

1 数値積分

与えられた関数 f を a から b まで積分する事、即ち、

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

を求める事を考える.

ラグランジュの補間公式により

$$P_n(x) := \sum_{i=0}^n f(x_i) L_i^{(n)}(x)$$
$$L_i^{(n)}(x) := \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

と置けば P_n は f の補間多項式で、 f が十分滑らかであれば $[a, b]$ で $f(x) \doteq P_n(x)$ が期待できるので、

$$I = \int_a^b f(x) dx \doteq \int_a^b P_n(x) dx =: I_n$$

一般にべき乗の積分は計算可能で、単に

$$\int_a^b x^n dx = \left[\frac{1}{n+1} x^{n+1} \right]_a^b = \frac{1}{n+1} (b^{n+1} - a^{n+1})$$

であるから、多項式 $P_n(x)$ の積分 I_n も計算できる.

例 1. $[0, 2\pi]$ 上の正弦関数を 4 等分割の標本点 $0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}, 2\pi$ の補間多項式は

$$f(0) = 0, \quad f\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1, \quad f(\pi) = 0, \quad f\left(\frac{3\pi}{2}\right) = -1, \quad f(2\pi) = 0,$$

$$L_1^{(4)}(x) = -\frac{8}{3\pi^4}x^4 + \frac{12}{\pi^3}x^3 - \frac{52}{3\pi^2}x^2 + \frac{8}{\pi}x,$$
$$L_3^{(4)}(x) = -\frac{8}{3\pi^4}x^4 + \frac{28}{3\pi^3}x^3 - \frac{28}{3\pi^2}x^2 + \frac{8}{3\pi}x$$

によって

$$P_4(x) = \frac{8}{3\pi^3}x^3 - \frac{8}{\pi^2}x^2 + \frac{16}{3\pi}x$$

で与えられる. この原始関数は

$$\int P_4(x) dx = \frac{2}{3\pi^3}x^4 - \frac{8}{3\pi^2}x^3 + \frac{8}{3\pi}x^2 + C$$

であるから $0 < y \leq 2\pi$ において

$$\begin{aligned} \int_0^y P_4(x) dx &= \left[\frac{2}{3\pi^3}x^4 - \frac{8}{3\pi^2}x^3 + \frac{8}{3\pi}x^2 \right]_0^y \\ &= \frac{2}{3\pi^3}y^4 - \frac{8}{3\pi^2}y^3 + \frac{8}{3\pi}y^2 \end{aligned}$$

特に $y = 2\pi$ においては

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} P_4(x) dx &= \frac{2}{3\pi^3}(2\pi)^4 - \frac{8}{3\pi^2}(2\pi)^3 + \frac{8}{3\pi}(2\pi)^2 \\ &= \frac{32}{3}\pi - \frac{64}{3}\pi + \frac{32}{\pi}\pi = 0\end{aligned}$$

となる.¹

図 1: 正弦関数と補間多項式 P_4 およびその積分 $\int_0^y \sin x dx$ と $\int_0^y P_4(x) dx$

1.1 ニュートン・コーツの公式

ラグランジュの補間公式により

$$\int_a^b P_n(x) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b L_k^{(n)}(x) dx.$$

特に多項式補間の標本点を等分割で採れば,

$$\begin{aligned}\int_a^b L_k^{(n)}(x) dx &= \frac{(-1)^{n-k} h}{k!(n-k)!} \int_0^n \frac{z(z-1)\cdots(z-n)}{z-k} dz \\ h &= \frac{b-a}{n}\end{aligned}$$

¹ 正弦関数は普通に積分ができて $\int_0^y \sin x dx = [\cos x]_0^y = \cos y - 1$ であり, 特に $y = 2\pi$ で $\int_0^{2\pi} \sin x dx = 0$ である.

であって

$$\int_a^b P_n(x) dx = \sum_{k=0}^n f(a+kh) \frac{(-1)^{n-k} h}{k!(n-k)!} \int_0^n \frac{z(z-1)\cdots(z-n)}{z-k} dz$$

となる. これを**ニュートン・コーツの公式**と言う.

ニュートン・コーツの公式の様に補間の積分 I_n によって目的の積分 I の近似値を与える公式を**補間型積分公式**という.

1.2 誤差

f が C^{n+1} -級であれば, ラグランジュの公式の誤差の評価よりニュートン・コーツの公式の誤差について次の評価が得られる:

$$\begin{aligned} |I_n - I| &= \left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b P_n(x) dx \right| \\ &\leq \int_a^b |f(x) - P_n(x)| dx \\ &\leq \|f(x) - P_n(x)\|_{\infty} (b-a) \\ &\leq \frac{(b-a)^{n+1}}{(n+1)!} \|f^{(n+1)}\|_{\infty} (b-a) \\ &= \frac{(b-a)^{n+2}}{(n+1)!} \|f^{(n+1)}\|_{\infty} \end{aligned}$$

が得られる. 右辺は $b-a$ が小さい程小さく, 積分区間が小さいほど良い評価が得られる. この現象は n が小さい時や, f の滑らかさがそれ程期待できない時にも比較的大きく影響する. また, 計算機の打ち切り誤差の観点から, あまり高次の多項式の計算は現実的ではない. この為, 実際に使用する時は積分区間 $[a, b]$ を小さな区間に分け, 各々の小区間で低い次数のニュートン・コーツの公式を用いる.

1.3 台形公式

ニュートン・コーツの公式において, 特に $n=1$ の時を考える, この時標本点の数は $n+1=2$ であり, 両端の2点のみである. 補間多項式の積分は

$$\int_a^b P_1(x) dx = \frac{f(a)+f(b)}{2} (b-a)$$

となる. P_1 が一次式である事から, これは $(a, f(a))$ と $(b, f(b))$ を通る直線, $x=a$, $x=b$, 及び x 軸で囲まれた台形の面積に他ならない. これを**台形公式**と言う.

例 2. 定積分 $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の値は

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx = 4 [\tan^{-1} x]_0^1 = 4 \frac{\pi}{4} = \pi$$

である. これを利用して数値積分により π の値を求めてみよう. $[0, 1]$ 区間を $[0, 1/4]$, $[1/4, 1/2]$, $[1/2, 3/4]$, $[3/4, 1]$ の 4 つの小区間に分け, 各小区間で台形公式を用いる. (図 2) 実線と x 軸, 直線 $x = 0$, $x = 1$ で囲まれた図形の面積は

$$\begin{aligned} I &= \int_{1/4}^0 \frac{4}{1+x^2} + \int_{1/2}^{1/4} \frac{4}{1+x^2} + \int_{3/4}^{1/2} \frac{4}{1+x^2} + \int_1^{3/4} \frac{4}{1+x^2} \\ &\doteq \frac{1}{4} \frac{f(1/4) + f(0)}{2} + \frac{1}{4} \frac{f(1/2) + f(1/4)}{2} + \frac{1}{4} \frac{f(3/4) + f(1/2)}{2} + \frac{1}{4} \frac{f(3/4) + f(1)}{2} \\ &= \frac{1}{8} \left\{ f(0) + 2f\left(\frac{1}{4}\right) + 2f\left(\frac{1}{2}\right) + 2f\left(\frac{3}{4}\right) + f(1) \right\} = \frac{5323}{1700} \end{aligned}$$

約 3.131176 である. ($\pi = 3.14159265 \dots$)

図 2: 台形公式による $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の近似

例 2 の様に元々の区間を (一般に m -) 等分割して各々の区間に台形公式を用いた時, 定積分 $\int_a^b f(x) dx$ の近似値は

$$\frac{b-a}{m} \left\{ \frac{1}{2} f(a) + \sum_{k=1}^{m-1} f\left(a + \frac{k(b-a)}{m}\right) + \frac{1}{2} f(b) \right\}$$

この種の公式を**ニュートン・コーツの複合公式**と言う。(上式は一次の複合公式)

1.4 シンプソンの公式

同様に、ニュートン・コーツの公式において、 $n = 2$ の時を特に**シンプソンの公式**と言う。この時の標本点は両端と中点の 3 点であり、 $\int_a^b P_2(x) dx$ は $(a, f(a)), (\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2}))$, と $(b, f(b))$ を通る 2 次曲線、 $x = a$, $x = b$, 及び x 軸で囲まれた図形の面積である。

$$\int_a^b P_1(x) dx = \frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6}(b-a)$$

である。

例 3. 台形公式の時と同様に定積分 $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の値を近似してみよう。先と同様に $[0, 1]$ 区間を $[0, 1/4]$, $[1/4, 1/2]$, $[1/2, 3/4]$, $[3/4, 1]$ の 4 つの小区間に分け、各小区間で今度はシンプソンの公式を用いる。(図 3) 実線と x 軸, 直線 $x = 0$, $x = 1$ で囲まれた図形の面積は

$$\begin{aligned} I &= \int_{1/4}^0 \frac{4}{1+x^2} + \int_{1/2}^{1/4} \frac{4}{1+x^2} + \int_{3/4}^{1/2} \frac{4}{1+x^2} + \int_1^{3/4} \frac{4}{1+x^2} \\ &\div \frac{1}{4} \frac{f(\frac{1}{4}) + 4f(\frac{1}{8}) + f(0)}{6} + \frac{1}{4} \frac{f(\frac{1}{2}) + 4f(\frac{3}{8}) + f(\frac{1}{4})}{6} + \frac{1}{4} \frac{f(\frac{3}{4}) + 4f(\frac{5}{8}) + f(\frac{1}{2})}{6} + \frac{1}{4} \frac{f(1) + 4f(\frac{7}{8}) + f(\frac{3}{4})}{6} \\ &= \frac{1}{6} \left\{ f(0) + 4f(\frac{1}{8}) + 2f(\frac{1}{4}) + 4f(\frac{3}{8}) + 2f(\frac{1}{2}) + 4f(\frac{5}{8}) + 2f(\frac{3}{4}) + 4f(\frac{7}{8}) + f(1) \right\} \\ &= \frac{32}{3} \left\{ 1 + 4\frac{1}{65} + 2\frac{1}{68} + 4\frac{1}{73} + 2\frac{1}{80} + 4\frac{1}{89} + 2\frac{1}{100} + 4\frac{1}{113} + \frac{1}{2} \right\} \end{aligned}$$

約 3.14159250 である. ($\pi = 3.14159265 \dots$)

図 3: シンプソンの公式による $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の近似