No. 1
Date 9・22・月

月1　数値計算法

偏微分方程式の分類

- 偏微分方程式
  未知変数が2個以上の独立変数に依存する
- 常微分方程式
  未知変数が1個の場合

伝熱学、流体力学および燃焼学では、熱運動および物質の移動を記述する時、それぞれ次のニュートン粘性法則、フーリエの伝導法則、およびフィンクの法則を基礎にしている。

ニュートンの法則：$\tau = -\mu \frac{\partial u}{\partial x}$

フーリエの法則：$q = -k \frac{\partial T}{\partial x}$

フィンクの法則：$N = -D \frac{\partial Y}{\partial x}$

このように、これら輸送現象は、速度 u、温度 T、および濃度 Y の勾配が、それぞれ、せん断応力 τ、熱流速 q、および質量流速 N に比例するという共通の基盤を有しており、基礎式は微小要素(コントロールボリューム)におけるエネルギー、運動量および質量のバランスを考えて導かれるため、おのずと変化率を含む方程式すなわち、偏微分方程式がえられる。

線形2階偏微分方程式は2独立変数の場合には、一般に

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G$$

という形をしている。ここで係数 $A \sim G$ は x と y の関数(定数を含む)である。
この2階微分方程式は、$B^2 - 4AC$ の正負によって次の3種類に分類できる。

$$\begin{cases} B^2 - 4AC > 0 & \text{双曲型} \\ B^2 - 4AC = 0 & \text{放物型} \\ B^2 - 4AC < 0 & \text{楕円型} \end{cases}$$

No.

Date

・双曲型の方程式の例.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \underset{\text{スモールc}}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \longleftrightarrow \underset{-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}{Au_{xx}} + Bu_{xy} + \underset{\frac{\partial u}{\partial t^2}\,(y=t)}{Cu_{yy}} + Du_x + Eu_y + Fu = G$$

双曲型の例として1次元波動方程式がある。
独立変数がtとxをもっており、それぞれ時間と空間を表す。

$A = -c^2,\ C = 1$, 他は0.

$B^2 - 4AC = 0^2 - 4(-c^2)\cdot 1 = 4c^2 > 0$ であり 双曲型

・放物型の方程式の例

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \underset{\text{移項.}}{a^2} \frac{\partial u}{\partial x^2} \longleftrightarrow \underset{\frac{\partial u}{\partial x^2}}{Au_{xx}} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + \underset{\frac{\partial u}{\partial t}\,(y=t)}{Eu_y} + Fu = G$$

放物型の例として1次元拡散方程式がある。

$A = -a^2,\ E = 1$. 他は0.

$B^2 - 4AC = 0^2 - 4(-a^2\cdot 0) = 0$ であり 放物型

・楕円型方程式の例.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = g(x,y) \longleftrightarrow \underset{\frac{\partial u}{\partial x^2}}{Au_{xx}} + Bu_{xy} + \underset{\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}}{Cu_{yy}} + Du_x + Eu_y + Fu = \underset{g}{G}$$

楕円型の2次元ポアソン方程式がある。

$A = 1.\ C = 1.\ G = g$、他は0

$B^2 - 4AC = 0^2 - 4\cdot 1\cdot 1 = -4 < 0$ であり、楕円型

なお、ポアソン方程式で特に右辺を0とした方程式はラプラス方程式と呼ばれている。

数値計算と誤差

- 得られた値
  (計算値：Numerical solution)
- 本来の正しい値
  (真値：Exact solution)

この間のずれ：誤差(error)

一般に真値を u 計算値を $\tilde{u}$ (チルダ) で表すと、誤差 e は次のように定義できる。

$$e = \tilde{u} - u$$

これを絶対誤差(Absolute error)ともいう。これに対して

$$e = |\tilde{u} - u| / u$$

を相対誤差(Relative error)と呼ぶ。→これを100倍して%表示。

数値計算で扱う誤差には、計算誤り、プログラムエラーや不適切な計算法

区別が必要

本来の誤差

① データ誤差(Data error)
与えられたデータ(いわゆる入力データ)に誤差があれば当然これに誤差を含む。これをデータ誤差という。

② 打ち切り誤差(Truncation error)
近似式を用いて計算する時の誤差で公差誤差ともいう。
例えば、差分式の打ち切り誤差は、次のように定義する。

$$T_{ij} = [\text{差分式}]_{ij} - [\text{偏微分方程式}]_{ij}$$

空間　時間

$$= \Big[\underbrace{\frac{u_{i,j+1}}{\Delta t}}_{\text{オイラー法}} - \underbrace{\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2}}_{\text{中心差分}}\Big] - \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j}$$

近似関数としてはやく収束する。数値計算では、$n \to \infty$ で収束は不十分。

項数1000以上、2項で十分な場合もある。

No.

Date

③ 丸めの誤差 (Round off error)

任意の数は、通常、有限小数で表わされる。計算機ではそれを有限桁で打ち切ってしまうために生ずる誤差を丸め誤差という。切り捨て、切り上げ、または四捨五入などが丸め誤差の操作である。

④ 桁落ちと情報落ち (情報喪失)

桁落ちとはほとんど等しい2つの数値の差をとることによって有効桁数の減少をひき起こすことをいう。

$$123.456 - 123.382 = 0.074$$ → 有効桁数が6→2桁

「4桁落ちた」

⑤ 離散化誤差と安定性誤差

数値計算による全誤差を厳密解 U と差分解 u との差と、差分解と数値解 N との差に大きく分けて考えることができる。

$$
\begin{aligned}
\text{全誤差} &= (U-N) \\
&= (U-u) + (u-N) \\
&= \text{離散化誤差} + \text{安定性誤差}
\end{aligned}
$$

安定収束

↓

通常誤差 ← こちらが大勢

前者を離散化誤差 (Discretization error)

後者を安定性誤差 (Stability error) という。

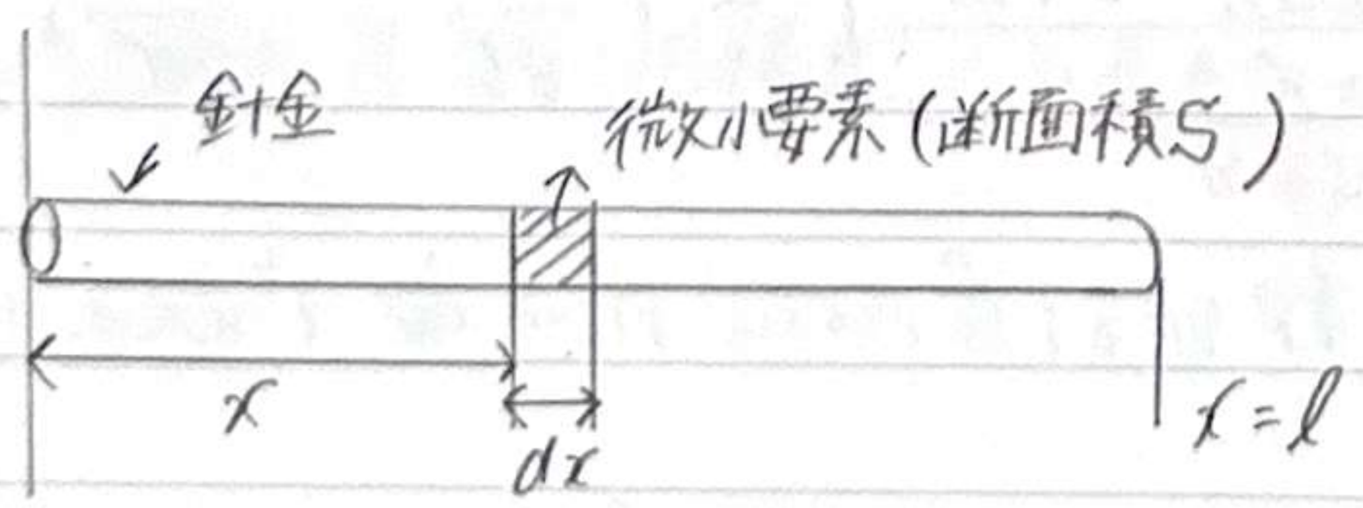
放物型偏微分方程式 (熱伝導方程式) の例

放物型の代表例は、フーリエによって最初に解かれた熱伝導の方程式である。

1次元の熱伝導方程式

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

は当初、細い針金の温度分布がどうなるかを知るため用いられたと言われる。



上図のように、長さ l の細い針金の微小要素を考える。

左の面から時間 dt の間に流入する熱量 Q はフーリエの法則により

No.
Date 10・6・月2

$$Q^- = -k\frac{\partial T}{\partial x}\cdot S\cdot dt$$

同様に右の面から流出する熱量Q^+は、

$$Q^+ = \frac{\partial Q^-}{\partial x}\cdot dx\cdot Q^-$$

したがって、差し引き

$$\Delta Q = Q^- - Q^+ = \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right)\cdot S\cdot dt\cdot dx$$

だけ微小要素内に蓄積される。この熱量により微小要素の温度がdTだけ上昇するとすると、結局、次式が得られる。

$$\rho c\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

上式中、c：比熱、k：熱伝導率、T：温度、t：時間、ρ：密度である。
特に、物性値が一定な場合は、

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

ここに、$a = k/\rho c$を温度伝導率という。

—— λ (W/m・K) ——

ダイヤモンド	1000 ~ 2000
銀	420
銅	398
金	320
アルミ	236
真ちゅう	106
鉄	90
ステンレス	84

次のように無次元化を行う。代表温度をT_0、代表長さをlとして、

$$T^+ = \frac{T}{T_0},\quad x^+ = \frac{x}{l},\quad t^+ = \frac{at}{l^2}$$

を用いると、

$$\frac{\partial T^+}{\partial t^+} = \frac{\partial^2 T^+}{\partial (x^+)^2}$$

以後、+記号を省略する。

初期温度T_0、長さlの針金の両端を$t=0$で突然、$T=0$にしたとすると、問題は次のように記述される。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

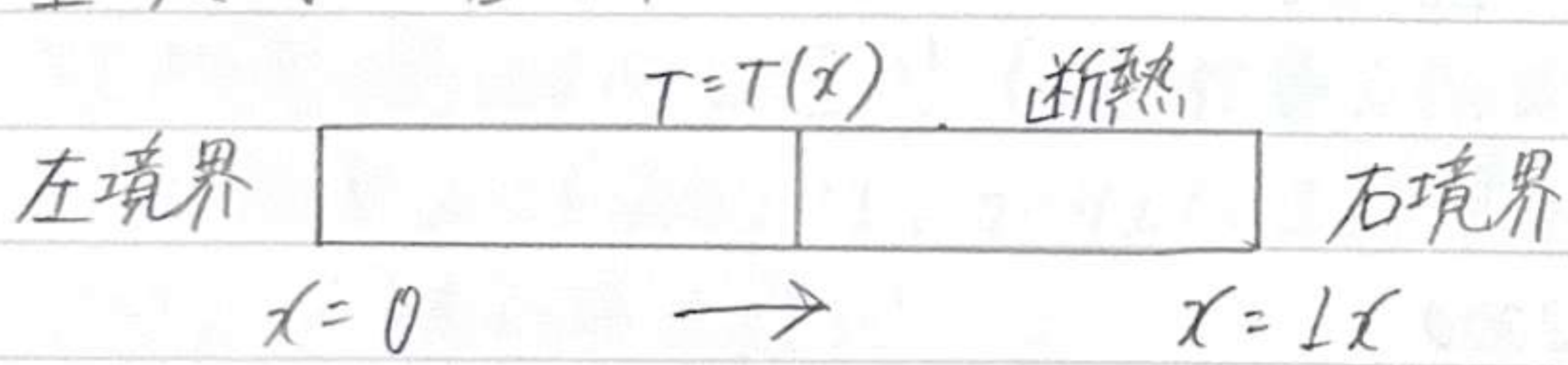
初期条件：$t=0$: $T=1$

境界条件：$t>0$: $T=0$ at $x=0,1$

変数分離を行ない、三角関数の直交性を用いることによりFourier関数の係数を決めるという方法を用いれば、次の解析解が考えられる。

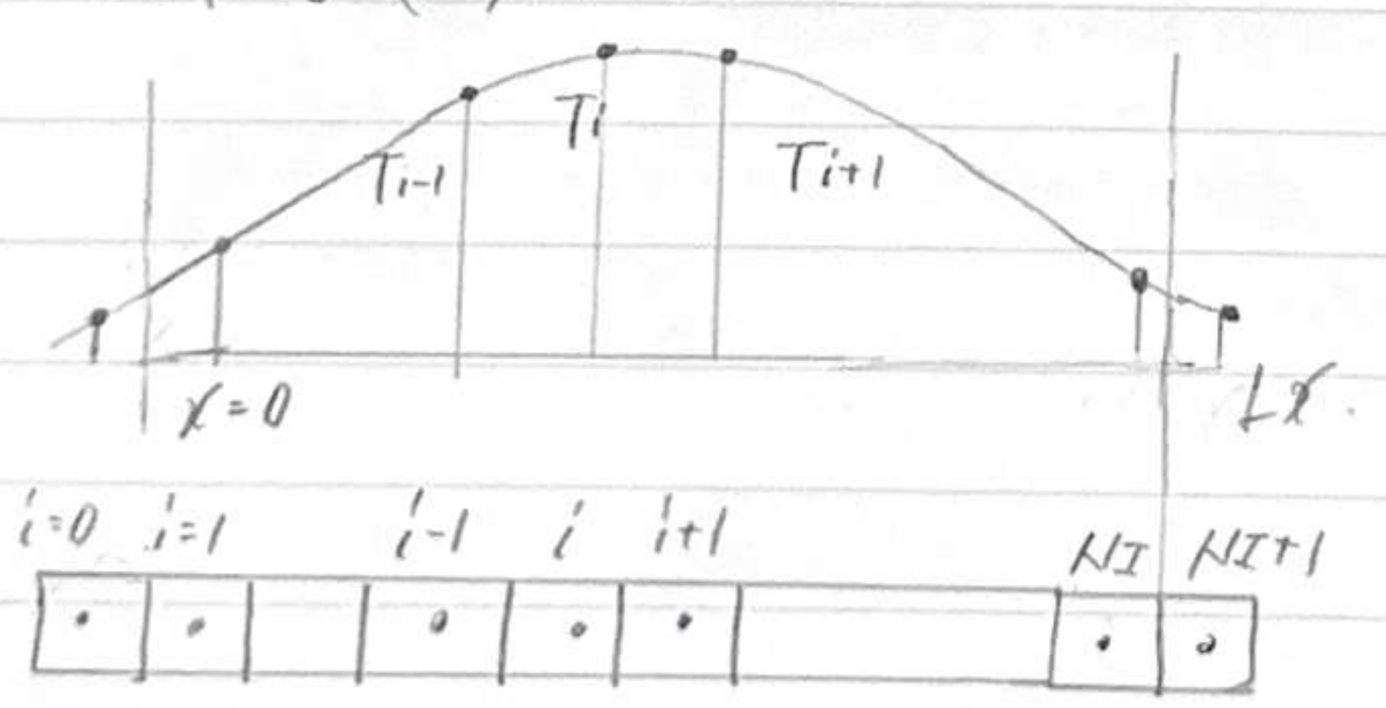
$$T = \frac{4}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+1} \sin(2n+1)\pi x \exp\left\{-(2n+1)^2\pi^2 t\right\}$$

基礎式の差分化



$$-\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = Q$$

発熱分布$Q(x)$とする。



この離散化されたT_iを用いて微分項を表すため、もとの連続関数$T(x)$を点x_iのまわりにテイラー展開し温度T_{i+1}およびT_{i-1}を示す。

$$T_{i+1} = T_i + \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=x_i}\Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{x=x_i}\Delta x^2 + \frac{1}{n!}\left(\frac{\partial^n T}{\partial x^n}\right)_{x=x_i}\Delta x^n + \cdots$$

$$T_{i-1} = T_i - \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=x_i}\Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_{x=x_i}\Delta x^2 - \cdots + \frac{1}{n!}\left(\frac{\partial^n T}{\partial x^n}\right)_{x=x_i}(-\Delta x)^n$$

ここでΔxは温度評価点の間隔であり、等間隔$\left(\Delta x = \frac{LX}{NI}\right)$とする。
上式を足し合わせると、点x_iにおける2階微分$\partial^2 T/\partial x^2$が次式のように表される。

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} - \frac{2}{4!}\left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right)_{x_i}\Delta x^2 - \cdots$$

上式の右辺第2項以降はΔxを十分小さくとれば、第1項に比べムシできるので、結局、2階微分は次式のように差分近似される。

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q \rightarrow -\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = Q.$$

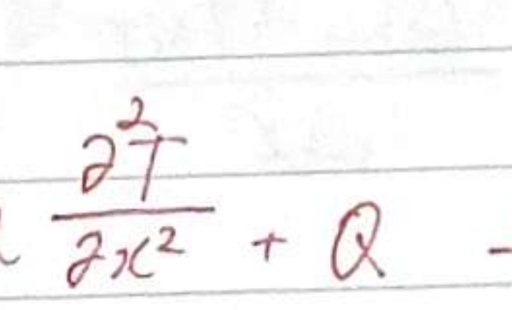
$$\underbrace{-\lambda \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}}_{\text{テーラ展開}} = Q \qquad (i=1\sim NI)$$

計算領域内の温度$(i=1\sim NI)$は上式により解かれる。

。境界条件の差分化
境界条件を与えるため計算領域の外側($i=0$および$i=NI+1$)に1個ずつ補助セルを設け、各セルの温度T_0、T_{NI+1}を境界条件により与える。

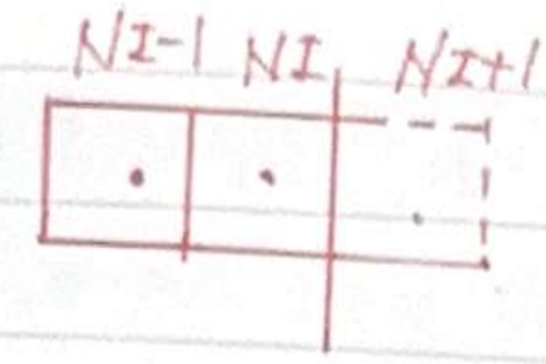
(1) ディリクレ型の場合。 0階
境界$x=0$において温度が$T=T_{B1}$で与えられるとすると、

$$\frac{T_0 + T_1}{2} = T_{B1}$$



同様に境界$x=LX$において温度が$T=T_{B2}$で与えられたとすると、

$$\frac{T_{NI+1}+T_{NI}}{2} = T_{B2}$$



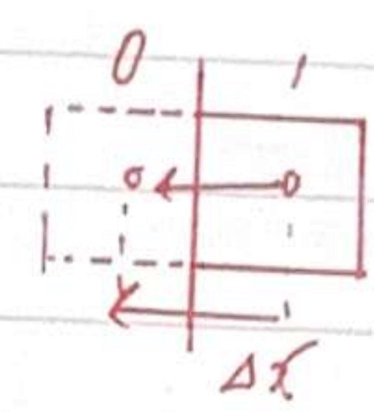
(2) ノイマン型の場合　1階微分

境界$x=0$において熱流束が$q=q_{B1}$で与えられたとすると、

$$-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = \frac{q_{B1}}{\lambda}$$

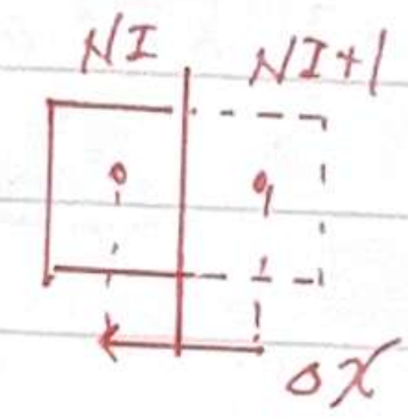
境界における温度の1階微分を差分近似することにより次式を得る。

$$\frac{T_0 - T_1}{\Delta x} = \frac{q_{B1}}{\lambda}$$



境界$x=LX$において熱流束が$q=q_{B2}$で与えられる場合も同様に、

$$\frac{T_{NI+1}-T_{NI}}{\Delta x} = \frac{q_{B2}}{\lambda}$$



No.

Date

3章 対角行列解法

温度T_i ($i=0\sim NI+1$)に関する代数連立方程式が次のマトリックスの形で表せる。

$$
\begin{bmatrix}
B_0 & C_0 & & & & & & & 0 \\
A_1 & B_1 & C_1 & & & & & & \\
 & & \cdots & & & & & & \\
 & & A_{i-1} & B_{i-1} & C_{i-1} & & & & \\
 & & & A_i & B_i & C_i & & & \\
 & & & & A_{i+1} & B_{i+1} & C_{i+1} & & \\
 & & & & & \cdots & & & \\
 & & & & & & A_{NI} & B_{NI} & C_{NI} \\
0 & & & & & & & A_{NI+1} & B_{NI+1} \ C_{NI+1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_{i-1} \\ T_i \\ T_{i+1} \\ \vdots \\ T_{NI} \\ T_{NI+1} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} D_0 \\ D_1 \\ \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \\ D_{NI} \\ D_{NI+1} \end{bmatrix}
$$

$$A_i = -\frac{\lambda}{\Delta x^2},\ B_i = 2\frac{\lambda}{\Delta x^2},\ C_i = -\frac{\lambda}{\Delta x^2},\quad D_i = Q \quad (i=1\sim NI).$$

$$A_i T_{i+1} + B_i T_i + C_i T_{i-1} = D_i$$

$$-\lambda \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} = Q$$

$$\underbrace{\boxed{-\frac{\lambda}{\Delta x^2}}}_{A_i} T_{i+1} + \underbrace{\boxed{\frac{2\lambda}{\Delta x^2}}}_{B_i} T_i \underbrace{\boxed{-\frac{\lambda}{\Delta x^2}}}_{C_i} T_{i-1} = \underbrace{\boxed{Q}}_{D_i}$$

境界条件 ($x=0$)

ディリクレ型：$A_0=0$、$B_0=1/2$、$C_0=1/2$、$D_0=T_{B1}$

ノイマン型：$A_0=0$、$B_0=-1/\Delta x$、$C_0=1/\Delta x$、$D_0=q_{B1}/\lambda$

境界条件 ($x=LX$)

ディリクレ型：$A_{NI+1}=1/2$、$B_{NI+1}=1/2$、$C_{NI+1}=0$、$D_{NI+1}:T_{B2}$

ノイマン型：$A_{NI+1}=1/\Delta x$、$B_{NI+1}=-1/\Delta x$、$C_{NI+1}=0$、$D_{NI+1}:q_{B2}/\lambda$

次のような前進消去(各行について上の行との引算によりA_iを消去した後、B_iで割算して対角項を1にする)と後退代入(各行について下の行との引算によりC_iを消去する)により容易に解を得ることができる。

No.

Date

前進消去　$C_0 = C_0 / B_0$

$D_0 = D_0 / B_0$

後進代入

```
FOR i=1 TO NI+1
    Bi = Bi - Ai * Ci-1
    Ci = Ci / Bi
    Di = (Di - Ai * Di-1) / Bi
FOR i = NI TO 0 STEP -1
    Di = Di - Ci * Di+1
    NEXT
```

結果の格納

```
FOR i=0 TO NI+1
    Ti = Di
NEXT
```

No.

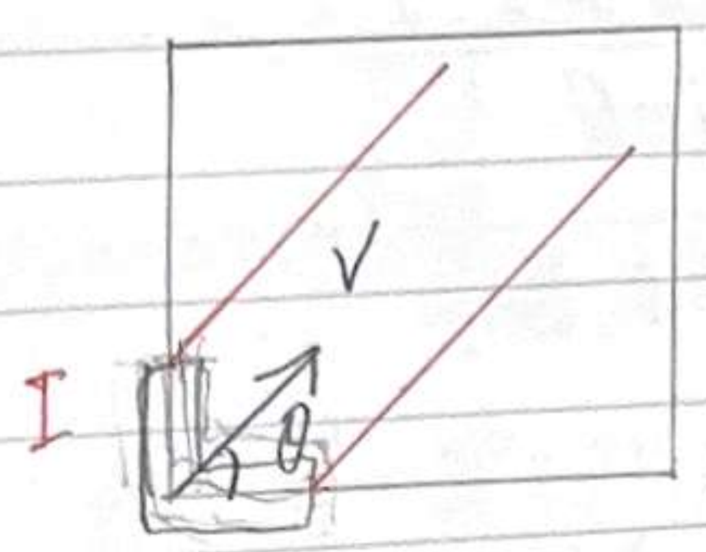
Date

○対流差分スキーム（数値粘性）

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 u$$

$$\Downarrow$$

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



$u = V\cos\theta$

$v = V\sin\theta$

$$\cos\theta \frac{\partial \phi}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$$

a) 1次風上差分

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$$ suuti 3　11.17

b) 2次風上差分

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{3\phi_i - 4\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{2\Delta x}$$ suuti 4　12.01

c) Quick

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{(1+\alpha)\phi_{i-2} - (10+4\alpha)\phi_{i-1} + (10-4\alpha)\phi_{i+1} - (1-\alpha)\phi_{i+2}}{16\Delta x}$$

(a)で、

$$\cos\theta \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} + \sin\theta \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta y} = 0$$

$\Delta x = \Delta y$

$$\Downarrow$$

$\phi_{i,j} =$

11.17 suuti 3

KOKUYO LOOSE-LEAF ノ-836B 6 mm ruled×36 lines

No.

Date

(a) 1次風上

$$\cos\theta \frac{\phi_{i,j}-\phi_{i-1,j}}{\Delta x} + \sin\theta \frac{\phi_{i,j}-\phi_{i,j-1}}{\Delta y} = 0$$ $\Delta x = \Delta y$ とすると、

$$\phi_{i,j}(\cos\theta + \sin\theta) = \cos\theta\,\phi_{i-1,j} + \sin\theta\,\phi_{i,j-1}$$

$$\phi_{i,j} = \frac{\cos\theta\,\phi_{i-1,j} + \sin\theta\,\phi_{i,j-1}}{\cos\theta + \sin\theta}$$

suuti3.c

```
1 ≤ i ≤ n-1
1 ≤ j ≤ n-1
U[i][j] = (cos(THEAT)*U[i-1][j] + sin(THEAT)*U[i][j-1])/
          (cos(THEAT) + sin(THEAT))
```

(b) 二次風上

$$\cos\theta \frac{3\phi_{i,j}-4\phi_{i-1,j}+\phi_{i-2,j}}{2\Delta x} + \sin\theta \frac{3\phi_{i,j}-4\phi_{i,j-1}+\phi_{i,j-2}}{2\Delta y} = 0$$

$\Delta x = \Delta y$ とすると、

$$3\phi_{i,j}(\cos\theta + \sin\theta) = 4\cos\theta\,\phi_{i-1,j} + 4\sin\theta\,\phi_{i,j-1} - (\cos\theta\,\phi_{i-2,j} + \sin\theta\,\phi_{i,j-2})$$

$$\phi_{i,j} = \frac{\cos\theta(4\phi_{i-1,j} - \phi_{i-2,j}) + \sin\theta(4\phi_{i,j-1} + \phi_{i,j-2})}{3(\cos\theta + \sin\theta)}$$

suuti4.c

```
2 ≤ i ≤ n
2 ≤ j ≤ n
U[i][j] = (cos(THEAT)*(4*U[i-1][j]-U[i-2][j]) + sin(THEAT)*
          (4*U[i][j-1]+U[i][j-2]))/(3*(cos(THEAT)+sin(THEAT)))

( 0 ≤ k ≤ 5                 6 ≤ k ≤ n
    U[1][k] = 1.0;              U[1][k] = 0.0;
    U[k][1] = 1.0;              U[k][1] = 0.0;   ) 追加条件
```

1次元対流拡散問題

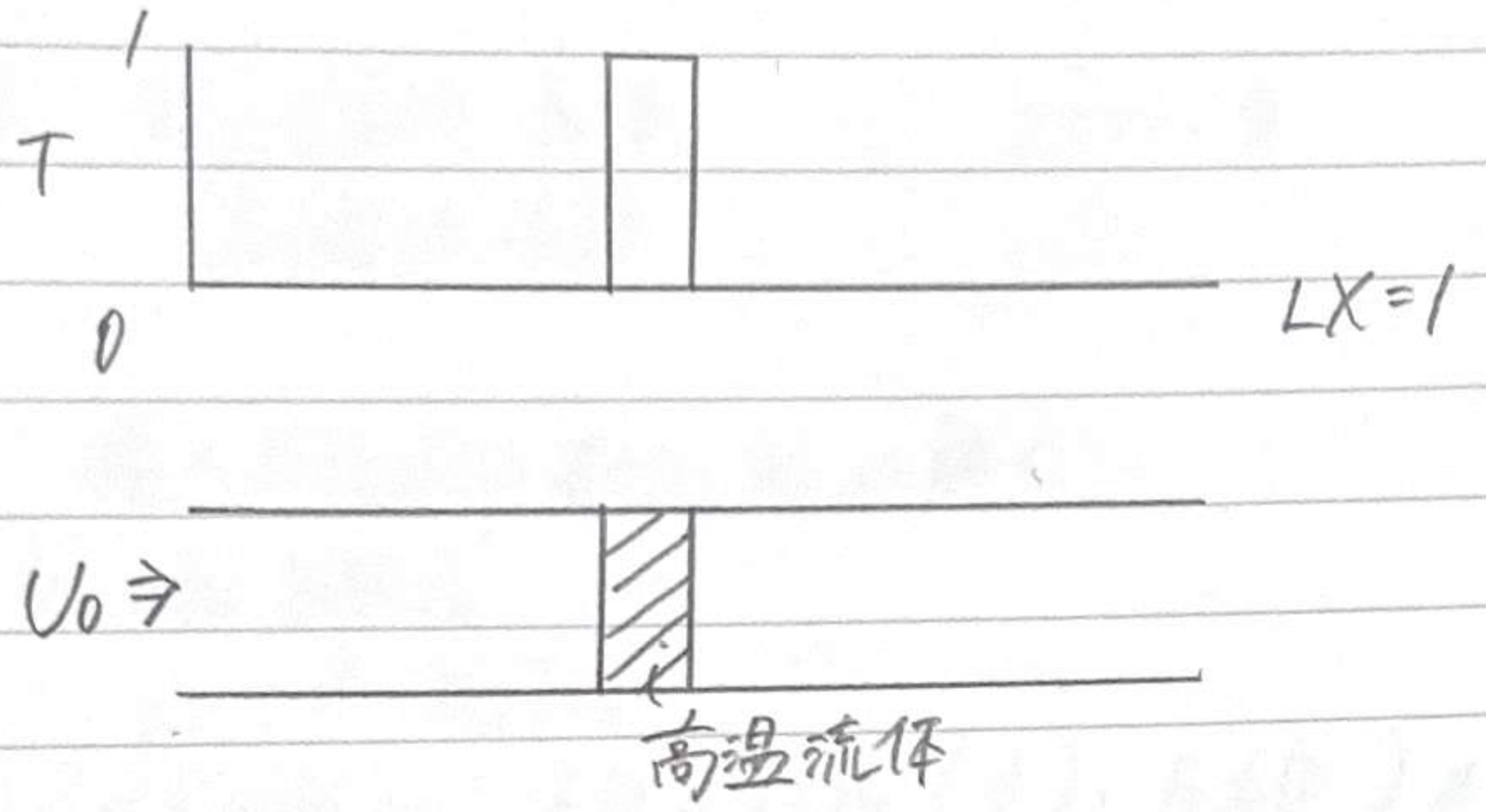


図1 計算モデル

○モデル方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} = a\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

無次

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{u}\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} = \frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x^2}$$

ペクレ数

上式に現れる。ペクレ数 $Pe\left(=\frac{U_0 L}{a}\right)$ は、対流輸送と拡散輸送の比である。

$$\underline{\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t}} = \underbrace{-u\frac{T_i^{n+1} - T_{i-1}^n}{\Delta x}}_{\text{風上差分}} + \frac{1}{Pe}\frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$