# お話：数値解析 第 4 回<br>数値積分

長田直樹

## 1 はじめに

定積分や無限積分の値を数値として求めることが数値積分である。通常の定積分 (特異点を持たない有限区間の積分) は、被積分関数 $f(x)$ の原始関数 $F(x)$ が分かれば、

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

により解決する。原始関数が分からなくても、MATLAB や Octave などの数値解析ソフトで値を求めることもできる。さらに、大学 1-2 年程度の微積分学に登場する積分のほとんどは、Mathematica や Maple などの数式処理ソフトを利用すると解決できる。たとえば、

$$\int_0^\infty e^{-x^2} \cos x dx$$

の値は容易に求めることができる。

しかしながら、自然科学や工学に現れる積分は、原始関数が初等関数で表せないことや、表せても手間がかかることが多い。数値解析ソフトや数式処理ソフトを用いる場合でも、プログラミングを行わなければ解決できないケースもある。またこれらのソフトが利用できないこともあるだろう。このような場合に利用するのが数値積分である。

数値積分公式は次のように分類することができる。代表的な公式も挙げておく。

1. 補間型 (複合公式を含む)<br>ニュートン・コーツ公式、ガウス型公式
2. 変数変換型<br>IMT 公式、二重指数関数型公式
3. 加速法の利用<br>ロンベルク積分法、広義積分に対するリチャードソン補外

今回は補間型公式としてニュートン・コーツ公式、変数変換型公式として二重指数関数型公式を取り上げる。ロンベルク積分法は次回に話す。

## 2 ニュートン・コーツ公式

### 2.1 補間型公式

関数 $f(x)$ は区間 $[a, b]$ で連続であるとする。$[a, b]$ の $n+1$ 個の点 $x_0 < \cdots < x_n$ における関数値 $f(x_0), \ldots, f(x_n)$ が与えられているとき、$p_n(x_j) = f(x_j)$ $(0 \le j \le n)$ を満たす高々$n$ 次 ($n$ 次以下のことを**高々$n$次**という) の多項式を $f(x)$ の**$n$次補間多項式**という。

$\int_a^b f(x)dx$ の定積分を

$$\int_a^b p_n(x)dx$$

で近似するのが、**補間型数値積分公式**である。補間型公式は

$$\sum_{j=0}^{n} W_j f(x_j)$$

の形をしている。$x_0, \ldots, x_n$ を**分点**、$W_0, \ldots, W_n$ は $f(x)$ に無関係な定数で**重み**という。

### 2.2 ニュートン・コーツ公式

$[a, b]$ を $N$ 等分し

$$x_j = a + j\frac{b-a}{N}, \quad j = 0, \ldots, N$$

を分点にとる公式を **(閉じた) $N+1$点ニュートン・コーツ公式**という。

$[a, b]$ を $N+2$ 等分し、両端を除いた

$$x_j = a + (j+1)\frac{b-a}{N+2}, \quad j = 0, \ldots, N$$

を分点にとる公式を**開いた$N+1$点ニュートン・コーツ公式**という。

ニュートン・コーツ公式を実際上用いるのは、台形則、中点則、シンプソン則がほとんどであるので、これらのみを説明する。

## 2.3 台形則

閉じた 2 点ニュートン・コーツ公式を求めよう。$p_1(a) = f(a), p_1(b) = f(b)$ を満たす高々1 次多項式は

$$p_1(x) = \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a) + f(a)$$

である。定積分 $\int_a^b f(x)dx$ を

$$\int_a^b p_1(x)dx = \frac{1}{2}(b-a)\left(f(a)+f(b)\right) \tag{1}$$

で近似する公式

$$T = \frac{1}{2}(b-a)\left(f(a)+f(b)\right)$$

を**台形則**あるいは台形公式と呼ぶ。

**命題 1** $f(x)$ は $[a,b]$ で $C^2$ 級とする。台形則 $T$ に対し

$$\int_a^b f(x)dx = T - \frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3, \quad a < \xi < b$$

を満たす $\xi$ が存在する。

**証明** 部分積分を 2 回用いることにより

$$\int_a^b (b-x)(x-a)f''(x)dx = 2T - 2\int_a^b f(x)dx \tag{2}$$

となる。一方、$(b-x)(x-a)$ は $[a,b]$ で非負だから、積分の平均値の定理により

$$\begin{aligned}&\int_a^b (b-x)(x-a)f''(x)dx \\ &= f''(\xi)\int_a^b (b-x)(x-a)dx = \frac{(b-a)^3}{6}f''(\xi)\end{aligned} \tag{3}$$

となる $\xi \in (a,b)$ が存在する。(2)(3) より求める結果が得られる。□

## 2.4 中点則

開いた 1 点ニュートン・コーツ公式を求める。$p_0((a+b)/2) = f((a+b)/2)$ を満たす 0 次多項式は

$$p_0(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

だから

$$\int_a^b p_0(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{4}$$

となる。

$$M = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

を**中点則**あるいは中点公式と呼ぶ。

**命題 2** $f(x)$ は $[a,b]$ で $C^2$ 級とする。中点則 M に対し

$$\int_a^b f(x)dx = M + \frac{f''(\xi)}{24}(b-a)^3, \quad a < \xi < b$$

となる $\xi$ が存在する。

**証明**

$$\begin{aligned}&\int_0^{(b-a)/2}\left(\frac{b-a}{2}-t\right)^2 \\ &\quad\times\left[f''\left(\frac{a+b}{2}-t\right)+f''\left(\frac{a+b}{2}+t\right)\right]dt\end{aligned}$$

を 2 通りに変形する。[証明を完成せよ。] □

## 2.5 シンプソン則

閉じた 3 点ニュートン・コーツ公式を求める。$p_2(a) = f(a), p_2((a+b)/2) = f((a+b)/2), p_2(b) = f(b)$ を満たす高々2 次多項式 $p_2(x)$ の $[a,b]$ での積分値は

$$S = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right)$$

である。[確かめよ。]

$S$をシンプソン則あるいはシンプソン公式という。台形則、中点則、シンプソン則の間には

$$S = \frac{2M+T}{3}$$

の関係がある。台形則と中点則の剰余項が消えるように重みをつけた平均になっている。

**命題 3** $f(x)$ は $[a,b]$ で $C^4$ 級とする。シンプソン則 $S$ に対し

$$\int_a^b f(x)dx = S - \frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5, \quad a < \xi < b$$

を満たす $\xi$ が存在する。

**証明略**

# 3　複合ニュートン・コーツ公式

積分区間 $[a,b]$ を $n$ 等分し、各小区間にニュートン・コーツ公式を適用する公式を複合ニュートン・コーツ公式という。ニュートン・コーツ公式はほとんどの場合、複合公式として使われる。

## 3.1　複合台形公式

$[a,b]$ を $n$ 等分し、$h=(b-a)/n, x_j = a+jh,\ (j=0,\dots,n)$ とおく。$[x_j, x_{j+1}](j=0,\dots,n-1)$ に台形則を適用し、それらの和をとると複合台形公式

$$T_n = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(x_n)\right]$$

が得られる。

複合台形公式の漸近公式が前回 (2008 年 7 月号) 話したオイラー・マクローリンの公式である。

**定理 1** (**オイラー・マクローリンの公式**)
関数 $f(x)$ は区間 $[a,b]$ で $C^{2m+2}$ 級であるとする。

$$\begin{aligned} & T_n - \int_a^b f(x)dx \\ = \ & \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}h^{2k}\left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right] \quad (5) \\ & +O(h^{2m+2}), \quad (h \to +0) \end{aligned}$$

**証明** 前号を見よ。

複合台形公式は、

$$T_1, T_2, T_4, T_8, \dots$$

と分割数を 2 倍づつ増やしてゆき、適当な終了条件を満たすまで反復を繰り返す。たとえば、あらかじめ与えた $\epsilon > 0$ に対し

$$|T_n - T_{2n}| < \epsilon$$

となれば反復を終了し $T_{2n}$ を近似値に採用する。

$T_n$ の分点は $T_{2n}$ の分点でもあるので、計算の無駄を省くため $T_{2n}$ の計算には $T_n$ の値を利用する。$h=(b-a)/n$ とおくと

$$T_n = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(a+jh) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

$$T_{2n} = \frac{h}{2}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{2n-1} f(a+j\frac{h}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

より、

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{j=1}^{n} f(a+(j-\frac{1}{2})h) \qquad (6)$$

と書ける。**複合中点公式**

$$M_n = h\sum_{j=1}^{n} f(a+(j-\frac{1}{2})h)$$

を用いると、(6) は

$$T_{2n} = \frac{1}{2}(T_n + M_n) \qquad (7)$$

と書ける。

## 3.2　複合シンプソン公式

$[a,b]$ を $2n$ 等分し、$h=(b-a)/2n, x_j = a+jh,\ (j=0,\dots,2n)$ とおく。$[x_{2j}, x_{2(j+1)}](j=0,\dots,n-1)$ にシンプソン則を適用し、それらの和をとると複合シンプソン公式

$$S_n = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4\sum_{j=1}^{n} f(x_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_{2j}) + f(x_{2n})\right]$$

が得られる。

$T_n, M_n, S_n$ の間に

$$S_n = \frac{2M_n + T_n}{3} \qquad (8)$$

が成り立つ。さらに、(7)(8) より

$$S_n = \frac{4T_{2n} - T_n}{3} \qquad (9)$$

が導ける。(5) と (9) より $S_n$ の漸近公式が得られる。

**定理 2** (**複合シンプソン公式の漸近公式**)
関数 $f(x)$ は区間 $[a,b]$ で $C^{2m+2}$ 級であるとする。$c_k = B_{2k}(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a))/(2k)!$ とおくと $h \to +0$ のとき

$$S_n - \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=2}^{m} \frac{4-2^{2k}}{3} c_k h^{2k} + O(h^{2m+2})$$

**証明** 容易である。[導いてみよ。] □

複合台形公式と複合シンプソン公式の間の関係 (9) は次回ロンベルク積分にも登場する。

# 4 急減衰する無限積分

## 4.1 全無限積分

全無限積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \lim_{\substack{b\to\infty \\ a\to-\infty}} \int_a^b f(x)dx$$

に対する刻み幅 $h$ の複合台形公式は

$$T(h) = h \sum_{j=-m}^{n} f(jh) \tag{10}$$

である。積分区間の両端の値は無視できるので、係数の 1/2 はつかない。$m, n$ は与えた $\epsilon > 0$ に対し、

$$|f(-mh)| + |f(-(m+1)h)| < \epsilon \tag{11}$$
$$|f(nh)| + |f((n+1)h)| < \epsilon \tag{12}$$

により定める。$f(x)$ が振動しながら減衰する (0 に収束する) 関数でたまたま $f(nh) = 0$ などとなる場合を除外するため、連続する 2 つの関数値を用いている。

$k = 1, 2, \ldots$ (あるいは最初のいくつかの $k$) に対し

$$\left| \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left( f^{(2k-1)}(nh) - f^{(2k-1)}(-mh) \right) \right| < \epsilon$$

が成り立つときは、(10) はオイラー・マクローリンの公式により高精度の結果が期待できる。

## 4.2 半無限積分

半無限積分

$$\int_a^{\infty} f(x)dx = \lim_{b\to\infty} \int_a^b f(x)dx$$

に対する刻み幅 $h$ の複合台形公式は

$$T(h) = h \left( \frac{1}{2} f(a) + \sum_{j=1}^{n} f(a+jh) \right) \tag{13}$$

である。$n$ は (12) により定める。

$k = 1, 2, \ldots$ (あるいは最初のいくつかの $k$) に対し

$$f^{(2k-1)}(a) = 0, \quad \left| \frac{B_{2k}}{(2k)!} f^{(2k-1)}(a+nh) \right| < \epsilon \tag{14}$$

が成り立つとき、(13) は高精度の結果が期待できる。

**例 1** $f(x) = e^{-x^2} \cos x$ の $[0, \infty)$ での積分に (13) を適用する。ライプニッツの公式より

$$f^{(2k-1)}(0) = 0, \quad k = 1, 2, \ldots$$

がいえる。[確かめよ。] $h = 1, \epsilon = 10^{-16}$ とすると

$$|f(6)| + |f(7)| > \epsilon, \quad |f(7)| + |f(8)| < \epsilon$$

より $n = 7$ である。(13) は表 1 のようになる。$h = 0.5$ で小数第 14 位まで正確な値が得られる。計算に使った分点数は 16($x = 0, 0.5, 1, 1.5, \ldots, 6.5, 7$ と 8) である。

表 1: $I = \int_0^{\infty} e^{-x^2} \cos x dx$

| $h$ | $T(h)$ | $T(h) - I$ |
|---|---|---|
| 1.000 | 0.691021866829514 | $8.28 \times 10^{-4}$ |
| 0.500 | 0.690194223521574 | $2.66 \times 10^{-15}$ |
| 0.250 | 0.690194223521571 | 0 |

$\epsilon = 10^{-3}$ とすると $n = 3$ である。$\int_0^{\infty} \exp(-x^2) \cos x dx$ の値を $\frac{1}{2} f(0) + f(1) + f(2) + f(3)$ で近似しただけだが、誤差はなんと $8.3 \times 10^{-4}$ である。

図 1 に曲線と近似の折れ線を示す。区間 $[0,1]$ で過小に評価したものと $[1,2]$ で過大に評価したものが相殺し合ったということになるが、これほどの精度は図 1 からだけでは納得できないであろう。

なお、無限積分の値は

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} \cos x dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{-1/4}$$

となることが留数定理を用いて証明できる。(一松信、講座複素解析、本誌 2007 年 12 月号 p.17 をみよ。)

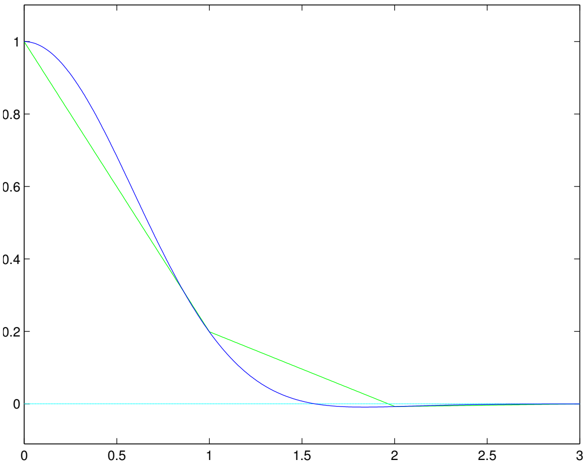


図 1: $\epsilon = 10^{-3}, h = 1$ での複合台形公式

# 5 二重指数関数型公式

## 5.1 変数変換型公式

関数 $f(x)$ は $a$ の近傍で有界ではないが極限値

$$I = \lim_{\epsilon \to +0} \int_{a+\epsilon}^{b} f(x)dx$$

が存在するとき、$I$ を $(a, \infty]$ における広義積分といい、通常の定積分と同じ記号

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

で表す。$a$ を特異点という。$[a, b)$ についても同様である。$(a, c]$ と $[c, b)$ における広義積分が存在するとき、それらの和を $(a, b)$ における広義積分という。

広義積分

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{15}$$

は複合中点公式など開いた補間型公式で計算することはできるが、一般に収束は遅い。そこで、区間 $(\alpha, \beta)$ において連続微分可能で

$$\lim_{t \to \alpha} \phi(t) = a, \quad \lim_{t \to \beta} \phi(t) = b$$

となる関数 $\phi(t)$ を用いて変数変換 $x = \phi(t)$ を行うと

$$I = \int_\alpha^\beta f(\phi(t))\phi'(t)dt \tag{16}$$

となる。(16) に精度のよい数値積分公式を適用する方法を**変数変換型数値積分公式**という。

## 5.2 二重指数関数型公式

ある意味で最適の変数変換型公式が、1974 年に高橋秀俊と森正武が発表した二重指数関数型公式 (double exponential formula の頭文字を取り DE 公式と略される) である。変換後の被積分関数 $g(t) = f(\phi(t))\phi'(t)$ が $|t| \to \infty$ のとき二重指数関数 $\exp(-\exp(|t|))$ のオーダーで減衰するためそのような名前がつけられている。((16) において $\alpha = -\infty, \beta = \infty$ としている。)

広義積分 (15) は変数変換 $x = ((b-a)u + (b+a))/2$ により積分区間が $(-1, 1)$ に移るので、$u$ を $x$ に置き換えて

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \tag{17}$$

を考える。(17) に対し変換

$$x = \phi(t) = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right), \quad -\infty < t < \infty \tag{18}$$

を行い、変換後の積分 (16) に複合台形公式を適用する公式を**二重指数関数型公式**という。(18) は DE 変換という。

(18) の右辺に現れる双曲線関数は

$$\sinh t = \frac{e^t - e^{-t}}{2}, \quad \cosh t = \frac{e^t + e^{-t}}{2}$$
$$\tanh t = \frac{\sinh t}{\cosh t} = \frac{e^t - e^{-t}}{e^t + e^{-t}}$$

により定義される。(微積分学の教科書を見よ。)

$$\phi'(t) = \frac{\pi}{2} \frac{\cosh t}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)}$$

なので、(17) に対する DE 公式は

$$\frac{\pi h}{2} \sum_{k=-m}^{n} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh kh\right)\right) \frac{\cosh kh}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh kh\right)} \tag{19}$$

となる。

被積分関数が $1 + x$ や $1 - x$ を因数に持つときは、

$$1 \pm \tanh((\pi/2)\sinh t)$$

の計算において**桁落ち** (近い数同士の引き算で有効桁が少なくなる現象) が生じやすい。そのため、(19) のまま計算するのではなく、桁落ちを避ける変形を行った後にプログラミングする。

**例 2** ベータ関数

$$B(p,q) = \int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1}dx, \quad (p,q>0) \quad (20)$$

は $0 < p < 1$ のとき $x = 0$ が特異点、$0 < q < 1$ のとき $x = 1$ が特異点である。

$$B(1/4, 3/4) = 4.44288293815836610179$$

の値を DE 公式で計算する。

$x = \frac{1}{2}(u+1)$ と変数変換すると

$$B\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) = \int_{-1}^1 (1+u)^{-\frac{3}{4}}(1-u)^{-\frac{1}{4}}du$$

である。$f(x) = (1+x)^{-3/4}(1-x)^{-1/4}$ として (19) を適用する。

$$1 - \tanh^2 x = \frac{1}{\cosh^2 x}, \quad 1 + \tanh x = \frac{\exp x}{\cosh x}$$

に注意すると

$$f(\tanh((\pi/2)\sinh x)) = \frac{\cosh((\pi/2)\sinh x)}{\sqrt{\exp((\pi/2)\sinh x)}}$$

となるので、複合台形公式 $T(h)$ は

$$\frac{\pi h}{2}\sum_{k=-m}^{n} \frac{\cosh kh}{\sqrt{\exp((\pi/2)\sinh kh)}\cosh((\pi/2)\sinh kh)} \quad (21)$$

である。

$\epsilon = 10^{-16}$ としたとき、(11)(12) で決まる $m, n$ は $m = 5, n = 4$ である。計算結果を表 2 に示す。

表 2: $I = B(1/4, 3/4)$

| $h$ | $T(h)$ | $T(h) - I$ |
|---|---|---|
| 1.000 | 4.445844600516824 | $2.96 \times 10^{-3}$ |
| 0.500 | 4.442883163952324 | $2.26 \times 10^{-7}$ |
| 0.250 | 4.442882938158366 | 0 |

桁落ち防止 (21) を行わず、$f(x) = (1+x)^{-3/4}(1-x)^{-1/4}$ に (19) を適用すると $t = \pm 4$ で $f(\phi(t))\phi'(t)$ が `inf` になり、計算できない。

無限積分に対する複合台形公式や、DE 公式は複素関数論を用いた誤差解析がなされている。開発者自身の [1] を見よ。同書には無限区間の積分に対する DE 公式についても解説がある。

DE 公式の C 言語によるプログラム (例 2 で用いたもの) を

`http://www.cis.twcu.ac.jp/~osada/rikei/`

においておく。

# 参考文献

[1] 森正武、数値解析第 2 版、共立出版、2002

[2] 長田直樹、数値微分積分法、現代数学社、1987

(おさだなおき/東京女子大学)