Title	ある初心者の試み : 超越関数を含む方程式の数値解法
Author(s)	小谷, 恒之
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 27 P.19-P.24
Issue Date	1977-11
Text Version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/11094/65361
DOI	
rights	

資　　料

ある初心者の試み

―― 超越関数を含む方程式の数値解法 ――

教養部　小谷恒之

一昨年秋、実験データに適合する数式のパラメーターをきめる問題、いわゆる非線形最適化の問題を解く必要が生じ、クリスマスの日に本屋へでかけて、プログラミングの入門書を購入したのが、計算機と私との縁のはじまりである。五〇の手習いだとか、大正生まれがプログラムを組むとは稀少価値があるなどとひやかされながら、いろいろの方々につまらない質問をたづねたづね、まあなんとかプログラムが組めるようになった。ことのおこりの最適化の問題については、後日のこのニュースに改めて書かしていただくことにして、今回は副題のようなプログラムについて、本年夏の私の経験をご紹介したい。

本年6月末、次のような2つの方程式の解を求めることで相談をうけた。

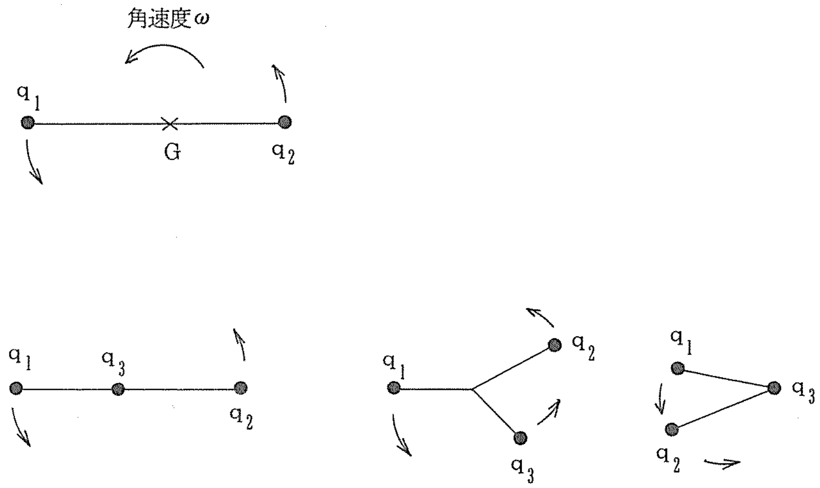
$$\frac{X^2}{\sqrt{1-X}} = AX + B \qquad (1)$$

と

$$(E - F\ Y^2)\sin(GY) + H\ Y\ \cos(GY) = 0 \qquad (2)$$

専門外の方には興味が少ないかも知れないが、どういう問題でこれらの方程式の解が必要になってきたかを記しておこう。原子核を構成している陽子や中性子といった重粒子や、それらの結合に関係する（湯川）中間子の存在はよく知られている。ところが、これらの重粒子や中間子は上記の3種類だけではなく、奇妙な粒子と呼ばれるものが、25年ほど前から、次々に発見され、当初の発見者には、ノーベル物理学賞が授与されてきた。あまりの多さにもう新しい素粒子の発見者にはノーベル賞は出さないとまでいわれたりして、百種類ほどに達してしまった。〔もつとも、3年前に発見されたψ（またはJ）粒子と呼ばれるものの一群は今までとは全然異なった特徴をもっていて、昨年発見者達はノーベル賞を授与されている。〕

こんなに多くの粒子が存在するのでは、それらを〝素粒子〞と呼ぶのはふさわしくない。そこで考え出された一つの模型が中間子は2つのクォーク　重粒子は3つのクォークから構成されているというものである(図1参照)。　これらのクォークは4種類で、（本年6月に発見された中性子の約10倍の重さの〝素粒子〞の存在が本当なら、もう1つ新しいクォークが必要で5種類になるが）、それぞれ固有の質量をもち、スピンは½とする。



(a)

(b)

図1　(a)中間子 (b)重粒子のクォークひも模型

ここで考えた模型では、中間子を例にとれば、2つのクォーク（q_1 と q_2）がある種の引力（ここでは〝ひも〟と呼ぶ）で束縛され、それらの重心Gのまわりを角速度ωで回転しているとする。これらのクォークの質量（m）と、回転のエネルギーまで考慮したこの系全体のエネルギーがこの中間子の質量であり、回転の角運動量にクォークの自転の角運動量などを加えあわせたものが、この中間子のスピンと考えようというのである。引力の大きさをγ（実験と比較するには$\gamma=1/2\pi$でよい）と表すと、(1)式の定数A，Bは

$$A=\pm 2\pi m\omega \tag{3}$$

$$B=\pm\pi\omega^2 \tag{4}$$

で与えられる。＋と－の組みあわせで、自然界に実現しているのは（＋，＋）、（＋，－）、（－，＋）の3組である。重心からクォークまでの距離に相当するものがXで、$1\geq X\geq 0$に規格化してあるのが(1)式である。クォークの質量mや回転の角速度ωが大きくなれば、$X\simeq 1$の解が予想される。mとωが与えられたとき、(1)式の解Xを求めて、中間子の質量やスピンを計算し、実験値と比較して、この模型の適否をきめようという問題である。

さらに、この〝ひも〟は、量子力学的な効果で、紙面に垂直な面内で微小振動をするが、その振動による、系の角運動量の変化を与えるものが、(2)式の解Yになっている。定数E，F，G，Hはm，ω，γ，Xのある種の関数である。紙面内での〝ひも〟の振動の効果を求めるには、(2)式のsinやcosに相当する部分に、超幾何関数がでてきて、かなりやっかいになるが、計算機のプログラムとしては、この場合をも計算しうるものでなくてはならない。数値計算の

結果は実験結果を数%内で説明することができた。

さて、プログラム作成に話を戻そう。失敗談を記しておくのも、後日どなたかの役に立つかもしれないので一つ記しておこう。

中学校時代から、2次方程式

$$az^2+bz+c=0 \tag{5}$$

の解は

$$z=\frac{1}{2a}\left[-b\pm\sqrt{b^2-4ac}\right] \tag{6}$$

と習ってきた。まさかこの式を用いていけないとは思わず、ただ、第1項と第2項とが打ち消す場合に精度が落ちるので、その場合の対策に苦労した。本年9月27日に大阪大学計算機センターで開かれた講演会で、東芝の平野菅保氏より、例えば、bが正なら、(5)式の1つの解は

$$z=\frac{1}{2a}\left[-b-\sqrt{b^2-4ac}\right] \tag{7}$$

で、他の解は

$$z=2c/\left[-b-\sqrt{b^2-4ac}\right] \tag{8}$$

とすべきだと教えてもらい、早速後述のプログラムを修正したところ、今迄の苦労は全く無駄であったことがわかった。こういう、プログラマーとしては当然の常識を知らないで、一人角力をしていたのかと、苦笑している次第である。

さて、(1)式は、両辺を2乗すれば、4次方程式である。この解法には、代数学でFessari－Cardanの解法がある。高エネルギー物理学研究所の小柳義夫氏が御親切に既製のプログラムのカードを送って下さったので、早速試みた。上述のようにωの大きい所に根があるはずなのに、X＝1の近傍へくると虚根しかでてこない。（正しい解は0.99998だった。）プログラムの精細を調べないで、この解法はあきらめてしまったが、多分上述の2次方程式の解法の失敗に相当したものなのであろう。平野氏の講演でも要注意ということだったが。

次に思いつくのは、これもおなじみNewton－Raphson法である（図2）。

$$X_1=X_0-(F_0/F_0') \tag{9}$$

ところで、上述のように、$X\simeq1$の近傍の解の場合、解析的に求めたF_0'の数値が、すぐ10^6位になってしまって、X_0が正しい根X_rに近づく収束性は絶望的である。(1)式の場合、根号のある項を両辺に乗じて、この困難は解消できるが、(2)式でもYの値が大きくなると、sinやcosのために急降下して、零点をよぎるので、同様の困難のため、収束性は著しくそこなわれる。Newton法によるプログラムを用い

る場合、関数の変化が急激でないことを調べておかないと危険であるというのが、初心者の感想である。

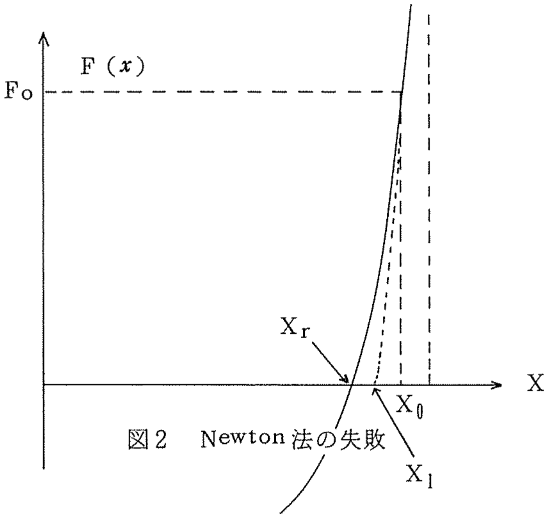


図2　Newton 法の失敗

さて、それでは(1)にも(2)にも共通に使えるプログラムとなると、一番単純な、２点での関数の値が符号を変えた場合、その２点間に零点が存在するという考えである（図３）。X_A と X_B の間の点 X_C と３点での関数値を計算し、放物線近似で、零点の位置を求めた。この場合に(7)と(8)式を使うべきだったのである。

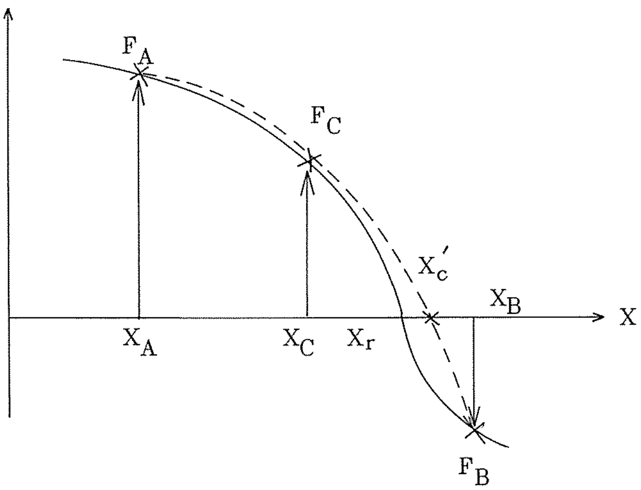


図３　F_A F_B <0 のとき、零点 X_r は $X_A \leq X_r \leq X_B$

（内挿式として、 $f = ax^2 + bx + c$ を用いると２根でてくるので、どちらを用いるかの判定が必要になる。内挿式として

$$f = \frac{ax + b}{x + c} \tag{10}$$

を用いれば一根ですむが、除数が零になる吟味もそれ程簡単でないので試みなかった。）

次に問題になるのは、X_A と X_B をどうやって見つけ出すかである。ここでも一番単純に根の存在の予想される領域の両端 X_{min} と X_{max} とを与え、その間を端から順番にある間隔で、次々に探して行く方法を用いた（図4）。ここでも等間隔では、関数値を求める回数が多くなりすぎるので、図4の（F_1，F_2，F_3）で放物線近似を用い、（$X' - X_2$）が（$X_3 - X_2$）の2倍以上であれば、間隔を拡げて、X_4 での F_4 を求め、（F_2，F_3，F_4）で放物線近似を適用する方法を用いた。間隔の拡大は一番端のもの5倍まで拡げた。

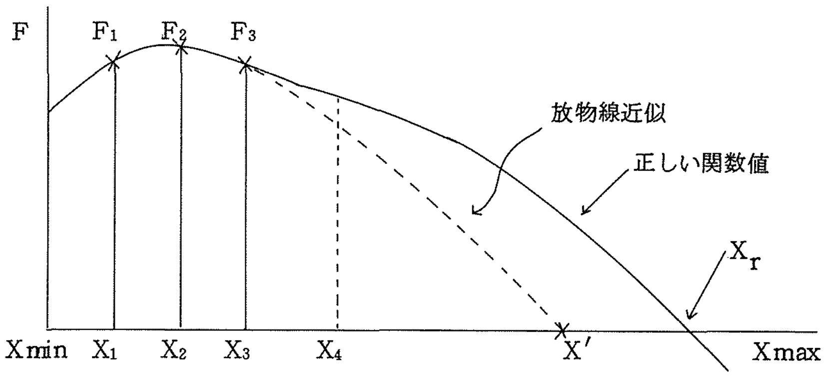


図4　逐次探索法

この方法では、図5の場合のような、$F_A F_B > 0$ であるため、2根をとばしてしまう可能性がある。そこで、一階微分 F'_A と F'_B を計算し、$F'_A F'_B < 0$ であれば、極大極小を求めて、一応の防止策とした。ＡＢ間に3根以上あるような場合は、遂次探索法の間隔を小さくする以外の処置は含まれていない。

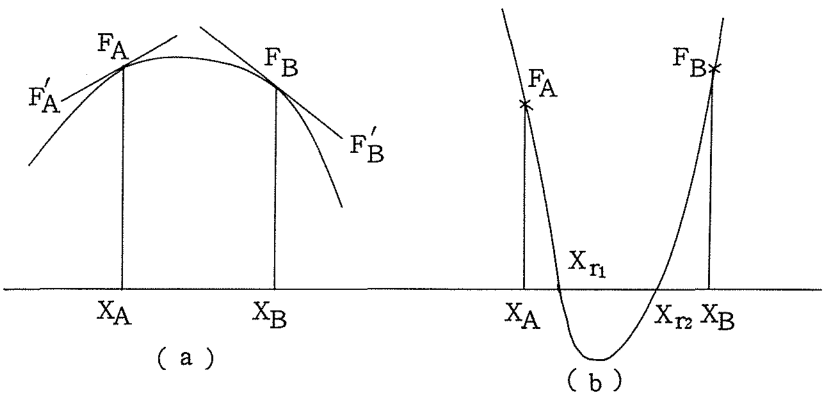


図5　微分係数 F'_A と F'_B を求めての点検

なお、われわれの問題では、角速度ωは$4 \geq \omega \geq 0.01$の間で連続的に変化するので、第1回目以後は、ところどころのωに対して、逐次探索法で点検をし、それ以外は1つ前のωに対する解X_rを近似値として、その前後で零点を探すように組んで、関数値を求める回数を極力減らすようにした。

以上が、私共のプログラムの概略であるが、既にもっとうまいプログラムが組まれているのかもしれない。もしお持ちの方はお借し下さるか、または文献をお教示いただければ幸である。

また、この種の一元非線形方程式を解く問題をかかえておられる方は、私共のプログラムでも試みていただければ幸である。御連絡いただければ、プログラム・リストまたはカードをお送りする。