計算物理学 II 第 8 回：数値微分・積分

ver. 2020/7/26

1　数値微分

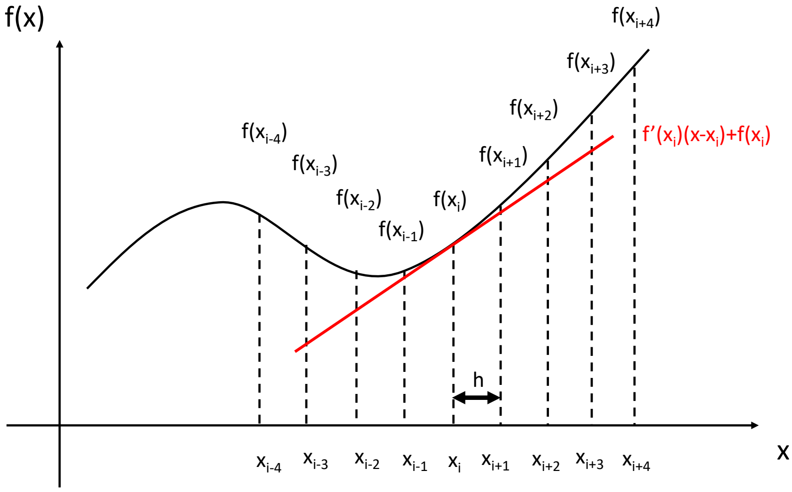

図 1　数値計算では関数 $f(x)$ の等間隔点 x_i での値を配列に保存していることが多く、これを用いて $x = x_i$ での微分 $f'(x_i)$ の近似値を求める。

関数 $f(x)$ の $x = a$ での微分は

$$f'(a) \equiv \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \tag{1}$$

で与えられます。数値計算では極限を取ることはできないので十分に小さい h を取って差分によって微分を表現することしかできません。最も簡単に見積もるには定義式に基づいて

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + \mathcal{O}(h) \tag{2}$$

を使えばよいのですが、この誤差は h のオーダーとなるため、この式を使って値の精度をあげるためには h を小さくする必要があります。数値計算での実数は倍精度実数型などを用いるため、表現できる値に精度があります (倍精度実数型で 16 桁程度)。h は小さくできますが、非常に小さな h に対して $f(a+h)$ と $f(a)$ の値が非常に近くなってしまい、引き算した値には素の 16 桁の精度はなくなってしまう、桁落ちと呼ばれる精度が落ちる現象が起きるため、h を小さくしすぎると逆に精度が落ちてしまいます。

また、実際の数値計算では等間隔に配置された x(グリッド点) に対して $(x_k = kh)$、$f(x_k)$ の値が既知となっていて、その間隔 h を変更することができないことがあります。このような場合は h の値を変えること

なく、微分の精度を上げることが必要です。以下では $x = x_i$ での微係数 $f'(x_i)$ を、x_i 付近の等間隔に配置された点 $x = x_k$ での $f_k = f(x_k)$ を用いて精度良く求める方法を議論します。

$f(x)$ の $x = x_i$ での Taylor 展開を用いると

$$f_{i+1} = f(x_i + h) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3 + \mathcal{O}(h^4) \tag{3}$$

$$f_{i-1} = f(x_i - h) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 - \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3 + \mathcal{O}(h^4) \tag{4}$$

となるので

$$f'(x_i) = \frac{-f_{i-1} + f_{i+1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \tag{5}$$

とすることで二階微分 $f''(x_i)$ の項を消去することができ、微分の精度を上げることができます。これは 3 点公式と呼ばれ、f_{i+1} と f_{i-1} の値があれば、式 (2) と全く同じ計算量でより精度の高い値が計算できます。

さらに精度を上げるためには、$f_{i\pm1}$ に加えて f_{i+2} と f_{i-2} を使って $f^{(3)}(x_i)$ を消去すると 5 点公式が導出できます。

$$f_{i+2} = f(x_i + 2h) = f(x_i) + f'(x_i)2h + \frac{1}{2}f''(x_i)(2h)^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)(2h)^3 + \mathcal{O}(h^4) \tag{6}$$

$$f_{i-2} = f(x_i - 2h) = f(x_i) - f'(x_i)2h + \frac{1}{2}f''(x_i)(2h)^2 - \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)(2h)^3 + \mathcal{O}(h^4) \tag{7}$$

より

$$f'(x_i) = \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12h} + \mathcal{O}(h^4) \tag{8}$$

同様に 7 点公式は f_{i-3}, f_{i+3} も用いて

$$f'(x_i) = \frac{-f_{i-3} + 9f_{i-2} - 45f_{i-1} + 45f_{i+1} - 9f_{i+2} + f_{i+3}}{60h} + \mathcal{O}(h^6) \tag{9}$$

9 点公式は f_{i-4}, f_{i+4} も用いて

$$f'(x_i) = \frac{3f_{i-4} - 32f_{i-3} + 168f_{i-2} - 672f_{i-1} + 672f_{i+1} - 168f_{i+2} + 32f_{i+3} - 3f_{i+4}}{840h} + \mathcal{O}(h^8) \tag{10}$$

となります。どの公式も極限を取れば数学的には同じ微係数となりますが、極限を取ることができない数値計算では誤差の少ないものを用いることが重要です。

高階微分についても同様に計算できます。2 階微分の最も簡単な 3 点公式は式 (3) と (4) から $f'(x_i)$ を消去することにより

$$f''(x_i) = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \tag{11}$$

となります。同様に 2 階微分の 5,7,9 点公式は

$$f''(x_i) = \frac{-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2}}{12h^2} + \mathcal{O}(h^4) \quad \text{(5 点公式)} \tag{12}$$

$$f''(x_i) = \frac{2f_{i-3} - 27f_{i-2} + 270f_{i-1} - 490f_i + 270f_{i+1} - 27f_{i+2} + 2f_{i+3}}{180h^2} + \mathcal{O}(h^6) \quad \text{(7 点公式)} \tag{13}$$

$$f''(x_i) = \frac{-9f_{i-4} + 128f_{i-3} - 1008f_{i-2} + 8064f_{i-1} - 14350f_i + 8064f_{i+1} - 1008f_{i+2} + 128f_{i+3} - 9f_{i+4}}{5040h^2} + \mathcal{O}(h^8) \quad \text{(9 点公式)} \tag{14}$$

となります。

2　数値積分

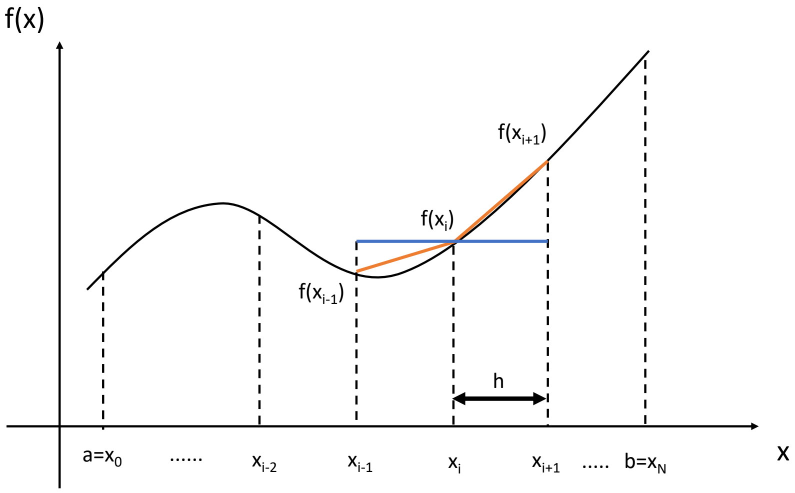

図 2　数値計算では関数 $f(x)$ の等間隔点 x_i での値を配列に保存していることが多く、これを用いて区間 $[a, b]$ での定積分の値を求める. 青は短冊による面積の評価、オレンジは台形公式による評価。

区間 $[a, b]$ での定積分は、$x_0 = a$, $x_N = b$ とおいて x を N 等分すると $h = (b - a)/N$ を用いて

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h \to 0} \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i)h \tag{15}$$

区分求積として定義できます。ここで $x_i = x_0 + ih$ です。微分のときと同様に、数値計算では極限をとることができないため、有限の h や N を用いて評価することとなります。極限をとらずにこの式をそのまま用いるとやはり精度がよくないため、これを改良した公式を導出します。まずは定積分の区間を

$$\int_{a=x_0}^{b=x_N} dx = \int_{x_0}^{x_1} + \int_{x_1}^{x_2} + \cdots \int_{x_{N-2}}^{x_{N-1}} + \int_{x_{N-1}}^{x_N} dx \tag{16}$$

というように幅 h の狭い分割し、このうちの特定の区間、例えば

$$\int_{x_{i-1}=x_i-h}^{x_{i+1}=x_i+h} f(x)dx \tag{17}$$

の積分値の評価したあと、これを足し合わせます (合成積分公式)。微分のときと同様に $x = x_i$ まわりで被積分関数 $f(x)$ を Taylor 展開します。

$$f(x_i + h) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{6!}f^{(3)}(x_i)h^3 + \mathcal{O}(h^4) \tag{18}$$

まずは最低次だけを考えると

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{x_i-h}^{x_i+h} [f(x_i) + \mathcal{O}(h)]dx = 2f(x_i)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{19}$$

となり、区間 $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ の中心 $x = x_i$ での関数の値 $f(x_i)$ を用いて幅 $2h$ 短冊の面積を計算していることになります。もとの定積分の値はこれを足し合わせて

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \left(\int_{x_0}^{x_2} + \int_{x_2}^{x_4} + \cdots \int_{x_{N-4}}^{x_{N-2}} + \int_{x_{N-2}}^{x_N}\right) f(x)dx = 2[f(x_1) + f(x_3) + \cdots f(x_{N-3}) + f(x_{N-1})]h + \mathcal{O}(h) \tag{20}$$

となります。($N \sim h^{-1}$ なので全体の誤差は h^2 から h のオーダーとなります)

2.1 台形公式

Taylor 展開の 1 次まで取り入れて、区間 $[x_{i-1}, x_i]$ と $[x_i, x_{i+1}]$ を別々に評価すると図のオレンジの線のように

$$f(x) = \begin{cases} f(x_i) + \dfrac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h}(x - x_i) + \mathcal{O}(h^2) & (x_i - h \le x \le x_i) \\ f(x_i) + \dfrac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}(x - x_i) + \mathcal{O}(h^2) & (x_i \le x \le x_i + h) \end{cases} \tag{21}$$

これを用いて

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \\ &= \int_{x_i-h}^{x_i} \left[f(x_i) + \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}(x - x_i)\right] dx + \int_{x_i}^{x_i+h} \left[f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}(x - x_i)\right] dx + \mathcal{O}(h^3) \\ &= hf(x_i) + \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}\left(-\frac{1}{2}h^2\right) + hf(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}\frac{1}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ &= \frac{h}{2}[f(x_{i-1}) + 2f(x_i) + f(x_{i+1})] + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \tag{22}$$

この公式では $[x_i - h, x_i]$ および $[x_i, x_i + h]$ の領域で関数を直線で近似し、台形の面積を評価しているため、台形公式と呼ばれます。全区間を足し合わせると

$$\begin{aligned} &\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx \\ &\quad = \frac{h}{2}\{[f(x_0) + 2f(x_1) + f(x_2)] + [f(x_2) + 2f(x_3) + f(x_4)] + \cdots + [f(x_{N-2}) + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)]\} + \mathcal{O}(h^2) \\ &\quad = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{N-2}) + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N)\right] + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \tag{23}$$

となり、区分求積法による評価とほとんど同じ形ですが、両端では 1/2 の因子がかかり、精度は向上します。

2.2 Simpson の公式

Taylor 展開での h^2 の項までを評価します。

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2}f''(x_i)(x - x_i)^2 + \mathcal{O}(h^3) \tag{24}$$

これを用いて計算すると

$$
\begin{aligned}
\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = & \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left[f(x_i) + f'(x_i)(x-x_i) + \frac{1}{2}f''(x_i)(x-x_i)^2 + \mathcal{O}(h^3) \right] dx \\
= & 2hf(x_i) + \frac{1}{3}f''(x_i)h^3 + \mathcal{O}(h^5) \\
= & \frac{h}{3}[f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})] + \mathcal{O}(h^5)
\end{aligned} \tag{25}
$$

最後の等式では二階微分 $f''(x_i)$ に対して 3 点公式 (11) を用いました。Taylor 展開の 3 次の項 $(x-x_i)^3$ はこの積分には効かないため、台形公式よりも h^2 も精度が向上しています。全区間で定積分を行うと

$$
\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)] + \mathcal{O}(h^4) \tag{26}
$$

となります。この公式を用いるためには N を偶数に取る必要があります。

2.3 Simpson の 3/8 公式、Boole の公式

さらに 3 次および 4 次まで Taylor 展開を行うことで、精度を向上させることができます。$x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}$ の 4 点を用いて

$$
\int_{x_i}^{x_{i+3}} f(x)dx = \frac{3h}{8}[f(x_i) + 3f(x_{i+1}) + 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3})] + \mathcal{O}(h^5) \tag{27}
$$

としたものを Simpson の 3/8 公式と呼びます。全区間では N は 3 の倍数として

$$
\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + 2f(x_3) + 3f(x_4) + 3f(x_5) + \cdots] + \mathcal{O}(h^4) \tag{28}
$$

となります。

また、x_i から x_{i+4} までの 5 点を用いて

$$
\int_{x_i}^{x_{i+4}} f(x)dx = \frac{2h}{45}[7f(x_i) + 32f(x_{i+1}) + 12f(x_{i+2}) + 32f(x_{i+3}) + 7f(x_{i+4})] + \mathcal{O}(h^7) \tag{29}
$$

と近似したものを Boole の公式 (Bode の公式) と呼びます。全区間での定積分の値は N を 4 の倍数として

$$
\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 14f(x_4) + 32f(x_5) + 12f(x_6) + \cdots] + \mathcal{O}(h^6) \tag{30}
$$

と与えられます。

2.4 Newton-Cotes の公式

台形公式、Simplson 公式、3/8 公式、Boole の公式はすべて等間隔の座標点 $\{x_i\}$ での $f(x)$ の値を用いて計算していますが、これらは Newton-Cotes の公式として以下の一つの形にまとめられます。

$$
\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N} w_i f(x_i) \tag{31}
$$

ここで w_i はそれぞれの座標点での重みであり、用いる公式によって値が異なります。

2.5 Gauss 求積法

座標点が等間隔に限られておらず、自由に設定できる場合は、Newton-Cotes の公式よりもより少ない点数で高い精度が得られる Gauss 求積法があります。Gauss-Legendre 求積法では、座標点を Legendre 多項式のゼロ点 (abscissa)($P_n(x_i) = 0$) ととります (n 次の Legendre 多項式の n 個のゼロ点はすべて $-1 \leq x_i \leq 1$ の範囲内にあります)。そして重み (weight)w_i を

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P_n'(x_i)]^2} \tag{32}$$

ととることにより、以下の $[-1, 1]$ 区間の積分を精度良く近似することができます。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{33}$$

これが Gauss-Legendre 求積法です。導出は少々複雑なのでここでは省略します。x_i と w_i の値は自分で計算して求めることもできますが、教科書などに表として与えられているものも利用するとよいでしょう。$[-1, 1]$ 以外の任意の積分範囲の定積分については変数変換をすることで積分範囲を $-1 \leq x \leq 1$ に変更し、Gauss-Legendre の公式を適用することができます。

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right) \tag{34}$$

また、積分区間が $[0, \infty)$ の場合は Laguerre 多項式 $L_n(x)$ のゼロ点 $\{x_i\}$ と重み $w_i = x_i/[(n+1)^2[L_{n+1}(x_i)]^2]$ を用いて近似することができます (Gauss-Laguerre 求積法)。

$$\int_{0}^{\infty} e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{35}$$

積分区間が $(-\infty, \infty)$ の場合は Hermite 多項式 $H_n(x)$ のゼロ点 $\{x_i\}$ と重み $w_i = 2^{n-1} n! \sqrt{\pi}/(n^2[H_{n-1}(x_i)]^2)$ を用いた公式も使用できます (Gauss-Hermite 求積法)。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{36}$$

3　演習問題

第 8 回分の演習問題のサンプルプログラムは Fortran, C 言語それぞれ

```
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-20/src/fortran8.tgz
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-20/src/c8.tgz
```

とすることでダウンロードできます。解凍は

```
$ tar zxvf fortran8.tgz
$ tar zxvf c8.tgz
```

(19)　$\sin x$ の $x = 1$(rad) での微分を以下の様々な h の値と 3 点、5 点公式による近似解と解析解 $\cos 1$ とのずれを評価し、次の表を埋めよ (余力があれば 7 点、9 点公式も)。

h	3 点公式	5 点公式	7 点公式	9 点公式
10^{-1}				
10^{-2}				
10^{-3}				
10^{-4}				
10^{-5}				
10^{-6}				
10^{-7}				

(20)　積分

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$$

を以下の様々な分割数 N に対して台形公式、Simpson 公式で評価し、解析解 $\log 2$ とのずれを評価せよ。(余力があれば Simpson 8/3 公式と Boole の公式も)

N	台形公式	Simpson の公式	Simpson の 3/8 公式	Boole の公式
12				
120				
1200				
12000				
120000				
1200000				
12000000				

(21) 前問の積分を $n = 2, 4, 6$ での Gauss-Legendre 求積法で計算し、精度を比較せよ。(n は Legendre 多項式の次数) ただし、Gauss-Legendre のゼロ点 $x_1, \cdots, x_n$ と重み $w_1, \cdots, w_n$ は計算せずに表からコピーして使ってよい。