研究報告書「確率ルンゲ・クッタ法の応用に関する研究」

小守 良雄

1 はじめに

分子生物学や化学などのシステムのモデリングに確率微分方程式 (SDE) が使われるのに伴って，SDE の数値解法の重要性は非常に高くなっている．それゆえ，数多くの研究者達が研究に取り組んでいる．

そのような解法の中で重要なものの一つは，硬い SDE に対する数値解法である．硬い常微分方程式 (ODE) に対しては，陰的解法で解くのが通例である．ここで,「硬い」とは「数値的に安定に解き難い」という意味であり，具体的には「ODE を線形化した時の係数行列に固有値の絶対値が非常に大きいものが含まれる」ことを意味する．

しかしながら，陰的解法の計算コストは ODE の次元が高くなるにつれて急激に増大するので，絶対値の大きい固有値が複素平面の負の実軸周りにのみ分布する場合は，拡大された絶対安定領域を持つ陽的解法が望ましい．そのような解法として，Abdulle と Medovikov によって提案されたチェビシェフ法がある [1]．固有値が上で述べたように分布し，ODE の次元が高い例として，放物型偏微分方程式に線の方法を適用して得られる ODE が挙げられる．

SDE の場合は，問題は更に複雑である．それにもかかわらず，Abdulle と Cirilli [2] は，ODE に対する 1 次のチェビシェフ法を SDE の解法へと拡張し，広い MS-安定領域を持った解法を得た．この解法は，1 次元のウィナー過程を持つストラトノビッチ型 SDE に対する強い意味で 1 次の解法である．また，拡散係数が 0 の場合は，この解法は 1 次のチェビシェフ法に一致する．

彼らが示したアプローチは重要である．なぜなら，SDE の陰的解法は非常に複雑で様々な問題があるからである [3, 4]．一方，彼らの解法は良い性能を示しているにもかかわらず，ウィナー過程が多次元の SDE に対して強い意味で 0.5 次，弱い意味で 1 次であり，近似次数が低いという改善すべき点が残っている．

本事業推進責任者は，多次元のウィナー過程を持った SDE に対して弱い意味で 2 次の陽的な確率ルンゲ・クッタ法を導出した [5]．本事業では，Abdulle と Cirilli のアプローチを取り入れて弱い意味で 2 次のチェビシェフ法を作成し，分子生物学に現れる実際の問題にこれを適用し，その有用性を示すのが目的である．

2 最適な安定性多項式とその近似

関数 e^z を 2 次まで近似する s 次の多項式 $R_s(z)$ の中で，最適な安定性多項式 $\bar{R}_s(z)$ は次のように定式化される:

$$\begin{aligned} &\bar{R}_s(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \sum_{i=3}^{s} a_i, \quad \alpha_i \in \boldsymbol{R}, \\ &|\bar{R}_s(z)| \leq 1, \quad \forall z \in [-\bar{l}_s, 0]. \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，$\bar{l}_s$ は，(1) が成り立つようなできるだけ大きな正の数である．

任意の s に対して，そのような多項式は存在して一意に定まるが，解は陽に知られていない．そこで，次のような近似が提案されている [1]．正の 2 次多項式を $w(x)$ とし，重み関数 $w(x)^2/\sqrt{1-x^2}$ に関する $[-1,1]$ 上の $s-2$ 次の直交多項式を $P_{s-2}(x)$ として

$$\tilde{R}_s(x) \stackrel{\text{def}}{=} w(x)P_{s-2}(x)$$

とおき，$\bar{R}_s(z)$ を $\tilde{R}_s(1+2z/\bar{l}_s)$ で近似する．

3　三項漸化式とチェビシェフ法

まず，$P_{s-2}(x)$ を陽に与える公式を紹介する．$w(x)$ の零点を $x_1 \stackrel{\text{def}}{=} \alpha+i\beta$，$x_2 \stackrel{\text{def}}{=} \alpha-i\beta$ $(\beta\neq 0)$ とおき，$s\geq 3$ に対して

$$Q_{s+2}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{vmatrix} T_{s-2}(x_1) & T_{s-2}(x_2) & T'_{s-2}(x_1) & T'_{s-2}(x_2) & T_{s-2}(x) \\ T_{s-1}(x_1) & T_{s-1}(x_2) & T'_{s-1}(x_1) & T'_{s-1}(x_2) & T_{s-1}(x) \\ T_{s}(x_1) & T_{s}(x_2) & T'_{s}(x_1) & T'_{s}(x_2) & T_{s}(x) \\ T_{s+1}(x_1) & T_{s+1}(x_2) & T'_{s+1}(x_1) & T'_{s+1}(x_2) & T_{s+1}(x) \\ T_{s+2}(x_1) & T_{s+2}(x_2) & T'_{s+2}(x_1) & T'_{s+2}(x_2) & T_{s+2}(x) \end{vmatrix}$$

とおくと，

$$w(x)^2P_{s-2}(x) = CQ_{s+2}(x)$$

が成り立つ．ただし，$T_n(x)$ は n 次のチェビシェフ多項式であり，C は正規化に依存する定数である．

正規化パラメータ a (1 に近い値をとる) を導入して $P_{s-2}(a)=1$ とし，$l_s \stackrel{\text{def}}{=} (1+a)/\bar{l}_s$ とおく．そして，$\hat{P}_{s-2}(z) \stackrel{\text{def}}{=} P_{s-2}(a+z/l_s)$ とおくと，次の三項漸化式が知られている:

$$\hat{P}_{s-2}(z) = (\mu_{s-2}z+\kappa_{s-2}+1)\hat{P}_{s-3}(z) - \kappa_{s-2}\hat{P}_{s-4}(z). \tag{2}$$

ここで，μ_{s-2} と κ_{s-2} は

$$\mu_{s-2}r_i\hat{P}_{s-3}(r_i) + \kappa_{s-2}\left\{\hat{P}_{s-3}(r_i) - \hat{P}_{s-4}(r_i)\right\} = \hat{P}_{s-2}(r_i) - \hat{P}_{s-3}(r_i) \qquad (i=1,2)$$

によって与えられる．ただし，r_i は

$$\begin{vmatrix} r_1\hat{P}_{s-3}(r_1) & \hat{P}_{s-3}(r_1) - \hat{P}_{s-4}(r_1) \\ r_2\hat{P}_{s-3}(r_2) & \hat{P}_{s-3}(r_2) - \hat{P}_{s-4}(r_2) \end{vmatrix} \neq 0$$

を満たすように適当に選ばれた 2 つの異なる実数である．

d 次元 ODE

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{y}}{\mathrm{d}t}(t) = \boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{y}(t)), \quad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{y}_0 \tag{3}$$

を考え，終端時間 T_{end} に対して刻み幅を $h \stackrel{\text{def}}{=} T_{end}/M < 1$ (M は自然数) とおく．等間隔点 $t_n \stackrel{\text{def}}{=} nh$ $(n=0,1,\ldots,M)$ をとり，(3) の真の解 $\boldsymbol{y}(t_n)$ に対して，離散近似解を $\boldsymbol{y}_n$ で表す．チェビシェフ法は，(2) を利用して次の手順で構成される一種の陽的ルンゲ・クッタ法である [1]．

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\zeta}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{y}_n, \\
&\boldsymbol{\zeta}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{y}_n + h\mu_1\boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\zeta}_0), \\
&\boldsymbol{\zeta}_i \stackrel{\text{def}}{=} h\mu_j\boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\zeta}_{j-1}) + (\kappa_j+1)\boldsymbol{\zeta}_{j-1} - \kappa_j\boldsymbol{\zeta}_{j-2}, \quad j=2,\ldots,s-2, \\
&\boldsymbol{\zeta}_{s-1} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\zeta}_{s-2} + h\theta\boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\zeta}_{s-2}), \\
&\boldsymbol{\zeta}^*_s \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\zeta}_{s-1} + h\theta\boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{\zeta}_{s-1}), \\
&\boldsymbol{y}_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\zeta}^*_s - h\theta\left(1-\tfrac{\tau}{\theta^2}\right)\left(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\zeta}_{s-1}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\zeta}_{s-2})\right).
\end{aligned} \tag{4}$$

ここで，$d=1$ 且つ $g_0(y)=\lambda y$ とおくと，上の式と (2) から

$$y_{s+1}=\hat{w}(z)\hat{P}_{s-2}(z)y_n$$

を得る．ただし，$z\stackrel{\mathrm{def}}{=}\lambda h$ であり，$\hat{w}(z)\stackrel{\mathrm{def}}{=}1+2\theta z+\tau z^2$ である．$\hat{w}(z)\hat{P}_{s-2}(z)$ が e^z に 2 次まで一致するように θ と τ を決めてやれば，$\hat{w}(z)\hat{P}_{s-2}(z)$ は $\bar{R}_s(z)$ の近似解である．よって，(1) からチェビシェフ法は $\Re(z)$ の負の方向に伸びた絶対安定領域を持つことがわかる．

実際的には，(1) の不等式を

$$|\bar{R}_s(z)|\le\xi,\quad \forall z\in[-\tilde{l}_s,0]$$

$(\xi<1,\tilde{l}_s<\bar{l}_s\ )$ に置き換えて，絶対安定領域が $\Re(z)$ の負の方向には少し短くなるが，$\Im(z)$ の方向に厚みの増したチェビシェフ法を考える．また，ξ を導入したこのような手法をダンピングと呼ぶ.

4　確率ルンゲ・クッタ法

d 次元 SDE

$$\mathrm{d}\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{y}(t))\mathrm{d}t+\sum_{j=1}^{m}\boldsymbol{g}_j(\boldsymbol{y}(t))\circ\mathrm{d}W_j(t),\quad \boldsymbol{y}(0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{5}$$

を考え，区間 $[0,\infty)$ 全体で連続な解を持つとする．ここで，$W_j(t)$ はスカラーのウィナー過程であり，$t\ge 0$ に対して $\boldsymbol{x}_0$ と $W_j(t)-W_j(0)$ は互いに独立であるとする．また，$\circ$ はストラトノビッチの意味の定式化であることを表す．前節と同様に (5) の真の解 $\boldsymbol{y}(t_n)$ に対して，離散近似解を $\boldsymbol{y}_n$ で表す．或る解法が $\boldsymbol{y}_n$ を生成し，もし十分滑らかで多項式オーダーで増加する関数 G に対して，定数 $C,\delta>0$ が存在し

$$|E[G(\boldsymbol{y}(t_M)]-E[G(\boldsymbol{y}_M)]|\le Ch^q,\quad h\in(0,\delta) \tag{6}$$

が成り立つ時，その解法は弱い意味で q 次であるという [6].

そのような解法として，次式で与えられる確率ルンゲ・クッタ法 [5] を考える:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}_{n+1}&=\boldsymbol{y}_n+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j_a,j_b=0}^{m}c_i^{(j_a,j_b)}\boldsymbol{Y}_i^{(j_a,j_b)},\\ \boldsymbol{Y}_{i_a}^{(j_a,j_b)}&=\tilde{\eta}_{i_a}^{(j_a,j_b)}\boldsymbol{g}_{j_b}(\boldsymbol{y}_n+\sum_{i_b=1}^{s}\sum_{j_c,j_d=0}^{m}\alpha_{i_ai_b}^{(j_a,j_b,j_c,j_d)}\boldsymbol{Y}_{i_b}^{(j_c,j_d)})\end{aligned} \tag{7}$$

$(1\le i_a\le s,\,0\le j_a,j_b\le m)$．ここで，$c_i^{(j_a,j_b)}$ と $\alpha_{i_ai_b}^{(j_a,j_b,j_c,j_d)}$ は定数であり，$\tilde{\eta}_{i_a}^{(j_a,j_b)}$ は $\boldsymbol{y}_n$ と独立な確率変数であり，

$$E\left[\left(\tilde{\eta}_{i_a}^{(j_a,j_b)}\right)^{2k}\right]=\begin{cases}K_1h^{2k} & (j_b=0),\\ K_2h^k & (j_b\ne 0)\end{cases}\qquad (K_1,K_2>0,\quad k=1,2,\ldots)$$

を満たす.

5　MS-安定性

1 次元のテスト SDE

$$\mathrm{d}y(t)=\lambda y(t)\mathrm{d}t+\sum_{j=1}^{m}\sigma_jy(t)\circ\mathrm{d}W_j(t),\qquad y(0)=x_0,\qquad \lambda,\sigma_1,\ldots,\sigma_m\in\boldsymbol{C} \tag{8}$$

を考える．ただし，

$$\Re(\lambda) + \sum_{j=1}^{m} \Big(\Re(\sigma_j)\Big)^2 < 0 \tag{9}$$

を仮定する．

一般に一段解法を (8) に適用すると

$$y_{n+1} = \mathcal{R}_1(h, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \lambda, \sigma_1, \ldots, \sigma_m) y_n$$

となる [4]．ここで，$\tilde{\boldsymbol{\eta}}$ は確率変数ベクトルである．この時，数値解法の安定性は次のように与えられる [4, 7, 8, 9].

定義 1 ある特別な h, λ, $\sigma_1, \ldots, \sigma_m$ に対して，もし

$$\mathcal{R}_2(h, \lambda, \sigma_1, \ldots, \sigma_m) \stackrel{\mathrm{def}}{=} E[|\mathcal{R}_1(h, \tilde{\boldsymbol{\eta}}, \lambda, \sigma_1, \ldots, \sigma_m)|^2] < 1 \tag{10}$$

が成立するならば，その数値解法は *MS-*安定であるという．ここで，$E[\cdot]$ は期待値演算を表す.

MS-安定性は，与えられた h, $\tilde{\boldsymbol{\eta}}$, λ, $\sigma_1, \ldots, \sigma_m$ に対して，$E[|y_n|^2] \to 0$ $(n \to \infty)$ を意味する．

理想的には，任意の $h > 0$ と (9) を満たす任意の λ, $\sigma_1, \ldots, \sigma_m$ に対して $E[|y_n|^2] \to 0$ $(n \to \infty)$ が成立するのが望ましい．なぜならば，(9) ならば $E[|y(t)|^2] \to 0$ $(t \to \infty)$ となるからである．しかしながら，陽的解法ではこれを実現できない．ただ，ODE に対するチェビシェフ法のように $z(= h\lambda)$ に関する制限を緩和できる可能性がある．

6 弱い意味で 2 次のチェビシェフ法

(7) において，一部のパラメータを次のように定める．

$$\begin{aligned}
&\alpha_{i_a i_b}^{(0,0,0,0)} = 0 \quad (i_a \geq i_b),\\
&\alpha_{i_a i_b}^{(0,0,0,0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} (1 + \kappa_{i_a - 1}) \alpha_{i_a - 1, i_b}^{(0,0,0,0)} - \kappa_{i_a - 1} \alpha_{i_a - 2, i_b}^{(0,0,0,0)} \quad (3 \leq i_a \leq s - 1,\ 1 \leq i_b \leq i_a - 2),\\
&\alpha_{i_a, i_a - 1}^{(0,0,0,0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mu_{i_a - 1} \quad (2 \leq i_a \leq s - 1),\\
&\alpha_{s, i_b}^{(0,0,0,0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \alpha_{s-1, i_b}^{(0,0,0,0)} \quad (1 \leq i_b \leq s - 2), \qquad \alpha_{s, s-1}^{(0,0,0,0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \theta,\\
&c_i^{(0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \alpha_{s,i}^{(0,0,0,0)} \quad (1 \leq i \leq s - 2), \qquad c_{s-1}^{(0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} 2\theta - \frac{\tau}{\theta}, \qquad c_s^{(0)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\tau}{\theta}.
\end{aligned}$$

この時，SRK 法 (7) は (4) を含む．つまり，$\boldsymbol{g}_i(\boldsymbol{y}) = 0$ $(1 \leq i \leq m)$ の時，両者は一致する．第 3 節で述べたように (4) は $\Re(z)$ の負の方向に伸びた絶対安定領域を持つ．したがって，(7) も $\Re(z)$ の負の方向に伸びた絶対安定領域を持つ，つまり，$|\sigma_i \sqrt{h}|$ $(1 \leq i \leq m)$ が十分小さいなら (7) は MS-安定となる．よって，ダンピングを用いて，MS-安定領域が大きく，弱い意味で 2 次の陽的解法ができ得る．

7 最後に

ウィナー過程が 1 次元の場合でさえ，一般に MS-安定領域は 4 次元空間における領域 (例えば，4 つの軸に $\Re(z)$, $\Im(z)$, $\Re(\sigma_1)\sqrt{h}$, $\Im(\sigma_1)\sqrt{h}$ ととる) になるので，しばしば $\Im(z) = \Im(\sigma_i) = 0$ $(1 \leq i \leq m)$ を仮定する．我々もこれを仮定し，MS-安定領域が $\Re(z)$ の負の方向に広い解法の導出に成功した．

2009 年 5 月 25 日～29 日に北京で開催された国際会議 SciCADE09，及び，2010 年 9 月 19 日～25 日にロードス島で開催された国際会議 ICNAAN2010 で研究成果の一部を発表した [10, 11]．また，研究成果を論文 [12] にまとめた．

参考文献

[1] A. Abdulle and A.A. Medovikov, *Numer. Math.* **90**, 1–18 (2001).

[2] A. Abdulle and S. Cirilli, *SIAM J. Sci. Comput.* **30**, 997–1014 (2008).

[3] G.N. Milstein, E. Platen and H. Schurz *SIAM J. Appl. Math.* **35**, 1010–1019 (1998).

[4] K. Burrage and T. Tian, *BIT* **44**, 21–39 (2004).

[5] Y. Komori, *J. Comput. Appl. Math.* **206**, 158–173 (2007).

[6] P. E. Kloeden and E. Platen, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, Corrected 3rd printing, Springer-Verlag, New York, 1999.

[7] Y. Saito and T. Mitsui, *SIAM J. Numer. Anal.* **33**, 2254–2267 (1996).

[8] H. Schurz, *Stability, stationarity, and boundedness of some implicit numerical methods for stochastic differential equations,* PhD thesis, Humboldt University, Germany, 1997.

[9] D.J. Higham, *BIT* **40**, 404–409 (2000).

[10] K. Burrage and Y. Komori, *International Conference on Scientific Computational and Differential Equations 2009 Conference Abstracts*, 166 (2009).

[11] K. Burrage and Y. Komori, *AIP Conference Proceedings 1281*, 2057–2060 (2010).

[12] Y. Komori and K. Burrage, *J. Comput. Appl. Math.* **236**, 2895–2908 (2012).