

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

第2回シミュレーションスクール

第2日: 熱拡散方程式のプログラムをつくろう

陰山 聡、政田 洋平

神戸大学大学院 システム情報学研究科 計算科学専攻

2010.12.07

今日以降の本スクールの基本方針

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 1 具体的な例題を一つに絞る
⇒ 2次元熱伝導問題
- 2 実習中心
⇒ 各自自分のコードを1から作る
- 3 そのコードを少しずつ改良していく
⇒ 最後は並列化されたコードをスーパーコンピュータに。

今日のスクール

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 1 初歩から、ゆっくり、丁寧に。
- 2 網羅的な紹介よりも、基礎的な手法と考え方の習得を。
- 3 具体的な例を通じてシミュレーションプログラムの作り方を体験的に学ぶ。

プログラミング言語について

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 実習中心 ⇒ 各自がプログラムを書く
- C/C++言語で書いてもOK。
- file名のつけ方は例題に習って (例:001.f95 ⇒ 001.c)

Makefileについて

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 今日と明日の講義ではMakefileは使わない
- 使ったほうが便利。実用的。
- 毎回、コンパイルコマンドを自分で打つほうが教育的
- Makefileの文法の問題にとらわれがち

言葉について

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- コード、プログラム
- 時間発展
- 2次元、2-D、2D
- ディレクトリ、フォルダ
- 解析的に、解析解

実習：ディレクトリ構造とサンプルコード

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 1 マシン「scalar」にログイン
- 2 `cd`
- 3 `mkdir Tue`
- 4 `mkdir Wed`
- 5 `cd Tue`
- 6 `mkdir data`
- 7 `cp -r /tmp/ss2/Tue/src-work .`

実習用コード

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

`src-work` 実習用（スケルトンコードあり。一部空白。）

`data` 各自のデータを出力する場所

`001.f95`等 実習用コードのファイル名: 数字.f95

`/tmp/ss2/Tue/src-sample` 実習問題の解答例

今日の目標

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

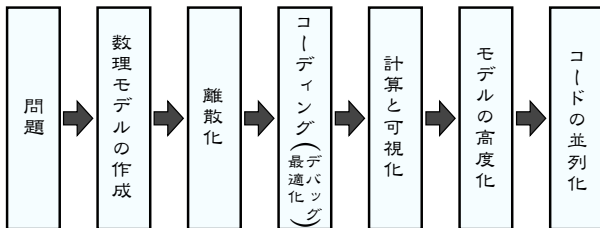
離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

シミュレーション研究の流れ



シミュレーションの流れ

熱拡散

陰山・政田

シミュレーション研究の流れ 今日の目標

はじめに

問題設定

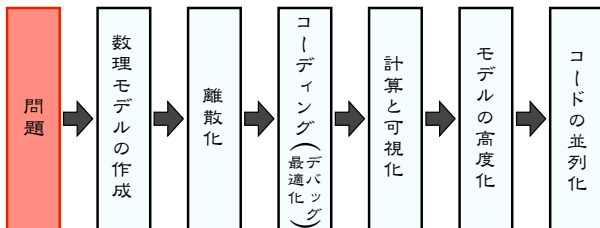
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く



シミュレーションの流れ

熱拡散

陰山・政田

シミュレーション研究の流れ 今日の目標

はじめに

問題設定

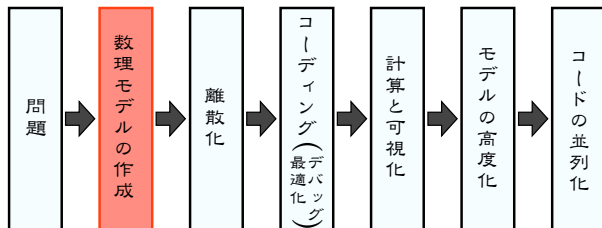
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く



シミュレーションの流れ

熱拡散

陰山・政田

シミュレーション研究の流れ 今日の目標

はじめに

問題設定

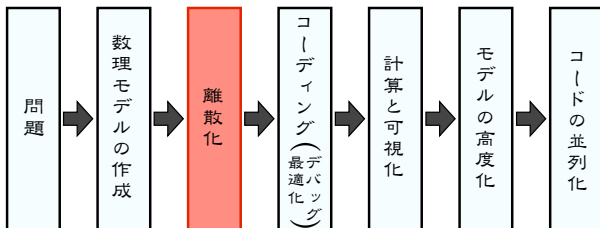
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く



シミュレーションの流れ

熱拡散

陰山・政田

シミュレーション研究の流れ 今日の目標

はじめに

問題設定

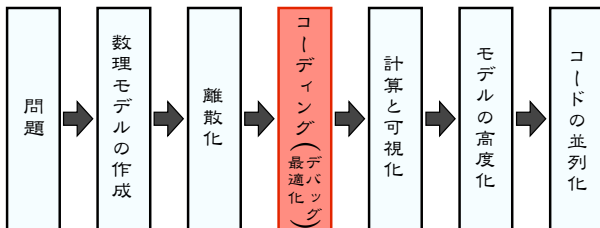
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く



今日の目標

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 例題(熱伝導問題)の設定
- 差分法の基礎
- シミュレーションプログラミングの基礎

問題設定： 床暖房問題

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

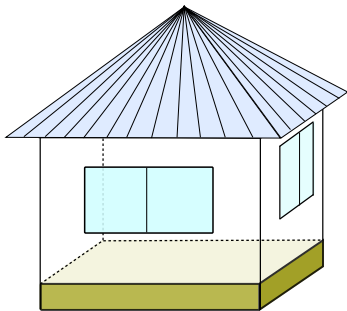
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



問題設定： 床暖房問題

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

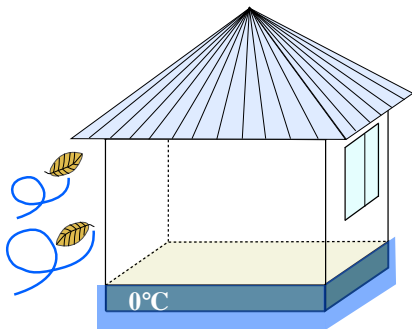
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



問題設定： 床暖房問題

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

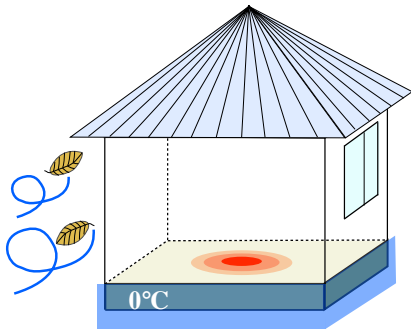
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



問題設定： 床暖房問題

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

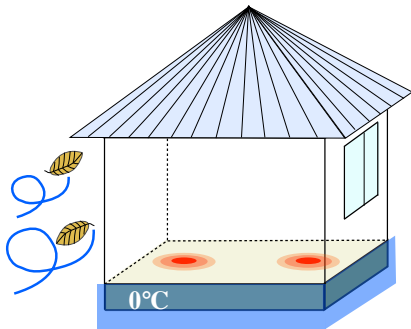
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



問題設定： 床暖房問題

熱拡散

一様な加熱

陰山・政田

はじめに

問題設定

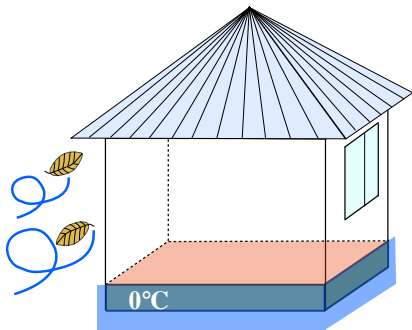
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



座標系

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

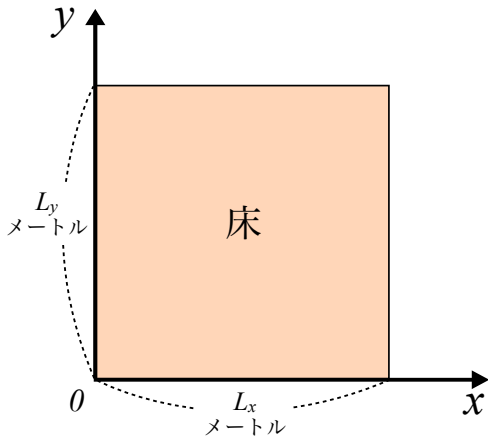
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



問題設定

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- $L_x \times L_y$ 平方メートルの長方形領域
- 辺上の温度は常に 0° (固定)
- 面内に熱源が分布
- 面の熱拡散率 k
- 面内の温度分布は？

熱伝導問題

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

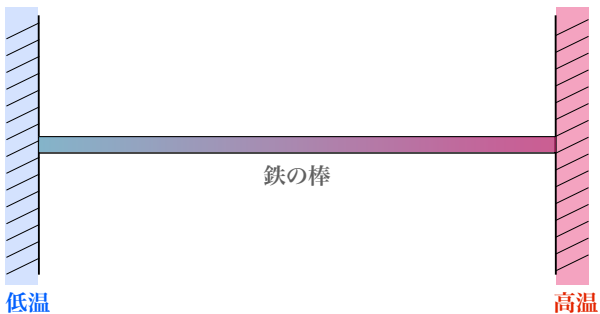
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



温度分布

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

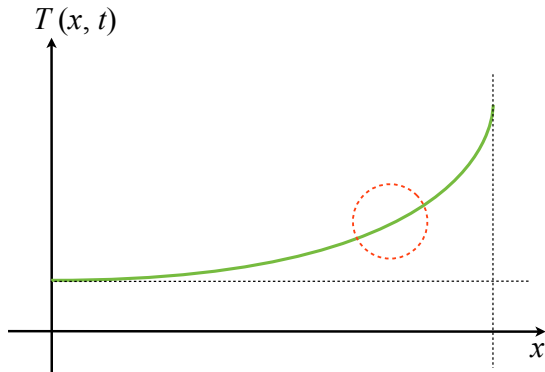
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



温度分布が線形(まっすぐ、傾き一定)の時

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

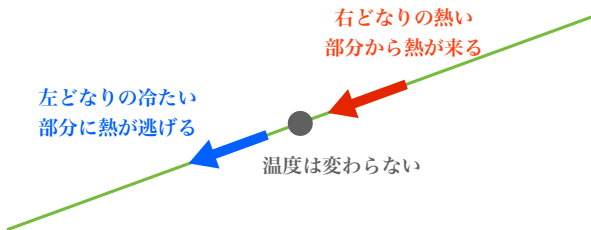
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く



温度分布が下に凸の時

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

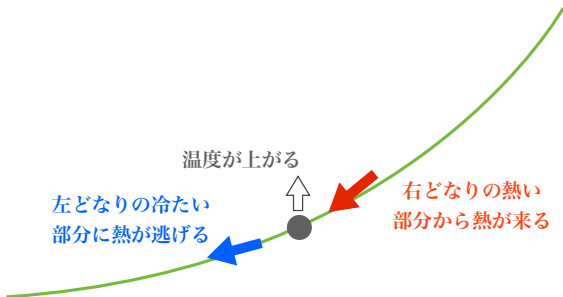
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



温度分布が上に凸の時

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

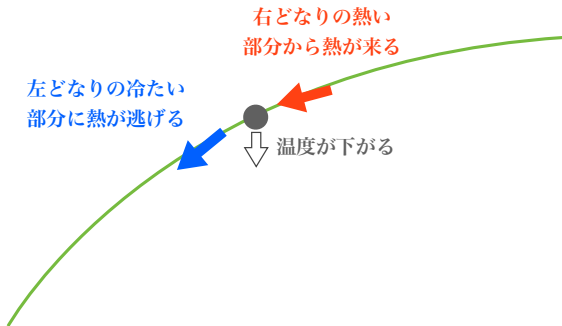
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



温度分布の空間微分と温度の時間変化の関係

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定


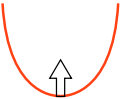
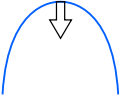
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く

	$\frac{\partial T}{\partial x} = \text{一定}$ $\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \right)$	$\frac{\partial T}{\partial t} = 0$
	$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} > 0$	$\frac{\partial T}{\partial t} > 0$
	$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} < 0$	$\frac{\partial T}{\partial t} < 0$

熱伝導(熱拡散) 方程式

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

温度 $T(x, t)$ に対する基本方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

k : 熱拡散係数

熱源があるとき

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

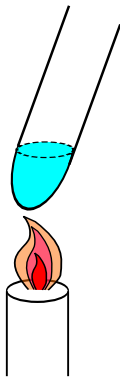
シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{\partial T}{\partial t} = s$$

s : 熱源 (heat source)

ろうそくで温度計を熱している図



熱拡散方程式

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

1D

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + s(x)$$

2D

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \left\{ \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y, t)}{\partial y^2} \right\} + s(x, y)$$

熱拡散方程式の表現

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) T(x, y, t) + s(x, y)$$

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \nabla^2 T(x, y, t) + s(x, y)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + s$$

∇^2 : ラプラシアン

問題の数学的定式化

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$(0, 0) \leq (x, y) \leq (L_x, L_y)$ の長方形領域で

$T(0, y) = T(L_x, y) = T(x, 0) = T(x, L_y) = 0$ という境界条件のもと

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \nabla^2 T(x, y, t) + s(x, y)$$

という熱拡散方程式を解き、

定常状態 ($\frac{\partial T}{\partial t} = 0$) の温度分布

$T(x, y)$ を求めよ。

離散化

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 離散化とはなにか？
- なぜ離散化が必要か？
- 解くべき方程式が分かっているのなら、計算機に放りこめばそれを解いてくれるのではないか？
- そういう時もある。

数式処理

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

解ける？

$$\frac{du}{dx} = x^2 + u^2$$

数式処理

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

解ける。

$$u(x) = -\frac{x \left(\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) J_{-\frac{3}{4}}\left(\frac{x^2}{2}\right) + 2J_{\frac{3}{4}}\left(\frac{x^2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right)}{J_{\frac{1}{4}}\left(\frac{x^2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) - 2J_{-\frac{1}{4}}\left(\frac{x^2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}$$

第一種ベッセル関数
ガンマ関数

数式処理

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

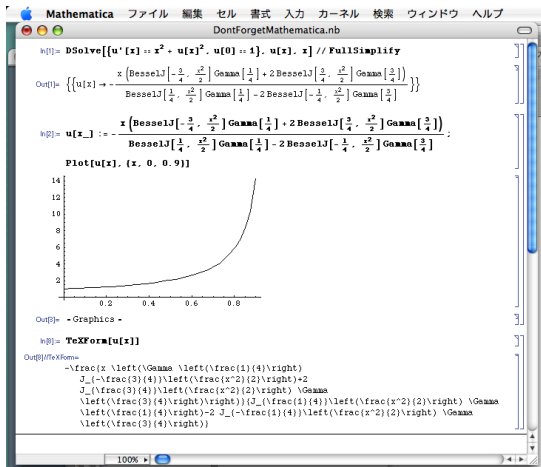
離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

数式処理ソフトウェア。



数学的定式の次に

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 解析的に(紙とペンで)解けないか？
- 数式処理ソフトで解けないか？
- 数值的に解く。あるいは計算機シミュレーションをする。

方程式を数値的に解く

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作
成

熱拡散方程式
を解く

計算機の「計算力」を活かして熱拡散方程式を数値的に解く。

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \nabla^2 T(x, y, t) + s(x, y)$$

計算機の計算力＝計算スピード

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- スーパーコンピュータ ⇒ 何が『スーパー』か？
- 計算機のスピード競争
- Top500リスト

Top500リスト

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

TOP500 List - November 2010 (1-100)

R_{max} and R_{peak} values are in TFlops. For more details about other fields, check the [TOP500 description](#).

Power data in KW for entire system

next

Rank	Site	Computer/Year Vendor	Cores	R_{max}	R_{peak}	Power
1	National Supercomputing Center in Tianjin China	Tianhe-1A - NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C / 2010 NUDT	186368	2566.00	4701.00	4040.00
2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz / 2009 Cray Inc.	224162	1759.00	2331.00	6950.60
3	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, Nvidia Tesla C2050 GPU / 2010 Dawning	120640	1271.00	2984.30	2580.00
4	GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows / 2010 NEC/HP	73278	1192.00	2287.63	1398.61
5	DOE/SC/LBNL/NERSC United States	Hopper - Cray XE6 12-core 2.1 GHz / 2010 Cray Inc.	153408	1054.00	1288.63	2910.00
6	Commissariat a l'Energie Atomique (CEA) France	Tera-100 - Bull bulx super-node S6010/S6030 / 2010 Bull SA	138368	1050.00	1254.55	4590.00
7	DOE/INNS/LANL United States	Roadrunner - BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 Ghz, Voltaire Infiniband / 2009 IBM	122400	1042.00	1375.78	2345.50
8	National Institute for Computational Sciences/University of Tennessee United States	Kraken XT5 - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz / 2009 Cray Inc.	98928	831.70	1028.85	3090.00
9	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUGENE - Blue Gene/P Solution / 2009 IBM	294912	825.50	1002.70	2268.00
10	DOE/INNS/LANL/SNL United States	Cielo - Cray XE6 8-core 2.4 GHz / 2010 Cray Inc.	107152	816.60	1028.66	2950.00

計算機の計算速度

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 単位はFLOPS
- Floating Point Operations Per Second
- 1秒あたりの倍精度浮動小数点数演算の演算回数
- 倍精度浮動小数点数: 15桁ほどの小数
- どんな演算? ⇒ 四則演算 (*、+、/、-)

計算機を活かす

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 計算機の速度を活かす
- 計算機の四則演算の速度を活かす
- 対象問題を四則演算の問題に焼き直す
- ⇒ 離散化

熱拡散方程式の離散化

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \nabla^2 T(x, y, t) + s(x, y)$$

をどう四則演算の問題として表現するか？

微分の離散化

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{一階の微分})$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{二階の微分})$$

を四則演算で表現する。

微分

熱拡散

微分は接線の傾き

陰山・政田

はじめに

問題設定

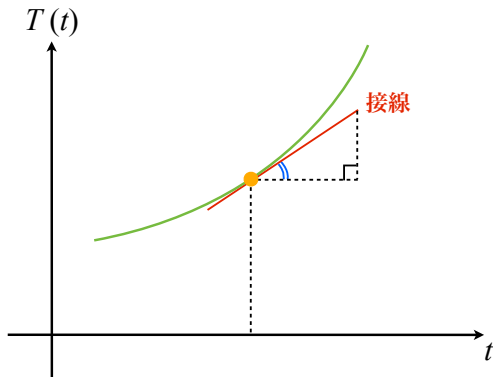
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く



微分を差分で近似する

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

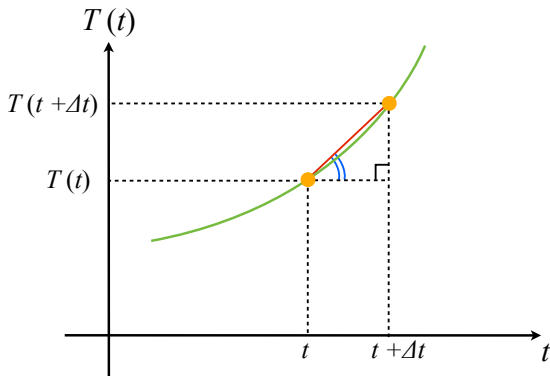
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



傾き $\frac{T(t+\Delta t) - T(t)}{\Delta t}$

差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{\partial T}{\partial t} \sim \frac{T(t + \Delta t) - T(t)}{\Delta t}$$

引き算 1回

割り算 1回

で微分を近似

$1/\Delta t$ をあらかじめ計算しておけば、割り算の代わりに掛け算。

実習：一階差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

関数

$$f(x) = 1 + \frac{x}{1} + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4}$$

の $x = 2$ における微分

$$\frac{df}{dx}$$

を差分で近似的に計算するコードを書く。

実習：一階差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- `src-work/001.f95` を編集
- 自分で一から書いても可。
- 正解例は `/tmp/ss2/Tue/src/001.f95`

実習：一階差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作
成

熱拡散方程式
を解く

ポイント

$$\frac{df(x)}{dx} \sim (f(x + \Delta x) - f(x)) / \Delta x$$

実習：一階差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

■ コンパイル `pgf95 -o 001.exe 001.f95`

■ 実行 `./001.exe`

コード解説

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

001.f95

実習：一階差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- $x = 2$ での微分の値を求めているがこれを他の x に変更して試してみる。
- Δx を小さくするとごさが小さくなることを確認せよ。

時間の離散化

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導


離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

連続点 

離散点 

2次元空間の離散化

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

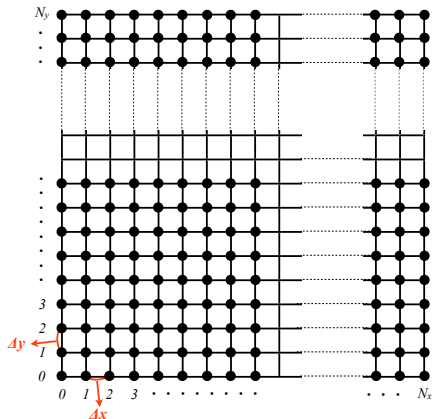
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



2階微分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

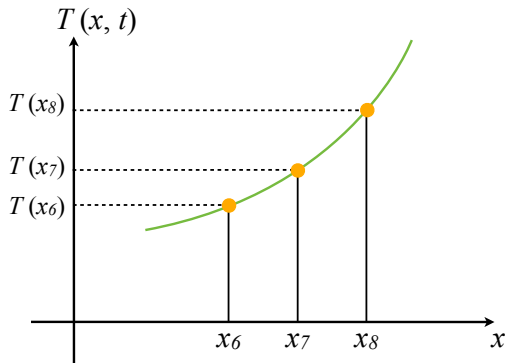
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



2階微分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

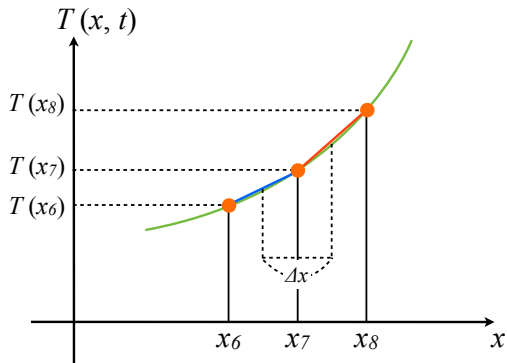
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



2階微分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\begin{aligned}\left[\frac{d^2}{dx^2}T(x)\right]_{x_7} &= \left[\frac{d}{dx}\left(\frac{dT}{dx}\right)\right]_{x_7} \\ &= \frac{\left(\frac{dT}{dx}\right)_{7.5} - \left(\frac{dT}{dx}\right)_{6.5}}{\Delta x} \\ &= \frac{\left(\frac{T(x_8)-T(x_7)}{\Delta x}\right)_{7.5} - \left(\frac{T(x_7)-T(x_6)}{\Delta x}\right)_{6.5}}{\Delta x} \\ &= \frac{T(x_8) - 2T(x_7) + T(x_6)}{(\Delta x)^2}\end{aligned}$$

2階差分

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{d^2T(x)}{dx^2} \sim \frac{T(x + \Delta x) - 2T(x) + T(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

実習

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

001.f95にならい、同じ関数

$$f(x) = 1 + \frac{x}{1} + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{4}$$

の $x = 2$ における2階微分 $\frac{df}{dx}(x = 2)$ の値を差分で計算するプログラムを作れ。

ファイル名は 002.f95 とすること。コンパイルは `pgf95 -o`

`002.exe 002.f95` 実行は `./002.exe`

Δx を小さくすると誤差が小さくなることを確認せよ。

2階差分のまとめ

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\frac{d^2T(x)}{dx^2} \sim \frac{T(x + \Delta x) - 2T(x) + T(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{d^2T(x_i)}{dx^2} \sim \frac{T(x_{i+1}) - 2T(x_i) + T(x_{i-1}))}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2T(x_i, y_j)}{\partial x^2} \sim \frac{T(x_{i+1}, y_j) - 2T(x_i, y_j) + T(x_{i-1}, y_j)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2T(x_i, y_j)}{\partial y^2} \sim \frac{T(x_i, y_{j+1}) - 2T(x_i, y_j) + T(x_i, y_{j-1}))}{\Delta y^2}$$

格子点の番号付け

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

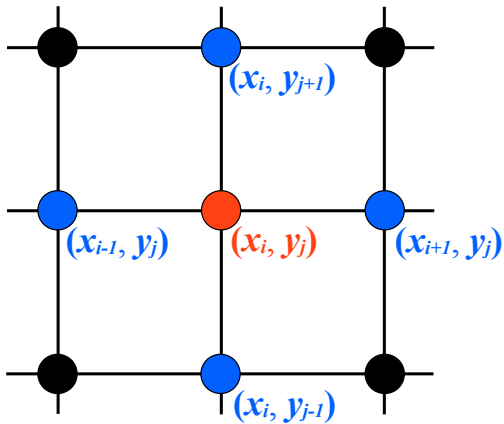
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



熱拡散方程式の差分表現

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーションコードの作成

熱拡散方程式を解く

$$\frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) T(x, y, t) + s(x, y)$$

$T(x_i, y_j, t) \Rightarrow T_{i,j}(t)$ と略記。

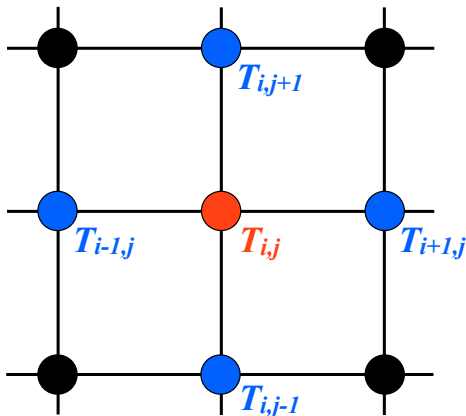
$$\begin{aligned} \frac{T_{i,j}(t + \Delta t) - T_{i,j}(t)}{\Delta t} &= k \left(\frac{T_{i+1,j}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)}{\Delta x^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{T_{i,j+1}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)}{\Delta y^2} \right) \\ &\quad + s_{i,j} \end{aligned}$$

差分テンソル

熱拡散

陰山・政田

$$\frac{T(x_{i+1}, y_j) - 2T(x_i, y_j) + T(x_{i-1}, y_j))}{\Delta x^2}, \quad \frac{T(x_i, y_{j+1}) - 2T(x_i, y_j) + T(x_i, y_{j-1}))}{\Delta y^2}$$



はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

時間発展の式

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\begin{aligned} T_{i,j}(t + \Delta t) &= T_{i,j}(t) \\ &+ \frac{k \Delta t}{\Delta x^2} \{T_{i+1,j}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)\} \\ &+ \frac{k \Delta t}{\Delta y^2} \{T_{i,j+1}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)\} \\ &+ s_{i,j} \Delta t \end{aligned}$$

この式は

Δt だけ未来の温度 = 現在の温度分布の四則演算

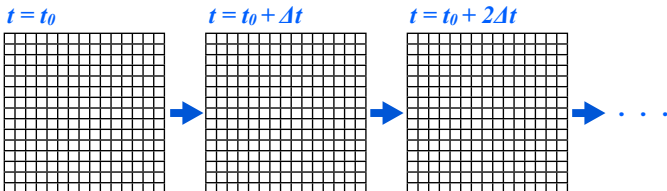
という形をしている。

時間発展

熱拡散

陰山・政田

格子系の上に定義された温度分布の時間変化



はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

格子系の作成

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 格子系 \Rightarrow 具体的な実体(モノ)として考える
- カプセル化
- 「格子系」以外のモノは、「格子系」にメッセージを送る。
- 他のモノは「格子系」の中身を直接操作することも(見ることも)できないようにするのが基本。
- バグ防止
- コード開発・メンテナンスの容易さ
- 大規模なシミュレーションコード開発には必須。

1D格子系作成コード

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- `$HOME/Tue/src-work/003.f95`
- エディタで `003.f95` を確認
- 実行 `pgf95 -o 003.exe 003.f95 && ./003.exe`

コード解説

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

003.f95

実習

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

003.f95を自由に編集し、コンパイル、実行せよ。

$nx=-2$ など、負の値を入れてみよ。

シミュレーションコーディング便利なテクニック

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- assert
- 前提条件(絶対に正しいはずの条件)を念の為に確認する。
- 万が一条件違反 ⇒ プログラム停止
- 走り続けておかしい結果に悩むよりも、潔く止まってくれた方がマシ

便利なルーチン集

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- utモジュール (ユーティリティ)
- どんどん充実させる
- ut_assert

コード解説

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

```
module ut
  use constants
  implicit none
```

```
contains
```

```
subroutine ut_assert(condition, message)
  logical, intent(in) :: condition
  character(len=*), intent(in) :: message
```

```
  if ( .not.condition ) then
    stop message ! print out the message and die.
  end if
```

```
end subroutine ut_assert
end module ut
```

便利なコーディングテクニック

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- そのモジュールのpublicなルーチン
- ルーチン名にアンダースコア二つ(underscore)をつける。
- モジュール名__名前
- アンダースコア二つ(underscore)がないルーチンは、いま見ているモジュール内部のprivateなルーチンとわかる
- ファイルを見つけやすい

実習: 2次元格子を作る

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

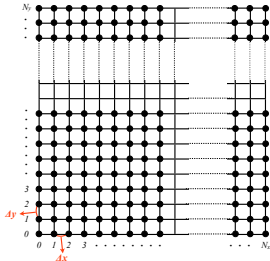
離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 解答例: `$HOME/Tue/src-work/004.f95`
- 自由に編集
- コンパイル、実行



コード解説

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

004.f95

場の量

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

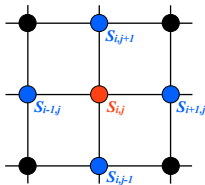
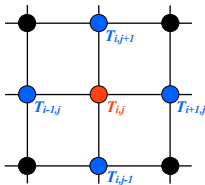
離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\begin{aligned} T_{i,j}(t + \Delta t) = & T_{i,j}(t) \\ & + \frac{k \Delta t}{\Delta x^2} \{T_{i+1,j}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)\} \\ & + \frac{k \Delta t}{\Delta y^2} \{T_{i,j+1}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)\} \\ & + s_{i,j} \Delta t \end{aligned}$$



場の量を作る

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 温度場 tmp
- 熱源場 src
- 解答例: `$HOME/src-work/005.f95`

コード解説

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

005.f95

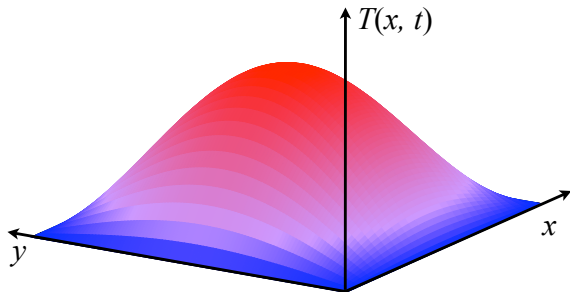
初期の温度分布

熱拡散

ルーチン名 iSet_tmp

陰山・政田

$$T(x, y) = \sin(x\pi/L_x) \times \sin(y\pi/L_y)$$



はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

時間発展

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

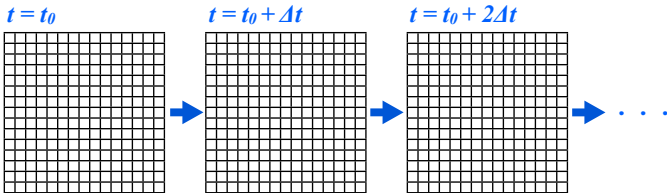
熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く



時間発展

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\begin{aligned} T_{i,j}(t + \Delta t) &= T_{i,j}(t) \\ &+ \frac{k \Delta t}{\Delta x^2} \{T_{i+1,j}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)\} \\ &+ \frac{k \Delta t}{\Delta y^2} \{T_{i,j+1}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)\} \\ &+ s_{i,j} \Delta t \end{aligned}$$

式変形

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\begin{aligned} T_{i,j}(t + \Delta t) &= T_{i,j}(t) \\ &+ \frac{k \Delta t}{\Delta x^2} \{T_{i+1,j}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i-1,j}(t)\} \\ &+ \frac{k \Delta t}{\Delta y^2} \{T_{i,j+1}(t) - 2T_{i,j}(t) + T_{i,j-1}(t)\} \\ &+ s_{i,j} \Delta t \\ &= \Delta t \left\{ \frac{k}{\Delta x^2} (T_{i+1,j} + T_{i-1,j}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{k}{\Delta y^2} (T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) + s_{i,j} \right\} \\ &+ \left\{ 1 - \Delta t \cdot 2 \left(\frac{k}{\Delta x^2} + \frac{k}{\Delta y^2} \right) \right\} T_{i,j} \end{aligned}$$

式変形

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\alpha_x = \frac{k}{\Delta x^2}$$

$$\alpha_y = \frac{k}{\Delta y^2}$$

$$\beta = 2(\alpha_x + \alpha_y)$$

とする。

式変形

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

$$\begin{aligned} T_{i,j}(t + \Delta t) &= \Delta t \{ \alpha_x (T_{i+1,j}(t) + T_{i-1,j}(t)) \\ &\quad + \alpha_y (T_{i,j+1}(t) + T_{i,j-1}(t)) \\ &\quad + s_{i,j} \} \\ &\quad + (1 - \beta \Delta t) T_{i,j}(t) \\ &= (\text{重み1})_x (\text{周囲の温度}) \\ &\quad + (\text{重み2})_x (\text{自分の温度}) \\ &\quad + (\text{加熱の効果}) \end{aligned}$$

熱拡散

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

重みつき平均値

$$f' = (1 - w)f(a) + wf(b)$$

$0 \leq w \leq 1$ ならば f' は $f(a)$ と $f(b)$ の間 それ以外だと。。。

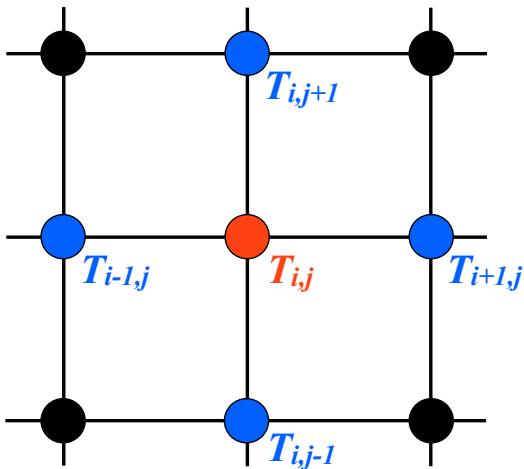
ギザギザの関数の場合 \Rightarrow 振動しながら発散

熱拡散

熱拡散

陰山・政田

拡散 (ラプラシアン) の効果 = 周囲の値の平均値に近づこうとする効果



はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

Δt はどこまで大きくとれるか

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 時間刻み幅 Δt は大きいほうが望ましい
- 必要な計算ステップ数（計算時間）が小さくなるので
- だがむやみに大きくとれるはずはない
- 限界値 $\Delta t_{\text{critical}}$ がある。
- CFL条件。クーラン条件。
- 今の場合 $1 - \beta\Delta t > 0$

CFL条件

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 解いている基本方程式に依存
- 用いている計算手法(今の場合は差分法)に依存

実習: 熱拡散方程式

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 差分法で熱拡散方程式を解くコードを作る
- 解答例: src-work/006.f95
- 今、熱源分布はなし; $\text{src}(:, :) = 0$
- 最終的には温度は全ての点でゼロ $T(:, :) = 0$ になるはず

デバッグに便利なpgf95のオプション

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- pgf95 -Mbounds 006.f95
- 配列の境界違反をチェック
- `tmp(i,j)` で $i > N_x$ のときなど

コード解説

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

006.f95

実習: 006.f95

熱拡散

陰山・政田

はじめに

問題設定

熱伝導

離散化

差分法

シミュレーション
コードの作成

熱拡散方程式
を解く

- 熱源分布を0以外にする
- 時間刻み幅 Δt を変える。 $\Delta t_{\text{critical}}$ よりも大きくしたらどうなるか？
- コンパイル&実行: `pgf95 -o 006.exe 006.f95 && ./006.exe`