2018/9/18

計算科学演習B
拡散方程式の差分解析

深沢圭一郎
学術情報メディアセンター

目的

この講義で並列化をおこなう元になるコードを作成する

- 拡散方程式
- 差分法
- 拡散方程式の数値解法
- 数値不安定性について
- 実際に計算機で解く流れ
- 演習のヒント

さまざまな基礎方程式1

数値解法を学ぶときは、基礎的ないくつかの物理方程式を例にすることが多い

移流方程式（convection equation）

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

- 伝達方程式とも言われる最も基本的な式。
- uという空間分布がcの速度で伝搬していく様子を表す
- 手で解ける

さまざまな基礎方程式2

拡散方程式（diffusion equation）

$$\frac{\partial u}{\partial t} + D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

- uという空間分布が拡散していく様子を表す（Dの速度で）
- 熱が伝わる（拡散していく）状態も表すので、熱伝導方程式とも呼ばれる。

波動方程式（wave equation）

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

- uという波が伝搬していく様子を表す

おもにこの3つが基本の式で、今回は拡散方程式を使います。

差分法1

偏微分方程式を解くことで、物理現象を解きたい!
→ 一般解が見つかっていないから、難しい。
→ だったら近似して解けないか?

ここで微分の定義を考えてみる

$$\frac{du}{dx} = \lim_{x \to 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$

となるので、ここから、

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$ （1次精度の前進差分と呼ぶ）

とする。

差分法2

差分法で偏微分方程式を四則演算で表すことができる!
→ コンピュータでも偏微分方程式が解ける!
→ 差分法は数値解法の基礎

前の差分は前進差分だったが、後進または中央でも差分可能

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x) - u(x - \Delta x)}{\Delta x}$$ （1次精度の後進差分）

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$ （2次精度の中心差分）

2点だけで無く、さらに多くの点から差分を取れば、精度が上がるが計算量もあがる。

差分法3

移流方程式を差分式で表すと

$$\frac{\partial u}{\partial t}+c\frac{\partial u}{\partial x}=0 \quad \rightarrow \quad \frac{u(x,t+\Delta t)-u(x,t)}{\Delta t}+c\frac{u(x+\Delta x,t)-u(x-\Delta x,t)}{2\Delta x}=0$$

（時間は前進差分、空間は中心差分を取った場合）

差分式はΔxやΔtが→0の時に元の式に帰着するのであれば、どのような構造をしていても良い。

→テーラー展開からも差分の式が作ることができる。
→詳細は板書

微分の差分での表現は一つでは無いから、計算対象によって最適な手法を選ぶことが重要。

∘ $$u(x+\Delta x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}u^{(n)}(x)\Delta x^n$$

$$=u(x)+u^{(1)}(x)\Delta x+\frac{1}{2!}u^{(2)}(x)\Delta x^2$$

$$+\frac{1}{3!}u^{(3)}(x)\Delta x^3+\cdots$$

∘ $$u(x-\Delta x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}u^{(n)}(x)\Delta x^n$$

$$=u(x)-u^{(1)}(x)\Delta x+\frac{1}{2!}u^{(2)}(x)\Delta x^2$$

$$-\frac{1}{3!}u^{(3)}(x)\Delta x^3+\cdots$$

前進差分

$$\frac{u(x+\Delta x)-u(x)}{\Delta x}=u^{(1)}(x)+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{n!}u^{(n)}(x)\Delta x^{n-1}$$

後進差分

$$\frac{u(x)-u(x-\Delta x)}{\Delta x}=u^{(1)}(x)+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}u^{(n)}(x)\Delta x^{n-1}$$

拡散方程式の数値解法1

拡散方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} + D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$ という形をしていた

$\dfrac{\partial u}{\partial t}$ は前進差分を取ると、$\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t}$ となる。

$D\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ はテーラー展開から求めて（板書参照）、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2}$$ となる。

拡散方程式の数値解法2

ここで、書くのを便利にするため、

$$u(x,t) = u_i^n$$
$$u(x+\Delta x,t) = u_{i+1}^n$$
$$u(x,t+\Delta t) = u_i^{n+1}$$

とする。すると、拡散方程式は、

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = D\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \mu(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad *\mu = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

となり、時間発展が計算できます。

この講義では**この2次元版が演習問題**です。

数値不安定

差分法が持つ精度では無く、計算手法や時間刻みと格子間隔から来る不安定

→ ここではクーラン条件だけをとりあげる(詳細は板書)

→ その他不安定については参考書などを参照

$\frac{\Delta x}{\Delta t} > c$ これがクーラン条件で、これを満たさないと安定に解けない。

拡散の場合は、

$\mu = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$ を満たす必要がある。

実際の解き方

差分式で方程式を解く場合には、初期条件（値）と境界条件（値）がないと解けない。

→ 初期値はまあ当たり前

→ 境界値は、差分式では、i+1やi-1など周辺の値を使うため、計算格子の端（境界）で、何らかの条件が必要。

ということを考えると、

初期値設定　　*$u(x, 0)$の値を決める

↓

境界値設定　　*$u(x_{min}-1, 0)$や$u(x_{max}+1, 0)$を決める

↓

差分計算

↓

結果書き出し

演習のヒント

2次元拡散方程式の差分化

板書になります。

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}} = D\left(\underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)$$

$\Delta x = \Delta y$ 로 가정.

$$\hookrightarrow \frac{u^{n+1}_{i,j} - u^{n}_{i,j}}{\Delta t}$$

$$\hookrightarrow \frac{u^{n}_{i+1,j} - 2u^{n}_{i,j} + u^{n}_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\hookrightarrow \frac{u^{n}_{i,j+1} - 2u^{n}_{i,j} + u^{n}_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

$$\Rightarrow u^{n+1}_{i,j} = \boxed{\qquad\qquad}$$