## 第10章

# Time-Dependent Problems

## 本日のトピック

1. 有限要素法の復習
2. 非定常問題の解き方
3. 例：拡散方程式

しょうぶざこ けんすけ
菖蒲迫 健介
九州大学 地球惑星科学専攻 地球内部ダイナミクス・修士2年

# 重み付き残差法と有限要素法



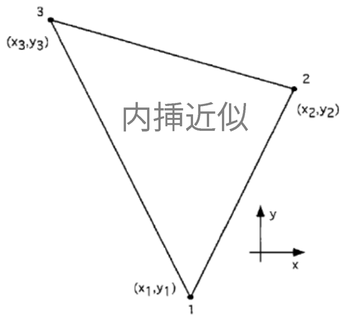
**ヘルムホルツ方程式を数値的に解きたい**

$$\nabla^2 u + f u = g$$

定常状態の流体の運動方程式

- **関数 $u$ を有限個の離散点の足し合わせで表現してみる**

$$u(\boldsymbol{x}) \approx \hat{u}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{N} u_j \phi_j(\boldsymbol{x})$$




$u_j, \phi_j$ は離散点のみで値が定義され，
それぞれ係数と基底関数である

= 形状関数

※ フィッティング係数と言っても良い

- 特殊な場合を除き，$u \neq \hat{u}$

無限個の正規直交関数系で展開

残差 $R(\boldsymbol{x}) = \nabla^2 \hat{u} + f\hat{u} - g \approx 0$

- **目標は，基底関数を適当に選んだときに，「全ての点で」残差をゼロにする係数 $u_j$ を探すこと**

$$R(\boldsymbol{x}) = 0$$

- 当然，それは結構厳しいので「全ての点で → 平均すると」と緩い条件に変えてみる

$$\int_\Omega R W_i d\boldsymbol{x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle R, W_i \rangle = 0 \quad (i = 1, \cdots, N)$$

- ここで，$W_i$ は $\phi_i$ とは無関係な重み関数
- **重み付き残差法** という

重み付き残差法のスローガン

- **「どこでも残差ゼロ」を「平均的に残差ゼロ」**
- ガラーキン有限要素法は，重み関数に基底関数を用いる

$$W_i = \phi_i$$



菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

# 重み付き残差法の例



**例１．ガラーキン有限要素法を使ってみる**

$$u(x) = g(x) \quad (0 \leqq x \leqq l)$$

$$g(0) = g(l) = 0$$

- 有限個の基底関数を使って，多項式展開（フィッティング）

$$\hat{u} = \sum_j^N u_j \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right)$$

特殊な場合

- もしも，無限個足し合わせれば，完全に元の関数を再現 (フーリエ級数展開)

- 有限個なので，「各点で」残差アリ

$$R = \hat{u} - g$$

- 重み付き残差法を発動　$\langle R, W_i \rangle = 0$

$$\left\langle \sum_j^N u_j \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right) - g, W_i \right\rangle = 0$$

$$\sum_j^N u_j \left\langle \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right), W_i \right\rangle = \langle g, W_i \rangle$$

- 行列形式へ

$$[A]\{u\} = \{b\}$$

$$A_{ij} = \left\langle \sin\left(\frac{j\pi x}{l}\right), W_i \right\rangle$$

$$b_i = \langle g, W_i \rangle$$

- ガラーキン法では，基底関数 = 重み関数

$$W_i = \sin\left(\frac{i\pi x}{l}\right) \quad \blacktriangleright \quad u_i = \frac{\left\langle g, \sin\left(\frac{i\pi x}{l}\right)\right\rangle}{\left\langle \sin^2\left(\frac{i\pi x}{l}\right)\right\rangle}$$

# 弱形式・境界条件



**ヘルムホルツ方程式を数値的に解きたい**

$$\nabla^2 u + fu = g$$

定常状態の流体の運動方程式

- 厳密な式の両辺に重み関数を掛けて，積分してみる

$$\langle \nabla^2 u, W_i \rangle + \langle fu, W_i \rangle = \langle g, W_i \rangle$$

**目標：二階微分を消し去りたい (∵ 非線形の多項式展開は嫌)**

- ベクトル恒等式にガウスの定理を使用

$$\nabla \cdot (f \nabla g) = \nabla f \cdot \nabla g + f \nabla^2 g$$

$$\int_V \nabla \cdot (f \nabla g) dV = \int_V \nabla f \cdot \nabla g dV + \int_V f \nabla^2 g dV$$

$$\oint_S (f \nabla g) \cdot \boldsymbol{n} dS = \int_V \nabla f \cdot \nabla g dV + \int_V f \nabla^2 g dV$$

$$\langle \nabla^2 u, W_i \rangle = - \langle \nabla u, \nabla W_i \rangle + \oint_S W_i \nabla u \cdot \boldsymbol{n} dS$$

$$- \langle \nabla u, \nabla W_i \rangle + \langle fu, W_i \rangle = \langle g, W_i \rangle - \oint_S W_i \nabla u \cdot \boldsymbol{n} dS$$

二階微分から一階微分へ → **弱形式**

- メリット：基底関数は簡単な線形系 / 二階微分のモデル不要
- 行列形式へ　$[A]\{u\} = \{b\}$

$$A_{ij} = - \langle \nabla \phi_j, \nabla W_i \rangle + \langle f \phi_j, W_i \rangle$$

$$b_i = \langle g, W_i \rangle - \oint_S W_i \frac{\partial u}{\partial n} dS$$

- **有限要素法は重み関数で積分した方程式(弱形式)を解く**
- ここで，$u$ の境界条件を「基本境界条件」
  $u$ の微分の境界条件を「自然境界条件」という

# 考え方と時間積分 (1)



## 非定常問題 = 時間依存性を持つ問題

■ 可能性１：基底関数を時間変化させる

ラグランジュ的

$$u(\boldsymbol{x},t) = \sum_i^N u_i \phi_i(\boldsymbol{x},t)$$

各時刻毎に基底関数を変えないといけない

■ 可能性２：係数を時間変化させる

オイラー的

$$u(\boldsymbol{x},t) = \sum_i^N u_i(t) \phi_i(\boldsymbol{x})$$

各時刻毎に節点の値だけが変化

- **一般的には，係数を時間変化させる方が簡単**
  **(∵ 最初だけ基底関数を場に張り付ければ良い)**
- **SPH法 (Smoothed Particle Hydrodynamics) も考え方は一緒**
  **ただし，計算点が動く → 動く有限要素法**

## 時間積分について

■ ある関数 $g$ の離散的な時間積分法

$$\int_k^{k+1} g dt = \Delta t \left( \theta g^{k+1} + (1-\theta) g^k \right)$$

■ $\theta = 0, 1, ½$ で場合分け

$$\int_k^{k+1} g dt = \begin{cases} g^k \Delta t & \text{前進オイラー法} \\ g^{k+1} \Delta t & \text{後退オイラー法} \\ \dfrac{g^{k+1} + g^k}{2} \Delta t & \text{中心差分法} \end{cases}$$

■ 一番簡単なのは，前進オイラー法


菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

# 考え方と時間積分 (2)

## 時間積分の方針 → 陽解法 vs 陰解法

■ 具体例)　一次元の移流方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = u \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

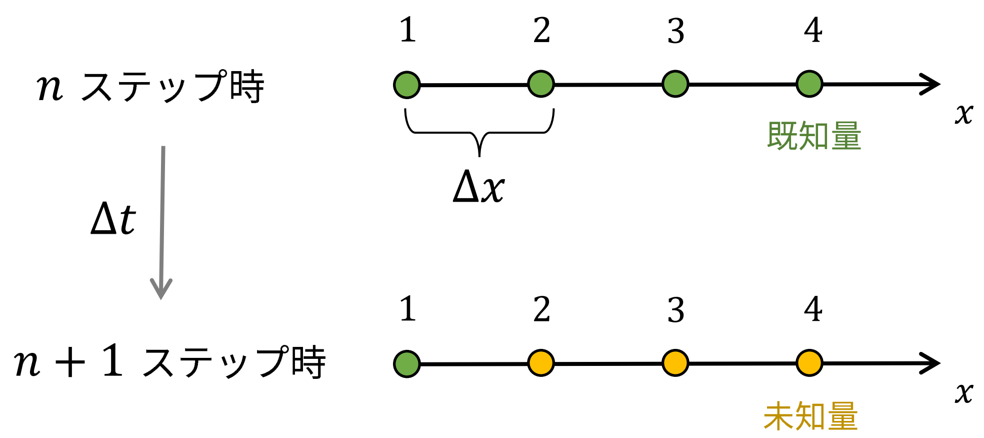
$\phi$: 知りたい量，　$u$: 一定速度

**一般解 (速度$u$で進む何か)**

ダランベールの解の片割れ

$$\phi = f(x+ut)$$

■ 離散化：　時間は前進差分（一次精度），空間は後退差分（一次精度）




■ 陽解法 (昔の値のみで積分)

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x}$$

▼

$$\frac{\phi_2^{n+1} - \phi_2^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_2^n - \phi_c}{\Delta x}$$
$$\frac{\phi_3^{n+1} - \phi_3^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_3^n - \phi_2^n}{\Delta x}$$
$$\frac{\phi_4^{n+1} - \phi_4^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_4^n - \phi_3^n}{\Delta x}$$

▼　$C \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x}$

$$\phi_2^{n+1} = \phi_2^n + C\left(\phi_2^n - \phi_c\right)$$
$$\phi_3^{n+1} = \phi_3^n + C\left(\phi_3^n - \phi_2^n\right)$$
$$\phi_4^{n+1} = \phi_4^n + C\left(\phi_4^n - \phi_3^n\right)$$

■ 陰解法 (未知の値も使って積分)

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x}$$

▼

$$\frac{\phi_2^{n+1} - \phi_2^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_2^{n+1} - \phi_c}{\Delta x}$$
$$\frac{\phi_3^{n+1} - \phi_3^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_3^{n+1} - \phi_2^{n+1}}{\Delta x}$$
$$\frac{\phi_4^{n+1} - \phi_4^n}{\Delta t} = u \frac{\phi_4^{n+1} - \phi_3^{n+1}}{\Delta x}$$

▼　$C \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x}$

$$\begin{pmatrix} (1-C) & 0 & 0 & C \\ C & (1-C) & 0 & 0 \\ 0 & C & (1-C) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \phi_4^{n+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_2^n \\ \phi_3^n \\ \phi_4^n \\ 0 \end{pmatrix}$$

**陽解法の方が圧倒的に簡単！ ただし…**

# 考え方と時間積分 (3)



## ■ 陽解法の方が簡単だけど，数値的不安定が発生

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = u \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$\begin{aligned}
\phi_2^{n+1} &= \phi_2^n + C\left(\phi_2^n - \phi_c\right) \\
\phi_3^{n+1} &= \phi_3^n + C\left(\phi_3^n - \phi_2^n\right) \\
\phi_4^{n+1} &= \phi_4^n + C\left(\phi_4^n - \phi_3^n\right)
\end{aligned}$$

- 桁落ち … 非常に近い値の引き算をすると，有効数字が減る

$$1.000 - 0.999 = 0.001$$

コンピューター上で4つ分の数字を確保すると仮定

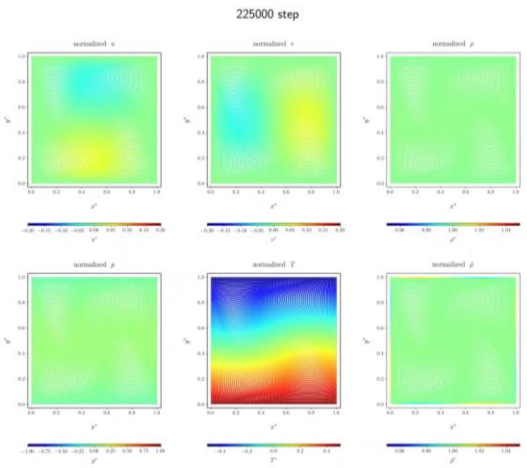
- 陽解法では，桁落ちに伴う数値誤差が蓄積

→ **数値不安定**を起こす原因

※ 物理的な不安定とは異なる

- 陰解法では誤差が蓄積しない

$$\begin{pmatrix} (1-C) & 0 & 0 & C \\ C & (1-C) & 0 & 0 \\ 0 & C & (1-C) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \phi_4^{n+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_2^n \\ \phi_3^n \\ \phi_4^n \\ 0 \end{pmatrix}$$




## ■ 数値的安定性が起こらない条件とは？

これを調べる方法を「von Neumannの安定性解析」という

5章のstabilityの内容

**一次元の移流拡散方程式**

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

流れ (移流項)　抵抗 (拡散項)

運動方程式とエネルギー方程式っぽいやつ

1. **CFL条件** (Courant-Friedrichs-Lewy)

$$C \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x} = \frac{u}{\Delta x / \Delta t} < 1$$

2. **拡散に関するvon Neumannの条件**

$$d \equiv \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2}$$

$\Delta x$が小さいとキツイ

$u$が大きいとキツイ

$\nu$が大きいとキツイ

$$\Delta t^{\mathrm{CFL}} < \frac{\Delta x}{u}$$

$$\Delta t^{\mathrm{dif}} < \frac{(\Delta x)^2}{2\nu}$$

タイムステップΔtを小さく取れば数値不安定は起きない

→ 細かい時間刻みでしか進めない



菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

# 基礎方程式と離散化



## 拡散方程式をガラーキン有限要素法で解いてみる

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (D\nabla u) = r \quad \blacktriangleright \quad \left\langle \frac{\partial u}{\partial t}\phi_i \right\rangle - \langle \phi_i \nabla \cdot (D\nabla u) \rangle = \langle r\phi_i \rangle$$

ソース項

■ 青字部分が二階微分を含むので，困る → 弱形式へ

$$\phi_i \nabla \cdot (D\nabla u) = \nabla \cdot (\phi(D\nabla u)) - \nabla \phi_i \cdot (D\nabla u)$$

▼

$$\int_V \phi_i \nabla \cdot (D\nabla u)\, dV = \int_V \nabla \cdot (\phi(D\nabla u))\, dV - \int_V \nabla\phi_i \cdot (D\nabla u)\, dV$$

▼

$$\langle \phi_i \nabla \cdot (D\nabla u) \rangle = \oint_S \phi_i (D\nabla u) \cdot \boldsymbol{n} dS - \langle \nabla\phi_i \cdot (D\nabla u) \rangle$$

▼

$$\left\langle \frac{\partial u}{\partial t}\phi_i \right\rangle + \langle D\nabla u \cdot \nabla\phi_i \rangle - \oint \phi_i (D\nabla u) \cdot \boldsymbol{n} dS = \langle r\phi_i \rangle$$

■ 定義を思い出して

$$u(\boldsymbol{x}, t) = \sum_i^N u_i(t)\phi_i(\boldsymbol{x}) \quad \blacktriangleright \quad \nabla u = \sum_i^N u_i \nabla \phi_i \qquad \frac{\partial u}{\partial t} = \sum_i^N \frac{du_i}{dt}\phi_i(\boldsymbol{x})$$

$$\sum_j^N \frac{du_j}{dt} \langle \phi_j \phi_i \rangle + \sum_j^N u_j \langle D\nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_i \rangle = \oint \phi_i (D\nabla u) \cdot \boldsymbol{n} dS + \langle r\phi_i \rangle$$

■ 行列形式にする

$$[M]\left\{\frac{du}{dt}\right\} + [K]\{u\} = \{R\}$$

$$M_{ij} = \langle \phi_j \phi_i \rangle$$
$$K_{ij} = \langle D\nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_i \rangle$$
$$R_i = \oint \phi_i (D\nabla u) \cdot \boldsymbol{n} dS + \langle r\phi_i \rangle$$

■ 時間積分を行う (最後の離散化)

$$[M]\{u^{k+1}\} = [M]\{u^k\} + \int_k^{k+1} (-[K]\{u\} + \{R\})\, dt$$

▼

$$[[M] + \theta \Delta t [K]]\{u^{k+1}\} = [[M] - (1-\theta)\Delta t [K]]\{u^k\} + \int_k^{k+1} \{R\} dt$$



菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

# 仕上げと行列計算



■ さっきの続き

$$[[M]+\theta\Delta t[K]]\,\{u^{k+1}\}=[[M]-(1-\theta)\Delta t[K]]\,\{u^{k}\}+\int_k^{k+1}\{R\}dt$$

■ 再度，行列形式にする

$$[A]\{u^{k+1}\}=[B]\{u^{k}\}+\{c^{k+1/2}\}$$

$$A_{ij}=\langle\phi_j\phi_i+\theta\Delta tD\nabla\phi_j\cdot\nabla\phi_i\rangle$$
$$B_{ij}=\langle\phi_j\phi_i-(1-\theta)\Delta t\nabla\phi_j\cdot\nabla\phi_i\rangle$$
$$c_i^{k+1/2}=\int_k^{k+1}\left(\oint\phi_i(D\nabla u)\cdot\boldsymbol{n}dS+\langle r\phi_i\rangle\right)dt$$

■ 例えば，基底関数に三角形の形状関数を選べば

$$A_{ij}=\frac{A_e}{12}(1+\delta_{ij})+\theta D\Delta t\,\frac{(\Delta x_i\Delta x_j+\Delta y_i\Delta y_j)}{4A_e}$$
$$B_{ij}=\frac{A_e}{12}(1+\delta_{ij})+(1-\theta)D\Delta t\,\frac{(\Delta x_i\Delta x_j+\Delta y_i\Delta y_j)}{4A_e}$$

Table9.1 を参照

■ 後は，各時刻毎の $u$ を求めれば良い
→ 行列演算([A]の逆行列計算)の効率化

■ 教科書にあった「LR分解」は「LU分解」のこと？

{u} を求めたい $[A]\{u\}=\{z\}$

上三角と下三角行列に分解

$$[A]=[L][R]$$

▼

$$[L][R]\{u\}=\{z\}$$

▼

$$[L]\{y\}=\{z\}\quad\Rightarrow\quad\{y\}=[L]^{-1}\{z\}$$

▼

$$[R]\{u\}=\{y\}\quad\Rightarrow\quad\{u\}=[R]^{-1}\{z\}$$

■ 超ドデカ行列[A]をひっくり返すのは結構大変だから，分割
■ 実は，[L]の計算は逐次代入的に計算可能 → [L]の逆行列計算は不要


菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2