数理解析研究所講究録
109巻 1971年 16-24



# 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 IRのQuery

日本プロセスコンサルタント(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. 論理式の処理
3. 化学構造式の処理
4. 言語処理
5. 図形処理
6. データのブロックの処理

となろう。これらの分野はいずれも，一般のデータプロセスや，技術計算にみられる数値計算程，一般のプログラマーへの普及はみられないが，特殊な分野では，実用的であるのみならず，重要な位置をしめている。

1，2，3，はいずれも式の処理であり，1つのグループとして議論するのも一方法と思うが，　式の構造，性質，演算のしかたが，それぞれちがうので，別々に議論することにした。

4は，コンパイラー，トランスレーターなどにみられる，プログラミング言語の処理には，かくせない。

6は，GPSS，SIMSCRIPT，SLなどのシステムシミュレーションのシステムや，PERTなどのデータのブロック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など広く

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・マネジャーも 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と、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・ディスプレー・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 プログラムを作るためには、上手な検索条件の判定のアルゴリズムを考えなければならない。
電算機の論理回路は、論理式そのものである。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 今度の研究会の主テーマである数式処理である。
これらの分野に共通していえることは、情報の構造の設定と構造を処理するアルゴリズムが主役であることである。

化学構造式の処理の例として 部分構造の検索システムがある。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プログラ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、どうかということである。しかしここで実用の意味をつぎの2通りに考えてみる必要がある。

1° 計算時間が充分早く実際のプロダクションが実行可能でプログラムが書き易いこと。

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と、アルゴリズムの合目的的性のチェックのためのモデルは充分こなせること。

PL/I のコンパイラーをPL/I の言語で組んだ例や、論理設計のためのプログラムを、実際のプロダクション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役に立つ訳で、さらにアルゴリズムの正さをチェックには充分役立つものと思う。

LISPは、形式的であり、アルゴリズムの論理を表現するのに適している。例えば、式の微分のLISPプログラムは、微分の規則を仕様書にしたものににている。

## §3 実例

### 3.1 原子核の3体問題

Rayleigh－Ritz 法によって、原子核の三体問題の固有波動関数をもとめる問題である。

$$\int \Psi \cdot A \Psi \, d\tau = \sum_{ij} a_i x_i y_j \quad \cdots\cdots (1)$$

(1) の二次形式の係数を計算する問題であるが

$$\Psi (r_1 , r_2 , r_3) = \sum_i x_i \cdot \Psi_i \quad \cdots\cdots (2)$$

$$\Psi_i = \prod_{j=1}^{3} (e^{-\mu (r_j - D)} - e^{-\mu (r_j - D)}) \cdot P_i (r_1 , r_2 , r_3) \quad \cdots (3)$$

で、A は微分演算子を含む演算子である。

$$A \Psi \qquad \text{および}$$

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

を LISP, FORHAC, FORTAN を用いて計算した。

詳細は、第9回プログラミングシンポジウムで報告ずみ。同報告書を参照されたい。

### 3.2 非線型回帰

いくつかの変数の関数のノルム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 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, \cdots x_n)$，観測値 $y(\mathbf{x})$ の数値表と、

関数 $f(x, a)$ が記号で与えられた場合

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

を最小にするようなパラメータ $a = (a_1, a_2, \cdots a_F)$ を決定することである。そこで

$$f(x, a) = \Sigma a_i f_i(x) \quad \cdots (2)$$

$f_i(x)$ 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 $f$ とその第一次導関数を計算する必要がある。$f$ の微分とエバルューションは 数式処理の技法をもちいた。

従来の非線型回帰の方法では、$f$ の微分と数値化の、サブルーチンを準備して、メインプログラムと結びつけなければならなかったが、一般化されたプログラムによって、特殊なサブルーチンをその都度作成するなど、わずらわしい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、グラフィック・ディスプレーの よい応用例である。 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 上の曲線をながめることができる。

ライトペンで 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、関数を決めていくことができる。

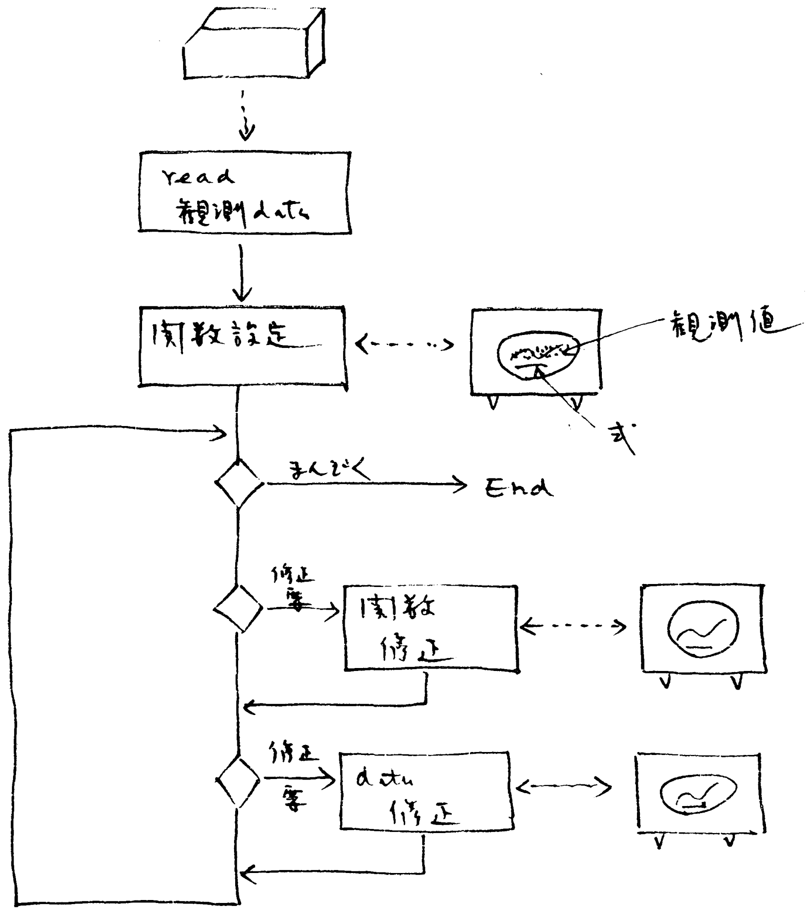


図1 非線形回帰の図

## 3.3 IR の Query

IR の Query は 条件式ともよばれる。単位条件と論理演算子からなる論理式である。

たとえば、

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

の $x_i$ $(i=1 \cdots 8)$ は 単位条件で 年令≦20、姓＝男とか key word DECISION があり、などの条件をあらわす。これらの条件にあえば $x_i=1$ であり あわなければ $x_i=0$ 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 $x_i$ $(i=1,2 \cdots 8)$ をエバリュエートし つぎに 式の値を求める。

カッコの内がわから演算すればよいわけであるが、式をつぎのように変換すれば 演算も容易である。

$$x_4 \vee x_5 \longrightarrow p_1$$
$$\overline{p_1} \longrightarrow p_2$$
$$x_7 \vee x_8 \longrightarrow p_3$$
$$x_2 \wedge x_3 \wedge p_2 \longrightarrow p_4$$
$$x_6 \wedge p_3 \longrightarrow p_5$$
$$p_4 \vee p_5 \longrightarrow p_6$$

$$x_1 \wedge p_6 \longrightarrow y$$

∧(and)，∨(or)，−(not) の関数サブルーチンを準備すれば．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。

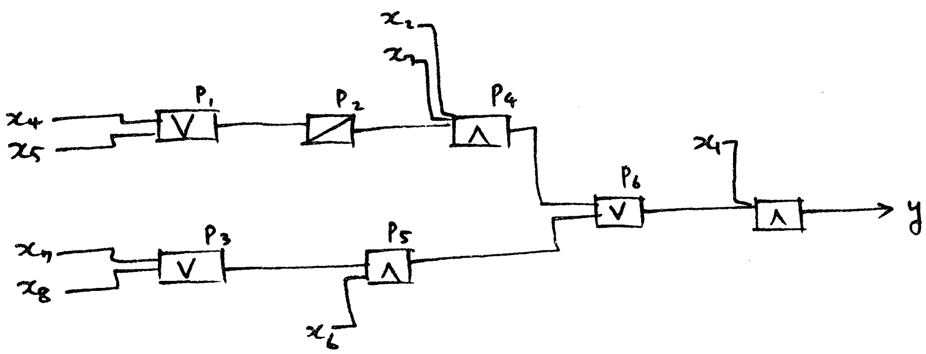


図2　Query の evaluation