

Computer 特に数式処理との関わり, および K_N 方程式とその $N \rightarrow \infty$ の解について

桂 重俊

東北大学名誉教授*

拙い私のためにこのような栄ある席¹⁾を設けて頂いたことに厚く御礼申し上げます。この機会にコンピュータと数式処理 (formula manipulation) の発展との関わりや K_N 方程式のことをお話してみたいと思います。

1 Computer 特に数式処理との関わり

私が computer に関心を持つに至ったきっかけは奇妙なことから始まった。昭和 26 年頃 Rockefeller Institute の Prof. Berlin より一通の手紙をもらった。内容は統計力学に関係することであったが活字の m が n の巾の 1.5 倍, i が n の巾の半分というスペースで、打ち上りが実に綺麗であった。私は好奇心から手紙の返事の追伸にこの手紙を打ったタイプライターはどここの社の何という型番のタイプライターであるかを問合せ、それがインターナショナル・ビジネス・マシーンという会社の Executive



というタイプライターであるという返事を得た。私は当時の研究費でそのタイプが買えるとは到底思わなかったがとにかく是非一度詳細を知りたいと思い、東京へ出張の折に神田にあっ

*skatsura@cat-v.ne.jp

¹⁾編集部により挿入された写真は渡辺隼郎会長よりの感謝状の贈呈

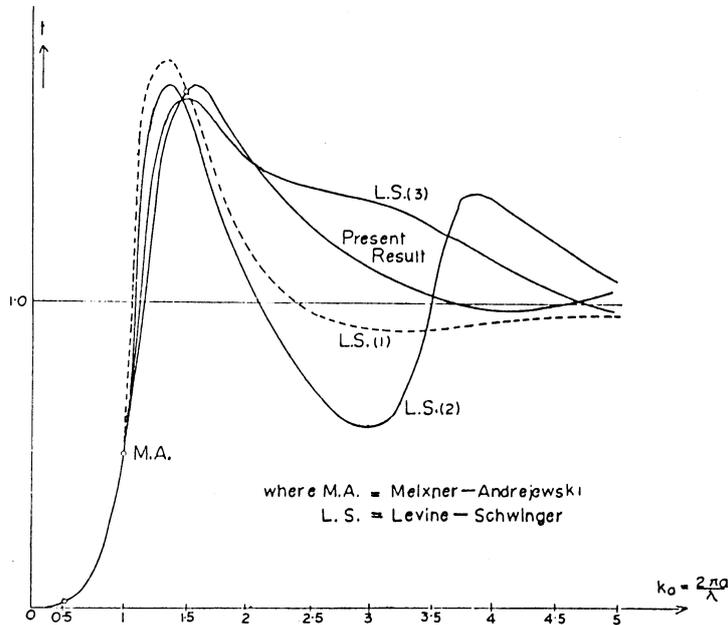


図 1: 円孔による電波の回折の透過係数 t

た間口 2 間位の 2 階建の代理店を探し出した。(IBM という名称になって居らずまたこの会社も殆んど知られていなかった時代である) 代理店にも Executive の実物はなかったが仕様についての話と値段を聞き高嶺の花と諦らめて帰ろうとしたが、帰る間に一体お宅は何を売っている会社かと聞いたところ、会計機であるということで加減、分類集計が主な目的である会計機の説明を聞いた。なお最後に本社では乗除をも行う計算機も作っており、カードに計算手順をプログラムして自動計算が行われるという話を聞いた。

その頃私は応用理学教室において電波の回折の問題を研究していた。空間に一枚の導体の板があり、この板に円形の孔があいているとき、下方から入射した電波のどれだけが透過するかを波長の関数として求めるという問題である。未知関数を不連続積分を含む級数で展開し展開係数を求めるという手法である。未知数 8 - 10 個の連立一次方程式を手回しのタイガー計算機で解くのに 6 - 9 時間を要した。これを 100 個くらい解いて波長に対する透過係数の一本のカーブが書けるという状況であった [1]。10 日位計算して飽きて放っておくと「どこまで出来たかね」と N 先生がこられる。この苦勞を免れる方法はないかと考えていたのであった。インターナショナルビジネスマシンの話を聞いたとき私の求めていたものは正にこれだと思ったのである。

この頃日本でもあちこちで数値計算が行われていた。東大の小谷研究室では五〇台のタイガーを五〇人の女性に回させながら分子積分の表を計算中であった。日本が計算機をもつこ

とは大変重要なことである! それにしても, もっと詳しく電子計算機のことを知らなければならぬ, と思って調べようと思ったが学術雑誌も大学には殆んど入っていない. 各学部からアメリカ文化センターの図書室に日参していた時代である. 当然アメリカ文化センターの御厄介になったが専門雑誌の数も少なかったし, またそこには殆んど電子計算機は登場して居らず, Time や Newsweek を手がかりにしてしらべ, Berkeley の Giant Brains という本を見つけだしたりした. どうにかイメージをつかんだところで世の中には電子計算機というものがある, いつまでもタイガー計算機を回しては諸外国から遅れることは必定であるということを電気, 物理, 数学, 金研等の雑誌会で説いてまわった.

その後数年たって大泉充郎先生より東北大学でも電子計算機を設計製作しよう. ついては君も手伝わないかということで, 私の出来る範囲なら是非お手伝いしたいと申し出, 大泉先生, 本多波雄, 野口正一, 小野寺大君等のグループが出来上った. その頃は日本のあちこちで電子計算機の設計が開始された時期である. 先づ各所の見学から始めようということで東大工 (TAC), 東大理 (PCI), 電々通研 (MI), 電気試験所 (MarkII), 富士フィルム (FUJIC), 日電 (NEAC1101), 有隣電機 (FACOM128) 等を小野寺君や野口君と訪ねて歩いた. リレー式である MarkII のみが実際に稼動して居たが, 真空管式やパラメトロソ式の方はメモリ 32 ワードの MI が動きはじめて Bootstrap が 12 ワードかかりこれを何ワードつめることが出来るかということが問題であった時代であった.

この頃ノイマンの法則というものがあつた. お前のところの計算機は何時出来るかときくと, どの大学でも, どのメーカーでも半年後と答える. 半年後にきいてみるとまた同じ答えが返ってくる. これがストアプログラム方式の生みの親 J.von Neumann の法則であつた. SENAC もこのノイマンの法則の洗礼をしばらく受けたのち東北大でも日電でも不眠不休で何人かの病人が出たのを克服し, 昭和 33 年 11 月やっと公開に漕ぎつけることが出来た. 公開の朝 6 時頃後藤英一さんが大泉教授室にやって来た. たむろしていた我々に向つて「やはり昨夜は徹夜だったんでしょ. 寝台で来たので駅からまっすくに来ましたが, 今, 計算機室で大泉教授室がロックしてあれば見学する必要はないと思って来ましたよ. ハハハ」と笑つた. 実際前日まで故障の直らなかつた SENAC は公開前夜の三時過ぎ, やつと原因が分つて朝の 5 時に動き出したのであつた.

計算機が役に立つことは物理学者, 工学者の間に浸透してきたが, $1/2 + 1/3 = 0.833333$ で, また 0.000001 を 1000000 回加えても 0.9999976 にしかならない. このため計算機の発展に対して一番冷たかつたのは数学者であつたのではあるまいか. これをなんとかしたいと有理数計算のソフトを情報処理学会に遠藤恵子君, 高橋理君とともに出したのは SENAC のメモリ 1000 ワード = 6kB の時代であつた ([2], 1961). 十数年後電通研の AL が発表されたとき, これが日本における数式処理の最初の論文であるといわれたときには驚いた.

1961 年渡米してオレゴン大学で統計力学の研究に従事した. このとき前記小谷先生の分子積分表の付録にある置換群の既約表現行列の表が, $N = 6$ のはじめの方までしかなかつたので $N = 8$ まで計算した.algorithm は 1935 年山内恭彦先生により見出だされていたが労力不足で計算の出来ていなかったものである.program をオレゴンの IBM1620 で作り, Seattle まで車でカードを運び, Washington 大学の IBM704 で計算して 317 ページの表が出来た. 発表する雑誌がなくてこまっていたら ADI(American Documentation Institute) に登録すれば

よいということをお教えられたのでここに登録し、ここに登録したということをお J.Chem.Phys. に載せた。数年後 Baker が $N = 12$ まで計算しやはり ADI に登録したという手紙をもらった。

その後研究室で数式処理システムを作ろうと思うにいたった。1972 年の卒業研究で石黒新一君が FORTRAN で数式処理システムを作り、 $\log x$ を x で微分して $1/x$ になったという発表に対して、T 先生から「君、それは計算機がやったんだろ、君は一体何をしたんだ」という質問を受けて憤慨したことを思い出す。これも 5 回微分におよんでメモリオーバーになった。大型計算機センターの利用者当たりのメモリーが 8kW の時代であった。1975 年滝沢誠君は FORMAS をつくって大磯のプログラミングシンポジウムで報告した。1978 年鈴木正幸君がつくった SLISP の上の SREDUCE は東北大大計の NEAC にのってながくサービスに供せられるようになった。この間阿部芳彦君の努力はわすれられてはならない。

1970 年代の後半 H 先生が東北大で講演されたとき「データベースや数式処理が役に立つ日が近い将来来るとは思われない」といわれた。私はデータベースについては同感であったが数式処理については反対意見であった。量子力学の進歩が量子論の創始者 Planck や Einstein を追い越していったように計算機の進歩は日本の計算機界のパイオニア H 先生の期待を越えて進歩しつつあるのを感じたのである。其後後藤英一教授は hash 機能を用いた HLISP を創始してこれを七大学に移植し、その上に Hearn からもらった Reduce をのせられた。日本の数式処理に対する認識を向上させた寺島元章さんなどの G グループの行脚の功績は大きかった。東北大では鈴木君の Sreduce を動かしていた。後藤さんの科研費グループ、のち佐々木建昭さんの理研の記号数式処理研究会グループが日本の数式処理の中心であった。これは大体利用を中心としたグループであったが、後に algorithm のグループ、implement のグループ、教育のグループに分かれ、合同して日本数式処理学会が創立されることになる。

Reduce はソースを公開したのでユーザーがその発展に貢献した。無限多倍長演算 (佐々木建昭氏による) が入り default が有理数演算となったので $1/2 + 1/3 = 5/6$ となった。はじめ不定積分は入っていなかったが後に装備された。(私が電機大にいったとき鎌田誠君と Reduce3.3 の bug report とその lisp による修正を数式処理通信に出し Hearn に送った (1991)。Hearn より次に出る 3.4 では修正したという返事をもらった。) Reduce の生みの親 A.C.Hearn が 1978 年東北大で Risch の algorithm について講演を行ったとき、あと 5 年で数式処理システムは 1 立方フィートの箱に入るであろうと結んだ。私は too optimistic! と思ったが彼の予想は二三年おくれて実現した。

数式処理システムとしてはしばらく上記各大学の Reduce と東大大型センターの Macsyma くらいであったが、近年 Mathematica, Maple, Derive と発表され、いずれも商業政策によってパソコンの進歩とともに世に普及しつつある。特に関数のグラフ表示が人々を魅了した。1994 年 Risa/Asir が公開された。日本で生まれたソフトとして世界に誇るべきものと思う。いつか NHK スペシャルで山本卓真氏が戦後の日本の誇りとして富士通のコンピュータ技術のことを挙げておられたが Risa/Asir はなかでも誇るべきものであることを忘れないで頂きたい。Mathematica で私が最初に試みた問題は超幾何関数 $\text{Im}_2F_1(1/2, 1/2, 1, x)$ の計算である。ver2.2 では解がでなかった。ver2.3 では誤った解がでた。ver2.31 に至って初めて正解ができるようになった。私が Mathematica に望むのは無給無職の元教員に対して Student Version の購入を認めることである。

2 KFIFG 方程式

数式処理システムはそのアルゴリズム面の発展から近頃は計算機代数 (Computer algebra) といわれるようになった. その問題のひとつとして KFIFG 方程式がある. これはスピングラスの問題から発生した. 強磁性物質と反強磁性物質を混合すると強磁性でも反強磁性でもないスピングラスという物質があらわれる.

図 2 にスピングラスの実験データと我々の理論による相図 [3] を示す. 定性的にきわめてよい一致を示しているといえるであろう.

実在格子を Bethe 格子 (Cayley tree) で代表させ, この上のランダムイジングモデルを有効場の方法で取り扱ったとき次の代数方程式が得られる [5, 4].

$$\sum_{k=-N}^N u_k u_{n-k} = u_n \quad |n| \leq N-1 \quad (1)$$

但し

$$u_k = 0 \quad |k| \geq N+1 \quad (2)$$

$$\sum_{k=-N}^N u_k = 1 \quad (3)$$

$$u_k = u_{-k} \quad (4)$$

とする.(1) - (4) より

$$u_N = \sum_{n=N}^{2N} \sum_{k=-N}^N u_k u_{n-k} \quad (5)$$

が得られることに注意しておく. これは Katsura - Fukuda - Inawashiro - Fujiki - Gebauer 方程式とも言われるべきものであるが数式処理 (計算機代数) グループの間では Katsura - N 方程式という名で呼ばれている. (1) - (4) を辞書式順序による Groebner 基底の方法で解くと

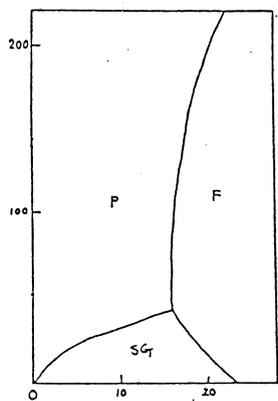
$$F_N(u_0) = 0 \quad (6)$$

$$u_k = f_{Nk}(u_0) \quad (7)$$

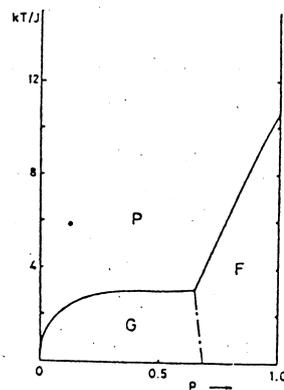
の形にとける. F_N は u_0 の $2N$ 次の代数方程式で f_{Nk} は u_0 の $2N - 1$ 次の多項式であるので (6)(7) がもとめられればあとは代数方程式の解法に帰する. 例えば

$$\text{katsura1} := [2 * u_1 + u_0 - 1, 2 * u_1^2 + u_0^2 - u_0] \quad (8)$$

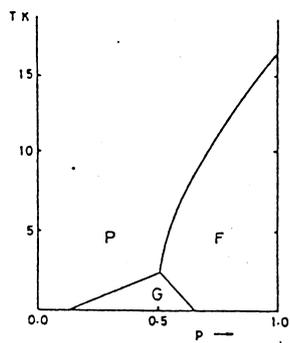
$$\text{katsura2} := [2 * u_1 + u_0 + 2 * u_2 - 1, (2 * u_0 + 2 * u_2 - 1) * u_1, 2u_1^2 + u_0^2 - u_0 + 2 * u_2^2] \quad (9)$$



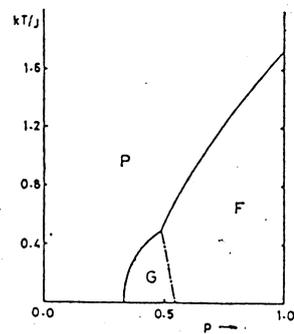
a)



b)



c)



d)

図 2: スピングラスの相図 a)AuFe 合金実験 b)AuFe 合金理論 c)Eu_pSr_{1-p}S 実験 d)Eu_pSr_{1-p}S 理論

$$F_2 = 21 * u_0^4 - 46 * u_0^3 + 34 * u_0^2 - 10 * u_0 + 1 \quad (10)$$

$$4f_{21} = 4 * u_1 = -42 * u_0^3 + 71 * u_0^2 - 34 * u_0 + 5$$

$$4f_{22} = 4 * u_2 = 42 * u_0^3 - 71 * u_0^2$$

N の増すにつれて急激に難しくなる。 $N = 5$ は 1984 年理研の VAX を 24 時間用いて解が出なかった。多くの人のアタックの後 1989 年に森継修一さんが東大の大型機を数時間かけて解いた。" $N = 1$ は高校の数 I の問題, $N = 2$ は大学入試の難問, $N = 4$ は手計算では到底無理, $N = 5$ は目的のためには手段を選ばず計算機を動かしてようやく解いた"といわれたもので、Computer Algebra における標準問題 (CPU および algorithm の競争のための) と見做され、PoSSo (Polynomial Solving System) の Web に載せられている [6]。 (はじめ各 N に対して別々に示されており誤りがあったので私が一般式を post した。) u_k はもとの問題において確率の意味をもつので $0 \leq u_k \leq 1$ の実数解のみを問題とする。得られた解を横軸 $h = k/N$ に対して図示すると図 3 のようになる [7, 8]。

N の約数の数を $\omega(N)$ とすると、物理的に意味のある解の数は、 $\omega(N) + 1$ であり、 N に対する解は N の約数に対するすべての解を含んでいる。

1996 年 Pentium150 を載せた Gateway2000 において K4 が Reduce 3.5 で 25 秒, Maple V で 131 秒, Asir で 0.76 秒 (Mathematica V2.2 は答え出ず) であった。K5 に対しては Reduce, Mathematica, Maple は答えが出ず, Asir は 1077 秒で答えがでた [9]。2000 年 6 月 1 日 (昨日) には K5 が Pentium300 により 71 秒, hgr では 12 秒。図 4 に K5 の解のはじめの 1 ページを掲げる。この進歩は CPU のそれとともに Asir の Algorithm の進歩によるもので野呂正行, 竹島卓, 横山和弘氏によるものである。(Faugere の詳細が分からないのが残念である。)

3 KFIFG 方程式の $N \rightarrow \infty$ の解

図 3 より $N \rightarrow \infty$ の極限の解は両端及び中央にある 3 本の δ 関数と、 $-1 < h < 1$ の間の連続関数の和になるであろうと予測される。本節においてこの極限分布を求めることを考える [8]。

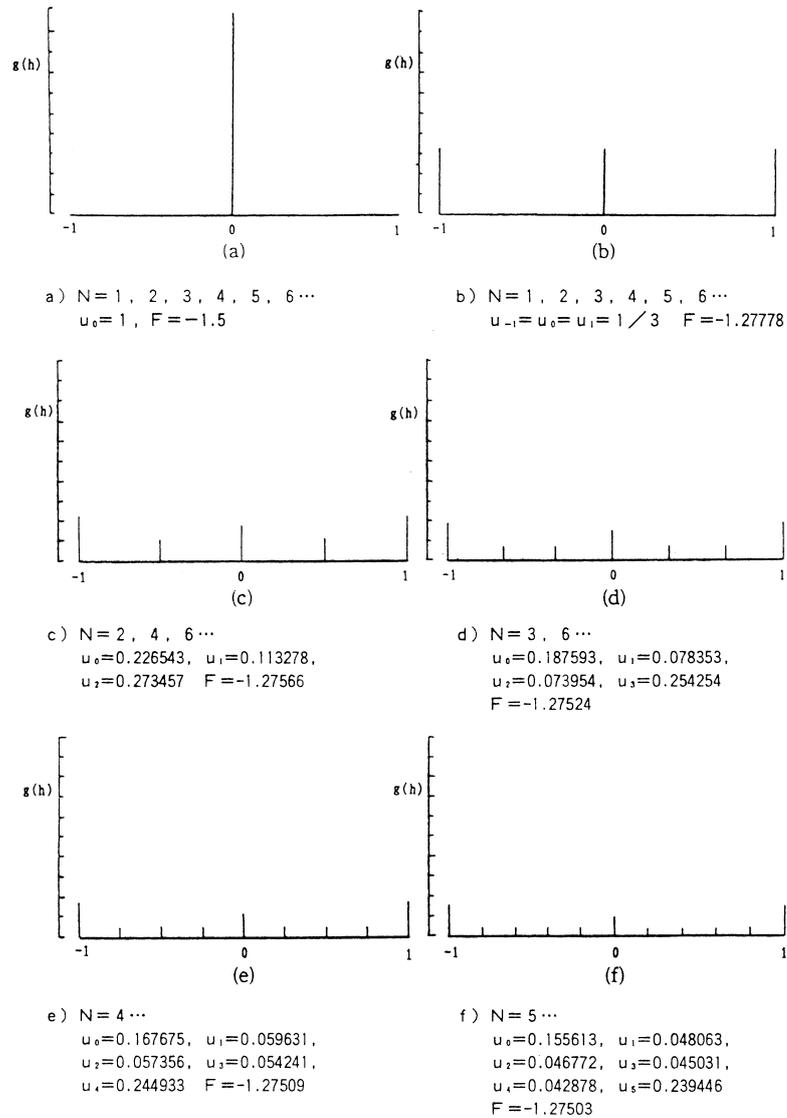
横軸に k , 縦軸に k' をとって $u_k u_{k'}$ である k, k' の組に をつけると

図 5 のようになる ($N = 3$ の場合)。(1) は $k + k' = N - 1$ の場合は、この格子点の $u_k u_{k'}$ の積を斜め 45° にとった和が u_n であることを示している。また図 5 の右上の三角部分のにおける $u_k u_{k'}$ の和が u_N であることを示している。 $N \rightarrow \infty$ の場合 (1), (5) の和分方程式は積分方程式になるであろうと考えてこれを求める。

$$h = \lim_{N \rightarrow \infty} (k/N) \quad (11)$$

$$g(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} u_k$$

$$|h| \geq 1$$



$N = 1, 2, 3, 4, 5$ に対する $g(h) = u_k$. [1] [17].

図 3: $N = 1, 2, 3, 4, 5$ に対する u_k

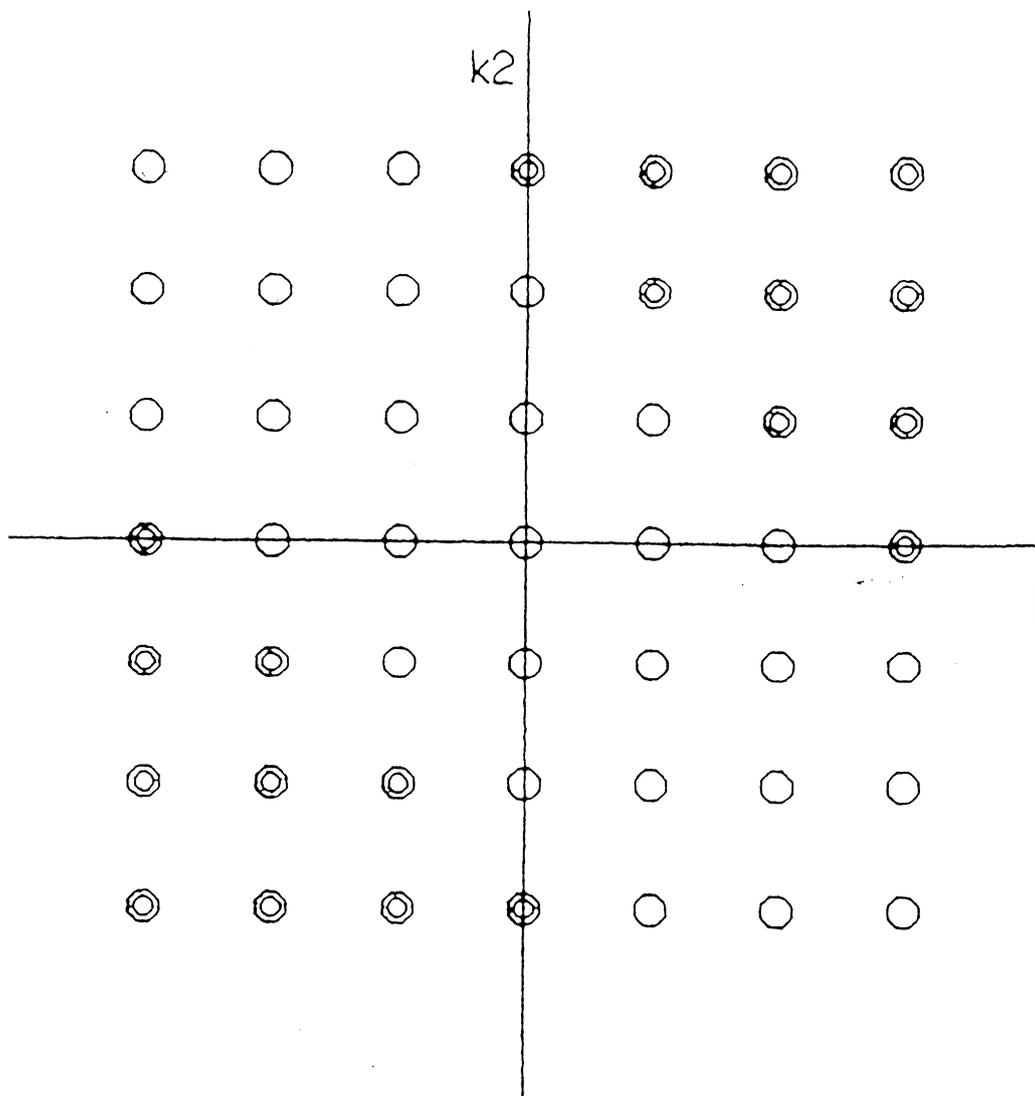


図 5: k, k' 平面における (1),(2) の和の範囲, $N = 3$ の場合. $k = -2, -1, 0, 1, 2$ に対しては左上から右下への 45° の直線部分の和. $k = -N$ に対しては左下の三角部分の和. $k = N$ に対しては右上の三角部分の和

とすると $|h' + h''| < 1$ のときは

$$g(h) = \int g(h')g(h'')\delta(h - (h' + h''))dh'dh'' \quad (12)$$

である. 本論文においては $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty}$ を \int と記すことにする.

$h + h' > 1$ のときは

$$g(h) = \int g(h')g(h'')\delta(h - 1)dh' \quad (13)$$

$h' + h'' > 1$

$h' + h'' < -1$ のときも同様.

(12)-(13) をまとめて

$$g(h) = \int g(h')g(h'')\delta(h - f(h' + h''))dh'dh'' \quad (14)$$

$$\begin{aligned} f(h) &= \operatorname{sgn}(h) \quad 1 \leq |h| \\ &= h \quad -1 \leq h \leq 1 \end{aligned}$$

とかける.

$g(h)$ の Fourier 変換を $S(x)$ とおく

$$g(h) = (1/2\pi) \int S(x) \exp(ix) dx \quad (15)$$

(15) を (14) に入れると

$$\begin{aligned} g(h) &= (1/2\pi)^2 \int S(y) \exp(ih'y) S(z) \exp(ih''z) \\ &\quad \times \exp(ix - if(h' + h'')x) dh'dh'' dydz dx \end{aligned} \quad (16)$$

ここで $h' + h'' = \eta$ とおくと

$$\begin{aligned} g(h) &= (2\pi)^2 \int S(y) S(z) \exp(ix) \delta(z - y) \\ &\quad \times \left[\int_{-\infty}^{-1} \exp(i\eta y + ix) d\eta + \int_{-1}^1 \exp(i(y-x)) d\eta + \int_1^{\infty} \exp(i\eta y - ix) d\eta \right] dx dy dz \end{aligned} \quad (17)$$

(17) の [] 内を計算すると

$$S(x) = (1/2\pi)^2 \int K(x, y) [S(y)]^2 dy \quad (18)$$

$$K(x, y) = \frac{2 \sin(y-x)}{y-x} - \frac{2 \sin(y-x)}{y} + 2\pi \delta(y) \cos(x) \quad (19)$$

を得る.

積分方程式の解法

ここで Bessel 関数の加法定理

$$\frac{\sin(y-x)}{y-x} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)j_n(x)j_n(y) \quad (20)$$

($j_n(x)$ は n 次の球 Bessel 関数) を用いて (19) を変形し (18) に代入する. 非線形積分方程式の解 $S(x)$ を

$$S(x) = a + b \cos x + \sum_{n=0}^{\infty} d_{2n}j_{2n}(x) \quad (21)$$

とおく.

(20),(21) を (18) に代入し j_n の二重級数のべきの両辺の係数を等しいとおく. 必要な定積分の値を留数計算でもとめる. 両辺の未定係数をそれぞれ比較すると $a, b, c, d_n (n = 0, 2, \dots)$ の連立代数方程式を得る. d_4 以上を省略すると 4 変数の 2 次方程式になる. これを再び Groebner の方法で解くと a の 8 次方程式が得られ, b, d_0, d_2 は a の 7 次式であらわされる, これを解いて物理的に意味のある解として図 4 の (a),(b) の解の他に

$$a = 0.10683, b/2 = 0.21843, d_0 = 0.45631, d_2 = 0.05759 \quad (22)$$

を得る. $S(x)$ の逆 Fourier 変換を行うと, 球 Bessel 関数の Fourier 変換が Legendre 関数になることを用いて

$$g(h) = a\delta(h) + (b/2)[\delta(h+1) + \delta(h-1)] + d_0 - (d_2/4)(3h^2 - 1) \quad (23)$$

となる.(21) を d_2 までで打ち切り,(22) を (23) にいれて図示すると図 6 のようになる. これが図 4 の $N \rightarrow \infty$ における極限分布である.

私は K_N 方程式を提出したことよりはこれを解いたことをもって自分の仕事と見做されたいと思っている.

4 おわりに

$1/2 + 1/3 = 5/6$ にはじまるこのような, K_N のような問題が, 自宅の机上でも出来るようになったことを考えると涙がでるほど嬉しい. 代数方程式を解いたときはソフトウェア研究への無理解に対して当時猛反発を感じた T 先生の質問が現実になったのかなあと感じるこの頃である.

時間もなくなってきましたのでそろそろ幕を閉じたいと思います. 学問というものは一歩一歩踏台に登り, 梯子をかけて築き上げて行くものです. 皆さんも先人の作った踏台に上り, 梯子を上ってビルを建てて下さい. ビルが出来上ったとき, 梯子も踏台もとり外され, 消えてしまうかも知れません. そのとき, いま出来たビルはまた次のビルのための梯子と踏台になるのです.

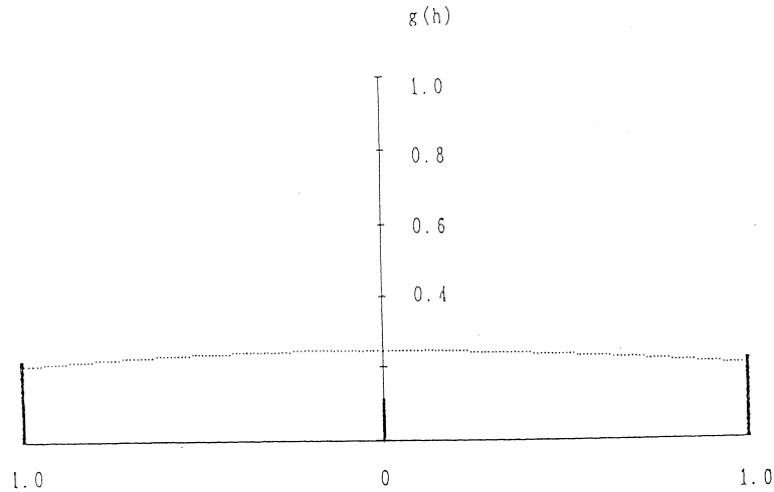


図 6: $N \rightarrow \infty$ における有効場分布関数 $g(h)$

私を支えて下さった諸先生, 数式処理グループのメンバー, 研究を共にした後輩, 秘書の方々, に感謝して拙い話をおわりたいと思います.

小さき梯子

幾年を日に幾時間回しつぎ一本のカーブ画きたることも
 「完成は半年後」と誰も誰もノイマンの法則かつてありにし
 公開の前夜の徹夜知れば足ると早朝訪い来し後藤英一
 Pentium 130 の世に懐う「わが青春の 4004」
 GOTO が知能の始めと教えしかいま GOTO は諸悪の根元
 タルタリアの怨念なども語りつつ REDUCE ASIR ノートに積みて
 出題をしたるのみにて名のつきし Hilbert の問題スピングラス方程式
 二十四時間かけて得ざりしその解がいま数秒で指の先より
 かのビルの足場の一つ五年前わが作りしは小さき梯子
 いま作るこの踏台は誰が踏まむわれも踏まめど他人よ踏めかし

参 考 文 献

- [1] Y.Nomura and S.Katsura, Diffraction of electromagnetic waves by circular plate and circular hole, *J.Phys.Soc.Japan* **10** (1995) 285-304.
- [2] K. 遠藤 T. 高橋, S. 桂, 有理数の四則および有理数係数多項式の計算, 情報処理学会全国大会 (1961) 25.
- [3] S.Katsura and A.Matsuno, The transition from the spin glass to the ferromagnetic state in the bond-random Ising model in the face-centred cubic lattice, *Physica A* **122** (1983) 483-488.
- [4] S.Katsura and A.Matsuno, Phase diagram of a spin glass of $\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}\text{S}$, *phys. stat. sol.(b)* **119** (1983) 73-79.
- [5] S.Katsura, W.Fukuda, S.Inawashiro, N.Fujiki and R.Gebauer, Distribution of effective field in the Ising spin glass of the $\pm J$ model at $T = 0$, *Cell Biophysics* **11** (1987) 309-319.
- [6] PoSSo (Multivariate polynomials),
<http://www-sop.inria.fr/saga/POL/BASE/2.multipol/> 多くの問題が入っており katsura.htm もこの中にある.
- [7] S. 桂, M. 清野, ある種の非線形積分方程式とその応用, *統計数理* **40** (1992) 195-209.
- [8] S. 桂, KFIFG 代数方程式の $N \rightarrow \infty$ における解について, 東北科学技術短大紀要, **2** (1995) 1-9.
- [9] S. 桂, S. 鈴木, T. 竹島 Reduce, Mathematica, Maple, Asir - 初級計算および Katsura Equation -, 東北科学技術短大紀要, **3** (1997) 62-72.