

## 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

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

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

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

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

但し  $A^0 = I$  とする

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

iff  $k \geq \text{ind}(A)$

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

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

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

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

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

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

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

と書ける

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

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

$QA = AQ$  のとき

$\operatorname{ind}(AQ) = \operatorname{ind}(QA) = \operatorname{ind}(A)$  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

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

$(A, B)$  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,  $\operatorname{ind}(A, B) := \operatorname{ind}([cA + B]^{-1}A)$  で index が定義できる

定理4  $\operatorname{ind}(A, B)$  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

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

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

とにおいて,  $\operatorname{ind}(G) = \operatorname{ind}(\bar{G})$  を示す.

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

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

$$= I + (\bar{c} - c)G \quad \text{よ'}$$

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

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

$$\text{従} \tau \quad \bar{G} = \{ I + (\bar{c} - c)G \}^{-1} G$$

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

補題 3 よ'  $\text{ind}(G) = \text{ind}(\bar{G})$  を得る Q.E.D.

定理 5  $(A, B)$  : regular とし

i)  $Q$  : non singular

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

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

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

が成'り立'

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

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

$$\mathcal{N}_k := \{ U \mid U = \text{diag}(U_1^{(k_1)}, \dots, U_s^{(k_s)}), \max_{1 \leq i \leq s} \{k_i\} = k \}$$

と定義する

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

定理6  $(A, B)$  : regular with index  $k$  and

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

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

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

$$U \in \mathcal{N}_k$$

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、 $1, 2, \dots, m+1$  に対して、

$$\det(kA+B) = 0 : 1 \leq k \leq m+1 \quad \text{より零でない}$$

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

をとれば、 $U_1, \dots, U_m, U_{m+1}$  : 一次従属なる故

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

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

$x(t) := \sum_{k=1}^{m+1} \alpha_k e^{k(t-t_0)} U_k$  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

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

$$\text{このとき } k := \text{ind}(A, B),$$

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

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

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

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

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、

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

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

に同値変形される。ところで(2)の2番目の関係式

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

$y_2, \tilde{q}_2$  : 適当に滑めらかであるとすれば、

$$y_2 = \tilde{q}_2 - Uy_2'$$

$$= \tilde{q}_2 - U(\tilde{q}_2 - Uy_2')$$

$$= \tilde{q}_2 - U\tilde{q}_2' + U^2y_2''$$

$$= \dots$$

$$= \tilde{q}_2 - U\tilde{q}_2' + \dots + (-1)^{k-1} U^{k-1}\tilde{q}_2^{(k-1)} + (-1)^k U^k y_2^{(k)}$$

$$= \sum_{\ell=0}^{k-1} (-1)^\ell U^\ell \tilde{q}_2^{(\ell)}$$

となる。

従って (2) は

$$\begin{cases} y_1' = -W y_1 + \tilde{q}_1 & (3) \end{cases}$$

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

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

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

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

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

$$3 \leq i \leq M$$

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

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

$$1 \leq i \leq M$$

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

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

$$a_{30} = C_3^2 / (2C_3 + 1), \quad a_{33} = (C_3^2 + C_3) / (2C_3 + 1)$$

$$b_0 = (2C_3 - 1) / (2C_3 + 1), \quad b_3 = 2 / (2C_3 + 1)$$

$$C_3 \geq 1/\sqrt{2}$$

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。

$$y_n - y(t_n)$$

$t_n$	$1/2^4$	$1/2^5$	$1/2^6$
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。

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

order 3 condition

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

$$\begin{cases} h : b_0 + b_3 + b_4 = 1 \\ h^2 : -b_0 + 2b_3C_3 + 2b_4C_4 = 1 \end{cases}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hbar^3 D^2 f : b_0 + 3b_3 C_3^2 + 3b_4 C_4^2 = 1 \\ \hbar^3 f_y D f : b_0 + 3b_3 \{ (2a_{33} - 1) C_3 + a_{33} \} + \\ \quad + 3b_4 \{ 2a_{43} C_3 + (2a_{44} - 1) C_4 + a_{43} + a_{44} \} \\ = 1 \end{array} \right.$$

$$\text{但し } D := \partial/\partial t + f \partial/\partial y$$

$$\text{for } z = g(t)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hbar : b_0 + b_3 + b_4 = 1 \\ \hbar^2 : -b_0 + b_3 \{ -1 + (C_3^2 + C_3)/a_{33} \} + \\ \quad + b_4 \{ -1 - a_{43} (C_3^2 + C_3)/a_{33} a_{44} + (C_4^2 + C_4)/a_{44} \} \\ = 1 \\ \hbar^3 : b_0 + b_3 \{ 1 + (C_3^3 - C_3)/a_{33} \} + \\ \quad + b_4 \{ 1 - a_{43} (C_3^3 - C_3)/a_{33} a_{44} + (C_4^3 - C_4)/a_{44} \} \\ = 1 \end{array} \right.$$

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 .