

風上差分

春日 悠

2019年6月9日

目次

1	風上差分	3
1.1	差分近似	3
1.2	風上差分	5
1.3	流束による表現	6
2	高次精度風上差分	8
2.1	2次精度風上差分	8
2.2	QUICK	9
2.3	3次精度風上差分	10
2.4	Lax-Wendroff 法	10
2.5	Beam-Warming 法	11
2.6	Fromm 法	11
2.7	MUSCL 内挿	11
3	単調性を保つ高次精度風上差分スキーム	13
3.1	有界性と単調性	13
3.2	緩和修正法	14
3.3	高解像度スキーム	15
3.4	TVD スキーム	15
3.4.1	TVD スキーム	15
3.4.2	TVD-MUSCL スキーム	18
3.5	NVD スキーム	20
3.6	勾配制限	23
3.6.1	Barth and Jespersen スキーム	23
3.6.2	Venkatakrishnan スキーム	24
3.6.3	Michalak and Ollivier-Gooch スキーム	24
3.6.4	勾配制限関数と流束制限関数の関係	25
3.7	WENO スキーム	27

3.7.1	WENO 補間	27
3.7.2	WENO 再構成	29
4	有限体積法における離散化スキーム	32
4.1	有限体積法における離散化スキーム	32
4.2	中心差分	33
4.3	1次精度風上差分	33
4.4	線形風上差分	33
4.5	TVD・NVD スキーム	34
5	各種スキームの比較	35
	参考文献	38

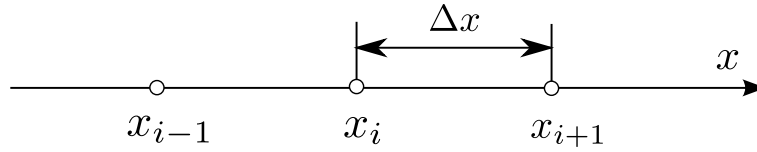


図 1: 格子点

1 風上差分

1.1 差分近似

関数の微分を，有限個の点列上で表された変数による代数式で近似することを考える．関数 $\phi(x)$ を考え，これを $x + \Delta x$ でテーラー展開すると次式になる．

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) + \frac{d\phi(x)}{dx} \Delta x + \dots \quad (1)$$

展開を 2 項で打ち切ると，次式を得る．

$$\frac{d\phi(x)}{dx} \approx \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x} \quad (2)$$

これを関数 $\phi(x)$ の微分の差分近似という．

ここで，点の座標をそれぞれ x_1, x_2, \dots, x_n と表す．これを格子点という．その中で注目している点を x_i とし，その前の点を x_{i+1} ，その後の点を x_{i-1} などと表す (図 1)．点どうしの距離は Δx とする．また， $\phi_i = \phi(x_i)$ ， $(d\phi/dx)_i = d\phi(x_i)/dx$ と表す． ϕ_{i+1} でテーラー展開すると

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \Delta x + O(\Delta x^2) \quad (3)$$

ここで $O(\Delta x^2)$ というのはオーダーといい，だいたいこの程度の大きさ (ここではせいぜい Δx^2 くらい) という程度の意味である．テーラー展開を打ち切る場合，このオーダーが打ち切り誤差であり，近似精度を表す指標となる．上式を変形すると

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (4)$$

右辺第 2 項を無視して

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \quad (5)$$

ここで無視した $O(\Delta x)$ は Δx の 1 乗のオーダーなので，この差分近似の精度は 1 次 (first-order) であるとか，1 次精度 (first-order accurate) であるという．この差分は x_i の前の x_{i+1} を使ったものなので前進差分 (forward difference) という．同様に後退差分 (backward difference) が次式で表される．

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \quad (6)$$

関数 $\phi(x)$ について, ϕ_{i+1}, ϕ_{i-1} でそれぞれテーラ展開を行うと, つぎのようになる.

$$\begin{aligned}\phi_{i+1} &= \phi_i + \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \\ \phi_{i-1} &= \phi_i - \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + O(\Delta x^3)\end{aligned}\tag{7}$$

ここで $\phi_{i+1} - \phi_{i-1}$ をとると

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)\tag{8}$$

これより

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x}\tag{9}$$

これを中心差分 (central difference) といい, 2 次精度である.

また, $\phi_{i+1} + \phi_{i-1}$ をとると

$$\begin{aligned}\phi_{i+1} &= \phi_i + \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i \Delta x^3 + O(\Delta x^4) \\ \phi_{i-1} &= \phi_i - \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_i \Delta x^3 + O(\Delta x^4)\end{aligned}\tag{10}$$

なので, 3 階微分の項が打ち消されて

$$\phi_{i+1} + \phi_{i-1} = 2\phi_i + \left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + O(\Delta x^4)\tag{11}$$

これより

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)\tag{12}$$

したがって

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2}\tag{13}$$

これは 2 階微分の中心差分であり, 2 次精度である.

もっと頑張れば 4 次精度の 1 階微分や 2 階微分の中心差分も作ることができ, それぞれ以下のようなになる [6].

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_i \approx \frac{-\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{12\Delta x}\tag{14}$$

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \approx \frac{-\phi_{i+2} + 16\phi_{i+1} - 30\phi_i + 16\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{12\Delta x^2}\tag{15}$$

見ての通り, 高次精度になると必要な点の範囲が広がっていく. 計算に用いられる点の組のことをステンシル (stencil) という. 一般的に, 高次精度の差分式ほどステンシルの幅が広がる.

1.2 風上差分

つぎの移流方程式を考える．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (16)$$

ここで u は移流速度で，特に断らない限り $u > 0$ とする．これを差分近似で表す．連続体の方程式を代数式で近似することを離散化 (discretisation) という．ここでは時間微分の項を前進差分，空間微分の項 (移流項) を中心差分で近似する．

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (17)$$

ここで Δt は時間刻み幅，変数の右肩の $n, n+1$ は時間ステップを表す．変形して

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{1}{2}c(\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n) \quad (18)$$

ここで c は $c = u\Delta t/\Delta x$ でありクーラン数 (Courant number) と呼ばれる．このように $n+1$ の値を n の変数だけで表すことができる方法を時間に関する陽解法 (implicit scheme) という．そうでないものを陰解法 (implicit scheme) という．陽解法は陰解法よりも計算が簡単になる代わりにクーラン数についての安定条件があり， $|c| \leq 1$ である必要がある．この条件は CFL (Courant-Friedrich-Lewy) 条件とか，クーラン条件などと呼ばれる．これは時間刻み幅 Δt が速度と格子幅に制限されることを意味する．

上の式はつぎのように表される．

$$\phi_i^{n+1} = -\frac{1}{2}c\phi_{i+1}^n + \phi_i^n + \frac{1}{2}c\phi_{i-1}^n \quad (19)$$

ここでは $u > 0$ 考えているので $c > 0$ であり，右辺第 1 項の係数が負になる．これは，もし $\phi > 0$ だとしても場合によっては ϕ_i^{n+1} の値が負になりうることを意味している．数値的には不自然な振動として現れる．それでも問題がない場合もあるが， ϕ が絶対温度の場合は物理的にあり得ない値を生じることになる．

この問題を回避する単純な方法として，空間微分に後退差分を適用する方法がある．

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (20)$$

変形して

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \quad (21)$$

この場合

$$\phi_i^{n+1} = (1-c)\phi_i^n + c\phi_{i-1}^n \quad (22)$$

となり， $c > 0$ かつ CFL 条件により $c \leq 1$ なので，右辺の係数はすべて正になる (むしろ係数を正にするために $|c| < 1$ という条件が必要である)．このように移流項の離散化に後退差分を用いる方法を風上差分 (upwind difference) という．この名前は風上から値を補間することを意味しており，実際は流速 u の正負を調べて補間方向を切り

替える．一般に，ステンシルを風上側に寄せぎみにする (upwind biased) 差分を風上差分と呼ぶ．

上式は次式のように変形できる．

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{1}{2}c(\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n) + \frac{1}{2}c(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \quad (23)$$

右辺第 2 項までは中心差分であり，第 3 項は空間の 2 階微分 (拡散を意味する) を離散化した形になっている．したがって，風上差分は中心差分に数値的な拡散を加えて安定化したものと考えることができる．それゆえ解がなまることになる．

上記のように方程式を差分近似して解く方法を有限差分法 (finite difference method)，あるいは単純に差分法という．また，方程式の離散化の手段のことを離散化スキーム (discretisation scheme)，差分法では特に差分スキームなどという．ここでは風上差分として 1 次精度の後退差分を用いたので，1 次精度風上差分スキーム (first order upwind scheme) などという．

1.3 流束による表現

ここでは速度 u は一定としているので，移流方程式は次のようにも書ける．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u\phi}{\partial x} = 0 \quad (24)$$

これを移流方程式の保存形式という．これを離散化すると

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (25)$$

ここで $f = u\phi$ は流束 (flux) であり，添字の $i+1/2$ は位置 $x_{i+1/2} = x_i + \Delta x/2$ での値を意味する． $x_{i+1/2}$ は，格子点を囲む領域を考えたときの界面 (ここでは格子界面と呼ぶことにする) の位置である．格子界面の流束の値は格子点の値からの推定値になるため， $f_{i+1/2}$ ， $f_{i-1/2}$ は数値流束 (numerical flux) と呼ばれる．ここでは u は一定なので，便宜上つぎのように表す．

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_{i+1/2}^n - \phi_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (26)$$

整理して

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c(\phi_{i+1/2}^n - \phi_{i-1/2}^n) \quad (27)$$

このように表現した場合，中心差分は以下のように表される．

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2} &= \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_i) \\ \phi_{i-1/2} &= \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i-1}) \end{aligned} \quad (28)$$

これは格子界面の値を格子点の値で線形補間することを意味している (ここでは格子幅が一定なので単純な平均になっている)．

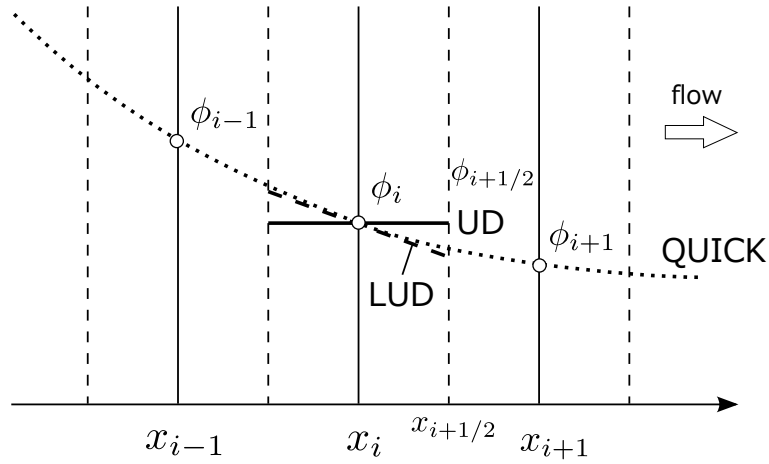


図 2: 風上差分 (UD: 1 次精度風上差分, LUD: 線形風上差分)

風上差分の場合は、つぎのようになる。

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2} &= \phi_i \\ \phi_{i-1/2} &= \phi_{i-1}\end{aligned}\tag{29}$$

これは格子界面の値を上流の格子点からそのままってくることを意味している (図 2 の UD)。速度 u の符号を考慮すると次式のようなになる。

$$\phi_{i+1/2} = \begin{cases} \phi_i & (u \geq 0) \\ \phi_{i+1} & (u < 0) \end{cases}\tag{30}$$

上式を速度 u の符号を調べて切り替えるのだが、形式的にひとつの式にまとめてしまうこともできる。

$$\begin{aligned}f_{i+1/2} &= \frac{u + |u|}{2} \phi_{i+1/2}^L + \frac{u - |u|}{2} \phi_{i+1/2}^R \\ &= \frac{1}{2} [f_{i+1/2}^R + f_{i+1/2}^L - |u|(\phi_{i+1/2}^R - \phi_{i+1/2}^L)]\end{aligned}\tag{31}$$

ここで、変数の上付きの L は格子界面の値を左から正方向に補間したもの、 R は右から負の方向に補間したものである。

流束による表現は、形式的には有限体積法 (finite volume method) の考え方から自然に出てくる。有限体積法では、代表点 x_i の周りに検査体積 (control volume) あるいはセル (cell) と呼ばれる領域を考え、その範囲で積分した方程式を考える。保存形式の移流方程式をセルで積分すると

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \right) dx = 0\tag{32}$$

有限体積法においては，代表点の値 (セル中心値) はセル内の体積平均値とみなされる．

$$\phi_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \phi dx \quad (33)$$

これより，積分方程式は次のように変形できる．

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_i + \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x} = 0 \quad (34)$$

この式は，セルにおける物理量の流入・流出のバランスを表しており，この形式は保存式を扱う場合に特に重要である．右辺第 2 項は，差分として見ると微分に対する 2 次精度の差分近似だが，有限体積法として見ると微分の平均値に対する厳密な表現になっている．

流束による表現を用いて差分法で離散化したものは，有限体積法から得られた上式を離散化したものと形としては同じものになる．ただし，厳密には上式は格子点周りの平均値についてのものであり，その前提で計算される数値流束は，格子点の値の補間で表されたものと一致するとは限らない (実際には単純な補間が用いられるかもしれない)．そのため，格子点周囲の平均値から数値流束の値を計算することを再構成 (reconstruction) と呼んで補間 (interpolation) と区別することがある．van Leer [9] は再構成の方法を差分法の枠組みの中で用いているが，現在では (同じ構造格子であれば) 格子点の値を格子点位置の値とみなすのが差分法，周囲の平均値とみなすのが有限体積法として区別されているようである．

2 高次精度風上差分

2.1 2 次精度風上差分

1 次精度風上差分では格子界面の値として上流の値をそのままスライドしたが，それを線形補間する方法が考えられる (図 2 の UD, LUD)．この方法は 2 次精度であり，2 次精度風上差分とか線形風上差分 (linear upwind difference) などといわれる．

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2} &= \phi_i + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \\ &= \phi_i + \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} \frac{\Delta x}{2} \\ &= \phi_i + \frac{1}{2}(\phi_i - \phi_{i-1}) \end{aligned} \quad (35)$$

流速 u の正負を考慮すると次のようになる．

$$\phi_{i+1/2} = \begin{cases} \phi_i + \frac{1}{2}(\phi_i - \phi_{i-1}) & (u \geq 0) \\ \phi_{i+1} + \frac{1}{2}(\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) & (u < 0) \end{cases} \quad (36)$$

このスキームは，2 次精度完全風上差分 (fully upwind) と呼ばれることがある．

上では勾配を後退差分で表したが，中心差分を用いる方法も考えられる．

$$\begin{aligned}
 \phi_{i+1/2} &= \phi_i + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \\
 &= \phi_i + \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} \frac{\Delta x}{2} \\
 &= \phi_i + \frac{1}{4}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1})
 \end{aligned} \tag{37}$$

流速 u の正負を考慮すると次のようになる．

$$\phi_{i+1/2} = \begin{cases} \phi_i + \frac{1}{4}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) & (u \geq 0) \\ \phi_{i+1} + \frac{1}{4}(\phi_i - \phi_{i+2}) & (u < 0) \end{cases} \tag{38}$$

これは 2 次精度完全風上差分と中心差分を算術平均 (足して 2 で割る) したものに相当する．このタイプの差分は upwind-biased centered scheme (風上中心差分?) などと呼ばれているようである．

2.2 QUICK

QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) [7] は 2 次多項式を構成して格子界面の値を補間する (図 2)．次式を考える．

$$\phi(x) = a_0 + a_1(x - x_i) + a_2(x - x_i)^2 \tag{39}$$

係数 a_0, a_1, a_2 を $\phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}$ から求め， $\phi_{i+1/2}$ を求める．最終的に次式が得られる．

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{8}(3\phi_{i+1} + 6\phi_i - \phi_{i-1}) \tag{40}$$

これは次式のように表すことができる．

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\phi_i + \phi_{i+1}) - \frac{1}{8}(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \tag{41}$$

これは中心差分に修正項が付加されたものであることを意味している．

流速 u の正負を考慮すると次のようになる．

$$\phi_{i+1/2} = \begin{cases} \frac{1}{8}(3\phi_{i+1} + 6\phi_i - \phi_{i-1}) & (u \geq 0) \\ \frac{1}{8}(3\phi_i + 6\phi_{i+1} - \phi_{i+2}) & (u < 0) \end{cases} \tag{42}$$

補間自体は 3 次精度であるが，差分としては 2 次精度になる．ただし，QUICK の精度については混乱があると発案者の Leonard らは指摘している [8] (Appendix A)．というのは，差分近似としては確かに 2 次精度であるが，有限体積法では誤差の評価方法が差分法と異なる．差分法としては $(f_{i+1/2} - f_{i-1/2})/\Delta x$ は微分の差分近似だが，有限体積法としては微分の平均についての厳密な表現であって，これを微分の近似式として評価するのは妥当ではなく，この式そのものの近似精度を評価する必要がある．

つまり、数値流束を $f_{i+1/2}^*, f_{i-1/2}^*$ 、真の流束を $f_{i+1/2}, f_{i-1/2}$ として区別すると、誤差として

$$\frac{(f_{i+1/2}^* - f_{i+1/2}) - (f_{i-1/2}^* - f_{i-1/2})}{\Delta x} \quad (43)$$

のオーダーを見なければならない。このように評価すると、QUICK は 3 次精度ということになる。

2.3 3 次精度風上差分

QUICK は格子界面の値を多項式で表したが、多項式を直接微分して差分を得る方法も考えられる。つぎの 3 次多項式を考える。

$$\phi(x) = a_0 + a_1(x - x_i) + a_2(x - x_i)^2 + a_3(x - x_i)^3 \quad (44)$$

係数 a_0, a_1, a_2, a_3 を $\phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}$ から求め、 x で微分すると、次の 3 次精度風上差分が得られる。

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i = \frac{2\phi_{i+1} + 3\phi_i - 6\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{6\Delta x} \quad (45)$$

格子界面の値で表現すると次式になる。

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{6}(2\phi_{i+1} + 5\phi_i - \phi_{i-1}) \quad (46)$$

QUICK と同様に Leonard らの方法を評価すると、このスキームは有限体積法においては 2 次精度である。

2.4 Lax-Wendroff 法

時間微分については 1 次精度の前進差分を考えてきたが、時間差分の高精度化を考える。格子点の値を時間について 2 階微分の項までテーラー展開する。

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta t \frac{\partial \phi_i^n}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2 \phi_i^n}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) \quad (47)$$

ここで時間の 2 階微分は、移流方程式から空間の 2 階微分に変換できる。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(-u \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = -u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (48)$$

したがって

$$\frac{\partial \phi_i^n}{\partial t} = \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} u^2 \Delta t \frac{\partial^2 \phi_i^n}{\partial x^2} + O(\Delta t^2) \quad (49)$$

これは 2 次精度である。空間 2 階微分と移流項に中心差分を適用すると、移流方程式は次式のように離散化される。

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{1}{2} c(\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n) + \frac{1}{2} c^2(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \quad (50)$$

これを Lax-Wendroff 法という．時間 2 次精度，空間 2 次精度である．風上差分 + 高精度項の形で表すと次式のようなになる．

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) + \frac{1}{2}c(c-1)(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \quad (51)$$

2.5 Beam-Warming 法

Lax-Wendroff 法と同様の方法で，空間 2 階微分に $i-1$ の中心差分を適用し，移流項に 2 次精度風上差分を用いると，Beam-Warming 法とよばれる次式を得る．

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) + \frac{1}{2}c(c-1)(\phi_i^n - 2\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n) \quad (52)$$

2.6 Fromm 法

Fromm 法は Lax-Wendroff 法と Beam-Warming 法を算術平均したものに当たる．

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c(\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) + \frac{1}{4}c(c-1)(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n - \phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n) \quad (53)$$

これは移流項に風上中心差分を適用したものになる．

2.7 MUSCL 内挿

van Leer は，保存則のための離散化スキームの高精度化の方法を示した [9]．これは MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws) 法などと呼ばれている (“MUSCL” 自体はプログラムコードの名前のようである [10]) ．

本来の方法はラグランジュ的なもので

1. 格子点の値を格子内の平均値とみなす
2. 格子内の値の分布を仮定する
3. 速度に応じて分布をスライドさせる
4. 格子内の平均値を計算し直す

といった手順で，次の時間ステップの格子点の値を計算するスキームを構成する．一般的には，ここで用いられる値の補間(再構成)の手法のみが用いられ，これは MUSCL 内挿 (MUSCL interpolation) などと呼ばれている．

格子点の値 ϕ_i を，格子内の平均値として考える．

$$\phi_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \phi(x) dx \quad (54)$$

格子界面の値 $\phi_{i+1/2}$ を推定することを目的として、 ϕ の分布を上式を満たすように次式で仮定する。

$$\phi(s) = \phi_i + \sum_{k=1}^{r-1} a_k P_k(2s) \quad (55)$$

ここでは簡単のために $s = (x - x_i)/\Delta x$ に変数変換している、 r は項の数、 $P_k(x)$ はルジャンドル多項式である。ルジャンドル多項式は直交多項式系の一つで、次式を満たす。

$$\int_{-1}^1 P_k(x) P_j(x) dx = 0 \quad (j = 0, 1, 2, \dots) \quad (56)$$

具体的には

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= (3x^2 - 1)/2 \\ P_3(x) &= (5x^3 - 3x)/2 \\ P_4(x) &= (35x^4 - 30x^2 + 3)/8 \end{aligned} \quad (57)$$

したがって、次式も成り立つ。

$$\int_{-1}^1 P_k(x) dx = 0 \quad (58)$$

これより

$$\int_{-1/2}^{1/2} \phi(s) ds = \phi_i + \sum_{k=1}^{r-1} a_k \int_{-1/2}^{1/2} P_k(2s) ds = \phi_i \quad (59)$$

つまり、積分すると格子点の値になるという性質を崩さずにいくらかでも項を増やすことができる。第1項のみを取れば単純な1次精度風上差分である。

ここで、3項まで取ると

$$\phi(s) = \phi_i + 2sa_1 + \frac{12s^2 - 1}{2} a_2 \quad (60)$$

係数は微分値から決める。

$$\begin{aligned} \phi'(0) &= 2a_1 = \delta_i \phi \\ \phi''(0) &= 12a_2 = \delta_i^2 \phi \end{aligned} \quad (61)$$

これより

$$\phi(s) = \phi_i + s\delta_i \phi + \frac{1}{2} \left(s^2 - \frac{1}{12} \right) \delta_i^2 \phi \quad (62)$$

微分値 $\delta_i \phi$ 、 $\delta_i^2 \phi$ は差分で求めることにする。

$$\begin{aligned} \delta_i \phi &= \frac{1}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \\ \delta_i^2 \phi &= \phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1} \end{aligned} \quad (63)$$

最終的に，格子界面 ($s = 1/2$) の値は次式で表される．

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2} &= \phi_i + \frac{1}{4}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) + \frac{1}{12}(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \\ &= \frac{1}{6}(2\phi_{i+1} + 5\phi_i - \phi_{i-1})\end{aligned}\quad (64)$$

これは 3 次精度風上差分に相当する．

MUSCL 内挿は次式のように一般化される [11] ．

$$\phi(s) = \phi_i + s\delta_i\phi + \frac{3\kappa}{2}\left(s^2 - \frac{1}{12}\right)\delta_i^2\phi\quad (65)$$

格子界面の値は， $u > 0$ のとき

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2} &= \phi_i + \frac{1}{2}\delta_i\phi + \frac{\kappa}{4}\delta_i^2\phi \\ &= \phi_i + \frac{1}{4}(1 - \kappa)(\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{1}{4}(1 + \kappa)(\phi_{i+1} - \phi_i)\end{aligned}\quad (66)$$

$u < 0$ の場合は

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2} &= \phi_{i+1} - \frac{1}{2}\delta_{i+1}\phi + \frac{\kappa}{4}\delta_{i+1}^2\phi \\ &= \phi_{i+1} - \frac{1}{4}(1 + \kappa)(\phi_{i+1} - \phi_i) - \frac{1}{4}(1 - \kappa)(\phi_{i+2} - \phi_{i+1})\end{aligned}\quad (67)$$

パラメタ κ の値に応じてスキームを変えることができる． $\kappa = 1$ のとき中心差分， $\kappa = -1$ のとき 2 次精度完全風上差分， $\kappa = 0$ のとき風上中心差分， $\kappa = 1/2$ のとき QUICK， $\kappa = 1/3$ のとき 3 次精度風上差分になる．

3 単調性を保つ高次精度風上差分スキーム

3.1 有界性と単調性

離散化スキームについて，物理量の有界性や単調性が問題になる．物理量が増えも減りもしないで移流するだけの場合，物理量は初期値の最小値と最大値の範囲内にある．これを有界性 (boundedness) といい，有界性を性質としてもつとき有界である (bounded) という．定常の現象の場合も同様で，発熱や冷却のない熱伝導問題では，領域内の温度は境界の温度の最小値と最大値のあいだにある．このような問題に対して有界性をもたない離散化スキームを用いた場合，非物理的な解を生じる可能性がある．

単調性 (monotonicity) は，物理量がオーバーシュートやアンダーシュートなどの振動を起こさない性質で，これを持つとき単調である (monotone) という．単調であるとき，振動が起らず有界性を破らないので，単調であるときは有界であると考えてよい．

有界性は計算の安定性と関連付けられ，両者はほぼ同じ意味で使われることがある．時間について陰解法を用いる場合や定常問題の場合，代数方程式を解くために反復法

が使われる．反復法の収束条件として，係数行列の対角要素（ここでは注目する格子点 i の係数）の絶対値が他の要素の絶対値の和よりも大きいという対角優位性 (diagonally dominant) をもつ必要がある．代数方程式がきちんと解けなければ計算が発散するか，解けても有界性が満たされない可能性がある．そのため，有界であるためには対角優位である必要があり，対角優位であるならば計算は安定するので，有界性をもつことは計算の安定性のための十分条件になる．

離散化スキームが単調性をもつためには，離散化式の係数がすべて正である必要がある．中心差分はこの条件を満たさないため，単調でなく，有界でもない．1次精度風上差分はこの条件を満たし，単調で有界である．一般に，単純な高次精度差分スキームは単調でない．

3.2 緩和修正法

高次精度差分スキームで有界性を確保するための方法として，緩和修正法 (deferred correction) がある．これは反復計算を行う場合に，スキームの一部をソース項に移動して計算を次の反復に遅らせて (deferred)，係数が正になるようにする．

時間について陰解法を用いた移流方程式の離散化を考える．

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + u \frac{\phi_{i+1/2}^{n+1} - \phi_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x} = 0 \quad (68)$$

格子界面の値について，1次風上差分による値を ϕ_{UD} ，中心差分による値を ϕ_{CD} とすると，中心差分による格子界面の値は次式で表すことができる．

$$\phi_{i+1/2} = \phi_{UD} + (\phi_{CD} - \phi_{UD}) \quad (69)$$

$u > 0$ として整理すると，次式になる．

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{2}(\phi_{i+1} - \phi_i) \quad (70)$$

たとえば，第2項を陽的に扱う．

これより，移流方程式の離散化式は次のようになる．

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c(\phi_i^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}) - \frac{1}{2}c(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \quad (71)$$

さらに整理して

$$(1+c)\phi_i^{n+1} = c\phi_{i-1}^{n+1} + \left\{ \phi_i^n - \frac{1}{2}c(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \right\} \quad (72)$$

これで $n+1$ についての係数はすべて正になる．

3.3 高解像度スキーム

衝撃波などの不連続性を捕捉したい場合や、単純に移流をきちんと解きたい場合、高解像度のスキーム (high resolution scheme) が必要になる。まず高次精度なものが必要になるが、一般に高次精度差分スキームは値に振動を生じる。一方で、振動を抑えられる 1 次精度風上差分では値が減衰してしまう。しかし、単調性をもつ単純な高次精度スキームは存在しないことが知られている (Godunov の定理)。では、いくつかのスキームを組み合わせたらどうか。必要に応じてスキームを切り替えれば、平均的に高精度で有界なスキームを構成できる。

このような考えのもとに構成されたものとして、TVD スキームや NVD スキームなどがある。

3.4 TVD スキーム

3.4.1 TVD スキーム

TVD スキーム [12] [13] は、単調性を保つために全変動 (Total Variation: TV) という量を用いる。TV は次式で定義される。

$$\text{TV}(\phi^n) = \sum_i |\phi_{i+1}^n - \phi_i^n| \quad (73)$$

これは隣同士の格子点の値の変化の総和であり、全体的な値のでこぼこ具合を表している。ある形の分布が増減なしで移流するとき、本来は形を変えないので、全体的な値のでこぼこ具合は変わらないはずであり、少なくとも増えることはないはずである。したがって、単調性を維持する条件として以下の条件が考えられる。

$$\text{TV}(\phi^{n+1}) \leq \text{TV}(\phi^n) \quad (74)$$

これを全変動 (Total Variation Diminishing: TVD) 条件という。この条件を満たすスキームを TVD スキームと呼ぶ。

次の形の離散化式を仮定する。

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - C_{i-1/2} \Delta \phi_{i-1/2}^n + D_{i+1/2} \Delta \phi_{i+1/2}^n \quad (75)$$

ここで $\Delta \phi_{i+1/2} = \phi_{i+1} - \phi_i$ である。 ϕ_{i+1}^n から上式を引いて TV を構成すると次式になる。

$$\begin{aligned} \sum_i |\Delta \phi_{i+1/2}^{n+1}| &= \sum_i (1 - C_{i+1/2} - D_{i+1/2}) |\Delta \phi_{i+1/2}^n| + \\ &\quad \sum_i C_{i-1/2} |\Delta \phi_{i-1/2}^n| + \sum_i D_{i+3/2} |\Delta \phi_{i+3/2}^n| \end{aligned} \quad (76)$$

TVD 条件から以下が得られる。

$$C_{i+1/2} \geq 0, \quad D_{i+1/2} \geq 0, \quad 0 \leq C_{i+1/2} + D_{i+1/2} \leq 1 \quad (77)$$

格子界面の値について，1次風上差分による値を ϕ_{UD} ，中心差分による値を ϕ_{CD} とし，次式のように構成する．

$$\phi_{i+1/2} = \phi_{UD} + \psi(\phi_{CD} - \phi_{UD}) \quad (78)$$

ここで ψ はスキームを調整する関数で，流束制限関数 (flux limiter function) と呼ばれる．本来は Lax-Wendroff 法と Beam-Warming 法を組み合わせるが，時間微分項の離散化と分けて考えるために上のようにする．流れを正方向として整理すると，上式は次式のように表される．

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{2}\psi(\phi_{i+1} - \phi_i) \quad (79)$$

流束制限関数を何の関数にするかが問題だが，ここでは，解の振動を抑えつつ減衰も抑えたい．解の変化が大きいく所だけで減衰が効けばよいので，解の変化を検出できればよい．解の変化の大きさを測るパラメタとして，次の連続する格子点の値の変化の比 (consecutive gradient) r_i を考える．

$$r_i = \frac{\Delta\phi_{i-1/2}}{\Delta\phi_{i+1/2}} \quad (80)$$

ψ はこの r_i の関数とする．文献によっては r_i を逆さまに定義している場合があるので注意．ここでは Sweby [13] の定義に従う．

スキームが TVD 条件を満たすための $\psi(r)$ の条件を求める．式 (79) を用いて移流方程式を離散化すると次式のようになる．

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - c\Delta\phi_{i-1/2}^n - \frac{1}{2}c(\psi(r_i)\Delta\phi_{i+1/2}^n - \psi(r_{i-1})\Delta\phi_{i-1/2}^n) \quad (81)$$

式 (75) と比較して，次式を得る．

$$C_{i-1/2} = c + \frac{1}{2}c \frac{\psi(r_i)\Delta\phi_{i+1/2}^n - \psi(r_{i-1})\Delta\phi_{i-1/2}^n}{\Delta\phi_{i-1/2}^n} \quad (82)$$

ここで $D_{i+1/2} = 0$ とした． $C_{i-1/2}$ は次のように表される．

$$C_{i-1/2} = c\left\{1 + \frac{1}{2}(\psi(r_i)/r_i - \psi(r_{i-1}))\right\} \quad (83)$$

$C_{i-1/2}$ の範囲は次のようになる．

$$c\left(1 - \frac{1}{2}\Phi\right) \leq C_{i-1/2} \leq c\left(1 + \frac{1}{2}\Phi\right) \quad (84)$$

ここで

$$|\psi(r_i)/r_i - \psi(r_{i-1})| \leq \Phi \quad (85)$$

式 (77) より

$$|\psi(r_i)/r_i - \psi(r_{i-1})| \leq 2 \quad (86)$$

これより以下を得る .

$$\psi(r)/r \leq 2, \quad \psi(r) \leq 2 \quad (87)$$

最後に $r \leq 0$ のとき $\psi(r) = 0$ という条件を加えて整理すると , スキームが TVD 条件を満たすための $\psi(r)$ の条件は以下ようになる .

$$\begin{cases} \psi(r) = 0 & (r \leq 0) \\ \psi(r) \leq 2r & (0 < r < 1) \\ \psi(r) \leq 2 & (r \geq 1) \end{cases} \quad (88)$$

代表的なスキームをそれぞれ制限関数の形で表すと , 以下ようになる .

1 次精度風上差分

$$\psi(r) = 0 \quad (89)$$

中心差分

$$\psi(r) = 1 \quad (90)$$

2 次精度風上差分

$$\psi(r) = r \quad (91)$$

QUICK

$$\psi(r) = \frac{3+r}{4} \quad (92)$$

1 次精度風上差分は TVD 条件を満たすが , 中心差分 , 2 次精度風上差分 , QUICK は部分的にしか満たさない (図 3) . ちなみに , 風上中心差分は中心差分と 2 次精度 (完全) 風上差分の算術平均なので , 単純に $\psi(r) = (1+r)/2$ である .

任意の 2 次精度差分スキームを中心差分と 2 次精度風上差分の混合で表すと , 2 次精度 TVD スキームの領域を限定することができる . さまざまな制限関数が提案されているが , 以下に代表的なものを挙げる .

minmod

$$\psi(r) = \max(0, \min(r, 1)) \quad (93)$$

superbee

$$\psi(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(r, 2)) \quad (94)$$

van Leer [14]

$$\psi(r) = \frac{r + |r|}{1 + r} \quad (95)$$

van Albada [15]

$$\psi(r) = \frac{r + r^2}{1 + r^2} \quad (96)$$

UMIST

$$\psi(r) = \max(0, \min(2r, (1 + 3r)/4, (3 + r)/4, 2)) \quad (97)$$

MUSCL [9]

$$\psi(r) = \max(0, \min(2r, (1 + r)/2, 2)) \quad (98)$$

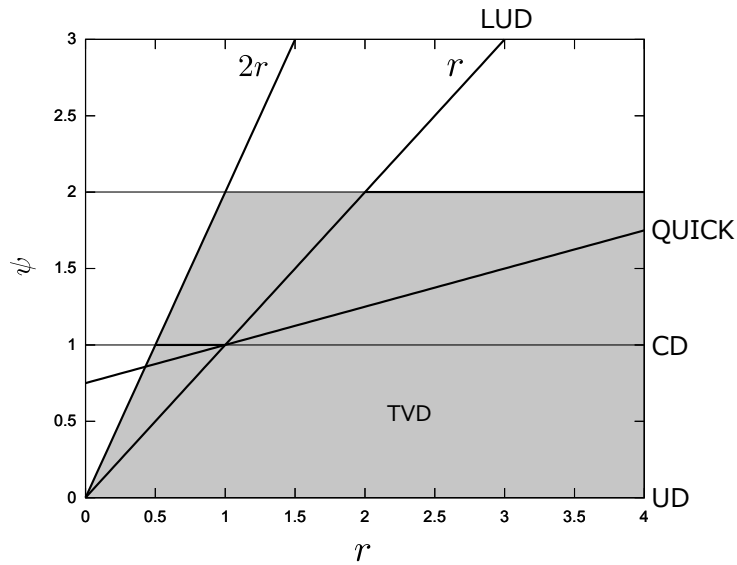


図 3: TVD 条件 (UD : 1 次精度風上差分 , CD : 中心差分 , LUD : 2 次精度風上差分)

ここで $\min(a, b, \dots)$ は引数のうちで最小の値を取り, $\max(a, b, \dots)$ は引数のうちで最大の値を取る. 上記はすべて TVD 条件を満たし, 2 次精度である (図 4). $\min\text{mod}$ は 2 次精度領域の下限を与え, superbee は上限を与える. ここで "MUSCL" として挙げたものは制限付き風上中心差分の形であり, "monotonized central" などと呼ばれたりする.

3.4.2 TVD-MUSCL スキーム

MUSCL 内挿では, 数値振動を抑制するために制限関数 $\Psi(r)$ を以下のように導入する.

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{4}(1 - \kappa)\Psi(1/r_i)(\phi_i - \phi_{i-1}) + \frac{1}{4}(1 + \kappa)\Psi(r_i)(\phi_{i+1} - \phi_i) \quad (99)$$

これは, 以下のように変形できる.

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2} &= \phi_i + \frac{1}{2}\psi(r_i)(\phi_{i+1} - \phi_i) \\ \psi(r) &= \frac{1}{2}(1 - \kappa)\Psi(1/r)r + \frac{1}{2}(1 + \kappa)\Psi(r) \end{aligned} \quad (100)$$

ここで, 制限関数が対称性 (symmetric property)

$$\frac{\Psi(r)}{r} = \Psi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (101)$$

を満たすとすると

$$\psi(r) = \Psi(r) \quad (102)$$

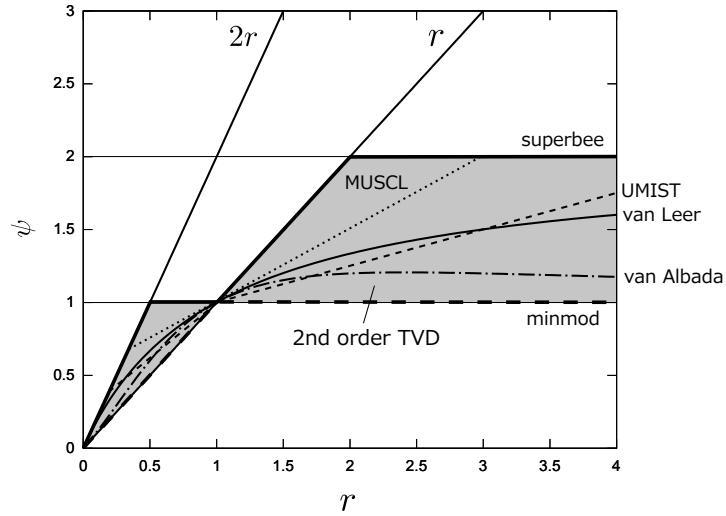


図 4: 2 次精度 TVD スキーム

である．上述の TVD 条件を満たす制限関数はすべて対称性をもつ．対称な制限関数を使う限りは上で見た TVD スキームと同じものになる．

MUSCL スキーム特有の制限手法として，まず minmod 制限関数を用いるものがある [11]．これは制限関数として以下のものを用いる．

$$\Psi(r) = \max(0, \min(1, br)) \quad (103)$$

これは対称でないことに注意．ここで b は

$$b = \frac{3 - \kappa}{1 - \kappa} \quad (104)$$

である．この制限関数を適用すると (r は正として)

$$\psi(r) = \frac{1}{2}(1 - \kappa) \min(r, b) + \frac{1}{2}(1 + \kappa) \min(1, br) \quad (105)$$

右辺第 1 項，第 2 項の制限関数の上限はそれぞれ b ， 1 である．TVD 条件を満たすには

$$\frac{1}{2}(1 - \kappa)b + \frac{1}{2}(1 + \kappa) \leq 2 \quad (106)$$

これより $b \leq (3 - \kappa)/(1 - \kappa)$ が得られる．

別の手法として，勾配制限関数 (slope limiter) を用いるものもある．勾配制限関数を $\psi_f(r)$ として， $\delta_i \phi$ ， $\delta_i^2 \phi$ をそれぞれ $\psi_f(r_i) \delta_i \phi$ ， $(\psi_f(r_i))^2 \delta_i^2 \phi$ に置き換える．

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2} &= \phi_i + \frac{1}{2} \psi_f(r_i) \delta_i \phi + \frac{\kappa}{4} (\psi_f(r_i))^2 \delta_i^2 \phi \\ &= \phi_i + \frac{1}{4} \psi_f(r_i) \left\{ (1 - \kappa \psi_f(r_i)) (\phi_i - \phi_{i-1}) + (1 + \kappa \psi_f(r_i)) (\phi_{i+1} - \phi_i) \right\} \end{aligned} \quad (107)$$

勾配制限関数として以下のものが用いられる .

$$\psi_f(r) = \frac{2r}{1+r^2} \quad (108)$$

これは van Albada の勾配制限関数と呼ばれている . $\kappa = 0$ とすると van Albada の流束制限関数を用いた TVD スキームと同じものになる .

3.5 NVD スキーム

NVD (Normalized Variable Diagram) [19] は , 注目格子点の両隣の格子点のあいだで変数を正規化してスキームを構成する考え方である . 変数 ϕ をつぎのように正規化する .

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}} \quad (109)$$

$\phi = \phi_{i-1}$ のとき $\tilde{\phi} = 0$, $\phi = \phi_{i+1}$ のとき $\tilde{\phi} = 1$ である .

これを用いて , 1 次精度風上差分 , 中心差分 , 2 次精度風上差分 , QUICK はそれぞれ次のように表される .

1 次精度風上差分

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \tilde{\phi}_i \quad (110)$$

中心差分

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \frac{1}{2}\tilde{\phi}_i + \frac{1}{2} \quad (111)$$

2 次精度風上差分

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \frac{3}{2}\tilde{\phi}_i \quad (112)$$

QUICK

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \frac{3}{4}\tilde{\phi}_i + \frac{3}{8} \quad (113)$$

NVD において , 有界性の基準として , 対流有界性基準 (CBC: Convection Boundness Criterion) と呼ばれる以下の基準が使われる .

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i \leq \tilde{\phi}_{i+1/2} \leq 1 & (0 < \tilde{\phi}_i < 1) \\ \tilde{\phi}_{i+1/2} = \tilde{\phi}_i & (\tilde{\phi}_i \leq 0, \tilde{\phi}_i \geq 1) \end{cases} \quad (114)$$

要するに , 値が $\phi_{i-1} < \phi_i < \phi_{i+1/2} < \phi_{i+1}$ となるようにしておき , それを破るときには 1 次風上差分を使うようにすれば有界性を確保できるだろう , ということである . 1 次精度風上差分はこの基準を満たすが , 中心差分 , 2 次精度風上差分 , QUICK は部分的にしか満たさない (図 5) .

CBC を満たすスキームを構成する単純な方法は , $\tilde{\phi}_i$ の途中で中心差分と 2 次精度風上差分を切り替えるものである . 両者は $\tilde{\phi}_i = 1/2$ で交わるので , つぎのようにすればよい .

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \begin{cases} \frac{3}{2}\tilde{\phi}_i & (0 < \tilde{\phi}_i \leq 1/2) \\ \frac{1}{2}\tilde{\phi}_i + \frac{1}{2} & (1/2 < \tilde{\phi}_i < 1) \\ \tilde{\phi}_i & (\tilde{\phi}_i \leq 0, \tilde{\phi}_i \geq 1) \end{cases} \quad (115)$$

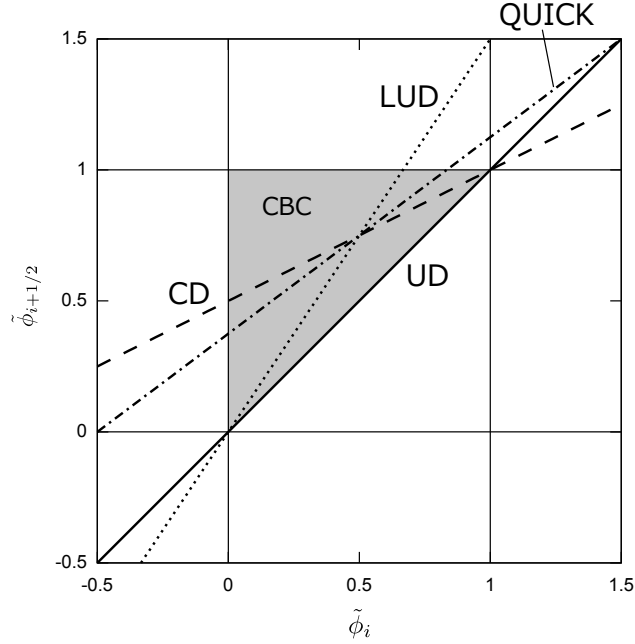


図 5: NVD における有界性基準

任意の 2 次精度差分スキームを中心差分と 2 次精度風上差分の混合で表すと, 2 次精度 NVD スキームの領域を限定することができる. 上記のスキームは 2 次精度領域の下限に当たる.

NVD の考え方で構成されたスキームのひとつに, 以下の Gamma スキーム [20] がある.

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \begin{cases} -\frac{\tilde{\phi}_i^2}{2\beta_m} + \left(1 + \frac{1}{2\beta_m}\right) \tilde{\phi}_i & (0 < \tilde{\phi}_i \leq \beta_m) \\ \frac{1}{2}\tilde{\phi}_i + \frac{1}{2} & (\beta_m < \tilde{\phi}_i < 1) \\ \tilde{\phi}_i & (\tilde{\phi}_i \leq 0, \tilde{\phi}_i \geq 1) \end{cases} \quad (116)$$

ここで β_m はパラメタで, $1/10 \leq \beta_m \leq 1/2$ である. このスキームは 2 次精度である (図 6).

正規化しているので, 最後にもとに戻す必要がある. 1 次精度風上差分と中心差分を組み合わせて表現すると, 次式になる (流れは正方向とする).

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{i+1/2} &= \tilde{\phi}_{UD} + \gamma(\tilde{\phi}_{CD} - \tilde{\phi}_{UD}) \\ &= \tilde{\phi}_i + \frac{1}{2}\gamma(1 - \tilde{\phi}_i) \\ \phi_{i+1/2} &= \phi_i + \frac{1}{2}\gamma(\phi_{i+1} - \phi_i) \end{aligned} \quad (117)$$

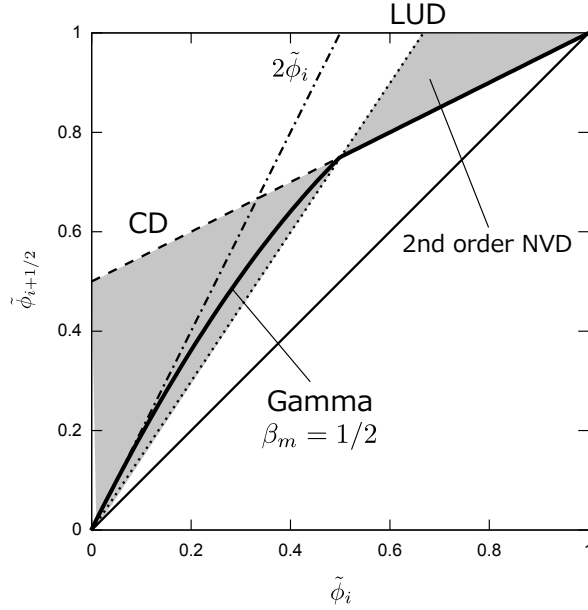


図 6: Gamma スキーム

ここで γ は $\tilde{\phi}_i$ を変数とした流束制限関数に当たる． r_i と $\tilde{\phi}_i$ は次式の関係にある．

$$r_i = \frac{\tilde{\phi}_i}{1 - \tilde{\phi}_i} \quad (118)$$

CBC を満たすように中心差分と 2 次精度風上差分で単純に組み合わせて作ったスキームの場合， γ は次式になる．

$$\gamma = \max(0, \min(\tilde{\phi}_i / (1 - \tilde{\phi}_i), 1)) \quad (119)$$

これは TVD スキームの minmod 制限関数に当たる．

Gamma スキームの場合， γ は次式になる．

$$\gamma = \max(0, \min(\tilde{\phi}_i / \beta_m, 1)) \quad (120)$$

CBC を満たす γ (つまり ψ) の条件は，以下ようになる．

$$0 \leq \gamma \leq 2 \quad (121)$$

これは TVD 条件より制限が緩い．TVD 条件の $\psi(r)/r \leq 2$ を考えると，以下の条件が得られる．

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} \leq 2\tilde{\phi}_i \quad (122)$$

これより，Gamma スキームの $\tilde{\phi}_i = 0$ における傾き $d\tilde{\phi}_{i+1/2}/d\tilde{\phi}_i$ を考えると，Gamma スキームが TVD 条件を満たすのは $\beta_m = \frac{1}{2}$ のときであることがわかる．

3.6 勾配制限

高次精度スキームの数値振動を抑制する方法として、勾配を制限するという考え方もある。たとえば、線形風上差分は勾配制限関数 (slope limiter) ψ_f を用いて以下のように書ける。

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \psi_f \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \quad (123)$$

勾配制限関数には以下のようなものが提案されている。

3.6.1 Barth and Jespersen スキーム

Barth and Jespersen の方法 [16] は、 $\phi_{i+1/2}$ が次式を満たすようにするものである。

$$\min(\phi_i, \phi_{i+1}) \leq \phi_{i+1/2} \leq \max(\phi_i, \phi_{i+1}) \quad (124)$$

要するに、格子界面の値が両側の格子点の値を超えないようにするということである。制限関数を用いると

$$\min(\phi_i, \phi_{i+1}) \leq \phi_i + \psi_f \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \leq \max(\phi_i, \phi_{i+1}) \quad (125)$$

上式から ϕ_i を引いて

$$\min(0, \phi_{i+1} - \phi_i) \leq \psi_f \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \leq \max(0, \phi_{i+1} - \phi_i) \quad (126)$$

ここで、勾配制限を用いない格子界面の値を $\phi_{i+1/2}^*$ とすると

$$\phi_{i+1/2}^* - \phi_i = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \quad (127)$$

と書けるので

$$\frac{\min(0, \phi_{i+1} - \phi_i)}{\phi_{i+1/2}^* - \phi_i} \leq \psi_f \leq \frac{\max(0, \phi_{i+1} - \phi_i)}{\phi_{i+1/2}^* - \phi_i} \quad (128)$$

である。

$$\begin{cases} \delta\phi^{\max} = \max(0, \phi_{i+1} - \phi_i) \\ \delta\phi^{\min} = \min(0, \phi_{i+1} - \phi_i) \end{cases} \quad (129)$$

とすると、 ψ_f は 1 を超えないものとして

$$\psi_f = \begin{cases} \min\left(1, \frac{\delta\phi^{\max}}{\phi_{i+1/2}^* - \phi_i}\right) & \phi_{i+1/2}^* > \phi_i \\ \min\left(1, \frac{\delta\phi^{\min}}{\phi_{i+1/2}^* - \phi_i}\right) & \phi_{i+1/2}^* < \phi_i \\ 1 & \phi_{i+1/2}^* = \phi_i \end{cases} \quad (130)$$

となる。これを格子界面ごとに計算して、その最小値を格子点勾配の制限関数とする。

制限関数は界面ごとに計算するが、求めたいものは格子点についての制限関数である。したがって、格子点のすべての隣接格子点の値を考慮して制限関数を求める方法も考えられる。格子点 i の界面 j に面する隣接格子点の値を ϕ_{ij} と書くことにすると、 $\delta\phi^{\max}$ 、 $\delta\phi^{\min}$ を次のように決めることもできる。

$$\begin{cases} \delta\phi^{\max} = \max(0, \max_j(\phi_{ij} - \phi_i)) \\ \delta\phi^{\min} = \min(0, \min_j(\phi_{ij} - \phi_i)) \end{cases} \quad (131)$$

ここで \max_j 、 \min_j は格子点 i のすべての界面についての最大値および最小値を求める関数である。

3.6.2 Venkatakrishnan スキーム

Venkatakrishnan は、Barth-Jaspersen の制限関数の改良版として次の関数を提案した [17]。

$$\psi_f = \begin{cases} f\left(\frac{\delta\phi^{\max}}{\phi_{i+1/2}^* - \phi_i}\right) & \phi_{i+1/2}^* > \phi_i \\ f\left(\frac{\delta\phi^{\min}}{\phi_{i+1/2}^* - \phi_i}\right) & \phi_{i+1/2}^* < \phi_i \\ 1 & \phi_{i+1/2}^* = \phi_i \end{cases} \quad (132)$$

ここで

$$f(y) = \frac{y^2 + 2y}{y^2 + y + 2} \quad (133)$$

Barth-Jaspersen の制限関数では値が 1 でクリッピングされてしまうが、この不連続性(微分不可能性)が格子サイズおよび残差についての収束性に悪影響を及ぼすらしい。上式はそれを避けるために連続関数で表されているが、値が 1 を超えるという問題がある。

3.6.3 Michalak and Ollivier-Gooch スキーム

Michalak and Ollivier-Gooch は、Venkatakrishnan の方法の改良として、以下の関数を提案した [18]。

$$f(y) = \begin{cases} P(y) & y < y_t \\ 1 & y \geq y_t \end{cases} \quad (134)$$

ここで y_t はパラメータで $1 < y_t < 2$ の値を取る。関数 $P(y)$ は次の条件を満たす関数である。

$$\begin{aligned} P(0) &= 0 \\ P(y_t) &= 1 \\ P'(0) &= 1 \\ P'(y_t) &= 0 \end{aligned} \quad (135)$$

3 次多項式

$$P(y) = ay^3 + by^2 + cy + d \quad (136)$$

を仮定して、係数を求めると

$$\begin{aligned} a &= \frac{y_t - 2}{y_t^3} \\ b &= \frac{3 - 2y_t}{y_t^2} \\ c &= 1 \\ d &= 0 \end{aligned} \quad (137)$$

すなわち

$$P(y) = \frac{y_t - 2}{y_t^3} y^3 + \frac{3 - 2y_t}{y_t^2} y^2 + y \quad (138)$$

この関数は連続でかつ値は 1 を超えない。パラメータ y_t については、 $y_t = 1.5$ が用いられている。

3.6.4 勾配制限関数と流束制限関数の関係

勾配制限関数を用いた格子界面の値は、勾配を中心差分で離散化するとすると

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2} &= \phi_i + \psi_f \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i (x_{i+1/2} - x_i) \\ &\approx \phi_i + \psi_f \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} \frac{\Delta x}{2} \\ &= \phi_i + \frac{1}{4} \psi_f (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \end{aligned} \quad (139)$$

一方、流束制限関数を用いた格子界面の値は

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{2} \psi (\phi_{i+1} - \phi_i) \quad (140)$$

したがって

$$\begin{aligned} \psi_f &= 2\psi \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}} \\ &= 2\psi \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\phi_{i+1} - \phi_i + \phi_i - \phi_{i-1}} \\ &= 2\psi \frac{\Delta \phi_{i+1/2}}{\Delta \phi_{i+1/2} + \Delta \phi_{i-1/2}} \\ &= 2\psi \frac{1}{1 + \Delta \phi_{i-1/2} / \phi_{i+1/2}} \\ &= \frac{2}{1 + r_i} \psi \end{aligned} \quad (141)$$

たとえば, van Albada の流束制限関数を勾配制限関数の形に変換すれば

$$\begin{aligned}
 \psi_f &= \frac{2}{1+r} \psi \\
 &= \frac{2}{1+r} \frac{r+r^2}{1+r^2} \\
 &= \frac{2}{1+r} \frac{r(1+r)}{1+r^2} \\
 &= \frac{2r}{1+r^2}
 \end{aligned} \tag{142}$$

これは TVD-MUSCL スキームで用いられる勾配制限関数である .

Barth-Jespersen 勾配制限関数を用いて $\phi_{i+1/2}$ を書き下すと次のようになる .

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{4} \min(f_1, f_2) (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \tag{143}$$

$$\begin{aligned}
 f_1 &= \min \left(1, \frac{\max(0, \phi_{i+1} - \phi_i)}{(\phi_{i+1} - \phi_{i-1})/4} \right) \\
 f_2 &= \min \left(1, \frac{\max(0, \phi_i - \phi_{i-1})}{(\phi_{i+1} - \phi_{i-1})/4} \right)
 \end{aligned} \tag{144}$$

ここでは $\phi_{i-1} \leq \phi_i \leq \phi_{i+1}$ と想定した。 f_1, f_2 はそれぞれ $i+1/2, i-1/2$ 位置の格子界面の勾配制限である。 f_1, f_2 は次のように書ける .

$$\begin{aligned}
 f_1 &= \max \left(0, \min \left(1, \frac{4}{1+r_i} \right) \right) \\
 f_2 &= \max \left(0, \min \left(1, \frac{4r_i}{1+r_i} \right) \right)
 \end{aligned} \tag{145}$$

したがって, 流束制限関数の形で書けば

$$\begin{aligned}
 \psi &= \frac{1+r}{2} \max \left(0, \min \left(1, \frac{4}{1+r}, \frac{4r}{1+r} \right) \right) \\
 &= \max(0, \min(2r, (1+r)/2, 2))
 \end{aligned} \tag{146}$$

これは "monotonized central" 制限関数である .

以下のように表現すると, 勾配を陽には用いないスキームに対しても勾配制限を用いることができる .

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \psi_f (\phi_{i+1/2}^* - \phi_i) \tag{147}$$

中心差分に適用すると

$$\phi_{i+1/2}^* = \phi_i + \frac{1}{2} (\phi_{i+1} - \phi_i) \tag{148}$$

なので

$$\phi_{i+1/2} = \phi_i + \frac{1}{2} \psi_f (\phi_{i+1} - \phi_i) \tag{149}$$

この場合は $\psi_f = \psi$ である．上と同じように Barth-Jespersen 制限関数を適用して整理すると

$$\psi = \max(0, \min(2r, 1)) \quad (150)$$

これは中心差分に TVD 条件を満たすような制限をかけたものである．

3.7 WENO スキーム

単調性をもつ高次精度スキームの 1 つに WENO スキームがある．WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) スキーム [21] [22] は，ENO (Essentially Non-Oscillatory) スキーム [24] をもとにしたものである．高次精度スキームは衝撃波などの物理量の不連続部分で数値振動を起こすが，TVD スキームは不連続部分で 1 次精度風上差分に切り替えることで数値振動を避けている．ENO スキームは補間に用いるステンシルの候補をいくつか用意し，その中からもっともなめらかなものを選択することで不連続性に対処する．ENO スキームの欠点は，ステンシルの選択に時間がかかることと，補間に用いるステンシルは候補の中のひとつだけであるため，必要なステンシルの幅が広い割には高精度にならないことである．WENO スキームは，候補となるすべてのステンシルを重み付けして用いることで高精度化を可能にする．

3.7.1 WENO 補間

WENO スキームでは補間 (interpolation) と再構成 (reconstruction) を明確に分けて考えている．まず、補間について述べる．候補として 3 つの 3 点ステンシル $S_1 = \{x_{i-2}, x_{i-1}, x_i\}$ ， $S_2 = \{x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\}$ ， $S_3 = \{x_i, x_{i+1}, x_{i+2}\}$ を考える．2 次の補間多項式を考える．

$$\phi(s) = a_0 + a_1s + a_2s^2 \quad (151)$$

ここで $s = (x - x_i)/\Delta x$ である．ラグランジュの補間公式を用いて整理すると，それぞれのステンシルに対して以下ようになる．

$$\begin{aligned} \phi^{(1)}(s) &= \frac{1}{2}(1+s)(2+s)\phi_i - s(2+s)\phi_{i-1} + \frac{1}{2}s(1+s)\phi_{i-2} \\ \phi^{(2)}(s) &= \frac{1}{2}s(1+s)\phi_{i+1} + \phi_i(1-s)(1+s) - \frac{1}{2}s(1-s)\phi_{i-1} \\ \phi^{(3)}(s) &= -\frac{1}{2}s(1-s)\phi_{i+2} + s(2-s)\phi_{i+1} + \frac{1}{2}(1-s)(2-s)\phi_i \end{aligned} \quad (152)$$

格子界面の値は

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2}^{(1)} &= \frac{15}{8}\phi_i - \frac{5}{4}\phi_{i-1} + \frac{3}{8}\phi_{i-2} \\ \phi_{i+1/2}^{(2)} &= \frac{3}{8}\phi_{i+1} + \frac{3}{4}\phi_i - \frac{1}{8}\phi_{i-1} \\ \phi_{i+1/2}^{(3)} &= -\frac{1}{8}\phi_{i+2} + \frac{3}{4}\phi_{i+1} + \frac{3}{8}\phi_i \end{aligned} \quad (153)$$

当然だが、 $\phi_{i+1/2}^{(2)}$ は QUICK と同じものになる．ステンシル候補で用いられている点は全部で 5 点あるので、5 点ステンシルでの 4 次多項式による補間を考えると、格子界面の値は次式で表される．

$$\phi_{i+1/2} = -\frac{5}{128}\phi_{i+2} + \frac{15}{32}\phi_{i+1} + \frac{45}{64}\phi_i - \frac{5}{32}\phi_{i-1} + \frac{3}{128}\phi_{i-2} \quad (154)$$

これを、3 点ステンシルによる補間によって表す．

$$\phi_{i+1/2} = \gamma_1\phi_{i+1/2}^{(1)} + \gamma_2\phi_{i+1/2}^{(2)} + \gamma_3\phi_{i+1/2}^{(3)} \quad (155)$$

これを展開し、係数の比較から次の値を得る．

$$\gamma_1 = \frac{1}{16}, \quad \gamma_2 = \frac{5}{8}, \quad \gamma_3 = \frac{5}{16} \quad (156)$$

アイデアとしては、問題ないときは 3 つの補間式を係数 γ_j で結合し、問題があれば係数を調整して一部の補間を無効にするというものである．ここでは不連続性に対処したいので、なめらかさを測る指標でもって係数を調整する．なめらかさの指標 (smoothness indicator) は次式で定義される．

$$\beta_j = \sum_{l=1}^k \int_{-1/2}^{1/2} \left(\frac{d^l \phi^{(j)}(s)}{ds^l} \right)^2 ds \quad (157)$$

ここでは $k = 2$ とすると、 β_1 は次のようになる．

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \int_{-1/2}^{1/2} \left(\frac{d\phi^{(1)}(s)}{ds} \right)^2 + \int_{-1/2}^{1/2} \left(\frac{d^2\phi^{(1)}(s)}{ds^2} \right)^2 ds \\ &= \frac{1}{3}(10\phi_i^2 - 31\phi_{i-1}\phi_i + 11\phi_{i-2}\phi_i + 25\phi_{i-1}^2 - 19\phi_{i-2}\phi_{i-1} + 4\phi_{i-2}^2) \end{aligned} \quad (158)$$

同様にして

$$\begin{aligned} \beta_2 &= \frac{1}{3}(4\phi_{i+1}^2 - 13\phi_i\phi_{i+1} + 5\phi_{i-1}\phi_{i+1} + 13\phi_i^2 - 13\phi_{i-1}\phi_i + 4\phi_{i-1}^2) \\ \beta_3 &= \frac{1}{3}(4\phi_{i+2}^2 - 19\phi_{i+1}\phi_{i+2} + 11\phi_i\phi_{i+2} + 25\phi_{i+1}^2 - 31\phi_i\phi_{i+1} + 10\phi_i^2) \end{aligned} \quad (159)$$

重みを次式のように計算する．

$$w_j = \frac{\tilde{w}_j}{\tilde{w}_1 + \tilde{w}_2 + \tilde{w}_3} \quad (160)$$

ここで

$$\tilde{w}_j = \frac{\gamma_j}{(\varepsilon + \beta_j)^2} \quad (161)$$

である． ε はゼロ割りを防ぐためのもので、 $\varepsilon = 10^{-6}$ などが用いられる．最終的に、格子界面の補間式は次式で表される．

$$\phi_{i+1/2} = w_1\phi_{i+1/2}^{(1)} + w_2\phi_{i+1/2}^{(2)} + w_3\phi_{i+1/2}^{(3)} \quad (162)$$

なめらかさの指標 β_j が大きければ、そのステンシルの補間式の効果は弱められ、不連続性を避けられる。すべての β_j が 1 に近ければ 5 点ステンシルの補間式に近づく。もとの重み γ_j が使われれば 5 次精度になるので、この方法は 5 次精度 WENO スキームと呼ばれる。ただし、差分近似としては精度が 1 つ落ちることに注意する。

もし任意の位置の補間が必要な場合は、重みを調整する必要がある。5 点ステンシルの補間式は

$$\begin{aligned}\phi(s) = & -\frac{1}{24}s(1-s)(1+s)(2+s)\phi_{i+2} \\ & +\frac{1}{6}s(2-s)(1+s)(2+s)\phi_{i+1} \\ & +\frac{1}{4}(1-s)(2-s)(1+s)(2+s)\phi_i \\ & -\frac{1}{6}s(1-s)(2-s)(2+s)\phi_{i-1} \\ & +\frac{1}{24}s(1-s)(2-s)(1+s)\phi_{i-2}\end{aligned}\quad (163)$$

これを次式で表す。

$$\phi(s) = \gamma_1(s)\phi^{(1)}(s) + \gamma_2(s)\phi^{(2)}(s) + \gamma_3(s)\phi^{(3)}(s)\quad (164)$$

係数を比較して、以下が得られる。

$$\begin{aligned}\gamma_1(s) &= \frac{1}{12}(1-s)(2-s) \\ \gamma_2(s) &= \frac{1}{6}(2-s)(2+s) \\ \gamma_3(s) &= \frac{1}{12}(1+s)(2+s)\end{aligned}\quad (165)$$

$s = 1/2$ とすれば $\gamma_1 = 1/16$, $\gamma_2 = 5/8$, $\gamma_3 = 5/16$ が得られる。

3.7.2 WENO 再構成

一方、再構成については次のようになる。MUSCL スキーム同様に、格子点の値を格子内の平均値として考える。

$$\phi_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x-1/2}^{x+1/2} \phi(x) dx\quad (166)$$

簡単のため $s = (x - x_i)/\Delta x$ として考える。

$$\phi_i = \int_{-1/2}^{1/2} \phi(s) ds\quad (167)$$

ここから $\phi(s)$ の分布を仮定するのだが、MUSCL スキームとは違う方法をとる。 $\phi(s)$ の原始関数 (primitive function) を $\Phi(s)$ とすると、積分は次のようになる。

$$\phi_i = \int_{-1/2}^{1/2} \phi(s) ds = \Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}\quad (168)$$

これより, $\phi_{i-1} = \Phi_{i-1/2} - \Phi_{i-3/2}$ などとなるので

$$\Phi_{i+1/2} = \sum_{j=0}^{k-1} \phi_{i-j} + \Phi_{i+1/2-k} \quad (169)$$

と表される. たとえば, $k = 3$ とすると

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2} &= \phi_i + \phi_{i-1} + \phi_{i-2} + \Phi_{i-5/3} \\ \Phi_{i-1/2} &= \phi_{i-1} + \phi_{i-2} + \Phi_{i-5/3} \\ \Phi_{i-3/2} &= \phi_{i-2} + \Phi_{i-5/3} \end{aligned} \quad (170)$$

となる.

さて, 原始関数 $\Phi(s)$ を多項式で近似することを考える. ここでは $\phi(s)$ を 2 次式で近似したいので, $\Phi(s)$ を 3 次式で表す.

$$\Phi(s) = \Phi_0 + a_0s + a_1s^2 + a_2s^3 \quad (171)$$

Φ_0 はどうせ消えるのであまり気にしなくてもよい. ステンシル $i-2, i-1, i$ を用いた補間式を構成するために, 上式の係数を $\Phi_{i-5/2}, \Phi_{i-3/2}, \Phi_{i-1/2}, \Phi_{i+1/2}$ から求める. ラグランジュの補間公式を用いて整理すると

$$\begin{aligned} \Phi^{(1)}(s) &= \frac{1}{24}s(4s^2 + 18s + 23)\phi_i \\ &\quad - \frac{1}{12}s(4s^2 + 12s - 1)\phi_{i-1} \\ &\quad + \frac{1}{24}s(4s^2 + 6s - 1)\phi_{i-2} \\ &\quad + \Phi_0^{(1)} \end{aligned} \quad (172)$$

ちゃんと $\Phi^{(1)}(1/2) - \Phi^{(1)}(-1/2) = \phi_i$ となるはずである. これを微分すると, 次式が得られる.

$$\begin{aligned} \phi^{(1)}(s) &= \frac{1}{24}(12s^2 + 36s + 23)\phi_i \\ &\quad - \frac{1}{12}(12s^2 + 24s - 1)\phi_{i-1} \\ &\quad + \frac{1}{24}(12s^2 + 12s - 1)\phi_{i-2} \end{aligned} \quad (173)$$

同様にして

$$\begin{aligned} \Phi^{(2)}(s) &= \frac{1}{24}s(4s^2 + 6s - 1)\phi_{i+1} \\ &\quad - \frac{1}{12}s(4s^2 - 13)\phi_i \\ &\quad + \frac{1}{24}s(4s^2 - 6s - 1)\phi_{i-1} \\ &\quad + \Phi_0^{(2)} \end{aligned} \quad (174)$$

$$\begin{aligned}
\phi^{(2)}(s) &= \frac{1}{24}(12s^2 + 12s - 1)\phi_{i+1} \\
&\quad - \frac{1}{12}(12s^2 - 13)\phi_i \\
&\quad + \frac{1}{24}(12s^2 - 12s - 1)\phi_{i-1}
\end{aligned} \tag{175}$$

$$\begin{aligned}
\Phi^{(3)}(s) &= \frac{1}{24}s(4s^2 - 6s - 1)\phi_{i+2} \\
&\quad - \frac{1}{12}s(4s^2 - 12s - 1)\phi_{i+1} \\
&\quad + \frac{1}{24}s(4s^2 - 18s + 23)\phi_i \\
&\quad + \Phi_0^{(3)}
\end{aligned} \tag{176}$$

$$\begin{aligned}
\phi^{(3)}(s) &= \frac{1}{24}(12s^2 - 12s - 1)\phi_{i+2} \\
&\quad - \frac{1}{12}(12s^2 - 24s - 1)\phi_{i+1} \\
&\quad + \frac{1}{24}(12s^2 - 36s + 23)\phi_i
\end{aligned} \tag{177}$$

格子界面の値は次式で表される .

$$\begin{aligned}
\phi_{i+1/2}^{(1)} &= \frac{11}{6}\phi_i - \frac{7}{6}\phi_{i-1} + \frac{1}{3}\phi_{i-2} \\
\phi_{i+1/2}^{(2)} &= \frac{1}{3}\phi_{i+1} + \frac{5}{6}\phi_i - \frac{1}{6}\phi_{i-1} \\
\phi_{i+1/2}^{(3)} &= -\frac{1}{6}\phi_{i+2} + \frac{5}{6}\phi_{i+1} + \frac{1}{3}\phi_i
\end{aligned} \tag{178}$$

$\phi_{i+1/2}^{(2)}$ は 3 次精度風上差分 (3 次精度 MUSCL スキーム) と一致している .
5 つのステンシルを用いた場合は

$$\begin{aligned}
\Phi(s) &= \frac{1}{1920}s(16s^4 + 40s^3 - 40s^2 - 100s + 9)\phi_{i+2} \\
&\quad - \frac{1}{480}s(16s^4 + 20s^3 - 120s^2 - 170s + 29)\phi_{i+1} \\
&\quad + \frac{1}{960}s(48s^4 - 440s^2 + 1067)\phi_i \\
&\quad - \frac{1}{480}s(16s^4 - 20s^3 - 120s^2 + 170s + 29)\phi_{i-1} \\
&\quad + \frac{1}{1920}s(16s^4 - 40s^3 - 40s^2 + 100s + 9)\phi_{i-2}
\end{aligned} \tag{179}$$

$$\begin{aligned}
\phi(s) = & \frac{1}{1920}(80s^4 + 160s^3 - 120s^2 - 200s + 9)\phi_{i+2} \\
& - \frac{1}{480}(80s^4 + 80s^3 - 360s^2 - 340s + 29)\phi_{i+1} \\
& + \frac{1}{960}(240s^4 - 1320s^2 + 1067)\phi_i \\
& - \frac{1}{480}(80s^4 - 80s^3 - 360s^2 + 340s + 29)\phi_{i-1} \\
& + \frac{1}{1920}(80s^4 - 160s^3 - 120s^2 + 200s + 9)\phi_{i-2}
\end{aligned} \tag{180}$$

格子界面の値は

$$\phi_{i+1/2} = -\frac{1}{20}\phi_{i+2} + \frac{9}{20}\phi_{i+1} + \frac{47}{60}\phi_i - \frac{13}{60}\phi_{i-1} + \frac{1}{30}\phi_{i-2} \tag{181}$$

これと

$$\phi_{i+1/2} = \gamma_1\phi_{i+1/2}^{(1)} + \gamma_2\phi_{i+1/2}^{(2)} + \gamma_3\phi_{i+1/2}^{(3)} \tag{182}$$

が一致するとして

$$\gamma_1 = \frac{1}{10}, \quad \gamma_2 = \frac{3}{5}, \quad \gamma_3 = \frac{3}{10} \tag{183}$$

である．また

$$\phi(s) = \gamma_1(s)\phi^{(1)}(s) + \gamma_2(s)\phi^{(2)}(s) + \gamma_3(s)\phi^{(3)}(s) \tag{184}$$

の場合は

$$\begin{aligned}
\gamma_1(s) &= \frac{80s^4 - 160s^3 - 120s^2 + 200s + 9}{80(12s^2 + 12s - 1)} \\
\gamma_2(s) &= -\frac{960s^6 - 5360s^4 + 4548s^2 - 49}{40(12s^2 - 12s - 1)(12s^2 + 12s - 1)} \\
\gamma_3(s) &= \frac{80s^4 + 160s^3 - 120s^2 - 200s + 9}{80(12s^2 - 12s - 1)}
\end{aligned} \tag{185}$$

あとは補間の場合と同じである．

4 有限体積法における離散化スキーム

4.1 有限体積法における離散化スキーム

これまでは差分法の離散化スキームについて考えてきたが，ここでは有限体積法における離散化スキームについて考える．有限体積法ではセルの面の値を補間する必要があり，これまで述べてきた格子界面の値の考え方を使うことができる．以下では，3次元の非構造メッシュを想定し，注目セル，隣接セル，注目セルと隣接セルに挟まれた面をそれぞれ P, N, f で表し，それぞれの中心位置を x_P, x_N, x_f ，それぞれの位置での値を ϕ_P, ϕ_N, ϕ_f などと表す (図 7)．

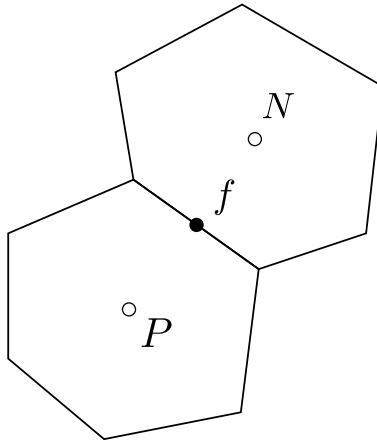


図 7: セル

4.2 中心差分

有限体積法において差分法の中心差分に当たるものは，次の線形補間である．

$$\phi_f = w\phi_P + (1 - w)\phi_N \quad (186)$$

ここで w は重みで， Nf 間の距離と PN 間の距離の比で表される．

$$w = \frac{|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N|}{|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P|} \quad (187)$$

4.3 1次精度風上差分

1次精度風上差分では，面中心の値を風上側からもってくる．

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f > 0) \\ \phi_N & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f < 0) \end{cases} \quad (188)$$

ここで \mathbf{S}_f は面の法線方向ベクトルである．

4.4 線形風上差分

線形風上差分は次式のように表現できる．

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P + (\nabla\phi)_P \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_P) & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f > 0) \\ \phi_N + (\nabla\phi)_N \cdot (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_N) & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f < 0) \end{cases} \quad (189)$$

4.5 TVD・NVD スキーム

TVD・NVD スキームは，1 次風上差分による値を ϕ_{UD} ，中心差分による値を ϕ_{CD} とすると，以下のように表される．

$$\phi_f = \phi_{UD} + \psi(\phi_{CD} - \phi_{UD}) \quad (190)$$

これより

$$\phi_f = \begin{cases} \{1 - \psi(1 - w)\}\phi_P + \psi(1 - w)\phi_N & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f > 0) \\ \psi w \phi_P + (1 - \psi w)\phi_N & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f < 0) \end{cases} \quad (191)$$

これは次のようにも書ける．

$$\begin{aligned} \phi_f &= w_p \phi_P + (1 - w_p)\phi_N \\ w_p &= \begin{cases} \psi w + (1 - \psi) & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f > 0) \\ \psi w & (\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f < 0) \end{cases} \end{aligned} \quad (192)$$

流束制限関数については，TVD・NVD それぞれの関数を使えばよい． r ， $\tilde{\phi}$ の計算には格子点が 3 つ必要になるが，非構造メッシュでは一般に面を挟んだ 2 つのセル値を考え，3 つのセル値は扱いにくいいため，計算には工夫が必要である．ここで r_i ， $\tilde{\phi}_i$ に対応するものを，面で計算される値として r_f ， $(\tilde{\phi}_P)_f$ と表す．

r_i は次のように表すことができる [25]．

$$r_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_i} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1} - (\phi_{i+1} - \phi_i)}{\phi_{i+1} - \phi_i} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_i} - 1 \quad (193)$$

ここで $\phi_{i+1} - \phi_{i-1}$ を次のように表す．

$$\phi_{i+1} - \phi_{i-1} = \frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x_{i+1} - x_{i-1}) = 2 \frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x_{i+1} - x_i) \quad (194)$$

したがって

$$r_i = \frac{2 \frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x_{i+1} - x_i)}{\phi_{i+1} - \phi_i} - 1 \quad (195)$$

これより， $\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f > 0$ のとき r_f を次式で計算する．

$$r_f = \frac{2(\nabla \phi)_P \cdot (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P)}{\phi_N - \phi_P} - 1 \quad (196)$$

$\mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f < 0$ のときは， $1/r_{i+1}$ から次式が得られる．

$$r_f = \frac{2(\nabla \phi)_N \cdot (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_P)}{\phi_N - \phi_P} - 1 \quad (197)$$

つまり，流れの方向に応じて勾配だけを切り替えればよい．

$\tilde{\phi}_i$ も同様に，

$$\tilde{\phi}_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1} - (\phi_{i+1} - \phi_i)}{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}} = 1 - \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{2 \frac{\partial \phi_i}{\partial x}(x_{i+1} - x_i)} \quad (198)$$

これより, $u \cdot S_f > 0$ のとき $(\tilde{\phi}_P)_f$ を次式で計算する .

$$(\tilde{\phi}_P)_f = 1 - \frac{\phi_N - \phi_P}{2(\nabla\phi)_P \cdot (x_N - x_P)} \quad (199)$$

$u \cdot S_f < 0$ のときは

$$\tilde{\phi}_{i+1} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{\phi_i - \phi_{i+2}} = \frac{\phi_i - \phi_{i+2} - (\phi_i - \phi_{i+1})}{\phi_i - \phi_{i+2}} = 1 - \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{2 \frac{\partial \phi_{i+1}}{\partial x} (x_{i+1} - x_i)} \quad (200)$$

したがって

$$(\tilde{\phi}_P)_f = 1 - \frac{\phi_N - \phi_P}{2(\nabla\phi)_N \cdot (x_N - x_P)} \quad (201)$$

これもまた, 流れの方向に応じて勾配を切り替えればよい .

もし TVD でも NVD でもないスキームをこの枠組みで実装したい場合は, 制限関数を次のように定義すればよい .

$$\psi = \frac{\phi_f - \phi_{UD}}{\phi_{CD} - \phi_{UD}} \quad (202)$$

5 各種スキームの比較

各種スキームの挙動の違いを見るために, 1次元スカラー輸送問題で比較する . 初期値を 0 とし, 左端のスカラー値を 1 に設定, 左から右に向かって流れを作る . 範囲は $0 \leq x \leq 1$ で, スカラーの前面が領域の中央 ($x = 0.5$) に来る時刻におけるスカラーの分布形状を比較する .

1次精度風上差分 (UD), 中心差分 (CD), 2次精度風上差分 (LUD), 勾配制限付き 2次精度風上差分 (LUD with limiter), QUICK の比較を図 8 に, その表示範囲を絞ったものを図 9 に示す .

まず, 中心差分の結果が激しく振動しているのが目につく . 一方で, 1次精度風上差分の結果がかなりなまっているのがわかる . QUICK の解の勾配がもっとも急であり数値拡散が小さいと見えるが, 上部が飛び出してしまっている (オーバーシュート) . 2次精度風上差分は 1次精度風上差分よりはずっと数値拡散の小さな結果になっているが, 下部が飛び出してしまっている (アンダーシュート) . しかし, 勾配制限を用いたほうについてはアンダーシュートが抑えられている .

つぎに, 各種 2次精度 TVD スキームおよび勾配制限付き 2次精度風上差分の比較を図 10 に示す . すべてのスキームの結果が minmod と superbee の間に収まっている . minmod と superbee 以外のスキームの挙動には大差なく, どれを選択するかは好みの問題となる . また, 勾配制限付き 2次精度風上差分の性能は 2次精度 TVD スキームと同等であることがわかる .

最後に, Gamma スキームの結果を図 11 に示す . 合わせて minmod, superbee の結果を載せているが, $\beta_m = 1/2$ の場合, Gamma スキームは 2次精度 TVD に近い挙動を示している . β_m が小さくなると解の勾配がより急になっている .

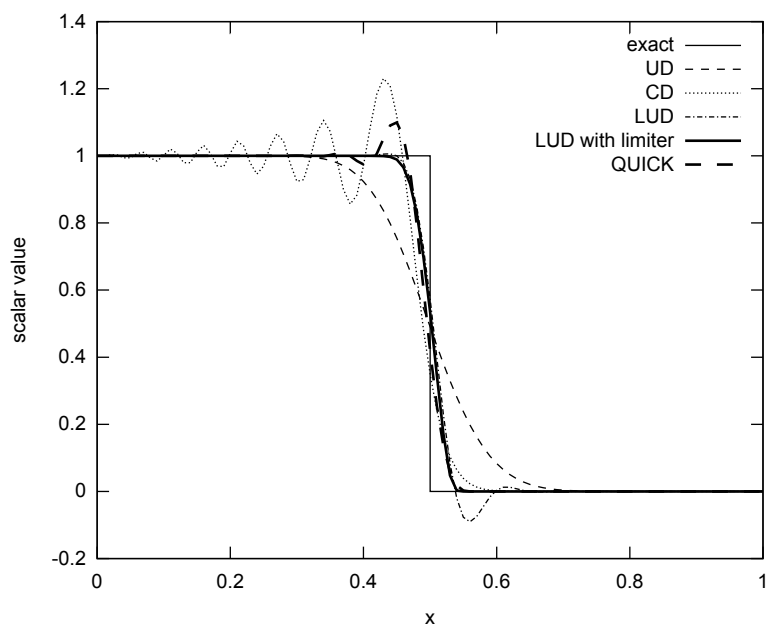


図 8: 1 次元スカラー輸送問題におけるスキームの比較 1

さて、以上の結果から、どのスキームを使うべきと言えるだろうか？精度の面では数値拡散が小さいものを選ぶべきだが、数値拡散が小さいと計算の安定性が損なわれるため、計算を実行できない場合がある。一方、数値拡散が大きなものを選ぶと精度が損なわれるが、安定して計算できる可能性がある。つまり、解きたい問題の求める精度と計算の安定性に応じて適切なスキームを選ぶことになる。また、いまひとつの観点に解の有界性がある。温度や濃度などオーバーシュート・アンダーシュートが起これば物理的に問題が生じる場合は、勾配制限付き 2 次精度風上差分か TVD スキームを用いるべきである。その中からどれを選ぶべきかは、上述の通り好みの問題である。

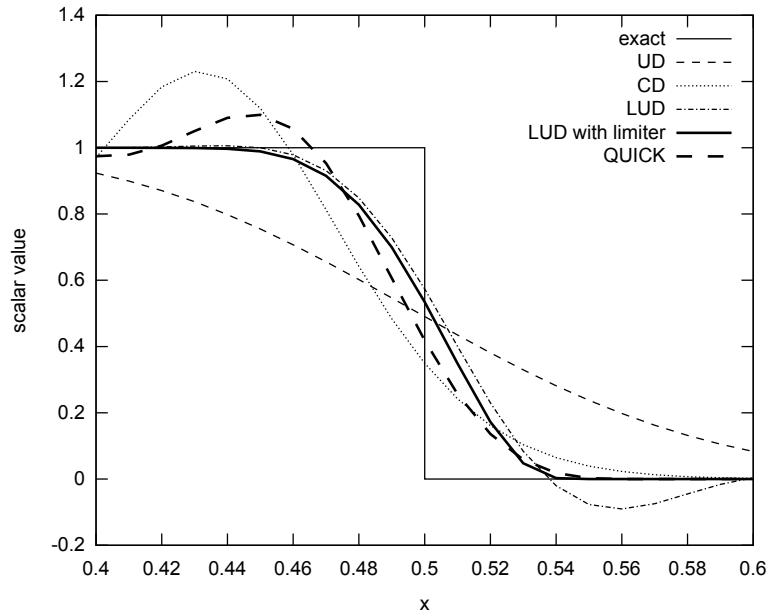


図 9: 1次元スカラー輸送問題におけるスキームの比較 2

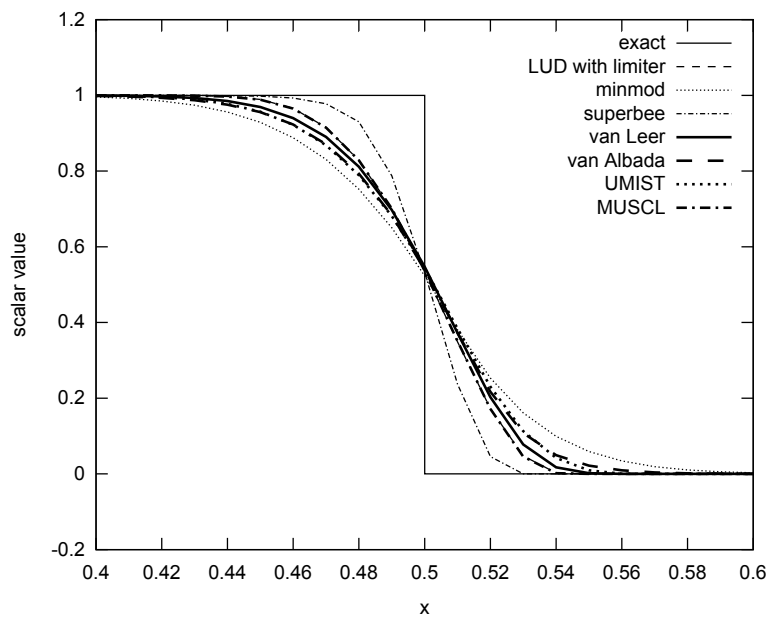


図 10: 1次元スカラー輸送問題におけるスキームの比較 3

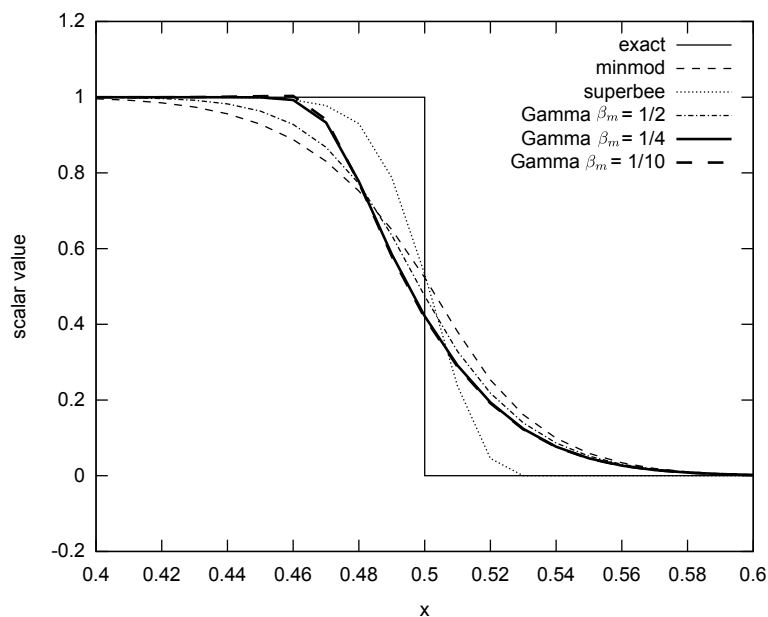


図 11: 1次元スカラー輸送問題におけるスキームの比較 4

参考文献

- [1] S・V・パタンカー：コンピュータによる熱移動と流れの数値解析，森北出版 (1985) .
- [2] 峯村吉泰：Java による流体・熱流動の数値シミュレーション，森北出版 (2001) .
- [3] 越塚誠一：数値流体力学，培風館 (1997) .
- [4] 藤井孝蔵：流体力学の数値計算法，東京大学出版会 (1994) .
- [5] H. K. Versteeg , W. Malalasekera : 数値流体力学 [第 2 版] , 森北出版 (2011) .
- [6] B. Fornberg : Generation of finite difference formulas on arbitrarily space grids , Mathematics of Computation , Vol. 51 , No. 184 , 699-706 (1998) .
- [7] B. P. Leonard : A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation , Compututer Methods in Applied Mechanics and Engineering , 19 , 59-98 (1979) .
- [8] B. P. Leonard and S. Mokhtari : ULTRA-SHARP nonoscillatory convection schemes for high-speed steady multidimensional flow , NASA Technical Memorandum 102568 , ICOMP-90-12 (1990) .
- [9] B. van Leer : Towards the ultimate conservative difference scheme IV : A new approach to numerical convection , Jornal of Computational Physics , 23 , 276-299 (1977) .

- [10] B. van Leer: Towards the ultimate conservative difference scheme V: A second-order sequel to Godunov's method , *Journal of Computational Physics* , 32 , 101-136 (1979) .
- [11] W. K. Anderson , J. L. Thomas and B. van Leer : Comparison of finite volume flux vector for the Euler Equations , *AIAA Journal* , Vol. 24 , No. 9 (1986) .
- [12] A. Harten : High resolution schemes for hyperbolic conservation laws , *Journal of Computational Physics* , 49 , 357-393 (1983) .
- [13] P. K. Sweby : High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws , *SIAM Journal on Numerical Analysis* , Vol. 21 , No.5 , 995-1011 (1984) .
- [14] B. van Leer : Towards the ultimate conservative difference scheme II : Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme , *Journal of Computational Physics* , 14 , 361-370 (1974) .
- [15] G. D. van Albada , B. van Leer and W. W. Roberts Jr. : A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics , *Astronomy and Astrophysics* , 108 , 76-84 (1982).
- [16] T. J. Barth and D. C. Jespersen : The design and application of upwind schemes on unstructured meshes , *AIAA paper 89-0366* (1989).
- [17] V. Venkatakrishnan : On the accuracy of limiters and convergence to steady-state solutions , *AIAA paper 93-0880* (1993).
- [18] K. Michalak and C. Ollivier-Gooch : Limiters for unstructured higher-order accurate solutions of the Euler equations , *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (2008).
- [19] B. P. Leonard : Simple high-accuracy resolution program for convective modeling of discontinuities , *International Journal for Numerical Methods in Fluids* , Vol. 8 , 1291-1318 (1988) .
- [20] H. Jasak , H. Weller , A. Gosman: High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes , *International Journal for Numerical Methods in Fluids* , 31 , 431-449 (1999) .
- [21] X.-D. Liu , S. Osher and T. Chan: Weighted essentially non-oscillatory schemes , *Journal of Computational Physics* , 115 , 200-212 (1994) .
- [22] G. Jiang and C.-W. Shu : Efficient implementation of weighted ENO schemes , *Journal of Computational Physics* , 126 , 202-228 (1996) .

- [23] C.-Shu : High order weighted essentially non-oscillatory schemes for convection dominated problems , SIAM Review , 51 , 82-126 (2009) .
- [24] A. Harten , B. Engquist , S. Osher and S. R. Chakravarthy : Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III , Journal of Computational Physics , 71 , 231-2023 (1987) .
- [25] M. S. Darwish and F. Moukalled : TVD schemes for unstructured grids , International Journal of Heat and Mass Transfer , 46 , 599-611 (2003) .