U BASICの化学計算への応用

成沢 芳男*、宮前 雄一

立教大学理学部化学科 〒171 東京都豊島区西池袋3-34-1

(Received at February 8, 1993; Accepted at April 30, 1993)

U B A S I Cにより水の密度データ及びこれを変形して複雑にしたデータを用い、線形の最小2乗近似計算を行い、B A S I C及びF O R T R A Nの結果と比較検討した。その結果、N 8 8 B A S I Cでは12次元までしか計算できず、またM S - F O R T R A Nでは50次元まで計算できたが、精度的に問題があった。この点はS u n - F O R T R A Nで4倍精度の計算によって検討した。

Keywords: Application of UBASIC, Least squares method, Curve fitting, FORTRAN

I. 緒言 U B A S I Cの化学計算への応用について述べる。U B A S I Cは木田祐司¹⁾によって開発された、巨大整数計算のための多倍長計算用B A S I Cで、2600桁の整数計算および実数計算、更には1300桁の複素数計算と有理数計算ができる。その他に整数論のための関数や複素数をサポートした初等関数も扱えるので、数学の分野では種々応用されているが、残念ながら化学分野への応用はこれまでない。

化学計算においては現在最も広く利用されている言語はF O R T R A Nであり、それに代わる言語はまだ開発されていない。われわれはU B A S I CをF O R T R A Nに代わるものとして提案しようという考えではなく、個別の計算で非常に高精度を必要とする場合に、U B A S I Cが大変に威力を発揮することをいくつかの計算例によって示そうと思う。

U B A S I Cはパソコンで2500桁の π の計算をわずか6秒で実行する。これはこれまでの言語では達成できない能力で、今後その高精度演算機能は化学の色々な分野で応用されるであろう。 π の計算に限って考えれば、いわゆるスーパーコンピュータによる性能テストで日米欧の技術競争があって、数万桁の計算を正確に行うことが報告されている。しかしスーパーコンピュータは誰でも気軽に使えるものではなく、また π の計算をすることが目的ではない。化学計算でよく遭遇する問題は最小2乗近似であろう。例えば多項式近似により最小2乗を行なおうとすると多項式のべきに相当する次数のマトリックス計算をする必要が生じる。近似の次数を上げれば一般に精度は良くなると考えられるが、膨大な計算のため計算誤差が大きくなり、逆に精度は下がる。しかしこれまでそのような計算誤差を検証する高精度演算ソフトがなく、化学の分野で系統的な検討が行われてこなかった。本論文では最小2乗近似の計算誤差を検討するためにB A S I C、F O R T R A N及びU B A S I Cのプログラムを作成し、演算誤差について論じる。

II. 序論 著者はすでに水の密度の多項式近似と測容器の補正²⁾の論文で、BASICによる多項式近似の計算を行った。水の密度の温度依存は4℃で0.999973の最大値を取り、0℃から30.5℃の範囲で0.999841~0.995494の変化しかなく、比較的次數の小さい多項式で近似でき、なおかつ有効桁数も小数点以下7桁程度であるため当時の8ビットパソコンで速度、精度とも充分であった。しかし更に複雑な曲線を最小2乗近似するためには、速度、精度とも高度なものが要求され、一挙に32ビットパソコンによる高精度計算が必要となるが、高次元マトリックス計算においてどれだけの演算誤差が生じるのかと言う点に関しては全く研究例がない。そこでUBASICを用い、他言語による計算結果と比較し、その有用性について論じたい。

III. 理論

1. 最小2乗法^{3), 4)}

最小2乗近似は区間(a, b)で与えられた関数g(x)に対して、適当な条件を満足する関数の中から、2乗誤差

$$E = \int_a^b [g(x) - f(x)]^2 dx \quad (1-1)$$

を最小にするf(x)を選定する方法である。

区間(a, b)で定義された関数g(x)がその区間内に指定された選点{x_i}_{i=1}ⁿと、その上の値{g(x_i)}_{i=1}ⁿとのみによって与えられている場合、適当な条件を満足するある範囲の関数からf(x)を選んで、2乗誤差

$$E = \sum_{i=1}^n [g(x_i) - f(x_i)]^2 \quad (1-2)$$

を最小にすればよい。

f(x)がある既知関数系{f_k(x)}の1次結合として

$$f(x) = \sum_{k=1}^m a_k f_k(x) \quad (m \leq n) \quad (1-3)$$

で与えられる場合には、2乗誤差Eを最小にする条件方程式は

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n A_{ki} a_i &= B_k \quad (k=1, 2, \dots, m) \\ \sum_{i=1}^n f_k(x_i) f_j(x_i) &= A_{kj}, \quad \sum_{i=1}^n g(x_i) f_k(x_i) = B_k \end{aligned} \right\} \quad (1-4)$$

である。

2. Gaussの消去法^{5), 6), 7)}

一般にn元連立1次方程式

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (2-1)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \quad (2-2)$$

$$\dots \dots \dots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \quad (2-n)$$

を解くには、(2-1)の両辺をa₁₁で割る。

$$1x_1 + a_{12}'x_2 + \dots + a_{1n}'x_n = b_1'$$

ただし $a_{12}' = a_{12} / a_{11}$, $a_{1n}' = a_{1n} / a_{11}$, $b_1' = b_1 / a_{11}$ である。これに a_{21} を掛けて(2-2)から引く。

$$\begin{array}{r} a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ -) \quad a_{21}x_1 + a_{21}a_{12}'x_2 + \dots + a_{21}a_{1n}'x_n = a_{21}b_1' \\ \hline 0x_1 + a_{22}'x_2 + \dots + a_{2n}'x_n = b_2' \end{array} \quad (2-2')$$

ただし $a_{22}' = a_{22} - a_{21}a_{12}'$, $\dots$, $a_{2n}' = a_{2n} - a_{21}a_{1n}'$, $b_2' = b_2 - a_{21}b_1'$ である。以下同様にして

$$0x_1 + a_{n2}'x_2 + \dots + a_{nn}'x_n = b_n' \quad (2-n')$$

までを作る。一般に a_{ij}' および b_i' の計算式は

$$a_{ij}' = a_{ij} - a_{i1}a_{1j}', \quad b_i' = b_i - a_{i1}b_1'$$

である。

これで x_1 が消去された。

—————→ 消去の第1段

次に(2-2')を a_{22}' で割り、その a_{i2}' 倍を式(2-i')から引く ($i = 3, \dots, n$)。

その際の係数の計算式は

$$\begin{array}{ll} a_{2j}'' = a_{2j}' / a_{22}' & b_2'' = b_2' / a_{22}' \\ a_{ij}'' = a_{ij}' - a_{i2}'a_{2j}'' & b_i'' = b_i' - a_{i2}'b_2'' \end{array}$$

である ($j = 2, \dots, n$, また $i = 3, \dots, n$)。これで x_2 が消去される。

—————→ 消去の第2段

あとは同様にして第 k 段の計算は次のようになる。

$$\begin{aligned} a_{kj}^{(k)} &= a_{kj}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)} & b_k^{(k)} &= b_k^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)} \\ & & (j &= k, \dots, n) \\ a_{ij}^{(k)} &= a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k)} \\ & (i = k+1, \dots, n \text{ また } j = k, \dots, n) \\ b_i^{(k)} &= b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} b_k^{(k)} & (i &= k+1, \dots, n) \end{aligned}$$

ただし右肩の $^{(k-1)}$ は「第 $k-1$ 段の結果」を表す。このような処理を $k = n-1$ まで実行すれば、 $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$ は消去されて、 x_n だけを未知数とする方程式ができる。

$$x_n = b_n^{(n-1)} / a_{nn}^{(n-1)}$$

そして得られた結果を順に前の式に代入していけば、残りの未知数が全部求まる。

$$x_k = b_k^{(k)} - a_{kn}^{(k)} x_n - a_{k,n-1}^{(k)} x_{n-1} - \dots - a_{k,k+1}^{(k)} x_{k+1} \quad (k = n-1, \dots, 1)$$

3. 曲線のあてはめ⁸⁾

離散的な点で与えられたデータに滑らかな曲線をあてはめることを考える。データは

$$\left. \begin{array}{ll} \text{点} & x_1, x_2, \dots, x_n \\ \text{値} & y_1, y_2, \dots, y_n \end{array} \right\} \quad (3-1)$$

とし、これから近似式 $y = f(x)$ を作る事が目的である。一般に n 個のパラメータを含む関数 $f(x, p_1, p_2, \dots, p_n)$ を作り

$$f(x_i, p_1, p_2, \dots, p_n) = y_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3-2)$$

になるように $p_1, p_2, \dots, p_n$ を定めるのが1つの解答である。ここでは議論を簡単にするために、 f が $p_1, p_2, \dots, p_n$ に関して線形1次の形

$$f(x) = p_1 \phi_1(x) + p_2 \phi_2(x) + \dots + p_n \phi_n(x) \quad (3-3)$$

で表されるとする。UBASICによる数値計算の演算精度を論ずるので複雑な非線形モデルは考慮しない。このようにすれば(3-2)は

$$\begin{bmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \dots & \phi_n(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \dots & \phi_n(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \phi_2(x_n) & \dots & \phi_n(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (3-4)$$

という連立1次方程式になるから、これを解けば $p_1, \dots, p_n$ が求められる。

実験データ(3-1)は計測誤差を含むので、パラメーターの数を n より少なくして、(3-2)の代わりに

$$\sum_{i=1}^m \left\{ f(x_i, p_1, p_2, \dots, p_m) - y_i \right\}^2 \quad (3-5)$$

が最小という条件でパラメーターを決める方が、自然な結果が得られる。式(3-5)を満たす $p_1, \dots, p_n$ を求めるには

$$\frac{\partial}{\partial p_i} = \sum_{i=1}^m \left\{ f(x_i, p_1, p_2, \dots, p_m) - y_i \right\}^2 = 0 \quad (3-6)$$

($i = 1, \dots, m$)

を連立方程式として解けば良い。 $f(x)$ が式(3-3)の形の場合には、これは

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{m1} & c_{m2} & \dots & c_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ p_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix} \quad (3-7)$$

ただし

$$\left. \begin{aligned} c_{ij} &= \sum_{k=1}^m \phi_i(x_k) \phi_j(x_k) \\ d_i &= \sum_{k=1}^m \phi_i(x_k) y_k \end{aligned} \right\} \quad (3-8)$$

となる。式(3-7)は正規方程式と呼ばれる。

IV. 計算 計算に用いたBASIC及びFORTRANのプログラムは水の密度を求める多項式近似の計算に用いたもの²⁾を一部修正して用いた。BASICは高精度演算を、FORTRANはMS-FORTRANで倍精度演算、Sun-FORTRANで4倍精度演算を行った。UBASICはBASICプログラムを改良して用いた。

0℃から30.5℃まで0.5℃刻みの水の密度データ²⁾を用いBASIC、FORTRAN及びUBASICプログラムによる各次元ごとの計算結果とデータとの差の2乗和を求めた。用いたパソコンは演算コプロセッサを内蔵したNEC PC9801RA及びPC9801FAであり、またFORTRAN計算はMS-FORTRAN Ver. 5.

1 及び Sun FORTRAN 1. 4 を用いてコンパイル及びリンクをして行なった。

V. 結果と考察 BASIC、FORTRAN 及び UBASIC プログラムによる各次元ごとの計算結果と水の密度データとの差の 2 乗和を計算した。0℃から 30. 5℃までの水の密度は変化が小さく、5 次の多項式で近似すれば十分であって、水の密度データの最適化では各プログラムの差は顕著に示されない。そこで 0℃から 30. 5℃まで 0.5℃刻みの 62 々のデータを複雑な変化のあるものに変え、より高次の多項式でなければ近似できないようにして各プログラム相互の差異を検討した。すなわち温度を x 、密度を y とし、新しい縦軸の値を Y とする。プログラムの内容を変えずにデータだけを変更し、また計算結果をグラフィック表示する関係から次式

$$Y = 0.80y + \sin x \times 0.0003 + 0.199 \quad (A)$$

を計算して、水の密度のデータと同様に x の値が 0 から 30. 5 まで 0.5 刻みで 62 々のデータ点を持つデータファイルを作成し、 x と Y の関係曲線に最もよくあてはまる多項式近似を行った。各プログラムによる水の密度データおよび (A) 式のデータについての誤差の 2 乗和を計算し、結果を Table 1 および 2 に示す。ただし BASIC の計算は Sun-FORTRAN 及び UBASIC のものと 12 次元まで全く同じであったが、13 次元以降は OVERFLOW のメッセージが表示され計算不能になったので、表には示さなかった。表中の DIMENSION (次元) はマトリックスの次元を示し、多項式の最高べき数はこれより 1 だけ減じたものである。表から明かな通り UBASIC は多倍長計算ソフトの特長を示し、いずれのデータでも 50 次元まで計算誤差が漸減した。51 次元以上の計算は実行していないが、次元数の限界はコンピュータのメモリ環境によって異なり、UBASIC の限界ではない。

UBASIC について (A) 式のデータを 10 次元及び 20 次元で近似したときの最適化の状況を Fig. 1 に示す。10 次元では曲線のあてはめはかなり不満足であるが、20 次元では最適化はかなり満足すべきものであった。

Table 1 の FORTRAN 及び UBASIC の誤差の 2 乗和を次元に対してプロットし、水の密度に対する結果を Fig. 3 (a) に、(A) 式に対する結果を Fig. 3 (b) に示す。Fig. 3 (a) の結果が示す通り、比較的 low 次元で多項式近似できる場合は各プログラムによる差は顕著に現れない。ただし MS-FORTRAN の場合は 30 次元と 39 次元のところに特異的に精度が悪くなる場所があるが、この点に関しては後に議論する。Fig. 3 (b) の結果は MS-FORTRAN も UBASIC や Sun-FORTRAN と同じく 11 次元までは全く同じであるが、12 次元以降は誤差が減少しないし、バラツキがひどい。これは MS-FORTRAN が DOUBLE PRECISION 型の計算をするために、精度的に適さないことを示す。なお (A) 式のデータについて UBASIC 及び Sun-FORTRAN の誤差のカーブは単調減少ではなく、階段状になったが、データが複雑になったため最適化するのにより高次の多項式近似が必要であることを示している。

なお Fig. 3 (a) 及び (b) の MS-FORTRAN の誤差の 2 乗和が 30 次元と 39 次元で特異的に大きくなることに関して原因は明かでないが、理由はいくつか考えられる。即ち 1: パソコンを用いていること、2: 演算コプロセッサを使っていること、3: MS-

F O R T R A N のコンパイラ及びリンカーを使っていること及び 4 : プログラムが正しく書かれていないこと。そこで Ethernet を通して P C 9 8 0 1 F A を富士通 S 4 / 4 7 0 ワークステーションにアクセスし、Allied Telesis の通信ソフト TCP/IP を用いてプログラムおよびデータを転送し、ワークステーション上で各次元毎の水の密度データ及び (A) 式に対する誤差の 2 乗和を計算した。なお実数計算はすべて QUADRUPLE PRECISION 型で行った。Fig. 3 から明かなように、M S - F O R T R A N は DOUBLE PRECISION 型で、精度上問題があったが、ワークステーションによる QUADRUPLE PRECISION の計算ではこの点が改善された。従って、M S - F O R T R A N の計算結果に異常が生じるのは上記 4 項のプログラムが正しく書かれていないことであるという理由は除かれる。また上記 1 ~ 3 項は 1 つに纏めることができ、パソコンによる倍精度演算では精度上問題があることを示しており、それ以上原因を明らかにするには M S - F O R T R A N の計算過程を詳細に検討する必要がある。それは今回の U B A S I C に関する性能検査の問題ではないので、これ以上の議論はしない。

再び Fig. 1 の話に戻って、Fig. 1 のグラフは U B A S I C で計算した結果ではあるが、Table 2 より 1 次元から 2 3 次元の範囲においては U B A S I C と S u n - F O R T R A N の計算結果は同じであるので、この 1 0 次元と 2 0 次元についての結果を表したグラフは、もし S u n - F O R T R A N で計算した結果を同様にグラフ表示しても同じものが得られると言える。すなわち、(A) 式のデータでは U B A S I C と S u n - F O R T R A N の間の顕著な差はグラフ上では見られない。しかしながら、(A) 式のデータでは 2 0 次元でほぼ満足な近似が出来ているが、S u n - F O R T R A N と U B A S I C が同じ誤差の 2 乗和を与えているのは 2 3 次元までであり、より複雑なデータを用いれば精度の差が明らかになると考え、水の密度のデータを (A) 式より更に複雑にした次式

$$Y = 0.80y + \sin 2x \times 0.0003 + 0.199 \quad (B)$$

を計算して、(A) 式のデータと同様に 6 2 ヶのデータ点を持つデータファイルを作成し、M S - F O R T R A N、S u n - F O R T R A N、および U B A S I C の 3 種類の言語で多項式近似および誤差の 2 乗和の計算を行い、結果を Table 3 に、またこれらの次元に対するプロットを Fig. 4 に示す。Fig. 4 より明かなように、(B) 式のデータを用いた場合には、U B A S I C で計算した誤差の 2 乗和は 2 7 次元から急激に減少しているが、S u n - F O R T R A N の結果はあたかも Fig. 3 (b) の M S - F O R T R A N のような、誤差の 2 乗和が減少しないバラツキのひどい結果となった。

U B A S I C について (B) 式のデータを 2 0 次元及び 3 5 次元で近似したときの最適化の状況を Fig. 2 に示す。(B) 式のデータでは、2 0 次元では満足な曲線のあてはめができていないが、3 5 次元ではかなり満足な結果が得られた。S u n - F O R T R A N で U B A S I C と同じ結果が出せる限界が 2 3 次元であり、Fig. 2 の 2 0 次元の近似曲線はほぼ S u n - F O R T R A N プログラムの近似できる限界に相当するので、このグラフからも U B A S I C の精度的な優秀性が確認できた。

従来、誤差の 2 乗和を計算して評価をするための高精度計算プログラムがなかったので、結果を比較することができなかったが、今回 U B A S I C を用いて、広く使われている基本的な言語の計算精度を論じることができた。

Table 1 水の密度データ使用時の誤差の2乗和

DIMENSION	U BASIC	Sun-FORTRAN	MS-FORTRAN
1	1.185×10^{-4}	1.185×10^{-4}	1.185×10^{-4}
2	1.140×10^{-5}	1.140×10^{-5}	1.140×10^{-5}
3	4.674×10^{-8}	4.674×10^{-8}	4.674×10^{-8}
4	4.574×10^{-10}	4.574×10^{-10}	4.574×10^{-10}
5	1.307×10^{-11}	1.307×10^{-11}	1.307×10^{-11}
6	6.930×10^{-12}	6.930×10^{-12}	6.930×10^{-12}
7	6.832×10^{-12}	6.832×10^{-12}	6.832×10^{-12}
8	6.784×10^{-12}	6.784×10^{-12}	6.784×10^{-12}
9	6.576×10^{-12}	6.576×10^{-12}	6.576×10^{-12}
1 0	6.456×10^{-12}	6.456×10^{-12}	6.456×10^{-12}
1 1	6.228×10^{-12}	6.228×10^{-12}	6.228×10^{-12}
1 2	6.220×10^{-12}	6.220×10^{-12}	6.220×10^{-12}
1 3	6.127×10^{-12}	6.127×10^{-12}	6.574×10^{-12}
1 4	6.046×10^{-12}	6.046×10^{-12}	6.105×10^{-12}
1 5	5.976×10^{-12}	5.976×10^{-12}	6.068×10^{-12}
1 6	5.504×10^{-12}	5.504×10^{-12}	6.083×10^{-12}
1 7	4.985×10^{-12}	4.985×10^{-12}	6.073×10^{-12}
1 8	4.974×10^{-12}	4.974×10^{-12}	6.072×10^{-12}
1 9	4.367×10^{-12}	4.367×10^{-12}	6.069×10^{-12}
2 0	4.340×10^{-12}	4.340×10^{-12}	6.079×10^{-12}
2 1	4.340×10^{-12}	4.340×10^{-12}	6.069×10^{-12}
2 2	4.227×10^{-12}	4.227×10^{-12}	6.071×10^{-12}
2 3	4.067×10^{-12}	4.067×10^{-12}	6.069×10^{-12}
2 4	3.696×10^{-12}	3.700×10^{-12}	5.975×10^{-12}
2 5	3.695×10^{-12}	3.722×10^{-12}	5.947×10^{-12}
2 6	3.691×10^{-12}	3.702×10^{-12}	5.916×10^{-12}
2 7	3.568×10^{-12}	3.705×10^{-12}	5.673×10^{-12}
2 8	3.505×10^{-12}	3.847×10^{-12}	5.589×10^{-12}
2 9	3.493×10^{-12}	3.626×10^{-12}	5.654×10^{-12}
3 0	3.490×10^{-12}	3.713×10^{-12}	1.055×10^{-11}
3 1	2.569×10^{-12}	3.552×10^{-12}	6.903×10^{-12}
3 2	2.365×10^{-12}	3.522×10^{-12}	5.419×10^{-12}
3 3	2.322×10^{-12}	3.520×10^{-12}	5.369×10^{-12}
3 4	2.315×10^{-12}	3.571×10^{-12}	5.433×10^{-12}
3 5	2.310×10^{-12}	3.531×10^{-12}	5.441×10^{-12}
3 6	1.954×10^{-12}	3.530×10^{-12}	5.405×10^{-12}
3 7	1.868×10^{-12}	3.531×10^{-12}	5.482×10^{-12}
3 8	1.792×10^{-12}	3.298×10^{-12}	5.486×10^{-12}
3 9	1.790×10^{-12}	3.324×10^{-12}	1.963×10^{-11}
4 0	1.610×10^{-12}	2.959×10^{-12}	5.769×10^{-12}
4 1	1.311×10^{-12}	3.216×10^{-12}	5.279×10^{-12}
4 2	1.298×10^{-12}	2.924×10^{-12}	5.238×10^{-12}
4 3	1.295×10^{-12}	2.751×10^{-12}	5.239×10^{-12}
4 4	1.233×10^{-12}	2.871×10^{-12}	5.264×10^{-12}
4 5	1.190×10^{-12}	2.580×10^{-12}	5.374×10^{-12}
4 6	1.023×10^{-12}	2.567×10^{-12}	5.203×10^{-12}
4 7	6.394×10^{-13}	2.583×10^{-12}	5.221×10^{-12}
4 8	6.007×10^{-13}	2.589×10^{-12}	5.206×10^{-12}
4 9	5.530×10^{-13}	2.727×10^{-12}	5.182×10^{-12}
5 0	4.628×10^{-13}	2.703×10^{-12}	5.184×10^{-12}

Table 2 (A) 式によるデータ使用時の誤差の2乗和

DIMENSION	U BASIC	Sun-FORTRAN	MS-FORTRAN
1	8.243×10^{-5}	8.243×10^{-5}	8.243×10^{-5}
2	9.912×10^{-6}	9.912×10^{-6}	9.912×10^{-6}
3	2.663×10^{-6}	2.663×10^{-6}	2.663×10^{-6}
4	2.626×10^{-6}	2.626×10^{-6}	2.626×10^{-6}
5	2.615×10^{-6}	2.615×10^{-6}	2.615×10^{-6}
6	2.496×10^{-6}	2.496×10^{-6}	2.496×10^{-6}
7	2.441×10^{-6}	2.441×10^{-6}	2.441×10^{-6}
8	2.441×10^{-6}	2.441×10^{-6}	2.441×10^{-6}
9	2.373×10^{-6}	2.373×10^{-6}	2.373×10^{-6}
1 0	1.984×10^{-6}	1.984×10^{-6}	1.984×10^{-6}
1 1	1.974×10^{-6}	1.974×10^{-6}	1.974×10^{-6}
1 2	1.819×10^{-6}	1.819×10^{-6}	1.822×10^{-6}
1 3	1.648×10^{-6}	1.648×10^{-6}	2.137×10^{-6}
1 4	6.954×10^{-7}	6.954×10^{-7}	1.758×10^{-6}
1 5	5.137×10^{-7}	5.137×10^{-7}	6.168×10^{-7}
1 6	1.042×10^{-7}	1.042×10^{-7}	4.114×10^{-6}
1 7	6.290×10^{-8}	6.290×10^{-8}	7.690×10^{-7}
1 8	7.238×10^{-9}	7.238×10^{-9}	7.103×10^{-7}
1 9	3.700×10^{-9}	3.700×10^{-9}	5.967×10^{-7}
2 0	2.773×10^{-10}	2.773×10^{-10}	1.982×10^{-6}
2 1	1.207×10^{-10}	1.207×10^{-10}	4.601×10^{-7}
2 2	1.385×10^{-11}	1.385×10^{-11}	2.515×10^{-7}
2 3	6.539×10^{-12}	6.539×10^{-12}	3.169×10^{-7}
2 4	5.003×10^{-12}	5.035×10^{-12}	2.878×10^{-7}
2 5	4.998×10^{-12}	5.188×10^{-12}	3.671×10^{-7}
2 6	4.940×10^{-12}	4.997×10^{-12}	3.568×10^{-7}
2 7	4.940×10^{-12}	4.950×10^{-12}	1.801×10^{-7}
2 8	4.825×10^{-12}	4.940×10^{-12}	1.211×10^{-7}
2 9	4.806×10^{-12}	4.940×10^{-12}	1.276×10^{-7}
3 0	4.795×10^{-12}	4.945×10^{-12}	4.649×10^{-6}
3 1	4.236×10^{-12}	4.926×10^{-12}	1.985×10^{-7}
3 2	4.140×10^{-12}	4.908×10^{-12}	1.602×10^{-7}
3 3	4.114×10^{-12}	4.918×10^{-12}	1.284×10^{-7}
3 4	4.094×10^{-12}	5.487×10^{-12}	7.423×10^{-7}
3 5	3.986×10^{-12}	4.879×10^{-12}	1.710×10^{-7}
3 6	3.506×10^{-12}	4.748×10^{-12}	9.418×10^{-8}
3 7	3.346×10^{-12}	4.745×10^{-12}	8.470×10^{-8}
3 8	3.235×10^{-12}	4.664×10^{-12}	2.022×10^{-7}
3 9	3.112×10^{-12}	4.671×10^{-12}	8.183×10^{-6}
4 0	2.836×10^{-12}	4.502×10^{-12}	9.362×10^{-8}
4 1	2.421×10^{-12}	4.652×10^{-12}	2.268×10^{-7}
4 2	2.412×10^{-12}	4.489×10^{-12}	7.794×10^{-8}
4 3	2.292×10^{-12}	4.439×10^{-12}	8.665×10^{-8}
4 4	2.242×10^{-12}	4.537×10^{-12}	1.220×10^{-7}
4 5	2.054×10^{-12}	4.299×10^{-12}	1.802×10^{-7}
4 6	1.601×10^{-12}	4.298×10^{-12}	6.503×10^{-8}
4 7	1.252×10^{-12}	4.287×10^{-12}	4.180×10^{-8}
4 8	1.252×10^{-12}	4.345×10^{-12}	6.391×10^{-8}
4 9	1.099×10^{-12}	4.354×10^{-12}	1.001×10^{-7}
5 0	1.015×10^{-12}	4.364×10^{-12}	5.379×10^{-8}

Table 3 (B) 式によるデータ使用時の誤差の2乗和

DIMENSION	U BASIC	Sun-FORTRAN	MS-FORTRAN
1	7.961×10^{-6}	7.961×10^{-6}	7.961×10^{-6}
2	9.778×10^{-6}	9.778×10^{-6}	9.778×10^{-6}
3	2.756×10^{-6}	2.756×10^{-6}	2.756×10^{-6}
4	2.754×10^{-6}	2.754×10^{-6}	2.754×10^{-6}
5	2.754×10^{-6}	2.754×10^{-6}	2.754×10^{-6}
6	2.728×10^{-6}	2.728×10^{-6}	2.728×10^{-6}
7	2.726×10^{-6}	2.726×10^{-6}	2.726×10^{-6}
8	2.696×10^{-6}	2.696×10^{-6}	2.696×10^{-6}
9	2.669×10^{-6}	2.669×10^{-6}	2.669×10^{-6}
1 0	2.653×10^{-6}	2.653×10^{-6}	2.653×10^{-6}
1 1	2.573×10^{-6}	2.573×10^{-6}	2.573×10^{-6}
1 2	2.573×10^{-6}	2.573×10^{-6}	2.573×10^{-6}
1 3	2.478×10^{-6}	2.478×10^{-6}	2.890×10^{-6}
1 4	2.443×10^{-6}	2.443×10^{-6}	2.501×10^{-6}
1 5	2.427×10^{-6}	2.427×10^{-6}	2.455×10^{-6}
1 6	2.343×10^{-6}	2.343×10^{-6}	2.672×10^{-6}
1 7	2.289×10^{-6}	2.289×10^{-6}	2.485×10^{-6}
1 8	2.274×10^{-6}	2.274×10^{-6}	2.480×10^{-6}
1 9	2.092×10^{-6}	2.092×10^{-6}	2.486×10^{-6}
2 0	2.028×10^{-6}	2.028×10^{-6}	2.493×10^{-6}
2 1	2.027×10^{-6}	2.027×10^{-6}	2.522×10^{-6}
2 2	1.932×10^{-6}	1.932×10^{-6}	2.439×10^{-6}
2 3	1.668×10^{-6}	1.668×10^{-6}	2.535×10^{-6}
2 4	1.604×10^{-6}	1.606×10^{-6}	2.302×10^{-6}
2 5	1.603×10^{-6}	1.619×10^{-6}	2.424×10^{-6}
2 6	1.508×10^{-6}	1.615×10^{-6}	2.372×10^{-6}
2 7	1.098×10^{-6}	1.608×10^{-6}	2.290×10^{-6}
2 8	7.943×10^{-7}	2.144×10^{-6}	2.291×10^{-6}
2 9	3.626×10^{-7}	1.330×10^{-6}	2.313×10^{-6}
3 0	2.007×10^{-7}	1.333×10^{-6}	2.343×10^{-6}
3 1	6.161×10^{-6}	1.338×10^{-6}	2.466×10^{-6}
3 2	2.673×10^{-6}	1.331×10^{-6}	2.308×10^{-6}
3 3	5.785×10^{-6}	1.251×10^{-6}	2.262×10^{-6}
3 4	2.059×10^{-6}	2.473×10^{-6}	2.533×10^{-6}
3 5	3.596×10^{-10}	1.150×10^{-6}	2.261×10^{-6}
3 6	1.085×10^{-10}	9.053×10^{-7}	2.249×10^{-6}
3 7	2.025×10^{-11}	8.859×10^{-7}	2.224×10^{-6}
3 8	8.017×10^{-12}	2.942×10^{-7}	2.240×10^{-6}
3 9	3.277×10^{-12}	2.613×10^{-7}	9.083×10^{-6}
4 0	3.071×10^{-12}	2.856×10^{-7}	2.185×10^{-6}
4 1	1.815×10^{-12}	2.905×10^{-7}	2.208×10^{-6}
4 2	1.779×10^{-12}	2.979×10^{-7}	2.195×10^{-6}
4 3	1.725×10^{-12}	7.859×10^{-7}	2.192×10^{-6}
4 4	1.704×10^{-12}	9.139×10^{-7}	2.215×10^{-6}
4 5	1.443×10^{-12}	6.183×10^{-7}	2.152×10^{-6}
4 6	1.285×10^{-12}	9.862×10^{-7}	2.208×10^{-6}
4 7	1.054×10^{-12}	1.383×10^{-7}	2.181×10^{-6}
4 8	1.051×10^{-12}	1.019×10^{-6}	2.181×10^{-6}
4 9	7.527×10^{-13}	4.766×10^{-7}	2.171×10^{-6}
5 0	7.478×10^{-13}	5.467×10^{-7}	2.187×10^{-6}

Fig.1. Simulation curves with UBASIC program

■ : data points calculated from equation(A) (see text);
 : dotted lines are simulation curves calculated with
 10th and 20th dimension.

Fig.2. Relationships between error square sum and dimension for each program
 (a):water density data ; (b):equation(A)
 ○:UBASIC simulation ; □:MS-FORTRAN simulation
 △:Sun-FORTRAN simulation.

ERROR SQUARE SUM

Fig. 3. Relationships between error square sum and dimension for each program equation(B)
 ○:UBASIC simulation ; □:MS-FORTRAN simulation
 △:Sun-FORTRAN simulation.

Fig.4. Simulation curves with UBASIC program

■ :data points calculated from equation(B) (see text);

....:dotted lines are simulation curves calculated with
20th and 35th dimension.

REFERENCES

- 1) 木田祐司, "UBASIC 86 Ver8.1 ユーザーズマニュアル", 日本評論社 (1990).
- 2) 成澤芳男・中埜邦夫, 分析化学, 32, T25 (1982).
- 3) 数学ハンドブック編集委員会編, "理工学のための数学ハンドブック", p. 326, 丸善 (1960).
- 4) 一松 信・竹之内脩編, "改訂増補新数学事典", 増補p. 41, 大阪書籍 (1979).
- 5) 戸川隼人著, "計算機のための数値計算", p. 18, サイエンス社 (1976).
- 6) 戸川隼人著, "BASICによる線形代数", p. 46, 共立出版 (1985).
- 7) 矢野健太郎監修, 宮本敏雄訳編, "数学ハンドブック", p. 834, 森北出版 (1985).
(I.N. プロシュテイン・K.A. セメンジャーエフ原著、G. グロッシェ・V. ツィーグラ
・D. ツィーグラ編集)
- 8) Ref. 5, p. 39.
- 9) K. Schäfer, G. Beggerow, "Landolt-Börnstein", 6Aufl, II Band, 1Tl, s. 36 (1971),
(Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York).

Application of U BASIC to chemical calculations

Yoshio NARUSAWA* and Yuichi MIYAMAE

Department of Chemistry, College of Science, Rikkyo(St. Paul's) University
3-34-1, Nishi-Ikebukuro, Toshima-ku, Tokyo 171

We have examined the differences of computational errors and abilities of UBASIC, N₂BASIC and FORTRAN's curve-fitting programs by calculating the least squares method. As a result, the maximum orders of polynomials possible for N₂BASIC and MS-FORTRAN was 11th, and for Sun-FORTRAN was 23rd. UBASIC could calculate up to 50th. Calculation of FORTRAN programs made clear to be meaningless in the higher order of polynomials, because of precisional errors.