## §７－１（ａ）　最小２乗法（１）

一組の変量（ｘ，ｙ）についてｎ個の観測点（$x_i$，$y_i$）（ｉ＝１，２，…，ｎ）があるとき、これらの観測点を最もよく表していると思われる関数ｙ（ｘ）をつくることを考える。

（ａ）原点を通る１次関数

ｎ個の観測点（$x_i$，$y_i$）（ｉ＝１，２，…，ｎ）を原点を通る１次関数

$$y = a_1 x \tag{1}$$

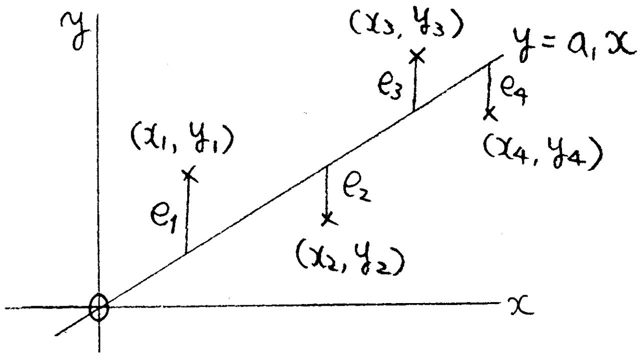
で近似することを考える。
（１）式と観測値$y_i$との差（残差）を$e_i$とすると

$$e_i = y_i - a_1 x_i \tag{2}$$

となる。ここで残差の２乗和をｆとすると、

$$f = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \{y_i - a_1 x_i\}^2 \tag{3}$$

となる。ｆを最小にするような$a_1$を決定すれば、その直線が与えられた観測点のデータを最もよく表している直線であると考えることができる（下図参照）。




（３）式を$a_1$について微分すると、

$$\frac{\partial f}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} (x_i y_i - a_1 x_i^2) = 0 \tag{4}$$

（極値の条件）

となる。これから

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \qquad \therefore\ a_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} \tag{5}$$

となる。観測データの最もよく合う原点を通る１次関数の傾きをこのようにして決めるこ

とができる。このような方法を最小自乗法という。

（b）原点を通らない1次関数

n個の観測点（$x_i$, $y_i$）（i＝1，2，…，n）を原点を通らない1次関数

$$y = a_0 + a_1 x \tag{6}$$

で近似することを考える。

（6）式と観測値$y_i$との差（残差）$e_i$は、

$$e_i = y_i - (a_0 + a_1 x_i) \tag{7}$$

となる。残差の2乗和fは、

$$f = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \{ y_i - (a_0 + a_1 x_i) \}^2 \tag{8}$$

となる。fを最小にするような$a_0$，$a_1$は、fの$a_0$，$a_1$のよる偏微分がゼロという条件から定まる。すなわち、

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial a_0} = -2 \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \{ y_i - (a_0 + a_1 x_i) \} = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial a_1} = -2 \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \{ (y_i - (a_0 + a_1 x_i)) x_i \} = 0 \end{cases}$$

すなわち、

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{cases} \quad \cdots (9)$$

ここで、

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = T_0, \quad \sum_{i=1}^{n} y_i x_i = T_1,$$
$$\sum_{i=1}^{n} 1 = S_0 \ (= n), \quad \sum_{i=1}^{n} x_i = S_1, \quad \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = S_2 \tag{10}$$

とおけば、（9）式は

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 \\ S_1 & S_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \end{pmatrix}$$

となる。

$$\therefore \ a_0 = \frac{T_0 S_2 - T_1 S_1}{n S_2 - S_1^2}, \quad a_1 = \frac{n T_1 - T_0 S_1}{n S_2 - S_1^2} \quad \cdots (11)$$

（c）m次関数

n個の観測点（$x_i$, $y_i$）（i＝1，2，…，n）をm次関数

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m \tag{12}$$

で近似することを考える。
（１２）式と観測値ｙｉとの差（残差）ｅｉは、

$$e_i = y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j \tag{13}$$

となる。残差の２乗和ｆは、

$$f = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left\{ y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j \right\}^2 \tag{14}$$

となる。ｆのａｋによる偏微分がゼロという条件は、

$$\frac{\partial f}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^{n} \left[ \left\{ y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j \right\} x_i^k \right] = 0 \ , \ (k=0,1,\cdots,m)$$

すなわち、

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i^k = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^k + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^{k+1} + \cdots + a_m \sum_{i=1}^{n} x_i^{k+m} \cdots \tag{15}$$

ここで、

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i^k = T_k , \quad \sum_{i=1}^{n} x_i^k = S_k \tag{16}$$

とおけば、（１５）式は

$$\sum_{j=0}^{m} a_j S_{k+j} = T_k \qquad (k=0,1,\cdots,m) \tag{17}$$

となる。これは（ｍ＋１）元の連立１次方程式

$$\begin{bmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & \cdots & S_m \\ S_1 & S_2 & S_3 & \cdots & S_{m+1} \\ \vdots & & & & \\ S_m & S_{m+1} & S_{m+2} & \cdots & S_{2m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_m \end{pmatrix} \tag{18}$$

である。これを解けば、（１２）式の各項の係数が求められる。
連立１次方程式の解は例えばクラメルの公式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

の解は、

$$x_j = \frac{|A_j|}{|A|} = \left|\begin{array}{ccccc} a_{11} & \cdots & b_1 & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & b_2 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & b_n & \cdots & a_{nn} \end{array}\right| \Bigg/ \left|\begin{array}{ccccc} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{array}\right| \qquad (19)$$

第j列

(Cramer's formula)

のよって求めることができる。高次の行列式を計算するには、そのための数値計算法（この授業では取り上げない）を知る必要があるが、少なくとも３次の行列式くらいであれば、行列式を展開してもそれほど複雑な式にはならない：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \qquad (20)$$

従って、われわれは２次式への最小２乗フィッティング（３次の行列式の計算が必要）は行うことができるはずである。

今後各種の実験データの処理に際しては、目測によって直線（ないし曲線）をひくのではなく、最小２乗法によって線をひくこと。

※問題２９

フロッピーディスク上のＮ個のデータ（$x_i$，$y_i$）（$i = 1, 2, \cdots, N$）のデータを読み込み、（原点を通らない）１次関数に最小２乗法でフィッティングするプログラムを作成せよ。ファイル入出力のやり方は§５を参照のこと。

【プログラム例】

```
      PROGRAM MON29
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z),INTEGER*4(I-N)
      DIMENSION X(100),Y(100)
      CHARACTER*15 IFLI
      WRITE(6,101)
  101 FORMAT(3X,'INPUT FILE NAME FOR DATA')
      READ(5,102) IFLI
  102 FORMAT(A15)
C
      OPEN(1,FILE=IFLI)
C
      WRITE(6,103)
  103 FORMAT(3X,'INPUT THE NUMBER OF DATA POINTS')
      READ(5,*) N
      PN=FLOAT(N)
```

```
C
      DO 100 I=1,N
      READ(1,*) X(I),Y(I)
  100 CONTINUE
      XSUM=0.0
      YSUM=0.0
      DO 200 I=1,N
      XSUM=XSUM+X(I)
      YSUM=YSUM+Y(I)
  200 CONTINUE
      XAV=XSUM/PN
      YAV=YSUM/PN
      DO 300 I=1,N
      SX=SX+(X(I)-XAV)**2
      SXY=SXY+(X(I)-XAV)*(Y(I)-YAV)
  300 CONTINUE
      A=SXY/SX
      B=YAV-A*XAV
      WRITE(6,301) A,B
  301 FORMAT(3X,'A = ',E12.5,3X,'B = ',E12.5)
      CLOSE(1)
      END
```

(11)式と等価な式：

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$S_x = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2, \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i$$

$$a = S_{xy} / S_x, \quad b = \bar{y} - a\bar{x}$$

このa, bがfitした直線
$y = ax + b$ の係数となる。

この部分のもとになる式は
このプログラムでは(11)式ではなく
(11)式と等価な式を使っている。
このやり方が正しいことを確認
するまでは(11)式を使って
プログラミングすること!

※問題３０

問題２９で作成したプログラムを用いて、次の表のデータを直線で近似せよ。まず、次表の数値をフロッピーディスク上のファイルに（エディターを使って）書き、数値をプログラムを走らせるときに読み込ませよ。

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| x | 0.0 | 0.1 | 0.2 | 0.3 | 0.4 | 0.5 |
| y | 1.0000 | 1.2589 | 1.5849 | 1.9953 | 2.5119 | 3.1623 |

※問題３１

フロッピーディスク上のＮ個のデータ（$x_i$，$y_i$）（ｉ＝１，２，…，Ｎ）のデータを読み込み、２次関数に最小２乗法でフィッティングするプログラムを作成せよ。

※問題３２

問題３０のデータを問題３１で作成したプログラムを用いて、２次関数で近似せよ。

※問題３３

問題３１で作成したプログラムを用いて、次の表のデータを２次関数で近似せよ。まず、次表の数値をフロッピーディスク上のファイルに（エディターを使って）書き、数値をプログラムを走らせるときに読み込ませよ。

| | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| x | 0 | 100 | 200 | 300 | 400 | 500 | 600 | 700 | 800 | 900 | 1000 |
| y | 8.24 | 9.40 | 10.70 | 12.15 | 13.40 | 14.60 | 15.65 | 16.60 | 17.40 | 18.23 | 18.93 |

## §７－１（ｂ）　最小２乗法（２）

ｎ個の観測点（$x_i$，$y_i$）（ｉ＝１，２，…，ｎ）を、ｍ次関数

$$y=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_mx^m \tag{1}$$

へ最小２乗法によってフィッティングをすると、各項の最適化された係数は、連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & \cdots & S_m \\ S_1 & S_2 & S_3 & \cdots & S_{m+1} \\ \vdots & & & & \vdots \\ S_m & S_{m+1} & S_{m+2} & \cdots & S_{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_m \end{pmatrix} \tag{2}$$

の解$a_0$，$a_1$，…，$a_m$として与えられる。ここで、

$$S_k=\sum_{i=1}^{n} x_i^k$$
$$T_k=\sum_{i=1}^{n} y_i x_i^k \tag{3}$$

である。

一般に、ｍ元連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \tag{4}$$

の解$x_1$，$x_2$，…，$x_m$は、クラメルの公式

$$x_j = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & b_1 & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & \cdots & b_2 & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & & \vdots & & \\ a_{m1} & \cdots & b_m & \cdots & a_{mm} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & & & & \\ a_{m1} & \cdots & a_{mj} & \cdots & a_{mm} \end{vmatrix}} \quad (j = 1, 2, \cdots, m) \qquad (5)$$

第j列

によって与えられる。この公式を使えば、（２）式は解ける（ｍ次関数へのフィットは（ｍ＋１）次の行列式を使うことになる）。ただし、クラメルの公式は４次の行列式くらいが実際にプログラミングできる限界であろう。それより多元の連立１次方程式の解は、行列の対角化によって解くべきである。行列の対角化にはいくつかのアルゴリズムがあるが授業ではとりあげない。

例：

（１）１次関数

$$y = a_0 + a_1 x$$

へのフィットは、連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 \\ S_1 & S_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \end{pmatrix}$$

を解けばよい。解はクラメルの公式

$$a_0 = \begin{vmatrix} T_0 & S_1 \\ T_1 & S_2 \end{vmatrix} \Big/ \begin{vmatrix} S_0 & S_1 \\ S_1 & S_2 \end{vmatrix}, \quad a_1 = \begin{vmatrix} S_0 & T_0 \\ S_1 & T_1 \end{vmatrix} \Big/ \begin{vmatrix} S_0 & S_1 \\ S_1 & S_2 \end{vmatrix}$$

によって与えられる。

【プログラム例】

```
      PROGRAM MON29A
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z),INTEGER*4(I-N)
      DIMENSION X(100),Y(100)
      CHARACTER*15 IFLI
      WRITE(6,101)
  101 FORMAT(3X,'INPUT FILE NAME FOR DATA')
      READ(5,102) IFLI
  102 FORMAT(A15)
C
      OPEN(1,FILE=IFLI)
C
      WRITE(6,103)
  103 FORMAT(3X,'INPUT THE NUMBER OF DATA POINTS')
      READ(5,*) N
```

```
      PN=FLOAT(N)
C
      DO 100 I=1,N
      READ(1,*) X(I),Y(I)
  100 CONTINUE
C
      S0=PN                    ---- S0 = n
      S1=0.0
      S2=0.0
      T0=0.0
      T1=0.0
      DO 200 I=1,N
      S1=S1+X(I)               ---- S1 = Σ xi
      S2=S2+X(I)**2            ---- S2 = Σ xi^2
      T0=T0+Y(I)               ---- T0 = Σ yi
      T1=T1+Y(I)*X(I)          ---- T1 = Σ yi xi
  200 CONTINUE
C
      DD=S0*S2-S1**2           <---- |S0 S1|
                                     |S1 S2|
      DD0=T0*S2-T1*S1          <---- |T0 S1|
                                     |T1 S2|
      DD1=S0*T1-S1*T0          <---- |S0 T0|
                                     |S1 T1|
      A0=DD0/DD                ---- a0
      A1=DD1/DD                ---- a1
C
      WRITE(6,301) A0,A1
  301 FORMAT(3X,'A0 = ',E12.5,3X,'A1 = ',E12.5)
      CLOSE(1)
      END
```

（２）２次関数

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

へのフィットは、連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix}$$

を解けばよい。解はクラメルの公式

$$a_0 = \frac{\Delta_0}{\Delta}, \quad a_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad a_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta},$$

ここで

$$\Delta = \begin{vmatrix} S_0 & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix}, \quad \Delta_0 = \begin{vmatrix} T_0 & S_1 & S_2 \\ T_1 & S_2 & S_3 \\ T_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix}$$

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} S_0 & T_0 & S_2 \\ S_1 & T_1 & S_3 \\ S_2 & T_2 & S_4 \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} S_0 & S_1 & T_0 \\ S_1 & S_2 & T_1 \\ S_2 & S_3 & T_2 \end{vmatrix}$$

によって与えられる。この式にでてくる３次の行列式を展開すると、

$$\Delta = S_0 \begin{vmatrix} S_2 & S_3 \\ S_3 & S_4 \end{vmatrix} - S_1 \begin{vmatrix} S_1 & S_3 \\ S_2 & S_4 \end{vmatrix} + S_2 \begin{vmatrix} S_1 & S_2 \\ S_2 & S_3 \end{vmatrix}$$

$$\Delta_0 = T_0 \begin{vmatrix} S_2 & S_3 \\ S_3 & S_4 \end{vmatrix} - S_1 \begin{vmatrix} T_1 & S_3 \\ T_2 & S_4 \end{vmatrix} + S_2 \begin{vmatrix} T_1 & S_2 \\ T_2 & S_3 \end{vmatrix}$$

$$\Delta_1 = S_0 \begin{vmatrix} T_1 & S_3 \\ T_2 & S_4 \end{vmatrix} - T_0 \begin{vmatrix} S_1 & S_3 \\ S_2 & S_4 \end{vmatrix} + S_2 \begin{vmatrix} S_1 & T_1 \\ S_2 & T_2 \end{vmatrix}$$

$$\Delta_2 = S_0 \begin{vmatrix} S_2 & T_1 \\ S_3 & T_2 \end{vmatrix} - S_1 \begin{vmatrix} S_1 & T_1 \\ S_2 & T_2 \end{vmatrix} + T_0 \begin{vmatrix} S_1 & S_2 \\ S_2 & S_3 \end{vmatrix}$$

のようになる。

【プログラム例】

```
      PROGRAM MON31
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z),INTEGER*4(I-N)
      DIMENSION X(100),Y(100)
      CHARACTER*15 IFLI
      WRITE(6,101)
  101 FORMAT(3X,'INPUT FILE NAME FOR DATA')
      READ(5,102) IFLI
  102 FORMAT(A15)
C
      OPEN(1,FILE=IFLI)
C
      WRITE(6,103)
  103 FORMAT(3X,'INPUT THE NUMBER OF DATA POINTS')
      READ(5,*) N
      PN=FLOAT(N)
C
      DO 100 I=1,N
      READ(1,*) X(I),Y(I)
  100 CONTINUE
C
      S0=PN                         S0 = n
      S1=0.0
      S2=0.0
      S3=0.0
      S4=0.0
      T0=0.0
      T1=0.0
      T2=0.0
      DO 200 I=1,N
      S1=S1+X(I)                    S1 = Σxi
      S2=S2+X(I)**2                 S2 = Σxi^2
      S3=S3+X(I)**3                 S3 = Σxi^3
      S4=S4+X(I)**4                 S4 = Σxi^4
      T0=T0+Y(I)                                     T0 = Σyi
      T1=T1+Y(I)*X(I)                                T1 = Σyixi
      T2=T2+Y(I)*X(I)**2                             T2 = Σyixi^2
  200 CONTINUE
C
```

```
      D=S0*(S2*S4-S3**2)-S1*(S1*S4-S2*S3)+S2*(S1*S3-S2**2)        Δ
      D1=T0*(S2*S4-S3**2)-S1*(T1*S4-T2*S3)+S2*(T1*S3-T2*S2)       Δ0
      D2=S0*(T1*S4-T2*S3)-T0*(S1*S4-S2*S3)+S2*(S1*T2-S2*T1)       Δ1
      D3=S0*(S2*T2-S3*T1)-S1*(S1*T2-S2*T1)+T0*(S1*S3-S2**2)       Δ2
C
      A0=D1/D
      A1=D2/D
      A2=D3/D
C
      WRITE(6,301) A0,A1,A2
  301 FORMAT(3X,'A0 = ',E12.5,2X,'A1 = ',E12.5,2X,'A2 = ',E12.5)
      CLOSE(1)
      END
```

（２） ３次関数

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

へのフィットは、４元連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & S_3 \\ S_1 & S_2 & S_3 & S_4 \\ S_2 & S_3 & S_4 & S_5 \\ S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix}$$

を解けばよい。解はクラメルの公式

$$a_0 = \Delta_0/\Delta, \quad a_1 = \Delta_1/\Delta, \quad a_2 = \Delta_2/\Delta, \quad a_3 = \Delta_3/\Delta$$

ここで、

$$\Delta = \begin{vmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & S_3 \\ S_1 & S_2 & S_3 & S_4 \\ S_2 & S_3 & S_4 & S_5 \\ S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \end{vmatrix}, \Delta_0 = \begin{vmatrix} T_0 & S_1 & S_2 & S_3 \\ T_1 & S_2 & S_3 & S_4 \\ T_2 & S_3 & S_4 & S_5 \\ T_3 & S_4 & S_5 & S_6 \end{vmatrix}, \Delta_1 = \begin{vmatrix} S_0 & T_0 & S_2 & S_3 \\ S_1 & T_1 & S_3 & S_4 \\ S_2 & T_2 & S_4 & S_5 \\ S_3 & T_3 & S_5 & S_6 \end{vmatrix}, \Delta_2 = \begin{vmatrix} S_0 & S_1 & T_0 & S_3 \\ S_1 & S_2 & T_1 & S_4 \\ S_2 & S_3 & T_2 & S_5 \\ S_3 & S_4 & T_3 & S_6 \end{vmatrix}, \Delta_3 = \begin{vmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & T_0 \\ S_1 & S_2 & S_3 & T_1 \\ S_2 & S_3 & S_4 & T_2 \\ S_3 & S_4 & S_5 & T_3 \end{vmatrix}$$

によって与えられる。一般に、４次の行列式を展開すると、

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix}$$

$$= a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} - a_{14} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} \end{vmatrix}$$

$$= D_1 - D_2 + D_3 - D_4$$

ここで

$$D_1 = a_{11}\left\{a_{22}\begin{vmatrix} a_{33} & a_{34} \\ a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} - a_{23}\begin{vmatrix} a_{32} & a_{34} \\ a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} + a_{24}\begin{vmatrix} a_{32} & a_{33} \\ a_{42} & a_{43} \end{vmatrix}\right\}$$

$$D_2 = a_{12}\left\{a_{21}\begin{vmatrix} a_{33} & a_{34} \\ a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} - a_{23}\begin{vmatrix} a_{31} & a_{34} \\ a_{41} & a_{44} \end{vmatrix} + a_{24}\begin{vmatrix} a_{31} & a_{33} \\ a_{41} & a_{43} \end{vmatrix}\right\}$$

$$D_3 = a_{13}\left\{a_{21}\begin{vmatrix} a_{32} & a_{34} \\ a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} - a_{22}\begin{vmatrix} a_{31} & a_{34} \\ a_{41} & a_{44} \end{vmatrix} + a_{24}\begin{vmatrix} a_{31} & a_{32} \\ a_{41} & a_{42} \end{vmatrix}\right\}$$

$$D_4 = a_{14}\left\{a_{21}\begin{vmatrix} a_{32} & a_{33} \\ a_{42} & a_{43} \end{vmatrix} - a_{22}\begin{vmatrix} a_{31} & a_{33} \\ a_{41} & a_{43} \end{vmatrix} + a_{23}\begin{vmatrix} a_{31} & a_{32} \\ a_{41} & a_{42} \end{vmatrix}\right\}$$

のようになる。

【プログラム例】

```
      PROGRAM LST3
C*********** LEAST SQUARE FITTING  3RD ORDER *****************
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z),INTEGER*4(I-N)
      DIMENSION X(100),Y(100)
      CHARACTER*15 IFLI
      WRITE(6,101)
  101 FORMAT(3X,'INPUT FILE NAME FOR DATA')
      READ(5,102) IFLI
  102 FORMAT(A15)
C
      OPEN(1,FILE=IFLI)
C
      WRITE(6,103)
  103 FORMAT(3X,'INPUT THE NUMBER OF DATA POINTS')
      READ(5,*) N
      PN=FLOAT(N)
C
      DO 100 I=1,N
      READ(1,*) X(I),Y(I)
  100 CONTINUE
C
      S0=PN                 ...  S0 = n
      S1=0.0
      S2=0.0
      S3=0.0
      S4=0.0
      S5=0.0
      S6=0.0
      T0=0.0
      T1=0.0
      T2=0.0
      T3=0.0
      DO 200 I=1,N
      S1=S1+X(I)            ... S1 = Σxi
      S2=S2+X(I)**2         ... S2 = Σxi^2
      S3=S3+X(I)**3         ... S3 = Σxi^3
      S4=S4+X(I)**4               :
      S5=S5+X(I)**5
      S6=S6+X(I)**6         ... S6 = Σxi^6
```

```
      T0=T0+Y(I)
      T1=T1+Y(I)*X(I)
      T2=T2+Y(I)*X(I)**2
      T3=T3+Y(I)*X(I)**3
  200 CONTINUE
```

---- $T_0 = \sum y_i$

--- $T_1 = \sum y_i x_i$

---- $T_3 = \sum y_i x_i^3$

```
C
      DO 300 I=1,5
      A11=S0
      A12=S1
      A13=S2
      A14=S3
      A21=S1
      A22=S2
      A23=S3
      A24=S4
      A31=S2
      A32=S3
      A33=S4
      A34=S5
      A41=S3
      A42=S4
      A43=S5
      A44=S6
```

--- $\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & S_3 \\ S_1 & S_2 & S_3 & S_4 \\ S_2 & S_3 & S_4 & S_5 \\ S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \end{pmatrix}$

```
C
      IF(I.EQ.2) THEN
      A11=T0
      A21=T1
      A31=T2
      A41=T3
      END IF
```

--- 第1列を $\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix}$ で置換

```
      IF(I.EQ.3) THEN
      A12=T0
      A22=T1
      A32=T2
      A42=T3
      END IF
```

--- 第2列を 〃

```
      IF(I.EQ.4) THEN
      A13=T0
      A23=T1
      A33=T2
      A43=T3
      END IF
```

--- 第3列を 〃

```
      IF(I.EQ.5) THEN
      A14=T0
      A24=T1
      A34=T2
      A44=T3
      END IF
```

--- 第4列を 〃

```
C
      D1=A11*(A22*(A33*A44-A43*A34)-A23*(A32*A44-A42*A34)
     *  +A24*(A32*A43-A42*A33))
      D2=A12*(A21*(A33*A44-A43*A34)-A23*(A31*A44-A41*A34)
     *  +A24*(A31*A43-A41*A33))
      D3=A13*(A21*(A32*A44-A42*A34)-A22*(A31*A44-A41*A34)
     *  +A24*(A31*A42-A41*A32))
      D4=A14*(A21*(A32*A43-A42*A33)-A22*(A31*A43-A41*A33)
     *  +A23*(A31*A42-A41*A32))
      D=D1-D2+D3-D4
C
```

: $D_1$

: $D_2$

: $D_3$

: $D_4$

-- $D$

※問題３４

塩化リチウム結晶のエンタルピーを測定したところ、次表のようなデータが得られた。熱力学的関係式

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$$

を用いて、この物質の熱容量をＳＩ単位系で求めよ（この温度範囲で熱容量は一定と仮定せよ）。

| $T$/K | 300 | 400 | 500 | 600 | 700 | 800 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $H$/kJmol$^{-1}$ | −413.5 | −410.8 | −408.1 | −405.4 | −402.5 | −399.6 |

※問題３５

３００Ｋの塩化リチウム結晶に静水圧をかけて圧縮したところ、圧力に対して体積が次表のように観測された。熱力学的関係式

$$\kappa = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$$

を用いて、この物質の等温$\overbrace{\text{圧縮率}}^{\kappa}$をＳＩ単位系で求めよ。
この圧力範囲で $(\partial V/\partial P)_T$ は一定と仮定せよ。

| $P$/GPa | 0.1 | 1.0 | 2.0 | 3.0 | 5.0 |
|---|---|---|---|---|---|
| $V$/cm$^3$mol$^{-1}$ | 10.23 | 9.94 | 9.65 | 9.41 | 9.01 |

※問題３６

溶融塩化リチウムの密度を測定したところ、次表のようなデータが得られた。これを絶対温度に対する１次式にフィットさせよ。

| $T$/K | $\rho$/gcm$^{-3}$ |
|---|---|
| 880 | 1.504 |
| 890 | 1.500 |
| 900 | 1.495 |
| 910 | 1.491 |
| 920 | 1.486 |
| 930 | 1.482 |
| 940 | 1.477 |
| 950 | 1.473 |
| 960 | 1.469 |
| 970 | 1.464 |
| 980 | 1.460 |
| 990 | 1.455 |
| 1000 | 1.451 |
| 1010 | 1.446 |
| 1020 | 1.442 |
| 1030 | 1.437 |
| 1040 | 1.433 |
| 1050 | 1.428 |
| 1060 | 1.424 |
| 1070 | 1.419 |

```
      IF(I.EQ.1) DD=D            Δ
      IF(I.EQ.2) DD0=D           Δ0
      IF(I.EQ.3) DD1=D           Δ1
      IF(I.EQ.4) DD2=D           Δ2
      IF(I.EQ.5) DD3=D           Δ3
  300 CONTINUE
C
      A0=DD0/DD
      A1=DD1/DD
      A2=DD2/DD
      A3=DD3/DD
      WRITE(6,301) A0,A1,A2,A3
  301 FORMAT(2X,'A0='E12.5,1X,'A1=',E12.5,1X,'A2=',E12.5,1X,'A3=',E12.5)
      CLOSE(1)
      END
```

※問題３７

次表のデータを用いて、次の多項式の係数ａ，ｂ，ｃ，ｄを求めよ。

$$y(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$$

【答】　$y(x) = -0.0001 + 1.0044x - 0.0197x^2 + 0.1904x^3$

| $x$ | 0.0 | 0.1 | 0.2 | 0.3 | 0.4 | 0.5 | 0.6 | 0.7 | 0.8 | 0.9 | 1.0 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $y$ | 0.0 | 0.1002 | 0.2013 | 0.3045 | 0.4108 | 0.5211 | 0.6367 | 0.7586 | 0.8881 | 1.0265 | 1.1752 |

※問題３８

次表のデータを用いて、次の多項式の係数ａ，ｂを求めよ。

$$\log y(x) = a + b/x$$

る。（ヒント：　$z = \log y$，　$u = 1/x$とおくと、この式は、$z = a + bu$　となり、１次関数へのフィッティングの問題に帰着する。このようなフィッティングの操作が、片対数の方眼紙に（$\log y_i$，　$1/x_i$）のデータをプロットしたときに直線をひく操作に対応していることを理解せよ。

| $x$ | 1.0 | 2.0 | 3.0 | 4.0 | 5.0 |
|---|---|---|---|---|---|
| $y$ | 15.76 | 6.99 | 5.61 | 4.70 | 4.27 |

※問題３９

溶融塩化リチウムの粘度を測定したところ、次表のようなデータが得られた。これをアレニウス式

$$\eta = \eta_0 e^{E/RT} \quad \left( \begin{array}{l} R:\text{気体定数 } 8.31\ \mathrm{JK^{-1}mol^{-1}} \\ T:\text{絶対温度 } \mathrm{K} \end{array} \right)$$

にフィットさせ、$\eta_0$とＥを求めよ。（ヒント：アレニウス式の両辺の対数をとれば、問題３８に帰着する。）２つのパラメーターはどのような物理的意味をもっているか。

| T/K | $\eta/10^{-3}$ Pa.s |
|---|---|
| 830 | |
| 840 | |
| 850 | |
| 860 | |
| 870 | |
| 880 | |
| 890 | |
| 900 | |
| 910 | |
| 920 | |
| 930 | 1.40 |
| 940 | 1.35 |
| 950 | 1.30 |
| 960 | 1.25 |
| 970 | 1.21 |
| 980 | 1.17 |
| 990 | 1.13 |
| 1000 | 1.10 |
| 1010 | 1.06 |
| 1020 | 1.03 |
| 1030 | 1.00 |
| 1040 | 0.97 |
| 1050 | 0.94 |
| 1060 | 0.92 |
| 1070 | |

※問題４０（＝バーロー：物理化学（下）１８．１６）

反応式２$NO_2$→２ＮＯ＋$O_2$に従う二酸化窒素の分解はある条件の下で次の速度式に従う。

$$速度 = k\,[NO_2]^2$$

温度の関数としてｋの値が次のように報告されている。アレニウス式$k = Ae^{-E_a/RT}$のパラメーターの値を求めよ。

| $T$/K | 592 | 603.2 | 627 | 651.5 | 656 |
|---|---|---|---|---|---|
| $k$/l mol$^{-1}$ s$^{-1}$ | 0.522 | 0.755 | 1.700 | 4.020 | 5.030 |

※問題４１

銀の定容熱容量を測定したところ、次表のようなデータが得られた（バーロー：物理化学（上）ｐ．１２５）。これを

$$C_V = \alpha T^3$$

$$C_V = \alpha T^3 + \gamma T$$

の２つの式にフィットせよ（ある次数の項$a_i$がないとき、解くべき連立１次方程式はどのようなものであるかをまず考えよ）。大抵の温度で一致は非常によいが、非常に低温では前者の式では大きな食い違いが生じることを確かめよ。Ｔの１乗と３乗の項はそれぞれどのような物理的意味をもっているか。

**表 4・6　銀の定容熱容量†**

| $T$/K | $C_{m,V}$ /J K$^{-1}$ mol$^{-1}$ | $T$/K | $C_{m,V}$ /J K$^{-1}$ mol$^{-1}$ | $T$/K | $C_{m,V}$ /J K$^{-1}$ mol$^{-1}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1.35 | 0.00106 | 12 | 0.347 | 74.56 | 16.90 |
| 2 | 0.00262 | 14 | 0.559 | 83.91 | 18.10 |
| 3 | 0.00657 | 16 | 0.845 | 103.14 | 20.07 |
| 4 | 0.0127 | 20 | 1.671 | 124.20 | 21.27 |
| 5 | 0.0213 | 28.56 | 4.297 | 144.38 | 22.48 |
| 6 | 0.0373 | 36.16 | 7.088 | 166.78 | 22.86 |
| 7 | 0.0632 | 47.09 | 10.80 | 190.17 | 23.34 |
| 10 | 0.199 | 65.19 | 15.37 | | |

† C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics," Wiley, New York (1953).

関数ｆ（ｘ）の点ｘでの微係数を計算することを考える。Ｔａｙｌｏｒ級数より次のようになる。

$$f(\bar{x}+h)=f(\bar{x})+hf'(\bar{x})+\frac{h^2}{2!}f''(\bar{x})+\frac{h^3}{3!}f'''(\bar{x})+\cdots \quad (1)$$

$$f(\bar{x}-h)=f(\bar{x})-hf'(\bar{x})+\frac{h^2}{2!}f''(\bar{x})-\frac{h^3}{3!}f'''(\bar{x})+\cdots \quad (2)$$

（１）式から（２）式を引き、２ｈで割ると次式を得る。

$$f'(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+h)-f(\bar{x}-h)}{2h}-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{f^{(2j+1)}(\bar{x})}{(2j+1)!}h^{2j} \quad (3)$$

同様にして次式が得られる。

$$f''(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+h)-2f(\bar{x})+f(\bar{x}-h)}{h^2}-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{f^{(2j+2)}(\bar{x})}{(2j+2)!}h^{2j} \quad (4)$$

この結果、もしｈが十分に小さければｆ’（ｘ）は次式で近似できる。

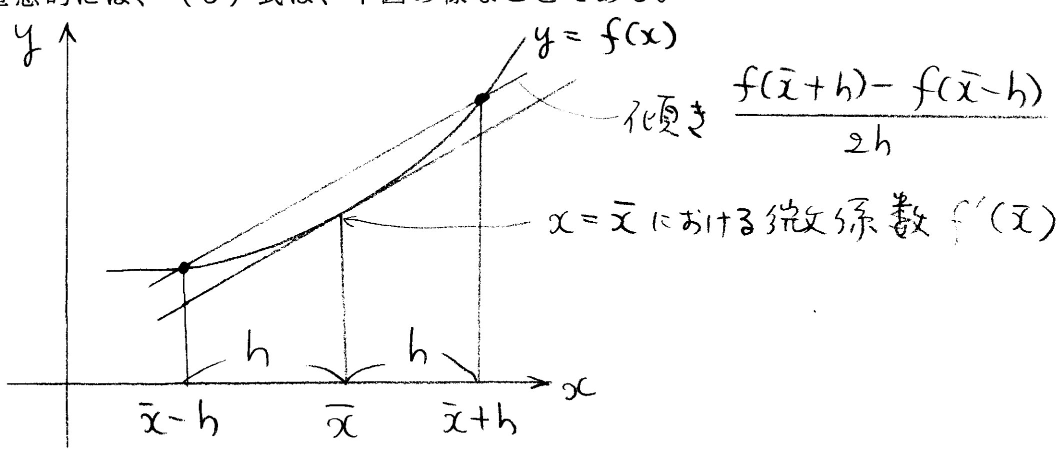
$$f'(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+h)-f(\bar{x}-h)}{2h} \quad (5)$$

また、ｆ’’（ｘ）は次のように近似できる。

$$f''(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+h)-2f(\bar{x})+f(\bar{x}-h)}{h^2} \quad (6)$$

より高次の導関数に対する公式も全く同様に導くことができる。

直感的には、（５）式は、下図の様なことである。



（５）式の微分の誤差は（３）式より明らかに$h^2$のオーダーである。もし、$f'(x)$を（５）式ではなく（１）式から直接得られる近似、

$$f'(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+h)-f(\bar{x})}{h}-\sum_{j=1}^{\infty}\frac{f^{(j+1)}(\bar{x})}{(j+1)!}h^{j}$$

を使うと誤差はｈの１次のオーダーとなり、精度が下がることに注意しよう。

ｆ（ｘ）のｘでの１次および２次導関数の近似は、ｈの値（正値）を小さく取れば、どれだけでも精度がよくなりそうである。数学の上ではそうなのだが、実際に数値計算をさせてみるとそうはならない（あまりｈを小さく取りすぎるとかえって精度が落ちる）。つまり、もし、ｈの大きさが大変小さくなれば、（５）式の分子の２つの項ｆ（ｘ＋ｈ）とｆ（ｘ－ｈ）はほとんど等しくなり、その差は小さくなる。すると有効数字の桁数が減ってしまう（こういう現象を桁落ちという。例えば、$y_1=1.00002$（有効数字６桁）と$y_2=0.99998$（５桁）　の差は、$y_1-y_2=0.00004$　で、有効数字１桁となる）。またｈが小さいので分母の２ｈも小さくなり、結局（５）式は２つの小さい数の商となる。このような場合、誤差は大きくなる。

従って、ｈは限りなく０に近づければよいというものでもなく、ある程度の大きさを持っていることが必要である（問題４２参照）。

ｈを小さくしても望む精度の答えが得られないならば、次の方法を用いるとよい。（３）式を$h^4$の項まで展開すると、

$$f'(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+h)-f(\bar{x}-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\bar{x})-\frac{h^4}{120}f^{(5)}(\bar{x})+\cdots \qquad (7)$$

となる。いま、ｒを±１以外の値とし、ｈをｒｈにより置き換えると$f'(x)$の別の推定式が次のように得られる。

$$f'(\bar{x})=\frac{f(\bar{x}+rh)-f(\bar{x}-rh)}{2rh}-\frac{r^2h^2}{6}f^{(3)}(\bar{x})-\frac{r^4h^4}{120}f^{(5)}(\bar{x})+\cdots \qquad (8)$$

（７）、（８）式から、$h^2f^{(3)}(x)/6$の項を消去すると次のようになる。

$$f(\bar{x})=\frac{1}{2hr(r^2-1)}\left[r^3f(\bar{x}+h)-f(\bar{x}+rh)-r^3f(\bar{x}-h)+f(\bar{x}-rh)\right]$$
$$+\frac{r^4h^4}{120}f^{(5)}(\bar{x})+\cdots \qquad (9)$$

この式は、$h^2$でなく$h^4$のオーダーまで$f'(x)$を正しく表している（（５）式より精度が上がった）！　より多くの関数値に対してこの方法を繰り返し用いれば、誤差を表す展開項からさらに高次の項を取り除くことができる。このようにして、誤差が$h^6$，$h^8$，…のオーダーである近似式を導くこともできる。

ｒの値として最も一般的に用いられるのはｒ＝１／２であり、この場合、（９）式は次の形となる（４点微分法）。

$$f'(\bar{x}) = -\frac{1}{6h}\left[f(\bar{x}+h) - 8f(\bar{x}+h/2) - f(\bar{x}-h) + 8f(\bar{x}-h/2)\right] + \frac{h^4}{480}f^{(5)}(\bar{x}) + \cdots \qquad (10)$$

このような方法は、離散データの微分（つまり、ｆ（ｘ）の解析形は不明だがあるｘの値に対するｆ（ｘ）の関数値はいくつか与えられている場合）を求めるときにも使え、便利である。この場合は、（９）式にｒ＝２を代入すると次式になる。

$$f'(\bar{x}) = \frac{1}{12h}\left[f(\bar{x}-2h) - 8f(\bar{x}-h) + 8f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}+2h)\right] + \frac{4h^4}{120}f^{(5)}(\bar{x}) + \cdots \qquad (11)$$

さらに近似の精度のよい６点微分法の式は、

$$f'(\bar{x}) = \frac{1}{60h}\left[45\left(f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}-h)\right) - 9\left(f(\bar{x}+2h) - f(\bar{x}-2h)\right) + \left(f(\bar{x}+3h) - f(\bar{x}-3h)\right)\right] \qquad (12)$$

である。

※問題４２

点ｘ＝１でのｆ（ｘ）＝ｅ$^x$の１次微係数の近似値を、ｈを０．１０から０．０１ずつ小さくしながら数値微分によって求めよ（ｈとｆ’（１）を出力させよ。微係数はもちろん（５）式を使って計算すること）。得られた近似値を厳密値と比較し、ｈの最適値を見いだせ（プログラム名 MON42.FOR）。

ちなみに、プログラム冒頭の「ＩＭＰＬＩＣＩＴ　ＲＥＡＬ＊８（…）」（倍精度宣言）を、「…　ＲＥＡＬ＊４（…）」に替えて単精度で計算させると誤差はどのくらい大きくなるか試してみよ（単精度で計算するのはこれ限りにせよ）。

※問題４３

問題４２の１次微係数を、（１０）式の４点微分法を使って求めよ。問題４２と同様に厳密値と比較せよ。問題４２の２点微分法より精度が上がったか？（プログラム名MON43.FOR）

※問題４４

下表のデータに対して、（１１）式を適用してｆ’（０．５）を推定せよ。厳密値および２点微分法の近似値と比較せよ。（プログラム名MON44.FOR）
（（１１）式から微係数が求められるのはｘ＝０．５のときのみであり、ｆ’（－０．５）などを求めるためには、補間法を使わなければならない。補間法については成書を参照の

こと。)

表: $f(x)$の数値

| $x$ | $f(x) = e^x$ |
|---|---|
| $-0.5$ | 0.6065 |
| 0.0 | 1.0000 |
| 0.5 | 1.6487 |
| 1.0 | 2.7183 |
| 1.5 | 4.4817 |

※問題45

ｆ（ｘ）＝ｘｅ$^x$のｘ＝１における１次微係数、２次微係数を数値微分により求め、厳密値と比較せよ。ｈを適当な大きさにとることによって誤差を０．１％以内に収めることができるか。(プログラム名MON45.FOR)

※問題46

２変数関数の数値２次微分はどのようにすればよいかを考えてみよ。

関数$y=f(x)$の定積分

$$I=\int_a^b f(x)\,dx \tag{13}$$

は、原始関数$F(x)$がわからなくても数値積分によって求めることができる。（当然の話だが、不定積分を求めることはできない。）

任意の関数$f(x)$の区間aからbまでのグラフを描くことができ、関数はこの区間でたちがよい（有限・一価・連続で、特異点を持たない）と仮定する。$a=x_0$, $b=x_n$とし、$x_i=x_0+ih$　$(i=1,2,\cdots,n)$となるように、区間$[a,b]$を等しい間隔$h$ $(=(b-a)/n)$をもつn個の部分区間に分けよう。

このとき積分は次のように書ける。

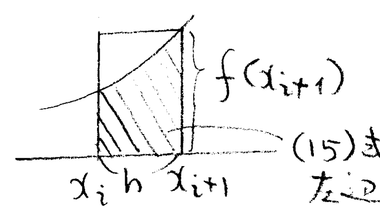
$$I=\int_a^b f(x)\,dx=\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx$$

$$=\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx+\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx+\cdots+\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx \tag{14}$$

（１４）式の各積分を、部分区間の境界の点での関数値で近似する、つまり、

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \simeq h f(x_{i+1}) \tag{15}$$

と近似する。ここで、$f_i=f(x_i)$である。すると定積分は




$$I=hf(x_1)+hf(x_2)+\cdots+hf(x_n)$$

$$=\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\cdot h \tag{16}$$

部分区間の数を増やすにつれ、近似による誤差が減少することがわかるであろう。この最も単純な形の求積法を矩形則による積分という。（左辺の「ウナギのしっぽ」$\int$→Σ、dx→Δxに替えた式そのものだ！）（$\Delta x\equiv h$）

　しかし、（１４）式の各積分を、（１５）のように近似するのでなく、各部分区間の関数値の平均で近似した方が正確であることは容易にわかる。つまり、

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}(f_i+f_{i+1}) \tag{17}$$

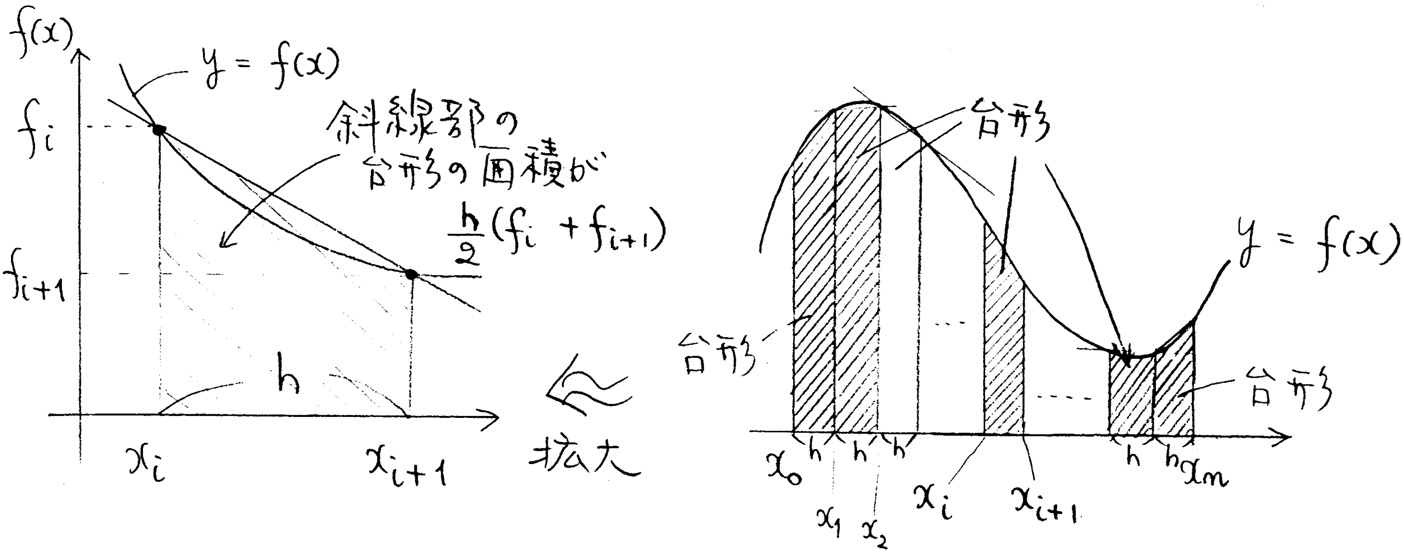
とすれば、積分は、

$$I=\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}(f_0+f_1)+\frac{h}{2}(f_1+f_2)+\cdots+\frac{h}{2}(f_{n-1}+f_n)$$

$$=\frac{h}{2}(f_0+2f_1+2f_2+\cdots+2f_{n-1}+f_n)$$

$$=\frac{h}{2}\left(f(x_0)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(x_n)\right) \qquad (18)$$

となる。この方法を台形則という（次図参照）。




台形則では、それぞれの部分空間のおおいを求めるために、２点で直線が決まるということを利用した。近似を改善するために、今度は区間［ａ，ｂ］を偶数個の部分区間に分割し、部分区間をおおうのに、直線ではなく連続した３点を通る放物線で近似する。すると近似の精度はさらに向上し、積分は、

$$I=\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f_0+4f_1+2f_2+4f_3+2f_4+\cdots\cdots+2f_{n-2}+4f_{n-1}+f_n) \qquad (19)$$

で与えられる。この方法はＳｉｍｐｓｏｎの方法と呼ばれる（詳細は成書参照）。

※問題４７

半径１の円の面積を、

$$I=4\int_0^1 \sqrt{1-x^2}\,dx$$

の数値積分によって求めよ（台形則（１８）式を使え）。積分区間は１０，２０，５０，１００等分して積分を実行し、それぞれ得られた値を厳密値　$\pi$　と比較せよ。（プログラム名MON47.FOR)

※問題４８

台形則を使って、積分

$$I = \int_1^2 \frac{1}{x^2}\,dx$$

をｈ＝１．０，０．５，０．２５について計算せよ。（プログラム名MON48.FOR)

※問題４９

次の積分を台形則またはＳｉｍｐｓｏｎの方法を使って評価せよ。ｈの大きさを$\pi$／１０から$\pi$／１００までのいろいろな値にかえてみよ。厳密値と比較せよ。（プログラム名MON49.FOR)

$$I = \int_0^{\pi} x \sin x \, dx$$

※問題５０

次の積分を評価せよ。

（１）　解析的に求めよ。

（２）　数値的に求めよ。無限大までの積分は、十分大きなｘ（そこでは被積分関数の値が十分ゼロに近くなる）までの積分で近似すること。（１）で求めた厳密値と比較せよ。

$$I_1 = \int_0^{\infty} e^{-ax^2}\,dx$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2}\,dx$$

$$I_3 = \int_0^{\infty} x^3 e^{-ax^2}\,dx$$

(2)の場合は $a=2$ として求めよ。

※問題５１

気体原子に対するＭａｘｗｅｌｌ－Ｂｏｌｔｚｍａｎｎの速度分布関数は、

$$F(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2k_B T}v^2} \qquad (0 \leq v < \infty)$$

である。ここで、$k_B$はボルツマン定数、$k_B$＝１．３８１×１０$^{-23}$　ＪＫ$^{-1}$　である。この分布関数は規格化されているか。解析的および数値的に調べよ（数値的に求めるとき原子はアルゴン　ｍ＝３９．９５　ｇｍｏｌ$^{-1}$，温度は　Ｔ＝３００　Ｋとせよ）。気体原子の速度がこの分布に従うとき、気体原子のもつ運動エネルギー　ｍｖ$^2$／２　の平均値を解析的および数値的に求めよ。得られた結果はエネルギーの等分配則の一例である。

※問題５２（＝バーロー「物理化学」問題６．１９）

温度$T_1$，$T_2$のときの物質のエントロピーを$S_1$，$S_2$とすると、

$$S_2 = S_1 + \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_P(T)}{T}\, dT$$

なる関係式が成り立つ。数値積分によって、３００Ｋにおける金属の銀の（絶対）エントロピーを、次表の１ｍｏｌあたりの熱容量データから計算せよ。温度Ｔが絶対零度に近づくと、熱容量は$T^3$に比例して変化する。また絶対零度では熱容量$C_p = 0$と仮定せよ。

表

| $T$/K | $C_P$/J K$^{-1}$ | $T$/K | $C_P$/J K$^{-1}$ | $T$/K | $C_P$/J K$^{-1}$ | $T$/K | $C_P$/J K$^{-1}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 15 | 0.67 | 90 | 19.13 | 170 | 23.61 | 250 | 25.03 |
| 30 | 4.77 | 110 | 20.96 | 190 | 24.09 | 270 | 25.31 |
| 50 | 11.65 | 130 | 22.13 | 210 | 24.42 | 290 | 25.44 |
| 70 | 16.33 | 150 | 22.97 | 230 | 24.73 | 300 | 25.50 |

※問題５３

２重積分の数値積分はどのようにすればよいかを考えてみよ。

## §７－２（ｃ）　モンテカルロ法による数値積分

§５の問題２７、および解答例を参照。モンテカルロ法は乱数を多数回発生させることにより、定積分を確率的に求める方法である。とくに被積分関数の形が複雑な場合や多重積分に対して有効である。

※問題５４

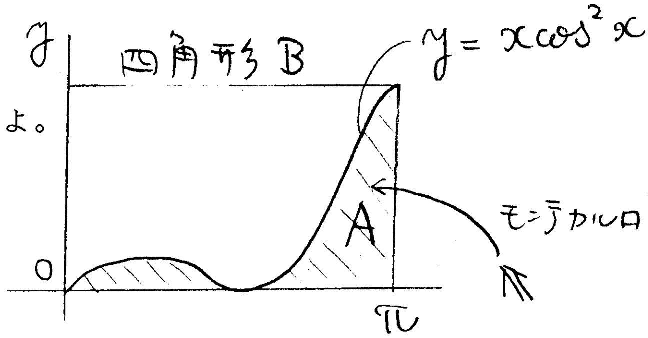
積分

$$I = \int_0^{\pi} x \cos^2 kx\, dx \qquad (k\text{は自然数})$$

を台形則、Ｓｉｍｐｓｏｎの方法、モンテカルロ法の３つの方法で求めよ。その際、積分区間の分割数ｎと、被積分関数の中のｋの値を変化させ、それぞれの近似値を厳密値と比較せよ（ｋ＝１でｎ＝１０，２０，３０のとき、および、ｋ＝２０でｎ＝２０の場合を調べよ）。ｋ＝２０，ｎ＝２０のときはモンテカルロ法以外の方法は役に立たないことを見よ（分割幅に比べて関数の振動が激しいときには台形則、Ｓｉｍｐｓｏｎ則は不向き）。

※問題５５

２重積分をモンテカルロ法で求める方法を考えてみよ。



まとめ

## Ｉ．数値微分

①　２点微分法

$$f'(\bar{x}) = \frac{f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}-h)}{2h}$$

②　４点微分法

$$f'(\bar{x}) = \frac{1}{12h}\left[f(\bar{x}-2h) - 8f(\bar{x}-h) + 8f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}+2h)\right]$$

③　６点微分法

$$f'(\bar{x}) = \frac{1}{60h}\left[45\left(f(\bar{x}+h) - f(\bar{x}-h)\right) - 9\left(f(\bar{x}+2h) - f(\bar{x}-2h)\right) + \left(f(\bar{x}+3h) - f(\bar{x}-3h)\right)\right]$$

## II．数値積分

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \qquad a = x_0,\ b = x_n,\ x_i = x_0 + ih\ (i = 0, 1, 2, \cdots, n),\ h = \frac{1}{n}(b-a)$$

①　矩形則

$$I = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\cdot h$$

②　台形則

$$I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right]$$

③　Ｓｉｍｐｓｏｎの方法

$$I = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

## §７－３　方程式の求根

方程式と一口に言っても、非線型代数方程式、線型代数方程式（連立１次方程式）、（常・偏）微分方程式などがあるが、ここでとりあげるのは、非線型の代数方程式の解を求める問題である。他の種類の方程式を解く方法は数値計算法の成書を参照されたい。

しばしば見受けられる問題に、式

$$f(x)=0$$

の根$\alpha$、つまり関数$f(x)$の０点を求めるものがある。例えば、関数$f(x)$の最大値を見つける場合、最大値のところで満足される必要条件として関数$F(x)$の導関数が０となることがある。実際、この条件は最大値を決定するために用いられる。

方程式$f(x)=0$の根を求めるためには次のような反復計算をすればよい。

$x_n$を真の解$\alpha$に対する近似解とする。このとき、Ｔａｙｌｏｒ級数を用いれば、$f(\alpha)$は点$x_n$のまわりに展開できて、次のようになる。

$$f(\alpha)=f(x_n)+(\alpha-x_n)f'(x_n)+\frac{(\alpha-x_n)^2}{2!}f''(x_n)+\cdots \quad (1)$$

$x_n$の値が$\alpha$に近いならば$(\alpha-x_n)$の値は小さく、$(\alpha-x_n)^2$およびそれ以上のオーダーの項は無視できる。従って、

$$f(\alpha)\simeq f(x_n)+(\alpha-x_n)f'(x_n) \quad (2)$$

しかし、$f(\alpha)=0$であるから、

$$f(x_n)+(\alpha-x_n)f'(x_n)\simeq 0 \quad (3)$$

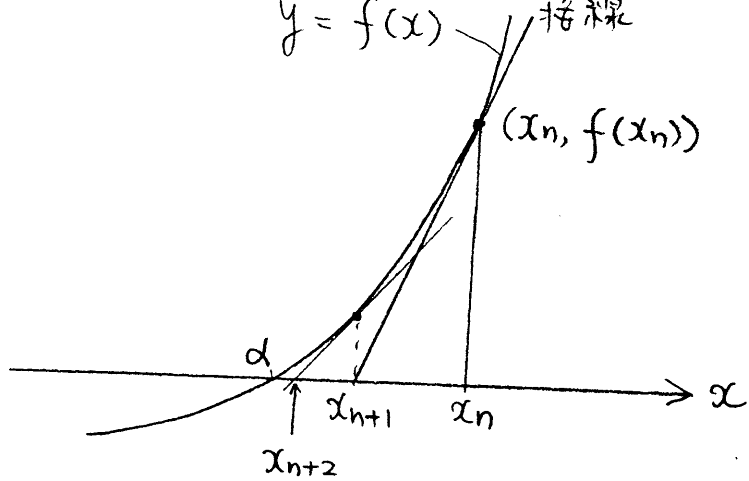
この関係から

$$\alpha\simeq x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (4)$$

これは反復計算

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (5)$$

のもとになる式であり、Ｎｅｗｔｏｎ（またはＮｅｗｔｏｎ－Ｒａｐｈｓｏｎ）の反復法として知られている。この方法の幾何学的意味は次図に示す通りである。




曲線上の点
$(x_n, f(x_n))$における接線とx軸との交点の座標を$(x_{n+1}, 0)$とすると、

$$f'(x_n) = -\frac{f(x_n)}{x_{n+1} - x_n} \tag{6}$$

すなわち、（５）式となる。

反復による根の収束判定の条件としては、２つの近似根の差があるしきい値より小さくなったことをもって、十分正確な根がもとまったとみなす。

$$|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon \tag{7}$$

Ｎｅｗｔｏｎ法は一般に極めて速く収束するが、$f(x)$の導関数を知ることがまず必要である。場合によっては導関数の計算に長い時間が費やされたり（または、導関数を解析的に求めること自体が難しくてプログラミングができなかったり）することがある。このようなときは、$f(x)$の導関数を２点$(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$，$(x_n, f(x_n))$を結ぶ線分の傾き、すなわち、

$$f'(x_n) \simeq \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} \tag{8}$$

によって近似する。この関係を（５）式に代入すると、

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) \tag{9}$$

となる。導関数を用いる代わりに、（９）式によって反復計算を行なって根を求める方法は、セカント法と呼ばれている。Ｎｅｗｔｏｎ法での初期値$x_0$、セカント法での初期値$x_0$，$x_1$はわれわれが適当に与えればよい。

※問題５６

$f(x) = e^x - 3x = 0$　の根をＮｅｗｔｏｎ法で求めよ。初期値$x_0 = 0$とし、収束判定条件として２つの近似根間の差をとり、$\varepsilon = 10^{-5}$とせよ。初期値を別の値にして試してみよ。

【プログラム例：問題５６、Ｎｅｗｔｏｎ法】

```
      PROGRAM MON56
```

```
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z),INTEGER*4(I-N)
C  INITIAL VALUE X0
      READ(5,*) X                    --- x_0
C
      N=0
   10 CONTINUE
      FX=EXP(X)-3.0*X                ---- f(x_n) = e^{x_n} - 3x_n
      DFX=EXP(X)-3.0                 ---- f'(x_n) = e^{x_n} - 3
C
      DX=-FX/DFX                     ----- - f(x_n)/f'(x_n)
      N=N+1                          繰り返し
      X=X+DX                         -------- x_n - f(x_n)/f'(x_n) (= x_{n+1})
      WRITE(6,101) N,X,DFX,DX
  101 FORMAT(3X,'N = ',I5,2X,'X = ',E12.5,2X,
     *  'DFX = ',E12.5,2X,'DX = ',E12.5)
      IF(ABS(DX).GE.1.0E-5) GO TO 10   --- 収束条件
                                           |x_{n+1} - x_n| < ε
C
      WRITE(6,102) N,X
      STOP
  102 FORMAT(3X,'NUMBER OF ITERATION = ',I5,3X,'X = 'E12.5)
      END
```

※問題５７

問題５６の根をセカント法で求めよ。初期値ｘ$_0$＝０，Ｘ$_1$＝１とし、収束判定条件として２つの近似根間の差をとり、$\varepsilon$＝１０$^{-5}$とせよ。初期値を別の値にして試してみよ。

【プログラム例：問題５７、セカント法】

```
      PROGRAM MON57
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z),INTEGER*4(I-N)
C  INITIAL VALUE X0,X1
      READ(5,*) XI,XF
C
      N=0
   10 CONTINUE
      FXI=EXP(XI)-3.0*XI             --- f(x_{n-1}) = e^{x_{n-1}} - 3x_{n-1}
      FXF=EXP(XF)-3.0*XF             --- f(x_n) = e^{x_n} - 3x_n
C
      DFX=(FXF-FXI)/(XF-XI)          ---- (f(x_n) - f(x_{n-1}))/(x_n - x_{n-1})
      DX=-FXF/DFX                    ---- - (x_n - x_{n-1})/(f(x_n) - f(x_{n-1})) f(x_n)
      N=N+1
```

繰返し

```
      XI=XF
      XF=XF+DX
      WRITE(6,101) N,XF,DFX,DX
  101 FORMAT(3X,'N = ',I5,2X,'XF = ',E12.5,2X,
     *    'DFX = ',E12.5,2X,'DX = ',E12.5)
      IF(ABS(DX).GE.1.0E-5) GO TO 10
C
      WRITE(6,102) N,XF
      STOP
  102 FORMAT(3X,'NUMBER OF ITERATION = ',I5,3X,'X = 'E12.5)
      END
```

$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n)$

収束条件 $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$

※問題５８

　$f(x) = xe^{x} - 5 = 0$

の解をＮｅｗｔｏｎ法を用いて小数点以下４桁まで求めよ。

※問題５９

　$f(x) = x^{3} - x + 1 = 0$

の解をＮｅｗｔｏｎ法を用いて小数点以下４桁まで求めよ。

※問題６０

　$f(x) = x^{3} + x^{2} - 1.0001x - 0.9999 = 0$

のすべての解をＮｅｗｔｏｎ法を用いて小数点以下４桁まで求めよ。

※問題６１

　$f(x) = x^{3} + x^{2} - 1.0001x - 0.9999 = 0$

のすべての解をＮｅｗｔｏｎ法を用いて小数点以下４桁まで求めよ。

※問題６２

　$f(x) = x \ln x - 1 = 0$

の解をＮｅｗｔｏｎ法を用いて小数点以下４桁まで求めよ。

※問題６３

ｖａｎ　ｄｅｒ　Ｗａａｌｓ気体に対する状態方程式は

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

である。ここで、ａ，ｂはｖａｎ　ｄｅｒ　Ｗａａｌｓ定数である。この式を変形してＶについての３次式を書け。

　この方程式を用いて、５００Ｋで１００気圧における窒素のモル体積を求めよ。窒素のｖａｎ　ｄｅｒ　Ｗａａｌｓ定数は

$$a = 1.37 \ /\mathrm{bar}\ l^2\,\mathrm{mol}^{-2}, \quad b = 0.0387 \ / l\,\mathrm{mol}^{-1}$$

である（バーロー：物理化学（上）ｐ．４４）。

※問題６４

２９８Ｋにおけるメタンのビリアル型の状態方程式（バーロー：物理化学（上）ｐ．１９）：

$$\frac{PV_m}{RT} = 1 + \frac{B}{V_m} + \frac{C}{V_m^2} + \frac{D}{V_m^3}$$

$V_m$：モル体積

$T = 298\,(\mathrm{K})$

の係数は

$$B = -4.281 \times 10^{-2} \ / l\,\mathrm{mol}^{-1}$$
$$C = 2.102 \times 10^{-3} \ / l^2\,\mathrm{mol}^{-2}$$
$$D = 1.5 \times 10^{-4} \ / l^3\,\mathrm{mol}^{-3}$$

である。１気圧のメタンのモル体積をこの式から求めよ。

（$T = 298\,\mathrm{K}$における）