

窓関数を用いたスペクトル法による非周期的な場の時間発展の 数値シミュレーション法の検討 II

大阪府立大学工学研究科 榎林聖子(Seiko Kurebayashi), 村上洋一(Youichi Murakami)
Graduate School of Engineering,
Osaka Prefecture University

1 はじめに

偏微分方程式の数値解法のひとつであるスペクトル法は、周期境界条件のもとでは非常に精度よく空間微分を計算できる。しかし境界の両端での値が一致しない場合、フーリエ級数で関数を表すと両端での不連続点の近傍で激しく振動し級数の収束性が悪くなり(ギブスの現象)、実用的でなくなる。本研究は、境界で不連続点がある初期条件においてもギブスの現象を回避して、スペクトル法のもとで精度よく計算する手法の提案を目的としている。

現在この手法には、周辺領域法、ウィンドウ法が提案されている。Schlatter et al [2] は 2 次元非圧縮の Navier-Stokes 方程式に周辺領域法、ウィンドウ法を適用して両者の比較を行っている。

本研究ではこれまで Schlatter らの方法[2]によるウィンドウ法で Burgers 方程式を計算し、厳密解との定量的な比較を行った。その結果衝撃波が一定速度で進行していく様子をシミュレーションすることができたが(図 1)、非常に小さいがほぼ線形に拡大する誤差が見られた(図 2) [1]。これは一様な領域で生じているので、時間刻みや空間分割数による誤差ではなく、ウィンドウ法特有の誤差である。この誤差を抑制するため、新たにウィンドウ法を様々に改良し、それに基づいた方法を同じ問題に適用し、その結果を比較する。さらに Burgers 方程式に比べて数値不安定がおこりやすい KdV 方程式に適用し、その有効性を検討する。

2 Burgers 方程式

Burgers 方程式では非線形項と散逸項を持ちながら非定常な厳密解が存在するため、各方法の有効性を定量的に調べることができる。

2.1 数値計算法

2.1.1 従来の方法

領域 $[0,L]$ において非周期的(左右の境界で値が不連続)な関数 $u(x,t)$ を考える。 $u(x,t)$ についての Burgers 方程式は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

で与えられる。式(1)をスペクトル法を用いて精度良く計算するために、窓関数 $W(x)$ によって $u(x,t)$ を人工的に周期的な関数 $\tilde{u}(x,t)$ にする(windowing)。Burgers方程式を修正し、新しい関数 $\tilde{u}(x,t)$ についてのBurgers方程式を導出する。

まず、

$$\tilde{u}(x,t) = W(x)u(x,t), \quad (2)$$

$$\widetilde{u}^2(x, t) = W(x)\{u(x, t)\}^2 \quad (3)$$

を定義する。ここで、 $W(x)$ は両端近傍で急速に0に減少する関数である (図3)。式 (1) の方程式全体に $W(x)$ を掛け合わせることで、 $\widetilde{u}(x, t)$ についてのBurgers方程式、

$$\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u}^2 \right) + \frac{1}{2} u^2 \frac{dW}{dx} + \nu \left\{ \frac{\partial^2 \widetilde{u}}{\partial x^2} - \frac{1}{W} \frac{dW}{dx} \left(\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial x} - u \frac{dW}{dx} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{dW}{dx} \right) \right\} \quad (4)$$

が得られる。式 (4) の右辺には u が含まれているので、もとの境界条件はこの時点で取り込まれている。また窓関数の微分 dW/dx が u にかけられているので、すべての項は周期化されている。式 (4) をフーリエ空間で時間発展させる。式の中の u については実空間で毎ステップ \widetilde{u} から再現する (dewindowing)。

2.1.2 方法 A

従来の方法では微分項に関しては \widetilde{u} で表すよう $\partial u / \partial x = (\partial \widetilde{u} / \partial x - u dW / dx) / W$ としていたため、分母に W が存在していた。これをなくすことで誤差が小さくなると考え、 $1/W$ を出さないよう $\partial u / \partial x$ のまま解く、方法 A を考えた。

$$\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \widetilde{u}^2 \right) + \frac{1}{2} u^2 \frac{dW}{dx} + \nu \left\{ \frac{\partial^2 \widetilde{u}}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{dW}{dx} \right) - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dW}{dx} \right\}. \quad (5)$$

(5) 式をフーリエ空間で時間発展させて解く。 $\partial u / \partial x$ は u と同様に実空間で dewindowing して得る。

2.1.3 方法 B

方法 B はこれまでと同様方程式全体に W をかけるが、従来の方法や方法 A のように項を細かく展開しない点が異なる。

$$\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial t} = \left(-u \frac{\partial u}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) W. \quad (6)$$

(6) 式の左辺を1つの項としてフーリエ空間で時間発展させて解く。方法 B では u 、 $\partial u / \partial x$ 、 $\partial^2 u / \partial x^2$ を dewindowing する必要がある。この方法では、(逆) フーリエ変換の回数が減るという利点がある。

2.1.4 方法 C

方法 C は上記の方法と異なり、もとの Burgers 方程式 (1) を、実空間で u について時間発展させて解く方法である。この方法では、 $\partial u / \partial x$ 、 $\partial^2 u / \partial x^2$ を作るところでのみウィンドウ法を使用しており、元の境界条件の新しい時刻の u を直接求める方法であり、 \widetilde{u} の時間発展を解いていないことに注意する。

2.1.5 方法 D

方法 D は

$$\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \widetilde{u}^2}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 \widetilde{u}}{\partial x^2} \quad (7)$$

をフーリエ空間で時間発展させて解く。この方法では新しい時刻の \widetilde{u} のみを dewindowing する。式を展開しなくてよいので、定式化が非常に簡単になり、高次の微分項を dewindowing する必要もない。

2.2 dewindowing について

窓関数をかけたことで、 \tilde{u} は境界での値が0になっているので、人工的にもとの境界条件をとりいれ、 u を再現する。dewindowingには以下の2つの方法を考えた。

$$(i) \quad u(x, t) = \{1 - W(x)\}u(x, 0) + \tilde{u}(x, t) \quad (8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = \{1 - W(x)\} \frac{\partial u}{\partial x}(x, 0) + \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}(x, t) \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = \{1 - W(x)\} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, 0) + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2}(x, t) \quad (10)$$

$$(ii) \quad u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = \begin{cases} \tilde{u}, \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}, \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2}(x, t) & \text{(内側の領域)} \\ u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(0, 0) & \text{(外側の領域)} \end{cases} \quad (11)$$

(i), (ii) どちらも初期条件から、もとの不連続な境界条件をとりこんでいる。なお、式(18)は Schlatter et al[2]で用いられている。これまでは u のみを dewindowing すればよかったため (i) を採用したが、(i) は高次になると窓関数をかけた影響を落とすきれなくなる。したがって今回は (ii) を採用した。

2.3 計算結果

次の両端での境界の値が不連続な初期条件、

$$u(x) = -2v \left\{ \frac{k}{2} + \frac{k}{2} \tanh \left(\frac{kx+x_0}{2} \right) \right\} \quad (12)$$

($v = 0.01, k = -10, x_0 = 50$) のもとで、各方法で時間発展の数値計算を行った。この誤差は u と \tilde{u} を行き来する際に生じる誤差であるので、同じステップ数 ($dt = 0.001, t = 5$) のもと比較を行った。比較のため時間発展はすべて前進オイラー法を用いた。結果を図4に示す。方法A、Dでは従来の方法に比べるとわずかに改善したが、誤差そのものを抑えることはできなかった。方法Bは従来の方法よりもさらに誤差が入ってしまった。方法Cは厳密解と比較しても誤差なくシミュレーションすることができ、他の方法に比べて精度が非常によかった。

各方法の特徴を表1に示す。精度については方法Cが他のものと比べて圧倒的に良いが、方法Cのみ積分因子法を使う事ができないため dt を大きくとることができない。高速フーリエ変換 (FFT) と逆変換 (IFFT) の計算回数や dt の大きさを考えると方法Dがもっとも実用的と考えられる。

表1 各方法の比較

| | 精度 | FFT・IFFTの回数 | dt |
|-------|-------------|-------------|----------|
| 従来の方法 | \triangle | $5+2=7$ | \circ |
| 方法A | \triangle | $4+2=6$ | \circ |
| 方法B | \times | $2+3=5$ | \circ |
| 方法C | \odot | $1+3=4$ | \times |
| 方法D | \circ | $2+2=4$ | \circ |

3 KdV 方程式

KdV 方程式は分散性を示す 3 階微分があるため数値不安定になりやすい. Burgers 方程式でもっとも精度がよかった方法 C ともっとも実用的だった方法 D で KdV 方程式の時間発展の数値計算を行った.

3.1 数値計算法

3.1.1 従来の方法

KdV 方程式,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \varepsilon u \frac{\partial u}{\partial x} + \mu \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \quad (12)$$

を従来の方法で解く場合は,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = & -\varepsilon \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \mu \frac{\partial^3 \tilde{u}}{\partial x^3} + \frac{u^2}{2} \frac{dW}{dx} + \mu \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{W} \frac{dW}{dx} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{W} \frac{dW}{dx} u \frac{dW}{dx} \right) + \frac{1}{W} \frac{dW}{dx} \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} - \left(\frac{1}{W} \frac{dW}{dx} \right)^2 \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \right. \\ & \left. \left(\frac{1}{W} \frac{dW}{dx} \right)^2 u \frac{dW}{dx} - \frac{1}{W} \frac{dW}{dx} \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{dW}{dx} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(u \frac{dW}{dx} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

周期関数 \tilde{u} の時間発展の方程式は式 (13) のように非常に複雑な式となり, 項が増えるため計算回数が増える. さらに窓関数の微分の項の積は非常に大きな値をとるので, 誤差も増える可能性がある. 微分階数が増えるとこの困難はさらに深刻になる. 面倒かつあまりよい結果が予想されないので, 今回この定式化による数値計算は行わなかった.

3.1.2 方法 C

もとの KdV 方程式 (12) を, 実空間で u について時間発展させて解く方法である. この方法では, $\partial u / \partial x$, $\partial^3 u / \partial x^3$ を作る場所でのみウィンドウ法を使用しており, 元の境界条件のもとで新しい時刻の u を直接求める方法である.

3.1.3 方法 D

方法 D は,

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = -\varepsilon \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \mu \frac{\partial^3 \tilde{u}}{\partial x^3} \quad (14)$$

をフーリエ空間で時間発展させて解く. 新しい時刻の \tilde{u} この方法のみを dewindowing する. 式を展開しなくてよいので, 定式化が非常に簡単になり, 高次の微分項を dewindowing する必要もない. なお, dewindowing については Burgers 方程式の場合と同様, (ii) を用いた.

3.2 計算結果

以下の左右の境界で値が不連続な初期条件,

$$u(x) = \frac{1}{2} \{1 - \tanh(2(x-5))\} \quad (15)$$

のもとでシミュレーションを行った結果, 方法 C, 方法 D ともに不連続な波が次第に分散していく様子をシミュレーションすることができた (図 5). 方法 C と方法 D の結果を $dt = 10^{-5}$, $t=1$ で比較した結果を図 6 に示す. 方法 C は積分因子法が使えないので, dt が非常に小さくなっている. 図 6 ではよく一致しているように見えるが, $u=1$ 付近を拡大してみると (図 7), 方法 D は方法 C に比べて振幅が下がる誤差が入ることがわかった.

方法Dでは積分因子法を使うことができるため、 $dt=0.01$ として計算を行った。結果を図8に示す。方法Cに合わせて $dt=10^{-5}$ としていた場合に比べると誤差は小さくなった。これは dt を大きくとることによってステップ数が減り、 u と \bar{u} の行き来が減ったためである。方法Dは方法Cと比べるとウィンドウ法による誤差そのものをなくすことはできないが、 u と \bar{u} の行き来の回数を減らすことで誤差を小さく抑えることができた。

4 おわりに

方法Cではウィンドウ法による誤差なくシミュレーションすることができた。しかし方法Cは積分因子法が使えず dt を大きくとることができないため、陽解法では実用的ではない。方法Dは計算回数が少なく、 dt を大きくとることができ、高次の微分項があっても u のみdewindowingすればよく実用的で他の方程式にも応用しやすい。ウィンドウ法による誤差そのものをなくすことはできないのでシミュレーションには注意が必要ではあるが、 dt を大きくとることで u と \bar{u} の行き来の回数を減らし誤差を小さく抑えることができた。今後はこの方法Dを2次元の方程式に適用する予定である。

5 参考文献

- [1] 榎林聖子, 村上洋一, 「窓関数を用いたスペクトル法による非周期的な場の時間発展の数値シミュレーション法の検討」, 数理解析研究所講究録 1800, 「非線形波動現象の新たな進展」(2011), 216-225
- [2] P.Schlatter, N.A.Adams, L.Kleiser, A windowing method for periodic inflow/outflow boundary treatment of non-periodic flows, Journal of Computational Physics 206 (2005), 505-535
- [3] A.C.Vliegthart, On Finite-Difference Methods for the Korteweg-de Vries Equation, Journal of Engineering Mathematics, Vol.5, No.2 (1971), 137-155

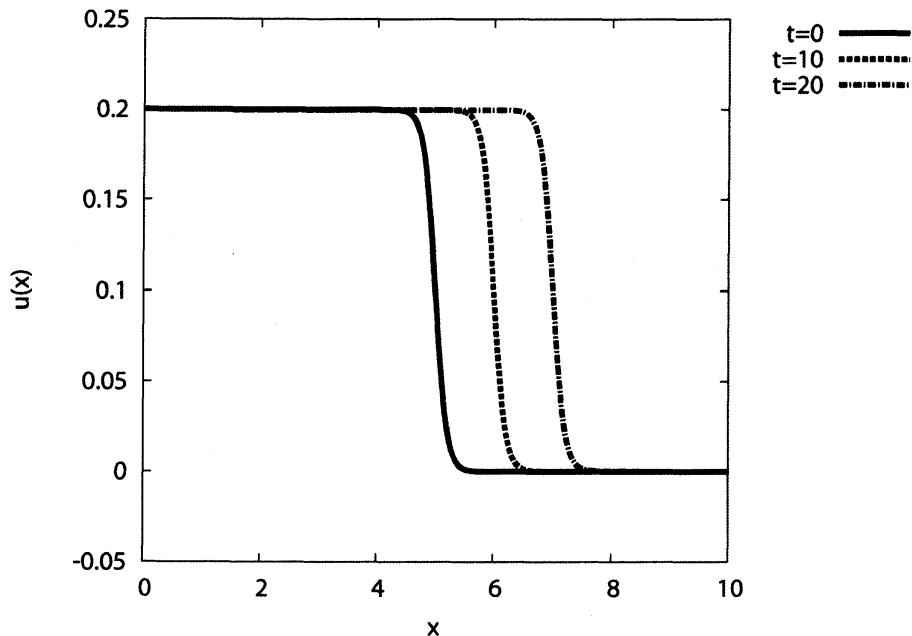


図1 Burgers 方程式の数値解による時間発展の様子

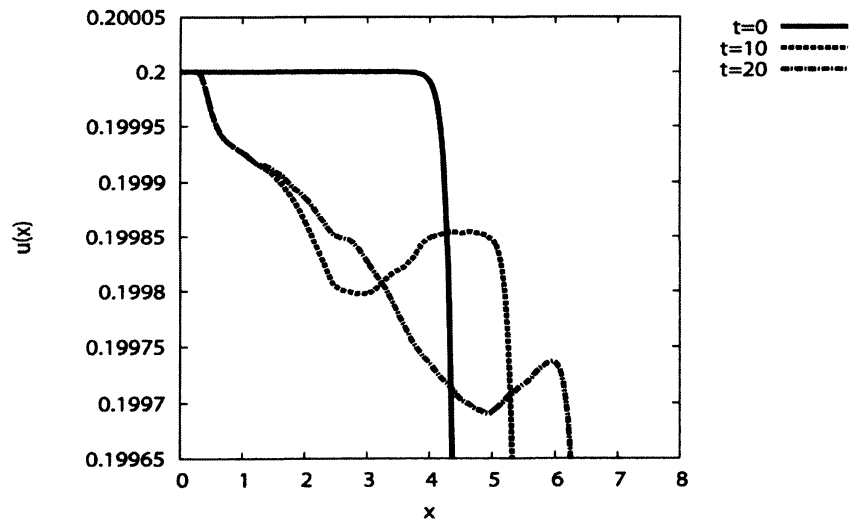


図2 図1の $u=0.2$ 付近の拡大図

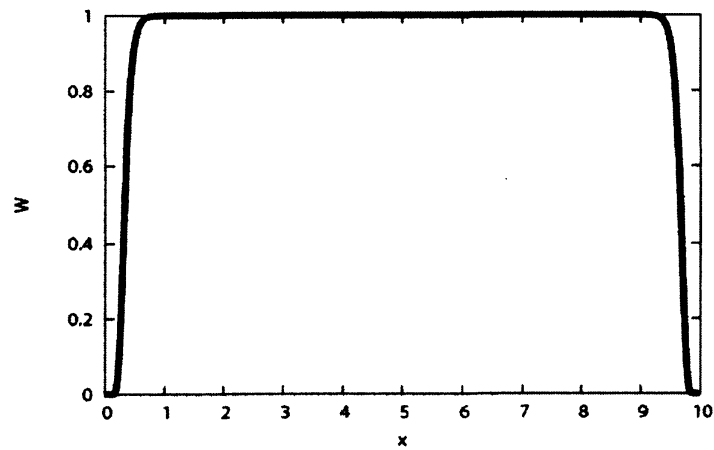


図3 $W(x)$ の概形

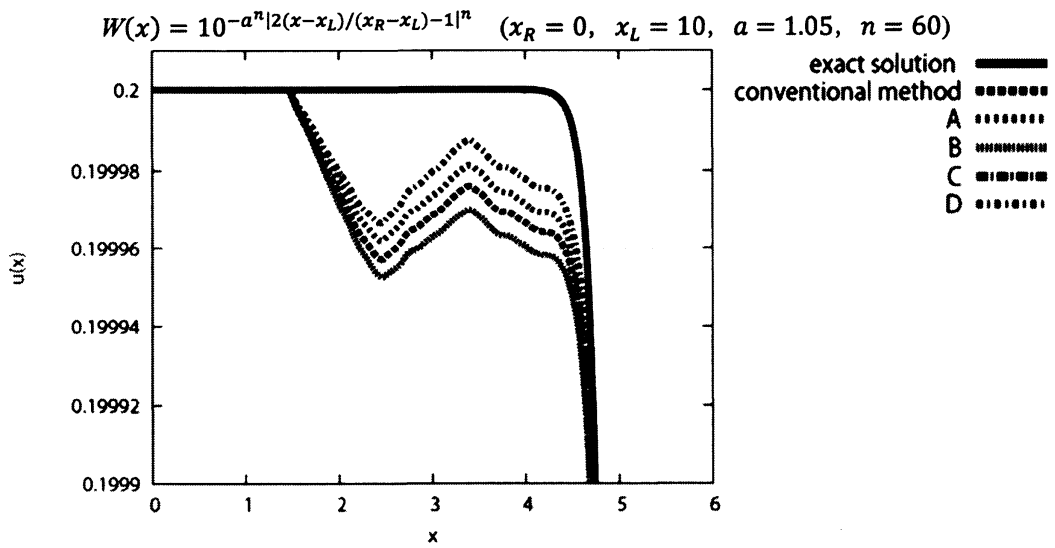


図4 Burgers 方程式を解いた場合の各方法の比較 ($dt = 0.001, t = 5$)

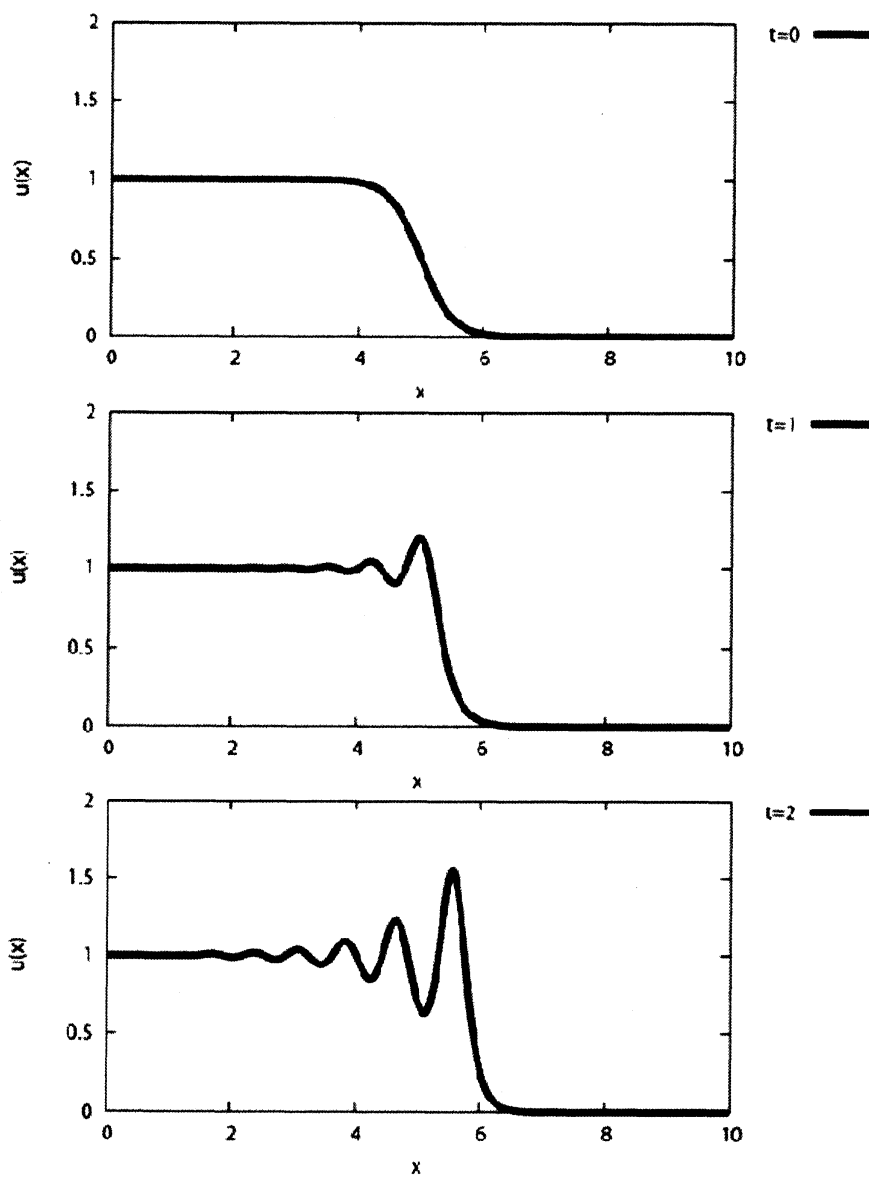


図5 KdV 方程式の時間発展の様子 ($\varepsilon = 1, \mu = 0.01$)

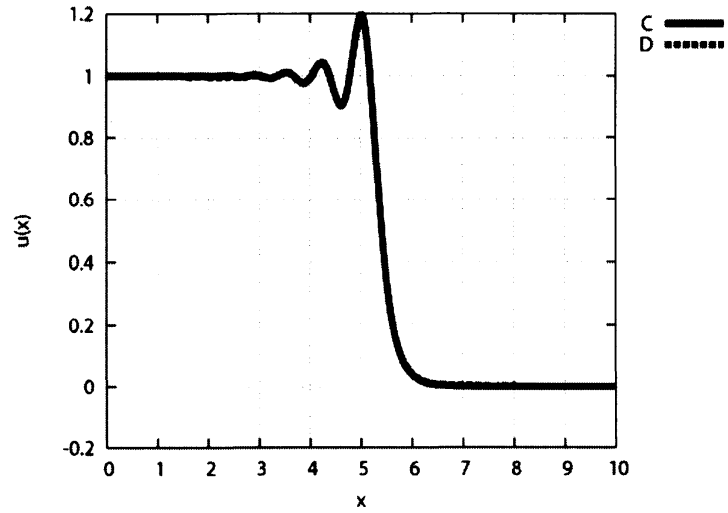


図6 KdV方程式を解いた場合の方法Cと方法Dの比較 ($dt = 10^{-5}$, $t = 1$)

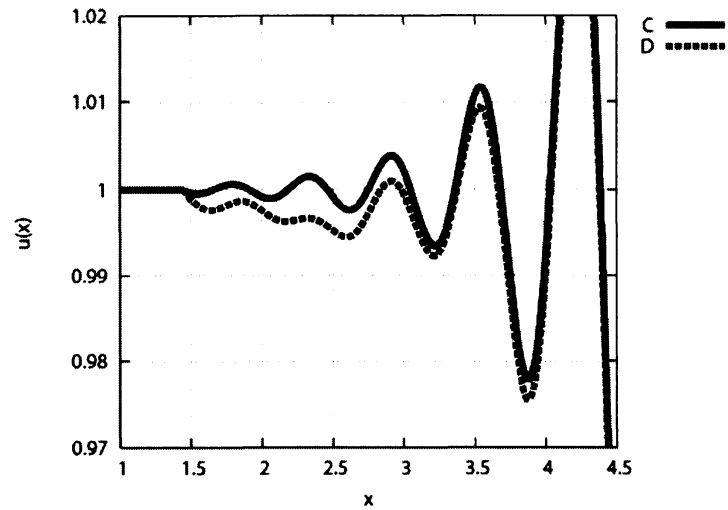


図7 図6の $u=1$ 付近での拡大図 (方法C, 方法Dともに $dt = 10^{-5}$ とした場合)

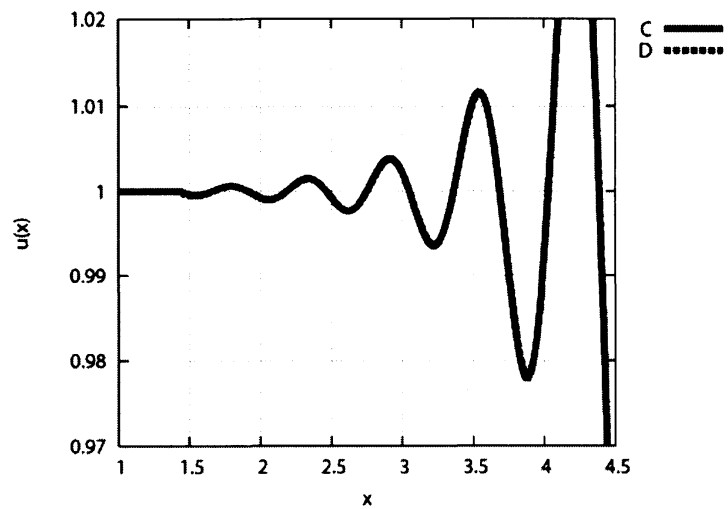


図8 方法Cと方法Dの比較 (方法Cは $dt = 10^{-5}$, 方法Dは $dt = 10^{-2}$ とした場合)