

遅延微分方程式の数値解法概観

名古屋大学・名誉教授 三井 斌友*

Taketomo MITSUI

Professor Emeritus, Nagoya University

1 数値解法の必要性と課題

本稿は、遅延微分方程式 (delay differential equations, 以下 DDEs) の数値解法の要点を、離散変数法 (discrete variable methods, DVMs) を中心として紹介し、その特性や評価を概説することを目的とする。対象とする問題を、ごく一般的に微分方程式

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(t, x(t), x(t - \tau(t))) \quad (t_0 \leq t \leq t_f) \quad (1.1)$$

と初期条件

$$x(t) = \varphi(t) \quad (t_0 - \tau(t_0) \leq t \leq t_0) \quad (1.2)$$

によって記述し、函数 x, f, φ, τ は条件

$$x : [t_0, t_f] \mapsto \mathbb{R}^d, \quad f : [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d, \quad \varphi : [t_0 - \tau(t_0), t_0] \mapsto \mathbb{R}^d, \quad \tau(t) \geq 0$$

を満たす写像とする。一意解が存在する問題を対象としなければ数値解法の意味はないが、本稿ではそのための条件を精密に記述することは避けるものの、解の一意存在を前提とする。

問題 (1.1), (1.2) と同時に常微分方程式 (ODEs) の初期値問題

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(t, x(t)) \quad (t_0 \leq t \leq t_f), \quad (1.3)$$

$$x(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}^d \quad (1.4)$$

も並行して考察する。もちろん両者で f は異なる。DDEs も ODEs も、その定性的振舞いに関する研究や、解函数を具体的に与える解析的解法 (analytical solution) が様々に発展していることは周知であるが、本稿は数値解法 (numerical solution) を考察の対象とし、その代表として DVMs を取り扱う。DVMs の原理は

- (1) 函数 f の知識のみを使い、その原始函数・導函数を要しない
- (2) 独立変数 t を $t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n < \cdots < t_N (= t_f)$ と離散化し、解の値 $x(t_n)$ の近似値 x_n を組織的に生成する

と述べることができる。そのため、広範な問題 (一般的な f をもつ問題) を対象とすることができ、それゆえ汎用性をもつコンピュータ・プログラミングが可能である特徴をもってい

*tom.mitsui@nagoya-u.jp

る。しかし、DVM の特性の理解なしにこれを適用することは、しばしば誤った結果を導きかねないことに注意を要する。DVM を解析し、特徴づける数値解析 (numerical analysis) がまず必要だが、特に DDEs ではまだ課題が大きいと筆者は考えている。それは方程式 (1.1) が時間遅れ項 $\tau(t)$ を含んでいるという、DDEs の本質が関わっている。本稿では DDEs に対する数値解析の到達点を、できるだけ手短かに提示し、今後の発展に資することを期している。

2 遅延微分方程式に対する区間接続法

DDEs の解に対する素朴なアプローチは、ステップ法 (method of steps) あるいは区間接続法 (continuation method) と呼ばれる、次のように記述される過程であり、DDEs に対する DVMs の出発点でもある。

区間接続法の過程

過程 (pre): $T_0 = t_0$ から出発して、 $\ell = 1, 2, \dots$ に対して $T_\ell - \tau(T_\ell) = T_{\ell-1}$ を逐次解き、区間の端点の列 $\{T_1, T_2, \dots, T_L\}$ を生成する。ただし、 T_L は $T_L \geq t_f$ を満たす最初の値とする。

過程 (0): $x_0(t)$ を、区間 $[t_0, T_1]$ 上の ODE の初期値問題

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(t, x(t), \varphi(t - \tau(t))), \quad x(t_0) = \varphi(t_0)$$

の解として求め、函数集合 $\Xi(t)$ の $t \in [t_0, T_1]$ 上の成分を $x_0(t)$ と定義する。

ℓ を $1, 2, \dots, L-1$ と増やししながら

過程 (ℓ): $x_\ell(t)$ を区間 $[T_\ell, T_{\ell+1}]$ 上の ODE の初期値問題

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(t, x(t), \Xi(t - \tau(t))), \quad x(T_\ell) = \Xi(T_\ell)$$

の解として求め、函数集合 $\Xi(t)$ の $t \in [T_\ell, T_{\ell+1}]$ 上の成分を $x_\ell(t)$ と定義すると反復する。

すなわち区間接続法は、DDE の解を ODE 初期値問題の解の系列に置き換え、区間ごとに成分をもつ $\Xi(t)$ によって DDE の解を与えようとしている。したがってこの過程が前進するためには、 f や φ に、例えば、 $f(t, x, y)$ の (x, y) に関する局所 Lipschitz 連続性、 $\tau(t)$ の連続性、 $(t_0, t_0 + \xi]$ で $t - \tau(t) > 0$ となる $\xi > 0$ の存在などの仮定が必要であり、これらは暗黙に成り立っているとしよう。何より過程 (0)、(ℓ) に現れる ODE の初期値問題が一意解をもち、何らかの手段で解を表示できる ($\Xi(t)$ を構成できる) ことが必要である。それが可能であっても、区間接続法を解析的手段のみで実行することは、簡単ではない。次の例でそれを確かめよう。

例題 2.1. スカラー問題だが変数遅延をもつ

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt}(t) &= \lambda \frac{t-1}{t} x(t - \log(t) - 1) \cdot x(t) \quad (t \geq 1), \\ x(t) &= \varphi(t) \equiv 1 \quad (0 \leq t \leq 1) \end{aligned}$$

を考えよう．すなわち $f(t, x, y) = \lambda \frac{t-1}{t} y(t - \tau(t)) \cdot x(t)$, $\tau(t) = \log(t) + 1$ とした．区間接続法の過程 **(pre)₀** によれば, $t > 1$ で $t - \log(t) - 1 = T_0 (= 1)$ を解き $T_1 (\approx 3.1461)$ がえられる．すると過程 **(0)** によって $[t_0 (= 1), T_1]$ で初期値問題

$$\frac{dx}{dt}(t) = \lambda \frac{t-1}{t} x(t), \quad x(1) = 1$$

を解き, $x_0(t) = \exp(\lambda(t - \log(t) - 1))$ と $x_0(T_1) = e^\lambda$ をえる．

区間接続法の過程 **(pre)₁** によれば, $t > 1$ で $t - \log(t) - 1 = T_1$ を解き, $T_2 (\approx 5.9254)$ をえる．過程 **(1)** では $[T_1, T_2]$ で ODE

$$\frac{dx}{dt}(t) = \lambda \frac{t-1}{t} \exp(\lambda(t - \log(t) - 1 - \log(t - \log(t) - 1) - 1)) \cdot x(t)$$

を初期条件 $x(T_1) = e^\lambda$ のもとで解く．変係数線型 ODE であることに変わりはないから, 解を解析的に表現することは可能だが

$$x(t) = \exp \left\{ \lambda \left(\int_{T_1}^t \frac{s-1}{s} \exp(\lambda(s - \log s - \log(s - \log s - 1) - \log \lambda - 2)) ds + 1 \right) \right\}$$

と与えられ, その複雑さには辟易する．過程 **(pre)₂** では $t > T_2$ で $t - \log(t) - 1 = T_2$ を解き $T_3 (\approx 9.1379)$ をえる．次いで過程 **(2)** として, 区間 $[T_2, T_3]$ で解く初期値問題の右辺項は依然変係数線型だが, 書き下すのも面倒なことは明らかである．さらに区間列 $[T_0, T_1], [T_1, T_2], [T_2, T_3], \dots$ は等間隔ではない．◆

この簡単な例題でも, 区間接続法を解析的に実行することは容易ではなく, まして連立系では実質的に不可能に近く, 数値的手段が必要なことが了解されよう．さらに ODE の離散変数法を区間接続法の過程 **(l)** に適用し, 区間列が等間隔でないならば, $\tau(t - \tau(t))$ の変数値 $t - \tau(t)$ に大きな問題を生じうる．すなわち, $t_n - \tau(t_n)$ が過去のいずれかのステップ点 t_m に等しいか, 非常に疑わしい．このままでは区間接続法に適用した離散変数法そのものが行き詰まってしまうため, 何らかの打開策が必要である．

3 連続 Runge–Kutta 法

本節を, ODE の初期値問題に対する代表的 DVM である Runge–Kutta 法を概説することから始める．対象の初期値問題 (1.3), (1.4) に対して, 一段階法 (single-step method) の代表である Runge–Kutta 法を導入する．すなわち, ステップ幅 $h = (t_f - t_0)/N$ のステップ点 $t_n = t_0 + nh$ ($n = 1, 2, \dots, N$) について, s 段 (stage) Runge–Kutta 法 (RK 法) を

$$X_{n,i} = x_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(t_n + c_j h, X_{n,j}) \quad (i = 1, \dots, s), \quad (3.1)$$

$$x_{n+1} = x_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, X_{n,i}) \quad (3.2)$$

で定義する．第二式の x_{n+1} が $x(t_n + h)$ を近似するよう構成するのに対して, 第一式の $X_{n,i}$ は第 n ステップでの i 番目の段の値 (stage value) とよばれ, $x(t_n + c_i h)$ を近似すると考えてよい．

ここで等ステップ幅 (equi-stepsizes) で定式化したのは, RK 法など一段階法では, $t_n + h$ での近似値 x_{n+1} が得られたら, 次のステップに対して新しいステップ幅 h_{new} を採用するのに何の障害もないからである. むしろ, いかにして“最適な”な h_{new} を選ぶかが, ODE に対する数値解析の大きなテーマである. いずれにせよ配列 $\{a_{ij}, b_i, c_j\}$ が RK 法を特徴づけるので, s 次正方形行列 $A = (a_{ij})$ と s 次ベクトル $\mathbf{b} = (b_i)$, $\mathbf{c} = (c_j)$ が RK 法のスキーム (式 (3.1), (3.2) のように, DVM の具体的計算手順をスキーム (scheme) と呼ぶ) を特定する.

DVM の数値解析において, スキームを評価する基準が重要であり, 本稿では収束性 (convergence) と安定性 (stability) に焦点をあてる. 収束性は, スキームにおいて $nh (= t)$ の値を固定し, $h \downarrow 0$ のとき $x_n \rightarrow x(t)$ を達成することを云う. さらに, 十分滑らかな解 $x(t)$ をもつ IVP に対して, $\sup_{0 \leq n \leq N} \|x(t) - x_n\| = Ch^{p+1}$ が成り立つならば, その DVM は p 次収束

すると云う. 一方安定性は, h の大きさを固定したとき, x_n の計算過程で混入した摂動が, 後続のステップで破滅的に拡大することがないことを云う. DVM の安定性 (数値的安定性) を考察するとき, 対象である微分方程式は安定であることを, たとえ暗黙にでも仮定することに注意しよう. 図 3.1 にこのことを図式化して示す. 収束次数 p の方法で h を半分にすれば, 離散化誤差は $(1/2)^p$ に減少するという意味で, 収束性は DVM の効率に関わる. これに対して, 安定性は DVM の信頼性に関わる. すなわち安定性を欠く DVM は, 信頼できる計算結果を与えない.

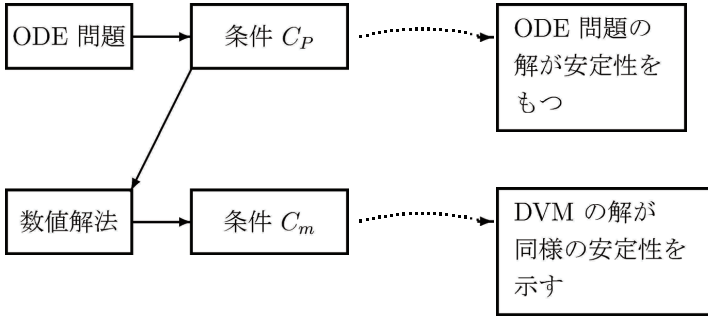


図 3.1: 安定性解析の図式

ODE に対する RK 法については, すでに多くの結果が知られている. その詳細はたとえば [3, 4] を参照するのがよいが, 大部なので, 要点を手取り早く知りたいならば [5] でもよい. 次に掲げる 4 段 ($s = 4$) の RK 法, すなわち“古典的 Runge-Kutta 法” (classical Runge-Kutta あるいは ‘the’ Runge-Kutta と呼ばれることがある. 以降 RK4 と略記) は収束次数 4 で, (限られた) 安定性をもつ.

$$\begin{cases} k_{n,1} = f(t_n, x_n), \\ k_{n,2} = f(t_n + (1/2)h, x_n + (1/2)hk_{n,1}), \\ k_{n,3} = f(t_n + (1/2)h, x_n + (1/2)hk_{n,2}), \\ k_{n,4} = f(t_n + h, x_n + hk_{n,3}), \\ x_{n+1} = x_n + (h/6)(k_{n,1} + 2k_{n,2} + 2k_{n,3} + k_{n,4}) \end{cases} \quad (3.3)$$

この表記は (3.1), (3.2) と異なるが, 配列を次のように導入すれば対応する.

$$A = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ 1/2 & 0 & & \\ 0 & 1/2 & 0 & \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1/6 \\ 1/3 \\ 1/3 \\ 1/6 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

RK 法の安定性については, 線型安定性解析 (linear stability analysis) の立場をとる. すなわち, 図 3.1 に云う「条件 C_P (problem condition)」として ODE の (局所) 線型化方程式

$$\frac{dx}{dt}(t) = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=\hat{x}(t)} x(t)$$

の漸近安定性をとる. これに対して適用された RK 法の解が $x_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) を満たす条件 (「条件 C_m (method condition)」) を調べる. 第一変分である $\partial f / \partial x|_{x=\hat{x}(t)}$ の固有値分布について, その実部が負であることが ODE の漸近安定の条件ゆえ, DVM の安定性を見るには, スカラーのテスト方程式

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x \quad (\lambda \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \lambda < 0) \quad (3.5)$$

に DVM を適用したとき, $x_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) の条件を探る. s 段 p 次 RK 法を (3.5) に適用すると, $z = \lambda h$ として

$$x_{n+1} = R(z)x_n, \quad R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \cdots + \frac{z^p}{p!} + \cdots + C_s z^s$$

が成り立つ. 一般に $s \geq p$ であり, さらに $s \geq 5$ ならば $s > p$ であることが証明されている. これより, RK 法 (3.1), (3.2) の安定性領域 (region of stability) として

$$\mathcal{R} = \{z \in \mathbb{C}; |R(z)| < 1\}$$

と導入するのは自然であろう. すなわち, $\lambda h \in \mathcal{R}$ ならば RK 法の解は漸近安定である. 元来漸近安定な ODE の局所線型化方程式の固有値たちは, すべて左半複素平面に分布しているから, $\mathcal{R}$ は左半平面に向かって広いことが望ましい. しかし図 3.2 に示したように, RK4 の安定性領域は左側にも有界という意味で, 「限定的に安定」である.

前節の最後に述べた, DDEs に対する区間接続法で生じた問題に戻ろう. すなわち, 区間接続法において区間 $[T_\ell, T_{\ell+1}]$ 上で

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(t, x(t), \Xi(t - \tau(t))), \quad x(T_\ell) = \Xi(T_\ell)$$

にステップ幅 h の RK を適用すると, $t = t_n + c_j h$ における函数値 $f(t, x(t), \Xi(t - \tau(t)))$ が必要であるが, 第 2 変数 $x(t)$ の値はまだしも, 第 3 変数 $\Xi(t - \tau(t))$ の対応する値 $\Xi(t_n + c_j h - \tau(t_n + c_j h))$ は, 過去の (t_n より手前の) ステップ点の値でも, 過去の段の値でもない可能性が高く, このままでは RK 法を続けることができない. ただし, $\tau(t) = \tau$ 一定の定数遅延で, ステップ幅を $h = \tau/m$ (m : 正整数) としたときは例外であることに, 予め注意しよう. そうではない一般の場合に, この問題にいかに対応して DVM を構成するかが課題である.

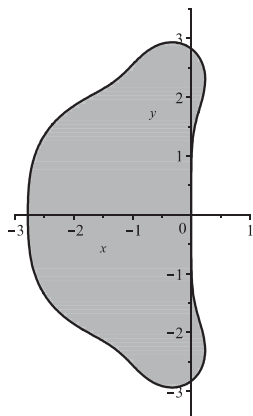


図 3.2: RK4 の安定性領域

そこで採用されるのが連続 Runge-Kutta 法 (continuous Runge-Kutta method, CRK) の考え方である. これは, ODE の場合の RK 法 $\{A, \mathbf{b}, \mathbf{c}\}$ に, θ ($0 \leq \theta \leq 1$) を変数とする多項式の集合 $\{w_i(\theta); i = 1, 2, \dots, s\}$ を付随させ, $w_i(0) = 0, w_i(1) = b_i$ の条件を満たすとする. すると θ を変数とする

$$\psi(t_n + \theta h) = x_n + h \sum_{i=1}^s w_i(\theta) f(t_n + c_i h, X_{n,i}) \quad (3.6)$$

は, $\theta = 0$ ならば $\psi(t_n) = x_n$, $\theta = 1$ ならば $\psi(t_n + h) = x_{n+1}$ を満たすことは明らかである. そこで, $\psi(t_n + \theta h)$ をできるだけ h の高い次数 (可能なら p 次) で $x(t_n + \theta h)$ の近似となるように構成し, これを連続 Runge-Kutta 法と呼ぼう. 1 ステップ前進するのに, 段の値として f を s 回計算する (コンピュータ・プログラムでいえば function call をする) 必要があるが, それ以上の函数値計算を CRK は要求しないことに注意する. 実は, continuous Runge-Kutta method と呼ばれる別の ODE 近似解法が存在するのだが, 本稿では (3.1), (3.2), (3.6) の組を CRK 法のスキームとし, (3.1), (3.2) をその“基礎となる (underlying) RK 法”と呼ぶ.

CRK 法の第一の課題は, そのような連続拡張 (continuous extension) を与える $\{w_i(\theta)\}$ が存在するかである. 例として, Heun 法と呼ばれる 2 段 2 次 RK 法の連続拡張

$$\begin{cases} X_{n,1} = x_n, & X_{n,2} = x_n + hf(t_n, x_n), \\ x_{n+1} = x_n + (h/2)(f(t_n, x_n) + f(t_n + h, X_{n,2})), \\ \psi(t_n + \theta h) = x_n + h((\theta - \theta^2)f(t_n, x_n) + \theta^2 f(t_n + h, X_{n,2})) \end{cases} \quad (3.7)$$

を用いて, スカラー初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = \cos(2t)x(1-x), \quad x(0) = 1/2$$

を解いた数値解と, 解析解 $\exp(\sin(2t)/2)/(1 + \exp(\sin(2t)/2))$ を図 3.3 に示す. 図中, x 印は Heun 法の (離散的な) 解, 実線は $\psi(t_n + \theta h)$, 点線は解析解を示している. ステップ幅

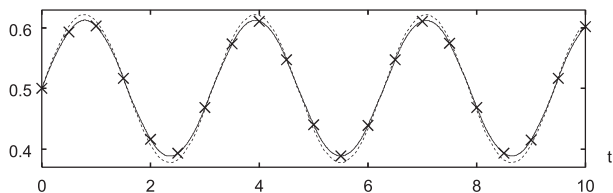


図 3.3: $h = 1/2$ とした 2 段 2 次 RK 法の連続拡張による例題

をことさら $h = 1/2$ と大きく設定しているにもかかわらず、連続拡張が解析解によく追従していることが理解できよう。

CRK 法の近似性について、一様次数 (uniform order) を導入することができる。すなわち、基礎となる RK 法の (離散的な) 解 $\{x_n\}$ から得られる連続的な解 $\phi_n(t)$ を

$$\frac{d\phi_n}{dt} = f(t, \phi_n) \quad (t_n \leq t \leq t_{n+1}), \quad \phi_n(t_n) = x_n$$

とするとき、連続 RK 法の解 $\psi(t)$ との差の評価

$$\sup_{0 \leq \theta \leq 1} \|\psi(t_n + \theta h) - \phi_n(t_n + \theta h)\| = \mathcal{O}(h^{q+1})$$

が成り立つならば、連続 RK 法は一様次数 q をもつという。上に導入した Heun 法の連続拡張 (3.7) は、一様次数は 2 であり、基礎となる Heun 法の近似次数と一致する。しかし、古典的 RK 法 RK4 に

$$\begin{cases} w_1(\theta) = \frac{2\theta^3}{3} - \frac{3\theta^2}{2} + \theta, \\ w_2(\theta) = w_3(\theta) = -\frac{2\theta^3}{3} + \theta^2, \\ w_4(\theta) = \frac{2\theta^3}{3} - \frac{\theta^2}{2} \end{cases} \quad (3.8)$$

を付随させた CRK4 は一様次数 3 を達成するが、4 段 RK 法 ($s = 4$) の連続拡張では一様次数 4 が不可能であることが知られている。CRK に関する詳しい記述は、たとえば [1] を参照されたい。

RK 法の連続拡張を導入することによって、ODE 初期値問題の近似解をステップ点や段の点のみならず“連続的に”与えることができる。そこで、DDE に対する区間接続法に CRK を適用すれば、ステップ点の値でも段の値でもない $\Xi(t_n + c_j h - \tau(t_n - c_j h))$ の“良い”近似値を手に入れることができる。ただし、DDE の解析解は区間の端点における導関数不連続性をもつことが知られているので、ODE のような“大域的な”高次収束性は期待できないことに注意を要する。各区間の内側で CRK 法の達成する一様次数で満足するしかない。

4 アルゴリズム

本節で、区間接続法と連続 RK 法を用いた遅延微分方程式の離散変数法アルゴリズムをプログラム風に記述し、叙述を明確にしよう。

入力: 函数 $f(t, x(t), y(t))$ と $\tau(t)$, 初期函数 $\varphi(t)$, 解くべき区間 $[t_0, t_f]$, 区間接続法にの一区間に CRK を適用するステップ数 $m \in \mathbb{N}$ を入力する.

準備: 区間端点の列 $\{T_\ell\}$, 第 ℓ 区間 $[T_\ell, T_{\ell+1}]$ におけるステップ幅 $h_\ell = (T_{\ell+1} - T_\ell)/m$ のための配列, ステップ点の数だけの近似解 $\{x_n\}$ の配列, その連続拡張 $\Xi(t)$ の配列をそれぞれ用意する.

第一予備過程: 配列 $\{a_{ij}, b_i, c_i\}$ と $\{w_i(\theta)\}$ を与えて連続 RK 法を導入し, $\varphi(t)$ を $t_0 - \tau(t_0) \leq t \leq t_0$ における $\Xi(t)$ の第 (-1) 要素として割り当てる.

第二予備過程: $T_0 = t_0$ から始めて $\ell = 1, 2, \dots, L$ について逐次 $T_\ell - \tau(T_\ell) = T_{\ell-1}$ を解いて, 区間端点 T_ℓ の列を形成する.

第 0 区間: 区間 $[t_0, T_1]$ で ODE の初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x(t), \varphi(t - \tau(t))), \quad x(t_0) = \varphi(t_0)$$

をステップ幅 $h_0 = (T_1 - t_0)/m$ の CRK によって解き, 離散近似解列 $x_{0,1}, x_{0,2}, \dots, x_{0,m}$ ($x_{0,n} \approx x(t_0 + nh_0)$) と, その連続化列 $\psi_{0,1}(t), \psi_{0,2}(t), \dots, \psi_{0,m}(t)$ を形成し, $t_0 \leq t \leq T_1$ に対する $\Xi(t)$ 第 0 成分として $\Psi_0(t) = \{\psi_{0,n}(t)\}$ を割り当てる.

$\ell = 1$ to $L - 1$ について次の過程を反復する:

第 ℓ 区間: 区間 $[T_\ell, T_{\ell+1}]$ で初期値問題

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x(t), \Xi(t - \tau(t))), \quad x(T_\ell) = \Xi(T_\ell)$$

をステップ幅 $h_\ell = (T_{\ell+1} - T_\ell)/m$ の CRK によって解き, 離散近似解列 $x_{\ell,1}, x_{\ell,2}, \dots, x_{\ell,m}$ ($x_{\ell,n} \approx x(T_\ell + nh_\ell)$) と, その連続化列 $\psi_{\ell,1}(t), \psi_{\ell,2}(t), \dots, \psi_{\ell,m}(t)$ を形成し, $T_\ell \leq t \leq T_{\ell+1}$ に対する $\Xi(t)$ 第 ℓ 成分として $\Psi_\ell(t) = \{\psi_{\ell,n}(t)\}$ を割り当てる.

出力: 近似解 $\{x_n\}$ の配列, その連続拡張 $\Xi(t)$ の配列を出力する.

注意 4.1. このアルゴリズムでは第 ℓ 区間第 n ステップ第 i 段において

$$\Xi(T_\ell + (n + c_i)h_\ell - \tau(T_\ell + (n + c_i)h_\ell))$$

の計算 (evaluation) が必要で, この変数値が函数集合 $\Xi(t)$ のどの成分に対応するかの計算過程が決定的に重要である. そのため, 通常 $\tau(t)$ は無限遅延 (infinite delay) や遅延消滅 (vanishing delay) ではないと仮定する.

注意 4.2. 定数遅延 τ の場合には, 第二予備過程を始め, アルゴリズムのいくつかの計算を省略でき, これを簡易化することが可能である.

5 安定性解析

先に述べたように、区間接続法と CRK を組み合わせたアルゴリズムを定式化したならば、その解析が必要である。収束性・収束次数については既述のように、区間の端点における DDE の解の導関数不連続性ゆえ、ODE のような大域的な高次収束性は期待できない。前述したアルゴリズムは「次数低下」をできるだけ回避するよう作られているが、変数遅延であっても、プログラムの容易さから通常採用されるような、全区間を等しいステップ幅で前進する方法をとると、実際に次数低下が生じる。詳しくは [5] などを参照されたい。以降区間接続法と CRK 法の組合せに対する安定性解析を [6] に沿いながら述べる。

ODE の場合に図 3.1 に示した図式を DDE の場合にも敷衍し、線型安定性解析の立場に立つと、ODE の場合の線型化方程式（テスト方程式）に対応する DDE は何かが、最初の課題である。ODE にならってスカラー方程式

$$\frac{dx}{dt}(t) = \lambda x(t) + \mu x(t - \tau) \quad (\lambda, \mu \in \mathbb{C})$$

をテスト方程式とすると、ODE に帰結してしまう $\mu = 0$ の場合を包含する次の結果を導くことができる。

定理 5.1. 条件 $\operatorname{Re} \lambda + |\mu| \leq 0$ が成り立てば、テスト方程式の解は漸近安定である。

これは、 $x(t) = \text{const.} \times \exp(zt)$ の解を仮定して、方程式に代入してえられる $z - \lambda - \mu \exp(-\tau z) = 0$ を満たす z について、 $\operatorname{Re} z < 0$ が成り立つ十分条件として導出できる。変数遅延 $\mu x(t - \tau(t))$ の場合にも、少し拡張された同様な結果が成り立つ（たとえば [1] の第 9 章）。

しかし定数遅延 τ の DDE 連立系を（局所）線型化すれば、 L, M を d 次実定数行列として

$$\frac{dx}{dt}(t) = Lx(t) + Mx(t - \tau) \quad (5.1)$$

がえられる。この連立系では、たとえ定数遅延であっても、 L, M の同時正則三角化を仮定できない問題に行き当たる。これは ODE からの大きな相違点であり、テスト方程式として行列係数の (5.1) を対象として安定性を考察すべきである。線型系 (5.1) の解として（定数行列） $\times \exp(zt)$ を仮定すれば、系の特性方程式（characteristic equation）

$$P(z; \tau) \stackrel{\text{def}}{=} \det[zI - L - M \exp(-z\tau)] = 0 \quad (5.2)$$

をえる。この超越方程式の解を特性根 z と呼ぼう。函数 $P(z; \tau)$ は z の有理型 (meromorphic) 函数であるから、特性根の個数はたかだか可算個である。ゼロ解 $x(t) = 0$ が (5.1) の解であることに注目すると、次の命題は自然である。

定理 5.2. 線型系 (5.1) のゼロ解が漸近安定である必要十分条件は、右半複素平面 $\mathbb{C}^+ = \{\zeta \in \mathbb{C}; \operatorname{Re} \zeta \geq 0\}$ に特性根が存在しないことである。

特性方程式は（したがって特性根も）遅延 τ に依存しているので、安定性基準も τ 依存が望ましい。しかし従来は

定理 5.3. 複素数 $\xi \in \mathbb{C}$, $|\xi| = 1$ に対して、行列 $L + \xi M$ の任意の固有値の実部が負であれば、ゼロ解は漸近安定である。（Hu-Mitsui 1995）

のように, τ 独立な結果が多かった. こちらの方が導出が容易だからである. そこで遅延依存の安定性基準への第一歩として, 次の定理をあげる.

定理 5.4. 特性方程式の不安定な特性根を z とすれば, 評価

$$|z| \leq \beta \stackrel{\text{def}}{=} \|L\| + \|M\|$$

が成り立つ. 右辺の行列ノルムは任意の自然ノルム (natural norm) である. (Hu-Mitsui 2017)

証明 特性方程式の不安定な特性根 z を考察しているので, 定理 5.2 により $\operatorname{Re} z \geq 0$ である. 行列函数 $W(z) = L + M \exp(-\tau z)$ を導入すると, 特性方程式を

$$P(z; \tau) = \det(zI - W(z)) = 0$$

と書くことができる. これは z が行列 $W(z)$ の固有値であることを意味するから, $\sigma(W(z))$ を固有値の集合とすれば, ある番号 j ($1 \leq j \leq d$) が存在して, $z = \lambda_j \in \sigma(W(z))$ が成り立つ. したがって評価

$$|z| = |\lambda_j| \leq \|W(z)\| = \|L + M \exp(-\tau z)\| \leq \|L\| + \|M\|$$

が成り立つ. ■

定理 5.4 に基づいて, 線型系 (5.1) の不安定性領域 (region of instability) を

$$D_\beta = \{z : \operatorname{Re} z \geq 0 \text{ and } |z| \leq \beta\}$$

と定義し, D_β の境界 (半円) を Γ_β とする (図 5.1). 不安定特性根の所在の可能性のある領域が限定できたので, そこに存在する特性根を数え上げることができれば安定性判別が可能になる. このことを念頭にして, 函数 $P(z; \tau)$ に偏角の原理を応用する. 一般に z 平面の単純閉曲線 $\Gamma \in \mathbb{C}$ が正に向きづけられているとし, 複素函数 $f(z)$ について, Γ に沿って一周したときの偏角の変化量を $\Delta_\Gamma \arg f(z)$ とする.

定理 5.5. 定理 5.4 によって不安定性領域 D_β がえられたとする. 系 (5.1) が漸近安定である必要十分条件は, 二条件

$$P(z; \tau) \neq 0 \quad \text{for } z \in \Gamma_\beta \tag{5.3}$$

と

$$\Delta_{\Gamma_\beta} \arg P(z; \tau) = 0 \tag{5.4}$$

が成り立つことである.

条件 (5.4) は不安定性領域 D_β の内部に特性根がないことを, 条件 (5.3) はさらに半円 Γ_β 上にも特性根がないことを主張しているから, 定理の命題は明白である. 函数 $P(z; \tau)$ は, τ, L, M を具体的に与えれば安定的に函数値計算が可能であり, しかも τ 依存であることに留意しよう.

例題 5.1. 次の係数行列をもつ 2 次元の DDE 系を考える.

$$L = \begin{bmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -0.9 \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \tag{5.5}$$

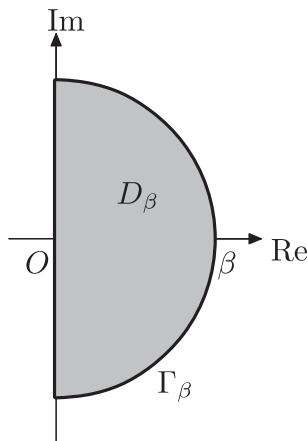


図 5.1: 線型系 (5.1) の不安定性領域

行列 L はすでに対角行列であるから、 L と M が同時正則対角化が不可能なことは明らかである。行列の 2 ノルムを採るとき、 $\beta = \|L\|_2 + \|M\|_2 = 3.618$ と計算され、不安定性領域 D_β と、その境界 Γ_β が確定する。遅延が $\tau = 1.1$ のとき Γ_β 上で $P(z; 1.1)$ がゼロとなることはなく、 $\Delta_{\Gamma_\beta} \arg P(z; 1.1) = 0$ と計算できるので、DDE は漸近安定である。しかし、 $\tau = 9$ のときは $\Delta_{\Gamma_\beta} \arg P(z; 9)/(2\pi) = 2$ と計算されるので、2 つの特性根が不安定性領域にあり、DDE は漸近安定ではない。◆

遅れ依存の DDE の安定性判別ができたので、これを発展させ、区間接続法と CRK を組み合わせた離散変数法の安定性判別を考察する。すなわち、(5.1) に対して区間接続法の各区間に s 段 CRK $\{A, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \{w_i(\theta)\}\}$ を適用したときの、(離散) 解の漸近挙動を考察する。定数遅延としたので、先に注意したように CRK はかなり簡易化され、定ステップ幅 $h = \tau/m$ のもと、第 n ステップ・第 i 段の値 $X_{n,i}$ と第 n ステップの出力値 x_{n+1} は

$$X_{n,i} = hL \left(x_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} X_{n,j} \right) + hM \left(x_{n-m} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} X_{n-m,j} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, s), \quad (5.6)$$

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^s b_i X_{n,i}, \quad (5.7)$$

と与えられる。段の値 $X_{n,i}$ を消去すれば x_n から x_{n+1} へ前進する線型差分方程式とみなすことができるので、その特性多項式を求めることができる。すなわち z を特性根として次の結果をうる。

補題 5.1. 系 (5.6) と (5.7) の特性多項式 $P_{RK}(z)$ は次のように与えられる。

$$P_{RK}(z) = \det \left\{ \begin{bmatrix} I_{sd} - h(A \otimes L) & 0 \\ -\mathbf{b}^\top \otimes I_d & I_d \end{bmatrix} z^{m+1} - \begin{bmatrix} 0 & h(\mathbf{e} \otimes L) \\ 0 & I_d \end{bmatrix} z^m \right. \\ \left. - \begin{bmatrix} h(A \otimes M) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} z - \begin{bmatrix} 0 & h(\mathbf{e} \otimes M) \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right\} \quad (5.8)$$

ここで s 次ベクトル $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$ と、行列の Kronecker 積 $\otimes$ を用いた.

古典的 RK (3.3) に見るように、行列 A は対角成分を含めて、右上成分はゼロなので、(5.8) の項 $I_{sd} - h(A \otimes L)$ は特異ではなく、多項式 $P_{RK}(z)$ は真に z の $d(s+1)(m+1)$ 次多項式である. このことから、次の結果をうる.

定理 5.6. 対象とする DDE は漸近安定と仮定する. すなわち定理 5.5 が成り立っているとすると. そのとき RK 法の特性多項式 $P_{RK}(z)$ が

(i) 単位円周 $\mu = \{z : |z| = 1\}$ 上でゼロにならない

(ii) μ を正の向きに一周したときの偏角の変化が

$$\frac{1}{2\pi} \Delta_{\mu} \arg P_{RK}(z) = d(s+1)(m+1) \quad (5.9)$$

を満たす

の条件を満足すれば、RK 法は漸近安定である.

定理の条件は、特性多項式のすべての根が単位円周の内側にあることを保証しているので、結論は当然である. 特性多項式が $h = \tau/m$ を通じて遅延依存であること、また $P_{RK}(z)$ の数値計算が μ に沿って可能であることに注意する. ただし、行列式の計算に Laplace 展開のような、莫大な手間を要する方法をとってはならない. 正則変換による行列の三角化を用いる.

例題 5.2. 例題 5.1 の 2 次元線型 DDE に初期条件

$$\varphi(t) = \begin{bmatrix} \sin t - 2 \\ t + 2 \end{bmatrix} \quad (t \in [-\tau, 0])$$

を与え、古典的 RK で解く. 遅延 $\tau = 1.1$ の場合、先にみたように DDE は漸近安定である. ステップ分割数が $m = 10$ ($h = \tau/m = 0.11$) のとき、計算すると

$$\Delta_{\mu} \arg P_{RK}(z)/(2\pi) = 110 = d(s+1)(m+1) = 2(4+1)(10+1) = 110$$

なので、RK 法の解は安定である (図 5.2, 解の第一成分を u_1 , 第二成分を u_2 で表示している. 以下同じ). しかしステップ分割数を $m = 1$ とすると

$$\Delta_{\mu} \arg P_{RK}(z)/(2\pi) = 19 \neq d(s+1)(m+1) = 20$$

なので、RK 法の解は不安定である (図 5.3). 図の両軸の尺度に注意されたい. 縦軸は 10^{23} の尺度であり、数値解はかなり長い時間 ($t \approx 180$) まで小さな変動を維持しているが、それを超えると急激に発散する. 20 個の特性根のうち、19 個は大きさが 1 より小なので、長い間小変動解が維持されるが、残る 1 個の不安定根がもたらす解の不安定さが結局凌駕してしまう.

この問題は $\tau = 9$ のとき不安定であった. ステップ分割数を $m = 100$ と大きくして古典的 RK を適用しても、数値解は図 5.4 に見るように、発散する. ◆

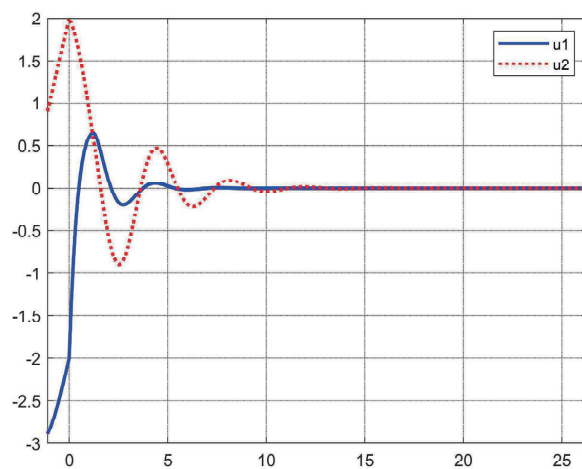


図 5.2: $\tau = 1.1$, 分割数 $m = 10$ のとき例題 5.2 の数値解の挙動

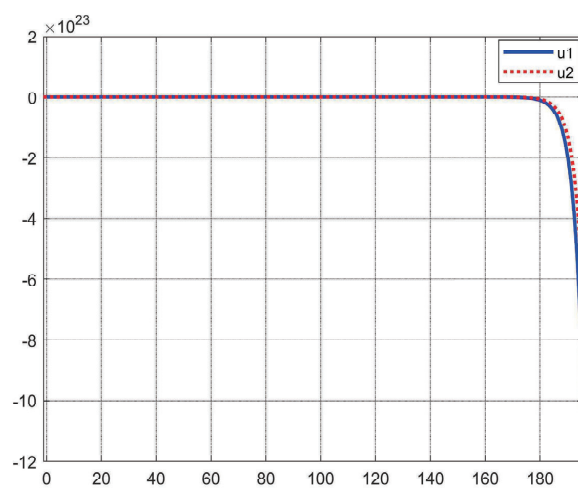


図 5.3: $\tau = 1.1$, $m = 1$ のとき例題 5.2 の数値解の挙動

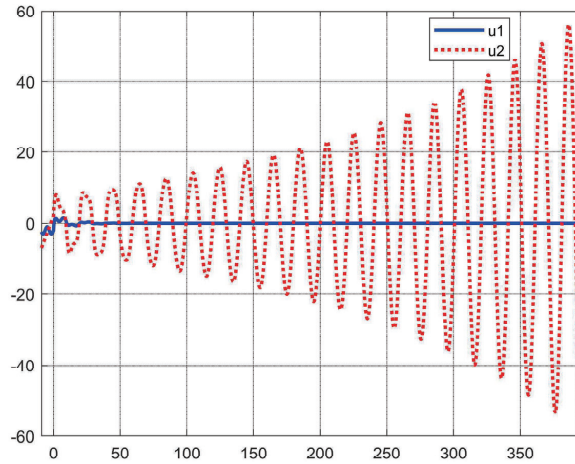


図 5.4: $\tau = 9$, $m = 100$ のとき例題 5.2 の数値解の挙動

6 まとめと課題

本稿では，遅延微分方程式に対する離散数値解の構成と解析について，区間接続法と連続 Runge-Kutta 法を構成要素とする数値スキームを記述し，その収束次数と線型安定性に関する解析結果を述べた．すなわち，区間接続法の区間内での収束性と，複素関数論を応用した遅延依存安定性の十分条件を示した．もちろんまだ課題は残っている．そのいくつかを挙げよう．

6.1 線型多段階法の適用

ODE の初期値問題に対するもう一つの代表的 DVM である，線型多段階法 (linear multi-step methods, LM 法) をどのように DDE に適用するかを考察し，その解析を行う必要がある．ODE の初期値問題 (1.3), (1.4) に対する k 段階 LM 法とは，等間隔 h のステップ点列 $t_{n+j} = t_n + jh$ ($j = 0, 1, \dots, k$) について，解の値 $x(t_{n+j})$ の近似値を x_{n+j} とし， $x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+k-1}$ が与えられたとき

$$\sum_{j=0}^k \alpha_j x_{n+j} = h \sum_{j=0}^k \beta_j f(t_{n+j}, x_{n+j}) \quad (6.1)$$

によって，次の近似解 x_{n+k} を定める．ここで $\{\alpha_j\}, \{\beta_j\}$ はスキームを定める定数であり， $\alpha_0 \alpha_k \neq 0$ とする．右辺において $\beta_k = 0$ ならば，新しい近似解 x_{n+k} は

$$\alpha_k x_{n+k} = \sum_{j=0}^{k-1} \{h \beta_j f(t_{n+j}, x_{n+j}) - \alpha_j x_{n+j}\}$$

によって直接求まる（陽的 (explicit) LM 法）が、 $\beta_k \neq 0$ ならば

$$\alpha_k x_{n+k} - \beta_k f(t_{n+k}, x_{n+k}) = \sum_{j=0}^{k-1} \{h\beta_j f(t_{n+j}, x_{n+j}) - \alpha_j x_{n+j}\}$$

を x_{n+k} について解かなければならない（陰的 (implicit) LM 法）．この定式化をそのまま DDE の初期値問題 (1.1), (1.2) に拡張するならば、 $f(t_{n+j}, x_{n+j}, x(t_{n+j} - \tau(t_{n+j})))$ の函数値が必要であり、第 3 変数値 $x(t_{n+j} - \tau(t_{n+j}))$ をどのように計算する (evaluate) かという、第 2 節で述べたと同じ問題に直面する．

もちろん定数遅延 τ であって、ステップ幅を $h = \tau/m$ ($m \in \mathbb{N}$) にとるならば、 $\tau = mh$ であるから LM 法の適用で必要となる過去の値は $x(t_{n+j} - mh) = x(t_{n+j-m})$ であり、スキームですでに計算された近似値 x_{n+j-m} を代入すればよい．しかし、変数遅延の初期値問題について、区間接続法と、ODE に対する LM 法を組み合わせるアルゴリズムを探るならば、同じ問題が生じる．この問題に対応する可能性の一つとして、LM 法のスキーム (6.1) を導出する背景にしばしば存在している、多項式補間の概念を活用することが考えられる．すなわち、微分方程式 (1.3) を $t = t_n$ から t_{n+k} まで積分すれば

$$x(t_{n+k}) - x(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+k}} f(s, x(s)) \, ds$$

であるが、右辺の被積分函数 $f(s, x(s))$ を、 $(t_n, f(t_n, x_n)), \dots, (t_{n+k-1}, f(t_{n+k-1}, x_{n+k-1}))$ を補間データとする補間多項式によって近似し、その積分を実行することでスキームをえる組織的な方法があり、Adams 型 LM 法が代表例である．この場合には、LM 法による近似解の背後にある多項式を用いて、DDE に対する区間接続法に必要な過去の値を計算することが考えられる．

しかし LM 法の DDE への適用における大きな問題として、ODE に対する LM 法が線型安定性において一般に RK 法より劣ることが挙げられる．おおまかに言って、収束次数を向上させる（そのためには、使うステップ数 k を増やさなければならない）と、LM 法の線型安定性は劣化する．このことを考慮すると、収束次数 2 で、すぐれた安定性を有する台形則 (trapezoidal rule)

$$x_{n+1} = x_n + h \frac{f(t_n, x_n) + f(t_{n+1}, x_{n+1})}{2} \quad (6.2)$$

($\alpha_0 = -1, \alpha_1 = 1, \beta_0 = \beta_1 = 1/2$ だから、実は一段階法でしかない!) を区間接続法と組み合わせることが考えられる．しかし、台形則は $s = 2, a_{11} = a_{21} = 0, a_{21} = a_{22} = 1, b_1 = b_2 = 1/2, c_1 = 0, c_2 = 1$ の特殊な RK 法（陰的 RK 法の一つ）とみなすことができるので、第 5 節の解析結果の範囲に留まってしまうかもしれない．いずれにせよ、LM 法の DDEs への適用は未発達である．

6.2 函数空間設定に由来する困難さ

より本質的な問題として、ODE と DDE とでは解函数が属する函数空間の設定が大きく異なることに由来する困難さがある．ODE の初期値問題では、初期値 x_0 は d 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^d$ にあり、そこから出発する解函数 $x(t)$ は t 軸に沿って滑らかに移動する $\mathbb{R}^d$ 内にある（図 6.1）．そのため近似解も $\mathbb{R}^d$ に属するベクトル x_n を構成するように考えればよく、ODE に対する DVMs はそのような観点から設計される．しかし DDE の初期値

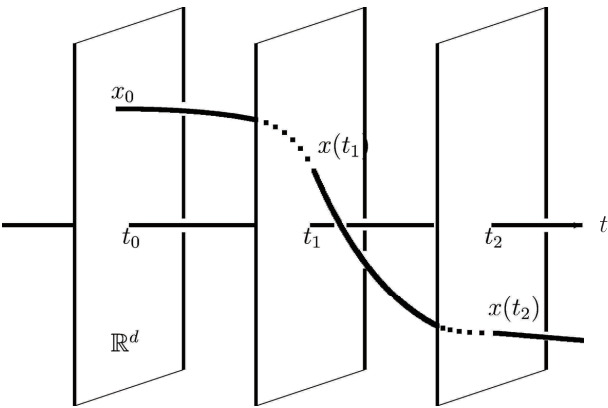


図 6.1: ODE の初期値問題の解の概念

問題の場合は、初期点 $t = t_0$ において微分方程式の解が後方に向って‘拘束される’のは初期関数 $\varphi(t)$ である．ノルムを $\|x\|_\tau \stackrel{\text{def}}{=} \max_{t-\tau \leq s \leq t} \|x(s)\|$ と導入し、函数空間

$$C_t(\mathbb{R}^d; \tau) = \{x : (t - \tau, t) \mapsto \mathbb{R}^d, \text{連続}\}$$

と定義したとき、 $\varphi(t) \in C_{t_0}(\mathbb{R}^d; \tau)$ を満たすとして、そこから t 軸に沿って解を含む函数空間 $C_t(\mathbb{R}^d; \tau)$ が移動する (図 6.2)．この函数空間はもちろん有限次元ではないし、可算無限次元でもない．さらに変数遅延の場合には、‘ t 軸に沿う厚さ’すら変動する．この枠組みのなかで $C_t(\mathbb{R}^d; \tau)$ に属する解函数を近似しようとするので、ODE に対する解析・方法を超えた数値スキームが求められている．本稿で記述した、区間接続法 + CRK の枠組みはその一つの試みであるが、まだ十分とは言えない．筆者もこの課題への明確な展望をもっていないが、適切なアプローチを見つけることを目標としたいと考えている．

参考文献

- [1] Bellen, A. and M. Zennaro, *Numerical methods for delay differential equations*. Oxford: Oxford UP, 2003.
- [2] Bellen, A., N. Guglielmi, S. Maset and M. Zennaro, Recent trends in the numerical simulation of retarded functional differential equations, *Acta Numerica* **18** (2009): 1–110.
- [3] E. Hairer, S.P. Nørsett & G. Wanner 原著，三井斌友監訳，常微分方程式の数値解法 I 基礎編，シュプリンガー・ジャパン，東京，2007.
- [4] E. Hairer & G. Wanner 原著，三井斌友監訳，常微分方程式の数値解法 II 発展編，シュプリンガー・ジャパン，東京，2008.

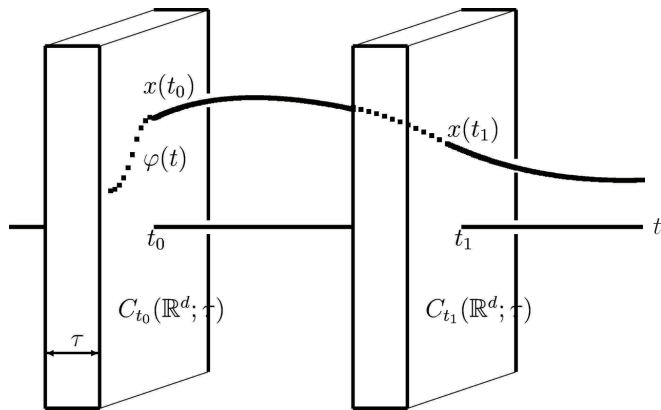


図 6.2: DDE の初期値問題の解の概念

- [5] 三井斌友・小藤俊幸・齊藤善弘, 微分方程式による計算科学入門, 共立出版, 東京, 2004.
- [6] Mitsui, T and Guang-Da Hu (胡 広大), *Numerical analysis of ordinary and delay differential equations*. UNITEXT 145, Springer-V, to be published.