時間差分スキーム(4)

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

ここでは 2 次のアダムス-バッシュフォーススキームについて振動方程式に当てはめた場合の安定性と位相比について述べる．2 次のアダムスバッシュフォーススキームは

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

と表せる．今, $f = i\omega U$ とすると,

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

増幅係数 λ を用いて U^{n+1} と U^n を U^{n-1} で表すと,

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

これらを (1) 式に代入すると

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

となる．ここで $p \equiv \omega\Delta t$ とすると

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

(2) 式からアダムス-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. (2) 式を λ について解くと,

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

$p \to 0$ のとき, $\lambda_1 \to 1$, $\lambda_2 \to 0$ である. したがって, λ_1 に対応するモードを物理モード, λ_2 に対応するモードを計算モードと解釈できる. 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 (3) 式を用いて調べる. (3) 式 の根号の部分をテイラー展開し, 地道に計算すると,

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

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. ここで, 増幅率を計算すると,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| &= \sqrt{\lambda_1\lambda_1^*} \\
&\sim \sqrt{\left\{\left(1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4\right)+i\left(p+\frac{1}{4}p^3\right)\right\}\left\{\left(1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4\right)-i\left(p+\frac{1}{4}p^3\right)\right\}} \\
&= \sqrt{\left(1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4\right)^2+\left(p+\frac{1}{4}p^3\right)^2} \\
&= \sqrt{1+\frac{1}{2}p^4+o(p^6)} \\
&\sim \sqrt{1+\frac{1}{2}p^4} \\
&\sim 1+\frac{1}{4}p^2 > 1, \\
|\lambda_2| &= \sqrt{\lambda_2\lambda_2^*} \\
&\sim \sqrt{\left(i\frac{1}{2}p+\frac{1}{2}p^2\right)\left(-i\frac{1}{2}p+\frac{1}{2}p^2\right)} \\
&= \sqrt{\frac{1}{4}p^4+\frac{1}{4}p^2} \\
&= \frac{p}{2}\sqrt{1+p^2} \\
&\sim \frac{p}{2}\left(1+\frac{1}{2}p^2\right) < 1
\end{aligned}
$$

となる. つまりアダムス-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減衰する.

また, リープフロッグスキームの時と同様にアダムスバッシュフォームスキームの物理モードの位相の振る舞いを調べると,

$$
\begin{aligned}
\frac{\theta_1}{p} &= \frac{1}{p}\arctan\frac{\lambda_{1,im}}{\lambda_{1,re}} \\
&\sim \frac{1}{p}\arctan\frac{p+\frac{1}{4}p^3}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4} \\
&= \frac{1}{p}\left\{\frac{p+\frac{1}{4}p^3}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4} - \frac{1}{3}\left(\frac{p+\frac{1}{4}p^3}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4}\right)^3 + \frac{1}{5}\left(\frac{p+\frac{1}{4}p^3}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4}\right)^5 + \cdots\right\} \\
&\sim \frac{1+\frac{1}{4}p^2}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4} - \frac{1}{3p}\left(\frac{p+\frac{1}{4}p^3}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4}\right)^3 \\
&= \left(1+\frac{1}{4}p^2\right)\left(1+\frac{1}{2}p^2+o(p^4)\right) - \frac{1}{3p}\left(p+\frac{1}{4}p^3\right)^3\left(1+\frac{1}{2}p^2+o(p^4)\right)^3 \\
&= 1+\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{4}p^2-\frac{1}{3}p^2+o(p^3) \\
&= 1+\frac{5}{12}p^2+o(p^3) > 1
\end{aligned}
$$

となり, 真の解よりも位相が早く進む. ここで, 4 行目から 5 行目の変形には, 以下のテーラー展開の式を用いた.

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{1-\frac{1}{2}p^2-\frac{1}{8}p^4} &= 1+\left(\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{8}p^4\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{8}p^4\right)^2+\cdots \\
&= 1+\frac{1}{2}p^2+o(p^4)
\end{aligned}
$$