Butcher級数

宮武　勇登

常微分方程式の数値解析では，厳密解および近似解を刻み幅について Taylor 級数展開することが基本的な手法である．Taylor 級数展開というその響きに反して，高次の数値解法の導出や解析は一筋縄では行かないが，根付き木を用いることで，明快な議論が可能となる．さらに，級数自体を根付き木ととり密接に対応させたものが Butcher 級数（B 級数）であるが，その豊富な代数的構造により，数値解析分野において半世紀近くにわたって貢献してきた．本稿では，B 級数の基本的な考え方と，そのいくつかの応用について紹介したい．

キーワード：常微分方程式，B 級数，根付き木，代数的解析

1. はじめに

近年，微分方程式に対する数値解法の研究において，近似解を（深層）ニューラルネットワークで表現する手法が注目を集めている [1]．しかし，現時点では，従来型の数値解法を一気に圧倒するほどの性能には至っておらず，適材適所の活用に加えて，困難を克服すべく活発に研究が進められている．その研究の進展は，スピード感こそ異なるものの，従来の数値解法の発展過程と類似しているようにも思われる．また，従来の数値解法の知見を活かした研究も進められている．

本稿では，どのような話題を取り上げるか検討した結果，最先端の数値解法ではなく，比較してやや古典的な話題ではあるが，常微分方程式の初期値問題に対する数値解法研究に焦点を当て，過去半世紀以上にわたって重要な役割を果たしてきた Butcher 級数（以下，B 級数）について紹介したい．B 級数は，常微分方程式の数値解析において，木構造を利用して代数的な議論を可能にする強力なツールである．しかし，その重要性に反して，数値解析の入門書などで取り上げられることは少ない．

筆者は，学生時代に B 級数を学んで以来，グラフ理論や最適化問題などを専門とする研究者が B 級数に対してどのような印象を抱くのかに強い関心をもっていた．このたび本稿執筆の機会を得たことを契機に，B 級数に関する知見を広く共有することを目的として，本稿を執筆するに至った．

なお，Butcher 級数という用語は Hairer と Wanner により 1974 年に導入されたものであり [2]，現代的な記法を用いた速修コースとしては文献 [3] などがわかりやすい．一方で，用語の元になった Butcher 自身による直近の成書 [4]（および翻訳版 [5]）も，Butcher 自身の感性に溢れた力作である．

みやたけ　ゆうと
大阪大学 D3 センター
〒 560–0043 大阪府豊中市待兼山町 1–32
yuto.miyatake.cmc@osaka-u.ac.jp

2. 歴史的背景

常微分方程式の初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{u}(t)=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}(t)),\quad \boldsymbol{u}(0)=\boldsymbol{u}_0\in\mathbb{R}^d \tag{1}$$

の数値解法を開発する際，最初の関心事はその近似精度であろう．時間刻み幅を h と表すと，n ステップ後の時刻 $t=nh$ である．この時刻における厳密解は $\boldsymbol{u}(nh)$ であり，Euler 法や Runge–Kutta 法などで得た近似解を $\boldsymbol{u}_n$ と表すことにすると，誤差

$$\boldsymbol{e}_n:=\boldsymbol{u}(nh)-\boldsymbol{u}_n$$

が小さいほど，近似解の精度が高いといえる．もう少し紐解くと，誤差の積み重ねは直感的には 1 ステップの誤差の積み重ねと解釈できるため，1 ステップで混入する誤差 $\|\boldsymbol{e}_1\|=\|\boldsymbol{u}(h)-\boldsymbol{u}_1\|$ が 0 に近いほど，良い数値解法といえそうである．この誤差を解析するには，厳密解 $\boldsymbol{u}(h)$ と近似解 $\boldsymbol{u}_1$ をどちらも h についての関数とみなし，h について級数展開して比較するのが有効である．通常，$(0<)h\ll 1$ であることを想定するため，$\boldsymbol{e}_1=\mathrm{O}(h^{p+1})$ となる p が大きいほど，精度の高い数値解法といえる（このとき，級数展開が p 次の項まで一致しており，その数値解法のことを p 次の解法という）．そのため，厳密解や近似解を刻み幅 h に関して Taylor 級数展開することが，本質的に重要となる．

たかが Taylor 級数展開，されど Taylor 級数展開である．困難は二つある．

一つ目は，「$d=1$（つまり，スカラー値の微分方程

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

式）のときに比べ，$d \geq 2$ の場合では議論がやや複雑になる」という点である．実は，この点はそれほど難しいものではないのだが，歴史的には，$d = 1$ の場合に解法を開発し期待する精度が達成できているにもかかわらず，$d \geq 2$ の場合に適用すると期待する精度が出ないということがあった．二つ目は，「高次になるにつれて，現れる項の数が指数的に増大する」という点である．たとえば，10 次の項まで考えるならば，累計で実に 1,205 個の項が現れ，これらの扱いが問題となる．

1857 年の Cayley の論文 [6] で，数学における木の重要性が指摘された．この議論は，現代の数値解析の視点から捉え直すと，常微分方程式の厳密解の Taylor 級数展開が根付き木を用いて表現できることを示唆している．しかし，その後 100 年近くにわたって，少なくとも数値解析学者にとって，この重要な発見はお蔵入りになっていた．1900 年前後にいくつかの Runge–Kutta 法が開発されたが，高次解法の開発には上述の点を含む多くの問題が残されたままであった．実際，理工系の多くの学部で標準的に学習する Runge–Kutta 法は 1901 年に Kutta により提案されたもので，これは 4 段 4 次の陽的な方法であるが，5 段 5 次の陽的 Runge–Kutta 法が可能かどうかは半世紀以上未解決であった．

1950 年代後半に，ニュージーランドの新鋭の数学者である Butcher が，Marson の講義を聞く [7]．このことがきっかけになり，常微分方程式の数値解法の研究は爆発的に進展することとなる．

3. B 級数

3.1 Taylor 級数展開

Taylor 級数展開により，常微分方程式の初期値問題 (1) の解は（少なくとも形式的には）

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}(h) =& \boldsymbol{u}_0 + h\dot{\boldsymbol{u}}(0) + \frac{h^2}{2}\ddot{\boldsymbol{u}}(0) + \frac{h^3}{6}\dddot{\boldsymbol{u}}(0) \\ &+ \frac{h^4}{24}\ddddot{\boldsymbol{u}}(0) + \cdots\end{aligned}$$

と表現できる（本稿では級数の収束については論じない）．ここで，$\boldsymbol{u}(t)$ の導関数値を，$\boldsymbol{f}$ とその微分を使って表すことを考えよう．

- $\dot{\boldsymbol{u}}(0)$ について
  微分方程式 (1) の両辺を $t = 0$ で評価すればよいから，$\dot{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}_0)$ である．
- $\ddot{\boldsymbol{u}}(0)$ について
  微分方程式 (1) の両辺を合成関数の微分を用いて t で微分し

$$\ddot{\boldsymbol{u}}(t) = \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{u}(t))\dot{\boldsymbol{u}}(t) = \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{u}(t))\boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}(t)) \quad (2)$$

  を得たうえで $t = 0$ を代入することで

$$\ddot{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{f}'(\boldsymbol{u}_0)f(\boldsymbol{u}_0) \ (= \boldsymbol{f}'\boldsymbol{f})$$

  を得る．以後，括弧内の表記のように $(\boldsymbol{u}_0)$ をしばしば省略する．
- $\dddot{\boldsymbol{u}}(0)$ について
  高階微分についても同様に進めていけばよいのだが，(2) の右辺を t で微分すると，項が二つ現れる．そのため，$\dddot{\boldsymbol{u}}(0)$ は

$$\dddot{\boldsymbol{u}}(0) = \boldsymbol{f}''\boldsymbol{f}\boldsymbol{f} + \boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}$$

  のように 2 項の和で表現される．ここで，右辺第 1 項について注意をしておく．関数 $\boldsymbol{f}'(\boldsymbol{u}(t))$ を t について微分すると $\boldsymbol{f}''(\boldsymbol{u}(t))\boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}(t))$ が現れるが，$\boldsymbol{f}''(\boldsymbol{u}(t))$ は 3 階のテンソルであり，$\boldsymbol{f}''(\boldsymbol{u}(t))$: $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ とみなせる．
- $\ddddot{\boldsymbol{u}}(0)$ について
  同様に計算すれば，4 階微分は

$$\begin{aligned}\ddddot{\boldsymbol{u}}(0) =& \boldsymbol{f}'''\boldsymbol{f}\boldsymbol{f}\boldsymbol{f} + 3\boldsymbol{f}''\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}\boldsymbol{f} \\ &+ \boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}''\boldsymbol{f}\boldsymbol{f} + \boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}\end{aligned}$$

  となる．ここで，右辺第 2 項と第 3 項は $d = 1$ の場合を除いて一致しない．なぜならば，2 項目の $\boldsymbol{f}''$ は $\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}$ と $\boldsymbol{f}$ に作用する多重線形作用素であり，3 項目の $\boldsymbol{f}''$ は $\boldsymbol{f}$ と $\boldsymbol{f}$ に作用する多重線形作用素だからである．このような項を区別することで，前節で述べた一つ目の問題点は回避できる．

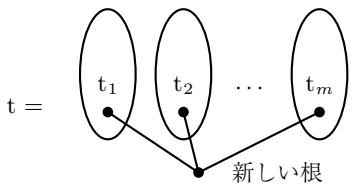
このようにして現れる項をよく眺めると，根付き技との密接な関係が見えてくる．

3.2 根付き木

根付き木[1]の集合を

$$\mathcal{T} = \{\bullet, \ldots\} \qquad (3)$$

と表す．ここで，形が同じ木（たとえば と ）は同一視する．また，



[1] 常微分方程式の数値解析の文脈では根を下に描く慣習があるため，本稿でもその慣習に従う．

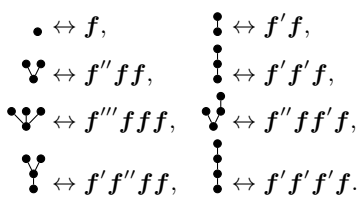
 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

のように，$\mathrm{t}_1, \mathrm{t}_2, \ldots, \mathrm{t}_m$ に共通の新しい根を付けた根付き木を

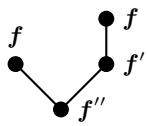
$$\mathrm{t} = [\mathrm{t}_1, \mathrm{t}_2, \ldots, \mathrm{t}_m]$$

と表す．もし，$\mathrm{t}_1, \mathrm{t}_2, \ldots, \mathrm{t}_m$ の中に互いに同一のものが含まれる場合は，$\mathrm{t} = [\mathrm{t}_1^{k_1}, \mathrm{t}_2^{k_2}, \ldots]$ のような表記をすることもある．たとえば，[] と [] を同一視する．

実は，根付き木と Taylor 級数展開で現れる $\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}$ などの項は一対一に対応する．実際，$u(0)$ の 1 次導関数値から 4 次導関数値までに，$1+1+2+4=8$ 個の項が現れたが，頂点数が 4 以下の根付き木も (3) に示されているようにちょうど 8 個あり，それらの間には次のような対応関係がある：



たとえば， ↔ $\boldsymbol{f}''\boldsymbol{f}\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}$ の関係は，



のように，各頂点に $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{f}'$, $\boldsymbol{f}''$ を対応させるとわかりやすい．ここでは，プライムの数と，その頂点から「上」に伸びている枝の数が一致するような関係になっている．

以上の対応関係を，$F($ $) = \boldsymbol{f}''\boldsymbol{f}\boldsymbol{f}'\boldsymbol{f}$ のように表し，このような F のことを要素的微分と呼ぶ．

3.3 B 級数

今度は，要素的微分の係数に着目しよう．準備として，$\emptyset \cup \mathcal{T}$ から $\mathbb{R}$ へのすべての写像の集合を B^* とする．また，B^* の部分集合 B を $\mathsf{B} = \{a \in \mathsf{B}^* \mid a(\emptyset) = 1\}$ で定義する．いま，与えられた $a \in \mathsf{B}^*$ に対して，形式的な級数

$$(B_h \boldsymbol{u}_0)a = a(\emptyset)\boldsymbol{u}_0 + h \sum_{\mathrm{t} \in \mathcal{T}} \frac{h^{|\mathrm{t}|} a(\mathrm{t})}{\sigma(\mathrm{t})} F(\mathrm{t}) \quad (4)$$

を考えよう（$|\mathrm{t}|$ は t の頂点数を表す）．ここで，σ は

$$\sigma(\bullet) = 1,$$
$$\sigma(\mathrm{t}) = \prod_{i=1}^{m} k_i! \sigma(\mathrm{t}_i)^{k_i}, \quad \mathrm{t} = [\mathrm{t}_1^{k_1}, \mathrm{t}_2^{k_2}, \ldots, \mathrm{t}_m^{k_m}]$$

で再帰的に定義される関数で，対称度と呼ばれる．上記の形式的級数 (4) を B 級数と呼ぶ．

B 級数についての最初の重要な観察は，微分方程式の時間発展フローは B 級数で表現できることである．実際，$e \in \mathsf{B}$ を

$$e(\bullet) = 1,$$
$$e(\mathrm{t}) = \frac{1}{|\mathrm{t}|} e(\mathrm{t}_1) \cdots e(\mathrm{t}_m), \quad \mathrm{t} = [\mathrm{t}_1, \ldots, \mathrm{t}_m]$$

で再帰的に定義すると，$\boldsymbol{u}(h) = (B_h \boldsymbol{u}_0)e$ が成り立つ．

3.4 Runge–Kutta 法も B 級数

ここまでは，微分方程式の解の級数展開を根付き木を用いて明快に表現したに過ぎない．数値解析的観点から重要なことは，Runge–Kutta 法をはじめ，多くの数値解法も B 級数で表現できることである．

たとえば，次のような時間発展写像 $\boldsymbol{u}_0 \mapsto \boldsymbol{u}_1$ を考えよう：

$$\boldsymbol{U}_i = \boldsymbol{u}_0 + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{U}_j), \quad i = 1, \ldots, s,$$
$$\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{u}_0 + h \sum_{i=1}^{s} b_i \boldsymbol{f}(\boldsymbol{U}_i).$$

ここで，$s \times s$ 型行列 A と s 次元ベクトル $\boldsymbol{b}$ を定めれば，具体的な数値解法になる．このような解法を s 段の Runge–Kutta (RK) 法という．RK 法の基本的な考え方は 1895 年から 1901 年にかけての Runge [8], Heun [9], Kutta [10] などの論文による．RK 法を表す便利な表記法として，以下のようなものがある：

$$\begin{array}{c|c} \boldsymbol{c} & A \\ \hline & \boldsymbol{b}^\top \end{array} = \begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array}. \quad (5)$$

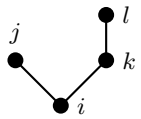
ここで c_i は A の i 行目の要素の和であり，内部段と呼ばれる $\boldsymbol{U}_i$ は $\boldsymbol{u}(c_i h)$ の近似とみなせる．この表記 (5) を Butcher 配列という．計算の効率性の観点から，もし A が狭義下三角であれば，$\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2, \ldots, \boldsymbol{U}_s$ の順に，（方程式を解くことなく）内部段を順々に計算していくことが可能であり，そのような場合を陽的な解法という．Kutta による標準的な RK 公式は

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/2 & 1/2 & & & \\ 1/2 & & 1/2 & & \\ 1 & & & 1 & \\ \hline & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 \end{array} \tag{6}$$

であり，4 段（4 次）の陽的な解法である [10].

さて，RK 法による $\boldsymbol{u}_1$ の級数展開も次のように B 級数で表現できる．写像 $\varphi \in \mathsf{B}^*$ を次のように定義しよう．たとえば については



のように頂点に添え字を付け，根の i については b_i を対応させ，他の三つの枝に関して a_{ij}, a_{ik}, a_{kl} を対応させる．それらをすべて掛け合わせて添字について和をとったものを

$$\varphi(\text{ }) = \sum_{i,j,k,l} b_i a_{ij} a_{ik} a_{kl}$$

とする．このように写像 φ を定義すると，実は $\boldsymbol{u}_1 = (B_h \boldsymbol{u}_0)\varphi$ が従う．このような $\varphi \in \mathsf{B}$ のことを要素的重みと呼ぶ．また，本質的に B^* の写像が B 級数を定めることから，以下では，写像のことを B 級数と呼ぶこともある．

以上の議論から，RK 法が p 次であることと，$|\mathrm{t}| \le p$ を満たすすべての根付き木に対して $\varphi(\mathrm{t}) = e(\mathrm{t})$ が成り立つことが必要十分であることがわかる．この条件を次数条件と呼ぶ．ここで，p 次の Runge–Kutta 法を構築するためには，頂点数が p 以下のすべての根付き木の個数分だけ条件があることを改めて注意しておく．

3.5 RK 法の設計の難しさ

ここで，1900 年前後を改めて振り返ろう．いわゆる RK 法 (6) は，$s = 4$ であり，行列 A は狭義下三角である．そのため，A と $\boldsymbol{b}$ をパラメータとすると，その自由度は $6 + 4 = 10$ 個ある．一方で，4 次精度を達成する次数条件は 8 個であったから，Kutta による技術的な貢献は，10 変数についての 8 本の代数方程式（多項式レベルではあるが非線形な連立方程式）を解いたことといえる．

必ずしも自明なことではないが，方程式の数より変数の数のほうが多いため，解があること自体はさほど不思議でない．ところが，5 段 5 次の陽的 RK 法を見つけるためには，15 変数についての 17 本の代数方程式を解かねばならない．Kutta はこれを解くことができず，代わりに，6 段（この場合の変数の数は 21 個）を使って 5 次精度解法を構築した（実は，この当時の議論では，微分方程式はスカラー値であることが暗に仮定されており，そのため，Kutta の議論は十分ではなく，なおかつ，Kutta の見つけた 5 段解法には間違いもあったが，いずれにしても 6 段 5 次の解法が存在することは正しい）．その後，半世紀以上経ってから，Butcher によって，5 段 5 次が不可能であることがようやく示された．他にも同様の「不可能」を示す定理が知られているが（たとえば文献 [11–13]），Butcher による一連の結果は「Butcher の障壁」と呼ばれている．

なお，現代において実用上の観点からの注目度はさほど高くはないものの，10 次の陽的 Runge–Kutta 法を達成する最小の段数は長らく $s = 17$ 段であるとされてきた．これは，Hairer による結果であり，153 変数に関する 1,205 本の代数方程式を代数的に解いて得られたものであり，実に驚異的である [14]（ギネス記録にも載っていた）．一方で，16 段で 15 次を達成できないという，いわゆる「Butcher の障壁」型の定理も知られていなかったが，2019 年に，Vanderbilt 大学の学生 Zhang が，卒業論文「Discovering New Runge–Kutta Methods Using Unstructured Numerical Search」の中で，16 段 10 次の陽的 RK 法の係数を決定したと発表した．彼は，136 変数に関する 1,205 本の連立方程式を，さまざまな工夫を施したうえで，非線形最適化の BFGS アルゴリズムを利用して係数を決定しており，上記の Hairer による代数的解とは意味が異なることに注意が必要である．しかし，複数の数値解析学者による検証の結果，16 段で 15 次が可能であるというこの主張は成立していると考えられており，2024 年には，数値解析分野の査読付き論文誌にも掲載された [15].

実は，陰的 RK 法については，s 段 $2s$ 次が可能であることが知られており（かつ，s 段で $2s + 1$ 次は不可能であることも知られている），これも Butcher による初期の結果の一つであるが，その議論では，根付き木を用いて，膨大な数の条件を縮約するということが行われている [16]．縮約の考え方は，Butcher による成書 [17] の中で，ニュージーランド・クリスマスツリーなどのニュージーランド固有の木のイラストと共に明快に説明されている．

 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

4. B 級数の合成

B 級数を用いた議論を展開するうえで,「B 級数の合成」が極めて重要である.

二つの B 級数 $a \in \mathsf{B}$, $b \in \mathsf{B}^*$ を考えよう. このとき, 初期値 $\boldsymbol{u}_0$ と写像 a による結果を初期値とし, それに写像 b を作用させる. すなわち,

$$\big(B_h\big((B_h\boldsymbol{u}_0)a\big)\big)b$$

を考えるのだが, 実はある写像 $ab \in \mathsf{B}^*$ が存在して,

$$\big(B_h\big((B_h\boldsymbol{u}_0)a\big)\big)b = (B_h\boldsymbol{u}_0)ab$$

と表せる. ここで重要なのは, ab を代数的に極めて明快に記述できることである.

定理 1（文献 [2, 18]）. B 級数 $a \in \mathsf{B}$, $b \in \mathsf{B}^*$ に対し,

$$\begin{aligned}&(ab)(\emptyset) = b(\emptyset),\\ &(ab)(\mathrm{t}) = b(\emptyset)a(\mathrm{t}) + \sum_{\mathrm{t}' \le \mathrm{t}} b(\mathrm{t}')a(\mathrm{t} \setminus \mathrm{t}'), \quad \mathrm{t} \in \mathcal{T}\end{aligned}$$

が成り立つ.

ここで, 根付き木 t に対し, $\mathrm{t}' \le \mathrm{t}$ を満たす t' とは, t からいくつかの頂点や枝を消去することで構成される根付き木を表しており, 部分木もしくは下位木と呼ばれる. たとえば, $\mathrm{t} =$ に対し, 対応する部分木は

$\mathrm{t}' =$

の 4 種類存在する. これらの t' に対して, $a(\mathrm{t} \setminus \mathrm{t}')$ の定義を例を通して述べる.

- $a($ $\setminus \bullet)$ について
  これは, から根と根から延びている枝を削除することを意味しており, そうすると 3 個の頂点が残る. そこで, $a($ $\setminus \bullet) = a(\bullet)^3$ と定義する.
- $a($ $\setminus$ $)$ について
  これは, から と根から延びている二本の枝を削除することを意味しており, その結果二つの頂点が残る. ただし, に対して部分木としての の選び方は 3 通りの組合せがあることから, $a($ $\setminus$ $) = 3a(\bullet)^2$ と定義する.
- $a($ $\setminus$ $)$ について
  これは, から と根から延びている一本の枝を削除することを意味しており, その結果一つの頂点が残る. ただし, に対して部分木としての の選び方は 3 通りの組合せがあることから, $a($ $\setminus$ $) = 3a(\bullet)$ と定義する.
- $\mathrm{t}' =$ について
  この場合は $a($$\setminus$ $) = a(\emptyset) = 1$ と定義する.

以上をまとめると,

$$\begin{aligned}ab(\text{}) =& b(\emptyset)a(\text{}) + b(\bullet)a(\bullet)^3 + 3b(\text{})a(\bullet)^2\\ &+ 3b(\text{})a(\bullet) + b(\text{})\end{aligned}$$

となる.

この定理の証明には, いくつかの方針が知られている. 最初の証明は Butcher によるもので [18], その後, Hairer と Wanner により, より直接的な証明が与えられた [2]（文献 [19] の Theorem II.12.6 も参照されたい）. より現代的な記法による証明は文献 [3] にある. 以上は, いずれもラベル付き木を利用した証明だが, 本稿で述べた通常の根付き木だけを用いた self-contained な証明が文献 [20] で与えられている.

なお, 2 項演算 $(a, b) \mapsto ab$ を備えた集合 B は,

$$1(\emptyset) = 1, \quad 1(\mathrm{t}) = 0, \quad \mathrm{t} \in \mathcal{T}$$

を単位元として, 群である [2]. この群のことを Butcher 群と呼ぶ. Butcher 群は, 物理学や幾何学（Hopf 代数など）における応用ももつ [21].

5. B 級数の応用

ここから, B 級数のいくつかの応用を紹介したい.

5.1 実効次数法

RK 法は B 級数法であるから, それぞれの RK 法に対し, 対応する要素的重み φ が定まる. 二つの RK 法 φ, ψ を考えよう. RK 法 ψ について, その逆の ψ^{-1} もまた同じ段数の RK 法となる（ただし, 時間逆向きに時間発展する解法となる）. そこで, これらの RK 法の合成により, $\Phi = \psi^{-1}\varphi\psi$ を考えると, これもまた離散的な h 時間発展を計算する RK 法となる. この新しい RK 法 $\tilde{\varphi}$ を用いて n ステップ計算するためには,

$$\tilde{\varphi}^n = \psi^{-1}\varphi^n\psi$$

を計算すればよく, ψ や ψ^{-1} の計算は 1 回でよい. そのため, $\tilde{\varphi}$ の計算コストは漸近的には φ の計算コストとほぼ同程度になる.

5 段 5 次の陽的 RK 法が存在しないことを思い起こそう. 実は, 5 段のある陽的 RK 法 φ と, 同じく 5 段の適切な RK 法 ψ を選べば, $\tilde{\varphi}$ を 5 次精度にできる. そのため, 5 段 5 次の陽的 RK 法は不可能ではあるものの, 実用上は, 5 段の陽的 RK 法と同程度のコスト

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

の計算で 5 次を達成することが可能である．このような，数値解法を Butcher の実効次数法と呼ぶ [22].

5.2 合成解法

Butcher の実効次数法や本稿では扱わないが分解解法と呼ばれる解法のように異なる数値解法の合成で優れた解法を構築することができるが，それだけでなく，一つの数値解法を用いつつも，複数のステップ幅で合成することで高次化を達成することもできる．たとえば，φ_h を対称な 2 次精度解法としよう（数値解法の対称性についてはここでは踏み込まないが，比較的容易に実現できるある「良い性質」のことだと認めて読み進めてほしい）．ここで，

$$\gamma = \frac{1}{2 - \sqrt[3]{2}}$$

として，

$$\tilde{\varphi}_h = \varphi_{\gamma h} \varphi_{(1-2\gamma)h} \varphi_{\gamma h}$$

という新しい数値解法 $\tilde{\varphi}_h$ を考えると，この数値解法は 4 次精度解法となる．このように，一つの数値解法を使いつつも，刻み幅を変えて最低 3 回の合成を行えば精度を 2 次ずつ上げていくことができる．

なお，3 回の合成により次数を上げる方法は「吉田のトリプル・ジャンプ」と呼ばれ [23]，5 回の合成により次数を上げる方法は「鈴木のフラクタル」と呼ばれている [24]．3 回の合成の場合，何次から 2 次上げるかによって γ の値は変わるものの，常に $\gamma > 1$ であるため，大きな刻み幅を用いなければならず，方程式によっては，安定性などの面で不安が残ることもある．一方で，5 回の合成では，パラメータの絶対値が 1 より小さくなる．時間発展ごとの計算量はやや増加するが，安定性や誤差の面で優れることがある．

5.3 構造保存数値解法

常微分方程式の初期値問題のうち，特に重要な問題クラスとしてハミルトン系がある．

次の形式の常微分方程式を考えよう：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{u}(t) = J^{-1}\nabla H(\boldsymbol{u}(t)), \quad \boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_0. \tag{7}$$

ただし，

$$J^{-1} = \begin{bmatrix} O & I \\ -I & O \end{bmatrix}$$

である．ハミルトン系には，解フローがシンプレクティックであるという顕著な性質がある．すなわち，ハミルトン系 (7) のフロー $\boldsymbol{\varphi}_t$ に対して

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t}{\partial \boldsymbol{u}_0}\right)^{\mathsf{T}} J \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_t}{\partial \boldsymbol{u}_0}\right) = J$$

が成り立つ．離散的なフローもシンプレクティックであるような解法をシンプレクティック解法といい，多くの場合，非常に性質の良い数値解が得られる．

ハミルトン系にはエネルギー保存則 ($H(\boldsymbol{u}(t)) = \text{const.}$) もあり，多くの解法と同様にシンプレクティック解法も一般にエネルギー保存則は失うが，正しいエネルギーからの誤差が増大することはなく，指数的に長い時間にわたって，一定の幅で抑えられることから（このことは「後退誤差解析」という手法で数学的にも示されている），非常に性質の良い数値計算が期待できる．そのため，長時間積分の需要の大きい特に天文学や分子動力学などの分野では必須の考え方であり，実は上述の合成解法は，シンプレクティック解法の次数を上げるためによく利用される．

B 級数がシンプレクティックであることは次のように特徴付けられる．二つの根付き木 $u, v \in \mathcal{T}$ に対し，Butcher 積 $u \circ v$ を

$$u \circ v = [u_1, \ldots, u_m, v], \quad u = [u_1, \ldots, u_m]$$

で定義する．B 級数 $a \in \mathsf{B}$ が任意のハミルトン系に対してシンプレクティックであるためには，任意の $u, v \in \mathcal{T}$ に対し

$$a(u \circ v) + a(v \circ u) = a(u)a(v)$$

が成り立つことが必要十分である．このような特徴付けはシンプレクティック解法を構築するうえで非常に大きな指針となる．

このように，微分方程式がもつ数理的な構造を再現する数値解法を構造保存数値解法という [3]．構造を保存する時間発展フローの考え方自体は Newton までさかのぼることができるが [25]，数値解析学者によって体系的に研究が進められるようになったのは 1980 年代後半頃からである．構造保存数値解法は，英語では “Geometric Numerical Integration” とも呼ばれ，しばしば幾何学的な議論も行われるが，体系的に研究が進展した背景には，B 級数をはじめとする代数的な理論が整備されて来ていたことの貢献が非常に大きい．

なお，もちろん，B 級数がエネルギー保存的であるための条件も知られている [26, 27]．ただし，根付き木をさらに一般の（根をもたない）木などに拡張したより高度な議論が必要なため，ここでは割愛する．ただし，離散的な時間発展写像に対応する B 級数は，シン

 Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

プレクティックである条件とエネルギーを保存する条件を両立できないという面白い事実もあることを注意しておく（すなわち，「良いところどり」はできない）．

6. 終わりに

本稿では，常微分方程式の現代的な数値解析において，その代数的な議論の基盤となっている B 級数の考え方や応用について述べた．紙面も限られていることから，本稿では，優雅な理論の一部しか紹介できなかったが，現代でも新しい解法の開発や解析を行ううえで，欠かせない理論である．また，ニューラルネットワークなどを用いた新しいタイプの数値解法を考えるうえでも，十分に活用の余地があり，色褪せることのない理論であると筆者は感じている．

一方で，本年は Butcher 級数という言葉が誕生してはや 52 年目であるが，世界的にも，常微分方程式の数値解析学者と OR 学会に所属する研究者や本誌の読者層に近い専門や関心をもつ研究者との交流は多くはなかったのではないかと思われる．本稿がその一助となり，新しい交流や研究につながることを期待したい．

参考文献

[1] M. Raissi, P. Perdikaris and G. E. Karniadakis, "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations," *Journal of Computational Physics*, **378**, pp. 686–707, 2019.

[2] E. Hairer and G. Wanner, "On the Butcher group and general multi-value methods," *Computing*, **13**, pp. 1–15, 1974.

[3] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, 2006.

[4] J. C. Butcher, *B-Series: Algebraic Analysis of Numerical Methods*, Springer, 2021.

[5] J. C. ブッチャー（三井斌友，宮武勇登，佐藤峻訳），『B 級数―数値解法の代数的解析―』，丸善出版，2024.

[6] A. Cayley, "XXVIII. On the theory of the analytical forms called trees," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **13**, pp. 172–176, 1857.

[7] R. H. Merson, "An operational method for the study of integration processes," In *Proceedings Symposium on Data Processing, Weapons Research Establishment, Salisbury, South Australia*, pp. 110–125, 1957.

[8] C. Runge, "Ueber die numerische Auflösung von Differentialgleichungen," *Mathematische Annalen*, pp. 167–178, 1895.

[9] K. Heun, "Neue Methoden zur approximativen Integration der Differentialgleichungen einer unabhängigen Veränderlichen," *Zeitschrift für Mathematik und Physik*, **45**, pp. 23–38, 1900.

[10] W. Kutta, "Beitrag zur näherungsweisen Integration totaler Differentialgleichungen," *Zeitschrift für Mathematik und Physik*, **46**, pp. 435–453, 1901.

[11] J. C. Butcher, "On Runge–Kutta processes of high order," *Journal of the Australian Mathematical Society*, **4**, pp. 179–194, 1964.

[12] J. C. Butcher, "On the attainable order of Runge–Kutta methods," *Mathematics of Computation*, **19** pp. 408–417, 1965.

[13] J. C. Butcher, "The nonexistence of ten-stage eighth order explicit Runge–Kutta methods," *BIT*, **25** pp. 521–540, 1985.

[14] E. Hairer, "A Runge–Kutta method of order 10," *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, **21**, pp. 47–59, 1978.

[15] D. K. Zhang, "An explicit 16-stage Runge–Kutta method of order 10 discovered by numerical search," *Numerical Algorithms*, **96**, pp. 1243–1267, 2024.

[16] J. C. Butcher, "Implicit Runge–Kutta processes," *Mathematics of Computation*, **18**, pp. 50–64, 1964.

[17] J. C. Butcher, *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, 3rd Edition, John Wiley & Sons, Ltd., 2016.

[18] J. C. Butcher, "An algebraic theory of integration methods," *Mathematics of Computation*, **26**, pp. 79–106, 1972.

[19] E. Hairer, S. P. Nørsett and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, 2nd Edition, Springer-Verlag, 1993.

[20] J. C. Butcher, T. Mitsui, Y. Miyatake and S. Sato, "On the B-series composition theorem," *arXiv*, arXiv:2409.08533, 2024.

[21] C. Brouder, "Runge–Kutta methods and renormalization," *The European Physical Journal C - Particles and Fields*, **12**, pp. 521–534, 2000.

[22] J. C. Butcher, "The effective order of Runge–Kutta methods," *Conference on the Numerical Solution of Differential Equations*, J. Li. Morris (ed.), Springer Berlin Heidelberg, pp. 133–139, 1969.

[23] H. Yoshida, "Construction of high order symplectic integrators," *Physics Letters A*, **150**, pp. 262–268, 1990.

[24] M. Suzuki, "Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations," *Physics Letters A*, **146** pp. 319–323, 1990.

[25] I. Newton, *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*, Londini anno MDCLXXXVII, 1687.

[26] P. Chartier, E. Faou and A. Murua, "An algebraic approach to invariant preserving integators: The case of quadratic and Hamiltonian invariants," *Numerische Mathematik*, **103**, pp. 575–590, 2006.

[27] E. Celledoni, B. Owren and Y. Sun, "The minimal stage, energy preserving Runge–Kutta method for polynomial Hamiltonian systems is the averaged vector field method," *Mathematics of Computation*, **83**, pp. 1689–1700, 2014.

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.