

図 1:

1 数値安定性

1.1 偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (1)$$

という方程式を考える。これは、熱伝導の方程式である。これを、空間中心差分、時間前進差分で差分化すると、

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{t^{n+1} - t^n} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(x_{i+1} - x_{i-1})/2}, \quad (2)$$

ここで、図 1 のように下付きの添字は空間の節点番号を、上付きの添字は時間の節点番号をあらわすとする。この式は時間間隔および空間間隔を一定すなわち $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ 、 $\Delta x = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ とすると、

$$u_i^{n+1} = u_i^n + r (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \quad (3)$$

ここで、

$$r \equiv \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \quad (4)$$

とした。右辺は、 $t = t^n$ での温度のみから計算できるから、これは $t = t^n$ の温度分布 u_i が与えられたときに、 t^{n+1} のそれが決まる関係を与えている。これは以下のような繰り返しを用いて計算することができる (Fortran の例)。

```
do i=1,nx-1
  uw(i)=u(i)+r*(u(i+1)-2d0*u(i)+u(i-1))
end do
u(1:nx-1)=uw(1:nx-1)
u(0)=u(1); u(nx)=u(nx-1)
```

このように、これは $t = t^n$ の分布のみで t^{n+1} のそれが求められるようになっている解法を陽解法と呼ぶ。 t^{n+1} の物理量 u_i^{n+1} を決める式に、 u_{i-1}^{n+1} や u_{i+1}^{n+1} のような成分が含まれるような解法を陰解法と呼ぶ。

式 (2) で右辺を u^{n+1} を用いて

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \simeq \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}, \quad (5)$$

のように評価すると、式 (3) は、

$$u_{i+1}^{n+1} - (2 - 1/r)u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} = -(1/r)u_i^n, \quad (6)$$

のようになるが、 $u_0 = u_N = 0$ の場合について陽に書き下すと以下のようなになる。

$$\begin{pmatrix} -2 + 1/r & 1 & 0 & \cdots & \cdots \\ 1 & -2 + 1/r & 1 & 0 & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & 1 & -2 + 1/r & 1 \\ \ddots & \ddots & \ddots & 1 & -2 + 1/r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-1}^{n+1} \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{N-1}^n \\ u_N^n \end{pmatrix} \quad (7)$$

のような連立方程式を解く問題に帰着する。

問題 $u_0 = u_1$ 、 $u_N = u_{N-1}$ の時には、式 (7) はどのように書けるか。

1.2 陽解法

式 (3) に対して、領域の左半分で $u = 1$ 、右半分で $u = 0$ の温度分布を与えて (これを初期条件と呼ぶ)、その後の解を解いてみた例を図 2 に掲げた。このとき、式 (3) では決まらない u_0 および u_N の値は $x = x_0$ と $x = x_N$ では $\partial u / \partial x = 0$ すなわち、 $u_0 = u_1$ 、 $u_N = u_{N-1}$ とした (これを境界条件と呼び、このように、初期条件と境界条件の支配下にある問題を初期値境界値問題と呼ぶ)。

1.2.1 Von Neumann の安定性解析

r の値によって ($r > 1/2$) は、解が振動し全く正しくない解を得ることを示している。これは以下のようにして理解できる。

$$u_i^0 = \exp(\sqrt{-1}i\theta) \quad (8)$$

のような、波を初期条件として用意したとする。 $\theta = k\Delta x$ で波数を表す。 t^n から t^{n+1} 1 ステップ進む間に、

$$u_i^n = g^n \exp(\sqrt{-1}i\theta) \quad (9)$$

から、 g 倍すなわち、

$$u_i^{n+1} = g^{n+1} \exp(\sqrt{-1}i\theta) \quad (10)$$

になったとする。式 (9) を、式 (3) に代入すると、

$$g^{n+1} \exp(\sqrt{-1}i\theta) = g^n \exp(\sqrt{-1}i\theta) + r g^n \left[\exp(\sqrt{-1}(i+1)\theta) - 2 \exp(\sqrt{-1}i\theta) + \exp(\sqrt{-1}(i-1)\theta) \right], \quad (11)$$

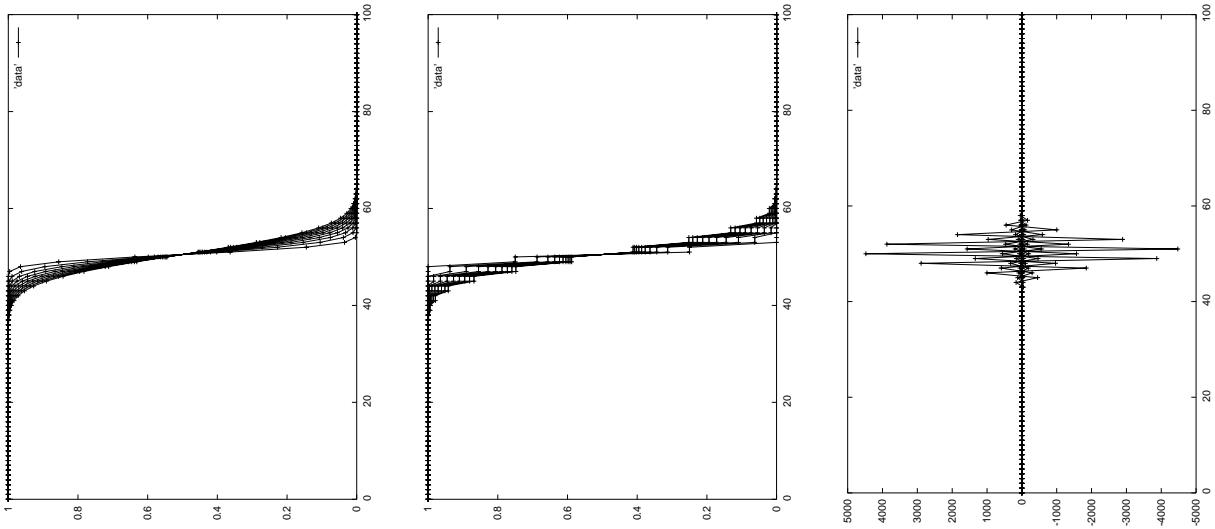


図 2: 式 (3) に対して、左半分で $u = 1$ 、右半分で $u = 0$ の初期条件もとで解いた時間発展解である。図は r の異なる値に対する $\Delta x = 1$ とすると $t = 10$ まで t で 1 おきの温度分布を表示している。 $r = 0.25$ (左)、 $r = 0.5$ (中)、 $r = 1$ (右) の場合を示す。 $r = 1$ にとると、振動が現れ、全く正しくない解が出現することがわかる。

すなわち、

$$g = 1 - 2r(1 - \cos \theta) = 1 - 4r \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (12)$$

となる。この波の振幅が増加しない $|g| < 1$ のためには

$$0 \leq r(1 - \cos \theta) = 2r \sin^2 \frac{\theta}{2} \leq 1 \quad (13)$$

すなわち、 $0 \leq r \leq 1/2$ でなければならない。このように、波に対する差分方程式の応答によって安定性を調べる方法を Von Neumann の安定性解析法と呼ぶ。

拡散方程式を式 (3) のように差分化した場合は g は実数になるが、一般的には、 g は複素数になる。その場合は、振幅のみならず位相の変化も生じる。

1.3 陰解法

同じようにして式 (6) にこれを適応すると、

$$(g^{n+1} - g^n) \exp(\sqrt{-1}i\theta) = rg^{n+1} \left[\exp(\sqrt{-1}(i+1)\theta) - 2 \exp(\sqrt{-1}i\theta) + \exp(\sqrt{-1}(i-1)\theta) \right] \quad (14)$$

となる。よって

$$\begin{aligned} g - 1 &= rg \left[\exp(\sqrt{-1}\theta) - 2 + \exp(-\sqrt{-1}\theta) \right] \\ &= rg(2 \cos \theta - 2) \end{aligned}$$

$$= -4rg \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (15)$$

したがって、

$$g = \frac{1}{1 + 4r \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (16)$$

となるが、どのような正の r に対しても $g < 1$ となるので、波の振幅は減少する。したがって、どのような r に対しても Von Neumann の安定性解析では安定である。

2 微分と差分の関係

第節では、微分と差分の関係を経験的にのべただけだったが、もう少し厳密に考えよう。

関数 $u(x, t)$ を (x_i, t^n) の回りでテイラー展開すると、

$$u(x, t) = u(x_i, t^n) + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_t (x - x_i) + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_x (t - t^n) + \mathcal{O}[(x - x_i)^2] + \mathcal{O}[(t - t^n)^2] + \mathcal{O}[(x - x_i)(t - t^n)], \quad (17)$$

である。式 (17) で、 $u_{i+1}^n - u_i^n = u(x_{i+1}, t^n) - u(x_i, t^n)$ をつくって計算すると、

$$u_{i+1}^n - u_i^n = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (18)$$

であるから、空間一階微分に対応する前進差分 $(u_{i+1}^n - u_i^n)/\Delta x$ は、

$$\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (19)$$

のように Δx に比例する誤差を持つ。つぎに、空間一階微分に対応する中心差分 $(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)/(2\Delta x)$ を調べてみよう。 $u_{i+1}^n - u_{i-1}^n$ を同じように計算すると、式 (17) で、右辺第 4 項まで (5、6 項は空間微分には現れないので) キャンセルして、残る Δx の最低次数の項は $\mathcal{O}(\Delta x^3)$ である。空間一階微分に対応する中心差分公式は

$$\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (20)$$

のように Δx^2 に比例する誤差を持つ。

問題 式 (17) の次の次数まで展開することによって、

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3), \quad (21)$$

であることを示せ。

3 双曲型方程式

一定の位相速度 c で伝搬する波の伝搬を表す方程式は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (22)$$

で書ける。流体力学の基礎方程式は波の位相速度が場所によって異なるが音波などの波が伝播することを表しているの、形としてはこれと良く似た方程式となる。流体力学のプロトタイプとしてこの線形の伝搬方程式を考えることにしよう。計算例としては、 $t = 0$ で $i = 1, \dots, 50$ に対して $u = 1$ 、 $i = 51, \dots, 100$ に対して $u = 0$ の初期条件を与えた例を用いる。 $\Delta x = c = 1$ とすると、 $t = 12.5$ および $t = 25$ の状態を比較することにしよう。比較すべき厳密解は

$$u(t = 12.5) = \begin{cases} 1 \dots i \leq 62.5 \\ 0 \dots i > 62.5 \end{cases} \quad \text{および} \quad u(t = 25) = \begin{cases} 1 \dots i \leq 75 \\ 0 \dots i > 75 \end{cases} \quad (23)$$

で与えられる。

時間前進差分 $\frac{\partial u}{\partial t}|_{t_n} = (u_i^{n+1} - u_i^n)/\Delta t$ と (式 (20) に見たように、中心差分の方が誤差が少ないので) 空間中心差分を用いると、式 (22) は

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c \frac{\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad (24)$$

となる。これを FTCS (Forward in Time and Central Difference in Space) スキームと呼ぶ。これはさぞ良い解を与えようと思いきや、図 3 のような激しい振動が現れ現実には使用できないスキームができあがる。

それでは、もう少し誤差の大きなスキームはどうだろうか。 $c > 0$ の場合に空間後退差分すなわち、 $\frac{\partial u}{\partial x} = (u_i^n - u_{i-1}^n)/\Delta x$ を用いると、

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n) \quad (25)$$

となるが、これを解いた結果を図 4 に掲げる。クーラン数 $\nu \equiv c\Delta t/\Delta x$ が小さく、多数のステップ数を用いて計算すると、飛びの部分が鈍ってしまうが、不自然な振動は生じない。すでに、お気づきのことと思うが、状態の変化 (状態の飛び) が i の小さい左から伝搬してくることに対応してそれが右側の状態を変化させるように、式 (25) は書かれており、 $c < 0$ の左向きに進む波に対して、空間後退差分をとるとうまく行かず図 3 のような不自然な振動を生じてしまう。

それでは、式 (24) と (25) の二つの計算法のこの結果の違いはどこから出るのだろうか。テイラー展開を用いてこのスキームにどの程度の誤差が含まれているかを見てみると、式 (25) は元の微分方程式 (22) に 2 つ余分な項を含んでおり

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -c \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \quad (26)$$

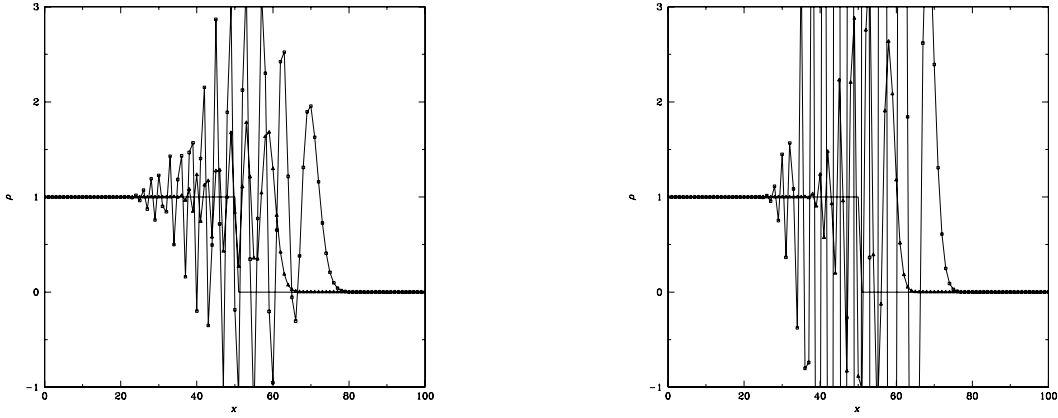


図 3: FTCS スキームで、初期値として、 $i = 1, \dots, 50$ に対して $u = 1$ 、 $i = 51, \dots, 100$ に対して $u = 0$ としクーラン数 $\nu \equiv c\Delta t/\Delta x = 0.25$ で 50 ステップ、100 ステップ計算した時の u をプロットした (左)。同じ初期条件で、クーラン数 $\nu = 0.5$ で 25 ステップ、50 ステップ計算したものが右図である。

と等しくなることがわかる。ここで、 $\frac{\partial u}{\partial t} = -c\frac{\partial u}{\partial x}$ に気をつけて変形すると、これは

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{c}{2}(\Delta x - c\Delta t)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (27)$$

となる。この式で

$$\Delta t < \Delta x/c \quad (28)$$

もしくは、クーラン数で書き直して

$$\nu < 1 \quad (29)$$

のようにとると、右辺は正の拡散係数を持つ拡散項であることがわかる。つまりこのようにして作った空間 1 次精度のスキームは正の拡散係数を持つ拡散項を差分化にともなう誤差として含むために余分の振動を生じなくなっていることがわかる。

FTCS(空間中心差分時間前進差分) スキームでは式 (27) の右辺 1 項に相当する項がキャンセルするので、右辺に主に残る誤差の項は第 2 項目すなわち負の拡散計数をもつ拡散項を差分化にともなう誤差として含むために元の方程式からは生じない不自然な振動が生じたことがわかる。

時間積分に関する誤差を減らすと、負の拡散に対応する項が消えるので、以下のような方法で時間積分精度を高めてみる。

$$u_i^{n+1/2} = u_i^n - \frac{\nu}{2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (30)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \nu \left(u_{i+1}^{n+1/2} - 2u_i^{n+1/2} + u_{i-1}^{n+1/2} \right) \quad (31)$$

これを調べてみたのが、図5である。FTCSスキーム(図3)に比べて、この時間精度拡張版(図5左)のほうが実用に近いものがある。

4 自己重力解法

重力加速度 g は、重力源の分布にしたがって、

$$g(\mathbf{r}) = - \int \frac{G(\mathbf{R} - \mathbf{r})dm}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} \quad (32)$$

の様に書かれる。ここで m は重力源の質量、 \mathbf{r} は重力加速度を計算する点へ、 \mathbf{R} は重力源へ向かう位置ベクトル、 G は万有引力定数である。ポテンシャル ϕ を用いて $g = -\nabla\phi$ と書けるが、
 ϕ

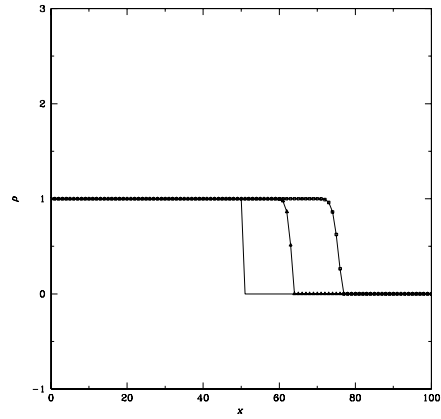
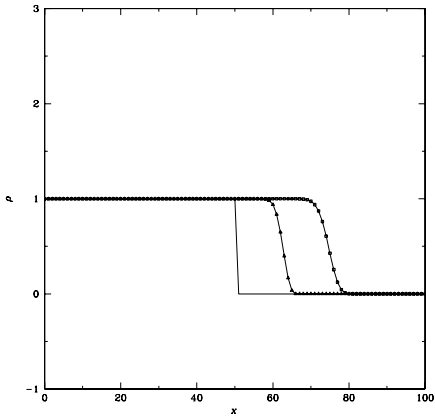
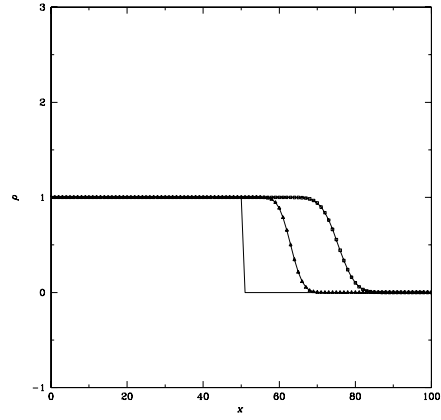
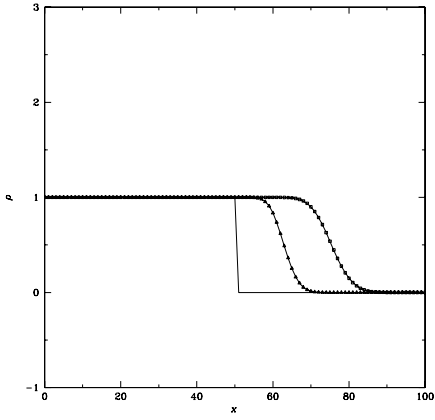


図 4: 図 3 とおなじ。ただし採用した計算スキームは空間 1 次精度後退差分をとったスキームで、クーラン数は左から $\nu = 0.25$ 、 $\nu = 0.5$ 、 $\nu = 0.8$ 、 $\nu = 0.95$ をとっている。

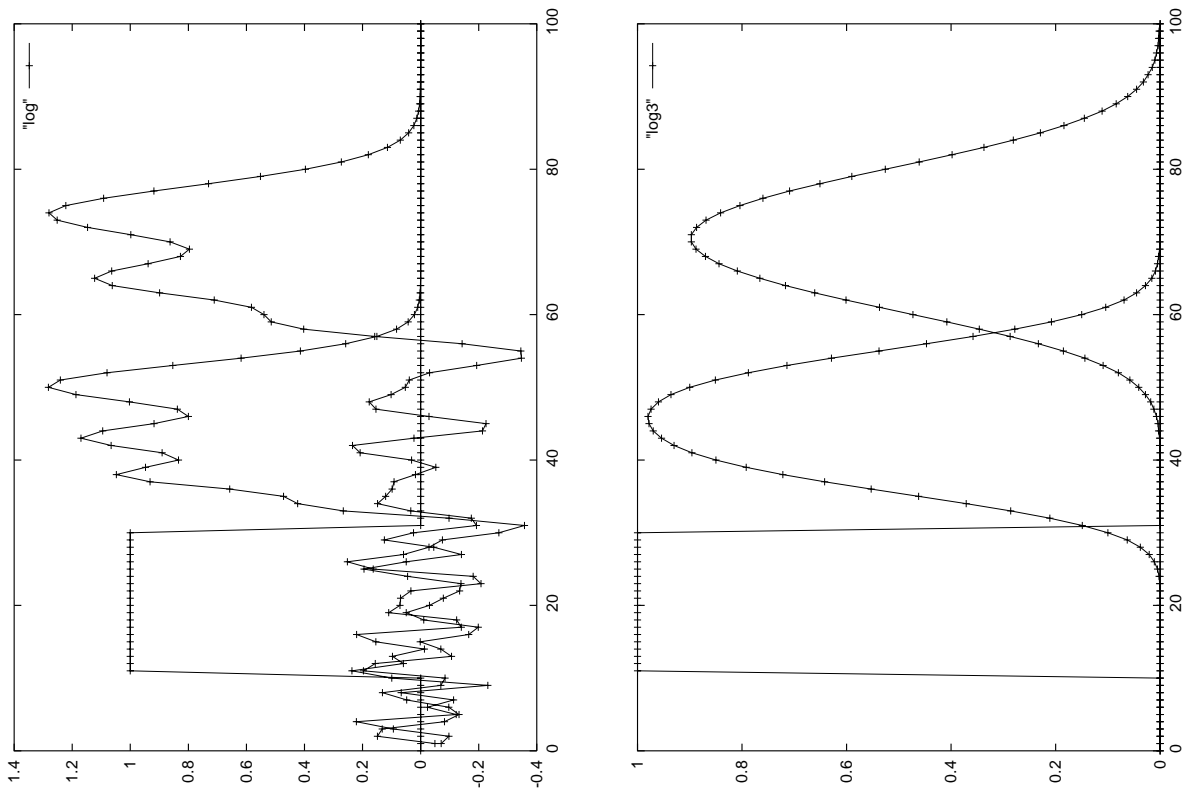


図 5: FTCS スキームを時間 2 次精度化したもの (左) と 1 次精度風上差分 (右) で、初期値として、 $i = 10, \dots, 30$ に対して $u = 1$ 、その他に対して $u = 0$ としクーラン数 $\nu \equiv c\Delta t/\Delta x = 0.25$ で 100 ステップ、200 ステップ計算した時の u をプロットした。