数式処理での数学問題の解答

八木善彦*

Mathematics Problem Solving with Computer Algebra Systems

Yoshihiko YAGI*

Keywords: Mathematica, mathematics education, computer algebra system

1. はじめに

近年, 数学問題の答え合わせをして欲しいという学生がよく来る. 正解の載っていない問題等についての問い合わせである.

その中には数式処理で答えの分かるものも含まれる. 神戸工業高専の総合情報センターには数式処理システム「Mathematica」(1) が導入されている. すぐ解答を得たい学生や質問担当の先生が不在のときなどにも利用できるよう, 「Mathematica」を用いて解答を得る際の手順等についてまとめる.

2. Mathematica について

2.1 Mathematica とは

Mathematica は数学やその応用分野のための科学技術計算を手助けするためのソフトウェアだ. 1986 年後半, スティーブンウルフラムは Mathematica の開発を開始し 1988 年 6 月に最初のバージョンが発表された. それ以来商業的に最も成功した数式処理システムとして世界的に認められている. 開発が古いこともあり, 仕様は大型コンピュータの端末から使える機能を保持している. これはキーボードからの操作が可能ということであり, 研究などで数式処理を利用する者には, 使い易い仕様となっている. Mathematica は, バージョンがあがるに従って機能も向上し現在ではマウスを使ったグラフィックユーザインターフェースに対応している. これは、初心者が使用する際に関数名を覚えていなくてもすぐ使えるように配慮したものになっている.

バージョン 4 から TraditionalForm が採用されたことにより数式表示は数学表記に近づき, パレットを使用した入力により初めて使う人が計算式を入力する敷居が低下したが, 入力の曖昧さや入力時のエラーを避けるにはキーボードからの操作を理解しておくのがよい. このまとめでは, プログラムなどの高度な使用法は無しで, 基本関数を使用して計算を行い, 数式処理システム Mathematica の基本関数で問題の解を得ることを想定する.

2.2 システムの操作

Linux での Mathematica は ターミナルから

```
Mathematica &
```

と入力することで起動する.

起動したらファイルメニューから使いそうなパレットを開いておくと便利である. (パレットメニュー→基本数学アシスタント, 古いバージョンではファイルメニュー→パレット→基本的入出力)

ヘルプメニューで Mathematica ブックを読むと詳しい使用法がわかる.

使用上の注意として

- Mathematica は関数型言語である
  計算の開始は $\boxed{\text{shift}}$-$\boxed{\text{enter}}$ の入力である

- システムの組み込み関数は関数名の先頭を大文字にすることで区別している
  したがってユーザ定義の関数や変数は小文字ではじめるのがよい

- 計算の順序を指定する括弧は"(", ")"のみを多重で使用し中括弧"{", "}"はリスト, 大括弧"[", "]"は関数の入力変数を表す記号である

- 定数も値を返す関数である
  例
  Pi π
  E e 自然対数の底
  I i 虚数単位
  これらはパレットを使用する場合はボタンをクリックするだけであるが, キーボードから入力する場合は知っておかなければならない

*一般科 教授

- 積はスペース" "またはアスタリスク"*"である. $2x$ は $2 \times x$ と解釈されるが, $x2$ は"$x2$"という変数名になってしまう
  スペースがかけ算に解釈されることは表示が数学表記に近くなって式が見やすくなるが, その式を見て入力する時, 誤った計算式となってしまう原因となる. 特に表示された式は, 見た目上, スペースが入っているか区別しづらいので注意が必要である

- Mathematica は一度定義された変数はすべて記憶しているため, 次の計算で同じ変数名を使用する場合は定義内容を再定義するか, 消去せねばならない

- 標準パッケージを読み込むときディレクトリの区切り文字バッククォート"`"は普段使うことの少ないキーなので入力時に間違えないよう注意して入力する必要がある

など独自の構文をもっており, 使用にあたっては, 事前に動作を確認しておくのがよい [2].

3. フーリエ級数

高専の低学年 (1～3年) での数学計算は Mathematica で問題の解を得ることができることを報告した [3]. 今回は, 4年の応用数学の範囲を取り上げる.

ラプラス変換, フーリエ変換, 留数の計算などは Mathematica の基本関数で計算できる. ベクトル解析につては, 標準のベクトル解析パッケージを読み込むことで, 球座標や円柱座標にも対応した勾配・発散・回転・ラプラシアンなどの計算を行うことができる. Mathematica は, フーリエ変換の基本関数をもっている. これは, 離散的な数値データのフーリエ変換である. Mathematica のフーリエ変換は, 物理科学でよく使われる表記で符号が決定されるため, 電子工学で使われる表記と逆になっているため注意が必要だ.

また Mathematica は, フーリエ級数またはフーリエ係数を直接得る基本関数はもっていない. Mathematica Book に示されるフーリエ級数の計算は, Fit[ ] 関数を用いて, 数値データに対し 三角関数の n 倍角 $\sin x,\ \sin 2x,\ \sin 3x, \cdots, \cos x,\ \cos 2x,\ \cos 3x, \cdots$ の線形結合に対する最適曲線を決定する問題として係数を計算するものである. この方法では, 近似計算であり, あらかじめ展開する項数を制限したものになる. 標準のフーリエ変換パッケージを使えばフーリエ級数を得られるが, 級数展開の項数を指定したものであるので, 問題解答として欲するものと異なり, 変数変換をしてやる必要がある. これらフーリエ級数の計算を, 計算上の注意も含めて検証する.

3.1 フーリエ係数の計算

Mathematica は, 積分計算が可能であるので, フーリエ係数は定義式により直接計算できる.

問題　次の周期 2π のフーリエ係数を求めよ. (1) $f(x) = \begin{cases} -x & (-\pi \leqq x < 0) \\ 0 & (0 \leqq x < \pi) \end{cases}$ $f(x+2\pi) = f(x)$

数学での周期 2ℓ のフーリエ係数の定義式 [4] は

$$c_0 = \frac{1}{2\ell}\int_{-\ell}^{\ell} f(x)dx$$
$$a_n = \frac{1}{\ell}\int_{-\ell}^{\ell} f(x)\cos\frac{n\pi x}{\ell}dx$$
$$b_n = \frac{1}{\ell}\int_{-\ell}^{\ell} f(x)\sin\frac{n\pi x}{\ell}dx$$

である. 科学技術分野では, 分野により異なった様々な定義が用いられるために定義にあわせる必要がある.

Mathematica の計算は図 1 のように進められる.

$$\mathrm{In}[1] := \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{0} -x\ dx$$
$$\mathrm{Out}[1] := \frac{\pi}{4}$$
$$\mathrm{In}[2] := \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{0} -x\mathrm{Cos}\ [nx]\ dx$$
$$\mathrm{Out}[2] := \frac{-1+\mathrm{Cos}\,[n\pi]+n\pi\mathrm{Sin}\,[n\pi]}{n^2\pi}$$
$$\mathrm{In}[3] := \mathrm{Simplify}\,[\%, n \in \mathrm{Integers}]$$
$$\mathrm{Out}[3] := \frac{-1+(-1)^n}{n^2\pi}$$
$$\mathrm{In}[4] := \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{0} -x\mathrm{Sin}\ [nx]\ dx$$
$$\mathrm{Out}[4] := \frac{n\pi\mathrm{Cos}\,[n\pi]-\mathrm{Sin}\,[n\pi]}{n^2\pi}$$
$$\mathrm{In}[5] := \mathrm{Simplify}\,[\%, n \in \mathrm{Integers}]$$
$$\mathrm{Out}[5] := \frac{(-1)^n}{n}$$

図 1 :Mathematica によるフーリエ係数の計算

図 1 で In[1] は係数 c_0 の計算, 次に In[2] は係数 a_n

の計算である. 計算時に n が整数であることを指定しなかったので In[3] で n は整数と指定し正しい値を得る. このことがあらかじめ分かっている場合は In[2] の式であわせて指定してもよい. In[4] は係数 b_n の計算である. 集合の要素を表す記号 (関数)"∈"はパレットのタイプセットの中にある. キーボードからの入力では $\boxed{\text{ESC}}$elem$\boxed{\text{ESC}}$ であり, 関数で指定する場合は Element[n, Integers] と入力する.

計算式を正しく入力すれば正解を得る. 区分的な関数なので定積分の範囲を正しくとらねばならない. なお, この区分的な関数を組み込み関数の絶対値"| |"と x を使って $\frac{|x|-x}{2}$ と定義した場合は定義式の通りの上端・下端で計算できる.

3.2 Mathematica 標準パッケージ

Mathematica は拡張性があり標準的な組み込み関数では計算できない種々の関数や機能を簡単に組み込むことができる. これらの関数は Mathematica のプログラムとしてファイルにまとめられパッケージとして Mathematica に追加できる. 特に定型的な関数操作を繰り返し用いる場合, 計算手順を新しいユーザ定義関数とし, パッケージにしておくことで, あとから繰り返し使うことができるようになる. それらの中で Mathematica に標準で付属しているパッケージ群を標準パッケージ [5] と言う. Mathematica のバージョン 7 からは, FourierSeries とその関連関数は Mathematica カーネルにも含まれているため, パッケージの読み込みは不要になった.

それ以前のバージョンのシステムを使用する場合, パッケージの読み込み前に関連関数を入力してしまうと"関数が存在しません"という警告がでるとともにその関数名が新関数として登録されるため, そこでパッケージの読み込みを忘れたことに気づいてパッケージの読み込みを行っても登録された関数名のために読み込みに失敗する. もし, 誤ってそうしてしまったら, Remove["*name*"] を実行し, 定義されてしまった関数名を取り除いてからパッケージの読み込みを再実行なければならない.

Mathematica は当初のバージョンから標準パッケージをもっており, 早くから使用されたこともあって, ネット上等に配布されたパッケージは数多い. 機能がないと思えばネット上で検索すると, 有ればよいと思う関数がすでに作成されていることが多い. また, それらの関数は自分の要求にあうようカスタマイズできる. このあたりの手軽さ, 便利さは, Mathematica が広く使われるようになった要因の 1 つであると思う. 本稿ではパッケージの解説が目的ではないので, それらの紹介はしないが, 標準パッケージの名前だけ以下にあげておく.

- 統計パッケージ　・分散分析　・階層的クラスタ　・仮説検定　・多変量統計　・統計プロット
- プロット, グラフパッケージ　・エラーバープロット　・プロットの凡例　・スプライン
- 離散数学パッケージ　・Combinatorica　・計算幾何学　・グラフユーティリティ
- 微積分パッケージ　・方程式トレッカー　・フーリエ級数　・関数近似　・数値計算　・微分方程式の数値解析　・変分法　・ベクトル解析
- 代数パッケージ　・有限体　・四元数
- 多面体および多胞体パッケージ　・多面体操作　・多胞体
- その他の数学的パッケージ　・コンピュータ演算　・素数証明
- 地図製作および日付パッケージ　・暦　・測地学　・世界プロット
- サウンドパッケージ　・オーディオ　・ミュージック
- 物理量および物理特性パッケージ　・黒体輻射　・物理定数　・共鳴吸収線　・標準大気　・単位
- ユーティリティパッケージ　・ベンチマーク　・開発者ユーティリティ　・試験的関数　・Notation　・XML

3.3 フーリエ変換パッケージ

Mathematica のフーリエ変換パッケージを使用した計算は図 2 のように進められる.

In[6] := << Caluculus‘FourierTransform‘

$$\text{In[7]} := \text{FourierTrigSeries}\left[\frac{\text{Abs}[x]-x}{2}, x, 3\right]$$

$$\text{Out[7]} := -\sin(x)+\frac{1}{2}\sin(2x)-\frac{1}{3}\sin(3x) -\frac{2\cos(x)}{\pi}-\frac{2\cos(3x)}{9\pi}+\frac{\pi}{4}$$

$$\text{In[8]} := \text{FourierSeries}\left[\frac{\text{Abs}[x]-x}{2}, x, 3\right]$$

$$\text{Out[8]} := \frac{1}{2}ie^{-it}-\frac{1}{2}ie^{it}-\frac{1}{4}ie^{-2it}+\frac{1}{4}ie^{2it} +\frac{1}{6}ie^{-3it}-\frac{1}{6}ie^{3it}$$

図 2 :パッケージよるフーリエ係数の計算

図 2 で In[6] はフーリエ変換パッケージの読み込み

である. (バージョン 7 以降のシステムではフーリエ変換パッケージがカーネルに含まれるようになったためこの行の入力は不要である)

In[7] で 3 次までの三角フーリエ級数を計算させた. 同様に In[8] で 3 次までの複素フーリエ級数を計算させた. 残念ながらパッケージは実計算向きであり, 一般の n 次のフーリエ係数は求められない.

3.4 区分関数

フーリエ係数の計算では, 区分関数を扱えると便利である. Mathematica の区分関数は記号的にも数値的にも扱える．図 2 の計算では絶対値をうまく使って区分関数を表したが, バージョン 7 以降の Mathematica では区分関数を直接的に作ることが可能である.

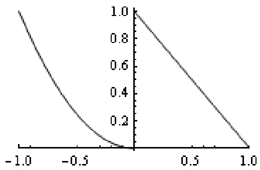
矩形波 SquareWave[ ], 三角波 TriangleWave[ ] や鋸波 SawtoothWave[ ] が使えるようになった. これらの関数に, 絶対値 Abs[x], 単位階段関数 UnitStep[x], 符号 Sign[x], 整数部 IntegerPart[x], 小数部 FractionalPart[x], 最大の整数 (切り下げ)Floor[x], 四捨五入 Round[x], 最小の整数 (切り上げ)Ceiling[x], 切り取り Clip[x] 等の関数を組み合わせて区分関数を構成する. また, 範囲を指定して区分関数を作る Bool[ ] や Piecewise[ ] がある.

次の図 3 に区分関数, 図 4 に矩形波, 三角波, 鋸波の例をあげる.

In[9] := $y = \text{Piecewise}[\{\{x^2, x<0\},\{1-x, x>0\}\}]$

Out[9] := $\begin{cases} x^2 & x<0 \\ 1-x & x>0 \\ 0 & \text{True} \end{cases}$

In[10] := $\text{Plot}[y,\{x,-1,1\}]$

Out[10] := 

In[11] := $y = \text{UnitStep}[[\text{Sin}[x]]]$

Out[11] := $\text{UnitStep}[[\text{Sin}[x]]]$

In[12] := $\text{Plot}[y,\{x,0,30\}]$

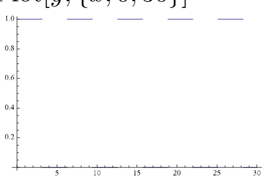
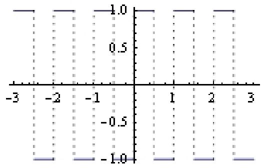
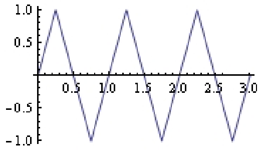
Out[12] := 

図 3 :区分関数

In[13] := $\text{Plot}[\text{SquareWave}[x],\{x,-3,3\}$, ExclusionsStyle$-$ $>$ Dotted]

Out[13] := 

In[14] := $\text{Plot}[\text{TriangleWave}[x],\{x,0,3\}]$

Out[14] := 

In[15] := $\text{Plot}[\text{SawtoothWave}[x],\{x,-2,2\}]$

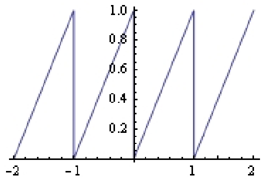
Out[15] := 

図 4 :矩形波, 三角波, 鋸波

図 3 の In[9] では $x<0$ で x^2, $x>0$ で $1-x$ という区分関数を変数 y に定義した. この Piecewise[ ] 関数は区分ごとに, それぞれの区間での関数をすべての区間, コンマ”,”で区切って入力する. In[10] でこの関数 y の区間 $[-1,1]$ のグラフを描かせた.

In[11] は $\sin x$ の階段関数を変数 y に定義した. In[12] で関数 y の区間 $[0,30]$ でのグラフを描かせた.

図 4 は Mathematica で定義されている矩形波, 三角波, 鋸波をグラフで表示させたものである.

4. 他のフーリエ計算

今回の検証で数値計算的なイメージのある Mathematica でのフーリエ係数の計算も関数として計算できることが確認できた. 以前はフーリエ級数の次数を上げていってグラフを描かせ, もとの関数に近づいていく様子を見せるものが多くあったが, 普通にノートで計算するのと同じ計算ができるので, 問題集などの解と比較することで立式が正しかったか確認できる.

フーリエ変換などは初期のバージョンから基本関数として種々の定義形式による変換・逆変換が可能であった. フーリエ係数においては自分で関数を設定し, 積分区間を考慮して計算を実行して初めて解が分かる. このレベルの段階に達した利用者では基本関数として準備していなくても使用者が十分対応できるという作り手側の声も聞こえてきそうだ.

フーリエ変換のパッケージがカーネルに取り込まれたように, バージョンが上がるごとに機能が強化され使いやすくなる.

フーリエの収束定理を用いた級数の計算も問題なくこなすので, 他のフーリエ計算でも問題なく利用できることが検証できた.

5. まとめ

高専の4年の教科書「応用数学」を通して問題を解いた. 計算問題はほとんどの問題がMathematicaの基本関数で解ける. 低学年のときのように, 基本関数を入力してすぐ答えが得られるものと異なり, 定義にしたがって式をたて計算しなければならないものもあるが, どちらも正解を確認できる. そういう問題のほうが内容についての理解は深まる. 計算の入力では, それぞれの計算に応じて適切なオプションの設定が必要となるが, Mathematicaの場合, 計算例を載せておくだけで, 必要な情報はヘルプメニューから引き出すことができる. 計算するための関数名や実際に使用するオプションが使用してある計算例があれば使いこなせるようになる. 低学年のときからMathematicaの利用になれておけば思考実験やシステムのプロトタイプの設計に利用できるようになる.

Web上のインタラクティブな計算・結果の可視化を可能にwebMathematicaの話題のほうが賑やかになった観もあるが, Mathematicaも区分関数や特殊関数が整備され, 偏微分方程式関連の機能向上も著しい. これからもますます使いやすくなっていくであろう.

数学問題の答え合わせをして欲しいという学生にも早くから数式処理ソフトのリテラシー教育を行っておけば自力で答え合わせができる. 学生は数式処理ソフトの使用法を体得すると同時に, いろいろな使い方を知ることになる. 数式処理ソフトは本来, 論文作成時の計算の検証に使用されてきたものであり, 技術者の基礎的な能力を向上させるために有用である. また, 情報をわかりやすく計画提案する能力も数式処理ソフトのリテラシーで向上するものと期待できる.

6. おわりに

最も商業的に成功しているといわれている数式処理ソフトはMathematicaであり, 現在の最新Mathematicaのバージョンは8である. パソコンの性能が向上するたびにソフトウェアのバージョンも向上し機能が強化される. 今回の調査で判明したようにMathematicaは学生が問題を解くに当たっての補助機器として学生を助けることができる. バージョンがあがるにつれ使い易くなっており, webやネットワークの機能も取り込みつつある. また工学分野では, 設計, 開発, 生産の標準的ツールになりつつある.

本来, 解析学の分野では複素数を用いた計算が主流である. 電磁気学や量子力学でも複素関数を扱うのが普通である. 高専の学生が複素関数を十分に使いこなすレベルにあるかというと疑問を感じる. それは2次元空間から2次元空間への対応といった思考が必要で3次元空間図形認識の領域を超えることによって可能となる.

このような高度な概念を理解しようとするとき, 数式処理システムが提供する様々な機能が思考を助け, 新しい認識を生み出す力となる. 必要なときに計算を試したりアルゴリズムを確認するということがすぐにできる環境が手近にあれば, それは技術者の基礎的な能力を向上させ, みずから考えるという能力をはぐくむものと考えられる.

コンピュータの世界では, 携帯端末の登場やネット上のサーバを利用するという新しい潮流が起こっている. その流れの中で, 数式処理システムもますます変化していき, 研究・学習の中に溶け込んでいく. 今後とも数理科学分野で, 教育や研究に活動に活用される. 道具として電子機器を利用し, 人間の自然認識力を高め理解を深めるための提案をこれからもしていく.

参考文献

(1) S.Wolfram:「The Mathematica Book, Fifth Edition」,Wolfram Mdia, 2003.

(2) 田村直行:「神戸大学Mathematica入門ページ」, http://bach.istc.kobe-u.ac.jp/mma/nyumon/. やシステムのヘルプの「Mathematicaの第一歩」

(3) 八木善彦:「高専数学の学習と数式処理」, 神戸高専研究紀要, 第48号, pp.155-160, 2003.

(4) 高遠節夫, 斎藤斉,etc:「新訂　応用数学」, 大日本図書,2006.

(5) Wolfram Research:「Guide to Standard Mathematica Packages」,Wolfram Research, Inc.