

# 圧縮性流れのアルゴリズム (II)

## - 離散化方程式の解法 -

東北大学工学部機械航空工学科 大林 茂

### 1 定常問題

高レイノルズ数のナビエ・ストークス方程式の定常解なるものがつねに存在するかどうかは大変に難しい問題である。計算流体力学では工学的立場から、何らかの仮定のもとに定常解があって近似的に現象を記述できると考える。とくに乱流現象については、時間平均をとった方程式に現れるレイノルズ応力の項を平均場の物理量でモデル化し、定常解を求めることが多い。ここでは乱流モデルの問題には触れずに、いわゆるレイノルズ平均をとったナビエ・ストークス方程式を適当なモデルを用いて解くということにしよう。そして流れ場は近似的に定常であるとする。

2次元問題を例にとって、計算面( , )を格子点(  $j, k$  ),  $j = 1, j_{\max}, k = 1, k_{\max}$ で分割する差分法を考えよう。解くべき方程式は一般座標を用いて、

$$F + G = 0 \quad (1)$$

と書ける。ここで  $F, G$  はそれぞれの方向の対流項と粘性項を含むものとする。各格子点上の従属変数の値を  $Q_{j,k}$  と置く。境界(  $j, 1$  ), (  $j, k_{\max}$  ),  $j = 2, j_{\max} - 1$  及び(  $1, k$  ), (  $j_{\max}, k$  ),  $k = 2, k_{\max} - 1$  上で適当な境界条件を与えられているとしよう。このとき求めるべき従属変数の値は、(  $j, k$  ),  $j = 2, j_{\max} - 1, k = 2, k_{\max} - 1$  の範囲となる。これをまとめて解ベクトル  $x$  とおこう。すなわち、

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} Q_{2,2} \\ \vdots \\ Q_{j_{\max}-1,2} \\ Q_{3,2} \\ \vdots \\ Q_{j_{\max}-1, k_{\max}-1} \end{pmatrix} \quad (2)$$

ここで  $F$  ,  $G$  に差分化を施せば , 差分方程式は各格子点上の従属変数同士の関係式として表される。関係式は  $\mathbf{x}$  の非線形関数なので , 何らかの線形化を施せば結果として ,

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (3)$$

と書ける。  $\mathbf{b}$  は境界条件から得られる。  $\mathbf{x}$  ,  $\mathbf{b}$  が  $n$  項列ベクトルのとき ,  $A = (a_{i,j})$  は  $n$  次の正方行列である。

行列  $\mathbf{A}$  が定数行列であれば , 上の式を線形の連立 1 次方程式とみなして解くことにより , 解  $\mathbf{x}$  を求めることができる。実際には行列  $\mathbf{A}$  , ベクトル  $\mathbf{b}$  はともに非線形性から  $\mathbf{x}$  の関数である。しかし , 反復的に前段階の  $\mathbf{x}$  を用いて  $\mathbf{A}$  を計算すれば , そのステップ内で定数行列とみなすことができる。逆にいえば , 非線形性を考慮しつつ上の方程式を解くには , 反復的に解く必要がある。

## 2 反復解法

さて , 行列  $\mathbf{A}$  を定数行列とみなしたときに , 連立 1 次方程式 ( 3 ) が解けるための  $\mathbf{A}$  の条件を調べてみよう。行列  $\mathbf{A}$  の逆行列が存在するとき , 行列  $\mathbf{A}$  は正則であるという。そこで , 行列  $\mathbf{A}$  が正則となるための条件を調べればよい。 1 次元モデル方程式として ,

$$c \frac{u}{x} = \frac{^2u}{x^2} \quad (4)$$

を考える。ここで、 $c, \Delta x > 0$ である。2次精度中心差分を用いると、

$$c \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2 \Delta x} = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} \quad (5a)$$

$$\frac{c}{2 \Delta x} u_{j+1} - \frac{c}{\Delta x^2} u_j + \frac{c}{2 \Delta x} u_{j-1} = 0 \quad (5b)$$

であるから、境界条件を無視すると、

$$\begin{matrix} & & & & 0 & \vdots \\ \ddots & & \ddots & & & u_{j-1} \\ & & -\frac{c}{2 \Delta x} + \frac{c}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} & \frac{c}{2 \Delta x} - \frac{c}{\Delta x^2} & u_j \\ & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & & \ddots & u_{j+1} \\ & & & & & \vdots \end{matrix} = 0 \quad (6)$$

となる。従って1次元では、2次精度中心差分を用いるとき**Aは3重対角行列**となる。ここで、

$$\frac{c \Delta x}{2} \mathbf{A} \quad (7)$$

ならば、

$$|a_{i,i}| \leq \sum_{j=i-1}^i |a_{i,j}| \quad (8)$$

である。このような行列  $A = (a_{i,j})$  を**優対角行列**と呼ぶ。このときすべての  $1 \leq i \leq n$  に

対し狭義の不等式が成り立つならば，行列Aを**狭義優対角**と呼ぶ。

次に既約行列を定義しよう。 $n \times n$ 行列Aが，ある $n \times n$ 置換行列Pによって，

$$PAP^T = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ 0 & A_{2,2} \end{pmatrix} \quad (9)$$

ただし， $A_{1,1}$ は $r \times r$ 小行列， $A_{2,2}$ は $(n - r) \times (n - r)$ 小行列， $1 < r < n$ ，と表せるならば，Aは**可約**であるという。そのような置換行列が存在しないならば，Aは**既約**であるという。Aが可約のとき，行列方程式 $PAP^T x = b$ はxとbも同様に分解して，

$$\begin{aligned} A_{1,1}x_1 + A_{1,2}x_2 &= b_1 \\ A_{2,2}x_2 &= b_2 \end{aligned} \quad (10)$$

と書ける。従って，まず第2の方程式を解き，得られた解 $x_2$ を用いて第1の方程式を解くことができる。このようにして元の行列方程式をより低次の二つの行列方程式に簡約化できることから可約という。一方，行列が既約であれば，行列のどの行や列も非対角要素がすべて0になることはあり得ない。

行列Aが既約かつ優対角行列であるとき，(8)式で少なくとも一つの*i*に対して狭義の不等式が成り立てば，Aを**既約優対角**という。既約優対角行列と狭義優対角行列に対して次の定理が成り立つ<sup>1</sup>。

**定理 1**  $n \times n$ 行列Aが，既約優対角または狭義優対角であれば正則である。さらにAのすべての対角要素が正実数ならば，Aの固有値  $\lambda_i$  は

$$\operatorname{Re} \lambda_i > 0 \quad (1 \leq i \leq n) \quad (11)$$

を満足する。

ここで(6)式を振り返ってみよう。境界条件として、ディリクレ型の境界条件を考える。たとえば流入条件は、通常上流側で変数を指定するのでディリクレ型である。すると、解くべき行列方程式  $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$  は次のように書ける。

$$\begin{array}{ccccccc}
 \frac{2}{x^2} & \frac{c}{2x} - \frac{1}{x^2} & & & 0 & \vdots & \frac{c}{2x} + \frac{1}{x^2} u_1 \\
 \vdots & \ddots & \ddots & & & u_{j-1} & 0 \\
 & -\frac{c}{2x} + \frac{1}{x^2} & \frac{2}{x^2} & \frac{c}{2x} - \frac{1}{x^2} & & u_j & \vdots \\
 & & \vdots & \ddots & \ddots & u_{j+1} & 0 \\
 0 & & & -\frac{c}{2x} + \frac{1}{x^2} & \frac{2}{x^2} & \vdots & -\frac{c}{2x} - \frac{1}{x^2} u_{jmax} \\
 & & & & & u_{jmax-1} & 
 \end{array} = \quad (12)$$

再び(7)式が成り立つとすると、(12)式左辺の行列は、境界で狭義の優対角となり、既約優対角であることがわかる。したがって、上の定理より  $\mathbf{A}$  は正則である。(7)式の左辺で  $c \Delta x / \nu$  をセルペクレ数と呼び、格子間隔に対する対流と粘性の比を表す。セルペクレ数が小さい、すなわち、粘性項が支配的となるような流れ場では、行列  $\mathbf{A}$  は正則となることがわかる。

一方、対流項が支配的であるときは優対角行列になるとは限らない。すなわちモデル方程式(4)で  $\nu = 0$  のとき、中心差分を用いた(6)式では対角要素  $a_{ii} = 0$  である。

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & 0 & \vdots & \\
 \ddots & \ddots & \ddots & & & u_{j-1} & \\
 & -\frac{c}{2x} & 0 & \frac{c}{2x} & & u_j & = 0 \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & u_{j+1} & \\
 0 & & & & & \vdots & 
 \end{array} \quad (13)$$

ここで対流項に1次精度の風上差分を用いると  $a_{ii} > 0$  となり、 $c > 0$  より下三角の優

対角行列となり正則である。

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & 0 & \vdots & \\
 & & & & & u_{j-1} & \\
 \ddots & & \ddots & & & & \\
 & & -\frac{c}{x} & \frac{c}{x} & & u_j & = 0 \\
 & & & \ddots & \ddots & & \\
 & & & & & u_{j+1} & \\
 0 & & & & & \vdots & 
 \end{array} \quad (14)$$

一般に

$$c \frac{u}{x} - c_{j-1/2}^+ \frac{u_j - u_{j-1}}{x} - c_{j+1/2}^- \frac{u_{j+1} - u_j}{x} \quad (15)$$

と近似するとき，TVD条件より， $c_{j\pm 1/2}^\pm = 0$ を得る。このとき，解くべき行列方程式は，

$$\begin{array}{ccccccc}
 & & & & 0 & \vdots & \\
 & & & & & u_{j-1} & \\
 \ddots & & \ddots & & & & \\
 & & -\frac{c_{j-1/2}^+}{x} & \frac{c_{j-1/2}^+ + c_{j+1/2}^-}{x} & -\frac{c_{j+1/2}^-}{x} & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & u_j & = 0 \\
 & & & & & \ddots & \\
 & & & & & u_{j+1} & \\
 0 & & & & & \vdots & 
 \end{array} \quad (16)$$

となり優対角行列である。ここでディリクレ型の境界条件をどこか1箇所で与えれば，境界で狭義の優対角となり，既約優対角行列を得る。従って，TVD差分法を用いたときも正則行列を得ることができる。これに中心差分で評価した粘性項が加わっても同様の議論が成り立つ。

以上1変数のモデル方程式の離散式についてまとめると，中心差分を用いるときには，粘性が支配的な流れ場の場合のみ解くことができる。一方，1次の風上差分法やTVD差分法を対流項に用いると常に解ける。(CFDでは，対流項に中心差

分を用いるとき，数値粘性項と呼ばれる項を加えて，風上差分を形式的に真似て，計算の安定化を図っていることを思い起こそう。)この議論は2次元，3次元の場合にも同様に成り立つ。さらに解くべき行列  $A$  が正則であれば，1次元ならば直接解法によって解けばよいし，2次元，3次元の場合には様々な反復解法を適用し効率的に解を求めることができる。たとえば次のような定理がある<sup>1</sup>。

**定理 2**  $n \times n$  行列  $A$  が既約優対角または狭義優対角であれば，行列方程式  $Ax = b$  に対する点ヤコビ法と点ガウス・ザイデル法は，ともに任意の初期近似ベクトルに対して収束する。

さて，オイラー方程式，ナビエ・ストークス方程式の場合には，密度，運動量，エネルギーの連立方程式となるので，1変数のモデル方程式についての結論をそのまま当てはめることができない。そこで，1次の風上差分または TVD 差分法を用いるものとして，対流項が支配的である流れ場を場合分けして考えてみよう。流れ場が亜音速の場合には，(16) 式の  $c_{j\pm 1/2}^{\pm} > 0$  がブロック小行列となった既約優対角行列となり正則である。また，超音速流ですべてが同じ側の片側差分となる場合も，ブロック三角行列となり正則である。しかし遷音速流の場合には，超音速領域での部分的な片側差分によって既約行列とはならないので，正則であるかどうかは簡単には言えない。従って，対流項が支配的である流れに対しては，定常的な方程式に対する反復解法を構成するのは困難である。

時間発展による陰解法を用いるならば対角要素に  $1/\Delta t$  が加わるので，たとえば TVD 差分法のもとで常に狭義優対角行列となり，正則であることがわかる。このため，非粘性流れや高レイノルズ数流れを計算する場合，通常時間発展法を用いる。例外として，超音速流で剥離のない場合は，時間項なしに効率的に解ける空間進行法がよく用いられる。

### 3 時間発展による定常解

ナビエ・ストークス方程式の数値計算には，反復解法が困難なため，定常解を求めるときも時間発展の方程式が用いられる。時間が十分進み，漸近的に定常状態に

達した解を定常解とみなす。上と同様に2次元問題を例にとると、解くべき方程式は、

$$Q_t + F + G = 0 \quad (17)$$

となる。空間方向の差分化を施すと、前節と同様の記号を用いて、

$$\frac{dx}{dt} = b - Ax \quad (18)$$

とかける。この方程式は、 $x$ に関する連立常微分方程式である。

常微分方程式(18)の安定性を調べるために境界条件を無視して  $b = 0$  とおこう。行列  $A$  の固有値を用いて、連立常微分方程式を  $n$  個の常微分方程式に分解すると、結局次のようなスカラーのモデル方程式を解くことになる。

$$\frac{du}{dt} = u, \quad = R + iI \quad (19)$$

ここで  $\lambda$  は一般に複素数であることに注意しよう。この方程式の解は

$$u(t) = u(0)e^{-\lambda t} \quad (20)$$

である。解  $u(t)$  は、 $R < 0$  ならば、 $t > 0$  で有界となるので、このときこの常微分方程式は安定であるという。これは、 $(R, I)$  の複素平面で虚数軸を含んだ左半平面に相当する(図1)。(14)式や(16)式に定理1を適用す

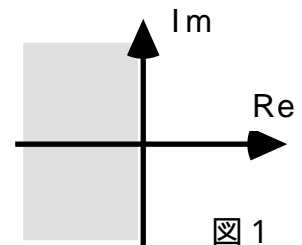


図1

ると行列  $A$  の固有値は正であるから  $dx/dt = -Ax$  の右辺の固有値は負となる。従って、1次の風上差分やTVD差分法のもとで、(18)式は安定な常微分方程式となることがわかる。



次に常微分方程式の数値解法の安定性を定義する。時間方向には、 $n = 1, n_{\max}$ で分割する。 $n$ ステップにおける数値解  $u$  を  $u^n$  と書こう。(19)式をたとえばオイラー陽解法で

$$u^{n+1} - u^n = \tau u^n \quad (21)$$

と離散化する。複素定数  $\lambda$  を用いて

$$u^n = u^0 \lambda^n \quad (22)$$

( $\lambda$  の  $n$ 乗) と書けると、 $|\lambda| \leq 1$  ならば数値解  $u$  は有界である。(22)式から、(21)式の特性方程式は、

$$-1 = \lambda \tau \quad (23)$$

となり、

$$|\lambda| = |1 + \lambda \tau| \leq 1 \quad (24)$$

であれば、オイラー陽解法は安定である。このようにして、常微分方程式の数値計算法の安定性は、特性方程式の根が  $|\lambda| \leq 1$  を満たすような  $\tau$  の範囲で与えられる。これを安定領域と呼ぶ。

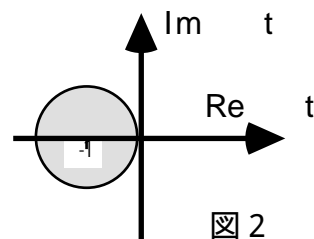
さて、代表的な解法について安定領域を調べてみよう。オイラー陽解法が安定となる  $\tau$  の範囲は、(24)式から、 $\lambda$  が実数ならば、

$$-2 \leq \tau \leq 0 \quad (25)$$

が複素数ならば、

$$= 1 + \tau (\lambda_R + i \lambda_I) \quad (26)$$

より，複素  $t$  平面で  $|t|=1$  となる  $(-1, 0)$  を中心とした半径 1 の円内で与えられる (図 2)。



オイラー陰解法では，

$$u^{n+1} - u^n = tu^{n+1} \quad (27)$$

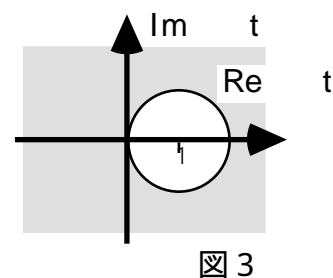
より

$$-1 = t \quad (28)$$

従って

$$= \frac{1}{1-t} \quad (29)$$

これは，複素  $t$  平面で  $|t|=1$  となる  $(1, 0)$  を中心とした半径 1 の円を除く全平面である (図 3)。



クランク・ニコルソン法では，

$$u^{n+1} - u^n = t \frac{u^{n+1} + u^n}{2} \quad (30)$$

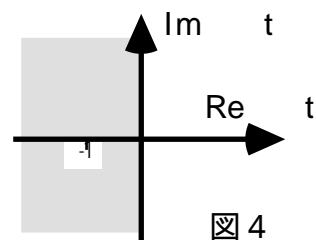
より

$$-1 = t \frac{+1}{2} \quad (31)$$

従って

$$= \frac{2+t}{2-t} \quad (32)$$

これは，複素  $t$  平面で  $\text{Re}(t) < 0$  となる左半平面である (図 4)。ただし，(32) 式はクランク・ニコルソン法の欠点も表している。すなわち， $t = -1$  となるとき  $-1$  となる。つまり， $u^n = (-1)^n u^0$  であり，振動する解と



なって、数値的振動がなかなか減衰しないことを示している。従って、実用計算では、クランク・ニコルソン法はあまり用いられない。

常微分方程式が安定なとき、その数値解法も安定であることが望ましい。そこで、常微分方程式の数値解法の安定領域が、複素  $t$  平面で（虚数軸込みの）左半平面を含むとき、その解法は **A 安定** であるという。一般に、

$$\frac{du}{dt} = f(u) \quad (33)$$

という常微分方程式を

$${}_{j=0}^k u^{n+j} = {}_t^k f(u^{n+j}) \quad (34)$$

ここで、 $k = 0$ 、 $0$  または  $0 = 0$ 、 $j = 0$ 、 $j = j = 1$  と離散化するとき、この方法を線形  $k$  段法と呼ぶ。 $k = 0$  のとき陰解法となる。A 安定な線形多段法について、次の性質が証明されている<sup>2</sup>。

- 定理 3**
- 1 A 安定な線形多段法は、たかだか 2 次精度である。
  - 2 A 安定な陽解法は、存在しない。
  - 3 A 安定な線形多段法の中で、クランク・ニコルソン法が最小の打ち切り誤差を与える。

A 安定な解法は、常微分方程式 (18) を解くのに望ましい性質を持っているが、必ず陰解法となる。一方、陽的に (18) 式を解くには、ルンゲ・クッタ法がよく用いられる。また、予測子・修正子法で MacCormack の陽解法と呼ばれる方法もあるが、この方法は、 $t$  の大きさに対する定常解の依存性が強いので、使う際には十分な注意が必要である。

陽的な方法で定常解を効率よく求めるには、さらに収束加速法を組み合わせる必

要がある。定常解への加速には、多重格子法 (multigrid) や局所時間刻み法 (spacially varying time stepping) と呼ばれる手法がよく用いられている。多重格子法については後で解説する。局所時間刻み法についてここで簡単に触れよう。時間精度を保つには、各格子点上で一様な  $\Delta t$  を用いて全格子点上の値を同時に進めなければならない。しかし時間発展の部分は無視し、定常解では時間  $t$  が無限大で解が  $\Delta t$  によらないとすると、全格子点上の値が一様に進行する必要はない。また、たとえ非粘性流であっても、物体近傍では形状を正しく評価するためにある程度細かい格子を用いるのが常であるから、一様な  $\Delta t$  をとろうとするとかなり小さい値にしなければならない。そこで、各格子点上でそれぞれ安定条件を満たすようにできるだけ大きい  $\Delta t$  をとれば、物体から離れた格子の粗い外部流の領域で解が速く収束するので、全体としても解は速く収束する。この方法は、陰解法に用いても同様なメリットをもつので盛んに用いられている。

上述のような加速方法を用いても陽解法である限り、高レイノルズ数流れを解こうとすると、実際の  $\Delta t$  は、安定条件によって境界層内部の格子間隔の大きさ程度に制限されかなり小さくなってしまふ。そのため多重格子法を用いない限り、定常解を得るためには非常に多くのタイムステップが必要となる。そこで、安定条件を高め  $\Delta t$  を大きくとって少ないタイムステップで定常解を得るために、A 安定な陰解法がよく用いられている。

## 4 陰解法

線形多段法のうち 1 段 法を考えよう。0  $\theta$  1 として、前節と同様に適当な線形化のもとに

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t} + [A^{n+1}x^{n+1} - (1 - \theta)A^n x^n] = b^n \quad (35)$$

と書ける。 $\theta$  が 0 のとき陽解法、 $\theta$  が 1 のときオイラー陰解法となる。ここで、境界条件  $b$  についてはプログラムの簡単化、汎用化のために常に陽的に扱うことにしよう。

この差分方程式は、初期値  $\mathbf{x}^0$  が与えられたとき  $\mathbf{x}^1$  を求め、 $\mathbf{x}^n$  が与えられたとき  $\mathbf{x}^{n+1}$  を求めて時間方向に進んでいく式である。さらに式を変形すると、

$$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{t} + [A^{n+1}\mathbf{x}^{n+1} - A^n\mathbf{x}^n] = \mathbf{b}^n - A^n\mathbf{x}^n \quad (36)$$

右辺は既知の  $\mathbf{x}^n$  に対する空間差分だけの項になるので、右辺で線形化をする必要がない。つまり、使用している空間差分を忠実にとればよい。右辺は定常状態で 0 となるべき量なので、これを残差と呼び  $\mathbf{R}^n$  で表そう。

$$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{t} + [A^{n+1}\mathbf{x}^{n+1} - A^n\mathbf{x}^n] = \mathbf{R}^n \quad (37)$$

$A^{n+1}$  は  $\mathbf{x}^{n+1}$  の関数なので、このままでは  $\mathbf{x}^{n+1}$  を求めるのが大変である。そこで、反復解法と同様に、1ステップ前の  $A^n$  を用いることにしよう。

$$\frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{t} + A^n[\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n] = \mathbf{R}^n \quad (38)$$

ここで、線形化のために、各項の従属変数に対するヤコビアン行列を用いる。このとき、粘性係数等は反復の段階内で定数とみなす。例えば対流項  $F$  について、

$$\begin{aligned} F^{n+1} &= F^n + \frac{F^n}{Q} \frac{Q^n}{t} t + o(t^2) \\ &= F^n + \frac{F^n}{Q} (Q^{n+1} - Q^n) + o(t^2) \end{aligned} \quad (39)$$

と書ける。従って、 $F/Q$  を係数として差分化を施せばよい。この線形化は対

流項の評価を中心差分で行うときにのみ，時間について2次精度を保つことに注意しよう。様々な風上差分やTVD差分法を用いる場合，数値流束は元の対流項と異なり，近傍の点における従属変数の複雑な関数となっている。このため，真のヤコビアンでなく(39)式の  $F/Q$  をそのまま用いる場合，風上差分やTVD差分法に対しては，たかだか1次精度しかない。左辺をまとめると，

$$\frac{\mathbf{I}}{t} + \mathbf{A}^n [x^{n+1} - x^n] = \mathbf{R}^n \quad (40)$$

と書ける。ただし，陰解法では安定性を高めるため  $\lambda = 1$  がよく用いられるので， $\lambda = 1$  とおいた。

ナビエ・ストークス方程式の陰解法は，上の式の左辺の陰解法行列  $[\mathbf{I}/t + \mathbf{A}^n]$  をいかに反転するかということに焦点が絞られる。この行列は，反復解法の節で考えた行列  $\mathbf{A}$  の対角要素に  $1/t$  を加えた形になっている。このため，粘性項に対して常に狭義の対角優位となる。対流項に対しても，TVD条件を満たすような差分化のもとで狭義の対角優位となる。いずれにしても，正則行列を与える。

## 5 陰解法のための反復法

ここで  $\mathbf{M}$  行列を定義しよう。  $n \times n$  行列  $\mathbf{A}$  が正則で，すべての  $i, j$  に対して  $a_{ij} \geq 0$ ，  $\mathbf{A}^{-1} \geq 0$  ( $\mathbf{A}^{-1}$  のすべての要素が非負) であれば，これを  $\mathbf{M}$  行列と呼ぶ。今，TVD差分法を用い，時間項を含んだ形で陰解法行列が狭義優対角であるとしよう。差分の形から，この行列  $\mathbf{A} = (a_{ij})$  は  $a_{ii} > 0$ ，  $a_{ij} \geq 0$  ( $i \neq j$ ) である。このとき次の定理を得る<sup>1</sup>。

**定理 4**  $n \times n$  行列  $\mathbf{A}$  が既約優対角または狭義優対角で，すべての  $i, j$  に対して  $a_{ij} \geq 0$ ，すべての  $1 \leq i \leq n$  に対して  $a_{ii} > 0$  であれば， $\mathbf{A}$  は  $\mathbf{M}$  行列である。

すなわち(40)式の左辺の陰解法行列は  $\mathbf{M}$  行列である。

さて， $n \times n$ 行列  $A$ ， $M$ ， $N$  で  $A = M - N$  とする。 $M$  が正則で， $M^{-1} \geq 0$ ， $N \geq 0$  であるとき，この分離を行列  $A$  の**正則分離** と呼ぶ。この分離は，

$$Mx^{m+1} = Nx^m + b \quad (41)$$

という反復法に対応する。たとえば行列  $A$  を  $A = D - E - F$  のように対角行列，狭義下三角及び狭義上三角行列に分解するとき，次のように選ぶと，(41)式はヤコビ法に，

$$\begin{aligned} M &= D \\ N &= E + F \end{aligned}$$

次のように選ぶとガウス・ザイデル法，

$$\begin{aligned} M &= D - E \\ N &= F \end{aligned}$$

次のように選ぶとSOR法となる ( $0 < \omega < 2$ )。

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{\omega} (D - E) \\ N &= \frac{1}{\omega} [ F + (1 - \omega)D ] \end{aligned}$$

このような分離による反復法に対して次の定理が成り立つ<sup>1)</sup>。

**定理5**  $A = M - N$  を行列  $A$  の正則分離とする。もしも  $A^{-1} \geq 0$  ならば  $M^{-1}N$  は収束行列であり，(41)式の反復法は任意の初期ベクトル  $x^0$  に対して収束する。

すなわち，対流項にTVD差分法を適用すると**M**行列が得られ，その正則分離による反復法は各時間ステップで必ず収束することが分かる。さらには，時間発展的に計算を進めていくとき前ステップの値から反復の初期値として十分よいものを取りることができるので，実際の反復回数も数回程度でよいと言われている。

これまで計算流体力学で用いられてきた差分法は、必ずしも対流項に対して TVD 条件を満たすような差分化をしていないが、ノイマンの線形の安定解析で安定であれば、適当な数値拡散と適当な  $\Delta t$  のもとで実際に行列を反転し、収束解を得ることができる。実際、陰的部分に加えられた数値拡散項は、対流項の差分を一次精度風上差分に近づける役割を果たしている。

ところで、(40) 式はデルタ形式 (delta-form,  $x^n = x^{n+1} - x^n$ ) と呼ばれる形に書かれていることに注意しよう。すなわち、定常方程式の差分化である右辺  $R$  が 0 に収束すると、左辺の行列  $[I / \Delta t + A^n]$  の解き方にかかわらず  $[x^{n+1} - x^n]$  が 0 になるので、収束解の左辺に対する依存性が小さい。たとえば、TVD 法を用いる場合でも、右辺の  $R$  の計算には高次精度の差分を用いるが、左辺の行列には 1 次精度の風上差分を用いることが多い。行列反転は計算時間を必要とするので、左辺はなるべく簡単な行列の方が好ましい。それゆえ高次の数値流束のヤコビアンを取る代わりに、(39) 式の線形化を用いる。しかし、それでは時間方向にたかだか 1 次精度しかないので、左辺の行列内で空間方向に高次の差分をとっても時間精度は変わらずあまり利点がない。したがって、左辺の陰解法行列内では通常、空間方向にも 1 次精度の差分を用いる。左辺の精度を落とすことにより、収束率が多少悪くなるが、それよりも左辺の行列を単純化することにより効率的に行列反転をする方が全体の効率を上げると考えられる。またプログラム作成もはるかに楽である。

また、解の信頼性を損なわずに、左辺の行列に対して様々な近似解法を適用することができる。そこで CFD では、(40) 式に対する反復法を構成するより、反復を必要としない近似的な直接解法を適用する方法が主流である。中でも、AF 法 (近似的因数分解法) は計算の効率化のために広く用いられている。なお、非対称行列に拡張された共役勾配法系の手法は、強力ではあるが全格子点数の何倍もの作業メモリーを必要とするので、CFD の実用計算ではあまり用いられない。

## 6 AF 法 (近似的因数分解法)

陰解法の式 (40) に  $\Delta t$  をかけて、次のように書こう。



$$[I + tA^n][x^{n+1} - x^n] = tR^n \quad (42)$$

ここで、 $A$  を線形化と差分化の作用素と考えよう。さて、 $A$  がより単純な作用素の和で書けたとする。

$$A = B + C \quad (43)$$

このとき、陰解法の式の左辺の行列  $[I + tA]$  は次のように近似的に因数分解できる。

$$I + tA = I + t(B + C) = [I + tB][I + tC] + O(t^2) \quad (44)$$

すると、分解された行列  $[I + tB]$ 、 $[I + tC]$  はもとの行列  $[I + tA]$  に比べ単純な形になるであろう。この考え方をういて行列の反転を効率化するのが A F 法である。例えば、 $B$ 、 $C$  をそれぞれ、方向のみの作用素としよう。基本的に 3 点の中心差分を用いるとき 2 次元ならば、5 点近似となるが、もとの行列  $[I + tA]$  は帯幅約  $2 \times j_{\max}$  のブロック対角行列となる。これに対し、分解された行列  $[I + tB]$ 、 $[I + tC]$  は添字  $j$  と  $k$  の入れ換えによりそれぞれブロック 3 重対角行列となる。そこで、帯幅  $2 \times j_{\max}$  のブロック対角行列を解く代わりにブロック 3 重対角行列を 2 回解けばよい。これが、A D I 因数分解法である<sup>3</sup>。

差分化による係数行列がいくら規則的な帯行列であるといっても、解ベクトル  $x$  は格子点の総数分の要素数を持つため、そのままでは反転すべき行列はかなり大きなものである。帯幅も 1 次元の格子点数分に広がることになる。一方、1 次元の差分化によって得られる係数行列は、対角優位のたかだか 3 重あるいは 5 重対角行列となるので、直接法によって容易に解くことができる。そこで、陰解法には A D I 法が大変有効である。特に上の例のように A F 法（近似的因数分解法）と結びつけてもとの行列を各方向に分解し、結果として得られる各方向の係数行列を L U 分解法などの直接法により解く A D I 因数分解法は、もとの行列を反転するのに比べは

るかに計算を簡略化できるので、現在の計算流体力学の最も代表的な手法となっている。以下では、A D I 因数分解法を単に A D I 法と呼ぶ。

次によく用いられているものが L U 因数分解法である<sup>4</sup>。A D I 法では各方向の 3 重対角行列を L U 分解法などの代数的な方法で解くのが一般である。これに対し、L U 因数分解法では、中心差分 ( $A$ ) を 2 つの片側差分 ( $B + C$ ) で表し、A F 法を適用する。結果として得られた行列  $[I + \tau B]$ 、 $[I + \tau C]$  は、それぞれ対角要素に対して片側だけに非零要素を持つ下三角行列と上三角行列になるので、あらかじめ近似的に L U 分解をした形になっている。従って、一方的に掃き出し計算を行なうだけでよい。

L U 因数分解法 (以下 L U 法と書く) を適用するとき、分解された行列が狭義優対角となって安定に計算が進むために、片側差分 ( $B$ ,  $C$ ) は対流項について本質的に風上差分でなければならない。すなわち、分解された行列が優対角となるためには片側差分による対角要素の係数が常に正となればよいことから、風上差分の係数の取り方と一致することが分かる。そこで、流束分離法と合わせて用いることができる。Steger-Warming の流束分離<sup>5</sup>は簡単なのでよく用いられるが、この方法では固有値の符号が変わるところでは必ずしも風上差分とはならない。このため実際に計算を進めると、単純な L U 分解ではもとの 3 重対角行列に比べ安定性が悪くなってしまうことがある。実際の安定性を改善するために、近似的 L U 分解ではなく、D D A D I 法<sup>6</sup>とも呼ばれる近似的 L D U 分解を用いる手法が提唱されている<sup>7</sup>。もとの行列  $[I + \tau A]$  を下三角要素  $L$ 、対角要素  $D$ 、上三角要素  $U$  の 3 つに分けよう。

$$I + \tau A = L + D + U \quad (45)$$

このとき、近似的 L D U 分解は、次のように書ける。

$$I + \tau A = [L + D]D^{-1}[D + U] + O(\tau^2) \quad (46)$$

誤差の項は  $D^{-1} L U$  であるが、 $L$  と  $U$  のどちらも  $O(\tau)$  の項なのでその積  $O$

( $t^2$ )は無視することができる。解くべき行列は下三角 $[L + D]$ と上三角 $[I + D^{-1}U]$ の2つの行列である。LU法に比べ計算量の増加は、対角要素の逆数 $D^{-1}$ の掛け算だけなのでほとんど無視できる。

LU法やLDU法は、掃き出し計算を行なう際のメモリ - の節約に大変効果的である。また3次元計算のとき、ADI法では3つの3重対角行列を解かねばならないのに比べ、LU法ならば2つの三角行列を解けばよいので計算量も少なくて済む。3次元ではある種のモデル方程式に対してADI法は不安定なスキ - ムとなることが知られているが、LU法ならば安定である。

分解 $A = B + C$ の行い方によって、様々なAFスキ - ムが構成できる。ADI法はそのうちの最もポピュラ - なものの一つにすぎない。例えば、一般に対流項は丁寧に取り扱う必要があるので、対流項と粘性項をAF法によって分けて扱おうとする考え方もできる。また、LU法とADI法を組み合わせるという考え方もある。あるいは、ある方向はLU法で、ある方向はADI法というように部分的に組み合わせることも可能である。一般的に言って、分解を施せば施すほど個々の行列の反転は簡略化される。一方、分解による誤差や掃き出し計算の回数は増えることになる。

こうしたAF法の取り方は、どのようなプログラムを作るかという方針にもよる。それには、どのような計算機を使うのかということが重要である。たとえば、パイプライン方式のス - パ - コンピュ - タ上では、プログラムのベクトル化が大切である。直接法による行列の反転(掃き出し計算)をそのままベクトル化するのは難しい。このため陽解法がよいという意見もあるが、陰解法でも大行列をそのまま直接法によって反転する訳ではないので、必ず何らかのベクトル化が可能である。ADI法を用いるときは、掃き出し計算をするのとは別の方向にベクトル化すればよい。ただ、そうするとベクトル化のために大きなメモリ - を必要とすることが欠点である。LU法を用いるときは、メモリ - の面で有利である。しかし、ベクトル化するためには添字の特別な付け換えによってデ - タを並べ換えなければならない。この意味では、LU法とADI法の両方の利点を取ったLU - ADI法<sup>8</sup>がベクトル化に適した、パイプライン式ス - パ - コンピュ - タ向きのAF法であるといえよう。次節では、代表的なADI法であるBeam-Warming法とその効率化ともいえる

LU - ADI法についてふれてみよう。

## 7 Beam-Warming法とその効率化

Stegerによって一般座標に拡張されたBeam-Warming法<sup>9</sup>はナビエ・ストークス方程式に対する最も代表的な差分法であろう。Beam-Warming法では、空間差分はすべて2次の中心差分をとり、陽に4階の陰に2階の定数係数の数値拡散項を加える。時間差分は、オイラー陰解法で、(39)式のように各項のヤコビアンをとって線形化する。さらに、ADI法を適用して各方向に分解しブロック3重対角行列を解く。差分法のアイデア自体は非常に単純であり、必ずしもBeamとWarmingの独創的な方法であるとはいえないが、計算流体力学の歴史的発展に寄与した影響力を考えれば、Beam-Warming法あるいはBeam-Warming-Steger法と呼ぶのにふさわしい。

簡単のため、対流項のみの定式化を考えよう。実際、粘性項は特別な取り扱いを必要としないし、高レイノルズ数流れでは陽的な部分のみ差分化し、陰計算において省略されることもある。このとき、実質的な安定性もほとんど変わらない。2次元のナビエ・ストークス方程式に対するBeam-Warming法は、

$$\left[ I + \tau A^n \right] \left[ I + \tau B^n \right] Q^n = \tau R^n \quad (47)$$

と書ける。ここで  $Q = Q^{n+1} - Q^n$ ,  $A = F / Q$ ,  $B = G / Q$ , はそれぞれの方向の中心差分作用素である。このBeam-Warming法はTV D差分法より以前に考えられた差分法であるため、線形の安定解析では無条件安定であるが、実際には陰計算部分の2階の数値拡散項のようにかなり強い数値拡散を入れ、さらに適当な  $\tau$  を設定する必要がある。

Beam-Warming法で最も手間がかかる場所は、ブロック小行列の反転の部分である。そこで、次に計算の効率化をはかるために対角化という手法が導入された<sup>10</sup>。この方法是对流項のヤコビアンが対角化可能であることを利用している。すなわち、

$$A = T \Lambda T^{-1}, B = T \Gamma T^{-1} \quad (48)$$

ここで、 $\Lambda$  は固有値からなる対角行列、 $T$  は固有ベクトルからなる変換行列である。これより例えば  $x$  方向について、

$$I + \Delta t A^n = I + \Delta t (T \Lambda T^{-1}) \quad (49)$$

変換行列  $T$  を  $O(\Delta t)$  の誤差を無視して差分の外に出すと、 $I = T \Lambda T^{-1}$  より、

$$I + \Delta t A^n = T [I + \Delta t \Lambda] T^{-1} + O(\Delta t) \quad (50)$$

従って変換行列をかけることを除くと、解くべき行列は4つのスカラーの3重対角行列となる。粘性項については、同じように対角化することはできないので、陰的部分では省略する。なお、物理的な対称面を越えて(50)式に対角化を行う場合、対角化の誤差によって、計算上非対称性が生じることがあるので注意しよう。

対角化によってもともとの線形化に比べ時間精度は落ちるが、デルタ形式の形で書かれているので定常解には影響しない。一方、1ステップあたりの計算量は約半分になる。対角化された計算方法では直接法による行列反転の手間が軽減されているので、3重対角行列の代わりに5重対角行列を容易に解くことができる。5重対角行列の反転を行なうならば、陰的部分にも2階の代わりに4階の数値拡散を入れることができる。右辺の陽的部分と左辺の陰的部分がより一致することにより、2倍から3倍早く収束解を得ることができる<sup>11</sup>。

さて、(50)式で中心差分に換えてSteger-Warmingタイプの流束分離による風上差分を導入しよう。

$$I + \Delta t A^n = T [I + \Delta t (\Lambda^+ + \Lambda^-)] T^{-1} + O(\Delta t) \quad (51)$$

ここで  $\tau$  はそれぞれ後退，前進差分である。（ただし， $F^+ = T^+ T^{-1} Q$ であるが， $F^+ / Q = T^+ T^{-1}$ であることに注意しよう。従ってSteger-Warmingの流束分離法を厳密に陰的に拡張すると，きれいに対角化できず計算時間がかかる。）この（51）式の右辺の行列に前節の近似的LDU因数分解法を適用すれば，改良されたLU-ADI法を得る<sup>12</sup>。メモリ上の節約やベクトル化の容易さに加え，対角化による計算の効率化もできるので，特に3次元大計算などに適した実用的な計算方法である。なお，3次元のADI法は3因子，LU-ADI法は6因子となるが，収束率はほぼ変わらない。近似的LDU分解の誤差による悪影響はないものと考えられる。

## 8 LU-SGS (Symmetric Gauss-Seidel) 法

(46)式で定義されるLDU法は，AF法的一种であるが同時に反復解法とも読みとれることを示そう<sup>7</sup>。1次元の差分式を例に取り，次のように書く。

$$\left[ I + \tau \begin{pmatrix} A^+ & \\ & A^- \end{pmatrix} \right] Q = R \quad (52a)$$

すなわち，

$$-hA^+ Q_{j-1} + (I + hA^+ - hA^-) Q_j + hA^- Q_{j+1} = R_j \quad (52b)$$

ここで， $h = \tau / \Delta x$  とする。(52)式に対し，2段階の対称ガウス・ザイデル (Symmetric Gauss-Seidel) 法は，

$$\begin{aligned} \text{Sweep 1: } & -hA^+ Q_{j-1}^{n+1/2} + (I + hA^+ - hA^-) Q_j^{n+1/2} = R_j^n \\ \text{Sweep 2: } & (I + hA^+ - hA^-) Q_j^{n+1} + hA^- Q_{j+1}^{n+1} = hA^+ Q_{j-1}^{n+1/2} + R_j^n \end{aligned} \quad (53a)$$

と書ける。これを見やすくするため，次のように行列表記に直そう。

$$\begin{aligned} \text{Sweep 1: } (L+D) Q^{n+1/2} &= R^n \\ \text{Sweep 2: } (D+U) Q^{n+1} &= -L Q^{n+1/2} + R^n \end{aligned} \quad (53b)$$

ここで，Sweep 2からSweep 1を差し引くと，

$$(D+U) Q^{n+1} = D Q^{n+1/2}$$

Sweep 1から， $Q^{n+1/2}$ を代入すると，

$$(D+U) Q^{n+1} = D(L+D)^{-1} R^n$$

従って，

$$(L+D)D^{-1}(D+U) Q^{n+1} = R^n \quad (54)$$

となり，対称ガウス・ザイデル法は(46)式のLDU因数分解と同じであることがわかる。(54)式は次の2ステップで解く。

$$\begin{aligned} \text{Step 1: } Q^{n+1/2} &= D^{-1}(R^n - L Q^{n+1/2}) \\ \text{Step 2: } Q^{n+1} &= Q^{n+1/2} - D^{-1}U Q^{n+1} \end{aligned} \quad (55)$$

YoonとJamesonによって提唱された方法<sup>7</sup>では，オイラー方程式に対して(52)式の $A^\pm$ を次のように粗く評価する。

$$A^\pm = \frac{1}{2}[A \pm (A)I] \quad (56)$$

ここで， $A = F/Q$ ， $(A)$ は $A$ のスペクトル半径(最大固有値)を表す。は経験上1.01程度に取るとよい。1より大きい分は，2次の数値粘性あるいは残差平均に対応する。このときブロック対角要素 $D$ は

$$I + hA^+ - hA^- = [1 + h(A)]I \quad (57)$$

となり、スカラーとなる。従って、(55)式の掃き出し計算で $D^{-1}$ の計算はただの割り算となり、実質的に行列反転のない陰解法となる。この方法をLU-SGS法と呼ぶ。

時間進行法では、 $t$ が重要なパラメータである。 $t$ が大きいほど速く収束することが期待される。実際、 $t$ のときには(40)式で左辺の行列 $[I / t + A^n]$ は $A^n$ になり定常方程式に対する反復解法に帰着するが、これはいわばニュートン法であって、適用可能ならば非常に高い収束率が期待できる。ただし遷音速領域では、完全な定常方程式に対する反復解法には困難がある。また、ニュートン法自体収束半径が小さいので実用性には疑問が残る。普通のAF法で $t$ を非常に大きく取ると、定式化のときに $O(t^2)$ の項を無視したので、誤差項の方が支配的となってしまうことになる(3次元では $O(t^3)$ となる)。従って、陰解法とはいえ、AF法で取りうる $t$ には制限がある。 $t$ を非常に大きく取るためには何らかの反復解法であることが望ましい。この意味で、LU-SGS法は反復解法の形をした直接法というユニークな方法である。実際、LU-SGS法は無条件安定であり、 $t$ として定式化し、実用計算に用いられている。ADI法と違って、 $t$ をユーザが格子に応じて指定したり、最適なものを探したりしなくてもよいのは大きな魅力である。

LU-SGS法を近似的LDU分解とみなすとき、(46)式はより丁寧に、

$$I + tA = [L + D]D^{-1}[D + U] + O\left(\frac{t^2}{1 + t}\right) \quad (58)$$

と書ける。 $t$ のときその誤差は、 $O(t)$ となる。従って、ADI法のように誤差が支配的となることはないが、なくなるわけではなく、非対角要素と同程度である。また、(57)式のスカラーである性質を保つためには、リーマン解法や粘性項のヤコビアンを厳密に入れることができない。これらのため、 $t$ としてもニュートン法の2次の収束率が得られるわけではない。LU-SGS法の収



束率は、格子にもよるがADI法と同程度か2, 3倍早い程度である。

LU-SGS法の欠点としては、アスペクト比の非常に大きい格子上で、収束率が多少悪くなることが知られている。それでも計算量そのものが他の陰解法より少ないので、トータルとしては効率的である場合が多い。一方、プログラムを作成する場合、ベクトル化はハイパー面上で容易にできるが、パラレル化は難しい。

また、(56)式におけるスペクトル半径の使用は、非常に強い数値粘性の導入を意味している。参考のため、1次元のLU-ADI法を考えると、

$$A^\pm = T^{-1} \Lambda^\pm T, \quad \Lambda^\pm = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \pm |c| & \\ & \end{pmatrix} \quad (59)$$

と定義する。従って、対角要素は、

$$I + hA^+ - hA^- = I + h|c| \quad (60)$$

となり、各波の特性速度（固有値）に対応した数値粘性が入る。極超音速流れを除き、波の特性速度  $u$ ,  $u + c$ ,  $u - c$  の値は大きくばらつくので、最大固有値を用いる場合、対応しない特性速度に対しては過度の数値粘性が入ることになる。従って、LU-SGS法とLU-ADI法はともに形式上1次精度ではあるものの、LU-SGS法を非定常計算にそのまま使うことはできない。さらに、(59)式では、たとえばすべての特性速度が正であるとき（超音速流れ）、 $\Lambda^+ = \Lambda^-$ ,  $\Lambda^- = 0$  となり、片側上流差分を与えるが、(56)式では、後流差分の影響を完全に打ち消すことができない。（それ故に既約優対角性を残し、 $t$  とできるとも考えられる。）LU-SGS法には、(56)式の取り方を工夫することにより、まだまだ改善する余地がある。なお、LU-ADI法やLU-SGS法はTVD法などと組み合わせるとき、陽解法のルンゲ・クッタ法よりも早い陰解法であることを指摘しておく。

## 9 多重格子法

多重格子法は現在知られている最も強力な反復法の一つである。これまで述べてきた様々な解法と組み合わせて、収束率を改善することができる。3節「時間発展による定常解」の(18)式,  $dx/dt = b - Ax$ , に戻って考えてみよう。ここで  $A = T T^{-1}$  と対角化できたとすると, (18)式の一般解は, 次のように書ける。

$$x(t) = \sum_{i=1}^n C_i e^{-\lambda_i t} T_i + A^{-1} b \quad (61)$$

安定性より右辺第1項の  $-\lambda_i < 0$  ( $1 \leq i \leq n$ ) である。実際, 行列  $A$  が正則であるとする  $\lambda_i > 0$  ( $1 \leq i \leq n$ ) とできる。すなわち,  $t \rightarrow \infty$  のとき右辺第1項は0となって, 定常解  $A^{-1} b$  を得る。そこで,  $t$  を大きく取れば早く収束解が求まるのであった。これは, 指数の肩,  $-\lambda_i t$ , を大きくすることと同値である。従って,  $t$  を変える代わりに,  $\lambda_i$  を変えてもよい。

$\lambda_i$  は波の伝播の波数と同じ意味を持っている。 $\lambda_i$  の大きい高周波の成分は早く減衰し,  $\lambda_i$  の小さい低周波のものはなかなか減衰しない。 $\lambda_i$  は流れ場とともに格子の関数である。従って, 格子を粗くしてやれば, 数値計算上それまで低周波だったものが, 高周波にとらえ直されることになる。こうして粗い格子を用いて, 各周波数成分を効率よく減衰させるのが多重格子法である。

多重格子法のうち, 2重格子法の手順は以下の様に行われる<sup>2</sup>。今, 格子幅  $h$  の格子上で,

$$S_h x_h = R_h \quad (62)$$

という線形問題を解くこととしよう。格子  $h$  上で, ある程度高周波成分の減衰した残差  $R$  が求まっているものとする(通常, 前節までにあげたような解法を1, 2回行えばよい)。まず, 残差  $R_h$  を格子  $h$  より粗い格子  $H$  上に, 制限作用素  $I_h^H$  を用いて移す。

$$\mathbf{R}_H = \mathbf{I}_h^H \mathbf{R}_h \quad (63a)$$

次に粗い格子で問題を解く（厳密に解ければそれに越したことはないが，CFDでは前節までにあげたような解法を2，3回行って厳密解に代用している）。

$$\mathbf{S}_H \mathbf{x}_H = \mathbf{R}_H \quad (63b)$$

そして修正量  $\mathbf{x}_H$  を補間作用素  $\mathbf{I}_H^h$  により格子  $h$  上に移す。

$$\mathbf{x}_h = \mathbf{I}_H^h \mathbf{x}_H \quad (63c)$$

最後に再び格子  $h$  上で何らかの反復を1，2回行えば，2重格子法の1サイクルが完結する。

多重格子法は，この2重格子法を何段にも組み上げることによって得られる。その組み上げ方により，VサイクルやWサイクルと呼ばれる方法がある。また，作用素の取り方にも注意が必要である。非線形問題には，解  $\mathbf{x}_h$  を残差  $\mathbf{R}_h$  とともに2種類の制限作用素を用いて粗い格子に移す，FAS (Full Approximation Scheme)<sup>13</sup> が用いられるが，詳細は文献<sup>14,15</sup>にゆずる。

## 10 前処理法

定常解を求めるときにその途中の解には興味はないので，収束を早めるために時間項に何らかの行列を掛けることを前処理という。前処理付きの数値解法は共役勾配法系の手法で一般的であるが，CFDでは少し異なった意味でよく用いられる。

再び，3節の(18)式から，

$$\mathbf{P}^{-1} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (64)$$

と書くとき， $\mathbf{P}^{-1}$  が前処理行列である。この一般解は，行列表記で書くとき，

$$x(t) = Ce^{-tPA} + (PA)^{-1}b \quad (65)$$

と書ける。 $PA$ の固有値が正で、 $A$ の固有値より絶対値でより大きくなるように（あるいは $PA$ の条件数が1に近くなるように） $P$ を選べば、収束を加速することができる。このように $P$ を選ぶ方法をグローバルな前処理法という。しかし、一般に $A$ の固有値を簡単に求めることはできないので、あらかじめ $P$ を決定して定式化を進めることができない。

(65)式で $P$ が単に対角要素のみであるとき、これは局所時間刻み法の一般化であるとも考えられる。また、 $P$ をブロック対角行列として、局所的に各特性速度に対して異なる $t$ を適用するようにブロック小行列を選ぶと、特性時間刻み法<sup>16,17</sup>を得る。すなわち、ローカルに（局所的に）元の偏微分方程式の性質を利用して前処理法を構成することができる。

そこで、3節(17)式の偏微分方程式に戻り、

$$P^{-1}Q_t + F + G = 0 \quad (66)$$

と置こう。この式を線形化して、 $P$ を掛けると

$$Q_t + (PA)Q + (PB)Q = 0 \quad (67)$$

となる。つまり、以前のヤコビアン $A (= F/Q)$ に代わり、 $PA$ というシステムの性質を考えることになる。ここで $P$ は正則であり、正定符号であることが要求される（実際、 $P$ が正定符号でなくてもよいとき、 $P = -I$ とおくと時間が逆行することになり不自然である）<sup>18</sup>。

$A$ の固有値は、 $u, u, u+c, u-c$ であり、流れ場によるものの一般に大きく異なる。これはブロック小行列の条件数を悪くすることになり、全体の収束を悪くすることになる。そこで、前処理により $PA$ の条件数がよくなると、全体の収束もよくなるであろう。このように $P$ を工夫する局所的な前処理が、CFDではよく

用いられる。

ChoiとMerkleによって提案された方法<sup>19</sup>では、保存変数  $(t, u, v, w, e)$  をいったん  $(t, u, v, w, T)$  に変換する。(3次元計算はまだ行われていないので、将来の参考のため3次元一般座標で書く。)このときヤコビアン行列  $A_v$  は次のような形となる。

$$A_v = \begin{pmatrix} \hat{U}/T & & & & -\hat{U}/T \\ x + u\hat{U}/T & x & y & z & -u\hat{U}/T \\ y + v\hat{U}/T & x & y + \hat{U} & z & -v\hat{U}/T \\ z + w\hat{U}/T & x & y & z & -w\hat{U}/T \\ -t + H\hat{U}/T & x & y & z & -\hat{U}/T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u + \hat{U} \\ v \\ w \\ H + u\hat{U} \\ H + v\hat{U} \\ H + w\hat{U} \end{pmatrix} \quad (68)$$

ここで、 $H = (e + p)/b$ 、 $\hat{U} = t + x u + y v + z w$ 、 $b = (u^2 + v^2 + w^2)/2$  である。変換された方程式に対して、次の前処理を施す。

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ bu & & 0 & 0 & 0 \\ bv & 0 & & 0 & 0 \\ bw & 0 & 0 & & 0 \\ bH - 1 & u & v & w & /(-1) \end{pmatrix} \quad (69)$$

ここで、 $b^{-1} = TM_r^2$  と置き、

$$M_r = \begin{cases} 1 & \text{if } M < 1 \\ M & \text{if } 1 < M < 1 \\ 1 & \text{if } M > 1 \end{cases} \quad (70)$$

さらにここで、 $b = 10^{-5}$  と置く。前処理を施されたヤコビアン、 $PA_v$  は、筆者が何日かけて行った計算によると、次の固有値を持つ。

$$= \hat{U}, \hat{U}, \hat{U}, \hat{U} \frac{1+M_r^2}{2} \pm \sqrt{\left( \quad \right)^2 TM_r^2 + \frac{\hat{U}^2}{2} (1-M_r^2)^2} \quad (71)$$

この前処理法は，亜音速領域で収束を加速することを目的としているので，マッハ数が小さいとき，第4，第5固有値が縮尺されて，全体の固有値が密集するように変形されていることがわかる。また， $M_r = 1$ で前処理なしの固有値に帰着する。

このように前処理の仕方によっては，圧縮性コードで，非圧縮流れを効率的に解くことが可能である。また，非圧縮方程式を解く際の疑似圧縮性も前処理の1種として定式化し直すこともできる<sup>18</sup>。

前処理法を使うときには，リーマン解法や特性境界条件は前処理付きのシステム  $PA$  に対して適用する必要がある。また，様々な変数変換と組み合わせて適用することも多いので，たとえ中心差分法を用いていても，数値粘性項は変数変換に応じて書き換えなければならない。また，非圧縮領域では，圧力変数を丸め誤差をさける様に変換することが勧められている。これらの条件を満たそうとすると，前処理法を付け加えることは，ほぼ新しいコードを作ることに等しい。それだけの労力をかけるなら，前処理をうまく工夫して，1つのコードで非圧縮から超音速まですべて効率よく解けるようにしたい。上の(68)式から(71)式の例では，遷音速ではあまり効率を改善していないし，超音速では何の改善もしない。この分野のより一層の研究を望みたい。

## 参考文献

1. R.S. バーガ (渋谷政昭訳) 「計算機による大型行列の反復解法」，サイエンス社，東京，1972.
2. C. Hirsch 「Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1」 John Wiley & Sons, Chichester, 1988. Volume 2, 1990.
3. R. M. Beam and R. F. Warming, "An Implicit Finite-Difference Algorithm for Hyperbolic Systems in Conservation Form," Journal of Computational Physics, Vol. 22, pp. 87-110, 1976.
4. A. Jameson and E. Turkel, "Implicit Schemes and LU Decompositions," Mathematics of

- Computations, Vol. 37, pp. 385-397, 1981.
5. J. L. Steger and R. F. Warming, "Flux Vector Splitting of the Inviscid Gasdynamics Equations with Application to Finite-Difference Methods," *Journal of Computational Physics*, Vol. 40, pp. 263-293, 1981.
  6. C. K. Lombard, J. Bardina, E. Venkatapathy and J. Olinger, "Multi-Dimensional Formulation of CSCM - an Upwind Flux Difference Eigenvector Split Method for the Compressible Navier-Stokes Equations," *AIAA Paper 83-1895-CP*, 1983.
  7. S. Yoon and A. Jameson, "Lower-Upper Symmetric-Gauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations," *AIAA Journal*, Vol. 26, pp. 1025-1026, 1988.
  8. S. Obayashi and K. Kuwahara, "An Approximate LU Factorization Method for the Compressible Navier-Stokes Equations," *Journal of Computational Physics*, Vol. 63, pp. 157-167, 1986.
  9. J. L. Steger, "Implicit Finite-Difference Simulation of Flow about Arbitrary Two-Dimensional Geometries," *AIAA Journal*, Vol. 16, pp. 679-686, 1979.
  10. T. H. Pulliam and D. S. Chaussee, "A Diagonal Form of an Implicit Approximate Factorization Algorithm," *Journal of Computational Physics*, Vol. 39, pp. 347-363, 1981.
  11. T. H. Pulliam and J. L. Steger, "Recent Improvements in Efficiency, Accuracy, and Convergence for Implicit Approximate Factorization Algorithms," *AIAA Paper 85-0360*, 1985.
  12. S. Obayashi, K. Matsushima, K. Fujii and K. Kuwahara, "Improvements in Efficiency and Reliability for Navier-Stokes Computations Using the LU-ADI Factorization Algorithm," *AIAA Paper 86-0338*, 1986.
  13. A. Brandt, "Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary Value Problems," *Mathematics of Computation*, Vol. 31 pp. 333-390, 1977.
  14. W. K. Anderson, J. L. Thomas and D. L. Whitfield, "Multigrid Acceleration of the Flux Split Euler Equations," *AIAA Paper 86-0274*, 1986.
  15. V. Vatsa and B. Waden, "Development of a Multigrid Code for 3-D Navier-Stokes Equations and its Application to a Grid-Refinement Study," *Computers & Fluids*, Vol. 18, pp. 391-403, 1990.

16. B. van Leer, W. T. Lee and P. L. Roe, "Characteristic Time-Stepping or Local Preconditioning of the Euler Equations," AIAA Paper 91-1552-CP, 1991.
17. A. G. Godfrey, "Steps Toward a Robust Preconditioning," AIAA Paper 94-0520, 1994.
18. E. Turkel, A. Fiterman and B. van Leer, "Preconditioning and the Limit to the Incompressible Flow Equations," ICASE Report No. 93-42, 1993.
19. Y. H. Choi and C. L. Merkle, "The Application of Preconditioning in Viscous Flows," Journal of Computational Physics, Vol. 105, pp. 207-223, 1993.