時間差分スキーム(3)

リープフロッグスキームの安定性と位相

リープフロッグスキームの場合, 2 つの増幅係数 λ_1 と λ_2 が存在する. 時間差分スキーム (2) の (27) 式より振動方程式にリープフロッグスキームを当てはめた差分式は,

$$U^n = a\lambda_1^n U_1^0 + b\lambda_2^n U_2^0. \tag{1}$$

したがって, 安定性条件は,

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &< 1, \\ |\lambda_2| &< 1 \end{aligned} \tag{2}$$

であることである. 以下では安定性条件を詳しくみるために, 3 つの特別な場合について考える.

Case1. $|p| < 1$ **のとき**

時間差分スキーム (2) の 2 段階スキームの安定性より,$1 - p^2 > 0$ のときは

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &= \sqrt{\lambda_1\lambda_1^*} = 1, \\ |\lambda_2| &= \sqrt{\lambda_2\lambda_2^*} = 1. \end{aligned} \tag{3}$$

よって, $|p| < 1$ のとき, 安定性は中立となる. 位相については,

$$\theta = \arctan\left(\frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}\right) \tag{4}$$

より, 物理モードの位相を θ_1, 計算モードの位相を θ_2 とすると,

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \arctan(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}), \\ \theta_2 &= \arctan(-\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}). \end{aligned} \tag{5}$$

$p \to 0$ の時の位相の振る舞いについて考える. 右極限 $p \to +0$ を考えると

$$
\begin{aligned}
\tan\theta_1 &= \frac{p}{\sqrt{1-p^2}} > 0, \\
\tan\theta_2 &= -\frac{p}{\sqrt{1-p^2}} < 0.
\end{aligned} \tag{6}
$$

ゆえに,

$$
\begin{aligned}
0 < \theta_1 < \frac{\pi}{2}, \\
\frac{\pi}{2} < \theta_2 < \pi.
\end{aligned} \tag{7}
$$

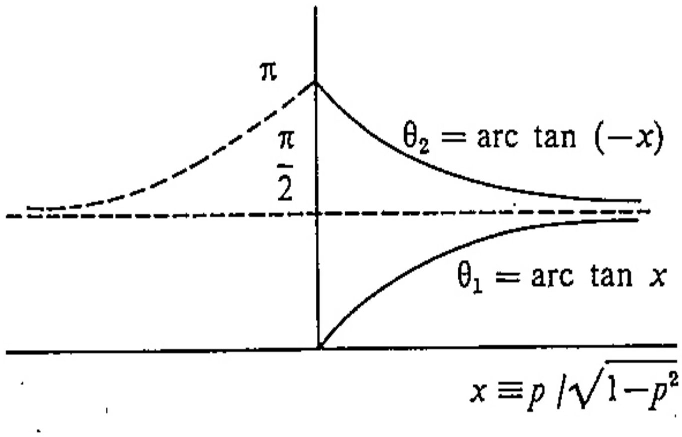

図 1: リープフロッグスキームにおける物理モードと計算モードの位相の振る舞い (Mesinger and Arakawa (1976) より引用). 縦軸は位相, 横軸は $x = p/\sqrt{1-p^2}$ である.

図 1 より,

$$
\theta_2 = \pi - \theta_1. \tag{8}
$$

特に, $p \to 0$ のとき, $\theta_1 \to p$, $\theta_2 \to \pi - p$ である. $p = \omega\Delta t$ であるから, $\Delta t \to 0$ のとき物理モードの位相は真の解の位相に近づくことがわかる. 一方, 計算モードの位相は π ずれてしまう. 同様に $p < 0$ で左極限 $p \to -0$ を考えると,

$$
\begin{aligned}
-\pi < \theta_1 < -\frac{\pi}{2}, \\
-\frac{\pi}{2} < \theta_2 < 0
\end{aligned} \tag{9}
$$

であるから,

$$
\theta_2 = -\pi - \theta_1. \tag{10}
$$

結局, $p \gtrless 0$ をまとめて表すと,

$$\theta_2 = \pm\pi - \theta_1 \qquad \text{(複号同順)} \tag{11}$$

となる.

物理モードの位相 θ_1 の振る舞いは次の通りである. $p \ll 1$ のとき,

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right) \\ &\sim \arctan\left\{p(1+\frac{1}{2!}p^2+9\frac{1}{4!}p^4+\cdots)\right\} \\ &\sim (p+\frac{1}{2}p^3) - \frac{(p+\frac{1}{2}p^3)^3}{3} + \cdots \\ &\sim p + \frac{p^3}{6} + \cdots . \end{aligned} \tag{12}$$

ゆえに,

$$\frac{\theta_1}{p} \sim 1 + \frac{p^2}{6} > 1. \tag{13}$$

リープフロッグスキームの物理モードの位相は真の解よりも早く進む. 但し, 松野スキームよりは遅い.

次に, θ_1 の微分を考える[1].

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dp} &= \left(\frac{1}{1+\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right)^2}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{1-p^2}} + \frac{p^2}{\sqrt{1-p^2}(1-p^2)}\right) \\ &= (1-p^2)\left(\frac{1}{\sqrt{1-p^2}(1-p^2)}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-p^2}}. \end{aligned} \tag{14}$$

[1] $\arctan x$ の微分を考える. $y = \arctan x$ とすると, $x = \tan y$ と書きかえることができる. よって,

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= \frac{1}{\frac{dx}{dy}} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{\cos^2 y}} \\ &= \frac{1}{1+\tan^2 y} \\ &= \frac{1}{1+x^2}. \end{aligned}$$

$\frac{d\theta_1}{dp} > 0$, $p \to 1$ のとき, $\theta_1 \to \frac{\pi}{2}$. さらに $p \gtrless 0$ のとき $\theta_2 = \pm\pi - \theta_1$. したがって,

$$
\begin{aligned}
U_1^n &= U_1^0 e^{in\theta_1}, \\
U_2^n &= U_2^0 e^{in(\pm\pi - \theta_1)}.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

簡単のために $\theta_1 = \frac{\pi}{8}$ の場合を考える. さらに, 初期において $\mathrm{Im}(U_1^0) = 0, \mathrm{Im}(U_2^0) = 0$ とする. このとき, 物理モード U_1^n の位相は反時計回りに $\frac{\pi}{8}$ ずつずれる. 計算モード ($p > 0$) の位相は $\theta_2 = \pi - \theta_1$ なので反時計回りに $\frac{7\pi}{8}$ ずつずれる. これらを実部と虚部に分けると, U_1 は

$$
U_1^n = U_1^0(\cos n\theta_1 + i \sin n\theta_1). \tag{16}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Re}[U_1^n] &= U_1^0 \cos n\theta_1, \\
\mathrm{Im}[U_1^n] &= U_1^0 \sin n\theta_1.
\end{aligned}
\tag{17}
$$

U_2 は

$$
\begin{aligned}
U_2^n &= U_2^0 e^{in(\pi - \theta_1)} \\
&= U_2^0 e^{in\pi} e^{-in\theta_1} \\
&= (-1)^n U_2^0 (\cos n\theta_1 - i \sin n\theta_1).
\end{aligned}
\tag{18}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Re}[U_2^n] &= (-1)^n U_2^0 \cos n\theta_1, \\
\mathrm{Im}[U_2^n] &= (-1)^{n+1} U_2^0 \sin n\theta_1.
\end{aligned}
\tag{19}
$$

これらを図示すると図 2 の様になる.

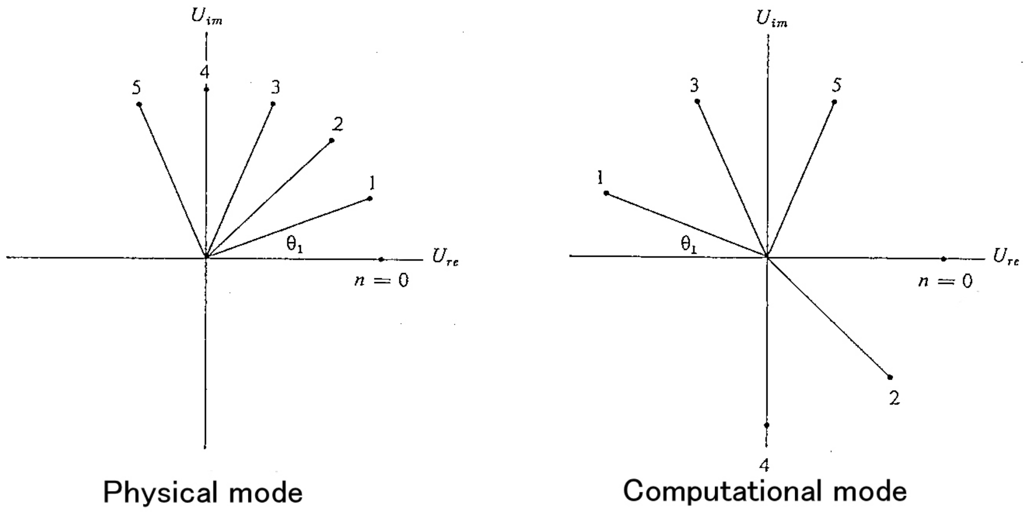

図 2: $\theta_1 = \frac{\pi}{8}$, 初期において $\mathrm{Im}(U_1^0) = 0, \mathrm{Im}(U_2^0) = 0$ としたときのリープフロッグスキームの (A) 物理モードと (B) 計算モードの位相の変化. U_1 の方は n が増えると反時計回りに動いていく. U_2 の方は $+$ と $-$ が交互に入れ替わってしまう.

Case2. $|p| = 1$ **のとき**

$$\lambda_1 = \lambda_2 = ip \tag{20}$$

なので,

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1. \tag{21}$$

ゆえに, この場合, 物理モードも計算モードもともに安定性は中立である. θ_1 の位相は,

$$\begin{aligned}\theta &= \arctan\left(\frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}\right),\\ \tan\theta_1 &= \frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to \infty \quad (p \to 1).\\ \tan\theta_1 &= \frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to -\infty \quad (p \to -1).\end{aligned} \tag{22}$$

同様に θ_2 の位相は,

$$\begin{aligned}\tan\theta_2 &= -\frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to -\infty \quad (p \to 1).\\ \tan\theta_2 &= -\frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to \infty \quad (p \to -1).\end{aligned} \tag{23}$$

よって,

$$\theta_1 = \theta_2 = \pm\frac{\pi}{2} \qquad (p = \pm 1). \tag{24}$$

このとき解はどちらのモードも,

$$U^n = U^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}} \tag{25}$$

となる.

Case3. $|p| > 1$ **のとき**

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= i(p + \sqrt{p^2-1}),\\ \lambda_2 &= i(p - \sqrt{p^2-1}).\end{aligned} \tag{26}$$

括弧の中身が実数であることに注意すれば,

$$\begin{aligned}|\lambda_1| &= |p + \sqrt{p^2-1}|,\\ |\lambda_2| &= |p - \sqrt{p^2-1}|\end{aligned} \tag{27}$$

である. したがって,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| &> 1 \qquad (p > 1), \\
|\lambda_2| &> 1 \qquad (p < -1).
\end{aligned}
\tag{28}
$$

ゆえに, 安定性は不安定である. $|p|$ が 1 を越えると, 急激に不安定になる. 例えば, $p > 1$ のとき,

$$
\frac{d|\lambda_1|}{dp} = 1 + \frac{p}{\sqrt{p^2 - 1}}.
$$

よって, $p \to 1 + 0$ のとき発散する. 位相は Case2 のときと同様にして,

$$
\theta_1 = \theta_2 = \pm\frac{\pi}{2}. \tag{29}
$$

解は,

$$
\begin{aligned}
U_1^n &= |p + \sqrt{p^2 - 1}|^n U_1^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}}, \\
U_2^n &= |p - \sqrt{p^2 - 1}|^n U_2^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}}.
\end{aligned}
\tag{30}
$$

位相の進み方は Case2 と同じだが, 振幅は時間とともに増加することがわかる.

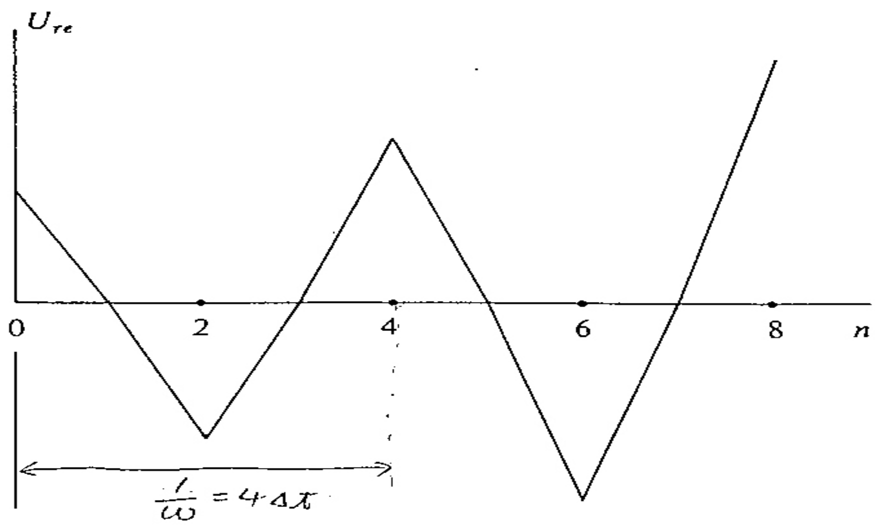

図 3: リープフロッグスキームにおける不安定モードの実部と時間の関係. $|\lambda| = 1.1$ とし, 初期時刻において虚部をゼロとしている.

図 3 より, 不安定なモードの周期は $4\Delta t$ である.

まとめ

リープフロッグスキームの利点は 2 次精度であることと, $|\omega\Delta t| \leqslant 1$ のときに安定であることである. 一方, 欠点は計算モードの安定性が中立であることと, 非線形方

程式の場合に計算モードの増加する場合があることである. なお, 計算モードを排除するには, 途中で 2 段階スキームを差し込むとよい.

アダムス-バッシュフォース (Adams-Bashforth) スキームの安定性と位相

時間差分スキーム (1) のアダムス-バッシュフォーススキームにおいて, $f = i\omega U$ と置いたとき,

$$\begin{aligned} U^{n+1} &= U^n + \Delta t \left(\frac{3}{2} f^n - \frac{1}{2} f^{n-1} \right) \\ &= U^n + i\omega\Delta t \left(\frac{3}{2} U^n - \frac{1}{2} U^{n-1} \right). \end{aligned} \tag{31}$$

このとき増幅係数 λ は,

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda U^{n-1}, \\ U^{n+1} &= \lambda U^n = \lambda^2 U^{n-1} \end{aligned} \tag{32}$$

を (31) 式に代入して,

$$\lambda^2 - \left(1 + i\frac{3}{2}p\right)\lambda + i\frac{1}{2}p = 0. \tag{33}$$

但し, $p \equiv \omega\Delta t$ である. ゆえに, アダムス-バッシュフォーススキームもリープフロッグスキームと同様に 2 つの λ をもつ. 上式を λ について解くと,

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{1}{2}\left[1 + i\frac{3}{2} + \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip}\right], \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}\left[1 + i\frac{3}{2} - \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip}\right]. \end{aligned} \tag{34}$$

$p \to 0$ のとき, $\mathrm{Re}\lambda_1 \to 1$, $\mathrm{Re}\lambda_2 \to 0$ である. したがって, λ_1 に対応するモードが物理モード, λ_2 に対応するモードが計算モードである. p が十分小さいとき, 計算モードは減衰する. これはアダムス-バッシュフォーススキームの利点である. そこで, $|p| < 1$ のときの λ_1 と λ_2 の振る舞いを調べる. (34) 式の根号の部分をテイラー展開し, 地道に計算すると,

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 1 + i\frac{3}{4} + \frac{1}{4}ip - \frac{1}{2}p^2 + O(p^3), \\ \lambda_2 &= i\frac{3}{4} - \frac{1}{4}ip + \frac{1}{2}p^2 + O(p^3). \end{aligned} \tag{35}$$

実部と虚部に分けて表すと,

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \left(1 - \frac{1}{2}p^2 - \cdots\right) + i\left(\frac{3}{4} + \frac{1}{4}p + \cdots\right), \\ \lambda_2 &= \left(\frac{1}{2}p^2 + \cdots\right) + i\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}p - \cdots\right) \end{aligned} \tag{36}$$

となるので,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| &= \sqrt{\lambda_1 \lambda_1^*} \\
&= \left(1 + \frac{9}{16} + \frac{3}{8}p + \cdots \right)^{\frac{1}{2}}, \\
|\lambda_2| &= \sqrt{\lambda_2 \lambda_2^*} \\
&= \left(\frac{9}{16} - \frac{3}{8}p + \cdots \right)^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{37}
$$

さらにテイラー展開すると最終的に,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| &= \frac{5}{4} + \frac{3}{20}p + \cdots, \\
|\lambda_2| &= \frac{3}{4} - \frac{1}{4}p + \cdots
\end{aligned} \tag{38}
$$

を得る. $|\lambda_1| > 1$, $|\lambda_2| < 1$ であるから, アダムス-バッシュフォーススキームの物理モードは不安定であり, 計算モードは安定である[2]. しかし, 4 段階数のアダムス-バッシュフォーススキームなら物理モードは安定であることも知られている.

摩擦方程式への応用

前節では様々なスキームを振動方程式に適用し, その安定性を考察した. 本節では様々なスキームを摩擦方程式に適用し, その安定性を考察する. 摩擦方程式は以下のように表される.

$$
\frac{dU}{dt} = -\kappa U, \qquad U = U(t), \qquad \kappa > 0. \tag{39}
$$

例) 熱伝導方程式

熱伝導方程式は,

$$
\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad \sigma > 0, \tag{40}
$$

と表される. ここで,

$$
u(x,t) = \mathrm{Re}[U(t)e^{ikx}] \tag{41}
$$

とおくと,

$$
\frac{\partial U}{\partial t} = -\sigma k^2 U. \tag{42}
$$

[2] この結論は 2024 年度ワークゼミで導いた. アダムス-バッシュフォーススキームの安定性に関する他のソースは今のところ未確認. 載っているとしたら Mesinger and Arakawa (1976).

これは (39) において, $\kappa = \sigma k^2$ とした場合に等しい. (39) の一般解は,

$$U(t) = U(0)e^{-\kappa t}. \tag{43}$$

よって, 実部も虚部も時間の経過とともに指数的に減少する.

反復しない 1 段階スキーム

それでは, 様々なスキームを (39) に適用したときの性質を, 再びフォンノイマン法を用いて調べてみる.

まず, 反復しない 1 段階スキーム, 時間差分スキームの (9) 式を摩擦方程式に適用すると,

$$U^{n+1} = U^n - \kappa\Delta t(\alpha U^n + \beta U^{n+1}) \tag{44}$$

となる. $K \equiv \kappa\Delta t$ と定義すると,

$$U^{n+1} = U^n - K(\alpha U^n + \beta U^{n+1}). \tag{45}$$

U^{n+1} について解くと,

$$U^{n+1} = \frac{1-\alpha K}{1+\beta K}U^n \tag{46}$$

となる.

オイラースキーム

オイラースキームの場合, (46) において, $\alpha = 1, \beta = 0$ である. よって, (46) は,

$$U^{n+1} = (1-K)U^n. \tag{47}$$

フォンノイマンの安定性条件は $\lambda \leq 1$ であったので,

$$|1-K| \leq 1, \tag{48}$$

すなわち,

$$0 < K \leq 2 \tag{49}$$

がオイラースキームを摩擦方程式にあてはめた場合の安定性条件となる. ただし, $\lambda = 1 - K$ であるので, 解を振動させないためには $K < 1$ とする必要がある. 振動方程式にオイラースキームをあてはめた場合の安定性条件は $p \ll 1$ が安定性条件であった. したがって, 同じスキームを用いた場合でも, 対象となる方程式が異なれば安定性の条件もまた異なることがわかる.

後退差分スキーム

後退差分スキームの場合 $\alpha = 0, \beta = 1$ なので, (46) は,

$$U^{n+1} = \frac{1}{K+1} U^n. \tag{50}$$

よって, 安定性条件は,

$$|\frac{1}{1+K}| \leq 1, \tag{51}$$

すなわち,

$$0 < K \tag{52}$$

に対して後退差分スキームは常に安定であり, 解は振動しない.

台形スキーム

台形スキームの場合 $\alpha = \beta = \dfrac{1}{2}$ なので, (46) は,

$$U^{n+1} = \frac{1 - \frac{1}{2}K}{1 + \frac{1}{2}K} U^n. \tag{53}$$

よって安定性条件は,

$$|\frac{1 - \frac{1}{2}K}{1 + \frac{1}{2}K}| \leq 1, \tag{54}$$

すなわち,

$$0 \leq K \leq 2. \tag{55}$$

ゆえに, $0 \leq K$ に対して台形スキームは安定であり, $K \leq 2$ であれば解は振動しない.

反復する 1 段階スキーム

次に, 反復する 1 段階スキームを考える. 反復する 1 段階スキームは (18) 式, (19) 式で表される. 今, $f^n = -\kappa U^n$ なので,

$$\begin{aligned}
U^{(n+1)^*} &= U^n - \kappa \Delta t U^n, && (56)\\
U^{n+1} &= U^n + \Delta t \{\kappa \alpha U^n + \beta(-\kappa)(U^n - \kappa \Delta t U^n)\} && (57)\\
&= U^n - \kappa \Delta t \alpha U^n + (\kappa \Delta t)^2 \beta U^n - \kappa \Delta t \, beta U^n && (58)\\
&= \{1 - \kappa \Delta t(\alpha + \beta) + (\kappa \Delta t)^2 \beta\} U^n && (59)\\
&= \{1 - \kappa \Delta t + (\kappa \Delta t)^2 \beta\} U^n && (60)\\
&= (1 - K + K^2 \beta) U^n. && (61)
\end{aligned}$$

ゆえに, 松野スキームもホインスキームも, 十分小さい K に対して安定となる.

2 段階スキーム

最後に, 2 段階スキームについて考える.

リープフロッグスキーム

(39) にリープフロッグスキームを適用すると,

$$\frac{U^{n+1}-U^{n-1}}{2\Delta t}=\kappa U^n, \tag{62}$$

ゆえに,

$$U^{n+1}=U^{n-1}-2\Delta t\kappa U^n. \tag{63}$$

ここで, (**??**) での議論と同様にして増幅係数 λ を導入すると,

$$U^{n+1}=U^{n-1}-2\Delta t\kappa U^n, \tag{64}$$
$$\lambda^2U^{n-1}=U^{n-1}-2\Delta t\kappa\lambda U^{n-1}, \tag{65}$$
$$\lambda^2=1-2K\lambda, \tag{66}$$
$$\lambda^2+2K\lambda-1=0. \tag{67}$$

この λ についての 2 次方程式を解くと,

$$\begin{aligned}\lambda_1&=-K+\sqrt{1+K^2},\\ \lambda_2&=-K-\sqrt{1+K^2}.\end{aligned} \tag{68}$$

$K\to 0$ のとき, $\lambda_1\to 1$, $\lambda_2\to -1$ となる. したがって, λ_1 が物理モードに対応し, λ_2 が計算モードに対応する. $K>0$ すなわち, 通常の時間積分に対して $\lambda_2<-1$ なので, 計算モードは常に不安定である. つまり時間ステップごとに解は形をかえ, 大きさは増大してしまう. 前に述べたとおり, 計算モードを完全に取り除くことは難しいうえに, 無視することもできないほどの大きさである. よって, 摩擦方程式に対してリープフロッグスキームは常に不安定である.

アダムス-バッシュフォーススキーム

アダムス-バッシュフォーススキームは,

$$U^{n+1}=U^n-\kappa\Delta t\left(\frac{3}{2}U^n-\frac{1}{2}U^{n-1}\right) \tag{69}$$

と表される. リープフロッグスキームの場合と同様に増幅係数を導入し, $K\equiv\kappa\Delta t$ とおけば,

$$\lambda^2=\lambda-\frac{3}{2}K\lambda+\frac{1}{2}K,$$
$$\lambda^2-\left(1-\frac{3}{2}K\right)\lambda-\frac{1}{2}K=0.$$

この λ に関する 2 次方程式を解くと,

$$\lambda = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{3}{2}K \pm \sqrt{1 - K + \frac{9}{4}K^2}\right) \tag{70}$$

を得る. ゆえに, アダムス-バッシュフォーススキームの場合, K が十分小さければ常に安定であり, 計算モードは減衰する.

複数のスキームを組み合わせた場合

例えば, 振動方程式と摩擦方程式を組み合わせたような式, すなわち,

$$\frac{dU}{dt} = i\omega U - \kappa U \tag{71}$$

という式を数値計算したい場合はどうすればよいだろうか. 振動項 $i\omega U$ に有効なリープフロッグスキームをもちいたいところではある. しかしながら, リープフロッグスキームは先ほど調べたように摩擦項 $-\kappa U$ に対して用いることはできない. この様な場合, 異なるスキームをそれぞれ別の項に適用することができる. すなわちこの例でいえば, 振動項に対してはリープフロッグスキームを, 摩擦項に対してはオイラースキームをそれぞれ用いればよい. すると,

$$U^{n+1} = U^{n-1} + 2\Delta t(i\omega U^n - \kappa U^{n-1}) \tag{72}$$

となる. 他のスキームの組み合わせももちろん可能である.

参考文献

川畑 拓也, 2011,「時間差分スキーム (1)」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/~gfdlab/comptech/resume/0728/2011_0728-takuya.pdf

Mesinger, F., and Arakawa, A., 1976, Numerical methods used in atmospheric models, GARP Publications series (World Meteorological Organization), No. 17, Part 1., 64 pp

石岡 圭一, 2004,「スペクトル法による数値計算入門」, 東京大学出版会, ISBN:4130613057

竹野 茂治, 2009,「勾配から角度を求める展開式」
`URL:http://takeno.iee.niit.ac.jp/\~{}shige/math/lecture/basic3/data/arctan1.pdf`

KIT 数学ナビゲーション, 2007,「微分 arctanx」
`URL:http://w3e.kanazawa-it.ac.jp/math/category/bibun/keisan/henkan-tex.cgi?target=/math/category/bibun/keisan/diff-arctan.html`