

Stochastic Galerkin method に基づく Burgers 方程式の数値解析とその性能評価

Stochastic Galerkin method for uncertainty quantification of Burgers' equation

- ジン ジョンファン, 東京工業大学, 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259, E-mail : jin.j.ab@m.titech.ac.jp
- 阿部 圭晃, 東京工業大学, 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259, E-mail : abe.y.ax@m.titech.ac.jp
- 肖 鋒, 東京工業大学, 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259, E-mail : xiao@es.titech.ac.jp

Jonghoon Jin, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku Yokoham, 226-8502, Japan

Yoshiaki Abe, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku Yokoham, 226-8502, Japan

Feng Xiao, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku Yokoham, 226-8502, Japan

In this research, we have implemented the polynomial chaos expansion based on stochastic Galerkin (SG) method to quantify the uncertainties in the Burgers' equation. The governing equation of each coefficient in the polynomial chaos expansion is obtained from the Galerkin method with Hermite and Legendre basis functions respectively. As the two special cases, i.e. the Burgers equation subjected to the uncertainties in boundary conditions and viscosity, have been separately investigated. The stochastic solutions computed from the SG method using the 1-st order polynomials are compared with those from the Monte Carlo simulations. We will show the effects of the order of polynomials and the dimension of uncertainties on the numerical the solutions of the stochastic Burgers' equation under the assumption of same variance in uncertainty.

1. Introduction

数値流体解析では多くの不確かさが存在する。まず、乱流のように流体現象そのものが不確かさを含む確率過程で表現される場合がある。また、流体現象をモデル化するとき、モデル化誤差が不確かさとして導入される。最後にモデル化された問題の数値解析を行う事で、時空間を離散化する事に伴う不確かさが生じる。一般に数値流体解析にはこのように様々な不確かさが混在しているため、様々な不確かさに対してどのような感度を有するかを議論する事は非常に重要である。

数値流体解析における不確かさの定量化に関して様々な研究が行われている。従来の流体ソルバーを用い、入力値を変化させた複数の決定論的な解析を行うことによって不確かさを定量化する手法を non-intrusive method という。ランダムに入力値を決める Monte Carlo simulation (MC) により不確かさを定量化する手法や複数の入出力における統計的推定を用いることで応答表面を求め Kriging を用いた不確かさ定量化手法⁽¹⁾などが研究されている。一方、不確かさを含む支配方程式を導き、その解を求め手法 (intrusive method) が研究されている。そのなかに polynomial chaos expansion (PCE) と Galerkin 手法により polynomial chaos の基底の直交性を用いることによって不確かさの定量化を行う手法、Stochastic Galerkin method (SG) がある⁽²⁾。

SG を用いた Burgers' equation における不確かさの定量化に関して、Xiu らは Burgers' equation の境界条件に Uniform 分布に従うような不確かさがある場合の議論を行った⁽³⁾。また、Beltagy らは SG を用いることにより、粘性に Gaussian 分布に従う不確かさがある場合の Burgers' equation における不確かさについて議論した⁽⁴⁾。

しかし、その解析手法を詳細に説明した論文は少なく、また不確かさの分布の変化、特に PCE における多項式の次数および不確かさの次元の変化による Burgers' equation の解の変化の議論は十分とは言えない。これらの背景の下、本研究では以下の点に着目する：

- 1次元の Stochastic Burgers' equation の SG に基づいた解析手法を詳細に示し、SG における不確かさの分布の影響を明確にする。
- Burgers' equation において PCE に基づく SG の解と MC によって求めた解との比較を行う。

- PCE における多項式の次数および不確かさの次元の変化と Burgers' equation の解の関連性を調べる。

2. Polynomial chaos expansion

2.1 Homogeneous chaos and polynomial chaos

PCE の基礎となる polynomial chaos を用いた確率変数の表現に関して簡略に説明する。より詳しい説明は⁽²⁾にある。独立な Gaussian 確率変数の集合 $\xi = \{\xi_i\}_{i=1}^{\infty}$ を考える。このとき、 ξ の要素からなる多項式中、 p 次以下のすべての多項式からなる空間に属し、 $p-1$ 次以下のすべての多項式からなる空間に直交する多項式の集合 Γ_p を the p th polynomial chaos と言い、この p th polynomial chaos Γ_p により張られる空間 $\bar{\Gamma}_p$ を the p th homogeneous chaos と言う。

ξ による確率変数 $R(\xi)$ を p th polynomial chaos Γ_k と係数 a_k との線形和

$$R(\xi) = a_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} a_{i_1} \Gamma_1(\xi_{i_1}) + \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} a_{i_1 i_2} \Gamma_2(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}) + \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} a_{i_1 i_2 i_3} \Gamma_3(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \xi_{i_3}) + \dots \quad (1)$$

のように表すことができる。ここで、 $\Gamma_k(\cdot)$ はその中身の組み合わせからなるすべての k th polynomial chaos である。この式を polynomial chaos の列 $\Gamma = \{\Gamma_1(\xi_{i_1}), \Gamma_2(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}), \dots\}$ に対応する直交多項式基底列 $\Psi = \{\Psi_j\}_{j=1}^{\infty}$ とその変換を満たす係数 a_{i_1, \dots, i_r} に対応する係数 a'_j を用いることにより

$$R = \sum_{j=0}^{\infty} a'_j \Psi_j \quad (2)$$

と簡単に表すことができる。

2.2 One-dimensional orthogonal polynomial basis of polynomial chaos

まず, 1 次元確率変数 ξ_k における直交多項式基底列 $\psi^{(A)} = \{\psi_i^{(A)}\}_{i=1}^{\infty}$ を考える. ここで, $A \in \{G, U\}$ は確率変数の分布を示し, G のときは Gaussian 分布, U のときは Uniform 分布における直交多項式基底であることを示すとする. 同じく, 各確率分布の確率密度関数を $p^{(A)}(\xi_j)$ と示すとする.

直交多項式基底列 $\psi^{(A)} = \{\psi_i^{(A)}\}_{i=1}^{\infty}$ はその直交性により, 重み関数 $p^{(A)}(\xi_j)$ によって定義される内積

$$\langle \psi_i^{(A)} \psi_j^{(A)} \rangle = \int \psi_i^{(A)}(\xi_k) \psi_j^{(A)}(\xi_k) p^{(A)}(\xi_k) d\xi_k \quad (3)$$

に対して直交となるため, 任意の i, j において

$$\langle \psi_i^{(A)} \psi_j^{(A)} \rangle = \delta_{i,j} \left\langle \left(\psi_i^{(A)} \right)^2 \right\rangle \quad (4)$$

である. ここで, $\delta_{i,j}$ はクロネッカーのデルタである.

重み関数 $p^{(A)}(\xi_j)$ によって内積 $\langle \cdot \rangle$ において直交性を持つ多項式列は Rodrigues' formula

$$\psi_n^{(A)}(\xi_k) = \frac{1}{e_n p^{(A)}(\xi_k)} \frac{d^n}{d\xi_k^n} \{ p^{(A)}(\xi_k) [g(\xi_k)]^n \} \quad (5)$$

により定まる⁽⁶⁾. e_n は n によって任意に選ばれる定数であり, $g(\xi_k)$ は n によっては変わらない ξ_k の多項式である.

続く小節 2.3, 2.4 では Gaussian 分布と Uniform 分布における直交多項式基底について述べる. 本稿で紹介された確率分布以外により構築される直交多項式およびそれによる PCE については⁽⁵⁾ に詳しく議論されている.

2.3 Gaussian measure and Hermite polynomials

Gaussian 確率変数における確率密度関数

$$p^{(G)}(\xi_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\xi_k^2}{2}\right) \quad (6)$$

である. また,

$$e_n = (-1)^n, \quad (7)$$

$$g(\xi_k) = 1 \quad (8)$$

と取ることで Rodrigues' formula により, 直交多項式を構成することができ, 構成された直交多項式

$$\Psi_n^{(G)}(\xi_k) = n! \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{1}{m! 2^m (n-2m)!} \xi_k^{n-2m} \quad (9)$$

は Hermite 多項式となる. ここで $[\cdot]$ は床関数である. このとき, Gaussian 分布の確率密度関数 $p^{(G)}(\xi_k)$ により Eq. (3) で定義された内積は Gaussian measure となる.

2.4 Uniform measure and Legendre polynomials

範囲 $[-1:1]$ にかけて Uniform な確率変数における確率密度関数

$$p^{(U)}(\xi_k) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \xi_k \in [-1:1] \\ 0 & \xi_k \notin [-1:1] \end{cases} \quad (10)$$

を考える. また,

$$e_n = (-1)^n 2^n n!, \quad (11)$$

$$g(\xi_k) = (1-x)^2 \quad (12)$$

と取ることで Rodrigues' formula により, 直交多項式を構成することができ, 構成された直交多項式

$$\Psi_n^{(U)}(\xi_k) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \binom{n}{m} \binom{2n-2m}{n} \xi_k^{n-2m} \quad (13)$$

は Legendre 多項式となる. ここで $[\cdot]$ は床関数である. このとき, 範囲 $[-1:1]$ にかけて Uniform な確率関数 $p^{(U)}(\xi_k)$ により Eq. (3) で定義された内積を Uniform measure とする.

2.5 Multiple dimension basis of orthogonal polynomials

上記では 1 次元の確率変数における直交多項式基底列 $\psi^{(A)} = \{\psi_i^{(A)}\}_{i=1}^{\infty}$ について議論した. この小節では互いに独立な多次元の確率変数 $\xi = \{\xi_i\}_{i=1}^{\infty}$ における直交多項式基底列 $\Psi = \{\Psi_i\}_{i=1}^{\infty}$ に関して述べる. 多次元直交多項式基底列 Ψ は確率変数 ξ の各要素が独立であることからその確率密度関数は

$$p(\xi) = \prod_{i=1}^{\infty} p^{(A)}(\xi_i) \quad (14)$$

である. また, 直交性を持つため, Eq. (4) を満たし,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i \Psi_j \rangle &= \int \cdots \int \Psi_i(\xi) \Psi_j(\xi) \prod_{i=1}^{\infty} p^{(A)}(\xi_i) \prod_{i=1}^{\infty} d\xi_i \\ &= \delta_{i,j} \left\langle \left(\Psi_i \right)^2 \right\rangle \end{aligned} \quad (15)$$

となる必要がある. そのため, 多次元直交多項式基底 Ψ_k は 1 次元確率変数における直交多項式基底 $\psi_i^{(A)}(\xi_j)$ の積

$$\Psi_k(\xi) = \prod_{i=1}^{\infty} \prod_{j=1}^{\infty} c_{i,j}^k \psi_i^{(A)}(\xi_j) \quad (16)$$

の形で表すことができる. ここで, $c_{i,j}^k \in \{0,1\}$ とする.

2.6 Truncated PCE

上記では無限次元の確率変数 $\xi = \{\xi_i\}_{i=1}^{\infty}$ を用いた無限次元までの多項式による PCE, Eq. (2), について説明を行った. しかし, 数値解析を行うことを考えると確率変数の次元 M と PCE で用いる多項式の最大次数 P を有限に限定する必要がある. よって, 確率変数 $\xi' = \{\xi_i\}_{i=1}^M$ を用いることにし, P 次多項式までの展開を考える. そのとき, Eq. (2) は

$$R = \sum_{k=0}^{PC} a'_k \Psi_k(\xi') + \epsilon(M, P) \quad (17)$$

となる. 基底の数 PC は M 次元の不確かさの P 次以下の直交多項式基底を重複することなく数えることにより

$$PC + 1 = \frac{(M+P)!}{M!P!} \quad (18)$$

と定まる. $\epsilon(M, P)$ は M, P が大きくなるにつれて 0 に急速に収束する⁽⁷⁾. 直交多項式基底 Ψ_k は有限個の 1 次元確率変数における直交多項式関数の積

$$\Psi_k(\xi') = \prod_{i=1}^P \prod_{j=1}^N c_{i,j}^k \psi_i^{(A)}(\xi_j) \quad (19)$$

からなり, 重複することなく数えることにより

$$\Psi_k(\xi') = \prod_{i=1}^{PC} \psi_{a_i^k}^{(A)}(\xi_i) \quad (20)$$

のように表すことができる. 定数 a_i^k は多項式の次数と不確かさの次元が低い順から並べることで直交多項式基底列 $\Psi = \{\Psi_i\}_{i=0}^{PC}$ の順序を決めることにより一意に定まる. 本アルゴリズムは Ghanem ら⁽²⁾ により明記されている. 節 3, 4, 5 における PCE は Truncated PCE を指す.

2.7 Calculation of statics by PCE

この小節では前の小節で紹介した PCE と統計量との関係を明確に示す. Eq. (3) で定義された内積 $\langle \cdot \rangle$ を小節 2.3, 2.4 で説明した通り, 対応する measure として考えることができる. そのとき対応する measure による確率変数 R の期待値は

$$E[R] = \langle R \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} a_i' \langle \Psi_0 \Psi_i \rangle = a_0' \quad (21)$$

となる. ここで, 一般的に

$$\langle \Psi_0 \rangle = 1 \quad (22)$$

$$\langle \Psi_0^2 \rangle = 1 \quad (23)$$

である性質が用いられた. 確率変数 R の分散は

$$\begin{aligned} V[R] &= \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} a_i' a_j' \langle \Psi_i \Psi_j \rangle - a_0'^2 \langle \Psi_0^2 \rangle^2 \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} a_i'^2 \langle \Psi_i^2 \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

となる.

また, PC までの truncated PCE を考えると分散は

$$V[R] = \sum_{i=1}^{PC} a_i'^2 \langle \Psi_i^2 \rangle + \epsilon'(N, P) \quad (25)$$

となることが分かる. すなわち, PCE を用いることによって平均が誤差なく求まり, 微小誤差 ϵ' を有する分散が求まる.

逆に平均 μ , 分散 σ^2 を持つような truncated PCE によって生成される確率変数 R' は

$$R' = \mu + \sum_{i=1}^{PC} b_i \Psi_i, \quad (26)$$

で表され, このときの係数 b_i は

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{PC} b_i^2 \langle \Psi_i^2 \rangle \quad (27)$$

を満たす必要がある.

3. Stochastic Burgers' equation and the solving method

3.1 Solution of Burgers' equation by Stochastic Galerkin method

M 次元の確率変数 $\xi' = \{\xi_i\}_{i=1}^M$ により生成される不確かさが速度 $u(x, t, \xi')$ および動粘度 $\nu(\xi')$ に含まれる場合の Stochastic Burgers' equation

$$\frac{\partial u(x, t, \xi')}{\partial t} + u(x, t, \xi') \frac{\partial u(x, t, \xi')}{\partial x} = \nu(\xi') \frac{\partial^2 u(x, t, \xi')}{\partial x^2} \quad (28)$$

を考える. 不確かさを持つ速度および動粘度の PCE は

$$\nu(\xi') = \sum_{i=0}^{PC} \nu_i \Psi_i(\xi'), \quad (29)$$

$$u(x, t, \xi') = \sum_{i=0}^{PC} u_i(x, t) \Psi_i(\xi') \quad (30)$$

となる. これを Eq. (28) に代入すると

$$\begin{aligned} &\sum_{i=0}^{PC} \left[\Psi_i \frac{\partial u_i}{\partial t} \right] + \sum_{i=0}^{PC} \left[\sum_{j=0}^{PC} \Psi_i \Psi_j u_j \frac{\partial u_i}{\partial x} \right] \\ &= \sum_{i=0}^{PC} \left[\sum_{j=0}^{PC} \nu_j \Psi_i \Psi_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} \right] \end{aligned} \quad (31)$$

となる. この式の両辺にある基底 Ψ_ℓ を掛け, 期待値 $\langle \cdot \rangle$ を取ることにより

$$\sum_{i=0}^{PC} h_{i,\ell} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \sum_{i=0}^{PC} \left[\sum_{j=0}^{PC} c_{ij\ell} \left(u_j \frac{\partial u_i}{\partial x} - \nu_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} \right) \right] = 0 \quad (32)$$

のように Stochastic Burgers' equation の各要素の PCE の係数の支配方程式が求まる. これを境界条件の下で解くことにより各係数が定まり, Stochastic Burgers equation の解が Eq. (29), Eq. (30) から求まる. ここで

$$h_{i,\ell} = \langle \Psi_i \Psi_\ell \rangle \quad (33)$$

$$c_{ij\ell} = \langle \Psi_i \Psi_j \Psi_\ell \rangle \quad (34)$$

である.

3.2 Discretization of the stochastic Burgers' equation

続いて Eq. (32) の大きさ Δx の各要素ごとの空間積分

$$\begin{aligned} &\sum_{i=0}^{PC} h_{i,\ell} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_k - \frac{\Delta x}{2}}^{x_k + \frac{\Delta x}{2}} u_i dx + \sum_{i=0}^{PC} \left[\sum_{j=0}^{PC} c_{ij\ell} \left(\int_{x_k - \frac{\Delta x}{2}}^{x_k + \frac{\Delta x}{2}} u_j \frac{\partial u_i}{\partial x} dx \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \nu_j \int_{x_k - \frac{\Delta x}{2}}^{x_k + \frac{\Delta x}{2}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} dx \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (35)$$

を考える. この式の各項を時間における前進差分

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_k - \frac{\Delta x}{2}}^{x_k + \frac{\Delta x}{2}} u_i dx = \frac{\Delta x}{\Delta t} (u_i^{n+1}(k) - u_i^n(k)), \quad (36)$$

空間における中心差分

$$\int_{x_k - \frac{\Delta x}{2}}^{x_k + \frac{\Delta x}{2}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} = \frac{1}{\Delta x} (u_i^{n+1}(k+1) - 2u_i^{n+1}(k) + u_i^{n+1}(k-1)) \quad (37)$$

および風上差分

$$\int_{x_k - \frac{\Delta x}{2}}^{x_k + \frac{\Delta x}{2}} u_j \frac{\partial u_i}{\partial x} = u_j^{n+1}(k) (u_i^n(k) - u_i^n(k-1)) \left(\frac{u_i^n(k) + |u_i^n(k)|}{2|u_i^n(k)|} \right) + u_j^{n+1}(k) (u_i^n(k+1) - u_i^n(k)) \left(\frac{u_i^n(k) - |u_i^n(k)|}{2|u_i^n(k)|} \right) \quad (38)$$

に基づき、以下の数式を得る：

$$\sum_{i=0}^{PC} [P_{i,\ell,k} u_i^{n+1}(k-1) + Q_{i,\ell,k} u_i^{n+1}(k) + R_{i,\ell,k} u_i^{n+1}(k+1)] = u_\ell^n(k), \quad (39)$$

$$P_{i,\ell,k} = \left(\sum_{j=0}^{PC} c_{ij\ell} \left(-u_j^n(k) \left(\frac{u_i^n(k) + |u_i^n(k)|}{2|u_i^n(k)|} \right) - \frac{\nu_j}{\Delta x} \right) \right) \left(\frac{\Delta t}{h_{\ell,\ell} \Delta x} \right), \quad (40)$$

$$Q_{i,\ell,k} = \left(h_{i,\ell} \frac{\Delta x}{\Delta t} + \sum_{j=0}^{PC} c_{ij\ell} \left(u_j^n(k) \frac{u_i^n(k)}{|u_i^n(k)|} + \frac{2\nu_j}{\Delta x} \right) \right) \left(\frac{\Delta t}{h_{\ell,\ell} \Delta x} \right), \quad (41)$$

$$R_{i,\ell,k} = \left(\sum_{j=0}^{PC} c_{ij\ell} \left(u_j^n(k) \left(\frac{u_i^n(k) - |u_i^n(k)|}{2|u_i^n(k)|} \right) - \frac{\nu_j}{\Delta x} \right) \right) \left(\frac{\Delta t}{h_{\ell,\ell} \Delta x} \right). \quad (42)$$

ここで右辺の整理のため、基底の直交性

$$\sum_{i=0}^{PC} h_{i,\ell} \frac{\Delta x}{\Delta t} u_i^n(k) = h_{\ell,\ell} \frac{\Delta x}{\Delta t} u_\ell^n(k) \quad (43)$$

を用いた。

また、空間要素の数 N として両端で定常の境界条件を与えるとして

$$u_\ell^{n+1}(k) = u_\ell^n(k) = u_\ell^0(k) \quad (k = 1, N) \quad (44)$$

とする。

3.3 Matrix solution and charateristic of discretized system

この小節では離散化した支配方程式, Eq. (39), と境界条件, Eq. (44), の行列表現について述べる。そのため、流速の PCE における係数 $u_i^n(k)$ ($i = 0 \sim PC, k = 1 \sim N$) を N 個ずつ $PC + 1$ 回並べた $N \times (PC + 1)$ 個の要素を持つ縦長ベクトル

$$U_n = [u_1^n \quad u_2^n \quad u_3^n \quad \cdots \quad u_{PC}^n]^T, \quad (45)$$

$$u_i^n = [u_i^n A \quad u_i^n(2) \quad \cdots \quad u_i^n(N)] \quad (i = 1, 2, \dots, PC) \quad (46)$$

を考える。次に $i = 1, 2, \dots, PC, j = i = 1, 2, \dots, PC$ において $M \times M$ 行列

$$A_{i,j} = \begin{bmatrix} \delta_{i,j} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ P_{i,j,2} & Q_{i,j,2} & R_{i,j,2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & P_{i,j,3} & Q_{i,j,3} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P_{i,j,4} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & Q_{i,j,M-1} & R_{i,j,M-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \delta_{i,j} \end{bmatrix} \quad (47)$$

からなる大きな行列

$$A = \begin{bmatrix} A_{0,0} & A_{1,0} & A_{2,0} & \cdots & A_{PC,0} \\ A_{0,1} & A_{1,1} & A_{2,1} & \cdots & A_{PC,1} \\ A_{0,2} & A_{1,2} & A_{2,2} & \cdots & A_{PC,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{0,PC} & A_{1,PC} & A_{2,PC} & \cdots & A_{PC,PC} \end{bmatrix} \quad (48)$$

を考えると Eq. (39), Eq. (44) は

$$AU_{n+1} = U_n \quad (49)$$

のように整理できる。 $A_{i,j}$ はそれぞれが一つの Burgers' equation の離散化された支配方程式の形をしており、それが $PC \times PC$ 個並ぶことにより A になる。

この線形連立方程式を U_{n+1} に関して解くことで、各多項式基底における不確かさの支配方程式, Eq. (39), を境界条件, Eq. (44), の下で解くことができる。

4. Notations of numerical solution

4.1 Value of Parameters

本研究では衝撃波の生成を観察することができるように解析空間 $[0, 1]$ の両端に速度のディレクレ境界条件として

$$u_1^0(1) = 1, \quad (50)$$

$$u_1^0(N) = -1 \quad (51)$$

を与えた。動粘性 ν は 0.01 として計算を行った。無次元時間ステップ幅 Δt は 10^{-3} とし $N = 2048$ の計算を行うときに限って $1/3 \times 10^{-3}$ とした。時間ステップの数を決めることにより、最大変化量が 10^{-5} 次数となる、無次元時間が 1.2 だけ進んだときまでの計算を行った。

4.2 Consideration of uncertainty

本稿では二つの場合における数値解析を行った．一つ目は、動粘度に Gaussian 分布に従う不確かさが存在する場合である．動粘度 ν に平均動粘度 ν_0 の 0.2 倍の分散

$$\sigma_\nu^2 = 0.2\nu_0 \quad (52)$$

を持つ Gaussian 分布に従う不確かさがあるとする．そのとき、動粘度の PCE は適切な係数 $b_i^{(\nu)}$ を用いて

$$\nu = \nu_0 + \sum_{i=1}^{PC} b_i^{(\nu)} \Psi_i^G \quad (53)$$

のようになる．

係数 $b_i^{(\nu)}$ は Eq. (52) の分散になる条件, Eq. (27), を満たす必要があるが、この条件だけでは一意に定まらない．本稿では係数を一意に定めるために同じ次数で係数の値が同じで、かつ次数が上がるにつれて $b_\nu = b_1^{(\nu)}/\sigma_\nu$ 倍だけされることを仮定する．仮定により、Table 1 に示したように b_ν が決まり、分散 σ_ν^2 に関して一意に係数 $b_i^{(\nu)}$ が定まる．

Table 1: Determination of PCE coefficient on same variance for Hermite polynomial

P	M	explicit form of Eq. (27)	b_ν^2
1	1	$b_\nu^2 - 1 = 0$	1
1	2	$2b_\nu^2 - 1 = 0$	0.5
1	3	$3b_\nu^2 - 1 = 0$	0.333333
1	4	$4b_\nu^2 - 1 = 0$	0.25
2	1	$2b_\nu^4 + b_\nu^2 - 1 = 0$	0.5
3	1	$6b_\nu^6 + 2b_\nu^4 + b_\nu^2 - 1 = 0$	0.380384
4	1	$24b_\nu^8 + 6b_\nu^6 + 2b_\nu^4 + b_\nu^2 - 1 = 0$	0.323663

二つ目の解析条件は左端の流速境界条件に Uniform 分布に従う不確かさが存在する場合である．左端における流速境界条件が平均速度 u_0 の 0.05 倍の大きさ Uniform 分布に従い、そのとき分散

$$\sigma_u^2 = \frac{0.1}{12}u_0 \quad (54)$$

を持つ．そのとき、左端 $x = 0$ における流速境界条件 $u_1^0(1)$ の PCE は適切な係数 $b_i^{(u)}$ を用いて

$$u_1^0(1) = u_0 + \sum_{i=1}^{PC} b_i^{(u)} \Psi_i^U \quad (55)$$

のようになる．

係数 $b_i^{(u)}$ も Eq. (54) の分散になる条件, Eq. (27), を満たす必要があるが、この条件だけでは一意に定まらない．よって、同じ次数で係数の値が同じで、次数が上がるにつれて $b_u = b_1^{(u)}/\sigma_u$ 倍になることを仮定すると、Table 2 に示したように b_u が決まることにより分散 σ_u^2 に関して一意に定まる．

Table 2: Determination of PCE coefficient on same variance for Legendre polynomial

P	M	explicit form of Eq. (27)	b_u^2
1	1	$b_u^2 - 3 = 0$	3
1	2	$2b_u^2 - 3 = 0$	1.5
1	3	$b_u^2 - 1 = 0$	1
1	4	$4b_u^2 - 3 = 0$	0.75
2	1	$3b_u^4 + 5b_u^2 - 15 = 0$	1.552970
3	1	$\frac{1}{7}b_u^6 + \frac{1}{5}b_u^4 + \frac{1}{3}b_u^2 - 1 = 0$	1.244539
4	1	$\frac{1}{9}b_u^8 + \frac{1}{7}b_u^6 + \frac{1}{5}b_u^4 + \frac{1}{3}b_u^2 - 1 = 0$	1.120127

4.3 Linear solver

本研究は MATLAB プログラムを用いた数値解析を行った．離散化された stochastic Burgers' equation, Eq. (49), は一般化最小残差法 (GMRES) を用いて 10^{-8} の許容誤差範囲で計算を行った．このとき、MATLAB の組み込み GMRES を用いた．

4.4 Monte carlo simulation

今回行った 1 次元確率変数におけるモンテカルロシミュレーションに関して説明する．まず、各確率密度分布関数により S 個の確率変数 $\delta^{(A)} = \{\delta_i^{(A)}\}_{i=1}^S$ を生成し、動粘度に不確かさを持つ場合に関しては

$$\nu = 0.01 + 0.2\delta_i^{(G)} \quad (56)$$

速度境界条件に不確かさを持つ場合に関しては

$$u_1^0(1) = 1 + 0.05\delta_i^{(U)} \quad (57)$$

のように不確かさを与えたときにおける時刻 1.2 での各要素における出力の平均および分散を求めた．

本研究で用いた確率変数 $\delta^{(G)}$, $\delta^{(U)}$ をそれぞれ Fig. 1, Fig. 2 に示す．Gaussian 分布に従う 500 個の確率変数 $\delta^{(G)}$ の平均は 0.0369 であり、分散は 0.9851 である．Uniform 分布に従う 500 個の確率変数 $\delta^{(U)}$ の平均は 0.0048 であり、分散は 0.0833 である．

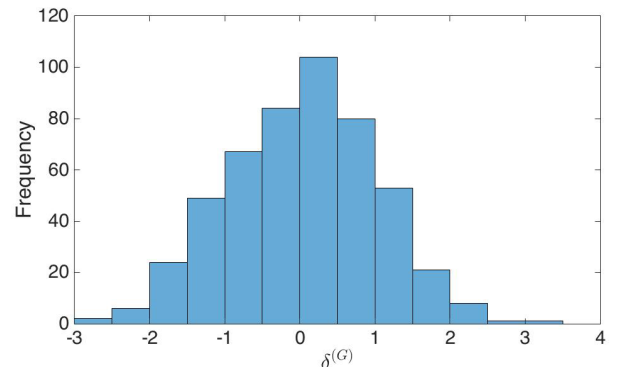


Fig. 1: The histogram of random variable $\delta^{(G)}$

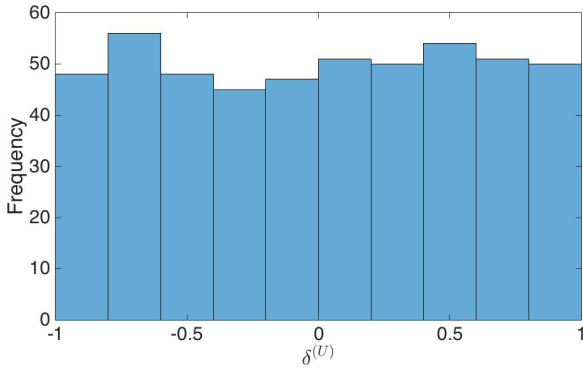


Fig. 2: The histogram of random variable $\delta^{(u)}$

4.5 Information of computer

本研究における数値計算はすべて Intel Core i7-4790 CPU 3.60GHz (4 core) の計算機の上で Matlab を用いて行った。

5. Numerical result and discussion

この節では節 3 で紹介した SG を用いた手法の実際の計算結果を報告し考察を行う。動粘度 ν に Gaussian 分布に従う不確かさがあるときおよび境界条件に Uniform 分布に従う不確かさがあるときにおける計算結果の報告および考察をそれぞれ 5.1, 5.2 で行う。まず, 1 次元 PCE と MC の比較を行う。次に, 多次元 PCE の結果を示し, 1 次元 PCE との比較を行う。最後に計算時刻に関する議論を行う。

5.1 Uncertainty of viscosity with Gaussian distribution

試行回数を 100, 500, 1000, 2000 と変えながら求めた MC の結果を Fig. 3 と Fig. 4 に示す。試行回数が増えることによって平均値には大きな差はない。分散については試行回数によって変動するが, 大きな変化は見られない。そのため, 本稿では MC の試行回数を 500 回にして議論を行うこととする。

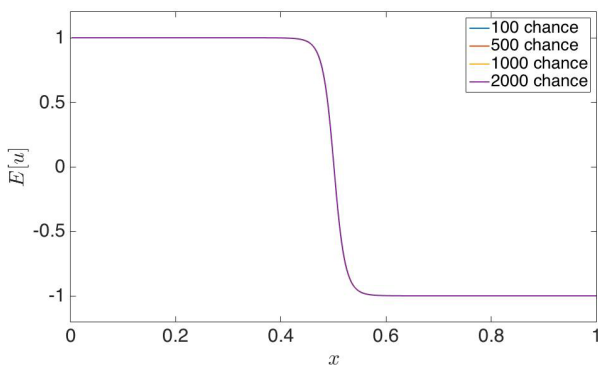


Fig. 3: Mean change by chance of Monte-carlo simulation

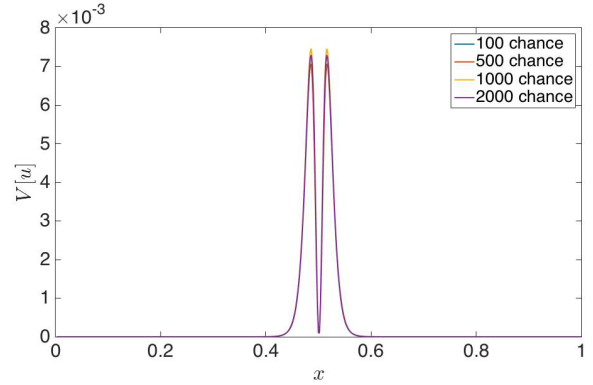


Fig. 4: Variation change by chance of Monte-carlo simulation

左端の境界条件 $u_1^0(1)$ に分散 0.2 の Gaussian 分布に従うような不確かさがあるとしたとき, SG によって得られた平均と MC によって得られた平均を空間要素の数 N を変えながら計算し, Fig. 5 に示す。SG は PCE の不確かさの次元が 1, 多項式のオーダーが 1 としたものをを用いた。どのような空間要素の数でも平均の値はほぼ等しく, MC, SG 両方とも平均値をよく推定できることがわかる。

また, それぞれの計算によって得られた分散を Fig. 6 示す。MC は空間要素の数が増えるにつれて分散が増加する。また, SG は空間要素の数が増えるにつれて分散が減少し, MC と SG が同じ方向を向いて変化している。空間要素の数の変化による MC および SG から得られた分散の変化様子から, 空間要素の数 N が 2048 個のときの MC から得られた分散と SG から得られた分散がほぼ一致した。

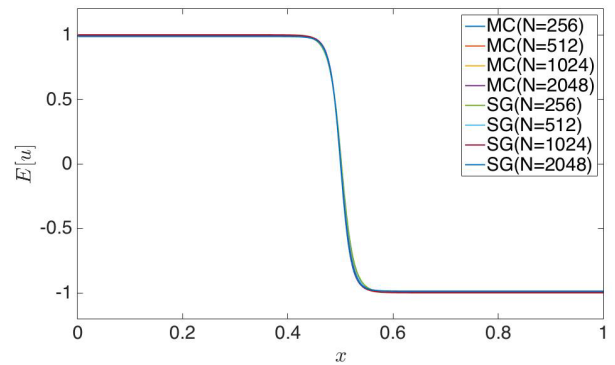


Fig. 5: Comparison of mean value between MC and SG

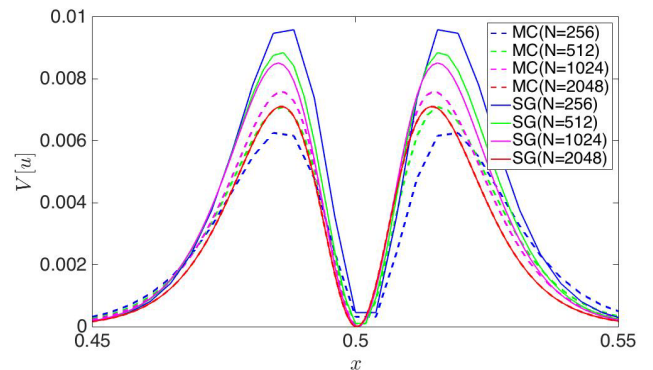


Fig. 6: Comparison of variation value between MC and SG

空間要素の数 N を 512 で固定した上、PCE における次数 P の変化による各要素における速度の分散 $V[u]$ の変化を Fig. 7 に示す。次数が増えることによって分散が減ることが分かる。これは動粘度における Gaussian 分布の不確かさは同じ分散を持つ確率変数であっても、高次次数の確率変数であるほど、Burgers' equation の解における影響が少ないことを意味する。

空間要素の数 N を 512 で固定した上、PCE における次元 M の変化による各要素における速度の分散 $V[u]$ の変化を Fig. 8 に示す。すべての線が重なっており、次元が変わっても分散が変わらないことが分かる。これは動粘度における Gaussian 分布の不確かさはその総和が同じであれば同じ次数における確率変数の数が増えることは Burgers' equation の解に影響を及ぼさないことを意味する。

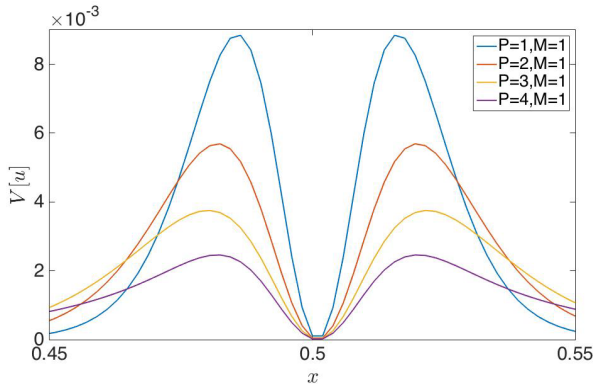


Fig. 7: Variation change by PCE order P

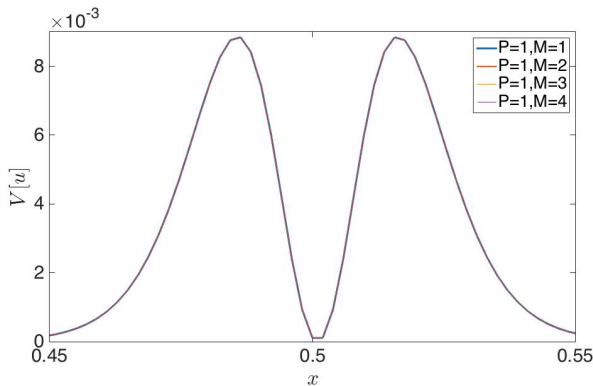


Fig. 8: Variation change by PCE dimension M

動粘度における Gaussian 分布の不確かさがある場合における SG を用いたときの計算時間 $T_S^{(G)}$ と MC における 1 試行における計算時間 $T_M^{(G)}$ を Table 3 に示した。SG は PCE の不確かさの次元が 1、多項式のオーダーが 1 としたものをを用いた。SG は MC の 10 回以下の計算時間がかかることが確認できる。特に SG と MC の結果が一致した 2048 回では SG は MC の 5~6 回程度の計算時間で計算できる。

5.2 Uncertainty of boundary condition with

Uniform distribution

u に ± 0.05 の Uniform 分布に従うような不確かさがあるとしたとき、SG によって得られた平均と MC によって得られた平均を空間要素の数 N を変えながらも、Fig. 9 に示す。SG は PCE の不確かさの次元が 1、多項式のオーダーが 1 としたものをを用いた。どのような空間要素の数でも平均の値はほぼ等しく、Burgers' equation の

Table 3: Calculation time comparison on case 1

N	T_S [sec]	T_M [sec]	T_S/T_M
256	1.6	0.8	2.0
512	5.8	1.3	4.5
1024	63.6	6.9	9.2
2048	556.0	102.8	5.4

解として想定される解の形状をしている。MC, SG 両方とも平均値をよく推定できる。

また、それぞれに得られた分散を Fig. 10 示す。MC と SG とともに空間要素の数が増えるにつれて分散が増加することが分かる。その形および分散が生じる位置が同じである。特に $N = 256$ のときほぼ一致し、 $N = 2048$ のときはより一致する。MC, SG 両方とも分散をよく推定できる。

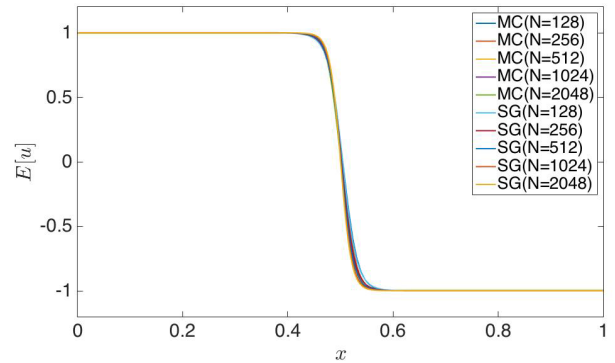


Fig. 9: Comparison of mean value between MC and SG

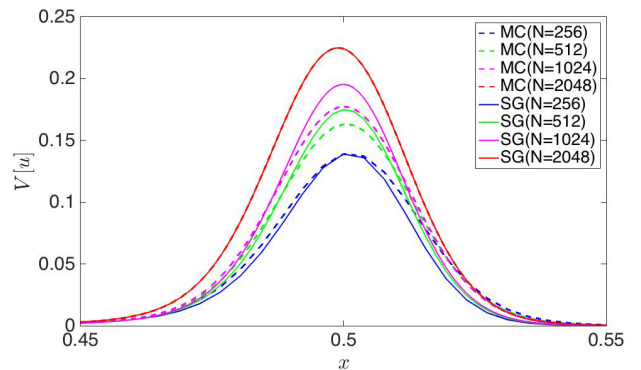


Fig. 10: Comparison of variation value between MC and SG

空間要素の数 N を 512 で固定した上、PCE における次数 P の変化による各要素における速度の分散 $V[u]$ の変化を Fig. 12 に示す。次数が増えることによって分散が減りながら右に傾く。

空間要素の数 N を 512 で固定した上、PCE における次元 M の変化による各要素における速度の分散 $V[u]$ の変化を Fig. 11 に示す。 $M = 1$ のときと $M = 3$ のときにおける解の分散が一致している。次元が増えることによって分散が変動することがわかる。PCE の多項式の最大次数を変化させた場合と異なり、分布が傾いていく様子は見られない。

境界条件に Uniform 分布の不確かさがある場合における SG を用いたときの計算時間 $T_S^{(U)}$ と MC における 1 試行における計算時間 $T_M^{(U)}$ を Table 4 に示した。SG は PCE の不確かさの次元が 1, 多項式のオーダーが 1 としたものをを用いた。SG は MC の 10 回以下の計算時間がかかることが確認できる。特に SG と MC の結果が一致した 2048 回では SG は MC の 5~6 回程度の計算時間で計算できる。

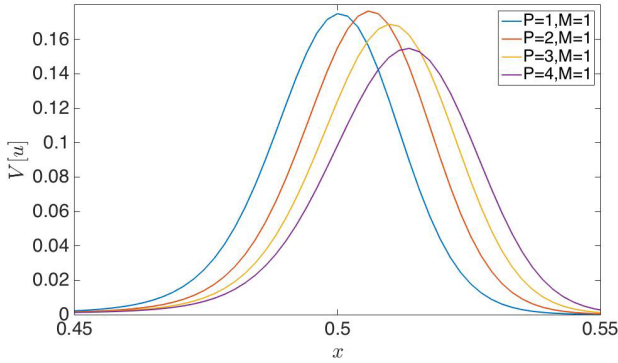


Fig. 11: Variation change by PCE order P

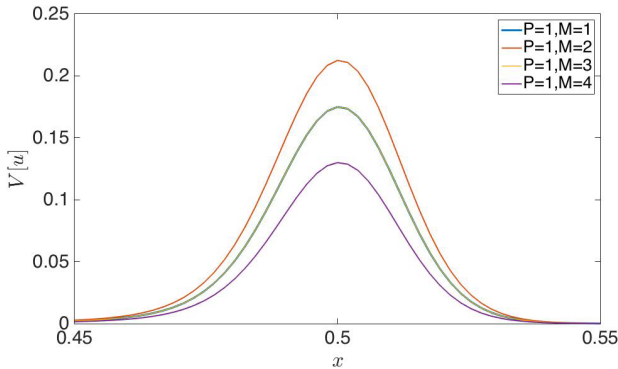


Fig. 12: Variation change by PCE dimension M

Table 4: Calculation time comparison on case 2

N	$T_S[\text{sec}]$	$T_M[\text{sec}]$	$T_S^{(U)}/T_M^{(U)}$
256	1.4	0.7	2.0
512	4.5	1.2	3.8
1024	45.3	6.6	6.9
2048	423.3	76.5	5.5

6. Conclusion

本研究では次を行った：

- 1次元の Stochastic Burgers' equation の Hermite 多項式および Legendre 多項式による PCE に基づく SG に基づいた解析手法を節 2, 節 3 に詳細に示した。
- 1次元の不確かさにおける 1次までの PCE に基づく SG を用いて動粘度に Gaussian 分布による不確かさがある場合と境界条件に Uniform 分布による不確かさがある場合における Burgers' equation の解の分

散を求め、モンテカルロシミュレーションによって求めた Stochastic Burgers' equation の解との比較を行った。

- 動粘度に Gaussian 分布による不確かさがある場合、要素の数が大きいとき SG により得られた解とモンテカルロシミュレーションにより得られた解が一致した。
- 境界条件に Uniform 分布による不確かさがある場合、要素の数が少ないときにも SG により得られた解が十分一致することが分かった。
- SG に基づいた手法の計算時間がモンテカルロシミュレーションの 1 回分あたりの計算時間の 10 倍以下となることが分かった。
- 動粘度に Gaussian 分布による不確かさがある場合と境界条件に Uniform 分布による不確かさがある場合において PCE における多項式の最大次数と不確かさの次元の変化による Stochastic Burgers' equation の解の変化を調べた。
 - 動粘度に Gaussian 分布による、かつ同じ大きさの分散を持つ不確かさがある場合、高い次数の不確かさがあるほど解の分散が小さくなるが、次元には解が影響されないことが分かった。
 - 境界条件に Uniform な分布による、かつ同じ大きさの分散を持つ不確かさがある場合、不確かさの次元が変わることにより解の分散が変動し、不確かさの次数が大きくなるにつれて解がシフトしながら減少するがその次元に変化によるものに比べると小さいことが分かった。

本稿では多次元直交多項式基底 Ψ_k が同じ確率分布における直交多項式基底のみによって生成される場合、すなわち Eq. (16) において $\psi_k^{(A)}$ の A がすべて同じ分布を示す場合のみに限って議論を行った。複数の確率の分布により生成された多次元直交多項式基底による PCE に関しては発表時に報告したい。

参考文献

- (1) "Dynamic Adaptive Sampling Based on Kriging Surrogate Models for Efficient Uncertainty Quantification", 54th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference, Structures, Structural Dynamics, and Materials and Co-located Conferences, (AIAA 2013-1470).
- (2) Ghanem, R., Spanos, P., "Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach", 2nd edn. Dover, new York, (2002).
- (3) Xiu, D. and Karniadakis, G. E., "Supersensitivity due to uncertain boundary conditions", Int. J. Numer. Meth. Engng. (2004), 61:12, pp 2114-2138.
- (4) El-Beltagy, M. A., Wafa, M. I. and Galal, O. H., "Upwind Finite-Volume Solution of Stochastic Burgers' Equation", Applied Mathematics (2012), Vol.3 no.11A, pp1818-1825.
- (5) Xiu, D., Karniadakis, G. E., "The Wiener-Askey polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations", SIAM Journal on Scientific Computing (2002), 24 (2), pp 614-644.
- (6) Abramowitz, M. and Stegun, I., "Handbook of Mathematical Functions", Dover, new York, (1940).
- (7) O.p. Le Maitre, O.M. Knio, "Spectral Methods for Uncertainty Quantification", Springer, 2010.