A. 【行列】 $A=\left(egin{array}{cc} 2 & 1 \ 0 & 1 \end{array}
ight)$ の時、 A^n を求めよ。

 $|A - \lambda E| = 0$ を解いて、固有値 λ を求める。

$$|A - \lambda E| = \begin{vmatrix} 2 - \lambda & 1 \\ 0 & 1 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

これを展開すると、 $(2-\lambda)(1-\lambda)=0$ だから、固有値は $\lambda=1,2$ 。

もし
$$\lambda = 1$$
 ならば、 $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$

これを解くとx = -y と求まるので、固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ とする。

もし
$$\lambda=2$$
 ならば、 $\left(egin{array}{cc} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{array} \right) \left(egin{array}{c} x \\ y \end{array} \right)=2 \left(egin{array}{c} x \\ y \end{array} \right)$

これを解くとx = 1, y = 0と求まるので、固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ とする。

この2つの固有ベクトルを並べて作った行列 $X=\left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{array}\right)$ で、Aを挟むと、

 $X^{-1}AX = A'$ は対角行列になる。A' の対角項は固有値に一致する。

$$A' = \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{array}\right)$$

 $X^{-1}AX = A'$ の両辺をn乗し、 $X \ge X^{-1}$ を両側から掛けると、

$$A^{n} = XA^{\prime n}X^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1^{n} & 0 \\ 0 & 2^{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 2^{n} & 2^{n} - 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

採点基準: 固有値→対角化の流れができていれば2点、固有値行列が求まれば+1点、解が得られれば+2点。

補習問題: 上の手順を参考にして、 $\left(egin{array}{cc} 1 & -1 \ 2 & 4 \end{array}
ight)^n$ を求めよ。

- B. 【数値計算】2つのうち片方を解答せよ。
 - 1. 関数電卓で、1を入力してから、30回以上cosボタンを連打すると、徐々にある値(約0.74)に収束する。この値を、同じく1からはじめてNewton-Raphson法で小数点以下6桁まで求めるには、何回繰り返す必要があるかを答えよ。

 $\cos x = 1$ である。 $\cos x = 1$ である。 $\cos x = 1$ を次々に計算して、その収束する値を探 すことにほかならない。収束した値を x_∞ と書けば、 $x_\infty = \cos x_\infty$ が成りたつ。つ まり、 $x_\infty - \cos x_\infty = 0$ である。

ところで、Newton-Raphson法は、f(x)=0をみたす根xを求める計算手法なので、 $f(x)=x-\cos x=0$ の根を求めると、 x_{∞} が得られる。

f(x)をxで微分すると、f'(x)=1+\sin xとなり、Newton-Raphson法の漸化式は

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

 $= x_i - \frac{x_i - \cos x_i}{1 + \sin x_i}$

 $x_0 = 1$ としてこの漸化式を次々に計算すると、

 $x_1 = 0.75036386784$

 $x_2 = 0.739112890911$

 $x_3 = 0.739085133385$

 $x_4 = 0.739085133215$

4回目で小数点以下6桁が変化しなくなったので、6桁の精度で計算したいなら、3回繰り返せば十分である。このように、Newton-Raphson法の収束は非常に早い。

採点基準: 解くべき方程式が導ければ3点、回数が求まれば+2点。

2. $\ln(1+x)$ をマクローリン展開し、その結果を使って、定積分 $f(x)=\int_0^x \ln(1+t)\mathrm{d}t$ をx で級数展開せよ。

$$g(x) = \ln(1+x)$$
 とすると、 $g'(x) = \frac{1}{1+x}$ 、 $g''(x) = -\frac{1}{(1+x)^2}$ 、
$$g'''(x) = 2\frac{1}{(1+x)^3} \cdots$$
 となるので、
$$g(x) = g(0) + \frac{xg'(0)}{1!} + \frac{x^2g''(0)}{2!} + \frac{x^3g'''(0)}{3!} + \cdots$$
$$= x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \cdots - (-1)^n \frac{x^n}{n} \cdots$$
 と展開できる。

【方法1】上で展開した多項式を、定積分すると、

$$\int_0^x g(t)dt = \int_0^x \left(t - \frac{t^2}{2} + \frac{t^3}{3} - \frac{t^4}{4} \cdots - (-1)^n \frac{t^n}{n} \cdots \right) dt$$

$$= \left[\frac{t^2}{2} - \frac{t^3}{2 \cdot 3} + \frac{t^4}{3 \cdot 4} - \frac{t^5}{4 \cdot 5} \cdots - (-1)^n \frac{t^n}{(n-1)n} \cdots \right]_0^x$$

$$= \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{2 \cdot 3} + \frac{x^4}{3 \cdot 4} - \frac{x^5}{4 \cdot 5} \cdots - (-1)^n \frac{x^n}{(n-1)n} \cdots$$

【方法2】先に定積分を行う。

$$f(x) = \int_0^x \ln(1+t)dt$$

$$= [(1+t)\ln(1+t) - t]_0^x$$

$$= (1+x)\ln(1+x) - x = (1+x)g(x) - x$$

$$= (1+x)\left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \cdot \dots - (-1)^n \frac{x^n}{n} \cdot \dots\right) - x$$

$$= x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} \cdot \dots - (-1)^n \frac{x^n}{n} \cdot \dots + x^2 - \frac{x^3}{2} + \frac{x^4}{3} - \frac{x^5}{4} \cdot \dots - (-1)^n \frac{x^{n+1}}{n} \cdot \dots - x$$

$$= x^2 \left(1 - \frac{1}{2}\right) - x^3 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\right) + x^4 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4}\right) - x^5 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{5}\right) \cdot \dots$$

採点基準: $\ln(1+x)$ のマクローリン展開2点、 $f(x)=\int_0^x \ln(1+t)\mathrm{d}t$ の展開+3点。一般項まで書いていればさらに+。

補習問題: $\exp(1+x)$ をマクローリン展開して第4項まで求めよ。

C. 【偏微分】理想気体の状態方程式はpV=NkT だが、もっと一般的に書けばpV=f(T) と書ける。

f(T) の導関数(T での微分)をf'(T) とする時、次の3つの値の積 $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_p \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ を求めよ。

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V} = \left(\frac{\partial \frac{f(T)}{V}}{\partial T} \right)_{V}$$

$$= \frac{f'(T)}{V}$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p} = \left(\frac{\partial \frac{f(T)}{P}}{\partial T} \right)_{T}$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{p}{\partial T}\right)_p$$
$$= \frac{f'(T)}{p}$$

$$\begin{split} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T &= \left(\frac{\partial \frac{f(T)}{p}}{\partial p}\right)_T \\ &= -\frac{f(T)}{p^2} \end{split}$$

これらを組みあわせると、

$$-\frac{f'(T)}{V}\frac{p}{f'(T)}\frac{f(T)}{p^2} = -\frac{f(T)}{pV} = -1$$

(実は、状態方程式に限らず、独立な3変数の間で $\left(\frac{x}{y}\right)_z \left(\frac{y}{z}\right)_x \left(\frac{z}{x}\right)_y = -1$ が成りたつ)

採点基準: 理想気体の場合で解ければ2点、一般式で解ければ5点。

補習問題: ファンデルワールスの状態方程式

$$\left(p + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

に関して、 $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$ を求めよ。

D. 【その他】多面体は、面、辺(面を囲む線)、頂点(辺をつなぐ点)でできている。多面体の面の総数をF、辺の総数をE、頂点の総数をVで表すことにする。例えば、立方体はF=6, E=12, V=8である。また、立方体では、隣接する2つの面は1本の辺を共有し、隣接する3つの面は1つの頂点を共有している。(正八面体の場合は、4つの面が1つの頂点を共有している。)

さて、正12面体、メタンハイドレートのケージ構造、フラーレン、カーボンナノチューブ(両端がふさがっているもの)は、いずれも次のような性質を持っている。

1. 表面が5角形と6角形の面だけで覆われている。(5角形と6角形の個数を F_5 と F_6 とすると、

$$F_5 + F_6 = F$$
)

- 2. 隣接する2つの面は1本の辺を共有し、隣接する3つの面は1つの頂点を共有している。
- 3. オイラーの関係式F-E+V=2 が成り立つ。

この時、多面体の形に関係なく、必ず $F_5 = 12$ となることを示せ。

(ヒント: まず、EとVを F_5 と F_6 で表す。)

まず、(1)より

$$F_5 + F_6 = F$$

$$5F_5 + 6F_6 = 3V = 2E$$

$$F - E + V = 2$$

(3)を(1)に入れると、

$$F_5 + F_6 = 2 + E - V$$

6倍すると

$$6F_5 + 6F_6 = 12 + 6E - 6V$$

(2)を差し引くと

$$F_5 = 12 + 6E - 9V = 12$$

採点基準: 5点~

発展問題(解けた人用): 上の3つの条件をみたす13面体は作れないことを示せ。