

数値解析の工具箱

慶応義塾大学理工学部 野寺 隆

概要. 最近続々と現れる数理解析のソフトウェアは、一昔前のものと比較して驚くほど低価格で、そのクオリティも高い。そこで、最近話題を集めている物理数学の研究に役立つ、いくつかのソフトウェアについて紹介し、その特徴などを明らかにする。

1. はじめに

近年の計算機産業の発展は目ざましく、スーパーコンピュータのように驚くほど超高速計算を可能にしたものから、家庭で手軽に購入でき家族全員がゲームを楽しんだり、主婦が家庭で証券財テクを楽しむことが可能なファミコン(現在では、1 万円で千円程度のおつりがくる)にいたるまでその用途は多種多用だ。

ただ、ここで見逃してならないことは、従来、ミニコンと言われる計算機が行ってきた仕事が、Sun や News に代表されるワークステーションと呼ばれる小型計算機にとって代られようとしていることである。さらに、その価格は驚くほど安価で、近年では、100 万円を切るものも現れ始め、大学の研究室単位でも十分購入できるようになったことである。さらに、ワークステーションの利点は、ビットマップディスプレイとマウスを標準装備しており、ウインドーシステム(X-window, SunView など)と呼ばれるソフトウェアを使って、画面上に数枚のウインドーを開いて、いろいろな仕事を平行して行えるようになったことである。特に、Fig.1.1 において近年話題を集めている NeXT の画面を示したのだが、このようなビットマップディスプレイを使う利点は、キャラクター端末では表現することが不可能だった、複雑なグラフや図形を簡単に表示可能にしたことである。さらに、論文などを TeX を使って記述したときに、そのできあがりを見ることが出来るのである。

数値解析のソフトウェアは、時代とともに様々な影響を受け、いろいろな変革を受けてきた。近年、数値解析ソフトウェアのもっとも顕著な特徴は、

- (1) ほぼ、バカチョン式の取扱いができる。
- (2) 豊富なグラフィック機能を持つ。
- (3) 数式処理の機能を持つものがある。

のように述べる事ができる。ただし、数値計算も行え、その上に数式処理の機能を持ち、グラフィック機能を自由自在に駆使できるソフトウェアは限定される。

以下、最近の代表的な数値解析に利用できるソフトウェアについて述べることにする。

2. 数値解析に関連するソフトウェアいろいろ

現在、数値解析のソフトウェアにはいろいろな形態をとるものがあり、基本的にパブリックドメインで提供され、ほぼカートリッジテープの値段で手に入るものや、いくらのお金を払ってソフトウェア会社から購入するものがある。当然、パブリックドメインで提供されているソフトウェアは、ソースコードが提供されており、ほぼユーザが自分自身でソフトのメンテナンスを行わねばならない。EISPACK や LINPACK は、パブリックドメインで提供されているソフトウェアの代表と言ってよいであろう。また、これは米国の

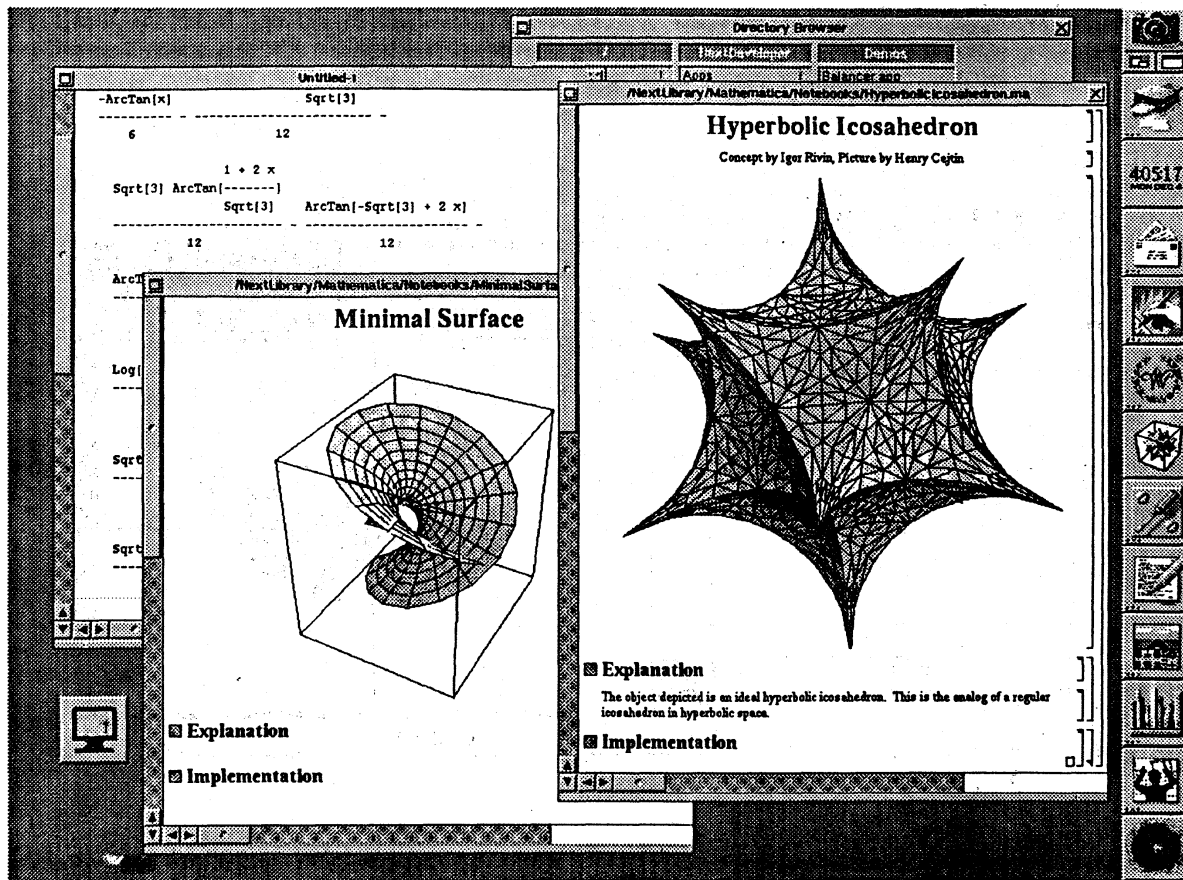


Fig.1.1 NeXT のウィンドウ

Netlib を通して、エレクトリックメールでユーザの希望するサブルーチンのコードを自動的に入手することが可能である。蛇足だが、J. Dongarra によって行われた最新のベンチマークテストのレポートが、今年の10月に発刊されている。

2.1 MATLAB

次に、LINPACK に関連したソフトウェアに、MATLAB がある。MATLAB は、会話型のシステムであり、計算機とユーザが相互に対話しながら計算を進めるものである。現在、MATLAB は、“Fast, Accurate, Reliable” を全面にして売り出しており、このソフトウェアは、下位の機種ではマッキントッシュや IBM-PC、AT、80386 ベースのマシン、上位の機種では Sun ワークステーション、Applo ワークステーション、さらに DEC Vax/VMS と Unix などでも利用可能である。日本にも代理店があり、購入することができる。このシステムは、

- (1) 行列計算
- (2) LINPACK と EISPACK の算法
- (3) Signal Processing
- (4) Linear Algebra Function
- (5) 2-D と 3-D のグラフィックス

と言うような機能を持ち、200 以上の関数を備えている。特に、このシステムの特徴として、数年前から、2

次元と3次元の図形表示機能を備えるようになった。システムの使い勝手はなかなかよいのだが、複雑な計算をすると計算精度に問題がある場合を指摘する人も多い。ソフトウェアのお値段は、数百ドルであるが、Macintosh用は、数十ドルのものがMATH WORKS, Inc. とは別の会社で売られている。Fig.2.1において、Macintosh用のMATLABのウィンドウを示した。

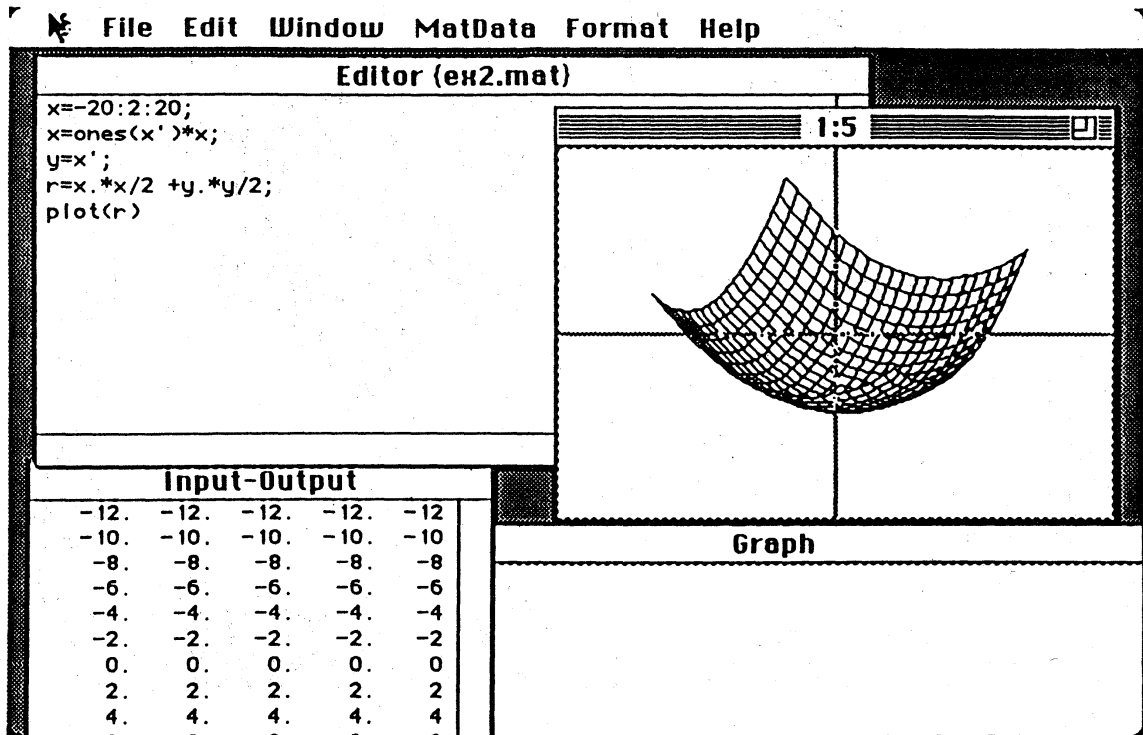


Fig.2.1 Macintosh用MATLABのウィンドウ

2.2 Mathematica™

現在、もっとも注目されているシステムの一つに、Stephen Wolfram と彼の仲間によって開発された Mathematica™ をあげることができる。これは、数値解析だけでなく、数理物理学の研究と教育を目指したものであり、数値計算、記号処理、さらには、図形処理を簡単な操作によって相互に行うことができるように工夫されたシステムである。

このシステムは、SMP を基本としているので、そのコマンド自体は MACSYMA のコマンドによく似ている。このシステムの特徴の一つは、数理物理学で必要とされる計算を、数値計算だけに頼ることなく、記号計算で行える所はそれを利用し、中間結果や最終結果をグラフィック処理して出力する、いわゆる視覚に訴える能力を兼ね備えている点にある。このシステムの出現により、最近では MACSYMA にも同様の機能の付加が考えられているようだ。このシステムと同様な目的で作られたソフトウェアに、Textronix 社の MathScribe (Fig.2.2 を参照) や MathSoft 社の MathStation (このシステムは、日本の代理店が大々的に宣伝を展開しているのだが、お値段は他のソフトウェアと比較して1桁違うように思われる) が上げられる。また、ごく最近では、Waterloo 大学で開発された MAPLE にもマイナーなグラフィック機能 (2-D の単純なグラフを描くことができる) を加えたシステムが登場している。Mathematica™ の数式処理能力は、MACSYMA

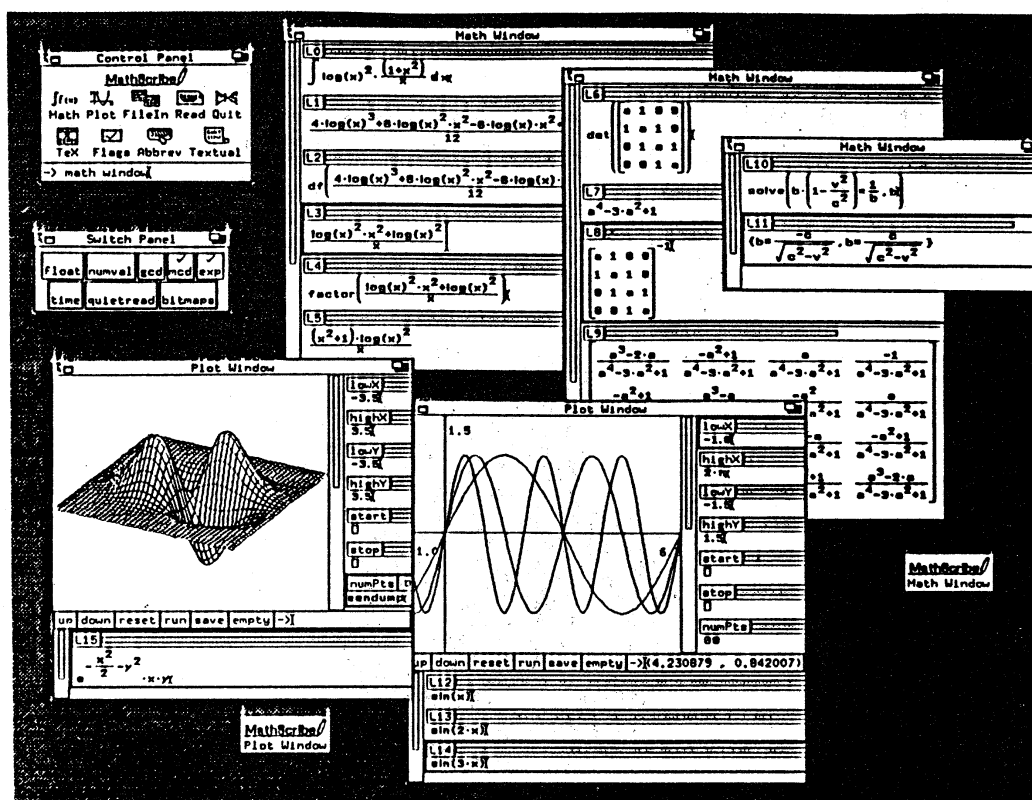


Fig.2.2 MathScribe のウィンドウ

のそれと比較すると一長一短があり単純には優劣がつけがたいように思われる。小生は他の数式処理システムの機能と比較して、Mathematica™ の数式処理能力はそれほどすばらしいものとは思わないが、価格の面で考えると、その優位差が歴然と現れるのではないか。一言でこの Mathematica™ を評価すると、クオリティは別ものと考えても、価格の面でかなり安く、さらに PostScript で出力する図形処理の能力を見ると、数理物理学を専攻している学生や研究者にとっては、つい手を出して購入したくなる代物である。すでに多くの計算機 (CRAY コンピュータからマッキントッシュまでの十数機種) で動くバージョンが販売されている。特に、Steven Jobs が開発した NeXT コンピュータには、これが標準でバンドルされている。

Mathematica™ の最大の特徴は、なんと言ってもユーザインタフェースが良くできており、マッキントッシュ用のものは、かなり使い勝手がよいし、help 機能も優れている。特に、notebook 機能は、マッキントッシュと NeXT コンピュータを除いて、他の機種には存在しない機能である。

この節の最後に、Mathematica™ のグラフィック機能を使って描いたチューブ (Fig.2.3 を参照) を取り上げることにする。10年前には、このチューブを描くのに数千行の Fortran プログラムを書く必要があつたのだが、Mathematica™ を使えば、基本的にはデータを生成するプログラムを除いて、1行でこの図を描くことが可能である。

Mathematica™ が登場した時点では、至る所にバグが発見され、他のシステムと比較して信頼性に問題があることも指摘され、評判が今一つ上がらなかった。しかし、現在では、着実にバグとりが行われているよ

```
<<Fffm.m
```

```
<<ParametricPlot3D.m
```

```
ParametricPlot3D[Fffm[u,v], {u, 0, 1, 1/120},  
  {v, 0, 1, 0.1}, Boxed->False, Shading->False].
```

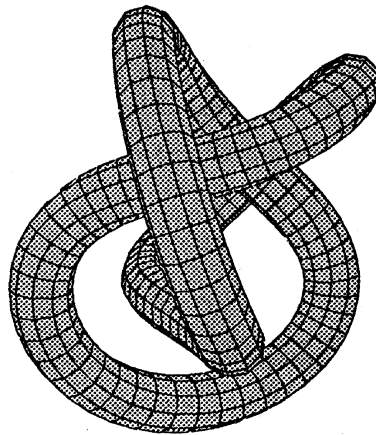


Fig.2.3 Mathematica™ によるチューブの製作

うだ. 先月(1989年10月), このシステムは, 1.22 にバージョンアップされた.

2.3 CLAM

次に, 近年, Scientific Computing Associate 社が開発し, 大々的に販売を開始した CLAM(The Computational Linear Algebra Machine 1) について述べることにしよう. このシステムは, 一見して, MATLAB に非常に良く似ており, 使用方法もほぼ似ていると言って寡言ではない. ただし, プログラミングは, MATLAB に比べて, より簡単であり, 3次元の図形表示も簡単に行えるように設計されている.

例えば, 双曲型の偏微分方程式

$$u_t + uu_x = 0$$

を区間[0,1] において, Lax-Wendorff の差分法を用いて下位を求め, それを図示するプログラムを記述してみると次のようになる. ただし, $\lambda = \Delta x / \Delta t$.

```
> procedure lax(u_init, lambda, t)
n = size(u_init)(2)
l = 0.25 * lambda
l2 = l.^2
u = zero(t,n)
u1 = u_init
```

```

do i = 1 : t
  urotm = [u1(n), u1(1:n-1)]
  urotp = [u1(2:n), u1(1)]
  u1 = u1 -1*(urotp.^2-urotm.^2)+
    12 * ((urotp + u1). * (urotp.^2 -u1.^2)-
      (u1+urotm). * (u1.^2-urotm.^2))
  u(i,:)=u1
enddo
return
end
> h = 0.02$
> u = lax(sin(2*#pi*h*[0:1/h-1]), 0.5, 100)$
> surface(u)
> title("Lax-Wendroff Solution for 100 times steps",-0.05,[0.025,0.025])

```

このプログラムを実行すると, Fig.2.4 に示した 3-D のグラフを出力する.

Lax-Wendroff Solution for 100 time steps

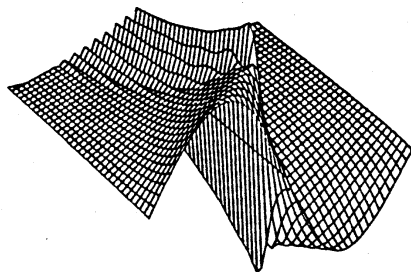


Fig.2.4 双曲型の偏微分方程式の例

この会社は, PCGPACK や最近では Linda(The portable parallel programming language) を販売している所で, CLAM を使って簡単なスパース行列も取り扱えるように工夫されている.

現在, 小生は, Sun3 用の CLAM を使用しているのだが, Scientific Computing Associates, Inc. が開発したデモプログラムがなかなか面白く, 感激させられるものがある.

2.4 その他の数値計算パッケージ

この他に注目すべきシステムとして, ベル研究所が開発した統計計算におけるデータ解析を目的とした S システム[14]などがある.

Apple社のマッキントッシュには、数値計算や統計計算に有効なソフトウェアがいろいろ揃っている。最近のものでは、Systatの簡易版であるFastatが安くて評判がよいようだ。さらに、Abacus社のStatView IIやMathViewもなかなかの優れたもののソフトウェアである。また、代数方程式系の近似解を計算するためのバカチョン式のソフトウェアとして、ターボシリーズのソフトウェアを次々に発売しているポーランド社が開発したEUREKA[15]もなかなか使って楽しいソフトウェアである。マッキントッシュのソフトウェアは、そろそろ‘わびさび’の境地になりつつあり、安定していると言う点でも利用価値は高い。

さらに、ソフトウェア自身には、それほど凝っていないのだが、数値計算に関連するプログラムを寄せ集めたNumerical Recipes[16]も持っていて損にはならないものの一つである。近年、C言語のバージョンも出版され、そのソフトウェアも同時に発売されている。

2.5 文書整形システム $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$

最後に、直接数値解析のソフトウェアとは関係ないのだが、計算機を使って論文やレポートの作成になくてはならない文書整形システムについて少しふれることにしよう。

現在、文書整形システムとして代表的なものは、Unixシステムでマニュアルが記述されているroffと、スタンフォード大学の計算機科学科のD. E. Knuth教授が開発した $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ 、さらに、カーネギーメロン大学で開発されたScribeをあげることができる。これらのシステムは、マッキントッシュのWordのようにWYSIWYGの形式ではなく、バッチ処理の形式をとるシステムである。特に、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ は数式の記述に関して多くのコマンドを有しており、数式を多用する数値解析の研究者や学生にはなくてはならないものであろう。

数学者にとって、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ を利用する利点の一つに、AMS(American Mathematical Society)の論文紙に $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ で記述した論文を投稿できることである。もし、論文の査読が通った場合に、論文が出版されるまでにかかる日数を、そうでない場合と比較して大幅に縮められることである。

$\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ には、通常、次の3つのマクロが準備されている。

- (1) plain $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$
- (2) $\text{A}_{\text{M}}\text{S}-\text{T}_{\text{E}}\text{X}$
- (3) $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$

このマクロの中で、現在では $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ を利用しているのが最も多いと思われる。 $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ は、Scribe風の書式形式を用いており、スタイルファイルの概念を用いて、だれでもが簡単に利用可能にしている。ただし、数式の記述能力に関して、多少、コマンドの数が足りないように思われる。

$\text{A}_{\text{M}}\text{S}-\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ は、 $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ のようにスタイルファイルの概念を用いているものの、コマンドの記述形式は、ほぼplain $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ に近い。ただし、数式の記述に関して、驚くほど沢山のコマンドを持っているので、数理解析学に現れる複雑な数式でも簡単に記述することができる。特に、数式の縦揃えでは、かなり複雑なことが可能である。数値解析の研究者にも、これはお勧めのものである。

前説で述べた最近の数式処理システムには、数式処理によって得た結果をそのまま論文の中に $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ やroffの形式で出力することが可能である。例えば、Fig.2.5aは、MathematicaTMによって計算した結果をTeXFormコマンドを使って自動的にplain $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ のコマンドに変換して出力したものである。また、Fig.2.5bは、MAPLEによる $\text{L}_{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の出力例とeqnの出力例を示したものである。

近年、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の日本語化も行われ、それに伴い $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ の利用者も大幅に増加した。また、 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ は、IBM PCやNECのPC98用のソフトを除いて、パブリックドメインでシステムが提供されており、ほぼテープ代でソフトウェアを入手できる。ただし、日本語の漢字フォント(大日本印刷提供のもの)は、有料なので勝手に持ち出したり、コピーすることはできないので注意する必要がある。現在では、junetのニュースでも $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ に関

In[1]:=

Integrate[Log[x]^8 (1+x^2)/x,x]

Out[1]=

$$\frac{315 x^2}{4} - \frac{315 x^2 \text{Log}[x]}{2} + \frac{315 x^2 \text{Log}[x]^2}{2} - 105 x^2 \text{Log}[x]^3 + \frac{105 x^2 \text{Log}[x]^4}{2} - 21 x^2 \text{Log}[x]^5 + 7 x^2 \text{Log}[x]^6 - 2 x^2 \text{Log}[x]^7 + \frac{x^2 \text{Log}[x]^8}{2} + \frac{\text{Log}[x]^9}{9}$$

In[2]:=

TeXForm[%]

Out[2]//TeXForm=

$$\begin{aligned} & \{(315 \{x^2\})\over 4\} - \\ & \{(315 \{x^2\} \backslash \log (x))\over 2\} + \\ & \{(315 \{x^2\} \{\{\backslash \log (x)\}^2\})\over 2\} - \\ & 105 \{x^2\} \{\{\backslash \log (x)\}^3\} + \\ & \{(105 \{x^2\} \{\{\backslash \log (x)\}^4\})\over 2\} - \\ & 21 \{x^2\} \{\{\backslash \log (x)\}^5\} + \\ & 7 \{x^2\} \{\{\backslash \log (x)\}^6\} - \\ & 2 \{x^2\} \{\{\backslash \log (x)\}^7\} + \\ & \{(x^2) \{\{\backslash \log (x)\}^8\}\over 2\} + \\ & \{\{\{\backslash \log (x)\}^9\}\over 9\} \end{aligned}$$

Fig. 2.5a Mathematica の TeXForm コマンド
を使った例


```

>
a:=int(ln(x)^8*(1+x^2)/x,x);
          9      8 2 2 7 2 6 5 2
a := 1/9 ln(x) + 1/2 ln(x) x - 2 x ln(x) + 7 x ln(x) - 21 ln(x) x
      2 4 2 3 2 2 2
      + 105/2 x ln(x) - 105 x ln(x) + 315/2 ln(x) x - 315/2 x ln(x)
      2
      + 315/4 x

>
readlib(latex): readlib(eqn):

>
# LaTeX output for expression a.
latex(a):
{ {\frac{{ {\ln x}^{9}}}{9}} + {\frac{{ { {\ln x}^{8}} {x^{2}} }}{2}}
} { - 2 {x^{2}} { {\ln x}^{7}} } + { 7 {x^{2}} { {\ln x}^{6}} } {
- 21 { {\ln x}^{5}} {x^{2}} } + {\frac{{ 105 {x^{2}} { {\ln x}^{4}}
}}{2}} { - 105 {x^{2}} { {\ln x}^{3}} } + {\frac{{ 315 { {\ln x}
^{2}} {x^{2}} }}{2}} { - \frac{{ 315 {x^{2}} {\ln x}}}{2}} + {\frac{{
315 {x^{2}} }}{4}}
}

>
# eqn output for expression a.
eqn(a):
{ { { {\ln( "x" )} sup 9 } over 9 } ^+^ { { { {\ln( "x" )} sup 8 } {
"x" sup 2 } } over 2 } { ^-^ 2 { "x" sup 2 } { {\ln( "x" )} sup 7
}} ^+^ { 7 { "x" sup 2 } { {\ln( "x" )} sup 6 } } { ^-^ 21 { {\ln(
"x" )} sup 5 } { "x" sup 2 } } ^+^ { { 105 { "x" sup 2 } { {\ln(
"x" )} sup 4 } } over 2 } { ^-^ 105 { "x" sup 2 } { {\ln( "x" )}
sup 3 } } ^+^ { { 315 { {\ln( "x" )} sup 2 } { "x" sup 2 } } over 2
} { ^-^ { 315 { "x" sup 2 } {\ln( "x" )} } over 2 } + { { 315 {
"x" sup 2 } } over 4 }
}

```

Fig. 2.5b MAPLE の \LaTeX 出力と eqn 出力
の例

連した情報を提供している。最近、バブリックドメインでマッキントッシュ用の日本語 TeX も提供されているし、パソコン用のメタフロントプログラムも利用できる。

AMS-TeX のマクロファイル amstex.tex とフォント、さらに AMS-TeX のスタイルファイル amsppt.sty は、下記の AMS から \$50.00 程度の値段で直接購入することもできる。

TeX Library

American Mathematical Society

P.O. Box 6248

Providence, RI 02940

U.S.A.

3. おわりに

最近の数値解析関連のソフトウェアについて、簡単な紹介をしてきた。これらのソフトウェアが最も重点をおいて製作されている所は、グラフィックスとの融合であり、ユーザインタフェースのより良い改善をめざしたものであるようだ。よって、ソフトウェアの使い勝手は、一昔前のものと比べると驚くほど向上したように思われる。しかし、残念なことに問題解決に使用している解法のアルゴリズムには、あまり変化は見られない。究極のソフトウェアに近づいたとは言えるが、まだまだ改良を加えねばならない点が至る所にあるようだ。

参考文献

1. C. Moler, "MATLAB User's Guide," MATH WORKS Inc., 21 Eliot Street South Natick, MA, 1987.
2. S. Wolfram, "MathematicaTM," Addison-Wesley, New York, 1988.
3. S.C.A., Inc., "An Introduction to CLAM," Scientific Computing Associates, Inc., New Haven, CT, 1988.
4. Textronix, Lab., "MathScribe User's Guide," Textronix Lab., Beaverton, Oregon, 1988.
5. B. W. Char et al., "MAPLE Reference Manual(5th Edition)," Brooks/Cole, Pacific Grove, CA, 1988.
6. D. E. Knuth, "TeXbook," (監訳) 斎藤 信男, アスキー出版, 1989, Addison-Wesley, New York, 1984.
7. M. D. Spivak, "Joy of TeX," American Mathematical Society, Providence, RI, 1986.
8. I. Aredon, *The TaO of TeX—A Gourmet Guide to Treasure Chest of Favorit Mathematician's Activities by Computer*, Keio Univ., KSTS/RR-88/002 (1988).
9. I. Aredon, *The TaO of TeX—Notes for Formulas Part I*, Keio Univ., KSTS/RR-88/003 (1988).
10. I. Aredon, "TeX 独稿古," Seminar on Mathematical Science No.13(Keio Univ.), マテマティカ, 1989.
11. I. Aredon, "はじめての AMS-TeX," Seminar on Mathematical Science No.14(Keio Univ.), マテマティカ, 1989.
12. I. Aredon, "とことん TeX," Seminar on Mathematical Science No.15(Keio Univ.), マテマティカ, 1989.
13. 大野義夫編, "TeX 入門," 共立出版, 1989.
14. 大野義夫, 野寺隆, "数学者のための AMS-TeX," (仮題), 近刊(岩波書店).
15. 野寺隆, NSG ソフトウェア MathematicaTM, 情報処理研報 88-91 (1988).
16. 野寺隆, MathematicaTM, Computer Today (1989), 53-61.
17. 野寺隆, 数式処理システムの現状, bit (1989), 1605-1614.
18. 野寺隆, ビーター ウェイナー, 戸川 隼人, パソコン用数式処理システム, NIKKEI BYTE(April) (1989), 255-269.
19. R. A. Becker and J. M. Chambers, "S, An Interactive Environment for Data Analysis and Graphics," (訳) 渋谷政昭, 柴田里程 (共立出版刊), Wardsworth Advance Books and Software, Belmont, CA, 1987.
20. Borland, "EUREKA User's Manual," Borland, Scotts Valley, CA, 1987.
21. W. H. Press et al., "Numerical Recipes," Cambridge University Press, Cambridge, London, 1986.
22. 野寺隆, Numerical Recipes と Example book について, 情報処理研報 88-20 (1988).