4. 定積分計算における誤差評価

高橋　　理，猪苗代　勉（東北大）

1. 〔 a , b 〕で定義された函数 $f(x)$ が与えられ（ x に対して $f(x)$ の近似値を得ること）たとき

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

の数値計算を行なうには一般に

$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\,P_i$$

の形の計算を行なうが，このとき n , x_i , P_i のとり方により多くの方法が考えられている。プログラムにより電子計算機で計算するには種々の点より x_i は等間隔が好都合であり又 P_i も面倒な数値は好ましくない。又この計算では $f(x)$ 計算が最も時間を要する部分となることが殆んど~~ない~~であるから， n はなるべく小さい方がよいことは勿論である。

結果に対する精度の要求により n がある程度大きくなることもありこのときも通用するプログラムにするためには種々の点より Simpson 1／3公式あたりが一般的といえよう。

所望の精度 ε を設けて数値計算を行なうのに (α) 積分区間を2 n 分割し2分割区毎に Simpson 公式を適用するものとする。このとき精度に対する評価としては， n を1ずつ上げて即ち分割点の中央に1つずつ分割点を追加して計算結果の改良を行ない遂には改良が進行しなくなつたとき，即ち

$$|\Phi(f,\ a,\ b,\ n)-\Phi(f,\ a,\ b,\ n+1)|<\varepsilon$$

のときを以つて打切る方式が考えられる。

この方式は級数計算の打切りと同じ思想であり簡単で実用的であるが，精度の保証に不安なしとしない。そこでここでは ⒝ Simpson 公式の誤差を大略評価してnを推定して計算することを考える。Simpson 1／3公式の誤差は周知の如く（例えば，岩波講座 現代応用数学 B. 13. I 参照）

（a, b）でC^4-class とすると

$$\int_{-h}^{h} f(x)\,dx = 1/3\{f(-h)+4f(0)+f(h)\} - h^5/90 f^{(4)}(\xi)$$

$$-h<\xi<h$$

をみたすξの存在することより（a, b）で$f^{(5)}(x)$が十分小さいならば次の推定を得る。

イ）［a, b］を4分割し$1/4(b-a)=k$とし

$$\Delta_2^4 f = f(a) - 4f(a+k) + 6f(a+2k) - 4f(a+3k) + f(b) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \text{㈱}$$

とすると

$$f^{(4)}(\xi) \fallingdotseq 1/k^4\,\Delta_2^4 f$$

この右辺をもつて$f^{(4)}(\xi)$を推定する。上記4分割の2分割区ずつにSimpson 1／3公式を用いたときの誤差は

$$(b-a)/_{180}\ \Delta_2^4 f = A \qquad (1)$$

ロ）［a, b］を$2n$分割したとき2分割区毎にSimpson 1／3 公式を用いて和をとるときの計算値を

$$\Phi(f,\ a,\ b,\ n)$$

とかくと

$$(b-a)/_{2n} = h_n$$

とし(1)を用いると

$$\int_a^b f(x)\,dx = \Phi(f,\ a,\ b,\ n) - \Sigma h^5/90\, f^{(4)} f(\xi_i)$$

$$\fallingdotseq \Phi(f,\ a,\ b,\ n) - 2^5/n^4\ A \qquad (2)$$

これより所望の精度 ε を与えられたとき

$$n^4 > 2^5\,|A|/\varepsilon \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad (3)$$

をみたす n により区間〔 a, b 〕を分割すればよいと推定できることになる。

2. （ a, b ）で $f^{(5)}(x)$ が十分小さくないときは勿論確実な保証が得られないが，そのときは〔 a, b 〕を大きく分けて計算し $f^{(5)}(x)$ の小さい部分は比較的大きな h で間に合せる方がよい。又比較的簡単な変数変換　$x=t^p$ 等が有利なことも多い。このときの p の選定の目安も $\Delta_n^4 f$ の変動から得られる。

以上の手続きはプログラムで実行可能であろう。

更にかくして定つた n について 1／3 公式を適用するに 4 つの分割区に(1)式の計算を行ない符号別の和 Σ^{+}, Σ^{-} および代数和 $\Sigma^{\pm}$ を累加して行くと全区間で 1／3 公式を終つたのち

$$\Phi(f,\ a,\ b,\ n) - \Sigma^{+} < \int_a^b f(x)\,dx < \Phi(f,\ a,\ b,\ n) - \Sigma^{-} \quad \cdots (4)$$

と殆んど確実に真値を評定できる。（丸め誤差も問題にする場合には Σ^{-} と Σ^{+} の累加を切捨て切上げとするわけであるが，積分計算では殆んど無意味であろう）

$\Sigma^{\pm}$ は(2)式におけるオ二項の Σ の近似値を与えるからこれを Simpson公式による $\Phi(f,\ a,\ b,\ n)$ に加算することにより更に近似が向上することが期待される。これにより(4)式の区間に入ることは大体確実で実際は，はるかによい精度の積分近似となることが多い~~いうことになる~~。

この最後の差分による補正操作は一般に Newton-Cotes 公式で 1 つ次数を近めることに匹敵する効果を生む。

従つて(2)により推定した$\overbrace{n}^{\text{で分割し更に}}$補正を施すときは十分過ぎることが多い。（例外もある）から，一般には，nとしては

$$2(2|A|/\varepsilon)^{1/4}$$

を越さぬ最大の２の巾でやつてみた。

計算例(1) $\displaystyle\int_0^{1.2}(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\ \exp(-x^2/2)\,dx$

〔森口，高田のp. 45. 例１と同じ〕

$n=2$（4分割）の時の$f^{(4)}(x)$	$0.\overbrace{000017}^{2246}=A$
推定したn	$n\doteqdot 2(2\|A\|/\varepsilon)^{1/4}\doteqdot 48.2\ (\varepsilon=10^{-10})$
$n=16$の時	
単純Simpson	0.3849303337
限界値	0.3849303277　0.3849303357
補正したSimpson	0.3849303297
$n=32$の時	
単純Simpson	0.3849303300
補正Simpson	0.3849303297
$n=64$の時	
単純Simpson	0.3849303297
補正Simpson	0.3849303297

・解析性について。

特異点の影響が全rangeにわたって小さければ全区間にわたって高次の近似式を用いたがよい。
特異点の影響が大きいところがあれば その部分を2n分割して低次の近似式をつかう。

計算例(2) $\displaystyle\int_0^{1.2} \frac{1}{1+x^2}\, dx$ 〔森口，高田のp. 50例2と同じ〕

$n=2$（4分割）の時の$f^{(4)}(x)$	$-0.0003\overbrace{8}^{7125} = A$	
nの推定	$n \doteqdot 2(2\|A\|/\varepsilon)^{1/4} \doteqdot 102.8$	$(\varepsilon = 10^{-10})$
$n=8$のとき		
単純Simpson	0.8760580467	
限界値	0.8760579950	0.8760581024
補正したSimpson	0.8760580506	
$n=64$のとき		
単純Simpson	0.8760580506	
補正したSimpson	0.8760580506	

計算例(3) $\displaystyle\int_0^{1} \sqrt{x}\, dx$

$n=2$（4分割）の時の$f^{(4)}(x)$	$-0.001\overbrace{2}^{303385} = A$	
推定したn	$n \doteqdot 2(2\|A\|/\varepsilon)^{1/4} = 139.8$	$(\varepsilon = 10^{-10})$
$n=128$		
単純Simpson	0.6666468462	
補正したSimpson	0.6666492623	

前記の例にくらべて精度が非常に悪い。しかし
nを相当大きくしてもよくならないことがもともとわかっている。

B-42

$$t^2 = x$$

で変数変換すると

$$2\int_0^1 t^2\, dt$$

となりSimpson の $n = 2$ で十分である。

本 PDF ファイルは 1962 年発行の「第 3 回プログラミング—シンポジウム報告集」をスキャンし、項目ごとに整理して、情報処理学会電子図書館「情報学広場」に掲載するものです。

この出版物は情報処理学会への著作権譲渡がなされていませんが、情報処理学会公式 Web サイトに、下記「過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について」を掲載し、権利者の捜索をおこないました。そのうえで同意をいただいたもの、お申し出のなかったものを掲載しています。

https://www.ipsj.or.jp/topics/Past_reports.html

過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について

情報処理学会発行の出版物著作権は平成 12 年から情報処理学会著作権規程に従い、学会に帰属することになっています。

プログラミング・シンポジウムの報告集は、情報処理学会と設立の事情が異なるため、この改訂がシンポジウム内部で徹底しておらず、情報処理学会の他の出版物が情報学広場 (=情報処理学会電子図書館) で公開されているにも拘らず、古い報告集には公開されていないものが少からずありました。

プログラミング・シンポジウムは昭和 59 年に情報処理学会の一部門になりましたが、それ以前の報告集も含め、この度学会の他の出版物と同様の扱いにしたいと考えます。過去のすべての報告集の論文について、著作権者（論文を執筆された故人の相続人）を探し出して利用許諾に関する同意を頂くことは困難ですので、一定期間の権利者捜索の努力をしたうえで、著作権者が見つからない場合も論文を情報学広場に掲載させていただきたいと思います。その後、著作権者が発見され、情報学広場への掲載の継続に同意が得られなかった場合には、当該論文については、掲載を停止致します。

この措置にご意見のある方は、プログラミング・シンポジウムの辻尚史運営委員長 (tsuji@math.s.chiba-u.ac.jp) までお申し出ください。

加えて、著作権者について情報をお持ちの方は事務局まで情報をお寄せくださいますようお願い申し上げます。

期間： 2020 年 12 月 18 日 〜 2021 年 3 月 19 日
掲載日： 2020 年 12 月 18 日

プログラミング・シンポジウム委員会

情報処理学会著作権規程
https://www.ipsj.or.jp/copyright/ronbun/copyright.html