

Runge-Kutta 法の安定性解析と連分数展開

Stability of Runge-Kutta methods and continued fractions

小藤 俊幸 (Toshiyuki Koto)

電気通信大学 情報工学科

1. はじめに

Runge-Kutta (RK) 法は, 常微分方程式の初期値問題

$$(1.1) \quad u'(t) = f(t, u(t)) \quad (t > 0), \quad u(0) = u_0$$

の最も基本的な数値解法である. 与えられた初期値 u_0 から, ステップ点 $t_n = nh$ (h はステップ幅, 一般には, n に依存する場合もある) 上の近似値 u_n を

$$(1.2) \quad U_{n,i} = u_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, U_{n,j}) \quad (1 \leq i \leq s),$$

$$(1.3) \quad u_{n+1} = u_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, U_{n,i})$$

の公式を用いて次々と計算していくことにより, (1.1) の数値解が求められる. ここで, $U_{n,i}$ は中間変数, $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq s}$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_s)^T$, $c = (c_1, c_2, \dots, c_s)^T$ は (s 段) RK 法の係数パラメータと呼ばれる定数である. 例えば, Gauss 公式と呼ばれる RK 法の場合, c_i ($1 \leq i \leq s$) を区間 $(0, 1)$ 上の Gauss 分点, すなわち, $(d^s/d\theta^s)\{\theta^s(1-\theta)^s\}$ のゼロ点とし, c_i を分点とする Lagrange 補間の基本多項式 $l_i(\theta)$ から, 係数 A, b を

$$(1.4) \quad a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\theta) d\theta, \quad b_i = \int_0^1 l_i(\theta) d\theta$$

のように定める.

この b_i は (c_i 上の関数値を用いる) Gauss の数値積分則の重みに他ならならず, Gauss 公式は数値積分則に基づいた公式であると考えられる. このように, 古典的な積分則に基づいて構成される RK 公式には, Gauss 公式以外にもいくつかの公式があり, 代表的なものを特性とともに挙げると, 表 1 のようになる. 表の c_i の項目にある Radau left, Radau right, Lobatto は, それぞれ, c_i が $(d^{s-1}/d\theta^{s-1})\{\theta^s(1-\theta)^{s-1}\}$, $(d^{s-1}/d\theta^{s-1})\{\theta^{s-1}(1-\theta)^s\}$, $(d^{s-2}/d\theta^{s-2})\{\theta^{s-1}(1-\theta)^{s-1}\}$ のゼロ点であることを表している. また, RK 公式が補間型であるとは, 係数 a_{ij} が (1.4) の第 1 式で定められることを言う. 補間型ではない公式の場合, a_{ij} の決め方は公式によって異なるが (例えば, [6]), 表 1 の公式の b_i はいずれも (1.4)

表 1: 数値積分則に基づく RK 法

公式	c_i	次数	補間型	安定性関数
Gauss	Gauss	$2s$	yes	(s, s) -Padé
Radau IA	Radau left	$2s - 1$	no	$(s - 1, s)$ -Padé
Radau IIA	Radau right	$2s - 1$	yes	$(s - 1, s)$ -Padé
Lobatto IIIA	Lobatto	$2s - 2$	yes	$(s - 1, s - 1)$ -Padé
Lobatto IIIB	Lobatto	$2s - 2$	no	$(s - 1, s - 1)$ -Padé
Lobatto IIIC	Lobatto	$2s - 2$	no	$(s - 2, s)$ -Padé

の第2式, すなわち, Lagrange の基本多項式 $l_i(\theta)$ を 0 から 1 まで積分したもので与えられる.

テスト方程式と呼ばれるスカラーの線形方程式

$$(1.5) \quad u'(t) = \lambda u(t) \quad (\lambda \in \mathcal{C})$$

に RK 法を適用すると,

$$(1.6) \quad u_{n+1} = r(h\lambda)u_n, \quad r(z) = 1 + zb^T(I_s - zA)^{-1}e$$

のような漸化式が得られる. ここで, I_s は s 次単位行列, $e = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$ である. テスト方程式 (2.3) の厳密解は指数関数であることから, $r(z)$ は指数関数の有理関数近似となる. RK 法の安定性を特徴づける関数という意味で $r(z)$ を安定性関数と呼ぶ. 表 1 の RK 法の安定性関数は, いずれも (指数関数の) Padé 近似となり, 次の性質をもつことが 60 年代後半に Ehle [5] によって証明されている. なお, (i, j) 次 Padé 近似とは, 分子に i 次, 分母に j 次多項式を用いる Padé 近似のことである.

定理 1.1 指数関数の (s, s) 次, $(s - 1, s)$ 次, $(s - 2, s)$ 次 Padé 近似は

$$(1.7) \quad |r(z)| < 1 \quad (\forall \operatorname{Re} z < 0)$$

をみたす.

RK 法が A 安定であるとは, 安定性関数が上の評価式 (1.7) をみたすこと言う. 定理 1.1 は, 表 1 の公式が, すべて A 安定であることを示している. RK 法の安定性理論においてはきわめて重要かつ基本的な定理である. そうした重要性からか, いくつかの別証明が与えられている. そのひとつに Padé 近似の連分数展開を用いた Butcher [2] による証明がある. 例えば, (s, s) 次 Padé 近似は

$$(s = 1) \quad \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}} = 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{z}}$$

$$(s=2) \quad \frac{1 + \frac{z}{2} + \frac{z^2}{12}}{1 - \frac{z}{2} + \frac{z^2}{12}} = 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{z} + \frac{1}{\frac{6}{z}}}$$

$$(s=3) \quad \frac{1 + \frac{z}{2} + \frac{z^2}{10} + \frac{z^3}{120}}{1 - \frac{z}{2} + \frac{z^2}{10} - \frac{z^3}{120}} = 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{z} + \frac{1}{\frac{6}{z} + \frac{1}{\frac{10}{z}}}}$$

のように展開され、この展開式を用いて、評価式 (1.7) を次のように示すことができる。右辺の (“1+” の右の) 分数部分の分母の $2/z$ 以降の式をまとめて Z (例えば、 $s=1$ のときは、単に $Z=2/z$) とおくと、上式はいずれも $1+2/(-1+Z)$ と表される。 $\operatorname{Re} z < 0$ ならば、 $\operatorname{Re} Z < 0$ となり、さらに、1次分数変換 $1+2/(-1+Z) = (1+Z)/(-1+Z)$ は左半平面 $\operatorname{Re} Z < 0$ を単位円内部にうつすことから、(1.7) が得られる。

本稿では、類似の論法が RK 法を遅延微分方程式 (delay differential equation) に適用した際の安定性を解析する場合にも有効であることを示す。

2. スカラーの遅延微分方程式に対する安定性

遅延微分方程式とは

$$(2.1) \quad u'(t) = f(t, u(t), u(t-\tau))$$

のような形の方程式を言う。ここで、 τ は遅延 (遅れ時間) を表す正数である。一般には、 τ が t や $u(t)$ に依存する場合、さらには、こうした τ が複数個含まれる場合なども考えられるが、以下の議論では、簡単のため、遅延 τ は定数であるとする。いずれの場合にも、(2.1) の初期値問題は、ある区間で定義された関数を初期条件として解くことになる。

遅延微分方程式に RK 法を適用するためには、 u_n から u_{n+1} を計算する際に、 $u(t_n + c_i h - \tau)$ に相当するデータをなんらかの方法で与えてやる必要がある。ここでは、RK 法の連続拡張 (例えば、[18])、すなわち、ステップ点上のみで計算されている RK 法の近似解を t の区間全体に拡張するという手法を用いることにする。表 1 に現れる公式の b_i はすべて (1.4) の第 2 式で与えられることに注意すると、(1.3) 式の b_i を多項式

$$(2.2) \quad w_i(\theta) = \int_0^\theta l_i(\sigma) d\sigma$$

でおきかえたものは, u_n と u_{n+1} を多項式でつないで, 区間 $[t_n, t_{n+1}]$ 全体に拡張したものと考えられる. これらをつなぎあわせたもので, 遅延を含む項の近似値を与えることにすると, u_n から u_{n+1} を計算する時点では, ($h < \tau$ ならば) (2.1) の右辺に現れる $u(t-\tau)$ ($t \leq t_{n+1}$) は既知関数のようにみなせることになり, RK 法が適用可能となる.

RK 法の遅延微分方程式に対する安定性を解析するためのテスト方程式として, 通常のテスト方程式 (1.5) に遅延を含む項を加えた

$$(2.3) \quad u'(t) = \lambda u(t) + \mu u(t-\tau) \quad (\lambda, \mu \in \mathcal{C})$$

のような方程式が提案されている [1]. この方程式のゼロ解は, パラメータ λ, μ が

$$(2.4) \quad \operatorname{Re} \lambda < -|\mu|$$

をみたすとき, 任意の $\tau > 0$ について漸近安定となる. この性質に基づき, RK 法の A 安定性の概念を, 遅延微分方程式の場合に拡張することができる.

ステップ幅 h は

$$(2.5) \quad h = \frac{\tau}{m} \quad (m : \text{正整数})$$

の形の一定値であるとする. テスト方程式 (2.3) に RK 法を適用すると,

$$(2.6) \quad U'_n = \alpha(u_n e + AU'_n) + \beta(u_{n-m} e + WU'_{n-m}),$$

$$(2.7) \quad u_{n+1} = u_n + b^T U'_n$$

のような差分方程式が得られる. ただし,

$$\alpha = h\lambda, \quad \beta = h\mu, \quad W = (w_j(c_i))_{1 \leq i, j \leq s}$$

であり, U'_n は (1.2)-(1.3) 式の $(hf(t_n + c_i h, U_{n,i}))_{1 \leq i \leq s}$ に相当する新たな中間変数 (のベクトル) である.

以上の記号のもとで, (2.3) に関する RK 法のある種の絶対安定性 (ステップ幅 h の大きさに依らない安定性) が次のように定義される.

定義 2.1 RK 法が P 安定であるとは,

$$(2.8) \quad \operatorname{Re} \alpha < -|\beta|$$

をみたす任意の α, β に対して, 差分方程式 (2.6)-(2.7) のゼロ解が漸近安定になることを言う.

通常のテスト方程式 (1.5) は (2.3) の特殊な場合 ($\mu = 0$ とおいたもの) とみなせることから, RK 法が P 安定であるためには A 安定であることが必要条件となる. A 安定な RK 法は必ずしも P 安定とはならないが, 補間型の公式に限ると, 次のような結果が Zennaro [19] により示されている. 特に, Gauss, Radau IIA, Lobatto IIIA 公式は, すべて P 安定である.

定理 2.2 補間型 RK 法が次の二つの条件を満たすならば, P 安定である.

- (i) 行列 A のすべての固有値の実部が非負である.
- (ii) RK 法は A 安定である.

この定理の証明は, Zennaro [19] の結果から導かれる次の補題を用いると容易である.

補題 2.3 条件 $\operatorname{Re} \alpha < -|z|$ を満たす任意の α, z に対して,

- (i) $I_s - \alpha A - zW$ は可逆,
- (ii) $|r_\alpha(z)| < 1$

が成り立つならば, RK 法は P 安定である. ここで, $r_\alpha(z)$ は

$$(2.9) \quad r_\alpha(z) = 1 + (\alpha + z)b^T(I_s - \alpha A - zW)^{-1}e$$

で定義される 2 変数 α, z の有理関数である.

補間型公式については, (1.4) の第 1 式, $w_i(\theta)$ の定義式 (2.2) から, $A = W$ となり,

$$(2.10) \quad I_s - \alpha A - zW = I_s - (\alpha + z)A$$

$$(2.11) \quad r_\alpha(z) = r(\alpha + z)$$

が成立する. 他方, (2.8) から $\operatorname{Re}(\alpha + z) < 0$ が示され, 定理 2.2 の条件から直ちに補題 2.3 の十分条件が導かれる.

非補間型公式の場合, 上記のような簡単な関係式は一般には見い出せそうもないが, 関数 $r_\alpha(z)$ は, 例えば, Radau IA 公式の場合,

$$(s=1) \quad 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{\alpha+z} + \frac{z-\alpha}{\alpha+z}},$$

$$(s=2) \quad 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{\alpha+z} + \frac{1}{\frac{6}{\alpha+z} + \frac{z-\alpha}{\alpha+z}}},$$

$$(s=3) \quad 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{\alpha+z} + \frac{1}{\frac{6}{\alpha+z} + \frac{1}{\frac{10}{\alpha+z} + \frac{z-\alpha}{\alpha+z}}}},$$

Lobatto IIC 公式の場合,

$$(s=2) \quad 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{\alpha+z} + \frac{\alpha}{2-\alpha}},$$

$$(s=3) \quad 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{\alpha+z} + \frac{1}{\frac{6}{\alpha+z} + \frac{\alpha}{4-\alpha}}},$$

$$(s=4) \quad 1 + \frac{2}{-1 + \frac{2}{\alpha+z} + \frac{1}{\frac{6}{\alpha+z} + \frac{1}{\frac{10}{\alpha+z} + \frac{\alpha}{6-\alpha}}}}$$

のような形に連分数展開される。これは、 W 変換 (W -Transformation) と呼ばれる陰的 RK 法の研究分野では比較的良好に知られた手法 ([6], IV.5) を用いて示される。この展開式を用いると、Ehle の定理 (定理 1.1) の Butcher による証明と同様な論法によって、次の定理を示すことができる [14]。

定理 2.4 *Radau IA 公式, Lobatto IIC 公式は P 安定である。*

3. 連立遅延微分方程式に対する安定性

遅延を含まない通常の微分方程式の場合とは異なり、前節の結果は、単純には、連立方程式の場合には適用できない。例えば、(2.3) の λ, μ を、それぞれ、正方行列 L, M でおきかえ、未知関数もベクトル値関数とした

$$(3.1) \quad u'(t) = L u(t) + M u(t - \tau)$$

のような方程式を考える。行列のスペクトルを $\sigma[\cdot]$, (複素) 左半平面を \mathcal{C}^- のように表すとき、方程式 (3.1) のゼロ解は、

$$(S) \quad \sigma[L + \zeta M] \subset \mathcal{C}^- \quad (\forall |\zeta| \leq 1)$$

の条件のもとで、任意の τ に対して漸近安定となる [3, 10]。行列 L, M は同時に対角化 (あるいは三角化) できるとは限らず、通常の微分方程式の場合のように、連立方程式に対する安定性をスカラーの方程式に対する安定性から導くことは、この場合はできない。しかしながら、補間型公式については、定理 2.2 を連立方程式の場合に拡張した次の結果 [11] が成立する (この結果の中立型方程式の場合への拡張については [8, 12], 非線形方程式の場合の類似の結果については [13] 参照)。

定理 3.5 方程式 (3.1) について, 条件 (S) が成り立つとする. 補間型 RK 法が定理 2.2 の条件 (i), (ii) をみたすならば, 次の (P) が成り立つ.

(P) 方程式 (3.1) に (2.5) の形の h を用いた RK 法を適用して得られる差分方程式のゼロ解は, 任意の $\tau > 0, m \geq 1$ に対して漸近安定となる.

この定理の証明の基本的なアイデアは極めて単純である. 複素数で展開されている P 安定性の議論を, 複素行列を対象にした議論に一から展開し直すというものである. 複素数 α, β に対応して $X (= hL), Y (= hM)$ のような行列を考え, それに応じて, 行列 $I_s - \alpha A - zW$, 有理関数 $r_\alpha(z)$ も, それぞれ,

$$(3.2) \quad M_X(Y) = I_{sd} - A \otimes X - W \otimes Y,$$

$$(3.3) \quad R_X(Y) = I_d + (b^T \otimes I_d) M_X(Y)^{-1} (e \otimes I_d) (X + Y)$$

(d は L, M のサイズ) のような行列, 行列から行列への写像におきかえることにする. そのとき, 補題 2.3 に対応して, 次が得られる (証明は, 例えば, in 't Hout と Spijker の定理 [9] による).

補題 3.6 条件

$$\sigma[X + \zeta Y] \subset \mathcal{C}^- \quad (\forall |\zeta| \leq 1)$$

をみたす任意の X, Y に対して

(i) $M_X(Y)$ は可逆,

(ii) $\rho[R_X(Y)] < 1$

となるならば, (P) が成り立つ. ここで, $\rho[\cdot]$ は行列のスペクトル半径を表す.

補間型公式については,

$$(3.4) \quad M_X(Y) = I_{sd} - A \otimes (X + Y), \quad R_X(Y) = r(X + Y)$$

の関係が成立する. したがって, 定理 3.5 は補題 3.6 とスペクトル写像定理から容易に示される.

Radau IA 公式, Lobatto IIIC 公式に対する $r_\alpha(z)$ の連分数展開も, 逆数を逆行列におきかえるなどして, 形式的には, $R_X(Y)$ の“連分数展開”に直すことができる. しかし, このことから直ちに定理 2.4 に対応する結果を導くことはできない. Butcher の論法は, $z, w \in \mathcal{C}$ が $\operatorname{Re} z < 0, \operatorname{Re} w < 0$ をみたすならば, $\operatorname{Re}(z+w) < 0$ となることが基本となっているが, 行列の場合, $\sigma[X] \subset \mathcal{C}^-$ かつ $\sigma[Y] \subset \mathcal{C}^-$ であっても $\sigma[X+Y] \subset \mathcal{C}^-$ とは限らないため, スカラーの場合の議論を, 単純には連立方程式の場合の議論には拡張できないのである. そこで, 方程式 (3.1) に対して, さらに次のような条件を考えることにする.

(LS) 任意の $|\zeta| \leq 1$ に対して, 正定値エルミート行列 H が存在して,

$$(3.5) \quad L^*H + HL \leq 0, \quad (L + \zeta M)^*H + H(L + \zeta M) \leq 0$$

が成り立つ.

ここで, “*” は共役転置の意味である. また, “ ≤ 0 ” は, 左辺のエルミート行列が半負定値であることを示している.

この条件を (3.1) に付け加えると, 上記の難点が解消されて, 定理 2.4 が連立方程式の場合に拡張される [15].

定理 3.7 方程式 (3.1) は, 条件 (S) および (LS) をみたすものとする. そのとき, Lobatto III C 公式について (P) が成立する. さらに, 条件 (LS) の行列 H が

$$(3.6) \quad L^*H^{-1}L - M^*H^{-1}M > 0$$

をみたすならば, Radau IA 公式についても (P) が成立する. ここで, 記号 “ > 0 ” は左辺のエルミート行列が正定値であることを表す.

最後に, この定理の系を 2 つ述べておく.

系 3.8 $\|\cdot\|$ を内積から導かれる行列 (作用素) ノルム, $\mu[\cdot]$ を対応する対数ノルム (例えば, [4]) とする. 行列 L, M が

$$(3.7) \quad \mu[L] < -\|M\|$$

をみたすならば, Lobatto III C 公式について (P) が成立する. 特に, 通常のユークリッド内積の場合には, Radau IA 公式についても (P) が成立する.

この系は, 条件 (LS) の H を, 内積を定義する正定値エルミート行列 (ユークリッド内積の場合は単位行列) にとることにより示される.

また, 最近筆者ら [16, 17] が新たなテスト方程式として提案しているスカラーの 2 階遅延微分方程式

$$(3.8) \quad u''(t) = \lambda u'(t) + \mu u'(t - \tau) + \nu u(t) \quad (\lambda, \mu, \nu \in \mathbb{C})$$

から, $u'(t)$ を新たな未知変数として得られる 2 変数の連立方程式を考える. この場合の L, M は

$$(3.9) \quad L = \begin{pmatrix} \lambda & \nu \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となり, 条件 (S) を λ, μ, ν を用いて表すと,

$$\operatorname{Re} \lambda < 0, \quad \operatorname{Re} \lambda \operatorname{Re}(\lambda \bar{\nu}) + (\operatorname{Im} \nu)^2 < 0,$$

$$|\mu| < \inf_{\operatorname{Re} z=0} \left| \frac{z^2 - \lambda z - \nu}{z} \right|$$

のようになる。この方程式については、次 ([16] の用語では、Lobatto IIC 公式は PR 安定) が成り立つ。

系 3.9 方程式 (3.8) から得られる連立方程式が条件 (S) をみたすならば、Lobatto IIC 公式について (P) が成立する。

この系は、 E_1 を (1, 1) 成分が 1 でそれ以外が 0 の 2×2 行列とし、条件 (LS) における H を代数的 Riccati 方程式

$$(3.10) \quad L^*H + HL + HMM^*H + E_1 = 0$$

の正定値エルミート解にとることによって示される。なお、方程式 (3.10) が、条件 (S) のもとで、正定値エルミート解をもつことは、例えば Hinrichsen-Pritchard [7] の結果によって保証される。

謝辞 本研究に関して熱心にご討論いただいた名古屋大学、鳥居 達生 教授、三井 斌友 教授、杉浦 洋 助教授に感謝します。

参考文献

- [1] V. K. Barwell, Special stability problems for functional differential equations, *BIT* **15** (1975), 130-135.
- [2] J. C. Butcher, On A-stable implicit Runge-Kutta methods, *BIT* **17** (1977), 375-378.
- [3] J. Chen, D. Xu and B. Shafai, On sufficient conditions for stability independent of delay, *IEEE Trans. Automat. Contr.* **40** (1995), 1675-1680.
- [4] K. Dekker and J. G. Verwer, *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*, North-Holland, Amsterdam, 1984.
- [5] B. L. Ehle, A-stable methods and Padé approximations to the exponential, *SIAM J. Math. Anal.* **4** (1973), 671-680.
- [6] E. Hairer and G. Wanner, *Solving ordinary differential equations II*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [7] D. Hinrichsen and A. J. Pritchard, Stability radius for structured perturbations and the algebraic Riccati equation, *Systems & Control Letters* **8** (1986), 105-113.

- [8] G.-D. Hu and T. Mitsui, Stability analysis of numerical methods for systems of neutral delay-differential equations, *BIT* **35** (1995), 504–515.
- [9] K. J. in 't Hout and M. N. Spijker, Stability analysis of numerical methods for delay differential equations, *Numer. Math.* **59** (1991), 807–814.
- [10] K. J. in 't Hout, The stability of θ -methods for systems of delay differential equations, *Ann. Numer. Math.* **1** (1994), 323–334.
- [11] T. Koto, A stability property of A -stable natural Runge-Kutta methods for systems of delay differential equations, *BIT* **34** (1994), 262–267.
- [12] T. Koto, A stability property of A -stable collocation-based Runge-Kutta methods for neutral delay differential equations, *BIT* **36**, 855–859.
- [13] T. Koto, The stability of natural Runge-Kutta methods for nonlinear delay differential equations, to appear in *Japan J. Ind. Appl. Math.* **14** (1997).
- [14] T. Koto, NP -stability of Runge-Kutta methods based on classical quadrature, to appear in *BIT* (1997).
- [15] T. Koto, Stability of the Radau IA and Lobatto IIIC methods for delay differential equations, Report CSIM 96-06, Department of Computer Science and Information Mathematics, University of Electro-Communications, 1996.
- [16] 小藤 俊幸, 小原 祥人, Runge-Kutta 法の P 安定領域, PR 安定領域の数値計算, 応用数学合同研究集会報告集, 281–286, 1996.
- [17] 小原 祥人, 小藤 俊幸, Runge-Kutta 法の 2 階遅延微分方程式に対する数値的安定性, 日本応用数学会平成 8 年度年会講演予稿集, 204–205, 1996.
- [18] M. Zennaro, Natural continuous extensions of Runge-Kutta methods, *Math. Comput.* **46** (1986), 119–133.
- [19] M. Zennaro, P -stability properties of Runge-Kutta methods for delay differential equations, *Numer. Math.* **49** (1986), 305–318.