

移流方程式の差分分解法: FCT

小高正嗣

1998 年 5 月 19 日

目次

1	はじめに	2
2	1次元 FCT: SHASTA	2
2.1	輸送過程	3
2.2	補正過程	6
2.3	まとめ: 1D-SHASTA	8
2.4	計算例	9
3	いくつかの問題	12
3.1	応用性	12
3.2	補正フラックスの問題 (1): clipping	13
3.3	補正フラックスの問題 (2): 多次元への拡張性	13
4	Zalesak(1979) による表現: 1次元	15
4.1	計算手順	15
4.2	補正係数の決め方	17
5	Zalesak(1979) による表現: 2次元	19
5.1	計算手順と補正係数の決め方	19
5.2	計算例	21
6	参考文献	26

1 はじめに

流れの問題を数値的に解く場合, 衝撃波面のような物理量の不連続面, またはその急な空間勾配を表現しなければならないことがある. 差分法でこれを表現する場合には数値拡散と数値的に発生する波を同時に抑える必要がある. 一般に空間方向に低次の差分スキームを用いると数値拡散が効きすぎてしまい, 本来は保存されるべき物理量の空間プロファイルが維持されない. 一方高次のスキームを用いると数値的な波が生じ, 正の値しか取り得ない物理量に負の値が現れる, という問題が発生する.

このような問題を解決するような差分方法はプラズマ物理学の分野において比較的以前から研究開発がなされてきた. その代表的な方法がフラックス修正法 (Flux Corrected Transport; 以下 FCT とする) と呼ばれる方法である. FCT は Boris and Book(1973) によって始めて提案され, 以後 Book *et al.*(1975), Boris and Book(1976) で拡張発展がなされた. そして Zalesak(1979) によって一般的表現が与えられた. 現在では FCT は通常 Zalesak(1979) で与えられた表現をもって定義されている. 以下 Boris and Book(1973) で提案された FCT を組み込んだ SHASTA と呼ばれる一次元移流方程式の差分スキームと, Zalesak(1979) で与えられた FCT の一般表現について簡単に解説する.

Book *et al.*(1975) でも指摘されているが, FCT とは特定の差分スキームではなくその手続き全般のことである. よっていろいろな差分スキームに対して応用できるという特徴を持っている.

なお気象業界における移流方程式の保存的差分スキームは, 移流されるスカラー量に負の値 (数値的波) を発生させないようにすることが課題となったのに対し, FCT は衝撃波面のような不連続を正確に表現するために開発されたことに注意してほしい.

2 1次元 FCT: SHASTA

ここでは Boris and Book(1973) によって提案されたオリジナルの FCT, 及びここで示されている 1次元移流方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0, \quad (1)$$

の差分スキーム SHASTA(Sharp And Smooth Transport Algorithm) について解説

する. FCT は後述する Zalesak(1979) による定義をもって与えられるのが一般的であるが, FCT の基本的な考え方を知るためにまずはオリジナルの FCT について見ていくことにする.

Boris and Book(1973) は FCT には一般的に 2 つの段階 (stage) があるとしている. その第一段階を輸送過程 (transport stage), 第二段階を補正過程 (corrective stage) と呼んでいる. 輸送過程で生じた数値拡散を補正過程で補うというのが FCT の基本的な考え方である.

2.1 輸送過程

SHASTA の輸送過程は以下のように与えられる. (図 1 参照).

1. 隣接する格子点間で台形を作り (図 1(a)), その面積が保存するように質量を輸送する.

時刻 $t_0 (\equiv n\Delta t)$ のときそれぞれ格子点上で密度は ρ_i^n, ρ_{i+1}^n , 速度は u_i^n, u_{i+1}^n とする. 格子間隔は Δx , 時間間隔は Δt とする. 台形的面積を一定に保つので, その高さは底辺の長さに半比例して与えられる. よって時刻 $t_0 + \Delta t$ の台形の高さ (図 1(b)) はそれぞれ,

$$\begin{aligned}\rho_1 &= \frac{\rho_{i+1}^n \Delta x}{\Delta x + \Delta t(u_{i+1}^n - u_i^n)}, \\ \rho_2 &= \frac{\rho_i^n \Delta x}{\Delta x + \Delta t(u_{i+1}^n - u_i^n)},\end{aligned}\tag{2}$$

と与えられる. ρ_1, ρ_2 は ρ_i^n, ρ_{i+1}^n が正のとき及び

$$\left| u \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| < \frac{1}{2},\tag{3}$$

の場合に常に正の値をとる. 以下ではこの条件が満たされるものとして手続きを進める.

2. 輸送された台形を格子を含むセル上に分割し, それぞれのセルに含まれる面積を格子点上に割り付ける. 具体的には図 1(c) の A は i に, B は $i+1$ に割り当てる. 割り当てた面積を格子間隔で割った値が次ステップの値になる. セルの境界上の値は線形補間で求める.

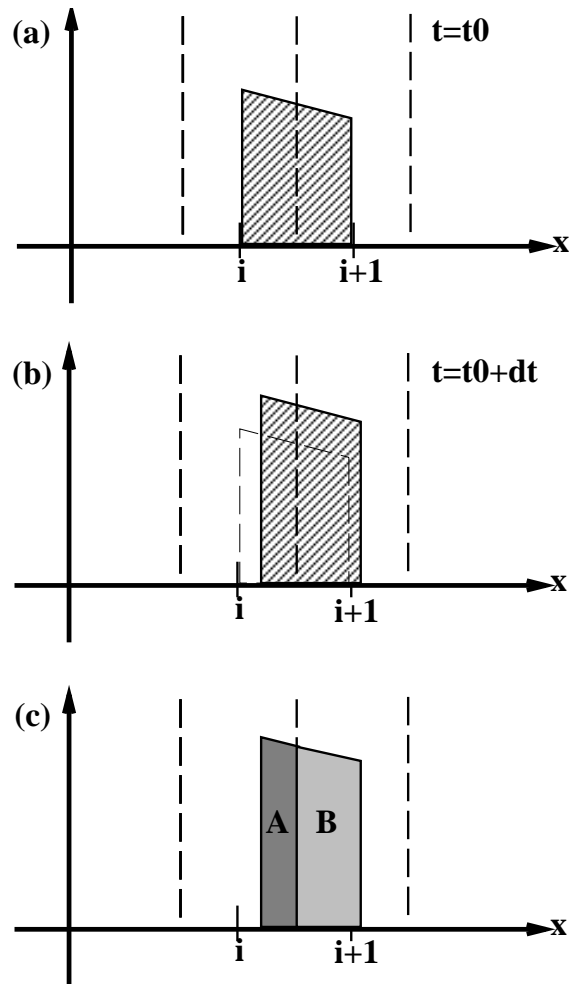


図 1: 1D SHASTA の輸送過程 (Boris and Book(1973), 図 1 を基に作成)

図 1(c)A の面積は

$$\frac{1}{2} \left[\rho_1 + \left(\rho_2 + \frac{\rho_1 - \rho_2}{\Delta x + \Delta t(u_{i+1}^n - u_i^n)} \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta x + u_{i+1}^n \Delta t \right) \right) \right] \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta x + u_{i+1}^n \Delta t \right),$$

B の面積は

$$\frac{1}{2} \left[\rho_2 + \left(\rho_2 + \frac{\rho_1 - \rho_2}{\Delta x + \Delta t(u_{i+1}^n - u_i^n)} \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta x - u_i^n \Delta t \right) \right) \right] \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta x - u_i^n \Delta t \right),$$

と与えられる. i 格子に割り付けられる面積は図 1(c)B と $i-1$ からの寄与

$$\frac{1}{2} \left[\rho_2 + \left(\rho_3 + \frac{\rho_2 - \rho_3}{\Delta x + \Delta t(u_i^n - u_{i-1}^n)} \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta x + u_i^n \Delta t \right) \right) \right] \cdot \left(\frac{1}{2} \Delta x + u_i^n \Delta t \right),$$

である. ただし,

$$\rho_3 = \frac{\rho_{i-1}^n \Delta x}{\Delta x + \Delta t(u_i^n - u_{i-1}^n)},$$

である. 割り付けられた面積を格子間隔で割って時刻 $t_0 + \Delta t$ の i 格子点での密度 ρ_i^{n+1} を得る.

以上をまとめると,

$$\begin{aligned} \rho_i^{n+1} &= \frac{1}{2} Q_-^2 (\rho_{i-1}^n - \rho_i^n) + \frac{1}{2} Q_+^2 (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n) + (Q_+ + Q_-) \rho_i^n, \\ Q_{\pm} &= \left(\frac{1}{2} \mp u_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) / \left[1 \pm (u_{i\pm 1}^n - u_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right], \end{aligned} \quad (4)$$

となる. 速度一定の場合は $\epsilon \equiv u_i^n \Delta t / \Delta x$ として,

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\epsilon}{2} (\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n) + \left(\frac{1}{8} + \frac{\epsilon^2}{2} \right) (\rho_{i+1}^n - 2\rho_i^n + \rho_{i-1}^n), \quad (5)$$

となる. これは中心差分で表現した移流に拡散が加わった形になっていて, 速度に依存しない拡散を除けば 2 段の Lax-Wendroff スキームと同じである¹.

¹2 段の Lax-Wendroff スキームとは以下のような方法である.

$$\rho_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\rho_i^n + \rho_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (f_{i+1}^n - f_i^n)$$

2.2 補正過程

(5)式から明らかなように SHASTA には速度に依存した拡散が含まれている. $u = 0$ の場合にも

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \frac{1}{8}(\rho_{i+1}^n - 2\rho_i^n + \rho_{i-1}^n), \quad (6)$$

となって拡散が残ってしまう. これを除いた修正解 $\bar{\rho}_i^{n+1}$ を求めるために, (6) 式を陽解法で逆に解く.

$$\bar{\rho}_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} - \frac{1}{8}(\rho_{i+1}^{n+1} - 2\rho_i^{n+1} + \rho_{i-1}^{n+1}), \quad (7)$$

(7) 式右辺第二項を “antidiffusion” と呼ぶ. (7) は形式的に移流形にすることができる. すなわち,

$$\bar{\rho}_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} - (f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}), \quad (8)$$

$$f_{i\pm\frac{1}{2}} \equiv \pm \frac{1}{8}(\rho_{i\pm\frac{1}{2}}^{n+1} - \rho_i^{n+1}), \quad (9)$$

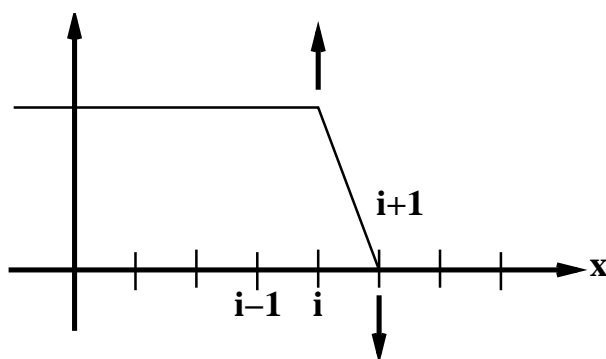


図 2: 1D の不連続面の伝播と antidiffusion の影響 (Boris and Book(1973), 図 2 を基に作成)

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(f_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}})$$

ただし $f_i^n = u_i^n \rho_i^n$ 等である. まず $\rho_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ を求め, その値を用いて ρ_{i+1}^{n+1} を求める. u_i^n が一定の場合は $\rho_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ を消去して,

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{1}{2}\epsilon(\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n) + \frac{1}{2}\epsilon^2(\rho_{i+1}^n - 2\rho_i^n + \rho_{i-1}^n)$$

となる.

となる. $f_{i\pm\frac{1}{2}}$ は antidiffusive フラックス と呼ぶ.

この antidiffusion または antidiffusive フラックスを加えれば数値拡散を除去することができるので, いつでも正しい解が得られるかというとは実はそうではない. 例えば図2のような不連続面が一定の速度で移流されるような場合を考えてみよう. ある時刻で図のように正しい解が得られているとする. これに antidiffusion を加えると図に示した矢印のように i での値は増加し $i+1$ の値は減少してしまう. よって新たに極値を作り出すことになる. とくに非負の物理量を計算している場合は $i+1$ に負の値が生じてしまう. 明らかにこれは非物理的な解である.

antidiffusion を加えるときは以上のような非物理的な解を生じないように注意しなければならない. すなわち,

- 新たに極大, 極小を作らない.
- すでに存在する極大 (極小) をさらに大きく (小さく) はしない.

という条件を満たすように $f_{i\pm\frac{1}{2}}$ を加えなければならない. そこで以下のような補正フラックス (corrected flux) $f_{i\pm\frac{1}{2}}^c$ を新たに定義し, これを (8) 式の $f_{i\pm\frac{1}{2}}$ と置き換えて用いることにする.

$$f_{i+\frac{1}{2}}^c \equiv S_{i+\frac{1}{2}} \max\{0, \min(S_{i+\frac{1}{2}}\Delta_{i-\frac{1}{2}}, |f_{i+\frac{1}{2}}|, S_{i+\frac{1}{2}}\Delta_{i+\frac{3}{2}})\}, \quad (10)$$

$$\Delta_{i+\frac{1}{2}} = \rho_{i+1}^{n+1} - \rho_i^{n+1}, \quad (11)$$

$$S = \begin{cases} +1 & \text{if } f_{i+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ -1 & \text{if } f_{i+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (12)$$

この補正フラックスはどのような場合に作用するよう定義されたのか具体的な例を挙げて調べてみる. 図3には $f_{i+\frac{1}{2}} > 0$ のときに取り得る配置を示してある. (a) のような場合 $f_{i\pm\frac{1}{2}}^c$ は図に示した矢印の範囲まで補正しうる大きさをとることができる. それ以上の大きさになると新たに極値が生じてしまう. これに対し (b)~(d) の場合 $f_{i\pm\frac{1}{2}}^c$ は 0 にしなくてはならない. そうしないと既に存在している極大 (極小) がさらに成長してしまい, 先に述べたような非物理的な解が生じるようになってしまうからである. (10)~(12) 式で与えた補正フラックスは図3(a) のような場合に極値を生じないように作用するように巧妙に定義したものなのである.

2.3 まとめ: 1D-SHASTA

1D-SHASTA の実行手続きを以下にまとめる².

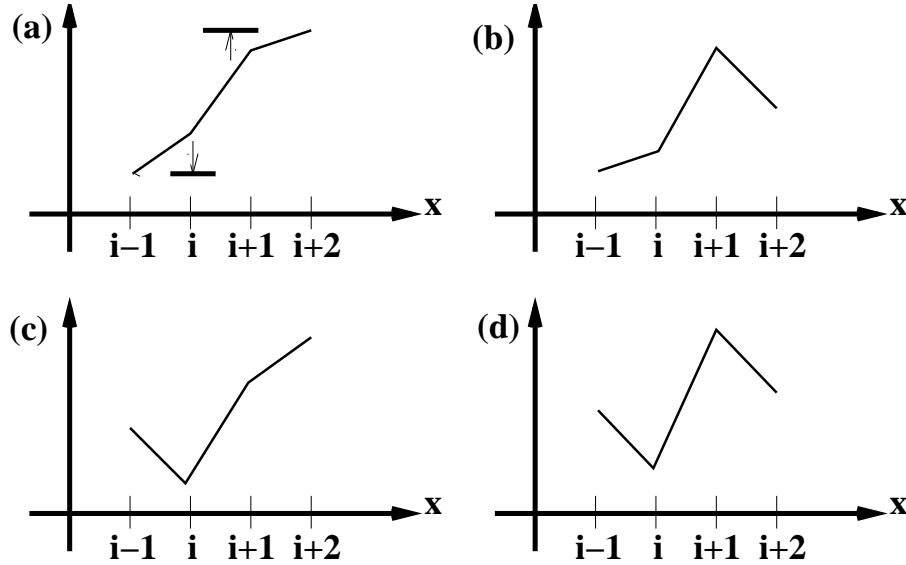


図 3: 変数の取り得る空間配置と補正流束の作用範囲 (Book *et al.*(1973), 図 6 を基に作成)

²ここで示した補正過程は (5) 式に基づいたものなので, (4) 式と (5) 式のずれに伴う部分は補正されない. $O((u_{i\pm 1} - u_i)\Delta t/\Delta x) \sim O(\epsilon) < 1$ として (4) 式を展開すると, (5) 式とのずれは,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} + \epsilon\right)^2 (u_{i-1}^n - u_i^n)(\rho_{i-1}^n - \rho_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} - \left(\frac{1}{2} - \epsilon\right)^2 (u_{i+1}^n - u_i^n)(\rho_{i+1}^n - \rho_i^n) \frac{\delta t}{\Delta x} \\ & + \left[\left(\frac{1}{2} + \epsilon\right)(u_{i-1}^n - u_i^n) - \left(\frac{1}{2} - \epsilon\right)(u_{i+1}^n - u_i^n) \right] \frac{\Delta t}{\Delta x} \rho_i^n, \end{aligned}$$

となる. これは $O(\epsilon)$ 以上のオーダーなので補正にとって最も重要な項は 0 次の拡散項であることがわかる. なおこれから $O(\epsilon)$ の項のみを抜き出すと

$$\frac{1}{4}(u_{i-1}^n - u_i^n)(\rho_{i-1}^n + \rho_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} - \frac{1}{4}(u_{i+1}^n - u_i^n)(\rho_{i+1}^n + \rho_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

となり, 拡散ではない. 速度場が滑らかで $O((u_{i\pm 1} - u_i)\Delta t/\Delta x) < O(\epsilon)$ とみなせるような場合には, このずれを無視することができる.

1. 輸送過程: (4) 式を解く.

$$\rho_i^{n+1} = \frac{1}{2}Q_-^2(\rho_{i-1}^n - \rho_i^n) + \frac{1}{2}Q_+^2(\rho_{i+1}^n - \rho_i^n) + (Q_+ + Q_-)\rho_i^n,$$

$$Q_{\pm} = \left(\frac{1}{2} \mp u_i^n \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) / \left[1 \pm (u_{i\pm 1}^n - u_i^n) \frac{\Delta t}{\Delta x} \right].$$

2. 補正過程 (1): 補正フラックスを計算する³

$$f_{i+\frac{1}{2}}^c = S_{i+\frac{1}{2}} \max\{0, \min(S_{i+\frac{1}{2}}\Delta_{i-\frac{1}{2}}, |f_{i+\frac{1}{2}}|, S_{i+\frac{1}{2}}\Delta_{i+\frac{3}{2}})\},$$

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{8}(\rho_{i+1}^{n+1} - \rho_i^{n+1}), \Delta_{i+\frac{1}{2}} = \rho_{i+1}^{n+1} - \rho_i^{n+1},$$

$$S = \begin{cases} +1 & \text{if } f_{i+\frac{1}{2}} \geq 0, \\ -1 & \text{if } f_{i+\frac{1}{2}} < 0. \end{cases}$$

3. 補正過程 (2): 補フラックスによる移流を計算する.

$$\bar{\rho}_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} - (f_{i+\frac{1}{2}}^c - f_{i-\frac{1}{2}}^c).$$

2.4 計算例

Boris and Book(1973) で行なわれたような一次元の計算を行なう. 解く方程式は1次元移流方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0,$$

である.

計算設定を以下にまとめる.

- 計算領域は $0 \leq x \leq 1$ をとり, 100 個の格子点に分割する. よって格子間隔

³実際に計算を行なう場合 Boris and Book(1973) では antidiffusion 係数 (仮に μ とおく) を以下のようにして精度を上げている.

$$\mu = \begin{cases} 0.125[1 + (1 - 0.25\bar{\rho}/|D_{i+\frac{1}{2}}|)^2], & |D_{i+\frac{1}{2}}| > 0.25\bar{\rho} \\ 0.125 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

ただし $\bar{\rho} = \sqrt{\rho_{\min}\rho_{\max}}$ であるが, $D_{i+\frac{1}{2}}$ が何であるかは Boris and Book(1973) には明示されていない.

は $\Delta x = 0.01$ である.

- 速度場は $u = 1.0$ で一定とする.
- ρ の初期値は $0 \leq x \leq 0.2$ で $\rho = 2.0$ とし, それ以外では 0.5 とする.
- 境界条件は周期境界条件を与える.
- 時間格子間隔は $\epsilon = u\Delta t/\Delta x = 0.2$ となるようにする.

時間方向にオイラー法を用いて得られた結果を図4に示す. 上段から順に上流差分, フラックス補正を行なわない SHASTA, SHASTA の各スキームを用いた場合であり, 左から順に初期値, 100 ステップ目, 800 ステップ目の図である. 上流差分では拡散が効いてしまい時間とともに初期値分布からのずれは大きくなる. 補正を行なわない SHASTA では (5) 式からも明らかであるが波数に依存しない拡散を持つため, 上流差分よりも初期値とのずれが大きくなる. 補正を行なった FCT-SHASTA スキームでは初期分布が比較的良好に保たれていることがわかる⁴.

⁴Boris and Book(1973) では脚注 2 に示したようにさらに細かい補正を行なうことでより高精度の結果を得ている (Boris and Book(1973), fig.3, fig.4 参照).

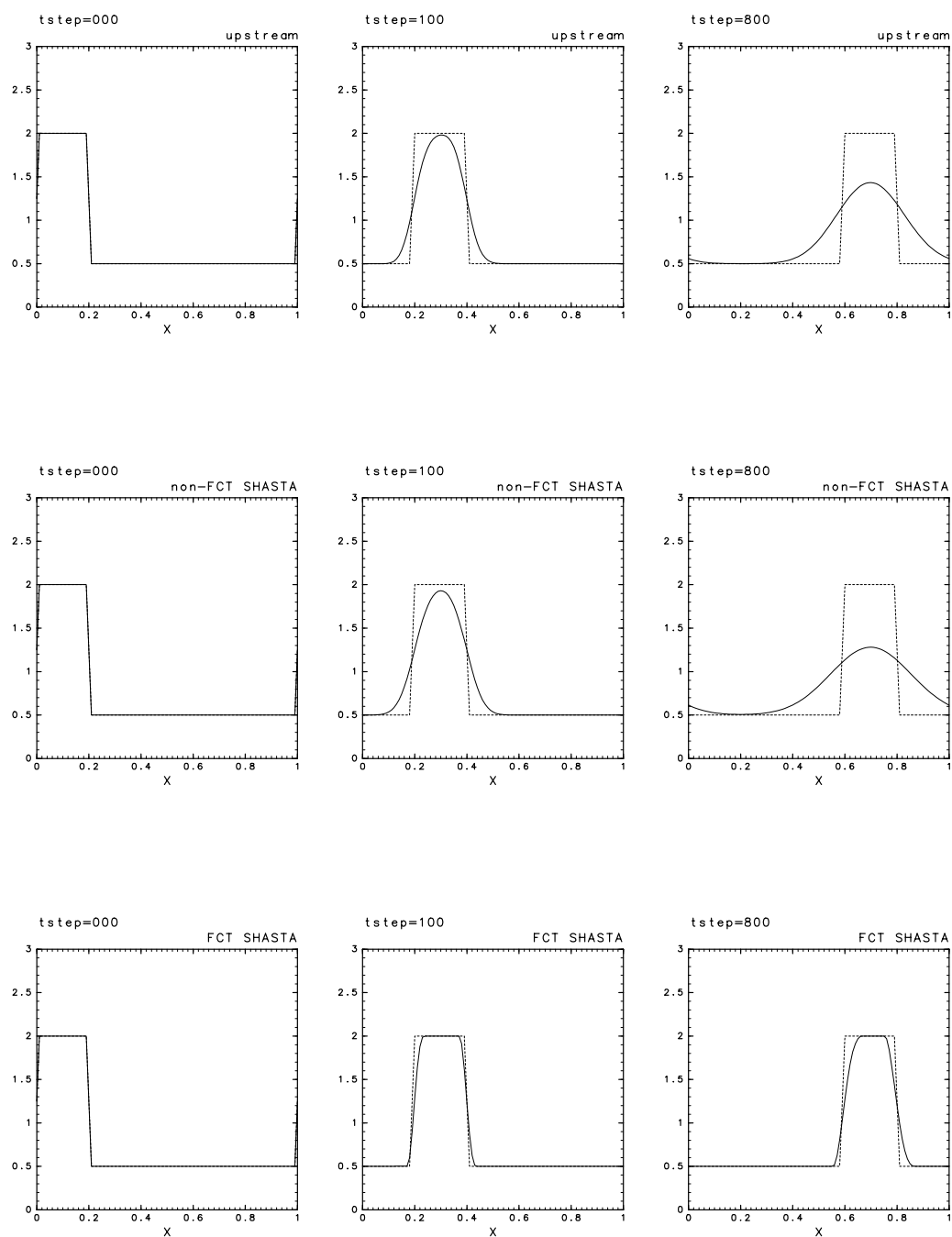


図 4: 一次元の計算例. 上から順に上流差分, フラックス補正を行わない SHASTA, SHASTA の各スキーム. 左から順に初期値, 100 ステップ目, 800 ステップ目の結果を示す. 各図の点線は解析解を示す.

3 いくつかの問題

オリジナルの FCT には, 種々のスキームに対する応用面, 補正フラックスの与え方に関して問題点がある (Zalesak, 1979). 以下順を追ってこれらを見ていくことにする.

3.1 応用性

Boris and Book(1973) では (4) または (5) のスキームに対して FCT を施したが, 拡散を含むような他のスキームに対しても応用することができる. 例えば上流差分に FCT を応用すると以下のような手順で計算を行なう (Book *et al.*, 1975).

1. 普通に上流差分で計算する.

$$\tilde{\rho}_i = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\rho_i^n u_i^n - \rho_{i-1}^n u_{i-1}^n].$$

2. 各格子点間で差分を計算する.

$$\Delta_{i+\frac{1}{2}} = \tilde{\rho}_{i+1} - \tilde{\rho}_i.$$

3. 補正フラックスを計算する.

$$f_{i+\frac{1}{2}}^c = S_{i+\frac{1}{2}} \max\{0, \min(S_{i+\frac{1}{2}} \Delta_{i-\frac{1}{2}}, \eta_{i+\frac{1}{2}} |\Delta_{i+\frac{1}{2}}|, S_{i+\frac{1}{2}} \Delta_{i+\frac{3}{2}})\},$$

$$S = \begin{cases} +1 & \text{if } \Delta_{i+\frac{1}{2}} \geq 0, \\ -1 & \text{if } \Delta_{i+\frac{1}{2}} < 0. \end{cases}$$

ここで,

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \epsilon_{i+\frac{1}{2}} (1 - \epsilon_{i+\frac{1}{2}}),$$

$$\epsilon_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{\Delta x} \max[u_i^n, u_{i+1}^n].$$

4. 補正を行なう.

$$\rho_i^{n+1} = \tilde{\rho}_i - (f_{i+\frac{1}{2}}^c - f_{i-\frac{1}{2}}^c).$$

この場合 antidiffusive フラックスが $\eta_{i+\frac{1}{2}} |\Delta_{i+\frac{1}{2}}|$ となっているだけで, 手順は先に示した SHASTA の場合と同様である. つまり用いるスキームの antidiffusive フラックスがわかれば, FCT は簡単にそのスキームに適用することができる.

しかし当然のことながらスキームごとに antidiffusive フラックスは異なる。よって適用するスキームを変更すると一から考察しなおさなければならない。これは結構面倒である。実際に計算するときには一からコードを組み直さなければならないからである。何らかのより一般的な FCT の定義法があれば、スキーム全体の見通しの点や実際に計算を行なう上で便利である。

3.2 補正フラックスの問題 (1): clipping

Boris and Book(1973) で与えられた補正フラックスは (10)~ (12) 式で与えられる。先に解説したようにこれは新たに正負の極値を作ったり、すでに存在する極値をさらに強めないような工夫がなされている。

しかしこの工夫が災いして、本当はピークを持つような分布が保存されないという欠点が生じてしまう。これは “clipping” と呼ばれている。具体的に図 5 を見ながら考えることにする。簡単のため速度は 0 とし数値拡散だけを考慮する。最初に (a) のような分布であったとすると拡散のため (b) のようになる。これに対して (10)~ (12) を基に補正フラックスを与えても、 i 点に存在したピークは再現されない。一方 $i-1, i+1$ 点での値は補正を受けるので i 点の値に次第に近づく。やがて 3 点はほぼ同じ値をとるようになる ((c))。こうなると拡散も補正も効かなくなってしまう。この状態が維持され、あたかも当初存在した山をはさみで切り取ってしまったかのようになる。

この問題は補正フラックスを決める際に 1 ステップ前の $\Delta_{i-\frac{1}{2}}, \Delta_{i+\frac{1}{2}}$ を参照することである程度解消されるが、基本的には回避できない。しかし鋭いピークを持つような成分が重要かどうかは計算の対象となる現象に依存するので、clipping が問題とならない場合もある。

3.3 補正フラックスの問題 (2): 多次元への拡張性

多次元に拡張した場合に (10)~ (12) 式をそのまま応用すると clipping とは別の問題が発生する。ここでは 2 次元の場合についてその問題を考えることにする。

今 1 ステップの輸送過程の計算が終了して図 6 のような分布が得られたとする。このとき $(x, y) = (i\Delta x, j\Delta y)$ に働く antidiffusion フラックスの向きは通常は図の矢印の向きになる。 y 方向の antidiffusion フラックスは極値を強める方向に働くので、補正フラックスは 0 になる。しかし x 方向のフラックスには制限がつかないので補正の結果 $(i\Delta x, j\Delta y)$ での値は増加することになる。よって y 方向の断面で見るとピークが成長していることになってしまう。これは FCT の基本思想と反する結

果であるので, 多次元に拡張する際には何らかの改良を加えなければならないことになる.

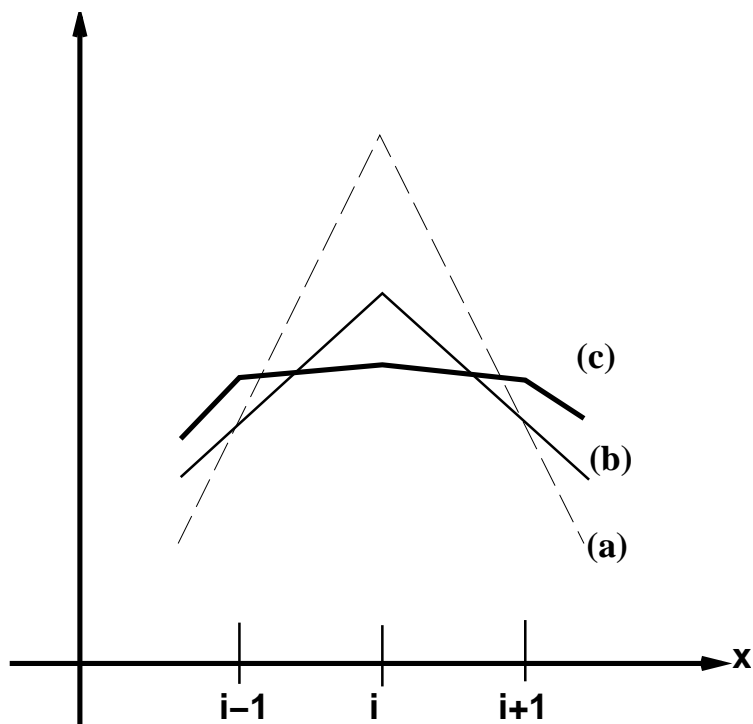


図 5: “clipping” の模式図 (Book *et al.*(1973), 図 7 を基に作成)

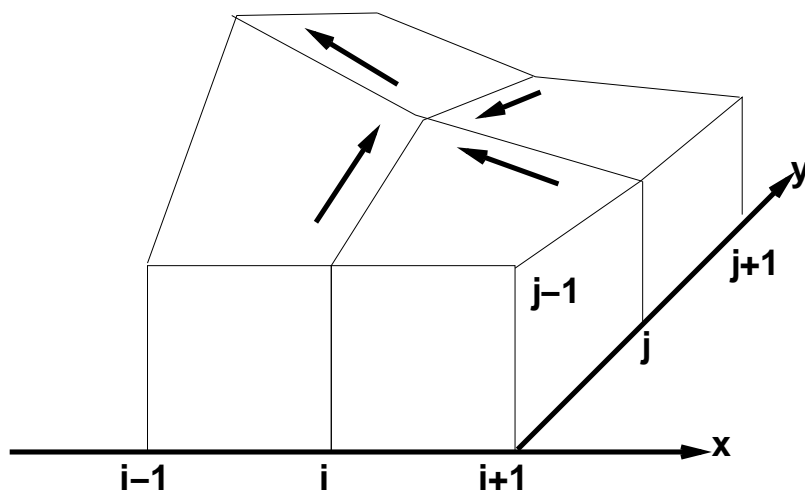


図 6: 2次元の場合の補正フラックス (Zalesak (1979), 図 2 を基に作成)

4 Zalesak(1979) による表現: 1次元

Zalesak(1979) はより一般化された FCT の表現を提案した. 現在 FCT というときには Zalesak(1979) による定義を指すのが普通である. この定義に従うと全節で挙げたいくつかの問題点をいくらか解決することができる. 以下ではこの Zalesak(1979) によって与えられた FCT について見ていくことにする.

簡単のため解く式は 1次元の移流方程式 (1) とする. これを保存形で差分化すると,

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{1}{\Delta x} [F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}], \quad (13)$$

となる. これに FCT を適用することを考える.

4.1 計算手順

Zalesak(1979) に従うとその計算手順は以下のようになる.

1. 精度の低い低次のスキームを用いてフラックスを計算する. これを $F_{i+\frac{1}{2}}^L$ と表す. このとき用いるスキームは上流差分のような「単調な」(数値波を作らない)スキームであることが要請される.

2. 精度の高い高次のスキームを用いてフラックスを計算する. これを $F_{i+\frac{1}{2}}^H$ と表す.

3. antidiffusive フラックスを以下のようにして定義する.

$$A_{i+\frac{1}{2}} \equiv F_{i+\frac{1}{2}}^H - F_{i+\frac{1}{2}}^L. \quad (14)$$

4. 低次のスキームで計算する.

$$\rho_i^{td} = \rho_i^n - \frac{1}{\Delta x} [F_{i+\frac{1}{2}}^L - F_{i-\frac{1}{2}}^L]. \quad (15)$$

5. 補正フラックスを適当な方法で計算する. 補正の与える際の条件は Boris and Book(1973) と同様である.

$$A_{i+\frac{1}{2}}^c = C_{i+\frac{1}{2}} A_{i+\frac{1}{2}}, \quad 0 \leq C_{i+\frac{1}{2}} \leq 1. \quad (16)$$

なお補正係数 $C_{i+\frac{1}{2}}$ の与え方については後述する.

6. 補正フラックスを与える.

$$\rho_i^{td} = \rho_i^n - \frac{1}{\Delta x} [A_{i+\frac{1}{2}}^c - A_{i-\frac{1}{2}}^c]. \quad (17)$$

このように定義することにより応用範囲が大きく広がる. 低次のスキームには条件がつくが, 高次のスキームに対しては何も制約がないのであらゆるスキームを用いることができる. 組み合わせるスキームを決めてしまえばあとは上記の手順に沿って機械的に計算を進めることができる. 実際計算をする場合には $F_{i+\frac{1}{2}}^L, F_{i+\frac{1}{2}}^H$ を計算する部分のコードだけを書き換えればよいことになるので, 種々のスキームを用いてそのパフォーマンスを比較検討することが容易になる.

なお Harten and Zwas(1972) による自己調節混合スキーム (Self-Adjusting Hybrid Schemes; 以下 SAHS とする) は, 上記の 5 番目に相当する所の計算方法が異なるだけで, その他の手順は同様である.

(14)~(17) をまとめて書くこともできる. この場合

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{1}{\Delta x} \left\{ [C_{i+\frac{1}{2}} F_{i+\frac{1}{2}}^H + (1 - C_{i+\frac{1}{2}}) F_{i+\frac{1}{2}}^L] - [C_{i-\frac{1}{2}} F_{i-\frac{1}{2}}^H + (1 - C_{i-\frac{1}{2}}) F_{i-\frac{1}{2}}^L] \right\}, \quad (18)$$

となる. FCT とは低次と高次のスキームの重ね合わせであり, その比率 $C_{i+\frac{1}{2}}$ の与え方に工夫を凝らしたものと捉えることができる. $C_{i+\frac{1}{2}}$ の与え方を変えると

SAHS にすることもできる. 一般に FCT として普通目にするのは (18) 式の表現である. ここまで来ると Boris and Book(1973), Book *et al.*(1975) の表現とは一見異なるが, やっていることは同じである.

4.2 補正係数の決め方

補正係数 $C_{i+\frac{1}{2}}$ は補正フラックスによって補正された値が極値を取らないように, すなわち ρ_i がある最大値 ρ_i^{max} 及び ρ_i^{min} を超えないように与える. その際対象となる格子点に関わる全ての補正フラックスの存在を考慮すれば, 全節で挙げたような多次元に拡張した場合に発生する問題を回避することができるだろう. これは次のような手順で $C_{i+\frac{1}{2}}$ を与えることで達成することができる.

1. antidiffusive フラックスに対しあらかじめ以下の条件を課しておく.

$$\begin{aligned} A_{i+\frac{1}{2}} = 0 & \quad \text{if} \quad A_{i+\frac{1}{2}}(\rho_{i+1}^{td} - \rho_i^{td}) < 0, \\ & \quad \text{and either} \quad A_{i+\frac{1}{2}}(\rho_{i+2}^{td} - \rho_{i+1}^{td}) < 0, \\ & \quad \text{or} \quad A_{i+\frac{1}{2}}(\rho_i^{td} - \rho_{i-1}^{td}) < 0. \end{aligned} \quad (19)$$

これは Book *et al.*(1975) で言うところの “terrace” を作らないようにするためのものである (Book *et al.* 1975, 図9 参照). 実際は $A_{i+\frac{1}{2}}(\rho_{i+1}^{td} - \rho_i^{td}) < 0$ となることは稀なので, この条件を与えなくてもさほど問題にはならない.

2. $\rho_i^{max}, \rho_i^{min}$ を以下のようにして与える.

$$\rho_i^{max} = \max(\rho_{i-1}^{td}, \rho_i^{td}, \rho_{i+1}^{td}), \quad (20)$$

$$\rho_i^{min} = \min(\rho_{i-1}^{td}, \rho_i^{td}, \rho_{i+1}^{td}). \quad (21)$$

または clipping を抑えるために,

$$\rho_i^a = \max(\rho_i^n, \rho_i^{td}), \quad (22)$$

$$\rho_i^{max} = \max(\rho_{i-1}^a, \rho_i^a, \rho_{i+1}^a), \quad (23)$$

$$\rho_i^b = \min(\rho_i^n, \rho_i^{td}), \quad (24)$$

$$\rho_i^{min} = \min(\rho_{i-1}^b, \rho_i^b, \rho_{i+1}^b), \quad (25)$$

とする.

3. 以下の3つの量を用意する.

$$\begin{aligned} P_i^+ &= \text{格子点 } i \text{ に入る全ての antidiffusive フラックスの和} \\ &= \max(0, A_{i-\frac{1}{2}}) - \min(0, A_{i+\frac{1}{2}}), \end{aligned} \quad (26)$$

$$Q_i^+ = (\rho_i^{\max} - \rho_i)\Delta x, \quad (27)$$

$$R_i^+ = \begin{cases} \min(1, Q_i^+/P_i^+) & \text{if } P_i^+ > 0, \\ 0 & \text{if } P_i^+ = 0. \end{cases} \quad (28)$$

R_i^+ は i 点に流入しうる antidiffusive フラックスの上限を決める.

4. 同様に以下の3つの量を用意する.

$$\begin{aligned} P_i^- &= \text{格子点 } i \text{ から出て行く全ての antidiffusive フラックスの和} \\ &= \max(0, A_{i+\frac{1}{2}}) - \min(0, A_{i-\frac{1}{2}}), \end{aligned} \quad (29)$$

$$Q_i^- = (\rho_i - \rho_i^{\min})\Delta x, \quad (30)$$

$$R_i^- = \begin{cases} \min(1, Q_i^-/P_i^-) & \text{if } P_i^- > 0, \\ 0 & \text{if } P_i^- = 0. \end{cases} \quad (31)$$

R_i^- は i 点から流出しうる antidiffusive フラックスの上限を決める.

5. 上で与えた R_i^+, R_i^- を用いて補正係数を以下のように与える.

$$C_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \min(R_{i+1}^+, R_i^-) & \text{if } A_{i+\frac{1}{2}} \geq 0, \\ \min(R_i^+, R_{i+1}^-) & \text{if } A_{i+\frac{1}{2}} < 0. \end{cases} \quad (32)$$

5 Zalesak(1979) による表現: 2次元

5.1 計算手順と補正係数の決め方

2次元の FCT は1次元のものをそのまま拡張することで得ることができる。(18) を2次元形に拡張すると,

$$\begin{aligned}
 \rho_{i,j}^{n+1} = & \rho_{i,j}^n - \frac{1}{\Delta x \Delta y} \{ [C_{i+\frac{1}{2},j} F_{i+\frac{1}{2},j}^H + (1 - C_{i+\frac{1}{2},j}) F_{i+\frac{1}{2},j}^L] \\
 & - [C_{i-\frac{1}{2},j} F_{i-\frac{1}{2},j}^H + (1 - C_{i-\frac{1}{2},j}) F_{i-\frac{1}{2},j}^L], \\
 & + [C_{i,j+\frac{1}{2}} G_{i,j+\frac{1}{2}}^H + (1 - C_{i,j+\frac{1}{2}}) G_{i,j+\frac{1}{2}}^L] \\
 & - [C_{i,j-\frac{1}{2}} G_{i,j-\frac{1}{2}}^H + (1 - C_{i,j-\frac{1}{2}}) G_{i,j-\frac{1}{2}}^L] \}, \quad (33)
 \end{aligned}$$

となる. 補正係数 $C_{i\pm\frac{1}{2},j}, C_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ を決める手順は (19)~(32) と同様である.

1. antidiffusive フラックスに対しあらかじめ以下の条件を課しておく.

$$\begin{aligned}
 A_{i+\frac{1}{2},j} = 0 & \quad \text{if} \quad A_{i+\frac{1}{2},j}(\rho_{i+1,j}^{td} - \rho_{i,j}^{td}) < 0, \\
 & \quad \text{and either} \quad A_{i+\frac{1}{2},j}(\rho_{i+2,j}^{td} - \rho_{i+1,j}^{td}) < 0, \\
 & \quad \quad \text{or} \quad A_{i+\frac{1}{2},j}(\rho_{i,j}^{td} - \rho_{i-1,j}^{td}) < 0, \\
 A_{i,j+\frac{1}{2}} = 0 & \quad \text{if} \quad A_{i,j+\frac{1}{2}}(\rho_{i,j+1}^{td} - \rho_{i,j}^{td}) < 0, \\
 & \quad \text{and either} \quad A_{i,j+\frac{1}{2}}(\rho_{i,j+2}^{td} - \rho_{i,j+1}^{td}) < 0, \\
 & \quad \quad \text{or} \quad A_{i,j+\frac{1}{2}}(\rho_{i,j}^{td} - \rho_{i,j-1}^{td}) < 0. \quad (19')
 \end{aligned}$$

2. $\rho_i^{max}, \rho_i^{min}$ を以下のようにして与える.

$$\rho_{i,j}^{max} = \max(\rho_{i-1,j}^{td}, \rho_{i,j}^{td}, \rho_{i+1,j}^{td}, \rho_{i,j-1}^{td}, \rho_{i,j+1}^{td}), \quad (20')$$

$$\rho_{i,j}^{min} = \min(\rho_{i-1,j}^{td}, \rho_{i,j}^{td}, \rho_{i+1,j}^{td}, \rho_{i,j-1}^{td}, \rho_{i,j+1}^{td}). \quad (21')$$

または clipping を抑えるために,

$$\rho_{i,j}^a = \max(\rho_{i,j}^n, \rho_{i,j}^{td}), \quad (22')$$

$$\rho_i^{max} = \max(\rho_{i-1,j}^a, \rho_{i,j}^a, \rho_{i+1,j}^a, \rho_{i,j-1}^a, \rho_{i,j+1}^a), \quad (23')$$

$$\rho_{i,j}^b = \min(\rho_{i,j}^n, \rho_{i,j}^{td}), \quad (24')$$

$$\rho_i^{min} = \min(\rho_{i-1,j}^b, \rho_{i,j}^b, \rho_{i+1,j}^b, \rho_{i,j-1}^b, \rho_{i,j+1}^b), \quad (25')$$

とする.

3. 以下の3つの量を用意する.

$$\begin{aligned}
 P_{i,j}^+ &= \text{格子点 } i, j \text{ に入る全ての antidiffusive フラックスの和} \\
 &= \max(0, A_{i-\frac{1}{2},j}) - \min(0, A_{i+\frac{1}{2},j}) \\
 &\quad + \max(0, A_{i,j-\frac{1}{2}}) - \min(0, A_{i,j+\frac{1}{2}}), \tag{26'}
 \end{aligned}$$

$$Q_{i,j}^+ = (\rho_{i,j}^{max} - \rho_{i,j})\Delta x\Delta y, \tag{27'}$$

$$R_{i,j}^+ = \begin{cases} \min(1, Q_{i,j}^+/P_{i,j}^+) & \text{if } P_{i,j}^+ > 0, \\ 0 & \text{if } P_{i,j}^+ = 0. \end{cases} \tag{28'}$$

4. 同様に以下の3つの量を用意する.

$$\begin{aligned}
 P_{i,j}^- &= \text{格子点 } i, j \text{ から出て行く全ての antidiffusive フラックスの和} \\
 &= \max(0, A_{i+\frac{1}{2},j}) - \min(0, A_{i-\frac{1}{2},j}) \\
 &\quad + \max(0, A_{i,j+\frac{1}{2}}) - \min(0, A_{i,j-\frac{1}{2}}), \tag{29'}
 \end{aligned}$$

$$Q_{i,j}^- = (\rho_{i,j} - \rho_{i,j}^{min})\Delta x\Delta y, \tag{30'}$$

$$R_{i,j}^- = \begin{cases} \min(1, Q_{i,j}^-/P_{i,j}^-) & \text{if } P_{i,j}^- > 0, \\ 0 & \text{if } P_{i,j}^- = 0. \end{cases} \tag{31'}$$

5. 補正係数を以下のように与える.

$$C_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} \min(R_{i+1,j}^+, R_{i,j}^-) & \text{if } A_{i+\frac{1}{2},j} \geq 0, \\ \min(R_{i,j}^+, R_{i+1,j}^-) & \text{if } A_{i+\frac{1}{2},j} < 0. \end{cases} \tag{32'}$$

$$C_{i,j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \min(R_{i,j+1}^+, R_{i,j}^-) & \text{if } A_{i,j+\frac{1}{2}} \geq 0, \\ \min(R_{i,j}^+, R_{i,j+1}^-) & \text{if } A_{i,j+\frac{1}{2}} < 0. \end{cases}$$

5.2 計算例

実際に式 (33) を (19')~(32') を用いて計算する. 計算設定は Zalesak(1979) と同様のもの, 初期値の与え方は Smolarkiewicz(1983) で用いられたもの同様とする.

- 計算領域に $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$ をとる. それぞれの方向に 100 個の格子に分割する. すなわち $\Delta x = \Delta y = 0.01$ である.
- 速度場は $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$ を中心に角速度 $\omega = 0.1$ で剛体回転する場を与える. すなわち $(u, v) = (-\omega(y - y_0), \omega(x - x_0))$ である.
- ρ の初期値は円錐形分布を与える. 底面の円の中心は $(x_m, y_m) = (0.75, 0.5)$, 半径は 0.15, 円錐の高さは 4 とする.
- 境界条件は全ての変数が壁で対称となるように与える.
- 時間格子間隔 Δt は 0.1 とした. これより与えられるクーラン数 $\text{MAX}(u\Delta t/\Delta x)$ は約 0.7 である.

以上の設定で計算すると, 時間方向に 628 ステップ計算でほぼ一回転する. 計算領域と初期値の分布を図 7 に示す.

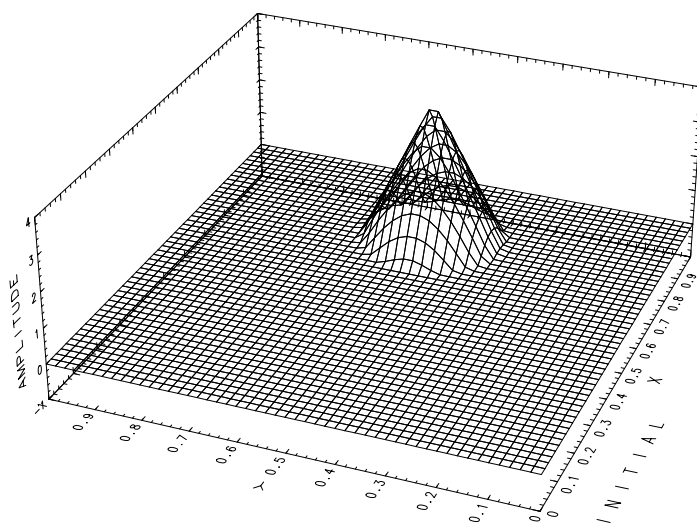


図 7: 計算領域と初期値の分布.

比較のためまず上流差分スキームを用いて計算を行なった. スキームを書くと以下のようなになる.

$$\begin{aligned} \rho_{i,j}^{n+1} = & \rho_{i,j}^n - \{F_x(\rho_{i,j}^n, \rho_{i+1,j}^n, u_{i+\frac{1}{2},j}^n) - F_x(\rho_{i-1,j}^n, \rho_{i,j}^n, u_{i-\frac{1}{2},j}^n)\} \\ & - \{F_y(\rho_{i,j}^n, \rho_{i,j+1}^n, v_{i,j+\frac{1}{2}}^n) - F_y(\rho_{i,j-1}^n, \rho_{i,j}^n, v_{i,j-\frac{1}{2}}^n)\}. \end{aligned} \quad (34)$$

ここで,

$$\begin{aligned} F_x(\rho_{i,j}^n, \rho_{i+1,j}^n, u_{i+\frac{1}{2},j}^n) &= [(u_{i+\frac{1}{2},j}^n + |u_{i+\frac{1}{2},j}^n|)\rho_{i,j}^n + (u_{i+\frac{1}{2},j}^n - |u_{i+\frac{1}{2},j}^n|)\rho_{i+1,j}^n] \frac{\Delta t}{2\Delta x}, \\ F_y(\rho_{i,j}^n, \rho_{i,j+1}^n, v_{i,j+\frac{1}{2}}^n) &= [(v_{i,j+\frac{1}{2}}^n + |v_{i,j+\frac{1}{2}}^n|)\rho_{i,j}^n + (v_{i,j+\frac{1}{2}}^n - |v_{i,j+\frac{1}{2}}^n|)\rho_{i,j+1}^n] \frac{\Delta t}{2\Delta y}, \end{aligned}$$

である. これを時間方向に修正オイラー法(2次のルンゲクッタ)を用いて計算した.

1回転後(628ステップ)と3回転後(1884ステップ)後の結果を図8と図9にそれぞれ示す. 上流差分では数値拡散が大きいので1回転後で既に初期分布は大きく損なわれている. 3回転もすると初期分布はあとかたもなくなってしまう.

同様の計算をFCTを用いて行なった. 低次のスキームに上流差分, 高次のスキームに2次中心差分を用いている. 1回転後(628ステップ)と3回転後(1884ステップ)後の結果を図10と図11にそれぞれ示す. 全体的に数値拡散は抑えられているが, 山の頂上付近が削られてしまい clipping が回避できていないことを示している.

続いて初期値分布を変えて同様の計算を行なった. 図7で円錐を置いた所に同じ高さを持つ円筒を置く(図12参照). ここでも低次のスキームに上流差分, 高次のスキームに2次中心差分を用いた. 1回転後(628ステップ)の結果を図13に示す. 初期値に円錐分布を与えた場合と比べ clipping はあまり目立たない.

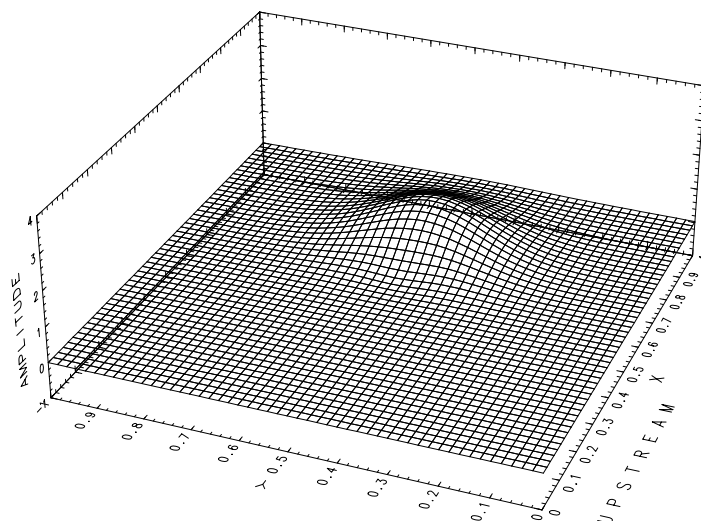


図 8: 上流差分による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果.

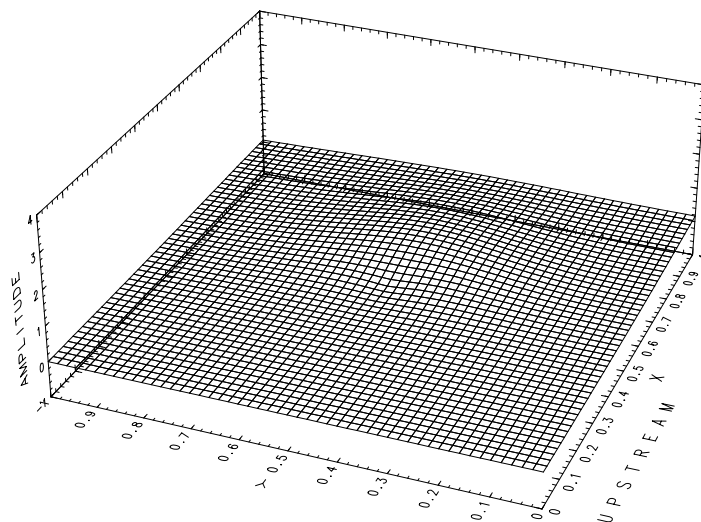


図 9: 上流差分による計算. 3 回転 (1884 ステップ) 後の結果.

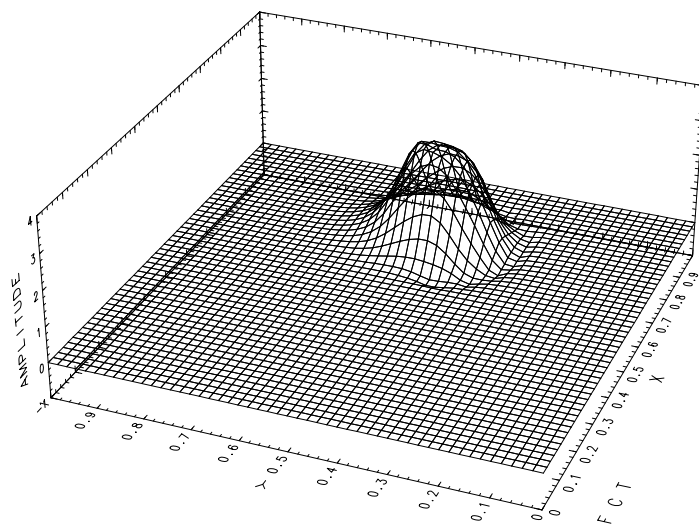


図 10: FCT による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果.

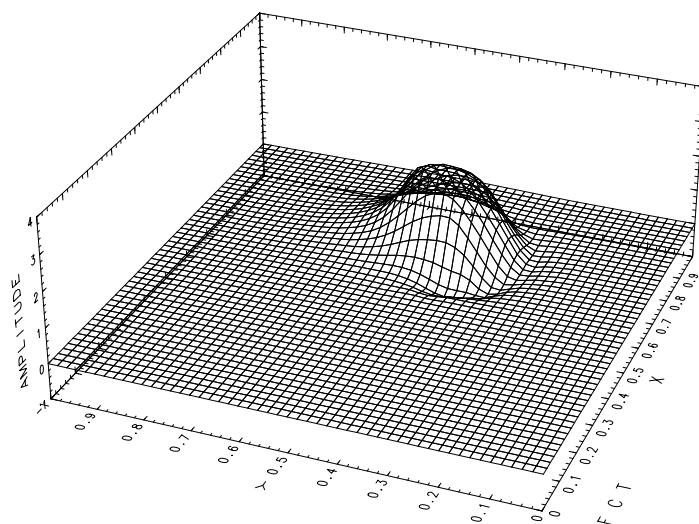


図 11: FCT による計算. 3 回転 (1884 ステップ) 後の結果.

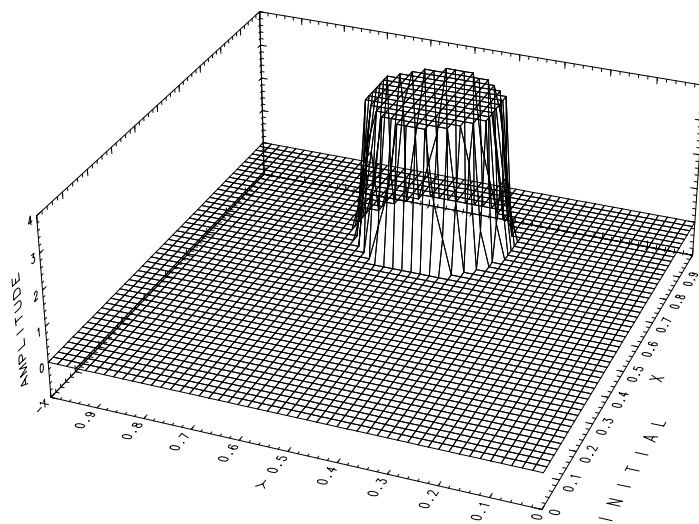


図 12: 計算領域と初期値の分布. 円筒分布を与えた場合.

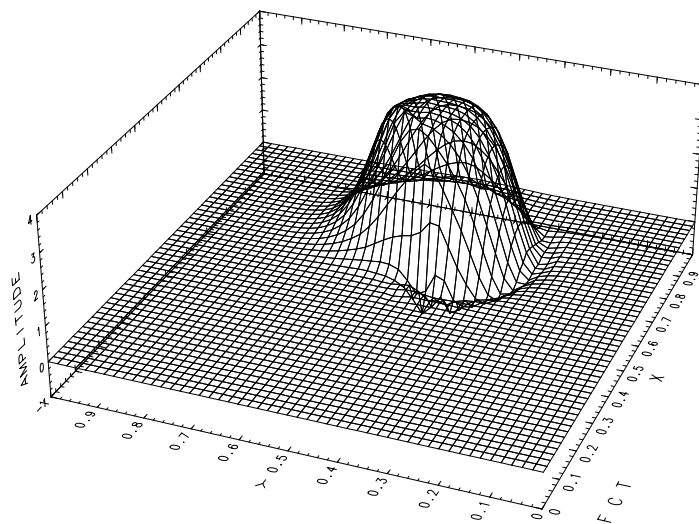


図 13: FCT による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果. 初期値に円筒分布を与えた場合

6 参考文献

- Book, D. L., Boris, J. P., and Hain, K., 1975: Flux-corrected transport II: Generalizations of the method. *J. Comput. Phys.*, **18**, 248-283.
- Boris, J. P., and Book, D. L., 1973: Flux-corrected transport I: SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *J. Comput. Phys.*, **11**, 38-69.
- Boris, J. P., and Book, D. L., 1976: Flux-corrected transport III: Minimal-error FCT algorithms. *J. Comput. Phys.*, **20**, 397-431.
- Harten, A., and Zwas, G., 1972: Self-Adjusting Hybrid Schemes for Shock Computations. *J. Comput. Phys.*, **9**, 568-583.
- 廣瀬直喜, 1995: 差分法による解析, 数値流体力学シリーズ第2巻「圧縮性流体解析」第2章, 数値流体力学編集委員会 編, 東京大学出版会.
- Zalesak, S. T., 1979: Fully multi-dimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, **31**, 335-362.