

修士論文

天体物理学のための
数値流体計算アルゴリズム

Numerical Algorithms for
Astrophysical Fluid Dynamics

Tomohisa Ueno

A thesis submitted to
the graduate school of science,
the University of Tokyo
in partial fulfillment of
the requirements for the degree of
Master of Science in Physics

January, 2019

Abstract

降着円盤の磁気流体力学や銀河形成の力学など、多くの天体物理現象は偏微分方程式で扱うことができるが、それらは高度に非線形なために数学的な解析解が知られておらず、数値計算に頼らざるを得ない。数値的なアプローチとして、有限差分法、有限体積法、粒子法などさまざまな方法が考案され続けてきた。しかし、どの方法にも一長一短があるため、より精密なシミュレーションを行うためには各々の問題に合わせたより洗練された手法が必要である。

正確なシミュレーションには、メッシュの大きさについて誤差が二次以上の精度で収束する方法(高次精度数値計算スキーム)が重要である。流体方程式には衝撃波を生むもの問題があるが、そのような最終的に空間一次精度になる問題に対しても高次精度スキームの誤差の絶対値の優位性は変わらない。本研究では、高次精度の方法である不連続ガラキン(Discontinuous Galerkin, DG)法について、その動作原理、理論的な誤差収束と計算量、数値振動抑制の方法(limiter)などについて調査を行った。特に、移流型の方程式において使われるMPP(Maximum Principle Positivity) limiterを局所的に適用できるように改良したLMPPB(Local MPP-TVB) limiterを開発した。そのうえで、実際にDG法の実装を行い、移流方程式を用いてlimiterの調査を行ったうえで、物理シミュレーションにおける典型的な流体問題の例として非粘性バーガーズ方程式やオイラー方程式、位相空間上でのボルツマン方程式の例としてブラゾフ方程式について計算を行い、各々の問題についてのDG法の最適なパラメータとlimiterを探索した。

その結果、高次精度の方法であるDG法は結果が一次に落ちるような衝撃波問題についても良いパフォーマンスを出すことが分かり、ブラゾフ方程式については別の方法であるMP(Monotonicity Preserving)法と同等以上の性能を出すことが分かった。

Contents

1	Introduction	3
2	Equations for Physics	5
2.1	スカラー偏微分方程式	5
2.1.1	移流方程式	5
2.1.2	非粘性バーガーズ方程式	6
2.1.3	保存則	6
2.2	ベクトル偏微分方程式	6
2.2.1	オイラー方程式	7
2.3	空間多次元の場合	8
2.3.1	記法	8
2.3.2	ベクトル偏微分方程式の場合の一般形	8
2.3.3	移流方程式	8
2.3.4	ブラゾフ方程式	8
3	Numerical method	10
3.1	有限差分法	10
3.1.1	定式化	10
3.2	不連続ガラキン (DG) 法	14
3.2.1	定式化	14
3.2.2	数値流束	18
3.2.3	limiter	19
3.2.4	ベクトル方程式かつ空間多次元の場合	25
3.2.5	実装	29
3.2.6	計算量オーダー	30
3.2.7	メモリ使用量	32
4	Result	33
4.1	共通設定	33
4.2	移流方程式 (1D)	33
4.2.1	ガウス積分次数の検討	33
4.2.2	矩形波	33
4.2.3	sin 波	36
4.2.4	階段波	37

4.3	移流方程式 (2D)	39
4.4	非粘性バーガーズ方程式 (1D)	39
4.5	オイラー方程式 (1D)	41
4.5.1	sod's problem(1D)	41
4.6	ブラゾフ方程式 (2D phase space)	41
4.6.1	重力不安定性	41
5	Discussion and Conclusion	48
5.1	ガウス積分次数	48
5.2	limiter の特性	48
5.2.1	MP 系列の limiter の適用範囲	48
5.2.2	LMPP limiter の滑らかな解に対しての精度低下	48
5.2.3	LMPP limiter と GMPP limiter の比較	49
5.2.4	positivity limiter	49
5.2.5	TVD/TVB limiter	49
5.2.6	filter	50
5.3	DG 法の最適な次数	50
5.4	高次精度の必要性	51
5.5	ブラゾフ方程式について MP 法との比較	51
6	Summary And Future Work	52
	Acknowledgments	54
	Appendix	54
A	誤差評価	55
A.1	L^p -ノルム	55
A.2	相対誤差	55
B	ルジャンドル多項式	56
C	ガウスルジャンドル積分	58
D	一次元オイラー方程式のリーマン問題の解析解	60
D.1	リーマン問題	60
D.2	sod's problem の場合	61
E	三分探索	64
F	ポアソンソルバー	66

Chapter 1

Introduction

天体物理現象の中には、時間的、空間的な制約によって現象の過程を観測することが困難なものが数多く存在する。例えば、ブラックホールによる星の潮汐破壊現象の全体像を直接観測することは困難であるが、観測によって光度曲線という形で一定の情報を得ることができる。このような問題においては、系を記述する適切な数値モデルを与えて数値シミュレーションを行い、それによって求まる観測可能な量を実際の観測と比較することで、観測不能な部分に対する相当の示唆を得ることができる。

多くの天体物理現象は、偏微分方程式、その中でも流体方程式として扱うことができる。しかしながら、これらの方程式は、高度に非線形なために数学的な解析解が知られておらず、数値計算に頼らざるを得ない。そのうえ、数値計算においても、例えば流体方程式の非粘性近似である非粘性バーガーズ方程式などは、衝撃波を生じる性質があり、精度の良い計算を行うためにはメッシュの解像度を上げなければならず、コストが高くなるという問題がある。

これらの偏微分方程式に対する数値的なアプローチとして、さまざまな方法が考案され続けてきた。数値アプローチは大きくオイラー法とラグランジュ法に大別される。オイラー法は、メッシュ等の数値サンプリング点を空間上に固定し、その中で物理現象を追う方法であり、最も単純な方法として、有限差分法がある。これは、関数を有限の数の等間隔メッシュでの値に落とし込み、微分を差分に置き換えて方程式の挙動を近似的に再現する空間一次精度の方法である (Joel H. Ferziger 2003)。その改良として、微分を計算する際に周囲の5点や7点の含まれる領域 (ステンシルと呼ぶ) を使い、空間5次や7次の高次精度を達成する MP (Monotonicity Preserving) 法 (Suresh & Huynh 1997) や、ステンシルを複数のサブステンシルに分割し、微分を各サブステンシルでの物理量の非線形補間で近似して5次などの高次精度を達成する WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) 法 (Liu et al. 1994) (Jiang & Shu 1996) が挙げられる。また、オイラー法には、有限差分法以外にも、方程式を積分系で取り扱うことで任意のメッシュ形状を扱える有限体積法などが存在する。

ラグランジュ法は、数値サンプリング点を物理量の伝播に対して動かす方法である。このカテゴリには計算対象を動くことのできる粒子の集まりとして定式化する粒子法が属する。粒子法の中でも、微分を近傍粒子の物理量の重みつき平均で取り扱う SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法 (Lucy 1977) は天体物理学においてよく利用される。

これらの手法には一長一短があり、例えばナイーブな有限差分法や有限体積法では

高次の誤差収束を達成できない、MP 法や WENO 法では等間隔正方格子以外の計算領域に対し定式化ができない等といった問題点がある。一般的な形状のメッシュにおいて定式化できることは重要で、例えば高精度の計算が必要になる場所のみを再帰的に分割する AMR(Adaptive Mesh Refinement) 法 (Berger & Colella 1989) や、情報の伝播に合わせてメッシュを動かすことでメッシュ導入時の誤差を防ぐ moving mesh 法などが利用可能になる。

これらの手法に対し、不連続ガラーキン (Discontinuous Galerkin ,DG) 法は、有限差分法と有限体積法の自然な拡張となっており、これらの手法の良い部分をいいとこどりしており、任意形状メッシュについても定式化が可能な反面、実装が複雑なうえに資料も非常に少ないため、天体物理シミュレーションの分野において今までは広くは使われてこなかった。本研究では、DG 法を一から実装し、それによって様々な偏微分方程式を解いて DG 法の性能評価を行うことを目標とした。

Chapter 2

Equations for Physics

2.1 スカラー偏微分方程式

スカラー偏微分方程式とは、

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

の形をした偏微分方程式である。但し $u(x, t)$ は各時刻 t において空間 x の関数として定義される物理量、 $f(u)$ は流束を表す。式 2.1 は保存則 (2.1.3 節で述べる) を満たすことが知られており、これを保存形という。これは

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + h(u) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (2.2)$$

と書き直すことができ、これを非保存形の偏微分方程式という。但し、

$$h(u) = \frac{\partial f(u)}{\partial u} \quad (2.3)$$

である。

2.1.1 移流方程式

a を定数として $f(u) = au$ のとき

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (2.4)$$

を移流方程式という。初期条件を $u(x, 0)$ とすると

$$u(x, t) = u(x - at, 0) \quad (2.5)$$

と解くことができる。

2.1.2 非粘性バーガーズ方程式

$f(u) = \frac{u^2}{2}$ のとき

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (2.6)$$

を非粘性バーガーズ方程式という。この方程式は衝撃波とよばれる物理量の不連続性を生じることが知られている。

2.1.3 保存則

保存形の方程式 (2.1) の両辺を $x = -\infty$ から $x = \infty$ まで積分すると

$$\frac{\partial}{\partial t} \int u(x, t) dx + \int \frac{\partial f(u)}{\partial x} dx = 0 \quad (2.7)$$

であり、第二項を部分積分して第一項を

$$M(t) := \int u(x, t) dx \quad (2.8)$$

で書き換えると、

$$\frac{\partial M}{\partial t} = f(u(-\infty, t)) - f(u(\infty, t)) \quad (2.9)$$

を得る。もし無限遠点での $f(u)$ が 0 であれば

$$M(t) = \text{const} \quad (2.10)$$

でありこれを保存則とよぶ。

2.2 ベクトル偏微分方程式

ベクトル偏微分方程式の保存形は \mathbf{u} を J 次元のベクトル

$$\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_J) \quad (2.11)$$

とすると

$$\frac{\partial \mathbf{u}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.12)$$

で与えられる。但し $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ はベクトル値を引数にとってベクトル値を返す関数である。この形の方程式に対しては、スカラーの場合と同様に保存則が成立する。非保存形は

$$\frac{\partial \mathbf{u}(x, t)}{\partial t} + \mathcal{A}(\mathbf{u}) \frac{\partial \mathbf{u}(x, t)}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.13)$$

で \mathcal{A} は行列

$$\mathcal{A}_{ij} = \frac{\partial f_j}{\partial u_i} \quad (2.14)$$

で与えられる。

2.2.1 オイラー方程式

オイラー方程式は粘性を持たない圧縮性流体¹の時間進化を表す方程式であり、宇宙の大規模構造形成や銀河形成など幅広い適用例がある。保存形は

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ m \\ e \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} m \\ \frac{m^2}{\rho} + p \\ (e+p)\frac{m}{\rho} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.15)$$

$$p = (\gamma - 1) \left(e - \frac{m^2}{2\rho} \right), \quad (2.16)$$

$$m := \rho u, \quad (2.17)$$

で与えられる。但し、 ρ は流体の密度、 u は速度、 e はエネルギー密度、 p は圧力、 γ は比熱比である。これは簡潔な形の非保存形に書き直すことができ

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix} + \mathcal{A} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix} = 0, \quad (2.18)$$

である。ただし係数行列は

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \gamma p & u \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

で与えられ、

$$\mathcal{A} = \mathcal{R} \Lambda \mathcal{R}^{-1}, \quad (2.20)$$

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \rho & \rho \\ -c & 0 & c \\ \rho c^2 & 0 & \rho c^2 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} u - c & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & u + c \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

と対角化できる。 c は音速

$$c = \left(\frac{\gamma P}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.23)$$

である。

¹これを完全流体という

2.3 空間多次元の場合

2.3.1 記法

この論文では連立方程式を表す添字を \mathbf{u} のように太字で表し (ベクトルの要素数は J)、空間次元を表す添字を \vec{x} のように上付き矢印で表す (ベクトルの要素数は D)。特に、式 (2.26) 中の \vec{f} は太字とベクトルの両方の添字を持つことに注意すること (要素数は JD)。また、行列に関しては \mathcal{A} のように表記する。

2.3.2 ベクトル偏微分方程式の場合の一般形

空間座標 \vec{x} が $2 \leq D$ 次元

$$\vec{x} = (x_1, \dots, x_D) \quad (2.24)$$

の場合を考える。このとき、ベクトル偏微分方程式の保存形は

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_1(\mathbf{u})}{\partial x_1} + \dots + \frac{\partial \mathbf{f}_D(\mathbf{u})}{\partial x_D} = \mathbf{0} \quad (2.25)$$

と表され、これをまとめて

$$\frac{\partial \mathbf{u}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (2.26)$$

とかく。

2.3.3 移流方程式

一般形において、方程式の本数 $J = 1$ 、 $\vec{f}(\mathbf{u}) = \vec{a}u$ と書けるとき、式 (2.26) は

$$\frac{\partial u(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{a} \cdot \vec{\nabla} u = 0, \quad (2.27)$$

となり、 \vec{a} 方向への移流を表す。

2.3.4 ブラゾフ方程式

ブラゾフ方程式 (無衝突ボルツマン方程式) は無衝突自己重力系や無衝突プラズマ系を位相空間上で定式化した方程式である。無衝突自己重力系としては宇宙論的なダークマターの時間発展やニュートリノ力学などの計算がブラゾフ方程式によって行われ、無衝突プラズマ系の例は、地球磁気圏や核融合プラズマ等が挙げられる。物理的空間が一次元の場合は位相空間は位置 x 、速度 v の二次元になる。流体近似においては、速度空間の分布は積分され、温度などの値で代表的されるが、ブラゾフ方程式では、その分布を正確に取り扱うことができる。そのため、ボルツマン分布に従わない (温度として取り扱えない) ような無衝突減衰や Landau Dumping のような問題を正しく解くことができる。

物質の分布関数 $f(x, v, t)$ の時間発展は式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + E(x, t) \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (2.28)$$

を満たす。 $E(x, t)$ は外力項で、自己重力系の場合重力ポテンシャル $\phi(x)$ と重力定数 G を用いて

$$E(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \phi(x), \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x) = 4\pi G \rho(x), \quad (2.30)$$

但し、密度 $\rho(x)$ は

$$\rho(x) = \int f(x, v) dv, \quad (2.31)$$

で与えられる。

Chapter 3

Numerical method

3.1 有限差分法

3.1.1 定式化

本節の議論は (藤井孝蔵 1994) を参考にした。

空間の離散化

ここでは空間 1 次元かつ解くべき偏微分方程式 $u(x, t)$ の x の定義域が $(0 < x < 1)$ の場合について説明する。 K をメッシュ数とし、 x の定義域を等分割すると、メッシュ幅は $h = \frac{1}{K}$ となる。 分割に用いた点は $x_0 = 0 < x_1 < \dots < x_i = ih < \dots < x_K = 1$ で

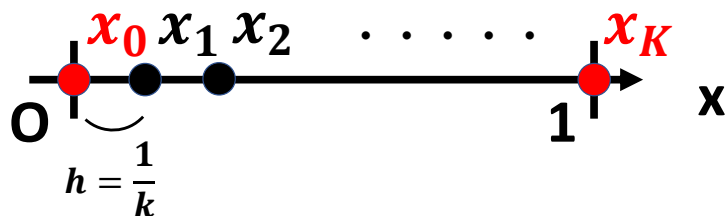


図 3.1: 分割の方法

あり、 x_i を格子点と呼ぶ。この格子点 (端点を除く) において u を x についてテーラー展開すると

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + h \frac{du(x_i)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2} + \frac{h^3}{6} \frac{d^3u(x_i)}{dx^3} + O(h^4), \quad (3.1)$$

$$u(x_{i+0}) = u(x_i), \quad (3.2)$$

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) - h \frac{du(x_i)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2u(x_i)}{dx^2} - \frac{h^3}{6} \frac{d^3u(x_i)}{dx^3} + O(h^4), \quad (3.3)$$

であり、式 (3.2)(3.3) より u の一階微分は

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h} + O(h), \quad (3.4)$$

と得られる。これを前進差分という。同様に

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{h} + O(h), \quad (3.5)$$

を後退差分という。これらは空間一次精度の定式化である。一方、

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h} + O(h^2), \quad (3.6)$$

を中心差分といい、これは二次精度の方法である。例えば、移流方程式 (2.4) は前進差分を用いると

$$\frac{du(x_i)}{dt} \simeq -a \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h}, \quad (3.7)$$

と離散化される。また、さらに高次精度の差分を達成する方法として

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \frac{-u(x_{i+2}) + 8u(x_{i+1}) - 8u(x_{i-1}) + u(x_{i-2}))}{12h} + O(h^4), \quad (3.8)$$

や

$$\frac{du(x_i)}{dx} = \frac{u(x_{i+3}) - 9u(x_{i+2}) + 45u(x_{i+1}) - 45u(x_{i-1}) + 9u(x_{i-2}) - u(x_{i-3}))}{60h} + O(h^6), \quad (3.9)$$

が挙げられる。

MP 法は、差分法の一つであり、数値振動の原因となる不連続性の有無をチェックし、解が滑らかな場合に式 3.8 のような高次精度の微分を採用する (Suresh & Huynh 1997)。

時間積分

空間と同様に時間に対しても離散化を行い、 $t = t_j$ の時の物理量から $t = t_{j+1}$ の物理量を計算する。これを時間積分といい、タイムステップを $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$ とすると次ステップの物理量は

$$u(x_i, t_{j+1}) = u(x_i, t_j) + \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \Delta t_j + O(\Delta t_j^2) \quad (3.10)$$

で与えられ、これを前進オイラー法という。この方法は時間刻み Δt_j に対し 1 次の方法である。¹これよりも高次の方法としてはルンゲクッタ法が挙げられる。2 次のルンゲクッタ法には任意性があるが、例えば

¹ 1 ステップ毎の誤差は $O(\Delta t_j^2)$ であるが、単位時間あたりに蓄積する誤差で考えると $O(\Delta t_j)$ になる

$$\begin{cases} k_{1ij} = \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \\ k_{2ij} = \frac{d(u(x_i, t_j) + k_{1ij}\Delta t_j)}{dt} \\ u(x_i, t_{j+1}) = u(x_i, t_j) + \frac{\Delta t_j}{2}(k_{1ij} + k_{2ij}) \end{cases} \quad (3.11)$$

で与えられる。ただし、 i は空間の添字、 j は時間の添字を表し、 $\frac{d(\dots)}{dt}$ は前に述べた空間の離散化を用いて数値的に評価される。同様に 3 次のルンゲクッタ法は例えば

$$\begin{cases} k_{1ij} = \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \\ k_{2ij} = \frac{d(u(x_i, t_j) + k_{1ij}\Delta t_j)}{dt} \\ k_{3ij} = \frac{d(u(x_i, t_j) + 2k_{2ij}\Delta t_j - k_{1ij}\Delta t_j)}{dt} \\ u(x_i, t_{j+1}) = u(x_i, t_j) + \frac{\Delta t_j}{6}(k_{1ij} + 4k_{2ij} + k_{3ij}) \end{cases} \quad (3.12)$$

4 次のルンゲクッタ法は例えば

$$\begin{cases} k_{1ij} = \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \\ k_{2ij} = \frac{d(u(x_i, t_j) + k_{1ij}\frac{\Delta t_j}{2})}{dt} \\ k_{3ij} = \frac{d(u(x_i, t_j) + k_{2ij}\frac{\Delta t_j}{2})}{dt} \\ k_{4ij} = \frac{d(u(x_i, t_j) + k_{3ij}\Delta t_j)}{dt} \\ u(x_i, t_{j+1}) = u(x_i, t_j) + \frac{\Delta t_j}{6}(k_{1ij} + 2k_{2ij} + 2k_{3ij} + k_{4ij}) \end{cases} \quad (3.13)$$

で与えられる。

TVD/TVB 条件

量

$$TV(t) = \int_{x_0}^{x_K} \left| \frac{du(x, t)}{dx} \right| dx \quad (3.14)$$

を定義すると、これは常に非負になり、波の振幅の総和に等しい (Total Variation)。これは数値的に

$$TV(t_j) := \sum_{i=0}^{K-2} |u(x_{i+1}, t_j) - u(x_i, t_j)| \quad (3.15)$$

と表すことができる。数値解が振動すると TV の値は増加するが、その対偶をとって

$$TV(t_{j+1}) \leq TV(t_j) \quad (3.16)$$

を課すことで数値振動を抑制できる。この条件を Total Variation Diminishing(TVD) という (Harten 1983)。また、 $TV(t=0)$ にのみ依存する定数 B に対し

$$TV(t_j) \leq B \quad (3.17)$$

が全ての時間 t_j で成立するとき、Total Variation Bounded(TVB) という。TVD は TVB よりも強い条件である。前節のルンゲクッタ法はこの TVD 条件を満たすようにすることができ、2 次の TVD ルンゲクッタ法は

$$\begin{cases} u(x_i, t_{j+1/2}) = u(x_i, t_j) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \\ u(x_i, t_{j+1}) = \frac{1}{2}u(x_i, t_j) + \frac{1}{2} \left(u(x_i, t_{j+1/2}) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+1/2})}{dt} \right) \end{cases} \quad (3.18)$$

で、3 次の TVD ルンゲクッタ法は

$$\begin{cases} u(x_i, t_{j+1/3}) = u(x_i, t_j) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \\ u(x_i, t_{j+2/3}) = \frac{3}{4}u(x_i, t_j) + \frac{1}{4} \left(u(x_i, t_{j+1/3}) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+1/3})}{dt} \right) \\ u(x_i, t_{j+1}) = \frac{1}{3}u(x_i, t_j) + \frac{2}{3} \left(u(x_i, t_{j+2/3}) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+2/3})}{dt} \right) \end{cases} \quad (3.19)$$

4 次の TVD ルンゲクッタ法は

$$\begin{cases} u(x_i, t_{j+1/4}) = u(x_i, t_j) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_j)}{dt} \\ u(x_i, t_{j+2/4}) = \frac{1}{2}u(x_i, t_j) - \frac{1}{4}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_j)}{dt} + \frac{1}{2}u(x_i, t_{j+1/4}) + \frac{1}{2}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+1/4})}{dt} \\ u(x_i, t_{j+3/4}) = \frac{1}{9}u(x_i, t_j) - \frac{1}{9}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_j)}{dt} + \frac{2}{9}u(x_i, t_{j+1/4}) - \frac{1}{3}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+1/4})}{dt} \\ \quad + \frac{2}{3}u(x_i, t_{j+2/4}) + \Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+2/4})}{dt} \\ u(x_i, t_{j+1}) = \frac{1}{3}u(x_i, t_{j+1/4}) + \frac{1}{6}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+1/4})}{dt} \\ \quad + \frac{1}{3}u(x_i, t_{j+2/4}) + \frac{1}{3}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+2/4})}{dt} + \frac{1}{3}u(x_i, t_{j+3/4}) + \frac{1}{6}\Delta t_j \frac{du(x_i, t_{j+3/4})}{dt} \end{cases} \quad (3.20)$$

で与えられる (Shu & Osher 1988)。

クーラン条件

スカラー偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + f(u) \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.21)$$

を考える。この方程式の位置 x における波の物理的な移流速度は $f(u)$ なので、1 ステップの時間 Δt のうちに情報が伝わる長さは $f(u(x))\Delta t$ で与えられる。ところで数値的には、式 (3.4) の離散化によると、 $u(x_i, t_{j+1})$ に寄与する値は $u(x_{i-1}, t_j), u(x_i, t_j), u(x_{i+1}, t_j)$ であり、隣接メッシュからのみ情報が伝達する。このため、全メッシュに対し $\Delta x \geq f(u(x))\Delta t$ が満たされていないと数値計算が破綻する。このことは、クーラン数 C を用いて

$$C := a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (3.22)$$

と書き直すことができる (クーラン条件)。ただし音速 $a = |f(u)|$ とした。これはスキームが安定であるための必要条件であり、実際の運用には 1 よりも小さい値を用いる (後述)。ベクトル偏微分方程式の場合、式 (2.14) の行列 A の固有値の絶対値の最大値を用いて

$$a = \max_i ||A||_i \quad (3.23)$$

とする。ただし $|A|_i$ は行列 A の i 番目の固有値を表し、外側の $|\cdot|$ は絶対値である。

誤差/次数の定義

ある時刻 t において、数値計算の結果と解析解を比べてスキームの収束次数を見積もるため、また数値計算同士の誤差を見積もるためには二つの $u(x_i)$ 同士を比較する方法が必要である。ここでは誤差評価の方法として L^2 誤差 (Appendix A.1) を採用する。特に、空間 n 次のスキームとはメッシュ幅 h に対し全メッシュでの合計誤差 ϵ が h^n に比例する場合をいう。例えば、式 (3.4) の前進差分は一メッシュ当たりの誤差は $O(h^2)$ であるが、全メッシュでの誤差は $O(h^1)$ になるため、一次精度のスキームである。

3.2 不連続ガラーキン (DG) 法

3.2.1 定式化

本章の議論は主に (Jan S. Hesthaven 2008) によった。

一般の基底の場合

スカラー偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, x \in \Omega \quad (3.24)$$

を考える。 Ω は一次元の閉区間で K 個の重ならないメッシュに分割されており、 k 番目のメッシュの領域を D^k とする。各メッシュ k において、

$$u^k(x, t) \simeq u_h^k(x, t) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \hat{u}_n^k(t) \psi_n^k(x) \quad (3.25)$$

と表されているとする。但し、 u^k は物理解、 u_h^k は数値解、 ψ_n^k はメッシュ k での n 番目の基底関数、 \hat{u}_n^k は基底関数の重みづけを表し、 N_p を基底関数の数とする。特に、 u_h^k は

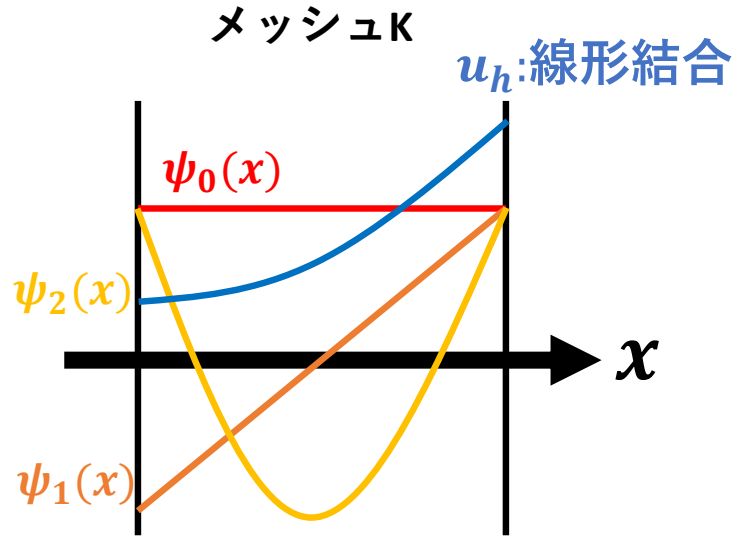


図 3.2: DG における物理量の表し方

メッシュの境界において不連続になりうる。さて、数値的に式 (3.24) は、残差 $R_h(x, t)$ を用いて

$$R_h(x, t) := \frac{\partial u_h}{\partial t} + \frac{\partial f(u_h)}{\partial x} \simeq 0 \quad (3.26)$$

と表現できる。0 を積分しても 0 のままであるから、

$$\int_{D^k} R_h(x, t) \psi_n(x) dx = 0, 0 \leq n \leq N_p - 1 \quad (3.27)$$

ここで、左辺が数値的に扱いやすい形になったので \simeq を $=$ に置き換え、これを Discontinuous Galerkin 法 (DG) の要請とした。²このように、時間発展方程式が x に対しての積分で書かれていることを積分系の方程式という。(逆に、差分法のような定式化を微分系の方程式という。) u_h^k はメッシュの境界において不連続なので、境界においては微分値が存在せず、定式化を行うことができない。積分系においては、節 (3.2.2) で議論するメッシュ境界での数値流束さえ定義してしまえば定式化は容易である。

式 (3.27) に式 (3.26) を代入して第二項を部分積分すると、

$$\int_{D^k} \left(\frac{\partial u_h^k}{\partial t} \psi_n^k - f(u_h^k) \frac{\partial \psi_n^k}{\partial x} \right) dx = - [f(u_h^k) \psi_n^k]_{x_l^k}^{x_r^k} = - \int_{\partial D^k} \hat{n} f(u_h^k) \psi_n dx \quad (3.28)$$

を得る。但し式中の x_l^k 、 x_r^k は区間 D^k の左右端を表し、 \hat{n} は D^k からの外向きの法線ベクトルを表す。³式 (3.28) は第一式がメッシュ内の物理量の時間発展、第三式が隣接メッシュからの物理量の流入とみなすことができ、これがスキームの時間発展を記述

²これらの違いはせいぜい数値誤差の分しかない

³今回は一次元であるから $\hat{n} = \pm 1$ である

する。式 (3.28) に式 (3.25) を代入すると

$$\int_{D^k} \left(\sum_{m=0}^{N_p-1} \frac{\partial \hat{u}_n^k(t)}{\partial t} \psi_n^k \psi_m^k - f(u_h^k) \frac{\partial \psi_n^k}{\partial x} \right) dx = - \int_{\partial D^k} \hat{n} f(u_h^k) \psi_n dx \quad (3.29)$$

である。ここで

$$f(u_h^k) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \hat{f}_n^k(t) \psi_n^k(x) \quad (3.30)$$

と f を基底で表現すると、両辺に $\psi_m^k(x)$ を掛けて x で積分することで

$$\int_{D^k} \psi_m^k(x) f(u_h^k) dx = \sum_{n=0}^{N_p-1} \hat{f}_n^k(t) \int_{D^k} \psi_n^k(x) \psi_m^k(x) dx \quad (3.31)$$

であり、基底の直交関係

$$\mathcal{M}_{ij}^k := \int_{D^k} \psi_i^k(x) \psi_j^k(x) dx \quad (3.32)$$

を用いて

$$\hat{f}_n^k(t) = \sum_{m=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k \int_{D^k} \psi_m^k(x) f(u_h^k) dx \quad (3.33)$$

である。但し、 $(\mathcal{M}^{-1})_{ij}^k$ は \mathcal{M} の i, j の添字を行列とみなした場合の逆行列である。式 (3.29) の左辺第二項に式 (3.30) を代入すると

$$\int_{D^k} \left(f(u_h^k) \frac{\partial \psi_n^k(x)}{\partial x} \right) dx = \int_{D^k} \left(\sum_{m=0}^{N_p-1} \hat{f}_m^k(t) \psi_m^k(x) \frac{\partial \psi_n^k(x)}{\partial x} \right) dx = \sum_{m=0}^{N_p-1} \hat{f}_m^k(t) \mathcal{S}_{mn}^k \quad (3.34)$$

と変形できる。但し、基底の微分の直交関係を

$$\mathcal{S}_{ij}^k := \int_{D^k} \psi_i^k(x) \frac{\partial \psi_j^k(x)}{\partial x} dx, \quad (3.35)$$

とした。式 (3.29) の左辺第一項に式 (3.32)、第二項に式 (3.34) を代入し書き換えると

$$\sum_{m=0}^{N_p-1} \left(\mathcal{M}_{mn}^k \frac{\partial \hat{u}_n^k(t)}{\partial t} - \mathcal{S}_{mn}^k \hat{f}_m^k(t) \right) = - \int_{\partial D^k} \hat{n} f(u_h^k) \psi_n dx \quad (3.36)$$

を得る。この右辺は

$$f(u_h^k(x_l^k)) \psi_n^k(x_l^k) - f(u_h^k(x_r^k)) \psi_n^k(x_r^k) \quad (3.37)$$

と書き換えることができる。しかし、 $f(u_h^k(x_r^k))$ や $f(u_h^k(x_l^k))$ はメッシュの領域の端にかかっているため一意に定まらない。数値的には $f(u_h^k)$ を数値流束 $f^*(u_h^k)$ で近似する。この数値流束の取り方には任意性があり、3.2.2 章で議論する。結局、式 (3.36) は

$$\frac{\partial \hat{u}_n^k(t)}{\partial t} = \sum_{m=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k (\mathcal{S}^T)_{mj}^k \hat{f}_j^k(t) + \sum_{m=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k (f_l^{*k} \psi_m^k(x_l^k) - f_r^{*k} \psi_m^k(x_r^k)) \quad (3.38)$$

とでき、左辺がメッシュ内の物理量の時間発展を与える。但し、 $(S^T)_{ij}^k$ は S の i, j の添字を行列とみなした場合の転置行列、 $f_{l/r}^{*k}$ はメッシュ k の左右境界を通る数値流束 $f^*(u_n^k(x_{l/r}^k))$ である。

初期条件

$\hat{u}_n^k(t)$ の初期条件 $\hat{u}_{n,\text{init}}^k := \hat{u}_n^k(t=0)$ は式 (3.30)~(3.33) と同様の計算により

$$u_{\text{init}}^k(x) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \hat{u}_{n,\text{init}}^k \psi_n^k(x), \quad (3.39)$$

と基底に分解して

$$\hat{u}_{n,\text{init}}^k = \sum_{m=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k \int_{D^k} \psi_m^k(x) u_{\text{init}}^k(x) dx, \quad (3.40)$$

と導入することができる。 $u_{\text{init}}^k(x)$ は外部から与えられた $t=0$ における初期条件である。

基底の取り方

本研究では基底 $\psi_n^k(x)$ としてルジャンドル多項式 (Appendix B) を採用する。すなわち、各メッシュ $[x_l^k, x_r^k]$ において区間の長さ $L_k := x_r^k - x_l^k$ とすると

$$\mu(x) := \frac{2x}{L_k} - 1, \quad (3.41)$$

$$\psi_n^k(x) = P_n(\mu(x)), \quad (3.42)$$

を採用する。ルジャンドル多項式の性質の式 (B.2) より、直交性

$$\mathcal{M}_{nm}^k = \int_{D^k} P_n(\mu(x)) P_m(\mu(x)) dx = \frac{L_k}{2n+1} \delta_{mn}, \quad (3.43)$$

が成立し、 \mathcal{M} は対角行列になる。また S についても式 (B.9) により

$$\mathcal{S}_{nm}^k = \int_{D^k} P_n(\mu(x)) \frac{\partial P_m(\mu(x))}{\partial x} dx = \begin{cases} 2 & (n+1 \leq m \text{ かつ } n+1 \equiv m, \text{ mod } 2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (3.44)$$

と簡潔な形になる。特に、分子分母の dx が相殺されるために L_k に依存しない。後に式 (3.104) で示すように、ルジャンドル多項式以外の基底を採用した場合は行列 \mathcal{M}, \mathcal{S} が疎行列にならないため、計算量が大幅に増えてしまう。

誤差評価の方法

誤差評価の方法として、 L^2 ノルム (Appendix A.1) を用いた。但し、単一のメッシュ内での解析解と数値解の誤差の評価にはメッシュ中心の値のみを使用した。これは、ガウスルジャンドル積分 (Appendix C) における最低次に対応する。

クーラン条件

DG 法の場合には差分法とは異なり、多項式補間の分だけ実効的なメッシュ解像度が上がっているとみなせ、そのクーラン数は式 (3.22) から

$$C := a \frac{\Delta t}{\Delta x} (2N - 1), \quad (3.45)$$

と変更される (Bernardo Cockburn 1989)。但し、 a は移流速度、 N は DG の次数 (一次元方向の多項式の数) である。

3.2.2 数値流束

定義

メッシュへの物理量の流入/流出の計算にはメッシュ境界における流束 $f(u(x))$ が必要であるが、数値解 $u_h(x)$ はメッシュの端点において不連続であるため単純に $f(u(x))$ を決めることができない。そこで $u_h(x)$ の両側からの極限を

$$u^-(x) := u_h(x - 0), \quad (3.46)$$

$$u^+(x) := u_h(x + 0), \quad (3.47)$$

として、 $f(u(x)) \simeq f^*(u^-, u^+)$ と近似する。DG 法は、 $f^*(u^-, u^+)$ が次の 3 つの性質を持つ場合に安定になる。

1. 整合性:

$$f^*(u, u) = f(u), \quad (3.48)$$

2. リプシッツ連続性⁴:

a_1, a_2, b_1, b_2 によらない定数 L_a, L_b が存在して

$$|f^*(a_2, b_2) - f^*(a_1, b_1)| \leq L_a |a_2 - a_1| + L_b |b_2 - b_1|, \quad (3.49)$$

3. 単調性:

$$f^*(a, b), a \leq b \text{ は } a \text{ について単調減少、} b \text{ について単調増加である} \quad (3.50)$$

これらの条件を満たす数値流束として以下のものがよく使われる。

Godunov flux

$$f^*(u^-, u^+) = \begin{cases} \min_{u \in [u^-, u^+]} f(u) & (u^- \leq u^+) \\ \max_{u \in [u^+, u^-]} f(u) & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (3.51)$$

Local Lax-Friedrich flux

$$f^*(u^-, u^+) = \frac{f(u^-) + f(u^+)}{2} - \frac{|\lambda|}{2} (u^- - u^+), \quad (3.52)$$

$$|\lambda| := \max_{u \in [u^-, u^+]} \left| \frac{\partial f(u)}{\partial u} \right|, \quad (3.53)$$

⁴関数の性質に対する数学的な概念で、連続的微分可能よりも弱く連続関数よりも強い条件である

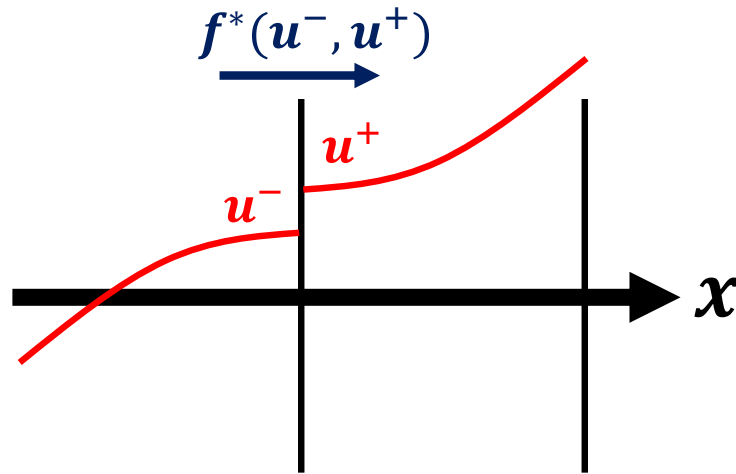


図 3.3: メッシュ境界における流束

Roe flux

$$f^*(u^-, u^+) = \frac{f(u^-) + f(u^+)}{2} - \frac{|\lambda|}{2}(u^- - u^+), \quad (3.54)$$

$$|\lambda| := \left| \frac{f(u^+) - f(u^-)}{u^+ - u^-} \right|, \quad (3.55)$$

なお、実装の都合上 $\min_{u \in [u^-, u^+]} \cdot(u)$ を $\min[\cdot(u_-), \cdot(u_+)]$ と近似することがある。(max についても同様) また、Roe flux は実装は簡単であるが単調性 (3.50) を満たさない。

3.2.3 limiter

Gibbs 現象

不連続関数を連続関数の N 次の級数で近似する際に、たとえ $N \rightarrow \infty$ であっても不連続点付近で近似値の最大値が元の関数の最大値よりも大きくなってしまう⁵。例として、矩形波の初期条件を $N = 4$ 、 $N = 10$ のルジャンドル多項式で近似した場合を示す (図 3.4、3.5)。次数が上がると差の L^2 ノルムの意味での近似の精度は向上するが、振動の振幅は改善しない。

これを Gibbs 現象といい、衝撃波を含む問題を数値的に解く際に数値解が振動する原因になる。そのため、振動を抑える機構が必要であり、limiter と呼ばれる手順によってこれを行う。

slope limiter

slope limiter は、以下の流れで行われる。

1. まず、全メッシュに対して振動して不適切な状態である "troubled" であるかどうか

⁵関数列は元の関数に各点収束するが絶対収束しない

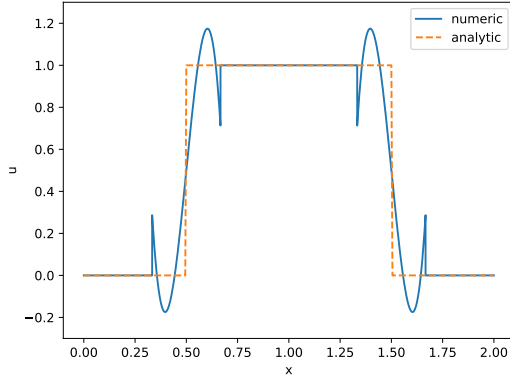


図 3.4: $N = 4$ での矩形波の近似:
不連続関数を連続関数で近似する
際に振動が生じている

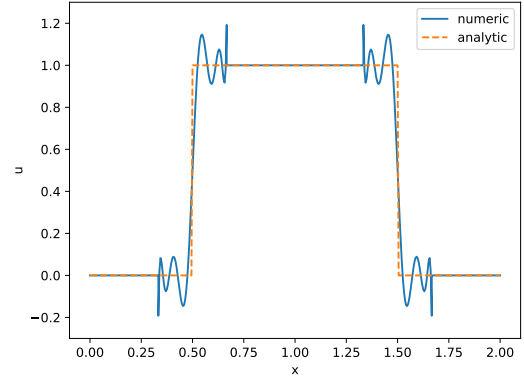


図 3.5: $N = 10$ での矩形波の近似:
次数を上げても、振動の
振幅は減少しない

の判定を行う。

2.”troubled”なメッシュに対し、振動を除去する操作を行う。

limiter が満たすべき性質として、

- 保存則を破らない
- 振動を抑える (TVD, TVB 条件を満たすなど)
- 振動がない部分の精度をなるべく下げない

が挙げられる。なお、ルンゲクッタ法 (式 3.11) のように時間積分を複数回行う場合は、時間積分をする度に slope limiter をかける必要がある。

実装

ルジャンドル多項式の基底を仮定して話を進める。k をメッシュの添字とし、 \bar{u}_h^k をメッシュ内の u_h^k の値の平均値とする。式 (3.25) の \hat{u}_n^k を用いて $\bar{u}_h^k = \hat{u}_0^k$ である。 u_l^k をメッシュの左端での u_h^k の値 $u_h^k(x_l^k + 0)$ とし、 u_r^k をメッシュの右端での u_h^k の値 $u_h^k(x_r^k - 0)$ とする。

1.limited edge value: v_l^k, v_r^k を計算する。

$$v_l^k = \bar{u}_h^k - m(\bar{u}_h^k - u_l^k, \bar{u}_h^k - \bar{u}_h^{k-1}, \bar{u}_h^{k+1} - \bar{u}_h^k), \quad (3.56)$$

$$v_r^k = \bar{u}_h^k - m(\bar{u}_h^k - u_r^k, \bar{u}_h^k - \bar{u}_h^{k-1}, \bar{u}_h^{k+1} - \bar{u}_h^k), \quad (3.57)$$

これは、メッシュ左右端での値 u_l^k, u_r^k に対して左右のメッシュとの値の比較により振動を抑えた値であり、minmod 関数は

$$m(a_1, \dots, a_n) = \begin{cases} \min_i a_i & (\text{全ての } a_i > 0) \\ \max_i a_i & (\text{全ての } a_i < 0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (3.58)$$

と定義される。もし、

$$v_l^k \neq u_l^k \text{ または } v_r^k \neq u_r^k, \quad (3.59)$$

であればこのメッシュを troubled としてマークする。

2.troubled のメッシュに対し、平均値 \hat{u}_0^k を保ったまま傾き \hat{u}_1^k を

$$\hat{u}_1^k \rightarrow m(\hat{u}_1^k, \hat{u}_0^{k+1} - \hat{u}_0^k, \hat{u}_0^k - \hat{u}_0^{k-1}), \quad (3.60)$$

$$\hat{u}_n^k \rightarrow 0 (2 \leq n), \quad (3.61)$$

と変更する。この変更によって新しい解は式 (3.56)(3.57) を満たす。この limiter によって、TVDM 条件、すなわちメッシュの平均値 \hat{u}_0^k (in the mean, "M") における TVD 条件が満たされることが保証される (Jan S. Hesthaven 2008)。

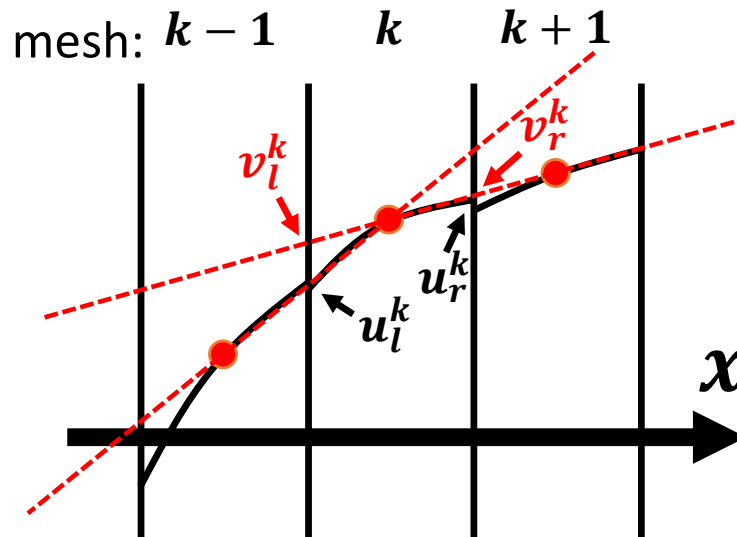


図 3.6: slope limiter の概念図:元の数値解 (黒実線) の傾きは傾きの絶対値が小さいほうの赤破線に limit される。なお、概念図のため v_l^k, v_r^k は式 (3.56)(3.57) とはわずかに異なる

top-hat 問題

slope limiter は振動、つまり数値解の極値を除去する機構であるが、これを急なピークをもつ問題 (例として sin 波) に適用すると極値の部分が平らになってしまう問題が生じる。これを top-hat 問題とよぶ。この問題を回避するため、slope limiter の強さを抑え、ある一定の曲率パラメータ M を持つ極値を許容するような改良を行う。この limiter について次節で議論する。

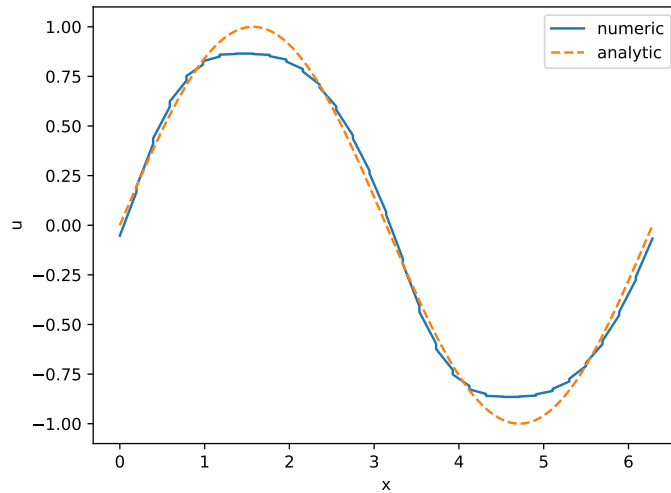


図 3.7: top-hat 問題の例、関数の真のピークが数値振動とみなされて鈍ってしまう

TVB limiter

先述の slope limiter に対し、 $m(\dots)$ の代わりに

$$\bar{m}(a_1, \dots, a_n) = m(a_1, a_2 + Mh^2 \text{sign}(a_2), \dots, a_n + Mh^2 \text{sign}(a_n)) \quad (3.62)$$

を採用することで曲率が M 以下の値を持つ極値をつぶさないことができる (Shu 1987)。但し、 $\text{sign}(a)$ は符号関数、 M は曲率を表すパラメータで、数値解の空間二回微分に対応する⁶。 M は問題ごとに手で定める必要があり、大きすぎると数値振動を抑えきれず、小さすぎると top-hat 問題を生じる。 M として初期条件の空間二回微分の最大値を採用することが多い。

filter

limiter に代わる振動抑制の操作として filter が挙げられる。この filter は、一般的なローパスフィルタのように、高周波 (\hat{u}_n^k の n が大きい部分に対応) をカットする効果がある。数値振動は一般に高周波成分を多く含み、それを抑制することでアルゴリズムの安定性を増すことができる。例えば、 α, s, η_c を定数として

$$\sigma(\eta) = \begin{cases} 1 & (0 \leq \eta \leq \eta_c) \\ \exp\left(-\alpha \left(\frac{\eta - \eta_c}{1 - \eta_c}\right)^s\right) & (\eta_c \leq \eta \leq 1), \end{cases} \quad (3.63)$$

$$\hat{u}_n^k = \exp\left(\frac{n-1}{N_p}\right) \hat{u}_n^k, \quad (3.64)$$

⁶つまり曲率半径とは大小が逆である

と係数を補正する (よく $\alpha = 36, s = 6$ や $s = 32, \eta_c = 0.5$ 等が使われる)。これは exponential filter と呼ばれる。filter は slope limiter よりも実装が単純で、処理にかかる時間も slope limiter よりも短い利点があるが、振動の有無に関わらず高周波成分を抑制してしまうため、slope limiter よりも数値解に対する影響が大きい。このように性能は slope limiter に劣るが、メッシュ領域が三角形や (超) 四面体である場合など slope limiter の実装が難しい場合に採用されることがある。

positivity limiter

この節の議論は (Guillet et al. 2018) によった。

物理学上は例えば密度 $\rho(x)$ や分布密度 $f(x, v)$ などの量は決して負にならないが、計算機上では数値誤差や振動の結果により負の量 (非物理的な状態) が発生しうる。これを修正する機構が positivity limiter である。positivity limiter は、前述の slope limiter 等とは独立した概念であるため、他の limiter と共存しうる。positivity limiter は各々のメッシュ k の領域 K において、以下の機構で行われる:

positivity limiter の対象になる変数を $u(\vec{x})$ とするとき、

- もしも、 $\vec{x} \in K$ においての多項式補間 $u(\vec{x})$ の最小値が 0 以上の場合、何もしない
- 最小値が 0 未満の場合、 $u(\vec{x}) = u_0 + u_1(\vec{x})$ と解を分解する。但し、 u_0 は K においての $u(\vec{x})$ の平均値

$$u_0 = \frac{\int_K u(\vec{x}) d\vec{x}}{\int_K d\vec{x}}, \quad (3.65)$$

$$u_1(\vec{x}) = u(\vec{x}) - u_0, \quad (3.66)$$

である。(ルジャンドル多項式の基底をとっている場合は定数部分が u_0 に、それ以外が $u_1(\vec{x})$ に対応する) もし、 $0 \leq u_0$ の場合は、新しい解を

$$u_{P\text{-limited}}(\vec{x}) = u_0 + r u_1(\vec{x}), \quad (0 \leq r < 1), \quad (3.67)$$

の $\vec{x} \in K$ での最小値が 0 になるように r を選んで修正する。特に、この操作においては明らかに保存則を破らない。

$u_0 < 0$ の場合には、

$$u_{P\text{-limited}}(\vec{x}) = 0, \quad (3.68)$$

と修正する。この操作では保存則が破れるので、この操作が起こることは望ましくない。

MPP(Maximum Principle Positivity) limiter

移流方程式やバーガス方程式、ブラゾフ方程式等の移流型の方程式においては、数学的に $u(\vec{x})$ は前ステップの $u(\vec{x})$ の最大値 M を超えることができない (最小値についても同様)。これを最大値の原理といい、このことを利用して positivity limiter と同様の解

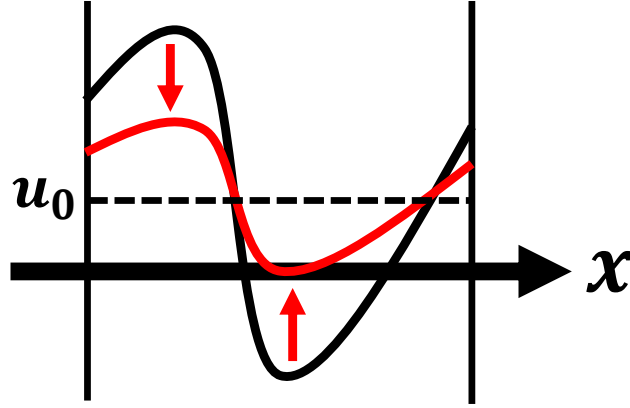


図 3.8: positivity limiter の概念図

の修正を行うことができ、これを MPP limiter という。全メッシュに対する解析的な最大値最小値を課す global MPP (GMPP) limiter⁷においては、初期条件が $u(x, 0) = \sin x$ の一次元移流方程式の場合、各 step 毎に最大値 1、最小値 -1 の制限を positivity limiter と同じ方法で与える。他の実装では、前 step の隣接メッシュの最大最小値を超えないことを課す local MPP (LMPP) limiter が挙げられ、この方法では各 step 毎にメッシュ内の $u(x)$ の最大最小値を三分探索 (Appendix E) で求める。つまり、各メッシュ k に対して時間積分前に

$$\min^k = \min_{x \in [K \text{ および隣接するメッシュ}]} u(x), \quad (3.69)$$

$$\max^k = \max_{x \in [K \text{ および隣接するメッシュ}]} u(x), \quad (3.70)$$

を計算しておき、時間積分後に k 内の解が $[\min^k, \max^k]$ に収まるように補正する。この方法の改良として、

$$\overline{\min}^k = \min^k - \frac{((1 + D)^{\frac{\Delta t}{1s}} - 1)(\max^k - \min^k)}{2} \quad (3.71)$$

$$\overline{\max}^k = \max^k + \frac{((1 + D)^{\frac{\Delta t}{1s}} - 1)(\max^k - \min^k)}{2} \quad (3.72)$$

として $[\overline{\min}^k, \overline{\max}^k]$ に収まるように補正する local TVB MPP (LMPPB) limiter についても試験を行った。ただし、 $D > 0$ である。

LMPPB limiter は、

$$\overline{\max}^k - \overline{\min}^k = (1 + D)^{\frac{\Delta t}{1s}} (\max^k - \min^k) \quad (3.73)$$

であるから (Δt はタイムステップ)、全メッシュでの n ステップ目の $u(x)$ の最大値と最小値の差を M_n とすると

$$M_{n+1} \leq (1 + D)^{\frac{\Delta t}{1s}} M_n \quad (3.74)$$

⁷一般に、MPP というとこのことを指す

が成立するため、時間 T の間には M_n は高々初期値の

$$(1 + D)^{\frac{T}{\Delta t}}, \quad (3.75)$$

倍にしかなりえない。厳密には、TVB 条件は式 (3.75) のように T に依存してはならないが、似た概念であるため、ここでは Local 「TVB」 MPP limiter と呼ぶこととする。

3.2.4 ベクトル方程式かつ空間多次元の場合

\mathbf{u} が J 成分かつ空間座標 \vec{x} が D 次元の場合 (式 (2.24) の偏微分方程式を解く場合) を考える。

メッシュ

ここでは、メッシュが D 次元超直方体 D^k で、その辺が \vec{x} 軸に平行な場合、

$$D^k = [x_1^{k-}, x_1^{k+}] \otimes [x_2^{k-}, x_2^{k+}] \otimes \cdots \otimes [x_D^{k-}, x_D^{k+}], \quad (3.76)$$

であり、 L_d^k を D^k の x_d 軸方向の長さ

$$L_d^k := x_d^{k+} - x_d^{k-} \quad (3.77)$$

であるとする⁸。

基底

まず、空間一次元 $D = 1$ の時は区別する必要のなかった DG 法の次数 N と基底の数 $N_p(N, D)$ を区別する必要がある。一般に $2 \leq D$ のとき $N < N_p$ である。 n 番目 ($0 \leq n < N_p$) の基底は各方向へのルジャンドル多項式の積

$$\psi_n^{k,D}(\vec{x}) = P_{n'(1)}(\mu_1(x_1)) P_{n'(2)}(\mu_2(x_2)) \cdots P_{n'(D)}(\mu_D(x_D)) = \prod_{d=1}^D P_{n'(n,N,d,D)}(\mu_d(x_d)), \quad (3.78)$$

で与えられる。但し、 $\mu_d(x_d)$ は空間の x_d 軸方向に対し、メッシュ領域を $[-1, 1]$ に対応させる変換 (式 (3.41) の多次元版)

$$\mu_d(x_d) := \frac{2x_d}{L_d^k} - 1, \quad (3.79)$$

であり、非負整数 $n'(n, N, d, D)$ は基底 n のうち x_d 軸方向のルジャンドル多項式の次数を表し、 n は多項式全体の次数が N 未満であるもの、つまり

$$\sum_{d=1}^D n'(n, N, d, D) < N, \quad (3.80)$$

n	d		$\psi_n^{k,D=2}(\vec{x})$
	0	1	
0	0	0	$P_0(x)P_0(y)$
1	0	1	$P_0(x)P_1(y)$
2	1	0	$P_1(x)P_0(y)$
3	2	0	$P_2(x)P_0(y)$
4	1	1	$P_1(x)P_1(y)$
5	0	2	$P_0(x)P_2(y)$

 表 3.1: $D = 2, N = 3$ の場合の基底の一例

を満たす基底のうち相異なるもの全てをとる。例えば、 $D = 2, N = 3$ のとき基底 $N_p(2, 3) = 6$ で $n'(n, 2, d, 2)$ は表 3.1 のようになる。但し、 $\vec{x} = (x, y)$ とした。

一般に次元 D 、次数 N に対する基底の数 $N_p(D, N)$ は和が $N - 1$ 以下である非負整数を D 個に振り分ける方法の数に等しいから組み合わせ ${}_n C_m$ を用いて⁹

$$N_p(D, N) = {}_{N+D-1} C_D = \frac{(N + D - 1)!}{D!(N - 1)!}, \quad (3.81)$$

で与えられる。特に、 $D = 1$ のとき

$$N_p(1, N) = N, \quad (3.82)$$

$D = 2$ のとき

$$N_p(2, N) = \frac{N(N + 1)}{2}, \quad (3.83)$$

$D = 3$ のとき

$$N_p(3, N) = \frac{N(N + 1)(N + 2)}{6}, \quad (3.84)$$

である。(図 3.9)

この基底 $\psi_n^{k,D}(\vec{x})$ を用いて、数値解 $\mathbf{u}_h^k(\vec{x}, t)$ を

$$\mathbf{u}_h^k(\vec{x}, t) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \hat{\mathbf{u}}_n^k(t) \psi_n^{k,D}(\vec{x}), \quad (3.85)$$

と表す。特に、基底は J によらないスカラー量で表すことができる。また、メッシュ内の f の基底への分解は式 (3.30)(3.33) の多次元の拡張

$$\vec{f}(\mathbf{u}_h^k) = \sum_{n=0}^{N_p-1} \hat{f}_n^k(t) \psi_n^k(\vec{x}), \quad (3.86)$$

⁸メッシュは一般的な形(超四面体など)に拡張することができ、それこそが DG 法の強みであるのだが、定式化が煩雑になりすぎるためここでは割愛する

⁹高校数学より、和が $N - 1$ 「以下」である非負整数を D 個に振り分ける方法の数は、和が $N - 1$ ちょうどである非負整数を $D + 1$ 個に振り分ける方法の数に等しい

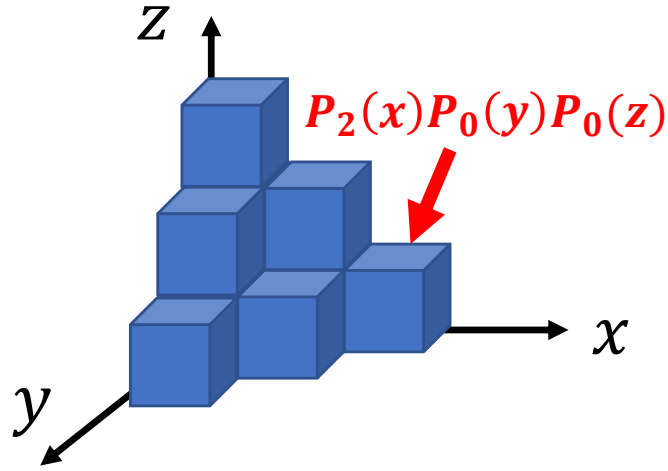


図 3.9: 空間次元 $D = 3$ の場合の基底 10 個:各立方体はその座標 $(x, y, z) = (i, j, k)$ に対応する多項式 $P_i(x)P_j(y)P_k(z)$ を表している

$$\hat{\mathbf{f}}_n^k(t) = \sum_{m=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k \int_{D^k} \psi_m^k(\vec{x}) \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{u}_h^k) d\vec{x}, \quad (3.87)$$

$$\mathcal{M}_{ij}^k := \int_{D^k} \psi_i^k(\vec{x}) \psi_j^k(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (3.88)$$

で与えられる。また、行列 \mathcal{S} (式 3.35) については $J \times J$ 行列の空間 D 次元ベクトル

$$\vec{\mathcal{S}}_{ij}^k := \int_{D^k} \psi_i^k(\vec{x}) \vec{\nabla} \psi_j^k(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (3.89)$$

となる。なお、空間一次元の場合に行列 \mathcal{M} と \mathcal{S} で成立した等式 (3.43)(3.44) はもはや成立しないので、以前と同様の手順を踏んで計算する必要がある。例えば、 $D = 2, N = 3$ で表 3.1 の基底の場合は行列 \mathcal{M} と \mathcal{S} は以下で与えられる。

$$\mathcal{M}_{ij}^k = V^k \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/9 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5 \end{pmatrix}, \quad (3.90)$$

$$\vec{\mathcal{S}}_{ij}^k = V^k \left(\frac{1}{L_1^k} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{L_2^k} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right). \quad (3.91)$$

但し、 V^k は超直方体 D^k の体積

$$V^k := \prod_{d=1}^D L_d^k, \quad (3.92)$$

である。ここで後で使用する補題を示しておく：

補題 3.2.1 N は D よりも十分に大きいとする。このとき、 \vec{S}_{ij}^k の全成分の要素数は $N_p^2 D$ 個であるが、そのうち非ゼロなものは $O(N^{D+1})$ 個である

証明:

$D = 1$ のとき、 S の式は式 (3.44) のように書き下せるから、0 でない要素は 2 のみで、その数は確かに $O(N^2)$ 個である。 $D > 1$ のとき、式 (3.89) のナブラの第一成分 (x_1 方向への微分) を考える。 i 番目の基底を $\psi_i^k(\vec{x}) = P_a(x_1)P_{N-1-I}(x_2, \dots, x_D)$ と分解する。但し、 $N-1-I$ は x_1 が含まれない全基底の次数の合計値で、 $0 \leq I \leq N-1$ である。ここで、 x_1 方向まで含めた全部の基底の次数の合計値が $N-1$ であることから、 $0 \leq a \leq I$ である。ルジャンドル多項式の直交性より、微分が絡まない成分に対しては同じ多項式でない値は非ゼロにならないので、 $\psi_j^k(\vec{x})$ についても $\psi_j^k(\vec{x}) = P_b(x_1)P_{N-1-I}(x_2, \dots, x_D)$ とかける。但し $0 \leq b \leq I$ で、 $P_{N-1-I}(x_2, \dots, x_D)$ の部分は共通である。このとき、 x_1 方向への積分を考えると、 $D = 1$ の場合と同等なので $O(I^2)$ 個である。一方、 $P_{N-1-I}(x_2, \dots, x_D)$ になる基底 $P_1(x_2), \dots, P_I(x_D)$ の組み合わせは和が $N-1-I$ 個になる非負整数を $D-1$ 個に振り分ける場合の数だから $\sum_{I=0}^{N+D-I-3} C_{D-1} = O((N+D-I)^{D-2})$ 個、よって求めたい全部の非ゼロ成分の数は $\sum_{I=0}^{N-1} O(I^2(N+D-I)^{D-2}) = O(N^{D+1})$ 個である。

初期条件

空間 D 次元、連立 J 次元の場合、式 (3.40) の初期条件の導入は

$$\hat{\mathbf{u}}_{n,\text{init}}^k = \sum_{m=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k \int_{D^k} \psi_m^k(x) \mathbf{u}_{\text{init}}^k(\vec{x}) d\vec{x} \quad (3.93)$$

と変更される。ただし、 $\mathbf{u}_{\text{init}}^k(\vec{x})$ はメッシュ k における外部から与えられた $t = 0$ における初期条件である。

クーラン条件

DG の場合のクーラン数 (式 3.95) は空間 D 次元、連立 J 次元の場合は

$$C := A \frac{\Delta t}{\Delta x} (2N-1), \quad (3.94)$$

となる。但し、 A は移流速度の空間、連立における最大値

$$A := \max_{d,j} \vec{a}, \quad (3.95)$$

である。

数値流束

数値流束は $D \times J$ 要素をもつ値 \vec{f}^* になり、例えば Local Lax-Friedrich flux(式(3.52))は

$$\vec{f}^*(\mathbf{u}^-, \mathbf{u}^+) = \frac{\vec{f}(\mathbf{u}^-) + \vec{f}(\mathbf{u}^+)}{2} - \frac{|\vec{\lambda}|}{2} \otimes (\mathbf{u}^- - \mathbf{u}^+), \quad (3.96)$$

$$|\vec{\lambda}| := \max_j \left(\max_{\mathbf{u} \in V^\pm} \left\| \frac{\partial \vec{f}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \right\|_j \right), \quad (3.97)$$

$$V^\pm := [u_1^-, u_1^+] \otimes [u_2^-, u_2^+] \otimes \cdots \otimes [u_J^-, u_J^+], \quad (3.98)$$

と変更を受ける。式(3.97)の意味であるが、まず $\frac{\partial \vec{f}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}$ の項で $J \times J$ のヤコビ行列を計算し、内側の $|\cdot|_j$ でその j 番目の固有値を計算し、外側の $|\cdot|$ でその絶対値をとっている。次に内側の \max で \mathbf{u} を超直方体 V^\pm の中で動かして固有値の絶対値の最大値をとる。この時点で (\cdot) の中身の次元は $D \times J$ である¹⁰。最後に外側の \max で $j = 1 \cdots J$ と変化させてその最大値をとり、最終的な D 成分のベクトル $|\vec{\lambda}|$ を得る。

時間発展

時間発展方程式(3.38)は数値流束 \vec{f}^* を用いて

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}_n^k(t)}{\partial t} = \sum_{m=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k (\vec{\mathcal{S}}^T)_{mj}^k \cdot \hat{\mathbf{f}}_j^k(t) + \sum_{m=0}^{N_p-1} (\mathcal{M}^{-1})_{nm}^k \int_{\partial D^k} \vec{n} \cdot \vec{f}^*(u_n^k) \psi_n d\vec{x} \quad (3.99)$$

と変更される。但し、右辺の積分は式(3.36)の形で記述した。 ∂D^k は D^k の $d-1$ 次元の表面、 \vec{n} は外向きの法線ベクトルである。但し式中の二つの \cdot については空間 D 成分の内積を取っている。

limiter

空間が二次元以上の場合の limiter は、まず全次元に対し式(3.59)を吟味し、一つでも当てはまった場合はセル全体を”troubled”としてマークする。その後、基底の一次式成分のみを左右のメッシュの物理量の平均値から定め(式3.60)、二次成分以上はすべて0に変更する(図3.10)。

3.2.5 実装

DG 法全体の流れを図3.11に示す。

¹⁰ \vec{f} 由来の D 次元と固有値の数の J 次元の直積

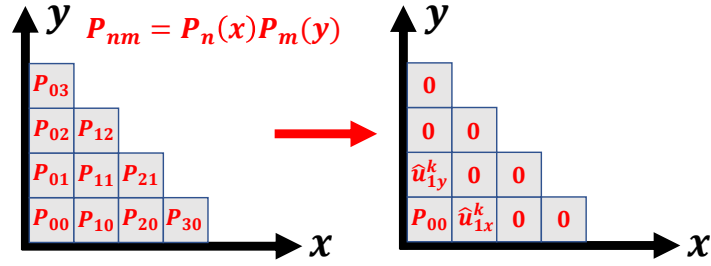


図 3.10: $D = 2$, $N_p = 4$ の場合の二次元 limiter の概念図、 \hat{u}_{1x}^k 等は式 (3.60) で定められた値

3.2.6 計算量オーダー

DG の次数 N とメッシュ分割数 K を引数とした計算時間オーダーを考える。まず、全計算にかかるタイムステップ数は式 (3.94) において、 $\Delta x \sim K^{-1}$ とすることで

$$O(NK), \quad (3.100)$$

であり、一ステップの一メッシュあたりにかかる計算は式 (3.99) より

$$O(N^D) + O(\text{order}^{D-1}) = O(N^D), \quad (3.101)$$

である。 $order$ は数値積分の次数である。左辺第一項は補題 (3.2.1) により (D は定数とするので D の係数は落とした)、第二項は M^{-1} は対角成分のみをもつ行列であることから積分の部分が律速する。右辺は $order$ を N と等しく取ると得られる。但し、式 (3.99) 中の \hat{f}_j^k に含まれるルジャンドル多項式 $P_l(x)$ は $O(1)$ で計算できると仮定した¹¹。

よって、計算 1 ステップにかかる計算時間はメッシュ数 K^D を掛けて

$$O(N^D K^D), \quad (3.102)$$

であり、計算全体ではタイムステップ数を掛けることで

$$O(N^{D+1} K^{D+1}), \quad (3.103)$$

を得る。ルジャンドル多項式以外の基底を使った場合は、 S, M が疎行列ではなくなるため式 (3.94) のシグマを愚直に計算しなければならず、計算量は

$$O(N^{2D+1} K^{D+1}), \quad (3.104)$$

まで増えてしまう。

¹¹理論上はルジャンドル多項式は $O(l)$ 個の項を持つ多項式の計算なので計算量は $O(l)$ になるが、実際にプロファイリングを行ったところ、 $l < 20$ の場合に対しては関数呼び出しのコストが加算乗算のコストを上回るので、実質的に $O(1)$ になった

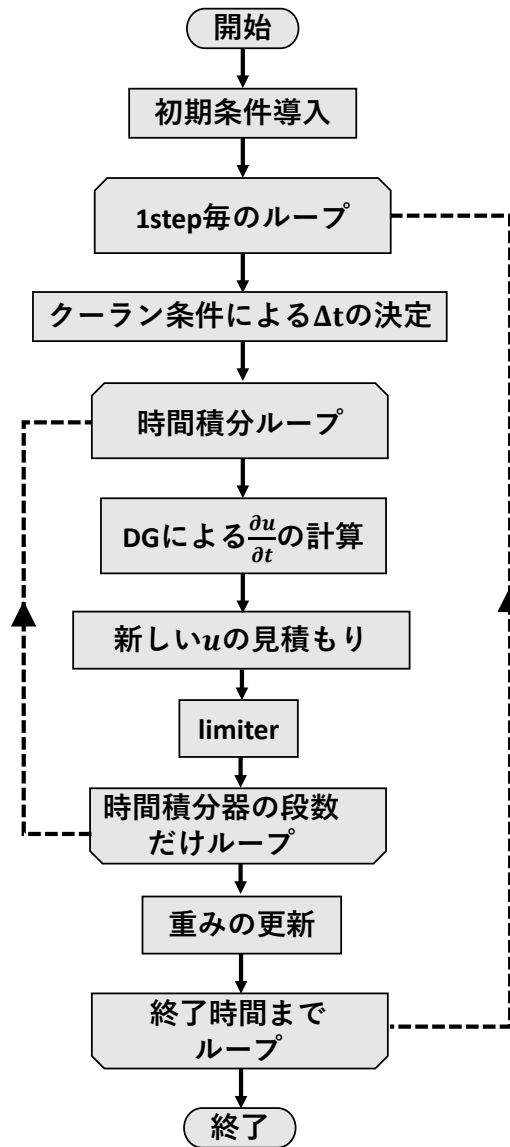


図 3.11: 実際の計算の流れ

3.2.7 メモリ使用量

一メッシュに一つの浮動小数が対応する MP 法などの方法と違い、DG 法は一メッシュあたり N_p 個の浮動小数を記録しておく必要がある。このため、理論上必要な最小限のメモリは (倍精度浮動小数を使用した場合)、

$$\text{Memory}(K, N, D) \sim K^D N_p(D, N) \times 8\text{byte}, \quad (3.105)$$

である。これは空間一次元 $D = 1$ の際は特にメリットとならないが、空間多次元の場合は $N_p(D, N)$ の係数のおかげでメモリが節約できる。例えば、 $D = 3$ の場合

$$\text{Memory}(K, N, 3) \sim \frac{K^3 N(N+1)(N+2)}{6} \times 8\text{byte}, \quad (3.106)$$

と係数 $\frac{1}{6}$ の分だけ有利になる。例として、 $N = 4, K = 128$ のメッシュで三次元計算を行う場合のメモリ使用量は $\text{Memory}(128, 4, 3) \sim 320\text{Mbyte}$ である。

Chapter 4

Result

4.1 共通設定

この章では、特に指定のない限りは、クーラン数 = 0.12(式 3.23)、3 次の TVD ルンゲクッタ (式 3.19)、Local Lax-Friedrich flux(式 3.52、3.53)、DG 法の基底はルジャンドル多項式 (式 3.42) を用いて計算を行った。

4.2 移流方程式 (1D)

4.2.1 ガウス積分次数の検討

ガウスルジャンドル積分 (Appendix C) の次数は、計算の精度とコストに直結するため、精度を落とさない必要最低限の次数を採用する必要がある。ここでは、
sin 波の一次元移流問題

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \pi \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (0 \leq x \leq 2\pi : \text{periodic}), \quad (4.1)$$

$$u(x, 0) = \sin x, \quad (4.2)$$

を $t = 0$ から $t = 2$ まで積分し、数値積分の次数と DG 法の次数を変化させて誤差の収束を調べた。滑らかな問題のため、limiter は使用していない。

例として、DG の次数 $N = 4$ のときの誤差収束を図 4.1 に示す。さらに、DG の次数と数値積分の次数を変えた時の誤差のふるまいを表 4.1 に示す。

この結果を踏まえ、今後は数値積分の次数を N と同じにとる。

4.2.2 矩形波

$u(x)$ の値の不連続性を含む場合のテストとして矩形波の一次元移流問題

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (0 \leq x \leq 2 : \text{periodic}), \quad (4.3)$$

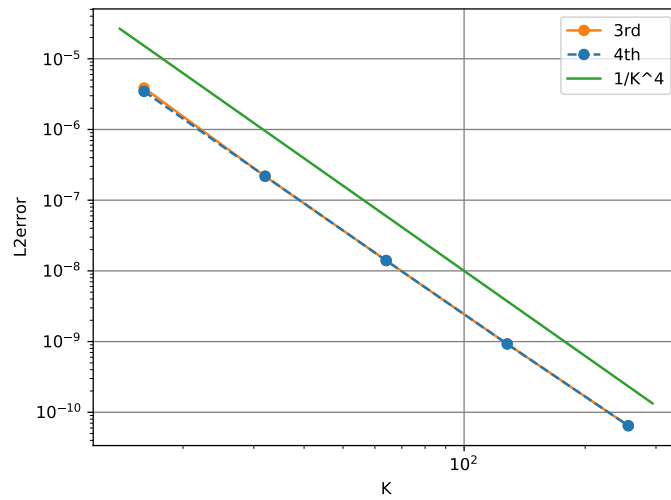


図 4.1: sin 波での DG4 に対し, 数値積分次数を 1st~4th に変えた時の誤差解析の結果
メッシュ数は 8~256, 時刻は $t = 2$, 1st, 2nd については発散した

N_P \ integral order	1st	2nd	3rd	4th	5th
1	⊙	⊙	⊙	⊙	⊙
2	○	⊙	⊙	⊙	⊙
3	×	⊙	⊙	⊙	⊙
4	×	×	⊙	⊙	⊙
5	×	×	×	○	⊙

表 4.1: DG 法の次数と数値積分の次数の関係: ⊙: 正しく解ける, ○: 収束次数は同じだが係数が劣る, △: 収束次数が悪い (該当なし), ×: 発散する

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & (\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{3}{2}) \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases} \quad (4.4)$$

を $t = 0$ から $t = 2$ まで積分し, limiter の種類を変化させて誤差と振動の様子を比較した。TVB limiter については曲率パラメータ $M = 10$, filter については $s = 6$, $\eta_c = 0.1$, $\alpha = 36$, LMPPB limiter については $D = 1$ とした。

波形

メッシュ数 $K = 32$, 次数 $N = 4$ について, 各々の limiter をかけたときの $t = 2$ における波形を図 4.2 から図 4.9 に示す。各図とも緑色の線が解析解, オレンジ色の線が数値解である。

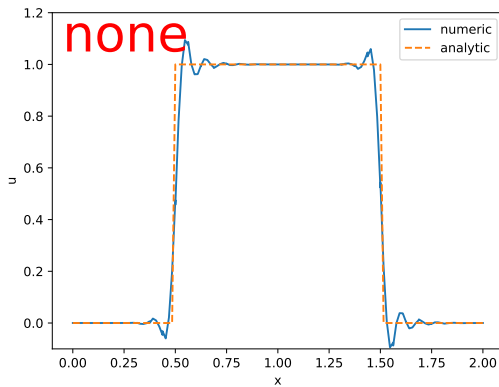


図 4.2: limiter 評価:none limiter
 $K = 32, N = 4, t = 2.0$

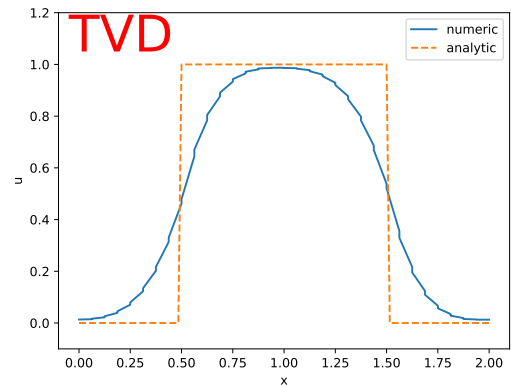


図 4.3: limiter 評価:slope limiter
 $K = 32, N = 4, t = 2.0$

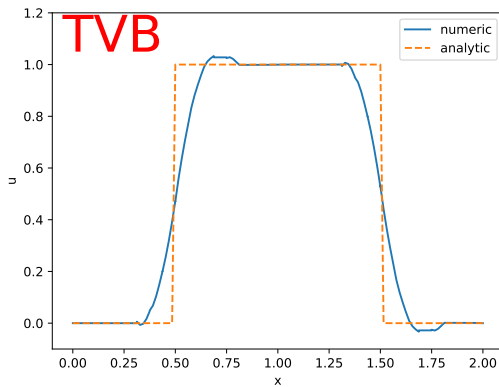


図 4.4: limiter 評価:TVB limiter
 $K = 32, N = 4, t = 2.0, M = 10$

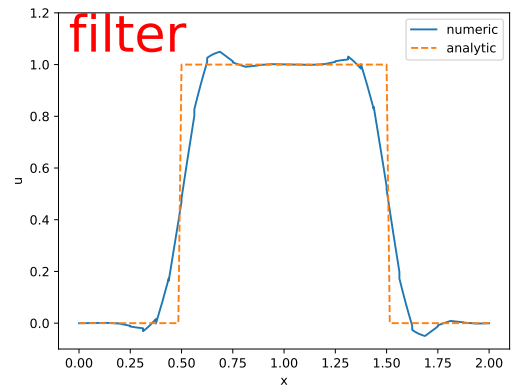


図 4.5: limiter 評価:filter
 $K = 32, N = 4, t = 2.0, s = 6,$
 $\eta_c = 0.1, \alpha = 36$

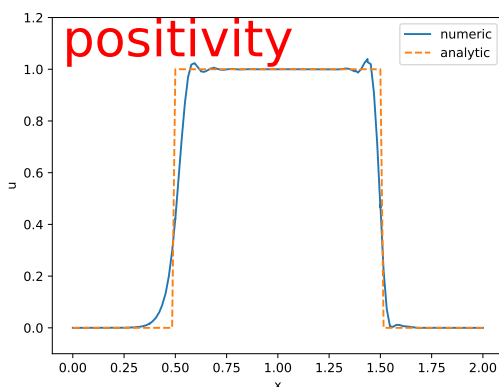


図 4.6: limiter 評価:positivity limiter
 $K = 32, N = 4, t = 2.0$

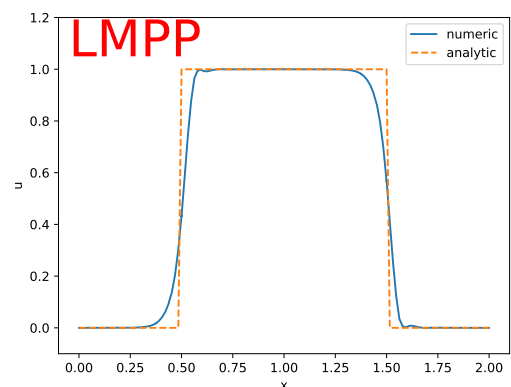


図 4.7: limiter 評価:MPPlocal
 $K = 32, N = 4, t = 2.0$

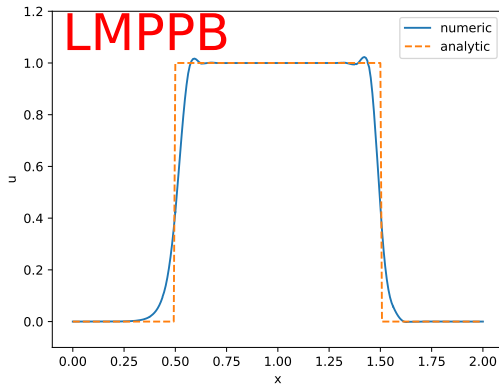


図 4.8: limiter 評価:MPPlocalTVB
 $K = 32, N = 4, t = 2.0, D = 1$

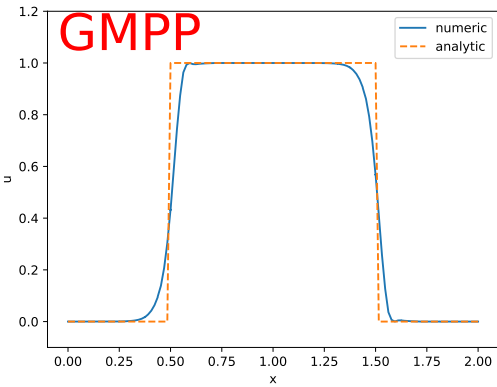


図 4.9: limiter 評価:MPPglobal
 $K = 32, N = 4, t = 2.0$

誤差解析

DG の次数を $N = 4$ に固定し、メッシュ数 K と、limiter の種類を変化させて解析解と数値解の L^2 誤差 (Appendix A.1) を調べた。

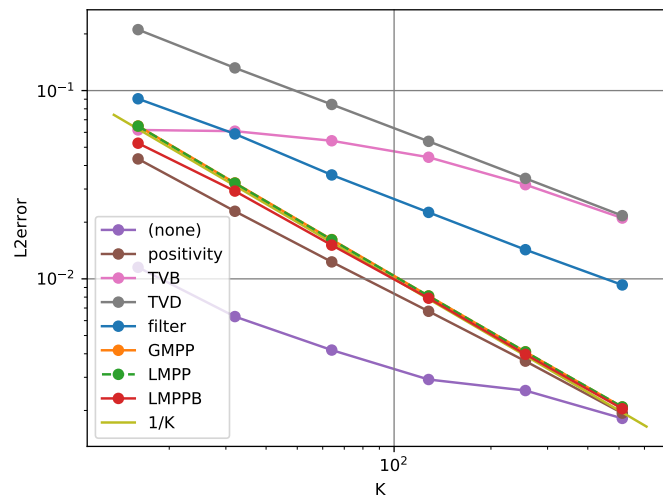


図 4.10: 矩形波移流の誤差解析:
 DG 法の次数 $N = 4$, メッシュ数 16~512, $t = 2$

4.2.3 sin 波

滑らかな問題の例として、sin 波の一次元移流問題式 (4.1)(4.2) について、前節と同様の解析を行った。但し、今回は DG の次数 $N = 3$ 、ルンゲクッタの次数を 4 次にした。問題の性質上、positivity limiter についてはテストを行わなかった。

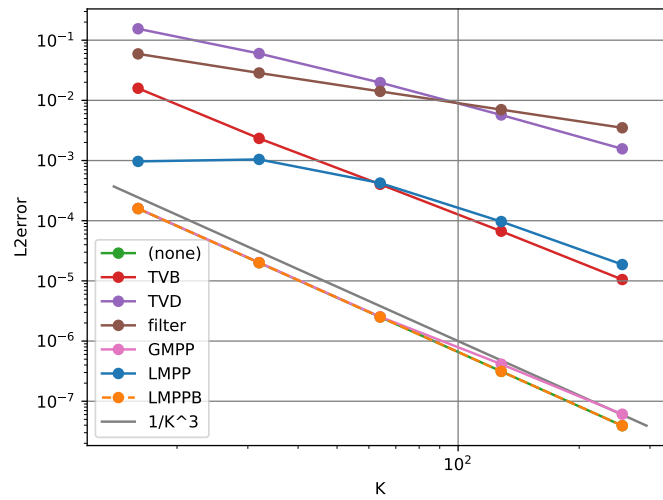


図 4.11: sin 波移流の誤差解析

滑らかな sin 波移流の問題について、limiter が精度を落とさないかどうかを各々の limiter について確かめ、誤差の収束をプロットした。

4.2.4 階段波

MPP limiter の global/local の性質を調べるため、移流方程式

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (0 \leq x \leq 1 : \text{periodic}), \quad (4.5)$$

について階段波

$$u(x, 0) = \begin{cases} 0 & \left(x \leq \frac{1}{4}\right) \\ \frac{1}{2} & \left(\frac{1}{4} < x \leq \frac{2}{4}\right) \\ 1 & \left(\frac{2}{4} < x \leq \frac{3}{4}\right) \\ \frac{1}{2} & \left(\frac{3}{4} < x\right), \end{cases} \quad (4.6)$$

を与えて $t = 0$ から 1 まで積分し、LMPP limiter と GMPP limiter を使用して前節と同様の解析を行った。特に、 $N = 4$ 、 $K = 64$ の場合の波形を図 4.12、4.13、4.14 に示す。 $N = 4$ の場合の誤差解析を図 4.15 に示す。

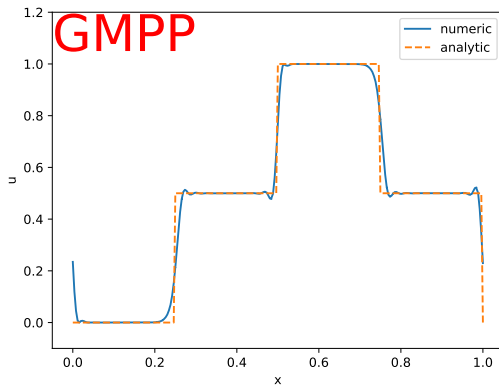


図 4.12: 階段波テスト:GMPP limiter
 $N = 4, K = 64, t = 1.0$

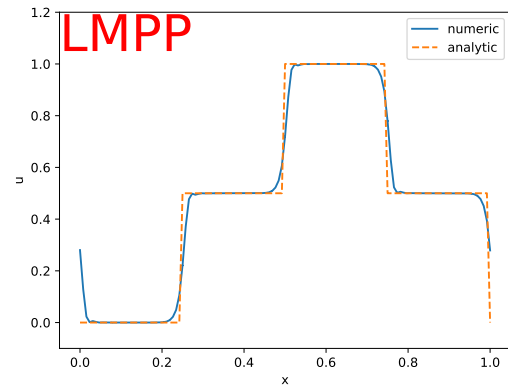


図 4.13: 階段波テスト:LMPP limiter
 $N = 4, K = 64, t = 1.0$

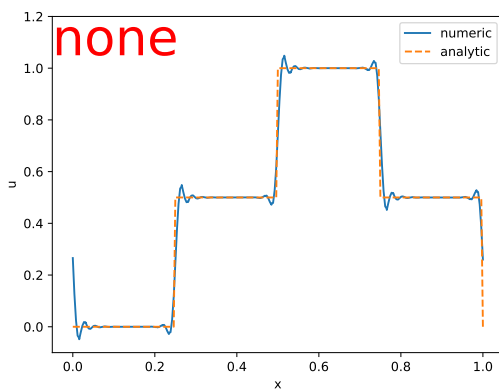


図 4.14: 階段波テスト:no limiter
 $N = 4, K = 64, t = 1.0$

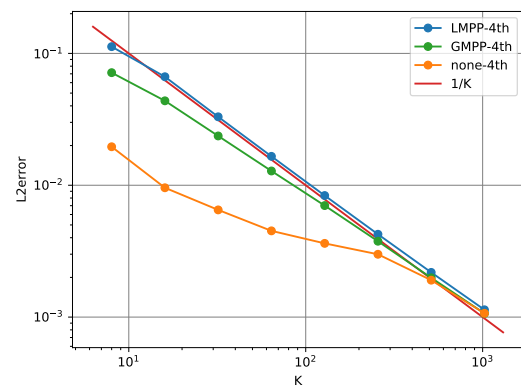


図 4.15: 階段波:limiter 別の誤差解析
 どの方法においても一次精度を達成する

4.3 移流方程式 (2D)

多次元の移流方程式 (2.27) について、空間次元 $D = 2$ とし、 \vec{x} の定義域を $[0, 2] \times [0, 2]$ (周期境界)、移流方向ベクトル \vec{a} を 30 度の方向

$$\vec{a} = \left(\cos \frac{\pi}{6}, \sin \frac{\pi}{6} \right), \quad (4.7)$$

として $t = 0$ から 2 まで積分を行い、DG の次数とメッシュ分割数を変化させて誤差の収束を調べた。limiter は GMPP limiter を用いた。誤差の収束を以下の図 4.16 に示す。

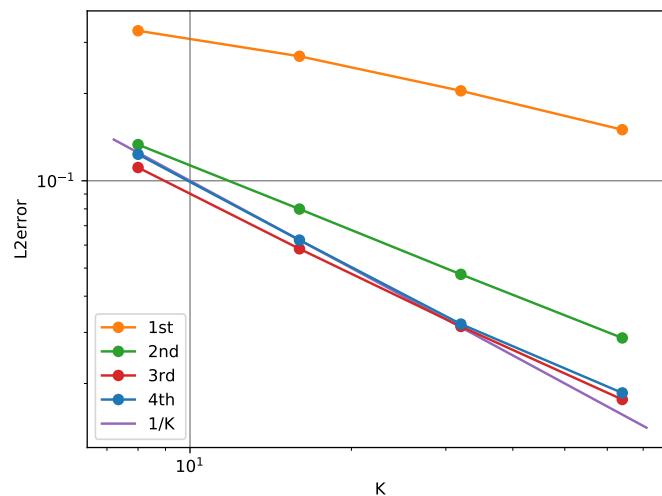


図 4.16: 二次元矩形波移流方程式の誤差解析

空間二次元の場合の GMPP limiter の働きをみるため、 $N = 2$ 、 $K = 64$ の場合について GMPP limiter の有無を変えて計算を行った。 $t = 2.0$ の計算結果について、値が元々の最大最小値を逸脱する領域を白黒で表し、その領域で GMPP limiter が発動する。(図 4.17、4.18)

4.4 非粘性バーガーズ方程式 (1D)

衝撃波を生み、かつ解析解の分かっている問題として非粘性バーガーズ方程式 (式 2.6) について誤差評価を行う。 x の定義域を $[-1, 1]$ 、初期条件を

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1/4 - x^2 & (-1/2 \leq x \leq 1/2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (4.8)$$

とすると、時刻 t での解析解は $0 \leq t \leq 1$ のとき

$$u(x, t) = \begin{cases} \frac{2xt - 1 + \sqrt{t^2 - 4xt + 1}}{2t^2} & \left(-\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{1}{2} \right) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (4.9)$$

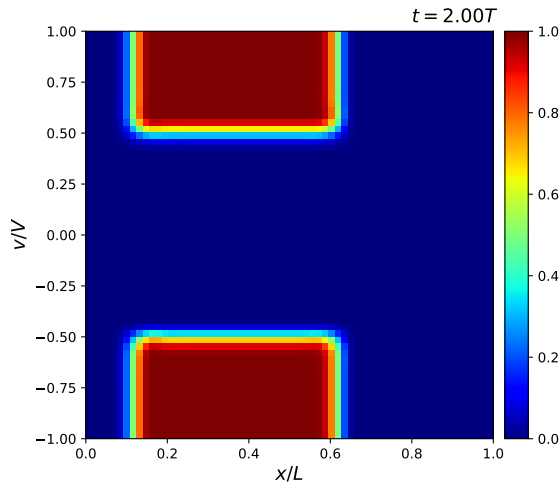


図 4.17: GMPP limiter を掛けた場合

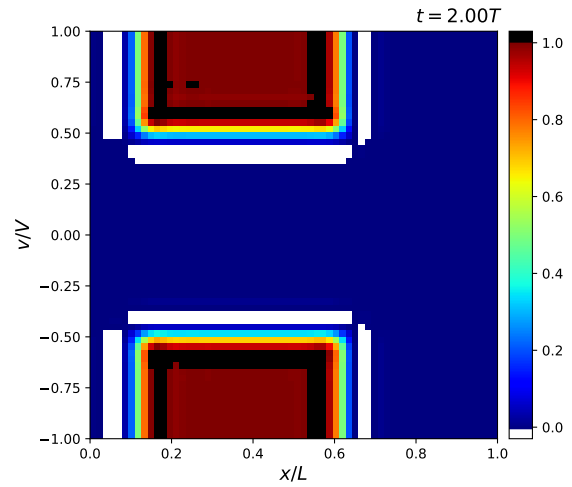


図 4.18: no limiter

$1 < t$ のとき

$$u(x, t) = \begin{cases} \frac{2xt - 1 + \sqrt{t^2 - 4xt + 1}}{2t^2} & \left(-\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{2 - 9t + 2(1 + 3t)^{\frac{3}{2}}}{18t} \right) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (4.10)$$

で与えられ、 $t = 1$ において衝撃波を生じる。解のプロットを図 4.19、4.20 に示す。

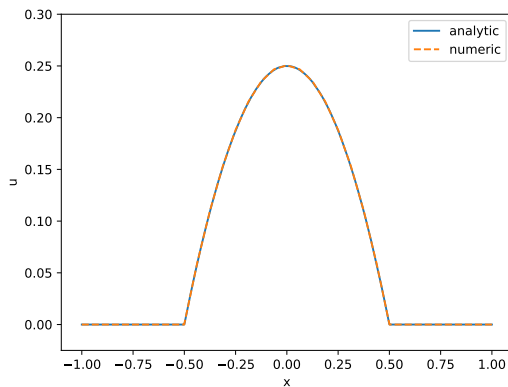


図 4.19: 非粘性バーガーズ方程式
 $t=0.0, N=2, K=32$

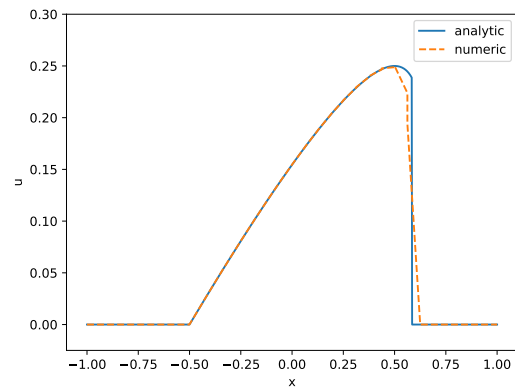


図 4.20: 非粘性バーガーズ方程式
 $t=2.0, N=2, K=32$

この方程式に対して、数値的に $t = 0$ から $t = 2$ まで積分し、メッシュ分割数と DG の次数を変化させて誤差の収束を調べた。limiter は GMPP limiter を用いた。

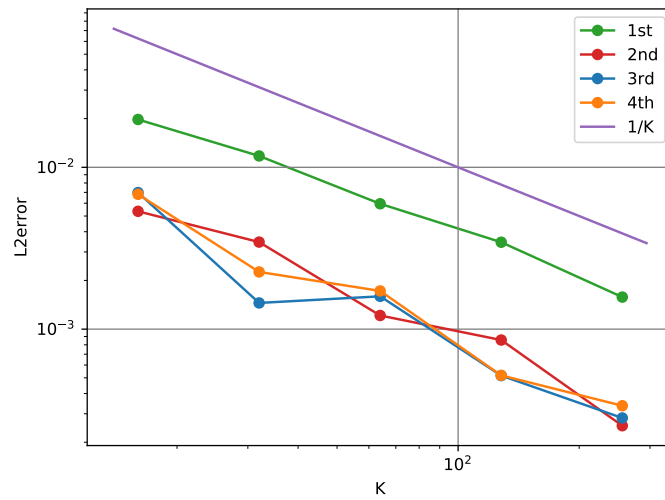


図 4.21: 非粘性バーガーズ方程式の誤差解析

4.5 オイラー方程式 (1D)

4.5.1 sod's problem(1D)

オイラー方程式の保存形 (式 2.15:再掲)

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ m \\ e \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} m \\ \frac{m^2}{\rho} + p \\ (e+p)\frac{m}{\rho} \end{pmatrix} = 0, \quad (4.11)$$

について、完全流体の衝撃波管問題¹のテストである sod's problem(Sod 1978) (初期条件と解析解は Appendix D.2 を参照) を解き、解析解と比較した (図 4.22)。なお、式 (3.97) の行列の固有値は式 (2.21) によって求めた。誤差の収束を図 4.23 に示す。DG の次数 N は 1~3 次、limiter は ρ と e に対し、positivity limiter を用いた。

4.6 ブラゾフ方程式 (2D phase space)

4.6.1 重力不安定性

ブラゾフ方程式 (2.28) に対し、定義域を

$$x : [0, L](\text{periodic}) \times v : [-V, V], \quad (4.12)$$

¹密度や圧力の異なる二つの流体の間に仕切りを設け、それを外した場合の物理現象を表す問題である

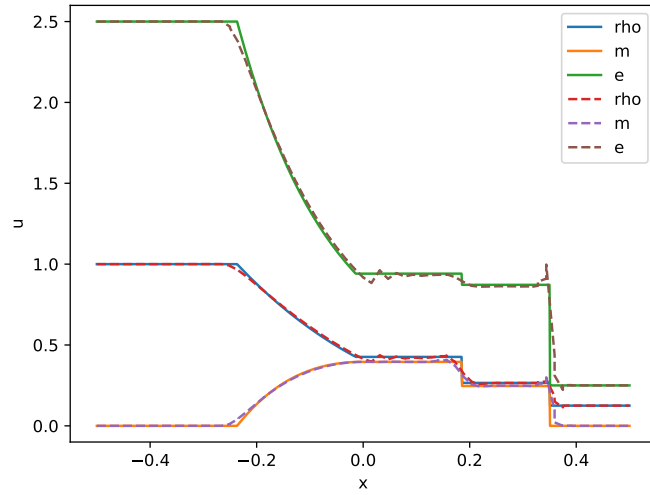


図 4.22: sod's problem(保存形)の解析解との比較:
 $N=2, K=64, t=0.2$

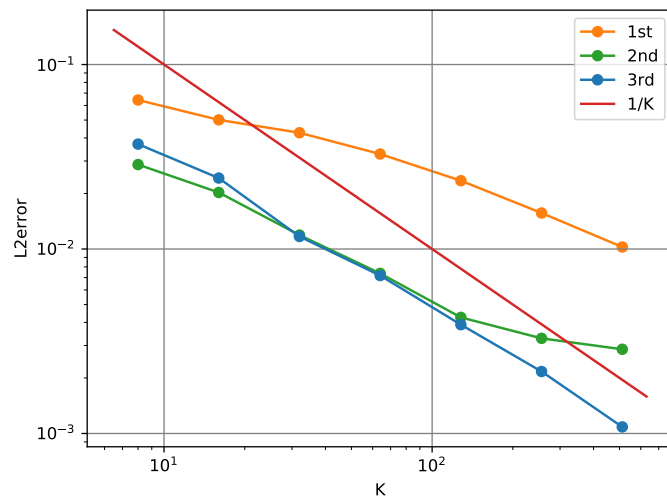


図 4.23: sod's problem の誤差解析

とし、初期条件

$$f(x, v, 0) = \frac{\rho_0}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} (1 + A \cos kx) \exp\left(\frac{-v^2}{2\sigma^2}\right), \quad (4.13)$$

に対し、 $t=4T$ まで積分を行った。但し、パラメータ $L = 1, T = 1, V = L/T, \rho_0 = 1, A = 0.01, \sigma = \frac{L}{4\sqrt{\pi}}, k = \frac{4\pi}{L}$ とした。また、式 (2.30) のポアソン方程式は Appendix F によって解き、式 (2.29) の数値微分は式 (3.8) を用いた。クーラン数は 0.8、LMPPB limiter を用いた。DG 法の次数 N とメッシュ数 K を変えた時の誤差評価を図 (4.24) に示し、その時間発展を図 (4.25~4.29) に示す。なお、この問題には解析解が存在しないため、論文 (Tanaka et al. 2017) の MP (Monotonicity Preserving)²法による詳細な計算結果³を提供していただき、その結果と比較した。比較は、DG 法の結果を多項式補間によって 2048×2048 に焼き直し、式 (A.4) によって行った (図 4.24)。LMPPB limiter の働きをみるため、 $N = 3, K = 64$ の場合について、計算結果の負の領域を白く表示した (図 4.30, 4.31)。

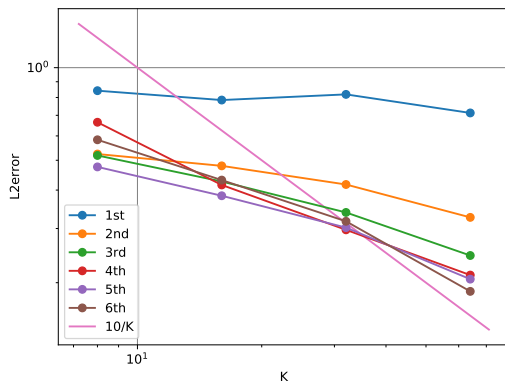


図 4.24: 重力不安定性の誤差解析

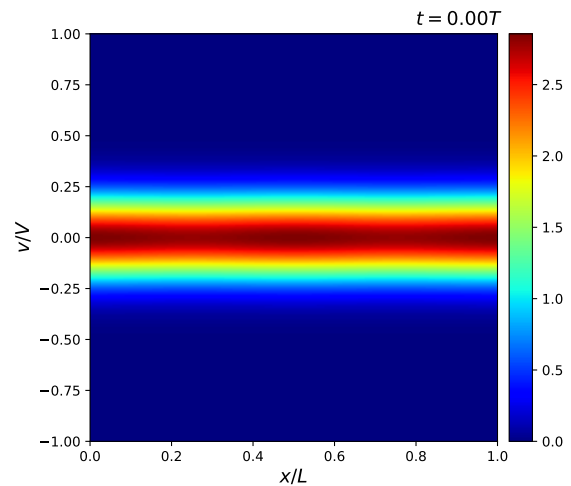


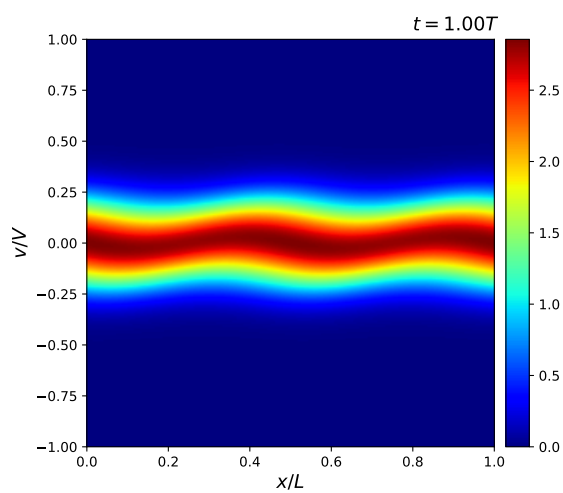
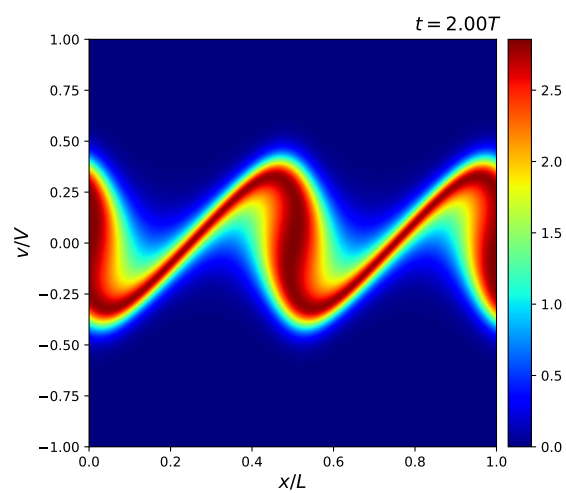
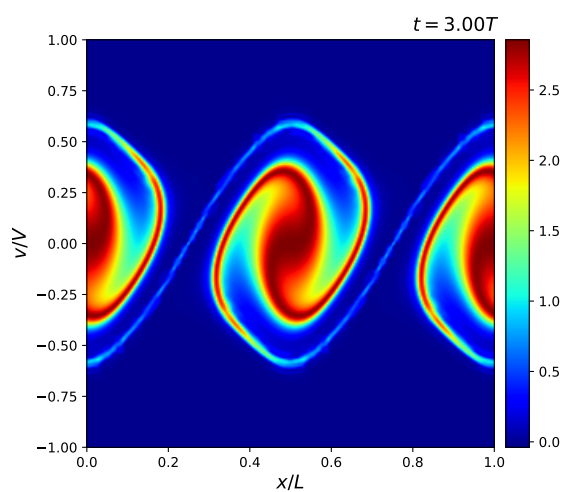
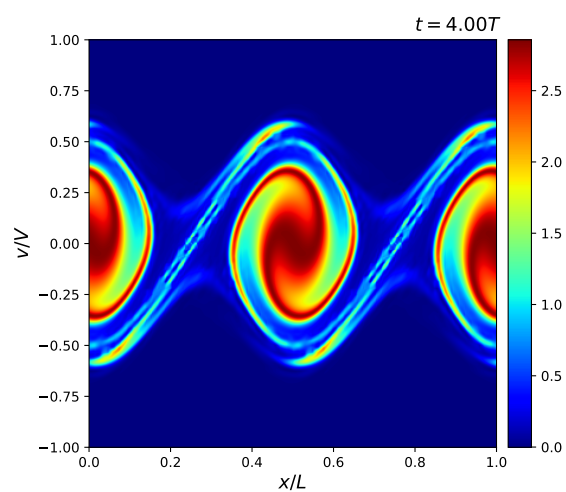
図 4.25: DG4, 64×64 での計算: $t = 0T$

また、メッシュ数を 64×64 に固定し、数値解法を MP5/MP7/DG1/.../DG6 の 8 通りに変化させ、 $t = 4T$ における数値解の鈍り方を等高線を使い可視化した。但し、 $N(1, 2, 3, \dots)$ 次精度の DG 法を DGN と呼ぶこととする。この結果を図 (4.33)~(4.40) に示す。 2048×2048 の精密解についても、比較用として解像度を 64×64 に落としたうえで図 (4.41) に示す。各々の図には、解像度を 64×64 に落としたうえで、精密解との相対誤差を示した。

図 4.33~4.40 の相対誤差と等高線の細かい出来具合によると、 64×64 のメッシュにおいて、細かい構造をとらえる能力は $DG1 \ll MP3 < MP5 < MP7 \simeq DG2 < DG3 \leq DG4 \leq DG5 \leq DG6$ であると分かる。

²紛らわしいが、MP5 法などといったときの MP (Monotonicity preserving) と MPP limiter というときの MPP (Maximum Principal Positivity) は完全に別物であり何の関係もない

³MP7 法による 2048×2048 の計算

図 4.26: DG4,64×64 での計算: $t = 1T$ 図 4.27: DG4,64×64 での計算: $t = 2T$ 図 4.28: DG4,64×64 での計算: $t = 3T$ 図 4.29: DG4,64×64 での計算: $t = 4T$

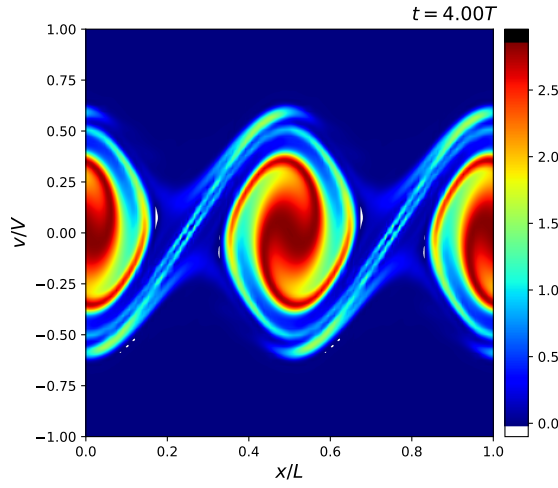


図 4.30: LMPPB limiter を掛けた場合:
DG3, 計算 $K = 64$,
2048×2048 でプロット
マージンの分だけ若干の負の領域
が残る

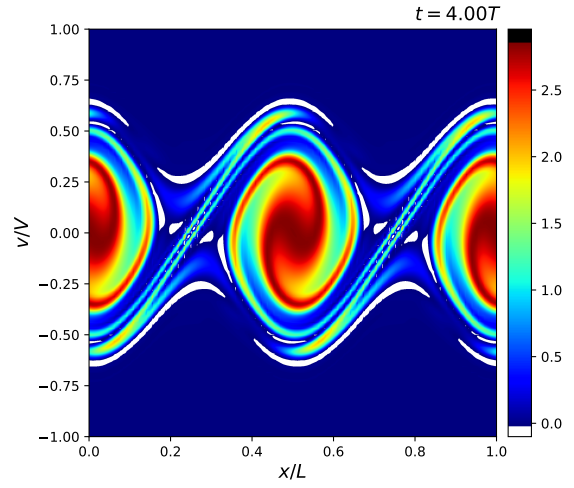


図 4.31: no limiter:
DG3, 計算 $K = 64$,
2048×2048 でプロット
数値振動によって密度が負の領域
が生じる

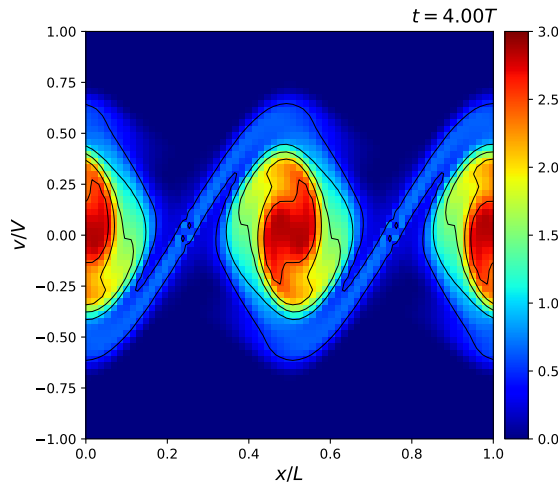


図 4.32: 等高線:MP3 , $K = 64$,
相対誤差 0.296

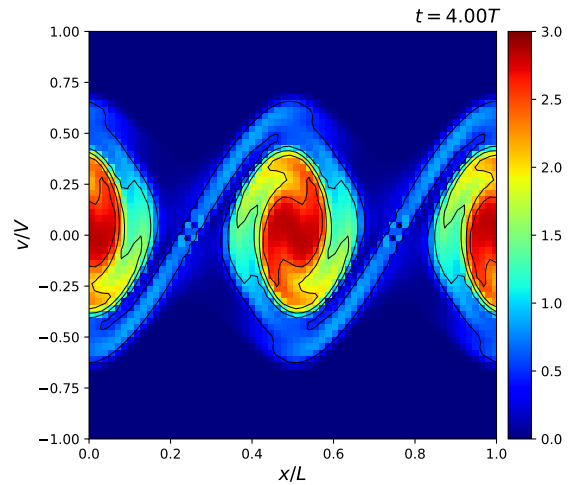


図 4.33: 等高線:MP5 , $K = 64$,
相対誤差 0.242

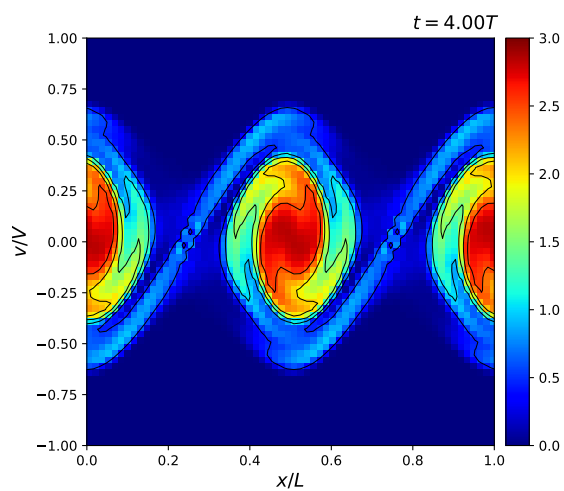


図 4.34: 等高線:MP7 , $K = 64$,
相対誤差 0.229

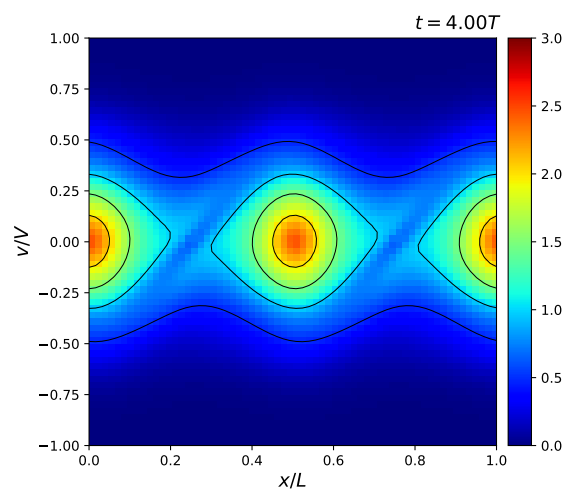


図 4.35: 等高線:DG1 , $K = 64$,
相対誤差 0.615

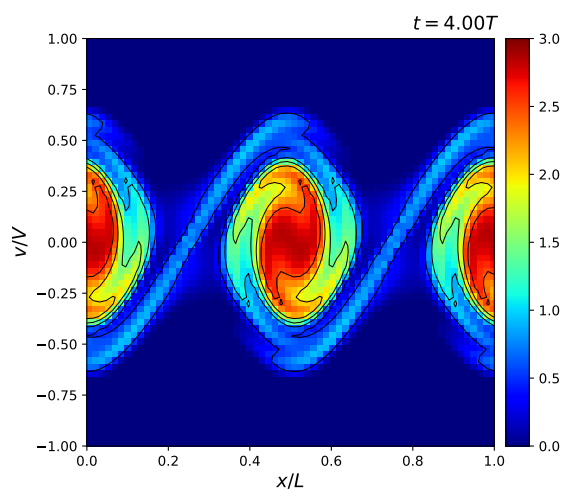


図 4.36: 等高線:DG2 , $K = 64$,
相対誤差 0.196

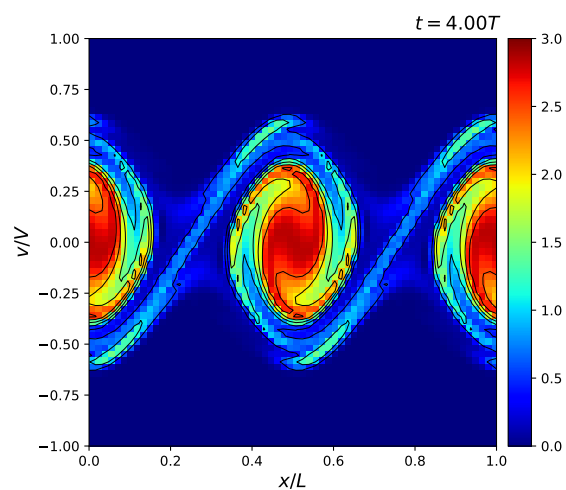


図 4.37: 等高線:DG3 , $K = 64$,
相対誤差 0.108

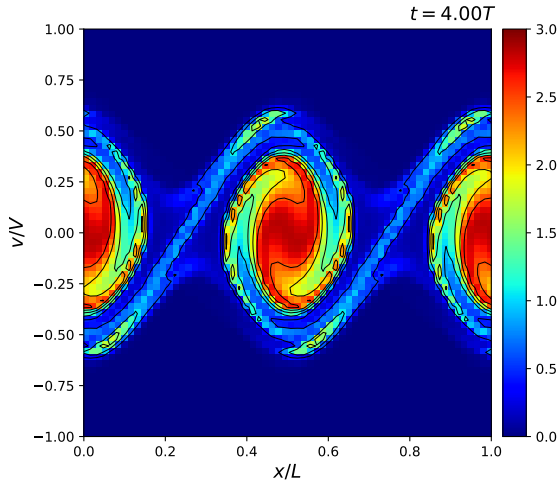


図 4.38: 等高線:DG4 , $K = 64$,
相対誤差 0.079

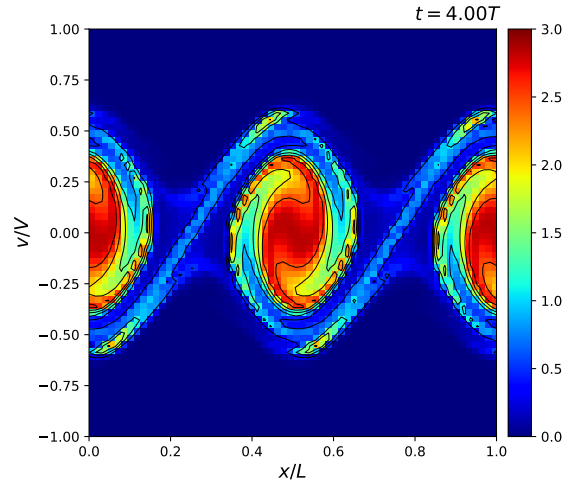


図 4.39: 等高線:DG5 , $K = 64$,
相対誤差 0.080

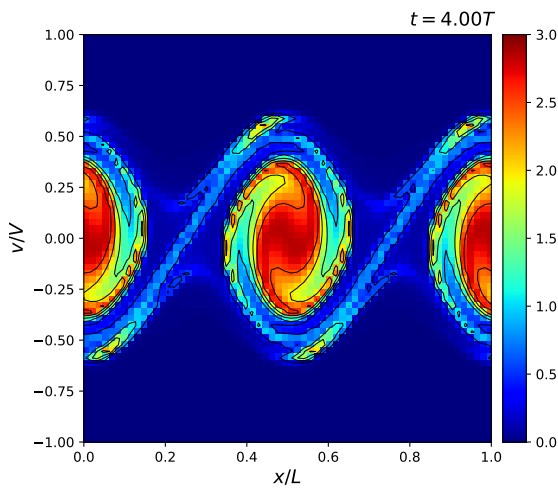


図 4.40: 等高線:DG6, $K = 64$,
相対誤差 0.072

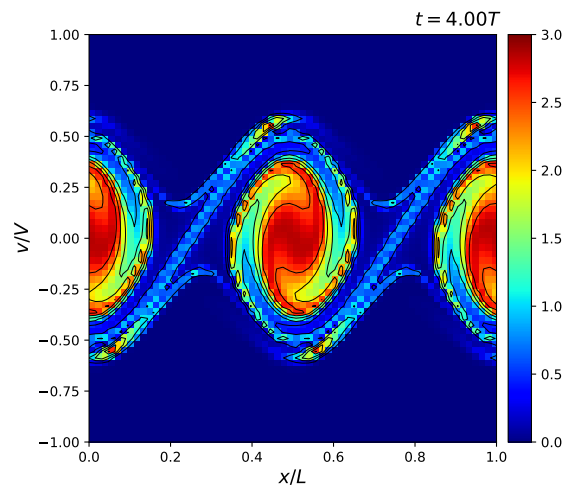


図 4.41: 等高線:精密解の解像度を落としたもの, 相対誤差 0

Chapter 5

Discussion and Conclusion

5.1 ガウス積分次数

表 4.1 の結果より、ガウスジャンドル積分の次数は DG 法の次数と同一にとる場合が最適であると分かった。これは数学的には、基底の数が N 個の DG 法の内部の補間は $N - 1$ 次の多項式であるから、定理 C.1 によると N 次のガウスジャンドル積分を使えば誤差なく求積することができることに由来すると考えられる。逆に、ガウスジャンドル積分の次数を N よりもたとえ 1 であっても下げてしまうと、精度が落ちる場合があることも分かった。

5.2 limiter の特性

5.2.1 MP 系列の limiter の適用範囲

最大値の原理が適用できる移流型の方程式 (移流方程式、バーガーズ方程式、ブラゾフ方程式) については、MP (Maximum Principle) 系列の limiter が最もよい誤差収束を達成した。結合本数 J が 1 ではない場合、係数行列 A がグローバルで一定な場合は領域全体で対角化を行うことで $J = 1$ の方程式に分離できるため、最大値の原理が適用できる。しかしながら、オイラー方程式は結合本数 $J \neq 1$ かつ、その行列 A はグローバルで同じ対角化が不可能な方程式であり¹、このような最大値の原理が適用できない問題に対しては MP 系列の limiter を使うことはできない。

5.2.2 LMPP limiter の滑らかな解に対しての精度低下

GMPP (Global MPP) limiter は領域全体の最大値最小値を制限するのに対し、LMPP (Local MPP) limiter は局所的に前ステップの最大最小値を超えないことを課すため、複数の高さの衝撃波が生じる問題に対して有効だと考えられる (5.2.3 節で議論する)。この LMPP limiter は、一次元移流方程式については、図 4.10 により不連続な初期条件に

¹いわゆる局所的に係数行列を「凍結」する方法を取らなければならない。有限差分法の定式化においてはこの方法は偶然にもうまくいくが、方程式が数学的に分離できていないので凍結した係数行列で変換した解に最大値の原理が適用できるかどうかは非自明である

対しては期待通りの一次精度を達成するが、図 4.11 のように滑らかな初期条件に対しては limiter がいない場合の高次精度を達成しない。このことは、sin 波の数値解の最大値が 1 ステップごとに 1.0 の前後で細かく振動していると考え、定性的には数値解の最大値がステップごとに

$$1, 1 + \Delta u, 1, 1 - \Delta u, 1, 1 + \Delta u, 1, 1 - \Delta u \dots, \quad (5.1)$$

の周期 4 の繰り返しで変化すると考えると説明できる。ただし Δu は微小量である。

LMPP limiter がいない場合は、この振動は時間で平均され誤差を生まないのに対し、LMPP limiter が存在する場合、最大値が前ステップを超える場合は最大値が引き下げられるので、

$$1, 1, 1 - \Delta u, 1 - 2\Delta u, 1 - 2\Delta u, 1 - 2\Delta u, 1 - 3\Delta u, 1 - 4\Delta u \dots, \quad (5.2)$$

と最大値は単調減少し、誤差を生じてしまう。この問題を解決するために考案されたものが LMPPB limiter で、式 3.72 において $\overline{max}^k - max^k \geq \Delta u$ とすることでこの最大値の減少を抑えることができる。

5.2.3 LMPP limiter と GMPP limiter の比較

階段波のように、高さの異なる複数の衝撃波が存在する場合、GMPP limiter では中間の高さの衝撃波について、振動を抑えることができない (図 4.12)。これは、GMPP limiter は global (定義域全体) での最大値最小値を元に limiting を行っているため、それ以外の場所に対しては発動しないからだと考えられる。一方で、LMPP limiter は local (隣接メッシュの最大値最小値のみ) を使用して limiting を行うため、全ての衝撃波について適切に limiting を行うことが可能である (図 4.13)。

誤差解析 (図 4.15) についても、メッシュ数が増えるにつれて limiter を掛けたことによる精度の低下が抑えられ、no limiter の場合に近づいていくことが分かった。逆に、メッシュ数が少ないときは limiter を掛けないことも悪くない選択肢であるといえる。

5.2.4 positivity limiter

密度や圧力など、物理学上の制約で負にならないパラメータのみにかけることができる。sod's problem など、MP 系の limiter が使用不可能な場合に、単独でもある程度の振動を抑えることができるほか、MP 系の limiter と合わせて MPP limiter として使うことができる。解の下限値設定は常に 0 であるので、LMPP limiter のような誤差を生むことがなく、連続、不連続な問題のどちらであっても大きく精度を下げることはないため、使用可能な場合は常にかけた方がよいと考えられる。

5.2.5 TVD/TVB limiter

TVD limiter は振動の抑制力が強すぎ、今回のテスト問題に対しては精度の良い計算が行えなかった。特に、sin 波移流、矩形波移流のどちらに対しても一次未満の誤差収束まで落ちてしまう。TVB limiter は曲率許容パラメータ M を問題ごとに手で入れないとならないため扱いが難しく、あまり精度の良い結果を得られなかった。

5.2.6 filter

filter は極めて原始的な仕組みであるが、図 (4.10) を見ると、矩形波の移流に対しては TVD limiter より精度よく計算ができています。しかし、振動の有無を考えず一様に高周波成分を消してしまうため、滑らかな問題に対しては明らかに精度が悪い。オイラー方程式での sod's problem のように、衝撃波が生まれかつそのほかの部分なるべくフラットな (高周波を含まない) 問題で、positivity limiter のみではどうしても振動が抑えられない場合は採用に値する可能性がある。

5.3 DG 法の最適な次数

まず全ての問題に共通する点として、一次精度の DG 法²は精度が悪く、計算に使用するメリットがない。これは、不連続点をもち最終的に精度が一次に落ちてしまう問題に対しても当てはまり、例えば図 4.21 が示すように、傾きは DG1、DG2 とともに一次精度であっても、誤差の係数が大きく異なる。

次は個別の方程式を、不連続性の程度によって 3 つのグループに分けて考察する。

まず、

(I) 十分に滑らかで、DG 法の次数と同じ誤差収束の精度が出る問題、これは sin 波の移流問題が含まれる。この問題に対しては、DG 法の次数を可能な限り高くすることで、浮動小数点の精度程度の誤差まで容易に到達することができる。さらに limiter も必要ない。

(II) 初期条件に不連続性がある問題や、非常に細かい構造が生まれてくる問題、これには矩形波の移流やブラゾフ方程式が含まれる。これらは、不連続点や細かい構造から誤差が生まれるため、全体の精度が落ちるが、その生じる誤差は高次の DG 法の精度を完全に打ち消すほどではない。その一方で、DG 法の次数を上げていっても (I) とは異なる誤差収束次数において頭打ちになる。そのため、DG 法の次数 N が 2 以上のある値 N_{opt} において計算コストに対する誤差が最適になる。今回のテストに関しては、二次元矩形波移流問題 (図 4.16) については $N_{opt} = 3$ 、ブラゾフ方程式の重力不安定性 (図 4.24) については $N_{opt} \geq 3$ だと考えられる。また、このタイプの問題に対し、limiter を外して計算を行った場合、多少の数値振動はするが発散はしないことが多く、さらにメッシュ分割数 K が小さいときには誤差も limiter 有よりも小さい場合があるため、limiter を掛けないことも選択肢になりうる。

(III) 最後に、非粘性バーガーズ方程式やオイラー方程式など、連続な問題から不連続性が常に生まれてくる問題を考える。これらは、生じる誤差の影響が大きく、高次の DG 法の精度を打ち消してしまい、DG 法の次数 $N = 2$ で精度が打ち止めになる。そのため、DG2 での計算が最適: $N_{opt} = 2$ である。この種類の問題に対し limiter を外してしまうと大きな数値振動を生み誤差収束が悪くなるか、最悪の場合は発散してしまうことも多い。

²メッシュ間隔が一定であるので通常の風上差分法と同一になる

5.4 高次精度の必要性

衝撃波を生じる問題に対しては誤差の収束が最高でも一次精度まで落ちてしまうため、このような問題に対しては DG 法のような高次精度スキームは不向きであり、一次精度の計算にメッシュ数をつぎ込む手法が多く採用されてきた。ここでは、この方法に対する高次精度スキームの利点を議論する。

第一に、図 4.23 のように、DG1 では一次精度すら出ず、DG2 以上ではその傾きが改善する場合がある。このような場合は、高次精度スキームの方が圧倒的に良い計算精度を達成する。

第二に、非粘性バーガーズ方程式 (図 4.21) において、DG1 と DG2 はどちらも一次精度しか出ていないが、その係数には大きな差がある。そのため、式 3.103 をみると、メッシュ数 K を倍にすることと DG 法の次数 N を倍にすることの計算量は同等である (どちらも計算量は 4 倍になる) にもかかわらず、誤差の低下は DG2 を使った場合の方が圧倒的に良い。これは、DG1 においては計算領域全体から一次精度の誤差が染み出てくるのに比べ、DG2 においては衝撃波周辺のみから一次精度誤差が発生し、それ以外の部分から発生する二次精度誤差は実質的に無視できるために係数が小さくなると考えると理解できる。

これらの理由から、衝撃波を生じる問題であっても最低でも二次精度のスキームを使った方が効率的である。

5.5 ブラゾフ方程式について MP 法との比較

ブラゾフ方程式の重力不安定性においては、高次の DG 法は MP 法よりもやや性能が良いと言える。DG3 以上では、細い腕がちぎれているような構造が見られるが、これは 64×64 の解像度で見た精密解 (図 4.41) にも同じように存在するため、これは数値振動やスキームの不備ではなくメッシュの荒さに起因する現象だと考えられる。

DG 法の方が荒いメッシュであっても MP 法よりも解をよく表現できる。その原因は、まず DG 法は自由度 (持っている double 型の値の数) が $N \times K$ であり実質的にメッシュの解像度が上がっていること、および MP 法は slope limiter と MPP limiter の両方を掛けているのに対し、DG 法では MPP limiter のみを使っているからだと考えられる。差分法において、空間高次精度のスキームは必ず数値振動を生む (ゴドノフの定理 (藤井孝蔵 1994)) ために slope limiter が欠かせないが、DG 法においてはその振動の度合いが小さい (例えば矩形波の移流方程式は limiter なしであっても多少の振動は生むが発散はしない)。そのため、MPP limiter のみで比較的安定に計算することが可能になった結果、精度が良くなったと考えられる。

Chapter 6

Summary And Future Work

本研究において、基礎的な偏微分方程式に対する DG 法のパフォーマンスを詳細に調査した。その結果、移流方程式やブラソフ方程式について、適切な limiter を選べば従来の方法以上の誤差収束を達成できた。

オイラー方程式については、本研究では positivity limiter のみを採用した。しかし、最大値の原理を適用していないため、これだけで振動が完全に抑えられているとはいえない(図 4.22)。また、TVD limiter についても精度を大きく落としてしまうため使うことができない¹。このため、オイラー方程式に対するより有効な limiter を開発する余地がある。具体的には、方程式を各移流成分に分離し特性線的なアプローチをとり MPP limiter を適用する方法が第一候補として挙げられる (S.Ii 2007)。オイラー方程式に電磁相互作用を取り入れたものが MHD (Magneto Hydro Dynamics) 方程式である。この方程式は、降着円盤やプラズマをはじめ、より高エネルギーの宇宙現象を扱うことができる。しかし、MHD 方程式は、単純に計算量が増えることに加え、磁場の発散項の取り扱いなど特有の問題があるため (Brackbill & Barnes 1980)、DG 法の基底で補間する扱いでそれらを定式化する必要がある。

オイラー方程式やブラソフ方程式についても、現在精度よく解けているものは実空間一次元 (位相空間二次元) であるから、実際の物理現象に適用するためには実空間三次元 (位相空間六次元) が要求されるため、計算量の壁を破らなければならない (MHD 方程式についても同様)。現在、OpenMP を用いたスレッド並列のみを使用しているので、MPI (Message Passing Interface) などのプロセス並列と組み合わせ、近年のスーパーコンピュータ上で効率よく計算可能なハイブリッド並列ができるように改良する必要がある。² DG 法は、MP 法や WENO 法の高次精度スキームと比較して演算がメッシュ内で閉じているため、並列計算コードができてしまえば、計算時間のスケールングに対しても有利だと考えられる。

¹差分法の slope limiter と DG 法の slope limiter (TVD limiter) は単調性を満たすために周囲のメッシュから一次精度の修正を入れるという点で共通している。slope limiter はメッシュサイズが粗いときには一次精度すら出ず、メッシュを細かくするにつれて一次に落ち着く性質があるため、粗いメッシュで次数を上げる手法である DG 法とは相性が非常に悪い

²近年のスーパーコンピュータは複数の計算ノードで構成されており、各ノードを構成している多数の演算コアを効率的に使用するために共有メモリシステム上での並列計算に適しているスレッド並列 (OpenMP や `std::thread` など) を使い、ノード間では分散メモリシステム上での計算に適しているプロセス並列 (MPI など) を用いたハイブリッド並列が適している。

最後に、現在オイラー的手法においては AMR(Adaptive Mesh Refinement) 法や moving mesh 法を用いてメッシュの形を構造に合わせて再分割したり、動かして時間発展させることや、他にも WENO 法と組み合わせて領域を細かく区切ることで衝撃波部分の精度を稼ぐことが行われている。この手法で、衝撃波問題のみならず、銀河形成シミュレーションなどの大規模変形を伴う問題についても精度よく解くことが可能になる。このためには、ポロノイメッシュ(一般には多角形が敷き詰められたメッシュ)の上での DG 法を定式化する必要があるが、多項式補間の入れ方から多角形上での数値積分など式は非常に複雑になる。

このように DG 法は実装の面では難しいが、一度実装をしまえば高次精度の計算を比較的容易に行うことができる。今後の展望として、まずはオイラー方程式、ブラゾフ方程式について DG 法を空間多次元に拡張し、実際の宇宙物理現象のシミュレーションを行いたい。多次元になったことで増大する計算量の問題に対しては、上記に挙げた方法の中でも、まずは並列化と AMR 法を取り入れ、時間時間の短縮と計算解像度の向上で対応したい。

Acknowledgments

本論文の執筆において、指導教員の吉田直紀教授をはじめ、多くの方々にお世話になりました。この場を借りて感謝申し上げます。

吉田直紀教授には、本研究テーマの導入をはじめ、数値アルゴリズムの専門家である田中賢研究員の紹介、ドイツでの研究議論のセッティング、研究の方針の相談、各種申請書類や本論文の添削と、多岐にわたり非常にお世話になりました。深く感謝しております。

筑波大学の田中賢研究員には、ブラゾフ方程式のMP法での計算結果の提供をはじめ、数値アルゴリズム全般に対する相談や並列計算についての指導をしていただきました。また、本論文を詳細に添削していただきました。私がこの研究を進めることができたのは田中研究員のおかげです。ありがとうございました。

ドイツでの研究議論の際、Christian Klingenberg教授には、DG法についての技術的な相談から、現地でのアパートの手配まで、非常にお世話になりました。現地の数学科の大学院生で、DG法を研究しているJayesh Badwaik氏は、DG法の技巧的な手法、特に空間多次元の場合について詳細に指導してくださいました。また、滞在において、井上茂樹研究員は、海外渡航が初めてであった私を様々な面でサポートしてくださいました。

東京大学の宇宙理論研究室の皆様には、日頃の生活やゼミナールにおいて、大変お世話になるとともに、楽しい日々を過ごすことができました。最後に、精神的、金銭的の両面で私を支えてくださった両親と妹に感謝します。

Appendix A

誤差評価

A.1 L^p -ノルム

$u(\vec{x})$ を有限次元の領域 V で定義されたスカラー関数、 $1 \leq p < \infty$ とするとき、 L^p -ノルムは

$$\|u\|_p := \left(\int_V |f(\vec{x})|^p d\vec{x} \right)^{\frac{1}{p}} \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。関数同士の減算を

$$(f - g)(\vec{x}) := f(\vec{x}) - g(\vec{x}) \quad (\text{A.2})$$

で定義すると $u_0(\vec{x})$ と $u_1(\vec{x})$ の間の L^p 空間上での距離は

$$\|u_0 - u_1\|_p \quad (\text{A.3})$$

で表せる。

A.2 相対誤差

本研究では、領域 V で定義された解析解を $f_{\text{ana}}(\vec{x})$ 、 $f_{\text{num}}(\vec{x})$ を数値解とするとそれらの相対誤差を

$$\epsilon = \frac{\|f_{\text{ana}}(\vec{x}) - f_{\text{num}}(\vec{x})\|_2}{\|f_{\text{ana}}(\vec{x})\|_2} \quad (\text{A.4})$$

で与える。

Appendix B

ルジャンドル多項式

ルジャンドル多項式はルジャンドルの微分方程式

$$\left(\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} \right] + n(n+1) \right) P_n(x) = 0 \quad (\text{B.1})$$

の多項式解 $P_n(x)$ として与えられ (永宮健夫 1967)、
閉区間 $[-1, 1]$ での L^2 内積に対する直交性

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (\text{B.2})$$

を満たす。低次の場合の具体的な表式を以下に示す。波形を図 B.1 に示す。

$$P_0(x) = 1, \quad (\text{B.3})$$

$$P_1(x) = x, \quad (\text{B.4})$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad (\text{B.5})$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad (\text{B.6})$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \quad (\text{B.7})$$

$$P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x), \quad (\text{B.8})$$

本文中で利用する等式

$$\int_{-1}^1 P_n(x) \frac{\partial P_m(x)}{\partial x} dx = \begin{cases} 2 & (n+1 \leq m \text{ かつ } n+1 \equiv m, \text{ mod } 2) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

を示す。まず、ルジャンドル多項式は完全系をなすから微分 $\frac{\partial P_n(x)}{\partial x}$ は $n-1$ 次以下のルジャンドル多項式の和で表すことができ、

$$\frac{\partial P_n(x)}{\partial x} = \sum_k (2n-1-4k) P_{n-2k-1}(x) \quad (\text{B.10})$$

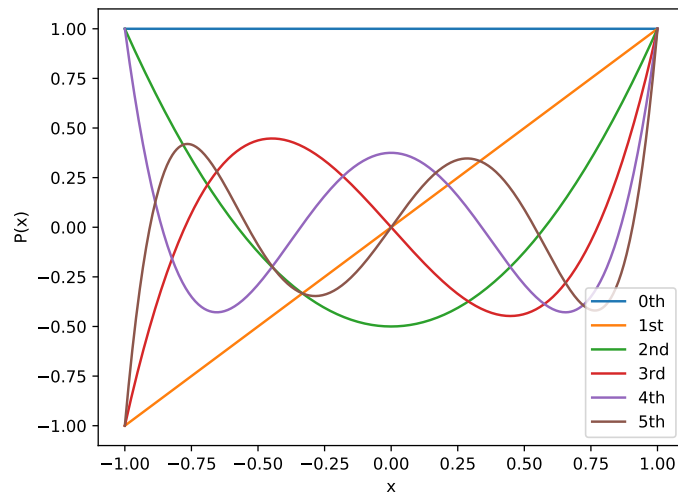


図 B.1: 5次までのルジャンドル多項式

と表せる。但し、 k は $0 \leq k$ かつ $0 \leq n - 2k - 1$ を満たす整数を動く。これを式 (B.9) の左辺に代入し (B.2) を使うと、

$$\int_{-1}^1 P_n(x) \sum_k (2m - 1 - 4k) P_{m-2k-1}(x) dx = \sum_k \frac{2(2m - 1 - 4k)}{2n + 1} \delta_{n, m-2k-1} = \sum_k 2\delta_{n, m-2k-1} \quad (\text{B.11})$$

を得る。 k は整数なので $\delta_{n, m-2k-1}$ は n と m の偶奇が一致しない場合にのみ値をもつ。また、 $0 \leq k$ なので $n + 1 \leq m$ でないと n と $m - 2k - 1$ は一致しえない。このことより式 (B.9) は示された。

Appendix C

ガウスルジャンドル積分

計算機上での積分の方法として、ガウスルジャンドル積分を用いる。これは

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(x_i) \quad (\text{C.1})$$

のように積分を有限和に置き換える近似方法である。 n はガウスルジャンドル積分の次数である。なお、積分区間が $[-1, 1]$ でない場合は変数変換

$$x \rightarrow ax + b, \quad (\text{C.2})$$

をして積分区間を $[-1, 1]$ に帰着させる。点の位置 x_i と重み w_i は以下の表 C.1 で与えられる (Abramowitz 1972)。この係数について、以下の定理が成立する (証明略):

定理 C.1 n を自然数とする。 $n - 1$ 次以下の任意の多項式を n 次のガウスルジャンドル積分で求積したとき、その結果は厳密解と完全に一致する。

また、空間 $D > 1$ 次元の場合、積分範囲が (超) 直方体の場合はガウスルジャンドル積分は以下のように拡張される。

$$I = \int_{-1}^1 \cdots \int_{-1}^1 f(\vec{x}) dx_0 \cdots dx_{D-1} = \sum_{i_0=0}^{n-1} \cdots \sum_{i_{D-1}=0}^{n-1} w_{i_0} \cdots w_{i_{D-1}} f(x_{i_0}, \cdots, x_{i_{D-1}}) \quad (\text{C.3})$$

n	i	x_i	w_i
1	0	0	2
2	0,1	$\pm\sqrt{1/3}$	1
3	0,2	$\pm\sqrt{3/5}$	5/9
	1	0	8/9
4	0,3	$\pm\sqrt{(3 + 2\sqrt{6/5})/7}$	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$
	1,2	$\pm\sqrt{(3 - 2\sqrt{6/5})/7}$	$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$

表 C.1: ガウスルジャンドル積分の係数表

Appendix D

一次元オイラー方程式のリーマン問題の解析解

D.1 リーマン問題

$t = 0$ の初期条件において、 $x < 0$ で物理量 ρ_L, u_L, p_L を持ち、 $x > 0$ で物理量 ρ_R, u_R, p_R を持つ問題をリーマン問題という。一次元オイラー方程式のリーマン問題は、解析解が知られており左向きに希薄波を持ち、右向きに接触不連続面と衝撃波を持つリーマン問題の場合、希薄波の頭と尾、接触不連続面、衝撃波の速度をそれぞれ $S_H < S_T < S_0 < V$ とすると、これらは時間 t に依存しないことが知られており

$x < S_H t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_L \\ u_L \\ p_L \end{pmatrix}, \quad (\text{D.1})$$

$S_H t \leq x < S_T t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_L \left(1 - \frac{\gamma-1}{2c_L} \left[\frac{x-S_H t}{S_T t - S_H t} (u_* - u_L) \right] \right)^{\frac{2}{\gamma-1}} \\ u_L + \frac{x-S_H t}{S_T t - S_H t} (u_* - u_L) \\ p_L \left(1 - \frac{\gamma-1}{2c_L} \left[\frac{x-S_H t}{S_T t - S_H t} (u_* - u_L) \right] \right)^{\frac{2\gamma}{\gamma-1}} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.2})$$

$S_T t \leq x < S_0 t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{*L} := \rho_L \left(\frac{p_*}{p_L} \right)^{1/\gamma} \\ u_* \\ p_* \end{pmatrix}, \quad (\text{D.3})$$

$S_0 t \leq x < V t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{*R} := \rho_R \frac{(\gamma-1)p_R + (\gamma+1)p_*}{(\gamma+1)p_R + (\gamma-1)p_*} \\ u_* \\ p_* \end{pmatrix}, \quad (\text{D.4})$$

$Vt \leq x$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_R \\ u_R \\ p_R \end{pmatrix}, \quad (\text{D.5})$$

で与えられる。但し領域の境の速度、

$$S_H = u_L - c_L, \quad (\text{D.6})$$

$$S_T = u_* - c_{*L}, \quad (\text{D.7})$$

$$S_0 = u_*, \quad (\text{D.8})$$

$$V = \frac{\rho_{*R}u_* - \rho_R u_R}{\rho_{*R} - \rho_R}, \quad (\text{D.9})$$

p_* は方程式

$$u_L - \frac{2c_L}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{p_*}{p_L} \right)^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}} - 1 \right] = u_R + (p_* - p_R) \left(\frac{2}{\rho_R[(\gamma + 1)p_* + (\gamma - 1)p_R]} \right)^{1/2}, \quad (\text{D.10})$$

の解である。式中左辺 c_L, c_{*L} は音速

$$c_L = \left(\frac{\gamma p_L}{\rho_L} \right)^{1/2}, \quad (\text{D.11})$$

$$c_{*L} = \left(\frac{\gamma p_*}{\rho_{*L}} \right)^{1/2}, \quad (\text{D.12})$$

を表し、 u_* は式 (D.10) の両辺の値である。

D.2 sod's problem の場合

オイラー方程式の非保存形 (2.18) のリーマン問題のうち、よく使われるテストとして sod's problem が挙げられ、これは $t = 0$ において

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} \rho_L = 1 & (x \leq 0) \\ \rho_R = 1/8 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (\text{D.13})$$

$$u(x, 0) = u_L = u_R = 0, \quad (\text{D.14})$$

$$p(x, 0) = \begin{cases} p_L = 1 & (x \leq 0) \\ p_R = 1/10 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad (\text{D.15})$$

の初期条件を設定する。(Appendix D.1) の議論より、この場合の解析解は $x < S_H t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.16})$$

$S_H t \leq x < S_T t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{5.91616t-x}{7.09938t} \right)^5 \\ \frac{x+1.18322t}{1.20001t} \\ \left(\frac{5.91616t-x}{7.09938t} \right)^7 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.17})$$

$S_T t \leq x < S_0 t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.42632 \\ 0.92745 \\ 0.30313 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.18})$$

$S_0 t \leq x < V t$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.26557 \\ 0.92745 \\ 0.30313 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.19})$$

$V t \leq x$ において

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ u(x, t) \\ p(x, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.125 \\ 0 \\ 0.1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.20})$$

で与えられる。但し、

$$S_H = -1.18322, \quad (\text{D.21})$$

$$S_T = -0.07027, \quad (\text{D.22})$$

$$S_0 = 0.92745, \quad (\text{D.23})$$

$$V = 1.75216, \quad (\text{D.24})$$

p_* は方程式

$$\sqrt{35}(1 - p_*^{1/7}) = \left(p_* - \frac{1}{10} \right) \left(\sqrt{\frac{400}{60p_* + 1}} \right), \quad (\text{D.25})$$

の解 $p_* = 0.30313$ で、 u_* は式 (D.25) の両辺の値 $u_* = 0.92745$ である。
保存形 (式 2.15) については、

$$m = \rho u, \quad (\text{D.26})$$

$$e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{m^2}{2\rho}, \quad (\text{D.27})$$

と変換することで解析解が求められる (図 D.3, 図 D.4)。

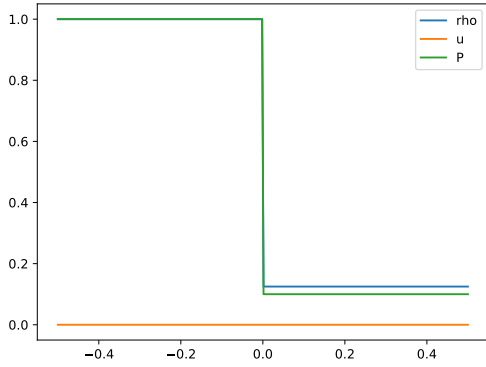


図 D.1: sod's problem の初期条件
(非保存形)

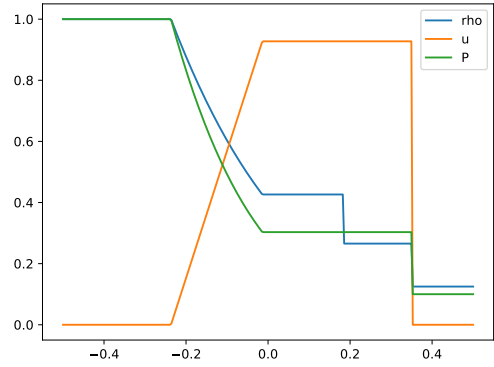


図 D.2: sod's problem の $t = 0.2$ における
解析解 (非保存形)

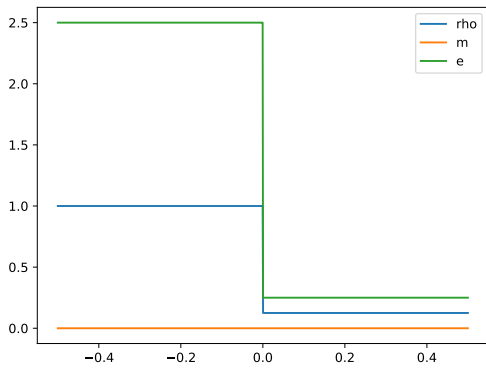


図 D.3: sod's problem の初期条件
(保存形)

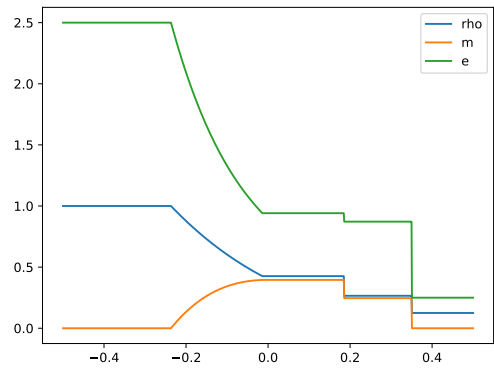


図 D.4: sod's problem の $t = 0.2$ における
解析解 (保存形)

Appendix E

三分探索

$f(x)$ を上に凸または下に凸な関数とするとき、その最大（最小）値は以下の手順で数値的に求められる。

- 初期値として、最大値の探索範囲を与える
- 探索範囲を三分割してそれぞれの点での関数値 $f(x)$ を求め、最大値をとった点の周囲に探索範囲を狭める
- 一度の試行で最大値の候補の範囲は $2/3$ (端点選ばれた場合は $1/3$) になるので、希望の精度になるまで繰り返す

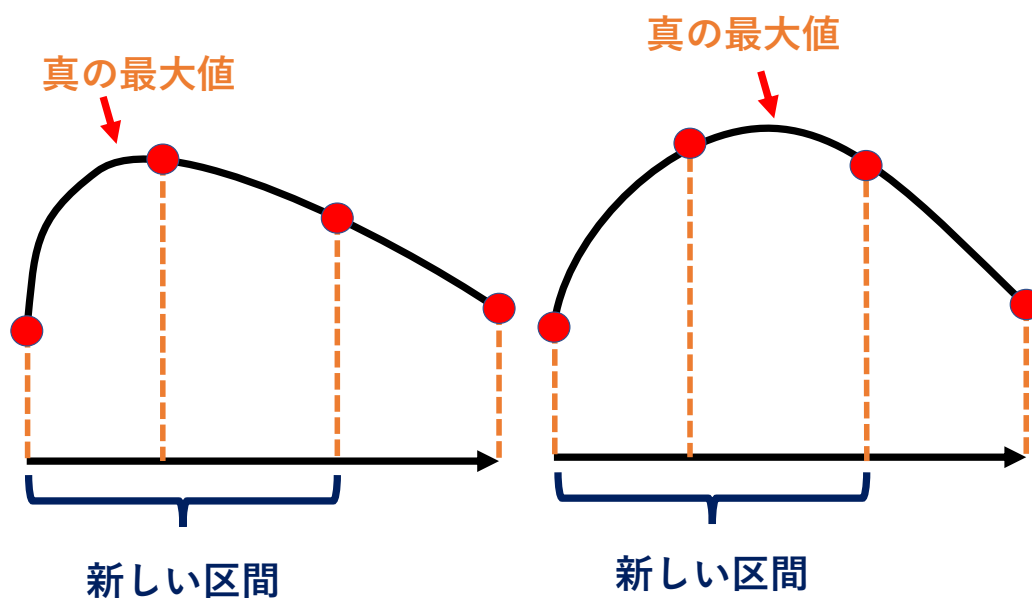


図 E.1: 空間一次元の三分探索

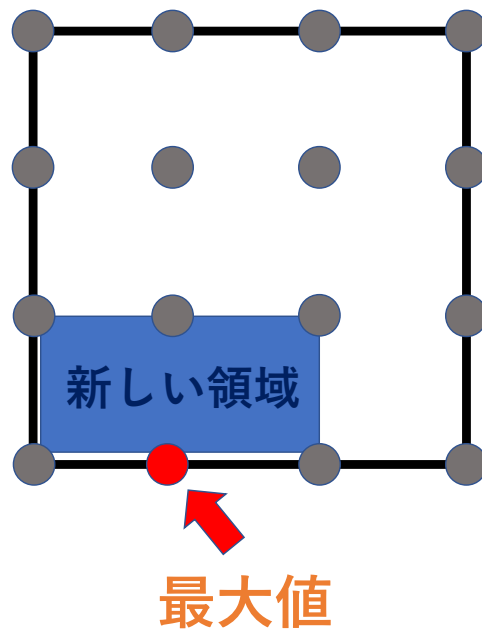


図 E.2: 空間多次元の三分探索

Appendix F

ポアソンソルバー

空間一次元ポアソン方程式

$$-\nabla^2\phi(x) = \rho(x), \quad (\text{F.1})$$

において $\rho(x)$ が与えられたとき、 $\phi(x)$ を数値的に計算することを考える。但し、空間は節 3.1.1 の方法で N メッシュに離散化されているとする。まず、 $\rho(x)$ を離散フーリエ変換¹

$$\tilde{\rho}(t) = \sum_{t=0}^{N-1} \rho(x) e^{-i\frac{2\pi tx}{N}}, \quad (\text{F.2})$$

する。この t に対応する波数 k は、 e の肩の $-i\frac{2\pi tx}{N}$ と $-ikx$ を比較することから、

$$k = \frac{2\pi t}{N}, \quad (\text{F.3})$$

である。式 F.2 の逆変換は

$$\rho(x) = \frac{1}{N} \sum_{t=0}^{N-1} \tilde{\rho}(t) e^{i\frac{2\pi tx}{N}}, \quad (\text{F.4})$$

である。さて、式 (F.1) に式 (F.4) を代入すると、

$$\sum_k k^2 \tilde{\phi}(k) e^{ikx} = \sum_k \tilde{\rho}(k) e^{ikx}, \quad (\text{F.5})$$

であるから、係数を比較して

$$\tilde{\phi}(k) = \frac{\tilde{\rho}(k)}{k^2}, \quad (\text{F.6})$$

であり、この $G(k) = \frac{1}{k^2}$ をグリーン関数といい、特にこの形のグリーン関数を poor man's Poisson solver という。式 (F.6) を式 (F.4) でフーリエ逆変換することで最終的な $\phi(x)$ を得る。

¹実装上は高速フーリエ変換 (FFT) を使って行うため、 $O(N \log N)$ で計算することができる

Bibliography

- Abramowitz, Milton; Stegun, I. A. 1972, Handbook of Mathematical Functions (with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables) (Dover)
- Berger, M. J., & Colella, P. 1989, Journal of Computational Physics, 82, 64
- Bernardo Cockburn, C.-W. S. 1989, Math. Comp., 52, 411
- Brackbill, J. U., & Barnes, D. C. 1980, Journal of Computational Physics, 35, 426
- Guillet, T., Pakmor, R., Springel, V., Chandrashekar, P., & Klingenberg, C. 2018, ArXiv e-prints, arXiv:1806.02343
- Harten, A. 1983, J. Comput. Phys., 49, 357
- Jan S. Hesthaven, T. W. 2008, Nodal Discontinuous Galerkin Methods (Springer Science & Business Media)
- Jiang, G.-S., & Shu, C.-W. 1996, Journal of Computational Physics, 126, 202
- Joel H. Ferziger, M. P. 2003, コンピュータによる流体力学 (シュプリンガー・フェアラーク東京)
- Liu, X.-D., Osher, S., & Chan, T. 1994, Journal of Computational Physics, 115, 200
- Lucy, L. B. 1977, AJ, 82, 1013
- Shu, C.-W. 1987, Math. Comp., 49, 105
- Shu, C.-W., & Osher, S. 1988, J. Comput. Phys., 77, 439
- S.Ii, F. 2007, Journal of Computational Physics, 222
- Sod, G. A. 1978, Journal of Computational Physics, 27, 1
- Suresh, A., & Huynh, H. T. 1997, Journal of Computational Physics, 136, 83
- Tanaka, S., Yoshikawa, K., Minoshima, T., & Yoshida, N. 2017, The Astrophysical Journal, 849, 76
- 永宮健夫. 1967, 応用微分方程式論 (共立出版社), 46-52
- 藤井孝蔵. 1994, 流体力学の数値計算法 (東京大学出版会)