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

$$U(n\Delta t) = U(0)e^{i\omega n\Delta t} \tag{1}$$

とする. 数値解は増幅係数を λ とすると

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda U^{n-1} \\ &= \lambda^n U^0. \end{aligned} \tag{2}$$

ここで, λ を極形式で書きなおすと

$$\lambda = |\lambda| e^{i\theta} \tag{3}$$

である. よって,

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda^n U^0 \\ &= |\lambda|^n U^0 e^{in\theta} \end{aligned} \tag{4}$$

である. ここで (4) 式の λ を実部 λ_{re} と虚部 λ_{im} に書き直すと

$$U^n = (\lambda_{re} + i\lambda_{im})^n U^0. \tag{5}$$

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

$$\tan\theta = \frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}. \tag{6}$$

よって,

$$\theta = \arctan\frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}. \tag{7}$$

一方真の解は $p=\omega\Delta t$ とすると,

$$U(n\Delta t)=U(0)e^{inp} \tag{8}$$

故に, 真の解の位相に対する数値解の位相の比は

$$\frac{\theta}{p}=\frac{1}{p}\arctan\frac{\lambda_{im}}{\lambda_{re}}. \tag{9}$$

オイラースキーム

オイラースキームは $\lambda=1+ip$ なので (9) 式は

$$\begin{aligned}\frac{\theta}{p}&=\frac{1}{p}\arctan p &(10)\\ &=\frac{1}{p}\cdot\left(p-\frac{1}{3}p^3+\frac{1}{5}p^5\cdots\right) &(11)\end{aligned}$$

$p\ll 1$ とすると

$$\frac{\theta}{p}\approx 1-\frac{1}{3}p^2<1 \tag{12}$$

よって, 数値解の位相は真の解に比べて遅く進む[1)].

後退スキーム

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

$$\begin{aligned}\frac{\theta}{p}&=\frac{1}{p}\arctan\frac{\frac{p}{1+p^2}}{\frac{1}{1+p^2}} &(13)\\ &=\frac{1}{p}\arctan p &(14)\end{aligned}$$

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 $\lambda=\dfrac{1}{1+p^2}\left(1-\dfrac{1}{4}p^2+ip\right)$ なので

$$\frac{\theta}{p}=\frac{1}{p}\arctan\frac{p}{1-\frac{1}{4}p^2}. \tag{15}$$

[1)] $\arctan x$ のマクローリン展開は付録 A 参照. 参考: 竹野 茂治, 2009,「勾配から角度を求める展開式」

$p \ll 1$ のとき $p = 0$ の周りで展開すると

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

ここで $\dfrac{p}{1-\frac{1}{4}p^2}$ の括弧内の三次以上の寄与を無視すると (16) 式は

$$\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &\approx \frac{1}{p}\left(p-\frac{p^3}{3}+\frac{p^5}{5}-\cdots\right) \qquad (17)\\
&= \frac{1}{p}\arctan p < 1. \qquad (18)
\end{aligned}$$

また, 括弧内の三次までの寄与を考慮すると

$$\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &\approx \frac{1}{p}\left(p+\frac{p^3}{4}-\frac{\left(p+\frac{p^3}{4}\right)^3}{3}+\frac{\left(p+\frac{p^3}{4}\right)^5}{5}-\cdots\right) \qquad (19)\\
&= \frac{1}{p}\left(p+\frac{p^3}{4}-\frac{\left(p^3+\frac{3p^5}{4}+\frac{3p^7}{16}+\frac{p^9}{64}\right)}{3}+\cdots\right) \qquad (20)\\
&= 1-\frac{1}{12}p^2+O(p^4) < 1. \qquad (21)
\end{aligned}$$

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

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p}\arctan\frac{p}{1-p^2}. \qquad (22)$$

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

$$
\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p}\arctan\frac{p}{1-p^2} \\
&= \frac{1}{p}\arctan\left\{p\left(1+p^2+p^4+\cdots\right)\right\} \\
&= \frac{1}{p}\left\{\left(p+p^3+p^5+\cdots\right) - \frac{\left(p+p^3+p^5+\cdots\right)^3}{3}\right. \\
&\quad \left. + \frac{\left(p+p^3+p^5+\cdots\right)^5}{3} - \cdots\right\}.
\end{aligned} \tag{23}
$$

ここで $\dfrac{p}{1-p^2}$ の三次以上の寄与を無視すると (23) 式は

$$
\frac{\theta}{p} \approx \frac{1}{p}\left(p - \frac{p^3}{3} + \frac{p^5}{5} - \cdots\right) \tag{24}
$$

$$
= \frac{1}{p}\arctan p < 1. \tag{25}
$$

また, 三次までの寄与を考慮すると

$$
\frac{\theta}{p} \approx \frac{1}{p}\left(p+p^3 - \frac{\left(p+p^3\right)^3}{3} + \frac{\left(p+p^3\right)^5}{5} - \cdots\right) \tag{26}
$$

$$
= \frac{1}{p}\left(p+p^3 - \frac{\left(p^3+3p^5+3p^7+p^9\right)}{3} + \cdots\right) \tag{27}
$$

$$
= 1 + \frac{2}{3}p^2 + O(p^3) > 1. \tag{28}
$$

よって, p が 0 の極近傍では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

$$
\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p}\arctan\frac{p}{1-\frac{1}{2}p^2}. \tag{29}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p}\arctan\frac{p}{1-\frac{1}{2}p^2} \\
&= \frac{1}{p}\arctan\left\{p\left(1+\frac{p^2}{2}+\frac{p^4}{4}+\cdots\right)\right\} \\
&= \frac{1}{p}\left\{\left(p+\frac{p^3}{2}+\frac{p^5}{4}+\cdots\right)-\frac{\left(p+\frac{p^3}{2}+\frac{p^5}{4}+\cdots\right)^3}{3}+\frac{\left(p+\frac{p^3}{2}+\frac{p^5}{4}+\cdots\right)^5}{5}-\cdots\right\}.
\end{aligned} \tag{30}
$$

ここで $\dfrac{p}{1-\frac{1}{2}p^2}$ の括弧内の三次以上の寄与を無視すると (30) 式は

$$
\frac{\theta}{p} \approx \frac{1}{p}\left(p-\frac{p^3}{3}+\frac{p^5}{5}-\cdots\right) \tag{31}
$$

$$
= \frac{1}{p}\arctan p < 1. \tag{32}
$$

また, 括弧内の三次までの寄与を考慮すると

$$
\frac{\theta}{p} \approx \frac{1}{p}\left(p+\frac{p^3}{2}-\frac{\left(p+\frac{p^3}{2}\right)^3}{3}+\frac{\left(p+\frac{p^3}{2}\right)^5}{5}-\cdots\right) \tag{33}
$$

$$
= \frac{1}{p}\left(p+\frac{p^3}{2}-\frac{\left(p^3+\frac{3p^5}{2}+\frac{3p^7}{4}+\frac{p^9}{8}\right)}{3}+\cdots\right) \tag{34}
$$

$$
= 1+\frac{1}{6}p^2+O(p^4) > 1. \tag{35}
$$

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

$$
U^{n+1} = U^{n-1} + 2i\omega\Delta t U^n. \tag{36}
$$

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

$$U^n = \lambda U^{n-1}. \tag{37}$$

$U^n = \dfrac{U^{n+1}}{\lambda}$ なので

$$\frac{U^{n+1}}{\lambda} = \lambda U^{n-1}, \tag{38}$$

$$U^{n+1} = \lambda^2 U^{n-1}. \tag{39}$$

これを (36) 式に代入すると

$$\lambda^2 U^{n-1} = U^{n-1} + 2i\omega\Delta t\lambda U^{n-1}. \tag{40}$$

両辺を U^{n-1} で割ると

$$\lambda^2 - 2i\omega\Delta t\lambda - 1 = 0. \tag{41}$$

これを解くと

$$\lambda = ip \pm \sqrt{1-p^2}. \tag{42}$$

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 (42) 式は,

$$\lambda_p = \sqrt{1-p^2} + ip, \tag{43}$$

$$\lambda_c = -\sqrt{1-p^2} + ip \tag{44}$$

の 2 つの解になる. それぞれの $|\lambda|$ を考えると,

$$\begin{aligned} |\lambda_p| &= (\sqrt{1-p^2} + ip)(\sqrt{1-p^2} - ip) && (45)\\ &= 1, && (46)\\ |\lambda_c| &= (-\sqrt{1-p^2} + ip)(-\sqrt{1-p^2} - ip) && (47)\\ &= 1 && (48) \end{aligned}$$

となる. よって, リープフロッ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. (9) 式より λ_p の場合は

$$\begin{aligned} \frac{\theta}{p} &= \frac{1}{p}\arctan\frac{p}{(1-p^2)^{\frac{1}{2}}} && (49)\\ &= \frac{1}{p}\arctan\left\{p\left(1+\frac{p^2}{2}+\frac{p^4}{4}+\cdots\right)\right\}. && (50) \end{aligned}$$

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み, そこから離れると早く進む. また, λ_c の場合は

$$\frac{\theta}{p} = \frac{1}{p}\arctan\left(-\frac{p}{(1-p^2)^{\frac{1}{2}}}\right) \tag{51}$$

$$= \frac{1}{p}\arctan\left\{-p\left(1+\frac{p^2}{2}+\frac{p^4}{4}+\cdots\right)\right\}. \tag{52}$$

よって, 真の解よりも遅く進む.

物理モードと計算モード

リープフロッグスキームの増幅係数は (42) 式より

$$\lambda_p = \sqrt{1-p^2} + ip, \tag{53}$$

$$\lambda_c = -\sqrt{1-p^2} + ip \tag{54}$$

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

$$\frac{dU}{dt} = 0. \tag{55}$$

(36) 式は

$$U^{n+1} = U^{n-1} \tag{56}$$

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

$$U^{n+1} = U^n. \tag{57}$$

これは $p \to 0$ の極限の λ_p のモードに対応するので

$$U^{n+1} = \lambda_p U^n. \tag{58}$$

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

$$U^{n+1} = -U^n. \tag{59}$$

これは $p \to 0$ の極限での λ_c のモードに対応するので

$$U^{n+1} = \lambda_c U^n. \tag{60}$$

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

$$U_p^n = \lambda_p^n U_p^0, \tag{61}$$
$$U_c^n = \lambda_c^n U_c^0 \tag{62}$$

の重ね合わせで表される. よって,a, b を定数とすると

$$U^n = a\lambda_p^n U_p^0 + b\lambda_c^n U_c^0. \tag{63}$$

U^0 と U^1 を (63) 式を用いて表すと

$$U^0 = aU_p^0 + bU_c^0, \tag{64}$$
$$U^1 = a\lambda_p U_p^0 + b\lambda_c U_c^0. \tag{65}$$

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

$$aU_p^0 = \frac{\lambda_c U^0 - U^1}{\lambda_c - \lambda_p}, \tag{66}$$
$$bU_c^0 = \frac{\lambda_p U^0 - U^1}{\lambda_p - \lambda_c}. \tag{67}$$

これを (63) 式に代入すると

$$\begin{aligned} U^n &= \lambda_p^n \frac{\lambda_c U^0 - U^1}{\lambda_c - \lambda_p} + \lambda_c^n \frac{\lambda_p U^0 - U^1}{\lambda_p - \lambda_c} \\ &= \frac{1}{\lambda_p - \lambda_c}\left[\lambda_p^n \left(U^1 - \lambda_c U^0\right) - \lambda_c^n \left(U^1 - \lambda_p U^0\right)\right]. \end{aligned} \tag{68}$$

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. (68) 式は $U^1 = \lambda_p U^0$ のとき

$$U^n = \frac{1}{\lambda_p - \lambda_c}\lambda_1^n(\lambda_p - \lambda_c)U^0 \tag{69}$$
$$= \lambda_1^n U^0. \tag{70}$$

一方, $U^1 = \lambda_c U^0$ のとき

$$U^n = \frac{1}{\lambda_p - \lambda_c}\lambda_2^n(\lambda_p - \lambda_c)U^0 \tag{71}$$
$$= \lambda_2^n U^0. \tag{72}$$

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 を厳密にしることができても 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.

付録 A. $arctan\theta$ のマクローリン展開

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

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

このとき $r=-t^2(|t|<1)$ とすると

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

これを $|x|<1$ である t を 0 から x まで積分すると

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

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

$$\tan y=x \tag{a.4}$$

両辺を x で微分すると

$$\frac{d\tan y}{dy}\cdot\frac{dy}{dx}=1, \tag{a.5}$$

$$\frac{1}{\cos^2 y}\cdot\frac{dy}{dx}=1, \tag{a.6}$$

$$\frac{dy}{dx}=\cos^2 y. \tag{a.7}$$

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

$$\frac{dy}{dx}=\cos^2 y \tag{a.8}$$

$$=\frac{1}{1+\tan^2 y} \tag{a.9}$$

$$=\frac{1}{1+x^2}. \tag{a.10}$$

よって, $|x|<1$ のときに

$$\arctan x=\int_0^x\frac{1}{1+t^2}dt. \tag{a.11}$$

(a.3) 式と (a.11) 式から

$$\arctan x=x-\frac{x^3}{3}+\frac{x^5}{5}-\cdots. \tag{a.12}$$

参考: 竹野 茂治, 2009,「勾配から角度を求める展開式」

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