EQUATRAN-M(イコートラン・エム)

――知的生産性を高める方程式解法ソフト――

小口 梧郎，宮原 是中

1. はじめに

専門分野によらず，およそ数式モデルを使って仕事をするということは次の3つの作業のくりかえしである．数式モデルを立てること，このモデルを解く（計算する）こと，そして計算結果を検討すること，である．ところで2つめのモデルを解く作業は多くの人にとって，たいへん気の重い作業になってはいないだろうか．プログラムの作成に手間と時間がかかるうえに，多くのトラブルがここに起因するからである．自分の専門領域とは無関係なプログラミングやデバッギングに煩わされた上にここでの小さな失敗に足を引っぱられる――今回紹介するソフトウエアEQUATRAN-M（イコートラン・エム）はこうした悩みを解決し，数式モデルを用いる仕事を能率よく，しかも楽しくしてくれる強力なツールである．

なお最近 EQUATRAN-M の新しいバージョン（バージョン2）を発表したので，以下の紹介はこの新バージョンにもとづくものとした[1]．

2. EQUATRAN-Mの機能

EQUATRAN-Mとは

EQUATRAN-M(EQUAtion TRANslator for Micro-computer) は連立方程式を解くソフトウエアである．代数方程式や常微分方程式などをそのまま入力すれば，プログラミングを行なうことなく，すぐにその解を得ることができる．「そのまま」入力するとは，方程式を変形したりあるいは解く順序に並べかえたりする必要がないということである．ちょうど紙の上に方程式を書き並べるのと同じように，ディスプレイ上に方程式を入力すればよいのである．

EQUATRAN-M は入力された方程式を解析して，計算可能なように式の変形と順序の並べかえを行なう．このさい，方程式が解ける構造をしているか（式と未知変数の対応がとれているか）もチェックする．そして必要に応じて線形連立方程式の直接解法，非線形連立方程式の反復解法，探索法による最適化計算あるいは常微分方程式の数値積分などの数値計算のアルゴリズムを組み込んで計算の手続きを自動的に生成したのち，これを実行して解を出力する．

EQUATRAN-M には方程式などを入力するための専用のスクリーンエディタ，計算手順を自動生成するコンパイラ，計算を実行するインタプリターと数値計算ルーチン，計算結果をグラフ化する作図プログラム，が一括して含まれており，方程式の入力から計算結果の解析までがたいへん能率よく実行できる．

どんな方程式が解けるのだろうか

方程式が解けるのはそれだけでたいへん便利な機能であるが，単純な代数方程式しか扱えないと

おぐち　ごろう，みやはら　これあつ　三井東圧化学
〒100 千代田区霞ケ関3－2－5

したら，その応用分野はかなり限られてしまうであろう．われわれが実際の問題でとり扱う数式モデルの中には，代数方程式では表わしにくいさまざまな関係が含まれていることが多いからである．EQUATRAN-M では代数方程式と常微分方程式および不等号制約条件つきの最適化の式が扱えるほか，これらの方程式の中に，論理演算や各種の組み込み関数，適用範囲によって式の形が異なる式(場合分けされている式)，数表によって定義される関数関係などを自由に組み入れることができる．また特に配列変数（ベクトルとマトリクスに相当）についての機能は強力で，ベクトルやマトリクス（あるいは，その任意の一部分）を含む方程式を直接記述することが可能である．さらに，マクロ機能といって，一群の方程式をまとめて登録しておくと，これをちょうどサブルーチンのように呼び出して使うことのできる機能も用意されているので，配列変数の機能とあいまって，数百の変数を含むような規模の大きな問題でもコンパクトに，しかもわかりやすく記述することができるのである．

ただし，EQUATRAN-M で直接扱えるのは実数の領域に限られており，また積分方程式や偏微分方程式も直接記述できないので離散化などの処理が必要である．

3. 使用例

簡単な例題をいくつか解いてみよう．EQUATRAN-M の機能は大きく，例題で示せるのはその一部分にすぎないが，だいたいの雰囲気は理解していただけよう．

線形連立方程式

方程式の中で連立して解く必要のある部分についてはその線形性が調べられ，線形であれば，直接解法（ガウスの消去法）が採用される．

〈例題 1．4点を通る3次式の決定〉
xy 平面上の4点(0,8)，(1,0)，(3,4)，(6,−3)を通る3次式，

$$y=ax^3+bx^2+cx+d \qquad (1)$$

の係数を決定せよ．

4点の座標を(x_1,y_1)，(x_2,y_2)，(x_3,y_3)，(x_4,y_4)で表わせば，この問題は次の4元の線形連立方程式を解く問題となる．

$$y_i=ax_i^3+bx_i^2+cx_i+d \quad (i=1,2,3,4) \qquad (2)$$

EQUATRAN-M では方程式などを記述したものをソーステキストという．図1はこの問題のためのソーステキストのリスト（ソースリスト）である．計算結果も併せて示してある．ソーステキストの中の /* と */ とで囲まれた部分はコメントとなる．1行目のコメントは問題のタイトルを兼ねている．3行目のVAR文(VARIABLE 文)は使用する変数名とその属性を定義する文で，一般の変数（スカラー変数）では省略してもよいが，配列変数に対しては必ずその次元と要素数を定義しておく．配列変数を使えば(2)式は5行目のように1つの式で記述することができる．配列変数間の演算はすべて対応する要素間の演算として定義されている．7～8行目は配列変数を配列定数

```
 1: /* 4点を通る3次式の決定（線形連立方程式）*/
 2:
 3: VAR y(4),x(4)
 4:
 5:     y=a*x^3+b*x^2+c*x+d
 6:
 7:     x=( 0,  1,  3,  6)
 8:     y=( 8,  0,  4,-3)
 9:
10: OUTPUT a, b, c, d


[   計算結果   ]
a                  =-0.7
b                  =6.133333
c                  =-13.433333
d                  =8
```

図 1　例題1のソースリストと計算結果

```
 1: /*Wilson パラメータの決定（非線形連立方程式）*/
 2:
 3: VAR,g0(2)      "無限希釈溶液の活量係数 γ°"
 4:     ,A(2)      "Wilson パラメータ (Λ12, Λ21)"
 5:
 6:     LOGE(g0(1))=-LOGE(A(1))+(1-A(2))
 7:     LOGE(g0(2))=-LOGE(A(2))+(1-A(1))
 8:
 9: INPUT   g0
10: OUTPUT A



[  入力データ  ]
g0              =                  ：無限希釈溶液の活量係数 γ°
  1) 0.4           2) 0.56
[  計算結果  ]

A               =                  ：Wilson パラメータ(Λ12, Λ21)
  1) 0.8454372     2) 2.084192
```

図 2 例題2のソースリストと計算結果

に等値する式である．また10行目のOUTPUT文は計算結果を表示する変数を指定している．

非線形連立方程式

非線形方程式の解法はEQUATRAN-Mの主要機能の1つである．収束計算の手法はニュートンラフソン法の改良法である．

〈例題 2. Wilson パラメータの決定〉

無限稀釈溶液についての2成分系のWilson式

$$\ln\gamma_1{}^0=-\ln\Lambda_{12}+(1-\Lambda_{21}) \qquad (3)$$

$$\ln\gamma_2{}^0=-\ln\Lambda_{21}+(1-\Lambda_{12}) \qquad (4)$$

を用い，活量係数 $\gamma_1{}^0$, $\gamma_2{}^0$ からパラメータ Λ_{12}, Λ_{21} を求めよ．

非理想溶液の活量係数を表現する式の中でよく使われるものの中にWilson式がある．2成分系のWilson式のパラメータ Λ_{12} と Λ_{21} は，実測データから得られる無限稀釈溶液の活量係数から，(3)，(4)式を使って決定することができる．

図2がこの問題のためのソースリストと計算結果である．3～4行目のVAR文には“ ”で囲まれた日本語の部分があるが，これは変数の説明項と呼ばれる．説明項はコメントとは異なり，変数のもつ属性として計算結果の表示などに利用される．6～7行目に現われるLOGEは自然対数を表わす組込み関数で，EQUATRAN-Mには初等関数をはじめ36種類の組込み関数が用意されている．9行目のINPUT文は計算の実行時に値を読み込む変数(この場合 γ^0)を指定するもので，これによってケーススタディが可能になる．

ところで式，(3)，(4)は非線形の連立方程式であるので，解を得るには反復収束計算が必要である．EQUATRAN-Mには，収束計算の方法（どの変数の値を仮定してどの式で収束の判定を行なうか）を自動的に選択する機能があり，図2の例ではこの機能を利用している．収束計算の方法はソーステキスト中にRESET文という文を書いてユーザーが指定することも可能で，いずれの場合も変数の初期仮定値とその変域とを指定することができるので，確実に希望する解を得ることができる．

常微分方程式とシミュレーション

EQUATRAN-Mでは常微分方程式と一般の方程式との混合問題を扱うことができるが，単に積分計算をするだけでなく連続系のシミュレーションがしかも対話形式で行える機能が備えられている．これを利用して簡単なゲームを作ってみた．

〈例題 3. 月面軟着陸ゲーム〉

月ロケットが月面に着陸しようとしている．現在高度は $h=10000$m, 降下速度 $v=500$ m/secである．逆噴射力を適当に操作して，着陸時の降下速度が5 m/sec以下となるように軟着陸を試みよ．ただし，逆噴射の能力は最大 20m/sec^2 であり，着陸までの時間は短いほどよいものとする．なお月の重力加速度は $g=1.7$m/sec^2 である．

逆噴射による加速度を u として次の運動方程式を得る.

$$\frac{d^2h}{dt^2}=-g+u \tag{5}$$

また，降下速度 v は次式で与えられる.

$$v=-\frac{dh}{dt} \tag{6}$$

図3にこのシミュレーションのためのソースリストを示す.

EQUATRAN-M では変数の微分項をアポストロフィ(′)を使って，$dh/dt \rightarrow h'$，$d^2h/dt^2 \rightarrow h''$ のように表現する．したがって(5)，(6)式はソースリストの9，10行目のように書けばよい．独立変数（この場合 t）は方程式とは別にINTEGRAL 文（リスト17行目）によって，その積分範囲や積分のきざみ幅などとともに指定されている．積分の初期条件は，リストの12行目のように等号（＝）の代わりに＃を用いた式によって与える.

14行目と15行目では，論理演算によって，着陸完了を示す変数 land と，軟着陸の条件（$v \leqq 5$）の成立を示す変数OKが計算されている．論理演算の結果は真が1，偽が0によって表わされる．リストの INTEGRAL 文には，BREAK land という項が付加されているが，これは land の値が真になった時点，すなわちロケットが着地した時点で積分計算を中断することの指定である.

本例の場合はこの中断でシミュレーションは終りであるが，一般には中断時に計算条件の変更を行なってシミュレーションを継続することもできる．積分の中断は，この BREAK 項によるほか，ＥＳＣキーを押すことによって随時行なうことができる．本例ではこの機能を使って逆噴射の調整を行なう.

図4にシミュレーションの様子を示す．刻々表示されるキャラクタグラフはリスト17行目のTREND 文の働きによる．最初は逆噴射を行なわず($u=0$)降下を続行し $t=5$ の時点でＥＳＣキーを押して積分を中断している．中断時にはモデル中の任意の変数の値を調べることができる（図4では h の値を表示)．ここで能力一杯の逆噴射($u=20$）を行なってゲームを継続している.

```
 1: /＊月面軟着陸ゲーム＊/
 2:
 3: VAR h       “高度         [m]      ”. .
 4:     ,v      “降下速度     [m/sec]  ”. .
 5:     ,t      “時間         [sec]    ”. .
 6:     ,u      “逆噴射加速度 [m/sec2] ”. .
 7:     ,g=1.7  “重力加速度   [m/sec2] ”
 8:
 9:      h’’＝－g＋u
10:      v＝－h’
11:
12:      h ＃ 10000； h’ ＃－500
13:
14:      land＝（h＜＝０）   /＊着陸 ！  ＊/
15:      OK＝（v＜＝５）     /＊制限速度内＊/
16:
17: INTEGRAL t[0, 500] STEP 0.5 BREAK land
18: TREND    v[0, 600], h[0, 10000] STEP 0.5
19: OUTPUT   t, v, OK
20: OUTPUT1  t, v, h, u STEP 1.0
21: INPUT    u
```

図 3 例題3のソースリスト

図5はゲーム終了後，ファイルに出力された結果（リスト20行目のOUTPUT 1 文はファイル出力のためのものである）からグラフを作成したものである．なんとか無事に軟着陸に成功しているようだ.

EQUATRAN-M のグラフ作成機能は技術計算専用であるため，円グラフや棒グラフなどは作れないが，片対数・両対数グラフが可能なほか，データ点を滑らかに結ぶスプライン曲線補間，1次～3次の回帰線の表示などの機能がある．また，グラフ中に凡例やコメントを入れることもできる.

3. 開発上のポイント

最後に EQUATRAN-M を開発する上で特に留意した点について触れておきたい.

記述性の高い言語の設計　EQUATRAN-M は数式モデルを記述するための言語であるといえる．記述性が高くかつドキュメント性の良い言語の設計が最大のポイントであると考えた．特に配

```
[  入力データ  ]
u              =0               :逆噴射加速度 [m/sec2]
-----------------------------------------------------------------------------
  t            1:v        2:h
-----------------------------------------------------------------------------
 0             500.0000    |         ·         ·         ·         · 1      2
 0.5000000     500.8500    |         ·         ·         ·         · 1     2|
 1.0000000     501.7000    |         ·         ·         ·         · 1    2 |
 1.500000      502.5500    |         ·         ·         ·         · 1   2  |
 2.000000      503.4000    |         ·         ·         ·         · 1  2   |
 2.500000      504.2500    |         ·         ·         ·         · 12     |
 3.000000      505.1000    |         ·         ·         ·         · 1      |
 3.500000      505.9500    |         ·         ·         ·         ·21      |
 4.000000      506.8000    |         ·         ·         ·         2 1      |
 4.500000      507.6500    |         ·         ·         ·        2· 1      |
 5.000000      508.5000    |         ·         ·         ·      2  · 1      |
 t=5               でESCキーにより中断しました
変数名>h
h              =7478.75         高:度           [m]
[  入力データ  ]
u              =20              :逆噴射加速度 [m/sec2]
 5.500000      499.3500    |         ·         ·         ·  2    · 1        |
 6.000000      490.2000    |         ·         ·         · 2     ·1         |
 6.500000      481.0500    |         ·         ·         · 2     1          |
 7.000000      471.9000    |         ·         ·         ·2     1·          |
 7.500000      462.7500    |         ·         ·         ·2     1·          |
 8.000000      453.6000    |         ·         ·        2     1 ·           |
 8.500000      444.4500    |         ·         ·       2·     1 ·           |
 9.000000      435.3000    |         ·         ·      2 ·    1  ·           |
 9.500000      426.1500    |         ·         ·    2   ·    1  ·           |
```

図 4　例題 3 の実行の様子（一部分）

列変数を含む方程式の記述法には苦心している．幸い，大型計算機用に開発され，十分実用性の実証されている方程式解法ソフト [1] があり，その言語仕様をほとんどそのまま利用することができた．さらに変数名に大文字を区別して使えること，一部日本語を使えるなど，パソコン向けの改良を行なった．

操作性の重視　EQUATRAN-M によってパソコンをいわば「超電卓」として使いたい．このため操作性の向上には，特別に設計上の重点が置かれている．エディタとして既存のものを利用せず，専用のスクリーンエディタを内蔵したのもこのためである．エディタの画面から直接各種のコマンドが実行できる．また，グラフの作成や DOS コマンドの実行もすべて EQUATRAN-M の内部から可能にしている．

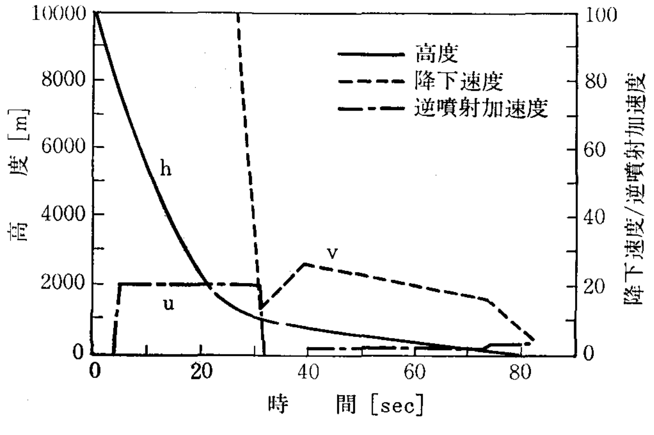

図 5　例題 3 のグラフ出力

充実したマニュアルと HELP 機能

プログラムを作らずに計算が行なえるという方程式解法ソフトは，いままでパソコンになじみのない人にもその利用を可能にする．この意味で，初心者でも 1 人で簡単に使えるよう，マニュアルと HELP 機能の充実に力を入れていることも強調しておきたい．

参 考 文 献

[1] Oguchi, G. and Mitsunaga, M.: A Powerful Language to Solve a set of NonlinearEquations. Preprint of International Congress "Contribution of Computer to the Development of Chemical Engineering and Industrial Chemistry", Paris, Mar. 7-10, 1978

(注)

1) 本ソフトについての詳細は三井東圧化学㈱システム部 (03-593-7286) へ問い合せてください．