

第8章 実質微分 $\partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ の計算

実質微分 (substantial derivative) は流れに関する方程式, Euler 方程式, Navier-Stokes 方程式, 各種輸送方程式に現れる微分演算子で次のように与えられる.

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla$$

ただし t は時間, \mathbf{u} は流速である. 右辺第 1 項は非定常項で定常流れではゼロになり, 第 2 項は対流項で流線 (streamline) に沿う微分である. 図 8.1(a) は空間 \mathbf{x} における流体素片 (同一流体粒子からなる) の単位時間における移動を示したものである. 点 A における流体素片のある性質 (property, 例えば温度) が φ ならば, 点 B では $\varphi + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi$ になる. しかし流体素片がここまで移動するには単位時間を要するので, 非定常流れでは更に φ_t だけ変化することになる. 上記の演算子は流跡線 (path line) に沿う微分を意味する. またこの演算子は流れの連続方程式 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ を用いれば次のように書換えられる.

$$\frac{d}{dt} \varphi = \frac{\partial}{\partial t} \varphi + \nabla \cdot (\mathbf{u} \varphi)$$

このように書換えられたものを保存形 (conservative form) 表示, もとのものを非保存形 (nonconservative form) または勾配形 (gradient form) 表示という. これらは本来同じものであるが, 数値計算では結果が微妙に違ってくる. 例えば 2 次中心差分を用いれば,

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \cdot \nabla \varphi)_{00} &\approx u_{00} \frac{\varphi_{10} - \varphi_{-1,0}}{2\Delta x} + v_{00} \frac{\varphi_{01} - \varphi_{0,-1}}{2\Delta y}, \\ (\nabla \cdot \mathbf{u} \varphi)_{00} &\approx \frac{(u\varphi)_{10} - (u\varphi)_{-1,0}}{2\Delta x} + \frac{(v\varphi)_{01} - (v\varphi)_{0,-1}}{2\Delta y} \end{aligned}$$

となるがこれらの式は全く同じものではない. また上式の左辺 $\nabla \cdot \mathbf{u} \varphi$ をある領域 Ω にわたって積分したものは, Gauss の定理によって

$$\iint_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \varphi \, dx dy = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \varphi \, ds$$

となり, 領域 Ω の境界 $\partial\Omega$ 上の積分に変換される. ただし \mathbf{n} は境界 $\partial\Omega$ の部分 ds における外向き単位法線ベクトル, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} \varphi$ は単位長さの境界を通過して単位時間に流入流出する φ である. 上式の数値積分

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (\mathbf{u} \cdot \nabla \varphi)_{ij} \Delta x \Delta y \\ &\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (\nabla \cdot \mathbf{u} \varphi)_{ij} \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

に右辺を代入し計算すれば, 上式では一般に領域内部に小さい値が残り, 下式では領域内部はことごとく相殺され境界のみに値が残る. 後者の場合に数値スキームは保存形であるという. 微分方程式の持つ保存性を数値解に反映させるためには保存形スキームを用いなければならないという主張はあるが, 普通の流れでは必ずしも絶対的なものではない.

以下には実質微分に関する数値計算についていくつかの項目に分けて説明する．多くの解法が提案されてきた背景には数値誤差と不安定性の問題がある．特に圧縮性流れでは衝撃波 (shocks) の捕獲と，更には滑り面 (slip surfaces) や境界面 (interfaces) の数値拡散である．また非圧縮性流れでも乱流渦や渦列に関して同様の問題が起きている．

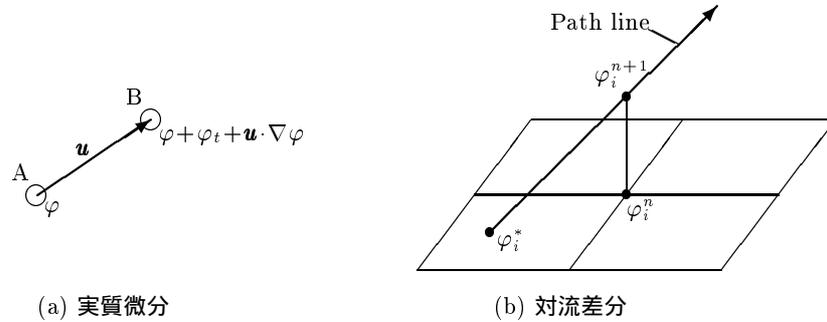


図 8.1: 実質微分と対流差分

8.1 人工粘性の付加と上流化

輸送方程式は一般に次のように書くことができる．

$$\frac{d\varphi}{dt} \equiv \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\varphi = \Phi(\varphi) \quad (8.1)$$

ただし $\Phi(\varphi)$ は通常 発生項, 拡散項などからなり, Navier-Stokes 方程式の場合には圧力項と粘性拡散項からなる．輸送方程式は, 微分方程式論で言う双曲型の性質を持ち, 初期値問題として解かれる¹．輸送方程式の対流項が普通に 2 次中心差分で十分近似できるならば, CFD は先端科学技術の一つ²にはなり得なかったかも知れない．手計算の時代には対流項を中心差分 (Richardson 法) で近似し問題は起きなかったようである．それは, 丸めの誤差を除き計算の誤りを正すためにときどき計算結果を紙にプロットし平滑化しながら計算を進めたためであろう．コンピュータの時代になって, 対流項の不安定性が問題になり, 初期の段階では人工粘性の付加や 1 次上流差分が用いられた．これら手法は今や過去のものとなったが, ここから話を始めることにする．

最も簡単な 1 次上流差分法 (upstream-difference scheme, 風上法 upwind-difference scheme) では, 対流項は次式で表される．

$$(f_x)_i \approx \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} (f_i - f_{i-1}) + O(\Delta x) & (u_i \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} (f_{i+1} - f_i) + O(\Delta x) & (u_i < 0) \end{cases} \quad (8.2a)$$

$$\approx \frac{1}{\Delta x} \{ u_i^+ (\varphi_i - \varphi_{i-1}) + u_i^- (\varphi_{i+1} - \varphi_i) \} + O(\Delta x) \quad (8.2b)$$

¹ 拡散項の含まれる場合には双曲型ではないが, 拡散項は多くの流れで他の項に比べ十分小さいので, 微分方程式は双曲型と見なして解かれる．例えば高 Reynolds 数流れで, Navier-Stokes 方程式を双曲型の Euler 方程式の解法を用いて解くがごときである．

² 将来疑問に思われる方のために, 1990 年頃には, USA を富ませる 20 の施策の中に CFD は入っていた．予算を重点配分すべき先端科学技術の内, 超伝導, 半導体材料, バイオテクノロジー, 光工学, ロボットの 5 つは日本が勝れ, CFD を含むコンピュータソフトや宇宙航空関連の残り 15 は米国が勝れているとされた．

ただし $f = u\varphi$, $u^\pm = (u \pm |u|)/2$, $u = u^+ + u^-$ である．このように 1 次上流差分には多少異なるいくつかの表現がある．更に次のように書換えることもできる．

$$(f_x)_i = \underbrace{u_i \frac{-\varphi_{i-1} + \varphi_{i+1}}{2\Delta x}}_{2 \text{ 次中心差分}} - \underbrace{\frac{|u_i|}{2\Delta x} (\varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \varphi_{i+1})}_{\text{人工粘性}} + O(\Delta x)$$

右辺第 2 項は $(1/2)|u_i|\Delta x \partial^2 \varphi / \partial x^2$ の差分式で $\varphi = u$ ならば粘性，一般には拡散を表す項である．このように 1 次上流差分は，2 次中心差分 (second-order central-difference) に人工粘性 (artificial viscosity, 拡散 diffusion) をある特定量付加したもので，大きい拡散の付加によって安定化を図ったものである．人工拡散は物理的拡散に比べ十分小さくしなければならないが，1 次上流差分では逆に十分大きく，計算の結果はこのことを念頭に評価しなければならない．

一般にスキームは次のように表現できれば，そのスキームは保存形 (conservative) である．

$$(f_x)_i = \frac{1}{\Delta x} (h_{i+1/2} - h_{i-1/2}) \quad (8.3)$$

ただし $h_{i+1/2}$ は数値流束関数 (numerical flux) と呼ばれるもので，一般に点 $x_{i+1/2}$ における f そのものではない．2 次中心差分の数値流束は次のようになる．

$$h_{i+1/2} = u_{i+1/2} \frac{\varphi_i + \varphi_{i+1}}{2} \quad (8.4)$$

また 1 次上流差分の数値流束は，多少変形し対称なものにすれば次のようになる．

$$h_{i+1/2}^{\text{Roe}} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1}) - \frac{1}{2}|u_{i+1/2}|\Delta\varphi_{i+1/2} \quad (8.5)$$

ただし $\Delta\varphi_{i+1/2} = \varphi_{i+1} - \varphi_i$ である．これは Roe スキーム³として知られるものである．

2 次の上流差分は次のように表される．

$$(f_x)_i = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta x} (f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i) + O(\Delta x^2) & (u \geq 0) \\ \frac{1}{2\Delta x} (-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}) + O(\Delta x^2) & (u < 0) \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} (f_i - f_{i-1} + \frac{1}{2}(-\Delta f_{i-3/2} + \Delta f_{i-1/2})) + O(\Delta x^2) & (u \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} (f_{i+1} - f_i - \frac{1}{2}(-\Delta f_{i+1/2} + \Delta f_{i+3/2})) + O(\Delta x^2) & (u < 0) \end{cases}$$

下式は 1 次上流差分とそれを 2 次にする補正項の和で表したものである．また 2 次上流差分の数値流束は，1 次上流差分の部分に Roe スキームを導入し次のように表すこともできる．

$$h_{i+1/2} = h_{i+1/2}^{\text{Roe}} + \frac{1}{2}(u_{i+1/2}^+ \Delta\varphi_{i-1/2} - u_{i+1/2}^- \Delta\varphi_{i+3/2}) \quad (8.6)$$

同様に，2 次中心差分は 1 次上流差分とそれを 2 次にする補正項の和で表せば，

$$(f_x)_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} (f_i - f_{i-1} + \frac{1}{2}(-\Delta f_{i-1/2} + \Delta f_{i+1/2})) + O(\Delta x^2) & (u \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} (f_{i+1} - f_i - \frac{1}{2}(-\Delta f_{i-1/2} + \Delta f_{i+1/2})) + O(\Delta x^2) & (u < 0) \end{cases}$$

³ Roe, P.L., Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes, *J. Comput. Phys.*, **43**, 357-372. この 1 次スキームは圧縮性流れの衝撃波の捕獲に優れている．

またその数値流束は

$$h_{i+1/2} = h_{i+1/2}^{\text{Roe}} + \frac{1}{2} |u_{i+1/2}| \Delta \varphi_{i+1/2} \quad (8.7)$$

となる．

Chakravarthy-Osher スキームは 2 次上流差分と 2 次中心差分の 1 次結合を取ったもので，その数値流束関数は次のようになる．

$$h_{i+1/2}^{\text{CO}} = h_{i+1/2}^{\text{Roe}} + u_{i+1/2}^+ \left\{ \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i-1/2} + \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2} \right\} \quad (u_{i+1/2} \geq 0 \text{ のとき})$$

$$- u_{i+1/2}^- \left\{ \underbrace{\frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i+3/2}}_{\text{2 次上流差分補正}} + \underbrace{\frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2}}_{\text{2 次中心差分補正}} \right\} \quad (u_{i+1/2} < 0 \text{ のとき}) \quad (8.8)$$

ただし κ は結合のパラメータで，この式は $\kappa = -1$ ならば 2 次上流差分， $\kappa = 1$ ならば 2 次中心差分になる．またこのスキームの打切り誤差 e_t は次のようになる．

$$e_t = -\frac{1}{12}(3\kappa-1)\Delta x^2 (f_{xxx})_i + O(\Delta x^3)$$

κ の値を変えると， $u \geq 0$ のときのスキームと打切り誤差の大きさは次のようになる．

κ	スキーム	$u \geq 0$ のスキーム	打切り誤差
-1	2 次上流差分	$(f_{i-2} - 4f_{i-1} + 3f_i)/2\Delta x$	$O(\Delta x^2)$
0		$(f_{i-2} - 5f_{i-1} + 3f_i + f_{i+1})/4\Delta x$	$O(\Delta x^2)$
1/3	3 次上流差分	$(f_{i-2} - 6f_{i-1} + 3f_i + 2f_{i+1})/6\Delta x$	$O(\Delta x^3)$
1/2	QUICK スキーム	$(f_{i-2} - 7f_{i-1} + 3f_i + 3f_{i+1})/8\Delta x$	$O(\Delta x^2)$
1	2 次中心差分	$(-f_{i-1} + f_{i+1})/2\Delta x$	$O(\Delta x^2)$

3 次上流差分の式はよく知られているもので， $u < 0$ の場合の式は 6.3.1 項の終りにも出ている．打切り誤差は $\kappa = 1/3$ のときにのみ $O(\Delta x^3)$ になるが，もとより Chakravarthy-Osher スキームの実質的精度は κ の値によって突然変化するものではなく， $\kappa = 1/2$ の QUICK スキームも著者がいうように 3 次ではないにしてもこれに極めて近い精度である．

Leonard の QUICK スキーム⁴ では，数値流束 $h_{i+1/2}$ と $h_{i-1/2}$ は，それぞれ $u \geq 0$ の場合には，上流側にシフトした 3 点の f_{i-1} , f_i , f_{i+1} を通る 2 次式の $x_{i+1/2}$ における値と， f_{i-2} , f_{i-1} , f_i を通る 2 次式の $x_{i-1/2}$ における値が用いられる．すなわち

$$h_{i+1/2} = \frac{1}{8}(-f_{i-1} + 6f_i + 3f_{i+1}) \approx u_{i+1/2} \frac{1}{8}(-\varphi_{i-1} + 6\varphi_i + 3\varphi_{i+1}),$$

$$h_{i-1/2} = \frac{1}{8}(-f_{i-2} + 6f_{i-1} + 3f_i) \approx u_{i-1/2} \frac{1}{8}(-\varphi_{i-2} + 6\varphi_{i-1} + 3\varphi_i)$$

上表の QUICK スキームの式は，式 (8.3) にこれらの数値流束の式を代入することによって導かれたものである． $u < 0$ の場合の数値流束の式も同様に得られ，これらをまとめれば QUICK スキームの数値流束の式は次のように書くことができる．

$$h_{i+1/2} = \frac{1}{16} \left\{ u_{i+1/2} (-\varphi_{i-1} + 9\varphi_i + 9\varphi_{i+1} - \varphi_{i+2}) + |u_{i+1/2}| (-\varphi_{i-1} + 3\varphi_i - 3\varphi_{i+1} + \varphi_{i+2}) \right\} \quad (8.9)$$

これより QUICK スキームは，中心差分の式 $(f_x)_i \approx (f_{i-2} - 10f_{i-1} + 10f_{i+1} - f_{i+2})/16\Delta x$ に人工散逸 $(|u|\Delta x^3/16)\varphi_i^{(4)} \approx |u|(\varphi_{i-2} - 4\varphi_{i-1} + 6\varphi_i - 4\varphi_{i+1} + \varphi_{i+2})/16\Delta x$ を付加したものと解釈することができる．

⁴Leonard, B.P., A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation, *Computer Meth. Appl. Mech. Engng.*, **19**(1979), 59-98.

中心差分の式の精度は $O(\Delta x^2)$, また人工散逸項 (artificial dissipation) の大きさは $O(\Delta x^3)$ で , スキームの精度は上表のように $O(\Delta x^2)$ である .

4 次の中心差分 $(f_x)_i \approx (f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2})/12\Delta x$ にこの人工散逸を付加すれば , 3 次スキームを作ることができる . その数値流束関数は一般に次のようになる .

$$h_{i+1/2} = \frac{1}{12}u_{i+1/2}(-\varphi_{i-1} + 7\varphi_i + 7\varphi_{i+1} - \varphi_{i+2}) + \alpha|u_{i+1/2}|(-\varphi_{i-1} + 3\varphi_i - 3\varphi_{i+1} + \varphi_{i+2}) \quad (8.10)$$

ただし α は人工散逸の大きさを決める係数で , $\alpha = 1/12$ に取れば通常の 3 次上流差分になる . また Kawamura-Kuwahara スキーム⁵ は $\alpha = 1/4$ に取るもので , 安定性に勝れる一方 , 形式的精度は 3 次でも計算結果の精度はあまり良くないようである .

以上述べたように上流差分は , それ自身の中に計算を安定化する人工拡散などの数値粘性 (numerical viscosity) を含むものである . 人工拡散などが計算を安定化するメカニズムは次のように説明できる . これらの項は , 通常右辺に付加されるが , 上流差分の場合にも仮に相当する項を分離し右辺に移したとすれば , これらの項は次のように表される .

$$\begin{aligned} \alpha|u_i|\Delta x^{-1}(\varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \varphi_{i+1}) &\approx \alpha|u_i|\partial^2\varphi/\partial x^2\Delta x \\ \alpha|u_i|\Delta x^{-1}(-\varphi_{i-2} + 4\varphi_{i-1} - 6\varphi_i + 4\varphi_{i+1} - \varphi_{i+2}) &\approx -\alpha|u_i|\partial^4\varphi/\partial x^4\Delta x^3 \\ \alpha|u_i|\Delta x^{-1}(\varphi_{i-3} - 6\varphi_{i-2} + 15\varphi_{i-1} - 20\varphi_i + 15\varphi_{i+1} - 6\varphi_{i+2} + \varphi_{i+3}) &\approx \alpha|u_i|\partial^6\varphi/\partial x^6\Delta x^5 \end{aligned}$$

係数 α は正に取られる . 今不安定性などにより φ_i の値がその周囲の φ の平均値ないしは重み平均値に較べて大きければ , 上記の項は負になるので , 時間ステップ Δt 後の φ_i の値はこの分だけ減少することになる . 逆に φ_i の値が周囲に較べ小さければ上記の項は正になり , Δt 後の φ_i の値はこの分だけ増加することになる . このようにして φ の値は平滑化され不安定性が抑えられる . しかし一方この平滑化 (smoothing) は , 大なり小なり結果の精度に悪影響を及ぼすものである .

流速 u の符号が変わるところでは , 差分式が破綻する虞があるので十分注意しなければならない . 今 , $u < 0 (x < x^*)$, $u \geq 0 (x \geq x^*)$ とする . 1 次上流差分の式 (8.2) では問題は起きない . しかし一見良さそうに見える 1 次上流差分の式

$$(f_x)_i = \frac{1}{\Delta x}(f_i^+ - f_{i-1}^+) + \frac{1}{\Delta x}(f_{i+1}^- - f_i^-)$$

ただし $f_j^\pm = u_j^\pm \varphi_j$, $(j = i, i \pm 1)$ は

$$(f_x)_i = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x}(f_i - f_{i-1}) & (u_{i-1} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x}f_i & (u_{i-1} < 0, u_i \geq 0) \\ -\frac{1}{\Delta x}f_i & (u_i < 0, u_{i+1} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x}(f_{i+1} - f_i) & (u_{i+1} < 0) \end{cases}$$

となり , これらの式から消えた f_{i-1} や f_{i+1} は x^* の近くでは小さいとはいえ , これらの式の打切り誤差は

⁵Kawamura, T. and Kuwahara, K., Computation of high Reynolds number flow around circular cylinder with surface roughness, AIAA Paper 84-0340, (1984).

$O(h^0)$ と大きく問題がないとは言えない．また Roe スキーム (8.5) の場合にも正確に書けば

$$(f_x)_i \approx \begin{cases} \frac{1}{\Delta x}(f_i - f_{i-1}) & (u_{i-1/2} > 0) \\ \frac{1}{2\Delta x}(f_i - f_{i-1}) & (u_{i-1/2} = 0) \\ 0 & (u_{i-1/2} < 0, u_{i+1/2} > 0) \\ \frac{1}{2\Delta x}(f_{i+1} - f_i) & (u_{i+1/2} = 0) \\ \frac{1}{\Delta x}(f_{i+1} - f_i) & (u_{i+1/2} < 0) \end{cases}$$

となり，中3つの式の打ち切り誤差は $O(h^0)$ の大きさになる．

次に2次以上のスキームについて流速 u の符号が変わるところでのスキームの動静を探る．Chakravarty-Osher スキームの数値流束は次のようにも書かれる．

$$\begin{aligned} h_{i+1/2}^{\text{CO}} = & f_i^+ + \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta f_{i-1/2}^+ + \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta f_{i+1/2}^+ \quad (u_{i+1/2} \geq 0 \text{ のとき}) \\ & + \underbrace{f_{i+1}^-}_{1 \text{ 次上流差分}} - \underbrace{\frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta f_{i+3/2}^-}_{2 \text{ 次上流差分補正}} - \underbrace{\frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta f_{i+1/2}^-}_{2 \text{ 次中心差分補正}} \quad (u_{i+1/2} < 0 \text{ のとき}) \end{aligned} \quad (8.11)$$

ただし $f_j^\pm = u_{i+1/2}^\pm \varphi_j$ である．

$$(f_x)_i = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} \left\{ u_{i+1/2} \left(\varphi_i + \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i-1/2} + \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2} \right) \right. \\ \quad \left. - u_{i-1/2} \left(\varphi_{i-1} + \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i-3/2} + \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i-1/2} \right) \right\} & (u_{i-1/2} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} \left\{ u_{i+1/2} \left(\varphi_i + \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i-1/2} + \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2} \right) \right. \\ \quad \left. - u_{i-1/2} \left(\varphi_i - \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2} - \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i-1/2} \right) \right\} & (u_{i-1/2} < 0, u_{i+1/2} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} \left\{ u_{i+1/2} \left(\varphi_{i+1} - \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i+3/2} - \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2} \right) \right. \\ \quad \left. - u_{i-1/2} \left(\varphi_i - \frac{1}{4}(1-\kappa)\Delta\varphi_{i+1/2} - \frac{1}{4}(1+\kappa)\Delta\varphi_{i-1/2} \right) \right\} & (u_{i+1/2} < 0) \end{cases}$$

この式の第1式と第3式の打ち切り誤差は $-(\Delta x^2/24)(u_{xxx}\varphi + 3u_{xx}\varphi_x + 6\kappa u_x\varphi_{xx})_i \Delta x^2 - ((3\kappa-1)\Delta x^2/12)(u\varphi_{xxx})_i + \dots$ となる．第1項は $f_j^\pm = u_{i+1/2}^\pm \varphi_j$ と置いたための誤差であるが，微分方程式が準線形であることを考えればあまり気にする必要はないと思われる．なお $f_j^\pm = |\text{sign}(u_{i+1/2}^\pm)|f_j$ と置き， $u_{i+1/2}$ の符号のみを使うことにすればこの誤差はなくなる．また第2項はスキーム固有のもので $\kappa = 1/3$ 近くで誤差が小さくなることを示している．上式の第2式の誤差は $-(\Delta x^2/24)(u_{xxx}\varphi + 3u_{xx}\varphi_x + 6\kappa u_x\varphi_{xx} + 4u\varphi_{xxx})_i + \dots$ となる． $\kappa = 1/3$ 近くで誤差が小さくなる利点は失われるが，なお2次精度を保っていることが分かる．以上要するに，上記の Chakravarty-Osher スキームは， u の符号が変わるところで若干の精度低下はみられるものの問題なく使用できる．

次に式 (8.11) で単純に $\Delta f_{j+1/2}^\pm = u_{j+1/2}^\pm \Delta\varphi_{j+1/2}$ とした場合を考える． u の符号がすべて同じになると

ころではもちろん何事も起こらないので，ここでは符号が変わるところだけを調べることにする．

$$(f_x)_i = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2}\kappa\right) \Delta f_{i-1/2} + \frac{1}{4}(1+\kappa) \Delta f_{i+1/2} \right\} & (u_{i-3/2} < 0, u_{i-1/2} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} \frac{1}{4}(1+\kappa) (\Delta f_{i-1/2} + \Delta f_{i+1/2}) & (u_{i-1/2} < 0, u_{i+1/2} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{1}{4}(1+\kappa) \Delta f_{i-1/2} + \left(1 - \frac{1}{2}\kappa\right) \Delta f_{i+1/2} \right\} & (u_{i+1/2} < 0, u_{i+3/2} \geq 0) \end{cases}$$

これらの式ではいくつかの項が欠落することになり，第1式の打ち切り誤差は $(u_x \varphi)_i - ((1-\kappa)/4)(u \varphi_x)_i$ であり，また上式の打ち切り誤差はすべて $O(\Delta x^0)$ である．そのまま使えば解が局所的に不自然な挙動をすることになる．その対策も各種提案されてきたが，不自然な挙動の原因を調べそれを正すべきで， $u < 0$ の式から $u > 0$ の式に徐々に乗り換えるときは本末転倒である．このような対策は不自然な挙動を覆い隠すには有効でも，新たに大きな数値誤差を招くことになる．

8.2 TVD 差分スキーム

1次上流差分は安定性に優れるが，1次精度で正しい解を得ることができない．一方2次以上のスキームは，精度と安定性が両立しない．これから述べる TVD スキームと呼ばれるものは，数値拡散を局所的に必要量だけ加えることによって安定性を確保し，数値拡散の付加による精度低下を極力抑えるものである．ここではまず，スカラー輸送方程式 (8.1) の，1次元における右辺0の方程式

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \quad (8.12)$$

の初期値問題に対して TVD 法を説明する．その解 $\varphi(x, t)$ には1パラメータ族の特性 (one parameter family of characteristics) $dx/dt = u$ が存在する⁶．各特性に沿って φ の値は一定になり，また特性を横切った不連続性 (discontinuities)⁷ は特性に沿って伝播する⁸． u はこの波の位相速度である．したがって φ の最大値と最小値は，一般に時間によらず一定になるが， xt 空間内に不連続が存在し，最大値の特性がその不連続に吸込まれれば最大値は減少することになる．同様に最小値の特性が吸込まれれば最小値が増加することになる．物理問題では不連続に特性が吸込まれるときに熱力学系 (system) のエントロピーが増加し，逆に不連続から特性が吐出されるときに系のエントロピーが減少する．不連続から特性が吐出されることは物理的にあり得ないことになる．したがって，総変化量 (total variation) $TV \equiv \int |\varphi_x| dx$ は時間によらず一定か時間とともに減少する．すなわち，TVD (total variation diminishing) である．

TV の定義式は差分で表示すれば，

$$TV(\varphi) \equiv \sum_j |\varphi_{j+1} - \varphi_j| \quad (8.13)$$

また，TVD 条件は，

$$TV(\varphi^{n+1}) \leq TV(\varphi^n) \quad (8.14)$$

⁶ このことに関し幾何学的イメージの湧かない人のために，微分方程式 (8.12) は， xt 空間内で，解 $\varphi(x, t)$ の勾配 $\nabla \varphi = (\varphi_x, \varphi_t)$ とベクトル $\mathbf{a} \equiv (u, 1)$ が直交しスカラー積が0になることを示している．微分演算子 $d/dt = \mathbf{a} \cdot \nabla$ は \mathbf{a} 方向の微分で，解 φ を微分したときに0ということは， φ が \mathbf{a} 方向に一定ということである．曲線 $\varphi(x, t) = \text{const.} \equiv c$ を特性曲線という．曲線 $\varphi(x, t) = c + \delta c$ も曲線 $\varphi(x, t) = c$ にほぼ平行な特性曲線である．このように c の値を次々に変えれば c を1つのパラメータとする特性曲線族が得られる．

⁷ φ 自身とその x に関する微分の不連続

⁸ 微分方程式論の教科書の双曲型方程式の章参照．また簡単な説明は例えば大宮司・三宅・吉澤編，乱流の数値流体力学，1998，東京大学出版会，4.2 節にもある．

となる．TVD スキーム (TVD scheme) は，解が常に TVD 条件 (8.14) を満足するように作られた数値スキームのことである．TVD 条件が満足されれば当然，(i) φ の新たな極値は発生しない，(ii) φ の最大値が増加，最小値が減少することもないので安定に解を求めることができる．なおここで誤解のないように一言付け加えれば，TVD 条件 (8.14) は同次方程式 (8.12) の解に対するものである．非同次方程式 $d\varphi/dt = g$ の場合には，この方程式を一つの特性 $dx/dt = u$ に沿って積分すれば $\varphi = \varphi_0 + \int_{t_0}^t g dt$ になることから明らかのように， φ の値は特性に沿って一定にはならない．当然 TVD 条件 (8.14) もそのまま成立することにはならない．また多次元の場合の因子化で得られた 1 次元の方程式でも，たとえ もとの方程式が同次であっても TVD 条件 (8.14) は一般に成立しない．TVD 法は，もともと圧縮性流れの解法として提案されたものである．1 次元圧縮性流れのオイラー方程式の場合には，特性は流跡線と圧力波で，これらの特性上で一定になる量はエントロピーまたはリーマン不変量と言われるものである．また非圧縮性流れの場合には，流跡線上の流速や輸送される量 φ である．TVD スキームを適用すれば，これらの量は対流項の計算において上記の条件 (i)，(ii) を満足することになるが，非同次方程式や多次元の場合には右辺の時間積分が加算されるために，当然のことながら TVD スキームを用いて得られた解が条件 (i)，(ii) を満足するわけではない．

初めに安定といわれる Roe スキームが TVD スキームであるや否やを調べる．1 次元同次スカラー輸送方程式 (8.12) は，梯形則を用い保存形差分方程式に書換えれば次のようになる．

$$\varphi_i^{n+1} + \theta \lambda (h_{i+1/2} - h_{i-1/2})^{n+1} = \varphi_i^n - (1-\theta) \lambda (h_{i+1/2} - h_{i-1/2})^n \quad (8.15)$$

ただし $\lambda = \Delta t / \Delta x$ である．式 (8.15) に Roe スキームの数値流束 (8.5) を代入すれば，右辺は

$$\begin{aligned} RHS &= \varphi_i^n - (1-\theta) \lambda \frac{1}{2} [(f_i + f_{i+1}) - |u_{i+1/2}| \Delta \varphi_{i+1/2} - (f_{i-1} + f_i) + |u_{i-1/2}| \Delta \varphi_{i-1/2}]^n \\ &= \varphi_i^n - (1-\theta) \lambda \frac{1}{2} (u_{i-1/2} \Delta \varphi_{i-1/2} + u_{i+1/2} \Delta \varphi_{i+1/2} - |u_{i+1/2}| \Delta \varphi_{i+1/2} + |u_{i-1/2}| \Delta \varphi_{i-1/2})^n \\ &= \varphi_i^n - (1-\theta) \lambda (u_{i-1/2}^+ \Delta \varphi_{i-1/2} + u_{i+1/2}^- \Delta \varphi_{i+1/2})^n \end{aligned} \quad (8.16)$$

のようになり，左辺も同様になる．次に両辺の TV を取れば，右辺は

$$\begin{aligned} TV(RHS) &= \sum \left| \{1 - (1-\theta) \lambda (u_{j+1/2}^+ - u_{j+1/2}^-)\} \Delta \varphi_{j+1/2} \right. \\ &\quad \left. + (1-\theta) \lambda (u_{j-1/2}^+ \Delta \varphi_{j-1/2} - u_{j+3/2}^- \Delta \varphi_{j+3/2}) \right|^n \end{aligned}$$

となる．いま 3 条件，

$$u^+ \geq 0, \quad u^- \leq 0, \quad (1-\theta) \lambda |u| \leq 1 \quad (8.17)$$

が成立するものとすれば，

$$\begin{aligned} TV(RHS) &\leq \sum \left[\{1 - (1-\theta) \lambda (u_{j+1/2}^+ - u_{j+1/2}^-)\} |\Delta \varphi_{j+1/2}| \right. \\ &\quad \left. + (1-\theta) \lambda (u_{j-1/2}^+ |\Delta \varphi_{j-1/2}| - u_{j+3/2}^- |\Delta \varphi_{j+3/2}|) \right]^n \\ &= \sum |\Delta \varphi_{j+1/2}^n| = TV(\varphi^n) \end{aligned}$$

となり⁹， $TV(RHS)$ の値は $TV(\varphi^n)$ を超えることはない．同様に左辺に関しては次のようになる¹⁰．

$$\begin{aligned} TV(LHS) &= \sum \left| \{1 + \theta \lambda (u_{j+1/2}^+ - u_{j+1/2}^-)\} \Delta \varphi_{j+1/2} - \theta \lambda (u_{j-1/2}^+ \Delta \varphi_{j-1/2} - u_{j+3/2}^- \Delta \varphi_{j+3/2}) \right|^{n+1} \\ &\geq \sum \left[\{1 + \theta \lambda (u_{j+1/2}^+ - u_{j+1/2}^-)\} |\Delta \varphi_{j+1/2}| - \theta \lambda (u_{j-1/2}^+ |\Delta \varphi_{j-1/2}| - u_{j+3/2}^- |\Delta \varphi_{j+3/2}|) \right]^{n+1} \\ &= \sum |\Delta \varphi_{j+1/2}^{n+1}| = TV(\varphi^{n+1}) \end{aligned}$$

⁹ $a, b, c \geq 0$ のときに $|a+b+c| \leq |a|+|b|+|c|$ なる関係が用いられた．

¹⁰ $a, b, c \geq 0$ のときに $|a-b-c| \geq |a|-|b|-|c|$ なる関係が用いられた．

結局

$$TV(\varphi^{n+1}) \leq TV(LHS) = TV(RHS) \leq TV(\varphi^n)$$

となり，Roe スキームは 3 条件 (8.17) のもとで TVD 条件 (8.14) を満足する TVD スキームであることが分かる．

多項式近似や Taylor 展開をもとに導出される 2 次以上の数値スキームは，例外なくそのままでは TVD スキームではない．これらのスキームは 1 次上流差分とこれを高次にする補正項の和で表すことができる．1 次上流差分の部分は上述のように TVD 条件を満足するので，補正項の大きさを TVD 条件が満足される範囲に制限できれば，これらのスキームの TVD 化が達成されることになる．補正項の大きさの制限には各種の制限関数 (limiter) と呼ばれるものが用いられる．在来の数値粘性が無差別に加えられたのに対し，制限関数は数値粘性を局所的に必要な量のみ加えるものである．Chakravarthy-Osher スキームは次のように minmod 制限関数を用いて TVD スキームに改良されている．

$$h_{i+1/2}^{CO} = h_{i+1/2}^{Roe} + \frac{1}{4} \left\{ (1-\kappa) \Delta \tilde{f}_{i-1/2}^+ + (1+\kappa) \Delta \tilde{f}_{i+1/2}^+ \right\} - \frac{1}{4} \left\{ (1-\kappa) \Delta \tilde{f}_{i+3/2}^- + (1+\kappa) \Delta \tilde{f}_{i+1/2}^- \right\} \quad (8.18)$$

ただし

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{f}_{j+1/2}^\pm &= u_{i+1/2}^\pm \minmod(r_{j+1/2}^\pm, b) \Delta \varphi_{j-1/2} & (j = i, i+1) \\ \Delta \tilde{f}_{j+1/2}^\pm &= u_{i+1/2}^\pm \minmod(r_{j+1/2}^\pm, b) \Delta \varphi_{j+3/2} & (j = i-1, i) \end{aligned} \quad (8.19)$$

$$\begin{aligned} \minmod(x, y) &\equiv \text{sign}(x) \max[0, \min\{|x|, \text{sign}(x)y\}] \\ &= \begin{cases} x & (|x| \leq |y|, x, y \text{ 同符号}) \\ y & (|x| > |y|, x, y \text{ 同符号}) \\ 0 & (x, y \text{ 異符号}) \end{cases} \end{aligned} \quad (8.20)$$

また $r_{j+1/2}^\pm = \Delta \varphi_{j+1/2} / \Delta \varphi_{j+1/2 \pm 1}$ ， $\Delta f_{j+1/2}^\pm = u_{i+1/2}^\pm \Delta \varphi_{j+1/2}$ ($j = i, i \pm 1$) である．ここで式 (8.19) の意味について説明する．その第 1 式は，minmod (minimum-modulus) 制限関数を用い当該勾配 $\Delta \varphi_{j+1/2}$ の大きさを隣りの勾配 $\Delta \varphi_{j-1/2}$ の大きさと比較において制限するものである．minmod($r, 1$) を図 8.2 に示す．当該勾配の大きさが隣りの勾配を b 倍したものを超えないときにはそのままに，超えるときは b 倍した隣りの勾配に，2 つの勾配の傾きが異なるときには 0 になる．第 2 式についても同様のことが言える．なおこのような使われ方をする制限関数は勾配制限関数 (slope limiter) といわれる．

次に Chakravarthy-Osher TVD スキームが TVD スキームになることを示す．前と同様に同次スカラー

輸送方程式の差分近似式 (8.15) に数値流束 (8.18) を代入すれば，右辺は

$$\begin{aligned}
RHS &= \varphi_i^n - (1-\theta)\lambda \left[u_{i-1/2}^+ \Delta\varphi_{i-1/2} + u_{i+1/2}^- \Delta\varphi_{i+1/2} \right. \\
&\quad + \frac{1-\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^+ \min\text{mod}(r_{i-1/2}^+, b) \Delta\varphi_{i+1/2} - u_{i-1/2}^+ \min\text{mod}(r_{i-3/2}^+, b) \Delta\varphi_{i-1/2} \} \\
&\quad + \frac{1+\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^+ \min\text{mod}(r_{i+1/2}^-, b) \Delta\varphi_{i-1/2} - u_{i-1/2}^+ \min\text{mod}(r_{i-1/2}^-, b) \Delta\varphi_{i-3/2} \} \\
&\quad - \frac{1-\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^- \min\text{mod}(r_{i+3/2}^-, b) \Delta\varphi_{i+1/2} - u_{i-1/2}^- \min\text{mod}(r_{i+1/2}^-, b) \Delta\varphi_{i-1/2} \} \\
&\quad \left. - \frac{1+\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^- \min\text{mod}(r_{i+1/2}^+, b) \Delta\varphi_{i+3/2} - u_{i-1/2}^- \min\text{mod}(r_{i-1/2}^+, b) \Delta\varphi_{i+1/2} \} \right]^n \\
&= \varphi_i^n - (1-\theta)\lambda \left[u_{i-1/2}^+ \Delta\varphi_{i-1/2} + u_{i+1/2}^- \Delta\varphi_{i+1/2} \right. \\
&\quad + \frac{1-\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^+ \min\text{mod}(1, br_{i+1/2}^-) \Delta\varphi_{i-1/2} - u_{i-1/2}^+ \min\text{mod}(r_{i-3/2}^+, b) \Delta\varphi_{i-1/2} \} \\
&\quad + \frac{1+\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^+ \min\text{mod}(r_{i+1/2}^-, b) \Delta\varphi_{i-1/2} - u_{i-1/2}^+ \min\text{mod}(1, br_{i-3/2}^+) \Delta\varphi_{i-1/2} \} \\
&\quad - \frac{1-\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^- \min\text{mod}(r_{i+3/2}^-, b) \Delta\varphi_{i+1/2} - u_{i-1/2}^- \min\text{mod}(1, br_{i-1/2}^+) \Delta\varphi_{i+1/2} \} \\
&\quad \left. - \frac{1+\kappa}{4} \{ u_{i+1/2}^- \min\text{mod}(1, br_{i+3/2}^-) \Delta\varphi_{i+1/2} - u_{i-1/2}^- \min\text{mod}(r_{i-1/2}^+, b) \Delta\varphi_{i+1/2} \} \right]^n
\end{aligned}$$

となる．この Chakravarthy-Osher スキームの RHS の式を Roe スキームの RHS の式 (8.16) と比較すれば，この RHS の式は，式 (8.16) の $u_{i\mp 1/2}^\pm$ を

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_{i-1/2}^+ &= u_{i-1/2}^+ \left[1 + \frac{1-\kappa}{4} \left\{ \frac{u_{i+1/2}^+}{u_{i-1/2}^+} \min\text{mod}(1, br_{i+1/2}^-) - \min\text{mod}(r_{i-3/2}^+, b) \right\} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1+\kappa}{4} \left\{ \frac{u_{i+1/2}^+}{u_{i-1/2}^+} \min\text{mod}(r_{i+1/2}^-, b) - \min\text{mod}(1, br_{i-3/2}^+) \right\} \right] \quad (8.21a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_{i+1/2}^- &= u_{i+1/2}^- \left[1 + \frac{1-\kappa}{4} \left\{ \frac{u_{i-1/2}^-}{u_{i+1/2}^-} \min\text{mod}(1, br_{i-1/2}^+) - \min\text{mod}(r_{i+3/2}^-, b) \right\} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1+\kappa}{4} \left\{ \frac{u_{i-1/2}^-}{u_{i+1/2}^-} \min\text{mod}(r_{i-1/2}^+, b) - \min\text{mod}(1, br_{i+3/2}^-) \right\} \right] \quad (8.21b)
\end{aligned}$$

で定義される $\tilde{u}_{i\mp 1/2}^\pm$ で置換えたものであることが分かる． LHS に関しても同じことが言える．したがって

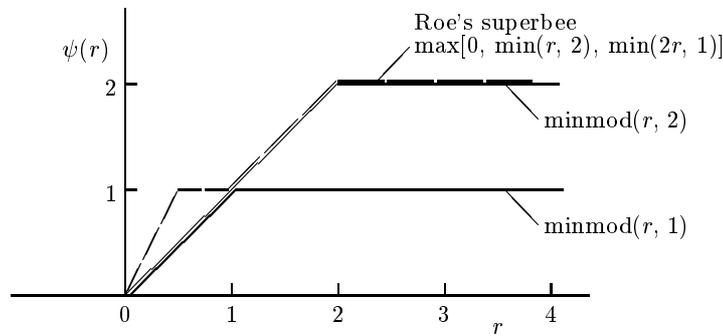


図 8.2: 各種制限関数

Chakravarthy-Osher スキーム (8.18) は、式 (8.17) と同型の 3 条件

$$\tilde{u}^+ \geq 0, \quad \tilde{u}^- \leq 0, \quad (1-\theta)\lambda|\tilde{u}| \leq 1 \quad (8.22)$$

が満足されるときに TVD 安定になる。

式 (8.22) の第 1 式と 2 式は式 (8.21) の [] の中が正 (または 0) のときに満足さる。これが常に正になるためには、第 1 式は $r_{i+1/2}^- = 0, r_{i-3/2}^+ \geq b$ のときに、第 2 式は $r_{i-1/2}^+ = 0, r_{i+3/2}^- \geq b$ のときに最も厳しい状態になり、このとき [] の中は $1 - \{(1-\kappa)/4\}b - \{(1+\kappa)/4\}$ となる。これが正であるためには条件

$$1 \leq b \leq (3-\kappa)/(1-\kappa) \quad (8.23)$$

が満足されなければならない。他方、式 (8.22) の第 3 式は $|\tilde{u}|$ の大きいときに厳しく、式 (8.21) の [] の中は $u_{i+1/2}^\pm \approx u_{i-1/2}^\pm$ と考えれば、第 1 式は $r_{i-3/2}^+ = 0, r_{i+1/2}^- \geq b$ 、第 2 式は $r_{i+3/2}^- = 0, r_{i-1/2}^+ \geq b$ のときに最大値 $[5-\kappa+(1+\kappa)b]/4$ になる。したがって条件

$$(1-\theta)b_1\lambda|u| \leq 1, \quad b_1 = \frac{1}{4}\{5-\kappa+(1+\kappa)b\} \quad (8.24)$$

が満足されなければならない。結局 Chakravarthy-Osher スキーム (8.18) は、条件式 (8.23) を満足する倍率 b の値を用い、 $CFL = |u|\Delta t/\Delta x$ すなわち時間間隔 Δt が条件式 (8.24) を満足する範囲に選ばれるときに TVD 安定になる。

ここで多少付け加えれば、倍率 b を大きめに取れば制限関数の働く領域は狭くなり、Chakravarthy-Osher スキーム本来の 2 次ないし 3 次精度で計算できる領域が広がる。広く使われている 3 次上流差分 $\kappa = 1/3$ の場合には、 b の上限は 4 である。3 次上流差分の $b = 4$ の場合には、陽解法 ($\theta = 0$) では CFL は 0.4 以下に制限される。他方 完全陰解法 ($\theta = 1$) では CFL の上限はないことになる。しかしながら実際の計算では、 CFL は主に左辺のアルゴリズムに依存する。LU-SGS 法は因子化に伴う誤差が小さく、 CFL を大きく取ることができるアルゴリズムである。また陰解法の Crank-Nicholson 法 ($\theta = 1/2$) でも CFL は 0.8 以下になり、無条件安定でないことに注意すべきである。逆にこの場合に CFL の上限を 1 に取れば b は 2.5 以下に制限される。なお $f(x)$ が不連続を持つ場合には、倍率 b は小さめの方がある種の不連続を呆けさせないことになるかもしれない。それは、この方が $f(x)$ の異常な変化に敏感に反応するからである。

3 次上流差分の場合の数値流束は倍率 b の上限 4 を取れば次のようになる。

$$h_{i+1/2}^{\text{CO}} = \begin{cases} f_i + \frac{1}{6}\text{minmod}(\Delta f_{i-1/2}, 4f_{i+1/2}) + \frac{1}{3}\text{minmod}(\Delta f_{i+1/2}, 4f_{i-1/2}) & (u \geq 0) \\ f_{i+1} - \frac{1}{6}\text{minmod}(\Delta f_{i+3/2}, 4f_{i+1/2}) - \frac{1}{3}\text{minmod}(\Delta f_{i+1/2}, 4f_{i+3/2}) & (u < 0) \end{cases} \quad (8.25)$$

ここで $u \geq 0, \Delta f_{i+1/2 \pm 1} \geq 0$ の 4 通りの場合が考えられるが、以下には $u > 0, \Delta f_{i-1/2} > 0$ の場合についてのみ説明する。他の場合も対称性により同様のこと言える。簡単のため $i = 0, \Delta f_{1/2}/\Delta f_{-1/2} = r$ と置けば上式は次のようになる。

$$h_{1/2}^{\text{CO}} = f_0 + \left\{ \frac{1}{6}\text{minmod}(1, 4r) + \frac{1}{3}\text{minmod}(r, 4) \right\} \Delta f_{-1/2} \quad (8.26)$$

$$= \begin{cases} f_0 + 1.5\Delta f_{-1/2} & (r > 4) & \text{(第 2 の minmod 関数が働く)} \\ f_0 + (1+2r)\Delta f_{-1/2}/6 & (1/4 < r \leq 4) & \text{(3 次上流差分)} \\ f_1 & (0 < r \leq 1/4) & \text{(第 1 の minmod 関数が働く)} \\ f_0 & (r \leq 0) & \text{(1 次上流差分: 第 1, 2 の minmod 関数が働く)} \end{cases} \quad (8.27)$$

このように Chakravarthy-Osher TVD スキームの数値流束は r の範囲によって異なる式で表される。 $\Delta f_{-1/2}$ を固定し、 $\Delta f_{1/2}$ すなわち r を変化させたときの数値流束 $h_{1/2}$ は図 8.3 のようになる。 $1/4 \leq r \leq 4$ の範囲では、 $h_{1/2}$ の値は 3 次上流差分の式

$$h_{1/2} = (-f_{-1} + 5f_0 + 2f_1)/6$$

から求められる。この外側の、勾配 Δf の変化の激しいところでは、上式のように第 1, 第 2 の制限関数が働くことになる。一般に、 $h_{1/2}$ の値は決して f_{-1} , f_0 , f_1 の値を超えて極値になることはない。

[乱流の数値流体力学, p.55, 図 3.3]

図 8.3: $h_{1/2} = f_0 + \{(1/6)\min\text{mod}(1, 4r) + (1/3)\min\text{mod}(r, 4)\}\Delta f_{-1/2}$ の値 ($u > 0$, $\Delta f_{-1/2} > 0$ の場合)

輸送方程式の保存形差分近似式 (8.15) は陽解法 ($\theta = 0$) では次のようになる。

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^n - \lambda(h_{i+1/2}^n - h_{i-1/2}^n)$$

今解 u の最大値 φ_0^n の近傍を考える。ここでは $u > 0$ としているので波は左方に伝播することになり、 φ_0^{n+1} と φ_1^{n+1} が最大値 φ_0^n を超えないことを確認できれば十分である。 φ_0^n は最大値であるから $\Delta\varphi_{-1/2}^n \geq 0$, $\Delta\varphi_{1/2}^n \leq 0$ で、 $u > 0$ であるから $\Delta f_{-1/2}^n \geq 0$, $\Delta f_{1/2}^n \leq 0$ となる。最大値近傍の数値流束は、 $\min\text{mod}$ 関数の働きによって次のようになる。 $h_{-1/2}^n = f_{-1}^n + (1/6)\min\text{mod}(\Delta f_{3/2}^n, 4\Delta f_{-1/2}^n) + (1/3)\min\text{mod}(\Delta f_{-1/2}^n, 4\Delta f_{-3/2}^n) \leq f_{-1}^n + 4\Delta f_{-1/2}^n/6 + \Delta f_{-1/2}^n/3 = f_0^n$ 。式 (8.23) は不等式 $h_{-1/2}^n \leq f_0^n$ が成立するように倍率 b を制限する条件である。また $h_{1/2}^n = f_0^n$, $h_{2/3}^n \geq f_1^n + 3\Delta f_{1/2}^n/2$ となる。したがって上式より、 $\varphi_0^{n+1} \leq \varphi_0^n$, $\varphi_1^{n+1} \leq \varphi_1^n - 5\lambda\Delta f_{1/2}^n/2$ となる。式 (8.24) は $\varphi_1^{n+1} \leq \varphi_0^n$ になるように時間ステップ Δt を制限する条件である。陰解法 ($\theta > 0$) では、上式の右辺に $-\theta\lambda\{(h_{1/2}^{n+1} - h_{1/2}^n) - (h_{-1/2}^{n+1} - h_{-1/2}^n)\}$ のような項が加わるが、最大値の近傍では中括弧の中は普通正になりより安全側に来る。

次に流速 u の符号の変わる場所の挙動について検討する。前節同様 $u < 0$ ($x < x^*$), $u \geq 0$ ($x \geq x^*$) と

すれば,

$$(f_x)_0 = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} \left\{ u_{1/2} \left(\varphi_0 + \frac{1}{6} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{-1/2}, 4\Delta\varphi_{1/2}) + \frac{1}{3} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{1/2}, 4\Delta\varphi_{-1/2}) \right) \right. \\ \quad \left. - u_{-1/2} \left(\varphi_{-1} + \frac{1}{6} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{-3/2}, 4\Delta\varphi_{-1/2}) + \frac{1}{3} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{-1/2}, 4\Delta\varphi_{-3/2}) \right) \right\} \\ \quad (u_{-1/2} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} \left\{ u_{1/2} \left(\varphi_0 + \frac{1}{6} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{-1/2}, 4\Delta\varphi_{1/2}) + \frac{1}{3} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{1/2}, 4\Delta\varphi_{-1/2}) \right) \right. \\ \quad \left. - u_{-1/2} \left(\varphi_0 - \frac{1}{6} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{1/2}, 4\Delta\varphi_{-1/2}) - \frac{1}{3} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{-1/2}, 4\Delta\varphi_{1/2}) \right) \right\} \\ \quad (u_{-1/2} < 0, u_{1/2} \geq 0) \\ \frac{1}{\Delta x} \left\{ u_{1/2} \left(\varphi_1 - \frac{1}{6} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{3/2}, 4\Delta\varphi_{1/2}) - \frac{1}{3} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{1/2}, 4\Delta\varphi_{3/2}) \right) \right. \\ \quad \left. - u_{-1/2} \left(\varphi_0 - \frac{1}{6} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{1/2}, 4\Delta\varphi_{-1/2}) - \frac{1}{3} \min\text{mod}(\Delta\varphi_{-1/2}, 4\Delta\varphi_{1/2}) \right) \right\} \\ \quad (u_{1/2} < 0) \end{cases}$$

となる. $\min\text{mod}$ 関数が働かなければ 前項に述べたように 一般には 3 次上流差分になり, u の符号が変わるところの第 2 式のみが 2 次精度である. またたとえ $\min\text{mod}$ 関数が働いても 上に述べたように r が 3 次上流差分の範囲を大きく逸脱しなければ精度が大きく低下することはない. しかし u の符号が変わるところに φ の極値もあれば, 第 2 式は $(f_x)_0 = (u_{1/2} - u_{-1/2})\varphi_0/\Delta x$ となり 0 次精度まで低下することになる.

制限関数は $\min\text{mod}$ 関数の他にも各種のものが提案されている¹¹. これらの制限関数の働きの一端を, 2 次中心差分を例に説明する. 2 次中心差分の数値流束に制限関数を導入して安定化したものは一般に次のように表される.

$$h_{i+1/2}^{(2)} = h_{i+1/2}^{(1)} + \frac{1}{2} |u_{i+1/2}| \Psi(r_{i+1/2}^\mp) \Delta\varphi_{i+1/2} \quad (u = u^\pm) \quad (8.28)$$

ただし $h_{i+1/2}^{(1)}$ は 1 次上流差分の数値流束, $\Psi(r)$ は制限関数で, $\Psi(r) = 1$ ならば普通の 2 次中心差分になる. これを TVD 化する制限関数は数多く考えられている. 例えば Roe の 'superbee'

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \max[0, \min(1, 2r), \min(2, r)] \\ &= \begin{cases} 0 & (r \leq 0) & (1 \text{ 次上流差分}) \\ 2r & (0 < r < 1/2) \\ 1 & (1/2 \leq r \leq 1) & (2 \text{ 次中心差分}) \\ r & (1 < r \leq 2) & (2 \text{ 次上流差分}) \\ 2 & (r > 2) \end{cases} \end{aligned}$$

は, $1 < r \leq 2$ でスキームを 2 次上流差分に切替え, また $r < 1/2$ と $r > 2$ では補正項を極値にならない限界値に取り安定化を図るものである. また

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \min\text{mod}[2r, (r+2)/3, 2] \\ &= \begin{cases} 0 & (r \leq 0) & (1 \text{ 次上流差分}) \\ 2r & (0 < r < 0.4) \\ \frac{r+2}{3} & (0.4 < r \leq 4) & (3 \text{ 次上流差分}) \\ 2 & (r > 4) \end{cases} \end{aligned}$$

¹¹Sweby, P.K., High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, **21**(1984), 995-1011.

と置けば，スキームの精度を 3 次上げることができる．このように制限関数は，スキームを安定化するだけでなく同時に精度を改善する働きを持たせることもできる．制限関数 $\Psi(r)$ は， $\Psi(1) = 1$ の点を通るべきで ($\varphi(x)$ が 1 次関数のときに $\varphi_{i+1/2}$ をその上取る)，また 2 次中心差分 $\Psi(r) = 1$ と 2 次上流差分 $\Psi(r) = r$ の間にあるべきで (その外側では実質的誤差が大きくなる)， $\text{minmod}(1, r)$ と superbee の間に取りられる．van Leer の制限関数 $(r+|r|)/(1+r)$ は， $\Psi(0) = 0$ ， $\Psi(1) = 1$ ， $\Psi(\infty) = 2$ を通る単調に増加する滑らかな曲線である．

制限関数は，一般に異なるスキームに対しては異なる働きをするので，スキームに適した制限関数が選ばれるべきである．2 次上流差分の数値流束

$$h_{i+1/2}^{(2)} = h_{i+1/2}^{(1)} + \frac{1}{2} |u_{i+1/2}| \Psi(r_{i+1/2}^{\pm}) \Delta \varphi_{i+1/2 \mp 1} \quad (u = u^{\pm}) \quad (8.29)$$

に対しては，主要部の精度を 3 次上げ同時に TVD 化する制限関数は次のようになる．

$$\Psi(r) = \text{minmod}[2r, (2r+1)/3, 2]$$

$$= \begin{cases} 0 & (r \leq 0) \\ 2r & (0 < r < 0.25) \\ \frac{2r+1}{3} & (0.25 < r \leq 2.5) \\ 2 & (r > 2.5) \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{(1 次上流差分)} \\ \text{(3 次上流差分)} \end{array}$$

8.3 高次 TVD 差分スキーム

2 次のスキーム式 (8.8) は，2 次上流差分と 2 次中心差分の線形結合を取ったもので，その結合のパラメータを $\kappa = 1/3$ に選ぶことによって次の 3 次上流差分スキームが得られた．

$$h_{i+1/2}^{(3)} = h_{i+1/2}^{(1)} + \frac{1}{6} \Delta f_{i-1/2}^+ + \frac{1}{3} \Delta f_{i+1/2}^+ - \frac{1}{6} \Delta f_{i+3/2}^- - \frac{1}{3} \Delta f_{i+1/2}^- \quad (8.30)$$

同様に 4 次上流差分と 4 次中心差分の線形結合を取れば 4 次のスキームが得られ，その結合のパラメータを適切に選べば 5 次スキームが得られる¹²．4 次の上流差分と中心差分の式は，例えば 6.3.1 項の終りの部分を，またこれらの数値流束の導出については次の表を参照されたい．

		f_{i-3}	f_{i-2}	f_{i-1}	f_i	f_{i+1}	f_{i+2}
上流差分 ($u \geq 0$)	$1/12 \Delta x$	-1	6	-18	10	3	
$h_{i+1/2}$	$1/12$		1	-5	13	3	
$-h_{i-1/2}$	$1/12$	-1	5	-13	-3		
中心差分	$1/12 \Delta x$		1	-8	0	8	-1
$h_{i+1/2}$	$1/12$			-1	7	7	-1
$-h_{i-1/2}$	$1/12$		1	-7	-7	1	

4 次上流差分と中心差分の $u \geq 0$ の場合の数値流束は次のようになる．

$$h_{i+1/2} = f_i + \frac{1}{12} (f_{i-2} - 5f_{i-1} + f_i + 3f_{i+1}) = f_i + \frac{1}{12} (-\Delta f_{i-3/2} + 4\Delta f_{i-1/2} + 3\Delta f_{i+1/2}),$$

$$h_{i+1/2} = f_i + \frac{1}{12} (-f_{i-1} - 5f_i + 7f_{i+1} - f_{i+2}) = f_i + \frac{1}{12} (\Delta f_{i-1/2} + 6\Delta f_{i+1/2} - \Delta f_{i+3/2})$$

¹²Yamamoto, S. and Daiguji, H., Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier-Stoke equations, *Comput. & Fluids*, **22**(1993), 259-270.

$u < 0$ の場合も同様になる．Chakravarthy-Osher スキーム (8.8) を参考にこれらの式の線形結合を取れば，次の一般的な 4 次スキームの数値流束が得られる．

$$\begin{aligned}
 h_{i+1/2} &= h_{i+1/2}^{(1)} \\
 &+ \frac{1-\phi}{24}(-\Delta f_{i-3/2}^+ + 4\Delta f_{i-1/2}^+ + 3\Delta f_{i+1/2}^+) + \frac{1+\phi}{24}(\Delta f_{i-1/2}^+ + 6\Delta f_{i+1/2}^+ - \Delta f_{i+3/2}^+) \\
 &- \frac{1-\phi}{24}(3\Delta f_{i+1/2}^- + 4\Delta f_{i+3/2}^- - \Delta f_{i+5/2}^-) - \frac{1+\phi}{24}(-\Delta f_{i-1/2}^- + 6\Delta f_{i+1/2}^- + \Delta f_{i+3/2}^-) \\
 &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{4 次上流差分補正}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{4 次中心差分補正}} \\
 &= h_{i+1/2}^{(3)} - \frac{1-\phi}{24}\Delta^3 f_{i-1/2}^+ - \frac{1+\phi}{24}\Delta^3 f_{i+1/2}^+ + \frac{1-\phi}{24}\Delta^3 f_{i+3/2}^- + \frac{1+\phi}{24}\Delta^3 f_{i+1/2}^- \tag{8.31}
 \end{aligned}$$

ただし

$$\Delta^3 f_{j+1/2} = \Delta^2 f_{j+1} - \Delta^2 f_j = \Delta f_{j-1/2} - 2\Delta f_{j+1/2} + \Delta f_{j+3/2} \quad (j = i, i \pm 1)$$

である．式 (8.31) の下式は，この 4 次スキームの数値流束が 3 次スキームの数値流束 (8.30) に 3 階差分の補正項を加えることによって簡単に得られることを示している．更にこの式は

$$\begin{aligned}
 Df_{i+1/2}^\pm &= \Delta f_{i+1/2}^\pm - \frac{1+\phi}{8}\Delta^3 f_{i+1/2}^\pm, \\
 Df_{j+1/2}^\pm &= \Delta f_{j+1/2}^\pm - \frac{1-\phi}{4}\Delta^3 f_{j+1/2}^\pm \quad (j = i \mp 1)
 \end{aligned} \tag{8.32}$$

で定義される $Df_{j+1/2}^\pm$ を導入すれば，次のように書換えられる．

$$h_{i+1/2} = h_{i+1/2}^{(1)} + \frac{1}{6}Df_{i-1/2}^+ + \frac{1}{3}Df_{i+1/2}^+ - \frac{1}{6}Df_{i+3/2}^- - \frac{1}{3}Df_{i+1/2}^- \tag{8.33}$$

式 (8.31) の打ち切り誤差 e_t は次のようになる (下表参照)．

$$e_t = -\left\{ \frac{1-\phi}{2}72 - \frac{1+\phi}{2}48 \right\} \frac{1}{12 \cdot 5!} \Delta x^4 f_i^{(5)} + O(\Delta x^5) = -\frac{1-5\phi}{5!} \Delta x^4 f_i^{(5)} + O(\Delta x^5)$$

したがって結合のパラメータ ϕ を $1/5$ に選べば 5 次精度に，また $1/5$ に近ければ 5 次に近い 4 次精度なる．5 次の場合には上式の Df は

$$\begin{aligned}
 Df_{i+1/2}^\pm &= \Delta f_{i+1/2}^\pm - \frac{3}{20}\Delta^3 f_{i+1/2}^\pm, \\
 Df_{j+1/2}^\pm &= \Delta f_{j+1/2}^\pm - \frac{1}{5}\Delta^3 f_{j+1/2}^\pm \quad (j = i \mp 1)
 \end{aligned} \tag{8.34}$$

となる．また式 (8.32) において $(1+\phi)/8 = (1-\phi)/4$ すなわち $\phi = 1/3$ と置けば， Df は

$$Df_{j+1/2}^\pm = \Delta f_{j+1/2}^\pm - \frac{1}{6}\Delta^3 f_{j+1/2}^\pm \quad (j = i, i \pm 1) \tag{8.35}$$

のように 1 つの式になり，スキームはコンパクトなものになる．

	f_i	$\Delta x f_i'$	$\Delta x^2 f_i''/2!$	$\Delta x^3 f_i'''/3!$	$\Delta x^4 f_i^{(4)}/4!$	$\Delta x^5 f_i^{(5)}/5!$	上流差分	中心差分
f_{i-3}	1	-3	9	-27	81	-243	-1	
f_{i-2}	1	-2	4	-8	16	-32	6	1
f_{i-1}	1	-1	1	-1	1	-1	-18	-8
f_i	1						10	0
f_{i+1}	1	1	1	1	1	1	3	8
f_{i+2}	1	2	4	8	16	32		-1
上流差分	0	12	0	0	0	72		
中心差分	0	12	0	0	0	-48		

×1/12Δx

次に式 (8.33) を式 (8.18) にならって TVD 化すれば次の 4 次の TVD 差分スキームが得られる .

$$h_{i+1/2} = h_{i+1/2}^{(1)} + \frac{1}{6} D\tilde{f}_{i-1/2}^+ + \frac{1}{3} D\tilde{f}_{i+1/2}^+ - \frac{1}{6} D\tilde{f}_{i+3/2}^- - \frac{1}{3} D\tilde{f}_{i+1/2}^- \quad (8.36)$$

ただし ,

$$\begin{aligned} D\tilde{f}_{j+1/2}^\pm &= \text{minmod}(Df_{j+1/2}^\pm, bDf_{j+1/2}^\pm), & (j = i, i+1) \\ D\tilde{f}_{j+1/2}^\pm &= \text{minmod}(Df_{j+1/2}^\pm, bDf_{j+3/2}^\pm) & (j = i-1, i) \end{aligned} \quad (8.37)$$

である . $\phi = 1/5$ の 5 次精度スキームの場合には上式の Df は

$$\begin{aligned} Df_{i+1/2}^\pm &= \Delta f_{i+1/2}^\pm - \frac{3}{20} \Delta^3 \bar{f}_{i+1/2}^\pm, \\ Df_{j+1/2}^\pm &= \Delta f_{j+1/2}^\pm - \frac{1}{5} \Delta^3 \bar{f}_{j+1/2}^\pm & (j = i \mp 1) \end{aligned} \quad (8.38)$$

となる . また $\phi = 1/3$ の 4 次精度コンパクトスキームの場合には

$$Df_{j+1/2}^\pm = \Delta f_{j+1/2}^\pm - \frac{1}{6} \Delta^3 \bar{f}_{j+1/2}^\pm \quad (j = i, i \pm 1) \quad (8.39)$$

となる . これらの式で $\Delta^3 \bar{f}$ の部分は 3 次スキームを 4 次または 5 次にする補正項である .

[乱流の数値流体力学 , p.59 , 図 3.5]

図 8.4: 典型的な勾配 $\Delta f_{j+1/2}$, $D\tilde{f}_{j+1/2}$, $Df_{j+1/2}$

以上述べた高次上流差分スキームは , 3 次上流差分スキームの 1 階差分 Δf を補正項付きの 1 階差分 Df に置換えたものであるが , この置換えにかかわらず TVD 条件はそのまま満足されるのであろうか . 2 次 TVD スキームの場合の式 (8.21a) に相当の 4 次 TVD スキームの式は次のようになる .

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i-1/2}^+ &= u_{i-1/2}^+ \left[1 + \frac{\mathcal{C}}{6} \left\{ \frac{u_{i+1/2}^+}{u_{i-1/2}^+} \text{minmod}(1, br_{i-1/2}^+) - \text{minmod}(r_{i-1/2}^-, b) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathcal{C}}{3} \left\{ \frac{u_{i+1/2}^+}{u_{i-1/2}^+} \text{minmod}(r_{i-1/2}^+, b) - \text{minmod}(1, br_{i-1/2}^-) \right\} \right] \end{aligned}$$

ただしここでは, $r_{i-1/2}^+ = D\varphi_{i+1/2}/D\varphi_{i-1/2}$, $r_{i-1/2}^- = D\varphi_{i-3/2}/D\varphi_{i-1/2}$, $\mathfrak{C} = D\varphi_{i-1/2}/\Delta\varphi_{i-1/2}$ ¹³とする. この式から, 倍率 b の条件 (8.23) は, \mathfrak{C} が正ならば次のように修正される.

$$0 < b \leq 6\mathfrak{C}^{-1} - 2 \quad (8.40)$$

また時間ステップ Δt の条件 (8.24) における b_1 は次のように修正される.

$$b_1 = 1 + \frac{1}{6}\mathfrak{C}(1+2b) \quad (8.41)$$

なお b の上限に対しては $b_1 = 3 - \mathfrak{C}/2$ となる.

図 8.4 は, 勾配 $\Delta f(x)$ とこれに補正項を加えた修正勾配 $D\tilde{f}(x)$ の典型的な挙動を示したものである. ただし $D\tilde{f}_{j+1/2} = \Delta f_{j+1/2} - \Delta^3 f_{j+1/2}/6$ は minmod 関数が働かない場合の $Df_{j+1/2}$ である. 修正勾配は基の勾配に比べ大きい擾乱を含むことが分かる. 実際の計算ではこれに起因して不安定性が生じるので, これを抑える何らかの対策が必要である. 上記の Chakravarthy-Osher TVD スキームでは, 2 次の補正項の大きさを, この補正項によって新たな関数 $f(x)$ の極値が生じないように, 勾配 Δf に minmod 関数を作用させてその大きさを制限し, またこれを可能にする倍率 b の上限が定められた. これに倣いここでは曲率 $\Delta^2 f$ に minmod 関数を作用させてその大きさを制限し, 勾配 $\Delta f(x)$ に極値が生じないようにすなわち関数 $f(x)$ に変曲点が生じないようにする¹⁴. この考えにしたがえば高次補正項は次のようになる.

$$\Delta^3 \tilde{f}_{j+1/2} = \Delta^2 \tilde{f}_{j+1}^\pm - \Delta^2 \tilde{f}_j^\pm \quad (j = i, i \pm 1) \quad (8.42)$$

ただし,

$$\begin{aligned} \Delta^2 \tilde{f}_k^\pm &= \min\text{mod}(\Delta^2 f_k^\pm, b_2 \Delta^2 f_{k-1}^\pm), \\ \Delta^2 \tilde{f}_k^\pm &= \min\text{mod}(\Delta^2 f_k^\pm, b_2 \Delta^2 f_{k+1}^\pm), \quad \Delta^2 f_k = \Delta f_{k+1/2} - \Delta f_{k-1/2} \end{aligned} \quad (8.43)$$

である. このとき Df の式は分かり易く書けば次のようになる.

$$Df_{j+1/2} = \begin{cases} \Delta f_{j+1/2} - \frac{1}{6}(b_2-1)\Delta^2 f_j & (R > b_2) \\ \Delta f_{j+1/2} - \frac{1}{6}(R-1)\Delta^2 f_j & (1/b_2 \leq R \leq b_2) \quad (4 \text{ 次上流差分}) \\ \Delta f_{j+1/2} - \frac{1}{6}(1-b_2)R\Delta^2 f_j & (0 < R < 1/b_2) \\ \Delta f_{j+1/2} & (R \leq 0) \quad (3 \text{ 次上流差分}) \end{cases} \quad (8.44)$$

ただし $R = \Delta^2 f_{j+1}/\Delta^2 f_j$, また式 (8.37) の minmod 関数が働けば 2 次上流差分になる. 図 8.4 において直線の傾きは曲率を表し, 変曲点は傾きが正から負またはその逆に変化するときを生ずる. したがって, 上図と上式を参照すれば, 不等式

$$\begin{aligned} Df_{1/2} &= \Delta f_{1/2} - \frac{1}{6}(1-b_2)\Delta^2 f_1 \leq \Delta f_{1/2} + \frac{1}{2}(\Delta f_{3/2} - \Delta f_{1/2}) \\ Df_{3/2} &= \Delta f_{3/2} - \frac{1}{6}(b_2-1)\Delta^2 f_1 \geq \Delta f_{3/2} - \frac{1}{2}(\Delta f_{3/2} - \Delta f_{1/2}) \end{aligned}$$

が成立すれば変曲点は現れないことになる. これらの式から倍率 b_2 の上限は一般に次のようになる.

$$\frac{1}{6}(b_2-1) \leq \frac{1}{2} \quad \text{すなわち} \quad 1 < b_2 \leq 4 \quad (8.45)$$

¹³ \mathfrak{C} は \mathbb{C} のフォーマルスクリプト体.

¹⁴ Daiguji, H., Yuan, X. and Yamamoto, S., Stabilization of higher-order high resolution schemes for the compressible Navier-Stokes equations, *Numer. Meth. Heat & Fluid Flow*, **7**(1997), 250-274.

最後に，条件式 (8.40)(8.41) における \mathfrak{c} は，経験上は 1 と置いて問題ないが，次のように評価される．

$$\mathfrak{c} = \frac{D\varphi_{i-1/2}}{\Delta\varphi_{i-1/2}} = \frac{Df_{i-1/2}}{\Delta f_{i-1/2}} = \begin{cases} 1 - \frac{1}{6}(b_2 - 1)(1 - r^-) & (R > b_2) \\ 1 - \frac{1}{6}(r^- - 2 + r^+) & (1/b_2 \leq R \leq b_2) \\ 1 - \frac{1}{6}(1 - b_2)(r^+ - 1) & (0 < R < 1/b_2) \\ 1 & (R \leq 0) \end{cases}$$

ただし $r^\pm = \Delta f_{i-1/2 \pm 1} / \Delta f_{i-1/2}$, $R = \Delta^2 f_i / \Delta^2 f_{i-1}$ である．いま上限 $b_2 = 4$ を用いることにすれば

$$\mathfrak{c} = \begin{cases} (1 + r^-)/2 & (R > 4) \\ (8 - r^- - r^+)/6 & (1/4 \leq R \leq 4) \\ (1 + r^+)/2 & (0 < R < 1/4) \\ 1 & (R \leq 0) \end{cases}$$

となる．これより \mathfrak{c} の大きさは

$$0 < \mathfrak{c} \leq 1 + \frac{1}{8} \quad (8.46)$$

となる．このことを少し噛み砕いていえば， $\Delta f \geq 0$, $\Delta^2 f \geq 0$ の場合には $R = 1/4$, $r^- = 0$, $r^+ = 5/4$ のときに \mathfrak{c} は最大値 $1 + 1/8$ になり， $\Delta f < 0$, $\Delta^2 f < 0$ の場合にも同じことが言える．残る $\Delta f < 0$, $\Delta^2 f \geq 0$ と $\Delta f \geq 0$, $\Delta^2 f < 0$ の場合には $R = 4$, $r^+ = 0$, $r^- = 5/4$ で \mathfrak{c} は同じ最大値になる．この \mathfrak{c} を用いれば，4 次コンパクト TVD スキームの倍率 b , b_2 と Courant 数 CFL を制限する条件式は次のようになる．

$$0 < b \leq \frac{10}{3} \quad (\leq 4) \quad (8.47a)$$

$$(1 - \theta)b_1 CFL \leq 1, \quad b_1 = \frac{39}{16} \quad (= 2.5) \quad (8.47b)$$

$$0 < b_2 \leq 4 \quad (8.47c)$$

なお括弧内の数字は 3 次 TVD 上流差分スキームで用いられているもので，そのまま用いても経験上問題はないようである．

以上述べた，4 次コンパクト TVD スキームについて纏めれば，計算に必要な式は，式 (8.36), (8.37), (8.39)–(8.43) で， b , b_1 , b_2 は式 (8.47) によって制限される．この 4 次コンパクト TVD スキームと 3 次の Chakravarthy-Osher TVD スキームの式は同形で，既存の 3 次 Chakravarthy-Osher スキームのプログラムは Δf を Df に置きかえることによって簡単にこの 4 次スキームのプログラムに書き換えることができる．最後に，このスキームで計算したときに変曲点はどうかという質問に対しては，3 次 Chakravarthy-Osher TVD スキームの計算結果に現れる変曲点はそのまま残るであろう．このことは，変曲点 ($R < 0$) のところでは，式 (8.44) に示すように，4 次の補正項はなく 3 次上流差分のままになっていることから分かる．4 次の補正項は，安定性を確保するために，この補正によって新たな変曲点が生じないようにその大きさが制限される．もし 3 次スキームでは現れず，4 次スキームにしてはじめて直接的に現れるような変曲点があるとすれば，そのような変曲点はこのスキームでは捕獲できないことになる．

8.4 対流差分法

$\mathbf{x}t$ 空間内に，図 8.1 に示すように，空間 \mathbf{x} 内の計算領域に長方形格子 (uniform rectangle grid) を形成し，これに直交するように時間軸 t を取る．上式を点 (\mathbf{x}_i, t^{n+1}) を通る 1 つの流跡線に沿って積分すれば次式が

得られる .

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^* + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \Phi(\varphi) dt \quad (8.48)$$

ただし 添字 * はこの流跡線に沿って移動する流体粒子の時間 t^n における位置 , 積分の起点を意味する . 式 (8.48) は厳密な式で , 対流差分法 (convective-difference method) では通常 次式で近似される .

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^* + \Phi_i^n \Delta t \quad (8.49)$$

ただし $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, また起点の位置は厳密には

$$\mathbf{x}_i^* = \mathbf{x}_i - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{u} dt \quad (8.50)$$

であるが , 次のように近似される .

$$\boldsymbol{\xi} \equiv \mathbf{x}_i^* - \mathbf{x}_i = -\mathbf{u}_i \Delta t \quad (8.51)$$

式 (8.49) の φ_i^* の値は , 式 (8.51) の $\boldsymbol{\xi}$ の値を用い , 時間 t^n における格子点の φ の値から Lagrange 補間によって求められる . すなわち

$$u_{ijk}^* = \sum_{\lambda} C_{\lambda}(\alpha) \sum_{\mu} C_{\mu}(\beta) \sum_{\nu} C_{\nu}(\gamma) u_{i+\lambda, j+\mu, k+\nu}$$

ただし $C_{\lambda}(\alpha), \dots$ は補間係数で , 1 次上流補間 , 2 次補間 , 2 次上流補間 , 3 次補間 , 3 次上流補間では次のようになる .

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=-1}^1 C_{\lambda}(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \alpha^- \tilde{\Delta} u_{i-1/2} + \alpha^+ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} \\ \sum_{\lambda=-1}^1 C_{\lambda}(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \tilde{\Delta}^2 u_i \\ \sum_{\lambda=-2}^2 C_{\lambda}(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \alpha^- \left\{ \tilde{\Delta} u_{i-1/2} + \frac{1}{2} (\alpha+m^-) \tilde{\Delta}^2 u_{i-1} \right\} + \alpha^+ \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} (\alpha-1) \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} \right\} \\ \sum_{\lambda=-2}^2 C_{\lambda}(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} (\alpha-1) \left\{ \alpha \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (\alpha+m^-) (\alpha^- \tilde{\Delta}^3 u_{i-1/2} + \alpha^+ \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2}) \right\} \\ \sum_{\lambda=-3}^3 C_{\lambda}(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \alpha^- \left\{ \tilde{\Delta} u_{i-1/2} + \frac{1}{2} (\alpha+m^-) (\tilde{\Delta}^2 u_{i-1} + \frac{1}{3} (\alpha+m^- + m^-) \tilde{\Delta}^3 u_{i-3/2}) \right\} \\ &\quad + \alpha^+ \left\{ \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \frac{1}{2} (\alpha-1) (\tilde{\Delta}^2 u_{i+1} + \frac{1}{3} (\alpha-1-m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+3/2}) \right\} \end{aligned}$$

また $\alpha = \xi / \Delta x_{i+1/2} = -u_i \Delta t / \Delta x_{i+1/2}$, $\alpha^{\pm} = (\alpha \pm |\alpha|) / 2$ である . その他の記号については 6.3.1 項を参

照されたい．等間隔格子の場合にはこれらの式は次のように簡単になる．

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda=-1}^1 C_\lambda(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv -\alpha^- u_{i-1} + (1-|\alpha|) u_i + \alpha^+ u_{i+1} \\
\sum_{\lambda=-1}^1 C_\lambda(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv \frac{1}{2} \{ \alpha(\alpha-1) u_{i-1} - 2(\alpha^2-1) u_i + \alpha(\alpha+1) u_{i+1} \} \\
\sum_{\lambda=-2}^2 C_\lambda(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \frac{1}{2} \alpha^- \{ (\alpha+1) u_{i-2} - 2(\alpha+2) u_{i-1} + (\alpha+3) u_i \} \\
&\quad + \frac{1}{2} \alpha^+ \{ (\alpha-3) u_i - 2(\alpha-2) u_{i+1} + (\alpha-1) u_{i+2} \} \\
\sum_{\lambda=-2}^2 C_\lambda(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv \frac{1}{2} \{ \alpha(\alpha-1) u_{i-1} - 2(\alpha^2-1) u_i + \alpha(\alpha+1) u_{i+1} \} \\
&\quad + \frac{1}{6} (\alpha^2-1) \{ \alpha^- (-u_{i-2} + 3u_{i-1} - 3u_i + u_{i+1}) + \alpha^+ (-u_{i-1} + 3u_i - 3u_{i+1} + u_{i+2}) \} \\
\sum_{\lambda=-3}^3 C_\lambda(\alpha) u_{i+\lambda} &\equiv u_i + \frac{1}{6} \alpha^- \{ -(\alpha+1)(\alpha+2) u_{i-3} + 3(\alpha+1)(\alpha+3) u_{i-2} \\
&\quad - 3(\alpha+2)(\alpha+3) u_{i-1} + ((\alpha+2)(\alpha+3) - \alpha+5) u_i \} \\
&\quad + \frac{1}{6} \alpha^+ \{ ((\alpha-3)(\alpha-2) - \alpha+5) u_i + 3(\alpha-3)(\alpha-2) u_{i+1} \\
&\quad - 3(\alpha-3)(\alpha-1) u_{i+2} + (\alpha-2)(\alpha-1) u_{i+3} \}
\end{aligned}$$

式 (8.49) と (8.51) の時間間隔 Δt は，他の陽解法と同様に， $C = \max(|u|\Delta t/\Delta x, |v|\Delta t/\Delta y, |w|\Delta t/\Delta z)$ で定義される Courant 数が 1 以下の範囲に，計算を速く終らせるために可能な限り大きく取られる．この制約は起点 x_i^* を x_i を頂点に持つ 4 要素 (3 次元では 8 要素) の中に取りを意味する．1 次上流補間はこの制約のもとで安定であるが精度不足で，一方 2 次以上の補間は，誤差は少ないが計算を不安定にする虞がある．上流補間は上流側にシフトした格子点の値を用いることにより，ある程度安定性を改善したものである．時間 t^n まで φ の値が求められているときに，このようにして式 (8.49) から φ_i^{n+1} の値を求め，解を Δt だけ前進させることができる．

式 (8.48) は前にも述べたように厳密な式である．この式を数値的に精度良く解くには，補間の精度を上げるだけでは不十分である．以下に述べる予測子修正子法は解の精度を総合的に上げるようにしたものである．この予測子修正子法では，式 (8.48) の差分近似式は次のように置かれる．

$$\varphi_i^{n+1(c)} = \varphi_i^* + \bar{\Phi}_i(\varphi) \Delta t \quad (8.52)$$

ただし $\bar{\Phi}$ の付いている量は，予測子の計算では上記の式 (8.49) のように既知の φ^n から直ぐ求められる $x_i t^n$ における値で近似し，また修正子の計算では次式で近似する．

$$\bar{f}_i^{(c)} = (f_i^* + f_i^{n+1})/2 \quad (8.53)$$

この式は流跡線に沿う積分区間の起点と終点の値の平均で近似するものである．また起点の位置に関しては，予測子は式 (8.51) から，修正子は次式から求められる．

$$\xi^{(c)} = x_i^* - x_i = -\bar{u}_i \Delta t \quad (8.54)$$

補間法と時間間隔 Δt の取り方については上述の通常対流差分法と同じである．ただし Courant 数は $C = \max(|\bar{u}|\Delta t/\Delta x, |\bar{v}|\Delta t/\Delta y, |\bar{w}|\Delta t/\Delta z)$ のように定義されたものが用いられる．

解を時間ステップ Δt 進める計算手順は次のようになる．

$$\begin{aligned} \text{予測子の計算: } & \xi^{(p)} \rightarrow \mathbf{u}_i^*, \varphi_i^* \rightarrow \mathbf{u}_i^{n+1(p)}, \varphi_i^{n+1(p)} \rightarrow \Phi_i^{n+1} \\ \text{修正子の計算: } & \xi^{(c)} \rightarrow \mathbf{u}_i^* \rightarrow \mathbf{u}_i^{n+1(c)} \rightarrow \\ & \xi^{(c)} \rightarrow \mathbf{u}_i^*, \varphi_i^*, \Phi_i^* \rightarrow \mathbf{u}_i^{n+1(c)}, \varphi_i^{n+1(c)} \rightarrow \Phi_i^{n+1} \end{aligned}$$

例えば φ が温度の場合には、通常 流速も同時に計算しなければならない。また修正子の計算は、1 回のみ、複数回、あるいは十分に収束するまで反復することが考えられるが、ここでは流速のみ 2 度計算し起点の位置を正確に求めるようにしている。

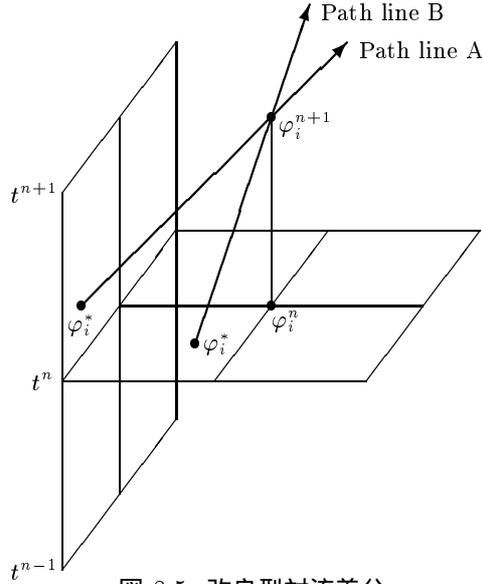


図 8.5: 改良型対流差分

上述の対流差分法では Courant 数が 1 以下に制限されたが、以下に述べる改良型対流差分法 (modified convective-difference method) では、流れ場の最大 Courant 数は 1 以上で 2 に近い値に取られる。この方法では、 φ_i^{n+1} の計算が各格子点に定義されるの局所 Courant 数 $|C|$ が 1 を超える場合 (図 8.5 の Path line A) と 1 以下の場合 (Path line B) では少し違ってくる。1 を超える場合には積分の起点は、点 \mathbf{x}_i を頂点に持つ 8 要素の上流側の面 (2 次元では 4 要素の上流側の辺) 上に取られ、他方 1 以下の場合には上述の方法と同様に $t = t^n$ 面上に取られる。この方法では時間間隔は格子点ごとに異なるものになり、局所時間間隔 Δt_{ijk} は次式から求められる。

$$\frac{1}{\Delta t_{ijk}} = \max \left(\frac{1}{\Delta t}, \frac{\bar{u}_{ijk}}{\Delta x_{i-1/2}}, -\frac{\bar{u}_{ijk}}{\Delta x_{i+1/2}}, \frac{\bar{v}_{ijk}}{\Delta y_{j-1/2}}, -\frac{\bar{v}_{ijk}}{\Delta y_{j+1/2}}, \frac{\bar{w}_{ijk}}{\Delta z_{k-1/2}}, -\frac{\bar{w}_{ijk}}{\Delta z_{k+1/2}} \right) \quad (8.55)$$

$\Delta t_{ijk} = \Delta t = t_{n+1} - t^n$ の場合 ($|C| \leq 1$) には、 φ_i^{n+1} の計算は上述の予測子修正子法で行われる。またほかの場合 ($|C| > 1$) には次のようになる。例えば $1/\Delta t_{ijk} = \bar{u}_{ijk}/\Delta x_{i-1/2}$ ならば起点は面 $x = x_{i-1}$ 上にあり、 $1/\Delta t_{ijk} = -\bar{u}_{ijk}/\Delta x_{i+1/2}$ ならば面 $x = x_{i+1}$ 上にあることになる。起点が面 $x = x_{i\pm 1}$ 上にあるときに、補間に必要な起点の位置 β, γ は次式で与えられる。

$$\beta = -\frac{\bar{v}_{ijk} \Delta t_{ijk}}{\Delta y_{j+1/2}}, \quad \gamma = -\frac{\bar{w}_{ijk} \Delta t_{ijk}}{\Delta z_{k+1/2}} \quad (8.56)$$

他の場合、2 次元の場合も同様である。また時間に関する補間は予測子の計算では 1 次外挿、修正子の計

算では 1 次または 2 次の補間を用いる .

$$u^* = -(1-\tau)u^{n-1} + (2-\tau)u^n \quad (8.57)$$

$$u^* = \tau u^n + (1-\tau)u^{n+1}, \quad u^* = -\frac{1}{2}\tau(1-\tau)u^{n-1} + \tau(2-\tau)u^n + \frac{1}{2}(1-\tau)(2-\tau)u^{n+1} \quad (8.58)$$

ただし $\tau = \Delta t_{ijk}/\Delta t$ である . $\tau = 1$ ならば $u^* = u^n$ になる . 起点における変数の補間は , 2 次元流れでは xt または yt の 2 次元の面上で , 3 次元流れでは yzt などの 3 次元空間で行われる . φ_i^{n+1} の計算は上述の予測子修正子法と同様の手順で行われる . 定常流れを求める場合には , 時間間隔 Δt は大きめに取り , $u^{n+1} = u^n$ であるから時間に関する補間を行わず空間補間のみとし , 解が収束するまで修正子の計算を繰り返すことになる .

上述の予測子修正子法による対流差分法は , 流れ現象に即した計算法である . 流れの中では , 図 8.1(a) に示すように , 流体素片が流跡線に沿って移動する間に , 輸送量 φ がその生成・消滅 , 拡散などの諸要因により変化する . 輸送方程式 (8.1) は勿論このことを記述するもので , 通常の方法では , 実質微分の時間微分と空間微分がそれぞれ差分式で近似される . これに対し上述の対流差分法では , 一つの流跡線に沿って積分した式 (8.48) の積分区間 $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ における式が差分方程式として用いられ , φ に影響を及ぼす諸因子は流跡線上の時間 t^n と t^{n+1} における値の平均値が用いられる . 1 次補間を用いる対流差分法は 1 次上流差分に比べて精度が高く , 2 次上流差分に近いものになる . 2 次以上の補間を用いる場合にも , 起点の位置 x_i^* と右辺 ϕ の値は複雑な流れでは結果に少なからず影響し , 予測子だけの計算と修正子までの計算とは様相がかなり違ってくることがある .

改良型対流差分法は , 保存性に優れ , 定常流れでは計算時間を大幅に節約することができる . これは単に時間ステップの大きさの問題ではない . 輸送方程式の対流項は , 上流境界上与えられた情報量 φ を流跡線に沿って下流境界まで伝達するものである . しかしながら在来の陽解法や対流差分法では , φ^{n+1} が φ^n の上流側の値だけでなくある範囲の平均値 (これは一つの解釈であるが) になるために , 上流の情報量は下流に向かって急速に減衰し , 非常に多くの時間ステップを経ないと下流境界まで完全には伝達されなかった . これに対し改良型対流差分法では , φ^{n+1} が φ^n の上流側の値のみの平均になるため , 拡散がない場合には上流から下流へ計算を進めることができ , ただ 1 回の掃引で情報量はそのまま下流境界まで伝達される . 流れ場の一部分が逆流しかつ拡散のある場合には , それでもなおかなりの反復が必要になるが , 他の解法とりわけ陰解法と比べても収束は格段に速くなる .