

2010 年度後期

気候モデリング特論

（第 1 部）

堀之内武¹

まえがき

「気候モデリング特論」では、気候システムの理解や将来予測のための重要な研究手法の一つである、数値モデリングについて学ぶ。堀之内担当分では、その基礎となる常微分方程式および偏微分方程式の数値解法を扱う。差分法の基礎に加え、大気モデリングで特に重要なスペクトル法も講じる。その後続く講義では、実際の大気海洋モデリングにあわせた格子のとりかたや、各種パラメタリゼーションなどについて学ぶことになる。全ての講義を終了した時点で、大気や海洋の簡単な数値モデルを自分で組めるだけの知識を手に入れることを目標とする。

参考書

本稿の内容の範囲に関する参考書の例をあげる。

- 数値解析 (第 2 版), 森 正武. 共立出版, pp 291, 2002.
- 流体力学の数値計算法, 藤井 孝蔵. 東京大学出版会, pp 234, 1994.
- スペクトル法による数値計算入門, 石岡圭一, 東京大学出版会, pp 232, 2004.
- Numerical prediction and dynamic meteorology, Haltiner and Wiliams, *John Wiley & Sons*, pp 477, 1980.

1

(C) 堀之内武（禁無断転載） 北海道大学地球環境科学研究院地球圏科学部門

本テキストは北海道大学環境科学院地球圏科学専攻の講義「気候モデリング特論」（3 教員で分担）の最初の 3 分の 1 の講義のために書き下ろしたテキストです。

第1章 序論

1.1 モデリングとは – 気候と地球流体の数値モデルについて

「モデル」とは、システムを単純化した記述をさす。科学では、その記述は、しばしば数量的に行われる。たとえば、「モデル大気」として、各月・緯度・高度での平均的な風速・気温・気圧・成分を数值的に記述したものがある（「CIRA モデル」など）。その延長として、システムの状態を直接表わすかわりに、それを計算機上で導出する手続きの集合である**数値モデル (numerical model)**がある。地球流体の科学で特に重要なのは、物理法則に基づいて時間発展を計算する数値モデルである。この場合、モデルとは時間発展の仕方の記述（定式化と、計算プログラムとしての実装）ということになる。数値モデルを使って計算を行うことを**(数値) モデリング (numerical modeling)**という。これは、**数値シミュレーション (numerical simulation)**とも呼ばれる。“simulate”の原義はまねることである。

大気や海洋のマクロな状態は物理法則に支配されている。その数値モデルの骨格は、プリミティブ方程式系などの、系の時間発展を記述する方程式系を、計算機で扱えるよう離散化したものである。さらに、系の外とのやり取り（境界でのやりとりや、放射など内部で働く現象）も適切に含めねばならない。大気と海洋は別々にモデル化されるが、ともに地球流体であり、その基礎は共通である。

地球上の大気全体をシミュレートする数値モデルは、**大気大循環モデル (atmospheric general circulation model; GCM)**と呼ばれる（GCMは時に global circulation model の略ともされる）。同様に、海洋全体をシミュレートする数値モデルは、**海洋大循環モデル (ocean (または oceanic) general circulation model)**である。それぞれ、領域を限ってシミュレートする**領域モデル (regional model)**もある。また、全球にしる領域にしる、系を単純化したモデルもあり、その空間性は、0次元から3次元までである。天気予報には、全球及び領域の大気の3次元数値モデルが用いられる。

現在、気候モデリングの主役は、大気や海洋などの複数の大循環モデルを組み合わせた、「**結合モデル**」である。もともと、個々の系のモデリングにおいては、他の系の情報を境界条件として必要とするが、結合モデルで同時に計算を進めることで、互いに影響しあう相互作用が生まれる。

大気や海洋の数値モデリングの役割は、予測・予報にとどまらず、理解を進めるためにも欠くことができない。その利点は、次のように要約できよう。

- **データの「一貫性」,「完全性」**：数値モデルにおいては、時間発展を決める全情報がモデル内に存在する。その出力は、観測と比べ、時間空間に密で、異なる物理量の間に一貫性があること、また観測が難しい量も含まれるといった利点があり、現象の理解の助けとなる。
- **「実験」が可能であること**：数値モデルは、設定を様々に変えて走らすことができる。例えば、着目する現象が、設定をどこまで単純化しても再現されるかをみることで、物理的な本質を探ることができる。また、多数の数値実験を行うことで、事象の確率性をみることもできる。（実用的にも、アンサンブル予報などに使われている。）

一方で、問題もある：

- **離散的, 数值的に扱うことから生じる問題**：にせの数値解の存在、分解能の不足など。
- **モデルや設定の不適切性**：完全な数値モデルというものには存在しない。モデルに取り込まれていないプロセスが重要な場合もある。サブグリッドスケールの現象のパラメタリゼーションには任意

性がある。定式化が間違っている場合もありえるであろう。また、不適切な設定により過った結論が導かれる可能性もある。

数値モデルやその出力を利用するに当たっては、こうした問題の存在を認識する必要がある。本稿では、第1の問題を扱う。

1.2 有限差分

微分方程式を数値的に解くためには、微分を何らかの方法で数値的に取り扱い可能な形に表現しなければならない。本節ではその基礎を学ぶ。

x を独立変数とする関数 $y(x)$ の微分を考える。微分の定義より、

$$\frac{dy}{dx}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x+h) - y(x)}{h} \quad (1.1)$$

と表わせる。よって、 h の絶対値が十分小さければ、

$$S(x, h) \equiv \frac{y(x+h) - y(x)}{h} \quad (1.2)$$

は $\frac{dy}{dx}(x)$ (以後 $y'(x)$ と表わす) の近似となる。ここで、 h は正でも負でも良い。このように、有限の長さだけ離れた複数の点における関数値を用いて微分を近似的に表わす表現を、有限差分 (finite difference) (または単に「差分」) と呼び、差分を用いて微分方程式を近似的に解く方法を差分法という。

y' は、

$$\frac{dy}{dx}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} \quad (1.3)$$

とも表わせるので、

$$T(x, h) \equiv \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} \quad (1.4)$$

も、 h の絶対値が十分小さいとき、 $y'(x)$ の近似となる。

差分の式 (1.2) も (1.4) も $h \rightarrow 0$ で $\frac{dy}{dx}(x)$ に収束する。このことを、差分が**適合性 (consistency)** をもつという。もちろん、数値計算に使う差分は適合的 (consistent) でなければならない。

1.2.1 差分の精度

$y(x)$ のテーラー展開より、

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \cdots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x) + \cdots \quad (1.5)$$

ここで $y^{(p)}$ は y の p 階微分を表わす。よって

$$\epsilon \equiv S(x, h) - y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - y'(x) = \frac{h}{2!}y''(x) + \frac{h^2}{3!}y^{(3)}(x) + \cdots \quad (1.6)$$

h を十分小さければ、(1.5) の右辺は、たまたま y'' がゼロでない限り、第1項に支配される。このため、 h をゼロに近づけていくと、誤差は h の1乗に比例して減少する。これを

$$\epsilon \sim O(h) \quad (1.7)$$

と表わす。誤差が h の 1 乗に比例するので、差分 (1.2) の**精度 (accuracy) は一次 (first-order)** であるという。差分と微分の差 ϵ は、テーラー展開を途中で打ち切ることで生じたと捉えられるので、**局所打ち切り誤差 (local truncation error)** と呼ばれる。

さて、

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) - \frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \cdots + (-1)^p \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x) \dots \quad (1.8)$$

であるので、(1.5), (1.8) を辺々引いて、

$$y(x+h) - y(x-h) = 2hy'(x) + 2\frac{h^3}{3!}y^{(3)}(x) + \dots \quad (1.9)$$

すなわち、

$$T(x, h) - y'(x) = \frac{h^2}{3!}y^{(3)}(x) + \frac{h^4}{5!}y^{(5)}(x) + \dots \quad (1.10)$$

右辺は $O(h^2)$ である。よって、(1.4) は $y'(x)$ の**2 次の精度の差分**である。これは、(1.5) と (1.8) の 2 つ式から y'' の項を消去できたためである。**差分の次数が大きければ、 h を小さくすると誤差がより急速に減少する。**

1.2.2 2 階微分の差分近似

(1.5), (1.8) を辺々加えて y' の項を消去し、両辺を h^2 でわると、

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} - y''(x) = \frac{h^2}{12}y^{(4)}(x) + \dots \quad (1.11)$$

を得る。よって、

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} \quad (1.12)$$

は、 $y''(x)$ の 2 次の精度の差分である ($y^{(3)}$ の項が消えたため 2 次精度になった)。なお、差分表現 (1.12) は、次のように考えても導くことができる。

$$\begin{aligned} \frac{d^2y}{dx^2}(x) &= \frac{d}{dx} \frac{dy}{dx}(x) \sim \frac{\frac{dy}{dx}(x) - \frac{dy}{dx}(x-h)}{h} \sim \frac{\frac{y(x+h)-y(x)}{h} - \frac{y(x)-y(x-h)}{h}}{h} \\ &= \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

1.2.3 等間隔の分点と高精度差分

計算機で一度に扱える数値は、有限個である。このため、未知の関数 $y(x)$ の評価は、 x 座標の有限個の点で行われることになる。そこで、 x 軸上の等間隔 ($= h$) な点列

$$x_n = x_0 + nh; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.14)$$

上で、 y やその微分が評価される場合を考える。

$$y_n \equiv y(x_n) \quad (1.15)$$

と書くことにすると、(1.6) より、

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} \quad (1.16)$$

は, $\frac{dy}{dx}(x_n)$ の 1 次精度の差分である. これは, **前進差分 (forward difference)** と呼ばれる. 同様に, (1.8) より, $\frac{dy}{dx}(x_n)$ の 1 次精度の差分として, 次を導くことができる.

$$\frac{y_n - y_{n-1}}{h}. \quad (1.17)$$

こちらは, **後退差分 (backward difference)** と呼ばれる. また, (1.10) より,

$$\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} \quad (1.18)$$

は, $\frac{dy}{dx}(x_n)$ の 2 次精度の差分である. これは**中央 (中心) 差分 (central difference)** と呼ばれる.

さて, 差分に使う点を増やせば, より高精度の差分を得ることができる.

$$y_n^{(p)} \equiv y^{(p)}(x_n) \quad (1.19)$$

などを書くことにすると, テーラー展開より

$$y_{n+k} = y_n + (kh)y'_n + \frac{(kh)^2}{2!}y''_n + \frac{(kh)^3}{3!}y_n^{(3)} + \cdots + \frac{(kh)^p}{p!}y_n^{(p)} + \cdots \quad (1.20)$$

(1.16) や (1.17) は, $k = 1$ または $k = -1$ の一つの方程式から y'_n を近似した 1 次精度の差分であり, (1.18) は, $k = -1, 1$ の 2 方程式から y''_n を消去した上で y'_n を近似した 2 次精度の差分である. 一般には, y_n に加えて p 個の点を使うことで, y'_n についての p 次の差分を得ることができる.

演習問題

1.1 式 (1.11) を導出せよ.

1.2 式 (1.20) を用いて, $y_{n-2}, y_{n-1}, y_n, y_{n+1}, y_{n+2}$ の 5 点をもとに y'_n の 4 次精度の差分を導け. (ヒント: $k = -1, 1$ の場合の 2 次精度差分 (1.18) と, $k = -2, 2$ の場合の同様の差分の打ち切り誤差より, 2 次の誤差要因である $y^{(3)}$ の項を消去すると楽に求まる.)

第2章 常微分方程式の初期値問題

大気や海洋の数値モデルは、時間及び空間に関する偏微分方程式をもとに、時間発展を計算するものである。本章では、微分方程式の数値解法の基礎を、常微分方程式を用いて学ぶ。次章で述べるように、時空間の偏微分方程式は、空間について離散化することで時間に関する連立常微分方程式に還元できるので、本章で説明する枠組み落とし込めるのである。

前章では、微分が差分で近似できることを学んだ。しかし、微分方程式を数値的に解くに当たっては、差分が適合的でありさえすれば良いのではない。後で示すように、適合的な差分を用いても、真の解とは似ても似つかない結果が得られることさえあるので注意が必要である。では、どのようなことに気をつけてどう計算すればよいかを学ぶのが、この章の目的である。精度、安定性、収束性、数値不安定などの重要概念も、本章で導入する。

2.1 問題設定

ここで対象とするのは、次の形であらわされる s 元連立の1階微分方程式である。本章では、独立変数は、慣例的に時刻にあてられる t とする。

$$\frac{du_r}{dt}(t) = f_r(t; u_1(t), u_2(t), \dots, u_s(t)) ; \quad r = 1, 2, \dots, s. \quad (2.1)$$

もちろん、未知関数は1つ、すなわち $s = 1$ でも構わないし、 f_r は t に依存しなくても良い。

もしも解くべき方程式が、

$$\frac{du}{dt} = tu$$

であれば、 $s = 1$ の非連立な1階微分方程式で、 $f(t, u) = tu$ である(添え字1は省略した)。また、もしも解くべき方程式が、

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= -u_1 u_2, \\ \frac{du_2}{dt} &= u_1 + u_2 \end{aligned}$$

であれば、 $f_1 = -u_1 u_2$, $f_2 = u_1 + u_2$ である(この場合 f は t に依存しない)。

さて、 $t = t_0$ を初期値をもとに、正の刻み幅 h で飛び飛びの時刻

$$t_n = t_0 + nh ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

に対し、 $n = 1, 2, \dots$ の順に $u_r(t_n)$ を求めるという問題を考える。ここで、次のように u_r や f_r を成分にもつ s 元ベクトルを導入する。

$$\mathbf{u} \equiv \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_s \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_n \equiv \begin{pmatrix} u_1(t_n) \\ u_2(t_n) \\ \vdots \\ u_s(t_n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f} \equiv \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_s \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

ベクトル表記を用いて, (2.1) の初期値問題は,

$$\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0, \quad (2.4)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}); \quad t \geq t_0 \quad (2.5)$$

と表わされる. 以上では, 下付き添え字を, 連立方程式の未知変数の区別と, t 軸上の飛び飛びの点を表わすのの両方に使って紛らわしいが, 以後, 前者はなるべくベクトルで表現し, 添え字は主に飛び飛びの点の表現に使う.

さて, ベクトルで書き表すと容易に想像できるように, 各成分に初期値が必要であるというだけで, 方程式が連立であることによって生ずる困難さは特でない. 未知変数が一つの場合と本質的には同じである.

高階常微分方程式の扱い

例えば

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -y$$

という方程式は, $z \equiv \frac{dy}{dt}$ を導入して, 次のように 2 元連立 1 階微分方程式として表わせる.

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= -y, \\ \frac{dy}{dt} &= z. \end{aligned}$$

これで, (2.1) の形に帰着される. なお, 初期値は $y(t_0), z(t_0)$ の 2 要素になるのは, 2 階微分方程式の自由度が 2 であることに正しく対応する. このように, 高階常微分方程式の初期値問題は, 連立 1 階常微分方程式の初期値問題に帰着される. なお, 境界値問題では一般に高階微分を直接扱う.

2.2 1 段法

\mathbf{u}_n と \mathbf{u}_{n+1} を近似的に関連付ける式を用いて, $n = 0, 1, \dots$ に順次適用して \mathbf{u} の近似値を計算する方法を **1 段法 (one-step method)** と呼ぶ. (これに対し, 後述する多段法では $t = t_n$ より前の情報も用いる.)

2.2.1 オイラー法

もっとも単純な 1 段法は, 前進差分 (1.16), 後退差分 (1.17) をもとに構成できる:

$$\text{前進差分: } \frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{h} = \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n), \quad (2.6)$$

$$\text{後退差分: } \frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{h} = \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}). \quad (2.7)$$

式 (2.6) より, 漸化式

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) \quad (2.8)$$

を得る. これに基づいて, $n = 0, 1, \dots$ で順次 \mathbf{u}_n を求める方法を**オイラー法 (Euler method)**, または, オイラースキーム (Euler scheme) と呼ぶ. 「スキーム」とは数値計算にかかる「手法」のことである.

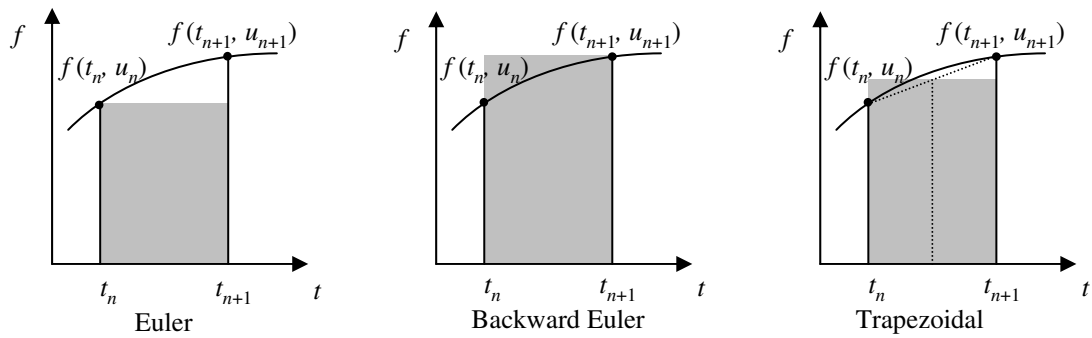


図 2.1: 左から、オイラー法, 後退オイラー法, 台形法の模式図 (1 変数関数の場合). 解析解では, u_{n+1} と u_n の差は, t_n から t_{n+1} までの, $f(t, u)$ の曲線と横軸の間の部分の面積になるが, 数値解では灰色の影をつけた部分の面積になる.

(2.7) の右辺は u_{n+1} に依存するため, 未知数である. よって, 漸化式は

$$u_{n+1} - hf(t_{n+1}, u_{n+1}) = u_n \quad (2.9)$$

となる. これは**後退オイラー (backward-Euler) 法**と呼ばれる. f が特別な場合以外は解析的には解けないので, 一般には何らかの数値的な (従って近似的な) 手法が必要となる. このように, 微係数の評価に, 求めたいステップでの関数値が必要な手法を, **陰解法 (implicit method)** と呼ぶ. これに対し, オイラー法は微係数の評価に以前のステップでの, つまり計算済みの, 関数値しか必要としない. このような手法を, **陽解法 (explicit method)** と呼ぶ.

オイラー法の精度

図 2.1 に, オイラー法および後退オイラー法を模式的に示す. $f(t, u(t))$ を $f(t_n, u_n)$ や $f(t_{n+1}, u_{n+1})$ で近似することで誤差が生じることがわかるであろう.

$f'(t, u(t))$ を, f を t の関数とみなして微分したものとする. $f''(t, u(t))$ 等も同様に定義する. すると,

$$f = u', \quad f' = u'', \quad f'' = u^{(3)}, \dots \quad (2.10)$$

である. もしわかりにくければ, $g(t) \equiv f(t, u(t))$ を導入して考えると良い. $f' = g'$ である. なお, ベクトル f' の各成分 f'_r ($r = 1, 2, \dots, s$) は

$$f'_r(t, u(t)) = \frac{\partial f_r}{\partial t} + \sum_{q=1}^s \frac{\partial f_r}{\partial u_q} \frac{du_q}{dt} \quad (2.11)$$

である. 単純に, $\frac{\partial f_r}{\partial t}$ ではないことに注意.

さて, (2.10) より, u のテーラー展開は次のように表わせる.

$$u(t+h) = u(t) + hf(t, u(t)) + \frac{h^2}{2!} f'(t, u(t)) + \frac{h^3}{3!} f''(t, u(t)) + \dots \quad (2.12)$$

(2.8) と (2.12) を比較すると, オイラー法は, (2.12) の右辺第 3 項以降を無視した形になっていることがわかる. この項は $O(h^2)$ であるので, オイラー法 1 ステップにおいて生じる誤差は $O(h^2)$ である. ただし, $[t_0, t_0 + T]$ という定まった長さの区間だけ微分方程式を解くことを考えると, 必要なステップ数 N は約 T/h であるため, 積算回数は h^{-1} に比例する. このため, 積算した誤差は h の一乗分減って,

$O(h)$ となる．常微分方程式の数値解法の精度は，このように一定区間に適用した場合の誤差のオーダーに基づいて評価されるため，オイラー法は精度は 1 次である．ただし，以上においては丸め誤差を無視してきた．丸め誤差は $O(h^{-1})$ で積算しうるので，実際の計算においては，むやみに h を小さくするのは危険である．

同様な議論により，後退オイラー法の誤差も $O(h)$ であることを示せる．よって，後退オイラー法の精度も 1 次である．

以上では，誤差の累積についての議論はやや直感的であった．厳密な取り扱いについては参考書 (森, 2002 など) を参照のこと．

★ **ポイントのまとめ:** 丸め誤差が無視できる範囲で，オイラー法，後退オイラー法の精度は 1 次であり，一定区間に適用した場合の誤差は $O(h)$ である．

台形法

次の公式は**台形法 (trapezoidal method)** と呼ばれ，2 次の精度である．

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{h} = \frac{f(t_n, u_n) + f(t_{n+1}, u_{n+1})}{2}. \quad (2.13)$$

「台形法」の名の由来は，図 2.1 より明らかであろう (影をつけた部分の面積は図の台形の面積と同じである)．これも陰解法であるため，後退オイラー法同様，特別な場合以外は解析的にはとけないことに注意．

オイラー法の実例 – 振動方程式

微分方程式

$$\frac{du}{dt} = iu \quad (2.14)$$

を考える．ここで i は虚数単位である．解析解は振動解である：

$$u(t) = u_0 e^{it} = u_0 [\cos(t) + i \sin(t)]. \quad (2.15)$$

この方程式は，次章で扱う移流・波動方程式における時間発展の基礎である．

オイラー法 (2.8) では， $u_{n+1} = u_n + ihu_n$ より，数値解は次のようになる．

$$u_n = u_0 (1 + ih)^n. \quad (2.16)$$

これは， $h \rightarrow 0$ で， $O(h)$ で解析解に収束するものの，その振幅は，

$$|u_n| = |u_0| (1 + h^2)^{n/2} \quad (2.17)$$

であり， n とともに指数関数的に増大する．一方，後退オイラー法では， $u_{n+1} - ihu_{n+1} = u_n$ より，

$$u_n = u_0 (1 - ih)^{-n}. \quad (2.18)$$

よって，振幅は

$$|u_n| = |u_0| (1 + h^2)^{n/2} \quad (2.19)$$

と， n とともに指数関数的に減少する．図 2.2 に $h = 0.1, 0.01$ の場合の数値解を示す．

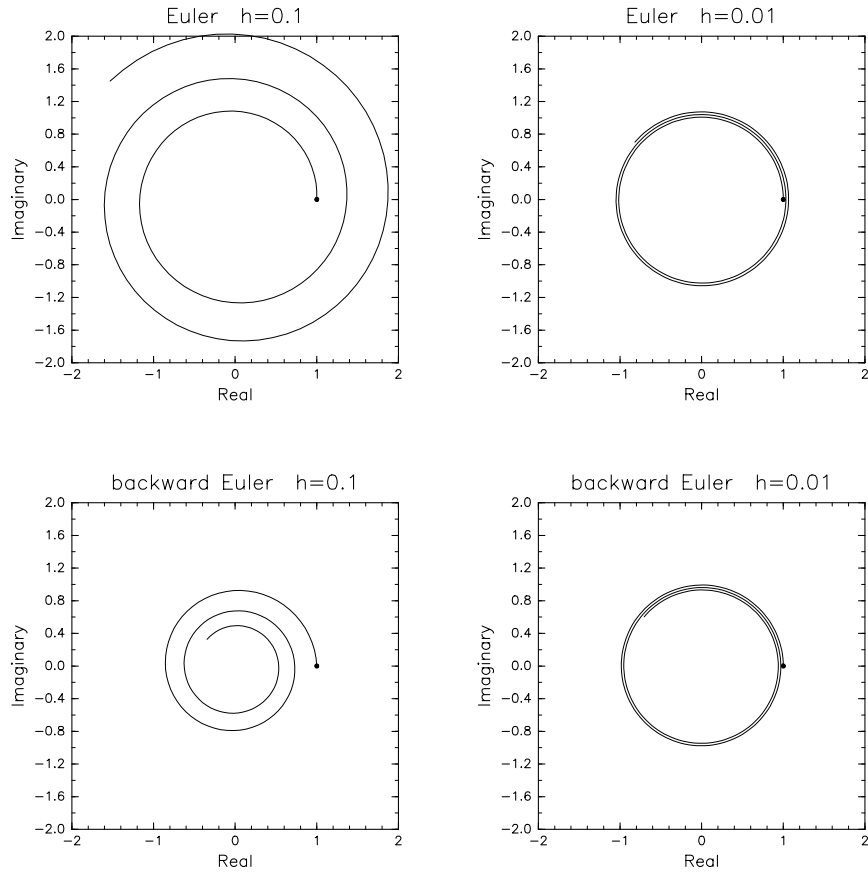


図 2.2: オイラー法 (上) および後退オイラー法 (下) による, 微分方程式 (2.14) の数値解. 初期値は 1 で (図中の黒丸), $t = 15$ まで数値積分. 刻み幅は, $h = 0.1$ (左) および $h = 0.01$ (右).

数値解は振幅が解析解と異なるだけでなく, 位相も変化する. 解析解は, (2.15) より $u_n = u_0 e^{inh}$ であるから, 1 ステップ計算するときの解析解の偏角の進み θ は

$$\theta = h \quad (2.20)$$

である. 一方, オイラー法および後退オイラー法でのそれ θ_f, θ_b は, (2.16), (2.18) より

$$\tan \theta_f = h, \quad (2.21)$$

$$\tan \theta_b = \frac{h}{1 - h^2} = h + h^3 + O(h^5) \quad (2.22)$$

である. θ と θ_f, θ_b の比較は \tan をとって行うのがやりやすい. テーラー展開より

$$\tan \theta = \tan h = h + \frac{h^3}{3} + O(h^5) \quad (2.23)$$

なので, 位相の誤差は次のように表現できる.

$$\tan \theta_f - \tan \theta = -\frac{h^3}{3} + O(h^5) \quad (2.24)$$

$$\tan \theta_b - \tan \theta = \frac{2h^3}{3} + O(h^5) \quad (2.25)$$

よって, 解析解に比べ, オイラー法では位相が遅れ, 後退オイラー法では位相が進む. その精度は 2 次である (\because 1 ステップ毎の誤差が $O(h^3)$ に h^{-1} を掛けたものが一定区間積分時の誤差になるので). 1 次精度である振幅に比べると, 位相の精度は良い.

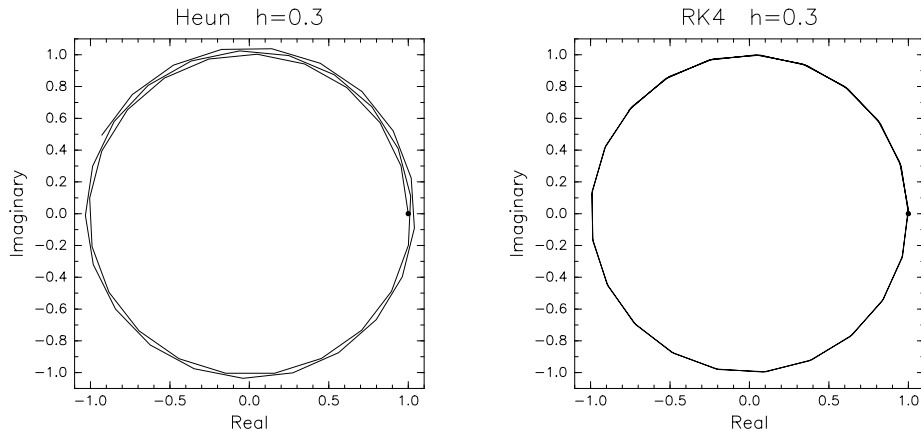


図 2.3: ホイン法 (左) および 4 次のルンゲ・クッタ法 (右) による, 微分方程式 (2.14) の数値解. 初期値は 1 である (図中の黒丸). 刻み幅は, $h = 0.3$.

2.2.2 ルンゲ・クッタ型公式

1 段法かつ陽解法でも, 計算を反復することで精度をあげることができる. その代表は, f の評価を再帰的行ったものを組み合わせる, **ルンゲ・クッタ (Runge-Kutta) 型公式**である.

ホイン法 (2 次のルンゲ・クッタ型公式)

次の一連の手続きは, **ホイン (Heun) 法**と呼ばれ, 精度は 2 次である.

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{u}_n + h\mathbf{k}_1), \\ \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \frac{h}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2). \end{aligned} \quad (2.26)$$

\mathbf{k}_2 は, オイラー法で $\mathbf{u}(t_{n+1})$ を近似したもので評価した \mathbf{f} である. よって, (2.13) と (2.26) の比較より, ホイン法は台形法の陽的公式に相当することがわかる. 実際に, その精度が 2 次であることをテーラー展開に基づいて示すことができる.

4 次のルンゲ・クッタ法

いわゆるルンゲ・クッタ法として有名なのは, 次の 4 次精度の公式である.

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{u}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1), \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{f}(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{u}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2), \\ \mathbf{k}_4 &= \mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{u}_n + h\mathbf{k}_3), \\ \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \frac{h}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4). \end{aligned} \quad (2.27)$$

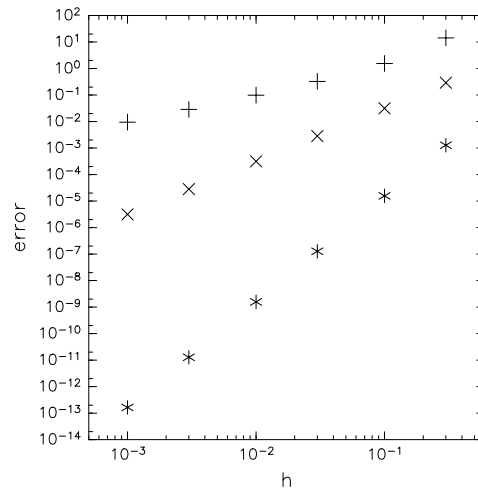


図 2.4: オイラー法 (+), ホイン法 (x), 4 次のルンゲ・クッタ法 (*) による, 微分方程式 (2.14) の数値解の誤差. 倍精度計算, 初期値 1 で, $t = 0$ から $t = 6\pi$ まで積分した.

これもテーラー展開に基づいて精度を確かめることができる. なお, もしも \mathbf{f} が t のみに依存し, \mathbf{u} に依存しなければ, (2.26) は単に台形法による数値積分, (2.27) は単にシンプソンの公式による数値積分である. それぞれの精度が 2 次, 4 次であることはよく知られている.

図 2.3 に, $h = 0.3$ で求めた (2.14) の数値解を示す. 図 2.2 のオイラー法の $h = 0.1$ の場合に比べ, 刻みを粗くしているにもかかわらず, 結果は格段に向上している. 図 2.4 に, 各スキームで得られた数値解の誤差を示す. h が減少すると, それぞれの精度に応じて誤差が減ることがわかる. オイラー法は, $h = 0.001$ にしても, $h = 0.3$ の場合の 4 次のルンゲ・クッタ法より精度が悪いので, 実用には適さない. 一方, 高次の 1 段法は, オイラー法より 1 ステップあたりの計算量が多いものの, より大きな刻み幅を用いることができるメリットがある. 特に精度の高い計算が必要な場合, 4 次のルンゲ・クッタ法を用いると良い.

★ **ポイントのまとめ:** ルンゲクッタ型公式は精度のよい 1 段法である. 1 次精度のオイラー法は, 実用に適さない (2 次精度以上のスキームを使うべし).

2.3 多段法

多段法とは, \mathbf{u}_{n+1} の計算に, $t = t_n$ より前の情報も用いる手法である. $t = t_{n-1}$ まで使えば 2 段法, $t = t_{n-2}$ まで使えば 3 段法などと呼ぶ. 多段法は, 2 つ以上前のステップでの関数値を必要とするため, \mathbf{u}_0 のみから, \mathbf{u}_1 を計算することができない. 従って, 多段法を使って初期値問題を解くためには, あらかじめ 1 段法等を使って, 必要なだけのステップ数の数値解を求めておく必要がある.

ルンゲ・クッタのような反復改良を含まない k 段法は, 次のような形で一般的に表わされる.

$$\mathbf{u}_{n+1} + \alpha_0 \mathbf{u}_n + \alpha_1 \mathbf{u}_{n-1} + \cdots + \alpha_{k-1} \mathbf{u}_{n-k+1} = h[\beta_{-1} \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{u}_{n+1}) + \beta_0 \mathbf{f}(t_n, \mathbf{u}_n) + \cdots + \beta_{k-1} \mathbf{f}(t_{n-k+1}, \mathbf{u}_{n-k+1})]. \quad (2.28)$$

陽解法では, $\beta_{-1} = 0$ である. α_{k-1} または β_{k-1} のいずれかはゼロでない (共にゼロなら k 段法ではない).

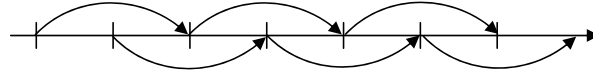


図 2.5: リープフロッグ法の計算プロセスの模式図. 奇数系列と偶数系列の 2 系列が存在する.

2.3.1 リープフロッグ (蛙飛び) 法

前章で紹介した中央差分 (1.18) をもとに, 次のスキームを構成できる:

$$\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} = f(t_n, u_n). \quad (2.29)$$

すなわち,

$$u_{n+1} = u_{n-1} + 2hf(t_n, u_n). \quad (2.30)$$

これは, リープフロッグ (Leap-frog) (蛙飛び) 法と呼ばれる. リープフロッグ法は, 2 次精度の陽解法で, 計算量もホイン法より少ない. と, 良いことづくめのように見える. しかし, 実は, 以下に示すように, 数値解が, 真の解と大きく異なる場合があるので, 注意を要する.

「蛙飛び」の名は, u_n を, 図 2.5 に示すように, 飛び飛びに数値解を求めていくことに由来する. その際, $n = 0, 2, 4, \dots$ の偶数系列と, $n = 1, 3, 5, \dots$ の奇数系列が存在することになる. 仮にもしも $f = 0$ であれば, 両系列は完全に独立である. $f \neq 0$ のときは, 両系列は f を通して相互作用するものの, その結果, 両者は親和的になるどころか, ますます離れていって, 誤差が指数関数的に増大する場合すらあるのである.

特性方程式

ここで, 一般的な観点から, リープフロッグ法の特性を調べよう. 数値スキームの安定性は, $f = 0$ の場合を考えても, 基本的なところは調べられる. (2.28) の右辺の f の項には, h という微小値がかかっている. そのため, 右辺にかかる誤差は減衰しやすい. それに対して, 左辺には h がかかっておらず, そのようなメカニズムが働かない. よって, 左辺のみの検討でも意味があるのである.

$f = 0$ なら $\frac{du}{dt} = 0$, すなわち $u = \text{一定}$, が解析解である. 一方, (2.29) で右辺がゼロの場合の数値解として

$$u_n = u_0 \lambda^n \quad (2.31)$$

という形のものを仮定すると (λ は定数),

$$u_0 \lambda^{n+1} - u_0 \lambda^{n-1} = 0. \quad (2.32)$$

すなわち,

$$\lambda^2 - 1 = 0. \quad (2.33)$$

よって,

$$\lambda = \pm 1. \quad (2.34)$$

$\lambda = 1$ は解析解そのものに対応する. 一方, $\lambda = -1$ は, 毎ステップ符号が入れ替わる, にせの解を表わす (もとの方程式の解とは全く関係ない).

一段法の $f = 0$ の特性方程式は, いずれも

$$\lambda - 1 = 0 \quad (2.35)$$

であり、解は $\lambda = 1$ という正しいもののみであるので、にせの解は、多段法に特有である。このような、にせの数値解は「**計算モード**」(computational mode)と呼ばれ、それに対して、解析解に対応する数値解は「**物理モード**」(physical mode)と呼ばれることがある。

さて、今考えている系は線形であるので、計算モードと物理モードの任意の線形和が数値解になり得る。ここで、多段法では、 \mathbf{u}_1 等を数値計算で求めねばならなかったことを思い出そう。それは解析解ではないので、何がしかの誤差が含まれる。また、 $t = t_1$ 等での解析解がわかっている場合でも、計算機で扱う場合は丸め誤差が存在する。リープフロッグ法では $\lambda = -1$ の計算モードが存在するということは、初期に存在した誤差が減衰せず保たれるということに他ならない。 $\mathbf{f} \neq 0$ であれば、計算モードの λ は一般に -1 から変化するが、その絶対値が増す方向に変化すれば、誤差が指数関数的に増大することになる。(なお、後述するアダムス型多段法では、計算モードは存在するものの、(2.28) の右辺に起因するため、減衰性である。)

減衰方程式の数値解と数値的安定性

リープフロッグ法では、計算モードが増幅して致命的なエラーを生じる場合があることを示す。ここでは、

$$\frac{du}{dt} = -u \quad (2.36)$$

という微分方程式を考える。この方程式は、次章で扱う拡散方程式における時間発展の基礎である。その解は、 $u = u_0 e^{-t}$ である。(2.36) にリープフロッグ法を適用すると、

$$u_{n+1} + 2hu_n - u_{n-1} = 0. \quad (2.37)$$

よって、(2.31) の形の解を仮定して得られる特性方程式は、

$$\lambda^2 + 2h\lambda - 1 = 0 \quad (2.38)$$

である。その解は、

$$\lambda = \pm \sqrt{1 + h^2} - h. \quad (2.39)$$

両解は、 h が微小の場合、

$$\lambda_1 = 1 - h + \frac{h^2}{2} + O(h^3), \quad (2.40)$$

$$\lambda_2 = -1 - h - \frac{h^2}{2} + O(h^3) \quad (2.41)$$

と表わせる。 λ_1 は、 $O(h^3)$ の誤差で e^{-h} の近似である物理モードを表わすのに対し、 λ_2 は計算モードに対応する。その絶対値は 1 よりも大きく、指数関数的に増大してしまう。計算モードの振幅は、 $h \rightarrow 0$ で e^t に収束するので、 h をいくら小さくしてもなくなる。

図 2.6 右は減衰方程式 (2.36) をリープフロッグ法で解いた数値解の例である。計算モードが増大して、 $t = 3$ 以降では、解析解とは解析解とは全くことなる結果となっている。このように、誤差が増大する現象を**数値的不安定 (numerical instability)** (もしくは単に「不安定」) という。常微分方程式の数値解が真の解に収束するためには、用いるスキームが適合性を持つだけでなく、安定である必要がある。逆に、線形方程式の場合、安定で適合するスキームは収束するという定理がある (Lax の同等定理)。

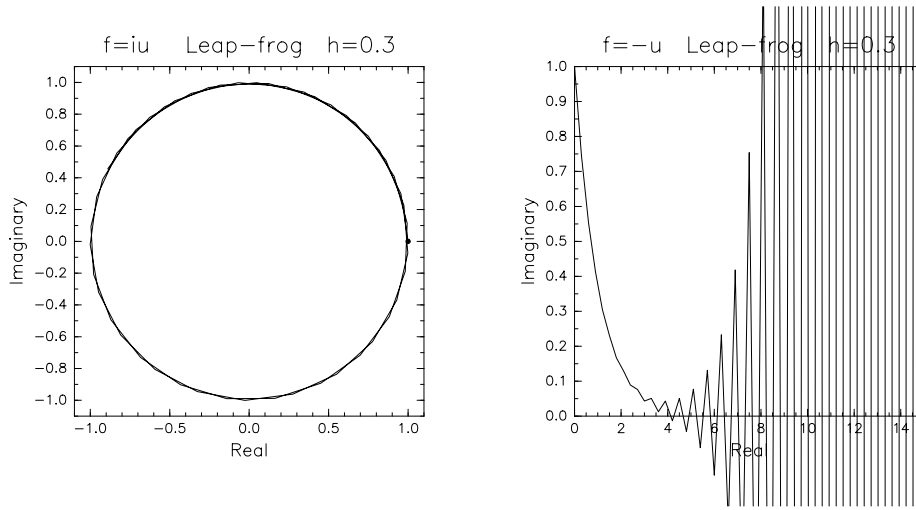


図 2.6: 振動方程式 (2.14) (左), 減衰方程式 (2.36) (右) をリープフロッグ法で解いた数値解. いずれも $h = 0.3$ で, u_1 は u_0 より同じ h のホイン法で求めた.

振動方程式

振動方程式 (2.14) にリープフロッグ法を適用する場合の特性方程式の解は,

$$\lambda_1 = \sqrt{1 - h^2} + ih, \quad \lambda_2 = -\sqrt{1 - h^2} + ih \quad (2.42)$$

である. $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$ なので, 両モードとも振幅は解析解と等しく, 数値的な増幅や減衰がない (中立であるという). 図 2.6 左は, 振動方程式 (2.14) をリープフロッグ法で解いた数値解の例である. 振幅は変化していない.

物理モード λ_1 の偏角 θ_l は,

$$\tan \theta_l = \frac{h}{\sqrt{1 - h^2}} = h + \frac{h^3}{2} + O(h^5) \quad (2.43)$$

(2.43), (2.23) より,

$$\tan \theta_l - \tan \theta = \frac{h^3}{6} + O(h^5) \quad (2.44)$$

よって, 位相には 2 次の誤差がある.

リープフロッグの不安定回避法

リープフロッグは, オイラー法と同じ計算量で, 2 次の精度をもつため, 現在でも大気海洋のモデルではよく使われている. ただし, 解くべき方程式には渦粘性・渦拡散等の減衰項が含まれるため, 何も対策しなければ計算モードが指数関数的に増大することになる.

それを回避するために使われる手法の一つは, Asselin により提案された, 時間フィルター法である. これはリープフロッグ実行後に毎回, 両系列を少しずつ「まぜる」修正操作を行うものである. δ を 1 より小さな正定数 (0.05 など) として,

$$\tilde{u}_n = (1 - 2\delta)u_n + \delta(u_{n+1} + u_{n-1}) \quad (2.45)$$

と修正する．この操作により計算量が増すが，もしも， \mathbf{f} を評価する計算量が格段に大きいのであれば（大気海洋の 3 次元モデルでは実際そうである），(2.45) を適用することによる計算時間の増大は限定的である．

他に，両系列の乖離を防ぐために，一定ステップ数ごとに 1 段法を挟んで系列の一つを捨てる不安定回避法もあるが，恣意性がより高く，推奨されない．

2.3.2 アダムス型公式

リープフロッグの不安定性は，(2.28) の左辺を多段にしたことに起因した．これに対し，左辺を 1 段にして右辺を多段にすると，計算モードが増大しない多段スキームが得られる．

(2.5) を $t = t_n$ から t_{n+1} まで積分すると，次の解析的な関係式が得られる．

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t)) dt. \quad (2.46)$$

アダムス型公式とは， $\mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))$ (の各成分 f_r) を多項式で近似して，(2.46) の右辺を解析的に積分するスキームである．多項式の次数を上げることで精度を上げることができる．その多項式は， t の分点での値を用いてラグランジュ (Lagrange) 補間により定める． p 個の標本点を通る $p-1$ 次の多項式は一意に定まる．それによる補間を，ラグランジュ補間と呼ぶ．

アダムス型公式は大きく 2 つに分けられる．一つは， \mathbf{f} の補間多項式を定める標本点に， $t_n, t_{n-1}, \dots, t_{n-p+1}$ の p 点を用いる p 次のアダムス・バッシュフォース公式 ($p = 2, 3, \dots$) で，陽解法である．ただし，(2.46) の積分区間は， $[t_n, t_{n+1}]$ なので補外になる．もう一つは，標本点として， $t_{n+1}, t_n, t_{n-1}, \dots, t_{n-p+2}$ の p 点を用いる p 次のアダムス・ムルトン公式である．この場合，(2.46) が補間になるのは良いが，陰解法である．

2 次のアダムス・バッシュフォース法は， t_n, t_{n-1} の 2 標本点を直線で結んだ補外に基づく． \mathbf{f} の補間多項式 $\tilde{\mathbf{f}}$ は

$$\tilde{\mathbf{f}}(t, \mathbf{u}(t)) = \frac{1}{h} [(t_n - t)\mathbf{f}_{n-1} + (t - t_{n-1})\mathbf{f}_n]. \quad (2.47)$$

これを (2.46) に代入して，

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_n) = \frac{3h}{2}\mathbf{f}_n - \frac{h}{2}\mathbf{f}_{n-1} \quad (2.48)$$

を得る．

一方，2 次のアダムス・ムルトン法は，

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_n) = \frac{h}{2}\mathbf{f}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{n+1} \quad (2.49)$$

となる．これは，台形法 (2.13) そのものである．

アダムス・ムルトン法は，補外でなく補間に基づくため，数値的に良い性質を持つと考えられる．しかし，陰解法であるため，そのままでは特別な場合にしか使えない．

そこで，まず陽解法で t_{n+1} の $\mathbf{u}(t_{n+1})$ を求め，その値で $\mathbf{f}(t_{n+1})$ を評価して，アダムス・ムルトン法にあてはめる，予測子・修正子法 (predictor-corrector) 法がしばしば用いられる（前段の陽解法を「予測子」，後段の陰解法を「修正子」と呼ぶ）．ホイン法は，予測子にオイラー法，修正子に 2 次のアダムス・ムルトン法を用いる予測子・修正子法となっている．

以上では 2 次の場合を例に示したが，アダムス型公式では， p を増やすことでより高次のスキームが得られる．アダムス・バッシュフォース法の 3 次の公式は次のようになる．

$$\mathbf{u}(t_{n+1}) - \mathbf{u}(t_n) = \frac{h}{12}(23\mathbf{f}_n - 16\mathbf{f}_{n-1} + 5\mathbf{f}_{n-2}) \quad (2.50)$$

アダムス・ムルトン法の 3 次, 4 次公式はそれぞれ次のようになる.

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) = \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) \quad (2.51)$$

$$u(t_{n+1}) - u(t_n) = \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \quad (2.52)$$

★ **ポイントのまとめ (多段法):** リープフロッグは, 計算量が少ないが, 計算モードが増大しやすいので, 回避策が必要である. アダムス型公式は, そのような問題がない多段法であり, 3 次以上の高精度スキームも存在する.

演習問題

- 2.1 テーラー展開を用いて, 後退オイラー法の精度は 1 次であることを示せ. さらに, 台形法の精度は 2 次であることを示せ. ただし, 誤差の累積の取り扱いについては本文と同様でよい.
- 2.2 微分方程式 (2.14) を, オイラー法, ホイン法, 4 次のルンゲ・クッタ法で解くプログラムを作成し, $u(0) = i$ とし, $t = 20$ まで, $h = 2^{-1}, 2^{-2}, 2^{-3}, 2^{-4}, 2^{-5}$ の場合の数値解を計算せよ. それぞれの場合の誤差を求め, h が十分小さいとき, 誤差がほぼ h^p に比例して減少することを示せ (p は各スキームの次数).
- 2.3 振動方程式 (2.14), 減衰方程式 (2.36) の数値解法に, 2 次のアダムス・バッシュフォース法 (2.48) を用いる場合の特性方程式を立てて解け (求まる λ の 2 根のどちらが物理モードでどちらが計算モードか記せ). その結果から, 振動方程式, 減衰方程式とも, 計算モードは急速に減衰する性質を持つことを示せ.

第3章 一次元の偏微分方程式の数値解法 (I) – 線形移流方程式と拡散方程式

本章では、流体の数値解法の基礎として、偏微分方程式の数値解法の基礎を学ぶ。ここでは空間1次元および時間の2変数の偏微分方程式を扱う。最初に、実用的な多くの問題が、線形の移流および拡散方程式に帰着されることを示し、もっとも基礎的なこれらに基づいて、解法と基礎的な注意事項を解説する。

3.1 問題設定

3.1.1 流体に関する様々な方程式

1次元移流拡散方程式

混合比 χ の微量成分が、拡散を受けながら1次元に流される場合、次の**移流拡散方程式**に従う:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) \chi = \kappa \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}. \quad (3.1)$$

κ は正の定数である。右辺がゼロの場合は、**移流方程式**と呼ばれる:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) \chi = 0 \quad (3.2)$$

逆に、移流がなければ、**拡散方程式**である。

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}. \quad (3.3)$$

浅水方程式

深さに比べ水平スケールが格段に大きく、自由水面をもつ水（海や水路、浅い水槽の水など）では、流速が高度方向にほぼ一様な運動がおきやすい。流速に高度依存性がないものとして得られる水の運動の方程式系は、浅水方程式と呼ばれ、次のように表わされる。

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \quad (3.4)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right) u = -g \frac{\partial h}{\partial x} \quad (3.5)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} \right) v = -g \frac{\partial h}{\partial y}. \quad (3.6)$$

ここで、 t は時刻、 x, y は水平2次元の直交座標、 h は水深、 u, v は速度の x, y 方向成分、 g は重力加速度(一定)である。底面は水平で凹凸がないものとした。よって h の非一様性は水面の凹凸による。また、摩擦や、地球回転の効果は無視した。

浅水方程式系は、傾圧性のある大気にも応用される．水平一様な基本場におけるプリミティブ方程式を線形化すると、鉛直構造とそれ以外が変数分離でき、後者は浅水方程式系になる．3次元空間を伝わる大気や海洋の波動の多くは、この枠組みで導出できる．

さて、(3.4)-(3.6) で、速度や水深が y 方向に一定の場合を考える．すると、各々は t と x のみの関数となり、 $\partial/\partial y$ の項は消え、次のような空間1次元の浅水方程式系を得る．

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} = 0, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + g \frac{\partial h}{\partial x} = 0 \quad (3.8)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) v = 0. \quad (3.9)$$

(3.9) は移流方程式 (3.2) と同じである．つまり、 v は受動的に流されるだけ．(3.7), (3.8) には v は表れないので、(3.2) は、(3.7), (3.8) を連立で解いたあとに、独立して解くことができる．

1次元ナビエ・ストークス方程式

圧縮性流体の基礎方程式ナビエ・ストークス (Navier-Stokes) 方程式で、自由度を水平の1次元とする．非断熱加熱 (大気海洋関連では相変化や放射による加熱など)、座標系の回転が無視できると、次のようになる：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u^2 + p + \frac{4}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left((e + p)u - \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0. \quad (3.12)$$

ここで、 t, x, u は上記と同じ、 ρ は密度、 p は圧力、 T は温度、 e は単位体積あたりの全エネルギー、すなわち単位体積あたりの内部エネルギー、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギーの和である．また、 μ は粘性係数、 κ は熱伝導係数である．

3.1.2 線形化と波動方程式、移流方程式

浅水方程式 (3.7), (3.8) で、静止 (すなわち $u = 0$)、深さ一定 $= H$ の基本場に対する微小な変動を考え、

$$h = H + h', \quad u = u' \quad (3.13)$$

と表わすと (ダッシュは微小量を表わす) 、

$$\frac{\partial h'}{\partial t} + H \frac{\partial u'}{\partial x} = 0, \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + g \frac{\partial h'}{\partial x} = 0. \quad (3.15)$$

これより h' を消去すると、

$$\frac{\partial^2 u'}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} = 0; \quad c \equiv \sqrt{gH} \quad (3.16)$$

を得る．これは、浅水波 (重力波) を表わす波動方程式である．重力波の位相速度は $\pm c$ である．分散性がないので、群速度は位相速度に等しい．

1 次元ナビエ・ストークス方程式より、音波を表わす同様な方程式を導くことができる。基本場として、一様な気圧 p_0 と密度 ρ_0 、流速ゼロを考えて、

$$p = p_0 + p', \quad \rho = \rho_0 + \rho', \quad u = u' \quad (3.17)$$

と線形化する。粘性と熱伝導は無視できるとする。

今、流体として $p = \rho RT$ の状態方程式を持つ理想気体を考えると、断熱を仮定してることになるので、

$$\frac{p'}{p_0} = \gamma \frac{\rho'}{\rho_0}; \quad \gamma \equiv \frac{C_p}{C_v} \quad (3.18)$$

となる。これを、エネルギー方程式 (3.12) に代えて用いることができる。(3.10), (3.11) を線形化し、(3.18) を代入して整理すると、

$$\frac{\partial^2 u'}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} = 0; \quad c \equiv \sqrt{\gamma RT_0} \quad (3.19)$$

を得る（ここで $p_0 = \rho_0 RT_0$ ）。これが、音波を表わす波動方程式である。水の場合も、圧力と密度を関係付ける状態方程式により、音波の波動方程式が同様に導ける。

(3.16), (3.19) は同じ形を持つ**双曲型の偏微分方程式**である。これをさらに整理し、簡単のため u' を改めて u と書くと、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} \right) u = 0 \quad (3.20)$$

を得る。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \right) f = 0, \quad (3.21)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} \right) g = 0 \quad (3.22)$$

の解 f, g は、(3.20) をみたすのは明らかである。(3.21) の解は、 $f(x - ct)$ という形で表わせる任意の関数、(3.22) の解は、 $g(x + ct)$ という形で表わせる任意の関数である。よって、(3.20) の解は、(3.21), (3.22) の解の重ね合わせであり、 $f(x - ct) + g(x + ct)$ という形で表わされる。¹

結局、波動方程式は、移流方程式 (3.2) で流速が一定の場合 (**線形移流方程式**) の組に帰着されるのである。ただし、正負の移動速度の両方に対応する必要はあるのは注意。

3.1.3 境界条件

x は通常有限であり、境界条件が必要である。よく使われる境界条件には、境界での値をゼロとするディレクレ条件、境界での微分をゼロとするノイマン条件がある（ゼロでなく一定値の場合も同じ枠組みになる）。また、左右の境界での値を同じにする周期境界条件を課す場合も多い。周期境界条件は、数値的には保存則を確かめやすいなどの利点がある。また、球面上の大気は、実際周期的な境界条件をもつ。

¹(3.20) は、(3.21), (3.22) で右辺が定数になる場合も成り立つが、その解は結局 $f(x - ct)$ と $g(x + ct)$ という形の関数の重ね合わせに含まれる。

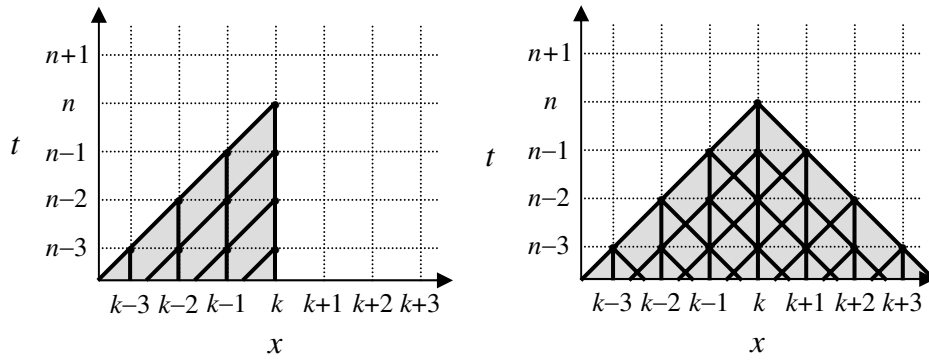


図 3.1: 1 次精度風上差分 (左), FTCS スキーム (右) で u_k^k に影響を与える範囲 (影) および計算に使われる点.

3.2 1 次元線形移流方程式

上記のように, 応用上重要な多くの問題が, 移流方程式または移流拡散方程式に帰着される. ここでは, その最も基本的なケースとして, 線形の移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \quad c > 0 \quad (3.23)$$

を考える. c は定数である. その解は, 上述のように, $f(x - ct)$ という形で表わされる任意関数である. すなわち, u の初期状態 $u(x, t_0)$ は, 速度 c で, x が正の方向に形を変えず伝わる.

これを数値計算で解くことを考える. x, t の格子点を

$$x_k = x_0 + k\Delta x; \quad k = 0, 1, \dots, K-1, \quad (3.24)$$

$$t_n = t_0 + n\Delta t; \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.25)$$

ととる. 格子点での u の値は,

$$u_k^n \equiv u(x_k, t_n) \quad (3.26)$$

と表わす. 本章では, このように x, t 両方についての添え字が付く量は, t に関する添え字を上につける (べき乗ではない – 以後, べき乗を紛れなく示す必要がある場合は, 括弧をつけて, $(a)^p$ などと表わす).

3.2.1 簡単な陽解法

1 次精度風上差分

(3.23) の偏微分を, t, x 両方について前方差分で表わすと,

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = -c \frac{u_k^n - u_{k-1}^n}{\Delta x} \quad (3.27)$$

となる. これを 1 次精度風上差分 (upwind-difference) と呼ぶ. (3.27) を変形して,

$$u_k^{n+1} = (1 - \nu)u_k^n + \nu u_{k-1}^n \quad (3.28)$$

$$\nu \equiv \frac{c\Delta t}{\Delta x}. \quad (3.29)$$

ν はクーラン数 (Courant number) と呼ばれる ($\nu > 0$).

図 3.1 (左) は, このスキームにおいて u_k^k の計算に用いられる範囲を示す. 今, c は正なので上流側から影響が及ぶことがわかる. これが, 「風上差分」 (または上流差分) と呼ばれるゆえんである.

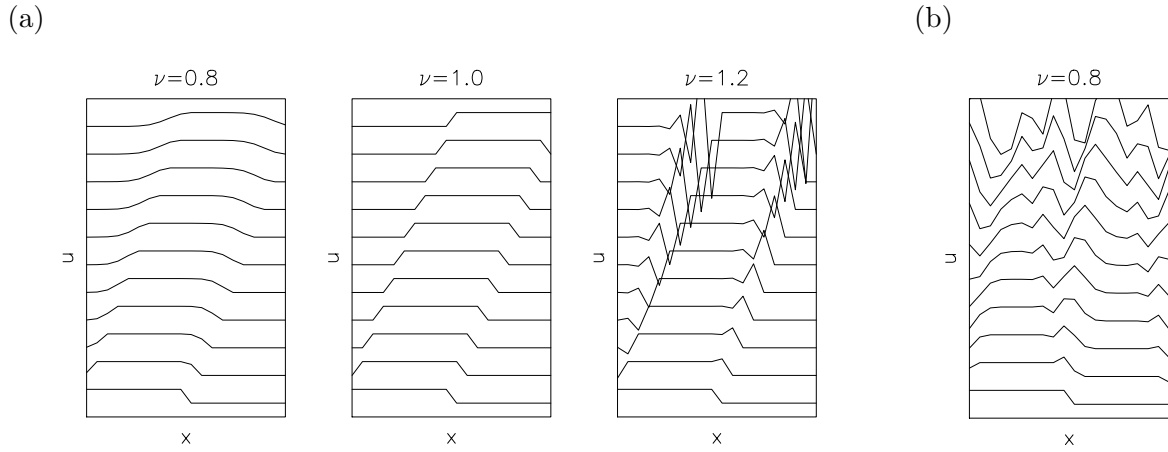


図 3.2: (a) 1 次精度風上差分 (3.28) による移流方程式の数値解. $K = 20$ の場合. 初期に階段型の関数を与え, 周期境界条件で $n = 0$ から $n = 10$ まで計算し, $n = 0, 1, \dots$ と上にずらして表示. ν は 0.8, 1, 1.2 の 3 つについて表示. (b) 同じ計算を FTCS スキームを使った場合. ν は 0.8 のみ.

時間に前方差分, 空間に中央差分を使う場合 (FTCS スキーム)

x 軸上のどちら側が上流であるかは, c の符号で変わる. また, 波動方程式 (3.20) では正負両方の速度に対応できる必要がある. よって, 風上差分のような空間に非対称な差分ばかりではなく, 対称な差分も必要であろう. そこで, 時間については前方差分のままで, 空間については中央差分を使うことにすると, 次のようになる.

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = -c \frac{u_{k+1}^n - u_{k-1}^n}{2\Delta x} \quad (3.30)$$

とあらされる. これは, FTCS (Forward in Time and Central Difference in Space) スキームと呼ばれることがある. (3.30) を整理して,

$$u_k^{n+1} = -\frac{\nu}{2} u_{k+1}^n + u_k^n + \frac{\nu}{2} u_{k-1}^n \quad (3.31)$$

が得られる.

数値解のふるまい

1 次精度風上差分および FTCS スキームによる移流方程式の数値解の例を示す. 周期境界条件を課し, $x \in [0, X]$ に対し初期値を,

$$u(x, t_0) = \begin{cases} 1; & 0 \leq x < X/2 \\ 0; & X/2 \leq x \leq X \end{cases} \quad (3.32)$$

とした. これは解析的には微分不可能である. 離散化すると, 有限の傾きに収まる形にはなるが, 「微分」方程式の数値解法のテストとしては厳しい設定であり, スキームの弱点が見やすい. x 方向に 20 点とって, 計算を行った.

図 3.2 に, 結果を示す. 1 次精度風上差分では, $\nu < 1$ では, 初期の急激な変化が鈍りながら伝播する. $\nu = 1$ では, 解析解と一致する (\because (3.28) で $\nu = 1$ なら, 単に $u_k^{n+1} = u_{k-1}^n$). そして, $\nu > 1$ では, 数値的不安定が発生する. 一方, FTCS スキームでは, ν に関わらず不安定になってしまう (図では 1 例のみ示す). 細かなスケールの変動が指数関数的に増大し, 数値解は急速に発散する.

前章の常微分方程式でも、数値的な不安定によって、適合的なスキームでも収束しないことがあった。しかし、1次精度風上差分は t についても x についても1段の差分であり、前章の経験から単純に考えても、 ν に応じて不安定が発生することは想像しがたい。また、FTCS スキームが常に不安定になるのも自明ではないであろう。

3.2.2 数値スキームの安定性

一般に、偏微分方程式の初期値問題の数値解法では、不安定が発生しやすい。このため、安定性を良く調べることが重要である。

フォン・ノイマン法

フォン・ノイマン (von Neuman) 法は、von Neuman によってはじめられた安定性の解析手法である。フーリエ級数を使って、定係数線形偏微分方程式の数値解を解析的に解くことで、安定性を厳密に議論できる。さらに、フォン・ノイマン法により得られた知見は、非線形の場合にも経験的に良い指針を与えることが知られている。

任意の u_k^n ($k = 1, 2, \dots, K$) は、フーリエ級数を使って、次のように表わされる:

$$u_k^n = \sum_{j=0}^{K-1} U_j^n \exp\left(2\pi i \frac{jk}{K}\right). \quad (3.33)$$

ここで i は虚数単位である。なお、波数 j が $K/2$ より大きい場合は、エリアジングにより波数 $K - j$ ($< K/2$) に帰着されるので、実質的な最高波数は $K/2$ である。

解くべき方程式も考えているスキームも線形であるので、フーリエ級数の各項の時間発展は独立であり、数値解はその重ね合わせである。よって、ひとつひとつの項、

$$u_{k,j}^n \equiv U_j^n \exp\left(2\pi i \frac{jk}{K}\right). \quad (3.34)$$

の、単独の時間発展を考えればよい。もし、ひとつでも指数間的に成長するものがあれば、数値解はやがてそれに支配されることになる。

ここで、

$$\theta_j \equiv \frac{2\pi j}{K} \quad (3.35)$$

とおくと、

$$u_{k,j}^n \equiv U_j^n \exp(i\theta_j k) \quad (3.36)$$

と書ける。以後は、簡単のため添え字 j は省略する:

$$u_k^n = U_n e^{i\theta k} \quad (3.37)$$

さらに、 $U_n = U_0 \lambda^n$ と表わせるとすると、

$$u_k^n = U_0 \lambda^n e^{i\theta k} \quad (3.38)$$

一次精度風上差分:

(3.28) に、(3.38) を代入すると、次を得る:

$$U_0 \lambda^{n+1} e^{i\theta k} = U_0 \lambda^n \left[(1 - \nu) e^{i\theta k} + \nu e^{i\theta(k-1)} \right] \quad (3.39)$$

これより，特性方程式

$$\begin{aligned}\lambda &= (1 - \nu) + \nu e^{-i\theta} \\ &= (1 - \nu + \nu \cos \theta) - i\nu \sin \theta\end{aligned}\quad (3.40)$$

を得る．

1 ステップごとの増幅率は

$$\begin{aligned}|\lambda| &= [(1 - \nu + \nu \cos \theta)^2 + \nu^2 \sin^2 \theta]^{\frac{1}{2}} \\ &= [1 - 2\nu(1 - \nu)(1 - \cos \theta)]^{\frac{1}{2}}\end{aligned}\quad (3.41)$$

となる． $\theta = 0$ となる自明な定数解の場合を除いて考えると， $\nu(1 - \nu)$ が正なら（負なら）， $|\lambda|$ は 1 より小さい（大きい）ので，振幅が時間とともに指数関数的に減衰（増幅）し，安定（不安定）である．また， $\nu(1 - \nu) = 0$ の場合は振幅が変わらず，中立である．すなわち，

$$\begin{cases} 0 < \nu < 1; & \text{安定} \\ \nu = 1; & \text{中立} \\ \text{それ以外;} & \text{不安定} \end{cases}\quad (3.42)$$

となる（ $\nu = 0$ は $\Delta t = 0$ を意味するので考慮対象外）．よって，前節（図 3.2）に示した ν による安定性の違いは，一次精度風上差分で移流方程式を解く場合の一般的な特徴である．

以上ように，フーリエ級数の各項を考えると，常微分方程式の場合と同じように特性方程式が得られる．これがフォン・ノイマン法のポイントである．

FTCS スキーム：

(3.31) に，(3.38) を代入して，次の特性方程式を得る：

$$\begin{aligned}\lambda &= -\frac{\nu}{2}e^{i\theta} + 1 + \frac{\nu}{2}e^{-i\theta} \\ &= 1 - i\nu \sin \theta.\end{aligned}\quad (3.43)$$

よって，

$$|\lambda| = (1 + \nu^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}.\quad (3.44)$$

すなわち，全ての ν で不安定である．

依存領域と CFL 条件

(3.29) より， $\nu = \frac{c}{(\frac{\Delta x}{\Delta t})}$ である．(3.23) より， c は，解析解において，空間構造が伝播する速度である（分散性がなく， $c = \text{位相速度} = \text{群速度}$ ）．一方， $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ は， $x-t$ 空間において，点 (x_{k-1}, t_n) と (x_k, t_{n+1}) を結ぶ線分の傾きであり，1 次精度風上差分において，情報が風下に伝わりうる速さの最大値である．よって， $\nu > 1$ であれば，数値解における情報の伝播速度は解析解におけるそれに追いつかないことになる．

図 3.3 に，1 次精度風上差分の依存領域と，解析解における情報伝播の関係を示す． $\nu > 1$ では，解析解における情報はスキームの依存領域外から伝わるので，数値解は解析解を表しようがない．また， $\nu < 0$ ，すなわち $c < 0$ であれば，(3.28) は「風下差分」になり，解析解の情報は依存領域外から伝播するので，やはり数値解は解析解を表しようがない．フォン・ノイマン法による安定性解析の結果 (3.42) が示すのは，このような場合に不安定になるということである．

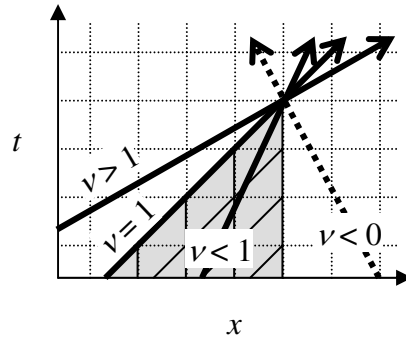


図 3.3: 1 次精度風上差分の依存領域 (影) と, 移流方程式の解析解における情報の伝播が, ν によってどう変わるか (太矢印)。

依存領域を, 解析解における情報伝播がカバーできるように取らなければならないということは, スキームによらず普遍的である. 移流方程式, あるいはそれに類する情報伝播がおこる双曲型の微分方程式を数値的に解く場合, そうすることは, 解析解に収束する数値解法の必要条件である. これを, 提唱者の頭文字より **CFL 条件** (Courant-Friedrichs-Lewy Condition) という.

解きたい方程式と空間分解能を決めれば, ν が 1 以下になるよう Δt を十分小さくするというというのが, 実際に必要なことである. 空間分解能を高めれば, 時間分解能もそれに比例して高める必要がある. よって, 実質的には, 空間 1 次元の偏微分方程式の初期値問題の計算量は, 格子点数 K の 2 乗に比例する.

さて, FTCS スキームは, CFL 条件を満たしても不安定であった. それを理解する鍵は, 次の「数値粘性」である.

3.2.3 精度と数値粘性

2 章で行ったような, テーラー展開によるスキームの評価を行う. ある n に対し, u_k^n ($k = 1, 2, \dots$) が正しく $u(x_k, t_n)$ を表わしてるとして, 次の時間ステップでの数値解 u_k^{n+1} を求める際に発生する誤差 ϵ を考える:

$$\epsilon \equiv u_k^{n+1} - u(x_k, t_{n+1}). \quad (3.45)$$

$\frac{\partial u}{\partial t}(x_k, t_n)$ を $\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_k^n$ などと表わすことにすると, テーラー展開および $\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x}$, (3.29) より,

$$\begin{aligned} u(x_k, t_{n+1}) &= u_k^n + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_k^n + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_k^n + \frac{(\Delta t)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_k^n + \dots \\ &= u_k^n - c \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_k^n + \frac{(c \Delta t)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_k^n - \frac{(c \Delta t)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_k^n + \dots \\ &= u_k^n - \nu \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_k^n + \frac{(\nu \Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_k^n - \frac{(\nu \Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_k^n + \dots \end{aligned} \quad (3.46)$$

同様な展開を, u_k^{n+1} に対して行う. 1 次精度風上差分 (3.28) では,

$$\begin{aligned} u_k^{n+1} &= u_k^n + \nu(u_{k-1}^n - u_k^n) \\ &= u_k^n + \nu \left[-\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_k^n + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_k^n - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_k^n + \dots \right]. \end{aligned} \quad (3.47)$$

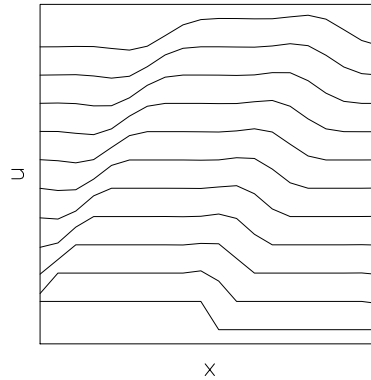


図 3.4: 図 3.2 と同様だが, Lax-Wendroff スキームによる数値解. $\nu = 0.8$.

(3.45)-(3.47) より, この差分の誤差は

$$\epsilon = \frac{\nu(1-\nu)}{2}(\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_k^n - \frac{\nu(1-\nu^2)}{3!}(\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_k^n + \dots \quad (3.48)$$

右辺第一項の係数は, (3.42) で安定となる条件を満たす場合は正である. よって, 誤差は $\kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ ($\kappa > 0$) という, 拡散項の形で働く. 図 3.2 で, $\nu < 1$ の場合に角がなまったのはこれで説明できる. この拡散は, もと方程式にはなく, 数値スキームに内在するものであるので**数値拡散**と呼ばれる. 一方, $\nu > 1$ での不安定は, **負の数値拡散**が働くためと説明できる.

(3.48) より, 1次精度風上差分の誤差は, $O((\Delta x)^2)$ である. 前章で述べたように, あるきまった t の範囲で数値解を求める場合の精度の見積もりでは, 計算回数を考慮に入れる必要がある. 時間のステップ数は, $(\Delta t)^{-1}$ に比例するが, CFL 条件を満たすため Δt は Δx に比例して変化させる必要があるので, 結局, このスキームの**精度は**, $(\Delta x)^{-1}$ が掛かって, $O(\Delta x)$, すなわち**1次である**.

FTCS スキームでは,

$$\begin{aligned} u_k^{n+1} &= u_k^n - \frac{\nu}{2}(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n) \\ &= u_k^n - \nu \left[\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_k^n + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_k^n + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.49)$$

(3.45), (3.46), (3.49) より, この差分の誤差は

$$\epsilon = -\frac{\nu^2}{2}(\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_k^n - \frac{\nu(1-\nu^2)}{3!}(\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_k^n + \dots \quad (3.50)$$

よって, このスキームは, 常に**負の数値拡散**をもつことになる. これが, CFL 条件を満たしても不安定になる原因である. 精度は1次である.

このスキームの不安定の原因は次のように考えることも出来る. FTCS スキームは, 空間差分は中央差分で2次精度である. しかし, 時間差分は1次のオイラースキームによるため, 振動型の方程式では振幅が増大する. こちらの誤差のほうが低次なので, 全体の誤差はこれに支配される. 振動の周期は, 空間スケールが小さいほど短いので, オイラー法による誤差は小さなスケールでより大きく表れる. このため, 小スケールの「ノイズ」が拡大して数値解を支配してしまう.

Lax-Wendroff スキーム

波動方程式 (refeq.3.16) を解くには, 正負の速度に対応しなければならず, FTCS スキームのような対称なスキームが望まれる. 前節でみたように, このスキームは負の数値拡散を内包するために不安定

である．そこで，負の数値拡散を打ち消す項を加えることで不安定が解消されると期待される．同時に，計算の精度も 2 次になる．

(1.13) より，

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_k^n \simeq \frac{u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (3.51)$$

よって，FTCS スキームに $\frac{\nu^2}{2}(u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n)$ を足しこめば，(3.50) の負の拡散項を相殺できる：

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{\nu}{2}(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n) + \frac{\nu^2}{2}(u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n) \quad (3.52)$$

これは，Lax-Wendroff スキームと呼ばれる．精度は 2 次である．

図 3.4 に Lax-Wendroff スキームによる数値計算例を示す．不安定はおこらず，1 次精度風上差分よりは「なまり」は少ない（それでもなまりはある—その程度は ν に依存する；3.2.7 参照）．

3.2.4 繰り返し法や多段法によるスキーム

上で紹介した Lax-Wendroff スキームは，時間についての差分（前方差分）に伴う主要な誤差（ t の 2 階微分の項）を，もとの微分方程式を利用して，空間的な微分の形（ x の 2 階微分の項－負の粘性項）に換算した上で，空間差分によって補正するという巧妙なスキームであった．ただし，このようなアプローチを非線形方程式に用いるには特別な工夫が必要である．

スキームの安定化，高精度化のもう一つのアプローチは，時間方向にオイラー法以外のスキームを用いることである．その場合，空間差分と時間差分を独立して扱うと，前章で取り上げた連立常微分方程式の初期値問題に還元できる．そのためには，各 x_k ($k = 1, 2, \dots, K$) での u の値 u_k をまとめて K 次元ベクトルとして扱い，(2.3) に準じて，

$$\mathbf{u} \equiv [u_1, u_2, \dots, u_K], \quad \mathbf{f} \equiv [f_1, f_2, \dots, f_K] \quad (3.53)$$

とする．ここで， f_k は，空間差分スキームによる $\left(\frac{du}{dt}\right)_k$ の表現である．例えば FTCS スキームで用いたのと同じ 2 次精度の中央差分では，

$$f_k = -\frac{c}{2\Delta x}(u_{k+1} - u_{k-1}) \quad (3.54)$$

となる．このように，まず空間差分を独立して適用することで， x と t の偏微分方程式が， t の常微分方程式 (2.5)，すなわち，

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) \quad (3.55)$$

として表わされるのである（ここでは， \mathbf{f} は t に依存しないので， \mathbf{u} のみの関数として表記した）．前節とあわせた表記にするには，あらかじめ f_k に Δt をかけておくと良い：

- 2 次精度の中央差分：

$$(\Delta t)f_k = -\frac{\nu}{2}(u_{k+1} - u_{k-1}) \quad (3.56)$$

- 4 次精度の中央差分：

$$(\Delta t)f_k = -\nu \left(\frac{2}{3}(u_{k+1} - u_{k-1}) - \frac{1}{12}(u_{k+2} - u_{k-2}) \right) \quad (3.57)$$

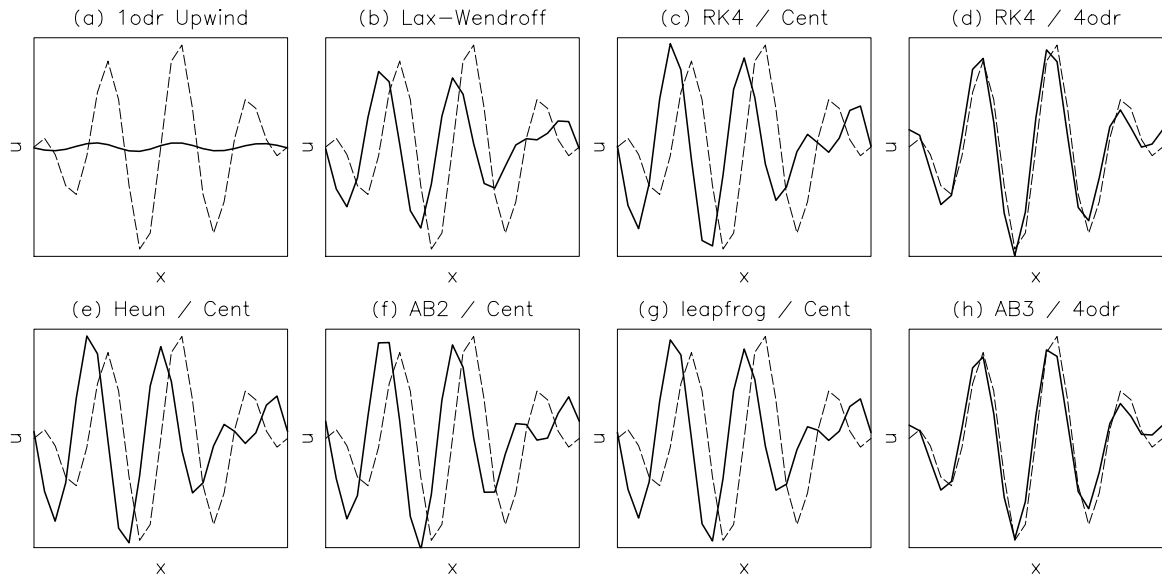


図 3.5: 様々スキームで, (3.59) を初期値として数値解を求めた結果 (実線). 破線は解析解. 計算条件は本文を参照のこと. 用いたスキームは, (a) 1次精度風上差分, (b) Lax-Wendroff スキーム, (c) x は 2 次精度中央差分, t は 4 次の Runge-Kutta スキーム, (d) 同 x は 4 次精度中央差分, (e) x は 2 次精度中央差分, t は Heun 法, (f) 同 t は 2 次の Adams-Bashforth 法, (g) 同 t は Leap-frog, (h) x は 4 次精度中央差分, t は 3 次精度の Adams-Bashforth 法.

このようにすると, それぞれの空間差分法に対し, 時間積分法として, 任意の解法が選べる. もしも Δt を十分小さく取れば, すなわち, ν を十分小さく取れば, 時間についてはどのスキームを用いても (3.55) の解に収束するはずである. しかし, 第 2 章で見たように 1 次精度では収束が悪いので, 実用上は 2 次以上の精度のスキームを使うべきであろう.

図 3.5 は, 初期値を

$$u(x, t_0) = \sin(3x) + \sin(4x); 0 \leq x < 2\pi \quad (3.58)$$

すなわち

$$u_k^0 = \sin\left(2\pi\frac{3k}{K}\right) + \sin\left(2\pi\frac{4k}{K}\right); k = 0, 1, \dots, K-1 \quad (3.59)$$

とし, 周期境界条件, $K = 24$, $\nu = 0.3$ のもとで, 様々なスキームで時間ステップ n を 40 まで計算した結果である. この間, 解析解は領域を半周する. 初期値に含まれる波数 3, 4 の三角関数は, 一波長が各々 8, 6 格子点で表わされる. 用いたスキームは, 前節で述べた 1 次精度風上差分, Lax-Wendroff スキームのほかは, 様々な空間差分と時間差分を組み合わせたスキームである. 1 次精度風上差分の結果は, 激しく減衰する (図の a). 空間が 2 次精度のスキーム (図の b, c, e, f, g) はいずれも同程度に位相が遅れている. 振幅は, Lax-Wendroff スキームではやや減っている. 一方, 空間 4 次精度のスキームは, いずれも 2 次精度のスキームに比べて, よい結果が得られている.

しかし, 高次精度スキームは万能ではない. 図 3.6 は, 前節同様, (3.32) の階段関数を初期値として, 同じ条件で計算した結果である. 2 次以上のスキームでは, いずれも形が大きく崩れている. これは, 次に示すように, 数値的な分散性の結果である. 4 次精度スキームでも, 状況は 2 次精度スキームとさほど変わらない. なお, Lax-Wendroff スキームで崩れが少ないのは, 下で述べるように高波数成分を減衰させる効果があるためである.

さて, 図 3.6 に示された, 悲惨ともいえるべき結果はどのように考えるべきだろうか. 初期値における

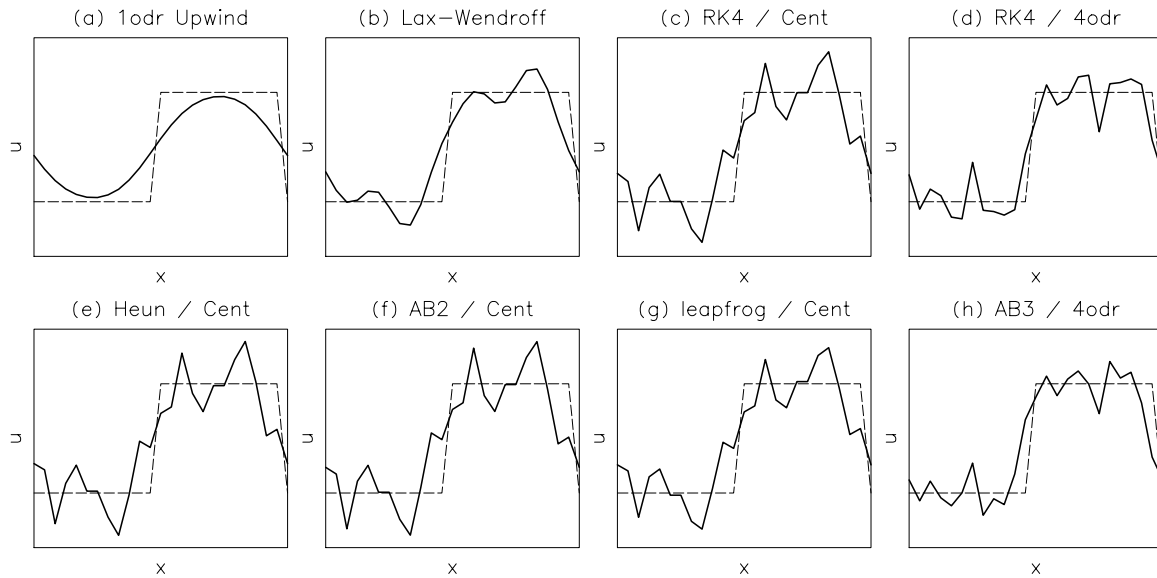


図 3.6: 図 3.5 と同様だが，初期値は (3.32). 他の条件は同一．

急激な変化は確かに極端ではあるが，実際の計算と無縁ではない．そもそも，微分方程式の数値計算は，変化を十分細かく分解した上で行うべきものではある．しかし，物理的な原因により，空間的な変化が時間とともに強化されることは，しばしば発生する．つまり，初期値にはない細かなスケールの擾乱や急激な変化が，時間発展のなかで発達するので，十分な分解能をあらかじめ設定するのが困難な場合があるのである．例えば，水蒸気や微量成分など主に移流に支配されるものは多いが，空間 2 次元以上では，シアーなどにより勾配が強められる効果が働くことは頻繁に起こる（前線形成など）．さらに，力学的には，衝撃波の形成など，1 次元でも不連続を形成する非線形現象も存在する．よって，図 3.6 のようにならないようにする対策が必要である．それについては，3.2.7 節で述べる．その前に，何が起こったのかを，分析する．

3.2.5 数値分散

前節で初期値の形が大きく崩れたのは，空間差分の特性として数値的な分散性があるからである．それを以下で示す．

フォン・ノイマン法で用いたフーリエ級数展開 (3.33) において，時間について離散化する以前の連続関数を考える．すなわち，(3.37) に代えて，

$$u_k(t) = U(t)e^{i\theta k} = U(t)e^{i\theta \frac{x_k - x_0}{\Delta x}} \quad (3.60)$$

を考える．これを，(3.23) に代入して得られる解析的な方程式は，

$$\frac{dU}{dt} = -i \frac{c\theta}{\Delta x} U \quad (3.61)$$

である．一方， x による偏微分を 2 次の中央差分 ((3.30) 右辺) で評価すると，

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{c}{2\Delta x} (e^{i\theta} - e^{-i\theta}) U = -i \frac{c \sin \theta}{\Delta x} U \quad (3.62)$$

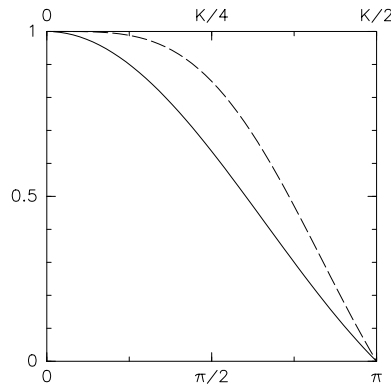


図 3.7: 空間差分スキームによる数値分散: 数値的な位相速度 c^* と真の位相速度 c の比. 実線は 2 次の中央差分 (3.62), 破線は 4 次の中央差分 (3.63). 横軸は θ (下側の目盛) および対応する波数 j (上側の目盛).

となる. (3.62), (3.61) より, x に 2 次の中央差分を用いると, 位相速度が

$$c^* = \frac{c \sin \theta}{\theta}. \quad (3.63)$$

になる, つまり, 解析解の $\sin \theta / \theta$ 倍になることがわかる. θ の実質的な範囲は, 0 から π までであるので, 高波数ほど位相速度が遅く, $\theta = \pi$ すなわち $j = K/2$ (一点ごとに符号を変える) では位相速度はゼロになる (図 3.7). このように, 数値的な原因で位相速度が変わることを**数値分散**という.

このスキームでは位相速度は変化するものの, (3.62) は依然振動型の方程式であり, 減衰も増幅もしない. よって, 安定性に関しては中立である.

さて, ここで示した数値分散は空間差分に内在するのであるから, 時間差分において Δt をいくら細かくしても (すなわち ν をいくら小さくしても) 解消しない. ν を十分小さくすれば (さらに安定なスキームであれば), 数値解は解析的な方程式 (3.61) の解でなく, (3.62) の解に収束するからである.

x に関する微分の評価に 4 次精度の中央差分 (3.57) を用いる場合は,

$$\frac{dU}{dt} = -i \frac{c \sin \theta (4 - \cos \theta)}{3\Delta x} U \quad (3.64)$$

となり, 数値解の位相速度 c^* は

$$c^* = \frac{c \sin \theta (4 - \cos \theta)}{3\theta} \quad (3.65)$$

となる. 2 次精度中央差分と同様に, $\theta = \pi$ で位相が全く進まなくなるという分散性を持つが, 低波数側では, より広い範囲で位相速度の遅れが小さい (図 3.7. 図 3.5 で, 4 次精度スキームの誤差が少なかったのは主にそのせいである (波数 $3 = K/8$, $4 = K/6$)).

階段型の初期値は, 多数のフーリエ成分の重ね合わせである. 図 3.6 で, 2 次以上のいずれのスキームでも初期値の形が大きく崩れたのは, 数値分散により成分毎の位相速度が異なるようになったのが原因である.

3.2.6 各スキームの特性

3.2.5 節で述べたように, ν が十分小さい場合の数値スキームの特性は空間差分できまり, 時間差分にはよらない. 時間差分と空間差分が独立なスキームでは, 本来, 数値計算は十分短い時間刻みで, すな

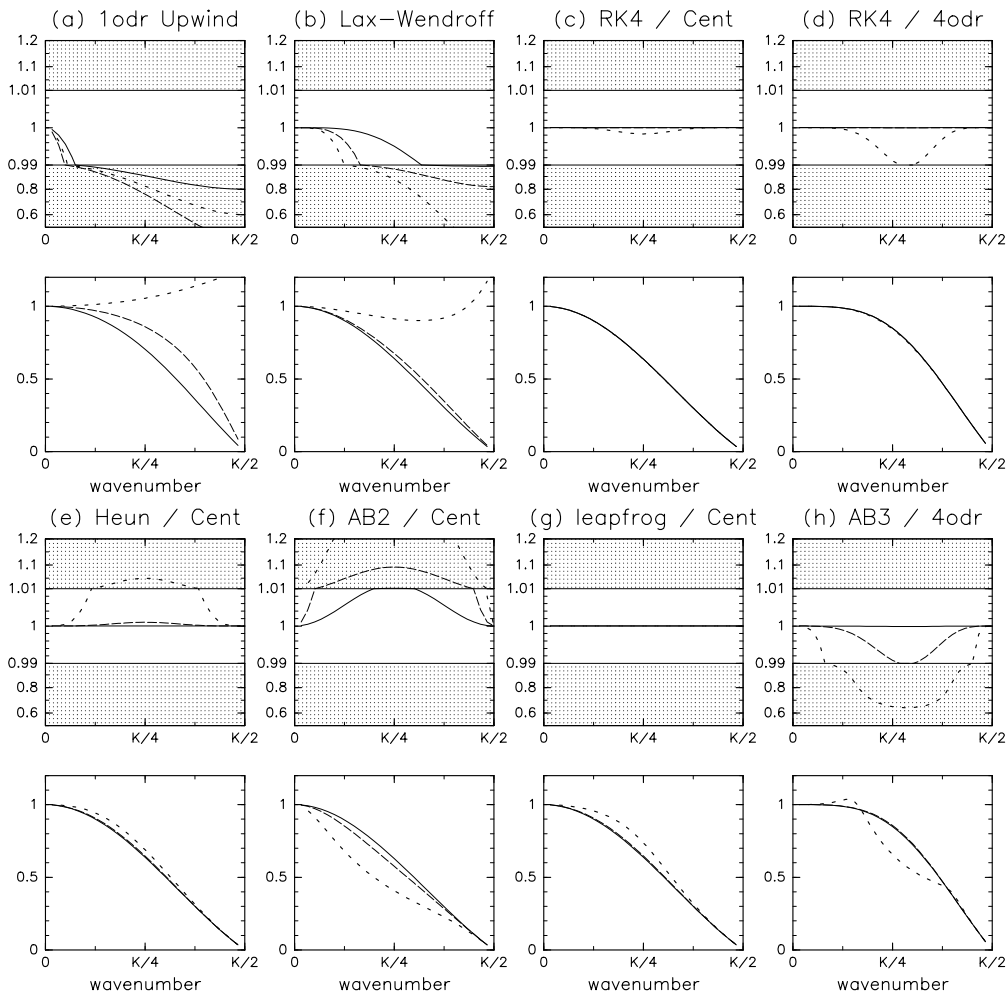


図 3.8: 各スキームの増幅率 ($|\lambda|$; (a),(b),... 等の上段) 及び分散性 (λ の偏角と解析解の偏角 $-\nu\theta$ の比; (a),(b),... 等の下段). 多段法 (f-i) については, 物理モードのみ示す. $\nu = 0.1$ (実線), 0.3 (破線), 0.8 (点線). 横軸は波数 (図 3.7 参照). 増幅率はスケールを 3 つにわけ, 1 近傍での違いを強調するように表示した (影をつけたところはより粗いスケールで示してある).

わち ν を十分小さくして, 実施すべきであるが, ν が 1 に近いところで特性がどう変わるかをみておくのは有意義である.

図 3.8 に, 各スキームの特性を表わす,

$$\lambda_j = U_j^{n+1}/U_j^n$$

を, 毎ステップの増幅率 ($|\lambda|$) と, 偏角にわけて示す. ただし, 後者は, λ の偏角を, 解析解における U_j^{n+1}/U_j^n の偏角 $-\nu\theta$ で割ったもので, 分散性を示す図 3.7 に対応する. 多段法については, 物理モードのみ示す. 横軸は θ であり, フーリエ級数の波数に相当する.

図 3.8 より, Lax-Wendroff スキームは高波数で減衰的に働くことがわかる. $\nu = 0.8$ (CFL 条件の限界 $\nu = 1$ に近い, 粗い時間刻み) では, 特に減衰性が目立つが, $\nu = 0.1$ でも, 高波数 (波数 $K/3$ 以上程度) では毎ステップ 1 % 減衰する. なお, 1 次精度風上差分では, 同じ $\nu = 0.1$ で, 高波数で約 20 % も減衰する.

その他のスキームは, 独立な空間差分と時間差分の組み合わせによる. 3.2.5 節で述べたように, 空間差分に用いたスキーム (2 次および 4 次の中央差分) は増幅率に関しては中立であるので, 各々の増幅

率は時間積分のみによる．Heun 及び 2 次の Adams-Bashforth スキームは，波数 $K/4$ (4 格子点で 1 波長; $\theta = \pi/2$) 前後でやや増幅気味，すなわち不安定である．Leap-frog では増幅率は全波数で 1 である．Adams-Bashforth 3 次スキーム (図の h) は減衰性である (ただし， ν が 0.5 以上ぐらいで計算モードが不安定になる ; 後述)．

階段型初期値の数値解で Lax-Wendroff スキームでは崩れが目立たなかった (図 3.6b) のは，数値分散の強い高波数成分が減衰してくれたおかげである．一方，中央差分を用いたスキームでは，位相誤差の大きい $\theta \simeq \pi$ 付近で減衰が (原理的に) なく，高波数での数値分散がそのまま数値解に反映してしまう．

一次精度風上差分および Lax-Wendroff スキームでは， ν が 1 に近づくと分散性が大きく変わる．他のスキームの分散性は， ν の広い範囲で空間差分による分散性を概ね反映している．ただし， ν が 1 に近づくと分散性がより顕著になるスキーム (2 次精度 Adams-Bashforth スキームなど) と，やや改善するスキーム (Leap-frog など) がある．

いくつかのスキームについての補足

- Lax-Wendroff スキーム

(3.52)，より，特性方程式の解は，

$$\begin{aligned}\lambda &= 1 - \frac{\nu}{2} \left(-e^{i\theta} + e^{-i\theta} \right) + \frac{\nu^2}{2} \left(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta} \right) \\ &= 1 - \nu^2 (1 - \cos \theta) - i\nu \sin \theta\end{aligned}\quad (3.66)$$

- 空間 2 次精度中央差分 / 時間 Heun スキーム

$$(u_k^{n+1})^* \equiv u_k^n + \frac{\nu}{2} (-u_{k+1}^n + u_{k-1}^n)$$

とおくと，

$$\begin{aligned}u_k^{n+1} &= u_k^n + \frac{\nu}{4} (-u_{k+1}^n + u_{k-1}^n - (u_{k+1}^n)^* + (u_{k-1}^n)^*) \\ &= u_k^n + \frac{\nu}{2} (-u_{k+1}^n + u_{k-1}^n) + \frac{\nu^2}{8} (u_{k+2}^n - 2u_k^n + u_{k-2}^n)\end{aligned}\quad (3.67)$$

よって，Heun スキームでは， x_{k-2} , x_k , x_{k+2} と，Lax-Wendroff スキーム (3.52) より広い範囲の点を使って，数値粘性を課していることに相当する．(3.67) より，

$$\lambda = 1 - \frac{\nu^2}{4} (1 - \cos(2\theta)) - i\nu \sin \theta\quad (3.68)$$

- 空間 2 次精度中央差分 / 時間 Leap-frog スキーム

$$u_k^{n+1} = u_k^{n-1} - \nu(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$$

より，

$$\lambda^2 + \nu(e^{i\theta} - e^{-i\theta})\lambda - 1 = 0.\quad (3.69)$$

よって，

$$\lambda = \pm \sqrt{1 - \nu^2 \sin^2 \theta} - i\nu \sin \theta\quad (3.70)$$

となる．復号は負のものが計算モード．根号内が正の場合，両モードとも絶対値は 1 である．計算モードは減衰せず，位相伝播は物理モードと逆向きになる (位相伝播の速さは同じ)．

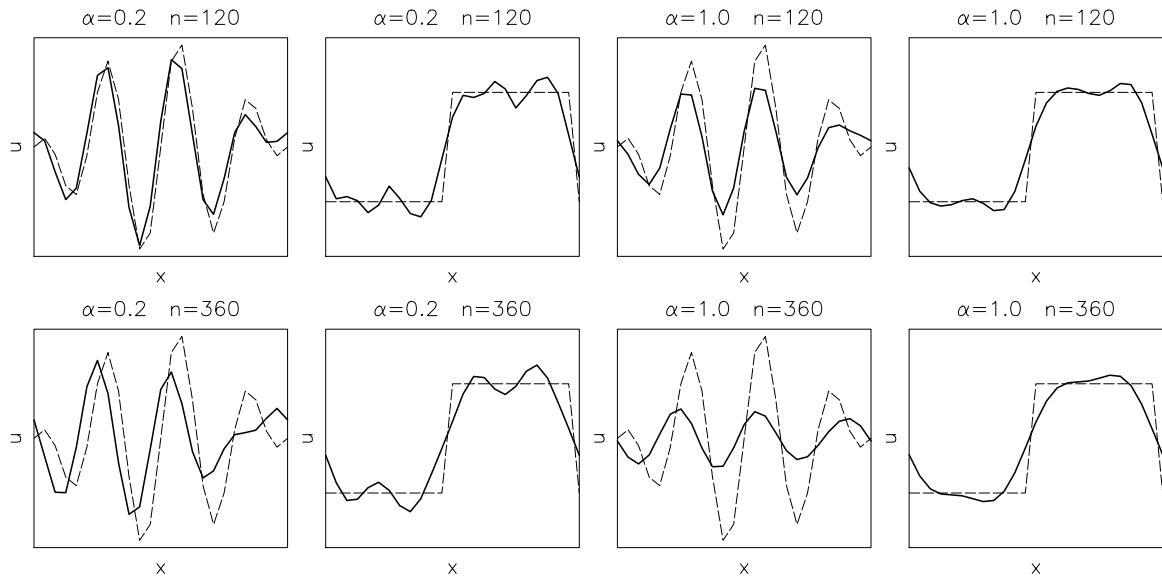


図 3.9: 図 3.5, 3.6 と同様な計算を, x について 4 次の中央差分で移流項を表わし, 4 階の人工粘性を付加して, t について 4 次の Runge-Kutta 法で計算した結果. ここでは $\nu = 0.1$ とした. (3.75) の係数 α は 0.2 と 1 の 2 通りについて, 時間積分のステップ数 n は 120 (解析解が領域を半周する) および 360 (同 1.5 周する) の場合について示す.

時間積分における, ルンゲクッタ型スキーム vs アダムス型スキーム

上で Heun スキームについて示したように, 時間積分にルンゲクッタ型の 1 段法を用いると, x についてより幅広い範囲の点を使うことで高精度が実現される. 1 段法に使われるのは, あくまで前の時間ステップのものに限られるので, 精度の確保はおのずと空間的な多点化によることになるのである. それに対し, アダムス型スキームでは, 用いる点を空間について広げない代わりに, 時間方向に広げる.

ルンゲクッタ型でもアダムス型でも, 同じ空間差分を使う限り, 移流に関する基本的な依存領域は変わらないものの, 高精度化を行う「補正部分」の依存領域は大きく異なり, ルンゲクッタ型のほうが広い. アダムス型では, 高精度化にかかる依存領域は, 移流の基本的な依存領域より狭いため, ν を 1 に近く取ると不安定化しやすい. 従って, より細かい時間刻みを採用する必要がある. アダムス型スキームの利点のひとつは, 時間刻みを細かく取れば計算モードが減衰するという点であるが, $\nu \sim 1$ ではその前提が満たされない. 実際, $\nu \sim 1$ で不安定化するのは, 計算モードである.

3.2.7 数値的振動の回避 – 人工粘性

これまでに見たように, 2 次精度以上のスキームでは, 数値分散によって, 値が急激に変化するところで小さなスケールの振動が発生した. これは数値的なノイズであるので, 抑えるべきである.

その方策には, 次の 2 種がある.

1. 空間的な変化が滑らかなところはそのままに, 値が急激に変化するところでのみ, 振動発生を抑えるようにする.
2. 小規模な振動を抑える人工的な粘性を全体にかける.

1 では, スキームは非線形になる. 2 では, スキームは線形のままにできる. 本節では, 大気海洋の数値モデリングでよく用いられる 2 を紹介する.

線形移流方程式 (3.23) に、粘性項を加えると線形の移流拡散方程式になる．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.71)$$

しかし、人工粘性の場合、高階の粘性が用いられることが多い：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\mu \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \quad (3.72)$$

や

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \mu \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \quad (3.73)$$

など．ここで、 μ は正の定数．高階粘性が好ましい理由は、そのほうが高波数成分、すなわち、小規模成分に選択的に強く働くからである． $u = \exp(isx)$ とおくと、 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -s^2 u$ 、 $-\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} = -s^4 u$ 、 $\frac{\partial^6 u}{\partial x^6} = -s^6 u$ であるから、それぞれ s の 2, 4, 6 乗に比例する選択的な減衰効果を持つ．粘性係数 μ は、数値的に良い特性を持つように決める．

人工粘性項の差分表現は、

$$(\Delta t) \frac{\partial u}{\partial t} = -c(\Delta t) \frac{\partial u}{\partial x}$$

を表わす差分表現 (2 次中央差分なら $\frac{\nu}{2}(u_{k+1}^n - u_{k-1}^n)$) への付加項として、次のように表わせる．

- 2 階微分の場合

$$(\Delta t) \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \simeq \frac{\alpha \nu}{4} (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n) \quad (3.74)$$

- 4 階微分の場合

$$-(\Delta t) \mu \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \simeq -\frac{\alpha \nu}{16} (u_{k+2}^n - 4u_{k+1}^n + 6u_k^n - 4u_{k-1}^n + u_{k-2}^n) \quad (3.75)$$

ここで、 α は、次元のある μ に代って導入した無次元の係数である． x に 2 次の中央差分を用い、 $\alpha = 2\nu$ として 2 次の人工粘性を付加すると、Lax-Wendroff スキームになる．(3.74), (3.75) とも、 u のフーリエ級数 (3.33) の実質的な最高波数 $j = K/2$ では、 $u_{k,K/2} = C[1, -1, 1, -1, \dots]$ に対し、(3.74), (3.75) いずれの右辺も $-\alpha \nu C$ となる．よって、 $j = K/2$ の波が解析解において半波長分移動するステップ数である ν^{-1} 回積分すると、 $U_{K/2}$ を $\alpha U_{K/2}$ だけ減じる効果がある (あるいは、 ν が 1 より十分小さい場合、 $(1 - \alpha \nu)^{\frac{1}{\nu}} = (1 - \alpha \nu)^{\frac{1}{\alpha \nu}} \simeq e^{-\alpha}$ より、 $U_{K/2}$ を約 $e^{-\alpha}$ 倍にする効果があるといえる)．

図 3.9 に、4 次の人工粘性を付加して 4 次精度スキームで $\nu = 0.1$ として計算した結果を示す． $\alpha = 0.2$ では、階段型の初期値で生じる数値振動は残るものの、3.6d に比べると改善が明らかである．また、三角関数型の初期値 (波数 $K/8$ と $K/6$ の重ね合わせ) に対する減衰効果は、位相のずれと同程度にとどまっている． $\alpha = 1$ では、数値振動はより抑えられているが、減衰もより顕著である．

なお、 $\alpha \nu$ が大きいと不安定になることがあるので注意を要する．次節を参照のこと．

3.3 1 次元拡散方程式

前節の最後では、人工粘性という形で拡散項を扱った．ここでは改めて、拡散/粘性の問題を取り上げる．拡散方程式は放物型であり、双曲型の移流方程式とは方程式の性質が異なるので、数値計算上もその点の考慮が必要である．

ここで考えるのは、拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (3.76)$$

で, κ が (正の) 定数の場合である. よって,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (3.77)$$

なお, 大気や海洋のモデルには渦拡散, 渦粘性項が含まれるが, その場合係数は安定度等によるため, 時空間に変動する. その場合でも, 数値計算の基本的な考え方は定係数の場合と共通である.

まず, もっとも簡単に, x については (1.11) で 2 階微分を表わし, t についてはオイラー法で時間積分することを考える:

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \alpha (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n). \quad (3.78)$$

ここで, α は正定数:

$$\alpha \equiv \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2}. \quad (3.79)$$

空間差分は 2 次精度であるが, 時間差分は 1 次精度であり, このスキームでは両差分にトレードオフはないので, 全体の精度は時間差分の精度に引きずられて 1 次である.

ここで, フォン・ノイマンの解析を行う, (3.38) の形の解 ($u_k^n = U_0 \lambda^n e^{i\theta k}$) を仮定すると,

$$\begin{aligned} \lambda &= 1 + \alpha(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}) \\ &= 1 - 2\alpha(1 - \cos \theta). \end{aligned} \quad (3.80)$$

スキームが安定 (中立を含む) である条件は, $0 \leq \theta \leq \pi$ で $|\lambda| \leq 1$ である. よって, 安定となる条件は,

$$\alpha \leq \frac{1}{2} \quad (3.81)$$

である. もしも $\alpha > \frac{1}{2}$ であれば, $\theta = \pi$ の近傍で $|\lambda| > 1$ となり, 不安定. つまり, (移流方程式の場合と同様に) 高波数, すなわち, 小スケールから不安定化する. 安定であっても, $\alpha > 1/4$ では, $\lambda < 0$ となる θ が存在する. その場合, 高波成分の符号が毎ステップ入れ替わるという, 非現実的な振る舞いする.

さて, (3.79) より, 安定性の条件 (3.81) は,

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2\kappa} \quad (3.82)$$

と書き直せる. よって, もしも Δx を $1/2$ にすれば, Δt は $1/4$ にしなければならない. 依存領域の境界を表わす直線の x - t 平面での傾きは Δx に比例するので, 安定に計算するには, $\Delta x \rightarrow 0$ で, 依存領域を無限遠 (または領域の端) まで取らねばならない.

空間規模がより細かくなるほど依存領域が広がる, すなわち情報伝播が速くなるのは, 時間微分の 1 階微分が空間の 2 階微分に比例する放物型の方程式の特徴による. よって, 上の問題は, 基本的にはスキームによらない. しかし, 数値的不安定は, 陰解法を使うことで回避できる.

時間積分に後退オイラー法を用いると,

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \alpha (u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1}). \quad (3.83)$$

このスキームも, 時間差分の精度を反映して 1 次精度である. フォン・ノイマンの解析を行うと,

$$\lambda = [1 + 2\alpha(1 - \cos \theta)]^{-1}. \quad (3.84)$$

よって, $\alpha > 0, \theta \neq 0$ で, 常に $|\lambda| < 1$, すなわち安定である. もとの方程式を忠実に解くには, 本来 Δt は $(\Delta x)^2$ に比例して小さくしなければならない. しかし, 正確さを犠牲にすれば, 陰解法を使うことで少なくとも安定にはできるということである. 実際の数値モデリングにおいて, 係数が大きく変化

する渦粘性を扱う場合、安定性を確保することは重要である。移流項など、渦拡散等以外の項がある場合、陰解法は一般に困難であるが、拡散項だけ陰的解法で取り扱うということがよく行われる。

さて、時間について台形法を用いることで、全体でも 2 次精度の陰解法スキームが得られる：

$$u_k^{n+1} = u_k^n + \frac{\alpha}{2} (u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n) + \frac{\alpha}{2} (u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1}). \quad (3.85)$$

これを **Crank-Nicolson スキーム** という。フォン・ノイマンの解析を行うと、

$$\lambda = \frac{1 - \alpha(1 - \cos \theta)}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)}. \quad (3.86)$$

どの $\alpha > 0, \theta \neq 0$ に対しても $|\lambda| < 1$ であるので、このスキームも常に安定である。ただし、 $\alpha > 1/2$ では、 $\lambda < 0$ となる θ が存在するので、数値解の振る舞いは非現実的である。

(3.83) や (3.85) は、 $u_k^{n+1}, k = 1, 2, \dots$ に対する連立方程式である。数値的には、 LU 分解や、反復法などにより解くことができる。1 次元問題では 3 重対角行列になるので、少ない計算量で LU 分解が可能である。

移流拡散方程式などのように、拡散以外の時間変化項を伴う場合、一旦拡散項を除いて時間積分を行った上で、その修正という形で陰解法的に拡散項を取り込むことができる。この方法は、多くのモデルで用いられている。

演習問題

- 3.1** (3.43), (3.66) を導出し、その絶対値を 1 と比較せよ。(フォン・ノイマンの方法による安定性解析をやってみるということ.)
- 3.2** x に関する微分の近似に風上差分を使う場合について、(3.62) に相当する式を求め、(3.61) と比較して特性 (分散性, 成長/減衰性) を説明せよ。
- 3.3** (3.14), (3.15) は、長さスケール H および時間スケール $T = \sqrt{H/g}$ を使って、 $t = T\tau, x = H\xi, u' = (H/T)u^*, h' = Hh^*$ と無次元化すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial h^*}{\partial \tau} + \frac{\partial u^*}{\partial \xi} &= 0, \\ \frac{\partial u^*}{\partial \tau} + \frac{\partial h^*}{\partial \xi} &= 0. \end{aligned}$$

と表わせることを示し、さらに、 $s = h^* + u^*, r = h^* - u^*$ を導入すると、位相速度が ± 1 の 2 つの独立な移流方程式に帰着されることを示せ。この性質を用いて、(3.14), (3.15) の初期値問題を、線形移流方程式の数値解法により近似的に解く手順の例を示せ (箇条書きやフローチャートなどにより)。なお、プログラムを作成するつもりで、データの入出力についても簡潔に言及せよ。

- 3.4** 線形移流方程式を数値的に解く幾つかのスキーム (本章に出てきたスキームから 3 種類程度) をプログラミングして、図 3.5 に示したのと同様な計算を、 $\nu = 0.1, 0.5$ について実施し、図示せよ。さらに、同じ計算を、 x に関する格子点数を倍に増やして実施し、比較せよ。

第4章 一次元の偏微分方程式の数値解法 (II) – いろいろな方程式

これまでは、基本的な1変数の線形方程式を扱ってきた。しかし、流体の基礎方程式は本来は非線形である。また、独立変数も一つとは限らない。以下では、非線形方程式および多変数方程式の扱いの基礎を述べる。実際の大気海洋モデリングに使われる空間2次元以上の差分法の理解の一助となるであろう。

4.1 空間1次元非線形方程式

線形方程式では、解同士の重ね合わせも解である。例えば解をフーリエ級数で表わす場合、級数の各項が解であれば、それぞれを独立に調べるだけでスキームの特性が調べられた。

方程式が非線形になると、重ね合わせは解にならず、異なるスケール間で相互作用がおきる。数値計算においても例えば、大きなスケールから小さなスケールへ特定の位相でエネルギーが供給され続け、振幅が増大して不安定になるといった現象が発生しうる。つまり、非線形性による不安定が生ずることがあるのである。非線形方程式の扱いでは、線形方程式の扱いの諸事項に加え、このような不安定への対処が必要になる。その対処法としては、以下で示すように、**もとの方程式が持つある種の保存性を満たすようにすることが有効である。**

4.1.1 Burgers 方程式

次の偏微分方程式を、Burgers 方程式と呼ぶ。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) u = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

ここでは移流拡散方程式において移流の対象が速度自身となっている。Burgers 方程式は、非線形性と散逸性を兼ねたもっとも簡単な空間1次元の方程式といえる。それは圧縮波や膨脹波を解に持つ。 u が

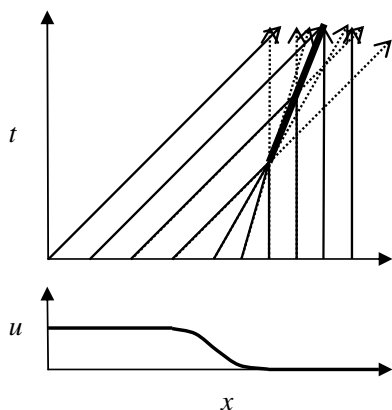


図 4.1: 衝撃波の形成過程の概念図。下段は初期値。上段は特性線を示す。実線は実際の特性線で、点線は交差後の仮想的な延長線である。実際には、特性線が交わる場所で集まって衝撃波を形成する(太線)。

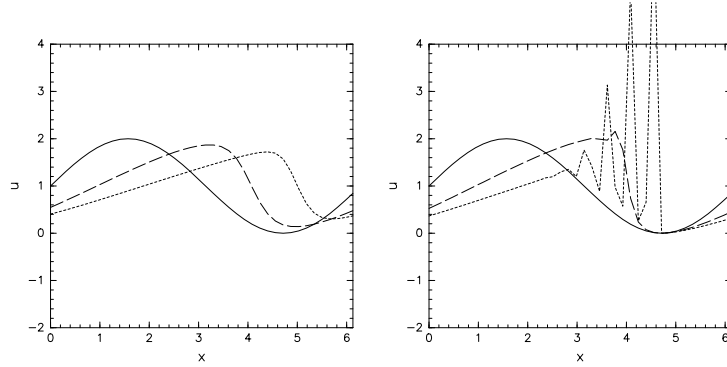


図 4.2: (4.6) による Burgers 方程式の数値解. 左: $\kappa = 0.15$, 右: $\kappa = 0$ の場合. $n = 0$ すなわち初期値 (実線) と $n = 30$ (破線), $n = 60$ (点線) の数値解. 計算条件は $K = 40$, $\Delta t / \Delta x = 0.1$ で, 時間積分法は 4 次の Runge-Kutta. 初期値は本文参照.

非一様であると, 移流速度が非一様となる. u の勾配 ($\frac{\partial u}{\partial x}$) が正の領域では, 移流された u 自身が収束し, 勾配が強まる, すなわち変化が「圧縮」される. 勾配が負の領域では逆に発散する (「膨脹」する). κ がゼロまたは十分小さいとき, 圧縮波は衝撃波となる. すなわち, その通過時に u が急激に変化する.

κ がゼロであれば, 流れ (速度 u) にのって, u 自身が保存する. x - t 断面上で普遍量が伝播する線を特性 (曲) 線という. この場合は, 流れに沿った線が特性線であり, 直線となる. u の勾配が負であれば, 図 4.1 に示すように, 特性曲線は交わる. もし交差すれば u が多価になるという, 非物理的な状態になる. その場合, 実際には特性曲線は一つに集まり, 交差はしない. 集まったところは, 速度が不連続に変わる不連続面となる. 衝撃波はこのように形成する.

さて, (4.1) を変形して,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (4.2)$$

∴

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_a}^{x_b} u dx = \left[\frac{u^2}{2} + \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right]_{x_a}^{x_b} \quad (4.3)$$

これより, u の領域積分は, 境界での出入りによる変化しかなく, 内部では保存する. これは運動量保存則に対応する.

$\kappa = 0$, すなわち「非粘性」の場合, (4.1) は,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (4.4)$$

(4.4) の両辺に u を掛けると,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u^2}{2} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^3}{3} \right) \quad (4.5)$$

が得られる. よって, u^2 の領域積分も, 境界でのやりとりによる変化がある以外は保存する. これはエネルギー保存則に対応する. $\kappa = 0$ なら同様に, 任意の自然数 p について u^p の領域積分は保存する.

単純な数値解法

まずは, もっとも単純に, (4.1) を次のように中央差分で表わしてみる.

$$\frac{du_k}{dt} = -u_k \frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2\Delta x} + \kappa \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{\Delta x^2} \quad (4.6)$$

これは線形方程式の場合と同様に 2 次精度の差分である。

これを使って、初期値を

$$u(x, 0) = \sin x + 1$$

として計算した数値解を図 4.2 に示す。時間積分は 4 次の Runge-Kutta 法により十分小さい時間刻みで行った。 $\kappa = 0.15$ の場合 (図 4.2 左), 徐々に波が突っ立つ衝撃波が見られる。 $\kappa = 0$ の場合 (図 4.2 右), 衝撃波の発達とともに, 前章でみたように不連続面で数値分散による「ぎざぎざ」が発生する。しかし, この乱れは, 数値分散だけによるのではない。実は単なる分散ではなく, ぎざぎざは拡大し続ける。つまり数値解は不安定である。この不安定は非線形にもとづくので, **非線形不安定 (non-linear instability)** と呼ばれる。

4.1.2 フラックス形での差分

(4.1) でなく (4.2) を離散化することで, Burgers 方程式の差分表現として, (4.6) とは異なる 2 次精度差分が得られる。

$$\frac{du_k}{dt} = -\frac{u_{k+1}^2 - u_{k-1}^2}{4\Delta x} + \kappa \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{\Delta x^2}. \quad (4.7)$$

これが (4.6) と異なるのは, 非線形である移流項の表現である。非線形項では一般に, 差分のもととなる微分表現のバリエーションに応じて, 同じ方式の差分 (ここでは 2 次の中央差分) でも, 複数の表現が存在しうる。

(4.7) は (4.2) をもとにしているので, u の積分量 (すなわち運動量) の保存則を満たすことが期待される。これは以下のようにフラックス形での差分という一般的な枠組みで示すことができる。

(4.2) を次のように書きなおす。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x} \quad (4.8)$$

$$f = \frac{u^2}{2} + \kappa \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4.9)$$

f の収束が u の時間変化を生じるので, f は u のフラックスといえる。ここで, $x_k = k\Delta x$ で評価する u_k に対し, フラックスは, $x_{k+\frac{1}{2}} = (k + \frac{1}{2})\Delta x$ という中点で評価することにし, $f_{k+\frac{1}{2}} \equiv f(x_{k+\frac{1}{2}})$ とおく。すると, (4.8) は

$$\frac{du_k}{dt} = -\frac{f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \quad (4.10)$$

と離散化できる。このような差分を**フラックス形 (flux form)**での差分という。(4.10) より,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^K u_k &= -\sum_{k=1}^K \frac{f_{k+\frac{1}{2}} - f_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta x} \\ &= f_{\frac{1}{2}} - f_{K+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.11)$$

よって, フラックス形での差分表現は積分量を保存する。どのような時間積分スキームを使っても, 積分量の変化は境界でのフラックスのみによる。

さて, (4.9) より, $f_{k+\frac{1}{2}}$ は次のように評価できる。

$$f_{k+\frac{1}{2}} = \frac{u_{k+1}^2 + u_k^2}{4} + \kappa \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}. \quad (4.12)$$

ここでは, $x_{k+\frac{1}{2}}$ での u^2 を u_{k+1}^2 と u_k^2 の平均として表わした。(4.10) に (4.12) を代入すると (4.7) が得られるので, (4.7) は確かにフラックス形での差分であり, u の積分を保存する (運動量保存)。

保存則を満たす分、(4.7) のほうが (4.6) よりも物理的に理に適っている。また、(4.6) より不安定がおきにくいなど、良い振る舞いをする（具体例は次節にまとめて示す）。流体の数値計算においては、フラックス f の表現を工夫することで様々なスキームが開発されている。また、フラックス形での差分は、**有限体積法 (finite volume method)** と密接な関係がある。

ただし、(4.7) でも非線形不安定がおきる場合がある。個々の u_k は大きく正負に振れても、 u_k の和は保存しうるので、この保存則は、非線形不安定を確実に押さえる縛りとしては作用しないのである。次節では非線形不安定を抑える方法を示す。

4.1.3 エネルギーを保存する差分法

前述のように、非粘性 Burgers 方程式では $\kappa = 0$ のとき、 u^2 の積分量が保存する（エネルギー保存則; 式 (4.5)）。同積分量は離散形では、

$$E \equiv \sum_{k=1}^K u_k^2 \Delta x \quad (4.13)$$

と書ける。 $E^{\frac{1}{2}}$ はベクトル $\mathbf{u} = [u_1, u_2, \dots, u_K]$ の **L2 ノルム (L2 norm)** $\|\mathbf{u}\|_2$ である:

$$\|\mathbf{u}\|_2 \equiv \left(\sum_{k=1}^K u_k^2 \Delta x \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.14)$$

もしも L2 ノルムが保存すれば、個々の u_k が次第に正負に振れる形で成長する不安定は抑えられる。 $\kappa \neq 0$ のときは L2 ノルムは保存しないが、拡散項はエネルギーを減少させるようにはたらくので、 $\kappa = 0$ でエネルギーを保存するスキームを使い拡散項も適切に取り扱えば、非線形不安定は回避できると期待できる。

では、ノルムが保存する差分法はどのようにすれば構成できるのであろうか。非線形項の差分表現は、(4.6) と (4.7) の 2 種類があった。**複数の差分法がいずれも L2 ノルムを保存しなくても、組み合わせれば保存する場合がある。** このように、直接の独立変数ではない高次項（ここでは u^2 ）の積分量を保存則するスキームは、複数の差分表現を組み合わせで導かれることが多い。例えば、空間 2 次元の差分法に用いられる**荒川ヤコビアン**も、このような考えで導くことができる。

以下では、L2 ノルム保存スキームを導く。まずは、(4.6), (4.7) の移流項部分について、 u^2 の保存性を具体的に調べる。 $\kappa = 0$ として、(4.6) の両辺に $u_k \Delta x$ を掛けて和をとると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^K \frac{u_k^2}{2} \Delta x &= \sum_{k=1}^K \left(-u_k^2 \frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2} \right) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^K u_k^2 u_{k+1} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K u_k^2 u_{k-1} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^K u_k^2 u_{k+1} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K u_{k+1}^2 u_k + \frac{u_1^2 u_0 - u_{K+1}^2 u_K}{2} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K u_k u_{k+1} (u_{k+1} - u_k) + \text{境界での項} \end{aligned} \quad (4.15)$$

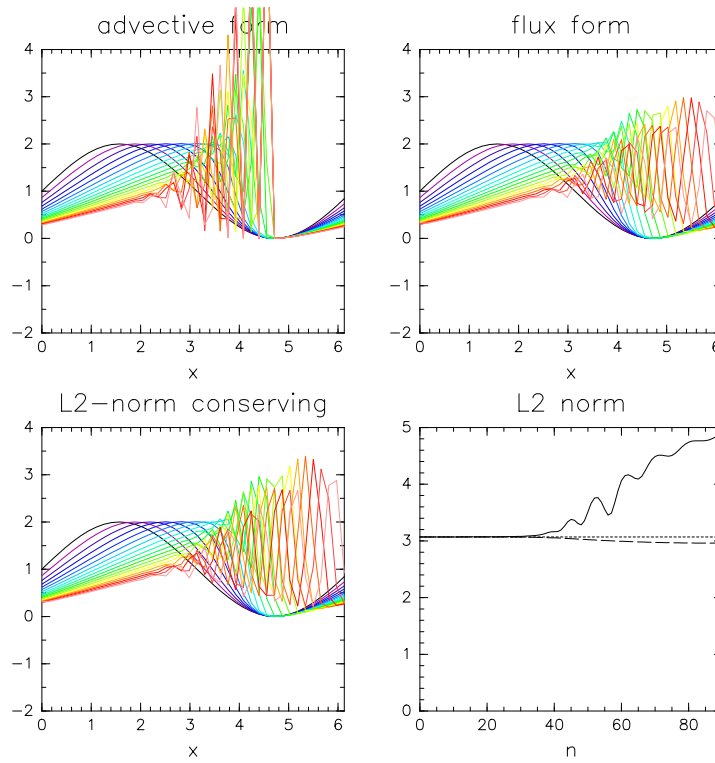


図 4.3: 非粘性バーガース方程式の数値解. (a) 移流項の差分に (4.6) を使う場合, (b) (4.7) を使う場合, (c) (4.17) を使う場合. $n = 0$ から 90 まで 5 個おきにプロット. (d) は, この 3 ケースの L2 ノルムの時間発展 (実線は (a), 破線は (b), 点線は (c) に対応). 計算条件は図 4.2 と同じ.

一方, (4.7) で $\kappa = 0$ として両辺に $u_k \Delta x$ を掛けて和をとると,

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \sum_{k=1}^K \frac{u_k^2}{2} \Delta x &= \sum_{k=1}^K \left(-u_k \frac{u_{k+1}^2 - u_{k-1}^2}{4} \right) \\
 &= -\frac{1}{4} \sum_{k=1}^K u_k u_{k+1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^K u_k u_{k-1}^2 \\
 &= -\frac{1}{4} \sum_{k=1}^K u_k u_{k+1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^K u_{k+1} u_k^2 + \frac{u_1 u_0^2 - u_{K+1} u_K^2}{4} \\
 &= -\frac{1}{4} \sum_{k=1}^K u_k u_{k+1} (u_{k+1} - u_k) + \text{境界での項}
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

(4.15), (4.16) より, (4.6) と (4.7) を 1:2 の比で線形結合すれば, L2 ノルムが保存することがわかる. よって,

$$\begin{aligned}
 \frac{du_k}{dt} &= -\frac{u_k}{3} \frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2\Delta x} - \frac{2}{3} \frac{u_{k+1}^2 - u_{k-1}^2}{4\Delta x} + \kappa \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{\Delta x^2} \\
 &= -\frac{u_{k+1}^2 + u_k u_{k+1} - u_k u_{k-1} - u_{k-1}^2}{6\Delta x} + \kappa \frac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{\Delta x^2}
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

は, **L2 ノルムを保存するスキーム**である. なお, 周期境界条件では, (4.15), (4.16) と「境界での項」は相殺してゼロである. なお, 数値計算では $\frac{du_k^2}{dt}$ を積分するわけではないので, 時間積分には誤差が十分小さいスキームを用いないと上記のスキームを用いても L2 ノルムは有意に変化しうることに注意.

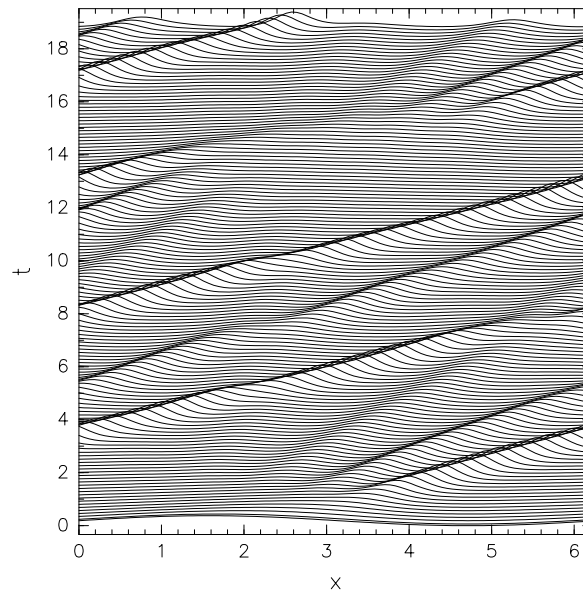


図 4.4: KdV 方程式の数値解の例. n について 20 置きに, 適当なスケールで折れ線として少しずつずらして表示. 縦軸は時刻 t . 計算条件は, $\kappa = 0.02$, $K = 100$, $\Delta x / \Delta t = 0.1$ で, 時間積分法は 4 次の Runge-Kutta. 移流項のスキームは (4.17) と同じ.

図 4.3 に, 初期値を

$$u(x, 0) = \sin x + 1$$

として (4.6), (4.7), (4.17) で非粘性 Burgers 方程式を解いた結果を示す. (4.6) は非線形不安定であり, L2 ノルムが増大する. この例では (4.7) は安定で, L2 ノルムが減少するが, 不安定になる場合もある (初期値が $u(x, 0) = \sin x$ など). (4.17) では L2 ノルムが保存する. このため初期値によらず非線形不安定は発生しない. 図からわかるように, 非線形不安定は発生しなくても, 数値分散による乱れは発生する. このため, 前章で述べたような対策は必要である. つまり, $\kappa = 0$ の Burgers 方程式を解く際にも, 人工的な数値粘性はかけるべきということである. ただし高階粘性でよい.

4.1.4 KdV 方程式

KdV (Korteweg-de Vries) 方程式:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} \right) u + \kappa \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (4.18)$$

は, 浅水方程式を単純化して有限振幅の浅水波を表わす 1 変数の方程式として導ける. 3 階微分の項は, 水深の違いによる分散性を反映する (水深が深いほど位相速度が大). Burgers 方程式では, 非線形移流項による突っ立ちは粘性項が緩和するが, KdV 方程式では分散性が緩和する.

KdV 方程式は, ソリトンと呼ばれる孤立波を解にもつことで有名である. 三角関数型の線形波と違い, ソリトンは一つの「盛り上がり」が孤立して伝播する波であり, 粒子的な性質を持つ. 孤立波どうしが衝突しても, それぞれは安定で「すり抜ける». ただし, その際, 単純な通過の場合とは少しずれた位置にもとの形状・振幅の波が形成されて伝播を続けるといった, 面白い特徴を持つ. KdV 方程式では, $\int u dx$ のみならず, $\int u^2 dx$ も κ がゼロでなくても保存する.

KdV 方程式の数値解を求める場合, 移流項は Burgers 方程式の場合と同様に離散化できる. その際は, (4.17) または (4.7) を使うのがよいであろう. (4.6) は避けるべきである.

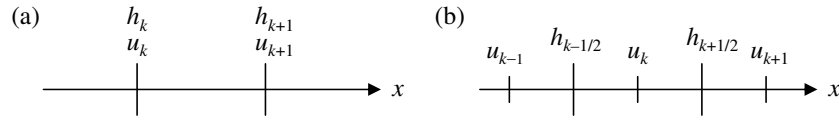


図 4.5: 2 変数 h, u の格子配置例. (a) h と u を同じ格子点で評価する場合. (b) 互い違いにする場合.

3 階微分 $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ は次のように離散化できる.

$$\frac{\partial^3 u_k^n}{\partial x^3} \simeq \frac{\frac{u_{k+2}^n - 2u_{k+1}^n + u_k^n}{\Delta x^2} - \frac{u_k^n - 2u_{k-1}^n + u_{k-2}^n}{\Delta x^2}}{2\Delta x} = \frac{u_{k+2}^n - 2u_{k+1}^n + 2u_{k-1}^n - u_{k-2}^n}{2\Delta x^3} \quad (4.19)$$

図 4.4 に, 初期値

$$u(x, 0) = \sin x + 1$$

に対する数値解を示す. 初期の sine 型の波は, 4 つの孤立波に分かれて伝播する (図ではごく浅い 4 つ目は見えにくい). 各々はピークの u に応じて異なる伝播速度を持つ. やがて, 孤立波同士が衝突するが, 上記のようにすり抜けて少しずれた位置から伝播を続ける. 全孤立波が一度に衝突しても, 衝突中は一見各々が融合したように見えるものの, その後はもとの孤立波に分かれて伝播を続ける.

4.2 独立変数が複数の場合

独立変数が複数でも, 数値解法の基本は 1 つの場合と変わらないが, 自由度が増すぶん, スキームの選択肢が増す. その中でよいスキームを選択するのが肝要である. 本節では, 波動方程式を題材にそれを示す.

ここでは, 浅水波の線形方程式 (3.14), (3.15) を無次元化して係数を落とした次の方程式を扱う (演習問題 3.3 参照).

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial x} = 0. \quad (4.21)$$

これから u を消去して得られる波動方程式は,

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = 0 \quad (4.22)$$

であり, 位相速度 ± 1 の非分散性波動を解に持つ.

演習問題 3.3 で述べたように, (4.20), (4.21) は新しい変数 $s \equiv h + u$, $r \equiv h - u$ を導入することで, 位相速度が 1 および -1 の 2 つの独立な移流方程式に帰着され, 別々に (例えば, それぞれについて高次の上流差分で) 解くことができる. しかし, 非線形方程式になるとそのような分離は一般には不可能なので, 正負の位相速度に同時に対応できるよう解く必要がある.

ここで, 2 変数の格子配置を考える. h と u を同じ格子点にとると,

$$h_k(t) \equiv h(x_k, t), \quad u_k(t) \equiv u(x_k, t) \quad (4.23)$$

となる. これまで同様, 格子点は等間隔に $x_k \equiv x_0 + k\Delta x$ ととる. これに対し, 次のように h と u を互い違いにとることも可能である.

$$h_{k+\frac{1}{2}}(t) \equiv h(x_{k+\frac{1}{2}}, t), \quad u_k(t) \equiv u(x_k, t) \quad (4.24)$$

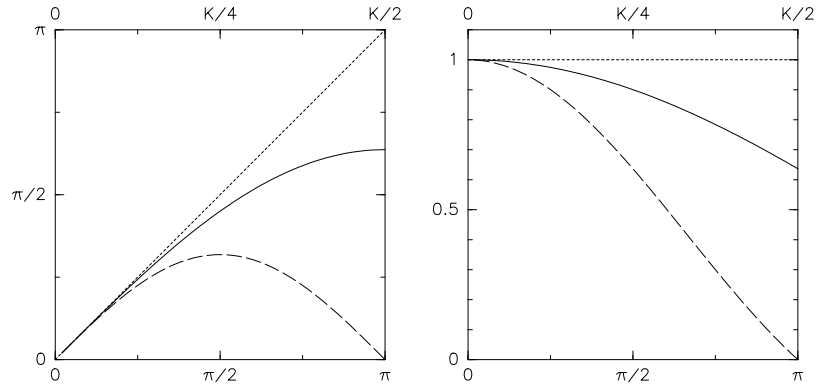


図 4.6: 格子配置による波動方程式の数値分散の違い. (左) 振動数 ($\times \Delta x$), (右) 位相速度. 横軸は図 3.7 と同じ. 破線は h と u を同じ格子点に配置した場合 (4.29), 実線は互い違いに配置した場合 (4.31), 点線は解析解を示す. 位相速度が負の場合は符号が入れ替わるだけ.

ここで, $x_{k+\frac{1}{2}} = x_0 + (k + \frac{1}{2})\Delta x$ である. 両配置を図 4.5 に示す.

(4.23) の格子配置で中央差分を用いる場合,

$$\frac{dh_k}{dt} = -\frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2\Delta x}, \quad (4.25)$$

$$\frac{du_k}{dt} = -\frac{h_{k+1} - h_{k-1}}{2\Delta x}. \quad (4.26)$$

一方, (4.24) の格子配置で中央差分を用いる場合,

$$\frac{dh_{k+\frac{1}{2}}}{dt} = -\frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta x}. \quad (4.27)$$

$$\frac{du_k}{dt} = -\frac{h_{k+\frac{1}{2}} - h_{k-\frac{1}{2}}}{\Delta x}, \quad (4.28)$$

となる. 同じ中央差分でも後者のほうが短い距離で差分をとれる. このため性質が良いことが期待できるだろう. 次に実際そうであることを示す.

格子配置による数値分散の違い

前述の 2 通りの格子について, 数値分散を調べる. (3.60) 同様,

$$\begin{aligned} h_k(t) &= H(t)e^{i\theta k} = H(t)e^{i\theta \frac{x_k - x_0}{\Delta x}}, \\ u_k(t) &= U(t)e^{i\theta k} = U(t)e^{i\theta \frac{x_k - x_0}{\Delta x}} \end{aligned}$$

あるいは,

$$h_{k+\frac{1}{2}}(t) = H(t)e^{i\theta(k+\frac{1}{2})} = H(t)e^{i\theta \frac{x_{k+\frac{1}{2}} - x_0}{\Delta x}}$$

とおいて調べる.

h と u を同じ格子点にとる場合, (4.25), (4.26) に代入して,

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= -i \frac{\sin \theta}{\Delta x} U, \\ \frac{dU}{dt} &= -i \frac{\sin \theta}{\Delta x} H. \end{aligned}$$

これより,

$$\frac{d^2 H}{dt^2} = -\frac{\sin^2 \theta}{\Delta x^2} H \quad (4.29)$$

を得る. 一方, 解析解は

$$\frac{d^2 H}{dt^2} = -\frac{\theta^2}{\Delta x^2} H \quad (4.30)$$

である. よって, 数値解の振動数は $\pm \sin \theta / \Delta x$, 位相速度は $\pm \sin \theta / \theta$ である (図 4.6 破線). この結果は, 1 変数の移流方程式で中央差分を用いた場合の結果 (3.63) と同じである.

一方, h と u を互い違いにとる場合, (4.27), (4.28) に代入して,

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= -i \frac{2 \sin(\theta/2)}{\Delta x} U, \\ \frac{dU}{dt} &= -i \frac{2 \sin(\theta/2)}{\Delta x} H. \end{aligned}$$

これより,

$$\frac{d^2 H}{dt^2} = -\frac{4 \sin^2(\theta/2)}{\Delta x^2} H \quad (4.31)$$

を得る. よって, 数値解の振動数は $\pm 2 \sin(\theta/2) / \Delta x$, 位相速度は $\pm 2 \sin(\theta/2) / \theta$ である. 図 4.6 の実線に示すように, **結果は大きく改善している**. h と u を同じ格子にとった場合, 最高波数では振動せず, 位相速度がゼロであったのに対し, 互い違いにとる場合は, 解析解の $\frac{2}{\pi}$ 倍になるだけで済んでいる. よって **互い違い格子点配置のほうが優れている**. なお, h と u を同じ格子にとる場合, 波数 $K/2$ 以上では数値解の振動数は波数とともに減少するので, 群速度は負である. つまり, 解析解と反対向きに波束が (従ってエネルギーも) 伝播してしまうことに注意せよ.

演習問題

- 4.1 移流項の計算に (4.6) を使う場合の不安定の発生過程について, 次のように考察せよ. 衝撃波面で u_k , $k = 1, 2, 3, 4$ が $[0, 1, -1, 0]$ のように細かく振れる値を持ったとする. ここで (4.6) を使うと, u_2, u_3 が増大することを示せ (u_1, u_4 の変化は考えないものとする). また, もしも (4.7) を使ったらどうなるか.
- 4.2 KdV 方程式 (4.18) では u^2 の積分量が (境界での出入りによる変化がなければ) 保存することを示せ.
- 4.3 Burgers 方程式の数値解を求めるプログラムを作成し, 様々なパラメタ値 (κ や分解能), 初期値について実行してみよ. $\kappa = 0$ の場合について, 差分法 (4.6), (4.7), (4.17) を比較せよ.
- 4.4 KdV 方程式の数値解を求めるプログラムを作成し, 孤立波の形成と衝突を観察せよ.
- 4.5 1 次元線形浅水方程式 (4.20), (4.21) を剛体壁にはさまれた有限の領域で解くことを考える. 壁で u, h が満たすべき境界条件を述べよ. (4.27), (4.28) の差分において, その境界条件を自然に実現するには, 壁は x_0 に置くと良い. このとき, $K = 0$ 付近で (4.27), (4.28) をどのようにすれば境界条件を実現できるか. 壁を $x_{\frac{1}{2}}$ に置くとどのような問題があるか.
- 4.6 (4.29), (4.31) の導出を確認せよ.

第5章 スペクトル法

矩形や球面など、計算領域の形状が単純だったり周期的な場合は、スペクトル法 (spectral method) による数値計算が有効である。スペクトル法とは、滑らかな直交関数系による展開に基づく数値計算法である。時間-空間の偏微分方程式を、空間に関し関数展開して、展開係数の時間発展に関する常微分方程式に帰着させる。現在、**大気大循環循環モデルの多くが採用している重要な方法**である。

その代表的な長所は、次のように言える。

- 差分による誤差がない（微分可能な関数を使うことで微分が直接評価できるため）。
- 適切な関数系を使うと、展開の収束が速く精度が高い。
- 保存則が満たされやすい。

短所は、

- 境界の形や境界条件が単純な場合しか適用できない

というのが、最大である。このため、境界が複雑な海洋のモデリングには一般に用いられない。

5.1 フーリエ級数によるスペクトル法

基底となる直交関数系に三角関数を用いる方法である。理論的にも実際にも最も扱いやすいので、まずはこれによってスペクトル法の基礎を紹介する。

5.1.1 線形方程式の場合

第3章で扱った1次元線形移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

を題材にする。新たな条件として、周期境界条件

$$u(x, t) = u(x + 2\pi, t) \quad (5.2)$$

を課すものとする。つまり、周期境界条件を課し、定義域の幅を 2π になるよう、スケーリングしてあるものとする。このため、前章までと違い指数関数内に $2\pi/L$ (L は定義域長) のファクターが現れないことに注意。(周期境界条件以外にも適用できるフーリエ変換法もある (問 5.1 参照) が、ここではもっとも簡単な周期境界条件を扱う。)

$u(x, t)$ をフーリエ級数展開する。

$$u(x, t) = \sum_{m=-M}^M \tilde{u}_m(t) e^{imx} \quad (5.3)$$

ここでは、波数を正負にとった．最高波数 M を**切断波数**という． $u(x, t)$ は実数とすると， $\tilde{u}_{-m} = \tilde{u}_m^*$ である（* は複素共役を表す）．なお，この時点では x に関する格子点は設定していない．

式 (5.3) を (5.1) に代入すると，

$$\sum_{m=-M}^M \frac{d\tilde{u}_m(t)}{dt} e^{imx} = \sum_{m=-M}^M -imc\tilde{u}_m(t) e^{imx} \quad (5.4)$$

両辺に e^{-ikx} をかけ $x = 0 \sim 2\pi$ の範囲で積分すると，三角関数の直交性

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{imx} e^{-ikx} dx = \delta_{m,k} \quad (5.5)$$

(ここで $\delta_{m,k}$ はクロネッカーの δ .) より次を得る．

$$\frac{d\tilde{u}_k(t)}{dt} = -ikc\tilde{u}_k(t) \quad (5.6)$$

式 (5.6) は，フーリエ係数に関する常微分方程式である．なお，データ解析におけるスペクトル解析では，スペクトル (“spectrum”) とはフーリエ係数の絶対値の 2 乗であるが，数値計算におけるスペクトル法 (“spectral” method) はそうではなく，フーリエ係数，より一般には関数展開における係数そのものを予報変数とする手法を指す．

さて，収束する差分法を用い， Δt を十分小さくとれば，式 (5.6) の数値解は解析解

$$\tilde{u}_k(t) = \tilde{u}_k(0) e^{-ikct}, \quad (5.7)$$

に近づく．これを式 (5.3) に代入すると，

$$u(x, t) = \sum_{m=-M}^M \tilde{u}_m(0) e^{im(x-ct)}. \quad (5.8)$$

これは，(5.1) の解析解そのもののフーリエ級数表現である．第 3, 4 章で示したように， x について差分法を用いると数値分散が発生するが，フーリエ級数によるスペクトル法を用いると，移流方程式の数値解は分散性を持たないのである．有限の時間差分によって位相速度は一般にずれうが，波数依存性がないので，形が崩れない．また，時間刻みを十分小さくとれば，空間スケールにかかわらず真の解に収束する．

5.1.2 非線形方程式の場合

今度は非線形移流方程式 (非粘性 Burgers 方程式) を考える．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (5.9)$$

式 (5.3) を代入すると (和をまとめるよう，添え字 n を導入する)，

$$\begin{aligned} \sum_{m=-M}^M \frac{d\tilde{u}_m}{dt} e^{imx} &= - \sum_{m=-M}^M \tilde{u}_m e^{imx} \sum_{m=-M}^M \tilde{u}_m i m e^{imx} \\ &= - \sum_{n=-M}^M \sum_{m=-M}^M i m \tilde{u}_n \tilde{u}_m e^{inx} e^{imx} \\ &= - \sum_{n=-M}^M \sum_{m=-M}^M i m \tilde{u}_n \tilde{u}_m e^{i(n+m)x} \end{aligned} \quad (5.10)$$

両辺に e^{-ikx} をかけ、式 (5.5) を用いると、

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{u}_k}{dt} &= - \sum_{n=-M}^M \sum_{m=-M}^M im\tilde{u}_n\tilde{u}_m\delta_{n+m,k} \\ &= - \sum_{m=\max(-M, -M+k)}^{\min(M, M+k)} im\tilde{u}_{k-m}\tilde{u}_m\end{aligned}\quad (5.11)$$

となる．最後の部分では、添え字 m の範囲をフーリエ係数が存在する範囲に合わせて調整した．右辺は、波数 m と $k-m$ の相互作用により、波数 k の時間変化を生ずることを意味する．よって、このような計算法を相互作用係数法と呼ぶ．

さて、式 (5.11) より、フーリエ係数 \tilde{u}_k それぞれについて、 $O(M)$ 回の計算が必要であることがわかる．そのため、全体で $O(M^2)$ の計算が必要となり、格子点数が増えるに従って急激に計算量が増大する．さらに、空間 2 次元の場合、 $O(M^4)$ となってしまう、計算量上著しく不利である．この欠点を回避できるのが、次節で説明する Orszag (1971) による変換法である．

5.1.3 変換法

今一度、式 (5.9) と (5.11) を見比べてみよう．後者は、前者をフーリエ変換したものとなっているはずである．よって、式 (5.9) の両辺をフーリエ変換した

$$\frac{d\tilde{u}_k(t)}{dt} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(u(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) e^{-ikx} dx \quad (5.12)$$

の右辺さえ正確に得られれば良いことがわかる．そこで、フーリエ係数に対する離散フーリエ逆変換により、**実空間で非線形項を評価するのが、変換法 (transform method)** である．

具体的な手順は次のようになる（初期値はフーリエ変換して $\tilde{u}_k(0)$ を求めてあるとする）．

1. 時刻 t (初期は 0) における、右辺の括弧内の $u, \frac{\partial u}{\partial x}$ を、離散フーリエ逆変換

$$u(x_j, t) = \sum_{m=-M}^M \tilde{u}_m(t) e^{imx_j}, \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t) = \sum_{m=-M}^M im\tilde{u}_m(t) e^{imx_j}, \quad (5.14)$$

により求める．ここで、 $x_j = 2\pi j/N$ ($j = 0, 1, \dots, N$) は、0 から 2π の範囲の、等間隔な格子点である（必要な格子点の数 N の値は後述）．

2. 式 (5.12) の右辺を、離散フーリエ変換

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left(u(x_j, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t) \right) e^{-ikx_j} \quad (5.15)$$

により求める．

3. 式 (5.12) の時間積分を 1 ステップ分、適当なスキーム (Runge-Kutta など) で行う（ただし、多段階法を使う場合は、1., 2. の繰り返しが発生する．）．その後時刻 t を更新し、1. から繰り返す．

さて、格子点数 N は、どうとればいいだろうか。正解は、式 (5.12) が、正確なフーリエ変換になるようにとる、である。式 (5.15) 中で現れる波数の絶対値の最大値は $3M$ である ($u, \frac{\partial u}{\partial x}, e^{-ikx_j}$ のそれぞれについて M であるため。これがもし線形項であれば $2M$ である)。この場合、一般に、 $N \geq 3M + 1$ ととればよい¹。最大波数 M をカバーする最低の格子点数 $2M$ と比較すると、約 $3/2$ 倍の格子点数を要することがわかる。逆に言えば、 $3/2$ 倍の格子点数を取ることで、2次の非線形項も正確にフーリエ変換できるということである。

さて、式 (5.15) より、非線形項の計算量は全体で $O(M)$ と抑えられることがわかる。ただし、その前後に必要な離散フーリエ変換の計算量は、直接法を用いるのであれば $O(M^2)$ になってしまうので、実は計算量は削減されない(むしろ増える)。しかし、よく知られているように、高速フーリエ変換 (Fast-Fourier Transform; FFT) を用いると $O(M \log M)$ となる。また、仮に FFT を用いなくても、空間 2 次元の場合の計算量は $O(M^4)$ でなく、 $O(M^3)$ で済む(格子点数 M^2 に M をかけたオーダー)。さらに、変換法には次のような長所がある。

- 非線形項が u^3 以上のオーダーであったり、 x の関数がかかっているといった、相互作用係数法ではより計算量が増える、あるいは扱いが難しい場合でも、適切な格子点数さえ確保すれば、正確に扱えることが多い。

5.2 球面上でのスペクトル法

全球大気の数値モデリングのように、球面上の問題を扱おうとすると、格子点法には、今までに述べてきたほかに、次のような困難がある。もしも、緯度、経度に関しそれぞれ独立に離散化することになると、極付近では緯度円の長さが小さいため、経度方向の格子点間隔が小さくなる。このため、極付近の短い格子点間隔においても CFL 条件が成立するよう、(中低緯度では不必要に) 短い Δt をとらねばならない。この問題は、緯度方向の分解能を上げるほど大きくなる。歴史的には、この極問題を回避するために様々な格子配置が考えられてきた(栗原グリッドなど)。しかし、良い性質を持つ格子を作るのは容易ではない。球面調和関数を用いたスペクトル法の登場によって、主流がスペクトル法に移ることになった。ただし、最近、正 20 面体を基礎に、全球を 3 角形で再帰的に細分する手法が大きな成功を収め、格子点法が再び注目を集めている²。この手法は、数値的に良い性質を持ち、極問題もない。

5.2.1 球面上の流体の方程式の例

以後の解説の理解のために、解くべき方程式の具体例を挙げる。球面上の非線形順圧渦度方程式は、次のように書ける。

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \left(\frac{u}{a \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (\zeta + f) = 0 \quad (5.16)$$

ここで u は東西流、 v は南北流、 ζ は相対渦度、 λ は経度、 a は球の半径である。 f はコリオリパラメタで、

$$f \equiv 2\Omega \sin \varphi. \quad (5.17)$$

Ω は、基本場となる球面(地球など惑星を想定している)の回転角速度、 φ は緯度である。

¹通常の離散フーリエ変換では、波数 $-M \sim M$ の範囲に対し、絶対値が最大の波数 $\pm M$ では sine 成分のみ (cosine 成分はエリアシングにより定数項と一致) という制約があるため、自由度は $2M$ で、必要な分点の数も $2M$ となるが、ここではそのような制約を課していないため、必要な分点の数は、 $3M$ より増える。

²この方法は **Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model (NICAM)** で導入された。NICAM の格子点は、単に正 20 面体を再帰的に分割したものではなく、「ばね力学」を導入して格子点を均等に再配置するといった高度の工夫により、これまでにない数値的に良い性質を実現している

流線関数 ψ を導入すると、流速は、

$$u = -\frac{1}{a} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi}, \quad v = \frac{1}{a \cos \varphi} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \quad (5.18)$$

と表わせる． $\mu \equiv \sin \varphi$ と置くと、 $d\mu/d\varphi = \cos \varphi$ より、

$$u = -\frac{\cos \varphi}{a} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \quad (5.19)$$

渦度は

$$\zeta = \nabla^2 \psi \quad (5.20)$$

である．式 (5.18) ～ (5.20) を、式 (5.16) に代入して、

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla^2 \psi + \left(-\frac{1}{a^2} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{1}{a^2} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) (\nabla^2 \psi + f) = 0. \quad (5.21)$$

これが解くべき方程式である．次々節では、球面調和関数展開を使うことで、この式が展開係数に関する簡単な常微分方程式になることを示す．そこで、準備として球面調和関数について述べる．

5.2.2 球面調和関数

次節で示すように、球面上の流体の偏微分方程式は、球面調和関数を基底とするスペクトル法を用いると、簡単に表現することができる．球面調和関数 Y_n^m ($m = 1, 2, 3, \dots$; $n = m, m+1, m+2, \dots$) は、球面上のラプラス方程式の固有関数であり、

$$\nabla^2 Y_n^m(\lambda, \mu) = -\frac{n(n+1)}{a^2} Y_n^m(\lambda, \mu) \quad (5.22)$$

を満たす．よって、式 (5.21) においてラプラシアンが消去できる．これは非常に大きなメリットである．格子点法では、このような単純な関係がないため、渦度方程式を解くためにはポワソン方程式を数值的に解く必要がある．これは、数值的には連立一次方程式を解かなければならないことを意味する．**球面調和関数は極で特異性を持たないのも良い特徴である．**さらに、粘性項を付与する場合も、ラプラシアンが消去できるので扱いやすい．なお、球面上のラプラシアンは、次の式で表される．

$$\nabla^2 = \left[\frac{1}{a^2(1-\mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \frac{1}{a^2} \frac{\partial}{\partial \mu} \left\{ (1-\mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right\} \right] \quad (5.23)$$

球面調和関数 Y_n^m は、経度方向には三角関数、緯度方向には Legendre 陪関数 P_n^m により、

$$Y_n^m(\lambda, \mu) = P_n^m(\mu) e^{im\lambda} \quad (5.24)$$

と表される．これから、 m は経度に関する波数であることがわかる．一方、式 (5.2.2) より、ラプラシアンがほぼ n^2 に比例するので、 n は、経度緯度両方にわたる全波数というべき性質を持つことが想像できるであろう (実際、そう呼ばれる)．

式 (5.23), (5.24) からわかるように、Legendre 陪関数は、

$$\frac{d}{d\mu} \left\{ (1-\mu^2) \frac{d}{d\mu} \right\} P_n^m(\mu) + \left\{ n(n+1) - \frac{m^2}{1-\mu^2} \right\} P_n^m(\mu) = 0 \quad (5.25)$$

という 2 階常微分方程式を満たす． $m = 0$ のときは Legendre 関数 $P_n(\mu)$ となる (すなわち $P_n(\mu) \equiv P_n^0(\mu)$)．いずれも、Chebyshev 多項式、Hermite 多項式、Bessel 関数などと同様の、「特殊関数」であ

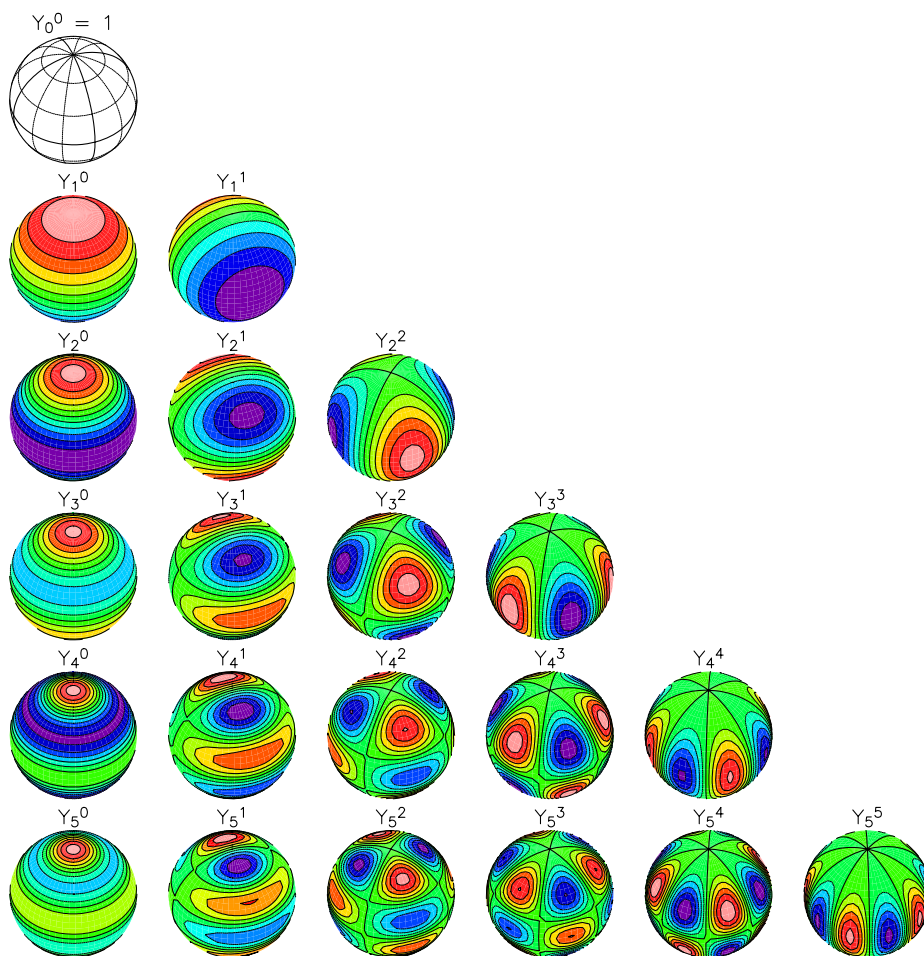
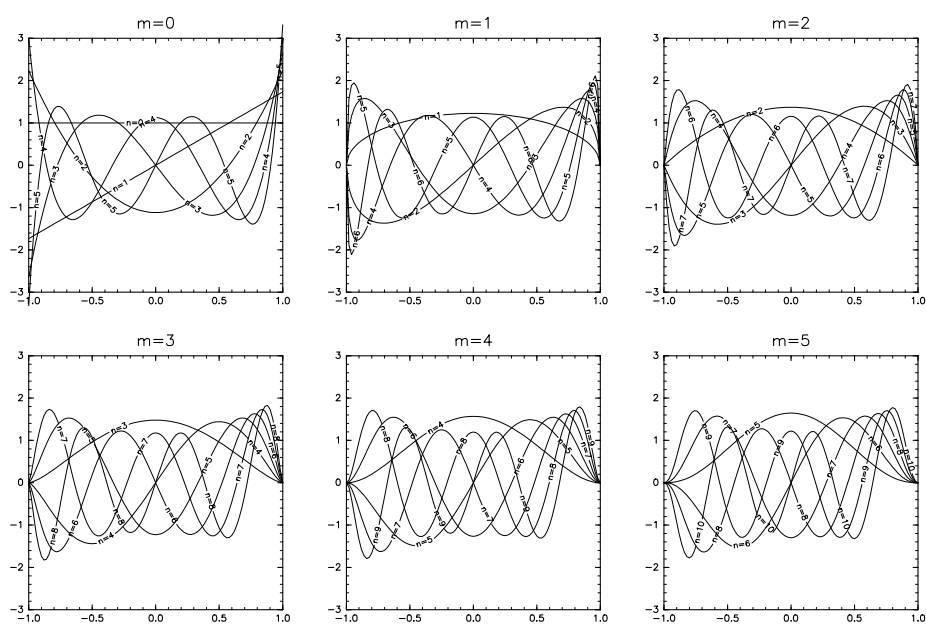


図 5.1: 球面調和関数

図 5.2: 正規化した Legendre 陪関数 \mathcal{P}_n^m

る．特殊関数の一般論については教科書に譲るとして，球面調和関数を用いたスペクトル法の実装に必要な性質に絞って紹介する．

Legendre 陪関数は次のように表される．

$$P_n^m = \frac{1}{2^n n!} (1 - \mu^2)^{|m|/2} \frac{d^{n+|m|}}{d\mu^{n+|m|}} (\mu^2 - 1)^n \quad (5.26)$$

これは次のような直交性をもつ．

$$\int_{-1}^1 P_n^m P_{n'}^m d\mu = \frac{2(n+|m|)!}{(2n+1)(n-|m|)!} \delta_{n,n'} \quad (5.27)$$

数値計算上は，次のように正規化すると良い．

$$\mathcal{P}_n^m(\mu) \equiv \sqrt{\frac{(2n+1)(n-|m|)!}{(n+|m|)!}} P_n^m(\mu) \quad (5.28)$$

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mathcal{P}_n^m(\mu) \mathcal{P}_{n'}^m(\mu) d\mu = \delta_{n,n'} \quad (5.29)$$

正規化した Legendre 陪関数に対し，次が成り立つ．

$$\epsilon_{n+1}^m \mathcal{P}_{n+1}^m(\mu) - \mu \mathcal{P}_n^m(\mu) + \epsilon_n^m \mathcal{P}_{n-1}^m(\mu) = 0 \quad (5.30)$$

$$(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \mathcal{P}_n^m(\mu) = -n \epsilon_{n+1}^m \mathcal{P}_{n+1}^m(\mu) + (n+1) \epsilon_n^m \mathcal{P}_{n-1}^m(\mu) \quad (5.31)$$

$$\epsilon_n^m \equiv \sqrt{\frac{n^2 - m^2}{4n^2 - 1}} \quad (5.32)$$

漸化式 (5.30) は，次に示すように Legendre 陪関数そのものの計算に使われる．式 (5.31) は，緯度による微分の計算に用いられる．

フーリエ変換に使う三角関数は多くの言語で組み込み関数として用意されているが，球面調和関数を使う場合は，時間積分のステップに入る前にまず Legendre 陪関数を求める必要がある．そのためには，漸化式 (5.30) を用いるのが良い（数値計算上は離散的な点での値が求まればよく，解析的な式を知る必要はないことに注意）．初期値として $n = m, n = m + 1$ の場合が既に求まっていることが必要だが，式 (5.26), (5.28) より，容易に解析的な表式が求まる（(5.26) 内の微分はそれぞれ， $(2n)!, (2n)!\mu$ となることに注意）．ただし， $n = m, m + 1$ の式もそのまま求めると m が大きいときにオーバフローを起こしやすいので， m についての漸化式に変換して， $\mathcal{P}_m^m, \mathcal{P}_{m+1}^m$ をそれぞれ， $m = 1, 2, \dots$ について求めると良い．図 1, 2 は，以上により得られた数値計算結果を示したものである．

5.2.3 球面調和関数展開とガウスの積分公式

球面調和関数展開では，球面上の任意の関数 $f(\lambda, \mu)$ を次のように表す．

$$f(\lambda, \mu) = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=|m|}^N \tilde{f}_n^m Y_n^m(\lambda, \mu) \quad (5.33)$$

M は展開に含める経度方向の最大の波数であり，定数であるが， N は定数とは限らず，とり方の流儀はいろいろある． N を m に関わらず一定の $N = M$ とするのは**三角切断 (triangular truncation)**と呼ばれる（名の由来は図 1 を見れば明らかであろう）． n が全波数であることを考えると，これを一定にすることは球面を等方的に離散化することに対応するので，一般には三角切断が用いられることが

多い．三角切断は，慣例的に記号 T で表され， $T42$ といえば，三角波数で $N = 42$ となる切断のことをさす．一方， N を m とともに増大させるのは，一般に平行四辺形切断と呼ばれる．特に $N = m + M$ とするのは，長斜方形切断 (rhomboidal truncation) と呼ばれ，慣例的に R の記号が与えられる．また，三角切断において一定以上の m を切断する台形切断 (trapezoidal truncation) もある．

さて，展開には，直交性 (5.29) を利用するので， $\mu = -1 \sim 1$ の積分を評価する必要がある．これを離散的な格子点で正確に行えるのが，次に述べる **Gauss-Legendre の積分公式** (5.34) である． $g(\mu)$ が $2N - 1$ 次以下の多項式であるとき，

$$\int_{-1}^1 g(\mu) d\mu = \sum_{k=1}^J w_k g(\mu_k) \quad (5.34)$$

が成り立つ．ここで， $\mu_k, k = 1, 2, \dots, J$ は，Legendre 関数 $P_J(\mu)$ のゼロ点 ($P_J(\mu) = 0$ の解) で， $(-1, 1)$ の範囲に J 個存在する．また，

$$w_k = \frac{2}{JP_{J-1}(\mu_k)P_J'(\mu_k)} = \frac{2\sqrt{(2J-1)(2J+1)}}{JP_{J-1}^0(\mu_k)\mathcal{P}_J^0'(\mu_k)} \quad (5.35)$$

は**ガウス重み**と呼ばれる．以上の証明は教科書に譲る．なお，実際の計算では， μ_k はニュートン法などにより数値的に求める．

さて， $f(\lambda, \mu)$ を経度方向にフーリエ変換した成分を $\tilde{f}^m(\mu)$ とすると，

$$\tilde{f}^m(\mu) = \sum_{n=m}^N \tilde{f}_n^m \mathcal{P}_n^m(\mu) \quad (5.36)$$

である．(5.29), (5.34) より，展開係数 \tilde{f}_n^m は次の級数で求まる．

$$\tilde{f}_n^m = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^J w_k \tilde{f}^m(\mu_k) \mathcal{P}_n^m(\mu_k) \quad (5.37)$$

ただし， J は被積分関数の次数に応じて十分大きくとる必要がある． \mathcal{P}_n^m は n 次の多項式に相当するので，式 (5.37) においては $J \geq N + 1$ にとればよい．ただし，実際には，フーリエ変換による変換法の場合と同様，非線形系を扱うため，より大きくとる必要がある (後述)．式 (5.37), (5.36) は Legendre 変換と呼ばれる．Legendre 変換には FFT のようによく使われる高速手法はない (いくつか提案はされているが相当複雑である)．このため，**分解能が高くなるほど計算量は増える**という問題はある．

5.2.4 球面調和関数を使ったスペクトルモデルの実装

以上で，準備がそろったので，球面上の渦度方程式 (5.21) をスペクトル法で計算する手順について考えよう．使う式が違うだけで，第 5.1.3 節で紹介した，フーリエ変換による変換法と同様である．

1. 時刻 t における， ψ や ψ の微分項 (非線形項に現れるもの) を，式 (5.33) により実空間での格子点値にする．その際，経度に関する微分は im による積に置き換え，緯度に関する微分は式 (5.31) により展開係数の差分として評価した上で変換する．
2. 非線形項の実空間での値より，フーリエ変換および (5.37) を用いて展開係数の時間変化率を求める．
3. 適当なスキームを用いて時間積分を行う．時刻 t を更新し，1. から繰り返す．

非線形項の評価のため，格子点数は経度，緯度両方とも切断波数が要求する点数の約 $3/2$ 倍の格子点数が必要であるのも，第 5.1.3 節同様である．経度方向に必要な格子点数は $3M + 1$ 以上である． $M = 42$ の場合は， $3M + 1 = 127$ ，一点増やして 128 とすれば，2 のべき乗になる．42 という一見半端な切断波数がよく用いられるのは，一般に FFT は 2 のべき乗の長さに対する実装が多いというのが理由なのである (なお，2 以外に，3, 5, 7 の倍数に対応したライブラリも多い)．

5.2.5 大気大循環モデル

式は相当複雑にはなるが、3次元プリミティブ方程式のスペクトル法も基本的には前節と同じように実装できる。時間積分には、Leap-frog が用いられることが多い。ただし、既に述べたように、Leap-frog では計算モードが増大するので、時間フィルターをかけるなどの工夫がさらに必要である。

なお、大気には硬い上端がないので、鉛直方向はスペクトル法になじまない。このため、水平にはスペクトル法、鉛直には格子点法という、混合手法をとる。さらに、放射過程、地表面過程、積雲パラメタリゼーションなど、流体の基礎方程式に含まれない部分はすべて、格子点で計算される。

本章の冒頭で述べたように、現在、気候モデリングに使われる大気モデルの多くは、球面調和関数によるスペクトル法に基づいている。格子点法に比べ計算量は多いものの、緯度経度という扱いやすい格子配置に基づきつつ、高精度で、球面上での計算の困難さを回避できる良い方法だからである。しかし、数値モデルが高分解能化するにつれ、計算量の問題が無視できなくなってきた。さらに、スペクトル法は、大域的な変換が必要なので、一般に並列計算には不利である。今後も、長期間の積分が必要な気候モデリングにはスペクトルモデルが重要な位置を占めるであろうが、気象現象の研究など多くの場面で新しい格子点法が益々重要になるであろう。

演習問題

- 5.1 通常のフーリエ変換は周期境界条件を要請する。しかし、cosine 関数のみを用いたフーリエ変換である cosine 変換、sine 関数のみを用いた sine 変換というフーリエ変換も存在する。cosine 変換、sine 変換について調べ、まとめよ。また、cosine 変換、sine 変換で表される関数が満たす境界条件を述べよ。（これらを使って矩形領域や水路中の流体のスペクトルモデルを作ることができる。）