

計算科学演習B

拡散方程式の差分解析

深沢圭一郎

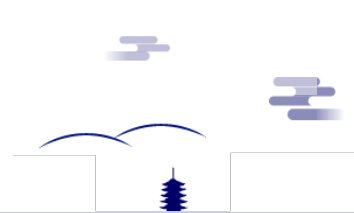
学術情報メディアセンター



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



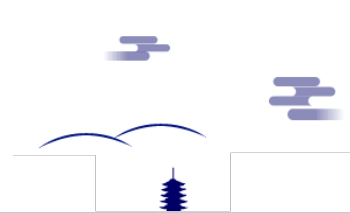
さまざまな基礎方程式1

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!

→ 一般解が見つからないから、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

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

となるので、ここから、

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

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!

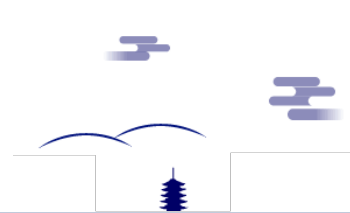
→ 差分法は数値解法の基礎

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

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

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

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

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

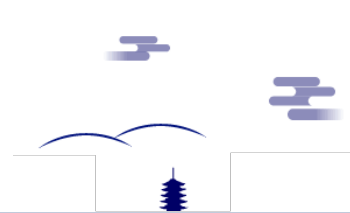
(時間は前進差分、空間は中心差分を取った場合)

差分式は Δx や Δt が $\rightarrow 0$ 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。



$$\begin{aligned}
 \circ \quad u(x+\Delta x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} u^{(n)}(x) \Delta x^n \\
 &= u(x) + u^{(1)}(x) \Delta x + \frac{1}{2!} u^{(2)}(x) \Delta x^2 \\
 &\quad + \frac{1}{3!} u^{(3)}(x) \Delta x^3 + \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \circ \quad u(x-\Delta x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} u^{(n)}(x) \Delta x^n \\
 &= u(x) - u^{(1)}(x) \Delta x + \frac{1}{2!} u^{(2)}(x) \Delta x^2 \\
 &\quad - \frac{1}{3!} u^{(3)}(x) \Delta x^3 + \dots
 \end{aligned}$$

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

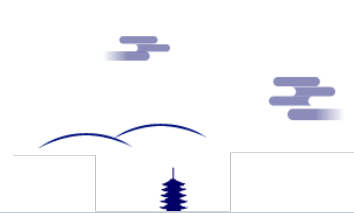
拡散方程式は

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

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

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

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



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

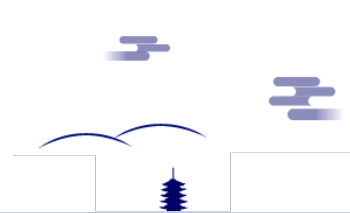
→ ここではクーラン条件だけを取りあげる(詳細は板書)

→ 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。



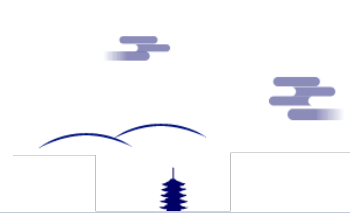
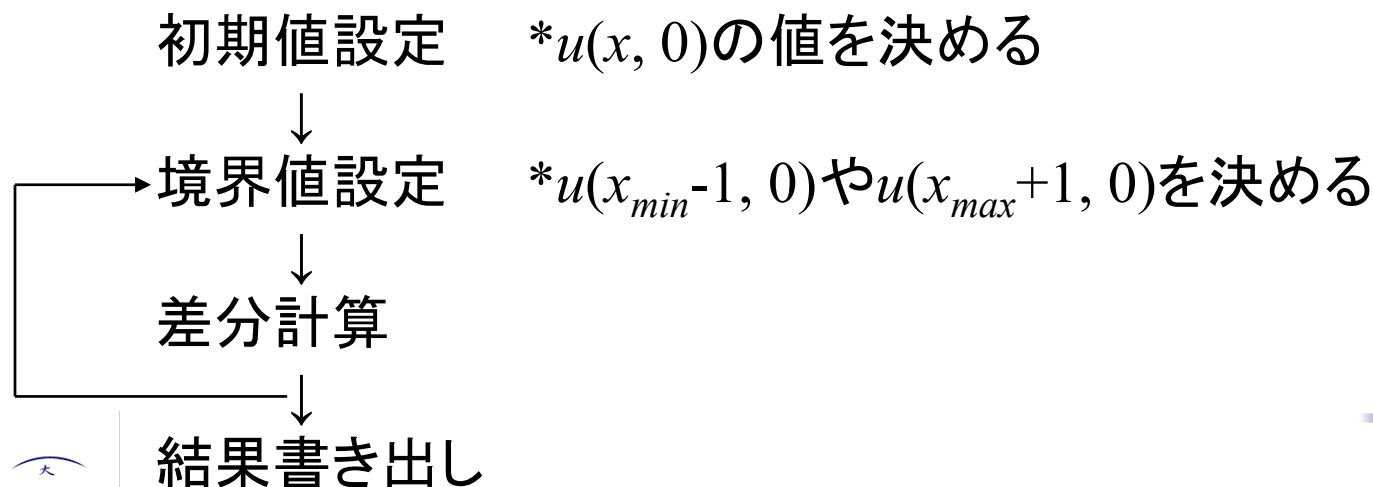
実際の解き方

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。

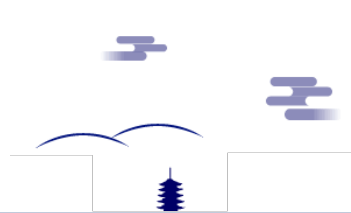
ということを考えると、



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。



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

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z.$$

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

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

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

$$\Rightarrow u_{i,j}^{n+1} =$$

