第 2 章　微分方程式の差分解法の基礎

本章では、移流拡散方程式を例にとって、微分方程式の差分解法の初歩的なところを解説する。2.1 節では拡散方程式を例にとって、差分化にあたっての一般的な注意事項について述べ、2.2 節では時間微分の差分化の方法、2.3 節では空間微分の差分化の方法、2.4 節では移流拡散方程式の差分化時の注意点、2.5 節では拡散部分の陰解法について述べる。地球流体力学における移流拡散方程式の差分法の解説書としては、Durran (1999) が詳しい。

2.1　拡散方程式の例

まず例として、一次元の拡散方程式 (熱伝導方程式)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{2.1}$$

に支配される初期値境界値問題を考える。初期値を $T(x,0) = f(x)$ とし、境界条件を $T(0,t) = T(L,t) = 0$ とする。厳密解は

$$T(x,t) = \sum_{m=0}^{\infty} f_m e^{-\kappa k_m^2 t} \sin(k_m x), \tag{2.2}$$

ここに、

$$f_m = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin(k_m x) dx, \quad k_m = \frac{m\pi}{L} \tag{2.3}$$

である。

これを数値計算によって解くことを考える。差分法では、時間・空間を有限間隔の格子に分割し、各格子に一個の変数を割当てて、考えている範囲に存在する格子の $T_j^n = T(x_j, t_n)$ を計算する。例えば、

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} = \kappa \frac{T_{j+1}^n - 2T_j^n + T_{j-1}^n}{\Delta x^2} \tag{2.4}$$

と差分化する ($\Delta t = t_{n+1} - t_n, \Delta x = x_{j+1} - x_j$)。これにより、$T^n$ が既知であれば、T^{n+1} が計算できる。この差分式は $\Delta t \to 0, \Delta x \to 0$ の極限で元の微分方程式 (2.1) に一致する (**一貫性; consistency**)。

今、初期値を $f(x) = T_0 \sin k_1 x$ とすると、差分式 (2.4) による $t = t_n$ での解は

$$T_j^n = \lambda^n T_0 \sin k_1 x_j, \tag{2.5}$$

ここに、

$$\lambda = 1 - \frac{2\kappa\Delta t}{\Delta x^2}(1 - \cos k_1 \Delta x) \tag{2.6}$$

となる。解が少なくとも振動したり発散したりしない (**安定性; stability**) ためには、$0 < \lambda < 1$ である必要があり、$\Delta x, \Delta t$ はこの条件を満たすように設定しなければならない。また、この解は $\Delta t \to 0, \Delta x \to 0$ の極限で厳密解に一致する (**収束性; convergence**)。

このように、一貫性、安定性、収束性を満たすような差分化をすることが、精度よく解を得るための必要条件である。

2.2　時間差分の方法

時間差分の方法は前節で述べた方法以外にもいろいろな方法があるが、MRI.COM で用いているのは次の 4 つである。

$$\text{前方差分}: \quad \frac{T^{n+1}-T^n}{\Delta t} = F(T^n) \tag{2.7}$$

$$\text{後方差分}: \quad \frac{T^{n+1}-T^n}{\Delta t} = F(T^{n+1}) \tag{2.8}$$

$$\text{松野スキーム}: \quad \frac{T^{*n+1}-T^n}{\Delta t} = F(T^n), \quad \frac{T^{n+1}-T^n}{\Delta t} = F(T^{*n+1}) \tag{2.9}$$

$$\text{leap-frog}: \quad \frac{T^{n+1}-T^{n-1}}{2\Delta t} = F(T^n) \tag{2.10}$$

前節で用いたのは前方差分である。前の 3 つの方法は 2 つの時間ステップの値を用いており、Δt について 1 次の精度であるのに対して、leap-frog は 3 つの時間ステップの値を用いており、2 次の精度を持つ。MRI.COM では基本的に精度の高い leap-frog を用いている。

しかし、前節で示した拡散方程式に leap-frog を適用することはできない。前節で前方差分のかわりに leap-frog を適用した場合の差分法による解は

$$T_j^n = (T_a\lambda_a^n + T_b\lambda_b^n)\sin k_1 x_j, \tag{2.11}$$

ここに、

$$\lambda_a = -\frac{-\alpha+\sqrt{\alpha^2+4}}{2}, \quad \lambda_b = -\frac{-\alpha-\sqrt{\alpha^2+4}}{2} \quad \left(\alpha \equiv \frac{4\kappa\Delta t}{\Delta x^2}(1-\cos k_1\Delta x)\right) \tag{2.12}$$

となる。任意の α について $\lambda_b < -1$ であるから、かならず振動しながら発散するモードを含む (**計算モード; computational mode**)。このため、MRI.COM では拡散項と粘性項については前方差分を適用する。ただし、混合層の中などで鉛直拡散・粘性係数が非常に大きい場合には、前節の議論から前方差分では時間ステップを非常に小さくとらなくてはならないため、鉛直拡散・粘性項に後方差分 (陰解法 (implicit method) とも呼ぶ。2.5 節参照) を適用する。

松野スキームは leap-frog による計算モードを抑えるために使用する。MRI.COM では leap-frog 9 ステップにつき、松野スキーム 1 ステップを用いている。

前方差分、leap-frog、松野スキームでは各格子点で独立に時間積分が可能であるが、後方差分の場合には連立方程式を解くことになる（2.5 節参照）。また、松野スキームは (当然のことながら) 前方差分、leap-frog の二倍の計算量が必要となる。

2.3　空間差分の方法 (移流方程式)

一次元移流方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -u\frac{\partial T}{\partial x} \tag{2.13}$$

を考える (u は定数)。解は、

$$T(x,t) = T(x-ut,0) \tag{2.14}$$

である。

時間差分には leap-frog を用いて差分式を書くと、

$$\frac{T_j^{n+1}-T_j^{n-1}}{2\Delta t} = -u\frac{T_{j+\frac{1}{2}}^n - T_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} \tag{2.15}$$

となる。ここで、$T^n_{j+\frac{1}{2}}, T^n_{j-\frac{1}{2}}$ は格子点 x_j に代表される区間の左右 (上下、前後でもなんでもいいが) の端 $x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}$ における値である。ここでは、$x_{j-\frac{1}{2}}$ は x_j と x_{j-1} の中点とする。隣の格子区間が接する点では等しい T が等しい流速で運ばれることから、この差分式では系全体での T の総和は保存する。

$T^n_{j-\frac{1}{2}}$ は一つまたは複数の格子点の値を用いて決めるが、その決めかたにはいくつかの方法がある。最も簡単でよく用いられるのは、

$$\text{上流差分：}\quad T^n_{j-\frac{1}{2}} = T^n_{j-1}(u>0),\ \ T^n_{j-\frac{1}{2}} = T^n_j(u<0) \tag{2.16}$$

$$\text{中央差分：}\quad T^n_{j-\frac{1}{2}} = \frac{T^n_{j-1}+T^n_j}{2} \tag{2.17}$$

の二つである。前者は Δx について 1 次の精度を持ち、後者は 2 次の精度を持つ。

中央差分の場合、差分式 (2.15) は

$$\frac{T_j^{n+1}-T_j^{n-1}}{2\Delta t} = -u\frac{T^n_{j+1}-T^n_{j-1}}{2\Delta x} \tag{2.18}$$

となる。いま、解を $T(x,t)=\tau(t)e^{-ikx}$ とすると、

$$\tau^{n+1} = \tau^{n-1} + 2i\alpha\tau^n (\text{但し}\alpha \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x) \tag{2.19}$$

となり、$|\alpha| \leq 1$ なら (中立) 安定である。任意の波数について安定であるためには、

$$\left|\frac{u\Delta t}{\Delta x}\right| \leq 1 \tag{2.20}$$

を満たさなければならない (**CFL 条件**)。次に、$\tau^n = \tau^0 e^{-in\Delta\theta}$ とすると、

$$\Delta\theta = -\sin^{-1}[\mu\sin k\Delta x] (\text{但し}\mu \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x}) \tag{2.21}$$

となる。右辺を Taylor 展開すると、

$$\begin{aligned}\Delta\theta &\simeq -\mu\sin k\Delta x - \frac{1}{6}(\mu\sin k\Delta x)^3 \\ &\simeq -\mu k\Delta x + \frac{\mu(k\Delta x)^3}{6} - \frac{\mu^3(k\Delta x)^3}{6} \\ &= -\mu k\Delta x\left\{1-\frac{(k\Delta x)^2}{6}(1-\mu^2)\right\}\end{aligned} \tag{2.22}$$

となる。これは差分法による解は厳密解にくらべて位相が遅れ、波数によって遅れかたが異なることを意味する (**数値分散; numerical dispersion**)。つまり、初期値にはなかった極大極小を伴う分布が生じることになる。しかし、運動方程式の移流項に中央差分を適用することにより、運動エネルギーを保存させることができるので、この方法は広く用いられている。MRI.COM ではさらにエンストロフィー (渦度の二乗) が保存する" 荒川の方法" を用いている (これについては後の章に譲る)。

一方、上流差分を用いると、差分式 (2.15) は

$$\frac{T_j^{n+1}-T_j^{n-1}}{2\Delta t} = -u\frac{T^n_j-T^n_{j-1}}{\Delta x} \tag{2.23}$$

となる。右辺を Taylor 展開すると、

$$-u\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{u\Delta x}{2}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) \tag{2.24}$$

となり、第二項は拡散 (熱伝導) の形をしている (この項は中央差分では消える)。実際、上流差分を用いて移流方程式を解くと、初期の分布が拡散していくのが見られる (**数値拡散; numerical diffusion**)。

MRI.COM の水温・塩分の移流の計算ではこうした数値分散・数値拡散をなるべく小さくするために、3 次のスキーム (QUICK, QUICKEST, UTOPIA) を用いている。QUICK では格子境界での値を

$$\begin{aligned} \mathrm{QUICK}: T^n_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{-T^n_{j-2}+6T^n_{j-1}+3T^n_j}{8}(u>0) \\ T^n_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{3T^n_{j-1}+6T^n_j-T^n_{j+1}}{8}(u<0) \end{aligned} \tag{2.25}$$

とする。QUICKEST は時間ステップの間に移流によって格子境界の値が変化することを考慮して、その時間平均値を移流される値とする方法で、UTOPIA は QUICKEST の多次元への拡張である。具体的には後の章で述べる。

2.4　移流拡散方程式の差分

以上の議論から、移流拡散方程式 (1.26)、(1.27) を差分化する際には、時間差分に leap-frog を用いるときには、移流項には 1 ステップ前の、拡散項には 2 ステップ前のトレーサー（水温・塩分）の値を用いる必要があることがわかった。従って、形式的には、以下の差分式を用いることになる。

$$\frac{T^{n+1}-T^{n-1}}{2\Delta t} = -\mathscr{A}(T^n)+\mathscr{D}(T^{n-1}) \tag{2.26}$$

$$\frac{S^{n+1}-S^{n-1}}{2\Delta t} = -\mathscr{A}(S^n)+\mathscr{D}(S^{n-1}) \tag{2.27}$$

但し、鉛直拡散項などが極端に大きい場合には、$\mathscr{D}(T^{n-1})$ ではなく、$\mathscr{D}(T^{n+1})$ を用いる場合がある。これが次節で解説する陰解法である。

2.5　鉛直拡散方程式の陰解法

例えば、第 8 章で解説する境界層モデルでは、鉛直方向の拡散係数や粘性係数を大きくすることで、乱流による混合をパラメタライズしている。

このように、粘性項・拡散項が極端に大きくなる場合、急激な場の均質化がおき、時間変化が大きくなるため、安定した計算を行なうためには、時間間隔を非常に短くとらなくてはならない。

これを回避する方法として、陰解法がある。拡散・粘性項が大きいことによって、急激な場の均質化がおきるわけであるが、均質化された結果を先取り利用して、粘性・拡散項を差分化することにより、拡散・粘性項の寄与を小さくする、言い替えれば、本当は短い時間中におきる急減な変化を（実際にとっている）長い時間間隔で起こさせるようにして、変化を滑らかに起こさせるようにするというのが、基本的な考え方のようである。

現在のタイムステップを n、その前後を $n\pm1$ と表すことにし、leap-frog スキームを用いて、温度方程式を差分化する。拡散項については、水平方向には $n-1$ ステップ目の、鉛直方向には $n+1$ ステップ目の値を用いるので別々に書く。

$$(T^{n+1}-T^{n-1})/2\Delta t = -\mathscr{A}(T^n)+\mathscr{D}_H(T^{n-1})+\mathscr{D}_V(T^{n+1}) \tag{2.28}$$

タイムステップ T^{n+1} の項を左辺にまとめると、

$$T^{n+1} - 2\Delta t \mathscr{D}_V(T^{n+1}) = T^{n-1} + 2\Delta t(-\mathscr{A}(T^n) + \mathscr{D}_H(T^{n-1})) \tag{2.29}$$

となり、T^{n+1} を求めるための代数方程式とみなすことができる。
より具体的な差分表現に直すと、

$$\begin{aligned} T_k^{n+1} \quad - \quad & 2\Delta t \frac{1}{\Delta z_k}\left(\kappa_{k-\frac{1}{2}}(T_{k-1}^{n+1} - T_k^{n+1})/\Delta z_{k-\frac{1}{2}} - \kappa_{k+\frac{1}{2}}(T_k^{n+1} - T_{k+1}^{n+1})/\Delta z_{k+\frac{1}{2}}\right) \\ & = T_k^{n-1} + 2\Delta t(-\mathscr{A}(T_k^n) + \mathscr{D}_H(T_k^{n-1})) \end{aligned} \tag{2.30}$$

となり、

$$a = \frac{2\Delta t \kappa_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k-\frac{1}{2}}} \tag{2.31}$$

$$b = 1 + a + c \tag{2.32}$$

$$c = \frac{2\Delta t \kappa_{k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k+\frac{1}{2}}} \tag{2.33}$$

とすると、

$$-aT_{k-1}^{n+1} + bT_k^{n+1} - cT_{k+1}^{n+1} = T_k^{n-1} + 2\Delta t(-\mathscr{A}(T_k^n) + \mathscr{D}_H(T_k^{n-1})) \tag{2.34}$$

と書くことができる。$\mathscr{F}_k \equiv -\mathscr{A}(T_k^n) + \mathscr{D}_H(T_k^{n-1})$ として、行列を用いて書くと以下のようになる。

$$\begin{pmatrix} b & -c & & & & & \\ -a & b & -c & & & & \\ & -a & b & -c & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -a & b & -c & \\ & & & & -a & b & -c \\ & & & & & -a & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ \vdots \\ T_{KM-2}^{n+1} \\ T_{KM-1}^{n+1} \\ T_{KM}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_1^{n-1} + 2\Delta t \mathscr{F}_1 \\ T_2^{n-1} + 2\Delta t \mathscr{F}_2 \\ T_3^{n-1} + 2\Delta t \mathscr{F}_3 \\ \vdots \\ T_{KM-2}^{n-1} + 2\Delta t \mathscr{F}_{KM-2} \\ T_{KM-1}^{n-1} + 2\Delta t \mathscr{F}_{KM-1} \\ T_{KM}^{n-1} + 2\Delta t \mathscr{F}_{KM} \end{pmatrix} \tag{2.35}$$

左辺は 3 重対角行列の形をしている。

2.5.1　3 重対角行列の解法

一般に 係数行列が 3 重対角行列になる n 元連立 1 次方程式

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\ & & & A_n & B_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{n-1} \\ X_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_{n-1} \\ D_n \end{pmatrix} \tag{2.36}$$

を解く際は、以下に示す LU 分解を変形した方法である Thomas 法を用いて解く。

$$P_1 = C_1/B_1 \tag{2.37}$$
$$Q_1 = D_1/B_1 \tag{2.38}$$
$$P_k = \frac{C_k}{B_k - A_k P_{k-1}} \qquad (2 \leq k \leq n-1) \tag{2.39}$$
$$Q_k = \frac{D_k - A_k Q_{k-1}}{B_k - A_k P_{k-1}} \qquad (2 \leq k \leq n) \tag{2.40}$$
$$X_n = Q_n \tag{2.41}$$
$$X_k = Q_k - P_k X_{k+1} \qquad (1 \leq k \leq n-1) \tag{2.42}$$

References

Durran, D. R., 1999: *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics.*, Springer-Verlag, 465pp.