数理解析研究所講究録
第359巻 1979年 15-27

数学ソフトウェアと教育

名大 工学部　　二宮市三

電子計算機による科学技術計算の普及にともない，数学ソフトウェアの重要性が認識されつつある。しかしながら，現状では解決しなければならない多くの問題が残っている。

その第一は数学ソフトウェアの開発の遅さである。すでに学問として確立された算法が，実際に役に立つソフトウェアとして具現されるまでには多大の時間を必要とする。これは純粋の算法としては問題にならないが現実のソフトウェアとしては欠くことのできない多くの困難な実用上の決定を行わなければならないことに帰因する。また，このようなソフトウェア開発の仕事に従事する人材の層の薄さも原因の一つであるが，これを解決するには著作権の確立など社会的な評価の拡充が必要である。

その第二は利用者の認識不足と誤った情報の流通である。これに対しては，良いソフトウェアの存在と所在を知らせ，正しい情報を提供する教育宣伝活動を盛んにしなければなら

ない。

以上の観点から，数値計算のいくつかの主な領域でのソフトウエアの問題点，著者及びその周辺で行われている開発の現状などについて述べることにする。

1．基本演算

この項で述べることは，数学ソフトウエアというよりはむしろFORTRANなどの言語プロセッサーに関係することがらである。

a．冪乗の最適化

X＊＊Nの形の冪乗ルーチンでは，Nが小さいときは直接に乗算を行い，Nが大きいときはNのビットパターンを利用して，自乗をくりかえす高速演算を行うのが望ましい。

X＊＊Yの形の冪乗ルーチンでは，X＊logYの計算を注意深く行って精度の損失を防ぐことが必要である。

最もよくあらわれるX＊＊2については，冪乗ルーチンを引用することなく，X＊Xと同じ目的プログラムが作られねばならない。

b．部分的倍精度演算

線型計算では積和を部分的に倍精度で計算し，丸めの誤差を最小限に抑えるということが非常に重要である。たとえばS＝A＊B＋Sという文があってSだけが倍精度のときには

單精度の数AとBの積を單精度の乗算で作り，レジスターの上にできているその結果にそのまゝSを倍精度の加算で加えるといった無駄のない翻訳が要求される。

c. 早期あふれの防止

複素数の除算や絶対値の計算では，定義式通りの計算をすると，実数部と虚数部の二乗和を作るとき早期あふれが起ることがよくある。これは上述の二乗和のかわりに，これを実数部と虚数部の中の絶対値の大きい方の二乗で除したものを計算することにより防ぐことができる。絶対値の場合はこのような処置がとられていることが多いが，除算の場合には案外見過されていることがある。除算では早期あふれ防止の算法の方が従来の算法よりも計算時間が短かい[(1)]という二重の利点があるので，是非とも実行すべきである。

2. 基本外部関数

a. 区間縮小における精度損失防止

指数関数と三角関数の計算では，指数法則や周期性を利用して引数の値を一定の小さい標準区間内の値に変換することが必要である。このために引数に変換定数（$\log_2 e$，$1/2\pi$）を乗じ，その結果から整数部分を引き去るという計算が行われる。整数部分引き去りによる引数の相対誤差の増大を最小限に抑えるには，変換定数の乗算を倍精度で行って引数の相

対誤差を始めから存在するもの以上に増加させてはならない。しかしながら，初めから引数に存在する誤差の増大を防ぐことは原理上不可能である。したがって数値計算の教育では“絶対値の大きい引数に対する指数関数や三角関数の値の末尾には，引数の整数部分の桁数程度の桁数だけ誤差が入る”ということを常識として徹底させなければならない。

6．原点に零点をもつ関数の原点附近の精度確保

原点に零点をもつ関数の原点附近の値は，相対誤差規準の意味で桁数一杯の精度を保持すべきである。双曲線正弦，双曲線正接などは指数関数で簡単に定義されるので，ややもすると原点附近でも定義式通りの計算が行われて，上の要請に反することがある。是非とも原点附近では相対誤差規準に関する最良近似式を採用することが必要である。

3．準基本外部関数

a．直角単位の三角関数

普通の三角関数を$f(x)$とするとき，直角単位の三角関数というのは引数xに対して$g(x)=f(\frac{\pi}{2}x)$を値とする関数$g(x)$のことをいう。このような関数の存在理由は二つある。第一の理由はπを因数とする引数に対する三角関数の値$\sin\frac{\pi}{2}x$ $\cos 2\pi x$，$\tan \pi x$などが要求されることが多いという事実で，このような場合に$g(x)$のような関数を用いれば，πの

値を陽に書く必要がなく，そのための誤りの機会も少ない。第二の理由は，より本質的な理由であるが，それは三角関数のための関数副プログラムでは，区間縮小のために直接計算されているのはむしろ直角単位の関数gであって，普通の三角関数は$f(x)=g(\frac{2}{\pi}x)$として間接的に計算されているという事実である。したがって，$g(x)$を$f(\frac{\pi}{2}x)$として計算すると，実際には$f(\frac{\pi}{2}x)=g(\frac{2}{\pi}\cdot\frac{\pi}{2}x)$という計算が行われ$\frac{\pi}{2}$を掛けて$\frac{\pi}{2}$で割るという無益の二重手間をかけることになる。逆に$g(x)$を使えば区間縮小のときに変換定数を乗ずる必要がなくなり，xに誤差がなければxの絶対値が大きくても$g(x)$の値は非常に正確である。名大大型計算機センターではSINHP，COSHP，TANHP，COTHP[2]及びこれらの名前の頭にDをつけた倍精度用の関数が用意されていて大いに利用されている。この合理的で便利な関数の普及を切に希望する。

6．逆双曲線関数[2]

$\sinh^{-1}x=\log(x+\sqrt{1+x^2})$，$\cosh^{-1}x=\log(x+\sqrt{x^2-1})$

$\tanh^{-1}x=\frac{1}{2}\log\frac{1+x}{1-x}$ などの逆双曲線関数は簡単な有理関数や二次無理関数の原始関数として応用上しばしばあらわれる重要な関数であるが，すべて対数関数で表現されるので特別扱いをする必要がないようにみえる。しかしながら，これらの中で$\sinh^{-1}x$と$\tanh^{-1}x$は原点を零点とする関数

であって，これらを上の定義式通り計算すると原点附近では良い精度はえられない。同じ理由で，より基本的なものとして $\log(1+x)$ およびその逆関数 e^x-1 がある。これらの関数には，原点附近の引数に対する特別の近似式を用意した専用関数ルーチンをそなえるべきである。名大センターには e^x-1 を除いてその他のものには，それぞれ ASINH, ACOSH, ATANH, ALOG1(2) およびこれらの倍精度版が登録されている。

c．階乗関数

$n!$ や $n!!$ はよく利用される関数であるが n が増加すると急激に増大してすぐに計算機の実数の最大限界を越えてしまう。例えば非常に一般的な 2^{255} とか 16^{63} を限界とする計算機では $57!$，$97!!$ および $56!$，$96!!$ がそれぞれ限界である。したがって $n!$ や $n!!$ をわざわざ計算するよりは数表を用意しておいてその値を持ち出すだけの関数ルーチンを設けることが合理的である。名大ライブラリでの名前はそれぞれ FCTRL，FFCTR(2) である。

d．複素数の1－ノルム

複素数のノルムとしては2－ノルムとしての普通の絶対値 CABS があるが，その計算には平方根を必要とし，また早期あふれ防止のための処置などがあって案外時間をくうので

単に複素数の小ささをしらべるだけでよい反復計算の収束判定などにCABSを計算するのは贅沢である。このような場合には時間のかからない，早期あふれの心配のない1ーノルムすなわち実数部と虚数部との絶対値和で十分用が足りる。名大センターではCABS1[2]という関数が利用に供されている。

4．特殊関数

a．ベッセル関数[2]

特殊関数の中で最も利用度が高く重要なものはベッセル関数である。名大センターでは最も重要な0次と1次の専用ルーチンを始めとして整数次のルーチンが，ベッセル関数，変形ベッセル関数，球ベッセル関数および変形ベッセル関数の才1種ならびに才2種に対して完備している。この外に才1種ベッセル関数および変形ベッセル関数に対して，非整次と複素変数整数次のルーチンがあり，最近では0次のベッセル関数および変形ベッセル関数の不定積分[3]のためのルーチンが開発された。

b．その他の関数[2]

ガンマ関数とその対数，誤差関数と余誤差関数およびその逆関数，ルジャンドル多項式と陪多項式，指数積分，正弦および余弦積分，フレネル正弦および余弦積分，才1種および才2種完全楕円積分，ヤコビー楕円関数などがルーチン化さ

れている。

5．フーリエ解析と補間

a．フーリエ解析

複素FFTと実数FFTとは従来からも完備していたが，データの対称性をさらに利用した高速余弦変換，高速正弦変換およびこれらと密接な関係のあるチェビシェフ補間さらにはこれらに基づく微分，積分などの解析操作を行うための多くのプログラム群から成るパッケージが鳥居[4][5]によって最近開発登録された。

b．補間法

1次元および多次元の3次ならびに高次の各種スプライン補間のためのソフトウェアが秦野（福井大）[3]によって，また最近では，不規則分布データに基づく三角網，四面体網補間のためのプログラムが佐藤[5]によって開発された。

6．連立1次方程式

a．ジョルダン消去法と逆行列計算の不合理性

非対称の係数行列をもつ一般の連立1次方程式の解法としては，部分的ピボッティングを伴うガウスの消去法あるいはこれと数学的に同等なLU－分解法（クラウト法とドゥーリトル法）が標準の方法であり，特に積和を部分的倍精度演算で処理した場合のLU－分解法が最適であることはすでに定

説となっているところである。しかるに計算機利用者の間には，ガウス－ジョルダン消去法（掃き出し法）をプログラミングの簡単性のために良しとする誤った常識が流布しているのは残念なことである。ジョルダン消去法はN元の方程式を解くのに，ガウスの消去法の$N^3/3$の50%増しの$N^3/2$の乗算を必要とする点で決定的に劣るのであるから，この望ましくない風潮を速やかに打破しなければならない。

ジョルダン消去法の誤用よりもさらに悪質なのは逆行列の乱用である。連立1次方程式$Ax=b$の解が$x=A^{-1}b$と表わさるからというので逆行列を計算するのであろうが，N元の場合にガウスの消去法の3倍のN^3の計算量を必要とするので全く問題にならない。同じ係数行列で定数項bだけが異る多くの方程式を解く場合には，一度だけ逆行列を計算しこれを定数項の左から掛けるのは合理的であるようにみえるが，これもガウスの消去法やLU－分解法で一度方程式を解けば，その後はそのとき生成されたLU－成分を再利用して，逆行列を定数ベクトルの左から掛けるのと同じ計算量N^2で方程式を解くことができるので，良い方法ではない。要するに逆行列というものはそれ自体が必要な場合以外は，これを計算することは必要でも賢明でもない。このような知見が線型計算の常識となるように教育者各位の協力を切に希望する。

6. コレスキー分解法

コレスキー分解法や修正コレスキー分解法は正値対称の係数行列をもつ連立1次方程式の最適の計算法であるが，そのソフトウェア化が我が国で本格的に始ったのはほんの二三年前ぐらいからに過ぎない。現在では密行列，帯行列などの行列の性質の外に，一般表現，圧縮表現など行列の表現方法に応じて多くのプログラムが豊富に取りそろえられるようになった。

これに対して今後充実させて行かなければならないものに対称不定符号行列に対するバンチのLDL^{T}分解法や特異値分解とこれに基づく最小二乗解と最小ノルム解の計算法などがある。

7. 固有値問題

連立1次方程式とは異り，啓蒙活動が盛んで正しい情報が流通していて，対称行列ではハウスホルダー・QR法やハウスホルダー・バイセクション法，非対称行列ではヘッセンベルグ・ダブルQR法などの本格的な方法が優先的に利用されているのは喜ばしいことである。

今後開発すべきものの中で興味のあるのは，大次元行列の極く一部分の固有値，固有ベクトルを計算するための算法としてのジェニングスの同時反復法やベイスの部分空間反復法

ならびにこれらをチェビシェフの加速法やウィンのε－算法で加速する試みであろう。

8．数値積分

a．一次元の数値積分

従来からの台形則，シンプソン則，各種ガウス則などの固定点積分則と自動積分則としてのロンバーグ則あたりまでがつい最近までの我が国のソフトウエアの整備状況であり，利用者の意識としてもシンプソン則の人気が最高でガウス則やロンバーグ則の良さが漸く認められようとしているのに対して，学問の進展は急速であり，多くのすぐれた自動積分法や適応型積分法が研究されている。名大では最近積分関係のソフトウエアの開発が盛んで，二宮の特異点の認識処理能力をもつ適応型ニュートン・コーツ則[(2)]，鳥居・長谷川の算術級数的に標本的を増すクレンショー・カーティス型の積分法[(2)]，および秦野（名大センター）の二重指数関数型変換積分則[(2)]が相ついで登録された。これらはそれぞれピーク型，振動型，端点での特異性に強いという特性をもっていて，これらをその特性に応じて利用すればどのような関数にも対処できるという意味で相補性を具えているということができる。

今後研究すべき問題として，特異点の所在と位数が既知の場合の特異積分の取り扱いや，ウインのε－算法による特異

積分の計算法などがある。

8. 多重積分

多重積分というのは一次元積分の繰り返えしで表わされるので一見興味の少ない問題のようにみえるが，ソフトウエアとしては極めて興味深い問題である。名大では最近，超直方体領域における任意次元の直積型積分ルーチン[(6)]が二宮によって，また三次元の曲面境界領域に対する普遍型自動積分ルーチン[(6)]が秦野・長谷川・二宮によって開発されている。

9. 常微分方程式の初期値問題

ルンゲ・クッタ・ギル法一辺倒というのがソフトウエア提供側と利用者側との現状である。古典的ルンゲ・クッタ法は勿論のこと，誤差評価能力をもつフェールベルグやヴァーナーのルンゲ・クッタ法，ブリルシュ・ストーアーの有理関数補外法そして可変次数多段法などが早急にソフトウエア化され，利用されなければならない。

10. その他のソフトウエア

以上に述べたものの外に，非線型方程式，多変数関数の最適化，常微分方程式の境界値問題，偏微分方程式の解法などの重要な分野があるが，筆者はその任ではないので省略することにする。

11. 参考文献

(1) 二宮市三, 複素数除算ルーチンについて, 情報処理学会第15回大会講演論文集, pp361-362, 1974

(2) 名古屋大学大型計算機センターライブラリ・プログラム利用の手引(改訂版), 1978.

(3) 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 9, No. 4, 1978.

(4) 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 10, No. 1, 1979.

(5) 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 10, No. 2, 1979.

(6) 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol. 10, No. 3, 1979.