

移流方程式の差分解析法: MPDATA

小高正嗣

1998 年 5 月 11 日

目次

1	はじめに	2
2	1 次元 MPDATA	2
2.1	上流差分スキーム	2
2.2	時間方向の差分と誤差	5
2.3	1 次元 MPDATA	6
2.4	スキームの適合性と安定性	8
3	2 次元 MPDATA	9
4	2 次元 の計算	11
4.1	設定	11
4.2	計算例: 上流差分	12
4.3	計算例: 2 次中心差分	14
4.4	計算例: MPDATA	14
4.5	計算例: FCT	17
5	一般的な場合の MPDATA	20
5.1	N 次元の場合	20
5.2	速度場が発散場の場合	20
5.3	速度場が非定常な場合	22
6	参考文献	24

1 はじめに

大気や海洋の問題においてスカラー量の移流を正確に計算することが必要となる場合がある。水蒸気混合比や塩分濃度のような正のスカラー量の移流を計算するときには、負の値が生じないように計算を進めなくてはならない。差分法で移流方程式を解く場合、空間方向に高次の正確度を持つ差分スキームを用いて計算すると、差分誤差によって発生した波により負の値が生じてしまう。上流差分や低次の差分スキームを用いると負の値は生じないが、数値拡散が効きすぎてしまうという別の問題が発生する。

上記の問題を解決するような移流方程式の差分スキームはこれまでにいくつか提案されている。ここでは Smolarkiewicz(1983, 1984), Smolarkiewicz and Clark(1986) によって提案されている MPDATA(Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm) という差分スキームについて簡単に解説する。

2 1次元 MPDATA

MPDATA は上流差分スキームで生じた拡散を適当な方法で補正するスキームである。以下ではまず上流差分スキームとその誤差について解説し、その後 MPDATA の導出を行なう。

2.1 上流差分スキーム

解く方程式は以下の移流方程式である。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\psi) = 0. \quad (1)$$

ここで ψ を正のスカラー量、 \mathbf{v} は速度である。簡単のため定常で非発散な速度場を仮定する。速度場が非定常または非発散の場合については後述する。物理量の格子配置はスタガードにとる。

1次元の場合 (1) 式は、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\psi) = 0, \quad (2)$$

となる. 空間方向を上流差分を用いて差分化する. $x = i\Delta x, t = n\Delta t$ での ψ を ψ_i^n と表すことにすると, (2) 式は以下のように差分化される.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\{F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) - F(\psi_{i-1}^n, \psi_i^n, u_{i-\frac{1}{2}}^n)\}. \quad (3)$$

ただし,

$$F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) = [(u_{i+\frac{1}{2}}^n + |u_{i+\frac{1}{2}}^n|)\psi_i^n + (u_{i+\frac{1}{2}}^n - |u_{i+\frac{1}{2}}^n|)\psi_{i+1}^n] \frac{1}{2\Delta x}, \quad (4)$$

等である.

上流差分スキームの誤差

上流差分スキーム (3) 式の誤差を評価する. まず (3) 式を以下のように変形する.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} &= -\frac{1}{\Delta x} \left(u_{i+\frac{1}{2}}^n \frac{\psi_i^n + \psi_{i+1}^n}{2} - u_{i-\frac{1}{2}}^n \frac{\psi_i^n + \psi_{i-1}^n}{2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2\Delta x} \left[|u_{i+\frac{1}{2}}^n| (\psi_i^n - \psi_{i+1}^n) - |u_{i-\frac{1}{2}}^n| (\psi_{i-1}^n - \psi_i^n) \right] \end{aligned} \quad (5)$$

ここで $u_{i+\frac{1}{2}}^n, u_{i-\frac{1}{2}}^n, \psi_{i+1}^n, \psi_{i-1}^n$ を u_i^n, ψ_i^n の周りのテーラー展開で表現する. $|u_{i+\frac{1}{2}}^n|$ 等は $|u_{i+\frac{1}{2}}^n|$ と考えて $|u_i^n|$ の周りの展開として表現する.

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2}}^n &= u_i^n + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\Delta x}{2} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^n \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 + \dots, \\ u_{i-\frac{1}{2}}^n &= u_i^n - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\Delta x}{2} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^n \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 + \dots, \\ |u_{i+\frac{1}{2}}^n| &= |u_i^n| + \frac{\partial |u|}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\Delta x}{2} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 |u|}{\partial x^2} \Big|_i^n \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 + \dots, \\ |u_{i-\frac{1}{2}}^n| &= |u_i^n| - \frac{\partial |u|}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\Delta x}{2} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 |u|}{\partial x^2} \Big|_i^n \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 + \dots, \\ \psi_{i+1}^n &= \psi_i^n + \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 + \dots, \\ \psi_{i-1}^n &= \psi_i^n - \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 + \dots. \end{aligned}$$

それぞれの2次までをとって(5)式の右辺へ代入する. 右辺の()内は

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\Delta x} \left[\left(u_i^n \psi_i^n + \frac{u_i^n}{2} \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x + \psi_i^n \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\Delta x}{2} \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{u_i^n}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \frac{(\Delta x)^2}{2} + \frac{\psi_i^n}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^n \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 + O(\Delta x^3) \right) \\
& - \left(u_i^n \psi_i^n - \frac{1}{2} u_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x - \psi_i^n \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\Delta x}{2} \right. \\
& \left. \left. + \frac{u_i^n}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \frac{(\Delta x)^2}{2} + \frac{\psi_i^n}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^n \left(\frac{\Delta x}{2} \right)^2 + O(\Delta x^3) \right) \right] \\
& = -\frac{1}{\Delta x} \left[u_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x + \psi_i^n \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x + O(\Delta x^3) \right] \\
& = -\frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \Big|_i^n + O(\Delta x^2),
\end{aligned}$$

となる. 右辺の[]内は整理すると

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2\Delta x} \left[\left(-|u_i| \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x - \frac{|u_i|}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 - \frac{\partial |u|}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \frac{(\Delta x)^2}{2} + O(\Delta x^3) \right) \right. \\
& \left. - \left(-|u_i| \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x + \frac{|u_i|}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 + \frac{\partial |u|}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \frac{(\Delta x)^2}{2} + O(\Delta x^3) \right) \right] \\
& = \frac{1}{2\Delta x} \left[|u_i| \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Big|_i^n (\Delta x)^2 + \frac{\partial |u|}{\partial x} \Big|_i^n \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i^n \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \right] \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} |u| \Delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_i^n + O(\Delta x^2).
\end{aligned}$$

よって(5)式は,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \Big|_i^n + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} |u| \Delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_i^n + O(\Delta x^2). \quad (6)$$

となる. すなわち1次の正確度を持つ上流差分スキームは移流拡散方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (u\psi) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \psi}{\partial x} \right), \quad K = \frac{1}{2} |u| \Delta x,$$

を2次の正確度で近似したものに等しいことがわかる.

2.2 時間方向の差分と誤差

さらに (6) の時間微分を前進差分で差分する.

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} = - \left. \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \right|_i^n + \left. \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} |u| \Delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right|_i^n + O(\Delta x^2). \quad (7)$$

この場合の誤差を評価する. 左辺の ψ_i^{n+1} を ψ_i^n の周りのテーラー展開で表現する.

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^n + \left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|_i^n \Delta t + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \right|_i^n (\Delta t)^2 + \dots$$

これの 2 次までをとって (6) に代入する. ただし右辺第 3 項の t の 2 階微分は (2) 式を用いて空間微分で置き換える. すなわち,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[u \left(- \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[u \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[u^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]$$

とする. ただし u は定常かつ非発散としている. これより (7) 式は以下のようになる.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_i^n = - \left. \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \right|_i^n + \left. \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2} (|u| \Delta x - \Delta t u^2) \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \right|_i^n + O(\Delta x^2, \Delta t^2). \quad (8)$$

よって (2) 式を時間, 空間方向にそれぞれ 1 次の正確度を持つ上流・前進差分スキームで差分表現したものは, 移流拡散方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{impl} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right),$$

($K_{impl} = 0.5[|u| \Delta x - \Delta t u^2]$) を 2 次の正確度で近似したものであることがわかる.

2.3 1次元 MPDATA

MPDATA では (8) 式に現れた数値拡散の効果を補正することを考える. まず数値拡散による ψ の変化

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{impl} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right),$$

が,

$$-\frac{\partial}{\partial x} (u_d \psi), \quad (9)$$

と表されるような拡散速度 (diffusion velocity) u_d

$$u_d = \begin{cases} -\frac{K_{impl}}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x}, & \text{if } \psi > 0 \\ 0, & \text{if } \psi = 0. \end{cases} \quad (10)$$

の移流によるものであるとする. u_d の移流による変化分を補正するため反拡散速度 (antidiffusive velocity) \tilde{u}

$$\tilde{u} = -u_d, \quad (11)$$

を定義し, これを用いた上流差分 (3) をもう一度計算する. 全体の手続きをまとめると,

1. 普通に上流差分を計算する.

$$\psi_i^* = \psi_i^n - \{F(\psi_i^n, \psi_{i+1}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n) - F(\psi_{i-1}^n, \psi_i^n, u_{i-\frac{1}{2}}^n)\}. \quad (12)$$

2. \tilde{u} を求め, それを用いて上流差分を計算する.

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^* - \{F(\psi_i^*, \psi_{i+1}^*, \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}) - F(\psi_{i-1}^*, \psi_i^*, \tilde{u}_{i-\frac{1}{2}})\}. \quad (13)$$

ただし,

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(|u_{i+\frac{1}{2}}^n| \Delta x - \Delta t u_{i+\frac{1}{2}}^2)(\psi_{i+1}^* - \psi_i^*)}{(\psi_i^* + \psi_{i+1}^* + \epsilon) \Delta x}. \quad (14)$$

となる. ϵ は 0 割を防ぐための微小量で Smolarkiewicz(1983) では 10^{-15} としている. (13), (14) 式を用いた計算を繰り返すことで精度はよくなるが, Smolarkiewicz(1984)

では 3 回以上繰り返しても計算量が増えるわりには精度が上がらなかったとしている。

2.4 スキームの適合性と安定性

スキーム (12), (13) の適合性と安定性について考察する. まず適合性を調べる. (12) 式は $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ の極限で (2) 式に一致する. (13) 式だが $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ の極限で (14) 式から,

$$\tilde{u} \rightarrow 0,$$

となることがわかるので, (13) は

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0,$$

となる. よって (12), (13) のスキームは適合性があることがわかる.

次に安定性を調べてみる. スキーム (12) の安定条件は

$$\max \left(\frac{|u_{i+\frac{1}{2}}| \Delta t}{\Delta x} \right) \leq 1, \quad (15)$$

である. スキーム (13) も形は同じ上流差分なので安定条件は,

$$\max \left(\frac{|\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}| \Delta t}{\Delta x} \right) \leq 1, \quad (16)$$

となる. $\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}$ に (14) 式を代入すると,

$$\max \left[\underbrace{\frac{|u_{i+\frac{1}{2}}| \Delta t}{\Delta x}}_A \times \underbrace{\left(1 - \frac{|u_{i+\frac{1}{2}}| \Delta t}{\Delta x} \right)}_B \times \underbrace{\frac{|\psi_{i+1}^* - \psi_i^*|}{(\psi_i^* + \psi_{i+1}^* + \epsilon)}}_C \right] \leq 1, \quad (17)$$

となる. (15) 式が成り立つとすれば A, B は 1 以下である. C も 1 以下となるので (15) 式が成り立てば (17) 式も成り立つことがわかる. 特に (15) が成り立つとき $A \times B$ の最大値は 0.25 であるので C が 1 に近いときでもスキーム (13) はかなり安定である.

3 2次元 MPDATA

続いて2次元の場合MPDATAスキームを導出する. 2次元の場合も(7)式に ψ_i^{n+1} を代入するところまでは1次元の場合と同様に計算する.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_{i,j}^n &= - \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \Big|_{i,j}^n + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} |u| \Delta x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \Big|_{i,j}^n \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \Big|_{i,j}^n + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{2} |v| \Delta y \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \Big|_{i,j}^n - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \Big|_{i,j}^n \Delta t. \end{aligned} \quad (18)$$

右辺第3項の t の2階微分を空間微分に置き換える. このときクロスタームが現れることに注意.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= - \frac{\partial}{\partial x} \left[u \left(- \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[v \left(- \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[u^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + uv \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[v^2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + uv \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

これを代入して,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_{i,j}^n &= - \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \Big|_{i,j}^n - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \Big|_{i,j}^n \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2} (|u| \Delta x - \Delta t u^2) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{2} \Delta t uv \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] \Big|_{i,j}^n \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{2} (|v| \Delta y - \Delta t v^2) \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{1}{2} \Delta t uv \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \Big|_{i,j}^n, \end{aligned} \quad (19)$$

となる. 反拡散速度 \tilde{u}, \tilde{v} は,

$$\tilde{u} \equiv \frac{1}{\psi} \left[\frac{1}{2} (|u| \Delta x - \Delta t u^2) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{2} \Delta t uv \frac{\partial \psi}{\partial y} \right], \quad (20)$$

$$\tilde{v} \equiv \frac{1}{\psi} \left[\frac{1}{2} (|v| \Delta y - \Delta t v^2) \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{1}{2} \Delta t uv \frac{\partial \psi}{\partial x} \right], \quad (21)$$

と与えられる. 実際に行なう手順は 1 次元のときと同様である.

1. 普通に上流差分を計算する.

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^* &= \psi_{i,j}^n - \{F_x(\psi_{i,j}^n, \psi_{i+1,j}^n, u_{i+\frac{1}{2},j}^n) - F_x(\psi_{i-1,j}^n, \psi_{i,j}^n, u_{i-\frac{1}{2},j}^n)\} \\ &\quad - \{F_y(\psi_{i,j}^n, \psi_{i,j+1}^n, v_{i,j+\frac{1}{2}}^n) - F_y(\psi_{i,j-1}^n, \psi_{i,j}^n, v_{i,j-\frac{1}{2}}^n)\}. \end{aligned} \quad (22)$$

2. \tilde{u}, \tilde{v} を求め, それを用いて上流差分を計算する.

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{n+1} &= \psi_{i,j}^* - \{F_x(\psi_{i,j}^*, \psi_{i+1,j}^*, \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j}) - F_x(\psi_{i-1,j}^*, \psi_{i,j}^*, \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j})\} \\ &\quad - \{F_y(\psi_{i,j}^*, \psi_{i,j+1}^*, \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}}) - F_y(\psi_{i,j-1}^*, \psi_{i,j}^*, \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}})\}. \end{aligned} \quad (23)$$

ただし,

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{\psi_{i+\frac{1}{2},j}^*} \left[\frac{1}{2} (|u_{i+\frac{1}{2},j}^n| \Delta x - \Delta t (u_{i+\frac{1}{2},j}^n)^2) \frac{\psi_{i+1,j}^* - \psi_{i,j}^*}{\Delta x} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \Delta t u_{i+\frac{1}{2},j}^n v_{i+\frac{1}{2},j}^n \frac{\psi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^* - \psi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^*}{\Delta y} \right], \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\psi_{i,j+\frac{1}{2}}^*} \left[\frac{1}{2} (|v_{i,j+\frac{1}{2}}^n| \Delta y - \Delta t (v_{i,j+\frac{1}{2}}^n)^2) \frac{\psi_{i,j+1}^* - \psi_{i,j}^*}{\Delta y} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \Delta t u_{i,j+\frac{1}{2}}^n v_{i,j+\frac{1}{2}}^n \frac{\psi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^* - \psi_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^*}{\Delta x} \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

なお (24),(25) 式において,

$$\psi_{i+\frac{1}{2},j}^* = \frac{1}{8} (\psi_{i+1,j+1}^* + \psi_{i,j+1}^* + 2\psi_{i+1,j}^* + 2\psi_{i,j}^* + \psi_{i+1,j-1}^* + \psi_{i,j-1}^*), \quad (26)$$

$$\psi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^* = \frac{1}{4} (\psi_{i+1,j+1}^* + \psi_{i,j+1}^* + \psi_{i+1,j}^* + \psi_{i,j}^*), \quad (27)$$

$$u_{i,j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{4} (u_{i+\frac{1}{2},j+1}^n + u_{i-\frac{1}{2},j+1}^n + u_{i+\frac{1}{2},j}^n + u_{i-\frac{1}{2},j}^n), \quad (28)$$

などとする.

4 2次元の計算

実際に2次元の移流方程式,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\psi) + \frac{\partial}{\partial y}(v\psi) = 0, \quad (29)$$

をMPDATAスキームを用いて計算する. 比較のため上流差分, 中心差分, フラックス修正法 (Flux Corrected Transport; 以下 FCT と表記) による計算も行なう.

4.1 設定

Smolarkiewicz(1983) で用いられた設定と同様とする.

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

以上の設定で計算すると, 時間方向に 628 ステップ計算でほぼ一回転する. 計算領域と初期値の分布は図 1 に示す.

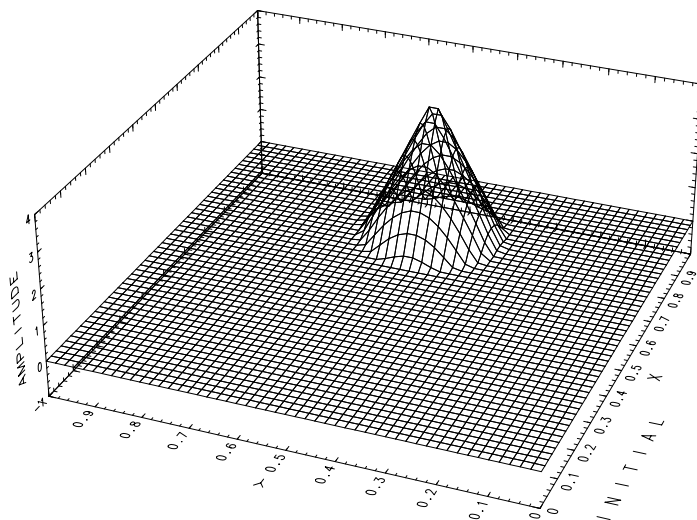


図 1: 計算領域と初期値の分布.

4.2 計算例: 上流差分

比較のためまず上流差分スキーム (22) 式だけを用いて計算を行なった. スキームを再掲すると以下ようになる.

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{n+1} = & \psi_{i,j}^n - \{F_x(\psi_{i,j}^n, \psi_{i+1,j}^n, u_{i+\frac{1}{2},j}^n) - F_x(\psi_{i-1,j}^n, \psi_{i,j}^n, u_{i-\frac{1}{2},j}^n)\} \\ & - \{F_y(\psi_{i,j}^n, \psi_{i,j+1}^n, v_{i,j+\frac{1}{2}}^n) - F_y(\psi_{i,j-1}^n, \psi_{i,j}^n, v_{i,j-\frac{1}{2}}^n)\}. \end{aligned} \quad (30)$$

ここで,

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

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

1 回転後 (628 ステップ) と 3 回転後 (1884 ステップ) 後の結果を図 2 と図 3 にそれぞれ示す. 上流差分では数値拡散が大きいいため 1 回転後 で既に初期分布は大きく損なわれている. 3 回転もすると初期分布はあとかたもなくなってしまふ.

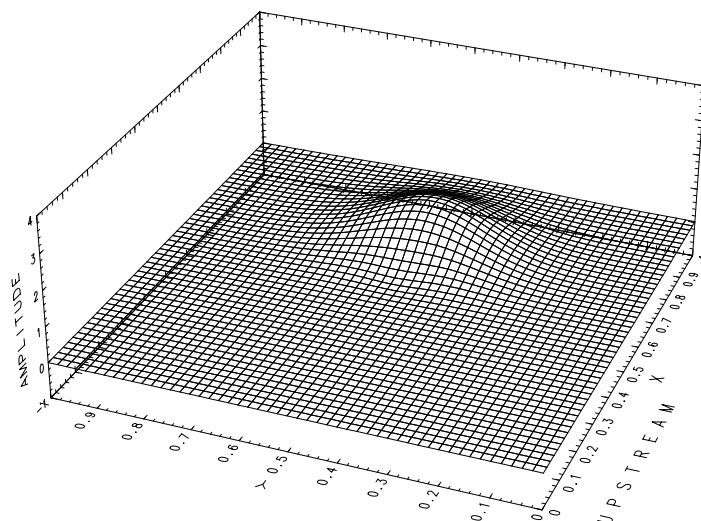


図 2: 上流差分による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果.

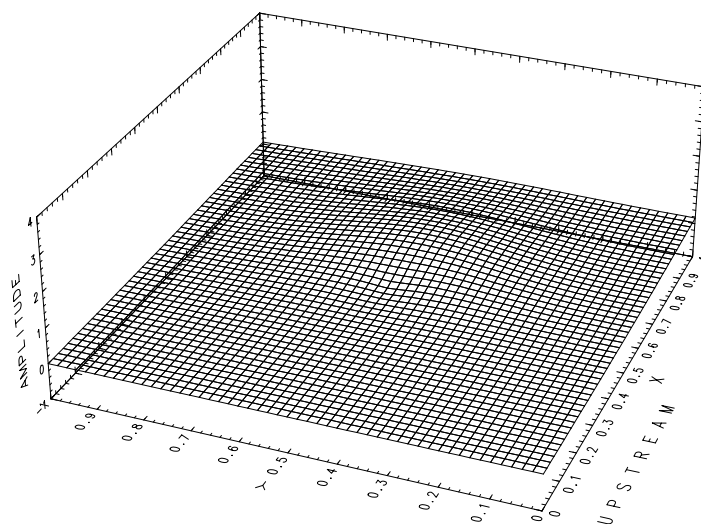


図 3: 上流差分による計算. 3 回転 (1884 ステップ) 後の結果.

4.3 計算例: 2次中心差分

次に2次の中心差分スキームを用いて計算を行なった。スキームは、

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{n+1} = & \psi_{i,j}^n - \{F_x(\psi_{i,j}^n, \psi_{i+1,j}^n, u_{i+\frac{1}{2},j}^n) - F_x(\psi_{i-1,j}^n, \psi_{i,j}^n, u_{i-\frac{1}{2},j}^n)\} \\ & - \{F_y(\psi_{i,j}^n, \psi_{i,j+1}^n, v_{i,j+\frac{1}{2}}^n) - F_y(\psi_{i,j-1}^n, \psi_{i,j}^n, v_{i,j-\frac{1}{2}}^n)\}. \end{aligned} \quad (31)$$

ただしここでの F_x, F_y は

$$F_x(\psi_{i,j}^n, \psi_{i+1,j}^n, u_{i+\frac{1}{2},j}^n) = u_{i+\frac{1}{2},j}^n (\psi_{i,j}^n + \psi_{i+1,j}^n) \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (32)$$

$$F_y(\psi_{i,j}^n, \psi_{i,j+1}^n, v_{i,j+\frac{1}{2}}^n) = v_{i,j+\frac{1}{2}}^n (\psi_{i,j}^n + \psi_{i,j+1}^n) \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad (33)$$

である。時間方向には同様に修正オイラー法を用いて計算した。ただし時間格子間隔を $\Delta t = 0.1$ として計算すると計算不安定を起こしてしまったので、ここでは $\Delta t = 0.05$ とした。また壁での波の反射を抑えるため壁際の1グリッドでは ψ の1次に比例した減衰(減衰係数は5)を加えてある。

1回転後(1256ステップ)と3回転後(3768ステップ)後の結果を図4と図5にそれぞれ示す。中心差分では初期分布の形状はそれなりに維持されるが、進行方向の後側に波が発生しそれに伴い負の値が生じていることがわかる。

4.4 計算例: MPDATA

MPDATA ((22)~(25)式)を用いて同様の計算を行なった。なお $\Delta t = 0.1$ に戻してある。途中必要となる平均値計算は(26)~(28)に従い求めた。これらの平均操作については Smolarkiewicz(1982) の記述を参考にしてある。

1回転後(628ステップ)と3回転後(1884ステップ)後の結果を図6と図7にそれぞれ示す。初期分布は比較的良好に保たれている。2次中心差分で発生したような波も生じていない。

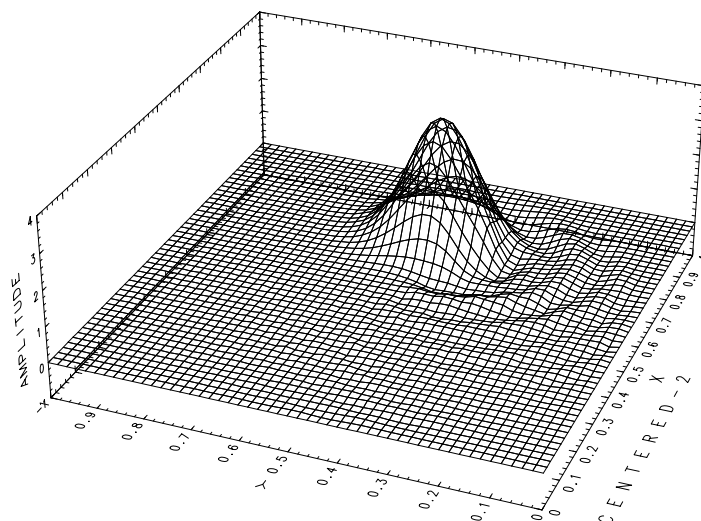


図 4: 中心差分による計算. 1 回転 (1256 ステップ) 後の結果.

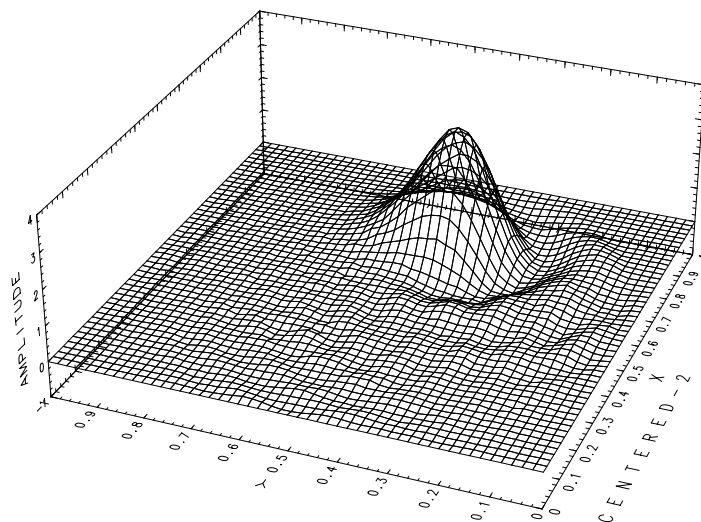


図 5: 中心差分による計算. 3 回転 (3768 ステップ) 後の結果.

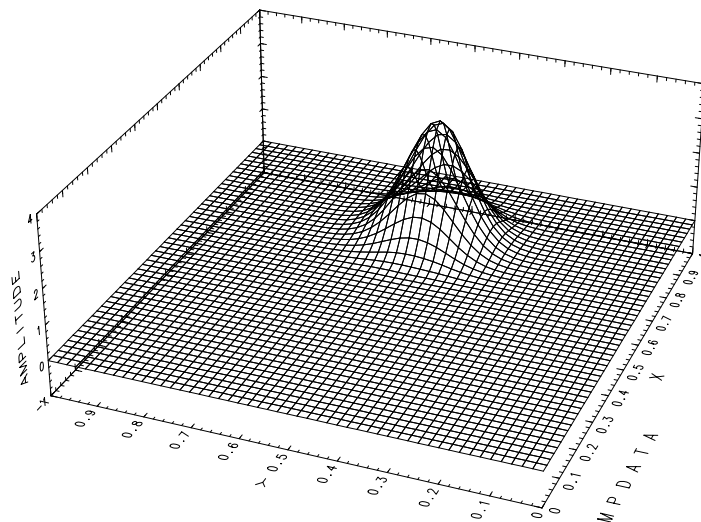


図 6: MPDATA による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果.

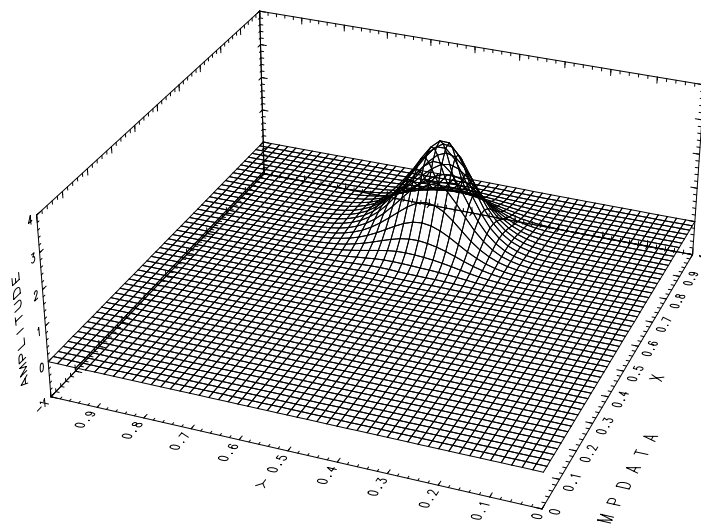


図 7: MPDATA による計算. 3 回転 (1884 ステップ) 後の結果.

4.5 計算例: FCT

FCT を用いて同様の計算を行なった. FCT の一般形は例えば 2 次元の場合次のように表される.

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{n+1} = & \psi_{i,j}^n - \{ [CF_x \cdot FH_x + (1 - CF_x) \cdot FL_x]_{i+\frac{1}{2},j} \\ & - [CF_x \cdot FH_x + (1 - CF_x) \cdot FL_x]_{i-\frac{1}{2},j} \} \\ & - \{ [CF_y \cdot FH_y + (1 - CF_y) \cdot FL_y]_{i,j+\frac{1}{2}} \\ & - [CF_y \cdot FH_y + (1 - CF_y) \cdot FL_y]_{i,j-\frac{1}{2}} \} \end{aligned} \quad (34)$$

ここで FH_x, FH_y は高次精度 (例えば 2 次中心差分) で求めたフラックス, FL_x, FL_y は低次精度 (例えば上流差分) で求めたフラックス, CF_x, CF_y は補正係数 (Corrective Factor) と呼ばれる係数である. FCT は Boris and Book(1973, 1976), Book et al.(1975) によって提案され, Zalesak(1979) によって一般形が示された. 補正係数の決めかたは Zalesak(1979) にその詳細が述べられている. ここでは高次精度に 2 次中心差分, 低次精度に上流差分を用いた.

まず補正係数を $CF_x = CF_y = 0.8$ と固定して計算を行なった. 1 回転後 (628 ステップ) と 3 回転後 (1884 ステップ) 後の結果を図 8 と図 9 にそれぞれ示す. 上流差分と比べ初期分布は比較的良好に保たれている. 2 次中心差分で発生したような波も生じない. しかし上流差分による数値拡散が時間とともに無視できなくなる.

続いて補正係数をきちんと毎ステップ計算するようにして同様の計算を行なった. 1 回転後 (628 ステップ) と 3 回転後 (1884 ステップ) 後の結果を図 10 と図 11 にそれぞれ示す. 全体的に数値拡散は抑えられているが, 山の頂上付近が削られてしまい “clipping” と呼ばれる現象が回避できていないことを示している.

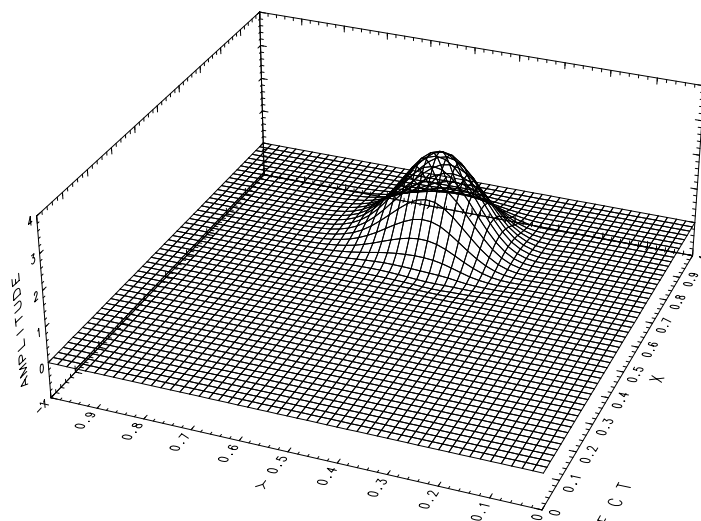


図 8: 補正係数一定の FCT による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果.

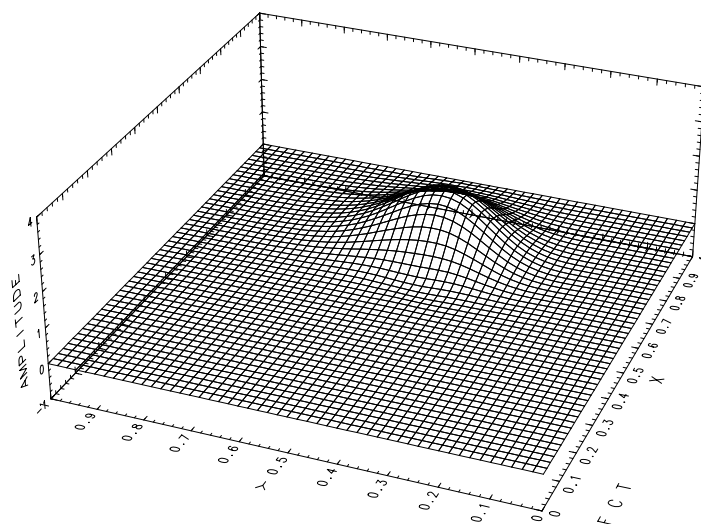


図 9: 補正係数一定の FCT による計算. 3 回転 (1884 ステップ) 後の結果.

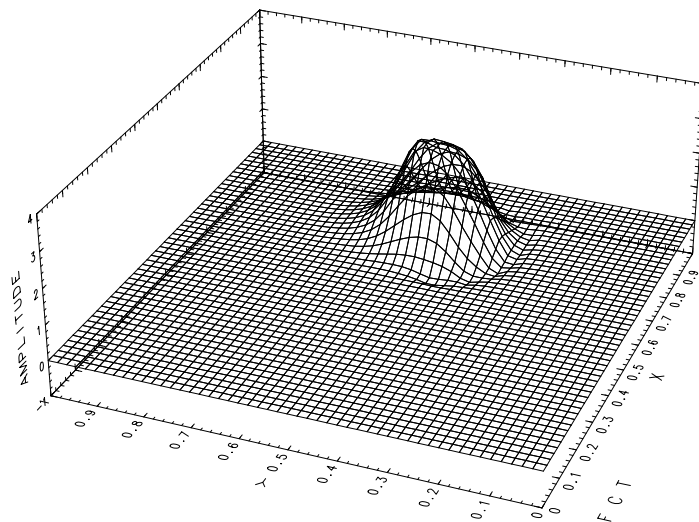


図 10: FCT による計算. 1 回転 (628 ステップ) 後の結果.

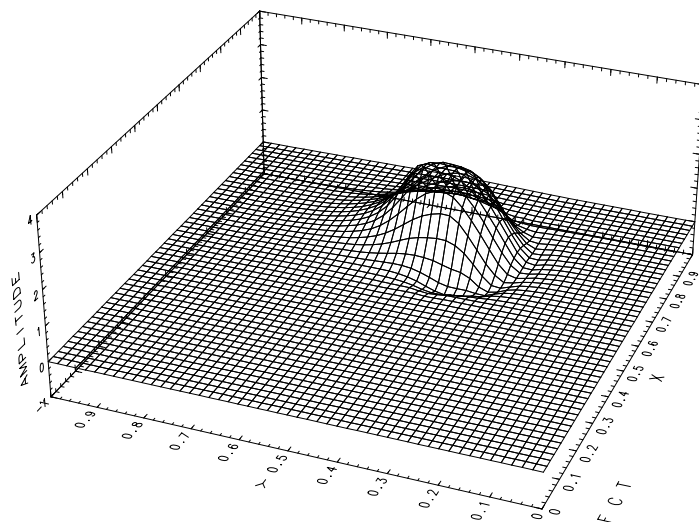


図 11: FCT による計算. 3 回転 (1884 ステップ) 後の結果.

5 一般的な場合の MPDATA

ここではより一般的な場合, すなわち N 次元, 速度場が発散的, 速度場が非定常の各場合の MPDATA について記述する.

5.1 N 次元の場合

第 I 次元方向の座標, 速度をそれぞれ x^I, u^I とする. 2 次元の場合の結果から考えれば i での ψ の時間変化は

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|_i^n &= - \sum_{I=1}^N \left. \frac{\partial}{\partial x^I} (u^I \psi) \right|_i^n \\ &\quad + \sum_{I=1}^N \left. \frac{\partial}{\partial x^I} \left[\frac{1}{2} (|u^I| \Delta x^I - \Delta t (u^I)^2) \frac{\partial \psi}{\partial x^I} - \sum_{J \neq I} \frac{1}{2} \Delta t u^I u^J \frac{\partial \psi}{\partial x^J} \right] \right|_i^n \end{aligned} \quad (35)$$

となる. これより反拡散速度は

$$u_{d,i}^I = 0.5 [|u^I \Delta x^I - \Delta t (u^I)^2 | \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x^I}]_i - \sum_{J \neq I} 0.5 \Delta t u^I u^J \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x^J} \Big|_i, \quad (36)$$

と与えられる.

5.2 速度場が発散場の場合

速度場が発散場の場合, 例えば 2 次元では (18) 式の右辺第 5 項の展開を以下のようにする.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= - \frac{\partial}{\partial x} \left[u \left(- \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[v \left(- \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \right) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[u^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + uv \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[v^2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + uv \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x} \left[u\psi \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[v\psi \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \end{aligned}$$

よって (19) 式は以下のように変更される.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_{i,j}^n &= - \frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \Big|_{i,j}^n - \frac{\partial}{\partial y} (v\psi) \Big|_{i,j}^n \\
&+ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2} (|u|\Delta x - \Delta t u^2) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{2} \Delta t u v \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] \Big|_{i,j}^n \\
&+ \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{2} (|v|\Delta y - \Delta t v^2) \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{1}{2} \Delta t u v \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \Big|_{i,j}^n \\
&- \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Delta t u \psi \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \Big|_{i,j}^n - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} \left[\Delta t v \psi \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] \Big|_{i,j}^n \quad (37)
\end{aligned}$$

反拡散速度は

$$\tilde{u} \equiv \frac{1}{\psi} \left[\frac{1}{2} (|u|\Delta x - \Delta t u^2) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{1}{2} u v \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] - \frac{1}{2} \Delta t u \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (38)$$

$$\tilde{v} \equiv \frac{1}{\psi} \left[\frac{1}{2} (|v|\Delta y - \Delta t v^2) \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{1}{2} u v \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] - \frac{1}{2} \Delta t v \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad (39)$$

となる. N 次元では

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_{\mathbf{i}}^n &= - \sum_{I=1}^N \frac{\partial}{\partial x^I} (u^I \psi) \Big|_{\mathbf{i}}^n \\
&+ \sum_{I=1}^N \frac{\partial}{\partial x^I} \left[\frac{1}{2} (|u^I|\Delta x^I - \Delta t (u^I)^2) \frac{\partial \psi}{\partial x^I} - \sum_{J \neq I} \frac{1}{2} \Delta t u^I u^J \frac{\partial \psi}{\partial x^J} \right] \Big|_{\mathbf{i}}^n \\
&- \sum_{I=1}^N \frac{\partial}{\partial x^I} \left[\left(\frac{1}{2} \Delta t u^I \sum_{J=1}^N \frac{\partial u^J}{\partial x^J} \right) \psi \right] \Big|_{\mathbf{i}}^n, \quad (40)
\end{aligned}$$

となつて, 反拡散速度は

$$u_{d,i}^I = 0.5 [|u^I \Delta x^I - \Delta t (u^I)^2 | \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x^I} \Big|_{\mathbf{i}} - \sum_{J \neq I} 0.5 \Delta t u^I u^J \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x^J} \Big|_{\mathbf{i}} - 0.5 \Delta t u^I \sum_{J=1}^N \frac{\partial u^J}{\partial x^J} \Big|_{\mathbf{i}}] \quad (41)$$

と表される.

5.3 速度場が非定常な場合

速度場が非定常な場合, ψ の t に関する 2 階微分をこれまでのように簡単に空間微分に置き換えることができない. たとえば 1 次元の場合,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} (u\psi) \right) \right] = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\psi \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\psi \frac{\partial u}{\partial t} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[u^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \right], \quad (42)$$

となる. スキームには上式の右辺第 1 項が考慮されなければならない. しかし u と ψ が結合していなければ, この項の存在は以下の手続きに従い簡単に取り込むことができる. まず 1 次元移流方程式 (2) を次のように時間方向に差分化する.

$$\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} = -\frac{\partial}{\partial x} (u^{n+\frac{1}{2}} \psi^n), \quad (43)$$

$\psi^{n+1}, u^{n+\frac{1}{2}}$ をそれぞれ時刻 t の周りで展開する. このとき ψ の t に関する 2 階微分は (42) のように表す.

$$\begin{aligned} \psi_i^{n+1} &= \psi_i^n + \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_i^n \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \Big|_i^n (\Delta t)^2 + O(\Delta t^3) \\ &= \psi_i^n + \frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_i^n \Delta t - \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial u}{\partial t} \right) \Big|_i^n + O(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (44)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} (u^{n+\frac{1}{2}} \psi^n) = -\frac{\partial}{\partial x} (u^n \psi^n) - \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial u}{\partial t} \right) \Big|_i^n + O(\Delta t^2) \quad (45)$$

これらを (43) に代入すると,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \Big|_i^n = -\frac{\partial}{\partial x} (u^n \psi^n) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \Delta t (u^n)^2 \frac{\partial \psi^n}{\partial x} \right) \Big|_i^n + O(\Delta t^2), \quad (46)$$

となる. 右辺第 1 項を上流差分で空間方向に差分化すると (8) が求まる.

以上より速度場が非定常な場合には時刻 $t + \Delta t/2$ における速度場を用いて計算すればよいことがわかる. $u^{n+\frac{1}{2}}$ は,

$$u^{n+\frac{1}{2}} = \frac{u^n + u^{n+1}}{2} + O(\Delta t^2)$$

等として求めてやればよい.

6 参考文献

- Book, D. L., Boris, J. P., and Hain, K., 1975: Flux-corrected transport II: Generalizations of the method. *J. Comput. Phys.*, **18**, 248-283.
- Boris, J. P., and Book, D. L., 1973: Flux-corrected transport I: SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *J. Comput. Phys.*, **11**, 38-69.
- Boris, J. P., and Book, D. L., 1976: Flux-corrected transport III: Minimal-error FCT algorithms. *J. Comput. Phys.*, **20**, 397-431.
- Smolarkiewicz, P. K., 1982: The Multi-Dimensional Crowley Advection Scheme. *Mon. Wea. Rev.*, **110**, 1968-1983.
- Smolarkiewicz, P. K., 1983: A Simple Positive Definite Advection Scheme with Small Implicit Diffusion. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 479-486.
- Smolarkiewicz, P. K., 1984: A Fully Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm with Small Implicit Diffusion. *J. Comput. Phys.*, **54**, 325-362.
- Smolarkiewicz, P. K. and Clark, T. L., 1986: The Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm: Further Development and Applications. *J. Comput. Phys.*, **67**, 396-438.
- Smolarkiewicz, P. K. and Grabowski, W. W., 1990: The Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm: Nonoscillatory Option. *J. Comput. Phys.*, **86**, 355-375.
- Zalesak, S. T., 1979: Fully multi-dimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comput. Phys.*, **31**, 335-362.