

時間差分スキームのまとめ

振動方程式

$$\frac{dU}{dt} = i\pi U, \quad U(0) = 1 \quad (1)$$

について, 様々な時間差分スキームを適用して数値的に計算した結果をまとめる. 計算は全て単精度で行い, 計算時間は $0 \leq t \leq 4$ とした. グラフは実線が数値解, 破線が解析解を表す. なお $p = \pi\Delta t$ とする.

オイラースキーム

式(1)にオイラースキームを用いて差分化した式は

$$U^{n+1} = (1 + ip)U^n.$$

よって増幅係数は

$$\lambda = 1 + ip.$$

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果(それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目を計算した値)を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	1.4827092	1.0019721	1.0019720	-1.63158774E-2
4×10^{-2}	1.00000000	2.1842029	1.0078648	1.0078648	-2.80020535E-2

時間の刻み幅が2倍になると, 絶対誤差が約2倍になっている. これは誤差が $O(\Delta t)$ のオーダーを持つ事による. 増幅係数の1からのずれは約4倍になっている. これは $|\lambda| = 1 + O(\Delta t^2)$ だからである. また

$$\frac{\theta}{p} \approx 1 - \frac{1}{3}p^2 < 1$$

となるから、数値解の位相は解析解の位相より遅く進んでいる。このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ (図2) を参照。

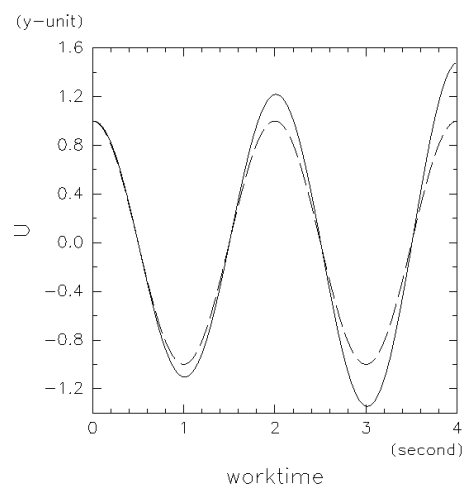


図 1: オイラースキームを用いて、 $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果。

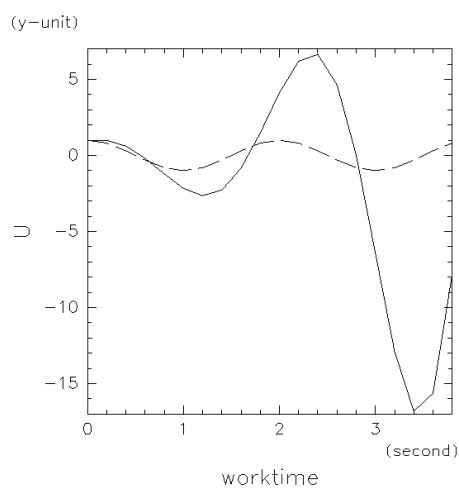


図 2: オイラースキームを用いて、 $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果。

後退スキーム

式(1)に後退スキームを用いて差分化した式は

$$U^{n+1} = U^n + ipU^{n+1}.$$

増幅係数は

$$\lambda = \frac{1 + ip}{1 + p^2}.$$

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果(それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目を計算した値)を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	0.67425215	0.99803191	0.99803185	1.99537575E-2
4×10^{-2}	1.00000000	0.45586878	0.99219650	0.99219662	4.25848961E-2

時間の刻み幅を 2 倍にすると, 絶対誤差が約 2 倍になる. これは誤差が $O(\Delta t)$ のオーダーを持つ事による. 増幅係数の 1 からのずれが約 4 倍になっている. これは増幅係数が

$$|\lambda| = \frac{1}{\sqrt{1 + p^2}} \approx 1 - \frac{1}{2}p^2$$

となっているからである. 位相については

$$\frac{\theta}{p} \approx 1 - \frac{1}{3}p^2 < 1$$

となるので, オイラスキームと同様に数値解は解析解よりも遅くなる. このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ(図 4)を参照.

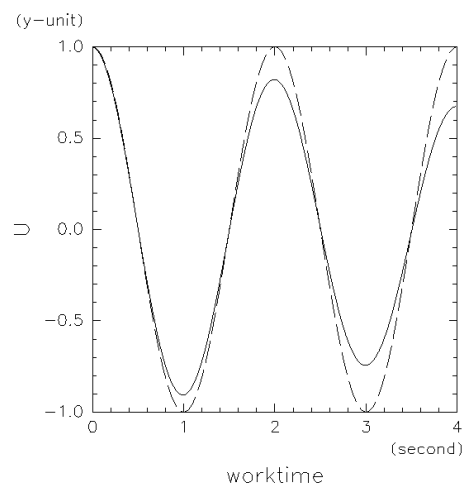


図 3: 後退スキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果.

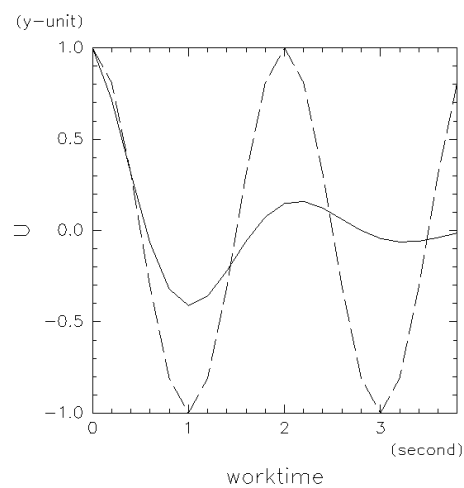


図 4: 後退スキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果.

台形スキーム

式 (1) に台形スキームを用いて差分化した式は

$$U^{n+1} = U^n + \frac{i p}{2} (U^n + U^{n+1}).$$

増幅係数は

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

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果 (それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目を計算した値) を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	1.0000066	1.0000000	1.0000000	5.88953495E-4
4×10^{-2}	1.00000000	0.99986190	1.0000000	1.0000000	2.35441327E-3

時間の刻み幅を 2 倍にすると, 絶対誤差が約 4 倍になる. これは $O(\Delta t^2)$ のオーダーを持つ事による. ただし解が 1 や -1 となるころでは誤差が理論通りの精度にならない. 解析解と数値解の値が近いので, グラフでは解析解の線と数値解の線が重なってしまう. 位相については

$$\frac{\theta}{p} \approx 1 - \frac{1}{12}p^2 + O(p^4) < 1$$

となるので数値解の位相は解析解の位相より遅くなる. このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ (図 6) を参照.

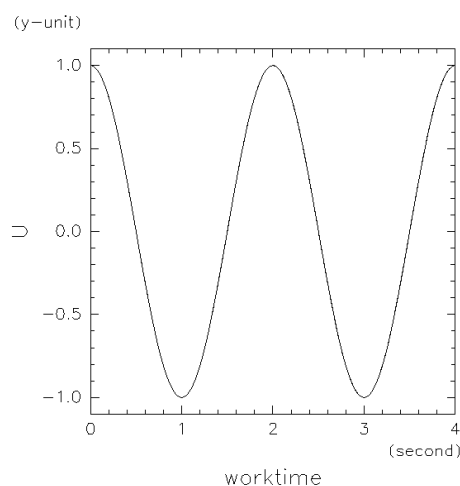


図 5: 台形スキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果.

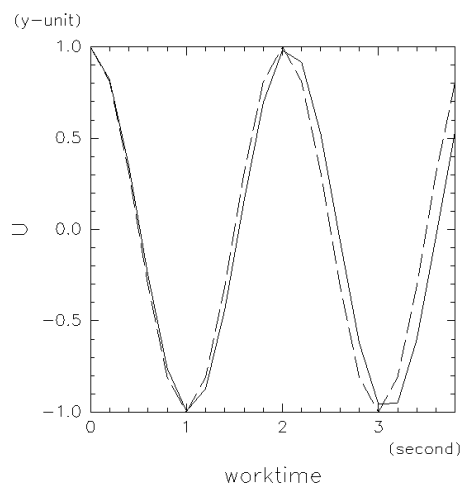


図 6: 台形スキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果.

松野スキーム

式 (1) に松野スキームを用いて差分化した式は

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

増幅係数は

$$\lambda = 1 + ip - p^2.$$

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果 (それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目を計算した値) を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	0.67398202	0.99803185	0.99803191	1.32847726E-2
4×10^{-2}	1.00000000	0.45291054	0.99219859	0.99219859	1.74482167E-2

時間の刻み幅を 2 倍にすると, 絶対誤差は大きくなるものの 2 倍にはならなかった. 松野スキームでは絶対誤差が理論通りにならないケースがある. 増幅係数の 1 からのずれが約 4 倍になっている. これは増幅係数の絶対値が

$$|\lambda| = \sqrt{1 - p^2 + p^4} = 1 - O(\Delta t^2)$$

となるためである. 位相については

$$\frac{\theta}{p} \approx 1 + \frac{2}{3}p^2 + O(p^3) > 1$$

となるので数値解の位相は解析解の位相より速くなる. このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ (図 8) を参照.

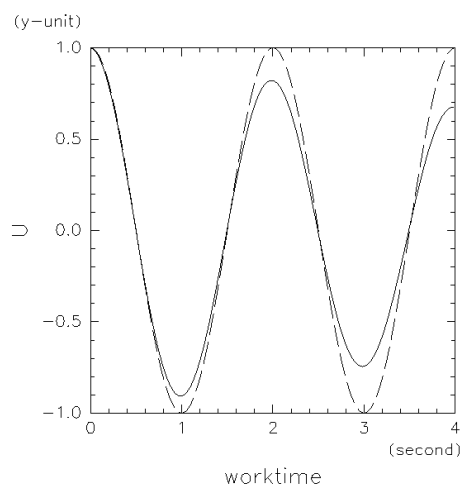


図 7: 松野スキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果.

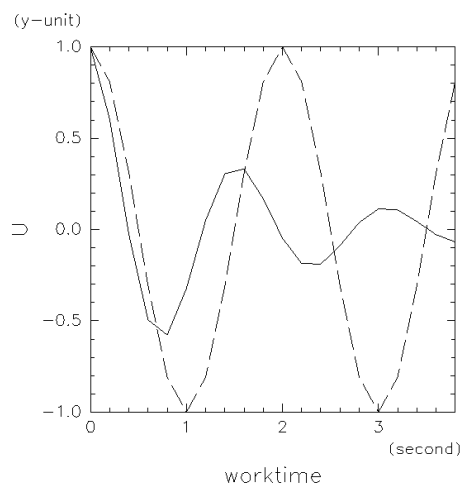


図 8: 松野スキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果.

ホインスキーム

式(1)にホインスキームを用いて差分化した式は

$$U^{n+1} = \left(1 + ip - \frac{p^2}{2}\right) U^n.$$

増幅係数は

$$\lambda = 1 + ip - \frac{p^2}{2}.$$

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果(それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目の値)を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	1.0003552	1.0000020	1.0000019	-1.19614601E-3
4×10^{-2}	1.00000000	1.0025758	1.0000310	1.0000311	-4.83867526E-3

時間の刻み幅を 2 倍にすると, 誤差は約 4 倍になった. これは誤差が $O(\Delta t^2)$ のオーダーを持つ事による. また増幅係数の 1 からのずれが約 16 倍になっている. これは増幅係数の絶対値が

$$|\lambda| = \sqrt{1 + \frac{1}{4}p^4} \approx 1 + \frac{1}{8}p^4$$

となっているからである. 位相については

$$\frac{\theta}{p} \approx 1 + \frac{1}{6}p^2 + O(p^4) > 1$$

となるので数値解の位相は解析解の位相より速くなる. このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ (図 10) を参照.

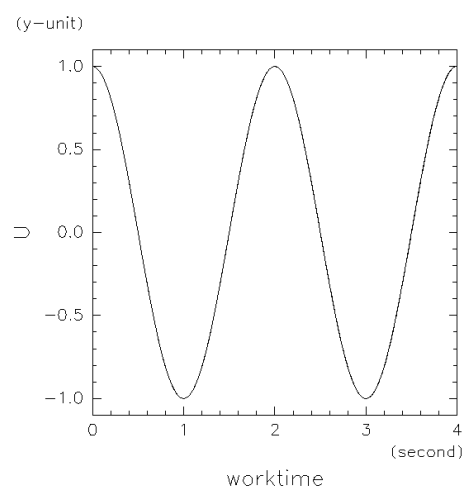


図 9: ホインスキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果.

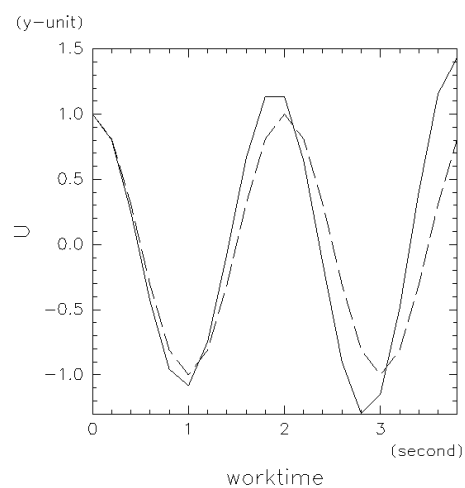


図 10: ホインスキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果.

リープフロッグスキーム

式(1)にリープフロッグスキームを用いて差分化した式は

$$U^{n+1} = U^{n-1} + 2ipU^n.$$

物理モードの増幅係数は

$$\lambda = \sqrt{1 - p^2} + ip.$$

計算モードの増幅係数は

$$\lambda = -\sqrt{1 - p^2} + ip.$$

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果(それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目を計算した値)を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	0.99996626	0.99999309	0.99999994	-1.12247467E-3
4×10^{-2}	1.00000000	0.99946183	0.99990833	0.99999994	-4.76795435E-3

精度を良くするために, U^0 から U^1 を計算するとき台形スキームを用いた. 時間の刻み幅を 2 倍にすると, 絶対誤差は約 4 倍になる. これは誤差が $O(\Delta t^2)$ のオーダーを持つことによる. 台形スキームのときと同じように, 解が 1, -1 になるころでは誤差が理論通りにならない. 増幅係数はステップごとに 1 を中心に振動するような振る舞いをする¹. 具体的には, 刻み幅が $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ のとき, 増幅係数は $\lambda = 1 \pm 5.0 \times 10^{-5}$ となり, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ のとき, 増幅係数は $\lambda = 1 \pm 5.0 \times 10^{-4}$ となる. これはわずかに計算モードの影響があるからである. 位相については

$$\frac{\theta}{p} = \arctan\left(\frac{p}{\sqrt{1-p^2}}\right) \approx 1 + \frac{p^2}{6} > 1$$

となるので数値解の位相は解析解の位相より速くなる. このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ(図 12)を参照.

¹ 「振動するような」と書いたのは, 基本的に振動するが, たまに 2 ステップ連続で 1 を下回ったり, 上回ったりする場合があるからである.

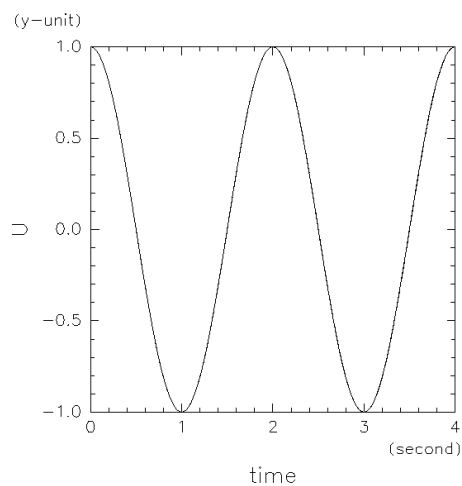


図 11: リープフロッグスキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果.

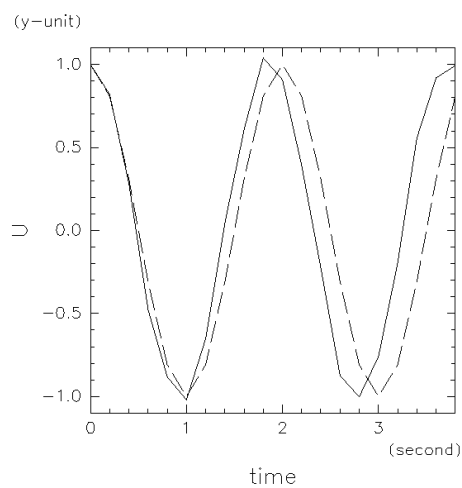


図 12: リープフロッグスキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果.

アダムス・バッシュフォーススキーム

式(1)に二次のアダムス・バッシュフォーススキームを用いて差分化した式は

$$U^{n+1} = U^n + ip \left(\frac{3}{2}U^n - \frac{1}{2}U^{n-1} \right).$$

物理モードの増幅係数は

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

計算モードの増幅係数は

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

$\Delta t = 2 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 4 \times 10^{-2}$ で計算した結果(それぞれ 200 ステップ目, 100 ステップ目を計算した値)を以下に示す. ただし, 絶対誤差については位相のずれの影響を少なくするため, それぞれ 30 ステップ目, 15 ステップ目の値を表記している.

Δt	解析解	数値解	増幅係数	増幅係数解析値	絶対誤差
2×10^{-2}	1.00000000	1.0005734	1.0000039	1.0000038	-2.87300348E-3
4×10^{-2}	1.00000000	1.0030313	1.0000644	1.0000644	-1.12338066E-2

精度を良くするために, U^0 から U^1 を計算するとき台形スキームを用いた. 時間の刻み幅を 2 倍にすると, 誤差は約 4 倍になる. これは誤差が $O(\Delta t^2)$ のオーダーを持つことによる. ただし, 解が 1, -1 になるところでは誤差が理論通りにならない. また増幅係数の 1 からのずれが約 16 倍になっている. これは物理モードの増幅係数の絶対値が

$$|\lambda| = 1 + O(\Delta t^4)$$

となっているからである. なお $|p| < 1$ であるから計算モードは減衰するので, 計算モードの増幅係数は無視できる. 位相については

$$\frac{\theta}{p} \approx 1 + \frac{5}{12}p^2 + O(p^3) > 1$$

となるので²数値解の位相は解析解の位相より速くなる. このことは $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で計算した結果のグラフ(図 14)を参照.

²導出は付録参照.

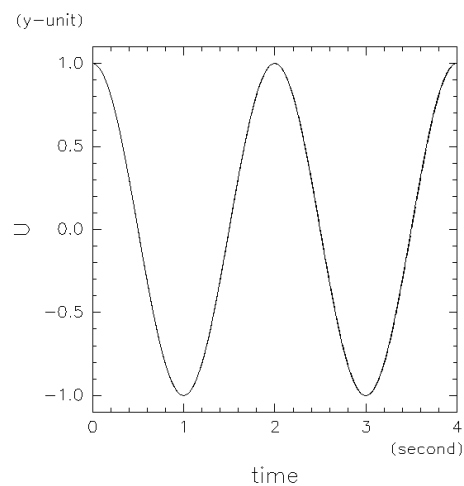


図 13: アダムス・バッシュフォーススキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-2}$ で 200 ステップ計算した結果.

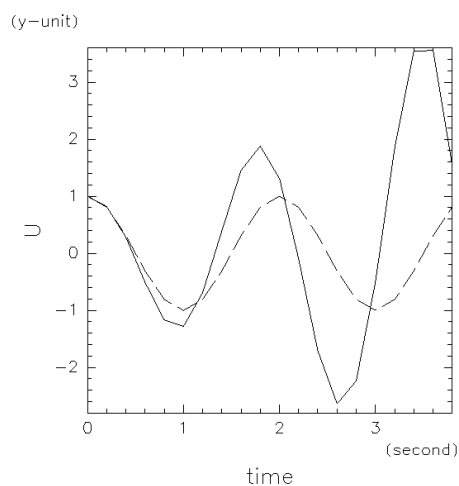


図 14: アダムス・バッシュフォーススキームを用いて, $\Delta t = 2 \times 10^{-1}$ で 20 ステップ計算した結果.

付録: アダムス・バッシュフォーススキームの位相比

ここでは二次のアダムス・バッシュフォーススキームの物理モードの位相比を導出する.

物理モードの増幅係数は

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

である. 今, $|p| < 1$ であることより, 根号の部分をテイラー展開し計算すると,

$$\lambda = 1 + ip - \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{4}ip^3 - \frac{1}{4}p^4 + \dots$$

実部と虚部に分けると,

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

位相比 θ/p を求める.

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p} \arctan \left(\frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}} \right) \\ &= \frac{1}{p} \arctan \left(\frac{p + \frac{1}{4}p^3 + \dots}{1 - \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{4}p^4 \dots} \right) \end{aligned}$$

$|p| < 1$ であるから, () の中は三次までを有効とすると

$$\frac{\theta}{p} \approx \frac{1}{p} \arctan \left(\frac{p + \frac{1}{4}p^3}{1 - \frac{1}{2}p^2} \right).$$

\arctan の () の中身をテイラー展開して

$$\frac{\theta}{p} \approx \frac{1}{p} \arctan \left(p + \frac{3}{4}p^3 + O(p^4) \right).$$

次に, \arctan をテイラー展開して計算すると

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{p} &\approx \frac{1}{p} \left\{ \left(p + \frac{3}{4}p^3 + O(p^4) \right) - \frac{1}{3} \left(p + \frac{3}{4}p^3 + O(p^4) \right)^3 + \frac{1}{5} \left(p + \frac{3}{4}p^3 + O(p^4) \right)^5 + \dots \right\} \\ &\approx \frac{1}{p} \left\{ p + \frac{5}{12}p^3 + O(p^4) \right\} \\ &= 1 + \frac{5}{12}p^2 + O(p^3). \end{aligned}$$