

共役変数を介する数値微分桁落ち誤差最小化と ψ - ω 法への適用例, 並びに Ψ - U 法のコンセプト

Minimization of cancellation of significant digits in numerical differentiation using conjugate variables: an application for ψ - ω method, and a concept of Ψ - U 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

Considering numerical differentiation falls in the digits, this study proposes an exclusion method to minimize the cancellation of significant digits in numerical derivatives and verifies the bench-mark test problem, i.e., ψ - ω method for the forced cavity problem, which can be compared and validated. A conjugate variable concept was introduced to represent a pair of variables (A+B) and (A-B). Cancellations digits e_1 and e_2 entered into the conjugate variables in the form (A+ e_1)+(B- e_1) and (A+ e_2)-(B+ e_2). Subsequently, a concept Ψ - U method, where Ψ was the strain potential, was shown during the course of this study.

1. 目的と背景

数値微分は桁落ちし易い。本稿の目的は微分方程式を解くに当たり、避けて通れない数値微分誤差の緩和法を示すことにあり、2D キャビティを ψ - ω 法で解く方法に適用して、検証例を示すことにある。次いで、3D へ拡張し易い Ψ - U 法を示す。

四辺形要素・六面体要素に特有の、せん断ロックが表われる原因は要素関数にゆがみ項が含まれるため、としてその緩和法を示した。(1)

ポアソン方程式はスカラー ϕ のケースでも、2D で 2 項の微分項を含み、3D では 3 項の微分項を含む。微分項はベクトル $\nabla\phi$ の成分であり、ポアソン方程式は自由度数が項数分ある。

したがって、その自由度数に相当する条件式・制約式で解くことが望ましい。

一般には境界から追って、条件数不足による spurious 誤差がなるべく集積しないよう(理想は精度保証付き解法)にして、ポアソン方程式のみで解く。([Appendix-1] 参照のこと。)

その典型例として 2 重にラプラシアンが表れる ψ - ω 法が挙げられる。かつ、変数が最も少ないベンチマークテスト問題として 2D 強制キャビティがあり、Ghia らによる数値計算例(2)が比較データとしても在る。

Ghia らは差分法を適用し、Multigrid Method と呼び、境界で ψ -grid の対称性を利用して ω -grid に境界値を与え、 ψ, ω いずれもポアソン方程式のみで解いており、上述の論理では条件式数不足である。

すなわちラプラシアンは数値微分によるが、数値微分は桁落ちし易いので、それに対する工夫が必要である。

つまりは、自由度数に見合った条件式数で解くことが工夫であり、spurious 誤差を緩和する対策である。

2D モデルの変数は ψ, ω であり、いずれもスカラーで、連続の式は代数的に満たし、検証する点は、上述の条件式数を加えて桁落ちを抑え得るか、否かに絞られる。

Ghia らは Re 数 1×10^4 の流れ場に 257×257 GRIDS を要している。それを、もっと少ない格子数で解ければ、上述の主張が検証されたこととなる。

既報(1)では、応力項に対する対策と、適合性に対する対策を施す Locking-free 有限要素法を示した。

適合性に対する工夫は上述の条件式数対策であり、共役(共軛)

変数の概念を導入して説明した。([Appendix-2] 参照のこと。)
本稿での対策も同様に共役変数で説明できる。

2. ψ - ω 法の考察, 並びに共役変数

(1) 問題設定

流れ関数式(1)と渦度輸送方程式(2)を反復計算して解く問題設定であり、古典的な ψ - ω 法として概念は確立されている。 (ω) の符号の定義に留意。)

$$\nabla^2 \psi - \omega = 0 \quad (1)$$

$$\frac{D\omega}{Dt} - \frac{1}{Re} \nabla^2 \omega = 0 \quad (2)$$

(2) 添え字記号と新しい演算子

本稿の議論は 3D へも拡張できなければ、流れ場計算では無意味であることから、記号はベクトルのケースで定義する。

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。

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

$\nabla_{curl} \mathbf{u}$ で、回転の成分をベクトル表示する。curl: $\nabla_{curl} \mathbf{u}$ 同様、せん断ひずみとその成分ベクトルを $shru: \nabla_{shr} \mathbf{u}$ で表す。すなわち、それぞれ式(3)および式(4)で表す。

$$curl \mathbf{u} = \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}} - \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}}, \quad \nabla_{curl} \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} \partial u_{i-1} / \partial x_{i+1} \\ -\partial u_{i+1} / \partial x_{i-1} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

$$shru = \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}}, \quad \nabla_{shr} \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} \partial u_{i-1} / \partial x_{i+1} \\ \partial u_{i+1} / \partial x_{i-1} \end{Bmatrix} \quad (4)$$

$\nabla_{diag}^2, \nabla_{off}^2, \nabla_{curl}^2, \nabla_{shr}^2$ 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(5)および式(6)の演算子を定義する。

$$imi \mathbf{u} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}}, \quad \nabla_{imi} \mathbf{u} = \begin{Bmatrix} \partial u_i / \partial x_i \\ \partial u_{i+1} / \partial x_{i+1} \end{Bmatrix} \quad (5)$$

$$nai\mathbf{u} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}}, \quad \nabla_{nai}\mathbf{u} = \begin{Bmatrix} \partial u_i / \partial x_i \\ -\partial u_{i+1} / \partial x_{i+1} \end{Bmatrix} \quad (6)$$

2D では $(i=1,2), (i+1=2,1), (i-1=2,1)$ かつ $(i+1=i-1)$ となる。また、 ψ - ω 法ではスカラーへのベクトル演算子の適用となる。

本稿で使う共役変数は $(curl\psi: shrv)$ の対、および $(curl\omega: shro)$ の対であり、3D では $(imi\psi: nai\psi)$ も適用する。

(3) ポアソン方程式解法の課題と対処法

式(1), 式(2) いずれもポアソン方程式を解く問題である。

既報⁽¹⁾では、その数値計算上の桁落ち誤差(spurious 誤差)の原因を次のように指摘している。

$\nabla^2\omega = \omega^{(20)} + \omega^{(02)}$ も 2 自由度で表されが、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、 $e > 0, e' > 0$ 。

$\nabla^2\psi = \psi^{(20)} + \psi^{(02)}$ も全く同様であり、共役変数の最小化式を制約条件とする必要がある。

したがって互いの誤差(残差)を、互いに最小化する必要がある。

(4) 制約条件式の考察

ラプラシアン $\nabla^2\psi$ は、数式的にスカラーポテンシャルの $\nabla^2\varphi$ と区別できない。 $\nabla\varphi$ は Transverse 成分から排除する必要がある。

すなわち $\nabla^2\psi=0$ が要求されるが、これは式(1)の要求に反する。

その解釈を、 $\nabla^2\psi=0$ の要求は共役変数 $(\psi^{(20)}+e')-(\psi^{(02)}+e')$ の桁落ち e' を offset(相殺)するため、とする。

よって式(1)を解くことは、 $\nabla^2\psi-(\omega-2e')=0$ を解くことに等しい。

$(\psi^{(20)}+e)+(\psi^{(02)}-e)$ の桁落ち e は、 $(\psi^{(20)}+e)-(\psi^{(02)}-e) \Rightarrow 0$ を満たすことで offset する。これは数式的に $(\varphi^{(20)}+e)-(\varphi^{(02)}-e) \Rightarrow 0$ を解くことに等しい。

$\varphi^{(20)}-\varphi^{(02)}$ 或いは $\psi^{(20)}-\psi^{(02)}$ は、直交座標(x-y)系を $\pi/2$ 回転した (s-n) 座標系の、ゆがみ項 $2\varphi^{(11)}, 2\psi^{(11)}$ に等しい。

$\varphi^{(20)}-\varphi^{(02)}$ をひずみで表せば式(7)となる。

$$\varepsilon_x - \varepsilon_y = 2\gamma_{sn} \quad (7)$$

その応力の関係式(8)は広く知られている。

$$\sigma_x - \sigma_y = 2\tau_{sn} \quad (8)$$

したがって、 $(\psi^{(20)}+e)-(\psi^{(02)}-e) \Rightarrow 0$ の e と、(s-n) 座標系の $\psi^{(11)}$ との等式 $\psi^{(11)}=e$ が成り立つ。かつ、双 1 次要素では $\psi^{(11)}=const.$

そこで、 $(\psi^{(20)}+e)-(\psi^{(02)}-e) \Rightarrow 0$ の e に式(1)の解結果の $\psi^{(11)}$ を代入して解く。

次いでその解の 1/2 を式(1)の解に加えることで、桁落ちを緩和・排除する。

つまり、 $\nabla^2\psi=0$ と $\psi^{(20)}-\psi^{(02)}=0$ を同時に満たす平均的な ψ を、式(1)の ψ 変数として解くことに等しい。

(5) 数値計算法

式(1)を制約条件付きの式(10)とし、式(2)を同様に制約条件付き

の式(11)として解く。

$$\nabla^2\psi - \omega = 0 \quad (nai^2\psi = 0) \quad (10)$$

$$\frac{D\omega}{Dt} - \frac{1}{Re}\nabla^2\omega = 0 \quad (nai^2\omega = 0) \quad (11)$$

境界条件処理は Ghia らの方法を採り、対称条件を入れて ψ の壁面法線方向 2 階微分を計算し、 ω の境界値とする。

ただし、移動壁の移動速度=1.0 の与え方は多少異なる。Ghia らは法線方向 3 次差分式で与えている。

本稿では、他の壁面同様、移動壁も対称条件を入れた ω は与える。よって、第 1 ノードはパラメータとなる。

移動速度=1.0 は移動壁面に接するセルに、既報⁽⁹⁾の 3 重 3 次の C' 連続要素を、固定値として加える方法で与える。

C' 連続要素のパラメータは、壁面上の法線方向勾配 $\{\psi^{(01)}\}_k$ 以外はすべてゼロである。よって、法線方向のみ 3 次であることは、Ghia らと同じである。かつ、内部変動を境界要素に反映するパラメータが在るのも同じである。

異なるのは、移動壁両隣の要素である。本稿では移動壁に沿って $0 \rightarrow 1.0$ に 3 次式で変化する。かつ、その勾配は両端でゼロであり、忠実なモデル化として、解精度を高め得る。

時間ステップ ($n=0,1,2,3,\dots$) 計算と、非線形式なので時間ステップ内での反復 ($m=0,1,2,3,\dots$) 計算を要す。いずれも 0 ステップは初期値設定のステップである。

式(10)の計算式を式(12)に、式(11)の計算式を式(13)に示す。

$\{\xi, \zeta, \{\alpha, \beta\}$ はそれぞれ ψ, ω と同形状の要素であるが、ノードのひとつを $=0$ に固定し、残りの 3 ノードは自由とする。局所で用いる作業用要素である。 ([Appendix-3] 参照のこと。)

式(13)の移流項は上流化し、局所加速度項には更にペナルティ項を加える。

$$\int_{\Omega} [\delta\psi^{(10)} \cdot \{\Delta\psi^{(10)} - (\xi + \zeta)/2\} + \delta\psi^{(01)} \cdot \{\Delta\psi^{(01)} - (\xi - \zeta)/2\} + \delta\psi^{(00)} \cdot \omega^{(00)}] d\Omega = 0, \quad (12)$$

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

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

$$\int_{\Omega} [\delta\omega^{(10)} \cdot \frac{1}{Re} \{\Delta\omega^{(10)} - (\alpha + \beta)/2\} + \delta\omega^{(01)} \cdot \frac{1}{Re} \{\Delta\omega^{(01)} - (\alpha - \beta)/2\} + \delta\omega^{(00)} \cdot \frac{D\omega}{Dt}] d\Omega = 0, \quad (13)$$

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

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

局所加速度項に加えるペナルティ項を式(14)に示す。

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} [\delta\omega^{(00)} \cdot \omega^{(00)} + \delta\omega^{(01)} \cdot \psi^{(01)} + \delta\omega^{(10)} \cdot \psi^{(10)}] d\Omega = 0 \quad (14)$$

解法は陽解法とする。ただし、連立方程式は解く必要がある。

3. Ψ -U 法

(1) Helmholtz 分解における共役変数

ψ - ω 法は非適合要素法である。境界条件(値)は変位で与える (Neumann 境界値は従属的に決まる)ので、変位要素は取り扱い易

い。

また、 ψ - ω 法は *Transverse* 成分のみ対象とし、*Lateral* 成分は無視する。したがって、圧力を与えて流れ場を解く風洞などは扱えない。 U 要素法では両者を含んで表せる。i.e., $U=U^L+U^T$ 。

そこで、Helmholtz 分解特性を速度要素 U に反映させる Ψ - U 法 の概念を示す。

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。ディメンジョンは同じである。

2D では流れ関数 ψ 同様、スカラー Ψ となる。 $\psi \equiv \psi_3$, $\Psi \equiv \Psi_3$ であり、3D では Ψ_1, Ψ_2 も同様に計算して、それらの和で表す。

なお、 Ψ_3 は x 方向、 y 方向の平衡式には、 z 方向速度として顕れる。2D モデルとは z 方向に無限に $\Psi_3 = \text{const.}$ と仮定するモデルを指す。

よって、 $\{\psi_3^{(00)}\} = 0$ とするが、 Ψ_3 の $\langle x-y \rangle$ 面内勾配は z 軸に無関係な導関数として存在する。(固体で言う平面ひずみモデルと平面応力モデルの混合条件のモデル。)

Ψ - U 法の桁落ち誤差を防ぐための共役変数は、式(15)のとおりである。(2D で例示。)

以下では、変位は u 、速度は U で表すが、いずれも $\{u,v,w\}$ でも表すとする。

| 目的変数 | 共役変数 | |
|---|---|---|
| $\gamma: \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}$ | $\omega: \frac{\partial \Psi_1}{\partial y} - \frac{\partial \Psi_2}{\partial x}$ | } |
| $\theta: \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}$ | $naiu: \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y}$ | |
| $imiP: \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial y}$ | $naiP: \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y}$ | |

(15)

φ と P は空間的に同様な働きをする。ただし P は応力で、変位はない。かつ、 φ は $1/\Delta t$ の重み付きでの働きとなる。

MAC (Marker and Cell)法系統のスキームは φ のポアソン方程式で連続の式残差を offset (相殺) するが、高次の数値微分は桁落ちし易い。

そこで、より低次の微分階数で対応できるひずみポテンシャル ϕ や、圧力ポテンシャル $p (= -1/3 \text{div} U)$ を適用する。([Appendix-4] 参照のこと。)

(2) 数値計算スキーム

問題設定は、式(16)~式(18)の3式を均等に解くことである。

$$\frac{DU}{Dt} + \nabla \frac{P}{\rho} - \frac{1}{Re} (2\nabla_{diag}^2 + shr^2) U = 0 \quad (16)$$

$$\frac{DU}{Dt} + \nabla \frac{P}{\rho} - \frac{1}{Re} \nabla^2 U = 0 \quad (17)$$

$$\frac{DU}{Dt} + \nabla \frac{P}{\rho} + \frac{1}{Re} \text{curl}^2 U = 0 \quad (18)$$

制約条件として連続の式、およびその共役変数の最小化式を付帯する。([Appendix-5] 参照のこと。)

$\Psi^{(00)}$ の連続性は必ずしも必要ではない。そこで、前述の $\{\alpha, \beta\}$ 作業用要素同様に適用する。付帯条件も同様に、それぞれ $\{\xi, \zeta\}$ 要素を介する。

すなわち、 P も含めてポテンシャル $\{P, \phi, \Psi\}$ は勾配のみ必要

で、要素間の連続性は必ずしも必要としない。よって、いずれも上述のように作業要素として適用する。

かつ、必要に応じて連続要素として、連立方程式を解いて求める。

ここでの目的の、その①は式(16)~式(18)を満たして桁落ちを防ぐほか、その②は ∇U に含まれる連続の式残差 $\text{div} U$ を ϕ 要素を介して直接 offset することにある。

U は局所加速度、移流速度に表れるが、 ∇U は移流項の勾配とせん断ひずみに表れる。②は同じ微分レベルで非圧縮性を満たして置くべしとするものである。

4. ベンチマークテスト問題

共役変数は $\pi/2$ 回転座標系の表示式であることを述べた。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。

有限要素法では、Fig.1 の幾何学的には $\langle s-n \rangle$ 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。

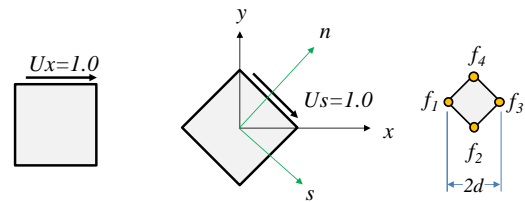


Fig.1 Bench-mark test problem

すなわち、要素関数式(19)の連立方程式 $[A]\{U_{xy}\} = \{B_{xy}\}$ と要素関数式(20)の連立方程式 $[A_{sn}]\{U_{xy}\} = \{B_{sn}\}$ の和の連立方程式を解くことと同じである。

$$\left. \begin{aligned} u &= u_0^{(00)} + u_0^{(10)}x + u_0^{(01)}y + u_0^{(11)}xy \\ v &= v_0^{(00)} + v_0^{(10)}x + v_0^{(01)}y + v_0^{(11)}xy \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

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

式(20)の係数項の導関数は、式(21)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。

$$\left. \begin{aligned} f_0^{(00)} &= \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4}{4} \\ f_0^{(10)} &= \frac{f_3 - f_1}{2d} \\ f_0^{(01)} &= \frac{f_4 - f_2}{2d} \\ f_0^{(20)} &= \frac{f_3 - (f_2 + f_4)/2 + f_1}{d^2} \\ f_0^{(02)} &= \frac{f_4 - (f_1 + f_3)/2 + f_2}{d^2} \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

5. まとめと今後の課題

- 数値微分は桁落ちし易く、微分方程式を解くには桁落ち対策が必要なことを指摘し、共役変数の最小化法を示した。
- 連続の式を変位 u と同じレベルの変数 ϕ で満たして、NS 方程式の勾配項に適用する方法で、 φ の数値微分適用を避け方法を示した。
- 桁落ちの原因は、微分方程式項の自由度に対する条件式数不足であることを最初に指摘した。
- よって、幾つかの座標回転した系で解く必要があり、共役変数は2つの回転座標系で解くことに等しい。
- 一般には座標回転なしで、せん断形 NS 方程式を解く。したがって、 $\nabla \text{div} U = 0$ が回転形 NS 方程式の桁落ち防止の役割を

代替すると推測する。ただ、 $\nabla \text{div} \mathbf{U} = 0$ を代数的に満たす流れ関数で、桁落ち防止が必要な論理は説明できない。今後の検討課題である。

- 既報では多方向有限要素法も示した。解が座標系に拠らないよう、 $\pi/2$ 回転した座標軸でも解いて平均値を探る。その方法も条件式数を増やす方法として説明できる。
- 2D 強制キャビティで検証する必要がある。並行して検証すべきベンチマークテスト問題を示した。
- 考え方を延長し、 Ψ - U 法のコンセプトを示した。

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] Helmholtz の定理の考察

数学ハンドブック(丸善)によれば、任意のベクトル場 \mathbf{V} は一般にスカラーポテンシャル ϕ とベクトルポテンシャル $\boldsymbol{\psi}$ によって

$$\mathbf{V} = \nabla\phi + \text{curl}\boldsymbol{\psi} \quad (\text{div}\boldsymbol{\psi} = 0)$$

$$\phi = -\iiint_V \frac{\text{div}\mathbf{V}}{4\pi r} dV, \quad \boldsymbol{\psi} = \iiint_V \frac{\text{curl}\mathbf{V}}{4\pi r} dV$$

のごとく表される。

この分解法は $\text{curl}\nabla\phi = 0, \text{div}(\text{curl}\boldsymbol{\psi}) = 0$ が代数的に満たされるよう選んでいる。

デカルト座標で表し、座標回転すれば、回転や発散は必ずしも $=0$ とはならない。

$\nabla\boldsymbol{\psi}$ の和分解形は対称テンソルと反対称テンソルより成る。後者が Helmholtz 分解形の Transverse 成分に充てられている。

z 軸を法線とする平面内のスカラー ψ_3 の単純せん断; $\partial\psi_3/\partial y$ と $\partial\psi_3/\partial x$ の和を $-\pi/2$ 回転した y 軸への投影量が Helmholtz 表示形であり、 $\pi/2$ 回転した y 軸への投影量の回転や発散は必ずしも $=0$ とはならない、ことを指す。(対称テンソルの非対角項。)

変位 \mathbf{u} の微分式 $f = \nabla \text{div} \mathbf{u} + \text{div}(\text{curl} \mathbf{u})$ は $\nabla \text{div} \mathbf{u}$ を作用させれば、ラプラシアン形やせん断形に変形できる。 \mathbf{u} に $\boldsymbol{\psi}$ を代入しても同様である。よって $\boldsymbol{\psi}$ をせん断形表示すれば、作用変数 $\text{div}\boldsymbol{\psi}$ には $\text{curl}\boldsymbol{\psi}$ 表示形を保証する特性が要求される。それが Coulomb ゲージと解釈する。原始変数法では連続の式である。

[Appendix-2] 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 k で除すことで得る。i.e.; $(A_x - B_x)/k$

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 ϵ_x が加わっていても $\langle i.e.; (A_x + \epsilon_x) - (B_x + \epsilon_x) \rangle$, 結果は変わらないが、 ϵ_x が桁落ちするからである。

かつ反復計算では、 ϵ_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。)

ϵ_x はノード A_x の嵩上げ分(下駄)であり、 $(A_x + \epsilon_x) + (B_x + \epsilon_x) \equiv R$ の値を最小化 ($R \rightarrow 0$) することで下駄の値を最小化 $2\epsilon_x \rightarrow 0$ 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。 ϵ_x の値は予め分らないから、共役変数を最小化する。

[Appendix-3] 桁落ち誤差の最小化

スカラーの勾配 ∇f の数値微分の桁落ち誤差 e を、 $=\{u, v\}$ の適合誤差で考える。

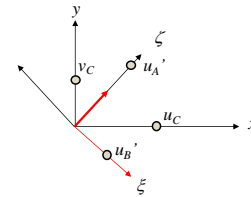
$\langle x-y \rangle 2D$ の変位を $\{u, v\}$, θ 回転した変位を $\{u', v'\}$ とし、 $\theta_A = \pi/2$ 回転変位を $\{u', v'\}_A$, $\theta_B = -\pi/2$ 回転変位を $\{u', v'\}_B$ で表す。

変位に誤差 e が $\{u+e_A, v+e_A\}, \{u+e_B, v+e_B\}$ の 2 パターンで混入していたとする。ただし、 $e_A > 0, e_B > 0$ 。

任意の誤差 e は e_A と e_B の和と差の組み合わせで表わせる。

$u' = \{\cos\theta, \sin\theta\} \cdot \{u, v\}^T, v' = \{-\sin\theta, \cos\theta\} \cdot \{u, v\}^T$ であるから、 e_A は $\{u', v'\}_A$ では u' 値でしか検出されず、 v' では相殺される。 e_B は $\{u', v'\}_B$ で同様である。

u'_B, u'_A は直交しているから、直交座標 $\langle \xi - \zeta \rangle$ 上のパラメータ $\{\xi, \zeta\}$ との差を最小化 ($\xi - u'_B \Rightarrow 0, \zeta - u'_A \Rightarrow 0$) することで、桁落ち誤差も最小化 ($2e_B \Rightarrow 0, 2e_A \Rightarrow 0$) する。



すなわち、 $(\xi - (u-v) \Rightarrow 0), (\zeta - (u+v) \Rightarrow 0)$ を計算する。

次いで、 $\{\xi, \zeta\}$ を $\langle x-y \rangle$ 座標で表した $\{u, v\}_c$ と、元の $\{u, v\}$ との差を最小化 $(u - (\xi + \zeta)/2 \Rightarrow 0), (v - (\xi - \zeta)/2 \Rightarrow 0)$ することで、桁落ち誤差を緩和・排除する。

すなわち、 $(f^{(10)} - (\xi + \zeta)/2 \Rightarrow 0), (f^{(01)} - (\xi - \zeta)/2 \Rightarrow 0)$ で計算する。

$\alpha^{(10)} + \alpha^{(01)} \equiv (u+v), \beta^{(10)} + \beta^{(01)} \equiv (u-v)$ と置いて、 $\{\alpha, \beta\}$ 要素をそれぞれ f 要素から計算する。ただし、 $\{\alpha, \beta\}$ 要素それぞれノードのひとつは固定する。

よって、スカラー f 要素から桁落ち誤差を最小化した f 要素の数値微分値 ∇f は、 $f^{(10)} = (\alpha + \beta)^{(10)}, f^{(01)} = (\alpha - \beta)^{(01)}$ の右辺を適用することで得る。

$\{\alpha, \beta\}$ 要素は、適合誤差最小、かつ桁落ち誤差最小のフィルターの役割を果たしている。

流れ関数 $\boldsymbol{\psi}$ のケースでも、単なるスカラーの数値微分誤差 $f \equiv \boldsymbol{\psi}$ で考える。

ラプラシアン $\nabla^2 f$ ($\equiv \text{im}^2 f$) の数値微分では、 $na^2 f \equiv f^{(20)} - f^{(02)}$ を共役変数として、 $u \equiv f^{(20)}, v \equiv f^{(02)}$ にそれぞれ 2 パターンの誤差 e が含まれるとして考える。

$\alpha : (f^{(20)} + f^{(02)}), \beta : (f^{(20)} - f^{(02)})$ をフィルターとして、同様に桁落ち誤差を最小化する。

[Appendix-4] 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 $p = -2/3 \text{div} \mathbf{U}$ を考えることができる。

3 重 3 次要素に絞れば、 $\nabla(p + 2/3 \text{div} \mathbf{U}) = 0$ 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 $naip + nai 2/3 \text{div} \mathbf{U} = 0$ となる。よって、圧力ポテンシャル p を介して $\nabla \text{div} \mathbf{U} = 0$ を数値的に満たすことができる。

[Appendix-5] 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、 $\boldsymbol{\varepsilon}=\nabla^2_{\text{diag}}\phi, \boldsymbol{\gamma}=\text{shr}(\text{curl}\psi)$ で表わせれば都合がよい。

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、

$$\begin{aligned} u_s^L &= (\varphi^{(10)} + \varphi^{(01)})/\sqrt{2}, & v_n^L &= (\varphi^{(10)} - \varphi^{(01)})/\sqrt{2} \\ u_s^T &= (\psi^{(01)} - \psi^{(10)})/\sqrt{2}, & v_n^T &= (\psi^{(01)} + \psi^{(10)})/\sqrt{2} \end{aligned}$$

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ぬ。要素間適合条件式は $(\Delta \mathbf{u}^L_{,sn} \Rightarrow 0)$ 、 $(\Delta \mathbf{u}^T_{,sn} \Rightarrow 0)$ である。

ひずみベクトル場 $\mathbf{V}=2\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\gamma}$ は $=2\nabla_{\text{ini}}\nabla\phi + \text{shr}(\text{curl}\psi)$ で表される。 $\pi/2$ 回転した s - n 座標上では、

$\mathbf{V}_{sn}=2\nabla_{\text{ini}} \mathbf{u}^L_{sn} + \text{shr} \mathbf{u}^T_{sn}$ であり、 $\mathbf{u}^L_{sn}, \mathbf{u}^T_{sn}$ 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、 $\mathbf{V}_{sn}=2\text{imi} \text{nai}\phi + \text{shr}^2\psi$ であり、 $(\partial/\partial x + \partial/\partial y)\text{nai}\phi = \text{nai}^2\phi$ に留意すれば、 $=2\text{nai}^2\phi + \text{shr}^2\psi$ である。

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

\mathbf{u}^L に着目すれば、 imiu^L 表示項と、 naiu^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、従来にない指摘である。

$\nabla\mathbf{u}$ の対角項を、 $\text{imiu} + \text{naiu}$ 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。

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) U.Ghia, K.N.Ghia and C.T.Shin "High-Re Solutions for Incompressible Flow using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method", Journal of Computational Physics 48, (1982), pp387-411.
- (3) 今村, "ベクトルポテンシャルによる非圧縮流れ場の数値解法," 第 32 回数値流体力学シンポジウム論文集, 講演番号 C09-2, (2018).