

常微分方程式

室井ちあし

1989/06/24

1 常微分方程式を解く各種スキーム

ここでは、常微分方程式を解く各種 scheme の分類と定義について説明する。

偏微分方程式を解く scheme を考える場合でも、常微分方程式を解く scheme についての知識を得ておくことは必要である。なぜなら

- 偏微分方程式の時間微分項の近似をするとき、そのまま使える。
- スペクトル法では、偏微分方程式は、常微分方程式の組に帰着される。
- Lagrange 的な記述を用いると、常微分方程式の組が出てくる。

といった理由があげられるからである。

次のような常微分方程式を考える。

$$\frac{dU}{dt} = f(U, t), \quad U = U(t) \quad (1)$$

ただし、独立変数 t は時間とする。

時間の grid interval を Δt とする。時間 $n\Delta t$ における U の近似値を $U^{(n)}$ と書く。

$$f^{(n)} \equiv f(U^{(n)}, n\Delta t)$$

ここでの問題は、 $U^{(n)}$, $U^{(n-1)}$, \dots が分かっていた時、どうやって $U^{(n+1)}$ を求めるか、ということである。その答えは解析的には、

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(U, t) dt \quad (2)$$

となる。数値計算では (2) を近似して計算することになる。その近似方法をスキームと呼ぶ。スキームにはたくさんの種類がある。

以下では、まずスキームの分類を行い、そのあと時間微分項を積分するために用いられるいくつかのスキームを定義しよう。

1.1 スキームの分類

スキームは、 n や $n + 1$ といった各時間 level における依存変数を関係付ける。スキームは時間 level を幾つ用いるかで次のように分類される。

- two level scheme : n と $n + 1$ の 2 つを用いたもの。
- three level scheme : 更に $n - 1$ も加え 3 つを用いたもの。

また、そのレベルの使い方からスキームは

- implicit scheme (陰解法)
 $U^{(n+1)}$ の値を決めるために用いる f を計算する際に、 $n + 1$ ステップ目での値 $U^{(n+1)}$, すなわち、これから求められるべきものを用いるスキーム。
- explicit scheme (陽解法)
 f を計算するのに、 n ステップ目までの値のみを使うもの。すなわち、既に求まっているもののみを用いるスキーム。

の 2 つに分けられる。

偏微分方程式系の implicit scheme では、 $U^{(n+1)}$ を求めるために連立方程式を解くことになる為、計算量が膨大になることが多い。しかし、常微分方程式ならば、その操作は比較的容易である。

差分は、格子点と、格子点を使って求めた導関数との関係によって、

- 中心差分 (centered difference)

使用した格子点の中心点における導関数を求めるもの. たとえば

$$\Delta u_{j+\frac{1}{2}} = u_{j+1} - u_j$$

- 非中心差分 (uncentered difference)

格子点の中心ではない点における導関数を求めるもの. たとえば

$$\Delta u_j = u_{j+1} - u_j$$

という2つに分けられる. 中心差分の方が通常良く使われる.

1.2 two level scheme の定義

最初のステップでは, two level scheme しか使えない.

反復しないスキーム¹

反復しない two level scheme は, まとめて

$$\begin{aligned} U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)}) \\ f^{(n)} &\equiv f(U^{(n)}, n\Delta t) \end{aligned} \quad (3)$$

とかける. ただし, スキームには適合性がなければならないから

$$\alpha + \beta = 1$$

である. 表1に主な反復しない two level scheme を示す.

¹仮の値を使わないスキーム

²Euler scheme ともいう.

³一般に two level の uncentered scheme は, 1 次の accuracy を持つ.

⁴backward scheme ともいう.

表 1: 反復しない two level schemes

	種類	(α, β)	中心・非中心	陽・陰	正確度
A1	前進 scheme ²	(1,0)	uncentered	explicit	1次 ³
A2	後退 scheme ⁴	(0,1)	uncentered	implicit	1次 ³
A3	台形 scheme	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	centered	implicit	2次

反復するスキーム

反復するスキームとは前進 scheme を使って $n+1$ ステップでの仮の値を計算し (これを * で表す), 本来 implicit scheme である A2, A3 のスキームに仮の値を代入するものである. こうすることにより, A2, A3 のスキームは explicit となる. 反復すると, 安定性が良くなる.

反復する two level scheme は, まとめて

$$\begin{aligned}
 U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n)} \\
 U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)*}) \\
 f^{(n+1)*} &\equiv f(U^{(n+1)*}, (n+1)\Delta t) \\
 \alpha + \beta &= 1
 \end{aligned} \tag{4}$$

とかける. 表 2 に主な反復する two level scheme を示す.

表 2: 反復する two level schemes

	種類	(α, β)	代入されるスキーム	陽・陰	正確度
A4	松野 scheme ⁵	(0,1)	後退スキーム (A2)	explicit	1次
A5	Heun scheme	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	台形スキーム (A3)	explicit	2次

1.3 three level scheme の定義

$U^{(n+1)}$ を計算するのに, 何等かの形で $U^{(n-1)}$ を使うスキームを three level scheme と呼ぶ. もちろん, 最初のステップでは使えない. また, 自由度が 1 つ増えるため,

⁵Euler-backward scheme ともいう.

computational mode の問題が生じる。¹

主なスキームを表で示す。

表 3: 主な three level schemes

	種類	式	陽・陰	正確度
B1	Leapfrog scheme ²	$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} + 2\Delta t \cdot f^{(n)}$	explicit	2次
B2	Adames-Bashforth scheme	$U^{(n+1)} = U^{(n)} + \Delta t(\frac{3}{2}f^{(n)} - \frac{1}{2}f^{(n-1)})$	explicit	2次 ³

1.4 補足

要は式(2)の積分をいかに正しくやるかであるから、上表の他、Simpson 則を用いたスキーム(これらをまとめて Malne-Simpson scheme という)など、他にもたくさんある。これらは、Young(1968)の論文を参照。

通常気象学では、1次か2次といった低次の accuracy を持つスキームが使われる。この理由は、

- 偏微分方程式では、常微分方程式とは異なり、高次の accuracy を持つスキームを使っても(少なくともこれまでは)余り意味がないとされてきた。常微分方程式では、初期条件として1点での関数及び必要な導関数の値を与えれば十分であり、それで答えが出なかったら、それはスキームが悪いことになる。一方、偏微分方程式では、初期条件を離散的にしか与えなかったことによる誤差が無視出来ない。スキームの時間に関する accuracy だけを上げてても無意味である。ところが、空間に関する accuracy を上げようにも、実際問題としてはそれを定めるだけの初期値のデータ密度がないため無駄、とされたのである。
- 安定な解を得るためには、時間間隔を十分に小さく取らねばならない。この時、誤差は主として空間差分など他の原因で起きており、時間微分項だけが んばって計算しても無意味である。

¹数値計算ノート振動方程式に適用したときのスキームの特性 参照

²気象のモデル作りで広く使われる。

³本来の Adams-Bashforth scheme は、4次の正確度を持つ。

もちろん、だからスキームはどうでもいいのではない。正確度以外の特性にも十分注意を払わねばならない、ということである。

2 semi-Implicit 法

気象業界においては、速やかに変動する現象（雲の発達など）と、緩やかに変動する現象（低気圧の発達など）とが入り交じっている。しかも、この2つの現象は相互に影響を及ぼし合っている。さて、我々に興味があるのは、主として緩やかに変動する現象である。緩やかに変動する現象を観察するためには、長時間積分しなければならない。しかし、方程式を積分するためには、速やかに変動する現象も計算しなければならない。ところが、安定性を保つためには、時間差分 Δt を空間差分に比べ必要以上に小さく取らねばならない。こうすると、時間も金もかかる。なんとか楽をして解を求めよう、多少の誤差には目をつぶろう、どうせ色々な所で誤差が入ってくるのだ、大きく狂わなければいいではないか、というのが以下の話である。

以下、様々なごまかしをする。これが許容誤差範囲内で正しいかどうかは、実際の天気図と照らし合わせてみても分からない。自然現象をモデル化するとき誤差が入ったのか、積分するときにごまかしをしたが効いているのか、判断できないからである。そこで、通常、なにかごまかしをする時には、時間差分を小さく取った真面目な計算を1回行い、これを control とする¹。

2.1 semi-Implicit 法の原理

気象学において、速やかに変動する現象には余り興味がない。しかし、ないと困る。そこで、速い現象はいいかげんに計算し、緩やかに変動する現象は真面目に計算しよう、という考えが浮かぶ。振動方程式

$$\frac{\partial F}{\partial t} = i(\alpha + \beta)F$$

を考える。ここで、 α は速い現象に対応し、 β は遅い現象に対応する。このとき

$$\alpha \gg \beta$$

である。これに対して

$$\frac{F^{(n+1)} - F^{(n-1)}}{2\Delta t} = i\alpha \frac{F^{(n+1)} + F^{(n-1)}}{2} + i\beta F^{(n)}$$

¹これでは意味がよくわからない。

というスキームをくむ。これが大した面倒もなく解けるならば、時間差分 Δt は通常、全部をまじめに計算する場合の 3 ~ 4 倍に取ることができる（これは経験則）ので、有効である。これを

semi-Implicit 法！

という。このスキームの増幅係数を λ とした時、 λ^2 を計算すると

$$\begin{aligned} \text{Physical mode} & : 1 + \frac{4\alpha\beta\Delta t^2\sqrt{1+\alpha^2\Delta t^2}}{1+\alpha^2\Delta t^2} \\ \text{Computational mode}^1 & : 1 - \frac{4\alpha\beta\Delta t^2\sqrt{1+\alpha^2\Delta t^2}}{1+\alpha^2\Delta t^2} \end{aligned}$$

となる。ここで、 $\alpha \gg \beta$ という条件から β の 2 次以上の項を落とした。これより、Physical mode は発散気味、Computational mode は抑制気味であることがわかる。

3 振動方程式に適用したときのスキームの特性

数値解の振舞いは、どのような方程式に対して適用したかによって異なる。ここでは、振動方程式に対して適用した場合を調べてみる。

振動方程式とは、 $f(U, t) = i\omega U$, すなわち

$$\frac{dU}{dt} = i\omega U, \quad U = U(t)$$

という形をした方程式のことである。 ω は実数とする。

この解は、

$$U(t) = U(0)e^{i\omega t}$$

である。離散的な値 $t = n\Delta t$ に対しては

$$U(n\Delta t) = U(0)e^{in\omega\Delta t}$$

となる。

¹数値計算ノート 振動方程式に適用したときのスキームの特性 参照

3.1 特性の調べ方

この方程式の数値解の性質は, von Neumann 法を用いて調べるのが便利である.

増幅係数 λ を見れば

$$\begin{array}{ll} \text{不安定} & > \\ \text{中立} & |\lambda| = 1 \\ \text{減衰} & < \end{array}$$

といえる.

また, 1 タイムステップ毎の位相の変化 θ を見れば, 位相は

$$\begin{array}{ll} \text{進む} & > \\ \text{中立} & \frac{\theta}{\omega\Delta t} = 1 \\ \text{遅れる} & < \end{array}$$

といえる.

以下, 実際のスキームに適用する.

3.2 two level schemes の特性

反復しないスキーム

反復しないスキーム

$$\begin{aligned} U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)}) \\ f^{(n)} &\equiv f(U^{(n)}, n\Delta t) \end{aligned}$$

を振動方程式に適用すれば,

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + i\omega\Delta t (\alpha U^{(n)} + \beta U^{(n+1)}) \quad (5)$$

となる.

以後, 見やすくするため,

$$p \equiv \omega \Delta t \quad (6)$$

と書き, $U^{(n+1)}$ について解けば,

$$U^{(n+1)} = \frac{1 + i\alpha p}{1 - i\beta p} U^{(n)} \quad (7)$$

となる.

よって,

$$\lambda = \frac{1 + i\alpha p}{1 - i\beta p} = \frac{1}{1 + \beta^2 p^2} (1 - \alpha\beta p^2 + ip) \quad (8)$$

である.

各スキームを表にまとめる.

表 4: 反復しない two level schemes

種類	(α, β)	$\lambda, \lambda , \theta$	安定性
Euler scheme	(1,0)	$\lambda = 1 + ip$ $ \lambda = (1 + p^2)^{\frac{1}{2}}$ $= 1 + \frac{1}{2}p^2 + \dots$ $\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan p < 1$	<p>常に不安定. λ を展開した式は一見安定¹のようだが, むやみに適用しても余りうまく行かない. 位相は遅れる. $p = 1$ の時は, $\frac{\theta}{p} = \frac{\pi}{4}$ である.</p>
backward scheme	(0,1)	$\lambda = \frac{1}{1+ip}(1 + ip)$ $ \lambda = (1 + p^2)^{-\frac{1}{2}}$ $\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan p < 1$	<p>Δt の値によらず安定. 特に高い周波数²ω で減衰し, 高周波カットのフィルターとなる. 位相は遅れる. $p = 1$ の時は, $\frac{\theta}{p} = \frac{\pi}{4}$ である.</p>
台形 scheme	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$\lambda = \frac{1}{1+\frac{1}{4}p^2}(1 - \frac{1}{4}p^2 + ip)$ $ \lambda = 1$ $\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1-\frac{1}{4}p^2}$	<p>常に安定. 増幅係数については真の解同様に振舞う.</p>

反復しないスキームのうち, 後退スキームと, 台形スキームは, Δt がどんなに大きくとも, 安定であることがわかる.

反復するスキーム

振動方程式に

$$\begin{aligned}
 U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n)} \\
 U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)*}) \\
 f^{(n+1)*} &\equiv f(U^{(n+1)*}, (n+1)\Delta t) \\
 \alpha + \beta &= 1
 \end{aligned}$$

を代入すれば,

$$\begin{aligned}
 U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + i\omega\Delta t U^{(n)} \\
 U^{(n+1)} &= U^{(n)} + i\omega\Delta t (\alpha U^{(n)} + \beta U^{(n+1)*})
 \end{aligned} \tag{9}$$

¹ $|\lambda| = 1 + O[(\Delta t)^2]$ だから, 辛うじて von Neumann の条件を満たすかに見える.

²高い周波数は, 初期条件に左右されやすく, 異常に大きな値が出やすいため, 実際の計算では, 高い周波数をわざと減衰させたいことが多い.

$U^{(n+1)*}$ を消去して, $p \equiv \omega\Delta t$ とすれば,

$$U^{(n+1)} = (1 - \beta p^2 + ip)U^{(n)}$$

よって,

$$\lambda = 1 - \beta p^2 + ip \quad (10)$$

である.

各スキームの β に具体的な値を代入してみる.

表 5: 反復する two level schemes

種類	β	$\lambda, \lambda $	安定性
松野 scheme	1	$\lambda = 1 - p^2 + ip$ $ \lambda = (1 - p^2 + p^4)^{\frac{1}{2}}$ $\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1-p^2}$ $= 1 + \frac{2}{3}p^2 + \dots$	$ p \leq 1$ (i.e. $\Delta t \leq \frac{1}{ \omega }$) の時, 安定 (条件付き安定 ⁷). 位相は進む. 例えば, $p = 1$ の場合, $\frac{\theta}{p} = \frac{\pi}{2}$ である.
Heun scheme	$\frac{1}{2}$	$\lambda = 1 - \frac{1}{2}p^2 + ip$ $ \lambda = (1 + \frac{1}{4}p^4)^{\frac{1}{2}}$ $= 1 + \frac{1}{8}p^4 + \dots$ $\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1-\frac{1}{2}p^2}$	常に不安定. しかし, $ \lambda = 1 + O[(\Delta t)^4]$ より, 不安定性が弱く, Δt が小さければ十分使える.

特に, 松野 scheme の $|\lambda|$ を微分すれば,

$$\frac{d|\lambda|}{dp} = \frac{p}{(1 - p^2 + p^4)^{\frac{1}{2}}} (1 - 2p^2)$$

となる. よって, Matsuno scheme は, $p = \frac{1}{\sqrt{2}}$ の時, $|\lambda|$ が最少となる. 最も高い周波数を 1 番強く減衰させるため, Matsuno(1966a) に従って, 必要な周波数が $0 < p < \frac{1}{\sqrt{2}}$ となるように時間間隔をとり, backward implicit scheme で高い周波数を落とすということが行われる. このようにして高い周波数を落とすテクニックは, 現在の大気モデルでは, 観測されたデータを近似することによって発生する, 高い周波数のノイズを落とすため, 広く使われている. Matsuno(1966b) によれば, このテクニックは, より高い accuracy を持った scheme でも使える.

⁷松野 scheme では, $\Delta t \leq \frac{1}{|\omega|}$ から明らかのように, 周波数が高い程 Δt についての条件は厳しくなる.

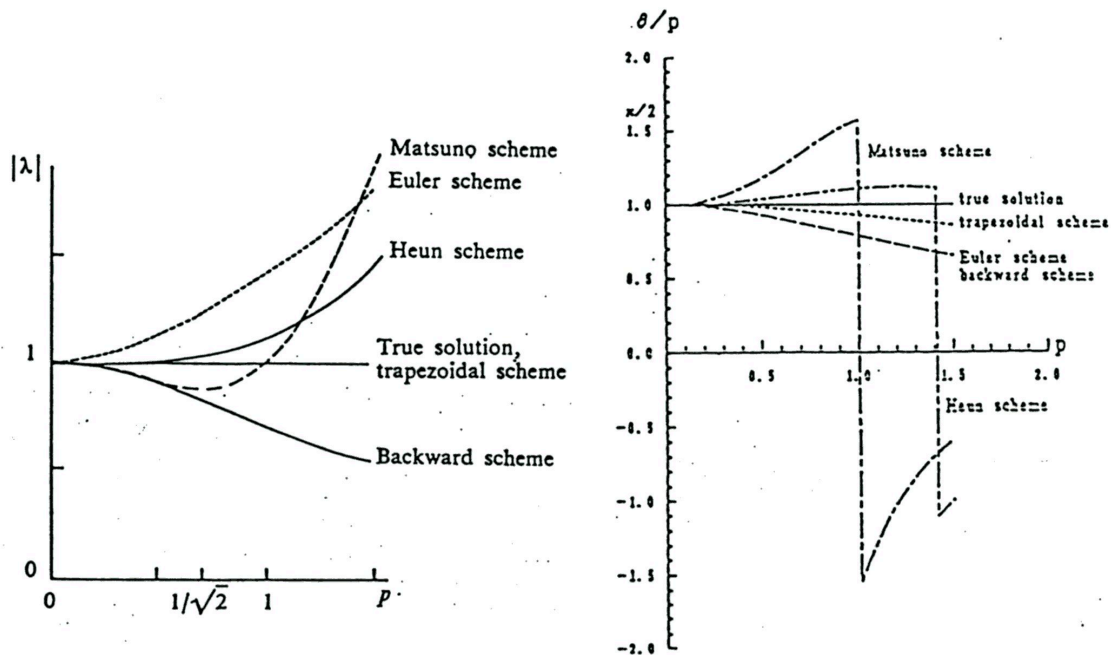


図 1: 5 つの two level scheme と真の解の $|\lambda(p)|$ と θ/p (F.Mesinger & A.Arakawa, 1976)

図 1 は, ここの結果をまとめたものである. $\omega\Delta t \geq 0$ の場合を示している.

振動方程式の差分による位相の狂いは, 余り重要ではない. まず第一に, 安定性に影響しないからであり, 第二には, これらを実際に運動方程式に適用してみると, 通常, 空間差分による位相のずれの方がより大きいからである.

3.3 three level schemes の特性

three level schemes, あるいはもっと高い次元のスキームの問題点は, 物理的に考えれば初期条件は 1 つですむはずなのに, 2 つ以上の初期条件が必要で, これをより低い次元のスキームを使って計算しなければならないということである.

また, 第 2 の問題として, 物理的な解の他に, computational mode と呼ばれる, 数値計算をした事によって発生したモードが現れる. ここでは, これらを扱う.

leapfrog scheme

three level scheme の一例として, leapfrog scheme を考える. 振動方程式に適用す

ると, このスキームは,

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} + i2\omega\Delta t U^{(n)} \quad (11)$$

となる. 増幅係数 λ は

$$U^{(n)} = \lambda U^{(n-1)}, \quad U^{(n+1)} = \lambda^2 U^{(n-1)} \quad (12)$$

である. これを式 (11) に代入すれば

$$\lambda^2 - i2p\lambda - 1 = 0$$

これを解いて, 2 つの増幅係数

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \sqrt{1-p^2} + ip, \\ \lambda_2 &= -\sqrt{1-p^2} + ip \end{aligned} \quad (13)$$

をうる. このように, three level scheme では, λ の解は必ず 2 つ求まってしまう. 一般に, n level scheme では, $n-1$ 個の λ が求まる. 1 つ 1 つの λ の値に対応する解を, モードという.

λ_1 は, $\Delta t \rightarrow 0$ (すなわち, $p \rightarrow 0$) のとき, $\lambda_1 \rightarrow 1$ となる. すなわち, 真の解に近づく. 一般に, この様な λ に対応する解を

physical mode !

という. 一方 λ_2 は, $\Delta t \rightarrow 0$ のとき, $\lambda_2 \rightarrow -1$ となる. すなわち, 真の解には近づかない. この様な λ に対応する解を

computational mode !

という. この computational mode は, 数値計算のみに生ずる解であり, 物理的には全く無意味である.

computational mode について

この2つのモードの関係をはっきりさせるため、簡単な例を考える。振動方程式において、 $\omega = 0$ とすると、

$$\frac{dU}{dt} = 0 \quad (14)$$

となる。この解は

$$U = \text{const.} \quad (15)$$

である。さて、leapfrog scheme を式 (14) に適用すると、

$$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} \quad (16)$$

となる。初期条件として与えられているのは $U^{(0)}$ であるから、式 (16) より、 $U^{(2)}, U^{(4)}, U^{(6)}, \dots$ は決定される。問題は $U^{(1)}, U^{(3)}, U^{(5)}, \dots$ である。2つの極端な場合を表にまとめる。実際には、この2つの中間となる。ここで、式 (14) は線形であるから、解の重ね

表 6: $U^{(0)}$ と $U^{(1)}$ の関係

	たまたま $U^{(1)} = U^{(0)}$	たまたま $U^{(1)} = -U^{(0)}$
すべての n に対して	$U^{(n+1)} = U^{(n)}$	$U^{(n+1)} = -U^{(n)}$
$p = 0$ の時の	$U^{(n+1)} = \lambda_1 U^{(n)}$ に対応	$U^{(n+1)} = \lambda_2 U^{(n)}$ に対応
解はすべて	physical mode となる	computational mode となる

合わせがきく。よって、

$$U^{(n)} = a\lambda_1^n U_1^{(0)} + b\lambda_2^n U_2^{(0)} \quad (17)$$

とかける。ただし、 a, b は定数である。

初期条件は、

$$\begin{aligned} U^{(0)} &= aU_1^{(0)} + bU_2^{(0)}, \\ U^{(1)} &= a\lambda_1 U_1^{(0)} + b\lambda_2 U_2^{(0)} \end{aligned} \quad (18)$$

となる。

a, b を消去すれば

$$U^{(n)} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left[\lambda_1^n (U^{(1)} - \lambda_2 U^{(0)}) - \lambda_2^n (U^{(1)} - \lambda_1 U^{(0)}) \right] \quad (19)$$

となる。

よって、physical mode が強く出るか、computational mode が強く出るかは、この2つの項のうち、どちらが大きいかによる。 $\lambda_1, \lambda_2, U^{(0)}$ は定数であるから、これは $U^{(1)}$ のみによる。もし、うまく $U^{(1)} = \lambda_1 U^{(0)}$ となれば、解はすべて physical mode

となる. 不幸にして, $U^{(1)} = \lambda_2 U^{(0)}$ としてしまえば, 解はすべて computational mode となる.

このように, $U^{(1)}$ の選択は重要であるが, 実際には, 解が分からないから計算しているのであって, 仕方がないから two level scheme, 例えば Euler scheme や, Heun scheme を使って計算することになる. このとき, computational mode がどの程度強く出ているかは分からない. 理論的には, computational mode という観点からは, Heun scheme の方が優れている. また実際には丸め誤差があるから, たとえ初期値を完璧に選んでも, computational mode を完全になくすことはできない. ただ, 実際にやってみると, 大気モデル, 更に一般に偏微分方程式を解くとき, 通常, 丸め誤差による computational mode の出現は余り重要ではないことが分かる.

three level scheme 全般の議論に戻る.

スキームは安定でなければならないこと, computational mode は完全には除去できないことを考えると, λ_1, λ_2 は共に 1 より小さくなければならない. ここで 3 つの場合 ($|p| < 1$, $|p| = 1$, $|p| > 1$) を考えるのが便利である.

これらを以下の表にまとめてみる.

補足説明する.

$|p| < 1$ のとき, leapfrog scheme では位相は進む. ただし, その速度は, Matsuno scheme の $1/4$ である.

θ_1 を微分すると

$$\frac{d\theta_1}{dp} = \frac{1}{\sqrt{1-p^2}}$$

となる. よって, $p \rightarrow 1$ の時, 位相の誤差は急速に増加して, $\frac{\theta_1}{p} \rightarrow \frac{\pi}{2}$ となる.

2 つの解の振舞いを複素平面に表示したものが図 2 である. 但し, $\theta_1 = \frac{\pi}{8}$ としている.

$${}^4\theta_2 = \pi - \theta_1$$

$${}^5\theta_2 = -\pi - \theta_1$$

6 2 つのモードは

$$U^{(n)} = U^{(0)} e^{\pm i n \frac{\pi}{2}}$$

とかける. よって, 複素平面でみると, 位相は 1 ステップ毎に $\pm \frac{\pi}{2}$ 変化する. 真の解では, ± 1 しか変化しない. この様に, $p = 1$ の時は, 位相の誤差は大きい.

⁷不安定性は, $|p|$ が 1 を越えると急速に増加する. ($\frac{d|\lambda_1|}{dp}$ は, $p > 1$ において, 単調に増加する.)

表 7: leapfrog scheme の mode

		physical mode	computational mode
増幅係数		$\lambda_1 = \sqrt{1 - p^2} + ip$	$\lambda_2 = -\sqrt{1 - p^2} + ip$
$\Delta t \rightarrow 0$	$(p \rightarrow 0)$	$\lambda_1 \rightarrow 1$ 真の値に近づく	$\lambda_2 \rightarrow -1$ 真の値に近づかない
$ p < 1$	性質	$ \lambda_1 = 1$ 安定かつ中立	$ \lambda_2 = 1$ 安定かつ中立
	位相	$\theta_1 = \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right)$ $= p + \frac{1}{6}p^3 + \dots$	$\theta_2 = \arctan\left(-\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right)$
	$p > 0^4$	$0 < \theta_1 < \frac{\pi}{2}$	$\frac{\pi}{2} < \theta_2 < \pi$
	$p < 0^5$ $p \rightarrow 0$	$-\frac{\pi}{2} < \theta_1 < 0$ $\theta_1 \rightarrow p$	$-\pi < \theta_2 < -\frac{\pi}{2}$ $\theta_2 \rightarrow \pm\pi - p$
$ p = 1$	性質	$\lambda_1 = ip$ $ \lambda_1 = 1$ 安定かつ中立	$\lambda_2 = ip$ $ \lambda_2 = 1$ 安定かつ中立
	位相 ⁶ $p = \pm 1$	$\theta_1 = \pm\frac{\pi}{2}$	$\theta_2 = \pm\frac{\pi}{2}$
$ p > 1$	性質	$\lambda_1 = i(p + \sqrt{p^2 - 1})$ $ \lambda_1 = p + \sqrt{p^2 - 1} $ $ \lambda_1 > 1$ 不安定 ⁷	$\lambda_2 = i(p - \sqrt{p^2 - 1})$ $ \lambda_2 = p - \sqrt{p^2 - 1} $
	$p > 1$ $p < -1$		$ \lambda_2 > 1$ 不安定
	位相	$\theta_1 = \pm\frac{\pi}{2}$	$\theta_2 = \pm\frac{\pi}{2}$

computational mode の振舞いを、時間の関数として、実数部と虚数部とに分けて示したのが図 3 である。

$|p| > 1$ のとき、表の増幅係数と位相から、2つのモードは、 $p \geq 1$ のとき、

$$\begin{aligned} U_1^{(n)} &= |p + \sqrt{p^2 - 1}|^n U_1^{(0)} e^{\pm i n \frac{\pi}{2}} \\ U_2^{(n)} &= |p - \sqrt{p^2 - 1}|^n U_2^{(0)} e^{\pm i n \frac{\pi}{2}} \end{aligned} \quad (20)$$

となる。

複素平面でみると、2つのモードは1ステップ毎に $\pm\frac{\pi}{2}$ で回転している。ただし、この場合、大きさは単調に増加していく。

不安定なモードを図示すると、例えば図 4 のようになる。このとき、周期は必ず $4\Delta t$

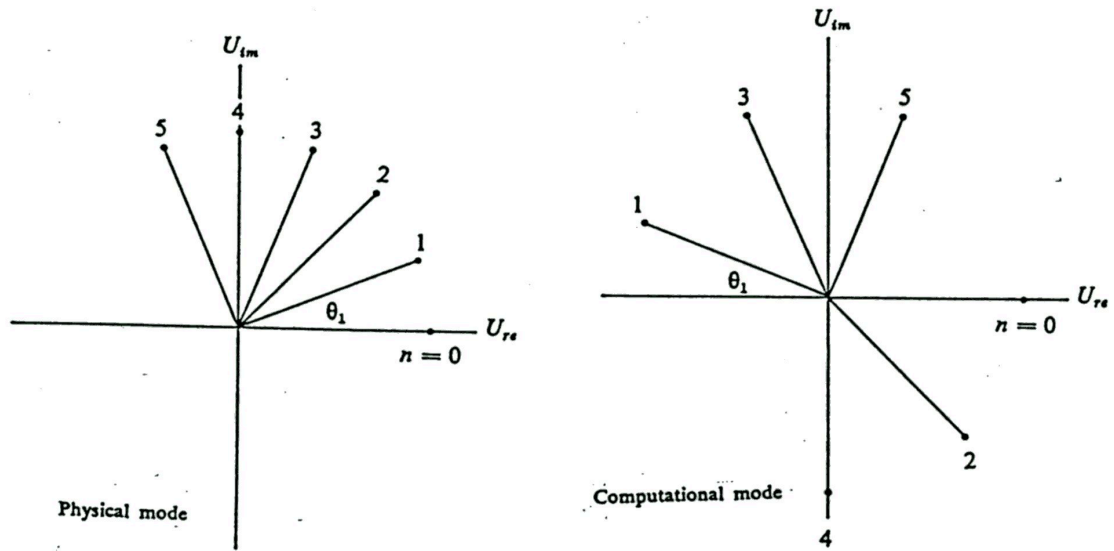


図 2: leapfrog scheme の physical 及び computational mode ($\theta_1 = \frac{\pi}{8}$, 虚部が 0 から始まる) (F.Mesinger & A.Arakawa, 1976)

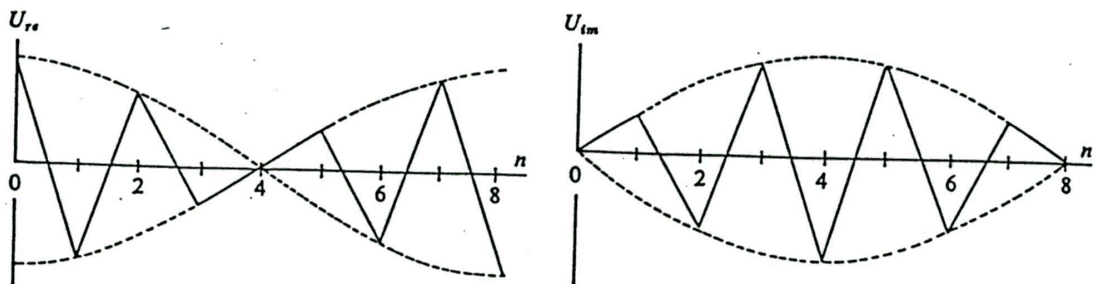


図 3: leapfrog scheme の computational mode の実部と虚部 (F.Mesinger & A.Arakawa, 1976).

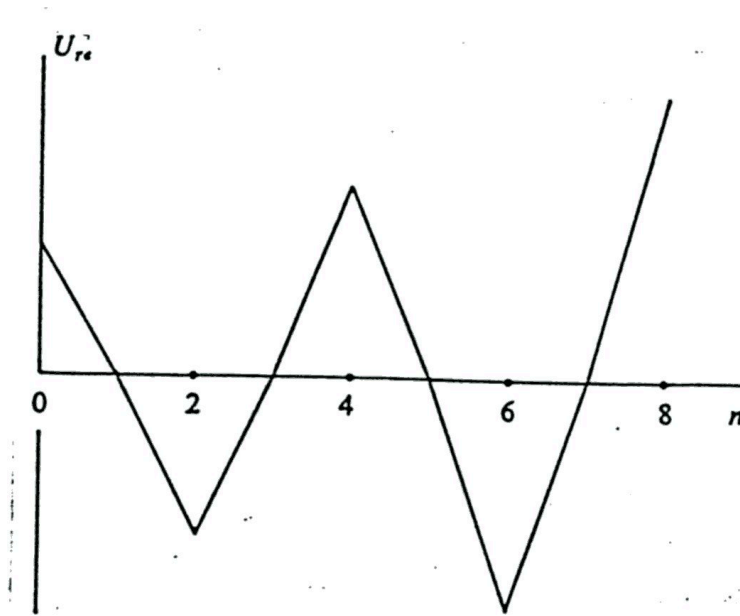


図 4: leapfrog scheme での不安定モードの実部 (但し, $|\lambda| = 1.1$) (F.Mesinger & A.Arakawa, 1976).

である。これが、この不安定性の特徴であり、計算していて不安定になったら、周期を調べれば、これが原因ではないかどうかは分かる。

以上より、leapfrog scheme の欠点は、computational mode が減衰しない事であると言える。非線形方程式では、一般に、computational mode はゆっくりと増加する傾向がある (Lilly, 1965 などを参照)。これを防ぐため、所々に two level scheme や、multi level scheme をいれるということが行われる。

1つの方程式を解くのではなく方程式系を解く場合には、physical mode のみ計算する方法がある。(ここでは触れない。)

Adams-Bashforth scheme

Adams-Bashforth scheme を振動方程式に適用すると、

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} + i\omega\Delta t \left(\frac{3}{2}U^{(n)} - \frac{1}{2}U^{(n-1)} \right) \quad (21)$$

となる。

式 (21) を代入して

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

となる. これより増幅係数は

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2} \left(1 + i\frac{3}{2}p + \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip} \right) \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2} \left(1 + i\frac{3}{2}p - \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip} \right)\end{aligned}\quad (22)$$

と求めることができる. よって, モード毎に整理すると次の表のようになる.

表 8: Adams-Bashforth scheme の mode

	physical mode	computational mode ⁸
増幅係数 ⁹	$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2} \left(1 + i\frac{3}{2}p + \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip} \right) \\ &= 1 + ip - \frac{1}{2}p^2 + i\frac{1}{4}p^3 - \frac{1}{8}p^4 + \dots \\ &= \left(1 - \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{8}p^4 - \dots \right) \\ &\quad + i \left(p + \frac{1}{4}p^3 + \dots \right)\end{aligned}$	$\begin{aligned}\lambda_2 &= \frac{1}{2} \left(1 + i\frac{3}{2}p - \sqrt{1 - \frac{9}{4}p^2 + ip} \right) \\ &= i\frac{1}{2}p + \frac{1}{2}p^2 - i\frac{1}{4}p^3 + \frac{1}{8}p^4 + \dots \\ &= \left(\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{8}p^4 + \dots \right) \\ &\quad + i \left(\frac{1}{2}p - \frac{1}{4}p^3 - \dots \right)\end{aligned}$
$p \rightarrow 0$	$\lambda_1 \rightarrow 1$	$\lambda_2 \rightarrow 0$
$ \lambda $	$\begin{aligned} \lambda_1 &= \left(1 + \frac{1}{2}p^4 + \dots \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= 1 + \frac{1}{4}p^4 + \dots \\ &> 1\end{aligned}$	$\begin{aligned} \lambda_2 &= \left(\frac{1}{4}p^2 + \dots \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2}p + \dots\end{aligned}$

これより, physical mode の増幅係数が 1 より大きいので, このスキームは不安定であることがわかる. しかし, Heun scheme と同様 (4 次の係数は Heun scheme の 2 倍であるが), その不安定性は非常に弱いので, 少し危険と感じたら Δt を小さくすれば, 実用には差し支えない. 実際, このスキームは気象学ではしばしば使われている. (例えば Deardorff の惑星境界層のシミュレーション (Deardorff,1974))

以上の three level scheme の特性についてまとめたのが図 5 である.

この他の方法については, Lilly(1965),Kurihara(1965),Young(1968) などの論文を見ること.

実際のスキームの選択では, ここに記した特性の他に, 計算機の容量なども考えねばならない.

⁸computational mode の増幅係数を十分小さくできるので, Adams-Bashforth scheme では, computational mode は問題とならない.

⁹ p は小さくとる, ということを考えて級数展開する.

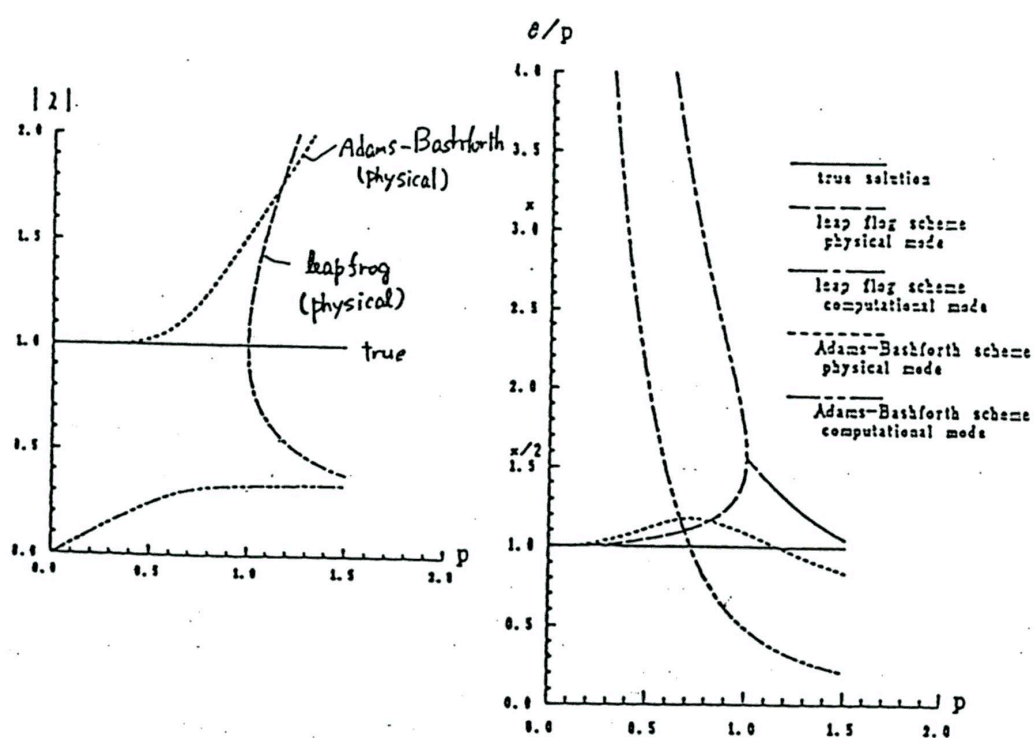


図 5: three level scheme と真の解の $|\lambda|$ と θ/p .

4 摩擦方程式に適用したときのスキームの特性

適用する方程式によって、スキームの特性は変わる。ここでは、摩擦方程式に適用したときの、スキームの特性を考える。ただし、摩擦方程式とは、

$$\frac{dU}{dt} = -\kappa U, \quad U = U(t), \quad \kappa > 0 \quad (23)$$

という方程式である。応用としては、速度に比例した摩擦力が出て来る場合（地面付近の境界層など）、熱伝導方程式をこれへ帰着させる場合などがある。

この一般解は、

$$U(t) = U(0)e^{-\kappa t} \quad (24)$$

である。すなわち、この解は、実数部も虚数部も時間と共に指数的に減少する。

ここへ様々なスキームを適用したときの性質を、von Neumann 法で解析する。

4.1 two level scheme の特性

反復しないスキーム

反復しないスキーム

$$\begin{aligned} U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)}) \\ f^{(n)} &\equiv f(U^{(n)}, n\Delta t) \\ \alpha + \beta &= 1 \end{aligned}$$

を摩擦方程式に代入すれば、

$$U^{(n+1)} = U^{(n)} - \kappa\Delta t (\alpha U^{(n)} + \beta U^{(n+1)}) \quad (25)$$

となる。ここで、

$$K \equiv \kappa\Delta t \quad (26)$$

とかけば、

$$U^{(n+1)} = \frac{1 - \alpha K}{1 + \beta K} U^{(n)} \quad (27)$$

となる。各スキームを以下の表に示す。

表 9: 反復しない two level schemes

種類	(α, β)	性質
Euler scheme	$(1, 0)$	$0 < K \leq 2$ で安定 解は $K < 1$ で振動しない
backward scheme	$(0, 1)$	$K > 0$ で安定 解は振動しない
台形 scheme	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$K > 0$ で安定 解は $K < 2$ で振動しない

反復するスキーム

反復するスキーム

$$\begin{aligned}
 U^{(n+1)*} &= U^{(n)} + \Delta t \cdot f^{(n)} \\
 U^{(n+1)} &= U^{(n)} + \Delta t (\alpha f^{(n)} + \beta f^{(n+1)*}) \\
 f^{(n+1)*} &\equiv f(U^{(n+1)*}, (n+1)\Delta t) \\
 \alpha + \beta &= 1
 \end{aligned}$$

を考えると,

$$U^{(n+1)} = (1 - K + \beta K^2)U^{(n)} \quad (28)$$

となる. 同様に表にまとめる.

表 10: 反復する two level schemes

種類	β	性質
Matsuno scheme	1	$0 < K \leq 1$ で安定 解は振動しない
Heun scheme	$\frac{1}{2}$	$0 < K \leq 2$ で安定 解は振動しない

Matsuno, Heun 両スキームは, K が十分小さければ安定である.

4.2 three level scheme の特性

次に, three level scheme について以下の表にまとめる.

表 11: three level schemes

	leapfrog scheme	Adams-Bashforth scheme
式	$U^{(n+1)} = U^{(n-1)} - 2KU^{(n)}$ $\lambda^2 + 2K\lambda - 1 = 0$	$U^{(n+1)} = U^{(n)} - K(\frac{3}{2}U^{(n)} - \frac{1}{2}U^{(n-1)})$ $\lambda^2 - (1 - \frac{3}{2}K)\lambda - \frac{1}{2}K = 0$
physical mode $K \rightarrow 0$	$\lambda_1 = -K + \sqrt{1 + K^2}$ $\lambda_1 \rightarrow 1$	$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{2}K + \sqrt{1 - K + \frac{9}{4}K^2} \right)$ $\lambda_1 \rightarrow 1$
computational mode $K \rightarrow 0$	$\lambda_2 = -K - \sqrt{1 + K^2}$ $\lambda_2 \rightarrow -1$	$\lambda_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{2}K - \sqrt{1 - K + \frac{9}{4}K^2} \right)$ $\lambda_2 \rightarrow 0$
安定性	$K > 0$ で $\lambda_2 < -1$ computational mode は常に不安定. 摩擦方程式には適さない.	K が十分小さければ安定 (computational mode は落ちる)

特に, leapfrog scheme の不安定性を, 簡単な例で図示する. U は実数で, $U^{(1)} = U^{(0)}$ とする (図 6). 破線を, 真の解とする. 真の解, $U^{(1)}, U^{(0)}$ が分かっているので, $\frac{dU}{dt} = -\kappa U$ は, 真の解の, 適当な U の値における接線の傾きに等しいということを利用すれば, 数値解を表す実線が得られる. 点 C の取り方を具体的に説明する. まず, 破線 (即ち, 真の解) 上において, U_{re} の値が点 B と等しくなる点において接線を引く. これが直線 T である. 次に, 線分 AC が直線 T と平行になるように点 C をとればよい. ほかの点も同様にして取る.

図を見ると, AC, BD, CE, ... は, すべて負の傾きを持つ. しかも, BD より DF の方が傾きが大きい. 従って, いつかは (この図では, $n = 6$ の場合) $U_{re} < 0$ となる. こうなると暴走してしまう.

5 方程式が複数の項を含む場合のスキームの選択

方程式が, 振動項と, 摩擦項の両方を含んでいたときは, 例えば leapfrog scheme は摩擦項があるから使えない. こういったときには, 振動項には leapfrog scheme を

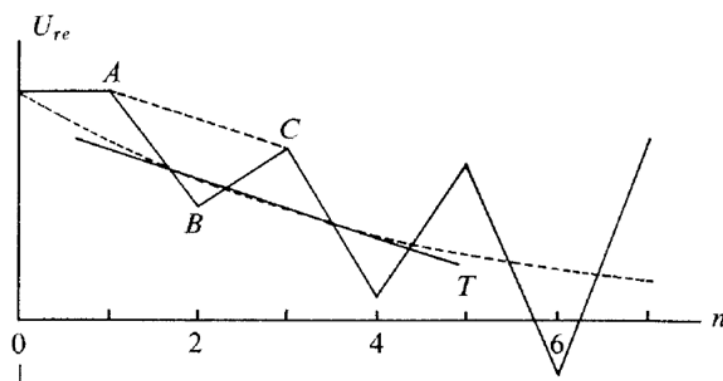


図 6: leapfrog scheme の不安定性の例 (F.Mesinger & A.Arakawa, 1976).

使い, 摩擦項には違うスキームを使えばよい. もちろん, 他の組合せも可能である.

文献

- Deardorff, J. W., 1974: Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. *Boundary-Layer Meteor.*, **7**, 81-106.
- Kurihara, Y., 1965: On the use of implicit and iterative methods for the time integration of the wave equation. *Mon. Wea. Rev.*, **93**, 33-46.
- Lilly, D. K., 1965: On the computational stability of numerical solutions of time-dependent non-linear geophysical fluid dynamics problems. *Mon. Wea. Rev.*, **93**, 11-26.
- Matsuno, T., 1966a: Numerical integrations of the primitive equations by a simulated backward difference method. *J. Meteor. Soc. Japan, Ser. 2*, **44**, 76-84.
- , 1966b: A finite difference scheme for time integrations of oscillatory equations with second order accuracy and sharp cut-off for high frequencies. *J. Meteor. Soc. Japan, Ser. 2*, **44**, 85-88.
- Mesinger, F. and A. Arakawa, 1976: Numerical Methods Used in Atmospheric Models. *WMO/ICSU Joint Organizing Committee, GARP Publications Series*, No.17.

Young, J. A., 1968: Comparative properties of some time differencing schemes for linear and non-linear oscillations. *Mon. Wea. Rev.*, **96**, 357-364.