

但し記憶容量の関係で、大型機用のプログラムと比べ、項数など制限も多いし、また計算時間がかかるのは止むを得ないが、現時点では費用も数倍かかる。また結晶計算の一特徴として、1ステップの計算の出力が、次のステップの入力となり各プログラムを流れてゆく。従って、途中で大型計算機を使用する場合、入出力が有機的に結びつかねばならないので、金大計算機におけるカード出力の必要を痛感する。

結晶学における計算機の役割は充分述べられたとは思わない。ORTEP¹⁵⁾⁹⁾とか、ディスプレイ¹⁶⁾、更に結晶学のデータを整理、再利用するドキュメンテーション⁷⁾¹⁷⁾など全然ふれることができなかった。しかし結晶学における大型電子計算機の必要性を御理解いただければ幸甚である。

文 献

- 1) 桜井敏雄 「X線結晶解析」 裳華房 昭44
- 2) 斉藤喜彦編 「回折結晶学」 丸善 昭40 中 飯高洋一 361頁
- 3) 細谷資明 科学(1973年) 2, 66
- 4) 細谷資明 日本結晶学会誌(1961) 3, 1, 2
- 5) 竹内慶夫 " (1964) 6, 2, 115
- 6) 武田 弘 " (1966) 8, 2, 97
- 7) 松倉利通 " (1972) 14, 3, 98
- 8) 飯高洋一 bit (1971) 3, 7, 90
- 9) 飯高洋一, 岡田健二 bit (1971) 3, 9, 32
- 10) S. C. Kendrew, et al : Nature (1960) 185, 422
- 11) T. Matsumoto, M. Tokonami, N. Morimoto ; Collected Abstracts of 9th I. U. Cr. Congress (1972), 71
- 12) 桜井敏雄編 「結晶解析ユニバーサル・プログラム・システム」〔I〕日本結晶学会(1969)
「 " " 〔II〕 " (1969)
- 13) 例えば東大用 東大計算センター・ニュース(1973) 5, 4, 17
- 14) 例えば京大用 庄山茂, 大崎健次, 日本結晶学会誌(1972) 14, 152
石塚和夫, 真崎規夫, 京大広報(1973) 6, 2
名大用 田仲二郎, 佐々木教祐, 名大連報(1972) 17
(1973) 24
CDC-3600/ 6600用(CRCセンチュリー・リサーチKK), CDCライブラリー
- 15) C. K. Johnson ORTEP, ORNL-3794, UC-4 -Chem, TID-4500 Oakridge Natl. Lab (1965)
- 16) E. F. Meyer, T. V. Willoughby ; Collected Abstracts of 9th I.U. Cr. Congress (1972) 253
T. V. Willoughby, E. F. Meyer ; " " (1972) 254
- 17) 第9回国際結晶学会議持集号, 日本結晶学会誌(1973) 15, 1

— 研 究 —

χ^2 -Minimizationの方法とその応用例(その2)

教養部 岩尾秀嶺・センター車古正樹

先号(Vol 2, No 3, p 17, 1973)で、これから述べる例題の問題の所在を明らかにしたので、この号では、具体的な計算方法と、その結果について、出きるだけ計算機利用者の指針に

なるような書き方をしよう。¹⁾

吾々の $\pi^- p \rightarrow \pi^+ n$ に対する χ^2 は、300点の t_k ($k = 1, \dots, 300$) に対して、実験誤差も含めて与えられている(素粒子反応のこのような実験は、Counter 実験と呼ばれるもので、実験の統計誤差は、例えばFeynman Lecture, Vol.1, 第6章確率(Addison-Wesley, 1969)の方法で与えられる)。

理論式は複雑であるから省略させていただく。この式は $n=14$ 々のパラメーターによって規定される。これらのパラメーターに対する出発値として各々に対して $n(n+1)=14 \times 15$ 個の一律の擬似乱数(0-1)を発生させ適当な範囲でパラメータズを決める。

Simplex法²⁾を適用するには、こうして決められた $n+1=15$ 組の初期値 (a_i, b_i, c_i, \dots) に対する15々の χ^2 から出発する。こうして求めた χ^2 は、パラメーター空間(14次元)上のある閉じた曲面を形成する。ここから先は、Simplex法によって、取り得る χ^2 の範囲をせばめて行く。この方法を採用する前に、理論式の主な部分の4-5個のパラメーターについては、直接法によって、大凡の見当がついていたので、Simplex法に移ってから約200-300回の繰り返し操作で、 χ^2 の取り得る範囲(それらの最大値と最小値の差が最小値の1%位になるまで縮少する)がせばめられた。

次にこのように狭められた範囲のパラメーターから χ^2 を更に小さくするようなパラメーターを求めるに当って、Marquardt法²⁾が適用された。この方法で安定した χ^2 (χ^2 が minimum における変化量がその値の $1/1000$ 乃至 $1/10000$ に当る)の値に達するのに更に数回のくりかえし計算が必要である。尚Marquardt法で χ^2 が安定しない解は捨てられる(擬似の minimum であった)。

吾々は、以上の擬似乱数、Simplex法、Marquardt法及び x-y plotter で計算結果を示すまでを、計算時間を出きるだけ少なくするような仕方ですべてのプログラムしてある。

吾々の方法は更に弾性散乱 ($\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p$) に応用する事を、この一連の仕事の目的としている。ここに上げた例題は余りに複雑過ぎて、具体的にFlow chartを含めた計算例(少数のパラメーターで、実験誤差が分かっている場合又は誤差の測定は為されていない例等)は、次号で掲載させていただく事にします。

- 1) 吾々の2年越しの研究結果は、今論文をまとめている最中で、何れProgress of Theoretical Physics, (基礎物理学研究所発行)という欧文の雑誌に発表する予定である。若し、もっと詳しい結果をお知りになりたい方は、Preprint も作りますので、著者等に請求して下さい。

- 2) J. Kowalik and M. R. Osborne, Methods for Unconstrained Optimization problems (American Elsevier, 1968.)

山本善之、小山健夫訳、非線型最適化問題(培風館)、尚、 χ^2 -test の分かり易い解説が小柳義夫、" χ^2 -fitの理論と実際、" と題して、日本物理学会誌Vol.28 (1973)、18にのっている。

測定値から未知パラメーターを決定する方法(I)

—— パラメーターに関して非線形な方程式の場合 ——

理学部 須原正彦・村田重男

§ 1. 測定の次に来るもの

我々は、応々にして苦勞して物理測定実験により得た物理量そのものもさることながら、例えば圧力、温度その他種々の量の関数として物理量が求まった場合、その関数中のパラメーター