

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 $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq s}$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_s)^T$ ($c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$) 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

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

に, RK 法を適用すると, 漸化式

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

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

$$(1.3) \quad |r(z)| < 1 \quad (\operatorname{Re} z < 0)$$

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

$$(1.4) \quad \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= Cx(t) + e u(t), \\ y(t) &= b^T x(t) \end{aligned}$$

により定義する. このシステムの伝達関数は

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

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

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

のように表せる. したがって, Runge-Kutta 法の A 安定性は

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

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]

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

に適用すると,

$$(2.2) \quad U'_n = \alpha(u_n e + AU'_n) + \beta(u_{n-m} e + WU'_{n-m}),$$

$$(2.3) \quad u_{n+1} = u_n + b^T U'_n$$

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

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

$$(2.5) \quad \alpha = \lambda h, \quad \beta = \mu h.$$

である.

さらに,

$$(2.6) \quad \Omega_P = \{(\alpha, \beta) \in \mathcal{C}^2 : |\beta| < -\operatorname{Re} \alpha\},$$

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

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

により定義する. Cramer の公式により, $r_\alpha(z)$ は

$$(2.8) \quad r_\alpha(z) = p_\alpha(z)/q_\alpha(z),$$

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

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

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、

$$(2.11) \quad E = (w'_j(c_i))_{1 \leq i, j \leq s}$$

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、 $2\mathcal{R} + \zeta\mathcal{R}E + \bar{\zeta}E^T\mathcal{R} \geq 0$ 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

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

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

と表すことができる。さらに、(2.12) と

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

により、

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

を得る。一方、 $\zeta = z/\text{Re } \alpha$ とおくと、

$$(2.15) \quad \begin{aligned} \mathcal{R}Z + \bar{Z}^T \mathcal{R} &= \mathcal{R}(\alpha I + zE) + (\bar{\alpha}I + \bar{z}E^T)\mathcal{R} \\ &= \text{Re } \alpha (2\mathcal{R} + \zeta\mathcal{R}E + \bar{\zeta}E^T\mathcal{R}) \end{aligned}$$

となり, 条件 (A), (C₁) と (2.14) から

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

の関係が得られる. これと, (C₂) 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 (C₂) により,

$$(2.17) \quad \lim_{z \rightarrow z_0} |r_{\alpha_0}(z)| = \infty$$

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. $\square$

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,

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

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

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

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

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,

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

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 SIRC 法 (3.1) は, A 安定であると仮定する. そのとき,

$$(3.5) \quad \Phi(c_1, c_2, c_3) = \varphi(\gamma)$$

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

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

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

$$(3.7) \quad \varphi(\gamma) \geq 0,$$

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

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

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

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

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

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

により定義すると, 計算により, $\mathcal{R}e = b$,

$$(3.11) \quad \widehat{\mathcal{R}}\hat{A} + \hat{A}^T\widehat{\mathcal{R}} - \widehat{b}\widehat{b}^T = \widehat{g}\widehat{g}^T \geq 0$$

となることが示される. ここで,

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

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, $\text{rank}[\gamma I - \hat{A}, \hat{b}] = 3$ であることが簡単に確かめられ, $(\hat{A}, \hat{b})$ は可制御となる (例えば, [12], Theorem 4.3.3). 行列 $\hat{A}$ 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, SIRC 法 (3.1) は $C(2)$, $B(2)$ をみたすことから, 行列

$$(3.13) \quad E = (w'_j(c_i))_{1 \leq i, j \leq 3}$$

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

$$(3.14) \quad E = V \widehat{E} V^{-1},$$

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

と表すことができる. さらに, (3.10) と (3.15) から,

$$(3.16) \quad \det [2\widehat{\mathcal{R}} + \zeta \widehat{\mathcal{R}} \widehat{E} + \bar{\zeta} \widehat{E}^T \widehat{\mathcal{R}}] \\ = 2(1 + \operatorname{Re} \zeta) [4 \det[\widehat{\mathcal{R}}](1 + \operatorname{Re} \zeta) - \{\Phi(c_1, c_2, c_3) - \varphi(\gamma)\}^2 |\zeta|^2]$$

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 (C₁) 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, (C₁) の条件が成り立たないとする, エルミート行列

$$(3.17) \quad 2\widehat{\mathcal{R}} + \zeta \widehat{\mathcal{R}} \widehat{E} + \bar{\zeta} \widehat{E}^T \widehat{\mathcal{R}}$$

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 (C₂) 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. $\square$

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.