数理解析研究所講究録
第520巻 1984年 180-191

Runge-Kutta型公式のattainable orderの決定

福井大・工　三井斌友(Taketomo Mitsui)

§1. はじめに

本講究録の若林・田中・山下の稿でもふれられているが、常微分方程式の初期値問題の数値解法としてのRunge-Kutta型公式の研究には，その複雑な代数的関係式のゆえに、SAM (Symbolic and Algebraic Manipulation) が不可欠となっている。筆者はREDUCE-2を用いて，ひとつの公式群に対する解析を行なった([3],[4])ところであるが，その要点と，さらに必要になった解析を述べる。

常微分方程式(系)の初期値問題

$$
(1.1)\quad \begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x, y), & a < x < b \\ y(a) = y_I \end{cases}
$$

に対する陽的1段階法とは、x_0, y_0, h が，$y_0 \fallingdotseq y(x_0)$ なるように与えられたとき ($a \leqq x_0 < b$)、$y(x_0+h)$ の近似値として

$$
(1.2)\qquad y_1 = y_0 + h\,\phi(x_0, y_0; h)
$$

を求めようというものである. ここで $\phi(x, y; h)$ は増分函数

という.（explicit）Runge-Kutta公式とは，増分函数として

$$(1.3)\quad \begin{cases} \phi(x,y;h)=\sum_{i=1}^{s} w_i k_i \\ k_1=f(x,y), \quad k_i=f(x+\alpha_i h,\ y+h\sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j), \quad i=2,3,\cdots,s \end{cases}$$

をとるもので，sはこのRK公式のstage number，$k_1, k_2, \cdots, k_s$は、解函数の1階導函数値である.

RK公式の最初の問題は，到達可能次数attainable orderである．それは次のように定義される．s-stage RK公式がorder rであるとは，十分滑らかな解$y(x)$をもつ任意の問題(1.1)に対して，

$$y(x+h)-y_1=O(h^{r+1}), \qquad a\leqq x<b$$

がなりたつこと，及び十分滑らかな解をもつ或る問題(1.1)に対しては

$$y(x+h)-y_1\neq O(h^{r+2}), \qquad a\leqq x<b$$

がなりたつことである．RK公式(1.3)は，$\alpha_i, \beta_{ij}, w_i$なる公式を決めるパラメータをもっているが，$s$-stage公式のパラメータのあらゆる選び方のなかで，達しうる最大のorderをattainable order $r^*(s)$という．

これは，換言すれば，$y(x+h)$のhについてのべき級数展開と，y_1のhについてのべき級数展開を比べたとき，$r^*(s)$までのべきの係数がすべて一致することを意味する．但ここで，$y(x+h)$のべき級数展開に現われる解$y(x)$の高階導函数は，

$$y'(x)=f(x,y)\ ,\ \ y''(x)=f_x(x,y)+f_y(x,y)\cdot f(x,y)\ ,\ \cdots$$

のようにおきかえる.

J.C. BUTCHERによってえられた結果によれば

s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$s \geqq 10$
$r^*(s)$	1	2	3	4	4	5	6	6	7	8?	$r^*(s) \leqq s-2$

である. 10-stageでorder 8の公式は, 予想されているが, まだ得られていない. SHANKS [6] の与えた公式は, 10-stageでalmost 8th orderである. いずれにせよ, attainable orderの決定は, そこから安定性解析, 最良公式, 埋め込み型公式embedded formulaなどへと発展していく重要な問題である.

§2. 2階導函数値を含むRunge-Kutta型公式

RK公式(1.3)は, 解函数の1階導函数値の重みつき平均をとるのに対して, 解の2階導函数

$$y''(x)=\frac{d}{dx}f(x,y)=f_x(x,y)+f_y(x,y)\cdot f(x,y)\equiv g(x,y)$$

の計算evaluationも含むRunge-Kutta型公式を考えよう. この場合増分函数は

$$(2.1)\quad \begin{cases} \phi(x,y;h)=\sum_{i=1}^{p}\mu_i k_i + h\sum_{i=1}^{q}\nu_i K_i \\ k_1 = f(x,y) \\ k_i = f(x+\alpha_i h,\ y+h\sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j + h^2\sum_{j=1}^{i-1}\gamma_{ij}K_j),\quad i=2,3,\cdots,p \end{cases}$$

$$\begin{cases} K_1 = g(x+\rho_1 h,\ y+h\sigma_{11}k_1), \\ K_i = g(x+\rho_i h,\ y+h\sum_{j=1}^{i}\sigma_{ij}k_j + h^2\sum_{j=1}^{i-1}\tau_{ij}K_j), \quad i=2,3,\cdots,q \end{cases}$$

となる．これを (p, q)-stage 公式という．$g(x, y)$ については、その解析的形式をSAMを用いて与えることを前提としている（微分方程式系(1.1)では，特にそのようにしなければ、誤りやすい）。

さて，[4]においては $(1, q)$-stage公式のパラメータ ν_i, ρ_i, τ_{ij} の満たすべき決定方程式系の導出にSAMを用い，attainable order の下限を決めるとともに，$q = 1 \sim 4$ に対して attainable order を実際に定めた．決定方程式系の導出には，別の方針（HAIRER [2]）もありうるが，ここではSAMを活用する方針をとった．その結果は，表1のようになる．

ここで、$(1, q)$-stage公式の attainable order を決定することは，ν_i, ρ_i, τ_{ij} についての，一部線型の連立代数方程式系である決定方程式系の，可解性の問題に帰着された。原理的には，それは Yes か No かの答が代数的にえられる性質の問題であるが，今のところ，決定方程式を放りこめば答を出してくれるというような便利な machine あるいは software は存在しない（将来ともそう簡単に実現するとは思えないが）ので、或る程度 ad hoc にやらざるをえない．[4]においては、

(E-0) $2 \sum_i v_i = 1$

(E-1) $6 \sum_i v_i \rho_i = 1$

(E-21) $12 \sum_i v_i \rho_i^2 = 1$

(E-22) $24 \sum_i v_i T_{i0} = 1$

(E-31) $20 \sum_i v_i \rho_i^3 = 1$

(E-32) $120 \sum_i v_i T_{i1} = 1$

(E-33) $120 \sum_i v_i \rho_i T_{i0} = 3$

(E-41) $30 \sum_i v_i \rho_i^4 = 1$

(E-42) $360 \sum_i v_i T_{i2} = 1$

(E-43) $720 \sum_i v_i \rho_i T_{i1} = 4$

(E-44) $360 \sum_i v_i \rho_i^2 T_{i0} = 6$

(E-45) $720 \sum_i \sum_j v_i \tau_{ij} T_{j0} = 1$

(E-46) $360 \sum_i v_i T_{i0}^2 = 3$

(E-51) $42 \sum_i v_i \rho_i^5 = 1$

(E-52) $840 \sum_i v_i T_{i3} = 1$

(E-53) $2520 \sum_i v_i \rho_i T_{i2} = 5$

(E-54) $2520 \sum_i v_i \rho_i^2 T_{i1} = 10$

(E-55) $5040 \sum_i \sum_j v_i \tau_{ij} T_{j1} = 1$

(E-56) $840 \sum_i v_i \rho_i^3 T_{i0} = 10$

(E-57) $5040 \sum_i \sum_j v_i (\rho_i + \rho_j) \tau_{ij} T_{j0} = 8$

(E-58) $5040 \sum_i v_i T_{i0} T_{i1} = 10$

(E-59) $2520 \sum_i v_i \rho_i T_{i0}^2 = 15$

(E-601) $56 \sum_i v_i \rho_i^6 = 1$

(E-602) $1680 \sum_i v_i T_{i4} = 1$

(E-603) $6720 \sum_i v_i \rho_i T_{i3} = 6$

(E-604) $10080 \sum_i v_i \rho_i^2 T_{i2} = 15$

(E-605) $20160 \sum_i \sum_j v_i \tau_{ij} T_{j2} = 1$

(E-606) $6720 \sum_i v_i \rho_i^3 T_{i1} = 20$

(E-607) $40320 \sum_i \sum_j v_i (\rho_i + \rho_j) \tau_{ij} T_{j1} = 10$

(E-608) $20160 \sum_i v_i T_{i1}^2 = 10$

(E-609) $1680 \sum_i v_i \rho_i^4 T_{i0} = 15$

(E-610) $40320 \sum_i \sum_j v_i \rho_i \rho_j \tau_{ij} T_{j0} = 18$

(E-611) $20160 \sum_i \sum_j v_i (\rho_i^2 + \rho_j^2) \tau_{ij} T_{j0} = 21$

(E-612) $40320 \sum_i \sum_j \sum_k v_i \tau_{ij} \tau_{jk} T_{k0} = 1$

(E-613) $20160 \sum_i v_i T_{i0} T_{i2} = 15$

(E-614) $40320 \sum_i v_i \rho_i T_{i0} T_{i1} = 60$

(E-615) $10080 \sum_i v_i \rho_i^2 T_{i0}^2 = 45$

(E-616) $20160 \sum_i \sum_j v_i \tau_{ij} (T_{j0} + 2T_{i0}) T_{j0} = 18$

(E-617) $6720 \sum_i v_i T_{i0}^3 = 15$

ここで $\sum_i \cdots (\sum_j \cdots)$ などは、$\sum_{i=1}^{g} \cdots (\sum_{j=1}^{i-1} \cdots)$ の意味

T_{ik} は、$T_{1k} = 0$, $T_{ik} = \sum_{j=1}^{i-1} \rho_i^k \tau_{ij}$, $i = 2, 3, \cdots, g$ の意味.

表 1. 決定方程式系

$q = 1 \sim 3$ は簡単であったが，(1, 4)-stage 公式が厄介で，結局 interval arithmetic を用いる，非代数的な推論になった．しかし，これは以下のように algebraic alternative が可能である．

(1, 4)-stage 公式は，もし order 7 になるならば，14個のパラメータが，表1の (E-0) ～ (E-59) の22個の方程式を同時に満足しなければならない．[4] で述べているように，$\rho_1 \sim \rho_4$ に注目し，これらのうち或る2個が等しい場合と，相等しいものはない場合に大別し，更に細かく場合を分け，すべての場合に矛盾が含まれることを示えうとする．最も面倒なのは，$\rho_1 \sim \rho_4$ はすべて相異なり，かつ

$$\nu_1 = A_2 = A_3 = A_4 = 0 \qquad \text{但} \ A_i = \sum_{j=1}^{i-1} \tau_{ij} - \frac{1}{2}\rho_i^2$$

の場合である．このときは，まず ρ_2, ρ_3, ρ_4 は次のような3次方程式の distinct root であることが示される．

$$(2.2) \quad f(x) \equiv x^3 - \frac{9}{7}x^2 + \frac{3}{7}x - \frac{1}{35} = 0$$

次に，(E-0), (E-1), (E-21), (E-31) を用いれば，$\nu_2 \sim \nu_4$ は $\rho_2 \sim \rho_4$ を用いて表わすことができる．また，$A_2 = A_3 = A_4 = 0$ と，同様にして導かれる

$$B_2 = B_3 = B_4 = 0 \qquad \text{但} \ B_i = \sum_j \rho_j \tau_{ij} - \frac{1}{6}\rho_i^3$$

を用いると，$\tau_{21}, \tau_{31}, \tau_{32}, \tau_{41}, \tau_{42}, \tau_{43}$ を $\rho_2 \sim \rho_4$ を用いて表わすことができるし，同時に $\rho_1 = \rho_2/3$ もえられる．

これらの関係を(E-54)の左辺に代入すると，丁度うまい具合にρ_2，ρ_3のみの代数式として表現でき，結局次のような$\varphi(\rho_2, \rho_3)$が0にならなければならない。

$$(2.3)\quad \varphi(\rho_2, \rho_3) = 525\rho_2^2\rho_3^2 - 360\rho_2^2\rho_3 - 420\rho_2\rho_3^2 - 5\rho_2^2 + 260\rho_2\rho_3 + 105\rho_3^2 - 60\rho_3 + 3$$

勿論こういう面倒な計算もREDUCEの手を借りて行なわれる．一方，ρ_2，ρ_3は$f(\rho_2) = f(\rho_3) = 0$をみたすのであるから，結局これら3つの方程式が同時になりたつことがあるかどうかという問題となる．

§3. REDUCEによる終結式の計算

前節の結果より，(1, 4)-stage公式の*attainable order*を決定するには

"$\varphi(\rho_2, \rho_3) = 0$，$f(\rho_2) = 0$，$f(\rho_3) = 0$を満足する実数$\rho_2$，$\rho_3$は存在しない．但$\rho_2 \neq \rho_3$."

を言わなければならない．序でにいえば，(2.2)より$f(x) = 0$は相異なる3実根をもつことが分っている．

問題は終結式が*vanish*するかどうかであるから，REDUCE 3.0のoperator RESULTANTを用いることにする．$35f(x)$を改めて$f(x)$とおき(REDUCE 3.0は，*integer coefficient*のもののみを*polynomial*と解釈するところがあるので)，

$$R1 := \mathrm{RESULTANT}(f(\rho_2),\ \varphi(\rho_2, \rho_3),\ \rho_2)$$

$$R2 := \mathrm{RESULTANT}(f(\rho_3),\ R1(\rho_3),\ \rho_3)$$

と求める．ところが，R2 = 0 となってしまった！

調べてみると

(3.1) $R1 = 800(231525\rho_3^6 - 463050\rho_3^5 + 338625\rho_3^4 - 111880\rho_3^3 + 16155\rho_3^2 - 750\rho_3 - 1)$

であり，FACTORIZE をかけてみると

(3.2) $R1/800 = (6615\rho_3^3 - 4725\rho_3^2 + 765\rho_3 + 1)\cdot f(\rho_3)$

となっていることが分る．従って，R2 = 0 となるのが当然である．factor $f(\rho_3)$ があるのは，

(3.3) $\varphi(\rho_2, \rho_2) = 3(5\rho_2 - 1)f(\rho_2)$

であるから，$\rho_2 = \rho_3$ の条件のためである．つまり，禁止されている条件 $\rho_2 = \rho_3$ のもとでは，$f(\rho_3)$ が R1 の factor になるのである．従って

$$6615\rho_3^3 - 4725\rho_3^2 + 765\rho_3 + 1$$

と $f(\rho_3)$ との resultant をとることが必要で，これを実行すると，結果は −3354148000 となり，万々歳というわけである．

この成功例に気をよくして，更に higher stage の公式を調べることに適用する．次は，(1, 5)-stage 公式になるわけだが，今度は 20個のパラメータ ν_i, ρ_i, τ_{ij} が，表1の (E-0)～

(E-617)の39個の方程式を満たしうるか(満たさないことを期待して)ということになる.

(1, 4)-stageの場合と同じ手法で場合分けを調べていくと、面倒な場合が二つある. 第1は

「$\rho_1=\rho_3$, $3\rho_1=\rho_2$, $\nu_1=0$, $\nu_3A_3=A_4=A_5=\nu_3B_3=B_4=B_5=0$で, $\rho_1, \rho_2, \rho_4, \rho_5$は相異なる」

第2は

「$\rho_1\sim\rho_5$はすべて相異なり, $\nu_1=A_2=A_3=A_4=A_5=B_2=B_3=B_4=B_5=0$」

である. ここでA_i, B_iは§2での定義を$i=5$まで拡張したものである.

第1の場合に対しては, $\rho_1, \rho_2, \rho_4, \rho_5$が満たすべき4次方程式として

$$(3.4)\quad f(x;r)=x^4-rx^3+\frac{9(r-1)}{7}x^2-\frac{3r-4}{7}x+\frac{2r-3}{70}$$

がえられる. 但, (1, 4)-stageの場合と違って, この4次方程式は実パラメータrを含んでいる. そのパラメータは, $3\rho_1=\rho_2$の条件, つまり$f(x;r)=0$と$f(3x;r)=0$が共通根xをもたなければならない条件から, ひとつの6次方程式をみたさなければならない. これを$g(r)=0$としておく.

次いで, (E-601)〜(E-617)のうちのいくつかを含む条件式を使いながら, $\nu_2\sim\nu_5$, $\tau_{21}\sim\tau_{54}$を, $\rho_2\sim\rho_5$で表現し、最

終的に

$$(3.5)\quad \Phi(\rho_3, \rho_4, \rho_5) \equiv \{42\rho_4\rho_5 - 14(\rho_4+\rho_5)+7\}\rho_3 - \frac{50}{3}\rho_4\rho_5 + \frac{25}{3}(\rho_4+\rho_5) - 5 = 0$$

が満たされるかどうかに帰着する．すなわち

$$\Phi(\rho_3, \rho_4, \rho_5)=0,\quad f(\rho_3; r)=0,\quad f(\rho_4; r)=0,\quad f(\rho_5; r)=0$$

から ρ_3, ρ_4, ρ_5 を消去した終結式を作り，これはパラメータ r の多項式となる（48次式となった）から，これと $g(r)=0$ の r についての終結式を調べる．

このように一口で言うが，実は operator RESULTANT に単純に放りこんだのでは，たちまちパンクしてしまうので，Sylvester 行列式を作りながら，色々工夫して実行する．その結果，最後は3827桁の整数となって，第1の場合の成立の可能性はつぶされる。

第2の場合は，それ以上にすさまじい．というのは，第1の場合にあった $g(r)=0$ にあたる条件がないので，終結式の計算はとてつもなく面倒であり，最終段階に至って，ついに DEC2020 上の REDUCE 2.0 の容量一杯を使い切って，なお答がえられない事態となった．そこで，mod(p) の計算に移行させ，ようやく否定的な結論に至った．いうまでもないことだが

$$\text{resultant} \neq 0 \mod (p) \quad \Longrightarrow \quad \text{resultant} \neq 0$$

だからである.

§4. まとめ

Runge-Kutta公式，またそれに近い型の公式は，multistage multiderivativeの公式と位置づけられ，multistepの方法と対比させられながら，研究が進んでいる([1]). その場合は，hand-calculationで行なえることは，殆んど調べつくされており，今後はSAMの活用が不可欠であろう.

本稿では

(1) RK型公式のattainable orderの決定には，決定方程式系の導出と同様，SAMが有効であること

(2) しかし，相当な工夫をしなければ，所期の目的は達し難いこと

(3) $\mathbf{Z}_p$上の演算は有望であるが，素数pをいかにとるべきかは予め推定しがたいこと

を，経験をふまえながら述べた. 今後には，attainable orderをもつ公式の解系，その最適化，stability analysisなどの課題があると思われる. これらに対してもSAMの活用が期待される.

なお，計算は京都大学数理解析研究所・DEC System 2020を用いた.

References

[1] Gekeler, E., Discretization methods for stable initial value problems, Lect. Notes in Math., 1044, Springer, 1984.

[2] Hairer, E., private communication, 1982.

[3] Mitsui, T., 2階導函数を使うRunge-Kutta型公式の探索, 京都大学数理解析研究所講究録, 406「数式処理と数学研究への応用」, 1980.

[4] Mitsui, T., Runge-Kutta type integration formulas including the evaluation of the second derivative, Part I, Publ. RIMS, 18(1982), 325-364.

[5] Mitsui, T., -----------, Part II, in preparation.

[6] Shanks, E.B., Solutions of differential equations by evaluations of functions, Math. Comp., 20(1966), 21-38.