2. スカラー非線型方程式の数値解析

次の 1 次元スカラー非線型波動方程式を考える．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

において，流束 f が u の 2 次式で表される．即ち，

$$f = au^2 + bu + c$$

さて，f を書き換えて，

$$\begin{aligned} f &= a\left(u^2 + \frac{b}{a}u + \frac{c}{a}\right) \\ &= a\left\{\left(u + \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{4ac - b^2}{4a^2}\right\} \end{aligned}$$

とし，$u' \equiv u + \dfrac{b}{2a}$ を導入すると，

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + 2au'\frac{\partial u'}{\partial x} = 0$$

さらに，$x' \equiv \dfrac{x}{2a}$ とスケーリングすると，

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + u'\frac{\partial u'}{\partial x'} = 0$$

となる．この方程式はバーガース方程式と呼ばれる．

上記のように流束 f が u の 2 次式で表される場合，一般性を失わずに Burgers 方程式に帰着することができることが分かる．

ここでは，バーガース方程式の数値解析法について述べる．

改めて，次の式を考える．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

あるいは，

$$\begin{aligned} &\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \\ &f = \frac{1}{2}u^2 \end{aligned} \tag{2- 1}$$

この式が，空間 $0 \le x \le 1$ で定義され，領域 $[0,1]$ の両端では周期境界条件が課されているものとする．

また，$t = 0$ で初期状態として，u の空間分布が与えられているものとする．

次に，式(2- 1)を有限体積法を用いて離散化し，$u(x)$の時間発展を追うことを考える．
有限体積法は，計算領域(この場合[0,1])を有限個のセルに分割し，セルごとに定義される物理量のセル平均量が, 個々のセルの境界面から正味に流入(出)する物理量を計算し, セル平均量の時間発展を計算する方法である．

計算領域を N 等分割するものとし, セルに番号をつける(左から右に数えて i=1,...,N)．個々のセルの幅は定義から$\Delta x = 1/N$である．i 番目のセルの左側の境界（i-1 番目のセルとの境界）は$x = (i-1)\Delta x$に位置し，i 番目のセルの右側の境界（i+1 番目のセルとの境界）は$x = i\Delta x$に位置する．

さて，有限体積法を構築するために，まず，(2- 1)を i 番目のセルに亘ってxで積分する．

$$\int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \right) dx = 0 \qquad (2\text{- }2)$$

左辺を書き換えて，

$$\begin{aligned} \int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} \frac{\partial u}{\partial t} dx + \int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} \frac{\partial f}{\partial x} dx &= \int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} \frac{\partial u}{\partial t} dx + \int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} df \\ &= \frac{d}{dt} \int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} u dx + \left[f_{i+1/2} - f_{i-1/2} \right] \end{aligned}$$

を得る．二番目の等号においては，時間微分値の積分値が，積分値の時間微分に等しいことを前提としている．また，

$$f_{i+1/2} \equiv f(x = i\Delta x)$$
$$f_{i-1/2} \equiv f(x = (i-1)\Delta x)$$

を表す．
従って，式(2- 2)は以下のように表される．

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} u dx \right) = f_{i-1/2} - f_{i+1/2} \qquad (2\text{- }3)$$

次に，i 番目のセルでのuのセル平均量u_iを定義する．

$$u_i \equiv \frac{\int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} u dx}{\int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} dx} = \frac{1}{\Delta x} \int_{(i-1)\Delta x}^{i\Delta x} u dx \qquad (2\text{- }4)$$

式(2- 3)，(2- 4)から，

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{f_{i-1/2} - f_{i+1/2}}{\Delta x} \qquad (2\text{-}5)$$

次に時間積分について述べる．一定の積分幅を仮定し，それをΔt とする．時刻 t=0 で初期状態として，各セルでのセル平均値u_i（i=1,…,N）が与えられ，数値積分をn回重ねることで，$t = n\Delta t$ での値が全て分かっているとすると，$t = (n+1)\Delta t$ における値は，以下のようにして計算される．

まず上式を$n\Delta t \sim (n+1)\Delta t$ の間で積分する．

$$\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} \frac{du_i}{dt} dt = \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} \frac{f_{i-1/2} - f_{i+1/2}}{\Delta x} dt$$

書き換えて，

$$\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} du_i = \frac{1}{\Delta x}\left(\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f_{i-1/2} dt - \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f_{i+1/2} dt \right)$$

さらに，

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

ただし，

u_i^n は時刻$t = n\Delta t$ におけるu_iを意味する．

右辺の積分を評価する方法として，数値計算法では，代表的に 2 種類の方法に分類する．陽解法(explicit scheme)と陰解法(implicit scheme)である．

陽解法では, 右辺中の流束を時刻$t = n\Delta t$ での値で評価する. それに対し, 陰解法では, 時刻$t = (n+1)\Delta t$ での値で評価する．陽解法では既知量（u_i^n）を用いて右辺を計算することができる．

陽解法を用いて先ほどの式を表すと以下のようになる．

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

一方，陰解法の場合は，

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

と表される．右辺がu_i^{n+1}の関数であるためu_i^{n+1}を求めるためには，何らかの線形化操作をする必要がある．

当面，陽解法を用いて話を進める．

　次に，セル界面での数値流束について述べる．

ＦＤＳとＦＶＳ

１）ＦＤＳスキーム(Flux difference splitting scheme)

$$\hat{f}_{i+1/2} = \hat{f}(u_i, u_{i+1})$$

What is flux difference?

$$\Delta f \equiv f_{i+1} - f_i$$
$$\Delta u \equiv u_{i+1} - u_i$$

$$\begin{aligned}\Delta f &= \frac{1}{2}\left(u_{i+1}^2 - u_i^2\right) \\ &= \frac{1}{2}(u_{i+1} + u_i)(u_{i+1} - u_i) \\ &= \frac{1}{2}(u_{i+1} + u_i)\Delta u\end{aligned}$$

What is flux-difference splitting?

$$\Delta f = \Delta f^+ + \Delta f^-$$

where

$$\Delta f^+ = f_{i+1} - \hat{f}_{i+1/2}$$
$$\Delta f^- = \hat{f}_{i+1/2} - f_i$$

flux-difference splitting scheme:

$$\hat{f}_{i+1/2} = \frac{1}{2}\left(f_i + f_{i+1} + \Delta f^- - \Delta f^+\right) \qquad (2\text{- }6)$$

How to split the flux difference?

$$\begin{aligned}df &= \left(\frac{df}{du}\right)du \\ &= udu\end{aligned}$$

Find $\tilde{u}$ so that $\Delta f = \tilde{u}\,\Delta u$.
Easily found that

$$\tilde{u} \equiv \frac{1}{2}(u_i + u_{i+1})$$

Split flux-differences are

$$\Delta f = \Delta f^{+} + \Delta f^{-}$$

$$\Delta f^{\pm} \equiv \tilde{u}^{\pm} \Delta u$$

$$\tilde{u}^{\pm} \equiv \frac{\tilde{u} \pm |\tilde{u}|}{2}$$

これらより,

$$\begin{aligned} \hat{f}_{i+1/2} &= \frac{1}{2}\left(f_i + f_{i+1} + \tilde{u}^{-}\Delta u - \tilde{u}^{+}\Delta u\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(f_i + f_{i+1} - |\tilde{u}|\Delta u\right) \end{aligned} \tag{2- 7}$$

$$\hat{f}_{i+1/2} = \hat{f}(u_i, u_{i+1}) = \frac{1}{2}\left[f_i + f_{i+1} - \frac{1}{2}|u_i + u_{i+1}| \cdot (u_{i+1} - u_i)\right] \tag{2- 8}$$

Flux Vector Splitting scheme (FVS)

$$f = f^{+} + f^{-}$$

$$\hat{f}_{i+1/2} = \hat{f}(u_i, u_{i+1}) = f^{+}(u_i) + f^{-}(u_{i+1})$$

一つの方法

$f = \dfrac{1}{2} u \cdot u$だから,

$$f^{\pm} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}\left(u \pm |u|\right) \cdot u$$

とすると, $f = f^{+} + f^{-}$を満たす.

$$\hat{f}_{i+1/2} = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\left(u_i + |u_i|\right)u_i + \frac{1}{2}\left(u_{i+1} - |u_{i+1}|\right)u_{i+1}\right] \tag{2- 9}$$

高次精度化

上述の範囲では，スキームの空間精度は１次精度となる．これらは，セル界面での数値流束を評価する際に，接しあう当該セルの物理量(平均量)そのものを用いている(piece-wise constant)．実際の解はセル内部でも変化しているはずであるから，数値流束をこのようにして近似することによって誤差を生み出す．セル界面での数値流束を評価する

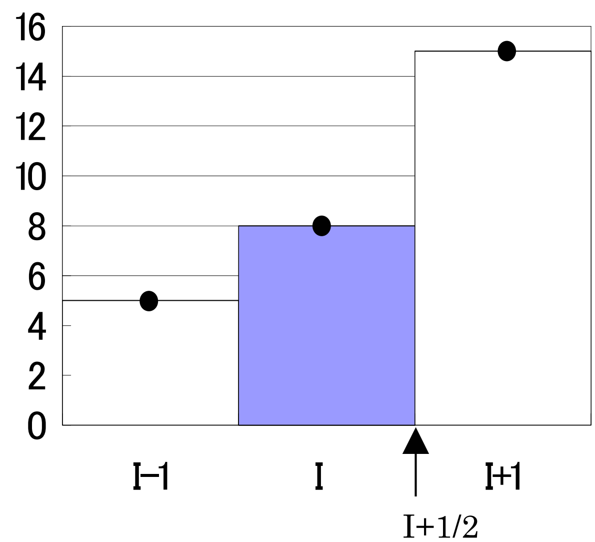
精度を高める一つの方法は，セル内に物理量の分布を想定し，セル界面での適切な物理量を評価（再構築：reconstruction）して，数値流束を計算することである．これはMUSCL アプローチと呼ばれることがある。セルの分布を一次式で仮定するとpiece-wise linear，二次式で仮定すると piece-wise parabolic などと呼ぶ.

ただし，分布をただ仮定して，界面の値を評価しただけでは，数値計算の安定性が失われてしまい，高精度化を達成することはできない.

適切に高精度化を行うためには，

- 物理量の保存
- 単調性

に配慮しなければならない.



１次精度：　セル内で一定
２次精度：　セル内で１次関数
３次精度：　セル内で２次関数

$$\mathbf{q}^{L}_{i+1/2} = \mathbf{q}_i + \frac{\phi}{4}[(1-\kappa)\nabla\mathbf{q}_i + (1+\kappa)\Delta\mathbf{q}_i]$$

$$\mathbf{q}^{R}_{i-1/2} = \mathbf{q}_i - \frac{\phi}{4}[(1+\kappa)\nabla\mathbf{q}_i + (1-\kappa)\Delta\mathbf{q}_i]$$

後退差分　：　$\nabla\mathbf{q}_i = \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{i-1}$

前進差分　：　$\Delta\mathbf{q}_i = \mathbf{q}_{i+1} - \mathbf{q}_i$

$\phi = 0$ ：一次精度

$\phi = 1$ ：高次精度

κ	-1	0	1/3	+1
精度	２次精度	２次精度	３次精度	２次精度
特徴	１次風上	１次対称(Fromm 法)	２次多項式 セル平均値を保存	中心差分

課題５ ：Burger's Equation Without limiter

次の非線型波動方程式(バーガーズ方程式)が初期値と境界条件と共に与えられている．時刻、t=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 における解を数値計算し、重ねてプロットせよ．空間は０から１までを１００分割すること．数値計算は表の各設定を用いて実施し、それぞれの数値解の特性を吟味せよ．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad 0 \le x \le 1$$

初期条件：

$$u(x) = \sin(2\pi x) \qquad \text{at} \qquad 0 \le x < 0.66$$

$$u(x) = -\sin(2\pi x) \qquad \text{at} \qquad 0.66 \le x \le 1$$

境界条件： $x = 0,1$ で周期条件

数値計算ケース

	$\Delta t = 0.005$		$\Delta t = 0.001$		$\Delta t = 0.0001$	
	ＦＤＳ	ＦＶＳ	ＦＤＳ	ＦＶＳ	ＦＤＳ	ＦＶＳ
$\phi = 0$	1	16	2	17	3	18
$\phi = 1, \kappa = -1$	4	19	5	20	6	21
$\phi = 1, \kappa = 0$	7	22	8	23	9	24
$\phi = 1, \kappa = 1/3$	10	25	11	26	12	27
$\phi = 1, \kappa = 1$	13	28	14	29	15	30

高次精度の外挿を用いると解の増加・減少特性（ここでは単調性）を壊すことがある．

単調性を維持するために導入されるのが次に示すリミッターである．

リミッター

高次精度の場合、($\phi = 1$)

$$q^r_{i-1/2} = \overline{q}_i - \frac{1}{4}\left[(1+\kappa)\nabla q_i + (1-\kappa)\Delta q_i\right]$$
$$q^l_{i+1/2} = \overline{q}_i + \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\nabla q_i + (1+\kappa)\Delta q_i\right] \quad (1)$$

であるから、

$$q^r_{i-1/2} = \overline{q}_i - \frac{1}{2}\delta q^r$$
$$q^l_{i+1/2} = \overline{q}_i + \frac{1}{2}\delta q^l \quad (2)$$

と表すと、ここで、

$$\delta q^r \equiv \frac{1}{2}\left[(1+\kappa)\nabla q_i + (1-\kappa)\Delta q_i\right]$$
$$\delta q^l \equiv \frac{1}{2}\left[(1-\kappa)\nabla q_i + (1+\kappa)\Delta q_i\right] \quad (3)$$

である.

<u>リミッター $R(\theta)$ の定義</u>

リミッターを用いた左/右物理量(セル平均を保存する意味で左右の変化量を等量とする.但し他の方法も可能ではある.)

$$q^{r-\lim}_{i-1/2} \equiv \overline{q}_i - \frac{1}{2}\delta q_{\lim}$$
$$q^{l-\lim}_{i+1/2} \equiv \overline{q}_i + \frac{1}{2}\delta q_{\lim} \quad (4)$$

$$\delta q_{\lim} = \tfrac{1}{2}\{\mathrm{sgn}(\delta q^r_{\lim}) + \mathrm{sgn}(\delta q^l_{\lim})\}\min[|\delta q^r_{\lim}|, |\delta q^l_{\lim}|]$$
$$\delta q^r_{\lim} \equiv R^r(\theta)\,\delta q^r$$
$$\delta q^l_{\lim} \equiv R^l(\theta)\,\delta q^l \quad (5)$$
$$\theta \equiv \frac{\Delta q_i}{\nabla q_i}$$

このとき、リミッター$R^r(\theta)$と$R^l(\theta)$は以下の条件を満たす。

1) $\overline{q}_{i-1}, \overline{q}_i, \overline{q}_{i+1}$が単調に増加(減少)しない場合(i.e. $\theta < 0$)は$R^r(\theta) = R^l(\theta) = 0$
i.e. 1次精度

2) 単調増加(i.e. $\overline{q}_{i-1} < \overline{q}_i < \overline{q}_{i+1}$)の場合は、

$$\overline{q}_{i-1} \le \overline{q}_i - \tfrac{1}{2}\delta q^r_{\lim} \le \overline{q}_i \quad かつ \quad \overline{q}_i \le \overline{q}_i + \tfrac{1}{2}\delta q^l_{\lim} \le \overline{q}_{i+1} \quad (6)$$

を満たす。これよりリミッターに関して以下のようにして条件が導かれる.
最初の不等式から

$$
\begin{aligned}
&\overline{q}_{i-1} \le \overline{q}_i - \tfrac{1}{2}\delta q^r_{\lim} \le \overline{q}_i \\
\Rightarrow\quad & -\nabla q_i \le -\tfrac{1}{2}\delta q^r_{\lim} \le 0 \\
\Rightarrow\quad & -\nabla q_i \le -\tfrac{1}{2} R^r(\theta)\,\delta q^r \le 0 \\
\Rightarrow\quad & 2\nabla q_i \ge R^r(\theta)\ \ \delta q^r \ge 0 \\
\Rightarrow\quad & \frac{2\nabla q_i}{\delta q^r} \ge R^r(\theta) \ge 0 \qquad\qquad \because \delta q^r > 0 \\
\Rightarrow\quad & \frac{2\nabla q_i}{\tfrac{1}{2}\left[(1+\kappa)\nabla q_i + (1-\kappa)\Delta q_i\right]} \ge R^r(\theta) \ge 0 \\
\Rightarrow\quad & \frac{4\nabla q_i}{(1+\kappa)\nabla q_i + (1-\kappa)\Delta q_i} \ge R^r(\theta) \ge 0 \\
\Rightarrow\quad & \frac{4}{1+\kappa+(1-\kappa)\theta} \ge R^r(\theta) \ge 0
\end{aligned}
\tag{7}
$$

同様に二つ目の不等式から

$$
0 \le R^l(\theta) \le \frac{4\theta}{1-\kappa+(1+\kappa)\theta} \tag{8}
$$

(3) 単調減少(i. e.　$\overline{q}_{i-1} > \overline{q}_i > \overline{q}_{i+1}$)の場合も、式(7), (8)を満たさなければならない。

(4) $\nabla q_i = 0$ で $\Delta q_i \ne 0$ の場合（i. e.　$\theta \to \infty$）は、$R^r(\theta) = 0$ 及び $0 \le R^l(\theta) \le 4/(1+\kappa)$ でなければならない.

(5) $\nabla q_i \ne 0$ で $\Delta q_i = 0$ の場合（*i.e.*　$\theta = 0$）は、式(7), (8)に拠る。

$R^r(\theta)$ 及び $R^l(\theta)$ はリミッターである以上、原則として、1 以下でなければならない.

以上より

$$
\begin{aligned}
0 \le R^r(\theta) \le \min\left[\frac{4}{1+\kappa+(1-\kappa)\theta}, 1\right] \\
0 \le R^l(\theta) \le \min\left[\frac{4\theta}{1-\kappa+(1+\kappa)\theta}, 1\right]
\end{aligned}
\tag{9}
$$

以上

課題６ ： Burger's Equation With limiter

次の非線型波動方程式(バーガーズ方程式)が初期値と境界条件と共に与えられている．時刻、t=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 における解を数値計算し、重ねてプロットせよ．空間は０から１までを１００分割すること．数値計算は表の各設定を用いて実施し、それぞれの数値解の特性を吟味せよ．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad\qquad 0 \le x \le 1$$

初期条件：

$$u(x) = \sin(2\pi x) \qquad \text{at} \qquad 0 \le x < 0.66$$
$$u(x) = -\sin(2\pi x) \qquad \text{at} \qquad 0.66 \le x \le 1$$

境界条件： $x = 0,1$ で周期条件

数値計算ケース　　　　リミッターを用いて計算すること．

	$\Delta t = 0.005$		$\Delta t = 0.001$		$\Delta t = 0.0001$	
	ＦＤＳ	ＦＶＳ	ＦＤＳ	ＦＶＳ	ＦＤＳ	ＦＶＳ
$\phi = 1, \kappa = -1$	1	13	2	14	3	15
$\phi = 1, \kappa = 0$	4	16	5	17	6	18
$\phi = 1, \kappa = 1/3$	7	19	8	20	9	21
$\phi = 1, \kappa = 1$	10	22	11	23	12	24

$$u_{i-1/2}^{r-\lim} = \overline{u}_i - \tfrac{1}{2}\delta u_{\lim}$$
$$u_{i+1/2}^{l-\lim} = \overline{u}_i + \tfrac{1}{2}\delta u_{\lim}$$
$$\delta u_{\lim} \equiv \tfrac{1}{2}\{\mathrm{sgn}(\delta u_{\lim}^{r}) + \mathrm{sgn}(\delta u_{\lim}^{l})\}\min\left[\left|\delta u_{\lim}^{r}\right|, \left|\delta u_{\lim}^{l}\right|\right]$$
$$\delta u_{\lim}^{r} \equiv R^{r}(\theta)\delta u^{r}$$
$$\delta u_{\lim}^{l} \equiv R^{l}(\theta)\delta u^{l}$$
$$\delta u^{r} \equiv \tfrac{1}{2}\left[(1+\kappa)\nabla u_i + (1-\kappa)\Delta u_i\right]$$
$$\delta u^{l} \equiv \tfrac{1}{2}\left[(1-\kappa)\nabla u_i + (1+\kappa)\Delta u_i\right]$$
$$\theta \equiv \Delta u_i / \nabla u_i$$
$$0 \le R^{r}(\theta) \le \min\left[\frac{4}{1+\kappa+(1-\kappa)\theta},\quad 1\right]$$
$$0 \le R^{l}(\theta) \le \min\left[\frac{4\theta}{1-\kappa+(1+\kappa)\theta},\quad 1\right]$$

課題７ ： Entropy Fix （膨張衝撃波の除去）

次の非線型波動方程式（バーガーズ方程式）が初期値と境界条件と共に与えられている．時刻、t=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 における解を数値計算し、重ねてプロットせよ．空間は０から１までを１００分割すること．数値計算は空間一次精度及び二次精度（風上差分）について、それぞれ、リミッターを用い、ＦＤＳ法により行う．時間ステップは 0.001 を用いる．

Ｅｎｔｒｏｐｙ　Ｆｉｘの方法を考案し、数値粘性の導入量によってどのように数値解が変わるかを吟味せよ．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad\qquad 0 \le x \le 1$$

初期条件：

$$u(x) = \sin(2\pi x) \qquad \text{at} \qquad 0 \le x < 0.66$$

$$u(x) = -\sin(2\pi x) \qquad \text{at} \qquad 0.66 \le x \le 1$$

境界条件： $x = 0,1$ で周期条件

数値計算ケース　　FDS+limiter で Entropy Fix を施す． $\Delta t = 0.001$

$\phi = 0$ 及び、 $\phi = 1, \kappa = -1$ の場合について計算する．

以上