

時間差分スキーム

この章では独立変数, 従属変数がともに1つの常微分方程式について考える. なぜなら1次元線形移流方程式も連立常微分方程式を解く問題に帰着されるからである.

7つの時間差分スキームを具体的な常微分方程式にあてはめて, スキームの安定性と位相の振る舞いについて考える. この章で取り上げる常微分方程式は, 振動方程式と摩擦方程式である.

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

$$\frac{dU}{dt} + \alpha U = 0. \quad (2)$$

時間差分スキームの定義

以下のような常微分方程式を考える.

$$\frac{dU}{dt} = f(U, t). \quad (3)$$

微分方程式 (3) の解を $U(t)$ とし, $U(n\Delta t)$ における近似的な解を U^n と表記する. 時間差分スキームを適用した差分式が,

$$U^{n+1} = \sum_{k=1}^N a_{k-1} U^{n-k+1} + \Delta t f(U^{n+1}, U^n, U^{n-1}, \dots, U^{n-N+1}, (n+1)\Delta t, n\Delta t, (n-1)\Delta t, \dots, (n-N+1)\Delta t) \quad (4)$$

と書けるとき, これを N 段階 (N-step) スキーム¹⁾ という. すなわち, 時刻 $t = (n+1)\Delta t$ の U^{n+1} を求める差分式に, いくつの異なる時刻の U^n が現れているか, ということである. a_k は定数であり, f はある既知の関数である. f の中に U^{n+1} を含まない差分スキームを陽的なスキーム (explicit scheme) といい, 含む差分スキームを陰的なスキーム (implicit scheme) という. また, 段数 (stage) とは U^n から U^{n+1} を計算するのに関数 f を何回計算するかを表す.

¹⁾N レベル (N-level) スキームということもある.

1 段階 (1-step) スキーム

1 段階スキームとは, U^{n+1} を U^n を用いて求めるスキームである. 本節で扱う 1 段階スキームは,

- オイラースキーム (前進差分スキーム)
- 後退差分スキーム
- 台形スキーム (修正オイラースキーム)
- 松野スキーム (前進・後退スキーム)
- ホインスキーム

の 5 つである. この 5 つのスキームをそれぞれ紹介し, その誤差を考察する.

オイラースキーム (前進差分スキーム)

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = f^n,$$

すなわち,

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t f^n. \quad (5)$$

ただし, $f^n = f(U^n, n\Delta t)$ である. オイラースキームの打ち切り誤差 $\varepsilon_{\text{オイラー}}$ は次のとおりである. まず $U((n+1)\Delta t)$ を $n\Delta t$ のまわりでテイラー展開して,

$$U((n+1)\Delta t) = U(n\Delta t) + \frac{dU}{dt} \Big|_{n\Delta t} n\Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_{n\Delta t} (n\Delta t)^2 + \dots$$

より,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{オイラー}} &= \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - f^n \\ &= \frac{dU}{dt} \Big|_{n\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_{n\Delta t} n\Delta t + \dots - f^n \\ &= \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_{n\Delta t} n\Delta t + \dots \end{aligned}$$

ゆえに,

$$\varepsilon_{\text{オイラー}} = O(\Delta t).$$

後退差分スキーム

$$\begin{aligned}\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} &= f^{n+1}, \\ U^{n+1} &= U^n + \Delta t f^{n+1}.\end{aligned}\quad (6)$$

但し, $f^{n+1} = f(U^{n+1}, (n+1)\Delta t)$ である. 後退差分スキームの打ち切り誤差 $\varepsilon_{\text{後退}}$ は次の通りである.

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{後退}} &= \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - f^{n+1} \\ &= \frac{1}{\Delta t} \left[U^{n+1} - \left(U^{n+1} - \left. \frac{dU}{dt} \right|_{n+1} \Delta t + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dt^2} \right|_{n+1} (\Delta t)^2 + \dots \right) \right] - f^{n+1} \\ &= -\frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dt^2} \right|_{n+1} \Delta t - \dots.\end{aligned}$$

ゆえに,

$$\varepsilon_{\text{後退}} = O(\Delta t).$$

(6) 式は求めたい値である U^{n+1} 自体が右辺に含まれている. よって後退差分スキームは陰的なスキームである.

台形スキーム

$$\begin{aligned}\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2} (f^n + f^{n+1}), \\ U^{n+1} &= U^n + \frac{1}{2} \Delta t (f^n + f^{n+1}).\end{aligned}\quad (7)$$

台形スキームの打ち切り誤差 $\varepsilon_{\text{台形}}$ は次の通りである.

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\text{台形}} &= \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} (f^n + f^{n+1}) \\ &= \frac{1}{2} \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} f^n \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} f^{n+1} \\ &= \frac{(\varepsilon_{\text{オイラー}} + \varepsilon_{\text{後退}})}{2} \\ &= \frac{1}{3} \left. \frac{d^3U}{dt^3} \right|_n (\Delta t)^2 + \dots \\ \varepsilon_{\text{台形}} &= O(\Delta t^2).\end{aligned}$$

台形スキームは (7) 式も求めたい値である U^{n+1} 自体が右辺に含まれている。よって台形スキームは 2 次の精度を持つ陰的なスキームである。

松野スキーム (前進・後退スキーム)

松野スキームは 1-step, 2-stage (1 段階 2 段) のスキームである。

$$\begin{aligned} U^* &= U^n + \Delta t f^n, \\ U^{n+1} &= U^n + \Delta t f^*. \end{aligned} \quad (8)$$

但し, $f^* = f(U^*, (n+1)\Delta t)$ である。松野スキームの打ち切り誤差 $\varepsilon_{\text{松野}}$ は次のとおりである。

$$\begin{aligned} f^* &= f^n + \frac{\partial f}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t + O(\Delta t^2) \\ &= f^n + \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

$$U^{n+1} = U^n + \frac{dU}{dt} \Big|_n \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_n \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

であるため,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{松野}} &= \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - f^* \\ &= \frac{dU}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Delta t + O(\Delta t^2) - \left[f^n + \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2) \right] \\ &= \left[\frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} - \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right] \Delta t + O(\Delta t^2) \\ &= O(\Delta t). \end{aligned}$$

ゆえに, 松野スキームは 1 次の精度をもつ。

ホインスキーム

修正オイラススキームとも, 2 次のルンゲクッタスキームとも呼ばれる。

$$\begin{aligned} U^* &= U^n + \Delta t f^n, \\ U^{n+1} &= U^n + \frac{1}{2} \Delta t (f^n + f^*). \end{aligned} \quad (9)$$

但し, $f^* = f(U^*, (n+1)\Delta t)$ である. ホインスキームの誤差 $\varepsilon_{\text{ホイン}}$ は松野スキームの時と同様にして,

$$f^* = f^n + \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{dU}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2),$$

$$U^{n+1} = U^n + \frac{dU}{dt} \Big|_n \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_n \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

なので, $\frac{d}{dt} f(U, t) = \frac{\partial f}{\partial U} \frac{dU}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t}$ と $\frac{dU}{dt} = f$ に注意すると,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{ホイン}} &= \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \frac{1}{2}(f^n + f^*) \\ &= \frac{dU}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Delta t + O(\Delta t^2) - \left[f^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{dU}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right] \Delta t + \frac{1}{2} O(\Delta t^2) \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{d^2U}{dt^2} - \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{dU}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \right] \Delta t - O(\Delta t^2) \\ &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\frac{dU}{dt} - f \right) \Delta t - O(\Delta t^2) \\ &= -O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

ゆえにホインスキームは 2 次の精度をもつ.

2 段階 (2-step) スキーム

U^{n+1} を求める式に 2 つの U^i ($i \leq n$) が現れるスキーム. ただし, 1 ステップ目の計算 (U^0 から U^1 を求めるとき) には使えない. 本節では,

- リーフフロッグスキーム
- アダムス-バッシュフォーススキーム

の 2 つのスキームを紹介し, それぞれの精度について考察する.

リーフフロッグスキーム (Leapfrog scheme)

$$U^{n+1} = U^{n-1} + 2\Delta t f^n \tag{10}$$

打ち切り誤差は,

$$U^{n+1} = U^n + \frac{dU}{dt} \Big|_n \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_n (\Delta t)^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3U}{dt^3} \Big|_n (\Delta t)^3 + O(\Delta t^4),$$

$$U^{n-1} = U^n - \frac{dU}{dt} \Big|_n \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_n (\Delta t)^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3U}{dt^3} \Big|_n (\Delta t)^3 + O(\Delta t^4)$$

より,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{leap} &= \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\Delta t} - f^n \\ &= \frac{dU}{dt} \Big|_n + \frac{1}{3!} \frac{d^3U}{dt^3} \Big|_n (\Delta t)^2 + O(\Delta t^4) - f^n \\ &= O(\Delta t^2).\end{aligned}$$

アダムス-バッシュフォーススキーム (Adams-Bashforth scheme)

ここでは 2 次精度のアダムス-バッシュフォーススキームを紹介する.

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

右辺第 2 項の段階数を増やすことで精度を上げることができる²⁾. 打ち切り誤差は,

$$f^{n-1} = f^n - \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{dU}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2)$$

より,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{AB} &= \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \left(\frac{3}{2}f^n - \frac{1}{2}f^{n-1} \right) \\ &= \frac{dU}{dt} \Big|_n + \frac{1}{2} \frac{d^2U}{dt^2} \Big|_n \Delta t - \left\{ f^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial U} \frac{dU}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t^2) \right\} + O(\Delta t^2) \\ &= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\frac{dU}{dt} - f \right) \Delta t + O(\Delta t^2) \\ &= O(\Delta t^2).\end{aligned}$$

アダムス-バッシュフォーススキームは段階数と段数が一致するスキームである.

²⁾たとえば 4 次精度のものもある. 4 次精度のアダムス-バッシュフォーススキームは次のとおりである.

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\Delta t}{24} (55f^n - 59f^{n-1} + 37f^{n-2} - 9f^{n-3}).$$

右辺第 2 項の段階数を増やすことで, 4 次以上の精度をもつスキームを作ることできる.

スキームのまとめ

1 段階スキーム

オイラースキーム

$$\begin{aligned}U^{n+1} &= U^n + \Delta t f^n, \\f^n &= (U^n, n\Delta t), \\ \varepsilon &= O(\Delta t).\end{aligned}$$

後退差分スキーム

$$\begin{aligned}U^{n+1} &= U^n + \Delta t f^{n+1}, \\f^{n+1} &= (U^{n+1}, (n+1)\Delta t), \\ \varepsilon &= O(\Delta t).\end{aligned}$$

台形スキーム

$$\begin{aligned}U^{n+1} &= U^n + \frac{1}{2}\Delta t (f^n + f^{n+1}), \\ \varepsilon &= O(\Delta t^2).\end{aligned}$$

松野スキーム

$$\begin{aligned}U^* &= U^n + \Delta t f^n, \\U^{n+1} &= U^n + \Delta t f^*, \\f^* &= (U^*, (n+1)\Delta t), \\ \varepsilon &= O(\Delta t).\end{aligned}$$

ホインスキーム

$$\begin{aligned}U^* &= U^n + \Delta t f^n, \\U^{n+1} &= U^n + \frac{1}{2}\Delta t (f^n + f^*), \\f^* &= (U^*, (n+1)\Delta t), \\ \varepsilon &= O(\Delta t^2).\end{aligned}$$

2 段階スキーム

リーブフロッグスキーム

$$U^{n+1} = U^{n-1} + 2\Delta t f^n,$$
$$\varepsilon = O(\Delta t^2).$$

アダムス-バッシュフォーススキーム

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t \left(\frac{3}{2} f^n - \frac{1}{2} f^{n-1} \right),$$
$$\varepsilon = O(\Delta t^2).$$