2 段階スキームの振動方程式への応用

ここでは, 真の解の位相に対する数値解の位相の比を調べる.

2 段階スキームの安定性

U^{n+1} を求めるのに U^n, U^{n-1} を用いて求める 2 段階スキームの安定性を求める.

リープフロッグスキーム (leapfrog scheme)

振動方程式に対してリープフロッグスキームをあてはめた差分式は

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

2 段階スキームを用いた場合初期値が U^0, U^1 の 2 つ必要になる. ここで U^0 は物理的な初期値, U^1 は U^0 から何らかの方法で計算し求めた初期値である.

増幅係数 λ を計算すると

$$U^n = \lambda U^{n-1}. \tag{2}$$

$U^n = \dfrac{U^{n+1}}{\lambda}$ なので

$$\frac{U^{n+1}}{\lambda} = \lambda U^{n-1}, \tag{3}$$

$$U^{n+1} = \lambda^2 U^{n-1}. \tag{4}$$

これを (1) 式に代入すると

$$\lambda^2 U^{n-1} = U^{n-1} + 2i\omega\Delta t\lambda U^{n-1}. \tag{5}$$

両辺を U^{n-1} で割ると

$$\lambda^2 - 2i\omega\Delta t\lambda - 1 = 0. \tag{6}$$

これを解くと

$$\lambda = ip \pm \sqrt{1-p^2}. \tag{7}$$

よって, λ の解は 2 つ存在する. 一般に m 段階スキームには m 個の増幅係数が現れる. それぞれの λ に対する数値解をモード (mode) と呼ぶ.

リープフロッグスキームの場合 (7) 式は,

$$\lambda_{\mathrm{p}} = \sqrt{1-p^2} + ip, \tag{8}$$

$$\lambda_{\mathrm{c}} = -\sqrt{1-p^2} + ip \tag{9}$$

の 2 つの解になる. それぞれの $|\lambda|$ を考えると,

$$|\lambda_{\mathrm{p}}| = (\sqrt{1-p^2} + ip)(\sqrt{1-p^2} - ip) = 1, \tag{10}$$

$$|\lambda_{\mathrm{c}}| = (-\sqrt{1-p^2} + ip)(-\sqrt{1-p^2} - ip) = 1 \tag{11}$$

となる. よって, リープフロッグスキームの二つの増幅係数はどちらも安定である. また, 2 段階スキームにおける真の解と数値解の位相比は，1 段階スキームの場合と同様に,

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p}\arctan\frac{\lambda_{\mathrm{i}}}{\lambda_{\mathrm{r}}} \tag{12}$$

である. λ_{p} の場合は

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p}\arctan\frac{p}{(1-p^2)^{\frac{1}{2}}} \tag{13}$$

$$= \frac{1}{p}\arctan\left\{p\left(1+\frac{p^2}{2}+\frac{p^4}{4}+\cdots\right)\right\}. \tag{14}$$

よって, ホインスキームと同じ形になるので, 解析解と比べて早く進むことが分かる. また, λ_{c} の場合は

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p}\arctan\left\{-\frac{p}{(1-p^2)^{\frac{1}{2}}}\right\} \tag{15}$$

$$= \frac{1}{p}\arctan\left\{-p\left(1+\frac{p^2}{2}+\frac{p^4}{4}+\cdots\right)\right\}. \tag{16}$$

よって, 真の解よりも遅く進む.

物理モードと計算モード

リープフロッグスキームの増幅係数は (7) 式より

$$\lambda_{\mathrm{p}} = \sqrt{1-p^2} + ip, \tag{17}$$

$$\lambda_{\mathrm{c}} = -\sqrt{1-p^2} + ip \tag{18}$$

の 2 つの解である． ここで $\Delta t \to 0$ の極限を考えると λ_p のときは $\lambda_\mathrm{p} \to 1$ で $U^{n+1} = U^n$, λ_c のときは $\lambda_\mathrm{c} \to -1$ で $U^{n+1} = -U^n$ となり, λ_c のときには反転してしまう. そこで λ_p に対応する数値解を物理モード (physical modes). λ_c に対応する数値解を計算モード (computational modes) と呼ぶことにする. 実際の計算で得られる数値解は, これらのモードの重ね合わせになる.

重ね合わせを考える前に極端な例として $\omega = 0$ の場合を考える. そのとき

$$\frac{dU}{dt} = 0. \tag{19}$$

(1) 式は

$$U^{n+1} = U^{n-1} \tag{20}$$

となる. これは U^1 の与え方によって解の振舞いが変わる.

U^1 が $U^1 = U^0$ と与えられた場合

$$U^{n+1} = U^n. \tag{21}$$

これは $p \to 0$ の極限の λ_p のモードに対応するので

$$U^{n+1} = \lambda_\mathrm{p} U^n. \tag{22}$$

この場合, 解は物理モードのみから構成される.

U^1 が $U^1 = -U^0$ として与えられた場合

$$U^{n+1} = -U^n. \tag{23}$$

これは $p \to 0$ の極限での λ_c のモードに対応するので

$$U^{n+1} = \lambda_\mathrm{c} U^n. \tag{24}$$

この解は計算モードのみから構成される.

次に $\omega \neq 0$ の一般の場合を考える. その場合数値解は

$$U_\mathrm{p}^n = \lambda_\mathrm{p}^n U_\mathrm{p}^0, \tag{25}$$

$$U_\mathrm{c}^n = \lambda_\mathrm{c}^n U_\mathrm{c}^0 \tag{26}$$

の重ね合わせで表される. よって,a, b を定数とすると

$$U^n = a\lambda_\mathrm{p}^n U_\mathrm{p}^0 + b\lambda_\mathrm{c}^n U_\mathrm{c}^0. \tag{27}$$

U^0 と U^1 を (27) 式を用いて表すと

$$U^0 = aU_\mathrm{p}^0 + bU_\mathrm{c}^0, \tag{28}$$

$$U^1 = a\lambda_\mathrm{p} U_\mathrm{p}^0 + b\lambda_\mathrm{c} U_\mathrm{c}^0. \tag{29}$$

これを $aU_{\rm p}^0$ と $bU_{\rm c}^0$ の連立方程式と考えて解くと

$$aU_{\rm p}^0 = \frac{\lambda_{\rm c}U^0 - U^1}{\lambda_{\rm c} - \lambda_{\rm p}}, \tag{30}$$

$$bU_{\rm c}^0 = \frac{\lambda_{\rm p}U^0 - U^1}{\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}}. \tag{31}$$

これを (27) 式に代入すると

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda_{\rm p}^n \frac{\lambda_{\rm c}U^0 - U^1}{\lambda_{\rm c} - \lambda_{\rm p}} + \lambda_{\rm c}^n \frac{\lambda_{\rm p}U^0 - U^1}{\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}} \\ &= \frac{1}{\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}} \left\{ \lambda_{\rm p}^n \left(U^1 - \lambda_{\rm c}U^0 \right) - \lambda_{\rm c}^n \left(U^1 - \lambda_{\rm p}U^0 \right) \right\}. \end{aligned} \tag{32}$$

よって, 物理モードの振幅は $|U^1 - \lambda_{\rm c}U^0|$ に, 計算モードの振幅は $|U^1 - \lambda_{\rm p}U^0|$ に比例することが分かる. (32) 式は $U^1 = \lambda_{\rm p}U^0$ のとき

$$U^n = \frac{1}{\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}} \lambda_{\rm p}^n (\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}) U^0 \tag{33}$$

$$= \lambda_{\rm p}^n U^0. \tag{34}$$

一方, $U^1 = \lambda_{\rm c}U^0$ のとき

$$U^n = \frac{1}{\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}} \lambda_{\rm c}^n (\lambda_{\rm p} - \lambda_{\rm c}) U^0 \tag{35}$$

$$= \lambda_{\rm c}^n U^0. \tag{36}$$

となり, どちらも $\omega = 0$ の場合に対応する.

U^1 は $\lambda_{\rm p}$ から求めることができるが必ずしも計算モードを除去できるわけではない. また複雑な式になると解析的に物理モードを求めることができなくなる. そこで, U^1 は 1 段階スキームから求める. 仮に, 物理モード $\lambda_{\rm p}$ を厳密にしることができても U^n は差分式の厳密解にはなりえない. これは計算機によって丸め誤差があるためである. よって, 数値モードを完全に除去することは現実的には難しい. しかしながら, 丸め誤差の影響は些細なものなので, あまり神経質になる必要はない[1)].

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. (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,

$$U^n = a\lambda_1^n U_1^0 + b\lambda_2^n U_2^0. \tag{37}$$

1) Mesinger and Arakawa(1976) では丸め誤差は 「a little important」であると述べられている.

したがって, 安定性条件は,

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &< 1, \\ |\lambda_2| &< 1 \end{aligned} \tag{38}$$

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

2 段階スキームの安定性より,$1 - p^2 > 0$ のときは

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &= \sqrt{\lambda_1 \lambda_1^*} = 1, \\ |\lambda_2| &= \sqrt{\lambda_2 \lambda_2^*} = 1. \end{aligned} \tag{39}$$

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

$$\theta = \arctan \left(\frac{\lambda_\mathrm{i}}{\lambda_\mathrm{r}} \right) \tag{40}$$

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,

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \arctan(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}), \\ \theta_2 &= \arctan(-\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}). \end{aligned} \tag{41}$$

$p \to 0$ 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

$$\begin{aligned} \tan\theta_1 &= \frac{p}{\sqrt{1-p^2}} > 0, \\ \tan\theta_2 &= -\frac{p}{\sqrt{1-p^2}} < 0. \end{aligned} \tag{42}$$

ゆえに,

$$\begin{aligned} 0 < \theta_1 < \frac{\pi}{2}, \\ \frac{\pi}{2} < \theta_2 < \pi. \end{aligned} \tag{43}$$

図 1 [2] より,

$$\theta_2 = \pi - \theta_1. \tag{44}$$

[2] arctan の本来の値域は $-\pi/2 \to \pi/2$ であるが，それを拡張しているがゆえに，arctan が多価関数のようになっているため，θ_1, θ_2 のどちらが物理モードか計算モードかの結論はいかようにもつけられそうになっている．

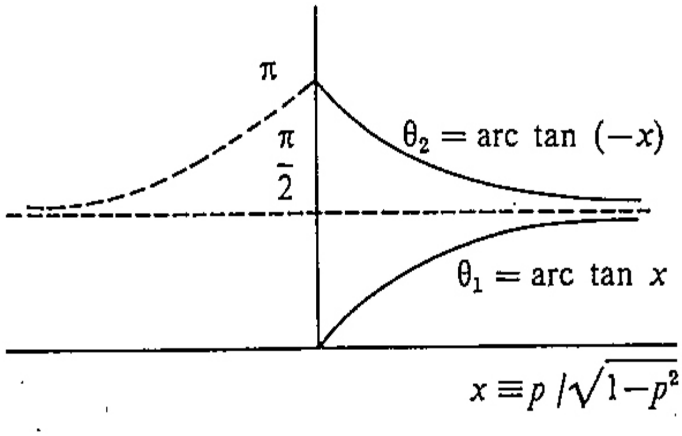

図 1: リープフロッグスキームにおける物理モードと計算モードの位相の振る舞い (Mesinger and Arakawa (1976) より引用). 縦軸は位相, 横軸は $x = p/\sqrt{1-p^2}$ である.

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,

$$
\begin{aligned}
-\frac{\pi}{2} < \theta_1 < 0, \\
-\pi < \theta_2 < -\frac{\pi}{2}
\end{aligned}
\tag{45}
$$

であるから,

$$
\theta_2 = -\pi - \theta_1. \tag{46}
$$

結局, $p \gtrless 0$ をまとめて表すと,

$$
\theta_2 = \pm\pi - \theta_1 \qquad \text{(複号同順)} \tag{47}
$$

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,

$$
\begin{aligned}
\theta_1 &= \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right) \\
&\sim \arctan\left\{p(1+\frac{1}{2!}p^2+9\frac{1}{4!}p^4+\cdots)\right\} \\
&\sim (p+\frac{1}{2}p^3) - \frac{(p+\frac{1}{2}p^3)^3}{3}+\cdots \\
&\sim p+\frac{p^3}{6}+\cdots.
\end{aligned}
\tag{48}
$$

ゆえに,

$$
\frac{\theta_1}{p} \sim 1+\frac{p^2}{6} > 1. \tag{49}
$$

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[3].

$$
\begin{aligned}
\frac{d\theta_1}{dp} &= \left(\frac{1}{1+\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right)^2}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{1-p^2}}+\frac{p^2}{\sqrt{1-p^2}(1-p^2)}\right) \\
&= (1-p^2)\left(\frac{1}{\sqrt{1-p^2}(1-p^2)}\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{1-p^2}}.
\end{aligned}
\tag{50}
$$

$\frac{d\theta_1}{dp} > 0$, $p \to 1$ のとき, $\theta_1 \to \frac{\pi}{2}$. さらに $p \gtrless 0$ のとき 式 (47) より,

$$
\begin{aligned}
U_1^n &= U_1^0 e^{in\theta_1}, \\
U_2^n &= U_2^0 e^{in(\pm\pi-\theta_1)}.
\end{aligned}
\tag{51}
$$

[3] $\arctan x$ 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,

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

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

$$U_1^n = U_1^0(\cos n\theta_1 + i \sin n\theta_1). \tag{52}$$

よって,

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}[U_1^n] &= U_1^0 \cos n\theta_1, \\ \mathrm{Im}[U_1^n] &= U_1^0 \sin n\theta_1. \end{aligned} \tag{53}$$

U_2 は

$$\begin{aligned} U_2^n &= U_2^0 e^{in(\pi-\theta_1)} \\ &= U_2^0 e^{in\pi} e^{-in\theta_1} \\ &= (-1)^n U_2^0 (\cos n\theta_1 - i \sin n\theta_1). \end{aligned} \tag{54}$$

よって,

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}[U_2^n] &= (-1)^n U_2^0 \cos n\theta_1, \\ \mathrm{Im}[U_2^n] &= (-1)^{n+1} U_2^0 \sin n\theta_1. \end{aligned} \tag{55}$$

これらを図示すると図 2 の様になる.

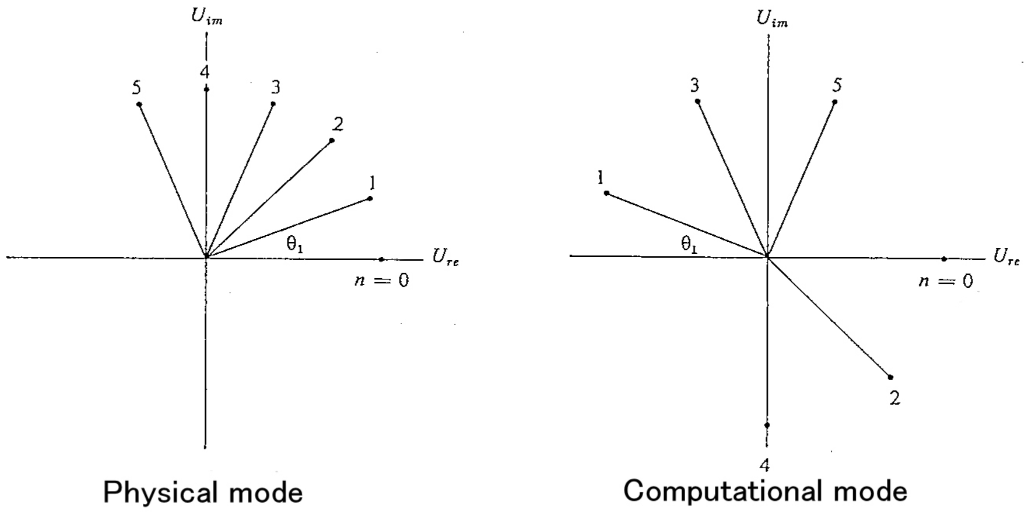

図 2: $\theta_1 = \frac{\pi}{8}$, 初期において $\mathrm{Im}(U_1^0) = 0, \mathrm{Im}(U_2^0) = 0$ としたときのリープフロッグスキームの物理モード (左) と計算モード (右) の位相の変化. U_1 の方は n が増えると反時計回りに動いていく. U_2 の方は $+$ と $-$ が交互に入れ替わってしまう.

Case2. $|p| = 1$ **のとき**

$$\lambda_1 = \lambda_2 = ip \tag{56}$$

なので,

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1. \tag{57}$$

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 Case.1 の場合から $p \to \pm 1$ の極限を考える．すると，θ_1 の位相は,

$$\begin{aligned} \theta &= \arctan\left(\frac{\lambda_\mathrm{i}}{\lambda_\mathrm{r}}\right), \\ \tan\theta_1 &= \frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to \infty \quad (p \to 1). \\ \tan\theta_1 &= \frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to -\infty \quad (p \to -1). \end{aligned} \tag{58}$$

同様に θ_2 の位相は,

$$\begin{aligned} \tan\theta_2 &= -\frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to -\infty \quad (p \to 1). \\ \tan\theta_2 &= -\frac{p}{\sqrt{1-p^2}} \to \infty \quad (p \to -1). \end{aligned} \tag{59}$$

よって,

$$\theta_1 = \theta_2 = \pm\frac{\pi}{2} \qquad (p = \pm 1). \tag{60}$$

このとき解はどちらのモードも,

$$U^n = U^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}} \tag{61}$$

となる．

Case3. $|p| > 1$ **のとき**

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= i(p + \sqrt{p^2-1}), \\ \lambda_2 &= i(p - \sqrt{p^2-1}). \end{aligned} \tag{62}$$

括弧の中身が実数であることに注意すれば,

$$\begin{aligned} |\lambda_1| &= |p + \sqrt{p^2-1}|, \\ |\lambda_2| &= |p - \sqrt{p^2-1}| \end{aligned} \tag{63}$$

である. したがって,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| > 1 \qquad & (p > 1), \\
|\lambda_2| > 1 \qquad & (p < -1).
\end{aligned}
\tag{64}
$$

ゆえに, $|p| > 1$ のときの解は不安定になる. $|p|$ が 1 を越えると, 急激に不安定になる. 例えば, $p > 1$ のとき,

$$
\frac{d|\lambda_1|}{dp} = 1 + \frac{p}{\sqrt{p^2 - 1}}. \tag{65}
$$

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,

$$
\theta_1 = \theta_2 = \pm\frac{\pi}{2}. \tag{66}
$$

解は,

$$
\begin{aligned}
U_1^n &= |p + \sqrt{p^2 - 1}|^n U_1^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}}, \\
U_2^n &= |p - \sqrt{p^2 - 1}|^n U_2^0 e^{\pm in\frac{\pi}{2}}.
\end{aligned}
\tag{67}
$$

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.

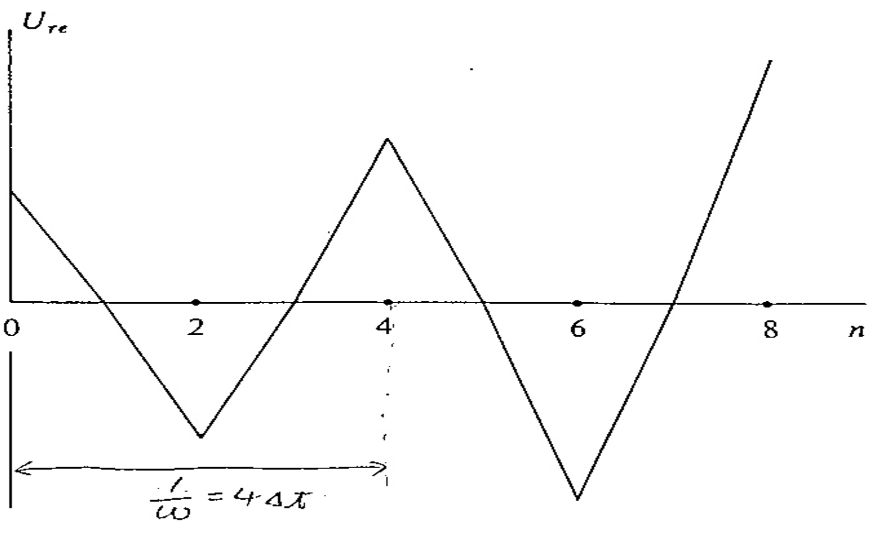

図 3: リープフロッグスキームにおける不安定モードの実部と時間の関係. $|\lambda| = 1.1$ とし, 初期時刻において虚部をゼロとしている.

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, $|\omega\Delta t| \leq 1$ 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が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,

$$
\begin{aligned}
U^{n+1} &= U^n + \Delta t\left(\frac{3}{2}f^n - \frac{1}{2}f^{n-1}\right) \\
&= U^n + i\omega\Delta t\left(\frac{3}{2}U^n - \frac{1}{2}U^{n-1}\right).
\end{aligned} \tag{68}
$$

このとき増幅係数 λ は,

$$
\begin{aligned}
U^n &= \lambda U^{n-1}, \\
U^{n+1} &= \lambda U^n = \lambda^2 U^{n-1}
\end{aligned} \tag{69}
$$

(69) 式を (68) 式に代入して,

$$
\lambda^2 - \left(1 + i\frac{3}{2}p\right)\lambda + i\frac{1}{2}p = 0. \tag{70}
$$

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,

$$
\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{1}{2}\left[1 + i\frac{3}{2}p + \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip}\right], \\
\lambda_2 &= \frac{1}{2}\left[1 + i\frac{3}{2}p - \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip}\right].
\end{aligned} \tag{71}
$$

$p \to 0$ 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. (71) 式の根号の部分をテイラー展開し, 地道に計算しなければならない. Mesinger & Arakawa (1976) によると,

$$
\begin{aligned}
\lambda_1 &= 1 + ip - \frac{1}{2}p^2 + i\frac{1}{4}p^3 - \frac{1}{8}p^4 + \cdots \\
&= \left(1 - \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{8}p^4 - \cdots\right) + i\left(p + \frac{1}{4}p^3 + \cdots\right),
\end{aligned} \tag{72}
$$

$$
\begin{aligned}
\lambda_2 &= \frac{1}{2}ip + \frac{1}{2}p^2 - i\frac{1}{4}p^3 + \frac{1}{8}p^4 - \cdots \\
&= \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{8}p^4 + \cdots\right) + i\left(\frac{1}{2}p - \frac{1}{4}p^3 - \cdots\right)
\end{aligned} \tag{73}
$$

となる. この絶対値を計算すると,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| &= \left(1 + \frac{1}{2}p^4 + \cdots\right)^{\frac{1}{2}} , \\
|\lambda_2| &= \left(\frac{1}{4}p^2 + \cdots\right)^{\frac{1}{2}} .
\end{aligned} \tag{74}
$$

この式を再度テイラー展開すると,

$$
\begin{aligned}
|\lambda_1| &= 1 + \frac{1}{4}p^4 + \cdots , \\
|\lambda_2| &= \frac{1}{2}p + \cdots
\end{aligned} \tag{75}
$$

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. 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.

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