浮動小数点数を係数に持つ Taylor 級数法による微分代数方程式の解法

平山 弘[1,a)]　小宮 聖司[1,b)]

概要：常微分方程式の初期値問題の解は Taylor 級数の形式で、任意次数まで計算できる。得られた Taylor 級数解を数値計算に利用すれば、任意の次数の数値解法が得られる。さらに、得られた Taylor 級数を Padé 展開式に変形すると、A 安定な数値計算方法を与える。[4] 微分代数方程式の初期値問題に関しては、数値計算法としては多くの研究があるが、多くの問題に適用可能な方法は存在しない [3] ように思われる。微分代数方程式は、この方程式何回か微分することによって、常微分方程式の数値解法である Runge-Kutta 法が適用可能な方程式に変形出来ることが知られている。このような方程式に変形するために必要な微分回数を index(指数) と呼ぶ。微分代数方程式の数値解法としてよく引用され、IMSL などのライブラリに登録されている DASSL 法も index 1 までの問題のみに適用可能な 5 次の計算法で、多くの微分代数方程式を直接解くことはできない。Taylor 級数を使った微分代数方程式の解法については、Chang and Corliss[1] の研究があるが、プリプロセッサを利用しているためか、DASSL 法とは異なり、index の制限はないが解ける問題にいろいろな制限がある。本論文では、微分代数方程式の解を浮動小数点数を係数とする Taylor 級数に展開することによって、高 index の方程式の任意次数の数値計算法を与えることができることを示す。

キーワード：微分代数方程式, 数値的 Taylor 展開

Solving for differential algebra equation by Taylor series method with floating point numbers as coefficients

Hiroshi Hirayama[1,a)]　Komiya Seiji[1,b)]

Abstract: The solution of the initial value problem of ordinary differential equations can be calculated up to an arbitrary order in the form of Taylor series. If the obtained Taylor series solution is used for numerical calculation, a numerical solution method of arbitrary order can be obtained. Furthermore, when the obtained Taylor series is transformed into the Pad é expansion formula, A stable numerical calculation method is given. [4]

There is a lot of research on the initial value problem of differential algebraic equations as a numerical calculation method, but it seems that there is no method applicable to many problems [3]. It is known that the differential algebraic equation can be transformed into an equation to which the Runge-Kutta method, which is a numerical solution method for ordinary differential equations, can be applied by differentiating this equation several times. The number of derivatives required to transform into such an equation is called an index.

The DASSL method, which is often cited as a numerical method for solving differential-algebraic equations and is registered in libraries such as IMSL, is a fifth-order calculation method that can be applied only to problems up to index 1, and it is not possible to solve many differential-algebraic equations directly. Regarding the solution of differential algebra equations using Taylor series, there is a study by Chang and Corliss cite chang, but unlike the DASSL method, it is a problem that can be solved although there is no index limitation, probably because it uses a preprocessor. Has various restrictions.

In this paper, we show that by expanding the solution of a differential algebra equation to a Taylor series with floating point numbers as coefficients, it is possible to give a numerical calculation method of arbitrary order of a high index equation.

Keywords: differential algebra equation, numerical Taylor series

1. はじめに

線形の常微分方程式の初期値問題の解は容易に Taylor 級数の形式で、任意次数まで計算できる。例えば

$$\frac{dy}{dx} + y = 0 \tag{1}$$

この方程式の解を次のように仮定する。

$$y(x) = y_0 + y_1 x + y_2 x^2 + \cdots + y_n x^n + \cdots \tag{2}$$

この解を (1) の左辺に代入し、右辺は 0 であるから x の係数は 0 になる。すなわち

$$\begin{aligned} y_1 &+ y_0 = 0 \\ 2y_2 &+ y_1 = 0 \\ &\cdots \\ ny_n &+ y_{n-1} = 0 \\ &\cdots \end{aligned} \tag{3}$$

この漸化式から、$y_n = \frac{(-1)^n}{n!}$ と得られる。したがって、この微分方程式の解は次のようになる。

$$y(x) = y_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} = y_0 e^{-x} \tag{4}$$

(1) の方程式のような線形微分方程式の場合、(3) のような漸化式が得られるので Taylor 級数解の n 次の係数を容易に計算出来る。

微分代数方程式で例題としてよく扱われる次の単振り子の方程式を扱う。

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \lambda(t)x(t) = 0 \tag{5a}$$
$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} + \lambda(t)y(t) = -1 \tag{5b}$$
$$(x(t))^2 + (y(t))^2 = 1 \tag{5c}$$

(5c) のように微分項を含まない式が含まれる連立微分方程式が典型的な微分代数方程式である。(5c) を 1 回微分し 2 で割ると、次の式が得られる。

$$x(t)\frac{dx(t)}{dt} + y(t)\frac{dy(t)}{dt} = 0 \tag{6}$$

さらに微分すると次の式が得られる。

$$\left(\frac{dx(t)}{dt}\right)^2 + x(t)\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \left(\frac{dy(t)}{dt}\right)^2 + y(t)\frac{d^2y(t)}{dt^2} = 0 \tag{7}$$

(7) の中の 2 階微分を (5a) と (5b) を使って消去し、さらに (5c) の関係式を使うと次のようになる。

$$\left(\frac{dx(t)}{dt}\right)^2 - \lambda(t) + \left(\frac{dy(t)}{dt}\right)^2 - y(t) = 0 \tag{8}$$

(8) を微分し、(6) を使うと、次の関係式ができる。

$$\frac{d\lambda(t)}{dt} = -3\frac{dy(t)}{dt} \tag{9}$$

3 回の微分操作を行うことによって、単振り子の方程式の (5c) の式は、(9) のように常微分方程式に変更することができる。このように変更すると Runge-Kutta 等の常微分方程式数値計算法がこの方程式に使うことができる。このような変更にために、式の微分を 3 回行ったので、この単振り子の微分代数方程式は index 3 の微分代数方程式と呼ばれる。

単振り子の方程式は、次のように変更されたことになる。

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \lambda(t)x(t) = 0 \tag{10a}$$
$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} + \lambda(t)y(t) = -1 \tag{10b}$$
$$\frac{d\lambda(t)}{dt} = -3\frac{dy(t)}{dt} \tag{10c}$$

このように変更された方程式を解くためには、初期条件を与えなければならない。$x(0), x'(0), y(0), y'(0), \lambda(0)$ を与えなければならない。微分代数方程式を解くためには、初期値 $x(0), x'(0), y(0), y'(0)$ を与えれば解くことができる。これらの値がわかれば、(8) の式から容易に $\lambda(t)$ の初期値が計算できるからである。

(10c) まで計算しないで、(9) で計算することが多い。この場合、index は 3 から 1 と小さくなるが微分代数方程式にはかわらない。index が 1 の場合、微分代数方程式を解く DASSL と呼ばれる計算プログラムが存在するからである。ここでは、IMSL ライブラリの中の DASSL プログラムを使用した。

初期条件 $x(0) = x_0, x'(0) = x_1, y(0) = y_0, y'(0) = y_1$ から $x(t) = x_0 + x_1 t + x_2 t^2, y(t) = y_0 + y_1 t + y_2 t^2, \lambda(t) = r_0$ と仮定して微分代数方程式に代入する。ここで、x_2, y_2, r_0 はこれから決定する定数である。x_2, y_2, r_0 を決定する方程式は、連立一次方程式になるから容易に計算できる。これを解くと x_2, y_2, r_0 が決定される。次の次数の係数を決定するために $x(t) = x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + x_3 t^3, y(t) = y_0 + y_1 t + y_2 t^2 + y_3 t^3, \lambda(t) = r_0 + r_1 t$ と仮定して微分代数方程式に代入し高次項を省略すると x_3, y_3, r_1 の連立一次方程式が得られる。この操作を繰り返すと任意次数の Taylor 級数解が得られる。

2. 未定係数を含む Taylor 級数の計算

次のような最高次の係数に未定係数を含む Taylor 級数

[1] 神奈川工科大学創造工学部自動車システム開発工学科
Department of Vehicle System Engineering, Faculty of Creative Engneering, Kanagawa Institute of Technology, Shimo-Ogino 1030, Atsugi, Kanagawa, 243-0292, Japan
[a] hirayama@kanagawa-it.ac.jp
[b] kom@eng.kanagawa-it.ac.jp

を考える。

$$f(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + \cdots + (f_n + p_1 + p_2 + \cdots + p_m)x^n \tag{11}$$

この級数は、x^k の係数 $f_k(k = 1, \cdots, n)$ を表す n 個の配列と未定係数 $p_k(k = 1, \cdots, m)$ を表す m 個の配列からなる。これらの級数の演算は、Taylor 級数と同様な方法で定義できる。大きく違っている点は、未定係数部分が出てきたらそれ以降の x の係数の計算を打ち切ることである。

以下で四則演算や主要な関数の計算法を示す。ここでは省略されているが、定数倍、定数の加算、代入などの演算が定義されている。

2.1 未定係数を含む Taylor 級数の四則演算

Taylor 級数の四則計算のプログラムは、以下のように簡単に作ることができる。通常の Taylor 級数と同じように平行移動によって、展開位置を原点へ移すことができるので一般性を失うことなしに、原点で展開した式だけを扱うことができる。この級数を次のように定義する。

$$f(x) = f_0 + f_1x + \cdots + (f_i + p_1 + \cdots + p_m)x^i \tag{12a}$$

$$g(x) = g_0 + g_1x + \cdots + (g_j + q_1 + \cdots + q_m)x^j \tag{12b}$$

$$h(x) = h_0 + h_1x + \cdots + (h_k + r_1 + \cdots + r_m)x^k \tag{12c}$$

$f(x), g(x), h(x)$ はそれぞれ i, j, k 次の有限項で打ち切った Taylor 級数である。

2.1.1 加減算

$h(x)$ が $f(x)$ と $g(x)$ の和差のとき、f, g および h の係数は、次のような関係になる

$$h(x) = f(x) \pm g(x) h_n = f_n \pm g_n (n = 0, \cdots, k) \tag{13}$$

ここで、$k = \min(i, j)$ である。未定係数は、$i = j$ ならば、次のようになる。

$$r_n = p_n \pm q_n (n = 1, \cdots, m) \tag{14}$$

もし、$i > j$ および $i < j$ ならば、それぞれ次のようになる。

$$r_n = \pm q_n, r_n = p_n (n = 1, \cdots, m) \tag{15}$$

未定係数は k 次の項の係数の一部となる。未定係数部分がなければ、通常の Taylor 級数の計算になる。一方だけ未定係数がある場合には未定係数を持たない Taylor 級数は非常に高い次数の式と見なすことによって計算している。以下の未定係数を含む Taylor 級数の計算でも同様である。

2.1.2 乗算

$h(x)$ が $f(x)$ と $g(x)$ の積のとき、f, g および h の係数は、次のような関係になる。

$$h(x) = f(x)g(x) h_n = \sum_{m=0}^{n} f_m f_{n-m} (n = 0, \cdots, k) \tag{16}$$

ここで、$k = \min(i, j)$ である。未定係数は、$i = j$ ならば、次のようになる。

$$r_n = g_0 p_n + f_0 q_n (n = 1, \cdots, m)$$

もし、$i > j$ および $i < j$ ならば、それぞれ次のようになる。

$$r_n = f_0 q_n, r_n = g_0 p_n (n = 1, \cdots, m)$$

乗算は $i = j = 0$ のときを除いて計算できる。

2.1.3 逆数

$h(x)$ が $f(x)$ の逆数のとき、次の式が成り立つ。

$$h(x) = \frac{1}{f(x)}$$

この計算の場合、$h(x)$ と $f(x)$ は同じ次数 $k = i$ になる。係数には、以下のような関係が成り立つ。

$$h_0 = \frac{1}{f_0} \quad h_n = \sum_{l=0}^{n-1} h_l f_{n-l} \quad (n = 1, \cdots, k)$$

未定係数の係数は、以下のようになる。

$$r_n = h_0 p_n (n = 1, \cdots, m)$$

逆数計算は $i > 0$ であれば計算できる。

2.1.4 除算

$h(x)$ が $f(x)$ と $g(x)$ の商のとき、次の関係式が成り立つ。

$$h(x) = \frac{f(x)}{g(x)}$$

このよう場合、$g(x)$ の逆数を計算し、$f(x)$ を掛けて計算する。$h(x)$ の次数は $k = \min(i, j)$ となる。もし $i < j$ ならば、逆数の計算次数を i 次にすることによって不要な計算をなくすことができる。

2.2 未定係数を含む Taylor 級数の関数計算

未定係数を含む Taylor 級数の関数計算も通常のべき級数のように定義できる。ここではプログラム言語で用意されている数学関数のいくつかの計算法を示す。得られる未定係数を含む Taylor 級数は元の未定係数を含む Taylor 級数と同じ次数である。また、未定係数を含む Taylor 級数の次数は 1 次以上であるとすると、その関数値は式 (6) の形をした結果が得られる。

2.2.1 指数関数 $h(x) = e^{f(x)}$

指数関数は次の微分方程式を満たす。

$$\frac{dh(x)}{dx} = h(x)\frac{df(x)}{dx}$$

この微分方程式から、次のような関係が得られる。$h(x)$ と $g(x)$ は同じ次数 $k = i$ になるから次の関係式が得られる。

$$h_0 = e^{f_0} \quad h_n = \frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n} l h_{n-l} f_l \quad (n = 1, \cdots, k)$$

未定係数部分は、次のようになる。

$$r_n = h_0 p_n \quad (n = 1, \cdots, m)$$

2.2.2 対数関数 $h(x) = \log f(x)$

指数関数は次の微分方程式を満たす。

$$f(x)\frac{dh(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dx}$$

この微分方程式から、指数関数計算の場合と同様な方法で、次のような関係式が得られる。また $h(x)$ と $g(x)$ は同じ次数 $k = i$ になる。

$$h_0 = \log f_0 \quad h_n = \frac{1}{nf_0}\left(nf_n - \sum_{l=1}^{n-1} lh_l f_{n-l}\right) \quad (n = 1, \cdots, k)$$

未定係数部分は、次のようになる。

$$r_n = \frac{p_n}{f_0} \quad (n = 1, \cdots, m)$$

2.2.3 べき乗 $h(x) = f(x)^\alpha$(α は定数)

この関数は、次の微分方程式

$$f(x)\frac{dh(x)}{dx} = \alpha h(x)\frac{df(x)}{dx}$$

を満たす。この式の両辺に、(12a)、(12b)、(12c) の式を代入して、各次数の x の係数を等しいと置いて、次の関係式が得られる。

$$h_0 = f_0^\alpha \quad h_n = \frac{1}{nf_0}\sum k = 1^n((\alpha+1)k - n)f_k h_{n-k}$$

未定係数部分は、次のようになる。

$$r_n = h_0 p_n \quad (n = 1, \cdots, m)$$

$\alpha = \frac{1}{2}$ とおけば、平方根を計算するためのプログラムになる。

2.2.4 三角関数

$f(x)$ の三角関数 $g(x) = \sin f(x)$ 、$h(x) = \cos f(x)$ は、次の微分方程式を満たす

$$\frac{dg(x)}{dx} = h(x)\frac{df(x)}{dx} \quad \frac{dh(x)}{dx} = -g(x)\frac{df(x)}{dx}$$

この式から、係数に対する次のような関係式が得られる。この計算の場合、$h(x)$ と $g(x)$ は同じ次数 $j = i$ 、$k = i$ になる。

$$g_0 = \sin f_0 \quad g_n = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} jf_j h_{n-j} \quad (n = 1, \cdots, k)$$

$$h_0 = \cos f_0 \quad h_n = -\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} jf_j g_{n-j} \quad (n = 1, \cdots, k)$$

未定係数部分は、次のようになる。

$$q_n = h_0 p_n \quad r_n = g_0 q_n (n = 1, \cdots, m)$$

三角関数は、$\sin x$ と $\cos x$ を同時に計算すると、計算式が単純で見易い公式となる。これは $\sinh x$ や $\cosh x$ の場合も同様である。

3. 逆関数の Taylor 級数展開

ここでは，Taylor 級数を計算法について簡単に述べる．関数の逆関数の Taylor 級数を計算する方法については，古くから Lagrange Inversion Formula?などいろいろな方法が知られている．ここでは常微分方程式の解として計算する．$y = f(x)$ の逆関数は，x と y を入れ替えた関数であるから，$x = f(y)$ または $y = f^{-1}(x)$ と書ける．これは、index が 1 である微分代数方程式であるから、$x = f(y)$ の両辺を x で微分すると，$1 = f^{'}(y)\frac{dy}{dx}$ であるから，次の逆関数の微分方程式を得る．これは以下のように容易に計算できる。

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{f'(y)} \tag{17}$$

この微分方程式を Picard の逐次近似法 [4] によって，関数 $f(x)$ の逆関数の Taylor 級数を計算することができる．Picard の逐次近似法を使って解を Taylor 級数を計算する手順を説明する．次の形をした逆関数が満たす微分方程式を考える．これ以降 $p(x) = f^{'}(x)$，$q(x) = \frac{1}{p(x)}$ とすると

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{p(y)} = q(y) \quad \text{初期条件} \quad y(x_0) = y_0 \tag{18}$$

このような微分方程式は，次の Picard の逐次近似法によって解くことができる．

$$y_0(x) = y_0 \qquad y_{k+1}(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} \frac{1}{p(y_k(t))}dt \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{19}$$

3.1 Taylor 級数の逆関数の計算例

例として関数 $f(x) = e^{-x} - 2x - 3$ の逆関数 $y = f^{-1}(x)$ を求める．(17) から，$f'(x) = -e^{-x} - 2$ であるから逆関数は，次の微分方程式を満たす．

$$\frac{dy}{dx} = q(y) = \frac{1}{p(y)} = -\frac{1}{e^{-y}+2} \qquad \text{初期条件}:y(-2) = 0 \tag{20}$$

初期条件は，$x = f(y)$ に $y = 0$ を代入して x を決める．$y(-2) = 0$ すなわち $x_0 = -2$，$y_0 = 0$ となる．

最初に (19) で $k = 0$ として，0 次の近似計算を行う．初期条件 $y_0 = 0$ から，$q(y) = -\frac{1}{3}$ となる．この結果を (19) に代入して積分すると，1 次の近似解 $y_1(x) = -\frac{1}{3}(x+2)$ が得られる．

次に (19) で $k = 1$ として，1 次の近似計算を行う．1 次の近似解 $y_1(x)$ を $q(y)$ に代入し，$(x+2)$ の 1 次まで計算する．定数項は 0，1 次の係数は $-\frac{1}{3}$ であるから，$p(y) = -\exp(y) - 2 = -3 - \frac{1}{3}(x+2)$ となる．その逆数を逆数関数 $\mathrm{rcp}(x)$ または割り算を使って計算する．$q(y) = -\frac{1}{3} + \frac{1}{27}(x+2)$ となる．この結果を (19) に代入して積分すると，2 次の近似解 $y_2(x) = -\frac{1}{3}(x+2) + \frac{1}{54}(x+2)^2$ が得られる．

$k=2$ として，2 次の近似解を求める．この 2 次の近似解 $y_2(x)$ を $p(y)$ に代入し，(19) の式を使って 2 次まで計算すると，$p(y)=-\exp(y)-2=-3-\frac{1}{3}(x+2)-\frac{1}{27}(x+2)^2$ となる．この逆数を計算すると，$q(y)=-\frac{1}{3}+\frac{1}{27}(x+2)$ となる．2 次の項の係数がゼロであるため，1 次の計算結果と同じになる．したがって，3 次の近似解 $y_3(x)=-\frac{1}{3}(x+2)+\frac{1}{54}(x+2)^2$ が得られる．

同様に $k=4$ として，計算を繰り返すと $y_4(x)=-\frac{1}{3}(x+2)+\frac{1}{54}(x+2)^2-\frac{1}{8748}(x+2)^4$ この計算を 6 次まで計算すると次のような式が得られる．

$$\begin{aligned} y_6(x) &= -\frac{1}{3}(x+2)+\frac{1}{54}(x+2)^2-\frac{1}{8748}(x+2)^4 \\ &- \frac{1}{196830}(x+2)^5+\frac{1}{885735}(x+2)^6 \end{aligned}$$

この例題では，分数を使って計算している．この例では，指数関数は $x=0$ の場合のみ計算しているので，分数で正確に計算出来るが，一般には分数では計算出来ない．そのため通常は浮動小数点数で計算する．この微分方程式の係数を倍精度浮動小数点数にして，Taylor 級数解を 20 次まで計算した．その結果を 6 次まで表示すると次のようになる．

$$\begin{aligned} y &= -0.333333(x+2)+0.0185185(x+2)^2 \\ &- 7.61389\times 10^{-20}(x+2)^3-0.000114312(x+2)^4 \\ &+ 5.08053\times 10^{-6}(x+2)^5+1.12901\times 10^{-6}(x+2)^6 \end{aligned}$$

3 次の項がゼロではなく絶対値が小さい数値になっている．倍精度浮動小数点数の丸め誤差の影響によるものである．分数を使った展開式と比較すれば，この 3 次の係数はゼロであることがわかる．得られた倍精度の Taylor 級数は，分数計算の Taylor 級数と丸め誤差の影響を考慮すると一致することがわかる．

得られた Taylor 展開式が関数 $f(x)$ の逆関数の近似式であることを確かめるために，$f(x)=0$ の解 (厳密解:$-0.59420\ 49585\ 08771\ 74868\cdots$) を計算する．20 次の逆関数の近似 Taylor 級数に $x=0$ を代入すると，$-0.59420\ 49585\ 08517$ となり，約 12 桁の精度の $f(x)=0$ の解が得られる．この結果から得られた Taylor 級数は $f(x)$ の逆関数の近似 Taylor 展開式であると思われる．

得られた逆関数の n 次の近似 Taylor 級数を関数 $f(x)$ に代入すると，n 次まで正確に計算出来るので，計算結果を n 次まで採ると x に一致する．上記の 6 次までの Taylor 級数は，$x=-2$ で展開されているので，計算結果も $x=-2$ で展開された結果になる．

4. 数値例

4.1 厳密解が知られている例

ここでは，厳密解がわかっている次の例 [7] をあげる．

$$\begin{cases} v_1'+v_3v_2'-(v_3+1)v_3' = -v_1+1+\sin x \\ (v_3+1)v_1'+v_1v_2' = -e^{-x} \\ v_1v_2v_3-0.5e^{-x}\sin 2x = 0 \end{cases} \tag{21}$$

初期条件を次のような値

$$v(0)=\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix},\quad v'(0)=\begin{pmatrix}-1\\1\\0\end{pmatrix} \tag{22}$$

のとき、解析解は次の式で表されることが知られている。

$$v_1(x)=e^{-x}\quad v_2(x)=\sin x\quad v_3(x)=\cos x$$

(21) の微分代数方程式の解は、初期条件 (22) から次のように仮定できる。

$$v_1(x)=1-x+e_1x^2\quad v_2(x)=x+e_2x^2\quad v_3(x)=1+e_3x^2 \tag{23}$$

e_1、e_2、e_3 は、これから決定すべき定数である。(23) を (21) に代入し、x の高次の項を省略すると、次の式が得られる。

$$\begin{cases} e_2x^2+O(x^3) = 0 \\ (-2+4e_1+2e_3)x+O(x^2) = 0 \\ (-2+2e_1+2e_2-2e_3)x+O(x^2) = 0 \end{cases} \tag{24}$$

すなわち

$$\begin{pmatrix}0&1&0\\4&2&0\\2&2&-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_1\\e_2\\e_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\2\\2\end{pmatrix} \tag{25}$$

このように、省略した高次の項が同じ次数になるとは限らないことに注意する必要がある。これは、(21) の方程式がすべて同じ階数の方程式でないことに由来する。この方程式を解くことによって、次の式が得られる。

$$v_1(x)=1-x+0.5x^2,\ v_2(x)=x,\ v_3(x)=1-0.5x^2 \tag{26}$$

(26) から、さらに 3 次の解を次のように仮定できる。

$$v_1(x)=1-x+0.5x^2+e_1x^3,\ v_2(x)=x+e_2x^3,\ v_3(x)=1-0.5x^2+e_3x^3 \tag{27}$$

これを再度 (21) に代入すれば、次の方程式が得られる。小数点以下 6 桁しか表示していないが、実際の値は、倍精度（約 15 桁）で計算している。

$$\begin{cases} (0.166667+e_2)x^3+O(x^4) = 0 \\ (-1.5+6e_1+3e_3)x^2+O(x^3) = 0 \\ (1+3e_1+3e_2-3e_3)x^2+O(x^3) = 0 \end{cases} \tag{28}$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 6 & 3 & 0 \\ 3 & 3 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1666667 \\ 1.5 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (29)$$

この方程式を解くことによって、

$$v_1(x) = 1.x + 0.5x^2 - 0.166667x3,$$
$$v_2(x) = x - 0.166667x^3, \quad v_3(x) = 1 - 0.5x^2 \quad (30)$$

この操作を繰り返し、9 次まで求めると以下のようになる。

```
v1=1-x+0.5*x^2-0.166667*x^3+0.0416667*x^4
  -0.00833333*x^5+0.00138889*x^6-0.000198413*x^7
  +2.48016e-05*x^8-2.75573e-06*x^9
v2=x-0.166667*x^3+5.55112e-17*x^4+0.00833333*x^5
  +1.00614e-16*x^6-0.000198413*x^7+7.71952e-17*x^8
  +2.75573e-06*x^9
v3=1-0.5*x^2+1.38778e-17*x^3+0.0416667*x^4
  +4.59702e-17*x^5-0.00138889*x^6+4.07931e-18*x^7
  +2.48016e-05*x^8-2.849e-18*x^9
```

上の結果は計算機からの出力である。この問題では、解はすべて同じ次数まで得られる。

4.2 ホモトピー法への応用例

ホモトピー法で現れるような微分代数方程式も容易に解ける。この種の微分代数方程式は、最高階数の項について解かれた形になっていないので、Chang and Corliss[1] の方法では直接適用できない問題である。次の方程式 [6] を解くことを考える。

$$\begin{cases} 2v_1^3 + 2v_1v_2 - 22v_1 + v_2^2 + 13 & = & 0 \\ v_1^2 + 2v_1v_2 + 2v_2^3 - 14v_2 + 9 & = & 0 \end{cases} \quad (31)$$

この場合、方程式は、ニュートン・ホモとピー法を使うと次の微分代数方程式になる。

$$\begin{cases} 2v_1^3 + 2v_1v_2 - 22v_1 + v_2^2 + 13 - (1-t) & = & 0 \\ v_1^2 + 2v_1v_2 + 2v_2^3 - 14v_2 + 9 - 2(1-t) & = & 0 \\ \left(\frac{dv_1}{ds}\right)^2 + \left(\frac{dv_2}{ds}\right)^2 + \left(\frac{dv_3}{ds}\right)^2 - 1 & = & 0 \end{cases} \quad (32)$$

この例では $s = 0$ のとき、$t(s) = 0$ と決め、$v_1(s) = 1$, $v_2(s) = 2$ としたとき (32) が成り立つように $(1-t)$ の係数を決める。この値が初期条件となる。すなわち、次の式となる。

$$t(0) = 0, v_1(0) = 1, v_2(0) = 2 \quad (33)$$

s を増加または減少させ $t(s) = 1$ となる s を決定し、そのときの $v_1(s)$ および $v_2(s)$ を求める。この値が方程式 (43) の解となる。初期条件から、１次の係数を求めるために、

$$v(s) = 1 + e_1s, \quad v_2(s) = 2 + e_2s, \quad t(s) = e_3s \quad (34)$$

として、代入し、高次の項を省略すると、次の方程式が得られる。

$$\begin{cases} -12e_1 + 6e_2 + e_3 & = & 0 \\ 6e_1 + 12e_2 + 2e_3 & = & 0 \\ e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 - 1 & = & 0 \end{cases} \quad (35)$$

これから、次の値が得られる。(復号同順)

$$e_1 = 0, \quad e_2 = \pm\frac{1}{\sqrt{37}}, \quad e_3 = \mp\frac{6}{\sqrt{37}} \quad (36)$$

この方程式は連立一次方程式ではないので、これまで示した方法では解けない。手計算などの別の手段で解かなければならない。今回は、この部分を手計算で解いている。$s = 0$ において、次のような Taylor 展開式が得られる。以下にその展開式の 5 次までの式を示す。この問題では独立変数は s であるが、計算システムの関係から表示は x となっている。

```
V1 : 1-0.00900901*x^2+0.0020735*x^3
     -0.00062522*x^4+0.000222944*x^5
V2 : 2+0.164399*x-0.0225225*x^2+0.00587492*x^3
     -0.00191935*x^4+0.000700004*x^5
T : 0.986394*x+0.00375375*x^2-0.00138637*x^3
    +0.000557427*x^4-0.000236486*x^5
```

この方程式を解くと次の 7 つの解が得られる。最初の 4 個は s を正の方向に計算して得られた。それに続く 3 個は負の方向に計算して得られた。その結果を表 1 に示す。

表 1　ホモトピー法による計算結果

s	v_1	v_2
1.23913	0.987519	1.80077
7.39822	0.712509	0.855747
31.3793	0.793267	-2.81385
49.0951	3.25325	-2.71235
-38.8619	-3.36941	2.51438
-47.3769	-3.4536	1.1443
-78.7825	-4.25544	-3.84461

5. 終わりに

微分代数方程式の解の Taylor 展開を数値的に行う方法を説明した.

微分代数方程式を常微分方程式の Runge-Kutta 法などの数値解法計算するためには、微分代数方程式を index 回微分操作を行い常微分方程式の計算法をしなければならないため、実際に計算するのはかなり面倒な前処理を行わなければならないため、実際に計算された例は少ない。数値的 Taylor 展開法は容易に計算次数をあげることができるため，効率的な計算法であると思われる。

参考文献

[1] Chang Y. F. and Corliss G.: ATOMFT: Solving ODEs and DAE Using Taylor Series, Computers Math. Applic.,

Vol.28, pp. 209.233 (1994)
[2] Ellis M. A. and Stroustrup B.: The Annotated C++ Reference Manual, Addison- Wesley (1990)
[3] Hairer E., Wanner G.: Solving Ordinary Differential Equations II, Springer-Verlag (1991)
[4] 平山, 小宮, 佐藤: Taylor 級数法による常微分方程式の解法, 日本応用数理学会, Vol.12, No.1. pp.1.8 (2002)
[5] Rall,L. B.: Automatic Differentiation-Technique and Applications, Lecture Notes in Computer Science, Vol.120, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (1981)
[6] 牛田, 田中: 電子回路シミュレーション, コロナ社, (2002)
[7] 渡辺, 高木: 常微分方程式初期値問題の数値計算プログラム HIDMAS, 日本応用数理学会論文誌, Vol.1, pp.135.163 (1991)