

数値シミュレーションの基礎（時間進展問題に対する解析の留意点について）

INTRODUCTION TO NUMERICAL SIMULATION (POINTS TO NOTICE IN NUMERICAL ANALYSIS FOR TIME DEPENDENT PROBLEMS)

倉橋貴彦^{#, A)}

Takahiko Kurahashi^{#, A)}

^{A)} Department of Mechanical Engineering, Nagaoka University of Technology

Abstract

The introduction to numerical simulation is shown in this lecture. In the numerical simulations for unsteady problems, it is important to give appropriate numerical conditions. The Von Neumann stability analysis is frequently employed to determine the appropriate numerical conditions. In addition, it is known that the consideration of the numerical stability in the finite difference method contribute to the growth of the numerical techniques in the finite element method. In this lecture, the formulation based on the Von Neumann stability analysis and the discretization based on the stabilized finite element method are explained under history of the development of the technique of numerical stability.

1. はじめに

本講演では、時間進展の問題を対象とした数値シミュレーションにおいて、計算誤差が増大し発散しないように計算条件を設定する方法について説明する。数値計算では、一般に、支配方程式に対して離散化を行い、微分方程式を代数方程式に変形することによりプログラミングを実施するが、適用する離散化の方法が適切でない場合、どのような計算条件を設定したとしても、計算が発散する場合がある。これは理論的にも証明することができフォン・ノイマンの安定性解析[1]を実施することにより確認することができる。この安定性解析を実施することにより、計算を安定に行うための計算条件の設定範囲を誘導することができ、汎用ソフトウェアが頻繁に使用される現在においては、この安定解析法は必ず知っておくべきものである。また、この計算安定性に関する考察を踏まえ、計算を安定にする「有限差分法による離散化式」と等価となるように「有限要素法による離散化式(有限要素方程式)」を誘導する方法が開発された。現在では、安定化有限要素法[2, 3]という呼び名として知られており、計算力学の分野においては様々な問題に対して幅広く適用されている。このような経緯も踏まえ、本講演では計算の安定性に焦点をおき、上記の内容について解説を行う。

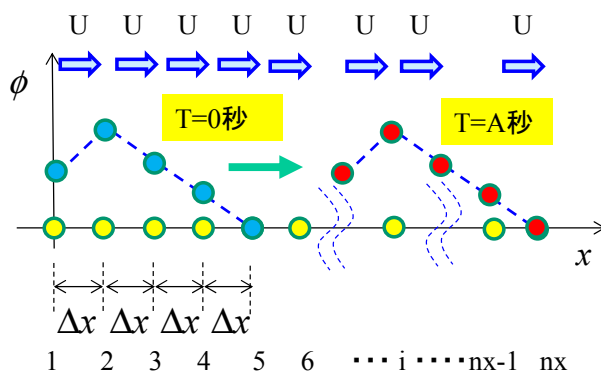


Figure 1: Image of advection phenomenon.

Equation (1)の離散化を行うために、時間方向に前進差分、空間方向に対して後退差分を適用すると、Eq. (2)に示す差分式が得られる。

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + U \left(\frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} \right) = 0 \quad (2)$$

Equation (2)において、 Δt 、 Δx は時間刻みおよび空間刻みを示し、 j は空間刻みの点の番号、 n は時間ステップを示す。ここで、物理量 ϕ が厳密解 D および数値誤差 ε の和に与えられるものとし、Eq. (3)のように表す。

$$\phi_i^n = D_i^n + \varepsilon_i^n \quad (3)$$

Equation (3)をEq. (2)に代入するとEq. (4)が得られる。ここで、Eq. (4)において、厳密解 D はEq. (2)の差分式において正解を与えるものと考えていることから、数値誤差 ε についての式のみを残すとEq. (5)に示す数値誤差の時間進展式が得られる。

2. フォン・ノイマンの安定性解析

2.1 式展開について

フォン・ノイマンの安定性解析を行うにあたり、Eq. (1)に示す移流方程式を支配方程式として導入する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

ϕ は物理量、 U は移流流速を示す。この方程式の物理的意味は、物理量 ϕ が分布の形を変えずに、移流流速 U により運ばれていくというものである (Fig. 1 参照)。

[#] kurahashi@mech.nagaokaut.ac.jp

$$\frac{(D_j^{n+1} + \varepsilon_j^{n+1}) - (D_j^n + \varepsilon_j^n)}{\Delta t} + U \left(\frac{(D_j^n + \varepsilon_j^n) - (D_{j-1}^n + \varepsilon_{j-1}^n)}{\Delta x} \right) = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\varepsilon_j^{n+1} - \varepsilon_j^n}{\Delta t} + U \left(\frac{\varepsilon_j^n - \varepsilon_{j-1}^n}{\Delta x} \right) = 0 \quad (5)$$

$$|e^{a\Delta t}| \leq 1 \Rightarrow \left| \frac{\varepsilon(x, t + \Delta t)}{\varepsilon(x, t)} \right| \leq 1 \quad (10)$$

$$|e^{a\Delta t}| > 1 \Rightarrow \left| \frac{\varepsilon(x, t + \Delta t)}{\varepsilon(x, t)} \right| > 1$$

Equation (9)について絶対値を計算すると、Eq. (11)のように書くことができる。また、安定を判別する値が 1 であることも考慮し、右辺の平方根を外すために両辺に対して二乗をする(Eq. (12))。

ここで、数値誤差 ε が $e^{at}e^{ikx}$ により表されるものとする、Eq. (5)は Eq. (6)のように書き表すことができる。

$$\frac{e^{a(t+\Delta t)}e^{ikx} - e^{at}e^{ikx}}{\Delta t} + U \left(\frac{e^{at}e^{ikx} - e^{at}e^{ik(x-\Delta x)}}{\Delta x} \right) = 0 \quad (6)$$

Equation (6)の両辺を $e^{at}e^{ikx}$ により割ると指数関数の部分は Δt および Δx に関する項のみが残り、Eq. (7)のように書くことができる。

$$\frac{e^{a\Delta t} - 1}{\Delta t} + U \left(\frac{1 - e^{-ik\Delta x}}{\Delta x} \right) = 0 \quad (7)$$

ここで、 $e^{a\Delta t}$ に関する等式を整理すると Eq. (8)のように書くことができる。ここに $U\Delta t/\Delta x$ の項を変数 r により表し、このパラメータをクーラン数と呼ぶ。

$$e^{a\Delta t} = 1 - \frac{U\Delta t}{\Delta x} (1 - e^{-ik\Delta x}) \quad (8)$$

$$= 1 - r(1 - e^{-ik\Delta x})$$

また、指数関数の部分をオイラーの公式により拡張すると Eq. (9)のように書くことができる。

$$e^{a\Delta t} = 1 - r(1 - e^{-ik\Delta x})$$

$$= 1 - r(1 - \cos(k(-\Delta x)) - i \sin(k(-\Delta x)))$$

$$= 1 - r(1 - \cos(k(-\Delta x))) + ir \sin(k(-\Delta x)) \quad (9)$$

ここで、Eq. (9)の左辺の $e^{a\Delta t}$ は、現在と Δt 秒後における数値誤差の比(誤差の増幅率)を表しているため、Eq. (10)のように、 $e^{a\Delta t}$ の絶対値が 1 より大きい小さいかで数値計算の安定性を判別することになる。

$$|e^{a\Delta t}| = \sqrt{(1 - r(1 - \cos(k(-\Delta x))))^2 + (r \sin(k(-\Delta x)))^2} \quad (11)$$

$$|e^{a\Delta t}|^2 = (1 - r(1 - \cos(k(-\Delta x))))^2 + (r \sin(k(-\Delta x)))^2 \quad (12)$$

Equation (12)を展開すると、Eq. (13)のように書くことができる。Equation (13)において、クーラン数 r を調節し、左辺の値(判定値)についてプロットした図を Fig. 2 に示す。

$$|e^{a\Delta t}|^2 = 1 - 2r(1 - \cos(k(-\Delta x))) + 2r^2(1 - \cos(k(-\Delta x))) = 1 - 2r(1 - r)(1 - \cos(k(-\Delta x))) \quad (13)$$

Figure 2 において、例えば $r=2$ の場合の判定値は 5 となり、 $r=1$ の場合の判定値は 1、また、 $r=0$ の場合の判定値は 0 となっている。図からも読み取れるように $0 \leq r \leq 1$ の場合は判定値が 1 を下回っているため、数値計算は安定に行うことができ、 r が 1 より大きい場合は数値計算が不安定になることを示している。

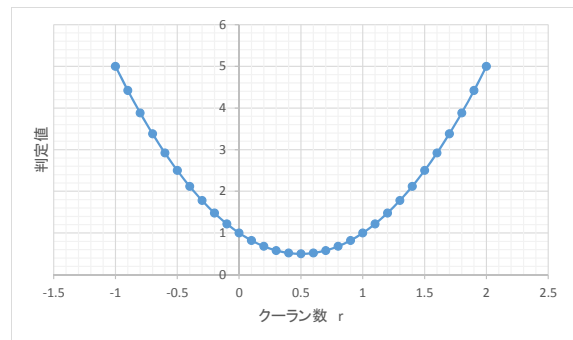


Figure 2: Variation of judgement value.

2.2 安定性解析結果を踏まえた数値実験

前節の安定性解析の結果の確認として、クーラン数 r を 0.5、1.0、1.5 と設定した場合 (Case1~3) の移流方程式の各時刻における結果を Fig. 3~Fig. 5 に示す。

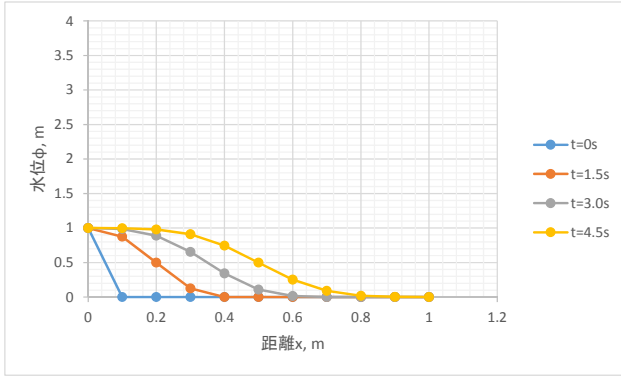


Figure 3: Distribution of solution in case 1 ($r=0.5$).

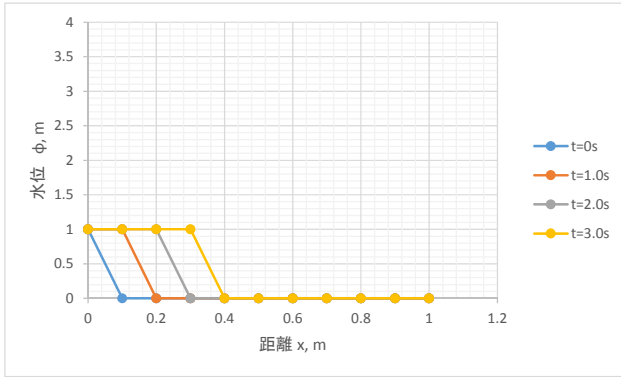


Figure 4: Distribution of solution in case 2 ($r=1.0$).

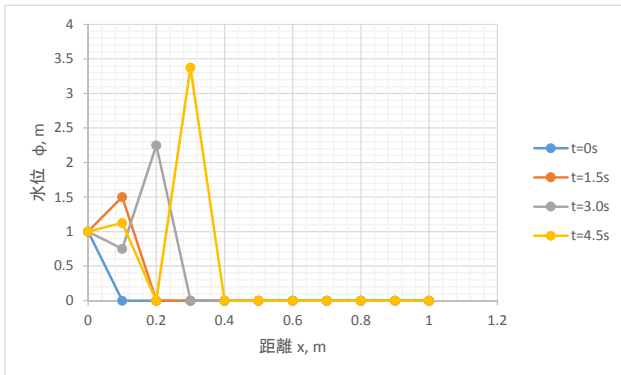


Figure 5: Distribution of solution in case 3 ($r=1.5$).

Figure 3~Figure 5 における計算条件としては、空間刻みを $\Delta x=0.1\text{m}$ 、波速 U を 1m/s と固定し、クーラン数の条件を満たすように時間刻み Δt の値を設定している。Case1 では $\Delta t=0.5\text{s}$ 、Case2 では $\Delta t=1.0\text{s}$ 、Case3 では $\Delta t=1.5\text{s}$ と設定している。結果として、Case1 では数値計算

は安定、Case2 では数値計算は中立、Case3 では数値計算は不安定となっている。上記の結果は、安定性解析の結果を表しており、フォン・ノイマンの安定性解析により誘導されたクーラン数の範囲は正しいものと言うことができる。このように、選択する離散化手法の組み合わせによって、数値計算を安定に行うためには、時間刻みの設定の仕方にも留意をする必要がある。

3. 安定化有限要素法

3.1 空間方向の差分方法の設定による離散化式の違いについて

Equation (1)の離散化において、時間方向に前進差分、空間方向に中心差分を適用すると Eq. (14)を得ることができる。この式にフォン・ノイマンの安定性解析を適用すると、設定した空間刻み l_e 、波速 U に対してどのように時間刻み Δt を設定しても数値計算は不安定となることを証明することができる。

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - U \frac{\Delta t}{l_e} \left(-\frac{1}{2} \phi_{i-1}^n + \frac{1}{2} \phi_{i+1}^n \right) \quad (14)$$

ここで、空間方向に対する近似式を後退差分にすることで計算を安定にできることから、Eq. (14)に対して付加項をすることで、Eq. (2)に変形することを考える。Equation (14)をもとに、Eq. (14)と Eq. (2)が等価となるように式を変形すると Eq. (15)のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \phi_i^{n+1} = \phi_i^n - U \frac{\Delta t}{l_e} \left(-\frac{1}{2} \phi_{i-1}^n + \frac{1}{2} \phi_{i+1}^n \right) \\ + \Delta t \left(\frac{Ul_e}{2} \right) \frac{-\phi_{i-1}^n + 2\phi_i^n - \phi_{i+1}^n}{l_e^2} \end{aligned} \quad (15)$$

Equation (15)の右辺第 3 項において、項の一部は Eq. (16)に示すように、物理量 ϕ に対する空間の二階微分の式に対する差分式にマイナスを乗じた式となっていることがわかる。よって、Eq. (15)の右辺第 3 項の係数部分を τ とおくことで、Eq. (15)の右辺第 3 項は Eq. (17)に示すように、 τ という係数と物理量 ϕ に対する空間の二階微分の差分式の積により表されていることがわかる。

$$-\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \approx \frac{-\phi_{i-1}^n + 2\phi_i^n - \phi_{i+1}^n}{l_e^2} \quad (16)$$

$$\therefore -\tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \approx \frac{Ul_e - \phi_{i-1}^n + 2\phi_i^n - \phi_{i+1}^n}{2 l_e^2} \quad (17)$$

この係数 τ を安定化パラメータと呼び、この定式化において係数 τ は Eq. (18)のように書くことができる。

$$\therefore \tau = \frac{U l_e}{2} \quad (18)$$

本節で示した内容を総括すると、Eq. (1)の離散化に対して時間方向に前進差分、空間方向に対して後退差分を適用するということは、以下に示す Eq. (19)において、時間方向に前進差分、空間方向に対して中心差分を適用し、係数 τ を Eq. (18)により表したものと等しいということになる。二階微分の式は一般に拡散項や粘性項と呼ばれることから、Eq. (19)の第3項は数値計算を安定に行うために付加した拡散項ということで数値拡散項や数値粘性項と呼ばれる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \frac{\partial \phi}{\partial x} - \tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0 \quad (19)$$

3.2 有限要素法における安定化項について

ここで、有限要素法による定式化について考えてみる。有限要素法では、支配方程式に重み関数を乗じて、要素領域において積分することで得られる重み付き残差方程式を誘導するところから始まる。重み関数を w とすると、Eq. (1)に対する重み付き残差方程式は Eq. (20)のように書くことができる。Equation (20)の重み関数 w および物理量 ϕ に対して、一次関数による内挿補間を行うことで各要素に対する有限要素方程式が得られる。しかし、得られた有限要素方程式に対して前章に示したフォン・ノイマンの安定性解析を行うと、無条件不安定 ($\Delta x, \Delta t, U$ の条件をどのように設定しても数値計算は発散する) という結果が得られる。そのため、前節に示したように、支配方程式に数値的な拡散項を付加することにより、数値計算が安定に行えるように定式化を行う。

$$\int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + U \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = 0 \quad (20)$$

Equation (1)の左辺に数値拡散項を加えた Eq. (19)を導入し、重み関数(任意関数) w を乗じて、要素領域において積分をすると Eq. (21)に示す重み付き残差方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + U \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial x} dx \\ - \tau \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} dx = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Equation (21)の左辺第3項に対してグリーンの定理を適用する(部分積分を行う)と Eq. (22)のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + U \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial x} dx \\ + \tau \int_{x_a}^{x_b} \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = \tau \left[w \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_{x_a}^{x_b} \end{aligned} \quad (22)$$

解析領域の境界において安定化パラメータ τ は零とすると、Eq. (23)のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + U \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial x} dx \\ + \tau \int_{x_a}^{x_b} \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = 0 \end{aligned} \quad (23)$$

ここで、Eq. (23)を変形すると Eq. (24)のように表すことができる。Eq. (20) と Eq. (24)を比較すると、左辺第2項の重み関数が変わっていることを確認できる。重み関数は任意関数であるため、どのように設定をしても問題がないことから、Eq. (1)に対して有限要素法による数値計算を安定に行うためには、Eq. (1)の左辺第2項(移流項)の重み関数に付加項を付けて離散化を行うことで、数値計算を安定に行うことができることを示している。

$$\begin{aligned} \int_{x_a}^{x_b} w \frac{\partial \phi}{\partial t} dx \\ + U \int_{x_a}^{x_b} \left(w + \frac{\tau}{U} \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = 0 \end{aligned} \quad (24)$$

安定化有限要素法の1つである SUPG 法を適用した流れ解析の一例を示す。ここで、Eq. (25)~Eq. (27)に示す浅水長波流れの問題に適用した事例を示す(詳細は文献[4]参照)。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + g \frac{\partial \eta}{\partial x} = 0 \quad (25)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + g \frac{\partial \eta}{\partial y} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + h \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = 0 \quad (27)$$

有限要素解析を行うために Fig. 6 に示す有限要素分割図と Table 1 に示す計算条件を準備する。

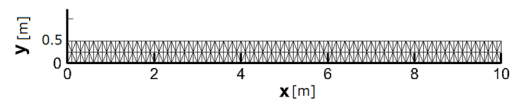


Figure 6: Finite element mesh.

Table 1: Computational Conditions

Time increment Δt [s]	0.001
Time steps	3000
Standard water depth h [m]	100
Gravitational acceleration g [m/s ²]	9.81
Number of mesh division for x direction	100
Number of mesh division for y direction	2

Figure 7 に示す水位分布を初期条件とし、解析を行うと $T=0.1s$ では Fig. 8 に示す水位分布が得られる。この解析はタンク内において行われた解析であり、時間進展とともに Fig. 9 に示す水面形分布を得ることができる。ここに示すように、解析が発散せず安定して行っていることを確認できる。近年では、本解析手法を用いたデータ同化シミュレーションにも着手している。詳細は文献[5]を参照して頂くことにする。

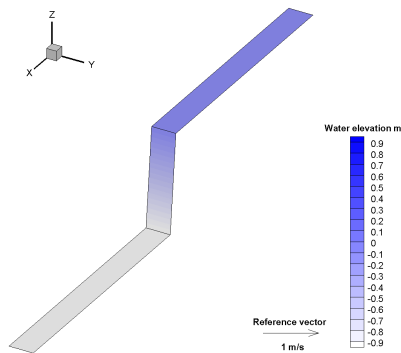


Figure 7: Distribution of water elevation at $t=0.0s$.

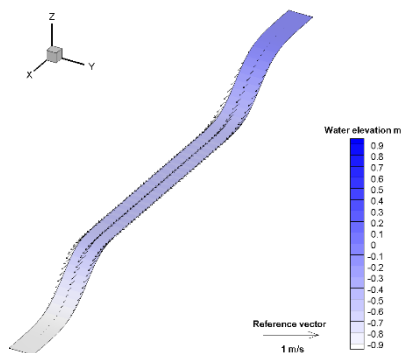


Figure 8: Distribution of water elevation at $t=0.1s$.

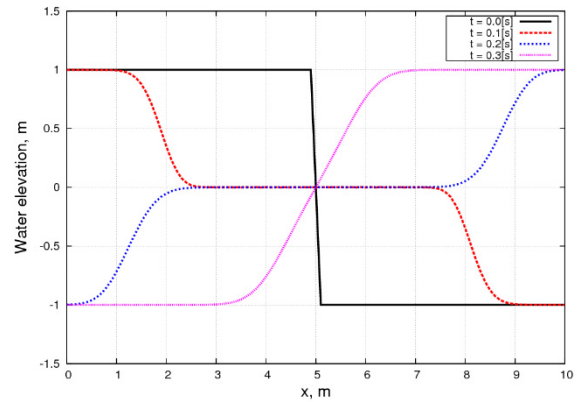


Figure 9: Comparison of water elevation at each time.

4. おわりに

本講演では、非定常の数値計算におけるフォン・ノイマンの安定性解析について紹介をし、有限差分法において発展してきた数値安定性の考え方を取り入れた有限要素法(安定化有限要素法)について説明を行った。安定化有限要素法による計算例としては、浅水長波方程式を用いたタンク内の流れ解析の一例を示した。ソフトウェアが頻繁に用いられる近年においては、入力した解析条件が適切か否かについてはユーザー皆様が適宜判断できることが重要である。本講演を通じて、構造解析、伝熱解析や流体解析等を行う際、ユーザー皆様が少しでも解析条件の設定に配慮してもらえることを願っている。

謝辞

本講演の機会を提供頂きました日本加速器学会の関係皆様に謝意を表します。また、本原稿の解析結果は、九州大学情報基盤研究開発センターの高性能アプリケーションサーバを使用し計算を行ったものであります。合わせてここに謝意を表します。

参考文献

- [1] M. Kawahara, “有限要素法流体解析”, JUSE Press. Ltd., 1985.
- [2] Research committee of finite element method for flow problems in Japan Society for Computational Engineering and Science, “有限要素法による流れのシミュレーション”, Maruzen Publishing, 1998.
- [3] T. Nakayama, “流れ解析のための有限要素法入門”, University of Tokyo Press, 2008.
- [4] T. Kurahashi, M. Nogami, S. Imai, T. Yoshiara and T. Eto, “波動水槽内の浅水流再現シミュレーションー SUPG 法による解析結果と水位計測値の比較ー”, Research Reports of National Institute of Technology, Nagaoka College, Vol.52, pp.21-27, 2016.
- [5] T.Kurahashi, K.Saito and M.Nogami, “Application of the ensemble Kalman filter FEM for estimation of flow field in shallow water regions”, JSIAM Letters, Vol.10, pp.4-8, 2018.