愛知工業大学研究報告
第 35 号 A　平成12年

ランダムな分布点での関数値に基づく一般化された Simpson 公式について

On the generalized Simpson's formula based on the function-values at random points

樋口功
Isao HIGUCHI

Abstract

The integration formulas of Newton-Cotes are given by the function-values at equally spaced abscissas.

The Gaussian integration formulas are based on the values at nonequally spaced points distributed regularly by the orthogonal polynomials.

On the other hand, it occurs often when we treat with the experimental data, that the calculation of integral must be done by using the values at random points in the interval.

In this paper, we shall first establish the generalized Simpson's formula based on the data at irregularly distributed points.

Next, we shall give the concrete form of the best formula having the highest order of accuracy in all the 3-points numerical integration formulas.

1．序

原始関数が必ずしも求まらない関数の近似積分公式の代表的なものとして，Newton-Cotes 型積分公式および Gauss 型積分公式が昔から知られている。

Newton-Cotes 型積分公式は，等間隔分布点の関数値に基づく計算式である。

Gauss 型積分公式における基準点は，等間隔には配置されていないが，Legendre 関数のゼロ点であるという意味で，これまた規則的な分布点である。

ところが物理・工学等の実験データを整理する段階で，原始関数はおろか，被積分関数そのものさえ不明のなかで，ランダムな分布点のデータだけを頼りに積分を計算せざるを得ない場面が，しばしば生じる。

ランダムな分布点での関数値をもとにした一般化された Simpson 公式を作り，可能な限り精度の高い３点近似積分公式を導くのが，本研究の目標である。

筆者は [5] において，ランダムな２分布点における関数値に基づく無数の一般台形公式と，その中で最高の精度を持つ積分公式の具体的な形を決定した。

本論では，その議論をランダムな３点分布の場合へ拡張して考察した。

以下の結果が得られたので報告する。

1. ランダムな３点近似積分公式で精度が最も高くなるものの一般形は次のように表される。 関数 $f \in C^3$ および区間 [a,b]，(h=b-a) に対し，

$$\begin{aligned}\tilde{I}_{k,l,m}(f) = {} & \frac{h}{6(k-l)(l-m)(m-k)} \\ & \times\Big\{(m-l)(6lm-3l-3m+2)f(a+kh) \\ & +(k-m)(6mk-3m-3k+2)f(a+lh) \\ & +(l-k)(6kl-3k-3l+2)f(a+mh)\Big\}, \quad \forall k,\ \forall l,\ \forall m\ ;\ 0 \le k < l < m \le 1\end{aligned}$$

またその誤差は $O(h^4)$ である。

2. １で求めた $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ は，被積分関数 $f(x)$ を，３点

$$\big(a, f(a+kh)\big), \qquad \big(a, f(a+lh)\big), \qquad \big(a, f(a+mh)\big)$$

を通る２次曲線で近似し，$[a,b]$ 上で積分したものである。その意味で $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ は，Simpson 公式の一般化である。

3. $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ の精度は，

$$k = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}, \qquad l = \frac{1}{2}, \qquad m = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$$

のとき最高となる。

従って，最良の３点近似積分公式は

$$\begin{aligned}\tilde{I}(f) &= \tilde{I}_{\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10},\frac{1}{2},\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10}}(f) \\ &= \frac{h}{18}\Big\{5f\Big(a+(\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10})h\Big)+8f\Big(a+\frac{h}{2}\Big)+5f\Big(a+(\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10})h\Big)\Big\}\end{aligned}$$

で，その精度は Simpson 公式より２ランク高く，誤差は $O(h^7)$ である。

2. ランダムな３点の値に対する Simpson 公式の一般化

任意の実数 k, l, m $(0 \leq k < l < m \leq 1)$, および p, q r に関する３点近似積分公式を $\tilde{I}(f)$, その誤差を $E_{\tilde{I}}(f)$ と置く，すなわち

$$\tilde{I}(f) = h\Big\{pf(a+kh) + qf(a+lh) + rf(a+mh)\Big\},$$

$$E_{\tilde{I}}(f) = \tilde{I}(f) - I(f) = \tilde{I}(f) - \int_a^{a+h} f(x)dx$$

とする。

先ず，任意の k, l, m が与えられたとき， $\tilde{I}(f)$ の精度が最も高くなるような p, q, r と k, l, m の関係を調べる。

定理 1. k, l, m を $0 \leq k < l < m \leq 1$ を満たす任意の実数とする。$[a, b]$ 上の３点近似積分公式

$$\tilde{I}(f) = h\Big\{pf(a+kh) + qf(a+lh) + rf(a+mh)\Big\}, \ h = b - a$$

の精度が最も高くなるのは

$$p = \frac{6lm - 3l - 3m + 2}{6(m-k)(l-k)}$$

$$q = \frac{6mk - 3m - 3k + 2}{6(k-l)(m-l)}$$

$$r = \frac{6kl - 3k - 3l + 2}{6(l-m)(k-m)}$$

のときである。 従って，ランダムな３点での値を基にした近似積分公式で最良のものは

$$\begin{aligned}\tilde{I}(f) = \tilde{I}_{k,l,m}(f) = & \frac{h}{6(k-l)(l-m)(m-k)} \\ & \times\Big\{(m-l)(6lm - 3l - 3m + 2)f(a+kh) \\ & +(k-m)(6mk - 3m - 3k + 2)f(a+lh) \\ & +(l-k)(6kl - 3k - 3l + 2)f(a+mh)\Big\}, \ \forall k, \forall l, \forall m \ ; \ 0 \leq k < l < m \leq 1\end{aligned}$$

で， 任意の関数 $f \in C^n$ $(n \geq 3)$ に対し

$$E_{\tilde{I}}(f) = E_{\tilde{I}_{k,l,m}}(f) = O(h^4)^1$$

が成り立つ。

[1] $E_{\tilde{I}}(f) \leq Ch^4$ を満たす定数 C が存在するとき，$E_{\tilde{I}}(f) = O(h^4)$ と表す

証明. $f \in C^n \ (n \geq 3)$ に対し Taylor の定理より，以下の式を満たす $\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \delta$ が存在する。

$$I(f) = \int_a^{a+h} f(x)dx = F(a+h) - F(a) = f(a)h + \frac{1}{2!}f'(a)h^2 + \frac{1}{3!}f''(a)h^3 + \frac{1}{4!}f'''(\alpha)h^4$$

$$\begin{aligned}\tilde{I}(f) &= h\Big\{pf(a+kh) + qf(a+lh) + rf(a+mh)\Big\} \\ &= h\Big[p\Big\{f(a) + f'(a)kh + \frac{1}{2!}f''(a)(kh)^2 + \frac{1}{3!}f'''(\beta)(kh)^3\Big\} \\ &\qquad + q\Big\{f(a) + f'(a)lh + \frac{1}{2!}f''(a)(lh)^2 + \frac{1}{3!}f'''(\gamma)(lh)^3\Big\} \\ &\qquad + r\Big\{f(a) + f'(a)mh + \frac{1}{2!}f''(a)(mh)^2 + \frac{1}{3!}f'''(\delta)(mh)^3\Big\}\Big]\end{aligned}$$

ここで誤差を計算すると

$$\begin{aligned}E_{\tilde{I}}(f) &= \tilde{I}(f) - I(f) \\ &= (p+q+r-1)f(a)h + (pk+ql+rm-\frac{1}{2})f'(a)h^2 \\ &\qquad + \Big[\frac{1}{2!}(pk^2+ql^2+rm^2) - \frac{1}{3!}\Big]f''(a)h^3 + O(h^4)\end{aligned}$$

3数 $p,\ q,\ r$ を決めるために，$h,\ h^2,\ h^3$ の係数を 0 と置けば十分だから

$$(1) \qquad p+q+r=1, \qquad pk+ql+rm=\frac{1}{2}, \qquad pk^2+ql^2+rm^2=\frac{1}{3}$$

式 (1) を $p,\ q,\ r$ を未知数とする連立方程式とみなして解くと

$$p = \frac{6lm-3l-3m+2}{6(m-k)(l-k)}$$

$$q = \frac{6mk-3m-3k+2}{6(k-l)(m-l)}$$

$$r = \frac{6kl-3k-3l+2}{6(l-m)(k-m)}$$

となる。　よって $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ が決まり，その誤差は $O(h^4)$ である。

定理 2. 定理１で求めた３点近似積分公式 $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ は，曲線 $y=f(x)$ 上の３点

$$\big(a+kh, f(a+kh)\big),\quad \big(a+lh, f(a+lh)\big),\quad \big(a+mh, f(a+mh)\big)$$

を通る２次曲線で $f(x)$ を近似し，$[a,b]$ 上で積分したものと一致する。

証明. $y_0=f(a+kh)$, $y_1=f(a+lh)$, $y_2=f(a+mh)$ と置く。 ３点

$$(a+kh, y_0),\qquad (a+lh, y_1),\qquad (a+mh, y_2)$$

を通る２次曲線は

$$\begin{aligned} y=\tilde{f}(x) &= y_0+\frac{y_1-y_0}{h(l-k)}(x-a-kh) \\ &\quad +\frac{(l-m)y_0+(m-k)y_1+(k-l)y_2}{h^2(k-m)(m-l)(l-k)}(x-a-kh)(x-a-lh) \end{aligned}$$

である。ここで

$$\int_a^{a+h}(x-a-kh)dx=\frac{h^2}{2}(1-2k)$$

$$\int_a^{a+h}(x-a-kh)(x-a-lh)dx=\frac{h^3}{6}(6kl-3k-3l+2)$$

だから

$$\begin{aligned} \int_a^{a+h} y dx &= \int_a^{a+h}\tilde{f}(x)dx \\ &= \frac{h}{6(k-l)(l-m)(m-k)} \\ &\quad \times\Big\{(m-l)(6ml-3l-3m+2)f(a+kh) \\ &\qquad +(k-m)(6mk-3m-3k+2)f(a+lh) \\ &\qquad +(l-k)(6kl-3k-3l+2)f(a+mh)\Big\} \end{aligned}$$

で，これは $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ と一致する。

注意. 3点を通る2次曲線で $f(x)$ を近似するという意味で，積分公式 $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ は確かに Simpson 公式の一般化である。 また実際， $k=0,\ l=\frac{1}{2},\ m=1$ のとき，

$$\tilde{I}_{0,\frac{1}{2},1}(f)=\frac{h}{6}\Big\{f(a)+4f(a+\frac{h}{2})+f(a+h)\Big\}$$

で，これは Simpson 公式そのものである。

一般の $k,\ l,\ m$ の値に対しては $\tilde{I}(f)$ の誤差の限界は $O(h^4)$ までだが， $k,\ l,\ m$ の値によってはその精度を更に高めることもできる。 たとえば， $k=0,\ l=\frac{1}{2},\ m=1$ のときの Simpson 公式 $\tilde{I}_{0,\frac{1}{2},1}(f)$ の誤差は，任意の $f(x)\in C^n\ (n\geq 4)$ に対して $O(h^5)$ である。

4. 精度が最も高い3点近似積分公式

最後に，一般化された Simpson 公式 $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ が，どのような $k,\ l,\ m$ の値に対して精度が最も高くなるかを調べる。

定理 3. $k,\ l,\ m$ を $0\leq k<l<m\leq 1$ を満たす任意の実数とする。 一般化された Simpson 公式 $\tilde{I}_{k,l,m}(f)$ の精度は，

$$k=\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10},\qquad q=\frac{1}{2},\qquad r=\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10}$$

のとき最高となる。 従って最良の3点近似積分公式は

$$\tilde{I}_{\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10},\frac{1}{2},\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10}}(f)=\frac{h}{18}\Big\{5f\Big(a+(\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10})h\Big)+8f(a+\frac{h}{2})+5f\Big(a+(\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10})h\Big)\Big\}$$

で，その誤差は，任意の $f(x)\in C^n\ (n\geq 6)$ に対し $O(h^7)$ である。

証明. 任意の $f(x)\in C^n\ (n\geq 6)$ に対し Taylor の定理より，以下の式を満たす $\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \delta$ が存在する。

$$\begin{aligned}I(f)&=\int_a^{a+h}f(x)dx=F(a+h)-F(a)\\&=f(a)h+\frac{1}{2!}f'(a)h^2+\cdots+\frac{1}{6!}f^{(5)}(a)h^6+\frac{1}{7!}f^{(6)}(\alpha)h^7\end{aligned}$$

$$\tilde{I}(f) = h\Big\{pf(a+kh) + qf(a+lh) + rf(a+mh)\Big\}$$

$$= h\Big[p\Big\{f(a) + f'(a)kh + \frac{1}{2!}f''(a)(kh)^2 + \cdots + \frac{1}{5!}f^{(5)}(a)(kh)^5 + \frac{1}{6!}f^{(6)}(\beta)(kh)^6\Big\}$$

$$+q\Big\{f(a) + f'(a)lh + \frac{1}{2!}f''(a)(lh)^2 + \cdots + \frac{1}{5!}f^{(5)}(a)(lh)^5 + \frac{1}{6!}f^{(6)}(\gamma)(lh)^6\Big\}$$

$$+r\Big\{f(a) + f'(a)mh + \frac{1}{2!}f''(a)(mh)^2 + \cdots + \frac{1}{5!}f^{(5)}(a)(mh)^5 + \frac{1}{6!}f^{(6)}(\delta)(mh)^6\Big\}\Big]$$

ここで誤差を計算し整理すると

$$E_{\tilde{I}}(f) = \tilde{I}(f) - I(f)$$

$$= (p+q+r-1)f(a)h + (pk+ql+rm-\frac{1}{2})f'(a)h^2$$

$$+\cdots+\Big\{\frac{1}{5!}(pk^5+ql^5+rm^5) - \frac{1}{6!}\Big\}f^{(5)}(a)h^6 + O(h^7)$$

誤差が $O(h^7)$ となるように 6数 $p,\ q,\ r,\ k,\ l,\ m$ を決めるため， $h,\ h^2, \cdots,\ h^6$ の係数を 0 と置いて

(2) $\qquad p+q+r=1$

(3) $\qquad pk+ql+rm=\dfrac{1}{2}$

(4) $\qquad pk^2+ql^2+rm^2=\dfrac{1}{3}$

(5) $\qquad pk^3+ql^3+rm^3=\dfrac{1}{4}$

(6) $\qquad pk^4+ql^4+rm^4=\dfrac{1}{5}$

(7) $\qquad pk^5+ql^5+rm^5=\dfrac{1}{6}$

式 (2) $\sim$ (7) よりまず $p,\ q,\ r$ を消去すると

(8) $12klm - 6kl - 6lm - 6mk + 4k + 4l + 4m = 3$

(9) $30klm - 20kl - 20lm - 20mk + 15k + 15l + 15m = 12$

(10) $20klm - 15kl - 15lm - 15mk + 12k + 12l + 12m = 10$

3式 (8), (9) (10) より

$$k + l + m = \frac{3}{2}$$
$$kl + lm + mk = \frac{3}{5}$$
$$klm = \frac{1}{20}$$

よって, 根と係数の関係から, k, l, m は次の3次方程式の解である。

$$x^3 - \frac{3}{2}x^2 + \frac{3}{5}x - \frac{1}{20} = 0$$

これより

$$(2x-1)(10x^2 - 10x + 1) = 0 \quad \text{で}, \quad x = \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{15}}{10}$$

ここで $0 \leq k < l < m \leq 1$ だったから,

$$k = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}, \qquad l = \frac{1}{2}, \qquad m = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$$

このとき

$$p = \frac{6lm - 3l - 3m + 2}{6(m-k)(l-k)} = \frac{5}{18}$$
$$q = \frac{6mk - 3m - 3k + 2}{6(k-l)(m-l)} = \frac{4}{9}$$
$$r = \frac{6kl - 3k - 3l + 2}{6(l-m)(k-m)} = \frac{5}{18}$$

となり, 定理が証明された。

注意. 定理3により, Gauss 型3点近似積分公式が, ランダムな分布点での値を基にした一般化された Simpson 公式の中で最も精度が高いものとして, 特徴付けられたことになる。

参考文献

[1] 篠崎壽夫，松下祐輔，応用数学計算法入門 (上)，(下), コロナ社, 1971.

[2] 清水麻希子，冨永真琴，樋口功，誤差の評価から逆算した閉型積分近似公式について，愛知工業大学研究報告，34 号 A, 1999.

[3] 杉浦洋，入門数値計算，サイエンス社, 1997.

[4] 高田勝，機械計算法，養賢堂, 1994.

[5] 樋口功，シンプソン公式と同等の精度を持つ新台形公式について，愛知工業大学研究報告，34 号 A, 1999

[6] 山本哲朗，数値解析入門，サイエンス社, 1995.

[7] F.B.Hidebrand, Introduction to numerical analysis, MacGraw-Hill, 1974.

[8] A.Ralston and P.Rabinowitz, A first course in numerical analysis, MacGraw-Hill, 1986.

[9] J.Stoer and R.Bulirsch, Introduction to numerical analysis, Springer-Verlag, 1996.

（受理　平成12年３月18日）