

微分-代数系の数値解法における簡約ニュートン法 — 指数3の場合 —

小藤 俊幸

富士通(株)国際情報社会科学研究所

微分方程式に対する陰的な数値解法の実現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にある。本講演では、陰的ルンゲ・クッタ法を指数3の微分-代数系(ヘッセンベルク系)に適用する場合を取上げ、そのような非線形系の数値解法について論じる。具体的には、上記非線形系の可解性を簡約ニュートン法による反復過程の収束性に基づいて証明し、同反復法を陰的ルンゲ・クッタ法の各ステップの計算に用いる際の特性を明らかにする。また、数値例を通じ、簡約ニュートン法の実際的な反復の停止方法について考察する。

Simplified Newton Method for the Application of Runge-Kutta Methods to Index-3 DAEs

Toshiyuki Koto

International Institute for Advanced Study of Social
Information Science, Fujitsu Limited

We consider an application of implicit Runge-Kutta methods to index-3 differential-algebraic equations (DAEs). Specifically we discuss approximation properties of simplified Newton method applied to nonlinear equations which arise in the evaluation of the implicit formula at each time-step. We prove the convergence of the iterative method for such nonlinear equations applying a Kantorovich type theorem. Moreover, we discuss, based on some numerical experiments, the smallest number of the iterations required to obtain proper approximate solutions to DAEs.

1. はじめに

微分-代数方程式系

$$\begin{aligned} u_1'(t) &= f_1(u_1, u_2, u_3), \\ u_2'(t) &= f_2(u_1, u_2), \\ 0 &= f_3(u_2) \quad (a \leq t \leq b) \end{aligned} \quad (1.1)$$

について考察する。ここで、 $u_k(t)$ ($k=1, 2, 3$) は \mathbb{R}^{d_k} 値関数とし、 $u_k'(t)$ は導関数 du_k/dt の意味である。また、各 f_k は十分滑らかな \mathbb{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 3 のヘッセンベルク形式とも呼ばれており、応用上重要な微分-代数系が、しばしば、このような形をとることが知られている([1])。例えば、滑らかな(摩擦のない)拘束条件下でのオイラー・ラグランジュの運動方程式は(1.1)の形に定式化される([4],[6])。

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、一意可解となることから、その数値解法として、後退微分公式(BDF)、陰的ルンゲ・クッタ法等の微分方程式に対する陰的な数値解法の適用が考察されている([2],[5])。特に、陰的ルンゲ・クッタ法に関しては、その精度等に関する基本的な解析が、Hairerらによってなされている。

しかし、(1.1)に対する数値解法の研究は、その緒についたばかりであり、理論上、あるいは、実際の観点から、様々な課題を抱えていることも否めない。実際、文献[5]では、いくつかの理論的な問題が、予想、あるいは研究課題の形で述べられている。また、陰的な公式を適用するためには、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、その効率的な解法の構成が、公式の実現と言う面からは、重要な課題である。

本講演では、微分-代数系(1.1)に対して陰的ルンゲ・クッタ法を適用する際に生じる非線形方程式系の可解性を、ニュートン法タイプの反復解法の一つである簡約ニュートン法に基づいて論じ、それらの非線形系に対する同反復法の収束特性を明らかにする。また、数値例を通じ、簡約ニュートン法の具体的な停止方法について、若干の考察を行う。

2. 微分-代数系に対する陰的ルンゲ・クッタ法

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、陰的ルンゲ・クッタ法の適用について述べる。

微分-代数系(1.1)に対して、

$$\begin{aligned} g_1(u_1, u_2, u_3) &= (\partial^2 f_3 / \partial u_2^2)(f_2, f_2)(u_1, u_2) \\ &+ (\partial f_3 / \partial u_2)(u_2)(\partial f_2 / \partial u_2)(u_1, u_2) f_2(u_1, u_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ (\partial f_3 / \partial u_2)(u_2)(\partial f_2 / \partial u_1)(u_1, u_2) f_1(u_1, u_2, u_3), \\ g_2(u_1, u_2) &= (\partial f_3 / \partial u_2)(u_2) f_2(u_1, u_2), \\ g_3(u_2) &= f_3(u_2) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} M(u_1, u_2, u_3) &= (\partial g_1 / \partial u_3)(u_1, u_2, u_3) \\ &= (\partial f_3 / \partial u_2)(\partial f_2 / \partial u_1)(\partial f_1 / \partial u_3) \end{aligned} \quad (2.2)$$

とおくと、 g_k ($k=1, 2, 3$) は \mathbb{R}^{d_3} -値写像、 M は $d_3 \times d_3$ 行列値写像となり、次の命題が成立する。

命題 1 $u_{k,0} \in \mathbb{R}^{d_k}$ ($k=1, 2, 3$) は

$$\begin{aligned} g_1(u_{1,0}, u_{2,0}, u_{3,0}) &= 0, \quad g_2(u_{1,0}, u_{2,0}) = 0, \\ g_3(u_{2,0}) &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

を満たすものとする。また、 $(u_{1,0}, u_{2,0}, u_{3,0})^T$ の近傍で、(2.2)の行列は可逆とする。そのとき、

$$u_k(a) = u_{k,0} \quad (k=1, 2, 3)$$

を満たす(1.1)の(滑らかな)解 $u_k(t)$ が $t=a$ の近傍で一意に存在する。□

証明 まず、解の存在を仮定して、一意性を示す。 $G = (\partial g_1 / \partial u_1) f_1 + (\partial g_1 / \partial u_2) f_2$ とおくと、 t に関する微分操作、および代入操作によって、(1.1)から

$$\begin{aligned} u_1' &= f_1(u_1, u_2, u_3), \quad u_2' = f_2(u_1, u_2), \\ u_3' &= -M(u_1, u_2, u_3)^{-1} G(u_1, u_2, u_3), \end{aligned} \quad (2.4)$$

および、

$$\begin{aligned} g_1(u_1, u_2, u_3) &= 0, \quad g_2(u_1, u_2) = 0, \\ g_3(u_2) &= 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

の方程式系を得る。ただし、(2.4)と(2.5)は独立な系ではなく、(2.4)の解に対して、

$$\begin{aligned} dg_1/dt &= 0, \quad dg_2/dt = g_1, \\ dg_3/dt &= g_2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

が成立する。特に、(1.1)の解は微分方程式(2.4)を満たすことから、解の一意性を得る。

一方、(2.4)は $u_{k,0}$ ($k=1, 2, 3$) を初期値とする解をもつが、(2.3)、(2.6)の関係により、この解軌道上で g_k ($k=1, 2, 3$) は恒等的にゼロとなる。このことから、(1.1)の可解性を得る。□

注意 微分-代数系に、有限回の微分操作、代入操作を施して、(2.4)のような各変数についての陽的な微分方程式系に変形されるとき、変形に要する微分操作の回数を微分-代数系の指数と呼ぶ。これが、Gearらによってなされている微分-代数系の指数の定義である([3])。(1.1)から(2.4)への変形は、3回の微分

操作を要し、したがって、微分-代数系 (1.1) の指数は 3 となる。また、Hairer らは、微分-代数系の指数について、異なる定義を与えているが ([5]), その定義のもとでも、(1.1) は指数 3 の系として扱われている。□

以下、命題 1 の解関数 $u_k(t)$ は $[a, b]$ の近傍に延長可能であり、 $u_k(t)$ の近傍で (2.2) は可逆であるとする。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、

$$a = t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_N = b$$

$$(t_n = a + nh, n = 1, 2, \dots, N)$$

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、端点 t_n をステップ点と呼ぶ。各 t_n 上の解の近似値を、成分ごとに、 $u_{k,n} (k=1, 2, 3)$ と表し、

$$a_{ij} (1 \leq i, j \leq s), \quad b_i (1 \leq i \leq s),$$

を s 段階的ルンゲ・クッタ法の係数パラメータとする。係数パラメータは、しばしば、 $A = (a_{ij}) (1 \leq i, j \leq s)$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_s)^T$ のような行列、ベクトル記法を用いて表される。以下では、行列 A の可逆性を仮定し、逆行列を

$$A^{-1} = (w_{ij}) (1 \leq i, j \leq s)$$

と書くことにする。そのとき、微分-代数系 (1.1) に対する陰的ルンゲ・クッタ法は、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：

$$u_{1,n+1} = u_{1,n} + h \sum_{i=1}^s b_i f_1(U_{1,i}, U_{2,i}, U_{3,i}),$$

$$u_{2,n+1} = u_{2,n} + h \sum_{i=1}^s b_i f_2(U_{1,i}, U_{2,i}),$$

$$u_{3,n+1} = u_{3,n} + \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s b_i w_{ij} (U_{3,j} - u_{3,n})$$

(2.7)

ただし、 $u_{k,0}$ は真の解の初期値で与えるものとし、 $U_{k,i} (k=1, 2, 3, i=1, 2, \dots, s)$ は非線形方程式系

$$U_{1,i} = u_{1,n} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f_1(U_{1,j}, U_{2,j}, U_{3,j}),$$

$$U_{2,i} = u_{2,n} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f_2(U_{1,j}, U_{2,j}),$$

$$0 = f_3(U_{2,i}) \quad (i=1, 2, \dots, s) \quad (2.8)$$

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、非線形系 (2.8) が可解であることが前提となる。以下、(2.8) の可解性について述べる。

まず、通常のように、パラメータ c_i を

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

により定義し、係数パラメータに関する以下の代数的条件を簡約化条件と呼ぶ：

$$B(\xi) : \sum_{i=1}^s b_i c_i^{\xi-1} = 1/k \quad (k=1, 2, \dots, \xi),$$

$$C(\xi) : \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{\xi-1} = c_i^{\xi}/k \\ (k=1, 2, \dots, \xi, i=1, 2, \dots, s).$$

また、

$$\rho = 1 - b^T A^{-1} e \quad (e = (1, 1, \dots, 1)^T) \quad (2.9)$$

という量を定義しておく。

微分-代数系 (1.1) に対する陰的ルンゲ・クッタ法の適用可能性に関しては、次の定理が基本的である。

定理 2 ([5], p.72) $w_k (= w_k(h)) \in \mathbb{R}^{d_k} (k=1, 2, 3)$ は

$$g_1(w_1, w_2, w_3) = O(h), \quad g_2(w_1, w_2) = O(h^2)$$

$$g_3(w_2) = O(h^3) \quad (2.10)$$

を満たすものとする。また、(2.2) が可逆となるような近傍の存在を仮定する。そのとき、行列 A が可逆であり、簡約化条件 $C(2)$ が満たされるならば、非線形方程式系

$$U_{1,i} = w_1 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f_1(U_{1,j}, U_{2,j}, U_{3,j}),$$

$$U_{2,i} = w_2 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f_2(U_{1,j}, U_{2,j}),$$

$$0 = f_3(U_{2,i}) \quad (i=1, 2, \dots, s) \quad (2.11)$$

は、十分小さい h に対して、局所的に一意可解であり、解は

$$U_{k,i} = w_k + O(h) \quad (k=1, 2, 3) \quad (2.12)$$

の評価を満たす。□

注意 (1.1) に対し、ルンゲ・クッタ法が適用可能であることが、上記定理に基づいて示される。実際、係数パラメータが、簡約化条件 $B(q+1), C(q) (q \geq 2)$, および、 $|\rho| < 1$ を満たすならば、

$$u_{k,n} - u_k(t_n) = O(h^q) \quad (k=1, 2),$$

$$u_{3,n} - u_3(t_n) = O(h^{q-1})$$

の評価が成り立つことが示されている ([5], Theorem 6.4)。このとき、

$$g_1(u_{1,n}, u_{2,n}, u_{3,n}) = g_1(u_1(t_n), u_2(t_n), u_3(t_n))$$

$+O(h^{q-1}),$

$$g_2(u_{1,n}, u_{2,n}) = g_2(u_1(t_n), u_2(t_n)) + O(h^q)$$

$$g_3(u_{2,n}) = g_3(u_2(t_n)) + O(h^q)$$

となり, $q \geq 3$ ならば, $w_k = u_{k,n}$ ($k=1, 2, 3$) とおいたものが, 定理2の条件を満たすことは容易に検証される. $q=2$ の場合, $g_3(u_{2,n}) = O(h^3)$ の検証は, いささか面倒である. 要点のみを述べると,

$$0 = f_3(U_{2,i}) \quad (i=1, 2, \dots, s)$$

等の関係から, 漸化式

$$g_3(u_{2,n+1}) = \rho g_3(u_{2,n}) + \epsilon_n \quad (\epsilon_n = O(h^3))$$

が示され, $g_3(u_{2,0}) = 0$ により

$$\|g_3(u_{2,n})\| \leq \sum_{m=0}^{n-1} |\rho|^{n-1-m} \epsilon_m \leq O(h^3),$$

すなわち, $g_3(u_{2,n}) = O(h^3)$ が得られる. \square

3. 簡約ニュートン法の収束特性

文献[5]では, 定理2について, (2.11) 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, (2.11) の解法としては, ニュートン法タイプの反復法を用いるほうがより实际的である. 以下では, 定理2の簡約ニュートン法に基づく別証明を与えることを通じて, 同反復法の収束特性を明らかにする.

まず, 準備として, 反復法の収束性に関し, 比較的よく知られた次の定理を述べておく.

カントロピッチ型定理 ([7], p.418)

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

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

の評価を満たすものとする. また, ある $x^0 \in D$ に対して

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

$$(\eta = \|G(x^0) - x^0\|)$$

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, 次が成立する:

$B(x^0, \tau) \subset D$ ならば, $x^{p+1} = G(x^p)$ ($p=0, 1, \dots$) は $B(x^0, \tau)$ 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 $\{x \in \mathbb{R}^d \mid \|x - y\| < \rho\}$, $B(y, \rho)$ はその閉包である. \square

さらに, 記号をいくつか用意する. まず, 未知変数を

$$U_k = (U_{k,1}, U_{k,2}, \dots, U_{k,s})^T \quad (k=1, 2, 3),$$

$$U = (U_1, U_2, U_3)^T,$$

のようなベクトル記法を用いて表す. また,

$$F_{1,i}(U) = U_{1,i} - w_1 - h \sum_{j=1}^s a_{ij} f_1(U_{1,j}, U_{2,j}, U_{3,j}),$$

$$F_{2,i}(U) = U_{2,i} - w_2 - h \sum_{j=1}^s a_{ij} f_2(U_{1,j}, U_{2,j}),$$

$$F_{3,i}(U) = f_3(U_{1,i}) \quad (i=1, 2, \dots, s)$$

とおき,

$$F_k(U) = (F_{k,1}(U), F_{k,2}(U), \dots, F_{k,s}(U))^T,$$

$$F(U) = (F_1(U), F_2(U), F_3(U))^T$$

のように書くことにすると, (2.11) は

$$F(U) = 0 \quad (3.1)$$

と表される. 以下, (3.1) に対する簡約ニュートン法

$$U^{p+1} = U^p - F'(W^0)^{-1} F(U^p) \quad (p=0, 1, \dots),$$

$$W_{k,i}^0 = w_k \quad (k=1, 2, 3, i=1, \dots, s) \quad (3.2)$$

を考察する. ただし, (3.1) の初期近似は,

$$U_{1,i}^0 = w_1, \quad U_{2,i}^0 = w_2 + c_i h f_2(w_1, w_2),$$

$$U_{3,i}^0 = w_3 \quad (i=1, 2, \dots, s) \quad (3.3)$$

により与えるものとする.

また, ノルム $\|\cdot\|_h$ を

$$\|U\|_h = \|P_h U\|,$$

$$P_h = \text{diag}(hI_{(1)}, I_{(2)}, h^2I_{(3)}) \quad (3.4)$$

により定義する. ここで, $I_{(1)}, I_{(2)}, I_{(3)}$ は, それぞれ, $d_1 s$ 次元, $d_2 s$ 次元, $d_3 s$ 次元の単位行列であり, $\text{diag}(hI_{(1)}, I_{(2)}, h^2I_{(3)})$ はブロック対角行列

$$\begin{bmatrix} hI_{(1)} & & \\ & I_{(2)} & \\ & & h^2I_{(3)} \end{bmatrix}$$

の略記である. 以下, 同様な略記法を用いる. そのとき,

$$G(U) = U - F'(W^0)^{-1} F(U) \quad (3.5)$$

により与えられる写像 G に関して, 以下の評価が成立する。(証明は次節で与える.)

補題 3 W^0 の近傍において

$$\|G'(U) - G'(V)\|_h \leq \gamma \|U - V\|_h, \quad \gamma = O(h^{-4}) \quad (3.6)$$

が成立する. □

補題 4 $U^p (p=1, 2, 3)$ は,

$$\begin{aligned} U_{1,i}^p &= w_1 + hc_i f_1(w_1, w_2, w_3) + O(h^2), \\ U_{2,i}^p &= w_2 + hc_i f_2(w_1, w_2) \\ &\quad + h^2 c_i^2 / 2 \{ (\partial f_2 / \partial u_1)(w_1, w_2) f_1(w_1, w_2, w_3) \\ &\quad + (\partial f_2 / \partial u_2)(w_1, w_2) f_2(w_1, w_2) \} + O(h^3), \\ U_{3,i}^p &= w_3 + O(h) \quad (i=1, 2, \dots, s) \end{aligned} \quad (3.7)$$

を満たす. □

補題 5 $U = W^0 + O(h)$ に対して

$$\|G'(U)\|_h \leq O(h) \quad (3.8)$$

が成立する. □

定理 2 の証明

$$\begin{aligned} U^{p+1} - U^p &= G(U^p) - G(U^{p-1}) \\ &= \left[\int_0^1 G'(U_{\mu^p}) d\mu \right] (U^p - U^{p-1}) \\ &\quad (U_{\mu^p} = \mu U^p + (1-\mu)U^{p-1}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

と表されることに注意する.

補題 4 より

$$\|U^1 - U^0\|_h = O(h^2), \quad (3.10)$$

および,

$$U_{\mu^p} = W^0 + O(h) \quad (0 \leq \mu \leq 1, p=1, 2, 3)$$

を得る. したがって, $U_{\mu^p} (p=1, 2, 3)$ は, 補題 5 の仮定を満たし,

$$\|G'(U_{\mu^p})\|_h \leq O(h) \quad (0 \leq \mu \leq 1)$$

と評価される. この式と (3.9), (3.10) 式より, $p=1, 2, 3$ に対して, 順次,

$$\|U^{p+1} - U^p\| = O(h^{p+2}) \quad (3.11)$$

を得る. したがって, 特に U^3 は

$$\|G'(U^3)\|_h \leq \delta, \quad \delta = O(h), \quad (3.12)$$

$$\|G(U^3) - U^3\|_h \leq \eta, \quad \eta = O(h^5) \quad (3.13)$$

を満たす.

このとき,

$$\alpha = \gamma \eta / (1-\delta)^2 = O(h), \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \tau &= [(1-\delta)/\gamma][1 - (1-2\alpha)^{1/2}] \\ &= \eta / (1-\delta) \frac{1 - (1-2\alpha)^{1/2}}{\alpha} = O(h^5) \end{aligned} \quad (3.15)$$

が成立することから, U^3 は, 十分小さい h に対して, カントロビッチ型定理の x^0 に関する条件を満たす. したがって, 簡約ニュートン法 (3.2) は (3.1) の解 U^* に収束することが示され, 非線形系 (2.11) の可解性を得る.

さらに, (3.15) 式より,

$$\|U^* - U^3\|_h = O(h^5) \quad (3.16)$$

を得るが, ノルム $\|\cdot\|_h$ の定義から, この式は各成分ごとに

$$\begin{aligned} U_1^* &= U_1^3 + O(h^4), \quad U_2^* = U_2^3 + O(h^5), \\ U_3^* &= U_3^3 + O(h^3) \end{aligned}$$

となることを意味している. 上式と補題 4 の評価から, 解の評価 (2.12) を得る. □

注意 上の証明では, 真の解に対する評価 (2.12) を示すために, (3.16) 式を用いているが, これは, 近似解 U^3 についての誤差評価式ともみなされる. また, (3.11) 式を用いると, U^1, U^2 についても

$$\|U^* - U^1\|_h = O(h^3),$$

$$\|U^* - U^2\|_h = O(h^4)$$

の評価が得られる. なお, (3.16) 式は, つぎのように一般化することができる:

K を任意の固定された正整数とすると, $p (1 \leq p \leq K)$ に対して

$$\|U^* - U^p\|_h = O(h^{p+2}) \quad (3.17)$$

が成立する. □

4. 補題の証明

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 ([7]) に基づく.

補題 6 $\|\cdot\|$ を \mathbf{R}^d 上のノルム, P を正則な d 次正方向行列とすれば,

$$\|x\|_P = \|Px\| \quad (x \in \mathbf{R}^d)$$

も \mathbb{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、

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

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7 $\|\cdot\|$ を \mathbb{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、

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

の関係を満たす。ただし、 L は任意の d 次正方行列、 l_i ($i=1, 2, \dots, d$) は L の列ベクトルである。□

補題3の証明

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

より、

$$\begin{aligned} G'(U) - G'(V) &= F'(W^0)^{-1} (F'(V) - F'(U)) \end{aligned} \quad (4.1)$$

を得る。

行列の基本変形により、 $F'(W^0)$ は

$$F'(W^0)^{-1} = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix},$$

$$J_{11} = I_{(1)} - I_s \otimes (\partial_3 f_1) M_0^{-1} (\partial_2 f_2) (\partial_1 f_2) + O(h),$$

$$J_{12} = -h^{-1} A^{-1} \otimes (\partial_3 f_1) M_0^{-1} (\partial_2 f_3) + O(1),$$

$$J_{13} = h^{-1} A^{-1} \otimes (\partial_3 f_1) M_0^{-1} + O(1),$$

$$\begin{aligned} J_{21} &= hA \otimes (\partial_1 f_2) (I_{d_1} - (\partial_3 f_1) M_0^{-1} (\partial_2 f_3) (\partial_1 f_2)) \\ &\quad + O(h^2), \end{aligned}$$

$$J_{22} = I_{(2)} - I_s \otimes (\partial_1 f_2) (\partial_3 f_1) M_0^{-1} (\partial_2 f_3) + O(h),$$

$$J_{23} = I_s \otimes (\partial_1 f_2) (\partial_3 f_1) M_0^{-1} + O(h),$$

$$J_{31} = -h^{-1} A^{-1} \otimes M_0^{-1} (\partial_2 f_3) (\partial_1 f_2) + O(1),$$

$$J_{32} = -h^{-2} A^{-2} \otimes M_0^{-1} (\partial_2 f_3) + O(h^{-1}),$$

$$J_{33} = h^{-2} A^{-2} \otimes M_0^{-1} + O(h^{-1})$$

$$(M_0 = (\partial_2 f_3) (\partial_1 f_2) (\partial_3 f_1)) \quad (4.2)$$

の形の逆行列をもつことが示される。ただし、 $\partial_3 f_1 = (\partial f_1 / \partial u_3)(w_1, w_2, w_3), \dots$ である。このとき、

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

となり、補題6, 7より、

$$\|F'(W^0)^{-1}\|_h \leq O(h^{-2}) \quad (4.3)$$

を得る。

一方、 $F'(U)$ を具体的に書き表すと、

$$F'(U) = \begin{bmatrix} I_{(1)} + hf_{11}(U) & hf_{12}(U) & hf_{13}(U) \\ hf_{21}(U) & I_{(2)} + hf_{22}(U) & \\ & f_{32}(U) & \end{bmatrix},$$

$$f_{1k}(U)$$

$$= -(A \otimes I_{d_k}) \text{diag}[(\partial f_1 / \partial u_k)(U_{1,i}, U_{2,i}, U_{3,i})] \quad (k=1, 2, 3),$$

$$f_{2k}(U) = -(A \otimes I_{d_k}) \text{diag}[(\partial f_2 / \partial u_k)(U_{1,i}, U_{2,i})] \quad (k=1, 2),$$

$$f_{32}(U) = \text{diag}[(\partial f_3 / \partial u_2)(U_{2,i})] \quad (4.4)$$

となることから、

$$\begin{aligned} F'(V) - F'(U) &= \begin{bmatrix} h\Delta_{11} & h\Delta_{12} & h\Delta_{13} \\ h\Delta_{21} & h\Delta_{22} & \\ & \Delta_{32} & \end{bmatrix} \\ (\Delta_{ki} &= f_{ki}(V) - f_{ki}(U)) \end{aligned}$$

と表される。したがって、

$$\begin{aligned} P_h (F'(V) - F'(U)) P_h^{-1} &= \begin{bmatrix} h\Delta_{11} & h^2\Delta_{12} & \Delta_{13} \\ \Delta_{21} & h\Delta_{22} & \\ & h^2\Delta_{32} & \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と計算され、補題6, 7より、

$$\begin{aligned} \|F'(U) - F'(V)\|_h &\leq O(1) \{ (h \|\Delta_{11}\| + \|\Delta_{21}\|) + (h^2 \|\Delta_{12}\| \\ &\quad + h \|\Delta_{22}\| + h^2 \|\Delta_{32}\|) + \|\Delta_{13}\| \} \quad (4.5) \end{aligned}$$

を得る。さらに、

$$\|\Delta_{ki}\| \leq O(1) \|U - V\|$$

を用いて

$$\|F'(U) - F'(V)\|_h$$

$$\leq O(h^{-2}) \|U - V\|_h \quad (4.6)$$

を得る.

(4.1) の関係により, (4.3), (4.6) の評価を合わせて, 評価 (3.6) を得る. □

補題 4 の証明 $F(U^0)$ を具体的に計算し, 簡約化条件 C(2), および, 条件 (2.10) を用いて整理すると,

$$\begin{aligned} F_{1,i}(U^0) &= -hc_i f_1(w_1, w_2, w_3) + O(h^2), \\ F_{2,i}(U^0) &= -h^2 c_i^2 / 2 (\partial_2 f_2) f_2(w_1, w_2) + O(h^3), \\ F_{3,i}(U^0) &= h^2 c_i^2 / 2 (\partial_2^2 f_3 / \partial^2 u_2)(f_2, f_2)(w_1, w_2) \\ &\quad + O(h^3) \end{aligned}$$

を得る. 上式と (4.2) 式から $F'(W^0)^{-1}F(U^0)$ を計算し, 再び, 条件 C(2), (2.10) を用いて整理すると,

$$\begin{aligned} (F'(W^0)^{-1}F(U^0))_{1,i} &= -hc_i f_1(w_1, w_2, w_3) + O(h^2), \\ (F'(W^0)^{-1}F(U^0))_{2,i} &= -h^2 c_i^2 / 2 \{(\partial_2 f_2) f_2(w_1, w_2) \\ &\quad + (\partial_1 f_2) f_1(w_1, w_2, w_3)\} + O(h^3), \\ (F'(W^0)^{-1}F(U^0))_{3,i} &= O(h) \end{aligned}$$

となつて, $p=1$ に対する評価 (3.7) が得られる.

さらに, $F(U^1)$ を計算し, 整理すると,

$$\begin{aligned} F_1(U^1) &= O(h^2), \quad F_2(U^1) = O(h^3), \\ F_3(U^1) &= O(h^3) \end{aligned}$$

を得る. したがつて, (4.2) 式により,

$$F'(W^0)^{-1}F(U^1) = \begin{bmatrix} O(h^2) \\ O(h^3) \\ O(h) \end{bmatrix}$$

が得られ, $p=2$ に対する (3.7) を得る. $p=3$ の場合も同様な計算で示される. □

補題 5 の証明 (4.4) の表示から, $U = W^0 + O(h)$ に対して,

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

が成立し, (4.2) を用いて,

$$\begin{aligned} G'(U) &= -F'(W^0)^{-1} \begin{bmatrix} O(h^2) & O(h^2) & O(h^2) \\ O(h^2) & O(h^2) & \\ & & O(h) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} O(h) & O(1) & O(h^2) \\ O(h^2) & O(h) & O(h^3) \\ O(1) & O(h^{-1}) & O(h) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と計算される. このとき,

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

となり, 補題 6, 7 より, 評価 (3.8) を得る. □

5. 数値例

非線形方程式系の効率的な数値解法を, 一般的に構成することは, 非常に困難であると考えられる. しかし, 対象を陰的ルンゲ・クッタ法の適用に際して生じる非線形系に限定するならば, 二つの点から, そのような解法の構成を示唆することができる. ひとつは, ニュートン法タイプの反復解法を用いる際の初期近似が比較的容易に得られることである (例えば, (3.3) 式参照). いま一つは, 微分(-代数)方程式系の近似解を得るという観点からは, 上記非線形系は必ずしも厳密に解く必要はないという点である.

各ステップにおける非線形系が厳密に解けたとしても, その解は, 本来解くべき微分方程式の解と比べると, ステップ幅 h のあるべき乗のオーダーの誤差を含んでいる. したがつて, 上記非線形系の数値解が適当な (h のべき乗のオーダー) 誤差を含んでいても, 最終的な結果にあまり影響を与えないことは十分考え得る. 実際, このようなアイデアは, 通常微分方程式の場合, ニュートン反復を有限回で打ち切るという発想に基づき, 一般化ルンゲ・クッタ法として実現が試みられている ([8]). また, 指数 1 の微分-代数系に対しても, 各ステップにおける非線形系の求解が適当な誤差を含んだ場合の大域誤差の挙動が論じられている ([1], Theorem 4.3.1).

以上の点に着目し, 簡約ニュートン法の反復を有限回で打ち切った際の, 微分-代数系 (1.1) に対する陰的ルンゲ・クッタ法の誤差挙動をみるために, 簡単な数値実験を行った. 具体的には, 各ステップにおいて, (2.7) 式の間変数 $U_{k,i}$ ($k=1, 2, 3, i=1, 2, \dots, s$) を (3.2) 式から計算される $U_{k,i}^{(p)}$ で代用することにより得られる近似解列を

$$u_{k,n}^{(p)} \quad (k=1, 2, 3, n=1, 2, \dots, N) \quad (5.1)$$

とし, いくつかの p に対し, 積分の端点 $t=b$ における有効桁数を

$$-\log_{10} |u_k(b) - u_{k,N}^{(p)}| \quad (5.2)$$

により評価した.

実際の計算では、陰的ルンゲ・クッタ法は、条件 $B(3), C(2), |\rho| < 1$ を満たす最も簡単な公式である 2 段 Radau II_A 公式、

$$\begin{aligned} a_{11} &= 5/12, & a_{12} &= -1/12, \\ a_{21} &= 3/4, & a_{22} &= 1/4, \\ b_1 &= 3/4, & b_2 &= 1/4 \end{aligned} \quad (5.3)$$

を用い、微分-代数系は次の例題を考察した。

例

$$\begin{aligned} v' &= -4vy - 2y^3 + z^2 - w^2, \\ x' &= 4vz + xy - z + y^2z, \\ y' &= 4v + 2y^2, & z' &= x - yz, \\ 0 &= y + 2z^2 - 1. \end{aligned} \quad (5.4)$$

この方程式系は

$$u_1 = v, \quad u_2 = (x, y, z)^T, \quad u_3 = w$$

とおくことにより、(1.1)の形の微分-代数系とみなせる。なお、積分区間は $[0, \pi/4]$ ($a=0, b=\pi/4$) とし、初期条件は

$$\begin{aligned} v(0) &= -0.5, & x(0) &= 1, & y(0) &= 1, & z(0) &= 0, \\ w(0) &= 1 \end{aligned} \quad (5.5)$$

で与えた。このとき、(5.4)の厳密解は

$$\begin{aligned} v(t) &= -(\sin(2t) + \cos^2(2t))/2, \\ x(t) &= \cos(t) + \sin(t)\cos(2t), & y(t) &= \cos(2t), \\ z(t) &= \sin(t), & w(t) &= \cos(t) \end{aligned} \quad (5.6)$$

により与えられる。

以下、数値結果について簡単に述べる。まず、表 1.a, 1.b, 1.c は、反復回数 p が 1, 2, 3 の場合について、分割数 N を変化させたときの

$$\begin{aligned} -\log_{10} |v(\pi/4) - v^{(p)}_N|, \\ -\log_{10} |x(\pi/4) - x^{(p)}_N|, \\ -\log_{10} |w(\pi/4) - w^{(p)}_N| \end{aligned}$$

の値を示している。(なお、 y 変数、 z 変数については、 x 変数とはほぼ同様な挙動を示すことから割愛した。) いずれの p に対しても、誤差は、次数的には、 v 変数が $O(h^2)$ 、 x 変数が $O(h^3)$ 、 w 変数が $O(h)$ ($h = (\pi/4)/N$) となっている。しかし、誤差定数 (誤差が Ch^p で評価されるときに定数 C) をみると、 $p=1$ の場合と $p=2, 3$ の場合とは明らかな相違がある (図 1 参照)。

また、 $p=2$ の場合と $p=3$ の場合との比較を、表 2 に示す。ここで、

$$\begin{aligned} \Delta v_N &= v^{(2)}_N - v^{(3)}_N, & \Delta x_N &= x^{(2)}_N - x^{(3)}_N, \\ \Delta w_N &= w^{(2)}_N - w^{(3)}_N \end{aligned}$$

である。両者の差は、ほぼ、 v 変数が $O(h^3)$ 、 x 変数が $O(h^4)$ 、 w 変数が $O(h^2)$ となっている (図 2 参照)。

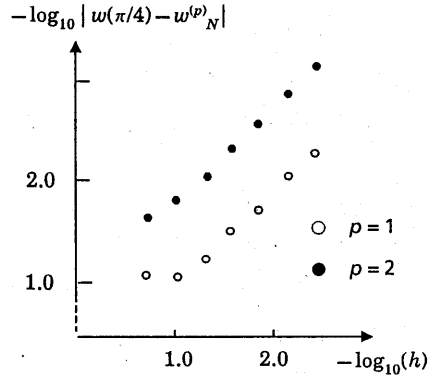


図 1 w 変数の誤差

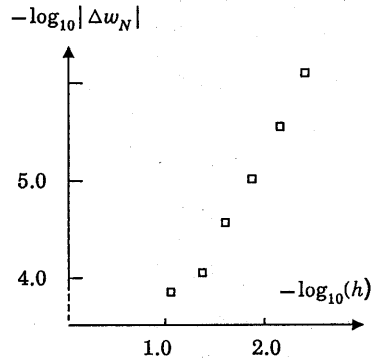


図 2

以上の結果から次のことが推測される: まず、簡約ニュートン法の反復を 1 回で打ち切っても、公式 (5.3) の次数的な性質は保証される。ただし、その場合の誤差定数は、公式本来のものとは大きく異なる可能性がある。また、反復を 2 回以上繰り返せば、非線形系の求解から生じる誤差は、(5.3) 本来の大域誤差と比較して、オーダ的には無視できる。

理論的な解析は、今後の課題である。

参考文献

- [1] Brenan, K. E., Campbell, S. L. and Petzold, L. R.: *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, North-Holland (1989).

- [2] Brenan, K.E. and Engquist, B. E : Backward Differentiation Approximations of Nonlinear Differential/Algebraic Equations, *Math. Comp.*, 51 (1988), pp. 659-676, S7-S16.
- [3] Gear, C. W. : Differential-Algebraic Equation Index Transformations, *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 9 (1988), pp. 39-47.
- [4] Gear, C. W., Gupta, G. K. and Leimkuhler, B. : Automatic Integration of Euler-Lagrange Equations with Constraints, *J. Comp. Appl. Math.*, 12&13, pp. 77-90 (1985).
- [5] Hairer, E., Lubich, C. and Roche, M. : *The Numerical Solution of Differential-Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods*, Lecture Notes in Math., 1409, Springer-Verlag (1989).
- [6] McClamroch, N. H. : Singular Systems of Differential Equations as Dynamic Models for Constrained Robot Systems, *Proc. IEEE Conf. Robotics Automation*, San Francisco (1986).
- [7] Ortega, J. M. and Rheinboldt, W. C. : *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, Academic Press (1970).
- [8] 杉浦 洋, 鳥居達生 : 一般化 R. K. 法の一構成法, 情報処理学会研究報告, 89-NA-30 (1989).

表 1.a u 変数の誤差

p N	4	8	16	32	64	128	256
1	2.415	2.736	3.262	3.857	4.466	5.073	5.678
2	3.003	3.553	4.146	4.748	5.351	5.954	6.556
3	2.977	3.563	4.157	4.755	5.355	5.956	6.558

表 1.b x 変数の誤差

p N	4	8	16	32	64	128	256
1	3.840	4.587	5.433	6.310	7.120	8.096	8.996
2	5.487	6.236	7.128	8.032	8.938	9.842	10.75
3	5.302	6.214	7.124	8.032	8.937	9.842	10.75

表 1.c w 変数の誤差

p N	4	8	16	32	64	128	256
1	1.055	1.045	1.229	1.486	1.769	2.063	2.360
2	1.662	1.808	2.061	2.344	2.637	2.934	3.233
3	1.597	1.805	2.065	2.347	2.639	2.935	3.234

表 2 $p=2$ と $p=3$ の比較

N	4	8	16	32	64	128	256
$-\log_{10} \Delta u_N $	4.20	5.19	5.74	6.54	7.40	8.23	9.17
$-\log_{10} \Delta x_N $	5.76	7.50	9.21	10.84	12.32	13.67	15.00
$-\log_{10} \Delta w_N $	2.46	3.95	4.13	4.51	5.03	5.60	6.18