

## 1. 数値積分

### (a) 台形則 (trapezoidal rule)

台形則は積分区間を等間隔に分割し, 各分割区間で被積分関数を両端の 2 点を通る 1 次式で近似する方法である。分点を  $x_i = \frac{b-a}{n}i + a$  ( $i = 0 \dots n$ ) とし,  $y_i = f(x_i)$ ,  $h = \frac{b-a}{n}$  と置くと

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx h \sum_{i=0}^{n-1} \frac{y_i + y_{i+1}}{2} \\ &= h \left\{ \frac{y_0 + y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right\}\end{aligned}$$

となる。誤差項は  $-\frac{1}{12}h^2[f''(x)]_a^b$  である。

### (b) シンプソン則 (Simpson's rule)

台形則と同様の方法であるが, 各分割区間で両端及び中点の 3 点を通る 2 次式で被積分関数を近似する。区間の中点を含めた分点を  $x_i = \frac{b-a}{2n}i + a$  ( $i = 0 \dots 2n$ ) とし,  $y_i = f(x_i)$ ,  $h = \frac{b-a}{2n}$  と置くと

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx h \sum_{i=0,2,\dots,2n-2} \frac{y_i + 4y_{i+1} + y_{i+2}}{3} \\ &= \frac{h}{3} \{ y_0 + y_{2n} + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2n-1}) \\ &\quad + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{2n-2}) \}\end{aligned}$$

となる。誤差項は  $-\frac{1}{180}h^4[f^{(3)}(x)]_a^b$  である。

### (c) ガウス型公式

上の二つの積分法は分点を等間隔にとった。このようなタイプの公式をニュートン-コーツ (Newton-Cotes) 公式という。一方, 被積分関数が多項式であると仮定した場合にできるだけ高次の場合まで正しい公式になるように最適化した分点と重みを用いるのがガウス型公式である。ガウス型公式は少ない分点で精度よい積分値を得られるが, 分点および重みを求めるのが面倒なのが難点である。n 個の分点と重みをそれぞれ  $x_i, A_i$  とすると

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

と書ける。重み関数  $w(x)$  と積分区間によって以下のようなタイプがある。

#### (1) ガウス-ルジャンドル (Gauss-Legendre) 公式

重み関数が  $w(x) = 1$  で積分区間が  $[-1 : 1]$  の場合

分点:ルジャンドル多項式の零点  $P_n(x_i) = 0$

重み: $A_i = 2/[nP_{n-1}(x_i)P'_n(x_i)]$

#### (2) ガウス-ラゲール (Gauss-Laguerre) 公式

重み関数が  $w(x) = e^{-x}$  で積分区間が  $[0 : \infty]$  の場合

分点:ラゲール多項式の零点  $L_n(x_i) = 0$

重み: $A_i = (n!)/\{x_i[L'_n(x_i)]^2\}$

(3) ガウス-エルミート (Gauss-Hermite) 公式

重み関数が  $w(x) = e^{-x^2}$  で積分区間が  $[-\infty : \infty]$  の場合

分点:エルミート多項式の零点  $H_n(x_i) = 0$

重み:  $A_i = 2^{n+1} n! \pi^{1/2} / [H'_n(x_i)]^2$

以上の公式は被積分関数  $f(x)$  が  $(2n - 1)$  次以下の多項式であれば厳密に正しい公式となっている。また、積分区間が  $[a : b]$  の場合にガウス-ルジャンドル公式を適用したい場合、分点として  $x'_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_i$  を用い、重みに  $\frac{b-a}{2}$  を乗ずればよい。

## 2. 反復法による方程式の根

(a) 二分法 (bisection method)

方程式  $f(x) = 0$  の根が区間  $[a : b]$  の間に 1 つだけあることが分かっている場合、以下に述べる二分法を用いることができる。(図 1)

まず、区間  $[a : b]$  を中点で二分する。この二分された二つの区間のうち、根のある方の区間を選ぶ。根ある区間は区間の両端で  $f(x)$  の符号が異なるので判別できる。この根のある方の区間をさらに中点で二分し、また根のある方の区間を選ぶ。この操作を繰り返していけば毎回区間の巾が半分になって行く。区間の巾が十分小さくなったところでこの操作を打ち切る。

(b) ニュートン-ラプソン法 (Newton-Rapson method)

ニュートン-ラプソン法 (あるいは単にニュートン法と呼ぶこともある。) の手順は次のように行う。

いま、反復の  $i$  番めの近似値を  $x_i$  とする。図 2 のように真の根は曲線  $y = f(x)$  と  $x$  軸の交点の  $x$  座標である。曲線  $y = f(x)$  上の点  $(x_i, f(x_i))$  での接線は、

$$y = f'(x_i)(x - x_i) + f(x_i)$$

であり、この接線と  $x$  軸との交点の  $x$  座標を次の近似値  $x_{i+1}$  とする。すなわち

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

ととる。初期値として良い値を選べば図 2 に見るように反復を重ねるごとに急速に真の値に近づいて行く。ニュートン法は二分法に比べると遥かに効率のよいアルゴリズムであるが、(根の近くでは一回の反復のたびに有効桁数がほぼ倍になる。) いつも収束すると保証されているわけではない。