

スプリッティング法

春日 悠

2019 年 11 月 4 日

目 次

1 ADI 法	1
2 スプリッティング法	3
3 移流拡散方程式への適用	5

1 ADI 法

非定常拡散方程式を考える．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\nabla \cdot \phi) \quad (1)$$

2 次元として，クランク・ニコルソン法で離散化する．

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}(\delta_x^2 \phi^{n+1} + \delta_y^2 \phi^{n+1}) + \frac{1}{2}(\delta_x^2 \phi^n + \delta_y^2 \phi^n) \\ &= \frac{1}{2}(\delta_x^2 + \delta_y^2)(\phi^{n+1} + \phi^n) \end{aligned} \quad (2)$$

ここで δ_x^2 , δ_y^2 は，ラプラシアンをそれぞれ x 方向， y 方向に離散化することを意味する演算子である．上式を次のように 2 つの式で表す．

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1/2} - \phi^n}{\Delta t/2} &= \delta_x^2 \phi^{n+1/2} + \delta_y^2 \phi^n \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^{n+1/2}}{\Delta t/2} &= \delta_x^2 \phi^{n+1/2} + \delta_y^2 \phi^{n+1} \end{aligned} \quad (3)$$

これは，それぞれ第 1 式は x 方向についての，第 2 式は y 方向についての三重対角方程式になっており，TDMA (三重対角行列アルゴリズム) でそれぞれ x 方向， y 方向と順に解くことで計算できることを意味している．この方法は ADI (alternating direction implicit) 法と呼ばれる．

式 (3) の 2 式を足すと、次式になる。

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \delta_x^2 \phi^{n+1/2} + \frac{1}{2} \delta_y^2 (\phi^{n+1} + \phi^n) \quad (4)$$

式 (2) を回復するには、次式が成立しなければならない。

$$\delta_x^2 \phi^{n+1/2} = \frac{1}{2} \delta_x^2 (\phi^{n+1} + \phi^n) \quad (5)$$

しかし、式 (3) の第 2 式から第 1 式を引いて整理すると

$$\phi^{n+1/2} = \frac{1}{2} \delta_x^2 (\phi^{n+1} + \phi^n) - \frac{\Delta t}{4} \delta_y^2 (\phi^{n+1} - \phi^n) \quad (6)$$

これより

$$\delta_x^2 \phi^{n+1/2} = \frac{1}{2} \delta_x^2 (\phi^{n+1} + \phi^n) - \frac{\Delta t}{4} \delta_x^2 \delta_y^2 (\phi^{n+1} - \phi^n) \quad (7)$$

したがって、式 (3) では上式の右辺第 2 項が誤差として生じる。ただ、 $\phi^{n+1} - \phi^n$ は Δt に比例するので、誤差のオーダーは $O(\Delta t^2)$ であり、クランク・ニコルソン法による時間 2 次精度は失われていない。この誤差は、もとの式を分離したことで生じたものなので分離誤差と呼ばれる。

次のように考えることもできる。式 (2) は次のように表すことができる。

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2 - \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2 + \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^n \quad (8)$$

これは次のように書ける。

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^{n+1} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^n \\ &\quad - \frac{\Delta t^2}{4} \delta_x^2 \delta_y^2 (\phi^{n+1} - \phi^n) \end{aligned} \quad (9)$$

右辺第 2 項を無視すると

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2\right) \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2\right) \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^n \quad (10)$$

これは次のように分離できる。

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2\right) \phi^* &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^n \\ \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \phi^{n+1} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2\right) \phi^* \end{aligned} \quad (11)$$

ここで $\phi^* = \phi^{n+1/2}$ において整理すると、式 (3) が得られる。式 (9) で右辺第 2 項を無視するというのは因数分解を近似することになるため、この方法を近似因数分解 (approximate factorization) 法という。

2 スプリッティング法

ADI 法のように、1 つの方程式を複数の式に分離して解く方法をスプリッティング (splitting) 法という。次式のように、方程式の右辺を 2 つに分けられるとする。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = f_1(\phi) + f_2(\phi) \quad (12)$$

これに対して 1 次精度の陰的時間差分を適用すると

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = f_1^{n+1} + f_2^{n+1} \quad (13)$$

これは次のように分離して表す。

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^*}{\Delta t} &= f_2^{n+1} \end{aligned} \quad (14)$$

あるいは

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* + f_2^{n+1} \end{aligned} \quad (15)$$

右辺を 3 つに分けられる場合も同様である。

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* \\ \frac{\phi^{**} - \phi^*}{\Delta t} &= f_2^{**} \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^*}{\Delta t} &= f_3^{n+1} \end{aligned} \quad (16)$$

あるいは

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* \\ \frac{\phi^{**} - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* + f_2^{**} \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= f_1^* + f_2^{**} + f_3^{n+1} \end{aligned} \quad (17)$$

このように、もとの式をある程度自由に分離して、解きやすい形で扱うことができる。ただし、分離誤差については別途考慮が必要である。

式 (2) について、次式のように表すこともできる。

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} \delta_x^2 - \frac{\Delta t}{2} \delta_y^2\right) \Delta \phi = \Delta t (\delta_x^2 + \delta_y^2) \phi^n \quad (18)$$

ここで $\Delta\phi = \phi^{n+1} - \phi^n$ である. これに近似因数分解法を適用すると

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_x^2\right) \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_y^2\right) \Delta\phi = \Delta t(\delta_x^2 + \delta_y^2)\phi^n \quad (19)$$

この近似による誤差は $O(\Delta t^3)$ で, 時間離散化精度としては 2 次精度である. これは次のように分離できる.

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_x^2\right) \Delta\phi^* &= \Delta t(\delta_x^2 + \delta_y^2)\phi^n \\ \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_y^2\right) \Delta\phi &= \Delta\phi^* \end{aligned} \quad (20)$$

ここで $\Delta\phi^* = \phi^* - \phi^n$ とすると, 次式が得られる.

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \delta_y^2\phi^n \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \frac{1}{2}\delta_y^2(\phi^{n+1} + \phi^n) \end{aligned} \quad (21)$$

ただし, 第 2 式は第 1 式から得られる次式

$$\Delta\phi^* = \frac{\Delta t}{2}\Delta\phi^* + \Delta t(\delta_x^2 + \delta_y^2)\phi^n \quad (22)$$

が用いられている. 次のように表すこともできる.

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \delta_y^2\phi^n \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^*}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_y^2(\phi^{n+1} - \phi^n) \end{aligned} \quad (23)$$

3 次元でも同様に考えられる. クランク・ニコルソン法で離散化した式は次式になる.

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(\delta_x^2 + \delta_y^2 + \delta_z^2)(\phi^{n+1} + \phi^n) \quad (24)$$

これは次式で表される.

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_x^2\right) \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_y^2\right) \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_z^2\right) \Delta\phi &= \Delta t(\delta_x^2 + \delta_y^2 + \delta_z^2)\phi^n \\ &\quad - \frac{\Delta t^2}{4}(\delta_x^2\delta_y^2 + \delta_y^2\delta_z^2 + \delta_x^2\delta_z^2)\Delta\phi \\ &\quad + \frac{\Delta t^3}{8}\delta_x^2\delta_y^2\delta_z^2\Delta\phi \end{aligned} \quad (25)$$

近似因数分解法を適用した場合の誤差のオーダーは $O(\Delta t^3)$ 、時間離散化精度としては 2 次精度である. 上式の右辺 2 項以降を無視すると, 次のように分離できる.

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_x^2\right) \Delta\phi^* &= \Delta t(\delta_x^2 + \delta_y^2 + \delta_z^2)\phi^n \\ \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_y^2\right) \Delta\phi^{**} &= \Delta\phi^* \\ \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\delta_z^2\right) \Delta\phi &= \Delta\phi^{**} \end{aligned} \quad (26)$$

ここで $\Delta\phi^* = \phi^* - \phi^n$, $\Delta\phi^{**} = \phi^{**} - \phi^n$ とすると, 次式が得られる.

$$\begin{aligned}\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \delta_y^2\phi^n + \delta_z^2\phi^n \\ \frac{\phi^{**} - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \frac{1}{2}\delta_y^2(\phi^{**} + \phi^n) + \delta_z^2\phi^n \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \frac{1}{2}\delta_y^2(\phi^{**} + \phi^n) + \frac{1}{2}\delta_z^2(\phi^{n+1} + \phi^n)\end{aligned}\quad (27)$$

あるいは

$$\begin{aligned}\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_x^2(\phi^* + \phi^n) + \delta_y^2\phi^n + \delta_z^2\phi^n \\ \frac{\phi^{**} - \phi^*}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_y^2(\phi^{**} - \phi^n) \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^{**}}{\Delta t} &= \frac{1}{2}\delta_z^2(\phi^{n+1} - \phi^n)\end{aligned}\quad (28)$$

上記で見た例では, 近似因数分解法の誤差のオーダーは $O(\Delta t^3)$ であったが, これは $\Delta\phi$ についての式になっているためである. 単純に ϕ^{n+1} についての式に近似因数分解法を適用すると, 分離誤差が $O(\Delta t^2)$ となるため時間離散化精度としては 1 次精度となり, せっかくのクランク・ニコルソン法の 2 次精度が台無しになるので注意が必要である.

3 移流拡散方程式への適用

移流拡散方程式

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi u) = \nabla \cdot (\nabla\phi) \quad (29)$$

へのスプリットティング法の適用を考える. 次のように離散化したものとする.

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + A\phi^{n+1} = L\phi^{n+1} \quad (30)$$

ここで A , L はそれぞれ対流項の発散, 拡散項のラプラシアンについての離散化を表す演算子である. これを次のように対流と拡散で分離して解く方法が考えられる.

$$\begin{aligned}\frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= -A\phi^* \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^*}{\Delta t} &= L\phi^{n+1}\end{aligned}\quad (31)$$

もし対流項が陽的に扱われていれば, 上式は (第 1 式の右辺の ϕ^* が ϕ^n となり) 元の離散化式を回復できるため問題ないが, 上のように陰的に扱われている場合は分離誤差が生じる. 元の式は次のように書き換えられる.

$$(1 + \Delta t A)(1 - \Delta t L)\phi^{n+1} = \phi^n - \Delta t^2 AL\phi^{n+1} \quad (32)$$

上式の右辺第 2 項を無視すれば上の分離式が得られるが、これは時間離散化精度としては 1 次精度になる。

分離誤差を小さくするには、 $\Delta\phi = \phi^{n+1} - \phi^n$ の式で考える。

$$(1 + \Delta t A)(1 - \Delta t L)\Delta\phi = \Delta t(L - A)\phi^n - \Delta t^2 AL\Delta\phi \quad (33)$$

$\Delta\phi$ が Δt に比例するため、誤差のオーダーは $O(\Delta t^3)$ 、時間離散化精度は 2 次精度になる。左辺第 2 項を無視して分離すると

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t A)\Delta\phi^* &= \Delta t(L - A)\phi^n \\ (1 - \Delta t L)\Delta\phi &= \Delta\phi^* \end{aligned} \quad (34)$$

これより次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= -A\phi^* + L\phi^n \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= -A\phi^* + L\phi^{n+1} \end{aligned} \quad (35)$$

あるいは

$$\begin{aligned} \frac{\phi^* - \phi^n}{\Delta t} &= -A\phi^* + L\phi^n \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^*}{\Delta t} &= L(\phi^{n+1} - \phi^n) \end{aligned} \quad (36)$$

参考文献

- [1] J. Douglas Jr. : Alternating Direction Methods for Three Space Variables, Numerische Mathematik, Vol. 4, pp. 41-63, 1962.
- [2] J.H. ファーツィーガー, M. ペリッチ : コンピュータによる流体力学, シュプリンガー・フェアラーク東京, 2003.