数値解析学から見た
計算手法の高精度化・高効率化の取組み
および物質・材料との連携へ向けた展開

田上 大助 (九大 IMI)

私の履歴書[1/2]

- 田上 大助
    - 理学部 数学科
    - 工学部 機械工学科
    - 理学部 数学科
    - マス・フォア・インダストリ研究所

私の履歴書[2/2]

- 田上 大助
- 専門: 数値計算
  数値解析/計算力学

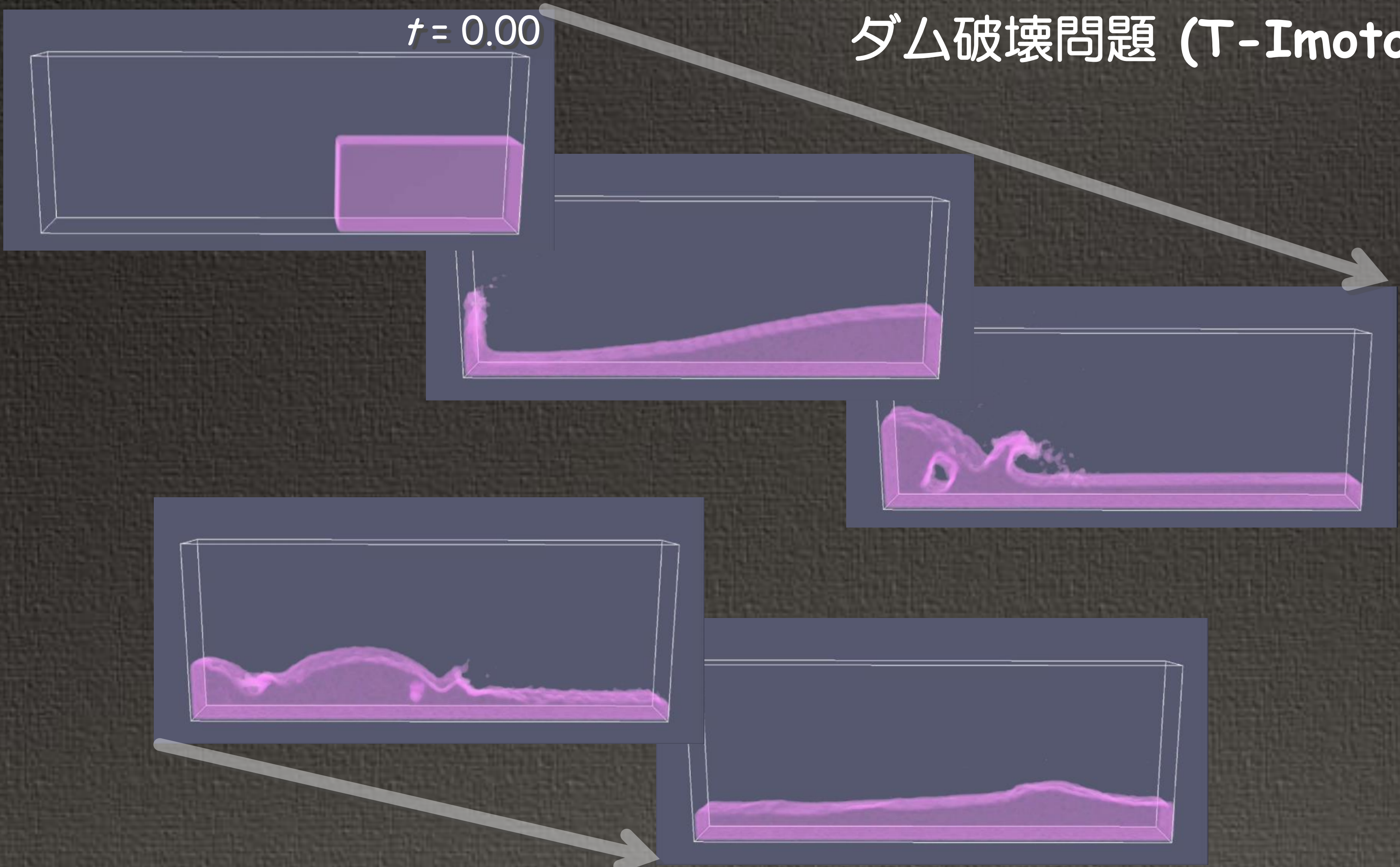
  現象:
  - 流れ問題 (粘性流れ, 粘弾性流れ)
  - 磁場問題 (静磁場, 渦電流)

  計算手法:
  - 有限要素法
  - 領域分割法
  - 粒子法

- 数値計算の適用/精度確認

粒子法の適用例

ダム破壊問題 (T-Imoto)



数理モデルの定式化: 圧縮性流れ問題

Find $\boldsymbol{u}$: 流速; ρ: 密度; p: 圧力; e: エネルギー; T: 温度 s.t.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\otimes\boldsymbol{F} = \boldsymbol{\nabla}\otimes\boldsymbol{G} & [\text{保存系圧縮性Navier-Stokes方程式}], \\ p = \rho R T & [\text{状態方程式}], \\ e = c_V T + \dfrac{1}{2}\rho|\boldsymbol{u}|^2 & \left[\text{エネルギー方程式; } Q = C_v T = e - \dfrac{1}{2}\rho|\boldsymbol{u}|^2\right]. \end{cases}$$

where

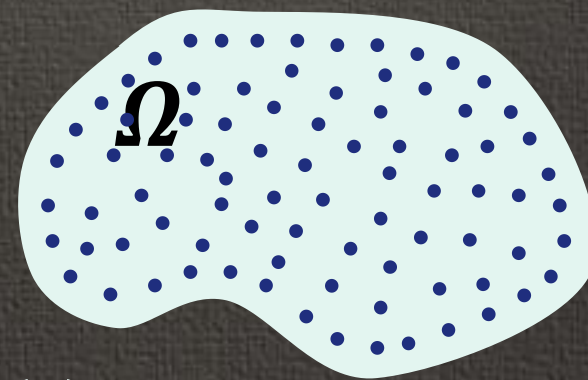
$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho\boldsymbol{u} \\ e \end{pmatrix}, \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} \rho\boldsymbol{u}^T \\ p\mathbf{I} - \rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u} \\ (e+p)\boldsymbol{u}^T \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}^T \\ 2\mu\mathbf{D}(\boldsymbol{u}) - \dfrac{2}{3}\mu(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})\mathbf{I} \\ e\boldsymbol{u}\otimes\left\{2\mu\mathbf{D}(\boldsymbol{u}) - \dfrac{2}{3}\mu(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u})\mathbf{I}\right\} + \dfrac{\mu}{Pr(\gamma-1)}\{\boldsymbol{\nabla}(\gamma T)\}^T \end{pmatrix},$$

μ: 粘性係数; γ: 比熱比; c_V: 体積比熱; R: 気体定数; Pr: プラントル数

[*] Versteeg, H.K. and Malalasekera, W.: 数値流体力学, 第2版, 森北出版, 2007.

SPH法の導入：微分作用素の近似



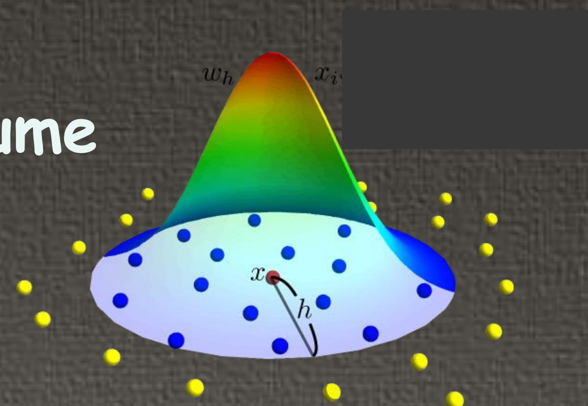
$$(\Pi_h u)(x) := \sum_j V_j\, u(x_j)\, \phi_j(x),$$

$$(\nabla_h u)(x) := \sum_j V_j \left\{u(x_j) - u(x)\right\} \nabla\phi_j(x),$$

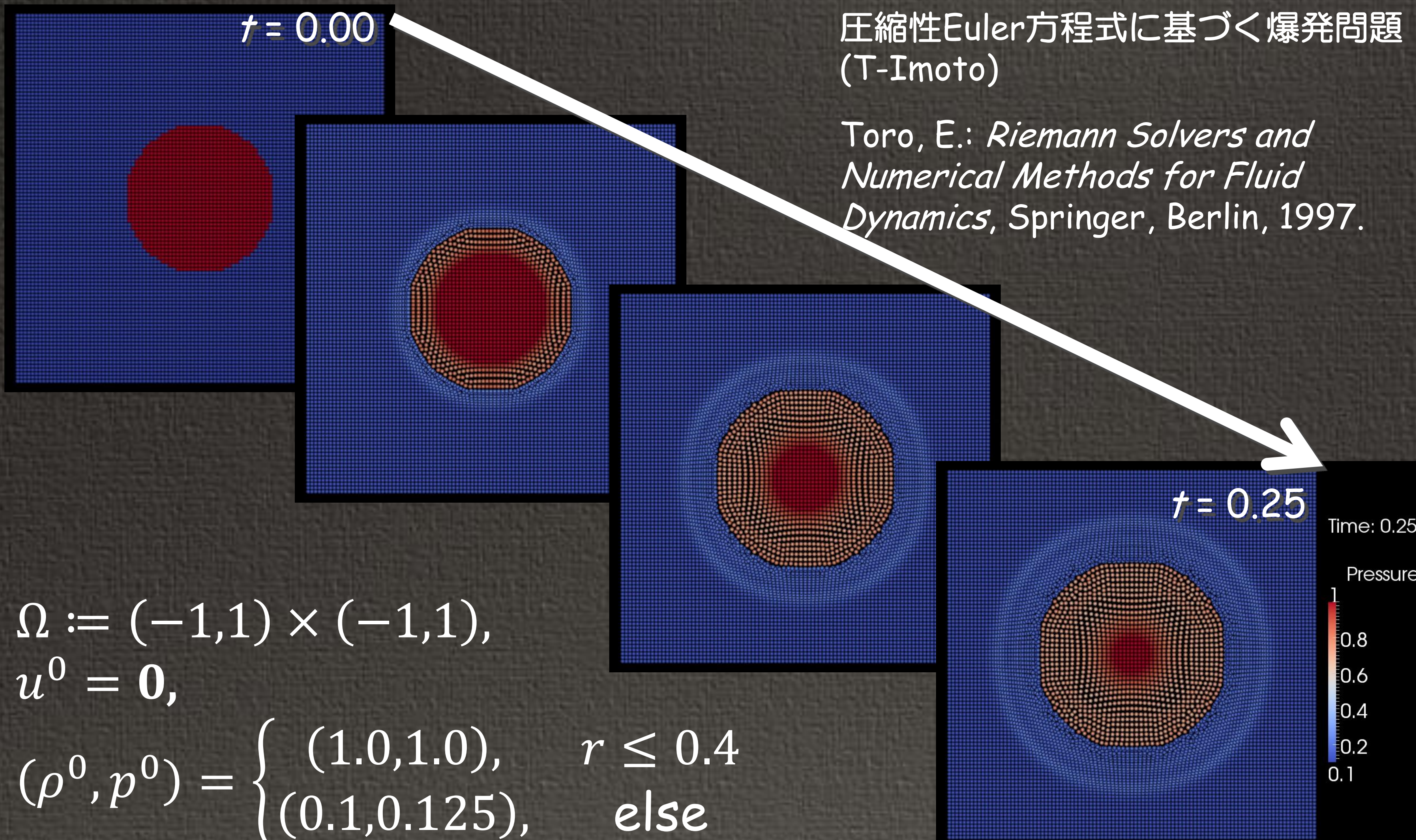
$$(\Delta_h u)(x) := 2\sum_j V_j \frac{u(x) - u(x_j)}{\left|x - x_j\right|^2}(x - x_j)\cdot\nabla\phi_j(x)$$

V_j; Particle volume, for example,

$$\left\{\sum_k \phi_k(x_j)\right\}^{-1}, \quad \frac{|\Omega_h|}{N}, \quad \textbf{Voronoi volume}$$



1次元爆発問題による検証 [1/2]

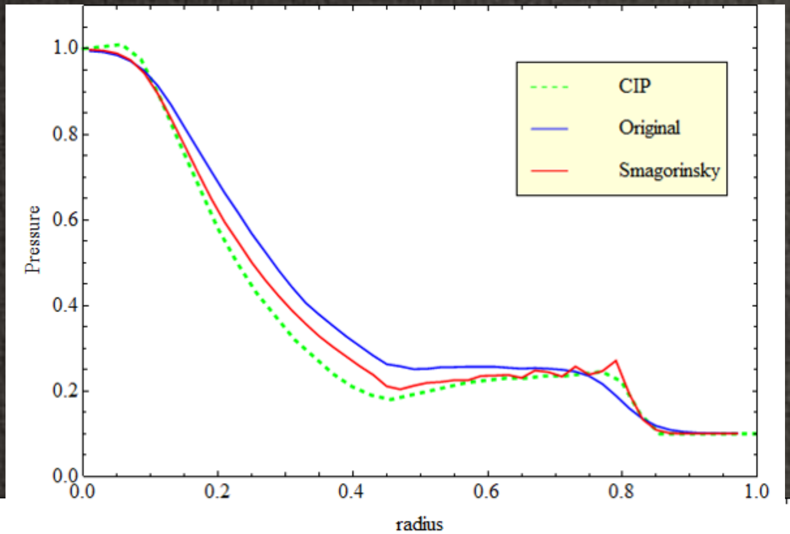


圧縮性Euler方程式に基づく爆発問題 (T-Imoto)

Toro, E.: *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Springer, Berlin, 1997.

$$\Omega := (-1,1) \times (-1,1),$$
$$u^0 = \mathbf{0},$$
$$(\rho^0, p^0) = \begin{cases} (1.0, 1.0), & r \leq 0.4 \\ (0.1, 0.125), & \text{else} \end{cases}$$

1次元爆発問題による検証 [2/2]

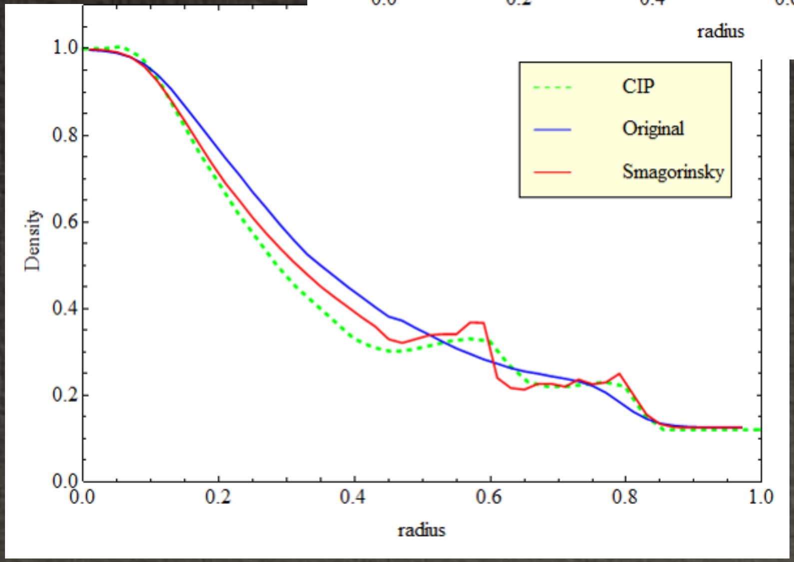


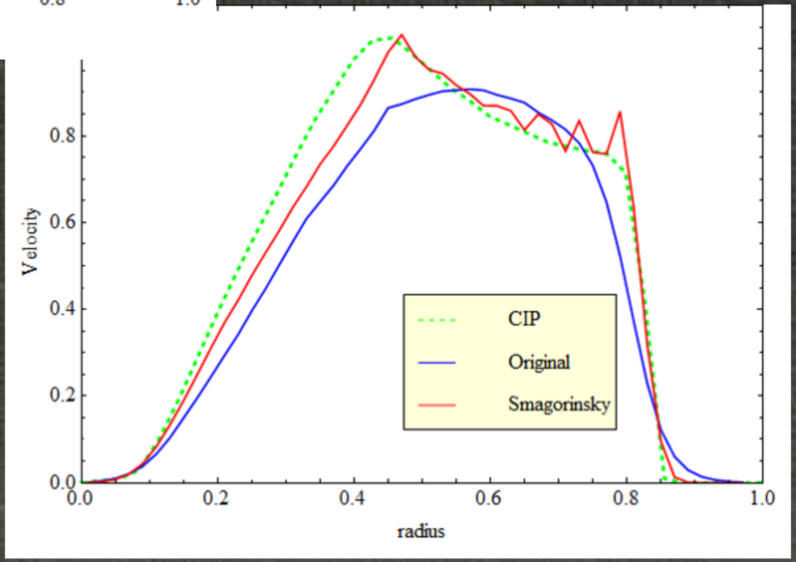
上中: 圧力; 左下: 密度;
右下: 流速

青: SPH 渦粘性無

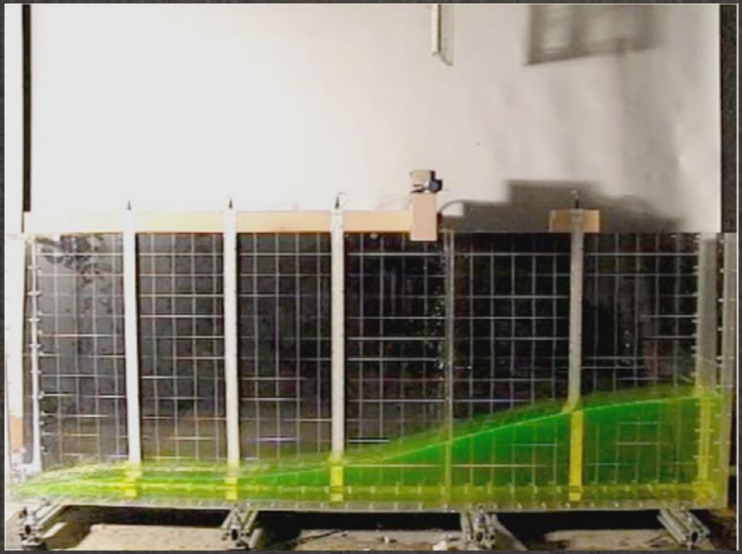
赤: SPH 渦粘性有
緑: 2次元CIP

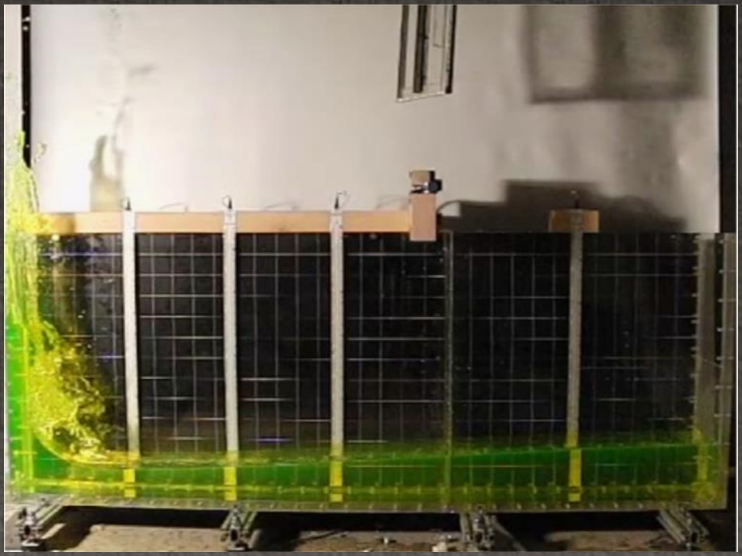
[*] Xiao, Feng, *J. Comput. Phys.*, 195 (2004), 629-654





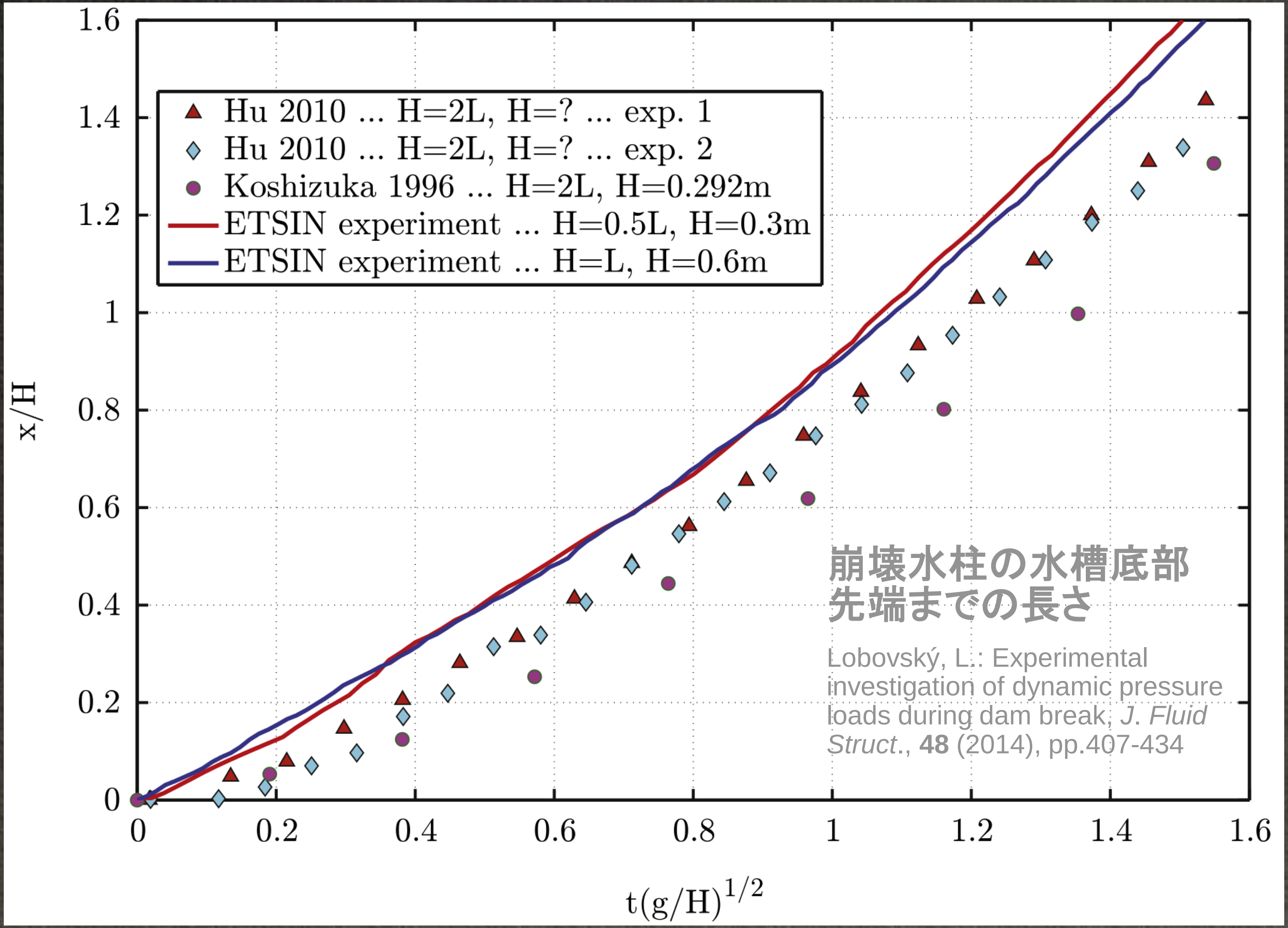
ダム破壊問題による検証 [1/2]





Lobovský, L.: Experimental investigation of dynamic pressure loads during dam break, *J. Fluid Struct.*, **48** (2014), pp.407-434

ダム崩壊問題による検証 [2/2]



- 数値解析 (数学の視点から見た計算手法の正当化)

数値シミュレーションの流れ

自然現象		粘性流体/粘弾性流体
↓	モデル化	↓ 質量保存 運動方程式 構成方程式
数理モデル		Navier-Stokes方程式/ Oldroyd-Bモデル
↓	離散化	↓ 有限差分法 有限要素法 有限体積法 粒子法
近似方程式		連立 (非) 線形方程式

数値シミュレーションの流れ

粘性流体/粘弾性流体

↓ 質量保存
運動方程式
構成方程式

Navier-Stokes方程式/
Oldroyd-Bモデル

↓ 有限差分法
有限要素法
有限体積法
粒子法

連立 (非) 線形方程式

数値解析学

- (非定常) 非圧縮Navier-Stokes方程式 + 有限要素法
  - …, Girault-Raviart (1979), …, Heywood-Rannacher (1982), …, Guermond-Quartapelle (1998), …, T-Tabata (2000), …
- 熱対流問題 + 有限要素法
  - …, Boland-Layton (1990), Bernardi, et al. (1995), …, Tabata-T (2005), …
- 粘弾性流れ問題 + 有限要素法
  - …, Bonito, et al. (2007), …, Lee, et al. (2011), … , T (2012), …
- Poisson方程式/熱方程式/移流方程式 + 粒子法
  - Raviart (1985), …, Imoto-T (2015), …

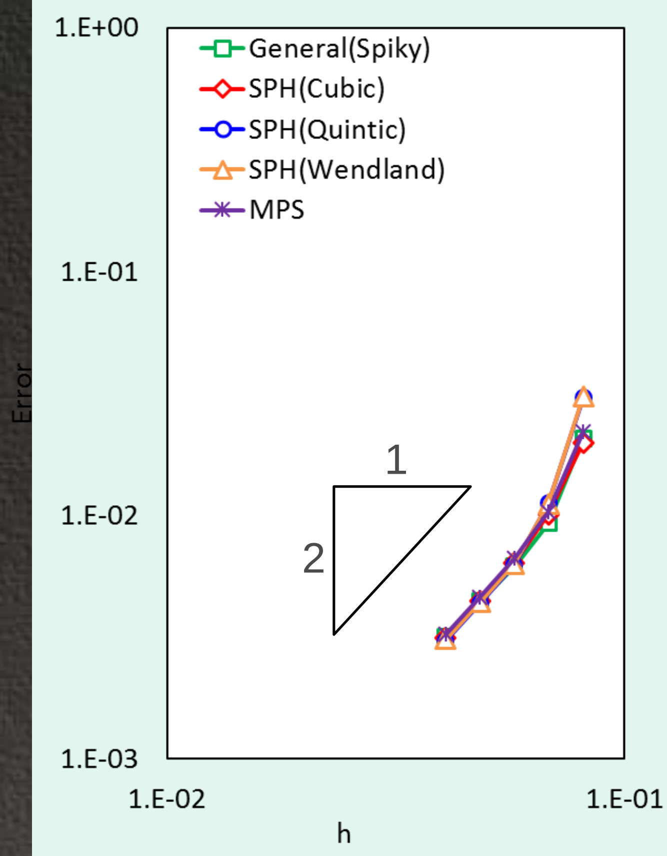
$$\|(u - u_h, p - p_h)\| \leq c\left(\Delta t^{\alpha} + h^{\beta}\right)$$

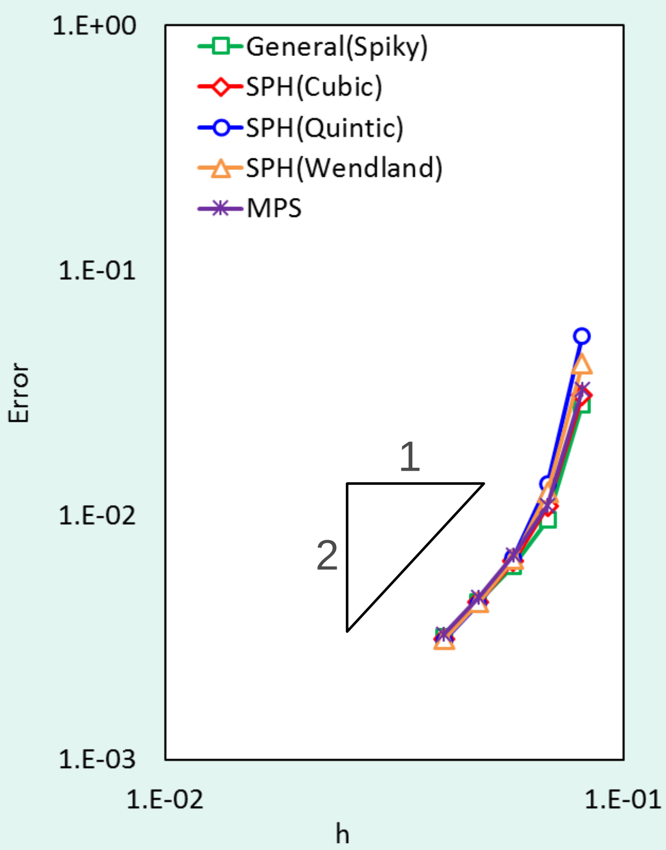
粒子法の誤差評価

- Raviart (1985), Moussa-Vila (2000), Moussa (2006), Oger, et al. (2007);
  - 特定の方程式・状況でのみ適用可能で汎用性が低い
- MPSで用いる近似微分作用素の打切り誤差解析;
  - Ishijima-Kimura (2010)
- 粒子体積にVoronoi体積を導入したSPH法の提案，補間作用素・近似微分作用素の打切り誤差解析;
  - Imoto-T (2013)
- ある一般化された粒子法の提案, (強形式に基づく) Poisson/熱方程式に適用した際の誤差評価
  - Imoto-T (2014/2015)
- (弱形式に基づく) Poisson方程式に対するある粒子型解法の誤差評価
  - T (2014)

数値解析学による事前誤差評価

$$\|(u - u_h, p - p_h)\| \le c(\Delta t^{\alpha} + h^{\beta})$$

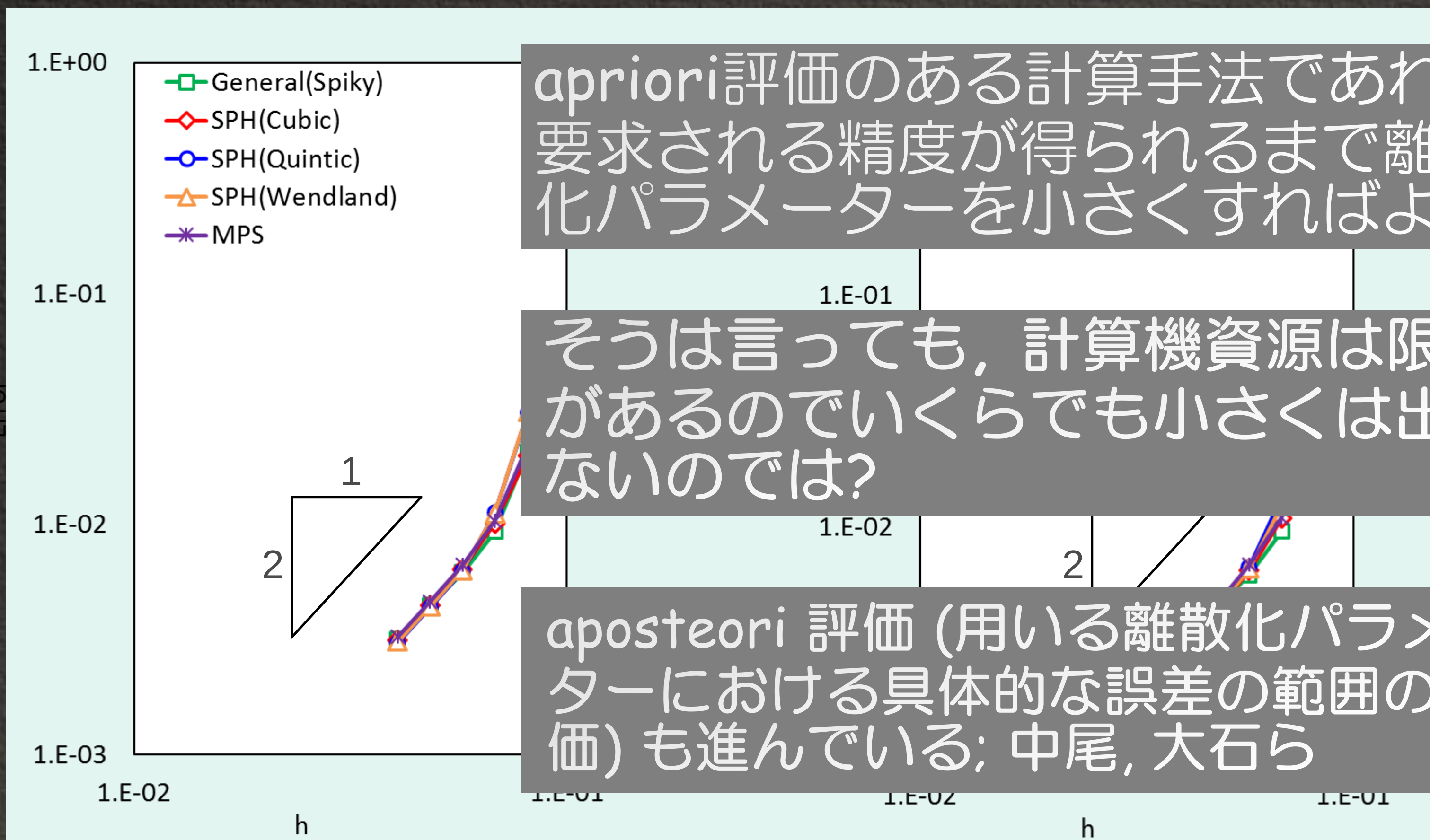




一般化粒子法を熱方程式に適用した際の誤差

数値解析学による事前誤差評価

$$\|(u-u_h, p-p_h)\| \le c\left(\Delta t^{\alpha} + h^{\beta}\right)$$



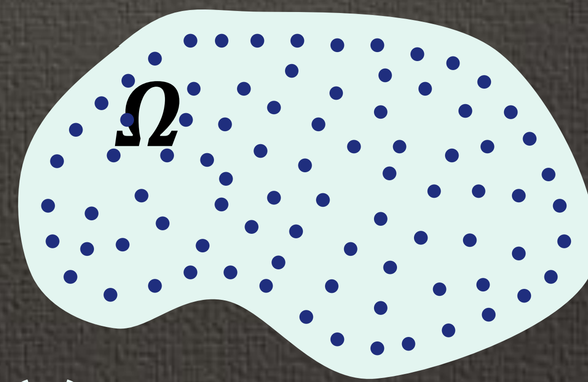
apriori評価のある計算手法であれば，要求される精度が得られるまで離散化パラメーターを小さくすればよい

そうは言っても，計算機資源は限りがあるのでいくらでも小さくは出来ないのでは?

aposteori 評価 (用いる離散化パラメーターにおける具体的な誤差の範囲の評価) も進んでいる; 中尾, 大石ら

一般化粒子法を熱方程式に適用した際の誤差

SPH法の導入：微分作用素の近似



$$(\Pi_h u)(x) := \sum_j V_j\, u(x_j)\, \phi_j(x),$$

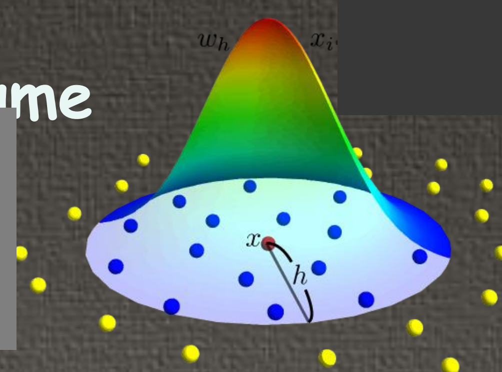
$$(\nabla_h u)(x) := \sum_j V_j \{u(x_j) - u(x)\} \nabla\phi_j(x),$$

$$(\Delta_h u)(x) := 2\sum_j V_j \frac{u(x) - u(x_j)}{|x - x_j|^2}(x - x_j)\cdot\nabla\phi_j(x)$$

V_j; Particle volume, for example,

$\left\{\sum \phi_i(x_j)\right\}^{-1}$ $\frac{|\Omega_h|}{}$ Voronoi volume

粒子の数, 粒子の粗密, 影響半径hの大きさ, 粒子体積V_iの選択など離散化パラメータの選択に大きな自由度がある



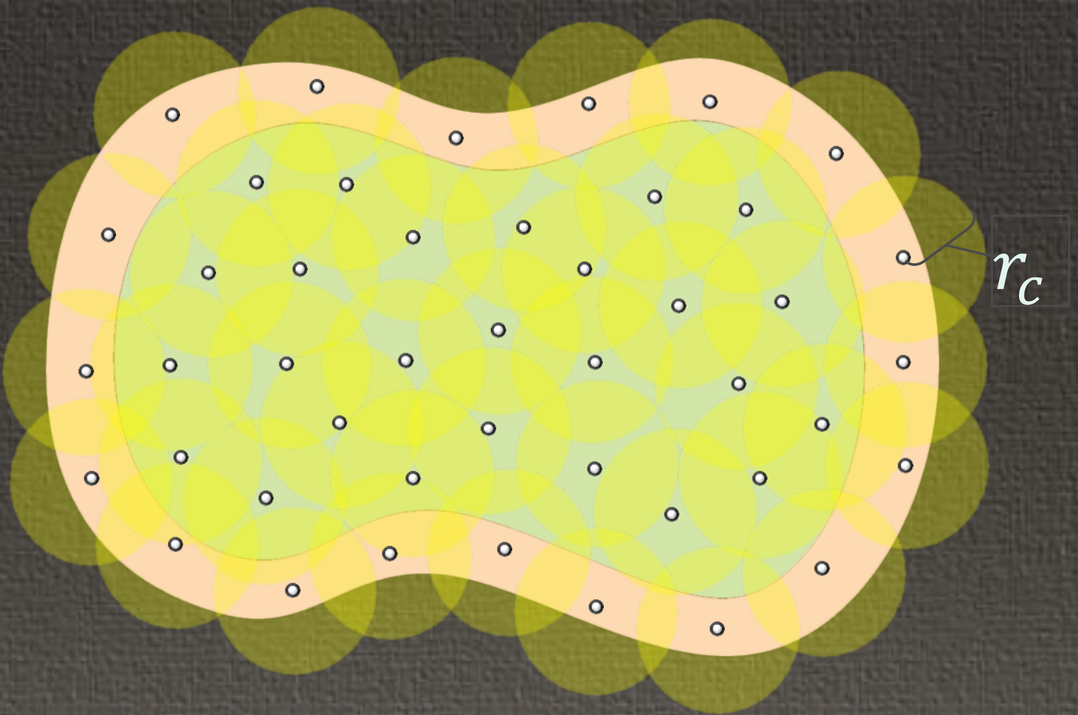
事前誤差評価を得るための十分条件 [1/5]

被覆半径

$$r_C := \min\left\{r;\ \bigcup_{x_i \in X_{N,H}} \overline{B(x_i, r)} \supset \Omega_H\right\}$$

$$B(x_i, r) := \{y \in \mathbb{R}^d;\ |y - x| < r\}$$

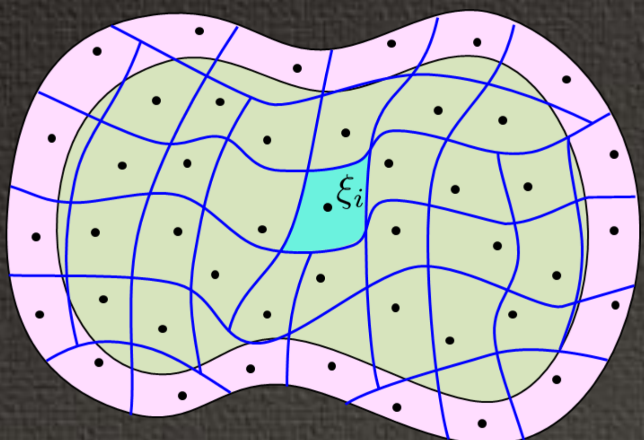
- 被覆半径はVoronoi分割におけるVoronoi体積の直径から導かれるので，計算が可能
- 粒子の配置が *一様* であれば被覆半径はより小さくなる

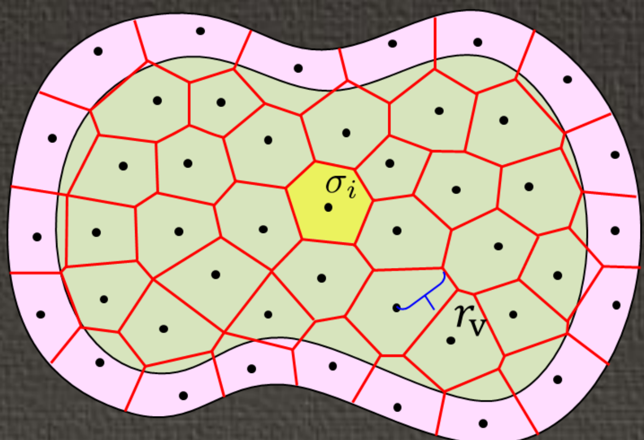


事前誤差評価を得るための十分条件 [2/5]

Voronoi偏差

$$d_V := \inf_{\Xi} \max_{x_i \in X_{N,H}} \left\{ \sum_{j=1,\ldots,N} \frac{\left|\mathrm{meas}(\sigma_i \cap \omega_j) + \mathrm{meas}(\sigma_j \cap \omega_i)\right|}{|\omega_i|} |x_i - x_j| \right\}$$

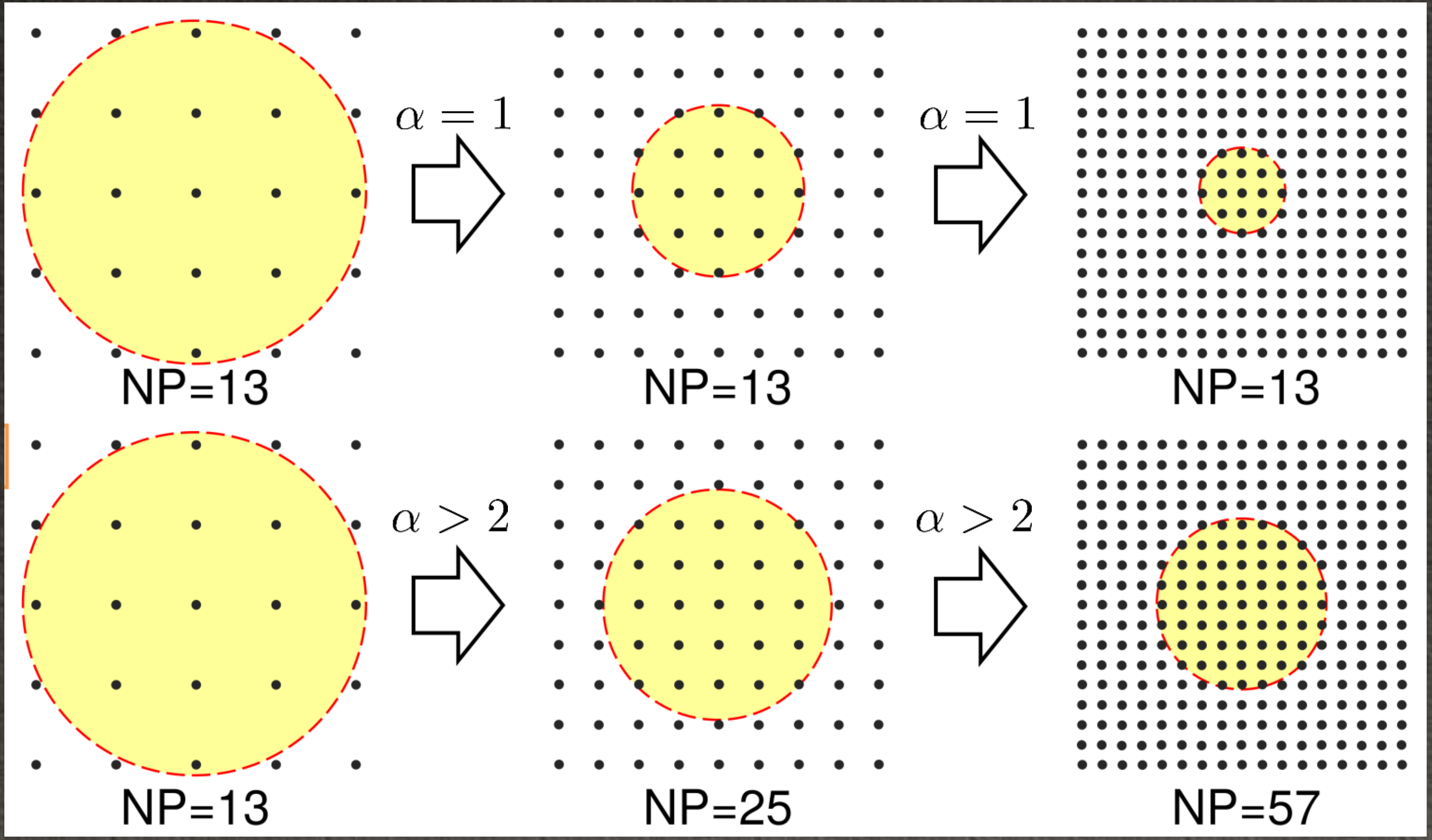




- Voronoi偏差の計算はある線形計画問題と等価になるので，計算が可能
- Voronoi体積のときVoronoi偏差は0で最小となる (一意ではない)

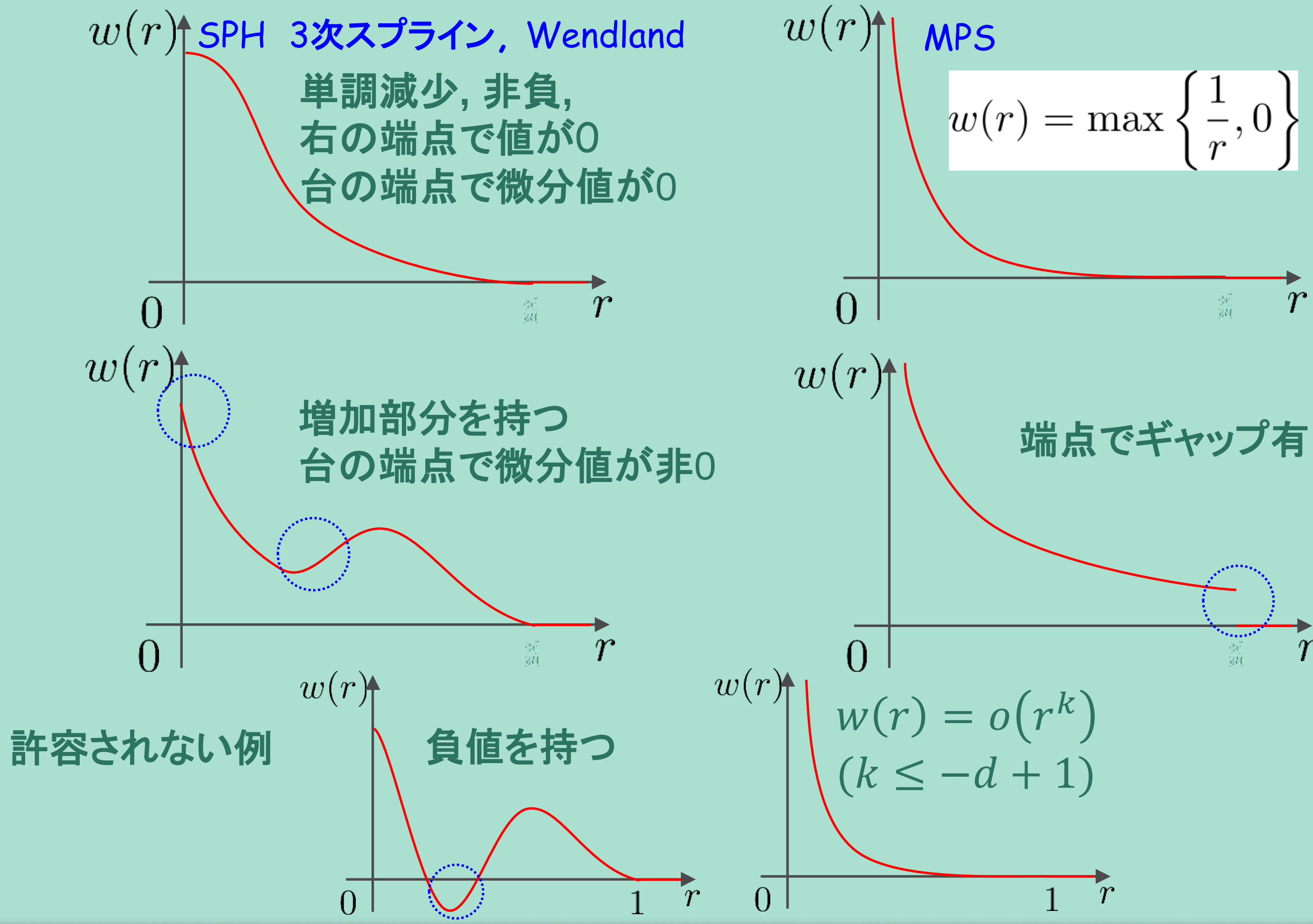
事前誤差評価を得るための十分条件 [3/5]

粒子配置の正則性　$h_N^{\alpha} \geq c(r_C + d_V)$

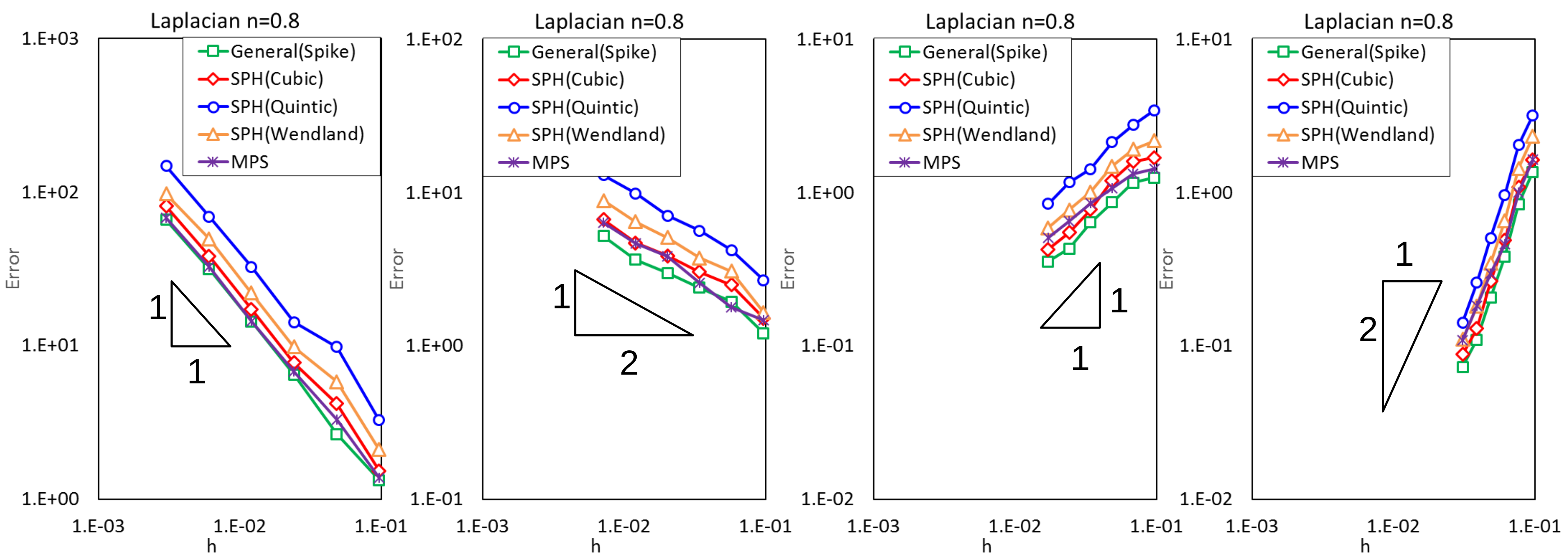


事前誤差評価を得るための十分条件 [4/5]

許容される参照 (重み) 関数



数値解析学による事前誤差評価



$$h_N^{\alpha} \geq c(r_C + d_V)$$

$$\Rightarrow \quad \|u - u_h\| \leq c h^{\min\{2,\alpha-2\}}$$

事前誤差評価を得るための十分条件 [5/5]

- 粒子配置の正則性;
  計算可能な指標を用いているため，用意した計算モデルが良い離散化パラメーターを用いているかを判定可能
- 重み関数 (参照関数) の許容範囲の明確化;

経験的知見に頼っていた計算モデルの準備に対して，数学からの知見によって，明確な判断基準を与えられる

↓

$$\|(u-u_h, p-p_h)\| \leq c\left(\Delta t^{\alpha} + h^{\beta}\right)$$

より良い精度の数値計算に向けて

- 事前誤差評価は，設定した関数空間に与えられた物差しでどの程度近似できているかを測る
- 元の系が持っている様々な物理性質 (面積・体積など場の物理量の保存性, 減衰性, ...) は離散化によって一般には保存されない

物理的性質も保存されるような離散化の導入が必要

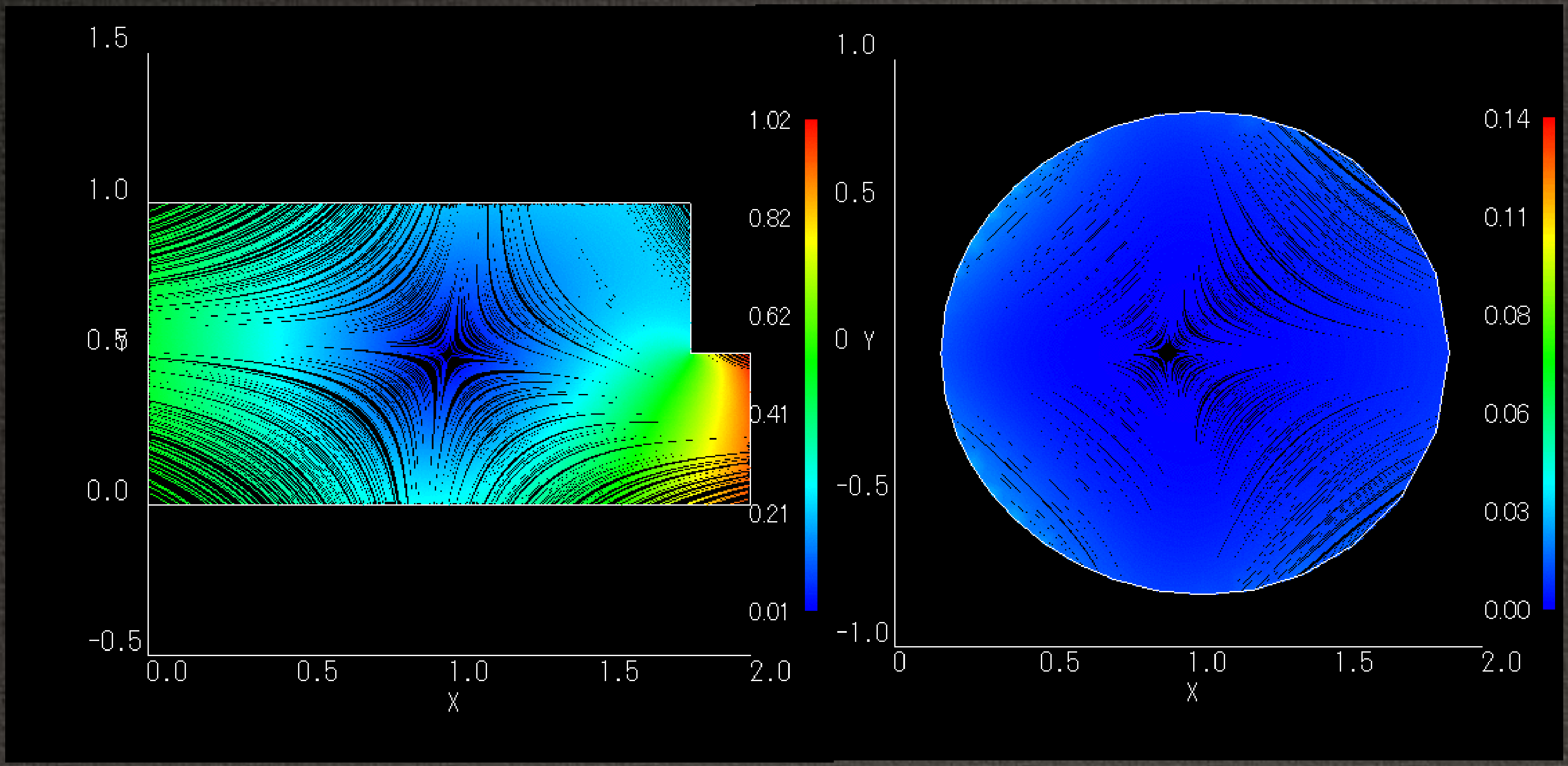
- 構造保存数値計算手法

  松尾，降旗，谷口；Quispell, Celledoniら

- 特性曲線法，Lie微分

  田端，野津；Pironneau, Leeら

より良い精度の数値計算に向けて



より良い精度の数値計算に向けて

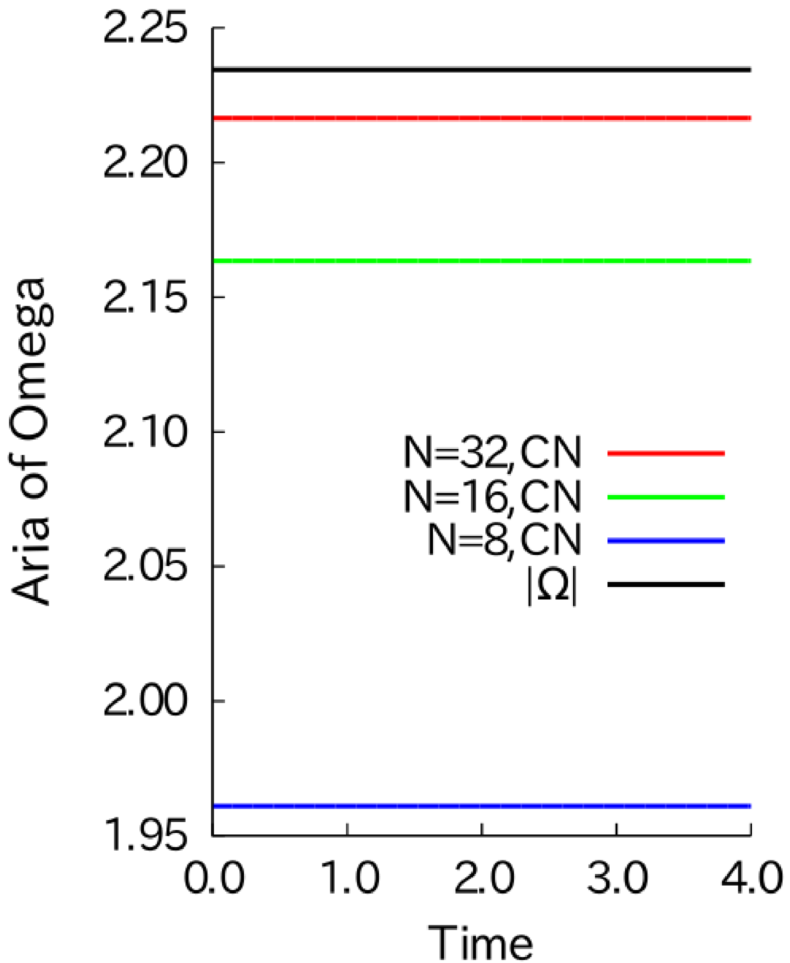


図: 面積の時間変化.

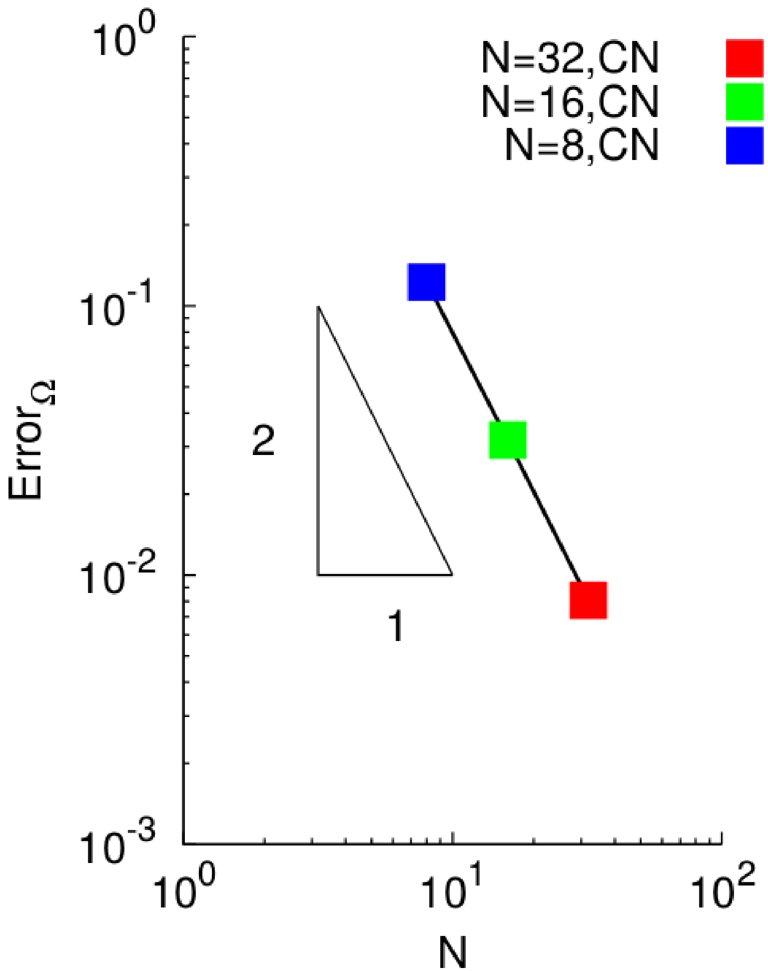


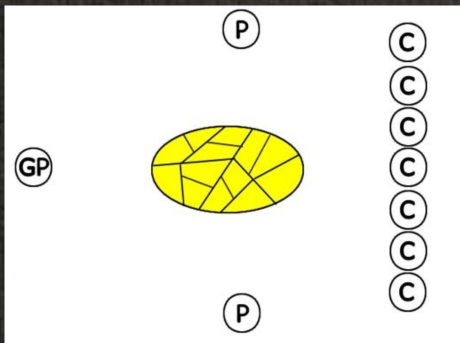
図: 面積の相対誤差.

- より効率良く数値計算するためには (並列計算に適した計算手法の開発)

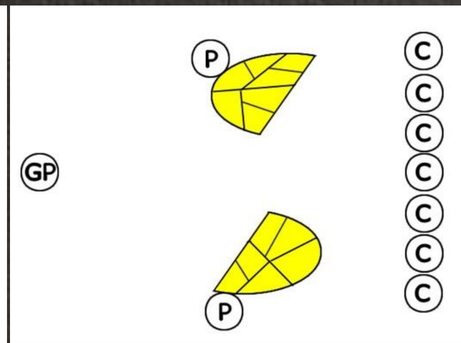
- うまく計算する

反復型(階層型)領域分割法

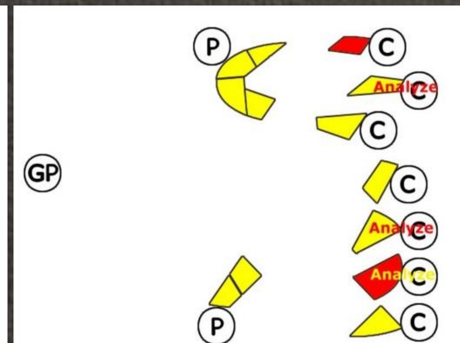
反復型領域分割法：概念図



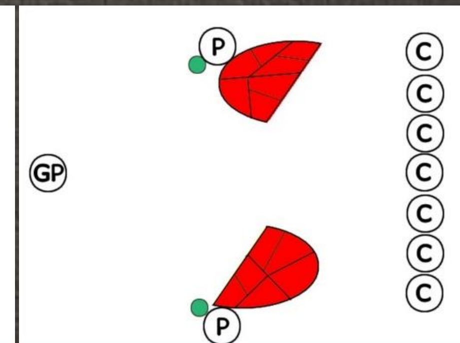
①まず解析領域を “Part” に分割し, さらに各 “Part” を部分領域に分割する. また, 計算機を “GP”, “P”, “C” の3つの型に振り分ける.



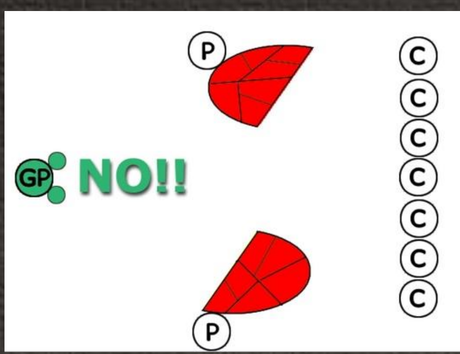
②いくつかの部分領域の集合である各 “Part” ごとに “P” を割り当てる. 人工境界問題の初期値を設定し, 各 “P” にデータを渡す.



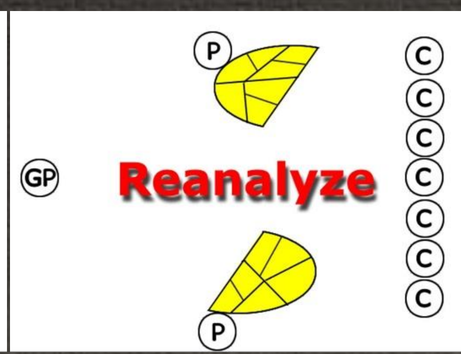
③人工境界上のデータを基に与えられる境界条件を使って “C” がそれぞれの部分領域問題を解析し, その結果を “P” に渡す.



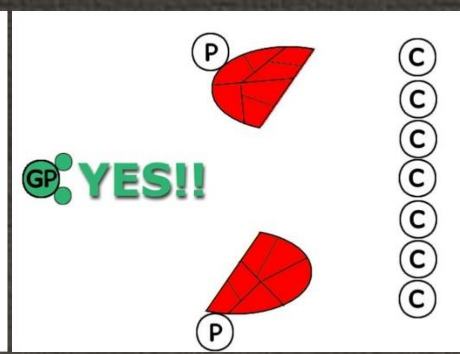
④人工境界問題の反復解法に現れる行列ベクトル積等に対する各 “Part” の寄与分を “P” が計算し, その結果を “GP” に渡す.



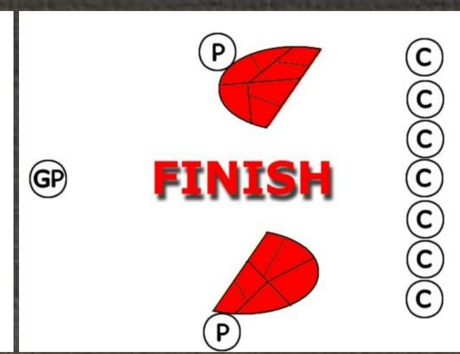
⑤ “GP” が人工境界問題の反復解法の1回の反復ステップを計算し, 人工境界上のデータの更新と収束判定を行う.



⑥収束していなければ更新された人工境界上のデータを “GP” から “P” に渡し, ③に戻って部分領域問題の解析を再度行う.



⑦人工境界問題の反復解法が収束したら, 人工境界上の自由度が決定する. これを境界条件として部分領域問題の解析をもう一度行う.



⑧前の段階で得られた部分領域問題の解析により各部分領域内部自由度が決定する. これにより元の全体領域での解が得られる.

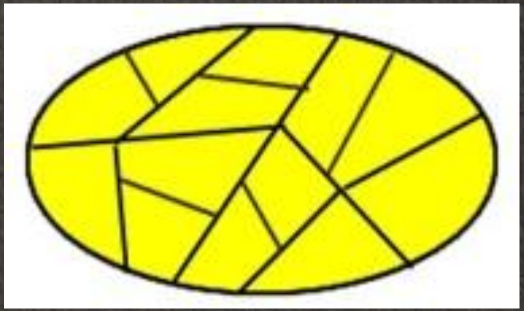
- はやく計算する

バランシング前処理

分業するほど得なのか? [1/2]

通常の領域分割法の解き易さ

$$\kappa \leq \frac{C}{hH}$$

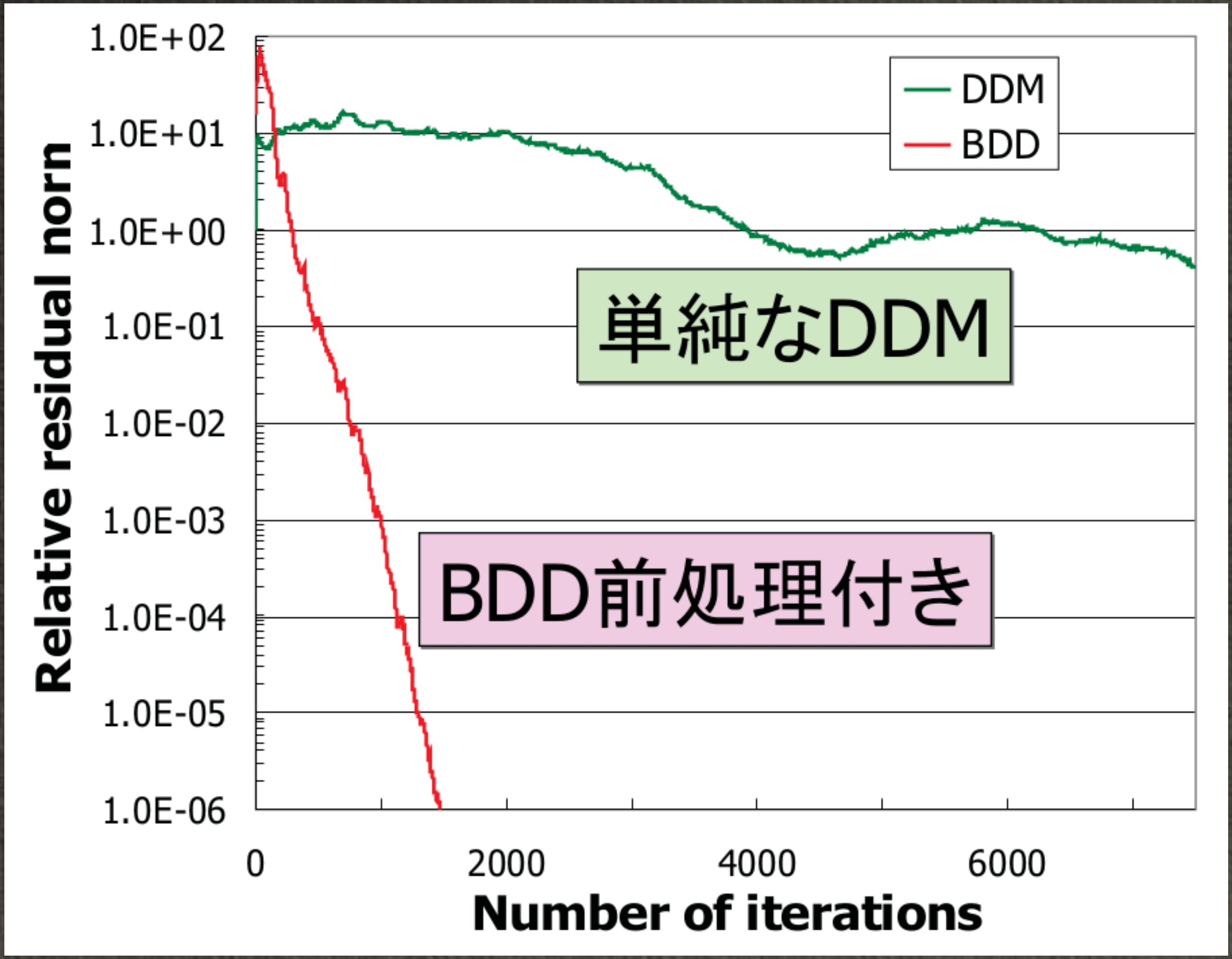


バランシング領域分割法の解き易さ

$$\kappa \leq C\left\{1 + \left(\log_e \frac{H}{h}\right)^2\right\}$$

$\boldsymbol{\kappa}$: 条件数; $\boldsymbol{H}$: 部分領域直径; $\boldsymbol{h}$: メッシュサイズ

分業するほど得なのか? [2/2]

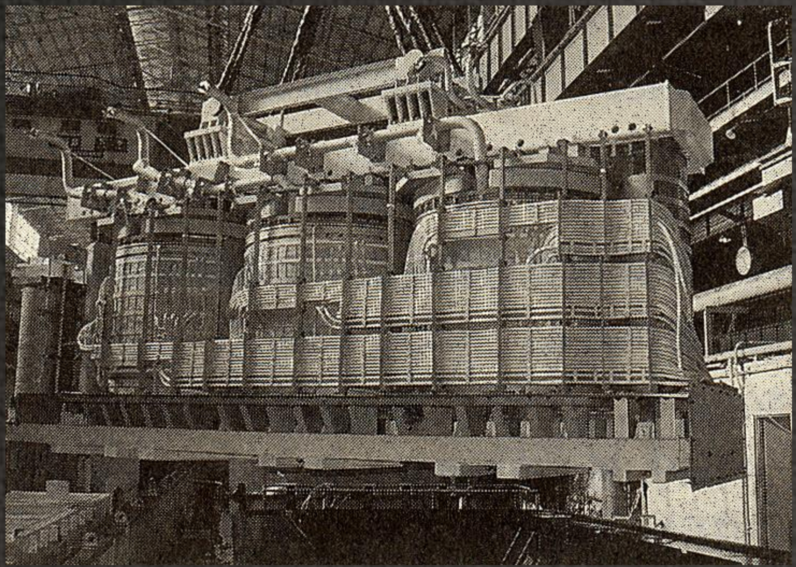


領域分割法で現れる人工境界問題に対する
反復計算の収束履歴 (Ogino, et al.)

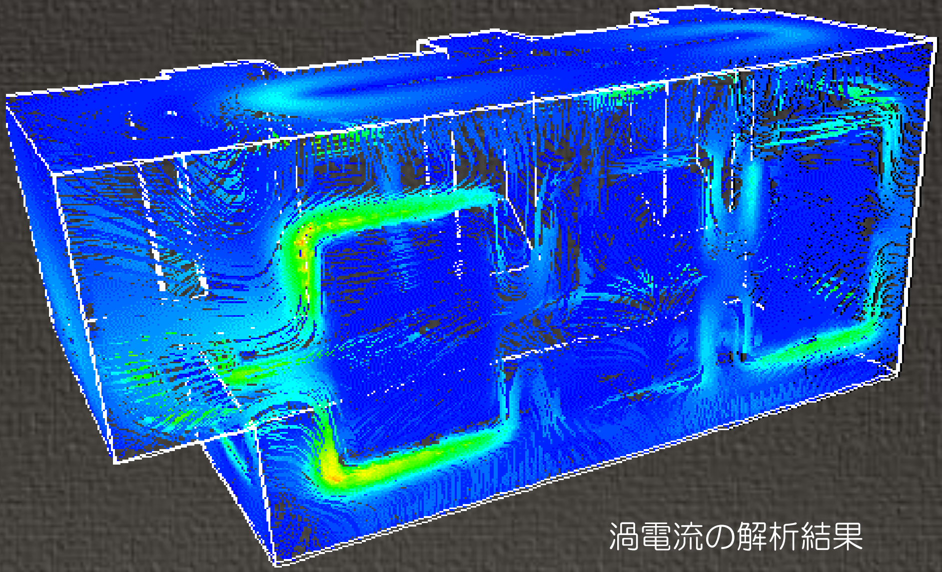
- 物理的性質の導入

ゲージ条件を考慮した渦電流問題の領域分割法

変圧器内部の磁場 (渦電流)



森安正司, 実用電気機器学, 森北出版, 2000



渦電流の解析結果

変圧器内部の渦電流が
引き起こす現象

(時間調和) Maxwell方程式+適当な境界条件

Two subdomain problem

$\boldsymbol{\Gamma}^{(1)} \cap \boldsymbol{\Gamma}$:

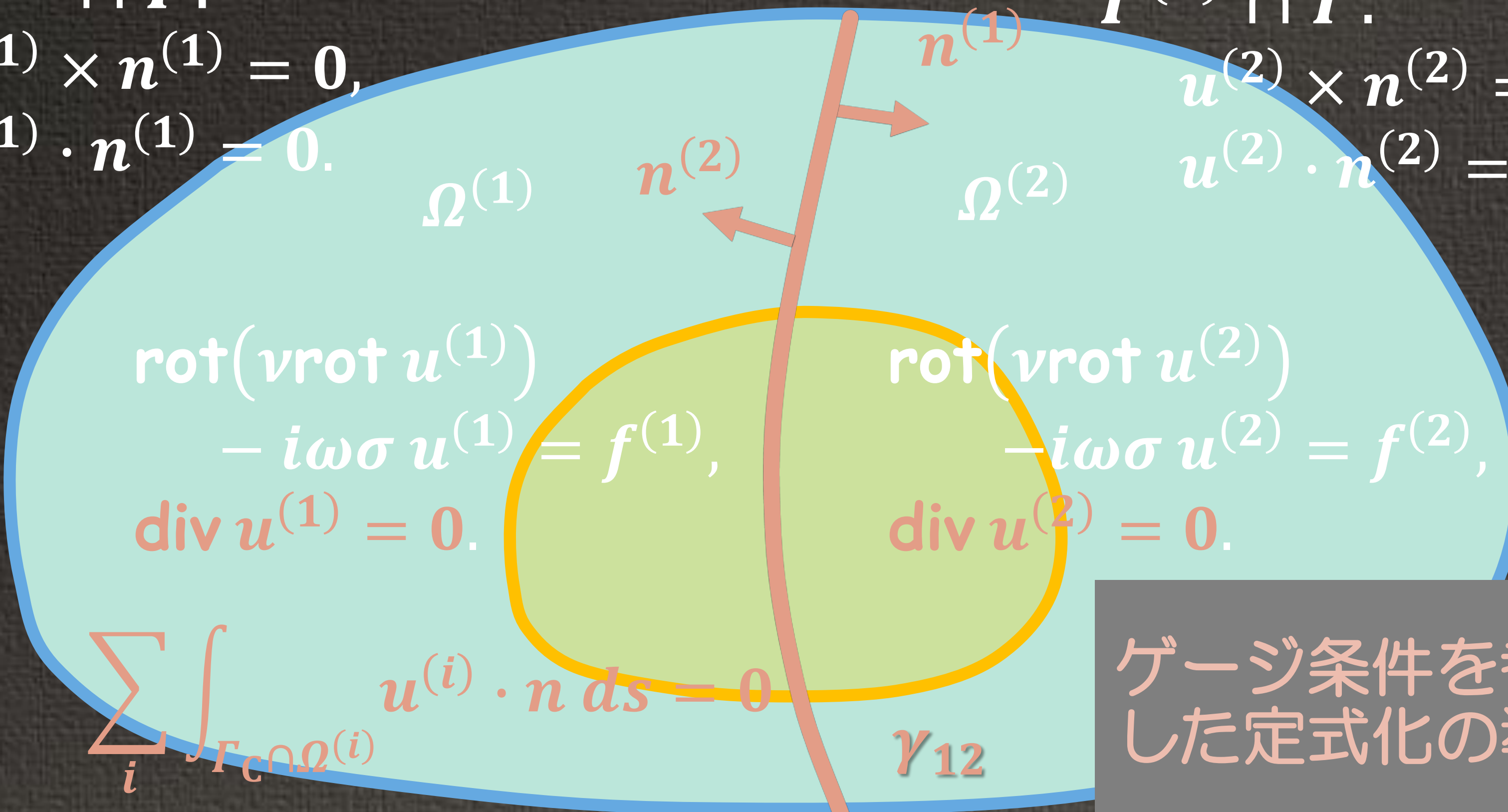
$\boldsymbol{u}^{(1)} \times \boldsymbol{n}^{(1)} = \mathbf{0},$

$\boldsymbol{u}^{(1)} \cdot \boldsymbol{n}^{(1)} = 0.$

$\boldsymbol{\Gamma}^{(2)} \cap \boldsymbol{\Gamma}$:

$\boldsymbol{u}^{(2)} \times \boldsymbol{n}^{(2)} = \mathbf{0},$

$\boldsymbol{u}^{(2)} \cdot \boldsymbol{n}^{(2)} = 0.$



$$\mathrm{rot}\left(\nu \,\mathrm{rot}\, \boldsymbol{u}^{(1)}\right) - i\omega\sigma\, \boldsymbol{u}^{(1)} = \boldsymbol{f}^{(1)},$$

$$\mathrm{div}\, \boldsymbol{u}^{(1)} = 0.$$

$$\mathrm{rot}\left(\nu \,\mathrm{rot}\, \boldsymbol{u}^{(2)}\right) - i\omega\sigma\, \boldsymbol{u}^{(2)} = \boldsymbol{f}^{(2)},$$

$$\mathrm{div}\, \boldsymbol{u}^{(2)} = 0.$$

$$\sum_i \int_{\Gamma_C \cap \Omega^{(i)}} \boldsymbol{u}^{(i)} \cdot \boldsymbol{n}\, ds = 0$$

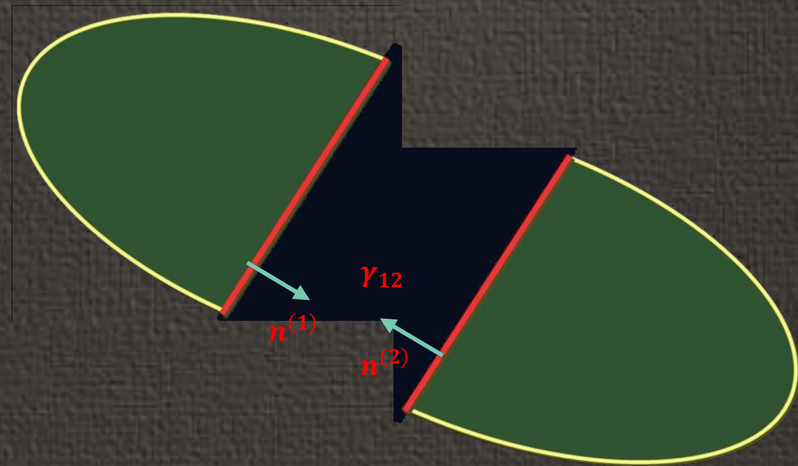
ゲージ条件を考慮した定式化の導入

$$\boldsymbol{u}^{(1)} \times \boldsymbol{n}^{(1)} = \boldsymbol{u}^{(2)} \times \boldsymbol{n}^{(2)},$$

$$\left(\nu \,\mathrm{rot}\, \boldsymbol{u}^{(1)}\right) \times \boldsymbol{n}^{(1)} = \left(\nu \,\mathrm{rot}\, \boldsymbol{u}^{(2)}\right) \times \boldsymbol{n}^{(2)}.$$

Interface problem

FEM equations: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$



Renumbering

$$\begin{pmatrix} A_{II}^{(1)} & O & A_{IB}^{(1)} \\ O & A_{II}^{(2)} & A_{IB}^{(2)} \\ A_{BI}^{(1)} & A_{BI}^{(2)} & A_{BB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_I^{(1)} \\ x_I^{(2)} \\ x_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_I^{(1)} \\ b_I^{(2)} \\ b_B \end{pmatrix}$$

I: with respect to Inner DOF

B: with respect to Interface DOF

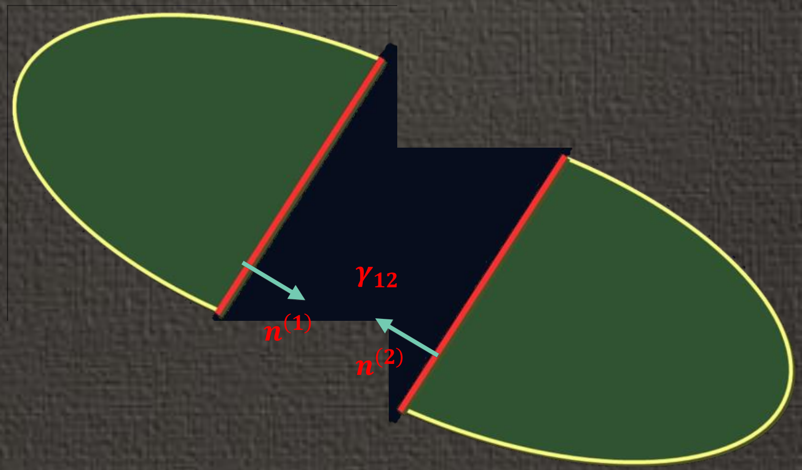
Reduction

Interface problems: $\mathbf{K}\mathbf{x}_{\mathbf{B}} = \mathbf{G}$

$$\mathrm{K} := \mathrm{A}_{\mathrm{BB}} - \sum_{i=1}^{2} \mathrm{A}_{\mathrm{BI}}^{(i)} \left\{\mathrm{A}_{\mathrm{II}}^{(i)}\right\}^{\ddagger} \mathrm{A}_{\mathrm{IB}}^{(i)}, \mathrm{G} := \mathrm{b}_{\mathrm{B}} - \sum_{i=1}^{2} \mathrm{A}_{\mathrm{BI}}^{(i)} \left\{\mathrm{A}_{\mathrm{II}}^{(i)}\right\}^{\ddagger} \mathrm{b}_{\mathrm{I}}^{(i)},$$

Construct the whole solution

Solve $\mathbf{K}\mathbf{x}_{\mathrm{B}} = \mathbf{G}$



Set $\mathbf{x}_{\mathrm{B}}$ as B.C.

Subdomain problem:

$$\mathbf{A}_{\mathrm{II}}^{(i)}\mathbf{x}_{\mathrm{I}}^{(i)} = \mathbf{b}_{\mathrm{I}}^{(i)} - \mathbf{A}_{\mathrm{IB}}^{(i)}\mathbf{x}_{\mathrm{B}}$$

Reconstruction of the solution

$$(u,p) = \begin{cases} \left(u^{(1)}, p^{(1)}\right) & \text{in } \Omega^{(1)} \\ \left(u^{(2)}, p^{(2)}\right) & \text{in } \Omega^{(2)} \end{cases}$$

Bi-Conjugate Gradient procedure

Complex symmetric

$$(\nu \mathrm{rot} u_h, \mathrm{rot} v_h) - (i\omega\sigma u_h, v_h) + (v_h, \mathrm{grad} p_h) = (f, v_h),$$
$$(u_h, \mathrm{grad} q_h) = 0,$$
$$\forall (v_h, q_h) \in V_h \times Q_h.$$

FEM equations: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

$$\mathbf{x} = \left(u_1, \dots, u_{N_u}, p_1, \dots, p_{N_p}\right)$$

Interface problem:

$$\mathbf{Kx_B} = \mathbf{G}$$

$$\mathbf{x_B} = \left(u_{\mathrm{B}_1}, \dots, u_{\mathrm{B}_{M_u}}, p_{\mathrm{B}_1}, \dots, p_{\mathrm{B}_{M_p}}\right)$$

Choose $\mathbf{u}_{\mathrm{B},0}$;
$\mathbf{g}_0 := \mathbf{G} - \mathbf{K}\mathbf{x}_{\mathrm{B},0}$;
$\mathbf{w}_0 := \mathbf{g}_0$;
For $n = 0, 1, 2, \dots$;
$\quad \rho_n := \dfrac{(\bar{\mathbf{g}}_n, \mathbf{g}_n)}{(\bar{\mathbf{w}}_n, \mathbf{K}\mathbf{w}_n)}$;
$\quad \mathbf{x}_{\mathrm{B},n+1} := \mathbf{x}_{\mathrm{B},n} - \rho_n \mathbf{w}_n$;
$\quad \mathbf{g}_{n+1} := \mathbf{g}_n - \rho_n \mathbf{K}\mathbf{w}_n$;
$\quad \gamma_n := \dfrac{(\bar{\mathbf{g}}_{n+1}, \mathbf{g}_{n+1})}{(\bar{\mathbf{g}}_n, \mathbf{g}_n)}$;
$\quad$ If $\gamma_n < \varepsilon^2$, break;
$\quad \mathbf{w}_{n+1} := \mathbf{g}_{n+1} + \gamma_n \mathbf{w}_n$;
End;

Reduction of CG procedure

Compute the initial residual $g_0 = G - Kx_{B,0} g_0$ by

$$g_0 = \sum_i \left(A_{BI}^{(i)} \;\; A_{BB} \right) \left(\mathbf{x}_{I,0}^{(i)} \;\; x_{B,0} \right)^T - \mathbf{b}_B$$

with $\mathbf{x}_{I,0}^{(i)}$ by solving the subdomain problem

$$\left(A_{II}^{(i)} \;\; A_{IB}^{(i)} \right) \left(\mathbf{x}_{I,0}^{(i)} \;\; x_{B,0} \right)^T = b_I^{(i)}$$

The Lagrange multiplier component of $\mathbf{x}_{I,0}^{(i)}$ is equal to 0, then the ones component of g_0 is also equal to 0. Therefore the computation of such a component of g_0 is not required in the CG procedure.

Reduction of CG procedure

Compute Kw_n by

$$\mathrm{Kw}_n = \sum_i \begin{pmatrix} \mathrm{A}_{\mathrm{BI}}^{(i)} & \mathrm{A}_{\mathrm{BB}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_n^{(i)} & \mathrm{w}_n \end{pmatrix}^T$$

by $\mathbf{r}_n^{(i)}$ by solving the subdomain problem

$$\begin{pmatrix} \mathrm{A}_{\mathrm{II}}^{(i)} & \mathrm{A}_{\mathrm{IB}}^{(i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_n^{(i)} & \mathrm{w}_n \end{pmatrix}^T = 0$$

The Lagrange multiplier component of $\mathbf{r}_n^{(i)}$ is equal to 0, then the ones component of Kw_n is also equal to 0. Therefore the computation of such a component of Kw_n is not required in the CG procedure.

Bi-Conjugate Gradient procedure

Complex symmetric

$$(\nu \mathrm{rot} u_h, \mathrm{rot} v_h) - (i\omega\sigma u_h, v_h) + (v_h, \mathrm{grad} p_h) = (f, v_h),$$
$$(u_h, \mathrm{grad} q_h) = 0,$$
$$\forall (v_h, q_h) \in V_h \times Q_h.$$

FEM equations: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

$$\mathbf{x} = (u_1, \ldots, u_{N_u}, 0, \ldots, 0)$$

Interface problem:

$$\mathbf{Kx_B} = \mathbf{G}$$

$$\mathbf{x_B} = (u_{B_1}, \ldots, u_{B_{M_u}}, 0, \ldots, 0)$$

We can reduce to compute Lagrange multiplyer component.

Choose $\mathbf{u}_{B,0}$;

$\mathbf{g}_{u,0} := (\mathbf{G} - \mathbf{K}\mathbf{x}_{B,0})_u$;

$\mathbf{w}_{u,0} := \mathbf{g}_{u,0}$;

For $n = 0, 1, 2, \ldots$;

$$\rho_n := \frac{(\bar{\mathbf{g}}_{u,n}, \mathbf{g}_{u,n})}{(\bar{\mathbf{w}}_{u,n}, (\mathbf{K}\mathbf{w}_n)_u)};$$

$\mathbf{u}_{B,n+1} := \mathbf{u}_{B,n} - \rho_n \mathbf{w}_{u,n}$;

$\mathbf{g}_{u,n+1} := \mathbf{g}_{u,n} - \rho_n (\mathbf{K}\mathbf{w}_n)_u$;

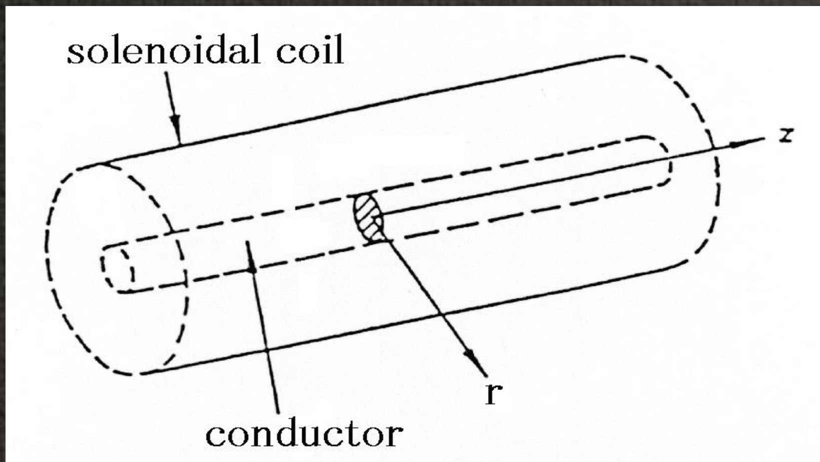
$$\gamma_n := \frac{(\bar{\mathbf{g}}_{u,n+1}, \mathbf{g}_{u,n+1})}{(\bar{\mathbf{g}}_{u,n}, \mathbf{g}_{u,n})};$$

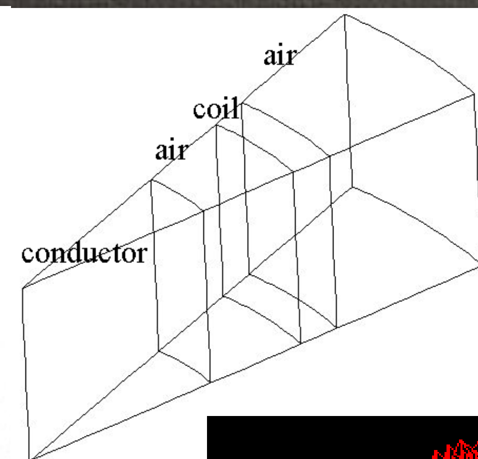
If $\gamma_n < \varepsilon^2$, break;

$\mathbf{w}_{u,n+1} := \mathbf{g}_{u,n+1} + \gamma_n \mathbf{w}_{u,n}$;

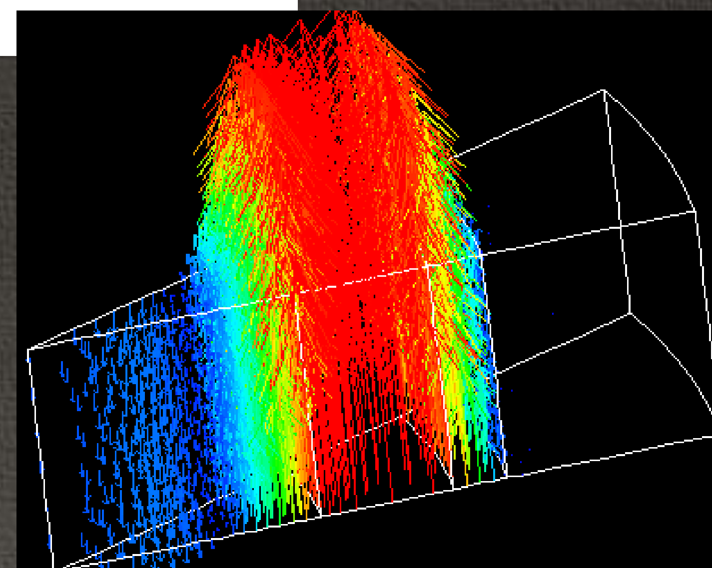
End;

Simple 3D model





# of Elements: 4,310,648;
# of Nodes: 5,817,074;
# of DOF: 5,450,598



Magnetic field (real part)

Computational conditions IIa

PC cluster:

Intel Core i7-2600@20

(3.4GHz; 64bit; 4cores)

Domain decomposition:

80x540 subdomains

Computational conditions:

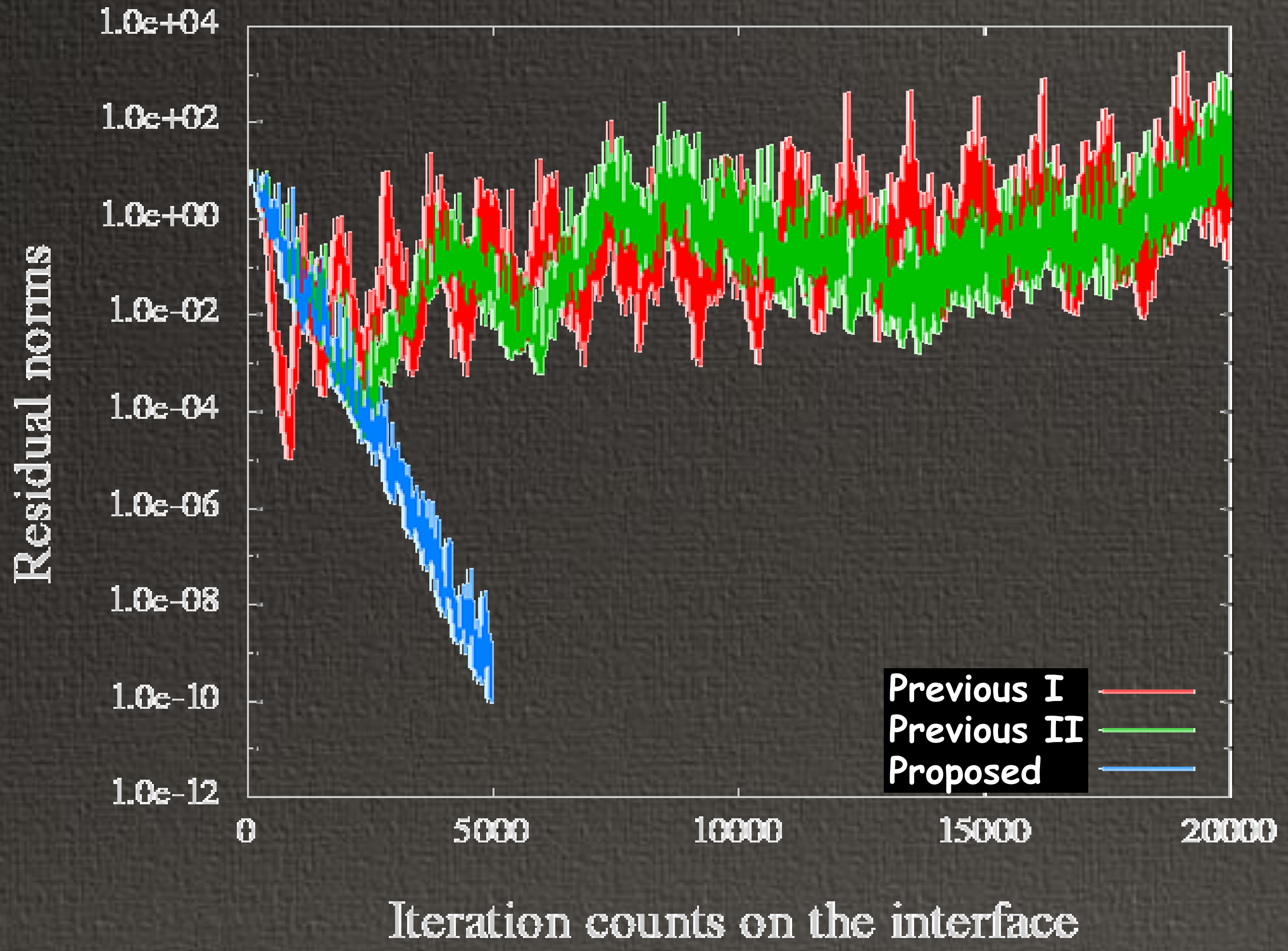
Interface Problem Criterion = 1.0E-10

Subdomain problem

Conventional: ICBiCG (Criterion = 1.0E-9)

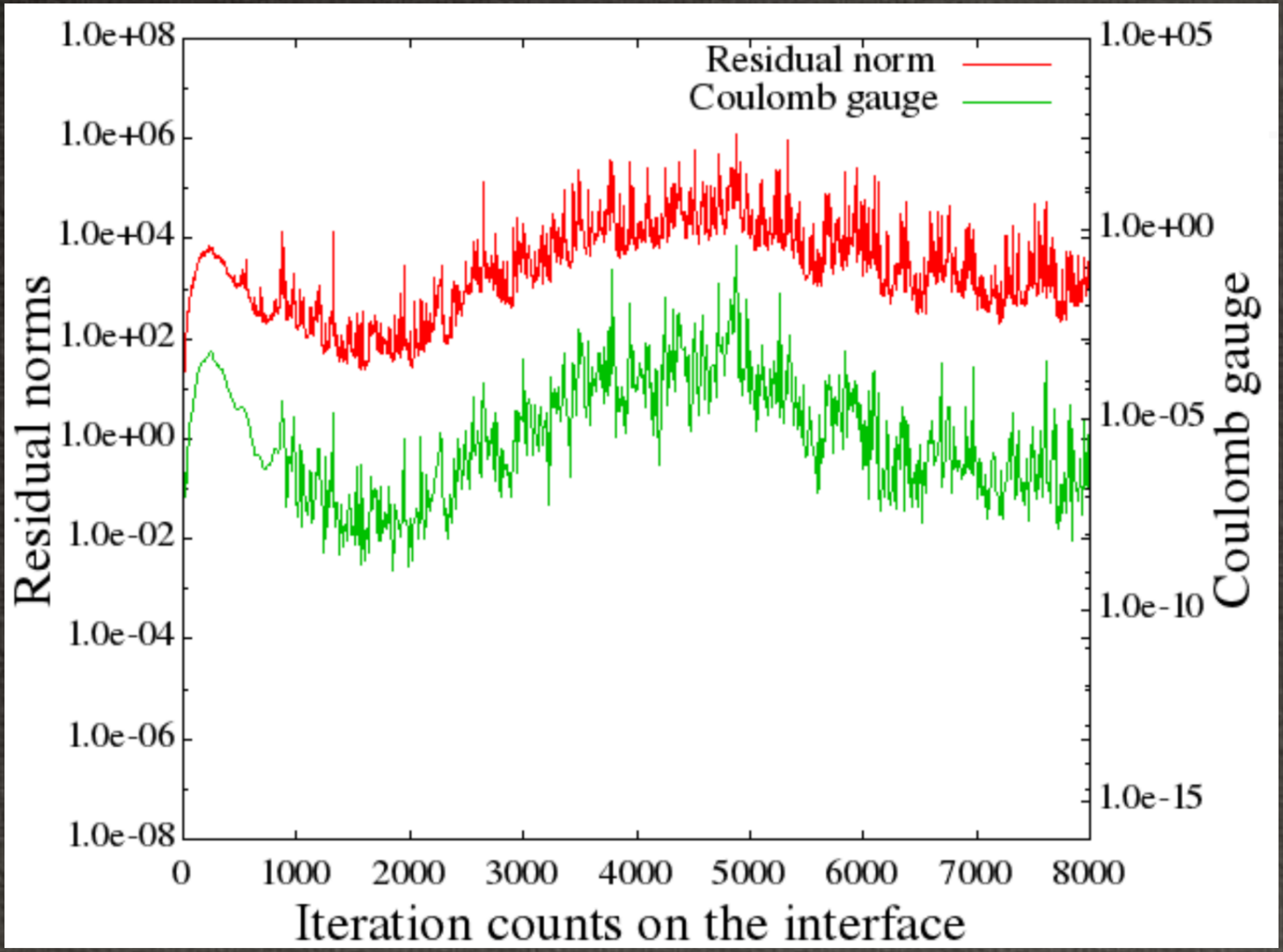
Proposed: LU with pivotting.

Convergence history II



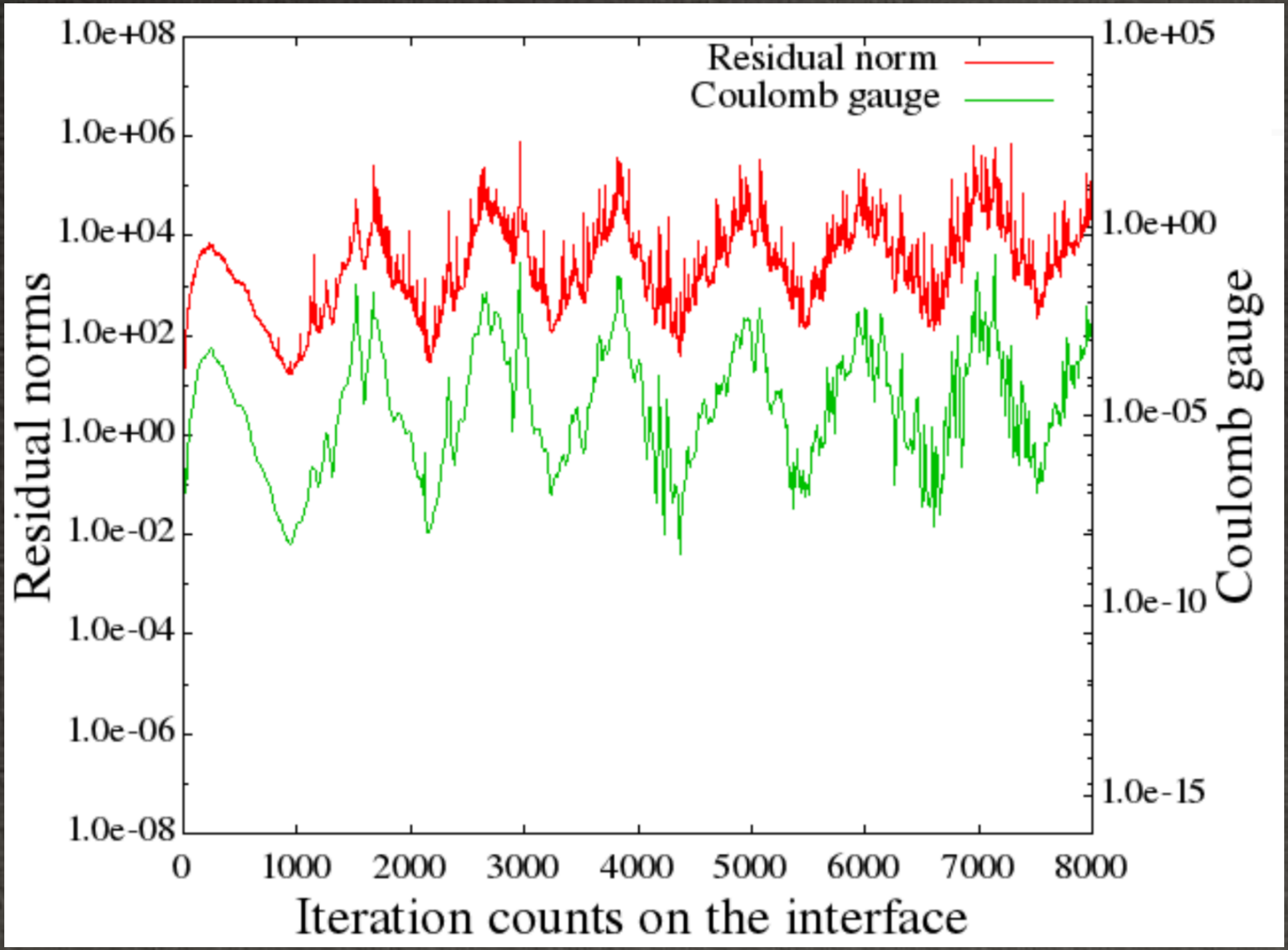
Convergence history of an iterative procedure in Iterative DDM with/without gauge conditions.

Convergence history II-1



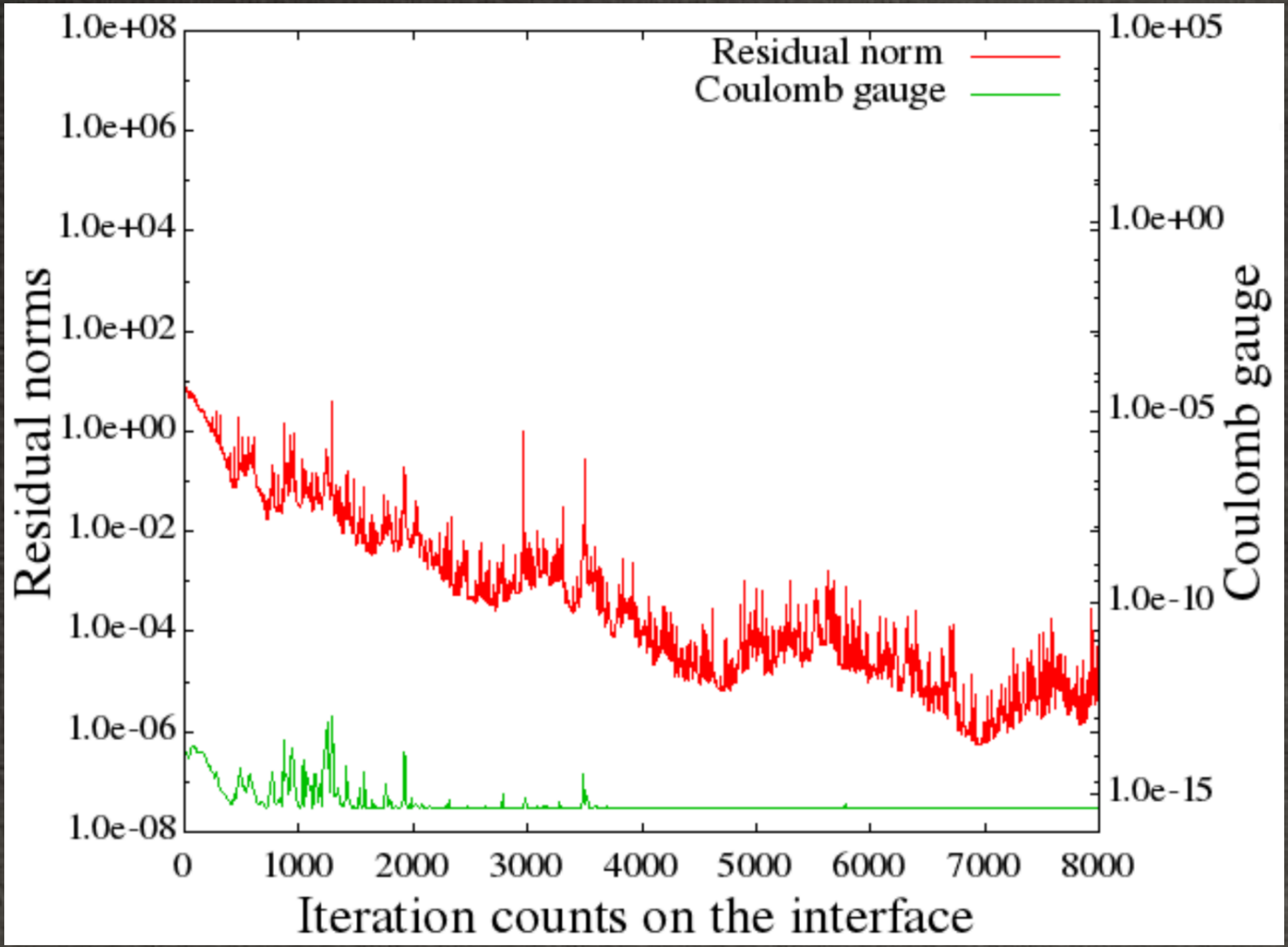
Residual/Gauge of an iterative procedure in Iterative DDM without gauge conditions (A).

Convergence history II-2



Residual/Gauge of an iterative procedure in Iterative DDM without gauge conditions (A-phi).

Convergence history II-3



Residual/Gauge of an iterative procedure in Iterative DDM with gauge conditions.

Computational conditions IIIa

Oakleaf-fx@Univ. of Tokyo

Fujitsu Prime HPC FX10 384node

Domain decomposition:

6,114x1,140 subdomains

# of elements 690,643,584

# of nodal points 922,179,353

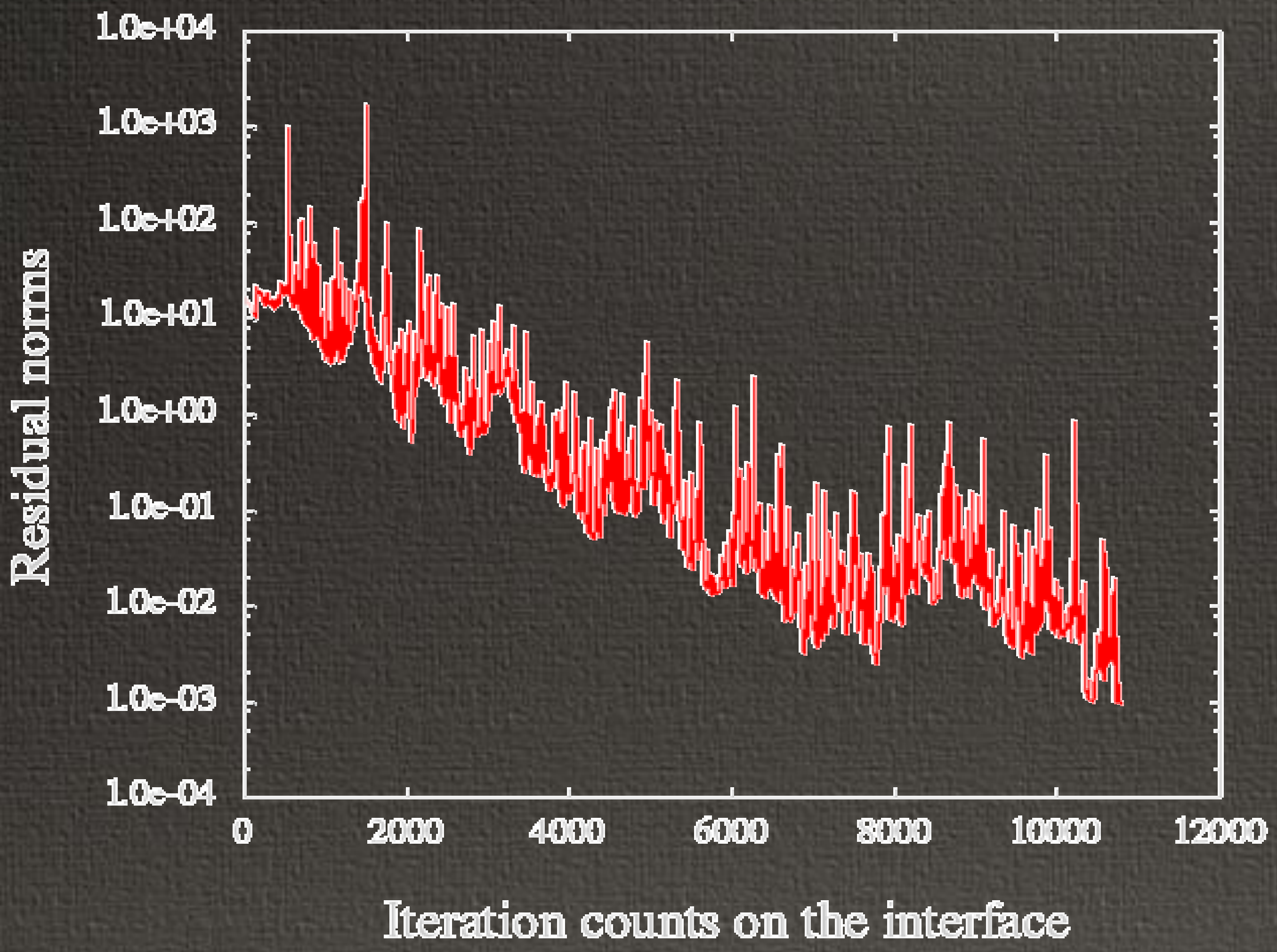
Computational conditions:

Interface Problem Criterion = 1.0E-10

Subdomain problem

Proposed: LU with pivotting.

Convergence history III



Convergence history of an iterative procedure in Iterative DDM with/without gauge conditions.

数値シミュレーションの流れ (再掲)

粘性流体/粘弾性流体

質量保存
運動方程式
構成方程式

Navier-Stokes方程式/
Oldroyd-Bモデル

有限差分法
有限要素法
有限体積法
粒子法

連立 (非) 線形方程式

より良い精度の数値計算に向けて (再掲)

- 事前誤差評価は，設定した関数空間に与えられた物差しでどの程度近似できているかを測る
- 元の系が持っている様々な物理性質 (面積・体積など場の物理量の保存性, 減衰性, …) は離散化によって一般には保存されない

物理的性質も保存されるような離散化の導入が必要

- 構造保存数値計算手法

松尾，降旗，谷口；Quispell, Celledoniら

- 特性曲線法，Lie微分

田端，野津；Pironneau, Leeら

より良い精度の数値計算に向けて

物理的性質も保存されるような
離散化の導入が必要

- 構造保存数値計算手法

  松尾，降旗，谷口；Quispell, Celledoniら

- 特性曲線法，Lie微分

  田端，野津；Pironneau, Leeら

- フェイズフィールド法を用いた計算手法の開発 (破壊，ソフトマター)

  木村ら；Cesanaら

まとめ

- 事前誤差評価などの数値解析学の結果によって, いわゆるknow-howを排除した数値計算が可能となる
- 元の系が持っている様々な物理性質 (面積・体積など場の物理量の保存性, 減衰性, …) が厳密に保存された離散化の導入など, 数理モデルにより親和性のある計算手法の開発が望まれている