

# 地球惑星物理学演習: 時間発展問題の数値解法

櫻庭 中\*

2008年6月5日(五訂版)

計算機をもちいたシミュレーション研究は、地球物理学のみならずさまざまな科学分野において有力な研究手法のひとつになっており、その重要性は今後ますます大きくなると予想される。本演習ではそうした数値シミュレーション、とくに時間を含んだ偏微分方程式を数値的に解くことに帰着するような時間発展問題に関して、その基礎的な知識を身につけることを目標とする。

## 目次

<b>1</b>	<b>数値解法のあらまし</b>	<b>2</b>
1.1	針金の熱伝導方程式	2
1.2	無次元化	3
1.3	離散化	4
1.4	差分法	5
1.5	計算スキーム	7
1.6	数値計算の実行	8
1.7	球の冷却	9
<b>2</b>	<b>偏微分方程式の例</b>	<b>10</b>
2.1	拡散方程式	10
2.2	移流方程式	11
2.3	波動方程式	11
2.4	ナビエ・ストークス方程式	12
<b>3</b>	<b>離散化手法のいろいろ</b>	<b>13</b>
<b>4</b>	<b>時間積分の基礎</b>	<b>13</b>
4.1	時間積分の原理	14
4.2	オイラー法	14
4.3	時間積分の安定性	14
4.4	後退オイラー法(陰解法)	17

---

\*さくらばあたる, 東京大学理学部地球惑星物理学教室

<b>5</b>	<b>さまざまな時間積分手法</b>	<b>18</b>
5.1	ルンゲ・クッタ法	18
5.2	アダムズ・バッシュフォース法とその類型	21
5.3	リープフロッグ法	24
5.4	2階の常微分方程式の解法	24
5.5	誤差の見積もり	25
<b>6</b>	<b>空間の離散化</b>	<b>29</b>
6.1	差分法	29
6.2	差分法の安定性	31
6.3	有限体積法	32
6.4	スペクトル法	33
6.5	有限要素法	36
<b>7</b>	<b>応用問題</b>	<b>37</b>
7.1	津波の伝播	37
7.2	熱対流	43
<b>8</b>	<b>その他の話題</b>	<b>47</b>
8.1	移流方程式	47
8.2	高次精度の陰的差分スキーム	50
8.3	非線形不安定	51
8.4	硬い方程式	53
8.5	粒子法	54
8.6	境界値問題の解法	54
8.7	固有値問題の解法	55

## 1 数値解法のあらまし

### 1.1 針金の熱伝導方程式

はじめにごく簡単な例題を解いてみることで時間発展問題の数値解法のあらましを紹介しようと思う。よりくわしい解説はあとの章で順を追っておこなう。ここで扱うのは1次元の熱伝導問題である。すなわち長さ  $a$  の針金のようなものがあり、初期温度は一様に  $u_0$  であるとする。時刻  $t = 0$  に瞬間的に針金の両端を  $u_0 - \Delta u$  に冷却して、その後もその温度に保ったとき、任意の時刻における針金の温度分布  $u(x, t)$  を求めたい(ここで  $x$  は空間座標で  $0 \leq x \leq a$ )。

まずフーリエの法則により、ある点  $x$  での熱流量  $Q(x, t)$  はそこでの温度勾配に比例する。すなわち、右向きの熱の流れを正とすると、

$$Q(x, t) = -k \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1.1)$$

で、比例定数  $k$  を熱伝導率という。つぎに点  $x$  から  $x + \delta x$  までの区間がもつ熱量は、単位質量あたりの比熱を  $c$ 、線密度を  $\rho$  とすると  $\rho c u \delta x$  である。この時間変化率は、エネルギー保存則により、「点  $x$  から流れ込む熱流量」引く「点  $x + \delta x$  から流れ出る熱流量」足す「その区間に含まれる熱源による発熱」となるはずである。よって単位質量あたりの熱源の量を  $h$  とすると

$$\frac{d}{dt}(\rho c u \delta x) = Q(x, t) - Q(x + \delta x, t) + \rho h \delta x$$

が成り立つ。両辺を  $\delta x$  で割ると、

$$\frac{d}{dt}(\rho c u) = -\frac{Q(x + \delta x, t) - Q(x, t)}{\delta x} + \rho h$$

となるが、 $\delta x \rightarrow 0$  の極限をとると、右辺第1項は  $Q$  を空間偏微分したものに一致する。さらに (1.1) をもちいて  $Q$  を消去すると、熱伝導方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c u) = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \rho h \quad (1.2)$$

が得られる。以下では簡単のため  $\rho, c, k, h$  などは定数とする。

## 1.2 無次元化

多くの場合なんらかの適当な尺度で変数を無次元化しておく都合がよい。たとえば長さを  $a$ 、時間を熱拡散時間  $\rho c a^2 / k$ 、温度を  $\Delta u$  で規格化すると、無次元長さが  $x' \equiv x/a$ 、無次元時間が  $t' \equiv kt / (\rho c a^2)$ 、無次元温度が  $u' \equiv u / \Delta u$  などと定義され、

$$\frac{\partial u'}{\partial t'} = \frac{\partial^2 u'}{\partial x'^2} + H \quad (0 < x' < 1, t' > 0) \quad (1.3)$$

なる無次元の方程式が導かれる。ここで  $H \equiv \rho a^2 h / (k \Delta u)$  は熱源の効果をあらわす無次元パラメーターである。もともとの方程式には  $a$  や  $k$  などの複数のパラメーターが存在していたが、無次元化することでそれらの効果は単一のパラメーター  $H$  に凝縮されてしまったことに注意しよう。すなわち熱源の量を4倍にした場合の結果と、熱源はそのままに針金の長さを半分にした結果とは、同じ方程式の解としてあらわされるから、二度解く必要はない(相似則)。

式 (1.3) には温度は微分された形でしか入ってこないの、 $u'(x', t')$  が解ならばそれに任意の定数を足したものもまた方程式を満たす。そこで便宜上、初期条件として  $u'(x', 0) = 1$ 、境界条件として  $u'(0, t') = u'(1, t') = 0$  を採用することにする。

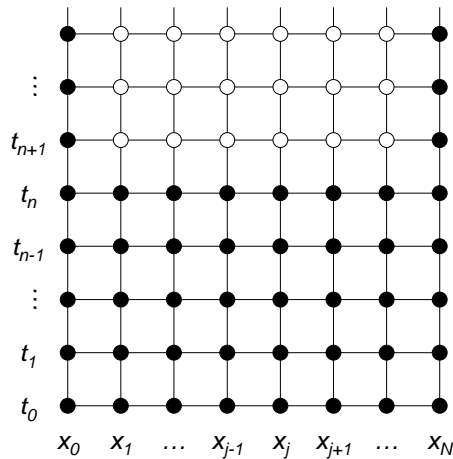


図 1: 空間と時間の離散化の概念図。横軸が空間座標, 縦軸が時間。黒丸はすでに計算で得られているか, または境界条件や初期条件によって与えられている既知の点。白丸はこれから計算しようとしている未知の点。時間発展問題を解くということは, いま得られている情報 (黒丸) をもとにして未来 (白丸) を予測するということである。

### 1.3 離散化

偏微分方程式 (1.3) を計算機上で扱うためには, 連続変数である  $x, t$  および  $u$  を離散的な変数に焼きなおし, 現象を離散化する必要がある (これ以降はすべて変数は無次元化されているものとみなし, 無次元変数につけるプライム記号は省略する)。ここではまず独立変数を

$$\begin{cases} x_j \equiv j\Delta_x & (j = 0, 1, 2, \dots, N_x) \\ t_n \equiv n\Delta_t & (n = 0, 1, 2, \dots) \end{cases} \quad (1.4)$$

のように定義して, 時空間  $(x, t)$  を図 1 に示されるような格子に区切る。そして格子点上での温度

$$u_j^n \equiv u(x_j, t_n) \quad (1.5)$$

で針金の温度をあらわすことにする。ここで  $\Delta_x \equiv 1/N_x$  は空間の格子間隔,  $\Delta_t$  は時間ステップの幅である。すなわち空間の離散化とは, 本来なめらかに変化する温度の空間分布を, とびとびの点で計った温度データでもって推定するようなものであり, また時間に関する離散化とは, アニメーションのコマ撮りのごとく, とびとびの時間ステップでの温度データをつなぎ合わせることで温度変化をあらわすことに相当する。 $\Delta_x$  や  $\Delta_t$  を細かくしてやれば近似の度合いはよくなると考えられる。具体的に数値解を求める手順を説明するとすれば, まず初期条件により図 1 の下辺の値が, また境界条件により図 1 の左辺と右辺の値がそれぞれ与えられる。そしてその値をもとに, 順々に一段ずつ下から上に向かって時間ステップを進めて, 格子点上の温度の値を推定してゆく。これが時間発展問題の標準的数値解法である。

## 1.4 差分法

さて方程式 (1.3) にあられる偏微分係数 ( $\partial u/\partial t$  や  $\partial^2 u/\partial x^2$ ) も離散化された時空間のなかで定義しおなす必要がある。そのための手法としてここでは有限差分法を適用しよう (くわしくは 6.1 節を参照のこと)。まず時間を固定し、空間偏微分の近似法を考える。1 階微分の定義は

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_j} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_j + \delta x, t) - u(x_j, t)}{\delta x}$$

であるから、 $\delta x$  を有限の格子間隔  $\Delta_x$  で置き換えることで

$$\boxed{\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_j} \simeq \frac{u(x_j + \Delta_x, t) - u(x_j, t)}{\Delta_x} = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta_x}} \quad (1.6)$$

という近似式を得る (ただし  $u_j(t) \equiv u(x_j, t)$ )。同様に

$$\boxed{\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_j} \simeq \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta_x}} \quad (1.7)$$

と書くこともできる。テーラー展開すれば明らかなように、これらの近似式は誤差が  $O(\Delta_x)$  であるので、1 次の差分公式という。とくに式 (1.6) を前進差分、式 (1.7) を後退差分という。前進差分と後退差分とを足して 2 で割ると、

$$\boxed{\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_j} \simeq \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta_x}} \quad (1.8)$$

となるが、このとき  $O(\Delta_x)$  の誤差がちょうど打ち消しあう。これを 2 次の中心差分公式という。ふつう 1 階微分係数を計算するときには、より精度のよい中心差分 (1.8) をもちいる。

以上の考え方は 2 階微分にも応用できる。変数  $u$  の 1 階導関数を  $v$  と書こう。ごく単純に考えると、 $v$  の 1 階微分係数 (=  $u$  の 2 階微分係数) は、公式 (1.8) を 2 回もちいることで、

$$\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{x=x_j} \simeq \frac{v_{j+1} - v_{j-1}}{2\Delta_x} = \frac{u_{j+2} - 2u_j + u_{j-2}}{4\Delta_x^2}$$

とあらわされる。しかしこの公式はもっとコンパクトな形に書き直したほうがよい。形式的に格子間隔  $\Delta_x$  を半分にして考えると、 $v$  の 1 階微分係数の中心差分公式は

$$\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{x=x_j} \simeq \frac{v(x_j + \frac{1}{2}\Delta_x, t) - v(x_j - \frac{1}{2}\Delta_x, t)}{\Delta_x}$$

と書くことができる。さらに

$$v(x_j + \frac{1}{2}\Delta_x, t) \simeq \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta_x}, \quad v(x_j - \frac{1}{2}\Delta_x, t) \simeq \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta_x}$$

であるから、結局  $u$  の 2 階微分係数の近似式として

$$\boxed{\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_j} \simeq \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2}} \quad (1.9)$$

を得る。この誤差も  $O(\Delta_x^2)$  であり、やはり 2 次の中心差分公式という。

---

```

program schemeA
implicit none
! 時刻ゼロから tendまで計算し、途中 dtout ごとに温度データを出力する
!  nx : 空間領域の分割数, dx : 格子間隔, dt : 時間ステップの幅
!  u  : 温度分布をあらわす配列 (大きさ nx+1)
!  w  : 作業用配列 (大きさ nx+1)
integer nx, j
parameter (nx=16)
real*8 dx, t, dt, tout, dtout, tend, u(0:nx), w(0:nx)
parameter (dx=1.0d0/nx, tend=1.0d0, dt=1.0d-3, dtout=1.0d-2)
! 初期温度場の設定
do j=1,nx-1
  u(j)=1.0d0
end do
! 両端の温度はゼロ
u(0)=0.0d0
u(nx)=0.0d0
! 時刻をリセットし、時間発展の計算をスタート (無限 do ループ)
t=0.0d0
tout=0.0d0
do
  ! 温度データを書き出す (サブルーチン output は別にあるものとする)
  if (t>=tout) then
    call output(u,nx,t)
    tout=tout+dtout
  end if
  ! t=tend になったら終了
  if (t>=tend) stop
  ! 方程式の右辺を計算して配列 w に保存
  do j=1,nx-1
    w(j)=(u(j+1)-2.0d0*u(j)+u(j-1))/(dx*dx)
  end do
  ! 温度場を更新し、時間ステップをひとつ進める
  do j=1,nx-1
    u(j)=u(j)+dt*w(j)
  end do
  t=t+dt
end do
end

```

---

図 2: スキーム A で熱伝導方程式を解くプログラムの例。Fortran 77 風ではあるが、無限 DO ループなど、多くのコンパイラで採用されているような拡張機能を随所にもちいている。なおこの例では配列 u は次の時間ステップの温度で上書きして、過去の値は捨ててしまっている。これは無駄なメモリを消費しないため、温度データはそのつどファイルに書き出すのがよい。

## 1.5 計算スキーム

まず方程式にあらわれる空間微分は2次精度の中心差分で置き換えることにする。すると熱伝導方程式 (1.3) は

$$\frac{du_j}{dt} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2} + H \quad (1 \leq j \leq N_x - 1) \quad (1.10)$$

と離散化される。境界条件より  $j = 0$  と  $j = N_x$  での温度は恒等的にゼロである。つぎに時間微分項も同様に差分近似すればよいのだが、ここでは説明の便宜上、次に示す3通りの方法を考えることとし、それらをもちいた数値解法をそれぞれスキーム A, B, C と名づける:

$$\left. \frac{du_j}{dt} \right|_{t=t_n} \simeq \begin{cases} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta_t} & \text{(A: 1次前進差分)} \\ \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta_t} & \text{(B: 1次後退差分)} \\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta_t} & \text{(C: 2次中心差分)} \end{cases} \quad (1.11)$$

このとき (1.10) は、それぞれ

$$u_j^{n+1} = \begin{cases} u_j^n + \gamma(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \Delta_t H & \text{(スキーム A)} \\ u_j^n + \gamma(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + \Delta_t H & \text{(スキーム B)} \\ u_j^{n-1} + 2\gamma(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + 2\Delta_t H & \text{(スキーム C)} \end{cases} \quad (1.12)$$

のように離散化される (ただし  $\gamma \equiv \Delta_t / \Delta_x^2$ )。

スキーム A, C はともに時刻  $t_{n+1}$  における未知の温度場  $u_j^{n+1}$  を推定するのに、すでに値が分かっている  $t_n$  以前の温度場の情報をもちいている。このような解法をとくに陽解法 (explicit method) という。いっぽうスキーム B は右辺にも未知の情報が含まれているので、

$$\sum_{k=1}^{N_x-1} A_{jk} u_k^{n+1} = u_j^n + \Delta_t H \quad (j = 1, 2, \dots, N_x - 1) \quad (1.13)$$

のような連立一次方程式を解かなければならない。ここで

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 2\gamma & -\gamma & & & \\ -\gamma & 1 + 2\gamma & -\gamma & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -\gamma & 1 + 2\gamma \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

は次元が  $(N_x - 1)$  の正方行列である。ただしこの行列は、対角成分とその1個右上, 左下の成分しか非零成分がないので、とくに3重対角行列, あるいは帯幅3の帯行列とよぶ。スキーム B は陰解法 (implicit method) の一例である。

スキーム C はこれらのうちでもっとも高精度なスキームであるが、 $t_{n+1}$  の温度場を推定するのに  $t_{n-1}$  の情報 (過去の情報) を参照する。したがって計算の開始時 ( $n = 0$ ) にはこれを

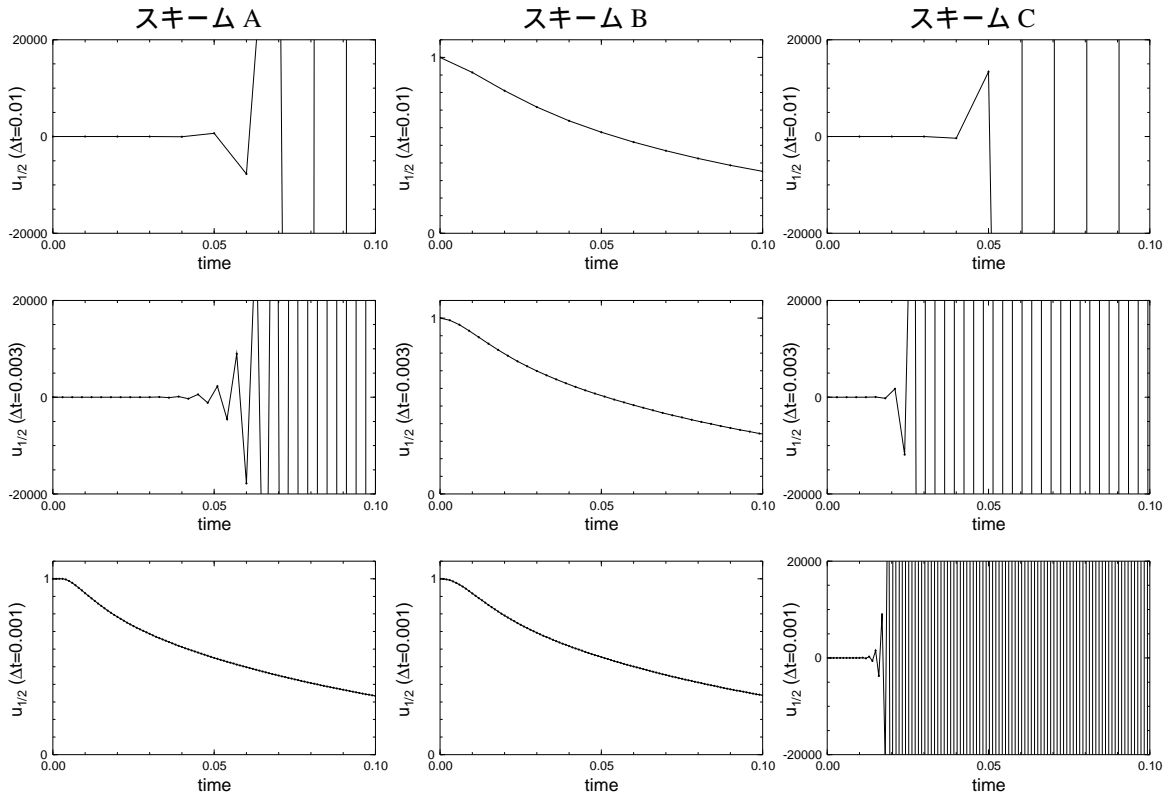


図 3: 1次元の熱伝導方程式をスキーム A (左列), B (中央) および C (右列) をもちいて解いた結果で,  $x = 0.25$  での温度の時間変化を示す ( $H = 0, \Delta_x = 1/16$ )。上段から下に, それぞれ  $\Delta_t = 10^{-2}$ ,  $3 \times 10^{-3}$ ,  $10^{-3}$  の数値解である。発散する場合と減衰する場合とで縦軸のスケールが異なることに注意。スキーム A と C では, 両端が冷却されたという情報が  $x = 0.25$  に伝わるまでに  $N_x/4$  時間ステップという有限の時間を要する。

もちいることができない。ここでは簡便な対策として, 計算の最初だけスキーム A を使うことにする。スキーム A は 1 次精度の時間差分なのだが, 最初に 1 回使うきりなので, 全体の精度にはあまり影響しないと考えられる。なおスキーム C のように, 過去の時間ステップの情報をもちいて未来を予測する計算方法は多段階法 (multistep method) とよばれる。

## 1.6 数値計算の実行

では実際に解いてみよう。それには図 2 で示されるようなプログラムを計算機で動かすことになる。熱源なし ( $H = 0$ ), 格子間隔を  $\Delta_x = 1/16$  として, スキーム A, B, C のそれぞれにもとづいて方程式を数値的に解いた結果を図 3 に示す。この計算結果から次のような傾向がわかる:

- スキーム A では  $\Delta_t$  を大きくすると解は振動的に発散する。しかしある程度  $\Delta_t$  を小さくすると温度場はなめらかに減衰するようになる<sup>1</sup>。

<sup>1</sup>厳密解は  $u(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4 \sin(2m+1)\pi x}{(2m+1)\pi} e^{-(2m+1)^2 \pi^2 t}$  である。



- スキーム B では  $\Delta_t$  を大きくしても発散しない。
- スキーム C では  $\Delta_t$  を小さくしても解は発散する。

以上の結果は一見奇妙に思えるかもしれない。スキーム C は時間微分に関してより高精度 (2 次精度) の差分公式をもちいていたのに、解は途中で発散してしまう。いっぽう 1 次精度のスキーム A, B のほうがむしろ安定に計算が実行でき、好ましい結果をもたらすようである。なぜこのような結果が生じるかの理由づけはあとの章でおこなうことにするが、ともかくここで示した例は、問題によって適するスキームと適さないスキームとがあり、ただやみくもに差分公式の精度をあげても意味がないということを示唆する。

### 例題 1

1. スキーム A のプログラムを作成し、計算を実行せよ ( $H = 0$  とせよ)。温度変化の様子がわかるように図やアニメーションを作成せよ。中点での温度が 0.5 になる時刻  $T_1$ 、および  $x = 0.25$  において熱流量 (温度勾配) の大きさが最大になる時刻  $T_2$  を求めよ。
2. スキーム B, C のプログラムも作成し、数値解の安定性について考察せよ。 □

## 1.7 球の冷却

つぎに同様の問題を一様球について解いてみよう。すなわち半径  $a$  で温度  $u_0$  の球があって、時刻ゼロに表面温度を  $u_0 - \Delta u$  に急激に冷却する<sup>2</sup>。球の中心からの距離を  $r$  として温度を  $u(r, t)$  とあらわす。半径  $r$  の球面を通して単位時間に外向きに流れる熱量  $Q(r, t)$  はフーリエの法則により

$$Q(r, t) = -4\pi r^2 k \frac{\partial u}{\partial r} \quad (1.15)$$

である。半径  $r$ , 厚さ  $\delta r$  の薄い球殻がもつ熱量は、密度を  $\rho$  として  $4\pi r^2 \rho c u \delta r$  であり、その時間変化率は「内側の球面 ( $r$ ) を通して流入する熱量」引く「外側の球面 ( $r + \delta r$ ) を通して流出する熱量」足す「球殻内に分布する熱源による発熱」である。よって

$$\frac{\partial}{\partial t}(4\pi r^2 \rho c u \delta r) = Q(r, t) - Q(r + \delta r, t) + 4\pi r^2 \rho h \delta r \quad (1.16)$$

が成り立ち、 $\delta r \rightarrow 0$  の極限をとることで球の熱伝導方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c u) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( k r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \rho h = k \left( \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \rho h \quad (0 < r < a) \quad (1.17)$$

が導かれる。この式は  $r \rightarrow 0$  で発散するように思われるが、温度場が球対称であるという仮定から、球の中心では  $\partial u / \partial r = 0$  であり、

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} = 2 \frac{\partial^2 u}{\partial r^2}$$

<sup>2</sup>ケルビン卿 (1824–1907) が地殻熱流量から逆算して地球の「年齢」を推定するのにもちいたのは半無限媒質の冷却問題の解であるが、これはその球体版である。

が成り立つ (ロピタルの定理)。よって球の中心での熱伝導方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c u) = 3k \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \rho h \quad (r = 0) \quad (1.18)$$

となる。

これらの方程式は、針金の熱伝導問題と同様に有限差分法で解くことができる。ただし球の中心の扱いには格別の注意をしなければならない。いまの場合、球の表面では温度が固定されるが (ディリクレ型の境界条件)、中心温度は方程式 (1.18) を解くことによって求めなければならない、球の中心では単に温度勾配がゼロであるという条件 (ノイマン型の境界条件) が与えられるだけである。動径座標を

$$r_j = j\Delta_r \quad (j = 0, 1, \dots, N), \quad \Delta_r = a/N,$$

と定義し、 $u_j(t) = u(r_j, t)$  と書くことにする。いま仮に  $u_{-1}$  なる点が存在するとすると、球の中心での 2 階微分係数は形式的に

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \right|_{r=0} = \frac{u_1 - 2u_0 + u_{-1}}{\Delta_r^2}$$

と書くことができる。ところが仮定により球の中心では温度勾配がゼロであるから

$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=0} = \frac{u_1 - u_{-1}}{2\Delta_r} = 0,$$

すなわち  $u_{-1} = u_1$  でなければならない。よって球の中心での 2 階微分係数は

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \right|_{r=0} = \frac{2u_1 - 2u_0}{\Delta_r^2} \quad (1.19)$$

で近似できる。他の場所では通常の 2 次の中心差分をもちいればよい。

### 例題 2

1. 変数を無次元化し、球の冷却問題を数値的に解け。球の中心温度が半分になる時刻  $T_1$ 、 $r = a/2$  での温度勾配の大きさが最大になる時刻  $T_2$  を求めよ。熱源の影響はどうか。
2. 地球、月、小惑星程度の大きさの球体について、この問題を具体的に考えよ。 □

## 2 偏微分方程式の例

### 2.1 拡散方程式

前章の熱伝導方程式 (1.2) は拡散方程式 (diffusion equation) とも呼ばれ、一般的には

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \eta \nabla^2 u + q \quad (2.1)$$

のような形式になる。ここで  $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$  はラプラス作用素,  $\eta$  は拡散率 (diffusivity) とよばれる。時間発展問題<sup>3</sup>を構成する偏微分方程式のもっとも典型的なもののひとつで, 物質の拡散現象, 流体の粘性, 磁気拡散などさまざまな局面で顔を出す。拡散方程式は放物型 (parabolic) の偏微分方程式の例である。

拡散方程式の解の振幅は時間とともに指数関数的に減衰し, その減衰速度は  $u$  の空間波長に依存する。たとえば波長  $\lambda$  の温度構造は熱拡散時間  $\tau_\eta \simeq \lambda^2/\eta$  のうちに平均化されてなくなる。すなわち細かい空間構造ほどすぐに減衰してしまう。

拡散方程式 (2.1) の定常解はポアソン (Poisson) 方程式

$$\nabla^2 u = -q/\eta \quad (2.2)$$

の解に一致する。これは時間に依存しない, 境界値問題 (boundary value problem) の一例であり, 楕円型 (elliptic) の偏微分方程式に属する。時間発展問題を解くときでも, その過程で境界値問題を解かなければならない場合がある (4.4 節および 8.6 節を参照)。

## 2.2 移流方程式

風上で火をたけば温かくなる。これは温度場の空間パターンが流れに乗って移動するからである。このように場の流れによって物理量に移ろうさまを記述するのが移流方程式 (advection equation)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.3)$$

である ( $c$  は流れの速度)。3次元の場合は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\mathbf{c} \cdot \nabla u \quad (2.4)$$

となる。ここで  $\nabla u = (\partial u/\partial x, \partial u/\partial y, \partial u/\partial z)$  は  $u$  の勾配をあらわす。実際は流速  $c$  じたいも時間発展する場合が多い。そのような場合この方程式は非線形方程式となる。移流方程式 (2.3) の一般解は  $f$  を任意の関数として

$$u(x, t) = f(x - ct) \quad (2.5)$$

と書きあらわされる。

## 2.3 波動方程式

バネにつながれた質点の単振動を記述する運動方程式 (振動方程式) は

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = -\omega^2 u \quad (2.6)$$

<sup>3</sup>あるいは初期値問題 (initial value problem) とも。

のような常微分方程式である。ここに  $\omega$  は角周波数で、振動の周期は  $2\pi/\omega$  とあらわされる。複素変数を導入すれば、これは

$$\frac{du}{dt} = i\omega u \quad (2.7)$$

の形式の1階常微分方程式と等価である(ここでは  $u$  は複素変位)。このようなバネがたくさん連結されたものの極限として、弦の振動をあらわす偏微分方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.8)$$

が導かれる。ここで  $u$  は弦の変位、 $\alpha$  は弦を伝わる波の速度である。3次元の弾性体の振動の場合、方程式は

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \alpha^2 \nabla^2 u \quad (2.9)$$

のような形式になる。3次元の場合は変位はベクトル量であるが、ここでは  $u$  は適当に定義した変位のポテンシャル関数のひとつを表すものとする。式(2.8)や(2.9)は波動方程式(wave equation)と呼ばれる。地震波の伝播などはこの式に従う。

波動方程式(2.8)の一般解は  $f, g$  を任意の関数として

$$u(x, t) = f(x - \alpha t) + g(x + \alpha t) \quad (2.10)$$

となる。1次元の移流方程式の場合には一方向にしか「変位」が伝播しなかったが、波動方程式では両方向に伝播する。移流方程式と波動方程式とはともに双曲型(hyperbolic)の偏微分方程式に分類される。

## 2.4 ナビエ・ストークス方程式

最後に比較的複雑な例として、粘性流体の運動を記述するナビエ・ストークス(Navier-Stokes)方程式

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right] = -\nabla p + \rho \nu \nabla^2 \mathbf{V} + \mathbf{F} \quad (2.11)$$

をあげる。ここで  $\mathbf{V}$  は流体の速度、 $\rho$  は密度、 $p$  は圧力、 $\nu$  は動粘性率、そして  $\mathbf{F}$  は外力である。地球物理学では重力や、系の回転に起因する見かけ上の力であるコリオリ力などの影響を考慮しなければならない場合が多い。

ナビエ・ストークス方程式は非線形偏微分方程式の好例である。その主たる非線形性は移流項

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_x}{\partial y} + V_z \frac{\partial V_x}{\partial z} \\ V_x \frac{\partial V_y}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_y}{\partial y} + V_z \frac{\partial V_y}{\partial z} \\ V_x \frac{\partial V_z}{\partial x} + V_y \frac{\partial V_z}{\partial y} + V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} \end{pmatrix}$$

に起因する。基本的にはナビエ・ストークス方程式とは流体の運動量の移流・拡散方程式に何らかの外力が加わったものであるといえる。

### 3 離散化手法のいろいろ

変数を離散化するもっとも単純な手法は、すでに述べたとおり時空間  $(x, t)$  を格子に区切り、格子点上での変数の値を離散変数としてもちいる方法である (式 (1.4) あるいは図 1 を参照)。格子間隔  $\Delta_x$  や  $\Delta_t$  は必ずしも一定でなくてもよい。とくに変数が激しく変動するようなところ (変数の高階微分係数が大きいところ) で格子の間隔を狭くすると効果的である。この離散化のもとで自然に構成される差分法についてはすでに 1 章で紹介した。

関数展開にもとづく手法もよくもちいられる。もっとも一般的な関数展開法のひとつである重みつき残差法 (method of weighted residual) によれば、定義域を張る基底関数  $\phi_k(x)$  ( $k = 0, 1, \dots, N$ ) をもちいて未知関数  $u(x, t)$  を

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^N u_k(t) \phi_k(x) \quad (3.1)$$

のように展開する。これを方程式に代入し、両辺に重み関数  $w_j(x)$  ( $j = 0, 1, \dots, N$ ) をかけて積分する。たとえば 1 次元の拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.2)$$

であれば展開係数  $u_k(t)$  は

$$\frac{d}{dt} \sum_{k=0}^N A_{jk} u_k(t) = \sum_{k=0}^N B_{jk} u_k(t) \quad (3.3)$$

のような連立常微分方程式を満たす。ただし係数行列は

$$A_{jk} = \int_0^1 w_j \phi_k dx, \quad B_{jk} = \int_0^1 \eta w_j \frac{d^2 \phi_k}{dx^2} dx,$$

で与えられる。基底関数として方程式の固有関数や素性の知れた直交多項式などを使うのがスペクトル法 (spectral method)、空間を任意の形状の要素に分割して、各要素内で局所的に値をもつようなスプライン関数をもちいるのが有限要素法 (finite element method) である。時間に関しても実空間ではなく、たとえばフーリエ変換をほどこして周波数領域で方程式を解くことも可能である。

### 4 時間積分の基礎

スペクトル法や有限要素法では方程式は時間に関する連立常微分方程式に変換される。また差分法でも空間のみに差分近似をほどこせば<sup>4</sup>、やはり同様の常微分方程式を得る。したがって時間に関する常微分方程式を研究することは時間発展問題を解くための基礎でありきわめて重要である。

ここではおもに 1 階の常微分方程式

$$\frac{du}{dt} = F(u(t), t) \quad (4.1)$$

<sup>4</sup>しばしば線の方法 (method of lines) と呼ばれる。

を数値的に解く方法についてのべる ( $F$  は与えられた関数)。なお本章では時間は式 (1.4) と同じく  $t_n \equiv n\Delta_t$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) のように離散化されるものとする。

#### 4.1 時間積分の原理

方程式 (4.1) を解くということは、その両辺を時間積分するということに等しい。たとえば時刻  $t = t_n$  での変数の値  $u_n \equiv u(t_n)$  が求まっていれば、次の時刻  $t_{n+1}$  での値は

$$u_{n+1} = u_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(u, t) dt \quad (4.2)$$

のような漸化式で定まる。初期条件  $u_0$  が与えられれば、 $u_1, u_2, \dots$  と逐次的に変数  $u$  の値が得られる。そのようなわけで常微分方程式 (4.1) を解く手法のことを時間積分手法と称する。

#### 4.2 オイラー法

変数の時間発展が (4.2) に従うとはいっても、未来の  $u$  の値はそもそも未知なのであるから、 $F(u, t)$  の積分は見積もりようがない。そこで式 (4.2) において、区間  $t_n \leq t \leq t_{n+1}$  では  $F$  は一定値をとるととりあえず仮定し、その定数として時刻  $t_n$  における値をとって積分を実行すると

$$u_{n+1} = u_n + \Delta_t F(u_n, t_n) \quad (4.3)$$

が得られる。こうして次のステップの  $u$  の値を推定する計算手法がオイラー法であり、時間積分法のもっとも基礎的なものである。オイラー法はテーラー展開公式

$$u_{n+1} = u_n + \Delta_t \left. \frac{du}{dt} \right|_{t=t_n} + \frac{1}{2} \Delta_t^2 \left. \frac{d^2u}{dt^2} \right|_{t=t_n} + \dots \quad (4.4)$$

の  $\Delta_t^2$  以下の項を無視することによっても導かれる。1章のスキーム A の時間積分法はオイラー法である。

式 (4.4) によれば、 $\Delta_t$  がじゅうぶん小さいとき、オイラー法の誤差は局所的には  $O(\Delta_t^2)$  であることがわかる。しかし一般に時間積分スキームの誤差とは、 $t = 0$  から  $t = 1$  まで積分したときに生ずる大域的な誤差をいう。単位時間を積分するには、( $\Delta_t$  が 1 よりも十分小さいことを暗に仮定して)  $1/\Delta_t$  回の時間ステップを要するのであるから、誤差も最悪の場合  $1/\Delta_t$  倍に増大する。したがってオイラー法の大域的な誤差は  $O(\Delta_t)$  である。その意味で「オイラー法は 1 次の精度をもつ」という。

#### 4.3 時間積分の安定性

時間積分スキームを評価する基準には、

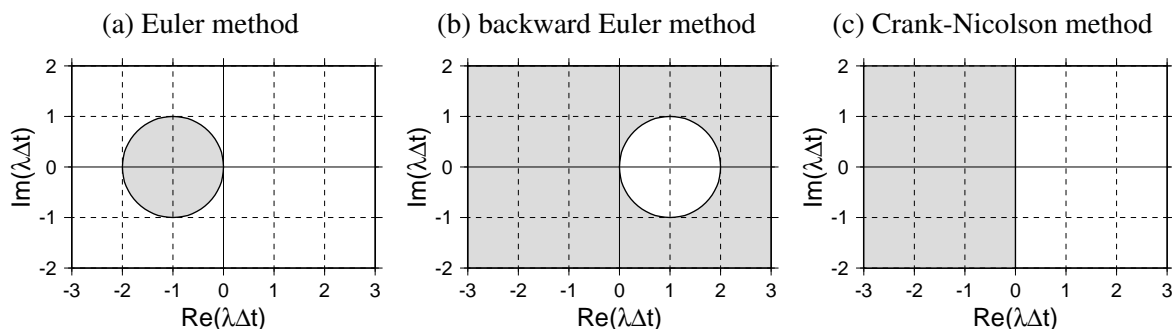


図 4: 常微分方程式  $du/dt = \lambda u$  を (a) オイラー法, (b) 後退オイラー法, (c) クランク・ニコルソン法で解いた場合の安定領域。固有値  $\lambda$  は一般に複素数であるから, 図では  $\lambda\Delta t$  という量を複素平面表示してある ( $\Delta t$  は時間積分の刻み幅)。  $\lambda\Delta t$  という量が灰色の領域に含まれていれば, その数値解は発散しない。

1. 適合性 (consistency):  $\Delta t$  を小さくしたときに, 時間積分スキームがもとの微分方程式に収束すること;
2. 収束性 (convergency):  $\Delta t$  を小さくしたときに, 得られる数値解が真の解に近づいてゆくこと;
3. 安定性 (stability): 数値解が発散しないこと;

などがある。適合性は時間積分スキームをつくる時に必要な理論上の要請である。オイラー法は精度としては 1 次であるが, テーラー展開が可能な限りにおいてその適合性は保証されている。数値解の収束性はもっとも重要な要請であるが, それをきちんと評価することはそれほど簡単でない。なぜならわたしたちは真の解がわからないからこそ数値計算をしているのであって, 数値解の真の解からのずれは厳密には見積もりようがないからである。もっとも単純には時間積分の刻み幅を試験的に小さくすることによって収束性を判断する(くわしくは 5.5 節を参照)。

時間積分スキームの安定性は, わたしたちがつねに注意しなければならない実用上最低限の問題である。そこでここでは安定性の問題についてくわしくのべることにする。たとえば線形の常微分方程式

$$\frac{du}{dt} = \lambda u \quad (4.5)$$

を考えよう。ここで  $u$  や  $\lambda$  は一般には複素数であってよい<sup>5</sup>。この式をオイラー法を使って解くと

$$u_{n+1} = u_n + \lambda\Delta t u_n = (1 + \lambda\Delta t)u_n$$

のようになる。このスキームが安定であるとは, 変数  $u_{n+1}$  の絶対値が  $u_n$  のそれよりも大きくならないということ, つまり条件

$$\frac{|u_{n+1}|}{|u_n|} = |1 + \lambda\Delta t| \leq 1 \quad (4.6)$$

<sup>5</sup>式 (4.5) の厳密解は  $u_0 e^{\lambda t}$  である。もとから振幅の大きさが発散するものを数値的に解いても当然発散するだけであるから, ここでは  $\lambda$  の実部は負であると考えよう。

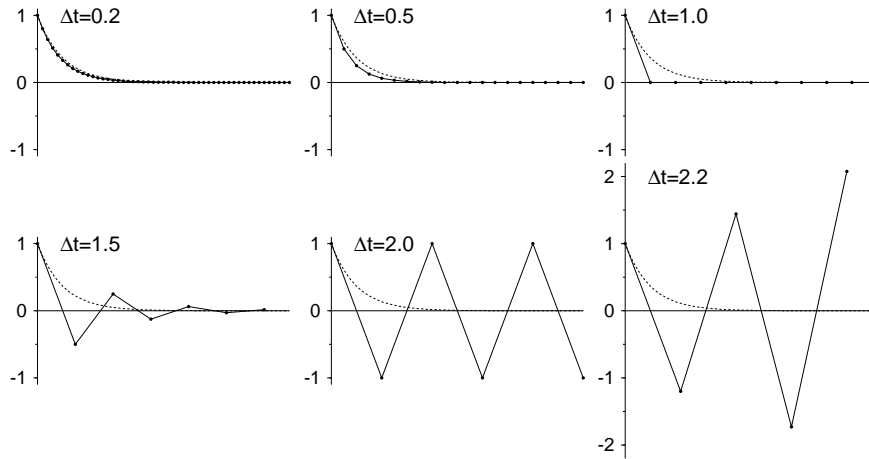


図 5: 微分方程式  $du/dt = -u$  を初期条件  $u(0) = 1$  のもと、さまざまな時間刻み幅でオイラー法をもちいて時間積分した結果 (横軸は時間で  $0 \leq t \leq 10$  の範囲を示す)。破線は厳密解  $u = e^{-t}$  をあらわす。  $\Delta_t > 2$  では数値解は振動しつつ発散する。  $1 < \Delta_t < 2$  であれば数値解は振動しつつ減衰し、十分時間がたつとゼロに収束する。  $\Delta_t < 1$  であれば解のふるまいは厳密解に近づく。

が成り立つことであると定義する。したがって  $\lambda\Delta_t$  なる量が複素平面上の点  $(-1, 0)$  を中心とする半径 1 の円 (図 4(a) の灰色の円) 内に存在していれば条件 (4.6) が成り立ち、数値解は発散しない。このような複素平面内の領域のことを時間積分スキームの安定領域という。

たとえば  $\lambda = -1$  のとき、オイラー法のもとで安定な数値解を得るためには時間刻み幅を  $0 < \Delta_t \leq 2$  の範囲にとらなければならない (図 5)。また質点の単振動の問題では  $\lambda$  に相当する数は純虚数である (式 (2.7) を参照)。その場合いくら  $\Delta_t$  を小さくとっても、オイラー法の安定領域に虚軸が含まれていない以上、数値解は必ず発散する。したがってオイラー法は振動方程式には向かない。もっとも  $\lambda\Delta_t$  が安定領域に含まれなくても、数値解の振幅の増大率がじゅうぶん 1 に近いならば実質的には問題は生じないこともある。1 章の熱伝導問題にはスキーム C は適切でなかったが、それはスキームの安定性に起因したものである。くわしくは 6.1 節で述べる。

条件 (4.6) が成り立つことと、その数値解の精度や収束性とはまったく別物であることに注意。ここで述べたのは単に数値解が発散しないための条件である<sup>6</sup>。

微分方程式がもっと複雑な形式の場合はどうなるだろうか。たとえば線形の連立常微分方程式

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

<sup>6</sup>ただし定係数の線形常微分方程式の場合、適合性のあるスキームで安定に時間積分することができたならば、その数値解はもとの微分方程式の解に収束する。これをラックスの同値定理という。



を考える。右辺の  $3 \times 3$  の係数行列が対角化可能ならば、適当な一次変換  $(u, v, w) \rightarrow (u', v', w')$  が存在して

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

のような形に書ける。ここで  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$  は係数行列の固有値である。式 (4.8) はまさに三本の独立な常微分方程式を意味するから、もとの微分方程式 (4.7) を安定に計算するためには  $\lambda_1 \Delta_t, \lambda_2 \Delta_t, \lambda_3 \Delta_t$  のいずれもが複素平面上の安定領域に含まれている必要がある。応用上は複素固有値のうちの絶対値最大のものに注目し、それが安定領域に含まれていれば十分である場合が多い。

#### 4.4 後退オイラー法 (陰解法)

オイラー法では区間  $t_n \leq t \leq t_{n+1}$  において式 (4.2) のなかの  $F$  が時間変化しないと仮定し、その定数として時刻  $t_n$  における値をとった。これを時刻  $t_{n+1}$  での値にしたのが後退オイラー法 (backward Euler method)

$$\boxed{u_{n+1} = u_n + \Delta_t F(u_{n+1}, t_{n+1})} \quad (4.9)$$

で、1章の例ではスキーム B に相当する。これはオイラー法と同様に 1 次精度のスキームであるが、陰解法であるので  $u_{n+1}$  に関する方程式を解く必要があり、解はすんなりとは求まらない。

後退オイラー法によれば線形の微分方程式 (4.5) は

$$u_{n+1} = (1 - \lambda \Delta_t)^{-1} u_n \quad (4.10)$$

のようにして逐次積分される。したがってこの公式の安定領域は複素平面上の点  $(1, 0)$  を中心とする半径 1 の円の「外側の」領域である (図 4(b))。したがって、まずよっぽどのがない限り後退オイラー法では発散する解がでてこない。とくに  $\lambda \Delta_t$  の実部が負であれば常に安定である。さらに  $\lambda \Delta_t$  の実部が正であっても、それが安定領域におさまっているかぎり数値解の振幅は減衰する。これは本来指数関数的に増大する解の挙動が正しくあらわされないことを意味する。後退オイラー法はオイラー法にくらべて安定領域が広い。同じ次数のスキームどうしを比較した場合、一般に陰解法のほうがより安定である。

ここで陰解法の計算法について簡単に触れておこう。たとえば線形の連立常微分方程式

$$\frac{du}{dt} = Au \quad (4.11)$$

に後退オイラー法を適用すると、

$$(I - \Delta_t A)u_{n+1} = u_n \quad (4.12)$$

となる ( $u$  は  $N$  元のベクトル,  $A$  は  $N \times N$  の正方行列,  $I$  は単位行列)。すなわち未知数  $u_{n+1}$  は連立一次方程式を解いてはじめて求められる。係数行列  $A$  が比較的単純な場合 (たとえ

ば三重対角行列など), あるいは  $N$  がそれほど大きくない場合には, ガウスの消去法に代表されるような直接解法をもちいれればよい。また行列のサイズ  $N$  が大きくて非零要素がまばらに分布しているような場合には反復解法が適している (くわしくは 8.6 節を参照)。またそもそも方程式が非線形の場合には, ニュートン法などの反復解法を必要とする。

### 例題 3

オイラー法 (4.3) と後退オイラー法 (4.9) とを足して 2 で割ったスキーム

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}\Delta_t(F_n + F_{n+1}) \quad (4.13)$$

をクランク・ニコルソン (Crank-Nicolson) 法という (ただし  $F_n = F(u_n, t_n)$  と表記する)。

1. テーラー展開公式をもちいてこのスキームの局所誤差を評価し, それが  $\Delta_t^3$  に比例していることを示せ。
2. 線形の微分方程式  $du/dt = \lambda u$  にこのスキームを適用したときの安定条件が  $Re(\lambda) \leq 0$  であることを示せ (図 4(c) 参照)。 □

## 5 さまざまな時間積分手法

### 5.1 ルンゲ・クッタ法

#### 数値積分法

微分方程式 (4.1) の解を精度よく求めるには, 式 (4.2) における時間積分

$$I \equiv \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(u(t), t) dt \quad (5.1)$$

の精度を向上させればよい。そこでまず数値積分の方法について簡単に紹介しておこう (図 6 を参照のこと)。もっとも単純な積分法は, オイラー法や後退オイラー法の項で説明したとおり, 区間  $t_n \leq t \leq t_{n+1}$  で  $F$  が一定であるとみなし, 積分値  $I$  を短冊の面積で近似する方法である。このとき積分の誤差が  $O(\Delta_t^2)$  になることはすでにみた。

ところで区間の中点  $t_{n+1/2} \equiv t_n + \frac{1}{2}\Delta_t$  での値  $F_{n+1/2}$  をとって同様に積分すると

$$I \simeq \Delta_t F_{n+1/2} \quad (5.2)$$

となるが, これは中点公式 (midpoint rule) といって積分の誤差が  $O(\Delta_t^3)$  になる。計算精度をあげるためには, 積分区間内で  $F$  を直線近似することも考えられる。たとえば  $(t_n, F_n)$  および  $(t_{n+1}, F_{n+1})$  の 2 点をつかって

$$F \simeq F_n + \frac{F_{n+1} - F_n}{\Delta_t}(t - t_n)$$

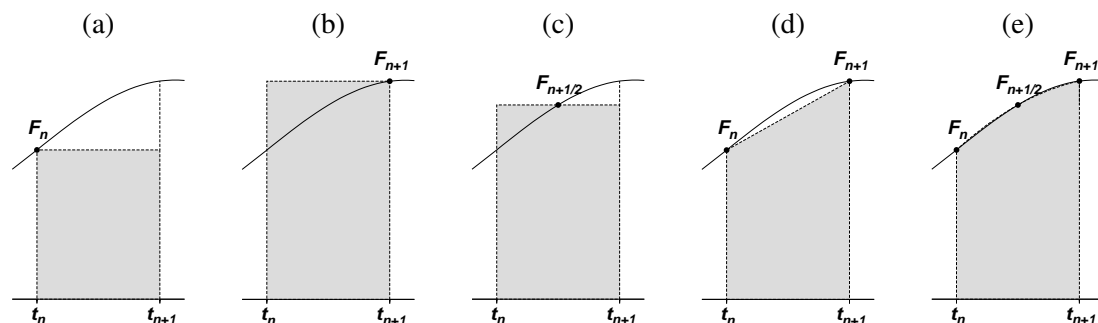


図 6: 積分  $I$  の近似のいろいろ。横軸は時間で、曲線は関数  $F$  のグラフである。(a)(b) 短冊の面積で近似。(c) 中点公式。(d) 台形公式。(e) シンプソンの公式。

と近似し、積分を実行すると

$$I \simeq \frac{1}{2} \Delta_t (F_n + F_{n+1}) \quad (5.3)$$

となり、誤差はやはり  $O(\Delta_t^3)$  となる。これは台形公式 (trapezoidal rule) と呼ばれ、クラーク・ニコルソン法 (4.13) を導く。さらに  $F$  をこの区間で放物線で近似すれば、積分の精度はより向上する。とくに区間の両端と中点とをとって

$$F \simeq F_n + \frac{2(F_{n+1} - F_n)}{\Delta_t^2} (t - t_n)(t - t_{n+1/2}) - \frac{4(F_{n+1/2} - F_n)}{\Delta_t^2} (t - t_n)(t - t_{n+1})$$

と  $t$  の 2 次式で近似すれば、シンプソンの公式 (Simpson's rule)

$$I \simeq \frac{1}{6} \Delta_t (F_n + 4F_{n+1/2} + F_{n+1}) \quad (5.4)$$

が得られ、その誤差は  $O(\Delta_t^5)$  となる。これらの積分公式では  $F_{n+1/2}$  や  $F_{n+1}$  は前もって知ることはできないから、微分方程式の数値計算としてはやや難がある。そこで  $F_{n+1/2}$  や  $F_{n+1}$  を順次陽的に求めよう、というのが以下で紹介するルンゲ・クッタ法である。

## 2 次のルンゲ・クッタ法

オイラー法をもちいれば

$$u_{n+1/2}^* = u_n + \frac{1}{2} \Delta_t F_n, \quad u_{n+1}^* = u_n + \Delta_t F_n, \quad (5.5)$$

すなわち

$$F_{n+1/2} \simeq F(u_{n+1/2}^*, t_{n+1/2}), \quad F_{n+1} \simeq F(u_{n+1}^*, t_{n+1}), \quad (5.6)$$

などと近似的に計算することができる (変数について \* 印はそれがオイラー法で求めた仮の値であることを明示する)。これをそのまま中点公式 (5.2) に適用したのが改良オイラー法 (modified Euler method)

$$u_{n+1} = u_n + \Delta_t F(u_{n+1/2}^*, t_n + \frac{1}{2} \Delta_t), \quad (5.7)$$

また台形公式 (5.3) に適用したのがホイン法 (Heun method)

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2} \Delta_t [F(u_n, t_n) + F(u_{n+1}^*, t_n + \Delta_t)], \quad (5.8)$$

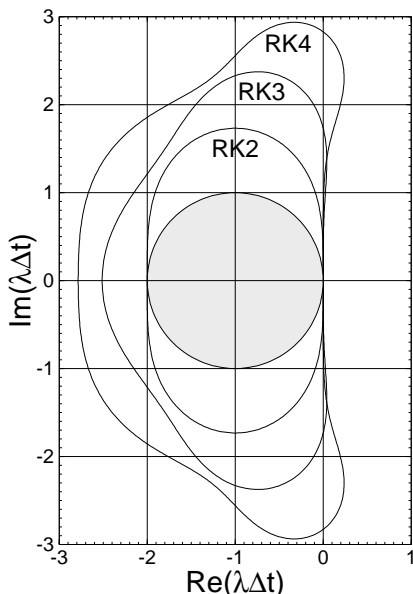


図 7: 常微分方程式  $du/dt = \lambda u$  をルンゲ・クッタ法で解いた場合の安定領域。RK $s$  は  $s$  次のルンゲ・クッタ法を表す。灰色の円板はオイラー法の安定領域である。固有値  $\lambda$  は一般に複素数であるから, 図では  $\lambda\Delta t$  という量を複素平面表示してある ( $\Delta t$  は時間積分の刻み幅)。

である。改良オイラー法の計算手順は, 中間変数  $k_1, k_2$  をもちいて,

$$\begin{aligned} k_1 &= F(u_n, t_n), & k_2 &= F(u_n + \frac{1}{2}k_1\Delta t, t_n + \frac{1}{2}\Delta t), \\ u_{n+1} &= u_n + \Delta t k_2, \end{aligned} \quad (5.9)$$

またホイン法の計算手順は

$$\begin{aligned} k_1 &= F(u_n, t_n), & k_2 &= F(u_n + k_1\Delta t, t_n + \Delta t), \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{1}{2}\Delta t(k_1 + k_2), \end{aligned} \quad (5.10)$$

と書きあらわすこともできる。これらの公式の局所誤差が実際に  $O(\Delta t^3)$  であることはテーラー展開によって確認することができる。改良オイラー法を線形常微分方程式 (4.5) に適用すると, 安定条件は

$$\frac{|u_{n+1}|}{|u_n|} = \left| 1 + \lambda\Delta t + \frac{1}{2}(\lambda\Delta t)^2 \right| < 1 \quad (5.11)$$

となる。これを満たす  $\lambda\Delta t$  の範囲は図 7 に示されている。単純なオイラー法に比べて手間は 2 倍かかるけれども, 精度のみならず安定性も向上していることがわかる。なおホイン法の安定領域もまったく同じである。

### 3 次のルンゲ・クッタ法

オイラー法による推定値 (5.6) をそのままシンプソンの積分公式 (5.4) に適用して  $O(\Delta t^5)$  の精度を得ようというのはあまりに虫のよい話であり, もっと工夫が必要である。結論が

らいうと, 次の3段階の手順を踏めば積分の精度を  $O(\Delta_t^4)$  にすることができる:

$$\begin{aligned} k_1 &= F(u_n, t_n), & k_2 &= F(u_n + \frac{1}{2}k_1\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t), \\ k_3 &= F(u_n - k_1\Delta_t + 2k_2\Delta_t, t_n + \Delta_t), \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{1}{6}\Delta_t(k_1 + 4k_2 + k_3), \end{aligned} \quad (5.12)$$

$k_2$  を求めるところは前と同じで,  $\Delta_t$  を半分にしたときのオイラー法である。 $k_3$  を求めるところがトリッキーであるが, 直観的には,  $k_1$  と  $k_2$  の値をもちいて, 1次近似で  $t = t_{n+1}$  での  $F$  の値を外挿により求め, それを陰的なオイラー公式に代入して  $u_{n+1}$  の仮の値を推定したもの, と解釈できる。3次公式になると安定領域に虚軸が含まれることがわかる。

#### 4次のルンゲ・クッタ法

シンプソン則 (5.4) と同じ  $O(\Delta_t^5)$  の精度は, 次のような4段階の手順によって得られる<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned} k_1 &= F(u_n, t_n), & k_2 &= F(u_n + \frac{1}{2}k_1\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t), \\ k_3 &= F(u_n + \frac{1}{2}k_2\Delta_t, t_n + \frac{1}{2}\Delta_t), & k_4 &= F(u_n + k_3\Delta_t, t_n + \Delta_t), \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{1}{6}\Delta_t(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned} \quad (5.13)$$

この公式の証明は大変煩雑なので, ここでは省略せざるを得ない。ただオイラー法の4倍の手間をかければ, 大域的に4次精度の公式が陽的につくれるという事実は注目に値する。図7によれば4次のルンゲ・クッタ公式の安定領域は低次のものに比べて広く, より安定であることがわかる。とくに安定領域が虚軸を大きく含んでいるところが特徴的であり, 振動方程式の解を発散させない(むしろ振幅が減衰する)。精度や安定性の点からしても4次のルンゲ・クッタ法は汎用性のあるすぐれた計算手法であるといえよう。

## 5.2 アダムズ・バッシュフォース法とその類型

時間積分 (5.1) の精度を高めるのに, 積分区間内で  $F$  を直線や放物線などで近似するのは前と同じ発想であるが, アダムズ・バッシュフォース法では, すでに計算で求められている過去の値 ( $F_{n-1}, F_{n-2}, \dots$  など) をもちいるのが特徴である。こうすると時間ステップを一段進めるのに関数  $F$  の計算が一回きりで済むので, 経済的である。

<sup>7</sup>一般の4段ルンゲ・クッタ公式は

$$\begin{aligned} k_1 &= F(u_n, t_n), & k_2 &= F(u_n + \alpha_1 k_1 \Delta_t, t_n + \alpha \Delta_t), & k_3 &= F(u_n + (\beta_1 k_1 + \beta_2 k_2) \Delta_t, t_n + \beta \Delta_t), \\ k_4 &= F(u_n + (\gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2 + \gamma_3 k_3) \Delta_t, t_n + \gamma \Delta_t), & u_{n+1} &= u_n + (c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3 + c_4 k_4) \Delta_t, \end{aligned}$$

のようにあらわすことができる。この公式の局所誤差を  $O(\Delta_t^5)$  にするためには係数  $\alpha_1, \beta_1, \beta_2, \dots$  などはある条件を満たさなければならないが, それには任意性があり, 必ずしも (5.13) には限らない。しかし公式 (5.13) は係数にゼロのものが多いなど都合のよい性質をもつためよくもちいられる。なお同様に2次や3次のルンゲ・クッタ公式にも係数のとり方に任意性がある。

## アダムズ・バッシュフォース法

現在とそのひとつ前の時間ステップの情報を持ちれば、関数  $F$  は

$$F \simeq F_n + \frac{F_{n-1} - F_n}{t_{n-1} - t_n}(t - t_n) \quad (5.14)$$

のように線形近似できる。これを (4.2) における積分区間  $t_n \leq t \leq t_{n+1}$  に外挿し、積分を実行すると、公式

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}\Delta_t(3F_n - F_{n-1}) \quad (5.15)$$

が得られる。これを 2 次のアダムズ・バッシュフォース (Adams-Bashforth) 法という<sup>8</sup>。線形の微分方程式 (4.5) にこれを適用すると、式変形ののち

$$\frac{u_{n+1}}{u_n} \frac{u_n}{u_{n-1}} = \left(1 + \frac{3}{2}\lambda\Delta_t\right) \frac{u_n}{u_{n-1}} - \frac{1}{2}\lambda\Delta_t$$

を得る。よって解の振幅の増加率  $\chi \equiv u_{n+1}/u_n$  は 2 次方程式

$$\chi^2 - \left(1 + \frac{3}{2}\lambda\Delta_t\right)\chi + \frac{1}{2}\lambda\Delta_t = 0 \quad (5.16)$$

の根であるから、それらの絶対値がともに 1 よりも小さい、というのが安定条件になる。そのような  $\lambda\Delta_t$  の範囲を示したのが図 8(a) である。

もっと前の時間ステップでの値を利用すれば近似の精度はさらにいくらでもあげられる。たとえば  $t = t_n, t_{n-1}, t_{n-2}$  での値を利用すれば、関数  $F$  を  $t$  の 2 次多項式で近似することができ、3 次の公式

$$u_{n+1} = u_n + \frac{\Delta_t}{12}(23F_n - 16F_{n-1} + 5F_{n-2}) \quad (5.17)$$

が得られる。さらに 4 次の公式は

$$u_{n+1} = u_n + \frac{\Delta_t}{24}(55F_n - 59F_{n-1} + 37F_{n-2} - 9F_{n-3}) \quad (5.18)$$

など。アダムズ・バッシュフォース法は、近似の精度を上げると安定領域が狭くなる傾向をもつ (図 8(a))。また 3 次以上の公式では安定領域に虚軸が含まれる。

アダムズ・バッシュフォース法では計算の開始時に前の時間ステップの値が使えないという問題が生じる。簡便な解決策は最初だけ次数の低い公式を使うことである。たとえば計算の最初ではオイラー法 (すなわち 1 次のアダムズ・バッシュフォース法) を使うなど。しかしその際の誤差が無視できない場合もある。そのような場合は最初だけ  $\Delta_t$  を細かくすることが考えられる。また最初だけルンゲ・クッタ法を使うことも考えられる。

<sup>8</sup>テーラー展開で導くこともできる。  $du/dt = F$  に注意すれば

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + \Delta_t F_n + \frac{1}{2}\Delta_t^2 dF/dt + O(\Delta_t^3), \\ F_{n-1} &= F_n - \Delta_t dF/dt + O(\Delta_t^2), \end{aligned}$$

であるから、二番目の式に  $\Delta_t/2$  をかけて辺々足し算すると公式 (5.15) が得られる。局所誤差が  $O(\Delta_t^3)$  であることもすぐにわかる。

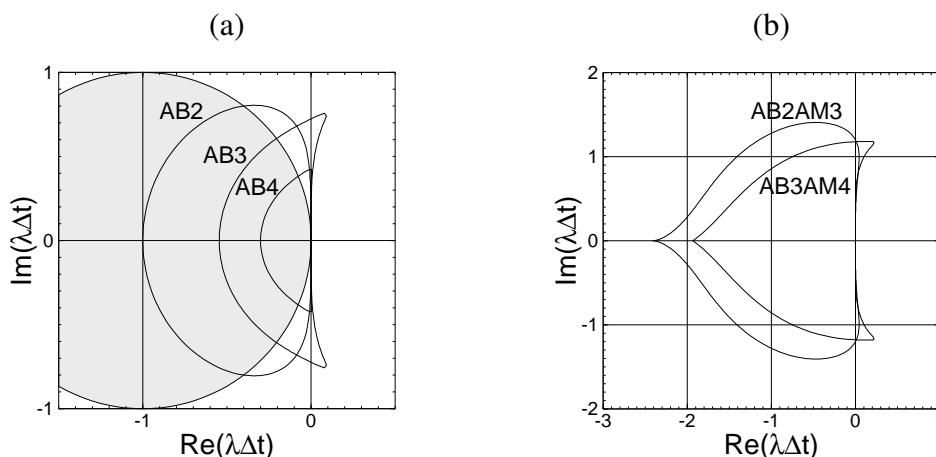


図 8: (a) 常微分方程式  $du/dt = \lambda u$  を  $s$  次のアダムズ・バッシュフォース法 (AB $s$  と表記) で解いた場合の安定領域。灰色の円板はオイラー法 (AB1) の安定領域を表す。同じ陽解法ではあるが、安定領域はルンゲ・クッタ法にくらべて小さい。(b) 同じ方程式を  $s$  次の予測子・修正子法で解いた場合の安定領域。予測子に  $(s-1)$  次のアダムズ・バッシュフォース法、修正子に  $s$  次のアダムズ・モルトン法をもちいている (AB $(s-1)$ AM $s$  と表記)。

アダムズ・バッシュフォース法は多段階法の一例である。これを線形の微分方程式に適用した場合の数値解の振幅の増加率  $\chi$  は、(5.16) のような代数方程式の根として求められ、一般に二つ以上存在する。これらのうち物理的に意味をもつのは 1 つだけで、これを物理モードという。いっぽうその他の根は数値計算上どうしてもでてくるゴミのようなもので、これを計算モードという。計算モードは存在したとしてもすみやかに減衰するべきであるから、その振幅の増加率は、つねに物理モードのそれよりも小さくしなければならない。たとえば (5.16) の根は  $|\lambda\Delta t| \rightarrow 0$  の極限では  $\chi = 0, 1$  で、前者が計算モード、後者が物理モードに相当し、たしかにこの要請が満たされていることがわかる。一般にアダムズ・バッシュフォース法では、もっと高次の公式でも  $|\lambda\Delta t|$  がじゅうぶん 1 より小さいならば、計算モードはすみやかに減衰し、問題は生じない。

### アダムズ・モルトン法

アダムズ・モルトン (Adams-Moulton) 法は、前節で述べたアダムズ・バッシュフォース法と原理はほぼ同じであるが、時刻  $t_{n+1}$  での  $F$  の値も利用するところが違う。したがってこれは陰解法に分類される。2 次公式は台形公式、あるいはクランク・ニコルソン法 (4.13) に等しい。3 次公式は

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{12}\Delta t(5F_{n+1} + 8F_n - F_{n-1}) \quad (5.19)$$

であり、さらに 4 次の式は

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{24}\Delta t(9F_{n+1} + 19F_n - 5F_{n-1} + F_{n-2}) \quad (5.20)$$

となる。アダムズ・モルトン法の安定領域は比較的広い。とくに 2 次のクランク・ニコルソン法は方程式の固有値の実部がゼロまたは負であればつねに安定である。

### 予測子・修正子法

まず陽解法であるアダムズ・バッシュフォース法を用いて、時刻  $t_{n+1}$  での変数の仮の値  $u_{n+1}^*$  を求める。つぎにその仮の値を使って陰解法であるアダムズ・モルトン法でもう一度  $u_{n+1}$  を推定しなおし、解の精度をあげる。これが予測子・修正子法 (predictor-corrector method) の要点である。したがって時間ステップを一つ進めるのに  $F(u, t)$  の計算が2回必要になる。たとえば3次の公式は

$$\begin{aligned} u_{n+1}^* &= u_n + \frac{\Delta t}{2}(3F_n - F_{n-1}), \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{\Delta t}{12}(5F_{n+1}^* + 8F_n - F_{n-1}), \end{aligned} \quad (5.21)$$

のような二段構えとなる (ただし  $F_{n+1}^* \equiv F(u_{n+1}^*, t_{n+1})$ )。予測子では2次のアダムズ・バッシュフォース法を用いているが、修正子の段階を経ることで大局的な精度は3次になる (予測子にも3次公式を使う流儀もある)。この3次の予測子・修正子法を用いる場合、計算の開始時には過去の計算ステップでの値が使えないので、最初のステップだけ次数を落とした2次の予測子・修正子法 (オイラー法+クランク・ニコルソン法) を用いればよい<sup>9</sup>。予測子・修正子法は、計算の手間は2倍必要になるけれども、単なるアダムズ・バッシュフォース法に比べて安定領域が広いというメリットがある (図 8(b))。

### 5.3 リーフフロッグ法

左辺の時間微分項  $du/dt$  を中心差分公式で直接近似したのが、2次精度のリーフフロッグ (leapfrog) 法

$$u_{n+1} = u_{n-1} + 2\Delta t F(u_n, t_n) \quad (5.22)$$

である。1章の熱伝導問題におけるスキームCに相当する。線形微分方程式にこれを適用したときの数値解の振幅の増加率  $\chi$  は、それが満たす2次方程式を解いて

$$\chi = \lambda\Delta t \pm \sqrt{1 + (\lambda\Delta t)^2}$$

と求まる。よって安定条件  $|\chi| < 1$  を満たすためには、固有値  $\lambda$  が純虚数でかつ  $|\lambda\Delta t| \leq 1$  の場合に限られることがわかる。したがってこれは振動方程式 (もしくは振動的なふるまいをする方程式) に適する。

### 5.4 2階の常微分方程式の解法

たとえば波動の伝播を論ずるときのように、時間に関する2階の常微分方程式を解かなければならない場合がある。そのようなときには、

1. 補助変数を導入して1階の連立微分方程式に帰着させる;

<sup>9</sup>2次の予測子・修正子法とはホイン法 (5.10) に等しい。



2. 2階微分をリーフログ法と同様の手法で直接差分近似する;

などの方法がとられる。後者の場合, 与えられた方程式が

$$\frac{d^2u}{dt^2} = F(u, t) \quad (5.23)$$

であったとすれば, 時間微分項を2次の中心差分で置き換えて

$$u_{n+1} = 2u_n - u_{n-1} + \Delta_t^2 F(u_n, t_n) \quad (5.24)$$

なる公式が得られる。 $F = \lambda u$  の場合にこの公式を適用したときの安定条件は,  $\lambda$  は実数でかつ  $-4 \leq \lambda \Delta_t^2 \leq 0$  となる。たとえば振動方程式 (2.6) に適用したとすれば  $\Delta_t \leq 2/|\omega|$  であれば数値解は発散しない。

## 5.5 誤差の見積もり

時間に関する常微分方程式を解くとき, ステップ幅  $\Delta_t$  はどう選ぶのがよいだろうか。誤差を減らすには  $\Delta_t$  を小さくすればいいのだが, それではいくら経っても計算が終わらない。そこで誤差をある範囲内に抑えた上でなるべく  $\Delta_t$  を大きくとるための工夫がいろいろ考案されている。

### 素朴な方法

$s$  次の時間積分スキームの局所誤差の主要項は定義により  $C\Delta_t^{s+1}$  である。係数  $C$  は  $u$  の高階微分に比例しており当然ながら前もって知ることができない。ところが時刻  $t_n$  から  $t_{n+1}$  まで時間積分して得た結果  $u_{n+1}$  と,  $\Delta_t$  を半分にして2倍の労力で求めた結果  $\hat{u}_{n+1}$  との差  $\Delta u$  は

$$\Delta u \equiv u_{n+1} - \hat{u}_{n+1} \simeq C\Delta_t^{s+1} - 2C\left(\frac{\Delta_t}{2}\right)^{s+1} = (1 - 2^{-s})C\Delta_t^{s+1} \quad (5.25)$$

のようであり, 誤差の大きさがある程度見積もることができる。ひとたび誤差の大きさがわかれば, その相対値

$$\mathcal{E} \equiv \frac{|C\Delta_t^{s+1}|}{|\hat{u}_{n+1}|} \simeq \frac{|\Delta u|}{(1 - 2^{-s})|\hat{u}_{n+1}|} \quad (5.26)$$

があらかじめ設定した許容値に近づくように  $\Delta_t$  の値を再設定することも可能である。たとえば許容される誤差を  $\mathcal{E}_0$  とおくと, 期待される最適な時間刻み幅は

$$\Delta_t^{\text{new}} = \Delta_t (\mathcal{E}_0 / \mathcal{E})^{\frac{1}{s+1}} \quad (5.27)$$

である<sup>10</sup>。ただこの方法は時間ステップを進めるたびに余計な計算をしなければならないという欠点がある。

<sup>10</sup>実際はもう少し工夫が必要である。くわしくは Press et al. (1992), Numerical Recipes in Fortran 77, Chap.16, Cambridge Univ. Press を参照。

埋めこみ型の時間積分公式

3 次のルンゲ・クッタ公式 (5.12) によれば

$$u_{n+1}^{(3)} = u_n + \frac{1}{6}\Delta_t(k_1 + 4k_2 + k_3) \quad (5.28)$$

であったが, 中間変数  $k_2$  をもちいると, 2 次精度の改良オイラー法 (5.9) による変数  $u$  の推定値が

$$u_{n+1}^{(2)} = u_n + k_2\Delta_t \quad (5.29)$$

のようにあらわされる。このようにある次数の時間積分公式が, より高次の公式を計算する過程で使われる中間変数をもちいてあらわされてしまうとき, その積分公式は高次の公式に埋め込まれて (embedded) いる, という。このとき二つの推定値の差

$$\Delta u \equiv u_{n+1}^{(3)} - u_{n+1}^{(2)} = \frac{1}{6}\Delta_t(k_1 - 2k_2 + k_3) \quad (5.30)$$

はちょうど改良オイラー法の局所誤差  $O(\Delta_t^3)$  を近似的に与えるので, 余計な計算なしに効率的にスキームの局所誤差を見積もることができて便利である<sup>11</sup>。

またアダムズ・バッシュフォース法などの多段階法の場合, 過去の時間ステップでの計算値が保存されている限り原理的にはいくらでも高次の公式をつくることができるので, スキームの埋め込みはつねに可能である。とくに予測子・修正子法では予測子と修正子との差をそのスキームの誤差の評価に使うことができる。

#### 例題 4

惑星のケプラー運動を考える。太陽の位置を原点にとって惑星の位置を直角座標で  $(x(t), y(t))$  とあらわすと, 運動方程式は

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{GMx}{r^3}, \quad \frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{GMy}{r^3}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad (5.31)$$

となる ( $G$  は万有引力定数,  $M$  は太陽の質量)。速度  $u \equiv dx/dt$ ,  $v \equiv dy/dt$  を定義し, 長さを  $t = 0$  での太陽 - 惑星間の距離  $a$ , 速度を  $\sqrt{GM/a}$ , 時間を  $\sqrt{a^3/(GM)}$  で規格化すると, 運動方程式は

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \frac{du}{dt} = -\frac{x}{r^3}, \quad \frac{dv}{dt} = -\frac{y}{r^3}, \quad (5.32)$$

のように無次元化される。初期条件  $(x, y, u, v) = (1, 0, 0, v_0)$  のもとでこれを時間積分せよ (ちなみに軌道は極座標表示で  $r = v_0^2/[1 - (1 - v_0^2)\cos\theta]$  であり,  $v_0 = 1$  で円軌道,  $v_0 = \sqrt{2}$  で放物線軌道になる)。時間積分スキームには本章で紹介した手法 (ルンゲ・クッタ法など) をもちいること。エネルギーや角運動量の保存はどの程度成り立っているか。いくつかの異なる時間積分スキームで解き, 誤差がスキームの次数とともに減少することを確認せよ。もうひとつ同質量の惑星がそばにあったとしたらどうなるか。□

<sup>11</sup>もっと高次の公式もある。前掲の文献を参照のこと。

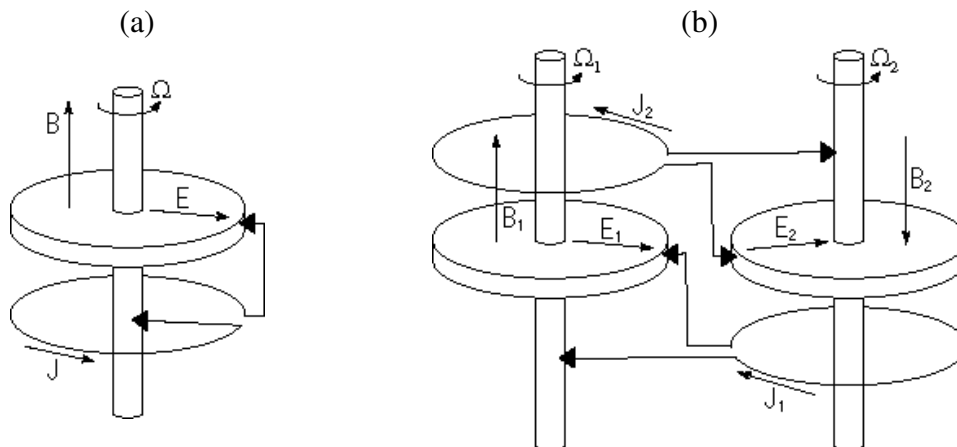


図 9: (a) 円板ダイナモ。反時計回りに回転する円板に対して、磁場が上向きになるように初期電流が流れる。その後円板の電磁誘導により、回路には自発的に電流が流れ続ける。コイルは空間に固定されている。(b) 2つの同じ円板ダイナモを組み合わせた力武ダイナモ。

**例題 5**

地磁気は液体金属コアの対流運動が駆動する自励ダイナモ (self-excited dynamo) 作用によって生成されている。自励ダイナモのもっとも簡単なモデルが円板ダイナモである。これは導体の円板と回転軸およびコイルとからなり、それらは図 9(a) のように配置される。はじめにコイルに電流  $J$  を流す。するとコイルを貫く磁場  $B$  が発生し、それは円板をも貫く。円板は一定の外トルクのもと、角速度  $\Omega$  で回転しており、円板中心と縁とのあいだには放射状の誘導電場が生ずる。円板の縁と回転軸とはコイルを介して短絡されるので、コイルには誘導電流が流れるが、その電流がジュール散逸に打ち勝って初期電流を増幅させるならば、この系には自発的に電流が流れ続けることになる。いっぽう円板には回転を止める向きのローレンツ力が作用するので、電流が無限に大きくなることはない。

磁場  $B$  が一様であるとする、円板を貫く磁束  $\Phi$  は

$$\Phi = \pi a^2 B = MJ$$

とあらわされる ( $a$  は円板の半径,  $M$  はコイルと円板とのあいだの相互インダクタンス)。このとき円板の中心と縁とのあいだの電位差は、単位時間あたりの磁束の変化量に等しいから

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{\Omega}{2\pi} \Phi = \frac{M\Omega J}{2\pi}$$

である。よってキルヒホッフの定理から

$$L \frac{dJ}{dt} = \frac{M\Omega J}{2\pi} - RJ \tag{5.33}$$

がなりたつ ( $L$  はコイルの自己インダクタンス,  $R$  は回路の抵抗)。いっぽう円板にはたらくローレンツ力によるトルクは

$$\int_0^a J B r dr = \frac{1}{2} a^2 J B = \frac{MJ^2}{2\pi}$$

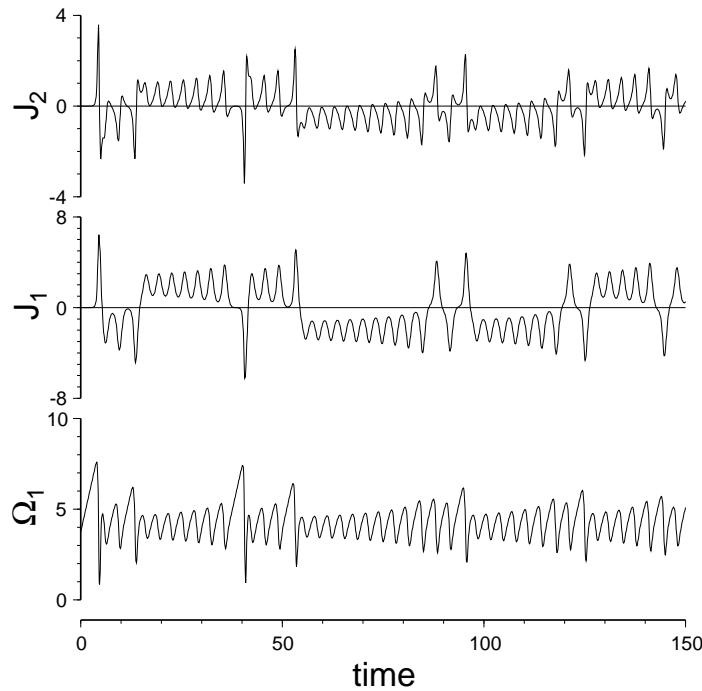


図 10:  $\mu = 1$ ,  $K = 2$  の力武ダイナモの積分結果。初期条件は  $\Omega_1 = \Omega_0$  で、微弱電流を流している。カオス的な電流の反転がみられる。

だから、慣性モーメントを  $C$ 、円板に作用する一定の外トルクを  $G$  として、運動方程式は

$$C \frac{d\Omega}{dt} = G - \frac{MJ^2}{2\pi} \quad (5.34)$$

となる。電流を  $\sqrt{2\pi G/M}$ 、時間を  $\sqrt{2\pi CL/(GM)}$ 、角速度を  $\sqrt{2\pi GL/(CM)}$  でそれぞれ規格化すると、方程式 (5.33)(5.34) は

$$\frac{dJ}{dt} = (\Omega - \mu)J, \quad \frac{d\Omega}{dt} = 1 - J^2 \quad (5.35)$$

と無次元化される。ここで  $\mu = R \sqrt{2\pi C/(GLM)}$  は電気抵抗をあらわす無次元数である。

2つの円板ダイナモを組み合わせたのが力武ダイナモ<sup>12</sup>である(図9(b))。単一の円板ダイナモの場合と同様の考察から、円板  $i$  ( $i = 1, 2$ ) の無次元角速度  $\Omega_i(t)$  とそこに流れる無次元電流  $J_i(t)$  は、連立常微分方程式

$$\begin{cases} \frac{dJ_1}{dt} = \Omega_1 J_2 - \mu J_1, & \frac{dJ_2}{dt} = \Omega_2 J_1 - \mu J_2, \\ \frac{d\Omega_1}{dt} = 1 - J_1 J_2, & \frac{d\Omega_2}{dt} = 1 - J_1 J_2, \end{cases} \quad (5.36)$$

を満たすことがわかる。(5.36) よりあきらかに  $\Omega_1 - \Omega_2 \equiv \Omega_0$  は初期条件によって決まる定数で、一般性を損なうことなく  $\Omega_0 \geq 0$  とおくことができる。この系は

$$J_1 = \pm K, \quad J_2 = \pm K^{-1}, \quad \Omega_1 = \mu K^2, \quad \Omega_2 = \mu K^{-2} \quad (5.37)$$

<sup>12</sup>T. Rikitake (1958), *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **54**, 89; D.L. Turcotte (1997), *Fractals and chaos in geology and geophysics* (2nd Ed.), Cambridge Univ. Press.

という定常解をもつ (複号同順)。ここで  $K$  は 1 以上の定数で

$$K = \sqrt{(\Omega_0/2\mu) + \sqrt{1 + (\Omega_0/2\mu)^2}} \quad \text{または} \quad K^2 - K^{-2} = \Omega_0/\mu \quad (5.38)$$

で与えられる。電流が正負の両方とりうることは、同じ円板の回転速度に対して、磁場の極性が両方向とりうることを示している。この系の無次元パラメータとして  $(\mu, \Omega_0)$  のかわりに  $(\mu, K)$  をとる場合が多い。

1. 円板ダイナモの方程式 (5.35) について、無次元数  $\mu$  を適当にふって系のふるまいがどうなるか調べよ。
2. 適当な  $(\mu, K)$  を与えて力武ダイナモの時間発展を計算し、系のふるまいを考察せよ (たとえば図 10 を参照)。 □

## 6 空間の離散化

### 6.1 差分法

差分法の原理

1 章で述べたとおり差分法 (finite difference method) では空間座標を格子 (grid) に区切り、格子点上での値によって変数の空間分布を記述する。たとえば定義域が  $0 \leq x \leq 1$  であれば

$$x_j = j\Delta_x \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N; \Delta_x \equiv 1/N) \quad (6.1)$$

とし、離散変数  $u_j \equiv u(x_j)$  を定義するのがふつうである。格子点数  $N$  をじゅうぶん多くとれば変数の空間分布はよく再現されるはずである。

関数  $u(x)$  が格子点  $x = x_j$  の近傍でじゅうぶんなめらかであれば、テーラー展開公式により

$$u_{j+1} = u_j + \Delta_x \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_j} + \frac{1}{2} \Delta_x^2 \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x=x_j} + \frac{1}{6} \Delta_x^3 \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x=x_j} + \frac{1}{24} \Delta_x^4 \left. \frac{d^4u}{dx^4} \right|_{x=x_j} + \dots, \quad (6.2)$$

$$u_{j-1} = u_j - \Delta_x \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_j} + \frac{1}{2} \Delta_x^2 \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x=x_j} - \frac{1}{6} \Delta_x^3 \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x=x_j} + \frac{1}{24} \Delta_x^4 \left. \frac{d^4u}{dx^4} \right|_{x=x_j} + \dots, \quad (6.3)$$

が成り立つ。式 (6.2) から式 (6.3) を辺々引き算すると

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta_x} - \frac{1}{6} \Delta_x^2 \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x=x_j} + \dots$$

が得られる。したがって格子点  $x_j$  における 1 階微分係数の差分近似は 2 次の精度で

$$\boxed{\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta_x}} \quad (6.4)$$

である。同様に式 (6.2) と (6.3) とを辺々足し算すると

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2} - \frac{1}{12} \Delta_x^2 \left. \frac{d^4 u}{dx^4} \right|_{x=x_j} + \dots$$

であるから、2 階微分係数の差分近似式は

$$\boxed{\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2}} \quad (6.5)$$

で、これもまた 2 次精度である。近似式 (6.4)(6.5) は  $x = x_j$  を中心としてその両側の点をつかって微分係数を表現しているのだから、中心差分公式とか 3 点公式などという。

3 階や 4 階微分についても同様にして差分近似が可能である。ただしその場合は  $x_{j-2} \leq x \leq x_{j+2}$  までをつかった 5 点公式になる。またより高精度の差分近似式をつくることもできる。この場合も隣り合う三つの格子点だけでなく、もっと多くの格子点における  $u$  の値を利用する。たとえば 4 次精度の中心差分公式は

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_j} = \frac{-u_{j+2} + 8u_{j+1} - 8u_{j-1} + u_{j-2}}{12\Delta_x}, \quad (6.6)$$

$$\left. \frac{d^2 u}{dx^2} \right|_{x=x_j} = \frac{-u_{j+2} + 16u_{j+1} - 30u_j + 16u_{j-1} - u_{j-2}}{12\Delta_x^2}, \quad (6.7)$$

のような 5 点公式である。

以上の差分公式は関数  $u$  の補間多項式を使ってもまったく同様に導くことができる。たとえば  $x = x_{j-1}, x_j, x_{j+1}$  の 3 点あれば  $u$  は

$$u(x) \simeq u_j + \frac{(u_{j+1} - u_j)(x - x_j)(x - x_{j-1})}{(x_{j+1} - x_j)(x_{j+1} - x_{j-1})} + \frac{(u_{j-1} - u_j)(x - x_j)(x - x_{j+1})}{(x_{j-1} - x_j)(x_{j-1} - x_{j+1})} \quad (6.8)$$

のような  $x$  の 2 次関数で補間でき、1 階および 2 階微分係数の差分近似式が得られる。

### 境界での差分公式

境界では定義域の外側の格子点が存在しないので、片側差分、たとえば  $x = 0$  での 1 階微分係数であればテーラー展開 (6.2) をもとに

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_0} = \frac{u_1 - u_0}{\Delta_x} \quad (6.9)$$

のような 1 次の差分公式をもちいる。一般に境界での差分公式は精度が劣るが、実用的にはそれでよい場合が多い。

境界ではふつう何らかの境界条件が課せられる。たとえば  $x = 0$  で  $u$  の値そのものが指定されているディリクレ型の場合には、そもそもその境界では方程式を解く必要がない。恒等的に  $u_0$  に指定された値を代入していればよい。

境界条件に微分が含まれる場合はとくに注意が必要である。たとえば  $x = 0$  で  $u$  の 1 階微分係数が

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=x_0} = k \quad (6.10)$$

のように指定されているノイマン型の境界条件の場合, テーラー展開公式 (6.2) により

$$u_1 = u_0 + k\Delta_x + \frac{1}{2}\Delta_x^2 \frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x=x_0} + \frac{1}{6}\Delta_x^3 \frac{d^3u}{dx^3} \Big|_{x=x_0} + \dots \quad (6.11)$$

のような式が得られるから, たとえば  $u$  の 2 階微分係数は 1 次の精度で

$$\frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x=x_0} = \frac{2(u_1 - u_0 - k\Delta_x)}{\Delta_x^2} \quad (6.12)$$

のように求まる。なお境界の外側に  $x_{-1}$  なる仮想的な点をとると, 境界条件 (6.10) が

$$\frac{u_1 - u_{-1}}{2\Delta_x} = k \quad (6.13)$$

と差分近似できることから,  $u$  の 2 階微分係数は形式上

$$\frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x=x_0} = \frac{u_1 - 2u_0 + u_{-1}}{\Delta_x^2} = \frac{2(u_1 - u_0 - k\Delta_x)}{\Delta_x^2} \quad (6.14)$$

のように計算できる。この結果は (6.12) と同じであるが, テーラー展開による導出法のほうが汎用性の点ですぐれている。

## 6.2 差分法の安定性

時間を含んだ偏微分方程式を解くにあたり差分法によって空間の離散化をおこなうと, 各格子点での変数の値  $u_j$  が満たすべき連立常微分方程式が得られる (線の方法)。たとえば 1 次元の熱伝導方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (6.15)$$

に対して空間微分を 2 次の中心差分公式で近似すると

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \frac{\eta}{\Delta_x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} \quad (6.16)$$

が得られる (境界条件として  $u_0 = u_N = 0$  を課した)。この連立常微分方程式の係数行列の固有値  $\lambda$  はすべて負の実数であり, そのうち絶対値が最大のものは  $\lambda \approx -4\eta/\Delta_x^2$  である<sup>13</sup>。時間積分にオイラー法を適用すると, 安定条件 (4.6) より  $-2 \leq \lambda\Delta_t < 0$  が必要であるから, 時間積分の刻み幅は

$$\Delta_t \leq \frac{\Delta_x^2}{2\eta} \quad (6.17)$$

に制限される。ここで注意すべきことは, 空間解像度を上げようとして  $\Delta_x$  を小さくすると, 時間積分の刻み幅を  $\Delta_x^2$  に比例して小さくしなければならない, ということである。あ

<sup>13</sup> $k$  番目の固有値は  $\lambda_k = (2\eta/\Delta_x^2)(\cos k\pi/N - 1)$  である。

る一定の時間だけ数値計算をおこなうとき、 $\Delta_x$  を半分にすると必要な時間ステップ数は4倍になる。オイラー法でなく、もっと安定領域の広いスキームを使えばこの条件(6.17)はいくぶん緩和される。とくにクランク・ニコルソン法や後退微分公式(8.4節を参照)などを使えばどんなに $\Delta_t$ を大きくとっても数値解は発散することはない。

ここで1章の針金の熱伝導問題をふりかえってみよう。スキームAは熱伝導方程式に対してオイラー法をもちいたものにほかならないから、その安定条件は(6.17)に等しい。図3にみるような数値解のふるまいは確かにこのことを示している。スキームBは後退オイラー法をもちいている。後退オイラー法では負の実軸はつねに安定であるので、 $\Delta_t$ を大きくしても発散することはない。いっぽうスキームCは時間積分にリーブフロッグ法を適用したものにほかならない。リーブフロッグ法の安定領域は虚軸に限られるから、拡散方程式に適用すると必ず発散する。1章でどんなに $\Delta_t$ を細かくしてもスキームCが発散したのはこうした理由による。

以上は拡散方程式に関する安定性の議論であったが、他の方程式でも同様である。たとえば1次元の移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x} \quad (6.18)$$

の空間微分を、周期境界条件  $u_j = u_{N+j}$  のもとで2次の中心差分で近似したとすれば、問題は

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \frac{c}{2\Delta_x} \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & 1 \\ 1 & 0 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 0 & -1 \\ -1 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

を解くことに帰着する。右辺の係数行列は実反対称なので固有値  $\lambda$  はすべて虚数であり、そのうち絶対値最大のものは  $\lambda = \pm ic/\Delta_x$  である。したがって1次元の移流方程式を安定に積分するためには虚軸を安定領域に含むスキームを使わなければならない。たとえばリーブフロッグ法の安定領域は  $\lambda$  が虚数でかつ  $|\lambda\Delta_t| \leq 1$  であったから、その場合に  $\Delta_t$  が満たすべき条件は

$$\Delta_t \leq \frac{\Delta_x}{c} \quad \text{あるいは} \quad \frac{\Delta_x}{\Delta_t} \geq c \quad (6.20)$$

である。この形式の安定条件のことをとくにクーランの条件 (Courant condition) という<sup>14</sup>。またこの方程式にオイラー法を適用すると解が必ず発散するであろうことは容易に予測できるだろう。

### 6.3 有限体積法

これまで、与えられた偏微分方程式をいかに解くかという、物理的というよりはむしろ数学的な観点でさまざまな計算手法を説明してきた。しかし実際に地球物理で解く方程

<sup>14</sup>CFL 条件 (Courant-Friedrichs-Lewy condition) とも。一般には双曲型の偏微分方程式を解く際の安定性に関する条件のことをクーラン条件と称する。



式は、もともと物理的な考察をもとに導出されたもので、むしろその導出過程に沿って離散化をおこなうのが正当ともいえる。

1章の終わりで説明した球の冷却問題を例にとろう。熱伝導方程式を導くとき、厚さ  $\delta r$  の薄い球殻を考え、その内側と外側の境界を通して出入りする熱のバランスの式を立てた。厚さ  $\delta r$  を格子間隔  $\Delta_r$  に読み替えた上で、内側の球面を  $r = r_i - \Delta_r/2$ 、外側の面を  $r = r_i + \Delta_r/2$  と定義し、球殻の温度を  $u_i = u(r_i)$  で代表すると、熱収支の式 (1.16) は

$$\frac{d}{dt}(4\pi r_i^2 \Delta_r \rho c u_i) = Q(r_{i-1/2}, t) - Q(r_{i+1/2}, t) + 4\pi r_i^2 \Delta_r \rho h \quad (6.21)$$

で表わされる (ただし  $r_{i\pm 1/2} = r_i \pm \Delta_r/2$ )。さらに熱流量は式 (1.15) を中心差分で置き換えることで

$$Q(r_{i+1/2}, t) = -4\pi r_{i+1/2}^2 k \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta_r} \quad (6.22)$$

などと近似できるから、結局球の冷却は

$$\frac{d}{dt}(\rho c u_i) = k \frac{r_{i+1/2}^2 (u_{i+1} - u_i) - r_{i-1/2}^2 (u_i - u_{i-1})}{r_i^2 \Delta_r^2} + \rho h \quad (6.23)$$

で記述できる。これは空間の離散化のみについていえば、単純に式 (1.17) を中心差分公式で近似した式と誤差  $O(\Delta_r^2)$  の範囲で一致する。しかし式 (6.23) は熱エネルギーの保存という物理法則により忠実であり、実際エネルギーを保存するスキームになっている。

われわれが解くべき問題は、多くの場合、運動量やエネルギーなどの保存法則である。領域を有限の大きさの微小な体積に分割し、その体積中で成り立つ局所的な保存則を差分で表現するという離散化手法を一般に有限体積法 (finite volume method) という。とくに移流方程式の数値計算などでこの考え方が応用される。

## 6.4 スペクトル法

### スペクトル法の原理

区間  $x_0 \leq x \leq x_1$  で関数系  $\{\phi_k(x)\}$  ( $k = 0, 1, \dots, N$ ) が定義されていて、直交性

$$\int_{x_0}^{x_1} \phi_j(x) \phi_k(x) p(x) dx = c_k \delta_{jk} \quad (6.24)$$

を満たすとする ( $p(x)$  は適当に定義された重みをあらわす関数、 $\delta_{jk}$  はクロネッカーのデルタ、 $c_k$  は定数)。この直交関数系をもちいて、未知関数を

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^N u_k(t) \phi_k(x) \quad (6.25)$$

のように展開する。展開係数  $u_k$  は直交性により

$$u_k(t) = \frac{1}{c_k} \int_{x_0}^{x_1} u(x, t) \phi_k(x) p(x) dx \quad (6.26)$$

のように一意に決まる。もともとの微分方程式を展開係数  $u_k$  の時間発展方程式に焼きなおして解くのがスペクトル法である。たとえば1次元の拡散方程式への適用例については3章を参照のこと(重み関数  $w_j(x)$  がここでは  $\phi_j(x)p(x)$  に対応していることに注意)。

スペクトル法の長所は、他の空間離散化手法に比べて精度がよいということである。また計算で発生する誤差(打ち切り誤差)が最高次の係数  $|u_N|$  で見積もられるので、空間解像度がじゅうぶんかどうかの判定がたやすいということもメリットである。いっぽうデメリットとして、複雑な空間領域を扱うのが困難なこと、一般に計算量が差分法などに比べて多いことなどがあげられる。

### 境界条件を課す方法

スペクトル法で境界条件を課す方法には二通りある。ひとつは基底関数がすでに境界条件を満足している場合で、これをとくにガレルキン(Galerkin)法という。たとえば極座標  $(r, \theta, \varphi)$  で表示された変数の球面調和関数展開

$$u(r, \theta, \varphi) = \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{l=m}^{N-1} [A_l^m(r) \cos m\varphi + B_l^m(r) \sin m\varphi] P_l^m(\cos \theta) \quad (6.27)$$

は、球面領域  $0 \leq \varphi \leq 2\pi, 0 \leq \theta \leq \pi$  の(座標の上での)境界条件を自然に満たす( $P_l^m(x)$  はルジャンドル陪関数)。全球気象モデルをはじめ、地磁気や重力場の表示などグローバルな物理量をあらわすのによくもちいられる。

基底となる直交関数が境界条件を満たさない場合、もし境界条件の数が  $s$  ( $s \geq 1$ ) 個あるのだとしたら、 $u_k(t)$  に関する常微分方程式を  $0 \leq j \leq N-s$  の範囲で解く。そして境界条件をあらわす  $u_k$  についての  $s$  個の代数方程式を付け加え、それらをあたかも連立方程式として解く。これをタウ法(tau method)という。

たとえば区間  $-1 \leq x \leq 1$  で定義される拡散方程式(6.15)をチェビシェフ多項式

$$T_k(x) = \cos(k \arccos x) \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (6.28)$$

による展開で解こう。チェビシェフ多項式は直交性

$$\int_{-1}^1 T_j(x) T_k(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2} (1 + \delta_{k0}) \delta_{jk} \quad (6.29)$$

を満たすから、通常の意味での重み関数は  $(1-x^2)^{-1/2}$  であるが、ここではあえて  $p(x) = (1-x^2)^{3/2}$  とする。すると展開係数が満たすべき常微分方程式は

$$\frac{d}{dt} \sum_{k=0}^N A_{jk} u_k(t) = \sum_{k=0}^N B_{jk} u_k(t) \quad (0 \leq j \leq N-2), \quad (6.30)$$

ただし

$$\begin{cases} A_{jk} \equiv \int_{-1}^1 (1-x^2)^2 T_k T_j \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}, \\ B_{jk} \equiv \eta \int_{-1}^1 (1-x^2)^2 \frac{d^2 T_k}{dx^2} T_j \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}, \end{cases} \quad (6.31)$$

となる。ここでチェビシェフ多項式の漸化式

$$\begin{cases} (1-x^2)^2 T_k = \frac{T_{k-4} - 4T_{k-2} + 6T_k - 4T_{k+2} + T_{k+4}}{16}, \\ (1-x^2)^2 \frac{dT_k}{dx^2} = \frac{k(k+1)T_{k-2} - 2k^2 T_k + k(k-1)T_{k+2}}{4}, \end{cases} \quad (6.32)$$

によれば、行列  $A$  は 9 重、 $B$  は 5 重の帯行列になることがわかる<sup>15</sup>。チェビシェフ多項式は定義域の端点において

$$T_k|_{x=\pm 1} = (\pm 1)^k, \quad \left. \frac{dT_k}{dx} \right|_{x=\pm 1} = (\pm 1)^{k+1} k^2, \quad (6.33)$$

などの値をとる。境界で  $u = 0$  という条件を課すとすれば

$$\sum_{k=0}^N u_k = 0, \quad \sum_{k=0}^N (-1)^k u_k = 0, \quad (6.34)$$

の二つの式を式 (6.30) とともに解けばよい。

### スペクトル変換法

スペクトル法の難点のひとつに非線形方程式の計算量が膨大になるという点があげられる。たとえば非線形移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} \quad (6.35)$$

にフーリエ級数展開に基づくガレルキン法を適用してみよう。変数が

$$u(x, t) = \sum_k u_k(t) e^{ikx} \quad (6.36)$$

のように展開できたとすれば、解くべき方程式は形式的に

$$\frac{du_k}{dt} = \sum_p i p u_p u_{k-p} \quad (6.37)$$

となる。フーリエ展開 (6.36) の項数を  $N$  だけとったとすれば、連立常微分方程式 (6.37) の右辺を計算するのに  $O(N^2)$  回の乗算・加算が必要になってしまう。差分法ではそれが  $O(N)$  であったのだから、 $N$  が莫大になったときのスペクトル法の不利は歴然である。

この事態を回避するために式 (6.37) の右辺を実空間に戻って計算するのがスペクトル変換法である。定義域が  $-\pi \leq x \leq \pi$  だったとして格子点  $x_j \equiv \pi j/N$  ( $-N \leq j \leq N-1$ ) をとれば

$$u(x_j, t) = \sum_{k=-N}^{N-1} u_k(t) e^{i\pi jk/N}, \quad (6.38)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_j} = \sum_{k=-N}^{N-1} i k u_k(t) e^{i\pi jk/N}, \quad (6.39)$$

<sup>15</sup> $k$  の偶数、奇数を分けて考えれば、係数行列はそれぞれ 5 重、3 重の帯行列になる。

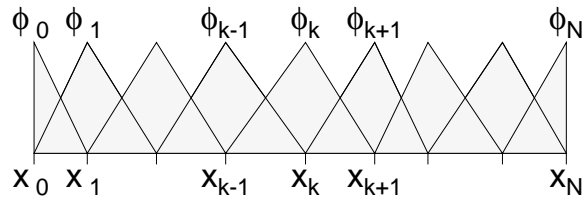


図 11: 有限要素法における基底関数の例。

などの和の計算は高速フーリエ変換 (fast Fourier transform; FFT) によって  $O(N \log N)$  回の乗算・加算でできる。これらを各格子点上で掛け合わせ、さらにそのスペクトル係数を FFT をもちいて求める。すると結局のところ  $O(N \log N)$  回の演算で非線形項を見積もることができる。スペクトル変換法の特徴は、FFT によって演算量を少なく抑えるところである。フーリエ級数展開の他、チェビシェフ多項式展開でもこのスペクトル変換法が用いられる。

## 6.5 有限要素法

有限要素法とは重みつき残差法の一つであり、原理的にはスペクトル法と大差ない。ただ基底関数 (試行関数) として局所的にのみ値をもつような単純なスプライン関数をもっている。たとえば格子点  $x_k$  で 1, その両隣の格子点でゼロになる線形の関数

$$\phi_k(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} & (x_{k-1} \leq x \leq x_k) \\ \frac{x_{k+1} - x}{x_{k+1} - x_k} & (x_k \leq x \leq x_{k+1}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (6.40)$$

などである (図 11)。この基底関数をもちいて

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^N u_k(t) \phi_k(x) \quad (6.41)$$

と展開すると、結局のところ離散変数  $u_k$  は格子点  $x_k$  における変数の値  $u(x_k)$  に等しいことに注意。

たとえば拡散方程式 (6.15) の場合、重み関数 (試験関数) として基底関数と同じものをとると

$$\frac{d}{dt} \sum_{k=0}^N A_{jk} u_k(t) = \sum_{k=0}^N B_{jk} u_k(t), \quad (6.42)$$

ただし

$$A_{jk} = \int_0^1 \phi_j \phi_k dx, \quad B_{jk} = \eta \int_0^1 \phi_j \frac{d^2 \phi_k}{dx^2} dx, \quad (6.43)$$

なる式が得られる。行列  $B_{jk}$  は部分積分によって

$$B_{jk} = -\eta \int_0^1 \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_k}{dx} dx + \left[ \phi_j \frac{d\phi_k}{dx} \right]_0^1 \quad (6.44)$$

のように変形される。こうすることで行列  $B_{jk}$  を求めるのに  $\phi_j$  の 2 階微分の計算が不要になる。これは線形な基底関数を用いる場合には好都合である (なぜなら 2 階微分係数はつねにゼロであるから)。このようにして微分の階数を落としたものを、もとの方程式の弱形式 (weak form) という。

1 次元の場合、有限要素法によって離散化した方程式と差分法で離散化した方程式とはあまり大差がない (実際重み関数としてデルタ関数  $\delta(x - x_j)$  をとればそれは差分法に等しい)。有限要素法のメリットは 2 次元、3 次元の問題に適用したときに顕著になる。とくに基底関数のとり方がまったく任意であるので、複雑な形状をした領域で方程式を扱うことがたやすくできる。

### 例題 6

矩形板の熱伝導方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (0 < x < 1, 0 < y < 1), \quad (6.45)$$

を数値的に解くプログラムを作成せよ。ただし境界条件は  $y = 0$  の辺上で  $u = 1$ 、他の三辺では  $u = 0$  とする<sup>16</sup>。初期条件は  $y = 0$  の境界以外のすべての点で  $u = 0$  とする (すなわち  $y = 0$  の辺を急激に加熱する)。定常解を求め図示せよ。板の中心点の温度が定常状態の温度の半分に達するまでの時間を求めよ。 □

## 7 応用問題

これまでに得た知識をもとに、比較的複雑な問題を解いてみよう。

### 7.1 津波の伝播

線形長波方程式

津波とは、地震などにもなう海水位の変動が波として水平方向に伝わる現象である。津波の伝播を論ずるには、原理的には海水の 3 次元運動を流体力学的に解析すればよい。しかし海の深さがせいぜい数 km であるのに対して、波源である地震断層の水平スケールは 100 km 以上にも達するため、一般に水深  $h$  は津波の波長  $L$  に比べてじゅうぶん小さいとしてよい ( $\sigma \equiv h/L \ll 1$ )。そのような仮定の下では、水の流動速度は水平成分が卓越し、

<sup>16</sup>放物型の方程式では境界条件に不連続があっても解は内部領域で連続になる。

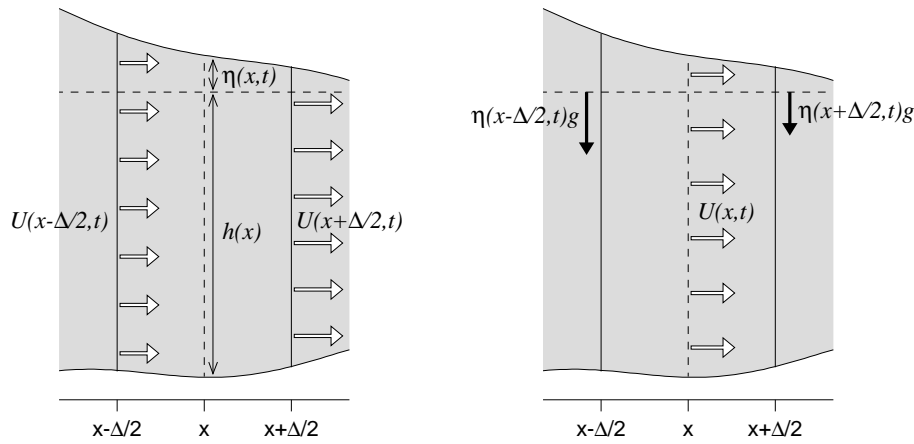


図 12: 海の断面図。連続の式は幅  $\Delta$ 、高さ  $D = h + \eta$  の水柱の質量保存則から導かれる (左)。運動方程式は水柱の側面に作用する圧力の差が水平加速度に比例するという式から得られる (右)。

その鉛直分布もほぼ一様とみなすことができる。そこで運動方程式を鉛直方向に平均化して、流速場などの変数を水平座標  $(x, y)$  の関数としてあらわす。これを長波近似という。

鉛直座標  $z$  の原点を静水面にとり、水面 (波の高さ) を  $\eta(x, y, t)$ 、海底面を  $-h(x, y)$  とする。全水深は  $D(x, y, t) \equiv \eta(x, y, t) + h(x, y)$  である。水平流速の  $x, y$  成分は本来は  $u(x, y, z, t)$ ,  $v(x, y, z, t)$  と書かれるべきであるが、長波の仮定により、それらの平均値

$$U(x, y, t) = \frac{1}{D} \int_{-h}^{\eta} u(x, y, z, t) dz, \quad V(x, y, t) = \frac{1}{D} \int_{-h}^{\eta} v(x, y, z, t) dz \quad (7.1)$$

を変数にとる。

津波の支配方程式は以下のように導かれる。まず点  $(x, y)$  を中心とする断面積  $\Delta^2$ 、高さ  $D$  の水柱の質量保存を考えよう。水の圧縮性を無視すると、水柱の質量  $\rho \Delta^2 D$  の時間変化率は、側面から流入する水の量によって決まる ( $\rho$  は水の密度)。たとえば単位時間に  $x$  軸に直交する側面を通過する海水量は  $\rho \Delta U D$  である。図 12 を参考にして 4 つの面からの水の流入、流出を考慮すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\rho \Delta^2 D) &= \rho \Delta \left[ U(x - \frac{\Delta}{2}, y, t) D(x - \frac{\Delta}{2}, y, t) - U(x + \frac{\Delta}{2}, y, t) D(x + \frac{\Delta}{2}, y, t) \right] \\ &\quad + \rho \Delta \left[ V(x, y - \frac{\Delta}{2}, t) D(x, y - \frac{\Delta}{2}, t) - V(x, y + \frac{\Delta}{2}, t) D(x, y + \frac{\Delta}{2}, t) \right] \end{aligned} \quad (7.2)$$

が成り立つ。よって  $\Delta \rightarrow 0$  の極限をとると、質量保存の式 (あるいは連続の式)

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}((h + \eta)U) + \frac{\partial}{\partial y}((h + \eta)V) = 0 \quad (7.3)$$

が得られる。一般に波の高さは水深に比べてじゅうぶん小さいので ( $\epsilon \equiv \eta/h \ll 1$ )、非線形項を無視して

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(hU) + \frac{\partial}{\partial y}(hV) = 0 \quad (7.4)$$

とすることができる。

つぎに運動方程式の水平成分を考えよう。線形長波近似 ( $\sigma \ll 1, \epsilon \ll 1$ ) をとる限り, 水平方向には圧力勾配に起因する力のみが作用する。ある深さ  $z$  での水圧は  $\rho g(\eta - z)$  である。よって水平方向にはたらく力は

$$-\rho g \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad -\rho g \frac{\partial \eta}{\partial y}$$

である ( $g$  は重力加速度)。これは鉛直座標  $z$  によらないから, 平均をとっても積分の外に出すことができるので, 鉛直方向に平均化した運動方程式 (ナビエ・ストークス方程式) は

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad \frac{\partial V}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (7.5)$$

となる。なお (7.4)(7.5) から  $U, V$  を消去すると, 波動方程式

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( gh \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( gh \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \quad (7.6)$$

が導かれ, 津波の伝播速度が  $\sqrt{gh}$  であることがわかる。なお以下では  $\eta, U, V$  が満たす時間に関する 1 階の連立微分方程式を解くことによって津波の伝播を解析する。

### 無次元化

長さを典型的な水深  $h_0$ , 流速を  $\sqrt{gh_0}$ , 時間を  $\sqrt{h_0/g}$  で規格化すると, 線形長波の式は

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(hU) - \frac{\partial}{\partial y}(hV), \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (7.8)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (7.9)$$

と無次元化される。本節の以下の部分では, すべての変数は無次元化されているものとする。

### スタガード格子

一辺  $a$  の正方形の水域を考え, 空間座標を  $x_j = j\Delta$  ( $j = 0, 1, \dots, M$ ),  $y_k = k\Delta$  ( $k = 0, 1, \dots, M$ ) のように離散化し, 離散変数

$$\eta_{jk}(t) \equiv \eta(x_j, y_k, t), \quad U_{jk}(t) \equiv U(x_j, y_k, t), \quad V_{jk}(t) \equiv V(x_j, y_k, t), \quad (7.10)$$

を定義する。ここで  $\Delta \equiv a/M$  は空間の格子間隔である。単純に式 (7.7)–(7.9) の空間偏微分を 2 次の中心差分で近似すると, 津波の時間発展方程式

$$\frac{d\eta_{jk}}{dt} = \frac{h_{j-1k}U_{j-1k} - h_{j+1k}U_{j+1k}}{2\Delta} + \frac{h_{jk-1}V_{jk-1} - h_{jk+1}V_{jk+1}}{2\Delta}, \quad (7.11)$$

$$\frac{dU_{jk}}{dt} = g \frac{\eta_{j-1k} - \eta_{j+1k}}{2\Delta}, \quad (7.12)$$

$$\frac{dV_{jk}}{dt} = g \frac{\eta_{jk-1} - \eta_{jk+1}}{2\Delta}, \quad (7.13)$$

が導かれる。ところで式(7.11)より,  $\eta_{jk}$  の時間変化は  $U_{j\pm 1k}$  および  $V_{jk\pm 1}$  によって決まる。さらに式(7.12)より,  $U_{j\pm 1k}$  の時間発展は  $\eta_{jk}, \eta_{j\pm 2k}$  に依存し, また式(7.13)より,  $V_{jk\pm 1}$  の時間発展は  $\eta_{jk}, \eta_{jk\pm 2}$  に依存していることがわかる。以上の事情を整理すると,  $\eta_{jk}$  の時間変化は

$$\eta_{j+2pk+2q}, U_{j+2p+1k+2q}, V_{j+2pk+2q+1} \quad (p, q \text{ は整数})$$

によって規定され, それ以外の変数, たとえば  $\eta_{j+1k}$  や  $U_{j+1k+1}$  などには依存しないことがわかる。すなわち  $\eta_{jk}$  と  $\eta_{j+1k}$  とはまったく独立にふるまい, 結果的に得られる数値解はギザギザした分布をしめすようになる<sup>17</sup>。

この現象を回避する有効な方法のひとつがスタガード格子の導入である。これはそもそもの方程式の導出過程を考えると自然に理解できる。まず連続の式を導くとき, 極限をとる前の式は(7.2)のようであった。これをそのまま離散化すると

$$\frac{d\eta_{jk}}{dt} = \frac{h_{j-\frac{1}{2}k}U_{j-\frac{1}{2}k} - h_{j+\frac{1}{2}k}U_{j+\frac{1}{2}k}}{\Delta} + \frac{h_{jk-\frac{1}{2}}V_{jk-\frac{1}{2}} - h_{jk+\frac{1}{2}}V_{jk+\frac{1}{2}}}{\Delta}$$

となろう。ここで  $U_{j\pm\frac{1}{2}k}(t) \equiv U(x_j \pm \frac{\Delta}{2}, y_k, t)$  などである。運動方程式も, 図12を参考にすると

$$\frac{dU_{jk}}{dt} = \frac{\eta_{j-\frac{1}{2}k} - \eta_{j+\frac{1}{2}k}}{\Delta}, \quad \frac{dV_{jk}}{dt} = \frac{\eta_{jk-\frac{1}{2}} - \eta_{jk+\frac{1}{2}}}{\Delta},$$

のように離散化するのが, ある意味自然である。これらの離散方程式にあらわれる変数の添え字を適当にシフトして

$$\frac{d\eta_{j+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}}}{dt} = \frac{h_{jk+\frac{1}{2}}U_{jk+\frac{1}{2}} - h_{j+1k+\frac{1}{2}}U_{j+1k+\frac{1}{2}}}{\Delta} + \frac{h_{j+\frac{1}{2}k}V_{j+\frac{1}{2}k} - h_{j+\frac{1}{2}k+1}V_{j+\frac{1}{2}k+1}}{\Delta}, \quad (7.14)$$

$$\frac{dU_{jk+\frac{1}{2}}}{dt} = \frac{\eta_{j-\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}} - \eta_{j+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}}}{\Delta}, \quad (7.15)$$

$$\frac{dV_{j+\frac{1}{2}k}}{dt} = \frac{\eta_{j+\frac{1}{2}k-\frac{1}{2}} - \eta_{j+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}}}{\Delta}, \quad (7.16)$$

と書き直すと,

- $\eta$  の添え字はすべて半奇数,
- $U$  の添え字は,  $x$  座標については整数,  $y$  座標については半奇数,
- $V$  の添え字は,  $x$  座標については半奇数,  $y$  座標については整数,

という法則が必ずなりたつ。また離散変数

$$\begin{cases} \eta_{j+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}} & (0 \leq j \leq M-1, 0 \leq k \leq M-1), \\ U_{jk+\frac{1}{2}} & (0 \leq j \leq M, 0 \leq k \leq M-1), \\ V_{j+\frac{1}{2}k} & (0 \leq j \leq M-1, 0 \leq k \leq M), \end{cases} \quad (7.17)$$

とその方程式(7.14)–(7.16)は,  $xy$  平面をくまなく覆いつつ, かつもっともコンパクトに現象を離散化していることがわかる(図13)。このとき解が独立なふるまいをする2つのグループに分離するなどという現象は起こらない。これがスタガード格子<sup>18</sup>である。

<sup>17</sup> 俗にチェッカーボード不安定などという。

<sup>18</sup> 食い違い格子とも。スタガー (stagger) には互い違いにずらして配列するという意味がある。



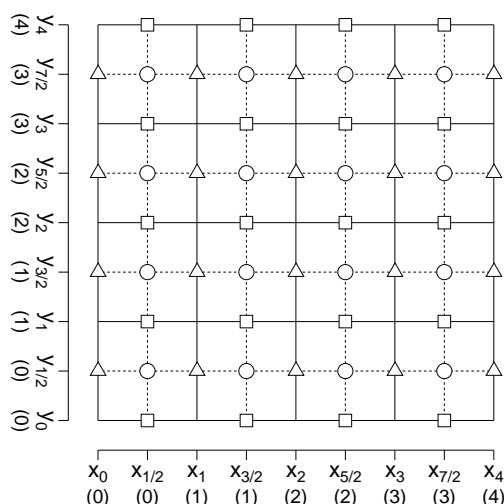


図 13: スタガード格子 ( $M = 4$  の場合)。印の点には波高  $\eta$  を、印の点には  $U$  を、そして印の点には  $V$  をそれぞれ配する。これらの点はそれぞれに幅  $\Delta$  の格子を形成し、全空間を覆っている。かっこ内の数字は変数の座標をあらわすために便宜上つけたもの。

スタガード格子は境界条件を課しやすいという利点も有する。岸壁のように水を通さない境界を考えよう。このとき境界条件は

$$x = 0, a \text{ で } U = 0, \quad y = 0, a \text{ で } V = 0, \quad (7.18)$$

である。これはすなわち、波の高さについては、式 (7.14) を、境界条件など考えずに、ただ  $0 \leq j \leq M-1, 0 \leq k \leq M-1$  の範囲で解けばよく、いっぽう流速については、 $0 \leq k \leq M-1$  の範囲で  $x$  成分の式

$$\begin{cases} U_{0k+\frac{1}{2}} = U_{Mk+\frac{1}{2}} = 0, \\ \frac{dU_{jk+\frac{1}{2}}}{dt} = \frac{\eta_{j-\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}} - \eta_{j+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}}}{\Delta} \quad (1 \leq j \leq M-1), \end{cases} \quad (7.19)$$

を、また  $0 \leq j \leq M-1$  の範囲で  $y$  方向の式

$$\begin{cases} V_{j+\frac{1}{2}0} = V_{j+\frac{1}{2}M} = 0, \\ \frac{dV_{j+\frac{1}{2}k}}{dt} = \frac{\eta_{j+\frac{1}{2}k-\frac{1}{2}} - \eta_{j+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}}}{\Delta} \quad (1 \leq k \leq M-1), \end{cases} \quad (7.20)$$

を解けばよい、ということの意味する。波の高さについては境界条件を陽に必要としないなど、必要最小限の条件しか課していないことに注意しよう。

### 例題 7

1. 両端が水を通さない壁で遮断された長さ  $a$  の水路で線形長波の式を解き、解の様子をあらわすアニメーションを作成せよ。初期条件としては、たとえば速度ゼロ、波高は

$$\eta(x, t = 0) = \begin{cases} \eta_0(\cos(4\pi x/a) + 1) & (0 \leq x \leq a/4) \\ 0 & (a/4 \leq x \leq a) \end{cases}$$

などとする。数値解の誤差について検討せよ。水深一定の場合と、水底の地形が変化する場合とを比較せよ。

2. 一辺の長さが  $a$  の正方形の海での線形長波の式を解き、波の伝播のようすを観察せよ。また任意の海岸線の形状をあらわすための方法について考えよ。 □

### 非線形分散波

線形長波近似は外洋の津波の伝播をよく近似するが、波長に対する水深の比  $\sigma$  が大きくなると鉛直方向の流れが無視できなくなったり、また水深に対する波高の比  $\epsilon$  が大きくなると非線形項が無視できなくなったりする。ここでは条件つきながらそのような場合にも適用できるペレグリンの式<sup>19</sup>

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + g \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{h}{2} \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} \left( \frac{\partial}{\partial x} (hU) + \frac{\partial}{\partial y} (hV) \right) - \frac{h^2}{6} \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} \left( \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} \right), \quad (7.21)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + g \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{h}{2} \frac{\partial^2}{\partial t \partial y} \left( \frac{\partial}{\partial x} (hU) + \frac{\partial}{\partial y} (hV) \right) - \frac{h^2}{6} \frac{\partial^2}{\partial t \partial y} \left( \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} \right), \quad (7.22)$$

を紹介しよう(連続の式は(7.3)で変わらない)。左辺は通常のナビエ・ストークス方程式を鉛直平均した形になっている。いっぽう右辺はかなり込み入っているが、基本的には変数を  $\sigma$  や  $\epsilon$  でベキ展開して式変形し、その初項をとったもので、鉛直方向の移流が関わっている。これにより  $\sigma$  が比較的大きいときに生じる分散の効果(波の伝播速度が波長によって変わる)が表現される。なおこの式の導出過程で  $\epsilon \sim \sigma^2$  が仮定されている。

1次元の問題における支配方程式は、前述のように無次元化すると、

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( (h + \eta)U \right), \quad (7.23)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -U \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (7.24)$$

$$F = U - \frac{h}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (hU) + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \quad (7.25)$$

のように書くことができる。ここで  $F(x, t)$  は式を見やすくするために導入した補助変数である。これらをスタガード格子をもちいて離散化すると、

$$\frac{d\eta_{j+1/2}}{dt} = \frac{(h_j + \eta_j)U_j - (h_{j+1} + \eta_{j+1})U_{j+1}}{\Delta} \quad (0 \leq j \leq M-1), \quad (7.26)$$

$$\frac{dF_j}{dt} = \frac{U_j(U_{j-1} - U_{j+1})}{2\Delta} + \frac{\eta_{j-1/2} - \eta_{j+1/2}}{\Delta} \quad (1 \leq j \leq M-1), \quad (7.27)$$

ただし

$$\begin{aligned} F_j &= U_j - \frac{h_j(h_{j-1}U_{j-1} - 2h_jU_j + h_{j+1}U_{j+1})}{2\Delta^2} + \frac{h_j^2(U_{j-1} - 2U_j + U_{j+1})}{6\Delta^2} \\ &= -\frac{h_j(3h_{j-1} - h_j)}{6\Delta^2}U_{j-1} + \left(1 + \frac{2h_j^2}{3\Delta^2}\right)U_j - \frac{h_j(3h_{j+1} - h_j)}{6\Delta^2}U_{j+1}, \end{aligned} \quad (7.28)$$

<sup>19</sup>D.H. Peregrine (1967), *J. Fluid. Mech.* **27**, 815.

となる (いま  $0 \leq x \leq a$  の領域を考え, 境界条件は  $U$  の値によって与えられているものとする)。式 (7.26) の右辺には定義されていない整数添え字の  $\eta$  があらわれる。これは  $\eta_j = (\eta_{j-1/2} + \eta_{j+1/2})/2$  などと適当な線形補間によって置き換えてやる。これらの式を解くためのフローチャートは次のようになるだろう:

1. ある時刻の  $\eta_j, U_j, F_j$  が与えられる。
2. 式 (7.26), (7.27) で次の時間ステップでの  $\eta_j, F_j$  を推定する。
3. 係数が3重対角行列であるような連立1次方程式 (7.28) を解いて,  $F_j$  から  $U_j$  を得る。

### 例題 8

長さ  $a$  の1次元の水路で非線形分散波の式を解け。ただし  $x = a$  には水を通さない壁があり,  $x = 0$  では一定の流量の水がつねに水路に流れ込む ( $U(x = 0, t) = U_0$ ) という境界条件をもちいること。初期条件は速度ゼロ, 波高ゼロとする。同様の条件で線形長波の式も解き, 波の伝播のようすを比較せよ。 □

## 7.2 熱対流

### 方程式

重力場のもとで流体を下から熱し, 上から冷やすと, 熱膨張 (収縮) により流体の下側が軽く, 上側が重くなる。これは重力的に不安定であるから, 上下関係を逆転させるような流体の流れ, すなわち対流 (convection) が起こる。ここでは箱の中の流体の熱対流現象を考える。

流体は非圧縮であると仮定しその密度を  $\rho$  (一定) とする。箱の各辺に沿った直交座標系  $(x, y, z)$  を, 重力の向きが  $-z$  方向になるようにとる。いま問題を解きやすくするために流れの  $y$  成分はゼロであるとし, かつ流れ場や温度場は  $y$  座標に依らないと仮定する。これは物理的には  $y$  軸方向に伸びたロール状対流セルが発達するという仮定である。箱の  $xz$  断面は一辺が  $L$  の正方形とし, 計算領域を  $0 \leq x \leq L, 0 \leq z \leq L$  とする。流体をとりまく壁の温度を  $T_0$  とし, 時刻ゼロ以降は下面 ( $z = 0$ ) の温度のみ  $T_0 + \Delta T$  の高温に保つ。

流体の速度の水平成分  $u$ , 鉛直成分  $w$ , 圧力  $P$ , および温度  $T$  は, ナビエ・ストークス方程式

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \rho \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial x}, \quad (7.29)$$

$$\rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \rho \nu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial P}{\partial z} - \rho g, \quad (7.30)$$

### 熱伝導方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \kappa \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad (7.31)$$

および非圧縮の仮定をあらわす連続の式

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (7.32)$$

を満たす。ここで  $g$  は重力加速度の大きさ,  $\nu$  は流体の動粘性率,  $\kappa$  は熱拡散率で, これらは定数とみなす。

密度は一定であると仮定したが, それでは対流を駆動する浮力が表現できない。そこで式 (7.30) の重力項を

$$\rho g \rightarrow \rho(1 - \alpha(T - T_0))g \quad (7.33)$$

で置き換える。これは温度に比例して流体が熱膨張して密度が小さくなることを意味する ( $\alpha$  は熱膨張係数)。ただし熱膨張の効果は重力項のみにおよび, 他の項ではすべて密度は一定であるとする。このような熱対流の計算の仕方をブシネスク近似 (Boussinesq approximation) という。この近似により得られる数値解は熱対流の室内実験等をよく再現することが知られている。この近似のもとでは式 (7.30) は最終的に

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = \nu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \alpha g \theta \quad (7.34)$$

と書きあらわされる。ここで  $\theta \equiv T - T_0$  は温度の擾乱 (perturbation),  $p \equiv P - P_s$  は圧力擾乱である ( $P_s$  は静水圧で  $dP_s/dz = -\rho g$  を満たす)。他の方程式については単に  $P \rightarrow p$ ,  $T \rightarrow \theta$  と置き換えてやればよく, 式の形自体は変わらない。以下では従属変数を  $u, w, \theta, p$  にとる。

### 無次元化

長さを  $L$ , 時間を  $L^2/\nu$ , 速度を  $\nu/L$ , 温度を  $\Delta T$ , そして圧力を  $\rho\nu^2/L^2$  を単位として規格化すると, 支配方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (7.35)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \frac{\partial p}{\partial z} + Pr^{-1} Ra \theta, \quad (7.36)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial x} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} = Pr^{-1} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right), \quad (7.37)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (7.38)$$

となる (これ以降は変数はすべて無次元化されているものとする)。ここでレイリー数  $Ra = \alpha g \Delta T L^3 / (\kappa \nu)$  およびプラントル数  $Pr = \nu / \kappa$  は系を代表する無次元パラメーターである。

### 離散化

空間座標を  $x_j = jh$  ( $0 \leq j \leq N$ ),  $z_k = kh$  ( $0 \leq k \leq N$ ) のように離散化し,  $xz$  平面に格子を張る。ここで  $h \equiv 1/N$  は格子の間隔である。格子点上における変数の値を  $u_{jk} = u(x_j, z_k)$

のように定義する (他の変数も同様)。支配方程式中の空間に関する偏微分係数は2次の中心差分で近似する。

### 擬似圧縮性法

非圧縮流体の対流計算では連続の式 (7.38) をつねに満たすように式 (7.35)(7.36) を時間積分しなければならない。そのための計算手法には種々あるが、ここでは擬似圧縮性法 (artificial compressibility method) をもちいる。この手法では連続の式 (7.38) を

$$\varepsilon^2 \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \quad (7.39)$$

のように改竄する。もし流れが定常状態に達するとすれば  $\partial p / \partial t = 0$  であるから式 (7.38) は本来の連続の式に帰する。したがって擬似圧縮性法は定常流を計算するための簡便法であるといえる。無次元パラメーター  $\varepsilon$  がじゅうぶん小さい数であるとすれば、非定常の流れもそれなりに再現できる。

ナビエ・ストークス方程式中の移流項 (非線形項), 粘性項, 浮力項をすべて無視したうえで, 式 (7.35)(7.36) および (7.39) から速度変数を消去すると

$$\varepsilon^2 \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \quad (7.40)$$

を得る。これは波動方程式であり, 流体中を伝わる音速が  $1/\varepsilon$  であることを示している。

式 (7.39) を通常の差分法で解くと, 圧力場がなめらかでなくなり不安定を起こすことが知られている。これを回避する方法にはいくつかあるが<sup>20</sup>, ここでは連続の式 (7.39) に拡散項を人為的に付け加えて

$$\varepsilon^2 \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} + \varepsilon_D^2 \left( \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} \right) \quad (7.41)$$

のようにさらに改竄した式を解くことにする。圧力場をなめらかにするためには無次元パラメーター  $\varepsilon_D$  は大きいほうがよいが, あまり大きすぎると本来の非圧縮の仮定 (7.38) からかけ離れてしまう。いま空間に関する偏微分係数は2次の中心差分で近似するからその誤差は  $O(h^2)$  である。したがって  $\varepsilon_D = O(h)$  であれば非圧縮性を犠牲にしない程度に圧力場を平滑化することができる。

### 境界条件と初期条件

速度は境界面上でゼロになる。これは粘性流体が一般に満たす条件である。壁の温度は一定に保たれるので, 温度擾乱は下面 ( $z = 0$ ) で 1, その他の境界ではゼロになる。速度と

<sup>20</sup>たとえば前節で述べたようなスタガード格子の使用などが典型的であり, むしろそれを採用すべきであるが, ここではあえて別のアプローチを紹介している。

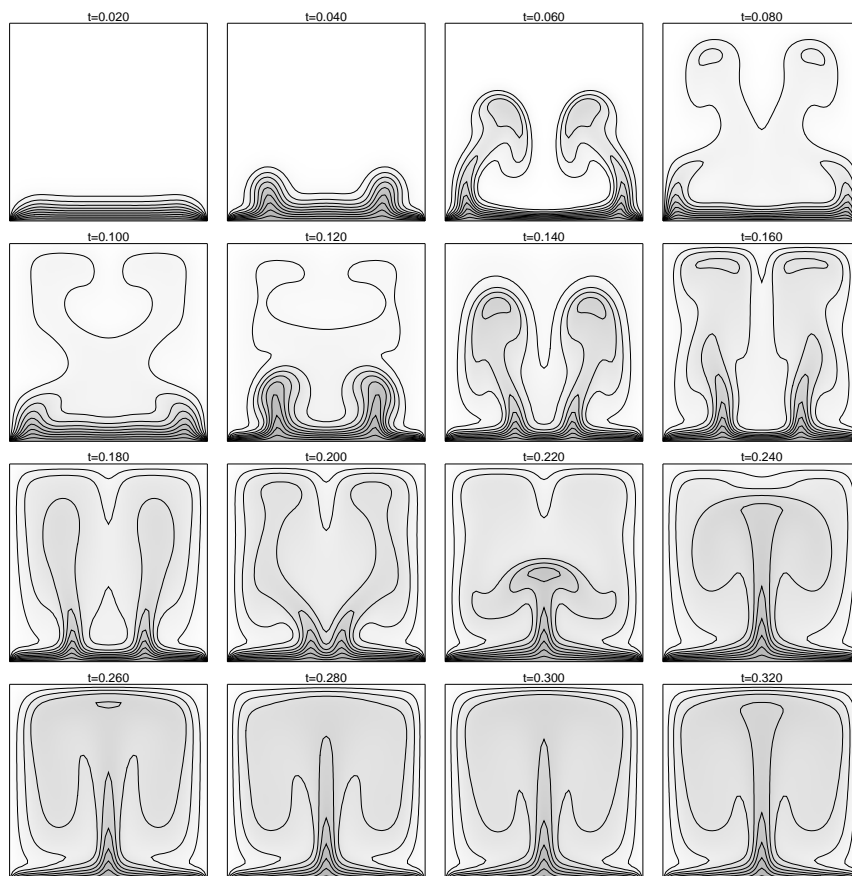


図 14: 箱の中の熱対流の計算結果 ( $Ra = 4 \times 10^5$ ,  $Pr = 7$ ,  $\varepsilon = \varepsilon_D = 0.1 \times h$ ,  $h = 1/64$ )。横軸を  $x$ 、縦軸を  $z$  とし、等温線を 0.1 刻みで示す (白い部分が低温部)。左上が  $t = 0.02$ 、右下が  $t = 0.32$  の図で、左から右へ 0.02 刻みで時間が進む。まず加熱面近傍の流体が熱伝導で温められて温度境界層ができ、境界層が厚くなると左右の壁のそばで対流不安定が起こって二本のプリューム(キノコ雲のような上昇流)が現れるようす、またその後プリュームが合体し、中央で上昇するような定常流れに落ち着くようすなどが見てとれる。

温度とは境界でつねに値が与えられるのでそこでは微分方程式を解かなくてよい。いっぽう圧力擾乱に関しては境界条件が陽に与えられていない。ここでは線形補間、たとえば

$$p(x_0, z_k) = 2p(x_1, z_k) - p(x_2, z_k) \quad (7.42)$$

などによって境界での圧力場がつねに決まっているものとする。これは擬似的な境界条件であって、やはり境界では圧力の方程式を解く必要がなくなる。また初期条件は、速度場と圧力擾乱はすべての点でゼロ、温度擾乱も境界以外の内部領域ではゼロとする<sup>21</sup>。

<sup>21</sup>これらの初期条件、境界条件はともに  $x = 1/2$  という軸に関して対称である。方程式自体も対称であるから、生ずる対流パターンはいくら時間がたっても対称のまま、実際におこるべき現象を再現できない恐れがある。そこで振幅が 1 に比べてじゅうぶん小さい温度擾乱を初期条件として与えるとよい。与え方は任意であるが、波長が適当に短く、また対称成分と反対称成分とが適当にまざったものにする。

## 時間積分

空間偏微分をすべて2次の中心差分で置き換えると、方程式系(7.35)–(7.37), (7.41)は、変数  $u_{jk}, w_{jk}, p_{jk}, T_{jk}$  ( $1 \leq j \leq N-1, 1 \leq k \leq N-1$ ) に関する連立常微分方程式に帰する。これは適当な時間積分スキームをもちいて解くことができる。陽解法をもちいる場合、時間積分のステップ幅  $\Delta_t$  は、まず拡散項の安定条件から  $\Delta_t < O(h^2)$  である必要がある。また擬似圧縮性から生じる音波を安定に計算するためにはクーラン条件  $\Delta_t < \epsilon O(h)$  が必要である。ところで流体の非圧縮性をよりよく近似するためには無次元パラメータ  $\epsilon$  はなるべく小さいほうがよい。そこで  $\epsilon = O(h)$  とすれば、 $\epsilon$  をある程度小さく抑えたうえで、時間ステップ数をそれほど増やさずに時間積分を進めることができるであろう。

### 例題 9

本節の問題設定にしたがって熱対流の数値シミュレーションをおこなえ。たとえば図14は、 $Ra = 4 \times 10^5$ ,  $Pr = 7$ , 格子間隔  $h = 1/64$ ,  $\epsilon = \epsilon_D = 0.1 \times h$  としたときの計算結果である<sup>22</sup>。境界条件やその他の設定を適当に変えて計算し、流れのようすを観察せよ。 □

## 8 その他の話題

### 8.1 移流方程式

#### 数値分散と風上差分

##### 1次元の移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (8.1)$$

を空間に関して差分法で解く。移流項(左辺第2項)を

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j} = c \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta_x} \quad (8.2)$$

のように単純な2次の中心差分で近似すると、図15(a)にみるように波形の崩れや位相の遅れが目立つ。

なぜ2次の中心差分で計算すると誤差が増大するのだろうか。たとえば  $u(x) = \sin kx$  なる波がどのように移流されるかをみてみよう。差分公式(8.2)によれば

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j} = c \frac{\sin k(x_j + \Delta_x) - \sin k(x_j - \Delta_x)}{2\Delta_x} = \frac{c}{\Delta_x} \sin k\Delta_x \cos kx_j \approx ck \left[ 1 - \frac{1}{6}(k\Delta_x)^2 \right] \cos kx_j \quad (8.3)$$

である。この結果と厳密解

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j} = ck \cos kx_j \quad (8.4)$$

<sup>22</sup> 大きさ3cm四方の箱に水を入れて、1Kの温度差をつけた場合に相当する。なお常温での水の動粘性率は  $\nu = 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s, 熱拡散率は  $\kappa = 1.4 \times 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s, 熱膨張率は  $\alpha = 2 \times 10^{-4}$  K<sup>-1</sup> の程度である。

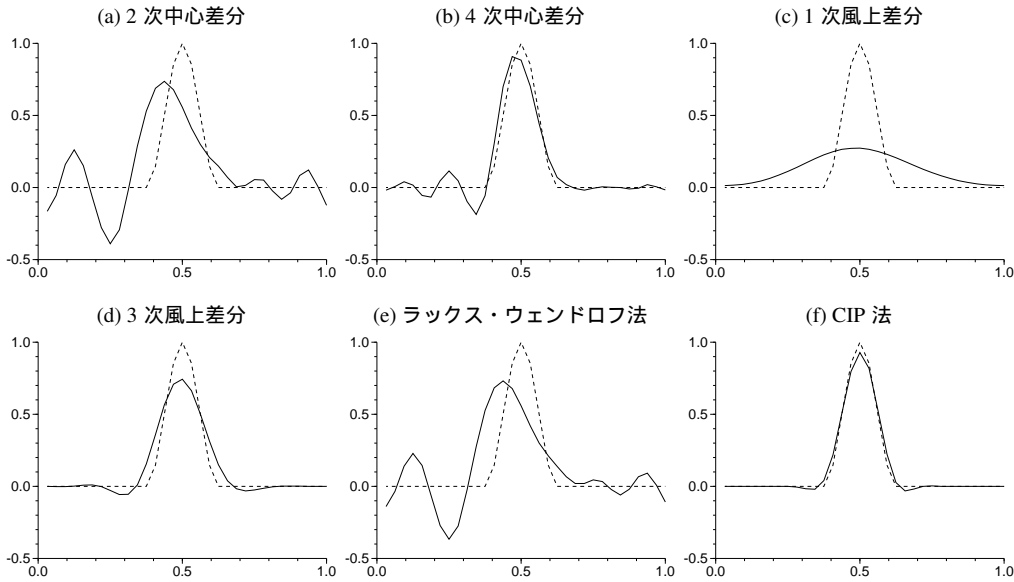


図 15: 1 次元移流方程式 (8.1) を区間  $0 \leq x \leq 1$  で周期境界条件のもとで解いた結果 ( $c = 1$ ,  $\Delta_x = 1/32$ )。横軸が  $x$  で時刻  $t = 1$  での  $u$  の値をプロットした。初期条件は、区間  $\frac{3}{8} \leq x \leq \frac{5}{8}$  では  $u = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos 8\pi(x - \frac{1}{2})$ , それ以外ではゼロである。(a)(b) は空間の離散化に 2 次および 4 次の中心差分, (c)(d) は 1 次および 3 次の風上差分をもちいた場合の結果。時間積分法は 3 次の予測子・修正子法とし, 時間ステップはじゅうぶん細かくとった。(e)(f) はそれぞれラックス・ウェンドロフ法, CIP 法による計算結果である。なお点線は厳密解をあらわす。

とを比較するとあきらかなように, 2 次の中心差分公式では波の位相速度がみかけ上

$$c \left[ 1 - \frac{1}{6} (k\Delta_x)^2 \right]$$

に等しくなっている。これは  $k$  が大きいほど (波長が短いほど) 数値解の移流の速度が遅くなることを意味する。このように本来波の位相速度は波長によらず一定であったのに, 数値計算では波の速度が波長に依存し分散性をもってしまう。これを数値分散 (numerical dispersion) という。

数値分散やそれに起因する不安定を抑えるために風上差分法 (upwind difference method) という差分近似法が考案されている。そもそも方程式 (8.1) は速度  $c$  で波が伝播するさまをモデル化したものである。 $c$  が正であれば波は  $x$  の正の方向に,  $c$  が負であれば  $x$  の負の方向に伝播する。そこで点  $x = x_j$  での差分近似を波がやってくる方向 (風上側) の情報に重きをおいておこなう。そのようにすると数値解が安定化する。

たとえば 1 次の風上差分では  $c$  の正負によって移流項を

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j} = \begin{cases} c \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta_x} & (c > 0 \text{ のとき}) \\ c \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta_x} & (c < 0 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (8.5)$$

のように近似する。図 15(c) よれば 1 次の風上差分を用いた数値解は解の形がなめらかになり, 短波長の誤差がなくなっていることがわかる。ただし解の振幅はずいぶん小さくなっ



てしまった。1次の風上差分法(8.5)は絶対値記号を使えば

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_j} = c \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta_x} - |c| \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{2\Delta_x} \quad (8.6)$$

のように一本の式にまとめられる。この式の第1項は通常2次精度の中心差分(8.2)である。いっぽう第2項は $u$ の2階微分の中心差分近似に比例していて、 $c$ の正負に関わらず、つねに拡散項としてふるまうことがわかる。1次の風上差分は、通常中心差分による近似に加えて、人工的に粘性係数 $\frac{1}{2}|c|\Delta_x$ の粘性項を付け加え、短波長の誤差を無理やり抑えたもの、と解釈できる。この付加項のことを数値粘性(numerical viscosity)という。ここでは1次の風上差分公式を示したが、もっと高次の公式(3次や5次)も使われる場合がある。

## CIP法

1次元の移流方程式(8.1)は一般解

$$u(x, t) = f(x - ct) \quad (8.7)$$

をもつ。もし $t = t_n$ での変数 $u$ の値が厳密にわかっていたとしたら、次の時間ステップ $t_{n+1}$ では

$$u_j^{n+1} \equiv u(x_j, t_{n+1}) = u(x_j - c\Delta_t, t_n) \quad (8.8)$$

のように厳密に求まる。ここで問題になるのは $x_j - c\Delta_t$ という点が一般には格子点と格子点の間に位置するという点である。そこで $t = t_n$ での変数の分布 $u^n(x) \equiv u(x, t_n)$ を適当な多項式で補間することにする。

まず $c > 0$ として、2点 $x = x_j, x_{j-1}$ での値を使って $u^n(x)$ を線形補間する。すると

$$u^n(x) = u_j^n + \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta_x} (x - x_j) \quad (8.9)$$

と近似できるので、

$$u_j^{n+1} = u^n(x_j - c\Delta_t) = u_j^n - c\Delta_t \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta_x} \quad (8.10)$$

と求まる。これは空間について1次の風上差分、時間積分についてオイラー法を適用したものにほかならない。

つぎに3点 $x = x_{j+1}, x_j, x_{j-1}$ での値を使って $u^n(x)$ を2次関数で補間する。すると

$$u^n(x) = u_j^n + \frac{u_{j-1}^n - u_j^n}{2\Delta_x^2} (x - x_j)(x - x_{j+1}) + \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{2\Delta_x^2} (x - x_j)(x - x_{j-1}) \quad (8.11)$$

と近似できるので、

$$u_j^{n+1} = u^n(x_j - c\Delta_t) = u_j^n - c\Delta_t \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta_x} + \frac{1}{2}(c\Delta_t)^2 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta_x^2} \quad (8.12)$$

と求まる。この計算手法はラックス・ウェンドロフ(Lax-Wendroff)法と呼ばれる。

$u^n(x)$  を 3 次関数で補間するのが CIP 法である<sup>23</sup>。ただし単純な補間ではなく、3 次関数を決定するための 4 つの独立な情報として、 $c > 0$  の場合には  $u_j^n, u_{j-1}^n$  およびそれらの空間に関する 1 階微分係数をとる。いま

$$\dot{u}_j^n \equiv \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_j, t=t_n}$$

と定義すれば

$$\begin{cases} u^n(x) = \alpha(x - x_j)^3 + \beta(x - x_j)^2 + \dot{u}_j^n(x - x_j) + u_j^n, \\ \dot{u}^n(x) = 3\alpha(x - x_j)^2 + 2\beta(x - x_j) + \dot{u}_j^n, \end{cases} \quad (8.13)$$

と書くことができる。未定係数  $\alpha, \beta$  は定義式  $u_{j-1}^n \equiv u^n(x_{j-1})$  および  $\dot{u}_{j-1}^n \equiv \dot{u}^n(x_{j-1})$  から、

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\dot{u}_j^n + \dot{u}_{j-1}^n}{\Delta_x^2} - \frac{2(u_j^n - u_{j-1}^n)}{\Delta_x^3}, \\ \beta = \frac{2\dot{u}_j^n + \dot{u}_{j-1}^n}{\Delta_x} - \frac{3(u_j^n - u_{j-1}^n)}{\Delta_x^2}, \end{cases} \quad (8.14)$$

のように求められる。したがって

$$u_j^{n+1} = u^n(x_j - c\Delta_t) = u_j^n - c\Delta_t \dot{u}_j^n + (c\Delta_t)^2 \beta - (c\Delta_t)^3 \alpha \quad (8.15)$$

なる公式が得られる。ところでこのスキームでは  $\dot{u}_j^{n+1}$  の値も求める必要がある。もとの方程式 (8.1) を空間微分すればすぐにわかるように  $\dot{u}$  自身も移流方程式に従う。よって

$$\dot{u}_j^{n+1} = \dot{u}^n(x_j - c\Delta_t) = \dot{u}_j^n - 2c\Delta_t \beta + 3(c\Delta_t)^2 \alpha \quad (8.16)$$

で計算可能である。CIP 法は初期条件として  $u$  のみならずその空間 1 階導関数をも必要とする。

CIP 法で 1 次元移流方程式を解いた結果を図 15(f) に示す。空間に関する精度は 3 次の風上差分法と同じであるが、数値粘性を含まない分、解のかたちがよく保存されていることがわかる。

## 8.2 高次精度の陰的差分スキーム

例として 1 次元の拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (8.17)$$

を考える。2 次の差分公式を使うと空間の 2 階微分が

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2} - \frac{1}{12} \Delta_x^2 \left. \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right|_{x=x_j} + O(\Delta_x^4) \quad (8.18)$$

<sup>23</sup> 矢部, 内海, 尾形 (2003), CIP 法, 森北出版。

となることはすでにみた。ところで  $u$  自身を「ゼロ階」の微分だとみなしてそれを2次精度の3点公式で近似することができる。その方法は一意ではないが、たとえば

$$\left. \frac{\partial^0 u}{\partial x^0} \right|_{x=x_j} = \frac{u_{j+1} + 10u_j + u_{j-1}}{12} - \frac{1}{12} \Delta_x^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_j} + O(\Delta_x^4) \quad (8.19)$$

とすれば、 $\Delta_x^2$  に比例する誤差の係数 (ここでは  $1/12$ ) がちょうど2階微分の公式 (8.18) のといっしょになる。これらの公式 (8.18)(8.19) を方程式 (8.17) に適用した近似式

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{u_{j+1} + 10u_j + u_{j-1}}{12} \right) = \eta \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2} \quad (8.20)$$

は形式的には空間に関して  $O(\Delta_x^2)$  の誤差を含むが、実は実質的に  $O(\Delta_x^4)$  の誤差しか含まない。近似式 (8.20) と真の式 (8.17) との差 (誤差) は、

$$\frac{1}{12} \Delta_x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial^0 u}{\partial x^0} \right) - \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right]_{x=x_j} + O(\Delta_x^4) \quad (8.21)$$

であるが、 $O(\Delta_x^2)$  の誤差はちょうどもとの方程式を空間微分したものになっている。式 (8.21) の括弧内は、差分近似によってつねに  $O(\Delta_x^2)$  の誤差に保たれているから、結局誤差全体は  $O(\Delta_x^4)$  に抑えられるのである<sup>24</sup>。

差分近似式 (8.20) は3点公式ながら4次の精度をもつが、左辺も差分近似されているために連立一次方程式を解く手間が別途必要である。しかし時間積分スキームに陰解法 (たとえばクランク・ニコルソン法) を使うのだとすれば行列の帯幅は変わらないので、計算量はそのままで解の精度が増すという好ましい結果をもたらす。

同様の考えで、関数の評価点の数を増やさないで精度のよい微分係数を一般的に求める、コンパクト差分法という方法も知られている。この方法では、差分近似式を

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_j} + \alpha \left( \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_{j+1}} + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_{j-1}} \right) = \beta \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta_x^2} \quad (8.22)$$

のように表現する。この場合  $\alpha = 1/10, \beta = 6/5$  ならば4次の精度をもつ。1階微分と2階微分とを同時に求める、結合コンパクト差分法も知られており、より精度が高い。コンパクト差分法は、微係数を陰的に求めるのが特徴的であり、性質としては通常の差分法とスペクトル法の間くらいに位置する。

### 8.3 非線形不安定

非線形の移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} \quad (8.23)$$

を考える。時刻  $t = t_n$  で波数  $k_1$  の波と波数  $k_2$  の波が存在し、変数  $u_n(x) \equiv u(x, t_n)$  が

$$u_n = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{ik_2 x} \quad (8.24)$$

<sup>24</sup>Geller, R.J. & N. Takeuchi (1995), *Geophys. J. Int.* **123**, 449–470.

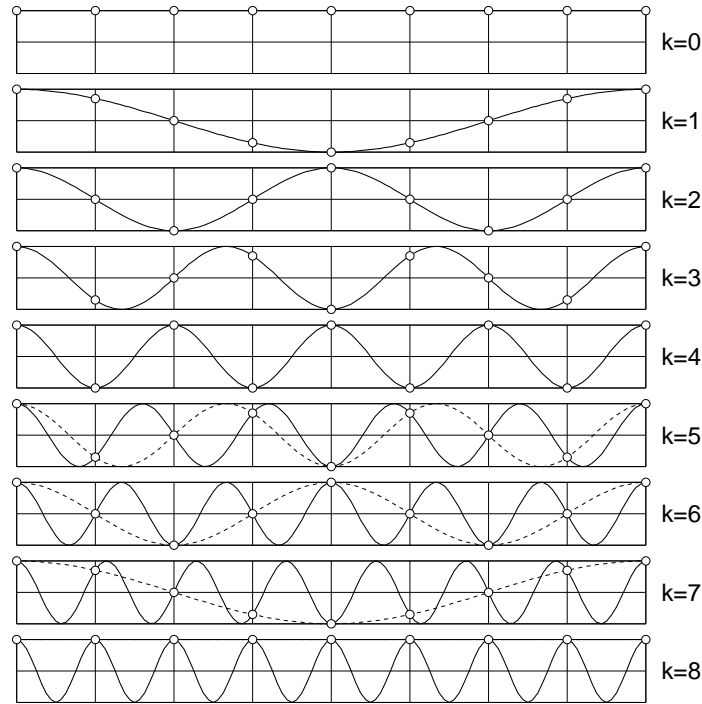


図 16: 区間  $0 \leq x \leq 1$  を八等分した格子上で  $\cos 2\pi kx$  なる波を表現したときの模式図。この格子上で表現できる波の最大波数は  $k_m = 4$  である。波数をそれよりも大きくしてしまうと、実質的に波数  $(2k_m - k)$  の波と同一視されてしまう。たとえば  $k = 6$  の波は格子点上では  $k = 2$  の波と区別がつかない。これをエイリアシングという。

のような形式に書きあらわされるとする。このとき方程式 (8.23) を単純にオイラー法で時間積分したとすれば、次の時間ステップでは

$$u_{n+1} = u_n - i\Delta_t \left[ k_1 A_1^2 e^{2ik_1 x} + k_2 A_2^2 e^{2ik_2 x} + (k_1 + k_2) A_1 A_2 e^{i(k_1 + k_2)x} \right] \quad (8.25)$$

のような形式になる。ここで注目すべきことは、もともと存在していた波数  $k_1, k_2$  の波のほかに、新しく  $2k_1, 2k_2, k_1 + k_2$  などの高波数 (= 短波長) の波が生成されていることである。

自然界ではこのような短波長の波は分子拡散などの機構で散逸する。しかし計算機上ではそのようなミクロの構造まで解像度をもつことは不可能である。差分法であれば格子間隔  $\Delta_x$  よりも細かい構造を数値解で表現することはできない。すなわち数値解で表現できる波数の最大値  $k_m$  が存在する。

図 16 からあきらかなように  $k > k_m$  なる波は有限の格子では波数  $2k_m - k$  の波として解釈され、非線形項によってつくられる短波長の波のエネルギーが長波長側に染みだすという現象が起こる。これをエイリアシング (aliasing) という。エイリアシングが起こると本来散逸すべき波のエネルギーがより波長の長い波を増幅させる方向にはたらき、ついには解の振幅を発散させてしまうことがある。これが非線形不安定である。

非線形不安定に直面したときに試みるべき根本的な解決方法は空間の解像度をあげることであるが、計算コストの問題でそれがいつでも可能なわけではない。風上差分は数値粘

性を含むから波数の大きい波を散逸させ非線形不安定を除去する効果がある。また支配方程式に人工的な超粘性項を付け加えることもしばしばおこなわれる(7章の熱対流問題ではこれをおこなった)。ただしこれらの方法では粘性が効きすぎてしまって本来起こるべき現象が再現されない危険性もはらんでいる。乱流の解析などでは格子間隔よりも細かいスケールで起こるはずの現象を理論的にパラメータ化して方程式に組み込むことがおこなわれる。またエイリアシングに起因する誤差を本質的に除去する目的で、解をスペクトル展開した上で  $\frac{2}{3}k_m < k < k_m$  に相当する高波数成分を切り落とす(ローパスフィルターをかける)という手法もある。

## 8.4 硬い方程式

ある二つ以上の現象が混在していて、それらの時定数が大きく異なるとき、そのような現象を記述する方程式は硬い(stiff)という。硬い方程式には非常に大きな固有値と非常に小さな固有値とが混在している。すでに述べたとおり、時間積分の安定性は絶対値最大の固有値(=時定数の短い現象)によって支配される。したがって時定数の長い現象を再現したいと思っても、時間積分の刻み幅が小さく制限されて膨大な計算ステップが必要になり、計算の実行が困難になる。

たとえば地球のマントル物質の運動には地震波の伝播のような数秒以下の短い時定数をもつものもあれば、数億年スケールのマントル対流のような現象もある。通常はマントルの流動現象を論じるのにいちいち弾性波の伝播の詳細を知る必要はない。そこでマントル対流の計算では連続の式の時間微分項を無視し、音波の解を除去する。このような近似的な非弾性近似(anelastic approximation)という。

こうした現象の分離はいつでも可能であるわけではない。たとえばマントルの粘性率は温度や組成の影響で著しく変化し、場所によって値が桁で異なる。そのような場合、低粘性部分の粘性流動を解析するのに必要な時間積分の刻み幅が、高粘性部分の粘性係数によってコントロールされてしまう。式(6.17)をみると分かるように時間ステップ幅は粘性率(式(6.17)では $\eta$ に相当)に反比例するから、たとえば粘性率が3桁高い部分があれば時間ステップが1000倍も多く必要になる<sup>25</sup>。

数値計算の安定性を維持するために時間積分の刻み幅が細かくなり、かなり無駄とも思える計算をチマチマとしなければならない、というのが硬い方程式を扱う際の問題点である。この種の問題はより安定な時間積分スキームを使うことで解決できる場合がある。とくに安定領域の広いクランク・ニコルソン法などの陰解法を使うのがもっとも効果的である。

硬い方程式に適性のある、後退微分公式(またはギア(Gear)の公式)とよばれる一群の時間積分法がある。これは微分方程式  $du/dt = F(u, t)$  に対して、左辺の時間微分項を、過去

<sup>25</sup>これを異方性(anisotropy)の問題ともいう。異方性は方程式の係数が場所によって異なることだけでなく、格子の間隔が場所によって異なることによっても引き起こされる(式(6.17)を見よ)。

の変数  $u$  の値をもちいて直接差分近似するもので、たとえば2次公式は

$$u_{n+1} = \frac{4}{3}u_n - \frac{1}{3}u_{n-1} + \frac{2}{3}\Delta_t F(u_{n+1}, t_{n+1}) \quad (8.26)$$

また3次公式は

$$u_{n+1} = \frac{18}{11}u_n - \frac{9}{11}u_{n-1} + \frac{2}{11}u_{n-2} + \frac{6}{11}\Delta_t F(u_{n+1}, t_{n+1}) \quad (8.27)$$

のように導かれる。これらはやはり陰解法で安定領域がきわめて広い。とくに線形の常微分方程式  $du/dt = \lambda u$  に対しては、 $\lambda$  が負の実数であればつねに安定である。

## 8.5 粒子法

物理現象の数値シミュレーションがすべて偏微分方程式の求解によって達成されるわけではない。たとえば海洋の流れはナビエ・ストークス方程式でよく近似されるが、本来的には多数の水分子の相互的な運動をもって記述すべきものである。全体としてみたときの平均的な海水の流れが偏微分方程式であらわされるだけのことである。多くの物理現象は究極的にはなんらかの分子間の相互作用のようなものの積み重ねとして記述される。このような視点のもと、マクロな物理現象を多数の粒子どうしの相互作用に還元するような数値解法を一般に粒子法<sup>26</sup>という。境界面が時間とともに移動する問題など、通常のやり方では格子を形成することが難しい問題にとくに適性がある。

## 8.6 境界値問題の解法

時間発展問題にあってもその数値解法の過程でしばしば境界値問題、たとえばポアソン方程式

$$\nabla^2 u + f = 0 \quad (8.28)$$

を解かなければならないときがある ( $f$  は与えられた関数)。ポアソン方程式の数値解法には種々あるが、ここでは代表的な反復解法である緩和法を紹介する。式(8.28)は拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + f \quad (8.29)$$

の時間無限大の解のはずだから、任意の初期条件から始めて式(8.29)をじゅうぶん長時間積分すればポアソン方程式(8.28)の近似解が求まる。

空間を2次精度の差分法で離散化しオイラー法で時間積分すると式(8.29)は

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n + \frac{\Delta_t}{\Delta_x^2}(u_{j-1k}^n - 2u_{jk}^n + u_{j+1k}^n) + \frac{\Delta_t}{\Delta_y^2}(u_{jk-1}^n - 2u_{jk}^n + u_{jk+1}^n) + \Delta_t f_{jk} \quad (8.30)$$

となる(ただし関数  $u$  は2次元平面内で定義され  $u_{jk} = u(x_j, y_k)$  とする)。この時間積分が安定であるには式(8.30)の絶対値最大の固有値

$$-4\Delta_t \left( \frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{1}{\Delta_y^2} \right)$$

<sup>26</sup>たとえば越塚誠一(1997), “数値流体力学”, 培風館など。

がオイラー法の安定条件である  $-2$  以上になる必要がある。制限いっぱい  $\Delta_t$  を大きくとった積分公式

$$u_{jk}^{n+1} = \frac{1}{2(1+\Delta_x^2/\Delta_y^2)}(u_{j-1k}^n + u_{j+1k}^n) + \frac{1}{2(1+\Delta_y^2/\Delta_x^2)}(u_{jk-1}^n + u_{jk+1}^n) + \frac{1}{2(1/\Delta_x^2+1/\Delta_y^2)}f_{jk} \quad (8.31)$$

を繰り返して変数  $u$  を収束させる方法をとくにヤコビ法という。ヤコビ法の計算式 (8.31) はポアソン方程式 (8.28) を直接離散化した式

$$\frac{u_{j-1k} - 2u_{jk} + u_{j+1k}}{\Delta_x^2} + \frac{u_{jk-1} - 2u_{jk} + u_{jk+1}}{\Delta_y^2} + f_{jk} = 0 \quad (8.32)$$

で形式的に  $u_{jk}$  について解いたものに一致する<sup>27</sup>。  $n$  番目のステップでの離散方程式の残差 (residual) を

$$r_{jk}^n \equiv \frac{u_{j-1k}^n - 2u_{jk}^n + u_{j+1k}^n}{\Delta_x^2} + \frac{u_{jk-1}^n - 2u_{jk}^n + u_{jk+1}^n}{\Delta_y^2} + f_{jk}$$

で定義すると、一般にヤコビ法の式 (8.31) は

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n + \left(\frac{2}{\Delta_x^2} + \frac{2}{\Delta_y^2}\right)^{-1} r_{jk}^n \quad (8.33)$$

と書くこともできる。ヤコビ法は収束が遅いので、収束を速めるさまざまな工夫が考案されている。たとえばSOR (successive overrelaxation) 法という加速手法では (8.33) を

$$u_{jk}^{n+1} = u_{jk}^n + \omega \left(\frac{2}{\Delta_x^2} + \frac{2}{\Delta_y^2}\right)^{-1} r_{jk}^n \quad (8.34)$$

と書き換える。ここで  $\omega$  は緩和係数で、 $0 < \omega < 2$  である。その他、拡散時間が格子間隔の2乗に比例することから、長波長の残差は粗い格子で、短波長の残差は細かい格子でそれぞれ緩和させる、多重格子 (multigrid) 法などももちいられる。

## 8.7 固有値問題の解法

非線形の時間発展問題を考察するとき、変数の振幅が微小であると仮定し、非線形項を無視した上で、その系の時間発展を解析することがある。たとえば7.2節で述べた熱対流問題について、熱的擾乱に対する系の安定・不安定を論ずる場合などがその典型である。このとき、すべての変数が時間に関して  $\propto e^{\lambda t}$  のように変化すると仮定すると、支配方程式が  $d/dt(Bu) = Au$  であったならば、それは結局のところ固有値問題

$$Au = \lambda Bu \quad \text{もしくは} \quad B^{-1}Au = \lambda u \quad (8.35)$$

に帰着する。ここで  $u$  は従属変数をまとめてあらわした  $N$  元のベクトル、 $A, B$  はそれぞれ  $N \times N$  の係数行列<sup>28</sup>である。固有値  $\lambda$  の実部は変数  $u$  の振幅の増加率をあらわす。した

<sup>27</sup>むしろそれがヤコビ法の定義である。

<sup>28</sup>これらは多くの場合帯行列など、非零要素がまばらにしか分布しない行列である。しかし  $B^{-1}A$  は一般に密行列になってしまうので、(8.35) のように  $A$  と  $B$  とを分けたままで考えたほうがよい。

がって物理的に興味があるのは多くの場合もっとも成長の速いモード, すなわち  $Re(\lambda)$  が最大の固有値とその固有ベクトルである。

ところで固有値問題 (8.35) において, 絶対値最大の固有値を求めるための, べき乗法 (power method) という計算手法が知られている。これは任意の初期ベクトル  $u_0$  に対して, 漸化式

$$u_n = B^{-1}Au_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (8.36)$$

によってベクトル  $u_n$  を計算すると,  $n \rightarrow \infty$  の極限で  $u_n = \lambda_M u_{n-1}$ , すなわち

$$B^{-1}Au_n = \lambda_M u_n \quad (8.37)$$

になる, という事実に基づく ( $\lambda_M$  は  $N$  個ある固有値のうち絶対値最大のもの)。計算アルゴリズムが単純な上<sup>29</sup>, 固有値と固有ベクトルとが同時に求まるという利便性もある。

われわれが求めたいのは実部が最大の固有値  $\lambda_R$  である。そこで想定される  $\lambda_R$  の実部よりも大きい実部をもつ数  $\lambda_0$  をとったうえで, 式 (8.35) の両辺から  $\lambda_0 Bu$  を引き算する:

$$(A - \lambda_0 B)u = (\lambda - \lambda_0)Bu$$

そしてこれをさらに変形すると, 結局 (8.35) は

$$(A - \lambda_0 B)^{-1}Bu = \frac{1}{\lambda - \lambda_0}u \equiv \sigma u \quad (8.38)$$

なる等価な固有値問題に帰着する。これにべき乗法を適用すると,  $n \rightarrow \infty$  の極限で

$$(A - \lambda_0 B)^{-1}Bu_n = \sigma_M u_n \quad (8.39)$$

となり,  $(A - \lambda_0 B)^{-1}B$  の絶対値最大の固有値  $\sigma_M$  が求まる。ところで  $\lambda_0$  は複素平面上で  $\lambda_R$  にもっとも近いことが期待される (なぜなら複素平面上で  $\lambda_R$  より右側には固有値は存在しない)。よって  $\sigma_M = 1/(\lambda_R - \lambda_0)$ , すなわち

$$\lambda_R = \lambda_0 + 1/\sigma_M \quad (8.40)$$

である可能性が高い。実際は  $\lambda_R$  の虚部が未知であるから必ずしもこの等式は成り立たないが, 想定される固有値の範囲内で  $\lambda_0$  をいくつか試すことによって, 実部最大の固有値が比較的少ない手間で計算できる。なおべき乗法は, 絶対値が最大の固有値と2番目に大きい固有値とのそれら絶対値の差が大きいほど収束が速い。よって何らかの方法で  $\lambda_R$  の概算値が得られたら,  $\lambda_0$  としてその値をとると, 計算能率が著しく向上する。

<sup>29</sup>具体的にはベクトル  $u_{n-1}$  を, その絶対値最大の元が1になるように規格化して, (8.36) によって  $u_n$  を計算する。すると固有値  $\lambda_M$  の推定値は,  $u_n$  の絶対値最大の元に等しい。これが収束するまで繰り返す。