

第 1 章

偏微分方程式の差分解法

松元亮治 (千葉大理)

1.1 磁気流体力学の基礎方程式

磁気流体の時間発展は以下の方程式により記述できる。ただし、 ρ は密度、 P は圧力、 $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 $\mathbf{B}$ は磁束密度、 ϵ は内部エネルギーである。運動方程式、エネルギー式において粘性項は無視できるものとした。誘導方程式にあらわれる電気抵抗 η は空間的に一定と仮定してある。

- 連続の式

$$\rho \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.1)$$

- 運動方程式

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla P + \frac{(\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}}{4\pi} + \rho \mathbf{g} \quad (1.2)$$

- 誘導方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B} \quad (1.3)$$

- エネルギー式

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla(\rho \epsilon \mathbf{v}) + P \nabla \cdot \mathbf{v} = Q_J - Q_{rad} \quad (1.4)$$

重力加速度 $\mathbf{g}$ には、一般には外力による部分と自己重力による部分が含まれる。自己重力系では重力ポテンシャル ϕ を、以下のポアソン方程式を解くことによって求める。

$$\nabla^2 \phi = 4\pi G \rho \quad (1.5)$$

$$\mathbf{g} = -\nabla \phi \quad (1.6)$$

エネルギー方程式の右辺のうち Q_J はジュール加熱項、 Q_{rad} は放射冷却項である。太陽フレアの計算などでは熱伝導が重要になる。熱伝導の効果は温度 T を以下の方程式を用いて求めることによって取り入れることができる (横山氏の講義参照)。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\gamma(\gamma - 1)}{\rho} \nabla(\kappa_{\parallel} \nabla_{\parallel} T) \quad (1.7)$$

ここで、 γ は比熱比、 $\kappa_{\parallel}$ は磁力線に平行な方向の熱伝導率、 $\nabla_{\parallel}$ は磁力線に平行な方向の微分である。

1.2 偏微分方程式の型

2次元2階偏微分方程式

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f u + g = 0 \quad (1.8)$$

は以下のように分類できる。

条件	型	例
$b^2 - 4ac > 0$	双曲型	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$
$b^2 - 4ac = 0$	放物型	$\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
$b^2 - 4ac < 0$	楕円型	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

連続の式、熱伝導の式、ポアソン方程式は、それぞれ双曲型、放物型、楕円型偏微分方程式の典型例になっている。以下では偏微分方程式の差分解法について解説するが、方程式の型により解法、数値的安定性などが違ってくるため、解こうとしている方程式がどの型なのかを理解しておくことが重要である。

1.3 差分近似

変数 u が空間座標 x, y に依存するという2次元問題を考える。

2次元空間を図のような格子に区切り、各格子点の座標を (x_i, y_j) とする。格子間隔は x 方向が Δx 、 y 方向が Δy とする。 $x_{i\pm 1} = x_i \pm \Delta x$ 、 $y_{j\pm 1} = y_j \pm \Delta y$ である。以下、格子点番号 (i, j) を用いて $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ のように略記する。

着目している点 (x_i, y_j) のまわりでテイラー展開すると、

$$u_{i+1,j} = u(x_i + \Delta x, y_j) = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (1.9)$$

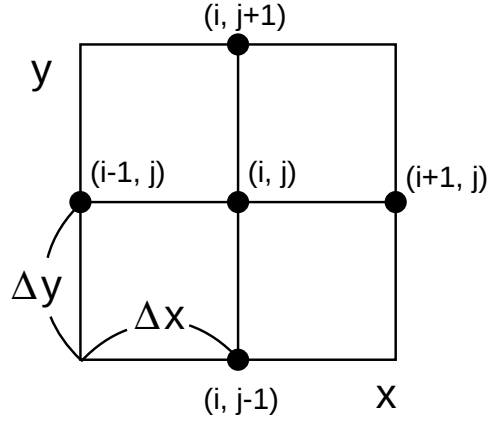


図 1.1: 2次元メッシュの図

$$u_{i-1,j} = u(x_i - \Delta x, y_j) = u_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (1.10)$$

(1.9) 式から (1.10) 式を引くと

$$u_{i+1,j} - u_{i-1,j} = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + O(\Delta x^3) \quad (1.11)$$

したがって、

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (1.12)$$

すなわち、 (i, j) 点における u の x 方向の微分係数 $(\partial u / \partial x)_i$ が Δx^2 の誤差を含む近似のもとで (Δx について 2 次の精度で) 以下のように求まる

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (1.13)$$

これを中心差分の式と言う。

同様にして、 Δx について 1 次の精度で以下の差分近似式が得られる。

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \quad (\text{前進差分}) \quad (1.14)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (\text{後退差分}) \quad (1.15)$$

(1.9) 式と (1.10) 式を加えると

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} = 2u_{i,j} + \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + O(\Delta x^4) \quad (1.16)$$

したがって、

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (1.17)$$

これより、 u の x に関する 2 階微分の係数 $(\partial^2 u / \partial x^2)_i$ を Δx について 2 次の精度で以下のように近似することができる

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad (1.18)$$

同様に、

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_j = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2}. \quad (1.19)$$

1.4 放物型方程式の差分解法

1.4.1 天体シミュレーションにあらわれる放物型方程式

- 熱伝導方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$$

- 磁気拡散方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \eta \nabla^2 \mathbf{B}$$

以下のような 1 次元拡散方程式を差分近似によって初期値問題として解くことを考えてみよう。すなわち、時刻 $t = 0$ における $u(t, x)$ の値 $u(0, x)$ を与えて、任意の時刻 $t (> 0)$ における $u(t, x)$ を求める。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.20)$$

拡散係数 κ は x に依らないとする。よく知られているように、この方程式の解は初期条件をフーリエ変換することによって解析的に求めることができる。解のおおまかな様子を図に示す。

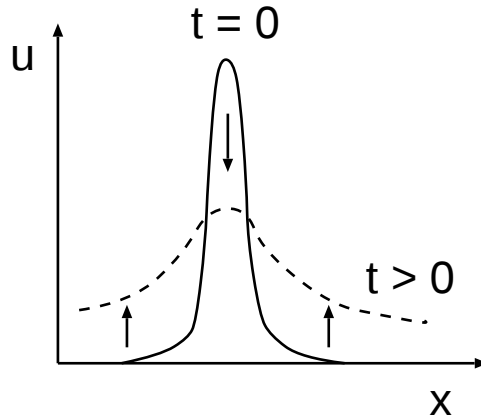


図 1.2: 拡散方程式の解の時間発展の様子

1.4.2 拡散方程式の陽解法 (explicit 法)

1次元拡散方程式 (1.20) を時間について現在の時刻 t_n と Δt 後の時刻 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ の間で前進差分、空間については中心差分をとって差分化すると次式を得る。ここで、 $u_j^n = u(t_n, x_j)$ である。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \kappa \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (1.21)$$

このような差分のとり方を FTCS スキーム (Forward in Time and Centered Difference in Space) とする。式 (1.21) を変形して次式を得る

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (1.22)$$

右辺は時刻 t_n での値、左辺は時刻 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ での値だけで書けている。したがって、時刻 t_n での各格子点での値がわかっているならば直ちに 1 タイムステップ後 (t_{n+1}) の各格子点での値を計算することができる。このような解法のことを 陽解法 とする。FTCS スキームにおける変数の依存関係を図示すると次のようになる。

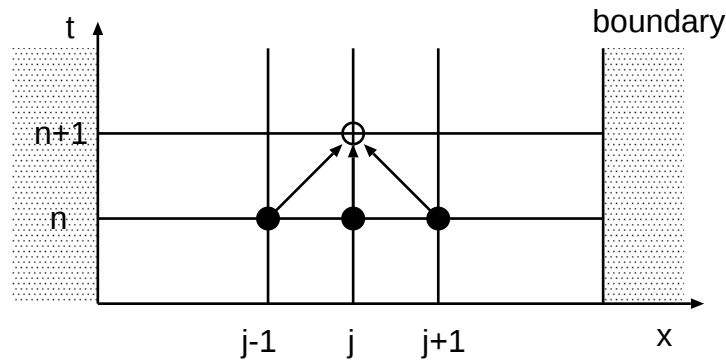


図 1.3: FTCS スキームにおける変数の依存関係

FTCS スキームにより、1次元拡散シミュレーションを行うアルゴリズムは次のようになる。

1. 各メッシュ点の座標値 x_j をセットする (メッシュ生成)
2. 各メッシュ点の初期値 $u_j(t=0)$ をセットする (初期条件)
3. 時刻 t が、あらかじめ決められた終了時刻 t_{end} に達するまで、あるいは決められた回数だけ、以下を繰り返す
 - (a) 左右の境界を除く各格子点について Δt 後の値を (1.22) 式によって計算する (時間積分)
 - (b) 左右の境界の値を境界条件から決める。たとえば隣接点と同じ値を入れる (境界条件の適用)
 - (c) 時刻を Δt だけ進める

1.4.3 Von Neumann の安定性解析

前節の FTCS スキームによって 1 次元拡散のシミュレーションを行ってみると Δt がある条件を満たしていない場合には解が激しく振動して数値的に不安定になることがわかる。数値的に安定に時間積分を進めることができるための条件を求めてみよう。

差分法 (差分スキーム) の数値的安定条件を導くひとつの方法として 1 タイムステップの間の振幅の増大率を g として

$$u_j^n = g^n e^{ij\theta} \quad (1.23)$$

を差分式に代入して g を求め、 $|g| \leq 1$ となる条件を求める方法がある。ここで i は虚数単位。これを Von Neumann の安定性解析と言う。たとえば $\theta = \pi$ のとき u_j^n は左図のように 2 メッシュで 1 波長の波、 $\theta = \pi/3$ のときは右図のように 6 メッシュで 1 波長の波をあらわす。

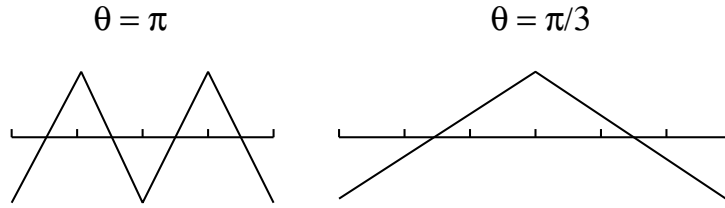


図 1.4: フォンノイマンの安定性解析。左図: $\theta = \pi$ の場合。右図: $\theta = \pi/3$ の場合。

$u_j^n = g^n \exp(ij\theta)$ を FTCS 差分式に代入すると

$$g^{n+1} e^{ij\theta} = g^n e^{ij\theta} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} g^n [e^{i(j+1)\theta} - 2e^{ij\theta} + e^{i(j-1)\theta}]. \quad (1.24)$$

よって、

$$g = 1 - 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \theta). \quad (1.25)$$

増幅率が $|g| \leq 1$ であるためには

$$-1 \leq 1 - 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \theta) \leq 1. \quad (1.26)$$

したがって、

$$0 \leq \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \theta) = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \leq 1. \quad (1.27)$$

任意の θ (任意の波長の波) について安定であるためには

$$0 \leq \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (1.28)$$

以上により、FTCS スキームにより 1 次元拡散方程式のシミュレーションを行う場合、時間ステップ Δt が上式を満たすようにコントロールする必要があることがわかる。たとえばメッシュサイズを半分にした場合、 Δt は 1/4 にしなければならない。

1.4.4 拡散方程式の陰解法 (implicit 法)

拡散方程式を差分化する際に右辺の空間差分の部分に、求めるべき t_{n+1} での u の値を含めて差分化する方法がある。このような方法を陰解法(implicit)法と呼び、explicit 法とは安定性条件が異ってくる。代表的な陰解法である Crank-Nicolson 法では、パラメータ λ を導入して、以下のように差分化する。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \kappa \left[\lambda \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + (1 - \lambda) \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right] \quad (1.29)$$

これを整理すると次のような行列を含む式になる。

$$\mathbf{A} \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{b}(\mathbf{u}^n). \quad (1.30)$$

これを解いて $\mathbf{u}^{n+1}$ を求めればよい。図 1.5 に、この場合の変数の依存関係を示す。

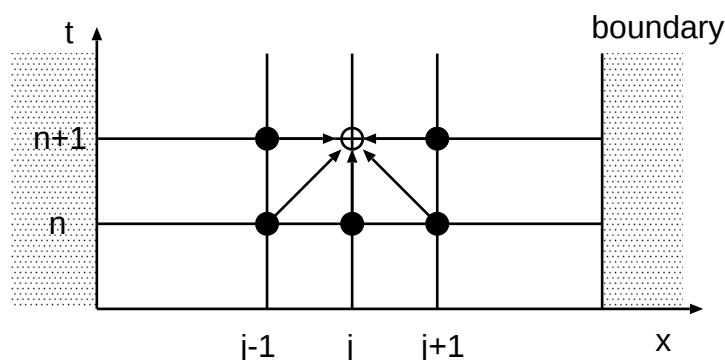


図 1.5: Crank-Nicolson 法における変数の依存関係

練習問題

1. 行列 $\mathbf{A}$ とベクトル $\mathbf{b}$ の各要素を求めなさい。
2. Von Neumann の安定性解析により、 $\lambda > 1/2$ ならば $\kappa \Delta t / \Delta x^2 > 0$ を満たす任意の Δt について Crank-Nicolson スキームは数値的に安定であることを示しなさい。

1.5 楕円型方程式の差分解法

楕円型方程式を中心差分等により差分化すると行列 $\mathbf{A}$ 、既知ベクトル $\mathbf{b}$ 、未知ベクトル $\mathbf{x}$ を用いて $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ という形の方程式になる。多次元問題では行列 $\mathbf{A}$ のサイズが大きくなるため、LU 分解などの直接解法は効率が悪い。そこで、この方程式を効率良く解くための種々の反復解法が提案されてきた。たとえば、対称行列については ICCG 法、非対称行列については BiCG 法などが用いられている。また、メッシュサイズの大きい格子と小さい格子を交互に用いて収束を速める多重格子法 (Multigrid) も利用されている。昨年度の数値天体物理学サマースクールのテキスト等を参照されたい。

1.6 双曲型方程式の差分解法

1.6.1 線形スカラー方程式

流体・磁気流体方程式の数値解法で最も困難な部分は、不連続面の伝搬を扱わなければならない点である。問題の本質的な部分だけを取り出すために、次のような1次元スカラー移流方程式を考える。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1.31)$$

ただし、 c は定数で $c > 0$ とする。この方程式は、スカラー量 u の空間分布が、一定の速度 c で伝播することをあらわす波動方程式である。

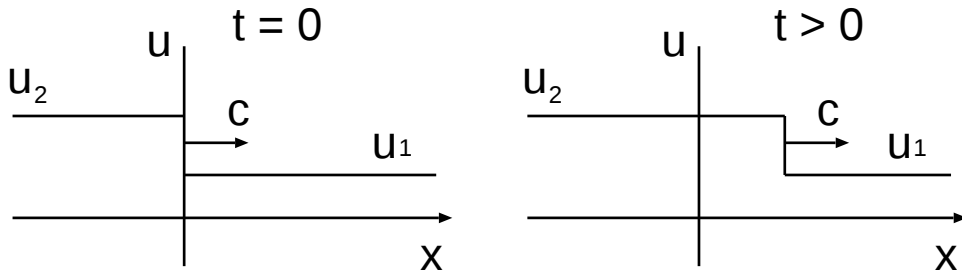


図 1.6: 1次元スカラー移流問題の初期条件と時間発展

いま、図 1.6のように初期に $x \geq 0$ で $u = u_1$ 、 $x < 0$ で $u = u_2$ のように $x = 0$ で不連続な分布を考えてみる。方程式 (1.31) の厳密解は

$$u(t, x) = u(0, x - ct) \quad (1.32)$$

である。右図のように、 $t > 0$ での厳密解は、初期 ($t = 0$) のスカラー量 u のプロファイルが形を保って ct だけ平行移動した形になる。

1.6.2 FTCS スキーム

放物型方程式の場合と同様に、1次元スカラー方程式 (1.31) を時間について前進差分、空間について中心差分をとって差分化すると次式を得る。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (1.33)$$

これを整理すると、

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}\nu(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (1.34)$$

ここで、 ν は次式で定義される数であり、クーラン数 と呼ばれる。

$$\nu \equiv c \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (1.35)$$

1.6.3 FTCS スキームの数値的安定性

1. von Neumann の方法

$u_j^n = g^n e^{ij\theta}$ において差分式 (1.34) に代入すると、

$$g = 1 - \frac{1}{2}\nu(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \quad (1.36)$$

$$= 1 - i\nu\sin\theta \quad (1.37)$$

したがって

$$|g|^2 = 1 + \nu^2 \sin^2\theta \geq 1 \quad (1.38)$$

以上の結果より、 $\theta = 0$ の場合を除いて FTCS スキームは常に不安定になる。

2. テイラー展開による方法

差分化した式にテイラー展開を適用して偏微分方程式を導き、FTCS 差分式がどのような偏微分方程式を満たしているかを調べてみる。

$t_{n+1} = t_n + \Delta t$, $x_{j\pm 1} = x_j \pm \Delta x$ を用いると、

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta t^2 + \dots \quad (1.39)$$

$$u_{j+1}^n = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta x^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^3 + \dots \quad (1.40)$$

$$u_{j-1}^n = u_j^n - \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta x^2 - \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^3 + \dots \quad (1.41)$$

FTCS スキームの差分式

$$u_j^{n+1} - u_j^n = -\frac{1}{2}\nu(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (1.42)$$

の左辺に (1.39)、右辺に (1.40)、(1.41) を代入すると、

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta t^2 = -\nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^3 + \dots \right) \quad (1.43)$$

これを整理すると

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta t - \frac{c}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^2 + \dots \quad (1.44)$$

ここで、解くべき偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1.45)$$

より

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.46)$$

であることを用いると

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{c^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta t - \frac{c}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^2 + \dots \quad (1.47)$$

右辺が差分化によって新たに加わった項である。右辺第 1 項は負の拡散係数を持つ拡散項になっている。「正の拡散」は物理量の値のピークをなまらせる働きがあるが、「負の拡散」では物理量が周囲よりもわずかに高い値を持つ部分があるところのピークがどんどん大きくなるという不安定性を生ずる。

よって、テイラー展開法からもスカラー移流方程式の FTCS スキームは数値的に不安定であることがわかる。

1.6.4 Lax-Friedrich のスキーム

この方法では FTCS スキームの右辺の u_j^n を $(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)/2$ で置き換え、以下のように差分化する。

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (1.48)$$

$u_j^n = g^n \exp(ij\theta)$ を代入して増幅率 g を求めると

$$g = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) - \frac{\nu}{2}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \quad (1.49)$$

$$= \cos\theta - i\nu\sin\theta \quad (1.50)$$

したがって

$$|g|^2 = \cos^2\theta + \nu^2\sin^2\theta \quad (1.51)$$

図 1.7 に増幅率 $|g|$ を θ の関数として極座標 (g, θ) で示す。Lax-Friedrich のスキームでは、クーラン数 $\nu = c\Delta t/\Delta x$ が $|\nu| \leq 1$ を満たす場合、安定に計算を進めることができる。この条件のことを Courant, Friedrich, Lewy 条件 (CFL 条件 あるいはクーラン条件) と言う。

Lax-Friedrich スキームの欠点は数値散逸が大きく、不連続面が時間とともになまってしまうことである。

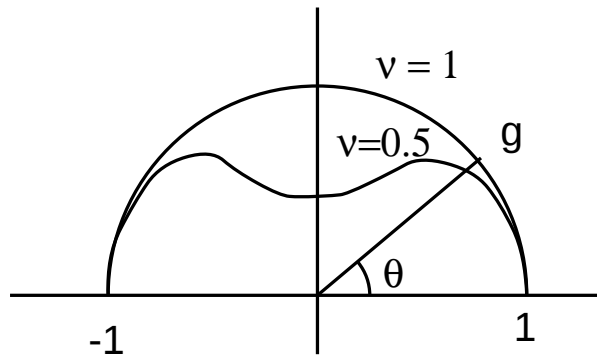


図 1.7: Lax-Friedrich スキームの場合の増幅率

1.6.5 1次精度風上差分法

図 1.8のように波が正の方向に伝わっている場合を考える。このとき、 j 点での空間微分を、 j 点と風上にあたる $j-1$ 点の間の差分で近似する方法が風上差分である。

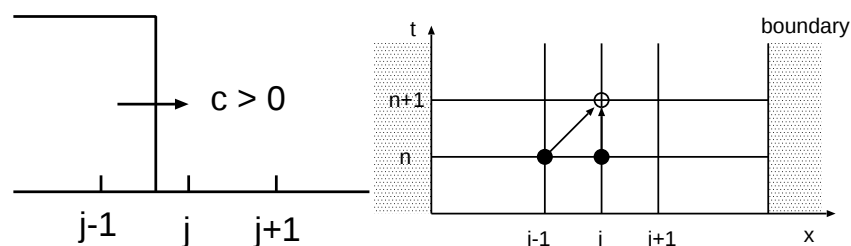


図 1.8: 左図：右方向に伝わる波、右図：1次精度風上差分における依存関係

1次元スカラー移流方程式を時間については前進差分、空間については風上差分として差分化すると、 $c > 0$ の場合、以下の差分式を得る。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (1.52)$$

したがって

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n) \quad (1.53)$$

図 1.8右図に1次精度風上差分における変数の依存関係を示す。増幅率は

$$g = 1 - \nu(1 - e^{-i\theta}) \quad (1.54)$$

$$= (1 - \nu + \nu \cos \theta) - i\nu \sin \theta \quad (1.55)$$

したがって

$$|g|^2 = (1 - \nu + \nu \cos \theta)^2 + \nu^2 \sin^2 \theta \quad (1.56)$$

$$= 1 - 2\nu(1 - \nu)(1 - \cos \theta) \quad (1.57)$$

これより、 $0 \leq \nu \leq 1$ の場合、任意の θ について $|g| \leq 1$ であり、安定であることがわかる。

練習問題

- クーラン数 ν が 1, 0.75, 0.5 の場合について1次精度風上差分の増幅率 $|g|$ を位相 θ の関数として求め、極座標 $(|g|, \theta)$ でプロットせよ。
- 1次精度風上差分法の差分式 (1.53) にテイラー展開を適用することによって、以下の偏微分方程式が得られることを示せ。右辺第1項が拡散項であることを注意して、クーラン条件を導け。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} c \Delta x (1 - \nu) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{6} c (\Delta x)^2 (2\nu^2 - 3\nu + 1) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \quad (1.58)$$

1.6.6 Lax-Wendroff のスキーム

Lax-Wendroff スキームはテイラー展開にもとづく差分法であり、以下のようにして導かれる。

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) \quad (1.59)$$

右辺第 2 項、第 3 項に $\partial u / \partial t = -c \partial u / \partial x$ 、 $\partial^2 u / \partial t^2 = c^2 \partial^2 u / \partial x^2$ を代入すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \Delta t \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} c^2 \Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta t^3) \quad (1.60)$$

空間微分 $\partial u / \partial x$ 、 $\partial^2 u / \partial x^2$ をそれぞれ中心差分で近似すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2} c \Delta t \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{1}{2} c^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (1.61)$$

これが Lax-Wendroff スキームである。以上の導出過程からわかるように、Lax-Wendroff スキームは空間、時間についていずれも 2 次精度の解法になっている。

Lax-Wendroff スキームの安定性を von Neumann の方法で調べてみる。増幅率は

$$g = 1 - \frac{\nu}{2} (e^{i\theta} - e^{-i\theta}) + \frac{\nu^2}{2} (e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}) \quad (1.62)$$

$$= 1 - i\nu \sin \theta + \nu^2 \cos \theta - \nu^2 \quad (1.63)$$

したがって、

$$|g|^2 = [1 - \nu^2(1 - \cos \theta)]^2 + \nu^2 \sin^2 \theta \quad (1.64)$$

$$= 1 - 2\nu^2(1 - \nu^2)(1 - \cos \theta) \quad (1.65)$$

これより、 $|\nu| \leq 1$ であれば任意の θ について $|g| \leq 1$ であり、安定であることがわかる。

1 次元スカラー方程式の場合、Lax-Wendroff スキームは以下のように 2 段階に分けたスキームと同等である。この方法を 2 段階 Lax-Wendroff 法 と呼ぶ。

$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{u_{j+1}^n + u_j^n}{2} - \frac{1}{2} c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^n - u_j^n) \quad (1.66)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j-1/2}^{n+1/2}) \quad (1.67)$$

これを図示すると図 1.9 のようになる。

Lax-Wendroff 法は空間、時間についていずれも 2 次精度の方法であるが、不連続面近傍で数値振動を生じるという欠点を持つ。これに関して、以下の定理が知られている。

Godunov の定理

1 次元スカラー移流方程式 $\partial u / \partial t + c \partial u / \partial x = 0$ に対して、 $u_j^{n+1} = \sum_k a_k u_{j+k}^n$ の形の 2 次精度以上の精度を持つどのようなスキームも解の単調性を維持することはできない。

数値振動を抑える方法には以下のものがある。

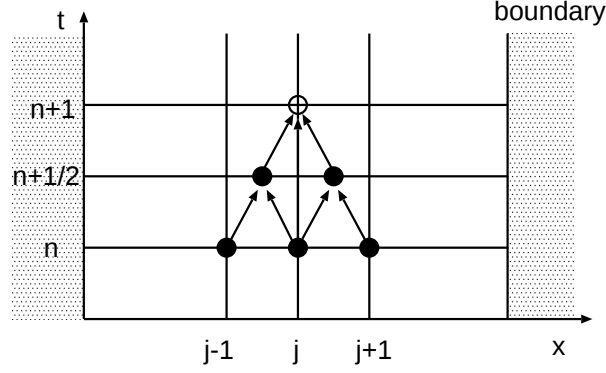


図 1.9: 2 段階 Lax-Wendroff スキームにおける情報の流れ

- 人工粘性を加える
粘性係数を κ として、

$$\tilde{u}_j^{n+1} = u_j^{n+1} + \kappa(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (1.68)$$

とする。

- 流束制限関数を用いる
これについては次節で解説する

1.7 流束制限関数の導入

1.7.1 保存形表示と数値流束

1 次元スカラー移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1.69)$$

を以下の形 (保存形) に変形する

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (1.70)$$

ここで、

$$f = cu \quad (1.71)$$

は流束をあらわす。図 1.10 に四角で囲って示した領域 ($x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}$) における保存量 u の時間変化は、この時間の間に左右の境界 $x_{j\pm 1/2}$ を通って出入りする流束 $\tilde{f}_{j\pm 1/2}$ の差に等しい。これより次式を得る。

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{f}_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n) \quad (1.72)$$

メッシュ境界の流束 $\tilde{f}_{j\pm 1/2}^n$ は各メッシュ点での流束から近似的に計算することができる。これを 数値流束 と言う。各種差分スキームの差分式から数値流束を求めると以下のようになる。

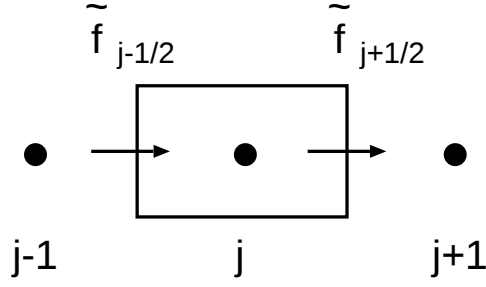


図 1.10: メッシュ点とメッシュ境界を通して出入りする流束の関係

- FTCS

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}(f_{j+1}^n + f_j^n) \quad (1.73)$$

- Lax-Friedrich

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{1}{\nu}\right) f_{j+1}^n + \left(1 + \frac{1}{\nu}\right) f_j^n \right] \quad (1.74)$$

- Upwind (風上差分)

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \left[(f_{j+1}^n + f_j^n) - |c|(u_{j+1}^n - u_j^n) \right] \quad (1.75)$$

- Lax-Wendroff

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \left[(1 - \nu) f_{j+1}^n + (1 + \nu) f_j^n \right] \quad (1.76)$$

1.7.2 流束制限関数

Lax-Wendroff 法の数値流束を補正することによって、不連続面近傍での振動を抑えることができないかどうか考えてみよう。Lax-Wendroff 法の数値流束は次のようにも書ける。

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = c \left[u_j^n + \frac{1}{2}(1 - \nu)(u_{j+1}^n - u_j^n) \right] \quad (1.77)$$

数値振動が生じない 1 次精度の風上差分の数値流束は $c > 0$ のとき $\tilde{f}_{j+1/2}^n = cu_j$ であり、Lax-Wendroff 法の数値流束の右辺第 1 項と一致している。そこで、Lax-Wendroff 法の数値流束の右辺第 2 項を次のように補正してみる。

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = c \left[u_j^n + \frac{1}{2}(1 - \nu) B_{j+1/2} (u_{j+1}^n - u_j^n) \right] \quad (1.78)$$

ここで導入した $B_{j+1/2}$ のことを 流束制限関数 と呼ぶ。数値流束 (1.78) を差分式 (1.72) に代入して変形すると次式を得る。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{u_{j-1}^n - u_j^n} = \nu \left[1 - \frac{1}{2}(1 - \nu) B_{j-1/2} \right] + \frac{1}{2} \nu (1 - \nu) \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \quad (1.79)$$

ここで、

$$r_j \equiv \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{u_{j+1}^n - u_j^n} \quad (1.80)$$

である。

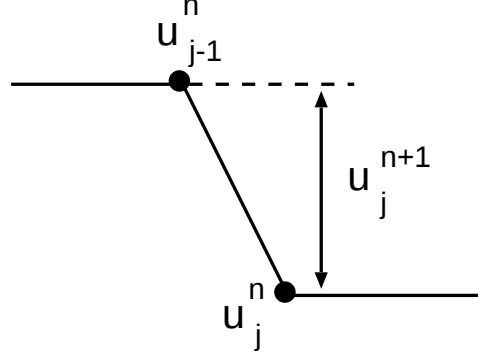


図 1.11: 数値振動が生じないようにするために u_j^{n+1} の値を制限する範囲

数値振動が生じないようにするために、図 1.11に示したように u_j^{n+1} が u_j^n と u_{j-1}^n の間の値をとるように制限を加えることにしよう。これには、式 (1.79) の左辺の値を以下のように制限すればよい。

$$0 \leq \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{u_{j-1}^n - u_j^n} \leq 1 \quad (1.81)$$

式 (1.79) の右辺を代入すると以下の条件を得る。

$$-\frac{2}{\nu} \leq B_{j-1/2} - \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \leq \frac{2}{1-\nu} \quad (1.82)$$

CFL 条件が満たされている場合 $0 \leq \nu \leq 1$ なので、

$$-2 \leq B_{j-1/2} - \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \leq 2 \quad (1.83)$$

この関係式は、以下のふたつの条件がともに満たされれば成立する。

$$0 \leq B_{j+1/2} \leq 2 \quad (1.84)$$

かつ

$$0 \leq \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \leq 2 \quad (1.85)$$

この範囲を図示すると図 1.12の斜線のない領域になる。 $r < 0$ の場合は $B_{j+1/2} = 0$ のみが許される。

Lax-Wendroff 法の数値流束では $B_{j+1/2} = 1$ (図の LW) であるため、 $r < 1/2$ の領域で許容範囲外となり、数値振動が生じる。図の許容範囲内にある流束制限関数を用いることにより、数値振動が起これないようにすることができる。その一例は以下の minmod 関数 (図の minmod) である。

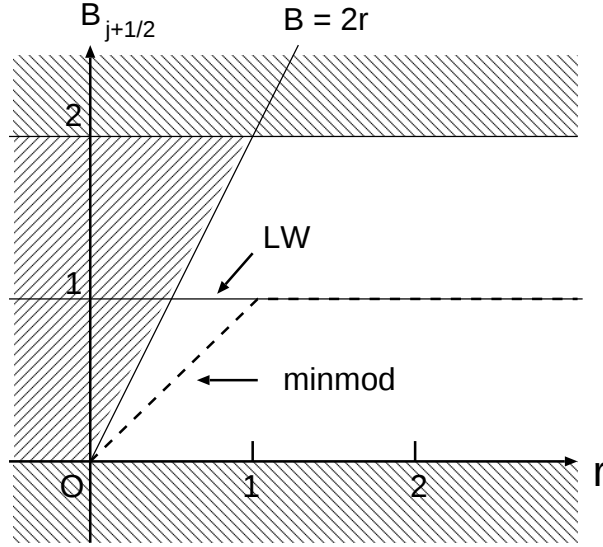


図 1.12: 流束制限関数 $B_{j+1/2}(r)$ の許容範囲。LW は Lax-Wendroff スキームの数値流束に対応する制限関数。minmod は minmod 関数。

$$\minmod(r) = 0 \quad (r < 0) \quad (1.86)$$

$$= r \quad (0 \leq r \leq 1) \quad (1.87)$$

$$= 1 \quad (r > 1) \quad (1.88)$$

1.7.3 TVD スキーム

以下のように定義されるメッシュ点ごとの物理量の変化量の総和のことを Total Variation (TV) と言う。

$$TV(u^n) \equiv \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n| \quad (1.89)$$

Total Variation が時間とともに増大しないという条件

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (1.90)$$

のことを Total Variation Diminishing (TVD) 条件と呼ぶ。

流束制限関数を導入することによって、差分スキームが TVD 条件を満たすようにすることができる。

参考文献

- 流体力学の数値計算法 (1994) 東京大学出版会、藤井孝蔵著
- 昨年度の数値天体物理学サマースクールのテキスト (2000)、富阪幸治、花輪知幸著