4 数値微分と数値積分

4.1 数値微分

時間 t により変化する変数 x の微分演算

$$\frac{dx}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} \tag{4.1}$$

を数値計算する場合，$\Delta t \to 0$ の極限をとる部分に関して，ある有限の数値 Δt を用いて，

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} \tag{4.2}$$

とすることが考えられる．しかしながら，Δt が十分な小ささをもっていないと，これは無視できない誤差を含むことになり，なんらかの補正を行うことが必要である．

補間の章で述べたように，間隔の等しい点列 $x_0, \cdots, x_n$ に対しての関数の値が $f_0, \cdots f_n$ で与えられている場合，Newton の等差前進補間式を微分することで，微分を計算することができる．

$$P(x) = f_0 + s\Delta f_0 + \cdots + \frac{s(s-1)\cdots(s-N+1)}{N!}\Delta^N f_0 \tag{4.3}$$

$$\frac{dP(x)}{dx} = \frac{1}{h}\frac{dP(x)}{ds} = \frac{1}{h}\sum_{k=1}^{n}\frac{d}{ds}\frac{s(s-1)\cdots(s-k+1)}{k!}\Delta^k f_0 \tag{4.4}$$

ここで $n=1$，すなわち，$(x_0, f_0), (x_1, f_1)$ が与えられているときの微分は次のようになる．

$$\frac{dF(x)}{dx} = \frac{1}{h}\Delta f_0 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} \tag{4.5}$$

今，微分を求める点を中心とした等差の 3 点の列 (x_{-1}, x_0, x_1) を考えると

$$P(x) = \frac{s(s-1)}{(-1)(-2)}f_{-1} + \frac{(s+1)(s-1)}{(1)(-1)}f_0 + \frac{(s+1)s}{(2)(1)}f_1 + O(h^3) \tag{4.6}$$

で与えられる．ここで，$O(h^3)$ は誤差を表す項である．これを x で微分すると，

$$\frac{dP(x)}{dx} = \frac{1}{h}\frac{dP}{ds} = \frac{1}{h}\left(\frac{2s-1}{2}f_{-1} - 2sf_0 + \frac{2s+1}{2}f_1\right) + O(h^3) \tag{4.7}$$

となり，点列の中心，x_0 での微分の値は $s=0$ とおくことで，

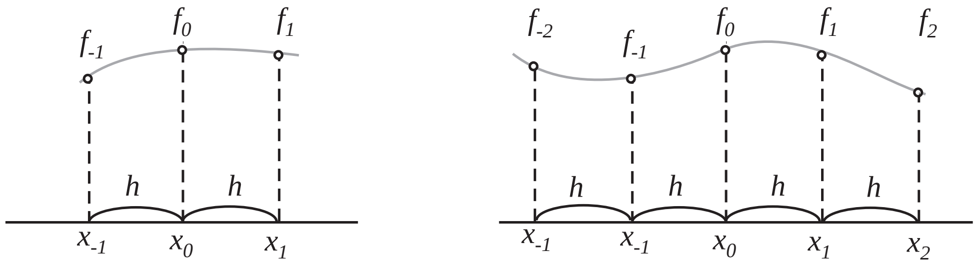
$$\left.\frac{dF(x)}{dx}\right|_{x=x_0} = \frac{1}{2h}(f_1 - f_{-1}) + O(h^3) \tag{4.8}$$

となる．同様に 5 点の補間の式では以下の式が得られる．

$$\left.\frac{dF(x)}{dx}\right|_{x=x_0} = \frac{1}{12h}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2) + O(h^5) \tag{4.9}$$

【練習問題 4-1】
今，$F(x) = x^4 + x^3 - x^2 + x - 8$ を考える．この曲線上に $\{x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2\} = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ の 5 点を考えるとき，x_0 を中心とする 3 点での微分と 5 点での微分をそれぞれ求めよ．またそれを真の $x=0$ での微分値と比較せよ．

数値微分を行う際に，増分 h の大きさを小さくすればするほど，微分の精度が高まると考えがちであるが，数値計算においては，$f(x+h) - f(x)$ の計算の際の桁落ちの影響で，h を小さくすればするほど，微分値の精度が落ちるということが生じる．目安としては以下のことを覚えておくと良い．



(a) 3点補間　　(b) 5点補間

図 4.1: 等間隔での3点補間と5点補間

$(f(x+h)-f(x))/h$ により微分を計算する場合，h は計算桁数の半分くらいのところに選ぶのがよく，その場合の数値微分の計算結果の有効桁数は計算桁数の約半分になる．

$(f(x+h)-f(x-h))/2h$ により微分を計算する場合，h は計算桁数の 1/3 くらいのところに選ぶのがよく，その場合の数値微分の計算結果の有効桁数は計算桁数の約 2/3 になる

4.2 数値積分

4.2.1 区分求積法

もっとも単純な数値積分の手法である．これは，積分区間 $[a,b]$ を N 個の等間隔 h の小区間に分割して $[a,a+h],[a+h,a+2h],\cdots,[b-h,b]$ として，

$$I_N = \sum_{n=0}^{N-1} f(a+nh)h + O(h^2) \tag{4.10}$$

により求める．この数値積分の方法を**区分求積法**とよぶ．これは，各小区間 $[x_n,x_{n+1}]$ での関数の値を $f(x_i)$ の定値として近似していることに他ならない．

4.2.2 台形公式

上記の分割した各区間の中で，関数を一次関数として近似したものが**台形公式**と呼ばれるものである．これは，各区間 $[x_n,x_{n+1}]$ での積分の値（面積）を

$$I_n = \frac{f(x_n)+f(x_{n+1})}{2}h \tag{4.11}$$

$$I_N = \sum_{n=0}^{N-1} I_n = h\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{n=1}^{N-1} f(a+nh)+\frac{1}{2}f(b)\right] \tag{4.12}$$

として総和をとることで積分を求める．

台形公式は簡単な式であるが，区間数 N を倍にすると，誤差は約 1/4 になるため，高い精度で求めることができる．

区間の数を倍にするときには，

$$J_N = h\sum_{n=1}^{N} f(a+(n-\frac{1}{2})h) \tag{4.13}$$

を計算し，$I_{2N} = (I_N + J_N)/2$ を計算してやればよい．

4.2.3　シンプソンの公式

分割した各区間での関数を 2 次関数で近似すると，台形公式よりもさらに高い精度で評価することができる．ここで，近似する関数を $F(x) = ax^2 + bx + c$ とおくと，

$$
\begin{aligned}
I_n &= \int_{x_n}^{x_n+h} (ax^2 + bx + c)dx = \left[\frac{a}{3}x^3 + \frac{b}{2}x^2 + cx\right]_{x_n}^{x_n+h} \\
&= \frac{a}{3}(3x_n^2 h + 3x_n h^2 + h^3) + \frac{b}{2}(2x_n h + h^2) + ch \\
&= \frac{h}{6}(f(x_n) + 4f(x_n + h/2) + f(x_n + h)) \qquad (4.14)
\end{aligned}
$$

となる．この式を**シンプソンの公式**と呼ぶ．台形公式やシンプソンの公式で行ったような，区間 $[a, b]$ を n 等分し，その各区間を m 次の多項式で近似して数値積分を行う方法を総称して**ニュートン・コーツ (Newton-Cotes) の公式**と呼ばれる．

【練習問題 4-2】
今，$F(x) = x^4 - 4x^3 + 6x + 3$ を考える．この曲線上に $\{x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2\} = \{-2, -1, 0, 1, 2\}$ の 5 点を考え，4 つの区間に分割したとき，

$$I = \int_{-2}^{2} F(x)dx \qquad (4.15)$$

を，区分求積法，台形公式，シンプソンの公式で計算せよ．また，$F(x)$ の積分を解析的に求め，その値と比較せよ．

4.3　数値積分に関する注意事項

4.3.1　不連続点の回避

数値積分を行う関数の $f(x)$ が不連続である場合には当然であるが，導関数 $f'(x), f''(x)$ などが不連続である点がわかっている場合には，その不連続点を区分点として積分を分割するのがよい．すなわち，$c \in [a,\ b]$ が不連続な性質を持つ点である場合には，

$$\int_a^b = \int_a^c + \int_c^b \qquad (4.16)$$

とするのがよい．

4.3.2　特異点の解消

被積分関数の端点が特異性を持つ場合がある．たとえば，半径 1 の円の面積を，第一象限の面積の 4 倍として求める場合，

$$I = \int_0^1 4\sqrt{1 - x^2}dx \qquad (4.17)$$

を数値積分すると，$x = 1$ の端点近くで大きな誤差を発生させる．これは，$x = 1$ で $f(x) = 4\sqrt{1 - x^2}$ の導関数が ∞ となってしまうためである．

この問題に対しては，次のような変数変換を施すことで解消される．

$$
\begin{aligned}
1-x=t^2, &\qquad f(x)=4\sqrt{1-x^2}=4t\sqrt{2-t^2},\\
dx=-2tdt, &\qquad x=1\sim1 \Leftrightarrow t=1\sim0\\
&\qquad I=\int_0^1 f(x)dx=\int_0^1 8t^2\sqrt{2-t^2}dt
\end{aligned}
\tag{4.18}
$$

変数変換を用いる方法として，高橋らによる**２重指数変換**は幅広い適用が可能で，万能変換と称されることもある．これは，$[-1,1]$ を積分範囲とする定積分を対象としているが，適当なスケール変換によって積分の範囲を $[-1,1]$ にすることができるので，一般性は失われない．これに対して以下のような変数変換を施す．

$$
x=\tanh(\frac{\pi}{2}\sinh t),\quad dx=\frac{\frac{\pi}{2}\cosh t}{\cosh^2(\frac{\pi}{2}\sinh t)}dt \tag{4.19}
$$

また，積分範囲は次のようになる．

$$
\int_{-1}^{1}\cdots dx \quad\Longrightarrow\quad \int_{-\infty}^{\infty}\cdots dt \tag{4.20}
$$

.

4.4　多重積分とモンテカルロ法

これまで一次元の積分を考えてきたが，積分する変数が複数の多重積分の数値積分について考えてみる．対象とする多重積分が

$$
I=\int_c^d\int_a^b f(x,y)dxdy \tag{4.21}
$$

のような積分領域が矩形の場合には，１次元の区分求積法や台形公式などを拡張して適用することができる．しかしながら，積分する領域が矩形でない場合や次元が高くなると数値積分を行うことが困難になってくる．

そうした場合においても用いることのできる手法は**モンテ・カルロ法 (Monte-Carlo Method)** である．たとえば，関数 $f(x)$ の区間 $[a,b]$ の数値積分を求める場合を考える．区間 $[a,b]$ に一様乱数 v を発生させて，

$$
w \quad=\quad (b-a)f(v) \tag{4.22}
$$

とすると，w の期待値 $E(w)$ は

$$
E(w)\quad=\quad\int_a^b w\frac{1}{(b-a)}dv \quad=\quad \int_a^b f(x)dx \quad=\quad I \tag{4.23}
$$

となる．これにより，乱数 v を独立に $v_1,v_2,\cdots,v_N$ の N 個作り，それぞれに対して $w_i=(b-a)f(v_i)$ の値を求めて，それら N 個の平均 $w_{(N)}$

$$
w_{(N)}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}w_i=\frac{(b-a)}{N}\sum_{i=1}^{N}f(w_i) \tag{4.24}
$$

として求めることができる．モンテ・カルロ法は積分する変数の数などによらずに計算できるため，汎用的な手法であるが，計算する件の数 N に対して誤差は $1/\sqrt{N}$ に比例してしか減少しないため，効率がよいとは言えない．ただ，他に方法がない場合の最後の手段として用いられる．

参考文献

伊理正夫，藤野和建：数値計算の常識，共立出版社，ISBN-4-320-01343-3