3　数値積分

3.1　はじめに

関数 $f(x)$ の定積分

$$I[f(x)] = \int_a^b f(x)\,dx$$

は $f(x)$ の原始関数 $F(x)$ が求まれば

$$I = F(b) - F(a)$$

として求めることができる。しかし、実際には解析的に原始関数を求めることができないことも多く、そんな時には数値積分に頼らざるを得ない。またそもそも積分すべき関数が解析的に書けていない場合、例えば実験によって求まったデータのグラフを積分するには、数値積分以外に方法はない。ここでは二つの近似度の異なる数値積分の方法を説明する。

まず定積分がどう定義されていたかを復習しておこう。積分区間 $[a,\, b]$ を n 等分して、$x_0, x_1, x_2, \ldots,$ x_n を各分点とする。但し $x_0 = a$、$x_n = b$ と取る。分点の間隔は $h = (b-a)/n$ となる。図 1 のように、区間 $[x_i,\, x_{i+1}]$ における関数 $f(x)$ の最小値を与える点を $x = \xi_i$ として、和

$$s[f(x);\ h] = \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\,h$$

を考える。和 s は図 1 の影をつけた部分の面積である。この図を見て分かるように、s は $f(x)$ と x 軸に挟まれる面積より小さい。同様に、同区間の最大値を与える点を $x = \eta_i$ とすると、

$$S[f(x);\ h] = \sum_{i=0}^{n-1} f(\eta_i)\,h$$

で定義される S は $f(x)$ と x 軸に挟まれる面積より大きい。ここで $h \to 0$ のときに、下からの面積の近似値 s と上からの面積の近似値 S が一致するならば、その極限値 I を定積分と呼ぶのであった。[1]

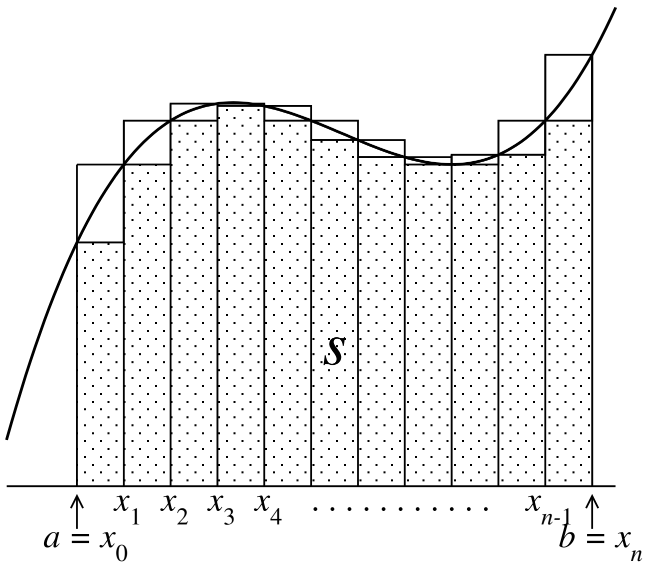

図 1: 面積の下極限 (影をつけた部分) と上極限 (白と影の和)。

[1] 数学の教科書では、区間 $[a,\, b]$ の分割の仕方は (等間隔に限らず) 任意で、分割した区間のうち最大幅のものが 0 に近付くように分割数を無限にする時に、s と S の極限値が一致するならその極限値を定積分とすると書いてあるかも知れない。

3.2　台形公式

関数の積分は、関数の表わす曲線と x-軸で囲まれる面積と等しいので、図 2(a) のように、細長い台形の面積を足し合わせて区間 $[a, b]$ の定積分を近似することができる。式で書くと、

$$
\begin{aligned}
I\,[f(x)] &= \int_a^b f(x)dx \\
&\sim \frac{1}{2}\left(f(x_0)+f(x_1)\right)\times h + \frac{1}{2}\left(f(x_1)+f(x_2)\right)\times h + \cdots + \frac{1}{2}\left(f(x_{n-1})+f(x_n)\right)\times h \\
&= \left(\frac{1}{2}f(x_0)+f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_{n-1})+\frac{1}{2}f(x_n)\right)\times h
\end{aligned}
$$

となることがわかる。この公式は、見方を変えると図 2(b) のように、細長い長方形での定積分の近似を行ない、積分区間の始めと終わりの部分に補正を施した形になっている。

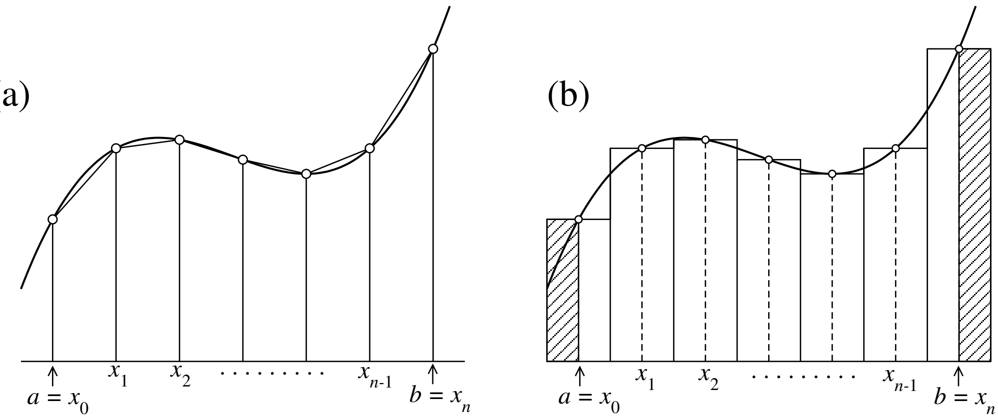

図 2: 台形公式による数値積分 (a) と矩形積分 (b) の比較。台形公式で求められる面積は、矩形積分で斜線部分を除いたものに等しい。

> 練習問題 4: 関数 $f(x) = x^2$ の 0 から x までの定積分を台形公式によって求めるプログラムを作れ。積分区間の上限 x や分点の間隔 h の影響が調べられるように、分点の数と積分区間の上限をキーボードから読み込めるようにすること。

3.3　Simpson 公式

図 2(a) から分るように、台形公式による積分は被積分関数を折れ線で近似していることになっている。つまり各区間では一次式で関数を近似していることになっている。一次式を用いるよりも二次式を用いて近似した方が精度が良いと一般に期待できるので (図 3 参照)、二次式を用いた数値積分法を考えよう。

二次式の一般形 $f(x) = ax^2 + bx + c$ は a、b、c と三個のパラメータを持っており、三つの点を選ばないと近似式が書けない。$x = x_i, x_{i+1}, x_{i+2}$ において関数の値が、それぞれ $y = y_i, y_{i+1}, y_{i+2}$ になったとすると、これら三点を通る二次関数は

$$
f(x) = y_i\frac{(x-x_{i+1})(x-x_{i+2})}{(x_i-x_{i+1})(x_i-x_{i+2})} + y_{i+1}\frac{(x-x_{i+2})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i+2})(x_{i+1}-x_i)} + y_{i+2}\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i+2}-x_i)(x_{i+2}-x_{i+1})}
$$

と書けることは、x に x_i, x_{i+1}, x_{i+2} の三つの値を代入することにより確かめることができる。台形公式のときと同様に $h = x_{i+1} - x_i$ とすれば、この区間の積分は

$$
\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx = \frac{h}{3}(y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2})
$$

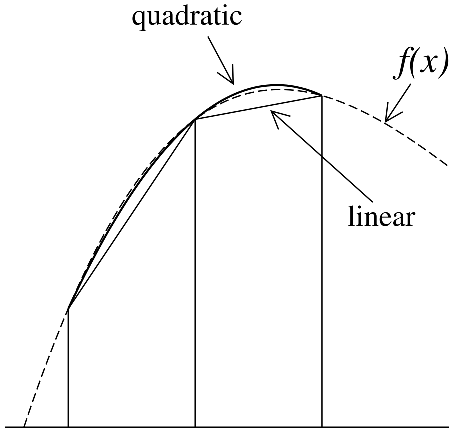

図 3: Simpson 公式による数値積分。太線の “quadratic” が二次関数による被積分関数の近似曲線であり、“linear” と書いてある台形則による近似より被積分関数の良い近似になっている。

となる。この式を Simpson（シンプソン）公式と言う。[2]

区間 $[a, b]$ にわたる積分をするときは、二区間毎に積分をするために区間の数を偶数にする必要があることに注意しなければならない。定積分は

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx \\
&\sim \frac{h}{3} \times (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) + \frac{h}{3} \times (f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)) \\
&\qquad + \cdots + \frac{h}{3} \times (f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) \\
&= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]
\end{aligned}$$

と計算される。各分点での関数の値 $f(x_i)$ を計算して、重みを付けて合計を取ったような表式になっている。

> 練習問題 5: 練習問題 4 と同じ関数、$f(x) = x^2$ の 0 から x までの定積分を Simpson 公式によって求めるプログラムを作れ。台形公式を用いた場合よりも答えが解析解に近付くことを確かめよ。

＊ 雑談 ＊

Simpson 公式を用いた積分は、積分しようとする関数を二次関数で内挿するため、(難しいことを言わなければ) 直線で内挿する台形公式よりも精度が良いと考えられる。Simpson 公式の証明は至って平易なものであり、得られた結果は、奇数番目の分点は偶数番目の分点の二倍の重みをつけて関数の値を足し上げなさいという、これも簡単なものであった。まあ、実際のプログラミングは一筋縄では行かなかったかも知れないが、計算しなければならない式は複雑なものではない。

しかし、奇数番目と偶数番目で重みを変えるだけで計算精度が向上するというのは、少し考えてみると不思議なことである。例えば、ある関数 $f(x)$ を Simpson 公式を用いて 0 から 100 まで 1 刻みで積分をする時は、$f(1)$, $f(3)$, $f(5)$, ..., $f(99)$ には 4/3 の重み、$f(2)$, $f(4)$, $f(6)$, ..., $f(98)$ には 2/3 の重みを付けて加えるという具合に、x が奇数である時と偶数である時で異なる重み付けをする。そうすると、全てに等しい重みを付けて加え合せる台形則より良い結果が得られるというのである。関数の具体的な形に依らず、x が奇数になる点を重視した方が計算精度が高いというのである。きっと奇数には偶数よりも関数の振舞いを良く再現する神秘的な性質があるのであろうなどと妄想をしてみたりする。ところが、刻み幅は同じ 1 にして、同じ関数の積分を積分範囲を 1 から 99 までに変更してみると話は変って来る。今度は x が偶数の時に二倍の重み付けをすると精度の高い積分がで

[2] $h = x_{i+2} - x_i$ と定義して、$\int f(x)dx = \frac{h}{6}(y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2})$ とする教科書も多いので、別の本を読む時には注意して欲しい。

きるのだという。さっきと話が違うじゃないかという訳である。いったいどういうことになっているのであろうか。数学的に証明された公式を「どうなっているんだ」もないもんだと考える人は正しい。そういう才能に恵まれた人達はこの駄文を読んでも意味がない。しかし釈然としない思いの人もいるかも知れないので、簡単な例を幾つか計算して Simpson 公式と台形公式の比較をしてみようと思う。

例として、三次関数 $f(x) = x^3$ の 0 から 1 までの積分を考えてみる。解析的な答えは $I_{\mathrm{analytic}} = 1/4$ である。区間 [0, 1] を n 等分し、Simpson 公式を用いて積分をすると、

$$
\begin{aligned}
I_{\mathrm{Simpson}}\left[f(x)\right] &= \frac{h}{3}\left[f(0) + 4f(h) + 2f(2h) + 4f(3h) + 2f(4h) + \ldots + 4f((n-1)h) + f(nh)\right] \\
&= \frac{h}{3}\left(f(0) + f(1)\right) + \frac{4h}{3}\left(f(h) + f(2h) + f(3h) + f(4h) + \ldots + f((n-1)h)\right) \\
&- \frac{2h}{3}\left(f(2h) + f(4h) + \ldots + f((n-2)h)\right) \\
&= \frac{h}{3}\left(f(0) + f(1)\right) + \frac{4h}{3}\sum_{k=1}^{n-1}(kh)^3 - \frac{2h}{3}\sum_{k=1}^{n/2-1}(2kh)^3
\end{aligned}
$$

ここで、$h = 1/n$ である。高校で教わる級数の和を求める公式

$$
\sum_{k=1}^{n} k^3 = \frac{1}{4}n^2(n+1)^2
$$

を用いることで、

$$
I_{\mathrm{Simpson}}[f(x)] = \frac{h}{3}\left[(0^3 + 1^3) + \frac{4h^4}{3} \times \frac{1}{4}(n-1)^2 n^2 - \frac{2^4 h^4}{3}\frac{1}{4}\left(\frac{n}{2} - 1\right)^2\left(\frac{n}{2}\right)^2\right] = \frac{1}{4}
$$

と計算できる。数値計算などしなくても和が求まってしまい、結果は解析的な積分と (偶然?) 一致する。同様の計算を台形公式に対しても実行することができて、結果は $I_{\mathrm{trapezoidal}} = 1/4{+}1/4n^2$ となる。こちらは誤差 $1/4n^2$ を持つことが分る。

級数の和を求める公式は他にも、$\sum k = n(n+1)/2$、$\sum k^2 = n(n+1)(2n+1)/6$、$\sum k^4 = n(n+1)(2n+1)(3n^2+3n-1)/30$、$\sum e^k = e(1-e^n)/(1-e)$ 等が知られているので、これらを利用して和を求めることができる積分の例を表 1 に示す。三角関数の積分については $\sin x = \Im e^{ix}$ を用いた。

表 1: 級数の和が解析的に求まる関数の区間 [0, 1] での積分。数値計算の際の分点の数を n とする。

$f(x)$	台形則	Simpson 則	解析解
1	1	1	1
x	1/2	1/2	1/2
x^2	$\frac{1}{3}\left(1 + \frac{1}{2n^2}\right)$	1/3	1/3
x^3	$\frac{1}{4}\left(1 + \frac{1}{n^2}\right)$	1/4	1/4
x^4	$\frac{1}{5}\left(1 + \frac{5}{3n^2} - \frac{1}{6n^4}\right)$	$\frac{1}{5}\left(1 + \frac{2}{3n^4}\right)$	1/5
e^x	$\frac{1}{2n}\frac{e^{1/n}+1}{e^{1/n}-1}(e-1)$	$\frac{1}{3n}\frac{e^{2/n}+4e^{1/n}+1}{e^{2/n}-1}(e-1)$	$e-1$
$\sin(\pi x)$	$\frac{1}{n}\cot\frac{\pi}{2n}$	$\frac{2}{3n}\left(2\cot\frac{\pi}{2n} - \cot\frac{\pi}{n}\right)$	$\frac{2}{\pi}$

このまま計算を続けて行けば、幾らでも高い次数の多項式でも数値積分の結果を計算できそうだが、きりがないのでこの辺りで止めておこう。幾つかの例を計算しただけで、この先がどうなるか数学的には判断できないのであるが、どうやら Simpson 則を用いた方が誤差は小さくなりそうである。こんな扱いでは満足できない人は、数値計算の教科書で誤差解析を勉強すると良い。

*

3.4　応用：拡散対の相互拡散と保野解析

再び材料科学のトピックの中から、学生実験のテーマでもある拡散対の相互拡散と保野解析を例として考えてみよう。材料工学実験Iの「拡散現象」の項目で説明したように、二種類の金属を貼り合せて、高温で熱処理することにより、互いに原子が行き来できるようにしたものを拡散対と呼ぶ。拡散対の界面付近の濃度プロファイルを測定することにより、濃度に依存する拡散係数を近似的に求めることができる。保野博士は、原子の移動の中立面 (マタノ界面) を探して、座標原点をそこに移動することにより、式

$$D(c_0) = -\frac{1}{2t}\frac{dx}{dc}\int_0^{c_0} x\, dc$$

によって濃度 c_0 における拡散係数を求めることができることを示した。[3] この式を見ると数値的に微分と積分ができれば拡散係数が求められることが分る。

応用問題 2: ニッケル板の上に銅メッキを施して拡散対を作製した。850°C で 22 時間保持したところ、図 4 に示すような EPMA のプロファイルを得た。Boltzmann–保野法によりマタノ界面での相互拡散係数を求めよ。データは

`http://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/lmsm/jikken/computer/matano.data`

にある。データは 3 カラムから成っていて、1 カラム目が距離で単位は μm、2、3 カラム目がそれぞれ Cu と Ni からのシグナルの計数である。データ点数は 2001 点ある。あるいは自身の学生実験のデータを用いても良い。

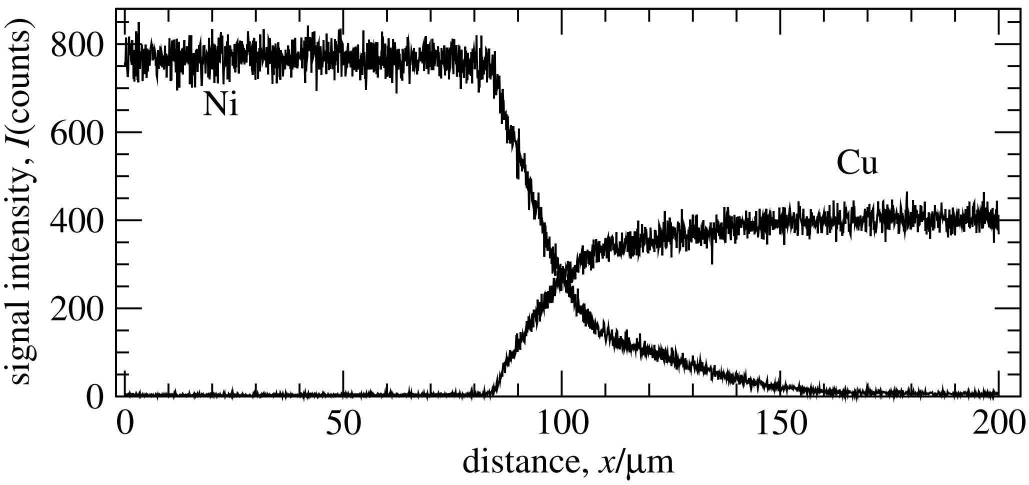

図 4: 界面付近の濃度プロファイル

ヒント

与えられたデータは装置が X 線を検知した回数 (計数) なので、まずは濃度に換算しなければならない。銅やニッケルの濃度は計数に比例していると仮定して良いが、元素によって比例定数が異なることと、バックグラウンドの計数 (濃度が 0 でも検知器が反応する場合があることによる計数) があるために話は少々ややこしい。

まず、バックグラウンドに関しては以下のように考える。図 5 は $x = 0 \sim 50$ μm における銅からの X 線の計数の度数分布を示したものである。図 4 の濃度プロファイルを見るとこの領域では銅の濃度は 0 であると考えられるが、計数は 0 回から 9 回まで分布している。この分布は、折れ線で示した平均値 3.12 の Poisson(ポワソン)分布で良く近似できる。そこで、バックグラウンドの計数は約 3.1 であると考えられる。

[3] 参考文献: C. Matano, Japan. J. Phys. **8**, 109(1933)。また拡散現象については、小岩先生と中嶋先生の共著テキスト「材料における拡散」(内田老鶴圃) が詳しい。

さて、i 番目の測定点における銅またはニッケルの濃度を c_i^{Cu}、c_i^{Ni}、計数を N_i^{Cu}、N_i^{Ni} とすれば、バックグラウンドも考えた比例関係の式は $N_i^{\mathrm{Cu}} = \alpha^{\mathrm{Cu}} c_i^{\mathrm{Cu}} + \beta$、$N_i^{\mathrm{Ni}} = \alpha^{\mathrm{Ni}} c_i^{\mathrm{Ni}} + \beta$、と書くことができる。バックグラウンドの計数 $\beta \sim 3.1$ は元素によらないとしておく。拡散対には銅とニッケルの二つの元素しかないので、濃度の和は 1 になるはずなので、これらの式から

$$N_i^{\mathrm{Cu}} - \beta = \alpha^{\mathrm{Cu}} - \frac{\alpha^{\mathrm{Cu}}}{\alpha^{\mathrm{Ni}}}(N_i^{\mathrm{Ni}} - \beta)$$

が成り立つ。最小二乗法のアイディアを援用して、

$$S \equiv \sum_i \left[(N_i^{\mathrm{Cu}} - \beta) - \left(\alpha^{\mathrm{Cu}} - \frac{\alpha^{\mathrm{Cu}}}{\alpha^{\mathrm{Ni}}}(N_i^{\mathrm{Ni}} - \beta) \right) \right]^2$$

が最小になる α^{Cu} と $\alpha^{\mathrm{Cu}}/\alpha^{\mathrm{Ni}}$ を求めれば、比例係数の α^{Cu} と α^{Ni} が求まり、計数を濃度に換算できる。

こうして計数を濃度に換算しただけだと、X 線の測定器の計数には確率的な変動があるので、濃度が細かく振動してしまうので微分をする時に困る。データを幾つかのグループに分けて平均で置換えるとプロファイル曲線は滑かになる。例として図 6 にデータを 25 個ずつのグループに分けて平均を取った時の曲線を示す。

プロファイル曲線がある程度滑かになれば、プロファイルの導関数は関数の差分で近似することができ

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

として良い。学生実験の解説ではプロファイル曲線の縦軸と横軸を交換すると書いたが、測定点の位置と違って濃度は等間隔で分布していないので、差分を計算するときに分母が 0 に近い数になるという問題がある。微分についての関係式

$$\frac{dx}{dc} = \frac{1}{\frac{dc}{dx}}$$

を用いれば、等間隔な位置座標を用いて差分の計算をすることができる。

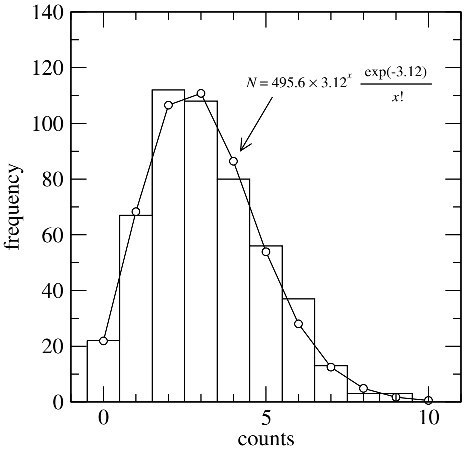

図 5: バックグラウンドの計数の度数分布。折れ線は Poisson 分布によるフィッティングである。

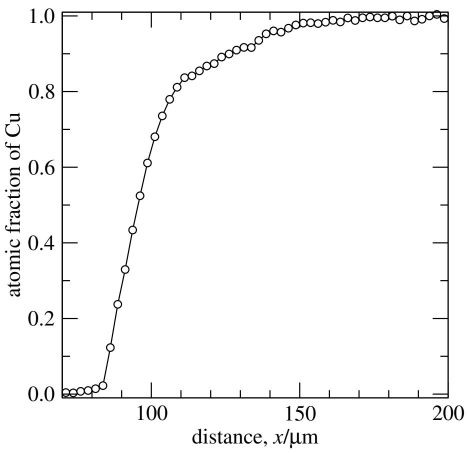

図 6: 平均値を取って平滑化した濃度プロファイル。