

差分法の桁落ち誤差最小化, 並びに不等距離差分法による粒子法勾配モデル

Minimization of cancellation of significant digits in the finite difference method, and gradient model for particle method constructed by non-equidistant finite difference method

○ 今村純也, *imi* 計算工学研究室, 351-0114 和光市本町 31-9-803, E-mail: jimamura@ra2.so-net.ne.jp
Junya Imamura, *imi* Computational Engineering Laboratory, 351-0114 Wako-shi, Honcho 31-9-803

The exclusion method for cancellation of significant digits in numerical derivatives has already been proposed. In 1970, Sugihara and Imamura proposed a non-equidistant finite difference method (FDM), as the method the moving least square method is 95% same. A gradient model for the particle method using both methods is proposed in this study. Non-equidistant FDM supported by the exclusion method is used for the cancellation of significant digits.

1. 目的と背景

(1) 目的

Navier-Stokes (NS)方程式の変位関数を, 重み付き回帰計算によって誘導し, 粒子法の勾配モデルとして適用する方法を提案する。

数値微分は桁落ちし易い。微分方程式の解精度は, 数値微分の桁落ち程度で左右されると言っても過言ではない。

乗・除演算の桁落ちは少ないが, 加・減算は桁落ちが大きい。数値微分は, 基本的に後者に基づく差分による。

粒子法の勾配モデルは, 数値微分によって表すので, この点の対策が重要である。

既報⁽¹⁾で共役(共軛)変数の概念を導入し, 共役変数の最小化式を制約条件とすることで, 当該変数の桁落ち(spurious)誤差を緩和・排除する技法を提案した。

変位・速度関数の誘導に際して, 共役変数最小化法を組み込むことで, 勾配モデルの spurious 誤差を排除して, 粒子法を組立てる点が本稿のポイントである。([Appendix-1]参照のこと。)

数値微分桁落ちの典型例は, 累積計算する陽解法に表れる。

対して, 陰解法は数値積分法であり, 桁落ちは少ないが, そのための反復計算を要す。

粒子を transaction として, 陽的計算で advance するのが, 高速計算のためには望ましい。本稿の目的はそこに在る。

もう一点, NS 方程式解法で重要なのは, 非圧縮性・圧縮性に拘わらず非圧縮計算である, ことを指摘して置きたい。

したがって, 連続の式 $\text{div} \mathbf{U} = 0$ を満たすことが重要である。 $\nabla \phi$ で体積率偏差を除いた \mathbf{U} の数値微分は誤差を含む。直接 $\text{div} \mathbf{U} = 0$ を満たす必要がある。(望ましくは $\nabla \text{div} \mathbf{U} = \mathbf{0}$ も。)([Appendix-2] 参照のこと。)

(2) 背景

不等距離差分法(日本建築学会論文集, 1967)は, 杉原・今村が提案した方法・呼称である。その後, moving least square method として 95% 同じ方法(故・野口裕久氏の評価)が提案されていて, 手法は広く知られているので説明は省略する。

この方法によれば, 粒子間の勾配・ラブラシアンが容易に計算可能である。ただ, 数値差分法の視点が重要で, 課題ははじめに述べた桁落ち誤差の排除である。

既報⁽¹⁾は Locking free 有有限要素法の提案を目的とした。せん断 Locking を回避する技法として, 応力項に関する技法と, 適合性に関する技法を提案したものである。

前者は, 応力は方向性を持つてはならないとした。座標系によらず同じ値になければならない, ことが基本である。

後者は, 有限要素法では幾何学的変位は連続でなければならぬ

とした。したがって, 要素関数項をすべて使って表す。渦度など, 応力以外の導関数項も同様である。重み関数も同様である。

応力項が方向性を持たないとは, パスカルの三角形をすべて埋め得る導関数レベルまで(完全形ベクトル導関数と呼ぶ)を使う, ことである。双 1 次関数では 1 階微分項まで使い, 2 階導関数項はゆがみ項 $u^{(1)}$ のみなので無視する。

ただ, 応力に使わないゆがみ項には適切な処置が必要である。それが共役変数を最小化する, とする制約条件式である。この制約条件は, 共役変数の概念の導入経過からして, 桁落ちを最小化することと同じである。([Appendix-3]参照のこと。)

体積 Locking は, 修正 Helmholtz 分解(*iH-d*)表示法を取り入れることで完全に排除した。([Appendix-4]参照のこと。)

本稿では, 関数項を完全形(ベクトル導関数)とすることで, 応力条件を満たし, 適合条件は適合誤差分散最小の意味で満たす。

粒子法は自由界面問題に適切である。自由界面では渦なしのスクラーパーポテンシャル流が卓越する。

ただ, 水平方向は Dirichlet 境界であり, 渦流を全く無視することはできない。鳴門の渦流れが典型例である。屈曲する河川の, 堤防へ掛かる応力計算には不可欠である。

したがって, 流れ関数 $\psi (= \psi_3)$ を組み込む必要がある。

本稿では, Φ - Ψ 法を示す。かつ, 気・液 2 相流とする。

2. 方法

(1) 直交格子の併用

ここでは自由界面問題を主たる対象とする。自由界面問題は体積の保存が課題である。(固体は一般に自由界面問題であり, この課題を共有している。)

粒子法は質量を 100% 保存するが, 粒子の重なりや, 逆に液相内で疎空間を生じる, などは好ましくない。密度の問題である。

直交格子セルは常に体積一定であるから, セル内の粒子数も一定でなければならない。(気・液 2 相流とする理由でもある。)

そこで, 粒子一直交格子の融合モデルを考え, 近傍粒子のサーチも容易ならしめる。かつ, 将来の表面張力導入⁽²⁾を視野に入れ, 双対直交格子とする。

粒子一直交格子により, 粒子は界面を表す役割を果たす。

密度は正の物理量であり, 指数関数表示する。指数部 r をべき級数とし $\rho = \exp(r)$ で表示する。かつ, 後述のように双対格子で表して平均化する。

今ひとつ, 密度分布を求めることで, 粒子間斥力モデルも質量保存式で表せる, ことを指摘して置く。

(2) 渦なし流れ解法

従来、渦なしポテンシャル流れはラプラス方程式 $\nabla^2\phi=0$ を解く問題とされてきた。

共役変数最小化は、ラプラシアンを目的変数とすれば、その桁落ち誤差を最小化するためである。しかし、相互に桁落ち防止し合うので、共役変数の桁落ち誤差も目的変数で最小化することとなる。

よって、目的関数式と制約条件式は対等であり、渦なし流れは2つの最小化変分式を解いて求める。(渦流れも2変分式を解く。)

力学的には、ラプラス方程式で連続の式を満たし、共役変数式でせん断ひずみを排除する。

流れ関数 ψ で渦度輸送方程式を解く問題は、 ψ のポアソン方程式を解く問題に帰着することは広く知られており、同様である。

渦度の共役変数はせん断ひずみを表す。よって、水平面内の渦度・せん断ひずみいずれも(2変分式を)最小化することで、桁落ち誤差は最小化される。(鉛直面内の渦度・せん断は無視。)

(3) 水平面内渦の解法

流れ関数 ψ 同様、2D モデルでは $\Psi (= \Psi_3)$ が考えられる。

$\langle x-y \rangle$ 2D モデルは、 z 方向は無限に *const.* なモデル化を指す。

Ψ_3 は x 方向、 y 方向の平衡式の応力項に、 z 方向速度の $\langle x-y \rangle$ 面内変化として表れる。

すなわち、2D では $\{\Psi_3^{(000)}\}=0$ と仮定できるが、 $\langle x-y \rangle$ 面内の勾配は在る。よって、鉛直方向を z として水平面内の渦はスカラー Ψ で計算する。 Ψ はフィルター要素で表す。([Appendix-5] 参照のこと。)

(4) 添え字記号と新しい演算子、並びに共役変数

添え字は $(i=1, 2, 3)$ のほか、 $(i+1=2, 3, 1)$ ($i-1=3, 1, 2$) を適用する。すなわち、 $i+2=i-1, i-2=i+1$ である。これにより *curl* などが添え字付きで容易に数式表示できる。また、スカラーを表す(と判定可能な)項は、総和規約による。

$\nabla \mathbf{u}$ の対角項を $\nabla_{diag} \mathbf{u}$ で表し、非対角項を $\nabla_{offd} \mathbf{u}$ で表す。

$\nabla_{curl} \mathbf{u}$ で、回転の成分をベクトル表示する。*curl* $\mathbf{u} : \nabla_{curl} \mathbf{u}$ 同様、せん断ひずみとその成分ベクトルを *shru* : $\nabla_{shru} \mathbf{u}$ で表す。すなわち、それぞれ式(1)および式(2)で表す。

$$curl \mathbf{u} = \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}} - \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}}, \quad \nabla_{curl} \mathbf{u} = \left\{ \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}}, -\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}} \right\}^T \quad (1)$$

$$shru = \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}}, \quad \nabla_{shru} \mathbf{u} = \left\{ \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}}, \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}} \right\}^T \quad (2)$$

$\nabla^2_{diag}, \nabla^2_{offd}, \nabla^2_{curl}, \nabla^2_{shru}$ はいずれもベクトルを表すとする。

本稿ではスカラーにも、 $\{\phi, \phi, \phi\}$ としてベクトル演算子を適用する。(e.g. $div \phi \equiv \phi^{(100)} + \phi^{(010)} + \phi^{(001)}$)

その他、式(3)および式(4)の演算子を定義する。

$$imiu = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}}, \quad \nabla_{imiu} \mathbf{u} = \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}} \right\}^T \quad (3)$$

$$naiu = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}}, \quad \nabla_{naiu} \mathbf{u} = \left\{ \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}}, -\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}} \right\}^T \quad (4)$$

shru と *curl* は互いに共役変数である。*imiu* と *naiu* も互いに共役変数であり、式(5)と式(6)で対応付けられ、意義付けられる。

$$2divu = (u^{(100)} + v^{(010)}) + (v^{(010)} + w^{(001)}) + (w^{(001)} + u^{(100)}) \quad (5)$$

$$(u^{(100)} - v^{(010)}) + (v^{(010)} - w^{(001)}) + (w^{(001)} - u^{(100)}) = 0 \quad (6)$$

$\langle x-y \rangle$ 座標の法線応力と、 $\pi/2$ 回転した $\langle s-n \rangle$ 座標のせん断応力の関係式(7)は力学的に重要な式として知られている。

よって、共役変数 $(u^{(100)}, v^{(010)})$ は、 $\langle s-n \rangle$ 座標のせん断ひずみとして意義付けられる。等方性では式(7)で表される。

$$\sigma_x - \sigma_y = 2\tau_{sn} \quad (7)$$

ラプラシアン $\nabla^2 \mathbf{u}$ の共役変数の、式(8)と式(9)なども調和式を解く上で重要である。

$$2\nabla^2 \mathbf{u} = (u^{(200)} + u^{(020)}) + (u^{(020)} + u^{(002)}) + (u^{(002)} + u^{(200)}) \quad (8)$$

$$(u^{(200)} - u^{(020)}) + (u^{(020)} - u^{(002)}) + (u^{(002)} - u^{(200)}) = 0 \quad (9)$$

共役変数 *shru* : *curl* \mathbf{u} も式(5) : 式(6)や、式(7) : 式(8)同様に、対比して表せば分かり易い。いずれも 2D の和で表される。

(5) 基礎方程式

非圧縮 Navier-Stokes 方程式を式(10)に示し、質量保存式を式(11)に示す。(密度 : ρ , 速度 : \mathbf{U} , 圧力 : P , 粘性係数 : μ)

$$\rho \frac{D\mathbf{U}}{Dt} + \nabla P - \mu(2\nabla^2_{diag} \mathbf{U} + shr^2 \mathbf{U} - \frac{2}{3} \nabla div \mathbf{U}) = 0 \quad (10)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \cdot div \mathbf{U} = 0 \quad (11)$$

ただし、鉛直面内のせん断応力・渦度は無視する。

(6) 不等距離差分による勾配計算法

u_i をパラメータとする例で、不等距離差分法による勾配モデル(3次導関数まで)を Fig.1 に示す。(u_i を u で表す。)

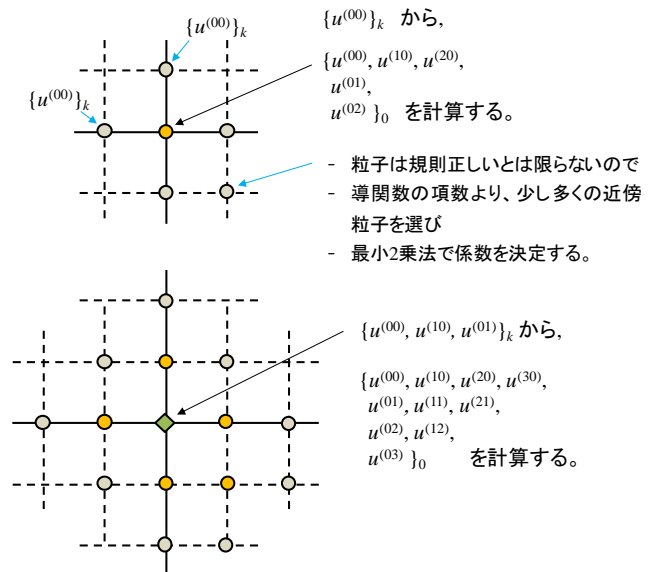


Fig.1 Gradient model by non-equidistant finite difference method

2ステップ計算とし、第1ステップでパラメータ $\{u^{(00)}, u^{(10)}, u^{(01)}\}_k$ のほか、2階のパラメータ $\{u^{(20)}, u^{(02)}\}_0$ を計算する。(不完全2次式。)

第2ステップでは、その結果の $\{u^{(00)}, u^{(10)}, u^{(01)}\}_0$ をノード k の回帰データ $\{u^{(00)}, u^{(10)}, u^{(01)}\}_k$ とし、不等距離差分法は、回帰式を完全3次式として、 $\{u^{(00)}\}_k$ と $\{u^{(10)}, u^{(01)}\}_k$ の残差にそれぞれ、 $1/\Delta t$ と μ の重みを付けて回帰計算する。

桁落ち誤差最小化ステップを入れるのは第1ステップ計算結果に対してである。

計算結果を u^{m-1} とし、増分 Δu で $u^m = u^{m-1} + \Delta u$ で更新する。(線形式では反復回数は1回。)

修正は $\{u^{(20)}, u^{(02)}\}_0$ に対して行う。回帰結果の $\{u^{(11)}\}$ 分布を最小化(排除)するよう式(7)の2階微分形について行う。(座標変換問題。)修正量の計算は式(12)による。

$$\int_{\Omega} [\delta u^{(20)} \cdot \{\Delta u^{(20)} - (\alpha^{(20)} + \beta^{(02)})/2\} + \delta u^{(02)} \cdot \{\Delta u^{(02)} - (\alpha^{(20)} - \beta^{(02)})/2\}] d\Omega = 0, \quad (12)$$

$$\text{where } \int_{\Omega} [\delta \alpha^{(20)} \cdot \{\alpha^{(20)} - (u^{(20)} + u^{(02)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$$\int_{\Omega} [\delta \beta^{(02)} \cdot \{\beta^{(02)} - (u^{(20)} - u^{(02)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

(7) 双対直交格子, 並びにセルの密度表示

双対直交格子は、いわゆる差分法で言うスタッガード格子である。その特性を新たに引き出そうとするものである。

2次関数表示の双対格子を mG と呼び、他方の格子を sG と呼ぶ。両者の役割を交換すれば、 sG のノード周りでも2次関数表示できる。その平均の関数を1/4領域ごと適用する。

その要領を2Dの例で、Fig.2に示す。

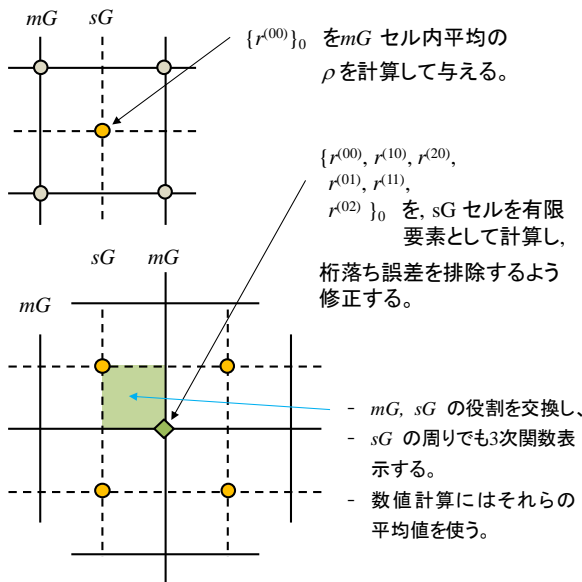


Fig.2 Dual Cartesian grid method

まず mG のノードパラメータ $\{r^{(00)}\}_k$ を、 sG セル内の粒子を集計して平均密度 ρ を計算し、その指数部で設定する。

mG セルの r の関数形を2次式とし、パラメータをFig.1同様、回帰計算と桁落ち排除計算で表示する。

sG セルの r も、役割を交換して計算し、それらの ρ の平均を適用する。

(8) 連続の式の精度向上

$1 \times 1 \times 1$ の体積の右辺を体積率と呼ぶ、こととする。その1からのずれを体積率偏差($divu$)と呼ぶ。(発散と同義。)

MAC (Marker and Cell)法系統のスキームでは、変位レベルの $\nabla \phi$ で体積率偏差をoffsetして、その数値微分で勾配レベルの変数を表す。したがって、体積率偏差は誤差を含む。

本稿では勾配レベル($divu$)で直接offsetする。そのため $\nabla \phi$ の微

分レベルの変数 $\nabla \phi$ で ∇u を揃い上げてoffsetする。

体積 Locking は $iH-d$ 表示して回避した。 $iH-d$ は U^z を $\nabla \psi$ の対角項で定義した。かつ、 U^z を圧縮成分と非圧縮成分に分解し、後方で非圧縮法線ひずみのほか、せん断ひずみ・渦度も表すとした。よって、 $\nabla \phi^{\#} = \nabla_{diag} \psi$ となる。($\nabla \phi = \nabla \phi^C + \nabla \phi^{\#}$ ($\nabla^2 \phi^{\#} = 0$))

なお、圧縮・膨張計算は、当該式に($\nabla \phi^C + \nabla_{diag} \psi$)を代入し、 $\nabla \phi^C$ を変数として解くこととなる。よって、圧縮成分 $\nabla \phi^C$ の計算には非圧縮計算が前提となる。

変位レベルの変数は $\nabla \phi^{\#} = \nabla_{diag} U$ となる。したがって、連続の式は $div \Phi^{\#} = 0$ 。($\nabla \Phi = \nabla \Phi^C + \nabla \Phi^{\#}$ ($div \Phi^{\#} = 0$))

更にひずみレベルの変数は、 $\nabla p^{\#} = 1/3 \nabla div U^{\#}$ となる。

(9) 質量の保存

質量保存式(11)に ρ 分布を代入して $div U$ を計算し、 U を更新する。修正分は粒子を移動する。 $div U$ の計算には、後述のように、桁落ち対策を加える。

指数関数表示の ρ では、式(11)は式(13)を解く問題となる。

$$\frac{Dr}{Dt} + div U = 0 \quad (13)$$

この計算法では、斥力モデルを特に加える必要はない。

MPS法の勾配モデルと、密度指数関数の斥力特性の比較をFig.3に示す。

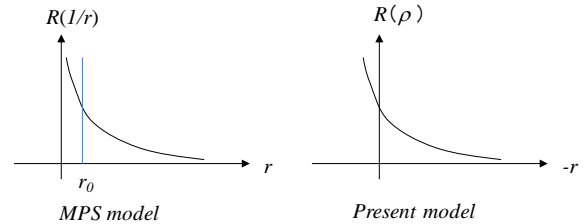


Fig.3 Repulsion by MPS model and by present model

MPSモデルでは、 r は粒子からの距離で、 $r > 0$ 。粒子が粗になれば $r \gg 0$ 。本モデルでは $r \rightarrow -10 \sim -30$ 。

いずれも密になれば従属値の斥力は $R \rightarrow \infty$ 。

(10) Navier-Stokes 方程式計算法

粒子は相(気体、液体、壁材)属性および r 、並びに空間データ $\{x_0, u, U, \nabla u, \nabla U\}$ を保持して移動する。 $(x_0$ は初期座標点。)

時間軸は t の2次式とする。時間ステップ n で変位 u^n 、速度 U^n を保持し、 $n+1$ の u^{n+1} を仮定し、 U^{n+1} を計算する。

ステップ n の $\{\nabla u, \nabla U\}^n$ の数値微分誤差(桁落ち)を後述の方法で計算し、系全体の連立方程式を解いて、 $\{u, U\}^n$ を修正して、圧力勾配 ∇P を計算する。(∇P の初期値は重力項。)

$n \sim n+1$ の加速度をNS方程式で陽的に計算し、変位増分 Δu を計算して $n+1$ の u^{n+1} を修正する。

NS方程式を解くに必要な ρ 分布の修正、それによる質量の保存、および $\{u^n, u^{n+1}\}$ の修正は予め行って置く。

必要に応じて ∇P を再計算し、 u^{n+1} を修正するステップを反復する。次いで、時間ステップ n を進める。

鉛直面内: $\langle y-z \rangle$ 、 $\langle z-x \rangle$ 面内はせん断・回転は無視するとした。ペナルティ係数を液相の粘性係数の10倍、などに設定して気・液両相いづれにも適用する。

後述の、桁落ち誤差の緩和・排除は水平面内同様に行う。

上述ペナルティ法および桁落ち回避対策は、気・液 2 相の数値計算を容易ならしめる。

(11) 桁落ち誤差の修正

U^n の勾配に含まれる数値微分誤差を緩和・排除して、精度高い陽的計算を行う。

NS 方程式の空間微分項を修正して与え、連立方程式を解いて、粒子速度 U^n と変位 u^n を修正するものである。

勾配に含まれる数値微分誤差は式(1)～式(9)に示した共役変数によって検出される。([Appendix-6] 参照のこと。)

検出はフィルター要素による。(別稿³⁾ 参照のこと。)

いずれも式(12)と同じスキームとなるが、念のため、 Ψ と Φ のフィルターのケースで式(14)、式(15)に示す。 $\{\Delta u, \Delta v\}$ が修正量である。($U^m = U^{m-1} + \Delta U_i$)

$$\begin{aligned} \omega \int_{\Omega} [\delta v^{(10)} \cdot \{\Delta v^{(10)} - (\psi^{(01)} + \psi^{(10)})/2\}] \\ + \delta u^{(01)} \cdot \{\Delta u^{(01)} - (\psi^{(01)} - \psi^{(10)})/2\}] d\Omega = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\text{where } \int_{\Omega} [\delta \psi^{(01)} \cdot \{\psi^{(01)} - (v^{(10)} + u^{(01)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$$\int_{\Omega} [\delta \psi^{(10)} \cdot \{\psi^{(10)} - (v^{(10)} - u^{(01)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega} [\delta u^{(10)} \cdot \{\Delta u^{(10)} - (\phi^{(10)} + \phi^{(01)})/2\}] \\ + \delta v^{(01)} \cdot \{\Delta v^{(01)} - (\phi^{(10)} - \phi^{(01)})/2\}] d\Omega = 0, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{where } \int_{\Omega} [\delta \phi^{(10)} \cdot \{\phi^{(10)} - (u^{(10)} + v^{(01)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$$\int_{\Omega} [\delta \phi^{(01)} \cdot \{\phi^{(01)} - (u^{(10)} - v^{(01)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

式(14)の ω は、水平面内には粘性係数 $=\mu$ であるが、垂直面内は気相・液相で一律のペナルティ係数である。

3. まとめと今後の課題

- 直交格子セルの Locking-free 有限要素法を確立した。それにより粒子法の勾配モデルの誘導を発想した。
- 固体で指摘される体積ロッキングは分離解法で解決した。
- Locking-free 法は、座標回転によっても分離解法を堅持する方法であり、せん断ロッキングと体積ロッキング対策は同根であり、方法を共役変数の概念で示した。(Helmholtz 分解は座標回転の 1 技法である。 [Appendix-7] 参照のこと。)
- 数値微分は桁落ちし易い。粒子法勾配モデルの最大の課題であり、その誘導過程での桁落ち排除対策を示した。
- 不等距離差分法を 2 ステップで適用することで、少ない近傍粒子のサーチで済み、直交格子の併用で、更に容易となった。
- 粒子法は自由界面問題に適切であるが、気・液 2 相問題解法として示した。
- 自由界面問題は渦なし流が卓越する。しかし、水平面内は渦流を無視できない。鉛直面内の渦流・せん断流をペナルティ法で offset することで、気・液 2 相計算を構築した。
- 河川堤防への、渦流の影響などの計算には適当な方法であり、今後の課題としたい。

謝辞: Helmholtz 分解の有限要素法への適用の研究に関し、長年慶應義塾大学名誉教授 棚橋隆彦先生にアドバイスを頂いた。記して感謝の意を表します。

[Appendix-1] 数値微分誤差の考察と最小化

数値微分は基本的に差分計算である。ノード A の値 A_x と、ノード B の値 B_x の差を、間隔 h で除すことで得る。 $i.e.; = (A_x - B_x) / h$

関数の局所原点から遠く離れた 2 点では、差演算の桁落ち誤差は大きい。(乗・除算誤差は比較的小さい。)

2 点の値に e_x が加わっていても $i.e.; (A_x + e_x) - (B_x + e_x) >$, 結果は変わらないが、 e_x が桁落ちするからである。

かつ反復計算では、 e_x が増大しない保証はない。

それを食い止めるには、反復計算で局所原点 (local origin) の値が、global origin から離れて行くのを防ぐ他ない。(local origin はノード値で決まる。)

e_x はノード A_x の嵩上げ分 (下駄) であり、 $(A_x + e_x) + (B_x + e_x) \equiv R$ の値を最小化 ($R \rightarrow 0$) することで下駄の値を最小化 $2e_x \rightarrow 0$ して、増大しないよう保つ。($\rightarrow 0$ は最小 2 乗法などによることを表す。)

変分式に表れる $(A_x - B_x)$ を目的変数、 $(A_x + B_x)$ を共役変数と呼ぶものである。

$(A_x + B_x)$ が目的変数の変分式では、 $(A_x - B_x)$ を共役変数と呼ぶ。 e_x の値は予め分らないから、共役変数を最小化する。

[Appendix-2] 圧力ポテンシャル p

圧力 P は法線応力平均として定義され、体積粘性率 $= -2/3\mu$ と置く根拠となっている。圧力は応力であるが、これにより体積率偏差と関係付けられ、圧力ポテンシャル $p = -2/3 \text{div} U$ を考えることができる。

3 重 3 次要素に絞れば、 $\nabla(p + 2/3 \text{div} U) = 0$ の速度はゆがみ項のみとなる。

したがって、残差の共役変数の条件式は $nai p + nai 2/3 \text{div} U = 0$ となる。よって、圧力ポテンシャル p を介して $\nabla \text{div} U = 0$ を数値的に満たすことができる。

[Appendix-3] ポアソン方程式の桁落ち誤差と防止法

ラプラシアン $\nabla^2 \omega = \omega^{(20)} + \omega^{(02)}$ で表されるポアソン方程式の桁落ち誤差は、それぞれの項に桁落ち e が $= (\omega^{(20)} + e) + (\omega^{(02)} - e)$ のように有効桁低下分 (spurious 誤差) として加わっている状態を指す。 e が幾らであっても数値計算は進行する。しかし、 e が 10^{15} などにそれぞれの項で成長すれば計算は破綻 (数値的発散) する。

そこで、 $(\omega^{(20)} + e) - (\omega^{(02)} - e) \Rightarrow 0$ とすることで ($2e \Rightarrow 0$) とする。

すなわち予測値 (仮定値) 段階で $(\omega^{(20)} - \omega^{(02)}) \Rightarrow 0$ を制約条件式とする。($\Rightarrow 0$ は最小 2 乗を表す。)

これは共役変数に桁落ち e' が $(\omega^{(20)} + e') - (\omega^{(02)} + e')$ のように含まれているケースでも同様である。ただし、 $e > 0$, $e' > 0$ 。

したがって、互いの誤差 (残差) を、互いに均等に配分する必要がある。

$\omega^{(20)} - \omega^{(02)}$ を $\pi/2$ 回転すれば $\omega^{(11)}$ となる。よって、ゆがみを最小化することで、桁落ち誤差を最小化する。

[Appendix-4] 修正 Helmholtz 分解 (iH - D)

$1 \times 1 \times 1 = 1$ の体積の右辺を体積率と呼ぶ、こととする。その 1 からのずれを体積率偏差 ($div u$) と呼ぶ。(発散と同義。)

変形後も体積率偏差ゼロが非圧縮で、その偏差が圧縮・膨張である。前者に対応する変位 u^I と、 u^I 変位後の後者を表す変位 u^C

を区別して表す。

Helmholtz の定理は任意のベクトル場 \mathbf{u} を $\mathbf{u}=\mathbf{u}^L+\mathbf{u}^T$ (\mathbf{u}^L :Lateral, \mathbf{u}^T :Lateral) に分解する。

これを $\mathbf{u}=(\mathbf{u}^C+\mathbf{u}^L)+(\mathbf{u}^T)=(\mathbf{u}^L)^C+(\mathbf{u}^L+\mathbf{u}^T)^T$ で表し, $(\mathbf{u}^L)^T$ を $=\nabla_{diag}\psi$ で表す. ($\therefore \nabla_{diag}\psi=\nabla\phi^T$)

$(\mathbf{u}^L)^C=\nabla\phi^C$ を, 単に $\nabla\phi$ で表すとし, $\mathbf{u}=\nabla\phi+\nabla_{diag}\psi+\text{curl}\psi$ で表す方法を修正 Helmholtz 分解 (iH-d) と呼ぶ。

[Appendix-5] 2D のスカラーポテンシャル Ψ

渦流れを対象とする ψ - ω の法は古典的手法として知られる。

ϕ - ψ を変位ポテンシャルと呼べば, Φ - Ψ 法はひずみポテンシャルを用いる方法である。

流れ関数 ψ に対して 2D モデルでは Ψ が考えられる。それぞれ ψ_3 および Ψ_3 を表している。

$\langle x-y \rangle$ 2D モデルは, z 方向は無限に *const.* なモデル化を指す。

Ψ_3 は x 方向, y 方向の平衡式の応力項に, z 方向速度の変化として表れる。

すなわち, 2D では $\{\psi_3^{(00)}\}=0$ と仮定するが, Ψ_3 は z 軸に無関係な $\langle x-y \rangle$ 面内の勾配は存在する。(固体で言う平面ひずみモデルと平面応力モデルの混合モデル。法線方向は前者で, せん断に関しては後者。)

よって, 鉛直方向を z として水平面内の渦はスカラー Ψ で計算する。(3D では Ψ_1, Ψ_2 も同様に計算して, それらの和で表す。)

Ψ と U の違いは, Ψ はひずみベクトル場のポテンシャルであり, 境界条件なしで, 無限遠点でゼロである。

対して U は, 無限に広がる Ψ を, 境界条件を設けて切り取って定義した変位である。単位は同じである。

Ψ は相対量 (勾配) が問題であり, $\psi_3^{(00)}$ の連続性は必ずしも必要ではない。よって, Ψ はフィルター要素で表す。

[Appendix-6] ベクトル場の力学的分解と Helmholtz 分解

Navier-Stokes 方程式 (コーシーの運動方程式) は応力項を法線応力とせん断応力に分解して表す。ニュートン流体では粘性係数を介して, 法線ひずみとせん断ひずみに分解して表わせる。

力学的特性として, 法線ひずみは圧縮性と非圧縮性の両特性を有す。対してせん断ひずみは非圧縮のみである。

せん断ひずみはスカラー u_i の単純せん断の和で定義される。単純せん断の形状は平行四辺形であり, 体積変化はゼロであることによる。

Helmholtz 分解はベクトル場を Lateral 成分と Transverse 成分に分解して表す。前者は圧縮性と非圧縮性の両特性を有し, 後者は非圧縮のみであり, かつ代数的に非圧縮性を満たすことから, ひずみを表すにはたいへん都合よい。

すなわち, ポテンシャル $\nabla\phi$ と $\text{curl}\psi$ で, $\boldsymbol{\varepsilon}=\nabla^2_{diag}\phi, \boldsymbol{\gamma}=\text{shr}(\text{curl}\psi)$ で表わせば都合がよい。

ただし, デカルト座標で成り立つそれら特性は, $\pm\pi/2$ 回転しても成り立たなくては, 一般性はない。

変位ベクトル場 \mathbf{u} も同様であり, $x-y$ 座標上の $\mathbf{u}^L, \mathbf{u}^T$ は, z 軸周りに $\pi/2$ 回転した $s-n$ 座標上では, 2D 表示して,

$$u_s^L = (\varphi^{(10)} + \varphi^{(01)})/\sqrt{2}, \quad v_n^L = (\varphi^{(10)} - \varphi^{(01)})/\sqrt{2}$$

$$u_s^T = (\psi^{(01)} - \psi^{(10)})/\sqrt{2}, \quad v_n^T = (\psi^{(01)} + \psi^{(10)})/\sqrt{2}$$

であり, 適合性 (条件) は $x-y$ 座標系と同等に満たされなければならない。要素間適合条件式は $(\Delta u^L_{sn} \Rightarrow 0), (\Delta u^T_{sn} \Rightarrow 0)$ である。

ひずみベクトル場 $\mathbf{V}=2\boldsymbol{\varepsilon}+\boldsymbol{\gamma}$ は $=2\nabla_{diag}\phi+\text{shr}(\text{curl}\psi)$ で表さ

れる。 $\pi/2$ 回転した $s-n$ 座標上では,

$V_{sn}=2\nabla_{diag}u^L_{sn}+\text{shr}u^T_{sn}$ であり, u^L_{sn}, u^T_{sn} にはそれぞれ $\pi/2$ 回転したポテンシャル表示形を代入して表せる。

すなわち, $V_{sn}=2\text{imi}nai\phi+\text{shr}^2\psi$ であり, $(\partial/\partial x+\partial/\partial y)nai\phi=nai^2\phi$ に留意すれば, $=2nai^2\phi+\text{shr}^2\psi$ である。

平衡式の応力項 $\mu(2\nabla^2_{diag}u^L+\text{shr}^2u^T-2/3\nabla\text{div}u^L)$ は $\nabla\text{div}u^L$ を作用させて, $\mu(\nabla^2u+1/3\nabla\text{div}u)$ に変形でき, 更に $\mu(-\text{curl}u+4/3\nabla\text{div}u)$ に変形可能なことは広く知られている。 (u^T) に着目して順に, せん断形, ラブラシアン形, 回転形, と呼ぶ。

ただ, それらを恒等式と呼ぶ書籍もあるが, Helmholtz 分解の観点からは, 非圧縮成分に限られることは明らかであろう。

かつ, 座標回転して表した 3 式であり, $\nabla\text{div}u$ は回転作用素である。

よって, いずれの式でも平衡式を満たさなくてはならない。特にせん断形と回転形は, 互いに $\pi/2$ 回転した座標上の表示形であり, 両式を数値的 (最小 2 乗的) に満たす必要がある。

u^L に着目すれば, $\text{imi}u^L$ 表示項と, $\text{nai}u^L$ 表示項の適合条件を満たさなければならない点と, 同様の応力項の平衡条件を満たさなければならない点は, 従来になく指摘である。

∇u の対角項を, $\text{imi}u+\text{nai}u$ に和分解して, それぞれの項で平衡条件を満たすべし, とするものである。

上述は桁落ち (spurious) 誤差の緩和・排除の観点からも説明でき, かつ要求される。

[Appendix-7] 多方向有限要素法

共役変数は $\pi/2$ 回転座標系の表示式である。概念は, 桑原邦郎氏が提案した多方向差分法に同じ, と考えている。

正方キャビティの例では, Fig.a の幾何学的に $\langle s-n \rangle$ 座標系の要素関数を, $\pi/2$ 回転した $\langle x-y \rangle$ 座標系で表示して解くことと同じである。

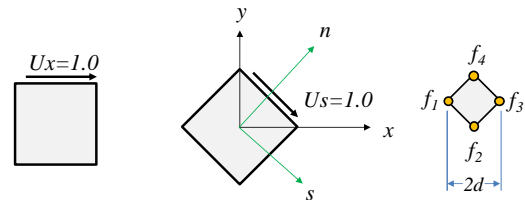


Fig.a Bench-mark test problem

すなわち, 要素関数式(a)の連立方程式 $[A]\{U_{sn}\}=\{B_{sn}\}$ と要素関数式(b)の連立方程式 $[A_{sn}]\{U_{xy}\}=\{B_{xy}\}$ の和の連立方程式を解くことと同じである。

$$\left. \begin{aligned} u &= u_0^{(00)} + u_0^{(10)}x + u_0^{(01)}y + u_0^{(11)}xy \\ v &= v_0^{(00)} + v_0^{(10)}x + v_0^{(01)}y + v_0^{(11)}xy \end{aligned} \right\} \quad (a)$$

$$\left. \begin{aligned} u &= u_0^{(00)} + u_0^{(10)}x + u_0^{(01)}y + u_0^{(20)}\frac{x^2}{2} + u_0^{(02)}\frac{y^2}{2} \\ v &= v_0^{(00)} + v_0^{(10)}x + v_0^{(01)}y + v_0^{(20)}\frac{x^2}{2} + v_0^{(02)}\frac{y^2}{2} \end{aligned} \right\} \quad (b)$$

式(b)の係数項の導関数は, 式(c)でノードパラメータ表示する。ただし, $2d$ は正方要素の対角線長さである。

$$\left. \begin{aligned} f_0^{(00)} &= \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4}{4} \\ f_0^{(10)} &= \frac{f_3 - f_1}{2d} \\ f_0^{(01)} &= \frac{f_4 - f_2}{2d} \\ f_0^{(20)} &= \frac{f_3 - (f_2 + f_4)/2 + f_1}{d^2} \\ f_0^{(02)} &= \frac{f_4 - (f_1 + f_3)/2 + f_2}{d^2} \end{aligned} \right\} \quad (c)$$

参考文献

- (1) 今村, "修正 Helmholtz 分解要素を用いる Locking-free FEM, " 日本流体力学学会年會 2019 論文集, (2019).
- (2) 今村, "修正 Helmholtz 分解の提案およびその有限要素, 並びに流体・固体への適用", 計算工学講演會論文集, vol.22, (2017), F-06-2.
- (3) 今村, "Helmholtz 分解に基づく有限フィルター要素を用いる直交格子法, " 第 33 回数值流体力学シンポジウム論文集, 講演番号 D12-5, (2019).