2022.10.07

第10章の続き

Time-Dependent Problems

本日のトピック

1. 有限要素法の復習
2. 熱拡散の数値計算
3. SPHでもやってみた

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

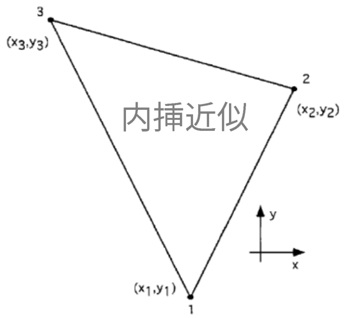
ヘルムホルツ方程式を数値的に解きたい

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

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, ϕ_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 ϕ_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

$$W_i = \phi_i$$

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

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

■ 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

$$[M]\left\{\frac{du}{dt}\right\} + [K]\{u\} = \{R\} \qquad \begin{aligned} M_{ij} &= \langle\phi_j\phi_i\rangle \\ K_{ij} &= \langle D\nabla\phi_j\cdot\nabla\phi_i\rangle \\ R_i &= \oint\phi_i(D\nabla u)\cdot\boldsymbol{n}dS + \langle r\phi_i\rangle \end{aligned}$$

■ 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

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

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

- 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

- 求めたい量: u^{k+1} (次の時刻の物理量)
- そのためには，行列 Aの逆行列を両辺に掛ければ良い
- 具体的アルゴリズム

頑張って左の式を作る→ $[A]^{-1}$ を計算 → $[A]^{-1}$ を $[B],\{c\}$ に掛ける

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

- 時間発展を追いたければ，u^{k+1} を新しく u^k として計算
- 面倒そうだが，格子点(節点)を固定すれば，最初の一回だけ 青字を計算しておけばOK

- 教科書では，移流方程式，波動方程式，電信方程式の例アリ 電信方程式(Telegraph Equation) ⋯ 波動方程式 + 損失項
- 基本的な解き方は，拡散方程式と同じ
- 流体の運動は，基本的に移流拡散方程式に従うので，上記を組み合わせたら解ける

時間積分

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

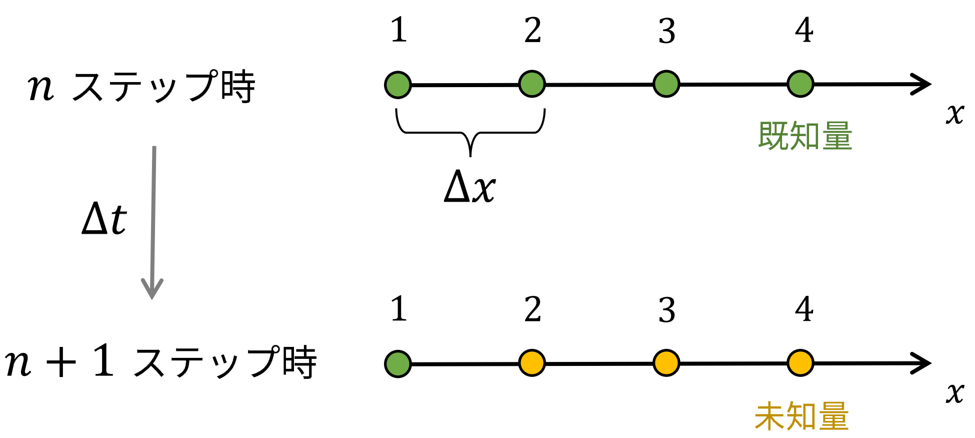
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = u\frac{\partial \phi}{\partial x}$$

ϕ: 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，空間は後退差分

（一次精度）　（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…

菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

時間積分

■ 陽解法の方が簡単だけど，数値的不安定が発生

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = u\frac{\partial \phi}{\partial x} \quad \blacktriangleright \quad \begin{aligned} \phi_2^{n+1} &= \phi_2^n + C\left(\phi_2^n - \phi_c\right) \\ \phi_3^{n+1} &= \phi_3^n + C\left(\phi_3^n - \phi_2^n\right) \\ \phi_4^{n+1} &= \phi_4^n + C\left(\phi_4^n - \phi_3^n\right) \end{aligned}$$

- 桁落ち … 非常に近い値の引き算をすると，有効数字が減る

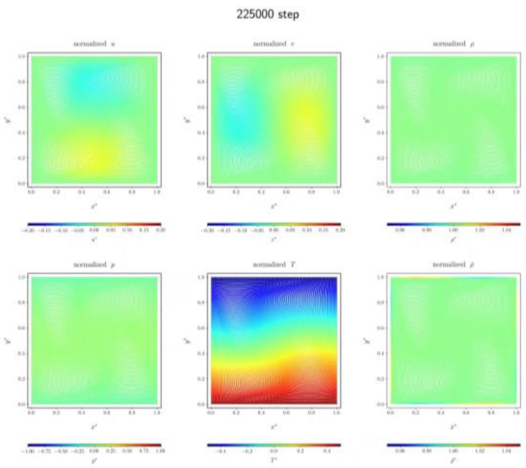
$$1.000 - 0.999 = 0.001$$

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

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t} + u\frac{\partial \phi}{\partial x}}_{\text{流れ (移流項)}} = \underbrace{\nu\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}}_{\text{抵抗 (拡散項)}}$$

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**

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

Δxが小さいとキツイ
uが大きいとキツイ
ν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

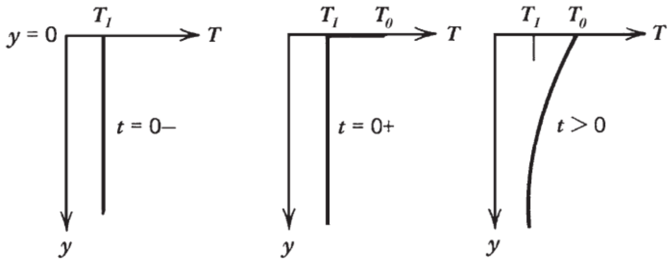
菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

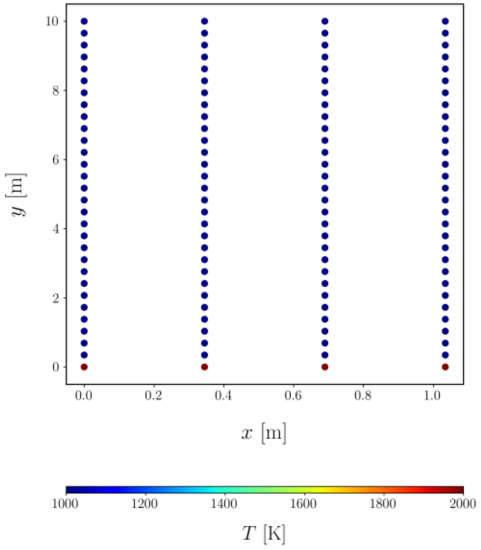
計算の概要

熱伝導問題

- **計算モデル「一次元の熱拡散問題 」**
- 参考: Turcotte & Schubert (2014) Geodynamics

  リソスフェアのプレート冷却問題 (上から冷やしていく問題)
- 今回は問題設定を簡単にするため，「下から温める」に変更





解析解 : 場所と温度の関数

$$T = T_0 + (T_1 - T_0)\left[\frac{y}{y_{L0}} + \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\exp\left(-\frac{\kappa n^2 \pi^2 t}{y_{L0}^2}\right)\sin\left(\frac{n\pi y}{y_{L0}}\right)\right]. \qquad (4.130)$$

今は，T0が高温温度，T1が初期温度

- やったこと
  1. ガラーキン有限要素法のコードを書いた
  2. ついでにSPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)法のコードも
  3. 解析解と比べてみた

- 基礎方程式

流体の温度に関するエネルギー方程式

$$\rho c_p\left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)T\right] = \nabla\cdot(k\nabla T) + \Phi + \rho J$$

流れなし + 内部発熱なし

熱拡散方程式 $$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa\nabla^2 T$$

熱拡散率 $$\kappa = \frac{k}{\rho c_p}$$

大きいほど，さっさと熱が伝わる
固体では大体 10^{-6} のオーダー

- 初期条件 → 一様温度 + 底面だけ高温
- 境界条件 → (上下) 一定温度，(横) 周期境界
- 本質的には一次元だけど，二次元の問題として計算した

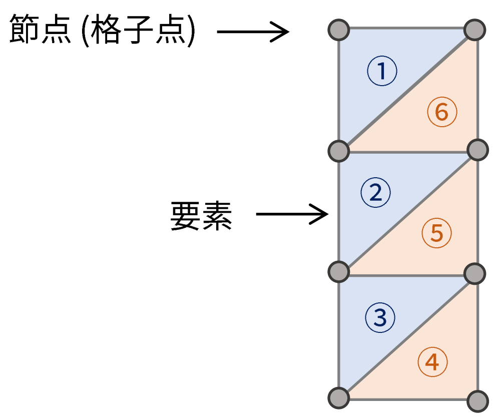
菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

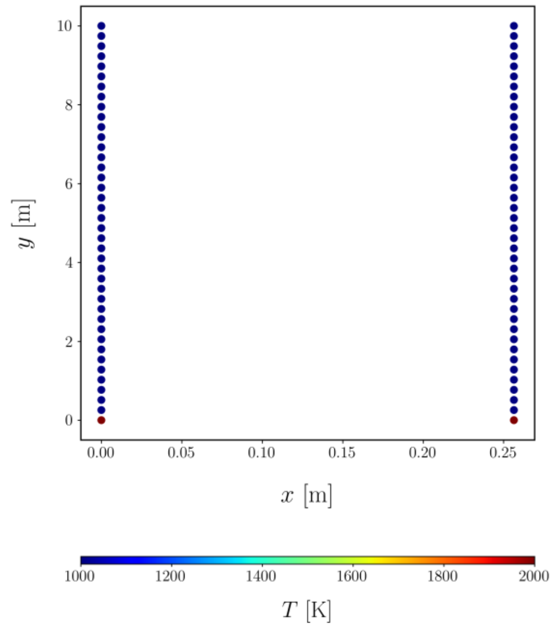
セットアップ

有限要素法

基底関数

■ 形状関数 → 規則的な三角形格子





■ 各要素毎に方程式を作る

■ 行列にするときに「重なれば」足し算で結合する

■ 行列をひっくり返して解く

■ 縦方向の粒子数は任意

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

$$A_{ij} = \langle \phi_j \phi_i + \theta \Delta t D \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \rangle$$

$$B_{ij} = \langle \phi_j \phi_i - (1-\theta) \Delta t \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \rangle$$

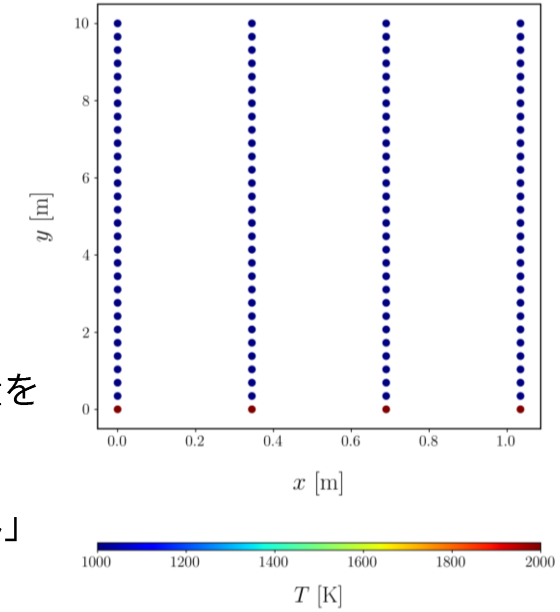
$$c_i^{k+1/2} = \int_k^{k+1} \left(\oint \phi_i (D \nabla u) \cdot \boldsymbol{n} dS + \langle r \phi_i \rangle \right) dt$$

SPH法

Smoothed Particle Hydrodynamics

■ 粒子毎にSPHの方程式を解く (後でちょこっと解説)

$$\frac{dT_i}{dt} = \sum_j^N \frac{4\kappa_i \kappa_j}{\kappa_i + \kappa_j} \frac{m_j}{\rho_j} \frac{\boldsymbol{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{r_{ij}^2} T_{ij}$$



■ 基本コンセプト：粒子 i の物理量を近所の粒子 j の値を使って近似

■ 粒子 i からの「距離に応じた重み」
→ FEMでは「残差に重み」

■ 上と下には一定温度の固定壁粒子を設定

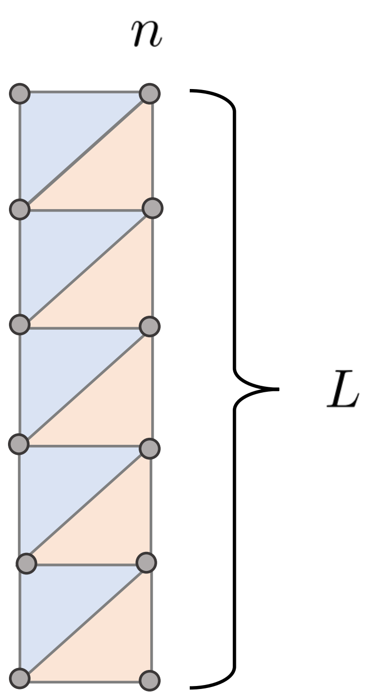
■ 横は周期境界

■ 縦方向の粒子数は任意
(ただし，FEMと違って少し増やすだけで計算量激増)

時間ステップについて

- 非定常問題なので，時間ステップ Δt を決める必要あり
- 早く計算を終わらすためには，なるべく大きくしたい
- 時間差分：一次精度の陽解法 (前進オイラー法)

→ 拡散に関する von Neumann 条件が発動



時間ステップの制約

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2\kappa}$$

- Δx ：格子幅　$\Delta x \approx \frac{L}{n}$

・長さ L を小さくするほどキツイ
・解像度 n を細かくすればキツイ
(+ 計算量も増える)

- Input パラメーター
  - 長さ L
  - 縦方向の格子点数 n
  - 熱拡散率 κ (デフォルトはカンラン石)

→ 勝手に Δt を計算するようにしてある

- 終わりはどうやって決める？

→ 入力する

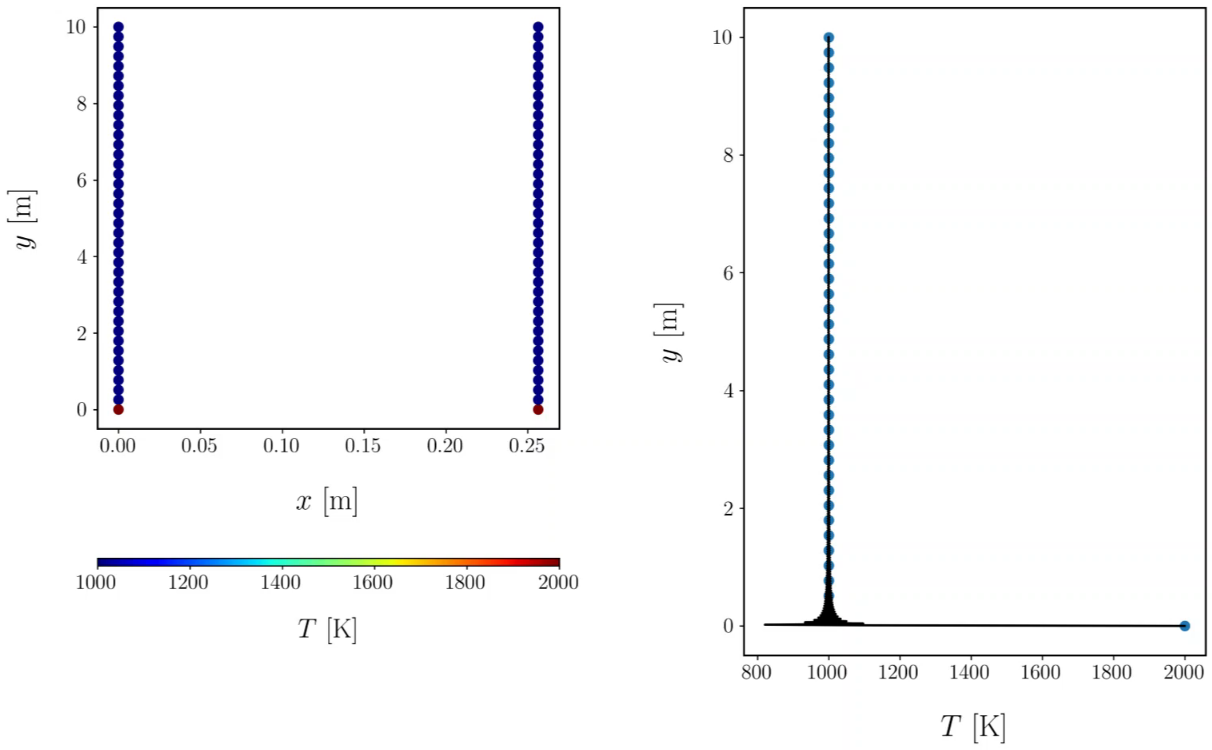
- τ： 系全体に熱が伝わる時間　$\tau \approx \frac{L^2}{\kappa}$

$$\text{total step} \approx \frac{\tau}{\Delta t} \approx 2n^2$$

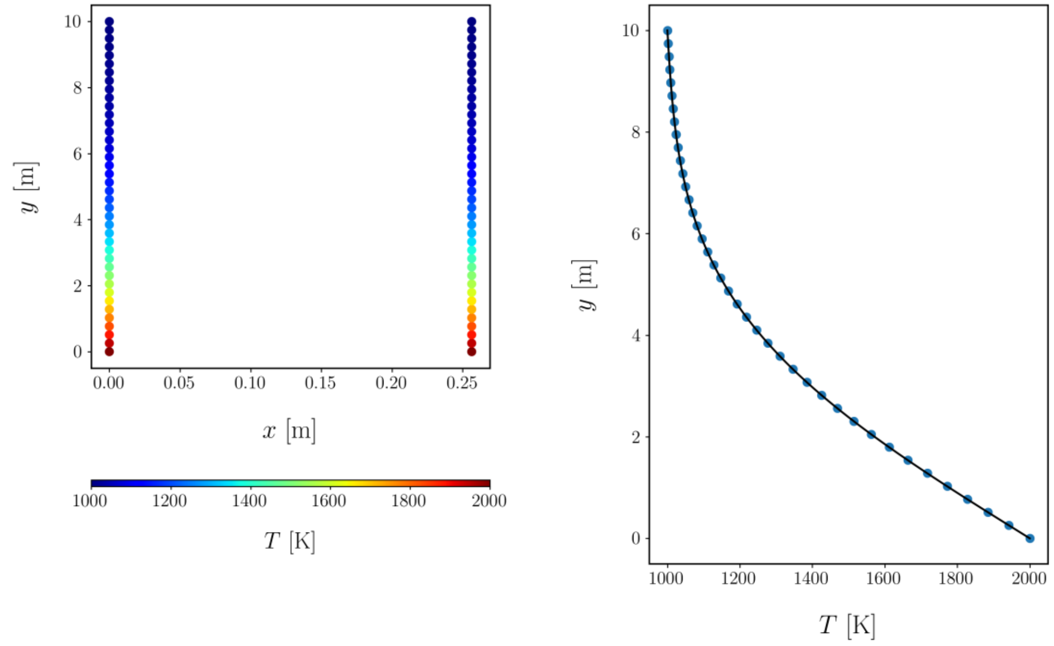
格子点数 n が増えると，見たい現象を見るのに，
沢山のステップを踏ませないといけない

有限要素法の結果

0 step



2000 step

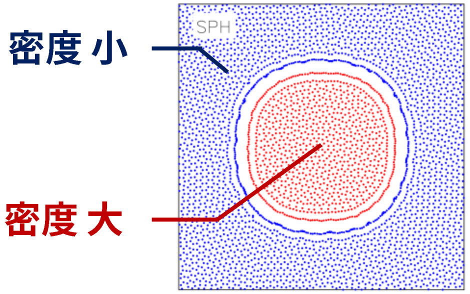


- 一次精度やけど，手くいく
- 表面項を無視したけども，影響は小さかったようである

SPHとは

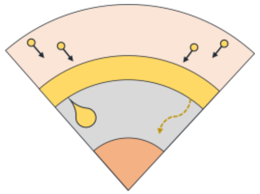
ただし，従来のSPH法は物質境界を正しく扱えない

従来のSPH法



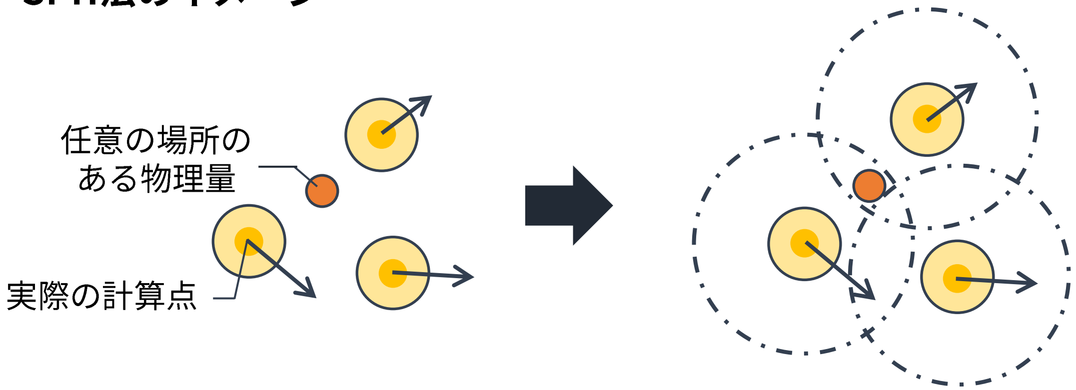
Saitoh and Makino (2013)

- 物質境界で非物理的な力が働く
- コア形成を正しく解けない



- 原因 → **なめらかにされた密度**

SPH法のイメージ



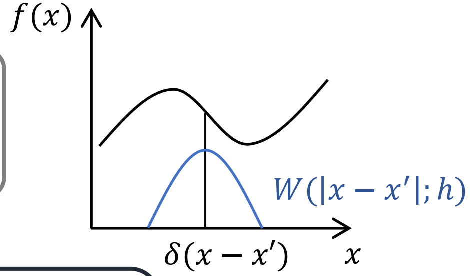
空間の空隙をなめらかな関数で内挿補間する

$$f(\boldsymbol{x}) = \int_\Omega f(\boldsymbol{x}')\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}' \approx \boxed{\int_\Omega f(\boldsymbol{x}')W(|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|;h)d\boldsymbol{x}'}$$

$$\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}_i \qquad \boldsymbol{x}' \to \boldsymbol{x}_j$$

粒子近似

$$f(\boldsymbol{x}_i) = f_i \approx \boxed{\sum_j^N f_j W_{ij} \Delta V_j}$$



$$\boxed{\rho_i = \sum_j^N m_j W_{ij}} \quad \Delta V = \frac{m}{\rho} = \frac{Y}{p} \quad \boxed{p_i = \sum_j^N Y_j W_{ij}}$$

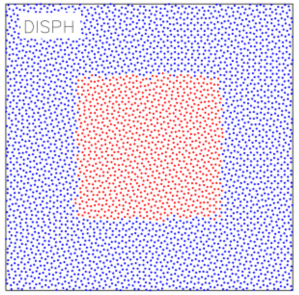
従来のSPH法 **DISPH法**

The Density-Independent SPH

[Saitoh and Makino, 2013; Hosono et al., 2013]

- DISPH法は物質境界を正しく与える
- ただし，<u>コア形成を扱いやすい形ではない</u>

DISPH法

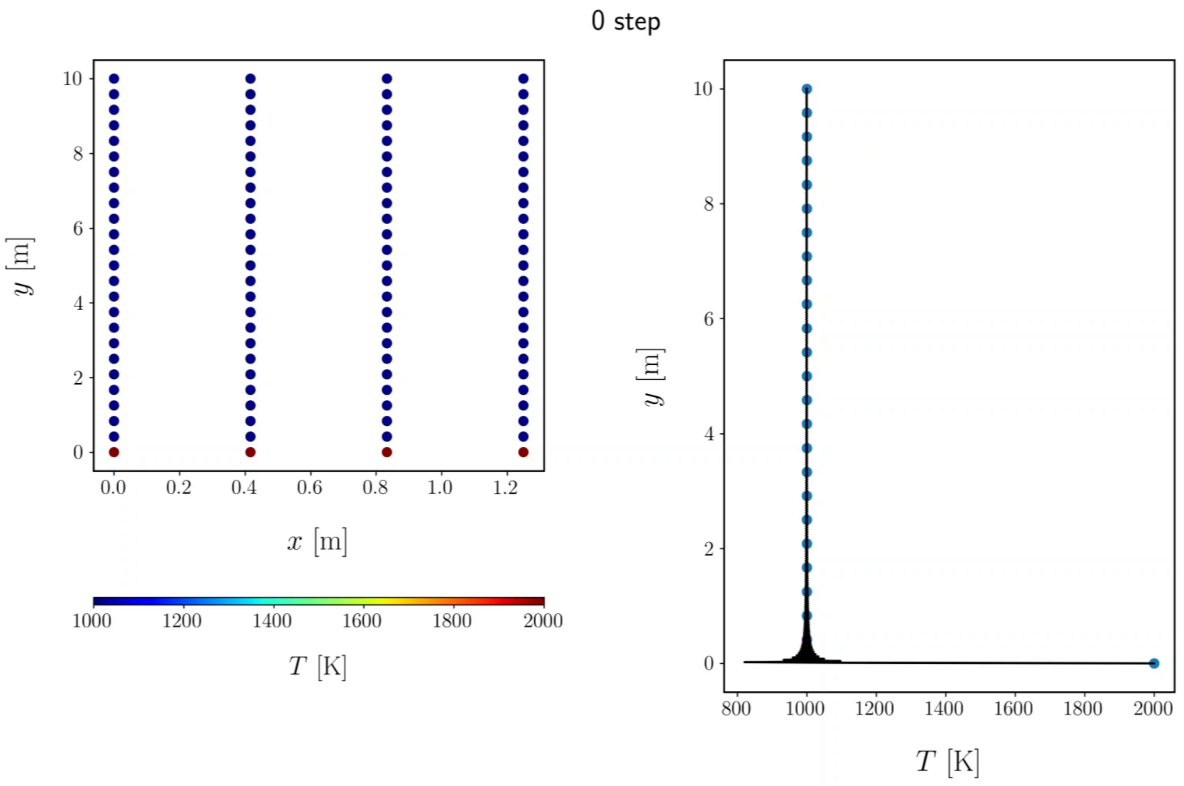


研究目的

従来のDISPH法をコア形成を扱いやすい形にする

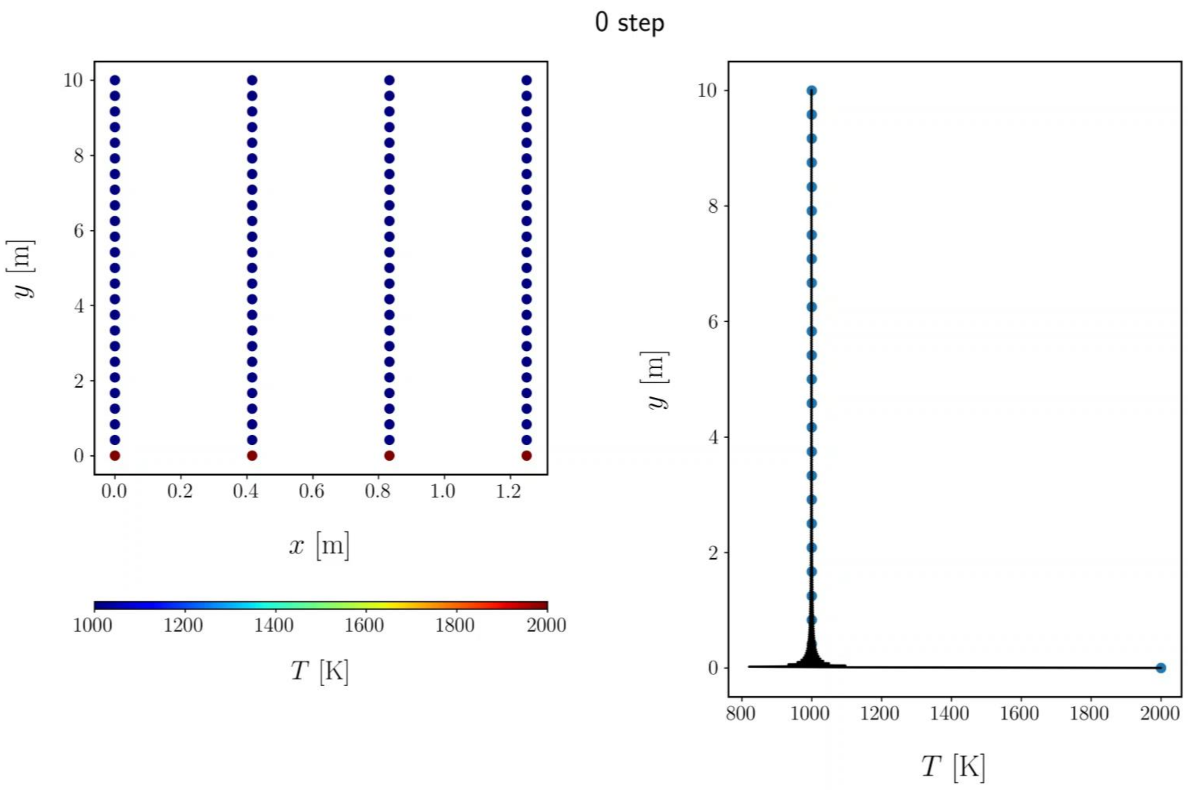
SPHの結果

Morris Formula



■ 上手くいく

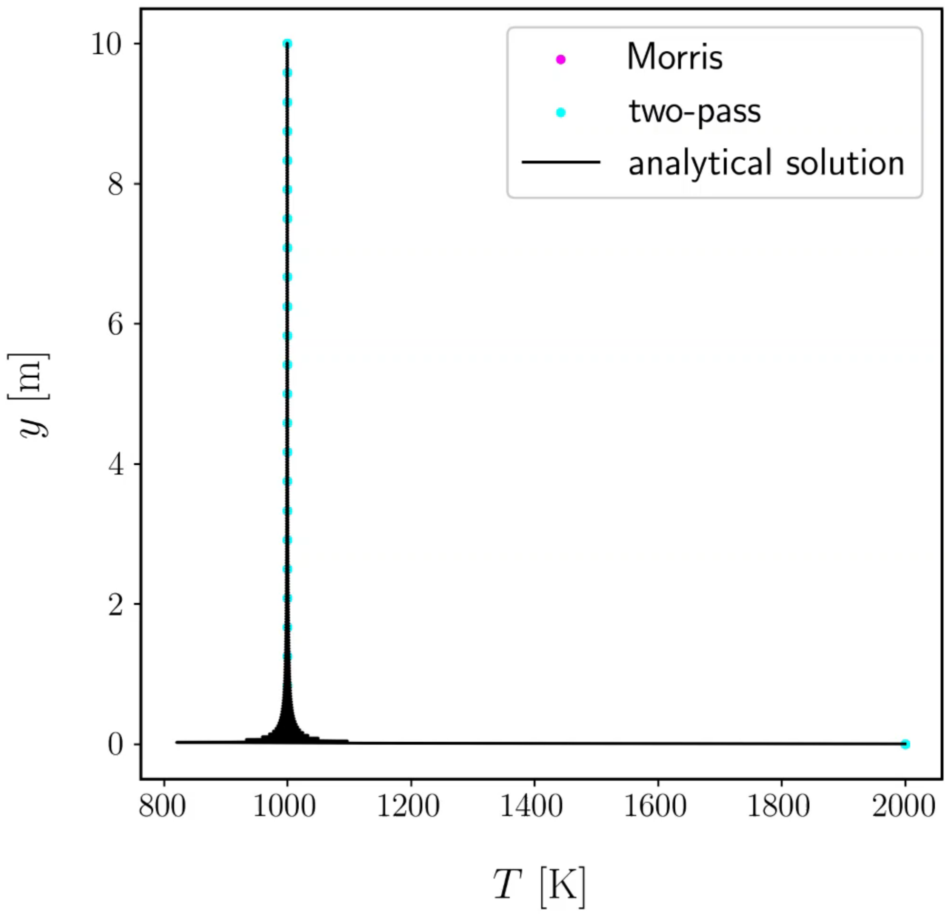
Two-pass derivatives



■ 全然ダメ → 壁境界の与え方がダメな気がする

菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2

今日のまとめ



■ やったこと

1. ガラーキン有限要素法のコードを書いた
2. ついでにSPH(Smoothed Particle Hydrodynamics)法のコードも
3. 解析解と比べてみた

■ 結果

・ガラーキン有限要素法は初心者だけど，上手く再現できた
・SPHは上手くいくモデルとそうでないモデルがある
(自分が境界の与え方がダメそう)

■ プログラムについて

・プログラムはご自由にお使いください
・FEMは瞬時に計算が終わりますが，SPHは n が増えると大変です
(ex.) total_step = 10000，n = 40 → cpu_time = 2 hours

菖蒲迫 健介
九州大学 地惑 地球内部ダイナミクス・M2