Implicit Time Integration*

Nobuyuki Umetani

平成 22 年 7 月 13 日

目次

1 Time Integration for 1st-order problem **1**
1.1 Linear Problem 2
1.2 Nonlinear problem 3
1.2.1 ＰＭＡ法 3
1.2.2 修正ＰＭＡ法 4

2 Backward Eular method for 2nd order problem **7**

3 Reference **8**

1 Time Integration for 1st-order problem

質量行列と剛性行列からなる次のような系に対する陰的な時間積分スキームを $\mathbf{C}$ が線形，非線形の場合について紹介する．

$$\mathbf{Ma} + \mathbf{Cv} = \mathbf{F} \tag{1}$$

陰的な時間増分法を行う場合、時刻 t、時間ステップ n の速度 $\mathbf{v}_n$ と加速度 $\mathbf{a}_n$ から時刻 $t + \Delta t$, 時間ステップ $n + 1$ での速度 $\mathbf{v}_{n+1}$ と加速度 $\mathbf{a}_{n+1}$ を求める際には以下の時刻 $n + 1$ における平衡方程式と時間積分関係式の２つの式を連立させて解く

*これは忘れっぽい著者が昔勉強したことを書き留めておく備忘録です．きっと間違えを多く含んでいます．すいません．ご指摘ご意見などありましたら教えてもらえると有り難いです．

- 時刻 $t + \Delta t$, 時間ステップ n における平衡方程式

$$\mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1})\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{F} \tag{2}$$

- 時間積分関係式

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{a} dt \tag{3}$$

時間積分関係式を数値的には次のように時間方向に離散化する

時間積分関係式

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \{(1-\gamma)\mathbf{a}_n + \gamma \mathbf{a}_{n+1}\}\Delta t \tag{4}$$

ここで γ は 0.5 から 1 の値をとるパラメータで、時間積分の精度、数値粘性などを制御することができる。

γ を 0.5 とした場合は Crank-Nicolson 法と等価となり二次精度を持つ。γ を 1.0 とした場合は完全陰解法、または後退オイラー法 (Backward-Euler Method) と呼ばれ一次精度であるが安定性が高い

1.1 Linear Problem

熱拡散問題，非定常移流拡散問題を解く時は線形問題として取り扱うことができる．この時平衡方程式における係数行列 $\mathbf{C}$ が定数なので，平衡方程式は次のようになる．

$$\mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{C}\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{F} \tag{5}$$

これに時間積分関係式を代入して変形することで，前ステップの解から次ステップの解を求めることができる．線形性から一度の行列計算で解を求めることができる．前ステップの解からの差を求める増分解析と，直接解を求める方法について方法を示す

直接解を求める方法については，時間積分関係式を離散化された平衡方程式に代入すると次のようになる．

$$(\mathbf{M} + \gamma \Delta t \mathbf{C})\mathbf{a}_{n+1} = \mathbf{F} - \mathbf{C}\{\mathbf{v}_n - \Delta t(1-\gamma)\mathbf{a}_n\} \tag{6}$$

これを解いて $\mathbf{a}_{n+1}$ を直接求める。また、時間積分関係式から $\mathbf{v}_{n+1}$ が求まる

増分については上の式を増分形に変形をとると、次のようになる。

線形問題を増分について解く

1. $(\mathbf{M} + \gamma \Delta t \mathbf{C})\Delta \mathbf{a} = \mathbf{F} - \mathbf{C}(\mathbf{v}_n + \Delta t \mathbf{a}_n) - \mathbf{M}\mathbf{a}_n$
2. $\mathbf{a}_{n+1} = \mathbf{a}_n + \Delta \mathbf{a}$
3. $\Delta \mathbf{v} = \Delta t \mathbf{a}_n + \gamma \Delta t \Delta \mathbf{a}$
4. $\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta \mathbf{v}$

1.2 Nonlinear problem

特に速度 $\mathbf{v}$ に対して係数行列 $\mathbf{C}$ が非線形であることを考える．流体や，非線形熱伝導問題がこのような形を取る．

$$\mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1} + \mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1})\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{F} \tag{7}$$

このような方程式は反復的な計算をさせて解へ収束させる方法を取る．代表的な方法である PMA 法について説明する．

1.2.1 ＰＭＡ法

ＰＭＡ法 (Predictor Multicorrector Algorithm) は, 一度次のステップの解について時間積分関係式を満たす範囲内で予測をして、それが時刻 $t + \Delta t$ での平衡方程式を満足するようにするために、Newton-Raphson 法による増分解析を用いて、時間積分関係式を満たすように解を修正していく手法である。

時間積分関係式を満たす時刻 $t + \Delta t$ での流速、加速度の予測 $\mathbf{v}_{n+1}^{pred}$,$\mathbf{a}_{n+1}^{pred}$ は無数に考えられるが代表的な予測は

1. 加速度 0 の予測

$$\begin{cases} \mathbf{a}_{n+1}^{pred} = 0 \\ \mathbf{v}_{n+1}^{pred} = \mathbf{v}_n + (1-\gamma)\mathbf{a}_n \Delta t \end{cases} \tag{8}$$

2. 加速度変化なしの予測

$$\begin{cases} \mathbf{a}_{n+1}^{pred} = \mathbf{a}_n \\ \mathbf{v}_{n+1}^{pred} = \mathbf{v}_n + \mathbf{a}_n \Delta t \end{cases} \tag{9}$$

代入すると簡単にわかるが、これらの式は時間積分関係式を満たしている。
これらの予測をもちいたＰＭＡの手続きは以下のとおり

PMA のアルゴリズム

1. 速度、加速度の初期化
   速度、加速度の初期値に予測値をセットする
   $$\begin{cases} \mathbf{a}_{n+1}^{1} = \mathbf{a}_{n+1}^{pred} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{1} = \mathbf{v}_{n+1}^{pred} \end{cases}$$
2. i を 1 にセット
3. 増分量 $\Delta\mathbf{a}^i$ の計算
   - $\mathbf{M}^*\Delta\mathbf{a}^i = \mathbf{R}^i$
   - 但し、
     $$\begin{cases} \mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \gamma\Delta t\mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^{i}) \\ \mathbf{R}^i = \mathbf{F} - \mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1}^{i} - \mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^{i})\mathbf{v}_{n+1}^{i} \end{cases}$$
4. 解の更新
   $$\begin{cases} \mathbf{v}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{v}_{n+1}^{i} + \gamma\Delta t\Delta\mathbf{a}^i \\ \mathbf{a}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{a}_{n+1}^{i} + \Delta\mathbf{a}^i \end{cases}$$
5. さらに反復が必要なら i を 1 進めて 3 番に進む
6. 反復が必要ないなら時間を Δ だけすすめて 1 番に進む

1.2.2　修正ＰＭＡ法

ＰＭＡ法では系の非線形性が強い場合不安定になり、収束しない場合がある。これは 1 回目の増分量の計算において非線形項を予測値を元に計算しているためである。そこで 1 回目の増分計算に限り、非線形項を前の時間ステップ n の速度 $\mathbf{v}_n$ を元に計算する。つまり、一回目の反復で $\mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^{i}) \rightarrow \mathbf{C}(\mathbf{v}_n)$ と置き換える。

修正 PMA のアルゴリズム

1. 速度、加速度の初期化
   速度、加速度の初期値に予測値をセットする
   $$\begin{cases} \mathbf{a}_{n+1}^1 = \mathbf{a}_{n+1}^{pred} \\ \mathbf{v}_{n+1}^1 = \mathbf{v}_{n+1}^{pred} \end{cases}$$
2. i を 1 にセット
3. 増分量 $\Delta\mathbf{a}^i$ の計算
   - $\mathbf{M}^*\Delta\mathbf{a}^i = \mathbf{R}^i$
   - 但し、
   - $i = 1$ のとき
     $$\begin{cases} \mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \gamma\Delta t\mathbf{C}(\mathbf{v}_n) \\ \mathbf{R}^i = \mathbf{F} - \mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1}^1 - \mathbf{C}(\mathbf{v}_n)\mathbf{v}_{n+1}^1 \end{cases}$$
   - $i > 1$ のとき
     $$\begin{cases} \mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \gamma\Delta t\mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^i) \\ \mathbf{R}^i = \mathbf{F} - \mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1}^i - \mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^i)\mathbf{v}_{n+1}^i) \end{cases}$$
4. 解の更新
   $$\begin{cases} \mathbf{v}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{v}_{n+1}^i + \gamma\Delta t\Delta\mathbf{a}^i \\ \mathbf{a}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{a}_{n+1}^i + \Delta\mathbf{a}^i \end{cases}$$
5. さらに反復が必要なら i を 1 進めて 3 番に進む
6. 反復が必要ないなら時間を Δt だけすすめて 1 番に進む

具体的に速度、加速度の予測に加速度の変化がない 2 番の予測を用いた場合は、このアルゴリズムは次のようにも変形できる。

修正 PMA のアルゴリズム (加速度の変化がない予測)

1. 速度、加速度の初期化
   速度、加速度の初期値に前のステップの解を代入
   $$\begin{cases} \mathbf{a}_{n+1}^{1} = \mathbf{a}_n \\ \mathbf{v}_{n+1}^{1} = \mathbf{v}_n \end{cases}$$

2. i を 1 にセット

3. 増分量 $\Delta\mathbf{a}^i$ の計算

   - $\mathbf{M}^*\Delta\mathbf{a}^i = \mathbf{R}^i$
   - 但し、
   - $i = 1$ のとき
     $$\begin{cases} \mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \gamma\Delta t\mathbf{C}(\mathbf{v}_n) \\ \mathbf{R}^i = \mathbf{F} - \mathbf{M}\mathbf{a}_n - \mathbf{C}(\mathbf{v}_n)\mathbf{v}_n - \Delta t\mathbf{C}(\mathbf{v}_n)\mathbf{a}_n \end{cases}$$
   - $i > 1$ のとき
     $$\begin{cases} \mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \gamma\Delta t\mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^{i}) \\ \mathbf{R}^i = \mathbf{F} - \mathbf{M}\mathbf{a}_{n+1}^{i} - \mathbf{C}(\mathbf{v}_{n+1}^{i})\mathbf{v}_{n+1}^{i} \end{cases}$$

4. 解の更新

   - $i = 1$ のとき
     $$\begin{cases} \mathbf{v}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{v}_{n+1}^{1} + \Delta t\mathbf{a}_n + \gamma\Delta t\Delta\mathbf{a}^1 \\ \mathbf{a}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{a}_{n+1}^{1} + \Delta\mathbf{a}^1 \end{cases}$$
   - $i > 1$ のとき
     $$\begin{cases} \mathbf{v}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{v}_{n+1}^{i} + \gamma\Delta t\Delta\mathbf{a}^i \\ \mathbf{a}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{a}_{n+1}^{i} + \Delta\mathbf{a}^i \end{cases}$$

5. さらに反復が必要なら i を 1 進めて 3 番に進む

6. 反復が必要ないなら時間を Δt だけすすめて 1 番に進む

この変形は結果には全く影響はないが前のステップの解をそのまま初期値としているので、プログラミングする際に簡単になる。

2 Backward Eular method for 2nd order problem

次のように，慣性と内力で表される系を考える．

$$M\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \tag{10}$$

式 (10) は２階の微分方程式なので，陰的時間積分で表すために，一回の微分方程式に変換する．これは単純に速度を $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ のように書いて，次のように変換すればよい．

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ M\dot{\mathbf{x}} \end{pmatrix} = \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ M\mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \end{pmatrix}. \tag{11}$$

以下，簡単のために $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(t)$,$\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(t)$ とする， また，$\Delta\mathbf{x} = \mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)$,$\Delta\mathbf{v} = \mathbf{v}(t + \Delta t) - \mathbf{v}(t)$ であるとする．

陽的オイラー法 (explicit Eular method,Eular Method)[1] では，式 (11) の Δx と Δv を次のように近似する．

$$\begin{pmatrix} \Delta\mathbf{x} \\ M\Delta\mathbf{v} \end{pmatrix} = h\begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{f}_0 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

但し $\mathbf{f}_0$ は $\mathbf{f}_0 = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0)$ とした．

後退オイラー法 (Backward Eular method) では, Δx と Δv は次のように近似される．

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ M\Delta v \end{pmatrix} = h\begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{f}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, \mathbf{v} + \Delta\mathbf{v}) \end{pmatrix}. \tag{13}$$

陽的オイラー法では $\mathbf{f}$ の値を求めることだけが必要であったが，後退オイラー法では (13) を満たすように $\Delta\mathbf{x}$ と $\Delta\mathbf{v}$ の値を求める必要がある．

式 (13) は一般的には非線形方程式である．厳密に式 (13) を満たす物を求める (反復計算が必要になる) のではなく，テイラー展開 (Taylor series expansion) によって $\mathbf{f}$ を一次近似した計算を用いると，簡単に近似計算できる (semi-implicit Eular method[2] と呼ばれる)．

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_0 + \Delta\mathbf{x}, \mathbf{v}_0 + \Delta\mathbf{v}) = \mathbf{f}_0 + \frac{\partial\mathbf{f}}{\partial\mathbf{x}}\Delta\mathbf{x} + \frac{\partial\mathbf{f}}{\partial\mathbf{v}}\Delta\mathbf{v} \tag{14}$$

ここで $\mathbf{f}$ の微分 $\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial\mathbf{x}}$ は，状態 $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0)$ において評価されることに注意したい．これは $\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial\mathbf{v}}$ についても同じである．

これを，式 (13) に代入すると次の線形方程式が得られる

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta v \end{pmatrix} = \Delta t \begin{pmatrix} v \\ M^{-1}\left(\mathbf{f}_0 + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\Delta \mathbf{x} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{v}}\Delta \mathbf{v}\right) \end{pmatrix}. \tag{15}$$

式 (15) の下行に $\Delta \mathbf{x} = \Delta t(\mathbf{v}_0 + \Delta \mathbf{v})$ を代入すると次の式が得られる．

$$M\Delta \mathbf{v} = \Delta t\left(\mathbf{f}_0 + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\Delta t(\mathbf{v}_0 + \Delta \mathbf{v}) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{v}}\Delta \mathbf{v}\right) \tag{16}$$

ここで I は単位行列を表すとする．$\Delta \mathbf{v}$ についてまとめると，$\mathbf{v}$ の増分についての次の方程式が得られる．

$$\left(M - \Delta t\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} - \Delta t^2\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{v}}\right)\Delta \mathbf{v} = \Delta t\left(\mathbf{f}_0 + \Delta t\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{v}_0\right) \tag{17}$$

一度 $\Delta \mathbf{v}$ が得られると,$\mathbf{x}$ は $\Delta \mathbf{x} = \Delta t(\mathbf{v}_0 + \Delta \mathbf{v})$ のように簡単に得られる

3 Reference

[3],[4],[5],[6] などを参考にした.

参考文献

[1] Wikipedia, : Eular Method, http://en.wikipedia.org/wiki/Euler_method.

[2] Wikipedia, : Semi-implicit Eular Method, http://en.wikipedia.org/wiki/Semi-implicit_Euler_method.

[3] 久田俊明：非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎, 丸善 (1999).

[4] 渡辺浩志：非線形有限要素法特論, http://www.sml.k.u-tokyo.ac.jp/members/nabe/.

[5] Wikipedia, : Crank-Nicolson Method, http://en.wikipedia.org/wiki/Crank-Nicolson_method.

[6] Baraff, D. and Witkin, A.: Large steps in cloth simulation, in *Proceedings of the 25th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, pp. 43–54ACM (1998).