特異解の計算（Muller 法）

1.　はじめに

本論文全体を通して特性行列式の根を求めることが必要になる．ここでは，この根を求める方法についてまとめておく．

切欠き両面の境界条件，異種材料の接合部分での連続条件により特異解を求めるための条件式は 8 元ないし 12 元以上の連立方程式となり，その係数行列が零となる解，すなわち，特異解を求めることは必ずしも簡単ではないため，限定された形にしか適用されていないのが現状である．

本研究では，異種材料が接合した複合材料に関して，任意の弾性定数，およびその接合面に対して任意の切欠きの方向と開き角をもつ最も一般的な形態の切欠きについてその特異性を明らかにするため，超越方程式に展開する手段をとらず, 特性行列式の根を直接求める手法によって定式化を試みたものである．その方法としてここでは，Muller の方法により特性行列式の根を求める．

2.　Muller の方法

代数方程式の根を求める方法として Newton 法は収束も早く，はさみうち法等と併用すれば指定した範囲の根を複素根も含めてすべて求められ，きわめて有効な解法ではあるが，一般には与えられた関数 f の導関数 f' を計算しなければ計算できない．従って，特性行列式が代数方程式に展開が困難な場合はこれを用いることができないことになる．

また，はさみうち法（あるいは割線法）は関数 f を 2 点 $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$，$(x_n, f(x_n))$ を結ぶ直線で近似し，その直線と x 軸との交点を新しい近似値として根を求めていく方法である．この方法は，2 つ前までの近似値を用いて差分商で近似するため関数 f の導関数 f' を必要としない．すなわち，次の形を用いる．

$$x_{n+1} = x_n - \frac{(x_n - x_{n-1}) f(x_n)}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \tag{1}$$

この方法は根を探していき, 符号の変化する所をさらに細分して所定の精度になるまで繰り返し根を求めればよく，きわめて簡単な方法であるが，求める精度によっては時間的な問題が生じ，また，解が複素根になるような場合には適用し難い．

以上の考察より，指定した範囲の根を全て求められ，しかも根が複素根でも求められるような解法を用いればよいことになる．さらに，高次多項式（超越方程式を含む）あるいは行列式の零点を求めることができ，その係数が複素数でも計算可能な解析方法であればよいことになる．これらのことが可能な計算方法は数多く存在すると考えられるがここでは Muller 法を用いることにする [1),2)]

Muller 法は，はさみうち方法で関数 f を直線近似する代わりに，関数 f に一致する 2 次関数で 3 点を近似して収束を早めたもので，求めたい解に対して，3 つの互いに異なる近似解 x_{n-2}, x_{n-1}, x_n が既に得られているものとすると，関数 f を点 x_{n-2}, x_{n-1}, x_n において 2 次式で補間することによって次の近似解を得る．ここで, 2 次式の 2 つの零点の中で x_n に最も近い零点が新しい近似解 x_{n+1} として選択される．次に，(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n) のかわりに (x_{n-1}, x_n, x_{n+1}) を用いてこの過程を繰り返し，指定された誤差の値以下になるまで計算する．計算方法を文献 2)によって記すと次のようになる．

P を Lagrange の補間多項式に展開すると

$$P(x)=\frac{(x-x_{n-1})(x-x_{n-2})}{(x_n-x_{n-1})(x_n-x_{n-2})}f_n+\frac{(x-x_n)(x-x_{n-2})}{(x_{n-1}-x_n)(x_{n-1}-x_{n-2})}f_{n-1}+\frac{(x-x_n)(x-x_{n-1})}{(x_{n-2}-x_n)(x_{n-2}-x_{n-1})}f_{n-2} \tag{2}$$

この式で

$$h_n=x_n-x_{n-1},\ h=x-x_n \tag{3}$$

とおくと

$$\begin{aligned}P(x)&=P(x_n+h)\\&=\frac{(h+h_n)(h+h_n+h_{n-1})}{h_n(h_n+h_{n-1})}f_n-\frac{h(h+h_n+h_{n-1})}{h_nh_{n-1}}f_{n-1}+\frac{h(h+h_n)}{(h_n+h_{n-1})h_{n-1}}\end{aligned} \tag{4}$$

が得られる．h の同じべきを含む項をまとめて

$$q_n=h_n/h_{n-1},q=h/h_n \tag{5}$$

とおくと

$$P(x)=P(x_n+qh_n)=(1+q_n)^{-1}(A_nq^2+B_nq+C_n) \tag{6}$$

となる．ここに,

$$\left.\begin{aligned}A_n&=q_nf_n-q_n(1+q_n)f_{n-1}+q_n^2f_{n-2},\\B_n&=(2q_n+1)f_n-(1+q_n)^2f_{n-1}+q_n^2f_{n-2},\\C_n&=(1+q_n)f_n\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

式(6)の 2 次方程式 $P(x_n+qh_n)=0$ を解けば

$$x_{n+1}=x_n+h_nq_{n+1},\quad h_{n+1}=h_nq_{n+1} \tag{8}$$

が得られ，これより

$$q_{n+1}=\frac{2C_n}{-B_n\pm\sqrt{B_n^2-4A_nC_n}} \tag{9}$$

となって解が求められる．ここで，復号は精度の関係で q_{n+1} の値が小さい方を値になるように，すなわち，分母の絶対値が大きくなる方を選ぶ.

この方法は，式(9)に見られるように 2 次式の根の形を取るため実根，複素根の区別なく求めることができる．また，任意の関数の任意に指定された数の根を求めることができ，その初期値を与える必要がないという利点がある．

3. Muller 法の計算手順

上の計算式の形でプログラムを組めば良いため，改めて述べるまでもないが，次に簡単に計算手順を記す.

1) 計算範囲（本計算では 0< λ <1），所用誤差 $\varepsilon_1,\varepsilon_2$，繰り返し回数 i，求める根の個数を指定する.
2) 関数 f の 3 つの零近似値を x_{n-2},x_{n-1},x_n とし，その値 f_{n-1},f_{n-1},f_n を求める.
3) 式(3),(5)を計算する
4) 式(9)を計算する.
5) 式(8)を計算する.
6) 行列式=0 の計算あるいは関数 $f(x_{n+1})=0$ を計算する.
7) $n=n+1$ とする.

8) $|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon_1, |f(x_n)| < \varepsilon_2$ となるまで 4 から 7 を繰り返す.

本計算の関数 f の零近似値（上記 2）は 0.5 近辺の値を採用した．これは 0.0 近辺のものを使用しても解などには影響はないようである.

また，解の増分はここではこれ以上接近した解はないものと考えて 0.001 とした.

所用誤差 $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ は本法では10^{-12} に取って計算したが，どの程度の精度が必要かよって決めればよい.

また，繰り返し回数 i は誤差が $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ に収まらなかった場合に強制的に外に出すためのものである．しかし現在までの計算では数値結果の前後の関係から判断してこのような場合には未だ遭遇していない．これも計算時間に関係するため適当な回数に設定する．本法では $N = 50$ として計算した.

求める根の数は4としておけば本計算の場合は十分である，すなわち，4 個までの根はすべて求めることができるが，それ以上ある場合は 4 個で打ち切ってしまうため，不安であれば 8 などとしておけばよい.

上記 6)では異種材料に沿った切欠きが存在する場合と, それ以外の一般的な場合を判別して使い分ける必要が生ずる．またこのとき，複素係数をもつ行列式の零点を求めるサブルーチンが必要となる．これは，行列式でなくても高次多項式（超越方程式を含む）でも可能であることはもちろんである.

本論文の計算では 180° から 360° までの 180 点を 1 点最大 4 根存在する場合で複素根も含めて，CPU Pentium 90MH のパソコンで 1 分程度で計算でき，きわめて能率的であると思われる．また，誤差を $\varepsilon \le 10^{-12}$ に取っており十分な精度で解が求められたものと考える.

本法は，一般には，実係数の高次多項式の零点（根）を求める方法として一般的であるが，上述のように関数の導関数を必要としないため，零点を求めることができるもの，すなわち，行列式についても用いることができることになる．また，行列式の根は係数が複素数であってもその根を求めることが可能であるため，この種のすべての問題に適用できることになる.

（1997.3.45）

4. FORTRAN によるプログラム

以上により, 特異解を求めるプログラムを組むことができる．応力・変位を求めるプログラムも続いて付加し, 一連に計算できるようにすれば効率が良い. このプログラムは, 複素係数の行列式も含めて, 指定した区間の根を全て求めることができるきわめて汎用性の高いものである．また，このプログラムは，行列式から特異根をもとめているが，少しの変更で，超越方程式からも求めることができる.

5.　計算例

力学的な背景は別の機会に述べるとして，上記プログラムで計算した結果である．2 実根および複素根が得られている．

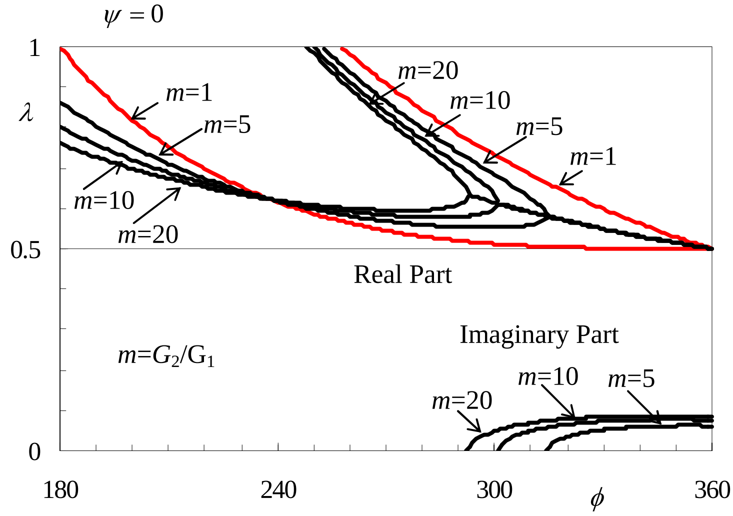

図 1　異種材接合面の傾きが０°の場合の特異解

参考文献

1)　Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., *Numerical Recipes in Fortran*, 2nd Ed.,p.364, Cambridge University Press, 1992.

2)　P.ヘンリッチ著，一松信・平本巌・本田勝共訳：数値解析の基礎，培風館，pp.201-203, 1973.