数理解析研究所講究録
1040 巻 1998 年 31-38

Runge-Kutta 法の安定性解析と線形システム論

Runge-Kutta methods and linear systems theory

小藤 俊幸 (Toshiyuki Koto)
電気通信大学 情報工学科

1. はじめに

係数パラメータ $A=(a_{ij})_{1\le i,j\le s}$, $b=(b_1,\ b_2,\ \dots,\ b_s)^T$ ($c_i=\sum_{j=1}^{s}a_{ij}$) から定まる s 段 Runge-Kutta (RK) 法について考える．いわゆるテスト方程式

$$\frac{du}{dt}=\lambda\,u(t)\quad(\lambda\in\mathbb{C}) \tag{1.1}$$

に，RK 法を適用すると，漸化式

$$u_{n+1}=r(h\lambda)u_n,\quad r(z)=1+zb^T(I-zA)^{-1}e \tag{1.2}$$

が得られる．ここで，h はステップ幅，I は s 次単位行列，$e=(1,\ 1,\ \dots,\ 1)^T$ である．また，有理関数 $r(z)$ は，RK 法の安定性関数と呼ばれ，$r(z)$ が

$$|\,r(z)\,|<1\quad(\mathrm{Re}\ z<0) \tag{1.3}$$

の評価をみたすとき，RK 法は A 安定であると言われる．

いま，$C=A-(1/2)eb^T$ とおき，1 入力 1 出力の線形システムを

$$\frac{dx}{dt}=Cx(t)+e\,u(t), \tag{1.4}$$

$$y(t)=b^Tx(t)$$

により定義する．このシステムの伝達関数は

$$\rho(z)=b^T(zI-C)^{-1}e \tag{1.5}$$

となり，伝達関数 $\rho(z)$ を用いると，安定性関数 $r(z)$ は

$$r(z)=\frac{1+\frac{1}{2}\rho\left(z^{-1}\right)}{1-\frac{1}{2}\rho\left(z^{-1}\right)} \tag{1.6}$$

のように表せる．したがって，Runge-Kutta 法の A 安定性は

$$\mathrm{Re}\ \rho(z)<0\quad(\mathrm{Re}\ z<0) \tag{1.7}$$

と等価になり，さらに，(1.7) は，線形システム論の用語を用いると，$-\rho(-z)$ が正実 (positive real) であると言いかえることができる．

正実有理関数（一般には，有理関数の行列）には，さまざまな応用があり，その特性に関して詳しい研究がなされている．例えば，正実有理関数は，拘束条件付きの Liapunov 行列方程式によって特徴づけられることが知られている（正実性の補題，Positive Real Lemma, 例えば，[1], 11.4 節）．この結果を，RK 法の安定性解析に応用したものが，次の定理である．

定理 1.1 *(Scherer-Müller [13])* 線形システム *(1.4)* は $\rho(z)$ の最小実現であるとする（このとき，*RK* 法は *minimal* であると言う）．そのとき，*RK* 法が A 安定であることは，次の条件と等価である*:*

(A) ある対称半正定値行列 $\mathcal{R}$ について，

$$\mathcal{R}A + A^T\mathcal{R} - bb^T \geq 0, \quad \mathcal{R}e = b$$

がなりたつ．

ここで，記号 "≥ 0" は，対称行列（あるいは，エルミート行列）が半正定値であることを示す．

RK 法が A 安定ならば，このような $\mathcal{R}$ が存在することは，構成的に証明される．基本的には，四則演算と平方根の操作により，$\mathcal{R}$ が構成されるのであるが，その際，A 安定性の条件 (1.3) が直接的に用いられている．また，高段数の公式に対する $\mathcal{R}$ を，この方法で（数値的ではなく，"厳密に"）求めることは，必ずしも容易ではない．そうした状況もあり，上の定理を，例えば，ある公式の A 安定性を示すような場合に用いるのは難しいと思われる．しかし，(1.3) と比較すると，(A) は，係数パラメータに対するより直接的な条件を与えていることから，A 安定公式のさらなる特性を明らかにするような場合には，有効な定理ではないかと思われる．ここでは，RK 法を遅延微分方程式 (delay differential equation) に適用した際の安定性を調べるいわゆる P 安定性解析に，上記の定理を応用した事例 [10]（関連した結果については，[6, 11] を参照）について述べる．

2. Runge-Kutta 法の P 安定性

RK 法の自然連続拡張 (natural continuous extension, [14]) を定義する多項式を $w_j(\theta)$ $(1 \leq j \leq s)$ と表すことにする．また，m を正整数とし，

$$t_n = hn, \quad h = \tau/m, \quad n \in N.$$

の形のステップ点を考える．RK 法をスカラーのテスト方程式 [2, 15]

$$u'(t) = \lambda\, u(t) + \mu\, u(t-\tau) \quad (\lambda,\ \mu \in \mathbb{C}) \tag{2.1}$$

に適用すると,

$$U_n' = \alpha(u_n e + AU_n') + \beta(u_{n-m}e + WU_{n-m}'), \tag{2.2}$$

$$u_{n+1} = u_n + b^T U_n' \tag{2.3}$$

の差分方程式が得られる．ここで，u_n は $u(t_n)$ の近似値，$U_n' \in \mathbb{C}^s$ は中間変数，

$$W = (w_j(c_i))_{1 \le i,j \le s} \ , \tag{2.4}$$

$$\alpha = \lambda h, \quad \beta = \mu h. \tag{2.5}$$

である．

さらに，

$$\Omega_P = \{(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2 \ : |\ \beta\ | < -\mathrm{Re}\,\alpha\}, \tag{2.6}$$

とおくとき，RK 法の (2.1) に対する安定性が以下のように定義される．

定義 2.1 次の条件をみたす (α, β) の集合 S_P を，*RK* 法の P 安定領域と言う*:* $\det[I - \alpha A] \neq 0$ であって，差分方程式 *(2.2)-(2.3)* のゼロ解は，任意の $m \geq 1$ に対して，漸近安定となる．

定義 2.2 P 安定領域 S_P が領域 Ω_P を含むとき，*RK* 法は P 安定であると言う．

文献 [15] にならって，関数 $r_\alpha(z)$ を

$$r_\alpha(z) = 1 + (\alpha + z)b^T(I - \alpha A - zW)^{-1}e. \tag{2.7}$$

により定義する．Cramer の公式により，$r_\alpha(z)$ は

$$r_\alpha(z) = p_\alpha(z)/q_\alpha(z), \tag{2.8}$$

$$p_\alpha(z) = \det[I - \alpha A - zW + (\alpha + z)eb^T], \tag{2.9}$$

$$q_\alpha(z) = \det[I - \alpha A - zW] \tag{2.10}$$

のように書き直される．これらの関数を用いると，RK 法が P 安定となるための十分条件をつぎのように述べることができる（例えば，[7], Theorem 2.2）．

補題 2.2 任意の $(\alpha, z) \in \Omega_P$ に対して，$q_\alpha(z) \neq 0$ かつ $|\ r_\alpha(z)\ | < 1$ ならば，*RK* 法は P 安定である．

この補題で述べられている十分条件は，2変数の有理関数に関する条件であり，この条件によって，具体的な公式の P 安定性を判定することは必ずしも容易ではない．例えば，[7] では，Radau 型公式，Lobatto 型公式といった古典的数値積分則から導出される RK 法（いわゆる quadrature RK 法）の P 安定性が解析されているが，これらの公式と指数関数の Padé 近似との密接な関係（[8, 9] も参照）が解析の基礎

となっているため，同様な手法で他の公式の P 安定性を調べるのは難しいように思われる．以下では， quadrature RK 法以外の方法への適用を意図して，補題 2.2 の条件の変形を行なう．検証が可能な P 安定性の判定条件を導くために，RK 法とその自然連続拡張に関して，次の条件を考える．

(B) ある正方行列 E について，

$$AE = W, \quad b^T E = b^T$$

が成り立つ．

この条件 (B) は，例えば，RK 法が，ある整数 $q \geq 1$ について，簡約化条件 $C(q)$, $B(q)$ をみたし，自然連続拡張（の定義多項式）の次数が q 以下ならば成立する．実際，

$$E = \left(w_j'(c_i)\right)_{1 \leq i,j \leq s} \tag{2.11}$$

で与えられる行列 E について，条件 (B) がみたされることが，簡単な計算により確かめられる．

定理 2.3 条件 *(A)* と *(B)* を仮定する．そのとき，以下の 2 条件が成り立つならば，*RK* 法は *P* 安定である*:*

(C₁) 任意の複素数 $|\zeta| < 1$ に対して，$2\mathcal{R} + \zeta \mathcal{R} E + \overline{\zeta} E^T \mathcal{R} \geq 0$ が成立する*;*

(C₂) $p_\alpha(z)$ と $q_\alpha(z)$ は領域 Ω_P に共通のゼロ点をもたない．

証明 まず，$q_\alpha(z) \neq 0$ を仮定する．条件 (B) より，$r_\alpha(z)$ は

$$r_\alpha(z) = 1 + b^T Z v, \tag{2.12}$$

$$Z = \alpha I + zE, \quad v = (I - AZ)^{-1} e \tag{2.13}$$

と表すことができる．さらに，(2.12) と

$$b = \mathcal{R} e = \mathcal{R}(I - AZ)v, \quad b^T = \overline{v}^T (I - \overline{Z}^T A^T)\mathcal{R}$$

により，

$$\begin{aligned} |r_\alpha(z)|^2 - 1 &= (1 + \overline{v}^T \overline{Z}^T b)(1 + b^T Z v) - 1 \\ &= \overline{v}^T (\mathcal{R} Z + \overline{Z}^T \mathcal{R}) v - (\overline{Z}\overline{v})^T (\mathcal{R} A + A^T \mathcal{R} - b b^T) Z v \end{aligned} \tag{2.14}$$

を得る．一方，$\zeta = z / \operatorname{Re} \alpha$ とおくと，

$$\begin{aligned} \mathcal{R} Z + \overline{Z}^T \mathcal{R} &= \mathcal{R}(\alpha I + zE) + (\overline{\alpha} I + \overline{z} E^T)\mathcal{R} \\ &= \operatorname{Re} \alpha \, (2\mathcal{R} + \zeta \mathcal{R} E + \overline{\zeta} E^T \mathcal{R}) \end{aligned} \tag{2.15}$$

となり，条件 (A), (C_1) と (2.14) から

$$(2.16) \qquad (\alpha, z) \in \Omega_P \text{ かつ } q_\alpha(z) \neq 0 \quad \Rightarrow \quad | r_\alpha(z) | \leq 1$$

の関係が得られる．これと， (C_2) を合わせると，任意の $(\alpha, z) \in \Omega_P$ について，$q_\alpha(z) \neq 0$ となることが示される．実際，ある $(\alpha_0, z_0) \in \Omega_P$ に対して，$q_{\alpha_0}(z_0) = 0$ ならば，条件 (C_2) により，

$$(2.17) \qquad \lim_{z \to z_0} | r_{\alpha_0}(z) | = \infty$$

となるが，$q_{\alpha_0}(z)$ のゼロ点はすべて孤立していることから，これは，(2.16) に反する．

正則関数の最大値原理により，任意の $(\alpha, z) \in \Omega_P$ に対して， $| r_\alpha(z) | < 1$ が成立する．したがって，補題 2.2 により，RK 法は P 安定である． □

3. P 安定な Singly Implicit Runge-Kutta 法

定理 2.3 の応用として，Burrage [3, 4] によって提案されている Singly Implicit Runge-Kutta (SIRK) 法のいくつかが P 安定であることを示す．SIRK 法とは，行列 A の固有値が，ただ一つの実数からなる RK 法である．適当な線形変換を用いることにより，中間変数の計算を“各段ごとに”行なうことができることから，一般の陰的 RK 法よりも実装が容易であるとされている．

簡約化条件 $C(2)$, $B(2)$ をみたす 3 段 SIRK 法は，

$$(3.1) \qquad A = V\hat{A}V^{-1}, \quad b = (V^{-1})^T\hat{b},$$

のように表すことができる．ここで，

$$V = \begin{pmatrix} 1 & c_1 & c_1^2 \\ 1 & c_2 & c_2^2 \\ 1 & c_3 & c_3^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2\gamma^3 \\ 1 & 0 & -6\gamma^2 \\ 0 & 1/2 & 3\gamma \end{pmatrix},$$

$\hat{b} = (1,\ 1/2,\ 1/3)^T$, γ, c_1, c_2, c_3 は自由パラメータである．文献 [3] で示されているように，この方法の次数は 3 次以上であり，特に，自由パラメータが

$$(3.2) \qquad \varphi(\gamma) \equiv \frac{1}{12} - \gamma + 3\gamma^2 - 2\gamma^3 = 0,$$

$$(3.3) \qquad \Phi(c_1,\ c_2,\ c_3) \equiv \int_0^1 \prod_{i=1}^{3} (c_i - \theta) d\theta = 0$$

の条件をみたすとき，4 次となる．また，[14], Theorem 7 から，SIRK 法 (3.1) は，

$$(3.4) \qquad w_i(\theta) = 3(2c_i - 1)b_i\theta^2 + 2(2 - 3c_i)b_i\theta, \quad i = 1,\ 2,\ 3.$$

で定義される自然拡張をもつ．

この自然拡張を考えた SIRK 法 について，次が成立する:

定理 3.4 *SIRK 法 (3.1) は，A 安定であると仮定する．そのとき，*

$$\Phi(c_1,\ c_2,\ c_3) = \varphi(\gamma) \tag{3.5}$$

が成り立つならば，(3.1), (3.4) で定義される解法は，P 安定である．

条件式 (3.2), (3.3) より，4 次 SIRK 法は (3.5) をみたす．したがって，4 次 SIRK 法が A 安定ならば，P 安定である．また，簡単な計算により，

$$c_1 = \gamma(2-\sqrt{2}), \quad c_2 = \gamma(2+\sqrt{2}), \quad c_3 = 1-\gamma \quad (\gamma \in \mathbb{R}) \tag{3.6}$$

で与えられる自由パラメータは (3.5) をみたすことが分る．このパラメータは，埋め込み型公式を構成する目的で，Burrage [4] によって導入されたものである．

証明 SIRK 法 (3.1) が A 安定であるための必要十分条件は，γ が

$$\varphi(\gamma) \geq 0, \tag{3.7}$$

$$\widehat{\varphi}(\gamma) \equiv \left(\frac{1}{3}-\gamma\right)\left(-\frac{1}{6}+\gamma\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{9}{2}\gamma+9\gamma^2-6\gamma^3\right) \geq 0 \tag{3.8}$$

をみたすことであり，具体的には，$1/3 \leq \gamma \leq \gamma_0 \equiv 1/2+\cos(\pi/18)/\sqrt{3} = 1.06858\cdots$ となる (例えば，[5]).

関数 $\varphi(\gamma)$, $\widehat{\varphi}(\gamma)$，行列 V を用いて，対称行列 $\mathcal{R}$ を

$$\mathcal{R} = (V^{-1})^T \widehat{\mathcal{R}} V^{-1}, \tag{3.9}$$

$$\widehat{\mathcal{R}} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4+\varphi(\gamma) \\ 1/3 & 1/4+\varphi(\gamma) & \widehat{r}_{33} \end{pmatrix}, \tag{3.10}$$

$$\widehat{r}_{33} = \frac{1}{3} - \frac{3}{2}\gamma + 4\gamma^2 - 2\gamma^3 + 6\gamma\varphi(\gamma) - 4\sqrt{\varphi(\gamma)\widehat{\varphi}(\gamma)}$$

により定義すると，計算により，$\mathcal{R}e = b$,

$$\widehat{\mathcal{R}}\widehat{A} + \widehat{A}^T\widehat{\mathcal{R}} - \widehat{b}\widehat{b}^T = \widehat{g}\widehat{g}^T \geq 0 \tag{3.11}$$

となることが示される．ここで，

$$\widehat{g} = \left(0,\ -\sqrt{\varphi(\gamma)},\ 2\sqrt{\widehat{\varphi}(\gamma)} - 6\gamma\sqrt{\varphi(\gamma)}\right)^T \tag{3.12}$$

である．後者と (3.1) からこの $\mathcal{R}$ について，条件 (A) の不等式が成り立つことが分る．さらに，$\mathrm{rank}[\gamma I - \widehat{A},\ \widehat{b}] = 3$ であることが簡単に確かめられ，$(\widehat{A},\ \widehat{b})$ は可制御となる（例えば，[12], Theorem 4.3.3）．行列 $\widehat{A}$ の唯一の固有値 γ は正であり，$\widehat{\mathcal{R}}$

が (3.11) をみたすことから，$\widehat{\mathcal{R}}$ は正定値である（[12], Theorem 5.3.1）．したがって，$\mathcal{R}$ も正定値であり，条件 (A) が成立する．

一方，SIRK 法 (3.1) は $C(2)$, $B(2)$ をみたすことから，行列

$$E = (w_j'(c_i))_{1\le i,j\le 3} \tag{3.13}$$

について，条件 (B) が成立する．行列 V と $\Phi(c_1,\ c_2,\ c_3)$ を用いると，この行列は

$$E = V\widehat{E}V^{-1}, \tag{3.14}$$

$$\widehat{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1/6 - 6\Phi(c_1,\ c_2,\ c_3) \\ 0 & 1 & 1 + 12\Phi(c_1,\ c_2,\ c_3) \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.15}$$

と表すことができる．さらに，(3.10) と (3.15) から，

$$\det\left[2\widehat{\mathcal{R}} + \zeta\widehat{\mathcal{R}}\widehat{E} + \overline{\zeta}\widehat{E}^T\widehat{\mathcal{R}}\right] \tag{3.16}$$

$$= 2(1+\mathrm{Re}\,\zeta)\left[4\det[\widehat{\mathcal{R}}](1+\mathrm{Re}\,\zeta) - \{\Phi(c_1,\ c_2,\ c_3) - \varphi(\gamma)\}^2 \mid \zeta\mid^2\right]$$

が得られ，(3.5) が成り立つならば，左辺の行列式は，任意の $|\zeta| < 1$ に対して，ゼロとはならないことが分る．このことより，条件 (C_1) が，$\widehat{\mathcal{R}}$ の正定値性を用いて，以下のように示される：ある $\zeta = \zeta_0$ $(|\zeta_0| < 1)$ について，(C_1) の条件が成り立たないとすると，エルミート行列

$$2\widehat{\mathcal{R}} + \zeta\widehat{\mathcal{R}}\widehat{E} + \overline{\zeta}\widehat{E}^T\widehat{\mathcal{R}} \tag{3.17}$$

は，$\zeta = \zeta_0$ で負の固有値をもつ．したがって，固有値の ζ に関する連続性，$\widehat{\mathcal{R}}$ の正定値性から，$|\zeta_1| < |\zeta_0|$ であって $\zeta = \zeta_1$ に対する (3.17) がゼロ固有値をもつような ζ_1 が存在する．これは，上の行列式が $\zeta = \zeta_1$ でゼロとなることを意味し，上述の性質に反する．

条件 (C_2) も，単純ではあるがやや面倒な計算により示され，定理 2.3 から定理の主張を得る．□

参考文献

[1] 有本 卓, 線形システム理論，産業図書，1974.

[2] V. K. Barwell, Special stability problems for functional differential equations, *BIT* **15** (1975), 130–135.

[3] K. Burrage, A special family of Runge-Kutta methods for solving stiff differential equations, *BIT* **18** (1978), 22–41.

[4] K. Burrage, Efficiently implementable algebraically stable Runge-Kutta methods, *SIAM J. Numer. Anal.* **19** (1982), 245–258.

[5] E. Hairer and G. Wanner, *Solving ordinary differential equations* II, Springer-Verlag, Berlin, 1991.

[6] T. Koto, The stability of natural Runge-Kutta methods for nonlinear delay differential equations, *Japan J. Ind. Appl. Math.* **14** (1997), 111–123.

[7] T. Koto, *NP*-stability of Runge-Kutta methods based on classical quadrature, *BIT* **37** (1997), 870-884.

[8] T. Koto, Stability of the Radau IA and Lobatto IIIC methods for delay differential equations, to appear in *Numer. Math.* (1998).

[9] 小藤 俊幸, Runge-Kutta 法の安定性解析と連分数展開, 数理解析研究所講究録 **990** (1997), 169–178.

[10] T. Koto, A criterion for *P*-stability properties of Runge-Kutta methods, Report CSIM 97-03, Department of Computer Science and Information Mathematics, The University of Electro-Communications, 1997.

[11] 小藤 俊幸, 中山 浩, SDIRK 法の P 安定性解析, 日本応用数理学会平成 1997 年度講演予稿集 (1997), 112–113.

[12] P. Lancaster and L. Rodman, *Algebraic Riccati equations*, Clarendon Press, Oxford, 1995.

[13] R. Scherer and M. Müller, Algebraic conditions for *A*-stable Runge-Kutta methods, in J. R. Cash and I. Gradwell (ed.), "Computational Ordinary Differential Equations", 1–7, Clarendon Press, Oxford, 1992.

[14] M. Zennaro, Natural continuous extensions of Runge-Kutta methods, *Math. Comput.* **46** (1986), 119–133.

[15] M. Zennaro, *P*-stability properties of Runge-Kutta methods for delay differential equations, *Numer. Math.* **49** (1986), 305–318.