化学情報処理概論プログラミング問題

問題 1　for 課題 2

実数係数a，b，cを読み込んで二次方程式$ax^2 + bx + c = 0$ $(a \neq 0)$を解くプログラムを作れ．なお，解が複素数の場合にも対応せよ．

問題 2　for 課題 2

正の整数 m, n（$m < n$）を読み込んで，mからnまでの整数の和 $m + (m+1) + \cdots + (n-1) + n$ を求め，結果が公式$(m+n)(n-m+1)/2$ によって計算した結果と一致することを確かめるプログラムを作れ．

問題 3　for 課題 2

3 行 3 列の行列に対する行列式の値を計算するプログラムを作れ．

問題 4　for 課題 2

5 桁以下の正の整数が 100 個あるとする．これらをキーボードから入力するとき，0, 1, …, 9 のキーがおのおの何回押されたかを調べるプログラムを作れ．

問題 5　for 課題 3

100 個の実数を読み込み，最大値，及びそれが何番目に現れたかを出力するプログラムを作れ．ただし，最大値が複数回出現する場合も考慮せよ．

問題 6　for 課題 3

10000 円札，5000 円札，2000 円札，1000 円札，500 円硬貨，100 円硬貨，50 円硬貨，10 円硬貨，5 円硬貨，1 円硬貨のそれぞれが十分に用意されているとき，23751 円をもっとも少ない数の通貨で支払うには，10000 円札 2 枚，2000 円札 1 枚，1000 円札 1 枚，500 円硬貨 1 個，100 円硬貨 2 個，50 円硬貨 1 個，1 円硬貨 1 個を出せばよい．支払い額を読み込み，その額をもっとも少ない数の通貨で支払うにはどうすればよいかを教えるプログラムを作れ．

問題 7　for 課題 3

l 行 m 列の行列と m 行 n 列の行列を読み込み，これらの積（l 行 n 列の行列）を計算するプログラムを作れ．ただし，MATMUL などの組み込み関数は使用しないこと．

問題 8　for 課題 3

以下のヒントに従って，モンテカルロ法を使って円周率を求めるプログラムを作れ．生成する点の数を入力とする．
［ヒント］0 から 1 までの 2 つの乱数x，yから点(x, y)を生成する．この操作を n 回繰り返して，生成した点が原点から距離 1 以内の点であった場合の数を m とする．このとき$4m/n$は円周率の近似値となる．これはモンテカルロ法により 1 辺の長さが 1 の正方形と半径 1 の四分円の面積比を求めていることに相当する．様々な n に対して求まった円周率の誤差について調査してみるとよい．　具体的に
乱数には組み込みサブルーチン RANDOM_NUMBER などを利用するとよい．

問題 9　for 課題 3

$x(1+x)=a$ を満足する x の値（$0<x<1$の範囲内のもの）を小数以下 4 桁まで求めたい．ただし，a は 2 より小さい正の実数で，データとして読み込むものとする．次のような考え方によるプログラムを作れ．ただし、別途に 2 次方程式の解の公式により答えを計算しその結果と比較するプログラムとせよ．
［ヒント］左辺の関数は，x が 0 から 1 まで増加するのにともない，0 から 2 まで単調に増加する関数である．よって，上の方程式を満足する x の値が 0 と 1 の間に存在することは明らかである．最初 $x_{\rm min} = 0, x_{\rm max} = 1$ ととる．$x_{\rm min}$ は解 x の下限，すなわち求めるべき答えはこれより上にあることを意味する．同様に $x_{\rm max}$ は x の上限を意味する．$x_{\rm test}=(x_{\rm min}+x_{\rm max})/2$を計算しこれを左辺の x に代入する．このとき左辺の値が a 以上(未満)であれば，$x_{\rm test}$ を $x_{\rm max}$ ($x_{\rm min}$) に代入する．この手続きを繰り返すと $x_{\rm min}$ と $x_{\rm max}$ の差はだんだんゼロに近づいてゆく．この差が十分小さく(たとえばこの場合は 0.00001 より小さく)なったところで繰り返しを打ち切ればよい．

問題 10　for 課題 3

n 原子分子を構成する各原子の質量 m_i と座標(x_i, y_i, z_i)を読み込み，質量中心の座標を計算するプログラムを作れ．ただし原子数は 100 以下としてよい．

問題 11　for 課題 4

ある国の所得税のシステムは次のようになっている．

年間所得が 2,500 ドル未満は課税しない．

2,500 ドル以上	5,000 ドル未満は，	控除額 2,500 ドル，	税率 10%	
5,000 ドル以上	10,000 ドル未満は，	控除額 3,750 ドル，	税率 20%	
10,000 ドル以上	20,000 ドル未満は，	控除額 5,833 ドル，	税率 30%	
20,000 ドル以上	40,000 ドル未満は，	控除額 9,375 ドル，	税率 40%	
40,000 ドル以上	80,000 ドル未満は，	控除額 15,500 ドル，	税率 50%	
80,000 ドル以上	は，	控除額 26,250 ドル，	税率 60%である．	

年間所得をデータとして読み込み課税額を計算するプログラムを作れ．ただし，課税額は次式によって計算し，1 ドル未満は切り捨てるものとする．

課税額=（年間所得ー控除額）×税率

問題 12　for 課題 4

正則な 2 次正方行列の固有値，規格化された固有ベクトルを求めるプログラムを作れ．

問題 13　for 課題 4

0 以上 1 未満の多数の実数を読み込み，0 以上 0.1 未満, 0.1 以上 0.2 未満, 0.2 以上 0.3 未満, …の区間に入る個数を数えるプログラムを作れ．かつ各区間に入る個数を区間とともに表として出力するプログラムとせよ．ただし，実数の数は 100 以下としてよい．

問題 14　for 課題 4

四辺形 ABCD の面積を計算するプログラムを作れ．ただし，頂点 A, B, C, D の位置は，直交系を基準とするそれぞれの座標(x, y)で与えられるものとする．

［ヒント］四辺形 ABCD を 2 つの三角形に分割し，各三角形の面積をヘロンの公式

$$S = \sqrt{s(s-a)(s-b)(s-c)}$$

（ただし，a, b, c は各辺の長さで，$s = (a+b+c)/2$）により求め，それらの和として全体の面積を計算する．ただし，念のため，四辺形を三角形 ABC と ACD に分割した場合と ABD と BCD とに分割した場合の両方について計算するようにプログラムせよ．変な形の四辺形の場合（四辺形の内角のひとつが 180 度を越える場合）には，異なる答えが得られる．このときは小さい方の答えが正しい．

問題 15　for 課題 5

3 次元空間の N 個の点を考える．これらの位置を座標(x, y, z)の形で読み込み，2 点間の距離をすべて計算せよ．さらに，距離の小さい順に並べ替えて，座標とともに出力せよ．ただし，$N \leq 10$としてよい。

問題 16　for 課題 5

n 原子からなる分子を構成する各原子の質量 m_i と座標(x_i, y_i, z_i)と部分電荷 μ_iを読み込み，双極子モーメントを計算するプログラムを作れ．

問題 17　for 課題 5

n 次多項式$P_n(x)$は n-1 次多項式$Q_{n-1}(x)$とrを用いて次のようにあらわされる．

$$P_n(x) = (x - a)Q_{n-1}(x) + r$$

$P_n(x)$の各次数の係数と a を入力として、$Q_{n-1}(x)$の各次数の係数とrを計算するプログラムを作れ．ただし，$n \leq 10$としてよい．

問題 18　for 課題 5

ボウリングの得点を計算するプログラムを作れ．ただし，データとしては，最初に投球数、そのあとに各投球の直後に残っているピンの数を次の例のように与えるものとする．

18, 5, 1, 0, 2, 0, 3, 1, 0, 8, 0, 0, 3, 0, 0, 1, 0, 1

問題 19　for 課題 5

n 原子からなる平面分子を構成する各原子の質量 m_i と座標(x_i', y_i')を読み込み，主慣性モーメントを計算するプログラムを作れ．
［ヒント］まず質量中心の位置を計算し，これを原点とする座標系に平行移動する．移動後の座標を(x_i, y_i)とする．

$$I_{xx} = \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} m_i {y_i}^2 \qquad I_{yy} = \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} m_i {x_i}^2 \qquad I_{xy} = \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{n}} m_i x_i y_i$$

とおくと，主慣性モーメントの値は，2 次方程式

$$(I_{xx} - \lambda)\left(I_{yy} - \lambda\right) - {I_{xy}}^2 = 0$$

の 2 つの解，および，$\left(I_{xx} + I_{yy}\right)$である．

問題 20　for 課題 5

直交座標系 xyz において x, y, z の値がいずれも整数（負の整数およびゼロを含む）であるすべての点に原子が配置されているとする．任意の点の座標(x_0, y_0, z_0)と距離 d を読み込み，この点から d 以内にある原子の総数を数えるプログラムを作れ．ただし，点の座標と距離は実数とする．