数値流体ゼミ第３回

忝村顕史

4/28

今日のお品書き

1. 2.4 数値流束
   - (1) 数値流束の考え方
   - (2) 数値流束を利用した整理：情報が左からくる $c > 0$ の場合
   - (3) 数値流束を利用した整理：情報伝播の方向が不明な場合
2. 2.5 数値流束と高次精度化の考え方
   - 精度の評価
   - (1) 情報伝播の方向がわかっている $(c > 0)$ の場合
   - (2) 情報電波の方向が不明な場合

流束とは？

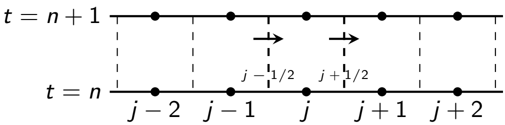
まず波動方程式を保存表示型で表現する．

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (f = cq)$$

今は c が定数だから単純にこう変形できたが，c がこれから t や q の関数になっていくのでその時はこの変形はできない．
流体力学においてはこの f は流束 (flux) と呼ばれる．ある位置にある物理量が速度 c で流されていくというイメージ．

数値流束を使った離散化

隣り合う各空間格子点の間に境界を設け，その境界上で離散化をしてみる.



$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\tilde{f}_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n\right)$$

この $\tilde{f}_{j+1/2}^n$ などを数値流束と呼ぶ.

数値流束を使った離散化

今の式に Δx をかけてみると，

$$\Delta x \cdot q_j^{n+1} = \Delta x \cdot q_j^n - \Delta t \cdot \tilde{f}_{j+1/2}^n + \Delta t \cdot \tilde{f}_{j-1/2}^n$$

となる．元々 $t = n$ で Δx に入っていた状態量の総和は $\Delta x \cdot q_j^n$ で，Δt の間に左から入ってきた量 $(\Delta t \cdot \tilde{f}_{j+1/2}^n)$ と右から出ていく量 $(\Delta t \cdot \tilde{f}_{j-1/2}^n)$ を足したり引いたりする事で $t = n + 1$ のときの量が求まる，ということがわかる．有限体積法と同じ考え方．

おまけ：有限体積法とは？

有限堆積法とは，PDE を解くための手法の一つ．分割された個々の空間に対して積分形の基礎方程式を用いて代数方程式 (連立一次方程式) を得る方法．発散項を含む体積積分を発散定理を使って表面積分に変換し，それらを有限体積の表面の流束として評価する．(ある体積に流れ込んでくる流束)=(隣接する体積から流れ込んでくる流束) なので保存的な解法と言える．非構造格子を扱う時の定式化が容易なことも長所．詳しくは「流体力学の数値計算法」8 章を参照

数値流束を使った離散化

$\tilde{f}^n_{j-1/2}$ などは実際には存在しない量．つまり f^n_j などから作る必要がある．(流れとかを一旦無視すると) 一番自然なのは両側の平均をとって構成する方法．これを用いると，

$$
\begin{aligned}
q_j^{n+1} &= q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\tilde{f}^n_{j+1/2} - \tilde{f}^n_{j-1/2}\right) \\
&= q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\frac{f^n_{j+1} + f^n_j}{2} - \frac{f^n_j + f^n_{j-1}}{2}\right) \\
&= q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\frac{f^n_{j+1} - f^n_{j-1}}{2}\right)
\end{aligned}
$$

これは結局 FTCS 法．c の正負も考えて $\tilde{f}$ の構成の仕方を変えてみる．

数値流束を使った離散化の例

- FTCS 法

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{f^n_{j+1} + f^n_j}{2}$$

- 一次精度風上法

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = f^n_j$$

- LAX 法

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{1}{\nu}\right) f^n_{j+1} + \left(1 + \frac{1}{\nu}\right) f^n_j\right]$$

- Lax-Wendroff 法

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}[c(1 - \nu)q^n_{j+1} + c(1 + \nu)q^n_j]$$

ν はクーラン数.

計算結果

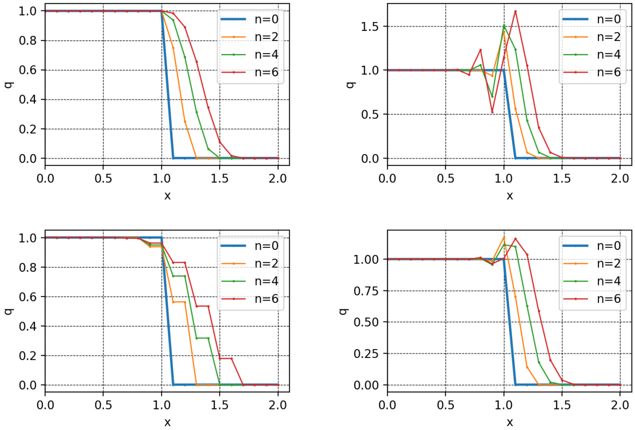


Figure: 右上から，一次精度風上，FTCS，LAX，LW

数値流束を使った離散化の例

c の符号が不明な場合，一次精度風上法は，

$$\begin{aligned}\tilde{f}^n_{j+1/2} &= \frac{c+|c|}{2} q^n_j + \frac{c-|c|}{2} q^n_{j+1} \\ &= \frac{1}{2}\left[\left(f^n_{j+1} + f^n_j\right) - |c|\left(q^n_{j+1} - q^n_j\right)\right]\end{aligned}$$

となる (他の三つは変わらない)． $\tilde{f}^n_{j-1/2}$ も同じように考えれば，

$$\frac{1}{2}\left[\left(f^n_{j+1} - f^n_{j-1}\right) - |c|\left(q^n_{j+1} - 2q^n_j + q^n_{j-1}\right)\right]$$

前 2 項は空間微分の中心差分，後ろの項は拡散的な項
q^{n+1}_j の表記は保存型表示に基づいていて，全部足し合わせると境界での出入りが全体の物理量の変化ということがわかる

精度の上げ方

より厳密な解を得るために解の解像度を上げたい．

手法 1　一次精度のまま：格子点の数を増やす

手法 2　高次精度化の方法を使う

どちらも必要な格子点の数が増えるので計算量が増える (一概にどちらがいいとは言い切れない)．手法 2 の高次精度化について考えてみる．

精度とは

まず次のような線形の微分方程式の差分近似を満たす解を考える．

$$L(u) = 0$$

L は差分オペレータ (関数みたいなもの)，差分近似は n 次精度とする．元の方程式の厳密解を $\bar{u}$ としてこの打ち切り誤差 ε は厳密解との差なので

$$L(\bar{u}) = \varepsilon$$

格子幅を h とすれば $\varepsilon \sim O(h^n)$．線形な方程式だから

$$L(\bar{u} - u) = \varepsilon$$

$e = \bar{u} - u$ とおけば，

$$e = L^{-1}(\varepsilon) \equiv O(h^m)$$

となる．

精度とは

ある地点 j での解の誤差は

$$e_j = Ch^m$$

とかける．対数をとれば

$$\log e_j = m \log h + \log C$$

異なる格子幅 h' を使った場合の解を u' として，差をとると

$$\log e_j - \log e_j' = m(\log h - \log h') + \log C - logC'$$

m はほぼ n とほぼ等しいので，厳密解が分かればプロットの傾きから精度 n がわかる．つまり精度というのはどのくらい早く厳密解に収束するのかという指標 [1].

[1] 差分近似の取り方が安定であったり，丸め誤差が十分小さいことを仮定するなど，この議論はたくさんの仮定を含んでいるので厳密ではないが大まかな考え方としては良い

精度の上げ方

x 負の方向から情報がくるので，2 次精度の後退差分を使って風上差分法を作れば，

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \Delta t \cdot c \cdot \frac{3q_j^n - 4q_{j-1}^n + q_{j-2}^n}{2\Delta x}$$

となる．これを少し変形すれば，

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \Delta t \cdot c \cdot \frac{\left(\frac{3}{2}q_j^n - \frac{1}{2}q_{j-1}^n\right) - \left(\frac{3}{2}q_{j-1}^n - \frac{1}{2}q_{j-2}^n\right)}{\Delta x}$$

つまり 1 次精度の q_j^n を $\frac{3}{2}q_{j-1}^n - \frac{1}{2}q_{j-1}^n$ で置き換えると 2 次精度になる．

流束を使った考え方

今の式を数値流束を使って書き直してみると

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\tilde{f}_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n\right)$$

において，

$$\tilde{f}_{j+1/2}^n = \begin{cases} f_j^n & (1\text{ 次精度}) \\ \frac{3}{2}f_j^n - \frac{1}{2}f_{j-1}^n & (2\text{ 次精度}) \end{cases}$$

1 点だけ考えて次の点を作れば 1 次精度，2 点考えて線形的に次の点を作れば 2 次精度となる．

離散化の仕方

左右両方からの情報を含んだ式にしないといけないので，左からくるものに L，右からくるものに R をつけて表せば，

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[(f_R + f_L) - |c|\,(q_R - q_L)\right]$$

であり，(1) と同じように考えれば，

$$f_R = f^n_{j+1}, \quad f_L = f^n_j \quad (1\text{ 次精度})$$
$$f_R = \frac{3}{2}f^n_{j+1} - \frac{1}{2}f^n_{j+2}, \quad f_L = \frac{3}{2}f^n_j - \frac{1}{2}f^n_{j-1} \quad (2\text{ 次精度})$$

となる．

計算結果

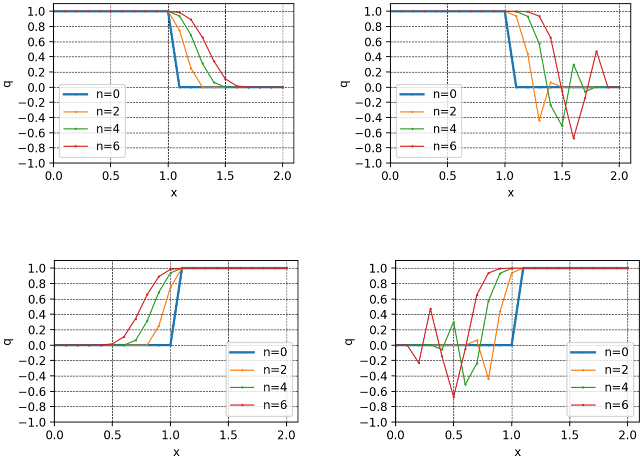


Figure: 左：一次精度　　　　右：二次精度

Godunov の定理

今の場合，2 次精度では振動が生じてしまっている．2 次以上の精度ではスカラーの移流方程式で解の単調性を維持できない (Godunov の定理)．今までの手法は全て

$$q_j^{n+1} = \sum_k c_k q_{j+k}^n$$

の形に表される．この c_k が常に正でないと単調性を維持できない．

Godunov の定理の証明

ある時刻の物理量の勾配を考えると,

$$
\begin{aligned}
q_{j+1}^{n+1} - q_j^{n+1} &= \sum_k c_k q_{j+k+1}^n - \sum_k c_k q_{j+k}^n \\
&= \sum_k c_k \left(q_{j+k+1}^n - q_{j+k}^n \right)
\end{aligned}
$$

もしデータが単調なら右辺のそれぞれの勾配は同じ符号で，c_k が全て負でなければ左辺の勾配の符号も同じ．つまり非負は十分条件．
c_k の一つが負と仮定すれば，$q_j^0 = 1(j \leqq 0), q_j^0 = 0(j \geqq 1)$ とすると，時刻 1，位置 $-k$ での勾配は

$$
q_{-k+1}^1 - q_{-k}^1 = c_k (q_1^0 - q_0^0)
$$

となり，右辺は正となってしまう．つまり $c_k > 0$ は必要条件

単調性の確認

(1)1 次精度風上法の場合

$$c_j = 1 - c\frac{\Delta t}{\Delta x}(= 1 - \nu), \quad c_{j-1} = c\frac{\Delta t}{\Delta x} = \nu$$

$\nu < 1$ なので係数は全て正．ということで単調性を維持できる．
(2)2 次精度風上法

$$\begin{aligned} c_j &= 1 - \frac{3}{2} \cdot c \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \left(= 1 - \frac{3}{2}\nu\right) \\ c_{j-1} &= 2 \cdot c \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} = 2\nu \\ c_{j-2} &= -\frac{1}{2} \cdot c \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \left(= -\frac{1}{2}\nu\right) \end{aligned}$$

3 つ目の項の係数が負になるので単調性は維持できない．

単調性の確認

(3)Lax-Wendroff 法の場合

$$c_j = 1 - c^2\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}^2\right) \quad (= 1 - \nu^2)$$

$$c_{j-1} = \frac{1}{2}\cdot c\cdot\frac{\Delta t}{\Delta x} + \frac{1}{2}\cdot c^2\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \quad \left(= \frac{\nu}{2}(1+\nu)\right)$$

$$c_{j+1} = -\frac{1}{2}\cdot c\cdot\frac{\Delta t}{\Delta x} + \frac{1}{2}\cdot c^2\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \quad \left(= -\frac{\nu}{2}(1-\nu)\right)$$

これも 3 つ目の係数が負になるので単調性を維持できない.