

第 1 部 MHD・流体モデル

流体・磁気流体方程式の差分解法

松元亮治、富阪幸治、花輪知幸

2002.8

目次

第1章	差分法の基礎	7
1.1	偏微分方程式の型	7
1.2	差分近似	8
1.3	線形スカラー移流方程式の差分解法	9
1.3.1	1次元線形スカラー移流方程式	9
1.3.2	FTCS スキーム	10
1.3.3	FTCS スキームの数値的安定性	12
1.3.4	Lax-Friedrich のスキーム	14
1.3.5	1次精度風上差分法	15
1.3.6	Lax-Wendroff のスキーム	18
1.4	保存形表示と数値流束	20
1.5	Burgers 方程式の数値解法	21
1.6	流束制限関数	24
1.7	TVD スキーム	26
1.8	放物型方程式の差分解法	26
第2章	システム方程式の解法	31
2.1	基礎方程式	31
2.1.1	質量	31
2.1.2	運動量	32
2.1.3	エネルギー	32
2.1.4	磁気流体力学	34
2.1.5	保存形式	35
2.2	円筒座標、球座標	36
2.2.1	1次元球対称	36
2.2.2	2次元軸対称円筒座標	36
2.3	波動	37
2.3.1	線形的气体ダイナミクス	37
2.3.2	Riemann 問題	40
2.3.3	非線形的气体ダイナミクス	41
2.4	衝撃波	43

2.4.1	ランキン・ユゴニオ関係	43
2.4.2	磁気流体力学	46
2.5	衝撃波管問題	46
2.5.1	等温衝撃波	47
2.5.2	等温の場合の Riemann 不変量	48
2.5.3	等温の場合の衝撃波管の解析解	50
2.5.4	断熱気体の衝撃波管問題	51
2.5.5	断熱気体の衝撃波管問題解析解*	54
第 3 章	流体および磁気流体力学方程式の風上差分	61
3.1	はじめに	61
3.2	Maxwell 方程式の数値解法	63
3.3	Burgers 方程式の復習と Maxwell 方程式の風上数値流束	67
3.4	流体力学方程式の風上差分	68
3.5	磁気流体力学方程式の風上差分化	71
3.6	さらに勉強する人へ	77

はじめに

流体・磁気流体方程式を差分近似にもとづいて数値的に解くことにより、さまざまな宇宙現象をシミュレートすることができる。このテキストでは、シミュレーションの初心者を対象として差分法の基礎から風上差分にもとづく磁気流体方程式の解法に至るまでを解説した。各章の内容は以下の通りである。

- 1 章：差分法の基礎 （松元亮治）

線形及び非線形の 1 変数の波動方程式を例にして差分法の基礎を学ぶ。差分のとりかたや時間きざみの選び方によっては数値的な不安定性が生ずることを示し、安定性のために満たすべき条件について解説する。また、数値的な安定性に優れ、数値振動を起こさない解法として 1 次精度の風上差分を導入する。2 次精度以上の解法では解の単調性が維持されず数値振動が発生することを示し、単調性を維持するための流束制限関数についても解説する。

- 2 章：システム方程式の解法 （富阪幸治）

流体・磁気流体力学の方程式系にあらわれる 2 変数以上の非線形連立偏微分方程式の解法について解説する。これらの方程式が波動方程式の集合であることを示し、特性線および特性線に沿って一定に保たれるリーマン不変量について解説する。これらの準備をした上で、初期に圧力、密度などに不連続な分布を持つ気体の時間発展を解析的に求める方法を説明し、この手法を衝撃波管に適用する。

- 3 章：流体および磁気流体力学方程式の風上差分 （花輪知幸）

システム方程式に対して風上差分を適用する方法について解説する。最初に線形のマクスウェル方程式を例にして 4 変数の場合の風上差分の方法を説明し、続いて流体力学・磁気流体力学方程式にも風上差分を適用する。流体・磁気流体方程式では特性速度が場所によって変化するため適切な平均の取り方が問題となる。平均量の計算方法の例として Roe 平均についても紹介する。

シミュレーションサマースクールでは、このテキストを用いた講義と、宇宙流体・磁気流体シミュレーションの統合ソフトウェア CANS (Coordinated Astronomical Numerical Softwares) を用いた実習がセットになっている。数値不安定性の発生や衝撃波の伝播など、講義で習った内容を実際にシミュレーションを行って確認することにより、理解が深まるであろう。

第1章 差分法の基礎

松元亮治 (千葉大理)

この章では流体・磁気流体方程式を差分法を用いて数値的に解く際に必要になる基礎的事項について解説する。波の伝播をあらわす線形移流方程式や非線形の Burgers 方程式をとりあげ、差分解法の数値的な安定性や数値振動について論じる。特に、数値的な安定性に優れ、非物理的な数値振動を起こさない差分法として風上差分法を紹介する。

1.1 偏微分方程式の型

流体・磁気流体現象をはじめとする自然現象の多くは、以下の2次元2階偏微分方程式で記述される。

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f u + g = 0. \quad (1.1)$$

この方程式は以下のように分類できる。

条件	型	例
$b^2 - 4ac > 0$	双曲型	$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ 波動方程式
$b^2 - 4ac = 0$	放物型	$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 熱伝導方程式
$b^2 - 4ac < 0$	楕円型	$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 4\pi G\rho$ ポアソン方程式

波動方程式、熱伝導の式、ポアソン方程式は、それぞれ双曲型、放物型、楕円型偏微分方程式の例になっている。以下では主として双曲型方程式を例にして、差分近似にもとづく偏微分方程式の数値解法を解説する。

1.2 差分近似

変数 u が空間座標 x, y に依存するという2次元問題を考える。

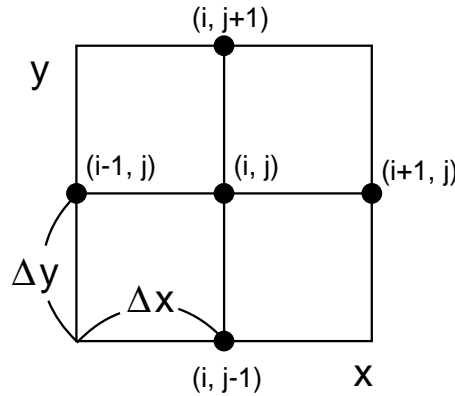


図 1.1: 2次元メッシュの図

2次元空間を図のような格子に区切り、各格子点の座標を (x_i, y_j) とする。格子間隔は x 方向が Δx 、 y 方向が Δy とする。 $x_{i\pm 1} = x_i \pm \Delta x$ 、 $y_{j\pm 1} = y_j \pm \Delta y$ である。以下、格子点番号 (i, j) を用いて $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ のように略記する。

着目している点 (x_i, y_j) のまわりでテイラー展開すると、

$$u_{i+1,j} = u(x_i + \Delta x, y_j) = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (1.2)$$

$$u_{i-1,j} = u(x_i - \Delta x, y_j) = u_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \frac{\Delta x^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (1.3)$$

式 (1.2) から式 (1.3) を引くと

$$u_{i+1,j} - u_{i-1,j} = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + O(\Delta x^3) \quad (1.4)$$

したがって、

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (1.5)$$

すなわち、 (i, j) 点における u の x 方向の微分係数 $(\partial u / \partial x)_i$ が Δx^2 の誤差を含む近似のもとで (Δx について2次の精度で) 以下のように求まる

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (1.6)$$

これを中心差分の式と言う。

同様にして、 Δx について 1 次の精度で以下の差分近似式が得られる。

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \quad (\text{前進差分}) \quad (1.7)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (\text{後退差分}) \quad (1.8)$$

式 (1.2) と式 (1.3) を加えると

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} = 2u_{i,j} + \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + O(\Delta x^4) \quad (1.9)$$

したがって、

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (1.10)$$

これより、 u の x に関する 2 階微分の係数 $(\partial^2 u / \partial x^2)_i$ を Δx について 2 次の精度で以下のように近似することができる

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad (1.11)$$

同様に、

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_j = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2}. \quad (1.12)$$

1.3 線形スカラー移流方程式の差分解法

1.3.1 1次元線形スカラー移流方程式

流体・磁気流体方程式の本質は波の伝播にある。この部分だけを取り出して次のような方程式を考える。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1.13)$$

ただし、 c は定数で $c > 0$ とする。この方程式は、スカラー量 u の空間分布が、一定の速度 c で伝播することをあらわす波動方程式である。

方程式 (1.13) の厳密解は

$$u(x, t) = u(x - ct, 0) \quad (1.14)$$

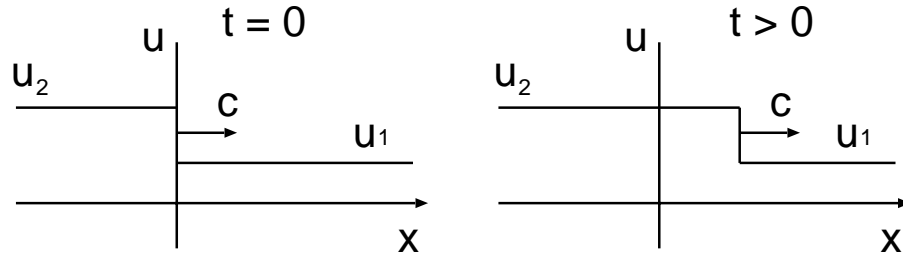


図 1.2: 1次元スカラー移流問題の初期条件と時間発展

である。これは、時刻 $t > 0$ におけるスカラー量 u のプロファイルは $t = 0$ のスカラー量 u のプロファイルが形を保って ct だけ平行移動した形になることをあらわす。

いま、図 1.2 のように初期に $x \geq 0$ で $u = u_1$ 、 $x < 0$ で $u = u_2$ のように $x = 0$ で不連続な分布を考えてみると $t > 0$ での厳密解は右図のような形になる。

1.3.2 FTCS スキーム

1次元線形スカラー移流方程式 (1.13) を時間について現在の時刻 t_n と Δt 後の時刻 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ の間で前進差分、空間については中心差分をとって差分化すると次式を得る。ここで、 $u_j^n = u(x_j, t_n)$ である。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (1.15)$$

このような差分のとり方を FTCS スキーム (Forward in Time and Centered Difference in Space) と言う。これを整理すると、

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}\nu(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (1.16)$$

ここで、 ν は次式で定義される数であり、クーラン数 と呼ばれる。

$$\nu \equiv c \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (1.17)$$

式 (1.16) の右辺は時刻 t_n での値、左辺は時刻 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ での値だけで書けている。したがって、時刻 t_n での各格子点での値がわかっているならば直ちに 1 タイムステップ後 (t_{n+1}) の各格子点での値を計算することができる。このような解法のことを 陽解法 と言う。FTCS スキームにおける変数の依存関係を図示すると図 1.3 のようになる。矢印は時刻 t_{n+1} の白丸の点の値を計算するのに時刻 t_n の黒丸の格子点の値を使うことを示す。

1次元波動伝播のシミュレーションを行うアルゴリズムは一般に次のようになる。

1. 各メッシュ点の座標値 x_j をセットする (メッシュ生成)

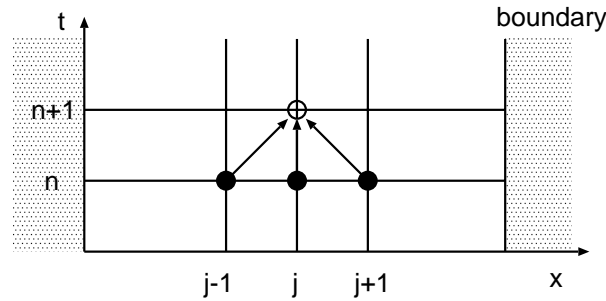


図 1.3: FTCS スキームにおける変数の依存関係

2. 各メッシュ点の初期値 $u_j(t=0)$ をセットする (初期条件)
3. 時刻 t が、あらかじめ決められた終了時刻 t_{end} に達するまで、あるいは決められた回数だけ、以下を繰り返す
 - (a) 左右の境界を除く各格子点について Δt 後の値を差分式にもとづいて計算する (時間積分)。たとえば FTCS スキームの場合には計算式 (1.16) を用いる。
 - (b) 左右の境界の値を境界条件から決める。たとえば隣接点と同じ値を入れる (境界条件の適用)
 - (c) 時刻を Δt だけ進める

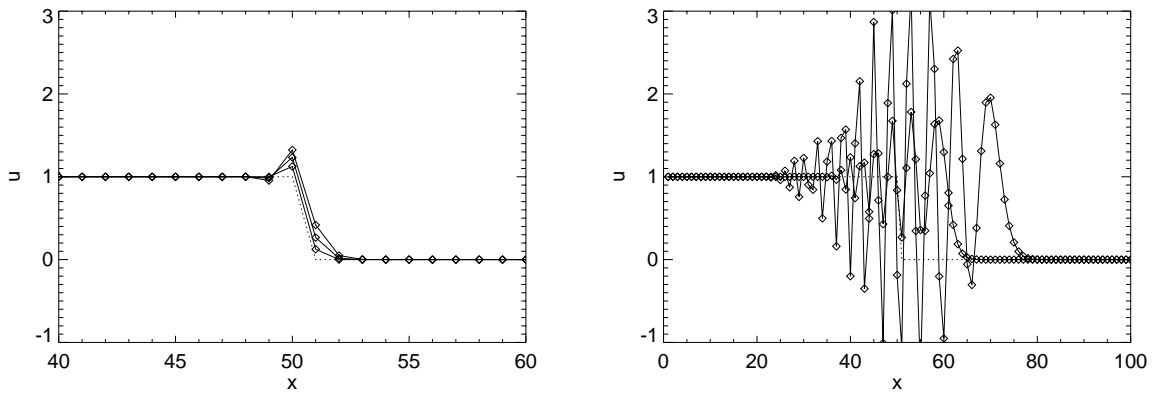


図 1.4: 左図 : FTCS スキームで、初期値として、 $j = 1, \dots, 50$ に対して $u = 1$ 、 $j = 51, \dots, 100$ に対して $u = 0$ とし、クーラン数 $\nu = c\Delta t/\Delta x = 0.25$ で 1 ステップ、2 ステップ、3 ステップ 1 計算したときの u をプロットした図。右図 : 50 ステップ、100 ステップ計算したときの u をプロットした図。

FTCS スキームを用いて 1 次元線形スカラー移流方程式を解いた結果を図 1.4 に示す。波は形を保って伝わらずに振動が発生してしまっている。この振動は物理的な理由で発生しているのではなく、数値的不安定性によるものである。なぜこのような数値振動が発生してしまうの

か、次節で説明する。

1.3.3 FTCS スキームの数値的安定性

Von Neumann の安定性解析

前節の FTCS スキームによって 1 次元波動伝播のシミュレーションを行ってみると解が激しく振動して数値的に不安定になってしまうことがわかった (図 1.4)。この不安定性の原因を調べるために

$$u_j^n = \cos(j\theta) \quad (1.18)$$

を差分式 (1.16) に代入してみる。ここで θ は、波の波数を k として $\theta = k\Delta x$ であらわされる量である。たとえば $\theta = \pi$ のとき u_j^n は図 1.5 左図のように 2 メッシュで 1 波長の波、 $\theta = \pi/3$ のときは右図のように 6 メッシュで 1 波長の波をあらわす。

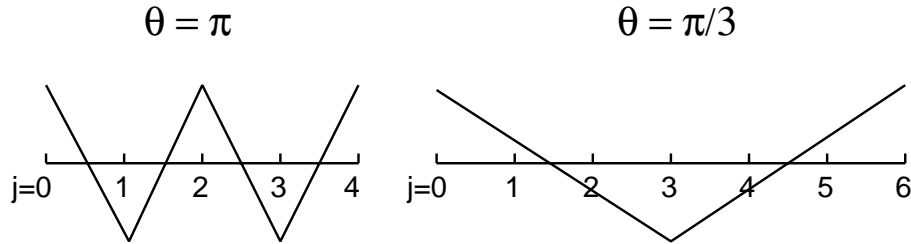


図 1.5: メッシュ番号を j としたときの $u_j^n = \cos(j\theta)$ のプロフィール。左図: $\theta = \pi$ の場合。右図: $\theta = \pi/3$ の場合。

その結果は

$$u_j^{n+1} = \cos(j\theta) + \nu \sin\theta \sin(j\theta) \quad (1.19)$$

これをもう一度差分式に代入すると

$$u_j^{n+2} = (1 - \nu^2 \sin^2 \theta) \cos(j\theta) + 2\nu \sin\theta \sin(j\theta) \quad (1.20)$$

$$= \operatorname{Re} \left[(1 - i\nu \sin\theta)^2 e^{ij\theta} \right] \quad (1.21)$$

である。ここで、 i は虚数単位、 Re は実部をとることをあらわす。以上からわかるように、

$$u_j^{n+k} = \operatorname{Re} \left[(1 - i\nu \sin\theta)^k e^{ij\theta} \right] \quad (1.22)$$

が成り立つ。

差分法 (差分スキーム) の数値的安定性を導くひとつの方法として、式 (1.18) を複素数に拡張した

$$u_j^n = g^n e^{ij\theta} \quad (1.23)$$

を差分式に代入して複素増幅率 g を求め、1 タイムステップ間の振幅の増幅率 $|g| \leq 1$ となる条件を求める方法がある。これを Von Neumann の安定性解析と言う。

$u_j^n = g^n \exp(ij\theta)$ を FTCS 差分式に代入すると

$$g = 1 - \frac{1}{2}\nu(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \quad (1.24)$$

$$= 1 - i\nu\sin\theta \quad (1.25)$$

したがって

$$|g|^2 = 1 + \nu^2 \sin^2\theta \geq 1 \quad (1.26)$$

以上の結果より、 $\theta = 0$ の場合を除いて FTCS スキームは常に不安定になる。

テイラー展開による方法

この節は最初に読む際には読み飛ばしてもかまわない。

差分化した式にテイラー展開を適用して差分式が満たす偏微分方程式を導くことによって、FTCS スキームが数値的に不安定であることを示すことができる。 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ 、 $x_{j\pm 1} = x_j \pm \Delta x$ を用いると、

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta t^2 + \dots \quad (1.27)$$

$$u_{j+1}^n = u_j^n + \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta x^2 + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^3 + \dots \quad (1.28)$$

$$u_{j-1}^n = u_j^n - \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta x^2 - \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^3 + \dots \quad (1.29)$$

FTCS スキームの差分式

$$u_j^{n+1} - u_j^n = -\frac{1}{2}\nu(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (1.30)$$

の左辺に (1.27)、右辺に (1.28)、(1.29) を代入すると、

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta t^2 = -\nu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^3 + \dots \right) \quad (1.31)$$

これを整理すると

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta t - \frac{c}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^2 + \dots \quad (1.32)$$

ここで、解くべき偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1.33)$$

より

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.34)$$

であることを用いると

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{c^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Delta t - \frac{c}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Delta x^2 + \dots \quad (1.35)$$

右辺が差分化によって新たに加わった項である。右辺第1項は負の拡散係数を持つ拡散項になっている。「正の拡散」は物理量の値のピークをなまらせる働きがあるが、「負の拡散」では物理量が周囲よりもわずかに高い値を持つ部分があるとこのピークがどんどん大きくなるという不安定性を生ずる。

よって、テイラー展開法からもスカラー移流方程式のFTCSスキームは数値的に不安定であることがわかる。

1.3.4 Lax-Friedrich のスキーム

この方法ではFTCSスキームの右辺の u_j^n を $(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)/2$ で置き換え、以下のように差分化する。

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (1.36)$$

$u_j^n = g^n \exp(ij\theta)$ を代入して増幅率 g を求めると

$$g = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) - \frac{1}{2}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \quad (1.37)$$

$$= \cos\theta - i\nu\sin\theta \quad (1.38)$$

したがって

$$|g|^2 = \cos^2\theta + \nu^2\sin^2\theta \quad (1.39)$$

図1.6に増幅率 $|g|$ を θ の関数として極座標 (g, θ) で示す。Lax-Friedrich のスキームでは、クーラン数 $\nu = c\Delta t/\Delta x$ が $|\nu| \leq 1$ を満たす場合、安定に計算を進めることができる。この条件のことを Courant, Friedrich, Lewy 条件 (CFL 条件あるいはクーラン条件) と言う。

クーラン条件の意味を考えてみよう。差分式 (1.36) を書き換えると以下の式を得る。

$$u_j^{n+1} = \frac{1-\nu}{2}u_{j+1}^n + \frac{1+\nu}{2}u_{j-1}^n \quad (1.40)$$

クーラン条件 $|\nu| \leq 1$ が満たされている場合、時刻 $t = t_{n+1}$ の値 u_j^{n+1} は $t = t_n$ の $j-1$ 点の値 u_{j-1}^n と $j+1$ 点の値 u_{j+1}^n の内挿値になっている。

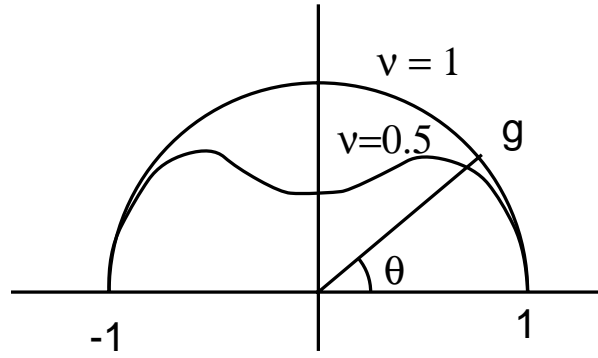


図 1.6: Lax-Friedrich スキームの場合の増幅率

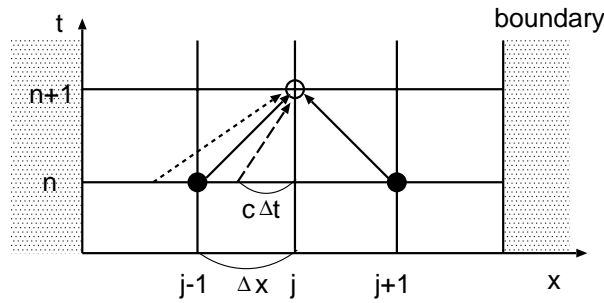
図 1.7: Lax-Friedrich スキームにおける依存関係。破線と点線はそれぞれ $\nu < 1$ 、 $\nu > 1$ の場合の波の伝播を示す。

図 1.7 に Lax-Friedrich スキームにおける変数の依存関係を示す。実線は時刻 $t = t_{n+1}$ の白丸の格子点の値を計算する際に用いられる時刻 $t = t_n$ の格子点、破線は $\nu = c\Delta t/\Delta x < 1$ の場合、点線は $\nu > 1$ の場合の波の伝播を示す。

クーラン条件は $|c|\Delta t < \Delta x$ 、すなわち時間間隔 Δt の間に波が 1 メッシュ以上伝わってはいけないことを意味する。 u_j^{n+1} は u_{j-1}^n と u_{j+1}^n だけから計算されるが、時間間隔が $\Delta t > \Delta x/|c|$ となると $x_{j-1} \leq x \leq x_{j+1}$ より外側からも情報が伝わってくるため計算を安定に進めることができなくなるのである。

図 1.8 に Lax-Friedrich スキームを用いて 1 次元線形スカラー移流方程式の解を求めた結果を示す。数値振動のない解が得られている。Lax-Friedrich スキームの欠点は数値散逸が大きく、不連続面が時間とともになまってしまうことである。

1.3.5 1 次精度風上差分法

図 1.9 のように波が正の方向に伝わっている場合を考える。このとき、 j 点での空間微分を、 j 点と風上にあたる $j-1$ 点の間の差分で近似する方法が風上差分である。

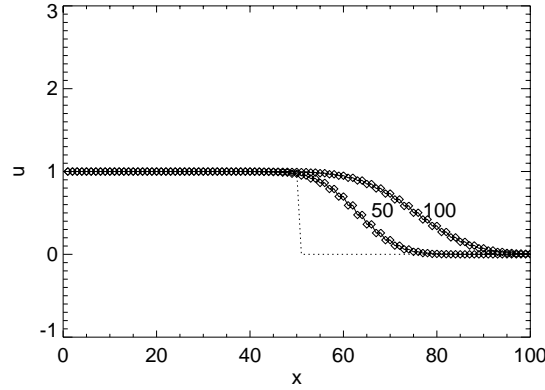


図 1.8: Lax-Friedrich スキームを用いた 1 次元線形スカラー移流問題のシミュレーション結果。クーラン数 $\nu = 0.25$ で 50 ステップ、100 ステップ計算した結果を示す。

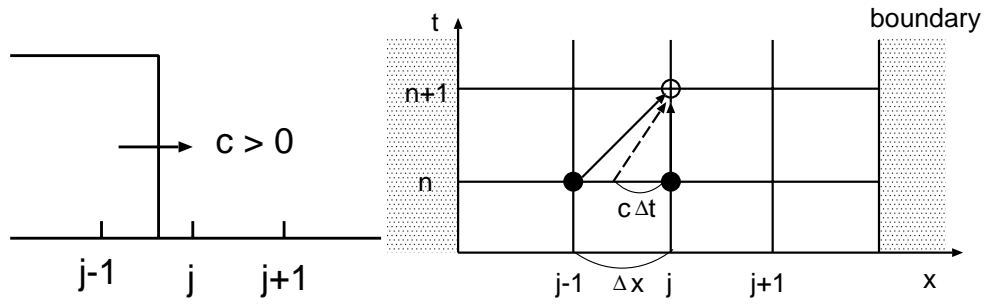


図 1.9: 左図：右方向に伝わる波、右図：1 次精度風上差分における依存関係。破線は波による情報の伝達を示す。

1 次元スカラー移流方程式を時間については前進差分、空間については風上差分として差分化すると、 $c > 0$ の場合、以下の差分式を得る。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (1.41)$$

したがって

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n) \quad (1.42)$$

図 1.9 右図に 1 次精度風上差分における変数の依存関係を示す。黒丸は時刻 t_{n+1} の白丸の格子点の値を計算する際に用いられる時刻 t_n の格子点、破線は時刻 t_{n+1} に白丸の格子点に到達する波の伝播を示す。

増幅率は

$$g = 1 - \nu(1 - e^{-i\theta}) \quad (1.43)$$

$$= (1 - \nu + \nu \cos \theta) - i\nu \sin \theta \quad (1.44)$$

したがって

$$|g|^2 = (1 - \nu + \nu \cos \theta)^2 + \nu^2 \sin^2 \theta \quad (1.45)$$

$$= 1 - 2\nu(1 - \nu)(1 - \cos \theta) \quad (1.46)$$

これより、 $0 \leq \nu \leq 1$ の場合、任意の θ について $|g| \leq 1$ であり、安定であることがわかる。

風上差分の差分式 (1.42) は次のようにも書ける。

$$u_j^{n+1} = (1 - \nu)u_j^n + \nu u_{j-1}^n. \quad (1.47)$$

クーラン条件 $0 \leq \nu \leq 1$ が満たされている場合、 u_j^{n+1} は時刻 $t = t_{n+1}$ に j 番目の格子点に到達する波の $t = t_n$ での位置 (図 1.9 の破線矢印の出発点) における値 $u(x_j - c\Delta t, t_n)$ を u_{j-1}^n と u_j^n から線形内挿した値になっている。

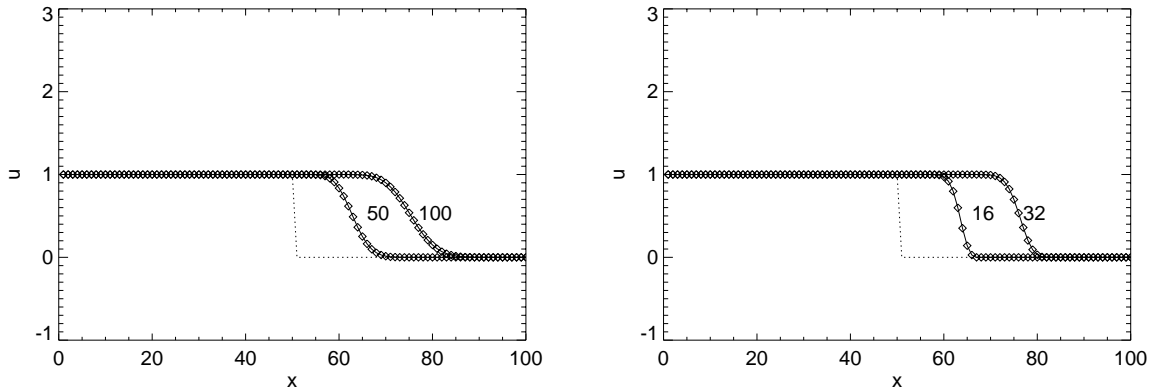


図 1.10: 1 次精度風上差分法を用いた 1 次元線形スカラー移流問題のシミュレーション結果。左: クーラン数 $\nu = 0.25$ で 50 ステップ、100 ステップ計算した結果。右: $\nu = 0.80$ で 16 ステップ、32 ステップ計算した結果。

図 1.10 に 1 次精度風上差分法を用いたシミュレーション結果を示す。

練習問題

- クーラン数 ν が 1, 0.75, 0.5 の場合について 1 次精度風上差分の増幅率 $|g|$ を位相 θ の関数として求め、極座標 $(|g|, \theta)$ でプロットせよ。
- 1 次精度風上差分法の差分式 (1.42) にテイラー展開を適用することによって、以下の偏微分方程式が得られることを示せ。右辺第 1 項が拡散項であることに注意して、クーラン条件を導け。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} c \Delta x (1 - \nu) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{6} c (\Delta x)^2 (2\nu^2 - 3\nu + 1) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots \quad (1.48)$$

1.3.6 Lax-Wendroff のスキーム

Lax-Wendroff スキームはテイラー展開にもとづく差分法であり、以下のようにして導かれる。

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) \quad (1.49)$$

右辺第2項、第3項に $\partial u / \partial t = -c \partial u / \partial x$ 、 $\partial^2 u / \partial t^2 = c^2 \partial^2 u / \partial x^2$ を代入すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \Delta t \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} c^2 \Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta t^3) \quad (1.50)$$

空間微分 $\partial u / \partial x$ 、 $\partial^2 u / \partial x^2$ をそれぞれ中心差分で近似すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2} c \Delta t \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{1}{2} c^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (1.51)$$

これが Lax-Wendroff スキームである。以上の導出過程からわかるように、Lax-Wendroff スキームは空間、時間についていずれも2次精度の解法になっている。

Lax-Wendroff スキームの安定性を von Neumann の方法で調べてみる。増幅率は

$$g = 1 - \frac{\nu}{2}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) + \frac{\nu^2}{2}(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}) \quad (1.52)$$

$$= 1 - i\nu \sin \theta + \nu^2 \cos \theta - \nu^2 \quad (1.53)$$

したがって、

$$|g|^2 = [1 - \nu^2(1 - \cos \theta)]^2 + \nu^2 \sin^2 \theta \quad (1.54)$$

$$= 1 - 2\nu^2(1 - \nu^2)(1 - \cos \theta) \quad (1.55)$$

これより、 $|\nu| \leq 1$ であれば任意の θ について $|g| \leq 1$ であり、安定であることがわかる。

1次元スカラー方程式の場合、Lax-Wendroff スキームは以下のように2段階に分けたスキームと同等である。この方法を 2段階 Lax-Wendroff 法 と呼ぶ。

$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{u_{j+1}^n + u_j^n}{2} - \frac{1}{2} c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^n - u_j^n) \quad (1.56)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j-1/2}^{n+1/2}) \quad (1.57)$$

これを図示すると図 1.11 のようになる。

図 1.12 に Lax-Wendroff 法を用いて1次元線形スカラー移流方程式の数値解を求めた結果を示す。

Lax-Wendroff 法は空間、時間についていずれも2次精度の方法であるが、不連続面近傍で数値振動を生じるという欠点を持つ。これに関して、以下の定理が知られている。

Godunov の定理

1次元スカラー移流方程式 $\partial u / \partial t + c \partial u / \partial x = 0$ に対して、

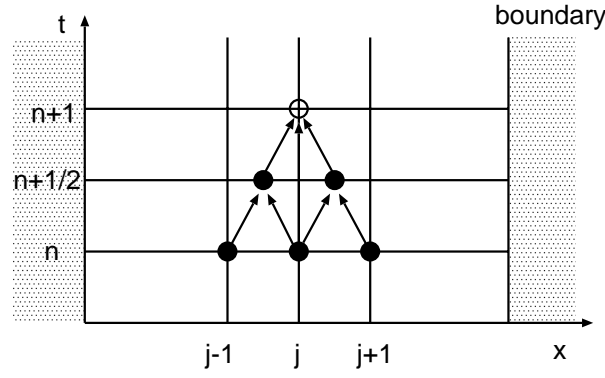


図 1.11: 2 段階 Lax-Wendroff スキームにおける依存関係。第一段階で時刻 t_n における格子点 $j-1$ 、 j 、 $j+1$ の値から時刻 $t_{n+1/2}$ における格子点 $j-1/2$ 、 $j+1/2$ の値が計算される。第二段階ではこれらの点の値を用いて時刻 t_{n+1} の白丸の格子点の値が求まる。

$$u_j^{n+1} = \sum_k a_k u_{j+k}^n \quad (1.58)$$

の形の 2 次精度以上の精度を持つどのようなスキームも解の単調性を維持することはできない。

ここで、「解の単調性を維持する」とは、時刻 t_n におけるプロフィール $u(x, t_n)$ が x に関して単調増加または単調減少する関数であるならば時刻 t_{n+1} における関数 $u(x, t_{n+1})$ も単調増加または単調減少関数でなければならないことを意味する。たとえば 1 次精度風上差分の場合、 $0 \leq \nu \leq 1$ なら u_j^{n+1} は必ず u_{j-1}^n と u_j^n の間の値をとるため、もしも $u_{j-1}^n \leq u_j^n \leq u_{j+1}^n$ なら $u_j^{n+1} \leq u_{j+1}^{n+1}$ となり、単調性が維持される。Godunov の定理の証明については、たとえば藤井 (1994) を参照されたい。

数値振動を抑える方法には以下のものがある。

- 人工粘性を加える

粘性係数を κ として、

$$\tilde{u}_j^{n+1} = u_j^{n+1} + \kappa \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (1.59)$$

とする。

拡散係数 κ は、たとえば以下のように不連続面付近で大きな値をとるように決める。 Q_v はパラメータである。

$$\kappa_{j+1/2} = Q_v \Delta x |u_{j+1}^n - u_j^n| \quad (1.60)$$

- 流束制限関数を用いる

これについては後述する。

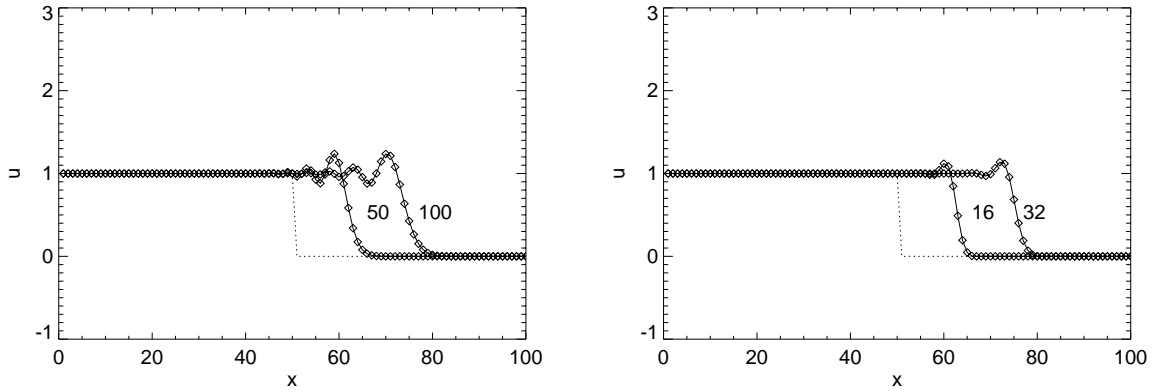


図 1.12: 2 段階 Lax-Wendroff 法による 1 次元線形スカラー移流方程式のシミュレーション結果。左図：クーラン数 $\nu = 0.25$ で 50 ステップ、100 ステップ計算した結果。右図：クーラン数 $\nu = 0.80$ で 16 ステップ、32 ステップ計算した結果。

1.4 保存形表示と数値流束

1 次元スカラー移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1.61)$$

を以下の形に変形する

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (1.62)$$

ここで、

$$f = cu \quad (1.63)$$

は流束をあらわす。式 (1.62) の形を保存形と呼ぶ。

保存形式の物理的意味を考えるために、図 1.13 に四角で囲って示した領域 ($x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}$) における保存量 u の時間変化を求めてみよう。方程式 (1.62) を $x = x_{j-1/2}$ から $x = x_{j+1/2}$ まで積分すると次式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u dx + f(x_{j+1/2}) - f(x_{j-1/2}) = 0. \quad (1.64)$$

したがって、保存量 u の積分量

$$u_j^n = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t_n) dx \quad (1.65)$$

の時間変化は、この時間の間に左右の境界 $x_{j\pm 1/2}$ を通って出入りする流束 $f_{j\pm 1/2}$ の差に等しい。これより次式を得る。

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n) \quad (1.66)$$

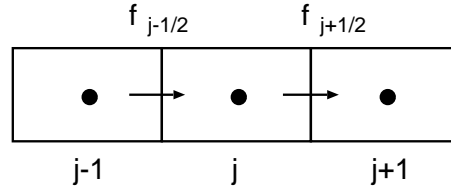


図 1.13: メッシュ点とメッシュ境界を通して出入りする流束の関係

差分式 (1.66) は保存則を厳密に満たす。これが保存形式を用いる利点である。

メッシュ境界の流束 $f_{j\pm 1/2}^n$ は各メッシュ点での流束から近似的に計算することができる。これを 数値流束 と言い、 $\tilde{f}_{j\pm 1/2}^n$ であらわす。各種差分スキームの差分式から数値流束を求めると以下ようになる。

- FTCS

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}(f_{j+1}^n + f_j^n) \quad (1.67)$$

- Lax-Friedrich

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \left[\left(1 - \frac{1}{\nu}\right) f_{j+1}^n + \left(1 + \frac{1}{\nu}\right) f_j^n \right] \quad (1.68)$$

- Upwind (風上差分)

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \left[(f_{j+1}^n + f_j^n) - |c|(u_{j+1}^n - u_j^n) \right] \quad (1.69)$$

この式は、 $c > 0$ の場合は $\tilde{f}_{j+1/2}^n = f_j^n$ 、 $c < 0$ の場合は $\tilde{f}_{j+1/2}^n = f_{j+1}^n$ と一致する。

- Lax-Wendroff

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \frac{1}{2} \left[(1 - \nu) f_{j+1}^n + (1 + \nu) f_j^n \right] \quad (1.70)$$

1.5 Burgers 方程式の数値解法

ここまでは、移流の速さ c が一定の場合の 1 次元線形スカラー移流方程式を扱ってきた。本節では、以下のような 非線形 波動方程式を差分近似によって解くことを考える。これは、非粘性の場合の Burgers 方程式である。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (1.71)$$

この方程式は流線に沿うラグランジュ微分 $d/dt = \partial/\partial t + u\partial/\partial x$ を用いると次のように表現できる。

$$\frac{du}{dt} = 0 \quad (1.72)$$

粒子的な描像に立てば、この方程式は力を受けていない粒子の運動を記述しており、その解はもちろん $u = \text{一定}$ である。初期速度分布が正弦波的な場合、図 1.14 に示すように、振幅が正の領域は $+x$ 方向に、負の領域は $-x$ 方向に移動してしだいに波が突っ立ち、有限の時刻で後からきた粒子が前の粒子に追いついてしまう。連続系では空間の 1 点で速度が多価になることはできないため、このような場合に解に不連続が生じる。

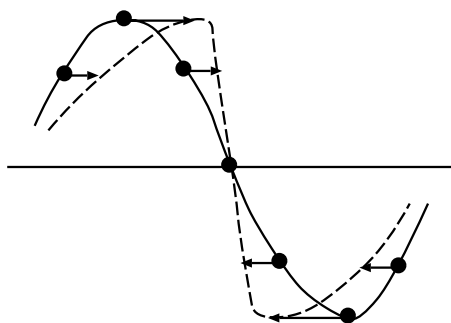


図 1.14: Burgers 方程式の解の様子。ある有限の時刻で後ろからきた粒子が前の粒子に追いつく。

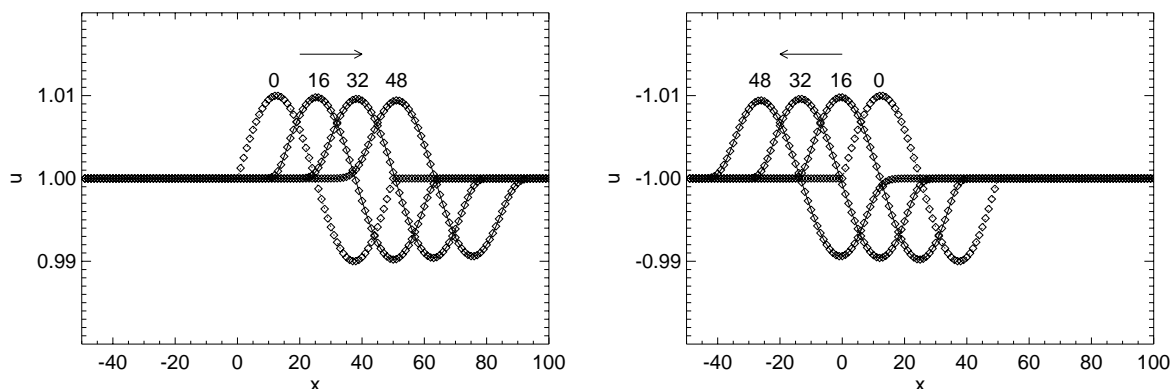


図 1.15: Burgers 方程式を 1 次精度風上差分法で解いた結果の例。左：初期に $u > 0$ の場合。右：初期に $u < 0$ の場合。図中の数字は時間ステップ数。時間きざみは $\Delta t/\Delta x = 0.8$ とした。

Burgers 方程式を差分法によって解くため、方程式をまず、以下のような保存系に変形する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0 \quad (1.73)$$

これは、流束 $f(x)$ が $f(x) = u^2/2$ の場合に相当し、各種差分スキームを適用することができる。たとえば 1 次精度の風上差分法を適用する場合、線形スカラー方程式で移流の速さ c が一定である場合には $c > 0$ のとき $f_{j+1/2}^n = f_j^n$ であったことに注意し、メッシュ境界の $j + 1/2$ 点での速さを $(u_j(t) + u_{j+1}(t))/2$ で近似すると、

- $u_{j+1}(t) + u_j(t) > 0$ のとき、 $f_{j+1/2}^n = f_j^n = |u_j(t)|^2/2$
- $u_{j+1}(t) + u_j(t) \leq 0$ のとき、 $f_{j+1/2}^n = f_{j+1}^n = |u_{j+1}(t)|^2/2$

図 1.15 に初期に $u(x) = 1 + \epsilon \sin(kx)$ ($\epsilon = 0.01, 0 \leq kx \leq 2\pi$) のような速度分布を与えた場合の Burgers 方程式の解を 1 次精度の風上差分法で計算した結果を示す。図 1.15 左図の場合、初期に $u \sim 1$ であることから予想できるように非線形効果が小さい間の解は波の速さが $c = 1$ の場合の線形スカラー移流方程式の解とほぼ一致し、波はほぼその形を保ちながら右側に伝わっていく。図 1.15 左図では初期に $u \sim -1$ であり、波は左に伝わる。

非線形性が強くなる場合の Burgers 方程式の数値解の例を図 1.16 に示す。この例では初期に $u(x) = 1 + 0.1 \sin(kx)$ のような速度分布を与え、その後の時間発展を 1 次精度の風上差分法によって解いた。Burgers 方程式の非線形項 $u \partial u / \partial x$ の効果により波がしだいに突っ立ち、不連続（衝撃波）が形成されることがわかる。

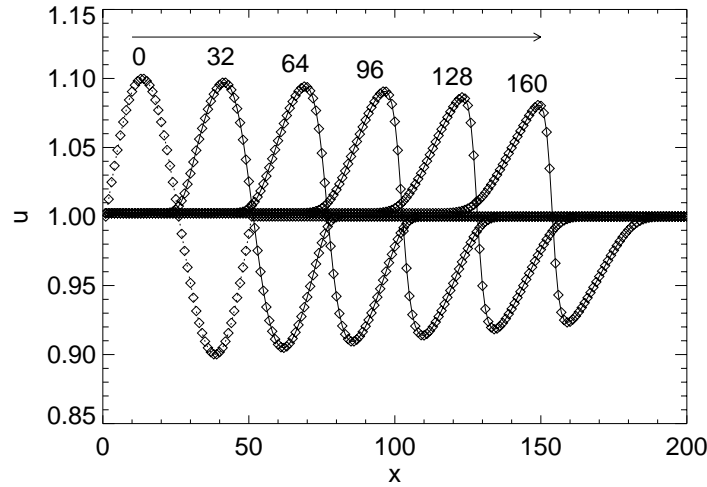


図 1.16: 初期に $u(x) = 1 + 0.1 \sin(kx)$ の速度分布から始めた場合の Burgers 方程式の数値解。図中の数字は時間ステップ数。1 次精度風上差分法で時間きざみは $\Delta t / \Delta x = 0.8$ とした。

1.6 流束制限関数

以上、線形スカラー移流方程式と Burgers 方程式を例にして差分解法について解説してきた。1 次精度の風上差分法を用いるとこれらの方程式の解にあらわれる不連続面を数値振動を起こすことなくとらえることができる。しかしながら、Godunov の定理が示すように、空間 2 次精度以上の解法では数値振動があらわれてしまうことがわかった。

Lax-Wendroff 法の数値流束を補正することによって、不連続面近傍での振動を抑えることができるかどうか考えてみよう。Lax-Wendroff 法の数値流束は次のようにも書ける。

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = c[u_j^n + \frac{1}{2}(1-\nu)(u_{j+1}^n - u_j^n)] \quad (1.74)$$

数値振動が生じない 1 次精度の風上差分の数値流束は $c > 0$ のとき $\tilde{f}_{j+1/2}^n = cu_j^n$ であり、Lax-Wendroff 法の数値流束の右辺第 1 項と一致している。そこで、Lax-Wendroff 法の数値流束の右辺第 2 項を次のように補正してみる。

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = c[u_j^n + \frac{1}{2}(1-\nu)B_{j+1/2}(u_{j+1}^n - u_j^n)] \quad (1.75)$$

ここで導入した $B_{j+1/2}$ のことを 流束制限関数 と呼ぶ。数値流束 (1.75) を差分式 (1.66) に代入して変形すると次式を得る。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{u_{j-1}^n - u_j^n} = \nu[1 - \frac{1}{2}(1-\nu)B_{j-1/2}] + \frac{1}{2}\nu(1-\nu)\frac{B_{j+1/2}}{r_j} \quad (1.76)$$

ここで、

$$r_j \equiv \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{u_{j+1}^n - u_j^n} \quad (1.77)$$

である。

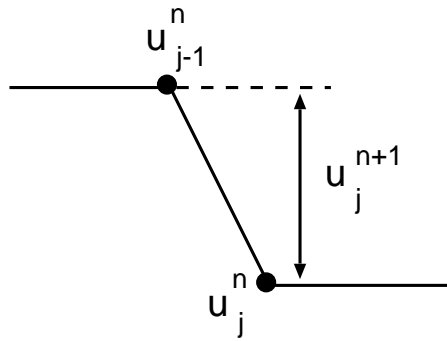


図 1.17: 数値振動が生じないようにするために u_j^{n+1} の値を制限する範囲

数値振動が生じないようにするために、図 1.17 に示したように u_j^{n+1} が u_j^n と u_{j-1}^n の間の値をとるように制限を加えることにしよう。これには、式 (1.76) の左辺の値を以下のように制限

すればよい。

$$0 \leq \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{u_{j-1}^n - u_j^n} \leq 1 \quad (1.78)$$

式 (1.76) の右辺を代入すると以下の条件を得る。

$$-\frac{2}{\nu} \leq B_{j-1/2} - \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \leq \frac{2}{1-\nu} \quad (1.79)$$

CFL 条件が満たされている場合 $0 \leq \nu \leq 1$ なので、

$$-2 \leq B_{j-1/2} - \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \leq 2 \quad (1.80)$$

この関係式は、以下のふたつの条件がともに満たされれば成立する。

$$0 \leq B_{j+1/2} \leq 2 \quad (1.81)$$

かつ

$$0 \leq \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \leq 2 \quad (1.82)$$

この範囲を図示すると図 1.18 の斜線のない領域になる。 $r < 0$ の場合は $B_{j+1/2} = 0$ のみが許される。

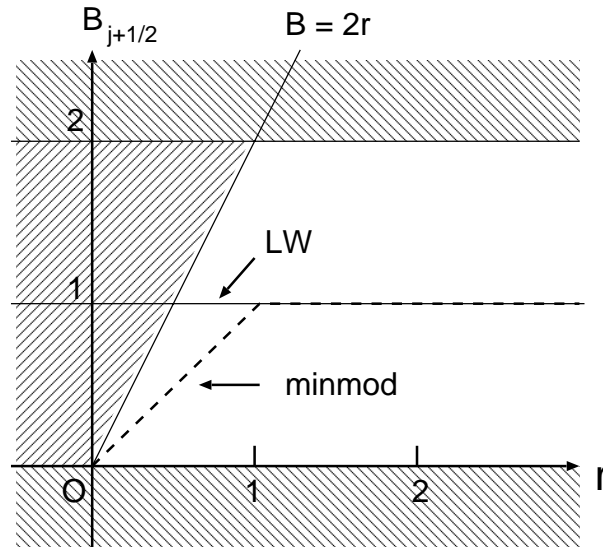


図 1.18: 流束制限関数 $B_{j+1/2}(r)$ の許容範囲。LW は Lax-Wendroff スキームの数値流束に対応する制限関数。minmod は minmod 関数。

Lax-Wendroff 法の数値流束では $B_{j+1/2} = 1$ (図の LW) であるため、 $r < 1/2$ の領域で許容範囲外となり、数値振動が生じる。図の許容範囲内にある流束制限関数を用いることにより、数

値振動が起こらないようにすることができる。その一例は以下の minmod 関数 (図の minmod) である。

$$\text{minmod}(r) = \begin{cases} 0 & (r < 0) \\ r & (0 \leq r \leq 1) \\ 1 & (r > 1) \end{cases} \quad (1.83)$$

1.7 TVD スキーム

前節では、数値振動をおさえる方法として流束制限関数を導入した。ここでは、数値振動の発生を定量化する方法について考える。

このために、1次元線形スカラー移流方程式において以下の量を定義する。

$$U = \int \left| \frac{du}{dx} \right| dx. \quad (1.84)$$

この量は波の振幅の総和に等しく、移流方程式の厳密解では波のプロフィールが保たれるため、 $dU/dt = 0$ である。

以上との類推により、メッシュ点ごとの物理量の変化量の総和を次式のように定義し、これを Total Variation (TV) と言う。

$$TV(u^n) \equiv \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n| \quad (1.85)$$

Total Variation が時間とともに増大しないという条件

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (1.86)$$

のことを Total Variation Diminishing (TVD) 条件と呼ぶ。

流束制限関数を導入することによって、差分スキームが TVD 条件を満たすようにすることができる。

1.8 放物型方程式の差分解法

天体シミュレーションにあらわれる放物型方程式

- 熱伝導方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$$

- 磁気拡散方程式

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \eta \nabla^2 B$$

以下のような1次元拡散方程式を差分近似によって初期値問題として解くことを考えてみよう。すなわち、時刻 $t = 0$ における $u(x, t)$ の値 $u(x, 0)$ を与えて、任意の時刻 $t (> 0)$ における $u(x, t)$ を求める。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.87)$$

拡散係数 κ は x に依らないとする。よく知られているように、この方程式の解は初期条件をフーリエ変換することによって解析的に求めることができる。解のおおまかな様子を図に示す。

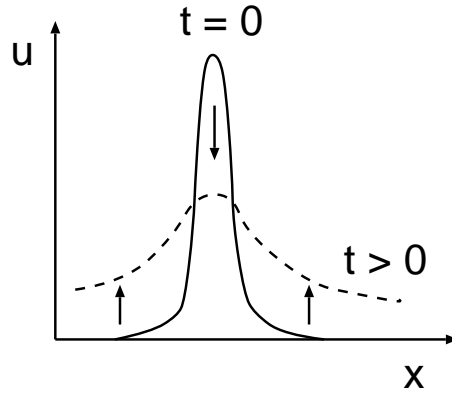


図 1.19: 拡散方程式の解の時間発展の様子

拡散方程式の陽解法 (explicit 法)

1次元拡散方程式 (1.87) を時間について現在の時刻 t_n と Δt 後の時刻 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ の間で前進差分、空間については中心差分 (FTCS 差分) をとって差分化すると次式を得る。ここで、 $u_j^n = u(x_j, t_n)$ である。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \kappa \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \quad (1.88)$$

式 (1.88) を変形して次式を得る

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (1.89)$$

右辺は時刻 t_n での値、左辺は時刻 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ での値だけで書けている。したがって、時刻 t_n での各格子点での値がわかっているならば直ちに1タイムステップ後 (t_{n+1}) の各格子点での値を計算することができる (陽解法)。

Von Neumann の安定性解析

FTCS スキームの数値的安定性を調べるために $u_j^n = g^n \exp(ij\theta)$ を FTCS 差分式に代入すると

$$g^{n+1} e^{ij\theta} = g^n e^{ij\theta} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} g^n [e^{i(j+1)\theta} - 2e^{ij\theta} + e^{i(j-1)\theta}]. \quad (1.90)$$

よって、

$$g = 1 - 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \theta). \quad (1.91)$$

増幅率が $|g| \leq 1$ であるためには

$$-1 \leq 1 - 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \theta) \leq 1. \quad (1.92)$$

したがって、

$$0 \leq \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos \theta) = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \leq 1. \quad (1.93)$$

任意の θ (任意の波長の波) について安定であるためには

$$0 \leq \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (1.94)$$

以上により、FTCS スキームにより 1 次元拡散方程式のシミュレーションを行う場合、時間ステップ Δt が上式を満たすようにコントロールする必要があることがわかる。たとえばメッシュサイズを半分にした場合、 Δt は 1/4 にしなければならない。

拡散方程式の陰解法 (implicit 法)

拡散方程式を差分化する際に右辺の空間差分の部分に、求めるべき t_{n+1} での u の値を含めて差分化する方法がある。このような方法を 陰解法(implicit) 法と呼び、explicit 法とは安定性条件が異ってくる。代表的な陰解法である Crank-Nicolson 法では、パラメータ λ を導入して、以下のように差分化する。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \kappa \left[\lambda \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + (1 - \lambda) \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right] \quad (1.95)$$

これを整理すると次のような行列を含む式になる。

$$\mathbf{A} \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{b}(\mathbf{u}^n). \quad (1.96)$$

これを解いて \mathbf{u}^{n+1} を求めればよい。

練習問題

1. 行列 \mathbf{A} とベクトル \mathbf{b} の各要素を求めなさい。

2. Von Neumann の安定性解析により、 $\lambda > 1/2$ ならば $\kappa\Delta t/\Delta x^2 > 0$ を満たす任意の Δt について Crank-Nicolson スキームは数値的に安定であることを示しなさい。

参考文献

- (1) 流体力学の数値計算法 (1994) 東京大学出版会、藤井孝蔵著
- (2) 数値天体物理学サマースクールのテキスト (2000)、富阪幸治、花輪知幸著
- (3) Numerical Computation of Internal and External Flows, C. Hirsch, John Wiley & Sons, 1990

(1) は、数値流体力学全般についてまとめられたテキストであり、必読文献である。

第2章 システム方程式の解法

富阪幸治（国立天文台）

第1章では、線形、非線形の一変数の波動方程式の数値解法について学んだ。ここでは、流体力学、磁気流体力学の方程式系について学び、ここにあらわれる非線系連立方程式の解法が第1章のそれと同じようにして得られることを示す。

2.1 基礎方程式

ここでは、まず流体力学の基礎方程式を導出する。その後、磁場の効果を考慮し、磁気流体力学の基礎方程式を得る。

2.1.1 質量

まず最初の基礎方程式は、ある体積の中に含まれる流体の質量が単位時間に流れ込む質量流速によって増減するという連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.1)$$

から得られる。これに Gauss の定理

$$\int_S \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \text{div} \mathbf{E} dV \quad (2.2)$$

を用いて右辺を体積積分に変換すると、

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_V \text{div}(\rho \mathbf{v}) dV = 0 \quad (2.3)$$

が得られる。この式は空間中にある体積を固定した時にその内部に含まれる質量の保存を表す式である。

V として微小体積を考えれば、微分形で表した質量保存の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.4)$$

が得られる。

2.1.2 運動量

つぎに、ある体積の中に含まれる流体の運動量は、質量と同じように、単位時間に流れ込む運動量流束によって増減するが、それに加えて運動量の場合は、この流体の体積に加わっている「力」によっても増減する。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{v} dV = - \int_S \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) dS - \int_S p \mathbf{n} dS + \int_V \rho \mathbf{g} dV \quad (2.5)$$

右辺第2項は、表面に加わる力で、ここでは圧力による運動量変化を表している。第3項は体積力で、ここでは重力 $\rho \mathbf{g}$ (\mathbf{g} は重力加速度) による運動量変化を表している。もう一つの Gauss の定理

$$\int_S f \mathbf{n} dS = \int_V \text{grad} f dV \quad (2.6)$$

を用いて右辺第2項を体積積分に変換すると、

$$\int_V \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_V \text{div}(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) dV = - \int_V \text{grad} p dV + \int_V \rho \mathbf{g} dV \quad (2.7)$$

ここで V として微小体積を考えれば、

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\text{grad} p + \rho \mathbf{g} \quad (2.8)$$

が得られる。 $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$ はテンソル積で

$$\rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \begin{pmatrix} \rho v_x v_x & \rho v_x v_y & \rho v_x v_z \\ \rho v_y v_x & \rho v_y v_y & \rho v_y v_z \\ \rho v_z v_x & \rho v_z v_y & \rho v_z v_z \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

をあらわす。この式は添字をつけて書くと、

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (2.10)$$

と書ける。もちろん、 $x_1 = x$ 、 $x_2 = y$ 、 $x_3 = z$ を表している。

2.1.3 エネルギー

エネルギーの保存を考える。単位体積あたりの全エネルギー e は運動エネルギーと内部エネルギー ϵ の和で

$$e = \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 + \epsilon \quad (2.11)$$

理想気体の場合、単位質量あたりの内部エネルギーは温度に比例するので、単位体積あたりのそれは温度 \times 密度に比例し、 $\epsilon = p/(\gamma - 1)$ (γ は気体の比熱比) とかける。質量と同じように、全エネルギーの増減はエネルギー流束によるだけなら、 $\partial e / \partial t + \text{div}(e \mathbf{v}) = 0$ となるはずであるが、そうではない

熱力学の第1法則で断熱の場合を考えると、内部エネルギー U と体積 V は

$$\frac{dU}{dt} + p \frac{dV}{dt} = 0 \quad (2.12)$$

という関係で変化する。これは次のように書き換えられる。

$$\frac{d}{dt} \int_V \epsilon dV + p \int_S (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) dS = 0, \quad (2.13)$$

第2項を変形するのに、単位時間あたりの体積変化が $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) dS$ の積分に比例することを用いた。ここで、第1項の時間微分が空間に固定された体積に含まれる内部エネルギーでなく、時間 $t = 0$ で体積 $V(t = 0)$ にあった物質の時間 $t > 0$ での体積 $V(t)$ に含まれる内部エネルギーの時間変化（ラグランジェによる微分と呼ぶ）を表していることに注意し、時間微分が空間に固定された体積に含まれる内部エネルギーの時間変化（オイラーによる微分と呼ぶ）に書き換える。

$$\frac{d}{dt} \int_V \epsilon dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \epsilon dV + \int_S \epsilon (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) dS, \quad (2.14)$$

であるから、

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \epsilon dV + \int_S \epsilon (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) dS = -p \int_S (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) dS \quad (2.15)$$

となる。この微分形として、単位体積あたりの熱エネルギー ϵ は

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \operatorname{div}(\epsilon \mathbf{v}) = -p \operatorname{div} \mathbf{v} \quad (2.16)$$

という関係にしたがって変化することが簡単な計算でわかる。これと式 (2.8) から得られる運動エネルギーの変化を表す（この式の右辺が単位体積・単位時間に流体素片になされた仕事を表すことに注意）

$$\frac{\partial \rho |\mathbf{v}|^2 / 2}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\frac{\rho |\mathbf{v}|^2}{2} \mathbf{v} \right) = -\mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} p + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{g}, \quad (2.17)$$

の和をとれば全エネルギーに関する方程式が得られる。断熱の場合のエネルギーに関する方程式は、

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div} [(e + p) \mathbf{v}] = \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{g} \quad (2.18)$$

ここで e は単位体積あたりの全エネルギーで

$$e = \rho |\mathbf{v}|^2 / 2 + \epsilon \quad (2.19)$$

流体力学の基礎方程式は、式 (2.4)、(2.8) および (2.18) である。このようにして得られた、流体力学の基礎方程式は、ガリレイ変換不変であることに注意しておこう。

2.1.4 磁気流体力学

磁場の効果を取り入れよう。ローレンツ力を外力として加えると、

$$\begin{aligned}\frac{1}{c}\mathbf{j} \times \mathbf{B} &= -\frac{1}{4\pi}\mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}), \\ &= -\nabla \left(\frac{B^2}{8\pi} \right) + \frac{1}{4\pi}(\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{B},\end{aligned}\quad (2.20)$$

だから、式 (2.8) は

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\text{grad} p + \rho \mathbf{g} - \nabla \left(\frac{B^2}{8\pi} \right) + \frac{1}{4\pi}(\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{B} \quad (2.21)$$

もしくは、流束の項に Maxwell の応力テンソルを加える形にして、

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j + p \delta_{ij} - \frac{1}{4\pi} B_i B_j + \frac{1}{8\pi} B^2 \delta_{ij}) = \rho g_i \quad (2.22)$$

のように書き直せる。またエネルギー方程式は、エネルギーに磁場のエネルギーを加え、流束にポインティングベクトルを加えることによって、

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(e + \frac{B^2}{8\pi} \right) + \nabla \cdot \left[(e + p) \mathbf{v} + \frac{1}{4\pi} \{ \mathbf{B} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \} \right] = 0 \quad (2.23)$$

のようになる。

さらに、電磁気学のファラデーの法則

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.24)$$

とアンペールの法則

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{j} \quad (2.25)$$

オームの法則

$$\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2.26)$$

から磁場の誘導方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \frac{c^2}{4\pi\sigma} \nabla^2 \mathbf{B} \quad (2.27)$$

が得られる。ここで、電気伝導度 $\sigma \rightarrow \infty$ を完全磁気流体力学極限とよぶ。

これから、磁気流体力学の基礎方程式は、式 (2.4)、(2.21) もしくは (2.22)、(2.23) と (2.27) になる。

2.1.5 保存形式

流体力学の基礎方程式をまとめると、以下のようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = 0, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \rho v_x}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x^2 + p}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_x v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_x v_z}{\partial z} = \rho g_x, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial \rho v_y}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_y v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_y^2 + p}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_y v_z}{\partial z} = \rho g_y, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial \rho v_z}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_z v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_z v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z^2 + p}{\partial z} = \rho g_z, \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial (e + p)v_x}{\partial x} + \frac{\partial (e + p)v_y}{\partial y} + \frac{\partial (e + p)v_z}{\partial z} = \rho(v_x g_x + v_y g_y + v_z g_z), \quad (2.32)$$

ここで、体積力の外力が働いていない（通常の流体力学が主に対象とする）場合は密度、運動量密度、全エネルギー密度は、それらの流束の発散で与えられる。このため、このような形式の基礎方程式を保存形式と呼ぶ。

これは、保存量

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \\ e \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

に対して、その x 方向、 y 方向、 z 方向に流れる流束、

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_x v_z \\ (e + p)v_x \end{bmatrix}, \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v_y \\ \rho v_y v_x \\ \rho v_y^2 + p \\ \rho v_y v_z \\ (e + p)v_y \end{bmatrix}, \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho v_z \\ \rho v_z v_x \\ \rho v_z v_y \\ \rho v_z^2 + p \\ (e + p)v_z \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

を用いて、

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U})}{\partial z} = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (2.35)$$

\mathbf{S} はソース項で体積力である重力のみが働いている時は

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho g_x \\ \rho g_y \\ \rho g_z \\ \rho(v_x g_x + v_y g_y + v_z g_z) \end{bmatrix}, \quad (2.36)$$

のように与えられる。

2.2 円筒座標、球座標

軸対称、球対称などの対称性を持つ問題については、空間の独立変数の数（次元）を減らすことにより、計算量を減少させる。そのため、1次元球対称の場合の球座標や、2次元軸対称の場合の円筒座標で書いた基礎方程式を見ておくことにする。

2.2.1 1次元球対称

1次元球対称の場合は、基礎方程式は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 \rho v_r}{\partial r} = 0, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \rho v_r}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 \rho v_r^2}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial r}, \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 (e + p) v_r}{\partial r} = 0, \quad (2.39)$$

であるが、 r^2 を掛けた量を保存量と流束にとることによって

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}(\bar{U})}{\partial r} = \bar{S}(\bar{U}), \quad (2.40)$$

$$\bar{U} = r^2 \mathbf{U} = r^2 \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_r \\ e \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{F}} = r^2 \mathbf{F} = r^2 \begin{bmatrix} \rho v_r \\ \rho v_r^2 + p \\ (e + p) v_r \end{bmatrix}, \bar{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2rp \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

2.2.2 2次元軸対称円筒座標

2次元軸対称の問題を円筒座標 (z, r) を用いて解く場合は良く行なわれる。円筒座標 (z, r) について考えると、 $\text{div} \mathbf{A}$ が $\partial A_x / \partial x + \partial A_y / \partial y$ から $(1/r) \partial (r A_r) / \partial r + \partial A_z / \partial z$ などの表式が変わるので流束とソース項がデカルト座標のそれとは違うことになる。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial r} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{U})}{\partial z} = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (2.42)$$

について、

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_r \\ \rho v_z \\ e \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho v_r \\ \rho v_r^2 + p \\ \rho v_r v_z \\ (e + p) v_r \end{bmatrix}, \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v_z \\ \rho v_z v_r \\ \rho v_z^2 + p \\ (e + p) v_z \end{bmatrix}, \mathbf{S} = -\frac{1}{r} \begin{bmatrix} \rho v_r \\ \rho v_r^2 \\ \rho v_r v_z \\ v_r (e + p) \end{bmatrix}, \quad (2.43)$$

もう一つの方法は保存量、流束に r を掛けた量を用いると、

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}(\bar{\mathbf{U}})}{\partial r} + \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}(\bar{\mathbf{U}})}{\partial z} = \bar{\mathbf{S}}(\bar{\mathbf{U}}), \quad (2.44)$$

について、

$$\bar{U} = rU, \bar{F} = rF, \bar{G} = rG, \bar{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ p \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

2.3 波動

一次元の流体力学を考える。基礎方程式は

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0, \quad (2.46)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ e \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ (e + p)v_x \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

であるが、ここでは特にエントロピー一定のガスに対する1次元流体力学を考える。エントロピー一定でなくとも $p = p(\rho)$ のように圧力が密度だけに依存して変化するバロトロピー気体でも議論は同じである。エネルギー保存に関する e の変化を考える第3成分の式はポアッソンの関係式 $p = K\rho^\gamma$ (バロトロピー気体なら $p = p(\rho)$) で置き換えられる。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0, \quad (2.48)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

この2本の式と $p = K\rho^\gamma$ で方程式系が閉じることは容易にわかる。

ここで、 $\frac{\partial p}{\partial x} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{\text{ad}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) = c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}$ ($\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{\text{ad}} = c_s^2$ にあられる c_s を音速と呼ぶ) であることに注意して、上の式を書き直すと

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} = 0, \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \rho v_x}{\partial t} + \frac{\partial \rho(v_x^2 + c_s^2)}{\partial x} = 0, \quad (2.51)$$

となる。

2.3.1 線形的气体ダイナミクス

系が一様 (密度 ρ_0) で静止 (速度 $v_x = 0$) しており、変化が微小である場合 ($|\delta\rho| \ll \rho_0$ 、 $|v_x| \ll c_s$) 式 (2.51) は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial v_x}{\partial x} = 0, \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + \frac{c_s^2}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad (2.53)$$

となる。

これは昨日学んだ移流方程式のように書き直すと

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ v_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \rho_0 \\ c_s^2/\rho_0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho \\ v_x \end{pmatrix} = 0 \quad (2.54)$$

のようになる。ここで出てくる行列 A を対角化することを考える。

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \rho_0 \\ c_s^2/\rho_0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

の固有値を求めると二つの相異なる実固有値は $\lambda_1 = -c_s$ 、および $\lambda_2 = +c_s$ であること、また行列 A を対角行列

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

に対角化するには、行列 A の固有値 λ_i とその固有値に属する行列 A の右固有ベクトル $\mathbf{r}^{(i)}$ を用いると、

$$A\mathbf{r}^{(i)} = \lambda_i \mathbf{r}^{(i)}, \quad (2.57)$$

($\mathbf{r}^{(i)}$ は縦ベクトル $(\alpha, \beta)^t$)。また、その固有値に属する行列 A の左固有ベクトル $\ell^{(i)}$ を用いると、

$$\ell^{(i)} A = \lambda_i \ell^{(i)}, \quad (2.58)$$

($\ell^{(i)}$ は横ベクトル (γ, δ)) で、

$$\ell^{(i)} A \mathbf{r}^{(i)} = \lambda_i, \quad (2.59)$$

と書ける。これを、 $i = 1, 2$ について両方考える。つまり、右固有ベクトルを横に並べて作った右固有行列

$$R = (\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \quad (2.60)$$

および、左固有ベクトルを縦に並べて作った左固有行列

$$L = \begin{pmatrix} \ell^{(1)} \\ \ell^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

を用いると、

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = L A R, \quad (2.62)$$

もしくは、

$$A = R \Lambda L, \quad (2.63)$$

のように対角化されることがわかる。もちろん、 $\ell^{(i)} \cdot \mathbf{r}^{(j)} = \delta_{ij}$ であるから、 $LR = I$ で L と R は逆行列の関係にある。 R 、 L を具体的に書くと、

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \rho_0 & \rho_0 \\ -c_s & c_s \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

また

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2c_s\rho_0} \begin{pmatrix} c_s & -\rho_0 \\ c_s & \rho_0 \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

である。これは、式 (2.54) が以下のように書き直せることを意味する。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{R}\Lambda\mathbf{L}\frac{\partial U}{\partial x} = 0. \quad (2.66)$$

ここで、行列 R 、逆行列 L が一定であり 微分演算と交換することを用いると、この式は、以下のように書き換えられる。

$$\frac{\partial LU}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial LU}{\partial x} = 0, \quad (2.67)$$

すなわち、 $LU = L(\rho, v_x)^t = (w_1, w_2)^t$ という新しい変数に対しては、基礎方程式は独立な二つの式に分解できることがわかる。

$$\frac{\partial w_1}{\partial t} - c_s \frac{\partial w_1}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial w_2}{\partial t} + c_s \frac{\partial w_2}{\partial x} = 0 \quad (2.68)$$

$t = 0$ での w に対する初期条件は u に対するそれから $w(x, t = 0) = Lu(x, t = 0)$ のようにして求められ、移流方程式はその $w(x, t = 0)$ の値を w_1^0 は左へ、 w_2^0 は右へ、速度 c_s で移動させて行く。すなわちこの解は、

$$\begin{aligned} w_1(x, t) &= w_1(x + c_s t, 0), \\ &= Lu(x + c_s t, 0), \\ &= \frac{1}{2\rho_0 c_s} [c_s \rho(x + c_s t, 0) - \rho_0 v_x(x + c_s t, 0)], \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} w_2(x, t) &= w_2(x - c_s t, 0), \\ &= Lu(x - c_s t, 0), \\ &= \frac{1}{2\rho_0 c_s} [c_s \rho(x - c_s t, 0) + \rho_0 v_x(x - c_s t, 0)], \end{aligned} \quad (2.70)$$

最後に、この解を、 $U = RW$ で逆変換すれば、 ρ 、 v_x の時間発展が得られ、

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \rho_0 w_1(x, t) + \rho_0 w_2(x, t), \\ &= \frac{1}{2c_s} [c_s \rho(x + c_s t, 0) - \rho_0 v_x(x + c_s t, 0)] \\ &\quad + \frac{1}{2c_s} [c_s \rho(x - c_s t, 0) + \rho_0 v_x(x - c_s t, 0)], \end{aligned} \quad (2.71)$$

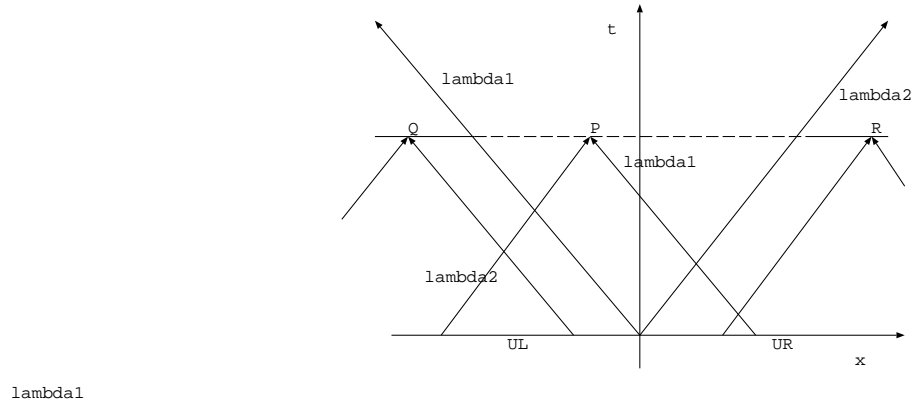


図 2.1: 特性線によって分けられた領域ごとに、いずれの初期値の影響下にあるかがわかる。

$$\begin{aligned}
 v_x(x, t) &= -c_s w_1(x, t) + c_s w_2(x, t), \\
 &= -\frac{1}{2\rho_0} [c_s \rho(x + c_s t, 0) - \rho_0 v_x(x + c_s t, 0)] \\
 &\quad + \frac{1}{2\rho_0} [c_s \rho(x - c_s t, 0) + \rho_0 v_x(x - c_s t, 0)], \tag{2.72}
 \end{aligned}$$

のように得られる。

2.3.2 Riemann 問題

線形ガスダイナミクス方程式のような定係数の双曲型方程式系の初期値問題で初期値に存在した不連続が進化する形の解を考える。つまり、

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \tag{2.73}$$

初期条件

$$U(x, t = 0) = \begin{cases} U_L, & x < 0 \\ U_R, & x > 0 \end{cases}, \tag{2.74}$$

のようなものである。式 (2.71)、(2.72) から、図 2.1 で、点 P、Q、R は影響を受ける初期状態 $\rho(x \pm c_s t, t = 0)$ 、 $v_x(x \pm c_s t, t = 0)$ が U_L であるか U_R であるかが異なっている。

すなわち、点 P は右に進む音波 $\lambda_2 = +c_s$ では U_L と、左に進む音波 $\lambda_1 = -c_s$ では U_R に影響を受けており、点 Q は右に進む音波でも左に進む音波でも U_L に影響を受けており、点 R は右に進む音波でも左に進む音波でも U_R に影響を受けていることがわかる。

$U = RW$ という関係は

$$\begin{aligned}
 U(x, t) &= \sum_{i=1}^2 w_i(x, t) \mathbf{r}^{(i)}, \\
 &= \sum_{i=1}^2 w_i(x - \lambda_i t, t = 0) \mathbf{r}^{(i)}, \tag{2.75}
 \end{aligned}$$

と書き直せる。ここで、 $\mathbf{r}^{(i)}$ は λ_i に属する右固有ベクトルを表している。

同様に、初期状態 U_L と U_R を λ_i に属する固有ベクトルで展開すると

$$U_L = \sum_{i=1}^2 \alpha_i \mathbf{r}^{(i)}, \quad U_R = \sum_{i=1}^2 \beta_i \mathbf{r}^{(i)} \quad (2.76)$$

となるが、図 2.1 で点 Q の属する領域では $U_L = \alpha_1 \mathbf{r}^{(1)} + \alpha_2 \mathbf{r}^{(2)}$ であり、また、点 R の属する領域では $U_R = \beta_1 \mathbf{r}^{(1)} + \beta_2 \mathbf{r}^{(2)}$ であるが、点 P の属する領域では $U_* = \beta_1 \mathbf{r}^{(1)} + \alpha_2 \mathbf{r}^{(2)}$ となる。

ここで、注意すべき点は、この Riemann 問題で、左から右へ λ_1 で伝搬する特性線を越えると、 $\Delta U = (\beta_1 - \alpha_1) \mathbf{r}^{(1)}$ だけ変化し、またさらに λ_2 で伝搬する特性線を越えると、 $\Delta U = (\beta_2 - \alpha_2) \mathbf{r}^{(2)}$ だけ値が変化するということである。

2.3.3 非線形のガスダイナミクス

バーガーズ方程式

ここまでの例では、定数係数の行列 A は一定値の特性スピード $\pm c_s$ を与えたため、すべての特性線は同じ傾きを持ち、同じ種類の特性線が交わることはなかった。

非線形の代表選手として非粘性バーガーズ方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2/2}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad (2.77)$$

を学んだ。ここでは行列 A に相当するものは u となるから、一つだけ存在する特性スピード λ が空間、時間によって異なり、 $d\lambda(u)/du > 0$ であることがわかる (convex flux)。

振幅の大きな部分が早い特性スピードを持ち次第に波形がつたって来る。最終的に後ろから来た特性線が前からのものに追いつくところでは物理量が不連続になり実存の気体中では衝撃波を生じる。実際の衝撃波では、ここまで考慮していなかった熱伝導、粘性などの輸送現象が重要になって気体の平均自由行程程度で物理状態が変化するがその平均自由行程程度より大きな通常の気体のスケールで考えれば物理量が不連続になるように見える。

等温ガス

式 (2.51) で音速を一定とすると、等温ガスに対する基礎方程式が得られる。ここで $\rho u = m$ と書いて従属変数を

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ m \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

と書き直すと、流束の方はこれらを使って

$$F = \begin{pmatrix} m \\ a^2 \rho + \frac{m^2}{\rho} \end{pmatrix}, \quad (2.79)$$

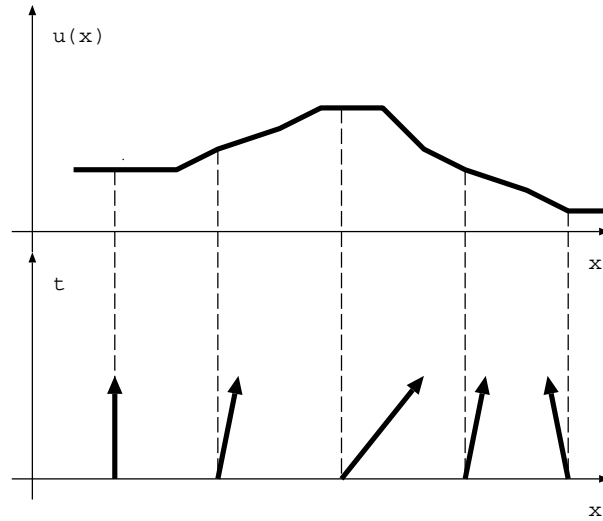


図 2.2: 非粘性バーガーズ方程式の波形（上）と特性線の傾き（下）の関係。振幅の大きな部分が早い特性スピードを持ち次第に波形がつたって来る。

のように書ける。音速の値が一定であることを強調するためにここでは $c_s = a$ と書いておくことにする。次に、基礎方程式を移流方程式型に書き換えると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ a^2 - \frac{m^2}{\rho^2} & \frac{2m}{\rho} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho \\ m \end{pmatrix} = 0, \quad (2.80)$$

のようになる。

この式は線形的气体ダイナミクス方程式で行なったのと同じ方法で対角化を行なうことができ、 A のこの固有値は

$$\lambda_1 = \frac{m}{\rho} - a = u - a, \quad (2.81)$$

$$\lambda_2 = \frac{m}{\rho} + a = u + a, \quad (2.82)$$

であることがわかる。それぞれの固有値に属する固有ベクトルは、

$$\mathbf{r}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ u - a \end{pmatrix}, \mathbf{r}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ u + a \end{pmatrix}, \quad (2.83)$$

なので、対角化する行列は

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ u - a & u + a \end{pmatrix}, \mathbf{L} = \begin{pmatrix} \frac{u+a}{2a} & -\frac{1}{2a} \\ -\frac{u-a}{2a} & \frac{1}{2a} \end{pmatrix}, \quad (2.84)$$

で、

$$\mathbf{L} \mathbf{A} \mathbf{R} = \mathbf{\Lambda}, \quad \mathbf{R} \mathbf{\Lambda} \mathbf{L} = \mathbf{A}, \quad (2.85)$$

のように対角化される。

2.4 衝撃波

非粘性バーガーズ方程式に関してリーマン問題を考える。ここでは簡単のために $u > 0$ の場合のみを考えるが、 $u < 0$ の場合についても容易に理解できよう。

初期条件で左右の物理量の値の差が小さい場合は、 $u_R > u_L$ であっても $u_R < u_L$ であっても図 2.4 下に見るように、物理量の不連続は、 u で右に伝搬する。ところが、不連続が非線形の場合には、(1) 初期に $U_L = u_L$ 、 $U_R = u_R$ で $u_L > u_R$ である場合は、 $x < 0$ からでる特性線が $x > 0$ からでる特性線に追い付くことになる。 u_L を運んでくる波と u_R を運んでくる波が同じ点に到達するので不連続が発生する (図 2.3 上)。流体力学の場合この不連続は衝撃波と呼ばれる。

その逆に、(2) $u_L < u_R$ である場合 (図 2.3 下、図 2.4 上右) は、 u_L と u_R の間の不連続が同様に右へ伝搬して行く可能性があるが、このような、特性線の重なりによらない不連続の生成は物理的には起こり得ず、また、流体力学で生ずる衝撃波に当てはめると不連続を前面から後面に通り過ぎる間に気体のエントロピーが減少する場合に相当しており、物理的には起こり得ない (エントロピー条件)。

$u_L < u_R$ である場合は、希薄波と呼ばれる構造が出現し、位相空間で希薄波の Head と示された点から希薄波の Tail と示された点まで u の値が線形に変化しそれに応じて特性線の傾きも次第に変化する流れを生ずる。

2.4.1 ランキン・ユゴニオ関係

保存系の流体力学の 1 次元の基礎方程式

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0, \quad (2.86)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ e \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ (e + p)v_x \end{bmatrix}, \quad (2.87)$$

を、空間の決まった 2 点 x_L から x_R まで積分する。その間に衝撃波を含みその位置 $x_S(t)$ は時間とともに速度 $V = dx_S(t)/dt$ で移動するとする。

$$\frac{d}{dt} \int_{x_L}^{x_S} \mathbf{U}(x, t) dx + \frac{d}{dt} \int_{x_S}^{x_R} \mathbf{U}(x, t) dx = \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_L, t)) - \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_R, t)), \quad (2.88)$$

のようになる。左辺を書き換えると、

$$[\mathbf{U}(x_{S_L}) - \mathbf{U}(x_{S_R})] V + \int_{x_L}^{x_S} \frac{\partial \mathbf{U}(x, t)}{\partial t} dx + \int_{x_S}^{x_R} \frac{\partial \mathbf{U}(x, t)}{\partial t} dx = \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_L, t)) - \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_R, t)), \quad (2.89)$$

となる。ここで、 $\mathbf{U}(x_{S_L})$ は衝撃波面へ左から近付いた $x = x_S - \epsilon (\epsilon > 0)$ での値、 $\mathbf{U}(x_{S_R})$ は衝撃波面へ右から近付いた $x = x_S + \epsilon$ での値を表す。左辺の 2 つの積分は $x_L \rightarrow x_S$ 、 $x_R \rightarrow x_S$

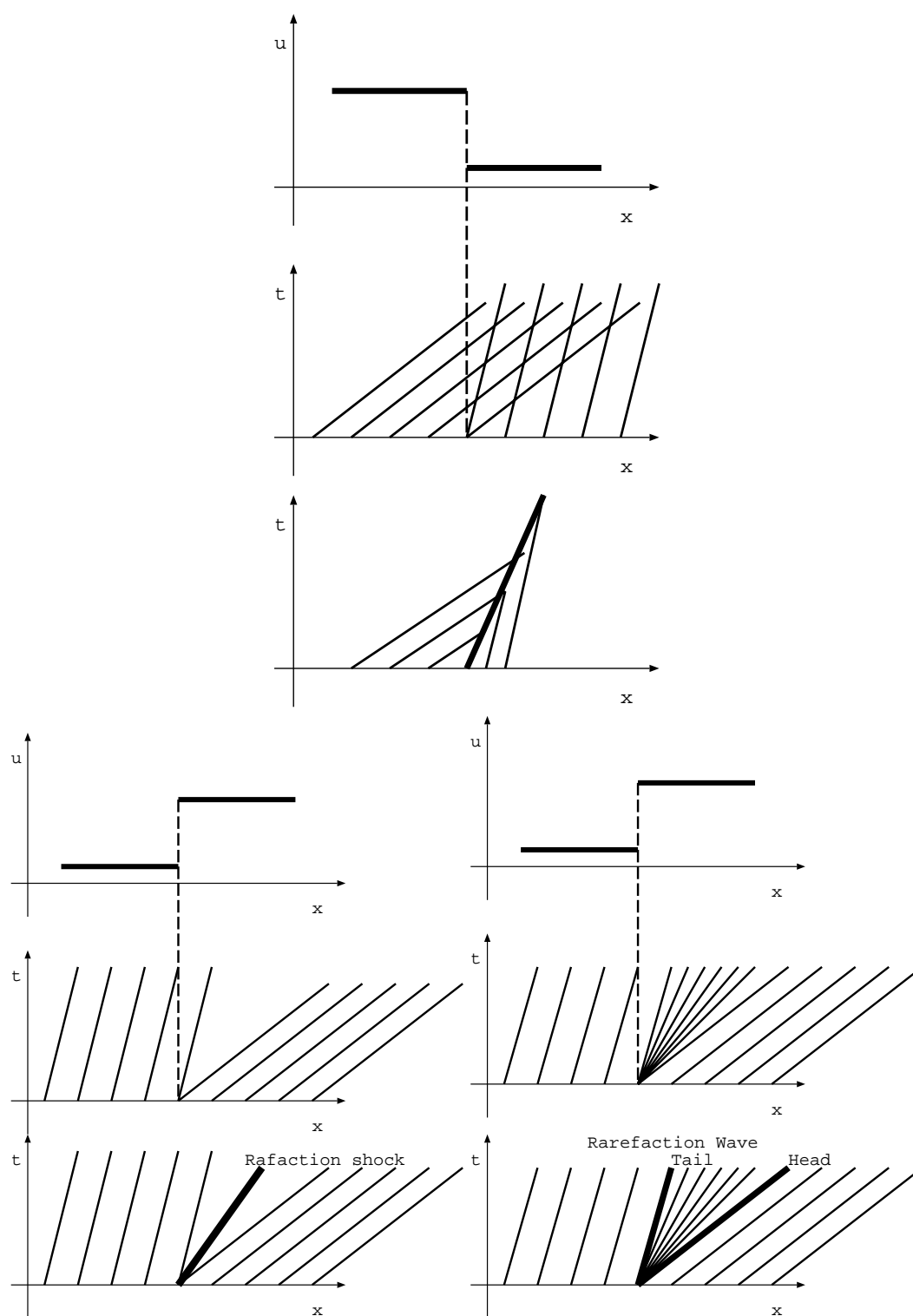


図 2.3: 非粘性バーガーズ方程式のリーマン問題。(上) $u_L > u_R$ の場合、特性線の重なりが衝撃波を形成する。(左下) $u_L < u_R$ の場合、特性線は遠ざかって行く、この場合、 u_L と u_R を不連続で接続する解(膨張衝撃波)は、非物理的で、(右下)の希薄波をはさんで物理量が u_L から u_R まで連続的に変化する現象が実現する。

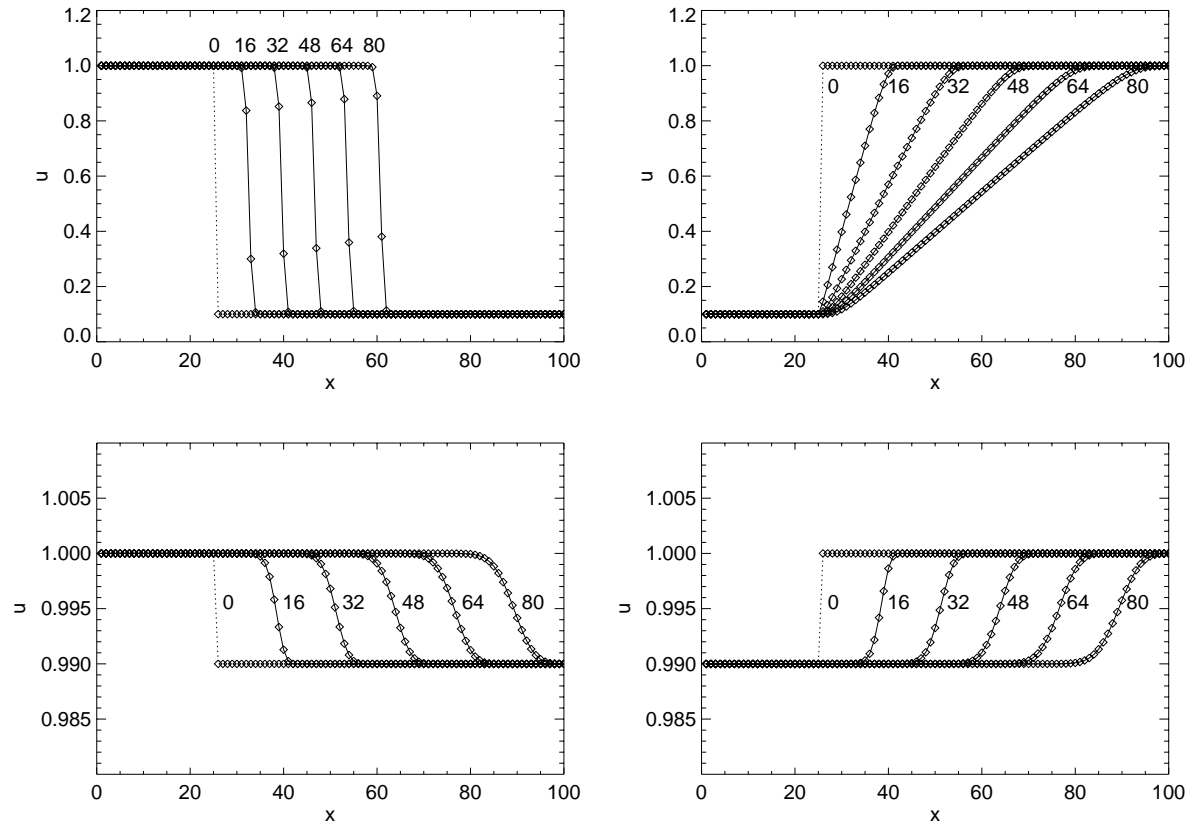


図 2.4: 非粘性バーガーズ方程式のリーマン問題。(左) $u_L = 1$ 、 $u_R = 0.1$ の場合、衝撃波型 ($t = 0.8 \times [0, 16, 32, 48, 64, 80]$)。(右) $u_L = 0.1$ 、 $u_R = 1$ の場合、希薄波型 ($t = 0.8 \times [0, 16, 32, 48, 64, 80]$)。下はそれぞれ、振幅が微小で線形な系としてふるまう場合で、(左) $u_L = 1$ 、 $u_R = 0.99$ の場合と (右) $u_L = 0.99$ 、 $u_R = 1$ の場合。

のように近付ければ小さくなるので、

$$[U(x_{S_L}) - U(x_{S_R})]V = F(U(x_L, t)) - F(U(x_R, t)), \quad (2.90)$$

これをランキン・ユゴニオ関係と呼ぶ。流体力学の基礎方程式はガリレイ変換不変であるので、速度 V で移動する座標系に移っても式の形は変化しない。そこで、普通は衝撃波の伝搬速度と同じ速度で移動する座標系に移って、その座標系での速度 $\hat{v}_x = v_x - V$ を用いると、この系では

$$F(U(x_L, t)) - F(U(x_R, t)) = 0, \quad (2.91)$$

であるから、

$$(\rho \hat{v}_x)_L = (\rho \hat{v}_x)_R \quad (2.92)$$

$$(\rho \hat{v}_x^2 + p)_L = (\rho \hat{v}_x^2 + p)_R \quad (2.93)$$

$$[(\hat{e} + p)\hat{v}_x]_L = [(\hat{e} + p)\hat{v}_x]_R \quad (2.94)$$

という衝撃波前面と後面の物理量の関係をつけるものをランキン・ユゴニオ関係と呼ぶ。

2.4.2 磁気流体力学

結果のみを示すと流れの速度が衝撃波面に垂直な垂直衝撃波を考え、かつ磁場が衝撃波面に平行な向きをしている時、質量流束、運動量流束、エネルギー流束の表式から、

$$(\rho v_x)_L = (\rho v_x)_R \quad (2.95)$$

$$(\rho v_x + p + \frac{B^2}{8\pi})_L = (\rho v_x + p + \frac{B^2}{8\pi})_R \quad (2.96)$$

$$\left[(e + p + \frac{B^2}{4\pi})v_x \right]_L = \left[(e + p + \frac{B^2}{4\pi})v_x \right]_R \quad (2.97)$$

$$(v_x B)_L = (v_x B)_R \quad (2.98)$$

のようになる。

2.5 衝撃波管問題

時間 $t = 0$ での初期状態で圧力、密度などに不連続な分布を持っており時間発展をすると衝撃波を生ずるものを衝撃波管とよぶ。

ここではまず等温ガスに対して、初期に左側 ($x < 0$) に $\rho = \rho_L$ 、右側 ($x > 0$) に $\rho = \rho_R$ ただし、 $\rho_L > \rho_R$ のような分布を考え、そこに生じる流れを調べる。

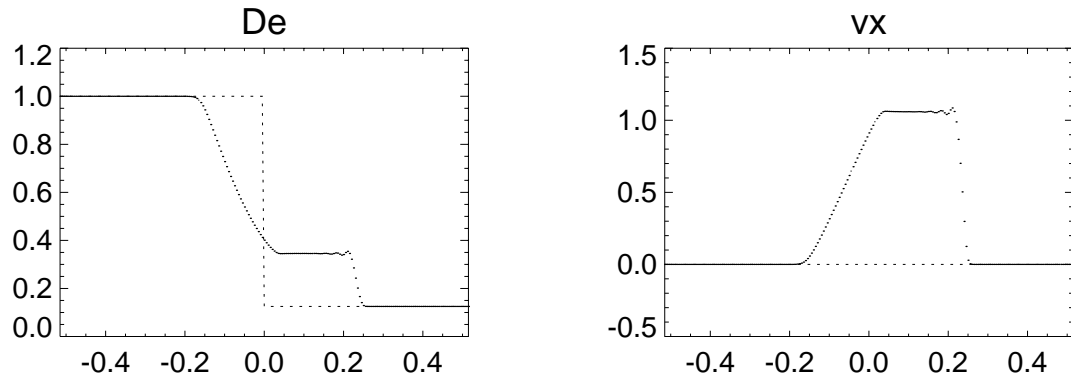


図 2.5: 等温の衝撃波管問題。点線は初期値 $\rho_L = 1$ ($-0.5 < x < 0$)、 $\rho_R = 0.125$ ($0 < x < 0.5$)、 $v_{xL} = v_{xR} = 0$, $c_s = 1$ 、実線は $t = 0.142$ の構造。計算法は修正ラックス・ベンドルフ法。右側に進んで行く等温衝撃波と、左側に進んで行く希薄波が生じていることがわかる。

2.5.1 等温衝撃波

衝撃波に止まった系で、衝撃波前面の速度を u_1 、衝撃波後面の速度を u_2 、それぞれの密度を、 ρ_1 、 ρ_2 、とおくと、ランキン・ユゴニオ関係から、

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2, \quad (2.99)$$

$$\rho_1 (u_1^2 + a^2) = \rho_2 (u_2^2 + a^2), \quad (2.100)$$

ここで、式 (2.99) から

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{u_1}{u_2} = x, \quad (2.101)$$

と置くと、式 (2.100) は

$$x^2 - (M_1^2 + 1)x + M_1^2 = 0, \quad (2.102)$$

となり、これから、

$$x = M_1^2 = \left(\frac{u_1}{a} \right)^2 = \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad (2.103)$$

よって、

$$u_1 u_2 = a^2 \quad (2.104)$$

となる。衝撃波の前方は静止していたとき、静止系から見た時の衝撃波後面の速度 U_2 は、衝撃波面の進む速度を $V_s = u_1$ として

$$U_2 = V_s - u_2 = V_s - \frac{a^2}{V_s}, \quad (2.105)$$

であり、衝撃波後面の密度は

$$\rho_2 = \rho_1 \left(\frac{V_s}{a} \right)^2 \quad (2.106)$$

となる。

2.5.2 等温の場合の Riemann 不変量

連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad (2.107)$$

を ρ で割ったもの

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial \ln \rho}{\partial x} = 0, \quad (2.108)$$

と、運動方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{a^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \quad (2.109)$$

を等温音速 a で割ったもの、

$$\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial t} + u \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial x} + a \frac{\partial \ln \rho}{\partial x} = 0, \quad (2.110)$$

から、式 (2.108) と式 (2.110) を加えると、

$$\frac{\partial (\ln \rho + \mathcal{M})}{\partial t} + (u + a) \frac{\partial (\ln \rho + \mathcal{M})}{\partial x} = 0, \quad (2.111)$$

また、式 (2.108) から式 (2.110) を引くと、

$$\frac{\partial \ln(\rho - \mathcal{M})}{\partial t} + (u - a) \frac{\partial \ln(\rho - \mathcal{M})}{\partial x} = 0, \quad (2.112)$$

が得られる。すなわち、 $dx/dt = u + a$ の特性線の上では、 $J_+ = \ln \rho + \mathcal{M}$ が一定で、 $dx/dt = u - a$ の特性線の上では、 $J_- = \ln \rho - \mathcal{M}$ が一定となる。この J_{\pm} が等温の場合の Riemann 不変量である。

先に基礎方程式を対角化した時の変形を思いだそう (式 2.80-2.85)。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \quad (2.113)$$

を

$$\frac{\partial w_1}{\partial t} + \lambda_1 \frac{\partial w_1}{\partial x} = 0, \quad (2.114)$$

$$\frac{\partial w_2}{\partial t} + \lambda_2 \frac{\partial w_2}{\partial x} = 0, \quad (2.115)$$

$$(2.116)$$

のように書き換えた。この等温のガスダイナミクスでは、 $dx/dt = u - a$ にそって、 w_1 が一定、 $dx/dt = u + a$ にそって、 w_2 が一定に進化する。

流束ヤコビアン A が一定で、微分演算と交換する時は、

$$LU = W, \quad (2.117)$$

でこのベクトル W の成分 $(w^{(1)}, w^{(2)}, \dots)$ が、特性線 $dx/dt = \lambda_1$ 、 $dx/dt = \lambda_2$ 、 \dots 、の上で一定（リーマン不変量と呼ぶ）つまり

$$dW = d(LU) = 0, \quad (2.118)$$

になるが、一般に、流束ヤコビアン A が一定ではないが対角化できる時、どのような量が一定に保たれるかを考える。

式 (2.118) に対応するものが、

$$LdU = dW, \quad (2.119)$$

であることは容易に理解できよう。これを成分表示すると、

$$(L)_{il} du_l = dw_i, \quad (2.120)$$

で、これは、 du_j の間に関係があることをしめしている。 i 番めの特性線に沿っては

$$(\ell^{(i)})_l du_l = 0, \quad (2.121)$$

が成り立つ。

これを、等温ガスの場合に適応して、 J_{\pm} が不変量になっていることを示してみよう。式 (2.84) より、 $\lambda_1 = u - a$ に対しては、左固有ベクトル (L の第 1 行目のベクトル $\ell^{(1)}$) は、

$$\ell^{(1)} = \left(\frac{u+a}{2a} \quad -\frac{1}{2a} \right), \quad (2.122)$$

で、式 (2.120) で、 $u_1 = \rho$ 、 $u_2 = \rho u$ であることに注意すると、

$$dw_1 = \frac{u+a}{2a} d\rho - \frac{1}{2a} d(\rho u) = 0, \quad (2.123)$$

展開すると

$$a d\rho - \rho du = 0, \quad (2.124)$$

これから

$$d(\mathcal{M} - \log \rho) = 0, \quad (2.125)$$

となり、先の J_- が保存量であることが確かめられた。

問題 同じようにして、特性線 $dx/dt = u + a$ に沿って、 J_+ が保存量であることを示せ。

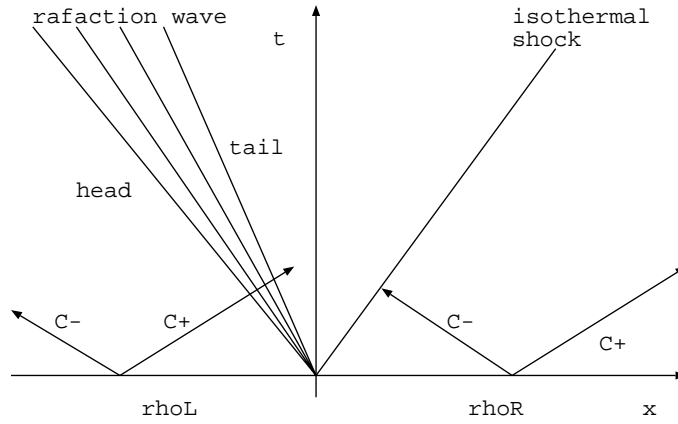


図 2.6: 等温の衝撃波管問題。

2.5.3 等温の場合の衝撃波管の解析解

マイナス方向に希薄波が伝搬する。その上では右向きに伝わる特性線 $dx/dt = u + a$ ($C+$) に沿って、 J_+ が一定である。特性線 C_+ は、もっとも左側の静止している部分につながっていることに注意すると、

$$J_+ = \ln \rho + \mathcal{M} = \ln \rho_L, \quad (2.126)$$

ここで ρ_L はもっとも左側の静止している部分の密度である。これから、

$$\frac{\rho}{\rho_L} = \exp(-\mathcal{M}), \quad (2.127)$$

が成り立つ。希薄波のテール（この場合もっとも右側）の密度と速度が、衝撃波後面のそれ (U_2 , ρ_2) に等しいことを用いると、

$$\frac{\rho_2}{\rho_L} = \exp\left(-\frac{U_2}{a}\right), \quad (2.128)$$

等温衝撃波の条件式 (2.105、2.106) から、もっとも右側の静止している衝撃波前面の密度 ρ_R と、もっとも左側の静止している希薄の先の密度 ρ_L と、衝撃波の速度の関係が以下のように得られる。

$$\frac{\rho_R \left(\frac{V_s}{a}\right)^2}{\rho_L} = \exp\left[-\left(\frac{V_s}{a} - \frac{a}{V_s}\right)\right], \quad (2.129)$$

これは $V_s/a = \xi$ とおくと、

$$\xi^2 \exp\left(\xi - \frac{1}{\xi}\right) = \frac{\rho_L}{\rho_R}, \quad (2.130)$$

となる。この解は数値的に求めると、 $\rho_L/\rho_R = 10$ のときに、 $\xi = 1.75194\dots$ で $\xi - 1/\xi = 1.1811\dots$ のように求められる。

すなわち、初期の密度の不連続の位置を原点にとり、 $a = 1$ とすると、

$$\rho = \begin{cases} \rho_R & x > \xi t \\ \rho_R \xi^2 & (\xi - \frac{1}{\xi} - 1)t < x < \xi t \\ \rho_L \exp(-\mathcal{M}) & -t < x < (\xi - \frac{1}{\xi} - 1)t \\ \rho_L & x < -t \end{cases} \quad (2.131)$$

$$U = \begin{cases} 0 & x > \xi t \\ \xi - \frac{1}{\xi} & (\xi - \frac{1}{\xi} - 1)t < x < \xi t \\ \frac{x+t}{t} & -t < x < (\xi - \frac{1}{\xi} - 1)t \\ 0 & x < -t \end{cases} \quad (2.132)$$

となる。これを数値計算の結果と比較する。

2.5.4 断熱気体の衝撃波管問題

一般の断熱気体については、第3日目にその流束ヤコビアン固有値、固有ベクトルなどを学ぶが、結果だけを述べると、

$$\frac{\partial U}{\partial t} + M \frac{\partial U}{\partial x} = 0, \quad (2.133)$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ v_x \\ p \end{pmatrix}, M = \begin{pmatrix} v_x & \rho & 0 \\ 0 & v_x & 1/\rho \\ 0 & \gamma p & v_x \end{pmatrix}, \quad (2.134)$$

は、固有値は音速 $c_s = (\gamma p / \rho)^{1/2}$ を使って、

$$\lambda_1 = u - c_s, \quad (2.135)$$

$$\lambda_2 = u, \quad (2.136)$$

$$\lambda_3 = u + c_s, \quad (2.137)$$

$$(2.138)$$

であることがわかる。等温の場合との違いは、 $u \pm c_s$ に加えて、 $\lambda_2 = u$ で伝搬する波が加わったことである。

初期に不連続を持つ分布から進化した衝撃波管問題では、第3の特性線に対応して、衝撃波、希薄波以外に第3の不連続が接触不連続面が発生する（場合がある）。

固有値 λ_i に属する、左固有ベクトル $\ell^{(i)}$ は、

$$\ell^{(1)} = \frac{1}{2\rho c_s^2} (0, -\rho c_s, 1) \quad (2.139)$$

$$\ell^{(2)} = \frac{1}{\rho c_s^2} (c_s^2, 0, -1) \quad (2.140)$$

$$\ell^{(3)} = \frac{1}{2\rho c_s^2} (0, \rho c_s, 1) \quad (2.141)$$

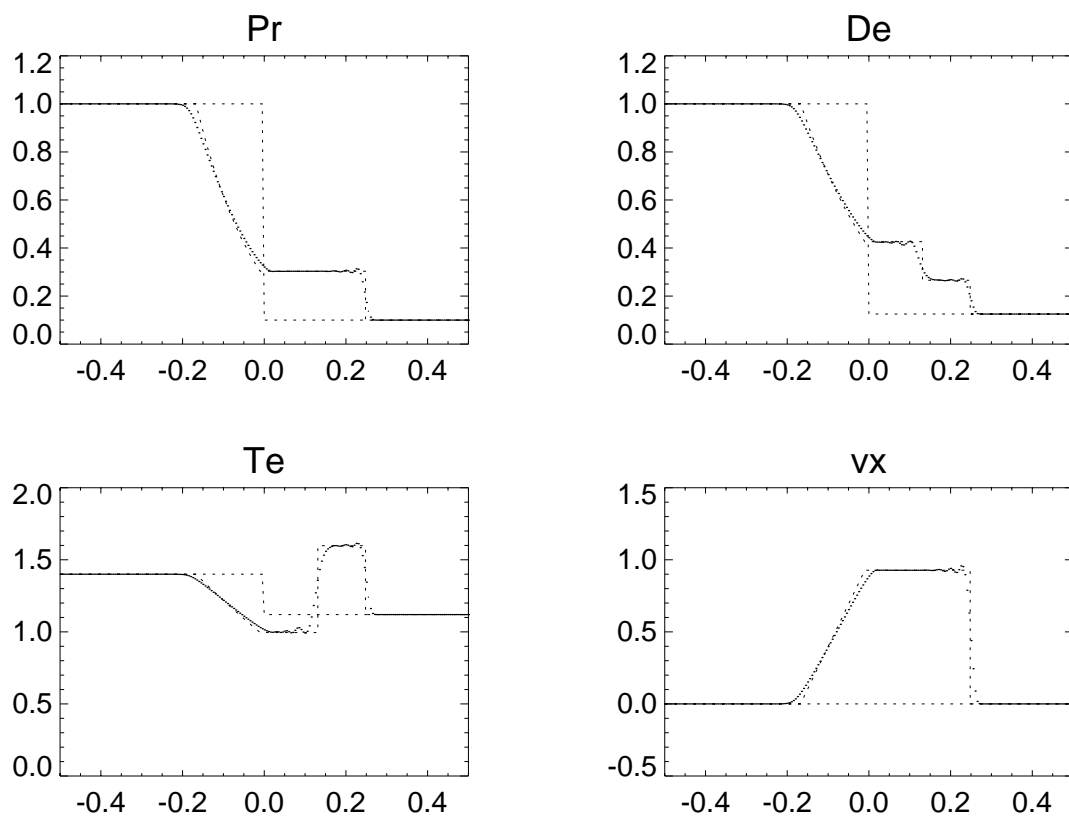


図 2.7: 断熱気体の衝撃波管問題。点線は初期値 $\rho_L = 1(-0.5 < x < 0)$ 、 $\rho_R = 0.125(0 < x < 0.5)$ 、 $p_L = 1(-0.5 < x < 0)$ 、 $p_R = 0.1(0 < x < 0.5)$ 、 $v_{xL} = v_{xR} = 0$ 、 $\gamma = 1.4$ 、実線は $t = 0.142$ の構造。計算法は修正ラックス・ベンドルフ法。右側に進んで行く衝撃波と、左側に進んで行く希薄波、その間に接触不連続面が生じていることがわかる。

になるから、先に導いたように、 LdU を作ると、

$$\frac{dx}{dt} = u - c_s \text{ にそって } \ell^{(1)} dU = \frac{1}{2\rho c_s^2} (-\rho c_s du + dp) = 0 \quad (2.142)$$

$$\frac{dx}{dt} = u \text{ にそって } \ell^{(2)} dU = \frac{1}{\rho c_s^2} (c_s^2 d\rho - dp) = 0 \quad (2.143)$$

$$\frac{dx}{dt} = u + c_s \text{ にそって } \ell^{(3)} dU = \frac{1}{2\rho c_s^2} (\rho c_s du + dp) = 0 \quad (2.144)$$

(λ_2 に属する波である) 接触不連続面越えては、 $dx/dt = u - c_s$ と $dx/dt = u + c_s$ の特性線が左右を結んでいる。したがって接触不連続面越の左右で、

$$-\rho c_s du + dp = 0 \quad (2.145)$$

$$\rho c_s du + dp = 0 \quad (2.146)$$

となっていなければならないことがわかる。これから $dp = 0$ 、 $du = 0$ すなわち接触不連続面では密度 (及び温度) のみが不連続になることがわかる。

断熱気体の流体力学での Riemann 不変量

λ_1 に属する (つまり $dx/dt = u - c_s$ の特性線が関係する) 希薄波では、 $J_+ = u + 2c_s/(\gamma - 1)$ および、エントロピー s が一定、 λ_3 に属する希薄波では、 $J_- = u - 2c_s/(\gamma - 1)$ および、エントロピー s が一定となる。

これは以下のようにして示すことができる。 λ_1 に属する特性線を跨いで、

$$\frac{dx}{dt} = u \text{ にそって } \ell^{(2)} dU = \frac{1}{\rho c_s^2} (c_s^2 d\rho - dp) = 0 \quad (2.147)$$

$$\frac{dx}{dt} = u + c_s \text{ にそって } \ell^{(3)} dU = \frac{1}{2\rho c_s^2} (\rho c_s du + dp) = 0 \quad (2.148)$$

が成り立つが、これから、

$$\rho c_s du + c_s^2 d\rho = 0, \quad (2.149)$$

これから、

$$\int du + \int \frac{c_s}{\rho} d\rho = 0, \quad (2.150)$$

が得られる。 c_s が $\rho^{(\gamma-1)/2}$ に比例することを用いると、第2項も積分できて、

$$u + \frac{2c_s}{\gamma - 1} = J_+, \quad (2.151)$$

が一定値をとる。

λ_3 に属する特性線を跨いでも同様の議論ができて、

$$u - \frac{2c_s}{\gamma - 1} = J_-, \quad (2.152)$$

が一定値をとることが示せる。

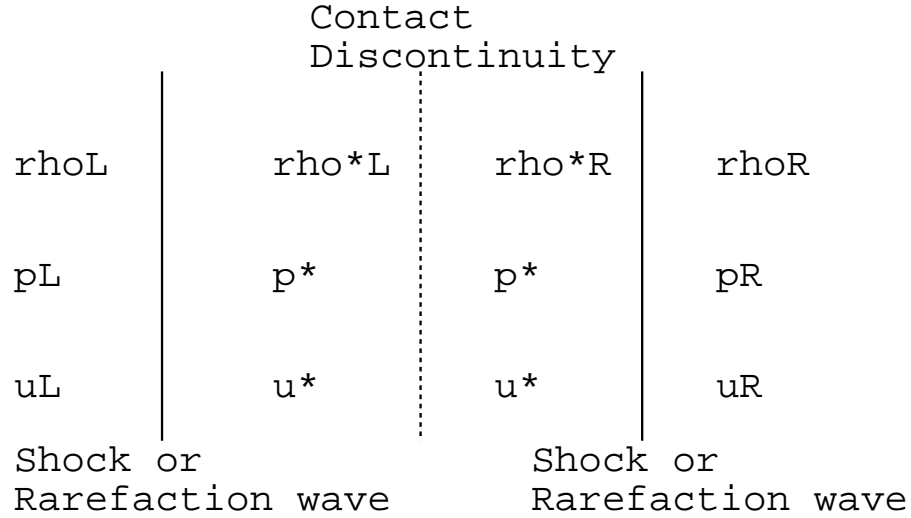


図 2.8: 断熱気体の衝撃波管問題。断熱気体の場合は、真空が現れない普通の問題については、 $dx/dt = u \pm c_s$ の特性線に関連した非線形の波が衝撃波か希薄波として現れ、その中間に、接触不連続面を生じる。初期の密度、圧力、速度が、 $x < 0$ に対しては、 ρ_L 、 p_L 、 u_L 、 $x > 0$ に対しては、 ρ_R 、 p_R 、 u_R であるとき、中間（希薄波のテールの外、衝撃波の後ろ面）の速度と圧力が u_* と p_* 、接触不連続面の左側の密度が ρ_{*L} 、右側の密度が ρ_{*R} 、衝撃波の速度が V_s であるとして、それらの間の関係を求めることによって、衝撃波管問題の解を求めることができる。

2.5.5 断熱気体の衝撃波管問題解析解*

等温の時に示したように、断熱ガスの衝撃波管問題についても、iteration を用いて解析的に解を求めることができる（リーマン解法プログラムと呼ぶ）。興味ある方々は以下を読んでいただきたい。

初期の密度、圧力、速度が、 $x < 0$ に対しては、 $U_L = (\rho_L, p_L, u_L)$ 、 $x > 0$ に対しては、 $U_R = (\rho_R, p_R, u_R)$ である Riemann 問題を考える（図 2.8 参照）。これらの値の組合せによって、左右には衝撃波もしくは希薄波が伝搬する。左側に伝わる波（衝撃波もしくは希薄波）の先の領域は U_L の状態が、右側に伝わる波（衝撃波もしくは希薄波）の先の領域は U_R の状態が、保たれている。その間、 U_L と U_R 両方に依存する中間（希薄波のテールの外、衝撃波の後ろ面）の領域の速度と圧力が u_* と p_* を求めよう。

p_* は、次の方程式の解 p で与えられる。

$$f(p, U_L, U_R) \equiv f_L(p, U_L) + f_R(p, U_R) + \Delta u = 0, \quad (2.153)$$

ここで、

$$\Delta u \equiv u_R - u_L, \quad (2.154)$$

である。ここで、 f_L と f_R は左、右に進む不連続が衝撃波か希薄波かによって次のように与え

られる。

$$f_L(p, U_L) = \begin{cases} (p - p_L) \left(\frac{A_L}{p + B_L} \right)^{1/2} & \text{if } p > p_L \text{ (shock)} \\ \frac{2a_L}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p}{p_L} \right)^{(\gamma-1)/(2\gamma)} - 1 \right] & \text{if } p < p_L \text{ (rarefaction)} \end{cases} \quad (2.155)$$

$$f_R(p, U_R) = \begin{cases} (p - p_R) \left(\frac{A_R}{p + B_R} \right)^{1/2} & \text{if } p > p_R \text{ (shock)} \\ \frac{2a_R}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p}{p_R} \right)^{(\gamma-1)/(2\gamma)} - 1 \right] & \text{if } p < p_R \text{ (rarefaction)} \end{cases} \quad (2.156)$$

ここで、

$$\begin{aligned} A_L &= \frac{2}{(\gamma + 1)\rho_L}, \\ A_R &= \frac{2}{(\gamma + 1)\rho_R}, \\ B_L &= \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}p_L, \\ B_R &= \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}p_R, \end{aligned} \quad (2.157)$$

である。

この解を使って、 u_* は

$$u_* = \frac{u_L + u_R}{2} + \frac{f_R(p_*) - f_L(p_*)}{2} \quad (2.158)$$

で与えられる。

左に進む衝撃波

左に進む衝撃波の場合の f_L を求めてみよう。左に進む衝撃波の速度を $V_L < 0$ とする。 V_L で動く座標での、ガスの速度は、 $\hat{u}_L = u_L - V_L$ 、 $\hat{u}_* = u_* - V_L$ である。ランキン・ユゴニオ条件 (式 2.94) は

$$\rho_L \hat{u}_L = \rho_{*L} \hat{u}_*, \quad (2.159)$$

$$\rho_L \hat{u}_L^2 + p_L = \rho_{*L} \hat{u}_*^2 + p_*, \quad (2.160)$$

$$(\hat{e}_L + p_L) \hat{u}_L = (\hat{e}_{*L} + p_*) \hat{u}_*, \quad (2.161)$$

で与えられる。ここで、 ρ_{*L} は接触不連続面の左側で左へ進む衝撃波の右側の密度を、 \hat{e}_{*L} は接触不連続面の左側で左へ進む衝撃波の右側のガスの V_L で動く座標で見た全エネルギーである。

通常行なうように、質量流束 (式 2.160) を

$$Q_L = \rho_L \hat{u}_L = \rho_{*L} \hat{u}_* \quad (2.162)$$

において、他の式を書き換える。運動量流束の式 (2.161) から、

$$Q_L = -\frac{p_* - p_L}{\hat{u}_* - \hat{u}_L} = -\frac{p_* - p_L}{u_* - u_L}, \quad (2.163)$$

したがって、 u_* を求める式として

$$u_* = u_L - \frac{p_* - p_L}{Q_L}, \quad (2.164)$$

が得られる。

また、 $\hat{u}_L = Q_L/\rho_L$ 、 $\hat{u}_* = Q_L/\rho_{*L}$ を式 (2.163) に代入すると、

$$Q_L^2 = -\frac{p_* - p_L}{\frac{1}{\rho_{*L}} - \frac{1}{\rho_L}} \quad (2.165)$$

となる。ランキン・ユゴニオ関係から密度と圧力の不連続の間の関係

$$\frac{\rho_L}{\rho_{*L}} = \frac{\frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{p_*}{p_L}}{\frac{\gamma-1}{\gamma+1} + \frac{p_*}{p_L}} \quad (2.166)$$

を、この式 (2.165) に代入すると、

$$Q_L^2 = \frac{\gamma+1}{2} \left(p_* + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} p_L \right) \rho_L \quad (2.167)$$

がえられる。これを式 (2.164) に代入すると、 u_* と p_* の間の関係を表す式が得られ、

$$u_* = u_L - (p_* - p_L) \left[\frac{\gamma+1}{2} \left(p_* + \frac{\gamma-1}{\gamma+1} p_L \right) \rho_L \right]^{-1/2}, \quad (2.168)$$

となり、この式は

$$u_* = u_L - f_L(p_*, \mathbf{U}_L), \quad (2.169)$$

で

$$f_L(p_*, \mathbf{U}_L) = (p_* - p_L) \left[\frac{A_L}{p_* + B_L} \right]^{1/2} \quad (2.170)$$

および

$$A_L = \frac{2}{(\gamma+1)\rho_L}, \quad B_L = \frac{\gamma-1}{\gamma+1} p_L \quad (2.171)$$

これは、衝撃波を通り抜けた後の u_* と p_* の間の関係を表す式で、先に上げた式 (2.155) の衝撃波の場合に一致する。

左に進む希薄波

希薄波の内部ではエントロピーの生成は起こらないので（起こるのは衝撃波のみ）、希薄波をはさんで

$$\rho_{*L} = \rho_L \left(\frac{p_*}{p_L} \right)^{1/\gamma} \quad (2.172)$$

が成り立つ。

式 (2.151) のリーマン不変量 J_+ が左に進む希薄波を越えて一定であることを用いると、

$$u_L + \frac{2c_{sL}}{\gamma - 1} = u_* + \frac{2c_{s*L}}{\gamma - 1} \quad (2.173)$$

が成り立つ。ここで、音速 c_{s*L} を

$$c_{s*L} = c_{sL} \left(\frac{p_*}{p_L} \right)^{(\gamma-1)/(2\gamma)}, \quad (2.174)$$

で書き換えると、

$$u_* = u_L + \frac{2c_{sL}}{\gamma - 1} \left[1 - \left(\frac{p_*}{p_L} \right)^{(\gamma-1)/(2\gamma)} \right] \quad (2.175)$$

となる。これは、希薄波を通り抜けたガスがもつ u_* と p_* の間の関係を記述している。最初に上げた式で希薄波の場合、すなわち、

$$u_* = u_L - f_L(p_*, \mathbf{U}_L), \quad (2.176)$$

$$f_L(p_*, \mathbf{U}_L) = \frac{2c_{sL}}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p_*}{p_L} \right)^{(\gamma-1)/(2\gamma)} - 1 \right], \quad (2.177)$$

と一致している。

右に進む衝撃波

左に進む場合と同様の計算を行えば、

$$u_* = u_R + f_R(p_*, \mathbf{U}_R), \quad (2.178)$$

で

$$f_R(p_*, \mathbf{U}_R) = (p_* - p_R) \left[\frac{A_R}{p_* + B_R} \right]^{1/2} \quad (2.179)$$

および

$$A_R = \frac{2}{(\gamma + 1)\rho_R}, \quad B_R = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} p_R \quad (2.180)$$

右に進む希薄波

左に進む場合と同様の計算を行なえば、

$$u_* = u_R + f_R(p_*, \mathbf{U}_R), \quad (2.181)$$

$$f_R(p_*, \mathbf{U}_R) = \frac{2c_{sR}}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p_*}{p_R} \right)^{(\gamma-1)/(2\gamma)} - 1 \right], \quad (2.182)$$

断熱ガスのリーマン解法

左側の波が与える u_* と右側のそれが等しい条件から、

$$u_R + f_R(p_*, \mathbf{U}_R) = u_L - f_L(p_*, \mathbf{U}_L), \quad (2.183)$$

書き換えると、

$$f_R(p_*, \mathbf{U}_R) + f_L(p_*, \mathbf{U}_L) + u_R - u_L = 0, \quad (2.184)$$

で、この式を、満足する p_* の値が実現する中間の領域の圧力である。 p_* が一端求まれば、

$$u_* = u_R + f_R(p_*, \mathbf{U}_R), \quad (2.185)$$

または

$$u_* = u_L - f_L(p_*, \mathbf{U}_L), \quad (2.186)$$

を用いれば、中間の領域の速度が求められる。

最後に、衝撃波、希薄波の伝搬速度を求めておこう。左に進む衝撃波面の速度は

$$\rho_L(u_L - V_L) = \rho_{*L}(u_* - V_L) = Q_L \quad (2.187)$$

から

$$V_L = u_L - \frac{Q_L}{\rho_L}, \quad (2.188)$$

であり、式 (2.163) を用いれば、衝撃波の速度を決めることができる。

次に希薄波についても同じように左に進むものを考えると、希薄波の頭 (Head) と尾 (Tail) はそれぞれ異なるリーマン不変量を持つ $dx/dt = u - c_s$ で進む特性線に一致している。すなわち、希薄波の頭と尾の進行速度、 S_{HL} および S_{TL} は

$$S_{HL} = u_L - a_L, \quad S_{TL} = u_* - a_{*L}, \quad (2.189)$$

となる。また、接触不連続面は

$$S_0 = u_*, \quad (2.190)$$

で伝搬する。

例題

図 2.7 に示した衝撃波管問題を解析的に解いてみよう。

$\rho_L = 1$ 、 $\rho_R = 0.125$ 、 $p_L = 1$ 、 $p_R = 0.1$ 、 $u_L = u_R = 0$ 、 $\gamma = 1.4$ から、式 (2.153) を満足する p を数値的に求めると、 $p_* = 0.30313$ 、 $u_* = 0.92745$ のようになる。

これから、 $\rho_{*L} = 0.42632$ 、 $\rho_{*R} = 0.26557$ 、 $S_{HL} = -1.18322$ 、 $S_{TL} = -0.07027$ 、 $S_0 = u_* = 0.92745$ 、 $V_R = 1.75216$ 、 $t = 0.142$ での位置を求めると、希薄波の頭 $x = -0.16802$ 、希薄波の尾の位置 $x = -0.00998$ 、衝撃波の位置 $x = 0.24881$ のように求めることができる。

練習問題：図 2.7 に示した衝撃波管問題の解析解を求めるプログラムを作成せよ。

参考文献

この章の参考文献として、以下のものを上げておく。

- (1) 宇宙流体力学 坂下志郎、池内了 培風館
- (2) 流体力学 巽友正 培風館
- (3) 流体力学の数値計算法 藤井孝蔵 東京大学出版会（初期の版には誤植が多いので注意必要）
- (4) Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics 2nd Edition E.F.Toro Springer

(1)、(2) はここで取り扱う圧縮性の流体力学についても詳しく記述してある教科書で、基礎方程式の導出、ランキン・ユゴニオ関係の導出など、ここで記述をはしった部分について参考にして欲しい。(3)、(4) は数値流体力学の教科書。

第3章 流体および磁気流体力学方程式の風上差分

花輪知幸（名大理）

3.1 はじめに

私たちは初日に移流方程式や Burgers 方程式の数値解法として、風上差分法を習った。風上差分法は衝撃波の取り扱いに優れていることや、非物理的な数値振動を起こさない(=TVD 条件を遵守する)ことを学んだ。昨日は、流体力学方程式や磁気流体力学方程式は波動方程式の集合体—システム方程式—であることを学んだ。この2日間の学習成果を総合すると、風上差分法は流体力学方程式や磁気流体力学方程式の数値解法としても有効であろうと容易に想像できる。実際、衝撃波を伴う(磁気)流れを解析する方法として多くの数値計算コードに採用されている。

「流束は風上で評価せよ」という風上差分法の原理(概念)は単純であるが、これを実際に流体力学方程式や磁気流体力学方程式に応用することは簡単ではない。最初に習った線型波動方程式は1成分で波の位相速度が一定であったのに対し、流体力学方程式は連立であり波の速度も時間や場所によって異なるためである。これらの違いをまとめたのが表 3.1 である。

名称	変数	自由度	線型/非線型	方程式
移流方程式	u	1	線型	3.1
Burgers 方程式	u	1	非線型	3.2, 3.3
Maxwell 方程式	E_y, E_z, B_x, B_y	4	線型	3.4, 3.5
流体力学方程式	ρ, v, P	3	非線型	3.6
磁気流体力学方程式	$\rho, v_x, v_y, v_z, B_y, B_z$	7	非線型	3.7

表 3.1: さまざまな波動方程式の比較。変数の数は独立変数を (x, t) とした 1 次元の場合で数えた。

移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

Burgers 方程式 [波の速度を明示した形式(上)と流束を明示した形式(下)]

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0 \quad (3.3)$$

(真空中の)Maxwell 方程式 [ベクトル形式と成分ごとに分解した形式]

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{B} &= 0 \\ \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} &= 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_y}{\partial t} + c \frac{\partial B_z}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} - c \frac{\partial B_y}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} - c \frac{\partial E_z}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial B_z}{\partial t} + c \frac{\partial E_y}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

流体力学方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ \frac{\rho v^2}{2} + \frac{P}{\gamma - 1} \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + P \\ \frac{\rho v^3}{2} + \frac{\gamma P v}{\gamma - 1} \end{pmatrix} = 0 \quad (3.6)$$

磁気流体力学方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \\ B_y \\ B_z \\ \rho E \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho u^2 + P + \frac{\rho u}{B_y^2 + B_z^2 - B_x^2} \\ \rho u v - \frac{B_x B_y}{4\pi} \\ \rho u w - \frac{B_x B_z}{4\pi} \\ B_y u - v B_x \\ B_z u - w B_x \\ \rho H u - \frac{B_x (B_x u + B_y v + B_z w)}{4\pi} \end{pmatrix} = 0 \quad (3.7)$$

$$E = \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \frac{P}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}{8\pi\rho} \quad (3.8)$$

$$H = \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \frac{\gamma P}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}{4\pi\rho} \quad (3.9)$$

この表では波動方程式が数学的に易しいほうから難しい方へと並べられている。Burgers 方程式は非線型なので移流方程式より難しい。Maxwell 方程式は連立方程式で変数が多いので難し

い。流体力学方程式は非線型である上に連立なので一層難しい。また変数が増えるので、磁気流体力学方程式はさらに一層難しい。

最初から流体力学方程式や磁気流体力学方程式の風上差分を考えるのは難しいので、本講義では最初に Maxwell 方程式を例にとり、連立方程式の解き方を学ぶ。次に Burgers 方程式の風上差分を簡単におさらいし、流体力学および磁気流体力学の風上差分を学ぶ。

3.2 Maxwell 方程式の数値解法

Maxwell 方程式 (3.5) の 1 段目と 4 段目の和と差、2 段目と 3 段目の和と差は

$$\frac{\partial}{\partial t}(E_y + B_z) + c \frac{\partial}{\partial x}(E_y + B_z) = 0 \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(E_y - B_z) - c \frac{\partial}{\partial x}(E_y - B_z) = 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(E_z + B_y) - c \frac{\partial}{\partial x}(E_z + B_y) = 0 \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(E_z - B_y) + c \frac{\partial}{\partial x}(E_z - B_y) = 0 \quad (3.13)$$

と表される。このように書き換えると 1 段目の従属変数は $E_y + B_z$ だけとなる。従って改めて $u = E_y + B_z$ と置き換えると、この方程式は移流方程式に変形できることが分かる。2 段目以降も同様なので、

$$\frac{\partial w_1}{\partial t} + c \frac{\partial w_1}{\partial x} = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial w_2}{\partial t} - c \frac{\partial w_2}{\partial x} = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial w_3}{\partial t} - c \frac{\partial w_3}{\partial x} = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial w_4}{\partial t} + c \frac{\partial w_4}{\partial x} = 0 \quad (3.17)$$

$$w_1 = E_y + B_z \quad (3.18)$$

$$w_2 = E_y - B_z \quad (3.19)$$

$$w_3 = E_z - B_y \quad (3.20)$$

$$w_4 = E_z + B_y \quad (3.21)$$

$$E_y = \frac{w_1 + w_2}{2} \quad (3.22)$$

$$E_z = \frac{w_3 + w_4}{2} \quad (3.23)$$

$$B_y = \frac{w_1 - w_2}{2} \quad (3.24)$$

$$B_z = \frac{w_3 - w_4}{2} \quad (3.25)$$

と書き換えられる。Maxwell 方程式は式 (3.14)-(3.17) のような移流方程式の集まりである。これらはそれぞれ独立なので、初日に習った風上差分法で解くことができる。この移流方程式の

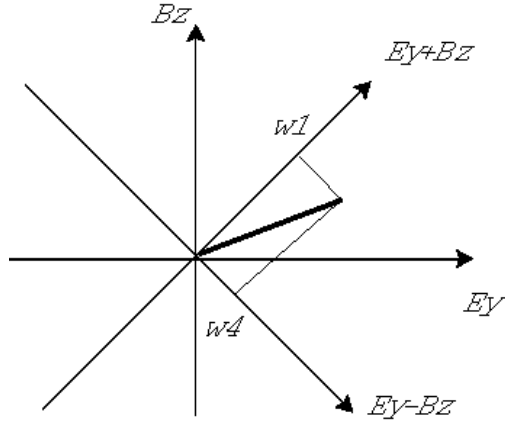


図 3.1: 変数 E_y , B_z , w_1 , w_4 の関係を幾何学的に示した図。

変数 w_1, w_2, w_3, w_4 は式 (3.18) - (3.21) より求めることができる。また式 (3.22) - (3.25) を用いれば、 E_y, E_z, B_y, B_z を求めることができる (図 3.2)。

[発展問題] 変数 $E_y + B_z$ や $E_y - B_z$ の物理的な意味を述べよ。

上記の結果を見通しよくするために、行列を使って計算してみよう。

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} E_y \\ E_z \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & -c & 0 \\ 0 & -c & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} E_y \\ E_z \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} = 0 \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \quad (3.27)$$

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} E_y \\ E_z \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & -c & 0 \\ 0 & -c & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

方程式 (3.27) を移流方程式 [式 (3.1)] と比較すると、変数 u がベクトルになったのに伴い、波の速度 c が行列 A に変化していることに気づく。Maxwell の方程式に現れる波の速度 $\pm c$ は、行列 A の固有値として求めることができる。

$$|A - \lambda I| = 0 \quad (3.30)$$

ここで I は単位行列を表す。具体的に計算すると

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 & c \\ 0 & -\lambda & -c & 0 \\ 0 & -c & -\lambda & 0 \\ c & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \leftrightarrow \quad (\lambda - c)^2 (\lambda + c)^2 = 0 \quad (3.31)$$

このようにして求めた固有値 (λ_k) と右固有ベクトル (r_k)

$$A r_k = \lambda_k r_k \quad (3.32)$$

$$r_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = c \quad (3.33)$$

$$r_2 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 0 \\ -1/2 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = -c \quad (3.34)$$

$$r_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = -c \quad (3.35)$$

$$r_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_4 = c \quad (3.36)$$

が求められる。この右固有ベクトルと式 (3.22)-(3.25) が類似しているので、ベクトル u を右固有ベクトルの線型結合

$$u = \begin{pmatrix} E_y \\ E_z \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} = w_1 r_1 + w_2 r_2 + w_3 r_3 + w_4 r_4 = \sum_{k=1}^4 w_k r_k \quad (3.37)$$

で表すことができる。これからの計算を簡単にするため、縦ベクトル w 、横ベクトル ${}^t w$ 、行列 R を

$$w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

$${}^t w = (w_1, w_2, w_3, w_4) \quad (3.39)$$

$$R = \begin{pmatrix} {}^t r_1 \\ {}^t r_2 \\ {}^t r_3 \\ {}^t r_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

と定義すると

$$u = R w \quad (3.41)$$

と表すことができる。この行列 R の逆行列を L とすると、

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \ell_3 \\ \ell_4 \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

$$\ell_1 = (1/2, 0, 0, 1/2) = 2 {}^t r_1 \quad (3.43)$$

$$\ell_2 = (1/2, 0, 0, -1/2) = 2 {}^t r_2 \quad (3.44)$$

$$\ell_3 = (0, 1/2, 1/2, 0) = 2 {}^t r_3 \quad (3.45)$$

$$\ell_4 = (0, 1/2, -1/2, 0) = 2 {}^t r_4 \quad (3.46)$$

従って逆行列 L は、 R の行と列を入れ替え 2 倍したものに他ならない。これは固有ベクトルが互いに直行していて、その長さが $|r_k|^2 = 2$ だからである。このため逆行列 L の各行もやはり行列 A の (左) 固有ベクトルとなる。

$$\ell_k A = \lambda_k \ell_k \quad (3.47)$$

この逆行列を使うと、式 (3.18)-(3.21) は、

$$w = L u \quad (3.48)$$

とまとめられる。これは式 (3.41) に L を掛け、右辺と左辺を取り替えたものとも等しい。

このようにして決められた行列 R と L を使うと、

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial(Lu)}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial(Lu)}{\partial x} = 0 \quad (3.50)$$

$$RL = LR = I \quad (3.51)$$

$$\Lambda = LAR = \begin{pmatrix} -c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

ここまでの一連の計算は、線型代数の時間に習った行列の対角化である。¹

変数 $w = Lu$ についての方程式は独立で線型な移流方程式の集まりなので、これらはそれぞれ1章で習った風上差分で解ける。求まった値を変換により $u = Lw$ に戻せば Maxwell 方程式も解ける。

この節の教訓：連立方程式 (システム方程式) では波の速度が行列で表されるので、行列の固有値・固有ベクトルを計算し、成分ごとの簡単な方程式にすると良い。

3.3 Burgers 方程式の復習と Maxwell 方程式の風上数値流束

Burgers 方程式では変数 u の値により波の位相速度が変わる。また Maxwell 方程式では成分により位相速度が $\pm c$ の値をとる。このように位相速度が一定で無い場合の風上数値流束を復習しよう。

Burgers 方程式の場合

$$u_j(t + \Delta t) = u_j(t) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{f}_{j+1/2} - \tilde{f}_{j-1/2}) \quad (3.53)$$

$$\tilde{f}_{j+1/2} = \begin{cases} \frac{[u_j(t)]^2}{2} & [u_{j+1}(t) + u_j(t) > 0] \\ \frac{[u_{j+1}(t)]^2}{2} & [u_{j+1}(t) + u_j(t) \leq 0] \end{cases} \quad (3.54)$$

式 (3.54) は

$$\tilde{f}_{j+1/2} = \frac{1}{2} \left[\frac{[u_{j+1}(t)]^2 + [u_j(t)]^2}{2} - \left| \frac{u_{j+1} + u_j}{2} \right| (u_{j+1} - u_j) \right] \quad (3.55)$$

この結果から類推すると、対角化された Maxwell 方程式は

$$\frac{\partial w}{\partial t} + LAR \frac{\partial w}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f_w}{\partial x} = 0 \quad (3.56)$$

$$f_w = LARw = \Lambda w \quad (3.57)$$

¹第2章でも同様に行列の対角化を行った。

なので、これを風上差分化した公式は

$$\mathbf{w}_j(t + \Delta t) = \mathbf{w}_j(t) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{\mathbf{f}}_{w,j+1/2} - \tilde{\mathbf{f}}_{w,j-1/2}) \quad (3.58)$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_{w,j+1/2} = \frac{1}{2} [\mathbf{f}_{w,j+1} + \mathbf{f}_{w,j} - |\Lambda| (\mathbf{w}_{j+1} - \mathbf{w}_j)] \quad (3.59)$$

と予想される。ここで行列 $|\Lambda|$ は対角行列の絶対値なので、対角要素の絶対値をとったもの

$$|\Lambda| = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} = c \quad (3.60)$$

と定義する。

元の変数で考えると

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_u}{\partial x} = 0 \quad (3.61)$$

$$\mathbf{f}_u = \mathbf{A} \mathbf{u} \quad (3.62)$$

なので、これを風上差分化した公式は

$$\mathbf{u}_j(t + \Delta t) = \mathbf{u}_j(t) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{\mathbf{f}}_{u,j+1/2} - \tilde{\mathbf{f}}_{u,j-1/2}) \quad (3.63)$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_{u,j+1/2} = \mathbf{R} \tilde{\mathbf{f}}_{w,j+1/2} \quad (3.64)$$

$$= \frac{1}{2} [\mathbf{f}_{u,j+1} + \mathbf{f}_{u,j} - \mathbf{R} |\Lambda| \mathbf{L} (\mathbf{u}_{j+1} - \mathbf{u}_j)] \quad (3.65)$$

式 (3.65) は流体力学で使う数値流束と形の上でそっくりとなる。

3.4 流体力学方程式の風上差分

これまでに見てきたように、風上差分の計算では波の位相速度を求める操作が欠かせない。具体的には

1. 微分方程式を $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0$ の形に書き直し、「速度行列」 \mathbf{A} を求める。
2. 速度行列 \mathbf{A} の固有値を求める。
3. 速度行列 \mathbf{A} の固有ベクトルを求める。
4. 固有値と固有ベクトルより数値流束を求める。

という演算が必要である。以下ではそれぞれについて説明する。

ステップ1 速度行列を求める。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = 0 \quad (3.66)$$

を合成関数の微分則を使って書き換えると、

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad (3.67)$$

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \quad (3.68)$$

$$(\mathbf{A})_{i,j} = \frac{\partial f_i}{\partial u_j} \quad (3.69)$$

が得られる。

流体力学方程式では

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ \frac{\rho v^2}{2} + \frac{P}{\gamma - 1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix} \quad (3.70)$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \frac{\rho v^2}{2} + \frac{P}{\gamma - 1} \\ \frac{\rho v^3}{2} + \frac{\gamma P v}{\gamma - 1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \frac{(\rho v)^2}{\rho} + (\gamma - 1) \left(\frac{\rho v^2}{2} + \frac{P}{\gamma - 1} \right) \\ \frac{\rho v}{\rho} \left[\frac{1 - \gamma}{2} \frac{(\rho v)^2}{\rho} + \gamma (\rho E) \right] \end{pmatrix} \quad (3.71)$$

$$E = \frac{v^2}{2} + \frac{P}{(\gamma - 1)\rho} \quad (3.72)$$

$$H = \frac{v^2}{2} + \frac{\gamma P}{(\gamma - 1)\rho} \quad (3.73)$$

上記の変形は f を u で偏微分するため。2章でも等温の場合に同様の変形を行った。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{3 - \gamma}{2} v^2 & (3 - \gamma) v & \gamma - 1 \\ \left(\frac{\gamma - 1}{2} v^2 - H \right) v & H - (\gamma - 1) v^2 & \gamma v \end{bmatrix} \quad (3.74)$$

ステップ2 固有値を求める。

$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = 0$ より、

$$\lambda_1 = v + c_s \quad (3.75)$$

$$\lambda_2 = v \quad (3.76)$$

$$\lambda_3 = v - c_s \quad (3.77)$$

$$c_s = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}} \quad (3.78)$$

ステップ3 固有ベクトルを求める。

$$\mathbf{r}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ v + c_s \\ H + v c_s \end{pmatrix} \quad (3.79)$$

$$\mathbf{r}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} \quad (3.80)$$

$$\mathbf{r}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ v - c_s \\ H - v c_s \end{pmatrix} \quad (3.81)$$

$$\ell_1 = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{v^2}{2} \frac{\gamma - 1}{c_s^2} - \frac{u}{c_s} \right), \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c_s} - \frac{\gamma - 1}{c^2} v \right), \frac{\gamma - 1}{2 c_s^2} \right] \quad (3.82)$$

$$\ell_2 = \left[1 - \frac{v^2}{2} \frac{\gamma - 1}{c_s^2}, \frac{\gamma - 1}{c_s^2} v, -\frac{\gamma - 1}{c_s^2} \right] \quad (3.83)$$

$$\ell_3 = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{v^2}{2} \frac{\gamma - 1}{c_s^2} + \frac{u}{c_s} \right), \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c_s} + \frac{\gamma - 1}{c^2} v \right), \frac{\gamma - 1}{2 c_s^2} \right] \quad (3.84)$$

ここまでに見てきたように、流体力学方程式では速度行列 A が密度・速度・圧力の関数なので、場所によりその値が異なる。従って固有値や固有ベクトルも場所によって異なる。このため数値流束を計算する際に、どこの密度・速度・圧力を使って計算するのかという疑問がうまれる。これに対して Roe (1981) は

$$\bar{\rho} = \sqrt{\rho_{j+1} \rho_j} \quad (3.85)$$

$$\bar{v} = \frac{\sqrt{\rho_{j+1}} v_{j+1} + \sqrt{\rho_j} v_j}{\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j}} \quad (3.86)$$

$$\bar{H} = \frac{\sqrt{\rho_{j+1}} H_{j+1} + \sqrt{\rho_j} H_j}{\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j}} \quad (3.87)$$

$$\bar{c}_s^2 = (\gamma - 1) \left(\bar{H} - \frac{\bar{v}^2}{2} \right) \quad (3.88)$$

を使って「平均量」を計算すれば良いことを見いだした。この平均の取り方を Roe 平均と呼ぶこともある。

Roe 平均で速度や単位質量当たりのエネルギーは $\sqrt{\rho}$ で重みをとった平均。一方、密度や圧力は $1/\sqrt{\rho}$ で重みをとった平均。ちょっと予想外なのは平均化された音速 (\bar{c}_s)。音速は温度 (=

圧力と密度の比) によって決まるのだが、なぜか音速 \bar{c}_s の計算に速度 v も使う。式 (3.88) を計算すると、

$$\bar{c}_s^2 = \gamma \frac{\frac{P_{j+1}}{\sqrt{\rho_{j+1}}} + \frac{P_j}{\sqrt{\rho_j}}}{\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j}} + \frac{\gamma - 1}{2} \frac{\sqrt{\rho_{j+1} \rho_j}}{(\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j})^2} (v_{j+1} - v_j)^2 \quad (3.89)$$

が得られる。この式は、速度勾配があると ($v_{j+1} \neq v_j$)、その分だけ平均音速が上昇することを示している。

この Roe 平均で計算した $A(u_{j+1}, u_j)$ は任意 u_j と u_{j+1} に対して、Property U とよばれる以下の 3 条件、

- i) $(f_{j+1} - f_j) = A(u_{j+1}, u_j)(u_{j+1} - u_j)$
- ii) 固有値はすべて実数 (波の速度はすべて実数)
- iii) $u_{j+1} = u_j$ の場合、 $A = \partial f / \partial u$

を満たす。時間の関係で省略するが、Property U を満たす平均の取り方はこれ一つに限られることも証明できる。詳しくは Hirsch あるいは藤井の教科書に書かれている。

$$u_j(t + \Delta t) = u_j(t) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{f}_{u,j+1/2} - \tilde{f}_{u,j-1/2}) \quad (3.90)$$

$$\tilde{f}_{u,j+1/2} = R \tilde{f}_{w,j+1/2} \quad (3.91)$$

$$= \frac{1}{2} [f_{u,j+1} + f_{u,j} - R |\Lambda| L (u_{j+1} - u_j)] \quad (3.92)$$

形式的には Maxwell 方程式の風上差分と同じであるが、波の速度行列 $\Lambda = LAR$ は流れにより変化する量である。絶対値をとると

$$|\Lambda| = \begin{pmatrix} |v + c| & 0 & 0 \\ 0 & |v| & 0 \\ 0 & 0 & |v - c| \end{pmatrix} \quad (3.93)$$

この節の教訓: 数値流束の計算に必要なものは、波の位相速度 (固有値 λ_k) と波の固有モード (固有ベクトル r_k と ℓ_k) である。これらの量は場所とともに変化するので、適切な平均量 (Roe 平均) を使う。

3.5 磁気流体力学方程式の風上差分

流体力学方程式のところで分かったように数値流束に直接現れる量は、固有値と固有ベクトルである。磁気流体力学方程式では変数が増えるので計算がさらに厄介になる。ここでは計算結果だけを述べる。固有値や固有ベクトルは、流体力学方程式の時と同様に特殊な平均量を使って計算する。

ベクトル形式で記述した1次元磁気流体力学方程式

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ B_y \\ B_z \\ \rho E \end{pmatrix} \quad (3.94)$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P + \frac{\rho u}{B_y^2 + B_z^2 - B_x^2} \\ \rho uv - \frac{B_x B_y}{4\pi} \\ \rho uw - \frac{B_x B_z}{4\pi} \\ B_y u - v B_x \\ B_z u - w B_x \\ \rho H u - \frac{B_x (B_x u + B_y v + B_z w)}{4\pi} \end{pmatrix}, \quad (3.95)$$

$$E = \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \frac{P}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}{8\pi\rho}, \quad (3.96)$$

$$H = \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2} + \frac{\gamma P}{(\gamma - 1)\rho} + \frac{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}{4\pi\rho}, \quad (3.97)$$

1次元の磁気流体力学方程式には、fast 波 (右向きと左向き)、slow 波 (右向きと左向き)、Alfvén 波 (右向きと左向き)、エントロピー波の7種類の波 (固有値・固有ベクトル) が存在する。流体力学で見てきたように、右向きと左向きの固有値と固有ベクトルは速度の符号が違っただけでよく似ている。紙数を節約するために以下では次のように fast 波、slow 波、Alfvén 波の固有値・固有ベクトルを次のようにまとめて記述する。

固有値と (右) 固有ベクトル

$$\mathbf{r}_{1,7} = \mathbf{R}_{u \pm c_f}, \quad \mathbf{r}_{2,6} = \mathbf{R}_{u \pm b_x}, \quad \mathbf{r}_{3,5} = \mathbf{R}_{u \pm c_s}, \quad \mathbf{r}_4 = \mathbf{R}_u, \quad (3.98)$$

$$\lambda_{1,7} = \bar{u} \pm c_f, \quad \lambda_{2,6} = \bar{u} \pm b_x, \quad \lambda_{3,5} = \bar{u} \pm c_s, \quad \lambda_4 = \bar{u}, \quad (3.99)$$

流体力学の時と同様に、これらの固有値と固有ベクトルは \mathbf{u}_j と \mathbf{u}_{j+1} の平均量を使って評価する必要がある。Brio & Wu (1988) は $\gamma = 2$ の場合に、Property U を満たす平均が存在することを示した。Brio & Wu (1988) に比べて少し複雑ではあるが、現在は一般の γ に対して Property U を満たす固有値・固有ベクトルも知られている。以下では一般の γ について Property U を満たす固有値・固有ベクトルを示す。²

²Property U の条件 (i) は第2章で習った衝撃波のランキンユゴニオ条件と関係がある。どちらも非線型性を考慮している。

$$\mathbf{R}_{u \pm c} = \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} \pm c \\ \bar{v} \mp \frac{B_x \bar{B}_y c}{4\pi \bar{\rho}(c^2 - b_x^2)} \\ \bar{w} \mp \frac{B_x \bar{B}_z c}{4\pi \bar{\rho}(c^2 - b_x^2)} \\ \frac{\bar{\rho}(c^2 - b_x^2)}{\bar{B}_y c^2} \\ \frac{\bar{\rho}(c^2 - b_x^2)}{\bar{B}_z c^2} \\ \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} + \frac{\bar{\rho}(c^2 - b_x^2)}{c^2} \pm c\bar{u} + \chi + \delta b^2 \end{bmatrix}, \quad (3.100)$$

$$\mathbf{R}_{u \pm b_x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mp \bar{B}_z \operatorname{sgn}(B_x) \\ \pm \bar{B}_y \operatorname{sgn}(B_x) \\ \bar{B}_z \sqrt{\frac{4\pi}{\bar{\rho}}} \\ -\bar{B}_y \sqrt{\frac{4\pi}{\bar{\rho}}} \\ \mp (\bar{B}_z \bar{v} - \bar{B}_y \bar{w}) \operatorname{sgn}(B_x) \end{bmatrix} \quad (3.101)$$

$$\mathbf{R}_u = \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} \\ \bar{v} \\ \bar{w} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} + \delta b^2 \end{bmatrix} \quad (3.102)$$

$$\chi = \mp \frac{B_x c (\bar{B}_y \bar{v} + \bar{B}_z \bar{w})}{4\pi \bar{\rho}(c^2 - b_x^2)} + \frac{\gamma - 2}{\gamma - 1} (c^2 - a^2) \quad (3.103)$$

$$\delta b^2 = \frac{\gamma - 2}{\gamma - 1} \frac{(B_{y,j+1} - B_{y,j})^2 + (B_{z,j+1} - B_{z,j})^2}{8\pi (\sqrt{\rho_{j+1}} + \sqrt{\rho_j})^2} \quad (3.104)$$

$$c_{f,s}^2 = \frac{a_*^2 \pm \sqrt{a_*^4 - 4a^2 b_x^2}}{2} \quad (3.105)$$

$$b_x = \frac{|B_x|}{\sqrt{4\pi \bar{\rho}}} \quad (3.106)$$

$$a_*^2 = (\gamma - 1) \left(\bar{H} - \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} - \delta b^2 \right) - (\gamma - 2) \left(\frac{B_x^2 + \bar{B}_y^2 + \bar{B}_z^2}{4\pi \bar{\rho}} \right) \quad (3.107)$$

$$a^2 = (\gamma - 1) \left(\bar{H} - \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} - \delta b^2 - \frac{B_x^2 + \bar{B}_y^2 + \bar{B}_z^2}{4\pi\bar{\rho}} \right) \quad (3.108)$$

$$\bar{v} = \frac{\sqrt{\rho_j}v_j + \sqrt{\rho_{j+1}}v_{j+1}}{\sqrt{\rho_j} + \sqrt{\rho_{j+1}}} \quad (3.109)$$

$$\bar{w} = \frac{\sqrt{\rho_j}w_j + \sqrt{\rho_{j+1}}w_{j+1}}{\sqrt{\rho_j} + \sqrt{\rho_{j+1}}} \quad (3.110)$$

$$\bar{B}_y = \frac{\sqrt{\rho_{j+1}}B_{y,j} + \sqrt{\rho_j}B_{y,j+1}}{\sqrt{\rho_j} + \sqrt{\rho_{j+1}}} \quad (3.111)$$

$$\tilde{B}_y = \frac{B_{y,j} + B_{y,j+1}}{2} \quad (3.112)$$

$$\bar{B}_z = \frac{\sqrt{\rho_{j+1}}B_{z,j} + \sqrt{\rho_j}B_{z,j+1}}{\sqrt{\rho_j} + \sqrt{\rho_{j+1}}}, \quad (3.113)$$

$$\tilde{B}_z = \frac{B_{z,j} + B_{z,j+1}}{2} \quad (3.114)$$

上記の公式で (3.100) は、fast 波と slow 波の両方の固有ベクトルを表している。波の速度 c に c_f を代入すれば fast 波の固有ベクトルが、 c_s を代入すれば slow 波の固有ベクトルが得られる。また c_s との混同を避けるため、音速は a で表されている。

実際に磁気流体力学方程式の数値流束を計算するためには、上記の式に少し工夫を加える必要がある。工夫が必要となるのは、固有値が等しくなる (縮退する) 場合である。気をつけて上記の式を運用しないと、固有ベクトルが独立でなくなる場合がある。この問題を回避するために、Ryu & Jones (1995) は変数に工夫を凝らした。上記の公式にこの工夫を加えると以下のようになる。

$$\mathbf{R}_{1,7} = \begin{bmatrix} \alpha_f \\ \alpha_f (\bar{u} \pm c_f) \\ \alpha_f \bar{v} \mp \alpha_s \beta_y b_x \operatorname{sgn}(B_x) \\ \alpha_f \bar{w} \mp \alpha_s \beta_z b_x \operatorname{sgn}(B_x) \\ \alpha_s \beta_y c_f \sqrt{4\pi/\bar{\rho}} \\ \alpha_s \beta_z c_f \sqrt{4\pi/\bar{\rho}} \\ \alpha_f \left\{ \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} + \delta b^2 \pm c_f \bar{u} + \frac{c_f^2}{\gamma - 1} \right. \\ \left. + \frac{\gamma - 2}{\gamma - 1} (c_f^2 - a^2) \right\} \mp \alpha_s b_x \operatorname{sgn}(B_x) (\beta_y \bar{v} + \beta_z \bar{w}) \end{bmatrix} \quad (3.115)$$

$$\mathbf{R}_{2,6} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mp \beta_z \operatorname{sgn}(B_x) \\ \pm \beta_y \operatorname{sgn}(B_x) \\ \beta_z \sqrt{4\pi/\bar{\rho}} \\ -\beta_y \sqrt{4\pi/\bar{\rho}} \\ \mp (\beta_z \bar{v} - \beta_y \bar{w}) \operatorname{sgn}(B_x) \end{bmatrix} \quad (3.116)$$

$$\mathbf{R}_{3,5} = \begin{bmatrix} \alpha_s \\ \alpha_s (\bar{u} \pm c_s) \\ \alpha_s \bar{v} \pm \alpha_f \beta_y a \operatorname{sgn}(B_x) \\ \alpha_s \bar{w} \pm \alpha_f \beta_z a \operatorname{sgn}(B_x) \\ -\frac{\alpha_f \beta_y a^2 \sqrt{4\pi}}{c_f \sqrt{\bar{\rho}}} \\ -\frac{\alpha_f \beta_z a^2 \sqrt{4\pi}}{c_f \sqrt{\bar{\rho}}} \\ \alpha_s \left\{ \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} + \delta b^2 \pm c_s \bar{u} + \frac{c_s^2}{\gamma - 1} + \frac{\gamma - 2}{\gamma - 1} (c_s^2 - a^2) \right\} \\ \pm \alpha_f a \operatorname{sgn}(B_x) (\beta_y \bar{v} + \beta_z \bar{w}) \end{bmatrix} \quad (3.117)$$

$$\mathbf{R}_4 = \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} \\ \bar{v} \\ \bar{w} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} + \delta b^2 \end{bmatrix} \quad (3.118)$$

$$\alpha_f = \frac{\sqrt{c_f^2 - b_x^2}}{\sqrt{c_f^2 - c_s^2}} \quad (3.119)$$

$$\alpha_s = \frac{\sqrt{c_f^2 - a^2}}{\sqrt{c_f^2 - c_s^2}} = \frac{c_f}{b_x} \frac{\sqrt{b_x^2 - c_s^2}}{\sqrt{c_f^2 - c_s^2}} \quad (3.120)$$

$$\beta_z = \frac{\bar{B}_z}{\sqrt{\bar{B}_y^2 + \bar{B}_z^2}}, \quad (3.121)$$

$$\beta_y = \frac{\bar{B}_y}{\sqrt{\bar{B}_y^2 + \bar{B}_z^2}} \quad (3.122)$$

平均磁場が0の場合 ($\bar{B}_y = \bar{B}_z = 0$) は β_y と β_z は

$$\beta_y = 1 \quad \text{and} \quad \beta_z = 0 \quad (3.123)$$

と定義される。また $c_f = c_s = a = b_x$ の場合、 α_f と α_s は

$$\alpha_f = 1 \quad \text{and} \quad \alpha_s = 0 \quad (3.124)$$

$$\beta_y^2 + \beta_z^2 = 1, \quad (3.125)$$

$$\alpha_f^2 + \frac{b_x^2}{c_f^2} \alpha_s^2 = 1 \quad (3.126)$$

と定義される。

$$w_2 = \frac{1}{2} \left[-\bar{\rho} (\beta_z \Delta v - \beta_y \Delta w) \operatorname{sgn}(B_x) + \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{4\pi}} (\beta_z \Delta B_y - \beta_y \Delta B_z) \right] \quad (3.127)$$

$$w_6 = \frac{1}{2} \left[\bar{\rho} (\beta_z \Delta v - \beta_y \Delta w) \operatorname{sgn}(B_x) + \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{4\pi}} (\beta_z \Delta B_y - \beta_y \Delta B_z) \right] \quad (3.128)$$

$$\begin{aligned} w_1 + w_7 &= \frac{\alpha_f}{c_f^2} \left(\Delta P + \frac{\tilde{B}_y \Delta B_y + \tilde{B}_z \Delta B_z}{4\pi} \right) \\ &+ \left\{ \frac{\alpha_s}{a^2 c_f} [(\gamma - 1) c_s^2 - (\gamma - 2) a^2] \sqrt{4\pi \bar{\rho}} \right. \\ &+ \left. (\gamma - 2) \sqrt{\bar{B}_y^2 + \bar{B}_z^2} \frac{\alpha_f}{c_f^2} \right\} \frac{\beta_y \Delta B_y + \beta_z \Delta B_z}{4\pi}, \end{aligned} \quad (3.129)$$

$$w_1 - w_7 = \frac{\alpha_f}{c_f} \bar{\rho} \Delta u - \frac{\alpha_s c_s}{c_f a} \operatorname{sgn}(B_x) \bar{\rho} (\beta_y \Delta v + \beta_z \Delta w), \quad (3.130)$$

$$\begin{aligned} w_3 + w_5 &= \frac{\alpha_s}{a^2} \left(\Delta P + \frac{\tilde{B}_y \Delta B_y + \tilde{B}_z \Delta B_z}{4\pi} \right) \\ &+ \left\{ \alpha_f \left[\frac{\gamma - 2}{c_f} - (\gamma - 1) \frac{c_f}{a^2} \right] \sqrt{4\pi \bar{\rho}} \right. \\ &+ \left. (\gamma - 2) \sqrt{\bar{B}_y^2 + \bar{B}_z^2} \frac{\alpha_s}{a^2} \right\} \frac{\beta_y \Delta B_y + \beta_z \Delta B_z}{4\pi}, \end{aligned} \quad (3.131)$$

$$w_3 - w_5 = \frac{\alpha_s b_x}{c_f a} \bar{\rho} \Delta u + \frac{\alpha_f}{a} \operatorname{sgn}(B_x) \bar{\rho} (\beta_y \Delta v + \beta_z \Delta w), \quad (3.132)$$

$$w_4 = \rho_{j+1} - \rho_j - \alpha C_f (w_1 + w_7) - \alpha_s (w_3 + w_5), \quad (3.133)$$

$$\Delta P = P_{j+1} - P_j, \quad (3.134)$$

$$\Delta B_y = B_{y,j+1} - B_{y,j}, \quad (3.135)$$

$$\Delta B_z = B_{z,j+1} - B_{z,j}. \quad (3.136)$$

$$R_4 = \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} \\ \bar{v} \\ \bar{w} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2}{2} + \delta b^2 + \varepsilon \end{bmatrix}, \quad (3.137)$$

and

$$\varepsilon = \frac{\rho_{j+1}e_j - \rho_j e_j - (P_{j+1} - P_j)/(\gamma - 1)}{w_1}. \quad (3.138)$$

3.6 さらに勉強する人へ

時間が限られているので、講義内容は基本的な概念に絞った。そのため実用的なコードを作成するのに必要な知識のいくつかを割愛せざるを得なかった。ここでは割愛した中でも重要な項目と、それについての参考書を示す。

1. 膨張衝撃波 (expansion shock) の回避

ポイント 波の位相速度 λ_k が、 $\lambda_{k,j} < 0$ かつ $\lambda_{k,j+1} > 0$ である時に、Roe の方法は不自然な解 (expansion shock) を生むことがある。回避法は良く知られている。

参考書 Hirsch の教科書 pp. 467–469

2. 数値流束の 2 次精度化

ポイント ここで講義した風上差分法は時間空間ともに 1 次精度であるが、これ時間空間ともに 2 次精度に拡張して使うのが普通である。よく用いられる方法として MUSCL 法がある。

参考書 藤井の教科書 第 3 章

3. Godunov の定理と TVD 条件

ポイント 高次精度の数値流束を使うと、1 次精度風上差分では回避された数値振動が現れやすくなる。Godunov の定理はこれを回避するための基礎理論として有名。また TVD 条件は数値振動が起こさないための十分条件として有名。簡単な解説は 1 章に掲載されている。

参考書 藤井の教科書 第 3 章

4. 流速制限関数 (flux limiter)

ポイント MUSCL 法で使われる。流速制限関数が必要であることは Godunov の定理より導かれる。1 章で紹介された minmod 関数はその 1 例。

参考書 藤井の教科書 第3章

5. MUSCL 法の (磁気) 流体力学方程式への適用

ポイント システム方程式に MUSCL を適用する手順は予想外に面倒である。特に磁気流体力学の場合は工夫が必要である。具体的な手順の例は Fukuda & Hanawa (2000) に載っている。

6. Property U

ポイント Property U が何故必要なのか。また Roe の平均はどのようにして導かれたのか。原理的な理解のために学習することは益。

参考書 Hirsch の教科書 pp. 463–465

7. 円筒座標および極座標での計算

ポイント 2次元シミュレーションでは円筒座標や極座標が役に立つ場合が多い。これらの座標を用いるときは少し工夫が必要である。

8. 一般的な状態方程式への拡張

ポイント この講義や普通の教科書で扱うのは理想的な状態方程式だけである。しかし一般的な状態方程式の場合にも風上差分を拡張することができる。

参考書 Nobuta & Hanawa (1999)

参考文献

- (1) 藤井孝藏, 1994, 流体力学の数値計算法, 東大出版会
- (2) M. Brio and C. C. Wu, 1988, J. Comput. Phys., vol. 75, p. 400
- (3) N. Fukuda and T. Hanawa, 2000, Astrophys. J., vol. 533, p. 911
- (4) C. Hirsch, 1990, Numerical Computation of Internal and External Flows, vol. 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows, Wiley
- (5) K. Nobuta & T. Hanawa 1999, Astrophys. J., vol. 510, p. 614
- (6) P. L. Roe, 1981, J. Comput. Phys., vol. 43, p. 357
- (7) D. Ryu and T. W. Jones, Astrophys. J., vol. 442, p. 228

CIP 法入門

「天体とスペースプラズマのシミュレーションサマースクール」

2002 年 9 月 11 日-9 月 15 日

場所：名古屋大学情報メディア教育センター

1 CIP 法の基礎概念

双曲型の微分方程式を解く数値計算手法は、差分法だけでもこれまで様々な手法が提案されてきたが [1]、Yabe らによって提案された CIP (Cubic Interpolated Profile [2][3] 法も高次精度差分法の一つであり、これまで流体力学を始め様々な分野で応用され、成果を上げている。本文ではこの CIP 法の導入とその応用、最後に最近提案された保存保証型 CIP 法について触れる事にする。関数 $f(x, t)$ に対する次の微分方程式を考える。

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

例えば u が一定値の場合、この方程式の解析解は良く知られている様に次式で表される。

$$f(x, t) = f(x - ut, 0) \quad (2)$$

この解は初期条件のプロファイルが速度 u で平行移動する事を意味している。
(図 1)

この方程式を差分法で解く時は、格子間を補間関数 (多項式) で近似する事から始める。

実際の系では、速度 u は時間的・空間的に一定値ではなく変化する事もあるが、短い時間 Δt 内であれば各格子点 x_i 上の速度 u_i はそれぞれ一定値とみなせる。よって、式 (2) を用いて

$$f(x_i, t + \Delta t) \approx f(x_i - u_i \Delta t, t) \quad (3)$$

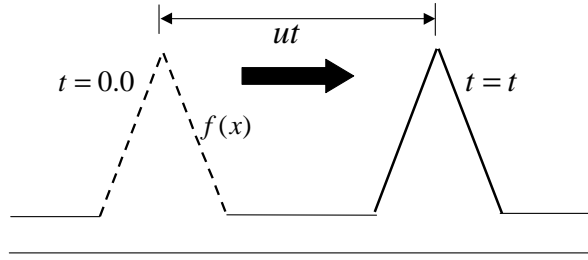


図 1: 関数の平行移動

としてよい。つまり、ある時刻 t における格子点 x_i 上の物理量が分かっているならば Δt 秒後の物理量は式 (3) で求まることになる。

最も簡単な例は 2 点間を 1 次関数で補間する「1 次風上差分法」である。しかしこの手法の場合、プロファイルが移動するに従って解が緩やかになってしまう (図 2: 数値拡散) 他にも 3 点を用いて 2 次関数で補間する「Lax-Wendroff 法」など様々な手法があるが、数値拡散・位相誤差による数値振動等が見られる事がある。

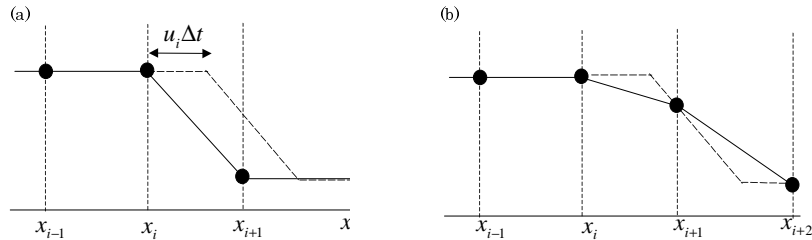


図 2: 1 次風上の例 (a) 初期条件 (実線) を $u\Delta t$ 動かす (点線)。 (b) 正しい解 (点線) と数値計算上の解 (実線)。

CIP 法は、格子 2 点間 $[i, i+1]$ で 3 次補間関数 $F(x)$ を作る。この手法の大きな特徴として、従来の差分法は値のみを用いて格子点間を多項式で補間するが、CIP 法は格子点上の微分値も用いる。

$$F(X) = aX^3 + bX^2 + cX + d \quad X = x - x_i \quad (4)$$

補間関数の係数は条件「関数の値と微分値が格子点上で連続」という事を要

請すると (速度 $u < 0$ とする)

$$F(0) = f_i^n, F(\Delta x) = f_{i+1}^n, \partial_x F(0) = \partial_x f_i^n, \partial_x F(\Delta x) = \partial_x f_{i+1}^n \quad (5)$$

となる。式 (5) から、3 次関数の係数 a, b, c, d は次の様に求まる。

$$a = \frac{\partial_x f_i^n + \partial_x f_{i+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{2(f_i^n - f_{i+1}^n)}{\Delta x^3} \quad (6)$$

$$b = \frac{3(f_{i+1}^n - f_i^n)}{\Delta x^2} - \frac{2(\partial_x f_i^n + \partial_x f_{i+1}^n)}{\Delta x} \quad (7)$$

$$c = \partial_x f_i^n \quad (8)$$

$$d = f_i^n \quad (9)$$

ここで n は n ステップ目における値もしくは微分値という事を表している。
速度が正の場合は $i+1 \rightarrow i-1$, $\Delta x \rightarrow -\Delta x$ と変更するだけでよい。

CIP 法では値と共に微分値も時間発展させなくてはならないが、速度 u が一定値の場合は式 (1) を空間微分すると

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} + u \frac{\partial(\partial_x f)}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

となり、微分値は値と全く同じ方程式を満たす事が分かる。よって、 Δt 秒後 ($n+1$ ステップ目) における値と微分値は次の様に求める事ができる。

$$f_i^{n+1} = F(x_i - u\Delta t) = a\xi^3 + b\xi^2 + \partial_x f^n \xi + f_i^n \quad (11)$$

$$\partial_x f_i^{n+1} = \frac{dF(x_i - u\Delta t)}{dx} = 3a\xi^2 + 2b\xi + \partial_x f^n \quad (12)$$

ここで $\xi = -u\Delta t$ である。初期条件を与えれば式 (11),(12) から時間発展を求める事ができる。

矩形波が速度一定で移流する計算例を載せる。比較の為、1 次風上差分法と Lax-Wendroff 法の計算結果も載せた (図 3)。風上差分法は数値拡散が非常に大きい為、時間発展すると大きく崩れてしまう。また、Lax-Wendroff 法は数値振動が非常に大きい。それに対し、CIP 法は矩形が殆ど崩れる事がなく、解析解に近い形状を保っている事が分かる。

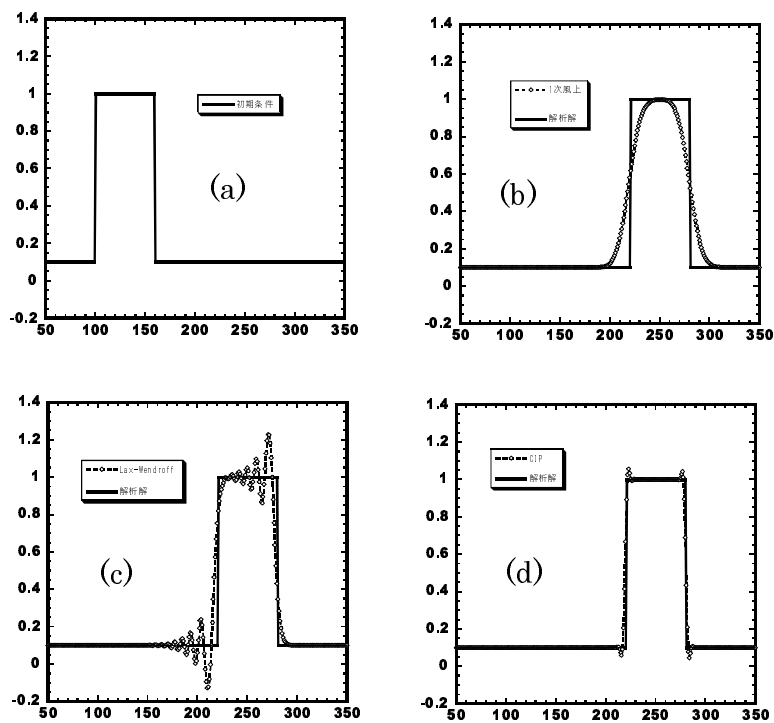


図 3: 矩形波の移流. $u = 1, \Delta x = 1, \Delta t = 0.2$, 600 ステップ計算した結果. (a) 初期条件、(b) 1 次風上差分、(c) Lax-Wendroff、(d) CIP. 実線が解析解、白丸が数値解.

2 非線形方程式への応用

次の様な方程式を考える。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} = g \quad (13)$$

これは速度が空間・時間依存し、右辺 g も 0 ではない (f, x, t の関数)。この様な場合、CIP 法では「移流相」「非移流相」と分ける事を行なう。式 (13) を変形すると

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = g - f \frac{\partial u}{\partial x} \equiv G \quad (14)$$

となり、また、式 (14) を空間微分すると

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} + u \frac{\partial(\partial_x f)}{\partial x} = \partial_x G - \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (15)$$

式 (14),(15) の左辺は先述の移流部分であるが、ここに右辺の項の効果を加える。

移流相

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

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} + u \frac{\partial(\partial_x f)}{\partial x} = 0 \quad (17)$$

非移流相

$$\frac{\partial f}{\partial t} = G \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} = \partial_x G - \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (19)$$

計算手順はまず移流相を CIP 法で解いて $(f^n, \partial_x f^n) \rightarrow (f^*, \partial_x f^*)$ と中間の値を求める。(式 (11),(12) で $(f^{n+1}, \partial_x f^{n+1})$ ではなく、 $(f^*, \partial_x f^*)$ とする。)

次にその中間値を用いて、非移流相で単純な時間前進差分・空間中心差分により $(f^*, \partial_x f^*) \rightarrow (f^{n+1}, \partial_x f^{n+1})$ を求め、次ステップの値とする。具体的な計算については次節で述べる。

2.1 非移流相の計算法

移流計算については先述したので、ここでは非移流計算について述べる。
式 (18) は差分化すると

$$f_i^{n+1} = f_i^* + G_i \Delta t \quad (20)$$

となる。(今後、上添字 * は移流相計算後の値を意味するものとする。) 次に
式 (19) は差分化すると下式になる。

$$\partial_x f_i^{n+1} = \partial_x f_i^* + \frac{G_{i+1} - G_{i-1}}{2\Delta x} \Delta t - \partial_x f_i^* \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \Delta t \quad (21)$$

ここで G_i の計算であるが、直接 G の式を代入しても計算は出来るが、計算量を
軽減する工夫として式 (20) を用いる事が出来る。つまり $G_i = (f_i^{n+1} - f_i^*)/\Delta t$
なので式 (21) は

$$\partial_x f_i^{n+1} = \partial_x f_i^* + \frac{(f_{i+1}^{n+1} - f_{i+1}^*) - (f_{i-1}^{n+1} - f_{i-1}^*)}{2\Delta x \Delta t} \Delta t - \partial_x f_i^* \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \Delta t \quad (22)$$

と既に求まっている量で計算する事が出来る。

2.2 計算手順のまとめ

式 (14) の解き方を簡単に手順をまとめておくと

1. CIP 法 (式 (11),(12)) を用いて、移流相 (式 (16),(17)) の計算を行い
($f^n, \partial_x f^n$) \rightarrow ($f^*, \partial_x f^*$) とする。
2. 式 (20),(22) を用いて非移流相の計算を行ない、($f^*, \partial_x f^*$) \rightarrow ($f^{n+1}, \partial_x f^{n+1}$)
とし、時間発展させる。
3. 以下、繰り返し

この用にすれば、後述の流体方程式やその他の様々な双曲型方程式 (Vlasov-
Boltzmann 方程式、等) に対して CIP 法が適用出来る事が分かる。

3 流体力学への応用

3.1 基礎方程式

1次元直交座標系での非粘性圧縮性流体の基礎方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = -\rho \frac{\partial u}{\partial x} \quad (23)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (24)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} = -\gamma p \frac{\partial u}{\partial x} \quad (25)$$

となる。ここで ρ は密度、 u は速度、 p は圧力、 e は単位質量当たりの内部エネルギーである。理想気体では

$$e = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} \quad (26)$$

である。 γ は比熱比である。式 (23) ~ (25) はそれぞれ式 (14) と全く同形である。よってそれぞれを移流相・非移流相に分けて CIP 法を用いて計算する事が出来る。

ここで物理量の定義点についてであるが、大きく2つに分ける事が出来る。1つは (ρ, u, p) 全て同じ点に定義するレギュラー格子、もう1つはスカラー量 (ρ, p) の定義点の中間点にベクトル量 u (多次元を考慮してこう呼ぶ事にする。) を定義するスタガード格子であるが、本手法では後者を用いる。

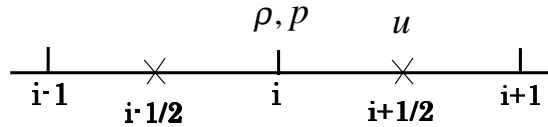


図 4: スタガード格子での、1次元での物理量配置。

3.2 人工粘性

圧縮性流体の計算では、超音速になると衝撃波が発生する。衝撃波は数学的には不連続面であるが、実際は流体に粘性がある為、衝撃波は分子の平均自由行程程度の厚さを持っている。数値解析では、衝撃波の厚さを格子幅 Δx 程

度で捉える事が出来れば良いので、衝撃波面のみに作用する人工的な粘性を圧力項に加える事で衝撃波を捉える事が可能になる。ここでは Von-Neumann 型の人工粘性 [4][5] を用いる。

$$q_i = \begin{cases} \alpha[-\rho_i C_s (\frac{\partial u}{\partial x})\lambda + \frac{\gamma+1}{2} (\frac{\partial u}{\partial x})^2 \lambda^2] & \text{if } \frac{\partial u}{\partial x} < 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

である。 q_i は圧力と同じ定義点なので、 $(\partial u / \partial x) = (u_{i+1/2} - u_{i-1/2}) / \Delta x$ であり、圧縮領域のみに人工粘性が加わる事になる。 λ は衝撃波の厚さであるが、ここでは格子幅 Δx とすればよい。また、 $C_s = \sqrt{\gamma p_i^n / \rho_i^n}$ は音速、 α は人工粘性係数で 0.6 から 1.0 の間程度の値である。

よって、人工粘性を入れた差分式は

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^*}{\Delta t} = -\rho_i^* \frac{u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*}{\Delta x} \quad (27)$$

$$\frac{u_{i+1/2}^{n+1} - u_{i+1/2}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho_{i+1/2}^*} \frac{(p_{i+1}^* + q_{i+1}^*) - (p_i^* + q_i^*)}{\Delta x} \quad (28)$$

$$\frac{p_i^{n+1} - p_i^*}{\Delta t} = -\{\gamma p_i^* + (\gamma - 1)q_i^*\} \frac{u_{i+1/2}^* - u_{i-1/2}^*}{\Delta x} \quad (29)$$

となる。ここで $\rho_{i+1/2}^* = (\rho_{i+1}^* + \rho_i^*)/2$ である。式 (29) 中で $(\gamma - 1)q_i^*$ となっているのは、元々は保存形の基礎方程式の圧力に人工粘性を加える事から導かれる為である。

3.3 応用：CCUP 法

前節で移流相に CIP、非移流相に式 (27) ~ (29) を用いて流体方程式が解ける事が分かった。ところで、この非移流相を次の様に書き換えてみる。

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^*}{\Delta t} = -\rho^* \nabla \cdot \vec{u}^{**} \quad (30)$$

$$\frac{\vec{u}^{**} - \vec{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla p^{**}}{\rho^*} \quad (31)$$

$$\frac{p_i^{**} - p_i^*}{\Delta t} = -\gamma p^* \nabla \cdot \vec{u}^{**} \quad (32)$$

ここで格子点の下添字は省略し、一般的なベクトルの形で書く事にする。式 (27) ~ (29) では右辺の時刻は全て * であったが、本手法では右辺にも ** がある陰解法になっている。式 (31) の両辺の div を取り、 $\gamma p = \rho C_s^2$ (C_s は音速)

である事に注意して式 (32) を代入すると、次の圧力に関する poisson 方程式が導かれる。

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla p^{**}}{\rho^*} \right) = \frac{p^{**} - p^*}{\rho^* C_s^2 \Delta t^2} + \frac{\nabla \cdot \vec{u}^*}{\Delta t} \quad (33)$$

本手法を CIP-CUP 法 (CIP-Combined Unified Procedure) と呼ぶ [6]。式 (33) を反復法 (SOR, Bi-CGSTAB, etc) で p^{**} を求めてから式 (31) で \vec{u}^{**} を求め、式 (30) で ρ^{n+1} を求める。非圧縮性流体は音速の近似であるが、式 (33) で $C_s \rightarrow \infty$ とすると MAC 法の様な式になる。この様に音速を変える事によって圧縮性・非圧縮性流体を統一的に解く事が出来る。実際には人工粘性・実粘性・熱伝導等の効果を入れる事になるので、

$$\frac{\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^{**}}{\Delta t} = \vec{Q}_u \quad (34)$$

$$\frac{p^{n+1} - p^{**}}{\Delta t} = Q_p \quad (35)$$

(\vec{Q}_u, Q_p は先述の効果) の様に後でそれらの効果で時間発展させ、 p^{n+1} 、 \vec{u}^{n+1} を求める。

3.4 計算例

計算例として最も典型的な衝撃波管問題を CIP 法と CCUP 法で解いた結果を示す。初期条件は $p = 1, \rho = 1$ ($x < 1$), $p = 0.1, \rho = 0.125$ ($x > 1$)。比熱比 $\gamma = 1.4$ 、格子幅 $\Delta x = 0.1$ 時間刻み $\Delta t = 0.01$ とし、400 ステップまで計算を行なった。また、人工粘性係数 $\alpha = 0.7$ である。図 5 は密度の結果であるが、共に解析解とほぼ一致した解が得られている事が分かる。また、衝撃波面も sharp に捉えられている事が分かる。

接触不連続面で若干の overshoot, undershoot が見られるが、これらも単調性が保証されている有理関数 CIP 法 [7] を用いる事で改善する事が出来る。圧縮性流体の計算では CIP 法の方が Rarefaction Wave 等を見ても若干良い様であるが、CCUP 法は計算が安定であるという利点がある。

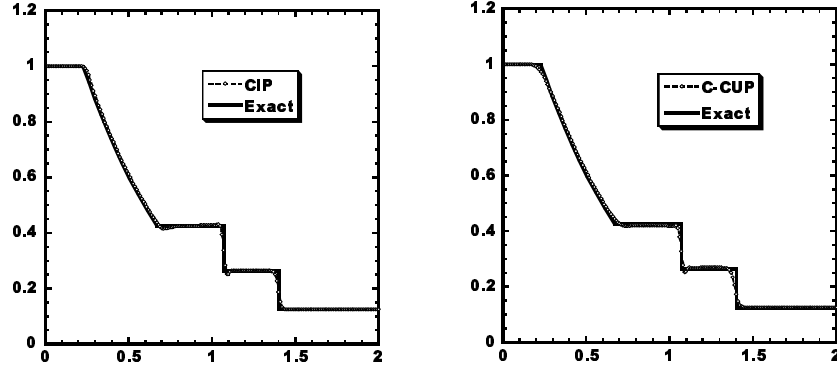


図 5: CIP 法 (左) と CCUP 法 (右) の計算結果 (密度)

3.5 (Appendix) 円柱・球座標系の半径方向 1 次元 CIP

ここまで述べてきたのはデカルト 1 次元座標系だが、容易に他の座標系にも拡張出来る。例えば流体方程式は次の様に一般的に書き換えられる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^\delta} \frac{\partial(\rho u r^\delta)}{\partial r} = 0 \quad (36)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} \quad (37)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + u \frac{\partial e}{\partial r} = -\frac{p}{\rho r^\delta} \frac{\partial(ur^\delta)}{\partial r} \quad (38)$$

ここで、 $\delta = 0, 1, 2$ はそれぞれデカルト、円柱、球座標に対応する。よって、右辺の非移流項は

$$\mathbf{G} = \left(-\frac{\rho}{r^\delta} \frac{\partial(ur^\delta)}{\partial r}, -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r}, -\frac{p}{\rho r^\delta} \frac{\partial(ur^\delta)}{\partial r} \right) \quad (39)$$

と変えるだけで良い。

4 保存保証型 CIP 法

4.1 CIP-CSL2(Conservative Semi-Lagrangian) 法

第 1,2 章で述べた CIP 法は「非保存形」の方程式に適用するので、値の保存が数学的には保証されていない。(しかし、通常非保存形の差分法と比較しても保存の崩れは非常に小さい。)そこで近年、保存が保証される CIP

法が提案されている。これまで CIP-CSL4[8] 法と CIP-CSL2 [9] 法が提案されているが、本節では CIP-CSL2 法について述べる。

例えば次の様な方程式を考える。

$$\frac{\partial D}{\partial t} + u \frac{\partial D}{\partial x} = 0 \quad (40)$$

これは普通の移流方程式だが、式 (40) の空間微分を取り、 $D' \equiv \partial D / \partial x$ とすると次の保存方程式が得られる。

$$\frac{\partial D'}{\partial t} + \frac{\partial (uD')}{\partial x} = 0 \quad (41)$$

この事から、式 (41) で $D' \equiv f(= \text{値})$, 式 (40) で $D = \int f dx$ とすれば CIP 法における値と微分値の関係をそのまま積分値と値に置き換える事が出来、第 1,2 章で述べた関係式をそのまま適用する事が出来る。

通常の CIP 法は値 f と微分値 $\partial f / \partial x$ を用いて 3 次補間関数を構築するが、CIP-CSL2 法は値 f と積分値 $\rho = \int f dx$ を用いて 2 次関数を構築する。その際、積分値 ρ は格子の中心に定義する。値が 2 次関数なので、積分値の関数は 3 次関数になっている。そこで

$$D_i(x) = \int_{x_i}^x f(x') dx' \quad (42)$$

を導入し、

$$D_i(x) = A1_i X^3 + A2_i X^2 + f_i^n X \quad (43)$$

と積分値を 3 次関数で補間すれば、その微分に対応する値の関数は

$$F_i(x) = \frac{\partial D(x)}{\partial x} = 3A1_i X^2 + 2A2_i X + f_i^n \quad (44)$$

と書く事が出来る。ここで $X \equiv x - x_i$ である。

補間関数 $D_i(x)$ の連続条件は、 $D_i(x)$ が値を与える事に注意すると CIP 法と同様に

$$\begin{aligned} D_i(x_i) &= 0, \quad D_i(x_{iup}) = -\text{sgn}(u_i) \rho_{icell}^n, \\ \partial_x D_i(x_i) &= f_i^n, \quad \partial_x D_i(x_{iup}) = f_{iup}^n \end{aligned} \quad (45)$$

ここで、 ρ_{icell}^n は上流側の格子内の全質量 ($icell = i - \text{sgn}(u_i)/2$)、 $iup = i - \text{sgn}(u_i)$ である。よって、係数 A1,A2 は

$$A1 = \frac{f_i^n + f_{iup}^n}{\Delta x_i^2} + \frac{2\text{sgn}(u_i)\rho_{icell}^n}{\Delta x_i^3} \quad (46)$$

$$A2 = -\frac{3\text{sgn}(u_i)\rho_{icell}^n}{\Delta x_i^2} - \frac{2(f_i^n + f_{iup}^n)}{\Delta x_i} \quad (47)$$

$\Delta x_i \equiv x_{iup} - x_i$ であり、この様に一意に決定する事が出来る。

4.2 時間発展のまとめ

CIP 法が値 f と微分値 $\partial_x f$ の時間発展が必要なのに対応して、CIP-CSL2 法は値 f と積分値 ρ の時間発展が必要である。よって、保存方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} = 0 \quad (48)$$

を CIP-CSL2 法で解く時は

1. 値 f は、式 (48) を移流相と非移流相に分け、式 (16),(18) ($g = 0$) の様に時間発展させる。つまり

(a) 移流相

$$f_i^* = F(x_i - u\Delta t) = 3A1\xi^2 + 2A2\xi + f_i^n \quad (49)$$

(b) 非移流相

$$f_i^{n+1} = f_i^* + G_i\Delta t \quad G_i = -f_i^* \frac{\partial u}{\partial x} \quad (50)$$

である。

2. 積分値 ρ は、格子内の質量の流入出を考慮すればよいので (図 6 参照)

$$\rho_{i-1/2}^{n+1} = \rho_{i-1/2}^n + (\Delta\rho_{i-1}^n - \Delta\rho_i^n) \quad (51)$$

とすればよく、また $\Delta\rho_i^n$ は格子点上での質量流束を表し、

$$\begin{aligned} \Delta\rho_i^n &= \int_{x_i+\xi}^{x_i} F(x')dx' = -D_i(x_i + \xi) \\ &= -(A1_i\xi^3 + A2_i\xi^2 + f_i^n\xi) \end{aligned} \quad (52)$$

と書く事が出来る。

3. 以下、繰り返し

ここで $\xi = -u_i \Delta t$ である。式 (51),(52) は、各格子間での質量（積分値）の収支を表しているので、計算領域全体で全質量が保存される事がわかる。

本手法は、例えば流体方程式の連続の式は CIP-CSL2 法で解いて質量保存させ、運動方程式・エネルギー式は通常の CIP 法で解くといった応用が出来る。

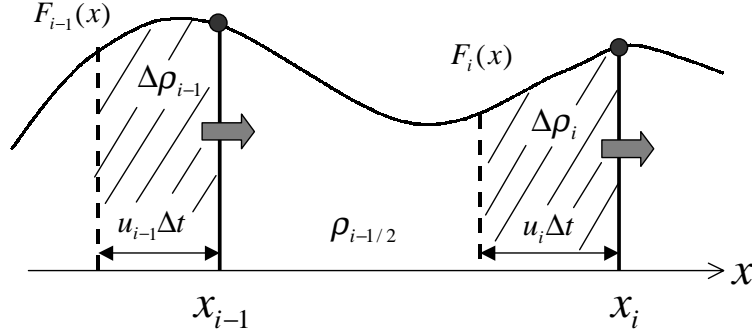


図 6: Δt 内の格子内の質量流入・流出。

4.3 計算例

式 (48) の計算例として、次の計算を行なった。速度は

$$u(x) = 1.0 / (1.0 + 0.5 \sin(2\pi x)) \quad (53)$$

とし、値の初期条件は

$$f(x, t = 0) = \begin{cases} 1 & \text{if } 0.25 \leq x \leq 0.45 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

とした。格子幅 $\Delta x = 2.0/N$ (N は格子数)、時間幅 $\Delta t = \Delta x \times 0.2$ とし、格子数を変えてそれぞれ $t = 0.8$ まで計算を行なった。また、積分値 ρ の初期条件は格子間が直線補間されているとして

$$\rho_{i-1/2}^0 = \frac{f_{i-1}^0 + f_i^0}{2} (x_i - x_{i-1}) \quad (54)$$

とした。

図 7(a)(b) は計算結果と解析解との比較、図 7(c)(d) は Mass Error (最も粗い $N = 200$) を表している。計算結果については、同じ格子数で従来の CIP 法とほぼ同等の結果を得る事が出来ている。保存については、値 f については完全には保存はしていない。これは初期条件で積分値を直線補間したと仮定

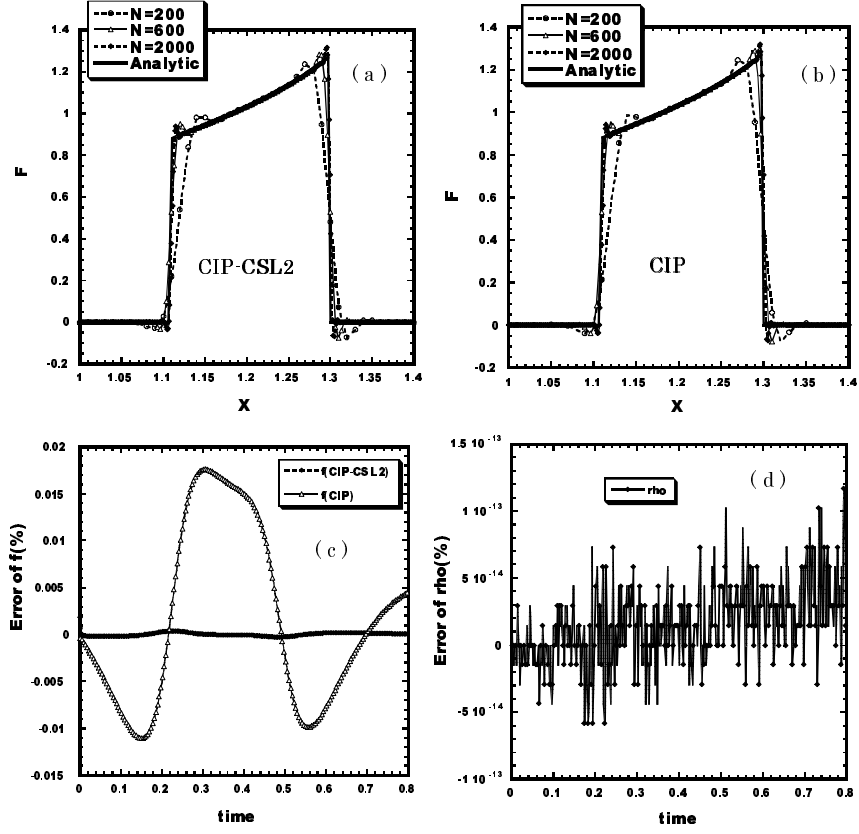


図 7: 計算結果。(a) 格子数 $N = 200, 600, 2000$ の結果と解析解 (CIP-CSL2)、
 (b) 同 CIP、(c) 値 f の Mass Error(CIP、CIP-CSL2)、(d) 積分値 ρ の Mass
 Error(CIP-CSL2)。

した為である。CIP 法も十分小さい範囲で f も保存されているが、CIP-CSL2 法は更にその保存が良くなっている。また、CIP-CSL2 法で用いられている積分値 ρ については計算機の誤差 ($\sim 10^{-14}$) 以内で質量が保存されている。格子内質量の正しい定義が $f_i \Delta x$ ではなく $\rho_{i-1/2}$ であることを考慮すれば、本手法は完全な保存保証スキームである事が分かる。

4.4 多次元化

4.4.1 2次元

多次元化する方法として、Directional Splitting[10]の方法を簡単に紹介する。例えば2次元の場合、方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} + \frac{\partial(vf)}{\partial y} = 0 \quad (55)$$

となるが、1次元の手法を活用する為に図8の様な物理量を定義する。

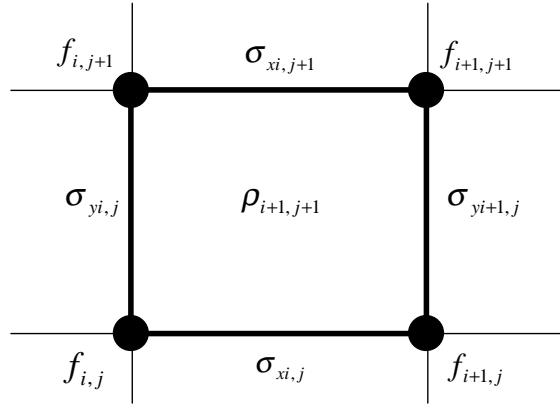


図 8: CIP-CSL2 の物理量 (2 次元)。線密度 σ_x, σ_y と密度 ρ 。

ここで、

$$\sigma_{xij}^n = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y_j, t) dx \quad (56)$$

$$\sigma_{yij}^n = \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x_i, y, t) dy \quad (57)$$

$$\rho_{ij}^n = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x, y, t) dy dx \quad (58)$$

である。計算手順は

$$STEP1 : \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} = 0 \quad (59)$$

$$STEP2 : \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(vf)}{\partial y} = 0 \quad (60)$$

を順次行なう。前節、式 (48) ~ (52) の手順を $CIPCSL1D(u, f^n, f^{n+1}, \rho^n, \rho^{n+1}, x)$ と置くと、

$$\begin{aligned} STEP1 : CIPCSL1D(u, f^n, f^{step1}, \sigma_x^n, \sigma_x^{step1}, x) \\ \bar{u} = \frac{u_{ij} + u_{i+1j}}{2} \\ CIPCSL1D(\bar{u}, \sigma_y^n, \sigma_y^{step1}, \rho^n, \rho^{step1}, x) \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} STEP2 : CIPCSL1D(v, f^{step1}, f^{n+1}, \sigma_y^{step1}, \sigma_y^{n+1}, y) \\ \bar{v} = \frac{v_{ij} + v_{i+1j}}{2} \\ CIPCSL1D(\bar{v}, \sigma_x^{step1}, \sigma_x^{n+1}, \rho^{step1}, \rho^{n+1}, y) \end{aligned} \quad (62)$$

とすればよい。

4.4.2 3次元

3次元では、線密度 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ と面密度 S_{xy}, S_{yz}, S_{zx} (と密度 ρ) を用意する (図9参照)。ここで

$$S_{xyijk}^n = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x, y, z_k, t) dy dx \quad (63)$$

$$S_{yzijk}^n = \int_{z_k}^{z_{k+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x_i, y, z, t) dy dz \quad (64)$$

$$S_{zxijk}^n = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{z_k}^{z_{k+1}} f(x, y_j, z, t) dx dz \quad (65)$$

$$\rho_{ijk}^n = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} \int_{z_k}^{z_{k+1}} f(x, y, z, t) dx dy dz \quad (66)$$

である。同様に計算手順は

$$STEP1 : \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} = 0 \quad (67)$$

$$STEP2 : \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(vf)}{\partial y} = 0 \quad (68)$$

$$STEP3 : \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(wf)}{\partial z} = 0 \quad (69)$$

であり、2次元と同様に

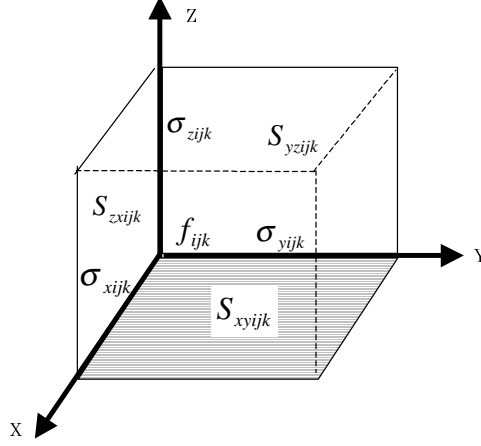


図 9: CIP-CSL2 の物理量 (3 次元)。線密度 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ と面密度 S_{xy}, S_{yz}, S_{zx}

$$\begin{aligned}
\text{STEP1} & : \text{CIPCSL1D}(u, f^n, f^{\text{step1}}, \sigma_x^n, \sigma_x^{\text{step1}}, x) \\
& \quad \bar{u} = \frac{u_{ijk} + u_{ij+1k}}{2} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\bar{u}, \sigma_y^n, \sigma_y^{\text{step1}}, S_{xy}^n, S_{xy}^{\text{step1}}, x) \\
& \quad \hat{u} = \frac{u_{ijk} + u_{ijk+1}}{2} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\hat{u}, \sigma_z^n, \sigma_z^{\text{step1}}, S_{zx}^n, S_{zx}^{\text{step1}}, x) \\
& \quad \tilde{u} = \frac{u_{ijk} + u_{ijk+1} + u_{ij+1k} + u_{ij+1k+1}}{4} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\tilde{u}, S_{yz}^n, S_{yz}^{\text{step1}}, \rho^n, \rho^{\text{step1}}, x) \tag{70} \\
\text{STEP2} & : \text{CIPCSL1D}(v, f^{\text{step1}}, f^{\text{step2}}, \sigma_y^{\text{step1}}, \sigma_y^{\text{step2}}, y) \\
& \quad \bar{v} = \frac{v_{ijk} + v_{i+1jk}}{2} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\bar{v}, \sigma_x^{\text{step1}}, \sigma_x^{\text{step2}}, S_{xy}^{\text{step1}}, S_{xy}^{\text{step2}}, y) \\
& \quad \hat{v} = \frac{v_{ijk} + v_{ijk+1}}{2} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\hat{v}, \sigma_z^{\text{step1}}, \sigma_z^{\text{step2}}, S_{yz}^{\text{step1}}, S_{yz}^{\text{step2}}, y) \\
& \quad \tilde{v} = \frac{v_{ijk} + v_{ijk+1} + v_{i+1jk} + v_{i+1jk+1}}{4} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\tilde{v}, S_{zx}^{\text{step1}}, S_{zx}^{\text{step2}}, \rho^{\text{step1}}, \rho^{\text{step2}}, y) \tag{71} \\
\text{STEP3} & : \text{CIPCSL1D}(w, f^{\text{step2}}, f^{n+1}, \sigma_z^{\text{step2}}, \sigma_z^{n+1}, z) \\
& \quad \bar{w} = \frac{w_{ijk} + w_{i+1jk}}{2} \\
& \quad \text{CIPCSL1D}(\bar{w}, \sigma_x^{\text{step2}}, \sigma_x^{n+1}, S_{zx}^{\text{step2}}, S_{zx}^{n+1}, z) \\
& \quad \hat{w} = \frac{w_{ijk} + w_{ij+1k}}{2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& CIPCSL1D(\hat{w}, \sigma_y^{step2}, \sigma_y^{n+1}, S_{yz}^{step2}, S_{yz}^{n+1}, z) \\
& \tilde{w} = \frac{w_{ijk} + w_{ij+1k} + w_{i+1jk} + w_{i+1j+1k}}{4} \\
& CIPCSL1D(\tilde{w}, S_{xy}^{step2}, S_{xy}^{n+1}, \rho^{step2}, \rho^{n+1}, z)
\end{aligned} \tag{72}$$

である。

参考文献

- [1] E.F.Toro, Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics (Springer, 1997)
- [2] T.Yabe, F.Xiao and T.Utsumi, The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis, *J.Comput.Phys.*,**169**,556 (2001).
- [3] T.Yabe and T.Aoki, A Universal Solver for Hyperbolic Equations by Cubic-Polynomial Interpolation. I. One-Dimensional Solver, *Comput.Phys.Commun.*,**66**,219 (1991).
- [4] J.Von Neumann, R.D.Richtmyer, *J.Appl.Phys.*,**21**,232 (1950).
- [5] Y.Ogata and T.Yabe, Shock capturing with improved numerical viscosity in primitive Euler representation, *Comput.Phys.Commun*,**119**,179 (1999)
- [6] T.Yabe and P.Y.Wang, Unified Numerical Procedure for Compressible and Incompressible Fluid, *J.Phys.Soc.Japan.*,**60**,No.7,2105 (1991).
- [7] F.Xiao,T.Yabe and T.Ito, *Comput.Phys.Comm.*,**93**,1 (1996).
- [8] R.Tanaka,T.Nakamura and T.Yabe, *Comput.Phys.Comm.*,**126**,232 (2000)
- [9] T.Yabe,R.Tanaka,T.Nakamura and F.Xiao, *Mon. Wea. Rev.*,**129**,332 (2001)
- [10] T.Nakamura,R.Tanaka,T.Yabe,and K.Takizawa, *J. Comput.Phys.*,**174**,171 (2001)

CIP 法による MHD 解法

「天体とスペースプラズマのシミュレーションサマースクール」

2002 年 9 月 11 日-9 月 15 日

場所：名古屋大学情報メディア教育センター

1 CIP 法による MHD 解法：CIP-MOCCT 法

現在様々な MHD 解法が存在するが、CIP 法で MHD を解く場合に磁場項と誘導方程式をどの様に解くかが課題となる。その解決法として、誘導方程式の解法である MOCCT 法を組み合わせた CIP-MOCCT 法が Kudoh (国立天文台) によって提案された [1][2][3]。これを紹介する。

磁気流体の基礎方程式は次の様に書かれる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla (p + \frac{B^2}{8\pi}) + \frac{1}{4\pi\rho} (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} + \mathbf{Q}_f \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p = -\gamma p \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{Q}_p \quad (3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} - \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = 0 \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (5)$$

ここで \mathbf{Q}_f は実粘性・人工粘性・重力等の外力項、 \mathbf{Q}_p は熱伝導・人工粘性等の項である。

式 (1) ~ (3) 中の左辺は CIP 法で解き、右辺は非移流相として解けば良いのだが (圧力項を Poisson 方程式で解けば CCUP 法になる) 式 (4),(5) の解法に MOCCT 法を用いる。

2 MOCCT 法の概略

MOCCT 法は $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ を満たす様に式 (4) を解く CT 法と、アルフベン波特性曲線を安定に解く為の MOC 法を組み合わせた手法である。

2.1 MOC : Alfven 波特性曲線法

磁気流体方程式中の Maxwell 方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E} \quad (6)$$

$$\mathbf{E} = -\mathbf{u} \times \mathbf{B} + \eta \mathbf{J} \quad (7)$$

であるが、ここでは $\eta = 0$ とする。まずは簡単の為、1 次元 (X 方向) の場合を採りあげる。格子点 x_i 上に ρ, p, B_y, v_y を配置し、格子点間に v_x と起電力 (電場) E の z 成分 ε_z を配置する。(図 1)

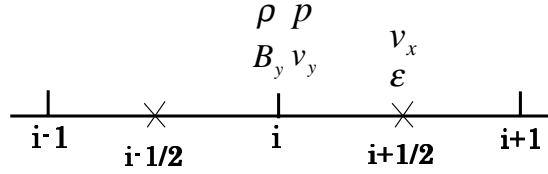


図 1: 1 次元の物理量配置。速度 X 成分と電場は格子の中心に定義。

式 (6),(7) より B_y の方程式は次の様に差分化する事が出来る。

$$\frac{B_{yi}^{n+1} - B_{yi}^n}{\Delta t} + \frac{(\varepsilon_z)_{i+1/2}^* - (\varepsilon_z)_{i-1/2}^*}{\Delta x} = 0 \quad (8)$$

$$\varepsilon_{zi+1/2}^* = u_{i+1/2} B_y^* - v^* B_x$$

ここで * は中間の時刻 $(n + 1/2)$ を表す。また、 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ より、 $B_x = \text{const}$ である。この ε_z^* を求める時にアルフベン波の特性曲線法 (Method of Characteristics : MOC) を用いる [4]。アルフベン波は非圧縮性 MHD に見られる波動であるので、特性曲線は次の 2 つの式、運動方程式と誘導方程式から導かれる。

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} = \frac{B_x}{4\pi\rho} \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial (v_x v_y)}{\partial x} \quad (9)$$

$$\frac{\partial B_y}{\partial t} = B_x \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial (v_x B_y)}{\partial x} \quad (10)$$

($\rho, v_x, B_x = \text{constant}$) 式 (9),(10) を変形すると、別の 2 式が得られる。

$$\frac{Dv_y}{Dt} \mp \frac{1}{\sqrt{4\pi\rho}} \frac{DB_y}{Dt} = 0 \quad (11)$$

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \left(v_x \pm \frac{B_x}{\sqrt{4\pi\rho}} \right) \frac{\partial}{\partial x} \quad (12)$$

式 (12) は特性速度 (移流速度) が $C^\pm = v_x \pm \frac{B_x}{\sqrt{4\pi\rho}}$ を意味し、特性線 : 式 (11) に沿って $v_y \mp \frac{B_y}{\sqrt{4\pi\rho}}$ が保存される不変量になっている事を表している。

よって、式 (11) を特性線に沿って積分すると、特性曲線の始点 (時刻 n) と * の間には次の様な関係式が導かれる事になる。(図 2)

$$v_y^* - v_y^+ - \frac{1}{\sqrt{4\pi\rho^+}}(B_y^* - B_y^+) = 0 \quad (13)$$

$$v_y^* - v_y^- + \frac{1}{\sqrt{4\pi\rho^-}}(B_y^* - B_y^-) = 0 \quad (14)$$

ここで、 $(B_y, v_y)^\pm$ は各特性線 C^\pm の始点の値である。式 (13),(14) から、 v_y^* と B_y^* は

$$v_y^* = \frac{v_y^+ \sqrt{4\pi\rho^+} + v_y^- \sqrt{4\pi\rho^-} - B_y^+ + B_y^-}{\sqrt{4\pi\rho^+} + \sqrt{4\pi\rho^-}} \quad (15)$$

$$B_y^* = \frac{-v_y^+ + v_y^- + B_y^+ / \sqrt{4\pi\rho^+} + B_y^- / \sqrt{4\pi\rho^-}}{1/\sqrt{4\pi\rho^+} + 1/\sqrt{4\pi\rho^-}} \quad (16)$$

の様に求める事が出来る。簡単の為、 $\rho^+ = \rho_{i-1}^n$, $\rho^- = \rho_{i+1}^n$ とする。

始点の値 $f(= B_y, v_y)^\pm$ は、式 (12) を見ても分かるように移流の形をしているので、格子間を補間して求める事が出来る。補間方法には様々あるが、例えば van Leer の方法 ($i - 1/2$ と $i + 1/2$ を直線補間する方法) では

$$f(= B_y, v_y)^\pm = \begin{cases} f_i^n + \frac{1}{2}(\Delta x - C_{i+1/2}^\pm \Delta t) \frac{\Delta f}{\Delta x^{(i)}} & \text{if } C_{i+1/2}^\pm > 0 \\ f_{i+1}^n - \frac{1}{2}(\Delta x + C_{i+1/2}^\pm \Delta t) \frac{\Delta f}{\Delta x^{(i+1)}} & \text{otherwise} \end{cases}$$

ここで、

$$\frac{\Delta f}{\Delta x^{(i)}} = \begin{cases} \frac{2\Delta f_{i-1/2}\Delta f_{i+1/2}}{\Delta f_{i-1/2} + \Delta f_{i+1/2}} & \text{if } \Delta f_{i-1/2}\Delta f_{i+1/2} > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

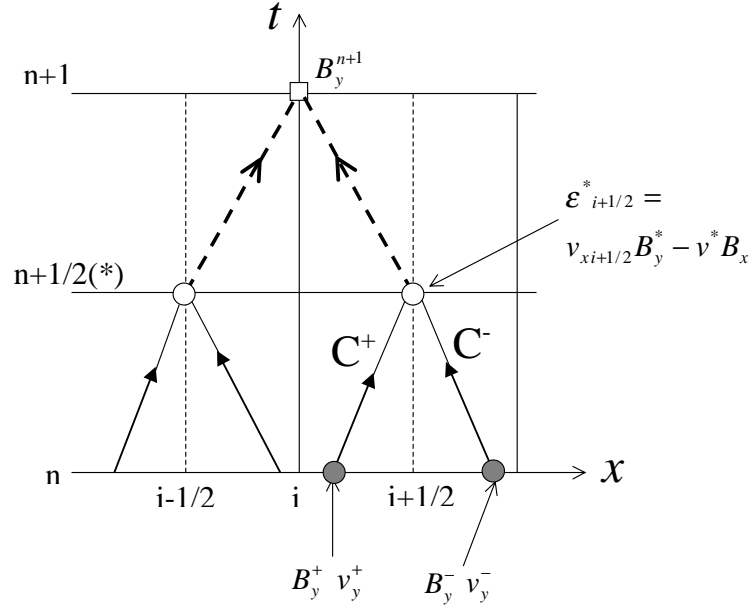


図 2: アルフベン波特性曲線と磁場の時間発展。実線矢印：特性曲線により起電力を求める。点線矢印：式 (8) を用いて B_y の時間発展を行なう。

$\Delta f_{i+1/2} = (f_{i+1} - f_i) / \Delta x$ である。この補間方法にも CIP 法を適用する事も出来る。

2.2 多次元、CT 法

前節は 1 次元の場合だが、そのまま多次元に拡張する事も出来る。例えば 2 次元では磁場の各成分は

$$\frac{\partial B_x}{\partial t} = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \quad (17)$$

$$\frac{\partial B_y}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \quad (18)$$

$$\varepsilon = -(v_x B_y - v_y B_x) \quad (19)$$

であるが、各物理量の配置は図 3 の様にする。スタガード格子なので、スカラー量は格子中心、ベクトル量は格子境界、また起電力 ε は格子の角に配置する。この様にすれば 1 次元の手法を用いて X 方向で B_y, v_y 、Y 方向で B_x, v_x を求め、式 (19) の ε が求まり、式 (17),(18) を差分化した式

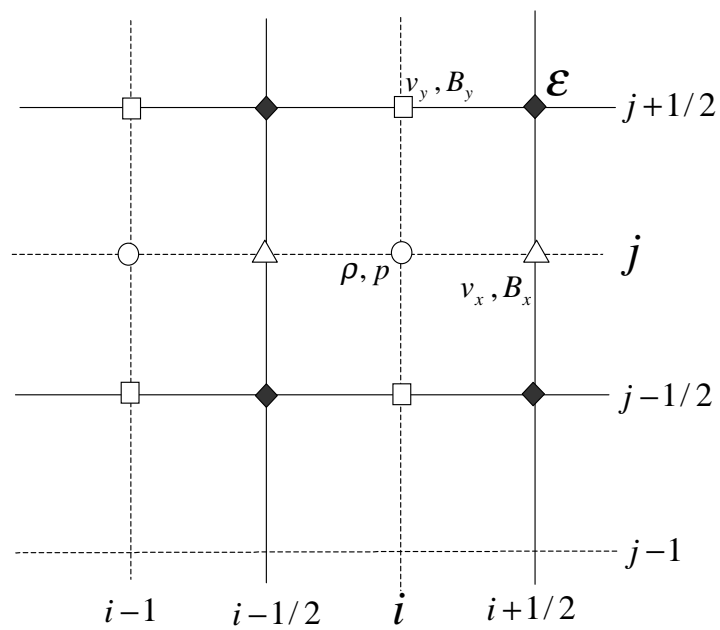


図 3: 2 次元 MHD コードでの物理量の配置、CT 法

$$\frac{B_{x(i+1/2,j)}^{n+1} - B_{x(i+1/2,j)}^n}{\Delta t} = - \frac{\varepsilon_{(i+1/2,j+1/2)}^{n+1/2} - \varepsilon_{(i+1/2,j-1/2)}^{n+1/2}}{\Delta y} \quad (20)$$

$$\frac{B_{y(i,j+1/2)}^{n+1} - B_{y(i,j+1/2)}^n}{\Delta t} = \frac{\varepsilon_{(i+1/2,j+1/2)}^{n+1/2} - \varepsilon_{(i-1/2,j+1/2)}^{n+1/2}}{\Delta x} \quad (21)$$

で磁場が時間発展される。これは 3 次元でも同様に拡張が出来る。

図 3 の様に物理量を配置する方法を CT 法と呼ぶが、この様に磁場と電場を異なる場所で定義すると、式 (20),(21) を用いて、初期条件で $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ が満たされていれば常に $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ になる事が示される [4]。

この事から分かるように、CT 法は単に $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ を保証する手法であり、電場 ε の求め方の規定はしていない。これに MOC 法を組み合わせる事で安定なスキームになっている。

2.3 運動方程式中の磁気ストレス項

運動方程式の右辺にも磁気ストレス項が存在するが、この項にも MOC 法を用いて値を評価する事になる。例えば、2 次元 MHD の運動方程式の y 成分は次式である。

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \left(p + \frac{B_x^2}{8\pi} \right) + \frac{B_x}{4\pi\rho} \frac{\partial B_y}{\partial x} \quad (22)$$

この内、磁気圧項（右辺第 1 項）は圧力と同様の差分を作ればよいが、第 2 項はストレス項でありこの項に MOC 法を適用する。非移流相において第 2 項の差分のみ表記すると

$$\begin{aligned} & \frac{(v_y)_{i,j+1/2}^* - (v_y)_{i,j+1/2}^n}{\Delta t} = \dots \\ & + \left(\frac{1}{4\pi\bar{\rho}} \right) \langle B_x \rangle_{i,j+1/2}^n \frac{(B_y)_{i+1/2,j+1/2}^* - (B_y)_{i-1/2,j+1/2}^*}{\Delta x} \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、 $\bar{\rho}, \langle B_x \rangle_{i,j+1/2}^n$ はそれぞれ v_y の定義点 $(i, j + 1/2)$ 上での平均値である。例えば

$$\langle B_x \rangle_{i,j+1/2}^n = \frac{1}{4} [(B_x)_{i+1/2,j} + (B_x)_{i+1/2,j+1} + (B_x)_{i-1/2,j} + (B_x)_{i-1/2,j+1}] \quad (24)$$

等である。式 (23) における、 B_y^* の値の見積りに MOC 法を用いる。しかし、この計算は非移流相の計算であり、移流部分は CIP 法で別に計算する事になるので特性速度は

$$C^\pm = \pm \frac{B_x}{\sqrt{4\pi\rho}} \quad (25)$$

を用いて計算する。(式 (11),(12) は移流項も含めて特性線を出していた))
これは運動方程式の x 成分も同様に計算を行なう。

2.4 計算手順

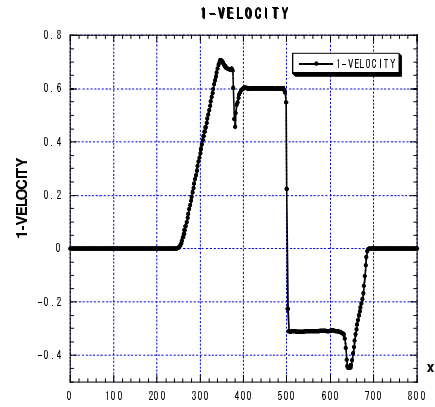
CIP 法と MOCCT 法をまとめた手順は次の様になる。

1. 初期条件 ($\rho^n, \mathbf{u}^n, p^n, \mathbf{B}^n$) を設定。
2. 非移流項の計算 ($\rho^n, \mathbf{u}^n, p^n \rightarrow \rho^*, \mathbf{u}^*, p^*$)
 - (a) この時、運動方程式のストレス項の計算は MOC 法で求める。(式 (23) ~ (25))
3. 移流相と磁場の時間発展
 - (a) CIP 法で ρ, \mathbf{u}, p の移流相の計算を行なう。 $(\rho^*, \mathbf{u}^*, p^*) \rightarrow (\rho^{n+1}, \mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1})$
 - (b) MOC 法で電場 ε を計算し、CT 法で磁場 \mathbf{B}^{n+1} を計算。(式 (20),(21))
4. 以下、繰り返し

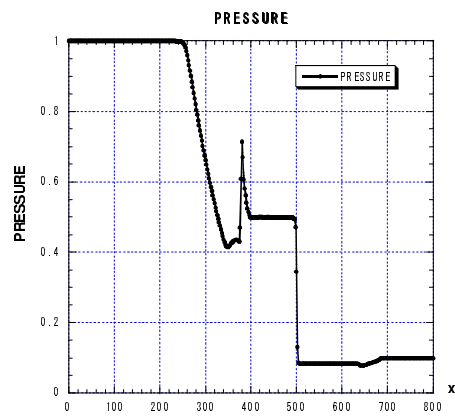
典型的な計算例として、1.5 次元衝撃波管問題の計算例を CIP-MOCCT 法で解いた結果を示す。1.5 次元なので磁場・速度の y 成分はあるが、 $\partial/\partial y = 0$ である (勿論、z 成分は値・微分共に 0)。初期条件は $p = 1, \rho = 1, B_y = 1.0$ ($x < 400$), $p = 0.1, \rho = 0.125, B_y = -1.0$ ($x > 400$)。比熱比 $\gamma = 1.4$ 、格子幅 $\Delta x = 2.0$ とし、 $t = 80.0$ の結果を示す。人工粘性係数は 0.7 である。



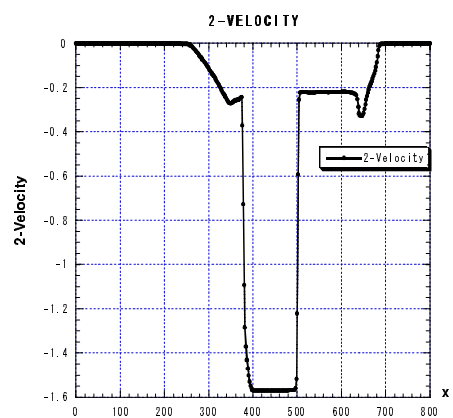
密度



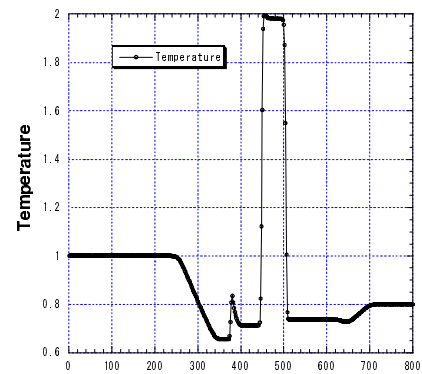
X 方向速度



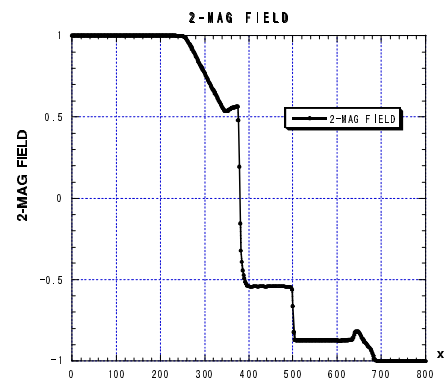
压力



Y 方向速度



温度



磁場 Y 成分

圖 4: 1 次元 MHD 衝擊波管問題。

参考文献

- [1] T.Kudoh and K.Shibata, Numerical MHD Simulation of Astrophysical Problems by Using CIP-MOCCT Method; *CFD Journal*,**8**, 56 (1999)
- [2] T.Kudoh and K.Shibata, Alfven Wave Model of Sppicules and Coronal Heating, *Astrophysical Journal*,**514**,493 (1999)
- [3] T.Kudoh and K.Shibata, Magnetically Driven Jets from Accretion Disks. II. Nonsteady Solutions and Comparison with Steady Solutions, *Astrophysical Journal*,**476**,612 (1997)
- [4] J.F.Hawley and J.M.Stone, MOCCT: A Numerical technique for astrophysical MHD, *Comput.Phys.Commun*,**89**,127 (1995)

Finite Volume TVD Scheme on Unstructured Grids for Space MHD Simulations and Space Weather

T. Tanaka¹

Communications Research Lab., Koganei-shi, Tokyo 184-8795, Japan

Abstract. A three-dimensional (3-D) high-resolution magnetohydrodynamic (MHD) simulation scheme is developed on unstructured grid systems to solve the complex-system problems in space science and space weather in which numerical difficulties arise from inhomogeneity due to strong background potential fields, inclusion of multi-species ions, and formations of shocks and discontinuities. The ideal MHD equations are extended to the 9-component MHD equations for multi-component ions and modified so as to avoid a direct inclusion of background potential field in dependent variables through the use of new variables. The numerical scheme adopts the finite volume method (FVM) with an upwinding numerical flux based on the linearized Riemann solver. Upwindings on unstructured grid systems are realized from the fact that the MHD equations are symmetric with respect to the rotation of the space. Despite the modifications of the equation system, the eigenvectors in the mode-synthesis matrix necessary for the evaluation of the upwinding numerical flux can still be written analytically. To get a higher order of accuracy, the upwinding flux is extended to the third-order total variation diminishing (TVD) numerical flux in the calculation of FVM, through the monotonic upstream scheme for conservation laws (MUSCL) approach and Van Leer's differentiable limiter. Three numerical examples are given in order to show the efficiency of the above scheme.

1 Introduction

Recently, the magnetohydrodynamic (MHD) simulations are widely applied to many problems in space science with a great success [1] [2] [3] [4] [5] [6] [7] [8] [9] [10] [11] [12]. A rapid development of supercomputers in computational speed and memory size gives a conviction for further developments in this fruitful area. In these studies, the developments of supercomputers and numerical schemes are like the two wheels of a cart. In order to apply the MHD simulations to the problems having more complex configurations, further improvements of numerical schemes are also unavoidable. In this paper, we develop a numerical MHD scheme that enables an exact treatment of multi-scale space plasma including multi-component ions and strong background potential field, with an excellent capturing of shocks and discontinuities.

In the space science, we must always study the complex systems which are controlled by the coupling processes between different regions having quite different characteristics. Auroral physics is a typical example of this kind of problem [3] [5]. The main process controlling this problem is the coupling effects that

occur between the magnetosphere and the ionosphere. The characteristic length and time scales of these two regions are vastly different. If numerical MHD simulations are applied to these problems, then it becomes necessary to assign different grid point densities to each region, in order to facilitate the simultaneous treatment of the different regions. Therefore, it is unavoidable to adopt an unstructured grid system. The ordinary finite difference method (FDM) which is widely used to solve differential equations numerically is no longer applicable on an unstructured grid system and so here we consider the finite volume method (FVM) based on the flux conservation law [13].

High-speed flowing plasma that is frequently treated in space science tends to form shocks and discontinuities. The use of standard numerical schemes of second-order accuracy (e.g. the Lax-Wendroff method) generates spurious oscillations at high gradients. Therefore, there is a need to use more advanced schemes that can adequately represent these shocks and discontinuities. An outstanding approach is to evaluate numerical flux in the FVM from an upwinding method based on the linearized Riemann solver [14] [15] [16]. To get a higher order of accuracy, the upwinding scheme for numerical flux is extended to the total variation diminishing (TVD) scheme. Among many TVD schemes, a third-order TVD scheme based on the monotonic upstream scheme for conservation laws (MUSCL) approach is considered in this paper [17] [18]. With this numerical flux, excellent shock-capturing is enabled along with stable and highly-accurate computations. The eigenvalues and eigenvectors of the MHD flux Jacobian matrix necessary for the upwinding calculations are derived from the well-known Alfvén, fast and slow velocities [14]. The calculation of eigenvectors is done with special care when wave propagations become parallel or perpendicular to the ambient magnetic field, because degenerations of eigenvalues occur in these cases [14] [19].

Another problem in space science is that many planets and stars treated in the complex-system simulation have a strong dipole magnetic field generated in their interior regions. In the case of the earth, the magnitude of the dipole magnetic field is about 30000 nT in the ionospheric region near the Earth, while it diminishes rapidly in the magnetosphere to about 10 nT. Therefore, the magnitude of the intrinsic magnetic field varies over a wide range in the whole treating region, in the problem of magnetosphere-ionosphere (M-I) couplings. On the other hand, the variable components of magnetic field, which are calculated from the MHD equations, exhibit a similar magnitude over the whole region. As a result, the ratio of variable to intrinsic components of the magnetic field becomes extremely small in the ionospheric region. These situations give a difficulty in the numerical study of the coupling process between two different regions. Especially, severe difficulties appear in the energy equation. However, this difficulty due to the wide range in the ratio of variable to internal magnetic fields can be avoided from the fact that intrinsic magnetic field includes only potential components. Thus, it becomes important to construct the MHD calculations suppressing the direct inclusion of the intrinsic component of the magnetic field, as dependent

variables [3] [19]. In this paper, therefore, a modified equation system is used to cope with such a problem, changing dependent variables.

In order to apply the MHD simulation to more complicated problems in space science, an additional improvements is imposed on the original MHD equations. Since space plasma does not always consist of single ion specie, sometimes we must treat the plasma that includes multi-component ions with the source and sink [9]. The ordinary 8-component MHD equations can be extended to the 9-component MHD equations for 2-component plasma.

It is shown in this paper that the equation system with the above modifications can still be written in the conservation form and can also be treated numerically through the FVM with the upwinding TVD flux. The eigenvalues and eigenvectors necessary to construct a TVD scheme are calculated for the 9-component MHD equations with modified variables. Construction of the scheme is seen in sections 2, 3, 4, and 5. In section 6, a brief comment is given about the suitability of the present scheme for parallel computation. To show the feasibility of the scheme, three numerical examples are shown in sections 7, 8, and 9. The first example in section 7 shows an excellent ability of present scheme for the capturing of shocks and discontinuities. The second example in section 8 demonstrates the applicability of the present scheme to multi-component plasma. The last example in section 9 adopts the present scheme to the space weather problem that includes a potential magnetic field, and shows the capability of low-noise calculation even in the low- β region.

2 TVD schemes for hyperbolic equations

The history of the development of numerical schemes for hyperbolic conservation law is long and rich [20]. The idea that stable computation can be accomplished through an approximate dissipation term was used in early schemes. The advection equation, the most simple hyperbolic equation, can be written in a one dimensional coordinate system (x, t) as

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

Where C is an advection speed. Let u_i^n be the numerical solution of (1) at $x = i\Delta x$ and $t = n\Delta t$. Then, the explicit time integration of this equation is

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -C \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{d}{2} \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta t}. \quad (2)$$

The stability condition for equation (2) is $1 > d > k^2$, with $k = |C|\Delta t/\Delta x$. Friedrichs-Lax, Godunov, and Lax-Wendroff schemes are obtained automatically by selecting $d = 1$, $d = k = |C\Delta t/\Delta x|$, and $d = k^2 = (C\Delta t/\Delta x)^2$, respectively. Out of these schemes only the Lax-Wendroff scheme has the second order accuracy.

Modern shock-capturing schemes add only enough dissipation in small localized regions to eliminate numerical oscillations. These schemes enforce some

constraint on the problem, usually that the solutions be TVD. The Godunov scheme can be modified to

$$u_i^{n+1} - u_i^n = C_{i+1/2}^-(u_{i+1}^n - u_i^n) - C_{i-1/2}^+(u_i^n - u_{i-1}^n), \quad (3)$$

with

$$C_{i+1/2}^- = (|C| - C)\Delta t/2\Delta x, C_{i-1/2}^+ = (|C| + C)\Delta t/2\Delta x. \quad (4)$$

These coefficients satisfy the condition

$$0 < C_{i+1/2}^- + C_{i-1/2}^+ < 1, 0 < C_{i+1/2}^-, C_{i-1/2}^+, \quad (5)$$

and the total variation at step $n + 1$ under this condition is

$$\begin{aligned} TV(u^{n+1}) &= \sum |u_{i+1} + C_{i+3/2}^-(u_{i+2} - u_{i+1}) - C_{i+1/2}^+(u_{i+1} - u_i) \\ &\quad - u_{i+1} - C_{i+1/2}^-(u_{i+1} - u_i) + C_{i-1/2}^+(u_i - u_{i-1})| \\ &\leq \sum C_{i+3/2}^- |u_{i+2} - u_{i+1}| \\ &\quad + \sum (1 - C_{i+1/2}^+ - C_{i+1/2}^-) |u_{i+1} - u_i| \\ &\quad + \sum C_{i-1/2}^+ |u_i - u_{i-1}| \\ &= \sum |u_{i+1} - u_i|. \end{aligned} \quad (6)$$

Thus, the TVD is satisfied for the Godunov scheme. This scheme is a first-order upwind TVD scheme.

In order to obtain a higher-order TVD scheme, we write equation (2) in the flux formula

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\frac{F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n}{\Delta x}, \quad (7)$$

then the Godunov and Lax-Wendroff fluxes in the case of $C > 0$ are

$$F_{i+1/2}^G = Cu_i, \quad (8)$$

and

$$F_{i+1/2}^L = Cu_i + C/2 \cdot (1 - k)(u_{i+1} - u_i), \quad (9)$$

respectively. Equation (8) shows the fact that the Godunov scheme is an upwind scheme. By combining Godunov and Lax-Wendroff fluxes as

$$F_{i+1/2} = (1 - B_{i+1/2})F_{i+1/2}^G + B_{i+1/2}F_{i+1/2}^L, \quad (10)$$

one can obtain

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{u_{i-1}^n - u_i^n} = k - \frac{1}{2}k(1 - k)B_{i-1/2} + \frac{1}{2}k(1 - k)\frac{B_{i+1/2}}{r_i}, \quad (11)$$

with

$$r_i = (u_i - u_{i-1})/(u_{i+1} - u_i). \quad (12)$$

In order for the scheme to be TVD, the left hand side of equation (11) must be between 0 and 1 and the resulting sufficient condition obtained after some simple algebra is the following,

$$-\frac{2}{k} < -2 < B_{i-1/2} - \frac{B_{i+1/2}}{r_i} < 2 < \frac{2}{1-k}, \quad (13)$$

which reduces to

$$0 < B_{i+1/2}, B_{i+1/2}/r_i < 2. \quad (14)$$

Commonly used limiters which give the constraint for the TVD scheme satisfy this condition.

For a coupled nonlinear equation system

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = 0, \mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}, \quad (15)$$

the Riemann problem is solved to evaluate the upwind flux. From the flux Jacobian matrix \mathbf{A} , its eigenvalues λ_k , and eigenvectors \mathbf{r}_k , $\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i$ can be expanded as

$$\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i = \sum C_k \mathbf{r}_k, C_k = \mathbf{r}_k^{-1} \Delta \mathbf{u}, \mathbf{A}_{i+1/2} \mathbf{r}_k = \lambda_k \mathbf{r}_k, \quad (16)$$

then, the upwind flux can be evaluated as

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{i+1/2} &= \mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1/2}^R) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_i + \sum^- C_k \mathbf{r}_k) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_i) + \mathbf{A} \sum^- C_k \mathbf{r}_k \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{u}_i) + \sum^- \lambda_k C_k \mathbf{r}_k = \mathbf{f}_i/2 + (\mathbf{f}_{i+1} - \sum \lambda_k C_k \mathbf{r}_k)/2 + \sum^- \lambda_k C_k \mathbf{r}_k \\ &= (\mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{i+1})/2 - (\sum^+ \lambda_k C_k \mathbf{r}_k - \sum^- \lambda_k C_k \mathbf{r}_k)/2 \\ &= (\mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{i+1})/2 - (\sum |\lambda_k| C_k \mathbf{r}_k)/2 \\ &= (\mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{i+1})/2 - (\mathbf{R}|\mathbf{A}|\mathbf{R}^{-1} \Delta \mathbf{u})/2. \end{aligned} \quad (17)$$

The accuracy of the scheme increases by considering the interpolation of dependent variables. An example is the MUSCL interpolation in which i and j are replaced by L and R as

$$\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_i + \mathbf{s}_i \{ (\mathbf{1} - \mathbf{s}_i/3)(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_{i-1}) + (\mathbf{1} + \mathbf{s}_i/3)(\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) \}/4, \quad (18)$$

$$\mathbf{u}_R = \mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{s}_{i+1} \{ (\mathbf{1} + \mathbf{s}_{i+1}/3)(\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) + (\mathbf{1} - \mathbf{s}_{i+1}/3)(\mathbf{u}_{i+2} - \mathbf{u}_{i+1}) \}/4, \quad (19)$$

where \mathbf{s}_i is a limiter at the grid point i .

Assuming first-order accuracy in implicit terms, we can also obtain an implicit MUSCL scheme as

$$\begin{aligned} &\frac{\Delta x}{\Delta t} \Delta \mathbf{u}_i^{n+1} + \frac{\partial \mathbf{F}_{i+1/2}}{\partial \mathbf{u}_{i+1}} \Delta \mathbf{u}_{i+1}^{n+1} + \frac{\partial \mathbf{F}_{i+1/2}}{\partial \mathbf{u}_i} \Delta \mathbf{u}_i^{n+1} \\ &- \frac{\partial \mathbf{F}_{i-1/2}}{\partial \mathbf{u}_i} \Delta \mathbf{u}_i^{n+1} - \frac{\partial \mathbf{F}_{i-1/2}}{\partial \mathbf{u}_{i-1}} \Delta \mathbf{u}_{i-1}^{n+1} \\ &= -(\mathbf{F}_{i+1/2}^n - \mathbf{F}_{i-1/2}^n), \end{aligned} \quad (20)$$

with a notation $\Delta \mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^{n+1} - \mathbf{u}_i^n$.

3 Finite volume TVD scheme for 9-component MHD equations

In space plasma simulation, sometimes we must treat multiple plasma components. The ideal MHD equations can be extended to the 9-component MHD equations that treat 2-component plasma. The nondimensional conservation-law form for these equations can be written in the Cartesian coordinate system (x, y, z, t) as

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{u})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{u})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{u})}{\partial z} = \mathbf{S}, \quad (21)$$

where the dependent variables are $\mathbf{u} = (\rho, \mathbf{m}, \mathbf{B}, U, \rho_2)^T$ and $\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}$, and \mathbf{S} are flux functions in the x, y, z directions and source terms. $\rho, \mathbf{m}, \mathbf{B}$ and U are the density, momentum, magnetic field and energy density. Where $\rho = \rho_1 + \rho_2$ with ρ_1 and ρ_2 being the densities of first and second plasma components. Using Gauss's law, the integration form of equation (21) can be written as

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{u} dv + \int (\mathbf{F} n_x + \mathbf{G} n_y + \mathbf{H} n_z) ds = \int \mathbf{S} dv, \quad (22)$$

where dv and ds are the volume and surface element of the control volume and \mathbf{n} is a unit vector normal to the surface of the control volume.

Let us define a matrix \mathbf{T} which rotates the x axis to the direction of \mathbf{n}

$$\mathbf{T} = \begin{vmatrix} 1 & & & \\ & \mathbf{T}_1 & & \\ & & \mathbf{T}_1 & \\ & & & 1 \\ & & & & 1 \end{vmatrix}, \quad (23)$$

with

$$\mathbf{T}_1 = \begin{vmatrix} n_x & n_y & n_z \\ t_{1x} & t_{1y} & t_{1z} \\ t_{2x} & t_{2y} & t_{2z} \end{vmatrix}, \quad (24)$$

then equation (22) is expressed as

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{u} dv + \int \mathbf{T}^{-1} \mathbf{T} (\mathbf{F} n_x + \mathbf{G} n_y + \mathbf{H} n_z) ds = \int \mathbf{S} dv, \quad (25)$$

where \mathbf{t}_1 and \mathbf{t}_2 are unit vectors tangent to the surface of the control volume and orthogonal to each other. Since the form of the MHD equations must be unchanged for the rotation of the coordinate system, the relation

$$\mathbf{T} (\mathbf{F}(\mathbf{u}) n_x + \mathbf{G}(\mathbf{u}) n_y + \mathbf{H}(\mathbf{u}) n_z) = \mathbf{F}(\mathbf{T}\mathbf{u}) = \mathbf{F}(\mathbf{u}_n) \quad (26)$$

must hold [15] [16] [19]. Then one can obtain from equation (25)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{u} dv + \int \mathbf{T}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{u}_n) ds = \int \mathbf{S} dv. \quad (27)$$

Introducing new dependent variables $\mathbf{u}_1 = (\rho, \mathbf{m}, \mathbf{B}_1, U_1, \rho_2)^T = (\rho, m_x, m_y, m_z, B_x - B_{0x}, B_y - B_{0y}, B_z - B_{0z}, U - (\mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{B}_0)/\beta - B_0^2/(2\beta), \rho_2)^T$, with the conditions $\partial \mathbf{B}_0 / \partial t = \text{rot} \mathbf{B}_0 = \text{div} \mathbf{B}_0$, then the equation for \mathbf{u}_1 can be written in the conservaton-law form as

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{u}_1 dv + \int \mathbf{T}^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{u}_{1n}, \mathbf{B}_{0n}) ds = \int \mathbf{S} dv, \quad (28)$$

with $\mathbf{u}_{1n} = \mathbf{T} \mathbf{u}_1$, $\mathbf{m}_n = T_1 \mathbf{m} = (m_n, m_{t1}, m_{t2})^T$, $\mathbf{B}_n = \mathbf{T}_1 \mathbf{B} = (B_n, B_{t1}, B_{t2})^T$, $\mathbf{B}_{1n} = \mathbf{T}_1 \mathbf{B}_1 = (B_{1n}, B_{1t1}, B_{1t2})^T$, and $\mathbf{B}_{0n} = \mathbf{T}_1 \mathbf{B}_0 = (B_{0n}, B_{0t1}, B_{0t2})^T$. The flux function in the normalized form is written

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} m_n \\ P + \frac{m_n m_n}{\rho} + \frac{B^2}{2\beta} - \frac{1}{\beta} B_n B_n - \frac{B_0^2}{2\beta} + \frac{1}{\beta} B_{0n} B_{0n} \\ \frac{m_{t1} m_n}{\rho} - \frac{1}{\beta} B_{t1} B_n + \frac{1}{\beta} B_{0t1} B_{0n} \\ \frac{m_{t2} m_n}{\rho} - \frac{1}{\beta} B_{t2} B_n + \frac{1}{\beta} B_{0t2} B_{0n} \\ 0 \\ \frac{m_n}{\rho} B_{t1} - \frac{m_{t1}}{\rho} B_n \\ \frac{m_n}{\rho} B_{t2} - \frac{m_{t2}}{\rho} B_n \\ \frac{m_n}{\rho} (U_1 + \frac{B_1^2}{2\beta} + P) - \frac{B_{1n}}{\beta} \\ \times (\frac{m_n}{\rho} B_{1n} + \frac{m_{t1}}{\rho} B_{1t1} + \frac{m_{t2}}{\rho} B_{1t2}) \\ + \frac{B_{1t1}}{\beta} (\frac{m_n}{\rho} B_{0t1} - \frac{m_{t1}}{\rho} B_{0n}) \\ + \frac{B_{1t2}}{\beta} (\frac{m_n}{\rho} B_{0t2} - \frac{m_{t2}}{\rho} B_{0n}) \\ \frac{\rho_2}{\rho} m_n \end{bmatrix}. \quad (29)$$

In the solar wind-magnetosphere-ionosphere (S-M-I) interaction problem, a dipole field will be adopted as \mathbf{B}_0 . In the expression of (29), the \mathbf{B}_0 terms are added to the second, third, fourth, and last components of \mathbf{F} , considering $\text{rot} \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_0 = 0$ and $\mathbf{m} \times \mathbf{B} \cdot \text{rot} \mathbf{B}_0 = 0$. The variable component of energy density U_1 , density ρ , momentum \mathbf{m} , and the variable components of magnetic field \mathbf{B}_1 are related to pressure P by the equation

$$P = (\gamma - 1)(U_1 - \frac{m^2}{2\rho} - \frac{B_1^2}{2\beta}). \quad (30)$$

Constants in these equations are β and γ , with $\beta = \mu \rho_0 R T_0 / B_{00}^2$, γ the polytropic index, μ the magnetic permeability, R the gas constant, ρ_0 the normalization density, B_{00} the normalization field, and T_0 the normalization temperature. Momentum \mathbf{m} and time t are normalized by $\rho_0 (R T_0)^{1/2}$ and $L_0 / (R T_0)^{1/2}$, with L_0 normalization length.

From equation (28), a discrete formulation of the MHD equations in the FVM style is written for the grid point i in the form

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_{1i} V_i + \sum_j \mathbf{T}_{ij}^{-1} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{u}_{1ni'}, \mathbf{u}_{1ni}, \mathbf{u}_{1nj}, \mathbf{u}_{1nj'}, \mathbf{B}_{0nij}) S_{ij} = \mathbf{S} V_i, \quad (31)$$

where j denotes the grid points neighboring the grid point i , V_i denotes the volume of the control volume cell which includes the grid point i , \mathbf{T}_{ij} is the

rotation matrix at the interfacing surface between i and j , S_{ij} is the surface area of the i and j interface, $\mathbf{u}_{1ni'}$, \mathbf{u}_{1ni} , \mathbf{u}_{1nj} , and $\mathbf{u}_{1nj'}$ are $\mathbf{u}_{1i'}$, \mathbf{u}_{1i} , \mathbf{u}_{1j} , and $\mathbf{u}_{1j'}$ rotated by \mathbf{T}_{ij} , and \mathbf{B}_{0nij} is \mathbf{B}_{0n} at the i and j interface. Adopting equation (17), the first-order upwind numerical flux $\underline{\mathbf{F}}_{ij}$ for equation (31) is given as

$$\underline{\mathbf{F}}_{ij} = \frac{1}{2}[\mathbf{F}(\mathbf{u}_{1nj}, \mathbf{B}_{0nij}) + \mathbf{F}(\mathbf{u}_{1ni}, \mathbf{B}_{0nij}) - \mathbf{R}_{ij} | \mathbf{\Lambda}_{ij} | \mathbf{R}_{ij}^{-1}(\mathbf{u}_{1nj} - \mathbf{u}_{1ni})]. \quad (32)$$

Here, the mode synthesis matrix \mathbf{R}_{ij} and the eigenvalue matrix $\mathbf{\Lambda}_{ij}$ are calculated from the following diagonalization process:

$$\mathbf{A}_{ij}\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_{ij}\mathbf{\Lambda}_{ij}, \quad (33)$$

$$\mathbf{A}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}_{1n}}(\mathbf{u}_{inij}, \mathbf{B}_{0nij}), \quad (34)$$

with \mathbf{A}_{ij} the flux Jacobian matrix of \mathbf{F} at the i and j interface, and \mathbf{u}_{1nij} a symmetric average of \mathbf{u}_{1nj} and \mathbf{u}_{1ni} . As seen from equation (33), the mode synthesis matrix consists of the right eigenvectors of the flux Jacobian matrix \mathbf{r}_{ijk} , and the diagonal matrix $\mathbf{\Lambda}_{ij}$ consists of eigenvalues λ_{ijk} , $k = 1 \sim 9$.

To get a higher order of accuracy, the MUSCL approach is used changing i and j in equation (32) to L and R , suffixes which indicate variables just on the negative and positive sides of the interface [17]. Adopting equations (18) and (19), then the numerical flux is defined by the following relation:

$$\underline{\mathbf{F}}_{ij} = \frac{1}{2}[\mathbf{F}(\mathbf{u}_{1nR}, \mathbf{B}_{0nij}) + \mathbf{F}(\mathbf{u}_{1nL}, \mathbf{B}_{0nij}) - \mathbf{R}_{RL} | \mathbf{\Lambda}_{RL} | \mathbf{R}_{RL}^{-1}(\mathbf{u}_{1nR} - \mathbf{u}_{1nL})], \quad (35)$$

with

$$\mathbf{A}_{RL}\mathbf{R}_{RL} = \mathbf{R}_{RL}\mathbf{\Lambda}_{RL}, \quad (36)$$

$$\mathbf{u}_{1nL} = \mathbf{u}_{1ni} + \mathbf{s}_i(1 - \mathbf{s}_i/3)(\mathbf{u}_{1ni} - \mathbf{u}_{1ni'}) + (1 + \mathbf{s}_i/3)(\mathbf{u}_{1nj} - \mathbf{u}_{1ni})/4, \quad (37)$$

$$\mathbf{u}_{1nR} = \mathbf{u}_{1nj} - \mathbf{s}_j(1 - \mathbf{s}_j/3)(\mathbf{u}_{1nj} - \mathbf{u}_{1nj'}) + (1 + \mathbf{s}_j/3)(\mathbf{u}_{1nj} - \mathbf{u}_{1ni})/4, \quad (38)$$

where the diagonal matrices \mathbf{s}_i and \mathbf{s}_j consist of the so-called Van Leer's differentiable limiter. The k -th components of s_i and s_j are calculated from the k -th components of \mathbf{u}_{1n} . Without the suffixes 1 and k , they are written as

$$s_i = \frac{2(u_{nj} - u_{ni})(u_{ni} - u_{ni'}) + \epsilon}{(u_{nj} - u_{ni})^2 + (u_{ni} - u_{ni'})^2 + \epsilon}, \quad (39)$$

$$s_j = \frac{2(u_{nj'} - u_{nj})(u_{nj} - u_{ni}) + \epsilon}{(u_{nj'} - u_{nj})^2 + (u_{nj} - u_{ni})^2 + \epsilon}, \quad (40)$$

with ϵ a small number. Interpolation points i' and j' are obtained by extending the line which connects grid points i and j to the neighboring surface of control volumes.

A serious problem in numerical MHD simulations involves the violation of the $\text{div}\mathbf{B} = 0$ condition. Not only numerical roundoff errors but also the use of upwind fluxes and a non-Cartesian grid system make it difficult to fulfill the

$\text{div} \mathbf{B} = 0$ condition automatically. In the present calculation, an extra equation is added to eliminate artificial magnetic monopoles [21]. The variable components of magnetic field \mathbf{B}_1 are replaced every several time steps, by a new field \mathbf{B}_{1c} given as

$$\mathbf{B}_{1c} = \mathbf{B}_1 + \text{grad}\phi, \quad (41)$$

$$\nabla^2 \phi = -\text{div} \mathbf{B}_1. \quad (42)$$

To solve equation (41), the conjugate residual (CR) method is applied.

4 Eigenvalues and eigenvectors for the 9-component MHD equations

In this section, eigenvalues and eigenvectors are shown for the 9-component MHD equations. For the Jacobian matrix of flux fuction (29), eigenvalues $\lambda_k, k = 1 \sim 9$ are [14]

$$\lambda_1 = m'_n, \quad (43)$$

$$\lambda_{2,3} = m'_n \pm |B'_n|, \quad (44)$$

$$\lambda_{4,5} = m'_n \pm V_f, \quad (45)$$

$$\lambda_{6,7} = m'_n \pm V_s, \quad (46)$$

$$\lambda_8 = 0, \quad (47)$$

$$\lambda_9 = m'_n, \quad (48)$$

where

$$V_f^2, V_s^2 = \frac{1}{2}[C_0 + B'^2 \pm \{(C_0 + B'^2)^2 - 4C_0 B_n'^2\}^{1/2}], \quad (49)$$

$$C_0 = \gamma P / \rho, \quad (50)$$

with the notation $\mathbf{u}'_n = (\rho, \mathbf{m}'_n, \mathbf{B}'_n, U, \rho_2)^T = (\rho, m_n/\rho, m_{t1}/\rho, m_{t2}/\rho, B_n/\sqrt{\beta\rho}, B_{t1}/\sqrt{\beta\rho}, B_{t2}/\sqrt{\beta\rho}, U, \rho_2)^T$. In the expresion of eigenvalues, $\sqrt{C_0}, |B'_n|, V_f$ and V_s correspond to sound, Alfven, fast and slow velocities, respectively. In addition to one entropy, two Alfven, two fast and two slow waves of normal MHD equations, there appears one more entropy wave in the 9-component MHD equations. Calculations of eigenvectors must be done with special care avoiding the degeneration of eigenvectors when wave propagations become perpendicular or parallel to the magnetic field. The right eigenvectors \mathbf{r}_k which correspond to λ_k are [19]

$$\mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ m'_n \\ m'_{t1} \\ m'_{t2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \cdot m'^2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (51)$$

$$\mathbf{r}_{2,3} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \mp B''_{t2} \cdot \text{sgn}(B'_n) \\ \pm B''_{t1} \cdot \text{sgn}(B_n) \\ 0 \\ B''_{t2} \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} \\ -B''_{t1} \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} \\ \mp (B''_{t2} m'_{t1} - B''_{t1} m'_{t2}) \cdot \text{sgn}(B'_n) + (B''_{t2} B'_{1t1} - B''_{t1} B'_{1t2}) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (52)$$

$$\mathbf{r}_{4,5} = \begin{bmatrix} a_f \\ a_f(m'_n \pm V_f) \\ a_f m'_{t1} \mp a_s B''_{t1} V_f B'_n \\ a_f m'_{t2} \mp a_s B''_{t2} V_f B'_n \\ 0 \\ a_s B''_{t1} V_f^2 \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} \\ a_s B''_{t2} V_f^2 \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} \\ a_f \cdot 0.5 \cdot m'^2 + a_f V_f^2 / (\gamma - 1) \pm a_f V_f m'_n \\ \mp a_s V_f (B''_{t1} m'_{t1} + B''_{t2} m'_{t2}) B'_n \\ + a_f (-1) / (\gamma - 1) (V_f^2 - C_0) \\ + a_f (V_f^2 - C_0) (B''_{t1} B'_{1t1} + B''_{t2} B'_{1t2}) \\ / (B''_{t1}{}^2 + B''_{t2}{}^2) \\ a_f \rho_2 / \rho \end{bmatrix}, \quad (53)$$

$$\mathbf{r}_{6,7} = \begin{bmatrix} a_s \\ a_s(m'_n \pm V_s) \\ a_s m'_{t1} \pm a_f B''_{t1} \sqrt{C_0} / V_f \cdot \text{sgn}(B'_n) \\ a_s m'_{t2} \pm a_f B''_{t2} \sqrt{C_0} / V_f \cdot \text{sgn}(B'_n) \\ 0 \\ -a_f B''_{t1} \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} C_0 / V_f^2 \\ -a_f B''_{t2} \sqrt{\frac{\beta}{\rho}} C_0 / V_f^2 \\ a_s \cdot 0.5 \cdot m'^2 + a_s V_s^2 / (\gamma - 1) \pm a_s V_s m'_n \\ \pm a_f (B''_{t1} m'_{t1} + B''_{t2} m'_{t2}) \\ \times \sqrt{C_0} / V_f \cdot \text{sgn}(B'_n) + a_s (-1) / (\gamma - 1) (V_s^2 - C_0) \\ + a_s (V_s^2 - C_0) (B''_{t1} B'_{1t1} + B''_{t2} B'_{1t2}) \\ / (B''_{t1}{}^2 + B''_{t2}{}^2) \\ a_s \rho_2 / \rho \end{bmatrix}, \quad (54)$$

$$\mathbf{r}_8 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (55)$$

$$\mathbf{r}_9 = \begin{bmatrix} 1 \\ m'_n \\ m'_{t1} \\ m'_{t2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \cdot m'^2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (56)$$

where

$$B''_{t1} = (B'_{t1} + \epsilon) / (B'^2_{t1} + B'^2_{t2} + 2\epsilon^2)^{1/2}, \quad (57)$$

$$B''_{t2} = (B'_{t2} + \epsilon) / (B'^2_{t1} + B'^2_{t2} + 2\epsilon^2)^{1/2}, \quad (58)$$

$$B''_{1t1} = (B'_{1t1} + \epsilon) / (B'^2_{t1} + B'^2_{t2} + 2\epsilon^2)^{1/2}, \quad (59)$$

$$B''_{1t2} = (B'_{1t2} + \epsilon) / (B'^2_{t1} + B'^2_{t2} + 2\epsilon^2)^{1/2}, \quad (60)$$

$$a_f = (V_f^2 - B_n'^2)^{1/2} / (V_f^2 - V_s^2)^{1/2}, \quad (61)$$

$$a_s = (V_f^2 - C_0)^{1/2} / (V_f^2 - V_s^2)^{1/2} V_f, \quad (62)$$

and ϵ is a small number.

5 Source terms and boundary conditions

The selection of source terms and boundary conditions depends on the kind of problem treated by the MHD simulation. Typical source terms considered in space science are ion production and loss, gravitational acceleration and aerodynamic friction. They are written as

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} q_1 + q_2 - L_1 - L_2 \\ -\nu \mathbf{m} - \rho \mathbf{g} \\ \mathbf{0} \\ -\mathbf{m} / \rho \cdot (\nu \mathbf{m} + \rho \mathbf{g}) + T_q (q_1 + q_2) / (\gamma - 1) - T_L (L_1 + L_2) / (\gamma - 1) \\ q_2 - L_2 \end{bmatrix}, \quad (63)$$

where q_i and L_i ($i = 1, 2$) are ion production and loss terms for i -th ion species, T_q is the temperature of ions when they are produced, T_L is the temperature of ions

when they are lost. ν and \mathbf{g} are ion-neutral collision frequency and gravitational acceleration. Production and loss rates q_i and L_i ($i = 1, 2$) are normalized by ρ_0 and $L_0/(RT_0)^{1/2}$.

A typical boundary condition on the outer boundary is to give a plasma flow on the upstream side and a zero gradient condition on the downstream side. Commonly used boundary conditions on the inner boundary are ion chemical equilibrium, given plasma velocity, or zero gradient condition. In the case of S-M-I coupling, the plasma velocity perpendicular to the ambient magnetic field is decided from the field aligned current (FAC) flowing into the ionosphere. Assuming a spherical ionosphere at $r=1 R_e$, these processes are simulated on the inner boundary and on the ionosphere from

$$\nabla \cdot \sigma \nabla \phi_I = G_m (\text{rot} \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{n}_b) = J_{\parallel}, \quad (64)$$

$$\sigma = \sigma_{EUV} + \sigma_{Diff}(P, \rho) + \sigma_J(J_{\parallel}), \quad (65)$$

$$\phi_m = \phi_I - f_1(J_{\parallel})|J_{\parallel}|, \quad (66)$$

$$\mathbf{m} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}_b) \mathbf{n}_b = -\rho \nabla \phi_m \times \mathbf{B} / B^2, \quad (67)$$

where σ is the ionospheric conductivity tensor, ϕ_I is the ionospheric potential, ϕ_m is the magnetospheric potential, J_{\parallel} is the FAC, \mathbf{n}_b is a unit vector along \mathbf{B} , and G_m is a geometrical factor associated with the mapping along field lines from $r=3 R_e$ to $r=1 R_e$. σ_{EUV} , σ_{Diff} , and σ_J are the ionospheric conductivities due to the solar EUV, the diffuse auroral precipitation modeled by the pressure and temperature, and discrete precipitation modeled by the upward FAC [5]. Parallel potential is introduced through f_1 that is constant at the upward FAC and 0 at the downward FAC.

6 Parallel computation in a spherical geometry

Recently, the most powerful super-computers, such as the Fujitsu VPP and NEC SX, adopt the vector-parallel architecture with a distributed memory system. Efficient utilization of these vector-parallel super-computers is essential for the future study of space MHD simulations. In parallel computations with a distributed memory system, it is desirable to set a one-dimensional structuring axis in the three-dimensional space. In a spherical geometry that is important for space science, this "parallel" axis is chosen to be the radial direction. An unstructured grid can then be generated on spherical surfaces which construct the remaining two-dimensional space.

In the construction process of the grid system, it is desirable that two-dimensional spherical surfaces are covered by control volumes of similar size, because the integration time step is restricted by the smallest control volume. An example for such kind of grid system is shown in Fig. 1. The left panel in Fig. 1 shows the grid structure on the spherical inner boundary, while the right panel shows how to construct a 3-D grid structure by extending the position of spherically allocated grids outward from the inner boundary.

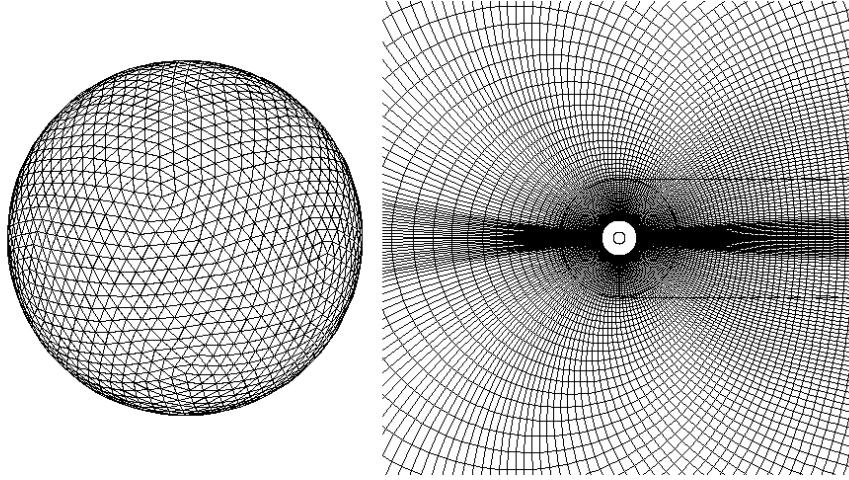


Fig. 1. Grid structure for the 3-D FVM calculation

In parallel computations on the distributed memory system of vector-parallel computers, it is important to identify the difference between distributed and redundant data areas. The parallel axis is used to distribute dependent variables to processors and to define the overlap data areas. In the finite volume TVD scheme, the most serious load in calculations comes from those for eigenvalues (43-50), eigenvectors (51-62), limiters (39,40) and numerical flux (29). These calculations are done sequentially in subroutines on a two-dimensional redundant data area, after copying 3-D dependent variables from a distributed data area to two-dimensional redundant data areas. Using this method means that we do not have to rewrite subroutines with parallel programming constructs. The parallelization then occurs only in the main program which calls these subroutines. In the calculation of numerical flux, the dependent variables on the neighboring grid point of the calculation point must be referred to. To enable this referring in the parallel computation, the overlap data areas are used with the data transmission. Overlap data must be synchronized to data in the neighboring processors before the subroutines begin concurrent operation. After the main calculations, the final correction of the dependent variables is done in the main program, on the distributed data area. Finally, two processors calculate the inner and outer boundary conditions.

7 Numerical example 1 (Heliospheric structure)

The pressure difference between the solar corona and interstellar space drives the ionized solar atmosphere outward, despite the restraining influence of solar gravity. The solar wind thus generated interacts with the very local interstellar medium (VLISM) at some large distance from the sun. Here, the volume of the

space created by the solar wind is called the heliosphere [8] [10] [11] [22] [23]. In this section, results are shown for the MHD simulation of the heliosphere.

At a distance where the local ram pressure of the solar wind becomes comparable to the external VLISM pressure, the solar wind shocks to form the termination shock (TS), which is a strong shock with a compression ratio 4. Then outside the TS, the shocked subsonic solar wind flows to the downstream direction of a uniform interstellar flow surrounding the heliosphere. This region constrained by the VLISM and filled with shocked solar wind plasma is called as heliosheath (HS). It is bounded inside by the TS and outside by a tangential discontinuity between the heliosphere and the VLISM called the heliopause (HP). Some observational evidences suggests that the interstellar wind is also supersonic. The supersonic interstellar flow recognizes the shocked solar wind plasma in the HS as an obstacle and forms a bow shock (BS), which is a magnetoacoustic shock. The shocked interstellar wind inside the BS contacts the shocked solar wind through the HP.

Since the formation process of the heliosphere generates many shocks and discontinuities, it offers a good problem to test the shock-capturing capability of the TVD scheme. The outer and inner boundaries for the calculation are set at 1000 AU and 50 AU. In this section, the interstellar plasma and the solar wind plasma are assigned to ρ_1 and ρ_2 , respectively. Consequently, ρ_1 is zero at the inner boundary and ρ_2 is zero at the upstream boundary. On the inner boundary, a supersonic solar wind is adopted. The solar wind speed and density at 1 AU are assumed to be 400 km/sec and 5 cm^{-3} respectively, and the strength of the toroidal interplanetary magnetic field (IMF) here is assumed to be $2.8 \cos(\theta) \text{ nT}$ with θ the heliolatitude. Toward the outer boundary, the solar wind maintains a constant velocity while its density and magnetic field fall with heliocentric distance r as r^{-2} and r^{-1} . The solar wind temperature at the inner boundary is assumed to be 10^4 K . The speed, density and temperature of the interstellar medium are assumed to be 25 km/sec, 0.1 cm^{-3} , and 10^4 K . The direction of the interstellar flow and magnetic field are assumed to be parallel to the ecliptic plane (toward $-x$) and to the solar rotational axis (toward $+z$). The strength of interstellar magnetic field is 0.15 nT. \mathbf{S} and \mathbf{B}_0 are not considered in this problem.

Figure 2 shows the normalized equipressure (P) contour on the polar (upper half) and ecliptic (lower half) planes. The interstellar wind is from the right. The normalization value for P and contour spacing are 0.0144 pPa and 0.7, respectively. From the pressure distribution, the major structures of the heliosphere, the TS with Mach disk, the HP, and the BS are clearly visible as discontinuities. These high-quality resolutions of discontinuities are due to the excellent shock-capturing property of the TVD scheme.

At the BS the kinetic energy of the interstellar wind is converted to thermal and magnetic energies. Downstream of the BS, consequently, gas pressure dominates over the kinetic pressure. At the HP, increased gas and magnetic pressure are supported by the HS plasma pressure which is maintained by a supply of shocked solar wind pressure from the TS. The highest pressure in the HS appears

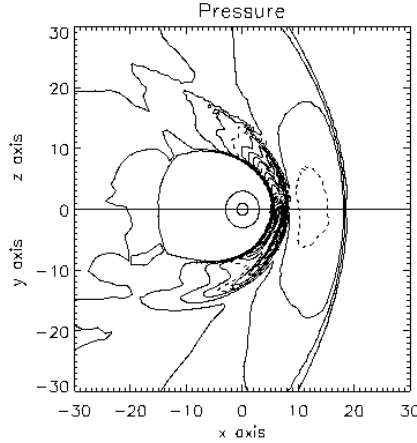


Fig. 2. Pressure distribution in the heliosphere

in the nose region because it must finally balance with the dynamic pressure of the interstellar wind.

The enhanced HS pressure around the nose region accelerates the shocked solar wind plasma toward the heliotail (HT). At the flank of the heliosphere, the oblique TS also helps the HS flow direct downtail based on the principle that at an oblique shock the downstream flow is always deflected away from the shock normal. On the contrary, the tailside TS consists of right-angle shock, because the post-shock flow can direct downtail as it is. Consequently, tangential discontinuity develops in the downstream HT, to separate fast HT flow that continues from the flank HS from a slow HT flow that exits directly from the tailside TS. This is a basic mechanism to form a bullet-shaped TS (Mach disk) on the downstream side [11].

8 Numerical example 2 (Solar wind-Venus interaction)

Since the internal magnetic field of Venus is negligibly small, the solar wind makes a direct contact with the ionosphere. When the interaction processes between the solar wind and planetary ionospheres are studied, at least two plasma components must be considered [9] [24] [25]. In the case of venusian ionosphere, the primary component of ionospheric plasma is O^+ ions, whereas the primary component of the solar wind is H^+ ions. So one must consider two plasma components to distinguish the ionospheric plasma from the solar wind plasma. In this section, therefore, the solar wind plasma and ionospheric plasma are assigned to ρ_1 and ρ_2 , respectively. In this problem, source terms \mathbf{S} are essentially important, because the high-density low-temperature ionospheric plasma that supports the impinging solar wind stratifies gravitationally on the balance of ion production and loss, neutral drag, and the gravitational acceleration. For the

calculation of ρ_2 , L_2 , and ν , a stratified atmosphere composed of O and CO₂ is assumed around the planet. q_1 , L_1 , and \mathbf{B}_0 are set to zero in this section.

The inner and outer boundaries of the calculation region are at $1 R_p$ and $10 R_p$, with R_p the planetary radius. On the outer boundary, the solar wind flow is given on the upstream ($+x$) side while the zero gradient condition is adopted on the downstream ($-x$) side. Where the IMF is assumed to be parallel to the y -axis. Near the inner boundary, the ion-neutral collision and ion chemical processes become dominant. Therefore, the ion chemical equilibrium and zero plasma velocity conditions are adopted on the inner boundary. Since the scale sizes of the ionosphere and the solar wind are quite different from each other, the grid points must be allocated so as to be dense in the ionosphere and coarse in the solar wind.

Figure 3 shows the result for the distributions of O⁺ (left) and total ($=\text{H}^+ + \text{O}^+$, right) ion densities. The solar wind is from the left. The left and right panels in Fig. 3 show contours of $\log(\rho_2/\rho_{sw})$ and $\log(\rho/\rho_{sw})$, respectively. Where ρ_{sw} is the solar wind density. The contour spacing is 0.2 and the dashed contours are used at every 1.0. The minimum contour value for a dashed contour is 0.0. The upper and lower halves of the two panels show sun-planet meridian planes and equatorial planes defined by the direction of the IMF. The solid circles show the size of the planet. An excellent capturing of shocks and discontinuities is seen in Fig. 3. Results of the calculation show the formation of the BS, magnetic barrier and the ionopause in the dayside region. At the ionopause, the primary ion species change from H⁺ on the high-altitude side to O⁺ on the low-altitude side. In the nightside region, the ionospheric structure shows rather complex features. A part of O⁺ ions penetrates into the magnetotail which results from the draping process of the IMF. Then, the penetrating O⁺ ions tend to gather toward the central part of the magnetotail and form a high-density region. In

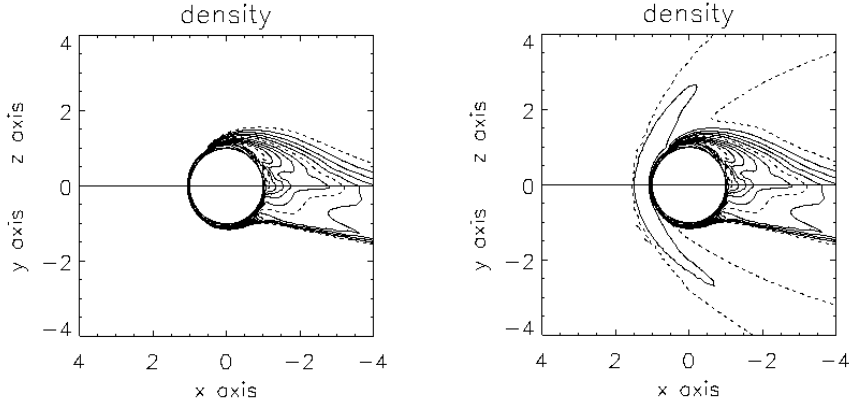


Fig. 3. O⁺ density (left) and H⁺+O⁺ density (right) around the planet

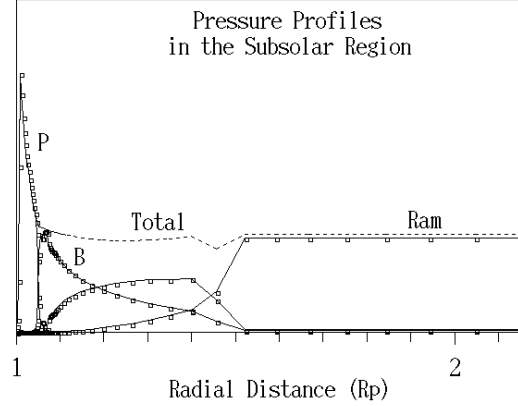


Fig. 4. Pressure balance along the sun-planet line

these results, the solar wind and ionospheric plasmas are distinguished clearly by the 9-component MHD equations.

Figure 4 shows altitude distributions of fluid pressure (P), magnetic pressure (B) and plasma dynamic pressure (Ram) at the subsolar point. Where small rectangles show positions of radial grid points. The pressures are normalized by the solar wind pressure. In the upstream solar wind, plasma kinetic energy dominates both of fluid pressure and magnetic pressure. At the BS, plasma kinetic energy is converted to plasma thermal energy. As a result, the fluid pressure becomes dominant after passing the BS. Approaching the ionopause, the magnetic pressure increases while the plasma pressure decreases, due to the formation of the magnetic barrier. At the ionopause, the magnetic barrier is supported by the fluid pressure of cold ionospheric plasma. This pressure of cold ionospheric plasma is maintained by the photoionization and ion chemical processes in the planetary upper atmosphere. The plasma pressure on the bottom side of the ionosphere is supported by the neutral atmosphere through ion-neutral collisions.

9 Numerical example 3 (Substorm and space weather)

A goal of the space weather effort is to increase our understanding of the S-M-I coupling system. In recent years, the global MHD simulation has become increasingly successful at constructing and predicting the behavior of the S-M-I system [1] [5] [6] [12]. It gives a theoretical foundation for the complex behavior of the S-M-I system that is controlled by the coupling process between different regions.

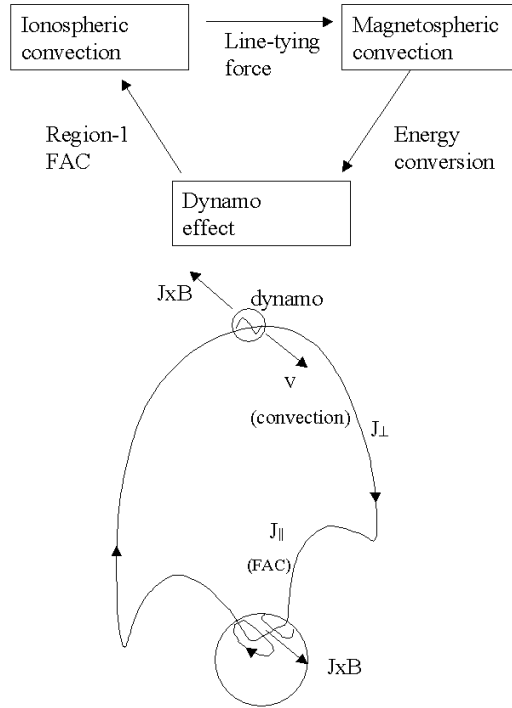


Fig. 5. Magnetospheric convection

In the solar wind interaction with the magnetosphere, energy and momentum are transferred from the solar wind to the magnetosphere through non-ideal MHD processes, to generate magnetospheric plasma convection [4]. Figure 5 schematically shows the construction of convection system. In the magnetosphere, the large-scale transportation of plasma is equivalent to a global electric field. The process driving the magnetospheric convection is at the same time the process generating the FACs, because the magnetospheric perpendicular stress must be transmitted to the polar ionosphere so as the ionospheric convection to follow the magnetospheric convection [3] [26]. In the current circuit connecting the magnetospheric dynamo and the conducting ionosphere, the $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$ force in the ionosphere acts to accelerate the ionospheric convection against atmospheric friction. As a counter part of this energy dissipation in the ionosphere, FACs must be powered through the dynamo driven by the energy conversion in the convection system. Therefore, acting as a load for the magnetospheric convection in the M-I coupling system, the ionosphere controls the intensity of FAC.

In this section, we investigate the M-I processes that maintain the self-consistency in the convection system, including the generation mechanism of the M-I current systems, the ionospheric control of the magnetospheric configuration, and possible extension of convection status to the substorm. The FAC and

plasma convection play a central role in the M-I coupling, while the state of energy source for these current systems depends on the solar wind-magnetospheric interaction. To improve our understanding of this problem, therefore, a self-consistent treatment is required for the coupling effects between three different regions, namely the solar wind, the magnetosphere and the ionosphere.

In the numerical study of the S-M-I coupling process, numerical errors in the low- β region near the ionosphere should be reduced. For this purpose, the MHD calculation is reconstructed as shown in equation (29) to suppress the direct inclusion of the potential component of the magnetic field as dependent variables. From these situations, a dipole magnetic field is assumed as \mathbf{B}_0 . \mathbf{S} and ρ_2 are not considered in this section. The outer and inner boundaries for the simulation are at $200 R_e$ and $3 R_e$. A uniform solar wind with a speed of 350 km/sec and an IMF magnitude of 5 nT is assumed at the upstream boundary and zero gradients are assumed at the downstream boundary. Dependent variables are projected along the field line from the inner boundary ($=3.0 R_e$) to the ionosphere. In the ionosphere, equations (64) and (65) are solved to match the divergence of the Pedersen and Hall currents with the FAC.

Figure 6 shows the response of the magnetosphere to the southward turning of the IMF. The color figure shows the pressure distribution in the noon-midnight meridian plane of the magnetosphere at three times. Where P is normalized by the solar wind P . The bottom row illustrates the initial magnetospheric configuration for the northward IMF. At this time (7.7 minutes after the southward turning of the IMF), a thick and low-pressure plasma sheet is observed. The flow structure at this time (not shown) indicates that x line is situated beyond $x = -60 R_e$, which is the remnant of merging cell structure under the northward IMF condition [4] and called the distant neutral line. The growth phase shown in the second row (59 minutes after the southward turning of the IMF) is characterized by erosion of the dayside magnetosphere, thinning of the plasma sheet, and an increase in the flaring angle. The tail-like configuration of the plasma sheet during the growth phase is the consequence of an enhanced convection.

The substorm onset occurs as an abrupt change of the magnetospheric configuration in the near-earth tail. The top row in Fig. 6 (72.6 minutes after the southward turning of the IMF) shows the pressure distribution after the onset illustrating the appearance of the high-pressure region in the inner magnetosphere and the formation of the NENL in the midtail. Figure 6 also shows pressure and V_x distributions along the $-x$ axis in the near-earth and midtail regions before and after the onset. Where V_x is normalized by the solar-wind sound velocity. After $t=70$ min, a sudden change of pressure profile is seen to start just like a transition from one state to another [5]. Before the onset ($t < 70$ min), the strongest $-\nabla P$ force acts in the region between $x = -10$ and $-20 R_e$. As a result, earthward convection is obstructed at $x = -14 R_e$. In addition, a gradual formation of NENL is seen at $x = -33 R_e$ before the onset. After the onset ($t > 70$ min), the peak position in the pressure distribution shows a rapid inward movement. The pressure peak abruptly moves further inward to $x = -8 R_e$. At the same time, the convection flow intrudes into the inner magnetosphere inside $x = -10 R_e$ in-

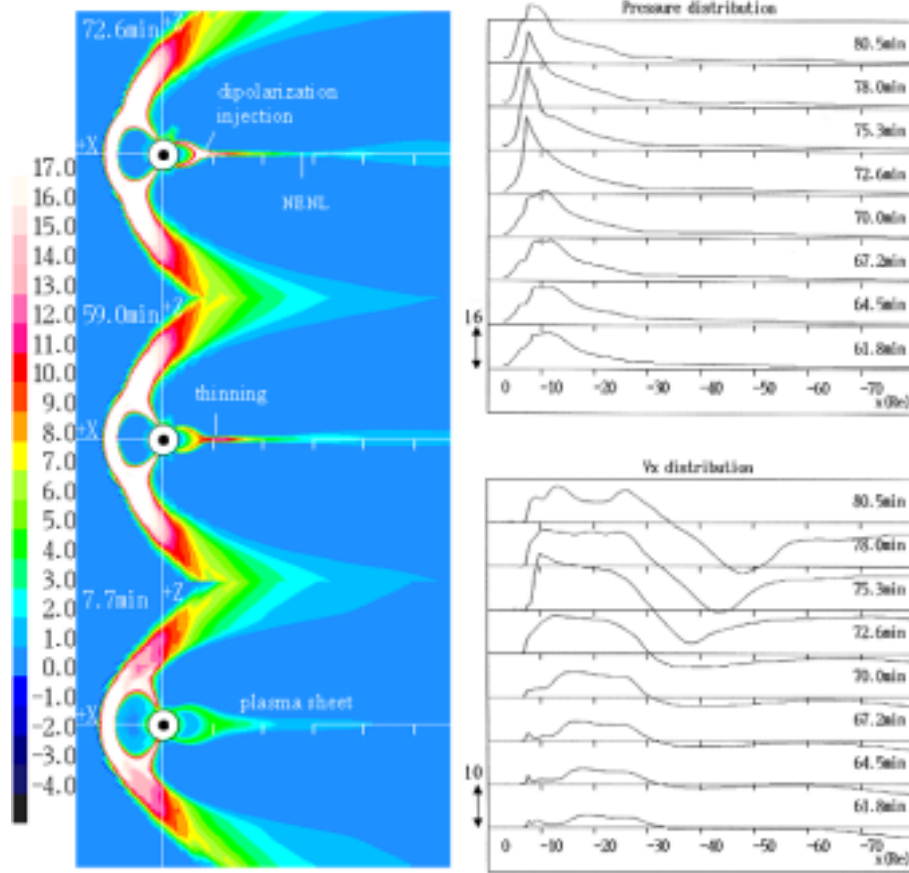


Fig. 6. Substorm sequence obtained from the MHD simulation

creasing in magnitude. Through these transition processes, a new stress balance is achieved in the near-earth plasma sheet in which recovered magnetic tension is balanced by newly established pressure inside $x = -10 R_e$. This pressure change is, in turn, a result of energy conversion from magnetic energy to internal energy caused by the pumping effect of convection associated with the recovery of magnetic tension. The fastest earthward flow in the plasma sheet appears after about 5 minutes from the onset. Then, tailward flow increases its speed. After $t = 75.3$ min, the NENL begins to gradually retreat downtail.

During substorms, the ionospheric conductance enhances to a large extent due to precipitating particles which carry enhanced FACs. As a result, the coupling rate between the magnetosphere and the ionosphere becomes stronger, and

the magnetosphere comes to hold a heavier load. However, the role of a variable M-I coupling in substorm onset is not clear at the present time [5].

References

1. T. Ogino: J. Geophys. Res. **91**, 6791 (1986)
2. T. Tanaka: J. Geophys. Res. **98**, 17,251 (1993)
3. T. Tanaka: J. Geophys. Res. **100**, 12,057 (1995)
4. T. Tanaka: J. Geophys. Res. **104**, 14,683 (1999)
5. T. Tanaka: J. Geophys. Res. **105**, 21,081 (2000)
6. J. A. Fedder, J. G. Lyon: J. Geophys. Res. **100**, 3623 (1995)
7. S. Cable, R. S. Steinolfson: J. Geophys. Res. **100**, 21,645 (1995)
8. H. Washimi, T. Tanaka: Space Sci. Rev. **78**, 85 (1996)
9. T. Tanaka, K. Murawski: J. Geophys. Res. **102**, 19,805 (1997)
10. T. J. Linde, T. I. Gombosi, P. L. Roe, G. Powell, D. L. DeZeeuw: J. Geophys. Res. **103**, 1889 (1998)
11. T. Tanaka, H. Washimi: J. Geophys. Res. **104**, 12,605 (1999)
12. G. L. Siscoe, N. U. Crooker, G. M. Erickson, B. U. O. Sonnerup, K. D. Siebert, D. R. Weimer, W. W. White, N. C. Maynard: 'Global geometry of magnetospheric currents'. In: *Magnetospheric Current System*, ed. by S. I. Ohtani (AGU, Washington D.C. 2000) pp. 41-52
13. M. Vinokur: J. Comput. Phys. **82**, 1 (1989)
14. M. Brio, C. C. Wu: J. Comput. Phys. **75**, 400 (1988)
15. T. Tanaka: Comp. Fluid Dyn. J. **1**, 14 (1992)
16. T. Tanaka: SIMPO Newsl. **3**, 31 (1993)
17. B. van Leer: J. Comput. Phys. **32**, 101 (1979)
18. H. C. Yee, G. H. Klopfer, J. L. Montagne: J. Comput. Phys. **88**, 31 (1990)
19. T. Tanaka: J. Comput. Phys. **111**, 382 (1994)
20. K. Murawski, T. Tanaka: Astrophys. Space Sci. **254**, 187 (1997)
21. J. Brackbill, D. Barnes: J. Comput. Phys. **35**, 426 (1980)
22. E. N. Parker: *Interplanetary Dynamical Processes* (Interscience, New York 1963)
23. H. Washimi, T. Tanaka: Adv. Space Res. **23(3)**, 551 (1999)
24. T. Tanaka: Earth Planets Space **50**, 259 (1998)
25. T. Tanaka: Adv. Space Res. **26(10)**, 1577 (2000)
26. T. Tanaka: 'Generation mechanism of the field-aligned current system deduced from a 3-D MHD simulation of the solar wind-magnetosphere-ionosphere coupling'. In: *Magnetospheric Research with Advanced Techniques*, ed. by R. L. Xu, A. T. Y. Lui (Pergamon, 1998) pp. 133-142

並列 3 次元 MHD コードと 3 次元可視化

荻野竜樹（名古屋大学太陽地球環境研究所）

1. はじめに

太陽風と地球磁気圏相互作用の 3 次元グローバル電磁流体力学的 (MHD) シミュレーションは、約 20 年前に、力が釣り合った平均的な磁気圏の形をやっと再現できることから出発して、コンピュータと IT 技術の長足の進歩に相まって発展を続け、最近では、衛星・地上観測と比較して磁気圏のダイナミクスを議論できる程度にまで成長してきた。こうして、上流の太陽風や惑星間磁場 (IMF) の変化に対する磁気圏・電離圏の応答や、磁気圏での大きな擾乱現象であるサブストームや磁気嵐を直接シミュレーションから調べようとする試みも行われるようになってきた。これらの太陽風磁気圏相互作用のグローバル MHD シミュレーションを精度よく実行するためには、計算方法の改良が一方で必要であると同時に、最大級のスーパーコンピュータの利用、それも効率的な並列計算法の利用は不可欠である。

そのような並列計算共通プログラム言語の候補として、High Performance Fortran (HPF) と Message Passing Interface (MPI) があると言われてきた。HPF は、米国の共同研究者が共通プログラム言語として優れていると言っている反面、多くの大型プログラムで性能が十分に出ないという批判の声も出ていた。こうした中、2000 年から HPF/JA (JAHPF による HPF の日本拡張版) が使えるようになり、VPP Fortran でフルベクトル化フル並列化されている流体コードや MHD コードは、比較的容易に HPF/JA に書き換えることができ、更にその HPF/JA のプログラムは VPP Fortran と同等の性能を得ることが示された。しかし、HPF/JA の成功にもかかわらず、HPF の普及は進んでいないのが現状である。こうして、世界標準並列化言語として最後に残った MPI に対する期待が高まることになる。この講義と実習では、VPP Fortran と HPF/JA で書かれた 3 次元 MHD コードとの比較をしながら、MPI を用いた並列計算 3 次元 MHD コードの作成と使用方法を主として解説する。

太陽風磁気圏相互作用などの複雑なシミュレーション結果を理解するためには可視化は必須である。特に、重要でかつ面倒な 2 つの機能にアニメーション動画作成と 3 次元可視化があるが、アニメーション動画は時間変化を示すことによって磁気圏ダイナミクスの理解を助け、3 次元可視化は磁気圏の流線、磁力線及び電流構造の特徴を明らかにするのに威力を発揮する。さらに、最近話題になっているインターネットによる情報公開は、簡単にはできないような自己矛盾のないシミュレーション結果を誰もが即座に見ることができ、現象をよりよく理解する上で強力な手段となりつつある。

そうした中で、VRML (Virtual Reality Modeling Language) の登場によって、3 次元画像処理専用機と 3 次元画像処理専用ソフトウェアを持たなくても、誰でも VRML のビューアさえあれば 3 次元画像を自分の好きなように見ることができるようになった。自分のコンピュータの処理能力に依存するが、ネットスケープやインターネットエクスプローラなどのブラウザを使えば、VRML2.0 対応の cosmpayer 等のビューアが標準で付いている。パーソナルコンピュータも最近高速になってきたので、

高速のcpuとグラフィックアクセラレータを積み、更に十分なメモリ(256MB以上)を載せれば、可視化に十分な性能を発揮できる。また、精度の高い3次元画像を快適に見たいのであればWebspaceやCosmoworldsの利用が更に有効である。

2. 太陽風磁気圏相互作用の3次元グローバルMHDモデル

太陽風磁気圏相互作用の3次元MHDモデルでは、MHD方程式とマクスウェル方程式を初期値境界値問題として、様々な方法でその時間発展を解いている。偏微分方程式を差分法して2step Lax-Wendroff法で解く方法などはその例である。空間分解能を上げるための計算方法における様々な工夫として、非一様格子法、非構造格子法、自動調節格子法、時空間多重格子法の導入などが行われている。以下では、私達が3次元MHDシミュレーションに用いている高精度計算法の一つであるmodified leap-frog法について述べる[1-4]。

2.1. 基礎方程式

MHDモデルの基礎となる規格されたMHD方程式とMaxwell方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}\rho) + D\nabla^2 \rho \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\mathbf{J} \times \mathbf{B} + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho}\Phi \quad (2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla)p - \gamma p \nabla \cdot \mathbf{v} + D_p \nabla^2 p \quad (3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B} \quad (4)$$

$$\mathbf{J} = \nabla \times (\mathbf{B} - \mathbf{B}_d) \quad (5)$$

式(1)~(4)はそれぞれ、連続の式、運動方程式、エネルギー保存則より求まる圧力変化の式、インダクション方程式と呼ばれる磁場変化を示す式である。ただし、 ρ はプラズマ密度、 \mathbf{v} は速度ベクトル、 p はプラズマ圧力、 \mathbf{B} は磁場ベクトルである。この8つのパラメータを未知数として求めていく。ただし、差分法の数値誤差により、 \mathbf{B}_d に対する \mathbf{J} が有限値になるため、式(5)を用いてその数値誤差を除去している。ここでの \mathbf{B}_d は地球の固有磁場としての双極子磁場である。また、 $\mu^{-2}\mathbf{v}$ は粘性項である。 $\eta = \kappa_0 (\kappa_0 / \rho)^{-3/2}$ は温度に依存した電気抵抗である。ここでの $\kappa_0 = p / T$ はプラズマ温度であり、 κ_0 は電離層における値で、 $\kappa_0 = 0.0005-0.002$ の範囲にとる。重力項は、 $\mathbf{g} = -g_0 / r^3 (-x^2 - y^2 - z^2)$ 、 $g_0 = 1.35 \times 10^{-7} (9.8 \text{ m/s}^2)$ は重力加速度であり、 $\gamma = 5/3$ は3次元空間における比熱比である。また、粒子の拡散係数 D 、圧力の拡散係数 D_p 、 μ の各係数は、初期値や急激な磁場変化に起因する短波長の数値的振動を抑制するために人工的に与えたものであり、 $D = D_p = \mu / \rho_{sw} = 0.001$ (ただし、 ρ_{sw} は太陽風の密度)とした。また、各パラメータは次のものにより規格化した。距離は地球半径

$R_e = 6.37 \times 10^6$ m、密度は電離層における値 $n_s = mn_s (10^{10} \text{ m}^{-3})$ 、磁場は赤道における現在の双極子磁場強度 $B_s = 3.12 \times 10^4$ nT、速度は赤道におけるアルフベン速度 $V_A = 6.80 \times 10^6$ m/s、時間はアルフベン通過時間 $t_s = R_e / V_A = 0.937$ s である。

2.2. 座標系と境界条件

シミュレーションには、図 1 に示すような太陽方向 x 軸正、夕方向 y 軸正、磁気北極方向 z 軸正とした太陽地球磁気圏座標系を用いて、MHD 方程式とマックスウェル方程式を時空間で差分化して、MHD 方程式系における 8 個の物理変数、プラズマ密度、速度 \mathbf{v} 、圧力 p 及び 磁場 の時間発展を解く。ここでは、朝夕と南北で対称性を仮定した 1/4 領域の地球磁気圏モデルを考える。

Therefore the following boundary conditions are imposed for each physical quantity, $\phi = (\rho, \mathbf{v}, p, \mathbf{B})$:

(1) fixed boundary $\phi = \text{const}$ at $x = x_0$;

(2) free boundary $\partial\phi/\partial x = 0$ at $x = x_1$;

(3) free boundary at an angle of 45° to the x axis, $\partial\phi/\partial y = 0$ at $y = y_0$, $\partial\phi/\partial z = 0$ at $z = z_0$;

(4) mirror boundary at $z = 0$,

$$\frac{\partial\rho}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\partial v_y}{\partial z} = \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0 \quad (6a)$$

$$v_z = B_x = B_y = 0 \quad (6b)$$

(5) mirror boundary at $y = 0$.

$$\frac{\partial\rho}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{\partial v_z}{\partial y} = \frac{\partial B_x}{\partial y} = \frac{\partial B_z}{\partial y} = 0 \quad (7a)$$

$$v_y = B_y = 0 \quad (7b)$$

(6) all physical quantities are fixed for

$$\xi = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \leq \xi_a (= 3.5)$$

The internal quantity ϕ_{in} at the initial state and the external quantity ϕ_{ex} are at each time

step connected by the introduction of a smooth function $f \equiv a_0 h^2 (a_0 h^2 + 1)$ as

$$\phi = f\phi_{ex} + (1-f)\phi_{in} \quad (8)$$

where $a_0 = 100$, $h = (\xi/\xi_a)^2 - 1$ for $\xi \geq \xi_a$ and $h = 0$ for $\xi < \xi_a$.

2.3. 初期条件

初期条件には、「対称面より上流で零のミラーダイポール磁場」と「重力とプラズマ圧力が静的に釣り合った球対称の電離層」を仮定し、シミュレーション箱の上流から一定の密度、速度、温度を持つ太陽風を流し始めて、定常状態に近い磁気圏の構造を求める。初期にミラーダイポール磁場を用いる理由

は、上流で流れに平行な磁場成分を含めないためである。前述したように、境界条件としては、上流は固定端、側面と上下面は磁気圏前面に形成される衝撃波の形状を考慮して、 x 軸と 45 度の角度を持たせた自由端、下流は面に垂直な方向に自由端、地球の中心を通る $y = 0$ 又は $z = 0$ の面では磁場と速度のベクトルと矛盾の無い鏡像の境界条件を課す。更に、太陽風や IMF のパラメータを時間変化させて、磁気圏・電離圏の応答や擾乱現象を調べる。

初期条件の具体的な関数は次の様に与える。

Density

$$\rho_0 = \xi^{-3} \quad \rho_0 \geq 0.2\rho_{sw} \quad (9a)$$

$$\rho_0 = 0.2\rho_{sw} \quad \rho_0 < 0.2\rho_{sw} \quad (9b)$$

Plasma pressure

$$p_0 = p_{00}\xi^{-2} \quad p_0 \geq p_{sw} \quad (10a)$$

$$p_0 = p_{sw} \quad p_0 < p_{sw} \quad (10b)$$

Gravity force

$$\mathbf{g} = -\frac{g_0}{\xi^3}(x, y, z) \quad (11)$$

Dipole magnetic field

$$\mathbf{B}_d = \frac{1}{\xi^5}(-3xz, -3yz, x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (12)$$

where $g_0 = 1.35 \times 10^{-6}$ and $p_{00} = (\gamma - 1)g_0/\gamma = 5.4 \times 10^{-7}$.

The solar wind parameters used are $\rho_{sw} = 5 \times 10^{-4}$ (corresponding to $5/\text{cm}^3$). $\mathbf{v}_{sw} = (v_{sw}, 0, 0)$

at $x = x_0$. $v_{sw} = 0.0441 - 0.118(300 - 800 \text{ km/s})$, $p_{sw} = 3.56 \times 10^{-8}$ ($T_{sw} = 2 \times 10^5 \text{ K}$). and $B_{IMF} = 0$ or $\pm 1.5 \times 10^{-4} (\pm 5 \text{ nT})$, where B_{IMF} stands for the z component of the uniform IMF traveling with the solar wind.

2.4. Modified Leap-Frog 法の導入

数値計算法としては、図 2 に示すような Modified leap-frog 法を用いる。最初の 1 回を two step Lax-Wendroff 法で解き、続く $(\ell-1)$ 回を leap-frog 法で解き、その一連の手続きを繰り返す。 ℓ の値は数値的に安定な範囲で大きい方が望ましいので、2 次精度の中心空間差分を採用するとき、数値精度の線形計算と予備的シミュレーションから $\ell = 8$ に選んでいる。Modified leap-frog 法は、two step Lax-Wendroff 法の数値的安定化効果を一部取り入れて、leap-frog 法の数値的減衰と分散の小さい効果をより多く取り入れた、数値的減衰と分散にバランスの良くとれた一種の組み合わせ計算法となっている。また、パラメータ ℓ を変化させることによって、性質の良く分かった 2 つの計算法に一致させ

ることができるので、結果に与える数値誤差の影響も理解し易い利点を持っている。

Modified leap-frog 法の具体的な計算スキームを次に示す。先ず次の形の偏微分方程式を導入する。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial z} - f \quad (13)$$

(1) First step

$$f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^t = \frac{1}{8} \left(f_{i,j,k}^t + f_{i+1,j,k}^t + f_{i,j+1,k}^t + f_{i+1,j+1,k}^t + f_{i,j,k+1}^t + f_{i+1,j,k+1}^t + f_{i,j+1,k+1}^t + f_{i+1,j+1,k+1}^t \right) \quad (14)$$

$$\begin{aligned} f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} &= f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^t - \frac{1}{2} \Delta t f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^t \\ &\quad - \frac{\Delta t}{8\Delta x} (f_{i+1,j,k}^t + f_{i+1,j+1,k}^t + f_{i+1,j,k+1}^t + f_{i+1,j+1,k+1}^t - f_{i,j,k}^t - f_{i,j+1,k}^t - f_{i,j,k+1}^t - f_{i,j+1,k+1}^t) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{8\Delta y} (f_{i,j+1,k}^t + f_{i+1,j+1,k}^t + f_{i,j+1,k+1}^t + f_{i+1,j+1,k+1}^t - f_{i,j,k}^t - f_{i+1,j,k}^t - f_{i,j,k+1}^t - f_{i+1,j,k+1}^t) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{8\Delta z} (f_{i,j,k+1}^t + f_{i+1,j,k+1}^t + f_{i,j+1,k+1}^t + f_{i+1,j+1,k+1}^t - f_{i,j,k}^t - f_{i+1,j,k}^t - f_{i,j+1,k}^t + f_{i+1,j+1,k}^t) \end{aligned} \quad (15)$$

(2) Second step

$$\begin{aligned} f_{i,j,k}^{t+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{8} \left(f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} f_{i,j,k}^{t+1} &= f_{i,j,k}^t - \Delta t f_{i,j,k}^{t+\frac{1}{2}} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \left(f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. - f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta y} \left(f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. - f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta z} \left(f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. - f_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} - f_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{t+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

The concrete procedure of two-step Lax-Wendroff method in the 3-dimensional MHD code is as follows;

1. $f(i, j, k)$ is given for $2 \leq i \leq nx1$, $2 \leq j \leq ny1$ and $2 \leq k \leq nz1$
2. $f(i, j, k)$ for $i = 1, nx2$, $j = 1, ny2$, and $k = 1, nz2$ is determined from boundary condition
3. 1st interpolation

$$p(i, j, k) = \frac{1}{8} (f(i, j, k) + f(i+1, j, k) + f(i, j+1, k) + f(i+1, j+1, k) + f(i, j, k+1) + f(i+1, j, k+1) + f(i, j+1, k+1) + f(i+1, j+1, k+1)) \quad (18)$$

$$u(i, j, k) = p(i, j, k) \quad (19)$$

4. Calculation of 1st step

$$\begin{aligned} u(i, j, k) = & u(i, j, k) - \frac{1}{2} \Delta t p(i, j, k) \\ & - \frac{\Delta t}{8 \Delta x} (f(i+1, j, k) + f(i+1, j+1, k) + f(i+1, j, k+1) + f(i+1, j+1, k+1) \\ & \quad - f(i, j, k) - f(i, j+1, k) - f(i, j, k+1) - f(i, j+1, k+1)) \\ & - \frac{\Delta t}{8 \Delta y} (f(i, j+1, k) + f(i+1, j+1, k) + f(i, j+1, k+1) + f(i+1, j+1, k+1) \\ & \quad - f(i, j, k) - f(i+1, j, k) - f(i, j, k+1) - f(i+1, j, k+1)) \\ & - \frac{\Delta t}{8 \Delta z} (f(i, j, k+1) + f(i+1, j, k+1) + f(i, j+1, k+1) + f(i+1, j+1, k+1) \\ & \quad - f(i, j, k) - f(i+1, j, k) - f(i, j+1, k) - f(i+1, j+1, k)) \end{aligned} \quad (20)$$

5. 2nd interpolation

$$\begin{aligned} p(i, j, k) = & \frac{1}{8} (u(i-1, j-1, k-1) + u(i, j-1, k-1) + u(i-1, j, k-1) + u(i, j, k-1) \\ & + u(i-1, j-1, k) + u(i, j-1, k) + u(i-1, j, k) + u(i, j, k)) \end{aligned} \quad (21)$$

6. Calculation of 2nd step

$$\begin{aligned} f(i, j, k) = & f(i, j, k) - \Delta t p(i, j, k) \\ & - \frac{\Delta t}{4 \Delta x} (u(i, j, k) + u(i, j-1, k) + u(i, j, k-1) + u(i, j-1, k-1) \\ & \quad - u(i-1, j, k) - u(i-1, j-1, k) - u(i-1, j, k-1) - u(i-1, j-1, k-1)) \\ & - \frac{\Delta t}{4 \Delta y} (u(i, j, k) + u(i-1, j, k) + u(i, j, k-1) + u(i-1, j, k-1) \\ & \quad - u(i, j-1, k) - u(i-1, j-1, k) - u(i, j-1, k-1) - u(i-1, j-1, k-1)) \\ & - \frac{\Delta t}{4 \Delta z} (u(i, j, k) + u(i-1, j, k) + u(i, j-1, k) + u(i-1, j-1, k) \\ & \quad - u(i, j, k-1) - u(i-1, j, k-1) - u(i, j-1, k-1) - u(i-1, j-1, k-1)) \end{aligned} \quad (22)$$

この計算スキームは、 $u(i, j, k) = p(i, j, k)$ とおく場合 two step Lax-Wendroff 法となるが、 $u(i, j, k)$ に前のステップから計算した値をそのまま使用し、時間幅を $\frac{1}{2}\Delta t$ から Δt と2倍すれば、Leap-frog 法になる。Modified leap-frog 法は、1回目を two-step Lax-Wendroff 法、継続する $(\ell-1)$ 回を Leap-frog 法を用いて計算する方法である（図2参照）。

次に伝達方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (23)$$

を用いて、Modified leap-frog 法の数値的安定性を議論する。

時空間の差分を $u_i^j = u(x_i, t_j)$, $u_{i\pm 1}^{j+1} = u(x_i \pm \Delta x, t_j \pm \Delta t)$ と書き、フーリエ級数

$$u_i^j = u_o^j e^{ikx}, \quad u_{i\pm 1}^j = u_o^j e^{ik(x \pm \Delta x)} = u_i^j e^{\pm k\Delta x} \equiv u_i^j e^{\pm i\kappa} \quad (24)$$

を用いると、two step Lax-Wendroff 法の増幅率 $A = u_i^{j+1} / u_i^j$ は、

$$A_{2LW} = 1 + i\delta \sin \kappa + \delta^2 (\cos \kappa - 1) \quad (25a)$$

$$|A_{2LW}|^2 = 1 + (\delta^4 - \delta^2)(\cos \kappa - 1)^2 \quad (25b)$$

となる。従って、 $0 \leq \Delta t / \Delta x \leq 1$ の時、すべての $\kappa = k\Delta x$ に対して $|A_{2LW}| \leq 1$ が成立し、数値的に安定となる。

leap-frog 法は

$$A_{LF}^{\frac{1}{2}} = \pm \sqrt{1 + \delta^2 \sin^2 \frac{\kappa}{2}} - i\delta \sin \frac{\kappa}{2} \quad (26)$$

となり、 $|A_{LF}| = 1$ となって、限界的に安定である。

従って、Modified leap-frog 法の増幅率は次式で与えられる。

$$A_{MLF} = A_{2LW}^{1/\ell} A_{LF}^{(\ell-1)/\ell} \quad (27)$$

Modified leap-frog 法 (MLF) \ 2 step Lax-Wendroff 法 (2LW) 及び Runge-Kutta-Gill 法 (RKG) に対する増幅率の絶対値と位相速度の波数依存性を図3に、 ℓ を変化したときの Modified leap-frog 法 (MLF) に対する増幅率の絶対値と位相速度の波数依存性を図4に示す。Modified leap-frog 法は絶対値と同様に位相速度に対しても数値精度が大幅に改善されるのが理解される。

Modified leap-frog 法、two step Lax-Wendroff 法及び leap-frog 法の3種類の計算方法を波動方程式に適用した結果を図5に、電磁流体力学の非線形現象である MHD 衝撃波のシミュレーションに適用した

結果を図6に示す。線形な波動方程式でパルス波の伝搬を差分法で解く場合、波長の短い波ほど数値的減衰が大きくかつ位相速度が遅いので、パルス波が崩れて後に波列が現れる。その数値的な減衰と分散が modified leap-frog 法では大幅に改善されているのが見られる。非線形な現象の場合も two step Lax-Wendroff 法では、数値的分散によって衝撃波の後ろに振動が発生し、modified leap-frog 法では、それが小さく抑えられて衝撃波の形がよく得られているのが分かる。一方、leap-frog 法では、振動が深くなって衝撃波がパルス列に分離しているのが見られる。これは、数値的減衰は無いが数値的分散は存在する leap-frog 法の数値的特性に依存する現象で物理的には意味のないものである。

3 . MPI を用いた並列計算 MHD コード

1995 年に Fujitsu VPP500 が使用できるようになって、太陽風と地球磁気圏相互作用のグローバル MHD シミュレーションを実行するためのフルベクトル化されていた 3 次元 MHD コード (earthb) を VPP Fortran 用書き換えた。コードの全面的な書き換えを行って、VPP Fortran で計算効率の高い、ほぼフルベクトル化フル並列化された 3 次元 MHD コード (pearthb) を作成した[荻野, 1997]。その後、2000 年に 3 次元 MHD コードを VPP Fortran から HPF/JA へ書き換えた (hearthb) [荻野, 2000; Ogino, 2002]。結果的には、HPF/JA で書いた 3 次元 MHD コード (hearthb) も VPP Fortran の 3 次元 MHD コードと同様にフルベクトル化フル並列化することができ、計算速度も VPP Fortran と同等の性能を得ることができた。VPP Fortran でも、HPF/JA でもベクトル並列化 MHD コードとしては、ほとんど同等のものであるが、ベクトル化 MHD コード (earthb) とは全く別物である。その最も大きな違いは、ベクトル化 MHD コードは、プログラムサイズを最小化しているのに対し、ベクトル並列化 MHD コードでは並列計算の性質上プログラムサイズの最小化が不可能だったことである。このため、同じ格子点数の MHD シミュレーションをする場合、ベクトル化コードに比べて、ベクトル並列化コードは約 3 ~ 4 倍のコンピュータメモリが必要である[荻野, 2000; Ogino, 2002]。

2002 年になって、周りの人の協力を得て HPF/JA から MPI へと VPP Fortran から MPI への書き換えを行い、MPI でほぼフルベクトル化フル並列化された 3 次元 MHD コード (meartb) を作成することができた。その計算速度は、VPP Fortran と HPF/JA の MHD コードと同等以上の高計算効率を得ることができた。書き換えの労力だが、VPP Fortran か HPF/JA でフルベクトル化フル並列化された 3 次元 MHD コードがあれば比較的容易に MPI 利用の Fortran コードに書き換えることが可能である。もちろん、コードによってはフルベクトル化フル並列化を保つために工夫しなければならないことが生じることがある。MPI での問題点や大規模計算で MPI をどう使用すべきかは、後の補足説明で行う。

ベクトル化や並列化した場合、非ベクトル化コードや非並列化コードに比べて何倍の速度向上率が得られるかを示すものに、アムダールの法則がある。その法則によると、多数の PE (Processing Element) を用いて高い速度向上率を得るためには、並列化率が 100% に限りなく近いことが極めて重要となる。従って、高効率のシミュレーションコードを作成するためには、どうやってフルベクトル化とフル並列化を実現するかにかかっている。実際には、内側の do loop でベクトル化されているので、そのベクトル化を維持したまま外側の do loop で並列化をすればよいことになる。よく、「計算時間のかかっている

do roop から並列化せよ」と言われるが、その方法だとある程度までは並列化効率が上がるが、100%に近い並列化効率を得ることはほとんど不可能である。これまでのベクトル化と並列化の経験からすると、プログラムの構造をきちんと決めることが最も重要であると確信している。分散メモリ型並列計算機を用いる場合の並列計算の基本は単純なことで、計算する前に計算に必要な変数を全て各 PE に集めればよいわけで、それもできるだけ一括して転送し、転送回数をできるだけ少なくすればよい。即ち、プログラムの構造とは、領域分割の変数（方向）を軸とした計算の流れを示すフローチャートに、効率的な配列の利用内容を割り付けたものである。並列計算プログラムでは通常作業配列を多く取る必要が生じるので、プログラムの構造を決める時に作業配列の量を最小にすることが同時に必要となる。

具体的なベクトル並列計算の 3 次元 MHD コード VPP Fortran (pearthb) HPF/JA (hearthb) MPI (mearthb) を見てもらおうと分かるように、その 3 種類の Fortran プログラムの基本的構造はほとんど変わっていない。プログラムの構造をほとんど変えずに、VPP Fortran、HPF/JA、MPI の並列化指示行を挿入することでプログラムの大半の部分を書き換えることができる。それに、それぞれのコンパイラに特有の部分をユニットとして追加すれば、プログラムの大部分ができあがる。後に残される問題は、大まかに言えば境界条件と入出力である。これらも通常の場合はそれほど深刻な問題とはならない。しかし、MPI で超大型計算まで目標としている場合には、境界条件と入出力には注意が必要である。場合にもよるが、MPI の導入書や解説書に通常書いてある方法はほとんど通用しないと考えておいた方が無難である。

3 . 1 . MPI による MHD コードの作成（具体例）

MPI (Message Passing Interface) の使い方を分かりやすくかつ具体的に解説したものとして、青山幸也著「並列プログラミング虎の巻 MPI 版」がある。その中で、青山氏は、メッセージ交換サブルーチンについて、「並列化にともなう矛盾（副作用）を解消するために、必要最小限仕方なしに行うもの」と言明しているが、全く、達観だと思う。これを私なりに具体的に書くと、「計算する前に、できるだけ一括してかつできるだけ転送回数を少なくして、計算に必要な変数を全て各 PE (Processing Element) に集めて計算する」となる。

それでは、MPI による MHD コードの作成の重要な部分を具体的に見ていくことにする。MPI バージョンのディレクトリ mearthb には、二つの基本的な Fortran プログラムがある。どちらもこのスクール用のものである。

mearthb_send.f : ブロッキング通信 mpi_send と mpi_recv を利用

mearthb.isend.f : 非ブロッキング通信 mpi_isend と mpi_irecv を利用した改良版

3 次元 MHD コードは、HPF/JA から MPI へ移植しているので、!hpf\$ で示される HPF/JA の指示行がそのまま残っているが、MPI ではそれらは全てコメント行として扱われる。また、MPI への移植で変更した部分は全て、CC MPI START と CC MPI END のコメント行で挟まれている。以下では、mearthb_send.f の説明をする。

数値計算法としては、Modified leap-frog 法を用いていて、k (z)方向に領域分割を行う。プログラムの計算のパラメータなどは、後の 4 . 1 の計算パラメータの設定で詳しく説明しているので、ここでは省略する。PE (Processing Element) 数は $npe=2$ で、 $isize$ は PE 数、 $irank$ はランク (PE) の番号で、この場合、 $isize=npe=2$ 、 $irank=0,1$ となる。 ks と ke は $irank$ での通常の k の初期値と終期値を示し、各 $irank$ のローカルな $k=k_{local}$ とグローバルな $k=k_{global}$ の関係は、 $k_{global}=k_{local}+kss$ で与えられる。従って、 k (z)方向のグローバル変数と並列化後のローカル変数の対応は、

```
k=1,nz2    ->  k=ks,ke
k=1,nz2-1  ->  k=ks,ke1
k=2,nz2-1  ->  k=ks1,ke1
```

となる。また、 $recvcount$ と $displs$ は gather する時の各ランクのデータの大きさと各ランクのデータの先頭番地を示す。

CC MPI START

```
include 'mpif.h'
integer istatus(mpi_status_size)
common /para_info/ks,ks1,ke,ke1,kss,irank, isize
```

c for mpi_gatherv

```
parameter (npe=2)
integer recvcount(npe),displs(npe)
```

CC MPI END

よく使われる 1 次元方向の分割方法は 2 種類ある。分割方法 1 は、あるランクまで同数の ko が入り、それ以後のランクも同数の $ko-1$ が入る方法である。分割方法 2 は、同数の ko が入るランクをできるだけ多く取り、それ以後のランクは順次減らす方法である。ここでは、分割方法 1 を採用する。この場合あるランクまでに入る同数は、 $ko=nzz=(nz2-1)/npe+1$ となる。ここに両側の境界を含めて $nz2=nz+2$ となっている。 k (z)方向に分割した両側にのりしろが 1 個ずつ必要なので、各 PE に必要な k (z)方向の配列の範囲は $k=(0:nzz+1)$ で与えられ、大きさは $nzz+2$ と取ればよいことになる。また、 $fg(nx2,ny2,nz2)$ はファイル read と write のために利用する作業配列である。

CC MPI START

```
parameter(nzz=(nz2-1)/npe+1)
dimension f(nx2,ny2,0:nzz+1,nb),u(nx2,ny2,0:nzz+1,nb),
1          ff(nx2,ny2,0:nzz+1,nb),p(nx2,ny2,0:nzz+1,nbb),
2          pp(nx2,ny2,0:nzz+1,3)
```

c for all_gather

```
dimension fg(nx2,ny2,nz2)
```

CC MPI END

分割方法 1 を用いた、具体的なパラメータは次の部分で与えられる。この計算で、`isize` と `irank` に対する、`ks,ke,kss,recvcount(npe),displs(npe)` の値が決められる。`recvcount(npe)` を計算するのに、`mpi_gather` を用いている。この部分はそのまま他のプログラムにも利用できて、それが、理解できると MPI の 1 次元方向の分割方法は主な部分が分かったことになる。

CC MPI START

```
call mpi_init(ier)
call mpi_comm_rank(mpi_comm_world,irank,ier)
call mpi_comm_size(mpi_comm_world, isize,ier)
```

c

```
kk=nz2/ isize
kmod=mod(nz2, isize)
```

c

```
ks=1
kss=irank*kk+min(kmod,irank)
```

c

```
if (irank.lt.kmod) kk=kk+1
ke=ks+kk-1
ks1=ks
ke1=ke
if (irank.eq.0) ks1=2
if (irank.eq.isize-1) ke1=ke-1
```

c

```
nword=(ke-ks+1)*nx2*ny2
call mpi_gather(nword,1,mpi_integer,recvcount,
*           1,mpi_integer,0,mpi_comm_world,ier)
displs(1)=0
do i=2, isize
    displs(i)=displs(i-1)+recvcount(i-1)
end do
```

c

CC MPI END

次の 2 つは、単純なことでデータの `read`、`write` 及びファイルの入出力は `irank=0` で実行することを宣言している。

CC MPI START

```
if (irank.eq.0) then
```

```

        open(11,file='./school/mearthb/meart01.data',
1          access='sequential',form='unformatted')
        end if
CC MPI END

```

```

CC MPI START
        if (irank.eq.0)
        * write (6,12) iii,last,nx,ny,nz,n1,n2,n3,n4,n5,n6,eat0,rmu0,aru,
        1 eud,rrat,hx,hy,hz,t,t1,ro01,pr01,gra,dx2,dy2,dz2,dx4,dy4,dz4,
        2 bis,(cp(i),i=1,11),(cj(j),j=1,10)
CC MPI END

```

また、 k (z) 方向には領域分割されているので、 k (z) 方向のグローバルな変数 $k=1,nz2$ は必ずローカルな変数 $k=ks,ke$ に変更しなければならない。

```

CC MPI START
        do 22 k=ks,ke
CC MPI END

```

次の部分は、ブロッキング通信を用いて、 $irank$ の ks のデータを $irank-1$ に `mpi_send` で送り、そのデータを $irank+1$ から $irank$ の $ke+1$ に転送することで、のりしろのデータを一つ若いランクの PE に送る。`mpi_barrier` は同期を取るためである。

```

CC MPI START
        do m=1,nb
            len=nx2*ny2
            if (irank.gt.0) then
                call mpi_send(f(1,1,ks,m),n2,mpi_real,irank-1,
&                            100,mpi_comm_world,ier)
            end if
            if (irank.lt.isize-1) then
                call mpi_recv(f(1,1,ke+1,m),n2,mpi_real,irank+1,
&                            100,mpi_comm_world,istatus,ier)
            end if
        end do
        call mpi_barrier(mpi_comm_world,ier)
CC MPI END

```

次は、mpi_gatherv でデータを irank=0 に全て集めて、irank=0 でファイルに書き出している。この時、書き出しの前に mpi_barrier で同期を取る必要がある。

```
do 173 m=1,nb
CC MPI START
c    do m=1,nb
      call mpi_barrier(mpi_comm_world,ier)
      call mpi_gatherv(f(1,1,1,m),nword,mpi_real,fg(1,1,1),
*                               recvcount,displs,mpi_real,0,
*                               mpi_comm_world,ier)
c    end do
      call mpi_barrier(mpi_comm_world,ier)
CC MPI END
CC MPI START
      if(irank.eq.0) then
CC MPI END
        do 1732 k=1,nz2
          write(ntap) fg(1:nx2,1:ny2,k)
1732  continue
CC MPI START
        end if
CC MPI END
173  continue
```

また、MHD シミュレーションを続ける時、常に速度の絶対値の最大値をモニターすることによって、数値不安定が生じたかどうかを判定していて、vmax が規格化した値で 1 を越えたら、その時のデータを書き出して計算を終了するようにしている。その vmax の計算には、mpi_allreduce を用いる。

```
CC MPI START
      call mpi_allreduce(vmax,vmax1,1,mpi_real,mpi_max,
*                               mpi_comm_world,ier)
      vmax=vmax1
CC MPI END
```

以上みてきたように、HPF/JA のプログラムを MPI に書き換える場合、CC MPI START と CC MPI END で挟まれるテンプレート（モジュール）を追加・置き換えすれば、ほとんどそのまま書き換えることができる。VPP Fortran から MPI への書き換えもほとんど同じである。こうして、MPI に書き換えられた 3 次元 MHD コードは、ほとんどベクトル化と並列化がされていると考えてよい。もちろん、

時々、境界条件の部分で新たな工夫が必要なことが生じることがある。また、中規模までの計算では効率的な計算が行えたとしても、超大規模計算（3次元 MHD で約 1 億以上の格子点を使用）の場合は、更なる注意と考慮が必要である。

3.2. MPI 利用についての補足説明

MPI 利用で、並列計算効率の高いプログラムの作成、境界条件の扱い方、ファイルの read と write について、補足説明を行う。

(1) 非ブロッキング通信の使用

前の節では、ブロッキング通信 `mpi_send` と `mpi_recv` を利用していたが、非ブロッキング通信 `mpi_isend` と `mpi_irecv` を使用するとプログラムの計算効率が向上する。その使用方法は簡単で、使用例は `mearthb.isend.f` にあるのでご覧頂きたい。この場合、非ブロッキング通信を用いるので、送信 `mpi_isend` と受信 `mpi_irecv` コマンドと同時に送信・受信の完了を待つ `mpi_wait` をセットにして用いる必要がある。

(2) 周期的境界条件

周期的境界条件は、次のように最後の番号の PE、`irank=isize-1` の `k=ke-1` から、最初の番号の PE、`irank=0` の `k=ks` へと転送し、更に、最初の番号の PE、`irank=0` の `k=ks+1` から最後の番号の PE、`irank=isize-1` の `k=ke` へと転送すればよい。その具体的な例は、次に示すような Modified leap-frog 法で 3 次元の波動方程式を解くプログラム、ディレクトリ `mwave` の `mwave3.f.send` と `mwave3.f.isend` を参照して頂きたい。

CC MPI START

```
      if (irank.eq.isize-1) then
        call mpi_send(f(1,1,ke-1,m),n2,mpi_real,0,
&                    110,mpi_comm_world,ier)
      elseif (irank.eq.0) then
        call mpi_recv(f(1,1,ks,m),n2,mpi_real, isize-1,
&                    110,mpi_comm_world,istatus,ier)
      end if
c
      if (irank.eq.0) then
        call mpi_send(f(1,1,ks+1,m),n2,mpi_real, isize-1,
&                    115,mpi_comm_world,ier)
      elseif (irank.eq.isize-1) then
        call mpi_recv(f(1,1,ke,m),n2,mpi_real,0,
&                    115,mpi_comm_world,istatus,ier)
```

```

        end if
        call mpi_barrier(mpi_comm_world,ier)
CC MPI END

```

(3) 特殊な境界条件を MPI でどう解くか

次の例のように、分割の $k(z)$ 方向の変数を逆に並び替える場合は、効率のよい MPI のプログラムをどのように作るか、考えてみて下さい。ここに、 $nz2=nz+2$, $nz3=nz+3$ とする。(ヒント：必要最小の変数を `mpi_gatherv` で $irank=0$ に集めて、並び替え、続いて `mpi_scatterv` で各 PE に配信する方法が考えられる。)

```

do k=1,nz2
  f(2:nx1,1,k,1:nb) = f(2:nx1,2,-k+nz3,1:nb)
end do

```

(4) read と write のファイル入出力をどうするか

地球磁気圏の 3 次元 MHD コード `meearthb_send.f` では、データ入出力の作業配列 `fg(nx2,ny2,nz2)` を用意して、`mpi_gatherv` でデータを $irank=0$ に全て集めて、 $irank=0$ でファイルに書き出している。これは、配列を増やしてプログラムサイズを大きくする時、大きな問題となる。まず、送受信のバッファの制限内に収まっているか、次に $irank=0$ の `fg(nx2,ny2,nz2)` にデータを全て集めるので、 $irank=0$ のメモリ制限がある。通常の計算 (3 次元 MHD コードでの格子点が約 1 億個以下) では、ここで書いていることは深刻な問題とはならない。しかし、プログラムサイズを極端に大きくする時は作業配列 `fg` は使用せず、かつデータを $irank=0$ に全て集めることも止める必要がある。この場合は、個々のランク (PE) からそれぞれ名前を区別して個々にファイルを書き出し、後でその個々のファイルをまとめるなど編集して利用することになる。

(5) MPI のプログラム作成のまとめ

これまでみてきたように、MPI のプログラム作成は簡単だと思って間違いはないと思う。それも、VPP Fortran や HPF/JA で効率的に書かれたプログラムならなおさらである。そして、フルベクトル化とフル並列化も多くの場合、容易に達せられるであろう。問題が生じるとすれば、境界条件で発生することが時々ある。また、MPI プログラムの高効率化は使用している並列計算機の特徴や機能とも関係している。従って、問題が生じたり、高効率化が出ない場合は、センターなどのプログラム相談者に質問や相談するのがよいであろう。それと並行して、MPI プログラムを利用している研究者が MPI の使用知識を公開して共有化することも極めて現実的で有効な方法である。この目的で私達は次の Homepage (<http://center.stelab.nagoya-u.ac.jp/kaken/kakenhi.html>) を設けて、個々の研究者が得た並列計算の知識を共有化しようと計画している。

3.3. 並列計算法の効率

3次元MHDシミュレーションなどの大型シミュレーションを実行するためには、スーパーコンピュータの利用と、ベクトル化や並列化による計算速度の効率化は必須である。表1に、講義と実習で使用する3次元MHDコードをSUNとVPP-5000(VP Fortran, VPP Fortran, HPF/JA, MPI)で実行した時の速度の比較を示している。計算時間(sec)は、Modified leap-frog法で1回時間ステップを進めるのに要する時間を示している。SUN(GR720)に比べて、VPP5000(2PE)ではいずれも約70倍の計算速度がでていることが分かる。実際の太陽風地球磁気圏相互作用の3次元MHDシミュレーションでは、約1万回の繰り返し計算をするので、SUN(GR720)で約20時間、VPP5000(2PE,MPI)で約20分の計算時間がかかることが分かる。PEを増やすと更にその差は更に大きくなる。

表1. 計算機実習で用いる1/4領域の地球磁気圏シミュレーション3次元MHDコードの計算速度の比較: earthb、格子点数(nx,ny,nz)=(180,60,60)

Table 1. Comparison of computer processing capability of 3-dimensional global MHD code with a quarter volume: earthb with (nx,ny,nz)=(180,60,60).

Computer Processing Capability

A Quarter Model of the Earth's Magnetosphere (nx,ny,nz)=(180,60,60); earthb

computer	number of PEs compiler	sec	(MFLOPS)	GF/PE (date)
Fujitsu GR720	(1PE) Fortran 90 (frt)	7.72998	(136)	0.14 (2002.08.01)
Fujitsu VPP-5000	(1PE) VP Fortran	0.19342	(5,428)	5.43 (2002.08.01)
Fujitsu VPP-5000	(2PE) VPP Fortran	0.10509	(9,990)	5.00 (2002.08.01)
Fujitsu VPP-5000	(2PE) HPF/JA	0.11064	(9,489)	4.74 (2002.08.01)
Fujitsu VPP-5000	(2PE) MPI	0.09899	(10,606)	5.30 (2002.08.01)
Fujitsu VPP-5000	(2PE) MPI (isend)	0.09774	(10,797)	5.40 (2002.08.08)

frt: Fujitsu VPP Fortran 90 HPF: High Performance Fortran

MPI; Message Passing Interface

: MFLOPS is an estimated value in comparison with the computation by

1 processor of CRAY Y-MP C90.

並列計算法の有効性を示すために、VPP Fortran と HPF/JA と MPI で書かれた太陽風地球磁気圏相互作用の3次元MHDコードによるFujitsu VPP5000/64を用いての計算速度の比較を示す。VPP Fortran, HPF/JA 及び MPI で同等の計算速度がでていて、その計算効率もかなり高いことが分かる。これらの並列計算MHDコードはフルベクトル化とフル並列化ができていて、VPP Fortran と HPF/JA

の大規模計算では 400 Gflops 程度以上の高効率も実現している。こうして、ワークステーションや PC の最速のものに対して、最大規模のスーパーコンピュータは大体千倍以上の計算速度を有していることが理解できると思う。

配列が (800x200x478, 800x200x670) のようになくなって、計算の規模が大きくなった場合、MPI は通常のオペレーションモードではまだ必ずしも十分な高効率の計算速度を実現していない。表 2 では、MPI Fortran ジョブも高効率を得られているが、これはシングルモードでのテスト結果を示している。通常のオペレーションモードで必ずしも高効率を得られない理由は、当該の MPI Fortran コードの問題、ベクトル並列型スーパーコンピュータ VPP5000 とのマッチングの問題、MPI の計算時間計測のみが他と異なっている問題などいくつかの原因があるようなので、目下調査中である。問題がはっきりすれば、上述の Homepage などですす予定である。VPP Fortran と HPF/JA では cpu 使用時間の累計を計算時間計測に用いているが、MPI では cpu 使用時間の累計を計る方法が無いので単にジョブの経過時間を用いている。従って、MPI の計測では多重のジョブが同時に実行されているとそれだけ遅く出てしまう。いずれにせよ、MPI は使用開始して日が浅いので、解決すべき問題が多くある。MPI は最後の共通並列計算方法である点からも、その問題解決のためにも MPI の使用知識の共有化は重要であると考えている。

表 2 .VPP Fortran と HPF/JA と MPI で書かれた太陽風地球磁気圏相互作用の 3 次元 MHD コードによる Fujitsu VPP5000/64 での計算速度の比較

Table 2. Comparison of computer processing capability between VPP Fortran and HPF/JA and MPI in a 3-dimensional global MHD code of the solar wind-magnetosphere interaction by using Fujitsu VPP5000/64.

Number of PE	Number of grids	VPP Fortran cpu time Gflops Gf/PE	HPF/JA cpu time Gflops Gf/PE	MPI cpu time Gflops Gf/PE
1PE	200x100x478	119.607 (0.17) 0.17 (scalar)		
1PE	200x100x478	2.967 (6.88) 6.88	3.002 (6.80) 6.80	
2PE	200x100x478	1.458 (14.01) 7.00	1.535 (13.30) 6.65	1.444 (14.14) 7.07
4PE	200x100x478	0.721 (28.32) 7.08	0.761 (26.85) 6.71	0.714 (28.60) 7.15
8PE	200x100x478	0.365 (55.89) 6.99	0.386 (52.92) 6.62	0.361 (56.55) 7.07
16PE	200x100x478	0.205 (99.38) 6.21	0.219 (93.39) 5.84	0.191 (107.19) 6.70
24PE	200x100x478	0.141 (144.49) 6.02	0.143 (143.02) 5.96	0.1302(157.24) 6.55
32PE	200x100x478	0.107 (191.23) 5.98	0.110 (186.13) 5.82	0.1011(202.50) 6.33
48PE	200x100x478	0.069 (297.96) 6.21	0.074 (276.96) 5.77	0.0679(301.51) 6.28
56PE	200x100x478	0.064 (319.53) 5.71	0.068 (299.27) 5.34	0.0639(320.39) 5.72
64PE	200x100x478	0.0662(308.91) 4.83	0.0627(324.57) 5.07	0.0569(359.80) 5.62

1PE	500x100x200	2.691 (7.94) 7.94	2.691 (7.94) 7.94	
2PE	500x100x200	1.381 (15.47) 7.73	1.390 (15.37) 7.68	1.355 (15.77) 7.89
4PE	500x100x200	0.715 (29.97) 7.47	0.712 (29.99) 7.50	0.688 (31.03) 7.76
8PE	500x100x200	0.398 (53.65) 6.71	0.393 (54.38) 6.80	0.372 (57.50) 7.19
16PE	500x100x200	0.210 (101.87) 6.37	0.202 (105.74) 6.61	0.193 (110.70) 6.92
24PE	500x100x200	0.160 (133.70) 5.57	0.150 (142.40) 5.93	0.135 (158.26) 6.59
32PE	500x100x200	0.131 (163.55) 5.11	0.120 (175.50) 5.48	0.1084(197.10) 6.15
48PE	500x100x200	0.100 (214.48) 4.46	0.091 (231.69) 4.82	0.0811(263.44) 5.49
56PE	500x100x200	0.089 (239.48) 4.28	0.086 (244.85) 4.37	0.0688(310.54) 5.55
64PE	500x100x200	0.0956(222.95) 3.48	0.0844(249.49) 3.90	0.0687(310.99) 4.86
2PE	800x200x478	10.659 (15.33) 7.66	10.742 (15.21) 7.60	10.428 (15.67) 7.83
4PE	800x200x478	5.351 (30.53) 7.63	5.354 (30.52) 7.63	5.223 (31.28) 7.82
8PE	800x200x478	2.738 (59.67) 7.46	2.730 (59.85) 7.48	2.696 (60.61) 7.58
12PE	800x200x478	1.865 (87.58) 7.30	1.911 (85.49) 7.12	1.771 (92.25) 7.68
16PE	800x200x478	1.419 (115.12) 7.19	1.389 (117.66) 7.35	1.342 (121.81) 7.61
24PE	800x200x478	0.975 (167.54) 6.98	0.976 (167.45) 6.98	0.905 (180.59) 7.52
32PE	800x200x478	0.722 (226.33) 7.07	0.717 (227.72) 7.12	0.690 (236.63) 7.39
48PE	800x200x478	0.534 (305.70) 6.36	0.515 (317.26) 6.61	0.469 (348.38) 7.25
56PE	800x200x478	0.494 (330.95) 5.91	0.464 (352.49) 6.29	0.433 (377.73) 7.74
64PE	800x200x478	0.465 (351.59) 5.49	0.438 (373.41) 5.83	0.389 (420.45) 6.57
4PE	800x200x670	7.618 (30.06) 7.52	8.001 (28.62) 7.16	7.433 (30.81) 7.70
8PE	800x200x670	3.794 (60.36) 7.54	3.962 (57.81) 7.23	3.683 (62.17) 7.77
12PE	800x200x670	2.806 (81.61) 6.80	3.005 (76.21) 6.35	2.696 (84.95) 7.08
16PE	800x200x670	1.924 (119.00) 7.44	2.012 (113.85) 7.12	1.854 (123.53) 7.72
24PE	800x200x670	1.308 (175.10) 7.30	1.360 (168.44) 7.02	1.254 (182.61) 7.60
32PE	800x200x670	0.979 (233.85) 7.31	1.032 (221.88) 6.93	0.955 (239.77) 7.49
48PE	800x200x670	0.682 (335.62) 6.99	0.721 (317.80) 6.62	0.662 (346.21) 7.21
56PE	800x200x670	0.595 (384.61) 6.87	0.628 (364.87) 6.52	0.572 (400.59) 7.15
16PE	1000x500x1118	9.668 (123.52) 7.72	9.619 (125.50) 7.84	
32PE	1000x500x1118	5.044 (236.73) 7.40	4.992 (241.83) 7.56	
48PE	1000x500x1118	3.550 (336.40) 7.01	3.479 (346.97) 7.23	
56PE	1000x500x1118	2.985 (400.04) 7.14	2.935 (411.36) 7.35	
32PE	1000x1000x1118	9.979 (239.33) 7.48	9.813 (243.37) 7.61	
48PE	1000x1000x1118	7.177 (332.79) 6.93	7.028 (339.85) 7.08	

56PE 1000x1000x1118 5.817 (410.55) 7.33 5.794 (412.23) 7.36

: Mflops is an estimated value in comparison with the computation by
1 processor of CRAY Y-MP C90.

4 . 太陽風磁気圏相互作用の 3 次元 MHD コードの実行

ここでは、計算機実習で用いる 1/4 領域の太陽風と地球磁気圏相互作用の 3 次元グローバル MHD シミュレーションコードで用いているパラメータの説明をして、ワークステーションなどの普通の計算機で計算するメモリ節約型のベクトル化コード (earthb10.f) 及び、VPP Fortran, HPF/JA 及び MPI の 3 つのバージョンの並列計算 3 次元 MHD コードの計算実行方法とその具体例を示す。

3-Dimensional MHD Simulation of Earth's Magnetosphere

<Example to execute the MHD Code and Graphic programs>

We will demonstrate how to execute the 3-Dimensional magnetohydrodynamic (MHD) Simulation of Earth's Magnetosphere in 1/4 volume and how to use the graphics programs to make PostScript files and VRML files in this section. In the MHD model, MHD and Maxwell's equations are solved in the solar-magnetospheric coordinate system by using modified leap-frog method when the upstream solar wind and interplanetary magnetic field (IMF) boundary conditions are given. Moreover, north-south symmetry and dawn-dusk symmetry are assumed, therefore it is enough to solve 1/4 volume as the simulation box. The main simulation Fortran program, earthb10.f is fully vectorized and can be executed on many kinds of computers. By executing the main MHD simulation code, a simulated binary file is produced as output. When the output binary file is used as input, graphics programs can be executed to make PostScript files and VRML files for three dimensional visualization.

4 . 1 . 計算パラメータの設定

ベクトル化された 3 次元 MHD コード earthb(earthb10.f)で使用しているパラメータの設定を次にまとめて示す。ベクトル並列化 3 次元 MHD コードでのパラメータの設定内容は同じである。

main program : earthb10.f

earthb10.f using modified leap-frog scheme

3D MHD simulation of 1/4 earth's magnetosphere

Cartesian coordinate finite resistivity 45 degree boundary

(nx,ny,nz)=(180,60,60) : grid number without boundary

nxp=30 : parameter to determine earth position

$last=1024$: number of time steps
 $iiq0=8$: a unit of modified leap-frog scheme
 $iip0=32$: adjust upstream boundary condition
 $iis0=1024$: sampling step of data
 $thx=4.00$: parameter to adjust time step

$(xl,yl,zl)=(90.5,30.5,30.5)Re$: length in each direction

$hx=xl/float(nx+1)=0.5Re$: grid interval in x direction
 $hy=yl/float(ny+1)=0.5Re$: grid interval in y direction
 $hz=zl/float(nz+1)=0.5Re$: grid interval in z direction
 $t=0.5*hx*thx$: time interval
 $t(real)=t*ts$: real time to one time step advance
 $=0.5*0.5*4.00*0.937$: ts is normalization value in time
 $=0.937$ sec

$x=0.5*hx*float(2*i-nx2-1+2*nxp)$: x position versus grid number
 $y=0.5*hy*float(2*j-3)$: y position versus grid number
 $z=0.5*hz*float(2*k-3)$: z position versus grid number

where $nx2=nx+2$, $ny2=ny+2$ and $nz2=nz+2$

$ro01=5.0E-4$ (5/cc) : mass density of solar wind
 $pr01=3.56E-8$: pressure of solar wind
 $vsw=0.044$ (300km/s) : speed of solar wind
 $bis=CP(11)=1.5E-4$ (5nT) : amplitude of IMF

$eatt$: resistivity
 $rmuu$: viscosity
 $eud0$: friction or collision term

1-dimensional array variable $f(i1)=f(i,j,k,m)$

$n1=nx+2, n2=n1*(ny+2), n3=n2*(nz+2)$
 $nb=8, nbb=11, n4=n3*nb, n5=n3*nbb$

$i1=i+n1*(j-1)+n2*(k-1)+n3*(m-1)$

m=1 : rho, plasma density
 m=2 : Vx, x-component of velocity
 m=3 : Vy, y-component of velocity
 m=4 : Vz, z-component of velocity
 m=5 : P, plasma pressure
 m=6 : Bx, x-component of magnetic field
 m=7 : By, y-component of magnetic field
 m=8 : Bz, z-component of magnetic field

4 . 2 . 計算実行例

ベクトル化された 3 次元 MHD コード earthb(earthb10.f)とベクトル並列化 3 次元 MHD コード、MPI(mearthb)、HPF/JA(hearhb)、VPP Fortran(peartb)での計算実行例を次に示す。ベクトル並列化 3 次元 MHD コードの実行でコンパイルと実行のシェルは、それぞれのディレクトリの中に置いてあり、実行コマンドの例は readme ファイルに書かれている。

4.2.1. <<execution of main program>>

1. f77 -O earthb10.f
2. a.out &

where file must be defined in open statement like

```

c      open(10,file='earthb10.data',
c      1      access='sequential',form='unformatted')
c      open(11,file='earthb11.data',
c      1      access='sequential',form='unformatted')

```

c
or

1. f77 -o earthb10 -O earthb10.f
2. earthb10 &

4.2.2. <<compile and execution using by supercomputer, Fujitsu VPP5000>>

(1) MPI (Message Passing Interface): mearthb

All the comand shells are in "readme" file.

(1a) TSS

mpifrt progmpi.f :compile to make execution file, a.out
 jobexec -vp 2 ~/school/mearthb/a.out :execution of a.out by 2 PEs

(1b) Batch

```
qsub -q c -eo -o pconpmmpi2.out pcompmpi2.sh :compile  
qsub mpi_lim02e.sh :execution of progmpi by 2 PEs
```

(2) HPF/JA (High Performance Fortran): hearthb

```
qsub -q c -eo -o pconphpf2.out pcomphpf2.sh :compile  
qsub -q z -eo -lPv 2 -o pexeclpf.out pexeclpf.sh :execution by 2 PEs  
  
qsub -q c -eo -o comp.out comp.sh :compile vector mode only  
qsub -q x -eo -o exec.out exec.sh :execution by 1 PE
```

(3) VPP Fortran (Fortran 90): pearthb

```
qsub -q c -eo -o pcomp90.out pcomp90.sh :compile  
qsub -q z -eo -lPv 2 -o pexec90.out pexec90.sh :execution by 2 PEs
```

4 . 3 . 図形処理

図形処理を統一的行うためには、次の3つの条件が満たされる必要がある。

- 1 . コンピュータの種類に依存しない方法の確立
- 2 . ソフトウェアなど全てを自分たちでコントロールする
- 3 . プログラムなどできるだけ統一的に（共通に）扱う方法の確立

これを逆にいえば、コンピュータに依存したソフトウェアや言語・仕様は使わない、また、特定の業者のみが販売する図形処理応用ソフトウェアは使わない、ということになる。紆余曲折したが、画像処理と図形出力の統一的な扱いのためには、Fortran などを用いて PostScript 画像ファイルを直接作成することが有効な方法であるという結論に達した。その結果として、私達が現在行っているコンピュータシミュレーションの画像処理の統一的な方法を項目としてまとめると以下ようになる。

- (1) シミュレーションデータを IEEE Binary 形式で保存
- (2) Fortran プログラムで PostScript 画像ファイルを直接に作成
PostScript ファイルを作成するための Interface Subroutine Package を作成
- (3) PostScript ファイルからファイル変換ツール（xv, pstogif など）で圧縮された
画像ファイル（gif など）を作成
- (4) 圧縮画像ファイル（gif など）をWWWで公開

この方法により、Fortran が使えて、その中で大文字と小文字の区別ができれば、コンピュータの種類によらずに PostScript 画像ファイルを作って図形出力を取り出すことが可能になった。また、C 言語でもできるように C 言語用の Interface Subroutine Package も用意している。

<http://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/simulation/jst2k/hpf02.html>

4.3.1. graphics program to make PostScript files

1. gm150b.f (main) + gsub150.f (subroutine)
noon-midnight meridian and equatorial plots (black and white)
2. gm220b.f (main) + gsub220.f (subroutine)
energy distribution of cross section
3. gm480b.f (main) + gsub480.f (subroutine)
3-dimensional magnetic field lines

<<execution of PostScript graphics program>>

1. f77 -c -O gsub150.f
2. f77 -O gm150b.f gsub150.o
3. a.out > gm150b.ps &
4. gs gm150b.ps
5. lp gm150b.ps

1. f77 -c -O gsub220.f
2. f77 -O gm220b.f gsub220.o
3. a.out > gm220b.ps &

1. f77 -c -O gsub480b.f
2. f77 -O gm480b.f gsub480b.o
3. a.out & : output is written in fort.10
4. mv fort-10 gm480b.ps

太陽風と地球磁気圏相互作用の3次元グローバルMHDシミュレーションから得られた地球磁気圏の構造を示す図を、図7．子午面と赤道面及び尾部断面図（白黒：gm150b.ps） 図8．子午面と赤道面及び尾部断面図（カラー図：gm220b.ps） 図9．磁力線の3次元構造（gm480b.ps）に示す。

5．VRMLによる3次元可視化

VRML (Virtual Reality Modeling Language) の登場によって、VRMLのビューアさえあれば誰でも3次元画像を自分の好きなように見ることができる状況が実現した。自分のコンピュータの処理能力に依存して3次元画像処理（回転、拡大縮小など）の速度は決まるが、最近のネットスケープやインターネットエクスプローラなどを使えば、VRML 2.0 対応の cosmo player 等のビューアを利用して、

3次元可視化がいつでもどこでも実現できる。

VRMLファイルの作成をどう実現するかであるが、私達は、VRMLファイル作成のための Fortran Interface Subroutine Package を準備し、フォートランプログラムを用いて、3次元シミュレーションデータから直接にVRMLファイル(*.wrl)を作っている。これは3次元と2次元の違いはあるが、PostScript 画像ファイルを作成する方法と同様の方法である。VRMLのビューアには通常視点を移動する walk モードと対象物を移動・回転・拡大縮小する examine モードがあり、磁気リコネクションなどの微細構造の関係を見るのに大変有効である。

5.1. Fortran を用いたサブルーチンパッケージ

<ftp://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/sramp/simulation/vrml/>

VRML (Virtual Reality Modeling Language) and PostScript Fortran programs

1. vrml

3-dimensional visualization Fortran program by using VRML

2. PostScript

Fortran test program to make PostScript graphic files

3. PostScript2

Fortran test program to make PostScript graphic files with subroutine

5.2. 地球磁気圏の3次元 MHD シミュレーションへの適用

<ftp://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/sramp/simulation/earthb/>

3-dimensional graphics program by VRML files

<Virtual Reality Modeling Language>

1. zvrmagb.f (main) + zvrsubb.f (subroutine)

3-dimensional magnetic field lines

2. zvrcrob.f (main) + zvrsubb.f (subroutine)

cross sectional pattern by pixel image

<<execution of VRML graphics program>>

1. f77 -c -O zvrsubb.f

2. f77 -O zvrmagb.f zvrsubb.o

3. a.out & : output is written in fort.10

4. mv fort.10 fort.102

1. f77 -c -O zvrsubb.f
5. f77 -O zvrcrob.f zvrsubb.o
6. a.out & : output is written in fort.10
7. mv fort.10 fort.101
8. cat fort.101 fort.102 > zvrml01.wrl

V R M L を用いて、シミュレーションから得られた地球磁気圏構造を 3 次元可視化した例を図 10 に示す。

6 . おわりに

富士通 VP-2600、日立 S820、NEC SX-3、CRAY Y-MP などのベクトル計算機の時代までは、フルベクトル化された 3 次元 MHD コードを用いて Fortran コンパイラが載っている全ての計算機を利用して、太陽風と地球磁気圏相互作用の 3 次元グローバル MHD シミュレーションを実行することができた。この Fortran プログラムの汎用性のために、私達は 3 次元 MHD コードを世界中どこでも動かすことができ、MHD コードの配布などを通して世界中の多くの研究者と共同研究を行うことができた。しかし、ベクトル並列機と超並列機がコンピュータ シミュレーションの世の中に現れてくるや否や、Fortran プログラムの並列化の効率を上げるためにコンピュータに依存した様々の異なった手法を採らなければならなくなった。多くのシミュレーション研究者は共通のプログラム言語を失い、特定のメーカーの機種でしか並列化の効率を上げられない、方言の Fortran プログラム言語を使わざるを得ない状況が発生した。

そのような閉塞的な状況を打開する並列計算共通プログラム言語の候補として、HPF (High Performance Fortran) と MPI (Message Passing Interface)がある。HPF で書かれたコードは、日米のほとんどのスーパーコンピュータで高効率の計算が期待できないし、その改良版の HPF/JA (日本で開発改良された HPF の改良版) は高効率の実現できるが、それも現在は日本の富士通と NEC のスーパーコンピュータに限定され、日立のマシンでは高効率を得ることはできない。こうして、共通並列計算法としての MPI に対する期待は益々大きくなっていった。こうした状況下、MPI を用いた 3 次元 MHD コード作成の具体的方法を例示し、VPP Fortran や HPF/JA と同等以上の高効率計算が実現できることを具体的に示してきた。MPI は、今後画像処理なども含めて、多くの種類の計算機で広く並列計算に使われる方法として期待されている。

太陽風と地球磁気圏相互作用のシミュレーション結果などを理解し、更に、人によりよく理解してもらうためには可視化は必須であり、アニメーション動画の作成と 3 次元可視化 / 3 次元画像解析は極めて強力な威力を発揮する。動画によってその複雑な振る舞いを一目瞭然にすることができ、更に、インターネット 3 次元言語、V R M L の登場によって 3 次元画像解析を誰にでもすぐに手にすることができるようになった。即ち、ネットワークを通して 3 次元可視化コンテンツの共有化が実現できるようになったといえる。

世界最高速の性能を誇る国産の新世代並列型スーパーコンピュータを用い、スペースプラズマ現象を効率よく並列計算できる、HPF や MPI の共通コンピュータ言語を用いた電磁流体コード、粒子コード、及びハイブリッドコードを作成・普及させて、世界に先駆けた大規模シミュレーションとそれらのコードを連携した大規模シミュレーションから太陽風磁気圏電離圏ダイナミクスやスペースプラズマの非線形物理に新しい知見をもたらすことが期待される。

謝辞

本稿のコンピュータシミュレーションは名古屋大学情報連携基盤センターのスーパーコンピュータ、Fujitsu VPP5000/64 を利用してなされたものです。また、VPP Fortran から HPF/JA と MPI への書き換えでは多くの助言を頂いた名古屋大学情報連携基盤センターの津田知子助手と富士通株式会社の方に、更に、MPI への原型の書き換えではお世話と指導頂いた国立極地研究所の岡田雅樹助手と日立製作所の方に感謝いたします。

参考文献

- [1] T. Ogino, A three-dimensional MHD simulation of the interaction of the solar wind with the earth's magnetosphere: The generation of field-aligned currents, J. Geophys. Res., 91, 6791-6806 (1986).
- [2] T. Ogino, R.J. Walker and M. Ashour-Abdalla, A global magnetohydrodynamic simulation of the magnetosheath and magnetopause when the interplanetary magnetic field is northward, IEEE Transactions on Plasma Science, Vol.20, No.6, 817-828 (1992).
- [3] T. Ogino, Two-Dimensional MHD Code, (in Computer Space Plasma Physics), Ed. by H. Matsumoto and Y. Omura, Terra Scientific Publishing Company, 161-215, 411-467 (1993).
- [4] T. Ogino, R.J. Walker and M. Ashour-Abdalla, A global magnetohydrodynamic simulation of the response of the magnetosphere to a northward turning of the interplanetary magnetic field, J. Geophys. Res., Vol.99, No.A6, 11,027-11,042 (1994).
- [5] 荻野竜樹、「太陽風と磁気圏相互作用の電磁流体力学的シミュレーション」, プラズマ・核融合学会誌 ,CD-ROM 特別企画(解説論文), Vol.75, No.5, CD-ROM 20-30, 1999. <http://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/simulation/mhd3d01/mhd3d.html>
- [6] 荻野竜樹、「太陽風磁気圏相互作用の計算機シミュレーション」, 名古屋大学大型計算機センターニュース, Vol.28, No.4, 280-291, 1997.
- [7] 荻野竜樹、「コンピュータシミュレーションと可視化」, 愛媛大学総合情報処理センター広報 , Vol.6, 4-15, 1999. <http://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/simulation/simua/ehime985.html>
- [8] 荻野竜樹,「VPP Fortran から HPF へ」, 名古屋大学大型計算機センターニュース 解説,

372-405, Vol.31, No.4, (2000).

<http://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/simulation/hpfja/hpf013.html>

- [9] Ogino, T., Global MHD Simulation Code for the Earth's Magnetosphere Using HPF/JA, Special Issues of Concurrency: Practice and Experience, 14, 631-646, 2002.

<http://gedas.stelab.nagoya-u.ac.jp/simulation/hpfja/mhd00.html>

- [10] 津田知子、「新スーパーコンピュータ VPP5000/56 の利用について」,
名古屋大学大型計算機センターニュース、Vol.31, No.1, 18-33, 2000.
- [11] 津田知子、「MPI による並列化」, 名古屋大学情報連携基盤センター MPI 講習会資料、
2002 年 2 月
- [12] High Performance Fortran Forum, 「High Performance Fortran 2.0 公式マニュアル」,
Springer, 1999.
- [13] 富士通株式会社、「HPF プログラミング ～並列プログラミング (HPF 編)」
UXP/V 第 1.0 版、2000 年 6 月.
- [14] 富士通株式会社、「VPP FORTRAN プログラミング」, UXP/V, UXP/M
第 1.2 版、1997 年 4 月.
- [15] 富士通株式会社、「MPI プログラミング ～Fortran, C～」第 1.3 版、2001 年 4 月 .
- [16] 富士通株式会社、「MPI 使用手引き書 V20 用」, UXP/V 初版 1999 年 9 月
- [17] 青山幸也 (日本アイ・ビーエム株式会社) 「並列プログラミング虎の巻 MPI 版」
虎の巻シリーズ 2、2001 年 1 月 .
- [18] 株式会社日立製作所、「スーパーテクニカルサーバ SR8000 プログラム移植報告書」
国立極地研究所、2002 年 3 月 .
- [19] 名古屋大学情報連携基盤センター、「スーパーコンピュータ VPP5000 利用の手引き」
2002 年 4 月 .
「VPP5000 利用の手引きの pdf ファイル」
http://nucc.cc.nagoya-u.ac.jp/CENT/vpp_tebiki.pdf
「スーパーコンピュータ VPP5000/64 利用案内」の Homepage
http://www2.itc.nagoya-u.ac.jp/sys_riyou/vpp/vppteiki.htm

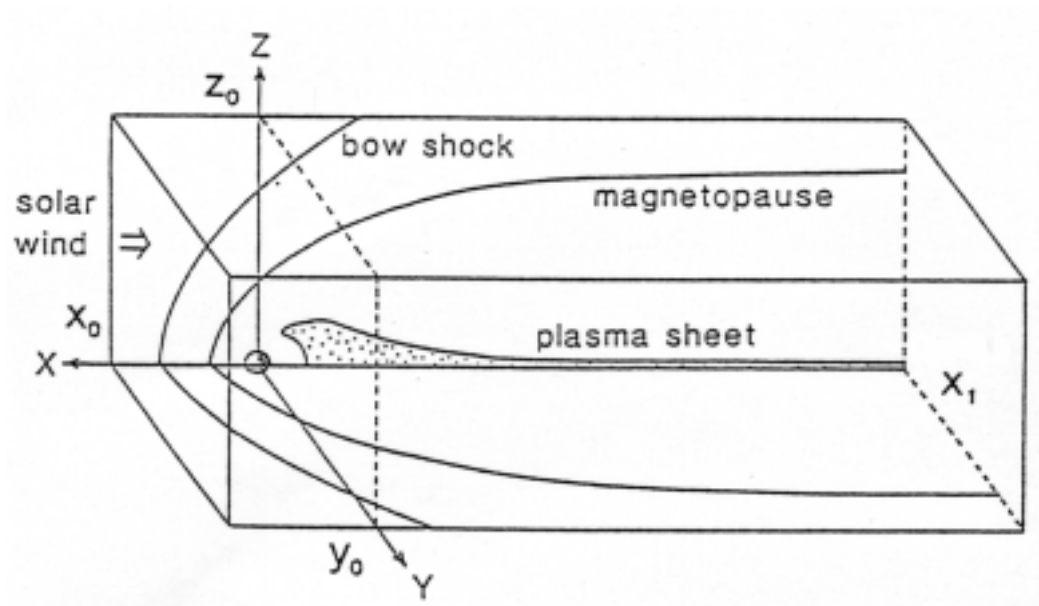
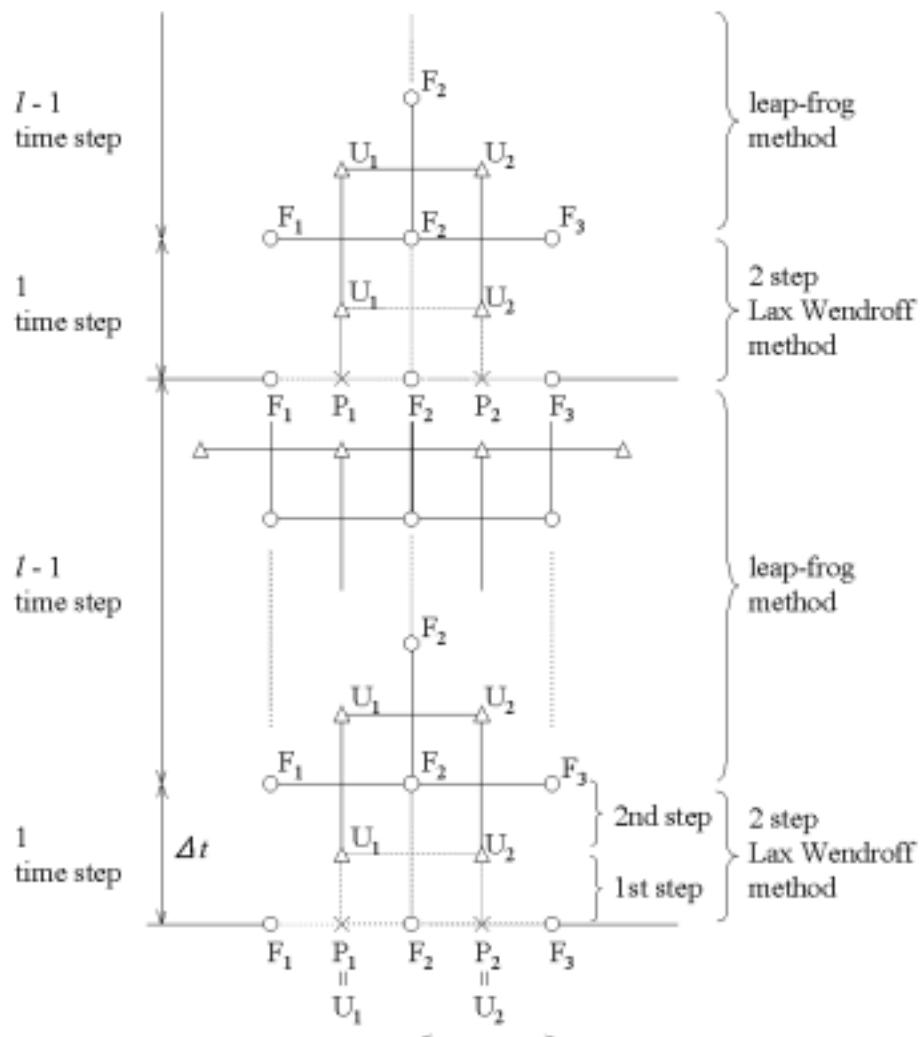


図 1 . 3次元 MHD シミュレーションに用いる太陽地球磁気圏座標系

Fig.1 Solar-terrestrial magnetosphere coordinate system in the 3-dimensional MHD simulation.

図 2 . Modified Leap-Frog 法の計算スキーム

Fig.2 Diagram of Modified Leap-Frog numerical scheme.



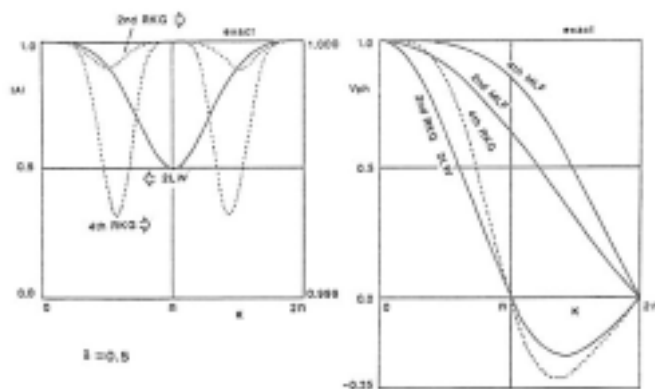


図3 Modified leap-frog 法 (MLF)、2 step Lax-Wendroff 法 (2LW) 及び Runge-Kutta-Gill 法 (RKG) に対する増幅率の絶対値と位相速度の波数依存性

Fig.3 Dependency of the absolute value and phase velocity of the amplification factor on wave number in cases of modified leap-frog, 2 step Lax-Wendroff and Runge-Kutta-Gill methods.

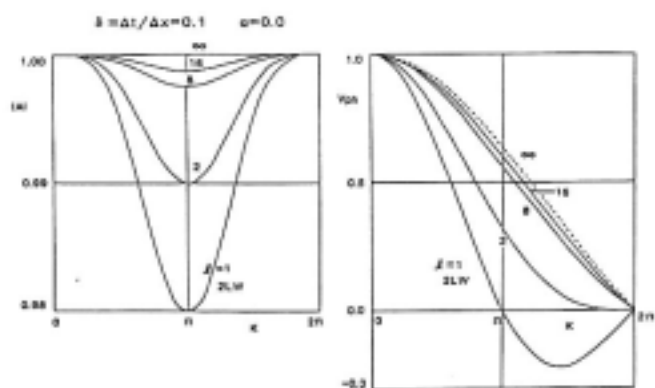


図4 ℓ を変化したときの Modified leap-frog 法 (MLF) に対する増幅率の絶対値と位相速度の波数依存性

Fig.4 Dependency of the absolute value and phase velocity of the amplification factor on wave number for modified leap-frog method with different ℓ values.

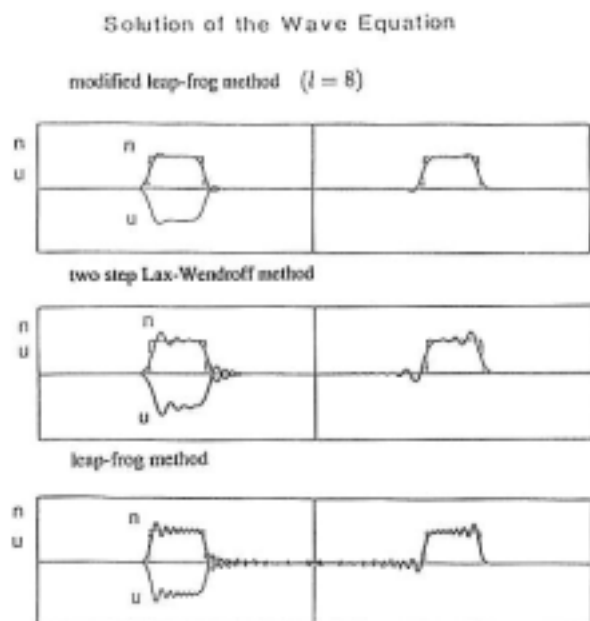


図5 3種類の計算方法を用いた波動方程式のシミュレーション

Fig.5 Simulation of the wave equation for 3 different kinds of numerical schemes.

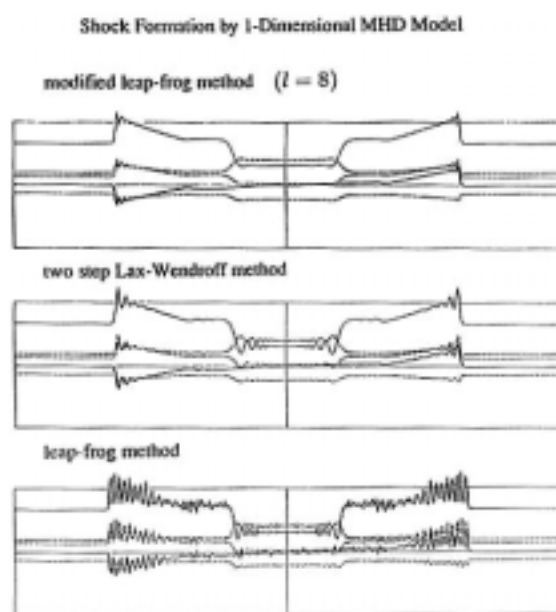


図6 3種類の計算方法を用いた MHD 衝撃波のシミュレーション

Fig.6 Simulation of the MHD shock wave for 3 different kinds of numerical schemes.

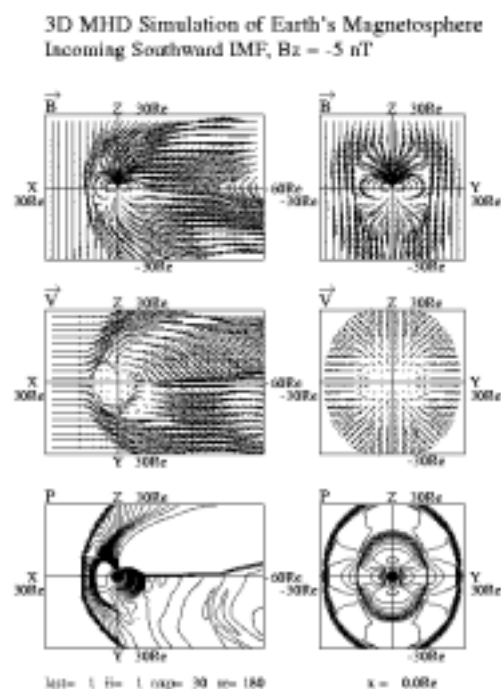


図 7 . 太陽と地球を結ぶ子午面と赤道面の地球磁気圏の構造と磁気圏尾部の断面図（白黒図：gm150b.ps）
Fig.7 Magnetospheric configurations in the noon-midnight meridian and equator and cross sectional patterns (black and white:gm150b.ps).

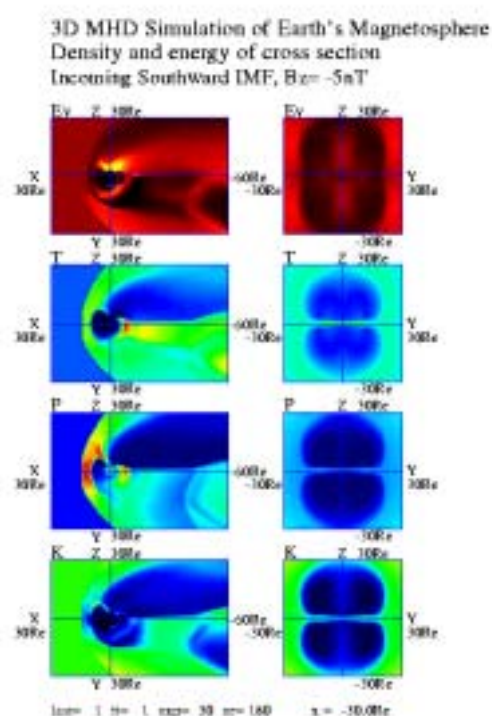


図 8 . 太陽と地球を結ぶ子午面と赤道面の地球磁気圏の構造と磁気圏尾部の断面図(カラー図:gm220b.ps)
Fig.8 Magnetospheric configurations in the noon-midnight meridian and equator and cross sectional patterns (color:gm220b.ps).

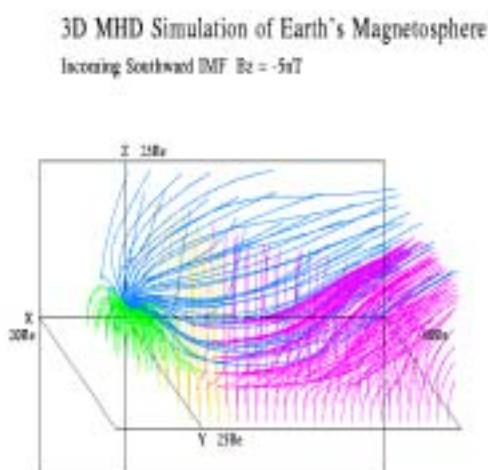


図 9 . 地球磁気圏の磁力線の 3 次元構造（gm480b.ps）
Fig.9 3-dimensional configuration of magnetic field lines in the earth's magnetosphere.

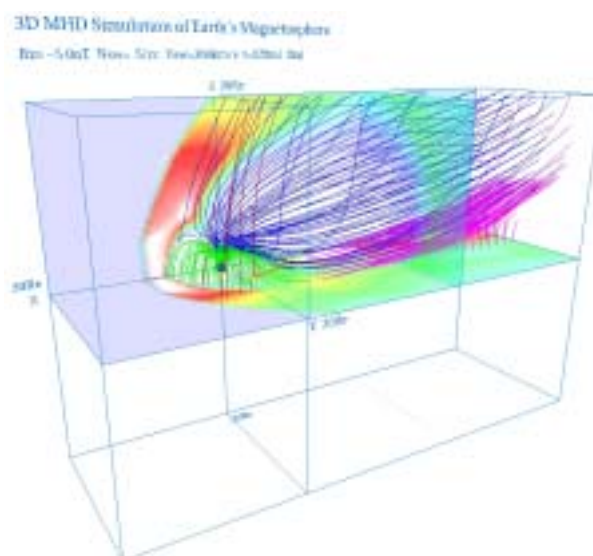


図 10 . VRML を用いた地球磁気圏の可視化（zvrml01.wrl）
Fig.10 3-dimensional visualization of the earth's magnetosphere by using VRML.

地球惑星大気擾乱の2次元シミュレーション

品川裕之（名古屋大学太陽地球環境研究所）

1．本シミュレーションの物理的意味

地球や惑星の大気は基本的には静水圧平衡の状態にあるが、局所的に急激な加熱や加速などが起きると力学バランスが崩れて擾乱が発生し、音波や重力波となって遠方にまで伝搬して行くと考えられている。実際、局所擾乱に関連した多くの現象が報告されている。

例えば、火山の噴火、核実験、雷、積雲に伴う強い対流、超高層のオーロラに伴う加熱や加速などによって、インフラソニック波（超低周波音波）や重力波が発生・伝搬することが知られている。また、地震や海洋表面の運動によって大気の下部境界が動かされて大気波動が発生するという研究もある。反対に、日食のように、局所的に突然加熱率が減少することによっても同様の大気擾乱や波動が発生するという報告もある。これらの物理過程は何れも、いまだに完全には解明されておらず、現在、気象や超高層研究分野で観測的研究と同時に数値シミュレーションによる研究が精力的に進められている。

本課題では、このような大気擾乱過程の基礎を学ぶため、地球、金星、火星の大気中で局所加熱が発生した場合の、大気変動の基本過程を再現するシミュレーションを紹介する。

2．モデル

本課題のシミュレーションモデルは、2次元（水平・高度）の中性流体シミュレーションで、基本場として各惑星大気の静水圧平衡モデルを与え、そこからの変動量を変数として、加熱による擾乱が与えられた時の変動量を数値的に求めるものである。数値解法はCIP法を用いている。CIP法については、本シミュレーションスクールで別途解説があるのでここでは省略する。

(1) 座標系

座標系は、鉛直・水平の2次元とし、計算領域は、水平方向が $-250\text{ km} \sim 250\text{ km}$ 、鉛直方向が 0 km （地表） $\sim 100\text{ km}$ である。格子点間隔は、水平が 5 km 、鉛直は 2 km としてある。

(2) 基礎方程式

基礎方程式は、以下のような重力場中の 2 次元流体方程式である。

$$\text{連続の式: } \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} - \frac{\partial \rho v}{\partial y}$$

$$\text{鉛直運動量方程式: } \frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - g$$

$$\text{水平運動量方程式: } \frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y}$$

$$\text{エネルギー方程式: } \frac{\partial T}{\partial t} = -v \frac{\partial T}{\partial y} - u \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{R}{c_v} T \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{Q}{c_v}$$

$$\text{状態方程式: } p = \rho R T$$

ここに、 x : 鉛直座標、 y : 水平座標、 ρ : 質量密度、 u : 鉛直速度、 v : 水平速度、 T :

温度、 p : 圧力、 R : 気体定数、 g : 重力加速度、 c_v : 定積比熱、 Q : 加熱率。

本シミュレーションでは、平衡状態にある基本場 ($\rho_0, u_0, v_0, T_0, p_0$) からの変動量 ($\rho' = \rho - \rho_0$ など) を変数として解いている。基本場は静水圧平衡 $\partial p_0 / \partial z = -\rho_0 g$ とし、他の式も基本場についてはバランスしていると仮定している。実際のプログラムでは基本場の平衡の式を用いて、上式を変形している。また、簡単のため、プログラムでは部分的に 2 次の項を無視している。さらに、現実の大気では、コリオリ力、熱伝導、粘性なども、場合によっては重要となるが、本シミュレーションでは含めていない。計算に用いる単位は cgs 系を用いている。

(3) 基本場のモデル

地球、金星、火星の 3 種類の場合があり、それぞれ下図のようにになっている。高度方向の温度分布は図 1、密度分布は図 2 のようになっている。その値はプログラムでは、subroutine init1 で与えている。これらの値は、近似的な代表値であり、実際の大気構造は季節や時間・場所によって大きく変動し、この例とは大きく異なる場合があることに注意していただきたい。

(4) 初期条件

計算では基本場からの変動量を変数としているので、その変動量に対する初期条件を与える。プログラム中では、地球と火星では、 $\rho' = u' = v' = T' = 0$ を与えている。金星の場合には、 $\rho' = u' = T' = 0$ であるが、水平風 u' に対しては、高度分布を与えている (図 3)。これは、実際に金星の中層大気で高速の水平風 (スーパーローテーション)

ン)が観測されているので、その効果を入れるためである。この水平風については、subroutine init1 で与えているので、受講者が変更することも可能である。

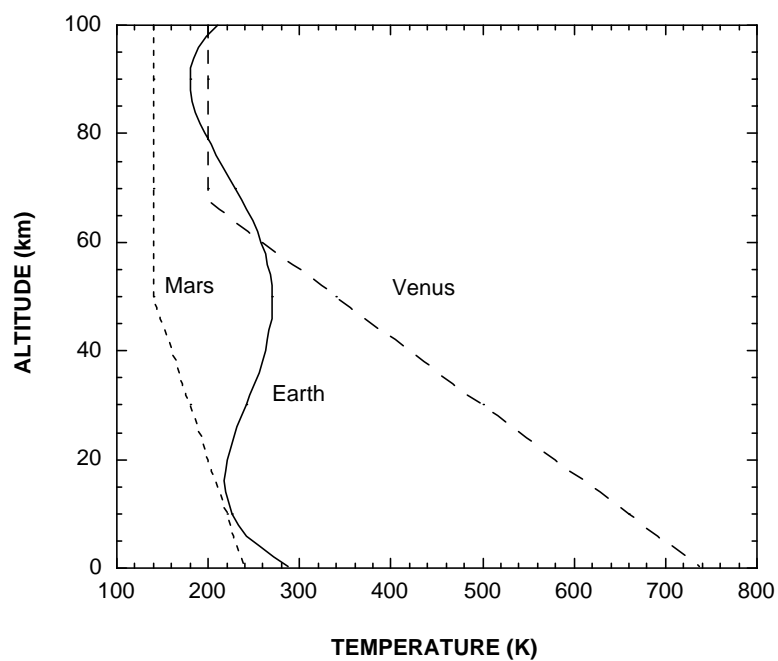


図 1 . 基本場の温度分布

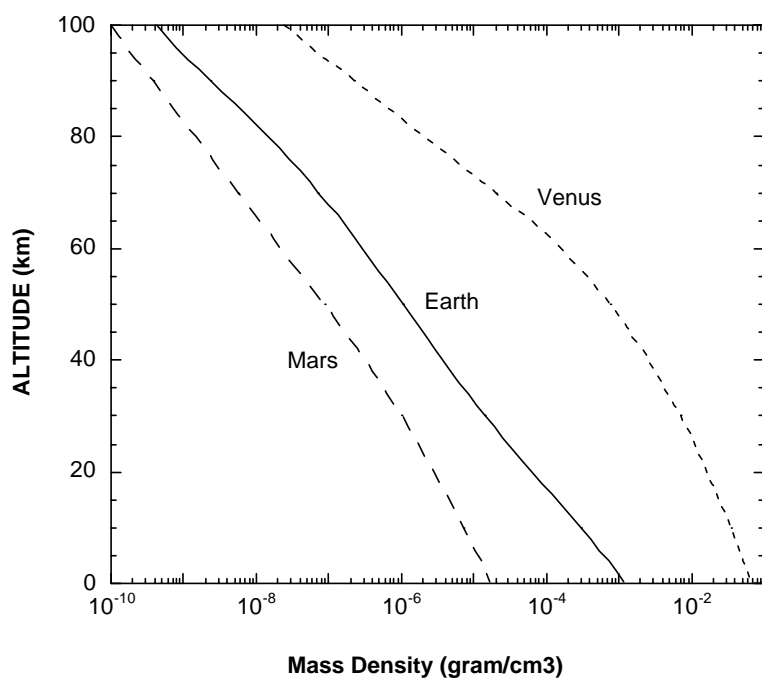


図 2 . 基本場の質量密度

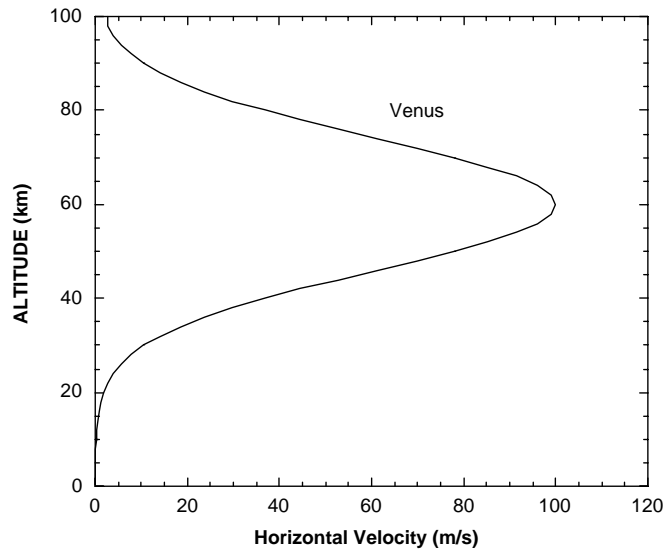


図 3 . 金星大気の水平速度の初期条件

(5) 境界条件

鉛直風以外の変数は、上下左右の境界で、勾配が 0 であるとしているが、鉛直風に関しては、地表で速度が 0 としている。

3 . プログラムの入力パラメータ

本シミュレーションでは大気擾乱を発生させるのは加熱である。加熱源の位置は、図 4 のように、また、加熱率の時間変化は図 5 のようになっている。この部分は適宜変更可能である。ts1, ts2, ts3 については後述参照。

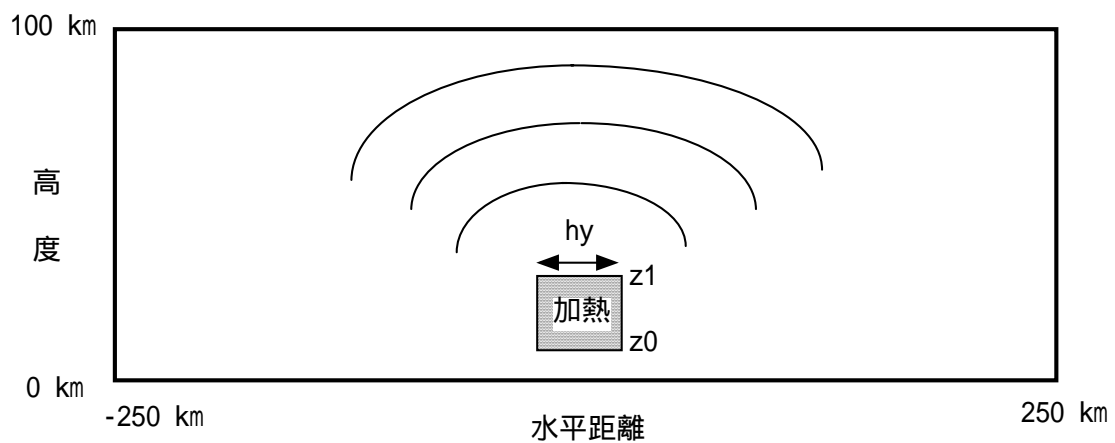


図 4 . 加熱源の位置

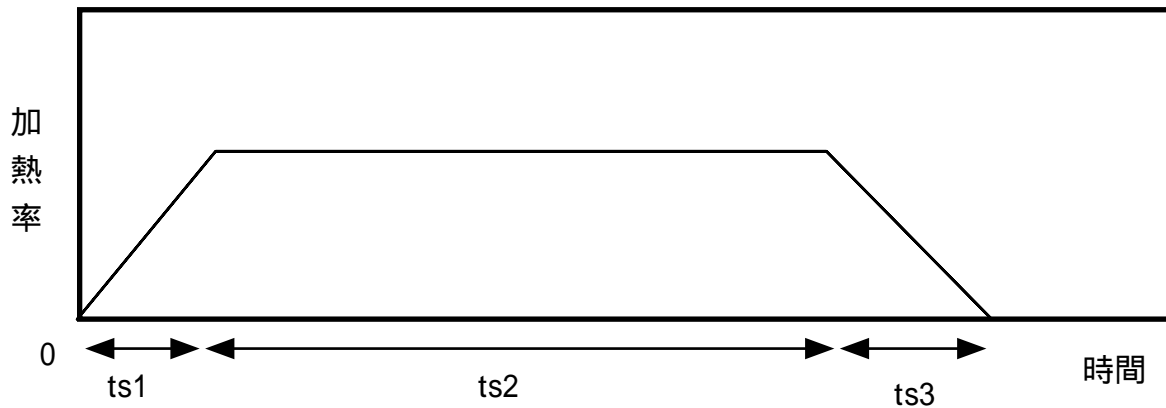


図 5 . 加熱率の時間変化

プログラムの主な変数は以下のものである。

変数	デフォルト値	内 容
nsteps	3000	計算の反復回数。これに dt を掛けたものが実際の物理時間になる。
iatm	1	惑星を選ぶパラメータ。地球=1；金星=2；火星=3
z0	0.0d+00	加熱源の下端の高度 (cm)
z1	1.0d+06	加熱源の上端の高度 (cm)
hy	2.0d+06	加熱源の幅 (cm)。加熱の中心は $y=0$ にある。なお、実際には加熱領域の端ではなだらかに (5 km 程度の幅で) 減衰するようにしている。
qpeak	1.0d+04	最大の加熱率 (erg/gram/cm ³ /s)
ts1	6.0d+01	時間的には加熱率は 0 から始まり、ts1 (秒) で最大加熱率 (qpeak) に到達する。これに負の値を与えると、周期 ts1 で sin 的に変動する加熱率が与えられる。
ts2	1.0d+03	ts1 の後、加熱率は時間 ts2 (秒) 一定の加熱率を保つ。
ts3	6.0d+01	ts1+ ts2 の後、加熱率は ts3 (秒) の時間で 0 に戻る。
dt	0.2	時間方向の刻み幅 (秒)

4 . 各サブプログラムの内容

main	入出力と、計算のためのサブルーチンを呼ぶ。入力パラメータと結果の書き出し方などは変更可能。
initl	基本場、初期値などを設定する。適宜変更可能。
pvt3	結果を書き出してチェックするための。普段は使わない。
veloc	staggered mesh を使っているので、1/2 mesh ずれたところで速度を計算するのに使う。

rhs	移流項以外の項の時間変化を計算する。
newgrd	cip 法では、変数の空間微分の時間発展を計算する必要がある ので、ここで rhs で計算した値の空間微分の時間発展を計算 する。
sift	次のタイムステップに進むために、変数の値を更新する。
bnd1, bnd2, bnd3	境界条件を与える。
dcip0	cip 法で移流項を計算する。

5 . 結果の例

本課題の Fortran プログラムをデフォルトパラメータで実行し、その結果を使って IDL プログラムを走らせると、以下の図のような結果が得られる。初期のプログラムでは、加熱源は中央の下におかれ、まず、ここから擾乱が発生し、上方に伝搬し、さらに水平に伝搬していく様子が現れる。一般に大気の変動量は、密度が下がるにつれて増大するので、大気上層では非常に大きくなる。そのため、プロットでは対数を使って表示している。

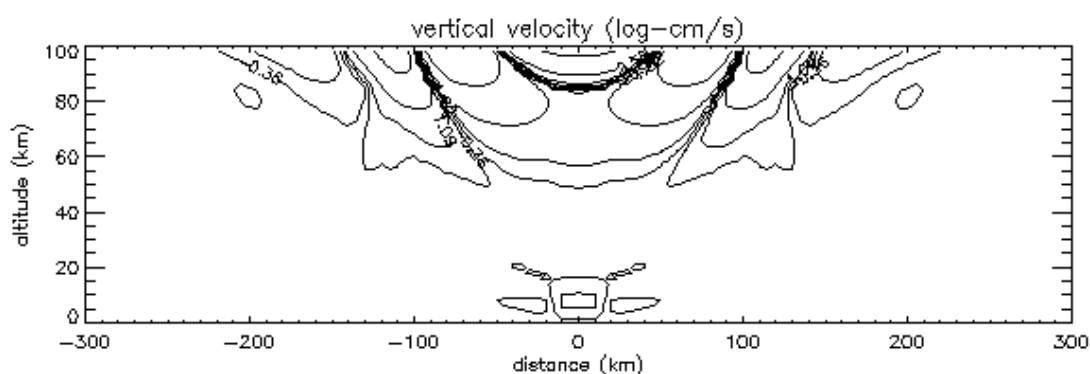


図 7 . 鉛直速度(u)。(速度(cm/s)の絶対値の対数を取り、その正の値に速度の符号をつけたもの。)

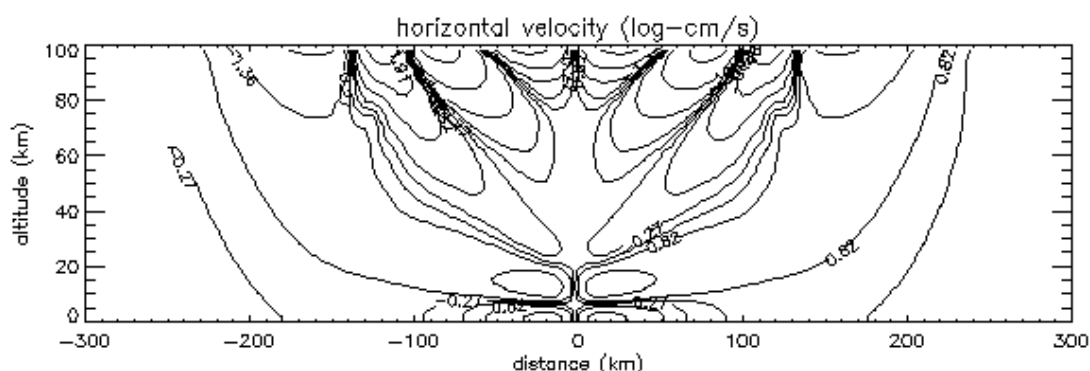


図 8 . 水平速度(v)。値の表示方法は図 7 と同じ。

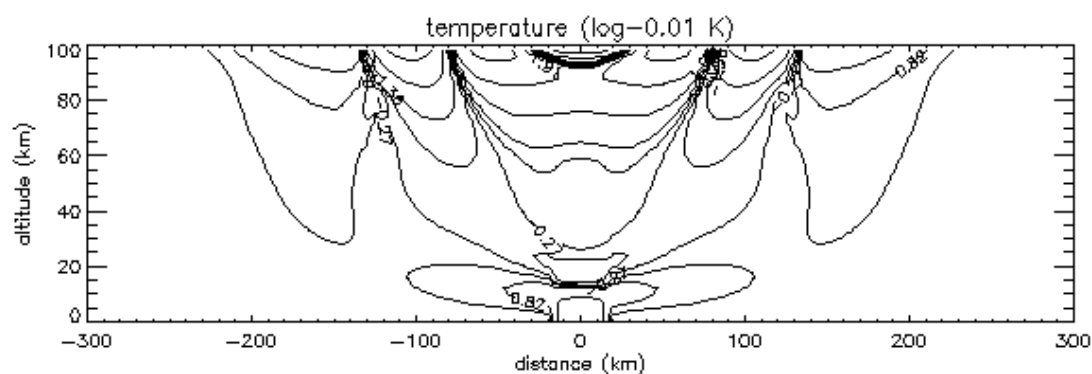


図 9 . 温度変化(T')。(温度変化(K)を 100 倍して、その絶対値の対数を取り、正の値に温度変化の符号をつけたもの。)

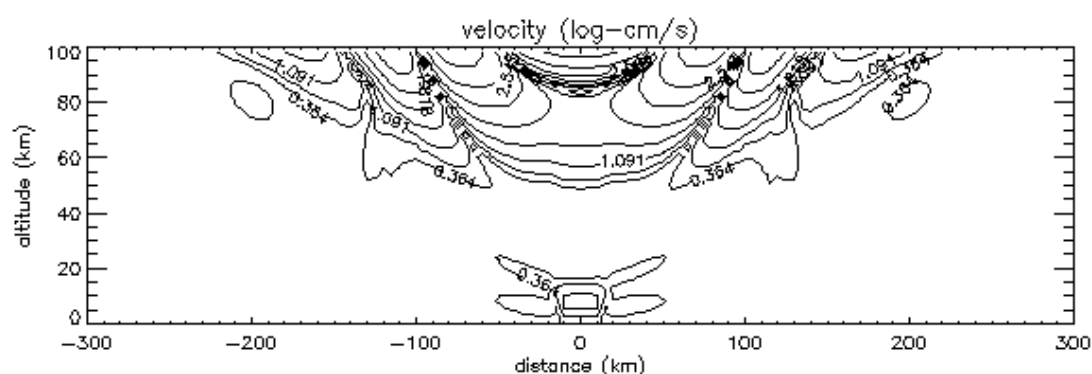


図 10 . 速度の絶対値。(速度(cm/s)の絶対値の対数を取り、正の値に速度の符号をつけたもの。)

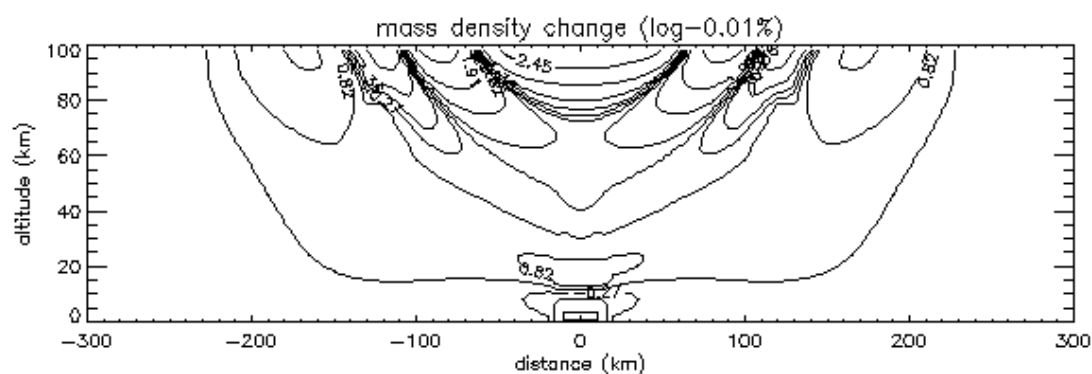


図 11 . 質量密度変化の割合。(質量密度変化の割合(r/r_0)に 10000 を掛け、その絶対値の対数を取り、正の値に符号をつけたもの。)

[注 : 図 7 ~ 図 11 は、実際の IDL プロットでは白黒が反転する。]

6．研究テーマ例

本プログラムを用いて、各惑星について以下のような研究を行うことができる。ただし、条件によっては数値不安定が起きる場合があり、必ずしも解を得られるとは限らない。

- (1) 加熱率の空間分布・時間変化などを変えて、擾乱の生成・伝搬のようすがどのように変わるかを調べる。
 - (2) 基本場の温度分布、初期の水平風速などを変えて、擾乱の生成・伝搬のようすがどのように変わるかを調べる。
 - (3) 加熱の代わりに「冷却」を入れて、日食によって起きる大気擾乱を調べる。
- 上記以外にも工夫次第でいろいろな現象を調べることができる。

7．参考文献

- 安田延壽、「基礎大気科学」、朝倉書店（1994）
小倉義光、「気象力学通論」、東京大学出版会（1978）
小倉義光、「一般気象学」（第2版）、東京大学出版会（1984）
小倉義光、「メソ気象の基礎理論」、東京大学出版会（1997）
松野太郎、島崎達夫、「成層圏と中間圏の大気」、東京大学出版会（1981）
松田佳久、「惑星気象学」、東京大学出版会（2000）
矢部 孝、他、「パソコンによるシミュレーション物理」、朝倉書店（1992）