8. シミュレーション技法の進歩

武本行正, 阿部芳彦

(名古屋大学プラズマ研究所附属電子計算機センター)

(1985年11月6日受理)

Progress of Methods of Computer Simulation

Yukimasa Takemoto and Yoshihiko Abe

(Received November 6, 1985)

Abstract

Computational studies of plasma physics and fusion theory require advanced techniques of simulation and numerical methods. These techniques are in progress in many fields of computational physics. As examples, the following topics are described ;

- (1) multigrid (MG) techniques of high speed running which enhance the convergence rate of iterative numerical method for solving the discretized equations of Poisson type.
- (2) stable upwind finite-difference and control-volume schemes with the third order accuracy for solving the convection-diffusion equations.

最近のシミュレーション技法の進歩としては、コンピュータの発達(科学技術計算用スーパーコンピュータの出現)に伴うプログラム実行の高速化手法ならびに差分式近似解法における高精度化や任意境界形状処理の導入等の発達が見られる。

この他にも、それぞれの章の分野で種々のシミュレーション技法の進展が見られるが、ここでは上述のいくつかの手法について以下述べてみたい。

1. 多重格子法

差分法の数値計算において、例えば軸対称プラズマの平衡解を得るためにPoisson型のGrad-Shafranov方程式を解く場合など³⁾⁴⁾、方程式の差分化から得られる連立一次方程式は多くの場合SOR法により解かれる。しかし計算の格子点総数が増加すると、急速に収束が遅くなり計算時間の大半をこれに費やすことになる。

この連立一次方程式を高速に解く手法としては、BunemanらによるCyclic Reduction法^{1) 2)}が格子点数 2^N の場合によく用いられ、その他ベクトル計算機向きにOdd・Even法等が簡単に修正が可能のため使用される。ここでは、高速解法の一つとして近頃注目されている多重格子法(Multigrid法、略してMG法)について述べる⁶⁾。

1.1 多重格子法の原理

ある計算領域に対して幾種類かの異なる格子間隔をもつGridを用意して、互いにGrid間で解を行き来させながら細かいGridでの解をより粗いGridでの解により補正するという解法である。このため、格子点数は 2^N に制限されることもなく、かつ何層のGridを用意するかも自由に選択できる利点がある⁵⁾。

Brandtらに従って^{5) 7)}、一般的な非線型方程式

$$\begin{aligned} LU(x) &= F(x) \text{ in } \Omega, \\ AU(x) &= \phi(x) \text{ on the boundary } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1)$$

を考える。ここに U は未知変数、 F と ϕ は領域 Ω と境界値 $\partial\Omega$ 上での既知の関数であり、また L と A は微分オペレータとする。ここで格子を領域 Ω において $G^0, G^1, \dots, G^M$ と0から M 層へと設定する。この時、各層に相当する格子サイズは $h_0 > h_1 > \dots > h_M$ とする。この時の、ある格子 G^K (格子サイズは h_K)上の差分近似式を、

$$\begin{aligned} L^K U^K(x) &= F^K(x) \quad \text{for } x \in G^K, \\ A^K U^K(x) &= \phi^K(x) \quad \text{for } x \in \partial G^K \end{aligned} \quad (2)$$

とする。

1.2 多重格子法の適用

さて、このMG法には、線型と非線型との2種類のモードがBrandtらにより提唱されている。線型問題に使用されるのは、細かい格子での近似解の残差の補正をより粗い格子上で求めていくというCS(the correction scheme)モードである。以下まずこの手法を簡単に述べる。

(1) 線型問題への適用

以下簡単に述べるため、境界上の値は、除外して考えることとする。最も細かい格子 G^M における離散化近似式

$$L^M U^M = F^M \quad (3)$$

を解くことを考える。この格子上である回数繰り返し演算(SOR法やGauss-Seidel法など用いて)を行い、近似解 U^M が求まったと仮定する。次に U に対する補正 V を以下のように導入する。

$$U^M = U^M + V^M \quad (4)$$

その後より粗い格子 G^{M-1} へと移行する。すると差分式は、

$$L^{M-1} V^{M-1} = f^{M-1}, \quad (5)$$

$$f^{M-1} \equiv I_M^{M-1} (F^M - L^M v^M)$$

となる。 f の導出は(4)式に L を作用させれば上式となる。ここで、 v^M は格子 G^M 上での近似解 U^M と等しい。また I_M^{M-1} は G^M から G^{M-1} への補間オペレータである。この G^{M-1} の格子網上で繰り返し演算により近似解 U^{M-1} を求め、これが収束判定を満たさず、収束が遅ければ同様に G^{M-2} へ進む。

$M-1 \geq K \geq 2$ の範囲では、(5)式は、

$$L^{K-1} V^{K-1} = f^{K-1}, \quad (6)$$

$$f^{K-1} \equiv I_K^{K-1} (f^K - L^K v^K)$$

となる。もし、格子 G^1 に到達すると、

$$L^1 V^1 = f^1 \quad (7)$$

が解かれ、そして次に v を次式により計算する。

$$v_{\text{new}}^2 \leftarrow v^2 + I_1^2 v^1 \quad (8)$$

もし格子 G^{K-1} で収束判定が満たされた場合、 v の補正を、

$$v_{\text{new}}^K \leftarrow v^K + I_{K-1}^K v^{K-1} \quad (9)$$

にて行い、 G^K での近似解を補正する。ここに I_{K-1}^K は粗い格子 G^{K-1} から細かい格子 G^K への補間オペレータである。

こうして G^M での収束判定条件に到達する上で上記ステップを繰り返すことになる。

(2) 非線型問題への適用

非線型問題に適用可能なモードは、細かい格子での解そのものをより粗い格子上で直接近似していくというFAS(the full approximation scheme)モードである。

この場合、補正 v^K を求めるかわりに解そのものの近似 u^K を各格子で求めるのに次式

$$u^K = I_{K+1}^K u^{K+1} + v^K \quad (10)$$

を用いるため、(6)式のかわりに

$$L^K U^K = \bar{F}^K \quad (11)$$

$$\bar{F}^K \equiv L^K (I_{K+1}^K u^{K+1}) + I_{K+1}^K (\bar{F}^{K+1} - L^{K+1} u^{K+1})$$

を用いる。 $K=M$ では $\bar{F}^M$ は F^M に等しい。

また、(9)式は(10)(11)の置きかえにより、

$$u_{\text{new}}^{K+1} \leftarrow u^{K+1} + I_K^{K+1} (u^K - I_{K+1}^K u^{K+1}) \quad (12)$$

を用いる [(11), (12)式は(6), (9)式とくらべ添字が+1ずれているが特に意味はない]。

このFASモードのフロー・チャートを図1に示す。この場合の代表的な結果を以下に紹介する。それはStaggered Grid (スタガード・グリッド)での圧力場決定のためのPoisson型方程式の解法に適用した例である。境界条件はNeumann型であるため(Dirichlet型の方がより簡単に収束し, このMG法でも適応性が良い), 良い例ではないかもしれないが, それでもかなり高速化される。最も細かな格子分割は 96×64 , 粗な格子は 3×2 とし, 6層のGridを設定した。表1にSOR法(加速係数1.98), MG法(非ベクトル化), MG法(ベクトル化, Odd-Even法)の3通りの手法のCPU時間比を掲げる。MG法のベクトル化版でSOR法の40倍もの高速化率と成ることがわかる。(武本行正)

図1. Multigridのアルゴリズム

表1. SOR法とMG法の対比

	total cpu (sec)	Poisson eq. (sec)	Poisson eq. 以外	ratio to SOR	grid time (μsec)
SOR * (ω = 1.98) (cyc = 455 ~ 507)	55.473	49.701 (89.6%)	5.4152	1	173.63
MG (non vect) (cyc = 455 ~ 507)	11.634	5.8675 (50.4%)	5.4152	0.1181 (1/8.47)	36.41
MG (vect) (cyc = 455 ~ 507)	2.5219	1.2658 (50.2%)	1.1629	0.02547 (1/39.26)	8.048

SOR, Multigrid scalar/vector の比較 (参考文献7より引用)

参 考 文 献

- 1) O. Buneman : SUIPR Rep. No. 294, Inst. for Plasma Research, Stanford Univ., California (1969).
- 2) R. W. Hockney : Methods in Computational Physics, Vol. 9 (Academic Press Inc., 1970) p. 135.
- 3) 内藤裕志, 武本行正 : 2次元軸対称トーラス平衡コード (EQLAUS 84 コード), KAKEN-84-009 (1985年2月).
- 4) 内藤裕志, 山崎耕造, 武本行正 : 2次元 MHD 安定性解析コード (ERATO 84 コード), KAKEN-84-010 (1985年2月).
- 5) A. Brandt : Math. Computation, Vol. 31, No. 138 (1977) 333.
- 6) H. Lomax (Chairman) : NASA CP-2202 (A Symposium held at Ames Research Center, Moffett Field, California, 1981).
- 7) J. E. Dendy, Jr. : Appl. Math. Comp. 13 (1983) 261.
- 8) 渡辺好夫 : 第16回流体力学講演会講演集 (1984) p. 2.
- 9) J. E. Dendy, Jr. : Black Box Multigrid, J. Comput. Phys. 48 (3) (1982) 366.

2. 差分法の高精度スキーム

近年, 物理現象等によく現われる移流・拡散方程式やナビエ・ストークス方程式 (以下N-S方程式と略記) 等の非線形項の差分近似解法で3次 (Δx^3) 精度の上流差分の有効性が認められるように成ってきた。プラズマ物理関連の数値計算でも差分を用いる場合に, 同様の場面で有効であろうと思われるので以下少し考察することとする。

2.1 高精度スキームの必要性

移流項の卓越した流れのモデリングは元来かなり困難であることがわかっていて。ここで1次元の移流・拡散方程式を考えよう。あるスカラー量 φ について,

$$\varphi_t + (u\varphi)_x = \Gamma \varphi_{xx} + S \quad (1)$$

とし, ここに u は移流流速, Γ は拡散係数, S はソース項である。

ここで (1) 式の Γ と S とが各々ゼロの場合のケース (pure convection) で, u 一定値の場合の無次元時刻 $t = 100$ の初期ステップ形状の変化の計算例を図1に示す¹⁾。クーラン数 $u \Delta t / \Delta x$ は0.5である。この図より1次精度の上流差分は数値拡散効果が入り安定性は良いが物理的に余り意味がない。一方2次や4

次の場合は安定性が悪く成ることがわかる。故に3次とか5次の奇数次精度の上流差分を用いるのが良い。一般的に、

- ① 奇数階の空間導関数(特に移流項のような)に対する差分手法として中心差分は(どんな高次精度でも)不適當である,
- ② これに対して3次精度の上流差分は、安定性も良く計算時必要な格子点の場変数配置もそれ程広がらないので、有効な差分化スキームである,

ことがこれまでに判明してきた。

Details of step convection at $t = 100$.
(a) first-order; (b) second-order; (c) third-order (QUICKEST); (d) fourth-order; (e) fifth-order.

図1. 各種差分スキームの比較(参考文献1より引用)

2.2 3次精度スキームの具体例

3次上流差分スキームで移流項に対する種々のモデリングが行われているが、代表的なスキームを以下紹介する。

(i) Kawamura スキーム

このスキームは2次精度の上流差分において3次の誤差項を取り除いたものと解釈できるスキームで、まず通常の2次精度上流差分を以下のように導入する：

$$\left(u \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_i = \begin{cases} u_i \frac{3\varphi_i - 4\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{2\Delta x}, & u_i > 0 \\ u_i \frac{-3\varphi_i + 4\varphi_{i+1} - \varphi_{i+2}}{2\Delta x}, & u_i < 0 \end{cases} \quad (2)$$

これを絶対値付表示にてまとめて表わせば、

$$\begin{aligned} \left(u \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_i &= u_i \frac{-\varphi_{i+2} + 4\varphi_{i+1} - 4\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{4 \Delta x} \\ &+ |u_i| \frac{\varphi_{i+2} - 4\varphi_{i+1} + 6\varphi_i - 4\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{4 \Delta x} \end{aligned} \quad (3)$$

(3) 式の第1項をテイラー展開して,

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{1}{3} (\Delta x)^2 u \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + O((\Delta x)^4)$$

を得, 同様に第2項は,

$$|u| (\Delta x)^3 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + O((\Delta x)^5)$$

となるので, (3) 式の誤差は $O((\Delta x)^2)$ である。したがってもう1次精度を上げるため第1項を

$$u_i \frac{-\varphi_{i+2} + 4\varphi_{i+1} - 4\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{4 \Delta x} \rightarrow u_i \frac{-\varphi_{i+2} + 8\varphi_{i+1} - 8\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{12 \Delta x}$$

におきかえる。するとこの式のテイラー展開は

$$u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + O((\Delta x)^4)$$

となるので, このスキームの誤差は $O((\Delta x)^3)$ で, その係数に短かい範囲においての拡散 (短波長の damping 効果をもつ) 項となる4階の導関数をもつ。

本スキームの最終形は以下の式となる³⁾:

$$\begin{aligned} \left(u \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_i &= u_i \frac{-\varphi_{i+2} + 8\varphi_{i+1} - 8\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{12 \Delta x} \\ &+ |u_i| \frac{\varphi_{i+2} - 4\varphi_{i+1} + 6\varphi_i - 4\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}}{4 \Delta x} \end{aligned} \quad (4)$$

なお本スキームは保存形でないところが少し欠点といえよう。

(ii) QUICK スキーム

B.P. Leonard の提唱^{1) 2)}による本スキームはコントロール・ボリューム法での3次精度スキームで風上側 (上流側) に1点追加した各コントロール・ボリューム面で放物線内挿を用いるものである⁴⁾。保存形にした移流項をコントロール・ボリュームで積分する (図2参照)。:

$$\int_{\ell}^r \left(\frac{\partial u \varphi}{\partial x} \right)_i d\xi = u_r \varphi_r - u_{\ell} \varphi_{\ell} (\equiv J) \quad (5)$$

ここに,

$$\begin{aligned} u_r &= \frac{1}{2} (u_{i+1} + u_i) \\ \varphi_r &= \frac{1}{2} (\varphi_{i+1} + \varphi_i) - \frac{(\Delta x)^2}{8} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)_r \end{aligned}$$

図2. 格子点配置

と φ の値については、放物線内挿を行う。すなわち風向きにしたがい、

$$CURV_r = \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)_r = \begin{cases} (\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}) / (\Delta x)^2, & u_r > 0 \\ (\varphi_{i+2} - 2\varphi_{i+1} + \varphi_i) / (\Delta x)^2, & u_r < 0 \end{cases} \quad (6)$$

したがって、最終的な差分近似式は(6)式を $CURV_r$ と表記すれば、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u \varphi}{\partial x} \right)_i &= \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1} + u_i) \left[\frac{1}{2} (\varphi_{i+1} + \varphi_i) - \frac{(\Delta x)^2}{8} CURV_r \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\Delta x} (u_i + u_{i-1}) \left[\frac{1}{2} (\varphi_i + \varphi_{i-1}) - \frac{(\Delta x)^2}{8} CURV_\ell \right] \end{aligned} \quad (7)$$

となる。 $CURV_\ell$ は(6)式を i 方向に -1 ずらせばよい(図3参照)。

次に本スキームの精度を少し考察しよう。

u 一定かつ $u > 0$ で考えると(3)式より、

$$\frac{J}{u \Delta x} = \frac{\varphi_r - \varphi_\ell}{\Delta x}$$

が得られ、これは i のまわりにテイラー展開することによって、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{1}{24} (\Delta x)^2 \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} + O((\Delta x)^4) \quad (8)$$

となる。一方、QUICK法で $u > 0$ の

場合には、

$$\begin{aligned} \varphi_r &= \frac{1}{2} (\varphi_{i+1} + \varphi_i) - \frac{1}{8} (\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}) \\ \varphi_\ell &= \frac{1}{2} (\varphi_i + \varphi_{i-1}) - \frac{1}{8} (\varphi_i - 2\varphi_{i-1} + \varphi_{i-2}) \end{aligned}$$

であるから

Quadratic upstream interpolation

図3. QUICK法による上流放物線内挿

$$\varphi_r - \varphi_l = \frac{1}{2} (\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}) - \frac{1}{8} (\varphi_{i+1} - 3\varphi_i + 3\varphi_{i-1} - \varphi_{i-2})$$

より同様にテイラー展開から $(\varphi_r - \varphi_l)/\Delta x$ は,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{1}{24} (\Delta x)^2 \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} + \frac{1}{16} (\Delta x)^3 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + O((\Delta x)^5) \quad (9)$$

となる。ゆえに(8)と(9)とを比較すれば, QUICK

法の誤差評価は,

$$-\frac{1}{16} (\Delta x)^3 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + O((\Delta x)^5)$$

であるのでコントロール・ボリュームで3次精度であると言える。

さて計算例として, (1) 式で $\Gamma=0$ のケースでソース項 S を図4の下のような分布形で与えた場合, セル・ペクレ数 $P_\Delta = u \Delta x / \Gamma$ は ∞ になる。このケースの定常解を求めるとQUICK法では exact 解と一致するが, 1次精度の上流差分では $P_\Delta = 2$ の計算となることが示される。つまり中心差分での $P_\Delta = 2$ の計算を1次上流差分では行っていることになり, 安定ではあるが誤差が非常に大きい。

図4. QUICK 法と1次上流差分法の比較

(iii) その他の3次精度スキーム

その他に B. P. Leonard の super 上流差分スキーム:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_i &= \lambda \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}}{2 \Delta x} - \frac{\varphi_{i+1} - 3\varphi_i + 3\varphi_{i-1} - \varphi_{i-2}}{6 \Delta x} \right) \\ &\quad + (1 - \lambda) \left(\frac{11\varphi_i - 18\varphi_{i-1} + 9\varphi_{i-2} - 2\varphi_{i-3}}{6 \Delta x} \right), \quad u_i > 0 \\ \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_i &= \lambda \left(\frac{\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}}{2 \Delta x} - \frac{\varphi_{i+2} - 3\varphi_{i+1} + 3\varphi_i - 3\varphi_{i-1}}{6 \Delta x} \right) \\ &\quad + (1 - \lambda) \left(\frac{2\varphi_{i+3} - 9\varphi_{i+2} + 18\varphi_{i+1} - 11\varphi_i}{6 \Delta x} \right), \quad u_i < 0 \end{aligned} \quad (10)$$

が有効であることが M. K. Patel らに示された⁵⁾。また指数関数を用いた locally に exact な差分スキームも考案されている。具体的なスキームのチェックの計算例として(1)式で時間微分の項のない定常の移流・拡散方程式で $S=0$ のケースで $0 \leq x \leq 1$ の範囲で境界条件:

$$\varphi(0) = 0, \quad \varphi(1) = 1$$

を与えた。ペクレ数 $P = u / \Gamma$ は10で格子点数は5である。

図5. 解析解と各種スキームの比較 (参考文献5より引用)

図6. $Re = 1200$ の円柱背後の非定常流線図

図5に解析解に対する各種スキームの比較を示す。Leonardのsuper上流差分スキームは解析解とほぼ同じ ϕ の分布プロファイルが得られ、非常によく合致しているのがわかる。

次にこれら3次精度スキームを非圧縮粘性流のN-S方程式へ応用した例で円柱まわりの流れ場解析例をいくつか述べると、レイノルズ数1200の層流の非定常解と実験値との対比を図6と図7に示す。実験との一致は非常に良好であり、本計算例⁷⁾のスキームはQUICK法を用いている。一方レイノルズ数の高い移流項の卓越した乱流で $Re = 6.7 \times 10^5$ のケースが小川ら⁸⁾によりKawamuraスキームを用いて実施され、乱流の直接シミュレーションの先駆的計算も行われている。

2.3 その他の高精度スキームと今後の展望

通常、流体力学や電磁流体力学でよく用いられるLeap-FrogスキームやLax-Wendroff、2段階Lax-WendroffスキームあるいはAdams-Bathforthスキーム等は全て時間2次精度(Δt)²の手法である。これを3次精度(Δt)³に向上させて時間・空間ともに3次精度のスキームとした方法にQUICKEST法(QUICK with Estimated Streaming Terms)がある¹⁾。クーラン数 $C = u \Delta t / \Delta x$ が0.05で、セル・ペクレ数50のケースで時刻 $T = 100$ のあるステップ形状の計算例を図8に示す。(a)は1次上流差分、(b)は2次上流差分、(c)がQUICKEST法である。exact解との一致は極めて良い。

図7. 渦の長さの幅の時間的変化

図8. QUICKEST法(c)とその他の方法の比較

また J. P. Boris らの提唱した位相誤差を小さくする (Low Phase Error: LPE) 方法としての FCT (Flux Corrected Transport) 法⁹⁾は 2 step の Predictor-Corrector 法で人工粘性 (数値拡散) の効果が入らないようにした巧妙な方法である。これを更に改良して 3 step の LPE 陽解法としたスキームが滝塚¹⁰⁾により提唱された。本法も非常に有望ではないかと思われる。

この他圧縮性流体での高次精度スキームとして TVD (Total Variation Diminishing) スキーム^{11) 12)}が注目されていることを付記する。

参 考 文 献

(武本行正, 阿部芳彦)

- 1) B. P. Leonard: The QUICK algorithm, Computer Methods in Fluids, ed. K. Morgan, C. Taylor and C. A. Brebbia (Pentech Press, 1980) p. 159.
- 2) B. P. Leonard: *Proceedings of the Second National Symposium on NUMERICAL PROPERTIES AND METHODOLOGIES IN HEAT TRANSFER*, ed. T. M. Shih (Hemisphere Publishing Corp., 1983) p. 211.
- 3) 河村哲也: 物理学会誌 40-6 (1985) p. 446.
- 4) Y. Takemoto, Y. Nakamura, H. Yamabe, H. Naitou and Y. Abe: IPPJ-734 (1985).
- 5) M. K. Patel, N. C. Markatos and M. Cross: Int. J. Num. Meth. in Fluids, 5 (1985) 225.
- 6) B. P. Leonard: Computational Techniques in Transient and Turbulent Fluid Flow, Recent Advances in Numerical Methods in Fluids Vol. 2, ed. C. Taylor and K. Morgan (Pineridge Press, 1981) p. 1.
- 7) 武本行正, 中村佳朗: 第17回乱流シンポジウム講演論文集, A-1, 日本流体力学会 (1985).
- 8) S. Ogawa and T. Ishiguro: Technical Report of National Aerospace Laboratory, TR-859T (1985).
- 9) J. P. Boris and D. L. Book: J. Comput. Phys., 20 (1976) 397.
- 10) 滝塚知典: 「MHD 数値計算法の基礎研究」研究報告 (2), 研究集会講演報告集 (1984) p. 97.
- 11) S. R. Chakravarthy and S. Osher: AIAA 85-0363 (1985).
- 12) S. R. Chakravarthy and S. Osher: Large-scale Computations in Fluid Mechanics, Lectures in Applied Mathematics Vol. 22-Part I (1985) p. 57.