

方程式の根を求めるプログラム

1X-4

坂田 宜子、二宮 市三
中部大学

1. はじめに

有限区間内における方程式 $f(x)=0$ の全根を求めるプログラムを作成した。本プログラムは(1)全ての根を、それぞれについて与えられた微小幅 ϵ 以下の区間に追い込む根の分離部と(2)各微小区間で実際に根の値を求める求根部からなる。(1)については第32回全国大会で発表したとおりであり¹⁾、今回はそこへ追加した求根プログラムについて主に発表する。本プログラムは $f(x)$ の値のみを用い、かつ連続性だけが条件であるので、多くの方程式に有効であり、実用的である。

2. プログラムの概要

本プログラムは、B. Jonesの手法で1根を追い込んだ1微小部分区間 (a, b) を発見すると、直ちにその区間内の根を求める。そして残りの他の根も、この反復処理で得る。

求根プログラムは、 (a, b) の両端での関数値が、(1)異符号の場合と、(2)同符号の場合の2つの部分からなる。

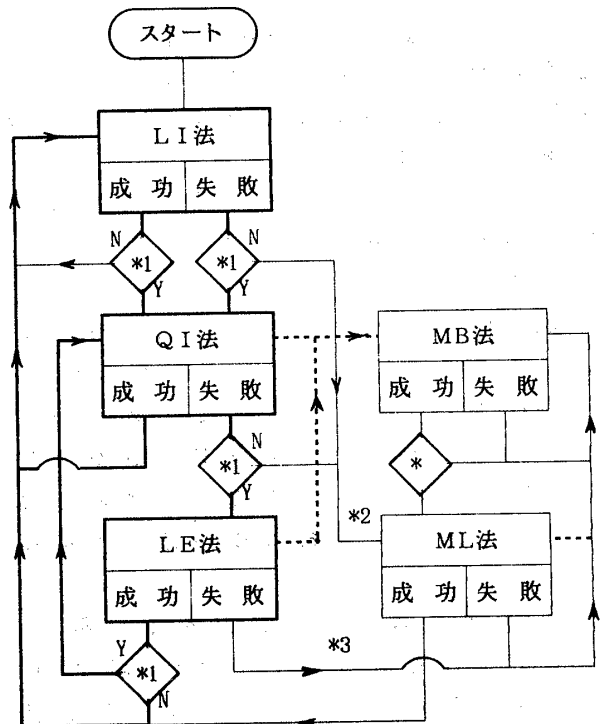
(1)の場合は、この区間内に少なくとも1根が存在することは明白なので、これを Shrager²⁾の示した強力な手法で求める。いま、根を (a, b) の部分区間 (X_1, X_2) 内に追い込んだものとする。次に (X_1, X_2) 内に根の近似値 X_3 を求め、 (X_1, X_3) または (X_3, X_2) のいずれか一方で根を含む方の部分区間を (X_1, X_2) とする。ただし端点 X_1, X_2 は常に $|f(X_1)| \leq |f(X_2)|$ となるようにとるものとする。したがって $X_1 < X_2$ であるとは限らない。以上を

反復して、部分区間の幅を高速、安全にしかも確実に減少させる。

そのために、次の5つの手法

- ・ LI 法: Linear Interpolation
- ・ LE 法: Linear Extrapolation
- ・ QI 法: inverse Quadratic Interpolation
- ・ MB 法: Modified Bisection
- ・ ML 法: Multiple Linear interpolation

を、流れ図に示すような経路で、たくみに使い分ける。その使い分けは X_3 が良い推定値であるか否かによる。即ち、 (X_1, X_3) に根があれば、この推定は成功と言える。なぜなら先の不等式が成立するときは、関数値で比べると X_1 の方が X_2 より根に近いと推定するのが自然であり、それと X_3 の間に根が存在するからである。ところがそうでなく (X_3, X_2) に根があるときは推定は失敗したと



言うことにする。なぜなら X_2 は X_1 よりも根から離れていると想像されていて、その X_2 との間根が存在するからである。5つの手法はこの成功と失敗の2つの出口を持つ。さらに流れ図の(*1)の部分では $|f(X_3)| < |f(X_1)|$ ($< |f(X_2)|$) を調べる。この不等式が成立するのは X_3 の関数値が X_1 のそれよりも0に近い場合であり、たとえ X_3 が失敗で得た結果であっても、事態はそれほど悪くない。しかし流れ線の(*2)や(*3)の部分に出てきたときは悪性の場合であるとしてLI法、QI法、LE法の主要循環経路を捨て、他のMB法やML法を用いる。(*2)はLI法やQI法が失敗に終わってかつ $|f(X_1)| \leq |f(X_3)|$ のとき、即ち X_3 の関数値が0より離れる方向にある場合で、基本的にはLI法を加速したML法を用いる。

さらに X_3 は常に区間 (X_1, X_2) 内の X_1 よりになるように求める。LI法は $|f(X_1)| \leq |f(X_2)|$ であるからこの要求を満たすことが出来るが、他の手法ではそれは保証されない。そのようなときはそれぞれの手法で X_3 を求めることをやめ、急ぎよ流れ図の点線部を通してMB法を用いる。MB法は2分法を基にしている。このように一度 (X_1, X_2) 内に捕捉した根は2度と離すことなく、確実に区間減少を行う。反復の終了は区間 (X_1, X_2) の幅が根の精度判定定数 ϵ_2 より小さくなるか、または X_1 と X_2 が隣り合ってしまったか、または $f(X_3) = 0$ になるかのいずれかである。いずれにしてもこの反復は確実に終了する。

またこのプログラム内でのオーバーフロー、0での除算、アンダーフローは安全に避けられているので、これらに起因したプログラムエラーは一切発生しない。

(2)の場合は、区間の両端で関数値の符号が同じであるので、根がx軸で接すると推測される。このときはこの区間

での関数の最小値を求める。それにはまず区間の両端の点とその中点を出発点として、放物線近似の極値を次の近似値とする反復を行う。途中で関数値の符号変化が見られれば、その時点で区間を2分し、各区間に(1)の処理を適用する。

3. 実行例

いくつかの具体的な例で数値実験を行ったが、ここにはその内の2例を示す。 $f(x)$ の計算回数的大部分は根の分離部に使われているのが注目される。

問題	根の分離部			求根部 $\epsilon_2 = 1.0D-7$	
	ϵ	根の存在区間	回数	根の値	回数
1	0.001	8.901-8.911	816	0.8909090909D+01	43
		7.697-7.701		0.7700000000D+01	
		7.634-7.643		0.7636363636D+01	
		6.355-6.366		0.6363636364D+01	
		6.296-6.303		0.6300000000D+01	
		5.089-5.094		0.5090909091D+01	
		4.900-4.905		0.4900000000D+01	
		3.814-3.819		0.3818181818D+01	
		3.497-3.502		0.3500000000D+01	
		2.545-2.547		0.2545454545D+01	
		2.098-2.102		0.2100000000D+01	
		1.271-1.274		0.1272727273D+01	
		0.699-0.701		0.7000000000D+01	
0.0-0.55D-3	0.0				
2	0.1	312.5-437.5	121	0.3733000000D+03	36
		371.1-375.0	233	0.3732000002D+03	23
	0.01	373.3-373.7	295	0.3733000000D+03	14
				0.3732000000D+03	
	0.001	372.6-373.3		0.3732000000D+03	

ϵ は根の分離判定定数、 ϵ_2 は根の精度判定定数
回数は $f(x)$ の計算回数

各番号の式と区間は次の通りである。

- 1) $f(x) = \sin(\pi x/14) + \sin(3\pi x/2)$ (0,9)
- 2) $f(x) = 1000(x-373.2)(x-373.3)$ (-1000, 1000)

プログラムはFORTRAN77で作成し、倍精度で計算した。計算機は中部大学情報処理センターのFACOM M360-APを使用した。

参考文献

- 1) 坂田、二宮「方程式の根の分離プログラム」情報処理学会第32回全国大会予稿集
- 2) R. I. Shrager "A rapid robust rootfinder" Math. of Computation Vol. 44, No. 169(1985), 151-165