

## 方程式解法ソフト

三井東圧化学

EQUATRAN-G(Windows版)の  
威力と使い方

横山 克己

数値計算の簡易言語とでもいうべき EQUATRAN (イコートラン) シリーズの中から、そのWindows版を紹介します。初めにその応用や機能を説明し、実際に例題をあげて操作した使用レポートをお伝えします。

## 1. 技術計算の悩みを一気に解決

昨今のパソコンの低価格化で、その普及が急速に進み、2, 3人に1台が、あるいは先進的な企業ではひとりひとりにパソコンが配布されています。このような状況下では、ワープロや表計算ソフトは仕事のツール(道具)として日常化してきています。

また、表計算ソフトやデータベースソフトに代表される、利用者が自らデータを操作できるようなアプリケーションが整備されてきており、利用者が主体となったシステムの構築、いわゆるEUC(エンド・ユーザー・コンピューティング)が進むと予想されています。

一方、技術計算の分野に目を向けると、大型計算機の時代から技術者・研究者自らFORTRANあるいはBASICを使ってプログラムを作り、問題を解決してきました。すでにEUCが行われていたともいえます。しかし、本来プログラマーでないわけですから、満足できるプログラムが完成するまでには、多くの時間と労力が必要になっていました。

ここで紹介するEQUATRANはこのような技術計算の悩みを一気に解決してくれるソフトです。技術計算をプログラミ

ングせずに簡便に行えるソフトで、「数値計算の簡易言語」といえるものです。今回はこのWindows版であるEQUATRAN-G for Windows(以下EQUATRAN-Gと表記)について紹介します。

## ●EQUATRAN-Gの基本とその応用例

EQUATRAN-Gの基本となる機能は、方程式の解法です。方程式をそのまま入力すると、直接数値解を得ることができます。たとえば、第1図のような5元連立方程式を入力したのち実行を指示すると、図の下のような計算結果を得ることができるのです。

しかし、単に方程式が解けると言われても、実際の仕事にどのように使えるのか、なかなか結びつかないかもしれませんので、そのあたりを説明しましょう。

一番身近な応用は、データから近似式を作るカーブフィッティングでしょう。観測データや文献などのデータから近似式を求めるのに最小2乗計算をし、データと近似式をグラフにプロットして評価できます。理系の学部を卒業した人なら必ずや経験があるでしょうし、実験を伴う研究業務にはつきものといえるでしょう。

線形・非線形連立方程式を使えば、時間依存のない電気回路の計算、化学平衡計算、管路網の計算やプロセスの物質収支計算などのいわゆるバランス計算を解くことができます。

連続系のダイナミックシミュレーションは、常微分方程式でモデル化できます。振動系のシミュレーション、電気回路の過渡現象の解析、制御系の解析や設計、

/\* 5元連立方程式 \*/

$$\begin{aligned} A + B - C + 2D + E &= 7 \\ A + 6B + 2C - 3D &= 12 \\ 2A - B + 5C - D + 3E &= -2 \\ -A - 2B + C - 2E &= 3 \\ A + B - 5C + D - 4E &= 1 \end{aligned}$$

OUTPUT A, B, C, D, E

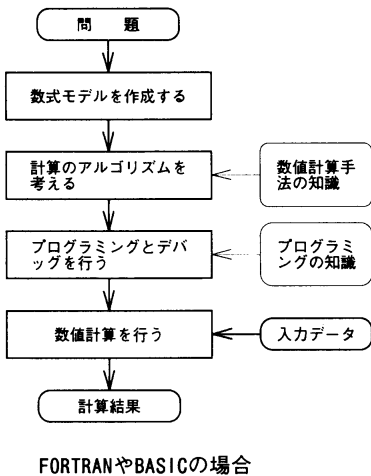
```
<< 計算結果 >>
A           = -1.264706
B           =  3.738754
C           =  3.624567
D           =  5.472318
E           = -2.794118
```

第1図 5元連立方程式の計算

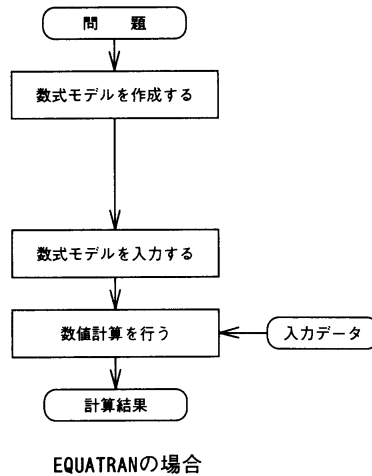
反応速度の検討、反応器のようなプラント機器の設計、血液循環系のシミュレーションや社会システムのシミュレーションなどがあります。

ボールをある初速度で飛ばした場合、重力や空気の抵抗を考慮した運動方程式を使ってその飛跡をシミュレーションすれば、これはもうゴルフゲームの世界です。また、司令船を月面に軟着陸させるゲームがありましたが、これなども引力とロケットの推力を考えてたてた運動方程式でシミュレートできるわけです。このように、数式モデルでいろいろな現象をシミュレートできることは、意外に好奇心をかき立てるものです。

●EQUATRAN-Gとプログラミング言語との違い



FORTRANやBASICの場合



EQUATRANの場合

第2図 問題解決の手続き

本誌の読者は、プログラムを作った経験のある人が多いと思いますので、プログラミング言語とはどこが違うのかを説明しましょう。

第2図は問題を解く場合のアプローチの違いを示しています。左側がFORTRANやBASICの場合です。数式モデルを作成したら、まず計算の手続き、すなわちアルゴリズムを考えます。このとき、線形・非線形方程式や常微分方程式などが含まれる場合は、それぞれの数値計算の手法（たとえば、常微分方程式を解くのであればルンゲ・クッタ法など）の知識が必要になります。次にそのアルゴリズムにしたがってFORTRANやBASICによりプログラムを作成し、正しく計算できるように誤りを直します（デバッグします）。今度はその言語の文法などプログラミングの知識が要求され、また多くの時間と労力が必要となります。

これに比べ右側のEQUATRAN-Gを使うと、一番やっかいな部分であるアルゴリズムを考える段階と、プログラミングおよびデバッグの段階を自動化できます。数式モデルを正しく入力さえすればよいので、欲しいときに答えが得られると同時に、各人が抱えている本来の専門の仕事に専念できることになります。

## 2. EQUATRAN-Gの機能

つぎにEQUATRAN-Gの各機能をすこし細かく見ていきましょう。

### ●方程式解法機能

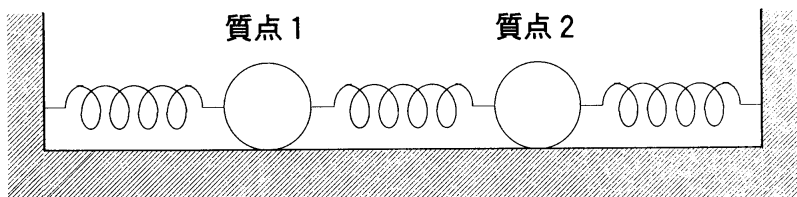
EQUATRAN-Gでは、線形連立方程式、非線形連立方程式、常微分方程式（高階または非線形を含む）の初期値問題、そして最適化計算、最小2乗法計算（非線形を含む）を数値的に解くことができます。

この場合、方程式はそのままの形で入力すればよく、変形したり、解く順序に並び替える必要はありません。解く順序は、EQUATRAN-Gが自動的に生成してくれます。

線形・非線形連立方程式の場合は、そのまま入力するだけです。特に非線形の場合は、一般に直接解くことができないので、繰り返し収束計算が必要となりますが、EQUATRAN-Gでは線形部分や非線形部分を判断して、それぞれの計算手法を自動的に組み込みます。なお、ユーザーが繰り返し収束計算の方法を指定をすることも可能です。

常微分方程式では、微分項はアポストロフィ（'）を微分記号として

$$\frac{dx}{dt} \rightarrow x', \quad \frac{d^2x}{dt^2} \rightarrow x''$$



第3図 連立振動

と書き表せばよいので、高階の方程式でもそのまま扱うことができます。

最適化計算とは、評価式の値が最大あるいは最小となるように、一つあるいは二つ以上の独立変数の値を求める問題ですが、これも独立変数と評価変数を指定するだけです。

EQUATRAN-Gでは、これらの単独の問題のほかに、これらの方程式が混在した複合問題、たとえば常微分方程式と線形・非線形連立方程式が混在した問題、最適化計算の中に非線形連立方程式が含まれるような問題なども、扱うことができます。さらにユーザー関数を利用すれば、高度な複合問題（多重積分、2点境界値問題、動的システムのパラメータ同定問題、MINIMAX問題など）も扱えます。

### ●方程式記述機能

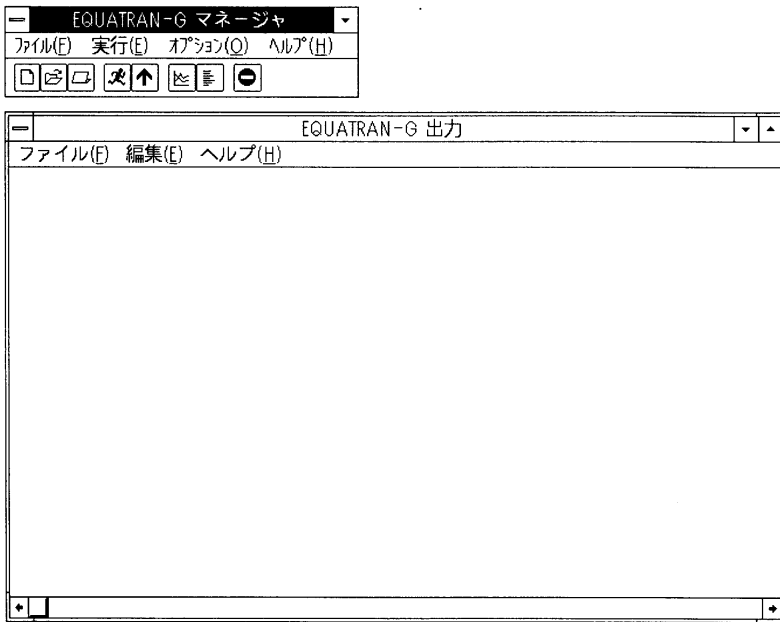
数式モデルを簡潔に記述するために、つまり数式モデルの表現力ですが、

- ・配列変数（1次元および2次元）
- ・組み込み関数（対数、指数、三角関数など36種類）
- ・数表（変数間の関係が図や表として与えられている場合に、数表として定義し、方程式の中で関数のように利用）
- ・条件付きの式（条件によって場合分けされるような式）
- ・ユーザー関数とマクロ（規模の大きな問題のモジュール化）

などの記述機能が用意されています。

### ●グラフ作成機能

片対数・両対数グラフ、スプライン曲線による補間、1～3次式による近似曲線など、科学技術分野向きのグラフ機能が用意されています。自動設定機能により、簡単にグラフが作れ、しかも、各種



第4図 マネージャパネルと出力ウィンドウ

のメイクアップ機能により、完成度の高いグラフが得られます。画面に表示されたグラフはそのままプリンタに任意のサイズで出力できます。

#### ●レポート作成機能

レポートの形に作成したテキスト（フォーム）中に、計算結果を任意の位置に、任意のフォーマットで埋め込むことができます。これにより、レポートの作成が容易にできます。

### 3. <例題> 連成振動

では、実際に使ってみましょう。例題として、つぎのような振動の問題を取り上げます。

3本のバネと二つの質点を一直線になるように滑らかな水平面上に置いて、第3図のようにつなぎ両端を固定する。一番左の質点（質点1）を右に0.02m動かして放した後の各質点の振動を計算せよ。

質点の質量mはいずれも0.1kg、バネの質量は無視しても差し支えないくらい小さく、弾性定数kはいずれも0.1N/mとし、また、つり合いの状態ではバネは伸び縮みのない自然な長さになっているものとする。

#### ●数式モデル

むかし勉強した物理を思い出してください。バネといえばフックの法則が付きものです。バネやゴムなどを引いたり押ししたりすると、その変形をもとに戻そうとする弾性力が働きますが、この弾性力は変形量に比例するというあれです。思い出しましたか。

任意の瞬間での各質点の位置を、静止位置から右に測って $x_1, x_2$  [m]変位しているとする

質点1に働く力は  $-k x_1 + k (x_2 - x_1)$   
 質点2に働く力は  $-k (x_2 - x_1) - k x_2$

ですから、運動方程式は

$$m \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -k x_1 + k (x_2 - x_1) \dots (1)$$

$$m \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -k (x_2 - x_1) - k x_2 \dots (2)$$

になります。

時間 $t=0$ での状態（初期条件）は、質点1が右に0.02m変位して静止していますので

$$x_1 = 0.02, \quad dx_1/dt = 0$$

$$x_2 = 0, \quad dx_2/dt = 0$$

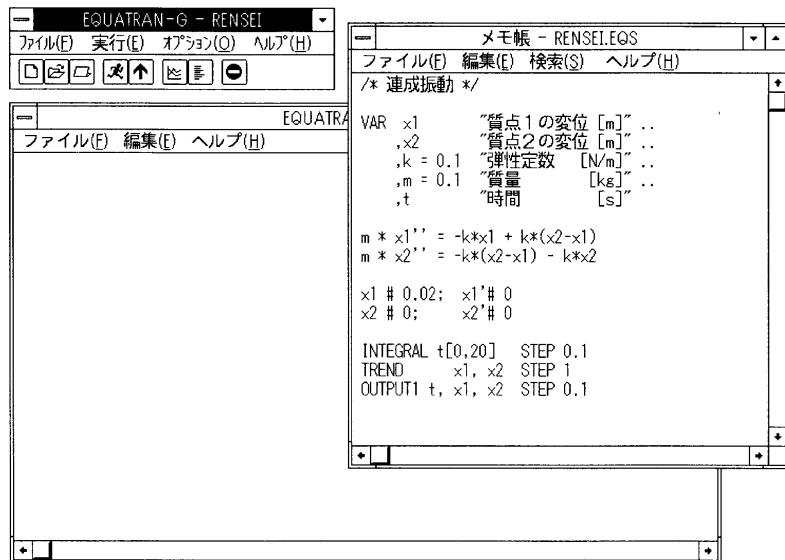
となり、(1)、(2)式をこの初期条件で解けばよいことになります。

#### ●ソーステキストの作成と計算の実行

EQUATRAN-Gを起動してみましょう。

第4図のように、マネージャパネルと出力ウィンドウのふたつのウィンドウが開かれます。EQUATRAN-Gはいくつかのプログラムで構成されていますが、マネージャパネルは各プログラムに実行を指示したりして、全体をコントロールする働きをします。出力ウィンドウは計算結果などを出力するためのウィンドウです。

問題を解くために数式モデルを入力して、ソーステキストを作成します。マネージャパネルのメニューの下には八つのボタンがあります（ツールバーと呼んでいます）が、一番左側の「新規作成」ボタンをマウスでクリックします。さらにファイル名を指定すると、第5図のよう



第5図 メモ帳によるソーステキストの入力

にエディタとしてメモ帳が開かれますので、ここにソーステキストを入力していきます。

3~7行目のVAR (VARIABLEの略)文では、変数の定義と弾性定数や質量の値を指定してあります。実は、このようなスカラー変数はBASICと同じように定義を省略できますが、変数の後ろに付けた説明項がなかなか便利に使われますし、後からこのソーステキストを見たときに分かりやすくなります。

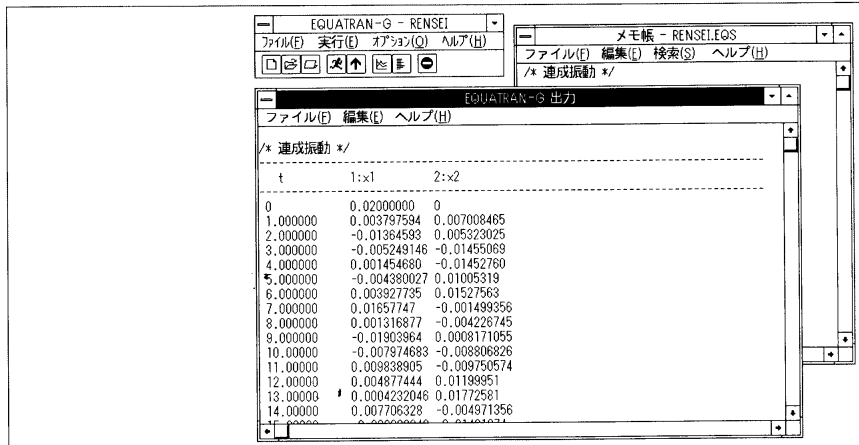
9~10行目に(1), (2)式の微分方程式を記述してありますが、方程式がそのままの形で記述されているので説明はいらなんでしょう。15行目のINTEGRAL文が積分計算の指定です。時間 t について、0 から20まで積分きざみ0.1で積分することを指定しています。また、12~13行目には初期条件を記述してあります。

16行目のTREND文と17行目のOUTPUT1文はそれぞれ出力に関する指定で、前者はあとで示す積分経過の画面出力、後者はグラフ化するためのファイルへの出力です。

このソーステキストを実行して解いてみましょう。マネージャパネルの左から4番目の「ラン」ボタンをクリックすると、第6図のように出力ウィンドウに計算結果が表示されます。これがTREND文による出力で、積分の途中経過を示しています。

### ● グラフ表示

数字の羅列では変化の様子がつかみに



第6図 出力ウィンドウに表示された計算結果

くいですね。そこで、計算結果をグラフ化してみることにします。マネージャパネルの6番目の「グラフ」ボタンをクリックしますと、どの変数でグラフ化するかを聞いてきますので、横軸に t を、縦軸に X1 を指定します。すると、第7図のようなグラフウィンドウが開かれてグラフが表示されます。自動設定の機能により変数名の指定のみでこれだけのグラフができてしまいます。プロットするもうひとつ変数 x2 を [設定] - [変数名] コマンドで追加します。

あとは、自分の気に入るように編集してやりますが、対応するところ(たとえば、軸の下限値を変更するのであれば、軸の近傍)でマウスをダブルクリックすると、修正用のダイアログボックスが表示されますので、簡単に編集ができます。編集したあとの結果を第8図に示しました。

なかなか複雑な動きですが周期的な振動になります。このままでは永久に振動

を続けてしまいますが、現実には摩擦力などが働き減衰することになります。

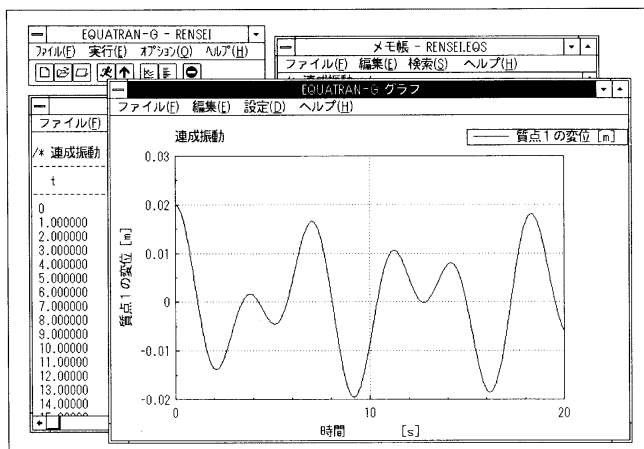
ここに示した例題は式の数が四つしかない簡単な例ですが、EQUATRAN-Gは方程式の数1000を超えるような問題でも解くことができることを申し添えておきます。

## 4. 盛んになるツールの活用

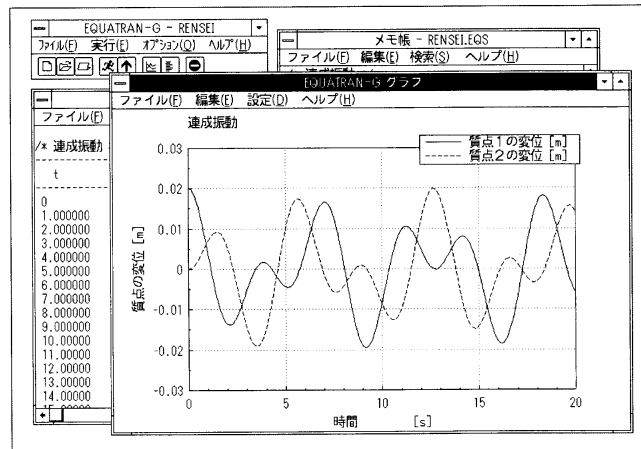
事務分野ではCOBOLやBASICで作っていた時代に比べ、表計算ソフトやデータベースソフトの利用により生産性が格段に上がっています。

技術分野でもEQUATRAN-Gや数式処理ソフトなどの利用により生産性の向上が図れます。そして、このようなツール(道具)の活用がますます盛んになってくるのではないのでしょうか。

(筆者=三井東圧化学システム部)



第7図 計算結果の出力表示 (自動設定)



第8図 計算結果の出力表示 (編集後)