数理解析研究所講究録
第2005巻 2016年 71-83

非線形方程式と常微分方程式の数値的解法理論の統合化

General Theory of Sand-RK Methods for Nonlinear Equations

静岡理工科大学 鈴木 千里

Chisato SUZUKI
Shizuoka Institute of Science and Technology

概要

非線形方程式に対する一段反復法である Newton 法の自然な一般化として, 多段反復法の Sand-Runge-Kutta (SRK) 法が議論される. 具体的には, s 段 SRK 法は s 段陽的 Rnge-Kutta (RK) 法を非線形方程式と同じ解をもつ常微分方程式の初期値問題に適用することによって構成される. このとき, RK 法が p 次なら, 対応する SRK 法は単解に対して $p+1$ の収束次数をもつ. また, この逆も成り立つことが示される. 更に RK 法と SRK 法の間のそれぞれの次数に関する上記の同型性から, SRK 法の収束次数に関する幾つかの定理が示される.

一般化の重要な意義は重解や近接解に対する Newton 法が抱えるボトルネックを解消することにある. 興味ある結果として, 例えば2段法では単解に対して3次の収束性を有し, 任意の1つの重解に対して2次収束するような SRK 法の存在が示される. また, 3段法では単解に対して4次の収束性を有し, 任意の2つの異なる重解に対して2次収束するような SRK 法の存在条件が示される. 最後に SRK 法の応用について言及する.

1 はじめに

自然界の現象や工学的現象などの数学的モデルをコンピュータで数値的に解析する際の最終の工程では

(i) 線形方程式
(ii) 非線形方程式
(iii) 積分を含む微分方程式

の数値解法の何れかを多かれ少なかれ利用することになる。それ故, これらの3つの分野の解法は古くから数値解析の基礎として研究が進められてきた. 本論では, これらの3つの内の非線形方程式 (特に系を念頭において) の数値的算法の理論についての新しい知見を展開する.

非線形方程式の反復解法の数値的算法の古典理論は1960年代中期には一通りの体系化がなされ, ベクトル値関数 $\boldsymbol{g}$ の非線形方程式系

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})=0 \tag{1}$$

に対する Newton 法

$$\boldsymbol{y}_{n+1}=\boldsymbol{y}_n+\boldsymbol{k},\quad \boldsymbol{k}=-J_g(\boldsymbol{y}_n)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n)$$

の自然な一般化として考えられる一般化 Newton 公式

$$\left\{\begin{array}{l}\boldsymbol{y}_{n+1}=\boldsymbol{y}_n+\displaystyle\sum_{i=1}^{s}w_i\boldsymbol{k}_i\\ \left\{\begin{array}{l}\boldsymbol{k}_1=-J_g(\boldsymbol{y}_n)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n)\\ \boldsymbol{k}_i=-J_g\Big(\boldsymbol{y}_n+\displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}\boldsymbol{k}_j\Big)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n),\\ (2\le i\le s)\end{array}\right.\end{array}\right. \tag{2}$$

の研究が行われた. ここで $J_g(\boldsymbol{y})$ は $\boldsymbol{g}$ の Jacobi 行列である. 特に古典理論では, 例えばスカラーにおいては, 一般化 Newton 公式が単解 $\hat{y}$ に対して q 次収束を保証するためには反復公式を特性づける反復関数

$$\left\{\begin{array}{l}G(y)=y+\displaystyle\sum_{i=1}^{s}w_ik_i\\ \left\{\begin{array}{l}k_1=-g'(y)^{-1}g(y)\\ k_i=-g'\Big(y+\displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}k_j\Big)^{-1}g(y)\\ (2\le i\le s)\end{array}\right.\end{array}\right.$$

が3つの条件

(i) $G(\hat{y})=\hat{y}$,
(ii) $G^{(r)}(\hat{y})=0,\ (1\le r\le q-1)$
(iii) $G^{(q)}(\hat{y})\neq 0$

を満たすように係数 $\{w_i\}$, $\{a_{ij}\}$ を決定すれば良いことが知られている [1]. しかし, 高い収束次数を望むときには条件式の数が増すことから, 条件を満たすように係数を決定することが極端に難しくなる. このような困難さの発生は陽的 Runge-Kutta(RK) 公式の高次化の研究でも同じであるが, 一般化 Newton 公式の研究においては, 陽的 RK 公式の研究で競われたようなゲキレースは起きなかった. それは段数を上げて得られる一般化 Newton 公式の計算量の増加が問題視されことに加えて, 段数を増やすことの意義の認識不足によるものと考えられる. 上述したような非線形方程式

に対する古典理論は Traub[1] により詳細に纏め上げられている. また個々の算法の改良版なども, 例えば Saaty-Bram の教科書 [2] に詳細に紹介されている.

しかし残念ながら, それ以降では根源的な点に影響を与える理論的な発展は余り見られない. 今日の研究の方向は, 収束性の悪い反復列の収束性改良や収束先の安定性の改良, 等の研究に力が注がれている. 何れにしても, そのような問題は方程式の性質に起因している訳であって, 解が 2 以上の重複度をもっていたり, 幾つもの近接する解を持っていたり, 非線形性が極度に強かったりすること等に起因することが多い. これらの問題点の解決に向けて, 1 変数の場合には多項式の方程式に対する DKA 法や高階導関数を用いるハレー法及び数列の収束を加速するエイトケン加速法などの高次収束化を図る幾多の研究が行われてきた. また方程式系に対しては Newton 法をベースにするホモトピー法やその変形版などの算法が多くの成果を上げてきた.

一方, 別の研究の流れもある. 非線形方程式 (1) の解 $\hat{\boldsymbol{y}}$ を得るために微分方程式

$$\frac{d\boldsymbol{z}}{dx} = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}), \quad x\in[0,\infty), \quad \lim_{x\to\infty} \boldsymbol{z}(x) = \hat{\boldsymbol{y}}$$

の定常解を求める Davidenko [3] に始まる連続法の流れである. この連続法の立場から, Branin [4] は

$$\frac{d\boldsymbol{z}}{dx} = -J_g(\boldsymbol{z})^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}), \quad x\in[0,\infty), \quad \lim_{x\to\infty} \boldsymbol{z}(x) = \hat{\boldsymbol{y}}$$

の微分方程式の定常解を考え, さらに $\boldsymbol{g}_z$ の特異性を克服するために Tanabe [5] は More-Penrose の一般化逆 J_g^+ を用いる微分方程式

$$\frac{d\boldsymbol{z}}{dx} = -J_g(\boldsymbol{z})^{+}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}), \quad x\in[0,\infty), \quad \lim_{x\to\infty} \boldsymbol{z}(x) = \hat{\boldsymbol{y}}$$

の定常解を利用する方法などが提唱されてきた. しかし何れの算法も幾つかの共通した問題を内包している. すなわち, 古典理論の延長線上の主要な研究テーマは

(a) 収束性の悪い反復列の収束性の向上

(b) 収束先の安定性の向上

の 2 点の改良である. これらは何れも方程式の性質に起因していることが多い. 具体的には

(1) 解が重複度をもつ

(2) 近接する解をもつ

(3) 非線形性が強い、等

に起因するとが多い.

上記の問題点の解決に向けて, 本研究では連続法で接近して Newton 法の自然な一般化を図り, **(1)** 重複解, **(2)** 近接解の問題について完全解決を図ることが狙いである.

本論文で展開される新しい知見の議論は, 方程式系にも適用できること前提としている. したがって, ホモトピー法が抱える問題点などの解決にも有効と考えられる.

上述の問題の解決には BIT に掲載された僅か 1 頁と数行の Sand の論文 [6] の影響を強く受けた. 彼の論文の主張を要約すれば, 「任意の非線形方程式は (適当な条件の下で) その解を終端 (有界) にもつ常微分方程式の初期値問題があって, これを陰的 RK 法で解けば非線形方程式の解が得られる」と言うものである. 残念ながら, このアプローチは陰的 RK 法の中間変数の計算おいて, 段数に応じた個数の非線形方程式を解くことが求められ, 実際的でなかった.

しかし, Suzuki はこの Sand のアイデアに着目して 2007 年頃から Newton 法の一般化の研究を開始して, Sand-Runge-Kutta(SRK) 法と称する実用的な算法群を構成した [7-12]. 結果的に, この構成手続きは耐え難い計算量のもとに反復関数に対する条件を満たすように係数を定めることなく, Newton 法の一般化公式 (2) の係数を定める手続きを示したことになっていた. ここでは Newton 法の一般化公式 (2) 式を s 段 SRK 公式と呼ぶことにする.

本論文では, s 段 SRK 公式と s 段陽的 RK 公式の間に或る等価性が示される. この等価性に基づいて SRK 法の段数と収束次数の関係が議論される. また, 2 段と 3 段の SRK 法については, 重解に対して 2 次収束するような公式の存在性について議論される. その際に, SRK 法の段数を増やすことによる高次収束化を目論むよりも, 本質的に重要な研究課題と思われる側面を指摘する.

最後に, SRK 法の研究の現状と今後の課題などが, SRK 法の応用への示唆と共に言及される.

2 等価な初期値問題

Sand の重要な示唆は「任意の非線形方程式 (1) に対して, (適当な条件の下で) その解を終端 (有界) にもつ初期値問題

$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{z}}{dx} = -J_g(\boldsymbol{z})^{-1}\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0), & (x\in[0,\tau]) \\ \boldsymbol{z}(0) = \boldsymbol{y}_0, & (\tau = \|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_0)\|) \end{cases} \tag{3}$$

がある」と指摘した点である. ここで $\boldsymbol{y}_0$ は非線形方程式の解に対する適当な近似値であって, $\hat{\boldsymbol{g}}$ は

$$\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_0)/\tau$$

のように定義されている. すなわち原理的には, この初期値問題を RK 法のような数値的算法で計算すれば, 非線形方程式の解が得られるとになる. この接近は連続法の一つであると考えられるが, これまでの連続法と異なる点は有限の値 τ で解に達することである. な

お, $\boldsymbol{z}(\tau)$ が非線形方程式 (1) の解 (単解) であることの検証は簡単である. 実際, 初期値問題の解は

$$\boldsymbol{z}(x) = \boldsymbol{g}^{-1}(-(x-\tau)\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0))$$

のような関数で与えられる. まず, この関数 $z(x)$ が初期値問題の微分方程式を満たすことは, 関数 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}(x)) = -(x-\tau)\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0)$ を x で微分すれば

$$J_g(\boldsymbol{z})\frac{d\boldsymbol{z}}{dx} = -\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0) \Rightarrow \frac{d\boldsymbol{z}}{dx} = -J_g(\boldsymbol{z})^{-1}\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0)$$

が得られることから分かる. また $\boldsymbol{z}(x)$ が $x=0$ のときには, $\boldsymbol{z}(0)$ が初期条件を満たすことは次で分かる.

$$\boldsymbol{z}(0) = \boldsymbol{g}^{-1}(\tau\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0)) = \boldsymbol{g}^{-1}(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_0)) = \boldsymbol{y}_0$$

最後に $\boldsymbol{z}(\tau)$ が方程式 (1) の解であることは $\boldsymbol{y}(\tau) = \boldsymbol{g}^{-1}(0)$ なので $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{z}(\tau)) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{g}^{-1}(0)) = 0$ と示される. ∎

以降, 非線形方程式 (1) に等価な上記の初期値問題 (3) を単に等価な初期値問題と呼ぶ.

3 SRK 公式の構成

非線形方程式 (1) を解くためには等価な初期値問題 (3) の **1 点解** $z(\tau)$ を求めれば良いことになる. このとき自然な思考は RK 法を利用することであろう. 既にに述べたように Sand の陰的 RK 法の利用の提唱は中間変数の計算に新たな非線形方程式が発生することから, 実際的ではない. この難関を避けるために Suzuki は陽的 RK 法の適用を提唱した.

具体的には常微分方程式

$$\boldsymbol{z}' = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{z})$$

に対する s 段陽的 RK 法

$$\begin{cases} \boldsymbol{z}_{n+1} = \boldsymbol{z}_n + \displaystyle\sum_{i=1}^{s}\boldsymbol{w}_i\boldsymbol{k}_i \\ \boldsymbol{k}_1 = h\boldsymbol{f}(\boldsymbol{z}_n) \\ \boldsymbol{k}_i = h\boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{z}_n + \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{a}_{ij}\boldsymbol{k}_j\big),\ (2 \le i \le s) \\ (i = 2,\ldots,s) \end{cases} \tag{4}$$

を等価な初期値問題 (3) に適用することを試みた. ここで h は積分刻み幅である. しかし普通に考えて, この適用によって, 例えば 16 桁精度で解 $\boldsymbol{z}(\tau)$ を得るには極めて小さな刻み幅が必要とされることは想像に難くない. そこで用いた方策は 1 点解 $\boldsymbol{z}(\tau)$ を精度良く求めるのではなく, 初期近似値 $\boldsymbol{y}_0$ を改良すると云うことにした. 具体的には積分刻み幅を $h = \tau$ とすることで得られる $\boldsymbol{z}_1$, すなわち

$$\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{y}_0 + \sum_{i=1}^{s}\boldsymbol{w}_i\boldsymbol{k}_i \quad (n = 0,1,\ldots)$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1 = -\tau J_g(\boldsymbol{y}_0)^{-1}\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{z}_0) \\ \boldsymbol{k}_i = -\tau J_g\big(\boldsymbol{z}_n + \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{a}_{ij}\boldsymbol{k}_j\big)^{-1}\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0) \\ (i = 2,\ldots,s) \end{cases}$$

は 1 点解 $\boldsymbol{z}(\tau)$ の近似値になっていることに着目した. このとき $\hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{y}_0) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_0)/\tau$ であることから, τ はキャンセレーションして消失する. この $\boldsymbol{z}_1$ を改良された新たな初期値と考えて $\boldsymbol{y}_1$ とすれば, $\boldsymbol{y}_0$ から $\boldsymbol{y}_1$ を生成するスキムは

$$\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{y}_0 + \sum_{i=1}^{s}\boldsymbol{w}_i\boldsymbol{k}_i$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1 = -J_g(\boldsymbol{y}_0)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_0) \\ \boldsymbol{k}_i = -J_g\big(\boldsymbol{y}_0 + \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{a}_{ij}\boldsymbol{k}_j\big)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_0) \\ (i = 2,\ldots,s) \end{cases}$$

として定義される. 同様な論法を展開して, $\boldsymbol{y}_1$ から $\boldsymbol{z}(\tau_1)$ の近似 $\boldsymbol{y}_2$ を与えるスキムが

$$\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{y}_1 + \sum_{i=1}^{s}\boldsymbol{w}_i\boldsymbol{k}_i$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1 = -J_g(\boldsymbol{y}_1)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_1) \\ \boldsymbol{k}_i = -J_g\big(\boldsymbol{y}_1 + \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{a}_{ij}\boldsymbol{k}_j\big)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_1) \\ (i = 2,\ldots,s) \end{cases}$$

によって与えられる. ここで τ_1 は $\boldsymbol{y}_1$ の残差 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_1)$ のノルムである. 同様な展開を繰り返すことにより, $\boldsymbol{y}_{n+1}$ を生成する一般スキムが

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_1 + \sum_{i=1}^{s}\boldsymbol{w}_i\boldsymbol{k}_i \quad (n = 0,1,\ldots)$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1 = -J_g(\boldsymbol{y}_n)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \\ \boldsymbol{k}_i = -J_g\big(\boldsymbol{y}_n + \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1}\boldsymbol{a}_{ij}\boldsymbol{k}_j\big)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \\ (i = 2,\ldots,s) \end{cases} \tag{5}$$

として得られ, これが s 段 SRK 法と呼ばれる.

本節の終わりにあったって注目すべき点を 2 つ指摘しておく. 一つは SRK 公式 (5) は Newton 法の一般化公式 (2) そのものであること, 更に, この SRK 公式の導出には (その係数が収束次数条件を満たすべく膨大な計算をすることなく) 常微分方程式に適用する陽的 RK 公式によって一意に決まる点である.

もう 1 点は, 「s 段 SRK 法は s 段陽的 RK 法 (4) と係数 $\{w_i, a_{ij}\}$ を介して 1 対 1 対応の関係にある」と云

うことである．すなわち，s 段 SRK 法のクラスと s 段陽的 RK 法のクラスの間に同型写像が存在すると云うことであって，この意味で両クラスは同型である．

この両クラスの同型性に基づいて，節 5 では陽的 RK 法の膨大な理論が SRK 法の理論構築に転用できることを示す．

4 SRK 法の収束次数

4.1 収束次数の定義

本論文では 2 つの次数が現れる．一つは RK 法の良く知られた精度を表す次数であり，もう一つは SRK 法の収束次数である．前者の次数については E. Hairer 等の文献 [13] の定義に従う．後者の次数についてはつぎのように定義する．

定義 或る算法によって生成された ($\hat{\boldsymbol{y}}$ への) 収束近似列 $\{\boldsymbol{y}_n\}$ が十分大きな任意の整数の $n \geq 0$ に対して

$$|\boldsymbol{y}_{n+1}-\hat{\boldsymbol{y}}| \leq G|\boldsymbol{y}_n-\hat{\boldsymbol{y}}|^q+O\big(|\boldsymbol{y}_n-\hat{\boldsymbol{y}}|^{q+1}\big)$$

を満たすような整数 $q>1$ が存在するとき，その算法の収束次数は ($\hat{\boldsymbol{y}}$ に対して) q 次であると云う．ここで $G>0$ は定数である．▮

4.2 s 段 SRK 法の収束次数

本節では s 段 RK 公式から導かれる s 段 SRK 法 (5) によって生成される (非線形方程式の解 $\hat{\boldsymbol{y}}$ への) 収束近似解列 $\{\boldsymbol{y}_n\}$ の収束速度について論ずる．

いま近似解 $\boldsymbol{y}_n$ と解 $\hat{\boldsymbol{y}}$ と差である誤差を $\boldsymbol{e}_n$ で表すことにすると，反復後の誤差 $\boldsymbol{e}_{n+1}$ は (5) の辺々から $\hat{\boldsymbol{y}}$ を差し引くことにより

$$\begin{cases} \boldsymbol{e}_{n+1}=\boldsymbol{e}_n+\boldsymbol{K}_s(\boldsymbol{y}_n), \\ \Big(\boldsymbol{K}_s(\boldsymbol{y}_n)=\displaystyle\sum_{i=1}^{s} w_i\boldsymbol{k}_i\Big) \end{cases}$$

のように $\boldsymbol{e}_n$ と $\boldsymbol{y}_n$ を用いて表すことができる．更に $\boldsymbol{y}_n$ が含まれる上式の右辺第 2 項を (適当な条件の下で) $\boldsymbol{e}_n$ の冪で展開することにより，$\boldsymbol{e}_{n+1}$ を

$$\boldsymbol{e}_{n+1}=C_1\boldsymbol{e}_n+\cdots+C_{q-1}\boldsymbol{e}^{q-1}+C_q\boldsymbol{e}_n^q+O(\boldsymbol{e}_n^{q+1}) \quad (6)$$

のように ($\boldsymbol{e}_n$ の冪に) 展開することができる．この展開において係数 $C_1,\ldots,C_q$ が条件

$$C_1=\cdots=C_{q-1}=0,\ C_q\neq 0$$

を満たすなら，そのときの s 段 SRK 法 (5) の収束次数は q 次となる．次節では具体的に 2 段 SRK 公式と 3 段 SRK 公式に対して，解の重複度条件に基づいて (6) 式のような冪展開を与える．

5 SRK 法の研究の現状

5.1 2 段 SRK 法の収束次数

先ず，2 段 2 次 RK 法から導かれる 2 段 SRK 法

$$\boldsymbol{y}_{n+1}=\boldsymbol{y}_n+w_1\boldsymbol{k}_1+w_2\boldsymbol{k}_2$$
$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1=-J_g(\boldsymbol{y}_n)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \\ \boldsymbol{k}_2=-J_g(\boldsymbol{y}_n+a_{21}\boldsymbol{k}_1)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \end{cases} \quad (7)$$

の収束特性について論ずる．この公式の各係数は 2 段 2 次 RK 公式の次数条件

$$\begin{cases} w_1+w_2=1 \\ a_{21}w_2=1/2 \end{cases}$$

を満たすように選ばれる．このとき，条件式が 2 つで決定されるべき係数は 3 つあることから，1 自由度を有する．$a_{21}=\alpha$ として，α を自由パラメータにすれば，条件式 (5.1) の一般解系

$$w_1=\frac{2\alpha-1}{2\alpha},\quad w_2=\frac{1}{2\alpha},\quad a_{21}=\alpha \quad (8)$$

を得る．この解系が成り立つための α に対する制約条件は $\alpha\neq 0$ だけである．以下ではこの制約を満たしていいることを前提として，2 段 SRK 法 (7) の収束特性について，単解の場合と $m(\geq 2)$ 重解の場合に分けて議論する．その際，ベクトル値関数の高階微分の表記の煩雑さを避けるために変数はスカラーとして議論する．具体的には $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})$ の微分表記が変わる．

5.1.1 解 $\hat{y}$ が単解の場合

解 $\hat{y}$ が単解条件 $g(\hat{y})=0, g'(\hat{y})\neq 0$ のもとで，2 段 SRK 法の誤差 $e_n=y_n-\hat{y}$ の漸化式

$$e_{n+1}=e_n+K_2(y_n),\ \big(K_2(y_n)=w_1k_1+w_2k_2\big) \quad (9)$$

の右辺を e_n の冪に展開するために，先ず k_1 と k_2 を e_n で冪で展開する．そのとき

$$\begin{cases} k_1=-e_n+\dfrac{1}{2}\dfrac{g''(\hat{y})}{g'(\hat{y})}e_n^2 \\ \qquad -\Big(\dfrac{1}{2}(\dfrac{g''(\hat{y})}{g'(\hat{y})})^2-\dfrac{1}{3}\dfrac{g^{(3)}(\hat{y})}{g'(\hat{y})}\Big)e_n^3+O(e_n^4) \\ k_2=-e_n+\Big(\dfrac{1}{2}-a_{21}\Big)\dfrac{g''(\hat{y})}{g'(\hat{y})}e_n^2+\bigg(\Big(\dfrac{1}{2}+2a_{21}-a_{21}^2\Big) \\ \qquad \times\dfrac{g''(\hat{y})^2}{g'(\hat{y})^2}+\Big(\dfrac{1}{3}-a_{21}+\dfrac{1}{2}a_{21}^2\Big)\dfrac{g^{(3)}(\hat{y})}{g'(\hat{y})}\bigg)e_n^3+O(e_n^4) \end{cases}$$

が得られる．これらを上式の右辺の $K_2(y_n)$ に代入して整理することにより，(9) 式は

$$e_{n+1}=C_1e_n^1+C_2\frac{g''(\hat{y})}{g'(\hat{y})}e_n^2+C_3e_n^3+O(e_n^4)$$

と展開できる．ここで

$$C_1 = 1 - w_1 - w_2$$
$$C_2 = \frac{1}{2}\big(w_1 + w_2 - 2\alpha w_2\big)$$
$$C_3 = C_{31}\frac{g''(\hat{y})^2}{g'(\hat{y})^2} - C_{32}\frac{g^{(3)}(\hat{y})}{g'(\hat{y})}$$
$$\begin{cases} C_{31} = \frac{1}{2}\big(2\alpha w_2(2-\alpha) - (w_1 + w_2)\big) \\ C_{32} = \frac{1}{6}\big(3\alpha w_2(2-\alpha) - 2(w_1 + w_2)\big) \end{cases}$$

このとき，2 段 2 次陽的 RK 法の次数条件により $C_1 = 0, C_2 = 0$ となる．しかし C_3 の中の C_{31} と C_{32} を同時にゼロとするような α は存在しない．したがって，C_3 を恒等的にゼロにすることはできない．最終的に

$$e_{n+1} = C_3 e_n^3 + O(e_n^4)$$

が得られる．この式から非線形方程式の解が単解であれば，任意の α に対して 2 段 2 次陽的 RK 法から導かれる 2 段 SRK 法は 3 次の収束性をもつことが分かる．

5.1.2 解 $\hat{y}$ が $m(\geq 2)$ 重解の場合

解 $\hat{y}$ が m 重解条件

$$g(\hat{y}) = \ldots = g^{(m-1)}(\hat{y}) = 0, g^{(m)}(\hat{y}) \neq 0$$

のもとで，2 段 SRK 法 (7) の誤差 e_n の漸化式

$$e_{n+1} = e_n + K_2(y_n),\ \big(K_2(y_n){=}w_1k_1{+}w_2k_2\big)$$

における $K_2(y_n)$ を e_n を冪展開すれば

$$e_{n+1} = C_1^{(m)}e_n^1 + C_2^{(m)}\frac{g^{(m+1)}(\hat{y})}{g^{(m)}(\hat{y})}e_n^2 + O(e_n^3) \quad (10)$$

が得られる．ここで $C_1^{(m)}, C_2^{(m)}$ は

$$\begin{cases} C_1^{(m)} = 1 + \frac{1-2\alpha}{2m\alpha} - \frac{m^{m-2}}{2\alpha(m-\alpha)^{m-1}} \\ C_2^{(m)} = \frac{2\alpha - 1}{2\alpha m^2(m+1)} + \frac{1}{2\alpha}\Big(\frac{(-1)^m m^{m-2}}{(m+1)(\alpha-m)^{m-1}} \\ \qquad + \frac{(-1)^m\alpha^{m-4}}{(\alpha-m)^m}\big(\alpha^2 - \frac{m(m+3)}{m+1} + m^2\big)\Big) \end{cases}$$

である．このとき $C_1^{(m)}$ がゼロになるような α が存在するば，(10) 式は

$$e_{n+1} = C_2^{(m)}\frac{g^{(m+1)}(\hat{y})}{g^{(m)}(\hat{y})}e_n^2 + O(e_n^3)$$

のようになる．この展開式はとなり，2 段 SRK 法 (7) が 2 次の収束性をもつことを意味することになる．

いま $C_1^{(m)}$ は通分して整理すれば

$$C_1^{(m)} = \frac{\big(1 + 2\alpha(m-1)\big)\Big(1 - \frac{\alpha}{m}\Big)^{m-1} - 1}{2m\alpha\Big(1 - \frac{\alpha}{m}\Big)^{m-1}}$$

となる．したがって，この式の分子がゼロであれば，$C_1^{(m)} = 0$ となる．なお $\alpha \neq m$ であることに注意せよ．いま，この式に変数変換

$$\alpha = m(1-z)$$

を施せば，分子から

$$p_m(z) = \big(1 + 2m(m-1)(1-z)\big)z^{m-1} - 1 \quad (11)$$

のような関数を定義することができる．そのとき，この関数の実ゼロ点 $\hat{z}\,(\neq 1)$ が見つかれば，$\alpha = m(1-\hat{z})$ を (8) に代入することで得られる係数

$$\begin{cases} w_1 = \frac{2m(1-\hat{z}) - 1}{2m(1-\hat{z})} \\ w_2 = \frac{1}{2m(1-\hat{z})} \\ a_{21} = m(1-\hat{z}) \end{cases}$$

をもつ 2 段 SRK 法 (7) は m 重解に対して 2 次収束を保証する算法となる．このような役割をもつ関数 (11) は 2 段 SRK 法の 2 次収束性の保証を与えると云う意味で特性関数である．

5.1.3 m 重解 2 次収束 SRK 公式の存在証明

特性関数の実ゼロ点の存在性について議論する．特性関数 (11) は $z = 1$ でゼロとなることは直ぐに分かるが，これは $\alpha = 0$ に相当して，w_1, w_2 の分母がゼロとなり係数が定義されない．

補題 1 任意の偶数 $m \geq 2$ に対して，特性関数 (11) は $z = 1$ を除いて 1 つの実ゼロをもち，任意の奇数 $m \geq 3$ に対しては $z = 1$ を除いて 2 つの実ゼロをもつ．∎

証明 いま $\mu_m = 1/(2m(m-1))$ とし，2 つの関数を

$$u(z) = -\frac{\mu_m}{z^{m-1}},\quad v(z) = z - (1 + \mu_m)$$

のように定義する．このとき特性関数は $z \neq 0$ を仮定すれば

$$p(z) = \frac{z^{m-1}}{\mu_m}(u(z) - v(z))$$

と表せる．したがって $p(z)$ の実ゼロ点は $y = u(z)$, $y = v(z)$, $(z \in R)$ の二つの関数曲線の交点の z の値である．以下では m が偶数の場合と奇数の場合に分けて議論する．

まず m が偶数のとき, $y = u(z)$ の曲線 $U = \{(z, u(z)); z \in R\}$ は第2象限と第4象限内の放物曲線となり, 一方 $y = v(z)$ の曲線 $V = \{(z, v(z)); z \in R\}$ は $z = 1 + \mu_m$ において z 軸と交わる傾きが1の直線である. これらの曲線 U, V は $z = 1$ で一つの交点もち, もう一つの交点は z が $0 < z < 1$ の範囲にある. これは $m \geq 2$ が偶数であれば成立する. したがって $z = 1$ 以外にもう一つのゼロ点がある.

つぎに m が奇数のときは, $y = u(z)$ の曲線 $U = \{(z, u(z)); z \in R\}$ は第3象限と第4象限内の放物曲線であり, 直線 $V = \{(z, v(z)); z \in R\}$ は $z = 1$ と z が $\infty < z < 1$ の範囲で交わる. これは $m \geq 3$ が奇数であれば成立する. したがって $z = 1$ 以外に, 第3象限に一つと第4象限にそれぞれ一の交点をもつ. すなわち $z = 1$ 以外に2つのゼロ点がある. ▮

この補題から, m 重解の問題に対して2次収束する2段SRK法の存在に関する次の定理が得られる.

定理 1 単解に対して3次収束する2段SRK法の中に重解に対して2次収束する公式が存在する. すなわち各 $m \geq 1$ に対して

(i) $2m$ 重解に対して2次収束する2段SRK法が1つだけ存在する.

(ii) $2m + 1$ 重解に対して2次収束する2段SRK法が2つ存在する. ▮

主張 重解に対して2次収束する2段SRK法のファミリの中でも2重解に対して2次収束する2段SRK法

$$\boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + (2k_1 + k_2)/3$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1 = -J_g(\boldsymbol{y}_n)^{-1} g(\boldsymbol{y}_n) \\ \boldsymbol{k}_2 = -J_g(\boldsymbol{y}_n + 3\boldsymbol{k}_1/2)^{-1} g(\boldsymbol{y}_n) \end{cases} \tag{12}$$

は Newton 法の直近の拡張であり, しかも一つしか存在しないことことから特別な存在である. 今後, この公式は今後しばしば引用することから, 本論文中では suzuki 法と呼ぶ. ▮

5.1.4 単,2-,3-重解2次収束公式の非存在証明

2段SRK公式は単解に対して3次収束が保証されているが, 実用的には2次収束であれば大抵は十分である. そこで次数を1つ落として得られる2段1次RK法は2つの自由パラメータをもつこことになる. これらの2つのパラメータの値を巧く選ぶことで, 単解でも2重解でも更に3重解でも2次収束するような2段SRK法が見つかれば好都合である. すなわち, 2段1次RK法の次数条件は

$$w_1 + w_2 = 1$$

だけであることから, $a_{21} = \alpha$ と $w_2 = \beta$ を自由パラメータとして採ることができる. このときの2段1次SRK法の係数 w_1, w_2, a_{21} は

$$w_1 = 1 - \beta, \quad w_2 = \beta, \quad a_{21} = \alpha$$

と定まる. この2つのパラメータを利用して単解, 2重解及び3重解に対して2次収束が同時に保証される2段SRK法を構成でききないだろうか. しかし, このように単解の収束次数を1つ落としたとしても望む2段SRK法は存在しないことを示すことができる. 実際, 単解に対しては任意の α, β に対してこの係数をもつ2段SRK法は2次収束することは簡単に示すことが可能である. いま, 2重解にも3重解に対しても2次収束するような実数 α, β は得られないことを示すことを示そう.

まず2重解条件

$$g(\hat{y}) = 0, \ g'(\hat{y}) = 0, \ g''(\hat{y}) \neq 0$$

の下で2段SRK法の誤差 e_n の漸化式の展開は

$$e_{n+1} = C_1^{(2)} e_n + C_2^{(2)} \frac{g^{(3)}(\hat{y})}{g^{(2)}(\hat{y})} e_n^2 + O(e_n^3)$$

として得られる. ここで

$$C_1^{(2)} = \frac{1}{2(2-\alpha)}(2 - (1+\beta)\alpha)$$

$$C_2^{(2)} = \frac{1}{24(2-\alpha)}((8 - (8 + 4\beta)\alpha + (2 + 4\beta)\alpha^2)$$

また3重解条件

$$g(\hat{y}) = 0, \ g'(\hat{y}) = 0, \ g''(\hat{y}) = 0, \ g^{(3)}(\hat{y}) \neq 0$$

の下では

$$e_{n+1} = C_1^{(3)} e_n + C_2^{(3)} \frac{g^{(4)}(\hat{y})}{g^{(3)}(\hat{y})} e_n^2 + O(e_n^3)$$

が得れる. ここで

$$C_1^{(3)} = \frac{18 - 12\alpha + 2\alpha^2 - 6\alpha\beta + \alpha^2\beta}{3(3 - \alpha^2)}$$

$$C_2^{(3)} = \frac{(3-\alpha)(27(1-\alpha) + 3(3+\beta)\alpha^2 - (1-\beta)\alpha^3)}{36(3-\alpha)^4}$$

このとき, $C_1^{(2)}$ と $C_1^{(3)}$ が共にゼロとなる実数 α, β が存在すれば2段1次SRK法は2重解に対して3重解に対しても2次収束する算法となる. そこで $C_1^{(2)}$ と $C_1^{(3)}$ の分子からなる連立方程式

$$\begin{cases} 2 - \alpha(1+\beta) & = 0 \\ 18 - 12\alpha + 2\alpha^2 - 6\alpha\beta + \alpha^2\beta & = 0 \end{cases} \tag{13}$$

を満たす解を調べる. まず (13) の第1式から

$$\alpha = \frac{2}{1+\beta}$$

が得られる．ここで $\beta \neq 0$ に注意．この α を (13) の第2式に代入して整理すると

$$\frac{3\beta^2+2\beta+1}{(1+\beta)^2}=0$$

が得られる．このとき β の解は2次方程式

$$3\beta^2+2\beta+1=0$$

を満たさねばならない．しかし判別式の値が $D=-8$ であることから実解をもたないことが分かる．すなわち (13) の解は何れも実解でないことから，望む2段SRK法は存在し得ない．▮

5.2 3段SRK法の収束次数

つぎに3段3次RK法から導かれる3段SRK法

$$\boldsymbol{y}_{n+1}=\boldsymbol{y}_n+w_1\boldsymbol{k}_1+w_2\boldsymbol{k}_2+w_3\boldsymbol{k}_3$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{k}_1=-J_g(\boldsymbol{y}_n)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \\ \boldsymbol{k}_2=-J_g(\boldsymbol{y}_n+a_{21}\boldsymbol{k}_1)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \\ \boldsymbol{k}_3=-J_g(\boldsymbol{y}_n+a_{31}\boldsymbol{k}_1+a_{32}\boldsymbol{k}_2)^{-1}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}_n) \end{cases} \tag{14}$$

の収束特性について論ずる．この公式の各係数は3段3次RK公式の次数条件

$$\begin{cases} w_1+w_2+w_3=1 \\ a_{21}w_2+(a_{31}+a_{32})w_3=1/2 \\ a_{21}^2w_2+(a_{31}+a_{32})^2w_3=1/3 \\ a_{21}a_{32}w_3=1/6 \end{cases} \tag{15}$$

を満たすように選ばれる．このとき，

$$a_{21}=\alpha \text{ と } a_{31}+a_{32}=\beta$$

とする α,β を自由パラメータにして，簡単な計算により一般解系

$$\begin{cases} w_1=\dfrac{6\alpha\beta-3(\alpha+\beta)+2}{6\alpha\beta} \\ w_2=-\dfrac{3\beta-2}{6\alpha(\beta-\alpha)} \\ w_3=\dfrac{3\alpha-2}{6\beta(\beta-\alpha)} \\ a_{21}=\alpha \\ a_{31}=\dfrac{\beta(3\alpha^2-3\alpha+\beta}{\alpha(3\alpha-2)} \\ a_{32}=\dfrac{\beta(\alpha-\beta)}{\alpha(3\alpha-2)} \end{cases} \tag{16}$$

を得ることができる． この解系が成り立つためには自由パラメータ α と β に対して幾つかの制約

$$\alpha\neq 0,\quad \beta\neq 0,\quad \alpha\neq 2/3,\quad \alpha\neq\beta$$

が課せられる．以下ではこの制約を満たしていいることを前提として，3段SRK法 (14) の収束特性について単解と $m(\geq 2)$ 重解の場合に分けて議論する．その際にも，ベクトル値関数の高階微分の表記の煩雑さを避けるためにスカラーにおいて議論する．

5.2.1 解 $\hat{y}$ が単解の場合

解 $\hat{y}$ が単解条件 $g(\hat{y})=0, g'(\hat{y})\neq 0$ の下で3段SRK法 (14) の誤差 e_n の漸化式

$$\begin{cases} e_{n+1}=e_n+K_3(y_n) \\ K_3(y_n)=w_1k_1+w_2k_2+w_3k_3 \end{cases} \tag{17}$$

の右辺は

$$e_{n+1}=C_1e_n+C_2e_n^2+C_3e_n^3+C_4e_n^4+O(e_n^5)$$

のように e_n の冪展開きる．そのとき，3段3次の陽的RK法の次数条件 (15) によって

$$C_1=C_2=C_3=0$$

となることから，展開

$$e_{n+1}=C_4e_n^4+O(e_n^5)$$

が得られる．ここで

$$C_4=C_{41}\frac{g''(\hat{y})^3}{g'(\hat{y})^3}-C_{42}\frac{g''(\hat{y})g^{(3)}(\hat{y})}{g'(\hat{y})^2}+C_{43}\frac{g^{(4)}(\hat{y})}{g'(\hat{y})}$$

$$\text{ただし}\begin{cases} C_{41}=\dfrac{1}{24}(15-12\alpha-16\beta+12\alpha\beta) \\ C_{42}=\dfrac{1}{12}(5-5\alpha-6\beta+6\alpha\beta) \\ C_{43}=\dfrac{1}{72}(3-4\alpha-4\beta+6\alpha\beta). \end{cases}$$

このとき C_{41},C_{42},C_{43} を同時にゼロにするような α,β を選ぶことは不可能である．これは3段SRK法 (14) は単解に対して4次の算法であることを意味する．

5.2.2 解 $\hat{y}$ が $m(\geq 2)$ 重解の場合

解 $\hat{y}$ が m 重解条件

$$g(\hat{y})=\ldots=g^{(m-1)}(\hat{y})=0, g^{(m)}(\hat{y})\neq 0$$

の下で誤差の漸化式 (17) の右辺を e_n で冪展開すれば，

$$e_{n+1}=C_1^{(m)}e_n^1+C_2^{(m)}\frac{g^{(m+1)}(\hat{y})}{g^{(m)}(\hat{y})}e_n^2+O(e_n^3)$$

が得られる．ここで係数 $C_1^{(m)}$ は

$$C_1^{(m)}=1+\frac{z}{m} -\frac{m^{m-2}v}{6w\alpha(m-\alpha)^{m-1}}+\frac{m^{m-2}u}{6w\beta(m+\beta s_m)^{m-1}}$$

のように定義された定数係数である．なお

$$\begin{cases} u=3\alpha-2 \\ v=3\beta-2 \\ w=\beta-\alpha \\ z=\dfrac{v}{6w\beta}-\dfrac{u}{6w\alpha}-1 \\ s_m=\dfrac{m^{m-1}w}{(m-\alpha)^{m-1}\alpha u}-(\dfrac{w}{\alpha u}+1). \end{cases} \tag{18}$$

また，$C_2^{(m)}$ も関数に依存しない定数係数である．このとき $C_1^{(m)}=0$ であれば，3段SRK法(14)は m 重解に対して2次の算法となることを意味する．このことから m 重解に対して2次の算法となるような α, β を規定する特性関数は(5.2.2)式から直接

$$q_m(\alpha,\beta)=C_1^{(m)}, \quad (m \geq 2) \tag{19}$$

として得られる．すなわち $q_m(\hat{\alpha},\hat{\beta})=0$ となる $\hat{\alpha},\hat{\beta}$ が存在すれば，そのとき $\alpha=\hat{\alpha}, \beta=\hat{\beta}$ として得られるする係数(16)をもつ3段SRK公式(14)は m 重解に対して2次の算法となる．

特性関数(19)は2つの変数 α, β を持つことから，つぎを主張することができる．

定理 2 $m_1, m_2 \geq 2$ を整数とする．このとき2つの特性関数 $q_{m_1}(\alpha,\beta)$ と $q_{m_2}(\alpha,\beta)$ を同時にゼロにするような α, β ($\alpha \neq 0, \beta \neq 0, \alpha \neq \frac{2}{3}, \alpha \neq \beta$) が存在するなら，それらの α, β から生成される係数(16)をもつ3段SRK法(14)は m_1 重解と m_2 重解に対して2次の方法である．∎

5.2.3 具体例1：解 $\hat{y}$ が2重解の場合

この小節では，2重解に対して2次収束するするような3段SRK法(14)について具体的に議論する．

m 重解に対して2次収束するための特性関数(19)式において $m=2$ とすることで，2重解に対して2次収束するするような3段SRK法の特性関数が

$$q_2(\alpha,\beta)=1+\frac{z}{2}-\frac{v}{6w\alpha(2-\alpha)}+\frac{u}{6w\beta(2+\beta s_2)}$$
$$\left(s_2=\frac{2w}{(2-\alpha)\alpha u}-\left(\frac{w}{\alpha u}+1\right)\right)$$

として得られる．ここで u, v, w, z は(18)式で定義されている．この特性関数は

$$q_2(\alpha,\beta)=\frac{a_{20}(\alpha)+a_{21}(\alpha)\beta+a_{22}(\alpha)\beta^2}{(\alpha-2)\eta_2} \tag{20}$$

のように整理することができる．ここで各係数は

$$\begin{cases} a_{20}(\alpha)=-3(3\alpha-5)(3\alpha-2) \\ a_{21}(\alpha)=18\alpha^3-81\alpha^2+108\alpha-38 \\ a_{22}(\alpha)=6\alpha-9 \\ \eta_2=12(\beta^2+(3\alpha^2-9\alpha+4)\beta-6\alpha^2+16\alpha-8) \end{cases}$$

である．

いま α と β の対 (α,β) が特性関数 q_2 をゼロするような1つの例を与える．いま α, β の一つは自由に選べるので $\alpha=3/2$ とすれば，q_2 は

$$q_2(3/2,\beta)=(20\beta-15)/8\eta_2$$

となる ここで $\eta_2=-3(4\beta^2-11\beta+10)/2$ は実ゼロ点をもたない．このとき β が 3/4 ならこの特性関数はゼロとなる．この特性関数をゼロにする $\alpha=3/2$ と $\beta=3/4$ を用いて，3段SRK法の係数(16)を計算すれば，つぎの係数が得られる．

$$\begin{aligned} &w_1=8/27, \quad &w_2=-1/27, \quad &w_3=20/27 \\ &a_{21}=120/80, \quad &a_{31}=-12/80, \quad &a_{32}=-117/80 \end{aligned}$$

これらの係数をもつ3段SRK法(14)は単解に対して4次収束して，2重解に対しては2次の収束する．

5.2.4 具体例2：解 $\hat{y}$ が3重解の場合

この小節では，3重解に対して2次収束するするような3段SRK法(14)について具体的に議論する．

m 重解の特性関数(19)において，$m=3$ とすれば，望む3段SRK法構成に必要な特性関数は

$$q_3(\alpha,\beta)=1+\frac{z}{3}-\frac{v}{2w\alpha(3-\alpha)^2}+\frac{u}{2w\beta(3+\beta s_3)^2}$$
$$\left(s_3=\frac{9w}{(3-\alpha)^2\alpha u}-\left(\frac{w}{\alpha u}+1\right)\right)$$

として得られる．ここで u, v, w, z は既に(18)式で定義されたものである．この特性関数は

$$q_3(\alpha,\beta)=\frac{1}{\eta_3(\alpha-3)^2}\sum_{i=0}^{4}a_{3i}(\alpha)\beta^i \tag{21}$$

のように整理することができる．ここで各係数は

$$\begin{cases} a_{30}(\alpha)=18(\alpha-3)^4(3\alpha-2)^2(5\alpha-29\alpha+40) \\ a_{31}(\alpha)=-3(\alpha-3)^2(3\alpha-2)(69\alpha^5-876\alpha^4 \\ \qquad +4314\alpha^3-10030\alpha^2+10392\alpha-3240) \\ a_{32}(\alpha)=3(36\alpha^8-771\alpha^7+5046\alpha^6-26917\alpha^5 \\ \qquad +69694\alpha^4-98730\alpha^3+61536\alpha^2+72\alpha-8640) \\ a_{33}(\alpha)=(6\alpha-6)(72\alpha^5-918\alpha^4+4521\alpha^3 \\ \qquad -10460\alpha^2+10716\alpha-3312) \\ a_{34}(\alpha)=3(\alpha-6)^2(\alpha-2)(4\alpha-15) \\ \eta_3=18(54-117\alpha+60\alpha^2-9\alpha^3-18\beta+45\alpha\beta \\ \qquad -21\alpha^2\beta+3\alpha^3\beta-6\beta^2+\alpha\beta^2)^2 \end{cases}$$

である．

いま α と β の対 (α,β) が特性関数 q_3 をゼロにするような1つの例を与える．いま，α, β の一つは自由に選べるので $\alpha=6$ とすれば，q_3 は

$$q_3(6,\beta)=\frac{2\beta^2(1119744\beta^2-6718464\beta+85847041)}{9\,\eta_3}$$

となる ここで $\eta_3=25924(\beta-3)$ は除外点 $\beta=3$ を除いてゼロ点をもたない．したがって特性関数をゼロに

する $\alpha=6$ とセットの β は $\beta=0$ は除外されるので，β の 2 次方程式

$$1119744\beta^2-6718464\beta+85847041=0$$

の実数解となる．すなわち $\alpha=6, \beta=9\pm2\sqrt{3}$ の 2 組が特性関数をゼロにする．例として，この特性関数をゼロにする $\alpha=6$ と $\beta=9+2\sqrt{3}$ を用いて，3 段 SRK 法の係数 (16) を計算すれば，つぎが得られる．

$$w_1=(615+32\sqrt{3})/828), \quad w_2=-(75+32\sqrt{3})/828$$
$$w_3=288/828, \quad a_{21}=192/32$$
$$a_{31}=-(301+72\sqrt{3})/32, \quad a_{32}=-(13+8\sqrt{3})/32$$

これらの係数をもつ 3 段 SRK 法 (14) は 3 重解に対して 2 次の収束性をもつ．勿論，単解に対しては 4 次の収束性をもつ．

5.3 異なる複数重解にも 2 次収束する公式

本小節では，定理 2 で主張したような 2 つの重解の何れにも 2 次の方法となるよう 3 段 SRK 法の存在が具体的に示される．最も有効性の高いと思われる $m_1=2, m_2=3$ の場合について例証する．すなわち，単解に対して 4 次，2 重解と 3 重解に対して 2 次収束を保証する 3 段 SRK 法を構成する．

具体的には定理 2 によって，2 重解に対する特性関数 (20) と 3 重解に対する特性関数 (21) の分子から得られる連立方程式

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{2} a_{2,i}(\alpha)\beta^i &= 0 \\ \sum_{i=0}^{4} a_{3,i}(\alpha)\beta^i &= 0 \end{cases} \tag{22}$$

の (α, β が共に実数の) 解を見つけることで構成できる．ここで $\{a_{2,i}(\alpha)\}$ は (20) 式で定義された高々α の 3 次の多項式係数であり，$\{a_{3,i}(\alpha)\}$ は (21) 式で定義された高々α の 8 次の多項式係数である．いま，(22) の最初の式から β について 2 つの解 $\beta_\pm$ が

$$\beta_\pm=\frac{9(\alpha-2)^2(2\alpha-1)-2\pm t}{6(2\alpha-3)} \tag{23}$$

として得られる．ここで $t=\sqrt{4+9(\alpha-2)\chi}$，なお

$$\chi=36\alpha^5-252\alpha^4+729\alpha^3-1058\alpha^2+748\alpha-200.$$

つぎに，これらの 2 つの解 $\beta_\pm$ を残る方程式に代入して，整理することで α に関する次の 2 つの無理方程式が得られる．

$$\beta_+ \text{ に対して} \qquad \sum_{i=0}^{14} c_i^{\mathrm{p}}(t)\alpha^i=0 \tag{24}$$

$$\beta_- \text{ に対して} \qquad \sum_{i=0}^{12} c_i^{\mathrm{n}}(t)\alpha^i=0 \tag{25}$$

これらの方程式の各係数は表1 に示す．

表 1 2 つの無理方程式 (24),(25) の係数

i	$c_i^{\mathrm{p}}(t)$	$c_i^{\mathrm{n}}(t)$
0	$89353584-614088\,t$	$22338396-153522\,t$
1	$-996979968+8245260\,t$	$-182229804+1600749\,t$
2	$5096784852-41410674\,t$	$677245410-5204997\,t$
3	$-15790599544+111472733\,t$	$-1505896597+8651507\,t$
4	$33069762322-185109605\,t$	$2225948617-8611637\,t$
5	$-49478597085+203033463\,t$	$-2303536077+5457564\,t$
6	$54524726217-151909353\,t$	$1712188935-2228463\,t$
7	$-44965054665+78134472\,t$	$-921740688+568710\,t$
8	$27898421139-27210735\,t$	$356958117-82512\,t$
9	$-12967303932+6129270\,t$	$-97035084+5184\,t$
10	$4447361133-804816\,t$	17579268
11	$-1091887452+46656\,t$	-1905120
12	181448100	93312
13	-18265824	
14	839808	

まず，方程式 (24) については 8 個の実数解と 6 個の複素数解が見つかっている．しかし α に対する制約条件から 2 つが除外され，都合 6 個の有効な実解得られる．これらについては β との対の形で表 2 に与える．なお，除外した実数解は $\alpha=3/2$ と $\alpha=2/3$ である．

一方，方程式 (25) については 3 個の実数解と 4 個の複素数解が見つかっている．しかし α に対する制約条件から 1 つが除外され，都合 2 個の有効な実解得られる．なお，除外した実数解は $\alpha=2/3$ である．結果的に有効な実数解は両者を合わせて 8 個みつかっている．これらの解を対応する $\beta_\pm$ の式 (23) に代入して，方程式系 (22) の有効な解 (α, β) が 8 対だけ得れる．これらの解は表2 に示す．なお表中の最後の 2 組だけが β_- に基づく解である．

表 2 無理方程式系 (24),(25) の有効な実数解

—	解 α, β の数値解
α_1	0.351894219969236999099461030933
β_1	−2.438052553756606981854322059780
α_2	0.659716242372418752425711901542
β_2	−0.071819735166196911407785625292
α_3	1.980376335850547515373862241478
β_3	0.553455239496115810944538794913
α_4	2.394491296817773315347553809334
β_4	1.301472984432801639481976840553
α_5	3.588471802378247481892487129904
β_5	1.529629876224172118767452166122
α_6	4.567168219994982907053748123678
β_6	1.541115271778886611533729506821
α_7	2.255622877436050045629464664241
β_7	−1.200759730772605931621233015203
α_8	3.692206944529613761254293647548
β_8	−13.88997403635469159218723697212

表2 によって示された 8 個の組 $\{\alpha_i, \beta_i\}$ $(i=1,\ldots,8)$ から (16) 式を用いて 3 段 SRK 法の係数を生成すれば，8 種類の 3 段 SRK 法が得られる．これらの何れもが

単解に対して4次, 2重解と3重解に対して2次の収束性をもつ算法となる. 例えば, 表2で示された $\{\alpha_6, \beta_6\}$ からは表3に示されるような係数が得られる.

表 3 $\{\alpha_6, \beta_6\}$ から得られる3段SRK法の係数

w_1	6.1344096399418756061703862014930E-01
w_2	−3.1635941429616268254050204147854E-02
w_3	4.1819497743542870763701158399855E-01
a_{21}	4.5671682199949829070537481236782E-00
a_{31}	1.4538537205662865377523909976962E-00
a_{32}	8.7261551212600073781338509124410E-02

表3の係数をもつ3段SRK法が2重解と3重解に対して実際に2次収束することを見るために簡単な重解問題となる関数

$$g_m(y) = e^y(y^2 - 7)^m$$

の方程式に適用を試みる. この関数では $m = 1, 2, 3$ に対して, それぞれ単解, 2重解, 3重解の問題となる. 初期値を $y_0 = 2.5$ としたときの実行結果が表4に示されている. この結果はほぼ理論で見積もられた通りである. 参考のために Newton 法の適用結果を述べておく. 同じ初期値を用いて誤差が 10^{-16} に達するまでの反復回数は単解で5回, 2重解で48回、3重解で81回であった.

表 4 g_m=0 への表3の係数の3段SRK法の適用結果

反復数	単解の誤差	2重解の誤差	3重解の誤差
1	−9.586E−04	−3.349E−02	1.615E−02
2	−5.000E−13	−1.228E−03	4.062E−04
3	0	−1.725E−06	2.823E−07
4		−3.414E−12	1.359E−13
5		−4.441E−16	−4.441E−16

(初期値 : $y_0 = 2.5$)

6 古典理論から新理論へ

先に節では各論的に2段SRK法と3段SRK法の特性について論じてきたが, 本節では s 段SRK法 (すなわち Newton 法の一般化公式) の特性に対する一般的な議論を展開する.

節3において s 段SRK公式 (5) のクラスと s 段陽的RK公式 (4) のクラスは同型であることを指摘した. この関係を用いて, 最初は s 段SRK法の収束次数に関する定理を述べる. なお, 各定理の証明は表記の簡便化のためにスカラーで記述する.

定理 3 s 段RK法が p 次ならば, 対応する s 段SRK法の収束次数は非線形方程式 (1) の単解に対して $p+1$ である. ▮

証明 先ず, 改良された初期値 $y_n(=z_n)$ に対する等価な初期値問題

$$\begin{cases} \dfrac{dz}{dx} = -g'(z)^{-1}g(y_n)/\tau_n, (x\in[x_n, x_n+\tau_n]) \\ z(x_n) = y_n, \quad (\tau_n = |g(y_n)|) \end{cases}$$

に刻み幅 $h = \tau_n(=h_n)$ の s 段陽的RK法 (4) を適用して, $z(x_n+\tau_n)$ の数値解 z_{n+1} を y_{n+1} とすることで s 段SRK公式

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{s} w_i k_i, \quad (n = 0, 1, \ldots)$$

$$\begin{cases} k_1 = -g'(y_n)^{-1}g(y_n) \\ k_i = -g'\big(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}k_j\big)^{-1} g(y_n) \end{cases}$$

が得られることを想起して欲しい. なお, 積分の刻み幅が $h_n = \tau_n$ なので $x_{n+1} = x_n + \tau_n$ である.

このとき, RK法が p 次であれば, $z(x_n) = y_n$ により, RK法の x_n での局所打切り誤差 T_n は

$$T_n = z(x_{n+1}) - y_n - \sum_{i=1}^{s} w_i k_i = Ch_n^{p+1}$$

である. ここで C は h_n に独立な係数であり, k_i は

$$\begin{cases} k_1 = -g'(y_n)^{-1}g(y_n), \\ k_i = -g'\big(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}k_j\big)^{-1} g(y_n) \end{cases}$$

である. 一方, 対応する s 段SRK法 (6) は上式と同じ中間変数 k_i をもつことから, これらの2つの式から

$$z(x_{n+1}) - y_{n+1} = Ch_n^{p+1}$$

が得られる. さらに $z(x_{n+1})$ が非線形方程式の解 $\hat{y}$ であることから, y_{n+1} の誤差 $e_{n+1}(=\hat{y}-y_{n+1})$ に対して

$$e_{n+1} = Ch_n^{p+1}$$

が成立する. また $\hat{y}$ が単解であることから, h_n は

$$h_n = |g(y_n)| = |g'(\tilde{y})(\hat{y} - y_n)| = |g'(\tilde{y})e_n)|$$

のように展開できる. この関係を用いて, 最後に評価

$$|e_{n+1}| = |C||g'(\tilde{y})|^{p+1}|e_n|^{p+1}$$

を得る. ここで $\tilde{y}$ は $\hat{y}$ と y_n の間の適当な値である. これは SRK 法が $p+1$ 次収束であることを意味する. ▮

次のは定理3の逆について述べたものである.

定理 4 非線形方程式 (1) の単解に対して s 段SRK法が q 次収束するなら, 対応する s 段陽的RK法は $q-1$ 次である. ▮

証明 単解 $\hat{y}$ に対して q 次収束するような s 段SRK法

に対応する s 段陽的 RK 法を初期値 y_nの 等価な初期値問題に適用する際の局所打切り誤差

$$T_n = z(x_n+1) - \big(z(x_n) + \sum_{i=1}^{s} w_i k_i\big)$$
$$\begin{cases} k_1 = -g'(z(x_n))^{-1} g(z(x_n)) \\ k_i = -g'(z(x_n) + \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j)^{-1} g(z(x_n)) \end{cases}$$

を評価する．ここで刻み幅 h_n は $\tau_n = |g(y_n)|$ である．

先ず $z(x_n) = y_n$ であることに着目すれば, 上式の右辺の第2項は s 段SRK 法により y_n から得られる y_{n+1} そのものである．したがって $z(x_{n+1}) = \hat{y}$ を利用して

$$T_n = \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{y}_{n+1} = -\boldsymbol{e}_{n+1}$$

が成立する．いま s 段 SRK 法の収束次数が q でれば, 誤差 e_{n+1} は適当な定数 $G > 0$ があって,

$$|\boldsymbol{e}_{n+1}| = G|\boldsymbol{e}_n|^q$$

と評価できる． これを利用することによって, 評価 $|T_n| = G|\boldsymbol{e}_n|^q$ が得られる．更に, $\hat{y}$ は単解であることから, 十分大きな n において $g(y_n) = g'(\tilde{y_n})e_n$ のような非零の $g'(\tilde{y_n})$ が取れ, 恒等式 $g'(\tilde{y})^{-1}g'(\tilde{y})=1$ を利用することで, 次の評価が得られる．

$$|T_n| = G|g'(\tilde{y})^{-1}|^q \ |g'(\tilde{y}))e_n|^q$$

最後に $h_n = |g(y_n)| = |g'(\tilde{y})e_n|$ を用いて

$$|T_n| = G|g'(\tilde{y})^{-1}|^q h_n^q$$

が得られる．これは対応する s 段陽的 RK 法が $q-1$ 次であることを意味する． ▮

これらの2つの定理をまとめることで, 次の等価定理が得られる．

定理 5 (等価定理) 同じ段数の陽的 RK 法と SRK 法が同じ係数を持つとき, つぎ2つの命題は同値である．
(i) 陽的 RK 法の次数は p である．
(ii) SRK 法の収束次数は $p+1$ である． ▮

等価定理によって陽的 RK 法の理論から, SRK 法についての多くの知見が得られる．しかし, ここでは興味ある特徴的な性質を幾つか述べるに止める．

性質 1 s 段陽的 RK 法の到達可能な次数が p なら, そのとき対応する s 段 SRK 法が達成し得る収束次数は $p+1$ である． ▮

次ぎは陽的 RK 法の理論 [13] からの転用である．

性質 2 $1 \leq s \leq 4$ に対して, $s+1$ 次収束する s 段 SRK 公式が存在する． ▮

陽的 RK 法では 5 段 5 次公式は存在しないこが良く知られている．これに相当する性質として, 5 段 SRK 法では 6 次収束する公式は存在しないことが主張できる．より一般的には次のようにまとめられる．

性質 3 $s \geq 5$ に対して, $s+1$ 次収束する s 段 SRK 法は存在しない． ▮

7 SRK 法のまとめと研究課題

この節では 2 段 SRK 公式と 3 段 SRK 公式についての結果の要約とそれぞれの今後の課題を整理する．また SRK 法の有用な応用分野について簡単に述べる．

7.1 2段SRK 公式

2 段 SRK 公式は単解に対して一般に 3 次収束する．また, その係数 $\{w_i, a_{ij}\}$ は (8) 式で示されるように自由パラメータとして α を有していることから, α の値を特性関数

$$p_m(\alpha) = -1 + (1 + 2\,(m-1)\ \alpha)\ \big(1 - \frac{\alpha}{m}\big)^{m-1}$$

の実のゼロ点に選ぶことで m 重解に対して 2 次収束が保証される 2 段公式が得られることを 5 節で示した．なお上式は見易くするために特性関数 (11) の変数を α に置き換え直したものである．現在, この条件から次のような結果が得られ, また課題も残されている．

(1) 各偶数重解に対して 2 次収束公式が 1 つづつ存在する．特に suzuki 法と称した m=2 の公式 (12) は Newton 法の直近の拡張公式であり, 利用価値の高いもの思われる．今後は Newton 法に代わって普通に使われても良い公式.
(2) 各奇数重解に対しては 2 次収束公式が 2 つづつ存在する．この 2 つの公式の収束領域の有意さ等の研究は残された課題である．
(3) 実際に 1000 重解まで 2 次収束する公式の存在を確認している．したがって, 非線形方程式の解の重複度が分かれば, 重複度に応じた公式を選ぶことで収束性の改善が期待できる．関連しての方程式の解の重複度を見積もる研究が望まれる．
(4) 単解を 2 次収束に落としても 2 種類の重複度に対して, 同時に 2 次収束するような公式は存在しない.

7.2 3段SRK 公式

3 段 SRK 公式は単解に対して一般に 4 次収束する．また, その係数 $\{w_i, a_{ij}\}$ は (16) 式で示されるように 2 つの自由パラメータ α, β を有していることから, これ

らの2つのパラメータの値を特性関数

$$p_m(\alpha,\beta)=1+\frac{z}{m}-\frac{m^{m-2}v}{6w\alpha(m-\alpha)^{m-1}}+\frac{m^{m-2}u}{6\beta w(m+\beta s_m)^{m-1}}$$

がゼロとなるように選ぶことで m 重解に対して2次収束が保証される3段SRK公式が得られることを5節で示した. ここで u, v, w, z, s_m は (18) で定義された通りである. 現在, この条件から次のような結果が得られており, また課題がある.

(1) 2種類の重複度に対して, 同時に2次収束するような公式が存在する. 例えば
  (i) 2重解と3重解に対して2次収束する公式が8つある (各公式の有意性 → 収束領域の検討 [課題]).
  (ii) 2重解と4重解に対して2次収束する公式が5つある (各公式の有意性 → 収束領域の検討 [課題]).

(2) 2段SRK法と3段SRK法の出発値に対する収束性の安定性の比較は未検討 [研究課題].

(3) 単-, 2-,3-,4-重解に対して, 2次収束するような3段SRK公式の存在性の検討 [研究課題].

7.3 期待される応用分野

[微分-代数方程式] SRK法はその構成の経緯から陽的RK法との親和性が素晴らしく良いことは想像に難くない. 例えば, 指数1の微分-代数方程式の初期値問題

$$\begin{cases} x' = f(t,x,y), & x(t_0) = x_0 \\ 0 = g(t,x,y), & g(t_0,x_0,y_0) = 0 \end{cases}$$

に対して, 微分方程式には古典的4段陽的RK法, 代数方程式にはsuzuki法 (12) を適用して x_n, y_n から x_{n+1}, y_{n+1} を計算するためのVBによる副プログラムCRK4が図1に示されている. なおSRK2はsuzuki法の副プログラムであり, 何れも極めて簡潔である.

Sub CRK4(t, x, y)
```
   k1 = f(t, x, y)
Call SRK2(t + h / 2, x + h * k1 / 2, y)
   k2 = f(t + h / 2, x + h * k1 / 2, y)
Call SRK2(t + h / 2, x + h * k2 / 2, y)
   k3 = f(t + h / 2, x + h * k2 / 2, y)
Call SRK2(t + h, x + h * k3, y)
   k4 = f(t + h, x + h * k3, y)
    x = x + h * (k1 + 2 * (k2 + k3) + k4) / 6
End Sub
```

Sub SRK2(t, x, y)
```
  u = y
For k = 1 To 8
  u_old = u
  k1 = -g((t, x, u) / Dg((t, x, u)
  k2 = -g((t, x, u) / Dg((t, x, u + 1.5 * k1)
  d = (2 * k1 + k2) / 3
  u = u + d
  If Abs(d) <= eps * Abs(u_old) Then GoTo 100
Next k
100 y = u                  'eps : 収束判定パラメータ
End Sub                    'Dg(t,x,y)=dg(t,x,y)/dy
```

図1 微分代数方程式を計算するためのプログラム

このプログラムを用いて, 文献 [14] で扱われている指標1の非線形微分代数方程式

$$\begin{cases} x' = -x(t)^2 + 2y(t)^2, & x(0) = 1 \\ 0 = -x(t) + (1+t)y(t), 0 < t < 5 \end{cases}$$

に適用を試みる. 適用結果は表5に示される.

表5 ADE(7.3) への適用結果

分割数	2^6	2^7	2^8	2^9
$\|e_x\|_\infty$	1.6E-06	1.1E-07	7.3E-09	4.7E-10
$\|e_y\|_\infty$	1.1E-06	7.9E-08	5.2E-09	3.3E-10

なお, SRK2の反復は全て2回で収束している. この結果は文献 [14] のDE-Sinc法のそれと遜色がない. 単純な分だけ本アプローチの方が優っているかも知れない. いずれにしてもこの分野への積極的な適用に期待する.

[代数的関数方程式]

$I=[a,b]$ とし, $\boldsymbol{f}$ は $I\times\boldsymbol{R}^k$ から $\boldsymbol{R}^k$ への1階連続微分可能な (一般には非線形の) 写像とする. この $\boldsymbol{f}$ によって定まる関数方程式

$$\boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{y}(t)) = 0, \quad (t\in I)$$

を満たすような関数解 $\boldsymbol{y}(t)$ を求める問題を (微分や積分等の極限的概念が含まれないと云う意味合いで) 代数的関数方程式と呼ぶことにする. このような代数的関数方程式の取扱いは幾つかのの分野の数値的算法を統一的に議論する上での一つの基礎を提供する.

さて, 数値解析で良く用いられる独立変数の離散化法では, 区間 I 内の N+1個の点

$$\{t_n : a = t_0 < t_1 < \cdots < t_n < \cdots < t_N = b\}$$

上の関数解 $\{\boldsymbol{y}(t_n)\}$ に対する数値解 $\{\boldsymbol{y}_n\}$ を求めることになる. そのとき, これらの N+1個の離散点上で方程式 (7.3) が離散化され, $\boldsymbol{y}(t_0), \boldsymbol{y}(t_1), \ldots, \boldsymbol{y}(t_N)$ を未知数とする N+1個の独立した非線形方程式

$$\boldsymbol{f}(t_n,\hat{\boldsymbol{y}}_n) = 0, \quad (n = 0,1,\ldots,N)$$

が得られる. ここで $\hat{\boldsymbol{y}}_n = \boldsymbol{y}(t_n)$ である. 現実的な解法としては, $\boldsymbol{f}(t_n,\hat{\boldsymbol{y}}_n) = 0$ の数値解を続く方程式 $\boldsymbol{f}(t_{n+1},\hat{\boldsymbol{y}}_{n+1}) = 0$ に対する反復法の初期値に用いるスキムが用いられる. このとき, 唯一の真の初期値 $\tilde{\boldsymbol{y}}_0$ から $\boldsymbol{y}_0, \boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_N$ へと逐次求めることになる. しかし複数個の解がある場合には, 求められた数値解が同じ系統の数値解, すなわち一つの連続解の離散解の近似になると云う保証はない. そのために得られる近似解が連続解の離散解であることの裏づけが必要がある. この保証について議論した [11] を参照してほしい.

特に, 関数方程式が複数個の近接解を持つ場合には, この算法におて如何なる反復解法を採用するかが本質

的となる.

数値例 1 2 つの解を持つ非線形関数方程式

$$f(t,y(t)) = 1 - \sin^2 \frac{\pi}{2}t - y(t)^2 = 0, \ (t \in [0,1)) \quad (26)$$

に上述したスキムの適用を試みる. 反復解法にはsuzuki法と Newton を採用した. 両者の実行結果を表 6 に示す. なお, 2 つの解は $y(t) = \pm\cos(\pi t/2)$. また実行条件は, 区間を 10 分割, 初期値を $y_0 = 0.5$, 収束判定パラメータを eps $= 10^{-6}$ とした. この問題は $t = 1$ 付近で 2 つの解は近接し, ちょうどにおいて重解となる. 表から Newton 法は重解や近接解が混在するような場合には適さないことが分かる. ∎

表 6 方程式 (26) への suzuki 法の適用結果

t	反復	誤差 (suzuki)	反復	誤差 (Newton)
0.0	4	0.0E-00	5	1.1E-15
0.2	3	0.0E-00	3	3.0E-13
0.4	3	1.1E-16	4	1.1E-16
0.6	3	0.0E-00	4	1.8E-13
0.8	4	1.7E-16	5	1.7E-16
1.0	1	1.6E-15	61	1.6E-15

数値例 2 δ をパラメータとする近接解と重解の非線形関数方程式

$$\begin{aligned} f(x,y(x)) &= (1 - x^2 \exp y(x)) \\ &\quad \times (1 - (x+\delta)^2 \exp y(x)), \ (x \in [0.5, 1]) \end{aligned} \quad (27)$$

に suzuki 法と Newton を採用した上述のそれぞれの算法を適用した結果が表 7 に示される. 全てのケースで最初の初期値は $y(0.5) = 0.9$ とした. この方程式は $\delta = 0$ のとき重解をもつ. また δ がゼロでない小さな値を取るほど解の近接度が増す. 区間を 10 分割して, eps $= 4 \times 10^{-7}$ として実行した結果を表 7 に示す. なお誤差ノルムは最大ノルムである. ∎

表 7 方程式 (27) に対する suzuki 法の適用結果

—	suzuki 法		Newton 法	
δ	平均反復	誤差 norm	平均反復	誤差 norm
10^{-0}	4	5.8E-15	47	5.8E-14
10^{-8}	8	4.7E-13	31	4.7E-13
10^{-4}	6	1.1E-16	16	2.4E-16

この例のように重解や近接解がある問題では, Newton 法は収束性 (一次収束) が極端に悪くなる. 一方, 2 重解に対して 2 次収束する suzuki 法は順調な収束 (2 次収束) を示している. しかし, 一般には, 解の重複度は未知であるために SRK 法の段数を増やして, 3 重解までに止まらず 4 重解, 5 重解等々と高次重解に対しても 2 次収束するような高段の SRK 公式の研究は意義あることである.

上述の視点から 4 段 (5 次収束の)SRK 法と 5 段 (5 次収束の)SRK 法の今後の研究に期待する,

7.4 おわりに

先の数値例ではスカラー方程式のみを扱ったが, Traub[1] や Ortega-Rheinboldt[16] で扱われた Newton 法では 1 次収束に退化する方程式系の例に対しても, SRK 法 (例えば, suzuki 法) では 2 次の収束性を見ることができる.

本論文では, これまで個別に扱われてきた非線形方程式に対する Newton 法の一般化の理論と微分方程式に対する陽的 Rune-Kutta 法の理論が統一的に扱えることを示した. このような異なる分野の算法を統一的に考察する研究は数値関数解析 [15] 的な立場である. 今後, 数値関数解析的アプローチによる研究に多くの成果を期待する.

参考文献

[1] J.F.Traub: Interative Methods for the Solution of Equations, Prentice-Hall,inc. 1964

[2] T.L. Saaty, J. Bram: Nonliear Mathematics, McGraw-Hill,1964.

[3] D. Davidenko: On A New Method of Numerical Solution of Systems of Nonlinear Equations, Dokl Akad. Nauk, 88, 601-602,1953

[4] F.H. Branin: A Globally Convergent Method for Finding Mulultiple Solutions of Nonlinear Simultaneous Equations, Conferrence, Scotland, NMNO, 1971

[5] K. Tanabe: Continuous Newton-Raphson Method for Solving an Underdetermined System of Nonlinear Equations, NONL., ANAL., TH., NETH & Apl1., Vol.3, No.4, 1976

[6] J. Sand: Integration methods for solving equations, BIT 25(1985), 687-688.

[7] 鈴木千里, 杉浦孝友: 4 次収束性を有する非線形方程式系に対する Runge-Kutta 法の最適化について, 日本応用数理学会 2008 年度年会, 2008.

[8] 鈴木千里: 非線形方程式の多重解に強い 2 段 3 次収束 Sand-RK 法について, 第 38 回数値解析シンポジウム, 2009.

[9] Ch. Suzuki: Two-Stage Sand-Runge-Kutta Methods Powerful for Non-linear Equations with Multiple Solutions, Computation World 2009, IEEE, 575-579.

[10] 鈴木千里: 近接解における SRK 法の特性について, 第 39 回数値解析シンポジウム, 2010.

[11] 鈴木千里: SRK 法における Newton ホモトピー法について, 第 29 回常微分方程式の数値解法とその周辺研究集会報告, 127-136, 2013.

[12] 鈴木千里: 代数的関数方程式に対する高精度算法について, 第 40 回数値解析シンポジウム, 2011

[13] E. Hairer, S.P. Norsett, G. Wanner: Solving ordinary differential equations I, Springer-Verlag, 1987

[14] 森正武, アヒニヤズヌルメメット, マイヌルメメット: DE-Sinc 法に基づく微分代数方程式の数値解法, 数理解析研究所講究録 1505, 58-67, 2006.

[15] 鈴木千里：数値関数解析の基礎, 森北出版, 2001

[16] J.M. Ortega, W.C. Rheinboldt: Iterative Solition of Nonlinear Equations in Several Variables,Academic Press, 1970