

精度保証付き計算を用いたアダプティブ法の開発

Development of Adaptive Method with Guaranteed Accuracy.

- 河原 洋祐, 北陸先端大, 〒 923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, k_yosuke@jaist.ac.jp
 熊畑 清, (株) 富士テクニカルリサーチ, 〒 923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, kumahata@mvb.biglobe.ne.jp
 松澤 照男, 北陸先端大院, 〒 923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, matuzawa@jaist.ac.jp

Yosuke KAWAHARA, JAIST, 1-1 Asahidai Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN

Kiyoshi KUMAHATA, JAIST, 1-1 Asahidai Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN

Teruo MATSUZAWA, JAIST, 1-1 Asahidai Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN

1. 緒言

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において最も重要なものはその精度であるといえる。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、得られた近似解の実際の精度に関しては詳細に顧みられることは少なかった。これは数値計算の検算に非常に多大な計算量が必要と考えられていたためである。だが近年、現実的な計算量で数値計算の結果を検算できることが明らかとされ、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。このような計算は精度保証付き計算 (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⁾。また数値流体力学のシミュレーションにおいて解析結果の精度は、メッシュの分割法によるところが大きく、精度を向上させるためにはより細かくメッシュを分割する必要がある。しかし、計算機資源の問題で、すべての領域に対して細かいメッシュを適用することは現実的ではない。そこでより複雑な流れに対してより精度の高い結果を得るために、事後誤差評価に基づいた効率的なメッシュ分割を行うアダプティブ法が開発された。従来アダプティブ法ではメッシュ細分化の指標は物理量の変化量や誤差であったが、本研究では計算結果の精度を用いることを試み、誤差範囲を一定に押えることによってシミュレーション全体の品質保証を可能とする二次元非圧縮性流体の精度保証付き計算ソルバの開発を行う。

2. 計算手法

二次元非圧縮粘性流れでは求めるべき未知関数は二次元の流速および圧力の 2 つであるが、ここでは熊畑²⁾が開発した精度保証付き計算ソルバを拡張し、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。以下の説明では、次のような微分方程式の境界値問題について考える。

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

2.1 不動点定理

不動点定理とは、ある写像 F と集合 U に対して以下の条件

$$F(U) \subset U \quad (2)$$

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

$$F(U) = \{v | v = F(u), u \in U\} \quad (3)$$

である。ここでの不動点方程式とは解 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。

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

$$U = U_h + U^\perp \quad (4)$$

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 $U \rightarrow U_h$ 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。

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

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。

2.3 有限次元部分 (離散化部分) の計算

(5) の第一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) の第一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えると (5) の第1式は、

$$[\inf_{u \in U} P_h F(u), \sup_{u \in U} P_h F(u)] \subset [U, \bar{U}] \quad (6)$$

として表すことが出来る。

2.4 無限次元部分 (直交補空間) の計算

(5) の第二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) の第二式の条件は

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

法として有限要素法を用いることとし、その構造的誤差評価に関する考察を行う。

ある問題の真の解 u と、有限要素法により求められた近似解 u_h との間にはメッシュサイズを 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

$$\|u - u_h\| \leq Ch \|u''\| \quad (8)$$

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

$$\sup_{u \in U} Ch \|g\| \leq \alpha \quad (9)$$

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。

2.5 検証アルゴリズム

実際に候補者集合 U を確定し、その大きさを求め、アダプティブメッシュを生成するには次のような検証ループのアルゴリズムが用いられる¹⁾

- 1 近似解 u_h を有限要素法により求める
- 2 初期推定誤差 $w_i = [w_i, \bar{w}_i]$, α 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 $\Delta u = g$ の右辺関数の値を決定する
- 5 解の存在条件

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

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

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 誤差を評価し、許容内なら終了、そうでなければアダプティブメッシュを生成し、1.へ

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、精度保証を行った。

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。

3.1 近似解の導出

まず、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

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

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

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⁾。

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

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

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

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 $\Delta t=1/100$ 、Reynolds 数=100 を ~~与えた~~ アダプティブメッシュ

本研究では、要素の形状として三角形要素を用いる。これは三角形要素が複雑なモデルに対して適用しやすく、また、複雑なモデルほど精度のばらつきが大きいと考えられ、精度保証付き計算を行う本研究に適していると考えられるからである。なお、本稿では、要素の細分割については、誤差の大きい節点を取りだし、その要素内に節点を発生させ、ついで要素を発生させるアダプティブ h 法に基づいたプログラムを採用している。

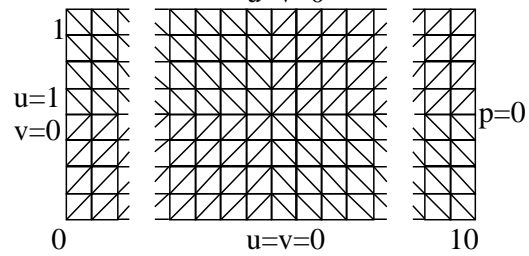


Fig. 1: 計算モデルと境界条件

3.3 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

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

となっており、右辺項は圧力 p の関数にはなっていない。しかし、 $F(P) \subset P$ 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。

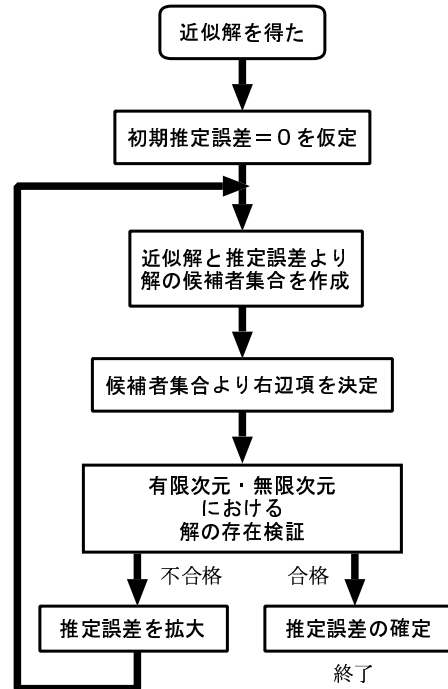


Fig. 2: 検証ループの流れ

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。

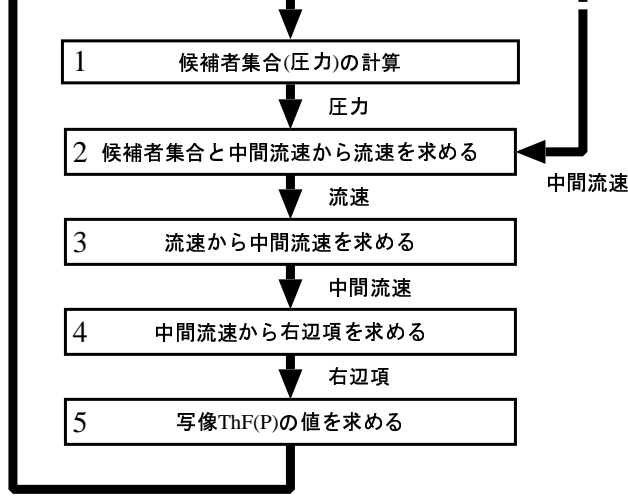


Fig. 3: 検証ループ内での $T_h F(P)$ の計算

通常の流速修正法ではそれぞれの計算を

... → 中間流速 → 流速 → 圧力 → 中間流速 ...

のように再帰的に求めることにより Δt 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 $T_h F(P)$ 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 $[P_i, \bar{P}_i]$ 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。

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

$$g^2 = \frac{1}{(\Delta t)^2} \left(\left(\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} \frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial y} + \left(\frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial y} \right)^2 \right) \quad (16)$$

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 $\tilde{u}_x^{1 \sim 3}, \tilde{u}_y^{1 \sim 3}$ 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 $N_{1 \sim 3}$ により次のように補間されている。

$$\tilde{u}_x = N_1 \tilde{u}_x^1 + N_2 \tilde{u}_x^2 + N_3 \tilde{u}_x^3 \quad (17)$$

$$\tilde{u}_y = N_1 \tilde{u}_y^1 + N_2 \tilde{u}_y^2 + N_3 \tilde{u}_y^3 \quad (18)$$

よって中間流速 \tilde{u} の微分は

$$\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial x} \tilde{u}_x^1 + \frac{\partial \tilde{N}_2}{\partial x} \tilde{u}_x^2 + \frac{\partial \tilde{N}_3}{\partial x} \tilde{u}_x^3 \quad (19)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_y}{\partial y} = \frac{\partial \tilde{N}_1}{\partial y} \tilde{u}_y^1 + \frac{\partial \tilde{N}_2}{\partial y} \tilde{u}_y^2 + \frac{\partial \tilde{N}_3}{\partial y} \tilde{u}_y^3 \quad (20)$$

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用いるため、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。

4. 一次元方程式での検証

前述の方法による微分方程式への精度保証について、先ず次に示す一次元の常微分方程式の二点境界値問題

$$\begin{cases} -u'' - u = x \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \quad (21)$$

を Galerkin 式有限要素法により解いた近似解に対する精度検証を行った。初期分割値を 10 とし、前述の計算を許容値として各節点の誤差幅と近似解の比を算出し、その値が 0.07 を越えた場合アダプティブ分割するように行った結果、次の値を得た。Fig.4 は誤差幅と近似解の比の移り変わりであり、両節点での値が 0.007 を越えている部分が分割されており、アダプティブ分割が成功していることを表している。Fig.5 及び Fig.6 はそれぞれ 2 ステップ後、3 ステップ後での誤差幅と厳密解を表しており、分割数が多くなるに従って精度が良くなっていることを表している。

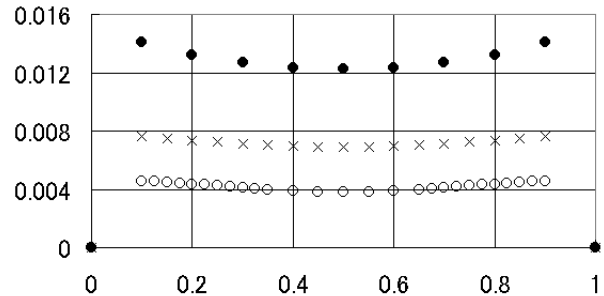


Fig. 4: 誤差幅と近似解の比

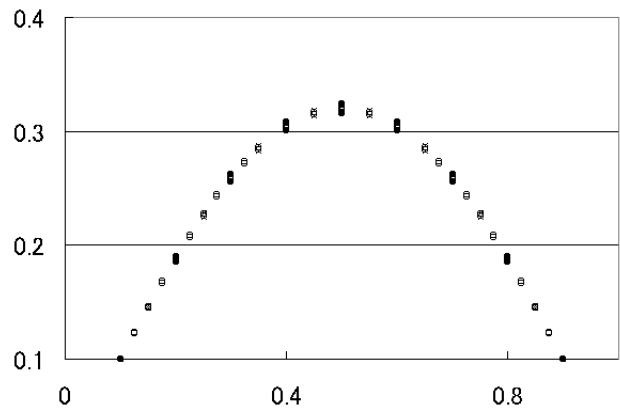


Fig. 5: 2 ステップ後の誤差幅

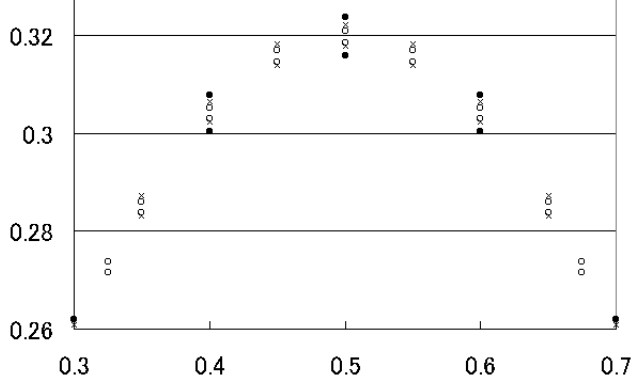


Fig. 6: 3 ステップ後の誤差幅

5. 圧力 Poisson 方程式に対する精度保証

誤差評価を適用する近似解を得るために、上で述べたモデルと条件に対するシミュレーションを実行した結果の速度分布と圧力分布を以下に示す。モデルは直径1、長さ10、初期分割数 $8 \times 10 \times 2$ 要素の2次元の管のモデルを用いた。また、計算条件として $\Delta t = 1/100$, Reynolds 数=100を与えた。三角形要素の各節点のうち、一つでも許容値を超えた要素を分割する。

Fig.6 は初期メッシュでの流れ場の状態、及び圧力分布を示している。Fig.7 は細分割後の流れ場を表す。この結果より、精度の低い要素を分割していることがわかる。

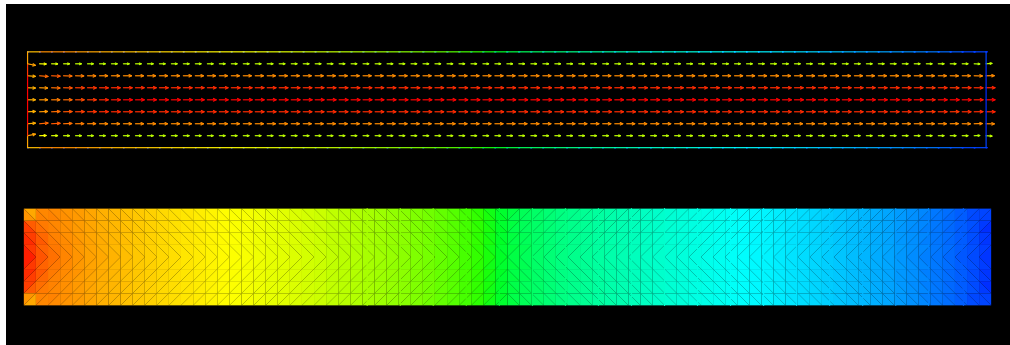


Fig. 7: 初期流れ場の状態

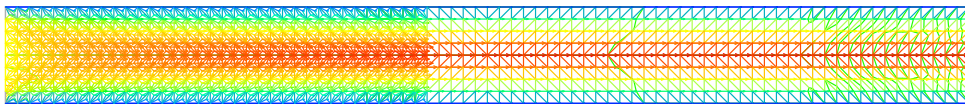


Fig. 8: 分割後の流れ場の状態

二次元流れにおいて精度保証付き計算を行い、その結果をもとにして要素の細分割を行うアダプティブ法を開発し、直管に対して計算を行った。今後の課題としては、バックステップ等のより複雑なモデルに対しての精度保証付き計算、及びそれを用いたアダプティブ法の開発が必要であると考えられる。

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. 熊畑, 非圧縮性流体への精度保証付きソルバの開発, JAIST 修士論文 (2000),
3. 渡部, 中尾, “精度保証付きシミュレーション [4] - 偏微分方程式の精度保証 -”, シミュレーション学会誌, Vol.19, No.3 (2000) pp.208-215.
4. 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.
5. 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).