

遷移の数値シミュレーション

- Spectral 法について -

東大生研 堀内 潔

(Kiyosi Horie)

§. 1. Spectral 法の紹介

例として、熱伝導方程式を考える。

$$(1.1) \quad \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & (0 < x < \pi, t > 0) \\ \text{境界条件} & u(0, t) = u(\pi, t) = 0 \\ \text{初期条件} & u(x, 0) = f(x). \end{cases}$$

$$(1.2) \quad \begin{cases} \text{この厳密解は,} & u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \sin nx, \\ & a_n(t) = f_n \exp(-Kn^2 t), \\ & f_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin nx dx \end{cases}$$

で与えられる。これを第 N 項で打ち切った

$$\text{スペクトラル近似} \quad u_N(x, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \sin nx$$

を考える。 a_n の満たす微分方程式は、

$$\frac{da_n}{dt} = -Kn^2 a_n \quad (n=1, \dots, N)$$

初期条件 $a_n(0) = f_n \quad (n=1, \dots, N)$

となる。従って、 $u(x, t)$ と $u_N(x, t)$

の誤差 $\varepsilon_N = u(x, t) - u_N(x, t)$ は、

$$\varepsilon_N = \sum_{n=N+1}^{\infty} f_n \exp(-kn^2 t) \sin nx \quad (1.3)$$

$$= O(\exp(-kN^2 t)) \quad \text{as } N \rightarrow \infty$$

と評価できる。したがって、 p -次精度の差分法の与える誤差が $O(1/N^p)$ であるのに対し、スペクトル法は、 N のどんな逆べきよりも速い収束を与える。計算の能率についても、(1.1)に関しては、高速フーリエ変換が使えるため、 $O(N \log N)$ の演算量である。

次の例として、passive scalarの convection (Color problem) を考える。これは、次式で与えられる流れ場中での図1(a)に示したユーンの剛体回転を取り扱ったものである。(Orszag (1971))

$$\text{流れ関数 } \psi(x, t) = -\frac{1}{2} \Omega x^2$$

$$(x^2 = x_1^2 + x_2^2)$$

A を color field, v を convection velocity として、

$$(1.4) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial A}{\partial t} = -V \cdot \nabla A, \\ \text{初期条件: } A(\underline{x}, 0) = \begin{cases} 1 - \frac{\bar{x}}{r} & (\bar{x} \leq r) \\ 0 & (\bar{x} > r) \end{cases} \\ \bar{x}^2 = (x_1 - x_0)^2 + x_2^2 \\ \quad (x_0 \text{ は, } \text{I-ions の 中心}) \\ \text{境界条件: } V(\underline{x} + 2\pi, t) = V(\underline{x}, t) \\ A(\underline{x} + 2\pi, t) = A(\underline{x}, t) \end{array} \right.$$

図 1 (a) では, $x_0 = 0.5$, $r = 0.25$

としてある. 問題(1.4) に対し,

Adams - Bashforth 形の時間差分を用い, 空間差分に, (1) 2次の中心差分, (2) 4次の中心差分, (3) スパクトル法を用い, ユーオンが一回転して戻ってきた時の解を, 図 1 (b), (c), (d) に各々示す. これより, 差分法を用いた場合には, 1. ユーオンの形状がくづれ, 特に, ピークの減衰が著しい. 2. ユーオンの後方に, "wake" ができ, 4次精度に上げても残る, ことがわかる. したがって, 差分の欠点は, phase の lag となって現われている. そこで, 遷移のシミュレーションのような精度の必要な計算では, こうした phase の lag は, 信頼性を著しく低下させ

るため、好ましくなく、スペクトル法のような高い精度をもった方法が必要となる。

しかしながら、スペクトル法を用いる際には、次のような困難が伴う。

- (i) nontrivial な境界条件を課さなくてはならない場合がある。
 - (ii) 非線形、もしくは、定数でない係数をもった項の計算が煩雑になる。
 - (iii) 複雑な形状に対する適用が難しい。
- (i) (1.1) に用いた $\sin$ 展開の場合、 E_N が考えている区間のどの x に対しても一様で、 N のどんな逆べきよりも速く収束するのは、 $u(x, t)$ が無限回微分可能で、次の境界条件 (1.5) を満たす場合である

$$(1.5) \quad \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}} = 0 \quad (\text{at } x=0, \pi, t>0)$$

これらの条件が満たされない場合、

$$E_N = O(1/N^p) \quad (p: \text{有限}) \text{ となり、差分法}$$

に対する優越性は消える。なお $\cos$ ine 展開の場合の (1.5) に相当する条件は、(1.6) である。

$$\frac{\partial^{2n+1} u(x,t)}{\partial x^{2n+1}} = 0 \quad (\text{at } x=0, \pi; t>0) \quad (1.6)$$

図2 は、 $f(x) = x/\pi$ に対する $\sin$ 展開の項数を数種類とした場合をプロットしたものであるが、(Gottlieb et al. (1977)) $f(x)$ は、既に $n=0$ で、(1.5) を満足しないため、Gibbs 現象と呼ばれる現象が生じている。

しかしながら、こうした固有関数展開で望ましいのは、固有関数の特別な性質によらず、展開すべき関数のなめらかさのみで収束率がよることである。

こうした展開の一例は、Chebyshev もしくは Legendre 多項式による展開である。この多項式による展開を用いれば、上記のような Gibbs 現象に伴う困難は、除去され、 $f(x)$ がなめらかでありさえすれば、速い収束性が得られる。これは、 $\sin$, $\cosine$ が non-singular な Sturm-Liouville 問題の解であるのに対し、Chebyshev 多項式等が、singular な Sturm-Liouville 問題の解になっていることによる。例えば、

Chebyshev 多項式 $T_n(x)$ は,

$$\frac{d}{dx} \sqrt{1-x^2} \frac{d\phi_n}{dx} + \frac{\lambda_n}{\sqrt{1-x^2}} \phi_n = 0 \quad (\lambda_n = n^2)$$

の解となっている。又, $T_n(x)$ は, $T_n(\cos \theta) = \cos n\theta$ とも表わされる。関数 $f(x)$ に対する Chebyshev 多項式展開 $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x)$ を考えると, $x = \cos \theta$ とおいて,

$$F(\theta) = f(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos n\theta$$

を得, $F(\theta)$ もしくは, $f(x)$ が p 階の連続微分をもてば, $n^p a_n \rightarrow 0 \quad (as \ n \rightarrow \infty)$ となるため,

$$\left| f(x) - \sum_{n=0}^N a_n T_n(x) \right| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |a_n| \quad (|x| \leq 1)$$

において, $F(\theta)$ がなめらか (無限回微分可能) であれば, N のどんな逆べきよりも速い収束が得られる。見方を変えてみると, この事は, $F(\theta) = f(\cos \theta)$ において, $F^{(2p+1)}(0) = F^{(2p+1)}(\pi) = 0$ という関係式が, 成立するため, (1.6) を満足することになっていることによる。 (p : 整数)

(ii). 次に, 非線形もしくは定数でない係数を持つ

項が含まれる場合を考える。

こうした方程式を

$$\frac{\partial u}{\partial t} = N(u, u) + L u$$

と書くことにし、これに対して、展開

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \psi_n(x)$$

を考える。今

$$N(\psi_m, \psi_p) = \sum_{n=1}^{\infty} C_{nmp}(t) \psi_n(x)$$

$$L(\psi_m) = \sum_{n=1}^{\infty} d_{nm}(t) \psi_n(x)$$

とすると、

$$\begin{aligned} \frac{da_n}{dt} &= \sum_{m=1}^N \sum_{p=1}^N C_{nmp}(t) a_m(t) a_p(t) \\ &+ \sum_{m=1}^N d_{nm}(t) a_m(t) \end{aligned}$$

($n=1, \dots, N$)

を得るが、右辺第一項の計算に $O(N^3)$ の演算量、第二項の計算に $O(N^2)$ の演算量が必要となり、膨大な演算量も必要とする。

これを解決する方法として、Pseudo spectral法がある。これは、考える x の区間に N 点の選点： $x_1, \dots, x_N$ を与え、

$$u(x_j, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \psi_n(x_j)$$

として, a_n を決める. 更に, u の微分分は次のように与える. 例えは,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{n=1}^N a_n(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial x}(x_j)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \sum_{n=1}^N a_n(t) \frac{\partial^2 \psi_n}{\partial x^2}(x_j)$$

更に, 非線形項 $N(u, u)$, 例えは $u \frac{\partial u}{\partial x}$ は, 実空間で計算するわけで, $\frac{\partial \psi_n}{\partial x}$ といった項が 少ない演算量で計算できれば, 上記の問題は, 解決される. 例えは, Fourier 展開では,

$$\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N a_n e^{inx} = \sum_{n=0}^N i n a_n e^{inx}$$

で, 極めて容易に計算でき; 又, Chebyshev 展開では,

$$\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N a_n T_n(x) = \sum_{n=0}^N b_n T_n(x)$$

と置くと, 漸化式

$$\begin{cases} C_{n-1} b_{n-1} - b_{n+1} = 2n a_n & (1 \leq n \leq N) \\ b_n = 0 & (n \geq N) \end{cases} \quad (C_0=2, C_n=1 (n>0))$$

により, $O(N)$ で容易に計算できる.

しかしながら, この方法は Aliasing と呼ばれる誤差を持つ. 例えは, Fourier 展開で考えると,

$$\begin{aligned} u u &= \left(\sum_l \tilde{u}_l \exp(ilx) \right) \cdot \left(\sum_m \tilde{u}_m \exp(imx) \right) \\ &= \sum_p \tilde{u}_p \exp(ipx) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{において, } \tilde{u}_p &= \sum_{l+m=p} \tilde{u}_l \tilde{u}_m + \sum_{l+m=p+N} \tilde{u}_l \tilde{u}_m \\ &\quad + \sum_{l+m=p-N} \tilde{u}_l \tilde{u}_m \end{aligned}$$

となり, 右辺第 2, 3 項に見られる誤差が生じる. しかし, この誤差は, circular な cut-off や phase-shift を 2/3 rule に基づいて適用することにより容易に消すことができる. 実際の計算では, momentum や energy の保存形で近似して, Aliasing が不安定性に結びつかないようにしているが, 実際の計算上, transient な状態を除けば, Aliasing が問題になる場合は, ほとんど無いように思われる.

更に, Pseudo-spectral 法は, 与えられた格子点数のもと, 最高の精度が得られる.

例えば, $\frac{\partial u}{\partial x}$ に 次のような中心差分で近似すると, $O((\Delta x)^2)$ の精度が得られる.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \simeq \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \simeq u_x + O((\Delta x)^2)$$

同様にして, 与えられた格子点から

$$\{u_{-k}, u_{-k+1}, \dots, u_{-1}, u_0, u_1, \dots, u_k\}$$

の場合, $\frac{\partial u}{\partial x} \simeq u_x + O((\Delta x)^{2k})$

の精度しか 最大限, 得られない. これに対し, Pseudo-spectral 法は, 微分係数を exact に与える.

- (iii) 複雑な形状に対する適用については, 現在, さかんに研究されており, 例えば, Orszag (1980), Patera (1984) を参照されたい. 更に, 本節全般の内容については Gottlieb et al. (1977) を参照されたい.

§. 2. 遷移の計算例.

§. 1 で述べたような事情から, Spectral 法を用いないと, 遷移の正確な計算は, 不可能であり, 現在までになされた主要な計算は, 全て, この方法を用いている.

(i) Orszag and Kells (1980)

これは, Plane Poiseuille 流; 及び,
 Plane Couette 流 に対し, Fourier -
 Chebyshev 展開を用いた計算で,
 Navier - Stokes 方程式の解法としては,
 Fractional step 法を用いている. 詳細
 は, 論文を参照されたいが, 主要な結論
 としては, 主流の 5~10% の強さをもつ
 初期擾乱の 3次元効果により, 実験で
 観察される 1000 のオーダーのレイノルズ数で
 の subcritical の遷移を説明した点にある.

(ii) Orszag and Patera (1983)

これは, (i) で用いた方法を, pipe 流 及び
 boundary layer も含めた一般的な wall
 bounded shear flow に適用し, 次のような
 "universality" を指適した.

1. 先づ, 基本流の primary (linear)
 instability が生じる.
2. 次に, この primary instability の
 non-linear saturation により secondary

flow が形成される。

3. secondary flow の linear instability が生じ、この段階では、3次元の infinitesimal な擾乱が、爆発的に成長する。

この際、2次元流は、“触媒”，すなわち、主流のエネルギーを3次元流に transfer する役目しか果たしていない。

(iii) Kleiser (1982)

(i), (ii) と同様にて、これも、Plane Poiseuille 流を取り扱ひ、Fourier - Chebyshev 展開を用い、Navier - Stokes 方程式の解法としては、Helmholtz 分解を用いている。

計算の条件は、全て、Nishioka et al. (1979) に合わせたもので、(但、実験の空間増幅は、計算では、時間増幅に置きかえられている。) one, もしくは two spike stage の初期まで、実験が見事に再現されている。

以上、3つの計算は、いづれも、基本流に、

2次元, 及び, 3次元の Orr-Sommerfeld 方程式の解を重ね合わせて与えられているが, 基本流に, ランダムな攪乱を重ね合わせた計算もなされている. 詳細は, Horiuti (1985) を参照された(が), そこでは, 比較的高めのレイノルズ数で, 攪乱も強めに与えられている. 展開としては, Fourier - Finite difference が用いられたが, T-S 波があらわに現われずに, いわゆる, peak-valley splitting が生じ, 強い3次元性に発展していく様子が見られた. この意味では, (2) で指摘された 2次元流の触媒としての役目を支持するように思われるが, 更に研究の必要な点である.

以上は, いづれも, 時間増幅として遷移を扱ったものであるが, 空間増幅としてまともに扱った計算は, まだ, ほとんどない. Spectral 法で, 空間増幅を扱おうには, 一方向 Fourier 展開, 残る2方向

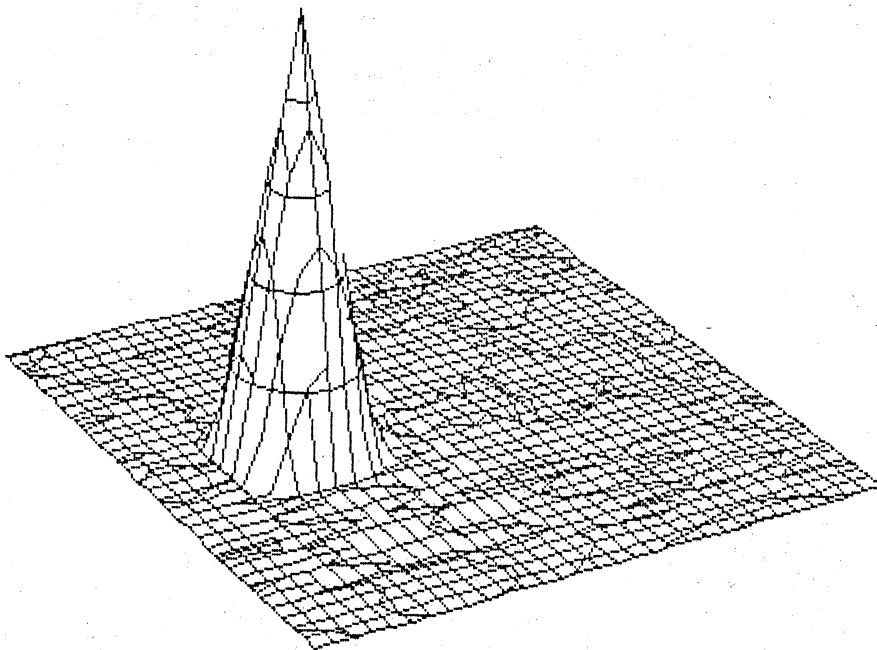
に Chebyshev 展開を用い, 適当な inflow / outflow の境界条件を課すことになるが, その際, 7ルに 2次元の問題を解く必要が生じ, 計算量が格段に増大する. 今後の計算機の発達にもよるが, 重大な課題の一つである. 但し, Orszag et al. (1980) 中では, inflow / outflow の条件を課した計算との比較に多少触れており, 本質的な差異はなかったとされている点に言及しておく.

参考文献

1. S.A. Orszag (1971) J.F.M. vol. 49, p. 75
2. D. Gottlieb and S.A. Orszag (1977)
NSF-CBMS Monograph No. 26, SIAM
3. S.A. Orszag (1980.) J. Comp. Phys. vol. 37
p. 70
4. A.T. Patera (1984) J. Comp. Phys. vol. 54, p. 468.
5. S.A. Orszag and L.C. Kells (1980)
J. F. M. vol. 96, p. 159.

6. S.A. Orszag and A.T. Patera (1983)
J. F. M. vol. 128, p. 347.
7. L. Kleiser (1982) KfK Report 3271
8. M. Nishioka et al. (1979)
Proc. IUTAM Symposium, Stuttgart
9. K. Horiuti (1985) to appear in
"Turbulent Phenomena" ed. T. Tatsumi
(TIT Press).

四



四 1 (a)

メッシュ
32 × 32

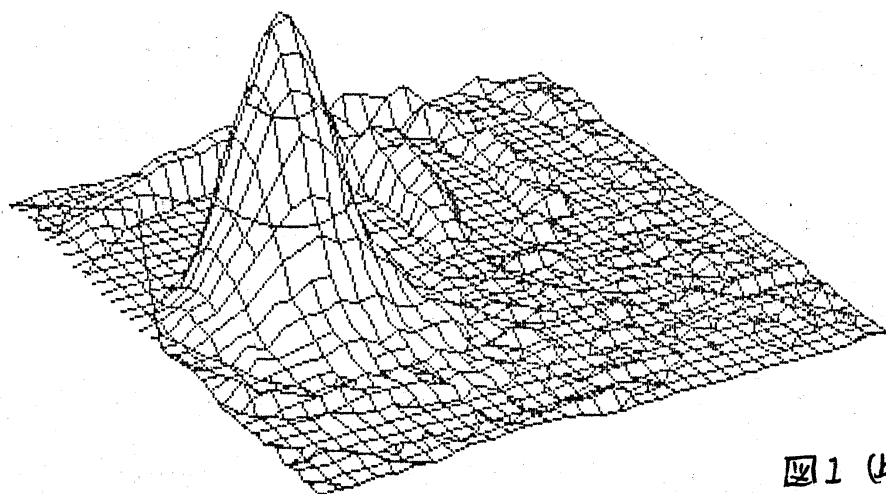


図1 (b)

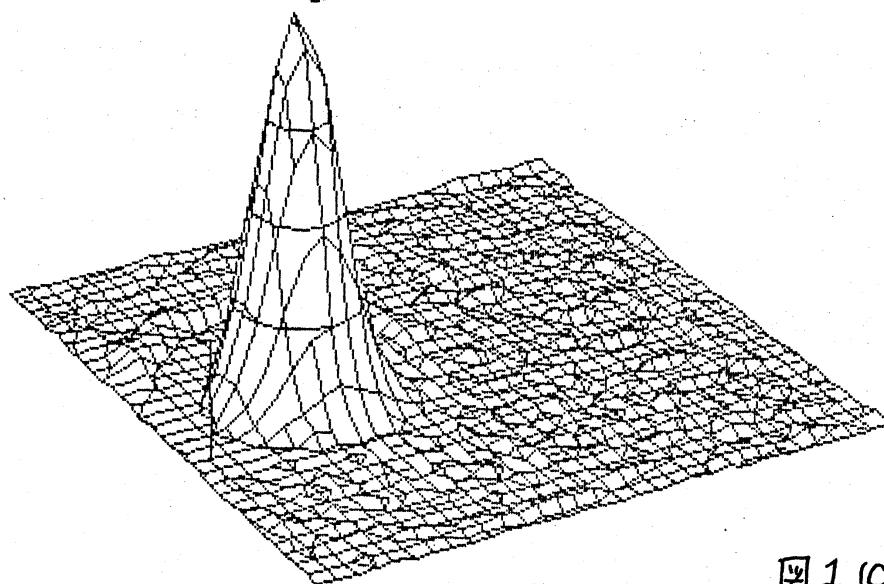


図1 (c)

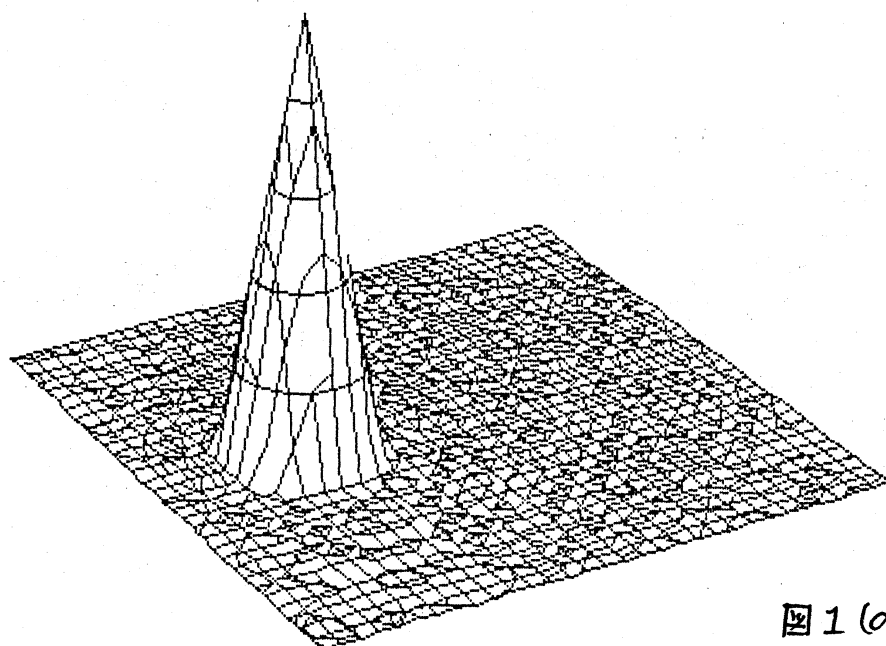


図1 (d)

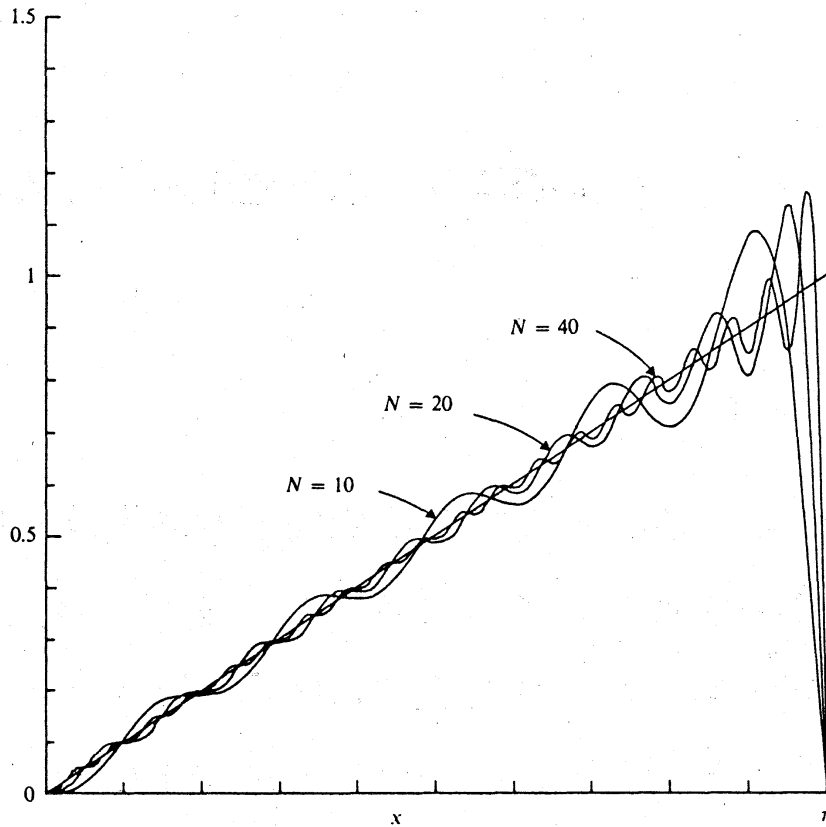


FIG. 3.3. A plot of the N -term partial sums of the Fourier sine series expansion of the function x/π for $N = 10, 20, 40$. The function x/π is also plotted. Observe the Gibbs phenomenon near $x = \pi$. Also observe that the rate of convergence of the Fourier series is like $1/N$ for x in the interior of the interval $0 < x < \pi$.

2