

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、その要旨と、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

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

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

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

を決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

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

をとるもので、 s はこのRK公式のstage number, $k_1, k_2, \dots, k_s$ 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、

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

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

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

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。但こゝで、 $y(x+h)$ のべき級数展開に現われる解 $y(x)$ の高階導函数は、

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

のようにあきかえる。

J.C. BUTCHERによつてえられた結果によれば

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

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、埋み込み型公式 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

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

$$\begin{cases} K_1 = g(x + p_1 h, y + h \sigma_1 k_1), \\ K_i = g(x + p_i h, y + h \sum_{j=1}^i \sigma_{ij} k_j + h^2 \sum_{j=1}^{i-1} \tau_{ij} K_j), \quad i=2, 3, \dots, g \end{cases}$$

となる。これを (p, g) -stage 公式といおう。 $g(x, y)$ 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 $(1, g)$ -stage 公式のパラメータ p_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、 $g = 1 \sim 4$ 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。

そこで、 $(1, g)$ -stage 公式の attainable order を決定することは、 p_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) $6720 \sum_i v_i T_{i0}^3 = 15$

$\cdots = \sum_i \cdots (\sum_j \cdots)$ などは, $\sum_{i=1}^8 \cdots (\sum_{j=1}^{i-1} \cdots)$ の意味

T_{ik} は, $T_{ik} = 0$, $T_{ik} = \sum_{j=1}^{i-1} \rho_i^k \tau_{ij}$, $i=2, 3, \dots, 8$ の意味.

表 1. 決定方程式系

$g = 1 \sim 3$ 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ぬ。[4] で述べているように、 $p_1 \sim p_4$ 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、 $p_1 \sim p_4$ はすべて相異なり、かつ

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

の場合である。このときは、まず p_2, p_3, p_4 は次のような 3 次方程式の distinct root であることを示される。

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

次に、(E-0), (E-1), (E-21), (E-31) を用いれば、 $\nu_2 \sim \nu_4$ は $p_2 \sim p_4$ 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

$$B_2 = B_3 = B_4 = 0 \quad \text{但 } B_i = \sum_j p_j \tau_{ij} - \frac{1}{6} p_i^3$$

を用いると、 $\tau_{21}, \tau_{31}, \tau_{32}, \tau_{41}, \tau_{42}, \tau_{43}$ を $p_2 \sim p_4$ を用いて表わすことができるし、同時に $p_1 = p_2/3$ 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 p_2, p_3 のみの代数式として表現でき, 結局次のような $\varphi(p_2, p_3)$ が 0 にならなければならない.

$$(2.3) \quad \varphi(p_2, p_3) = 525p_2^2p_3^2 - 360p_2^2p_3 - 420p_2p_3^2 \\ - 5p_2^2 + 260p_2p_3 + 105p_3^2 - 60p_3 + 3$$

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, p_2, p_3 は $f(p_2) = f(p_3) = 0$ 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成り立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

" $\varphi(p_2, p_3) = 0, f(p_2) = 0, f(p_3) = 0$ を満足する実数 p_2, p_3 は存在しない. 但 $p_2 \neq p_3$."

を言わなければならない. 序でに言えば, (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),

$$R1 := \text{RESULTANT}(f(p_2), \varphi(p_2, p_3), p_2)$$

$$R2 := \text{RESULTANT}(f(p_3), R1(p_3), p_3)$$

と求める。ところが、 $R2=0$ となっていました！

調べてみると

$$(3.1) \quad R1 = 800(231525 p_3^6 - 463050 p_3^5 + 338625 p_3^4 - 111880 p_3^3 + 16155 p_3^2 - 750 p_3 - 1)$$

であり、 FACTORIZE をかけてみると

$$(3.2) \quad R1/800 = (6615 p_3^3 - 4725 p_3^2 + 765 p_3 + 1) \cdot f(p_3)$$

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 $f(p_3)$ があるのは、

$$(3.3) \quad \varphi(p_2, p_2) = 3(5p_2 - 1)f(p_2)$$

であるから、 $p_2 = p_3$ の条件のためである。つまり、禁止されている条件 $p_2 = p_3$ のもとでは、 $f(p_3)$ が $R1$ の factor になるのである。従って

$$6615 p_3^3 - 4725 p_3^2 + 765 p_3 + 1$$

と $f(p_3)$ との resultant をとることが必要で、これを実行すると、結果は -33541480000 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 p_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。オ 1 は

「 $p_1 = p_3$, $3p_1 = p_2$, $\nu_1 = 0$, $\nu_3 A_3 = A_4 = A_5 = \nu_3 B_3 = B_4 = B_5 = 0$ で, p_1, p_2, p_4, p_5 は相異なる」

オ 2 は

「 $p_1 \sim p_5$ 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 の定義を $i=5$ まで拡張したものである。

オ 1 の場合に対しては, p_1, p_2, p_4, p_5 を満たすべき 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。このパラメータは, $3p_1 = p_2$ 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, $p_2 \sim p_5$ で表現し、最

終的に

$$(3.5) \quad \Phi(p_3, p_4, p_5) \equiv \{42p_4p_5 - 14(p_4 + p_5) + 7\}p_3 - \frac{50}{3}p_4p_5 + \\ + \frac{25}{3}(p_4 + p_5) - 5 = 0$$

が満たされるかどうかに着する。すなわち

$$\Phi(p_3, p_4, p_5) = 0, \quad f(p_3; r) = 0, \quad f(p_4; r) = 0, \quad f(p_5; r) = 0$$

から p_3, p_4, p_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、これを $g(r) = 0$ 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、オ1の場合の成立の可能性はつきさる。

オ2の場合は、それ以上にすさまじい。というのは、オ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、 $\text{mod}(p)$ 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

$$\text{resultant} \not\equiv 0 \pmod{p} \Rightarrow \text{resultant} \neq 0$$

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) $\mathbb{Z}_p$ 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階導関数を使うRunge-Kutta型公式の探索, 京都大学数理解析研究所講究録, 406「数式処理と数値研究への応用」, 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.