本ノート第 5 章は伊理正夫著「数値計算の常識」第 7 章 p.40〜の内容である.

第5章　数値積分法
—台形則を使いこなすには

式で書いてある関数は, よほどのことがない限り式で微分できるが, 積分はごく限られた形のものしか式の形で積分することはできない[1]. そこで, 定積分の数値計算法である「数値積分法」が重要視される. 数値積分法の最も基本的な公式といえば「台形則 (trapezoidal rule あるいは trapezium rule) 」か, あるいは「中点則 (mid-point rule) 」であろう. ここでは台形則について話を進めていく. また, 本当に困難なのは多重積分の数値計算なのであるが, まずは一変数関数 $f(x)$ の定積分

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

の数値計算の話から入ることにする.

1　基本的な性質

定積分

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

の積分区間 [a, b] を N 等分して

$$h = \frac{b-a}{N}$$

とおき, I を和

$$I_N = h\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{N-1} f(a+nh) + \frac{1}{2}f(b)\right] \tag{1}$$

[1]例えば誤差関数

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt$$

は式の形では積分できない.

で近似しようというのが台形則である.
$f(x)$ が解析的な関数のときには, 誤差 $I_N - I$ は任意の p に対して,

$$I_N - I = c_2 h^2 \left[f'(b) - f'(a)\right] + c_4 h^4 \left[f'''(b) - f'''(a)\right] + \cdots + c_{2p} h^{2p} \left[f^{(2p-1)}(b) - f^{(2p-1)}(a)\right] + O(h^{2p+2}) \quad (2)$$

と表わされることが分かっている. ここで c_i は h や f に関係しない定数である.

1.1　オイラー・マクローリンの公式

式 (2) はオイラー・マクローリンの公式である. 以下では, 長田直樹著 雑誌「理系への数学」連載「お話：数値解析 第 3 回」を参考にオイラー・マクローリンの公式を導く. なお、連載記事は http://www.cis.twcu.ac.jp/ osada/rikei/rikei2008-7.pdf にて PDF 形式で閲覧することができる.

命題

関数 $f(x)$ は区間 $[a, b]$ で C^{2m+2} 級であるとする. この時,

$$I_N - I = \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} \left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right] + O(h^{2m+2}), \ \ (h \to +0) \quad (1.1)$$

が成り立つ. 但し, $B_i(t)$ はベルヌーイ多項式[2）], B_i はベルヌーイ数である.
今回の証明ではベルヌーイ多項式, ベルヌーイ数ともに $i = 2$ の場合

$$B_2(t) = t^2 - t + \frac{1}{6} \quad (1.2)$$

$$B_2 = \frac{1}{6} \quad (1.3)$$

を用いる. また, $x_j = a + jh$ である.

証明

$j = 0, ..., n-1 \ : \ k = 1, ..., m+1$ に対し, $I_{j,k}$ を

$$I_{i,k} = \frac{1}{(2k)!} \int_0^h B_{2k}\left(\frac{t}{h}\right) f^{(2k)}(x_j + t) dt \quad (1.4)$$

[2）] ベルヌーイ多項式 $B_i(t)$ の定義式は,

$$B_n(t) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} B_k t^{n-k}.$$

とおく. $k=1$ のとき 式 (1.2), (1.3) を用いると, $I_{j,1}$ は部分積分を用いて,

$$\begin{aligned}
I_{j,1} &= \frac{1}{2!}\int_0^h \left(\frac{t^2}{h^2}-\frac{t}{h}+B_2\right) f''(x_j+t)dt \\
&= \frac{1}{2!}\left[\Big(\frac{t^2}{h^2}-\frac{t}{h}+B_2\Big)f'(x_j+t)\right]_0^h - \frac{1}{2!}\int_0^h \left(\frac{2t}{h^2}-\frac{1}{h}\right) f'(x_j+t)dt \\
&= \frac{B_2}{2!}[f'(x_j+h)-f(x_j)] - \frac{1}{2!}\left[\Big(\frac{2t}{h^2}-\frac{1}{h}\Big)f(x_j+t)\right]_0^h + \frac{1}{2!}\int_0^h \frac{2}{h^2}f(x_j+t)dt \\
&= \frac{B_2}{2!}[f'(x_j+h)-f(x_j)] - \frac{1}{2h}[f(x_{j+1})+f(x_j)] + \frac{1}{h^2}\int_0^h f(x_j+t)dt \\
&= \frac{B_2}{2!}[f'(x_j+h)-f(x_j)] - \frac{1}{2h}[f(x_{j+1})+f(x_j)] + \frac{1}{h^2}\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(t)dt
\end{aligned} \tag{1.5}$$

となる. 式 (1.5) を $j=0,...,n-1$ につて加えると,

$$\sum_{j=0}^{n-1} I_{j,1} = \frac{B_2}{2!}[f'(b)-f'(a)] - \frac{1}{h^2}I_N + \frac{1}{h^2}I. \tag{1.6}$$

$k=2,...,m+1$ のとき, ベルヌーイ多項式の性質,

$$B'_k(t) = kB_{k-1}(t) \tag{1.7}$$

$$B_{2k}(1) = B_{2k}(0) = B_{2k} \tag{1.8}$$

$$B_{2k-1}(1) = B_{2k-1}(0) = 0 \tag{1.9}$$

に注意すると,

$$\begin{aligned}
I_{j,k} &= \frac{1}{(2k)!}\left[B_{2k}\Big(\frac{t}{h}\Big)f^{(2k-1)}(x_j+t)\right]_0^h - \frac{1}{(2k)!}\int_0^h \frac{1}{h}B'_{2k}\Big(\frac{t}{h}\Big)f^{(2k-1)}(x_j+t)dt \\
&= \frac{1}{(2k)!}\left[B_{2k}(1)f^{(2k-1)}(x_j+h) - B_{2k}(0)f^{(2k-1)}(x_j)\right] \\
&\quad - \frac{1}{(2k)!h}\int_0^h 2kB_{2k-1}\Big(\frac{t}{h}\Big)f^{(2k)}(x_j+t)dt \\
&= \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(x_j+1) - f^{(2k-1)}(x_j)\right] + \frac{1}{h^2}I_{j,k-1}
\end{aligned} \tag{1.10}$$

よって,

$$I_{j,k-1} = h^2 I_{j,k}\frac{B_{2k}h^2}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(x_{j+1}) - f^{(2k-1)}(x_j)\right] \tag{1.11}$$

となる. 式 (1.6), (1.11) より,

$$I_N - I = \sum_{k=1}^{m+1}\frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right] + R_{m+1}, \tag{1.12}$$

但し,

$$R_{m+1} = -h^{2m+2}\sum_{j=0}^{n-1} I_{j,m+1} \tag{1.13}$$

が言える. [0, 1] において $|B_{2n}(t)| \le |B_{2n}|$ が成り立つ[3] ので,

$$R_{m+1} = -\frac{h^{2m+2}}{(2m+2)!}\int_0^h B_{2m+1}\big(\frac{t}{h}\big)\sum_{j=0}^{n-1} f^{(2m+2)}(x_j+t)dt \tag{1.14}$$

より,

$$|R_{m+1}| \le \frac{h^{2m+2}|B_{2m+2}|}{(2m+2)!}\int_a^b |f^{(2m+2)}(t)|dt. \tag{1.15}$$

$f^{(2m+2)}(x)$ は区間 $[a,b]$ で連続だから

$$R_{m+1} = O(h^{(2m+2)}), \ \ (h \to +0). \tag{1.16}$$

したがって,

$$I_N - I = \sum_{k=1}^{m}\frac{B_{2k}}{(2k)!}h^{2k}\left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)\right] + O(h^{2m+2}), \ \ (h \to +0). \tag{1.17}$$

証明終わり.

オイラー・マクローリンの公式を使えば台形則の誤差を見積もることができる. 式の形を見ればわかるとおり, 区間数 N を倍 (刻み幅 h を半分) にすると誤差は約 1/4 になる. この事実は性質のよくわからない関数 $f(x)$ に対して, あるいは丸め誤差の大きさの見当がつけがたいときなどに, 台形則が台形則らしく働いているかどうかを確認するのに役立つ. しかし, 丸め誤差の観点から, むやみに N を大きくすればよいというものではない. 詳しくは伊理テキスト第 3 章 p.16 ページを参照されたい.

さて, すなわち I_N がすでに計算されているときに I_{2N} を計算するには, 台形則 I_N と中点則

$$J_N = h\sum_{n=1}^{N} f\bigg(a + \big(n - \frac{1}{2}\big)h\bigg) \tag{1.18}$$

の平均をとるとよい. この証明は, $N \to 2N$ のとき $h \to \dfrac{h}{2}$ となることを忘れなければ簡単である.

証明

$$\frac{I_N + J_N}{2} = I_{2N} = \frac{h}{2}\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{2N-1} f(a + \frac{nh}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right] \tag{1.19}$$

[3] 証明は割愛

を示す.

$$
\begin{aligned}
I_N + J_N &= h\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{N-1} f(a+nh) + \sum_{n=1}^{N} f\Bigl(a + \bigl(n-\frac{1}{2}\bigr)h\Bigr) + \frac{1}{2}f(b)\right] \\
&= h\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{2N-1} f(a+\frac{nh}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right]
\end{aligned} \tag{1.20}
$$

ゆえに,

$$
\frac{I_N + J_N}{2} = I_{2N} = \frac{h}{2}\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{n=1}^{2N-1} f(a+\frac{nh}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right]
$$

証明終わり.