

音響計算用のコンパクト空間差分—シンプレクティック時間積分法の最適化

(Optimization of compact finite difference - symplectic integration method for wave acoustics)

岩津 玲磨 (Reima Iwatsu)*¹

鶴 秀生 (Hideo Tsuru)²

*¹Tokyo Denki University

²Nittobo Acoustic Engineering Corporation Ltd.

1 はじめに

音響解析には波動音響 (時間領域の解析: 差分法, 有限要素法), 幾何音響 (音線の追跡), 境界要素法 (周波数領域の解析) などの手法が用いられている. 時間領域の解析法 [1] を最近問題となっている低周波数騒音の伝播に適用する場合には, 音波を長時間積分する必要がある. 過去の研究によると, シンプレクティック積分法は低散逸低分散 (LDD) ルンゲ・クッタ (RK) 法 [2] に匹敵あるいは凌駕する良好な結果を示している [3].

一方で, 計算空力音響の分野では空間的な解像度が高いことからコンパクト差分 (CD) 法 [4] がよく用いられるようになってきている. コンパクト差分 (CD) 法の公式には, 公式の持ち得る最大次数以下の精度の公式群のなかに, 最大次数の公式よりも解像効率の高いものが存在することが知られている [5].

また, 音波の式を時間積分するために適した, 分割されたルンゲ・クッタ (PRK) 法のうち 3 段 3 位の公式 [6] は 6 係数に対してシンプレクティック性条件式の数が 5 で, さまざまな公式を作ることができる. しかし, 音波の式を長い時間積分してみると, 位相誤差が最小となる係数が必ずしも最良の結果を示さない [3].

このことは, 数値積分の際に空間, 時間両方から入ってくる誤差を総合的に考慮しないと最良の方法が得られないことを示唆する [7]. 以上の考察にもとづいて, 本報では長時間積分しても解の精度が劣化しないような計算法の構築を目的として, コンパクト空間差分—シンプレクティック時間積分法の最適化を試みることにする.

2 音波の方程式

はじめに, 波動方程式に中間変数を導入して以下のような形にあらわす [8]. 簡単のために 1 次元の波を扱うが, 結果は容易に 2,3 次元の場合に拡張できる.

$$u_t + \frac{1}{\rho} p_x = 0, \quad p_t + \rho c^2 u_x = 0 \quad (1)$$

ここで, u は流体の速度, p は平衡状態からの圧力のずれ, ρ は平衡状態の密度, c は平衡状態での音速をあらわす.

広く使われている方法 [1] では, 上の音波の方程式を空間 staggered 中心差分, 時間 Leap-Frog 法で離散化する. この方法によると, 波数の相対誤差をたとえば 10^{-3} 以下とするためには $\kappa (= k\Delta x) \leq 0.18$, 約 35p.p.w. (point per wave) の格子点が必要となる.

3 シンプレクティック PRK 法

s 段の分割された (partitioned) RK 法 [9]

$$\begin{cases} p^{i+1} = p^i - c_i \Delta t H_q(q^i) \\ q^{i+1} = q^i + d_i \Delta t H_p(p^{i+1}) \end{cases} \quad (2)$$

$i = 1, \dots, s$, $(p^1, q^1) = (p(t), q(t))$, $(p^s, q^s) = (p(t+\Delta t), q(t+\Delta t))$, $H(p, q) = V(q) + A(p)$, を音波の式に適用する (常微分方程式に対するシンプレクティック積分法を一般的な波の問題に適用する場合に関する議論については [10] を参照. 分割されたルンゲ・クッタ法の応用例については [11, 12, 13, 14] 参照).

通常のルンゲ・クッタ法同様, シンプレクティック積分法の位数条件は s の増加とともに $= 2, 3, 4, \dots$ に対して $3, 5, 8, \dots$ のように急速に増加する [9]. 2 段, 3 段の方法には係数の数よりも条件式の数の方が少ないので, いろいろな係数が存在する. 4 段法には, 幾通りかの係数が知られているが, 正確な解の数は不明なので, 現在知られている係数以外にも係数が存在する可能性がある. 3 段 3 位の方法は 6 係数に 5 条件が付帯するので, 以下のように $e = d_1 + d_2$, $e = d_1 d_2$ とおくことによって簡潔な変数表示ができる [15].

$$c_1 = 1 + \frac{1}{d_1 d} \left(\frac{1}{3} - \frac{d_1 + d}{2} \right), \quad c_2 = \frac{1}{d_1 d_2} \left(\frac{d}{2} - \frac{1}{3} \right), \quad c_3 = -\frac{1}{d d_2} \left(\frac{d_1}{2} - \frac{1}{3} \right). \quad (3)$$

$$\left(\frac{d}{2} - \frac{1}{3} \right)^2 = \frac{e}{3} \left(d - \frac{3}{4} \right), \quad d_1 \neq 0, \quad d_2 \neq 0, \quad d \neq \frac{3}{4}. \quad (4)$$

e は上の (4) 式をみたさなければならない. そのときさらに d が以下の (5) 式をみたすと

$$\mathcal{D} = d^2 - 4e \geq 0, \quad d < \frac{3}{4} \quad \text{or} \quad d \geq d_0 \simeq 2.218. \quad (5)$$

$$(d_1, d_2) = \frac{1}{2} \left(d \pm \sqrt{d^2 - 4e} \right) \quad \text{or} \quad (d_1, d_2) = \frac{1}{2} \left(d \mp \sqrt{d^2 - 4e} \right). \quad (6)$$

のように解ける. こうして求まった (d_1, d_2) の値を (3) 式に代入して, さらに $d_3 = 1 - d$ とすればすべての係数の値が定まる.

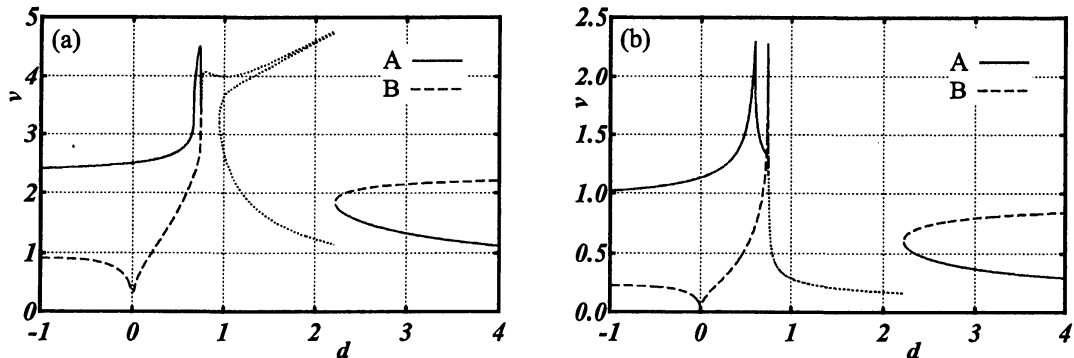


Figure 3.1: Stability limit ($G = \rho(M) \leq 1$) and the phase error limit defined as $|\nu^* - \nu|/\pi \leq 5 \cdot 10^{-4}$ after Bogey & Bailly'04) as a function of d

安定性と位相誤差の限界を d をパラメータとして $\nu = \omega \Delta t$ であらわしたグラフを図 3.1 に示す. 解曲線はふたつの枝 A, B からなる. 式 (6) の \pm 符号を枝 A, \mp の符号を枝 B とする. ルース法 [6] は枝 A 上の $d = 0$ に対応する. 枝 A 上 $d \simeq 0.7317 \dots$ は安定性最大点で, マクランラン解 [16] に対応する. 解 A, B を枝 A, B 上 $d = \frac{4}{9}$ の点でえられる係数とする [15]. 枝 A 上 $d \simeq 0.5367 \dots$, 枝 B 上 $d \simeq 0.7397 \dots$ の点でえられる係数はお互いに反対称 $c_i^A = d_{4-i}^B, d_i^A = c_{4-i}^B$ の関係にあるので, 実質的に同じ係数である. これは位相誤差最小点である. 以下においては解 C [3] とよぶことにする. 付録 A にこれらの係数の値をまとめて示す.

4 コンパクト・スタガード 4/6 次精度スキーム

空間方向の導関数は staggered 格子上的コンパクト差分法によって離散化する [4].

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = b \frac{f_{i+\frac{3}{2}} - f_{i-\frac{3}{2}}}{3\Delta x} + a \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} + e, \quad (7)$$

$$a = \frac{3}{8}(3 - 2\alpha), \quad b = \frac{1}{8}(22\alpha - 1), \quad e = \frac{9 - 62\alpha}{1920} \Delta x^4 f^{(5)}. \quad (8)$$

この公式は $\alpha = \frac{9}{62}$ のときに最大精度 6 をとり, それ以外の α の値では 4 次精度となる. 以下において便宜的に CD4/6 公式とよぶことにする. CD4/6 公式の実効波数は

$$\kappa^*(\kappa, \alpha) = \frac{2a \sin(\frac{\kappa}{2}) + \frac{2}{3}b \sin(\frac{3}{2}\kappa)}{1 + 2\alpha \cos(\kappa)} \quad (9)$$

$$= \frac{(22 \sin(\frac{3}{2}\kappa) - 18 \sin(\frac{\kappa}{2}))\alpha + 27 \sin(\frac{\kappa}{2}) - \sin(\frac{3}{2}\kappa)}{12(1 + 2\alpha \cos(\kappa))} \quad (10)$$

によって与えられる. ここで, $\kappa = k\Delta x$, $0 \leq \kappa \leq \pi$ である.

4.1 スタガード 4/6 次精度スキームの特性

実効波数を調べると

$$\kappa^*(0) = 0, \quad \kappa^*(\pi) = \frac{2a - \frac{2}{3}b}{1 - 2\alpha} = \frac{7 - 10\alpha}{3(1 - 2\alpha)} \quad (11)$$

となっている [17]. さらに κ^*, κ ともに $\kappa \in [0, \pi]$ においては単調増加である. これらのことより,

$$0 < \alpha < \frac{3\pi - 7}{6\pi - 10} \simeq 0.27 \quad (12)$$

であれば $\exists \kappa_1 \in [0, \pi]$ において $\kappa_1 = \kappa$ となる. さらに $\kappa < \kappa^*(0 < \kappa < \kappa_1)$, $\kappa^* < \kappa(\kappa_1 < \kappa < \pi)$ であることが示せる. つまり, $0 < \kappa < \pi$ に交点がひとつだけある. このとき $\frac{7}{3} < \kappa^*(\pi) < \pi$ となる. そこで α の替りにこの交点の座標 κ_1 を変数として用いることにする. すると κ_1 と α の関係は以下の式で与えられる.

$$\alpha = \frac{27 \sin(\frac{\kappa_1}{2}) - \sin(\frac{3}{2}\kappa_1) - 12\kappa_1}{18 \sin(\frac{\kappa_1}{2}) - 22 \sin(\frac{3}{2}\kappa_1) + 24\kappa_1 \cos(\kappa_1)} \quad (13)$$

4.2 波数 $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_f$ の関係

ここでスキームの実効波数に対して相対誤差 $e = |\kappa^*/\kappa - 1|$ に上限 ϵ を設ける. すると, 実効波数と厳密波数が交点 κ_1 をもつことの結果として, スキームの相対誤差がちょうど誤差許容値 ϵ となる点は κ_1 よりも原点側か π 側かのどちらかになる (図 4.1). これらの点を κ_2, κ_3 とおく.

$$\kappa_2 = \max_{\kappa < \kappa_1} \kappa \quad \text{where} \quad \left| \frac{\kappa^*}{\kappa} - 1 \right| \leq \epsilon, \quad \kappa_3 = \max_{\kappa > \kappa_1} \kappa \quad \text{where} \quad \left| \frac{\kappa^*}{\kappa} - 1 \right| \leq \epsilon.$$

われわれの目的は, なるべく広い範囲の波数に対してスキームの相対誤差が ϵ 以下になるように κ_1 の値を調節することである. そのようになる最大の波数を κ_f とおく.

$$\kappa_f = \max_{\kappa > 0} \kappa \quad \text{where} \quad \left| \frac{\kappa^*}{\kappa} - 1 \right| \leq \epsilon.$$

すると, 定義によりこの κ_f の値は κ_2 と κ_3 のうちの小さい方になる.

$$\kappa_f = \min \{ \kappa_2, \kappa_3 \}$$

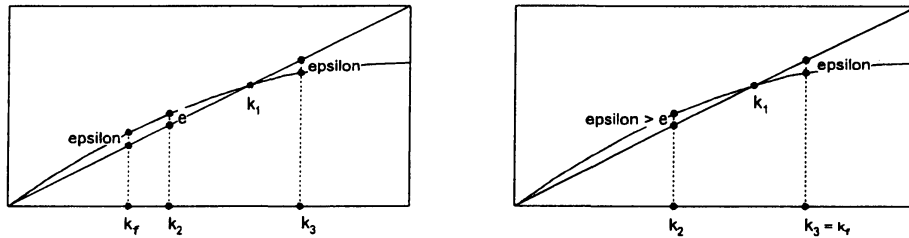


Figure 4.1: Schematic illustration of $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ and κ_f

調べてみると, $\kappa_2 = \frac{5}{6}\kappa_1$ である (図 4.2a). κ_3 と κ_1 の関係は図 4.2(b) に示されるようになる. 波数 κ が κ_1 よりも小さいときの相対誤差 e の最大値を図 4.2(c) に示す.

4.3 最適化法

過去の文献では, 対象波数域 $[0, \kappa_m]$ で重み付き誤差の積分 E_1 を最小化する方法 [23] が一般的である. この方法は”対象波数域で平均的に最良な特性”を策定しようとする試みである.

$$\text{minimize } E_1 = \int_0^{\kappa_m} |\kappa^* - \kappa| W(\kappa) d\kappa$$

対象とする波数の最大値 κ_m およびどの波数成分からの寄与を重要視するかを表現する重み付け関数 $W(\kappa)$ の選択に恣意性がある [18]. したがって, 計算した波のスペクトル分布が $W(\kappa)$ と大幅に異なる場合には望まれる成果がえられないことになる.

そこでここでは, ”誤差の最大値が指定された値 ϵ 以下となる波数範囲 $[0, \kappa_f]$ を最大化する”方法によって最適化をおこなうことにした. これによって”所要の計算精度に応じた最適スキーム”を選択することができる.

前節で述べたような方法で $\kappa_f(\epsilon)$ を求めると、図 4.2(d) で各 ϵ の値に対して κ_1 を変化させたときに κ_f が最大となる (図中で '絶壁の上にある') 点の κ 座標となる。対応する α の値は式 (13), a, b の値は式 (8) から求まる。

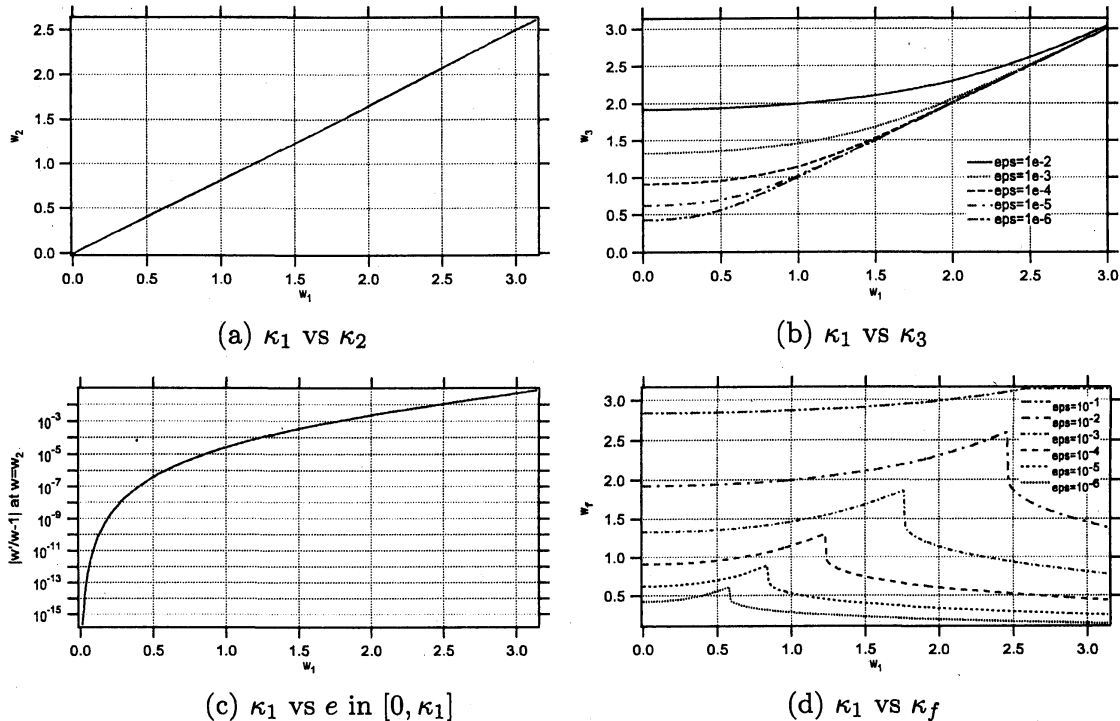


Figure 4.2: Compact-staggered FD scheme CDS4/6

こうして得られた最適化 scheme の係数を付録 B に示す。スキームの相対誤差 e の許容値として非常に緩やかな $\epsilon = 10^{-1}$ からかなり厳しい $\epsilon = 10^{-6}$ までの値に対して対角項の係数 α , 右辺の係数 a, b を載せる。図 4.3 に κ_1 の関数としてこれらの係数の値をプロットしてある。図 4.4 にはこれら最適化スキームの実効波数と相対誤差の値を波数 κ に対してプロットした図を示す。目視では、どの ϵ に対するスキームも $\pi/2$ をかなり越えた付近まで正確であるように見える。そこでスキームの解像効率を計算した。表 1 によれば $e = 10^{-3}$ に対する最適化スキームはレギュラー 6 次スキームよりも 1.7 倍、スタガード 6 次スキームよりも 1.4 倍の解像効率をもつことになり、解像度の大幅な改善がみられる (適用例については [13, 19, 21, 22] 参照)。

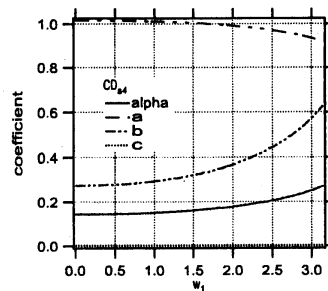


Figure 4.3: α, a, b and c vs κ_1

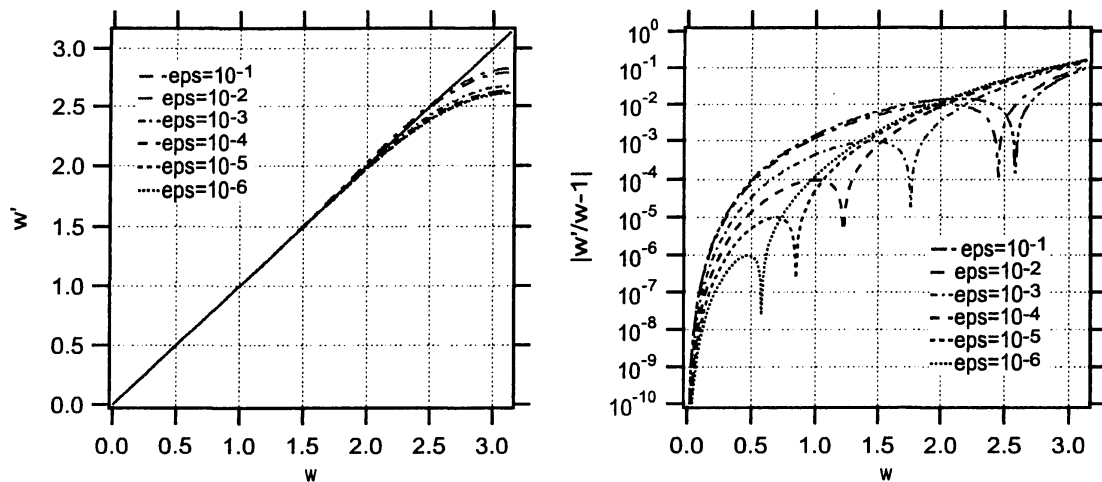


Figure 4.4: Optimized fourth-order compact staggered scheme

Table 1 ϵ and r_f

ϵ : tolerance of relative error $|\frac{\kappa^*}{\kappa} - 1|$, $r_f = \kappa_f/\pi$: resolving efficiency

e4 : explicit fourth-order, r6 : regular sixth-order,

s6 : staggered sixth-order *etc.*,

s4-opt : optimized schemes

ϵ	e4	Padé	r6	s6	Lele4	Lele4 ^(5,7)	s4-opt
10^{-1}	0.44	0.59	0.70	0.87	0.74	0.90	1.00
10^{-2}	0.23	0.35	0.50	0.59	0.59	0.83	0.82
10^{-3}	0.13	0.20	0.35	0.41	0.52	0.79	0.59
10^{-4}				0.28			0.41
10^{-5}				0.20			0.28
10^{-6}				0.14			0.19

5 シンプレティック PRK-コンパクト・スタガード差分系の最適化

波動方程式の解 $u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$ は、分散関係 $D(\omega, k) = \omega^2 - (ck)^2 = 0$ をみたく。計算空力音響でよく引用される文献によると、計算スキームはこのような波の分散関係を忠実に再現しなければならない [23]。この原則は、数値的分散関係が正確にみたされる条件としても表わすことができる [24]。ここでは、そのような方法によって時間積分法-空間離散化法の解析をおこなうことにする。

シンプレティック PRK 法は、音波の式 (1) を以下の式に従って積分する。

$$\begin{cases} u_{i+1} = u_i + c_i \Delta t [-\frac{1}{\rho} (p')_i] \\ p_{i+1} = p_i + d_i \Delta t [-\rho c^2 (u')_{i+1}] \end{cases} \quad (14)$$

ここで、導関数の近似にコンパクト・スタガード差分公式 (4/6 次精度)

$$A_f(u') = B_f u, \quad A_c(p') = B_c p \quad (15)$$

が用いられる ($A_f, B_f \in R^N \times R^{N+1}$, $A_c, B_c \in R^{N+1} \times R^N$, $u \in R^{N+1}$, $p \in R^N$). コンパクト差分公式は通常, 境界点に対する公式 (あるいは境界条件) によって閉じられるが, ここでは簡単のために周期条件の場合を扱うことにする. 離散フーリエ変換

$$f_j = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} \hat{f}_j e^{ikx_j}, \quad (f'_j)_{fdm} = \sum_{j=-N/2}^{N/2-1} (i\kappa^* \hat{f}_j) e^{ikx_j} \quad (16)$$

することによって, スタガード差分の実効波数を使ってモード k の時間積分の遷移行列が

$$\begin{pmatrix} \hat{u}_{i+1} \\ \hat{p}_{i+1} \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} 1 & -c_i \Delta t (\frac{1}{\rho} i k^*) \\ -d_i \Delta t \rho c^2 (i k^*) & 1 - c_i d_i (c \Delta t k^*)^2 \end{pmatrix}}^{M_{i+1}} \begin{pmatrix} \hat{u}_i \\ \hat{p}_i \end{pmatrix} \quad (17)$$

のように求まる ($i = 0, \dots, s$). s 段法に対しては, $M = M_1 \cdots M_s$ であるから

$$M = M_3 M_2 M_1 = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{pmatrix} \quad (18)$$

とおくと

$$\begin{aligned} m_1 &= 1 - (c_2 d_1 + c_3 d_2 + c_3 d_1) (\sigma \kappa^*)^2 + c_2 c_3 d_1 d_2 (\sigma \kappa^*)^4 \\ m_2 &= c_1 + c_2 + c_3 - (c_1 c_2 d_1 + c_2 c_3 d_2 + c_1 c_3 d_1 + c_1 c_3 d_2) (\sigma \kappa^*)^2 + c_1 c_2 c_3 d_1 d_2 (\sigma \kappa^*)^4 \\ m_3 &= d_1 + d_2 + d_3 - (d_1 c_2 d_3 + d_1 c_2 d_2 + c_3 d_3 d_2 + c_3 d_3 d_1) (\sigma \kappa^*)^2 - c_3 d_3 d_1 c_2 d_2 (\sigma \kappa^*)^4 \\ m_4 &= 1 - [c_1 d_1 + (c_1 + c_2) d_2 + (c_1 + c_2 + c_3) d_3] (\sigma \kappa^*)^2 \\ &\quad + [d_3 c_2 c_1 d_1 + c_1 d_1 c_2 d_2 + c_3 d_3 (c_2 d_2 + c_1 d_1 + c_1 d_2)] (\sigma \kappa^*)^4 - c_1 d_1 c_2 d_2 c_3 d_3 (\sigma \kappa^*)^6 \end{aligned}$$

である. ただし, ここで $\omega^* \Delta t = \nu^*$, $\sigma = c \frac{\Delta t}{\Delta x}$, $\kappa^* = k^* \Delta x$ とおいた.

5.1 SPRK3-CDS4 系の安定性限界

シンプレティック PRK-コンパクト・スタガード差分系の時刻 t から $t + \Delta t$ への遷移行列 M のスペクトル半径を $\rho(M)$ とおくと, この時間積分法の安定性の上限は

$$|\rho(M)| \leq 1 \quad (19)$$

によって与えられる. ここで

$$\begin{aligned} \text{tr}(M) &= 2 - (c_1 + c_2 + c_3) (d_1 + d_2 + d_3) (\sigma \kappa^*)^2 \\ &\quad + [c_1 c_2 (d_2 + d_3) d_1 + c_2 c_3 (d_3 + d_1) d_2 + c_3 c_1 (d_1 + d_2) d_3] (\sigma \kappa^*)^4 - c_1 d_1 c_2 d_2 c_3 d_3 (\sigma \kappa^*)^6 \\ \det(M) &= 1 \end{aligned}$$

であるから, 安定条件は

$$\text{tr}(M)^2 - 4 \det(M) \leq 0, \quad \frac{1}{2} |\text{tr}(M)| \leq 1 \quad (20)$$

と求まる (固有値が虚数のときには, $\rho(M) = 1$ となる. 固有値が実数のときには, 大きい方の固有値が必ず単位円の外側にある. そこで, 固有値が虚数であることが安定条件となる). 安定性の上限をクーラン数 $\sigma = c\Delta t/\Delta x$ を単位として, (k_1, d) 面上に示したものが図 5.1 である. κ_1 は CDS の非対角項係数 $\alpha = \alpha(k_1)$ の値を定める. 値域は $0 \leq \kappa_1 \leq \pi$ である. 一方 d は SPRK3 のパラメータで, 時間積分法の係数が実数となるためには $d < 3/4$ である必要がある.

安定性が最大となるのは, $(k_1, d) \simeq (0, 0.73)$ でそのとき $\sigma_{max} \simeq 1.7$ となる. $d \geq 2/3$ の部分ではそれ以下の部分より σ_{max} の値が大きい. $d < 2/3$ の部分では $0.8 \leq \sigma_{max} \leq 1.2$ で σ_{max} の分布は比較的平坦である. したがって, CDS6 を CDS4 に置き換えることによる安定性の低下はわずかであることがわかる. また CDS6 ($\kappa_1 = 0$) に対しては $d \geq 0.34$ で安定性の上限が 1.0 を越える.

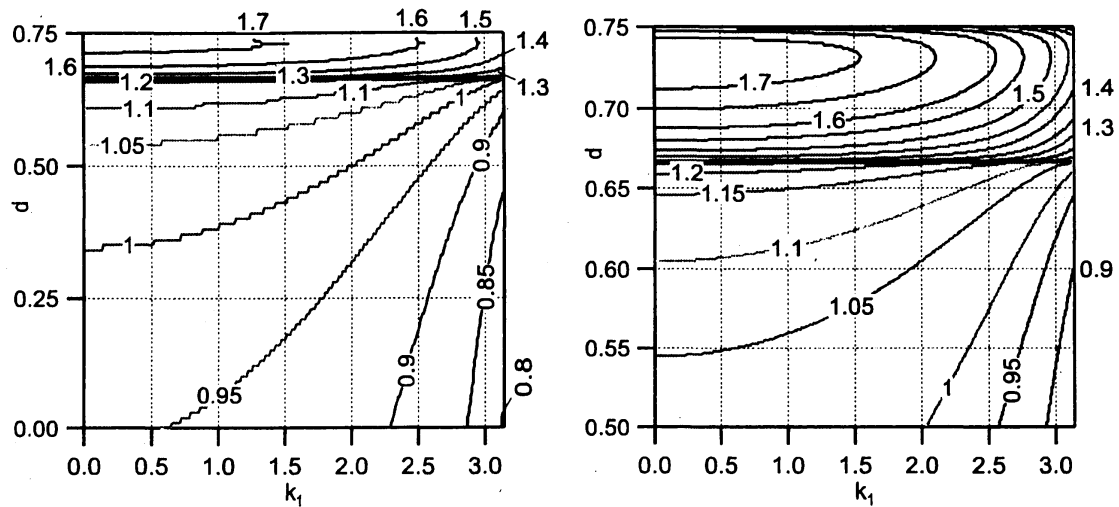


Figure 5.1: Stability limit on (k_1, d) -plane and $\max|V_g/\sigma - 1|$

5.2 SPRK3-CDS4 系の数値的群速度 V_g の精度限界

SPRK3-CDS4/6 法の数値的分散関係は

$$\cos(\nu^*) = \frac{1}{2} \frac{\text{tr}(M)}{\sqrt{\det(M)}} = 1 - \frac{1}{2}(\sigma\kappa^*)^2 + \frac{1}{24}(\sigma\kappa^*)^4 - \frac{1}{2}c_1c_2c_3d_1d_2d_3(\sigma\kappa^*)^6 \quad (21)$$

のように表わされる. 式 (21) 中の係数 $C_3 = \frac{1}{2}c_1c_2c_3d_1d_2d_3$ の値は, ルース法: $C_3 = \frac{7}{3456} \simeq 2.025 \cdot 10^{-3}$, マクラクラン法: $C_3 = 1.076 \cdot 10^{-3}$, 解 A: $C_3 = \frac{5}{7776} \left(\frac{107}{2} - 5\sqrt{\frac{209}{2}} \right) \simeq 1.535 \cdot 10^{-3}$, 位相誤差最小解 (解 C): $C_3 = \frac{1}{6!} \simeq 1.389 \cdot 10^{-3}$ である. これに対して, スキームがみたすべき厳密な数値的分散関係は

$$D(\nu^*, \kappa^*) = (\nu^*)^2 - (\sigma\kappa^*)^2 = 0 \quad (22)$$

である [24]. このような波の分散関係があるために, 群速度は $V_g = \frac{\omega}{k} = c$ をみたさなければならぬ. これは物理的厳密解で, 対応する数値的厳密解は

$$V_g = \sigma \quad (23)$$

となる. したがって, 波の分散関係が保持される (Dispersion Relation Preserving, DRP) 原則は線形波の場合には, できるだけ広範なクーラン数 σ と波数 κ に対して式 (23) が正確にみたされることほかならない.

そこで, 数値的群速度 V_g の精度限界波数 κ と (σ, d) の関係を CDS6 に対して調べた結果を図 5.2 に示す. 図には $\kappa_1 = 0$ つまり 6 次精度 CDS をもちいたときに相対誤差が許容値 $|V_g/\sigma - 1| \leq \epsilon$ をみたす最大波数 κ_{max} の値を CFL 数 σ と, SPRK3 のパラメータ d を縦横軸にとってプロットしてある. また図中の SL は安定性限界である. CDS6 が相対誤差 $\epsilon = 10^{-3}$ をみたす最大波数は $\kappa \simeq 1.28$ で, 時間積分を施してもこの精度が守られる d の値を探すと, $d \leq 0.57$ となる. この範囲の d の値を選ぶと, 安定限界までこの精度で積分が可能である. 安定限界の CFL 値は d の値を 0.57 から 0 に下げると, 1.10 から 0.951 まで下がる. とくに $d \lesssim 0.57$ のときには安定限界内では CFL 値によらず数値的群速度が正確となる最大波数が $\kappa_{max} \simeq 1.35$ と一定であることが注目される. このような性質を示すパラメータを選んで計算にもちいれば, 非常に正確に波の伝搬をみつかることができることになる. $d \leq 0.57$ の範囲では κ_{max} の値は 1.3 から 1.4 の間でほぼ一定値をとる. 以下のベンチマーク計算例では, このような条件がみたされるような範囲内から係数が簡単となる $d = 4/9$ (解 A) をとりあげて他の方法と比較した.

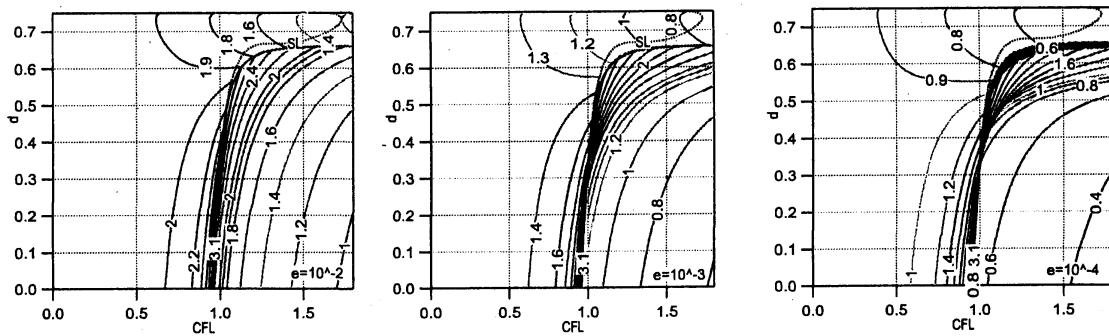


Figure 5.2: max k where $|V_g/\sigma - 1| \leq \epsilon$ on (σ, d) -plane for $\epsilon = 10^{-2}, 10^{-3}$ and 10^{-4}

6 計算結果

以下のようなベンチマーク問題 [25] について, 各種計算法を比較した. 初期値問題

$$u_t + p_x = 0, \quad p_t + u_x = 0 \quad (24)$$

$$p(0) = \cos\left(\frac{2\pi x}{a\Delta x}\right) \exp\left(-\ln(2)\left(\frac{x}{b\Delta x}\right)^2\right), \quad u(0) = p(0) \quad (25)$$

の $t_F = 1000, 10000$ における解を求める. ただし $a = 8, 6$, $b = 12$, $\Delta x = 1$, 計算領域は $-50 \leq x \leq t_F + 50$ にとった. 比較の対象として代表的な LDD ルンゲ・クッタ法

(Stanescu[26], Calvo[27], Berland[28]) を選んだ. SPRK 法には Ruth 法, McLachlan 法, 解 A, 解 C をとりあげた. 空間方向はいずれの時間積分法とも CDS6 をもちいている.

6.1 結果

図 6.1 と図 6.2 に $t = 1000, 10000$ における波形を $a = 8, 6$ に対して示す. また, 図 6.3 に数値誤差 $E_n = \frac{1}{n-2} \sum_{j=2}^{n-1} |f_j - f(x_j)|$ の値をクーラン数の関数として示す. f_j は格子点 j における数値解, $f(x_j)$ は同じ点における厳密解の値を表す.

波の 1 波長に十分な数の格子点が入っている場合には (図 6.1, 8p.p.w.) ここで取り上げたいずれの方法もある程度正確に波束をとらえることができる. しかし, この問題に対して 1 波長 6 点 ($\kappa = 1.05$) で波束の群速度を正確に計算することができているのは解 A と CDS6 の組み合わせだけである (図 6.2). 解 A と CDS6 の組み合わせはクーラン数 $\sigma = 0.9$ において V_g の相対誤差が 10^{-3} 以下となる波数範囲が $\kappa_{max} \leq 1.45$ である.

上に述べたベンチマーク問題の結果をクーラン数に対して誤差 E_n をプロットする形でまとめたものが図 6.3 である. この図は誤差の帯域幅を示すことになる [28]. ここで調べた 3 種の LDD ルンゲ・クッタ法は Stanescu らによるもの以外はいずれも類似の高い安定性をもっている. しかし, 安定性の上限にかけて誤差が悪化する傾向があり, 安定性上限近くまで時間刻みを大きくして計算することができない. 安定性上限より低い値のクーラン数において増幅率誤差限界と位相誤差限界のいずれかに達するので, 正確な計算をするためにはクーラン数をこれらの限界以下に小さくする必要が生じる.

これに対して symplectic 積分法は安定性の上限まで増幅率誤差限界がまったくないという長所をもっている. そこで, 格子点毎の誤差 E_n の値は位相誤差から生じていることになる. CAA 用スキームの解析には E_n がよくもちいられているが, この図からはエネルギー保存に関する情報を読み取ることができない. ここでとりあげた symplectic 積分法はパラメータ (d, κ_1, σ) がある値をとる場合に数値的群速度が波数によらず正確に表現される長所をもっている. 図 6.3 からはこのような特徴をみることができる.

6.2 考察

前節でとりあげた 4 種の 3 段 3 位の symplectic PRK 法の数値的群速度 V_g をクーラン数 0.5 と 1.0 に対してプロットしたのが図 6.4 である. クーラン数が 0.5 のときには各種法の V_g の違いは小さい. いずれの方法も相対誤差の許容値 10^{-3} に対して $\kappa \leq 0.41\pi \simeq 1.29$ において正確な数値的群速度を示す. この性能は空間方向のコンパクト差分 CDS6 の精度上限から定まっている. すなわち, 時間刻みが小さいために時間積分法は十分に正確で, 精度の上限は空間の離散化法の精度によって抑えられていることになる (図 6.5 も参照).

つぎに, クーラン数が 1.0 のときの V_g を調べると, Ruth 法の V_g は高波数で厳密値よりも大きく McLachlan 法と解 C の V_g は厳密値よりも小さくなっている. 図 6.4 の右端には原点まわりの拡大図を示してある. 1 次元波束伝播の数値計算結果をプロットした図 6.2 をみると, $t = 10000$ において Ruth 法による計算結果では波束が厳密解よりも速く進みすぎているのに対して, McLachlan 法と解 C の計算結果では逆に波束が厳密解よりも遅れている. このような傾向は数値的群速度の解析によって理解することができる.

ここで調べた 4 種の symplectic 積分法のうちでは $\sigma \simeq 1.0$ のときに V_g が正確となる波数

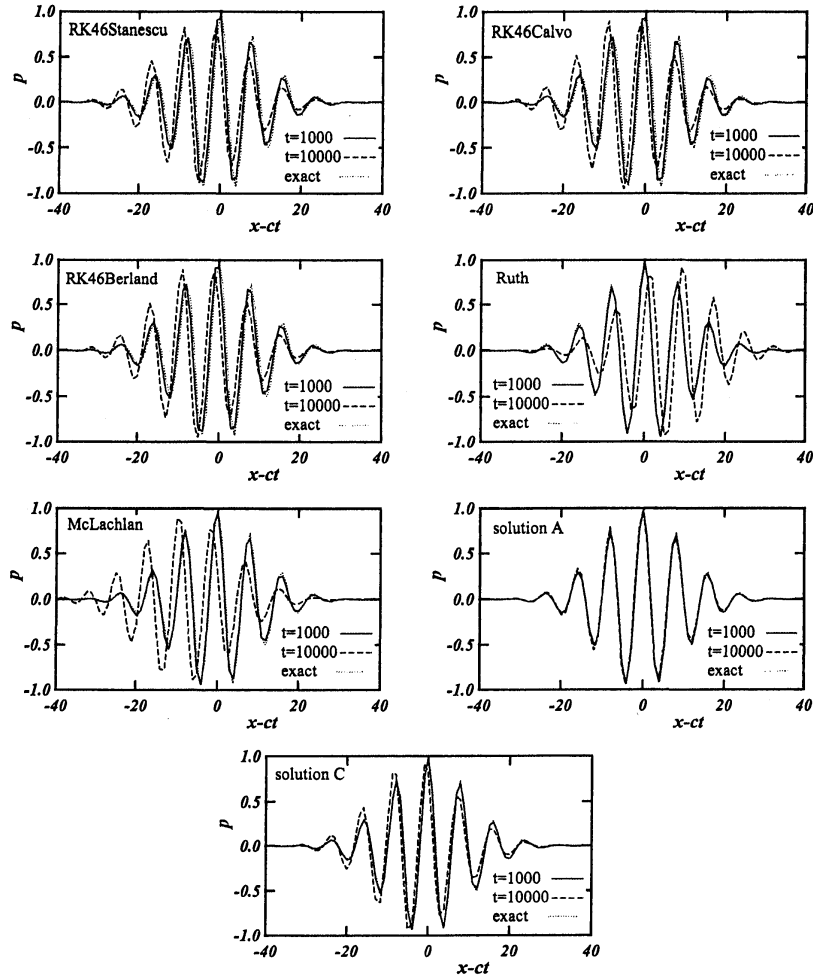


Figure 6.1: $a = 8$. $x' = x - ct$. Top left to bottom right, RK46-Stanescu ($\sigma = 0.6$), RK46-Calvo, RK46-Berland. Ruth's method ($\sigma = 0.9$), McLachlan's coefficients, solution A, solution C.

κ がもっとも大きいのは解 A である。この解 A と CDS6 の組み合わせは $\kappa \lesssim 1.2$ で V_g の相対誤差が $O(10^{-5})$ という精度を示している。

7 おわりに

常微分方程式に対する symplectic 積分法を波の式に適用する際には、位相誤差の小さいことが重要である。また、波の伝搬を数値計算するときには空間解像度が高いことが重要である。これらの知見をもとに時間、空間それぞれの方向に対して別々に計算法を選択しても必ずしも最良の結果をえられるとは限らない。時間、空間を組み合わせた数値計算法が示す DRP の性質または数値的群速度の正確性が重要である。

このような考え方にもとづいてコンパクト差分法 (CDS4/6)-分割されたシンプレクティッ

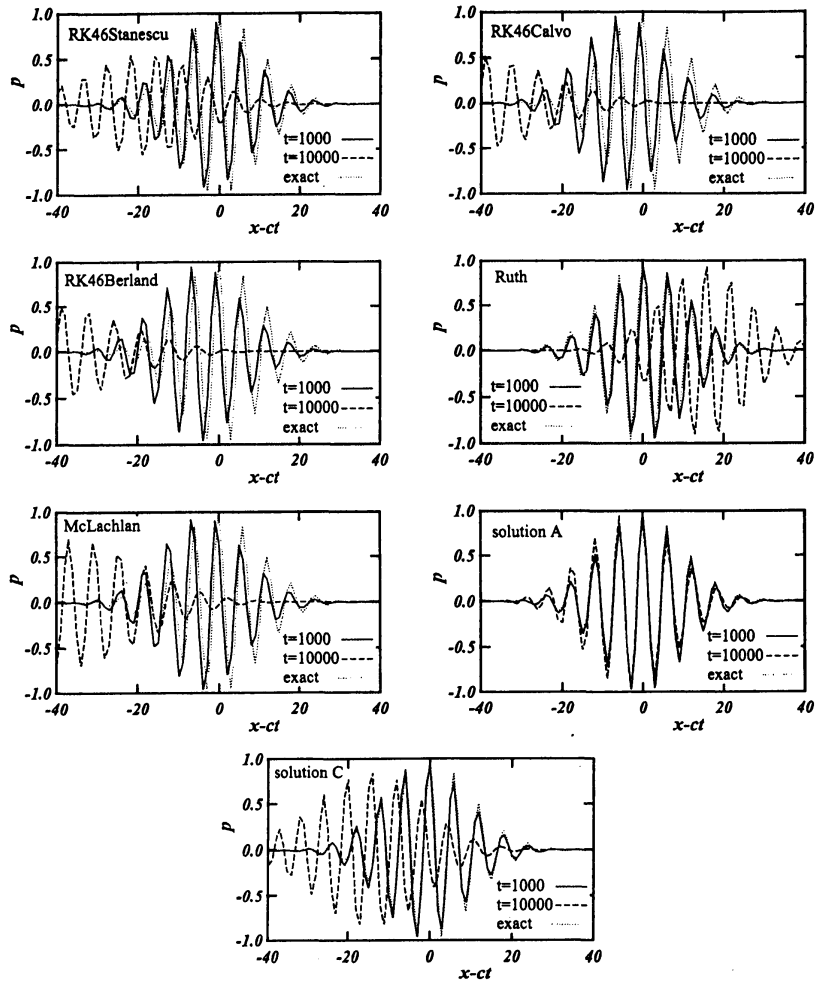


Figure 6.2: $a = 6$. $x' = x - ct$. Top left to bottom right, RK46-Stanescu ($\sigma = 0.6$), RK46-Calvo, RK46-Berland. Ruth's method ($\sigma = 0.9$), McLachlan's coefficients, solution A, solution C.

ク RK 法 (PRK33) 系の解析をおこなった。コンパクト差分法 (CDS4/6) は、非対角項の係数 α のかわりに厳密波数と実効波数の交点の座標 κ_1 をパラメータとしてパラメータ表示された 4,6 次 の 公式 を と り あ げ た。シンプレクティック積分法 (PRK33) は係数の和 $d (= d_1 + d_2)$ をパラメータとした 3 位の公式をもちいた。これらの公式の組み合わせを波動方程式に適用して安定性をできるだけ高く、位相誤差をなるべく小さくすることが課題である。

はじめに、周期境界条件の場合について解析をおこない、安定性を調べた。安定性を最大とする時間積分法はコンパクト差分の係数にはあまり影響されず、どの κ_1 の値に対しても $d \simeq 0.73$ であることがわかった。安定上限の最大値は $\sigma \simeq 1.7$ ($\kappa_1 = 0$ のとき) で、 κ_1 の値を大きく ($\kappa_1 \simeq \pi$) すると安定上限は $\sigma \simeq 1.45$ まで下がる。

つぎに、位相誤差を表わす指標として波の数値的群速度 V_g を調べた。 V_g は κ_1, d, σ (クーラン数) の関数として表される。その結果によると、 $\sigma \sim 1$ に対して適当な κ_1 と d の値を選

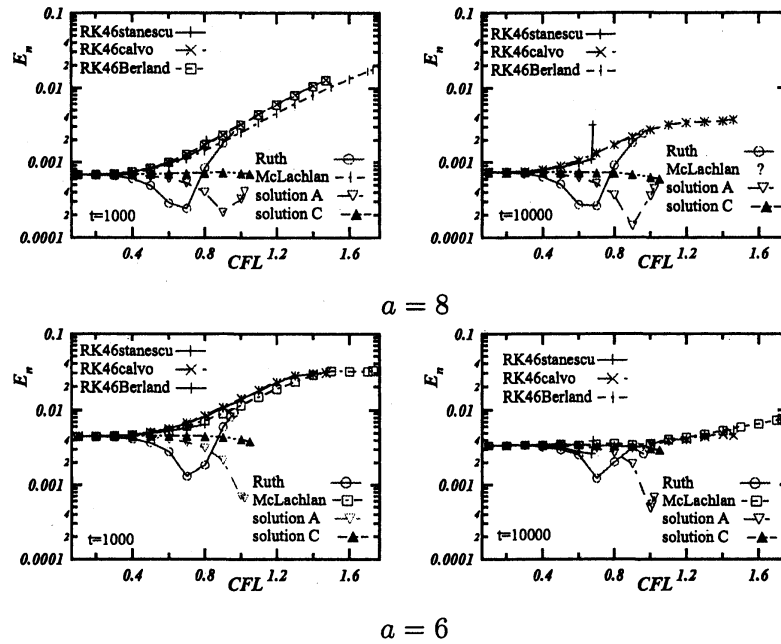
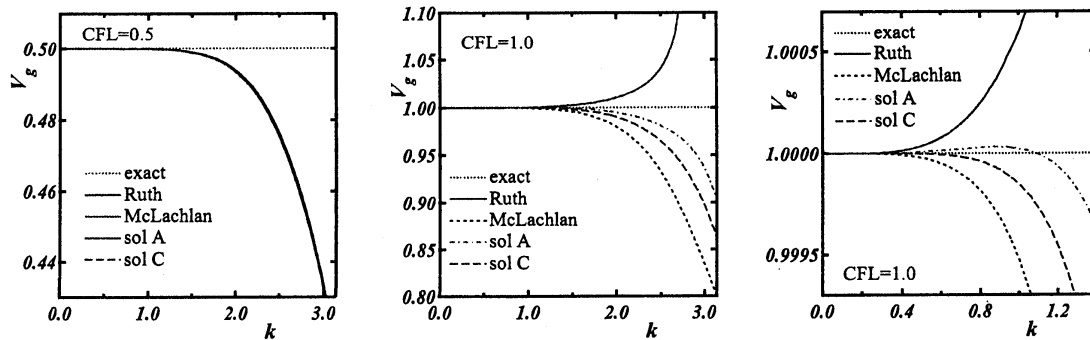
Figure 6.3: Numerical error E_n at $t = 1000$ and $t = 10000$ 

Figure 6.4: Numerical group velocity of SPRK3-CDS6 methods

ぶと $\kappa \in (0, \pi)$ で $V_g/\sigma \sim 1$ とできることがわかった (図 6.5 参照). このような性質をもちいれば, コンパクト差分で解像できる波数成分のすべてを空間方向と同様な精度をもって時間積分することができる. たとえば, 解 A ($d = 4/9$) + CDS4 ($\kappa_1 = 1.6$) の組み合わせでは安定上限 $\sigma_{max} = 1.01$, 解像度上限 $\kappa_f = 0.59\pi \simeq 1.85$ ($\epsilon = 10^{-3}$), $|V_g/\sigma - 1| \leq 5 \cdot 10^{-3}$ に対する位相誤差上限 $\kappa_{max} = \pi$ (同様に許容値 10^{-3} ならば, $\kappa_{max} = 1.2$) の性能となる. たとえばまた, 解 A + CDS4 ($\kappa_1 = 1.2$) の場合には, 安定上限は $\sigma_{max} = 1.02$, $\kappa_f = 1.2$ ($\epsilon = 10^{-4}$), 1.5 ($\epsilon = 10^{-3}$), $|V_g/\sigma - 1| \leq 10^{-3}$ に対する $\kappa_{max} = 2.2$) となる.

これからの課題として, 空間コンパクト差分法-時間積分法に対する最適値の選択があげられる. いまのところ暫定的に推薦できる値としては

$$\frac{1}{3} \leq d \leq 0.54 \dots, \quad \kappa_1 = 3(d - \frac{1}{3})\pi \quad (0 \leq \kappa_1 \leq 2.1 \dots) \quad (26)$$

付近の値が挙げられる。これは仮にまとめた値なので、これが適当かどうかについて今後もう少し検討を加えたい。解析結果を、このような簡便な形で最適値を提供できるようにまとめることを目標としたい。

また、音響の実用計算に対しては、境界スキームの最適化が課題である。過去の研究によると、境界においては 8p.p.w. 程度の格子密度が必要で、この改善が望まれる。

参考文献

- [1] Yee, K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media, IEEE Transactions on Antennas and propagation, AP-14(3) (1966) 802-807.
- [2] Fu, F.Q., Hussaini, M.Y. and Manthey, J.L., Low-dissipation and low-dispersion Runge-Kutta schemes for computational acoustics, J. Comput. Phys., 124 (1996) 177-191.
- [3] 岩津玲磨, 鶴秀生, 波動音響に対するシンプレティック時間積分法の最適化, オイラー方程式の数理解析: 渦運動と音波 150 年, 数理解析研究所講究録 1697, pp.167-178, 2010.
- [4] Lele, S.K., Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, J. Comput. Phys., 103 (1992) 16-42.
- [5] Gaitonde, D. and Shang, J. S., Optimized compact-difference-based finite-volume schemes for linear wave phenomena, J. Comput. Phys., 138 (1997) 617-643.
- [6] Ruth, D.R., A canonical integration technique, IEEE Trans. Nuclear Sci. NS-30, no.4 (1983) 2669-2671.
- [7] Ramboer, J., Broeckhoven, T., Smirnov, S. and Lacor, C., Optimization of time integration schemes coupled to spatial discretization for use in CAA applications, J. Comput. Phys., 213 (2006) 777-802. doi:10.1016/j.jcp.2005.08.033
- [8] Landau, L.D. and Lifchitz, E.M., Fluid Mechanics, Second English edition, revised Course of Theoretical Physics Volume 6, Elsevier, 1987, pp.251.
- [9] Hairer, E., Lubich, C. and Wanner, G., Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, second ed., Springer 2006.
- [10] McLachlan, R., Symplectic integration of Hamiltonian wave equations, Numer. Math. 66, 465-492, 1994.
- [11] 鶴秀生, 岩津玲磨, “音響設計のための時間領域差分法の高精度化,” 非線形波動現象の数理解析と応用, 数理解析研究所講究録 1645, pp.177-188, 2009.
- [12] Iwatsu, R. and Hideo Tsuru, Trigonometrically fitted symplectic integration methods of two-stage, second-order and three-stage, third-order, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vo.58, pp.295-300, 2010.

- [13] Tsuru, H. and Iwatsu, R., Accurate numerical prediction of acoustic wave propagation, *to appear in* Int. J. Adapt. Control Signal Processing, 2010 (DOI: 10.1002/acs.1118).
- [14] Iwatsu, R. and Hideo Tsuru, Extremely accurate symplectic integration method with frequency dependent coefficients for wave equations, *to appear in* Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vo.59.
- [15] Iwatsu, R., Two new solutions to the third-order symplectic integration method, Physics Letters, A 373, 3056-3060, 2009. (DOI:10.1016/j.physleta.2009.06.048).
- [16] McLachlan, R.I. and Atela, P., The accuracy of symplectic integrators, Nonlinearity 5 (1992) 541-562.
- [17] 岩津玲磨, 鶴秀生, 高解像最適化スキームを用いた時間領域の音響計算, 第 21 回数値流体力学シンポジウム講演論文集 (CD ROM, B2-1, 9pages) 2007.
- [18] Hardin, J.C. et al. (Eds.): ICASE/LaRC Workshop on benchmark problems in computational aeroacoustics, NASA CP -3300, 1995.
- [19] Iwatsu, R., Tsuru, H. and Hirosawa, K.: Application of optimized compact finite difference schemes on uneven grid to the computation of acoustic wave propagation, The Thirteenth International Congress on Sound and Vibration, CD-ROM (SS 38-3, 8 pages) Vienna, Austria, July 2-6, 2006.
- [20] 岩津玲磨, 鶴秀生, “時間領域音響計算に用いる compact 差分と多段階積分法の最適化,” 複雑流体の数値とシミュレーション, 数理解析研究所講究録 1539, pp.1-14, 2007.
- [21] 鶴秀生, 岩津玲磨, 音響シミュレーションにおけるコンパクト差分の精度向上, 電子情報通信学会 信学技報 vol.107, No. 469, US2007-91, RA2007-97 (2008-1), pp.13-18.
- [22] 鶴秀生, 岩津玲磨, 差分法による時間積分の高精度化と空間 Filtering による安定化, 日本音響学会 2008 年秋季研究発表会講演論文集, pp1131-1134, 2008.
- [23] Tam, C.K.W. and Webb, J.C. Dispersion-relation-preserving schemes for computational acoustics, J. Comput. Phys. 107 (1993) 262-281.
- [24] Schober, C.M. and Wlodarczyk, T.H., Dispersive properties of multisymplectic integrators, J. Comput. Phys. 227, 5090-5104, 2008.
- [25] Dahl, M. D. (Eds.): Fourth computational aeroacoustics (CAA) workshop on benchmark problems, NASA CP -212954, 2004.
- [26] Stanescu, D. and Habashi, W.G., 2N-storage low-dissipation and dispersion Runge-Kutta schemes for computational acoustics, J. Comput. Phys. 143 (1998) 674-681.
- [27] Calvo, M., Franco, J.M. and Rández, L., A new minimum storage Runge-Kutta scheme for computational acoustics, J. Comput. Phys. 201 (2004) 1-12.

[28] J. Berland, C. Bogey, and C. Bailly, Low-dissipation and low-dispersion fourthorder Runge-Kutta algorithm, *Comput. Fluids* 35 (2006) 1459-1463.

付録 A

Table A.1. Coefficients of third-order symplectic time integration method

	c_1	c_2	c_3	d_1	d_2	d_3
Ruth	$\frac{7}{24}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{24}$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{2}{3}$	1
solution A	$\frac{1}{12} \left(-7 + \sqrt{\frac{209}{2}} \right)$	$\frac{11}{12}$	$\frac{1}{12} \left(8 - \sqrt{\frac{209}{2}} \right)$	$\frac{2}{9} \left(1 + \sqrt{\frac{38}{11}} \right)$	$\frac{2}{9} \left(1 - \sqrt{\frac{38}{11}} \right)$	$\frac{5}{9}$
solution B	$-\frac{1}{12} \left(7 + \sqrt{\frac{209}{2}} \right)$	$\frac{11}{12}$	$\frac{1}{12} \left(8 + \sqrt{\frac{209}{2}} \right)$	$\frac{2}{9} \left(1 - \sqrt{\frac{38}{11}} \right)$	$\frac{2}{9} \left(1 + \sqrt{\frac{38}{11}} \right)$	$\frac{5}{9}$

Table A.2. Coefficients of third-order symplectic time integration method

	c_1	c_2	c_3
	d_1	d_2	d_3
McLachlan	d_3	d_2	d_1
	$z = - \left(\frac{2}{27} - \frac{1}{9\sqrt{3}} \right)^{1/3},$ $w = -\frac{2}{3} + \frac{1}{9z} + z,$ $y = \frac{1}{4}(1 + w^2),$ $\left(\frac{1}{9y} - \frac{w}{2} + \sqrt{y} \right)^{1/2} - \frac{1}{3\sqrt{y}}$		
	=0.919661523017399857	$\frac{1}{4d_1} - \frac{d_1}{2}$	$1 - d_1 - d_2$
solution C	0.260311692419906	1.094142798316745	-0.354454490736651
	0.630847692986669	-0.094142798316742	0.463295105330073

付録 B

Table B.1 Coefficients of staggered compact schemes
 CD4s : staggered fourth-order, CD6s : staggered sixth-order
 note $e_f = 1.0$ when $0.2671 \leq \alpha \leq 0.3674$ for CD6s $\epsilon = 10^{-1}$

ϵ	α	a	b
CDS4			
10^{-1}	0.212833485711787	0.965374885716160	0.460292085707413
10^{-2}	0.203215831180432	0.972588126614676	0.433843535746187
10^{-3}	0.170060344027744	0.997454741979192	0.342665946076297
10^{-4}	0.156199791520079	1.00785015635994	0.304549426680218
10^{-5}	0.150249257159465	1.01231305713040	0.288185457188529
10^{-6}	0.147500111333866	1.01437491649960	0.280625306168133
CDS6	$9/62(=0.145\dots)$

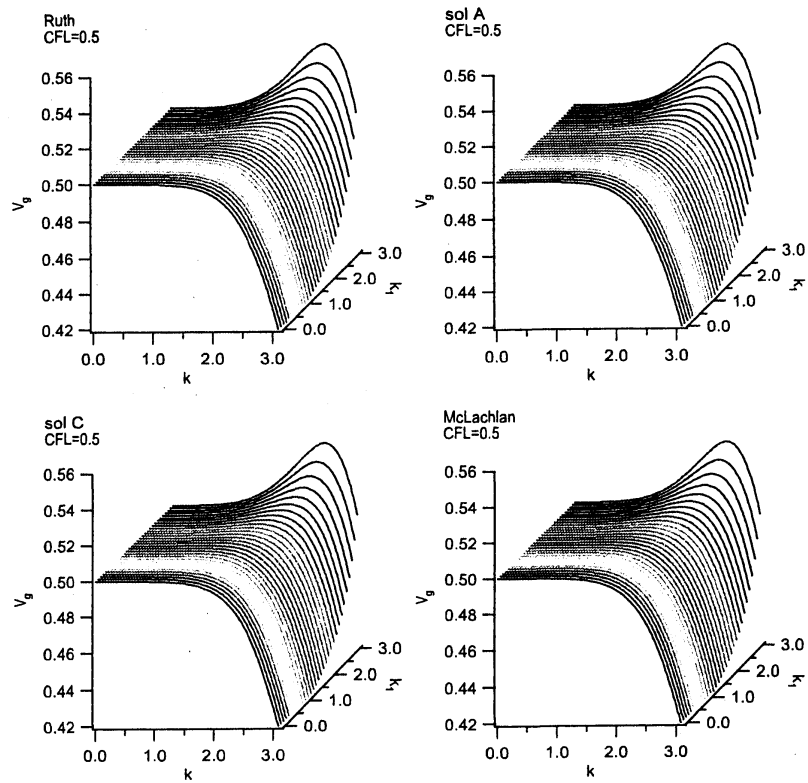


Figure 6.5: V_g at $\sigma = 0.5$, $d = 0, 4/9, 0.5367\dots, 0.7397\dots$

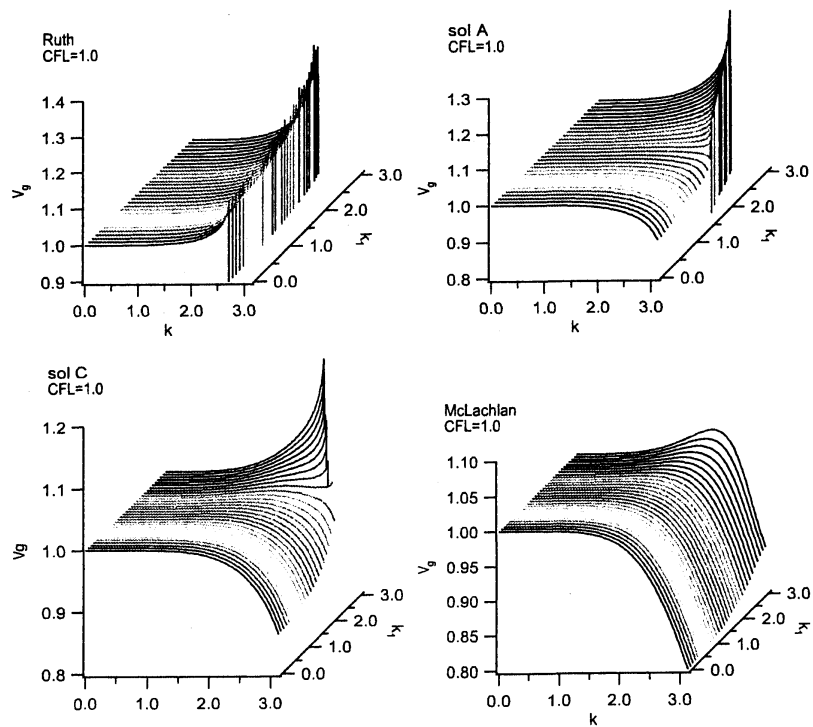


Figure 6.5: Numerical group velocity at $\sigma = 1.0$