第1章 差分法概論

1.1 時間・空間の離散化

時間・空間についての偏微分方程式を数値計算により近似的に解く手法の1つに(有限)差分法があ る。計算機は四則演算(と条件分岐)しかできないので、連続な独立変数である時間*t*と空間座標*x*を 有限な時間間隔 Δt と空間格子間隔 Δx に分割する必要がある。1次元空間 $0 \le x \le L \ge N$ 個に分割すると、 空間格子(メッシュ)は図 1-1 のようになり、左から*i*番目の格子点(グリッド)の座標を x_i と書くこ とにする。時間についても、連続的な時間変化を有限な時間間隔で進行するものとし、時間ステップと いう用語をつかう。*n*ステップ目の時刻を*t*ⁿとすると、次のステップは*t*ⁿ⁺¹ = *t*ⁿ + Δt となる。一般に、空 間離散化のインデックスは下付き添字、時間ステップは上付き添字で表現することが多い。



図 1-1 時間・空間の離散化

時間・空間についての偏微分方程式の従属変数 f(x,t)は、グリッド上で解かれる。fについても同じように添字を用い、nステップ目の時刻のi番目の格子点上でfの値を

$$f(t^{n}, x_{i}) = f_{i}^{n}$$
(1-1)

と表現する。

1.2 微分の差分近似

高校数学で始めて微分が出てきたとき、

$$\frac{d}{dx}f(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$
(1-2)

であったことを思い出すことができる。差分法では、上式で $\Delta x \to 0$ の極限を取らずに有限のままの値で 計算する。先の添字を使って書けば

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_{i} = \frac{f_{i+1} - f_{i}}{\Delta x} \tag{1-3}$$

となる。当然、数学的に微分した値には一致しないが、Δxを小さな値に設定すれば近似精度が良くなる

ことは想像できる。この差分近似の精度について確認してみる。 $f(x) = \sin x$ のときに、差分近似と数学的な微分の厳密解 $\cos x$ を比較してみる。表 1-1 は、 $0 \le x \le 1$ をN = 10等分した場合の計算結果である。 格子間隔を $\Delta x = 0.1$ $\Delta x = 0.05$ $\Delta x = 0.025$ と変えたとき、どのようになるかを以下で確認することができる。(ボタンをクリックすることで、対応する数表が表示される。)

	Δx	x = 0.1	$\Delta x = 0.05$	$\Delta x = 0.025$
i	X _i	$f_x = \sin x_i$	$\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}$	$\cos x_i$
1	0.0	0.000000000	0.998334166	1.000000000
2	0.1	0.099833417	0.988359141	0.995004165
3	0.2	0.198669331	0.968508759	0.980066578
4	0.3	0.295520207	0.938981356	0.955336489
5	0.4	0.389418342	0.900071963	0.921060994
6	0.5	0.479425539	0.852169348	0.877582562
7	0.6	0.564642473	0.795752138	0.825335615
8	0.7	0.644217687	0.731384037	0.764842187
9	0.8	0.717356091	0.659708187	0.696706709
10	0.9	0.783326910	0.581440752	0.621609968
11	1.0	0.841470985	0.497363753	0.540302306

表 1-1 差分法の計算精度

差分近似を数学的に評価するには、 $f(x_i + \Delta x)$ を x_i でテーラー展開すると、

. . .

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_i \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_i \Delta x^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\Big|_i \Delta x^3 +$$
(1-4)

.

であり、添字で表した以下の差分近似は前進差分(forward difference)という。

$$\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_i + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_i \Delta x + \frac{1}{6}\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\Big|_i \Delta x^2 +$$
(1-5)

右辺第1項が数学的に厳密な微分項であり、それに加えて第2項以降が続く。第2項以降は差分近似の 誤差であり、 Δx が小さな値であるとすると Δx の1乗の第2項が最も大きな計算誤差となる。

今まで格子点*i*と*i*+1を使って差分式を作成したが、格子点*i*-1と*i*を使って作成することもでき、

$$\frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_i - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_i \Delta x + \frac{1}{6}\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\Big|_i \Delta x^2 +$$
(1-6)

後退差分式(backward difference)が得られる。上記はi点の差分式を作成するために左右に偏った格子 点の使い方であるので、格子点i-1とiとi+1を使った差分式は(1-4)と(1-5)を足し合わせることにより、

$$\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i} + \frac{1}{6}\frac{\partial^{3} f}{\partial x^{3}}\Big|_{i}\Delta x^{2} +$$
(1-7)

中心差分(central difference)が導出できる。(1–7)式の右辺の第2項からの誤差は Δx^2 から始まっている

ので、前進差分式あるいは後退差分式より計算精度が高かく2次精度の差分式である。さらに高次の差 分式は3次精度の差分式

$$\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i} = \frac{-f_{i+2} + 6f_{i+1} - 3f_{i} - 2f_{i-1}}{6\Delta x}$$
(1-8)

$$\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i} = \frac{2f_{i+1} + 3f_{i} - 6f_{i-1} + f_{i-2}}{6\Delta x}$$
(1-9)

や4次精度の差分式

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i} = \frac{-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}}{12\Delta x} \tag{1-10}$$

が代表的である。1次精度や2次精度という意味は、差分式による計算結果と数学的な微分の厳密解の 誤差の平均

$$ERROR = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} |f'(x_i) - \not{\Xi} \dot{\Im} \vec{\Im}|$$
(1-11)

をプロットして見ると理解できる。ここでは、 $f(x) = \sin kx$, $k = 2\pi$ とし、領域 $0 \le x \le L$, L = 1.0をN 等分し、



図 1-2 差分式の格子サイズに対する精度

格子点数 N を変化させ、格子間隔は $\Delta x = L/N$ に対する差分式の誤差を示した。図 1-2 を見ると誤差の傾きが精度の次数を表していることが分かる。

2階微分に対する差分式は、式(1-5)から式(1-6)を引き算することにより

「応用数値解析」テキスト

$$f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \bigg|_i \Delta x^2 + \frac{1}{12} \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} \bigg|_i \Delta x^4 +$$
(1-11a)

となり、

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}$$
(1-11b)

が2階微分に対する2次精度の差分式である。4次精度の差分式は、

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Big|_i = \frac{-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}}{12\Delta x^2}$$
(1-11c)

となる。これらについても、図 1-1 のように精度検証を行うことを薦める。

1.3 移流方程式の差分法による計算

1.3.1 時間前進空間中心差分による計算

1次元移流方程式は、Navier Stokes 方程式の対流項部分の性質を現す双曲線型方程式の最もシンプルな 形であり、移流速度uが一定の場合はf(t,x) = F(x-ut)という一般解を持つ。ここでF(x)はxの任意関数 で、初期状態がf(0,x) = F(x)であれば、時刻tではF(x)が距離utだけ右にシフトすることを示している。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \tag{1-12}$$

図 1-1 のような時間・空間の離散化を行い、時間微分には前進差分式、空間微分には中心差分式を適用 すると、

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + u \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$$
(1-13)

になる。時刻*n*ステップまで計算された状態から*n*+1ステップ目を計算することを考えると、空間微分の時刻を*n*ステップのものにしておけば、式(1-13)は容易に解けて、

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{1}{2} \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n \right)$$
(1-14)

となる。式(1–13)は時間 Δt 後の値 f_i^{n+1} を解くために f_{i-1}^n , f_i^n , f_{i+1}^n を使っていて、 *i* 番目の格子点から – $\Delta x \le x \le \Delta x$ までの値しか参照していない。一方、時間 Δt 間に式(1-12)の解は物理的に $u\Delta t$ の距離を伝播 するので、その解が数値的に参照できる範囲 Δx 内になければならない。従って、

$$u\Delta t \le \Delta x \tag{1-15}$$

となるように Δt と Δx を決めなければならない。式(1–15)をクーラン条件または CFL(Courant Fradrics Levy)条件と言い、CFL 数を $u\Delta t / \Delta x$ と言うこともある。実際には、配列として確保する空間格子の間隔 Δx は計算量やメモリー量から決められることが多く、CFL 条件は時間ステップの幅 Δt を決める条件として用いられる。

式(1-14)をプログラム化することは容易であり、時間については一方向にしか進まないので現在のス

テップnの変数fと次のステップn+1の変数fnがあれば十分である。n+1ステップの計算が終了した後、 fnの値をfにコピーして更新することにより、さらに次のステップが計算できる。空間については、 0≤x≤1をN等分して格子点を作成する場合、N+1個の格子点があるので

double f[N+1], fn[N+1];

としてN+1個の要素を持つ配列を宣言する。境界条件を $f_0 = 0, f_N = 0$ とすると、各時刻(ステップ)で 計算するのは $i=1 \sim N-1$ までで、

for(i=1; i < N; i++) {
 fn[i] = f[i] - 0.5*cfl*(f[i+1] f[i-1]);
}
f[0] = 0.0; f[N] = 0.0;</pre>

ここで変数 cfl は、上述の CFL 数であり、事前に設定する必要がある。時間更新をこの後に全格子点で行い、

for(i=0; i < N+1; i++) f[i] = fn[i];</pre>

1 ステップの計算が終了する。これを N_{end} ステップまで計算するように外側に時間ループを置く。初期 条件として、 $0.4 \le x \le 0.6$ でf = 1、それ以外ではf = 0という矩形プロファイルを設定することにする。 以上をまとめると、

Program 1

```
100
#define
       Ν
#define Nend
              200
#define
       U
              1.0
     double f[N+1], fn[N+1], x[N+1], cfl = 0.4, time = 0.0,
           dx = 1.0/(double)N, dt = cfl^*dx/U;
     int
                  icnt = 0;
         i,
     for(i=0; i < N+1; i++) { f[i] = 0.0; x[i] = dx*(double)i; }</pre>
     for(i=40; i < 61; i++) { f[i] = 1.0; }
     do {
          for(i=1; i < N; i++) {
             fn[i] = f[i] - cfl*0.5*(f[i+1] - f[i-1]);
          }
          fn[0] = 0.0; fn[N] = 0.0;
          } while(icnt++ < Nend);</pre>
```

になり、これが main 関数となる。U は式(1–12)の移流速度 $_u$ である。これに各ステップのf の値を Enter キーを押すごとに表示する関数を加えたものが PROGRAM 1 である。



図 1-3 時間前進・空間中心差分による移流方程式の計算

1.3.2 計算の安定性

Program1 を実行して計算結果を確認して見る。式(1-12)の解析解から、計算結果は初期プロファイル が移流速度 U=1.0 で右に移動するはずである。しかし、計算結果は図 1-3 に示す通り矩形波は時間とと もにさまざまな波長の波に分裂し、その振幅は急激に大きくなり解析解からは遠く離れた結果となる。 このように計算結果が時間とともに振幅が指数関数的に増大してしまうような状態を「数値発散する」 と呼ぶ。

Von Neumann の安定性解析を行うことにより、線形偏微分方程式の安定性を調べることができる。数値計算には、丸め誤差を始めとしてさまざまな数値誤差が含まれる。その誤差を波数kの平面波の重ね合わせ(フーリエ級数)で表現できるとすると、nステップにおける波数kの誤差は $\delta f = \delta f^n e^{ikx}$ とかける。ここで、iは虚数単位であり、jを格子点番号とする。式(1-14)で $i \rightarrow j$ とし、 $\delta f = \delta f^n e^{ikx}$ を代入すると、

$$\delta f^{n+1} e^{ikx} = \delta f^n e^{ikx} - \frac{1}{2} \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left(\delta f^n e^{ik(x+\Delta x)} - \delta f^n e^{ik(x-\Delta x)} \right)$$
(1-16)

となり、両辺をe^{ikx}で割ると、

$$\delta f^{n+1} = \delta f^n - \frac{1}{2} \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left(\delta f^n e^{ik\Delta x} - \delta f^n e^{-ik\Delta x} \right)$$

= $\delta f^n \left(1 - iC_{CFL} \sin k\Delta x \right)$ (1-17)

無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科 となる。ここで CFL 数を $C_{CFL} = u\Delta t / \Delta x$ で置き換えた。誤差の時間変は、振幅の比 $\delta f^{n+1} / \delta f^n$ の絶対値

$$\left|\frac{\delta f^{n+1}}{\delta f^n}\right| = \sqrt{1 + C_{CFL}^2 \sin^2 k \Delta x}$$
(1-18)

であるので、 $0 \le k \Delta x \le \pi$ のどんな波数kに対してもn+1ステップの誤差の振幅 $|\delta f^{n+1}|$ は、nステップの誤差の振幅 $|\delta f^{n}|$ よりも大きくなることが分かる。つまり、時間前進・空間中心差分を用いて移流方程式を解く限り、計算中に発生した誤差が計算ステップを進めるごとに指数関数的に大きくなり数値発散することが分かる。

1.3.3 風上差分による計算

前節、前々節で移流方程式のような偏微分方程式を差分法で解く場合、微分項に対してどのような差 分式を適用しても計算できる訳ではないことが分かった。ここでは、移流方程式の解の特徴を考えて差 分式を適用してみる。移流速度uが時間的に変化しないとき、u>0であれば解はx軸の正の方向に移動 し、u<0であれば負の方向に移動する。つまり、nステップのプロファイルはn+1ステップの間に風上 から風下に移動するので、nステップにおける差分式を風上方向に取る。

$$u > 0$$
のとき、 $\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{j} = \frac{f_{j} - f_{j-1}}{\Delta x}$ (1-19)

$$u < 0$$
のとき、 $\frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{i} = \frac{f_{i+1} - f_{i}}{\Delta x}$ (1-20)

を移流方程式(1-12)に適用すると、 u > 0のとき

$$f_j^{n+1} = f_j^n - C_{CFL} \left(f_j^n - f_{j-1}^n \right)$$
(1-21)

となる。ここでも、下付添字 *j* は格子点番号である。Program1の中の一行を fn[j] = f[j] - cf1*(f[j] - f[j-1]); に変更すると、移流方程式を風上差分で解くプログラム(PROGRAM 2)になる。前節と同じ 矩形の初期プロファイルに対して移流方程式を計算すると図 1-4の結果となる。図から分かるように安 定に計算できていて、ステップが進むとともにプロファイルが拡散して行くことが分かる。この拡散は 移流項の 1 階微分に 1 次精度の差分式を使ったため、離散化の誤差が拡散的に働いているためであり、 数値拡散と呼ぶ。PROGRAM 2 では、周期的境界条件にしてあり、ステップをさらに進めることで数値 拡散の大きさを実感することができる。

Von Neumann の安定性解析を行うために $\delta f = \delta f^n e^{ikx}$ を式(1–21)に代入すると、

$$\mathcal{F}^{n+1} = \mathcal{F}^n - C_{CFL} \left(\mathcal{F}^n - \mathcal{F}^n e^{-ik\Delta x} \right) = \mathcal{F}^n \left(1 - C_{CFL} + C_{CFL} e^{-ik\Delta x} \right)$$
(1-22)

になり、振幅の比の絶対値を取ると、

$$\left|\frac{\delta f^{n+1}}{\delta f^n}\right| = \sqrt{\left(1 - C_{CFL} + C_{CFL}\cos k\Delta x\right)^2 + C_{CFL}^2\sin^2 k\Delta x}$$
(1-23)

になり、 $C_{CFL} \leq 1$ であれば1以下になり安定であることが分かる。

「応用数値解析」テキスト



図 1-4 風上による移流方程式の計算

1.3.4 セミ・ラグランジアン手法

移流方程式の風上差分法による計算を別の見方から考えてみる。移流方程式の解は、nステップの空間プロファイルがn+1ステップでは形を変えずに風上から風下に $u\Delta t$ の距離を移動する。格子点 j で $n \rightarrow n+1$ の計算はu > 0の場合、nステップの $x_{j-1} \le x \le x_j$ のプロファイルが移動してくるので、この範囲 の補間関数を考える。 $x = x_j$ で $f_j^n \ge x = x_{j-1}$ で f_{j-1}^n を結ぶ直線の補間式F(x)は、

$$F(x) = \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{x_j - x_{j-1}} (x - x_j) + f_j^n$$
(1-24)

となる。n+1ステップの $x = x_i$ における f_i^{n+1} は、補間式(1-24)の $x = x_i - u\Delta t$ の値になるので、

$$f_{j}^{n+1} = F^{n}(x_{j} - u\Delta t) = \frac{f_{j}^{n} - f_{j-1}^{n}}{\Delta x} (-u\Delta t) + f_{j}^{n}$$
(1-25)

となる。このように風上側にnステップのプロファイルの補間式を作成し、u∆tの距離遡った移流原点の値を補間してn+1ステップの値とする方法をセミ・ラグランジュ手法と言う。式(1-25)は風上差分の式(1-21)に一致していることから、移流方程式の風上差分は1次(直線)補間を用いたセミ・ラグランジュ手法であることが分かる。



1.3.5 Cubic セミ・ラグランジアン手法

前節では風上領域に最もシンプルな直線で補間関数を作成したが、より高い精度で補間関数を作成す れば、移流計算の精度が向上し数値拡散が少なくなることが予想できる。 $u \le 0$ のとき、 f_{j-2}^n , f_{j-1}^n , f_{j}^n , f_{j+1}^n の4点を通る3次多項式を考える。

補間関数を

$$F_{c}(x) = a(x - x_{j})^{3} + b(x - x_{j})^{2} + c(x - x_{j}) + f_{j}^{n}$$
(1-26)

と置き、未定定数a, b, cを $F_c(x_{j-1}) = f_{j-1}^n$, $F_c(x_{j-2}) = f_{j-2}^n$, $F_c(x_{j+1}) = f_{j+1}^n$ の条件を使って決定すると、

$$a = \frac{f_{j+1}^n - 3f_j^n + 3f_{j-1}^n - f_{j-2}^n}{6\Delta x^3}, \quad b = \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{2\Delta x^2}, \quad c = \frac{2f_{j+1}^n + 3f_j^n - 6f_{j-1}^n + f_{j-2}^n}{6\Delta x}$$
(1-27)

となる。ここで、全ての格子間隔は∆xであるとしている。式(1-26)を Cubic ラグランジアン補間という。



図 1-5 Cubic ラグランジュ補間

より多くの点を通過するように作れば、高次の補間関数になる。式(1-26)を使って*n*ステップの補間関数のらセミ・ラグランジュ手法により*n*+1ステップの値を求めるには、

$$f_{j}^{n+1} = F_{c}^{n}(x_{j} - u\Delta t)$$
(1-28)

とする。1.3.1節と同じ矩形の初期プロファイルに対して移流方程式を計算すると、



図 1-5 Cubic セミ・ラグランジアン手法による移流方程式の計算

図 1-5 のようになる。同じ 22 ステップの計算結果を図 1-4 の 1 次風上差分と比較すると、僅かなアン ダーシュートとオーバーシュートがあるものの、明らかに矩形波のプロファイルを良く捕らえているこ とが分かる。移流速度が 1 で、CFL 数を 0.4 としたので Δt = 0.004 (Δx = 1.0/100 なので)となり、250 ス テップで距離 1 進む。周期境界条件を課しているので 1 周して元の位置に戻り、1 周、2 周と進むにつ れ少しプロファイルは拡散して行くが、1 次風上差分と比較すると数値拡散が非常に少ないことが分か る。(PROGRAM 3)

1.3.6 CIP 法

Cubic セミ・ラグランジュ法は4点を使って補間関数を構築したが、風上2点(計算点と風上1点) で補間関数を構築するのが理想的である。しかし、2点の情報だけでは1次(直線)風上補間しかでき ないので、別の情報を格子点に与えることを考える。各格子点上で、従属変数の値に加え空間微係数も 独立して計算し、3次補間関数を構築するのが CIP 法である。今まで通り、従属変数の値 $_f$ に対しては 式(1–12)を使い、新たに導入する微係数 $_{f_x}$ については、式(1–12)を微分して

$$\frac{\partial f_x}{\partial t} + u \frac{\partial f_x}{\partial x} = 0 \tag{1-29}$$

を用いる。格子点 j で移流方程式を計算するための補間関数は u ≥0の場合、



 $x = x_{j} \ \mathcal{C} F(x_{j}) = f_{j}^{n} \ \mathcal{C} F_{x}(x_{j}) = f_{x,j}^{n} \ \mathcal{C}$ $F(x) = a(x - x_{j})^{3} + b(x - x_{j})^{2} + f_{x,j}^{n}(x - x_{j}) + f_{j}^{n}$ (1-30)

のように仮定し、未定定数 $a \ge b \ge F(x_{j-1}) = f_{j-1}^n \ge F_x(x_{j-1}) = f_{x,j-1}^n$ から決定すると、

$$a = \frac{f_{x,j}^{n} + f_{x,j-1}^{n}}{\Delta x^{2}} - 2\frac{f_{j}^{n} - f_{j-1}^{n}}{\Delta x^{3}}, \qquad b = \frac{2f_{x,j}^{n} + f_{x,j-1}^{n}}{\Delta x} - 3\frac{f_{j}^{n} - f_{j-1}^{n}}{\Delta x^{2}}$$
(1-31)

になる。n+1ステップの従属変数は、式(1-12)から

$$f_{j}^{n+1} = F(x_{j} - u\Delta t) = a(-u\Delta t)^{3} + b(-u\Delta t)^{2} - u\Delta t f_{x,j}^{n} + f_{j}^{n}$$
(1-32)

で時間発展し、n+1ステップの微係数 f_x も式(1-29)から解析解は f_x のプロファイルが速度uで移流することが分かる。従って、

$$f_{x,j}^{n+1} = F_x(x_j - u\Delta t) = 3a(-u\Delta t)^2 + 2b(-u\Delta t) + f_{x,j}^n$$
(1-33)

となる。式(1-32), (1-33)に従って矩形波の初期プロファイルに対して移流方程式を解くと、



無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科

44 STEP



図 1-6 CIP 法による移流方程式の計算

図 1-6 のような結果になる。Cubic セミ・ラグランジュ法による計算よりさらに初期プロファイルを維持していることが分かる。1 周した後の結果(250 ステップ)と2 周した後の結果(500 ステップ)が余 り変わらない点にも注目すべきである。(PROGRAM 4)

1.4 時間精度と空間精度

1.4.1 時間積分

前節では、時間・空間の偏微分方程式と解くために、時間微分項に時間差分、空間微分に空間差分を 適用した。*n*ステップから差分式を解くことで*n*+1ステップの数値解を求めているので、時間・空間積 分を行ったことになる。方程式(1-12)は、

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -u \frac{\partial f}{\partial x} \tag{1-34}$$

であるので時間微分と空間微分は等価であり、時間積分と空間積分も等価である。方程式(1–12)を解く には時間積分を 1 回行えば良い。時間積分はnステップの値 $f(t^n)$ からn+1ステップの値 $f(t^n + \Delta t)$ まで の $t^n \le t \le t^{n+1} = t^n + \Delta t$ を積分することである。 $f(t^n + \Delta t) \ge f(t^n)$ の関係は、 $f(t^n + \Delta t) \ge t = t^n$ の周りでテ ーラー展開すると、

$$f(t^{n} + \Delta t) = f(t^{n}) + \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{t=t^{n}} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} f}{\partial t^{2}}\Big|_{t=t^{n}} \Delta t^{2} + \frac{1}{6} \frac{\partial^{3} f}{\partial t^{3}}\Big|_{t=t^{n}} \Delta t^{3} + \dots + \frac{1}{m!} \frac{\partial^{m} f}{\partial t^{m}}\Big|_{t=t^{n}} \Delta t^{m} + \quad (1-35)$$

である。nステップからn+1ステップを求めていて、時間積分である。前節までの表記を用いて書くと、

$$f^{n+1} = f^n + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|^n \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \Big|^n \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} \Big|^n \Delta t^3 + \dots$$
(1-36)

であり、時間の前進差分はテーラー展開の∆tについて1次までとった近似に他ならない。時間の微係数 を方程式(1-12)を使って空間微分に置き換えると、

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = -u \frac{\partial f}{\partial x}\Big|^n \tag{1-37}$$

無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科 になる。時間積分の精度を上げるには∆rの高次まで残せばよいので、2次精度にするには2階微分に対 する中心差分を用いて、

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \bigg|^n = \frac{f^{n+1} - 2f^n + f^{n-1}}{\Delta t^2}$$
(1-38)

を代入すると、

$$\frac{f^{n+1} - f^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|^n \qquad \qquad \frac{f^{n+1} - f^{n-1}}{2\Delta t} = -u\frac{\partial f}{\partial x}\Big|^n \qquad (1-39)$$

が得られる。式(1-37)または式(1-39)の右辺に空間の差分式を代入すれば、移流方程式に対する差分式 が得られる。時間に関して式(1-37)は $n \ge n+1$ ステップだけなので2ステップの時間積分、式(1-39)は n-1, n, n+1ステップが含まれるので3ステップの時間積分と言う。3ステップの場合、当然ながら変数 の配列を3つ確保しておく必要がある。

テーラー展開で 2 ステップの時間積分のまま高次精度にするには偏微分方程式の関係を使い、式 (1-34)に加えて

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \qquad \qquad \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} = -u^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}$$
(1-40)

などの関係式を導出できる。これらを式(1-36)に代入すると、

$$f^{n+1} = f^n - u\Delta t \frac{\partial f}{\partial x} \bigg|^n + \frac{(u\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \bigg|^n - \frac{(u\Delta t)^3}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \bigg|^n + \dots$$
(1-41)

となり、高階の空間差分を適用すれば高次精度の時間積分が可能になる。

1.4.2 ルンゲ・クッタ法

式(1-37)は1次陽解法、式(1-39)は Leap-flog 法などと呼ばれることもある。時間積分にはさまざまな 方法があり、常微分方程式の数値計算手法として開発されたものを使うことができる。有名な手法とし ては、アダムス・バッシュフォース(Adams-Bashforth)法やルンゲ・クッタ(Runge-Kutta)法などがあ り、どちらもn次精度まで高次精度の時間積分の公式が導き出されている。ここでは、利用度の高いル ンゲ・クッタ法の2段(2次精度),3段(3次精度),4段(4次精度)の式を示しておく。

 $f_t = \Psi(f)$ の方程式に対して、2段2次精度のルンゲ・クッタ法は

$$f_t^n = \Psi(f^n),$$
 (1-42)

$$f_t^1 = \Psi(f^n + f_t^n \Delta t)$$
, (1-43)

$$f^{n} = f^{n} + \frac{1}{2} \left(f^{n}_{t} + f^{1}_{t} \right) \Delta t$$
(1-44)

である。3段3次のルンゲ・クッタは、

$$f_t^n = \Psi(f^n) \quad , \tag{1-45}$$

$$f_t^{\ 1} = \Psi(f^{\ n} + \frac{2}{3}f_t^{\ n}\Delta t) \quad , \tag{1-46}$$

$$f_t^2 = \Psi(f^n + \frac{2}{3}f_t^1 \Delta t) \quad , \tag{1-47}$$

$$f^{n} = f^{n} + \frac{1}{8} \left(2f_{t}^{n} + 3f_{t}^{1} + 3f_{t}^{2} \right) \Delta t \quad , \tag{1-48}$$

無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科 である。有名な4段4次の公式は

$$f_t^n = \Psi(f^n) \quad , \tag{1-49}$$

$$f_t^1 = \Psi(f^n + \frac{1}{2} f_t^n \Delta t), \qquad (1-50)$$

$$f_t^2 = \Psi(f^n + \frac{1}{2}f_t^1 \Delta t), \qquad (1-51)$$

$$f_t^3 = \Psi(f^n + f_t^2 \Delta t), \qquad (1-52)$$

$$f^{n} = f^{n} + \frac{1}{6} \left(f^{n}_{t} + 2f^{1}_{t} + 2f^{2}_{t} + f^{3}_{t} \right) \Delta t \quad , \tag{1-53}$$

である。5段では4次精度までにしかならず、6段で5次精度になる。

1.4.3 差分方程式の空間精度

移流方程式に対する差分方程式(1-37)や(1-39)は、左辺が時間についての差分式、右辺が空間に対す る差分式と考えることができる。時間差分と空間差分の精度はそれぞれ任意であり、その数値結果の精 度がどうなるかを検証してみる。計算領域 $0 \le x \le 1$)に対し、周期的境界条件を仮定すると移流速度u = 1ならば解析解はt = 1で元のプロファイルに戻る。初期状態を単一波長 $k = 2\pi$ の $f(x) = \sin kx$ とし、t = 1に おいて数値解と解析解の誤差を調べる。



図 1-7 さまざまな精度の時間差分・空間差分の組み合わせに対する移流方程式の数値解の精度

解析解との誤差を以下の

「応用数値解析」テキスト

$$ERROR = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} |f_{j} - \sin kx_{j}|$$
(1-54)

(*L*1 ノルムという)式(1-54)で評価する。図 1-7 におけるデータ点は、N = 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512の 結果に対応し、 $\Delta x = 1/N$ である。図 1-7 の (3:1)などの表記は、3 次精度の空間差分と1 次精度の時間 差分を用いて移流方程式を解いたときの数値解の精度である。CFL数は0.1 に固定している。(1:1), (3:1), (4:1)が1次精度の傾きを示していることから、1 次精度の時間差分を使うと高次精度の空間差分を用い たとしても空間1次精度に下がってしまうことが分かる。これは、移流方程式を解く場合、時間刻み Δt と Δx の間にも

$$\frac{\Delta f}{\Delta t} = -u \frac{\Delta f}{\Delta x} \qquad \Delta t \approx \Delta x \qquad (1-55)$$

が成り立ち、時間差分の精度が空間差分の精度より低い場合には時間差分の精度が空間精度になってしまう。従って、空間 2 次精度の解の精度で計算する場合には、時間精度も 2 次以上で計算する必要がある。空間 3 次精度で計算するには、時間・空間ともに 3 次にするのが最も効率が良い。図 1-7 に(1:2)が 無いのは、1.3.1 の時間前進・空間中心差分であるため、1.3.2 で示した通り計算が不安定で発散するためである。時間積分の方法にもよるが、式(1-39)を使った場合には(2:1)も不安定であり、ここでは波数 $k = 2\pi$ に限定し CFL 数も小さめにしているが、さらに高波数の場合や長時間積分を行うと不安定な場合 もでてくる可能性があり、Von Neumann の安定性解析で調べるのが最善である。

通常、空間格子点数は最低でも数 10 はあり、差分ステンシルを延ばして高次精度にすることは比較 的容易である。一方、時間積分を高次精度にすることは保持しておくステップ数が増え、計算量の増大 とともに使用するメモリ量も増える。

1.4.4 差分方程式の時間精度

これまでの結果は、差分方程式の空間精度の観点で調べたが、時間精度の観点から調べてみる。時間 ステップの刻み幅 Δt は、陽的な解法では CFL 条件から $\Delta t \leq \Delta x/u$ に制限されてしまうので、一次風上差 分法の式(1-21)でnステップになっている右辺の空間差分をn+1ステップにすると、

$$f_{j}^{n+1} = f_{j}^{n} - C_{CFL} \left(f_{j}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1} \right)$$
(1-56)

となる。これは、時間微分に後退差分を使ったことに対応する。時間についてのテーラー展開の式(1-35) に対しては、 $f^n = f(t^{n+1} - \Delta t)$ を $t = t^{n+1}$ の周りで展開すると、

$$f(t^{n+1} - \Delta t) = f(t^{n+1}) - \frac{\partial f}{\partial t} \Big|^{n+1} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \Big|^{n+1} \Delta t^2 - \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} \Big|^{n+1} \Delta t^3 + \dots$$
(1-57)

$$f^{n+1} = f^n + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{t=0}^{n+1} \Delta t - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \Big|_{t=0}^{n+1} \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} \Big|_{t=0}^{n+1} \Delta t^3 + \dots$$
(1-58)

になり、 Δt の一次精度まで展開したことになる。式(1–56)のように、時間の差分式の中に2つ以上のn+1ステップの変数が含まれる離散化式を陰解法という。式(1–56)は時間について1次精度の陰解法である が、2次精度にするには式(1–58)で Δt^2 の項までとる方法以外に、式(1–36)と式(1–58)を両辺で足し合わ せることにより(詳細には2階微分項をさらに展開して) Δt^2 の項が消えるため、

$$f^{n+1} = f^{n} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \Big|^{n} + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|^{n+1} \right) \Delta t + \frac{1}{6} \frac{\partial^{3} f}{\partial t^{3}} \Big|^{n+1} \Delta t^{3} + \dots$$
(1-59)

の Δt の項まで計算すれば Δt^2 の精度が得られる。時間微分項を一次風上差分で表せば、

$$f_{j}^{n+1} = f_{j}^{n} - \frac{1}{2}C_{CFL}\left(f_{j}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1} + f_{j}^{n} - f_{j-1}^{n}\right)$$
(1-60)

となる。式(1-60)は時間2次精度、空間1次精度の差分式である。式(1-56)に対して Von Neumann の安定 性解析を行うと、

$$\frac{\partial f^{n+1}}{\partial f^n} = \frac{1}{1 + C_{CFL} - C_{CFL} e^{-ik\Delta x}} \qquad \qquad \left| \frac{\partial f^{n+1}}{\partial f^n} \right| = \frac{1}{\sqrt{2C_{CFL} (C_{CFL}^2 + 1)(1 - \cos k\Delta x) + 1}} \tag{1-61}$$

になり、任意の $C_{CFL} \ge 0$ に対して安定である。

1.4.3 節と同じように、計算領域($0 \le x \le 1$)に対し、周期的境界条件を仮定してt = 1解析解(初期状態)と式(1-54)で誤差を評価する。ここでは空間格子数を 256 に固定し、CFL 数(時間刻み Δt)を変えて時間精度を評価すると式(1-56)は図 1-8 の(1:1)、式(1-60)は (1:2)となる。図 1-7 と同じように、(1:2)などの表記は、1 次精度の空間差分と2 次精度の時間差分を示す。CFL 数が 0.1 以下では両者ともほぼ同じ精度を示しているが、CFL 数を増加させるとともに(1:1)は時間について1 次の傾きで増加し、(1:2)は2 次の傾きで増加する。これは、CFL 数が小さいときは時間差分より空間差分の精度が数値解の精度を決めていて、CFL 数が大きくなると時間精度が数値解の精度を決めるようになることが分かる。(1:2)は空間1次精度の風上差分を使っているにもかかわらず、CFL 数が 64 を超えるようになると(この領域を詳細に調べると)驚くことに空間精度も2 次精度になる。



無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科

図 1-8 移流方程式の数値解の時間精度

移流項の空間微分を風上3次にすると、時間1次精度の陰解法は、

$$f_{j}^{n+1} = f_{j}^{n} - C_{CFL} \frac{2f_{j+1}^{n+1} + 3f_{j}^{n+1} - 6f_{j-1}^{n+1} + f_{j-2}^{n+1}}{6}$$
(1-62)

となり、時間2次精度の陰解法は、

$$f_{j}^{n+1} = f_{j}^{n} - C_{CFL} \frac{2(f_{j+1}^{n+1} + f_{j+1}^{n}) + 3(f_{j}^{n+1} + f_{j}^{n}) - 6(f_{j-1}^{n+1} + f_{j-1}^{n}) + (f_{j-2}^{n+1} + f_{j-2}^{n})}{12}$$
(1-63)

である。CFL 数を変化させ移流方程式の数値解の精度を検証すると、図 1-8 の(3:1) と(3:2) になる。 図 1-8 で示す殆どの領域で(3:1) は時間 1 次精度、(3:2) は時間 2 次精度の傾きになっていることが分 かる。空間精度が 3 次と高いため、時間精度が解の精度を支配している。この CFL 数の領域では、数値 解は(3:1) が空間 1 次精度、(3:2) が空間 2 次精度を示す。(3:2) が本来の空間 3 次精度を示すのは、 CFL 数が 0.1 以下のときである。(3:1) が空間 3 次精度を示すのは、CFL 数が 10⁻⁴ 以下であることが予 想される。

1.4.5 セミ・ラグランジュ法の時間・空間精度

テーラー展開などで時間積分を行う場合は、時間精度と空間精度ははっきりしているが、1.3.4 で示したセミ・ラグランジュ法の精度はどうであろうか。前節のように数値実験をして確かめることもできるが、多項式の補間関数

$$F(x) = \sum_{m=0}^{M} a_m (x - x_j)^m$$
(1-64)

を用いることにより、 $x = x_i$ における m 階の空間微係数

$$\frac{\partial^m F}{\partial x^m}(x_j) = m! a_m \tag{1-65}$$

を導出できる。ただし、0≤m≤Mである。式(1-41)は式(1-65)を代入すると、

$$f_j^{n+1} = f_j^n + \sum_{m=1}^M \frac{(-u\Delta t)^m}{m!} \frac{\partial^m f}{\partial x^m} \Big|_j^n + \dots \approx f_j^n + \sum_{m=1}^M \frac{(-u\Delta t)^m}{m!} \frac{\partial^m F}{\partial x^m}(x_j)$$

$$= f_j^n + \sum_{m=1}^M a_m (-u\Delta t)^m$$
(1-66)

となる。 $f_j^n = a_0$ であることを考えると、式(1-66)の右辺は補間式(1-64)に $x = x_j - u\Delta x$ を代入したものと 同じであることが分かる。従って、多項式の補間関数を構築して、積分する時間内に移動してくる距離 を遡って次のステップを求めるセミ・ラグランジアン法は、時間に関するテーラー展開で補間関数の最 高次数までで打ち切ったことに等しい。式(1-65)のm階微係数は、M次多項式から導出しているので、 M次の空間精度を持つ。つまり、3次の多項式を用いるセミ・ラグランジュ法は、時間・空間ともに 3 次精度であることが分かる。CIP 法の式(1-31), (1-32)についても、同様の手続きで時間・空間精度を確 認することができる。

1.5 拡散方程式の差分法による計算

1.5.1 時間前進空間中心差分による拡散方程式の計算

拡散方程式や熱伝導方程式は放物型偏微分方程式に分類され、Navier-Stokes 方程式の粘性項の性質と同じである。

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \tag{1-67}$$

ここで κ は拡散係数で正の定数であるとする。差分法で拡散方程式を解くために、時間微分項に前進差 分、2 階の空間微分項に 2 次精度中心差分を適用してみると、

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} - \kappa \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} = 0$$
(1-68)

になる。拡散方程式(1-67)の解析解の1つとして、変数分離法を用いて容易に求めることのできる $g(x,t) = a_0 \exp(-\kappa kt)\sin(kx)$ を選ぶ。ここで、任意の振幅を $a_0 = 1$ 、波数 $k = \pi$ とし、計算領域 $0 \le x \le 1$ に 対して境界条件をf(0,t) = f(1,t) = 0としている。差分式(1-68)をプログラム化し、計算領域 $0 \le x \le 1$ の格 子点をN = 100 ($\Delta x = 1/100$)として実行すると、



図 1-9 時間前進・空間中心差分による拡散方程式の計算

となる(**PROGRAM 5**)。時刻 t = 0.1において、解析解との誤差を以下の L1 ノルム

$$ERROR = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \left| f_j - g(x_j, t) \right|$$
(1-69)

で評価する。 N = 16, 32, 64, 128, 256, 512 と増やして Δx を変化させ、時間刻みは $\Delta t = 0.25 * \Delta x^2 / \kappa$ で指定 している。図 1-10 から、格子点を増やし Δx を小さくすると、誤差は Δx^2 で減るので空間 2 次精度であ ることが分かる。式(1-67)から $\Delta t \sim \Delta x^2$ であるため、時間微分に Δt の 1 次精度の前進差分を用いても空 間精度が Δx^2 になっている。 水の中に落としたインクが広がるような局在するプロファイルが拡散するプロセスに対して、矩形状の 初期プロファイルを設定し、差分式(1-68)で計算(PROGRAM 6)すると図 1-11 のようになる。



図 1-10 時間前進・空間中心差分で解いた拡散方程式の精度



図 1-11 矩形波の初期プロファイルから計算した拡散方程式の数値解

1.5.2 拡散方程式に対する Von Neumann 安定解析 前節では拡散方程式に対し、時間微分に前進差分、2 階空間微分に中心差分を適用した計算は、安定 に計算できているように見える。Von Neumann の安定解析で確認するために、ここでも同じように $\delta f = \delta f^n e^{ikx}$ を式(1-68)に代入すると、

$$\delta f^{n+1} = \delta f^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} \delta f^n \left(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x} \right) = \delta f^n \left(1 - 2\mu (1 - \cos k\Delta x) \right)$$
(1-70)

になる。ここで、 $\mu = \kappa \Delta t / \Delta x^2$ は無次元の正の定数であり、拡散数と呼ばれることもある。振幅の比

$$\frac{\partial f^{n+1}}{\partial f^n} = 1 - 2\mu (1 - \cos k\Delta x) \tag{1-71}$$

は実数であり、 $0 \le \mu \le 1/2$ であれば安定であることが分かる。 $\kappa > 0$ であるので $0 \le \mu$ は満足されていて、 $\mu \le 1/2$ の方から

$$\Delta t \le \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\kappa} \tag{1-72}$$

が必要となる。拡散方程式を安定に計算するためには、格子間隔Δx に対して時間ステップΔt を式(1-72) にしなければならない。

熱伝導問題などでは、κが大きいことが多く式(1-72)に従ってΔtを決めると目的の時間まで計算する には、非常に多くの計算ステップが必要になる。そこで、式(1-67)の空間微分にn+1時刻の差分式を適 用すると、

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} - \kappa \frac{f_{j+1}^{n+1} - 2f_j^{n+1} + f_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0$$
(1-73)

のように、差分式中にn+1ステップの従属変数が2個以上ある陰解法になる。格子点数の連立方程式になり簡単には解けないが、Von Neumannの安定性解析を行うと

$$\frac{\delta f^{n+1}}{\delta f^n} = \frac{1}{1 + 2\mu(1 - \cos k\Delta x)}$$
(1-73)

 $0 \le \mu$ であれば任意の μ に対して安定であるので、式(1–72)に束縛されずに非常に大きな Δt で計算できる。 図 1-8 と同じ設定で μ (Δt)を変化させて計算精度を検証する。式(1–73)の計算は、連立一次方程式の 行列解法を用いる必要があり、これについては後述する。N = 100で固定し式(1–69)で評価すると図 1-12 となる。 $\mu < 0.1$ では計算精度がほぼ一定で陽解法の精度と一致し、計算結果の精度は空間精度が支配的 になっていることが分かる。 $\mu > 1$ では計算結果の精度が Δt の1 次精度になっていて、時間精度が支配 的になっている。時間2次精度の陰解法で計算すると、図 1-10の(2:2)の精度になる。 $\mu \le 64$ 程度から 時間精度が数値解の精度を決めるようになり、この領域では空間精度が4次精度になっていることを確 認することができる。 $\Delta t \sim \Delta x^2$ でから、 $\Delta t^2 \sim \Delta x^4$ になるからである。陰解法で任意の Δt で計算できるか らと言って、大きな Δt で計算すると非常に大きな誤差の数値解になることに注意する必要がある。時間 積分の精度が数値解に大きな影響を及ぼすことが分かる。



1.6 移流拡散方程式の差分法による計算

1.6.1 低精度差分法による解法

移流現象と拡散現象が同時に起こるような場合、現象は移流拡散方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0$$
(1-74)

に支配される。ここでuは移流速度であり、u=0のとき拡散方程式(1-67)になる。 κ は拡散係数で $\kappa=0$ のときに移流方程式(1-12)になる。式(1-74)を差分法で解くには、移流方程式の数値解法と拡散方程式の数値解法を組み合わせればよい。時間積分を1次精度陽解法とするとき、式(1-74)の第2項に2次精度の中心差分を使うと移流拡散方程式でも数値不安定となるので、1次精度風上差分を用い、第3項の2階微分には中心差分を用いると、

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + u \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{\Delta x} - \kappa \frac{f_{j+1}^n - 2f_j^n + f_{j-1}^n}{\Delta x^2} = 0$$
(1-75)

になる($u \ge 0$ の場合), $u = 10, \kappa = 1$ のとき、計算領域 $0 \le x \le 1$ に対して初期値 $f^0(x) = a_0 \sin(kx)$, $a_0 = 1$, $k = 2\pi$ プロファイルに対して、t = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04の計算結果は図 1-13 になる。(**PROGRAM 7**)

無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科



図 1-13 移流拡散方程式の差分法(移流: 1次風上差分,拡散: 2次中心差分)による計算

移流項は1次精度であり、拡散項は2次精度であるので、結果として計算精度がとうなるかを調べてみる。拡散係数と移流速度の比 u/κ をパラメータとし、t=0.02における解析解との誤差を格子間隔 Δx に対してプロットすると図1-14になる。移流項の割合が少し多くなると数値結果はすぐに1次精度になってしまい、移流項の計算精度が重要であることが分かる。



図 1-14 移流拡散方程式を差分法(移流: 1次風上差分,拡散: 2次中心差分)で計算したときの精度

1.6.1 Fractional Step 法

移流項に高次差分を用いれば計算結果の精度を上げることができる。しかし、1.4.3 節によれば、移流 項に 3 次精度風上差分を用いた場合、時間精度も高次精度が必要になる。テーラー展開を使って時間 3 次精度で積分するには $\partial^2 f / \partial t^2 \ge \partial^3 f / \partial t^3$ が必要になり、

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2u\kappa \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \kappa^2 \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}$$
(1-76)

$$\frac{\partial^3 f}{\partial t^3} = -u^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + 3u^2 \kappa \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} - 3u\kappa^2 \frac{\partial^5 f}{\partial x^5} + \kappa^3 \frac{\partial^6 f}{\partial x^6}$$
(1-77)

このように多くの高次空間微分に対する差分近似が必要になる。テーラー展開による時間 3 次精度積分 は、非線形や多次元の場合にはさらに多くの項が現れる。計算コストや境界条件の設定の煩雑さを考え ると余り現実的な方法ではない。

式(1-74)を次の2つの方程式に分離することを考える。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \qquad \qquad \frac{\partial f}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \qquad (1-78)$$

まず移流方程式を解いて、中間的な従属変数の値に f^* を求める。次に、前節では拡散方程式を解いて $f^n \to f^{n+1}$ としていたのを $f^* \to f^{n+1}$ として n+1 のステップの値を求める。ここでは、移流方程式を Cubic セミ・ラグランジアン法で解き

$$f_i^* = F_i(x_i - u\Delta t) \tag{1-79}$$

次に拡散方程式を

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^*}{\Delta t} = \kappa \frac{f_{j+1}^* - 2f_j^* + f_{j-1}^*}{\Delta x^2}$$
(1-80)

で解いて更新する。この方法は Fractional Step 法と呼ばれている。偏微分方程式に対してこのようなこ とをして良いのかという点を考えると、1次精度の時間積分であれば右辺は単純 n ステップの差分の和 であるので、分割して加えても良さそうである。つまり、Fractional Step 法で偏微分方程式を解くと時 間精度は1次精度になる。時間が1次精度になると移流方程式の場合は計算結果が空間1次精度になっ てしまったが、Fractional Step 法ではどうであろうか。実際に移流拡散方程式を Fractional Step 法で解く と図 1-15 のようになる。

移流だけの計算精度が空間3次精度あり、拡散項は2次精度であるので、移流項の寄与が大きいほど 空間精度が3次になり、拡散項の寄与が大きくなると2次精度になる。全体の時間精度がFractional Step 法を用いて1次精度に落ちたにも関わらず、空間2次以上の精度が出ているのは、図1-15で用いた計算 のΔt が拡散計算の安定性を考慮して十分に小さく設定してあるため、計算結果を支配しているのが空間 の離散化精度であるためである。



図 1-15 移流拡散方程式を Fractional Step 法(移流: Cubic ラグランジュ法,拡散:2次中心差分)で計算したときの精度

1.7 Burgers 方程式の差分法による計算

移流拡散方程式の移流速度を従属変数 f に置き換えたものは Burgers 方程式と呼ばれる。Burgers 方程 式は流体方程式中の圧力勾配項を除いた式でもあり、流体的振る舞いを示す。ここで $f \rightarrow u$ として、従 属変数をu として Burgers 方程式を書くと式(1–80)になる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$
(1-81)

移流拡散方程式とほとんど変わらないように見えるが、第2項の移流項が非線形になったために解の振る舞いは移流拡散項と全く異なってくる。ある空間上の点 A で $u_A > 0$ のとき、さらに $\partial u/\partial x < 0$ であれば点 A より前方の点のuの値は u_A より小さく、その移流速度は点 A より遅い。従って、後ろから追いついてくる形になり、さらに後方の方がuの値が大きいので勾配はどんどん急峻になる。これを移流項のsteepeningと呼ぶ。このままだと後ろからの流れが前を追い越し、解は破綻してしまうが拡散項があるとこれを緩和する効果があるため釣り合った衝撃波が形成される。逆に $\partial u/\partial x > 0$ の場合、前方の方が移流速度が速くどんどん先に進んでしまう。uの初期プロファイルを $u(x) = \sin(kx) + 0.2$, $k = 2\pi$ として $0 \le x \le 1$ の領域で式(1-81)を解くことを考える。全節と同じように移流項に風上1次差分、拡散項に2次精度中心差分を適用し、

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + u_j^n \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} - \kappa \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} = 0$$
(1-82)

式(1-82)を時間1次精度で積分すると図1-16のようか結果になる。(PROGRAM8)



図 1-16 Burgers 方程式の差分法(移流:1次風上差分,拡散:2次中心差分)による計算結果

ここで、格子点数 N=100 で $\Delta x = 1/100$ とし、拡散係数は非線形性が顕著になるように $\kappa = 0.005$ と選んだ。 ただし、 Δt は初期の CFL 数が 0.4 となるようにし、固定している。移流項に 1 次精度風上差分を用いた 影響を見るために、ここでも Fractional Step 法を用い、移流計算には 3 次精度の Cubic ラグランジュ法



無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科

図 1-17 Burgers 方程式を Fractional Step 法(移流: Cubic ラグランジュ法,拡散:2次中心 差分)で計算したときの空間プロファイルの時間発展

を用いて計算すると図 1-17 になる (**PROGRAM 9**)。図 1-16 と図 1-17 を比較すると、*t*=0.3 あたりで形 成される衝撃波が Fractional Step 法の方が急峻なプロファイルとして表現されている。さらに、衝撃波 の移動速度が Fractional Step 法の方が早いことが分かる。移流項に 1 次精度風上差分を用いた場合でも、 格子点数を *N*=100, 200, 400 と変えて行くと、Fractional Step 法で計算した結果に近づくことが分かり、 Fractional Step 法で計算した結果の妥当性が検証できる。

1.8 非圧縮性流体の数値解法

機械工学において特に重要となる非圧縮性流体の数値計算手法について説明する。水や油のような液体は多少の圧力では体積が変化しないため非圧縮性流体として扱うことの妥当性は理解しやすい。しかし、空気のような気体についても日常生活においては非圧縮性流体として扱う近似が非常に良く成り立つ。空中の音波は空気の密度変化を伴う波動であるが、通常のその密度変化は10⁻⁶程度と非常に小さい。日常生活の時間スケールに対して音速の伝播速度は約 300m/sec と非常に早いため、空気に大きな密度変化が起こる時間より極めて短い時間内に圧力変化が生じ、大きな密度変化が生じないように圧力変化が 生じる。超音速ジェットのように非常に高速で移動する物体に伴う流れなどでは大きな密度変化が生じるため、圧縮性流体方程式を解いて現象を解析する必要がある。

非圧縮性流体は次の Navier-Stokes 方程式で記述される。

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{1-83}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu \Delta u \tag{1-84}$$

ここで、uは流体の速度ベクトル、pは圧力、 ρ は密度、vは動粘性係数である。式(1–83)は、質量保存 方程式(連続方程式)に $\rho = const$ (時間・空間)を代入することで得られる。式(1–83)と式(1–84)を特 徴的な速度U,スケールLで規格化すると、

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{1-85}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \frac{1}{\operatorname{Re}}\Delta u \tag{1-86}$$

となり、(1-85)式と(1-86)式中のuおよびpは規格化された速度と圧力である。Reはレイノルズ数であ り、1 m サイズの物体に1 m/sec の風が吹き付けるような空気の流れの場合、Re = 7×10^4 程度となる。 $\nabla \cdot u = 0$ を満足させるということは、本来の流体方程式中に含まれる音波が計算されないようにするた めの条件でもあり、音波の伝播速度に対する CFL 条件に数値計算の Δt が制限されないことにつながる。 式(1-86)中のpは結果として式(1-85)を満足するように求める必要がある。

1.8.1 MAC 法

非圧縮性流体の数値計算手法にはさまざまな方法があるが、最もスタンダードな MAC (Marker and Cell)法を示す。式(1-86)を時間について1次精度で離散化すると、

$$\frac{\boldsymbol{u}^{n+1}-\boldsymbol{u}^n}{\Delta t} + (\boldsymbol{u}^n \cdot \nabla)\boldsymbol{u}^n = -\nabla p^n + \frac{1}{\operatorname{Re}}\Delta \boldsymbol{u}^n$$
(1-87)

なり、この式により $u^n \rightarrow u^{n+1}$ に時間積分すると、 u^{n+1} は $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を満足しない。そこで、式(1-87)の 両辺の divergence を取ると、

$$\frac{\nabla \cdot \boldsymbol{u}^{n+1} - \nabla \cdot \boldsymbol{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot \left(\left(\boldsymbol{u}^n \cdot \nabla \right) \boldsymbol{u}^n \right) = -\nabla \cdot \nabla p^n + \frac{1}{\operatorname{Re}} \nabla \cdot \left(\Delta \boldsymbol{u}^n \right)$$
(1-88)

になる。 $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を仮定し、式(1-88)を p^n に対する Poisson 方程式として解くと、式(1-87)により $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を満足する u^{n+1} を求めることができる。ここで求めた p^n は $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を満足させる圧力であ り、n ステップの時刻という意味ではないことが分かる。

1.8.2 SMAC 法

Mac法は移流項や粘性項などの微分項に対する divergence を計算する必要があり離散化が煩雑になるため、中間変数 u^* を導入する SMAC(Simplified MAC)法が提案されている。n+1 では $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を満たすような圧力を $p^{n+1} = p^n + \varphi$ と仮定する。

$$\frac{\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}^n}{\Delta t} + (\boldsymbol{u}^n \cdot \nabla)\boldsymbol{u}^n = -\nabla p^n + \frac{1}{\operatorname{Re}}\Delta \boldsymbol{u}^n$$
(1-89)

により $u^n \rightarrow u^*$ に時間積分すると、 u^{n+1} に対する式は

$$\frac{\boldsymbol{u}^{n+1} - \boldsymbol{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \boldsymbol{\varphi} \tag{1-90}$$

となる。式(1–90)の両辺の divergence を取り $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を仮定すると、

$$\frac{\nabla \cdot \boldsymbol{u}^*}{\Delta t} = \Delta \boldsymbol{\varphi} \tag{1-91}$$

が得られる。これは与えられる左辺の生成項に対して、φに関する Poisson 方程式である。式(1–91)を 解いてφが得られたならば、式(1–90)を用いて

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = \boldsymbol{u}^* - \Delta t \nabla \boldsymbol{\varphi} \tag{1-91}$$

で u^{n+1} が求められる。圧力も $p^{n+1} = p^n + \varphi$ で更新される。 $\nabla \cdot u^{n+1} = 0$ を満足することは明らかである。 計算精度は式(1-89)を解くときの空間離散化の精度と時間積分の精度に依存する。

MAC 法も SMAC 法も *u*ⁿ⁺¹を求める方程式中に∇·*u*ⁿ⁺¹ = 0を仮定して求める圧力が含まれているため、 セミ陰解法と呼ばれることもある。圧縮性流体方程式中の音速の部分を陰解法で解かないようにし、流 速のみで制限される大きな∆*t* で解析したい時間スケールの計算を可能にしていると考えることもでき る。

1.9 Poisson 方程式の解法

全節で示した通り、非圧縮性流体方程式をセミ陰解法で計算する場合、圧力に対して Poisson 方程式

 $\Delta p = s$ (*s*はソース項)を解く必要があることが分かる。Poisson 方程式の計算は一般的に計算時間が かかり、非圧縮性流体計算の殆どの CPU 時間を占める。圧縮性流体計算は殆どの場合が 2 次元または 3 次元の現象であるが、ここでは簡単のために 1 次元の Poisson 方程式 $dp^2/dx^2 = s$ で説明する。 2 次精 度の中心差分で離散化すると、

$$\frac{p_{j+1} - 2p_j + p_{j-1}}{\Delta x^2} = s_j \tag{1-92}$$

となる。 $0 \le x \le 1$ の範囲を *N* 等分し、2 階の微分方程式であるので、2 つの境界条件を与えると解が決まるのは数学と同じであり、x = 0およびx = 1で $p_0 = 0$ および $p_N = 0$ などを与えると、

$$p_{0} = 0$$

$$p_{0} - 2p_{1} + p_{2} = s_{1}\Delta x^{2}$$

$$p_{1} - 2p_{2} + p_{3} = s_{2}\Delta x^{2}$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots = \cdots$$

$$p_{j-1} - 2p_{j} + p_{j+1} = s_{j}\Delta x^{2}$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots = \cdots$$

$$p_{N-3} - 2p_{N-2} + p_{N-1} = s_{N-2}\Delta x^{2}$$

$$p_{N-2} - 2p_{N-1} + p_{N} = s_{N-1}\Delta x^{2}$$

$$p_{N} = 0$$
(1-93)

のように書き下すことができ、連立線形一次方程式であることが分かる。行列を用いて書き表すと、

 $Ax = b \tag{1-94}$

となり行列AはN×N行列、xはN列の解ベクトル、bは定数ベクトルである。行列Aは3重対角行列 であり、これを数値的に解くことは容易である。また、 $|A| \neq 0$ であればGaussの消去法などを用いて逆 行列を求めることができ、必ず解くことができる。問題は計算量と使用するメモリ量であり、3次元の Poisson 方程式を考えて見る。100×100×100の計算格子を用いた場合、解ベクトルxは10⁶列になり、 行列Aも10⁶×10⁶になる。通常の科学技術計算では8Byteの倍精度実数を用いるので、行列の1要素当 たり8Byte割り当てるとすると、行列Aに対して必要となるメモリは8×10¹²Byte=8TB となる。通常の PCのメモリが2GBで、地球シミュレータの全メモリが10TB、東工大のTSUBAMEのメモリが20TB であることを考えると、100×100×100格子でPoisson方程式を解くためにGaussの消去法などを使うの は非現実的であることが分かる。係数行列Aは単純な直交格子でPoisson方程式を解く場合、2次元で は5重対角行列、3次元では7重対角行列となり、その他の部分の行列要素は全てゼロになっている。 このような行列を総称して疎行列と呼び、大規模疎行列の解法が発展してきた。大規模疎行列はGauss の消去法やLU分解法などの直接計算ではなく、反復計算により収束させて解を求める方法を取る。反 復解法はKrylov部分空間で反復・収束させる方法(ICCG,BiCGStab,GMRES等)と物理空間で収束させ る定常反復法(Jacobi法、Gauss-Seidel法、SOR法)の2つに大きく分けることができる。ここでは、 定常反復法について説明する。

1.9.1 Point Jacobi 法

物理空間で離散化した式(1–92)をそのまま収束させるので、変数に反復回数の上付き添字kを付けることにする。反復計算により全てのj点で $\left|p_{j}^{m+1} - p_{j}^{m}\right| \leq \varepsilon$ が成り立てば収束したと判定する。式(1–93)に対し、

$$\frac{p_{j+1}^m - 2p_j^{m+1} + p_{j-1}^m}{\Delta x^2} = s_j$$
(1-94)

と近似したとき、反復計算が収束すれば離散化した Poisson 方程式の解に到達することが分かる。m 回までの反復計算の結果が既知であるとすると、式(1-94)は

$$p_{j}^{m+1} = \frac{1}{2} \left(p_{j+1}^{m} + p_{j-1}^{m} - s_{j} \Delta x^{2} \right)$$
(1-95)

のように解くことができる。この反復計算が収束するかどうかを判定する必要があり、式(1–95)が非定 常偏微分方程式(移流方程式等)の差分近似計算と類似していることから、Von Neumannの安定性解析 を使ってみる。mステップにおける波数kの増分は、格子点 $x_j = j\Delta x$ において $\delta p_j = \delta p^m e^{ikj\Delta x}$ と仮定する と、式(1–95)に代入し増分の項を集めると、

$$\delta p^{m+1} e^{ik\Delta xj} = \frac{1}{2} \left(\delta p^m e^{ik\Delta x(j+1)} + \delta p^m e^{ik\Delta x(j-1)} \right)$$
(1-96)

$$\frac{\delta p^{m+1}}{\delta p^m} = \frac{1}{2} \left(e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} \right) = \cos k\Delta x \tag{1-97}$$

となり、1 より小さくなることから反復計算が安定に収束することが分かる。例題として、 $0 \le x \le 1$ の 領域を 100 格子で分割し、式(1–94)に基づき Point Jacobi 法で計算する。初期値として、 $-1 \le p_j \le 1$ の 乱数を与えた。生成項として Poisson 方程式の解析解が $p(x) = \sin(kx), k = 2\pi$ となるように $s(x) = -k^2 \sin(kx)$ とした。反復計算の収束性を判断するために、残差 R_i を

$$R_{j} = \frac{p_{j+1}^{m} - 2p_{j}^{m} + p_{j-1}^{m}}{\Delta x^{2}} - s_{j}$$
(1-98)

として図 1-18 にプロットした(PROGRAM 10)。反復計算を進めると残差が小さくなって行くことが 分かるが、4000 回反復計算しても10²程度減少しただけで、依然として10²オーダーの残差が残ってい る。図 1-18 の残差プロファイルがギザギザになっているのは、Point Jacobi 法の右辺が j+1 と j-1 にな っていて格子を1つ飛びに計算しているためであり、移流計算の数値モードと同じである。



無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科



図 1-18 Point Jacobi を用いた反復計算による Poisson 方程式の残差

1.9.2 Gauss-Seidel 法

反復計算は収束しさえすれば、その中間状態の値としての意味はない。反復計算では値を更新しなが ら収束に向かうので、できるだけ新しく更新された値を使うことにより収束性が向上する可能性がある。 Point Jacobi 法の計算において、通常は計算格子の index の順にループを回して計算するので、 p_j^{m+1} を計 算するときには既に p_{j-1}^{m+1} の計算は終了している。従って、式(1–95)の p_{j-1}^m を p_{j-1}^{m+1} に置き換え、

$$p_{j}^{m+1} = \frac{1}{2} \left(p_{j+1}^{m} + p_{j-1}^{m+1} - s_{j} \Delta x^{2} \right)$$
(1-99)

同じ計算を行うと、



無断転用を禁ず 東京工業大学工学部機械科学科 図 1-19 のように Point Jacobi 比較して非常に早く収束している(PROGRAM 11)。また、隣の格子との ギザギザな残差プロファイルも消失している。式(1-95)の反復法を Gauss-Seidel 法という。

1.9.3 SOR 法

大規模行列になると、Gauss-Seidel 法でも収束が非常に遅いと感じるようになる。そこで、式(1–99) の右辺で計算した値をすぐに p_j^{m+1} として代入するのでなく、 p_j^m と緩和させた値を p_j^{m+1} とすることを考える。

$$p_{j}^{m+1} = (1 - \omega)p_{j}^{m} + \omega \frac{1}{2} \left(p_{j+1}^{m} + p_{j-1}^{m+1} - s_{j} \Delta x^{2} \right)$$
(1-100)

ωは緩和係数である。この反復計算の安定性を調べると、驚くことに0≤ω≤2で安定なことが分かる。



図 1-20 Point Jacobi 法、Gauss-Seidel 法、SOR 法の反復計算による Poisson 方程式の残差履歴

 $0 \le \omega < 1$ は Gauss-Seidel 法に対する緩和過程であるが、 $1 < \omega \le 2$ は加緩和過程であり ω を加速係数と呼ぶことがある。安定性解析から $\omega = 1.8$ が最も高い加速率(早い収束性)になることが示されるが、多少の問題依存性がある。 $\omega = 1.8$ を用いて式(1-99)の反復計算を行うと、残差の最大値は図 1-20 のように急速に減衰することが分かる。 $1 < \omega$ のとき式(1-99)の反復計算を SOR(Successive Over-Relaxation)法と呼ぶ。SOR 法は現在もさまざまな場面で使われている。(**PROGRAM 12**)