# 数値計算の基礎

―　簡単なモデルを例にしたシミュレーションの手順　―

大気の運動は他の自然現象と同じようにニュートンの第 2 法則や熱力学第 1 法則といった物理法則によって支配される。これらの物理法則は、風や気温などの大気の状態を表す変数（気象変数と呼ぶ）がどのように時間変化するかを示す式で、数学的には時間及び空間に関する偏導関数を含んだ関係式（偏微分方程式という）で表される。また、物理法則を表現するこれらの偏微分方程式を数値シミュレーションの分野ではモデル方程式と呼んでいる。

原理的にはモデル方程式を解く（積分する）ことができれば、大気の状態を規定する気象変数が時間と空間の関数として決まり、大気の時空間における振る舞いを知ることができる。しかし、モデル方程式は少数の例外を除けば解析的（手計算）に解くことができない。そこで、モデル方程式を数値化して（四則演算の式で近似して）、その結果の代数式をコンピュータで解く（コンピュータでは微分、積分を直接扱うことができない）ことがなされる。これが数値シミュレーションで一般的に行われていることである。

本講義の目的は、簡単な微分方程式の数値解法の例を通して、数値シミュレーションに用いられる数値計算法の基礎を学ぶとともに数値シミュレーションにおいてどのような考え方の基にどのようなことが行われているかを理解することにある。しかし、数値シミュレーションに用いられる数値計算法は多岐にわたり、限られた時間の中ではそのほんの一部しか紹介できないであろうし、個々の数値計算法を個別に取り上げても纏りのないものになってしまうであろう。そこで、纏りをもたせるために本講義では簡単な 2 次元数値予報モデルの構築を具体的な目標に据え、それに向けて必要な最小限の道具立てを順に学ぶ形式とした。

具体的に学ぶ内容の概要は以下に示す通りであるが、①を除いた各問題は、

- 問題設定
- 差分法による数値化
- 計算手順
- FORTRAN によるプログラム例
- 実行結果

の形式で解説する。

①差分法（格子点法）

微分方程式中に現れる導関数を差分商に置き換えることにより近似方程式を作成し、それを解いて微分方程式の近似解を求める方法を差分法（格子点法）という。差分法は

微分方程式を数値化する代表的な方法で、スペクトル法や有限要素法などの他の方法に較べて直感的にも理解が容易である。また、導関数は元来差分商の極限として定義されているので、差分法は微分方程式の近似解法としてはきわめて自然なものであり、現在も広く使われている方法である。差分法において使われる差分商は様々な特性と精度を持つものが考案されているが、ここでは以下の各問題の数値解法に必要な範囲の基本的な差分商近似とその精度ついて述べる。

②１次元線形移流方程式

気象学において大気は流体として取り扱われるが、その流体の運動において移流は非常に重要な過程である。１次元線形移流方程式は、流体が一方向に一定の速さで流れる様を表現し、数学的には時間と空間に関する１階の偏導関数の両方を含む最も簡単な偏微分方程式である。そういう意味では、１次元線形移流方程式は最も簡単化した大気の予報モデルと見ることができ、その数値化はより複雑な予報モデルの数値化の雛形といえるものである。

ここでは、時刻 t=0 において従属変数の分布を与えて、その後従属変数の分布が１次元線形移流方程式に従ってどのように時間変化するかという問題（初期値問題という）に①の差分法を適用して数値的に解を求めることを考える。

③連立１次方程式の数値解法

理工学の分野に現れる問題では、連立１次方程式を解くことに帰着されるものが非常に多く、しかも未知数の数が数万以上に達することもある。このような問題では手計算で解くのは事実上不可能で、コンピュータの使用を前提とした数値解法を必要とする。④、⑤、⑥に登場する微分方程式の数値解法の問題は、いずれも非常に未知数の多い連立１次方程式を解くことに帰着される。ここではその準備として、連立１次方程式の数値解法の１つである Gauss の消去法の原理と計算手順について述べる。Gauss の消去法は最もよく知られた標準的な解法で、一般的な解法としては最も効率がよく信頼性も高いものである。

④２階常微分方程式の境界値問題

⑤の問題の準備として、２階常微分方程式の２点境界値問題を考える。２階常微分方程式の２点境界値問題は、①の差分法を適用して微分方程式に現れる２階の導関数を２階の中央差分商で近似すると、全格子点における従属変数の値を未知数とした連立１次方程式を解く問題に帰着する。しかも、この連立１次方程式の係数行列は特殊な形をしており対角成分と準対角成分以外はすべて０（三重対角行列という）である。また、得られた連立１次方程式は③に述べた Gauss の消去法を使って解くことができる。

⑤ポアソン方程式の境界値問題

２次元のポアソン方程式はｘとｙに関する２階の偏導関数を含む偏微分方程式である。言わば④を２次元の場合にした問題であり、①の差分法を適用してｘとｙに関する２階の導関数のそれぞれを２階の中央差分商で近似すると、④と同様に連立１次方程式を解く問題に帰着する。ただし、この場合の連立１次方程式の未知数は２次元空間に設定した全格子点における従属変数の格子点値であり、④の１次元の場合にくらべて解くべき連立１次方程式の未知数の数は格段に多いものとなる。例えばｘ、ｙの方向のそれぞれの格子点数が 10 であると連立１次方程式の未知数の数は 10x10=100、それぞれの方向の格子点数が増えて 100 の場合の未知数の数は 100x100=10000 にもなる。未知数の数が１万個の連立１次方程式に対する係数行列の要素の数は１万 ｘ１万＝１億となってしまい、係数行列を蓄えておくだけでも大きな記憶スペースを必要とする。このような巨大な係数行列を持つ連立１次方程式に対する効率的な数値解法としては過緩和法などが知られており、Gauss の消去法は必ずしも効率的な方法とはいえないが、ここでも敢て④と同様に Gauss の消去法を使って解く手順を示す。

⑥非発散順圧モデル

ここでは、この講義の最終到達目標である最も簡単な２次元数値予報モデルの構築を考える。必要な道具立ては①～⑤で十分準備できたのでそれらを組み合わせることで比較的簡単に数値予報モデルを構築することができる。

非発散順圧モデルは、高・低気圧の水平方向の大まかな動きを予報することができる最も簡単な２次元数値予報モデルである。モデル方程式の非発散順圧うず度方程式は、うず度の時間変化率が絶対うず度の水平移流から決まる形をしており、その名が示す通りうず度の予報方程式である。また、次元の違いはあるが②の１次元線形移流方程式と基本的には同じ形をしており、そう意味では時間積分そのもののやり方は②の１次元線形移流方程式の場合と同じである。

時間積分の各タイムステップにおける計算手順は、(1)流線関数を空間微分して風やうず度場を計算する。(2)(1)の結果を使って移流項を計算する。(3)(2)の結果うず度の時間変化率が求められる。(4)ポアソン方程式を解いてうず度の時間変化率から流線関数の時間変化率を求める。(5)(4)の流線関数の時間変化率から適当な時間差分近似を使って１タイムステップ先の流線関数を求める。以後のタイムステップでは、(1)～(5)の手順を繰り返せばよい。

なお、各タイムステップの(4)に登場するポアソン方程式の境界値問題の数値解法は、準備した道具立てを使うということで⑤の Gauss の消去法を使った計算手順で紹介するが、⑤でも述べたようにこの方法は格子点を増やすとともに非効率となり各タイムステップの計算時間が飛躍的に増大するので、過緩和法を使ったプログラム例も紹介する。