情報数学C

Mathematics for Informatics C

第9回 偏微分方程式の数値解法 (放物型方程式,楕円型方程式,双曲型方程式)

> 情報メディア創成学類 藤澤誠

情報数学C (GC21601)

今回の講義内容

■ 今日の問題

- 境界値問題
- 有限差分法
- 1階偏微分方程式:移流方程式
- 2階偏微分方程式

今回の講義で解く問題

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} + \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = g(x,y)$$

微分で構成される方程式

 $g\left(x, f(x), \frac{\partial f(x)}{\partial x}, \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}, \dots, \frac{\partial^n f(x)}{\partial x^n}\right) = 0$

ここで $n \ge 1$ で $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_m)$ が独立変数

今回の講義で解く問題

偏微分方程式(PDE: Partial Differential Equation) 2つ以上の独立変数を含む未知関数f(x)とその偏



求めたいのは、「未知関数f(x)」

⇒数値解析としては $\int x$ が与えられたときのf(x)の値

を求める」ということ(f(x)がどういう関数なのかは分かっていない)

今回の講義で扱う問題

偏微分方程式はどんなところで使われる?(前回と同じ) 自然現象,工学モデルの多くはその支配方程式が常微 分方程式/偏微分方程式*の形になる

ニュートンの運動方程式 $(m\frac{\partial^2 x}{\partial x^2} = F)$ が微分方程式であり, 多くの力学の支配方程式はこれから導かれているため微 分方程式になる

工学

熱力学の熱拡散方程式や流体力学のナビエ・ストークス 方程式,電磁気学のマクスウェル方程式,量子力学のシュ レディンガー方程式などほとんどの工学分野は微分方程 式で表された支配方程式を基礎としている

これらの微分方程式のほとんどが 非線形微分方程式で数学的に 解くことが難しい(境界条件が簡単なら解けたりするけど実際の問題には適用しづらい)

*常微分方程式と偏微分方程式の違いは独立変数の数(要は $\frac{df}{dx}$ か $\frac{\partial f}{\partial x}$ + $\frac{\partial f}{\partial y}$ の違い) 情報数学C (GC21601)

今回の講義で解く問題

偏微分方程式を解いた結果のf(x)は**関数**?

数値計算では具体的な数値が求まる. 関数f(x)の形(多項 式とか)が決まっていないのにどうやって何を求めるのか?

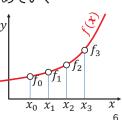
離散点 $x_1, x_2, ..., x_n$ における値 $f_1, f_2, ..., f_n$ を

• 初期値(x₀, f₀)から順番に求めていく

⇒ 初期値問題

• 境界条件[a, b] $(f(a) = \alpha,$ $f(\mathbf{b}) = \beta$)に基づいて求める

⇨境界值問題



今回の講義で解く問題

今回の講義で扱う「偏微分方程式」についての前提条件

- ・ 微分方程式のg(x, f(x), ...)が**数式として与えられ**, 初期値 (x_0, f_0) が値として, 境界条件が条件式として**得られた**とき, **離散点** x_i における f_i の値を求める(i = 1, 2, ...)
- f(x)は**2つ以上の変数xで表される**とする(つまり、 df/dxではなく $\partial f/\partial x$ と表される). 今回扱うのはf(x)の境界 条件が与えられたときの**境界値問題**
- g(x)は線形でも非線形でもどのような形でも良い.

今回の講義内容

- 今日の問題
- 境界値問題
- 差分法
- 1階偏微分方程式:移流方程式
- 2階偏微分方程式

情報数学C (GC21601)

情報數學C (GC21601)

境界值問題

境界値問題とは?

前回(常微分方程式)までは初期値問題:

xの範囲[a,b]に対して, $x_0=a$ における値 $y_0=f(x_0)$ を用いて, $y_i=f(x_i)$ $(i_{----}1,2,...,n)$ を**順番に求めていく**

最終的にynがどのような値になるのかは分からない

- 変数が1つだけの常微分方程式の場合, **時間**tを変数にしてモデル化することが多く, ほとんどの場合, 初期値問題でOK
- 偏微分方程式の場合,時間以外の別の軸(多くは空間) が含まれ,空間軸の場合は**両端点での値/条件が** 決まっている問題が多い

情報数学C (GC21601)

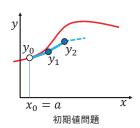
. ე

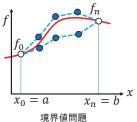
境界值問題

境界値問題とは?

2点境界值問題(1次元):

xの範囲[a,b]に対して, $x_0=a$ における値 f_0 と $x_n=b$ における値 f_n を用いてその間の値 f_i (i=1,2,...,n-1)を求める





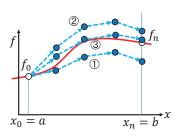
情報数学C (GC21601

8.芥但问思

境界值問題

境界値問題を解くための方法1:狙い撃ち法

初期値問題との違いは始点だけでなく終点も指定されること \Rightarrow 初期値問題と同じ方法で f_n まで求めて、指定値/条件に **外れていたら修正する**



- ①:1回目の試行
- ②:2回目の試行
- ③:3回目の試行

 x_n でのずれを式で表し(B(x, f)), それを0にする $\Rightarrow B(x, f) = 0$ で求根問題となるので**ニュートン法**などが使える

境界值問題

境界値問題を解くための方法2:**緩和法**

初期推定値を $i=0\sim n$ のすべての点で与え、微分方程式及び境界値/条件に合うようにすべての点の値を修正する。この修正を何度も反復(緩和)することで最終的に近似解を得る

①:全体の初期推定値を決める

②:全体を修正(反復1回目) ③:全体を修正(反復2回目)

複数の変数値を一度に解く ⇒線形システムAx = bの形に なるのでCG法などのソルバー が使える

情報数学C (GC21601

12

情報数学C (GC2160

1

境界值問題

境界条件の種類

f(x)に関する微分方程式のx = a, bにおける境界条件を考える

ディリクレ(Dirichlet)条件

境界においてとるべき**値を指定**する

$$f(a) = f_a$$
, $f(b) = f_b$

⇒ 周囲環境の温度や密度,壁面における速度など

ノイマン(Neumann)条件

境界においてとるべき条件を**勾配値として指定**する

$$\frac{\partial f}{\partial x}(a) = f_a, \ \frac{\partial f}{\partial x}(b) = f_b$$

⇒流入/流出条件や大きな空間の一部を切り取った場合など

境界值問題

境界値問題について

- 今回の講義では基本的に緩和法を用いる (実際の計算では境界条件を多数の地点で同時に満たす 必要があり、その場合でも緩和法は**安定して解ける**)
- 偏微分方程式では基本的に,
 - 時間微分については初期値問題として,
 - 空間微分については境界値問題として 解く(2つの組み合わせになることがほとんど)

今回の講義内容

- 今日の問題
- 境界値問題
- 有限差分法
- 1階偏微分方程式:移流方程式
- 2階偏微分方程式

有限差分法

以下の**境界条件付きの2階微分方程式**を(数値計算で)解 くことを考えてみる

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = g(x)$$
 境界条件: $f(a) = \alpha, f(b) = \beta$

 $x \in [a, b]$ をn分割し、各点 x_i (i = 0, 1, ..., n)での $f(x_i) = f_i$ を 求めるとすると緩和法の手順は:

- 1. f_i (i = 0,1,...,n)の初期値を設定
- 2. 微分方程式に合うように f_i を修正
- 3. 解が収束したら終了,収束してなければ2に戻る

となるがここで問題となるのが手順2の「微分方程式に合 **うように**」のところ ⇒ コンピュータで計算できるように 微分方程式を四則演算だけで表さなければならない

有限差分法

前回の講義で説明した前進オイラー法と微分の定義の関係 を思いだそう!

前進オイラー法の式: $f_{i+1} = f_i + hg(x_i, f_i)$

微分の定義でh → 0の極限をとらないものに相当

$$\frac{df}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}$$

この考え方を使えば、微分を四則演算だけに置き換えられる!

刻み幅をh = (b - a)/nとすると微分は以下の式で近似できる

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

有限差分法

微分を差分に置き換えて近似する方法を**有限差分法** (FDM:Finite Differential Method)もしくは単に**差分法**と呼ぶ

前進差分近似では計算点を前に進めたときの値 f;+1を用いたが, 後ろ (x_{i-1}) での値 f_{i-1} を用いても同様に近似できる

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{h}$$
 後退差分近似

前進/後退差分近似の誤差は前進オイラーの1区間の場合 の誤差と同じく $O(h^2)$ (n区間ではO(h)なので1次精度)

- ⇒ 精度を上げるには?
- ⇒ 2次以上の微分に対応するには?

有限差分法

前進/後退差分の式はテイラー展開からも求められる.

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + O(h^3)$$

1次項までを変形すると**前進差分近似**になる

$$\underline{f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i)} + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + O(h^3)$$

2次項まで考えれば精度が上げられそうだけどf"が邪魔なの で,両式の差をとってf"の項を消してみる

$$f(x_i + h) - f(x_i - h) = 2hf'(x_i) + O(h^3)$$

 \Rightarrow $O(h^3)$ 部分を無視して変形すると…

情報数学C (GC21601)

有限差分法

 f_{i+1} と f_{i-1} を用いた差分式

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$
 中心差分近似

中心差分近似の誤差は O(h3) (n区間全体で2次精度)

- ⇒ 他にも**高精度な差分法**があるがこれは後で説明
- ⇒まずは設定した境界値問題を解くために2次微分を近似 する方法を考える

有限差分法

3次項までテイラー展開:

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + \frac{h^3}{6}f'''(x_i) + O(h^4)$$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) - \frac{h^3}{6}f'''(x_i) + O(h^4)$$

今度は2つの式を足してみる

$$f''(x_i)pprox rac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2}$$
 :2次微分の差分法による近似 $(n$ 区間で3次精度)

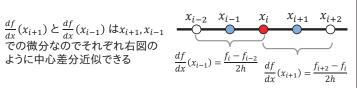
有限差分法

2次微分の近似式の意味を考えてみよう

差分法は1次元においては刻み幅hで格子分割した点 での値を用いて微分を近似する方法

⇒ 2次微分を1次微分を更に微分したものと考えれば、 「微分値の差分」として中心差分近似できる

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{df}{dx} \right) \approx \frac{\frac{df}{dx}(x_{i+1}) - \frac{df}{dx}(x_{i-1})}{2h}$$



有限差分法

それぞれ代入して整理すると:

$$\frac{d^2f}{dx^2} \approx \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4h^2}$$

刻み幅 $2h \rightarrow h$ とすると:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

 $(2h \rightarrow h$ とすると $f_{i+2} = f(x_i + 2h)$ が $f_{i+1} = f(x_i + h)$ になることに注意)

$$2h \to h$$
にすると右図のようになると考えればよい (最初から $x_{i-\frac{1}{2}}$ と $x_{i+\frac{1}{2}}$ での微分を中心差分で近似しても導出できる) $\frac{f_{i-1}}{h}$ $\frac{f_{i+1}-f_{i}}{h}$

有限差分法

境界条件付き2階微分方程式の問題に戻ろう

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = g(x) \quad \text{境界条件: } f(a) = \alpha, f(b) = \beta$$

中心差分近似を用いることで左辺を差分式に近似できる

$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = g(x_i)$$

$$f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = h^2 g(x_i)$$

この式が x_1 から x_{n-1} までのn-1個の計算点で定義される $(x_0 \ge x_n \circ f(x))$ は境界条件で決まっている)

有限差分法

Ax = bの**線形システム**の形になっている! ⇒ ガウスザイデル法や共役勾配法などで解けばf;が得られる

*共役勾配法で解くために正定値行列になるように-1を掛けています 25

有限差分法

境界条件付き2階微分方程式を数値計算で解く.

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = g(x)$$
 境界条件: $f(a) = \alpha, f(b) = \beta$

 $x \in [a,b]$ をn分割し、各点 x_i (i = 0,1,...,n)での $f(x_i) = f_i$ を 求めるとすると緩和法の手順は:

- 1. f_i (i = 0,1,...,n)の初期値を設定
- 2. 差分式を線形システムソルバで解くことで $f_1 \sim f_{n-1}$ を求める

で行っている

28

有限差分法

緩和法のコード例

(微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

```
double h = (x1-x0)/n; // 空間刻み幅
// 線形システムの係数行列と右辺項ベクトルの計算
vector<double> b(n-1, 0.0), x(n-1, 0.0);
vector< vector<double> > A(n-1, b);
vector< vector<double> > A(n-1
for(int i = 1; i < n-2; ++i){</pre>
```

1次元配列bで初期化することで $n-1 \times n-1$ の2次元配列になる (同時に0で初期化されている)

double xi = x0+h*(i+1); A[i][i-1] = -1; A[i][i] = 2; A[i][i+1] = -1; b[i] = -h*h*g(xi);

 $i = 2 \sim n - 2$ での係数行列。 右辺項の計算

// CG法で線形システムを解く int max iter = 100; double eps = 1e-6;
cg_solver(A, b, x, n-1, max_iter, eps); $i = 1 \ge i = n - 1$ での係数行列, 右辺項の計算(配列が0スタートなの で要素位置が1つずれることに注意)

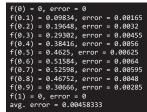
// 結果を配列fに戻す for(int i = 0; i < n-1; ++i) f[i+1] = x[i]; f[0] = alpha; f[n] = beta; // 境界条件 f_i の大きさがn+1に対して, Ax=bでのxは $f_1 \sim f_{n-1}$ のn-1なので別の配列を使って解いた後に f_i に戻す ようにしている

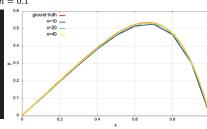
27

有限差分法

緩和法の実行結果例

範囲[0,1], 初期値 $f_i^{(0)}=0$, 刻み幅h=0.1





n=10で平均誤差約0.0046, n=20で約0.0011, n=40で約0.00027であり, 分割数が増える(刻み幅が小さく)なれば精度は上がっていく

今回の講義内容

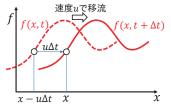
- 今日の問題
- 境界值問題
- 有限差分法
- 1階偏微分方程式:移流方程式
- 2階偏微分方程式

1階偏微分方程式

境界値問題も解けるようになったので,具体的な 偏微分方程式を差分法で解いてみよう!

移流方程式(1階偏微分方程式の例)

位置xと時間tに関する関数f(x,t)が一定速度uで流される場合(移流) を考えてみる



ある点xでの値は Δt 前に $x - u\Delta t$ に あった値が流れてきたと考えると:

 $f(x, t + \Delta t) = f(x - u\Delta t, t)$

1階偏微分方程式

移流方程式(続き)

前ページ青枠の式の左辺をtで,右辺をxについてテイラー展開:

$$f(x,t) + \Delta t \frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + O(\Delta t^2) = f(x,t) - u \Delta t \frac{\partial f(x,t)}{\partial x} + O((u \Delta t)^2)$$

2次項以降を無視して整理すると:

$$\left| \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \right|$$
 : 移流方程式

移流方程式は何らかの速度場が与えられたときに関数(分布)が どう変化するかを計算するのに使われる

例) 煙や水の移流シミュレーション, 画像中の領域追跡など(レベル セット法が有名,移流方程式自体は流体シミュレーションでは必須)

情報数学C (GC21601)

移流方程式

これまでに学んだ方法で移流方程式を解いてみよう

移流方程式の左辺第二項を右辺に移項して、F(x,t)と置き換えると

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -u \frac{\partial f}{\partial x} = F(x,t)$$
 (uは定数値とする)

前回の講義で見慣れた形であり、現在のfから未来のfを計算した いとすると、初期値問題として解ける. 時間軸方向の刻み幅を Δt として前進オイラー法で近似すると:

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + \Delta t F(x,t)$$

F(x,t)に含まれる**空間微分を境界値問題**として刻み幅hで中心 **差分近似**すれば:

$$f_i^{(k+1)} = f_i^{(k)} - \frac{u\Delta t}{h} \frac{f_{i+1}^{(k)} - f_{i-1}^{(k)}}{2}$$

情報数学C (GC21601)

FTCS法

$$f_i^{(k+1)} = f_i^{(k)} - \frac{u\Delta t}{h} \frac{f_{i+1}^{(k)} - f_{i-1}^{(k)}}{2}$$

この更新式*は、時間微分を前進オイラー法で、

空間微分を中心差分で近似するので

FTCS法 と呼ばれる(Forward-Time Centered-Space)

FTCS法で重要なのは $\nu = \frac{u\Delta t}{h}$ でこれは**クーラン数**と呼ばれる.

⇒ クーラン数は**計算の安定性**に関係する!

安定性に関して説明するためにも、 まずはコードと実行例を見てみよう

情報数学C (GC21601)

*更新式で $f_i^{(k)}$ は $f(x_i,t), f_i^{(k+1)}$ は $f(x_i,t+\Delta t)$ と考えれば良い 33

FTCS法

移流方程式のFTCS法による解法のコード例

(微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

double h = (xn-x0)/n; // 空間刻み幅 double n = (xn-x0//n, // エルッス double nu = u*dt/h; ← for(int i = 1; i <= n-1; ++i){ // ∂f/∂xの差分による近似 double gx = (f0[i+1]-f0[i-1])/2.0; \leftarrow // fの値を更新 f1[i] += -nu*gx;

クーラン数 $\nu = \frac{u\Delta t}{T}$ の計算

中心差分 $f_{i+1}^{(k)} - f_{i-1}^{(k)}$ の計算

f1[0] = alpha; f1[n] = beta;

境界条件(ディリクレ条 件)の設定

境界部分を考慮して反復の範囲が1~n-1になってい ることに注意(fは $0 \sim n$ で定義されている) この処理をt=0から Δt ずつ何回も反復することで時間 とともに関数が移流する挙動がシミュレーションできる.

Githubのコード例では前進オイラーだけでなく、ホインやRK4とも組み合わせられるようにしているので注意(関数ポインタを多用). 境界条件の設定方法も違う(こちらも関数ポインタを利用)

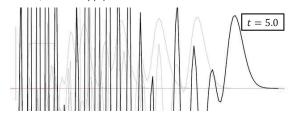
FTCS法

FTCS法による結果:矩形波の一定速度での移流

f(x,t)の初期値として,右のよう な矩形波(範囲 $x_a < x < x_b$ で1, それ以外で0となる関数)を設定

u = 0.75

範囲[0,5]を128分割にして, u = 0.75. $\Delta t = 0.1 h/|u|$ で移流



⇒ 非常に不安定. なぜ不安定なのかを解析してみよう

FTCS法

von Neumannの安定性解析でFTCSが不安定になることを 確かめてみる

安定性を確かめるためにfが**波の形**だったとして,f(x,t) =cos(wx) (wは波数)を複素数に拡張した以下の式を実際に **差分式に代入して解析**してみる($\theta = w\Delta x$ とおく)

$$f_i^{(k)} = e^{ij\theta}$$

ここでのiは虚数単位を表し,これと区別する ために空間方向の刻み幅をjにしています.

次のステップで波の形は変わらずに増幅(or減衰)している とすると**増幅係数**gを導入して:

$$f_i^{(k+1)} = ge^{ij\theta}$$

これらをFTCSの更新式に入れたときに|g| < 1なら収束するの で安定,|a| > 1なら振幅が増えていって不安定(発散)に なることが分かる.

FTCS法

von Neumannの安定性解析

実際にFTCS法での|g|を計算してみよう.

$$f_j^{(k+1)} = f_j^{(k)} - \frac{\nu}{2} (f_{j+1}^{(k)} - f_{j-1}^{(k)})$$
 $\left(\operatorname{CZC} \nu = \frac{u\Delta t}{h} \right)$ $\int \int f_j^{(k+1)} = g e^{(ij\theta)}, f_j^{(k)} = e^{(ij\theta)} \operatorname{Ed} \lambda$ $g e^{ij\theta} = e^{ij\theta} - \frac{\nu}{2} (e^{i(j+1)\theta} - e^{i(j-1)\theta})$ $\int \overline{\operatorname{Did}} e^{ij\theta} \operatorname{Cel} \left(e^{i(j+1)\theta} - e^{ij\theta} \operatorname{Cel} \left(e^{i(j+1)\theta} - e^{i(j-1)\theta} \right) \right)$ $g = 1 - \frac{\nu}{2} \left(e^{i\theta} - e^{-i\theta} \right) = 1 - i\nu \sin \theta$ オイラーの公式より $i \sin \theta = \frac{1}{2} (e^{i\theta} - e^{-i\theta})$ なので

複素数の絶対値なので $|g| = \sqrt{1 + v^2 \sin^2 \theta} > 1$. \Rightarrow FTCS法は**無条件不安定**である*

情報数学C (GC21601)

*これは移流方程式の場合で安定になる方程式もある(後で出てきます) 37

移流方程式

移流方程式の安定した数値計算のためには?

- RK4や予測子修正子法,陰的解法などの方法を 時間微分に使う(前回の講義で説明済み)
- 空間微分にもっと安定するようなor高精度な 差分法を使う
 - ⇒これからこちらについて説明していく
 - 風上差分
 - · Lax-Wendroff
 - セミラグランジュ法
 - その他(QUICK,QUICKEST,河村·桑原法,ENO,WENO)
 - ⇒ その他に挙げた方法は名前と特徴だけ紹介

情報数学C (GC21601

20

風上差分法

風上差分法

移流方程式は速度uによる移流を表す

⇒情報が**風上から風下に流れている**と考えるなら、 差分にも**風上の値を使うべき**では?

$$\begin{cases} f_i^{(k+1)} = f_i^{(k)} - \nu(f_i^{(k)} - f_{i-1}^{(k)}) & (u > 0 \sigma 場合) \\ f_i^{(k+1)} = f_i^{(k)} - \nu(f_{i+1}^{(k)} - f_i^{(k)}) & (u < 0 \sigma 場合) \end{cases}$$

風上差分法の安定性

$$g = 1 - \nu(1 - e^{-i\theta}) \quad \Rightarrow \quad |g| = \sqrt{1 - 2\nu(1 - \nu)(1 - \cos\theta)}$$

 $(1 - \cos \theta) \ge 0$ ということを考えると $0 \le \nu \le 1$ なら $|g| \le 1$ となるので風上差分は**安定**(精度は**1次精度**)

青報数学C (GC21601)

39

風上差分法

移流方程式の風上差分法による解法のコード例

(微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

情報数学C (GC21601)

風上差分法

風上差分法の結果:矩形波の一定速度での移流 FTCS法の時と同じく矩形の移流(条件は全く同じ)



時間方向の刻み幅は同じだけど**非常に安定**している(矩形形状が崩れているので**精度が良いわけではない**ことに注意).

⇒安定条件は? ($\Delta t = 0.1h/|u|$ と設定)

 $0 \le \nu \le 1$ (つまり $0 \le \frac{u\Delta t}{h} \le 1$)となるためには, $\Delta t \le \frac{h}{|u|}$ となるように時間方向の刻み幅を設定すればよい

⇒ この条件をCFL条件(Courant-Friedrith-Lewy条件)という

Lax-Wendroff法

Lax-Wendroff法(ラックス・ウェンドロフ法)

$$f_i^{(k+1)} = f(x_i, t + \Delta t)$$
をテイラー展開すると:
$$f_i^{(k+1)} = f(x_i, t) + \Delta t \frac{\partial f}{\partial t}(x_i, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(x_i, t) + O(\Delta t^3)$$

移流方程式を導出するときに**テイラー展開の2次項まで**考えれば $\frac{\partial f}{\partial t} = -u \frac{\partial f}{\partial x}$ であるとともに $\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ なので、これを代入:

$$f_i^{(k+1)} = f(x_i,t) - u\Delta t \frac{\partial f}{\partial x}(x_i,t) + \frac{u^2\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_i,t) + O(\Delta t^3)$$

 $\partial f/\partial x$ と $\partial^2 f/\partial x^2$ を中心差分で近似する:

$$f_i^{(k+1)} = f_i^{(k)} - u\Delta t \frac{f_{i+1}^{(k)} - f_{i-1}^{(k)}}{2h} + \frac{u^2\Delta t^2}{2} \frac{f_{i+1}^{(k)} - 2f_i^{(k)} + f_{i-1}^{(k)}}{h^2} + O(\Delta t^3)$$

Lax-Wendroff法

Lax-Wendroff法

3次項以降を無視して整理($\nu = u\Delta t/h$)

$$f_i^{(k+1)} = f_i^{(k)} - \frac{\nu}{2} \left(f_{i+1}^{(k)} - f_{i-1}^{(k)} \right) + \frac{\nu^2}{2} \left(f_{i+1}^{(k)} - 2f_i^{(k)} + f_{i-1}^{(k)} \right)$$

Lax-Wendroff法の誤差は前ページより $O(\Delta t^3)$, 計算精度としてはn回計算で**2次精度**

Lax-Wendroff法の安定性

$$\begin{split} g &= 1 - \frac{\nu}{2} \left(e^{i\theta} - e^{-i\theta} \right) + \frac{\nu^2}{2} \left(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta} \right) \\ & \qquad \qquad \Box \hspace{-0.5cm} \Rightarrow \hspace{-0.5cm} |g| &= \sqrt{1 - 2\nu^2 (1 - \nu^2)(1 - \cos\theta)} \end{split}$$

これも風上差分と同じく $0 \le \nu \le 1$ なら $|g| \le 1$ となる.

⇒ **CFL条件を満たす**ならLax-Wendroff法は**安定**

情報数学C (GC21601)

Lax-Wendroff法

移流方程式のLax-Wendroff法による解法のコード例 (微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

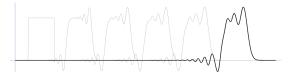
にいう風に変形している

/幸和粉帶C (CC21601

. . .

Lax-Wendroff法

Lax-Wendroff法の結果:矩形波の一定速度での移流 FTCS法の時と同じく矩形の移流(条件はここまでと全く同じ)



振動はしているものの, 振幅は大きくはならず, 元の形状の維持(一定速度移流なので元の形を保ったまま移動すべき)という点では風上差分より優れている(1次精度と2次精度の違い)

情報数学C (GC21601

45

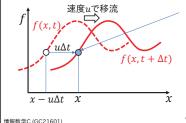
セミ・ラグランジュ法

セミ・ラグランジュ法(semi-Lagrangian method)

移流方程式の元になった式を思い出してみよう

$$f(x, t + \Delta t) = f(x - u\Delta t, t)$$

微分方程式を差分化しなくてもこれをそのまま計算 できるのでは? ⇒ セミ・ラグランジュ法*



この点における値は前のステップで $x-u\Delta$ の値が流れてきたと考えればよい

$$f_i^{(k+1)} = f(x_i - u\Delta t, t)$$

⇒ 流れてきた位置を

バックトレースで求めている

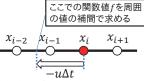
*なぜセミ・ラグランジュ法と呼ぶかは付録参照 46

セミ・ラグランジュ法

 $f(x_i - u\Delta t, t)$ を<mark>どうやって計算</mark>するのか?

関数値fが格納されているのは離散点 x_i (i = 0,1,...,n)でのみ. $u\Delta t = h$ ならよいけど必ずしもそうとは限らない \Rightarrow 何らかの補間を用いて求める必要がある!

線形補間
 風上差分と同じ(1次精度).
 ただし, CFL条件を満たさなくても安定して計算可能



CIP法(Constrained Interpolation Profile scheme)
 スプライン補間を使って3次多項式で補間. 傾き(導関数)を格納する必要があるが急激に変化する関数にも対応可能

*これらの他にもENOやWENO(後述)なども補間に使われる 47

セミ・ラグランジュ法

移流方程式のセミ・ラグランジュ法による解法のコード例 (微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

for(int i = 1; i <= n-1; ++i){
 // 現在の位置からパックトレースした位置を求める
 double x = x0+i*h;
 x -= u*dt; // パックトレース

 // xが含まれるグリッド番号の計算
 int ib = (int)((x-x0)/h);
 if(ib < 0) ib = 0;
 if(ib >= n) ib = n-1;
 // グリッド位置からの距離を[0,1]で正規化
 double dx = (x-ib*h)/h;

// fの値を線形補間で求める f1[i] = (1-dx)*f0[ib]+dx*f0[ib+1];

double h = (xn-x0)/n; // 空間刻み幅

バックトレースした位置xが含まれる区間番号(左側)は、範囲内の最小値を原点とした座標値 $x-x_0$ を刻み幅hで割って小数点以下切り捨てで求められる(番号が $0\sim n$ になるようなクランプ処理も忘れずに)

線形補間用に含まれる区間の 左端からの距離を刻み幅で 割ったものを計算しておく

情報数学C (GC21601)

48

セミ・ラグランジュ法

セミ・ラグランジュ法(線形補間)の結果 FTCS法の時と同じく矩形の移流(条件はここまでと全く同じ)



結果としては風上差分法とほぼ同じ(線形補間が1次 精度なので当然だが). ただし、こちらの方法はCFL条 件に関係なく安定している(Δt を大きくしても安定) ⇒ **高次の補間**を用いれば**精度は上げられる***

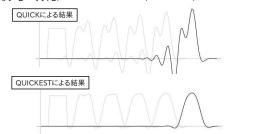
情報数学C (GC21601)

*高次補間を使った場合の例はこちらのリンク参照

1階偏微分方程式

その他の高精度差分法*

- **QUICK**: f_{i-1} , f_i , f_{i+1} の3点+風上側のもう一つの $f(f_{i-2} \text{ or } f_{i+2})$ を使った差分法(2次精度)
- QUICKEST: Lax-Wendroff法+風上側のもう一つの $f(f_{i-2}\text{ or }f_{i+2})$ を使った差分法(3次精度)

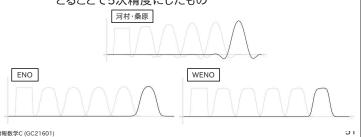


*これらの方法についての詳細はこちらのリンクを参照

1階偏微分方程式

その他の高精度差分法

- 河村・桑原スキーム: 4次精度中心差分+4次微分項 の3次精度の風上差分
- ENO,WENO: 風上差分を改良して3次多項式で近似 した3次精度差分法.WENOはENOで重み付き平均を とることで5次精度にしたもの



1階偏微分方程式

移流方程式の近似手法について*

- 保存系の差分法:物体が流れることを考えるとある領域内に 入ってきた量(流束)と出てきた量(流束)は等しくなる(非圧縮なら). このような保存を考えた差分法もある(保存系風上差分,保存系 Lax-Wendroffなど). 保存系は特に速度が場所によって変化する場
- Godunovの定理:「移流方程式で全領域で同じ差分法をつかう と2次精度以上で単調性を維持できない(数値振動する)」という もの. 単調性を維持するために流束制限関数というものを導入して 安定性を高める方法がある.
- TVDスキーム:計算点毎に値の変化量の総和(TV:Total Variation)を定義したとき、TVが時間とともに増大しないという条件 (TVD条件)を満たした方法

*今回の講義では時間の関係で説明しないが,今後困ったこ

とがあったらこれらのキーワードで調べると良さそう

1階偏微分方程式

2次元以上での移流方程式はどうなる?

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

: 2次元移流方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} + w \frac{\partial f}{\partial z} = 0$$

: 3次元移流方程式

u, v, wはそれぞれx, v, z方向速度

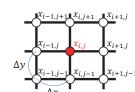
⇒ 全部まとめて**ベクトル表記**すると:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla f = 0$$

$$m{u} = (u,v,w)^T$$
, $abla = \left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right)^T \Rightarrow \nabla$ は勾配(gradient)と呼び、 f がスカラー値の場合 ∇f はベクトルになることに注意

1階偏微分方程式

2次元の場合で計算空間を格子状に分割してみる



x方向刻み幅を Δx , v方向刻み幅を Δv とすると中心差分は:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\Delta x}$$
 $\frac{\partial f}{\partial y} \approx \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2\Delta y}$

時間微分に**前進オイラー**, 空間微分に中心差分を用いた(要はFTCS)

$$f_{i,j}^{(k+1)} = f_{i,j}^{(k)} + \frac{u\Delta t}{\Delta x} \frac{f_{i+1,j}^{(k)} - f_{i-1,j}^{(k)}}{2} + \frac{v\Delta t}{\Delta y} \frac{f_{i,j+1}^{(k)} - f_{i,j-1}^{(k)}}{2}$$

⇒ 3次元でも同じ、基本的には1次元をそのまま拡張でOK、ただし、セミラク ランジュ法の場合は補間を多次元で行わなければならないことに注意

今回の講義内容

- 今日の問題
- 境界値問題
- 有限差分法
- 1階偏微分方程式:移流方程式
- 2階偏微分方程式

情報数学C (GC21601)

55

2階偏微分方程式の分類分け

1階偏微分方程式をここまで説明してきたが、実際の物理現象の多くは**2階偏微分方程式でモデル化**される

⇒ 2階偏微分方程式についても考えてみよう!

どんなモデル化がされているのかを説明するために、まずは **2階偏微分方程式を分類分け**する

2階偏微分方程式を定数係数A,B,Cを使って以下の形で 定義する

$$A\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = g\left(x, y, f, \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

xy平面内のある曲線上でこの方程式が解けるとする ⇒ この曲線を特性曲線と呼ぶ

情報数学C (GC21601

56

2階偏微分方程式の分類分け

特性曲線に沿った方向の微分(特性曲線の傾き)dy/dxについて以下が成り立つ

$$Ady^2 + 2Bdxdy + Cdx^2 = 0$$

傾きdy/dxについて解くと:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - AC}}{A}$$

判別式 $B^2 - AC$ の符号によって特性曲線が実数or複素数or一つのみとなり、特性曲線がどうなるかで2階微分方程式を分類分けできる.

 $B^2 - AC > 0$: 特性曲線は2つの実定数で表される \Rightarrow **双曲型**

 $B^2 - AC = 0$: 特性曲線は1つの実定数で表される \Rightarrow **放物型**

B² – AC < 0: 特性曲線は2つの複素定数で表される ⇒ **楕円型**

情報数学C (GC21601)

57

2階偏微分方程式の分類分け

各分類で代表的な2階偏微分方程式

双曲型 $(B^2 - AC > 0)$:

 $\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0$: 波動方程式 (波の運動を表す)

放物型 $(B^2 - AC = 0)$:

 $\frac{\partial f}{\partial t} = a \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$: 拡散方程式 (熱伝導など物体/物理量が広がっていく(拡散する)様子を表す)

楕円型 $(B^2 - AC < 0)$:

 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = g(x,y)$: **ポアソン方程式** (静電ポテンシャル, 重力ポテンシャル場などを求めるのに

使われる)

 $\Rightarrow g(x,y) = 0$ のときはラプラス方程式となる

*ポアソン方程式は境界値問題のところですでに取り扱っている 58

拡散方程式(FTCS法)

拡散方程式を数値計算で解いてみよう*

$$\frac{\partial f}{\partial t} = a \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

移流方程式の時と同じく、まずは**前進オイラー法+中心差分** で近似してみる(FTCS法)

$$\frac{f_i^{(k+1)} - f_i^{(k)}}{\Delta t} = a \frac{f_{i+1}^{(k)} - 2f_i^{(k)} + f_{i-1}^{(k)}}{\Delta x^2}$$

安定性は? $g=1-2\mu(1-\cos\theta)$

 $\mu = a\Delta t/\Delta x^2$ が0以上1/2以下なら安定. a > 0なら安定条件は:

$$\Delta t \leq rac{1}{2} rac{\Delta x^2}{a}$$
 $ightharpoonup$ 空間方向の分割幅 Δx に対して Δt をかなり小さくする必要はあるが無条件不安定ではない.

数学C (GC21601) *拡散方程式の具体的な例は<u>付録</u>参照 59

拡散方程式(FTCS法)

拡散方程式のFTCSによる解法のコード例

(微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

```
double dx = (xn-x0)/n; // 空間刻み幅
double mu = a*dt/(dx*dx);
for(int i = 1; i <= n-1; ++i){
   f1[i] = f0[i]+mu*(f0[i+1]-2*f0[i]+f0[i-1]);
}
f1[0] = alpha;
f1[n] = beta;
```

移流の時と同じく, 境界部分を考慮して反復の範囲が $1 \sim n - 1$ に なっていることに注意(fは $0 \sim n$ で定義されている). また, 2次元化 に備えて $h \to \Delta x$ としている.

情報数学C (GC21601)

60

拡散方程式(FTCS法)

拡散方程式をFTCS法で解いた結果

初期值 $f_i = 1$, 境界条件 $f_0 = f_n = 0$ 計算範囲[0,1], 分割数 $n = 50(\Delta x = 0.01)$ 拡散係数a = 0.02

安定条件 $\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{a}$ から $\Delta t = 0.01$ と設定

fを温度場とすると,両端が低温状 態のときの物体内部の熱の変化(熱 伝導)が拡散方程式で再現できてい ることが分かる

⇒ 安定条件を満たさなかったら?

 $\Delta t = 0.01$

情報数学C (GC21601)

拡散方程式(FTCS法)

拡散方程式をFTCS法で解いた結果

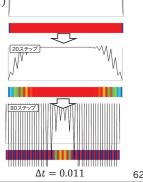
初期值 $f_i = 1$, 境界条件 $f_0 = f_n = 0$ 計算範囲[0,1], 分割数n = 50(h = 0.01)拡散係数a = 0.02



安定条件 $\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{a}$ から少しだけ外れ るようにΔt = 0.011c設定

条件を満たしていないと振動が 発生し,解が発散してしまっている

- ⇒時間方向の刻み幅(時間ステップ幅) の制限が強い
- ⇒ 制限をなくすには?



拡散方程式(クランク・ニコルソン法)

拡散方程式を陰的解法で解いてみよう

前回の講義で説明した陰的解法(後退オイラー法など)を 適用してみよう.

 $f_{i+1} = f_i + \Delta t \, \phi(\mathbf{x}_{i+1}, f_{i+1}, \mathbf{x}_i, f_i)$

クランク・ニコルソン法

$$\frac{f_i^{(k+1)} - f_i^{(k)}}{\Delta t} = a \left(\lambda \frac{f_{i+1}^{(k+1)} - 2f_i^{(k+1)} + f_{i-1}^{(k+1)}}{\Delta x^2} + (1 - \lambda) \frac{f_{i+1}^{(k)} - 2f_i^{(k)} + f_{i-1}^{(k)}}{\Delta x^2} \right)$$

展開して $f^{(k+1)}$ の項だけを右辺に集めれば $A\mathbf{f}^{(k+1)} = \mathbf{b}(\mathbf{f}^{(k)})$

線形システム*の形になるのでこれを共役勾配法などで解けばよい

*係数行列や右辺項ベクトルは境界値問題での緩和法と同じような形になる

拡散方程式

クランク・ニコルソン法のコード例

(微分方程式を範囲 $[x_0,x_n]$ でn分割して解く)

double dx = (xn-x0)/n; // 空間刻み幅 double eta = <math>a*dt/(dx*dx);

// 線形システムの係数行列と右辺項ベクトルの計算

(/ 総形システムの係製行列と右辺項ペクトルの計算 vectord vector double > (n-1, 0.0), x(n-1, 0.0); vector vector double > A(n-1, b); for(int i = 0; i < n-1; ++i){ int j = i+1; // 行列ののi行目はf[i+1]の式となる double xi = *dox*j; if(i = 0) A[i][i-1] = -cn_lambda*eta; A[i][i] = 1+2*cn_lambda*eta; if(i = n-2) A[i][i+1] = -cn_lambda*eta; b[i] = f0[j]*(1-cn_lambda)*eta*(f0[j+1]-2*f0[j]*f0[j-1]); }

} b[0] += cn_lambda*eta*f0[0];

b[n-2] += cn_lambda*eta*f0[n];
for(int i = 0; i < n-1; ++i) x[i] = f0[i+1];</pre>

// CG法で線形システムを解く

int max_iter = 100; double eps = 1e-6;
cg_solver(A, b, x, n-1, max_iter, eps);

// 結果を配列fに戻す for(int i = 0; i < n-1; ++i) f1[i+1] = x[i]; 4

1次元配列bで初期化することで $n-1 \times n-1$ の2次元配列になる (同時に0で初期化されている)

 $f_i (i = 1 \sim n - 1)$ についての係数 (配列が0スタートなので要素位置が1 つずれることに注意)

 $i = 1 \ge i = n - 1$ での係数行列。 右辺項に境界値 $f_0=lpha,f_n=eta$ の 項が含まれる

 f_i の大きさがn+1に対して, Ax=bで のxは $f_1 \sim f_{n-1}$ のn-1なので別の配列を使って解いた後に f_i に戻すように している

拡散方程式

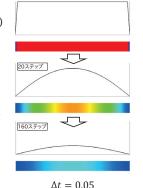
クランク・ニコルソン法で拡散方程式を解いた結果

初期值 $f_i = 1$, 境界条件 $f_0 = f_n = 0$ 計算範囲[0,1], 分割数n = 50(h = 0.01)拡散係数a = 0.02



FTCS法の安定条件 $\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{a}$ から 大きく外れる $\Delta t = 0.05$ を設定

条件を満たす最大値の5倍でも安定 して計算できている. 計算時間は掛 かるがその分**少ないステップ数で** 同じ結果が得られている



拡散方程式

2次元の拡散方程式はどう離散化する?

$$\frac{\partial f}{\partial t} = a \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \qquad \Box \qquad \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = a \nabla^2 f$$

基本的には**1次元の時と同じ**. 2次元の移流方程式の時と 同様に格子状に計算点を設定し,前進オイラー法+中心差 分(FTCS法)で近似した場合は:

$$\frac{f_{i,j}^{(k+1)} - f_{i,j}^{(k)}}{\Delta t} = a \left(\frac{f_{i+1,j}^{(k)} - 2f_{i,j}^{(k)} + f_{i-1,j}^{(k)}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1}^{(k)} - 2f_{i,j}^{(k)} + f_{i,j-1}^{(k)}}{\Delta y^2} \right)$$

$$f_{i,j}^{(k+1)} = f_{i,j}^{(k)} + \frac{a\Delta t}{h^2} \Big(f_{i+1,j}^{(k)} + f_{i-1,j}^{(k)} + f_{i,j+1}^{(k)} + f_{i,j-1}^{(k)} - 4 f_{i,j}^{(k)} \Big)$$

波動方程式

楕円型のポアソン方程式は差分法の例で解き, 放物型の拡散方程式も差分法で近似解が求められた.

⇒ 双曲型の波動方程式*は?

これまでと同じくそれぞれの微分を差分法で近似すれば良い. ただし,時間微分が2次微分になっているので, $f^{(k+1)}$ をもと めるために, $f^{(k)}$ だけでなく $f^{(k-1)}$ も使うことになる.

中心差分+中心差分(CTCS法)で近似した場合は:

$$\frac{f_i^{(k+1)} - 2f_i^{(k)} + f_i^{(k-1)}}{\Delta t^2} = c^2 \left(\frac{f_{i+1}^{(k)} - 2f_i^{(k)} + f_{i-1}^{(k)}}{\Delta x^2} \right)$$

*1次元の波動方程式は $\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) f = 0$ とすると因数分解できて、結局移流方程式と同じになるとも考えられる

情報数学C (GC21601)

差分法以外の解法

有限差分法(FDM:Finite Differential Method)以外で偏微分方程式 を解く方法*

- 有限体積法(FVM:Finite Volume Method): 分割した領域(区間)毎 に積分を含む保存方程式を適用する方法.非構造格子向き.
- 有限要素法(FEM:Finite Element Method): 物理量を値ではなく形 **状関数の線形結合**で表すことで高精度に微分方程式を解くことができ る. こちらも格子形状の自由度が高く**色々な分野で使われている**とても 有名な手法.
- 境界要素法(BEM:Boundary Element Method): 空間を領域(要素) で区切るのではなく,領域を囲む境界のみを離散化,解析する方法.
- 粒子法(Particle Method): 自由に動き回れる粒子を計算点として, **周囲の粒子の重み付き平均**で物理量を定義, 微分方程式を離散化し て解く方法。

*どの方法もそれだけで1年ぐらい講義できそうなぐらい広く深い. 68

講義内容のまとめ

- 今日の問題:偏微分方程式
- 境界値問題
 - 境界条件,緩和法
- 有限差分法
 - 前進/後退差分近似,中心差分近似
- 1階偏微分方程式:移流方程式
 - FTCS法, 風上差分, Lax-Wendroff法, セミ・ラグランジュ法
- 2階偏微分方程式
 - 拡散方程式,クランク・ニコルソン法

69

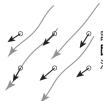
Appendix

(以降のページは補足資料です)

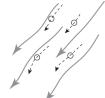
オイラー/ラグランジュ的手法

移流方程式のような流れに関する方程式の離散化方法は 計算点の考え方で大きく2種類に分けられる

オイラー的アプローチ



計算点を 固定して 流れを観測



計算点が 流れと共 に移動する (計算点の動き で流れを観測)

格子分割する方法は基本的にオイラー的な方法なんだけど、 移流元をバックトレースするのは計算点を移動するラグランジュ的. そのため**セミ**・ラグランジュ法という

特性曲線

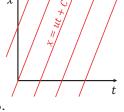
移流方程式 $\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0$ において、この式が常に満たされてい るような関数 ƒを具体的に求めてみると,

$$f(x,t) = x - ut$$

としたときに

$$\frac{\partial(x-ut)}{\partial t} + u\frac{\partial(x-ut)}{\partial x} = -u + u = 0$$

となって微分方程式を常に満たす. -方で定数を微分しても0になるのだから, 微分方程式を満たすということはf(x,t)の 値がx,tによらず一定値になっているといえる.



C:定数

 $f(x,t) = x - ut = C \implies x = ut + C$

常に満たす線 ⇒ 特性曲線

拡散方程式

拡散方程式の具体的な例:

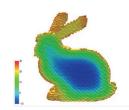
熱伝導方程式

物体内部での熱の伝わりをモデル化したもの(熱力学,伝熱工学)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$$

T:温度

κ:熱伝導係数



磁気拡散方程式

抵抗によって磁場が拡散・減衰する現象をモデル化したもの (磁気流体力学:MHD)

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \eta \nabla^2 \mathbf{B}$$

B:磁場

情報数学C (GC21601

73