

プログラム演習 (5) 多項式の積分計算

ある変数 (例えば x) に依存する関数 (例えば $f(x)$) があり、この関数の有限区間の積分値 (例えば $\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx$) が必要となることがしばしばある。仮にこの被積分関数が既知であれば、その積分を解析的に求められる場合があるが、一般的にはそのような場合は稀であり、数値的な積分計算を行う。

ここでは例として、解析解が得られる多項式の積分について考えよう。被積分関数を $f(x) = 2x^3 - x^2 - x + 2$ とし、区間 $[-1, +1]$ の積分を考えるとする。解析解は容易に得られるので、各自で計算しておくこと。

さて、最も直感的で簡便な方法は、着目区間 $[-1, +1]$ を適当な間隔で複数に分割し、分割した各々の区間で $f(x)$ の値を一定と仮定して、各分割区間で積分を全て足し合わせる、というものである。例えば、 $[-1, +1]$ を 4 つの区間で等間隔に区切った場合は、各区間の幅は 0.5 となるので、各区間の積分値は、その区間での $f(x)$ の代表値に 0.5 を乗じたものとなる。ここで、各分割区間における $f(x)$ の代表値の決め方であるが、分割区間の左端の x における $f(x)$ (下図左)、右端の x における $f(x)$ (下図中)、中央における $f(x)$ (下図右) などが考えられるであろう。

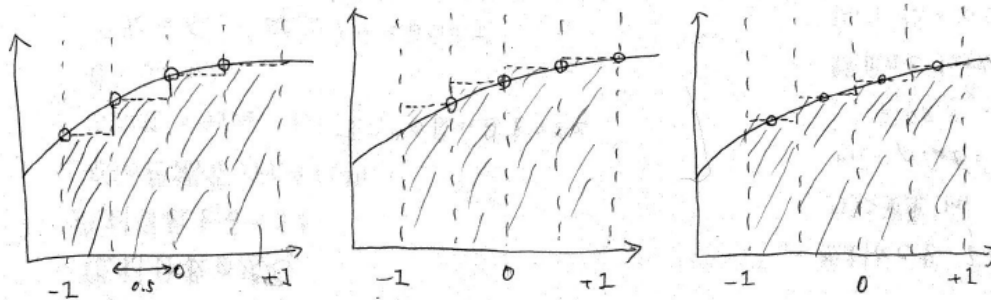


Fig. 1: 数値積分における区間分割の考え方

問題 1 : $f(x) = 2x^3 - x^2 - x + 2$ の区間 $[-1, +1]$ における積分を上述の方法で数値的に求め、解析解と比較せよ。この際、各区間の $f(x)$ を区間の左端、中央、右端のもので代表させて計算し、優劣について議論せよ。また、区間の分割数を 5、10、20 として計算を行い、分割数を大きくするにつれて、数値解が解析解に収束していくことを確かめよ。

問題 2 : 問題 1 では各区間の積分計算を $f(x)$ が一定であるとして行った。これは各区間の積分を「長方形」と仮定していることを意味する。一方、各区間の積分を「台形」と仮定して計算することも可能である。この方法で積分計算を行い、問題 1 の結果と比較せよ。

積分計算では求積公式と呼ばれるものを用いるのがより一般的である。

求積公式の例を以下に示す。

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^I w_i f(x_i) \quad (1)$$

この公式は、 I 個の離散点 (x_i) における関数値 ($f(x_i)$) を重みづけしてその総和をとることによって積分値を得る、というものである。積分区間を等間隔に分割して各区間での積分値の総和をとるという前述の方法も、基本的には (重みが各点で同一の) 求積公式と見做すことができる。

さて、求積公式の性能を考えたときには、できるだけ少ない離散点数で精度の良い積分計算を行うことが重要となる。被積分関数が多項式で記述、もしくは近似出来る場合には、Gauss-Legendre の求積公式が最も性能が高いことが知られている。例えば、離散点数が 2 のときの Gauss-Legendre 求積公式で用いる x_i 、 w_i として、 $(x_1, w_1) = (-0.5773502, 1.0)$ 、 $(x_2, w_2) = (+0.5773502, 1.0)$ が与えられている。

問題 3 : 離散点数を 2 とした Gauss-Legendre 求積公式を用いて問題 1 の積分を数値的に計算せよ。

Gauss-Legendre 公式における積分区間は $[-1, +1]$ となっている。従って、積分区間がこれと異なる場合には、積分区

間がこのようになるよう、最初に変数変換を施す必要がある。

被積分関数によっては、Gauss-Legendre 求積公式では効果的に積分計算が行えない場合がある。ここでは以下の関数の $[-1, +1]$ での積分を考えよう。

$$f(x) = \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \quad (2)$$

この積分は以下のように解析的に解を得ることが出来る¹。

$$\int_{-1}^{+1} f(x)dx = \frac{2}{\alpha} \arctan\left(\frac{1}{\alpha}\right) \quad (3)$$

Table 1: Gauss-Legendre quadrature

(a) 4-point	
x_i	w_i
± 0.339981	0.652145
± 0.861136	0.347855
(b) 8-point	
x_i	w_i
± 0.183435	0.362684
± 0.525532	0.313707
± 0.796666	0.222381
± 0.96029	0.101229
(c) 12-point	
x_i	w_i
± 0.125233	0.249147
± 0.367831	0.233493
± 0.587318	0.203167
± 0.769903	0.160078
± 0.904117	0.106939
± 0.981561	0.0471753
(d) 16-point	
x_i	w_i
± 0.0950125	0.189451
± 0.281604	0.182603
± 0.458017	0.169157
± 0.617876	0.149596
± 0.755404	0.124629
± 0.865631	0.0951585
± 0.944575	0.0622535
± 0.989401	0.0271525

問題 4 : この $f(x)$ の区間 $[-1, +1]$ での積分を 4 から 16 点の Gauss-Legendre 求積公式を用いて計算するとともに、解析解と比較して相対誤差を求めよ。ここで、 α として、0.1、0.01 の 2 ケースを計算せよ。なお、プログラムは配列、ループを用いて簡潔に記述せよ。Table 1 の数値データはホームページ上に「Gauss-Legendre 求積公式のための数値データ」として置いてあるので、それを利用すること。

¹ $x = \alpha \tan \theta$ の変数変換を施せばよい。