

いくつかの自由境界問題に対するスペクトル選点法の応用

徳島大学工学部	今井 仁司 (Hitoshi IMAI)
筑波大学電子・情報工学系	周 偉東 (Weidong ZHOU)
筑波大学電子・情報工学系	名取 亮 (Makoto NATORI)
大阪大学工学部	都田 艶子 (Tsuyako MIYAKODA)
徳島大学工学部	篠原 能材 (Yoshitane SHINOHARA)

1. 序論

実際の現象において自由境界を伴うものは数多くあり、それらの解析は実用上大変重用である。自由境界問題は本質的に非線形であり、かつ解析領域が未知であるため、その数値計算は容易ではなかった。ただしこの10年くらいの中に数値解法が進歩して比較的自由に計算できるようになった。

しかしながら、現在は単に自由境界問題が数値計算できるという時代ではなく、その質が問われる時代となってきた。これは自由境界問題の数値計算に限ったことではない。その質とは少なくとも2つほど考えられる。ひとつは高精度計算であり、もうひとつは微分方程式の解の性質を数値解に求めるというものである。後者は、数値解が微分方程式の解の知られている性質（保存量など）をもつように数値スキームを作るのであるが、汎用性にやや疑問が残るのと高精度化が難しいこと、また知られてない性質が満足されないためどのような意味の解が求まっているのか不安になることなどが問題点にあげられる。一方、そのようなことをしなくても、高精度計算ができれば数値解は微分方程式の解の性質を十分精度よく満たすと考えることもできる。この考え方にしたがって、ここでは自由境界問題の高精度計算に焦点を当てることにする。ただし、ここでは領域の位相の変化などの数値計算が難しい状況は起こらないとし、また解は滑らかであるよう問題だけを考えることにする。工学部の問題意識としてはこのような状況は不十分であるが、応用数学としての問題意識ではまだ十分な状況設定である。

応用数学における高精度数値計算の必要性は次の例で見ることができる。空間1次元のステファン問題における爆発現象の数値解析を考える。十分な計算精度を確保しないと解が負になってしまつて数値計算ができなくなり、図1のようなベリースローな現象の後のダイナミクスの解析できない。因みに図1の計算は容易に実現できる範囲内でもっとも高精度である、空間を2次の差分、時間を4次のルンゲ-クッタ法で離散化して、さらに時間の刻み幅をアダプティブに制御して初めて得られるものである。問題によってはさらなる高精度が要求される。このような要求に応えるのがここでの目的である。

高精度計算には2つのやり方がある。高次の公式を使うのと精度保証をするのとである。精度保証も理論的に行うのと数値的にアダプティブに行うのと両方がある。ここでは精度保証まで踏み込まないで、高次の公式を適用することを考える。高次の公式という観点から数値手法を振り返ると、有限要素法や差分法は分が悪い。有限要素法では、自由境

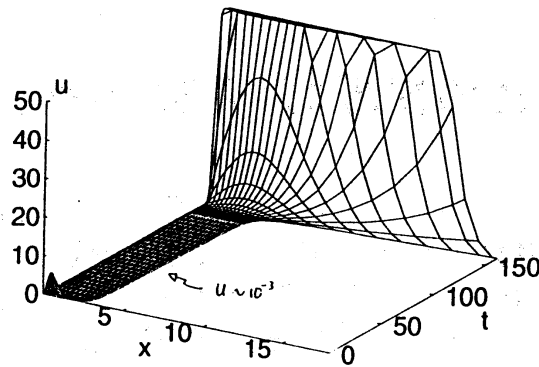


図 1: 高精度計算の必要性.

界を折れ線近似のような低次の近似 (有限要素近似) を行うため, いくら内部で高次の公式を用いてもそこで精度が決まってしまう. 差分法では, 精度がよいといわれている境界適合格子法でも, 自由境界上の格子点が定まるだけである. 後で格子点のデータからスムージングによって滑らかな境界を人工的に構成することはあっても, 精度よく計算できているわけではない. ここでは, スペクトル選点法と写像関数を用いた固定領域法 (境界適合格子法) を併用した, 任意精度 (正確には任意次数) の数値計算法を紹介する.

2. 空間スペクトル選点法

偏微分方程式の数値計算では時空間変数の離散化が必要となる. この節では空間変数の離散化について考える. 離散化には, 差分法や有限要素法などが汎用的であるが, 高精度数値計算には向いていない. そこでスペクトル法の適用を考える. スペクトル法では高精度はおろか任意精度 (正確には任意次数) の数値計算が可能になる [1,2,9]. スペクトル法を適用するには領域が矩形である必要がある. 当然のことながら, 自由境界問題ではそのような事態はあり得ないので, そのままでは適用できない. この状況は差分法が一時下火になったのと全く同じものである. 差分法は, その後境界適合格子法が開発されて領域形状の制限がなくなり, 再び復活した [8,11]. スペクトル法の適用にも全く同じことを考えればよい. 境界適合格子法, 数学的には写像関数を用いた固定領域法であるが, それを用いて解析領域を矩形 (の固定) 領域に変換した後, 差分法ではなくスペクトル法を適用すればよいのである. スペクトル法といってもいくつか種類があるが, ここでは非線形計算に適したスペクトル選点法のみをとりあげる.

以上の方法で空間に関してスペクトル選点法を適用して数値計算した例を 3 つ紹介する.

2.1. 厳密解がわかっているステファン問題

次の空間 1 次元のステファン問題を考える [4].

ステファン問題. 次を満たす u と s を求めよ.

$$u_t(x, t) = u_{xx}(x, t) + 2(t+2), \quad 0 < t, \quad 0 < x < s(t),$$

$$\begin{aligned}
u(x, 0) &= 1 - x^2, \quad 0 < x < s(0), \\
u(0, t) &= (t+1)^2, \quad 0 \leq t, \\
u(s(t), t) &= 0, \quad 0 \leq t, \\
\frac{d}{dt}s(t) &= -\frac{u_x(s(t), t)}{2} - t, \quad 0 < t, \\
s(0) &= 1.
\end{aligned}$$

この問題に対しては次の厳密解が知られている。

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= (t+1)^2 - x^2, \quad 0 \leq t, \quad 0 \leq x \leq s(t), \\
s(t) &= t+1, \quad 0 \leq t.
\end{aligned}$$

この問題に対して直接スペクトル選点法を適用できない。そこで、写像関数を用いた固定領域法を適用して、計算面の矩形領域で定義される問題に変換する。次の写像関数を考える。

$$\begin{cases} x = x(\xi, \tau), \\ t = \tau. \end{cases}$$

一般的には計算面の矩形領域に対応させるために、写像関数を方程式を解いて構成するのであるが、今のような簡単な問題ではその必要はなく次のように定義すだけでよい。

$$x(\xi, t) = \frac{s(t)}{2}(\xi + 1), \quad 0 \leq t, \quad -1 \leq \xi \leq 1$$

これを用いるともとの問題は次のように変換される。

計算面におけるステファン問題。 次を満たす u と \bar{s} を求めよ。

$$\begin{aligned}
u_t(\xi, t) &= \frac{4}{s^2(t)} u_{\xi\xi}(\xi, t) - \frac{\xi+1}{s(t)} \left(\frac{u_\xi(1, t)}{s(t)} + t \right) u_\xi(\xi, t) + 2(t+2), \\
& \hspace{20em} 0 < t, \quad -1 < \xi < 1, \\
u(\xi, 0) &= 1 - \frac{(\xi+1)^2}{4}, \quad -1 < \xi < 1, \\
u(-1, t) &= (t+1)^2, \quad 0 \leq t, \\
u(1, t) &= 0, \quad 0 \leq t, \\
s'(t) &= -\frac{u_\xi(1, t)}{s(t)} - t, \quad 0 < t, \\
s(0) &= 1.
\end{aligned}$$

2.2. 自由表面をもつ熱対流問題

前節よりも少し複雑な自由境界問題として自由表面をもつ熱対流現象をとりあげる。鍋の水を下から暖めることを考えよう。しばらくすると表面が波打つようになりそれは不

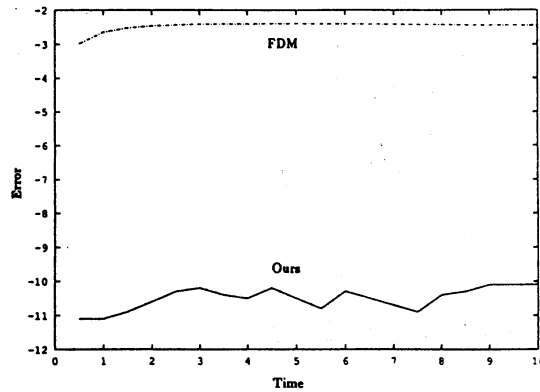


図 2: 差分法と空間スペクトル選点法との誤差の比較 [4].

規則な運動を始める。カオティックな現象が自由表面の運動に現れているのである。熱対流の解析領域は、2次元 xz 平面の平均深さが H 、水平方向には周期的で1周期の長さが $2\pi L$ の領域とする (図 3)。アスペクト比 A を $A = H/L$ で定義する。表面は自由に動いた

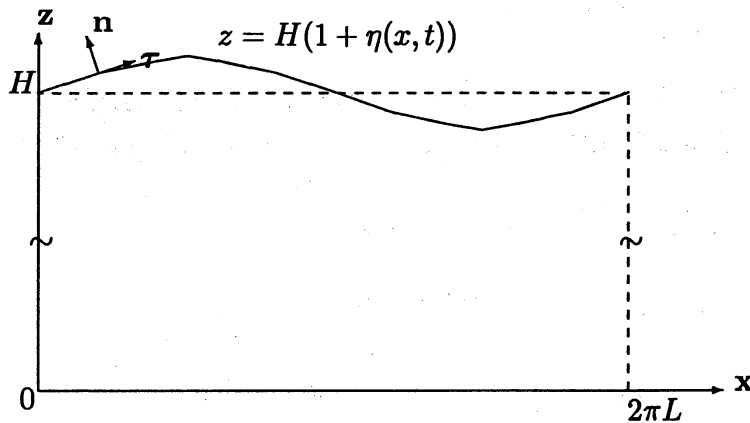


図 3: 自由表面を有する熱対流の解析領域

り変形したりする自由表面であり、下面は静止している固体壁 (粘着境界条件) とする。自由表面は、変形が大きくないと仮定し $z = H(1 + \eta(t, x))$ で表わされるとする。下面の固体壁を $z = 0$ とする。

空間スペクトル選点法を適用するために、以下の簡単な写像関数を使って xz 面の解析領域を $\xi\zeta$ 面の長方形領域に写像する [12]:

$$\begin{cases} x = \frac{1}{A}\xi, \\ z = \frac{1}{2}(1 + \eta(t, \xi))(1 + \zeta). \end{cases}$$

もとの xz 面での方程式は、変数変換によって、 $\xi\zeta$ 面の矩形領域での方程式になる。

以上で、長方形の固定領域問題に問題が変換されたので、空間スペクトル選点法を適用する。 ξ 方向は、境界条件が周期的なのでフーリエ選点法を使う。 ζ 方向は、境界条件が複雑であるためチェビシェフ選点法を使う。周期的である ξ 方向には N_ξ 個のフーリエ

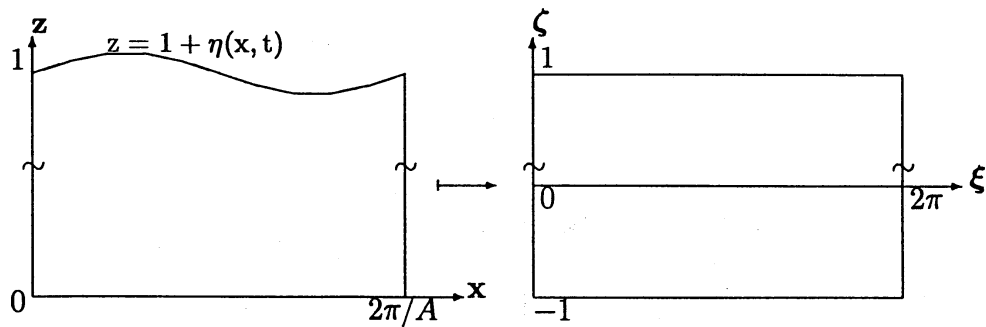


図 4: 写像関数を用いた固定領域法.

選点を用い, ζ 方向は圧力に N_ζ 個のガウス選点を, 速度には $N_\zeta + 1$ 個のガウス-ロバット選点を用いる. 時間に関する離散化は, 流体の計算でよく行われる半陰的な差分スキームを使う. アスペクト比は $A = 4$ とし, 疎な格子 ($N_\xi = N_\zeta = 8$) を使って数値計算した例を図5に示す. 計算時間が節約できると同時に, 解が滑らかであればこのくらいの格子点で十分だからである.

Time = 40.0
Time increment = 0.001
Nusselt = 1.070088
Rayleigh = 1375.0
Prandtl = 1000.0
Gamma = 0.2E+06
Aspect = 4.0
G = 0.1E+05

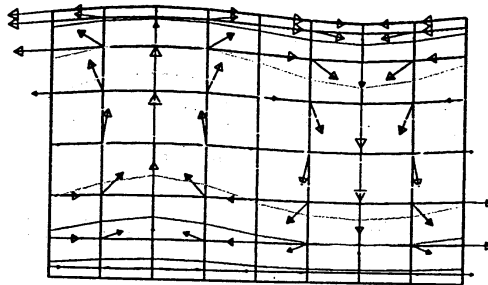


図 5: 自由表面を有する熱対流: $time = 40$ [12].

2.3. 自由境界を伴う不適切な形状設計問題

この節では今までとは違って写像関数をあらわに構成できない例をとりあげる. 次のプラズマ閉じ込めにおける容器の形状設計問題を考える (図6参照). これは不適切な問題である [10].

不適切な形状設計問題. γ_d を与えられた xy 軸対称のジョルダン曲線, κ を与えられた正定数とする. そのとき, γ_d と同じ対称性を持つジョルダン曲線 $\Gamma = \{(x, y) \mid u(x, y) = \kappa\}$ を求めよ. ただし,

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0 & \text{in } \Omega_{\gamma_d}, \\ u &= 0 & \text{on } \gamma_d, \end{aligned}$$

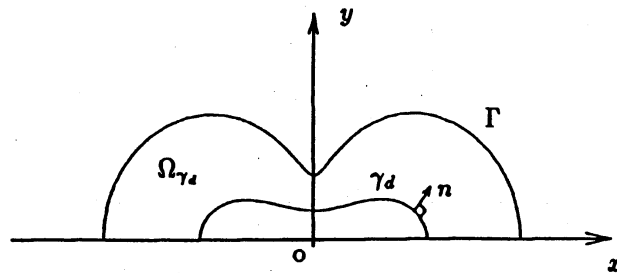


図 6: 不適切な形状設計問題.

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{4}{l_{\gamma_d}} \quad \text{on } \gamma_d.$$

この問題を，次の順問題 [3] の最適化によって近似的に解く.

自由境界問題 (FBP(Γ)). Γ を与えられたジョルダン曲線， κ を与えられた正定数とする. そのとき，次を満たす u と自由境界 γ を求めよ.

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0 && \text{in } \Omega_{\Gamma, \gamma}, \\ u &= 0 && \text{on } \gamma, \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= \frac{4}{l_\gamma} && \text{on } \gamma, \\ u &= \kappa && \text{on } \Gamma. \end{aligned}$$

ここで $\Omega_{\Gamma, \gamma}$ は γ と Γ に挟まれた領域である. n は γ 上の内向き単位法線ベクトルである.

この自由境界問題を精度よく解くために，離散化にスペクトル選点法を用い，自由境界問題のコスト関数の最小化にパウエル法を用いた FBP ソルバーを構築する [5]. 領域形状が比較的単純であれば前節のような写像関数を用いればよいのであるが，ここでは領域形状がそれほど単純でないため，数値格子生成法の一つである楕円型方程式を用いた写像関数の決定法を採用する. $\Omega_{\Gamma, \gamma}$ と $(-1, 1) \times (0, 2\pi)$ の間の写像関数 x と y は次を満たすものとして求める.

$$\begin{aligned} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} &= 0 && \text{in } (-1, 1) \times [0, 2\pi), \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} &= 0 && \text{in } (-1, 1) \times [0, 2\pi). \end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned} \alpha &= x_\eta^2 + y_\eta^2, & \beta &= x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta, \\ \gamma &= x_\xi^2 + y_\xi^2, & J &= x_\xi x_\eta - x_\eta y_\xi. \end{aligned}$$

x と y に対する境界条件は適当に定めればよいが、ここでは Γ 上と γ 上に格子点が等間隔に並ぶようなディリクレ境界条件を与えた。領域内の格子点を制御したければ右辺に適当な関数を持ってくればよい。 ξ 方向にはガウス-ロバット選点を用いたチェビシェフ選点法を、 η 方向にはフーリエ選点法を用いる。

数値計算例を図7に示す。 7×7 の格子点が自由境界問題 FBP(Γ) を解くために用いられている。

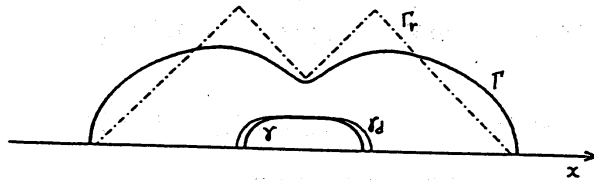


図 7: $\kappa=0.5$ のときの数値計算結果 [5].

3. 時空間スペクトル選点法

前節では、自由境界問題が固定された矩形領域の問題に変換されるのを見た。これによって、空間変数だけでなく、時間変数に対しても任意精度（正確には任意次数）のスペクトル選点法を適用できることがわかる。具体的な適用法を、前節のステファン問題を例にあげて示す。

時間変数に対してスペクトル選点法を適用するには、時間軸を区間に分割して、時空間の矩形領域を作る。そして、矩形領域で初期値境界値問題を解き、その解を接続していけばよい。時間軸を分割してできた一つの区間を $[t_s, t_e]$ としよう。次の変数変換を考える。

$$t(\tau) = \frac{\Delta t}{2}\tau + \frac{1}{2}(t_s + t_e), \quad -1 \leq \tau \leq 1, \quad \Delta t = t_e - t_s,$$

$$\tau(t) = \frac{2}{\Delta t}\left(t - \frac{1}{2}(t_s + t_e)\right).$$

ただし、ここでは時間に関してチェビシェフ選点法を用いるとしている。すると、計算面におけるステファン問題は次のように変換される [6].

時空間矩形領域におけるステファン問題。次を満たす u と \tilde{s} を求めよ。

$$\frac{2}{\Delta t}u_\tau = \frac{4}{\{\tilde{s}(\tau)\}^2}u_{\xi\xi} + \frac{\xi+1}{\tilde{s}(\tau)} \left\{ -\frac{u_\xi(1, \tau)}{\tilde{s}(\tau)} - \frac{\Delta t}{2}\tau - \frac{1}{2}(t_s + t_e) \right\} u_\xi$$

$$+\Delta t \cdot \tau + t_s + t_e + 4, \quad -1 < \tau \leq 1, \quad -1 < \xi < 1,$$

$$u(\xi, -1) = u_s(\xi), \quad -1 < \xi < 1,$$

$$\begin{aligned}
u(-1, \tau) &= \left\{ \frac{\Delta t}{2} \cdot \tau + \frac{1}{2}(t_s + t_e) + 1 \right\}^2, \quad -1 \leq \tau \leq 1, \\
u(1, \tau) &= 0, \quad -1 \leq \tau \leq 1, \\
\frac{2}{\Delta t} \tilde{s}'(\tau) &= -\frac{u_\xi(1, \tau)}{\tilde{s}(\tau)} - \frac{\Delta t}{2} \cdot \tau - \frac{1}{2}(t_s + t_e), \quad -1 < \tau \leq 1, \\
\tilde{s}(-1) &= \tilde{s}_s.
\end{aligned}$$

ここで、 $\tilde{s}(\tau) = s(t(\tau))$ 。また、 $t_s = 0$ のときは $u_s(\xi) = \frac{1 - (\xi + 1)^2}{4}$ 、 $\tilde{s}_s = 1$ 、それ以外では $U(\xi, \tau)$ 、 $\tilde{S}(\tau)$ を直前の矩形領域の u 、 \tilde{s} として $u_s(\xi) = U(\xi, 1)$ 、 $\tilde{s}_s = \tilde{S}(1)$ 。

この問題に対して、空間には $(N_g + 1)$ 個、時間には $(N_t + 1)$ 個のガウス - ロバット点を用いるチェビシエフ選点法で計算した計算結果を次の表に示す。ここで

表 1: $\Delta t = 2$ のときの誤差 $e^{Col}(t)$ [7].

Time	$N_g = 4, N_t = 4$	$N_g = 6, N_t = 4$	$N_g = 4, N_t = 6$
2	-0.118×10^{-9}	0.182×10^{-9}	-0.111×10^{-9}
4	0.137×10^{-9}	0.447×10^{-9}	0.399×10^{-9}
6	0.117×10^{-9}	-0.983×10^{-9}	-0.116×10^{-9}
8	0.197×10^{-9}	0.102×10^{-8}	0.231×10^{-9}
10	0.470×10^{-9}	-0.178×10^{-8}	-0.402×10^{-9}

$$e^{Col}(t) \equiv \max_j |u_j^{Col}(t) - u(x_j^{Col}, t)|,$$

$u_j^{Col}(t)$: j 番目の選点 $\tilde{\xi}_j$ における時刻 t での計算値

$$u(x_j^{Col}, t) = (t+1)^2 - (x_j^{Col})^2, \quad x_j^{Col} = \frac{1}{2}(t+1)(\tilde{\xi}_j + 1).$$

精度は非常に満足のものである。表のような大きな時間刻み幅でこのような精度で計算できるというのは驚きである。ただし弱点もあって、本解法は陰解法であるので反復法が必要となり、反復法の選択に注意を要するのと計算時間がかかる。これらが本解法の主な特徴であるが、それ以外にあまり気づかれない次のような特徴がある。

注意. よく行われる高精度化では、空間の離散化を行って常微分方程式系を導出し、その後常微分方程式の高精度解法を用いる。このやり方では、境界条件が非線形の場合未知数の消去がうまく行えず、常微分方程式系を導出できない場合がある。それにひきかえ時空間スペクトル選点法は、時空間の選点上で与えられた方程式が成り立つとするだけなので、適用範囲が境界条件によって制限されるということはない。

表からはもう一つ事実が読みとれて、計算精度が悪い（次数の低い）方に引きずられているのがわかる。これから、数値計算では一部分だけ高精度にしても意味がないことがわかる。

4. 結論

ここでは自由境界を高精度（任意精度）で解く数値手法を紹介した。それは、写像関数を用いた固定領域法とスペクトル選点法を併用したものである。実際にいくつかの自由境界問題に対してそれを適用し、高精度計算が行われていることを確認した。また、高精度以外の特徴に対しても考察した。

謝辞

本研究は、文部省科学研究費 No.07855011, No.07304019, No.07309021 の援助を一部受けて行われた。

参考文献

- [1] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni and T.A. Zang, Spectral Methods in Fluid Dynamics, Springer-Verlag, 1988.
- [2] C.A.J. フレッチャー, "コンピュータ流体力学(澤見 英男訳)", シュプリンガー・フェアラーク東京, 1993.
- [3] H. Imai and H. Kawarada, One-Component Asymmetric Plasmas in a Symmetric Vessel, Japan J. Appl. Math., 5(2)(1988), 173-186.
- [4] H. Imai, W. Zhou, M. Natori and H. Kawarada, Numerical Computations of Free Boundary Problems Using the Spectral Method, "Nonlinear Mathematical Problems in Industry I(H. Kawarada et al., eds.)," Gakkōtoshō, Tokyo, 1993, 39-47.
- [5] H. Imai, Application of the Fuzzy Theory and Spectral Collocation Methods to an Ill-Posed Shape Design Problem With a Free Boundary, "INVERSE PROBLEMS IN MECHANICS(eds. S.Saigal and L.G.Olson)," THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS, AMD-Vol.186 (1994), 103-107.
- [6] H. Imai, Y. Shinohara and T. Miyakoda, Application of Spectral Collocation Methods in Space and Time to Free Boundary Problems, "Hellenic European Research on Mathematics and Informatics '94 (Ed. Elias A. Lipitakis)," Hellenic Mathematical Society, Vol.2(1994), pp.781-786.
- [7] H. Imai, Y. Shinohara and T. Miyakoda, On Spectral Collocation Methods in Space and Time for Free Boundary Problems, "Computational Mechanics '95(eds. S.N. Atluri, G. Yagawa and T.A. Cruse)," Springer, Vol.1(1995), pp.798-803.
- [8] Y. Katano et al., Numerical study of drop formation from a capillary jet using a general coordinate system, Theor. Appl. Mech., 34, Univ. of Tokyo Press, 1986, 3-14.
- [9] Y. Morchoisne, Pseudo-spectral Space-Time Calculations of Incompressible Viscous Flows, AIAA Pap., No.81-0109 (1981).
- [10] A. Sasamoto, H. Imai and H. Kawarada, A Practical Method for an Ill-Conditioned Optimal Shape Design of a Vessel in Which Plasma Is Confined, "Inverse Problems in Engineering Sciences(M. Yamaguti et al., eds.)," Springer-Verlag, 1991, 120-125.
- [11] J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi and C.W. Mastin, Numerical Grid Generation, North-Holland, 1985.
- [12] 周 偉東, 今井 仁司, 名取 亮, 自由表面を有する熱対流の数値シミュレーションと線形安定性解析, 日本応用数学会論文誌, 4(1), 1994, 27-40.