地球惑星科学実習 B-3: 数値積分

岩山隆寛 *

2015 年 5 月 1, 8 日

1　はじめに

関数 $g(x)$ の定積分,

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} g(x)\,\mathrm{d}x, \tag{1}$$

を数値的に行うことを考える. 不定積分,

$$\int g(x)\,\mathrm{d}x,$$

が実行できれば, (1) の値を求めることはたやすいが, 不定積分が実行できないことが頻繁にある. このとき, ここで述べる数値積分が有用な手法となる.

2　数値積分一般論

x のいくつかの値 x_i, $(i = 1, 2, \ldots)$ に対して関数 $g(x)$ の値, $g(x_1)$, $g(x_2)$, $\ldots$ がわかっているとする. このとき, 積分 (1) を

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} g(x)\,\mathrm{d}x \simeq w_1 g(x_1) + w_2 g(x_2) + \ldots \tag{2}$$

の形で数値的に求めることを数値積分という.

x_i は**分点** といい, w_i を分点 x_i に対応する**重み**という. w_i は積分値ができるだけ正確になるように作られる.

* 神戸大学 大学院理学研究科 惑星学専攻. e-mail : iwayama@kobe-u.ac.jp

3　台形公式

3.1　解説

曲線 $y = g(x)$ を, x に関して $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$ の区間で数値的に定積分することを考える.

1. $[x_{\min}, x_{\max}]$ の区間を N 個に等間隔に分割する. このとき, 各分点 x_i, $(i = 0, 1, \ldots N)$ は

$$x_i = x_{\min} + i\Delta x, \tag{3}$$

$$\Delta x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N}, \tag{4}$$

   である. 各分点での y の値は,

$$y_i = g(x_i), \tag{5}$$

   である.

2. $N+1$ 個の点, $(x_0,\, g(x_0)), (x_1,\, g(x_1)), \ldots (x_N,\, g(x_N))$ を隣どうし直線で結ぶ. x 軸と折れ線の間の面積 I_{trap} を (1) の近似値とする.

   I_{trap} は上底 $g(x_{i-1})$, 下底 $g(x_i)$, 高さ Δx の台形の面積を $i = 1 \sim N$ まで足したものに等しい. そこで,

$$\begin{aligned}
I_{\text{trap}} &= \sum_{i=1}^{N} \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_{i-1}) + g(x_i)\right) \\
&= \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_0) + g(x_1)\right) + \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_1) + g(x_2)\right) + \ldots + \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_{N-1}) + g(x_N)\right) \\
&= \Delta x \left[\frac{g(x_0) + g(x_N)}{2} + g(x_1) + g(x_2) + \ldots + g(x_{N-1})\right] \\
&= \Delta x \left[\frac{g(x_0) + g(x_N)}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} g(x_i)\right]
\end{aligned} \tag{6}$$

   を得る. (6) は積分を台形の面積の和で近似しているので, **台形公式**と呼ばれる.

台形公式は, (2) の観点から眺めると, 重みを

$$w_0 = w_N = \frac{\Delta x}{2},\; w_i = \Delta x,\; (i = 1, \ldots N-1) \tag{7}$$

にとっていることに相当する.

3.2　5 月 1 日の課題

次の積分を台形公式に従って数値計算し, その結果を解析値と比較しなさい:

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,\mathrm{d}x = \pi. \tag{8}$$

ポイント： 分点の個数 N を変えて (Δx の値を変えて), 数値積分の結果と解析解を比較する. 例えば, 分点個数を $N = 10$, 20, 40 等と変えてみる.

注意： $\pi = 3.14159265358979323846\ldots$ なので, 倍精度の $\pi = \cos^{-1}(-1)$ は少数以下 17 桁までしか正しくない.

次ページに数値積分のサンプルプログラムを添付する.

```
c sample program for numerical integration
c produced by Takahiro IWAYAMA
c 2015.04.28
c23456789012345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012
      program integration

      implicit none
      integer  n
c n: number of division
      parameter (n=2**29)
c x : independent variables
c x_min: lower bound of integration
c x_max: upper bound of integration
      real*8   x, x_min, x_max
c I_theo: results of integration
c I_trap: results of numerical integration by trapezoidal method
      real*8   I_theo, I_trap
c pi: 3.141592...
c g: integrand
      real*8   pi, g

      x_min=0.d0
      x_max=1.d0

      pi=acos(-1.0d0)
      I_theo=pi

      call trapezoidal(x_min, x_max, n, I_trap)
      write(6,*) n, I_theo, I_trap, (I_trap-I_theo)/I_theo

      stop
      end
c-----------------------------------------------------------------
```

```
      subroutine trapezoidal(x_min, x_max, n, I_trap)
c numrical integration according to trapezoidal method
      integer  i, n
c n: number of division
c x: independent variable
c dx: increment of x
c x_min: lower bound of integration
c x_max: upper bound of integration
      real*8   x, dx, x_min, x_max
c I_trap: results of numerical integration by trapezoidal method
      real*8   I_trap
c g: integrand
      real*8   g

      I_trap=0.d0
      dx=(x_max-x_min)/dble(n)

        I_trap=I_trap+(g(x_min)+g(x_max))*dx*0.5d0
        do i=1, n-1
          x=x_min+dble(i)*dx
          I_trap=I_trap+g(x)*dx
        enddo

      return
      end
c-------------------------------------------------------------------
      real*8 function g(x)

      real*8  x

      g=4.d0/(1.d0+x**2)

      return
```

```
end
```

3.3　5 月 1 日の宿題

1. 次の定積分の解析解をもとめなさい．さらに，台形公式をもちいて数値積分を行い，真の値と比較しなさい．

   ポイント：　数値積分を行ったときの条件を明確に記述すること．さらに誤差も評価すること．

   (a)
   $$\int_0^1 x^3\,\mathrm{d}x \tag{9}$$

   (b)
   $$\int_0^{\pi/2} \sin x\,\mathrm{d}x \tag{10}$$

   (c)
   $$\int_0^1 \frac{1}{(1+x)^2}\,\mathrm{d}x \tag{11}$$

2. 台形公式のプログラムを復習しておくこと．来週は，Simpson の 1/3 公式に基づく数値積分のプログラムを各自で作成してもらいます．
3. 次節『台形公式の再解釈』を予習しておくこと．

3.4　台形公式の再解釈

台形公式 (6) を別の観点から解釈してみる．

$g(x)$ を 1 次式で近似した時の面積の公式を導いてみる．まず，x_i と x_{i+1} の間で $g(x)$ を 1 次式で近似してみる：

$$p_1(x) = ax + b. \tag{12}$$

(12) が x_i において $g(x_i)$，x_{i+1} において $g(x_{i+1})$ を通るとして a，b を決定すると

$$a = \frac{1}{x_i - x_{i+1}} g(x_i) + \frac{1}{x_{i+1} - x_i} g(x_{i+1}), \tag{13}$$

$$b = -\frac{x_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} g(x_i) - \frac{x_i}{x_i - x_{i+1}} g(x_{i+1}) \tag{14}$$

である．これらを (12) に代入して, $g(x_i)$, $g(x_{i+1})$ について整理すると

$$p_1(x) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} g(x_i) + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} g(x_{i+1}) \tag{15}$$

を得る．このように近似された関数 $p_1(x)$ を x_i から x_{i+1} まで定積分すると,

$$\begin{aligned}
\int_{x_i}^{x_{i+1}} p_1(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{2} a(x_{i+1}^2 - x_i^2) + b(x_{i+1} - x_i) \\
&= \frac{1}{2}(g(x_{i+1}) - g(x_i))(x_{i+1} + x_i) + g(x_{i+1})(x_{i+1} - x_i) - (g(x_{i+1}) - g(x_i))x_{i+1} \\
&= \frac{1}{2} g(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2} g(x_{i+1})(x_{i+1} - x_i) \\
&= \frac{\Delta x}{2} \left(g(x_i) + g(x_{i+1}) \right), \qquad (16)
\end{aligned}$$

となる．(16) は台形の面積を表している．したがって, (16) を $i = 0$ から $i = N - 1$ まで足したものは, 台形公式 (6) に一致する．

4　Simpson の 1/3 公式

4.1　解説

台形公式は (6) は関数を区分的に 1 次関数で近似していることに相当することを前節で見た．区分的に 2 次関数で近似した場合にはどのような積分公式が得られるか, をここでは議論する．

2 次式で近似するためには, 3 点必要である．そこでその 3 点を x_{i-1}, x_i, x_{i+1} とする．$g(x)$ を 2 次式で近似してみる:

$$p_2(x) = ax^2 + bx + c. \tag{17}$$

(17) が x_{i-1} において $g(x_{i-1})$, x_i において $g(x_i)$, x_{i+1} において $g(x_{i+1})$ を通るとして

a, b, c を決定すると,

$$
\begin{aligned}
a =& \frac{1}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f_{i-1} \\
&+ \frac{1}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f_i \\
&+ \frac{1}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_{i+1})} f_{i+1}, \qquad (18) \\
b =& - \frac{(x_i+x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f_{i-1} \\
&- \frac{(x_{i-1}+x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f_i \\
&- \frac{(x_{i-1}+x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_{i+1})} f_{i+1}, \qquad (19) \\
c =& \frac{x_i x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f_{i-1} \\
&+ \frac{x_{i-1} x_{i+1}}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f_i \\
&+ \frac{x_{i-1} x_i}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_{i+1})} f_{i+1}, \qquad (20)
\end{aligned}
$$

となる. これらを (17) に代入して, $g(x_{i-1})$, $g(x_i)$, $g(x_{i+1})$ について整理すると,

$$
\begin{aligned}
p_2(x) =& \frac{(x-x_{i+1})(x-x_i)}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f_{i-1} \\
&+ \frac{(x-x_{i+1})(x-x_{i-1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f_i \\
&+ \frac{(x-x_i)(x-x_{i-1})}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_{i+1})} f_{i+1}, \qquad (21)
\end{aligned}
$$

を得る. このように近似された関数 $p_2(x)$ を x_{i-1} から x_{i+1} まで定積分すると, $x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = \Delta x$ として,

$$
\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} p_2(x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}\Delta x \left(g(x_{i-1}) + 4g(x_i) + g(x_{i+1})\right), \qquad (22)
$$

を得る.

以上より, Simpson の 1/3 公式に基づく数値積分は以下のようにまとめられる:

1. $[x_{\mathrm{min}}, x_{\mathrm{max}}]$ の区間を $2N$ 個に等間隔に分割する. このとき, 各分点 x_i, $(i = 0, 1, \ldots 2N)$ は

$$x_i = x_{\min} + i\Delta x, \tag{23}$$

$$\Delta x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{2N}, \tag{24}$$

である.

2. $[x_{\min}, x_{\max}]$ の区間での $g(x)$ の積分を, $p_2(x)$ の積分で近似したものを I_{simp} と表すと, (22) を参考にして,

$$\begin{aligned} I_{\mathrm{simp}} &= \frac{1}{3}\Delta x(g(x_0) + 4g(x_1) + g(x_2) \\ &\quad + g(x_2) + 4g(x_3) + g(x_4) \\ &\quad + g(x_4) + 4g(x_5) + g(x_6) \\ &\quad + \dots \\ &\quad + g(x_{2N-2}) + 4g(x_{2N-1}) + g(x_{2N})) \\ &= \frac{1}{3}\Delta x\left(g(x_0) + g(x_{2N}) + 2\sum_{j=1}^{N-1} g(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{N} g(x_{2j-1})\right), \end{aligned} \tag{25}$$

を得る. この場合, 重みは $w_0 = w_{2N} = \Delta x/3$, $w_n = 2\Delta x/3$, (n は偶数で $2N-2$ 以下), $w_n = 4\Delta x/3$, (n は奇数で $2N-1$ 以下) である.

4.2　5 月 8 日の課題

次の積分を台形公式, Simpson の 1/3 公式に従って数値計算し, その結果を解析値と比較しなさい:

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,\mathrm{d}x = \pi. \tag{26}$$

ポイント：　分点の個数を同じ (Δx の値を同じ) にして, それぞれの公式で積分して結果を比較する.

5　より進んだ話題

5.1　Newton-Cotes の公式

関数を区分的に 1 次関数で近似するよりも, 2 次関数で近似するほうがより高精度の数値積分ができることを見た. そこで, 関数をより高次の多項式で近似した積分公式は

より高精度であろうことは想像がつく. 関数を n 次多項式で近似した数値積分公式は Newton-Cotes の公式と呼ばれる.

5.2 Gauss の積分公式

これまでは, 分点が等間隔の場合の数値積分公式について眺めてきたが, 分点が不等間隔の場合の積分公式も知られている. その代表的なものは, Gauss-Legendre の積分公式もしくは単に, Gauss の積分公式と呼ばれる.

6 5 月 8 日の宿題

次の定積分の解析解をもとめなさい. さらに, 台形公式, Simpson 公式をもちいて数値積分を行い, 真の値と比較しなさい.

1.
$$\int_0^1 x^3 \, \mathrm{d}x \tag{27}$$

2.
$$\int_0^{\pi/2} \sin x \, \mathrm{d}x \tag{28}$$

3.
$$\int_0^1 \frac{1}{(1+x)^2} \, \mathrm{d}x \tag{29}$$