

台形則近似

式で書いてある関数は、よほどのことがない限り解析的に微分できるが、積分はごく限られた形のものしか解析的に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)」である。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

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

の数値計算を扱う。

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

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

¹⁾例えば誤差関数

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

は解析的には積分できない。

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,

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

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) 式は「オイラー・マクローリン (Euler - Maclaurin) の公式」である. オイラー・マクローリンの公式の証明は付録を参照されたい. 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 GFD ワークノート「加減算の繰り返しによる桁落ち」を参照されたい.

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,

$$J_N = h \sum_{n=1}^N f\left(a + \left(n - \frac{1}{2}\right) h\right) \quad (2)$$

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

証明

$$\frac{I_N + J_N}{2} = I_{2N} = \frac{h}{2} \left[\frac{1}{2} f(a) + \sum_{n=1}^{2N-1} f\left(a + \frac{nh}{2}\right) + \frac{1}{2} f(b) \right] \quad (3)$$

を示す.

$$I_N + J_N = h \left[\frac{1}{2} f(a) + \sum_{n=1}^{N-1} f(a + nh) + \sum_{n=1}^N f\left(a + \left(n - \frac{1}{2}\right) h\right) + \frac{1}{2} f(b) \right] \\ = h \left[\frac{1}{2} f(a) + \sum_{n=1}^{2N-1} f\left(a + \frac{nh}{2}\right) + \frac{1}{2} f(b) \right] \quad (4)$$

ゆえに,

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

また定義より, I_{2N} は,

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

ここで, $N \rightarrow 2N$ のとき $h \rightarrow \frac{h}{2}$ であることを用いている. よって,

$$\frac{I_N + J_N}{2} = I_{2N}.$$

証明終わり.

付録: オイラー・マクローリンの公式の導出

(1) 式はオイラー・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/rieki/rieki2008-7.pdf> にて PDF 形式で閲覧することができる。以下の命題を証明する。

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、

$$I_N - I = \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} [f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a)] + O(h^{2m+2}), \quad (h \rightarrow +0) \quad (\text{A. 1})$$

が成り立つ。但し、 $x_j = a + jh$ である。また、 $B_i(t)$ はベルヌーイ多項式である。ベルヌーイ多項式 $B_i(t)$ の定義式は、

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

また、 B_k はベルヌーイ数と呼ばれ、

$$\begin{cases} B_0 = 1 \\ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k = 0 \quad (n = 2, 3, \dots) \end{cases}$$

を満たすように定義される。

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

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

$$B_2 = \frac{1}{6} \quad (\text{A. 3})$$

を用いる.

証明

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

$$I_{i,k} = \frac{1}{(2k)!} \int_0^h B_{2k} \left(\frac{t}{h} \right) f^{(2k)}(x_j + t) dt \quad (\text{A. 4})$$

とおく. $k = 1$ のとき (A. 2), (A. 3) 式を用いると, $I_{j,1}$ は部分積分を用いて,

$$\begin{aligned} I_{j,1} &= \frac{1}{2!} \int_0^h \left(\frac{t^2}{h^2} - \frac{t}{h} + B_2 \right) f''(x_j + t) dt \\ &= \frac{1}{2!} \left[\left(\frac{t^2}{h^2} - \frac{t}{h} + B_2 \right) f'(x_j + t) \right]_0^h - \frac{1}{2!} \int_0^h \left(\frac{2t}{h^2} - \frac{1}{h} \right) f'(x_j + t) dt \\ &= \frac{B_2}{2!} [f'(x_j + h) - f'(x_j)] - \frac{1}{2!} \left[\left(\frac{2t}{h^2} - \frac{1}{h} \right) f(x_j + t) \right]_0^h + \frac{1}{2!} \int_0^h \frac{2}{h^2} f(x_j + t) dt \\ &= \frac{B_2}{2!} [f'(x_{j+1}) - f'(x_j)] - \frac{1}{2h} [f(x_{j+1}) + f(x_j)] + \frac{1}{h^2} \int_0^h f(x_j + t) dt \\ &= \frac{B_2}{2!} [f'(x_{j+1}) - f'(x_j)] - \frac{1}{2h} [f(x_{j+1}) + f(x_j)] + \frac{1}{h^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(t) dt \end{aligned} \quad (\text{A. 5})$$

となる. (A. 5) 式を $j = 0, \dots, n-1$ について加えると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{n-1} I_{j,1} &= \frac{B_2}{2!} [f'(x_1) + f'(x_2) + \dots + f'(x_{n-1}) + f'(b) - f'(a) - \dots - f'(x_{n-1})] \\ &\quad - \frac{1}{2h} [f(a) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(b)] + \frac{1}{h^2} \left(\int_a^{x_1} f(t) dt + \dots + \int_{x_{n-1}}^b f(t) dt \right) \\ &= \frac{B_2}{2!} [f'(b) - f'(a)] - \frac{1}{h^2} I_N + \frac{1}{h^2} I. \end{aligned} \quad (\text{A. 6})$$

次に, (A. 4) 式において $k = 2, \dots, m+1$ のときを考える. ベルヌーイ多項式の性質,

$$B'_k(t) = kB_{k-1}(t), \quad (\text{A. 7})$$

$$B_{2k}(1) = B_{2k}(0) = B_{2k}, \quad (\text{A. 8})$$

$$B_{2k-1}(1) = B_{2k-1}(0) = 0 \quad (\text{A. 9})$$

を用いると²⁾,

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

ここで, (A. 9) 式より第 2 項目が零になるので,

$$\begin{aligned}
I_{j,k} &= \frac{1}{(2k)!} \left[B_{2k}(1) f^{(2k-1)}(x_j + h) - B_{2k}(0) f^{(2k-1)}(x_j) \right] \\
&\quad + \frac{1}{(2k-1)! h} \int_0^h \frac{1}{h} B'_{2k-1} \left(\frac{t}{h} \right) f^{(2k-1)}(x_j + t) dt \\
&= \frac{1}{(2k)!} \left[B_{2k}(1) f^{(2k-1)}(x_j + h) - B_{2k}(0) f^{(2k-1)}(x_j) \right] \\
&\quad + \frac{1}{(2k-1)! h^2} \int_0^h (2k-1) B_{2(k-1)} \left(\frac{t}{h} \right) f^{(2k-1)}(x_j + t) dt \\
&= \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left[f^{(2k-1)}(x_{j+1}) - f^{(2k-1)}(x_j) \right] + \frac{1}{h^2} I_{j,k-1}. \tag{A. 10}
\end{aligned}$$

(A. 10) 式において $k = 2, \dots, m+1$ の具体的な値を計算しておく. $k = 2$ の時は,

$$I_{j,2} = \frac{1}{h^2} I_{j,1} + \frac{B_4}{(4)!} \left[f^{(3)}(x_{j+1}) - f^{(3)}(x_j) \right]$$

となる. この $I_{j,2}$ を使って $k = 3$ のときの $I_{j,3}$ を求める.

$$\begin{aligned}
I_{j,3} &= \frac{1}{h^2} I_{j,2} + \frac{B_6}{(6)!} \left[f^{(5)}(x_{j+1}) - f^{(5)}(x_j) \right] \\
&= \frac{1}{h^2} \left(\frac{1}{h^2} I_{j,1} + \frac{B_4}{(4)!} \left[f^{(3)}(x_{j+1}) - f^{(3)}(x_j) \right] \right) + \frac{B_6}{(6)!} \left[f^{(5)}(x_{j+1}) - f^{(5)}(x_j) \right]
\end{aligned}$$

よって, $k = m+1$ のときは

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

²⁾ベルヌーイ多項式の性質の証明は付録 B に示す.

さらに $j = 0, \dots, n-1$ まで足し合わせて $I_{j,1}$ について解くと

$$\sum_{j=0}^{n-1} I_{j,1} = h^{2m} \sum_{j=0}^{n-1} I_{j,m+1} - \sum_{k=2}^{m+1} \frac{B_{2k}}{(2k)! h^{-2(k-1)}} \left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right]. \quad (\text{A. 11})$$

(A. 6), (A. 11) 式より,

$$I_N - I = \sum_{k=1}^{m+1} \frac{B_{2k} h^{2k}}{(2k)!} \left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right] + R_{m+1}, \quad (\text{A. 12})$$

但し,

$$R_{m+1} = -h^{2m+2} \sum_{j=0}^{n-1} I_{j,m+1} \quad (\text{A. 13})$$

である. I_{jk} の定義から

$$R_{m+1} = -\frac{h^{2m+2}}{(2m+2)!} \int_0^h B_{2m+2} \left(\frac{t}{h} \right) \sum_{j=0}^{n-1} f^{(2m+2)}(x_j + t) dt \quad (\text{A. 14})$$

となる. t が $[0, 1]$ において, $|B_{2n}(t)| \leq |B_{2n}|$ が成り立つ³⁾ので,

$$\begin{aligned} |R_{m+1}| &\leq \frac{h^{2m+2} |B_{2m+2}|}{(2m+2)!} \int_0^h \sum_{j=0}^{n-1} |f^{(2m+2)}(x_j + t)| dt \\ &= \frac{h^{2m+2} |B_{2m+2}|}{(2m+2)!} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} |f^{(2m+2)}(t)| dt \\ &= \frac{h^{2m+2} |B_{2m+2}|}{(2m+2)!} \int_a^b |f^{(2m+2)}(t)| dt. \end{aligned} \quad (\text{A. 15})$$

$f^{(2m+2)}(x)$ は区間 $[a, b]$ で連続なので, $h \ll 1$ のとき

$$R_{m+1} = O(h^{2m+2}). \quad (\text{A. 16})$$

したがって,

$$I_N - I = \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k} \left[f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right] + O(h^{2m+2}), \quad (h \rightarrow +0). \quad (\text{A. 17})$$

証明終わり.

³⁾証明は割愛. 2014 年度に行う.

付録 B: ベルヌーイ多項式の性質

ここでは, (A.7), (A.8), (A.9) 式のベルヌーイ多項式の証明を行う. なお, 上記の付録と同様に長田直樹著雑誌「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. 連載記事は <http://www.cis.twcu.ac.jp/~osada/rieki/rieki2008-7.pdf> にて PDF 形式で閲覧することができる.

$$B'_k(t) = kB_{k-1}(t), \quad (\text{A.7})$$

$$B_{2k}(1) = B_{2k}(0) = B_{2k}, \quad (\text{A.8})$$

$$B_{2k-1}(1) = B_{2k-1}(0) = 0 \quad (\text{A.9})$$

始めに, ベルヌーイ多項式の定義式と, ベルヌーイ数の定義式を再掲しておく. ベルヌーイ多項式の定義式は,

$$B_n(t) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k t^{n-k}. \quad (\text{B.1})$$

ベルヌーイ数の定義式は,

$$\begin{cases} B_0 = 1 \\ \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k = 0 \quad (n = 2, 3, \dots) \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

まず (A.7) 式を証明する. (B.1) 式を両辺を微分して,

$$\begin{aligned} B'_n(t) &= \sum_{k=0}^{n-1} (n-k) \binom{n}{k} B_k t^{n-1-k} \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{n!}{k!(n-1-k)!} B_k t^{n-1-k} \\ &= n \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} B_k t^{n-1-k} \\ &= nB_{n-1}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

となる。

次に (A.8) 式を証明する。ベルヌーイ多項式の定義式 (B. 1) に $t = 0$ を代入すると、 $n = k$ のときの係数だけが残るので、

$$B_n(0) = B_n. \quad (\text{B. 4})$$

また、 $t = 1$ を代入すると、

$$B_n(1) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k. \quad (\text{B. 5})$$

ベルヌーイ数の定義式 (B. 2) を (B. 5) 式に代入すると、

$$B_n(1) = B_n \quad (\text{B. 6})$$

これらから、(A.8) 式は成り立つ。

最後に、(A.9) 式を証明する。まず、 $B_{2k+1} = 0$ ($k = 2, 3, \dots$) であることを示す。まず、以下のベルヌーイ数の母関数と、ベルヌーイ多項式の母関数を導入する。

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!}, \quad (\text{B. 7})$$

$$\frac{x e^{tx}}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{x^n}{n!}. \quad (\text{B. 8})$$

まずベルヌーイ数の母関数を導出する。 e^x をテイラー展開して変形すると、

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!},$$

$$e^x - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

となる。よって、(B. 7) 式の両辺に $e^x - 1$ をかけて

$$x = \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{x^m}{m!} \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} B_k \frac{x^k}{k!} \right) \quad (\text{B. 9})$$

となることを示せばよい。なおここで紛れを防ぐため、(B. 7) 式の右辺の総和の添え字を k に、 e^x の展開式の総和の添え字を m に書き変えている。左辺の和の記号をまとめて変形すると、

$$(\text{左辺}) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k x^{k+m}}{k! m!}$$

$k + m = n$ において, m を消去する. $m \geq 1$ なので, $n - k \geq 1$ より, $n - 1 \geq k$ なので,

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{B_k x^n}{k!(n-k)!} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k \frac{x^n}{n!}. \end{aligned}$$

ここで,

$$(\text{左辺}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k \frac{x^n}{n!}$$

ベルヌーイ数の定義式 (B. 2) を代入すると,

$$(\text{左辺}) = x$$

となる. よって, (B. 9) が示されたので, ベルヌーイ数の母関数は,

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{x^n}{n!}. \quad (\text{B. 10})$$

であることがわかった.

これを用いて, (B. 8) 式を導出する. e^{tx} をテイラー展開すると,

$$e^{tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(tx)^n}{n!}$$

となる. これとベルヌーイ数の母関数の式 (B. 2) を (B. 8) 式の左辺に代入する. 先ほどと同様に紛れを防ぐため, ベルヌーイ数の母関数の総和の添え字を k に, e^{tx} の総和の添え字を m に書きかえると,

$$\begin{aligned} ((\text{B.8}) \text{ 式の左辺}) &= \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(tx)^m}{m!} \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} B_k \frac{x^k}{k!} \right), \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(tx)^m}{m!} B_k \frac{x^k}{k!}, \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k t^m x^{m+k}}{m! k!}, \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{B_k t^{n-k} x^n}{(n-k)! k!}, \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k t^{n-k} \frac{x^n}{n!}. \end{aligned} \quad (\text{B. 11})$$

なお途中で $m + k = n$ とおいている。ベルヌーイ多項式の定義式 (B. 1) より,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k t^{n-k} \frac{x^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{x^n}{n!}. \quad (\text{B. 12})$$

よって,

$$\frac{x e^{tx}}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{x^n}{n!}$$

となり, (B. 8) 式が導かれた.

この式の両辺入れ替えて t に $1 - t$ を代入して変形すると,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} B_n(1-t) \frac{x^n}{n!} &= \frac{x e^{(1-t)x}}{e^x - 1} \\ &= \frac{(-x) e^{t(-x)}}{e^{-x} - 1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} B_n(t) \frac{(-x)^n}{n!}. \end{aligned}$$

辺辺比べると,

$$B_n(1-t) = (-1)^n B_n(t).$$

$t = 1$ を代入すると,

$$B_n(0) = (-1)^n B_n(1).$$

$t = 0$ を代入すると,

$$B_n(1) = (-1)^n B_n(0).$$

(A.8) 式の証明から, $B_n(1) = B_n(0)$ ($n = 2, 3, \dots$) なので, n が 3 以上の奇数のときこの式が成り立つには,

$$B_n(1) = B_n(0) = 0 \quad (n \text{ は } 3 \text{ 以上の奇数})$$

証明終わり.

参考文献

長田直樹: 雑誌「理系への数学」連載「お話: 数値解析第 3 回」

<http://www.cis.twcu.ac.jp/~osada/rieki/rieki2008-7.pdf>

伊理正夫・藤野 和建, 1985: 数値計算の常識, 共立出版