

Matrix-free defect correction を用いた陰的 FR 法の安定性解析

Stability analysis of matrix-free defect correction scheme for implicit high-order flux reconstruction solver

- 岡村 充透, 東北大院, 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-01, okamura@cfd.mech.tohoku.ac.jp
 芳賀 臣紀, 宇宙航空研究開発機構, 神奈川県相模原市由野台 3-3-1, haga.takanori@jaxa.jp
 嶋 英志, 宇宙航空研究開発機構, 神奈川県相模原市由野台 3-3-1, shima.eiji@jaxa.jp
 澤田 恵介, 東北大, 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-01, sawada@cfd.mech.tohoku.ac.jp
 Mitsuyuki Okamura, Tohoku University, 6-6-01, Aramaki-Aza-Aoba, Aoba-ku, Sendai, Japan
 Takanori Haga, JAXA, 3-3-1, Yoshinodai, Sagamihara, Kanagawa, Japan
 Eiji Shima, JAXA, 3-3-1, Yoshinodai, Sagamihara, Kanagawa, Japan
 Keisuke Sawada, Tohoku University, 6-6-01, Aramaki-Aza-Aoba, Aoba-ku, Sendai, Japan

Stability analysis of Defect correction on Sub-Cell(DECS) scheme has been carried out for one dimensional scalar advection equation. DECS introduces sub-cells which are represented by solution points in a grid cell. A diagonally dominant Jacobian matrices can be constructed by employing the first-order upwind discretization for the sub-cells. And thus, the convergence of the iterative scheme such as Jacobi, LU-SGS, MFGS for the linear system is ensured. The stability limit of DECS is investigated by the linear stability analysis. Effect of the choice of the correction functions on the stability property is also discussed.

1. 諸元

近年、複雑形状周りの実用 LES を実現する次世代の流体ソルバの研究が盛んに行われており、非構造格子を用いながら高い空間精度を達成することが出来る、高次精度非構造格子法が注目を集めている。代表的な手法は不連続ガレルキン(Discontinuous Galerkin, DG)法⁽¹⁾であるが、最近では構築がより容易な流束再構築(Flux Reconstruction, FR)法⁽²⁾が提案され、関連する研究が多数報告されている。これらの手法はセル内に高次精度化のための自由度を持ち、セル境界で近似リーマン解法を用い数値流束を評価することが特徴である。高次精度化のために必要な情報がセル内に集まっているため、領域分割計算のコア間の通信に必要なデータがセル界面のみのため、高い並列性を期待することが出来る。FR 法をベースとしたオープンソースコードである PyFR は 18,000 個の CPU を使用して、13.7PFLOP/s(Peak 比 58.0%)という非常に高い演算性能を達成している。⁽³⁾

しかし、これらの手法はいまだ実用的に利用されているとは言い難く、その最大の理由として低コスト(計算メモリ、演算量)な陰解法がないことが挙げられる。DG/FR 法の陰解法では、計算セル間のカップリングは、有限体積法と同様に隣接セルのみのため、左辺のヤコビ行列は対角ブロックと非対角ブロックの並んだ疎行列となる。しかし、高次精度化に必要な自由度をセル内に持つため、各ブロック(次元はセル内自由度数×成分数の正方行列)はセルタイプにもよるが通常密な行列となる。そのため、左辺の演算コストやメモリ要求が非常に大きいため、実用化への大きな障壁となっている。これらの問題を解決すべく、芳賀ら⁽⁴⁾は Defect Correction on Sub-cell (DECS)を提案した。DECS では FR 法のセル内の自由度に対応するサブセルを導入することで、有限体積法(FVM)で利用されている LU-SGS, MFGS, LU-ADI などの効率的な陰解法を使用できる。FR 法や DG 法の左辺を右辺よりも低い精度で近似すると、特に粘性計算で係数行列の優対角性が失われヤコビ法やガウス-ザイデル法などの反復法が使用できないことが知られている。⁽⁵⁾ DECS では左辺の計算にサブセルに対する 1 次精度風上の FVM を適用することで優対角性が満たされる。芳賀ら⁽⁴⁾は MFGS⁽⁶⁾と FR 法を組み合わせた方法でメモリコスト、演算量を大幅に削減することに成功し、NACA0012 翼の非粘性 Euler 計算で

は良好な結果を得ることに成功した。しかし、粘性計算については収束性の低下が指摘されており、適用例も 2 次元の簡単なケースに限られており、本手法が実用的な問題に適用できるかより詳細な検証が必要である。非粘性計算についても、FR 法を特徴づける修正関数としては g_Ga の結果しか報告例がなく、他の修正関数を用いた場合の安定性の議論は不十分といえる。そこで本研究では DECS を使用し、1 次元線形移流方程式と 1 次元拡散方程式に対する Von Neumann 安定性解析と確認のために数値実験を行う。修正関数の変更等で安定性が変化するか検証し、実用化への応用を考える。

2. 離散化

2.1 支配方程式

支配方程式は 1 次元線形移流方程式と 1 次元線形拡散方程式である。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} = 0 \quad (E = cu) \quad (1)$$

本研究では $c = 1$ とする。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2)$$

本研究では $\mu = 1$ とする。

2.2 Flux Reconstruction 法

デカルト座標系 x で表される物理空間の全てのセルを、それぞれ一般座標 ξ で表される計算空間の標準セル $E_s = [-1 \leq \xi \leq 1]$ に変換する。物理空間の各セルは N 個の定義点 $\vec{x}_j = (x_j)$ と、またそれらに対応する形状関数 M を用いて次のように表せる。

$$\vec{x}(\xi) = \sum_{j=1}^N M_j(\xi) \vec{x}_j \quad (3)$$

変換のヤコビアン $J := |\partial x / \partial \xi|$ はこれらの微分を基に計算する。計算空間では次のように書ける。

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{E}}{\partial \xi} = 0 \quad (4)$$

$$\hat{u} = J \cdot u, \quad \hat{E} = J \cdot \xi_x \cdot E \quad (5)$$

u は保存量のベクトル, E は物理空間での流束関数である。式(4)を解くために各セルにK+1個の内点(内部自由度)を導入し、解をK次のラグランジュ多項式で近似する。

$$\hat{u}_i(\xi) = \sum_{j=1}^{K+1} \phi_j(\xi) \cdot u_{i,j} \quad (6)$$

iはセルのインデックス,jはSPのインデックスであり、 $\phi_j(\xi)$ はK次のラグランジュ多項式である。SPの選び方には任意性があるが、本研究ではガウス点を用いる。

各SPでの時間発展を行うために、流束の微分を計算する必要がある。式(6)を流束についても適用し式(7)のように多項式近似する。

$$\hat{E}_i(\xi) = \sum_{j=1}^{K+1} \phi_j(\xi) \cdot E_{i,j} \quad (7)$$

流束の微分は次のように書ける。

$$\partial_\xi \hat{E}_i(\xi) = \sum_{j=1}^{K+1} \phi'_j(\xi) \cdot E_{i,j} \quad (8)$$

しかし、式(7)の流束は隣接セルの情報を反映しておらずセル境界で不連続な分布となる。そこで、左右のセル境界で共通な流束 $\hat{E}_{i\pm\frac{1}{2}}^c$ を計算し、この値をとるようなセル内の分布 \hat{E}_i^c を修正関数を用いて再構築する。本研究では数値流束評価に風上法を用いた。粘性流束についてはBR2⁽⁷⁾を用いる。また、修正関数は一階微分が解の多項式近似の次数Kと等しくなるよう、K+1次式でなければならない。Huynh⁽²⁾はこれを左右二つの境界からの寄与に分離した。

$$\begin{aligned} \hat{E}_i^c &= \hat{E}_i(\xi) + \left[\hat{E}_{i-\frac{1}{2}}^{com} - \hat{E}_i(-1) \right] g_L(\xi) \\ &\quad + \left[\hat{E}_{i+\frac{1}{2}}^{com} - \hat{E}_i(1) \right] g_R(\xi) \end{aligned} \quad (9)$$

ここで、 g_L, g_R はそれぞれ左右の修正関数で、 g_L は左端($\xi = -1$)で1、右端($\xi = 1$)で0となる。また g_L と g_R は原点対称の関係にある。 $(g_R(\xi) = -g_L(-\xi))$ 修正関数はこれまでに多数提案されてきたが、本研究では空間精度の高い g_{DG} と精度は劣るものCFLを大きくとることが出来る g_{Ga} を使用する。最終的な流束微分は式(10)のようになる。

$$\begin{aligned} \partial_\xi \hat{E}_i^c &= \partial_\xi \hat{E}_i(\xi) + \left[\hat{E}_{i-\frac{1}{2}}^{com} - \hat{E}_i(-1) \right] g'_L(\xi) \\ &\quad + \left[\hat{E}_{i+\frac{1}{2}}^{com} - \hat{E}_i(1) \right] g'_R(\xi) \end{aligned} \quad (10)$$

以上によりFR法の半離散化式が得られた。

2.3 FR法におけるサブセルの導入と離散的保存

DCSSを使用するためにはセル内にある自由度ごとにサブセルとサブセル境界のメトリック(物理空間では面積ベクトルに対応)を定義する必要がある。そこで、まずサブセルという概念を導入するためにFR法の離散的保存則について述べる。

基礎方程式のセル内での積分により、次の関係が得られる。
(\hat{E}_i^c 等はFR修正後の流束である。)

$$\int_{-1}^1 \partial_\xi \hat{E}_i^c d\xi = \hat{E}_{i+\frac{1}{2}}^c - \hat{E}_{i-\frac{1}{2}}^c \quad (11)$$

$\partial_\xi \hat{E}_{i,j}^c$ をSPでの $\partial_\xi \hat{E}_i^c$ とする。位置が重複しない任意のK+1点のSPが与えられた時、 $\partial_\xi \hat{E}_i^c$ がK次までの多項式であれば、次を満足する ω_j が存在する。(ただし任意のSP位置の場合 $\omega_j > 0$ は保証されない)

$$\int_{-1}^1 \partial_\xi \hat{E}_i^c d\xi = \Delta\xi \sum_{j=1}^{K+1} \omega_j \partial_\xi \hat{E}_{i,j}^c \quad (12)$$

$$\sum_{j=1}^{K+1} \omega_j = 1 \quad (13)$$

なお、SPがGauss点で定義されれば ω_j はGauss積分のものと一致し、2K+1次までの多項式で等号が成立する。ここで次の定義を導入する。

$$\Delta\xi_j \equiv \Delta\xi \omega_j \quad (14)$$

$$\check{E}_{\frac{1}{2}}^c \equiv \hat{E}_{i-\frac{1}{2}}^c \quad (15)$$

$$\check{E}_{j+\frac{1}{2}}^c \equiv \check{E}_{j-\frac{1}{2}}^c + \Delta\xi_j \partial_\xi \hat{E}_{i,j}^c \quad (16)$$

この表記を用いると式(12)は次のように小区間の流束収支の総和として表すことができる。

$$\int_{-1}^1 \partial_\xi \hat{E}_i^c d\xi = \sum_{j=1}^{K+1} (\check{E}_{j+\frac{1}{2}}^c - \check{E}_{j-\frac{1}{2}}^c) \quad (17)$$

また、式(16)より流束の微分は次のように書ける。

$$\partial_\xi \hat{E}_{i,j}^c = \frac{\check{E}_{j+\frac{1}{2}}^c - \check{E}_{j-\frac{1}{2}}^c}{\Delta\xi_j} \quad (18)$$

η, ζ 方向に関しても同様なので、基礎方程式の半離散化式は次のように表される。

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{Q}_{j,k,l} + \frac{\check{E}_{j+\frac{1}{2}}^c - \check{E}_{j-\frac{1}{2}}^c}{\Delta\xi_j} + \frac{\check{F}_{k+\frac{1}{2}}^c - \check{F}_{k-\frac{1}{2}}^c}{\Delta\eta_k} \\ + \frac{\check{G}_{l+\frac{1}{2}}^c - \check{G}_{l-\frac{1}{2}}^c}{\Delta\zeta_l} \end{aligned} \quad (19)$$

これにより離散的保存関係が示された。算出手順から $\check{E}_{j+\frac{1}{2}}^c$ 等はSP

およびFPでの \hat{E}_i^c の線形結合で表されることは明らかである。したがって式(19)を差分式の形に変形することができ、FR法はセル内での差分法の一種といえる。

ヤコビアンの定義 $J := |\partial(x, y, z)/\partial(\xi, \eta, \zeta)|$ から、サブセルの

検査体積および面積ベクトル(ξ 一定の面上)は

$$V_{j,k,l} \approx \Delta\xi_j \Delta\eta_k \Delta\zeta_l J_{j,k,l} \quad (20)$$

$$\vec{S}_{j+\frac{1}{2},k,l} \approx \Delta\eta_k \Delta\zeta_l (\nabla\xi)_{j+\frac{1}{2}} \quad (21)$$

と評価できる。等号ではないのは、FDS 的にもとめた値と FVM 的な検査体積が一致するわけではないためである。無限小では両者は一致する。これらの対応関係を用いて FVM と FDS の様々なコンパチビリティを重視した方法を用いる。サブセル境界の面積ベクトルは、通常の FR 法では使われないので新しく計算する。

2.4 Defect Correction on Sub-cell (DECS)

前節の議論から、セル内の $SP(j,k,l)$ について計算空間内で $\Delta\xi_j \Delta\eta_k \Delta\zeta_l$ の体積を有する検査体積と、サブセル境界でのメトリックを定義できる。これにより FVM に対し開発された MFGS 等を使用することができる。

1 次元で考える。各サブセルについて有限体積法で離散化すると次のように書ける。

$$\frac{\Delta u_{i,j}}{\Delta t} + \frac{1}{V_{i,j}} \sum_m^2 \tilde{F}_{i,j,m} S_{i,j,m} = 0 \quad (22)$$

添え字 m はサブセル j の m 番目の境界面もしくは隣接するサブセル、 V, S はサブセルの体積および境界の面積を表す。式(22)にオイラー陰解法を適用し、左辺に一次精度風上法を用い線形化を行うと式(23)が得られる。

$$\frac{\Delta u_{i,j}}{\Delta t} + \frac{1}{V_{i,j}} \left[(A\Delta u)_{i,j+\frac{1}{2}} - (A\Delta u)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] = RHS_{i,j} \quad (23)$$

A は $\frac{\partial F}{\partial u}$ である。DECS では RHS は高次精度 FR 法の離散化を用い SP での修正後の流束微分を使用する。本研究では式(23)を MFGS で計算を行う。

2.4 Matrix free Gauss-Seidel (MFGS)

FVS の考えを用いて $A = A^+ + A^-$ に分離する。ここで、 A^+ と A^- は、それぞれセル境界から流出する流束と流入する流束を表している。この A^\pm を Jameson & Yoon はスペクトル半径 $\rho(A)$ を用い以下のように近似した。⁽⁸⁾

$$A^\pm = \frac{1}{2}(A \pm \rho(A)I) \quad (24)$$

また MFGS では非対角項の $A^\pm \Delta u$ に次のような近似を施す。 E_c は非粘性流束である。

$$A^\pm \Delta u = \frac{1}{2}(\Delta E_c \pm \rho(A)I) \quad (25)$$

$$\Delta E_c = E_c(Q^n + \Delta Q) - E_c(Q^n) \quad (26)$$

最終的に式(27)を計算する。

$$\left(\frac{I}{\Delta t} + \frac{\rho(A)}{V_{i,j}} \right) \Delta u_{i,j} + \frac{1}{2V_{i,j}} [(\Delta E_c - \rho(A)\Delta u)_{i,or,i+1,j} - (\Delta E_c + \rho(A)\Delta u)_{i,or,i-1,j}] = RHS_{i,j} \quad (27)$$

3. 1 次元線形移流方程式

3.1 安定性解析 解析条件

1 次元線形移流方程式に対し安定性解析を行う。空間項のみの安定性解析は過去に Huynh⁽²⁾が行っている。それらを参考に Matrix 形式で安定性解析を行う。安定性解析に使用した Matrix の構築については Appendix を参照されたい。時間積分を含めた安定条件は複素平面上に固有値をプロットした際に単位円の中に収まることが条件である。今回は CFL の取り方をセルの大きさとし CFL=1, 10, 100, 1e4, 1e8 で行った。

3.2 安定性解析 結果

1 次元線形移流方程式安定性解析の結果を Fig.1 から Fig.6 に示す。Fig.1 から Fig.3 までは修正関数 g_Ga の各空間精度の結果であり、Fig.4 から Fig.6 までは修正関数 g_DG の各空間精度の結果である。修正関数 g_Ga を用いた場合、全ての空間精度と CFL で固有値プロットが単位円の中に収まり安定であることがわかった。一方、修正関数 g_DG を用いた場合、空間 4 次精度は CFL=10 の段階で固有値プロットが単位円の外に出て不安定になることがわかった。さらに全ての固有値が単位円内に収まる CFL を探したところ、約 CFL=1.2 以下になることが分かった。数値実験で 1 次元線形移流方程式安定性解析の結果を検証する。

3.3 数値実験 計算条件

1 次元の計算領域 [0:1] を 10000 セルに分割し、境界に周期境界を適用する。初期波にガウス分布を仮定し、1 周期移流させた。Table1 に各修正関数、空間精度で計算した CFL を示す。CFL を 100 以上にしても固有値の分布がほとんど変わらないため、計算に使用した CFL の最大は 100 にした。

Table 1 CFL numbers

	2nd order	3rd order	4th order
g_Ga	1, 10, 100	1, 10, 100	1, 10, 100
g_DG	1, 10, 100	1, 10, 100	1.2, 1.35

3.4 数値実験結果

空間 4 次精度の修正関数 g_Ga と g_DG の結果を Fig.7 と Fig.8 に示す。本稿には掲載しないものの空間 3 次精度以下の計算は全ての CFL で安定に計算を行えることを確認した。Fig.7 の結果から修正関数 g_Ga 、空間 4 次精度の計算は安定性解析の結果のとおり、全ての CFL で安定に計算を行えた。対して空間 4 次精度の修正関数 g_DG の結果は安定性限界である Fig.8(a) の CFL=1.2 の計算は安定に行えているが、限界を超えた Fig.8(b) の CFL=1.35 の計算は波が大きく振動しており、その後波発散した。これらの結果から安定性解析の結果を検証することに成功した。

4. 1 次元線形拡散方程式

4.1 安定性解析 解析条件

1 次元線形拡散方程式に対し安定性解析を行う。空間項のみの安定性解析は過去に Huynh⁽⁹⁾が行っている。安定性解析に使用した Matrix の構築については Appendix を参照されたい。時間積分を含めた安定条件は線形移流問題と同じく複素平面上に固有値をプロットした際に単位円の中に収まることが条件である。dt(時間刻み)の取り方を $dt = \tau dx^2 / \mu$ とした。dx はセルの大きさ。 τ は 0 より大きい任意の値である。 $\tau = 0.1, 1, 10, 100, 1e3$ で解析を行った。

4.2 安定性解析 解析結果

1 次元線形拡散方程式の安定性解析の結果を Fig.9 から Fig.14 に示す。Fig.9 から Fig.11 までは修正関数 g_{Ga} の各空間精度の結果であり、Fig.12 から Fig.14 までは修正関数 g_{DG} の各空間精度の結果である。空間 2 次精度の計算は修正関数 $g_{\text{DG}}, g_{\text{Ga}}$ ともに固有値プロットが単位円の中に収まり安定であることが分かった。しかし、移流問題と異なり空間 3 次精度の計算からどちらの修正関数も固有値プロットが単位円の外に出て不安定になることが分かった。そこで各修正関数で 3 次精度以上の計算を安定に行うことが出来る τ を探した。計算を安定に行える τ を Table 2 にまとめる。

Table 2 Maximum τ for obtaining stable solutions

	2nd order	3rd order	4th order
g_{Ga}	Infinity	117	0.255
g_{DG}	Infinity	0.145	0.026

本稿には掲載しないものの各修正関数、各空間精度の安定性限界を数値実験で確かめることに成功し、安定性解析の結果を検証することに成功した。

5. 結言

高次精度 FR 法に DECS 法を適用し時間積分法に MFGS を用いた際の安定性解析、数値解析を 1 次元線形移流方程式、1 次元線形拡散方程式で行った。1 次元線形移流問題では、修正関数 Ga では空間 4 次精度まで、修正関数 DG では空間 3 次精度まで安定に計算を行うことが出来た。しかし、1 次元線形拡散問題では、修正関数 Ga 、空間 3 次精度でも安定制限界があり dt に制約がかかってしまう。また、修正関数 DG に関しては空間 3 次精度でも時間刻みを決めるパラメーター τ を約 0.14 しか取れないため、本来の陰解法の役割を果たすことが出来ていない。そのため現状の方法では運用が難しいことが判明した。そこで、現在計算を安定化させるテクニックを研究中である。現状は対角・非対角の項に適当な係数を付加することで全ての修正関数、空間精度で計算が安定になることを確認している。今後はなぜ対角・非対角の項に係数を付加することで計算が安定化するのか調査し、実用計算に向けて手法の改良に取り組んでいく。

参考文献

- (1) B. Cockburn, C.-W. Shu, "The Runge-kutta Discontinuous Galerkin Method for Conservation Laws V: multidimensional systems," *J.Comput.Phys.*141 (1998),pp.199-224.
- (2) H.T. Huynh, "A Flux Reconstruction Approach to High-Order Schemes Including Discontinuous Galerkin Methods," AIAA Paper 2007-4079
- (3) P. Vincent, F. Witherden, B. Vermeire, J.S. Park, A. Iyer, "Towards green aviation with python at petascale," in Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC '16, IEEE Press, Piscataway, NJ, USA, 2016
- (4) 芳賀 臣紀、嶋 英志 "Matrix-free defect correction を用いた陰滲・高次精度 FR ソルバーの構築" 第 29 回数値流体力学シンポジウム講演集 2015, B05-3, 2015
- (5) H. Asada, Y Ogino, K. Yasue, K. Sawada, "A Third Order Accurate Cellwise Relaxation Implicit Discontinuous Galerkin scheme for Unstructured hybrid meshes," *Mathematical Problems in Engineering*, 2014, 176752.
- (6) 嶋 英志 "構造/非構造格子 CFD のための簡単な陰解法," 第 29 回流体力学講演会,(1997) 2C9.
- (7) F. Bassi, S. Rebay, "Numerical evaluation of two discontinuous

Galerkin methods for the compressible Navier-Stokes equations," *Int.J.Numer.Meth.Fluids*, pp.198-207, 2002.

- (8) S. Yoon, and A. Jameson, "Lower-upper symmetric-Gauss-Seidel method for the Euler and Navier-Stokes equations," *AIAA Journal*, Vol.26, NO.9, pp.1025-1026, 1988
- (9) H.T. Huynh, "A Reconstruction Approach to High-Order Schemes Including Discontinuous Galerkin for Diffusion," AIAA Paper 2009-403

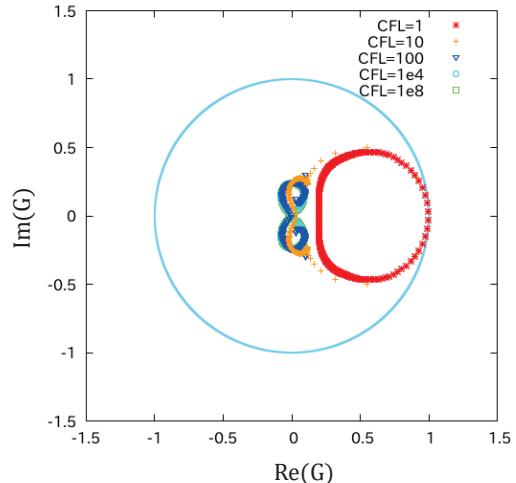


Fig.1: Stability analysis for correction function Ga, 2nd order

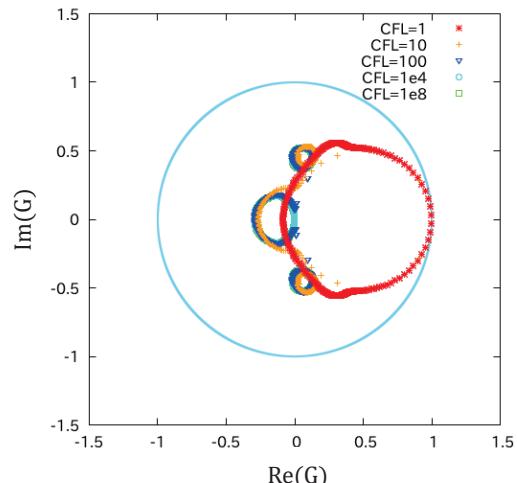


Fig.2: Stability analysis for correction function Ga, 3rd order

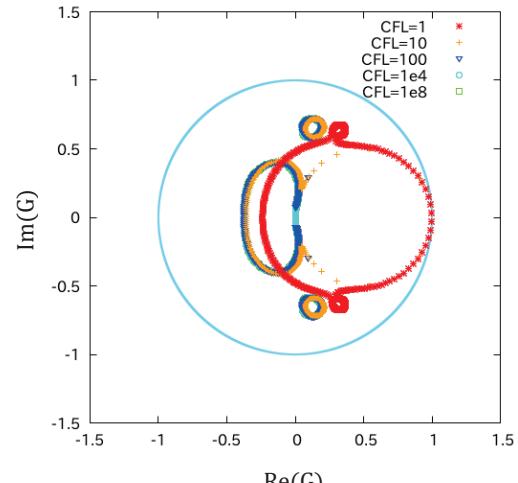


Fig.3: Stability analysis for correction function Ga, 4th order

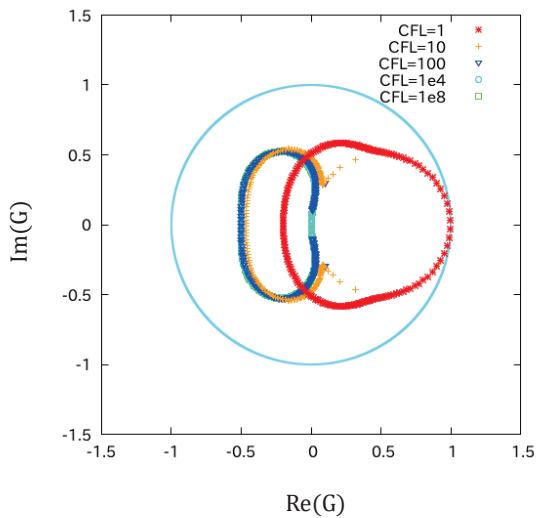


Fig.4: Stability analysis for correction function DG, 2nd order

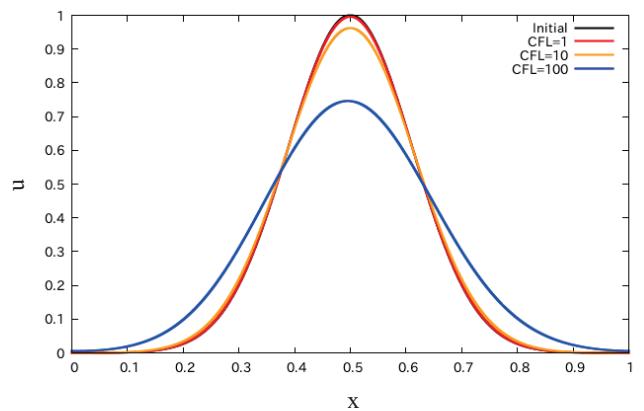


Fig.7: Numerical analysis for correction function Ga, 4th order $t=1.0$

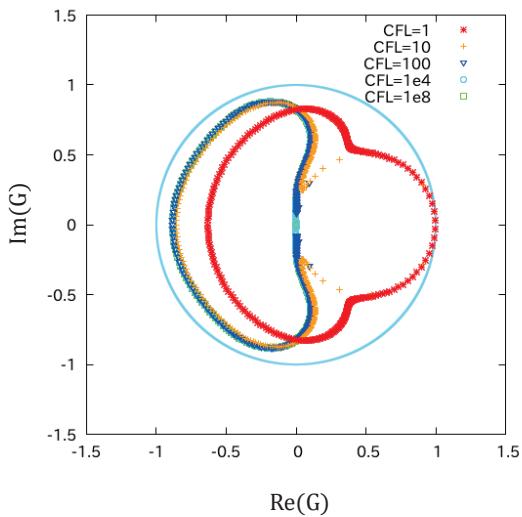
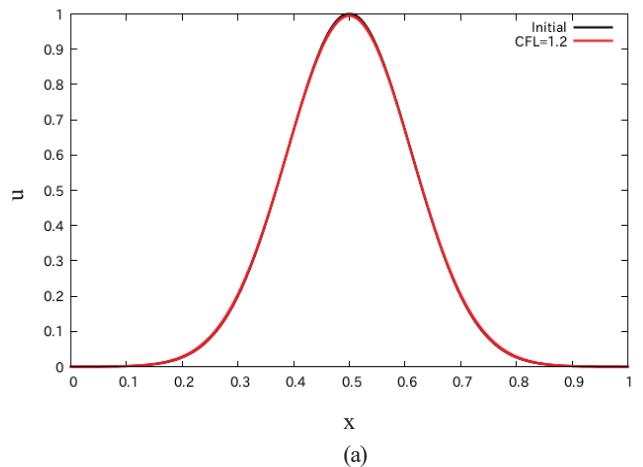


Fig.5: Stability analysis for correction function DG, 3rd order



(a)

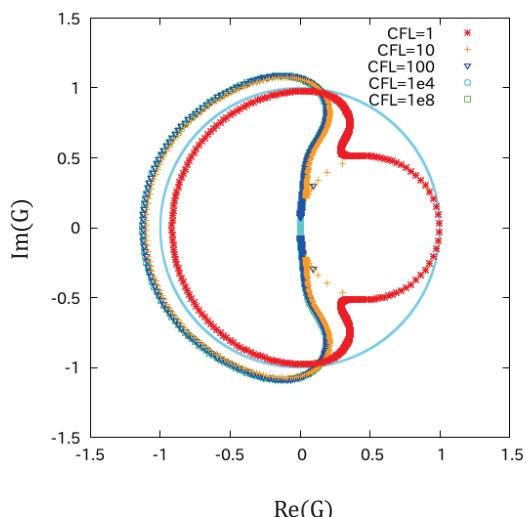
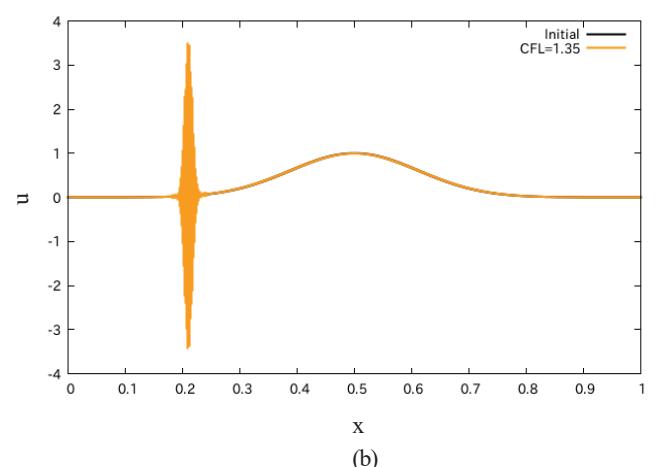


Fig.6: Stability analysis for correction function DG, 4th order



(b)

Fig.8: Numerical analysis for correction function DG, 4th order $t=1.0$
(a)CFL=1.2, (b)CFL=1.35

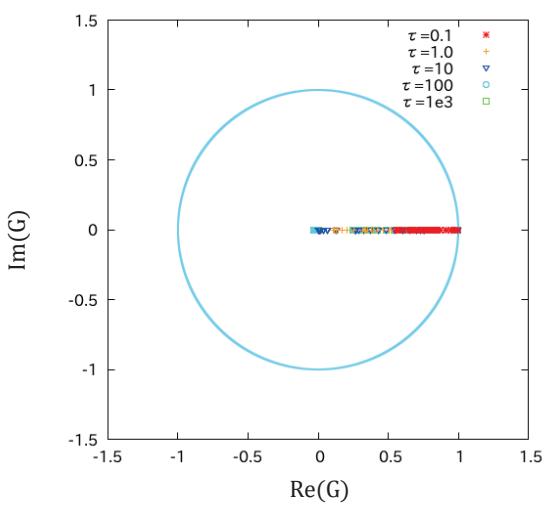


Fig.9: Stability analysis for correction function Ga, 2nd order

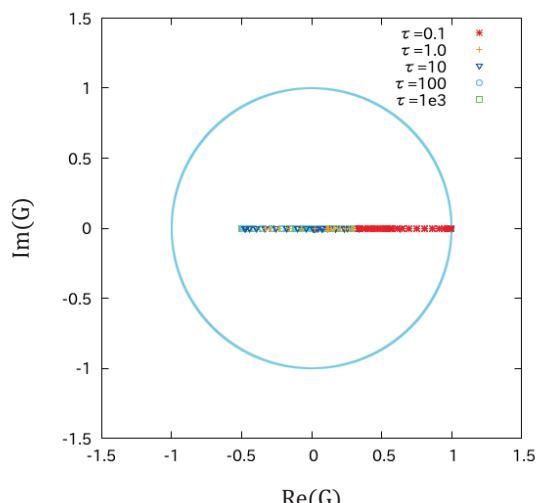


Fig.12: Stability analysis for correction function DG, 2nd order

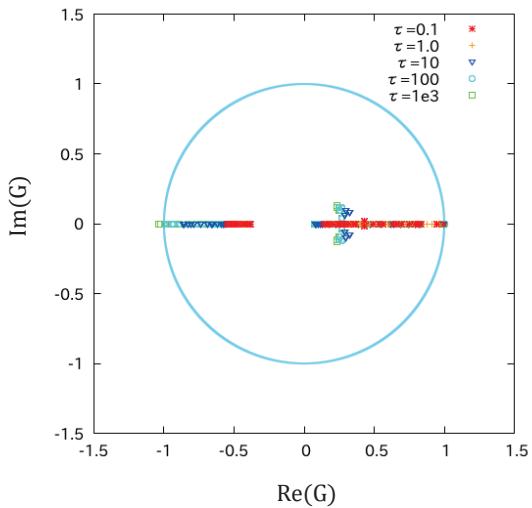


Fig.10: Stability analysis for correction function Ga, 3rd order

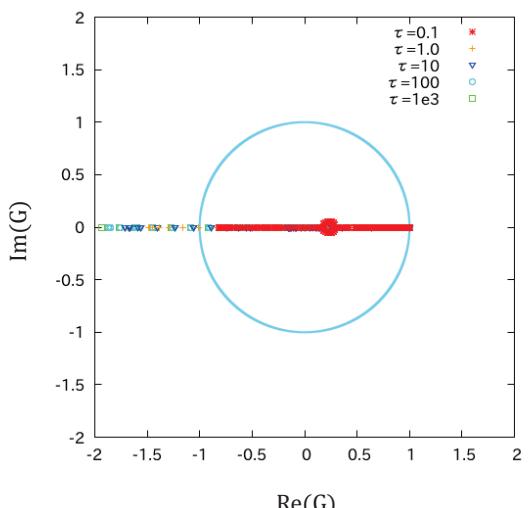


Fig.13: Stability analysis for correction function DG, 3rd order

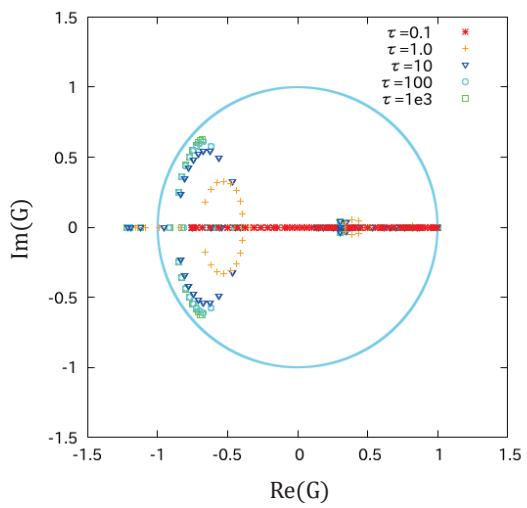


Fig.11: Stability analysis for correction function Ga, 4th order

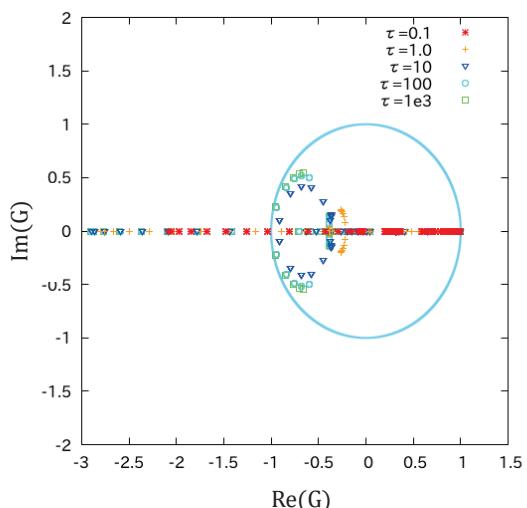


Fig.14: Stability analysis for correction function DG, 4th order

Appendix A

1 次元線形移流方程式に対し FR 法の安定性解析を行う。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (c = 1) \quad (1)$$

周期的な初期条件を考える。また、厳密解は次のように与えられる。

$$u_{init}(x) = e^{I\omega x} \quad (2)$$

$$u_{exact}(x, t) = e^{I\omega(x-ct)} \quad (3)$$

ω は $-\pi \leq \omega \leq \pi$ の間にある波数であり、 I は $I = \sqrt{-1}$ の虚数単位

である。各セルの範囲を $E_i = [i - \frac{1}{2}, i + \frac{1}{2}]$ としセルの大きさを

$\Delta x=1$ とする 各セルの SP における u は $u_{i,j} = \exp^{I\omega(i+\frac{\xi_j}{2})}$ で表せ、隣接セルにおいては次のように表すことが出来る。

$$u_{i-1,j} = \exp^{-I\omega} u_{i,j} \quad (4)$$

セル i の解ベクトルを $u_i = \{u_{i,j}, j = 1, \dots, K+1\}$ と表す。 j は SP のインデックス) u のセル内補間はラグランジュ多項式を用いて次式で表される。

$$u_i \equiv I[u_i](\xi) = \sum_{j=1}^K u_{i,j} \quad (5)$$

以下より FR 法の定式化に用いるオペレーターを定義し安定性解析に使用する Matrix を構築する。セル境界における外挿補間は次のように表せる。

$$u_i(-1) = \sum_{j=1}^{K+1} u_{i,j} \phi_j(-1) = l^T u_i \quad (6a)$$

$$u_i(1) = \sum_{j=1}^{K+1} u_{i,j} \phi_j(1) = r^T u_i \quad (6b)$$

l^T と r^T は列ベクトルである。

$$l^T = [\phi_j(-1), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (7a)$$

$$r^T = [\phi_j(1), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (7b)$$

セル内の各 SP における微分係数行列を $D((K+1)*(K+1))$ とする。

$$D_{j,l} = \partial_\xi \phi_l(\xi_j) \quad (8)$$

∂_ξ は ξ 方向の微分を表す。

各 SP における修正関数 g の微分係数(列ベクトル)は以下である。

$$g'_L = [\partial_\xi g_L(\xi_j), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (9a)$$

$$g'_R = [\partial_\xi g_R(\xi_j), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (9b)$$

線形移流問題では数値流束評価を風上にとる。空間項の 1 階微分は式(10)のように表される。 $\partial_\xi / \partial x = 2$ は座標変換のヤコビアンである。式(1)の時間微分項も含んだ式に代入する。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial u_i}{\partial \xi} = 2[D u_i + (r^T u_{i-1} - l^T u_i) g'_L] \quad (10)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + 2[D u_i + (r^T u_{i-1} - l^T u_i) g'_L] = 0 \quad (11)$$

ここで C_{-1}, C_0 を次のように表し式(11)に戻す。空間項の定式化は以上である。

$$C_{-1} = 2g'_L r^T, \quad C_0 = 2[D - (g'_L l^T)] \quad (12)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + C_{-1} u_{i-1} + C_0 u_i = 0 \quad (13)$$

続いて MFGS の離散化に移る。式(13)に Backward Euler を使用し右辺残差項を $R(u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1})$ とおく。線形移流方程式の場合、次のようになる。

$$R(u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1}) = C_{-1} u_{i-1}^{n+1} + C_0 u_i^n \quad (14)$$

残差項 R を線形近似する。

$$R^{n+1} = R^n + \frac{\partial R^n}{\partial u^n} \Delta u \quad (\Delta u = u^{n+1} - u^n) \quad (15)$$

$$\frac{\Delta u_i}{\Delta t} + R^n + \frac{\partial R^n}{\partial u_i^n} \Delta u_i = 0 \quad (16)$$

MFGS の場合流束ヤコビアンは対角とその隣の非対角成分のみの疎行列となる。また FR 法で MFGS を使用するためには DECS 法を用い、サブセルごとに体積 V 、面積 S を定義する。今回は一次元なので物理空間では以下のようになる。

$$\frac{\partial R^n}{\partial u^n} \approx A, V_j = \omega_j, S = 1 \quad (17)$$

$$A_{j,j} = \frac{1}{V_j} \sum_{m=1}^2 \frac{\sigma_{j,m}}{2} S_m, \quad A_{j,j-1 \text{ or } K+1} = \frac{-1}{2V_j} (c + \sigma_{j,1}) \quad (18)$$

m はサブセルごとの境界番号のインデックスであり、 $m=1$ の時は左の境界、 $m=2$ の時は右の境界を表す。線形移流の場合、非対角の項は風上ののみとなるため式(18)では風下の項は定式化していない。また式(18)の σ はスペクトル半径を表しており、 $\sigma = |c|$ となる。

時間積分も含めた定式化は以上である。今迄の離散化をまとめた。式(16)の R^n を空間離散化の Matrix に置き換え、時間積分の Matrix を加えると次のようになる。また隣接セルの情報は式(4)を使用し置き換えた。

$$\left(\frac{I_0}{\Delta t} + A \right) \Delta u_i = -(C_{-1} e^{-I\omega} + C_0) u_i^n \quad (19)$$

I_0 は単位行列である。 $\Delta u = u^{n+1} - u^n$ なので最終的に式(20)に変形できる。

$$u_i^{n+1} = \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A \right)^{-1} \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A - (C_{-1} e^{-I\omega} + C_0) \right) u_i^n \quad (20)$$

$$G = \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A \right)^{-1} \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A - (C_{-1} e^{-I\omega} + C_0) \right) \quad (21)$$

G が Amplification Matrix となり次ステップの波の拡大率となる。この Amplification Matrix の固有値を複素平面上にプロットした際に単位円の中に収まることが計算を安定に行うための条件である。

以上で 1 次元線形移流方程式での安定性解析の定式化を終える。

Appendix B

1 次元線形拡散方程式に対し FR 法の安定性解析を行う。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\mu = 1) \quad (1)$$

周期的な初期条件を考える。また、厳密解は次のように与えられる。

$$u_{init}(x) = e^{i\omega x} \quad (2)$$

$$u_{exact}(x, t) = e^{-\omega^2 t} e^{i\omega x} \quad (3)$$

ω は $-\pi \leq \omega \leq \pi$ の間にある波数であり、 I は $I = \sqrt{-1}$ の虚数単位である。各セルの範囲を $E_i = [i - \frac{1}{2}, i + \frac{1}{2}]$ としセルの大きさを

$\Delta x=1$ とする 各セルの SP における u は $u_{i,j} = \exp^{I\omega(i+\frac{j}{2})}$ で表せ、隣接セルにおいては次のように表すことが出来る。

$$u_{i-1,j} = \exp^{-I\omega} u_{i,j}, \quad u_{i+1,j} = \exp^{I\omega} u_{i,j} \quad (4)$$

セル i の解ベクトルを $u_i = \{u_{i,j}, j = 1, \dots, K+1\}$ と表す。 j は SP のインデックス u のセル内補間はラグランジュ多項式を用いて次式で表される。

$$u_i \equiv I[u_i](\xi) = \sum_{j=1}^K u_{i,j} \quad (5)$$

以下より FR 法の定式化に用いるオペレーターを定義し安定性解析に使用する Matrix を構築する。セル境界における外挿補間は次のように表せる。

$$u_i(-1) = \sum_{j=1}^{K+1} u_{i,j} \phi_j(-1) = l^T u_i \quad (6a)$$

$$u_i(1) = \sum_{j=1}^{K+1} u_{i,j} \phi_j(1) = r^T u_i \quad (6b)$$

l^T と r^T は列ベクトルである。

$$l^T = [\phi_j(-1), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (7a)$$

$$r^T = [\phi_j(1), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (7b)$$

セル内の各 SP における微分係数行列を $D((K+1)*(K+1))$ とする。

$$D_{j,l} = \partial_\xi \phi_l(\xi_j) \quad (8)$$

∂_ξ は ξ 方向の微分を表す。

各 SP における修正関数 g の微分係数(列ベクトル)は以下である。

$$g'_L = [\partial_\xi g_L(\xi_j), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (9a)$$

$$g'_R = [\partial_\xi g_R(\xi_j), \quad j = 1, \dots, K+1] \quad (9b)$$

まず一階微分を計算する。一階微分を $v = u_x$ とおくと $v_i = \{v_{i,j}, j = 1, \dots, K+1\}$ と表せる。空間項の 1 階微分は式(10)のように表される。 $\partial_\xi / \partial x = 2$ は座標変換のヤコビアンである。

$$v_i = \frac{\partial u_i}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial u_i}{\partial \xi} = 2[D u_i + \frac{1}{2} \{(r^T u_{i-1} + l^T u_i) - (r^T u_i + l^T u_{i+1})\} g'_L \\ + \frac{1}{2} \{(r^T u_i + l^T u_{i+1}) - (r^T u_{i-1} + l^T u_i)\} g'_R] \quad (10)$$

ここで C_{-1}, C_0, C_{+1} を次のように表し式(10)に戻す。

$$C_{-1} = g'_L r^T, \quad C_0 = 2D - g'_L l^T - g'_R r^T, \quad C_{+1} = g'_R l^T \quad (11)$$

$$v_i = C_{-1} u_{i-1} + C_0 u_i + C_{+1} u_{i+1} \quad (12)$$

次に二階微分を計算する。二階微分を $w = v_x = u_{xx}$ とおくと、 $w_i = \{w_{i,j}, j = 1, \dots, K+1\}$ と表せる。空間項の二階微分は式(13)のように表せる。

$$w_i = 2[D v_i + \left(v_{i-\frac{1}{2}}^{com} - l^T v_i\right) g'_L + \left(v_{i+\frac{1}{2}}^{com} - r^T v_i\right) g'_R] \quad (13)$$

v^{com} はセル境界での共通の一階微分である。本研究では v^{com} を BR2 で計算する。

$$v_{i-\frac{1}{2}}^{com} = [r^T D + g'_L(-1)r^T] u_{i-1} + [l^T D + g'_R(1)r^T] u_i \quad (14a)$$

$$v_{i+\frac{1}{2}}^{com} = [r^T D + g'_L(-1)r^T] u_i + [l^T D + g'_R(1)r^T] u_{i+1} \quad (14b)$$

解ベクトルに作用する列ベクトルを $B_{L,R}$ で書くと次式を得る。

$$v_{i-\frac{1}{2}}^{com} = B_L u_{i-1} + B_R u_i, \quad v_{i+\frac{1}{2}}^{com} = B_L u_i + B_R u_{i+1} \quad (15)$$

$$B_L = r^T D + g'_L(-1)r^T, \quad B_R = l^T D + g'_R(1)r^T \quad (16)$$

二階微分の計算式(式(13))に代入し、整理をすると式(17)となる。

$$w_i = 2[DC_{-1} + g'_L(-1)(B_L - l^T C_{-1}) - g'_R(1)r^T C_{-1}] u_{i-1} \\ + \{DC_0 + g'_L(-1)(B_R - l^T C_0) + g'_R(1)(B_L - r^T C_0)\} u_i \\ + \{DC_1 + g'_R(1)(B_R - r^T C_1) - g'_L(-1)l^T C_1\} u_{i+1} \quad (17)$$

解ベクトルに作用する行列を A_{-1}, A_0, A_{+1} で書くと式(18)を得る。

$$A_{-1} = 2[DC_{-1} + g'_L(-1)(B_L - l^T C_{-1}) - g'_R(1)r^T C_{-1}]$$

$$A_0 = 2[DC_0 + g'_L(-1)(B_R - l^T C_0) + g'_R(1)(B_L - r^T C_0)]$$

$$A_{+1} = 2[DC_1 + g'_R(1)(B_R - r^T C_1) - g'_L(-1)l^T C_1] \quad (18)$$

式(1)に代入すると半離散化式が得られる。

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = A_{-1} u_{i-1} + A_0 u_i + A_{+1} u_{i+1} \quad (19)$$

空間項の定式化は以上である。

統いて MFGS の離散化に移る。式(19)に Backward Euler を使用し右辺残差項を $R(u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1}, u_{i+1}^{n+1})$ とおく。線形拡散方程式の場合、次のようになる。

$$R(u_{i-1}^{n+1}, u_i^{n+1}, u_{i+1}^{n+1}) = A_{-1} u_{i-1}^{n+1} + A_0 u_i^{n+1} + A_{+1} u_{i+1}^{n+1} \quad (20)$$

残差項 R を線形近似する。

$$R^{n+1} = R^n + \frac{\partial R^n}{\partial u^n} \Delta u \quad (\Delta u = u^{n+1} - u^n) \quad (21)$$

$$\frac{\Delta u_i}{\Delta t} = R^n + \frac{\partial R^n}{\partial u_i^n} \Delta u_i \quad (22)$$

MFGS の場合流束ヤコビアンは対角とその隣の非対角成分のみの疎行列となる。また FR 法で MFGS を使用するためには DECS 法を用い、サブセルごとに体積 V 、面積 S を定義する。今回は一次元なので物理空間では以下のようになる。

$$\frac{\partial R^n}{\partial u^n} \approx A, V_j = \omega_j, S = 1 \quad (23)$$

$$A_{j,j} = \frac{1}{V_j} \sum_{m=1}^2 \frac{\sigma_{j,m}}{2} S_m \quad (24)$$

$$A_{j,j-1.or.K+1} = \frac{-\sigma_{j,1}}{2V_j}, \quad A_{j,j+1.or.1} = \frac{-\sigma_{j,2}}{2V_j} \quad (25)$$

m はサブセルごとの境界番号のインデクスであり、 $m=1$ の時は左の境界、 $m=2$ の時は右の境界を表す。また σ はスペクトル半径を表しており、 $\sigma = \frac{2s}{V}$ となる。

時間積分も含めた定式化は以上である。今迄の離散化をまとめ、式(22)の R^n を空間離散化の Matrix に置き換え、時間積分の Matrix を加えると次のようになる。また隣接セルの情報は式(4)を使用し置き換えた。

$$\left(\frac{I_0}{\Delta t} + A \right) \Delta u_i = (A_{-1} e^{-I\omega} + A_0 + A_{+1} e^{I\omega}) u_i^n \quad (26)$$

I_0 は単位行列である。 $\Delta u = u^{n+1} - u^n$ なので最終的に式(27)に変形できる。

$$u_i^{n+1} = \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A \right)^{-1} \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A + A_{-1} e^{-I\omega} + A_0 + A_{+1} e^{I\omega} \right) u_i^n \quad (27)$$

$$G = \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A \right)^{-1} \left(\frac{I_0}{\Delta t} + A + A_{-1} e^{-I\omega} + A_0 + A_{+1} e^{I\omega} \right) \quad (28)$$

G が Amplification Matrix となり次ステップの波の拡大率となる。この Amplification Matrix の固有値を複素平面上にプロットした際に単位円の中に収まることが計算を安定に行うための条件である。

以上で 1 次元線形拡散方程式での安定性解析の定式化を終える。