

時間差分スキーム(2)

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。

1 段階のスキームの位相

今、振動方程式の $t = n\Delta t$ のときの解を

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

とする。数値解は増幅係数を λ とすると

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda U^{n-1} \\ &= \lambda^n U^0. \end{aligned}$$

ここで、 λ を極形式で書きなおすと

$$\lambda = |\lambda| e^{i\theta}$$

である。よって、

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda^n U^0 \\ &= |\lambda|^n U^0 e^{in\theta} \end{aligned} \tag{1}$$

である。ここで (1) 式の λ を実部 λ_{re} と虚部 λ_{im} に書き直すと

$$U^n = (\lambda_{re} + i\lambda_{im})^n U^0. \tag{2}$$

また、 $\lambda_{re} + i\lambda_{im} = |\lambda| e^{i\theta}$ より

$$\tan \theta = \frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}.$$

よって、

$$\theta = \arctan \frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}. \tag{3}$$

一方真の解は $p = \omega \Delta t$ とすると,

$$U(n\Delta t) = U(0)e^{inp} \quad (4)$$

故に, 真の解の位相に対する数値解の位相の比は

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}. \quad (5)$$

オイラースキーム

オイラースキームは $\lambda = 1 + ip$ なので (5) 式は

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p} \arctan p \\ &= \frac{1}{p} \cdot \left(p - \frac{1}{3}p^3 + \frac{1}{5}p^5 \cdots \right) \end{aligned}$$

$p \ll 1$ とすると

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

よって, 数値解の位相は真の解に比べて遅く進む¹⁾.

¹⁾ $\arctan x$ のマクローリン展開を求める.

まず $\frac{1}{1-r}$ を求める. $|r| < 1$ のとき $r = 0$ の周りで展開すると

$$\frac{1}{1-r} = 1 + r + r^2 + r^3 + \cdots$$

このとき $r = -t^2$ ($|t| < 1$) とすると

$$\frac{1}{1+t^2} = 1 - t^2 + t^4 - t^6 + \cdots$$

これを $|x| < 1$ である t を 0 から x まで積分すると

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{dt}{1+t^2} &= \int_0^x (1 - t^2 + t^4 - t^6 + \cdots) dt \\ &= x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \cdots \end{aligned} \quad (a.1)$$

ここで $y = \arctan x$ の x 微分を考える. $y = \arctan x$ の定義より

$$\tan y = x$$

後退スキーム

後退スキームは $\lambda = \frac{(1+ip)}{1+p^2}$ なので

$$\begin{aligned}\frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p} \arctan \frac{\frac{p}{1+p^2}}{\frac{1}{1+p^2}} \\ &= \frac{1}{p} \arctan p\end{aligned}$$

となりオイラースキームと同様に数値解の位相は真の解に比べて遅く進む。

台形スキーム

台形スキームは $\lambda = \frac{1}{1+p^2} \left(1 - \frac{1}{4}p^2 + ip\right)$ なので

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1 - \frac{1}{4}p^2}.$$

$p \ll 1$ のとき $p = 0$ の周りで展開すると

両辺を x で微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d \tan y}{dy} \cdot \frac{dy}{dx} &= 1, \\ \frac{1}{\cos^2 y} \cdot \frac{dy}{dx} &= 1, \\ \frac{dy}{dx} &= \cos^2 y.\end{aligned}$$

ここで $\cos^2 y = \frac{1}{1 + \tan^2 y}$ なので

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

よって, $|x| < 1$ のときに

$$\arctan x = \int_0^x \frac{1}{1+t^2} dt. \quad (\text{a.2})$$

(a.1) 式と (a.2) 式から

$$\arctan x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \dots$$

参考:竹野 茂治, 2009, 「勾配から角度を求める展開式」

$$\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1 - \frac{1}{4}p^2} \\
&= \frac{1}{p} \arctan \left\{ p \left(1 + \frac{p^2}{4} + \frac{p^4}{16} + \dots \right) \right\} \\
&= \frac{1}{p} \left\{ \left(p + \frac{p^3}{4} + \frac{p^5}{16} + \dots \right) - \frac{\left(p + \frac{p^3}{4} + \frac{p^5}{16} + \dots \right)^3}{3} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\left(p + \frac{p^3}{4} + \frac{p^5}{16} + \dots \right)^5}{5} - \dots \right\}. \tag{17}
\end{aligned}$$

ここで $\frac{p}{1 - \frac{1}{4}p^2}$ の括弧内の三次以上の寄与を無視すると (17) 式は

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

また、括弧内の三次までの寄与を考慮すると

$$\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &\approx \frac{1}{p} \left(p + \frac{p^3}{4} - \frac{\left(p + \frac{p^3}{4} \right)^3}{3} + \frac{\left(p + \frac{p^3}{4} \right)^5}{5} - \dots \right) \\
&= \frac{1}{p} \left(p + \frac{p^3}{4} - \frac{\left(p^3 + \frac{3p^5}{4} + \frac{3p^7}{16} + \frac{p^9}{64} \right)}{3} + \dots \right) \\
&= 1 - \frac{1}{12}p^2 + O(p^4) < 1.
\end{aligned}$$

よって、数値解の位相は真の解に比べて遅く進む。

松野スキーム

松野スキームは $\lambda = 1 - p^2 + ip$ なので

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1 - p^2}.$$

となる. 台形スキームのときと同様に $p \ll 1$ のとき $p = 0$ の周りで展開すると

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1-p^2} \\ &= \frac{1}{p} \arctan \{p(1+p^2+p^4+\dots)\} \\ &= \frac{1}{p} \left\{ (p+p^3+p^5+\dots) - \frac{(p+p^3+p^5+\dots)^3}{3} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(p+p^3+p^5+\dots)^5}{5} - \dots \right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

ここで $\frac{p}{1-\frac{1}{4}p^2}$ の三次以上の寄与を無視すると (18) 式は

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

また, 三次までの寄与を考慮すると

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{p} &\approx \frac{1}{p} \left(p + p^3 - \frac{(p+p^3)^3}{3} + \frac{(p+p^3)^5}{5} - \dots \right) \\ &= \frac{1}{p} \left(p + p^3 - \frac{(p^3+3p^5+3p^7+p^9)}{3} + \dots \right) \\ &= 1 + \frac{2}{3}p^2 + O(p^3) > 1. \end{aligned}$$

よって, p が 0 の極近傍ではオイラスキームと同様に数値解の位相は真の解に比べて遅く進み, そこから離れていくと早く進む.

ホインスキーム

ホインスキームは $\lambda = 1 - \frac{1}{2}p^2 + ip$ なので

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1-\frac{1}{2}p^2}.$$

台形スキームと同様にやる. $p \ll 1$ のとき $p = 0$ の周りで展開すると

$$\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p} \arctan \frac{p}{1 - \frac{1}{2}p^2} \\
&= \frac{1}{p} \arctan \left\{ p \left(1 + \frac{p^2}{2} + \frac{p^4}{4} + \dots \right) \right\} \\
&= \frac{1}{p} \left\{ \left(p + \frac{p^3}{2} + \frac{p^5}{4} + \dots \right) - \frac{\left(p + \frac{p^3}{2} + \frac{p^5}{4} + \dots \right)^3}{3} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\left(p + \frac{p^3}{2} + \frac{p^5}{4} + \dots \right)^5}{5} - \dots \right\}. \tag{19}
\end{aligned}$$

ここで $\frac{p}{1 - \frac{1}{2}p^2}$ の括弧内の三次以上の寄与を無視すると (19) 式は

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

また、括弧内の三次までの寄与を考慮すると

$$\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &\approx \frac{1}{p} \left(p + \frac{p^3}{2} - \frac{\left(p + \frac{p^3}{2} \right)^3}{3} + \frac{\left(p + \frac{p^3}{2} \right)^5}{5} - \dots \right) \\
&= \frac{1}{p} \left(p + \frac{p^3}{2} - \frac{\left(p^3 + \frac{3p^5}{2} + \frac{3p^7}{4} + \frac{p^9}{8} \right)}{3} + \dots \right) \\
&= 1 + \frac{1}{6}p^2 + O(p^4) > 1.
\end{aligned}$$

よって、松野スキームと同様で、 p が 0 の極近傍では遅く進み、そこから離れると早く進む。

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

$$U^{n+1} = U^{n-1} + 2i\omega\Delta t U^n. \quad (20)$$

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

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

$$U^n = \frac{U^{n+1}}{\lambda} \text{ なので}$$

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

これを (20) 式に代入すると

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

両辺を $U^{(n-1)}$ で割ると

$$\lambda^2 - 2i\omega\Delta t \lambda - 1 = 0.$$

これを解くと

$$\lambda = ip \pm \sqrt{1 - p^2}. \quad (21)$$

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 (21) 式は,

$$\begin{aligned} \lambda_p &= \sqrt{1 - p^2} + ip, \\ \lambda_c &= -\sqrt{1 - p^2} + ip \end{aligned}$$

の2つの解になる. それぞれの $|\lambda|$ を考えると,

$$\begin{aligned} |\lambda_p| &= (\sqrt{1 - p^2} + ip)(\sqrt{1 - p^2} - ip) \\ &= 1, \\ |\lambda_c| &= (-\sqrt{1 - p^2} + ip)(-\sqrt{1 - p^2} - ip) \\ &= 1 \end{aligned}$$

となる。よって、リープフロ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、真の解と数値解の位相比を考える。(5) 式より λ_p の場合は

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

よって、ホインスキームと同じ形になるので p が 0 の極近傍では遅く進む、そこから離れると早く進む。また、 λ_c の場合は

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

よって、真の解よりも遅く進む。

物理モードと計算モード

リープフログスキームの増幅係数は (21) 式より

$$\begin{aligned}\lambda_p &= \sqrt{1-p^2} + ip, \\ \lambda_c &= -\sqrt{1-p^2} + ip\end{aligned}$$

の 2 つの解である。ここで $\Delta t \rightarrow 0$ の極限を考えると λ_p のときは $\lambda_p \rightarrow 1$ で $U^{n+1} = U^n$, λ_c のときは $\lambda_c \rightarrow -1$ 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

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

(20) 式は

$$U^{n+1} = U^{n-1}$$

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

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

これは $p \rightarrow 0$ の極限の λ_p のモードに対応するので

$$U^{n+1} = \lambda_p U^n.$$

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

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

これは $p \rightarrow 0$ の極限での λ_c のモードに対応するので

$$U^{n+1} = \lambda_c U^n.$$

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

$$\begin{aligned} U_p^n &= \lambda_p^n U_p^0, \\ U_c^n &= \lambda_c^n U_c^0 \end{aligned}$$

の重ね合わせで表される. よって, a, b を定数とすると

$$U^n = a\lambda_p^n U_p^0 + b\lambda_c^n U_c^0. \quad (22)$$

U^0 と U^1 を (22) 式を用いて表すと

$$U^0 = aU_p^0 + bU_c^0, \quad (23)$$

$$U^1 = a\lambda_p U_p^0 + b\lambda_c U_c^0. \quad (24)$$

これを $aU_p^{(0)}$ と $bU_c^{(0)}$ の連立方程式と考えて解くと

$$\begin{aligned} aU_p^0 &= \frac{\lambda_c U^0 - U^1}{\lambda_c - \lambda_p}, \\ bU_c^0 &= \frac{\lambda_p U^0 - U^1}{\lambda_p - \lambda_c}. \end{aligned}$$

これを (22) 式に代入すると

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda_p^n \frac{\lambda_c U^0 - U^1}{\lambda_c - \lambda_p} + \lambda_c^n \frac{\lambda_p U^0 - U^1}{\lambda_p - \lambda_c} \\ &= \frac{1}{\lambda_p - \lambda_c} [\lambda_p^n (U^1 - \lambda_c U^0) - \lambda_c^n (U^1 - \lambda_p U^0)]. \end{aligned} \quad (25)$$

よって、物理モードの振幅は $|U^1 - \lambda_c U^0|$ に、計算モードの振幅は $|U^1 - \lambda_p U^0|$ に比例することが分かる。(25) 式は $U^1 = \lambda_p U^0$ のとき

$$\begin{aligned} U^n &= \frac{1}{\lambda_p - \lambda_c} \lambda_1^n (\lambda_p - \lambda_c) U^0 \\ &= \lambda_1^n U^0. \end{aligned}$$

一方、 $U^1 = \lambda_c U^0$ のとき

$$\begin{aligned} U^n &= \frac{1}{\lambda_p - \lambda_c} \lambda_2^n (\lambda_p - \lambda_c) U^0 \\ &= \lambda_2^n U^0. \end{aligned}$$

となり、どちらも $\omega = 0$ の場合に対応する。

U^1 は λ_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 λ_p を厳密にすることができても 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²⁾。

²⁾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。

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>