数理解析研究所講究録 1441 巻 2005 年 1-13

ETDルンゲクッタ法の根付き木解析

京都大学・大学院工学研究科　小碇 創司 (Souji Koikari)
Graduate School of Engineering, Kyoto University

概要

スペクトル法を用いた数値計算などでしばしば現れるような、硬い線形項を持った常微分方程式の数値解法として、線形項の係数行列の指数関数を用いる方法が幾つか提案されている。そのような数値解法の一種であるルンゲクッタ型 Exponential Time Differencing 法 (ETD Runge–Kutta 法) について、根付き木解析を用いたオーダー理論を作り、オーダー条件を導いた。既存の２つの４段公式 “ETD4RK” と “ETDRK4-B” がオーダー条件を満たすことが証明され、また、オーダー条件すなわち連立代数方程式を解くことによって、新しい公式を導出することが可能になった。既存の２種類を含む３種の４段公式を、バーガーズ方程式と蔵本シバシンスキー方程式に適用して誤差を評価したところ、オーダー理論の示す通りの収束特性を持っていることが確認された。

1　導入

ルンゲクッタ法や線形多段階法など常微分方程式の数値解法の多くは、公式パラメータとして、解くべき方程式に依存しないスカラー定数を用いる。これに対し、問題に依存した実数や行列あるいはそれらの関数を公式に取り込んで用いる方法がある。特にスペクトル法 [11] を用いた数値計算で現れるような硬い線形項 —ラプラシアンの表現など— を持った方程式では、線形項の係数行列の指数関数あるいはその Padé 近似がしばしば用いられることがある。Cox and Matthews [2] による ETD ルンゲクッタ法は、そのような行列指数関数を用いる解法の１つであって、常微分方程式が定数行列 Λ を用いて

$$y'(x) = \Lambda\, y(x) + f(y(x)) =: g(y(x)),\ (y \in \mathbb{R}^N,\ f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N) \tag{1}$$

と書かれる場合を解く方法として提案されている。彼らの４段解法 “ETD4RK” は、彼ら自身によって評価されたほか、Kassam and Trefethen によっても評価された [6]。彼らは行列関数を精度よく計算する方法を導入した上で ETD4RK を評価し、他の４次解法と比較して全般的に優れていることを示した。また Krogstad [9] はリー群積分の観点から ETD ルンゲクッタ法を研究し、新しい公式 “ETDRK4-B” を提案した。

２段解法に限れば、ETD ルンゲクッタ法と等価な方法は 1960 年代から存在する。それらに共通する考え方は、上の常微分方程式 (1) を数学的に等価な積分方程式

$$y(x_{n+1}) = \mathrm{e}^{\Lambda h} y(x_n) + \mathrm{e}^{\Lambda h} \int_0^h \mathrm{e}^{-\Lambda\theta} f(y(x_n+\theta))\,\mathrm{d}\theta \tag{2}$$

に変換し、関数 $f(y(x_n+\theta))$ は θ の多項式精度で近似するが、指数関数 $\mathrm{e}^{\Lambda h}$ と $\mathrm{e}^{-\Lambda\theta}\theta^k$ の積分とは厳密に取り扱うというものである。この解釈に基づき、根付き木解析を用いて ETD ルンゲクッタ法のオーダー理論を作る試みが、著者によって行われた [7, 8]。ここでは数学的詳細に立ち入ることなくその概要についてまとめる。まず第2章で、 ETD ルンゲクッタ法の全体を、行列冪級数を係数とする陽的ルンゲクッタ法として一般的に定義し、第3章で、根付き木解析を用いたオーダー理論の概要と、そこから定義／導出されるオーダー条件を示し、最後に第4章で、3種類の ETD ルンゲクッタ公式を、バーガーズ方程式と蔵本シバシンスキー方程式に適用し、大域離散化誤差を評価した結果を示す。

2 ETDルンゲクッタ法の定義

陽的な ETD ルンゲクッタ法とは、式 (1) に含まれる行列 Λ の絶対収束冪級数

$$\alpha_{ij} := \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_{ij}^{(k)} (\Lambda c_i h)^k\,, \quad \beta_i := \sum_{k=0}^{\infty} \beta_i^{(k)} (\Lambda h)^k\,, \quad (\alpha_{ij}^{(k)},\ \beta_i^{(k)} \in \mathbb{R})\,, \tag{3}$$

を係数として、数値的手続き

$$\xi_i := \mathrm{e}^{\Lambda c_i h} y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}\, f(\xi_j)\,, \quad (i = 1, 2, \cdots, s)\,, \tag{4a}$$

$$y_{n+1} := \mathrm{e}^{\Lambda h} y_n + h \sum_{i=1}^{s} \beta_i f(\xi_i)\,, \tag{4b}$$

によって定義される、常微分方程式の時間積分法のことである。添字 i がステージの番号を表し、$i=1$ から $2, 3, \ldots$ と第 s ステージまで順番に計算する。計算手順としては普通の陽的ルンゲクッタ法と変わらないが、函数の評価値 $f(\xi_j)$ にかかる係数が、スカラーではなく行列になっているのが特徴である。これらの係数 α_{ij} や β_i は、通常、

$$Q_n(Z) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{Z^k}{(k+n)!} \;=\; Z^{-n} \sum_{k=n}^{\infty} \frac{Z^k}{k!} \;=\; Z^{-n} \left(\mathrm{e}^Z - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{Z^k}{k!} \right) \tag{5}$$

という行列冪級数の一次結合になっているが、これは $\mathrm{e}^{-\Lambda\theta}\theta^n$ の θ に関する積分に由来するものであり、Z には Λh または $\Lambda c_i h$ が入る。ここでは特に $Q_n(\Lambda c_i h)$ のことを Q_n^i と書くことにする。例えば Cox and Matthews によって 2002 年に提案された4段公式 ETD4RK [2] を、左の図のような各成分がそれぞれに行列係数であるようなブッチャー配列 [1] の形式で書くと [9]、

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & & & & \\ c_2 & \alpha_{21} & & & \\ c_3 & \alpha_{31} & \alpha_{32} & & \\ c_4 & \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \\ \hline & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 \end{array}$$

$$\begin{array}{c|llll} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}Q_1(\Lambda h/2) & & & \\ \frac{1}{2} & O & \frac{1}{2}Q_1(\Lambda h/2) & & \\ 1 & Q_1(\Lambda h) - Q_1(\Lambda h/2) & O & Q_1(\Lambda h/2) & \\ \hline & Q_1 - 3Q_2 + 4Q_3 & 2Q_2 - 4Q_3 & 2Q_2 - 4Q_3 & -Q_2 + 4Q_3 \end{array} \tag{6}$$

となる。最終行の Q_k の引数は Λh である。また 2004 年に Krogstad によって提案された 4 段公式 ETDRK4-B [9] は、

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2}Q_1^2 & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2}Q_1^3 - pQ_2^3 & pQ_2^3 & & \\
1 & Q_1^4 - 2Q_2^4 & \left(\frac{q}{2}-\frac{1}{p}\right)Q_1^4 + (2-q)Q_2^4 & \left(\frac{1}{p}-\frac{q}{2}\right)Q_1^4 + qQ_2^4 & \\
\hline
 & Q_1 - 3Q_2 + 4Q_3 & \frac{4p-2}{p}(Q_2 - 2Q_3) & \frac{2}{p}(Q_2 - 2Q_3) & -Q_2 + 4Q_3
\end{array}
\tag{7}
$$

という公式のクラスに含まれるものである [7]。ここで p と q は任意実数パラメータであり、$q := 2,\ p := 1$ とすると ETDRK4-B が得られる。最終行の Q_k の引数は、ETD4RK と同じく Λh である。

ETD ルンゲクッタ法を表すブッチャー配列 (6), (7) において、一つの行に含まれる係数を横方向に加算すると、ステージ計算の係数の場合は $c_i Q_1(\Lambda c_i h)$ となり、ポストステージ計算の係数の場合は $Q_1(\Lambda h)$ となる。この性質を適合性と呼ぶ。適合性を持った ETD ルンゲクッタ法は、自明な常微分方程式 $y' = 1$ を厳密に解く。従って、自励系問題に対して作られたオーダー理論は、そのまま非自励系の場合にも成立することになる。

本研究の主目的は、適合性を持った陽的 ETD ルンゲクッタ法のオーダー条件を定義し、その具体的表式を、簡単に計算できるようにすることである。

3 オーダー理論の概要

本章では、ETD ルンゲクッタ法のオーダー理論について記述する。厳密な定義や詳しい証明は文献 [7, 8] にあるので、ここでは概略と結果のみまとめる。

3.1 テーラー展開と項別比較

ルンゲクッタ型数値解法のオーダー条件を導くには、厳密解と数値解をテーラー展開し、展開式を項別比較する必要がある。普通のルンゲクッタ法の場合、解の展開は

$$\sum_{t\in \text{根付き木}} \text{厳密解展開項}\,(t)\,, \qquad \sum_{t\in \text{根付き木}} \text{数値解展開項}\,(t) \tag{8}$$

のように、各々根付き木によって添字づけられた項の和として表される。そして、同一の木 t に対応する "厳密解展開項 (t)" と "数値解展開項 (t)" とが等しいこと：

$$\text{厳密解展開項}\,(t) = \text{数値解展開項}\,(t)\,,\quad \forall t \in \text{根付き木のある部分集合} \tag{9}$$

を要請することによって、オーダー条件が得られる。

ETD ルンゲクッタ法についても、本質的に同じ構成を持ったオーダー理論を作ることができる。ただしそこでは、厳密解と数値解の展開は、種類の異なる根付き木集合上の和として

$$\sum_{t_c\in 2\,\text{色木}} \text{厳密解展開項}\,(t_c)\,, \qquad \sum_{t_w\in \text{重みつき木}} \text{数値解展開項}\,(t_w) \tag{10}$$

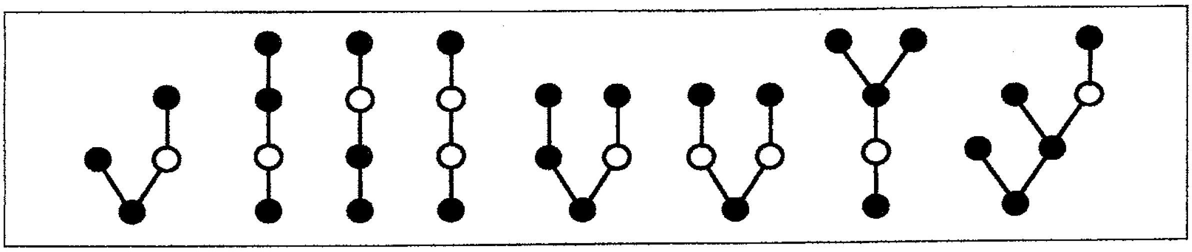


図 1: 2 色木 $\widehat{\mathbb{T}}$ の例

と書かれる。ここで2色木とは、頂点が黒または白の色を持った木であり、重みつき木とは、枝が非負整数の重みを持った木のことである。展開が異なる集合上の和として表されているので、項の対応を付けるために木集合間の全単射

$$\psi : 2\,色木 \to 重みつきの木, \quad 全単射 \tag{11}$$

を導入し、この全単射によって対応する木で添字付けられた項が等しいこと：

$$厳密解展開項\,(t_c) = 数値解展開項\,(\psi(t_c)), \quad \forall t_c \in 2\,色木のある部分集合 \tag{12}$$

を要請することによって、ETD ルンゲクッタ法のオーダー条件が導かれる。

3.2　2色木と基本微分

本章では、厳密解の展開を書き表すのに必要な2色木と基本微分を導入する。

2色木とは、通常の根付き木であって、その頂点が黒または白の色を持ったもののことである。形式的に言えば、頂点の集合が、2つの交わりを持たない部分集合に分割されているもののことである。2色木集合 $\mathbb{T}$ の部分集合として、全ての白い頂点が各々ちょうど一人の子頂点を持つものの全体、を考えることができる。ETD ルンゲクッタ法のオーダー理論では、主にこの部分集合が使われる。以下ではこの部分集合を $\widehat{\mathbb{T}}$ と表記する。図1は $\widehat{\mathbb{T}}$ に含まれる木の例である。

普通の根付き木集合の上で定義される基本的な函数、すなわちオーダー r、濃度 γ、対称度 σ は [1]、そのまま2色木集合上に拡張される。それぞれ色の区別を無視して計算すれば良い。対称度についてのみ、色を考慮にいれたものを定義することができる。それをここでは σ_c と書くことにする。

ここで導入された2色木を用いて、基本微分は以下のように定義される。

定義 1 (基本微分 $\mathcal{F}_\Lambda$)
基本微分 $\mathcal{F}_\Lambda$ は2色木の集合 $\widehat{\mathbb{T}}$ 上で

- 頂点が一つの木 $t = \tau$ に対しては $\mathcal{F}_\Lambda(t) := f$,
- それ以外の木に対しては、再帰的に、

$$\mathcal{F}_\Lambda(\tau) := g, \tag{13a}$$

$$\mathcal{F}_\Lambda([t_1]_1) := \Lambda\mathcal{F}_\Lambda(t_1), \quad (t_1 \in \mathbb{T}), \tag{13b}$$

$$\mathcal{F}_\Lambda([t_1 \cdots t_m]_0) := f^{(m)}(\mathcal{F}_\Lambda(t_1), \ldots, \mathcal{F}_\Lambda(t_m)),\ (t_1, \ldots, t_m \in \mathbb{T}). \tag{13c}$$

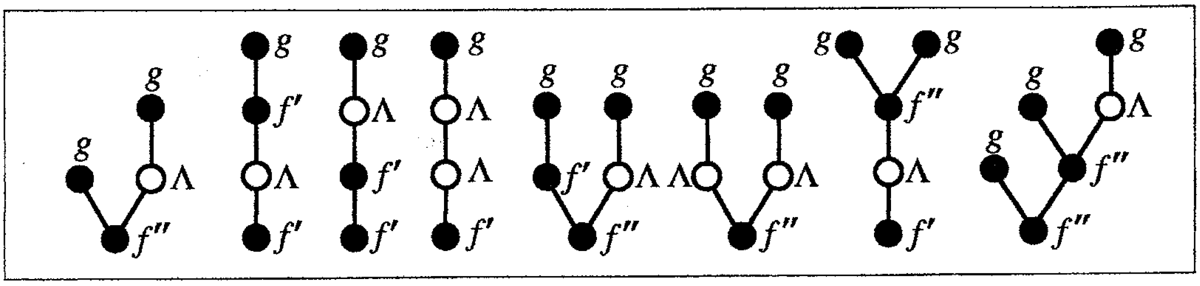


図 2: 基本微分の例

と定義される。ここで $[t]_0$ は木 t に黒い頂点を新しい根として追加する操作、$[t]_1$ は木 t に白い頂点を新しい根として追加する操作をそれぞれ表す。 ∎

計算アルゴリズムとしては、頂点が一個の木の場合は f、それ以外の場合は

- 葉に g を対応させる。
- 全ての白い頂点に Λ を対応させる。
- m 人の子を持つ頂点に f の m 階 Fréchet 微分を対応させる ($m \in \mathbb{N}$)。
- 子頂点に対応したものは、その親頂点に対応した (多重) 線形写像の引数であるとみなして、写像の合成を作る。

とすれば良い。図 2 に基本微分の計算例を示す。得られる基本微分は、左から順番に $f''(g, \Lambda g)$, $f'\Lambda f'g$, $f'f'\Lambda g$, $f'\Lambda\Lambda g$, $f''(f'g, \Lambda g)$, $f''(\Lambda g, \Lambda g)$, $f'\Lambda f''(g, g)$, $f''(g, f''(g, \Lambda g))$ である。

3.3 重みつきの木と基本ウェイト

本章では、数値解の展開を書き表すのに必要な重みつき木と基本ウェイトを導入する。

重みつきの木とは、通常の根付き木であって、その枝が非負整数の重みを持った物のことである。形式的には、枝の集合が交わりを持たない幾つかの部分集合に分割されているもののことと定義される。図 3 に重みつき木の例を幾つか示す。点線は重みゼロ、一重線は重み 1、二重線は重み 2、... を表す。

普通の根付き木集合の上で定義される基本的な函数、すなわち、オーダー r、濃度 γ、対称度 σ は、そのまま重みつき木集合上に拡張される。それぞれ重みを無視して計算すれば良い。対称度についてのみ、重みを考慮にいれたものを定義することができる。それをここでは σ_w と書くことにする。

ここで導入された重みつき木を用いて、ETD ルンゲクッタ法の基本ウェイトは以下のように定義/計算される。

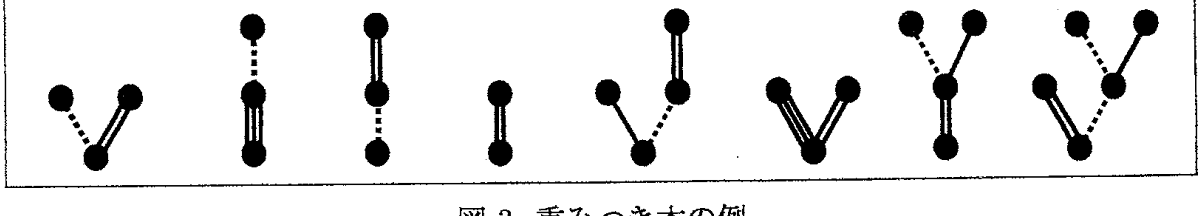


図 3: 重みつき木の例

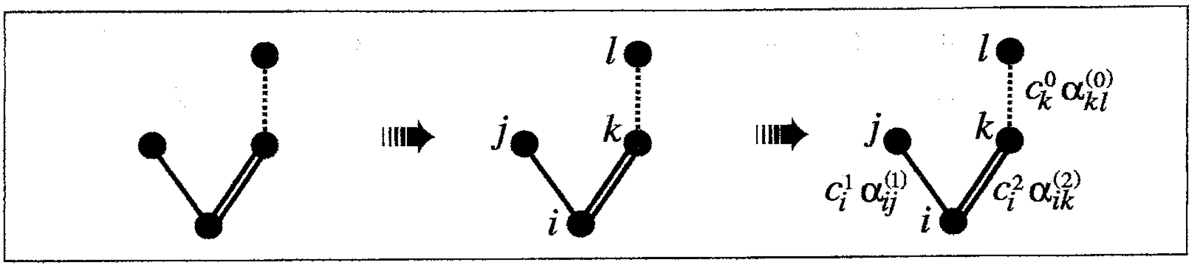


図 4: 基本ウェイトの計算例

定義 2 (基本ウェイト Φ_i)
頂点が一つの木 τ に対しては、$\Phi_i(\tau) := 1$ とする。それ以外の木 t_w に対して Φ_i は

- 木 $t_w \in \mathbf{T}$ の根に添字 i を対応させる。
- 根以外の頂点に添字 $j, k, \ldots$ を対応させる。
- 実数 $c_j^q \alpha_{jk}^{(q)}$ を重み q の枝 $[j,k]$ に対応させる。
- 枝に対応づけられた全ての実数の積をとり、i を除く全ての添字について総和をとる。

と定義／計算される。▮

図 4 に基本ウェイトの計算例を示す。この場合は $\displaystyle\sum_{j,k,l} c_i^3 \alpha_{ij}^{(1)} \alpha_{ik}^{(2)} \alpha_{kl}^{(0)}$ という値が得られる。

3.4 木の一対一対応

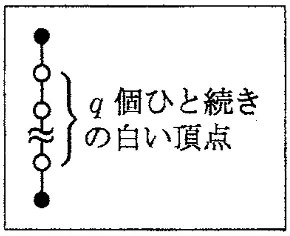


図 5: 要素切片

2 色木 t_c が部分集合 $\widehat{\mathbb{T}}$ に含まれるとき、定義によって、t_c の白い頂点は、それぞれちょうど一人ずつの子頂点を持つ。従ってその木は、左図のような要素切片の集まりとみなせる。切片の各々に対して、そこに含まれる q 個 $(0 \le q \in \mathbb{Z})$ の並んだ白い頂点を取り除き、両端の黒い頂点を重み q の枝で結ぶ、という操作を施すと、重みつきの木が得られる。この 2 色木と重みつき木の対応づけを ψ と書くことにする。これは写像でありかつ全単射になることが、形式的に証明される [8]。図 6 はこの操作の例を示している。

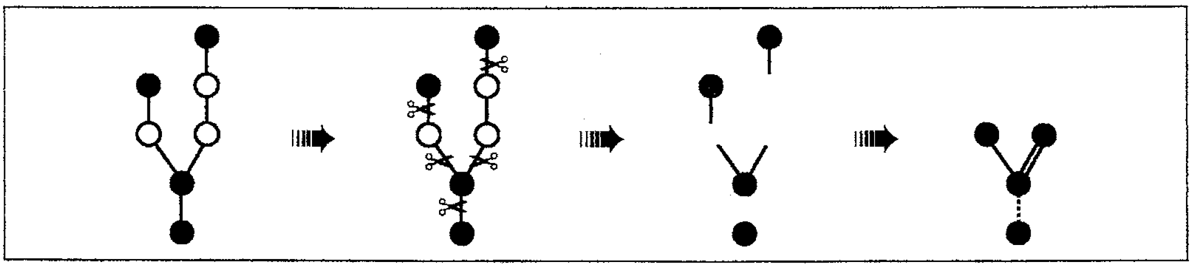


図 6: 2 色木 $\widehat{\mathbb{T}}$ から重みつき木への全単射

3.5 展開定理とオーダー条件

前章までで導入された基本微分や基本ウェイトを用いると、厳密解と数値解は以下のように展開できることが証明される [7, 8]。

定理 3 (厳密解の展開定理)
差分 $y(x_{n+1}) - \mathrm{e}^{\Lambda h} y(x_n)$ の展開は

$$\sum_{k=1}^{m} h^k Q_k(\Lambda h) \sum_{t_c \in \widehat{\mathbb{T}}_k} \alpha(t_c) \frac{\sigma(t_c)}{\sigma_c(t_c)} \mathcal{F}_\Lambda(t_c)(y(x_n)) + O(h^{m+1}) \tag{14}$$

と書かれる。ここで $\widehat{\mathbb{T}}_k$ は $\widehat{\mathbb{T}}$ に含まれる木であって頂点を k 個持つ物の全体であり、また、$\alpha(t_c) := (r(t_c))!/(\gamma(t_c)\sigma(t_c))$ である。∎

定理 4 (数値解の展開定理)
適合性の条件を満たす陽的 s ステージ ETD ルンゲクッタ法の数値解は、

$$y_{n+1} = \mathrm{e}^{\Lambda h}\, y_n + \sum_{t_c \in \widehat{\mathbb{T}}_{\leq m}} \frac{h^{r(t_c)}}{\sigma_w(\psi(t_c))} \sum_{i=1}^{s} \beta_i \Phi_i(\psi(t_c)) \mathcal{F}_\Lambda(t_c)(y_n) + O(h^{m+1}). \tag{15}$$

と展開される。ここで $\widehat{\mathbb{T}}_{\leq m}$ は $\widehat{\mathbb{T}}$ に含まれる木であって頂点が m 個以下のものの全体である。∎

これら 2 つの展開を項別に比較することによって、オーダー条件が定義される。

定義 5 (強 p 次オーダー条件)
適合性をもった陽的 s ステージ ETD ルンゲクッタ法は、$\widehat{\mathbb{T}}_{\leq p}$ に含まれる全ての 2 色木について

$$\sum_{i=1}^{s} \beta_i \Phi_i(\psi(t_c)) = \frac{\sigma_w(\psi(t_c))}{\sigma_c(t_c)} \frac{r(t_c)!}{\gamma(t_c)} Q_{r(t_c)}(\Lambda h), \tag{16}$$

を満たすとき、強 p 次の精度を持つという。∎

強 p 次オーダー条件が成り立つとき、常微分方程式の非線形項 $f(y(x))$ が独立変数 (時間変数) のみの $p-1$ 次式である問題は、厳密に解かれる。特に強 1 次精度というのは、非線形項に対する凍結ベクトル場近似 "frozen vector field approximation" [9] と呼ばれるもののことである。また、強 p 次公式による数値解が大域的に真の解に収束することは、普通のルンゲクッタ法における収束の証明 [10] と同様にして示される。

強オーダー条件で考えると、4 次精度と言われている既存の ETD ルンゲクッタ法は 3 次精度しかないことになるので、少し緩めた弱オーダー条件を導入する。

定義 6 (弱 p 次オーダー条件)
適合性をもった陽的 s ステージ ETD ルンゲクッタ法は、強 $p-1$ 次でありかつ $\widehat{\mathbb{T}}$ に含まれる頂点が p 個の全ての 2 色木について

$$\sum_{i=1}^{s} b_i \Phi_i(\psi(t_c)) = \frac{\sigma_w(\psi(t_c))}{\sigma_c(t_c)} \frac{1}{\gamma(t_c)}, \quad \left(b_i := \beta_i^{(0)}\right), \tag{17}$$

を満たすとき、弱 p 次精度を持つと言う。∎

$$
(\text{適合性})\begin{cases}
\alpha_{21} &= c_2Q_1^2\\
\alpha_{31}+\alpha_{32} &= c_3Q_1^3\\
\alpha_{41}+\alpha_{42}+\alpha_{43} &= c_4Q_1^4
\end{cases}
$$

$$
(\text{強 3 次})\begin{cases}
\beta_1+\beta_2+\beta_3+\beta_4 &= Q_1\\
\beta_2c_2+\beta_3c_3+\beta_4c_4 &= Q_2\\
\beta_2c_2^2+\beta_3c_3^2+\beta_4c_4^2 &= 2Q_3\\
\beta_3a_{32}c_2+\beta_4a_{42}c_2+\beta_4a_{43}c_3 &= Q_3
\end{cases}
$$

$$
(\text{弱 4 次})\begin{cases}
b_2c_2^3+b_3c_3^3+b_4c_4^3 &= \frac{1}{4}\\
b_3a_{32}c_2^2+b_4a_{42}c_2^2+b_4a_{43}c_3^2 &= \frac{1}{12}\\
b_3c_3\gamma_{32}c_2+b_4c_4\gamma_{42}c_2+b_4c_4\gamma_{43}c_3 &= \frac{1}{24}\\
b_3c_3a_{32}c_2+b_4c_4a_{42}c_2+b_4c_4a_{43}c_3 &= \frac{1}{8}\\
b_4a_{43}a_{32}c_2 &= \frac{1}{24}
\end{cases}
$$

ここで $b_i := \beta_i^{(0)}$、$a_{ij} := \alpha_{ij}^{(0)}$、$\gamma_{ij} := \alpha_{ij}^{(1)}$ である。

図 7: 弱 4 次オーダー条件

これは、強オーダー条件式 (16) に含まれる行列冪級数 β_i と $Q_{r(t_c)}(\Lambda h)$ を改めて展開し、その定数項を残したものである。弱オーダー条件式 (17) を単色の木に制限すると、普通のルンゲクッタ法のオーダー条件になる。したがって、弱 p 次オーダー条件が成り立つとき、$\Lambda h \to O$ の極限で ETD ルンゲクッタ法は、普通のルンゲクッタ公式に収束する。また、ここでは省略するが、同様の考えかたに基づいて、ステージ強オーダー条件とステージ弱オーダー条件も定義される [7, 8]。

以上によって、一本の根付き木に一つの条件式が対応すると言う、ルンゲクッタ型数値解法のオーダー条件と同じ形の定式化が得られた。さらにそこに現れる基本ウェイトや濃度といった函数は、比較的容易に手計算できるものとなっている。

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array}
$$

図 7 は、上記オーダー条件の定義から導かれる弱 4 次オーダー条件である。Cox and Matthews の ETD4RK [2] および Krogstad の ETDRK4-B [9] は、どちらも図 7 の条件を満たす。また、これら二つの公式は、$\Lambda h \to O$ の極限で、左図に示される普通の古典的 4 段 4 次ルンゲクッタ公式に収束する。

4 弱 4 次公式の評価

Kassam and Trefethen [6] において評価されている偏微分方程式の中から、線形作用素の表現行列が実対角型になる 2 つの問題、すなわち、バーガーズ方程式

$$u_t = \varepsilon u_{xx} - \left(\frac{1}{2}u^2\right)_x \ , \ \ (\varepsilon = 0.03\ ,\ \ x \in [-\pi, \pi]) \tag{18a}$$

$$u(x,0) := \exp\left(-10\sin^2\left(\frac{x}{2}\right)\right) \ , \ \ \text{周期境界条件} \tag{18b}$$

と蔵本シバシンスキー方程式

$$u_t = -u_{xx} - u_{xxxx} - uu_x\ ,\quad (x \in [0, 32\pi]) \tag{19a}$$

$$u(x,0) := \sin\left(\frac{x}{16}\right)\left(1+\cos\left(\frac{x}{16}\right)\right)\ ,\quad \text{周期境界条件} \tag{19b}$$

を選んで評価した[1]。蔵本シバシンスキー方程式の初期条件を少し変えた他は、彼らが評価した問題と全く同じである。空間の離散化には、フーリエ基底を使った擬スペクトル法を用いた。バーガーズ方程式の場合の空間の分割数は 256、蔵本シバシンスキー方程式の場合は 128 で評価した。行列係数の計算には、同じく Kassam and Trefethen [6] による複素周回積分法を用いた。

評価した ETD ルンゲクッタ法の弱 4 次公式は、前章までに出てきた Cox and Matthews による "ETD4RK" (式 (6)), Krogstad による "ETDRK4-B" (式 (7)) および、ステージ値に対して強オーダー条件を課すことによって導かれた公式：

$$\begin{array}{c|llll}
0 & & & & \\
\frac{1}{3} & \frac{1}{3}Q_1^2 & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2}Q_1^3 - \frac{3}{4}Q_2^3 & \frac{3}{4}Q_2^3 & & \\
1 & Q_1^4 - 5Q_2^4 + 12Q_3^4 & 9Q_2^4 - 36Q_3^4 & -4Q_2^4 + 24Q_3^4 & \\
\hline
 & Q_1 - 3Q_2 + 4Q_3 & O & 4Q_2 - 8Q_3 & -Q_2 + 4Q_3
\end{array} \tag{20}$$

である [7]。この公式を仮に "ETDRK4-S" ("S" はステージの略) と書くことにする。これら 3 つの公式は全て同一の弱 4 次オーダー条件を満たす。

誤差を評価するには正確な解を知る必要があるが、ここで例に選んだ問題については厳密解が知られていない。そこで普通の陽的ルンゲクッタ法を用い、4 倍精度実数 (16 バイト実数) と非常に細かいステップサイズを用いて計算した数値解をリファレンスとした。陽的ルンゲクッタ公式としては、Dormand and Prince [4] による埋め込み型公式 "RK5(4)7M":

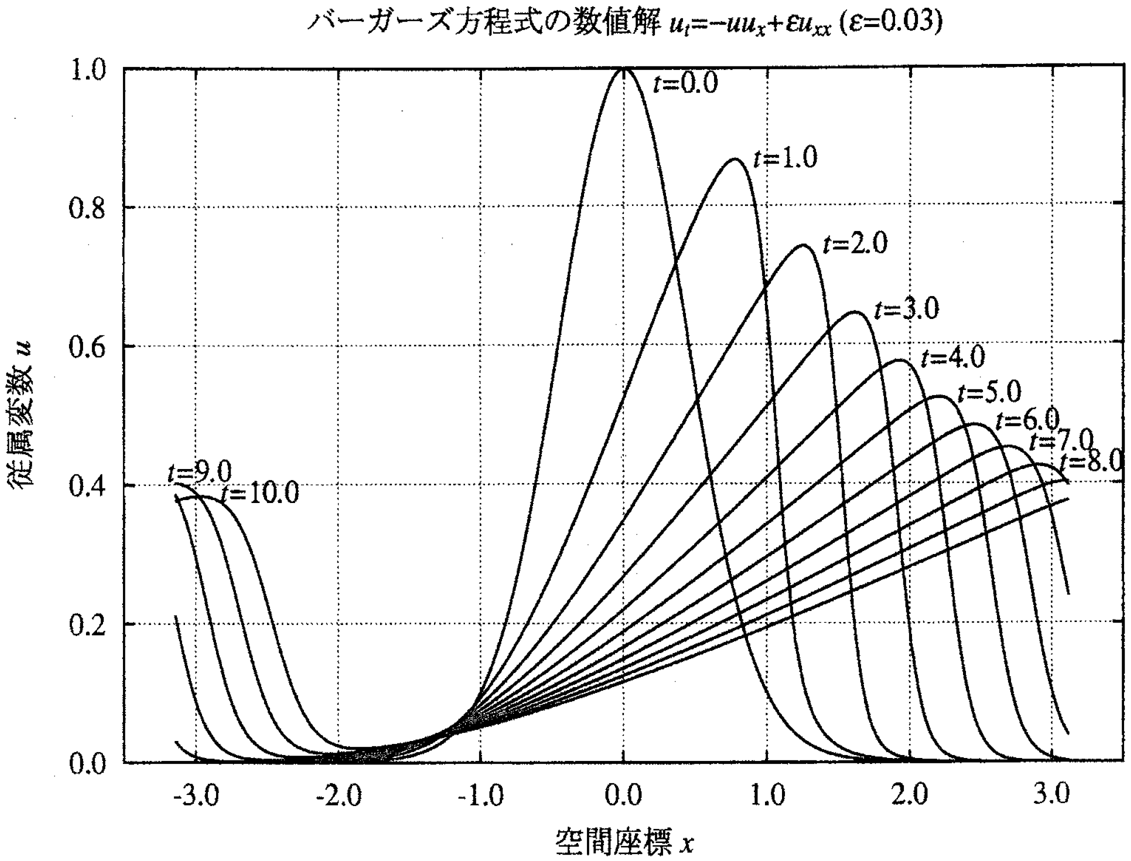
$$\begin{array}{c|ccccccc}
0 & & & & & & & \\
\frac{1}{5} & \frac{1}{5} & & & & & & \\
\frac{3}{10} & \frac{3}{40} & \frac{9}{40} & & & & & \\
\frac{4}{5} & \frac{44}{45} & -\frac{56}{15} & \frac{32}{9} & & & & \\
\frac{8}{9} & \frac{19372}{6561} & -\frac{25360}{2187} & \frac{64448}{6561} & -\frac{212}{729} & & & \\
1 & \frac{9017}{3168} & -\frac{355}{33} & \frac{46732}{5247} & \frac{49}{176} & -\frac{5103}{18656} & & \\
1 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & \\
\hline
 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & 0 \\
 & \frac{5179}{57600} & 0 & \frac{7571}{16695} & \frac{393}{640} & -\frac{92097}{339200} & \frac{187}{2100} & \frac{1}{40}
\end{array} \tag{21}$$

を用い、見積もられた誤差の絶対値の積分が 10^{-17} よりも小さくなるようにステップ幅を非常に小さく設定した。誤差に応じてステップ幅を変えることはしていない。また常微分方程式右辺の線形項と非線形項とを区別せずに、普通にルンゲクッタ法を適用している[2]。

---

[1]彼らの評価は、ETD4RK と他の ETD でない 4 次解法との比較であり、ETD4RK が全般的に優れていることが示されている。ここでは、ETD4RK を含む幾つかの ETD ルンゲクッタ法を評価する。

[2]本文は 3 ページ先に続く。



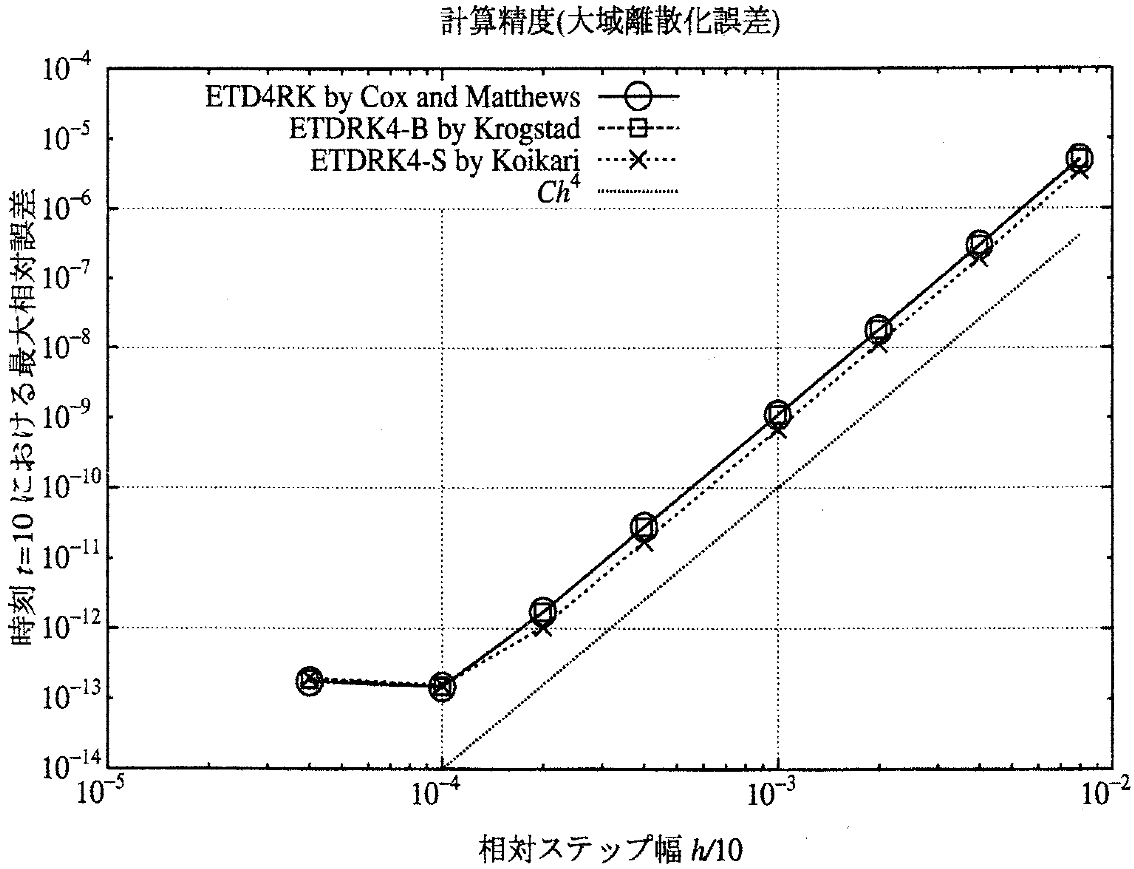
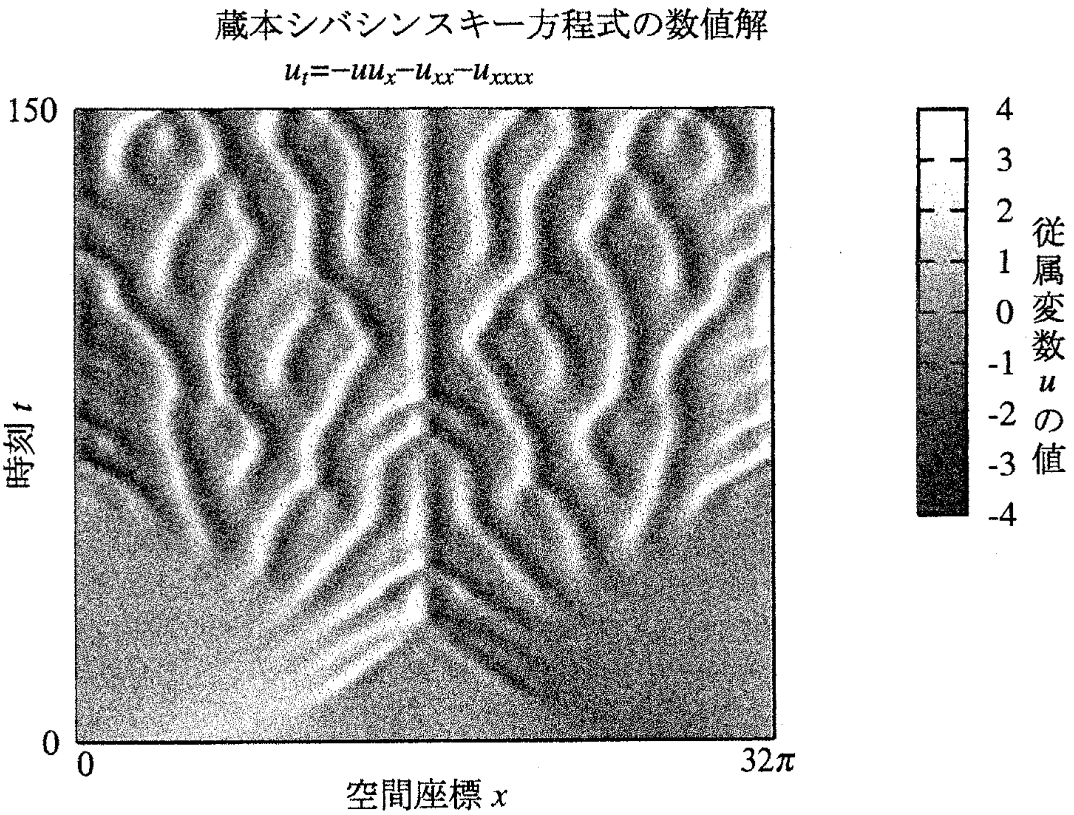


図 8: バーガーズ方程式の数値解と大域離散化誤差



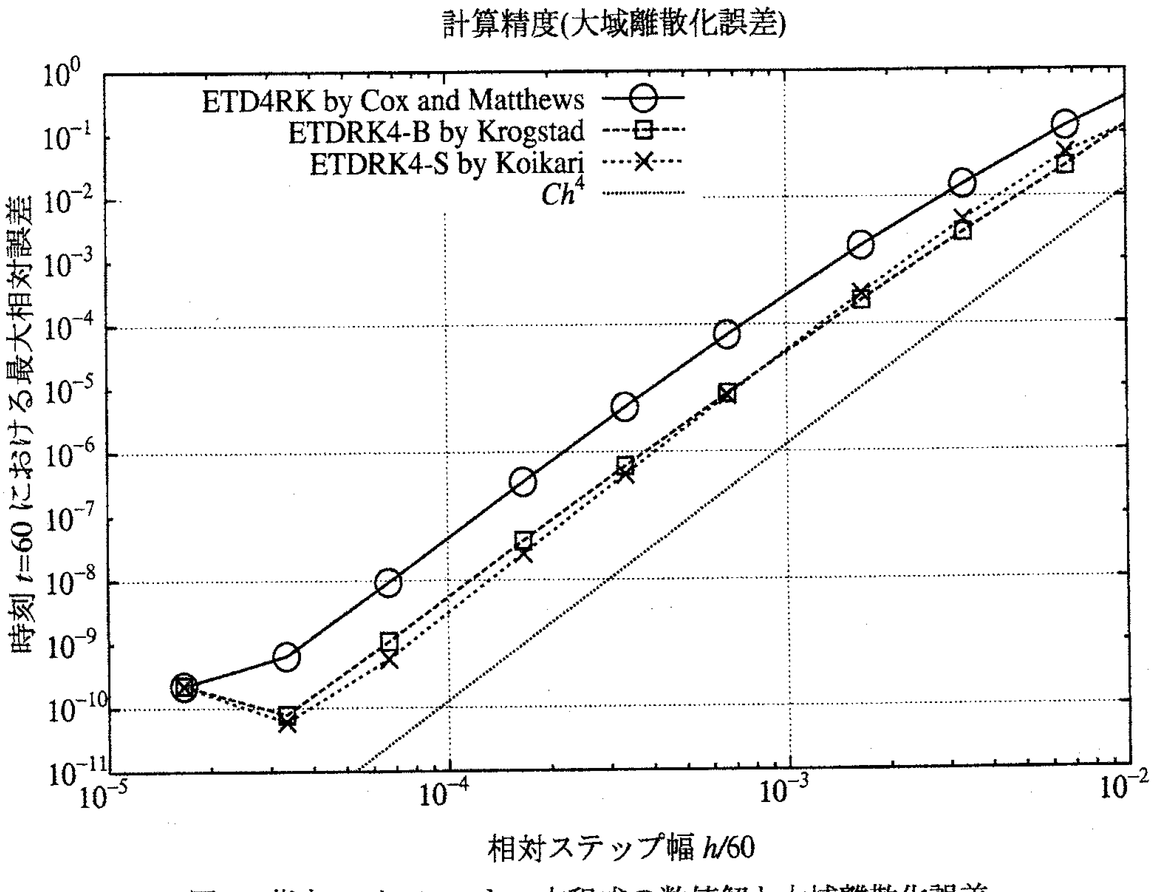


図 9: 蔵本シバシンスキー方程式の数値解と大域離散化誤差

数値計算は、AMD K6-2, 533MHz を搭載したパーソナルコンピューター上で行い、ETD ルンゲクッタ法の計算には Gnu の g++ コンパイラ、リファレンス解の計算にはインテルの Fortran 90 コンパイラを用いた。ETD ルンゲクッタ法の計算例は、全て数秒から数分で完了している。

バーガーズ方程式の数値解と誤差を図 8 に示す。下のグラフには $t = 10$ における相対誤差、すなわちその時刻における解の最大絶対値で誤差を割ったものが表示されている。グラフに見られるように、同一のオーダー条件を満たす相異なる 3 つの公式が、ほぼ同じ振舞をしているということは、ETD ルンゲクッタ法のオーダー条件の定義が、それなりに妥当であることを意味していると思われる。またグラフからわかるように、収束のオーダーは 4 次である。グラフに示されているのは大域離散化誤差なので、局所離散化誤差は 5 次オーダーで収束している。

蔵本シバシンスキー方程式の数値解と誤差を図 9 に示す。上の図は、Kassam and Trefethen [6] が Matlab で行った可視化と同じことを、初期条件だけ変えて gnuplot によって行ったものである。長い時間に渡って空間的に局在するピークの存在や、波の複雑な離合集散がとらえられている。下の図に示される誤差の振舞は、公式によって根本的に異なるようには見えないが、問題の数値的困難さを反映してか、多少のばらつきが見られる。これは ETD ルンゲクッタ法には、単純な弱 4 次オーダー条件だけではとらえきれない側面があることを示していると思われる。大域離散化誤差の収束の速さは、4 次か 4 次より少しだけ遅くなっている。

5 まとめ

Cox and Matthews によって提案されたルンゲクッタ型 Exponential Time Differencing 法 (ETD ルンゲクッタ法) のオーダー条件について、根付き木解析を用いて研究した。普通のルンゲクッタ法のオーダー理論との根本的違いは、常微分方程式を定める函数 f のフレッシェ微分が、公式に用いられる行列係数と非可換であることである。そのために、普通の根付き木を用いたのでは、基本微分と基本ウェイトを分離して定義することができない。そこで、2 色木と重みつき木を導入し、厳密解を 2 色木集合上の和として、数値解を重みつき木集合上の和として表した。2 色木と重みつき木の一対一対応を導入することによって展開を項別比較し、オーダー条件を定義／導出した。基本微分と基本ウェイトが分離して定義され、さらに 1 本の木にひとつのオーダー条件式が対応すると言う、普通のルンゲクッタ法のオーダー条件と同じ、望ましい形式を持ったオーダー理論が得られた。

既存の 2 つの公式 ETD4RK と ETDRK4-B が弱 4 次オーダー条件を満たすことを示し、また同じく弱 4 次オーダー条件を満たす新しい公式 ETDRK4-S を、オーダー条件を解くことによって導いた。これら 3 つの公式をバーガーズ方程式と蔵本シバシンスキー方程式に適用し、誤差の振舞がほぼオーダー理論の示す通りになっていることを確認した。

今後は、オーダー条件を解くことによって新しい公式の可能性を探索すると共に、より一般的な問題、特に線形作用素の表現行列が非対角である場合、あるいは周期的でない境界条件が課される問題にも広く適用し、評価する事が必要である。また時間刻み幅 h を一定にしたまま空間解像度をあげた場合の数値安定性についても研究する予定である。

参考文献

[1] J. C. Butcher, Numerical Methods for Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons, Chichester, 2003.

[2] S. M. Cox and P. C. Matthews, Exponential Time Differencing for Stiff Systems, J. Comput. Phys. 176 (2002) 430-455.

[3] S. M. Cox and P. C. Matthews, Instability and localisation of patterns due to a conserved quantity, Physica D 175 (2003) 196-219.

[4] J. R. Dormand and P. J. Prince, A family of embedded Runge–Kutta formulae, J. Comp. Appl. Math. 6 (1980) 19-26.

[5] M. Hochbruck and A. Ostermann, Exponential Runge–Kutta methods for parabolic problems, preprint (2004).

[6] A. -K. Kassam and L. N. Trefethen, Fourth-order time stepping for stiff PDEs, SIAM J. Sci. Comput. (2004), to appear.

[7] S. Koikari, Rooted tree analysis of Runge–Kutta methods with exact treatment of linear terms, J. Comp. Appl. Math. 177 (2005) 427-453. The first preprint version is available at "`http://www16.ocn.ne.jp/~koikari`".

[8] S. Koikari, Bicolored tree analysis and order conditions of ETD Runge–Kutta methods, submitted to J. Comp. Appl. Math. (2005), available at the same URI as the above reference.

[9] S. Krogstad, Generalized integrating factor methods for stiff PDEs, J. Comput. Phys. 203 (2005) 72-88.

[10] 岩波講座応用数学 [方法 3] 『微分方程式の数値解法』, 三井斌友著, 岩波書店 (1993)

[11] L. N. Trefethen, Spectral Methods in MATLAB, Society for Industrial & Applied Mathematics, 2001.