第11章　アダムズ-バッシュフォース公式

11.1　多段階公式

オイラー法, ルンゲ-クッタ型公式は $t = (n+1)\Delta t$ の従属変数の値を予報するのに, $t = n\Delta t$ の従属変数の値を用いてきた (1 段階公式). これに対し, アダムズ-バッシュフォース公式は $t = (n+1)\Delta t$ の従属変数の値を予報するのに, $t = n\Delta t$, $(n-1)\Delta t$, $(n-2)\Delta t, \cdots$ の従属変数の値を用いる (多段階公式).

解く式は,

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \tag{1.1}$$

とする. 時間刻みを h として,

$$x(t_n + h) \tag{1.2}$$

を, $t = t_n$ のまわりで展開する. 展開式は,

$$\begin{aligned} x(t_n + h) &= x(t_n) + \left(\frac{dx}{dt}\right)_n h + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2x}{dt^2}\right)_n h^2 + O(h^3) \\ &= x(t_n) + hf + \frac{1}{2}h^2\left(\frac{df}{dt}\right)_n + O(h^3) \end{aligned} \tag{1.3}$$

ルンゲ-クッタ型公式は, f_n をいろいろな t_n での (x_n, t_n) で評価してその重みつき平均で, (1.3) を近似する. アダムズ-バッシュフォース公式では, $f' = \frac{df}{dt}$, f'' を t_n よりも前の時刻での f_n の値を用いて, 過去に計算された f の値を用いて計算し, 展開式 (1.3) を近似する.

11.2　2 位のアダムズ-バッシュフォース公式

$$f' = \frac{df}{dt} \approx \frac{f_n - f_{n-1}}{n\Delta t} \tag{2.4}$$

と近似する. f_{n-1} は x_{n-1} が $O(h^2)$ で求められているとすると,

$$
\begin{aligned}
f_{n-1} &= f(x_{n-1}, t_{n-1}) \\
&= f\left(x(t_n - h) + O(h^2), t_n - h\right) \\
&= f\left(x(t_n - h), t_n - h\right) + O(h^2).
\end{aligned} \tag{2.5}
$$

(2.5) を t_n のまわりで展開すると,

$$
f_{n-1} = f(x_n, t_n) - hf'(x_n, t_n) + O(h^2).
$$

ゆえに,

$$
f' = \frac{f_n - f_{n-1}}{h} + O(h). \tag{2.6}
$$

(2.6) を展開式 (1.3) に代入すると,

$$
\begin{aligned}
x(t_n + h) &= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h^2\left[\frac{f_n - f_{n-1}}{h} + O(h)\right] + O(h^3) \\
&= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h\left[f_n - f_{n-1} + O(h^2)\right] + O(h^3) \\
&= x(t_n) + h\left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1}\right) + O(h^3).
\end{aligned} \tag{2.7}
$$

ここで,

$$
\begin{aligned}
f_n &= f(x_n, t_n) \\
f_{n-1} &= f(x_{n-1}, t_{n-1})
\end{aligned}
$$

である.

11.3　3 位のアダムズ-バッシュフォース公式

2 位の時と同様にして, $x(t_n + h)$ を 3 次の項まで展開する.

$$
x(t_n + h) = x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h^2 f' + \frac{1}{6}h^3 f'' + O(h^4). \tag{3.8}
$$

同様に,

$$
\begin{aligned}
f(x_{n-1}, t_{n-1}) &= f(x(t_n - h), t_n - h) + O(h^3) \\
&= f_{n-1} + O(h^3).
\end{aligned}
$$

ゆえに,

$$f_{n-1} = f_n - hf'_n + \frac{1}{2}h^2 f''_n + O(h^3) \tag{3.9}$$

$$f_{n-2} = f_n - 2hf'_n + \frac{1}{2}(2h)^2 f''_n + O(h^3). \tag{3.10}$$

(3.9) と (3.10) より,

$$4f_{n-1} - f_{n-2} = 3f_n - 2hf'_n + O(h^3).$$

従って,

$$f'_n = \frac{3f_n - 4f_{n-1} + f_{n-2}}{2h} + O(h^2). \tag{3.11}$$

同様に (3.9), (3.10) より,

$$2f_{n-1} - f_{n-2} = f_n - h^2 f''_n + O(h^3)$$

であるから,

$$f''_n = \frac{f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}}{h^2} + O(h^3). \tag{3.12}$$

(3.11), (3.12) を (3.8) へ代入すると,

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + hf_n + \frac{1}{2}h^2\left(\frac{3f_n - 4f_{n-1} + f_{n-2}}{2h}\right) + \frac{1}{6}h^3\left(\frac{f_n - 2f_{n-2} + f_{n-2}}{h^2}\right) \\ &= x_n + h\left(\frac{23}{12}f_n - \frac{16}{12}f_{n-1} + \frac{5}{12}\right) \\ &= x_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) \end{aligned} \tag{3.13}$$

となる. これが 3 位のアダムズ-バッシュフォースの公式である.

11.4　アダムズ-バッシュフォース公式の特徴

長所

- 何位の公式でも (ルンゲ-クッタ型公式に比べ) 簡単に作れる. なぜならばステップ数とオーダーが必ず一致するからである.
- 1 ステップあたりの関数評価が 1 回で済む

短所

- 高次になるにつれて安定領域が狭くなる.
- 計算開始時には過去の関数値 f_k を使えないので, 別の方法であらかじめ f_k を求めておく必要がある.

11.5 予測子・修正子法

アダムズ-バッシュフォース公式では, f', $f^{f''}$ を求めるのに, 過去の時刻の f の値を用いた. これに対し, 予測子・修正子法では f', f'' を求めるのに, 予報時刻の f の値を用いる. 例えば 2 位の公式では,

$$f(x_{n+1}, t_{n+1}) = f(x_n, t_n) + hf'(x_n, t_n) + O(h^2)$$

より,

$$f'_n = \frac{f_{n+1} - f_n}{h}. \tag{5.14}$$

(5.14) を (1.3) に代入すると,

$$\begin{aligned} x(t_n + h) &= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}h^2\frac{f_{n+1} - f_n}{h} \\ &= x(t_n) + hf_n + \frac{1}{2}hf_{n+1} - \frac{1}{2}hf_n \\ &= x(t_n) + \frac{1}{2}h(f_{n+1} + f_n). \end{aligned} \tag{5.15}$$

ゆえに,

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n).$$

ただし,

$$\begin{cases} f_{n+1} & = f(x^*, t^*) \\ x^* & = x_n + h\left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1}\right) \\ t^* & = t_n + h \end{cases} \tag{5.16}$$

となる.

11.6 アダムズ-バッシュフォース公式の安定性

振動方程式

$$\frac{dx}{dt} = \omega x \qquad (f \equiv \omega x) \tag{6.17}$$

にアダムズ-バッシュフォース公式を用いた場合の安定性を調べる.

11.6.1 2 位の公式の場合

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + h\left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1}\right) \\
&= x_n + h\left(\frac{3}{2}\omega x_n - \frac{1}{2}\omega x_{n-1}\right).
\end{aligned}
$$

増幅係数 λ を,

$$
\lambda \equiv \frac{x_{n+1}}{x_n} \tag{6.18}
$$

と定義する. このとき,

$$
\lambda = 1 + h\left(\frac{3}{2}\omega - \frac{1}{2}\frac{\omega}{\lambda}\right)
$$

であるから,

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

$h\omega \equiv p$ とおき, 上式を λ について解くと,

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

より,

$$
\lambda = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{3}{2}p \pm \sqrt{1 + p + \frac{9}{4}p^2}\right). \tag{6.19}
$$

$p \ll 1$ とすると, (6.19) は,

$$
\begin{aligned}
\sqrt{1 + p + \frac{9}{4}p^2} &= 1 + \frac{1}{2}\left(p + \frac{9}{4}p^2\right) - \frac{1}{8}\left(p + \frac{9}{4}p^2\right)^2 + \cdots \\
&= 1 + \frac{1}{2}p + p^2 + O(p^3).
\end{aligned}
$$

よって, λ の 2 つの解の p の 2 次までの近似式は,

$$
\lambda_+ = 1 + p + \frac{1}{2}p^2 + O(p^3), \tag{6.20}
$$

$$
\lambda_- = \frac{1}{2}p - \frac{1}{2}p^2 + O(h^3). \tag{6.21}
$$

$x_{n+1} = \lambda x_n$ より, $p \to 0$ の極限で,

$$
\begin{aligned}
\lambda_+ x_n &\to x_{n+1}, \\
\lambda_- x_n &\to 0.
\end{aligned}
$$

これより, λ_+ に対応する数値解は物理モード, λ_- に対応する数値解は計算モードである. 安定性の条件は $|\lambda| \le 1$, $p \ll 1$ として, p の 1 次の項まで考えると,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_+| &= \sqrt{(1+p_{\mathrm{re}})^2 + p_{\mathrm{im}}^2} > 1,\\
|\lambda_-| &= \frac{1}{2}|p| < 1.
\end{aligned}
$$

ここで, $p_{\mathrm{re}} = \mathrm{Re[p]}$, $p_{\mathrm{im}} = \mathrm{Im[p]}$ である. よって, 2 位公式の場合, 物理モードは不安定である. 一方計算モードは安定となる. 安定領域の境界は $|\lambda| = 1$ なので,

$$
p = \frac{\lambda^2 - \lambda}{\frac{3}{2}\lambda - \frac{1}{2}}
$$

に $\lambda = e^{i\theta}$ を代入して, $0 \le \theta \le 2\pi$ とすれば得られる.

11.6.2　2 位の予測子・修正子法の安定性

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + \frac{h}{2}(\omega x^* + \omega x_n),\\
x^* &= x_n + h\left(\frac{3}{2}\omega x_n - \frac{1}{2}\omega x_{n-1}\right)
\end{aligned}
$$

より,

$$
x_{n+1} = \left(1 + h\omega + \frac{4}{3}(h\omega)^2\right) x_n - \frac{1}{4}(h\omega)^2 x_{n-1}. \tag{6.22}
$$

再び増幅係数 λ を,

$$
\lambda \equiv \frac{x_{n+1}}{x_n}
$$

とおくと,

$$
\lambda^2 - \left(1 + p + \frac{3}{4}p^2\right)\lambda + \frac{1}{4}p^2 = 0.
$$

ただし, $p = h\omega$ である. これを λ について解くと,

$$
\lambda = \frac{1}{2}\left(1 + p + \frac{3}{4}p^2 \pm \sqrt{1 + 2p + \frac{3}{2}p^2 + \frac{3}{2}p^3 + \frac{9}{16}p^4}\right).
$$

$p \ll 1$ として,

$$
\begin{aligned}
\sqrt{1 + 2p + \frac{3}{2}p^2 + \frac{3}{2}p^3 + \frac{9}{16}p^4} &= 1 + \frac{1}{2}\left(2p + \frac{3}{2}p^2 + \frac{3}{2}p^3 + \frac{9}{16}p^4\right)\\
&\quad - \frac{1}{4}\left(2p + \frac{3}{2}p^2 + \frac{3}{2}p^3 + \frac{9}{16}p^4\right)^2 + O(p^9)\\
&= 1 + p - \frac{1}{4}p^2 + O(p^3).
\end{aligned}
$$

ゆえに,

$$\lambda_+ = 1 + p - \frac{1}{4}p^2 + O(p^3), \tag{6.23}$$

$$\lambda_- = \frac{1}{2}p^2 + O(p^3). \tag{6.24}$$

2 位のアダムズ-バッシュフォース公式と比較すると, 物理モードの振る舞いはほぼ同じであり, 計算モードの振る舞いは, 予測子・修正子法の方が早く減衰する ($|p| < 1$ のとき).