



3. 高速プラズマ流を伴う計算機シミュレーションの基礎

三好隆博, 草野完也¹⁾

広島大学大学院理学研究科, ¹⁾独立行政法人海洋研究開発機構地球シミュレータセンター

(原稿受付: 2007年1月11日)

音速やアルヴェン速度を超える高速プラズマ流を伴う現象の理解と予知において計算機シミュレーションは重要な方法論である。しかし、高速流のシミュレーションにおいては、双曲型方程式の不連続解である衝撃波を正確に捉えるための工夫が必要とされる。さらに、大規模な流れの中で衝撃波の内部構造や粒子運動論効果を考察するには、マクロスケールとミクロスケールの相互作用を取り扱うための先進的な計算手法を開発しなければならない。本章では衝撃波捕獲法の基礎から最新の計算手法までを紹介するとともに、流体とプラズマにおけるマルチスケールシミュレーション研究の現状を概説する。

Keywords:

simulation, shock wave, plasma, hydrodynamics, fluid dynamics, magnetohydrodynamics, MHD, TVD, Riemann Solver, numerical scheme, Godunov's method, HLL, HLLC, HLLD, AMR, multiscale simulation, Macro-Microinterlocked simulation, detonation, CIP, PIC

3.1 はじめに

音速やアルヴェン速度など電磁流体における特徴的な速さに比べて速い流れを伴う高速プラズマ現象は、コロナ質量放出や宇宙ジェット、レーザープラズマによる爆縮など、宇宙および実験室プラズマにおける重要な研究対象である。これらの現象は、文字どおりダイナミックな非定常現象であり強い非線形性に支配されているため、その理解と予知にとって計算機シミュレーションはきわめて重要な役割を果たす。

本章では、こうした高速流を伴う流体およびプラズマ現象の計算機シミュレーションを行うために必要な基礎的知識の説明と、シミュレーション技術の紹介を行う。3.2節では衝撃波を数値的に捉えることができる計算スキーム、いわゆる衝撃波捕獲法を構築する上で知っておくべき背景と予備知識を、3.3節では衝撃波捕獲法の基礎から多次元MHD問題など現実的問題に対する応用までを説明する。さらに、大規模流れに現れる衝撃波のようにきわめてスケールの異なる構造の連関が本質的であるマルチスケール現象のシミュレーションについて3.4節で簡単に説明する。

3.2 衝撃波捕獲法の予備知識

3.2.1 衝撃波捕獲法の必要性

衝撃波捕獲法の重要性を理解するために、最も簡単な双曲型方程式であるスカラー線形移流方程式、

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

を考えよう。ここで、 c は定数であり、 u はその形状を保つ

たまま一定速度で風下方向に移流する。つまり、 $u(x, t) = u(x - ct, 0)$ がその厳密解となる。第一式は保存形式、第二式は非保存形式で書かれている。この方程式が高速流にとって重要なことは後ほど説明されよう。

(1)を代表的な時間1次精度の有限差分法であるLax法、

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^n + u_{i-1}^n) - c \frac{\Delta t}{2\Delta x}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n), \quad (2)$$

と2次精度のLax-Wendroff法、

$$u_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^n + u_i^n) - c \frac{\Delta t}{2\Delta x}(u_{i+1}^n - u_i^n),$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x}(u_{i+1/2}^{n+1/2} - u_{i-1/2}^{n+1/2}), \quad (3)$$

を用いて離散化し、数値的に解いてみよう。それぞれのスキームの詳細については[1]などを参照されたい。ここで、 Δt は時間差分幅、 Δx は格子幅、添え字 n と i は時間差分点と空間差分点をそれぞれ表す。図1は矩形波を初期条件とした場合の結果である。これを見ると、Lax-Wendroff法はLax法よりも次数が高いにも関わらず不連続面の後ろに激しい振動を生むことがわかる。厳密解では矩形波の形状は変化しないので、この振動は非物理的な数値振動である。こうした数値振動の原因は、場を離散化したために現れる数値分散の効果にある。一方、精度次数が低いLax法では離散化に伴う数値拡散の効果がより強いため、数値分散による振動は抑えられている。この結果は、不連続な解を扱う場合、差分方程式の精度を単純に上げるだけでは

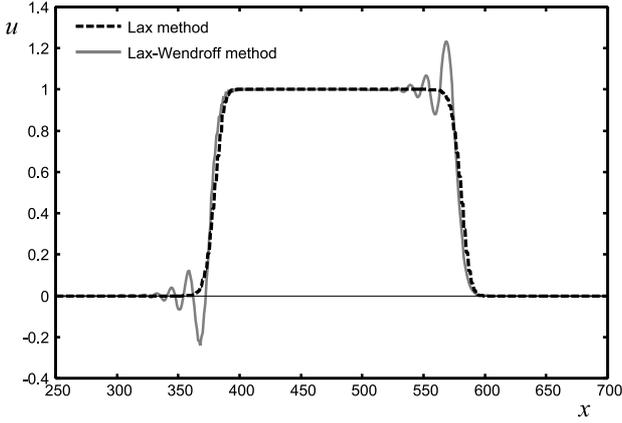


図1 矩形波を初期条件としたスカラー移流方程式の数値解。Lax法(破線)では解の単調性が維持されるが、Lax-Wendroff法(実線)では数値振動が現れる。

正確な解が得られないことを意味している。それゆえ、衝撃波を的確に捉えるためには、新たな方法(衝撃波捕獲法)を導入する必要がある。

3.2.2 特性理論と弱解

流れのダイナミクスを支配する方程式は、しばしば保存則により記述される。議論を簡単にするため、ここではソース項のない1次元保存則、

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

について考える。 \mathbf{U} 、 \mathbf{F} はそれぞれ保存量ベクトル、および流束ベクトルである。例えば、 x 軸に沿った1次元の理想MHD方程式では、

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ B_y \\ B_z \\ e \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p + B^2/2 - B_x^2 \\ \rho uv - B_x B_y \\ \rho vw - B_x B_z \\ B_y u - B_x v \\ B_z u - B_x w \\ (e + p + B^2/2)u - B_x (\mathbf{u} \cdot \mathbf{B}) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

と書ける。ただし、 $\mathbf{u} = (u, v, w)$ 、 $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ であり、 e は全エネルギーである。(4)は非保存形式により、

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + A \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0, \quad A(\mathbf{U}) \equiv \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}}, \quad (6)$$

とも表される。ここで、ヤコビアン A の固有値が独立な実数である場合、(4)および(6)は双曲型方程式となる。オイラー方程式やMHD方程式も双曲型方程式である。この時、 A の左固有ベクトル $\mathbf{l}^{(j)}$ および右固有ベクトル $\mathbf{r}^{(j)}$ を用いると(6)は、

$$\mathbf{l}^{(j)} \cdot \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{l}^{(j)} \cdot A \mathbf{r}^{(j)} \mathbf{l}^{(j)} \cdot \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \frac{\partial w^{(j)}}{\partial t} + \lambda^{(j)} \frac{\partial w^{(j)}}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

と書き換えられる。ただし、 $\lambda^{(j)}$ は A の実固有値である。ここで、 $w^{(j)}$ は特性量と呼ばれ、 $dw^{(j)} = \mathbf{l}^{(j)} \cdot d\mathbf{U}$ と定義される。(7)は情報の伝播速度(特性速度)が $\lambda^{(j)}$ である移流方程式であり、(1)と同様に特性曲線 $dx = \lambda^{(j)} dt$ に沿って $w^{(j)}$ が保存すること($dw^{(j)} = 0$)を示している。後の議論のため(7)をベクトル表示しておく、

$$L \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + L A R L \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0, \quad \Lambda = L A R, \quad (8)$$

となる。ここで、 \mathbf{W} は特性量ベクトル、 L および R はそれぞれ $\mathbf{l}^{(j)}$ 、 $\mathbf{r}^{(j)}$ で構成される左固有行列および右固有行列である。また、 Λ は $\lambda^{(j)}$ を対角成分に持つ固有値行列である。

$\lambda^{(j)}$ が定数の場合、つまり(7)が線形移流方程式である場合、特性曲線は傾き一定の直線となり相互に交わることはない。しかし、 $\lambda^{(j)}$ は一般には定数でなく特性曲線が交差する場合がある。すると、交差点近傍では特性量の値は大きく変化し、結果として交差点では解が不連続になる。すなわち、非線形双曲型の方程式は滑らかな初期条件から不連続解を有限時間で形成する性質を持つ。これが**衝撃波**である。一旦、不連続面が形成されるとそこではもはや微分が不可能となり、微分方程式(4)および(6)は成立しない。そこで無限回微分可能な任意の関数 $\phi(x, t)$ に対し、積分

$$\int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} \right) dx dt = 0, \quad (9)$$

を考える。 $\phi(\pm\infty, t) = 0$ 、 $\phi(x, +\infty) = 0$ の条件の下、(9)は部分積分を用いて、

$$\int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\mathbf{U} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{F} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt + \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x, 0) \mathbf{U}(x, 0) dx = 0, \quad (10)$$

となる。 ϕ は無限回微分可能であるので、(10)は不連続な \mathbf{U} に対しても成立する。(10)を満足する解を(4)の**弱解(weak solution)**という。ただし、解の一意性が消失するため、物理的な解としては別の条件(エントロピー条件)が必要となる[2]。オイラー方程式やMHD方程式においても、特に高速流問題に対して頻繁に衝撃波が形成される。

3.2.3 保存型解法と数値流束

MHD方程式など非線形方程式に対して離散化を行う場合、一般に保存形式(4)と非保存形式(6)では異なる数値解を与える。前者に基づく数値解法を保存型解法、後者による解法を非保存型解法と呼ぶ。真の解が連続である場合、空間格子および時間刻み幅が0の極限では両者は一致する。一方、不連続解が存在する場合、前述したように微分方程式(4)および(6)はもはや成立せず、(10)を解く必要がある。しかし、Lax & Wendroff[3]により、幸いにも保存型解法においては時間空間刻み幅0の極限で解が収束する限り、その解が(4)の弱解であることが示された。逆に、Hou & Le Floch[4]は、衝撃波が存在する場合、もし解が収束したとしても、非保存型解法による解は不正確であるこ

とを示した。したがって、その理論的保証は限定的ではあるが、衝撃波捕獲法としては保存型解法を用いることが望ましい。

方程式の離散化において、一般に**有限差分法**、**有限体積法**、**有限要素法**などが利用される。このうち有限体積法では(4)の積分形式、

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} \right) dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} U dx + F(x_2, t) - F(x_1, t) = 0, \quad (11)$$

を用いるため、衝撃波の捕獲と親和性が高い。また、密度、運動量、エネルギーなど重要な保存量が離散化レベルでも厳密に保存されるという利点がある。さらに、多次元問題に拡張した場合、有限要素法と同様に任意の格子形状に柔軟に拡張可能である。これらのことから、ここでは特に有限体積法に注目する。

図2に有限体積法概念を示そう。有限体積法では離散化された保存量 U_i は(11)の中辺第1項が示すようにセル i 内の平均値と考える。 U_i の時間増加分は、セル境界 $i+1/2$ および $i-1/2$ から流出入する流束 $F_{i\pm 1/2}$ から計算される。しかし、セル境界では物理量 $U_{i+1/2}$ は定義されておらず、流束を $F(U_{i+1/2})$ と与えることはできない。そこで、隣接するセル内の情報からセル境界の流束 $F_{i+1/2}^*$ を数値的に評価する必要がある。 $F_{i+1/2}^*$ は物理的な流束と対比して**数値流束**と呼ばれる。最終的に(11)は、

$$\Delta x \frac{dU_i}{dt} + F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^* = 0, \quad (12)$$

と離散化される。ここで Δx は空間格子幅である。時間積分についてはRunge-Kutta法などが利用できる[5]。有限体積法においては、数値流束 $F_{i+1/2}^*$ の評価方法が数値解法の特性を決定する。

従来の有限差分法は、時空間上に定義された**離散点**(**ステンシル**)の状態量 U_i から、適当な補間関数を使って微分演算子を近似することによって構成される。もし、こうして作られる差分スキームが保存型であるならば、数値流束を適当に定義することで有限差分法を有限体積法として解

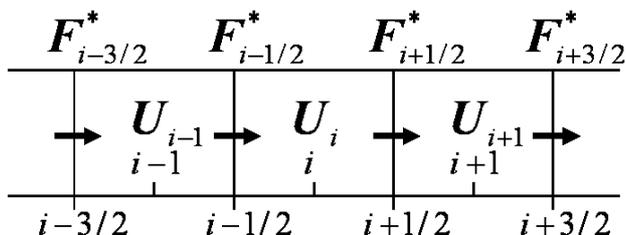


図2 有限体積法の模式図。

*1 例えば、風上差分法(17)と同様に、Lax法(2)の数値流束も、

$$f_{i+1/2}^* = f_i^+ + f_{i+1}^- = \frac{c + (\Delta x / \Delta t)}{2} u_i + \frac{c - (\Delta x / \Delta t)}{2} u_{i+1}$$

と正負の流束に分離できる。

積することもできる。例えば、(4)の最も簡単な差分スキーム、

$$\frac{dU_i}{dt} + \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2\Delta x} = 0 \quad (13)$$

は、数値流束を $F_{i+1/2}^* = (F_{i+1} + F_i)/2$ とした(12)に等しい。ただし、差分スキームが保存型でなければこうした対応を得ることはできない。しかし、有限差分法、有限要素法に基づいて開発される衝撃波捕獲法でも近年では保存型のスキームが採用されることが多く、いずれの手法も有限体積法と同等のスキームに収束しつつある。有限体積法でも時間積分を陽解法によって計算する限り、von Neumannの安定性解析から導かれる**Courant-Friedricks-Lewy(CFL)条件** $\nu \equiv c\Delta t / \Delta x < 1$ を満たす必要がある。ここで、 Δx は最小格子幅、 c は最大特性速度であり、 ν を**クーラン数**と呼ぶ。また、離散化に伴って数値拡散と数値分散が生じる点は有限差分法でも有限体積法でも共通している。

3.3 衝撃波捕獲法

3.3.1 風上差分法

再び、スカラー線形移流方程式(1)に戻り、不連続解を適切に捉える数値流束について考察しよう。この方程式が双曲型のMHD方程式やオイラー方程式と共通した性質を持つことはすでに説明した。(1)の解 u は完全に風上側の状態のみによって決定される。したがって、数値解法でも風上側のステンシルを利用することが望ましい。それゆえ、(1)に対して適切な最低次精度の数値解法は、1次精度の**風上差分法**、

$$\frac{du_i}{dt} + c \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = 0, \quad (c > 0), \quad (14)$$

である。(14)は数値流束 $f_{i+1/2}^*$ を

$$f_{i+1/2}^* = cu_i, \quad (15)$$

と定義するならば、有限体積法、

$$\Delta x \frac{du_i}{dt} + f_{i+1/2}^* - f_{i-1/2}^* = 0, \quad (16)$$

として理解できる。 c の符号によらない一般的な数値流束の定義は、

$$f_{i+1/2}^* = f_i^+ + f_{i+1}^- = \frac{c + |c|}{2} u_i + \frac{c - |c|}{2} u_{i+1}, \quad (17)$$

と与えられる。ここで、 f^\pm は $f = f^+ + f^-$ を満たし、それぞれ正負の固有値 $\partial f^\pm / \partial u = (c \pm |c|)/2$ を持つ流束である*1。したがって、 $f_{i+1/2}^*$ はセル境界に2つの方向から流れ込む流束の和として評価できる(図3(a))。一方、(1)の時間空間保存則から、 $f_{i+1/2}^*$ に別の解釈を与えることができる。(1)の時間空間保存則は、

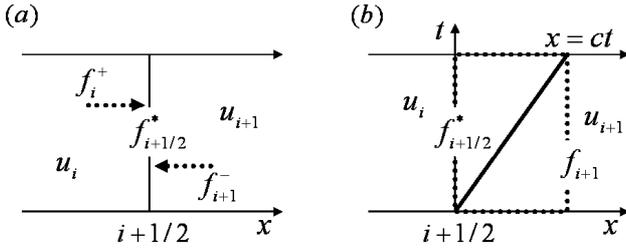


図3 風上差分法に対する数値流束の異なる物理的解釈。

$$\iint \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \right) dx dt = \int (u dx - f dt) = 0, \quad (18)$$

と与えられる。セル内で u_i が一定であると仮定すると、セル境界において状態量の不連続が生ずる。図3(b)に $c > 0$ の場合の模式図を示す。状態 u は厳密に特性曲線 $x=ct$ に沿って移動するので、太い実線の左側では状態 u_i が、右側では状態 u_{i+1} が維持される。ここでセル境界も含む点線に沿った時間空間積分を考えると、

$$c\tau \cdot u_i - c\tau \cdot u_{i+1} + \tau \cdot f_{i+1} - \tau \cdot f_{i+1/2}^* = 0, \quad (19)$$

(τ は任意の時刻) が与えられ、(15)が得られる。(17)ではセル内 i の特性速度 c_i により風上方向を評価しているが、(19)ではセル境界 $i+1/2$ の特性速度 $c_{i+1/2}$ により風上方向を決定している。それゆえ、線形方程式では最終的な数値流束は両者完全に一致するが、非線形方程式では一般に特性速度は一定でないため、2つの数値流束が一致するとは限らないことに注意する必要がある。

ここで、衝撃波捕獲法の観点から1次精度風上差分法の性質を考察しよう。議論を簡単にするため、時間積分法としてオイラー法 ($\partial u / \partial t \approx (u_i^{n+1} - u_i^n) / \Delta t$) を採用すると、(14)は、

$$u_i^{n+1} = |\nu| \frac{1 - \text{sign}(c)}{2} u_{i+1}^n + (1 - |\nu|) u_i^n + |\nu| \frac{1 + \text{sign}(c)}{2} u_{i-1}^n \equiv \sum_{k=-1}^1 C_k u_{i+k}^n, \quad (20)$$

と書ける。ここで、 sign は符号関数である。CFL条件 ($|\nu| < 1$) を満足する時、すべての C_k は正 (非負) であるため、

$$\begin{aligned} u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1} &= \sum_{k=-1}^1 C_k u_{i+1+k}^n - \sum_{k=-1}^1 C_k u_{i+k}^n \\ &= \sum_{k=-1}^1 C_k (u_{i+1+k}^n - u_{i+k}^n), \end{aligned} \quad (21)$$

*2 Lax法(2)は、

$$u_i^{n+1} = \frac{1-\nu}{2} u_{i+1}^n + \frac{1+\nu}{2} u_{i-1}^n$$

と表されるので、すべての C_k は非負である。したがって、図1で見たように単調性が維持される。

*3 離散幅を無限小にしたときに離散スキームが微分方程式に近づくとき、スキームは適合であるという。

*4 Lax-Wendroff法(3)は

$$u_i^{n+1} = -\frac{1}{2}\nu(1-\nu)u_{i+1}^n + (1-\nu^2)u_i^n + \frac{1}{2}\nu(1+\nu)u_{i-1}^n$$

と書ける。第1項の係数は負値をとる。

より単調性 (任意の i について $u_{i+1} > u_i$ あるいは $u_{i+1} < u_i$) が維持されることがわかる*2。したがって、新たな極値は発生しない。また、スキームの適合性*3から $\sum C_k = 1$ なので、

$$\min(u_{i+1}^n, u_i^n, u_{i-1}^n) \leq u_i^{n+1} \leq \max(u_{i+1}^n, u_i^n, u_{i-1}^n) \quad (22)$$

も成立する。つまり、極大値は増加せず、極小値は減少しない。これらの性質は、(1)の性質を正しくを反映しており、結果として不連続近傍においても数値振動を生じさせず、安定な数値解を与える。Laxの同等定理[6]から、適合かつ安定な数値解法の解は真の解に収束し得る。それゆえ、1次精度風上差分法は(1)に対して適切な近似解を与える有効な計算法であるといえる。

3.3.2 TVDスキーム

しかし、実際の応用問題では扱える格子数の制約などから、1次精度風上差分法では不十分であることが多い。したがって、解法の高次精度化は必須である。ところが、Godunovの定理[7]から、「2次以上の高次精度を持つ如何なる線形スキーム (C_k が定数であるスキーム) も解の単調性を維持できない」ことが証明されている。それゆえ、高次の風上差分法では図1のLax-Wendroff法のように非物理的な数値振動が生じる*4。この制約を乗り越えるためには、 C_k の値を状態量に応じて変化させる非線形スキームが必要になる。すなわち、不連続および極値近傍でのみ次数を1次に落とす工夫を行わなくてはならない。

単調性を維持するには、(i)空間において新たな極値が生成せず、(ii)初期条件における極小値が減少せず、極大値が増加しないことが要請される。これらは、全変動(Total Variation)、

$$TV(u^n) = \sum_i |u_{i+1}^n - u_i^n|, \quad (23)$$

が増加しないという条件を満たすことにより実現することができる。それゆえ、単調性維持の十分条件を、

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n), \quad (24)$$

のように表すことができる。これをTVD (Total Variation Diminishing) 条件と呼ぶ。また、(24)を満足するスキームをTVDスキームと呼ぶ[8]。高次精度のTVDスキームを実現するアプローチはいくつかあるが、ここでは代表的な手法を簡単に説明する。

空間方向3点、時間方向1点を利用した最も高次精度のスキームがLax-Wendroff法であることは良く知られている。ただし、図1で見たとおり、Godunovの定理から解の単調性が維持できない。ここで、有限体積法的な観点から、

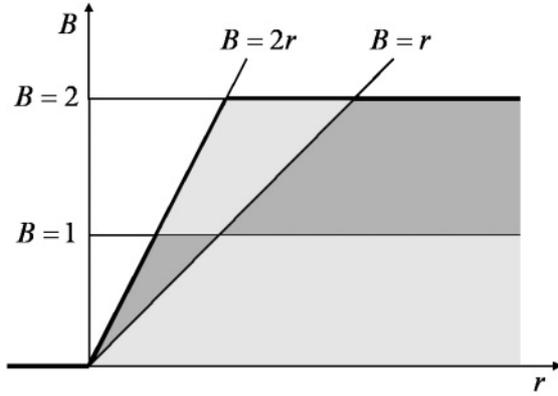


図4 TVD条件を満足する制限関数 B の領域. 特に、濃灰色領域は2次精度.

(1) に対する Lax-Wendroff 法 (3) の数値流束は、

$$f_{i+1/2}^* = c \left[u_i + \frac{1}{2}(1-\nu)(u_{i+1} - u_i) \right], \quad (25)$$

と表される。以降、 $0 \leq \nu \leq 1$ の条件下で議論を進めよう。(15) と比較すると (25) の右辺第2項は1次精度風上差分法に対する補正項とみなすことができる。そこで、**流束制限関数** $B_{i+1/2}$ を導入し、風上差分法と Lax-Wendroff 法を混合した非線形スキーム、

$$f_{i+1/2}^* = c \left[u_i + \frac{1}{2}(1-\nu)B_{i+1/2}(u_{i+1} - u_i) \right], \quad (26)$$

を考える。これを (16) に代入すると、

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{u_{i-1}^n - u_i^n} = \nu \left[1 - \frac{1}{2}(1-\nu)B_{i-1/2} \right] + \frac{1}{2}\nu(1-\nu)\frac{B_{i+1/2}}{r_i},$$

$$r_i \equiv \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}, \quad (27)$$

が得られる。ここでは時間積分法としてオイラー法を用いた。(27) 第一式の左辺が0と1の間であれば、 u_i^{n+1} は u_{i-1}^n と u_i^n の間にあり、数値振動を回避できる。このためには、

$$0 \leq B_{i+1/2} \leq 2, \quad 0 \leq \frac{B_{i+1/2}}{r_i} \leq 2, \quad (28)$$

を満たせば十分である。図4に(28)を満足する $B_{i+1/2}$ の存在領域、つまり TVD スキームの存在領域を示す。極値近傍や流れの振動する領域、すなわち、 $r_i \approx 0$ および $r_i < 0$ では、 $B_{i+1/2} = 0$ が自動的に選択され、1次精度風上差分法に帰着することがわかる。流れの滑らかな領域で精度を向上させるため、様々な流束制限関数が提案されている[9]。

(26) では数値流束を補正することにより高次精度化を実現した。一方、物理量 u を高次補間することにより高次精度化することも可能である。TVD 条件を満たすため、1次精度風上差分法が単調性を維持することに注目し、その性質を妨げない非線形補間法を利用する。すなわち、新たな極値が出現せず、また初期の極値の絶対値が増加しないようセル内分布を再構成する。この手法は **MUSCL 法** (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws)

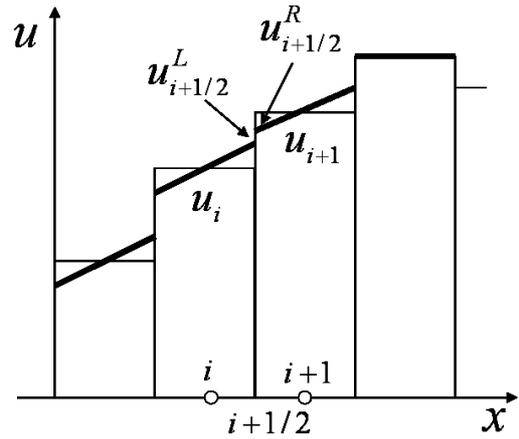


図5 MUSCL法によるセル内の線形分布近似.

[10] と呼ばれ、実際の問題で広く利用されている。1次精度風上差分法ではセル内の物理量分布は一定とした。一方、MUSCL 法では図5のとおり線形(2次精度)または2次曲線(3次精度)で近似する。2次精度の場合、セル境界の左右における物理量は、

$$u_{i+1/2}^L = u_i + \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i, \quad u_{i+1/2}^R = u_{i+1} - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1}, \quad (29)$$

となる。2次精度の数値流束 $f_{i+1/2}^*$ は、 u_i と u_{i+1} に代わり $u_{i+1/2}^L$ と $u_{i+1/2}^R$ から評価される。ここで、セル内勾配 $(\partial u / \partial x)_i$ は、単調性を維持するため制限関数を導入し、セル境界における物理量の大小関係が変わらないよう自動的に調整される。例えば、minmod 関数、

$$\text{minmod}(a, b) = \text{sgn}(a) \cdot \max[0, \min(|a|, \text{sgn}(a) \cdot b)], \quad (30)$$

を用いて、

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{1}{\Delta x} \text{minmod}(u_{i+1} - u_i, u_i - u_{i-1}), \quad (31)$$

と与えることが考えられる。この時、単調な場合は緩やかな勾配が選択されるが、極値では勾配0で1次精度となる。MUSCL 法についても、より解像度の高い様々な制限関数が提案されている[9]。

TVD スキームでは自動的に数値粘性を制御でき、きわめて安定かつ高精度な計算が可能となる。一方で、TVD スキームは非物理的な数値振動が発生する不連続領域だけでなく、滑らかな極値においてもスキームを1次精度に低下させる。それゆえ、特に圧縮性乱流などの研究では、ENO (Essentially Non-Oscillatory) 安定条件[11]、 $TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) + O(\Delta x^r)$ 、など、より上位のTV安定性の概念が提案されており、様々な非振動の高次精度計算スキームが存在する[5, 11, 12]。

3.3.3 非線形システム方程式に対する衝撃波捕獲法

これまで、線形スカラー移流方程式に対する衝撃波捕獲

表1 オイラー方程式とMHD方程式に対する衝撃波捕獲法.

スキーム		オイラー方程式	MHD方程式
Flux-Vector Splitting (FVS) 法		[13-15]	-
Kinetic Flux Vector Splitting (KFVS) 法		[16]	[17]
近似 Riemann 解法 (Godunov 型解法)	Flux Difference Splitting (FDS) 法	[20]	[21, 22]
	Harten-Lax-Van Leer (HLL) 法	[24, 25]	[26]
Advection Upstream Splitting (AUSM) 法		[27-29]	-
CIP 法		[30, 32-37]	[38]

法の重要な基礎を学んできた。ところが、オイラー方程式やMHD方程式など自然界の流れを記述する方程式は一般に非線形であり、また、多変数が連立するシステム方程式である。そのため、前節までに述べた手法をそのままでは適用できない。そこで以下では、非線形システム方程式(4)に対する衝撃波捕獲法について解説する。本節で紹介する解法は表1にまとめられている。

(1)流束ベクトル分離法 (Flux-Vector Splitting 法)

流束ベクトル分離法 (Flux-Vector Splitting: FVS 法) と呼ばれる手法では、流束ベクトル F をそれぞれ正負の固有値を持つ流束 F^+ と F^- に分離し、数値流束 $F_{i+1/2}^*$ を

$$F_{i+1/2}^* = F_i^+ + F_{i+1}^- \tag{32}$$

と評価する。つまり、線形スカラー移流方程式に対する解法(17)と同等のアプローチであり、 $F_{i+1/2}^*$ はセル境界 $i+1/2$ に2つの方向からそれぞれ流れ込む流束の和として評価される。オイラー方程式では、 F は U の1次同次関数で $F = AU$ と表されるので、 A を正負の固有値を持つ行列 A^\pm に分離すると、

$$F = (A^+ + A^-)U = \frac{A^+U}{F^+} + \frac{A^-U}{F^-} \tag{33}$$

と正負の流束が与えられる。ただし、 $\partial F^\pm / \partial U \neq A^\pm$ に注意。 A の分離法は一意ではないが、(8)を思い出し、最も単純には、

$$A^\pm = \frac{R(\lambda \pm |\lambda|)L}{2} = \frac{A \pm |A|}{2}, \quad |A| \equiv R|A|L \tag{34}$$

と定義すればよい。この時、(32)は、

$$F_{i+1/2}^* = \frac{1}{2}(F_i + F_{i+1}) - \frac{1}{2}(|A_{i+1}|U_{i+1} - |A_i|U_i) \tag{35}$$

となる。この計算法は Steger-Warming 法[13]と呼ばれ、オイラー方程式に対する最も基本的な衝撃波捕獲法の一つである。(35)の第1項を中心差分項とすると、第2項は数値粘性項に相当する。ただし、この手法は固有値の符号が切り替わる点 ($u = -c, 0, c$) で F^\pm の微分が不連続になるという欠点を持つ。そこで、Van Leer[14]や Hänelら[15]は F^\pm をマッハ数 M に関する多項式と仮定し、そのヤコビアン $\partial F^\pm / \partial U$ が非負値および非正値のみの固有値を持つような F^\pm を提案した。また、気体運動論の観点から流束ベクトルを分離する Kinetic Flux-Vector Splitting 法 (KFVS 法)[16]も提案されている。

一方、MHD方程式に対するFVS法については未だ大き

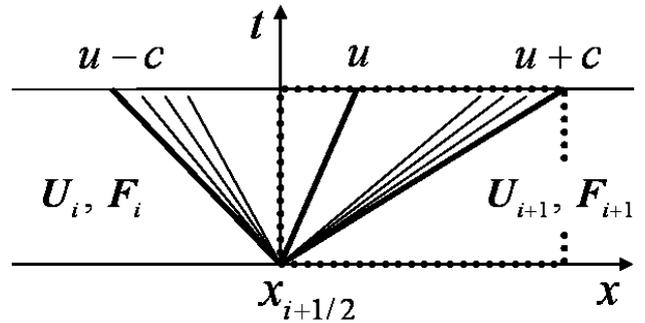


図6 Riemann問題の模式図。特性速度 $u, u \pm c$ で解は自己相似的に広がる。 u においては接触不連続、 $u \pm c$ では衝撃波もしくは扇状膨張波が形成される。

な進展がない。MHD方程式では $F \neq AU$ のため Steger-Warming 法は利用できない。Van Leer 型の手法では流束関数の同次性は要求されないが、機械的に流束を分離することができないため、MHD方程式の流束ベクトルを発見的に分離するにはオイラー方程式に比べきわめて複雑な作業が伴うであろう。MHD方程式に対するKFVS法の基礎的研究[17]は行われているが、安定性や解像度などに議論の余地は多分にある。MHD方程式では流束分離の指標となるマッハ数が複数次定義される。このことが流束分離の困難さや解像度および安定性の低下の一因であると予想される。FVS法の最大の長所は密度および圧力が正の値を保ち続ける正値性を満たすことである[18, 19]。したがって、FVS法は計算手法としてきわめてロバストである。ただし、MHDKFVS法については正値性などに関する詳細な理論的証明と数値的解析はまだ与えられていない。一方で、FVS法では接触不連続や剪断流を正確に解像できないことも知られている。

(2)近似 Riemann 解法 (Godunov 型解法)

FVS法ではセル境界の左右での特性速度により流束の分離を行った。一方、セル境界における特性速度を考慮して衝撃波を安定に解く方法もある。この手法は Godunov 法[7]と呼ばれ、原理的には(19)とまったく同じである。すなわち、セル境界で接する異なる二状態を初期条件とする問題、いわゆる衝撃波管問題 (Riemann 問題) の厳密解から数値流束を評価する。図6にセル境界におけるオイラー方程式に対する Riemann 問題の概念図を示す。固有値 $u \pm c$ に対応する波、すなわち音波に伴い、衝撃波または扇状膨張波 (自己相似的な連続波) が形成される。一方、 u に対応する波、すなわちエントロピー波により接触不連続は伝播する。Riemann 問題の厳密解を $R(x/t; U_i, U_{i+1})$

とすると、セル境界を含む領域 (図 6 点線) の時間空間保存則から、

$$F_{i+1/2}^* = F_{i+1} + \frac{1}{\tau} \int_0^{(u+c)\tau} R(x/\tau; U_i, U_{i+1}) dx - (u+c)U_{i+1} \quad (36)$$

が求められる。保存則の無矛盾性から、 $(u-c)\tau \leq x \leq 0$ における時間空間保存則からも (36) と同様の式が得られる。しかし、オイラー方程式や MHD 方程式は極度に非線形であり、厳密解を得るには Newton 法などの反復計算が必要となる。そこで、厳密解に代わって Riemann 問題のよい近似解を見つけることにより、適切な $F_{i+1/2}^*$ を求めることにする。この計算法は一般に **近似 Riemann 解法** または **Godunov 型解法** と呼ばれる。

最もよく用いられる近似法は局所線形近似である。ここで局所線形化とは、時間差分 Δt の間セル境界を跨いで A を一定とすることに他ならない。特に Roe[20] は、オイラー方程式に対して、線形近似した時間空間保存則、すなわち局所的なジャンプ条件、

$$F_{i+1} - F_i = A_{i+1/2} (U_{i+1} - U_i), \quad (37)$$

を満たすよう A を与えた*5。一旦、 $A_{i+1/2}$ が得られると、セル境界において正負の固有値を持つ波を跨ぐ局所的ジャンプ条件、

$$\begin{aligned} F_{i+1} - F_{i+1/2}^* &= A_{i+1/2}^+ (U_{i+1} - U_i), \\ F_{i+1/2}^* - F_i &= A_{i+1/2}^- (U_{i+1} - U_i), \end{aligned} \quad (38)$$

から、

$$F_{i+1/2}^* = \frac{1}{2}(F_i + F_{i+1}) - \frac{1}{2}|A_{i+1/2}|(U_{i+1} - U_i), \quad (39)$$

が求められる。ここで A^\pm , $|A|$ は (34) で定義される。この計算法を **線形近似 Riemann 解法** あるいは単に **Roe 法** という。流束の差を分離していることから、**流束差分法 (Flux Difference Splitting: FDS 法)** と呼ばれる。(35) と比較すると、数値粘性項である右辺第 2 項が異なる。FDS 法では流束関数の同次性が要求されず、あらゆる双曲型保存則に原理的には適用可能である。しかし、適切な固有ベクトルの計算は一般にはきわめて煩雑である。特に、MHD 方程式では固有ベクトルに特異性が出現するため、固有ベクトルの適切な renormalization が必要となる[21]。Roe の行列 (37) を解く時にも工夫が必要である[22]。FDS 法は FVS 法に比べ接触不連続をよく解像できることが知られる。しかし、一方で、FDS 法は密度および圧力の正值性が破れることが理論的に示されている[23]。特に、MHD 方程式では磁気エネルギーの寄与分から、オイラー方程式より正值性の条件は厳しく、計算が困難な応用問題も多く

*5 スキームの適合性から、 $A_{i+1/2}$ は線形独立な実固有値を持ち、 $U_i = U_{i+1} \equiv U$ の時 $A_{i+1/2} = \partial F / \partial U$ であることが必要である。これらの性質は合わせて **Property U** と呼ばれる。

*6 もし S_R , S_L として CFL 条件の許す最大および最小の速度、 $\pm \Delta x / \Delta t$, を与えた時、(42) は Lax 法 (2) に帰着する。このことから、Lax 法は数値粘性はきわめて大きい、固有値などが未知の方程式に対する足がかりとなる非常に有用な計算法であることが分かる。

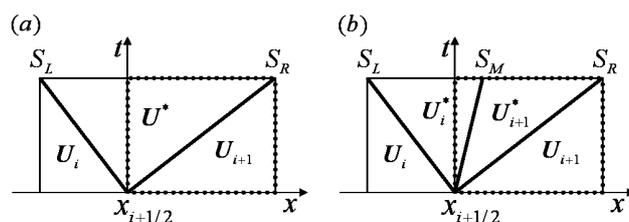


図 7 HLL 型近似 Riemann 解法に対する Riemann fan の模式図。(a)一状態近似 (HLL 法), (b)二状態近似 (HLLC 法)。

存在する。

正值性の維持はきわめて重要な要件であることから、これを保証する新たな近似法の開発も進められた。オイラー方程式における厳密な Riemann 問題 (図 6) の困難さの一つは、扇状膨張波解が存在することにある。そこで、最も速い特性速度 S_R と最も遅い特性速度 S_L に囲まれた領域 (Riemann fan) において、 u を一定と近似することにより、扇状膨張波解を近似解から除去する。こうして得られる近似解法を **HLL (Harten-Lax-Van Leer) 型の近似 Riemann 解法**[24] と呼ぶ。HLL 型解法には様々なバリエーションが考えられるが、最も簡単な HLL 型近似では Riemann fan を単一の状態 U^* と近似する (図 7 (a))。ここで U^* は、Riemann fan における時間空間保存則、

$$(S_R - S_L)U^* - S_R U_{i+1} + S_L U_i + F_{i+1} - F_i = 0, \quad (40)$$

を満たす。数値流束は格子境界を含む時間空間保存則、

$$\begin{aligned} -S_L(U^* - U_i) + F_{i+1/2}^* - F_i \\ = S_R(U^* - U_{i+1}) + F_{i+1} - F_{i+1/2}^* = 0, \end{aligned} \quad (41)$$

から、

$$F_{i+1/2}^* = \frac{S_R F_i - S_L F_{i+1} + S_R S_L (U_{i+1} - U_i)}{S_R - S_L}, \quad (42)$$

と与えられる。ここで S_L および S_R は近似的に、例えば、

$$\begin{aligned} S_L &= \min(u_i - c_i, u_{i+1} - c_{i+1}), \\ S_R &= \max(u_i + c_i, u_{i+1} + c_{i+1}), \end{aligned} \quad (43)$$

と与えればよい。 S_L , S_R の定義については他にも様々な流儀が存在するが、詳細な議論は[25]を参照していただきたい*6。ただし、本手法は非線形の近似法であり、 $F_{i+1/2}^* \neq F(U^*)$ であることに注意する。この手法 (HLL 法) は U , F の詳細によらず非常に単純であり、計算効率も非常に良い。加えて、正值性が理論的に証明されており[23]、きわめてロバストである。MHD 方程式にも当然適用可能である。しかし、一方で、Riemann fan を一状態で近似したため接触不連続を正しく解像することができない。そこでより上位の HLL 型の近似法が検討されている。 u

が一定の条件下では、Riemann fan で加減速が生じないため圧力 p も一定である。一方で、 u が一定であっても密度の不連続、すなわち接触不連続は存在し得る。そこで Riemann fan を二状態、 U_i^* , U_{i+1}^* で近似することを考えよう (図 7 (b))。ただし、速度 $u = S_M$ および圧力 $p = p^*$ は一定とする。この時、Riemann fan の時間空間保存則、

$$(S_R - S_M)U_{i+1}^* + (S_M - S_L)U_i^* - S_R U_{i+1} - S_L U_i + F_{i+1} - F_i = 0, \quad (44)$$

および S_R , S_L を跨ぐジャンプ条件、

$$\begin{aligned} S_R(U_{i+1}^* - U_{i+1}) &= F_{i+1}^* - F_{i+1}, \\ S_L(U_i^* - U_i) &= F_i^* - F_i, \end{aligned} \quad (45)$$

から、解 U_i^* , U_{i+1}^* を代数的に得ることができる。最終的に格子境界を含む時間空間保存則から、数値流束は、

$$F_{i+1/2}^* = \begin{cases} F_i & \text{for } S_L > 0 \\ F_i + S_L(U_i^* - U_i) & \text{for } S_L \leq 0 \leq S_M \\ F_{i+1} + S_R(U_{i+1}^* - U_{i+1}) & \text{for } S_M \leq 0 \leq S_R \\ F_{i+1} & \text{for } S_R < 0 \end{cases}$$

と与えられる。この手法は接触不連続を正しく解像できるため、HLLC 法 (C は Contact discontinuity の頭文字) と呼ばれる [25]。HLLC 法も HLL 法と同じく正値性が理論的に保証されている。また、計算効率も良い。それゆえ、FDS 法の代替として非常に有力である。

一方、MHD 方程式においては u が一定の条件と二状態近似のみの仮定では不十分であるため、HLLC 法は数値流束を一意に決定できない。そこで、 u が一定と無矛盾な四状態で Riemann fan を近似した HLLD 法 (D は Discontinuities の頭文字) が最近著者らにより提案された [26]。HLLD 法が MHD 方程式で表される接触不連続、接線不連続および回転不連続の 3 つの不連続を正しく解像できることは理論的に示されている。また、密度および圧力の正値性もあわせて証明された。さらに、数値実験から、FDS 法と同等の解像度を持つこと、FDS 法に比べ計算効率が良いことも明らかになった。したがって、HLLD 法は FDS 法に代わり、MHD 方程式に対する標準的な衝撃波捕獲法になると期待される。ただし、HLLC 法や HLLD 法は方程式のあらわな表式に依存するため、一般的な双曲型保存則に対する適用可能性は自明でない。

(3) その他の方法

その他にもオイラー方程式に対する風上法はいくつか提案されている。その一つに AUSM (Advection Upstream Splitting Method) 型の計算法 [27-29] がある。AUSM ではオイラー方程式を移流項と圧力項に分割し、個別に風上化をはかる。移流項については単純な風上差分法を適用する。一方、圧力項については、VanLeer の FVS 法と同様に、マッハ数に関する最低次数の多項式により近似する。本手法は直感的な分離法であるが、数値実験からは解像度や計算効率について良好な結果が得られている。ただし、手法の構築、改善を FVS 法からの類推や直感に頼ることから、MHD 方程式に対してはまだ十分に検討されていない。

これまで保存型の風上差分法に基礎をおく衝撃波捕獲法について述べてきたが、我が国で全く独自の手法の開発も進んでいる。矢部らの開発した、いわゆる CIP 法 (Cubic Interpolated Propagation/Constrained Interpolation Profile 法) [30] に属する手法である。CIP 法では物理量の時間発展と同時に物理量の微分値や積分値など複数のモーメントの時間発展も解きすすめる。物理量とそのモーメントによる局所的な高次補間で構成された分布を、セミ・ラグランジュ的に移流させることにより高精度の解を得る。CIP 法の基礎と応用については教科書 [31] をご覧いただきたい。ここでは、CIP 型の解法の主要なものを紹介するにとどめる。オリジナルの CIP 法は非保存型の方程式に基づくため、前節で述べた Hou-Le Floch の定理から、衝撃波のある問題に対しては適切ではない。そこで、保存性を考慮した CIP-CSL 法 [32] が提案されている。また、不連続近傍における数値振動を抑えるため補間関数を有理関数とした RCIP 法 [33] が考案されている。両者を結合した RCIP-CSL 法 [34] もある。また、CIP 法をオイラー形式に拡張した IDO 法 [35] も提案されている。IDO 法では非移流項についても局所補間を利用して微分を評価する。保存型の IDO 法 [36] も開発されている。また最近では、有限体積法と特性理論枠組みを用いた CM^2 -FVM [37] が提案されている。この手法は衝撃波捕獲法と同様に特性理論に基づいており、数値振動は自動的に除去される。MHD 方程式に対しても CIP 法を適用する試みはいくつかあるが、CIP 法と CT 法、MOC 法を組み合わせた CIP-MOCCT 法 [38] は特に宇宙流体力学分野を中心に広く利用されている。

3.3.4 衝撃波捕獲法の多次元化

実際の応用問題は一般に多次元問題である。多次元問題に対しては、通常、局所的に 1 次元問題に分離して各次元順々に時間積分する計算方法 (時間分割法)、空間微分と時間積分を分離し時間積分には安定な高次の Runge-Kutta 法を用いる計算方法のいずれかが用いられる [39]。両手法とも数値流束の評価方法は 1 次元解法に基づく。有限体積法では、ある時刻にセル境界を通して出入りする流束の和により時間変化分を評価すること、また、特に非構造格子の場合、次元分離の概念が明確ではないことから後者の手法が用いられることが多い。実用上はこれらの手法で問題ない。ただし、格子の形状と衝撃波の形が特定の条件を満

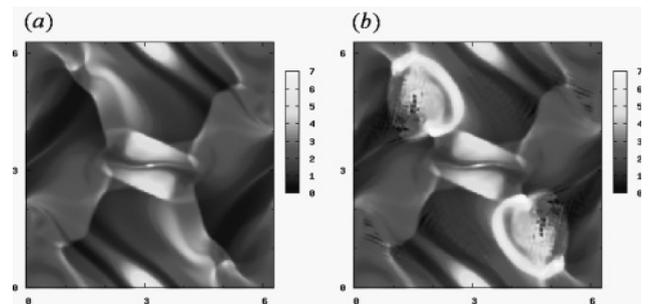


図 8 Orszag-Tang 渦問題 [43] の非線形シミュレーション結果。カラーは圧力を示す。(a) プロジェクション法により $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ を満たすよう磁場を補正、(b) 磁場は無補正。

たす時などに、多次元化した衝撃波捕獲法に特有の数値不安定性が現れることが知られている [40]。これを回避するため、数値不安定性が発生し得る条件を見つけたし部分的に低解像安定な数値流束に変更する手法 [28]、多次元の特性理論に基づいた真性の多次元解法 (genuinely multi-dimensional scheme) [41] などが提案されている。また、MUSCL 法などの高次精度化も、特に非構造格子の場合は、本質的に多次元制限関数の導入が必要となることもある [42]。

さらに MHD 方程式の場合、衝撃波捕獲法の単純な多次元化は一般に数値的な磁場の発散 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ を生成する。衝撃波捕獲法においては、ローレンツ力は保存型の流束、

$$-\nabla \cdot (\mathbf{B}^2/2\mathbf{I} - \mathbf{B}\mathbf{B}) = (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} + \mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{B}), \quad (47)$$

として表されるため、 $\nabla \cdot \mathbf{B} \neq 0$ の場合、非物理的な力が磁場方向に加わる。ここで \mathbf{I} は単位行列。そのため、MHD 方程式に対する多次元衝撃波捕獲法では、磁場のソレノイダル条件 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ の維持に関して特別に考慮する必要がある。実際に、図 8 に衝撃波を伴う渦の非線形発展について、 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ に関する補正を行った場合と無補正の場合の比較シミュレーション結果を示す。無補正の場合、局所的 (特に衝撃波近傍) に生成された数値的な $\nabla \cdot \mathbf{B}$ が解全体に影響を与え、補正を行った場合とまったく異なった結果を導くことがわかる。これまでに数値的な磁場発散の除去手法はいくつか提案されており、**プロジェクション法**、**移流・拡散法**、**CT 法 (Constrained Transport 法)** に大別される [43]。それぞれ一長一短があり未だ決定版はない。ここでは、それぞれの手法の概念を簡単に紹介する。

プロジェクション法では後処理によりソレノイダル条件を満足させる。一般に、ある数値解法で得られた予備的な数値解 \mathbf{B}' は、

$$\mathbf{B}' = \nabla \times \mathbf{A} + \nabla \phi, \quad (48)$$

と分離できる。この時、物理的に意味のある解はソレノイダル条件を満足する部分であると考え、最終的な数値解は、

$$\mathbf{B}^c = \mathbf{B}' - \nabla \phi, \quad (49)$$

と与えられる。ここで ϕ は、 $\nabla \cdot \mathbf{B}^c = 0$ から、

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot \mathbf{B}', \quad (50)$$

を満足する解である。プロジェクション法から得られる解 \mathbf{B}^c は、ソレノイダル条件を満たす \mathbf{B}' に対する最小補正場であること、元の数値解法と同次精度を維持することが証明されている [43]。一方で、毎ステップまたは数ステップ毎にポアソン方程式を解く必要があるため、計算効率はよくない。

移流・拡散法では $\nabla \cdot \mathbf{B}$ の移流や拡散を考慮することにより、 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ をできるだけ小さく抑えるというアプローチをとる。Powell の提案する移流法 [44] およびそれに類する方法 [45] では、 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ に関するソース項が付与された誘導方程式、

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{u}) = -\mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{B}) + D\nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}), \quad (51)$$

の時間発展を解く。ここで両辺の発散をとると、

$$\frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{B})}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{B})] = D\nabla^2(\nabla \cdot \mathbf{B}), \quad (52)$$

となり、 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ が移流拡散方程式に従い時間発展することが直感的に理解できる。ここで、 D は数値的な拡散係数であり、発見的方法により決定される。また、Dedner ら [46] は新たに $\nabla \cdot \mathbf{B}$ に関する線形スカラー方程式を連立させることにより、より効率的な移流拡散法を提案した。補正された誘導方程式および新たな線形スカラー方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{u}) + \nabla \phi &= 0, \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + c_h^2 \nabla \cdot \mathbf{B} &= -\frac{c_h^2}{c_p^2} \phi, \end{aligned} \quad (53)$$

と与えられ、誘導方程式の時間微分と発散をとると、 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ はテレグラフ方程式、

$$\frac{\partial^2(\nabla \cdot \mathbf{B})}{\partial t^2} + \frac{c_h^2}{c_p^2} \frac{\partial(\nabla \cdot \mathbf{B})}{\partial t} - c_h^2 \nabla^2(\nabla \cdot \mathbf{B}) = 0, \quad (54)$$

に従い時間発展することがわかる。(54) は $c_p \rightarrow \infty$ の時は波動方程式、 $c_h \rightarrow \infty$ の時は拡散方程式になる。 $\nabla \cdot \mathbf{B}$ の伝播速度 c_h は完全に数値的なものであり、効率的に $\nabla \cdot \mathbf{B}$ を除去するため、CFL 条件の上限を満たすよう決定される。Powell 法、Dedner 法とも陽的に補正磁場を計算するため計算効率はきわめてよく、また非構造格子への拡張も容易である。しかし、Powell 法は非保存形式のため、正しくジャンプ条件を満足しない場合があることが知られている [43]。一方、Dedner 法は \mathbf{B} に関して保存形式であり、Powell 法の問題は排除できると期待されるが、解が拡散的になるとの議論もある。

CT 法は磁場のソレノイダル条件を丸め誤差の精度で満足するように誘導方程式に対してのみ特別な離散化を用いる手法である。密度、運動量など流体量をセル中心に定義するのに対して、磁場に対してはスタガード格子を採用し、セル境界面の中心に面に垂直な磁場成分を定義する。垂直磁場の時間発展は、ファラデーの法則よりセル境界面を囲む線分における電場の周回積分によって与えられる。ここで、線分には物理量が定義されていないため、電場は隣接セルから評価される。ただし、内挿する物理量やセルに対する重みについては一意ではなく、様々な手法が存在する [38, 43]。磁場以外の流体量については 1 次元衝撃波捕獲法を用いる。CT 法では付加的な式を考慮する必要がなく、また陽的に磁場を計算するため計算効率もよい。しかし、磁場に対して特殊な離散化を用いるため、衝撃波捕獲法との整合性に関して問題がある。また、高次精度化、非構造格子に対する拡張に関しても研究の余地が残る。

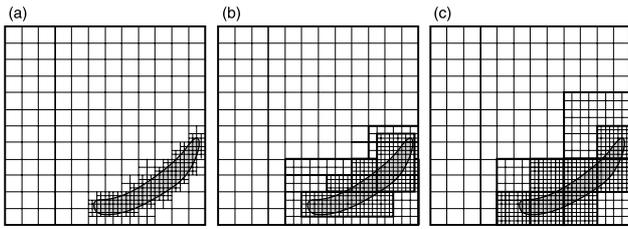


図9 AMR法における様々な格子のとり方. a: 直交非構造格子, b: ブロック構造格子, c: 自己相似型ブロック構造格子

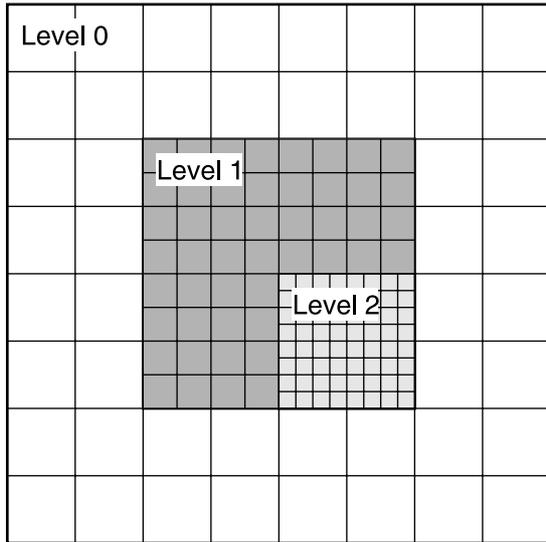


図10 ブロック構造格子における格子のレベルと細分化 (自己相似型の場合).

3.4 マルチスケールシミュレーション

前節までで説明したように高速流を捉える様々な計算スキームが提案されている。しかし、複雑な衝撃波などの局所構造を伴う流れを効率的に捉えるためには、さらに緻密なシミュレーション手法を駆使する必要がある。特に、衝撃波問題では局所的に高い分解能が必要であり、格子点の配置を工夫しなければならない。さらに、燃焼衝撃波や無衝突衝撃波においては、流体力学やMHDの近似そのものが破綻してしまう場合が考えられる。

ここでは、スケールの大きく異なる構造が互いに関連した現象をマルチスケール現象と呼ぶ。それゆえ、マルチスケール問題のシミュレーションでは異なるスケールにそれぞれ適合する格子配置や計算スキームを工夫しなくてはならない。マルチスケール問題に適合するシミュレーション手法の研究開発は、プラズマのみならず多くの分野に共通した重要課題でもある。本節では、こうした時空構造の極端な変化を伴う流れを扱うための方法について概説する。

3.4.1 適合細分化格子 (AMR)

有限差分法、有限体積法、有限要素法など空間を離散化して流体方程式を数値的に解く場合には、格子のとり方が数値解の精度を大きく左右する。格子点密度が十分に高くなくては、いかなるスキームでも流れを正確に捉えることができない。

適合細分化格子 (AMR: Adaptive Mesh Refinement) は解の発展に応じて必要とされる領域により多くの格子を自動的に配置し、効率的に分解能を高める先進的な方法である。様々なAMR法がすでに提案されており、その格子配置は非構造格子と構造格子に大別することができる。非構造格子では三角格子が一般に用いられ、構造格子では直交格子が多く用いられる。非構造格子は複雑な境界条件に一致する形状を作るために都合が良い反面、格子再配置の自由度が大きく、良い格子を作るためには工夫が必要であり、プログラムも複雑になる。一方、構造格子でのプログラムは比較的容易である。

直交格子の張り方は、図9に示す3種類の方式に分類することができる。このうち、Berger & Colella[47]によって提案されたブロック構造格子のアルゴリズムは、以下に示すようにプログラムが容易であるため広く利用されている。さらに、自己相似型ブロック構造格子では細分化された各レベルで同じ形状の格子体を利用するため、実装がやすく、ベクトル計算機における高速化にも都合が良い。図10のように細分化のレベル ($l=0, 1, 2, \dots$) を持つ構造格子を考えよう。各レベルの格子体は全て矩形領域を占め、高レベルの格子は低レベル格子を $1/r$ に細分化することによって生成される (図10では $r=2$)。もちろん、数値安定性を保つために格子幅 Δx と共に時間格子幅 Δt も細分化されるので、各レベルの格子幅は

$$\Delta x_{(l)} = \frac{\Delta x_{(0)}}{r^l}, \quad \Delta t_{(l)} = \frac{\Delta t_{(0)}}{r^l}, \quad (55)$$

となる。

こうした細分化格子で保存型の方程式 (簡単化のため2次元系) を有限体積法

$$U_{ij}^{n+1} = U_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_{i,j+1/2} - G_{i,j-1/2}), \quad (56)$$

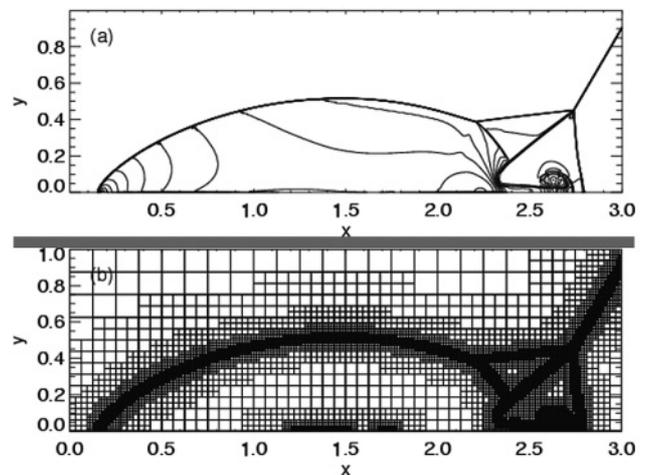


図11 double Mach reflection問題に適用された自己相似型ブロック構造格子AMRにおける密度分布と格子ブロック分布。文献[48]より転載。

に基づいて解く時、その積分は各レベルでのセル境界における数値流束 (F, G) を決めれば、それぞれ独立に実施することができる。ただし、より高レベルの格子の値を優先して採用すると共に、場の保存性を保つことを条件として (56) の値を修正しなければならない。値を修正すべき格子は (i) より高レベルの格子をその領域内に持つ格子と (ii) 領域内に高レベル格子は存在しないが、高レベル格子と境界を接する格子に分類できる。

(i) の場合、 $l-1$ レベル格子の値はその格子を埋め尽くす l レベル格子の値の保存型平均値で単純に置き換えられる。すなわち、

$$U_{i,j,l} := \frac{1}{r^2} \sum_{p=0}^{r-1} \sum_{q=0}^{r-1} U_{k+p,m+q,l+1}, \quad (57)$$

である。一方、(ii) の場合、境界を接する高レベル格子の数値流束の総和を低レベル格子の数値流束として採用する。すなわち、

$$U_{i,j,l}^{n+1} = U_{i,j,l}^n - \frac{\Delta t(l)}{\Delta x(l)} \left(F_{i+1/2,j,l} - \frac{1}{r^2} \sum_{p=0}^{r-1} \sum_{q=0}^{r-1} F_{k+1/2,m+p,l+1}(t+q\Delta t_{l+1}) \right) - \frac{\Delta t(l)}{\Delta y(l)} (G_{i,j+1/2,l} - G_{i,j-1/2,l}), \quad (58)$$

となる。

時間積分 (56) と上記の修正を各格子体で独立に行うためには、各格子体における境界条件を設定する必要がある。このため、高レベル格子体の境界条件は低レベル格子体の計算結果から補間によって与えられる。あるいは、同レベルの格子体が接して存在する場合は、その値を境界条件として用いる。それゆえ、レベル l の格子で時間 t から $t+\Delta t$ への積分が行われる前に、より高レベルの格子の積分が時間 t まで終了している必要がある。その上で、格子体の生成消滅ルールを決めれば AMR の基本アルゴリズムは完成する。ただし、適切に分解能を高めると共に格子の階層性を維持するためのルールには様々なバリエーションが考えられるので、詳細は [47, 48] などを参照されたい。

図11には松本 [48] による自己相似型ブロック構造格子を使った AMR シミュレーションの例を示す。AMR はすでに衝撃波を効率的に捉える方法として広く利用されており、ブロック構造格子を使ったコードとして Enzo [49], RIEMANN [50] などがある。また、自己相似型ブロック構造格子を使ったコードとしては BATSRUS [51], Flash [52], NIRVANA [53] などが有名である。なお、Berger 氏のページ (<http://cs.nyu.edu/cs/faculty/berger/amrsoftware.html>) ではブロック構造格子を使った 2 次元 AMR の Fortran コードが研究用に公開されている。また、AMR に関するサイトのリンク集として <http://flash.uchicago.edu/tomek/AMR/index.html> は役に立つ。

3.4.2 連結階層シミュレーション

第 1 章で学んだように、流れ場の特性長 L に対する平均自由行程 λ であるクヌッセン数が 1 に対して小さいと

き、流体力学は妥当なモデルである。しかし、クヌッセン数が 1 程度以上である希薄気体では微視的な分子運動論的取り扱いが必要になる。高速流体における衝撃波の厚さは λ 程度であるので、衝撃波の内部構造を調べる場合、流体力学的取り扱いだけでは十分でない。すなわち、衝撃波は λ に対して十分大きなマクロスケールの流れ場と、 λ 程度のミクロスケール構造が相互に関連した「マルチスケール現象」と考えることもできる。

こうしたマルチスケール問題では流体計算の精度や分解能をどんなに高めても十分ではなく、分子運動 (MD) モデルやモンテカルロ直接 (DSMC) 法のようなミクロスケールモデルを利用する必要がある。このうち、Bird によって開発された DSMC 法は分子のダイナミクスを相互作用の無い単純運動とモンテカルロ法を使った確率的衝突過程に分離して計算するものである [54]。MD モデルでは複雑な分子間相互作用を計算する必要があるのに対し、DSMC 法では計算をきわめて高速に行うことができるため、流体と MD の中間領域のモデルとして有用である。

しかし、MD や DSMC のようなミクロスケールモデルをマクロスケールまで拡大することは非効率であるのみならず、ほとんど不可能でもある。それゆえ、マルチスケール問題に適合した新しい数学的枠組みや計算方法論の開発が必要となる [55]。こうした目的のため、連結階層シミュレーション (Macro-Micro Interlocked Simulation) [56] や Heterogeneous Multiscale Method [57] など先進的な概念が近年、提案されている [58]。これらは、ミクロスケールで

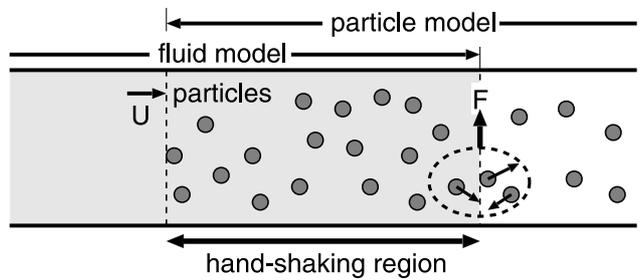


図12 流体モデルと粒子モデルの連結アルゴリズム。

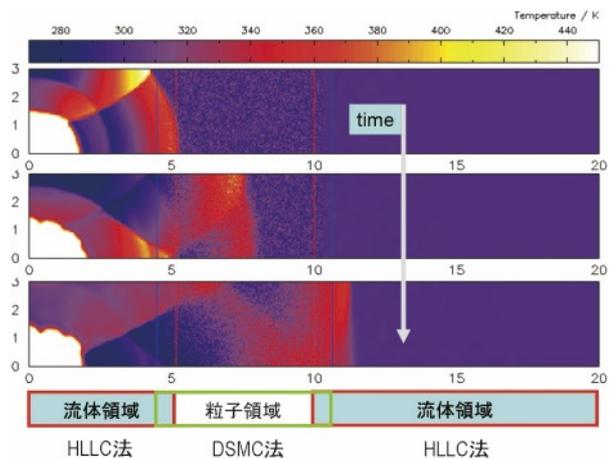


図13 デトネーションの連結階層シミュレーション。

の計算が必要である時間空間領域(あるいはパラメタ領域)でのみミクロスケールモデルでの計算を行い, これを他の領域を担うマクロスケールモデルの計算と有機的に連結することによって, 計算効率と精度を共に維持する新しい方法である。

流体中での衝撃波問題に関して, Wijesingheら[59]は adaptive mesh and algorithmic refinement (AMAR) と呼ばれる方法を開発している。これは, AMRによって格子サイズの細分化を繰り返し, そのスケールが λ 程度に達した段階で, 計算アルゴリズムを流体モデルからミクロスケールに適合した粒子モデル (DSMC 法) に変更するものである。図12はそのアルゴリズムを示している。まず, 流体モデルと粒子モデルの連結領域では hand-shaking 領域と呼ばれる重複層を置く。それゆえ, 流体領域の境界面は粒子領域内のあるセル境界に対応する。そこで, Δt の間にこのセル境界を横切る粒子によって作られる流束ベクトル F をその定義に従って粒子の速度モーメントから計算し, 流体領域の境界条件として使う。一方, 粒子領域の最外殻セルには流体モデルの流束ベクトル U を再現する新たな粒子を Chapman-Enskog 分布に基づき, 乱数を使って生成する [60]。

こうした流体スキームと粒子スキームの連結シミュレーションは流れの中で粒子運動論を正確に取り扱うことが必要な問題において有用である。例えば, 第1章でも説明されたデトネーション (爆轟) では燃焼衝撃波における急速な発熱反応によって非熱平衡状態が現れやすい。従来の燃焼流体計算ではアレニウスの式によって与えられる反応速度係数を使って反応項が評価されていた。しかし, 非熱平衡状態ではその妥当性が失われてしまう。そこで, 流体スキームの中に粒子スキームを埋め込み, 燃焼衝撃波近傍での粒子運動論を取り込むことができる連結階層シミュレーションが著者らのグループで開発されている。図13はこうして計算された燃焼衝撃波の伝播過程に関する連結階層シミュレーションのテスト結果であり, 衝撃波が HLLC 法による流体モデル領域と DSMC 法による粒子モデル領域の連結層を横切って適切に伝搬していることが示されている [61]。

最近, こうした連結階層手法をプラズマにも応用し, MHD モデルと particle-in-cell (PIC) 法によるプラズマ運動論モデルを連結したモデルも開発されている [62]。この方法はプラズマの運動論を, 大規模な流れ場の中で自己完結的に計算することを可能にするため, コロナ質量放出 (CME) に伴う粒子加速や, 大規模磁場構造のダイナミクスの中での無衝突コネクションなど, 様々なマルチスケールプラズマ現象の研究における強力なツールとなると考えられる。

3.5 まとめ

本章では, 衝撃波を中心として高速流のシミュレーション手法について, その基礎から最新の研究までを紹介した。流体シミュレーションの発展を受けて, 高速プラズマシミュレーションのアルゴリズム開発は現在急速に進展し

つつあり, 様々な新しい提案がなされ続けている。今やシミュレーションはプラズマ研究に不可欠の研究手段であり, 今後はより現実に近い現象の解析と予知に積極的に利用されていくだろう。この小文が新たにプラズマ流体シミュレーションの研究を始められる方々の一助になれば幸いである。

謝辞

本稿をまとめるにあたり協力していただいた, 松本倫明氏, 河野明男氏, 杉山徹氏に感謝いたします。

参考文献

- [1] 草野完也: 「講座: プラズマ計算機シミュレーション入門 6. MHD シミュレーションの基礎」, プラズマ・核融合学会誌 74, 1030 (1998).
- [2] P.D. Lax, *Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves*, CBMS monograph, (SIAM, Philadelphia, 1973) Vol. 11.
- [3] P.D. Lax and B. Wendroff, *Comm. Pure Appl. Math.* **13**, 217 (1960).
- [4] T.Y. Hou and G.L. Floch, *Math. Comput.* **62**, 497 (1994).
- [5] C.W. Shu and S. Osher, *J. Comput. Phys.* **77**, 439 (1988).
- [6] R.D. Richtmyer and K.W. Morton, *Difference Methods for Initial-Value Problems* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1967).
- [7] S.K. Godunov, *Math. Sbornik* **47**, 271 (1959) (*in Russian*). Translated US Joint Publ. Res. Service, JPRS 7226 (1969).
- [8] A. Harten, *J. Comput. Phys.* **49**, 357 (1983).
- [9] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows* (John Wiley & Sons Inc., Chichester, 1990) Vol. 2.
- [10] B. Van Leer, *J. Comput. Phys.* **32**, 101 (1979).
- [11] A. Harten, B. Engquist, S. Osher and S. Chakravarthy, *J. Comput. Phys.* **71**, 231 (1987).
- [12] G.S. Jiang and C.W. Shu, *J. Comput. Phys.* **126**, 200 (1996).
- [13] J.L. Steger and R.F. Warming, *Comput. Phys.* **40**, 263 (1981).
- [14] B. Van Leer, ICASE Report 82-30 (1982).
- [15] D. Hänel, R. Schwane and G. Seider, AIAA Paper 87-1105 (1987).
- [16] K. Xu, L. Martinelli and A. Jameson, *J. Comput. Phys.* **129**, 48 (1995).
- [17] K. Xu, *J. Comput. Phys.* **153**, 334 (1999).
- [18] J. Gressier, P. Villedieu and J.-M. Moschetta, *J. Comput. Phys.* **155**, 199 (1999).
- [19] T. Tang and K. Xu, *Math. Phys.* **50**, 258 (1999).
- [20] P.L. Roe, *J. Comput. Phys.* **43**, 357 (1981).
- [21] M. Brio and C.C. Wu, *J. Comput. Phys.* **75**, 400 (1988).
- [22] D.S. Balsara, *Astrophys. J. Sup.* **116**, 119 (1998).
- [23] B. Einfeldt, C.D. Munz, P.L. Roe and B. Sjogreen, *J. Comput. Phys.* **92**, 273 (1991).
- [24] A. Harten, P.D. Lax and B. van Leer, *SIAM Rev.* **25**, 35 (1983).
- [25] P. Batten, N. Clarke, C. Lambert and D.M. Causon, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* **18**, 1553 (1997).
- [26] T. Miyoshi and K. Kusano, *J. Comput. Phys.* **208**, 315 (2005).
- [27] M.-S. Liou and C.J. Steffen Jr., *J. Comput. Phys.* **107**, 23 (1993).

- [28] Y. Wada and M.-S. Liou, *SIAM J. Sci. Comput.* **18**, 633 (1997).
- [29] K.H. Kim, C. Kim and O.-H. Rho, *J. Comput. Phys.* **174**, 38 (2001).
- [30] T. Yabe and T. Aoki, *Comput. Phys. Commun.* **66**, 219 (1991).
- [31] 矢部 孝, 内海隆行, 尾形陽一: CIP法 (森北出版, 2003).
- [32] T. Yabe, R. Tanaka, T. Nakamura and F. Xiao, *Mon. Wea. Rev.* **129**, 332 (2001).
- [33] F. Xiao, T. Yabe and T. Ito, *Comput. Phys. Commun.* **93**, 1 (1996).
- [34] F. Xiao, T. Yabe, X. Peng and H. Kobayashi, *J. Geophys. Res.* **107**, D22, 4609 (2002).
- [35] T. Aoki, *Comput. Phys. Commun.* **102**, 132 (1997).
- [36] 青木尊之, 今井陽介: 保存型IDO法, 第19回数値流体力学シンポジウム講演論文, A2-5, 1 (2005).
- [37] S. Ii, F. Xiao, *to appear in* *J. Comput. Phys.* (2007).
- [38] T. Kudoh and K. Shibata, *CFD J.* **8**, 56 (1999).
- [39] 藤井孝蔵: 流体力学の数値計算法 (東京大学出版, 1994).
- [40] M. Dumbser, J.-M. Moschetta and J. Gressier, *J. Comput. Phys.* **197**, 647 (2004).
- [41] Y.-X. Ren and Y. Sun, *J. Comput. Phys.* **219**, 391 (2006).
- [42] T.J. Barth and D.C. Jespersen, *AIAA paper* 89-0366, (1989).
- [43] G. Toth, *J. Comput. Phys.* **161**, 605 (2000).
- [44] K.G. Powell, *An approximate Riemann solver for magnetohydrodynamics* (that works in more than one dimension), IC-ASE Report 94-24 (1994).
- [45] P.J. Dellar, *J. Comput. Phys.* **172**, 392 (2001).
- [46] A. Dedner, F. Kemm, D. Kroner, C.-D. Munz, T. Schnitzer and M. Wesenberg, *J. Comput. Phys.* **175**, 645 (2002).
- [47] M.J. Berger and P. Colella, *J. Comput. Phys.* **82**, 64 (1989).
- [48] T. Matsumoto, *Astro-ph/0609105*, (2006).
- [49] M.L. Norman and G.L. Bryan, *Numerical Astrophysics* (Kluwer, 1999) p.19.
- [50] D. Balsara, *J. Korean Astron. Soc.* **34**, 181 (2001).
- [51] W.B. Manchester, T.I. Gombosi, I. Roussev, A. Ridley, D.L. De Zeeuw, I.V. Sokolov, K.G. Powell and G. T'oth, *J. Geophys. Res.* **109**, A02107 (2004).
- [52] B. Fryxell *et al.*, *Astrophys. J. Supl.* **131**, 273 (2000).
- [53] U. Ziegler, *Astron. Astrophys.* **435**, 385 (2005).
- [54] G.A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford University Press, New York, 1994).
- [55] J. Dolbow, M.A. Khaleel and J. Mitchell, *Multiscale Mathematics Initiative: A Roadmap*, PNNL-14966, Pacific Northwest National Laboratory, United States Department of Energy (2004).
- [56] T. Sato, *J. Phys. Conference Series* **16**, . 310 (2005).
- [57] E. Weinan, B. Engquist and Z. Huang, *Phys. Rev.* **B67**, 092101 (2003).
- [58] *Multiscale Modeling and Simulation, Lecture Notes in Computational Science and Engineering* **39** (Edt. S. Attinger, P. Koumoutsakos, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004).
- [59] H.S. Wijesinghe, R.D. Hornung, A.L. Garcia and N.G. Hadjiconstantinou, *J. Fluids Engineering- Transactions of the ASME*, **126**, 768 (2004).
- [60] A.L. Garcia and B.J. Alder, *J. Comput. Phys.* **140**, 66 (1998).
- [61] A. Kawano and K. Kusano, *to be submitted*.
- [62] T. Sugiyama and K. Kusano, *submitted to* *J. Comput. Phys.* (2007).