

講座

プラズマ計算機シミュレーション入門V

6. MHD シミュレーションの基礎

草野 完也

(広島大学大学院先端物質科学研究科)

Introduction to MHD Simulation

KUSANO Kanya

Graduate School of Advanced Sciences of Matter, Hiroshima University,

Higashi-Hiroshima 739-8526, Japan

(Received 1 July 1998)

Abstract

Magnetohydrodynamic (MHD) simulation is a powerful methodology for research into fluid-like phenomena in plasmas. The finite difference method and the spectral method are two major procedures used to numerically solve the MHD equations. Several basic algorithms and important concepts for MHD simulations are described. Numerical stability, artificial diffusion and dispersion should be carefully taken into account when MHD equations are discretized.

Keywords:

magnetohydrodynamics, MHD, MHD simulation, finite difference method, spectral method, numerical stability, numerical diffusion, TVD scheme, explicit algorithm, implicit algorithm

6.1 はじめに

プラズマ現象が複雑で、その理解を難しくしている第一の原因は本質的にプラズマが膨大な数の多体系システムであることによる。本講座第2章で触れられたように、最新鋭の高速計算機を用いてもプラズマ粒子すべての運動を計算することはできない。そこで、プラズマ現象の計算機シミュレーションを行う場合、基本的に2つの可能な方法論のどちらかを用いなければならない。第1の方法は、これまで本講座に解説されてきた「粒子シミュレーション」であり、そこでは複数のプラズマ粒子を仮想的な超粒子として取りまとめることで取り扱う情報量を減らし、計算を可能とした。

第二の方法はここでとりあげる電磁流体力学 (MHD: magnetohydrodynamic) シミュレーションである。流

体としてのプラズマの概念は、超粒子の概念とは逆に個々のプラズマ粒子を細かく分割する仮想的操作を無限に繰り返す結果得られる[1]。無限に粒子を分割することによって、粒子の持つ離散的な情報量を統計的に平均化された連続量に変換することができる。さらに、電子の慣性項を無視しプラズマの準中性性を仮定するならば、サイクロトロン周波数より非常に遅い現象に適用できる近似理論として MHD 方程式を得る[2]。MHD 方程式はプラズマの粒子性に起因する固有の時間空間スケールを含まない。それゆえ、適用条件を満たす限り、巨視的なプラズマ現象の解析における強力な理論的方法論となり得る。MHD 方程式は宇宙および実験室における多様なプラズマ現象の理解に大いに貢献してきた[3]。ただし、MHD 方程式は非線形の偏微分方程式であるた

author's e-mail: kusano@sci.hiroshima-u.ac.jp

め、厳密解を得ることは一部の特殊な場合を除いて不可能である。それゆえ、その数値解を得ることは非常に重要な知見を我々に与える。

本論では、第2節でシミュレーションを行う上で理解しておく必要のある MHD 方程式の基礎的性質を説明する。MHD シミュレーションの代表的な方法として、第3節では差分法を、第4節ではスペクトル法の基礎をそれぞれ述べる。第5節では発展的方法として陰解法に触れ、第6節ではまとめとしていくつかの注意点をあげる。本論の目的は初学者が MHD シミュレーションの基礎を理解することにある。MHD の理論の詳細や MHD シミュレーション研究の実際的な応用に関しては、本講座の次章や文献[3, 4]を参照していただきたい。

6.2 MHD 方程式

MHD 方程式は密度 ρ 、速度 V 、磁場 B 、および圧力 P の 8 個の変数からなる偏微分方程式系である。一般的な MHD 方程式は連続の式、運動方程式、誘導方程式、エネルギー方程式から構成される。方程式の詳細は用いる状態方程式や考慮する外場の種類、問題に応じたエネルギーの生成・損失機構に依存する。例えば、理想気体の状態方程式に基づく標準的な MHD 方程式は以下のように記述できる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho V, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} = -\rho V \cdot \nabla V - \nabla P + J \times B - \nabla \cdot W, \quad (2)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \nabla \times (V \times B - R_\eta^{-1} J) \quad (3)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\nabla \cdot (PV) - (\gamma - 1) P \nabla \cdot V + R_\kappa^{-1} \nabla (P/\rho) + R_\eta^{-1} J^2 + W : \nabla V, \quad (4)$$

$$J = \nabla \times B, \quad (5)$$

$$W = R_\nu^{-1} [\nabla V + (\nabla V)^t - \frac{1}{3} \nabla \cdot V]. \quad (6)$$

ただし、磁場は solenoidal 条件 $\nabla \cdot B = 0$ を常に満足する必要があるため、 $B = \nabla \times A$ なるベクトルポテンシャル A を用いて(3)を

$$\frac{\partial A}{\partial t} = V \times B - R_\eta^{-1} J, \quad (7)$$

と書き直す場合もある。特に、何らかの空間対称性がある問題ではベクトルポテンシャルを使うと変数の数を減らすことができる。また、流速が電磁流体波動の位相速

度に比べて十分遅い場合、プラズマを非圧縮性流体とみなすことができるので、

$$\nabla \cdot V = 0, \quad (8)$$

となり、速度 V もベクトルポテンシャルを持つ。この場合、(4)は必要なく、(8)が解くべき状態方程式を与える。

MHD 方程式は物理定数に基づく固有のスケールを含まない。それゆえ、問題に応じた単位系を再構成して、変数を適当に無次元化することができる。(1)-(6)式では、適当な空間スケール L_0 、質量密度 ρ_0 、磁場 B_0 を用い、速度をアルヴェン速度 $V_A = B_0 / (\mu_0 \rho_0)^{1/2}$ で、時間をアルヴェン時間 $\tau_A = L_0 / V_A$ で、圧力を磁気圧 B_0^2 / μ_0 で規格化した。この場合、(2), (3), および(4)式における拡散項の係数はそれぞれ

$$R_\nu = \frac{\rho_0 L_0^2}{\nu \tau_A}, \quad R_\eta = \frac{\mu_0 L_0^2}{\eta \tau_A}, \quad R_\kappa = \frac{\rho_0 k_B L_0^2}{m \kappa \tau_A}, \quad (9)$$

と与えられる。ここで、 ν, η, κ は粘性、電気抵抗、熱伝導率を、 μ_0, k_B, m は真空の透磁率、ボルツマン定数、プラズマ粒子（イオン）の質量をそれぞれ表す。 R_ν, R_η および R_κ は、運動量、磁場および熱の拡散時間とアルヴェン時間 τ_A との比を表す無次元量であり、 R_ν をレイノルズ数、 R_η を磁気レイノルズ数と呼ぶ。拡散係数 (ν, η, κ) の扱いは考えるモデルに依存する。最も簡単なモデルは拡散係数を定数とみなすものであり、この場合、粘性項と電気抵抗項は線形項になる。プラズマの散乱過程の詳細を考慮し拡散係数の変数依存性をモデルに含めると拡散項は高次の非線形項になる。一方、拡散項以外の非線形性は最大二次である。

MHD シミュレーションとは適当な初期境界条件のもとで上記の MHD 方程式の数値解を得ることによって実現される。ただし、 $B = 0$ ならば、MHD 方程式は圧縮性流体の流体力学方程式に等しい。それゆえ、流体力学方程式のために開発された数値解法のほとんどを MHD 方程式にも適用することができる。しかし、磁場の効果によって MHD 方程式は流体力学方程式にはない特有の効果を持つことに留意すべきである。たとえば、流体力学方程式における線形波動は音波のみであるが、MHD 方程式はアルヴェン波、早い磁気音波、遅い磁気音波の 3 つの線形波動をもつ[3]。特に、早い磁気音波の位相速度は

$$V_{\text{fast}}^2 = \frac{1}{2} [(V_A^2 + V_s^2) + \sqrt{(V_A^2 + V_s^2)^2 - 4V_A^2 V_s^2 k_1^2 / k^2}] \quad (10)$$

で与えられ、常に音速 V_s よりも速いので、磁場のある場合、情報は中性流体中よりも速く伝播する。ただし、 k と $k_{\parallel}$ は波数とその磁場方向成分を表す。

6.3 差分法

MHD 方程式は連続場の方程式であり、その厳密解も連続的な自由度を持っている。しかし、計算機による数値解は可算有限個のデータから構成されなければならないから、方程式自身を有限個の情報の組み合わせで書き直す必要がある。差分法はこのための最も代表的な方法の一つである。

差分法の基本的な考え方は連続な空間と時間を離散的な小領域に分割し、小領域の状態を一つの値で表現するというものである。MHD 方程式に適用できる様々な差分アルゴリズムが知られている。しかし、実際にシミュレーションを実行する場合には、それぞれのアルゴリズムの特性を理解し考える問題に適合するアルゴリズムを選択あるいは開発しなければならない。以下では、差分解法を行う上で重要な概念を説明するとともに、代表的なアルゴリズムを紹介する。さらに詳しく学びたい方は、差分法と MHD 計算の基礎については文献[5]を、差分法の詳細については文献[6-8]を参照にされるとよい。

6.3.1 次数

微分型で書かれた MHD 方程式の差分解法を行うためには、第一に微分オペレータを差分で近似する必要がある。すなわち、離散点 $x_j = j\Delta$ ($j=0, 1, 2, \dots, M$) における関数 $f(x)$ の値 $f_j = f(x_j)$ を使って、微分 $f'_j = df/dx|_{x=x_j}$ の近似値を求めなければならない。求める近似式の精度は差分幅 Δ の何次の項まで考慮するかによって決まる。

そこで、関数 $f(x)$ を x_j の周りで Δ を使ってテイラー展開すると、

$$f_{j-2} = f_j - 2\Delta f'_j + \frac{(2\Delta)^2}{2} f''_j - \frac{(2\Delta)^3}{3 \cdot 2} f'''_j + \frac{(2\Delta)^4}{4 \cdot 3 \cdot 2} f''''_j + O(\Delta^5), \quad (11)$$

$$f_{j-1} = f_j - \Delta f'_j + \frac{\Delta^2}{2} f''_j - \frac{\Delta^3}{3 \cdot 2} f'''_j + \frac{\Delta^4}{4 \cdot 3 \cdot 2} f''''_j + O(\Delta^5), \quad (12)$$

$$f_{j+1} = f_j + \Delta f'_j + \frac{\Delta^2}{2} f''_j + \frac{\Delta^3}{3 \cdot 2} f'''_j + \frac{\Delta^4}{4 \cdot 3 \cdot 2} f''''_j + O(\Delta^5), \quad (13)$$

$$f_{j+2} = f_j + 2\Delta f'_j + \frac{(2\Delta)^2}{2} f''_j + \frac{(2\Delta)^3}{3 \cdot 2} f'''_j + \frac{(2\Delta)^4}{4 \cdot 3 \cdot 2} f''''_j + O(\Delta^5), \quad (14)$$

となる。たとえば、式(13)において Δ^2 より高次の項を無視すると、差分幅 Δ の一次の精度で近似式

$$f'_j{}^{(1)} = \frac{f_{j+1} - f_j}{\Delta} \quad (15)$$

を得る。上付き添字⁽¹⁾は Δ の一次精度であることを示す。二次精度の差分公式は式(12), (13)で Δ^3 以上の項を無視し、 f'_j を消去すると、

$$f'_j{}^{(2)} = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta} \quad (16)$$

のように得られる。同様に、差分点数を増やすと三次および四次精度の公式を(11)-(14)より

$$f'_j{}^{(3)} = \frac{2f_{j+1} + 3f_j - 6f_{j-1} + f_{j-2}}{6\Delta}, \quad (17)$$

$$f'_j{}^{(4)} = \frac{-f_{j+2} + 8f_{j+1} - 8f_{j-1} + f_{j-2}}{12\Delta}. \quad (18)$$

のように作ることができる。

これらの差分公式を使えば偏微分方程式を差分方程式に書き換えることができる。ここで、簡単な線形偏微分方程式、

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + V_0 \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (19)$$

について考えてみよう。この方程式は advective equation と呼ばれ、左辺は速度 V_0 をもつ場の対流微分を記述している。時間差分幅を δ 、空間差分幅を Δ とし、時間微分を一次精度の差分(15)で、空間微分を二次精度の差分(16)で置き換えると、

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\delta} = -V_0 \frac{f_{j+1}^n - f_{j-1}^n}{2\Delta}, \quad (20)$$

と書ける。ここで、上添字⁽ⁿ⁾は時間に関する差分点 ($t_n = n\delta$) を、下添字_(j)は空間に関する差分点 ($x_j = j\Delta$) を表す。上式を整理すると、

$$f_j^{n+1} = f_j^n - V_0 \frac{\delta}{2\Delta} (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) \quad (21)$$

となる。この式は時間差分点 $n+1$ の値を時間差分点 n の値で陽 (explicit) に記述する一つの陽解法アルゴリズムを与える。アルゴリズムが与えられれば、計算を繰り返すことにより、初期点 ($n=0$) の値から任意の時間差分点の値を計算することが原理的にできる。

6.3.2 数値的安定性

差分法による計算結果が本来の偏微分方程式の近似解

であるためには、差分幅 (δ, Δ) を小さくした時に、差分方程式の解が微分方程式の解に漸近しなければならない。このためには、アルゴリズムが数値的に安定である必要がある。ここで、数値的に安定であるとは、従属変数 f_j^n をフーリエ展開、

$$f_j^n = \sum_k \tilde{f}_k^n e^{ikx_j} \quad (22)$$

したとき、初期 ($n=0$) におけるあらゆるフーリエモードの大きさが有限である限り、その後の任意の時間差分点のフーリエモードの大きさも有限であることをいう [9].

実際に、アルゴリズム (21) の安定性を調べてみよう。(22) を (21) に代入すると、それぞれの波数モードについて

$$\tilde{f}_k^{n+1} e^{ikx_j} = \tilde{f}_k^n e^{ikx_j} - V_0 \frac{\delta}{2\Delta} \tilde{f}_k^n (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}}).$$

故に、

$$\tilde{f}_k^{n+1} = \{1 - i\alpha \sin(k\Delta)\} \tilde{f}_k^n, \quad (23)$$

となる。ただし、

$$\alpha = V_0 \frac{\delta}{\Delta} \quad (24)$$

である。一般に、 $\tilde{f}_k^{n+1} = g(\delta, \Delta, k) \tilde{f}_k^n$ と書けるとき、 g を増幅係数と呼ぶ。アルゴリズムが数値的に安定であるためには $|g| \leq 1$ でなければならない。一方、(23) に関しては

$$|g|^2 = g \cdot g^* = 1 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta) > 1 \quad (25)$$

であるため、アルゴリズム (21) は常に数値的に不安定であり、その誤差は指数関数的に増加してしまう。

実は、(21) 式の右辺第一項を近傍差分点の平均で置き換えることによってアルゴリズムを安定化できることが知られている。こうして作られたアルゴリズム

$$f_j^{n+1} = \frac{1}{2}(f_{j-1}^n + f_{j+1}^n) - V_0 \frac{\delta}{2\Delta} (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) \quad (26)$$

は Lax スキームと呼ばれ、(21) と同じ次数精度を持つ [10]。Lax スキームの増幅係数 g は上と同じような方法で、

$$|g|^2 = 1 - (1 - \alpha^2) \sin^2(k\Delta), \quad (27)$$

と与えられるから、その安定化条件は

$$\alpha \leq 1, \text{ or } \delta \leq \frac{\Delta}{|V_0|} \quad (28)$$

である。

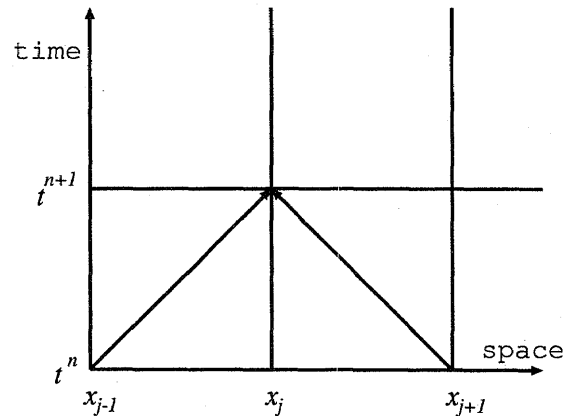


Fig. 1 Information flow in Lax scheme.

安定化条件 (28) の意味を直観的に理解することは容易である。Fig. 1 に示すように、Lax スキームでは f_j^{n+1} を $f_{j-1}^n, f_j^n, f_{j+1}^n$ の 3 つの値より決める。このことは、数値的に情報が $V_N = \Delta/\delta$ という速さで伝搬することを意味する。一方、偏微分方程式 (19) は速度 V_0 で場の量 f が伝搬することを記述している。すなわち、実際の情報伝搬速度は V_0 である。もし、数値的な情報伝搬速度 V_N が微分方程式に固有の情報伝搬速度 V_C よりも遅いならば、明らかに数値解は真の解を表現することができない。一般に、スキームが安定であるためには、 $V_C < V_N$ でなければならない。この条件は Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件と呼ばれ陽的な偏微分方程式の数値解法で一般的に成立する [11]。安定化条件 (28) は advective equation における CFL 条件である。

MHD 方程式は複数の物理過程から成り立つため、数値的な安定性を保つためにはそれぞれの過程に関係する CFL 条件をすべて満足しなければならない。たとえば、プラズマ流速を V とすると、空間に固定された座標に対して速い磁気音波は $V \pm V_{\text{fast}}$ なる速度で情報を運ぶので、MHD 波動に関する CFL 条件は

$$\delta \leq \frac{\Delta}{V + V_{\text{fast}}} \quad (29)$$

となる。一方、散逸による情報伝播に関係した CFL 条件も同時に満たす必要がある。たとえば、拡散方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} = R^{-1} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad (30)$$

における CFL 条件は

$$\delta \leq R\Delta^2 \quad (31)$$

となる。さらに、二次元または三次元問題においてはそれぞれの空間次元に関してこれらの CFL 条件をすべて

満足しなければならない。

6.3.3 分散と散逸

不安定なアルゴリズム (21) を

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(f_j^{n+1}-f_j^{n-1}) + \frac{1}{2}(f_j^{n+1}-2f_j^n+f_j^{n-1}) \\ &= -\frac{V_0\delta}{2\Delta}(f_{j+1}^n-f_{j-1}^n) \end{aligned} \quad (32)$$

のように書き直すことができる。この差分方程式は δ および Δ の二次の精度で微分方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\delta}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + V_0 \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (33)$$

を差分化したものに等しい。一方、安定なアルゴリズム (26) は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(f_j^{n+1}-f_j^{n-1}) + \frac{1}{2}(f_j^{n+1}-2f_j^n+f_j^{n-1}) \\ &= \frac{1}{2}(f_{j+1}^n-2f_j^n+f_{j-1}^n) - \frac{V_0\delta}{2\Delta}(f_{j+1}^n-f_{j-1}^n) \end{aligned} \quad (34)$$

と変形できるので、二次精度で微分方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\delta}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \frac{\Delta^2}{2\delta} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + V_0 \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (35)$$

を差分化したものに等しい。

このことは、一次精度の差分化の結果生じる (33) 式の左辺第 2 項が不安定性を生み出す一方、数値的な拡散項である (35) 式の左辺第 3 項がアルゴリズムを安定化すると解釈できる。実際、波数 k 、周波数 $\omega \sim V_0 k$ のフーリエモードを考えたとき、CFL 条件 (28) は (35) 式の左辺第 3 項の絶対値が第 2 項より大きいという条件、

$$\frac{\Delta^2 k^2}{2\delta} \geq \frac{\delta \omega^2}{2} \quad (36)$$

と等価であることがわかる。

(35) 式の左辺第 2 項および第 3 項の存在は、**数値的な散逸と分散**を生む。数値スキームの分散関係はフーリエモード

$$f(x, t) = \tilde{f}(k, \omega) e^{i(\omega t - kx)} \quad (37)$$

を (26) 式に代入すると

$$e^{i\omega\delta} = \cos(k\Delta) + i\alpha \sin(k\Delta) \quad (38)$$

のように得られる。ここで、 ω を実部と虚部に分け、 $\omega = \Omega + i\gamma$ と書くと、分散と散逸の関係式をそれぞれ

$$\tan(\Omega\delta) = \alpha \tan(k\Delta), \quad (39)$$

$$e^{-2\gamma\delta} = \cos^2(k\Delta) + \alpha^2 \sin^2(k\Delta) \quad (40)$$

のように書くことができる。上の関係式より、 $\alpha=1$ の時のみ、差分方程式の分散は与えられた微分方程式 (19) の分散関係

$$\Omega = V_0 k, \quad \gamma = 0, \quad (41)$$

を厳密に満たすことができる。しかし、MHD 方程式を解く場合には、非線形項による不安定化効果を避けるため一般に $\alpha < 1$ である必要があるので、数値的な分散と散逸を逃れることはできない。

6.3.4 Lax-Wendroff スキーム

安定でかつ数値的な分散と散逸が小さい差分スキームを作る方法の一つは差分の次数精度を高めることである。時間差分幅 δ の二次の精度をもつ代表的なアルゴリズムとして Lax-Wendroff (LW) スキームがある [12]。

ここで、保存型で書かれた偏微分方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial F(f)}{\partial x} = 0 \quad (42)$$

を考えよう。 f が質量、運動量、磁場、全エネルギー密度からなるベクトルであると考えらるならば、MHD 方程式も形式的に上の形で記述することができる [5]。LW スキームは Fig. 2 に示す 2 つのステップから構成される。第 1 ステップでは Lax スキーム

$$f_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(f_j^n + f_{j+1}^n) - \frac{\delta}{2\Delta}(F_{j+1}^n - F_j^n). \quad (43)$$

を用いて、時間差分幅を 1/2 だけ進めるとともに、 $f_{j+1/2}^{n+1/2}$ を用いて中間点の流束

$$F_{j+1/2}^{n+1/2} = F(f_{j+1/2}^{n+1/2}). \quad (44)$$

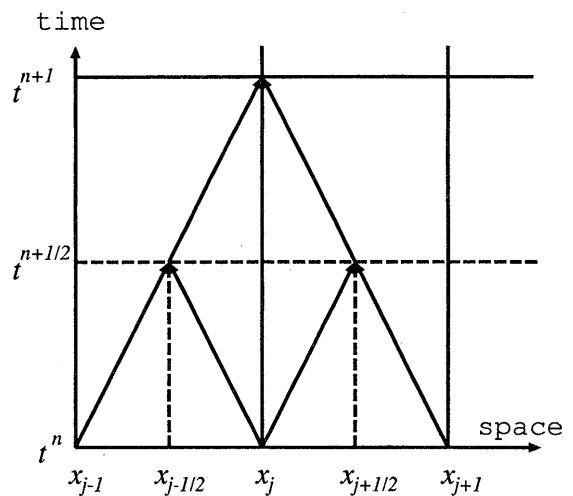


Fig. 2 Information flow in Lax-Wendroff scheme.

を定義する。第2ステップは中間点の流速と二次精度の中心差分公式

$$f_j^{n+1} = f_j^n - \frac{\delta}{\Delta} (F_{j+1/2}^{n+1/2} - F_{j-1/2}^{n+1/2}), \quad (45)$$

を使い時間差分を1進める。

$F = V_0 f$ の場合, LW スキームの増幅係数 g は

$$|g|^2 = 1 - \alpha^2 (1 - \alpha^2) (1 - \cos(k\Delta))^2, \quad (46)$$

で与えられる。これは安定化条件が再び CFL 条件 (28) であることを意味する。ただし, LW スキームの数値的散逸は $k\Delta$ の4乗のオーダーで発生することが知られている。これは比較的大きな波数のモードにのみ選択的に数値的散逸が影響することを意味しており, 長波長モードの計算にとっては都合がよい。これらの理由により, Lax-Wendroff スキームは MHD シミュレーションの解法にこれまで広く利用されてきた。

6.3.5 TVD スキーム

数値的分散の影響より, 衝撃波面のように関数値が急峻に変化する領域では LW スキームは数値的な振動を生むことが知られている。これは, LW スキームが解の単調性を維持することができないスキームであることを意味している。ここで, 解の単調性とは単調増加性または単調減少性をいう。一般に, LW スキームに限らず, 定数 c_k により

$$f_j^{n+1} = \sum_k c_k f_{j+k}^n, \quad (47)$$

と書くことのできる線形スキームは解の単調性を維持できないことが知られている [8]。それゆえ, 単調性を維持するためには何らかの非線形スキームが必要になる。

advective equation の場合, LW スキームにおける中間点の流束 (44) は

$$F_{j+1/2} = V_0 \left[f_j + \frac{1}{2} (1 - \alpha) (f_{j+1} - f_j) \right], \quad (48)$$

と書ける。そこで, 新しい関数 W を導入し

$$F_{j+1/2} = V_0 \left[f_j + \frac{1}{2} (1 - \alpha) W_{j+1/2} (f_{j+1} - f_j) \right], \quad (49)$$

なる流束を考えることで, LW スキームを非線形スキームに拡張することができる。ここで, $W_{j+1/2}$ は流束制限関数と呼ばれる。(49)を(45)に代入するなら,

$$\begin{aligned} \frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{f_{j-1}^n - f_j^n} &= \alpha \left[1 - \frac{1}{2} (1 - \alpha) W_{j-1/2} \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \alpha (1 - \alpha) \frac{W_{j+1/2}}{r_j}, \end{aligned} \quad (50)$$

を得る。ただし,

$$r_j = \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{f_{j+1}^n - f_j^n}, \quad (51)$$

である。数値振動は (50) 式の左辺の値が 0 以上 1 以下であれば現れない。この条件は, CFL 条件 ($0 \leq \alpha \leq 1$) が満足される時,

$$0 \leq W_{j+1/2} \leq 2, \quad (52)$$

$$0 \leq \frac{W_{j+1/2}}{r_j} \leq 2 \quad (53)$$

である限り破られない。すなわち, $W_{j+1/2}$ を Fig. 3 のグレー領域をとる r_j の関数とすれば, 単調性を維持する非線形スキームを作ることができる。

こうして作られるスキームは TVD (Total Variation Diminishing) スキームと呼ばれる。Total Variation とは関数の全変動

$$TV(f^n) = \sum_j |f_{j+1}^n - f_j^n|, \quad (54)$$

であり, TVD スキームは $TV(f^{n+1}) \leq TV(f^n)$ を保証する。TVD スキームには多くのバリエーションが開発されているが, これらについては文献 [7] に詳しい。

TVD スキームは衝撃波を含む問題にとっては非常に有効な方法を与える。しかし, 非線形スキームであるため数値的拡散の大きさを問題を解くまで事前に評価することは難しい。それゆえ, 抵抗不安定性や磁気再結合のように, 拡散が重要な働きをするような MHD 問題における使用には十分注意が必要である。

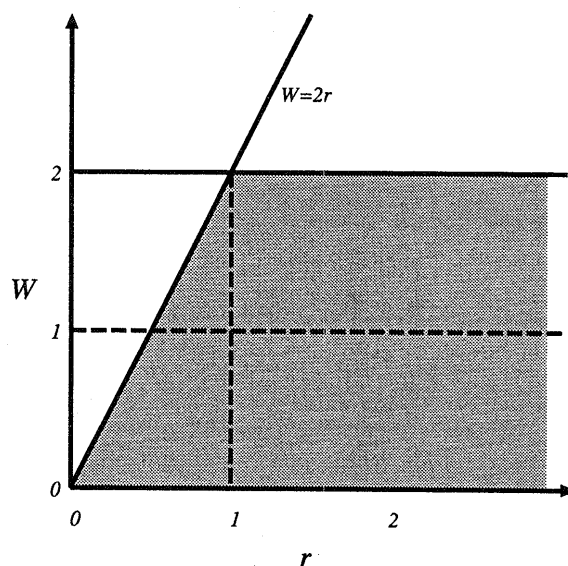


Fig. 3 TVD region of flux limiter function W .

6.3.6 高次精度スキーム

最近では計算機能力の向上により、三次以上のさらに精度の高いスキームを用いることも難しくなくなった。 δ に関する四次の精度を持つ Runge-Kutta-Gill (RKG) スキームはその代表的な例である。RKG スキームは常微分方程式の数値解法のために開発されたスキームとして広く利用されているが、陽的アルゴリズムによって差分化された MHD 方程式は連立常微分方程式と等価であるため、これを容易に転用することができる。RKG スキームは下に示す4段階の計算によって時間差分を1進める方法である。

$$d_1 = \frac{\delta}{2\Delta}(F_{j+1}^n - F_{j-1}^n), g^1 = f^n + c_1 d_1, q_2 = d_1, \quad (55)$$

$$d_2 = \frac{\delta}{2\Delta}[F(g_{j+1}^1) - F(g_{j-1}^1)],$$

$$g^2 = g^1 + c_2(d_2 - q_2), q_3 = c_{q2}q_2 + c_{s2}d_2, \quad (56)$$

$$d_3 = \frac{\delta}{2\Delta}[F(g_{j+1}^2) - F(g_{j-1}^2)],$$

$$g^3 = g^2 + c_3(d_3 - q_3), q_4 = c_{q3}q_3 + c_{s3}d_3, \quad (57)$$

$$d_4 = \frac{\delta}{2\Delta}[F(g_{j+1}^3) - F(g_{j-1}^3)],$$

$$f^{n+1} = g^3 + c_4(d_4 - 2q_4). \quad (58)$$

ただし,

$$c_1 = 1/2, c_2 = 1 - \sqrt{1/2}, c_3 = 1 + \sqrt{1/2}, c_4 = 1/6, \quad (59)$$

$$c_{q1} = -2, c_{q2} = 1 - 3c_2, c_{s2} = 2c_2,$$

$$c_{q3} = 1 - 3c_3, c_{s3} = 2c_3. \quad (60)$$

RKG スキームをプログラムする場合、 $f^n, g^{i=1,2,3}, f^{n+1}$ を同じ変数に格納できるので、メモリ領域を有効に使える利点がある。また、 d_i の計算手続きは常に同じであるため、プログラムも簡単である。

6.4 スペクトラル法

MHD シミュレーションにおいて差分法とともに広く利用されている方法にスペクトラル法がある。差分法が連続関数を実空間における離散点上のデータで近似するのに対し、スペクトラル法は連続関数を有限個の適当な直交関数展開で近似する。どのような関数系を用いるべきかは境界条件や問題に依存して決められる。以下ではフーリエ関数系を利用する方法について解説する。

6.4.1 フーリエ分解法

ここでは、 L の周期を持つ座標系 x に関する一次元問題を例にとりあげ解説する。円柱角度座標の場合には

x を θ に、 L を 2π に置き換えればよい。周期性より従属変数 f は

$$f(x) = f(x+L) \quad (61)$$

を満たすとする。

このとき、従属変数 f を複素フーリエ関数系で展開することができる。

$$f(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_m(t) e^{ik_m x}. \quad (62)$$

ただし、 $k_m = 2\pi m/L$ である。複素フーリエ係数は

$$a_m(t) = \frac{1}{L} \int_0^L dx \tilde{f}(x, t) e^{-ik_m x} \quad (63)$$

と与えられる。なお、変数 f は実数関数であるから、複素フーリエ係数は

$$\tilde{f}_m = \tilde{f}_{-m}^*, \quad (64)$$

という関係を満たさなければならない。ただし、記号 $(\)^*$ は複素共役を意味する。

もし、変数 f が M 個の差分点でのみ与えられている場合、その情報を有限個のフーリエ関数で以下のように表現することができる。

$$f_M(x_j, t) = \sum_{m=-M/2+1}^{M/2} \tilde{f}_m e^{ik_m x_j}, \quad (65)$$

ただし,

$$\tilde{f}_m(t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M f_M(x_j, t) e^{-ik_m x_j}. \quad (66)$$

ここで、 x_j は差分点の座標 $x_j = (j-1)L/M$ を表す。すると座標点 x_j 、時間 t における微分 $\partial f / \partial x$ を

$$\left(\frac{\partial f_M}{\partial x} \right)_j = \sum_{m=-M/2+1}^{M/2} ik_m \tilde{f}_m(t) e^{ik_m x_j}, \quad (67)$$

と近似することができる。

advective equation (19) 式をスペクトラル法で解く場合の分散関係を調べてみよう。6.3.3で考えたフーリエモード(37)式を有限フーリエ関数展開することによって得られる分散関係

$$\omega = V_0 k_m \quad \text{for} \quad -\frac{M}{2} < m \leq \frac{M}{2}, \quad (68)$$

はモードの数が有限であることを除いて、厳密解の分散関係 $\omega = V_0 k$ と一致する。すなわち、フーリエ展開法によれば少なくとも空間微分の近似に基づく数値的分散は発生しない。ただし、展開関数が有限個である誤差は常に存在することに留意する必要がある。

スペクトラル法の場合も時間に関しては差分で取り扱うのが一般的である。たとえば、時間差分幅 δ に関す

る2次の精度をもつアルゴリズムは中間変数 g を用いて以下のように書くことができる。

$$\tilde{g}_{k_m} = \tilde{f}_{k_m}^n + i\delta k_m V_0 \tilde{f}_{k_m}^n \quad (69)$$

$$\tilde{f}_{k_m}^{n+1} = \tilde{f}_{k_m}^n + i\delta k_m V_0 \tilde{g}_{k_m}. \quad (70)$$

$\alpha = \delta k_m V_0$ とすると、上のアルゴリズムの増幅係数 $|g|$ は

$$|g|^2 = 1 - \alpha^2 + \alpha^4, \quad (71)$$

と与えられるので、数値的安定化条件は

$$\alpha < 1, \quad \text{or} \quad \delta \leq \frac{1}{V_0 k_{M/2}}, \quad (72)$$

となる。これは差分法における CFL 条件(28)に対応している。

6.4.2 非線形計算

MHD 方程式には誘導電場 $E = -V \times B$ のような二次の非線形項が多く現れるが、スペクトラル法における非線形項の取り扱い方には2つの異なる方法がある。一つは、フーリエ空間で直接 convolution,

$$\tilde{E}_m = - \sum_{m'=\max(-M/2, m-M/2)}^{\min(M/2, m+M/2)} \tilde{V}_{m-m'} \times \tilde{B}_{m'} \quad (73)$$

をとる方法である。

もう一つは、高速フーリエ変換 (FFT) を用い、実空間にデータ変換

$$V(x_j) = \sum_{m=-M/2+1}^{M/2} \tilde{V}_m e^{ik_m x_j}, \quad B(x_j) = \sum_{m=-M/2+1}^{M/2} \tilde{B}_m e^{ik_m x_j}, \quad (74)$$

してから非線形積

$$E(x_j) = -V(x_j) \times B(x_j) \quad (75)$$

を計算し、再びフーリエ空間に変換

$$\tilde{E}_m = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M E(x_j) e^{-ik_m x_j}, \quad (76)$$

する方法である。実空間への変換を含むため、後者を pseudo スペクトラル法と呼ぶ[13]。

1回の時間ループを計算する場合、スペクトラル法における convolution の演算回数は M^2 に比例する。これに対して、pseudo スペクトラル法における FFT の演算回数は $M \ln_2 M$ に比例する。それゆえ、モデルに含まれるモードの数が増えると pseudo スペクトラル法の計算効率がスペクトラル法よりもはるかに良くなる。ただし、pseudo スペクトラル法は aliasing エラーと呼ばれる固有の誤差を生むことに留意すべきである。pseudo スペクトラル法では非線形項を実空間で計算するため、

モード間結合の取捨選択ができない。それゆえ、フーリエ係数が定義されていない領域 $m-m' < M/2$ と $M/2 < m-m'$ を含めた convolution (73) 式を計算することになる。有限個のフーリエ展開係数には

$$V_{m-m'} = V_{m-m' \pm M}$$

なる性質があるので、定義領域を越えたモードに代入された値は定義領域内の他のモードに影響を与えてしまう。これを aliasing エラーと呼ぶ。

aliasing エラーを生み出さないためには、非線形項の計算において一つの項が二重に計算されないよう総和 (73) の範囲を $-N \leq m < N$, $-N \leq m' < N$ のように制限する必要がある。ただし、 N は aliasing を避けるため、 $m-m'-M < -N$ および $m-m'+M > N$ を満たすように選ばれば良い。それゆえ、 $N < M/3$ ととればよいことが分かる。これは、定義されたフーリエ空間 $-M/2 \leq m < M/2$ の2/3のみを通過させるローパスフィルタをかけることで実現できる。

6.5 陰解法

差分法でもスペクトラル法でも時間発展を陽に解く限り、時間差分に関する精度をいかに高くしても数値的安定性のための CFL 条件を免れることはできない。CFL 条件を満たすためには空間格子の数の増加とともに時間分解能も向上させなければならない。たとえば、 m 次元問題で空間差分点の数を n 倍した場合、一定の物理現象を数値的に再現するために必要な演算数は、(29)式で δ を決める場合 n^{m+1} 倍に、(31)式で δ を決める場合 n^{m+2} 倍になる。それゆえ、空間分解能をわずかに向上させるだけで、計算の負荷は急激に増えてしまう。

この困難を避ける方法として陰解法 (implicit method) がある。ここで再び、advective equation (19) 式を考えよう。アルゴリズム (20) の右辺を時間差分点 $(n+1)$ での空間差分に置き換えると

$$f_j^{n+1} + V_0 \frac{\delta}{2\Delta} (f_{j+1}^{n+1} - f_{j-1}^{n+1}) = f_j^n \quad (77)$$

となる。このアルゴリズムは、時間発展の結果である時間差分点 $(n+1)$ の情報を用いて n から $n+1$ への時間発展が記述されているという意味で陰解法である。

6.3.2と同様にこのアルゴリズムの増幅係数 g を求めると、

$$|g|^2 = \frac{1}{1 + \alpha^2 \sin^2(k\Delta)} < 1 \quad (78)$$

であることがわかる。すなわち、アルゴリズム (77) 式は

δ の大小にかかわらず常に数値的に安定である。

陰解法が無条件に安定である理由は、アルゴリズム (77) 式を形式的に

$$A \cdot f^{n+1} = f^n \quad (79)$$

と書くことで理解できる。ここで、 A は空間差分点数 $M \times M$ の行列、 f^n は時間差分点 n の格子点で定義される関数値が作るベクトルである。 f^{n+1} はこの行列形式で書かれた連立一次方程式を解くことによって求められる。それゆえ、Fig. 4 のように f_j^{n+1} は f^n のすべての要素の影響を受ける。つまり、数値的情報伝搬速度は無限に速い。6.3.2の議論によれば、CFL 条件は数値的情報伝搬速度と物理的情報伝搬速度との大小関係で決まるので、上の議論より陰解法は絶対安定であることがわかる。

陰解法を使えば時間差分幅 δ を大きくすることができるので、時間ステップのループ回数を減らすことができる。たとえば、拡散係数が定数である限り、拡散項は線形であるので容易に陰解法を利用することができる。特に、(31) 式によって時間差分幅が制限されている場合、陰解法を用いると CFL 条件を緩和できる。

また、非線形項を線形項とそれ以外に分離し、前者のみを陰的に解く方法がある。これを準陰解法 (semi-implicit method) と呼ぶ。たとえば、流速よりも磁気音波の伝播速度が遙かに速い場合、磁気音波に関する線形項を選択的に陰解法で解くことにより、CFL 条件を緩和させることができる [14]。さらに最近では繰り返し計算を用いて非線形項も陰解法で解く方法が開発されている [15]。ただし、たとえ数値的に安定であったとしても、時間差分幅を増やすとともに誤差は増加する。時間差分幅をどの程度大きくできるかは問題に依存して決められるべきである。

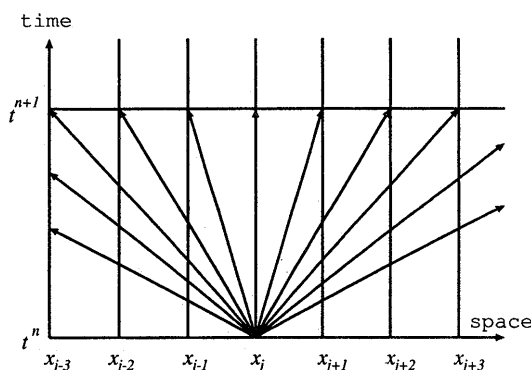


Fig. 4 Information flow in implicit scheme.

6.6 まとめ

MHD 方程式の数値解法には様々なバリエーションが存在する。それゆえ、与えられた問題の解の振る舞い、必要な分解能、必要な精度、境界条件、計算すべき現象時間、次元、利用できる計算機の性能などを考慮して、最適な方法を選ばなくてはならない。たとえば、フーリエ分解法は空間微分演算子に関して差分法より誤差を生みにくいが、一自由度ごとの計算負荷はより大きい。このため、フーリエ展開の収束性が良い場合はスペクトル法を、そうでない場合は差分法を使うことが多い。また、二次元や三次元の問題では空間次元ごとに境界条件が異なるので、差分法とスペクトル法を組み合わせることも多い。さらに複雑な境界条件を扱う問題では、非構造格子を用いた有限体積法や有限要素法を利用する方法、空間時間格子を解に適合させながらダイナミックに変化させる方法なども開発されている [16, 17]。

MHD シミュレーションによるプラズマ研究は常に 3 つのレベルから構成されている。第 1 は現象を微分方程式でモデル化するレベル。第 2 はモデルに適合するアルゴリズムを用いて、微分方程式を離散化するレベル。そして、第 3 は離散化された方程式からコンピュータを用いて数値解を得るレベルである。それぞれのレベルで情報は選別淘汰されるため、最終的な数値解は現象と等価ではないことに常に留意しなければならない。それゆえ、シミュレーション研究では単に数値解を得ることよりも、それぞれのレベルの妥当性を慎重に考察し、数値解が捉えた現象の本質が何であるかを理解することが重要である。

参考文献

- [1] S. Ichimaru, *Basic Principles of Plasma Physics, A Statistical Approach* (The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., London, 1973) p. 10.
- [2] K. Nishikawa and M. Wakatani, *Plasma Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1990) Sec. 4.5.
- [3] D. Biskamp, *Nonlinear Magnetohydrodynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [4] R. Moreau, *Magnetohydrodynamics* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1990).
- [5] D. Potter, *Computational Physics* (John Wiley & Sons, Chichester, 1973).
- [6] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol.1 Fundamentals of Numerical Discretization* (John Wiley & Sons, Chichester, 1988).
- [7] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and*

- External Flows, Vol.2 Computational Methods* (John Wiley & Sons, Chichester, 1990).
- [8] 藤井孝蔵：流体力学の数値計算法（東大出版会，1994）.
- [9] R.D. Richtmyer and K.W. Morton, *Difference Methods for Initial-Value Problems* (Interscience, New York, London, 1967).
- [10] P.D. Lax, Comm. Pure Appl. Math. **7**, 135 (1954).
- [11] R. Courant, K.O. Friedrichs and H. Lewy, Mathematische Annalen **100**, 32 (1928). *English translation in IBM Journal* (1967) 215-34.
- [12] P.O. Lax and B. Wendroff, Comm. Pure Appl. Math. **13**, 217 (1960).
- [13] D.D. Schnack, D.C. Baxter, and E. J. Caramana, J. Comp. Phys. **55**, 485 (1984).
- [14] D.D. Schnack, D.C. Barnes, Z. Mikić, D.S. Harned and E.J. Caramana, J. Comp. Phys. **70**, 330 (1987).
- [15] Y.Q. Hu and S.T.Wu, J. Comp. Phys. **55**, 33 (1984).
- [16] T.Tanaka, J. Comp. Phys. **111**, 381 (1994).
- [17] D.D. Zeeuw and K.G. Powell, J. Comp. Phys. **104**, 56 (1993).