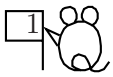
数値計算講義　第4 回
数値積分

金子　晃

kanenko@mbk.nifty.com
http://kanenko.a.la9.jp/

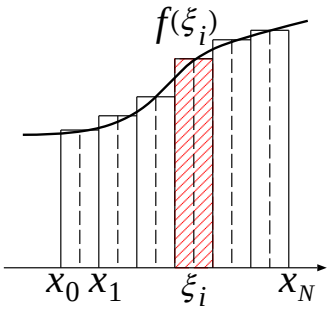
数値積分 ＝ 定積分の近似値 ＝ **Riemann** 近似和？



函数 $f(x)$ は有界閉区間 $[a,b]$ 上で値が有界：
i.e. $\exists M$ s.t. $|f(x)| \le M \quad (a \le x \le b)$
区間 $[a,b]$ の分割： $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_N = b,$
各微小区間 $[x_{i-1}, x_i]$ の代表点 ξ_i に対する f の値 $f(\xi_i)$

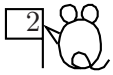
$\Longrightarrow$ Riemann 近似和 $\displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i \quad (\Delta x_i = x_i - x_{i-1})$

※ 数値計算では，N 等分割を 採用し，
$\xi_i = x_{i-1}$ または x_i にとるのが普通.
数学では，f が連続または単調なら，
$h \to 0$ とすれば，
この和は $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ に近付く.
計算機ではどうか？



数値計算では普通，代表点 ξ_i は区間の左または右端点に選ぶ.

リーマン近似和の数値実験　$f(x)=\dfrac{1}{1+x}$ で実験.

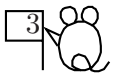


プログラミング的には級数の和．既にやったもの (cf. riemann.f).

$h=\dfrac{1}{N}$	$\displaystyle\sum_{i=1}^{N} f((i-1)h)h$	
0.100000000000000	0.718771403175428	
0.010000000000000	0.695653430481824	
0.001000000000000	0.693397243059937	
0.000100000000000	0.693172181184961	
0.000010000000000	0.693149680566267	
0.000001000000000	0.693147430560375	
0.000000100000000	0.693147205575825	
0.000000010000000	0.693147182933255	
0.000000001000000	0.693147180363882	⟵ ここから崩れる
0.000000000100000	0.693147170362674	

True value : $\displaystyle\int_0^1 \frac{1}{1+x}dx=\log 2=0.693147180559945$

Riemann 近似和の公式誤差の解析



各微小区間上で

$$\inf_{x_{i-1}\le x\le x_i} f(x)h \le \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \le \sup_{x_{i-1}\le x\le x_i} f(x)h$$

よって, 誤差は高々

$$\left(\sup_{x_{i-1}\le x\le x_i} f(x) - \inf_{x_{i-1}\le x\le x_i} f(x)\right)\, h$$

平均値の定理により

$$f(\xi) - f(\eta) = f'(c)(\xi-\eta) \quad \text{for} \quad \forall \xi,\eta \in [x_{i-1}, x_i]$$

$|f'| \le M_1$ とすれば, これは $\le M_1 h^2$

よって, 総和をとれば, 誤差は

$$M_1 h^2 \times N = M_1(b-a)h \qquad \left(h = \frac{b-a}{N}\right)$$

で押えられる. $\Longrightarrow$ 1 次の近似式

丸め誤差は, 各項で ε. よって, 総和をとれば $N\varepsilon = \dfrac{(b-a)\varepsilon}{h}$

この場合も, 二種の誤差の釣り 合いは, オーダー的に $h = \dfrac{\varepsilon}{h}$

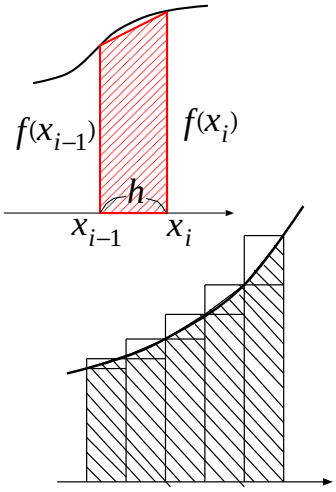
i.e. $h = \varepsilon^{1/2} = 10^{-8}$ ぐらいが最適で, これが同時に総 (相対) 誤差を 与える.

台形公式 (trapezoidal rule)

f のグラフを水平線で近似するよりは,
弦で近似して台形の面積の和をとる方がずっと正確だろう.

一つの部分区間 $[x_{i-1}, x_i]$ とその両端点上の点 $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$, $(x_i, f(x_i))$ を結ぶ弦で作られる台形の面積は

$$\frac{1}{2}\{f(x_{i-1}) + f(x_i)\}h$$



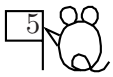
これを $i = 1, 2, ..., N$ につき加えると,
両端以外での値は2 度ずつ現れ,

$$\Big(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N)\Big)h$$

これも級数の和をちょっとひねるだけで
プログラム可.

計算量は Riemann 近似和とほぼ同じ!

台形公式の数値実験



前と同じ $f(x) = \dfrac{1}{1+x}$ で実験してみる (cf. daikei.f).

$h = 1/N$	近似値	
0.100000000000000	0.693771403175428	
0.010000000000000	0.693153430481824	
0.001000000000000	0.693147243059937	
0.000100000000000	0.693147181184961	
0.000010000000000	0.693147180566267	
0.000001000000000	0.693147180560375	
0.000000100000000	0.693147180575825	⟵ ここから崩れる
0.000000010000000	0.693147180433255	
0.000000001000000	0.693147180113882	
0.000000000100000	0.693147170337674	

True value : 0.693147180559945

これから台形公式が2 次の公式であることが予想される.
それを仮定した上で, 最も効率的な h は $h^2 = \dfrac{\varepsilon}{h}$ より
$h = \varepsilon^{1/3} \doteqdot 10^{-5}$, 総 (相対) 誤差は $h^2 = 10^{-10}$ 程度.

台形公式の誤差解析

微小区間を $[0,h]$ に平行移動して考える．(面積は平行移動で不変)
この区間分の値 $\dfrac{f(0)+f(h)}{2}h$ は 1 次関数 $f(0)+\dfrac{f(h)-f(0)}{h}x$ の積分値.
よってこの区間分の誤差は

$$\begin{aligned} E &= \int_0^h \left\{ f(x) - \left(f(0) + \frac{f(h)-f(0)}{h}x \right) \right\} dx \\ &= \int_0^h \left\{ f(x) - f(0) - \frac{f(h)-f(0)}{h}x \right\} dx \\ &= \int_0^h \left\{ f'(c_1)x - f'(c_2)x \right\} dx = \int_0^h f''(c)(c_1-c_2)x dx. \end{aligned}$$

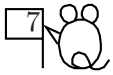
ここに $c_1, c_2 \in [0,h]$ (平均値の定理) よって $|c_1 - c_2| \leq h$
故に $M_2 = \sup |f''(x)|$ として1 区間分の誤差は,

$$|E| \leq M_2 h \int_0^h x dx = \frac{M_2}{2}h^3$$

全体での誤差はこれの $N = \dfrac{b-a}{h}$ 倍で $\dfrac{M_2(b-a)}{2}h^2$ で抑えられる.

誤差のオーダーが $O(h^2)$, それを保証するには f'' の評価が必要.

もう少し丁寧な計算をすると, 係数 1/2 は 1/12 に改良できる：

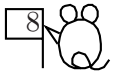


$$\int_0^h \Big\{ f(x) - f(0) - \frac{f(h)-f(0)}{h} x \Big\} dx$$
$$= \int_0^h \Big\{ \int_0^x f'(t)dt - \frac{x}{h} \int_0^h f'(t)dt \Big\} dx$$
$$= \int_0^h dx \int_0^x f'(t)dt - \frac{h}{2} \int_0^h f'(t)dt$$
$$= \Big[x \int_0^x f'(t)dt \Big]_0^h - \int_0^h x f'(x)dx - \frac{h}{2} \int_0^h f'(t)dt$$
$$= h \int_0^h f'(t)dt - \int_0^h x f'(x)dx - \frac{h}{2} \int_0^h f'(t)dt$$
$$= \int_0^h \Big(\frac{h}{2} - x \Big) f'(x)dx = \Big[\Big(\frac{hx}{2} - \frac{x^2}{2} \Big) f'(x) \Big]_0^h - \int_0^h \Big(\frac{hx}{2} - \frac{x^2}{2} \Big) f''(x)dx$$
$$= - \int_0^h \Big(\frac{hx}{2} - \frac{x^2}{2} \Big) f''(x)dx$$

よってこの絶対値は $\leq \Big[\frac{hx^2}{4} - \frac{x^3}{6} \Big]_0^h M_2 = \frac{M_2}{12} h^3$

この評価は最良なことが $f(x) = x^2$ で確認できる.

Simpson の公式



被積分函数のグラフを折れ線でなく放物線の断片で近似すると，
もっと精度が上がる．

3 点 (a, y_0), (b, y_1), (c, y_2) を通る放物線の方程式は,
Lagrange 補間多項式の作り方の処方により

$$y = y_0\frac{(x-b)(x-c)}{(a-b)(a-c)} + y_1\frac{(x-a)(x-c)}{(b-a)(b-c)} + y_2\frac{(x-a)(x-b)}{(c-a)(c-b)}$$

実際, これは 2 次式で, かつ与えられた 3 点を通ることは明らか．
ここで特に $a = -h$, $b = 0$, $c = h$ ととれば

$$\begin{aligned} y &= y_0\frac{x(x-h)}{-h(-2h)} + y_1\frac{(x+h)(x-h)}{h(-h)} + y_2\frac{(x+h)x}{2h\cdot h} \\ &= \frac{y_0(x^2-hx) - 2y_1(x^2-h^2) + y_2(x^2+hx)}{2h^2}. \end{aligned}$$

この 2 次式の $[-h, h]$ 上の定積分の値は, 奇数次の項の積分が消え，

$$\int_{-h}^{h} y\,dx = \frac{2y_0h^3 + 8y_1h^3 + 2y_2h^3}{6h^2} = \frac{h}{3}\{y_0 + 4y_1 + y_2\}$$

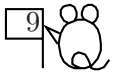
今, 区間 $[a, b]$ を $2N$ 等分し, 前の方から二つずつ対にして上の計算を
当てはめると, $y_i = f(a + ih)$ と置けば, 面積の近似値として

Simpson の公式

$$\begin{aligned} S &= \sum_{j=0}^{N-1}\frac{h}{3}\{y_{2j} + 4y_{2j+1} + y_{2j+2}\} \\ &= \frac{h}{3}\{y_0 + y_{2N} + 2(y_2 + y_4 + \cdots + y_{2N-2}) + 4(y_1 + y_3 + \cdots + y_{2N-1})\} \end{aligned}$$

この公式も，計算量は Riemann 近似和とそう変わらない．

Simpson 公式の数値実験



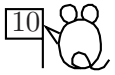
$f(x) = \dfrac{1}{1+x}$ で実験を続ける (cf. simpson.f).

$h = 1/N$	近似値	
0.100000000000000	0.693150230688930	
0.010000000000000	0.693147180872367	
0.001000000000000	0.693147180559975	
0.000100000000000	0.693147180559958	
0.000010000000000	0.693147180560013	⟵ ここから崩れる
0.000001000000000	0.693147180560307	
0.000000100000000	0.693147180575871	
0.000000010000000	0.693147180433503	
0.000000001000000	0.693147180113916	
0.000000000100000	0.693147170337656	

True value : 0.693147180559945

これから Simpson 公式が4 次の公式であることが予想される.
それを仮定した上で，最も効率的な h は $h^4 = \dfrac{\varepsilon}{h}$ より
$h = \varepsilon^{1/5} \doteqdot 10^{-3}$, 全誤差は $h^4 = 10^{-12}$ 程度.
4 桁の計算なら 10 等分程度で済む．Riemann 和だと 10000 等分必要だから，
プログラミングの時間まで入れれば，Riemann 和を計算機でやらせるより
Simpson 公式による手計算の方が速いかも！

Simpson 公式の誤差解析



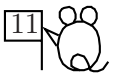
1 区間 (正確には二つの区間の一対分) を $[-h,h]$ に平行移動する.
この1 区間分の誤差は

$$\begin{aligned}
E &= \int_{-h}^{h} f(x)dx - \frac{h}{3}\{f(-h)+4f(0)+f(h)\} \\
&= \int_{-h}^{h} \{f(x)-f(0)\}dx - \frac{h}{3}\{f(h)+f(-h)-2f(0)\} \\
&= \int_{-h}^{h} \left(f(x)-f(0)-\frac{f(h)+f(-h)-2f(0)}{h^2}\frac{x^2}{2!} \right) dx \\
&= \int_{-h}^{h} \Big\{ f(x)-f(0)-f'(0)x-\frac{f''(0)}{2}x^2-\frac{f'''(0)}{3!}x^3 \\
&\qquad\qquad + \Big(f''(0)-\frac{f(h)+f(-h)-2f(0)}{h^2} \Big)\frac{x^2}{2!} \Big\} dx
\end{aligned}$$

(x の奇数冪の項の積分は対称性により 消えることに注意.) よって,

$$= \int_{-h}^{h} \{O(x^4)+O(h^2)x^2\}dx = O(h^5)$$

故に全体での誤差はこの $N=\dfrac{b-a}{h}$ 倍で $O(h^4)$ となる.



1 区間 $[-h,h]$ における函数 f に対する Simpson 公式の出力を
$\mathrm{Simp}[f] := h\{f(-h)+4f(0)+f(h)\}$ は定積分と同様の性質を持つ:

- $\mathrm{Simp}[\lambda f+\mu g]=\lambda\mathrm{Simp}[f]+\mu\mathrm{Simp}[g]$ (線型性)
- $f(x)\geq 0$ なら $\mathrm{Simp}[f]\geq 0$ (正値性)

よって, 積分形の剰余項を持つ Taylor の定理

$$f(x)=f(0)+f'(0)x+\frac{f''(0)}{2}x^2+\frac{f'''(0)}{3!}x^3+\int_0^x\frac{(x-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt$$

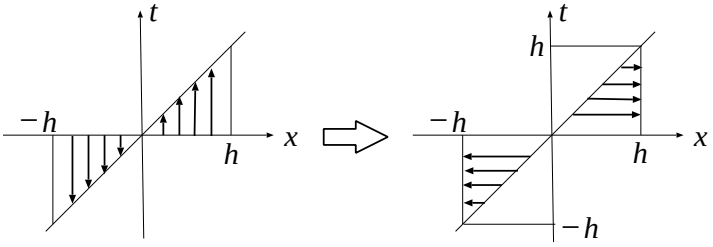
を用いると, 3 次多項式の部分は両者で同じ 値となるので,

$$\begin{aligned}E&=\mathrm{Simp}[f]-\int_{-h}^{h}f(x)dx\\&=\mathrm{Simp}[\int_0^x\frac{(x-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt]-\int_{-h}^{h}dx\int_0^x\frac{(x-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}&\mathrm{Simp}[\int_0^x\frac{(x-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt]\\&=\frac{h}{3}\int_0^h\frac{(h-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt+\frac{h}{3}\int_0^{-h}\frac{(-h-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt\\&=\frac{h}{3}\int_0^h\frac{(h-t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt+\frac{h}{3}\int_{-h}^0\frac{(h+t)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt\\&=\frac{h}{3}\int_{-h}^h\frac{(h-|t|)^3}{3!}f^{(4)}(t)dt\end{aligned}$$

積分の方は順序交換をする．



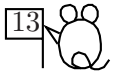
$$\int_{-h}^{h} dx \int_{0}^{x} \frac{(x-t)^3}{3!} f^{(4)}(t)dt$$
$$= \int_{0}^{h} f^{(4)}(t)dt \int_{t}^{h} \frac{(x-t)^3}{3!}dx + \int_{-h}^{0} f^{(4)}(t)dt \int_{t}^{-h} \frac{(x-t)^3}{3!}dx$$
$$= \int_{0}^{h} \frac{(h-t)^4}{4!} f^{(4)}(t)dt + \int_{-h}^{0} \frac{(-h-t)^4}{4!} f^{(4)}(t)dt$$
$$= \int_{-h}^{h} \frac{(h-|t|)^4}{4!} f^{(4)}(t)dt$$

よって，$|f^{(4)}(x)| \leq M_4$ とすれば，

$$|E| = \left| \frac{1}{3 \cdot 4!} \int_{-h}^{h} \{4h(h-|t|)^3 - 3(h-|t|)^4\} f^{(4)}(t)dt \right|$$
$$\leq \frac{M_4}{72} \int_{-h}^{h} \{4h(h-|t|)^3 - 3(h-|t|)^4\} dt$$
$$= \frac{M_4}{72} 2 \int_{0}^{h} \{4h(h-t)^3 - 3(h-t)^4\} dt = \frac{M_4}{36} \left(h^5 - \frac{3}{5} h^5 \right) = \frac{M_4}{90} h^5$$

この評価は $f(x) = x^4$ に適用してみると最良であることが分かる．

区間全体では，この $N = (b-a)/2h$ 倍で，誤差評価 $\dfrac{(b-a)}{180} M_4 h^4$ を得る．



例として $\int_0^\infty e^{-x^2}dx$ を考える．

倍精度で求める場合，

$$\int_R^\infty e^{-x^2}dx \le \int_R^\infty \frac{x}{R}e^{-x^2}dx = \frac{e^{-R^2}}{2R} < 10^{-16}$$

なる R をとれば，$\int_0^\infty e^{-x^2}dx = \int_0^R e^{-x^2}dx$ だと思ってもよい．

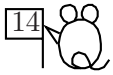

$e^{-R^2} < 10^{-16}$ で R を決める人が多いが，あまり根拠は無い．
(正項の無限級数をどこで切るかを見るのに，捨てる最初の項の大きさだけを見るのと同じくらい意味がない．)

$R = 6$ のとき $\frac{e^{-R^2}}{12} = 1.932935691869641\cdots \times 10^{-17}$ となるので，

ここでは，$\int_0^6 e^{-x^2}dx$ を今までの方法で計算してみる．

Cf. $\int_0^\infty \frac{1}{x^2+1}dx$ などは，この方法で R を求めると，
とても耐えられない値になる．
$\Longrightarrow$ 収束の遅い級数の和と同様，適当に変換して計算する．

数値実験の結果 (cf. normal.f)



$h = 1/N$	台形公式	Simpson 公式
0.600000000000000	0.886226925454957	0.885603411424864
0.060000000000000	0.886226925452758	0.886226925452758
0.006000000000000	0.886226925452757	0.886226925452757
0.000600000000000	0.886226925452748	0.886226925452747

真の値 $\dfrac{\sqrt{\pi}}{2}$: 0.886226925452758

これを 見ると，Simpson 公式の誤差はほぼ理論通り なのに対し，
台形公式は最初から 驚異的に (Simpson 公式よりも 更に) 良い近似値を
与えており，分割を 細かく するとかえって 悪く なってゆく．
今までの誤差解析が通用し ない！
1970 年代に，高橋英俊と 森正武により 発見・ 解明された特異現象．
(説明には函数論を 使う)
無限区間における 定積分はその後, 杉原, 大浦により 研究されている．
そのような 研究は, 特に Fourier 変換のような 振動する 積分に対して
需要が多い．

PARAMETER 文に注意!

たとい，IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z) と宣言しても，
g77 のコンパイラは PARAMETER(PI=3.14159265358979323846) を
単精度に解釈してしまい，その結果7 桁の精度しか得られない!
PARAMETER(PI=3.14159265358979323846D0) と書こう.
C の `#define` 文も避けた方がよい. (`const double PI= ...` とする.)

上のように説明してきたが, 今回実験してみて, 次のことが判明した:

① g77 も g95 も IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z) と
PARAMETER(PI=3.14159265358979323846) の組合せでは, 確かに
PI の値は上に書かれたように, 単精度に丸められてしまう.

② g77 も g95 も PARAMETER(PI=3.14159265358979323846D0) だけだと,
PI は倍精度浮動小数とはみなされず, F22.15 で出力してみると単精度で,
DSQRT などの関数に入れると型の不一致のエラーになる.

③ g77 も g95 も, これに加え IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
があれば, 上述のように PI を倍精度として扱ってくれ, 値も正確.

最後のやり方でよいのだが, これでは逆に単精度変数はすべて宣言が必要となる.
g77 の場合はパラメータごとに型の宣言をする手段が無いと思っていましたが,

```
DOUBLE PRECISION PI
PARAMETER(PI=3.14159265358979323846D0)
```

の順で書くと, PI はちゃんと倍精度になり, かつ代入ができないので
パラメータの扱いになっていることが小川さんの実験で分かりました.
ただし, これも逆の順に書くと, 二重定義のエラーになります. また
末尾の D0 を省くと, これでも単精度になってしまいます.
② については, 昔商用のコンパイラを使っていたときはこんなことは
なかったような気がしていますが, まだ調べていません.
もしかすると FORTRAN77 の限界かもしれない.

なお, FORTRAN 90 では定数にも型宣言ができるので,
最初からソースを FORTRAN 90 仕様で書けば, 何の問題も無い.

PARAMETER をやめて PI を変数として扱う方法もあるが,

① メモリーを一つ余計に使う.
② 実行中に値を変えられる恐れがある.

など微妙な違いがある.

ちなみに C 言語については, 実験の結果次のことが分かった.

① `#define PI 3.14159265358979323846` でちゃんと倍精度になる.
C 言語では関数名に型による差が無いので, 引数が単精度, 倍精度のどちらでもエラーにはならないが,
sin(x) に代入してみると確かに倍精度が出ている.

`#define` 文は単なるマクロで, PI の代わりにこの値が書き込まれるのだろう.
g77 コンパイラのパラメータ文に対する扱いはマクロとは異なるのか?

コンパイラの規格として定まっていないような事項については,
使用するコンパイラにどのように解釈されても大丈夫なような
安全な書き方を心がけよう.
GNU のコンパイラでは, うっかり油断すると, 倍精度でやってるつもりでも,
容易に単精度のゴミが入ってしまう.

本日の講義内容の自習課題

1 riemann.f をコンパイルし, 実行してみて,
講義で述べた Riemann 近似和の誤差の挙動を確認する.

2 daikei.f をコンパイルし, 実行してみて,
講義で述べた台形公式の誤差の挙動を確認する.

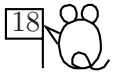
3 simpson.f をコンパイルし, 実行してみて,
講義で述べた Simpson 公式の誤差の挙動を確認する.

4 normal.f をコンパイルし, 実行してみて,
講義で述べた誤差の挙動の特異現象を確認する.

5 EXTERNAL 文の復習として, 台形公式と Simpson 公式を汎用函数に
書き直した normal.f あるいは sekibun.f の該当部分を読む.

6 daikei.f を C 言語に書き直した daikei.c を作る.

7 simpson.f を C 言語に書き直した simpson.c を作る.



問題 4.1 関数 $f(x)$ の定積分 $\int_a^b f(x)dx$ の近似値を求めるための数値積分公式である，Riemann 近似和，台形公式，Simpson 公式についてそれぞれ説明し，$f(x)$ が必要なだけなめらかなときのメッシュ h に対する近似のオーダーを (証明無しで) 示せ.

問題 4.2 定積分 $\int_0^{\pi/2} \sin x dx$ の近似値を，区間 $[0, \frac{\pi}{2}]$ の2 等分割に対して上記三種の数値積分公式により計算した結果を有効数字4 桁で与えよ.

問題 4.3 (1) 積分公式

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} hf(a+ih+h/2)$$

の意味を説明し, 誤差のオーダーを答えなさい. ただし f は必要なだけ微分可能とする.

(2) 台形公式と比較したこの公式の実用的な優劣を述べよ.[ヒント : まず図を描いてどんな値を計算しているかを見, オーダーを推測せよ.]

問題 4.4 $\int_0^\infty e^{-x^4}dx$ を数値計算する方法を述べ，実際に C 言語でプログラムを書け.

問題 4.5 $\int_0^\infty \frac{\sin x}{x^2+1}dx$ は収束が遅く，無理数かどうかもまだ分かっていない. この近似値を有効数字2 桁程度計算する工夫について述べよ.