

A numerical method for partial differential equations using the total symbol

Michio Yoneya (米谷 道夫) *

Tohoku National Industrial Research Institute, Sendai 983-8551 Japan

1 はじめに

物理現象を保存則にもとづいて定式化したとき連立偏微分方程式で表されることが多い。代表的な例の一つは流れの方程式で、これまで差分法、有限要素法あるいは境界要素法など様々な方法が適用されている。考えられる方法は出尽くした感があるが、これまでの方法ではソース（源泉）分布が与えられたような問題のとき手軽に数値解析できるとは言い難い。

本報告の解析方法は、偏微分方程式を解析的に解くときに使われる全表象 (total symbol) すなわち線形作用素のフーリエ表現を利用して、ソース分布が与えられた偏微分方程式を周波数空間 (フーリエ空間) で数値的に解くものである。これまで単独方程式の場合について、移動熱源問題、KdV 方程式、Poisson 方程式および Burgers 方程式で解法の検証を行ってきた [1]。この方法を連立偏微分方程式の Dirichlet 問題が解けるように拡張したので、その結果の一例を報告する。

線形作用素 A が定数係数ときの偏微分方程式

$$Au = f \quad (1)$$

で、作用素 A の全表象 (total symbol) $A(i\xi)$ が R^n 上で 0 でないなら、任意の $f \in C_0^\infty(R^n)$ に対して

$$u(x) = \mathcal{F}^{-1} \left[\frac{\hat{f}(\xi)}{A(i\xi)} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{f}(\xi)}{A(i\xi)} \exp(ix \cdot \xi) d\xi \quad (2)$$

が (1) 式を満たすことはよく知られている [2]。ここで \mathcal{F}^{-1} は逆フーリエ変換を、 $\hat{\cdot}$ は関数がフーリエ変換されたものであることを示す。この (2) 式を利用して、非線形偏微分方程式の数値計算が行える。

*email: yoneya@tniri.go.jp

2 数値解析の方法

代表的な連立偏微分方程式として非圧縮性流れを考える。支配方程式である Navier-Stokes 方程式は、運動量保存則と質量保存則（連続の式）の組で表される。式の中の放物型方程式には時間偏微分が含まれるが、時間について差分近似すると、支配方程式の時間発展は時間ステップの前後の関係式となり、前の時刻の既知関数から次の時刻の未知関数を求める問題となる。初期条件が大域的に与えられているとき、これを始点として順次解いていくことで時間発展が求めることができる。

このような支配方程式の中に境界条件を組み入れた式を考える。例えば、Green 関数では初期条件や境界条件がソース（源泉）項として表されることはよく知られている^[3]。これの類推として、境界値問題の境界条件を、境界ソース項を導入することで支配方程式の中に組み入れて問題を一体化し、全体を一気に解くことを考える。

ソース項を組み込んだ非圧縮性流体の支配方程式を行列表現すると次のようになる。

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} - \nu \Delta & 0 & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & \frac{1}{\Delta t} - \nu \Delta & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & i\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ p \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \frac{u_0}{\Delta t} - u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{v_0}{\Delta t} - v \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} \\ i\varepsilon p \end{bmatrix} + \sum_l \begin{bmatrix} S_u \\ S_v \\ S_p \end{bmatrix} \delta(x - x_l) \delta(y - y_l) \quad (3)
 \end{aligned}$$

ここで、連続の式に微小な純虚数 $i\varepsilon$ を導入したのは逆行列を定義するためである。

この拡張された支配方程式を偏微分作用素 A を用いて、

$$A \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sum_l \mathbf{S}_l \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) \quad (4)$$

で簡略化して表示する。右辺の \mathbf{S}_l は導入されたソース項で、 \mathbf{x}_l の点で保存量の生成消滅があることを表す。また $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ には未知関数 \mathbf{u} などの非線形項が含まれている。

このときの境界条件が、

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_k) = \varphi_k \quad \text{on } \mathbf{x}_k \quad (5)$$

であるとする。(3)、(4) 式でソース項を導入したのは、 \mathbf{x}_l 点のソース項 \mathbf{S}_l の強度を変化させることで、境界面上の点 \mathbf{x}_k での関数 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_k)$ の値を調節して、関数 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ が境界条件を満足できるようにするためである。

(4) 式をフーリエ変換すると、作用素 A の全表象 (total symbol) が 0 でないときに、

$$\hat{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\mathbf{A}(i\boldsymbol{\xi})} \left[\hat{\mathbf{f}}(\boldsymbol{\xi}) + \sum_l \mathbf{S}_l \exp(-i\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\xi}) \right] \quad (6)$$

が得られる。右辺の $\hat{f}(\xi)$ には非線形項が含まれているが、実空間での数値微分で $f(\mathbf{x})$ を求めて、これを周波数空間に写す。この非線形項には $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ などの未知関数が含まれているが、前の時刻の関数値を初期値として代入し、逐次近似法により収束させて求めることができる。境界積分方程式では、右辺のソース分布 $f(\mathbf{x})$ と基本解の合成積として体積積分が残るが、(6) 式ではこれを周波数空間での関数の代数積で計算できる。

数値的に取り扱うため (4)、(6) 式を離散化するが、このとき関数 \mathbf{u} や f などは格子点上のインパルス列として扱う。(6) 式で計算するため関数を実空間から周波数空間に写すが、このときの数値フーリエ積分変換には高速フーリエ変換 (FFT) を使うことができる。離散化したときの変数は、 x 座標については、

$$t = n\Delta t \quad (7)$$

$$\xi = -\frac{\pi N}{X} + k\Delta\xi \quad (8)$$

$$\Delta\xi = \frac{2\pi}{X} \quad (9)$$

で定義される。ここで X は実空間での周期関数の x 軸方向の周期で、 N はその周期の分割数 (格子点数) である。

境界条件 (5) 式で、境界 \mathbf{x}_k での関数を (6) 式で与えると、

$$\begin{aligned} \varphi_k &= \int_R \mathbf{u}(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \\ &= \int_{\Omega} A(i\xi)^{-1}\hat{f}(\xi) \exp(i\mathbf{x}_k \cdot \xi) d\xi \\ &+ \sum_l \left[\frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\Omega} A(i\xi)^{-1} \exp(i\xi \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l)) d\xi \right] \mathbf{S}_l \\ &= \beta_k + \sum_l \alpha_{kl} \mathbf{S}_l \end{aligned} \quad (10)$$

が得られる。境界値問題ではソース項つまり保存量の生成消滅があるのは境界面のみのなので、境界値が与えられた境界点とソース点は同じ点になる。従って、

$$\sum_l \alpha_{kl} \mathbf{S}_l = \varphi_k - \beta_k \quad (\mathbf{k} = 1, 2, \dots, \mathbf{K}) \quad (11)$$

の連立 1 次方程式を解くことでソース項 \mathbf{S}_l の値を決めることができる。

上記の表現ではフルマトリックスで計算量が多い。境界値問題のようにソース強度が未知関数となる問題では、この連立 1 次方程式の処理に計算時間の大半が費やされることになる。基本解の性質からソース項の影響はソースの近くでは大きく遠くでは小さくなる。従って、重要なのは対角要素付近のみである。この性質を使って収束を加速することも可能であろう。(11) 式で対角付近の帯行列だけを左辺に残し他の要素を右辺に移項して暫定的な \mathbf{S}_l を出発点にして \mathbf{S}_l を収束させて求めることで計算速度の加速が可能と考えられる。

本方法では周波数空間で計算を進めるのでデルタ関数が容易に扱える。このため予めソース (源泉) 分布が与えられた問題の方が境界値問題よりも楽に解ける。従来の計算方法では局所的な関係式に基礎をおいているが、本方法は周波数成分の線形近似での時間発展をも

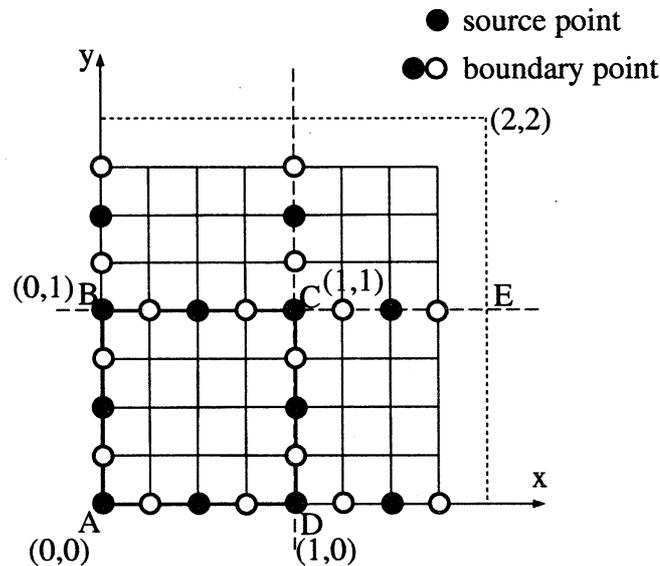


Figure 1: calculation coordinates.

とに解くので、大域的に大まかな近似解を求めて、その後で境界条件を満たすように境界面でのソース強度を調整して関数を境界条件に合わせるような計算方法になっている。この方法の利点の一つは、支配方程式の種類によらずほとんど同じ基本構成の計算プログラムで計算を実行できるので、モジュール化が楽になることが期待できることである。

3 計算例

代表的な連立偏微分方程式として、2次元非圧縮性流体の Cavity 流れの問題で解法を検証する。Cavity 流れ (driven cavity flow problem) は、縦横の寸法が1の矩形容器に水を入れて、水面の流速を $u = 1.0$ としたときの流れ場を求める問題である。容器の壁面では水は静止している。従って境界条件は、

$$(u, v) = (1.0, 0.0) \quad \text{on surface}(B - C) \quad (12)$$

$$(u, v) = (0.0, 0.0) \quad \text{on wall}(A - B, A - D, D - C) \quad (13)$$

である。

Cavity 流れの支配方程式は (3) 式であり、未知関数は (u, v, p) である。境界ソース項も (S_u, S_v, S_p) の3つあるが、支配方程式 (3) の3番目の式は連続の式 (質量保存則) で、境界を含めた全領域で物質の生成消滅がないとすると $S_p \equiv 0$ でなければならない。

圧力 p の境界条件については、境界面で法線方向への偏微分が $\partial p / \partial n = 0$ とする。しかし、境界ソース項を含めた (3) 式の支配方程式に圧力 p をコントロールできる要素は含まれていない。そこで圧力の境界条件を自然に満たすように計算領域を拡張する。拡張され

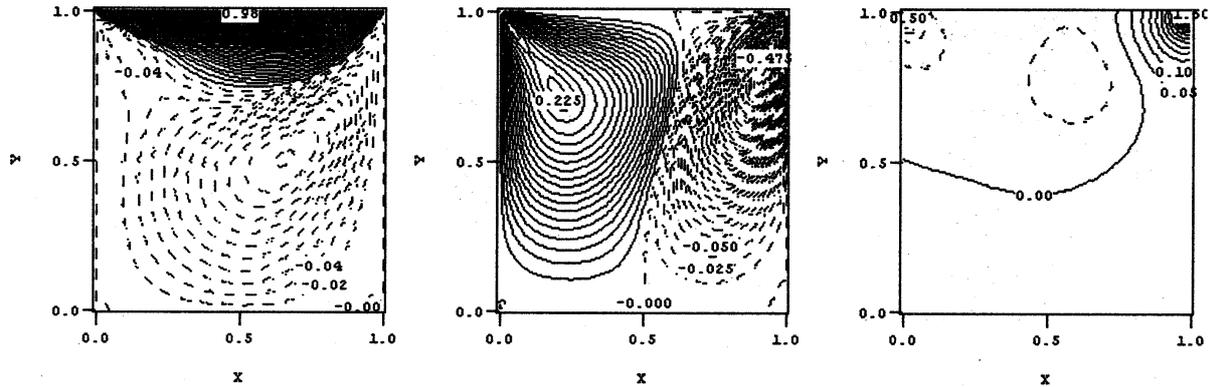


Figure 2: u, v, p of cavity flow at $Re=100$.

た計算領域の座標の模式図を Fig.1 に示す。もともとの問題の定義域は ABCD で囲まれた範囲で、B-C 間の流れの速度が $u = 1$ で与えられている。この定義域を D-C 軸および B-C 軸で折り返して拡張された計算領域を定義する。このとき C-E 間の流速は $u = -1$ である。また B 点と C 点の流速は $u = 0$ とする。こうすることで圧力の条件が自然に満たされるようになる。ここで計算に FFT を利用できるようにするため、この拡張された計算領域を単位胞とした周期領域を想定する。

Fig.1 の模式図では格子点数 8×8 の場合を示しているが、実際の計算は 64×64 あるいは 128×128 などの格子点数で行う。模式図中の ● はソースが置かれる場所 (source point) で、● および ○ の点は境界面上の点で境界値が与えられている点である。

計算では流体の密度を $\rho = 1$ にして、粘性係数 ν を変化させて Re 数を変えた。また、時間刻みは $\Delta t = 0.01$ とした。

これらの操作により Cavity 流れの問題は Dirichlet 問題に帰着される。

3.1 $Re = 100$ のときの計算

本解法では前の時刻の解をもとに Δ 時間後の大域的な時間発展を求めて、それを境界面でのソース分布を時間ステップ毎に求めて境界条件を満たすように解を補正する方法になっている。このため Dirichlet 問題では時間ステップ毎に境界点 (● および ○ 点) での関数値を境界値に置き換える操作を行う方法で境界条件を近似的に満たすこともできる。この方法では系に与える運動エネルギーが不足気味になり正確さは失うが、(11) 式の連立 1 次方程式を解く必要がなく計算は速くなる。このとき、時間刻み Δt を小さくしていくと正解に近づく。

Fig.2 は、 $Re = 100$ の計算を $(0 \leq x \leq 2 - \Delta x, 0 \leq y \leq 2 - \Delta y)$ の領域で 128×128 の格子点に分割して行い、その中から 65×65 の部分を抽出して図にしたもので、左から u, v, p のコンター図である。図は 10000 時間ステップ ($t = 100.00$) のときの流れの状態、ほぼ定常状態である。B 点と C 点の流れを静止させているため流れの詳細を別解法 (Dennis-Chang 法など) と比較できなかったが、B 点と C 点付近を除くと流れの様子はほぼ文献結果が再現できている。

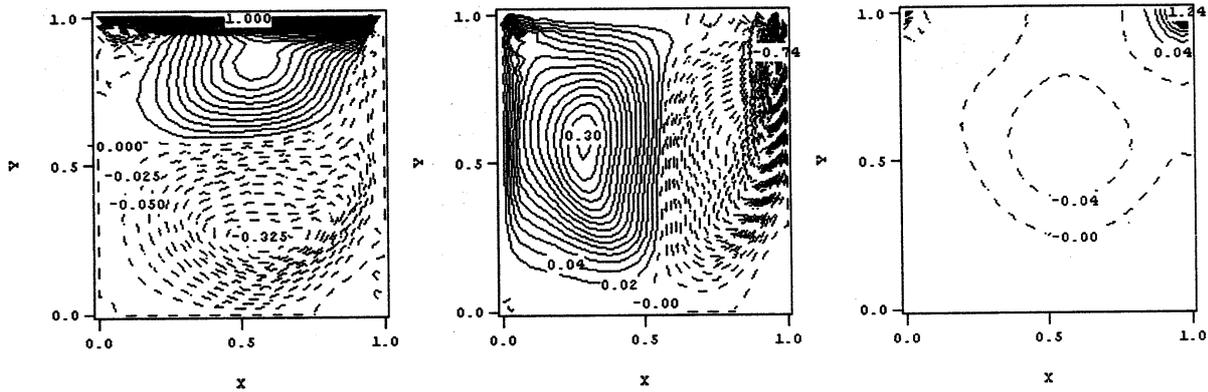


Figure 3: u, v, p of cavity flow at $Re=1000$ with boundary source control.

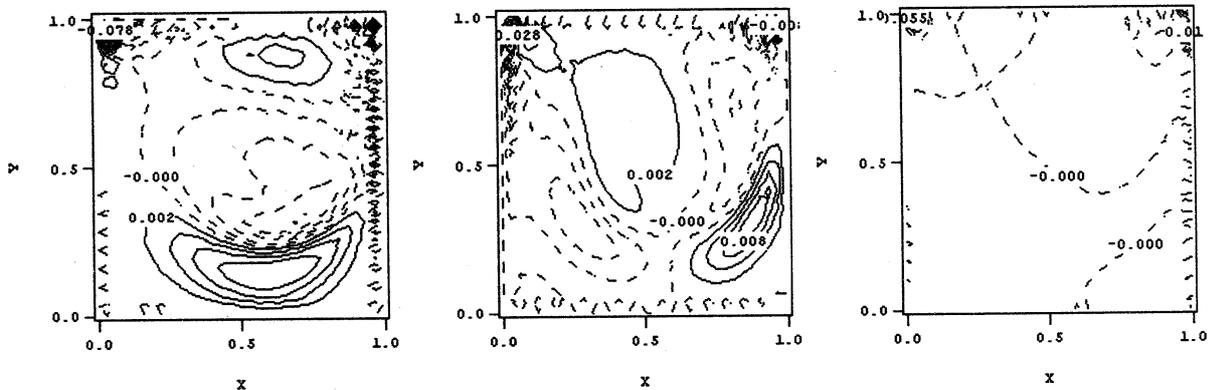


Figure 4: Difference of u, v, p at $Re=1000$ between replace method and source control method.

3.2 $Re = 1000$ のときの計算

Fig.3は、境界面のソース点(●点)でのソース強度を時間ステップ毎に(11)式の連立1次方程式を解いて与えたときの計算結果である。矩形容器内部に運動量の発生原因はないので、運動量を制御できるのは境界面だけである。従って、導入すべきソース点は境界面上にのみ分布するはずである。全ての境界点、つまり●点と○点の両方にソース項を置いたとき、(11)式の連立1次方程式が特異性を示して解すなわちソース強度分布が得られなかった。このためソース点は境界面上の格子点の1つおきにとった。 $Re = 1000$ のとき境界面中の○点の関数値を放置すると、B点の隣点とC点の隣点での関数 u が不安定になった。このため○点での関数値は時間ステップ毎に境界値に置き換える操作を行った。

$Re = 100$ のときと同様に計算は $(0 \leq x \leq 2 - \Delta x, 0 \leq y \leq 2 - \Delta y)$ の領域で行っている。計算に用いた格子点数は 64×64 で、その中から 33×33 の部分抽出して図にした。左からそれぞれ u, v, p のコンター図で、 $t = 10.00$ での流れの状態である。全体的に流れの様子を見ると概ね文献結果が再現されている。境界面付近に乱れが見えるが、これは求めた境界面でのソース分布の計算精度が不十分で、それが原因となった計算誤差であると思われる。

単純な「置き換えの方法」と境界面上の「ソース強度分布を求める方法」での計算結果の違いを、Fig.4に示す。大きな違いはB点近傍およびC点近傍に見られる。これは流速が急激に変化するB点近傍の吸い込みやC点近傍の吐き出しが大きく、これらの点の近傍の流速の挙動に強い影響を与えるため、単純な置き換え操作ではこれらの点近傍での現象を正しく表現できないため計算結果に違いが生じることを意味している。

本報告の数値解析方法では、境界面形状が複雑でソース強度分布を求めるのに計算時間が掛かるようなDirichlet問題のとき、時間ステップ毎に境界値に置き換える簡便な方法で大まかな推定値を得るか、時間計算はかかるが正確なソース強度分布を求めて精度を高めるかを選択できる。

4 おわりに

提案した数値解析方法は理論的な根拠がまだ不十分で、どのような問題に対して適用できるのか必ずしも明確ではない。しかし、非圧縮性流体のCavity問題すなわち連立偏微分方程式のDirichlet境界値問題を、境界面上にソース点を与えてその強さを境界条件から決めることで数値的に解くことが可能なことを示した。このとき時間発展方程式のDirichlet問題は、時間刻みを十分に小さくすることで時間ステップ毎に境界面上の関数値を境界値に置き換えるという操作でも数値的に近似解を求めることができることを示した。

境界面上に置かれるソース点は格子点間隔の2倍以上の間隔毎に配置した場合、つまり1つおきに配置したときに(11)式からソース強度分布を求めることができた。しかし、境界面のすべての格子点にソース点を配置したときには(11)式が特異性を示し解くことができなかった。本報告では、その理由を明らかにすることはできなかった。

Cavity流れによる検証結果では、流速が急速に変化するエッジ(端点)付近や境界面近傍に計算誤差があり、計算精度が十分とは言えなかった。計算精度を向上させるためには、誤差の発生原因をより詳細に把握する必要がある、方法論の理論的根拠とともに今後の課題である。

References

- [1] 米谷道夫, 定係数偏微分作用素のフーリエ表現を用いた数値解法, 数理解析研究所講究録,1038 (1998), 96-105.
- [2] 島倉紀夫, 楕円型偏微分作用素. 紀伊國屋書店, 1978
- [3] 今村 勤, 物理とグリーン関数. 岩波全書, 1978
- [4] 日本機械学会編, 流れの数値シミュレーション. コロナ社, 1988