

数值解析

第12回 数值積分

舟木 剛

平成29年1月11日2限

シラバス

- 授業の目的
 - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる。
- 授業計画
 - 数値計算と誤差(1回)
 - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに、行列式とその性質、行及び列の交換などの基本演算、逆行列の定義と求め方について説明する。
 - 代数方程式(2回)
 - 2分法, Newton-Raphson 法, Bailey 法について解説する。また、多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる。
 - 連立方程式(3回)
 - Gauss の消去法, Gauss-Jordan の掃き出し法, LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する。また, Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する。
 - 行列の固有値(3回)
 - 固有値の性質, べき乗法, Householder 法, QR 法について述べる。QR 法の収束定理について解説する。
 - 補間法(2回)
 - 線形補間, Lagrange 補間, Newton 補間, スプライン補間について述べる。多項式補間については算出方法をスプライン補間については3次のスプライン関数の導出方法を説明する。また, 自然なスプライン関数とその特徴について解説する。
 - 関数近似(1回)
 - 最小2乗法による関数の近似について解説する。
 - 数値積分(1回)
 - 台形公式, シンプソンの公式による数値積分について解説する。
 - 常微分方程式(1回)
 - 単区分法である Euler 法, 修正 Euler 法, Runge-Kutta 法ならびに複区分法である Adams-Moulton の予測子・修正子法について解説する。また, 数値不安定性についても解説する。
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

数値積分

- 関数 $f(x)$ の定積分

- $f(x)$ が簡単な場合 → 解析解
- $f(x)$ が複雑な場合 → 数値積分

- 積分 → 積算による近似

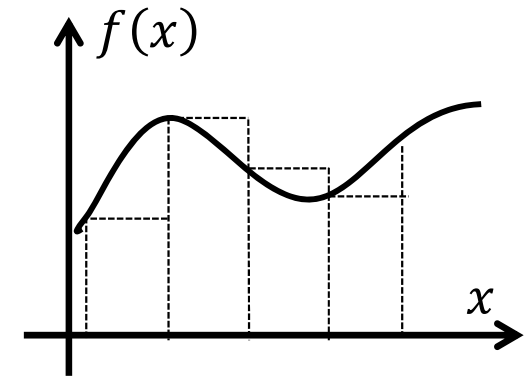
- 積分範囲 $[a, b]$ の定積分

- n 区間に分割

- 分割点 $x_i (i = 0, 1, \dots, n)$ の関数値 $f(x_i)$ を用いて近似

- $$I = \int_a^b f(x) dx \cong \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

- w_i 重み → 近似誤差が小さくなるように選ぶ



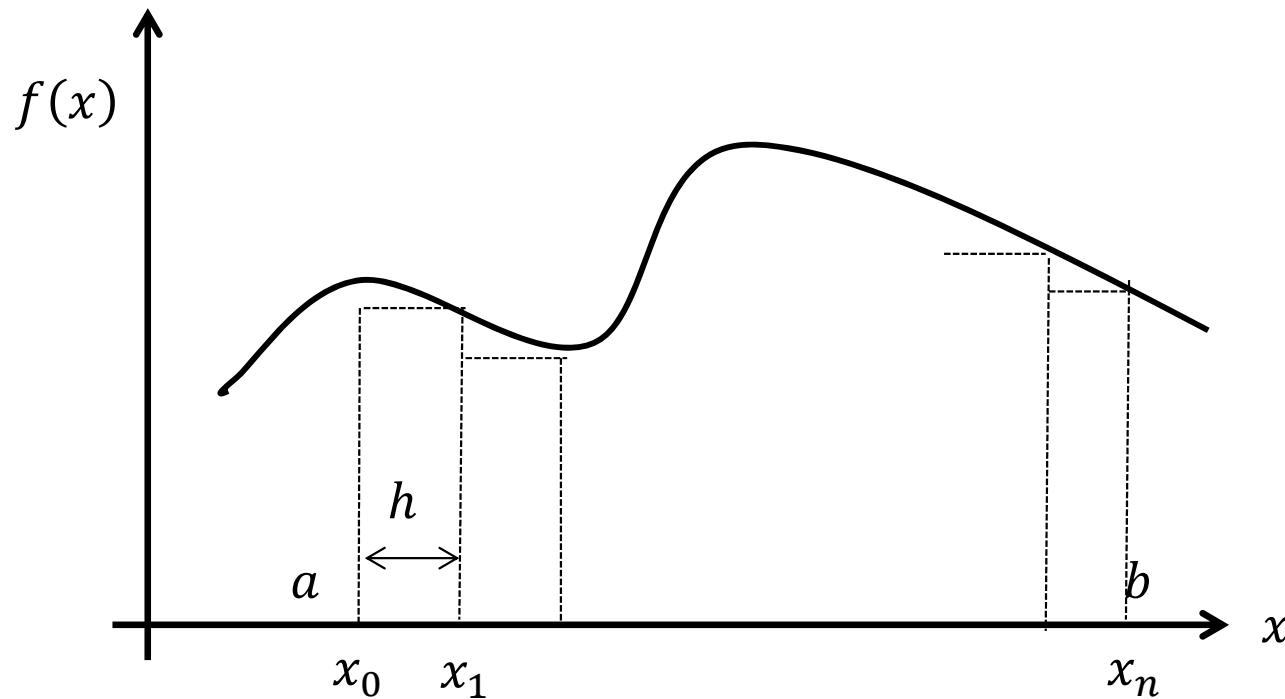
短冊の面積を
求めるのに相当

数値積分

- 積分区間を等間隔に分割
 - 区分求積法 $y_i = f(x_i)$ として求める
 - 関数 $f(x)$ を m 次補間多項式として近似
 - $I \cong \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$ の重み w_i を与える
 - ニュートン・コーツ型の積分公式
 - 1次の補間多項式 → 台形公式
 - 2次の補間多項式 → シンプソン公式 等
 - その他
 - 精度の逐次改善を図ったもの → ロンバーグ法
- 積分区間を不等間隔に分割
 - ガウス型積分公式 → 直交多項式の零点を分点とする
 - チェビシェフ・ガウスの積分公式
 - ルジャンドル・ガウスの積分公式

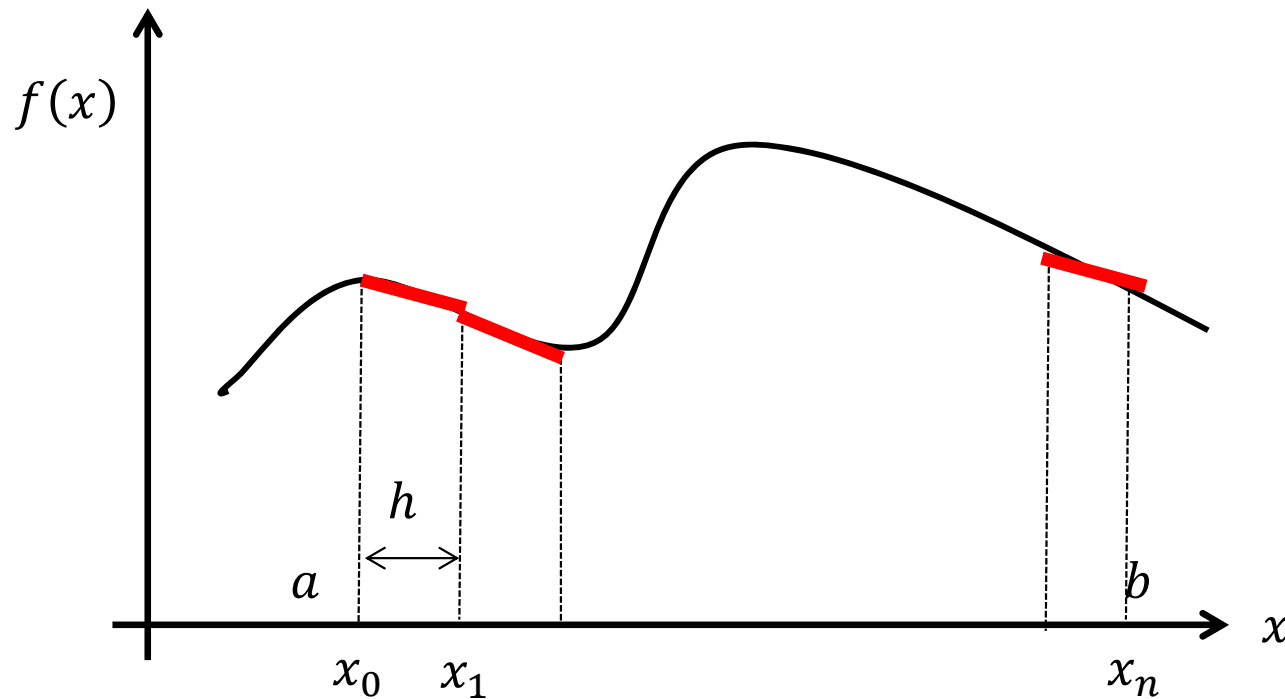
区分求積法

- 積分区間 $[a, b]$ を n 個の等間隔 h で分割
 - $I \cong h \sum_{i=1}^n f(x_i)$ として求める



台形公式

- 積分区間 $[a, b]$ を n 個の等間隔 h で分割
 - 関数 $f(x)$ を一次補間多項式(直線)で近似



台形公式

- 積分区間 $[a, b]$ を n 等分

- 刻み幅 $h = \frac{b-a}{n}$

- 分割点 $x_i = a + ih$ ($i = 0, 1, \dots, n$)

- 被積分関数 $f(x)$ の x_i 近傍でのテイラー展開

- $f(x_i + z) = f(x_i) + \frac{z}{1!} f'(x_i) + \frac{z^2}{2!} f''(x_i) + \frac{z^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{z^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots$

- $f'(x_i)$ でまとめると

- $f'(x_i) = \frac{f(x_i+z) - f(x_i)}{z} - \frac{z}{2!} f''(x_i) - \frac{z^2}{3!} f^{(3)}(x_i) - \frac{z^3}{4!} f^{(4)}(x_i) - \dots$

台形公式

- 分割点 x_i から x_{i+1} までの積分をテイラー展開を使って考える

- $$I_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_i+h} f(x) dx = \int_0^h f(x_i + z) dz$$
 - ただし $x = x_i + z, x_{i+1} = x_i + h$ z の積分にする $dx = dz$

- $$I_i = \int_0^h \left\{ f(x_i) + \frac{z}{1!} f'(x_i) + \frac{z^2}{2!} f''(x_i) + \frac{z^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{z^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots \right\} dz$$

$$= \left[z f(x_i) + \frac{z^2}{2 \times 1!} f'(x_i) + \frac{z^3}{3 \times 2!} f''(x_i) + \frac{z^4}{4 \times 3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{z^5}{5 \times 4!} f^{(4)}(x_i) + \dots \right]_0^h$$

$$= h f(x_i) + \frac{h^2}{2!} f'(x_i) + \frac{h^3}{3!} f''(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{(3)}(x_i) + \frac{h^5}{5!} f^{(4)}(x_i) + \dots$$

- $$z = h \text{ として } f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{h}{2!} f''(x_i) - \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(x_i) - \frac{h^3}{4!} f^{(4)}(x_i) - \dots$$

を代入

台形公式

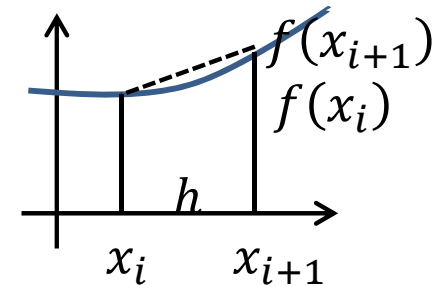
- 積分計算の変形

- $$\begin{aligned} I_i &= hf(x_i) + \frac{h^2}{2!} \left\{ \frac{f(x_i+h) - f(x_i)}{h} - \frac{h}{2!} f''(x_i) - \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(x_i) - \frac{h^3}{4!} f^{(4)}(x_i) - \dots \right\} \\ &\quad + \frac{h^3}{3!} f''(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{(3)}(x_i) + \frac{h^5}{5!} f^{(4)}(x_i) + \dots \\ &= hf(x_i) + \frac{h}{2} \{f(x_i+h) - f(x_i)\} + f''(x_i) \left\{ \frac{h^3}{3!} - \frac{h^3}{2 \times 2!} \right\} + f^{(3)}(x_i) \left\{ \frac{h^4}{4!} - \frac{h^4}{2 \times 3!} \right\} \\ &\quad + f^{(4)}(x_i) \left\{ \frac{h^5}{5!} - \frac{h^5}{2 \times 4!} \right\} + \dots \\ &= \frac{h}{2} \{f(x_i+h) + f(x_i)\} - \frac{h^3}{12} f''(x_i) - \frac{h^4}{24} f^{(3)}(x_i) - \frac{h^5}{80} f^{(4)}(x_i) - \dots \end{aligned}$$

- h^3 以降の項を無視

- $$I_i \cong \frac{h}{2} \{f(x_i+h) + f(x_i)\}$$
- ここで $x_i+h = x_{i+1}$
 - $$I_i \cong \frac{h}{2} \{f(x_{i+1}) + f(x_i)\}$$

台形公式



- $I_i = \frac{h}{2} \{f(x_{i+1}) + f(x_i)\}$
 - 2点 $(x_i, f(x_i)), (x_{i+1}, f(x_{i+1}))$ を直線で近似した台形の面積
- 区間 $[a, b]$ の積分 \rightarrow n 個の区間の積分 I_i の和

$$\begin{aligned}
 I &= \int_a^b f(x) dx \cong \sum_{i=0}^{n-1} I_i \\
 &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2} \{f(x_{i+1}) + f(x_i)\} \\
 &= \frac{h}{2} \left\{ \underset{\substack{\uparrow \\ \text{はじめ}}}{f(x_0)} + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{おわり}}}{f(x_n)} \right\}
 \end{aligned}$$

台形公式

- 区間 $[x_i, x_{i+1}]$ における台形公式の積分誤差 E_i

- $$E_i = I_i - \frac{h}{2} \{f(x_{i+1}) + f(x_i)\} = -\frac{h^3}{12} f''(x_i) - \frac{h^4}{24} f^{(3)}(x_i) - \frac{h^5}{80} f^{(4)}(x_i) - \dots = -\frac{h^3}{12} f''(x_i) - O(h^4)$$

- $f(x)$ が一次関数の場合 $f''(x) = f^{(3)}(x) = f^{(4)}(x) = \dots = 0$ となるので誤差は $E_i = 0$

- 区間 $[a, b]$ における台形公式の積分誤差 E

- $$E \leq \sum_{i=0}^{n-1} |E_i| = \sum_{i=0}^{n-1} \left| -\frac{h^3}{12} f''(x_i) - O(h^4) \right| \leq n \left| \frac{h^3}{12} M + O(h^4) \right|$$

- ただし $M = \max_{a \leq x \leq b} f''(x)$

- h が十分に小さいとき $\frac{h^3}{12} M \gg O(h^4)$

- $$E \leq n \frac{h^3}{12} M = \frac{b-a}{h} \frac{h^3}{12} M = h^2 \frac{b-a}{12} M$$

- 刻み幅 $h = \frac{b-a}{n}$

- 誤差は刻み幅 h の二乗 h^2 に比例

- 刻み幅半分で誤差1/4

台形公式

- 刻み幅 h の設定

- 刻み幅 h と刻み幅 $\frac{h}{2}$ の積分計算の比較

- 刻み幅 h $I_i = \frac{h}{2} \{f(x_i + h) + f(x_i)\}$ これだけ新たに求める
漸増計算が可能

- 刻み幅 $\frac{h}{2}$ $I'_{i+1} = \frac{h}{4} \{f(x_i + h) + 2f(x_i + \frac{h}{2}) + f(x_i)\}$

- 判断基準 $|I'_{i+1} - I_i| \leq \varepsilon$ または $\left| \frac{I'_{i+1} - I_i}{I'_{i+1}} \right| \leq \varepsilon$

- 収束判定指数 ε

- 刻み幅を小さくすると誤差は小さくなる

- 計算回数は増加する \rightarrow 丸め誤差が増加

シンプソン公式

- $f(x)$ を二次の補間多項式で近似
 - 台形公式より少ない計算量で, 誤差が小さくなる
- 積分区間 $[a, b]$ を $2n$ 等分
 - 刻み幅 $h = \frac{b-a}{2n}$
 - 分割点 x_0, x_1, \dots, x_{2n}
 - 分割点 x_{i-1} から x_{i+1} までの積分 I_i を考える
 - $I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx = \int_{-h}^h f(x_i + z)dz$
 - ただし $x = x_i + z$

シンプソン公式

- 被積分関数 $f(x)$ のテイラー展開

- $f(x_{i+1}) = f(x_i + h) = f(x_i) + \frac{h}{1!} f'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots$

- $f(x_{i-1}) = f(x_i - h) = f(x_i) + \frac{-h}{1!} f'(x_i) + \frac{(-h)^2}{2!} f''(x_i) + \frac{(-h)^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{(-h)^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots$

- 二階の導関数を求める

- $f(x_{i+1})$ と $f(x_{i-1})$ のテイラー展開の和

$$\begin{aligned} & f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) \\ &= f(x_i) + f(x_i) + \frac{h + (-h)}{1!} f'(x_i) + \frac{h^2 + (-h)^2}{2!} f''(x_i) + \frac{h^3 + (-h)^3}{3!} f^{(3)}(x_i) \\ &+ \frac{h^4 + (-h)^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots \\ &= 2f(x_i) + 2 \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + 2 \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + 2 \frac{h^6}{6!} f^{(6)}(x_i) + \dots \end{aligned}$$

- $f''(x_i) = \frac{1}{h^2} \left\{ f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}) - 2 \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) - 2 \frac{h^6}{6!} f^{(6)}(x_i) - \dots \right\}$

シン普森公式

- 被積分関数 $f(x)$ の x_i 近傍でのテイラー展開を用いて積分 I_i を求める

$$\begin{aligned}
 I_i &= \int_{-h}^h \left\{ f(x_i) + \frac{z}{1!} f'(x_i) + \frac{z^2}{2!} f''(x_i) + \frac{z^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{z^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \dots \right\} dz \\
 &= \left[z f(x_i) + \frac{z^2}{2 \times 1!} f'(x_i) + \frac{z^3}{3 \times 2!} f''(x_i) + \frac{z^4}{4 \times 3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{z^5}{5 \times 4!} f^{(4)}(x_i) \right. \\
 &\quad \left. + \dots \right]_{-h}^h \\
 &= \{h - (-h)\} f(x_i) + \frac{h^2 - (-h)^2}{2!} f'(x_i) + \frac{h^3 - (-h)^3}{3!} f''(x_i) \\
 &\quad + \frac{h^4 - (-h)^4}{4!} f^{(3)}(x_i) + \frac{h^5 - (-h)^5}{5!} f^{(4)}(x_i) + \dots \\
 &= 2h f(x_i) + \frac{2h^3}{3!} f''(x_i) + \frac{2h^5}{5!} f^{(4)}(x_i) + \frac{2h^7}{7!} f^{(6)}(x_i) + \dots
 \end{aligned}$$

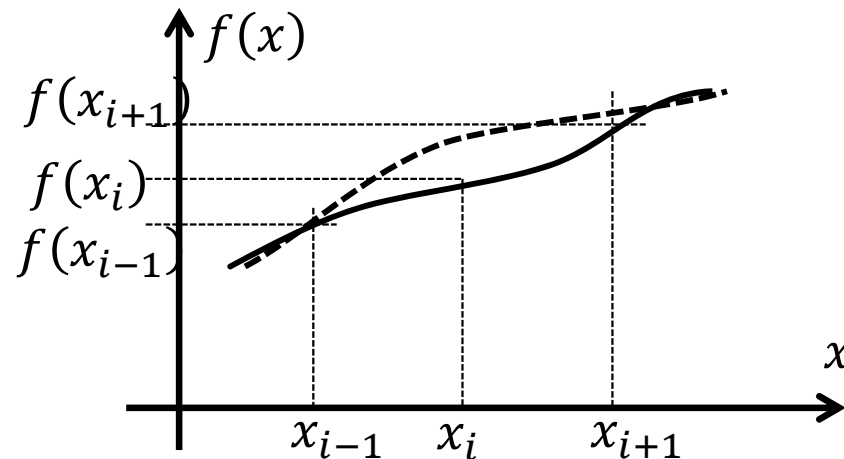
- $f''(x_i) = \frac{1}{h^2} \{ f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}) - 2\frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) - 2\frac{h^6}{6!} f^{(6)}(x_i) - \dots \}$ を代入

シン普森公式

- $$I_i = 2hf(x_i) + \frac{2h^3}{3!} \frac{1}{h^2} \left\{ f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}) - 2\frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) - 2\frac{h^6}{6!} f^{(6)}(x_i) - \dots \right\} + \frac{2h^5}{5!} f^{(4)}(x_i) + \frac{2h^7}{7!} f^{(6)}(x_i) + \dots$$
$$= \frac{h}{3} \left\{ \begin{array}{l} 6f(x_i) + f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}) - 2\frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) - 2\frac{h^6}{6!} f^{(6)}(x_i) - \dots \\ \frac{6h^4}{5!} f^{(4)}(x_i) + \frac{6h^6}{7!} f^{(6)}(x_i) + \dots \end{array} \right\}$$
$$= \frac{h}{3} \left\{ f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1}) + h^4 \left(\frac{6}{5!} - \frac{2}{4!} \right) f^{(4)}(x_i) + h^6 \left(\frac{6}{7!} - \frac{2}{6!} \right) f^{(6)}(x_i) \right\}$$

シンプソン公式

- $$I_i = \frac{h}{3} \left\{ f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1}) - h^4 \frac{1}{30} f^{(4)}(x_i) - h^6 \frac{1}{630} f^{(6)}(x_i) - \dots \right\}$$
- h^4 以上の項を無視
 - $$I_i \cong \frac{h}{3} \{ f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1}) \}$$



シンプソン公式

- I_i は分割点 x_{i-1} から x_{i+1} までの積分
- $2n$ 等分された区間 $[a, b]$ の積分 I は
 - $i = 2j + 1$ ($j = 0, 1, \dots, n - 1$)とすると
 - $i - 1 = 0, 2, \dots, 2n - 2$
 - $i + 1 = 2, 4, \dots, 2n$
 - $$I = \int_a^b f(x)dx \cong \sum_{j=0}^{n-1} I_{2j+1} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{h}{3} \{f(x_{2j}) + 4f(x_{2j+1}) + f(x_{2j+2})\} = \frac{h}{3} \{ \sum_{j=0}^{n-1} [f(x_{2j}) + 4f(x_{2j+1})] + \sum_{j=1}^n f(x_{2j}) \} = \frac{h}{3} \{ f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_{2j}) + f(x_{2n}) + 4 \sum_{j=0}^{n-1} f(x_{2j+1}) \}$$

シンプソン公式

- 区間 $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ におけるシンプソン公式の積分誤差 E_i
 - $E_i = I_i - \frac{h}{3} \{f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1})\} = \frac{h}{3} \left\{ -h^4 \frac{1}{30} f^{(4)}(x_i) - h^6 \frac{1}{630} f^{(6)}(x_i) - \dots \right\} = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(x_i) - O(h^7)$
 - $f(x)$ が2次関数の場合 $f^{(3)}(x) = f^{(4)}(x) = \dots = 0$ となるので誤差は $E_i = 0$
- 区間 $[a, b]$ におけるシンプソン公式の積分誤差 E
 - $E \leq \sum_{i=0}^{n-1} |E_i| = \sum_{i=0}^{n-1} \left| -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(x_i) - O(h^7) \right| \leq n \left| \frac{h^5}{90} M + O(h^7) \right|$
 - ただし $M = \max_{a \leq x \leq b} f^{(4)}(x)$
 - h が十分に小さいとき $\frac{h^5}{90} M \gg O(h^7)$
 - $E \leq n \frac{h^5}{90} M = \frac{b-a}{2h} \frac{h^5}{90} M = h^4 \frac{b-a}{180} M$
 - 刻み幅 $h = \frac{b-a}{2n}$
 - 誤差は刻み幅 h の二乗 h^4 に比例
 - 刻み幅半分で誤差1/16

シンプソン公式

- 刻み幅 h の設定

- 刻み幅 h と刻み幅 $\frac{h}{2}$ の積分計算の比較

- 刻み幅 h $I_i = \frac{h}{3} \{f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1})\}$

- 刻み幅 $\frac{h}{2}$ I'_{i+1}

$$= \frac{h}{6} \{f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) + f(x_{i+1}) + f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1})\}$$

$$= \frac{h}{6} \{f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) + 2f(x_{i+1}) + 4f(x_i) + f(x_{i-1})\}$$