

偏微分方程式の数値解法

中島 研吾

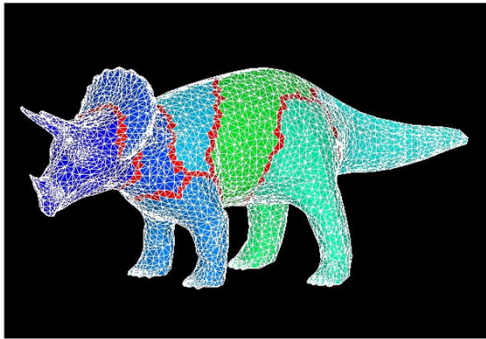
東京大学情報基盤センター

同 大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻

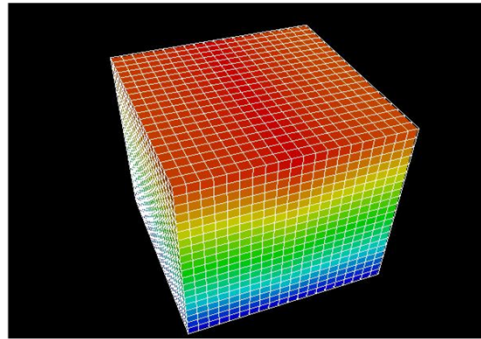
数値解析 (科目番号 500080)

科学技術計算の方法

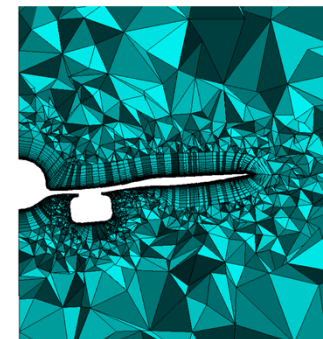
- 偏微分方程式 (Partial Differential Equations: PDE) 数値解
- メッシュ, 格子, 粒子 (mesh, grid, particle)
 - 大規模な連立一次方程式を解く必要あり
 - 細かいメッシュほど計算量は多いが精度の良い解



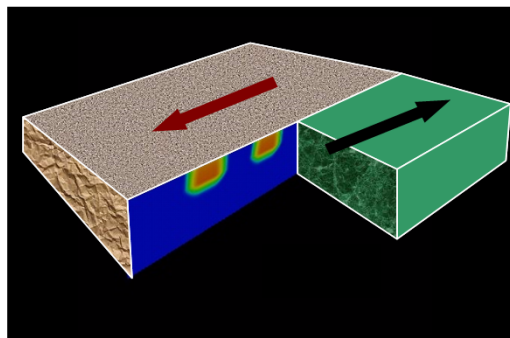
有限要素法
Finite Element Method
FEM



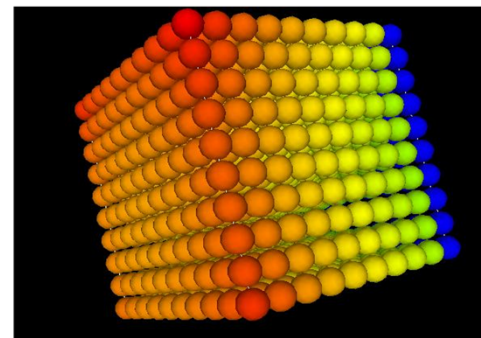
差分法
Finite Difference Method
FDM



有限体積法
Finite Volume Method
FVM



境界要素法
Boundary Element Method
BEM



個別要素法
Discrete Element Method
DEM

- 背景
- 偏微分方程式と物理現象
- 差分法 (Finite-Difference Method, FDM)
- 例1: 定常移流拡散方程式
- 例2: 非定常移流方程式
- 例3: 非定常拡散方程式
- レポート課題出題

数理モデルの構成法(1/2)

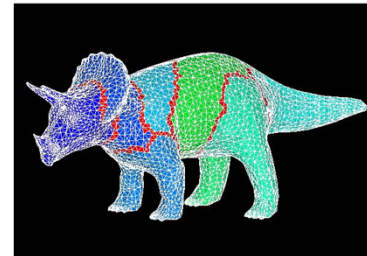
登坂・大西「偏微分方程式の数値シミュレーション」(東大出版会)

- 自然現象の理想化, 単純化, 定量的な解析
- 偏微分方程式 (Partial Differential Equations, PDE)
 - 対象領域の微小部分, 自然法則の記述 \Rightarrow 局所的方法 (local)
 - 支配方程式: governing equation
 - 境界条件: boundary condition
 - 初期条件: initial condition
- 積分方程式 (Integral Equations)
 - 全体的手法 (global)
 - グリーン関数 (Green function), 基本解 (fundamental function) によって偏微分方程式を積分方程式に書き換える
- 行列計算
 - 偏微分方程式: 局所的 \Rightarrow 疎行列
 - 積分方程式: 全体的 \Rightarrow 密行列

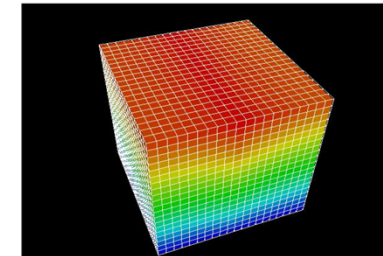
数理モデルの構成法 (2/2)

登坂・大西「偏微分方程式の数値シミュレーション」(東大出版会)

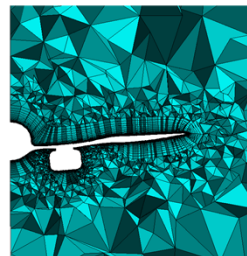
- 偏微分方程式 (Partial Differential Equations, PDE) : local
 - 有限要素法, (有限)差分法, 有限体積法, (個別要素法)
- 積分方程式 (Integral Equations) : global
 - 境界要素法
- 条件的手法 : conditional
 - 変分法 (Variational Method)
 - 汎関数 (functional) の極値問題
 - 例 : 最小ポテンシャルエネルギーの原理



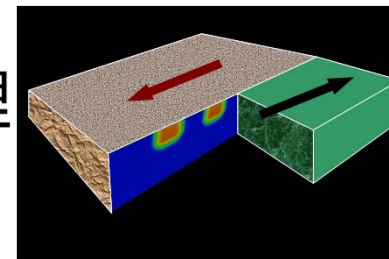
有限要素法
Finite Element Method
FEM



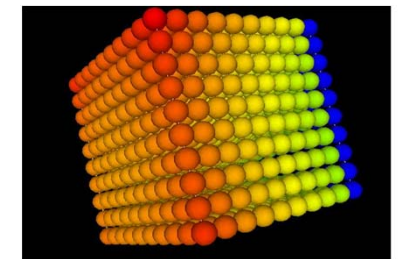
差分法
Finite Difference Method
FDM



有限体積法
Finite Volume Method
FVM



境界要素法
Boundary Element Method
BEM

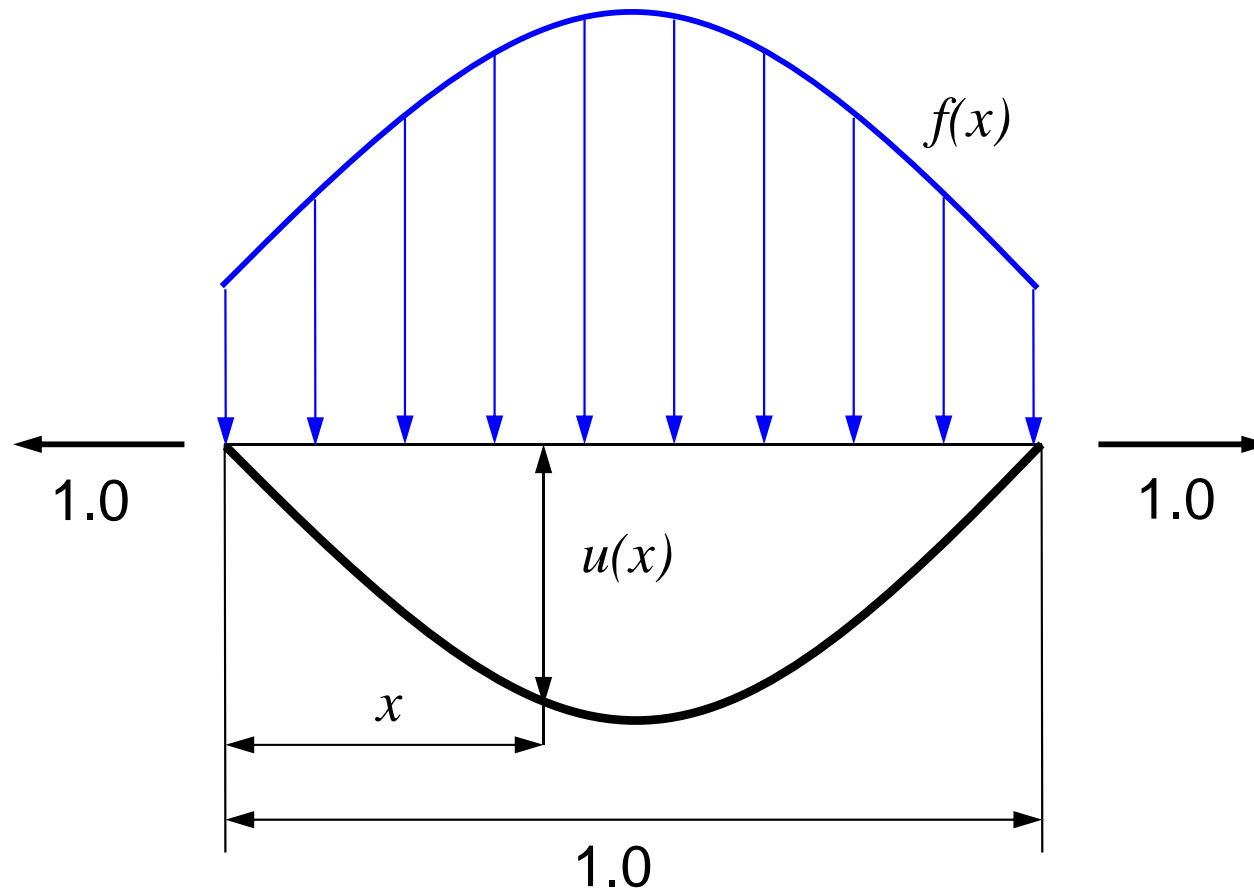


個別要素法
Discrete Element Method
DEM

例題

登坂・大西「偏微分方程式の数値シミュレーション」(東大出版会)

- 単位大きさの張力のもとで水平に張られた長さ1の糸に鉛直分布加重 $f(x)$ が加わった場合の糸の釣り合い形状 u を求めよ



局所的方法：(偏)微分方程式

登坂・大西「偏微分方程式の数値シミュレーション」(東大出版会)

- 糸の微小部分 Δx に作用する鉛直方向の力のつり合い(張力:1)
 - 位置 x における糸の傾きを $\theta(x)$ とする

$$1 \cdot \sin(\theta + \Delta\theta) - 1 \cdot \sin\theta + f(x)\Delta s = 0$$

$u(x) \Rightarrow 0, \theta \Rightarrow 0$ 微小な変位を仮定

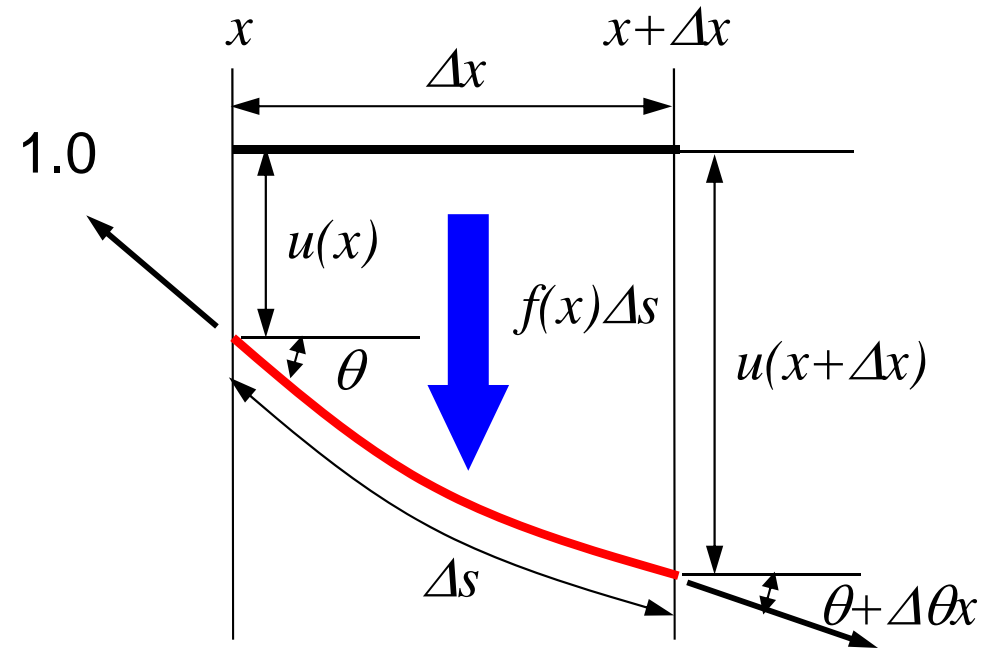
$$\sin\theta \approx \tan\theta = \frac{du}{dx} \Big|_{x=x}$$

$$\sin(\theta + \Delta\theta) \approx \tan(\theta + \Delta\theta) = \frac{du}{dx} \Big|_{x=x+\Delta x}$$

$$\approx \frac{du}{dx} \Big|_{x=x} + \frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x=x} \Delta x$$

$$\Delta s \approx \sqrt{\Delta x^2 + \{u(x+\Delta x) - u(x)\}^2} = \sqrt{1 + \left(\frac{du}{dx}\right)^2} \Delta x \approx \Delta x$$

$$\therefore \frac{d^2u}{dx^2} + f(x) = 0$$



全体的方法：積分方程式

登坂・大西「偏微分方程式の数値シミュレーション」(東大出版会)

- 任意の位置 ξ に単位力が作用したときの点 x における変位を $G(x, \xi)$ と表す
 - 従って $x = \xi$ における微小部分 $\Delta\xi$ には $f(\xi)\Delta\xi$ なる力が作用している
- 分布加重によって点 x において引き起こされる変位は各点 ξ に作用する加重による変位を全て重ね合わせればよい:

$$u(x) = \int_0^1 G(x, \xi) f(\xi) d\xi$$

- このような関数 $G(x, \xi)$ は点 ξ に単位強さが作用したときの点 x における変化量を表す関数
 - 影響関数 (influence function), グリーン関数 (Green's function)
 - 未知関数はグリーン関数の具体的な形がわかれば計算できる

条件的方法：変分表現

登坂・大西「偏微分方程式の数値シミュレーション」(東大出版会)

- 糸の有するポテンシャルエネルギー最小の原理

- 糸の伸びによるエネルギー

$$1 \cdot \left\{ \int_0^1 ds - \int_0^1 dx \right\} = \int_0^1 \sqrt{1 + \left(\frac{du}{dx} \right)^2} dx - 1 \approx \frac{1}{2} \int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx$$

- 分布加重による外力のなす仕事

$$\int_0^1 [f(x) \cdot u(x)] dx$$

- ポテンシャルエネルギーの総和：汎関数 (functional, 関数の関数)

$$\begin{aligned} J[u] &= \frac{1}{2} \int_0^1 \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx - \int_0^1 [f(x) \cdot u(x)] dx \\ &= \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - f(x) \cdot u(x) \right\} dx \end{aligned}$$

- 汎関数の極値を与える (停留させる: stationarize) 方程式

⇒ Euler方程式

- 結局微分方程式を解くのと同じことになる: 大学院講義

- 背景
- **偏微分方程式と物理現象**
- 差分法 (Finite-Difference Method, FDM)
- 例1: 定常移流拡散方程式
- 例2: 非定常移流方程式
- 例3: 非定常拡散方程式
- レポート課題出題

微分方程式の分類 (1/5)

- 3個の独立変数 (x_1, x_2, x_3) , 未知関数 $u(x_1, x_2, x_3)$
- その2階までの偏導関数を含む方程式 $G=0$ を2階の偏微分方程式 (Second order PDE) と言う:

$$G\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_3}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \frac{\partial u}{\partial x_3}, u, x_1, x_2, x_3\right) = 0$$

- 方程式が未知関数と全ての偏導関数について線形であるとき, 方程式は線形 (linear) であると言う。線形でない方程式は非線形 (non-linear)。

$$\sum_{i,j=1}^3 \left[a_{ij}(x_1, x_2, x_3) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} \right] + \sum_{i=1}^3 \left[b_i(x_1, x_2, x_3) \frac{\partial u}{\partial x_i} \right] + c(x_1, x_2, x_3) = 0$$

- 恒等的に $c=0$ の場合方程式は同次または斉次 (homogeneous), そうでない場合非同次または非斉次 (inhomogeneous)

微分方程式の分類(2/5)

- 未知関数 u に十分な滑らかさを仮定することにより下記が成立:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_i}$$

- 実数 a_{ij} について対称性 $a_{ij} = a_{ji}$ を仮定できるため, 以下の3次の正方行列 \mathbf{A} の固有値は全て実数:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

- 点 $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$ における行列を $\mathbf{A}(\mathbf{x})$, その固有値分布を考える:
 - 0固有値一つ以上含む: 方程式は点 \mathbf{x} において放物型 (parabolic)
 - 異符号固有値含む: 方程式は点 \mathbf{x} において双曲型 (hyperbolic)
 - 全固有値が同符号: 方程式は点 \mathbf{x} において楕円型 (elliptic)
 - 領域の全ての点において全固有値が同符号: 楕円型方程式 (双曲, 放物も同様)₁₂

微分方程式の分類 (3/5)

- 特に独立変数が2つ (x, y) の場合:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial u}{\partial y} + \gamma u = c(x, y)$$

- 正方行列 \mathbf{A} は以下のようになる:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A & B \\ B & C \end{pmatrix}$$

- 固有値を λ とすると, この行列の特性方程式は, 以下のように表されるため:

$$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = \begin{vmatrix} A - \lambda & B \\ B & C - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (A + C)\lambda + AC - B^2$$

- $AC - B^2$
 - $= 0$: 放物型, < 0 : 双曲型, > 0 : 楕円型

微分方程式の分類(4/5)

- 適当な変数変換を施して:

- 放物型: $\frac{\partial^2 u}{\partial X^2} - \frac{\partial u}{\partial Y} + \dots = 0$

- 双曲型: $\frac{\partial^2 u}{\partial X^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial Y^2} + \dots = 0$

- 楕円型: $\frac{\partial^2 u}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial Y^2} + \dots = 0$

微分方程式の分類 (5/5)

- 2階の偏微分方程式で記述される現象は多い

- 楕円型

- 定常熱伝導, ポアソン・ラプラス方程式 $\lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + Q = 0$

- ヘルムホルツ方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + k^2 u = 0$

- 放物型

- 非定常熱伝導方程式 $\rho c \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + Q$

- 双曲型

- 波動方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$

- 非定常移流方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = c \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S$

例：熱・物質の移動

- 熱の移動

- 伝導(熱伝導)(conduction)

- 固体, 液体, 気体⇒温度差・勾配

- 対流(convection)

- 液体, 気体⇒媒質の流れ

- 放射(輻射)(radiation)

- 電磁波(真空中でも伝わる)

- 物質の移動

- コーヒーにミルクを入れてかき混ぜる

- 拡散(diffusion)

- かき混ぜなくても「じわっと」広がる

- 移流(convection)

- 流れによって混ざる
- 攪拌, 注入によって引き起こされる流れ



熱伝導・物質拡散現象

● 熱伝導

- 物理量: u
- 熱流束 (heat flux: 熱流量の密度): q
- フーリエ (Fourier) の法則
 - (λ : 熱伝導係数)

$$q = -\lambda \frac{\partial u}{\partial x}$$

– 熱伝導方程式

- (ρ : 密度, c : 比熱)

$$\rho c \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)$$

熱伝導係数
一様の場合

● 物質拡散

- 物理量: C
- 物質流束 (mass flux: 物質流量の密度): J
- フィック (Fick) の法則
 - (D : 拡散係数)

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x}$$

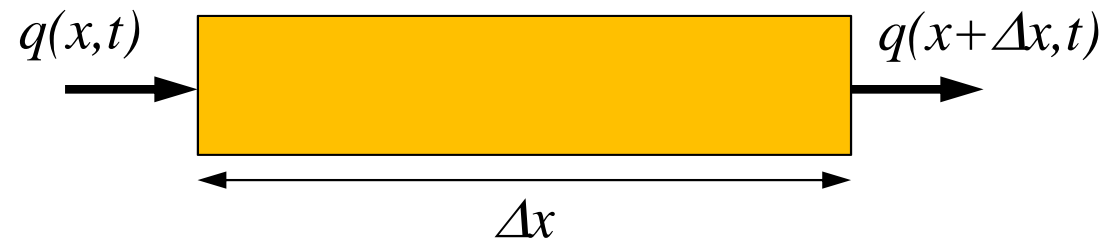
– 拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)$$

拡散係数
一様の場合

熱伝導方程式の導出 (1/2)

- 一様な単位断面積を有する長さ1の棒
 - 側面は断熱材料で覆われている
 - 任意の場所と時間での温度 $u(x, t)$ を定めるための数理モデル
 - 温度: T (temperature) と書くこともある



- フーリエ (Fourier) の法則

- ある断面に単位時間当たり流入する熱量 (熱流束) $q(x, t)$ はその点における温度勾配に比例

- 比例定数 \Rightarrow 熱伝導係数 λ

$$q(x, t) = -\lambda \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$$

- 断面 $x + \Delta x$ から流出する単位時間あたり熱量

$$q(x + \Delta x, t) = -\lambda \frac{\partial u(x + \Delta x, t)}{\partial x} \approx -\lambda \left\{ \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta x \right\}$$

$$= q(x, t) - \lambda \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta x$$

熱伝導方程式の導出 (2/2)

- 微小部分 Δx に単位時間当たり蓄えられる熱量 Δq

$$\Delta q = q(x + \Delta x, t) - q(x, t) \approx \lambda \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \Delta x$$

- エネルギー保存則により, 蓄えられた熱量は全て微小部分の温度上昇に費やされる

$$\Delta q = c \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right) (\rho \Delta x) = \rho c \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \Delta x \quad \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \quad \begin{array}{l} \text{単位時間当たり} \\ \text{温度上昇} \end{array}$$

$$\therefore \rho c \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- 強さ $Q(x, t)$ の熱源 (heat source) が存在する場合

$$\rho c \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Q$$

初期条件・境界条件

Initial/Boundary Conditions (B.C.ということはある)

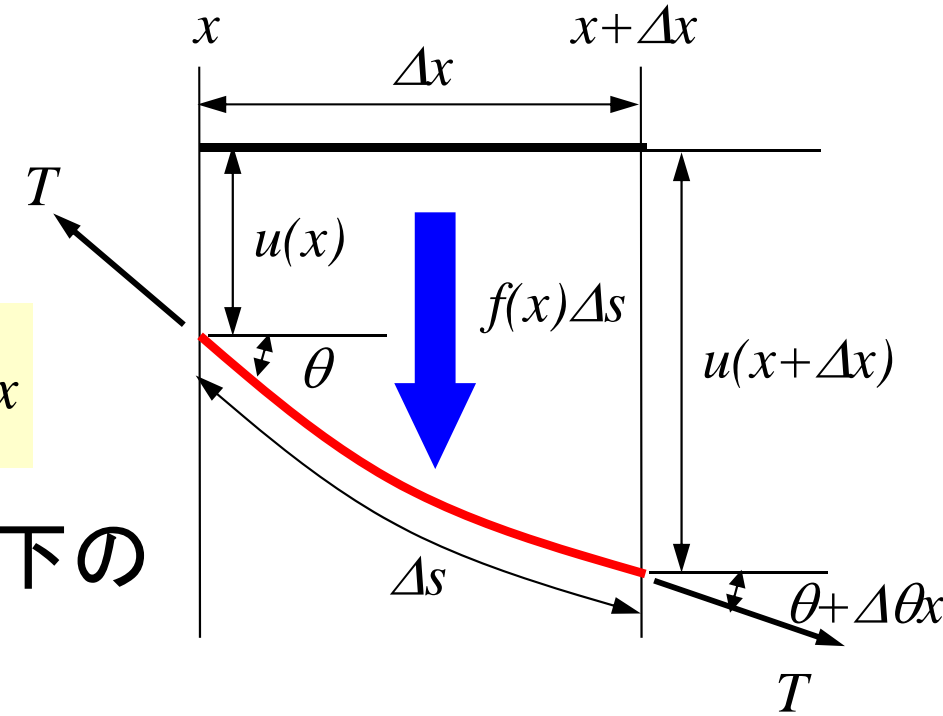
- 時間発展 (time-marching) の有無
 - 非定常 (unsteady, transient), 時間依存 (time dependent) : 初期・境界条件
 - 定常 (steady) : 境界条件
- 第1種境界条件, ディリクレ (Dirichlet) 条件
 - 境界で従属変数を規定 : 温度
 - 固体力学であれば変位固定境界
- 第2種境界条件, ノイマン (Neumann) 条件
 - 境界で従属変数の「勾配」を規定 : 熱量
 - 断熱 (熱量 = 0)
- 第3種境界条件, ロビン (Robin) 条件
 - 第1種と第2種の一次結合
 - 電磁気学の分野で広く使われ, インピーダンス境界条件とも呼ばれる

波動方程式の導出

- 糸の微小部分 Δx に作用する鉛直方向の力のつり合い (張力: T)

- ニュートンの運動の第2法則

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Delta x = T \cdot \sin(\theta + \Delta\theta) - T \cdot \sin\theta + f(x)\Delta x$$



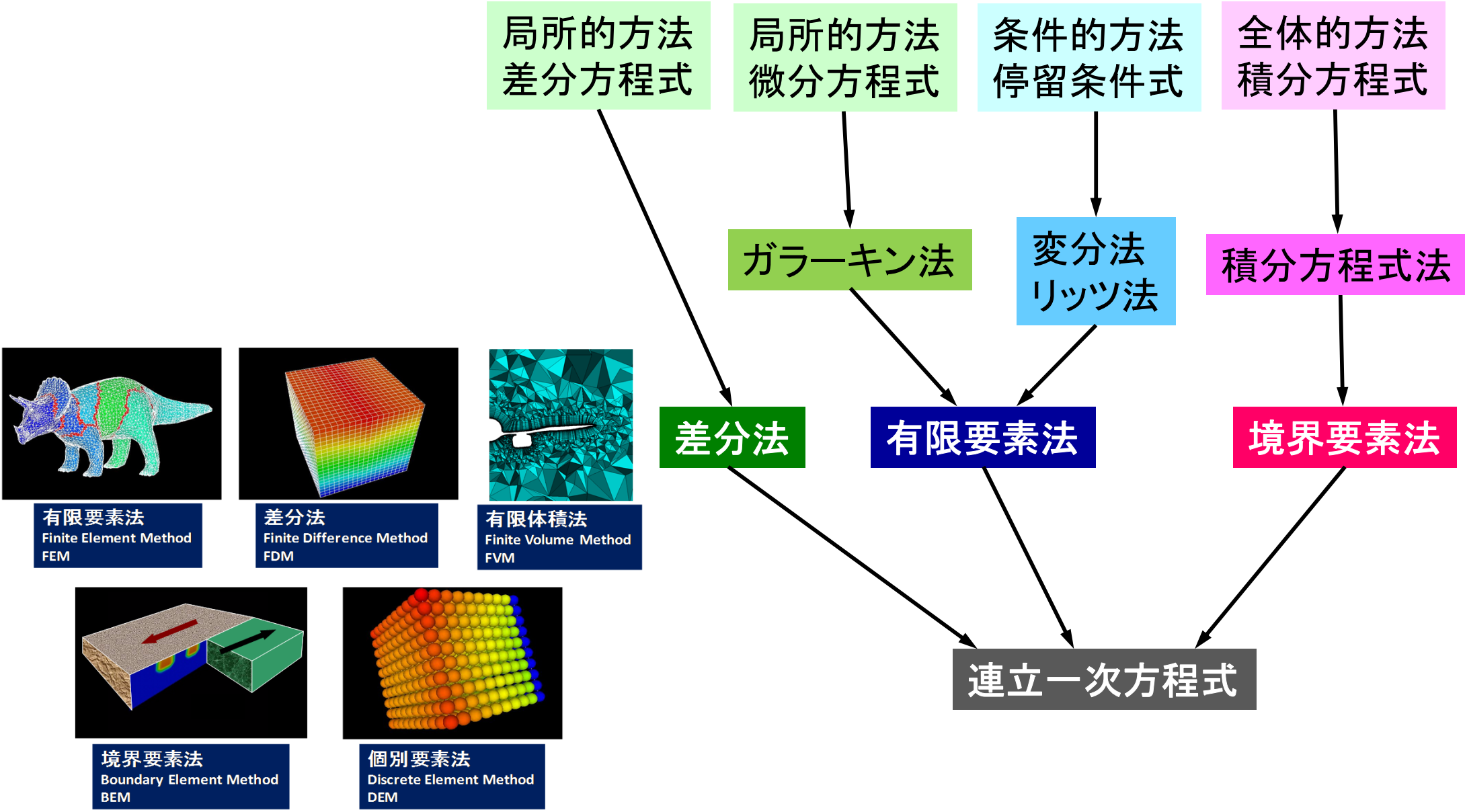
- 変位 u が微小であると仮定すると以下の微分方程式が得られる:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x) \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \left(c^2 = \frac{T}{\rho} \right)$$

分布加重が作用しない場合

- 背景
- 偏微分方程式と物理現象
- **差分法**
- 例1: 定常移流拡散方程式
- 例2: 非定常移流方程式
- 例3: 非定常拡散方程式
- レポート課題出題

様々な数値計算の手法



差分法と有限要素法

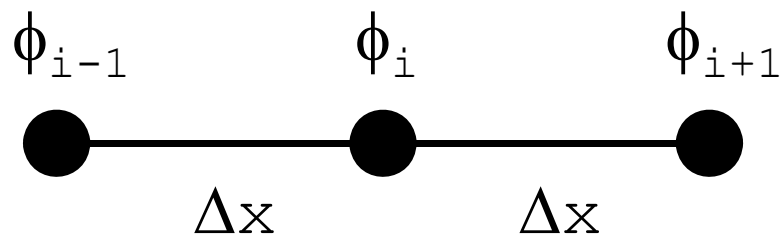
- 偏微分方程式の近似解法
 - 全領域を小領域(メッシュ, 要素)に分割する
 - 離散化(Discretization)
- 差分法
 - 微分係数を直接近似
 - Taylor展開

差分法

差分法とは

- 差分法 : Finite Difference Method
- マクロな微分
 - 微分係数を数値的に近似する手法
- 以下のような一次元系を考える

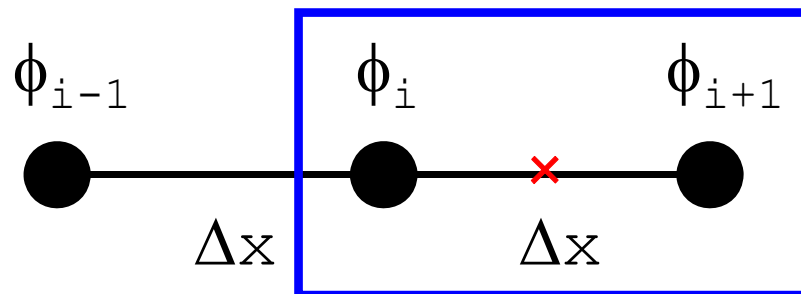
$$\begin{aligned}\frac{d\phi}{dx} &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x} \\ &\approx \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x}\end{aligned}$$



差分法

直感的な定義

- \times (i と $i+1$ の中点)における微分係数



$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{i+1/2} \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$$

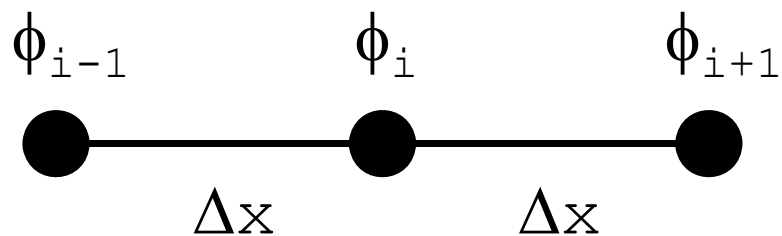
$\Delta x \rightarrow 0$ となると微分係数の
定義そのもの

- i における二階微分係数

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_i \approx \frac{\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{i+1/2} - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2}$$

差分法

厳密な定義: Taylor展開(1/3)

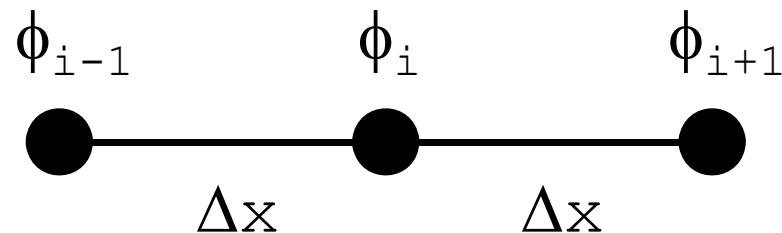


$$\phi_{i+1} = \phi_i + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

差分法

厳密な定義: Taylor展開 (2/3)



前進差分

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

$$\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

打ち切り誤差が
 Δx のオーダー
(一次精度)

後退差分

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

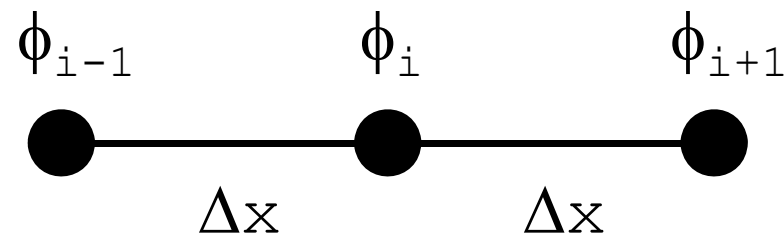
$$\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

打ち切り誤差が
 Δx のオーダー
(一次精度)

差分法

厳密な定義: Taylor展開 (3/3)

中央差分, 中心差分



$$\phi_{i+1} = \phi_i + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

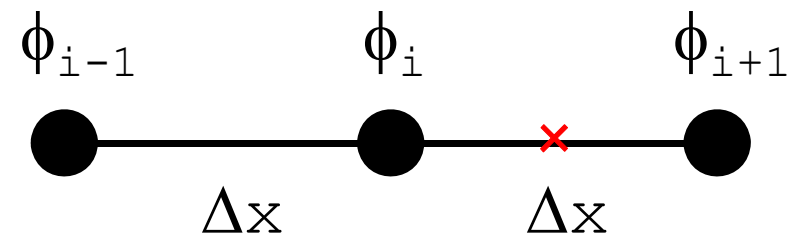
$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

$$\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{2 \times (\Delta x)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \dots$$

打ち切り誤差が
 $(\Delta x)^2$ のオーダー
 (二次精度)

差分法

直感的な定義：実は二次精度



$$\phi_{i+1} = \phi_{i+1/2} + \Delta x / 2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} + \frac{(\Delta x / 2)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{i+1/2} + \frac{(\Delta x / 2)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{i+1/2} \dots$$

$$\phi_i = \phi_{i+1/2} - \Delta x / 2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} + \frac{(\Delta x / 2)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{i+1/2} - \frac{(\Delta x / 2)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{i+1/2} \dots$$

$$\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1/2} + \frac{2 \times (\Delta x / 2)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_{i+1/2} \dots$$

打ち切り誤差が
(Δx)²のオーダー
(二次精度)

二点間の midpoint で二次精度，それ以外の点では一次精度・・・ということもできる。
 Δx が均一でない場合も同様のことが起こる。

差分法

一次元定常熱伝導方程式 要素単位の線形方程式

- 差分法による離散化

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \approx \frac{\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i+1/2} - \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2}$$

- 各要素における線形方程式は以下のような形になる

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + BF = 0$$



$$\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + BF(i) = 0 \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$\frac{1}{\Delta x^2} \phi_{i+1} - \frac{2}{\Delta x^2} \phi_i + \frac{1}{\Delta x^2} \phi_{i-1} + BF(i) = 0 \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$A_L(i) \times \phi_{i-1} + A_D(i) \times \phi_i + A_R(i) \times \phi_{i+1} = BF(i) \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$A_L(i) = \frac{1}{\Delta x^2}, \quad A_D(i) = -\frac{2}{\Delta x^2}, \quad A_R(i) = \frac{1}{\Delta x^2}$$

差分法と有限要素法

- 偏微分方程式の近似解法
 - 全領域を小領域(メッシュ, 要素)に分割する
 - 離散化(Discretization)
- 差分法
 - 微分係数を直接近似
 - Taylor展開
- 有限要素法
 - Finite Element Method(FEM)
 - 積分形式で定式化された「弱形式(weak form)」を解く
 - 微分方程式の解(古典解)に対して「弱解(weak solution)」
 - 重み付き残差法, 変分法
 - 複雑形状への適用
 - 差分でもある程度の複雑形状は扱うことが可能

差分法で複雑形状を扱う例

Handbook of Grid Generation

座標変換

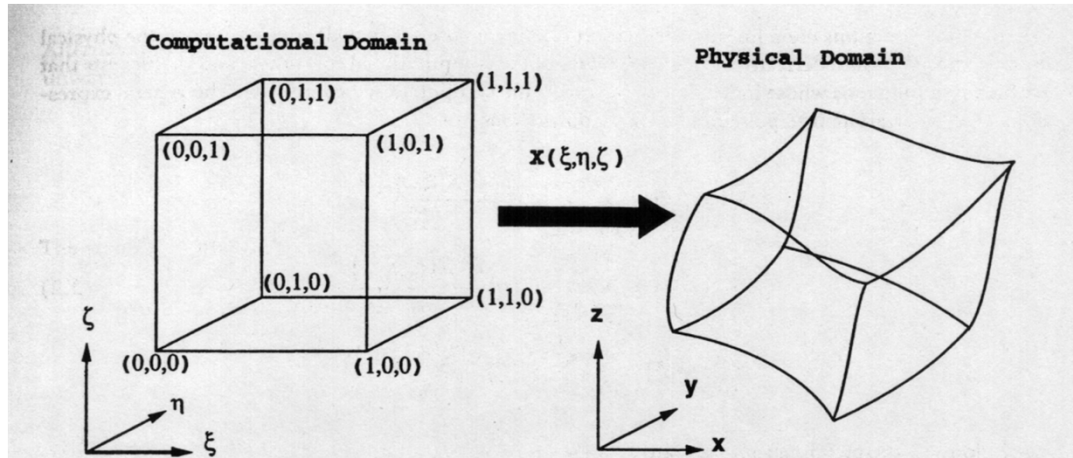


FIGURE 3.1 Transformation between computational and physical domains.

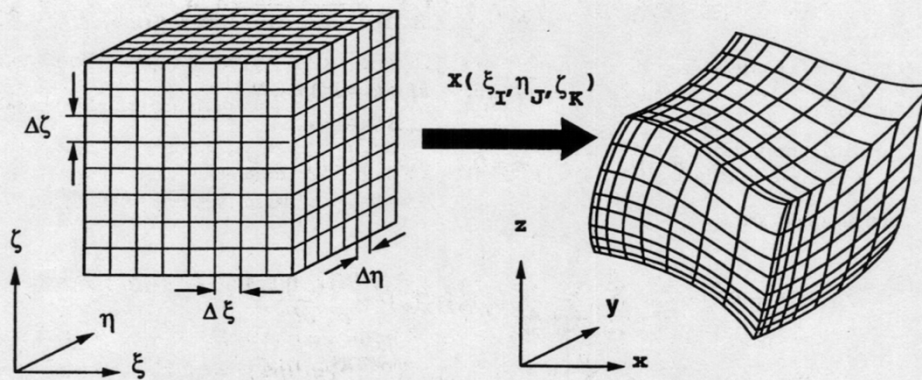
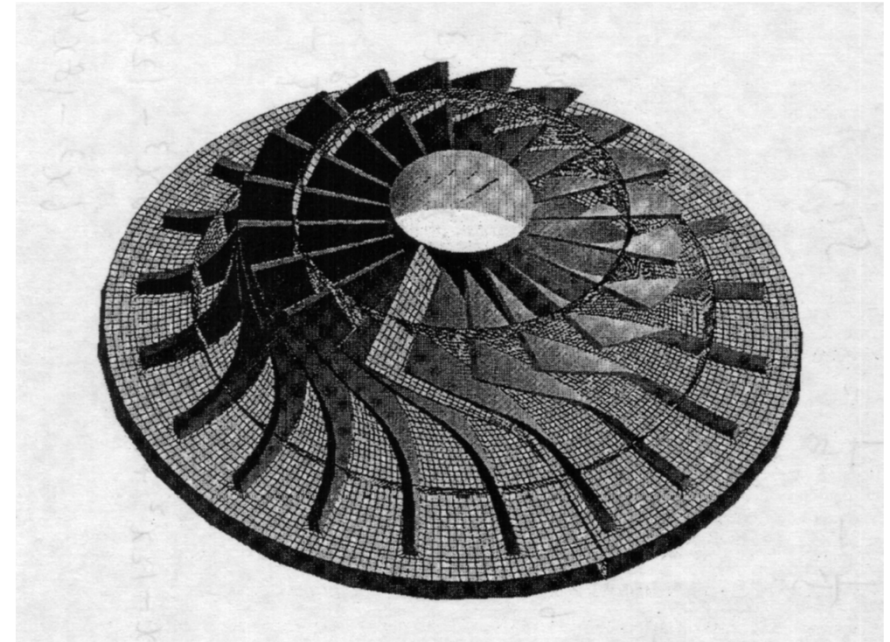


FIGURE 3.2 Grids in computational and physical domains.



- 背景
- 偏微分方程式と物理現象
- 差分法 (Finite-Difference Method, FDM)
- **例1: 定常移流拡散方程式**
- 例2: 非定常移流方程式
- 例3: 非定常拡散方程式
- レポート課題出題

例1: 定常移流拡散方程式

Steady Convection-Diffusion Equation

$$a \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1) \quad u(0) = 0, u(1) = 1$$

移流項 拡散項 境界条件
 a : 流速 ν : 拡散係数
 (≥ 0)



$$u(x) = A + Be^{\frac{a}{\nu}x} = A + Be^{Pe x} \quad Pe = \frac{aL}{\nu} = \frac{a}{\nu}$$

一般解

Pe : ペクレ数 (Peclet)
 L : 領域長さ (=1)

• ペクレ数

– 移流・拡散の比率を表す無次元数

• 拡散係数: $[L^2T^{-1}]$, 速度: $[L^1T^{-1}]$

– 大きいほど移流が卓越 (不安定), 拡散項 (流れの方程式では粘性項) は減衰項としてはたらく

非圧縮性粘性流体の支配方程式 (2D)

Navier-Stokes + Continuity
最も代表的な非線形微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

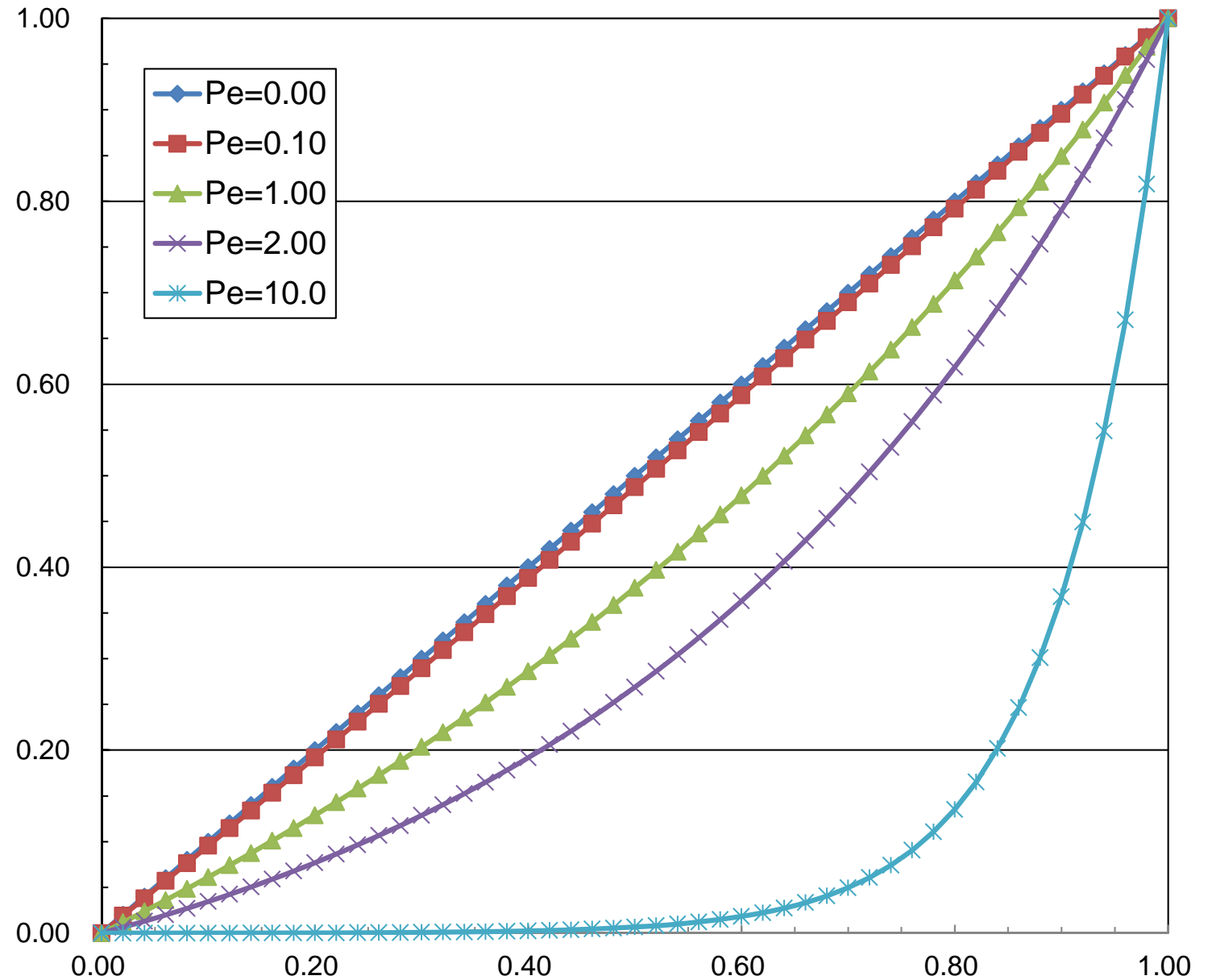
$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

定常移流拡散方程式の厳密解

Pe大 \Rightarrow 上流側(x=0)の影響大

$$u(x) = \frac{1 - e^{Pe x}}{1 - e^{Pe}}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-Pe e^{Pe x}}{1 - e^{Pe}}$$



中央差分による定式化

$$a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = \nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \longrightarrow (2 - R_c)u_{i+1} - 4u_i + (2 + R_c)u_{i-1} = 0$$

差分方程式

ペクレ数が大きくなると行列の対角成分が小さくなる \Rightarrow 不安定

$$R_c = \frac{a\Delta x}{\nu}$$

R_c : 格子レイノルズ数
(または格子ペクレ数, Reynolds)

$u_i = c_1(q_1)^i + c_2(q_2)^i$ 差分方程式の一般解

q_1, q_2 : 特性方程式の根 $(2 - R_c)q^2 - 4q + (2 + R_c) = 0$: 特性方程式

$(2 - R_c)q^{i+1} - 4q^i + (2 + R_c)q^{i-1} = 0$: 元の特性方程式

$$q_1 = 1, \quad q_2 = \frac{2 + R_c}{2 - R_c} \Rightarrow u_i = c_1 + c_2 \left(\frac{2 + R_c}{2 - R_c} \right)^i$$

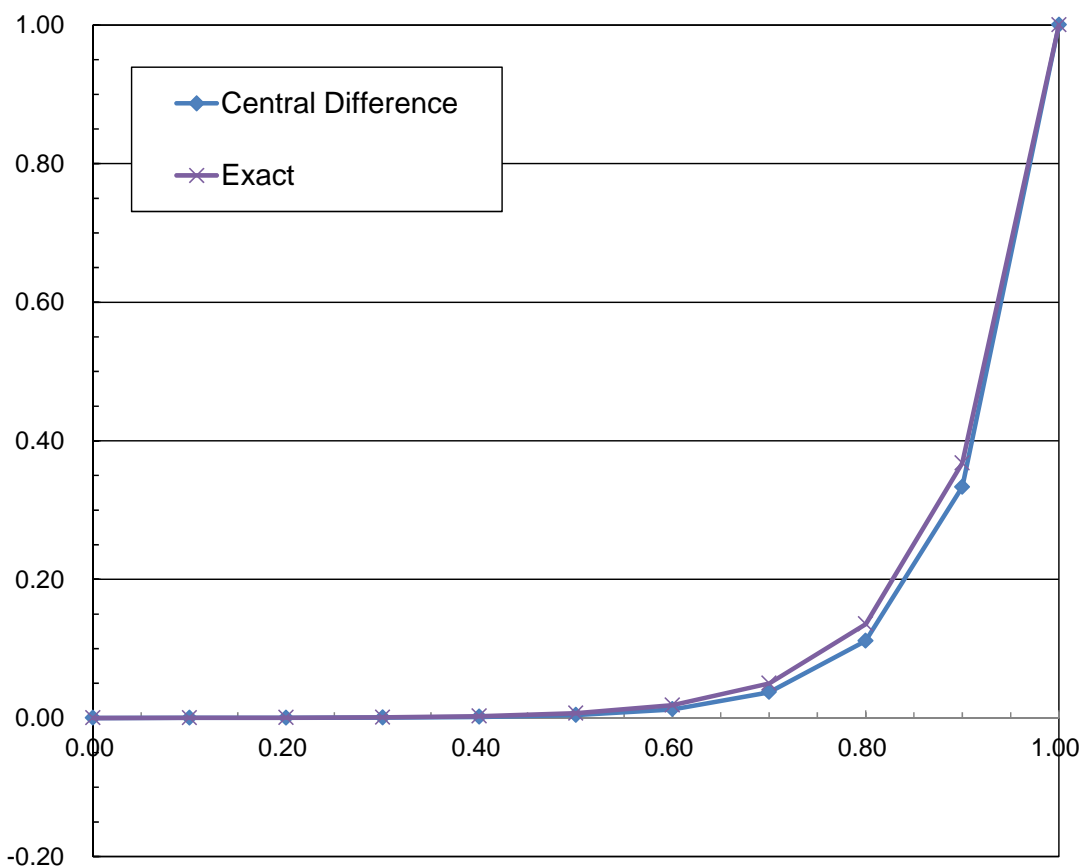
$q_2 \leq 0$ だと解が振動をする可能性がある

\Rightarrow 解が安定なためには $|R_c| < 2$ である必要がある: 細かいメッシュが必要

中央差分：計算結果

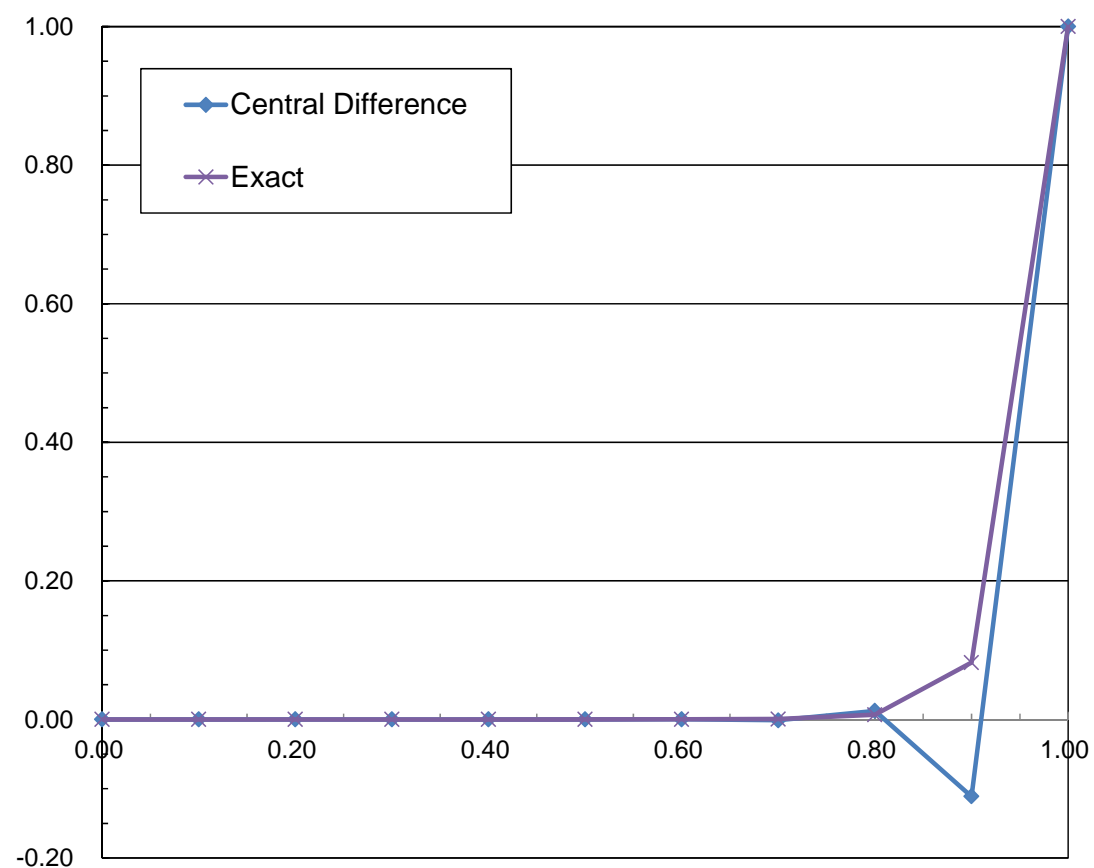
$$R_c = 1.00$$

$$\Delta x = 0.10, a = 1.00, \nu = 0.10$$



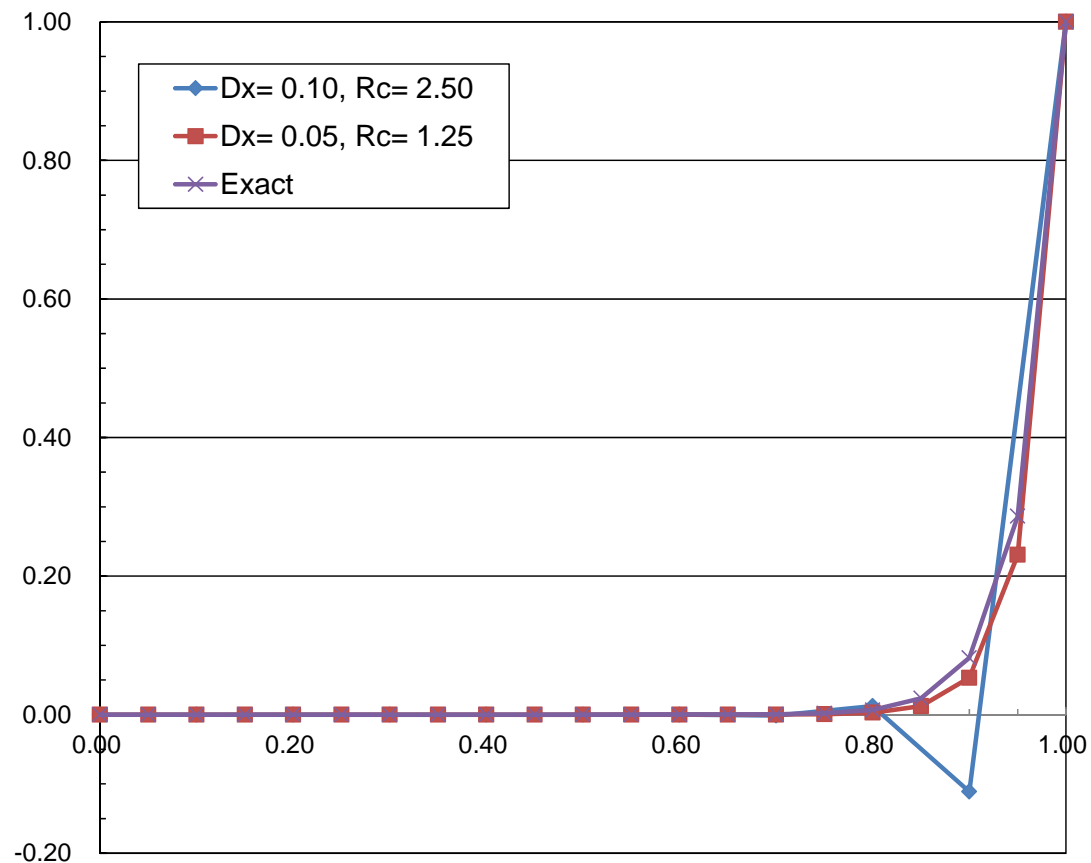
$$R_c = 2.50$$

$$\Delta x = 0.10, a = 1.00, \nu = 0.04$$



メッシュを細かくすると R_c が小さくなり 解が安定する

$a = 1.00, \nu = 0.04$

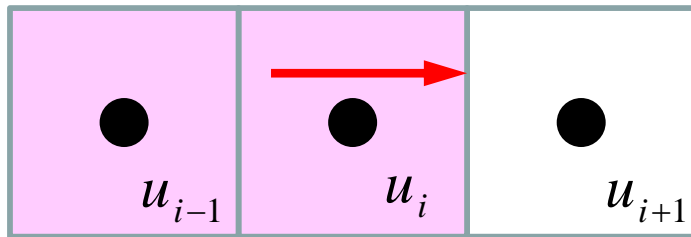


風上差分(1/2)

$$a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = v \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \quad \longrightarrow \quad a \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = v \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

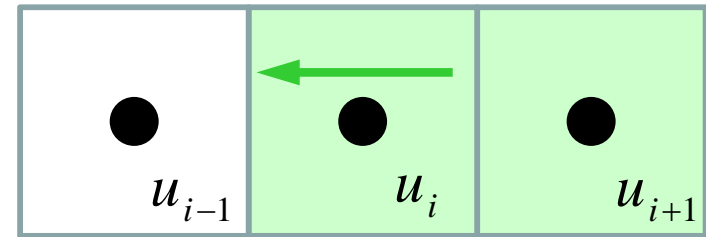
- 移流項の差分において，風上側の効果が卓越すると考え，速度が正なら後退差分，負なら前進差分を使用する
- 移流項の差分の精度が一次に下がるがより安定する
- 風上差分，風上化，上流化，一次上流化/風上化 (1st order upwinding) 他

$a > 0$



$$a \frac{\partial u}{\partial x} \approx a \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$$

$a < 0$



$$a \frac{\partial u}{\partial x} \approx a \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

- $R_c \geq 0$ であれば差分方程式の一般解は振動しない

$$q^2 - (2 + R_c)q + (1 + R_c) = 0$$

: 特性方程式

$$q_1 = 1, \quad q_2 = 1 + R_c \Rightarrow u_i = c_1 + c_2 (1 + R_c)^i$$

: 差分方程式の一般解

風上差分(2/2)

$$a \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{a\Delta x}{2} \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

風上差分

中央差分

人工的な拡散項・散逸項
これによって安定化する



$$a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = \left(v + \frac{a\Delta x}{2} \right) \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

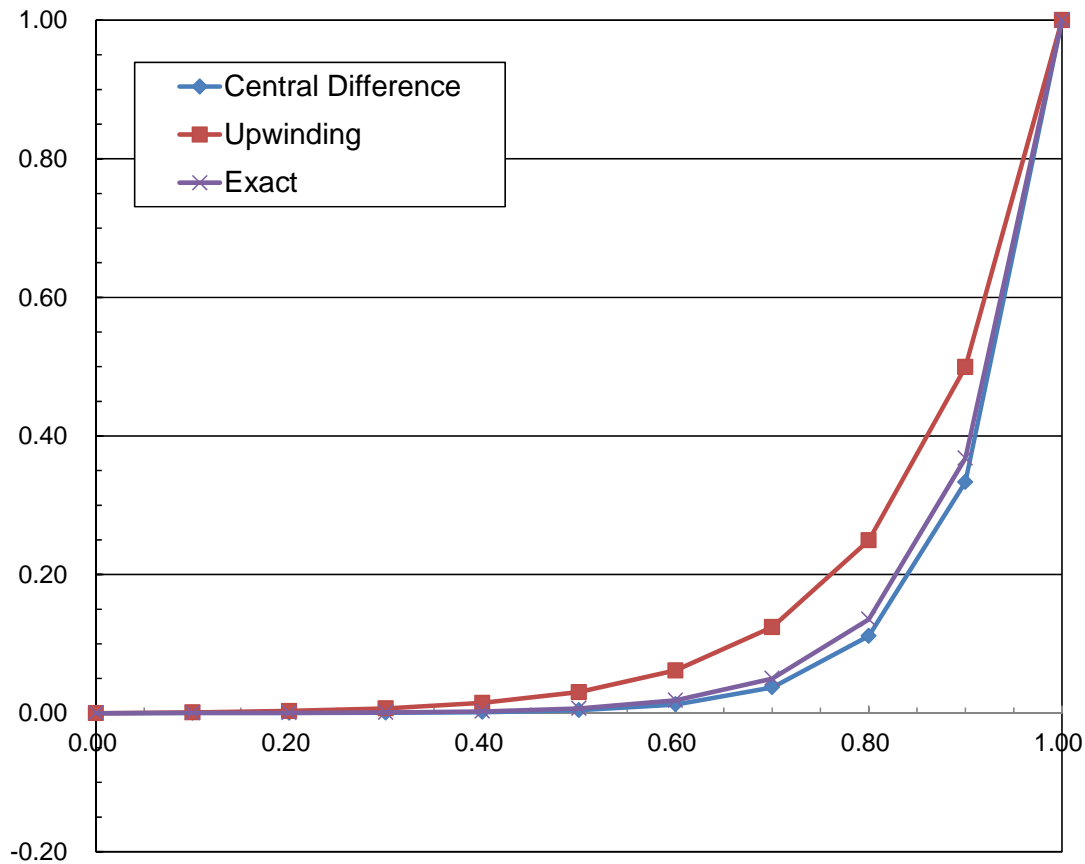
- 風上差分によって人工的な拡散項(散逸項)が導入されることによって計算は安定するが、必ずしも精度は高くない
- 風上差分スキーム, 中央差分スキームなどと言うこともある(scheme)

計算結果

風上差分による解は拡散係数が高いときの解に近くなる

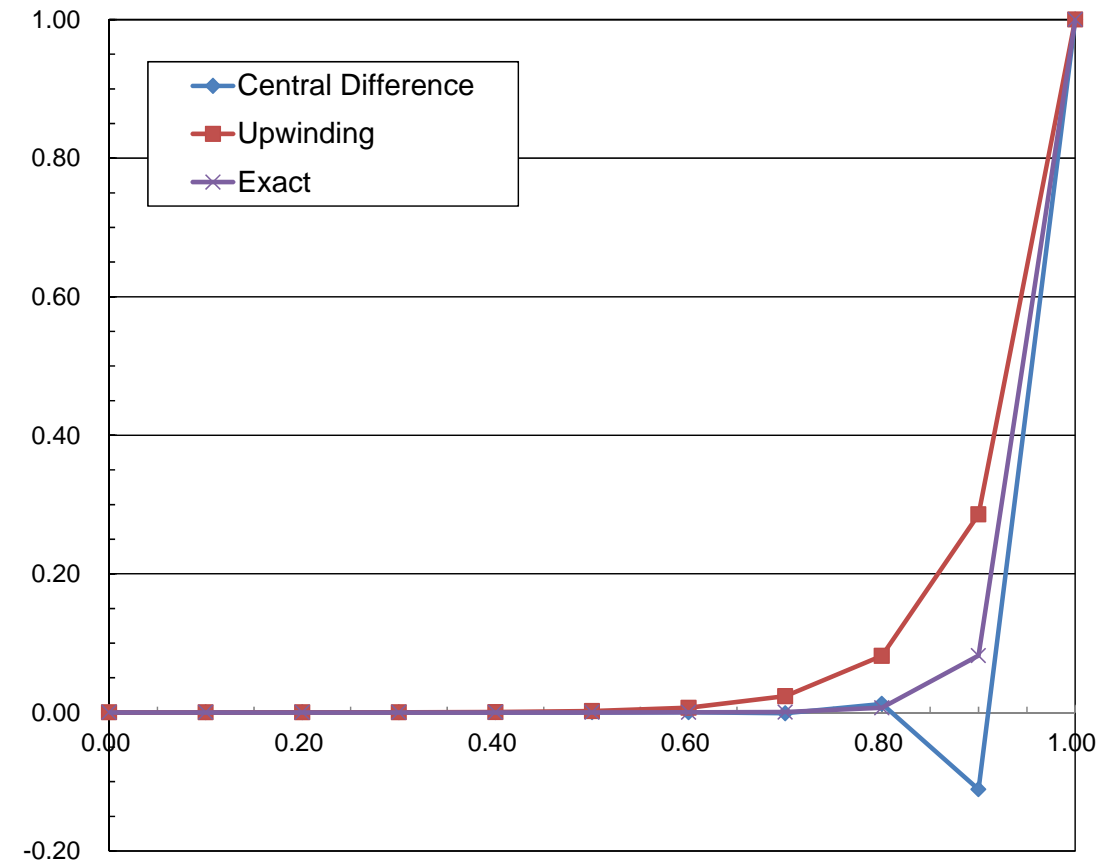
$$R_c = 1.00$$

$$\Delta x = 0.10, a = 1.00, \nu = 0.10$$



$$R_c = 2.50$$

$$\Delta x = 0.10, a = 1.00, \nu = 0.04$$



プログラム例：中央差分(1/2)

```

implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
real(kind=8), dimension(:), allocatable:: U1, U2
real(kind=8), dimension(:, :), allocatable:: AMAT

!C
!C-- INIT.
read  (*,*)  NE, VELO, DIFF

DX= 1. d0/dfloat (NE)
N = NE + 1

LENGTH= 1.0d0
allocate (U1 (N), U2 (N), AMAT (N, N))

REc=    VELO*DX/DIFF
PECLET= VELO/DIFF

COEFc2= VELO/(2. d0*DX)
COEFc1= VELO/(1. d0*DX)
COEFd=  DIFF/(DX*DX)

!C
!C-- Central Diff.

do j= 1, N
do i= 1, N
    AMAT (i, j)= 0. d0
enddo
enddo

do i= 1, N
    U1 (i)= 0. d0
enddo

```

$$a \frac{\partial u}{\partial x} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1)$$

$$u(0) = 0, u(1) = 1$$

NE: 分割数

N: 自由度数 (=NE+1)

DT: Δt

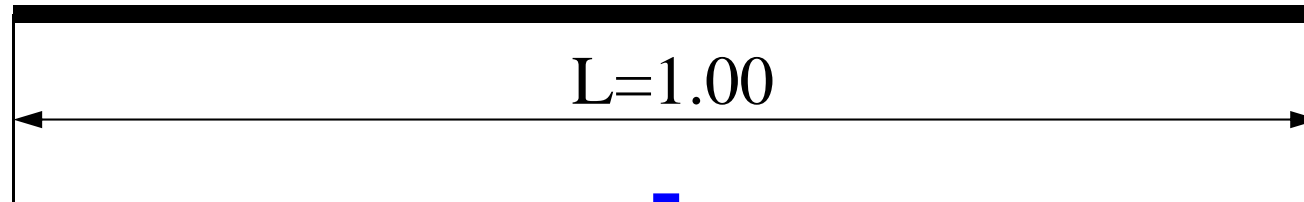
DX: Δx

DIFF: v

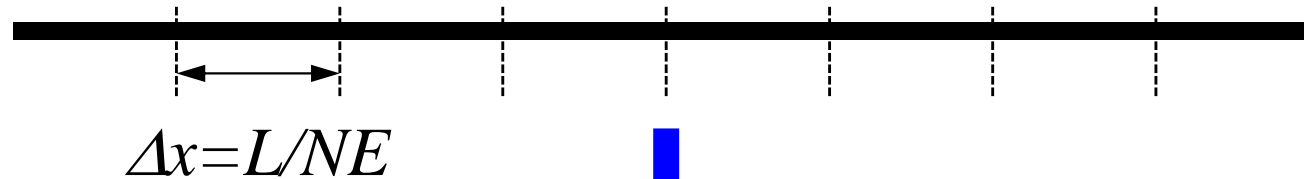
VELO: a

格子分割

対象とする
一次元領域



NE個に分割 (NE=8)



N個の格子点 (grid point) を
設定 (N=NE+1)

Fortran ① — ② — ③ — ④ — ⑤ — ⑥ — ⑦ — ⑧ — ⑨

C etc. ① — ② — ③ — ④ — ⑤ — ⑥ — ⑦ — ⑧

プログラム例：中央差分(1/2)

```
implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
real(kind=8), dimension(:), allocatable:: U1, U2
real(kind=8), dimension(:, :), allocatable:: AMAT
```

```
!C
!C-- INIT.
  read  (*,*)  NE, VELO, DIFF

  DX= 1. d0/dfloat (NE)
  N = NE + 1

  LENGTH= 1.0d0
  allocate (U1 (N), U2 (N), AMAT (N, N))
```

```
REc=  VELO*DX/DIFF
PECLET= VELO/DIFF
```

```
COEFc2= VELO/(2. d0*DX)
COEFc1= VELO/(1. d0*DX)
COEFd=  DIFF/(DX*DX)
```

```
!C
!C-- Central Diff.
```

```
do j= 1, N
do i= 1, N
  AMAT (i, j)= 0. d0
enddo
enddo
```

```
do i= 1, N
  U1 (i)= 0. d0
enddo
```

$$a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = v \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

PECLET: ペクレ数 ($=aL/v=a/v$)

REc: 格子レイノルズ数 ($=a\Delta x/v$)

COEFc1: $a/\Delta x$

COEFc2: $a/(2*\Delta x)$

COEFd: $v/\Delta x^2$

プログラム例：中央差分(2/2)：境界以外

```
do i= 2, N-1
  AMAT(i, i) = 2. d0 * COEFd
  AMAT(i, i-1) = -COEFC2 - COEFD
  AMAT(i, i+1) = COEFC2 - COEFD
enddo
```

```
!C
!C-- Boundary Conditions
U1(1) = 0. d0
U1(N) = 1. d0
AMAT(1, 1) = 1. d0
AMAT(N, N) = 1. d0
```

```
!C
!C-- Gaussian Elimination
call GAUSS (AMAT, U1, N, N)

stop
end
```

COEFC1: $a/\Delta x$

COEFC2: $a/(2*\Delta x)$

COEFD: $v/\Delta x^2$



$i=2\sim N-1$ の点において係数行列を生成する

$$a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = v \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$$\left(-\frac{a}{2\Delta x} - \frac{v}{\Delta x^2} \right) u_{i-1} + \frac{2v}{\Delta x^2} u_i + \left(\frac{a}{2\Delta x} - \frac{v}{\Delta x^2} \right) u_{i+1} = 0$$

$$\Rightarrow (2 - R_c) u_{i+1} - 4u_i + (2 + R_c) u_{i-1} = 0 \text{ where } R_c = \frac{a\Delta x}{v}$$

この値を使用

プログラム例：中央差分(2/2)：境界条件

```
do i= 2, N-1
  AMAT(i, i) = 2. d0 * COEFd
  AMAT(i, i-1) = -COEFc2 - COEFd
  AMAT(i, i+1) = COEFc2 - COEFd
enddo
```

```
!C
!C-- Boundary Conditions
```

```
U1(1) = 0. d0
U1(N) = 1. d0
AMAT(1, 1) = 1. d0
AMAT(N, N) = 1. d0
```

```
!C
!C-- Gaussian Elimination
call GAUSS (AMAT, U1, N, N)
```

```
stop
end
```

$$a \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1)$$

$$u(0) = 0, u(1) = 1$$



境界において成立する下記の方程式に従って、係数行列、右辺を設定

$$u_1 = 0$$

$$u_N = 1$$

- 背景
- 偏微分方程式と物理現象
- 差分法 (Finite-Difference Method, FDM)
- 例1: 定常移流拡散方程式
- **例2: 非定常移流方程式**
- 例3: 非定常拡散方程式
- レポート課題出題

例2: 非定常移流方程式

1st order wave equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} \quad (a > 0)$$

$$a = 300$$

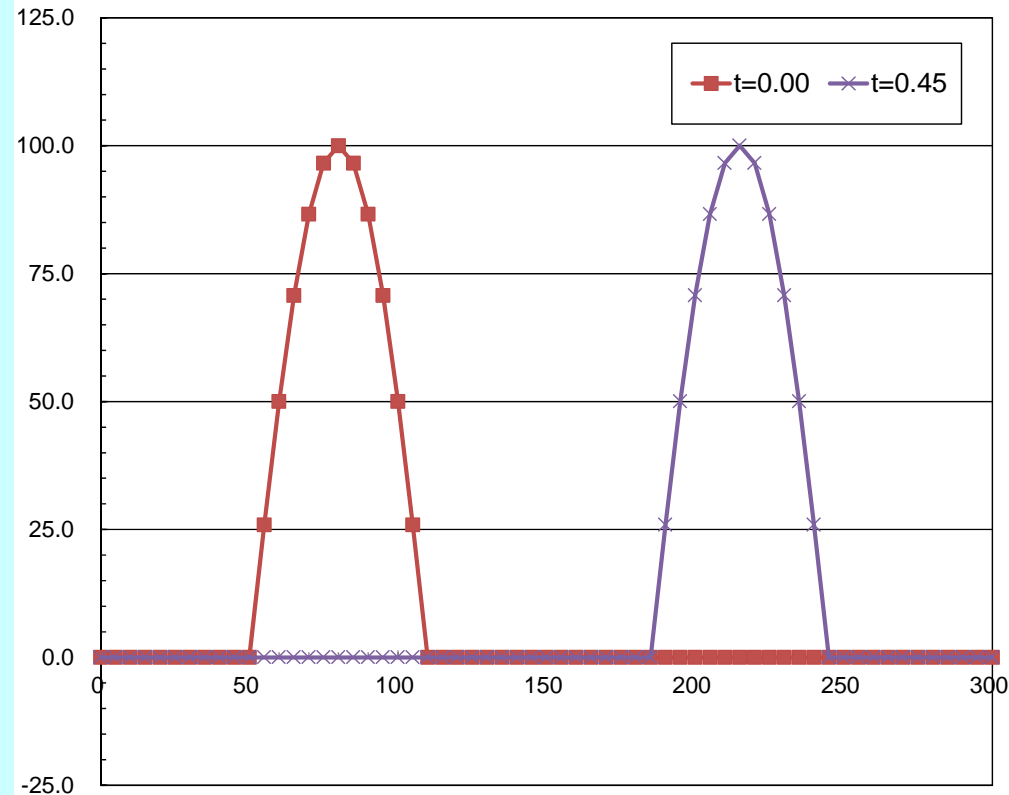
初期条件

$$u(x, 0) = 0: \quad 0 \leq x \leq 50, \quad 110 \leq x \leq 300$$

$$u(x, 0) = 100 \left\{ \sin \left[\pi \left(\frac{x - 50}{60} \right) \right] \right\}: \quad 50 \leq x \leq 110$$

境界条件

$$u(0, t) = u(300, t) = 0$$



- 波形が「速度 a で形状を変えずに移動する」のが正しい答えであるが、実は簡単では無い

非定常問題：時間方向の差分も必要

時間方向の積分，時間方向の離散化・・・

空間：中央差分

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$$

時間方向：前進差分：陽解法 (explicit)，前進オイラー (forward Euler)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \Rightarrow u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad \text{右辺は既知}$$

時間方向：後退差分：陰解法 (implicit)，後退オイラー (backward Euler)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \Rightarrow \frac{a\Delta t}{2\Delta x} u_{i+1}^{n+1} + u_i^{n+1} - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} u_{i-1}^{n+1} = u_i^n$$

連立一次方程式
を解く必要あり

$u_i^{(n)}$ n -回目のタイムステップにおける値

時間方向:前進, 空間方向:中央差分:FTCS

Forward-Time/Center-Space

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

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

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

クーラン数 (Courant)
1タイムステップに波が進むメッシュ数

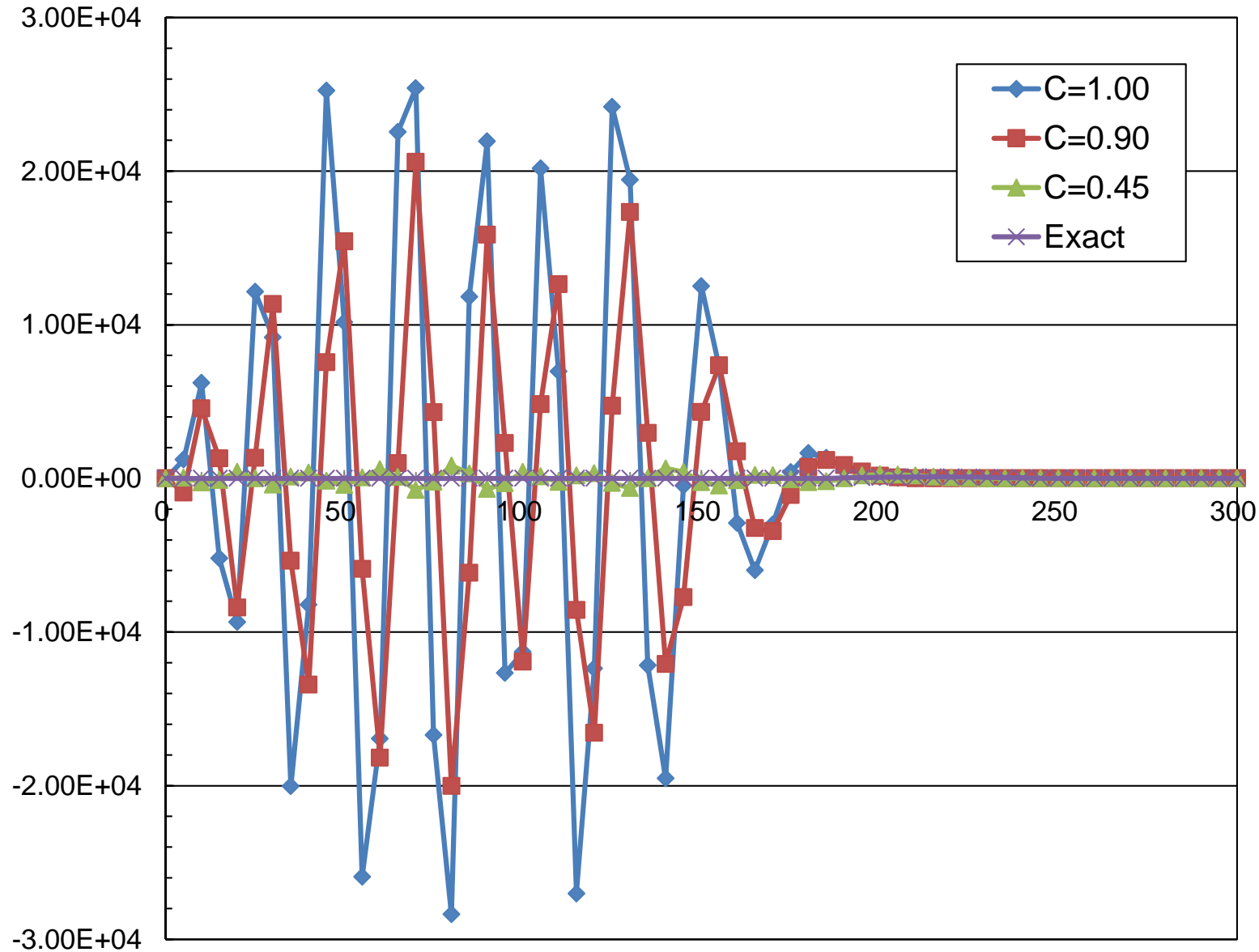
以下の条件で実施

- ① $\Delta x=5.0, \Delta t=0.01666, \quad c \sim 1.00$
- ② $\Delta x=5.0, \Delta t=0.015, \quad c=0.90$
- ③ $\Delta x=5.0, \Delta t=0.0075, \quad c=0.45$

計算結果: $t=0.45$

全然正解と合わない(桁が違う)

実はどんなに $\Delta t/\Delta x$ を小さくしても絶対に解けない



フォン・ノイマンの安定性解析

Von Neumann Stability Analysis

本問題の特解を以下のように仮定する:

$$u_i^n = g^n e^{Ik(i\Delta x)} = g^n e^{li\theta}$$



g^n : g の n 乗, I : 虚数単位, k : 波数, θ : 位相角 ($= k \Delta x$)

g : 差分方程式に従って Δt 進めた場合の増幅率
 時間が経過しても解が有限に留まるためには $|g| \leq 1$ を
 満足する必要がある(スペクトル半径 ≤ 1 に対応)

$$u_i^{n+1} = g^{n+1} e^{li\theta} = g \times g^n e^{li\theta} = g u_i^n$$

$$u_{i+1}^n = g^n e^{I(i+1)\theta} = e^{I\theta} \times g^n e^{li\theta} = e^{I\theta} u_i^n$$

$$u_{i-1}^n = g^n e^{I(i-1)\theta} = e^{-I\theta} \times g^n e^{li\theta} = e^{-I\theta} u_i^n$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \Rightarrow g u_i^n = u_i^n - \frac{c}{2} (e^{I\theta} - e^{-I\theta}) u_i^n$$

$$\frac{e^{I\theta} - e^{-I\theta}}{2I} = \sin \theta \Rightarrow g = 1 - Ic \sin \theta$$

$$|g| = \sqrt{1 + c^2 \sin^2 \theta} \geq 1$$

FTCSスキームは無条件不安定
 (c=0となることは無い)

時間方向：前進，空間方向：風上差分

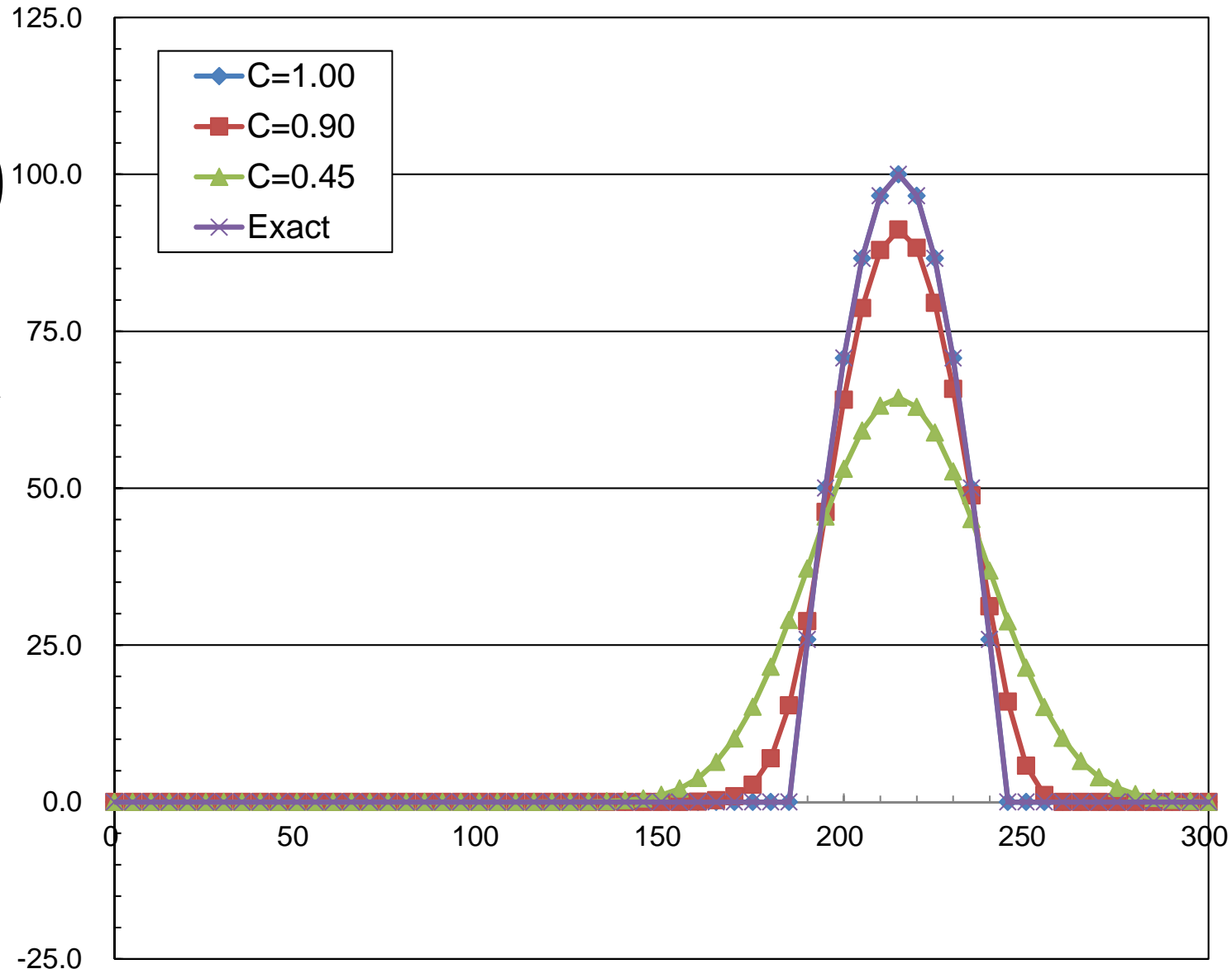
$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}$$

$$\Rightarrow u_i^{n+1} = u_i^n - c(u_i^n - u_{i-1}^n)$$

今度は解けた(精度は悪い)
タイムステップを細かくすると
人工粘性(数値粘性)による
誤差が蓄積して精度が悪化

**C=1.00の場合(安定限界)
が最も精度が良い**

$$\frac{a\Delta x}{2} \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$



再び安定性解析

Von Neumann Stability Analysis

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c(u_i^n - u_{i-1}^n) \Rightarrow gu_i^n = (1-c)u_i^n + ce^{-I\theta}u_i^n$$

$$g = 1 - c + ce^{-I\theta} = 1 - c + c(\cos \theta - I \sin \theta) = (1 - c + c \cos \theta) - Ic \sin \theta$$

$$|g| = \sqrt{1 + 2c^2 - 2c^2 \cos \theta + 2c \cos \theta - 2c} = \sqrt{1 + 2c(\cos \theta - 1)(1 - c)}$$

$$|g| = \sqrt{1 + 2c(\cos \theta - 1)(1 - c)}$$

$(\cos \theta - 1) \leq 0$ なので, $(1 - c) \geq 0$ なら $|g| \leq 1$

$$c = \frac{a\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \text{安定条件}$$

CFL条件 (Courant-Friedrichs-Lewy)
あくまでも「安定条件」であって精度を示すものではない

時間方向:後退, 空間方向:風上差分

Von Neumann Stability Analysis

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c(u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) \Rightarrow (1+c)u_i^{n+1} - cu_{i-1}^{n+1} = u_i^n$$

$$\Rightarrow (1+c)gu_i^n - cg e^{-I\theta} u_i^n = u_i^n$$

$$\therefore g = \frac{1}{(1+c) - c e^{-I\theta}}$$

$$|(1+c) - c e^{-I\theta}| = |(1+c - c \cos \theta) - Ic \sin \theta|$$

$$= \sqrt{1 + 2c^2 + 2c - 2c^2 \cos \theta - 2c \cos \theta}$$

$$= \sqrt{1 + 2c(c+1)(1 - \cos \theta)}$$

$$|g| = \frac{1}{\sqrt{1 + 2c(c+1)(1 - \cos \theta)}}$$

(1-cos θ) \geq 0なので, 分母は常に \geq 1
従って常に $|g| \leq 1$

無条件安定 (unconditional stable)

Lax-Wendroff法：時間方向2次精度

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \frac{\Delta t^2}{2!} + O(\Delta t)^3$$

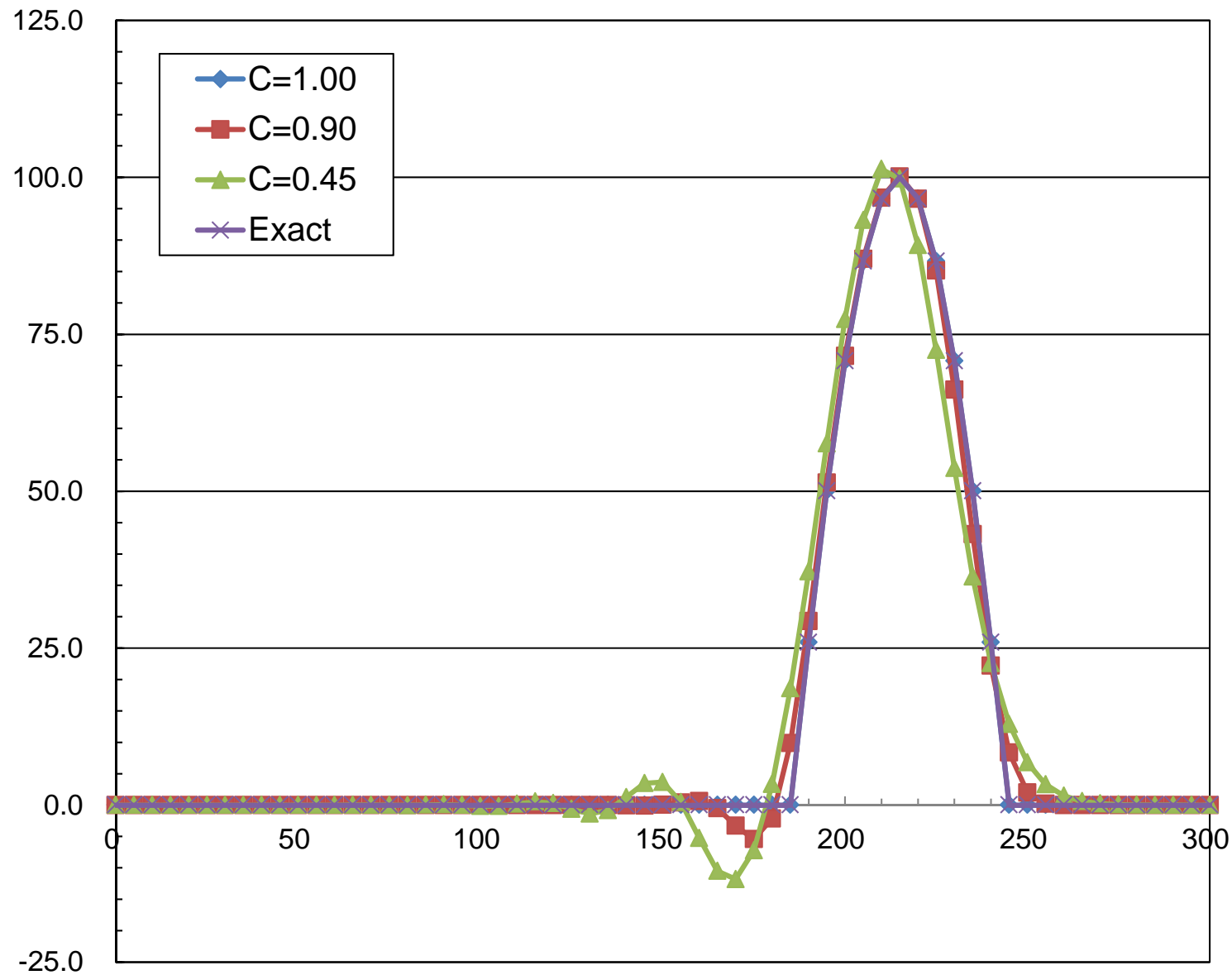
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -a \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = -a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\therefore u_i^{n+1} = u_i^n + \left(-a \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Delta t + \frac{\Delta t^2}{2} \left(a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + O(\Delta t)^3 \quad \text{時間方向二次精度}$$

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u_i^n - a \Delta t \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) + \frac{1}{2} a^2 (\Delta t)^2 \left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) \\ &= u_i^n - \frac{1}{2} c (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{1}{2} c^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \end{aligned}$$

数值粘性項：安定化

Lax-Wendroff法 (または「スキーム」)



もう一回安定性解析

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

$$gu_i^n = \left(-\frac{c}{2} + \frac{c^2}{2}\right)e^{+i\theta}u_i^n + (1-c^2)u_i^n + \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{2}\right)e^{-i\theta}u_i^n$$

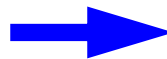
$$g = \left(-\frac{c}{2} + \frac{c^2}{2}\right)e^{+i\theta} + (1-c^2) + \left(\frac{c}{2} + \frac{c^2}{2}\right)e^{-i\theta}$$

$$= \frac{c}{2}(c-1)(\cos\theta + I\sin\theta) + (1-c^2) + \frac{c}{2}(c+1)(\cos\theta - I\sin\theta)$$

$$= 1 - 2c^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - Ic\sin\theta$$

$$|g| = \sqrt{1 - 4c^2(1-c^2)\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

$$(1-c^2) \geq 0 \text{ なら } |g| \leq 1$$



$$c = \frac{a\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \text{安定条件}$$

CFL条件 (Courant-Friedrichs-Lewy)

修正方程式 (Modified Equation) (1/2)

差分方程式に更にTaylor展開などの解析的方法を適用することにより代数方程式(差分方程式から)から再び連続的な微分方程式(修正方程式)を導出する。例として非定常移流方程式に風上差分を適用した例について検討する:

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

Taylor展開:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \frac{(\Delta t)^2}{2!} + \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \frac{(\Delta t)^3}{3!} + O(\Delta t)^4 \quad (2)$$

$$u_{i-1}^n = u_i^n - \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2!} - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^3}{3!} + O(\Delta x)^4 \quad (3)$$

(2), (3)を(1)に代入して展開:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \frac{(\Delta t)^2}{2} + a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\Delta x}{2} - \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \frac{(\Delta t)^3}{6} - a \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^2}{6} + O[(\Delta t)^3, (\Delta x)^3] \quad (4)$$

修正方程式 (Modified Equation) (2/2)

ここで以下の(5), (6)を(4)に代入して展開すると(7)が得られる:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial u}{\partial x} + [a^3 \Delta t - a^2 \Delta x] \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O[(\Delta t)^2, (\Delta x \Delta t), (\Delta x)^2] \quad (4)$$

$$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} = -a^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O[(\Delta t), (\Delta x)] \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{a \Delta x}{2} (1 - c) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{a (\Delta x)^2}{6} (2c^2 - 3c + 1) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O[(\Delta t)^3, (\Delta t)^2 (\Delta x), (\Delta t) (\Delta x)^2, (\Delta x)^3] \quad (7)$$

(7)が修正方程式である。(1)と比較すると、右辺第2項以降が誤差項として加わっていることがわかる。これが差分法に基づく「離散化」による誤差と考えることができる。支配的なのは右辺の第2項□。

証明の詳細は下記文献を参照されたい(良書だが東大にも一冊しかない)

K.A. Hoffmann & S.T. Chiang, Computational Fluid Dynamics for Engineers – Volume I, Chapter 4, Section 4.6 Modified Equation, Engineering Education System (EES), 1993.

人工粘性・数値粘性

Artificial/Numerical Viscosity

式(7)の誤差項の中で最も支配的なのは u の空間二次微分の項で拡散項, 粘性項と同じ形をしている:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{a\Delta x}{2} (1-c) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{a(\Delta x)^2}{6} (2c^2 - 3c + 1) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \quad (7)$$

$$+ O\left[(\Delta t)^3, (\Delta t)^2(\Delta x), (\Delta t)(\Delta x)^2, (\Delta x)^3\right]$$

この項の係数 α_e を人工粘性または数値粘性 (Artificial/Numerical Viscosity) と呼ぶ。人工粘性は差分法などの離散化による近似誤差として生じ、一般に解を安定させるが、「なまらせる (dissipate)」効果がある。

$$\alpha_e = \frac{1}{2} a\Delta x (1-c) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

人工粘性の効果を抑制するためには $\alpha_e=0$, すなわち $c=1$ であればよい (Courant数: 風上法の安定限界)。「例2」で示した計算例で, Δt を小さくしてCourant数を小さくすることで逆に精度が低下したことに対応する。ここでは風上差分の例を示したが, Lax-Wendroffでも同様である。

- 背景
- 偏微分方程式と物理現象
- 差分法 (Finite-Difference Method, FDM)
- 例1: 定常移流拡散方程式
- 例2: 非定常移流方程式
- **例3: 非定常拡散方程式**
- レポート課題出題

例3: 非定常拡散方程式 (1/3)

Unsteady Diffusion Equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1)$$

$$\lambda = 1.0$$

$$u(x, 0) = 0 \quad \text{初期条件}$$

$$u(0, t) = 0, u(1, t) = 1 \quad \text{境界条件}$$

空間方向:

中央差分(二次精度)を適用

FTCSスキーム(陽解法: Explicit): 前進オイラー(Forward Euler)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

$$\Rightarrow u_i^{n+1} = \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1}^n + \left(1 - \frac{2\lambda \Delta t}{\Delta x^2}\right) u_i^n + \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_{i-1}^n$$

$$\Rightarrow u_i^{n+1} = r u_{i+1}^n + (1 - 2r) u_i^n + r u_{i-1}^n \quad \left(r = \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2}\right)$$

例3: 非定常拡散方程式 (2/3)

Unsteady Diffusion Equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1)$$

$$\lambda = 1.0$$

$$u(x, 0) = 0 \quad \text{初期条件}$$

$$u(0, t) = 0, u(1, t) = 1 \quad \text{境界条件}$$

空間方向:

中央差分(二次精度)を適用

(陰解法: Implicit): 後退オイラー(Backward Euler), 連立一次方程式

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\lambda \Delta t}{\Delta x^2}\right) u_i^{n+1} - \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_{i-1}^{n+1} = u_i^n$$

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

例3: 非定常拡散方程式 (3/3)

Unsteady Diffusion Equation

(クランク-ニコルソン法 (Crank-Nicolson)) : 陰解法と陽解法の間

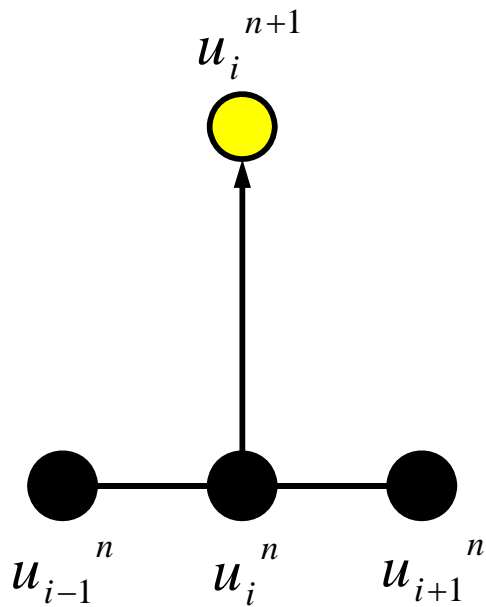
$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right)$$

$$\Rightarrow -\frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\lambda \Delta t}{\Delta x^2} \right) u_i^{n+1} - \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_{i-1}^{n+1} = \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} u_i^n$$

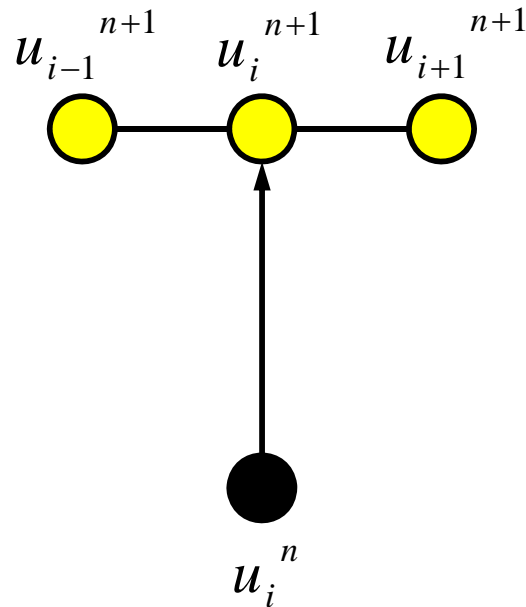
$$\Rightarrow -\frac{r}{2} u_{i+1}^{n+1} + (1+r) u_i^{n+1} - \frac{r}{2} u_{i-1}^{n+1} = \frac{r}{2} u_{i+1}^n + (1-r) u_i^n + \frac{r}{2} u_{i-1}^n$$

- クランク-ニコルソン法
 - 陰解法と陽解法の間
 - 連立一次方程式を解く必要はある
 - 時間方向に二次精度 (レポート課題)

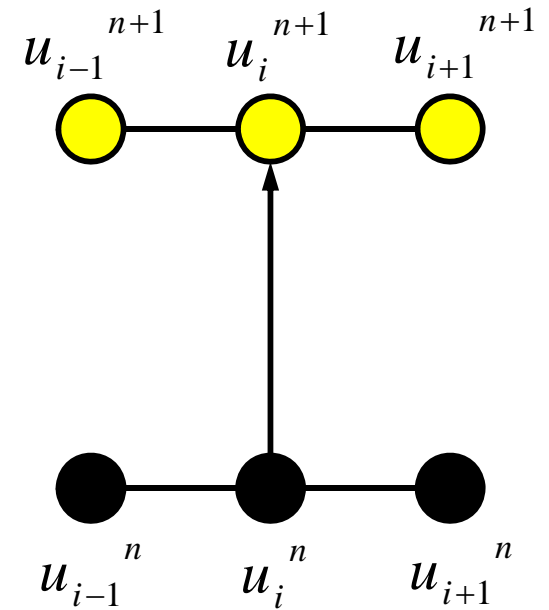
各スキームの計算法



陽解法 : Explicit
Forward Euler



陰解法 : Implicit
Backward Euler



クランク-ニコルソン
Crank-Nicolson

安定性解析

陽解法

$$\begin{aligned}
 u_i^{n+1} &= ru_{i+1}^n + (1-2r)u_i^n + ru_{i-1}^n \\
 \Rightarrow gu_i^n &= re^{I\theta}u_i^n + (1-2r)u_i^n + re^{-I\theta}u_i^n \\
 \Rightarrow g &= r(e^{I\theta} + e^{-I\theta}) + (1-2r) \\
 \Rightarrow g &= 2r \cos \theta + 1 - 2r = 1 + 2r(\cos \theta - 1)
 \end{aligned}$$

$$g = 1 + 2r(\cos \theta - 1) = 1 - 4r \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$$|g| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 - 4r \sin^2 \frac{\theta}{2} \leq 1$$

$$\Rightarrow r \leq \frac{1}{2 \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} \right)} \leq \frac{1}{2}$$

$$r = \frac{\lambda \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad \text{安定条件}$$

陰解法

$$\begin{aligned}
 -ru_{i+1}^{n+1} + (1+2r)u_i^{n+1} - ru_{i-1}^{n+1} &= u_i^n \\
 \Rightarrow \\
 -gr e^{I\theta}u_i^n + g(1+2r)u_i^n - gr e^{-I\theta}u_i^n &= u_i^n \\
 \Rightarrow g &= \frac{1}{1 + 2r(1 - \cos \theta)}
 \end{aligned}$$

$$|g| \leq 1$$

$$\because 1 - \cos \theta \geq 0 \Rightarrow 1 + 2r(1 - \cos \theta) \geq 1$$

無条件安定

Crank-Nicolsonも同様(レポート)

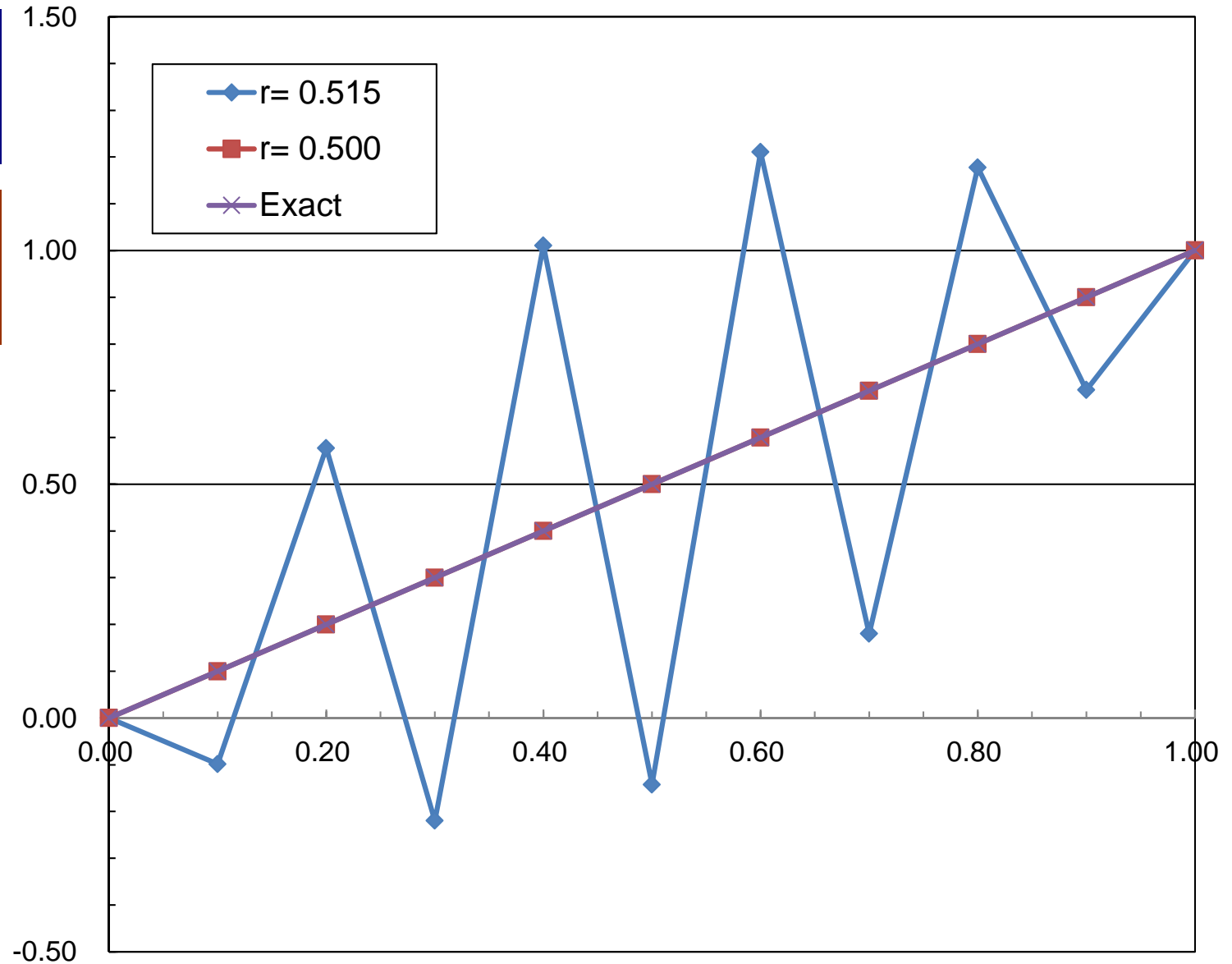
陽解法：計算結果 $t=2.00$

$r=0.515$

$\Delta x=0.10, \Delta t=0.00515$

$r=0.500$

$\Delta x=0.10, \Delta t=0.00500$



プログラム例：陰解法（1/3）

```

implicit REAL*8(A-H, O-Z)
real(kind=8), dimension(:), allocatable:: U, U0, B
real(kind=8), dimension(:,:), allocatable:: AMAT
real(kind=8) :: DX, DT, TIME, C, LENGTH
integer :: N

!C
!C +-----+
!C | INIT. |
!C +-----+
!C===

write (*,*) 'NE, DT, OMEGA'
read (*,*) NE, DT, OMG

DIFF= 1. d0

DX= 1. d0/dfloat (NE)
N = NE + 1
EPS= 1. d-08

allocate (B(N), U(N), U0(N), AMAT(N,N))
COEF= DIFF*DT/(DX*DX)

do j= 1, N
do i= 1, N
    AMAT(i, j)= 0. d0
enddo
enddo

do i= 1, N
    U(i)= 0. d0
    U0(i)= 0. d0
enddo

```

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1)$$

NE: 分割数

N: 自由度数 (=NE+1)

DT: Δt

DX: Δx

OMG: SORの ω ($1 \leq \omega < 2$)

DIFF: λ (=1.00)

COEF: $r, \lambda \Delta t / \Delta x^2$

U(i): u_i^{n+1}

U0(i): u_i^n

$$u(x, 0) = 0$$

$$u(0, t) = 0, u(1, t) = 1$$

プログラム例：陰解法（2/3）

```

do i= 2, N-1
  AMAT(i, i) = 2. d0*COEF + 1. d0
  AMAT(i, i-1) = -COEF
  AMAT(i, i+1) = -COEF
  AMAT(i, i) = 1. d0/AMAT(i, i)
enddo

!C
!C-- Boundary Conditions
  U(1) = 0. d0
  U(N) = 1. d0
!C===

!C
!C +-----+
!C | TIME integration |
!C +-----+
!C===

  TIME = 0. d0
  do
    TIME = TIME + DT

    BNRM2 = 0. d0
    do i= 2, N-1
      B(i) = U0(i)
      BNRM2 = BNRM2 + B(i)**2
    enddo
    if (BNRM2. eq. 0. d0) BNRM2 = 1. d0
  
```

$$-ru_{i+1}^{n+1} + (1 + 2r)u_i^{n+1} - ru_{i-1}^{n+1} = u_i^n$$

対角成分AMAT(i,i)は割算でしか使用しないので予め逆数にしてある：除算は他の四則演算と比べてコストが高い

$$u(x, 0) = 0$$

$$u(0, t) = 0, u(1, t) = 1$$

$$\|\mathbf{b}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |b_i|^2}$$

プログラム例：陰解法（3/3）

```

!C
!C-- SOR
do iter= 1, 100*N
  DNRM2= 0. d0
  do i= 2, N-1
    UU= U(i)
    RESID= ((B(i) - AMAT(i, i-1)*U(i-1)
&          - AMAT(i, i+1)*U(i+1))*AMAT(i, i)-UU)*OMG
    U(i)= UU + RESID
    DNRM2= DNRM2 + RESID**2
  enddo
  if (dsqrt(DNRM2/BNRM2). lt. EPS) exit
enddo

do i= 1, N
  U0(i)= U(i)
enddo
if (TIME. ge. 2. d0) exit
enddo
!C===

!C
!C-- Result
write (*, '(a, 1pe16. 6)') '### TIME', TIME
do i= 1, N
  XX = dfloat(i-1)*DX
  write (*, '(3(1pe16. 6))') XX, U(i)
enddo

stop
end

```

$$A_{i,i+1}u_{i+1}^{n+1} + A_{i,i}u_i^{n+1} + A_{i,i-1}u_{i-1}^{n+1} = B_i$$

$$u_i^{n+1} = \omega \left[\frac{1}{A_{i,i}} \left(B_i - A_{i,i-1}u_{i-1}^{n+1} - A_{i,i+1}u_{i+1}^{n+1} \right) - u_i^* \right] + u_i^*$$

$$\frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} < \varepsilon$$

境界条件が適用されている
両端の点を計算していない
 u_i^* : 一回前の反復の u_i^{n+1}

- 背景
- 偏微分方程式と物理現象
- 差分法 (Finite-Difference Method, FDM)
- 例1: 定常移流拡散方程式
- 例2: 非定常移流方程式
- 例3: 非定常拡散方程式
- レポート課題出題

レポート課題(1/3)

- (課題1)「例3: 非定常拡散方程式」の時間方向にクランク-ニコルソン法を適用する場合
 - 時間方向に二次精度であることを示せ
 - 無条件安定であることを示せ
- (課題2)「例1: 定常移流拡散方程式」を中央差分, 風上差分を適用して解き, 拡散係数, 格子分割の効果について考察せよ。
 - 連立一次方程式の求解にはピボット付きLU分解法またはピボット付きガウス消去法を使用すること

レポート課題 (2/3)

- (課題3)「例1: 定常移流拡散方程式」にべき乗法を適用して解き, 拡散係数, 格子分割の効果について考察せよ。
 - 連立一次方程式の求解にはピボット付きLU分解法またはピボット付きガウス消去法を使用すること
 - 講義で述べたように風上差分法は安定であるが必ずしも精度が良くない。様々な手法が提案されているが, このうちS.V. Patankar等による「べき乗法 (Exponential Method)」は精度の高い方法として知られている
 - Patankar, S.V., A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations, Numerical Heat Transfer, Vol.4, p.409, 1981

$$m_{i-1}u_{i-1} + m_{i-1}u_i + m_{i+1}u_{i+1} = 0, R_c = \frac{a\Delta x}{\nu}, D_c = \frac{\nu}{\Delta x^2}, F_c = \frac{a}{\Delta x}$$

$$\text{if } R_c \leq 10 \Rightarrow m_{i-1} = -D_c(1 + 0.1R_c)^5 - F_c, m_{i+1} = -D_c(1 - 0.1R_c)^5, m_i = -(m_{i-1} + m_{i+1})$$

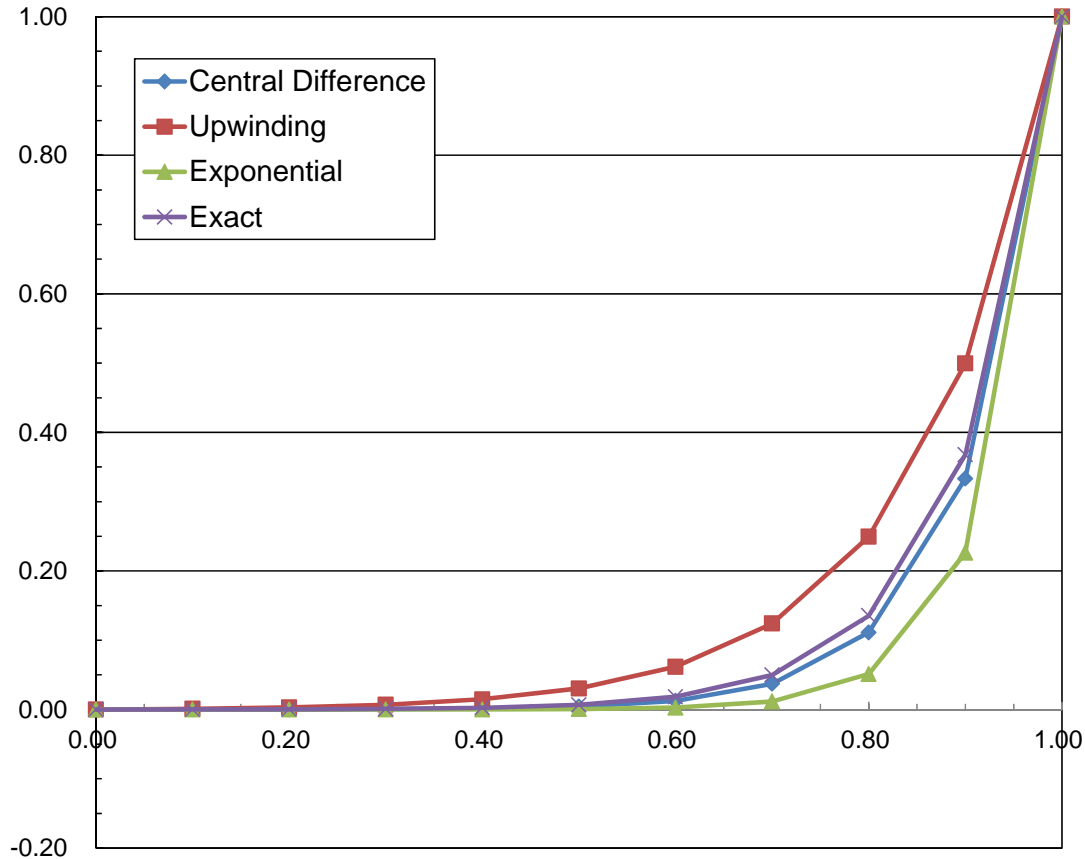
$$\text{if } R_c > 10 \Rightarrow m_{i-1} = -F_c, m_{i+1} = 0, m_i = -(m_{i-1} + m_{i+1})$$

計算結果

べき乗法 (Exponential Method) は特に R_c が大きいと精度高い

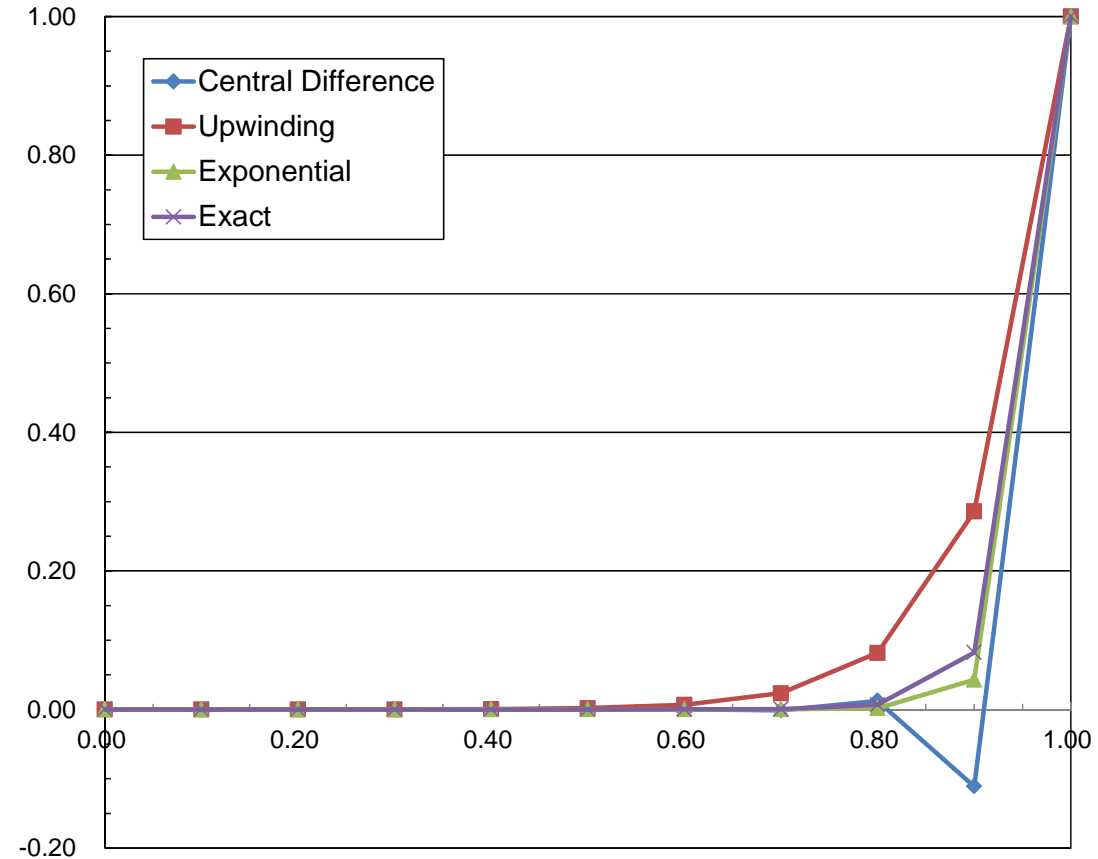
$R_c = 1.00$

$\Delta x = 0.10, a = 1.00, \nu = 0.10$



$R_c = 2.50$

$\Delta x = 0.10, a = 1.00, \nu = 0.04$



レポート課題(3/3)

- (課題2・3)はScilab, Matlab, C/C++, Fortran等によってプログラムを作成して実施することが望ましいが, 計算機を使用しなくても実施することは可能である。
- **提出期限**
 - 2014年2月19日(水)13:00
- **提出場所**
 - 駒場アドミニストレーション棟1階ロビー レポート回収ボックス
- **提出物**
 - (課題1)結果
 - (課題2・3)方針, 結果, 考察(図表含めてA4 8ページ以内)
 - プログラムを作成した場合はソースリストを変数の簡単な説明とともに提出すること(上記の8ページとは別)
 - プログラムを作成しない場合は連立一次方程式求解の計算書を提出(課題2, 課題3についてそれぞれ1例ずつ)(上記の8ページとは別)