6. 陰解法

前節では準一次元流れを扱い，定常解を時間依存法によって計算した．このとき時間積分については Euler 陽解法を用いた．今後とも，定常解の計算に時間依存法を使用するが，空間次元数が大きくなるに連れて，計算量が増加するため，CFL 条件によって拘束される陽解法では，計算時間が大きくなるという問題がある．ここで述べる陰解法は 1 ステップ当たりの計算量は増大するが，CFL 条件による拘束が無いため，タイムステップを比較的大きくとることが可能となり，収束にいたるまでのステップ数が少なくなることによって，総計算時間を短縮できることになる．

ここでは，準一次元定常流を例にとって，陰解法を説明する．陰解法と一言でいっても，色々有るが，最も基本的な，Euler 陰解法を用いた Beam-Warming 法及び，実用性の高い LU-SGS (Lower-Upper Successive Gauss-Sidel)法について紹介する．

6.1 Beam-Warming 法 （Euler 陰解法による）

準一次元流の Euler 方程式を用いて，説明する．準一次元の Euler 方程式は，次式で与えられる．

$$
\begin{gathered}
\frac{\partial A\mathbf{q}}{\partial t}+\frac{\partial A\mathbf{F}}{\partial x}=A\mathbf{S} \\
\mathbf{q}=\begin{bmatrix}\rho\\ \rho u\\ E\end{bmatrix} \\
\mathbf{F}=\begin{bmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho u H\end{bmatrix} \\
\mathbf{S}=\begin{bmatrix}0\\ p\dfrac{d(\ln A)}{dx}\\ 0\end{bmatrix}
\end{gathered}
\tag{6-1}
$$

さて，空間方向に前節同様，有限体積法により離散化し，対流項には 1 次元流れで学習した，Roe 法あるいは van Leer 法等を用いる．時間方向に関して本節では，Beam-Warming 法を採用し，解くべき値を $\Delta\overline{\mathbf{q}}\equiv\overline{\mathbf{q}}^{n+1}-\overline{\mathbf{q}}^{n}$ として定式化する．この形式はデルタフォームと呼ばれる．その中で時間積分に Euler 陰解法を用いることにする．

まず，前節と同様の手続きにより式(5-9)と同じ式を得る．ここで，$i=1,\ldots N-1$ はセル番号である．

$$
\frac{d\overline{\mathbf{q}}_i}{dt}+\frac{(\mathbf{F}A)_{i+1/2}-(\mathbf{F}A)_{i-1/2}}{\Delta x_i\,\overline{A}_i}=\overline{\mathbf{S}}_i
\tag{6-2}
$$

さらに時間幅（t_n, t_{n+1}）に亘って，式(6-2)を時間について積分する．

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left\{ \frac{d\overline{\mathbf{q}}_i}{dt} + \frac{(\mathbf{F}A)_{i+1/2} - (\mathbf{F}A)_{i-1/2}}{\Delta x_i \overline{A}_i} \right\} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \overline{\mathbf{S}}_i \, dt \tag{6-3}$$

さてここで，数値時間積分に Euler 陰解法を用いる．即ち，時間積分幅に亘って，対流項流束とソース項を時刻 t_{n+1} の時の値で一定であると仮定する．その仮定のもとで，式(6-3)を計算すると，次式を得る．

$$\overline{\mathbf{q}}_i^{n+1} = \overline{\mathbf{q}}_i^n - \frac{\Delta t^n}{Vol_i}\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^{n+1} A_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{n+1} A_{i-1/2}\right) + \overline{\mathbf{S}}_i^{n+1} \Delta t^n \tag{6-4}$$

ここで， $\Delta t^n \equiv t_{n+1} - t_n$ はタイムステップ， $Vol_i \equiv \Delta x_i \overline{A}_i$ は i 番目のセルの体積である．

式(6-4)には時刻 t_{n+1} における対流項流束及びソース項が含まれているので，Euler 陽解法の場合のように既知の値を用いて計算することができない．そこでまず，式(6-4)を $\Delta\overline{\mathbf{q}}$ に関して，線型化する．そのために，時刻 t_{n+1} における対流項流束とソース項を次のように表す．

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{i+1/2}^{n+1} &= \mathbf{F}_{i+1/2}^n + \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^n \Delta \mathbf{q}_{i+1/2} \\ \overline{\mathbf{S}}_i^{n+1} &= \overline{\mathbf{S}}_i^n + \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n \Delta \overline{\mathbf{q}}_i \end{aligned} \tag{6-5}$$

ここで $\mathbf{F}_{i+1/2}^n$， $\overline{\mathbf{S}}_i^n$ は $\mathbf{F}\left(\mathbf{q}_{i+1/2}^n\right)$, $\mathbf{S}\left(\overline{\mathbf{q}}_i^n\right)$ を， $\partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{q}|_{i+1/2}^n, \partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{q}|_i^n$ は $\partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{q}\left(\mathbf{q}_{i+1/2}^n\right)$, $\partial\mathbf{S}/\partial\mathbf{q}\left(\overline{\mathbf{q}}_i^n\right)$ 等を意味する．ヤコビアン行列を具体的に書くと

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \dfrac{\gamma - 3}{2} u^2 & (3-\gamma)u & \gamma - 1 \\ \dfrac{u}{2}\left[-2H + (\gamma-1)u^2\right] & H + (1-\gamma)u^2 & \gamma u \end{pmatrix},$$

$$\left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i = \frac{A_{i+1/2} - A_{i-1/2}}{Vol_i} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \dfrac{u^2}{2} & -u & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_i (\gamma - 1)$$

である．

式(6-5)を式(6-4)に代入して，

$$\begin{aligned} \Delta\overline{\mathbf{q}}_i = -\frac{\Delta t^n}{Vol_i}\Bigg[&\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^n + \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^n \Delta\mathbf{q}_{i+1/2}\right) A_{i+1/2} - \left(\mathbf{F}_{i-1/2}^n + \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^n \Delta\mathbf{q}_{i-1/2}\right) A_{i-1/2} \Bigg] \\ &+ \left(\overline{\mathbf{S}}_i^n + \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n \Delta\overline{\mathbf{q}}_i\right) \Delta t^n \end{aligned}$$

この式を整理して，

$$Vol_i\left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta t^n}-\left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\Delta\overline{\mathbf{q}}_i+\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^n A_{i+1/2}\right)\Delta\mathbf{q}_{i+1/2}-\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^n A_{i-1/2}\right)\Delta\mathbf{q}_{i-1/2} \\ =-\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^n A_{i+1/2}-\mathbf{F}_{i-1/2}^n A_{i-1/2}\right)+Vol_i\overline{\mathbf{S}}_i^n \tag{6-6}$$

を得る．さらに，保存量ベクトルの空間分布を x に関する二次多項式で表したとき，$i-1$，i，$i+1$ のセルにおけるセル平均値と，その多項式による対応する平均値が互いに等しくなるように多項式の係数を決める．それによって，セル境界面における保存量ベクトルを三つのセル平均値によって表す．

$$\begin{aligned}\Delta\mathbf{q}_{i+1/2}&=\frac{1}{6}\left(-\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1}+5\Delta\overline{\mathbf{q}}_i+2\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1}\right)\\ \Delta\mathbf{q}_{i-1/2}&=\frac{1}{6}\left(2\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1}+5\Delta\overline{\mathbf{q}}_i-\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1}\right)\end{aligned} \tag{6-7}$$

式(6-7)を式(6-6)に代入して整理すると次式を得る．

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{6}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^n A_{i+1/2}+2\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^n A_{i-1/2}\right)\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1}\\ &+\left\{Vol_i\left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta t^n}-\left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)+\frac{5}{6}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^n A_{i+1/2}-\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^n A_{i-1/2}\right)\right\}\Delta\overline{\mathbf{q}}_i\\ &+\frac{1}{6}\left(2\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^n A_{i+1/2}+\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^n A_{i-1/2}\right)\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1}\\ &=-\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^n A_{i+1/2}-\mathbf{F}_{i-1/2}^n A_{i-1/2}\right)+Vol_i\overline{\mathbf{S}}_i^n\end{aligned} \tag{6-8}$$

式(6-8)は $3\times(N-1)$ 個の自由度を持つ連立１次方程式である．式(6-8)の右辺は Euler 陽解法で用いた対流項流束とソース項の計算そのものである．左辺は，未知数ベクトル $\Delta\overline{\mathbf{q}}_i$（$i=1,\dots,N-1$）に掛かる係数が (3×3) 行列であり，また，ある点に着目すれば，自分自身とその左右の２点にのみ値が非ゼロの係数行列が掛かる．このような連立方程式は，ブロック三重対角系をなすと言われる．式(6-8)を行列の形で表すと，

$$\begin{bmatrix}\mathbf{B}_1 & \mathbf{\Gamma}_1 & & & & & \\ \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{\Gamma}_2 & & & & \\ & \mathbf{A}_3 & \mathbf{B}_3 & \mathbf{\Gamma}_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \mathbf{A}_{N-3} & \mathbf{B}_{N-3} & \mathbf{\Gamma}_{N-3} & \\ & & & & \mathbf{A}_{N-2} & \mathbf{B}_{N-2} & \mathbf{\Gamma}_{N-2}\\ & & & & & \mathbf{A}_{N-1} & \mathbf{B}_{N-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Delta\overline{\mathbf{q}}_1\\ \Delta\overline{\mathbf{q}}_2\\ \Delta\overline{\mathbf{q}}_3\\ \vdots\\ \Delta\overline{\mathbf{q}}_{N-3}\\ \Delta\overline{\mathbf{q}}_{N-2}\\ \Delta\overline{\mathbf{q}}_{N-1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{RHS}_1\\ \mathbf{RHS}_2\\ \mathbf{RHS}_3\\ \vdots\\ \mathbf{RHS}_{N-3}\\ \mathbf{RHS}_{N-2}\\ \mathbf{RHS}_{N-1}\end{bmatrix} \tag{6-9}$$

ここで，

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_i &= -\frac{1}{6}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} + 2\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) \\
\mathbf{B}_i &= Vol_i \left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta t^n} - \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i}^{n} \right) + \frac{5}{6}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} - \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) \\
\mathbf{\Gamma}_i &= \frac{1}{6}\left(2\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} + \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) \\
\mathbf{RHS}_i &= -\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) + Vol_i \overline{\mathbf{S}}_i^n
\end{aligned}
\tag{6-10}
$$

である．

また，式(6-7)の代わりに左右のセルの算術平均によってセル界面の値を近似した場合は

$$
\begin{aligned}
\Delta \mathbf{q}_{i+1/2} &= \frac{1}{2}\left(\Delta \overline{\mathbf{q}}_i + \Delta \overline{\mathbf{q}}_{i+1} \right) \\
\Delta \mathbf{q}_{i-1/2} &= \frac{1}{2}\left(\Delta \overline{\mathbf{q}}_{i-1} + \Delta \overline{\mathbf{q}}_{i} \right)
\end{aligned}
\tag{6-11}
$$

であるから，式(6-10)の代わりに，次式が適用される．

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_i &= -\frac{1}{2}\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \\
\mathbf{B}_i &= Vol_i \left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta t^n} - \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i}^{n} \right) + \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} - \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) \\
\mathbf{\Gamma}_i &= \frac{1}{2}\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} \\
\mathbf{RHS}_i &= -\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) + Vol_i \overline{\mathbf{S}}_i^n
\end{aligned}
\tag{6-12}
$$

また左辺の対流項に関係するオペレータに関する別の考え方として，セル境界面での値を単純に左右のセルでの平均値を使うものとすることもできる．即ち，

$$
\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i\pm 1/2}^{n} A_{i\pm 1/2} \Delta \mathbf{q}_{i\pm 1/2} = \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i}^{n} \overline{A}_i \Delta \overline{\mathbf{q}}_i + \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i\pm 1}^{n} \overline{A}_{i\pm 1} \Delta \overline{\mathbf{q}}_{i\pm 1} \right)
\tag{6-13}
$$

と近似することにより，

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_i &= -\frac{1}{2}\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1}^{n} \overline{A}_{i-1} \\
\mathbf{B}_i &= Vol_i \left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta t^n} - \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i}^{n} \right) \\
\mathbf{\Gamma}_i &= \frac{1}{2}\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1}^{n} \overline{A}_{i+1} \\
\mathbf{RHS}_i &= -\left(\mathbf{F}_{i+1/2}^{n} A_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{n} A_{i-1/2} \right) + Vol_i \overline{\mathbf{S}}_i^n
\end{aligned}
\tag{6-14}
$$

のように簡略化される．

Euler 陰解法では，式(6-10),(6-12),或いは(6,14)を用いて，式(6-9)を解くことになる．これは次に述べるブロック三重対角系の解法による．

6.2　ブロック三重対角系の解法

ここでは，係数行列を LU 分解することによって，ブロック三重対角系を解く方法を説明する．

まず，式(6-9)の左辺の係数行列を，ブロック下三角行列（block lower-triangular matrix）とブロック上三角行列（block upper-triangular matrix）の積の形で表す．

$$
\begin{bmatrix}
\mathbf{B}_1 & \mathbf{\Gamma}_1 & & & & & & \\
\mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{\Gamma}_2 & & & 0 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\
 & & \mathbf{A}_i & \mathbf{B}_i & \mathbf{\Gamma}_i & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & 0 & & & \mathbf{A}_{N-2} & \mathbf{B}_{N-2} & \mathbf{\Gamma}_{N-2} \\
 & & & & & \mathbf{A}_{N-1} & \mathbf{B}_{N-1}
\end{bmatrix}
$$
$$
=\begin{bmatrix}
\mathbf{I} & & & & & & \\
\mathbf{L}_{21} & \mathbf{I} & & & & 0 & \\
 & \ddots & \ddots & & & & \\
 & & \mathbf{L}_{i,i-1} & \mathbf{I} & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & & \\
 & 0 & & & \mathbf{L}_{N-2,N-3} & \mathbf{I} & \\
 & & & & & \mathbf{L}_{N-1,N-2} & \mathbf{I}
\end{bmatrix}
$$
$$
\times\begin{bmatrix}
\mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12} & & & & & \\
 & \mathbf{U}_{22} & \mathbf{U}_{23} & & & 0 & \\
 & & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & \mathbf{U}_{i,i} & \mathbf{U}_{i,i+1} & & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \\
 & 0 & & & & \mathbf{U}_{N-2,N-2} & \mathbf{U}_{N-2,N-1} \\
 & & & & & & \mathbf{U}_{N-1,N-1}
\end{bmatrix}
\tag{6-15}
$$

ブロック下三角行列及びブロック上三角行列の各要素行列は，元のブロック三重対角行列の要素行列によって次のように表される．

$$
\begin{aligned}
\mathbf{U}_{11} &= \mathbf{B}_1 \\
\mathbf{U}_{12} &= \mathbf{\Gamma}_1 \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\mathbf{L}_{i,i-1} &= \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{U}_{i-1,i-1}^{-1} \\
\mathbf{U}_{i,i} &= \mathbf{B}_i - \mathbf{L}_{i,i-1} \cdot \mathbf{U}_{i-1,i} \\
\mathbf{U}_{i,i+1} &= \mathbf{\Gamma}_i \\
&(i = 2, \cdots, N-2) \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\mathbf{L}_{N-1,N-2} &= \mathbf{A}_{N-1} \cdot \mathbf{U}_{N-2,N-2}^{-1} \\
\mathbf{U}_{N-1,N-1} &= \mathbf{B}_{N-1} - \mathbf{L}_{N-1,N-2} \cdot \mathbf{U}_{N-2,N-1}
\end{aligned}
$$

(6-16)

解くべき式，式(6-9)に式(6-15)を代入して，整理すると次式を得る．

$$
\begin{bmatrix}
\mathbf{I} & & & & & & \\
\mathbf{L}_{21} & \mathbf{I} & & & & 0 & \\
& \ddots & \ddots & & & & \\
& & \mathbf{L}_{i,i-1} & \mathbf{I} & & & \\
& & & \ddots & \ddots & & \\
& 0 & & & \mathbf{L}_{N-2,N-3} & \mathbf{I} & \\
& & & & & \mathbf{L}_{N-1,N-2} & \mathbf{I}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\mathbf{Q}_1 \\ \mathbf{Q}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_i \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_{N-2} \\ \mathbf{Q}_{N-1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\mathbf{RHS}_1 \\ \mathbf{RHS}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{RHS}_i \\ \vdots \\ \mathbf{RHS}_{N-2} \\ \mathbf{RHS}_{N-1}
\end{bmatrix}
$$

(6-17 a)

$$
\begin{bmatrix}
\mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12} & & & & & \\
& \mathbf{U}_{22} & \mathbf{U}_{23} & & & 0 & \\
& & \ddots & \ddots & & & \\
& & & \mathbf{U}_{i,i} & \mathbf{U}_{i,i+1} & & \\
& & & & \ddots & \ddots & \\
& 0 & & & & \mathbf{U}_{N-2,N-2} & \mathbf{U}_{N-2,N-1} \\
& & & & & & \mathbf{U}_{N-1,N-1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\Delta\mathbf{q}_1 \\ \Delta\mathbf{q}_2 \\ \vdots \\ \Delta\mathbf{q}_i \\ \vdots \\ \Delta\mathbf{q}_{N-2} \\ \Delta\mathbf{q}_{N-1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\mathbf{Q}_1 \\ \mathbf{Q}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_i \\ \vdots \\ \mathbf{Q}_{N-2} \\ \mathbf{Q}_{N-1}
\end{bmatrix}
$$

(6-17 b)

まず，式(6-17 a)は順方向に逐次代入することにより，未知ベクトル$\mathbf{Q}_1, \cdots, \mathbf{Q}_{N-1}$を求めることができる．即ち，

$$
\begin{aligned}
\mathbf{Q}_1 &= \mathbf{RHS}_1 \\
\mathbf{Q}_i &= \mathbf{RHS}_i - \mathbf{L}_{i,i-1} \cdot \mathbf{Q}_{i-1} \qquad (i = 2, \cdots, N-1)
\end{aligned}
\tag{6-18}
$$

次に，式(6-17 b)は逆方向に逐次代入することにより，未知ベクトル$\Delta\mathbf{q}_{N-1}, \cdots, \Delta\mathbf{q}_1$を求めることができる．即ち，

$$
\begin{aligned}
\Delta\mathbf{q}_{N-1} &= \mathbf{U}_{N-1,N-1}^{-1} \cdot \mathbf{Q}_{N-1} \\
\Delta\mathbf{q}_i &= \mathbf{U}_{i,i}^{-1} \cdot \left(\mathbf{Q}_i - \mathbf{U}_{i,i+1} \cdot \Delta\mathbf{q}_{i+1}\right) \qquad (i = N-2, \cdots, 1)
\end{aligned}
\tag{6-19}
$$

課題６－１

　課題 5－1 及び課題 5－2 を, Euler 陰解法を用いて計算せよ. その際, 式(6-10), (6-12), (6-14)をそれぞれ使た場合の収束性を比較せよ．このとき，CFL 数を 0.９程度とすること．また，Euler 陽解法において，CFL を同程度としたとき，計算がどのようになるかを確認すること.

残差の履歴，収束解の様子，境界条件の精度などについて考察のこと.

6.3 LU-SGS (Lower-Upper Successive Gauss-Sidel)法

基礎式(6-1)を時間(t_n, t_{n+1})に亘って積分すると,

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial A\mathbf{q}}{\partial t} dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial A\mathbf{F}}{\partial x} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} A\mathbf{S}\, dt \tag{6-20}$$

陰解法を採用して,時間積分の時間幅の間,流束項とソース項はt_{n+1}での物理量で一定になっていると近似すると,式(6-20)は以下のように時間に関して離散化される.

$$A\left(\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^n\right) + \frac{\partial A\mathbf{F}^{n+1}}{\partial x}\Delta t^n = A\mathbf{S}^{n+1}\Delta t^n \tag{6-21}$$

ここで, $\mathbf{F}^{n+1}, \mathbf{S}^{n+1}$ は$\mathbf{F}(\mathbf{q}^{n+1}), \mathbf{S}(\mathbf{q}^{n+1})$の意味である. $\Delta t^n \equiv t_{n+1} - t_n$ である.

次に,式(6-21)を未知数$\Delta\mathbf{q} \equiv \mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^n$ について線型化する.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^{n+1} &= \mathbf{F}^n + \left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|^n \Delta\mathbf{q} \\ \mathbf{S}^{n+1} &= \mathbf{S}^n + \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|^n \Delta\mathbf{q} \end{aligned} \tag{6-22}$$

式(6-22)を式(6-21)に代入して整理すると,

$$A\left[\mathbf{I} + \frac{\Delta t^n}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right) - \Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right]\Delta\mathbf{q} = \Delta t^n\left(-\frac{\partial A\mathbf{F}^n}{\partial x} + A\mathbf{S}^n\right) \tag{6-23}$$

さて,LU-SGS 法は左辺オペレータを風上化し,さらに近似的に対称二因数に分解することにより,安定かつ効率良く$\Delta\mathbf{q}$を求める方法である.まず,風上化のために,左辺の対流項流束を分離する.

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^+ + \mathbf{F}^- \tag{6-24}$$

ここで,各分離流束は

$$\mathbf{F}^\pm \equiv \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}^\pm\mathbf{X}^{-1} \tag{6-25}$$

のように,相似変換により分解され,その中の対角行列は,LU-SGS 法の特徴として,

$$\mathbf{\Lambda}^\pm \equiv \frac{\mathbf{\Lambda} \pm \nu_{\max}\mathbf{I}}{2} \tag{6-26}$$

と定義する.ここで$\nu_{\max}$ は,流束ヤコビアン行列$\mathbf{F}$ のスペクトル半径であり,

$$\nu_{\max} \equiv \max_k \left[|\lambda_k|\right] = |u| + a \tag{6-27}$$

によって定義される. 式(6-24)を式(6-23)の左辺に代入して,

$$A\left[\mathbf{I} - \Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|^n + \frac{\Delta t^n}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right) + \frac{\Delta t^n}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)\right]\Delta\mathbf{q} = \Delta t^n\left(-\frac{\partial A\mathbf{F}^n}{\partial x} + A\mathbf{S}^n\right) \tag{6-28}$$

を得る.

次に，式(6-28)を空間$(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$に亘って積分する．

$$
\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} A\left(\mathbf{I}-\Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)\Delta\mathbf{q}\,dx + \Delta t^n \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial x}\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)\Delta\mathbf{q}\,dx + \Delta t^n \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial x}\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)\Delta\mathbf{q}\,dx
$$
$$
= \Delta t^n \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \left(-\frac{\partial A\,\mathbf{F}^n}{\partial x} + A\,\mathbf{S}^n\right)dx
\tag{6-29}
$$

式(6-29)を積分して，

$$
\begin{aligned}
&\overline{A}_i \Delta x_i \left(\mathbf{I}-\Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\Delta\overline{\mathbf{q}}_i \\
&+\Delta t^n\left[\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i+1/2}\Delta\mathbf{q}_{i+1/2} - \left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i-1/2}\Delta\mathbf{q}_{i-1/2}\right] \\
&+\Delta t^n\left[\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i+1/2}\Delta\mathbf{q}_{i+1/2} - \left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i-1/2}\Delta\mathbf{q}_{i-1/2}\right] \\
&= \Delta t^n\left[-A_{i+1/2}\mathbf{F}^n_{i+1/2} + A_{i-1/2}\mathbf{F}^n_{i-1/2} + \overline{A}_i\Delta x_i \overline{\mathbf{S}}_i^n\right]
\end{aligned}
\tag{6-30}
$$

ここで，右辺は Euler 陽解法の際現れた形であるので，陽的部分と呼ぶことがある．右辺は前章で述べたので，ここでは詳しい説明は繰り返さない．

次に，左辺においてセル境界面での流束時間変化の空間差分項について，以下のようにセル平均値によって近似する．　その際，風上差分の考え方を適用し，右行き流束に関する差分は後退差分により，左行き流束に関する差分は前進差分により近似する．即ち，

$$
\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i+1/2}\Delta\mathbf{q}_{i+1/2} - \left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i-1/2}\Delta\mathbf{q}_{i-1/2} \approx \left(\overline{A}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_i\Delta\overline{\mathbf{q}}_i - \left(\overline{A}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i-1}\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1}
$$
$$
\left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i+1/2}\Delta\mathbf{q}_{i+1/2} - \left(A\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i-1/2}\Delta\mathbf{q}_{i-1/2} \approx \left(\overline{A}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_{i+1}\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1} - \left(\overline{A}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|^n\right)_i\Delta\overline{\mathbf{q}}_i
\tag{6-31}
$$

ここで，セル中心での流束ヤコビアン行列はセル平均値を用いて評価する．
式(6-31)の近似を用いて，式(6-30)を書き直すと，

$$
\begin{aligned}
&\overline{A}_i \Delta x_i \left(\mathbf{I}-\Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\Delta\overline{\mathbf{q}}_i \\
&+\Delta t^n\left[\overline{A}_i\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\Delta\overline{\mathbf{q}}_i - \overline{A}_{i-1}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1}^n\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1} + \overline{A}_{i+1}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1}^n\Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1} - \overline{A}_i\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\Delta\overline{\mathbf{q}}_i\right] \\
&= \Delta t^n\left[-A_{i+1/2}\mathbf{F}^n_{i+1/2} + A_{i-1/2}\mathbf{F}^n_{i-1/2} + \overline{A}_i\Delta x_i \overline{\mathbf{S}}_i^n\right]
\end{aligned}
\tag{6-32}
$$

これをさらに整理して，

$$\left[\mathbf{I} - \Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n + \frac{\Delta t^n}{\Delta x_i}\left(\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n - \left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\right]\Delta\overline{\mathbf{q}}_i + \frac{\Delta t^n}{Vol_i}\left[-\overline{A}_{i-1}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1}^n \Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1} + \overline{A}_{i+1}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1}^n \Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1}\right]$$
$$= \frac{\Delta t^n}{Vol_i}\left[-A_{i+1/2}\mathbf{F}_{i+1/2}^n + A_{i-1/2}\mathbf{F}_{i-1/2}^n + \overline{A}_i \Delta x_i \overline{\mathbf{S}}_i^n\right]$$

(6-33)

さて，式(6-25)～(6-27)の定義を用いると，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}} &= \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}^+\mathbf{X}^{-1} - \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}^-\mathbf{X}^{-1} \\ &= \mathbf{X}\left(\mathbf{\Lambda}^+ - \mathbf{\Lambda}^-\right)\mathbf{X}^{-1} \\ &= \mathbf{X}\left(\frac{\mathbf{\Lambda} + \nu_{\max}\mathbf{I}}{2} - \frac{\mathbf{\Lambda} - \nu_{\max}\mathbf{I}}{2}\right)\mathbf{X}^{-1} \\ &= \nu_{\max}\mathbf{I}\end{aligned} \qquad (6\text{-}34)$$

である．式(6-33)の左辺には準一次元問題特有のソース項のヤコビアン行列が含まれるので，LU-SGS 法の効率性を活かす目的で，ソース項を含む項を近似的に括り出す．一次の時間精度の範囲でこの近似は許される．さらには，式(6-34)を用いて式(6-33)を書き換えると，

$$\left(\mathbf{I} - \Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\left[\left(1 + \frac{\Delta t^n}{\Delta x_i}\nu_{\max}\right)\Delta\overline{\mathbf{q}}_i + \frac{\Delta t^n}{Vol_i}\left(-\overline{A}_{i-1}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1}^n \Delta\overline{\mathbf{q}}_{i-1} + \overline{A}_{i+1}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1}^n \Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1}\right)\right]$$
$$= \frac{\Delta t^n}{Vol_i}\left[-A_{i+1/2}\mathbf{F}_{i+1/2}^n + A_{i-1/2}\mathbf{F}_{i-1/2}^n + \overline{A}_i \Delta x_i \overline{\mathbf{S}}_i^n\right]$$

(6-35)

さらに，LU-SGS の最大の特徴として，左辺のオペレータ行列を近似的に下三角行列と上三角行列の積に分ける．即ち，

$$\left(\mathbf{I} - \Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\left[\mathbf{I} - \frac{\overline{A}_{i-1}}{\left(\frac{Vol_i}{\Delta t^n} + \overline{A}_i \nu_{\max}\right)}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1}^n\right]\left[\mathbf{I} + \frac{\overline{A}_{i+1}}{\left(\frac{Vol_i}{\Delta t^n} + \overline{A}_i \nu_{\max}\right)}\left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1}^n\right]\Delta\overline{\mathbf{q}}$$
$$= \left(\frac{Vol_i}{\Delta t^n} + \overline{A}_i \nu_{\max}\right)^{-1}\left[-A_{i+1/2}\mathbf{F}_{i+1/2}^n + A_{i-1/2}\mathbf{F}_{i-1/2}^n + \overline{A}_i \Delta x_i \overline{\mathbf{S}}_i^n\right]$$

(6-36)

この式の読み方には注意が必要である．この式は，以下のオペレーション分離を意味している．

（第 1 ステップ）

$$\left(\mathbf{I} - \Delta t^n \left.\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{q}}\right|_i^n\right)\Delta\mathbf{q}_i^{**} = \left(\frac{Vol_i}{\Delta t^n} + \overline{A}_i \nu_{\max}\right)^{-1}\left[-A_{i+1/2}\mathbf{F}_{i+1/2}^n + A_{i-1/2}\mathbf{F}_{i-1/2}^n + \overline{A}_i \Delta x_i \overline{\mathbf{S}}_i^n\right]$$

(6-37)

(第 2 ステップ)

$$\Delta\mathbf{q}_i^* - \frac{\overline{A}_{i-1}}{\left(\frac{Vol_i}{\Delta t^n} + \overline{A}_i \nu_{\max}\right)} \left.\frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i-1}^n \Delta\mathbf{q}_{i-1}^* = \Delta\mathbf{q}_i^{**} \tag{6-38}$$

(第 3 ステップ)

$$\Delta\overline{\mathbf{q}}_i + \frac{\overline{A}_{i+1}}{\left(\frac{Vol_i}{\Delta t^n} + \overline{A}_i \nu_{\max}\right)} \left.\frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{q}}\right|_{i+1}^n \Delta\overline{\mathbf{q}}_{i+1} = \Delta\mathbf{q}_i^* \tag{6-39}$$

式(6-36)，或いは，式(6-37)～(6-39)が，時間 1 次精度の範囲で式(6-35)の近似になっていることは，式(6-39)を式(6-38)に，さらにそれを式(6-37)に逐次代入することによって，確認することができる．(確認せよ．)

具体的な解法としては，まず第 1 ステップで，各点の $\Delta\mathbf{q}^{**}$ を算出する．このプロセスは，ポイント・インプリシット(point-implicit)法と呼ばれる．

次に，第 2 ステップでは，前進方向の逐次代入によって，各点の $\Delta\mathbf{q}^*$ を算出する．このとき出発点での値をゼロと仮定する．即ち $\Delta\mathbf{q}_0^* = 0$ と仮定する．

最後に第 3 ステップでは，後退方向の逐次代入によって，各点の $\Delta\overline{\mathbf{q}}$ を算出する．やはり出発点での値をゼロ，即ち $\Delta\overline{\mathbf{q}}_N = 0$ と仮定する．

課題６－２

課題 5－1 及び課題 5－2 を，LU-SGS 法を用いて計算せよ．

CFL 数，Euler 陰解法との相違，残差の履歴，収束解の様子，境界条件の精度などについて考察のこと．CFL 数は 1～４０の範囲で調べてみよ．