差分法の基礎

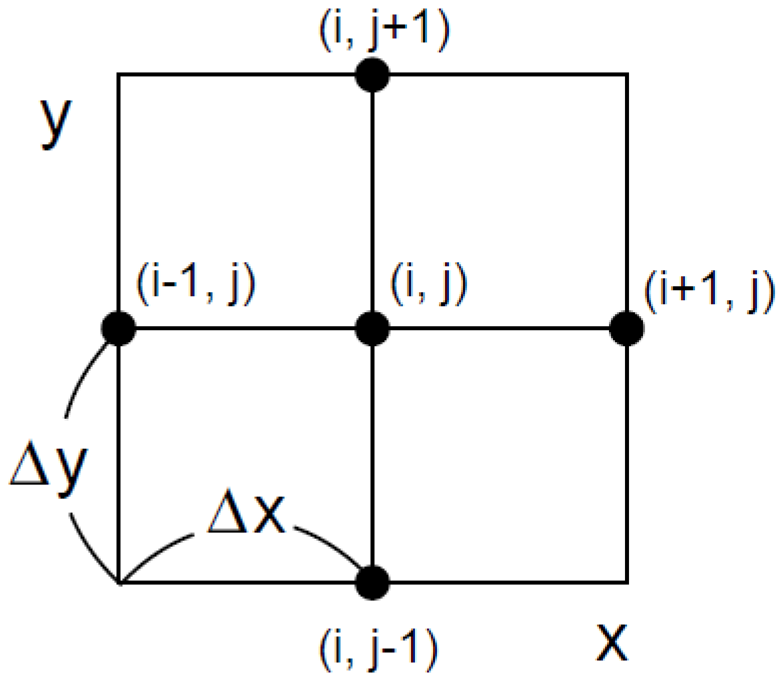
松元亮治(千葉大理)

本章の目標

- 線形及び非線形の1変数波動方程式を例にして差分法の基礎を学ぶ
- 差分法の数値的安定性を学ぶ
- 解の単調性を維持する解法として一次精度風上差分法を導入する

本章の参考書:流体力学の数値計算法
藤井孝蔵　著、東京大学出版会(1994)

差分近似



格子点番号 (i, j)

各格子点の座標: (x_i, y_j)

格子間隔:　Δx、Δy

格子点における物理量: $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$

中心差分

着目している点 (x_i, y_j) のまわりでテイラー展開

$$u_{i+1,j} = u(x_i + \Delta x, y_j) = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \frac{\Delta x^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i + \dots$$

$$u_{i-1,j} = u(x_i - \Delta x, y_j) = u_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i - \frac{\Delta x^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i + \dots$$

上式から下式を引くと

$$u_{i+1,j} - u_{i-1,j} = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + O(\Delta x^3)$$

$$\boxed{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}} + O(\Delta x^2)$$

中心差分

各種差分式

Δx について 1 次の精度で以下の差分近似式が得られる。

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \qquad \text{(前進差分)}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \qquad \text{(後退差分)}$$

式(1.1)+(1.2)

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} = 2u_{i,j} + \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + O(\Delta x^4)$$

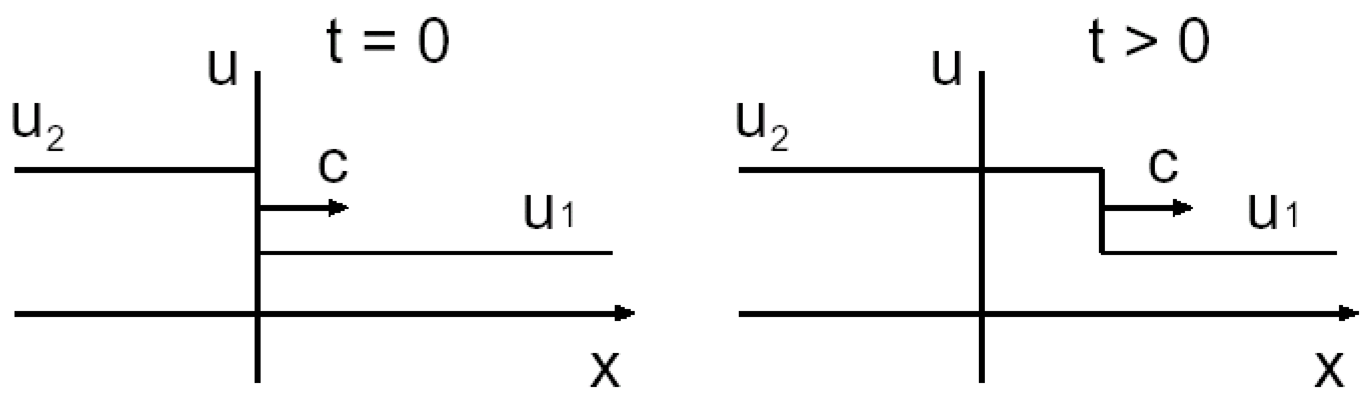
$$\boxed{\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2}} + O(\Delta x^2)$$

線形スカラー移流方程式

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

厳密解

$$u(x,t) = u(x - ct, 0)$$



FTCSスキーム

時間について前進差分、空間について中心差分

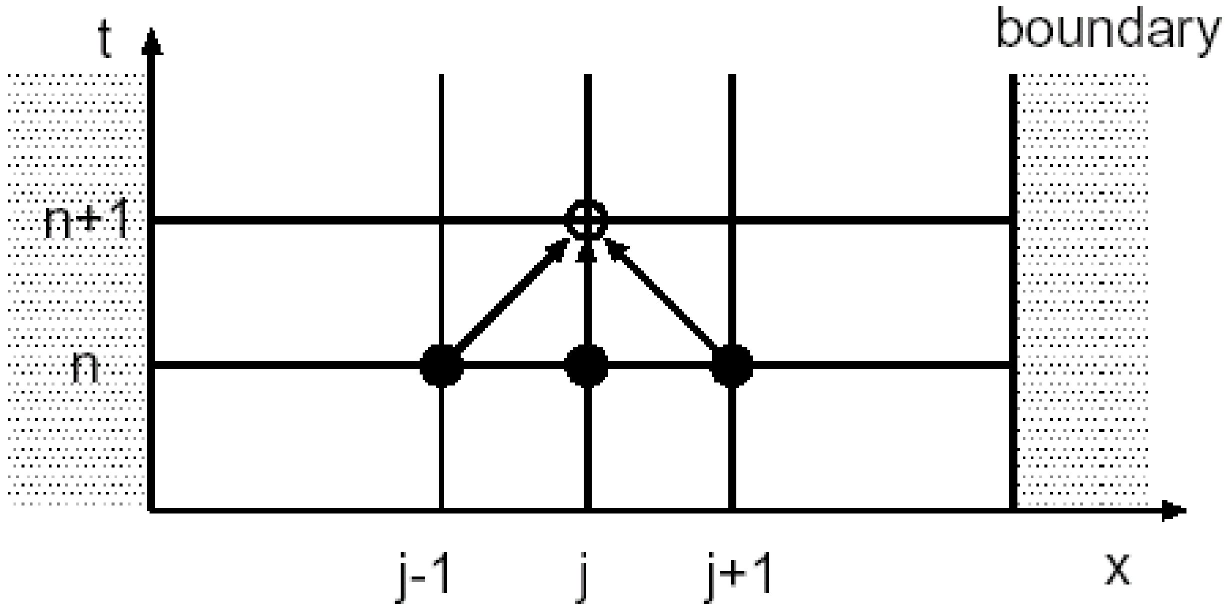
$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}\nu(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)$$

$$\nu \equiv c\frac{\Delta t}{\Delta x}$$ クーラン数

FTCS スキームは陽解法

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}\nu(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)$$



1次元波動伝播シミュレーションのアルゴリズム

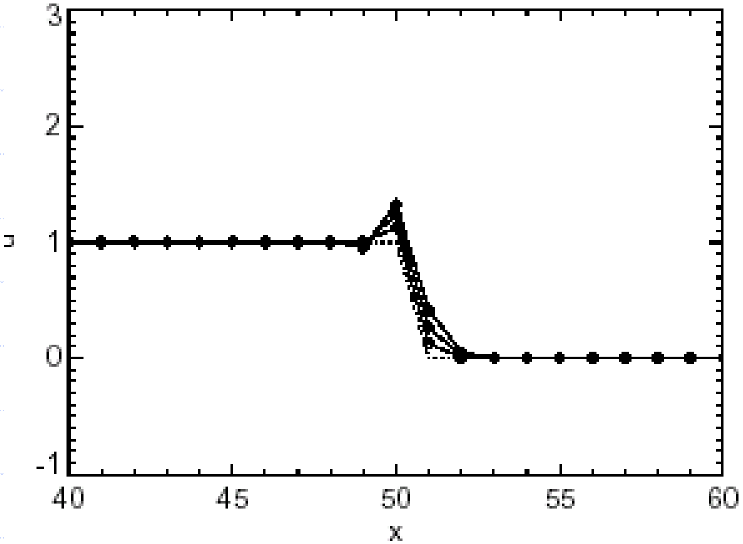
1. メッシュ生成：座標値x[j]をセットする
2. 初期条件：初期値u[j]をセットする
3. 時刻tが決められた時刻に達するまで以下を繰り返す

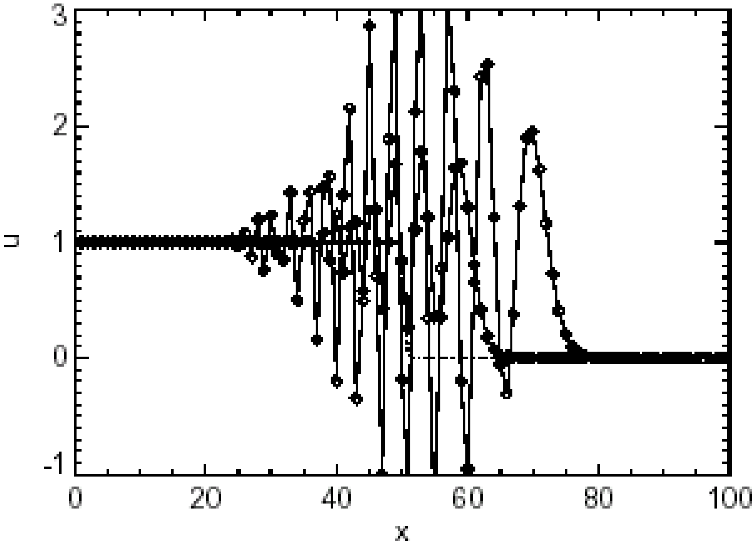
(a) Δt後の値を差分式にもとづいて計算

(b) 境界の値を境界条件から決める

(c) 時刻をΔtだけ進める

FTCSスキームによる計算例





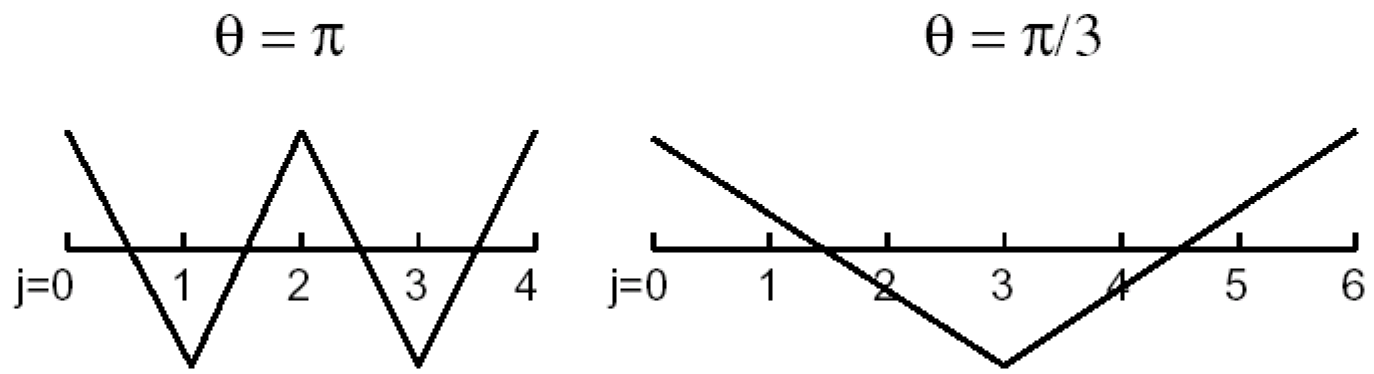
クーラン数 =0.25

FTCS スキームは数値的に不安定

フォンノイマンの安定性解析

FTCSスキームの差分方程式に次式を代入

$$u_j^n = \cos(j\theta)$$



u_j^n のプロフィール

プロフィールの変化

$$u_j^{n+1} = \cos(j\theta) + \nu\mathrm{sin}\theta\mathrm{sin}(j\theta)$$

$$= Re\left[(1 - i\nu\mathrm{sim}\theta)e^{ij\theta}\right]$$

$$u_j^{n+2} \;=\; (1-\nu^2\mathrm{sin}^2\theta)\cos(j\theta) + 2\nu\mathrm{sin}\theta\mathrm{sin}(j\theta)$$

$$= \; Re\left[(1 - i\nu\mathrm{sin}\theta)^2 e^{ij\theta}\right]$$

$$u_j^{n+k} = Re\left[(1 - i\nu\mathrm{sin}\theta)^k e^{ij\theta}\right]$$

FTCSスキームの安定性

複素数に拡張 $u_j^n = g^n e^{ij\theta}$

増幅率
$$
\begin{aligned}
g &= 1 - \frac{1}{2}\nu(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \\
&= 1 - i\nu\sin\theta
\end{aligned}
$$

$$|g|^2 = 1 + \nu^2\sin^2\theta \geq 1$$

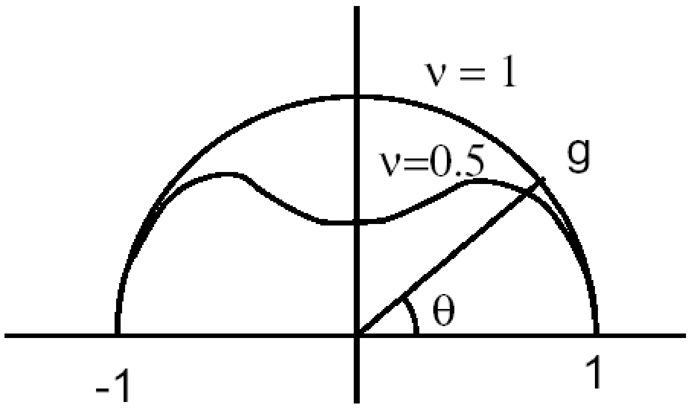
常に不安定！

Lax-Friedrich スキーム

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)$$

$$\begin{aligned} g &= \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) - \frac{1}{2}(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \\ &= \cos\theta - i\nu\sin\theta \end{aligned}$$

$$|g|^2 = \cos^2\theta + \nu^2\sin^2\theta$$

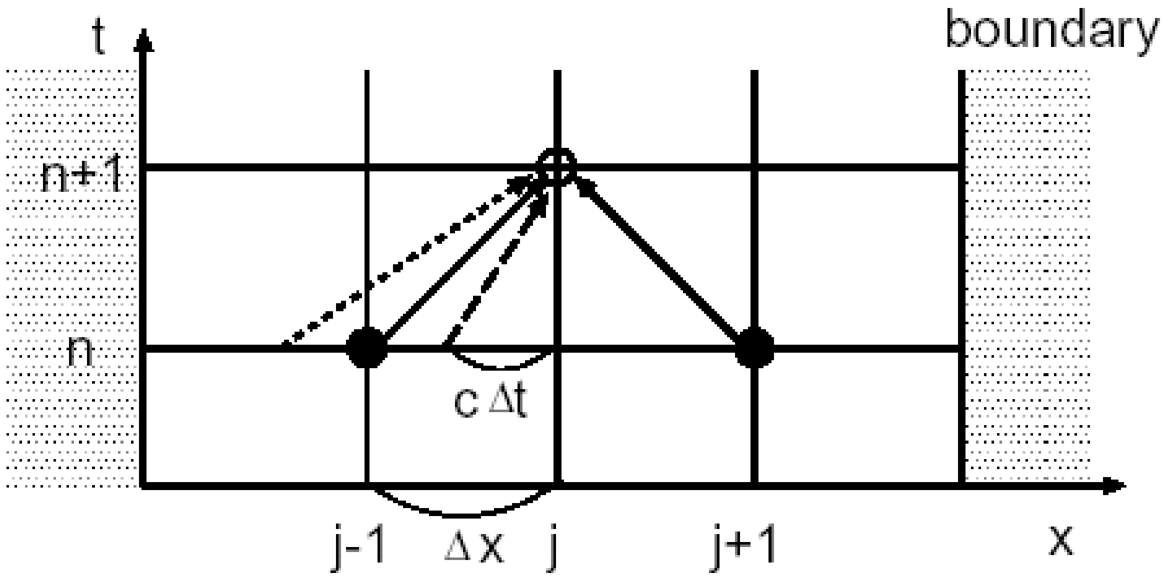


Stable when

$$\boxed{\nu = c\Delta t/\Delta x \leq 1}$$

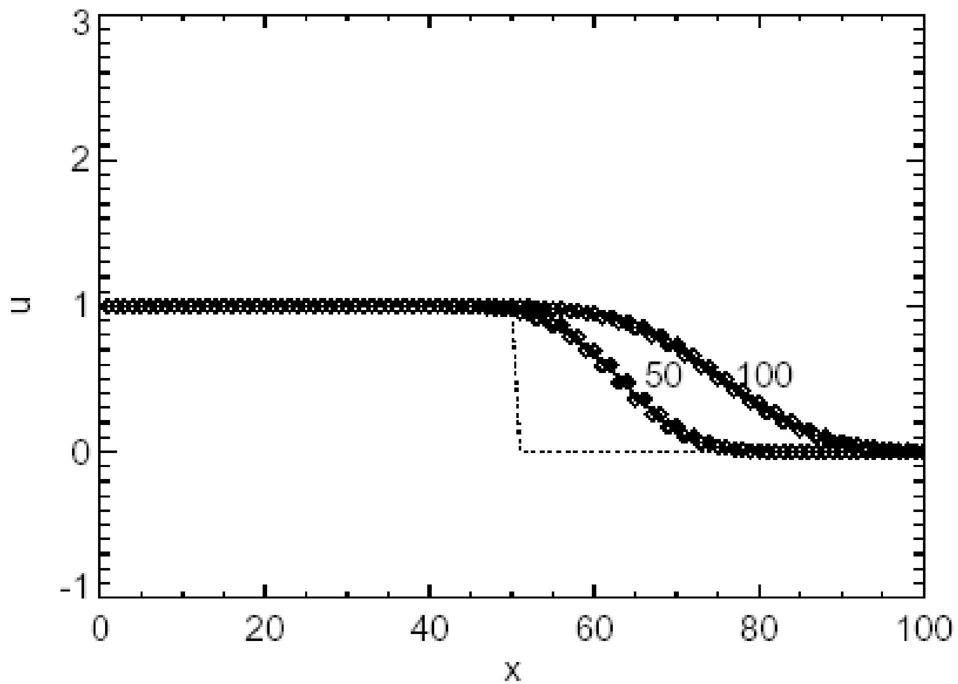
クーラン条件

クーラン条件の意味



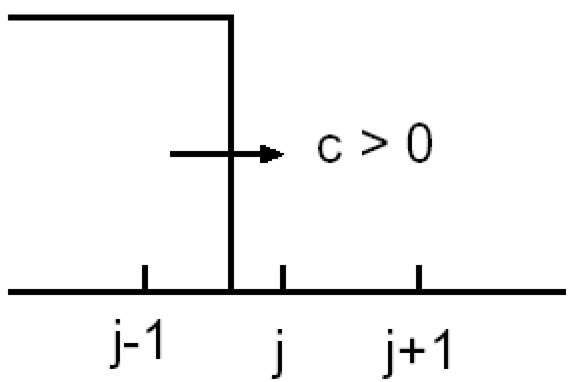
1タイムステップに波が1メッシュ以上
伝わってはいけないという条件

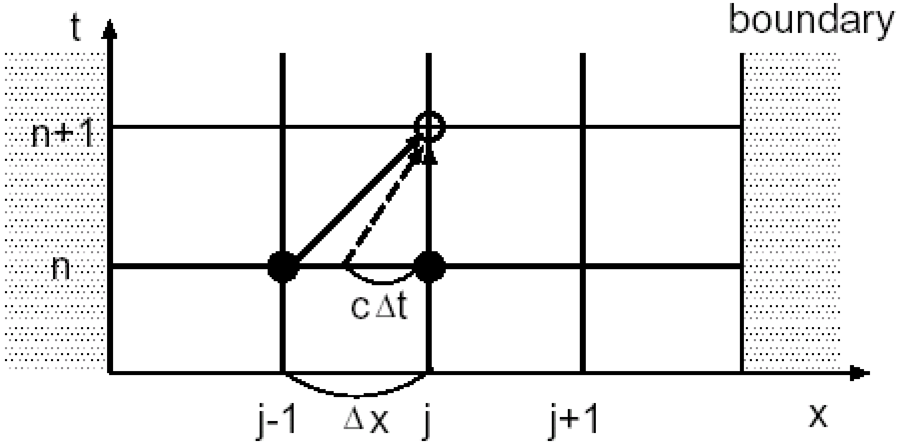
Lax-Friedrich スキームによる計算結果



クーラン数=0.25

1次精度風上差分法





$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c\frac{\Delta t}{\Delta x}(u_j^n - u_{j-1}^n)$$

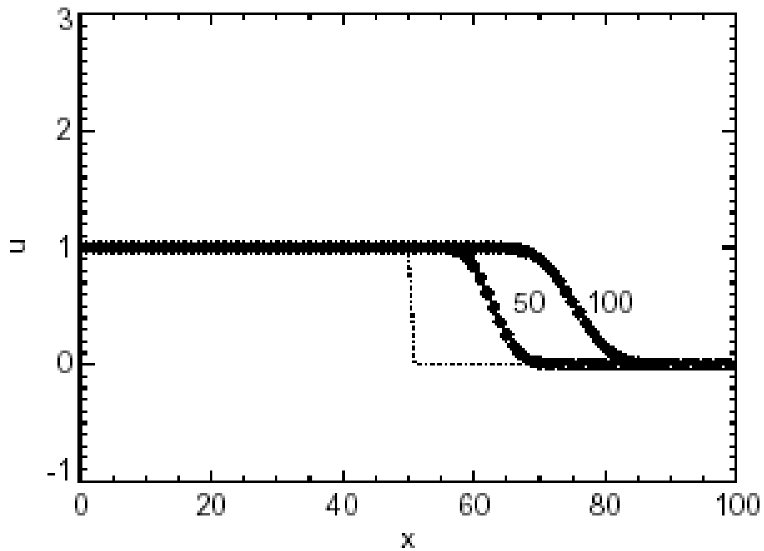
風上差分法の安定性

$$
\begin{aligned}
g &= 1-\nu(1-e^{-i\theta}) \\
&= (1-\nu+\nu\cos\theta)-i\nu\sin\theta
\end{aligned}
$$

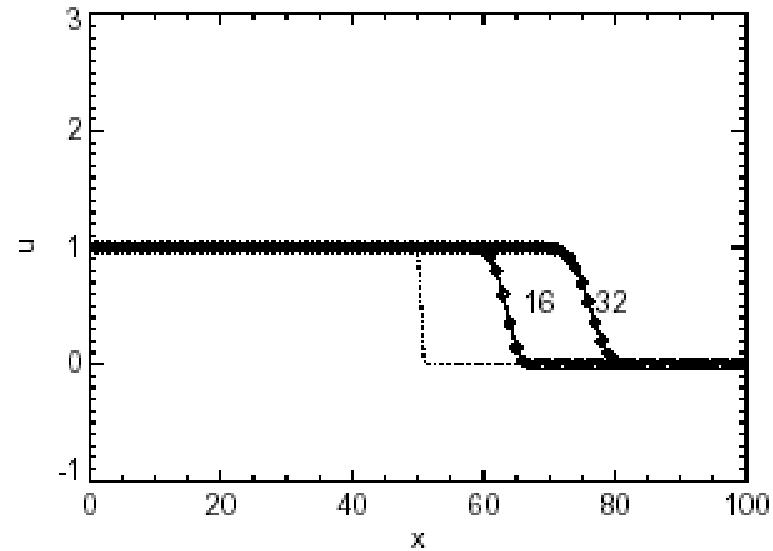
$$
\begin{aligned}
|g|^2 &= (1-\nu+\nu\cos\theta)^2+\nu^2\sin^2\theta \\
&= 1-2\nu(1-\nu)(1-\cos\theta)
\end{aligned}
$$

Stable when $0 \le \nu \le 1$

1次精度風上差分による計算例



クーラン数 =0.25



クーラン数 =0.8

高次精度スキームの例:
Lax-Wendroff Method

テイラー展開

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O(\Delta t^3)$$

$\partial u/\partial t = -c\partial u/\partial x$、$\partial^2 u/\partial t^2 = c^2 \partial^2 u/\partial x^2$ を代入

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c\Delta t \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2}c^2 \Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta t^3)$$

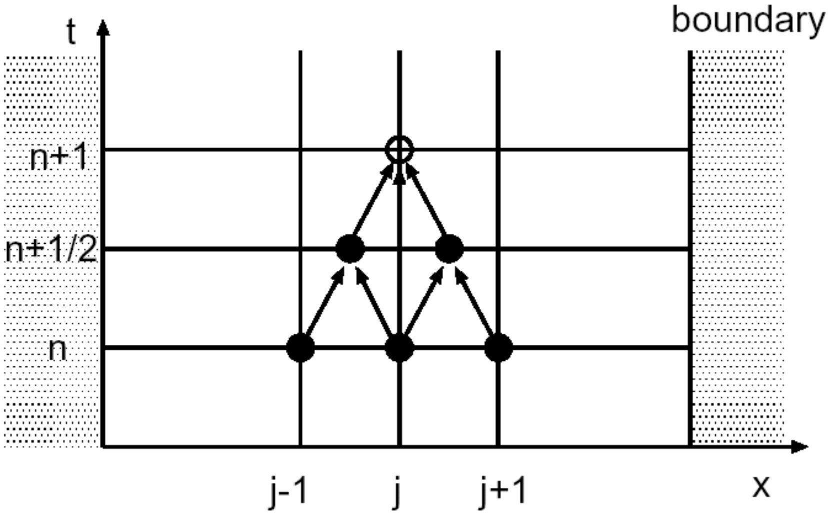
中心差分を用いると

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}c\Delta t \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + \frac{1}{2}c^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

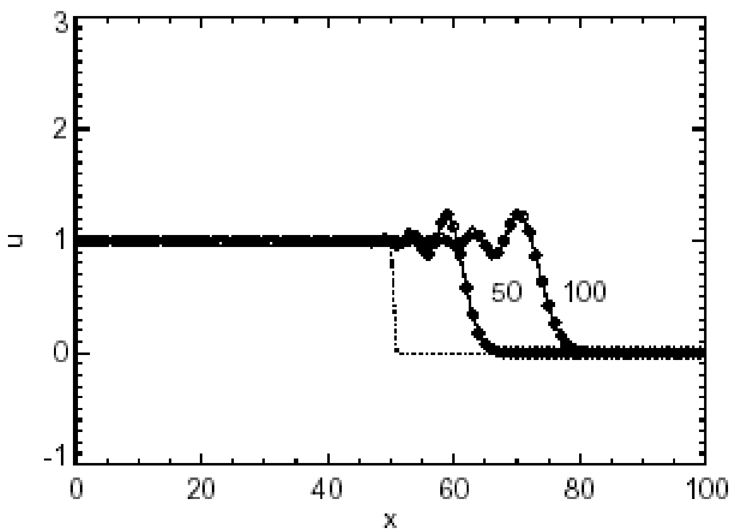
2step Lax-Wendroff method

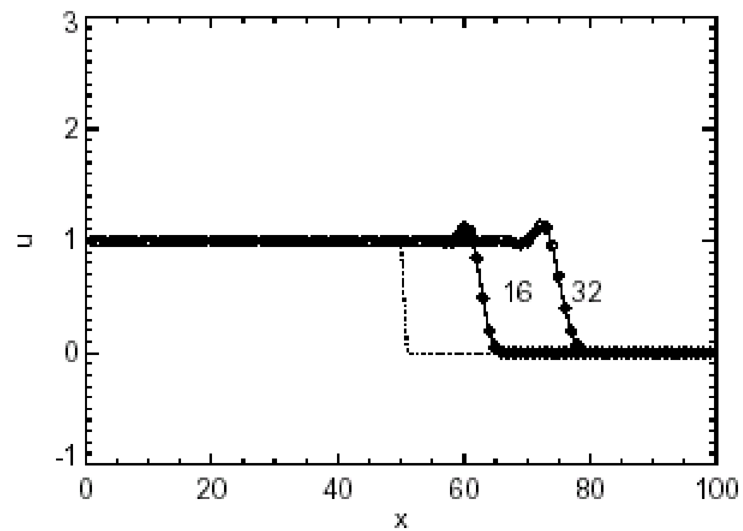
$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{u_{j+1}^n + u_j^n}{2} - \frac{1}{2} c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1}^n - u_j^n)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{j+1/2}^{n+1/2} - u_{j-1/2}^{n+1/2})$$



Lax-Wendroff 法による計算例





クーラン数 =0.25

クーラン数 = 0.80

Godunovの定理

- In 1D scalar advection equation,any scheme higher than 2nd order accuracy with form

$$u_j^{n+1} = \sum_k a_k u_{j+k}^n$$

Cannot maintain the monotonicity of the solution

1st Order Upwind Scheme preserves the monotonicity

人工粘性

数値振動を抑制するために、
以下の拡散項を加える

$$\tilde{u}_j^{n+1} = u_j^{n+1} + \kappa \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

速度勾配に比例した拡散係数の例

$$\kappa_{j+1/2} = Q_v \Delta x |u_{j+1}^n - u_j^n|$$

保存形

- 流体力学、磁気流体力学の方程式は以下の保存形に書くことができる

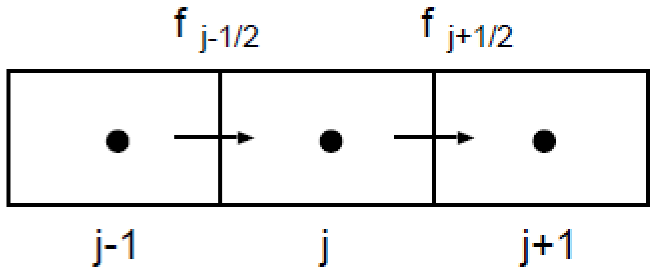
$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

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

ここで $f = cu$

保存形式の物理的意味

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



$x = x_{j-1/2}$ から $x = x_{j+1/2}$ まで空間積分

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u dx + f(x_{j+1/2}) - f(x_{j-1/2}) = 0.$$

$$u_j^n = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t_n) dx$$ を用いると

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n)$$

数値流束

- FTCS

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}(f^n_{j+1} + f^n_j)$$

- Lax-Friedrich

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[(1 - \frac{1}{\nu})f^n_{j+1} + (1 + \frac{1}{\nu})f^n_j\right]$$

- Upwind

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[(f^n_{j+1} + f^n_j) - |c|(u^n_{j+1} - u^n_j)\right]$$

- Lax-Wendroff

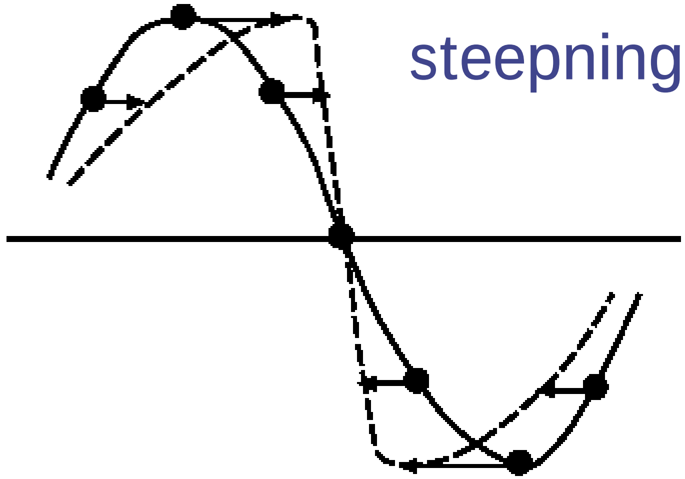
$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left[(1 - \nu)f^n_{j+1} + (1 + \nu)f^n_j\right]$$

非線形方程式の解法

- バーガース方程式

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

du/dt=0 !



steepning

バーガース方程式の保存形表示

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{u^2}{2}\right) = 0$$

風上差分を適用

when

$$u_{j+1}(t) + u_j(t) > 0 \quad f^n_{j+1/2} = f^n_j = |u_j(t)|^2/2$$

$$u_{j+1}(t) + u_j(t) \le 0 \quad f^n_{j+1/2} = f^n_{j+1} = |u_{j+1}(t)|^2/2$$

1次精度風上差分によるバーガース方程式のシミュレーション例

- 振幅が小さい場合

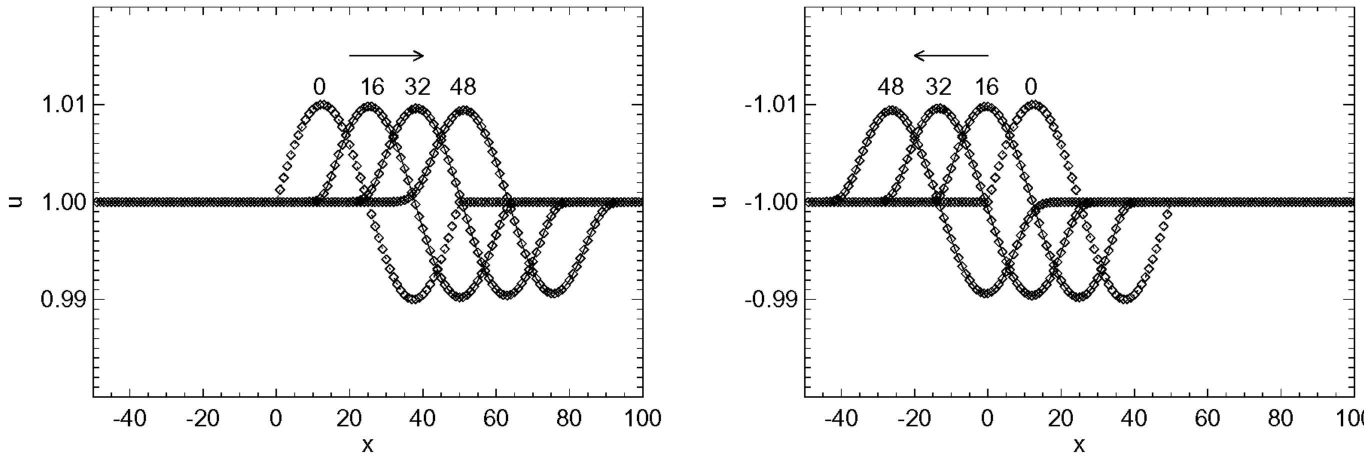


図 1.15: Burgers 方程式を 1 次精度風上差分法で解いた結果の例。左：初期に $u > 0$ の場合。右：初期に $u < 0$ の場合。図中の数字は時間ステップ数。時間きざみは $\Delta t/\Delta x = 0.8$ とした。

不連続面の形成

非線形性が強くなる場合の Burgers 方程式の数値解の例を図 1.16 に示す。この例では初期に $u(x) = 1 + 0.1\sin(kx)$ のような速度分布を与え、その後の時間発展を 1 次精度の風上差分法によって解いた。Burgers 方程式の非線形項 $u\partial u/\partial x$ の効果により波がしだいに突っ立ち、不連続（衝撃波）が形成されることがわかる。

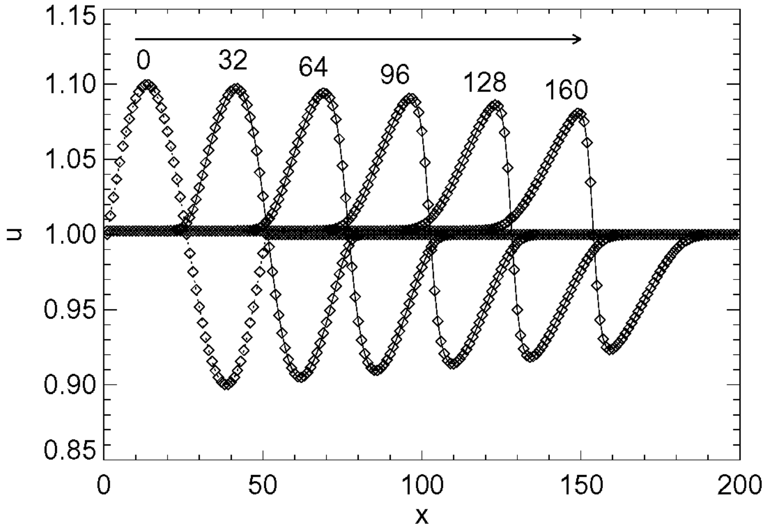


図 1.16: 初期に $u(x) = 1 + 0.1\sin(kx)$ の速度分布から始めた場合の Burgers 方程式の数値解。図中の数字は時間ステップ数。1 次精度風上差分法で時間きざみは $\Delta t/\Delta x = 0.8$ とした。

流束制限関数

Lax-Wendroff Schemeの数値流束

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = c[u^n_j + \frac{1}{2}(1-\nu)(u^n_{j+1} - u^n_j)]$$

右辺第一項は単調性を保つ1次精度風上差分と一致する。そこで、右辺第二項を以下のように変形する。

$$\tilde{f}^n_{j+1/2} = c[u^n_j + \frac{1}{2}(1-\nu)B_{j+1/2}(u^n_{j+1} - u^n_j)]$$

B j+1/2 は流束制限関数と呼ばれる

流束制限関数による数値振動の抑制

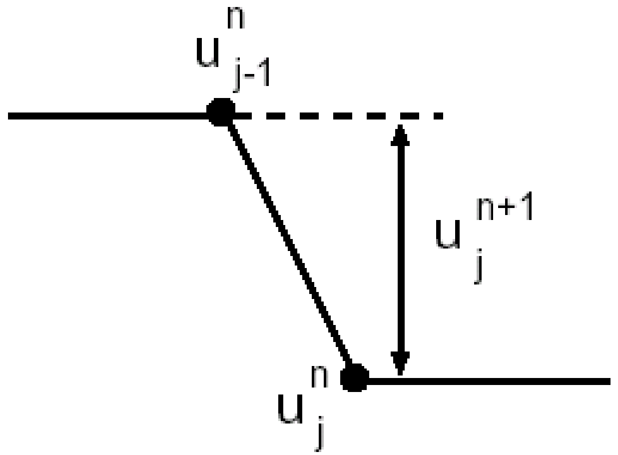
流束制限関数を導入した数値流束を次式に代入

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{u_{j-1}^n - u_j^n} = \nu[1 - \frac{1}{2}(1-\nu)B_{j-1/2}] + \frac{1}{2}\nu(1-\nu)\frac{B_{j+1/2}}{r_j}$$

ここで、 $r_j \equiv \dfrac{u_j^n - u_{j-1}^n}{u_{j+1}^n - u_j^n}$

流束制限関数が満たすべき条件



$$0 \le \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{u_{j-1}^n - u_j^n} \le 1$$ を満たすには

$$\boxed{-\frac{2}{\nu} \le B_{j-1/2} - \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \le \frac{2}{1-\nu}}$$

流束制限関数

- Since $0 \le \nu \le 1$

$$-2 \le B_{j-1/2} - \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \le 2$$

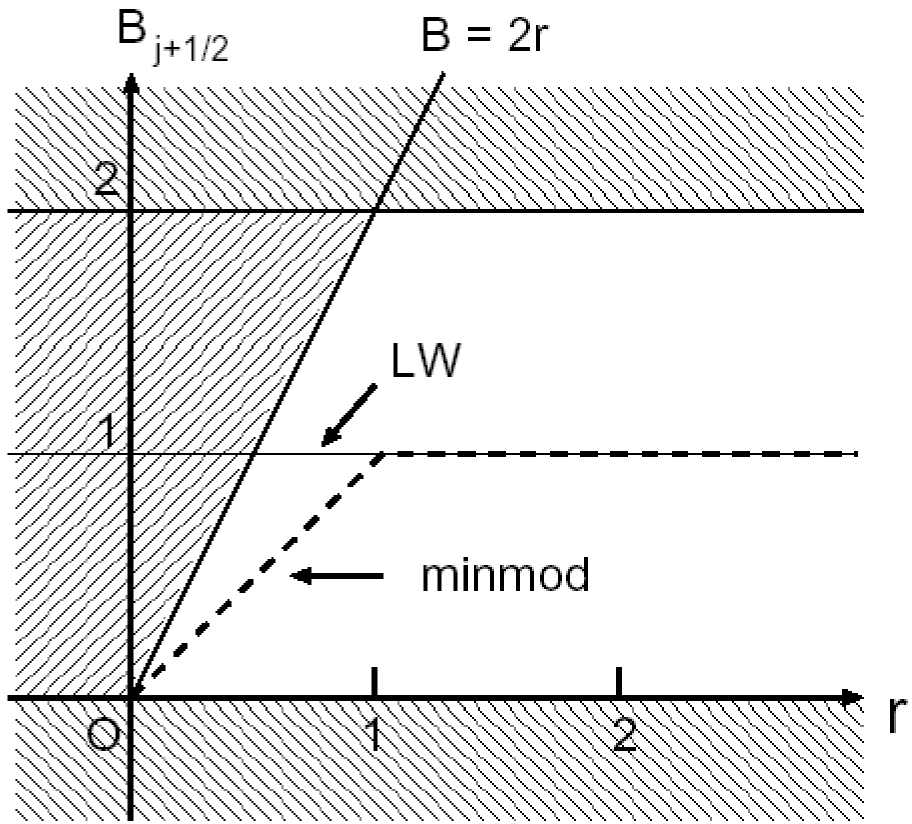
この不等式を満たす条件

$$0 \le B_{j+1/2} \le 2$$

and

$$0 \le \frac{B_{j+1/2}}{r_j} \le 2$$

流束制限関数の許容範囲



Minmod limiter

$$\mathrm{minmod}(r) = \begin{cases} 0 & (r < 0) \\ r & (0 \leq r \leq 1) \\ 1 & (r > 1) \end{cases}$$

TVD条件

◆数値振動の発生を定量化

$$U = \int \left| \frac{du}{dx} \right| dx. \tag{1.84}$$

この量は波の振幅の総和に等しく、移流方程式の厳密解では波のプロファイルが保たれるため、$dU/dt = 0$ である。

以上との類推により、メッシュ点ごとの物理量の変化量の総和を次式のように定義し、これを Total Variation (TV) と言う。

$$TV(u^n) \equiv \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n| \tag{1.85}$$

Total Variation が時間とともに増大しないという条件

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \tag{1.86}$$

のことを Total Variation Diminishing (TVD) 条件と呼ぶ。

この章ででてきたキーワード

- 中心差分と風上差分
- 陽的差分法
- クーラン数、クーラン条件
- Godunovの定理
- 保存形表示
- 数値流束
- 流束制限関数
- TVD条件

END