

A discrete gradient method for the Rayleigh-Plesset-Keller equation

早稲田大学理工学術院 及川一誠

Faculty of Science and Engineering, Waseda University

Issei Oikawa

1 はじめに

Rayleigh-Plesset-Keller 方程式 (以下, Keller 方程式)[4] は, 液体中の単一気泡の挙動を解析するために用いられる非線形常微分方程式である. Keller 方程式は, 従来の Rayleigh-Plesset 方程式 [7, 6] に圧力波放出の効果を考慮して得られる方程式であり, 気泡半径 $R = R(t) > 0$ を未知関数として, 次で与えられる:

$$\left(1 - \frac{\dot{R}}{c}\right) R \ddot{R} + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\dot{R}}{3c}\right) \dot{R}^2 = - \left(1 + \frac{\dot{R}}{c} + \frac{R}{c} \frac{d}{dt}\right) \frac{P(R(t))}{\rho_L}. \quad (1)$$

ここで, $P(R)$ は次で定義される.

$$P(R) := p_\infty - p_V - p_G(R) + \frac{2S}{R},$$

$$p_G(R) := p_{G_0} \left(\frac{R_0}{R}\right)^{3\kappa}.$$

以上の式中に現れる $c, \rho_L, p_\infty, p_V, S, p_{G_0}, R_0, \kappa$ の意味は表 1 及び図 1 に記した通りである. ここでは, 気泡は不凝縮ガスと蒸気で満たされ, 常に真球であると仮定する. さらに, 界面における質量の移動は無視できるものとする. 簡単のため, 液体は非粘性であるとする. 最近では, Keller 方程式は勾配系に書き直せることが分かっている. 新たに $Q = \rho_L R^3 \dot{R}$ を導入し, $\mathbf{u} = (R, Q)^T$ とおく. ある種のエネルギー関数 $E = E(R, Q)$ を上手く定義すると, (1) は

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{A}(\mathbf{u}) \nabla E := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & \alpha(\mathbf{u}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial E}{\partial R} \\ \frac{\partial E}{\partial Q} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

と表される。ただし、 $\alpha(\mathbf{u})$ はある実数値関数である。 $\kappa \geq 1$ 及び $p_\infty \geq p_V$ という自然な仮定のもとで、 $\alpha(\mathbf{u}) \leq 0$ が成り立ち、直ちに、エネルギーの単調減少性 $dE(\mathbf{u}(t))/dt = (\nabla E(\mathbf{u}(t)))^T \mathbf{A}(\mathbf{u}) \nabla E(\mathbf{u}(t)) \leq 0$ が導かれる。

(2) のような勾配系で表される方程式に対しては、離散勾配法 [3, 1, 5, 2] を適用することにより、自動的に、エネルギーの単調減少性を正確に満たす数値計算スキームが得られる。本研究では、Keller 方程式に対して、[3] により提案された coordinate increment 型の離散勾配法を用いて数値計算スキームを導出し、より一般的な状況下で誤差解析を行う。

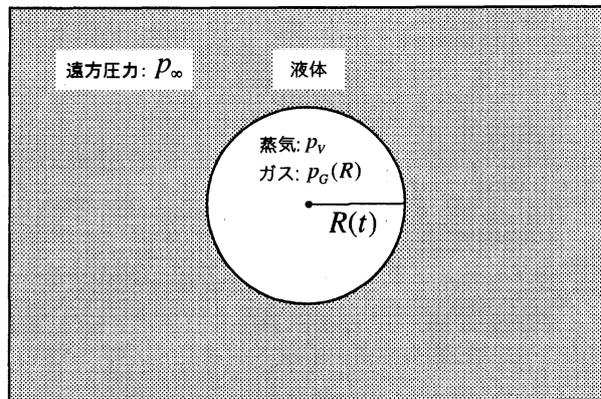


図 1: 単一気泡モデル

表 1: 記号及びパラメータ

音速	c	1478 [m/s]
比熱比	κ	5/3
基準不凝縮ガス圧力	p_{G_0}	14713 [Pa]
飽和蒸気圧	p_V	2337 [Pa]
遠方圧力	p_∞	10^5 [Pa]
基準半径	R_0	10^{-5} [m]
液体密度	ρ_L	998.2 [kg/m ³]
表面張力係数	S	7.275×10^{-2} [N/m]

2 離散勾配法

本節では、(2)の勾配系に対する離散勾配法の数値計算スキームについて述べる。計算区間を $[0, T]$ とし、時間刻み $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T$ は与えられているとする。時間刻み幅を $h_n := t_{n+1} - t_n$ と定義し、最大時間刻み幅を $h := \max_{1 \leq n \leq N} h_n$ と定義する。時刻 $t = t_n$ における近似解を $U_n = (R_n, Q_n)^T$ と記す。離散勾配法による数値計算スキームは次で与えられる:

$$\frac{U_{n+1} - U_n}{h_n} = \mathbf{A}(U_n) \tilde{\nabla} E(U_n, U_{n+1}). \quad (3)$$

ただし、初期条件は $U_0 = \mathbf{u}(0)$ とする。ここで、 $\tilde{\nabla}$ は離散勾配作用素と呼ばれるもので、任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^2$ と微分可能な関数 f に対して、以下を満たすものとして定義される:

$$f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{x}) = \tilde{\nabla} f(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x}), \quad (4)$$

$$\tilde{\nabla} f(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}). \quad (5)$$

[3] では、以下の coordinate increment 型の離散勾配作用素が提案されている:

$$\tilde{\nabla} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \frac{f(y_1, x_2) - f(x_1, x_2)}{y_1 - x_1} \\ \frac{f(y_1, y_2) - f(y_1, x_2)}{y_2 - x_2} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T, \mathbf{y} = (y_1, y_2)^T \in \mathbb{R}^2$ である。 $x_1 = y_1$ あるいは $x_2 = y_2$ のときは、上記の差分商の代わりに f の導関数の値そのものを用いる。 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ が任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ に対して、半負定値であれば、次のようにして E の単調減少性が導かれる:

$$\begin{aligned} \frac{E(U_{n+1}) - E(U_n)}{h_n} &= \tilde{\nabla} E(U_n, U_{n+1})^T \cdot \frac{U_{n+1} - U_n}{h_n} \\ &= \tilde{\nabla} E(U_n, U_{n+1})^T \mathbf{A}(U_n) \tilde{\nabla} E(U_n, U_{n+1}) \leq 0. \end{aligned} \quad (7)$$

行列 \mathbf{A} が(2)にあるような形をしている場合、 $\alpha(\mathbf{u}) \leq 0$ を満たしていれば、半不定値となることを注意しておく。

離散勾配スキーム (3)(6) を、 R_n, Q_n を用いて具体的に書き下すと次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{R_{n+1} - R_n}{h_n} &= \frac{Q_n + Q_{n+1}}{2\rho_L R_{n+1}^3}, \\ \frac{Q_{n+1} - Q_n}{h_n} &= -\frac{E(R_{n+1}, Q_n) - E(R_n, Q_n)}{R_{n+1} - R_n} + \alpha(R_n, Q_n) \frac{Q_n + Q_{n+1}}{2\rho_L R_{n+1}^3}. \end{aligned}$$

これらの式において, Q_{n+1} は簡単に消去することができる. Q_{n+1} を消去して得られる非線形方程式を解けば R_{n+1} が求められる. Keller 方程式の場合, 時間刻み幅 h_n が十分小さければ, 初期値を $(R_n, Q_n)^T$ として Newton 法で容易に解ける.

3 誤差解析

ここでは, Keller 方程式に限定せず, (2) の勾配系で表される一般的な方程式を考える. 前提として, $\alpha(\mathbf{u}) \leq 0$ を仮定する. 先に述べた通り, この仮定から, $dE(\mathbf{u}(t))/dt \leq 0$ が導かれる. Ω_0 を次で定義される sub-level 集合とする:

$$\Omega_0 := \{\mathbf{x} \in (0, \infty) \times \mathbb{R} : E(\mathbf{x}) \leq E(\mathbf{u}(0))\}.$$

近似解に関するエネルギー関数 E の単調減少性 (7) より, $\{U_n\}_{n=0}^N \subset \Omega_0$ が成立することに注意. 誤差解析のために, E, α に関して, さらに次を仮定する.

(A1) ある $M_\alpha \geq 0$ に対して, $-M_\alpha \leq \alpha(\mathbf{x}) \leq 0$ ($\mathbf{x} \in \Omega_0$) が成り立つ.

(A2) α は Ω_0 上で Lipschitz 連続である.

(A3) E は Ω_0 上で C^2 級であり, $\|\nabla E\|_\infty < \infty$, $\|\nabla^2 E\|_\infty < \infty$ が成り立つ.

Keller 方程式の場合, Ω_0 は $(0, \infty) \times \mathbb{R}$ 内のコンパクト集合であり, かつ E, α は Ω_0 上で C^∞ 級であることがわかっている. したがって, Keller 方程式における E, α は, 仮定 (A1)–(A3) を満たすということを注意しておく.

$\mathbf{u}(t) = (R(t), Q(t))^T$ を (2) の厳密解とする. (3) の局所離散化誤差を次で定義する:

$$\tau(t_n) := \frac{\mathbf{u}(t_n) - \mathbf{u}(t_{n-1})}{h_{n-1}} - \mathbf{A}(\mathbf{u}(t_{n-1})) \tilde{\nabla} E(\mathbf{u}(t_{n-1}), \mathbf{u}(t_{n-1})).$$

$\|\cdot\|_\infty$ をベクトルの無限大ノルムとする. つまり, $\mathbf{v} = (v_1, v_2)^T \in \mathbb{R}^2$ に対して, $\|\mathbf{v}\|_\infty := \max_{i=1,2} |v_i|$ と定義する. 大域離散化誤差を

$$\tau(h) = \max_{1 \leq n \leq N} \|\tau(t_n)\|_\infty$$

と定義する. 離散勾配作用素の定義 (5) から, 局所及び大域離散化誤差の h に関するオーダーが $O(h)$ であることが示せる.

定理 1. $\{U_n\}_{n=1}^N$ を (3) による近似解とする. 初期値は $U_0 = \mathbf{u}(0)$ とする. このとき, $\|\tau(t_n)\|_\infty \leq Ch$ ($1 \leq n \leq N$) 及び $\tau(h) \leq Ch$ が成り立つ.

Proof. Taylor の定理より,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t_n) - \mathbf{u}(t_{n-1}) &= h_{n-1} \dot{\mathbf{u}}(t_{n-1}) + O(h_{n-1}^2) \\ &= h_{n-1} \mathbf{A}(\mathbf{u}(t_{n-1})) \nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) + O(h_{n-1}^2) \\ &= h_{n-1} \mathbf{A}(\mathbf{u}(t_{n-1})) \tilde{\nabla} E(\mathbf{u}(t_{n-1}), \mathbf{u}(t_{n-1})) + O(h_{n-1}^2) \end{aligned}$$

であるから, $\|\tau(t_n)\|_\infty \leq Ch$ が成り立つことがわかる. 定義より, $\tau(h) \leq Ch$ も直ちに得られる. \square

誤差解析のために, まず次の補題を証明する.

補題 2. A と γ を正の実定数とし, $\{a_n\}_{n=0}^\infty$ をある $M \in \mathbb{R}$ に対して, $0 \leq a_n \leq M$ ($n \geq 0$) を満たす数列とする. $\{x_n\}_{n=0}^\infty$ を次を満たすような数列とする:

$$x_n \leq (1 + Aa_{n-1})(x_{n-1} + a_{n-1}\gamma), \quad x_0 = 0.$$

このとき, 次が成り立つ.

$$x_n \leq \left[\exp \left(A \sum_{j=0}^n a_{j-1} \right) - 1 \right] \frac{(1 + AM)\gamma}{A}. \quad (8)$$

ただし, $a_{-1} := 0$ とする.

Proof. 数学的帰納法により証明する. (8) が $n=0$ のとき成立するのは明らかである. (8) が $n-1$ のとき成立すると仮定する. このとき,

$$\begin{aligned} x_n &\leq (1 + Aa_{n-1}) \left[\left\{ \exp \left(A \sum_{j=0}^{n-1} a_{j-1} \right) - 1 \right\} \frac{(1 + AM)\gamma}{A} + a_{n-1}\gamma \right] \\ &= \left[(1 + Aa_{n-1}) \exp \left(A \sum_{j=0}^{n-1} a_{j-1} \right) - 1 \right. \\ &\quad \left. + \left(-1 + \frac{1 + Aa_{n-1}}{1 + AM} \right) Aa_{n-1} \right] \frac{(1 + AM)\gamma}{A}. \end{aligned}$$

$1 + Aa_{n-1} \leq \exp(Aa_{n-1})$ 及び $1 + Aa_{n-1} \leq 1 + AM$ であることに注意すると, 次が成り立つ.

$$\begin{aligned} x_n &\leq \left[\exp(Aa_{n-1}) \cdot \exp \left(A \sum_{j=0}^{n-1} a_{j-1} \right) - 1 \right] \frac{(1 + AM)\gamma}{A} \\ &= \left[\exp \left(A \sum_{j=0}^n a_{j-1} \right) - 1 \right] \frac{(1 + AM)\gamma}{A}. \end{aligned}$$

\square

次に、いま示した補題を用いて、離散勾配スキームの誤差評価を示す。

定理 3. $\mathbf{u}(t) = (R(t), Q(t))^T$ を (2) の厳密解とし、 \mathbf{U}_n を (3) による近似解とする。 E, α は (A1)–(A3) を満たすと仮定する。 h が十分小さいとき、以下の誤差評価が成り立つ。

$$\|\mathbf{u}(t_n) - \mathbf{U}_n\|_\infty \leq \left[\exp\left(\frac{Ct_n}{1-Ch}\right) - 1 \right] h. \quad (9)$$

ただし、 C は h によらない正定数である。

Proof. 時刻 $t = t_n$ における誤差を $\mathbf{e}_n = \mathbf{u}(t_n) - \mathbf{U}_n$ と表す。このとき、次が成り立つ。

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_n - \mathbf{e}_{n-1} &= \mathbf{u}(t_n) - \mathbf{u}(t_{n-1}) - (\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_{n-1}) \\ &= h_{n-1}[\mathbf{A}(\mathbf{u}(t_{n-1}))\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) + \boldsymbol{\tau}(t_n) - \mathbf{A}(\mathbf{U}_{n-1})\tilde{\nabla} E(\mathbf{U}_{n-1}, \mathbf{U}_n)] \\ &= h_{n-1}[(\mathbf{A}(\mathbf{u}(t_{n-1})) - \mathbf{A}(\mathbf{U}_{n-1}))\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) \\ &\quad + \mathbf{A}(\mathbf{U}_{n-1})(\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) - \tilde{\nabla} E(\mathbf{U}_{n-1}, \mathbf{U}_n)) + \boldsymbol{\tau}(t_n)]. \end{aligned}$$

ここで、 $\{\mathbf{U}_n\}_{n=0}^N, \{\mathbf{u}(t)\}_{t \geq 0} \subset \Omega_0$ に注意されたい。(A1) より $\|\mathbf{A}(\mathbf{U}_{n-1})\|_\infty \leq C$ が成り立つ。仮定 (A2) により

$$\|\mathbf{A}(\mathbf{U}_{n-1}) - \mathbf{A}(\mathbf{u}(t_{n-1}))\|_\infty = |\alpha(\mathbf{U}_{n-1}) - \alpha(\mathbf{u}(t_{n-1}))| \leq C\|\mathbf{e}_{n-1}\|_\infty$$

を得る。また、仮定 (A3) より、 $\|\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1}))\|_\infty \leq C$ が成り立つ。三角不等式を用いると、

$$\begin{aligned} &\|\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) - \tilde{\nabla} E(\mathbf{U}_{n-1}, \mathbf{U}_n)\|_\infty \\ &\leq \|\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) - \nabla E(\mathbf{U}_{n-1})\|_\infty + \|\nabla E(\mathbf{U}_{n-1}) - \tilde{\nabla} E(\mathbf{U}_{n-1}, \mathbf{U}_n)\|_\infty. \end{aligned} \quad (10)$$

(10) の右辺第 1 項は

$$\|\nabla E(\mathbf{u}(t_{n-1})) - \nabla E(\mathbf{U}_{n-1})\|_\infty \leq C\|\mathbf{e}_{n-1}\|_\infty$$

と評価できる。次に、(10) の右辺第 2 項を評価する。

$$\begin{aligned} &\|\nabla E(\mathbf{U}_{n-1}) - \tilde{\nabla} E(\mathbf{U}_{n-1}, \mathbf{U}_n)\|_\infty \\ &\leq \left| \frac{\partial E}{\partial R}(R_{n-1}, Q_{n-1}) - \frac{E(R_n, Q_{n-1}) - E(R_{n-1}, Q_{n-1})}{R_n - R_{n-1}} \right| \\ &\quad + \left| \frac{\partial E}{\partial Q}(R_{n-1}, Q_{n-1}) - \frac{E(R_n, Q_n) - E(R_n, Q_{n-1})}{Q_n - Q_{n-1}} \right| \\ &=: I + II. \end{aligned}$$

I と II は次のようにして評価できる.

$$\begin{aligned}
I &\leq C|R_n - R_{n-1}| \\
&\leq C(|R_n - R(t_n) + R(t_n) - R(t_{n-1}) + R(t_{n-1}) - R_{n-1}|) \\
&\leq C(\|e_n - e_{n-1}\|_\infty + h_{n-1}), \\
II &\leq \left| \frac{\partial E}{\partial Q}(R_{n-1}, Q_{n-1}) - \frac{\partial E}{\partial Q}(R_n, Q_{n-1}) \right| + C|Q_n - Q_{n-1}| \\
&\leq C(|R_n - R_{n-1}| + |Q_n - Q_{n-1}|) \\
&\leq C(\|e_n - e_{n-1}\|_\infty + h_{n-1}).
\end{aligned}$$

以上の結果と, $\tau(h) \leq Ch$ であることから,

$$\|e_n - e_{n-1}\|_\infty \leq Ch_{n-1}(\|e_{n-1}\|_\infty + \|e_n - e_{n-1}\|_\infty + h)$$

を得る. ただし, C は E と α にのみ依存する. h が十分小さいとすれば,

$$\|e_n\|_\infty \leq \frac{\|e_{n-1}\|_\infty + Ch_{n-1}h}{1 - Ch_{n-1}} \quad (11)$$

が成り立つ. ここで,

$$\frac{1}{1 - Ch_{n-1}} = 1 + \frac{Ch_{n-1}}{1 - Ch_{n-1}} \leq 1 + \frac{Ch_{n-1}}{1 - Ch}$$

であることに注意すると, (11) は次のように評価できる.

$$\|e_n\|_\infty \leq \left(1 + \frac{Ch_{n-1}}{1 - Ch}\right) (\|e_{n-1}\|_\infty + Ch_{n-1}h).$$

従って, 補題 2 より,

$$\begin{aligned}
\|e_n\|_\infty &\leq \left[\exp\left(\frac{C}{1 - Ch} \sum_{j=0}^n h_{j-1}\right) - 1 \right] (1 - Ch) \left(1 + \frac{Ch}{1 - Ch}\right) h \\
&= \left[\exp\left(\frac{Ct_n}{1 - Ch}\right) - 1 \right] h
\end{aligned}$$

が成り立つ. □

4 数値実験

提案スキームの誤差の収束次数を数値実験によって確認する. テスト問題として, 単一気泡が水中で振動するケースを考える. パラメータは表 1 で与

えられた値に設定し，初期条件は $U_0 = (R_0, 0)^T$ とする．時間刻み幅は一様に $h_n = 10^{-8}$ とする．以上の設定で，数値計算を実施した．求まった近似解 R_n の様子は図2の通りである．時刻 $t = 1.00, 2.00, 3.00[\mu\text{s}]$ における誤差は表2の通りになった． R_n 及び Q_n は，それぞれ R_0 及び $\rho_L R_0^3$ で割ることにより正規化されている．Keller 方程式の解析解は一般に求められないので，代わりに4次精度の Runge-Kutta 法により求めた高精度な近似解と比較している．これらの結果から，誤差の収束速度は R_n, Q_n 共に $O(h^{1.00})$ となっていることが読み取れる．これは定理3の誤差評価と一致する．

表 2: 誤差の収束履歴

h	$ R(t_n) - R_n /R_0$		$ Q(t_n) - Q_n /\rho_L R_0^3$	
	Error	Order	Error	Order
$t = 1.00 [\mu\text{s}]$				
1.00E-08	7.4662E-03	–	2.2517E-01	–
5.00E-09	3.3328E-03	1.164	1.1378E-01	0.985
2.50E-09	1.5586E-03	1.097	5.7149E-02	0.994
1.25E-09	7.5146E-04	1.052	2.8632E-02	0.997
$t = 2.00 [\mu\text{s}]$				
1.00E-08	3.1715E-05	–	5.1793E-03	–
5.00E-09	1.2115E-05	1.388	1.9975E-03	1.375
2.50E-09	5.1149E-06	1.244	8.5136E-04	1.230
1.25E-09	2.3149E-06	1.144	3.8882E-04	1.131
$t = 3.00 [\mu\text{s}]$				
1.00E-08	1.2079E-02	–	1.3880E-01	–
5.00E-09	5.9962E-03	1.010	6.8916E-02	0.989
2.50E-09	2.9868E-03	1.005	3.4591E-02	0.994
1.25E-09	1.4905E-03	1.003	1.7329E-02	0.997

謝辞

本研究は JSPS 科研費 24224004 の助成を受けたものである．

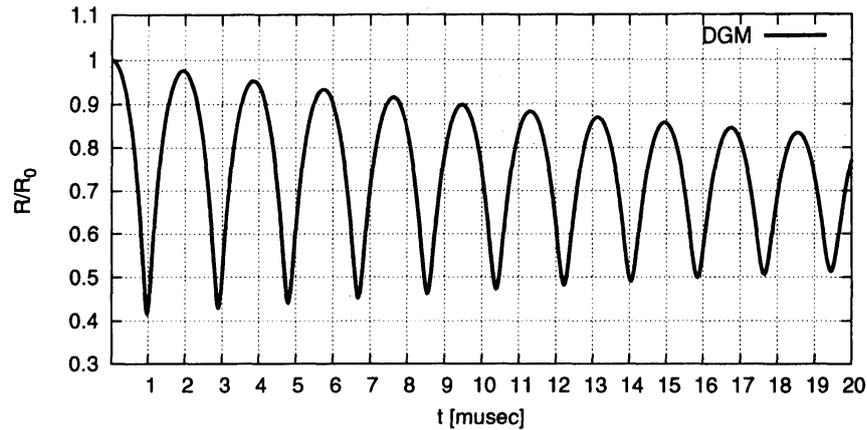


図 2: 近似解 R_n のグラフ

参考文献

- [1] O. Gonzalez. Time integration and discrete Hamiltonian systems. *J. Non-linear Sci.*, 6:449–467, 1996.
- [2] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations*. Springer, 2006.
- [3] T. Ito and K. Abe. Hamiltonian-conserving discrete canonical equations based on variational difference quotients. *J. Comput. Phys.*, 76(1):85–102, 1988.
- [4] J. B. Keller and I. I. Kolodner. Damping of Underwater Explosion Bubble Oscillations. *J. Appl. Phys.*, 27:1152–1161, 1956.
- [5] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel, and N. Robidoux. Geometric integration using discrete gradients. *R. Soc. Lond. Philos. Trans. Ser.*, 357(1754):1021–1045, 1999.
- [6] M. S. Plesset. The dynamics of cavitation bubbles. *ASME J. Appl. Mech.*, 16:228–231, 1949.
- [7] L. Rayleigh. On the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity. *Phil. Mag.*, 34:94–98, 1917.