偏微分方程式の数値解法について

中 野　　渉*・石　　信　一**

Numerical Methods for Partial Differential Equations

NAKANO Wataru　ISHI Shin-ichi

要 旨

現在，偏微分方程式の数値解法は，FTCS法などの初等的解法からADI法などの実用的解法まで数多く存在する．本研究では初期値問題に限定して，初等的差分解法がどのような必要性から実用的解法に発展したかについて検討した．本研究の目的は，高専の学生が数値計算法の授業で学んだ初等的解法の知識を，専門分野での実用的解法に発展させるための基礎知識を与えることにある．

Abstract

Many numerical methods to solve partial differential equations from elementary methods like FTCS to practical methods like ADI exist at present. Focusing to the finite difference methods for initial value problems, the ideas to extend the elementary methods to practical one were studied.
The purpose of this study was to provide students of Colleges of Technology the basic knowledge to extend the elementary numerical methods to the practical one.

1　はじめに

工学上の諸問題に登場する偏微分方程式の数値解法について，高等専門学校（以下，高専）の応用数学で学ぶ初等的な差分解法と，研究レベルで用いられる，より高精度で実用的な解法の間には大きな飛躍がある．著者らは，高専の応用数学においては初等的な解法によって数値計算法の基本的な考え方を理解することを優先すべきであり，高度で複雑な実用的解法を教授することは適切ではないと考えている．しかし，技術者・研究者として数値的方法は将来大いに役に立つ技術であり，高専で学んだ知識を発展させる方向を概説することは有益であろう．

高専において数値計算法を教育する中で，実用的解法に拡張する必要性を示し，新しい概念や手法の一端を紹介し，専門分野での活用につなげるのが本研究のねらいである．

偏微分方程式の数値計算法が多用される分野の代表として流体力学がある．流体の数値シミュレーションは，ハードウエアの急速な進歩に伴って近年大きく進展し，数値流体力学（CFD：Computational Fluid Dynamics）という新しい方法論に到達している．Navier-Stokes方程式をはじめとする流体力学の方程式系は非線形の連立偏微分方程式を構成しており，ここではその複雑な系の数値解法を扱うことはしない．その代わり本研究では流体方程式の単純なモデルとして移流拡散方程式を扱うことにする．

以下では，移流拡散方程式を移流方程式と拡散方程式に分割する「演算子分割」を示し，移流方程式についてはCIP（Cubic Interpolated Propagation）法まで，拡散方程式についてはCrank-Nicholson法とその多次元化であるADI法（Alternating-Direction Implicit method）まで拡張する考え方を解説する．

2　演算子分割法

2.1　モデル方程式

モデル方程式として，物理量$u(x,t)$を未知関数とする1次元移流拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v\frac{\partial u}{\partial x} + D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{1}$$

＊　助教授　機械工学科

＊＊　助教授　機械工学科

を考える．以下v,Dを定数とすると，この方程式の右辺第１項は一様な流れ v に伴う物理量の移動を表す移流項であり，第２項は拡散項である．

2.2　演算子分割法

一般の初期値問題を

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}[\, u \,] \tag{2}$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 + \cdots + \mathcal{L}_m \tag{3}$$

とする．演算子 $\mathcal{L}_1 \sim \mathcal{L}_m$ はそれぞれ異なる時間尺度を持つ現象に対応することが多く，それらを同時に１つの離散スキームで扱うことは計算効率とプログラムの単純化の観点からみて必ずしも得策ではない．そこで，演算子分割法では$u_j^n = u(j\Delta x, n\Delta t)$について，$\mathcal{L}_1 \sim \mathcal{L}_m$ の各演算子に対する離散スキーム

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= N_1(u^n, \Delta t) \\ &\cdots \\ u^{n+1} &= N_m(u^n, \Delta t) \end{aligned} \tag{4}$$

に分割して計算し，それらの和をもって u^{n+1} とする．

移流拡散方程式(1)に演算子分割法を適用すると，

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}_1[u] = -v\frac{\partial u}{\partial x} \tag{5}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}_2[u] = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{6}$$

式(5)は移流方程式，式(6)は拡散方程式である．これらの方程式の離散化手法として，差分法，有限体積法，有限要素法が代表的であり，有限体積法は物理量の保存則を満たす離散化を可能とし，有限要素法は複雑な境界条件に対応できる利点がある．ここでは応用数学で導入される差分法の路線での拡張に限定して述べる．

3　移流方程式の数値解法

3.1　FTCS法

移流方程式(5)の最も初等的な数値解法のひとつは，時間微分を前進差分で，空間微分を中心差分で近似する方法で

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = -v\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} \tag{7}$$

すなわち，

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{v\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \tag{8}$$

である．これはFTCS（Forward Time Centered Space）法と呼ばれる陽的スキームであり，放物型方程式においては有効な方法であるが，移流方程式のような双曲型方程式に対してこのスキームは無条件不安定である．図１に矩形の初期条件の下での移流方程式を計算した結果を示す．移流方程式の一般解は$u = F(x - vt)$であるから，初期波形が一定速度で平行移動するはずであるが，FTCS法ではたちまち数値的不安定が増幅しており，意味のある解が得られない．

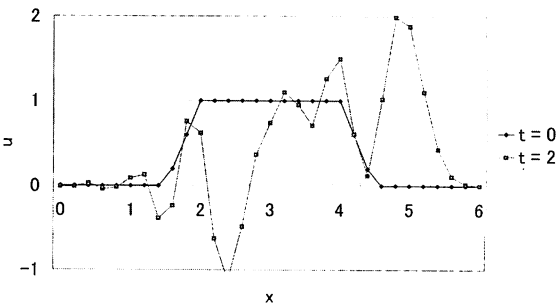

図１　FTCS法による移流方程式の数値解

3.2　Lax-Wendroff法

FTCS法を安定なスキームに改善するため，式(8)を不安定化する原因を調べてみる．von Neumann安定解析に従って，数値解に波数kの擾乱モード

$$u_j^n = \{a(k)\}^n e^{\sqrt{-1}\,kj\Delta x} \tag{9}$$

が含まれていると考え，それを式(8)に代入する．

$$a(k) = 1 - \sqrt{-1}\frac{v\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x \tag{10}$$

$k \neq m\pi/\Delta x$（mは整数）について$|a(k)| > 1$であるから，時間ステップnが進むにつれてそのモードが指数関数的に増幅するので，この差分スキームは確かに無条件不安定である．

一方，式(10)の右辺第１項を１より小さくするスキームはある条件で安定になると予想される．そこで，FTCSスキーム式(8)における時間微分項の近似方法を

$$u_j^n \to \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \tag{11}$$

と変更してみる．これがLax-Wendroff法

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{v\Delta t}{2\Delta x}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \tag{12}$$

である．

von Neumann安定解析の結果，

$$|a(k)|^2=1+\{(\frac{v\Delta t}{\Delta x})^2-1\}\sin^2 k\Delta x \qquad (13)$$

となる．従って，Courant数 $c=|v|\Delta t/\Delta x$ に関するCourant条件

$$c\leq 1 \qquad (14)$$

が成り立つとき

$$|a(k)|^2\leq 1 \qquad (15)$$

であり，このスキームは安定である．

図2にLax-Wendroff法による計算例を示す．確かに数値的不安定は抑えられており，このスキームが有益な方法であることを示している．しかし，このスキームでは数値拡散（数値粘性）によって波形が鈍るという新たな問題が生じている．Lax-Wendroff法は数値拡散という犠牲と引き換えに安定性を得る方法であり，これは計算領域内において物理量が空間的に不連続に変化する現象を扱うときは致命的な欠点となる．

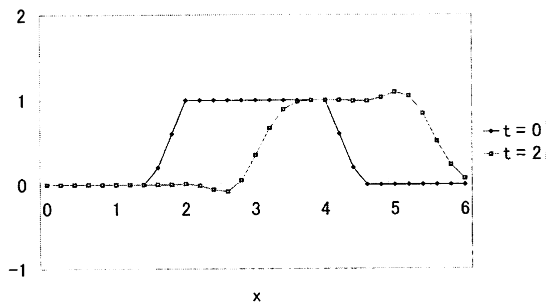

図2　Lax—Wendroff法による移流方程式の数値解

3.3 CIP法

移流方程式の数値拡散を劇的に抑える実用的なスキームCIP（Cubic interpolated Propagation）法が近年，矢部ら[1)] [2)]によって開発された．これは「移動境界流れ」を含めて広範な流れ問題を扱いうる非常に汎用性のある計算スキームであり，矢部らは偏心二重シリンダ内自然対流問題，レーザ照射によるアルミニウムの溶融・蒸発問題など多様な問題のシミュレーションに成功している．CIP法ではその汎用性の故に，移動境界を含む全計算領域を同じスキームで扱い得るため，移動境界の運動に合わせた境界適合格子を用いる必要が無く，固定格子を用いる事ができる．そのため，境界の大変形にも対応でき，計算量を大幅に減らせる事も魅力的である．移流方程式(5)に対するCIP法を概説する．

式(5)は1階の双曲型方程式であるので，特性曲線に沿って物理量 u は一定になる．これを利用すればよいが，このアイディアを単純に差分格子の世界に持ち込むと，物理量が急激に変化する部分では，数値拡散のために境界が不鮮明になってしまい使い物にならない．そこで，物理量 u だけでなく，その空間微分 u_x の時間発展も並行して計算しこれを利用することで数値拡散を押さえられる．空間微分の発展方程式は，移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t}=-v\frac{\partial u}{\partial x} \qquad (16)$$

を空間微分して得られる．

$$\frac{\partial u_x}{\partial t}=-v\frac{\partial u_x}{\partial x}-v_x\frac{\partial u}{\partial x} \qquad (17)$$

移流速度 v が空間について定数であれば右辺第2項は消えるから v_x についても移流方程式になる．また，演算子分割によっても移流方程式が分離される．従って時間ステップ n での波形 u が形を変えずに移動速度 v で $v\Delta t$ だけ移動する．言い換えれば，u^{n+1} は時間ステップ n での u^n の全領域における補間多項式 $F(x)$ さえ決定できれば

$$u^{n+1}(x)=F(x-v\Delta t) \qquad (18)$$

$$u_x^{n+1}(x)=\frac{dF}{dx}(x-v\Delta t) \qquad (19)$$

によって容易に時間発展させることができる（図3）．格子点 x_i を原点とする水平座標 ξ に関する3次の補間多項式

$$F_i(\xi)=A_i\xi^3+B_i\xi^3+C_i\xi+D_i \qquad (20)$$

を仮定する．格子点において u, u_x が連続となる条件を満たす3次のエルミート・スプライン補間多項式としてその係数が決められる．移流方程式

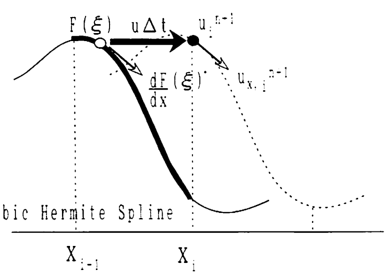

図3　CIP法の原理

のCIP法による数値解が図4である．

このようにCIP法は旧来の方法に比べて数値拡散が強力に抑えられており，移流項を有する偏微分方程式に対する高精度数値解法となっている．なお，さらに鮮明な境界を必要とする場合は，VOF法（Volume of Fluid Method）のような密度関数法によるdigitizerを用いるなどして，CIP法に修正を加える必要がある[2)]．

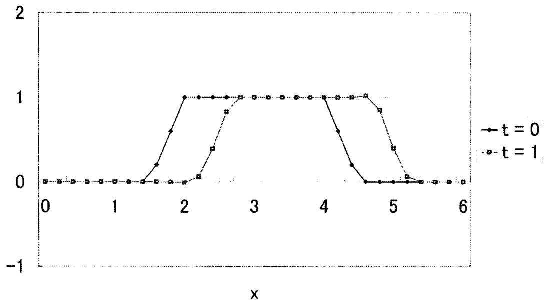

図4　CIP法による移流方程式の数値解

4　拡散方程式の数値解法

4.1　FTCS法

拡散方程式(6)についても，時間微分を前進差分で，空間微分を中心差分で近似するFTCS法が最も初等的な数値解法のひとつである．

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=D\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \tag{21}$$

すなわち，

$$u_j^{n+1}=u_j^n+\frac{D\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n) \tag{22}$$

である．このスキームは単純な陽解法であるという利点があり，偏微分方程式の差分解法の入門として適しているが，von Neumann解析の結果，このスキームの安定条件は拡散数$\gamma=D\Delta t/\Delta x^2$について，

$$\gamma\leq\frac{1}{2} \tag{23}$$

である．従って要求される空間解像度を実現するようにΔxを小さく取ると，上の条件からΔtはきわめて小さく取らねばならず，多大なステップ数を必要としてしまい効率が悪い．特に，必要な解が過渡現象でなく平衡解という場合はなおさらである．

4.2　Crank-Nicholson法

スキームの安定性を上げる一般的方法は陰解法を利用することである．例えばFTCS完全陰解法は

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}=D\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \tag{24}$$

である．これは任意の時間刻み幅Δtに対して安定であり，特に平衡解を求める目的に適している．

陽的FTCSの式(21)の右辺を完全陰的FTCSの式(24)の右辺との相加平均で置き換えると，Crank-Nicholson法のスキーム

$$\begin{aligned}\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t}&=D\{(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)\\&\quad+(u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})\}/2\Delta x^2\end{aligned} \tag{25}$$

となる．これは時間・空間ともに2次の精度を持ち過渡現象の解析にも利用可能である．この方程式から得られる連立方程式の左辺は

$$\begin{bmatrix} 2\frac{\gamma+1}{\gamma} & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2\frac{\gamma+1}{\gamma} & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & 2\frac{\gamma+1}{\gamma} & -1 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots & \ddots \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{26}$$

のような形の3重対角型であり，LU分解法やGauss消去法といった直接解法を用いて未知数の数N程度の演算回数で解くことができる．また，その解を出発値として数回の反復計算を行えばその精度を大幅に改良することができる．

4.3　ADI法

Crank-Nicholson法は1次元拡散方程式においては実用的な方法であるが，2次元以上の多次元拡散方程式の場合それを単純に適用するとうまくない．それは，誘導される連立方程式が3重対角型にならず計算速度が大きく低下してしまうからである．

例えば2次元拡散方程式について，Crank-Nicholson法に対して，時間ステップを分割する「時間分割」(Time Splitting)を導入することでその問題を解決することができる．

第2節で式(3)の初期値問題に対する演算子分割法を紹介した．ADI法ではその式(5)の代わりに$\mathcal{L}_1\sim\mathcal{L}_m$の全ての演算子を含みそのうち1つの演算子について陰形式である離散スキームを考え，

時間ステップを$\Delta t/m$に分割して

$$u^{n+\frac{1}{m}} = M_1(u^n, \Delta t/m)$$
$$u^{n+\frac{2}{m}} = M_1(u^{n+\frac{1}{m}}, \Delta t/m)$$
$$\cdots \tag{27}$$
$$u^{n+1} = M_m(u^{n+\frac{m-1}{m}}, \Delta t/m)$$

によって計算することにする．

2次元拡散方程式の場合，ラプラシアン∇^2をx方向の演算子L_xとy方向の演算子L_yに演算子分割する．時間ステップを$\Delta t/2$に分割して2段階に分けてu^{n+1}を求めるが，1段目ではL_xを陰的にL_yを陽的に扱い，2段目の式ではそれを入れ替える．「Alternating-Direction Implicit Method (ADI法)」の名のとおりである．

空間ステップを$\Delta x = \Delta y = h$としたとき，ADI法の具体的な差分スキームは次式である．

$$u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = u_{i,j}^n + \frac{D\Delta t}{h^2}(\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_y^2 u_{i,j}^n) \tag{28}$$

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{D\Delta t}{h^2}(\delta_x^2 u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_y^2 u_{i,j}^{n+1}) \tag{29}$$

ここで，$\delta_x^2 u_{i,j}, \delta_y^2 u_{i,j}$　はそれぞれ2階の中心差分である．なお，計算速度向上に大きな効果があるため，「時間分割」の方法は，ADI法に限らず数値流体力学の本格的な計算ではしばしば利用されている．

5　まとめ

偏微分方程式の初期値問題について，高専の応用数学で学ぶFTCS法などの初等的解法を拡張するときの基本的な考え方を示し，実際に移流拡散方程式をモデルとして，演算子分割法によってアルゴリズムを単純化し，移流方程式に対するCIP法，拡散方程式に対するCrank-Nicholson法，ADI法といった実用的な差分スキームについて解説した．

差分法はこれからも新しい方法が開発され発達していくと考えられる．どのような問題意識から差分スキームの改良が進められ，新しい概念が導入されてきたかを知ることで，新しい解法を開発していくときの指針になると思われる．著者らは今後の応用数学教育において，本研究の結果をわかりやすい形で反映させたいと考えている．

参考文献

[1]T. Yabe(1985)：　The Cubic-Interpolated Pseudo-Particle(CIP) Method for Solving Hyperbolic-Type Equations, J. Comput. Phys. 61, 261-268.

[2]T. Yabe(1997)：Unified Solver CIP for Solid, Liquid and Gas, *Computational Fluid Dynamics Review* 1997, M. M. Hafez et al., Wiley.

[3]W. Press et al.：Numerical Recipies in C, 技術評論社, 1997.

[4]数値流体力学編集委員会編：移動境界流れ解析，東京大学出版会, 1996.

[5]保原充・大宮司久明編：数値流体力学-基礎と応用，東京大学出版会, 1992.

(平成13年11月30日受理)