

非数値計算メモ

1. 非数値計算

2. 言語の問題

3. 実例

3.1 三体問題

3.2 非線形回帰

3.3 IRA Query

日本アイエス・システムズ (株)

黒沢 俊雄.

§1 非数値計算

非数値計算の範囲は広いが、大別すると、

1. 数式処理
2. 論理式処理
3. 化学構造式処理
4. 言語処理
5. 図形処理
6. データのプログラミング処理

としよう。これらの分野は、それぞれ、一般のデータ処理や、技術計算にみられる数値計算程、一般のデータ処理への普及はみられず、特殊な分野では、実用的であるのみならず、重要な位置を占めている。

1, 2, 3 は、それぞれ式処理であり、1つがプログラムとして議論するのでも一方法と思うが、式の構造、性質、演算のしかたが、それぞれちがうので、別に議論することにした。

4は、コンパイラ、トランスレータを別にみられる。データプログラミングが言語処理には、かゝる。

6は、GPS、SIMSCRIPT、SL などのシステムシミュレーションのシステムや、PERT などのデータのプログラミングをとりあつかうシステム、回路や通信のネットワークの処理を広く

用いられている。また OS におけるジョブ・スタックの取扱い、ファイルを操作する データ・マネージャも 6 の応用である。

5 における図形情報のセグメンテーション、各セグメントの合成、組合せの方法も、他の非数値情報の処理と共通している。グラフィック・ディスプレイ・システムは、5 および 6 の機能が採用されている。

また論理式の応用として、IR のための条件式がある。効果的な IR コンプライムを作るためには、上平な検査条件の判定のアルゴリズムを考案せねばならない。電算機の論理回路は、論理式のものである。設計の自動化には、論理式の自動処理が必須である。

そして今度の研究会の主題としてある数式処理である。これらの分野に共通していることは、情報の構造の設定と構造を処理するアルゴリズムが主題であることである。

化学構造式の処理の例として 部分構造の検査システムがある。グラフの理論に基づいた応用例である。

§ 2. 言語の問題

Lisp などの非数値処理専用 の フォーミング言語があるが、これらの評価がしばしば問題になる。実用的であるか、どうかと ううことである。しかし ここで 実用の意味を つぎの 2 通に考えざる必要がある。

- 1° 計算時間が充分早く 実際の フォーミングが実行可能で フォーミングが容易なこと。
- 2° アルゴリズムの表現が形式的で、視覚的に充分認識し やすいこと。アルゴリズムの合目的的性のフェック のためのモデルは充分な事であること。

PL/I の コンパイラを PL/I の 言語で組んだ例や、論理設計のための フォーミングを、実際の フォーミングを目 的とせずに 高いレベルの言語で組んだ例、又 COBOL を ALGOL で組んだ例もある。

これらの例は、1° の意味において 実用とは言えない。しかし、教育、訓練の目的や、システムの仕様をあらわす、ドキュメンテーションとして 充分に立つ訳で、さうにアル ゴリズムの正とフェックには充分な立つものと思う。

Lisp は、形式的であり、アルゴリズムの論理を表現するに 適している。例えば、式の微分等 Lisp フォーミングは、微分規則を記号書にしたものになる。

§3 実例

3.1 原子核の3体問題

Rayleigh-Ritz 法によって、原子核の3体問題の固有波動関数をもとめる問題である。

$$\int \psi \cdot A \psi \, d\tau = \sum_{i,j} a_{ij} x_i y_j \quad \dots (1)$$

(1) の二次形式の係数を計算する問題であるか。

$$\psi(r_1, r_2, r_3) = \sum_i x_i \cdot \psi_i \quad \dots (2)$$

$$\psi_i = \prod_{j=1}^3 (e^{-\mu(r_j-D)} - e^{-\mu(r_j-D)}) \cdot p_i(r_1, r_2, r_3) \quad \dots (3)$$

ここで、 A は微分演算子を含む演算子である。

$$A \psi \quad \text{など}$$

$$\int \psi \cdot A \psi \, d\tau$$

を LISP, FORNAC, FORTRAN を用いて計算した。

詳細は、第9回2012年ラミンギンホジウムで報告済み。同報告書を参照された。

3.2 非線型回帰

いくつかの変数 x の関数 y の値を最小にするようなパラメータの値を決める問題である。すなわち、独立変数 $x = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ 、観測値 $y(x)$ の数値表を。

関数 $f(x, a)$ が記号で与えられる場合

$$\| f(x, a) - y(x) \| \quad \dots (1)$$

を最小にするようなパラメータ $a = (a_1, a_2, \dots, a_F)$

を決定することである。そこで

$$f(x, a) = \sum a_i f_i(x) \quad \dots (2)$$

$f_i(x)$ は記号のまま、有理関数、三角関数、指数関数など、FORTRAN でとりあつかえる初等関数を入力できる。

このプログラムでは f と y の一次導関数を計算する必要があるので、 f の微分とエバリュエーションは数式処理の技法をもちいた。

従来の非線形回帰の方法では、 f の微分と数値化の、サバールマンを準備して、メインプログラムと結びつける必要があったが、一般化されたプログラムによって、特殊なサバールマンをこの都度作成する必要を、わざわざわしむ作業から開放されるようになった。

さらに非線形回帰の問題は、ガウフ・ゲスローの二つの応用例である。数式であたえた関数が

うまくフィットするかどうかを CRT 上の曲線を見ながらめ^ることができる[。]

ライトポンで関数の形を修正したり、偏りの大きい観測値を削除しながら CRT 上の曲線を見、関数を決めつくことができる。

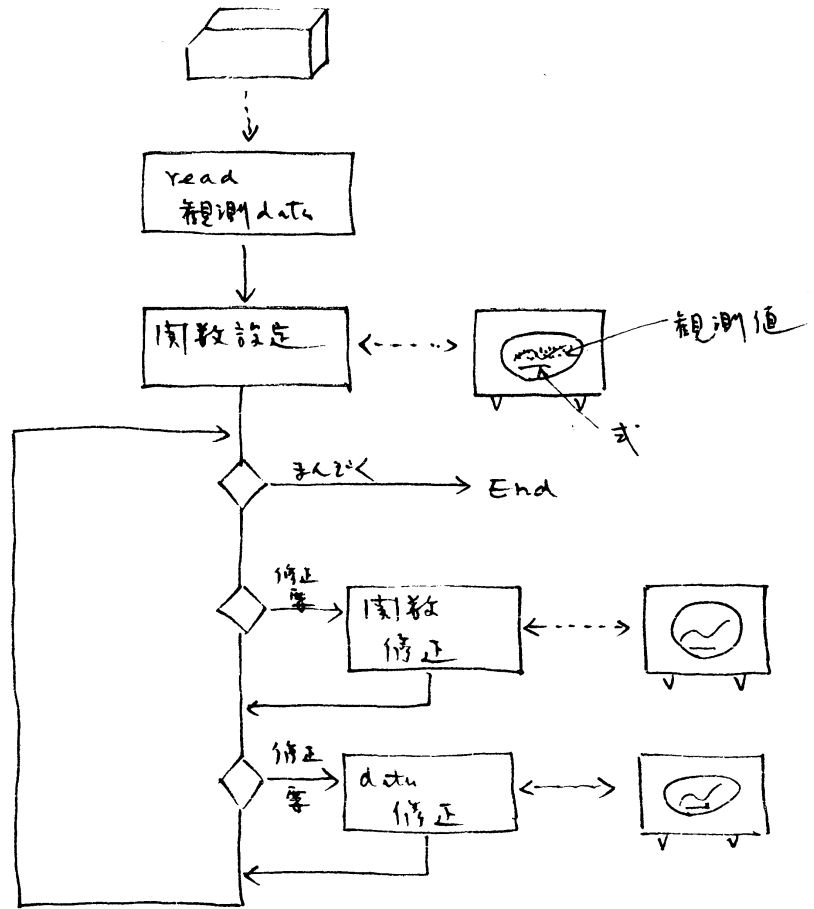


圖 1 非線形回歸圖

3.3 IRのQuery

IRのQueryは条件式ともいわれる。単位条件と論理演算子からなる論理式である。

たとえば、

$$x_1 \wedge \left[x_2 \wedge x_3 \wedge \overline{[x_4 \vee x_5]} \vee x_6 \wedge [x_7 \vee x_8] \right] \quad \dots (1)$$

の x_i ($i=1 \dots 8$) は 単位条件で 年齢 ≤ 20 、性別 = 男 とか、
key word DECISION があつ、それらの条件をあらわす。
= 条件にあつば $x_i = 1$ とあつ、あつてなかつば $x_i = 0$
の2値をもつ。また式(1)も2値の関数である。

Queryを処理するためには、まず x_i ($i=1, 2 \dots 8$) を
エバリュエートし、つぎに式の値を求めらる。

カッコの内がわから演算すればよいわけであるが、式をつま
のうに整理すれば演算も容易である。

$$\begin{aligned} x_4 \vee x_5 &\rightarrow p_1 \\ \overline{p_1} &\rightarrow p_2 \\ x_7 \vee x_8 &\rightarrow p_3 \\ x_2 \wedge x_3 \wedge p_2 &\rightarrow p_4 \\ x_6 \wedge p_3 &\rightarrow p_5 \\ p_4 \vee p_5 &\rightarrow p_6 \end{aligned}$$

$$x_1 \wedge p_6 \rightarrow y$$

\wedge (and), \vee (or), \neg (not) の演算サブルーチンが準備
 される。順次上記の演算を実行すれば、 y の値がえられる。

$y = 1$ ----- 合格

$y = 0$ ----- 選外。

である。これは論理回路のシミュレーションと同様
 である。

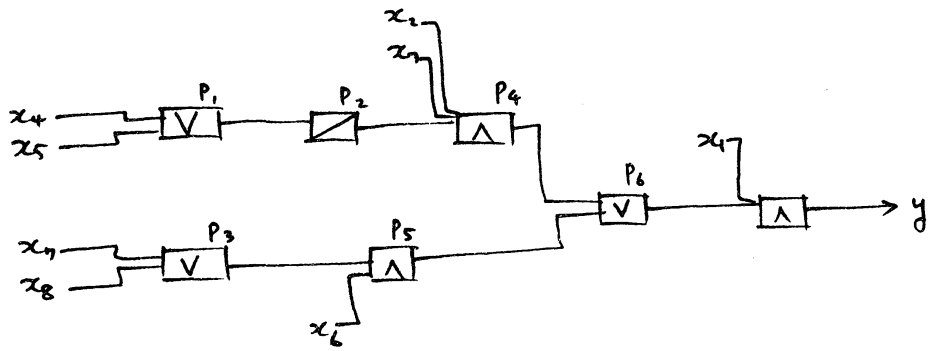


図2 Query の evaluation