保存則をもつ微分代数方程式に対する離散勾配法

東京大学 大学院情報理工学系研究科 佐藤峻[*1]
Shun Sato
Graduate School of Information Science and Technology
The University of Tokyo

1 はじめに

本稿では，微分代数方程式 (DAE: Differential-Algebraic Equation)

$$M\dot{z} = f(z) \tag{1}$$

が保存則をもつ場合の構造保存数値解法を考える．ここで $M \in \mathbb{R}^{d\times d}$ は特異な定行列，$z : [0,T) \to \mathbb{R}^d$ は従属変数．$f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ は十分滑らかな写像とする．

常微分方程式 (ODE: Ordinary Differential Equation) が保存則をもつ場合に，離散化後も保存則を継承する保存的数値解法が安定性や長時間挙動において優れることが広く知られている [8, 11]．そのため，保存的数値解法の構成法は各種知られており，中でも離散勾配法 [6, 12] (や発展偏微分方程式に対する離散変分法 [5, 4]) については，その適用範囲や実際の性能などに関して盛んに研究され，非常によく整備されている．特に，保存的 ODE の代表例である Hamilton 系に加えて，保存則をもつ偏微分方程式を離散化して得られる ODE も離散勾配法の適用対象であり，両者を統一的に扱えるまでにその枠組は整備されている．

しかし，ODE の拡張である DAE (ODE は (1) において定行列 M が正則な場合に相当する) に対する保存的数値解法の研究は未だ発展途上である．保存則をもつ DAE の例としては，拘束条件を伴う発展偏微分方程式の空間離散化 [18] や，拘束条件つき Hamilton 系が挙げられる．どちらの例についても保存的数値解法の研究は散発的に存在する (例えば，拘束条件を伴う発展方程式については [14, 13], 拘束条件つき Hamilton 系については [7]) が，ODE の場合のような統一的な枠組は存在しない．

本稿では，DAE に対する離散勾配法の統一的な枠組の構成を目指した著者の論文 [17] を概観しつつ，一部論文に書ききれなかった部分を詳しく解説する．[17] の内容は以下の通りである：

- DAE における不変量 (DAE の任意の解 $z(t)$ に対して $V(z(t)) = \mathrm{const.}$ を満たす関数) の扱いづらさを指摘した (本稿 3節)．
- 不変量の「適切性」という概念を導入 (本稿 3.3節) し，それを基に DAE における勾配流構造を整理した (本稿 4.1節)．
- 指数 1 の DAE に対して離散勾配法を構成した (本稿 4.2節)．

3.3節や 4.1節の内容は指数 1 でない場合にも成立するが，本稿では簡単のために指数 1 の場合に

*1 shun@mist.i.u-tokyo.ac.jp

限定して話を進める．また，[17] では，DAE における不変量の扱いづらさを見るために，ODE において知られている「全ての Runge–Kutta 法は線形不変量を自動的に保存する」という命題が DAE には拡張されないことを観察した．本稿ではこの部分の内容を少し拡充し，さらに二次不変量に関する議論も加えた．

本稿の残りの部分は以下のように構成される．まず，2節は離散勾配法の紹介や DAE (1) に対する Runge–Kutta 法の基礎について解説する．3，4節の内容については上述の通りであり，5節で本稿を締めくくる．

2 準備

2.1 常微分方程式に対する離散勾配法

ODE における勾配流は $\dot{z} = S(z)\nabla V(z)$ と書かれ，$S(z) \in \mathbb{R}^{d\times d}$ が任意の $z \in \mathbb{R}^d$ に対して歪対称行列であれば，関数 $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ は不変量である：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}V(z) = \langle \nabla V(z), \dot{z}\rangle = \langle \nabla V(z), S(z)\nabla V(z)\rangle = 0.$$

ここで $\langle\cdot,\cdot\rangle$ は $\mathbb{R}^d$ における通常の内積である．

このとき，離散勾配法 ($z^{(n)} \approx z(n\Delta t)$ $(n = 0, 1, \dots, N)$, $\Delta t = T/N$)

$$\frac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S}\,\overline{\nabla}V(z^{(n+1)}, z^{(n)})$$

は離散保存則 $V(z^{(n+1)}) = V(z^{(n)})$ を満たす [12]．ここで $\overline{S} = \overline{S}(z^{(n+1)}, z^{(n)})$ は S の歪対称性を保つ近似であり，$\overline{\nabla}V$ は以下のように定義される離散勾配である (各種の構成法が存在する)．

定義 2.1. 関数 $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ に対して，以下の 2 つの性質を満たす連続関数 $\overline{\nabla}V : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ を離散勾配という：

- 任意の $z, z' \in \mathbb{R}^d$ に対して $V(z) - V(z') = \langle \overline{\nabla}V(z, z'), z - z'\rangle$；
- 任意の $z \in \mathbb{R}^d$ に対して $\overline{\nabla}V(z, z) = \nabla V(z)$.

離散保存則は，離散勾配の 1 つ目の性質 (離散連鎖律) と $\overline{S}$ の歪対称性を用いて連続版と全く同様に証明される．

ここまでで ODE が勾配流表現されていれば保存的数値解法が構成できることを見たが，この仮定がどの程度厳しいものかも考える必要がある．この点については，多くの保存系が自然に勾配流表現されるという経験則もあるが，以下の命題が成立し任意の保存系が勾配流表現できることも知られている．

命題 2.1 ([12, Proposition 2.1]). $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ を C^r 級のベクトル場とし ($r \geq 1$, $d > 1$)，C^{r+1} 級の関数 V が f の不変量であるとする．このとき，ある C^r 級の歪対称行列値関数 $S : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times d}$ が存在して $f = S\nabla V$ を $\{z \in \mathbb{R}^d \mid \nabla V(z) \neq 0\}$ 上で満たす．さらに，S は非退

化な臨界点の近傍で有界になるようにできる．特に，S が Morse 関数であれば S は局所有界であるようにできる．

証明は割愛するが,「関数 V が不変量である」ことは「任意の $z \in \mathbb{R}^d$ に対して $\langle \nabla V(z), f(z) \rangle = 0$ が成立する」ことと必要十分であることを利用して構成的に証明できる．

2.2 指数 1 の微分代数方程式

本稿では，DAE (1) の (微分) 指数が一様に 1 であると仮定する (DAE (1) の指数に関する詳細は [1] を参照されたい)．以下，この仮定の意味を説明する．

まず，DAE (1) のもつ拘束条件を導出する．行列 M の像空間 $\mathrm{range}(M)$ の直交補空間の正規直交基底 $\{\ell_i\}_{i=1}^{d-\mathrm{rank}\,M}$ を束ねて行列 $L = (\ell_1, \dots, \ell_{d-\mathrm{rank}\,M})$ を構成する．このとき，DAE (1) の解 $z \colon [0,T) \to \mathbb{R}^d$ について $0 = L^\top M \dot{z} = L^\top f(z)$ が成立することに注意すると，拘束条件 $G(z) = L^\top f(z) = 0$ が満たされることが示される．

つまり，DAE (1) の全ての解軌道は多様体 $\mathcal{M} = \{z \in \mathbb{R}^d \mid G(z) = 0\}$ に含まれる．指数が一様に 1 であるときには，さらに，$G(z_0) = 0$ を満たす全ての $z_0 \in \mathbb{R}^d$ に対して，z_0 を初期値とする軌道が一意的に定まる．

2.3 微分代数方程式に対する Runge–Kutta 法

DAE (1) に対する s 段 Runge–Kutta 法を

$$M \frac{Z_i^{(n)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} f\left(Z_j^{(n)}\right) \qquad (i \in [s]) \tag{2}$$

$$z^{(n+1)} = \left(1 - \sum_{i,j \in [s]} b_i \omega_{ij}\right) z^{(n)} + \sum_{i,j \in [s]} b_i \omega_{ij} Z_j^{(n)} \tag{3}$$

と定める [9]．ここで ω_{ij} は A の逆行列の (i,j) 成分とする．また，$[s]$ は $[s] := \{1, 2, 3, \cdots, s\}$ と定義する．この際，DAE の数値解法の文脈では，以下の 2 つの仮定が標準的に置かれる：

(A1) 行列 A (A の i,j 成分が a_{ij}) が正則；
(A2) $a_{sj} = b_j$ が全ての $j \in [s]$ について成立．

上記の 2 つの仮定を満たす Runge–Kutta 法は数多く存在し，その中で最も単純なものは陰的 Euler 法である．(A1) と (A2) の仮定の帰結に関する詳細は [9, Chapter VI] を参照されたい．ここでは，本稿において重要な帰結のみを以下の補題と命題で示す．まず，以下の補題で示すように，仮定 (A1) により，各 $Z_i^{(n)}$ が拘束条件を満足することが保証される．

補題 2.2. DAE (1) に対する Runge–Kutta 法 (2), (3) が仮定 (A1) を満たすと仮定する．このとき，各 $i \in [s]$ に対して，$G\left(Z_i^{(n)}\right) = 0$ が成立する．

証明 $k \in [d - \mathrm{rank}\, M]$ を固定すると，式 (2) の両辺と ℓ_k の内積より

$$0 = \left\langle \ell_k, M\frac{Z_i^{(n)} - z^{(n)}}{\Delta t} \right\rangle = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \langle \ell_k, f\left(Z_j^{(n)}\right) \rangle$$

が任意の $i \in [s]$ に対して成立することがわかる．よって，行列 A の正則性から $\left\langle \ell_k, f\left(Z_j^{(n)}\right) \right\rangle = 0$ が任意の $j \in [s]$ に対して成立する．k は任意であったため，これは補題の成立を意味する． □

さらに，仮定 (A2) は，$z^{(n+1)} = Z_s^{(n)}$ を意味するので以下の命題が成立する．

命題 2.3. DAE (1) に対する Runge–Kutta 法 (2), (3) が仮定 (A1)(A2) を満たすと仮定する．このとき，$z^{(n+1)} \in \mathcal{M}$ が成立する．

3 DAE における不変量

本節では，不変量の取り扱いの難しさを述べる．ここで，DAE (1) の全ての解 $z : [0, T) \to \mathbb{R}^d$ が $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} V(z(t)) = 0$ を満たすとき，関数 $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を (1) の不変量という．

3.1, 3.2節では，不変量が線形や 2 次の単純な場合であっても保存的数値解法を構成することが困難であることを述べる．続いて 3.3節では不変量の適切性という概念を導入する．

3.1 線形不変量

本節では，不変量が線形，つまり定ベクトル $\gamma \in \mathbb{R}^d$ を用いて $V(z) = \langle \gamma, z \rangle$ とかける場合を考える．ODE の範囲内では，線形不変量に関しては，多くの数値解法で自動的に保存されることが知られており，例えば以下の事実が知られている．

命題 3.1 ([8, Chapter IV, Theorem 1.5])**.** 全ての Runge–Kutta 法は ODE $\dot{z} = f(z)$ の線形不変量を自動的に保存する．

上の結果から，DAE においても線形不変量に関しては自動的な保存則がある程度成立することが期待される．例えば，2.3節の議論から，仮定 (A1)(A2) を満たす Runge–Kutta 法については，線形不変量の自動的な保存を期待したくなる．しかし，実際には，$\gamma \in \mathrm{car}(M) := (\mathrm{null}(M))^{\perp}$ であるか否かで状況は大きく異なる．

まず，$\gamma \in \mathrm{car}(M)$ の場合には，(A1) を満たす全ての Runge–Kutta 法について，自動的に保存則が成立する．

定理 3.1 (cf. [17, Proposition 3.2])**.** 関数 $V(z) = \langle \gamma, z \rangle$ を $\gamma \in \mathrm{car}(M)$ を満たす不変量とする．このとき，(A1) を満たす全ての Runge–Kutta 法に対して，$V\left(z^{(n+1)}\right) = V\left(z^{(n)}\right)$ が成立する．

証明 $z(t)$ を DAE (1) の解とすると，ある $e : [0, T) \to \mathrm{null}(M)$ が存在して $\dot{z}(t) = M^{\dagger} f(z(t)) + e(t)$ とかける ($M^{\dagger}$: M の Moore–Penrose 一般逆行列)．よって，仮定より，

$$0 = \langle \gamma, \dot{z} \rangle = \langle \gamma, M^{\dagger} f(z) + e \rangle = \langle \gamma, M^{\dagger} f(z) \rangle$$

が成立する．つまり，$\langle \gamma, M^\dagger f(z)\rangle = 0$ が全ての $z \in \mathcal{M}$ に対して成り立つ．

Runge–Kutta 法の解に関しても，連続版と同様に，ある $e_{\mathrm{d}}^{(n)} \in \mathrm{null}(M)$ が存在して

$$\frac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \sum_{j=1}^{s} b_j M^\dagger f\left(Z_j^{(n)}\right) + e_{\mathrm{d}}^{(n)}$$

とかけることと，$Z_j^{(n)} \in \mathcal{M}$ (補題 2.2) を利用すると，

$$\frac{V\left(z^{(n+1)}\right) - V\left(z^{(n)}\right)}{\Delta t} = \left\langle \gamma, \frac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} \right\rangle = \left\langle \gamma, \sum_{j=1}^{s} b_j M^\dagger f\left(Z_j^{(n)}\right) + e_{\mathrm{d}}^{(n)} \right\rangle$$
$$= \sum_{j=1}^{s} b_j \left\langle \gamma, M^\dagger f\left(Z_j^{(n)}\right)\right\rangle = 0$$

が示される．□

注意 3.1. 上の定理では (A2) を仮定していない．(A2) を仮定しない場合には，$z^{(n+1)}$ が拘束条件を満たすとは限らない (第 2.3節を参照) が，離散保存則は $z^{(n)} \in \mathcal{M}$ すら仮定せずに証明されているため，(A1) さえ満たされていれば $V\left(z^{(n)}\right) = V\left(z^{(0)}\right)$ が任意の n に対して成立する．

上の証明の肝は，$e(t), e_{\mathrm{d}}^{(n)} \in \mathrm{null}(M)$ がともに $\gamma \in \mathrm{car}(M)$ によって消えることである．つまり，$\gamma \notin \mathrm{car}(M)$ の場合には上の論法は利用できない．また，実際に反例を構成できる：

例 3.1. 周期境界条件下の modified Huter–Saxton 方程式 [3]

$$u_{tx} = u - u u_{xx} - \frac{1}{2}(u_x)^2$$

($t \in [0, T)$ と $x \in \mathbb{S} := \mathbb{R}^d / L\mathbb{Z}$ は独立変数 (L は正の実数), $u : [0, T) \times \mathbb{S} \to \mathbb{R}$ が従属変数であり，下付き文字は偏微分を表す) に対する空間離散化 (cf. [16])

$$\delta_x^+ \dot{u}_k = \mu_x^+ u_k - \mu_x^+ \left(u_k \left(\delta_x^{\langle 2\rangle} u_k\right)\right) - \frac{1}{2}\left(\delta_x^+ u_k\right)^2 \tag{4}$$

を考える．ここで，$u_k(t) \approx u(t, k\Delta x)$ ($k \in [K]$) は u の近似であり (K は正整数であり，$\Delta x = L/K$ は空間刻み幅を表す)，前進差分作用素 δ_x^+，前進平均作用素 μ_x^+，2 階中心差分作用素 $\delta_x^{\langle 2\rangle}$ はそれぞれ以下のように定義する：$\delta_x^+ u_k := (u_{k+1} - u_k)/\Delta x$，$\mu_x^+ u_k := (u_{k+1} + u_k)/2$，$\delta_x^{\langle 2\rangle} u_k := (u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1})/(\Delta x)^2$．

DAE (4) は指数 1 であり，線形不変量 $V(u) = \sum_{k=1}^{K} u_k \Delta x$ をもつ．しかし，この線形不変量は $\gamma \in \mathrm{car}(M)$ を満たさず，図 1に示すように陰的 Euler 法による数値解が保存則を満たさない．比較手法として載せているスキーム [16] は，ここで検討しているような自動保存ではなく，modified Hunter–Saxton 方程式専用の保存的数値解法である．

3.2　二次不変量について

本節では，不変量が 2 次，つまり定行列 $Q \in \mathbb{R}^{d\times d}$ を用いて $V(z) = (1/2)\langle z, Qz\rangle$ とかける場合を考える．ODE の範囲内では，あるクラスの Runge–Kutta 法で 2 次不変量が自動的に保存

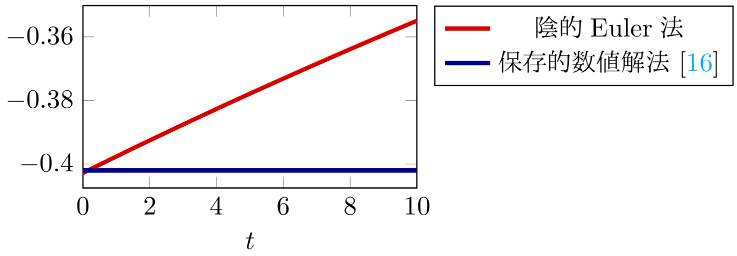

図 1　DAE (4) の線形不変量 V の時間変化．（赤線は陰的 Euler 法，青線は [16] のスキームの数値解であり，Lenells [10] の周期解を初期値とし，刻み幅は時間刻み幅 $\Delta t = 1/100$ と空間刻み幅 $\Delta x = 1/256$ を利用した．）

されることが知られている：

命題 3.2 ([2])**.** 以下の条件を満たす Runge–Kutta 法は ODE の 2 次不変量を自動的に保存する：

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_i \qquad (i, j \in [s]). \tag{5}$$

命題 3.1と定理 3.1の証明を見比べると分かる通り，ODE から DAE への拡張の本質は $\nabla V(z) \in \mathrm{car}(M)$ という性質である．このため，ある種の二次不変量についても，(A1), (A2), (5) を全て仮定すれば，自動的に保存されると期待できる．しかし，実際には以下の定理が成立するため，この全ての仮定が成立する Runge–Kutta 法はそもそも存在しない．

定理 3.2. 仮定 (A1), (A2) と (5) を全て同時に満たす Runge–Kutta 法は存在しない．

証明　仮定 (A2) より，(5) は，

$$a_{si} a_{ij} + a_{sj} a_{ji} = a_{si} a_{sj} \qquad (i, j \in [s]) \tag{6}$$

に書き換えられるため，(6) を満たす行列 A が特異であることを示せばよい．

まず，(6) において $i = j = s$ とすることで，$a_{ss} = 0$ を得る．さらに $i = s$ とすると

$$a_{sj} a_{js} = 0 \qquad (j \in [s])$$

を得る．ここで，$I := \{i \in [s] \mid a_{si} = 0\}$, $\overline{I} := [s] \setminus I$ とすると，$i \in I$ の場合の (6) を考えると，$a_{sj} a_{ji} = 0$ が成立するので，さらに $j \in \overline{I}$ のときは $a_{sj} \neq 0$ なので $a_{ji} = 0$ を得る．つまり，$A[\overline{I}, I]$ は零行列である ($A[J, K]$：行集合 J と列集合 K に対応する小行列)．$A[s, I]$ も I の定義より零行列なので，結局 $A[\overline{I} \cup \{s\}, I]$ は零行列である．

これより，$A[[s], I]$ の非零行は高々 $|I| - 1$ 個なので，$\mathrm{rank}\, A[[s], I] \le |I| - 1$ が成立する．よって，$\mathrm{rank}\, A \le \mathrm{rank}\, A[[s], \overline{I}] + \mathrm{rank}\, A[[s], I] \le |\overline{I}| + |I| - 1 = s - 1$ より，A は特異である．　□

3.3　適切な不変量

3.1節では，線形不変量の場合には $\gamma \in \mathrm{car}(M)$ である場合には扱いやすく，そうでない場合には線形不変量の場合にすら困難であることを見た．本節では，非線形な場合も同様に

$\nabla V(z) \in \mathrm{car}(M)$ を満たす不変量は扱いやすく，さらに十分に広いクラスをなすことを示す．その準備として，関数の「適切性」を以下のように定義する．

定義 3.1 ([17, Definition 3.1])**.** 微分可能な関数 $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が任意の $z \in \mathcal{M}$ に対して $\nabla V(z) \in \mathrm{car}(M)$ を満たすとき，(DAE (1) に対して) 適切であるという．

適切な不変量は以下の 3 つの望ましい特徴をもつ．

(P1) ODE の場合の自然な一般化になっている：
ODE は行列 M が正則な場合，つまり $\mathrm{car}(M) = \mathbb{R}^d$ の場合に相当するため，全ての不変量が適切である．

(P2) 簡潔な特徴づけをもつ：
関数 V が適切であるとき，「V が不変量である」ことと「任意の $z \in \mathcal{M}$ に対して $\langle \nabla V(z), M^\dagger f(z) \rangle = 0$ が成立する」ことが必要十分である．これは，定理 3.1の証明の冒頭と同様に

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} V(z(t)) = \langle \nabla V(z), \dot{z} \rangle = \langle \nabla V(z), M^\dagger f(z) + e \rangle = \langle \nabla V(z), M^\dagger f(z) \rangle$$

という変形をすることで確認できる．

(P3) 十分広いクラスをなす：
- 多くの知られている不変量が適切である．具体例については [17, Section 3.3] を参照されたい．
- 任意の関数に対して，$\mathcal{M}$ 上の値が同じ適切な関数が存在する (命題 3.3)．

性質 (P2) をもつことが適切性を導入する動機であり，この帰結は次節で述べる．(P1) と (P3) は適切性を仮定して議論を進めることの根拠であり，特に (P3) の 2 つ目の点である以下の命題は，適切性を仮定しても一般性を失わないことを示している．

命題 3.3 ([17, Proposition 3.2])**.** 関数 $\widetilde{V} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が C^{r+1} 級であるとする ($r \geq 1$)．また，$\mathcal{M}$ は C^{r+1} 級関数 $g_i : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ ($i \in [\hat{d}]$) を用いて $\mathcal{M} = \{ z \in \mathbb{R}^d \mid g_i(z) = 0 \ (i \in [\hat{d}] \}$ とかけるとする．このとき，ある C^r 級かつ適切な関数 $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が存在して，任意の $z \in \mathcal{M}$ に対して $V(z) = \widetilde{V}(z)$ を満たす．

4 DAE における勾配流構造と離散勾配法

4.1 DAE における勾配流構造

DAE に対する離散勾配法を考えるためには，ODE における勾配流 $\dot{z} = S(z)\nabla V(z)$ の DAE における対応物を考える必要がある．ここでは，特異な定行列 M を用いて

$$M\dot{z} = S(z)\nabla V(z) \tag{7}$$

とかける DAE を考える．ODE の場合の勾配流構造に関しては，2.1節で見たように，以下の 2 点が重要であった：(i) S が歪対称行列であれば，V が不変量になる；(ii) 任意の保存系は勾配流表現できる (命題 2.1).

前節で導入した適切性を満たす関数 V については，DAE 版の勾配流 (7) においても同様の性質が成立する．まず，1 つ目の性質に対応して，以下の命題が成立する．この命題は適切な不変量の性質 (P2) と $\langle \nabla V(z), M^{\dagger}S(z)\nabla V(z)\rangle = 0$ ($M^{\dagger}S(z)$ の歪対称性の帰結) より証明できる．

命題 4.1 ([17, Proposition 4.1]). $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を適切な関数とする．このとき，任意の $z \in \mathcal{M}$ に対して $M^{\dagger}S(z)$ が歪対称行列であれば，V は (7) の不変量である．

また，2 つ目の性質に対応して以下の定理が成立する．こちらの証明でも (P2) を利用するが，詳細については [17] を参照されたい．

定理 4.1 ([17, Theorem 4.1]). $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ を C^r 級のベクトル場とし ($r \geq 1$, $d > 1$)，C^{r+1} 級の関数 V を適切な不変量であるとする．このとき，ある C^r 級の行列値関数 $S : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d\times d}$ が存在して $f = S\nabla V$ を $\{z \in \mathcal{M} \mid \nabla V(z) \neq 0\}$ 上で満たし，かつ $M^{\dagger}S(z)$ は任意の $z \in \mathcal{M}$ に対して歪対称である．さらに，S は非退化な臨界点の近傍で有界になるようにできる．特に，S が Morse 関数であれば S は局所有界であるようにできる．

4.2 DAE 版の勾配流 (7) に対する離散勾配法

4.2.1 素朴な離散勾配法とその難点

本節では，DAE 版の勾配流 (7) に対する離散勾配法を考える．2.1節で紹介した ODE における離散勾配法を参考にすると，素朴には

$$\frac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S}\overline{\nabla}V\left(z^{(n+1)}, z^{(n)}\right) \tag{8}$$

のようにスキームを構成することが考えられる ($\overline{S} = \overline{S}\left(z^{(n+1)}, z^{(n)}\right)$ は $S(z)$ の離散化とする)．スキーム (8) について，もし $\overline{\nabla}V\left(z^{(n+1)}, z^{(n)}\right) \in \mathrm{car}(M)$ が成立し，かつ $A^{\dagger}\overline{S}$ が歪対称であれば，連続版と同様に $V\left(z^{(n+1)}\right) = V\left(z^{(n)}\right)$ が成立することを示すことができる [17, Proposition 5.1]．しかし，これらの仮定は以下に見るように自然には満たされない：

1. $\overline{\nabla}V\left(z^{(n+1)}, z^{(b)}\right) \in \mathrm{car}(M)$ が成り立つとは限らない：
   V が適切であり，$z, z' \in \mathcal{M}$ が成立している場合でさえ，その離散勾配が $\overline{\nabla}V(z, z') \in \mathrm{car}(A)$ を満たすとは限らない．
2. $M^{\dagger}\overline{S}$ の歪対称性が保証できるとは限らない：
   連続版では，歪対称性は $\mathcal{M}$ 上でしか保証されない．スキーム (8) では一般に $z^{(n)} \in \mathcal{M}$ が保証されず，したがって $M^{\dagger}\overline{S}$ が歪対称になるように離散化することも難しい．

実は，既存研究で扱われていたケースでは，上記の難点が問題の特殊性により自然に解消されていた [17, Examples 5.1 and 5.2]．しかし，一般論を展開するためにはこれらの難点を克服す

る必要がある．1節でも述べたように，3.3節と 4.1節の内容は指数 1 の仮定がなくとも成立するが，この節で述べた難点に対する解決法が見つかっているのは指数 1 の場合のみである．以下では指数 1 の DAE に限定する．また，(7) が命題 4.1の仮定を満たすとする．

4.2.2　適切性と相性の良い離散勾配の導入

まず，上の難点 1 を克服するために，適切性と相性の良い離散勾配の構成法を新たに考える．ここで， $z^{(n)}, z^{(n+1)} \in \mathcal{M}$ のとき $\nabla V(z^{(n)}), \nabla V(z^{(n+1)}) \in \mathrm{car}(M)$ が成立することに注意すると，これらの線形結合で離散勾配を構成することができればその離散勾配は $\mathrm{car}(M)$ に属することが分かる．よって，[17] では，

$$\overline{\nabla}_{\mathrm{P}} V(z, z') = \begin{cases} \theta(z, z')\nabla V(z) + \theta(z', z)\nabla V(z') & (\nabla V(z) \neq \nabla V(z')), \\ \nabla V(z) & (\nabla V(z) = \nabla V(z')) \end{cases}$$

を導入した．ここで，係数 $\theta : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ は以下のように定義する：

$$\theta(z, z') = \frac{V(z) - V(z') - \langle \nabla V(z'), z - z' \rangle}{\langle \nabla V(z) - \nabla V(z'), z - z' \rangle}.$$

定義 2.1であげた 2 つの性質を $\overline{\nabla}_{\mathrm{P}} V$ が満たすことは単純な計算で確認でき，上の観察の通り，以下の補題も成立する．

補題 4.2. $V : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を適切な関数とする．このとき，任意の $z, z' \in \mathcal{M}$ に対して $\overline{\nabla}_{\mathrm{P}} V(z, z') \in \mathrm{car}(M)$ が成立する．

しかし，$\theta(z, z')$ の分母が 0 になり得るために $\overline{\nabla}_{\mathrm{P}} V$ の連続性は一般には成立しない．[17] では，V が (i) 二次関数，(ii) 狭義凸関数，または (iii) L_V-平滑 (∇V が L_V-Lipschitz 連続) な凸関数の場合には連続性が担保できることを示した．さらに，上の 3 つの場合に属さない sine-Gordon 方程式の場合にも工夫すると連続性を担保できることも示したが，ここでは割愛する．

注意 4.1. 最近の論文 [15] において $\theta \in [0, 1]$ に対して $z^{(n+\theta)} = \theta z^{(n+1)} + (1 - \theta) z^{(n)}$ として

$$\overline{\nabla}_{\theta} V\left(z^{(n+1)}, z^{(n)}\right) = \frac{V\left(z^{(n+1)}\right) - V\left(z^{(n)}\right)}{\left\langle \nabla V\left(z^{(n+\theta)}\right), z^{(n+1)} - z^{(n)} \right\rangle} \nabla V\left(z^{(n+\theta)}\right)$$

という形の離散勾配が利用されており，$\theta = 0$ や $\theta = 1$ のケースは適切性と相性が良い，つまりこれらの離散勾配に対しても補題 4.2が成立する．ただし，係数の分母が 0 になり得るために連続性が破綻し得るという難点は同じである．

4.2.3　拘束条件と離散保存則を両立する離散勾配法の構築

前節で構成した離散勾配を利用するためには $z^{(n)} \in \mathcal{M}$ を担保する必要がある．そのために，ここでは DAE 版の勾配流 (7) を以下のように変形する：

$$\begin{cases} M\dot{z} = S(z)\nabla V(z) + \displaystyle\sum_{i=1}^{d - \mathrm{rank}\, M} c_i \ell_i, \\ G(z) = 0. \end{cases} \tag{9}$$

ここで，$c_i : [0,T) \to \mathbb{R}$ は冗長な従属変数 (厳密解では $c_i(t) = 0$) であり，G や ℓ_i は 2.2節で定義したものである．この再定式化により，拘束条件 $G(z) = 0$ が陽に現れるため，拘束条件が成立するような離散化が容易になる．さらに，(9) の解を $(z(t), c(t))$ とすると，ある $e : [0,T) \to \mathrm{null}(M)$ が存在して

$$\dot{z}(t) = M^{\dagger} S(z(t)) \nabla V(z(t)) + e(t)$$

が成立する (定理 3.1の証明や 3.3の性質 (P2) と同じ議論)．ここで，$M^{\dagger}\ell_i = 0$ $(i \in [d - \mathrm{rank}\, M])$ を用いた．これより，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} V(z) = \langle \nabla V(z), \dot{z} \rangle = \left\langle \nabla V(z), M^{\dagger} S(z) \nabla V(z) + e \right\rangle = 0$$

が成立する．ここで，ℓ_i を用いて冗長な変数を導入することで，変形後の DAE (9) でも保存則の証明が V の適切性と $M^{\dagger}S(z)$ の歪対称性だけで完結することが重要である．

再定式化 (9) に基づいて，スキーム

$$\begin{cases} M \dfrac{z^{(n+1)} - z^{(n)}}{\Delta t} = \overline{S}\bigl(z^{(n+1)}, z^{(n)}\bigr) \overline{\nabla}_{\mathrm{P}} V\bigl(z^{(n+1)}, z^{(n)}\bigr) + \displaystyle\sum_{i=1}^{d - \mathrm{rank}\, M} c_i^{(n+1)} \ell_i, \\ G\bigl(z^{(n+1)}\bigr) = 0 \end{cases} \tag{10}$$

を構成する．ここで，$\overline{S}(z^{(n+1)}, z^{(n)}) = (S(z^{(n+1)}) + S(z^{(n)}))/2$ とする．定義より，このスキームの解は拘束条件を満たす．さらに，以下の定理に示すように離散保存則も成立する．証明は $\overline{\nabla}_{\mathrm{P}} V\bigl(z^{(n+1)}, z^{(n)}\bigr) \in \mathrm{car}(M)$ が成立しているため，連続版と全く同様である．

定理 4.2 ([17, Theorem 6.1])**.** $z^{(n)}$ を (10) の解とする $(n \in [N])$．このとき，任意の $n \in [N]$ に対して $V(z^{(n)}) = V(z^{(0)})$ が成立する．

5 おわりに

本稿では，DAE に対する保存的数値解法に関する論文 [17] の概要を紹介しつつ，論文内ではあまり詳しく書けなかった線形や二次不変量に関する自動保存の話を詳しく紹介した．冒頭でも述べた通り，DAE に対する保存的数値解法の研究は未だその黎明期にあるといえ，[17] や本稿で得た結果で十分満足できるとは残念ながら言い難い．例えば，指数 2 以上の場合の保存的数値解法を構成法は未解決であるし，指数 1 の場合にも離散勾配の連続性が完全には解決できていない．しかし，本稿で紹介したような枠組はこれらの解決の際にも基礎となると思われる．

参考文献

[1] U. M. Ascher and L. R. Petzold. *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations.* SIAM, Philadelphia, PA, 1998.

[2] G. J. Cooper. Stability of Runge–Kutta methods for trajectory problems. *IMA J. Numer. Anal.*, 7(1):1–13, 1987.

[3] M. Faquir, M.A. Manna and A. Neveu. An integrable equation governing short waves in a long-wave model. *Proc. R. Soc. A*, 463:1939–1954, 2007.

[4] D. Furihata and T. Matsuo. Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations. CRC Press, Boca Raton, 2011.

[5] 降籏 大介, 森 正武. 偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出. 日本応用数理学会論文誌, 8:317–340, 1998.

[6] O. Gonzalez. Time integration and discrete Hamiltonian systems. *J. Nonlinear Sci.*, 6:449–467, 1996.

[7] O. Gonzalez. Mechanical systems subject to holonomic constraints: differential-algebraic formulations and conservative integration. *Phys. D*, 132(1-2):165–174, 1999.

[8] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner. *Geometric numerical integration, Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*. Springer, Heidelberg, 2010.

[9] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. II, Stiff and differential-algebraic problems*. Springer-Verlag, Berlin, 2010.

[10] J. Lenells. Periodic solitons of an equation for short capillary-gravity waves. *J. Math. Anal. Appl.*, 352(2):964–966, 2009.

[11] 松尾 宇泰, 宮武 勇登. 微分方程式に対する構造保存数値解法. 日本応用数理学会論文誌, 22: 213–251, 2012.

[12] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel, and N. Robidoux. Geometric integration using discrete gradients. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 357:1021–1045, 1999.

[13] Y. Miyatake, D. Cohen, D. Furihata and T. Matsuo. Geometric numerical integrators for Hunter–Saxton-like equations. *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, 34:441–472, 2017.

[14] Y. Miyatake, T. Yaguchi and T. Matsuo. Numerical integration of the Ostrovsky equation based on its geometric structures. *J. Comput. Phys.*, 231:4542–4559, 2012.

[15] S. Pathiraja and S. Reich. Discrete gradients for computational Bayesian inference. *J. Comput. Dyn.*, 6(2):385–400, 2019.

[16] S. Sato. Stability and convergence of a conservative finite difference scheme for the modified Hunter–Saxton equation. *BIT*, 59(1):213–241, 2019.

[17] S. Sato. Linear gradient structures and discrete gradient methods for conservative/dissipative differential-algebraic equations. *BIT*, 59(4):1063–1091, 2019.

[18] S. Sato and T. Matsuo. On spatial discretization of evolutionary differential equations on the periodic domain with a mixed derivative. *J. Comput. Appl. Math.*, 358:221–240, 2019.