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. 一般に, 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,

$$U^n = a\lambda_1^n U_1^0 + b\lambda_2^n U_2^0.$$

したがって, 安定性条件は,

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

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**

$1 - p^2 > 0$ より,

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &= \sqrt{\lambda_1 \lambda_1^*} = 1, \\ |\lambda_2| &= \sqrt{\lambda_2 \lambda_2^*} = 1. \end{aligned} \tag{9.2.40}$$

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

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

より,

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \arctan(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}), \\ \theta_2 &= \arctan(-\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}). \end{aligned} \tag{9.2.41}$$

$p \to 0$ 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, 物理モード, 計算モードともに,

$$\begin{aligned} \lambda_{im} &= |\lambda| \sin\theta \\ &= p \qquad (0 < \theta < \pi) \end{aligned}$$

となるので,

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

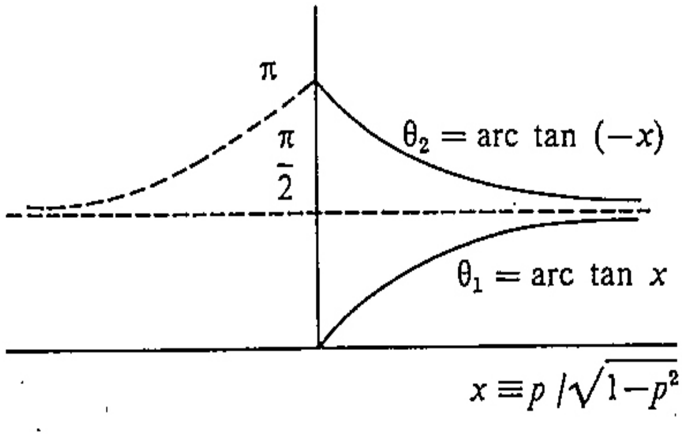

図 9.2.2: リープフロッグスキームにおける物理モードと計算モードの位相の振る舞い

ゆえに,

$$0 < \theta_1 < \frac{\pi}{2},$$
$$\frac{\pi}{2} < \theta_2 < \pi.$$

図 9.2.2 より,

$$\theta_2 = \pi - \theta_1.$$

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,

$$\lambda_{im} = |\lambda| \sin\theta$$
$$= p.$$

したがって $-\pi < \theta < 0$.

$$-\pi < \theta_1 < -\frac{\pi}{2},$$
$$-\frac{\pi}{2} < \theta_2 < 0$$

であるから,

$$\theta_2 = -\pi - \theta_1.$$

結局, $p \gtrless 0$ をまとめて表すと,

$$\theta_2 = \pm\pi - \theta_1 \qquad (\text{複号同順}) \tag{9.2.42}$$

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,

$$\theta_1 = \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right)$$

なので, $|x| < 1$ のとき,

$$\arctan x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \cdots$$

を用いると,

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

ゆえに,

$$\frac{\theta_1}{p} = 1 + \frac{p^2}{6} > 1.$$

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.

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

$\frac{d\theta_1}{dp} > 0$, $p \to 1$ 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,

$$\begin{aligned}
U_1^n &= U_1^0 e^{in\theta_1}, \\
U_2^n &= U_2^0 e^{in(\pm\pi - \theta_1)}.
\end{aligned} \tag{9.2.43}$$

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 $Im(U_1^0) = 0, Im(U_2^0) = 0$ 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 $\theta_2 = \pi - \theta_1$ より時計回りに進む. これを実部と虚部に分けて図示すると,

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

より,

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

なので, 図 9.2.3 の様になる.

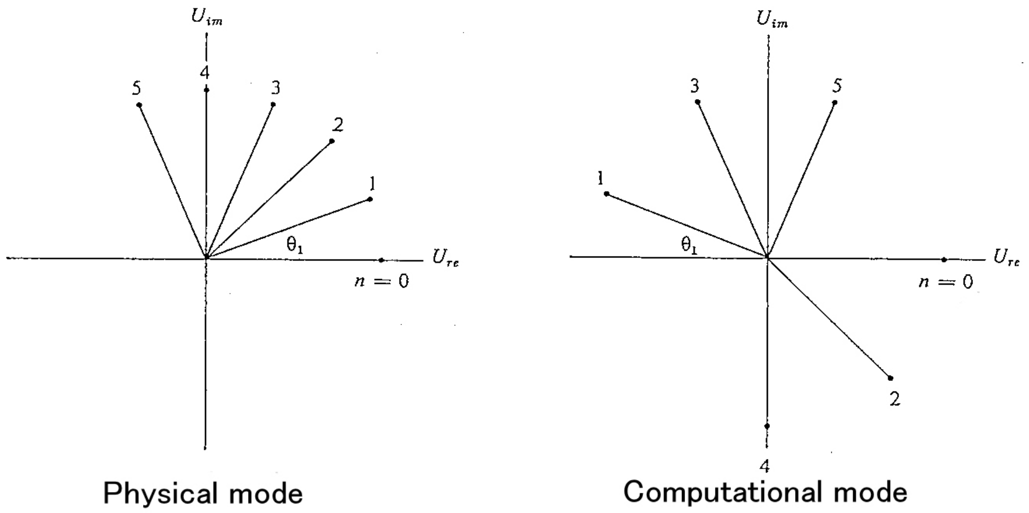

図 9.2.3: 物理モードと計算モード

Case2. $|p| = 1$ **のとき**

$$
\lambda_1 = \lambda_2 = ip
$$

なので,

$$
|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1. \tag{9.2.44}
$$

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. 位相は,

$$\theta_1 = \arctan\frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}},$$
$$\tan\theta_1 = \frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}} \to \infty.$$

であるから,

$$\theta_1 = \theta_2 = \pm\frac{\pi}{2} \qquad (p = \pm 1). \tag{9.2.45}$$

このとき解はどちらのモードも,

$$U^n = U^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}} \tag{9.2.46}$$

となる.

Case3. $|p| > 1$ **のとき**

$$\lambda_1 = i(p + \sqrt{p^2 - 1}),$$
$$= i(p - \sqrt{p^2 - 1}).$$

括弧の中身が実数であることに注意すれば,

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &= |p + \sqrt{p^2 - 1}|, \\ |\lambda_2| &= |p - \sqrt{p^2 - 1}| \end{aligned} \tag{9.2.47}$$

である. したがって,

$$|\lambda_1| > 1 \qquad (p > 1),$$
$$|\lambda_2| > 1 \qquad (p < -1).$$

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

$$\theta_1 = \theta_2 = \pm\frac{\pi}{2}. \tag{9.2.48}$$

解は,

$$\begin{aligned} U_1^n &= |p + \sqrt{p^2 - 1}|^n U_1^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}}, \\ U_2^n &= |p - \sqrt{p^2 - 1}|^n U_2^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}}. \end{aligned} \tag{9.2.49}$$

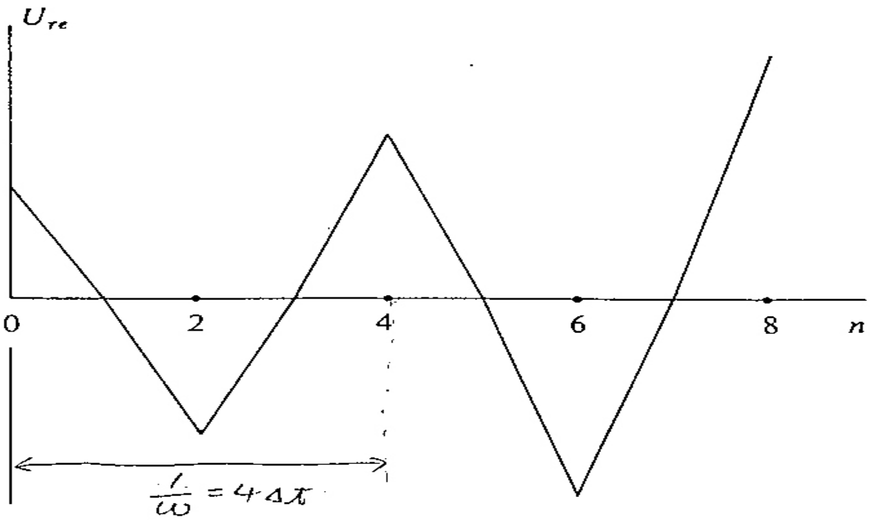

図 9.2.4: リープフロッグスキームにおける不安定モードの実部と時間の関係. $|\lambda| = 1.1$ とし, 初期時刻において虚部をゼロとしている.

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 9.2.5 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

(1.10) において, $f = i\omega U$ より,

$$
\begin{aligned}
U^{n+1} &= U^n + \Delta t \left(\frac{3}{2} f^n - \frac{1}{2} f^{n-1} \right) \\
&= U^n + i\omega\Delta t \left(\frac{3}{2} U^n - \frac{1}{2} U^{n-1} \right).
\end{aligned} \tag{9.2.50}
$$

このとき増幅係数 λ は,

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

を (2.50) に代入して,

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

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,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2}\left[1 + i\frac{3}{2} + \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip}\right],\\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}\left[1 + i\frac{3}{2} - \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip}\right].\end{aligned} \tag{9.2.51}$$

$p \to 0$ のとき, $\lambda_1 \to 1$, $\lambda_2 \to 0$ 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. (9.2.5) の根号の部分をテイラー展開し, 地道に計算すると,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 1 + ip - \frac{1}{2}p^2 + i\frac{1}{4}p^3 - \frac{1}{8}p^4 + \cdots,\\ \lambda_2 &= i\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}p^2 - i\frac{1}{4}p^3 + \frac{1}{8}p^4 - \cdots.\end{aligned}$$

実部と虚部に分けて表すと,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \left(1 - \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{8}p^4 - \cdots\right) + i\left(p + \frac{1}{4}p^3 + \cdots\right),\\ \lambda_2 &= \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{8}p^4 + \cdots\right) + i\left(\frac{1}{2}p - \frac{1}{4}p^3 - \cdots\right)\end{aligned}$$

となるので,

$$\begin{aligned}|\lambda_1| &= \sqrt{\lambda_1\lambda_1^*}\\ &= \left(1 + \frac{1}{2}p^4 + \cdots\right)^{\frac{1}{2}},\\ |\lambda_2| &= \sqrt{\lambda_2\lambda_2^*}\\ &= \left(\frac{1}{4}p^2 + \cdots\right)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{9.2.52}$$

さらにテイラー展開すると最終的に,

$$\begin{aligned}|\lambda_1| &= 1 + \frac{1}{4}p^4 + \cdots,\\ |\lambda_2| &= \frac{1}{2}p + \cdots\end{aligned} \tag{9.2.53}$$

を得る. $|\lambda_1|$ も $|\lambda_2|$ もともに 1 より大きいので, 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る. 但し, 増幅係数は $O(p^4)$ なので Δt を十分小さくとればあまり問題はない. また, 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.