

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.

特に小区間 $[a, b] \subset [\alpha, \beta]$ において、標本点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ についての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 $b-a$ が十分小あれば $[a, b]$ で $f(x) \doteq P_n(x)$ が期待できるので、

$$J = \int_a^b f(x) dx \doteq \int_a^b P_n(x) dx =: J_n$$

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 J_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

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

となる.¹

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.

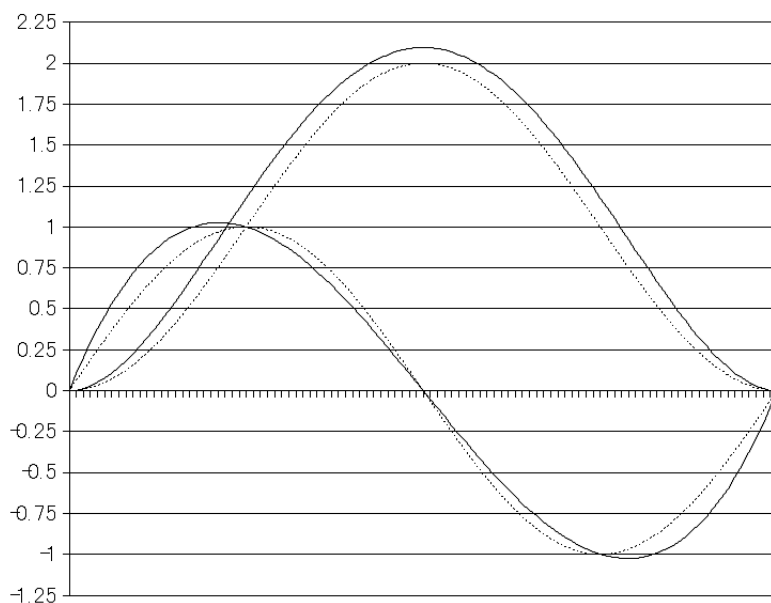


図 1: 正弦関数と補間多項式 P_4 およびその積分 $\int_0^y \sin x \, dx$ と $\int_0^y P_4(x) \, dx$

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 $x_i = a + i \frac{b-a}{n} (i = 0, \dots, n)$ とおけば,

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

$(x-a) \frac{n}{b-a} = z$ で置換積分をすれば

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

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 J_n によって目的の積分 J 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:

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

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 $[a_i, b_i]$ ($\alpha = a_0 < b_0 = a_1 < \dots < b_i = a_{i+1} < \dots < b_{M-1} = \beta$) に分け (等分し), 各々の小区間でニュートン・コーツの公式を用いる. つまり

$$I = \int_\alpha^\beta f(x) dx = \sum_{i=0}^{M-1} \int_{a_i}^{b_i} f(x) dx = \sum_{i=0}^{M-1} J^{(i)}$$

を $[a_i, b_i]$ での標本点

$$x_k^{(i)} = \frac{k(b_i - a_i)}{n} + a_i = \frac{(k + (i-1)n)(\beta - \alpha)}{Mn} + \alpha$$

についての補間多項式 $J_n^{(i)}$ の和

$$\sum_{i=0}^{M-1} J^{(i)} = I_{n,M}$$

で近似する. ニュートン・コーツの公式に対応する $I_{n,M}$ をニュートン・コーツの複合公式と言う

各小区間で $n+1$ 個の標本点を用いているが, 隣接する小区間の左端と右端は共通する点を用いているので, 標本点は $[\alpha, \beta]$ を $N := Mn$ 等分した $N+1$ 個の点となる.

最終的に I と $I_{n,M}$ の誤差 $|I - I_{n,M}|$ は, 各小区間で誤差 $|J^i - J_n^{(i)}|$

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

で評価を用いて, その総計, つまり M 倍の

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

となる. つまり, 必要なデータ量 N にたいして

$$I - I_{n,M} = O(N^{-(n+1)})$$

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の, 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 $h\hat{i} < x \leq h(\hat{i}+1)$ なる $\hat{i}$ を使って

$$|F_n(x)| = \prod_{i=0}^{\hat{i}} |x - x_i| = \prod_{i=0}^{\hat{i}} (x - x_i) \prod_{i=\hat{i}+1}^n (x_i - x) \leq \prod_{i=0}^{\hat{i}} h(\hat{i}+1-1) \prod_{i=\hat{i}+1}^n h(i-\hat{i}) = h^{\hat{i}+1}(\hat{i}+1)! h^{n-\hat{i}}(n-\hat{i})! \leq h^{n+1}n!$$

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。

$$\begin{aligned}\int_a^b L_0^{(1)}(x) dx &= \frac{(-1)^1}{0!1!} \frac{b-a}{1} \int_0^1 (z-1) dz = \frac{b-a}{2} \\ \int_a^b L_1^{(1)}(x) dx &= \frac{(-1)^0}{1!0!} \frac{b-a}{1} \int_0^1 z dz = \frac{b-a}{2}\end{aligned}$$

であるから補間多項式の積分、つまり一次のニュートン・コーツの公式は

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

となる。 P_1 が一次式であることから、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。これから台形公式とも呼ばれる。

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

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

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

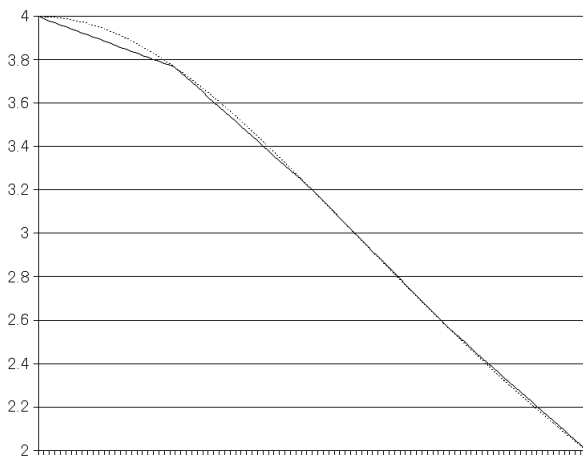


図 2: 台形公式による $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の近似

例 2 の様に元々の区間を 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、つまり一次のニュートン・コーツの複合公式は次の様に書ける;

$$\frac{\beta - \alpha}{N} \left\{ \frac{1}{2} f(\alpha) + \sum_{k=1}^{N-1} f\left(\alpha + \frac{k(\beta - \alpha)}{N}\right) + \frac{1}{2} f(\beta) \right\}.$$

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

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

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

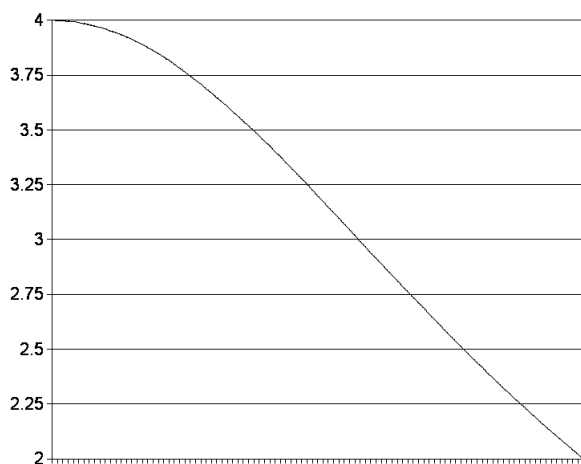


図 3: シンプソンの公式による $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$ の近似

二次のニュートン・コーツの複合公式;

$$\frac{\beta - \alpha}{N} \left\{ \frac{1}{3} f(\alpha) + \sum_{k=0}^{M-1} \frac{4}{3} f\left(\alpha + \frac{(2k+1)(\beta - \alpha)}{N}\right) + \sum_{k=1}^{M-1} \frac{2}{3} f\left(\alpha + \frac{2k(\beta - \alpha)}{N}\right) + \frac{1}{3} f(\beta) \right\}.$$

$$\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \int_0^n \frac{z(z-1)\cdots(z-n)}{z-k} dz \text{ の値.}$$

$n \backslash k$										
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$								
	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$							
	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$						
	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{8}{15}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$					
	$\frac{95}{288}$	$\frac{125}{96}$	$\frac{125}{144}$	$\frac{125}{144}$	$\frac{125}{96}$	$\frac{95}{288}$				
	$\frac{41}{140}$	$\frac{54}{35}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{68}{35}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{54}{35}$	$\frac{41}{140}$			
	$\frac{5257}{17280}$	$\frac{25039}{17280}$	$\frac{343}{640}$	$\frac{20923}{17280}$	$\frac{20923}{17280}$	$\frac{343}{640}$	$\frac{25039}{17280}$	$\frac{5257}{17280}$		
	$\frac{3956}{14175}$	$\frac{23552}{14175}$	$\frac{-3712}{14175}$	$\frac{41984}{14175}$	$\frac{-3632}{2835}$	$\frac{41984}{14175}$	$\frac{-3712}{14175}$	$\frac{23552}{14175}$	$\frac{3956}{14175}$	
	$\frac{25713}{89600}$	$\frac{141669}{89600}$	$\frac{243}{2240}$	$\frac{10881}{5600}$	$\frac{26001}{44800}$	$\frac{26001}{44800}$	$\frac{10881}{5600}$	$\frac{243}{2240}$	$\frac{141669}{89600}$	$\frac{25713}{89600}$
	$\frac{80335}{299376}$	$\frac{132875}{74844}$	$\frac{-80875}{99792}$	$\frac{28375}{6237}$	$\frac{-24125}{5544}$	$\frac{89035}{12474}$	$\frac{-24125}{5544}$	$\frac{28375}{6237}$	$\frac{-80875}{99792}$	$\frac{132875}{74844}$
										$\frac{80335}{299376}$