指数2の微分-代数系の数値解法における簡約 Newton 法†

小 藤 俊 幸††

常微分方程式に対する陰的な数値解法の適用に際して最も本質的な問題は，微分方程式が非線形の場合，ある種の非線形（代数）方程式系を解かねばならないことである．本論文では，陰的 Runge-Kutta 法を指数2の微分-代数系に適用する場合をとりあげ，そのような非線形方程式系の解法について論じる．具体的には，上記微分-代数系に対する陰的 Runge-Kutta 法の各ステップの計算に現れる非線形方程式系の可解性を，簡約 Newton 法による反復過程の収束性により証明し，同反復性を陰的 Runge-Kutta 法における非線形方程式系の求解に用いる際の特性を明らかにする．証明は，非線形関数方程式の反復解法に関する Kantorovich 型の定理に基づき，誤差評価を同時に与えるものとなっている．

1. はじめに

微分-代数方程式系

$$
\left.\begin{aligned} u_1'(t) &= f_1(u_1, u_2) \\ 0 &= f_2(u_1) \end{aligned}\right\} \quad (a \leq t \leq b) \qquad (1.1)
$$

について考察する．ここで $u_k(t)$ $(k=1,2)$ は R^{d_k}-値関数とし，$u_1'(t)$ は導関数 du_1/dt の意味である．また，f_k は十分滑らかな R^{d_k}-値写像を表すものとする．(1.1)は，線形方程式系からの類推で，サイズ2のHessenberg 形式とも呼ばれているが[3]，微分-代数系の分類上からは，指数2の系[6),8),9)]の典型と考えられ，応用上重要な多くの微分-代数系がこのような形に表されることが知られている[2),3),7),9)]．

微分-代数系(1.1)に対する初期値問題は，適当な付帯条件のもとでは一意可解となり，その数値解法として，後退微分公式(BDF)，あるいは陰的 Runge-Kutta 法等の微分方程式に対する陰的な数値解法の適用が論じられている．特に，陰的 Runge-Kutta 法に関しては，その精度等について，Brenan-Petzold[4)]，Hairer-Lubich-Roche[9)] らによって，詳しい解析がなされている．

しかしながら，実際に陰的 Runge-Kutta 法を適用する際には，ある種の非線形方程式系を数値的に解くことが必要であり，そのような点からは，上記の研究は十分であるとは言い難い．実際，文献9)では，そのような方程式系の可解性を，非線形関数方程式の数値解法の一種であるホモトピー法に基づいて論じており，この場合，より実際的な解法と考えられる Newton 法タイプの反復解法との関連が不明瞭である．

本論文の目的は，陰的 Runge-Kutta 法を微分-代数系に適用する際に生じる非線形方程式系の可解性を，Newton 法タイプの反復解法のひとつである簡約 Newton 法に基づいて論じ，特に，それらの非線形系に対する同反復法の収束特性を明確にすることにある．なお，反復解法として，特に簡約 Newton 法を取り上げるに際しては，計算量の面から，実現に有利と思われる点を配慮したことを述べておく．実際，同法は，陰的方法の実現に際してしばしば考察されている[9),12),14)]．

以下，簡単に本論文の構成について述べる．次の第2章では，微分-代数系(1.1)に対する陰的 Runge-Kutta 法の適用を示し，上述の非線形方程式系を具体的に定式化する．第3章では，それらの非線形系に対する簡約 Newton 法を考察し，その収束性を証明する．ただし，その際必要となるいくつかの補題の証明は，第4章で与える．第5章はまとめの章とし，簡約 Newton 法を実際に用いる際のいくつかの注意点を指摘する．

2. 微分-代数系に対する陰的 Runge-Kutta 法

ここでは，微分-代数系(1.1)に対する初期値問題の一意可解性を考察したのち，陰的 Runge-Kutta 法の適用について述べる．さらに，適用に際して生じる非線形方程式系の可解性を論じる．

2.1 陰的 Runge-Kutta 法の適用

陰的 Runge-Kutta 法の適用を論じるための準備として，まず，微分-代数系(1.1)の基本的な性質について述べる．

微分-代数系(1.1)に対して，

$$
\begin{aligned} g_1(u_1, u_2) &= (\partial f_2/\partial u_1)(u_1) f_1(u_1, u_2), \\ g_2(u_1) &= f_2(u_1), \end{aligned} \qquad (2.1.1)
$$

† Simplified Newton Method in Runge-Kutta Processes for Index-2 Differential-Algebraic Equations by TOSHIYUKI KOTO (International Institute for Advanced Study of Social Information Science, Fujitsu Laboratories Ltd.).

†† (株)富士通研究所国際情報社会科学研究所

$$M(u_1, u_2) = (\partial f_2/\partial u_1)(u_1)(\partial f_1/\partial u_2)(u_1, u_2) \qquad (2.1.2)$$

とおく．ここで，記号 $(\partial f_k/\partial u_l)$ は，

$$f_k = (f_k^{(i)})^{\mathrm{T}},\quad u_l = (u_l^{(j)})^{\mathrm{T}}$$

のように成分表示したとき，(i, j) 成分が

$$\partial f_k^{(i)}/\partial u_l^{(j)}$$

で与えられる $d_k \times d_l$ を行列を表す．特に，(2.1.2) は d_2 次正方行列である．

以下，$d_1 > d_2$ の関係を仮定する．そのとき，つぎの命題が成立する．

命題 1 $u_{k,0} \in R^{d_k}$ $(k=1, 2)$ は

$$g_1(u_{1,0}, u_{2,0}) = 0,\quad g_2(u_{1,0}) = 0 \qquad (2.1.3)$$

を満たすものとし，$(u_{1,0}, u_{2,0})^{\mathrm{T}}$ の近傍で，(2.1.2)の行列は可逆とする．そのとき，

$$u_k(a) = u_{k,0}\quad (k=1, 2)$$

を満たす(1.1)の（滑らかな）解 $u(t) = (u_1(t), u_2(t))^{\mathrm{T}}$ が $t=a$ の近傍で一意に存在する．□

証明 $F_2 = (\partial g_1/\partial u_1) f_1$ とおく．t に関する微分操作，および代入操作により，(1.1)は

$$u_1' = f_1(u_1, u_2),$$
$$u_2' = -M(u_1, u_2)^{-1} F_2(u_1, u_2), \qquad (2.1.4)$$

および，

$$0 = g_1(u_1, u_2),$$
$$0 = g_2(u_1) \qquad (2.1.5)$$

のように変形される．ここで，(2.1.4)のもとでは，

$$\frac{dg_1}{dt} = M(u_1, u_2) u_2' + F_2(u_1, u_2),$$

$$\frac{dg_2}{dt} = g_1(u_1, u_2) \qquad (2.1.6)$$

の関係が成り立つことに注意する．微分方程式系(2.1.4)は，明らかに $(u_{1,0}, u_{2,0})^{\mathrm{T}}$ を初期値とする一意解をもつが，(2.1.3)，(2.1.6)から，この解軌道上で g_1, g_2 は恒等的にゼロとなる．(1.1)と(2.1.4)，(2.1.5)の等価性により，命題の主張を得る．□

注意 (2.1.2)の可逆性のもとでは，(2.1.5)は局所的に $(d_1\text{-}d_2)$ 次元多様体の構造をもち，(2.1.4)の右辺は，この多様体上のベクトル場を定めることが，計算により示される．その意味では，微分-代数系は，多様体上の微分方程式とも解釈される．このような方向から，文献13）のような研究もなされている．□

命題1は，微分-代数系に対しても，微分方程式と同様に，初期値問題が考えられることを意味している．したがって，その数値解法として，微分方程式の初期値問題に対する数値解法の適用を試みることは，自然であろう．実際，陰的 Runge-Kutta 法については，以下のような形で微分-代数系に対する適用が考えられる．

以下，命題1の解関数 $u(t)$ は区間 $[a, b]$ の近傍に延長可能であり，$u(t)$ の近傍で，(2.1.2)の行列は可逆であると仮定する．後者は，解の一意性を保証するための仮定である．

区間 $[a, b]$ に対して，

$$a = t_0 < t_1 \cdots < t_n < \cdots < t_N = b$$
$$(t_n = t_0 + nh,\ n = 0, 1, \cdots, N)$$

のような等間隔の分割を考え，各小区間 $[t_n, t_{n+1}]$ をステップ，t_n をステップ点と呼ぶ．また，$u_{k,n}$ $(k=1, 2, n \geqq 1)$ を，各ステップ点 t_n 上における解の近似値とし，s 段陰的 Runge-Kutta 法の係数パラメータを a_{ij} $(1 \leqq i, j \leqq s)$，b_i $(1 \leqq i \leqq s)$ と表すことにする．そのとき，微分-代数系(1.1)に対する陰的 Runge-Kutta 法は，各ステップにおいて，$u_{k,n}$ から $u_{k,n+1}$ の算出方法を，以下のように与えることにより定式化される：

$$u_{k,n+1} = u_{k,n} + h \sum_{j=1}^{s} b_i U'_{k,i}\quad (k=1, 2) \qquad (2.1.7)$$

ただし，$u_{k,0}$ は命題1の条件を満たす初期値により与えるものとする．$U'_{k,i}$ $(k=1, 2,\ i=1, 2, \cdots, s)$ は $u_{k,n}$ から $u_{k,n+1}$ を算出するための中間変数で，具体的には，$U'_{k,i}$ および $U_{k,i}$ を未知変数とする非線形方程式系

$$U_{k,i} = U_{k,n} + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} U'_{k,j}\quad (k=1, 2),$$
$$U'_{1,i} = f_1(U_{1,i}, U_{2,i}),$$
$$0 = f_2(U_{1,i})\quad (i=1, 2, \cdots, s) \qquad (2.1.8)$$

を解くことにより決定される．

このような定式化が，実際に意味をもつためには，(2.1.8) の非線形方程式系が可解であることが前提となる．これについては次節で論じる．

2.2 非線形方程式系の可解性

まず，Runge-Kutta 法に関するいくつかの記号を用意する．通常のように，パラメータ c_i を

$$c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\quad (i=1, 2, \cdots, s)$$

により定義する．また，係数パラメータを，

$$A = (a_{ij})\quad (1 \leqq i, j \leqq s),$$
$$b = (b_1, b_2, \cdots, b_s)^{\mathrm{T}}$$

のような行列およびベクトル記法を用いて表し，特に，s 次正方行列 A を Runge-Kutta 行列と呼ぶことにする．さらに，$R(z)$ を Runge-Kutta 法の安定性

関数[5]，すなわち，

$$R(z)=1+zb^{\mathrm{T}}(I-zA)^{-1}e$$
$$(z\in C,\ e=(1,1,\cdots,1)^{\mathrm{T}})$$

とし，

$$\rho=\lim_{z\to\infty}R(z) \tag{2.2.1}$$

の量を定義しておく．

非線形方程式系(2.1.8)の可解性については，つぎの定理が基本的である．

定理 2 (文献 9)，p. 31) $w_k(=w_k(h))\in R^{d_k}$ $(k=1,2)$ は

$$g_1(w_1,w_2)=O(h),\ g_2(w_1)=O(h^2) \tag{2.2.2}$$

を満たすものとし，(2.1.2)が可逆となるような $(w_1, w_2)^{\mathrm{T}}$ の近傍の存在を仮定する．そのとき，Runge-Kutta 行列 A が可逆ならば，非線形方程式系

$$U_{1,i}=w_1+h\sum_{j=1}^{s}a_{ij}f_1(U_{1,j},U_{2,j}),$$
$$0=f_2(U_{1,i})\ (i=1,2,\cdots,s) \tag{2.2.3}$$

は，十分小さい h に対して，局所的に一意可解であり，解は

$$U_{k,i}=w_k+O(h)\ (k=1,2,\ 1\leqq i\leqq s) \tag{2.2.4}$$

の評価を満たす．□

定理2に基づいて，微分-代数系(1.1)に対する陰的 Runge-Kutta 法の適用可能性に関するつぎの定理3を示すことができる．定理3は，(1.1)に対する陰的 Runge-Kutta 法の収束性を示すものともなっている．なお，Runge-Kutta 行列 A の可逆性のもとでは，(2.2.1)の ρ は

$$\rho=1-b^{\mathrm{T}}A^{-1}e$$

のように表される．

定理 3 定理2の仮定のもとで，さらに，

$$\sum_{i=1}^{s}b_i=1,\ |\rho|<1 \tag{2.2.5}$$

を仮定する．そのとき，十分小さい h に対して，$u_{k,n}$ $(n=1,2,\cdots,N)$ は初期値 $u_{k,0}$ から逐次的に算出され，

$$u_{k,n}-u_k(t_n)=O(h)\ (k=1,2,\ 1\leqq n\leqq N) \tag{2.2.6}$$

の評価を満たす．ただし，記号 $O(h)$ は，表記の評価が（系(1.1)および解 $u(t)$ のみに依存し）n には依存しない定数を用いてなされることを意味する．□

この定理は，つぎの補題を介して証明される．

補題 4 定理3の仮定のもとで，各 n に対して，以下の(a)，(b)が成立する．

(a) $u_{k,n}$ に対して，

$$g_1(u_{1,n},u_{2,n})=O(h), \tag{2.2.7}$$
$$g_2(u_{1,n})=O(h^2), \tag{2.2.8}$$

が成り立つ．

(b) $u_{k,n}$ から $u_{k,n+1}$ が計算され，

$$\|\Delta u_{1,n+1}\|\leqq\|\Delta u_{1,n}\|+\delta_{1,n},$$
$$\delta_{1,n}=O(h^2), \tag{2.2.9}$$
$$\|\Delta u_{2,n+1}\|\leqq|\rho|\,\|\Delta u_{2,n}\|+\delta_{2,n},$$
$$\delta_{2,n}=O(h) \tag{2.2.10}$$
$$\|g_2(u_{1,n+1})\|\leqq|\rho|\,\|g_2(u_{1,n})\|+\delta_n,$$
$$\delta_n=O(h^2) \tag{2.2.11}$$

の評価を満たす．ただし，

$$\Delta u_{k,n}=u_{k,n}-u_k(t_n)$$

である．□

ここで，$\Delta u_{k,0}=0$ $(k=1,2)$，および，(2.2.9)，(2.2.10)から，それぞれ，

$$\|\Delta u_{1,n}\|\leqq\sum_{m=0}^{n-1}\delta_{1,m}, \tag{2.2.12}$$
$$\|\Delta u_{2,n}\|\leqq\sum_{m=0}^{n-1}|\rho|^{n-1-m}\delta_{2,m} \tag{2.2.13}$$

の評価が得られ，(2.2.6) が示されることに着目すると，定理3は補題4から直ちに導かれる．

補題4は n に関する帰納法により証明される．証明の基本的な考え方は，それほど難しいものではないが，厳密に論じるためにはいささか紙数を要す．厳密な証明は付録で与えることとし，ここでは，証明の骨子のみを述べる．

補題4の証明においては，各 n，および，$w_k=u_{k,n}$ に対して，定理2の仮定の成立を示すことが基本となる．このとき，まず，定理2により，(2.2.3) の解系の存在が示される．さらに，(2.1.8)および(2.1.7)式から $u_{k,n+1}$ が算出されることが，Runge-Kutta 行列 A の可逆性に基づいて示され，帰納法が進行する．

すなわち，微分-代数系(1.1)に対する陰的 Runge-Kutta 法は，各ステップで $w_k=u_{k,n}$ に対する非線形方程式系(2.2.3)を解くことに帰着される，というのが補題4の証明の骨子である．その意味では，陰的 Runge-Kutta 法の適用可能性は，定理2に集約されるとも言えよう．次章では，そのような観点から，定理2の簡約 Newton 法に基づく証明を与えることを通じ，同反復法を陰的 Runge-Kutta 法における非線形方程式系の求解に用いる際の特性について論じる．

3. 簡約 Newton 法の収束特性

定理2に関し，文献9)では，非線形方程式系(2.2.3)に対するホモトピー法に基づく証明が与えられている．しかし，(2.2.3) の解法としては，Newton 法タイプの反復解法を用いる方がより実際的である．以下

では，定理2の簡約 Newton 法に基づく別証明を与え，同反復法の収束特性を明らかにする．

まず，準備として，反復解法の収束性に関する定理としては，比較的よく知られている，つぎの定理を述べておく．

Kantorovich 型定理（文献 11)，p. 418)

$G: R^d \to R^d$ を，凸集合 $D \subset R^d$ の近傍で定義された微分可能な写像とし，R^d 上のノルム$\|\cdot\|$，および，任意の $x, y \in D$ に対して，

$$\|G'(x)-G'(y)\| \leqq \gamma \|x-y\|$$

の評価を満たすものとする．また，ある $x^0 \in D$ に対して

$$\|G'(x^0)\| \leqq \delta < 1,\quad \alpha = \gamma\eta/(1-\delta)^2 \leqq 1/2$$
$$(\eta = \|G(x^0)-x^0\|)$$

の関係を仮定する．そのとき，

$$\tau = [(1-\delta)/\gamma][1-(1-2\alpha)^{1/2}],$$
$$\tau^* = [(1-\delta)/\gamma][1+(1-2\alpha)^{1/2}]$$

により定義される τ, τ^* に対して，つぎが成立する．

$\bar{S}(x^0, \tau) \subset D$ ならば，$x^{p+1} = G(x^p)$ $(p=0, 1, \cdots)$ は $\bar{S}(x^0, \tau)$ の中に留まり，$D \cap S(x^0, \tau^*)$ における G の唯一つの不動点 x^* に収束する．ただし，$S(y, \rho)$ は開球 $\{x \in R^d \mid \|x-y\| < \rho\}$，$\bar{S}(y, \rho)$ はその閉包である．□

定理2の証明　未知変数を

$$U_k = (U_{k,1}, U_{k,2}, \cdots, U_{k,s})^{\mathrm{T}},\quad U = (U_1, U_2)^{\mathrm{T}}$$

のようなベクトル記法を用いて表す．さらに，

$$F_{1,i}(U) = U_{1,i} - w_1 - h\sum_{j=1}^{s} a_{ij} f_1(U_{1,j}, U_{2,j}),$$
$$F_{2,i}(U) = f_2(U_{1,i}),$$

とおき，

$$F_k(U) = (F_{k,1}(U),\ F_{k,2}(U), \cdots, F_{k,s}(U))^{\mathrm{T}},$$
$$F(U) = (F_1(U),\ F_2(U))^{\mathrm{T}}$$

と書くことにすると，非線形方程式(2.2.3)は

$$F(U) = 0 \tag{3.1}$$

のように表される．以下，(3.1)に対する簡約 Newton 法

$$U^{p+1} = U^p - F'(U^0)^{-1}F(U^p)\ (p=0, 1, \cdots),$$
$$U^0_{k,i} = w_k\ (k=1, 2,\ 1 \leqq i \leqq s) \tag{3.2}$$

を考察する．

まず，ノルム $\|\cdot\|_h$ を

$$\|U\|_h = \|D(h)U\|,$$
$$D(h) = \mathrm{diag}(I_{(1)}, hI_{(2)}) \tag{3.3}$$

のように定義する．ただし，$I_{(1)}$, $I_{(2)}$ は，それぞれ，d_1s 次元，d_2s 次元の単位行列であり，記号 $\mathrm{diag}(I_{(1)}, hI_{(2)})$ は

$$\begin{bmatrix} I_{(1)} & 0 \\ 0 & hI_{(2)} \end{bmatrix}$$

のようなブロック対角行列を表すものとする．以下，同様な略記法を使用する．そのとき，

$$G(U) = U - F'(U^0)^{-1}F(U) \tag{3.4}$$

により与えられる $G(U)$ に関して，以下の評価が成立する．

補題 5　U^0 の近傍において

$$\|G'(U)-G'(V)\|_h \leqq \gamma \|U-V\|_h,$$
$$\gamma = O(h^{-2}) \tag{3.5}$$

が成立する．□

補題 6　$U^1 = G(U^0)$, $U^2 = G(U^1)$ に対して，

$$U^p_{1,i} = w_1 + c_i h f_1(w_1, w_2) + O(h^2),$$
$$U^p_{2,i} = w_2 + O(h)\ (p=1, 2,\ 1 \leqq i \leqq s), \tag{3.6}$$
$$\|G'(U^2)\|_h \leqq \delta,\quad \delta = O(h), \tag{3.7}$$
$$\|G(U^2)-U^2\|_h \leqq \eta,\quad \eta = O(h^3) \tag{3.8}$$

が成立する．□

このとき，

$$\alpha = \gamma\eta/(1-\delta)^2 = O(h) \tag{3.9}$$

となることに注意する．上記 U^2 を，Kantorovich 型定理における x^0 と考えると，十分小さい h に対して，条件 $\alpha \leqq 1/2$（および $\delta < 1$）が満たされる．したがって，同定理により，簡約 Newton 法(3.2)は，$G(U)$ の不動点，すなわち，$F(U)=0$ の解 U^* に収束することが示され，特に，非線形系(2.2.3)の可解性を得る．さらに，

$$\tau = [(1-\delta)/\gamma][1-(1-2\alpha)^{1/2}]$$
$$= [\eta/(1-\delta)]\frac{1-(1-2\alpha)^{1/2}}{\alpha} = O(h^3)$$

により，

$$\|U^* - U^2\|_h = O(h^3) \tag{3.10}$$

の評価を得る．ノルム $\|\cdot\|_h$ の定義から，この評価は解 U^* が，各変数ごとに

$$U^*_1 = U^2_1 + O(h^3),\ U^*_2 = U^2_2 + O(h^2) \tag{3.11}$$

の関係を満たすことを意味している．$p=2$ に対する(3.6)から，解に関する(2.2.4)の評価を得る．□

注意　上の証明においては，(3.11)式((3.10)式)を非線形方程式系の解 U^* に関する評価式として用いた．しかし，同式は，U^* の近似値 U^2 についての誤差評価式と考えることもできる．このことに着目すると，以下のような主張を示すことができる．

陰的 Runge-Kutta 法により，(1.1) の適当な近似解が得られるためには，各ステップにおける (2.1.8) の非線形系は必ずしも厳密に解かれる必要はない．実

際，(2.1.8)の $U_{k,i}$ を，$w_k=u_{k,n}$ に対する上記 $U^2_{k,i}$ で置き換えることにより得られる近似解列を，改めて $u_{k,n}$ ($n=1,2,\cdots,N$) と書くことにすると，(3.11) の関係により，補題4の各評価がこれらの $u_{k,n}$ に対しても成立することが（補題4の証明に若干の修正を加えることにより）示される．このことは，Runge-Kutta 法の各ステップにおける非線形方程式系の求解を簡約 Newton 法によって実行する際には，反復回数を2回で打ち切っても (2.2.6) の収束性が保証されることを意味している．なお，(3.10)の評価は，つぎのように一般化することができる．

$K(\geqq 2)$ を任意の固定された整数とするとき，

$$\|U^*-U^p\|_h=O(h^{p+1})\ (2\leqq p\leqq K) \tag{3.12}$$

が成立する．

これについては補題6の証明において注釈を与える．□

4. 補題の証明

ここでは，定理2の証明に用いた補題の証明について述べる．証明は，以下の二つの補題に基づく．

補題A（文献 11)，p. 42）$\|\cdot\|$ を R^d 上のノルム，P を正則な d 次正方行列とすれば，

$$\|x\|'=\|Px\|\ (x\in R^d)$$

も R^d 上のノルムである．また，両者のノルムから誘導される行列の作用素ノルムに対して，

$$\|L\|'=\|PLP^{-1}\|$$

の関係が成立する．ここで，L は任意の d 次正方行列である．□

補題B（文献 11)，p. 43）$\|\cdot\|$ を R^d 上のノルムとする．$\|\cdot\|$ から誘導される行列の作用素ノルムは，ある定数 C に対して，

$$\|L\|\leqq C\sum_{i=1}^{d}\|l_i\|$$

の関係を満たす．ただし，L は任意の d 次正方行列，l_i は L の列ベクトルである．□

補題5の証明

$$G'(U)=I-F'(U^0)^{-1}F'(U)$$

より，

$$G'(U)-G'(V)=F'(U^0)^{-1}(F'(V)-F'(U)) \tag{4.1}$$

と表されることに注意する．

行列の基本変形により，$F'(U^0)$ は

$$F'(U^0)^{-1}=\begin{bmatrix}J_{11} & J_{12}\\ J_{21} & J_{22}\end{bmatrix}, \tag{4.2}$$

$$J_{11}=I_{(1)}-I_s\otimes(\partial_2 f_1)M_0^{-1}(\partial_1 f_2)+O(h),$$
$$J_{12}=I_s\otimes(\partial_2 f_1)M_0^{-1}+O(h),$$
$$J_{21}=-h^{-1}A^{-1}\otimes M_0^{-1}(\partial_1 f_2)+O(1),$$
$$J_{22}=h^{-1}A^{-1}\otimes M_0^{-1}+O(1)$$
$$(M_0=(\partial_1 f_2)(\partial_2 f_1))$$

の形の逆行列を持つことが示される．ただし，$\partial_2 f_1$，$\partial_1 f_2$ は，それぞれ，$(\partial f_1/\partial u_2)(w_1,w_2)$，$(\partial f_2/\partial u_1)(w_1)$ の略記であり，記号⊗は行列の Kronecker 積（たとえば，文献 1) 参照）を表す．このとき，

$$D(h)(F'(U^0))^{-1}D(h)^{-1}=\begin{bmatrix}O(1) & O(h^{-1})\\ O(1) & O(h^{-1})\end{bmatrix}$$

となり，補題A，Bを用いて，

$$\|F'(U^0)^{-1}\|_h\leqq O(h^{-1}) \tag{4.3}$$

を得る．

一方，$F'(U)$ を具体的に書き表すと，

$$F'(U)=\begin{bmatrix}I_{(1)}-h(A\otimes I_{d_1})f_{11}(U) & -h(A\otimes I_{d_1})f_{12}(U)\\ f_{21}(U) & 0\end{bmatrix},$$
$$f_{11}(U)=\mathrm{diag}[(\partial f_1/\partial u_1)(U_{1,i},U_{2,i})],$$
$$f_{12}(U)=\mathrm{diag}[(\partial f_1/\partial u_2)(U_{1,i},U_{2,i})],$$
$$f_{21}(U)=\mathrm{diag}[(\partial f_2/\partial u_1)(U_{1,i})] \tag{4.4}$$

となることから，$F'(U)-F'(V)$ は

$$F'(U)-F'(V)=\begin{bmatrix}h\Delta_{11} & h\Delta_{12}\\ \Delta_{21} & 0\end{bmatrix},$$
$$\Delta_{11}=(A\otimes I_{d_1})(f_{11}(V)-f_{11}(U)),$$
$$\Delta_{12}=(A\otimes I_{d_2})(f_{12}(V)-f_{12}(U)),$$
$$\Delta_{21}=f_{21}(U)-f_{21}(V)$$

のように表される．したがって，

$$D(h)(F'(U)-F'(V))D(h)^{-1}=\begin{bmatrix}h\Delta_{11} & \Delta_{12}\\ h\Delta_{21} & 0\end{bmatrix}$$

となり，補題A，Bより，

$$\|F'(U)-F'(V)\|_h\leqq O(1)(h\|\Delta_{11}\|+h\|\Delta_{21}\|+\|\Delta_{12}\|) \tag{4.5}$$

の評価を得る．さらに，

$$\|\Delta_{11}\|\leqq O(1)(\|U_1-V_1\|+\|U_2-V_2\|),$$
$$\|\Delta_{12}\|\leqq O(1)(\|U_1-V_1\|+\|U_2-V_2\|),$$
$$\|\Delta_{21}\|\leqq O(1)(\|U_1-V_1\|)$$

を用いて，

$$\|F'(U)-F'(V)\|_h\leqq O(h^{-1})\|U-V\|_h \tag{4.6}$$

を得る．

(4.1) 式および (4.2)，(4.6) の評価から，(3.5) を得る．□

補題6の証明のために，さらに，簡単な補題をひとつ用意する．

補題 7 $U=U^0+O(h)$ ならば，

$$\|G'(U)\|_h=O(h) \tag{4.7}$$

が成立する．□

証明 (4.4)式により，$U=U^0+O(h)$ に対して，

$$F'(U)=F'(U^0)+\begin{bmatrix} O(h^2) & O(h^2) \\ O(h) & 0 \end{bmatrix}$$

が成立する．したがって，

$$G'(U)=I-F'(U^0)^{-1}F'(U)$$
$$=-F'(U^0)^{-1}\begin{bmatrix} O(h^2) & O(h^2) \\ O(h) & 0 \end{bmatrix}$$

となり，(4.2)式を用いて，

$$G'(U)=\begin{bmatrix} O(h) & O(h^2) \\ O(1) & O(h) \end{bmatrix}$$

を得る．

$$D(h)G'(U)D(h)^{-1}=\begin{bmatrix} O(h) & O(h) \\ O(h) & O(h) \end{bmatrix}$$

の関係から，補題A，Bを用いて，(4.7)を得る．□

補題 6 の証明

まず，(3.6)を示す．$F(U^0)$ を具体的に計算して，

$$F_1(U^0)=-\mathbf{diag}(c_i)\otimes hf_1(w_1, w_2)+O(h^2)$$
$$F_2(U^0)=I_s\otimes g_2(w_1)$$

を得る．さらに，条件(2.2.2)および(4.2)式より

$$F'(U^0)^{-1}F(U^0)$$
$$=\begin{bmatrix} -\mathbf{diag}(c_i)\otimes hf_1(w_1, w_2)+O(h^2) \\ O(h) \end{bmatrix}$$

となり，$p=1$ に対する(3.6)を得る．$p=2$ の場合も同様な計算で示される．したがって，U^2 が補題7の仮定を満たすことが分かり，(3.7)を得る．

さらに，

$$G(U^p)-U^p=\left[\int_0^1 G'(U^p(\mu))d\mu\right](U^p-U^{p-1})$$
$$(U^p(\mu)=U^{p-1}+\mu(U^p-U^{p-1})) \tag{4.8}$$

と表されることに注意する．

$$\|U^1-U^0\|_h=O(h)$$

および，補題7から，

$$\|G'(U^1(\mu))\|_h=O(h)$$

が得られ，$p=1$ に対する(4.8)式より，

$$\|U^2-U^1\|=\|G(U^1)-U^1\|=O(h^2)$$

を得る．同様な議論を繰り返して，(3.8) を得る．なお，(3.12)の評価は，同様な議論を有限回繰り返したのち，Kantorovich 型定理を適用することにより，得られることを指摘しておく．□

5. おわりに

指数2の微分-代数系として，サイズ2の Hessenberg 形式と呼ばれる系を取り上げ，陰的 Runge-Kutta 法を適用した際に生じる非線形方程式系の解法について論じた．具体的には，上記非線形系の可解性が，特殊な形の非線形系の可解性（定理2参照）に帰着されることに着目し，そのような系の可解性を簡約 Newton 法による近似解の収束性に基づいて証明することを通じ，同反復法を Runge-Kutta 法の各ステップにおける非線形方程式の求解に用いる際の特性を明らかにした．

しかし，簡約 Newton 法を実際に用いる際には，なおいくつかの問題点がある．いずれも，各反復計算に必要なヤコビ行列に関するものであるが，まず，ヤコビ行列の条件数は，その具体的な形((4.2)，(4.4)式参照）から，$O(h^{-1})$ と見積もられ，簡約 Newton 法の各反復における線形方程式系はステップ幅 h が小さくなるに従って解きにくい系になると考えられる．文献 12) では，適当なスケーリングを用いることが推奨されているが，その効果については必ずしも明確ではない．

しかし，より根本的な問題は，ヤコビ行列そのものの計算であろう．これに関しては，近年発展をとげている記号処理的な手法[10]を用いることも考えられるが，たとえば，流体方程式の離散近似から導かれる系[3]のような大規模な系を扱う際には，やはり深刻な問題になると考えられる．このような問題の解決は今後の実際的な課題であろう．

謝辞 日頃からご指導いただく当研究所鈴木千里博士に感謝します．

参考文献

1) 有馬 哲：線型代数入門，p. 262，東京図書，東京 (1974).
2) Brenan, K. E.: Numerical Solution of Trajectory Prescribed Path Control Problems by Backward Differentiation Formulas, *IEEE Trans. Aut. Control*, Vol. AC-31, pp. 266-269 (1986).
3) Brenan, K. E., Campbell, S. L. and Petzold, L. R.: *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, p. 218, North-Holland, Amsterdam (1989).
4) Brenan, K. E. and Petzold, L. R.: The Numerical Solution of Higher Index Differential/Algebraic Equations by Implicit Runge-Kutta Methods, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 26, pp. 976-996 (1989).
5) Butcher, J. C.: *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, p. 528, John Wiley & Sons, Chichester (1987).
6) Gear, C. W.: Differential-Algebraic Equation Index Transformations, *SIAM J. Sci. Stat.*

Comp., Vol. 9, pp. 39-47 (1988).
7) Gear, C. W., Leimkuhler, B. and Gupta, G. K.: Automatic Integration of Euler-Lagrange Equations with Constraints, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol. 12 & 13, pp. 77-90 (1985).
8) Gear, C. W. and Petzold, L. R.: ODE Methods for the Solution of Differential/Algebraic Systems, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 21, pp. 75-89 (1985).
9) Hairer, E., Lubich, C. and Roche, M.: The Numerical Solution of Differential-Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods, *Lecture Notes in Math.*, Vol. 1409, p. 146, Springer-Verlag, Berlin (1989).
10) 三井斌友：数式処理と数値処理との界面，情報処理，Vol. 27, No. 4, pp. 422-430 (1986).
11) Ortega, J. M. and Rheinboldt, W. C.: *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, p. 592, Academic Press, New York (1970).
12) Petzold, L. R. and Lötstedt, P.: Numerical Solution of Nonlinear Differential Equations with Algebraic Constraints II: Practical Implications, *SIAM J. Sci. Stat. Compt.*, Vol. 7, pp. 720-733 (1986).
13) Rheinboldt, W. C.: Differential-Algebraic Systems as Differential Equations on Manifolds, *Math. Comp.*, Vol. 43, pp. 473-482 (1984).
14) Shampine, L. F.: Evaluation of Implicit Formulas for the Solution of ODEs, *BIT*, Vol. 19, pp. 495-502 (1979).

付録（補題４の証明）

ここでは，補題４の証明について述べる．証明は n に関する帰納法による．

（i） まず，$n=0$ の場合を考える．$u_{k,0}$ は (2.1.3) を満たす初期値により与えることから，(2.2.7)，(2.2.8) の成立は明らかである．また，解 $u(t)$ に対する仮定から，$u_{k,0}$ の近傍で (2.1.2) の行列は可逆である．したがって，$w_k=u_{k,0}$ とおいたものは，定理２の仮定を満たし，

$$U_{k,i}=u_{k,0}+O(h) \qquad (\text{A}.1)$$

を満たす (2.2.3) の解系が存在する．ここで，Runge-Kutta 行列 A の可逆性に注意すると，$u_{k,1}$ は (2.1.8) および (2.1.7) 式を用いて計算可能であり，特に，(A.1) および (2.2.5) の第１式により

$$u_{1,1}=u_{1,0}+hf_1(u_{1,0},u_{2,0})+O(h^2),$$

$$u_{2,1}=u_{2,0}+O(h)$$

の評価を満たすことが示される．上式と真の解に対する Taylor 展開を比較して，

$$\Delta u_{1,1}=O(h^2),\ \Delta u_{2,1}=O(h)$$

を得るが，これは，$\Delta u_{k,0}=0$ から，$n=0$ に対する (2.2.9)，(2.2.10) にほかならない．さらに，

$$g_2(u_{1,1})=g_2(u_{1,0})+hg_1(u_{1,0},u_{2,0})+O(h^2)$$

の関係により，(2.2.11) を得る．

（ii） つぎに，(a)，(b) の主張が，$n\leqq m-1$ まで成立していると仮定する．

この仮定により，$u_{k,m}$ はすでに得られており，$n\leqq m-1$ に対する (2.2.9)，(2.2.10) から $n=m$ に対する (2.2.6) の評価を得る（(2.2.12)，(2.2.13) 参照）．したがって，

$$g_1(u_{1,m},u_{2,m})=g_1(u_1(t_m),u_2(t_m))+O(h)$$

および，$n\leqq m-1$ に対する評価 (2.2.11) から，$n=m$ に対する評価 (a) を得る．

さらに，解 $u(t)$ に対する仮定から $u_{k,m}$ の近傍で (2.1.2) の行列は可逆となる．したがって，$w_k=u_{k,m}$ は再び定理２の仮定を満たし，$n=0$ の場合と同様に，

$$U_{k,i}=u_{k,m}+O(h) \qquad (\text{A}.2)$$

を満たす (2.2.3) の解系の存在，および $u_{k,m}$ から $u_{k,m+1}$ が得られることが示される．特に，$u_{1,m+1}$ については，

$$\begin{aligned}u_{1,m+1}&=u_{1,m}+hf_1(u_{1,m},u_{2,m})+O(h^2)\\&=u_{1,m}+hf_1(u_1(t_m),u_2(t_m))+O(h^2)\end{aligned}$$

となることが簡単な計算により確かめられ，$n=m$ に対する評価 (2.2.9) を得る．また，評価 (2.2.10) は文献 9)，定理 4.6 の証明と同様な議論により示される．

最後に，$n=m$ に対する評価 (2.2.11) を示す．

$$V_i=(\partial g_2/\partial u_1)(u_{1,m})f_1(U_{1,i},U_{2,i})$$

$$V=(V_1,V_2,\cdots,V_s)^{\mathrm{T}}$$

とおくと，

$$0=g_2(U_{1,i})$$

および，(2.1.7) より，それぞれ，

$$0=g_2(u_{1,m})\otimes e+hAV+O(h^2)$$

$$g_2(u_{1,m+1})=g_2(u_{1,m})+hb^{\mathrm{T}}V+O(h^2)$$

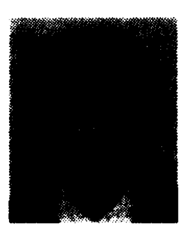
の関係を得る．V を消去すると，

$$g_2(u_{1,m+1})=\rho g_2(u_{1,m})+O(h^2)$$

$$(\rho=1-b^{\mathrm{T}}A^{-1}e)$$

となり，$n=m$ に対する (2.2.11) を得る．□

（平成２年６月11日受付）
（平成２年11月13日採録）



小藤 俊幸（正会員）

1961年7月31日島根県松江市生．1984年東京大学理学部数学科卒業．1986年同修士課程修了．同年富士通(株)に入社，国際情報社会科学研究所に配属．以来，数値解析の研究に従事．微分方程式の数値解法，並列アルゴリズム等に興味をもつ．日本応用数理学会会員．