4.3　台形公式とシンプソン公式の誤差

台形公式の誤差　台形公式による積分の近似値 $I^{(1)}$ は，真の積分値 I に対してどのくらい良い近似値になっているだろうか。前節で導いたラグランジュ補間の誤差の評価式を用いると，この疑問に答えることができる。

いま，$f(x) \in C^2$ とし，最初の区間 $[x_0, x_1]$ での誤差を考える。この区間での 1 次関数による $f(x)$ の補間を $f_1(x)$ とすると，(3.18) 式より

$$f(x) - f_1(x) = \frac{1}{2!} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1) \qquad (x_0 \le \xi(x) \le x_1) \tag{4.8}$$

ここで，(3.18) 式の ξ は誤差を評価する点 x に依存することを明示するため $\xi(x)$ と書いた。この式の両辺を x_0 から x_1 まで積分し，絶対値を取ると，

$$\begin{aligned}
\left| \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx - \int_{x_0}^{x_1} f_1(x)\,dx \right| &= \left| \int_{x_0}^{x_1} \{f(x) - f_1(x)\}\,dx \right| \\
&= \frac{1}{2} \left| \int_{x_0}^{x_1} f''(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)\,dx \right| \\
&\le \frac{1}{2} \max_{x_0 \le \xi \le x_1} |f''(\xi)| \left| \int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\,dx \right| \\
&= \frac{1}{12} \max_{x_0 \le \xi \le x_1} |f''(\xi)| \cdot h^3 \qquad (4.9)
\end{aligned}$$

ここで

$$\int_{x_0}^{x_1} (x - x_0)(x - x_1)\,dx = -\frac{1}{6} h^3 \tag{4.10}$$

を用いた。

これをすべての区間について足し合わせると，

$$\begin{aligned}
|I - I^{(1)}| &= \frac{1}{12} \max_{a \le \xi \le b} |f''(\xi)| \cdot h^3 \cdot n \\
&= \frac{1}{12} \max_{a \le \xi \le b} |f''(\xi)| \cdot (b - a)\,h^2 \qquad (4.11)
\end{aligned}$$

こうして台形公式の誤差が評価できた。この式より，刻み幅 h を小さくしたとき，誤差は $O(h^2)$ で減少することがわかる。

シンプソン公式の誤差　同様にしてシンプソン公式の誤差を評価すると，$f(x) \in C^3$ のとき，区間 $[x_0, x_2]$ での誤差として

$$\left| \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx - \int_{x_0}^{x_2} f_2(x)\,dx \right| \le \frac{1}{180} \max_{x_0 \le \xi \le x_1} |f^{(3)}(\xi)| \cdot h^4 \tag{4.12}$$

となる。ただし $f_2(x)$ は点 x_0，x_1，x_2 での値を用いた $f(x)$ の 2 次関数による補間とする。

しかし，実はこれは粗い評価である。もっとうまい評価を行うと，$f(x) \in C^4$ のとき

$$\left| \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx - \int_{x_0}^{x_2} f_2(x)\,dx \right| \le \frac{1}{90} \max_{x_0 \le \xi \le x_2} |f^{(4)}(\xi)| \cdot h^5 \tag{4.13}$$

と誤差の上界を求められる。ただし，$h = (x_2 - x_0)/2$ である。この式を導くには多少複雑な計算が必要なため，補遺として本章の最後に載せる。前章で学んだラグランジュ補間の誤差評価の良い練習問題なので，興味のある人は参照のこと。

(4.13) 式をすべての区間（全部で $n/2$ 個）について足し合わせると，

$$\begin{aligned} |I - I^{(2)}| &\leq \frac{1}{90} \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(4)}(\xi)| \cdot (b-a)\, h^5 \cdot \frac{n}{2} \\ &\leq \frac{1}{180} \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(4)}(\xi)| \cdot (b-a)\, h^4 \end{aligned} \quad (4.14)$$

となる。したがってシンプソン公式では，刻み幅 h を小さくしたとき，誤差は $O(h^4)$ で減少することがわかる。

特別な場合の誤差の振る舞い　いま，解析的に値が計算できる 4 個の積分

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin x \, dx = 1 \quad (4.15)$$

$$\int_0^1 e^x \, dx = e^x - 1 \quad (4.16)$$

$$\int_0^{2\pi} \frac{dx}{5 + 4\cos x} = \frac{2\pi}{3} \quad (4.17)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} \, dx = \sqrt{2\pi} \quad (4.18)$$

に台形公式とシンプソン公式とを適用し，誤差を評価する。ただし，無限区間における積分 (4.18) は，x 軸の正方向，負方向とも被積分関数が十分小さくなる点で積分を打ち切ることとし，有限区間 $[-10, 10]$ 上での積分で近似して評価する。

１番目，２番目の積分では，刻み幅 h を小さくするにつれて台形公式，シンプソン公式の誤差はそれぞれ $O(h^2)$，$O(h^4)$ で減少し，本節で導いた誤差評価が成り立っていることが確認できる。ところが，３番目，４番目の積分では，h を小さくするにつれ，台形公式の誤差が指数関数的に減少することが観察される（もちろん，本節で導いた誤差評価式は誤差の上界なので，この結果は誤差評価式とは矛盾しない）。

実はこのような急激な誤差減少は，次のような積分を台形公式で計算した場合に生じることがわかっている。

(a) 周期的な解析関数の 1 周期に渡る積分

(b) 無限遠で急速に減少する解析関数の $(-\infty, \infty)$ における積分

(4.17) 式，(4.18) 式はそれぞれ (a)，(b) の場合にあたる。この現象の説明と詳細な誤差評価については，たとえば森正武著「数値解析」，共立出版を参照のこと。

4.4　二重指数型数値積分公式

原理　前節最後に述べた台形公式の性質を利用して，一般の積分 $I=\int_a^b f(x)dx$（ただし $f(x)$ は解析関数）に対しても高精度な公式を作ることを考える。もし変数変換によって I を無限区間における急減少な解析関数の積分に変換できるならば，これに台形公式を適用することにより，標本点の数を増やすにつれ誤差が指数関数的に減少する公式を作ることができるはずである。

公式の導出　いま，簡単のため，求めたい積分が既に次のような $[-1,1]$ における積分に変換されているとする。

$$I=\int_{-1}^{1} f(x)\ dx \tag{4.19}$$

ここで，変数変換

$$x=\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right) \tag{4.20}$$

を考える。なお，

$$\sinh x=\frac{e^x-e^{-x}}{2},\quad \cosh x=\frac{e^x+e^{-x}}{2},\quad \tanh x=\frac{\sinh x}{\cosh x} \tag{4.21}$$

である。すると，この変換は区間 $(-\infty,\infty)$ を 1 対 1 で区間 $(-1,1)$ に写す。また，

$$dx=\frac{\frac{\pi}{2}\cosh t}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)}\,dt \tag{4.22}$$

よって，

$$I=\frac{\pi}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)\right)\cdot\frac{\frac{\pi}{2}\cosh t}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)}\,dt \tag{4.23}$$

となる。$|t|$ が無限大に近づくときの被積分関数の振る舞いについて調べると，$t\to\pm\infty$ のとき $\sinh t\to\pm\frac{1}{2}e^{|t|}$，$y\to\pm\infty$ のとき $\cosh y\to\frac{1}{2}e^{|y|}$ だから，

$$\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)\to\frac{1}{4}\exp\left(\frac{\pi}{2}\exp|t|\right) \tag{4.24}$$

すなわち，被積分関数の分母は極めて急速に（二重指数関数的に）0 に近づく。したがって $x\to a$，$x\to b$ のとき $f(x)$ が有限ならば，(4.23) 式は無限区間における急減少な解析関数の積分となる。

いま，台形公式の刻み幅を h とし，区間 $[N^-h,N^+h]$ の外側で (4.23) の被積分関数が十分小さくなるよう N^-，N^+ を定めて台形公式を適用すると，

$$\begin{aligned}I^{(D)} &= \frac{\pi}{2}\sum_{n=N^-}^{N^+} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right)\right)\cdot\frac{\frac{\pi}{2}\cosh(nh)}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right)}\cdot h\\ &= \sum_{n=N^-}^{N^+} a_n f(b_n)\end{aligned} \tag{4.25}$$

ここで，

$$a_n = \frac{\frac{\pi}{2}\cosh(nh)}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right)} \cdot h \tag{4.26}$$

$$b_n = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right) \tag{4.27}$$

これを**二重指数型数値積分公式**と呼ぶ。二重指数型数値積分公式は，台形公式やシンプソン公式と違い，元の変数 x で見ると，不等間隔の標本点を使った公式となっている。

端点で特異性を持つ積分への適用　二重指数型数値積分公式では，分母の因子 $\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right)$ が極めて急速に増大するため，$f(x)$ が端点で特異性を持っていても精度良く積分ができる場合が多い。たとえば，$\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ などはその例である。このような積分は，台形公式やシンプソン公式では精度良く積分することが難しい。

また，半無限区間 $[a,\infty)$，全無限区間 $(-\infty,\infty)$ 用の二重指数型公式もある。これらについては教科書を参照のこと。

補遺：　シンプソン公式の誤差

定理　区間 $[x_0, x_2]$ でシンプソン公式により $f(x) \in C^4$ を積分したときの誤差 ε は次式を満たす。

$$\varepsilon \leq \frac{1}{90} h^5 \max_{x_0 \leq \xi \leq x_2} |f^{(4)}(\xi)| \tag{4.28}$$

ただし，$h = (x_2 - x_0)/2$ とする。

証明　$x_1 = x_0 + h$ とし，$x = x_0$, x_1, x_2 の 3 点での値を使った $f(x)$ の 2 次のラグランジュ補間を $f_2(x)$ とする。$f_2(x)$ は $f(x)$ とこの 3 点で値が一致するが，それに加えて $x = x_1$ での 1 階の微係数も一致するようにした次の関数を考える。

$$\hat{f}_2(x) = f_2(x) + \frac{1}{h^2} [f_2'(x_1) - f'(x_1)] (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \tag{4.29}$$

$\hat{f}_2(x)$ がこの条件を満たすことは，実際に微分して $x = x_1$ を代入すれば容易にわかる（確認せよ）。$\hat{f}_2(x)$ を $f(x)$ の**拡張ラグランジュ補間**と呼ぶことにする（ここだけの用語）。

いま，区間 $[x_0, x_2]$ 内の任意の点を z とし，$x = z$ での $\hat{f}_2(x)$ の誤差を考える。$x = x_0$, x_1, x_2 では誤差は 0 であるから，$z \neq x_0$，$z \neq x_1$，$z \neq x_2$ とする。$x = z$ においても $f(x)$ と値を一致させるため，$\hat{f}_2(x)$ に新たな項を付け加えた次の関数を考える。

$$\tilde{f}_2(x) = \hat{f}_2(x) + c(x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2) \tag{4.30}$$

付け加えた項は $x = x_0$, x_1, x_2 で 0 となり，かつその微係数は $x = x_1$ で 0 となるので，$\tilde{f}_2(x)$ は $\hat{f}_2(x)$ と同様，$f(x)$ に $x = x_0$, x_1, x_2 で一致し，その 1 階微分は $x = x_1$ で $f'(x)$ と一致する。さらに，定数 c を適当に定めることにより，$x = z$ でも $f(x)$ に一致するようにする（これは常に可能）。$\tilde{f}_2(x) \in C^4$ であることに注意する。

いま，

$$g(x) = f(x) - \tilde{f}_2(x) \tag{4.31}$$

とおくと，$g(x)$ は区間 $[x_0, x_2]$ で x_0, x_1, x_2, z の少なくとも 4 個の相異なる零点を持つ。この 4 個の零点によって区切られた 3 個の区間のそれぞれにロルの定理を適用すると，$g'(x)$ は各区間の内部（両端を含まない）に少なくとも 1 個の零点を持つことがわかる。さらに，$f(x)$ と $\tilde{f}_2(x)$ の 1 階微分は $x = x_1$ で一致するから，$x = x_1$ も $g'(x)$ の零点となり，$g'(x)$ は区間 $[x_0, x_2]$ において少なくとも 4 個の相異なる零点を持つ。ここで，ラグランジュ補間の誤差評価で用いた補題を適用すると，$g^{(4)}(x)$ は $[x_0, x_2]$ で少なくとも 1 個の零点

を持つことがわかる。それを ξ とすると，

$$g^{(4)}(\xi) = \left[f^{(4)}(x) - \hat{f}_2^{(4)}(x) - c\frac{d^4}{dx^4}\left\{(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)\right\} \right]_{x=\xi} = 0 \tag{4.32}$$

ここで $\hat{f}_2(x)$ は 3 次式であるから，その 4 階微分は 0 であることに注意すると，この式から

$$c = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi) \tag{4.33}$$

が得られる。これを式 (4.30) に代入して $x = z$ とすると，$\tilde{f}_2(z) = f(z)$ より

$$f(z) - \hat{f}_2(z) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi)(z-x_0)(z-x_1)^2(z-x_2) \tag{4.34}$$

が成り立つ。これが $x = z$ における拡張ラグランジュ補間の誤差である。この式は任意の $z \in [x_0, x_2]$ について成り立つ。ただし，右辺の ξ は z に依存することに注意する。この式に式 (4.29) を代入し，z を改めて x と書くと，

$$\begin{aligned} f(x) - f_2(x) &= \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi(x))(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2) \\ &\quad + \frac{1}{h^2}\left[f_2'(x_1) - f'(x_1)\right](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \end{aligned} \tag{4.35}$$

この両辺を x_0 から x_2 まで積分する。すると，左辺第 1 項は求めたい積分 I，第 2 項はそのシンプソン公式による近似値 I_2 となる。また，右辺第 1 項については，

$$\int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)\,dx = -\frac{4}{15}h^5, \tag{4.36}$$

右辺第 2 項については

$$\int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\,dx = 0 \tag{4.37}$$

（積分区間を $[x_0, x_1]$ と $[x_1, x_2]$ に分割すると簡単に示せる）を用いる。すると，

$$\begin{aligned} |I - I_2| &= \left| \frac{1}{4!} \int_{x_0}^{x_2} f^{(4)}(\xi(x))(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)\,dx \right| \\ &\leq \frac{1}{4!} \max_{x_0 \leq \xi \leq x_2} |f^{(4)}(\xi)| \\ &\quad \times \left| \int_{x_0}^{x_2} (x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)\,dx \right| \\ &= \frac{1}{90} h^5 \max_{x_0 \leq \xi \leq x_2} |f^{(4)}(\xi)| \end{aligned} \tag{4.38}$$

以上より定理が証明できた。

参考文献　Rainer Kress: *Numerical Analysis*, Springer-Verlag, 1998.

第5章　数値微分法と加速法

ニュートン法で非線形方程式を解く場合をはじめとして，数値計算では関数 $f(x)$ の微分 $f'(x)$ の計算が必要な場合が多い。$f(x)$ が簡単な場合には手計算で微分できるが，複雑な関数の場合に近似的に微分を計算する方法として差分法による数値微分がある。本章では，まず差分法による数値微分について学んだ後，その計算精度を高める手法としてリチャードソン加速法を学ぶ。本章で学ぶ差分法は，次章以下で扱う常微分方程式，偏微分方程式の解法の基礎ともなる。

5.1　差分近似による数値微分

1階導関数の差分近似　いま，関数 $f(x)$ の点 x における1階微分 $f'(x)$ の値を求めることを考える。h を微小量とし，$f(x+h)$ を x の周りでテイラー展開すると，

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \cdots \\ &= f(x) + hf'(x) + O(h^2) \end{aligned} \tag{5.1}$$

したがって，

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) \tag{5.2}$$

と $f'(x)$ を近似できる。これを**前進差分**と呼ぶ。$h \to 0$ のとき右辺は微分の定義となるが，数値微分では有限の h で止めてこれを計算する。このときの誤差は $O(h)$（より正確には $\frac{1}{2}hf''(x)$）となる。これを**打切り誤差**と呼ぶ。

一方，$f(x-h)$ をテイラー展開すると，

$$\begin{aligned} f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) - \frac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \cdots \\ &= f(x) - hf'(x) + O(h^2) \end{aligned} \tag{5.3}$$

となる。これより，$f'(x)$ は

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h) \tag{5.4}$$

のようにも近似できる。これを**後退差分**と呼ぶ。

さらに，(5.1) 式と (5.3) 式より，

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \tag{5.5}$$

のような近似も可能である。これを**中心差分**と呼ぶ。中心差分の誤差は $O(h^2)$ であり，前進差分，後退差分より精度が高い。

２階導関数の差分近似　(5.1) 式と (5.3) 式より

$$f(x+h) - 2f(x) + f(x-h) = h^2 f''(x) + \frac{2}{4!} f^{(4)}(x) + \cdots \tag{5.6}$$

が成り立つ。したがって $f''(x)$ は

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2) \tag{5.7}$$

と近似できる。これも中心差分と呼ばれる。

5.2　数値微分における h の定め方

前節で示したどの差分公式についても，h は 0 に近いほど打切り誤差が小さくなる。それでは，h はできる限り小さく取るのがよいのだろうか。実はそうではない。h が小さいと，$f(x)$ と $f(x+h)$ とが非常に近い数になり，引き算において桁落ち（丸め誤差）の影響が大きくなるからである。

いま，倍精度で $f(x)$ を計算したとすると，仮数部は 2 進で 53 桁だから，54 桁目の大きさ程度の丸め誤差が入る可能性がある。したがって，$\varepsilon = 2^{-54}$ とすると，$f(x)$ に含まれる誤差は $|f(x)| \cdot \varepsilon$ 程度と見積もることができる。同様に，$f(x+h)$ に含まれる誤差も $|f(x)| \cdot \varepsilon$ 程度であるから，前進差分に含まれる丸め誤差は

$$\frac{|f(x)| \cdot \varepsilon + |f(x)| \cdot \varepsilon}{h} = |f(x)| \cdot \frac{2\varepsilon}{h} \tag{5.8}$$

程度となる。一方，打切り誤差は

$$\frac{1}{2} f''(x) \cdot h \quad (+O(h^2)) \tag{5.9}$$

である。数値微分の誤差は両者の和で，

$$|f(x)| \cdot \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{1}{2} f''(x) \cdot h \tag{5.10}$$

となる。これが最小になるのは相加・相乗平均より

$$h = 2\sqrt{\frac{|f(x)|}{|f''(x)|} \cdot \varepsilon} \tag{5.11}$$

のときとなる。ただし，一般には $f''(x)$ の値はわからない。そこで，大ざっぱに $|f''(x)| \sim |f(x)|$ と仮定すると

$$h = 2\sqrt{\varepsilon} \tag{5.12}$$

すなわち，倍精度計算では $h \sim 2^{-27}$ 程度に選ぶのがよい。このとき，前進差分の誤差は

$$\frac{1}{2}|f(x)| \cdot h \sim |f(x)| \cdot \sqrt{\varepsilon} \tag{5.13}$$

程度となる。$f(x)$ の誤差が $|f(x)| \cdot \varepsilon$ 程度であることを考えると，数値微分では誤差がかなり大きくなることを覚悟しなくてはならないことがわかる。

　同様にして，中心差分において最適な h の値も求められる。また，２階微分についても求められる。これらはレポート課題とする。