数値流体力学 第二回

油滴

2021/04/15

全体における今回の位置付け

ここからは最終的にオイラー方程式やナビエストークス方程式を解くことを見据えて偏微分方程式を解いていく。
特に、問題となるのは移流項の非線形性であるが、その前に線形の偏微分方程式を扱う。

移流方程式 1

ここからは偏微分方程式の簡単な例を用いてその解き方やそこで発生する問題について議論する。そこで例として考えるのが一次元波動方程式[1]である。

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c\frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (c > 0) \tag{1}$$

ここで t は時間、x は空間の座標であり q は時空間での変化を求めていく量である。(q は密度や圧力をイメージすればよい)
ここで c は一定になっており線形方程式になっている。(c>0)

[1] もしくは輸送方程式、移流方程式ともいうらしい

移流方程式 2

波動方程式を思い出すとこの方程式の解はダランベール解のように一般解をが書けて

$$q = f(x - ct) \tag{2}$$

この時 $x - ct$ が一定の線に沿って値は一定である。この直線のことを特性線と呼びこれが伝わる速度を特性速度という。[2]

[2] このあたりのことは偏微分方程式の特性曲線法を調べると出てくる

FTCS 法 1

$$\frac{\partial q}{\partial t} + c\frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (c > 0) \tag{3}$$

この方程式ある初期値のもとで解くことを考える。初期値として

$$q(x) = \begin{cases} 1.0 & (x \leq 1\text{のとき}) \\ 0.0 & (x > 1\text{のとき}) \end{cases} \tag{4}$$

とする。この場合には解析解が存在し、これと数値的に解いたものを比べることができるため練習として優れている。

FTCS 法 2

いよいよ数値的に計算していく。
値を q_j^n で表す。つまり $q_j^n = q(j\Delta x, n\Delta t)$ として離散化している。
まずは時間微分の差分化を考える。

FTCS 法 3　時間微分項

時間は前にしか進まないため、物理的に考えて前進差分を用いるのが良いだろう。つまり

$$\frac{\partial q}{\partial t} \simeq \frac{q_j^{n+1} - q_j^n}{\Delta t} \tag{5}$$

と近似するのである。空間微分を n ステップ目の q から求まれば

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \Delta t \frac{\partial q}{\partial x} \tag{6}$$

として n+1 ステップ目の q を求めることができる。

FTCS 法 4 空間微分項

ここからしばらくの問題としては空間微分をどうとれば良いかを様々な要因から探ることに集約される。まず、第一に候補に上がるのは二次精度[3]を持つ中心差分である。

$$\frac{\partial q}{\partial x} \simeq \frac{q^n_{j+1} - q^n_{j-1}}{2\Delta x} \tag{7}$$

基本的に今回学ぶ方法は中心差分の改良であるためこれを例にしっかり考える。

[3]正確に言えば今回の場合は時間方向に一次、空間方向に二次の精度である, ただ時間と空間を分けて考えるだけでは精度を評価できない

FTCS 法 5　空間微分項

時間微分と合わせると元の方程式は

$$\frac{q_j^{n+1} - q_j^n}{\Delta t} + c\frac{q_{j+1}^n - q_{j-1}^n}{2\Delta x} \tag{8}$$

とできる。q_j^{n+1} について書き直すと

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) \tag{9}$$

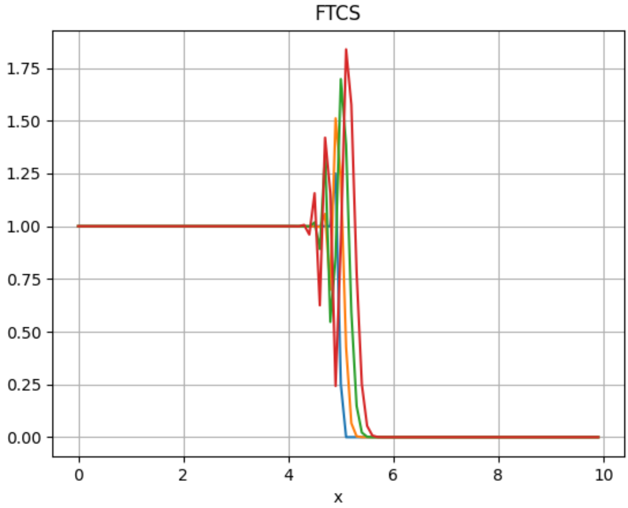
と n ステップ目の q の値から n+1 ステップ目の q の値をもとめることができる。

FTCS 法 6

このように、次の時間ステップを前の時間ステップの空間微分の差分化によって求めるやり方を一般に時間陽解法と呼ぶ。
陽解法は直観的にもプログラム的にも分かりやすいので、今後しばらくは陽解法を取り扱う。また、今回の差分法では空間微分に中心微分を用いており、この差分の取り方を FTCS 法という。[4]

[4] 時間に陽解法、空間に中心差分なので Forward in time and centerd in space scheme

FTCS 法 7



FTCS 法 8

見ての通り振動が発生してしまっており実用的ではない。
数値計算においては精度、計算量に加えて安定性にも配慮する必要がある！！ (ただし、これらの間にはトレードオフ関係がある。)
ここで数値計算の安定性について考える。

安定性解析 1

安定性は数値計算において非常に重要であり, 時間陽解法では

・CFL 条件
・ノイマン解析
・数値振動（今回はパス）

等を考える。

これらはその意味等を理解し非線形方程式に応用する必要がある。

安定性解析 2

時間、空間刻みを考えると FTCS 法において n-1 ステップ目の q の値のうち n ステップ目のある地点 x_0 に影響するものは $x_0 - \Delta x \leq x \leq x_0 + \Delta x$ に含まれるものである。

つまり、情報は最大で $c_0 = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ でしか伝わらない。

安定性解析 3

元の方程式においては特性速度 c で情報が伝わるから

$$c_0 \geq c \tag{10}$$

$$c\frac{\Delta t}{\Delta x} = \nu \leq 1 \tag{11}$$

である必要がある。この ν をクーラン数という。
また、この条件を CFL 条件[5]といい、時間陽解法ではこの限界を超えて時間刻みを大きくとることはできない。

[5] クーランさんたち三人の頭文字らしい

安定性解析 4

線形方程式なため解の重な合わせが可能
空間方向にいろんな波長の波を考え、その振幅がどのように変化するのかを調べる。
→全ての波長に対して安定である必要がある
(不安定な波長があるとその波長の振動が無限に増幅してしまう)

安定性解析 5

ノイマン解析

$$q_j^n = g^n e^{i(j\theta)} \tag{12}$$

として代入し、任意の $\theta(0 \leq \theta \leq \pi)$ に対する増幅率 g を調べる。[6]
様々な線形方程式に対して適応可能。

[6]要するに空間方向に離散フーリエ変換のようなことをしている

安定性解析 6

FTCS 法にノイマン解析を適応してみると

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) \tag{13}$$

代入して整理すると

$$g^{n+1}e^{i(j\theta)} = g^n e^{i(j\theta)} - \frac{\nu}{2}g^n(e^{i((j+1)\theta)} - e^{i((j-1)\theta)}) \tag{14}$$

$$g = 1 - i\nu\sin(\theta) \tag{15}$$

この g を絶対値と位相に分けると

安定性解析 7

$$g = |g| e^{i\phi} \tag{16}$$

$$|g| = 1 + \nu^2 \sin^2 \theta \tag{17}$$

$$\phi = -\arctan \nu \sin \theta \tag{18}$$

解析解では $g_0 = e^{-i\nu\phi}$ となるから FTCS 法は g の絶対値、位相共に正確でない。
特に増幅率が 1 を超えているため任意の波長の波が増幅され続ける。また、位相のずれを位相誤差という。

様々なスキーム

FTCS 法は正しい結果を得ることはできなかった。そのため、これを改良するもしくは考え方を変える必要がある。主なものとして以下の三つを順に取り上げる。

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \nu(q_j^n - q_{j-1}^n) \quad \text{一次精度風上法} \tag{19}$$

$$q_j^{n+1} = \frac{q_{j+1}^n + q_{j-1}^n}{2} - \frac{\nu}{2}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) \quad Lax\text{法} \tag{20}$$

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\nu}{2}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + \frac{\nu^2}{2}(q_{j+1}^n - 2q_{j-1}^n + q_{j-1}^n) \quad LW\text{法} \tag{21}$$

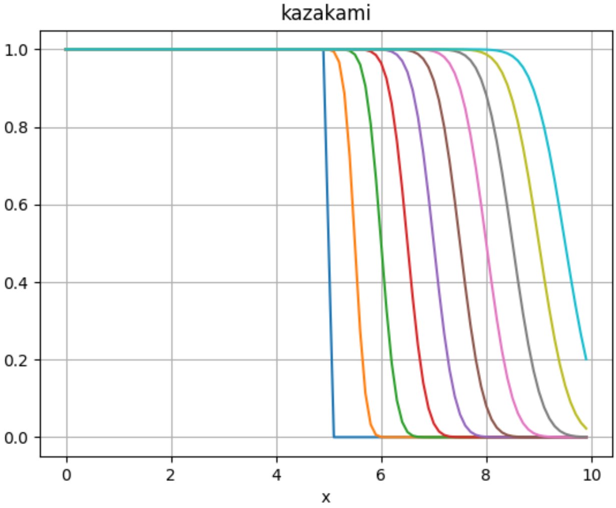
一次精度風上法1

FTCS 法における中心差分を情報が流れてくる方向のみ取り出して使う風上差分に置き換えている。

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \nu(q_j^n - q_{j-1}^n) \tag{22}$$

打切り誤差を考えると一次精度になっており精度は FTCS 法に劣る。これを実装して実行してみる。プログラムは FTCS 法のものを少しいじるだけなので改めて取り上げない。
(github に上げてあります)

一次精度風上法 2



一次精度風上法3

ノイマン解析をしてみると

$$
\begin{aligned}
g^{n+1}e^{i(j\theta)} &= g^{n}e^{i(j\theta)} - \nu g^{n}\left(e^{i(j\theta)} - e^{i((j-1)\theta)}\right) \\
g &= (1-\nu+\nu\cos\theta) - i\nu\sin\theta \\
|g| &= \sqrt{1-2\nu+2\nu^2+2\nu(1-\nu)\cos\theta} \\
\phi &= -\arctan\left(\frac{\nu\sin\theta}{1-\nu+\nu\cos\theta}\right)
\end{aligned}
$$

$\nu < 1$ で増幅率は 1 未満であり振幅は減衰する。
また、$\nu = 1$ の時、振幅、位相共に誤差が無くなる。

一次精度風上法 4

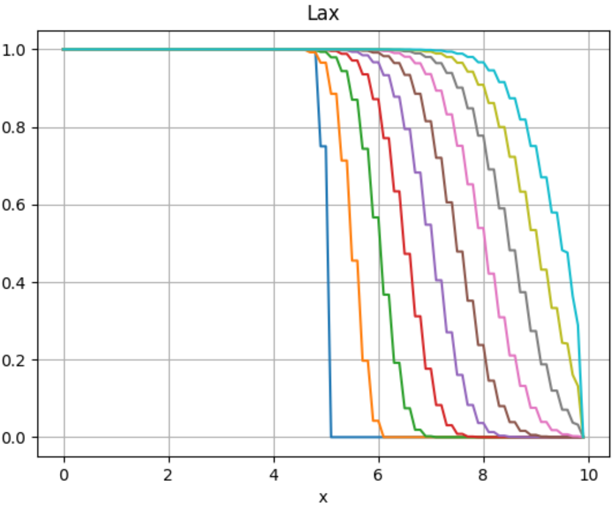
風上微分の注意として風上の方向が常に分かるとは限らないという事である。
今回のような場合は $c < 0$ のときに初期値を左右反転させれば良いので問題にはならないが、非線形方程式だとそうもいかないのでここで扱っておく。
プログラムがやや見にくくなるため、手を動して書いてみると良い。

Lax 法 1

Lax 法は FTCS 法において右辺第一項を左右の平均で表すことで安定化を図るものである。

$$q_j^{n+1} = \frac{q_{j+1}^n + q_{j-1}^n}{2} - \frac{\nu}{2}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) \tag{23}$$

Lax 法 2



Lax 法 3

やっぱりノイマン解析をしてみると

$$g^{n+1}e^{i(j\theta)} = \frac{1}{2}g^n(e^{i((j+1)\theta)} + e^{i((j-1)\theta)}) - \frac{\nu}{2}g^n(e^{i((j+1)\theta)} - e^{i((j-1)\theta)})$$

$$g = \cos\theta - i\nu\sin\theta$$

$$|g| = \sqrt{\cos^2\theta + \nu\sin^2\theta}$$

$$\phi = -\arctan\nu\tan\theta$$

Lax-Wendroff 法 1

L-W 法は一見意味がよくわからないが、巧妙に精度を上げている面白い方法である。方針としては u_j^{n+1} を時間でテイラー展開してそれを方程式を使って空間方向に変換する。

$$q_j^{n+1} = q_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial t^2} \right)_j^n + O(\Delta t^3) \tag{24}$$

$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x}$ で x に直すと

$$q_j^{n+1} = q_j^n - c \Delta t \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta t^2 c^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + O(\Delta t^3) \tag{25}$$

Lax-Wendroff 法 2

これを二次精度の中心差分で置き換えると

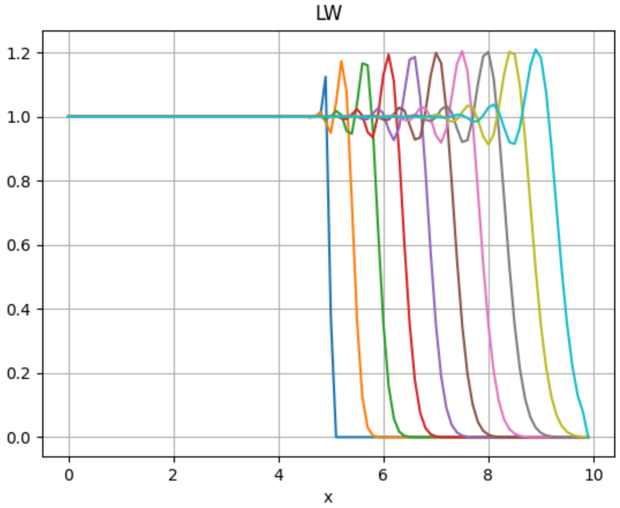
$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\nu}{2}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + \frac{\nu^2}{2}(q_{j+1}^n - 2q_{j-1}^n + q_{j-1}^n) \qquad (26)$$

と時空二次精度のスキームになる。ノイマン解析をすると (計算は省略)

$$|g| = \sqrt{(1-\nu^2(1-\cos\theta))^2 + \nu^2\sin^2\theta}$$
$$\phi = -\arctan\left(\frac{\nu\sin\theta}{1-\nu^2(1-\cos\theta)}\right)$$

実装したのが以下のとおりである。
(実際の実装には二段階法が便利)

Lax-Wendroff 法 3



プログラムリスト1

今回使ったプログラムは全て github に上げています。

・suutiryuutai_FTCS.py

p24 の空間微分に中心差分を用いた時間陽解法を実装。nu はクーラン数である。

追記:サンプルが教科書についてるからそっち見たほうが良い

・suutiryuutai_FTCS_zemi.py

上のプログラムに説明をコメントで書いている。また、ループ回数を調節している。

・suutiryuutai_itizikazakami.py

p27 の一次精度風上法を実装

プログラムリスト2

・suutiryuutai_itizikazakami_hiizon.py
c 符号非依存の一次精度風上法を実装
追記:コメント内のコードがださい、配列の反転を使うべき
・suutiryuutai_LAX.py
p34 の Lax 法を実装
・suutiryuutai_LAX-Wendroff.py
p34 の Lax-Wendroff 法を一段階で実装