

1 数値積分

与えられた関数 f を区間 $[a, b]$ で数値積分する事、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

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

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

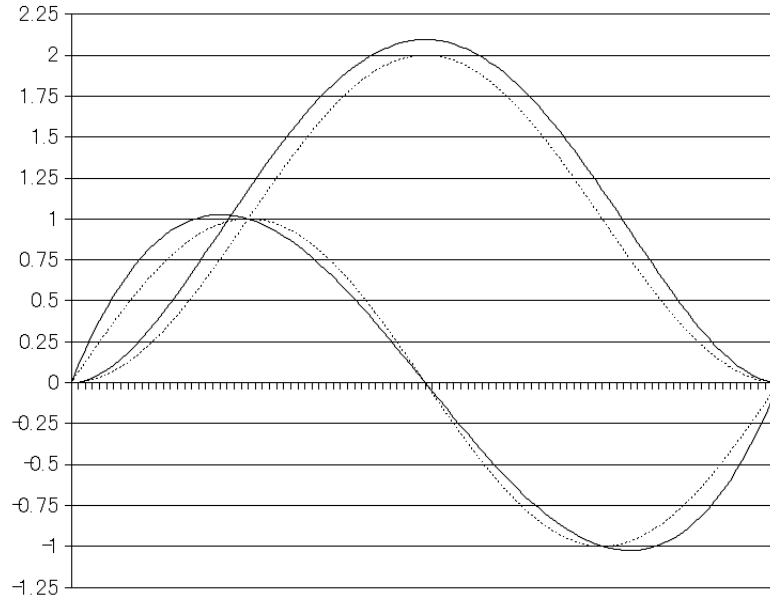


図 1: 正弦関数と補間多項式 P_4 およびその積分 $\int_0^y \sin x dx$ と $\int_0^y P_4(x) dx$

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る, 即ち $x_i = a + i\frac{b-a}{n}$ とおけば,

$$\begin{aligned} L_k^{(n)}(x) &= \prod_{i \neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \\ &= \prod_{i \neq k} \frac{x - (a + i\frac{b-a}{n})}{(a + i\frac{b-a}{n}) - (a + k\frac{b-a}{n})} \\ &= \prod_{i \neq k} \frac{(x-a)\frac{n}{b-a} - i}{i - k} \end{aligned}$$

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.

$(x-a)\frac{n}{b-a} = z$ で置換積分をすれば

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

であって, $h := \frac{b-a}{n}$ と置けば

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

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²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:

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

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とが見て取れる. この為, 実際に使用する時は積分区間 $[\alpha, \beta]$ を小さな区間 $[a_i, b_i]$ ($\alpha = a_0 < b_0 = a_1 < \cdots < b_i = a_{i+1} < \cdots < b_{M-1} = \beta$) 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.

²ニュートン・コーツ公式の場合, 補間点を均等に取っているため, 一般的なラグランジュ補間の場合より詳しい評価が得られる. 具体的には, $x \in [a, b]$ について

$$|F_n(x)| = \prod |x - x_i| \leq h \prod_{i=1}^n hi = h^{n+1} n!$$

実際, 積分区間を M 等分して n 次のニュートン・コーツの公式を用いた場合, 各小区間で

$$\frac{(b_i - a_i)^{n+2}}{(n+1)n^{n+1}} \|f^{(n+1)}\|_\infty = \frac{(\frac{\beta-\alpha}{M})^{n+2}}{(n+1)n^{n+1}} \|f^{(n+1)}\|_\infty$$

の誤差を含むので誤差の総計は, その M 倍の

$$\frac{1}{M^{n+1}} \frac{(\beta - \alpha)^{n+2}}{(n+1)n^{n+1}} \|f^{(n+1)}\|_\infty$$

となる. ($M \rightarrow \infty$ の時 $n+1$ 次のオーダーで小さくなる事に注意せよ)

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

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{1/4} \frac{4}{1+x^2} dx + \int_{1/4}^{1/2} \frac{4}{1+x^2} dx + \int_{1/2}^{3/4} \frac{4}{1+x^2} dx + \int_{3/4}^1 \frac{4}{1+x^2} dx \\ &\doteq \frac{1}{4} \frac{f(1/4) + f(0)}{2} + \frac{1}{4} \frac{f(1/2) + f(1/4)}{2} + \frac{1}{4} \frac{f(3/4) + f(1/2)}{2} + \frac{1}{4} \frac{f(3/4) + f(1)}{2} \\ &= \frac{1}{8} \left\{ f(0) + 2f\left(\frac{1}{4}\right) + 2f\left(\frac{1}{2}\right) + 2f\left(\frac{3}{4}\right) + f(1) \right\} = \frac{5323}{1700} \end{aligned}$$

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

例 2 の様に元々の区間を m 個の小区間に等分割して各々の小区間に対して台形公式を用いた時, 定積分 $\int_a^b f(x) dx$ の近似値は次の様に書ける;

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

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)

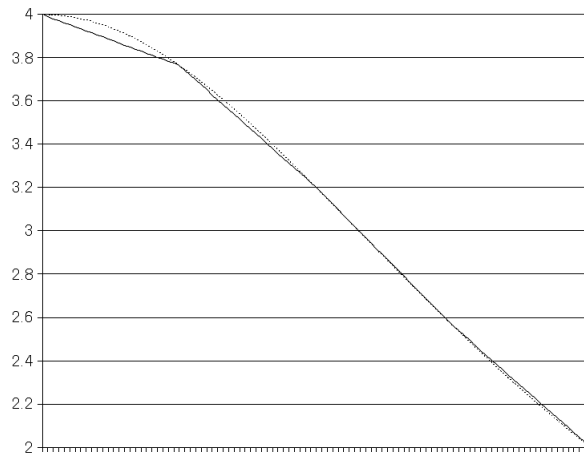


図 2: 台形公式による $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の近似

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。

$$\int_a^b P_2(x) dx = \frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6}(b-a)$$

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

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{1/4} \frac{4}{1+x^2} dx + \int_{1/4}^{1/2} \frac{4}{1+x^2} dx + \int_{1/2}^{3/4} \frac{4}{1+x^2} dx + \int_{3/4}^1 \frac{4}{1+x^2} dx \\ &\doteq \frac{1}{4} \frac{f(\frac{1}{4}) + 4f(\frac{1}{8}) + f(0)}{6} + \frac{1}{4} \frac{f(\frac{1}{2}) + f(\frac{3}{8}) + f(\frac{1}{4})}{6} + \frac{1}{4} \frac{f(\frac{3}{4}) + f(\frac{5}{8}) + f(\frac{1}{2})}{6} + \frac{1}{4} \frac{f(1) + f(\frac{7}{8}) + f(\frac{3}{4})}{6} \\ &= \frac{1}{6} \left\{ f(0) + 4f(\frac{1}{8}) + 2f(\frac{1}{4}) + 4f(\frac{3}{8}) + 2f(\frac{1}{2}) + 4f(\frac{5}{8}) + 2f(\frac{3}{4}) + 4f(\frac{7}{8}) + f(1) \right\} \\ &= \frac{32}{3} \left\{ 1 + 4\frac{1}{65} + 2\frac{1}{68} + 4\frac{1}{73} + 2\frac{1}{80} + 4\frac{1}{89} + 2\frac{1}{100} + 4\frac{1}{113} + \frac{1}{2} \right\} = \frac{152916620159}{48674874300} \end{aligned}$$

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

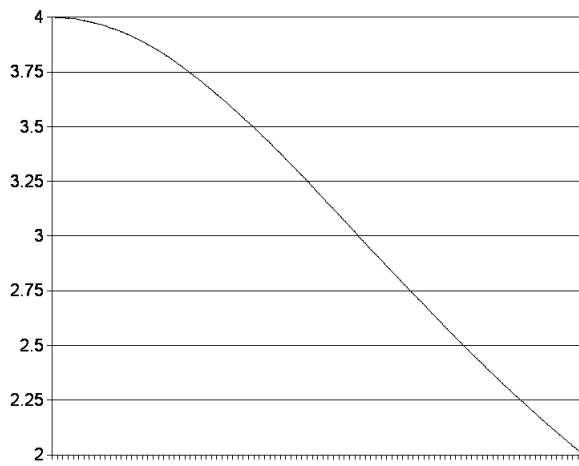


図 3: シンプソンの公式による $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の近似