非圧縮粘性流への精度保証付きソルバの開発

Development of incompressible viscous flow solver with guaranteed accuracy.

○ 熊畑 清, 北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科, 〒 923-1292 石川県辰口町旭台 1-1,k_kuma@jaist.ac.jp
松澤 輝男, 北陸先端科学技術大学院大学情報科学センター, 〒 923-1292 石川県辰口町旭台 1-1,matuzawa@jaist.ac.jp
Kiyoshi KUMAHATA, School of Information Science.,JAIST, Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN
Teruo MATSUZAWA, Center for Iinformation Science.,JAIST, Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN

In usual, a very large computaion efforts was needed to evaluation of the numerical solutions. In recent years, however ,It had been becoming clear that verification for computaion results is possible in practical time, therefore a quantitiative discussion for accuracy of numerical simulation results has been becoming possible. We attempt to posteriori error estimation for pressure Poisson equation with Numerical Verification Methods for Elliptic Problem proposed by Nakao.

1. はじめに

流体解析に限らず，電磁場解析や構造解析など連続系のシミュレーションでは，高精度な解を得るために，より高い精度のスキーム・より細かいメッシュの使用が推奨されるが，そのようにして得られた近似解の精度に関しては，あまり顧みられることはなく，多くの場合，偏微分方程式に基づく連続系のシミュレーションでは，解析結果の精度に関して，用いたスキームのオーダーレベルの誤差評価や解析者の持つノウハウによる検討がなされてきた感がある.

これは従来，数値計算結果により得られた近似解の精度を検証するには目的とする計算それ自体に要求される計算量と比して，検証に必要な計算量は膨大なものとなると考えられてきたという背景があるためと思われる．しかし近年，現実的な計算量で数値計算の結果の検証を行えることが明らかとなるにつれ、計算結果の精度を定量的にとらえることが可能となりつつある。

このような数値計算結果の検証を行う方法は精度保証付き数値計算 (numerical methods with guaranteed accuracy)、あるいは数値的検証法 (numerical verification method) と呼ばれ、連立一次方程式・補間・積分・微分・常微分方程式などの数値計算において確立している。そして近年、中尾らにより偏微分方程式を有限要素法による数値解に対しても検証を行う方法が開発された [1].

本研究では流体シミュレーションの信頼性向上を目指し、中尾らにより開発された偏微分方程式への精度保証付き数値計算法を，流体シミュレーションに対して適用し，非圧縮粘性流の方程式に対して適用し精度を定量的に把握する試みを行う.

2. 流体シミュレーションへのアプローチ

本来，非圧縮粘性流れでは求めるべき未知関数は N 次元の流速 ($N = 2 \sim 3$) および圧力の 2 つであるが，ここでは流体シミュレーションにおける計算結果の精度保証に対するテストケースの問題として，圧力の近似解に対して誤差範囲の検証を行うこととした.

これは非圧縮粘性流の計算法として広く用いられている流速修正法による定式化の元においては，流速は質量行列の集中化により圧力から陽に求められるため，シミュレーション全体の精度は圧力場の精度が支配的であると考えられるためである.

3. 中尾の方法による微分方程式に対する精度保証

3.1 不動点定理と不動点形式化

偏微分方程式の数値解に対する精度保証において本質的な役割を果たすのは不動点定理である [2].

不動点定理とは，ある写像 F と集合 U に対して

$$F(U) \subset U \tag{1}$$

あるいは同様な条件が満たされる場合，写像 F の像の集合 $F(U)$ 中に，不動点方程式 $u = F(u)$ の解が存在するというものである．ここで

$$F(U) = \{v | v = F(u), u \in U\} \tag{2}$$

である．この場合，不動点方程式とは次に示すような微分方程式の境界値問題

$$\begin{cases} -\nabla u = g(u) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \tag{3}$$

を解いて解 u を得ることを考えた際，これを g の存在する空間から u の存在する空間への写像 F による対応と考えることにより，上記の問題を不動点方程式 $u = F(u)$ で表した形式である.

微分方程式への精度保証とはこのように問題を不動点形式化し，あらかじめ求められている問題の近似解 u_h から，問題の真の解を含む可能性のある候補者集合 U を構成し，その大きさを求めることにより行う.

3.2 検証条件

候補者集合を構成するために予め求められた近似解 u_h は有限次元のベクトル空間 U_h の元である．一方，真の解 u は無限次元の関数空間 U の元であることから，候補者集合 U を真の解 u が近似解 u_h へと移動する際の変動量，すなわち u_h の直交補空間 $u^\perp$ の集合 $U^\perp$ を用いて次のように

$$U = U_h + U^\perp \tag{4}$$

表すこととする．

候補者集合 U を上記のように表すことにより，その中に真の解が存在するか否かについての検証条件 $F(U) \subset U$ は，真の解 u の $U \to U_h$ の移動，すなわち離散化を意味する演算子として P_h を導入することにより次の 2 式により表現される．

$$\begin{cases} P_h F(U) \subset U_h \\ (I - P_h) F(U) \subset U^\perp \end{cases} \tag{5}$$

この 2 つの式は u_h が定義されている有限次元ベクトル空間 U_h およびその直交補空間 $U^\perp$ における集合に関する議論である．

これを実際に計算機で扱える形式での議論に置き換える必要があり，第一式が示す有限次元部分 U_h と第二式が示す無限次元部分 $U^\perp$ に分けて考え計算機で計算可能な形へと変更する．

3.3 有限次元部分 (離散化部分) の計算

(5) の第 1 式は元の問題を離散化した問題についての有限次元空間 U_h における議論である．

写像 $F(U)$ への入力 U は無限次元の関数空間中での集合で，無限個の元を持つ無限集合であるのために，全ての元 $u \in U$ に対して (5) の第 1 式の検証を行うには無限回の演算を必要としてしまう．しかしここで，集合 U をその上界 sup と下界 inf で挟み込まれた区間であると考ると (5) の第 1 式は

$$[\inf_{u \in U} P_h F(u), \sup_{u \in U} P_h F(u)] \subset [\underline{U}, \overline{U}] \tag{6}$$

として表すことが出来る．

3.4 無限次元部分 (直交補空間) の計算

(5) の第 2 式は問題を離散化した際の変動量に関する U_h の直交補空間 $U^\perp$ を意味する．これを写像・集合による形式ではなく，関数・数値による実際に計算可能な形式とすることを考える．

変動される量の上限を α とおくと (5) の第 2 式の条件は

$$\sup_{u \in U} ||(I - P_h) F(u)|| \leq \alpha \tag{7}$$

と表せる．ここで離散化した問題 $P_h F(u)$ の解を得る方法として有限要素法を用いることとし，その構成的誤差評価に関する考察を行う．

ある問題の真の解 u と，有限要素方により求められた近似解 u_h との間には代表メッシュサイズを h，メッシュ分割の状態により決まる定数 C を用いて以下の関係

$$||u - u_h|| \leq Ch||u''|| \tag{8}$$

が成立することが有限要素法に対する補間誤差に関する議論から導かれる．この結果を用いると無限次元部分に関する計算可能な条件は

$$\sup_{u \in U} Ch||g|| \leq \alpha \tag{9}$$

と表現され [1)]．不動点定理についての計算機により計算可能な条件を導くことが出来た．なお上述の議論の詳細に関しては [3)] 等を参照のこと．

3.5 検証アルゴリズム

候補者集合 U を確定し，その大きさを求めるために次のような反復ループのアルゴリズムが用いられる [1)]

1 近似解 u_h は既に有限要素法により求まっている．

2 初期推定誤差 $w_i = [\underline{w_i}, \overline{w_i}], \alpha$ は共に 0 であると仮定

3 近似解 u_h と推定誤差 w_i, α により解の候補者集合 $U = u_h + W + \alpha$ を構成する

4 構成された候補者集合より問題 $\triangle u = g$ の右辺関数の値を決定する

5 解の存在条件

$$[\inf_{u \in U} P_h F(u), \sup_{u \in U} P_h F(u)] \subset [\underline{U}, \overline{U}]$$

$$\sup_{u \in U} Ch||g|| \leq \alpha$$

を検証．成立なら 7. へ

6 推定誤差を次のように拡大し 3. へ

$$W_i = [\inf_{u \in U} P_h F(u), \sup_{u \in U} P_h F(u)]$$

$$\alpha = \sup_{u \in U} Ch||g|| \leq \alpha$$

7 候補者集合の大きさが，近似解 u_h が含む誤差を示す→終了

4. 圧力の Poisson 方程式への適用

筆者は上述した中尾の方法を有限要素法による流速修正法における圧力に関する Poisson 方程式の近似解に対して適用し，精度保証を行うことを試みた．

流体力学においては圧力を p，流速を u で表すこととなっており，記号の表記が前節で述べた中尾の理論と衝突する．ここでは混乱を避けるために，以降より解を p，近似解を p_h，候補者集合を P として表記し，圧力 Poisson 方程式の右辺関数を g，問題を離散化する演算子を T_h とし，$\exists p$ に対する $T_h F(p)$ を f と表記することとする．

4.1　近似解の導出

先ず，候補者集合 P を作る元となる近似解を得るための計算について述べる．非圧縮粘性流れの基礎方程式

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \qquad (10)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right) \qquad (11)$$

は流速修正法による定式化の元で，それぞれ中間流速，圧力，流速を記述する次の 3 つの方程式により記述される [4]．

$$\tilde{u}_i = u_i^n - \triangle t\left\{u_j^n\frac{\partial u_i^n}{\partial x_j} - \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial u_i^n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^n}{\partial x_i}\right)\right\} \qquad (12)$$

$$\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x^2} = \frac{1}{\triangle t}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \qquad (13)$$

$$u_i^{n+1} = \tilde{u}_i - \triangle\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x_i} \qquad (14)$$

上式はさらに重み関数 u^*, p^* を導入し重み付き残差方程式を導き，計算領域を分割する各要素上における形状関数による未知数の内挿を行うことにより連立方程式による表記現を導ける．この連立方程式を各時間ステップ毎に順に解くことによって毎ステップごとの流れ場の近似解を得る．

さて，本稿では計算モデルとして，Fig.1 に示した三角形要素分割による直径 1，長さ 10，分割数 $8 \times 10 \times 2$ 要素の 2 次元の管のモデルを用い，一次の形状関数を用いた．また，計算条件として $\triangle t$=1/100，Reynolds 数=100 を与えた．

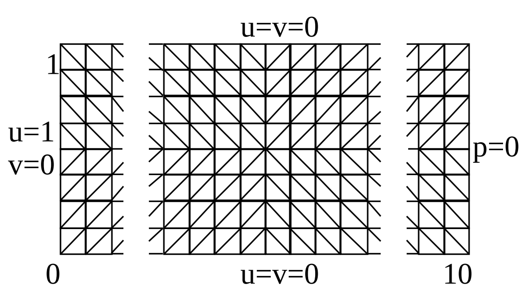

Fig. 1: 計算モデルと境界条件

4.2　検証アルゴリズムの計算

ここで候補者集合 P より問題の右辺側項を求める検証アルゴリズムのステップ 4 についてであるが，圧力に関する Poisson 方程式は

$$\triangle p = \frac{1}{\triangle t}\left(\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial y}\right) \qquad (15)$$

となっており，右辺項は圧力 p の関数にはなってはおらず，$F(P) \subset P$ の検証ループの適用が出来ない．しかし中間流速 $\tilde{u}$ は圧力 p に依存する流速 u の関数であるため，右辺項を $g(p)$ であると見なし，近似解を求める計算と同様に，流速修正法における時間積分のループを用いることにより計算を行うことにより検証ループ全体は Fig.2 に示したような流れとなる．

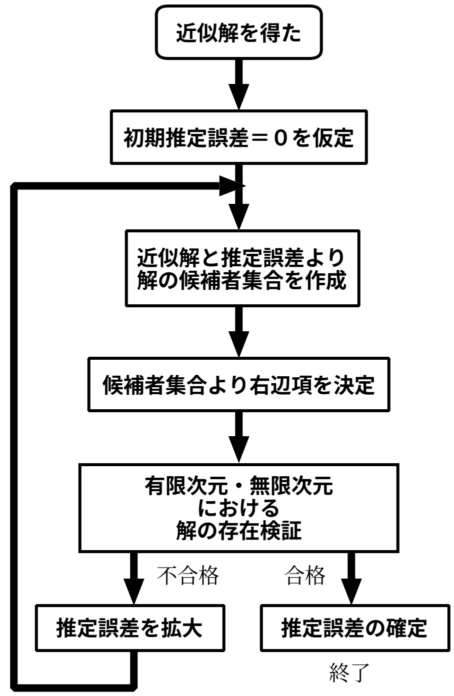

Fig. 2: 検証ループの流れ

しかし，ここで問題となるのは，圧力の候補者集合 P から流速 u を求める計算 (Fig.3 の 2) における中間流速 $\tilde{u}$ の扱いである．

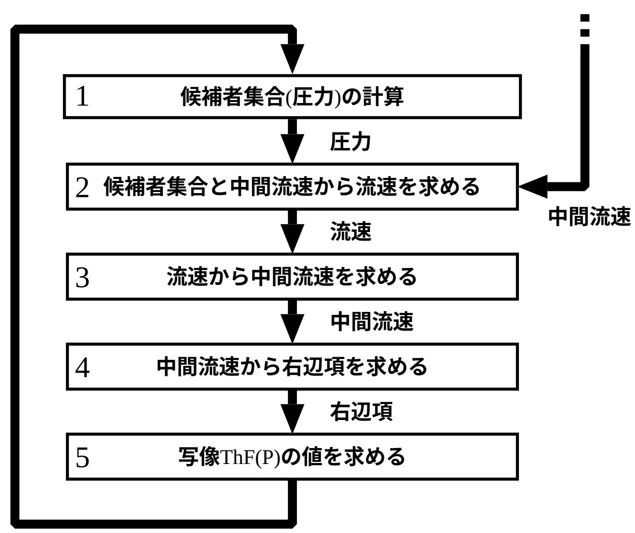

Fig. 3: 検証ループ内での $T_hF(P)$ の計算

通常の流速修正法ではそれぞれの計算を

$$\cdots \rightarrow \text{中間流速} \rightarrow \text{流速} \rightarrow \text{圧力} \rightarrow \text{中間流速} \cdots$$

のように再帰的に求めることにより $\triangle t$ づつの時間を進めているが，検証ループ内での計算においてこの再帰を用いると，ある時刻にでの近似圧力場の精度評価を行いたいにも関わらず，候補者集合 P とその写像 $T_hF(P)$ が異なる時刻に属することになってしまう．

そこで，検証ループ内での流速の計算には，検証ループの先頭で与えられた誤差評価の対象となる近似解と同時刻に属する流速を用いることとしている．

また，元となる候補者集合 (圧力) が幅を持つ区間値 $[\underline{P_i}, \overline{P_i}]$ であるために，これから求められる中間流速・流速・右辺項ベクトルも全て上界 sup と下界 inf で挟まれる区間値であることに留意した計算を行う必要がある．

4.3　有限次元部分の検証条件

中尾による方法での検証条件 $F(P) \subset P$ を有限次元部分 (離散化部分) と無限次元部分 (直交補空間) に分離した検証条件のうち，有限次元部分 (離散化部分) の検証条件，再掲すると

$$[\inf_{p \in P} T_h F(p), \sup_{p \in P} T_h F(p)] \subset [\underline{P}, \overline{P}] \tag{16}$$

であるが，これを求めるためには $T_h F(p)$ を求める必要がある．

ここで演算子 T_h はある関数 ψ をそれが属する連続な空間から，区分的多項式の集合の空間へと写す演算子であると定義されている．つまり $T_h F(p)$ は元の問題 $F(p)$ すなわち圧力 Poisson 方程式

$$\triangle p = g \tag{17}$$

を有限個の点上において定義される問題に写すと考えられる．つまり T_h は問題の離散化を意味していると考えられる．よって，問題 (17) を有限要素法により離散化するために，元の方程式の重み付き残差方程式を導く

$$(p', \phi') = (g, \phi) \tag{18}$$

を考える．但しここでは

$$(a, b) = \int_\Omega ab \ d\Omega \tag{19}$$

であり ϕ は重み関数とする．この重み付き残差方程式 (18) を離散化すると

$$(p'_h, \phi'_h) = (g, \phi_h) \tag{20}$$

となるが，ここで $p_h = T_h F(p)$ であることと，演算子 T_h により離散化されるということは関数 $T_h F(p)$ は M 個の節点上での値と重み関数との線形結合で表されるということなので

$$T_h F(p) = \sum_{i=1}^{M} f_i \phi_i \tag{21}$$

とも書けるということを考慮すると，上の離散化された重み付き残差方程式 (20) は

$$(\sum_{i=1}^{M} f_i \phi'_i, \phi'_h) = (g, \phi_h) \tag{22}$$

となる，これは圧力 Poisson 方程式の重み付き残差方程式と同じ形であり，連立方程式

$$\mathbf{A} \vec{f} = \vec{b} \tag{23}$$

を解くことにより $T_h F(p)$ を求めることが出来る．ここで係数行列 $\mathbf{A}$ と右辺ベクトル $\vec{b}$ は

$\mathbf{A} = (\phi'_i, \phi'_j)$ の行列形

$\vec{b} = (g, \phi_i)$ の行列形

という形になるが，これらは近似解を得るための連立方程式での係数行列の右辺ベクトルと全く同様に決定されることは明らかである．

ここでそもそも区間値である $p \in P$ より決定される $\vec{b}$ もまた区間であるために，$\vec{f}$ もまた区間 $f_i = [\underline{f_i}, \overline{f_i}]$ で表される．よって f_i の上界 sup・下界 inf により集合の形で表現されていた検証条件は

$$\left[\underline{f_i} \geq \underline{P_i} \quad \text{かつ} \quad \overline{f_i} \leq \overline{P_i} \right] \tag{24}$$

となる．

4.4　無限次元部分の検証条件

さて，次に中尾による方法での検証条件 $F(P) \subset P$ を有限次元部分 (離散化部分) と無限次元部分 (直交補空間) に分離した検証条件のうち，無限次元部分 (直交補空間) に関する検証条件

$$\sup_{p \in P} Ch||g|| \leq \alpha \tag{25}$$

を検証するために $||g||_{L^2}$ を求める．ここで L^2 ノルムは

$$||g||^2_{L^2} = \int_\Omega g^2 \ d\Omega \tag{26}$$

であるが，この全領域 Ω での積分の代わりに，全領域 Ω を M 個に分割する各三角形要素上での積分の総和を用い

$$||g||^2_{L^2} = \sum_{i=1}^{M} \int_e g_i^2 \ de \tag{27}$$

として扱うことができる．

さて，ノルムを求めたい関数 g は元の方程式である圧力 Poisson 方程式 (15) の右辺項であるので

$$g^2 = \frac{1}{(\triangle t)^2} \Big((\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x})^2 + 2 \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} \frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial y} + (\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x})^2 \Big) \tag{28}$$

である．三角分割･一次要素を用いた有限要素法により解いているので，ここである要素内において中間流速 $\tilde{u}_x, \tilde{u}_y$ は，三角要素の 3 つの頂点それぞれでの中間流速値 $\tilde{u}_x^{1\sim3}, \tilde{u}_y^{1\sim3}$ と，それぞれの頂点では 1，他では 0 となる 1 次の形状関数 $N_{1\sim3}$ により次のように補間されている．

$$\tilde{u}_x = N_1 \tilde{u}_x^1 + N_2 \tilde{u}_x^2 + N_3 \tilde{u}_x^3 \tag{29}$$
$$\tilde{u}_y = N_1 \tilde{u}_y^1 + N_2 \tilde{u}_y^2 + N_3 \tilde{u}_y^3 \tag{30}$$

よって中間流速 $\tilde{u}$ の微分は

$$\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial x} \tilde{u}_x^1 \frac{\partial \tilde{N}_2}{\partial x} \tilde{u}_x^2 \frac{\partial \tilde{N}_3}{\partial x} \tilde{u}_x^3 \tag{31}$$
$$\frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial y} = \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial y} \tilde{u}_y^1 \frac{\partial \tilde{N}_2}{\partial y} \tilde{u}_y^2 \frac{\partial \tilde{N}_3}{\partial y} \tilde{u}_y^3 \tag{32}$$

と表される．検証ループ内において中間流速 $\tilde{u}$ は既知であるし，形状関数の x, y による偏導関数は近似解を得るための計算で用いたものを使えるため，各要素上における g の値を陽に決定でき，$||g||_{L^2}$ を計算できる．

5. 実行結果と考察

誤差評価を適用する近似解を得るために，4.1 で述べたモデルと条件に対するシミュレーションを 100 サイクル実行した結果の速度分布と圧力分布を Fig.4 に示す．

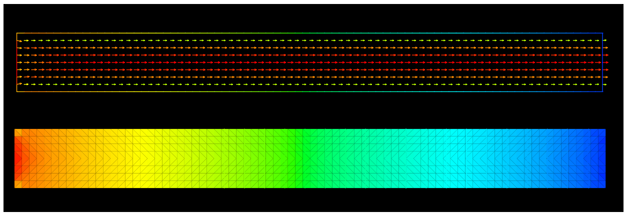

Fig. 4: Cycle=100 での流れ場の状態

ここに見られるような圧力分布に対して上述の誤差評価アルゴリズムを適用した結果は次のようになる．

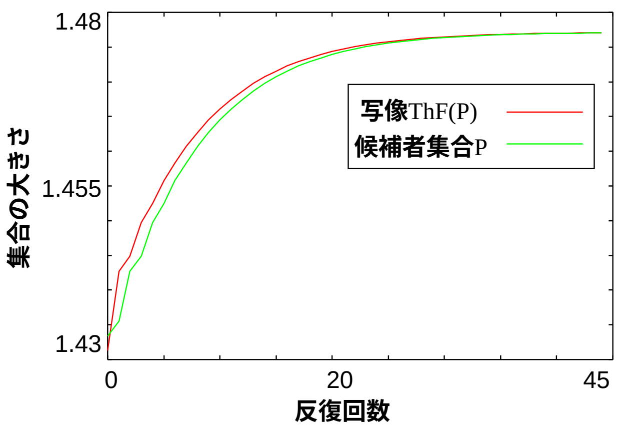

Fig. 5: 集合の幅の増大

Fig.5 は検証ループを回す毎に候補者集合 P と，その写像 T_hF の像の集合 $T_hF(P)$ の大きさがどのように変化してゆくかを示したものである．

当初，写像による集合 $T_hF(P)$ は候補者集合 P よりも大きく，検証条件は満たされないが，検証ループの反復を進め，P が拡大して行くにつれ，$T_hF(P)$ と P は近付いて行き，ある時点で $T_hF(P) \subset P$，すなわち不動点定理における解の存在条件が成立する．

しかし本ケースでは，かなり多くの反復を繰り返しても $T_hF(P) \subset P$ が厳密には達成されなかったため，ここでは P の大きさと $T_hF(P)$ の大きさの相対誤差が，1.0×10^{-5} 以下になったら $F(P) \subset P$ であると見なすこととした．

その結果検証ループは 44 回で終了し，圧力の近似解 p_h に対して次のような誤差上限が推定された．

検証に要した反復回数	44 回
有限次元誤差の最大値	0.0438079
無限次元誤差の最大値	0.0088530

用いた近似解に含まれる誤差の推定値は

$$推定誤差 = 有限次元誤差 + 無限次元誤差$$

であるので，推定誤差の大きさの最大値は 0.0526609．相対誤差値で 3%という結果が得られた．Fig.6 は圧力分布の管の中心軸 (y=0.5) での断面を示したものである．真の解は赤い 2 線で挟まれる推定範囲の中に存在する．

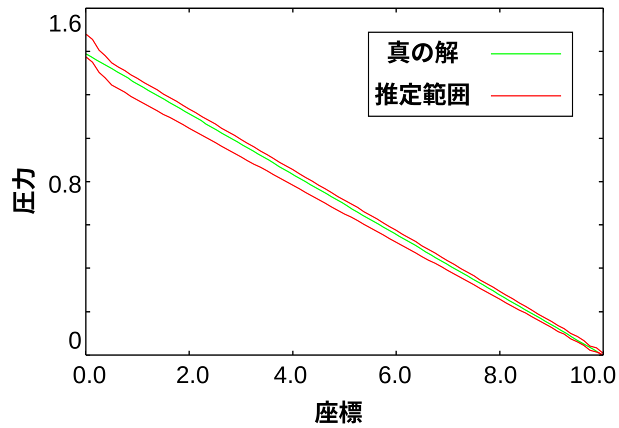

Fig. 6: y=0.5(中心軸) での圧力分布と誤差範囲

6. 結言

本稿の結果におけるこの最大で 3%という結果は，近似解をより細かいメッシュ，あるいはより高精度のスキームを用いて求めるか，より高い精度で誤差範囲を推定できるロジックの適用により更に小さくできるはずであり，バックステップ等のより複雑なモデルにおける精度評価と共に，今後の検討課題としたい．

参考文献

1. 中尾，山本，“チュートリアル応用数理の最前線 精度保証付き数値計算”，日本評論社 (1998).
2. 渡部，中尾，“精度保証付きシミュレーション [4] ー偏微分方程式の精度保証ー“，シミュレーション学会誌，Vol.19, No.3 (2000) pp.208-215.
3. 渡辺，中尾，“非線形楕円型境界値問題の解に対する精度保証付き数値的検証法”，計算機科学研究報告 10，九州大学大型計算機センター，(1993)pp.1-6.
4. 日本数値流体力学有限要素法研究会，” 有限要素法による流れのシミュレーション”，シュプリンガー・フェアラーク東京 (1998).