３　数値解の特性

３．１　ＣＦＬ条件

前の章では、波動方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}f+c\frac{\partial}{\partial x}f=0 \quad [1]$$

を

$$f^{+}_{x=x_0}=f^{-}_{x=x_0}-c\frac{f^{0}_{x=x_0+\Delta x}-f^{0}_{x=x_0-\Delta x}}{2\Delta x}(2\Delta t) \quad [2]$$

のように差分化して数値解を求めた。ここでは、このようにして得られた数値解の性質を考える。まず、初期時刻 $t=t_0$ に

$$f=\Re f_0\exp\left[ik\left(x-x_0\right)\right] \quad [3]$$

のような波動を与えたとき、どのように時間変化するか調べる。ただし、 f_0 は定数である。 k は波数であり、実数の定数である。時刻 t における f の値を

$$f=\Re f_0\exp\left[i\left\{k\left(x-x_0\right)-\omega\left(t-t_0\right)\right\}\right] \quad [4]$$

とおく。ただし、 ω は角振動数であり、定数である。このとき、

$$f^{0}_{x=x_0+\Delta x}=\Re f_0\exp[ik\Delta x]$$

$$f^{0}_{x=x_0-\Delta x}=\Re f_0\exp[-ik\Delta x]$$

$$f^{+}_{x=x_0}=\Re f_0\exp[-i\omega\Delta t]$$

$$f^{-}_{x=x_0}=\Re f_0\exp[i\omega\Delta t]$$

である。これらを、差分化した波動方程式[2]に代入すると、

$$\exp[-i\omega\Delta t]=\exp[i\omega\Delta t]-\frac{c\Delta t}{\Delta x}\left(\exp[ik\Delta x]-\exp[-ik\Delta x]\right) \quad [5]$$

となる。ここで、

$$r=\exp[-i\omega\Delta t] \quad [6]$$

とおく。 r はある時刻における解と次の時刻における解との比を表している。[6]を[5]に代入すると、

$$r=r^{-1}-\frac{c\Delta t}{\Delta x}\left(\exp[ik\Delta x]-\exp[-ik\Delta x]\right)$$

$$r^2+\frac{c\Delta t}{\Delta x}\left(\exp[ik\Delta x]-\exp[-ik\Delta x]\right)r-1=0$$

$$r^2+\frac{2c\Delta t}{\Delta x}i\sin(k\Delta x)r-1=0 \quad [7]$$

が得られる。[7]を解くと、

$$r=-\frac{c\Delta t}{\Delta x}i\sin(k\Delta x)\pm\sqrt{1-\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)} \quad [8]$$

となる。

ここで、[8]で得られた r の絶対値を調べる。 r の絶対値が 1 より大きいと解は時間とともに成長するので安定な解ではない。つまり、解が安定であるためには、 r の絶対値は 1 以下でなければならない。まず、根号の中身がゼロまたは正、つまり

$$1-\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)\geq 0 \qquad [9]$$

のとき、常に

$$|r|=1 \qquad [10]$$

である。したがって、波数 k によらず解は安定（中立）である。一方、根号の中身が負、つまり

$$1-\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)<0 \qquad [11]$$

のとき、

$$r=-\frac{c\Delta t}{\Delta x}i\sin(k\Delta x)\pm i\sqrt{\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)-1}$$

だから、

$$|r|=\frac{c\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x)\mp\sqrt{\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)-1}$$

である。ここで、

$$\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)>1$$

を考慮すると、複号のうち下のほうを選んだ場合、

$$|r|>1 \qquad [12]$$

であり、解が不安定であることがわかる。したがって、解が安定であるためには、[8]の根号の中身がゼロまたは正、つまり

$$1-\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)\geq 0$$

$$\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)\leq 1 \qquad [13]$$

を満たさなければならない。すべての k について、[13]が成り立つためには、

$$\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\leq 1$$

$$\Delta t\leq\frac{1}{c}\Delta x \qquad [14]$$

を満たす必要がある。これは、積分の時間間隔が、波動が格子間隔を伝播するのにかかる時間よりも小さくなければならないことを示している。このような条件を**ＣＦＬ条件** (Courant-Friedrichs-Lewy condition) という。CFL 条件は解の安定性のための条件である。

課題 3.1　波動方程式[1]の数値解を、リープフロッグ法の代わりにオイラー法を使って求めた場合について、解の安定性を検討せよ。

課題 3.2　熱伝導方程式（第 1 章の[3]）の数値解をオイラー法とリープフロッグ法を使って求めた場合について、それぞれ、解の安定性を検討せよ。

３．２　計算モード

前節の例では、CFL 条件が満たされ安定性が保たれている（ω は実数）という条件のもとであっても、r は２通りの値を持つ。もとの波動方程式は実際に２つの解を持つと考えてよいのだろうか。ここでは、r が２通りの値を持つことの意味を考察する。

波動方程式[1]は、位相速度 c で伝播する波動（$f = \Re \hat{f} e^{i(kx-\omega t)} = \Re \hat{f} e^{ik(x-ct)}$）だけを解に持つ。したがって、厳密解においては、

$$r = \exp[-i\omega\Delta t] = \exp[-ikc\Delta t] = -i\sin(kc\Delta t) + \cos(kc\Delta t) \qquad [15]$$

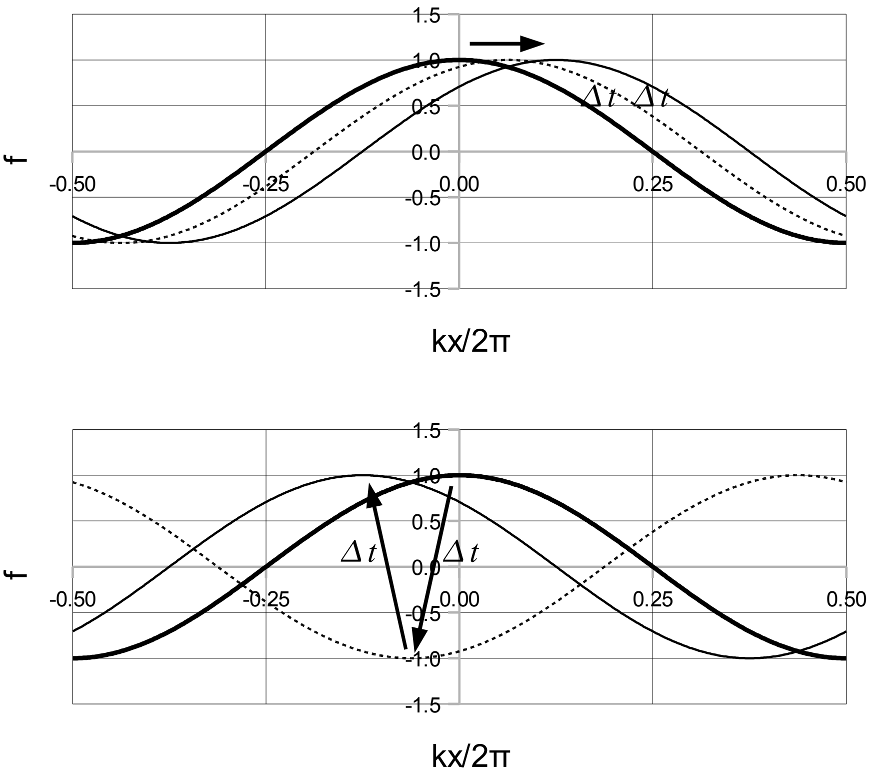
が成り立つ。しかし、数値解においては、[8]に示されたように、r は２つの解を持つ。[8]において、Δx と Δt が十分に小さく、$k\Delta x \ll 1$ 、$kc\Delta t \ll 1$ とすれば、

$$\sin(\theta) \simeq \theta \qquad (\ \theta \ll 1\ )$$

を用いて、

$$\begin{aligned} r &= -\frac{c\Delta t}{\Delta x} i \sin(k\Delta x) \pm \sqrt{1 - \frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)} \\ &\simeq -\frac{c\Delta t}{\Delta x} i (k\Delta x) \pm \sqrt{1 - \frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}(k\Delta x)^2} \\ &= -ikc\Delta t \pm \sqrt{1 - (kc\Delta t)^2} \\ &\simeq -i\sin)kc\Delta t) \pm \sqrt{1 - \sin^2(kc\Delta t)} \\ &= -i\sin(kc\Delta t) \pm \cos(kc\Delta t) \end{aligned} \qquad [16]$$

となる。複号のうち上のほうを選んだ場合に得られる解は、厳密解[15]に収束するから、現実の波動に対応すると考えられる。しかし、複号のうち下のほうを選んだ場合に得られる解は、厳密解[15]には収束せず、現実の波動とはまったく別の解であると考えられる。このようにもとの方程式系の解としては存在しないにもかかわらず、数値計算上、見かけのモードが現れることがある。これを**計算モード**(computational mode) という。これに対して、現実の波動に対応したモードを物理モードという。今回の波動方程式の例の場合、前の節で CFL 条件をみたさないときに現れた不安定な解は、計算モードに対応している。なお、計算モードの有無は解の安定性とは直接には対応せず、CFL 条件をみたしていて解が安定であっても、計算モードは存在しうることに注意する。



物理モード（上）と数値モード（下）の例

３．３　数値分散

前節では、CFL 条件が満たされている場合であっても、数値モードとよばれる物理的には存在しない解も得られてしまうことがわかった。では、物理モードは現実に存在する解を正しく再現しているだろうか。ここでは、物理モードの特性を解析し、厳密解と比較する。

波動の分散関係式は、厳密解においては、

$$\omega = ck \qquad [17]$$

である。一方、数値解においては、物理モードの解は、[8]より、

$$r = -\frac{c\Delta t}{\Delta x} i \sin(k\Delta x) + \sqrt{1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)}$$

を満たす。ここで、

$$r = \exp[-i\omega\Delta t] = -i\sin(\omega\Delta t) + \cos(\omega\Delta t)$$

を代入すれば、

$$-i\sin(\omega\Delta t) + \sqrt{1-\sin^2(\omega\Delta t)} = -\frac{c\Delta t}{\Delta x} i\sin(k\Delta x) + \sqrt{1 - \frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\sin^2(k\Delta x)} \qquad [18]$$

となる。両辺を比較すると、

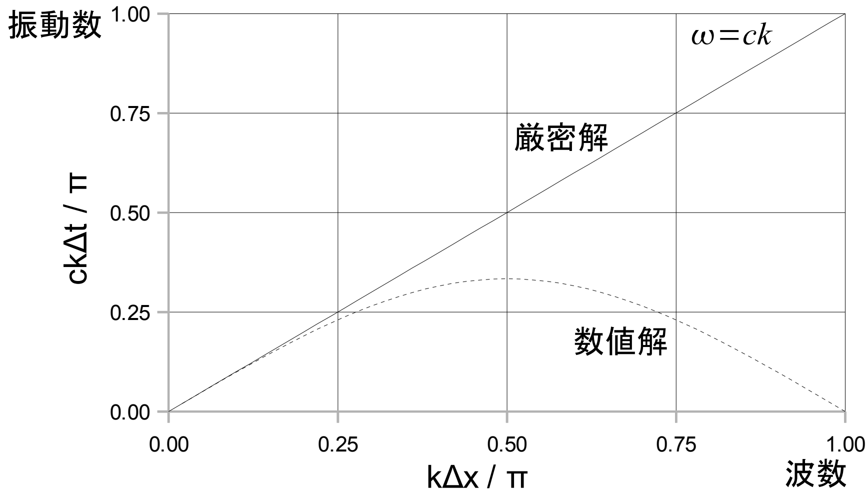
$$\sin(\omega\Delta t) = \frac{c\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x) \qquad [19]$$

が得られる。[17]を満たす ω を ω_0 とおくと、 $\omega_0 = ck$ だから、

$$\sin\left(\frac{\omega}{\omega_0}\frac{c\,\Delta t}{\Delta x}k\,\Delta x\right)=\frac{c\,\Delta t}{\Delta x}\sin(k\,\Delta x)$$

$$\omega=\omega_0\frac{\sin^{-1}\left\{\frac{c\,\Delta t}{\Delta x}\sin(k\,\Delta x)\right\}}{\frac{c\,\Delta t}{\Delta x}k\,\Delta x} \qquad [20]$$

となる。下の図に示したように、数値解における分散関係式は、厳密解における分散関係式とは一致しない。今回の波動方程式の例では、厳密解においては位相速度が波数によらず一定である非分散性波動が解として得られたが、数値解においては位相速度が波数によって変化し、分散が生じている。数値解の位相速度は厳密解よりも遅く、波数が大きいほど差が大きくなっている。このように数値計算上生じる見かけの分散を**数値分散** (numerical dispersion) という。数値分散が生じると、もとの偏微分方程式上では一定の形を保って伝播する解を持つ非分散性の波動であっても、数値積分においては徐々に形を変えながら伝播していく。



厳密解と数値解の分散関係（$\frac{c\,\Delta t}{\Delta x}=0.5$ の場合）

前の章の波動方程式の数値解の例では、波動本体の後に細かい波が生じている。これも数値分散が原因である。この例では、波数の大きい細かい成分は位相速度が小さいので、遅れて伝播している。

差分化された偏微分方程式を適切に数値積分するための条件を検討してきた。$\Delta x\to 0$ 、$\Delta t\to 0$ としたとき、差分方程式中の差分が微分方程式中の微分に収束する性質のことを**一貫性**(consistency)という。一貫性は差分方程式そのものの正確性に関する条件である。また、上で CFL 条件として検討したような、不安定解が生じない性質のことを**安定性** (stability)という。さらに、$\Delta x\to 0$ 、$\Delta t\to 0$ としたとき、数値解が厳密解に一致する性質のことを**収束性**(convergence)という。差分方程式が微分方程式に収束するからといって、数値解が厳密解に収束するとは限らないので、一貫性があっても必ずしも収束性が保証されるわけではない。