数理解析研究所講究録
791巻 1992年 63-73

微分代数方程式の数値解法

鹿大理　大迫尚行 (Naoyuki Ohsako)
鹿大理　中島正治 (Masaharu Nakashima)

定係数微分代数方程式

$$Ax'(t) + Bx(t) = q(t) \quad (1)$$

$$A \in L(\mathbb{R}^m) \text{ singular}, \quad B \in L(\mathbb{R}^m)$$

についての数値解法について、まず理論的なことを述べる

定義　$A \in L(\mathbb{R}^m)$ に対するindexを次で定義する

$$\mathrm{ind}(A) := \min\{k \in \mathbb{N} \cup \{0\} \mid \ker(A^k) = \ker(A^{k+1})\}$$

但し $A^0 = I$ とする

定理1　$\mathrm{im}(A^k) \oplus \ker(A^k) = \mathbb{R}^m$

iff　$k \geq \mathrm{ind}(A)$

定理2　$A \in L(\mathbb{R}^m)$: $\mathrm{ind}(A) = k$, $\mathrm{rank}(A^k) = r$

$s_1, \dots, s_r, \dots, s_m$: 一次独立, $S := [s_1, \dots, s_r, s_{r+1}, \dots, s_m]$

$\mathrm{im}(A^k) = \mathrm{span}(s_1, \dots, s_r)$

$\ker(A^k) = \mathrm{span}(s_{r+1}, \dots, s_m)$　とすると

$A = S\,\mathrm{diag}(M, N)\,S^{-1}$, where

$M \in L(\mathbb{R}^r)$: non singular

$N \in L(\mathbb{R}^{m-r})$: nilpotent with order k

と書ける

補題3　$Q \in L(\mathbb{R}^m)$: non singular , $A \in L(\mathbb{R}^m)$

のとき　$\mathrm{ind}(Q^{-1}AQ) = \mathrm{ind}(A)$, さらに

$QA = AQ$ のとき

$\mathrm{ind}(AQ) = \mathrm{ind}(QA) = \mathrm{ind}(A)$ が成り立つ

定義　$A, B \in L(\mathbb{R}^m)$ に対する行列束 (A, B) が

regular（若しくは non singular）であるとは

$\exists z \in \mathbb{R}$ such that $\det(zA + B) \neq 0$

(A, B) が singular とは　$\det(zA + B) \equiv 0$

ところで、regular なる行列束 (A, B) に対して

次の定理より、$\mathrm{ind}(A, B) := \mathrm{ind}([cA + B]^{-1}A)$ で

index が定義できる

定理4　$\mathrm{ind}(A, B)$ は $c \in \mathbb{R}$ の選び方によらない

(proof)　$c, \bar{c} \in \mathbb{R}$ with $c \neq \bar{c}$ and

$\det(cA + B) \neq 0$, $\det(\bar{c}A + B) \neq 0$　をとる.

このとき、$G := (cA + B)^{-1}A$, $\bar{G} := (\bar{c}A + B)^{-1}A$

とおいて、$\mathrm{ind}(G) = \mathrm{ind}(\bar{G})$ を示す.

$(cA + B)^{-1}(\bar{c}A + B) =$

$= (cA+B)^{-1}\{(cA+B)+(\bar{c}-c)A\}$

$= I + (\bar{c}-c)G$ より

$\{I+(\bar{c}-c)G\}\bar{G} = (cA+B)^{-1}(\bar{c}A+B)\bar{G}$

$= (cA+B)^{-1}A = G$

従って $\bar{G} = \{I+(\bar{c}-c)G\}^{-1}G$

ここで $\{I+(\bar{c}-c)G\}^{-1}$, G は可換なる故

補題3より $\mathrm{ind}(G) = \mathrm{ind}(\bar{G})$ を得る Q.E.D.

定理5 (A, B) : regular として

i) Q : non singular

$\Rightarrow \mathrm{ind}(QA, QB) = \mathrm{ind}(AQ, BQ)$

$= \mathrm{ind}(A, B)$

ii) $AB = BA \Rightarrow \mathrm{ind}(A, B) = \mathrm{ind}(A)$

が成り立つ

定義 $U^{(k)} := (u_{ij}) \in L(\mathbb{R}^k)$, where

$$u_{ij} := \begin{cases} 0 & j \neq i+1 \\ 1 & j = i+1 \end{cases}$$

$$\mathcal{N}_k := \{ U \mid U = \mathrm{diag}(U_1^{(\ell_1)}, \ldots, U_s^{(\ell_s)}), \max_{1 \le i \le s}\{\ell_i\} = k \}$$

と定義する

例 $U^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $U^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

定理6 (A, B) : regular with index k and

$\mathrm{rank}([(cA+B)^{-1}A]^k) = r$ のとき

$\exists P, Q \in L(\mathbb{R}^m)$: non singular with

$A = P\,\mathrm{diag}(I_r, U)Q$, $B = P\,\mathrm{diag}(W, I_{m-r})Q$

$U \in \mathcal{N}_k$

以上の準備をふまえたうえで、方程式(1)を考える。

(1)において

(i) (A, B) : singular のとき

$q \equiv 0$としたときの斉次方程式は、$x(t_0) = 0$

なる初期条件に対して、自明な解に限らない。

実際、$1, 2, \ldots, m+1$ に対して、

$\det(kA+B) = 0 : 1 \le k \le m+1$ より零でない

$u_k \in \mathbb{R}^m$ such that $(kA+B)u_k = 0 : 1 \le k \le m+1$

をとれば、$u_1, \ldots, u_m, u_{m+1}$: 一次従属なる故

$\alpha_i \in \mathbb{R} : 1 \le i \le m+1$, $(\alpha_1, \ldots, \alpha_m, \alpha_{m+1})^T \neq 0$ and

$\sum_{k=1}^{m+1} \alpha_k u_k = 0$ がとれる。このとき、

$x(t) := \sum_{k=1}^{m+1} \alpha_k e^{k(t-t_0)} u_k$ は、恒等的に零とならない解になっている。

(ii) (A, B) : regular のとき

$\exists c \in \mathbb{R}$ such that $\det(cA+B) \neq 0$

このとき $k := \mathrm{ind}(A, B)$,

$r := \mathrm{rank}([(cA+B)^{-1}A]^k)$ とすると、定理6の結果より、

$\exists P, Q \in L(\mathbb{R}^m)$: non singular and

$PAQ = \mathrm{diag}(I_r, U)$, $U \in \mathcal{N}_k$

$PBQ = \mathrm{diag}(W, I_{m-r})$

ここで変数変換 $y := Q^{-1}x$ と (1)の両辺に左からPを作用させることにより、(1)は、

$$\begin{pmatrix} I_r & \\ & U \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} W & \\ & I_{m-r} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{q}_1 \\ \tilde{q}_2 \end{pmatrix} \qquad (2)$$

但し $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}\begin{matrix} \}r \\ \}m-r \end{matrix}$, $Pq = \begin{pmatrix} \tilde{q}_1 \\ \tilde{q}_2 \end{pmatrix}\begin{matrix} \}r \\ \}m-r \end{matrix}$

に同値変形される。ところで(2)の2番目の関係式

$Uy_2' + y_2 = \tilde{q}_2$ において、$U^k = 0$ なる故

$y_2, \tilde{q}_2$: 適当に滑めらかであるとすれば、

$$\begin{aligned} y_2 &= \tilde{q}_2 - Uy_2' \\ &= \tilde{q}_2 - U(\tilde{q}_2 - Uy_2')' \\ &= \tilde{q}_2 - U\tilde{q}_2' + U^2 y_2'' \\ &= \cdots \\ &= \tilde{q}_2 - U\tilde{q}_2' + \cdots + (-1)^{k-1} U^{k-1}\tilde{q}_2^{(k-1)} + (-1)^k U^k y_2^{(k)} \\ &= \sum_{\ell=0}^{k-1} (-1)^\ell U^\ell \tilde{q}_2^{(\ell)} \end{aligned}$$

となる。

従って(2)は

$$\begin{cases} y_1' = -Wy_1 + \tilde{q}_1 & (3) \\ y_2 = \sum_{\ell=0}^{k-1} (-1)^\ell U^\ell \tilde{q}_2^{(\ell)} & (4) \end{cases}$$

なる正規形微分方程式(3)と代数的制約式(4)から成っている。

今回はこの正規形微分方程式と代数的制約式

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \\ z = g(t) \end{cases}$$

の近似解法について考察した。

上の方程式に対する近似式として、数値積分の安定性を求める上で、陰的R-K法が用いられるが、その中でも半陰的方法は、理論上、応用上重要な近似式である。ところが、one stage においては、オイラー近似になっている為、精度次数は高々1である。故に半陰的R-K法は、one stage では微分代数方程式には適さないことが分かる。この点の問題について、次の半陰的擬R-K法を用いると、どうなるかについて調べた。

半陰的擬R-K法のアルゴリズム

$$y_{n+1} = y_n + b_0(y_n - y_{n-1}) + h\sum_{j=1}^{M} b_j k_j$$

$$k_1 = f(t_{n-1}, y_{n-1}), \quad k_2 = f(t_n, y_n),$$

$$k_i = f(t_n + c_i h, \; y_n + a_{i0}(y_n - y_{n-1}) + h\sum_{j=1}^{i} a_{ij} k_j)$$

$$3 \le i \le M$$

$$z_{n+1} = z_n + b_0(z_n - z_{n-1}) + h\sum_{j=1}^{M} b_j \ell_j$$

$$z_n + a_{i0}(z_n - z_{n-1}) + h\sum_{j=1}^{i} a_{ij}\ell_j = g(t_n + c_i h)$$

$$1 \le i \le M$$

$$c_i = \sum_{j=1}^{i} a_{ij} + a_{i0}, \quad t_n = t_{n-1} + h$$

one stage $(M=3, \; b_j = a_{ij} = 0 : j = 1, 2)$ において

order 2 condition

for $y' = f(t, y)$

$$\begin{cases} h : b_0 + b_3 = 1 \\ h^2 : -b_0 + 2b_3 c_3 = 1 \end{cases}$$

for $z = g(t)$

$$\begin{cases} h : b_0 + b_3 = 1 \\ h^2 : -b_0 + b_3(-1 + (c_3^2 + c_3)/a_{33}) = 1 \end{cases}$$

stability condition

$$e_{n+1} - \{1 + b_0 - b_3(1 + a_{30})/a_{33}\} e_n +$$

$$+ \{b_0 - b_3 a_{30}/a_{33}\} e_{n-1} = 0$$

$$|e_n| < +\infty$$

上の条件を満足するスキームとして

$a_{30} = c_3^2/(2c_3+1)$, $a_{33} = (c_3^2+c_3)/(2c_3+1)$

$b_0 = (2c_3-1)/(2c_3+1)$, $b_3 = 2/(2c_3+1)$

$c_3 \geq 1/\sqrt{2}$

を得た。

上のスキームで、$c_3 = 1$ として

$$\begin{cases} y' = (-1/2)y, \; y(0) = 1 \\ z = \cos t \end{cases}$$

に適用すると、次の様な結果が得られた。

$y_n - y(t_n)$

t \ h	$1/2^4$	$1/2^5$	$1/2^6$
1	-9.1470131E-05	-2.3792731E-05	-6.060631E-06
4	-8.8104139E-05	-2.2026139E-05	-5.507139E-06
8	-2.41317395E-05	-5.9970595E-05	-0.000001495
12	-4.91696475E-06	-1.21973775E-06	-3.0378075E-07

$z_n - z(t_n) = 0$

さらに two stage についても調べた。

$M=4$, $b_j = a_{ij} = 0 : j = 1, 2$, $a_{33}a_{44} \neq 0$ として

order 3 condition

for $y' = f(t, y)$

$$\begin{cases} h : b_0 + b_3 + b_4 = 1 \\ h^2 : -b_0 + 2b_3c_3 + 2b_4c_4 = 1 \end{cases}$$

$$\left|\begin{array}{ll} h^3 D^2 f & : b_0 + 3b_3 c_3^2 + 3b_4 c_4^2 = 1 \\ h^3 f_y Df & : b_0 + 3b_3\{(2a_{33}-1)c_3 + a_{33}\} + \\ & \quad + 3b_4\{2a_{43}c_3 + (2a_{44}-1)c_4 + a_{43} + a_{44}\} \\ & \quad = 1 \end{array}\right.$$

但し $D := \partial/\partial t + f\,\partial/\partial y$

for $z = g(t)$

$$\left\{\begin{array}{ll} h & : b_0 + b_3 + b_4 = 1 \\ h^2 & : -b_0 + b_3(-1 + (c_3^2 + c_3)/a_{33}) + \\ & \quad + b_4\{-1 - a_{43}(c_3^2 + c_3)/a_{33}a_{44} + (c_4^2 + c_4)/a_{44}\} \\ & \quad = 1 \\ h^3 & : b_0 + b_3(1 + (c_3^3 - c_3)/a_{33}) + \\ & \quad + b_4\{1 - a_{43}(c_3^3 - c_3)/a_{33}a_{44} + (c_4^3 - c_4)/a_{44}\} \\ & \quad = 1 \end{array}\right.$$

stability condition

$$\begin{aligned} e_{n+1} - [\,1 + b_0 + \{-a_{44}(1 + a_{30})b_3 + (a_{43}(1 + a_{30}) - \\ - a_{33}(1 + a_{40}))b_4\}/a_{33}a_{44}\,]\,e_n + \\ + [\,b_0 - \{a_{30}a_{44}b_3 + (a_{33}a_{40} - a_{30}a_{43})b_4\}/a_{33}a_{44}\,]\,e_{n-1} \\ = 0 \end{aligned}$$

$|e_n| < +\infty$

上の条件を満足するスキームとして

$a_{30} = 1/15$, $a_{33} = 4/15$,

$a_{40}=0$, $a_{43}=3/4$, $a_{44}=1/4$,

$b_0=0$, $b_3=3/4$, $b_4=1/4$,

$c_3=1/3$, $c_4=1$

を得た.

このスキームで前の方程式に適用すると、次の様な結果が得られた。

$y_n-y(t_n)$

t \ h	$1/2^3$	$1/2^4$	$1/2^5$
1	0.000001295	1.711E-07	2.29E-08
4	1.2792E-06	1.604E-07	0.000000021
8	3.518E-07	4.374E-08	5.69E-09
12	7.1794E-08	8.902E-09	1.156E-09

$z_n-z(t_n)=0$

参考文献

[1] M. Nakashima: On pseudo-Runge-Kutta methods with 2 and 3 stages, publi. RIMS, Kyoto Univ, 18, 895-909.

[2] L. Petzold: Order results for implicit Runge-Kutta methods applied to differential / algebraic systems, SIAM J. Numer. Anal. 4, 837-852.

[3] A. Prothero and A. Robinson, On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations, Math. Comp, 28 (1974), 145-162.