計算天文学 II 第2回 安定性と陰解法

牧野淳一郎

2000 年 10 月 19 日

1 安定性

前回は、拡散方程式に対するもっとも簡単な差分近似である、空間微分

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} \tag{1}$$

と、時間微分

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} \tag{2}$$

の組合せをプログラムにしてみた。これを動かしてみた人は気がついたと思うが、この方法は $\Delta t/\Delta x^2 > 0.5$ になると 「うまく動かない」。

具体的には、拡散方程式なので本来は次第に滑らかになっていくべきなのに、どんどんガタガタになってしまう。しかも、これは$\Delta t/\Delta x^2 > 0.5$ であれば Δx や Δt をどんなに小さくしても起こる。

まず、なぜそういう振動が起きるのかを考え、それから振動を起こさない方法があるのかどうかを議論していこう。

2 線形安定性解析

さて、まず、なぜ振動が起きるかということだが、これは原理的には差分化された方程式の固有値を求めればわかる。

つまり、u_j を時刻 $t_j = j\Delta t$ での数値解をベクトルとして書いたものだとすると、差分近似は、

$$u_{j+1} = Au_j \tag{3}$$

という形に書ける。ここで A は $(n-1)$ 次元正方行列で、その各要素は差分近似の形から決まる。この場合には、対角要素とその両側一列以外の全ての要素が 0 である 3 重対角行列といわれる形をしている。要素の値は

$$a_{ii} = 1 - 2\delta \quad (0 < i < n) \tag{4}$$

$$a_{i,i-1} = a_{i-1,i} = \delta \tag{5}$$

ここで、 $\delta = \Delta t/\Delta x^2$ である。

この行列は実対称行列なので固有値分解ができて、適当なユニタリ行列 U を持ってきて

$$A = U^{-1}\Lambda U \tag{6}$$

と書ける。ここでΛ は固有値行列、つまり対角要素が固有値でそれ以外が 0 の行列である。

このように分解できるので、 $v = Uu$ とすれば最初の差分近似式は

$$v_{j+1} = \Lambda v_j \tag{7}$$

つまり、

$$v_{i,j+1} = \lambda_i v_{ij} \tag{8}$$

という $n-1$ 個の独立な方程式になって、解も自明に求まる。いうまでもないが、 U の各列は A の固有ベクトルになっている。つまり、U の i 行目を x_i と書くと、

$$\lambda x_i = A x_i \tag{9}$$

である。

不安定性が起きないための条件は、全ての固有値 λ_i の絶対値が 1 を超えないということである。

2.1 固有値を求める

さて、そういうわけで、固有値λがどうなっているか調べてみよう。式 (9) をもともとの差分近似に入れてちょっと変形すると、

$$(\lambda + 2\delta - 1)u_i = \delta(u_{i+1} + u_{i-1}) \tag{10}$$

となる。 x がいつのまにか u に戻っているが深い意味はない。ここで$\delta = \Delta t/\Delta x^2$ である。さらに、

$$\alpha = \frac{\lambda + 2\delta - 1}{\delta} \tag{11}$$

とおいてもうちょっと変形すると、結局

$$u_{i+1} - \alpha u_i + u_{i-1} = 0 \tag{12}$$

となる。

断るまでもないと思うが、これは元の偏微分を変数分離して空間方向の関数についての常微分方程式を導くのとほとんど同じ操作になっている。これを u_i についての差分方程式と見て解を求めることを考える。

線形差分方程式なので、解は $u_i = Cp^i$ の形である。これを代入すると

$$p^2 - \alpha p + 1 = 0 \tag{13}$$

解は

$$p = \frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \tag{14}$$

となる。

真面目にやるには境界条件を満たす固有ベクトルをもとめないといけないが、面倒なので無限遠境界の場合を考える。この時、 p が実数のものはどちらかで無限大に発散するのでよろしくないので、複素数の場合を考える。この時は $|p| = 1$ になっているので無限遠でも発散しない。

なお、有限の固定境界の場合も結局境界条件を満たすような解を作るためには p が複素数でないといけないことがすぐにわかる。このため、 $|\alpha| < 2$ だけを考えればよい。

このとき、式 (11) は

$$\lambda = 1 - (2 - \alpha)\delta \tag{15}$$

と書き直せる。$\delta > 0$ なので、$|\alpha| < 2$ なるある α について $|\lambda| < 1$ であるためには、結局

$$\delta < \frac{2}{2 - \alpha} \tag{16}$$

を満たせば良く、任意のα についてなり立つためには

$$\delta < \frac{1}{2} \tag{17}$$

つまり

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} \tag{18}$$

であればいいことになる。

上でやったことは、結局空間方向をフーリエ級数展開して、各空間波長に対する時間発展が安定である (減衰していく) ことを要求しているのと同じである。このようなやり方を von Neumann の方法による安定性解析という。

2.2 「直観的」説明

上の議論からわかることは、不安定条件に関係する α の値は実際には$\alpha = -2$ だけで、それ以外の α からはもっと緩い条件しかでない。 $\alpha = -2$ は $p = -1$ に対応するので、これは結局 u_i と u_{i+1} で値が逆転するようなパターンである。そのようなパターン (モード) が 1 ステップ計算するとどうなるかをもう一度もとの差分式に戻って書き直してみると、結局

$$u_{i,j+1} = (1 - 4\Delta t/\Delta x^2)u_{ij} \tag{19}$$

となる。括弧内の絶対値が 1 より大きいと、パターンがどんどん成長していってめちゃくちゃな答になるわけである。括弧内の絶対値が 1 より小さいためには、

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} \tag{20}$$

であればよく、前節の結果と同じである。このように、偏微分方程式の場合には大抵もっとも波長の短いモードが減衰できるかどうかで安定性が決まる。

3 陰解法

前節の議論から、先週作ったプログラムでまともな答が求まるためには、$\Delta t/\Delta x^2 < 1/2$ でないといけないということがわかった。これは結構厳しい条件である。というのは、空間刻みの数を増や

すと、その 2 乗に比例して時間刻みの数を増やさないといけないので、全体としては空間刻みの数の 3 乗に比例して計算時間がかかるということになるからである。まあ、最近の計算機は速いので待てなくもないかもしれないが、もうちょっとなんとかならないかという気もする。

実は、なんとかなる方法というのはある。これが陰解法 (implicit method) というものである。拡散方程式の場合、もっとも簡単な陰解法は、空間微分に u_j ではなく u_{j+1} のほうを使う、つまり、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{\Delta x^2} \tag{21}$$

というものを使うというだけである。時間微分は同じものですます。差分公式としてまとめて書くと、

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{\Delta x^2} \tag{22}$$

となる。先週の方法では、 $u_{i,j+1}$ は左辺に単独で現れ、右辺は時刻 j の項だけだったので、$u_{i,j+1}$を直接計算できた。このように、直接計算できる方法のことを陽解法 explicit method という。これに対し、上に書いた方法では時刻 $j+1$ の項が右辺に複数現れているので、これは全体として u_{j+1} についての線形連立方程式になっている。このように、新しい時刻での解が代数方程式を解かないと求められない方法のことを陰解法という。

線形連立方程式を解かないといけないのはもちろん面倒なわけだが、それだけのことはある。先ほどと全く同じように δ とか λ を定義すると、両者の関係が今度は

$$\lambda = \frac{1 + \alpha\delta}{1 + 2\delta} \tag{23}$$

となる。したがって、 $|\alpha| < 2$ なる任意の α と $\delta > 0$ なる任意の δ について、 $|\lambda| < 1$ が満たされているのである。つまり、どんなに Δt を大きくとっても、決して不安定にならない。この性質を無条件安定という。この場合には、安定性ではなくて計算精度の観点から Δt を決められることになり、だいぶましである。

3.1 3 重対角行列を解く

陽解法と同じように行列で書いてみると、

$$Au_{j+1} = u_j \tag{24}$$

で、

$$a_{ii} = 1 + 2\delta \tag{25}$$

$$a_{i,i-1} = a_{i-1,i} = -\delta \tag{26}$$

ということになる。A は δ の符号が違うだけで前と同じ三重対角行列になっている。行列 (以下、線形連立方程式のことを単に行列ということがある) を解くのは例えばガウスの消去法では計算量が一般には次元の 3 乗になるので嬉しくないが、三重対角の場合には計算量が次元数に比例する。前進消去で消さないといけない項が常に 1 つだけだからである。

具体的には、a_{ii} を ad, a_{ii-1} を al, a_{ii+1} を ad、右辺の値を b と表して、前進消去の部分が、

```
double c = al[i]/ad[i-1];
ad[i] -= c*au[i-1];
b[i] -=  c*b[i-1];
```

というだけである。後退代入も、 au のところだけを消せばいいので

```
        b[i] = (b[i]-au[i]*b[i+1])/ad[i];
```

というふうに一つ下の値を引くだけになる。

一応、3 重対角行列を解くプログラム全体を与えておくと、

```
void solve_tridiagonal(double ad[],
                       double al[],
                       double au[],
                       double b[],
                       int n)
{
    int i;
    for(i=1;i<n;i++){
        double c = al[i]/ad[i-1];
        ad[i] -= c*au[i-1];
        b[i] -=  c*b[i-1];
    }
    b[n-1] /= ad[n-1];
    for(i=n-2;i>=0;i--){
        b[i] = (b[i]-au[i]*b[i+1])/ad[i];
    }
}
```

となる。

係数の ad 等を計算して、1 ステップ進める関数全体は、

```
void push_system(double u[],
                 double ad[],
                 double au[],
                 double al[],
                 int nx,
                 double dx,
                 double dt)
{
      double delta = dt/(dx*dx);
      int i;
      for(i=0;i<nx-1;i++){
          ad[i] = 1 + 2*delta;
          al[i] = au[i] = -delta;
      }
      solve_tridiagonal(ad, al, au, u+1, nx-1);
}
```

である。

4　高精度の方法

さて、前節の簡単な陰解法は無条件安定で大変結構なのであるが、時間刻みを大きくとれるとなると、今度は計算精度のほうが気になってくる。空間方向の微分は 2 次精度で、テイラー展開の 2 次の項までが正しく入っているのに対し、時間微分は 1 次精度にしかなっていないからである。

なお、上の 1 次の陽解法のことを 1 次の前進差分、陰解法のことを 1 次の後退差分ということがある。

時間方向の精度をあげる一つの方法は、これまでに見てきた 2 つの方法を混ぜて使うことである。つまり、

$$\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{\Delta t}=\frac{u_{i+1,j+1}-2u_{i,j+1}+u_{i-1,j+1}}{2\Delta x^2}+\frac{u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}}{2\Delta x^2} \tag{27}$$

この方法をクランク ・ニコルソン法という。これは時間方向に対称な形になっている。この方法では、時間方向も 2 次精度にすることができる。

5　レポート課題

1 と 2 は必須。後はオプション。 プログラムが必要なものはプログラムを提出すること。

1. メインプログラムを付け加えて、1 次の陰解法のプログラムを完成し、$\Delta t/\Delta x$ をいろいろ変えて安定に計算できることを確認せよ。
2. クランク ・ニコルソン法が無条件安定であることを証明せよ。
3. クランク ・ニコルソン法のプログラムを作り、上と同様に安定であることを確認せよ。
4. クランク ・ニコルソン法の誤差が $\Delta t, \Delta x$ のそれぞれ何乗になっているか、 $\Delta t, \Delta x$ をいろいろ変えてプログラムを走らせて結果を厳密解と比べることで調べよ。
5. クランク ・ニコルソン法が時間方向 2 次精度であることを証明せよ。
6. 前進差分、クランク ・ニコルソン法、後退差分は、 時刻 j と $j+1$ での空間微分の混ぜ方を変えているだけである。これらすべてを統一的に計算できるプログラムを作成し、正しく動くことを確認せよ。
7. さらに、周期境界の場合も扱えるようにプログラムを拡張せよ。3 重対角行列の処理の部分をどう変えればいいか ？

6　次週予告

順番ではモンテカルロ法となっているが、これはちょっと飛ばして楕円型方程式を扱う。なお、来週は牧野はいないが、資料はつくってレポート課題は出すのでそのつもりで。資料は講義時までには準備しておく。