

補間公式

補間：有限の点のデータから連続関数を生成する

ラグランジュ補間

n 個の点から $n-1$ 次の多項式 $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{n-1}x^{n-1}$ を定める

$$f(x_k) = y_k \quad 1 \leq k \leq n \quad f(x) = \sum_{k=1}^n y_k \left(\prod_{l=1, l \neq k}^n \frac{x - x_l}{x_k - x_l} \right)$$

$n = 1$
定数

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad x_1 = \frac{a+b}{2} \quad (a \leq x \leq b)$$

中間点の値で決める定数の関数

$$\prod_{l=1, l \neq k}^n \frac{x - x_l}{x_k - x_l} = \begin{cases} 1 & (x = x_k) \\ 0 & (x = x_l) \end{cases}$$

$n = 2$
1 次関数

$$f(x) = f(a) \frac{x-b}{a-b} + f(b) \frac{x-a}{b-a} \quad x_1 = a, \quad x_2 = b$$
$$= \frac{f(b) - f(a)}{b-a} x + \frac{bf(a) - af(b)}{b-a}$$

$$x_1 = a, \quad x_2 = \frac{a+b}{2}, \quad x_3 = b$$

$n = 3$
2 次関数

$$f(x) = f(a) \frac{x - \frac{a+b}{2}}{a - \frac{a+b}{2}} \frac{x-b}{a-b} + f\left(\frac{a+b}{2}\right) \frac{x-a}{\frac{a+b}{2} - a} \frac{x-b}{\frac{a+b}{2} - b} + f(b) \frac{x-a}{b-a} \frac{x - \frac{a+b}{2}}{b - \frac{a+b}{2}}$$
$$= 2f(a) \frac{(x - \frac{a+b}{2})(x-b)}{(b-a)^2} + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) \frac{(x-a)(b-x)}{(b-a)^2} + 2f(b) \frac{(x-a)(x - \frac{a+b}{2})}{(b-a)^2}$$

シンプソン則による数値積分

微小区間の被積分関数 $f(x)$ を 2 次関数 $F(x)$ で近似して積分する

$x_1 = a, \quad x_2 = (a+b)/2, \quad x_3 = b$ の 3 点を使ってラグランジュ補間による 2 次関数を求める

2 次関数
$$F(x) \cong 2f(a)\frac{(x-\frac{a+b}{2})(x-b)}{(b-a)^2} + 4f(\frac{a+b}{2})\frac{(x-a)(b-x)}{(b-a)^2} + 2f(b)\frac{(x-a)(x-\frac{a+b}{2})}{(b-a)^2}$$

$$\begin{aligned} \int_a^b F(x) dx &= \frac{2}{(b-a)^2} \left[f(a) \int_a^b (x-\frac{a+b}{2})(x-b) dx + 4f(\frac{a+b}{2}) \int_a^b (x-a)(b-x) dx + f(b) \int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2}) dx \right] \\ \Rightarrow \int_a^b f(x) dx &= \frac{2(b-a)^3}{(b-a)^2} \left[f(a) \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \right) + 2f(\frac{a+b}{2}) \left(-\frac{1}{3} + \frac{1}{2} \right) + f(b) \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \right) \right] \\ &= \frac{(b-a)}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] \end{aligned}$$

$$\int_A^B f(x) dx \cong \frac{h}{6} \sum_{n=0}^{N-1} [f(A+nh) + 4f(A+(n+1/2)h) + f(A+(n+1)h)]$$

シンプソンの積分公式

$$h = (B-A)/N$$

微分方程式の解法 2

ルンゲ・クッタ法

微小区間の微分方程式 $\frac{d}{dx}F(x) = f(x)$ をシンプソン法を用いて積分し、解を求める

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(x) dx$$
$$\cong \frac{(b-a)}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

```
real*8 :: s=0.d0, h, f, PI
```

```
integer :: i, N=1000
```

```
PI=4.d0*atan(1.d0)
```

```
h=2*PI/N
```

```
do i=0, N-1
```

```
  s=s+(f(i*h)+4*f((i+0.5)*h)+f((i+1)*h))*h/6
```

```
  write(*,*) (i+1)*h, s
```

```
end do
```

```
end
```

$$\frac{d}{dx}F(x) = \cos(x)$$

```
real*8 function f(x)
```

```
real*8 :: x
```

```
f = cos(x)
```

```
return
```

レポート課題 No.2

提出期限 1月25日（金）

各自が興味を持っている研究分野に関連することで、数値計算を利用して解析することができる課題を自由に設定し、その解析方法と解析結果についてレポートとしてまとめ、提出してください。

重力多体問題、熱統計力学、分子動力学、2次元温度場・静電場解、量子化学計算、固体結晶のバンド計算、量子多体問題、並列計算法などが考えられます。

使用する計算プログラムの言語、解析に必要なとなるソフトウェアやライブラリについて、制限はありません。