

# 2

## 常微分方程式の数値解法

### 2.1 常微分方程式

常微分方程式とは

$$\frac{dy(t)}{dt} + f(t, y(t)) = 0 \quad (2.1)$$

のように、1つの独立変数(この場合は $t$ )を持つ微分方程式のことである。これを解くことにより従属変数 $y(t)$ を決定する。上式は1次の常微分方程式の一般形であり、 $f$ が簡単な関数、例えば $f = \alpha y(t)$ であれば(5.1)は容易に積分することができて $y(t) = y_0 \exp(-\alpha t)$ などの解が解析的に求まる。ここで $\alpha$ は正の定数、 $y_0$ は $t = 0$ での $y$ の値である。次に、2次の常微分方程式の例として

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \alpha_1 \frac{dy}{dt} + \alpha_2 y = 0 \quad (2.2)$$

を考えよう。 $y$ に加えて $v \equiv dy/dt$ を従属変数にとることで、上式は連立する一組の1次常微分方程式

$$\frac{dv}{dt} + \alpha_1 v + \alpha_2 y = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{dy}{dt} - v = 0 \quad (2.4)$$

であらわすことが出来る。これから類推されるように、一般に $n$ 次の常微分方程式は $n$ 個の連立1次常微分方程式で表すことができ、ベクトル表記を用いると以下の様に見える。

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} + \mathbf{f}(\mathbf{y}, t) = 0 \quad (2.5)$$

ここで  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n) = (y, \frac{dy}{dt}, \dots, \frac{d^{n-1}y}{dt^{n-1}})$ ,  $\mathbf{f} = (f_1(\mathbf{y}, t), f_2(\mathbf{y}, t), \dots, f_n(\mathbf{y}, t))$  である。数値的に式 (5.5) を解く技術は (5.1) の場合とさほど変わらないので、以降では (5.1) の数値解法を考える。(5.1) を形式的に  $t_0 \rightarrow t$  まで積分すれば

$$y(t) = y(t_0) - \int_{t_0}^t dt' f(y(t'), t') \quad (2.6)$$

なる解を得るが、右辺第 2 項の積分を解析的に求められるのは  $f$  の形がごく限られた場合のみである。その他の場合には計算機を用いて右辺第 2 項を数値的に評価することにより求められる、つまり計算機シミュレーションの出番となる。それを実現するための数値解法を以下に解説する。

## 2.2 Euler 法

(5.6) 式の  $t_0$  と  $t$  の間を、微小な幅  $\delta t$  を持つ複数の区間に分割する。 $t_n$  と  $t_{n+1}$  に挟まれた  $n$  番目の区間について、 $\delta t$  が微小であることを用いて以下のように近似する。

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) - \delta t f(y(t_n), t_n) \quad (2.7)$$

簡略化のために以後は以下のように表記する。

$$y_{n+1} = y_n - \delta t f_n \quad (2.8)$$

(5.8) を繰り返し用いることで、初期値  $y_0 \equiv y(t_0)$  から目的の値  $y(t)$  を得る方法を Euler 法と呼ぶ。同様に表記した元々の微分方程式 (5.5) 式  $(dy/dt)|_n + f_n = 0$  と比較すると、Euler 法は前進差分近似

$$\frac{dy}{dt} \Big|_n = \frac{y_{n+1} - y_n}{\delta t} \quad (2.9)$$

と同じであることが分かる。元々の微分方程式 (5.5) を Taylor 展開すると

$$y_{n+1} = y_n + \delta t \frac{dy}{dt} \Big|_n + \frac{\delta t^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2} \Big|_n + (\delta t)^3 \quad (2.10)$$

である。一方、Euler 法では

$$y_{n+1} = y_n - \delta t f_n = y_n + \delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_n \quad (2.11)$$

であるので  $\delta t$  に関して 2 次以上の項に誤差が生じる。つまり Euler 法の精度は 1 次である。

Euler 法に限らず数値計算では微小区間の演算を多数回繰り返して目的の解を得るので、毎回発生する誤差の積算によって計算が破綻しないように気をつけなければならない。破綻が起こらない場合にその解法は安定であるという。意味のあるシミュレーションを行うためには、用いた数値解法に対する安定条件を満たす必要がある。Euler 法についてこれを検証してみよう。 $t = t_n$  において、 $y = y_n + \delta y_n$  のように誤差  $\delta y_n$  を含むとする。この誤差を含めて (5.8) 式を書き直すと

$$y_{n+1} + \delta y_{n+1} = y_n + \delta y_n - \delta t [f_n + \delta f_n] \simeq y_n + \delta y_n - \delta t \left[ f_n + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n \delta y_n \right] \quad (2.12)$$

となる。これに (5.8) を代入すると、以下のような次ステップへの誤差の伝搬を表す式を得る。

$$\delta y_{n+1} = \left[ 1 - \delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n \right] \delta y_n \quad (2.13)$$

したがって誤差  $\delta y_n$  が次ステップに  $\delta y_{n+1}$  として伝搬されたときに増幅されない条件は

$$\left[ 1 - \delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n \right]^2 \leq 1 \quad (2.14)$$

であり、これから Euler 法の安定条件として、 $(\partial f / \partial y)|_n > 0$  かつ  $\delta t \leq 2 / (\partial f / \partial y)|_n$  が得られる。なお  $y, f$  が多変数 (ベクトル) の場合、(5.14) は

$$\delta \mathbf{y}_{n+1} = \left[ \mathbf{1} - \delta t \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_n \right] \cdot \delta \mathbf{y}_n \quad (2.15)$$

となり、行列  $\left[ \mathbf{1} - \delta t \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_n \right]$  の全ての固有値の絶対値が 1 以下の時に安定性の条件が満たされる。

- 1) 指数減衰の式  $dy/dt + \alpha y = 0$  を解く場合、Euler 法の安定条件は以下の通りとなる。

$$\alpha > 0, \quad \delta t \leq 2/\alpha$$

1) 単振動の式  $dy/dt \pm i\omega y = 0$  を解く場合、 $[\dots]^2 = 1 + \omega^2 \delta t^2 > 1$  となり Euler 法では安定には解けない。

2) 非線形の式  $dy/dt + \alpha y^2 = 0$  を解く場合、Euler 法の安定条件は

$$\alpha y > 0, \quad \delta t \leq 1/\alpha y$$

となり、刻々と変化する  $y(t)$  の値に依存するので注意が必要である。

### 2.3 Leap-Frog (かえるとび) 法

Euler 法では前進差分を用いたが、次式のように中心差分

$$\left. \frac{dy}{dt} \right|_n = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2\delta t} \quad (2.16)$$

を用いて (5.1) 式を差分化することもできる。

$$y_{n+1} = y_{n-1} - 2\delta t f_n \quad (2.17)$$

これを Leap-Frog 法と呼ぶ。微分方程式 (5.1) を  $\pm \delta t$  で Taylor 展開し、その両者の差である

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_n + (\delta t)^3 + (\delta t)^6 = y_{n-1} - 2\delta t f_n + (\delta t)^3 + (\delta t)^6 \quad (2.18)$$

と (5.17) を比較すると、 $\delta t$  に関して 3 次以上の項に誤差が生じている。つまり Leap-Frog 法は 2 次の精度を有することが分かる。誤差  $\delta y_n$  を含めて式 (5.17) を書き直せば

$$\delta y_{n+1} = \delta y_{n-1} - 2\delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n \delta y_n \quad (2.19)$$

を得る。ここで、誤差伝搬係数  $g$  を用いて  $\delta y_n = g \delta y_{n-1}$ 、 $\delta y_{n+1} = g^2 \delta y_{n-1}$  と表せば、安定条件は

$$g_{\pm} = \delta t \frac{\partial f}{\partial y} \pm \sqrt{\left( \delta t \frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + 1}, \quad g_+, g_- \leq 1 \quad (2.20)$$

となる。

- 1) 指数減衰の式  $dy/dt + \alpha y = 0$  を解く場合、 $g_{\pm} = \alpha \delta t \pm \sqrt{(\alpha \delta t)^2 + 1}$  となる。これより  $g_+ \times g_- = -1$  となり、 $|g_+| \geq 1$  または  $|g_-| \geq 1$  とならざるを得ない。つまり Leap-Frog 法では安定に解くことが出来ない。
- 2) 単振動の式  $dy/dt \pm i\omega y = 0$  を解く場合、i)  $1 - \omega^2 \delta t^2 \geq 0$  であれば  $g_{\pm} = i\omega \delta t \pm \sqrt{1 - \omega^2 \delta t^2}$ 、これより  $|g_+|^2 = |g_-|^2 = 1$  となりかろうじて安定性を満たす。ii)  $1 - \omega^2 \delta t^2 < 0$  であれば  $g_{\pm} = i(\omega \delta t \pm \sqrt{\omega^2 \delta t^2 - 1})$ 、これより  $g_+ \times g_- = -1$  となり不安定。つまり Leap-Frog 法で満たすべき安定条件は  $1 - \omega^2 \delta t^2 \geq 0$  である。

## 2.4 Runge-Kutta 法

精度と安定性のバランスに優れ、数値解析で非常によく使われる方法の1つに以下の Runge-Kutta 法 (2次) がある。

$$y_{n+\frac{1}{2}} = y_n - \frac{1}{2} \delta t f(y_n, t_n) \quad (2.21)$$

$$y_{n+1} = y_n - \delta t f(y_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.22)$$

(5.21) では、まず予備的に Euler 法で  $t_n \rightarrow t_{n+\frac{1}{2}}$  の中間地点  $t_{n+\frac{1}{2}}$  へ歩を進める。(5.20) が主たるステップであり、ここでは中間地点  $t_{n+\frac{1}{2}}$  で評価した  $f(y_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})$  を用いることで、Leap-Frog 法で  $t_n \rightarrow t_{n+1}$  に進めている。主たるステップが Leap-Frog 法なので、Runge-Kutta 法 (2次) もやはり2次の精度を有する。

前節同様に誤差  $\delta y_n$  を含めて (5.22) を書き直せば

$$\delta y_{n+1} = \left[ 1 - \delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n + \frac{1}{2} \left( \delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n \right)^2 \right] \delta y_n \quad (2.23)$$

となるので、Runge-Kutta 法 (2次) の安定条件は以下の通りである。

$$\left[ 1 - \delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n + \frac{1}{2} \left( \delta t \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_n \right)^2 \right]^2 \leq 1 \quad (2.24)$$

- 1) 指数減衰の式  $dy/dt + \alpha y = 0$  を解く場合、Runge-Kutta 法 (2次) の安定条件は以下の通りとなる。

$$\alpha > 0, \quad \delta t \leq 2/\alpha$$

1) 単振動の式  $dy/dt \pm i\omega y = 0$  を解く場合、 $[\dots]^2 = 1 + \omega^4 \delta t^4 / 4 > 1$  となり Runge-Kutta 法 (2 次) では安定には解けないように見える。しかし、 $\omega^2 \delta t^2 \gg \omega^4 \delta t^4 \approx 0$  でなので、Euler 法よりはましである。

現実の問題では、計算ステップを更に増やして精度を向上させた Runge-Kutta 法 (4 次) がよく使われる。その差分式は以下の通りであり、Taylor 展開との比較から 4 次の精度を持つことがわかる。

$$y_{n+1} = y_n - \frac{1}{6} \delta t \left[ f_n + 2f'_{n+\frac{1}{2}} + 2f''_{n+\frac{1}{2}} + f'''_{n+1} \right] \quad (2.25)$$

$$f'_{n+\frac{1}{2}} = f \left[ y_n - \frac{\delta t}{2} f_n, t_{n+\frac{1}{2}} \right] \quad (2.26)$$

$$f''_{n+\frac{1}{2}} = f \left[ y_n - \frac{\delta t}{2} f'_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}} \right] \quad (2.27)$$

$$f'''_{n+1} = f \left[ y_n - \delta t f''_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1} \right] \quad (2.28)$$

## 2.5 Predictor-Corrector 法

Runge-Kutta 法同様、精度と安定性のバランスに優れ、数値解析で非常によく使われる方法の 1 つに Predictor-Corrector 法がある。主たる差分式は

$$y_{n+1} = y_n - \frac{1}{2} \delta t [f(y_{n+1}, t_{n+1}) + f(y_n, t_n)] \quad (2.29)$$

であるが、右辺に求めるべき変数  $y_{n+1}$  が含まれるのでこのままでは解けない。このため  $y_{n+1}$  をまずオイラー法

$$y'_{n+1} = y_n - \delta t f(y_n, t_n) \quad (2.30)$$

で予測 (Predict) し、(2.29) に  $f(y'_{n+1}, t_{n+1})$  を用いた次式で補正 (Correct) する。

$$y_{n+1} = y_n - \frac{1}{2} \delta t [f(y'_{n+1}, t_{n+1}) + f(y_n, t_n)] \quad (2.31)$$

導出は省略するが、Runge-Kutta 法 (2 次) と同等の精度と安定性を有する。

## 2.6 Symplectic 法

これまでに紹介した数値解法では、程度の差こそあれ  $t$  の増大とともに数値的に得た解と真の解との間に乖離が起こる。この問題は、全エネルギーの保存が要請される Newton 力学系など、物理量の保存性が問題になる場合に特に注意が必要となる（安定性は誤差による数値的発散をおさえるものであり、真の解との乖離が小さく留まることを保証するものではない）。このような場合に有効な数値解析法が Symplectic 法である。

わかりやすい例として、以下のハミルトニアン  $H$  で表される 1 次元調和振動子（運動量  $p(t)$ 、変位  $q(t)$ ）について保存性の問題を考える。

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \quad (2.32)$$

Hamilton の運動方程式により、この調和振動子の運動は以下の常微分方程式に従う。

$$\frac{dq(t)}{dt} = p(t), \quad \frac{dp(t)}{dt} = -q(t) \quad (2.33)$$

この式は解析的に解くことが出来て、その解は

$$\begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(0) \\ p(0) \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

となる。これは面積を保存する写像、つまり  $[q(0), p(0)] \rightarrow [q(t), p(t)]$  の Jacobi の行列を  $\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{bmatrix}$  とすると  $\det \mathbf{M} = \cos^2 t + \sin^2 t = 1$  である。この面積保存性の高次元への拡張

$$\sum dp_i \wedge dq_i = \sum dp_i \wedge dq_i \quad (2.35)$$

を Symplectic 保存性と呼ぶ。力学ではこれを正準変換と呼ぶが、当然 Hamilton の運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (2.36)$$

も正準変換であるので、その解は Symplectic 性を持たなければならない。

この 1 次元調和振動子をまずは Euler 法で数値的に解いてみよう。差分方程式は以下ようになる。

$$\begin{bmatrix} q(t + \delta t) \\ p(t + \delta t) \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \delta t \\ -\delta t & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

この場合  $\det \mathbf{M} = 1 + \delta t^2$  となり、Symplectic 性は  $\delta t$  の 1 次までしか保証されない。このため、

$$H(t + \delta t) = \frac{1}{2}(q(t + \delta t)^2 + p(t + \delta t)^2) = (1 + \delta t^2)H(t) \quad (2.38)$$

のように、本来保存すべき系の全エネルギー  $H(t)$  が単調増加してしまう。

一方、4 次の Runge-Kutta 法では差分方程式は以下ようになる。

$$\begin{bmatrix} q(t + \delta t) \\ p(t + \delta t) \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\delta t^2}{2} + \frac{\delta t^4}{24} & \delta t - \frac{1}{6}\delta t^3 \\ -\delta t + \frac{1}{6}\delta t^3 & 1 - \frac{\delta t^2}{2} + \frac{\delta t^4}{24} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

この場合は

$$H(t + \delta t) = \left(1 - \frac{\delta t^6}{72} + \frac{\delta t^8}{576}\right) H(t) \quad (2.40)$$

となり Euler 法に比べると著しく改善されるものの、 $H(t)$  の微少な単調減少を引き起こしてしまう。

このような挙動を改善するには、はじめから Symplectic 性を満たした数値解析法を用いればよい。例えば、Euler 法を改良して

$$\begin{bmatrix} q(t + \delta t) \\ p(t + \delta t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \delta t \\ -\delta t & 1 - \delta t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

のような差分方程式を考えれば  $\det \mathbf{M} = 1$  となり、Symplectic 性が満たされる。Symplectic 性が正準変換と同じであることから、(2.41) の差分方程式は元の調和振動子のハミルトニアン  $H$  に近い、別のハミルトニアン  $H'$  に対する厳密な解法になっていることが予測できる。つまり、本来の  $H$  は保存しないものの、影のハミルトニアンである  $H'$  が高精度で保存することが期待できる。実際、(2.41) から



$$H' = H + \frac{1}{2}\delta t p q \quad (2.42)$$

の厳密な保存を導くことができる。 $H'$  と  $H$  の差が  $\delta t$  の 1 次のオーダーであることから、式 (2.41) は 1 次の Symplectic 法と呼ばれる。

補遺 1 )

任意のハミルトニアン  $H$  について 1 次の Symplectic 法を導いてみよう。ただし、ここでは

$$H(q, p) = T(p) + V(q) \quad (2.43)$$

と変数分離できる場合のみを考える。 $q$  と  $p$  をまとめて  $\Gamma$  と書くと、Hamilton 方程式はリュウヴィル演算子  $iL_H$  を用いて

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \{\Gamma, H\} = iL_H \Gamma \quad (2.44)$$

と書ける。ここで

$$\{A, B\} \equiv \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \quad (2.45)$$

は Poisson 括弧である。微分方程式 (2.44) を形式的に解いて

$$\Gamma(t + \delta t) = \exp(i\delta t L_H) \Gamma(t) \quad (2.46)$$

を得る。Liouville 演算子は線形なので  $iL_H = iL_T + iL_V$  であり、微小量  $\delta t$  について 1 次の精度で以下のように分解することができる。

$$\exp(i\delta t L_H) = \exp[i\delta t(L_T + L_V)] \simeq \exp(i\delta t L_T) \exp(i\delta t L_V) \quad (2.47)$$

この部分の近似を良くすればより次数の高い Symplectic 法を系統的に導くことができる。例えば 2 次精度のものは以下の通り。

$$\exp(i\delta t L_H) \simeq \exp(i\delta t L_T/2) \exp(i\delta t L_V) \exp(i\delta t L_T/2) \quad (2.48)$$

1 次の精度の (2.46) 式を採用して  $\delta t$  の 2 次以上の項を全て無視すれば

$$\Gamma(t + \delta t) \simeq \exp(i\delta t L_T) \exp(i\delta t L_V) \Gamma(t) \quad (2.49)$$

となり、これが 1 次の Symplectic 法に他ならない。ここで登場する 2 つの演

算子  $\exp(i\delta t L_T)$  と  $\exp(i\delta t L_V)$  はそれぞれハミルトニアンが  $T(p)$  と  $V(q)$  のみで表される系に対する  $\delta t$  だけの時間発展を意味する。各々が Symplectic 性を満たすことは明らかであるので、その合成写像も Symplectic 性を満たす。またそれぞれの演算子による写像は位相空間での直線運動になり、その厳密な解は簡単に求まる。 $\exp(i\delta t L_T)$  と  $\exp(i\delta t L_V)$  を順番通りに  $\Gamma(t)$  に作用させると、最終的な合成変換は以下のように書き下すことが出来る。

$$q(t + \delta t) = q(t) + \delta t \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{p(t)}, \quad p(t + \delta t) = p(t) - \delta t \left. \frac{\partial V}{\partial q} \right|_{q(t+\delta t)} \quad (2.50)$$

ハミルトニアンの変数分離ができる場合にはこのままの差分方程式が使えるが、分離できない場合には第 1 式の右辺に  $(\partial T / \partial p)_{p(t), q(t+\delta t)}$  のように  $t + \delta t$  の項が現れるので陰的解法が必要になる。

補遺 2 )

任意のハミルトニアンに対して作った 1 次の Symplectic 法 (2.49) に対する影のハミルトニアンを導いてみよう。影のハミルトニアンを  $H'$  と書けば、明らかに

$$\exp(\delta t L_T) \exp(\delta t L_V) = \exp(\delta t L_{H'}) \quad (2.51)$$

を満たすはずであり、これから

$$H' = T + V + \frac{\delta t}{2} \{V, T\} + \frac{\delta t^2}{12} (\{\{V, T\}, T\} + \{\{T, V\}, V\}) + O(\delta t^3) \quad (2.52)$$

が求める影のハミルトニアンである。したがって調和振動子  $H = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$  の場合は

$$H' = H + \frac{\delta t}{2} pq + O(\delta t^2) \quad (2.53)$$

であり、非線形振動子  $H = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{4}p^4$  の場合は

$$H' = H + \frac{\delta t}{2} pq^3 + O(\delta t^2) \quad (2.54)$$

となることがわかる。(2.52) を証明するには Baker-Campbell-Hausdorff の公式

$$\exp X \exp Y = \exp Z \quad (2.55)$$

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X[X, Y]] + [Y[X, Y]]) + \dots \quad (2.56)$$

$$[X, Y] \equiv XY - YX \quad (2.57)$$

を用いる。

# 3

## 偏微分方程式の数値解法

偏微分方程式は、 $\phi(x, y, z)$  のように従属変数  $\phi$  が 2 つ以上の独立変数  $x, y, z$  に依存する場合に現れる。これらの中で特に物理で重要となるものは、次の形の 2 次元 2 階偏微分方程式に帰着する。

$$a \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + 2b \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \phi}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial y} + f \phi + g = 0 \quad (3.1)$$

各項の係数  $a, b, c$  の関係によって以下のように 3 つの型に分類でき、それぞれ異なる計算手法が必要となる。

- $b^2 < ac$  の場合を楕円型と呼び、Laplace 方程式などがこれに相当する。
- $b^2 > ac$  の場合を双曲型と呼び、波動方程式などがこれに相当する。
- $b^2 = ac$  の場合を放物型と呼び、拡散方程式などがこれに相当する。

### 3.1 楕円型の偏微分方程式

楕円型偏微分方程式の代表的例は、Laplace 方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (3.2)$$

や Poisson 方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = f(x, y) \quad (3.3)$$

である。Laplace 方程式は、一様な物質中の熱や電気の定常流れや非圧縮流体の無渦流れなどを求める際に現れ、Poisson 方程式は、電荷密度分布と電位の関係を表す式などとして現れる。通常これらの楕円型微分方程式は、時間に依

存しない平衡状態や定常状態を記述する方程式であり、閉空間の端で境界条件を設定することで解くことが出来る。楕円型偏微分方程式は線形の多元連立方程式として定式化することができるので、その具体的な解法については4章行列演算の中で扱うこととする。

### 3.2 双曲型の偏微分方程式

双曲型の偏微分方程式の代表的例として1次元の波動方程式を取り上げる。場所  $x$ 、時刻  $t$  における波の変位を  $y(x, t)$  とすると、その運動は以下の偏微分方程式で表すことが出来る。正の定数  $c$  は音速を表す。

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0 \quad (3.4)$$

上式は  $(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x})(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x})y = 0$  と書き直せるので、以下のように1組の連立1次偏微分方程式に分割出来る。

$$\frac{\partial z}{\partial t} + c\frac{\partial z}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} + c\frac{\partial y}{\partial x} = z \quad (3.6)$$

式(3.5)は  $y$  に依らず独立に解けるが、式(3.6)を解くには(3.5)を解いて求めた  $z$  を用いる。どちらの式も技術的には同じ数値計算法で解くことが出来るので、(3.4)を数値的に解くことは、(3.5)を初期条件  $z_0(x) \equiv z(x, t=0)$  について与えられた境界条件のもとで解く問題に帰着する。

#### 3.2.1 単純な方法

式(3.4)の第一項( $t$ に関する時間微分)を前進差分(つまりEuler法)、第二項( $x$ に関する空間微分)を中心差分を用いて差分化すると

$$z_j^{n+1} = z_j^n - \frac{c\delta t}{2\delta x}(z_{j+1}^n - z_{j-1}^n) \quad (3.7)$$

を得る。ここで  $z_j^n \equiv z(j\delta x, n\delta t)$ 、つまり上付添字は時間ステップ、下付添字は離散化された場所を表す。

差分方程式 (5.7) の精度は、テイラー展開

$$z_j^{n+1} - z_j^n = \delta t \frac{\partial z}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \delta t^2 \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} \Big|_j^n + \dots \quad (3.8)$$

$$z_{j+1}^n - z_{j-1}^n = 2\delta x \frac{\partial z}{\partial x} \Big|_j^n + \frac{1}{3} \delta x^3 \frac{\partial^3 z}{\partial x^3} \Big|_j^n + \dots \quad (3.9)$$

を (5.7) へ代入した結果

$$\delta t \frac{\partial z}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{1}{2} \delta t^2 \frac{\partial^2 z}{\partial t^2} \Big|_j^n + \dots = -\frac{c\delta t}{2\delta x} \left( 2\delta x \frac{\partial z}{\partial x} \Big|_j^n + \frac{1}{3} \delta x^3 \frac{\partial^3 z}{\partial x^3} \Big|_j^n + \dots \right) \quad (3.10)$$

と、(5.5) に添字を付けた表式

$$\frac{\partial z}{\partial t} \Big|_j^n = -c \frac{\partial z}{\partial x} \Big|_j^n \quad (3.11)$$

との比較によって調べることが出来る。両者は  $\delta t$  について 2 次以上、 $\delta x$  について 3 次以上が異なっており、単純な方法 (5.7) は、時間  $t$  について 1 次、空間  $x$  について 2 次の精度を持つことがわかる。

次に差分方程式 (5.7) の安定性を、以下のような平面波の解を与えて考える。

$$z_j^n = v^n e^{ikx_j} \quad (3.12)$$

(3.12) を (5.7) に代入すると

$$v^{n+1} e^{ikx_j} = v^n e^{ikx_j} - \frac{c\delta t}{2\delta x} v^n (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}}) \quad (3.13)$$

$$v^{n+1} = \left[ 1 - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right] v^n \quad (3.14)$$

を得る。ここで、平面波の振幅に相当する変数  $v$  に誤差を導入して  $v^n \rightarrow v^n + \delta v^n$  とすると、

$$\delta v^{n+1} = \left[ 1 - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right] \delta v^n \quad (3.15)$$

となる。 $n$  ステップにおける誤差が  $n+1$  ステップで拡大しないための条件は

$$\left[ 1 - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right]^2 = 1 + \left( \frac{c\delta t}{\delta x} \right)^2 \sin^2(k\delta x) \leq 1$$

となるが、これは満たされることはない。つまり単純な方法では波動方程式を安定に解くことは出来ないことがわかる。

### 3.2.2 Lax 法

Lax 法では以下のように単純な方法 (5.7) に少し変更を加える。

$$z_j^{n+1} = \frac{1}{2}(z_{j+1}^n + z_{j-1}^n) - \frac{c\delta t}{2\delta x}(z_{j+1}^n - z_{j-1}^n) \quad (3.16)$$

単純な方法の場合と同様，平面波の解 (3.12) を代入し，誤差を考慮すると

$$\delta v^{n+1} = \left[ \cos(k\delta x) - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right] \delta v^n \quad (3.17)$$

を得る。 $n$  ステップにおける誤差が  $n+1$  ステップで拡大しないための条件は

$$\begin{aligned} \left[ \cos(k\delta x) - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right]^2 &= \cos^2(k\delta x) + \left( \frac{c\delta t}{\delta x} \right)^2 \sin^2(k\delta x) \\ &= 1 - \sin^2(k\delta t) \left( 1 - \left( \frac{c\delta t}{\delta x} \right)^2 \right) \leq 1 \end{aligned} \quad (3.18)$$

となる。つまり Lax 法で波動方程式を安定に解くための条件は，すべての波数  $k$  について  $\delta t \leq \delta x/c$  である。これは，音速  $c$  の波が  $\delta x$  進行するのに要する時間より  $\delta t$  を小さくしなければならないことを意味している。

本書では取り扱わないが，双曲型の偏微分方程式の数値解法として以下の方法が提案されている。

- Lelevier 法
- Lax-Wendroff 法
- Leap-Frog 法
- Quasi-Second Order 法

各方法の詳細は，参考文献 [Numerical Recipe] を参照されたい。

## 3.3 放物型の偏微分方程式

放物型の偏微分方程式の代表的例として拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} - K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (3.19)$$

を取り上げる。 $K$  は正の定数で拡散係数と呼ばれる。この式を与えられた境界条件のもと，初期条件  $u_0(x) \equiv u(x, t=0)$  について解くことを考える。

### 3.3.1 単純な方法

式 (5.19) の第一項 ( $t$  に関する時間微分) を前進差分 (Euler 法)、第二項 ( $x$  に関する空間微分) を中心差分を用いて差分化すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{K\delta t}{\delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (3.20)$$

を得る。ここに平面波  $u_j^n = v^n e^{ikx_j}$  を代入し、誤差を考慮すると

$$\delta v^{n+1} = \left[ 1 - \frac{4K\delta t}{\delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right) \right] \delta v^n \quad (3.21)$$

となる。したがって拡散方程式を単純な方法で安定に解くための条件は

$$\left[ 1 - \frac{4K\delta t}{\delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right) \right]^2 \leq 1 \quad (3.22)$$

である。波数  $k$  が  $0 < k \leq \pi/\delta x$  の範囲にあることを考慮すると、満たすべき条件は

$$\delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\delta x^2}{K} \quad (3.23)$$

となる。この条件を満足するように  $\delta t$  を小さく取れば問題ないように見えるが、 $\delta x^2$  は微量の 2 乗なので  $\delta t$  を極めて小さな値にする必要がある。この場合、(5.20) を繰り返して目的の時刻に達するためには膨大なステップを要し、計算効率が悪くなる。

### 3.3.2 Dufort-Frankel 法

Dufort-Frankel 法では以下のように単純な方法 (5.20) に変更を加える。

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + \frac{2K\delta t}{\delta x^2}(u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n) \quad (3.24)$$

上式は左右両辺に  $n+1$  ステップの変数があるので、それらを左辺に集めて陽解法の形に整理すると

$$u_j^{n+1} = \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right) u_j^{n-1} + \left(\frac{\alpha}{1+\alpha}\right) (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n), \quad \alpha \equiv 2K \frac{\delta t}{\delta x^2} \quad (3.25)$$

計算は省略するが、前節同様の方法で安定性を調べると、Dufort-Frankel 法では常に安定性の条件が満たされることがわかる。



## 3.3.3 Crank–Nicholson 法

単純な方法では,  $x$  に関する偏微分を中心差分

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{\delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \equiv \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j^n \quad (3.26)$$

を用いて差分化した。Crank–Nicholson 法では, これを以下のように差分化する。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left( \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j^n + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j^{n+1} \right) = \frac{1}{2\delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n + u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \quad (3.27)$$

単純な方法同様,  $t$  に関する偏微分に前進差分を用いて拡散方程式 (5.19) を差分化すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{K\delta t}{2\delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n + u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \quad (3.28)$$

となる。これをテイラー展開と比較すると, Crank–Nicholson 法は  $\delta t$  と  $\delta x$  両方について 2 次の精度を有することがわかる。 $n+1$  ステップの変数を左辺,  $n$  ステップの変数を右辺にまとめて整理すると

$$-u_{j+1}^{n+1} + \left(2 + \frac{2}{\alpha}\right) u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1} = u_{j+1}^n - \left(2 - \frac{2}{\alpha}\right) u_j^n + u_{j-1}^n \equiv d_j^n \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad (3.29)$$

$$\alpha \equiv K \frac{\delta t}{\delta x^2} \quad (3.30)$$

を得る。ここに平面波  $u_j^n = v^n e^{ikx_j}$  を代入すると

$$-\alpha v^{n+1} e^{ikx_{j+1}} + (2+2\alpha)v^{n+1} e^{ikx_j} - \alpha v^{n+1} e^{ikx_{j-1}} = \alpha v^n e^{ikx_{j+1}} + (2-2\alpha)v^n e^{ikx_j} + \alpha v^n e^{ikx_{j-1}} \quad (3.31)$$

$$v^{n+1} (1 + \alpha - \alpha \cos(k\delta x)) = v^n (1 - \alpha + \alpha \cos(k\delta x)) \quad (3.32)$$

を得る。誤差を考慮すると

$$\delta v^{n+1} = \left[ \frac{1 - \alpha + \alpha \cos(k\delta x)}{1 + \alpha - \alpha \cos(k\delta x)} \right] \delta v^n = \left[ \frac{1 - 2\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}{1 + 2\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)} \right] \delta v^n \quad (3.33)$$

となり, すべての  $k$  について自動的に安定性の条件  $\left[ \frac{1-2\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}{1+2\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)} \right]^2 \leq 1$  が満たされるこという優れた性質を持っていることがわかる。

(5.29) は  $N$  元連立方程式であり, 左辺に  $u_{j+1}^{n+1}, u_j^{n+1}, u_{j-1}^{n+1}$  があることからわかるように  $u_j^{n+1}$  は  $j$  番目の式だけでなくその前後  $j+1, j-1$  番目の式にも登場する。このような場合各式を独立に扱うことはできず, Crank–Nicholsen 法では陰的解法が要請される。両端  $j=1, N$  の式は境界条件によって異なるが, 簡単のため  $n$  が変わっても変化しないとする固定境界条件  $u_1^n = u_1^0, u_N^n = u_N^0$  の場合を考える。

1) 直説法 (Gauss 消去法)

(5.29) の  $N$  元連立方程式を行列を使って書き直すと以下ようになる。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 + \frac{2}{\alpha} & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 + \frac{2}{\alpha} & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 2 + \frac{2}{\alpha} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 + \frac{2}{\alpha} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-2}^{n+1} \\ u_{N-1}^{n+1} \\ u_N^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1^n \\ d_2^n \\ d_3^n \\ \vdots \\ d_{N-2}^n \\ d_{N-1}^n \\ d_N^n \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

説明を簡単にするため, 上式を以下のように表記し, 既知の変数  $a, b, c, d$  から未知の変数  $u$  を求める問題を考える。

$$\begin{bmatrix} b_1 & -c_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -a_2 & b_2 & -c_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -a_3 & b_3 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & b_{N-2} & -c_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -a_{N-1} & b_{N-1} & -c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -a_N & b_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{N-2} \\ d_{N-1} \\ d_N \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

Gauss 消去法では, 行列で書いた上の連立方程式について以下の操作を行う。

- 1 行目の (1) 式と 2 行目の (2) 式から  $u_1$  を消去し, それを (2)' 式とする。

$$b_1 u_1 - c_1 u_2 = d_1 \quad (1)$$

$$-a_2 u_1 + b_2 u_2 - c_2 u_3 = d_2 \quad (2)$$

↓

$$\alpha_2 u_2 - c_2 u_3 = s_2 \quad (2)'$$

$$\alpha_1 = b_1, \quad s_1 = d_1, \quad \alpha_2 = b_2 - \frac{a_2 c_1}{\alpha_1}, \quad s_2 = d_2 + \frac{a_2 s_1}{\alpha_1}$$

- 以後同様に,  $(i-1)'$  式と  $i$  行目の (i) 式から  $u_{i-1}$  を消去し, それを (i)' 式とする。 ( $i = 3, \dots, N-1$ )

$$\alpha_{i-1} u_{i-1} - c_{i-1} u_i = s_{i-1} \quad (i-1)'$$

$$-\alpha_i u_{i-1} + b_i u_i - c_i u_{i+1} = d_i \quad (i)$$

↓

$$\alpha_i u_i - c_i u_{i+1} = s_i \quad (i)'$$

$$\alpha_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\alpha_{i-1}}, \quad s_i = d_i + \frac{a_i s_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$$

- 最後に  $(N-1)'$  式と  $N$  行目の (N) 式から  $u_{N-1}$  を消去し, それを (N)' 式とする。

$$\alpha_{N-1} u_{N-1} - c_{N-1} u_N = s_{N-1} \quad (N-1)'$$

$$-\alpha_N u_{N-1} + b_N u_N = d_N \quad (N)$$

↓

$$\alpha_N u_N = s_N \quad (N)'$$

$$\alpha_N = b_N - \frac{a_N c_{N-1}}{\alpha_{N-1}}, \quad s_N = d_N + \frac{\alpha_N s_{N-1}}{\alpha_{N-1}}$$

ここでまず  $(N)'$  式から  $u_N = s_N/\alpha_N$  を求め、 $(i)'$  式を変形した  $u_i = (s_i + c_i u_{i+1})/\alpha_i$  を  $i = N-1, N-2, \dots, 1$  の順番で用いることで、すべての  $u_i$  を求めることが出来る。

#### 1) 反復法

Crank–Nicholson 法による拡散方程式の差分形 (5.28) を以下のように整理する。

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + \frac{K\delta t}{2\delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n + u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \\ &= \frac{1}{2}\alpha(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + b^n \end{aligned} \quad (3.36)$$

$b^n = u_j^n + \frac{1}{2}\alpha(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$  は時刻  $n$  ステップの変数のみを含むので既知である。反復法では、とりあえず左辺の  $u_j^{n+1}$  と右辺の  $u_{j+1}^{n+1}, u_j^{n+1}, u_{j-1}^{n+1}$  を独立なものと考え、 $u_j^{n+1}$  の試行的な値  $(u_j^{n+1})^l$  を右辺に代入し、左辺の  $(u_j^{n+1})^{l+1}$  を求める。その結果を右辺に代入した  $(u_j^{n+1})^l$  と比べ、両者が等しいとみなせるまで、この操作を  $l = 1, 2, \dots$  とくり返すことで最終的に正しい  $u_j^{n+1}$  を決定する。これを実現する具体的な方法として、以下の方法がある。

- 最も簡単な方法では、以下のように (3.36) をそのまま反復する。この場合、 $l = 1, 2, \dots$  と繰り返して解が正しい値に収束するのは  $0 < \alpha \leq 1/2$  の条件を満たす場合に限られる。

$$(u_j^{n+1})^{l+1} = \frac{1}{2}\alpha[(u_{j+1}^{n+1})^l - 2(u_j^{n+1})^l + (u_{j-1}^{n+1})^l] + d_j^n \quad (3.37)$$

- Jacobi 反復法では、以下のように右辺の  $(u_j^{n+1})^l$  を  $(u_j^{n+1})^{l+1}$  に置き換えた上で反復を試みる。この場合はすべての  $\alpha$  について解の収束が保証されている。

$$(u_j^{n+1})^{l+1} = \frac{1}{2}\alpha[(u_{j+1}^{n+1})^l - 2(u_j^{n+1})^{l+1} + (u_{j-1}^{n+1})^l] + b^n \quad (3.38)$$

$$= \frac{\alpha}{2(1+\alpha)}[(u_{j+1}^{n+1})^l + (u_{j-1}^{n+1})^l] + \frac{b^n}{1+\alpha} \quad (3.39)$$

- 上記 Jacobi 反復法において、離散化した場所を表す添字  $j$  については、小さな値から大きな値に順に計算する。この場合、 $(u_j^{n+1})^{l+1}$  を求める時点で  $(u_{j-1}^{n+1})^{l+1}$  は既知であるので、Jacobi 反復法を以下のように改良できる。

これを Gauss-Seidel 反復法と呼ぶ。この場合もすべての  $\alpha$  について解の収束が保証され、収束速度は Jacobi 法の 2 倍である。

$$(u_j^{n+1})^{l+1} = \frac{\alpha}{2(1+\alpha)} [(u_{j+1}^{n+1})^l + (u_{j-1}^{n+1})^{l+1}] + \frac{b^n}{1+\alpha} \quad (3.40)$$

# 4

## 流体のシミュレーション

### 4.1 流体の運動方程式

一定の密度  $\rho$ 、粘度  $\mu$  を持つ流体の運動は、以下の偏微分方程式で表わされる。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.2)$$

ここで  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 、 $p(\mathbf{x}, t)$  は、それぞれ座標  $\mathbf{x}$ 、時刻  $t$  における流体の流速ベクトルと圧力であり、(5.1) の偏微分方程式はナビエ・ストークス方程式と呼ばれる流体の運動方程式、(5.2) は流体の非圧縮性を表わす式である。問題の見通しをよくするため、上記連立偏微分方程式の無次元化を行う。流れの代表的な長さを  $L$ 、代表的な速度を  $U$  として、以下の様にチルダの付いた無次元変数を導入する。

$$\mathbf{x} = L\tilde{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{u} = U\tilde{\mathbf{u}}, \quad t = \frac{L}{U}\tilde{t}, \quad p = \rho U^2 \tilde{p}, \quad \nabla = \frac{1}{L} \tilde{\nabla} \quad (4.3)$$

これを (5.1)、(5.2) に代入し、煩雑さを避けるためにチルダを消去すれば

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (4.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.5)$$

を得る。ここで、 $Re = \rho UL/\mu$  はレイノルズ数と呼ばれる無次元パラメータであり、無次元化したナビエ・ストークス方程式 (5.4) に現れる唯一のパラメータである。

流速が音波の進行速度より十分に遅い場合には、流体の非圧縮性を表わす (5.5) 式をナビエ・ストークス方程式と共に用いることで、 $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$  と  $p$  の 4 変数で閉じた連立偏微分方程式となり、流体運動のシミュレーションが可能となる。しかし、(5.4) 式を解いて求めた  $\mathbf{u}$  が非圧縮条件 (5.5) 式を満たすためには、あらかじめそのように  $p$  を決定しておく必要があるため、高精度で効率のよいシミュレーションの実現には工夫が必要となる。

#### 4.2 MAC 法

MAC 法では、以下の手順で連立偏微分方程式 (5.4)、(5.5) のシミュレーションを実現する。まず、(5.4) 式の発散をとり、以下の式を得る。

$$\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot \{(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}\} = -\nabla^2 p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2(\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (4.6)$$

右辺第 2 項の導出には、 $\nabla \cdot (\nabla^2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \{\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{u}\} = \nabla^2(\nabla \cdot \mathbf{u})$  を用いればよい。さらに  $\nabla \cdot \mathbf{u} \equiv D$  と定義して、次式を得る。

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \nabla \cdot \{(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}\} = -\nabla^2 p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 D \quad (4.7)$$

ここで、 $\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{D^{n+1} - D^n}{\Delta t}$  を用いて (5.7) を差分化して次式を得る。

$$\frac{D^{n+1} - D^n}{\Delta t} + \nabla \cdot \{(\mathbf{u}^n \cdot \nabla)\mathbf{u}^n\} = -\nabla^2 p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 D^n \quad (4.8)$$

いま、求めるべき  $\mathbf{u}^{n+1}$  が非圧縮条件 (5.5) を満たすように  $D^{n+1} = 0$  とおくと

$$\nabla^2 p = -\nabla \cdot \{(\mathbf{u}^n \cdot \nabla)\mathbf{u}^n\} + \frac{D^n}{\Delta t} + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 D^n \quad (4.9)$$

となる。このポアソン方程式を解いて求めた  $p$  を  $p^*$  とする。なお、 $\Delta t \ll 1$  であるので右辺第 3 項は無視して構わない。ここで、 $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t}$  を用いて (5.4) 式を差分化し、次式を得る。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \left[ -(\mathbf{u}^n \cdot \nabla)\mathbf{u}^n - \nabla p^* + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{u}^n \right] \quad (4.10)$$

このようにして  $p^*$  を用いて求めた  $\mathbf{u}^{n+1}$  は、近似的に非圧縮条件 (5.5) 式を満たすことが保証される。

### 4.3 プロジェクション法

プロジェクション法では、以下の手順で連立偏微分方程式 (5.4)、(5.5) のシミュレーションを実現する。まず、 $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t}$  を用いて (5.4) 式を差分化し、次式を得る。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \left[ -(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n - \nabla p^n + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{u}^n \right] \quad (4.11)$$

このようにして単純に  $p^n$  を用いて求めた  $\mathbf{u}^{n+1}$  は、非圧縮条件 (5.5) 式を満たす保証がない。そこで、以下の様に微少な緩和係数  $\varepsilon$  を用いた  $l$  回の反復操作を行い、解の改善を試みる。

$$(\mathbf{u}^{n+1})^l = (\mathbf{u}^{n+1})^0 - \Delta t \nabla p^l \quad (4.12)$$

$$p^{l+1} = p^l - \varepsilon \nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+1})^l \quad (4.13)$$

この (5.13) 式が収束すれば、 $p^{l+1} - p^l = 0$  より  $\nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+1})^l = 0$ 、つまり非圧縮条件 (5.5) 式が満たされる。

(5.13) 式が収束する条件を考察する。(5.12) を (5.13) に代入すれば

$$\frac{p^{l+1} - p^l}{\varepsilon} = \Delta t \nabla^2 p^l - \nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+1})^0 \quad (4.14)$$

となるが、これは  $\varepsilon$  を仮想的な時間ステップ、 $\Delta t$  を仮想的な拡散係数とみなした場合の拡散方程式の単純な解法 (3-3-1 参照) になっている。つまり、 $\Delta x$  を流体格子の間隔 (解像度) とすれば、収束条件は  $\varepsilon \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$  である。

### 4.4 乱流のシミュレーション

連立偏微分方程式 (5.4)、(5.5) 自体は乱流 ( $Re \gg 1$ ) でも有効であるが、計算機で乱流のシミュレーションを行うのは非常に難しい。これは、乱流では大小さまざまなスケールの流れや渦が発生するので、実際にその  $Re$  で発生する最小スケールの流れを解像するためには非常に細かい計算格子を用いる必要がある



ことと、流れの時間変化が激しいために短い時間ステップが求められることに起因する。式 (5.1)、(5.2) を用いた乱流の定量的なシミュレーションは膨大な計算量を必要とし、スーパーコンピュータを用いたとしても出来ることが限られるのが現状である。そのため、限られた計算資源で乱流のシミュレーションを行うために、流体格子より小さなスケールで起こる時間変動の激しい流れの影響を統計平均量として効果的に反映する各種の乱流モデルが提案されてきた。

#### 4-4-1. レイノルズ方程式と渦粘性

時間変化の激しい乱流下の流速と圧力について、次式のようにある程度長い時間  $T$  で平滑化した平均量を定義し、

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{T} \int_t^{T+t} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t') dt', \quad \bar{p}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{T} \int_t^{T+t} p(\mathbf{x}, t') dt' \quad (4.15)$$

乱流下で激しく時間変動する量 ( $\mathbf{u}, p$ ) を、なだらかに変動する平均量 ( $\bar{\mathbf{u}}, \bar{p}$ ) と平均値 0 のまわりの揺らぎ ( $\mathbf{u}', p'$ ) の和で表現する。

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}', \quad p = \bar{p} + p' \quad (4.16)$$

(5.16) を (5.1)、(5.2) に代入し、両辺を時間  $T$  で平滑化する。 $\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{u}}' = 0$  であることに注意すると、次式が得られる。

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} = -\frac{1}{\rho} \nabla \bar{p} + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} - \nabla \overline{\mathbf{u}' \mathbf{u}'} \quad (4.17)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0 \quad (4.18)$$

平滑化された変数に対する新しい連立偏微分方程式 (5.17)、(5.18) を、元の方程式 (5.1)、(5.2) と比較すると、違いは (5.17) 式の右辺最後の項だけである。つまりこの項によって、時間変動の激しい流れの影響が、統計平均量として平滑化された流れに反映されること他ならない。残念ながら  $\overline{\mathbf{u}' \mathbf{u}'}$  は未知量であるのでこれ以上その詳細に立ち入ることが出来ないが、その役割については物理的な考察を行うことは可能である。乱流とは大小の渦が相互に影響し合った流れであるので、それによって運動量の交換が促進されるはずである。つまり、 $\overline{\mathbf{u}' \mathbf{u}'}$  の項は流体要素間の速度差をならす働きをされると考えられる。これは流体の粘性とよく似た働きであるので、以下の様なモデルが考えられた。これを

Boussinesq の渦粘性近似と呼ぶ。

$$-\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} = \frac{\mu_t}{\rho}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) - \frac{2}{3}k\delta \quad (4.19)$$

ここで、 $\delta$  は単位行列、 $k = \frac{1}{2}\overline{|\mathbf{u}'|^2}$  は乱流エネルギーと呼ばれる量で、流体の非圧縮性で決まる。渦粘性  $\mu_t$  については各種乱流モデルが提案されており、例えば混合距離モデルや  $k$ - $\varepsilon$  モデルなどがある。