応用数学の教材作成（数値計算法）

石　　信　一*

Teaching Materials of Applied Mathematics (Numerical Analysis)

Shin-ichi Ishi

要　旨

応用数学の授業改善の一方策として、シラバス用の授業教材の作成を試みた。

Abstract

We have made and showed a lecture-note about the methods of numerical analysis in order to improve upon the scheme of teaching in Applied Mathematics.

はじめに

応用数学の総時間数に対する「数値計算」の時間数の割合は、大体 1/5 程度（約 8 週程度）です（これは M4（4単位）、E4（5単位）、J3-4（4単位）の場合です。J 学科では数値計算の授業は J3 で行われている）。本稿では、そうした約8週程度の授業内容の作成を試みたものです。次のような項目から構成されています：

補間法、数値積分、方程式の解法（連立方程式、代数・超越方程式、微分方程式）、モンテカルロ法。（数値計算の教科書は、ここ数年、戸川隼人著「数値計算法」（コロナ社、1981年初版）を使用しています。数値計算の教科書としては、「初級者向き」と思います。しかし、授業時間数との関係で、教科書にある全ての内容を行うことはできていません。）

数値計算法の授業の目標・目的は、電卓等を使って実際に計算結果を得ること、においています。それ故、授業内容としては既習の内容の復習になるような題材を選んでします（数学的な概念については、特に目新しいものはありません）。

第1週　補 間 法

Lagrange の補間式

読んで字の如く、与えられた点の間を補うことである。例えば、二点$(x_0, y(x_0)=y_0)$、$(x_1, y(x_1)=y_1)$が与えられたとき、$x_0 \leq x \leq x_1$ のyー値は$y(x)=a+bx$(a、bは定数)で近似される、ということである。定数a、bは 二点を通るという条件から決まり、

$$y(x)=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0) \quad \longrightarrow \quad y(x)=y_0\frac{x-x_1}{x_0-x_1}+y_1\frac{x-x_0}{x_1-x_0} \tag{1}$$

と書き換える。これを一次あるいは線形補間式という((1)式は二点を通る直線の方程式)。

三点(x_0, y_0)、(x_1, y_1)、(x_2, y_2)を通る放物線の式は、$y(x)=a+b(x-x_0)+c(x-x_0)(x-x_1)$で、定数$a$、$b$、$c$は三点を通るという条件から決まる：

$$a=y_0,\quad b=\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0},\quad c=\frac{y_2-y_0-b(x_2-x_0)}{(x_1-x_0)(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

1

＊助教授　機械工学科

係数 c を書き換えれば、

$$c = y_0\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1\frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + y_2\frac{1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

となる。あるいは、三点を通ることを強調した二次式として、

$$y(x) = a(x-x_1)(x-x_2) + b(x-x_2)(x-x_0) + c(x-x_0)(x-x_1) \tag{2}$$

と書けば、係数 a、b、c は、

$$a = \frac{y_0}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}、\quad b = \frac{y_1}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)}、\quad c = \frac{y_2}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

上式(2)に代入すれば、

$$y(x) = y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1\frac{(x-x_2)(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)} + y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \tag{3}$$

と書ける。これを二次補間式という。

［例題１］ 下表での $y(2.05)$ の補間値を一次及び二次近似で求めよ。

x	2.0	2.1	2.2
$y(x)$	0.301030	0.322219	0.342423

［解］ (1)式（一次近似式）を使って、$y(2.05)$=0.311625。(3)式（二次近似式）を使って、$y(2.05)$=0.311748。真値は（対数表から）、$y(2.05)=\log_{10} 2.05 = 0.311754$。

(1)、(3)式の一般化を考える。$(n+1)$ 点 (x_0,y_0)、(x_1,y_1)、(x_2,y_2)、... が与えられたとき、それらの点を通る曲線の式（n 次の多項式）は、

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)} + y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_n)} \\ &+ \cdots + y_n\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\cdots(x_n-x_{n-1})} = \sum_{k=0}^{n} y_k N_k(x), \quad N_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j} \end{aligned} \tag{4}$$

となる[2]。この式を Lagrange 補間式という。

[2] (4)式は以下のようにして、その存在が保証される：$(n+1)$点のデータの組

$(x_0、y_0)$, (x_1, y_1), $\cdots$ (x_n, y_n)

が与えられているとき、これらの $(n+1)$ 点を通る n 次の多項式は、

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

と書ける。それらの点（座標）を $P(x)$ に代入すれば、

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n &= y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n &= y_2 \\ \vdots \quad & \quad \vdots \ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n & \quad y_n \end{aligned}$$

a_0、a_1... を未知数とする連立一次方程式となる。その係数行列は、

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} \neq 0.$$

よって、連立方程式は解を持つ。解 a_0、a_1, ... は一意に定まる。つまり、$n+1$ 次の多項式 $P(x)$ の係数が決まる。

Newton の補間式

一次補間式 $y(x)=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0)$ において、$x_1-x_0=h$、$y_1-y_0=\Delta y_0$ とおけば、$y(x)=y_0+\frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0)$ となる。一般に、関数 $y(x)$ において x の一定増分 Δx に対する y の増分

$$\Delta y=y(x+\Delta x)-y(x)$$

を一次差分(difference)という[3]。

二次補間式 $y(x)=a+b(x-x_0)+c(x-x_0)(x-x_1)$ で、係数 c を決めるには (x_2,y_2) を代入して（但し、x_0,x_1,x_2 は等間隔とする）、

$$y_2 = y_0+\frac{\Delta y_0}{h}(x_2-x_0)+c(x_2-x_0)(x_2-x_1)=y_0+\frac{\Delta y_0}{h}2h+c2hh$$

で、係数 c はこれより $c=\frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}$ を得る。ここに、$\Delta^2 y_0=\Delta y_1-\Delta y_0$ を二次差分（一次差分の差）という。よって、二次補間式は、

$$y(x)=y_0+\frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0)+\frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1) \tag{6}$$

となる。これらの式の一般化として、

$$\begin{aligned} y(x) &= y_0+\frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0)+\frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1)+\frac{\Delta^3 y_0}{3!h^3}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \\ &+ \cdots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned}$$

と書ける。x_0、x_1、x_2、...は等間隔であることから、$t=\frac{x-x_0}{h}$、$x-x_0=ht$ とおいて、

$$\begin{aligned} x-x_1 &= x-x_0+x_0-x_1=ht-h=h(t-1) \\ x-x_2 &= x-x_1+x_1-x_2=h(t-1)-h=h(t-2) \end{aligned}$$

等々を上式に代入すれば、

$$\begin{aligned} y(t) &= y_0+\Delta y_0 t+\frac{\Delta^2 y_0}{2!}t\,(t-1)+\frac{\Delta^3 y_0}{3!}t\,(t-1)\,(t-2)+\cdots+\frac{\Delta^n y_0}{n!}t\,(t-1)\cdots(t-(n-1)) \\ &= y_0+\sum_{k=1}^{n}\frac{\Delta^k y_0}{k!}t^{(k)} \qquad \left(t^{(k)}=t(t-1)(t-2)\cdots(t-(k-1))=\frac{t!}{(t-k)!} \right) \end{aligned}$$

となる（$t^{(n)}$を「Jordan の階乗記号」という）。これを Newton の（前進差分による）補間式という。

［例題 2］ 例題 1 の $y(2.05)$ の補間値を Newton の補間式で計算せよ。

［解］ 一次、二次の補間値を下表(差分表) を用いて、

$$y(2.05) = 0.301030+0.021189\times\frac{2.05-2.0}{0.1} = 0.311625$$

$$\begin{aligned} y(2.05) &= 0.301030+0.021189\times\frac{2.05-2.0}{0.1} \\ &+ \frac{1}{2}(-0.000985)\times\left(\frac{2.05-2.0}{0.1}\right)\left(\frac{2.05-2.0}{0.1}-1\right)=0.311748 \end{aligned}$$

---

[3] x の増分 Δx の取り方によって、次のような差分形式がある（問題によって使い分ける）：

$y(x+\Delta x)-y(x)$ （前進差分）： $y(x+\frac{\Delta x}{2})-y(x-\frac{\Delta x}{2})$ （中心差分）： $y(x)-y(x-\Delta x)$ （後退差分）

x	y	Δy	$\Delta^2 y$
2.0	0.301030		
		> 0.021189	
2.1	0.322219		> -0.000985
		> 0.020204	
2.2	0.342423		

[課題]

x	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
$y(x)$	0.4332	0.4452	0.4554	0.4641	0.4713	0.4772

$x=1.64$、1.96 での $y(x)$ の値を Lagrange、Newton 式で補間せよ。

[解] Lagrange 補間法では、

x	1.64	1.96
$y(x)$	0.4495	0.4750

Newton 補間のための差分表.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
1.5	0.4332				
		> 0.0120			
1.6	0.4452		> -0.0018		
		> 0.0102		> 0.0003	
1.7	0.4554		> -0.0015		> -0.0003
		> 0.0087		> 0	
1.8	0.4641		> -0.0015		> 0.0002
		> 0.0072		> 0.0002	
1.9	0.4713		> -0.0013		
		> 0.0059			
2.0	0.4772				

第2週　数値積分

$f(x)=x^2$ のように不定積分が既知のときには、$\int_0^1 x^2 dx = \left[\frac{1}{3}x^3\right]_0^1 = \frac{1}{3}$ として定積分が計算できる。しかし、どの関数にも不定積分が存在するわけではない。ここでは、関数型は既知として、不定積分が存在しないときでも積分値を計算できるようにしよう。

以下、関数 $f(x)=x^2$ を例にして、数値積分の方法を述べよう。

微小長方形を集めて定積分を近似することから始めよう。この近似を「長方形近似」と呼ぼう。区間 [0,1] を5等分した長方形近似では（$\Delta x=0.2$、Δx をきざみ幅という）、

$$
\begin{aligned}
S_\Sigma &= f(0)\Delta x + f(0.2)\Delta x + f(0.4)\Delta x + f(0.6)\Delta x + f(0.8)\Delta x \\
&= \{f(0)+f(0.2)+f(0.4)+f(0.6)+f(0.8)\}\,\Delta x = 0.24
\end{aligned}
$$

あるいは、

$$S^\Sigma = \{f(0.2)+f(0.4)+f(0.6)+f(0.8)+f(1.0)\}\,\Delta x = 0.44$$

となる。明らかに、S_Σと S^Σの大小関係は $S_\Sigma < S^\Sigma$である。ここに、S_Σを“下からの近似”、S^Σを“上からの近似”という。しかし、分点を細かくしていけば $S_\Sigma \approx S^\Sigma$が期待できる（下表参照）[4]。その前に、$\dfrac{S_\Sigma + S^\Sigma}{2}$を作ってみる：

$$
\begin{aligned}
\frac{S_\Sigma + S^\Sigma}{2} &= \frac{1}{2}\{f(0)\Delta x + f(0.2)\Delta x + f(0.4)\Delta x + f(0.6)\Delta x + f(0.8)\Delta x \\
&\quad + f(0.2)\Delta x + f(0.4)\Delta x + f(0.6)\Delta x + f(0.8)\Delta x + f(1.0)\Delta x\} \\
&= \frac{1}{2}[\{f(0) + f(0.2)\} + \{f(0.2) + f(0.4)\} + \{f(0.4) + f(0.6)\} \\
&\quad + \{f(0.6) + f(0.8)\} + \{f(0.8) + f(1.0)\}]\,\Delta x \\
&\overset{\text{台形近似}}{=} \frac{1}{2}[f(0) + 2\{f(0.2) + f(0.4) + f(0.6) + f(0.8)\} + f(1.0)]\,\Delta x \\
&= \frac{0.44 + 0.24}{2} = 0.34 \approx \frac{1}{3}
\end{aligned}
$$

ここに、台形近似とは(微小)区間 Δx の両端の関数値を使って、(微小)台形の面積を計算したものである、言い換えると、区間内の関数を直線（一次式）で近似したものである。二点を（x_0 、$f(x_0) = f_0$）,（x_1 、$f(x_1) = f_1$）とすれば、一次補間式を使って、

$$
\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_0+\Delta x} f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_0+\Delta x} (a + bx)dx \\
&= \frac{1}{2}[f(x_0) + f(x_0 + \Delta x)]\Delta x = \frac{1}{2}[f_0 + f_1]\Delta x
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここに、定数 a、b は一次補間式の係数である。

二次補間式を積分すれば、更に近似を上げた式が得られる[例題２]。しかし、一点でも次のように、Δx の中点の関数値を利用すれば精度をあげることができる：

S(中点公式) $= \{f(1.1) + f(1.3) + f(1.5) + f(1.7) + f(1.9)\}\,\Delta x = 0.33$

[例題１] $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_1^2 e^{-x^2/2}dx$ の近似値を求めよ（正規分布表によると近似値は 0.1359 ）。

[解] $f(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-x^2/2}$、 $\Delta x = 0.2$ として、[5]

$S^\Sigma = \{f(1.0) + f(1.2) + f(1.4) + f(1.6) + f(1.8)\}\,\Delta x = 0.1552$

$S_\Sigma = \{f(1.2) + f(1.4) + f(1.6) + f(1.8) + f(2.0)\}\,\Delta x = 0.1175$

---

[4]分点を増やした時の積分値：

分点	S_Σ	S^Σ	S(中点)
10	0.285	0.385	0.3325
25	0.3136	0.3536	0.332
50	0.3234	0.3434	0.333
100	0.32835	0.533835	0.33325
200	0.330837	0.335837	0.333331
500	0.332334	0.334334	0.333333
1000	0.332833	0.333833	
2000	0.333083	0.333583	

[5]分点を増やした時の積分値：

分点	S_Σ	S^Σ	S(台形)	S(中点)
10	0.126618	0.145416	0.136017	0.135849
25	0.132163	0.139683	0.135923	0.135896
50	0.134030	0.137789	0.1359095	0.135903
100	0.134966	0.136846	0.135906	0.135905

$$\frac{S_{\Sigma}+S^{\Sigma}}{2} = \frac{1}{2}[f(1.0)+2\{f(1.2)+f(1.4)+f(1.6)+f(1.8)\}+f(2.0)]\Delta x = 0.1364$$

$$S(\text{中点公式}) = \{f(1.1)+f(1.3)+f(1.5)+f(1.7)+f(1.9)\}\Delta x = 0.1357$$

[例題2] 次の二次補間式 $f(x)=f_0\dfrac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+f_1\dfrac{(x-x_2)(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)}+f_2\dfrac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$ を積分して得られる式を示せ。

[解] 三点 (x_0,f_0)、(x_1,f_1)、(x_2,f_2) は等間隔 $(h=x_{n+1}-x_n, x_n=x_0+nh)$ とする。

$$f_0\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_1)(x-x_2)dx \overset{\frac{x-x_0}{h}=t}{=} \frac{f_0}{-h\cdot-2h}\int_0^2(t-1)(t-2)dx = \frac{f_0}{2h^2}\frac{4}{3}h^3 = \frac{1}{3}f_0h$$

同様に積分を行えば、

$$f_1\frac{1}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_2)(x-x_0)dx = \frac{f_1}{-h\cdot h}\int_0^2 t(t-2)dx = \frac{f_1}{h^2}\frac{4}{3}h^3 = \frac{4}{3}f_1h$$

$$f_2\frac{1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_1)(x-x_2)dx = \frac{f_2}{2h\cdot h}\int_0^2 t(t-2)dx = \frac{f_2}{2h^2}\frac{2}{3}h^3 = \frac{1}{3}f_1h$$

よって、$\displaystyle\int_{x_0}^{x_2}f(x)dx=\frac{1}{3}(f_0+4f_1+f_2)h$ 同様にして、$\displaystyle\int_{x_2}^{x_4}f(x)dx=\frac{1}{3}(f_2+4f_3+f_4)h$

こうして、$[x_0,x_{2n}]$ の一般区間では、

$$\int_{x_0}^{x_{2n}}f(x)dx=\frac{1}{3}[f_0+f_{2n}+4(f_1+f_3+\cdots+f_{2n-1})+2(f_2+f_4+\cdots+f_{2n-2})]h \tag{2}$$

となる。この式を「Simpson公式」という。

Simpson 近似による[例題1]の計算は、$S_{Simpson}$ = 0.1356 である。

[課題] 次の積分の近似値と真値を求めよ(きざみ幅は $\Delta x=0.1$)。

$$(a)\ \int_0^1\frac{1}{1+x^2}dx \quad (b)\ \int_0^1\sqrt{1-x^2}dx \quad (c)\ \int_0^\infty e^{-x^2}dx$$

[解] (c) については、$\displaystyle\int_0^\infty e^{-x^2}dx\cong\int_0^4 e^{-x^2}dx$ とする。長方形近似には上・下からの近似値を示した。

	長方形近似		台形近似	*Simpson*近似	真 値
(a)	0.809981497	0.759981497	0.784981497	0.785398153	$\frac{\pi}{4}$ =0.785398163
(b)	0.826129582	0.726129583	0.776129582	0.78175204	$\frac{\pi}{4}$ =0.785398163
(c)	0.936226905	0.836226917	0.886226925	0.886226912	$\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ =0.886226925

おまけの話　数値微分

補間式を用いて「数値微分」ができる。補間式から補間値を得たように、補間式を微分して[6]、その式に数値を代入すればその点での微分係数が得られる。

前章の補間法の［例題1］での表の数値を用いて、$f'(2)$ の値を求める：

Lagrange（Newton）の一次補間式を微分して、

$$f'(x)=\frac{f_1-f_0}{x_1-x_0}\left(=\frac{\Delta f_0}{\Delta x}\right) \quad\Longrightarrow\quad f'(2)=0.21189$$

---

[6]Lagrange の補間式が得られていれば、それを微分すればよい：

$$f'(x)=\sum_{k=0}^{n}f_kN_k'(x), \qquad N_k'(x)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\left(\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)'$$

Lagrange の二次補間式を微分して、

$$f'(x) = f_0\frac{(x-x_1)+(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1\frac{(x-x_2)+(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)} + f_2\frac{(x-x_0)+(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \Longrightarrow$$

Newton の二次補間式の微分では、

$$f'(x) = \frac{\Delta f_0}{\Delta x} + \frac{\Delta^2 f_0}{2(\Delta x)^2}(2x-x_0-x_1) \quad \Longrightarrow \quad f'(2)=0.216818$$

となる。真値は $f'(2) = (\log_{10} x)'|_{x=2} = \left.\frac{1}{\log_e 10}\frac{1}{x}\right|_{x=2} = 0.217147$

以上の結果を下表にまとめた。併せて、$f'(2.1)$ の計算結果も示してある：

	一次近似	二次近似		真　値
		Lagrange	Newton	
$f'(2.0)$	0.21189	0.216823	0.216818	0.217147
$f'(2.1)$	0.202034	0.206963	0.206959	0.206707

第３－７週　方程式の数値解法

種々の方程式と呼ばれる中で、以下では、連立一次方程式、代数・超越方程式、微分方程式の数値解法について述べよう。

第３週　連立一次方程式の解法

二元一次の連立方程式（係数 $a,b,c,d \neq 0$）

$$\begin{cases} ax+by &= \alpha \\ cx+dy &= \beta \end{cases}$$

を例として、連立一次方程式の幾つかの解法を復習しよう。そして、その中から数値解に適した解法を探そう。

［例題１］次の二元一次連立方程式を解け：

$$\begin{cases} x+2y &= 3 \qquad (A) \\ 3x-2y &= 1 \qquad (B) \end{cases}$$

［解］

（Ｉ）　消去法：$(A)+(B)$から、
$4x=4$, $x=1$
$(A)\times 3-(B)$から、
$8y=8$、$y=1$
を得る。解は $x=y=1$ である。

（Ⅱ）代入法：(A)から
$x=3-2y \qquad (A)' \Rightarrow (B)$、整理して、
$3(3-2y)-2y=1$、$-8y=-8$
$y=1 \Rightarrow (A)'$、$x=1$
解は $x=y=1$ である。

（Ⅲ）　上記の連立方程式をベクトル表式

$$A\vec{x}=\vec{b} \tag{1}$$

で表す。ここに、係数行列 A、解ベクトル $\vec{x}$、定ベクトル $\vec{b}$ は，

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & -2 \end{pmatrix},\quad \vec{x}=\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},\quad \vec{b}=\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

である。解ベクトルは形式的に直ちに $\vec{x}=A^{-1}\vec{b}$ と書ける（一次方程式の解法 $ax=b$, $x=a^{-1}b$ のようにして)。ここに、逆行列 A^{-1} は定義式 $AA^{-1}=A^{-1}A=E=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$ から求まる(E は単位行列)。実際、行列の積計算

$$\begin{pmatrix}1&2\\3&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a+2c&b+2d\\3a-2c&3b-2d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

から、a､b､c､d は決まる。よって、逆行列 $A^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{4}&\frac{1}{4}\\\frac{3}{8}&-\frac{1}{8}\end{pmatrix}$ を得る。これより解ベクトルは,

$$\vec{x}=A^{-1}\vec{b}=\begin{pmatrix}\frac{1}{4}&\frac{1}{4}\\\frac{3}{8}&-\frac{1}{8}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{3}{4}+\frac{1}{4}\\\frac{9}{8}-\frac{1}{8}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

となる。

（Ⅳ）A の行列式 $|A|$ は、

$$|A|=\begin{vmatrix}1&2\\3&-2\end{vmatrix}=-2-6=-8$$

であるから解は Cramel の公式から、

$$x=\frac{\begin{vmatrix}3&2\\1&-2\end{vmatrix}}{|A|}=\frac{-8}{-8}=1,\quad y=\frac{\begin{vmatrix}1&3\\3&1\end{vmatrix}}{|A|}=\frac{-8}{-8}=1$$

となる。

（Ⅴ） もっとも初等的と思われる方法を述べる。原式を次のように書き換える。(A)､(B) の順序を換えて、x､y について解く[7]:

$$\begin{cases}x &= \frac{1}{3}(1+2y) \qquad (A)'\\ y &= \frac{1}{2}(3-x) \qquad (B)'\end{cases}$$

まず、$(A)'$式に $y=0$ を代入し、x を求める。その x を $(B)'$ 式に代入し、y を求める。次に、その y 値を $(A)'$ に代入し x を求める。x、y について self consistent になるまで繰り返す（ここでは 10^{-6}まで正確に求める）。

x	y
(初期値)	0
0.333333333	1.333333333
1.222222222	0.888888889
0.925925926	1.037037037
1.024691358	0.987654321
⋮	⋮
1.0	1.0

[7] (A) と (B) から、x と y を解くと、

$$\begin{cases}x &= 3-2y\\ y &= \frac{1}{2}(3x-1)\end{cases}$$

となる。しかし、この場合、これら解は収束しない。

（Ⅵ） 連立方程式の記述の簡単化として、係数行列を拡張した次のような行列

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

を利用するのがよい。変形の際の計算ルールは次の三つ（解法（Ⅰ）消去法）の場合の言い換えである）:

(1) ある行をスカラー倍しても解は不変。

(2) 行を交換しても解は不変。

(3) ある行をスカラー倍して、他の行に加えて、それを新しい行としても解は不変。

1 行目を（A）、2 行目を（B）として、次のように変形する：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{(B)-(A)*3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -8 & -8 \end{pmatrix} \xrightarrow{\frac{(B)}{-8}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{(A)-(B)*2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

よって、解ベクトルは、

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

である。[8]

（Ⅶ）上記の拡張された係数行列を用いた方法からわかるように、もし、係数行列が三角行列 $\begin{pmatrix} a & 0 \\ b & c \end{pmatrix}$ あるいは $\begin{pmatrix} r & s \\ 0 & t \end{pmatrix}$ の型（前者を下三角行列(Lower triangular matrix)、後者を上三角行列（Upper triangular matrix)）であれば、連立方程式の解法が容易になる。

$$A\vec{x} = LU\vec{x} = L\vec{y} = \vec{b}$$

$L\vec{y} = \vec{b}$ から $\vec{y}$ を求め、次に、$U\vec{x} = \vec{y}$ から解ベクトル $\vec{x}$ を求める。三角行列 L、U は $A = LU$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ b & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} r & s \\ 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ar & as \\ br & bs+ct \end{pmatrix}$$

から決まる（方程式 4 本に対して、未知数は 6 個あるので 2 個は任意である。$a = c = 1$ とおく。）:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix},\quad U = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & -8 \end{pmatrix},\quad L\vec{y} = \vec{b},\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix},\ \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -8 \end{pmatrix}$$

よって、求める解ベクトルは

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & -8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -8 \end{pmatrix}$$

から$y = x = 1$を得る。

---

[8]逆行列の求め方に応用できる：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 3 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{(B)-(A)*3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -8 & -3 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\frac{(B)}{-8}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{8} \end{pmatrix} \xrightarrow{(A)-(B)*2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & \frac{3}{8} & -\frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

よって、逆行列 A^{-1} として、

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{3}{8} & -\frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

を得る。

[課題] 次の連立一次方程式を解け。

$$(a)\begin{cases}3x+2y&=&1\\2x+5y&=&-3\end{cases}\quad (b)\begin{cases}x+y+z&=&6\\2x-3y+z&=&-1\\3x-2y+4z&=&11\end{cases}\quad (c)\begin{cases}x+\frac{1}{4}y&=&1\\\frac{1}{4}x+y+\frac{1}{4}z&=&0\\\frac{1}{4}y+z+\frac{1}{4}w&=&1\\\frac{1}{4}z+w+\frac{1}{4}u&=&0\\\frac{1}{4}w+u&=&1\end{cases}$$

[解]$(a)x=1,y=-1\quad(b)x=1,y=2,z=3$

$(c)x=1.15385,y=-0.615385,z=1.30769,w=-0.615385,u=1.15385$

第4週　代数・超越方程式の解法

方程式 $x^2-2=0$ の解は容易に求まり $x=\sqrt{2}$ である。しかし、$x-e^{-x}=0$ となると、すぐには解けない。ここでは、そうした方程式の解（数値解あるいは近似解）を微分法を用いて求めよう。

上記 $x^2-2=0$ の解は、関数 $y(x)=x^2-2$ で考えると、解は $y(x)=0$となる x の値、つまり、x 軸を横切る点を見つけることである。今、横切る点がわからないとする。しかし、$y(0)=-\sqrt{2}<0$、$y(2)=2>0$、 $x>0$ では $y(x)$ は単調増加（$y'(x)>0$）だから、 $y(x)$ は必ず x 軸を横切ることになる。

関数 $y(x)$の任意の点（x_0 ,$y(x_0)$）での接線の方程式は、

$$y-y(x_0)=y'(x_0)(x-x_0)$$

である。この接線が x 軸を横切る点は $y=0$ から、

$$x=x_0-\frac{y(x_0)}{y'(x_0)}$$

となる。この x の値を新たに x_1 として、点（x_1,$y(x_1)$）での接線を考え $y=0$ とすれば、

$$x_2=x_1-\frac{y(x_1)}{y'(x_1)}、\quad 同様の手続きを繰り返す \quad\rightarrow\quad x_{n+1}=x_n-\frac{y(x_n)}{y'(x_n)} \tag{2}$$

を得る。n 回と $n+1$ 回での x 値の差が収束すれば（設定した収束条件、例えば、その差が 10^{-8} 以下になれば計算を止めること）数値解とする。この方法を Newton-Raphson法 をいう。

[例題1] 次の方程式の数値解を求めよ（収束条件 $=10^{-5}$以下）。

$$(1)x^2-2=0\quad(2)x-e^{-x}=0\quad(3)x^3-2x+1=0$$

[解] (1) $y(x)=x^2-2,\ y'(x)=2x,\ x_{n+1}=x_n-\dfrac{x_n^2-2}{2x_n}$

$(2)y(x)=x-e^{-x},\ y'(x)=1+e^{-x},\ x_{n+1}=x_n-\dfrac{x-e^{-x}}{1+e^{-x}}$

$(3)y(x)=x^3-2x+1,\ y'(x)=3x^2-2,\ x_{n+1}=x_n-\dfrac{x^3-2x+1}{3x^2-2}$

(1)	x_n
(初期値)	3
1	1.83333
2	1.46210
3	1.41500
4	1.41421
5	1.41421

(2)	x_n
(初期値)	0
1	0.55531
2	0.56714
3	0.56714

(3)	x_n	x_n	x_n
(初期値)	-2	0	2
1	-1.7	0.5	1.5
2	-1.62309	0.6	1.21083
3	-1.61805	0.617391	1.06328
4	-1.61803	0.618033	1.00900
5	-1.61803	0.618034	1.00000
6		0.618034	1.00000

［課題１］

(1) $\sqrt[3]{10}$ の近似値(2.15443469)を少数第８位まで正確に求めよ。

(2) 次の方程式の近似値を求めよ。

$$(a) x^4 - x^3 - 7x^2 + x + 6 = 0 \quad (b) \tan x = \cos x \quad (x < |\frac{\pi}{2}|)$$

［解］ (a) $y(x) = x^3 - 10, y'(x) = 3x^2, x_{n+1} = x_n - \dfrac{x^3 - 10}{3x^2}$

(1)	x_n
(初期値)	2
1	2.16666667
2	2.15450362
3	2.15443469
4	2.15443469

(2) (a) $x = -2, -1, 1, 3$ (b) $x = 0.666239$

おまけの話　行列の固有値・固有ベクトルの求め方

行列 A として、$A\vec{x} = \lambda\vec{x}$ の方程式を固有値方程式という。例えば、行列 $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ として、固有値 λ は次の二次方程式（固有多項式）から決まる：

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \longrightarrow \lambda = 1,\ 3$$

固有値 $\lambda_i = 1, 3 (i = 1, 2)$ に対応する固有ベクトルは連立方程式の解法に帰する：

$$A\vec{x} = \lambda_i\vec{x} \longrightarrow \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \lambda_i \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix},$$

固有値 $\lambda_1 = 1 \longrightarrow$ 固有ベクトル $\vec{x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$, 固有値 $\lambda_2 = 3 \longrightarrow$ 固有ベクトル $\vec{x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$

$\vec{x}$ は規格直交化されたベクトルである(二つの固有ベクトルの内積は 0 ⇨ 固有ベクトルは直交する)。

［課題２］ 次の行列の固有値・固有ベクトルを求めよ(消去法で解ければよい)。

$$(a)\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (b)\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (c)\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (d)\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

［解］

$(a)\lambda = 2,\quad (-1, 0, 1),\quad \lambda = 2 - \sqrt{2},\quad (1, -\sqrt{2}, 1)\quad \lambda = 2 + \sqrt{2},\quad (1, \sqrt{2}, 1)$

$(b)\lambda = \frac{1}{2}(3 - \sqrt{5}),\quad (-1, \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), \frac{1}{2}(-1 - \sqrt{5}), 1),\quad \lambda = \frac{1}{2}(5 - \sqrt{5}),\quad (1, \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}), \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}), 1),$

$\lambda = \frac{1}{2}(3 + \sqrt{5}),\quad (-1, \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}), \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{5}), 1),\quad \lambda = \frac{1}{2}(5 + \sqrt{5}),\quad (1, \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), 1)$

$(c)\lambda = -1,\quad (-1, 0, 1),\quad \lambda = 1(\text{重根}),\quad (1, 0, 1),\quad (0, 1, 0)$

$(d)\lambda = -1(\text{重根}),\quad (-1, 0, 0, 1)\quad (0, -1, 1, 0),\quad \lambda = 1(\text{重根}),\quad (1, 0, 0, 1),\quad (0, 1, 1, 0)$

第5－7週　微分方程式の解法

一階及び二階の線形常微分方程式の数値解（近似解）を求める。初期値問題は逐次近似、境界値問題は連立方程式の解法に帰する。

常微分方程式の解法　－初期値問題－

一階及び二階の常微分方程式

$$\frac{dy(x)}{dx}=y'(x) \quad = \quad f(x,y), \quad y(x_0)=y_0 \tag{1}$$

$$\frac{d^2y(x)}{dx}=y''(x) \quad = \quad f(x,y(x),y'(x)), \quad y(x_0)=y_0, \quad y'(x_0)=y'_0 \tag{2}$$

の型の初期値問題の数値解を求めよう。数値解に対して、解析的な式によって与えられる微分方程式の解を解析解（その値を真値）という。次の簡単な微分方程式の数値解法から始めよう（(1) での非同次項が $f(x,y)=y(x)$ である特別の場合）：

$$y'(x)=\frac{dy(x)}{dx}=-y(x)\text{、初期条件 } y(0)=1 \text{ の数値解を求めよう（区間 [0,1]、きざみ幅}\Delta x=0.1\text{）} \tag{3}$$

解析解は、例えば、変数分離法によれば $y(x)=ce^{-x}$（「一般解」、cは定数)で、初期条件を考慮して $y(x)=e^{-x}$（特殊解、単に「特解」）である。

原方程式の両辺を積分する：

$$\int_0^x y'(x)dx=-\int_0^x y(x)dx \quad \longrightarrow \quad y(x)=y(0)-\int_0^x y(x)dx$$

求める解$y(x)$が被積分関数なので積分ができない。そこで、初期値を用いて $\int_0^x y(x)dx \overset{x\to 0}{\cong} y(0)\Delta x$ （$\Delta x=x-0$）と近似する（数値積分では長方形近似)。

$$\int_0^x y'(x)dx=-\int_0^x y(x)dx \quad \longrightarrow \quad y(x)=y(0)-\int_0^x y(x)dx \quad \longrightarrow \quad y(x)=y(0)-y(0)\Delta x \tag{4}$$

原方程式 $y'(x)=-y(x)$ を考慮すると、上式は関数のテイラー展開の一次近似に等価であることがわかる。この近似を「オイラー法」という[9]（近似式をオイラー式と呼ぶ)。従って、数値解は $y(x_{n+1})=y(x_n)-y(x_n)\Delta x$ を逐次的に計算すればよい。結果を下表に示す：

				数値解	解析解 (e^{-x})
$y(0.1)$	=	$y(0)-y(0)\times 0.1$	=	0.9	0.904837
$y(0.2)$	=	$y(0.1)-y(0.1)\times 0.1$	=	0.81	0.818731
$\vdots$	=	$\vdots$	=	$\vdots$	$\vdots$
$y(1.0)$	=	$y(0.9)-y(0.9)\times 0.1$	=	0.348678	0.367879

次に、近似を上げた台形公式に相当する近似式を見いだそう。

$$\int_0^x y(x)dx \Longrightarrow \frac{1}{2}[y(0)+y(x)]\Delta x \overset{(3)}{=} -\frac{1}{2}[y'(0)+y'(x)]\Delta x \tag{5}$$

[9]微分方程式 (3) 式を差分法で表現しよう。まず、一階微分 y' を一次差分商に書きかえる：$y'(x) \Longrightarrow \frac{\Delta y}{\Delta x}=\frac{y(x+\Delta x)-y(x)}{\Delta x}$.
こうして、問題の微分方程式 (3) 式が差分方程式に書き換えられる：

$$\frac{y(x+\Delta x)-y(x)}{\Delta x}=-y(x) \quad \Longrightarrow \quad y(x+\Delta x)=y(x)-y(x)\Delta x$$

と書き換えればよい[10]。台形近似は、Δx 区間の両端の微分係数 $y'(x)$ と $y'(x+\Delta x)$ を用いて、平均した微分係数を用いた式ともいえる（修正オイラー法ともいう）。このように、近似を上げるには、分点を増やし、その分点の微分係数に関して平均した値を用いればよいことになる（数値積分のときと同様である）。それでは、Simpson 近似に相当する式はどうなるか？（微分方程式の数値解法の分野では、Simpson 近似とは言わず Runge-Kutta 近似という（教科書Ｐ60及び［例題２］参照））それは両端の微分係数と中点のそれを加えて平均すればよい。即ち、

$$\int_0^x y(x)dx \Longrightarrow \frac{1}{6}[y(0)+4y(\frac{x}{2})+y(x)]\Delta x \overset{(3)}{=} -\frac{1}{6}[y'(0)+4y'(\frac{x}{2})+y'(x)]\Delta x \tag{7}$$

ここに $y(\frac{x}{2})$ はオイラー式で計算する。解析解と上述での種々の近似解の数値を下表にまとめた：

x	解析解 (e^{-x})	長方形近似 (4) 式	台形近似 (8) 式	台形近似 (5) 式	Simpson近似 (7) 式
0	1	1	1	1	1
0.1	0.904837418	0.9	0.904761905	0.905	0.905
0.2	0.818730753	0.81	0.818594104	0.819025	0.819025
0.3	0.740818221	0.729	0.740632761	0.741217625	0.741217625
0.4	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
1	0.367879441	0.34867844	0.367572542	0.368540985	0.368540985

＜注意＞　上表で台形近似 (5) 式 と Simpson の近似 (7) 式の数値が一致した理由を考察せよ。

［例題１］　常微分方程式 $y'(x)=-xy(x)$，$y(0)=1$の数値解を求めよ（区間 ［0.1］、きざみ幅 $\Delta x=0.1$）。

［解］　$y'=(x,y)$ でのオイラー式$y(x_{n+1})=y(x_n)+f(xn,yn)\Delta x$、
及び Runge-Kutta 式　$y(x_{n+1})=y(x_n)+\frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)$、

$$k_1=f(x_n,y_n)\Delta x, k_2=f(x_n+\frac{\Delta x}{2},y_n+\frac{k_1}{2})\Delta x, k_3=f(x_n+\frac{\Delta x}{2},y_n+\frac{k_2}{2})\Delta x, k_4=f(x_{n+1},y_n+k_3)\Delta x$$

を逐次的に解く。結果を下表に示す:

x	解析解	オイラー	*Runge－Kutta*
0	1	1	1
0.1	0.951229425	1	0.995841656
0.2	0.904837418	0.99	0.981833018
0.3	0.860707976	0.9702	0.958389467
0.4	⋮	⋮	⋮
1	0.60653066	0.62815651	0.611604049

［例題２］　二階線形常微分方程式 $y''(x)=-y(x)$，$y(0)=0$，$y'(0)=1$ の数値解を求めよ（区間［$0,\frac{\pi}{2}$］、きざみ幅 $\Delta x=\frac{\pi}{20}$）。

---

[10]この場合では、台形近似は、

$$y(x_{n+1})=y(x_n)-\frac{1}{2}[y(x_n)+y(x_{n+1})]\Delta x$$

このままでは右辺に解くべき $y(x_{n+1})$ が含まれているので、実際の計算には不便である。そこで、$y(x_{n+1})$について

$$y(x_{n+1})=\frac{2-\Delta x}{2+\Delta x}y(x_n)=\frac{1-\frac{\Delta x}{2}}{1+\frac{\Delta x}{2}}y(x_n)$$

と解いた式を用いるのがよい。

［解］題意の微分方程式を次のように一階の常微分方程式の連立方程式に書き直す：

$$\begin{cases} y'(x) &= z(x) \\ z'(x) &= -y(x) \end{cases} \tag{8}$$

z についての初期条件は $z(0)=y'(0)=1, z'(0)=y(0)=0$ である。上式をオイラー式で書けば,

$$\begin{cases} y(x_{n+1}) = y(x_n) + z(x_n) \times \Delta x \\ z(x_{n+1}) = z(x_n) - y(x_n) \times \Delta x \end{cases} \tag{9}$$

となる[11]。区間 $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$、きざみ幅 $\Delta x = \dfrac{\frac{\pi}{2}-0}{n}$ $(n=10)$ として、結果を下表に示す：

n	x	数値解((9)式)	数値解((10)式)	解析解
0	0	0	0	0
1	0.157079633	0.157079633	0.144742627	0.156434465
2	0.314159265	0.314159265	0.289485254	0.309016994
3	0.471238898	0.467363113	0.430936996	0.4539905
4	⋮	⋮	⋮	⋮
10	1.570796327	1.129518656	1.071171388	1

［課題］ 次の微分方程式の数値解を求めよ（$[0,1], \Delta x=0.1$）。併せて、解析解を求め、数値解と解析解のグラフ（解グラフ）を描け。

$$\begin{aligned} &(1)\ y'' - 3y' + 2y &= 0, \quad & y(0)=0,\ y'(0)=1 \\ &(2)\ y'' + 4y' + 4y &= 0, \quad & y(0)=0,\ y'(0)=1 \\ &(3)\ y'' - 6y' + 10y &= 0, \quad & y(0)=0,\ y'(0)=1 \end{aligned}$$

［解］ 数値解はオイラー法

[11]上式(9)は、オイラー式なのでテイラー展開の1次項まで残したものである。近似を上げるには、次のようにする：$y(x)$ をテイラー展開して

$$y(x+\Delta x) = y(x) + y'(x)\Delta x + \frac{y''(x)}{2}(\Delta x)^2 + \frac{y'''(x)}{3!}(\Delta x)^3 + \cdots$$

Δx の三次以上の項を無視し $y''=-y$ を用いて、

$$y(x+\Delta x) = y(x) + y'(x)\Delta x + \frac{-y(x)}{2}(\Delta x)^2 \tag{10}$$

と書く。同様に、$y'(x)$ のテイラー展開の1次までの項は、

$$y'(x+\Delta x) = y'(x) + y''(x)\Delta x = y'(x) + (-y(x))\Delta x$$

となる。上式(10)は、(9)式に比べて、$\dfrac{y''(x)}{2}(\Delta x)^2$ 分だけ近似が上がっていることがわかる。

	(1)		(2)		(3)	
	y(数値解)	解析解	y(数値解)	解析解	y(数値解)	解析解
0	0	0	0	0	0	0
0.1	0.1	0.286440165	0.1	0.081873075	0.1	0.134761017
0.2	0.23	0.551082712	0.16	0.134064009	0.26	0.361999123
0.3	0.397	0.801047171	0.192	0.164643491	0.506	0.72686242
0.4	0.6095	1.042495734	0.2048	0.179731586	0.8736	1.292914428
0.5	0.87781	1.28084183	0.2048	0.183939721	1.41116	2.148636196
0.6	1.214423	1.520924588	0.196608	0.180716527	2.183896	3.415887907
0.7	1.6344637	1.767155744	0.1835008	0.172617875	3.2791576	5.260791095
0.8	2.15622815	2.02364441	0.16777216	0.161517214	4.81318656	7.907542718
0.9	2.801832661	2.294304223	0.150994944	0.148768999	6.939717136	11.65569427
1	3.597993962	2.582946545	0.134217728	0.135335283	9.860847402	16.90139654

常微分方程式の解法　ー境界値問題ー

［例題２］の初期値問題（二階線形常微分方程式）を次のように境界値問題に書き換える：

［例題３］$y''(x) = -y(x)$，境界条件　$y(0) = 0$，$y(1) = 1$　の数値解を求めよ。

［解］まず、ニ階微分$y"$は二次差分商に書きかえる：

$$y''(x) \Longrightarrow \frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{\dfrac{\Delta y(x+\Delta x) - \Delta y(x)}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\{y(x+2\Delta x) - y(x+\Delta x)\} - \{y(x+\Delta x) - y(x)\}}{\Delta x^2}$$

$$= \frac{y(x+2\Delta x) - 2y(x+\Delta x) + y(x)}{\Delta x^2}$$

上式を用いて、微分方程式を差分方程式に書き換える：

$$y(x_{n-1}) - (2+\Delta x^2)y(x_n) + y(x_{n+1}) = 0$$

ここに、x_0 を基点として、分点を $x_k = x_0 + k\Delta x$　$(k=1,2,\ldots,n-1, \Delta x = cont.)$$ とする。簡単化のため、区間［0,1］を４等分（きざみ幅：Δx=0.25）として各点での関数の近似値を求めよう。

$$\begin{aligned} y(x_0) - (2+\Delta x^2)y(x_1) + y(x_2) &= 0 \\ y(x_1) - (2+\Delta x^2)y(x_2) + y(x_3) &= 0 \\ y(x_2) - (2+\Delta x^2)y(x_3) + y(x_4) &= 0 \end{aligned}$$

但し、　$y(x_0) = y(0) = 0, \quad y(x_4) = y(1) = 1$

上式は未知数　$y(x_1) = 0.29427$·とする三元一次の連立方程式であるから、解は、

$y(x_1)$ = 0.294274　（解析解：　0.294014）
$y(x_2)$ = 0.570156　（解析解：　0.619267）
$y(x_3)$ = 0.810403　（解析解：　0.810056）

となる。

微分方程式の境界値問題の解法が連立方程式の解法になった。きざみ幅（Δx）を小さくすれば精度は上がるが、連立方程式の次数が高くなるので解くのが困難になる。このようなことから、計算機による連立方程式の解法が発展した。

［課題２］ $y''(x) = y(x)$, ，境界条件 $y(0) = 0$, $y(1) = 1$ の数値解を求めよ（n =5)。

［解］

$$
\begin{aligned}
y(x_1) &= 0.171406 \quad (\text{解析解：}\ 0.17132)\\
y(x_2) &= 0.349667 \quad (\text{解析解：}\ 0.349517)\\
y(x_3) &= 0.541916 \quad (\text{解析解：}\ 0.54174)\\
y(x_4) &= 0.755841 \quad (\text{解析解：}\ 0.755705)
\end{aligned}
$$

偏微分方程式の差分解法

ニ階の線形偏微分方程式の中で、所謂、ラプラス方程式、熱伝導(及び波動)方程式を差分法で取り扱う。これらの偏微分方程式の境界値問題については、フーリエ級数を用いて変数分離解を求めることが既に授業の中で行われている。

まず、偏導関数を偏差分商で置き換えることから始めよう。例えば、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} = u_{xx}(x,y) &= \frac{u(x+2\Delta x,y)-2u(x+\Delta x,y)+u(x,y)}{(\Delta x)^2}\\
\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = u_{yy}(x,y) &= \frac{u(x,y+2\Delta y)-2u(x,y+\Delta y)+u(x,y)}{(\Delta y)^2}
\end{aligned}
$$

等々である。

偏微分方程式を差分式（差分商）で書き換えると、数値解は驚くほど容易に求まる。偏微分方程式の解法だからといって、特に新しい計算技術を必要としない。三つの偏微分方程式の差分方程式への書き換えはパラレルにできる。それ故、三つの方程式の内、一つの解法をきちんと理解できれば良い（但し、限られた境界条件での話）。難しい偏微分方程式の解法は、差分による数値計算では数値解が容易に求まる。数値解は、領域を格子状に分割するので、各格子点での値を計算することになる。ここで、三つの偏微分方程式についての数値解法の概要を述べておこう。

熱伝導方程式(変数を時間と空間の座標とすれば、時間について1階、座標について2階の微分を含む)の数値解では、格子点の一点の値を決めるのに三点の値が必要となる。これは式を見れば明らかで、一点（これを未来の点と呼べば）の値は、三点（これらを過去の点と呼ぶ）の値から決まる。このように、因果律（例えば、熱は高温から低温に流れる、その逆は起こらない）を式で確認できる。対応する解析解での因果律は、減衰指数関数で表されている。

波動方程式では、時間・座標の両変数とも2階の微分なので、数値解を求めるには、熱伝導方程式のそれと比べると、時間軸方向にもう1点必要になる。つまり、未来の点の値を決めるのに過去の四点の値が必要となる。これは、一見、波動方程式の解析解であるダランベール解（あるいは、ストークスの波動公式）の解釈に矛盾している、ように見える。その解釈では、解は依存領域（domain of dependence）によって決まる、からである。

ラプラス方程式の微分の階数は、形式的には波動方程式のそれに同じだから、ラプラス方程式の数値解には、四点の値が必要になる。ラプラス方程式には、時間変数は含まないので（これを定常的という。これの対して、熱及びは同方程式を非定常的という）、四点は一点に隣接する左右上下の四点である。それらの点は全て格子上にある。しかし、それらの点もまた隣接する四点に依存する。従って、各点の値を決めることは、連立方程式を解く問題に帰着する。格子点を増やせば、連立方程式の次元は大きくなる。計算機による連立方程式の解法が詳しく研究される理由が、実はここにある。偏微分方程式の解法が連立行程式の解法、つまり、解析の問題が代数の問題に化けた。こんな関係が出てくるところに、数値解析の面白さがある。ラプラス方程式の解を調和関数（Harmonic function）という。ラプラス方程式は、コーシー・リーマンの関係式（Cauchy-Riemann equations; 複素関数の微分可能条件、つまり、正則条件）から導びかれるから、正則関数の実部、虚部は、調和関数になっている。調和関数のことをポテンシャル関数ともいう。このような考察により、一点を決めるのに周りの四点（境界）を必要とすることがわかる。

ラプラス方程式と熱伝導方程式の解法手順を述べる（波動方程式のそれは類似しているので省略する）。

(Ⅰ)ラプラス方程式の解法

$$\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2}=\Delta u(x,y)=0,\quad (D: 0\le x\le a,\ 0\le y\le b)$$

境界条件　$u(x,0)=f(x),\quad u(x,b)=0,\quad u(0,y)=u(a,y)=0$ (1)

ラプラス方程式 (1) 式を境界条件の下で解く。

(1) 差分方程式を作る（微分 → 差分商）

$$\frac{u(x+\Delta x,y)-2u(x,y)+u(x-\Delta x,y)}{(\Delta x)^2}+\frac{u(x,y+\Delta y)-2u(x,y)+u(x,y-\Delta y)}{(\Delta y)^2}=0.$$

整理して（$\Delta x=\Delta y$ として）、

$$u(x+\Delta x,y)+u(x-\Delta x,y)+u(x,y+\Delta x)+u(x,y-\Delta y)-4u(x,y)=0.$$

$u(x,y)$ について解けば、

$$u(x,y)=\frac{1}{4}\{u(x+\Delta x,y)+u(x-\Delta x,y)+u(x,y+\Delta x)+u(x,y-\Delta y)\}.$$

記述の簡単化として、$u(x,y)=u_{i,j},\ u(x+\Delta x,y)=u_{i+1,j},\cdots$ とおけば、

$$u_{i,j}=\frac{1}{4}(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1})$$

と書ける。従って、求める 解 $u(x,y)$ は $u(x,y)$に隣接する 4 点の値 $(u(x\pm\Delta x,y),\ u(x,y\pm\Delta y))$ がわかれば決まる。

(2) 連立方程式を解く

簡単化して、境界条件を $a=b=1$, $f(x)=x$ とし、x、y の$[0,1]$ 区間を 3 等分$\Delta x=\frac{1}{3}$ した格子状の図形をとる。境界点の値は初期条件で与えられているので $(b_1=0, b_2=\frac{1}{3}, b_3=\frac{2}{3}, b_4=1, b_5=b_6=\cdots=b_{12}=0)$、境界内の 4 点の値を$u_1, u_2, u_3, u_4$, とすれば、それらは次の連立方程式で決まる：

$$\begin{aligned}
u_1 &= \frac{1}{4}(b_2+b_5+u_2+u_3)=\frac{1}{4}\left(\frac{1}{3}+u_2+u_3\right)\\
u_2 &= \frac{1}{4}(b_3+b_6+u_1+u_4)=\frac{1}{4}\left(\frac{2}{3}+u_1+u_4\right)\\
u_3 &= \frac{1}{4}(b_7+b_{10}+u_1+u_4)=\frac{1}{4}(u_1+u_4)\\
u_4 &= \frac{1}{4}(b_8+b_{11}+u_2+u_3)=\frac{1}{4}(u_2+u_3)
\end{aligned}$$

解は、$u_1=0.152778$、$u_2=0.222222$、$u_3=0.0555554$、$u_4=0.069444$。

近似を上げるには分点を増やせばよい（連立方程式の次元が上がるだけである）。

[例題１] ラプラス方程式を次の境界条件で解け([0,1], $\Delta x=\frac{1}{n}$, ($n=4$))。

$$a=b=1,\ f(x)=\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-x\right|$$

[解] 境界内の 4 点の値をu_i, ($i=1,2,3,4$)とする。

$b_2=0.25$	$b_3=0.5$	$b_4=0.25$
$u_1=0.132717$	$u_2=0.216607$	$u_3=0.135428$
$u_4=0.064207$	$u_5=0.0985119$	$u_6=0.075085$
$u_7=0.025574$	$u_8=0.0380952$	$u_9=0.0282951$

(Ⅱ) 熱伝導方程式の解法

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - c^2\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \Diamond\, u(x,t) = 0$$

初期条件 $u(x,0) = f(x)$　境界条件 $u(0,t) = u(a,t) = 0$

熱伝導方程式 (1) 式を初期条件・境界条件の下で解く。

(1) 差分方程式を作る(微分 → 差分商)

$$\frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} - c^2\frac{u(x+\Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2} = 0.$$

整理して（定数 $c^2\dfrac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ を新たに定数 c として）、

$$u(x,t+\Delta t) = cu(x+\Delta x,t) + (1-2c)u(x,t) + cu(x-\Delta x,t).$$

あるいは、

$$u_{i,j+1} = cu_{i+1,j} + (1-2c)u_{i,j} + cu_{i-1,j+1}$$

従って、求める解 $u(x,t+\Delta t)$ は、$u(x\pm\Delta x,t)$ と $u(x,t)$の3点の値がわかれば決まる。言い換えれば、時刻 t から Δt 進んだ状態 $u(x,t+\Delta t)$は、時刻 t での3つの状態 $u(x-\Delta x,t)$、$u(x,t)$、$u(x-\Delta x,t)$ がわかればよい。

(2) 逐次式を解く

簡単化して、境界条件を $a=1$、$f(x)=x$、$c=0.2(c^2=1, \Delta x=\frac{1}{3}, \ \Delta t=\frac{1}{45})$ とし、逐次式 (2) を解く。結果を下表に示す：

n	$u(0,t)$	$u(\frac{1}{3},t)$	$u(\frac{2}{3},t)$	$u(1,t)$
0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	1
1	0	0.383333	0.766666	0
2	0	0.440833	0.709166	0
3	0	0.481083	0.668916	0
4	0	0.509258	0.640741	0

[例題2]　熱伝導方程式を次の境界条件で解け($[0,1], \Delta x=\frac{1}{n}, \ n=4, \ \Delta t=\frac{1}{20}$)。

境界条件　$a=1, \ f(x)=\frac{1}{2}-\left|\frac{1}{2}-x\right|$

[解]

n	$u(0,t)$	$u(\frac{1}{4},t)$	$u(\frac{1}{2},t)$	$u(\frac{3}{4},t)$	$u(1,t)$
0	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	1
1	0	0.23	0.34	0.23	0
2	0	0.218	0.296	0.218	0
3	0	0.190	0.2648	0.190	0
4	0	0.16696	0.23488	0.16696	0

第8週　乱数とその応用ーモンテカルロ法ー

乱数（擬似一様乱数）を発生させて、それを色々な問題の数値解法に応用する。言い方を代えればモンテカルロ法への入門である。

一様疑似乱数 (Uniform Random Number)

合同式を用いた乱数の発生法

［合同式の定義］$A \equiv B \pmod{m}$ は$A-B$がmで割り切れる。つまり、$A-B=mt$なる整数tが存在すること。

$$\begin{cases} X_{n+1} \equiv aXn+c \pmod{m} \\ X_0 \equiv b \end{cases}$$

によって数列 $\dfrac{X_n}{m}=Y_n$ $(n<m)$ が［0,1］の一様擬似乱数とみなすことができる。

実際に擬似乱数を作ってみよう。定数としては、例えば、

$a=253,\ b=375,\ c=7381,\ m=2^{20} = 1048576$

を用いる。これらの値を用いて計算した数列 $X__{n}.¥ Y__n$ の数項を示す：

	1	2	3	4	5	
X_n	102256	712325	919110	806915	733132	…
Y_n	0.097518921	0.679326057	0.876531601	0.769534111	0.699169159	…

発生させた擬似乱数の信頼性を次の二点、［I］等確率性(どの数も同じ確率で出現すること）と［II］無相関性(どの数もそれらの間に相関がないこと）で調べる。等確率姓はχ^2－検定によって、無相関性は相関係数を求めることによって議論する。

擬似一様乱数の信頼性（等確率性と無相関性）

［I］乱数の等確率性の検定：

i番目の区間に落ちる乱数の数（実現度数f_i)が期待度数F_i（理論度数）にどれだけ適合しているかを検定するのに、χ^2－検定が用いられる。以下、その検定の手順を次に示す（教科書 確率統計 p116 参照)。

［仮説］区間[0,1]で発生する乱数は等確率である(乱数の分布が一様分布か？)。

(1) 区間［0,1]を10区間に分けて、各区間に落ちる乱数（実現度数f_i）を数える。

(2) 期待度数（理論度数）は $\dfrac{N}{10}$ で、N は発生した乱数の総数です。

(3) 各区間での偏差 $\dfrac{(f_i-F_i)^2}{F_i}$ の合計を取る： $C=\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\frac{(f_i-F_i)^2}{F_i}$

(4) 自由度 $\phi=n-1$ $(n=10)$ の χ^2－分布表より、危険率 α (%) に対するχ_0^2の値を求める:

$P(\chi^2 \geq \chi_0^2)=\displaystyle\int_{\chi_0^2}^{\infty} f_9(x)dx=\alpha$： $\alpha=5\%$のとき、$\chi_0^2=16.92$, $\alpha=1\%$のとき、$\chi_0^2=23.21$

(5) Cとχ_0^2の大小関係を比較する：

$C \leq \chi_0^2$ → 仮説は採択される：　　$C \geq \chi_0^2$ 仮説は棄却される

区間	$0 \leq x < 0.1$	$0.1 \leq x < 0.2$	……	$0.9 \leq x \leq 1.0$
実現度数 f_i				
期待度数 F_i	$\dfrac{N}{10}$	$\dfrac{N}{10}$		$\dfrac{N}{10}$
$\dfrac{(f_i-F_i)^2}{F_i}$				

[II] 乱数の無相関性

$(x_i\ ,y_i\ )$ の二次元標本として、x と y の相関係数 $\rho(x,y)$ は、

$$\rho(x,y) = \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_x)(y_i-\mu_y)}{\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_x)^2\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\mu_y)^2}} = \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_iy_i-\mu_x\mu_y}{\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu_x)^2\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\mu_y)^2}}$$

$$= \frac{c(x,y)}{\sigma_x\sigma_y}$$

で、$c(x,y)$ が共分散、μ_x、μ_y は x、y の平均値、σ_x、σ_y は x、y の標準偏差である。

相関係数 $\rho(x,y)$ の性質

(1) $|\rho(x,y)| \leq 1$

(2) x,y が独立ならば、$\rho(x,y) = 0$

(3) $y=ax+b$ (a,b は定数) $\longleftrightarrow$ $|\rho(x,y)| = 1$

[課題１]

1) 乱数を発生させるプログラムを作れ(組み込み関数 MOD を使う：$X=A$ MOD B．A を B で割った余り X とする)

2) 乱数を１００個発生させ，等確率性及び無相関性を議論せよ。

乱数の応用

上記で発生させた乱数を用いた数値解法を以下に述べよう。

定積分への応用

$\int_0^1 f(x)dx = c$ （c は定数）の近似値を次のようしてに求める

(1) 一様乱数の組 (x,y) を正方形 $(0 \leq (x,y) \leq 1)$ の中に発生させる。

(2) 点 (x_i,y_i) の位置が、関数 $y=f(x)$ の曲線の下にあれば成功 (success)、曲線より上にあれば失敗 (failure) とする。

(3) 上記の過程を繰り返し、成功の割合を数える。

即ち、試行回数を N、成功を n 回とすれば、この比率が定積分の近似値を与える：

$$\frac{n}{N} \approx \int_0^1 f(x)dx$$

このことは、$N \to \infty$ であれば、「大数の法則」

$$\lim_{N\to\infty} P\left\{\left|\frac{n}{N}-c\right| < \varepsilon\right\} = 1$$

によって定積分値が保証される。ここに、ε は任意の大きさにとれる。

[課題２]

(1) $\int_0^1 x^2dx$ の近似値を求めよ。 (2) $\frac{\pi}{4}$ の近似値を求めよ(つまり、π の近似値)。

正規乱数の発生

一様乱数を用いて別の確率分布に従う乱数を発生させることができる。ここでは、正規乱数の発生をみる。一様乱数を 12 個 $(x_1,x_2,\ldots,x_{12})$ 発生させる。

$$X = \sum_{i=1}^{12} x_i - 6$$

とおくと、X の確率分布は中心極限定理により正規分布に近づく。X の確率分布の平均値・分散は

$$\mu = E(X) = 12 \times \frac{1}{2} - 6 = 0 \qquad \sigma^2 = V(X) = 12 \times \frac{1}{12} = 1 \tag{3}$$

となるので、X の確率分布は $N(0,1^2)$ に従うことがいえる。

［課題３］(1) 発生させた正規乱数の度数分布表（棒グラフ）を作れ（区間[-3,3],幅0.2とせよ)。標準正規分布のグラフと比較せよ。

(2) 指数分布に従う乱数（指数乱数）を発生させよ。

Random Walk （乱歩・酔歩）

直線上の位置 x においた粒子は、等確率で左右に必ず移動するとする。

今、原点（$x=0$）にある粒子が、コイン投げで表（H:Head）がでたら右に Δx、裏(T：Tail)がでたら左へ Δx 移動するとする。コインを投げて移動する時間、即ち、１ステップに要する時間を Δt とする。この操作を繰り返し行うものとする。

コイン投げを N 回行って、全て表がでれば、移動距離は $N\Delta x$ である。また、N 回の内、表の出る回数が（$N-r$）回であれば、移動距離は（$N-2r$）$\times \Delta x$ となる。

［問１］ $\Delta x = 0.5m$として、100ステップでの(100回コイン投げを行ったとき)、原点からの移動距離は何mか？10回繰り返し行い、平均距離を求めよ。

移動距離は、一回ごとに異なるはずである。一回ごとに、表、裏、... の出方が違うからである。このような過程を確率過程という。つまり、確率変数が時間に依存する過程ということである。

［問２］50m進むには、何ステップ必要か？

次に、二次元に拡張しよう。原点にある粒子は、平面上のどの方向にも自由に移動できるものとする。原点から半径 r の円周上の点の座標を（X,Y）とすれば、

$$X = r\cos(2\pi x) \qquad Y = r\sin(2\pi x)$$

ここに、xは一様乱数である。

［問３］１ステップごとの移動距離は $\Delta x = 0.5m$ として、100ステップでの原点からの移動距離を求めよ。10 回繰り返し行い、平均距離を求めよ。

おまけの話　拡散方程式（熱伝導方程式）

粒子が時間間隔 Δt で、ある場所（位置）x において等確率で左右に動くとする。時刻 t に位置 x にある確率を $p(x,t)$ とすれば、

$$p(x,t+\Delta x) = \frac{p(x-\Delta x,t)}{2} + \frac{p(x+\Delta x,t)}{2} \tag{5}$$

と書ける。両辺を各々、Taylor展開（左辺は t、右辺は x について展開）すれば、

$$p(x,t) + \frac{\partial p}{\partial t}\Delta t + \cdots, \quad (\text{右辺}) = p(x,t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + \cdots \tag{6}$$

であるから、

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

となる。その解は、

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \tag{7}$$

である。この関数 (7) は、平均 $\mu=0$、分散 $\sigma^2=2Dt$ の正規分布の確率密度関数である。

この分布の x の二乗平均は、

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(x,t)dx = 2Dt \tag{8}$$

となる。この意味は、時間 t での原点からの平均二乗距離である。それ故、ある時間に粒子が移動する平均距離は、時間の平方根に比例する ($x \propto \sqrt{t}$)。Brown粒子が媒質から衝突を受ける時間間隔の平均値を t_0、時間 t の間の衝突回数を m とすれば、$t=t_0m$ となる。従って、上式 (8) を、

$$\overline{x^2} = l^2 m, \quad l^2 = 2Dt_0 \tag{9}$$

と書き換えられる。言い換えれば、粒子の移動距離は、衝突回数の平方根に比例する。即ち、l は衝突と衝突の間の移動距離（平均自由行程）を表わしている。

(平成14年11月22日受理)