

定係数偏微分作用素のフーリエ表現を用いた数値解法

東北工業技術研究所 米谷道夫

Abstract.

偏微分方程式の数値解法として、Fourier 変換した方程式を周波数空間で解く方法を検討した。すなわち、定係数線形作用素の全表象との周波数空間での代数積で数値積分を行う方法である。この方法では数値演算を周波数空間で行うので、ソースとしてのデルタ関数を容易に取り扱うことができるという利点がある。幾つかの例を具体的に解くことで、計算方法の検証を行った。例えば Dirichlet 境界値問題を、境界上に配置されたソースがあるとして、境界条件と合うようにその強度を調節することで解くことができた。また非線形方程式の簡単な例として Burgers 方程式が逐次近似法で解けることを示した。これらの検証により、計算精度にやや問題が残っているが、非線形方程式の境界値問題などのさらに一般的な問題への適用可能性を明らかにした。

1. はじめに

微分方程式の数値解法には多くの方法があるが、その中の有力な方法の 1 つに境界要素法がある。境界要素法は境界積分法による数値計算の一種で、線形作用素の Green 関数や基本解を利用して、もとの微分方程式を境界面上の積分からなる境界積分方程式に定式化する方法である。

この境界要素法では、一般の線形偏微分作用素 P についての偏微分方程式、

$$Pu = f \quad (1)$$

を解くときに基本解の具体的な構成が難しいという欠点がある。ここで、定係数偏微分作用素であれば、作用素のフーリエ表現つまり全表象 (total symbol) は容易に求めることができ、境界のないときの解は

$$u(x) = F^{-1} \left(\frac{Ff(\xi)}{P(\xi)} \right) (x) \quad (2)$$

と表される。ここで F はフーリエ変換演算を、 F^{-1} はフーリエ逆変換演算を表す。この式 (2) から解 u が、基本解を具体的に構成することなく、全表象 (total symbol) から直接的に得られることは容易に理解できる。また、境界積分法では微分方程式の非線形項は合成積となるが、この合成積はフーリエ空間 (周波数空間) では代数積であり、実空間で計算するよりも容易なことも明らかである。

本報告では主に Dirichlet 境界値問題に対して、定係数偏微分作用素のフーリエ表現を直接に用いて、フーリエ空間において数値解析的に行う方法を具体例をもって示す。

2. 拡散方程式

拡散方程式の基礎式は、拡散係数を D として、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3)$$

である。ここで初期条件がデルタ関数で与えられる問題を考える。言い換えると基本解を数値的に求めてみるということである。

$$u_0(x) = u(x, 0) = \delta(x) \quad (4)$$

まず両辺を空間についてフーリエ変換すると、

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = -\xi^2 D \hat{u} \quad (5)$$

$$\hat{u}(\xi, 0) = 1 \quad (6)$$

である。これを時間について差分近似して整理すると

$$\hat{u}(\xi, t) = \frac{1}{(1 + D\xi^2 \Delta t)} \hat{u}(\xi, t - \Delta t) \quad (7)$$

となる。これは初期値 $u_0(x)$ のフーリエ変換 $\hat{u}_0(\xi)$ から出発して、 Δt 時間刻み毎に (7) 式の操作を繰り返せば解が得られことを示している。ここで実空間での関数値を求めるには、周波数空間で与えられた関数をフーリエ逆変換変換すればよい。

実際に数値計算を行うには、周波数空間の関数 $\hat{u}(\xi, t)$ を離散化して、離散フーリエ変換された周期 N をもつ周期離散数列として取り扱う。この離散フーリエ変換には、その高速アルゴリズムである高速フーリエ変換 (FFT) を用いる。つまり、計算領域を 1 つの単位胞 (セル) として、このセルの繰り返しパターンからなる周期関数として計算することになる。FFT による数値フーリエ変換では、例えば初期値が実空間で与えられる場合には、まず最初に実空間における関数の周期を X とし $\Delta x = X/N$ 間隔でサンプリングを行う。つまり格子点上での関数値からなる離散信号 (インパルス列) を得る。これを FFT で離散フーリエ変換すれば、周期 $2\pi N/X$ で周波数分解能 $\omega_0 = 2\pi/X$ の離散スペクトルが得られる。このスペクトルの定義域は $(0, 2\pi N/X)$ なので、(7) 式のフーリエ変換表現における定義域に一致させるため周期条件を考慮して $(-\pi N/X, \pi N/X)$ に座標変換する。離散化した作用素のフーリエ表現 (全表象) と関数のスペクトルとの代数積をとることにより数値解が得られる。従ってこの計算方法では、周波数領域はサンプリング個数で決められるため、高周波成分の寄与は無視されることになる。

初期値がデルタ関数 $\delta(x)$ 、つまりフーリエ空間では定数で与えられたときの計算結果を Fig.1 と Fig.2 に示す。これらの例では拡散係数 $D = 1$ 、時間刻み $t = 0.00001$ とし、実空間での計算領域 $(-1, 1)$ を $N = 512$ で分割した。また、丸め誤差を少なくするため倍精度計算で行った。

Fig.1 は各時間における u 分布の数値計算結果で、Fig.2 は数値計算結果と基本解との誤差である。ここで相対誤差は (解析解 - 数値解) / (各時間ステップでの解析解の最大値) で求めた。

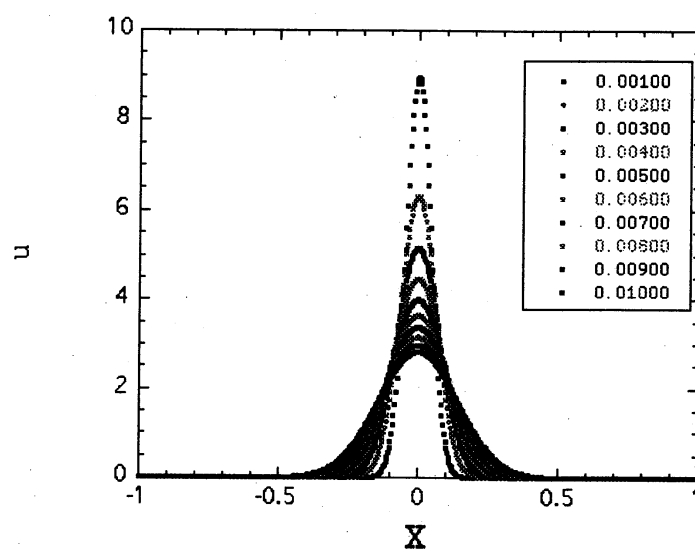


Fig. 1. 拡散方程式の計算結果

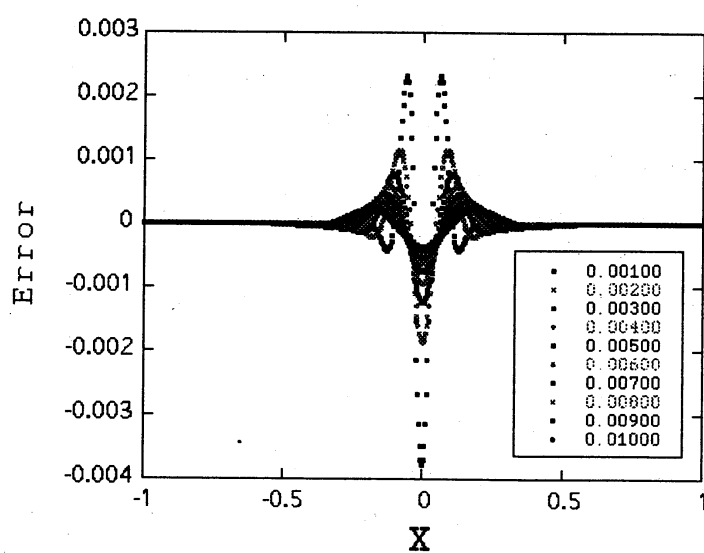


Fig. 2. 相対誤差

Fig.2を見ると、計算誤差は時間ステップが進むほど小さくなる。つまり時間が進むほど正解に近づくように見える。これは(7)式の定式化から理解できるように、計算は周波数空間でのみ行われているが、計算の初期段階ほど高周波成分の寄与が大きいがこれが無視されるためである。例えば、この離散化表現された格子点系においてデルタ関数とは、幅 $\Delta x = X/N$ で大きさ N/X の矩形近似であり解析的な表現とは大きく異なる。ここで、格子点間隔 ΔX を限りなく小さくした極限がデルタ関数になる。

計算精度がそれほど高くない理由の別の1つは、FFTで数値積分を方形近似で行うことに起因すると思われる。ただし、この例では関数 u は偶関数であり、FFTによる数値積分は台形公式の精度を有しているはずである。この拡散方程式の例では、計算は周波数空間でのみ行っており、上記のFFTの抱える性質は本質的には問題ではないが、非線形項を含む方程式などの場合にはこの影響が無視できなくなることも考えられる。

3. 計算の近似精度について

一般に、定係数偏微分作用素 P が与えられたとき、つまり

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = P \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) u(x,t) \quad (8)$$

$$u(x,0) = f(x) \quad (9)$$

のとき、この初期値問題の解は、

$$\hat{u}(\xi,0) = e^{P(i\xi)} \hat{f}(\xi) \quad (10)$$

である。本報告の数値解法では、この問題を次式で近似的に解くことになる。

$$\hat{u}(\xi_k,t) = \left[\frac{1}{1 - \hat{P}(i\xi_k)\Delta t} \right]^n \hat{f}(\xi_k) \quad (11)$$

$$\xi_k = -\pi N/X + k\Delta\xi \quad (12)$$

$$t = n\Delta t \quad (13)$$

ここで、 X は基本周期つまり計算区間幅で、 N はその空間領域の分割数である。 $\hat{u}(\xi_k,t)$ はフーリエ変換された変数で、空間について離散化されている。つまり、フーリエ空間での格子点番号 k での値をとっている。明らかに、ある周波数 ξ_k での関数値は他の周波数とは独立している。

また、(11)式について二項式定理を用いて整理すると、

$$\left[\frac{1}{1 - \hat{P}(i\xi_k)\Delta t} \right]^n \cong \exp(\hat{P}(i\xi_k)t) + \frac{1}{2}(-\hat{P}(i\xi_k))^2 t \Delta t \exp(\hat{P}(i\xi_k)t) + O(\Delta t^2) \quad (14)$$

が得られる。これを理論解(10)式と比較すると、誤差は第2項以降であることが分かる。従って、 $\Delta t \ll |\hat{P}(i\xi_k)|^2 t$ となるような条件で計算すれば正確な値に近づくことが分かる。また、作用素 P が例えば拡散方程式のそれのときには、高周波成分ほど誤差が大きくなるが、その一方でまた解を構成する周波数成分のうち高周波成分ほど速く減衰する。

4. Dirichlet 境界値問題

次に境界値問題を考える。先の例では原点にソース項としてデルタ関数が与えられた初期値問題の時間発展を解いたが、定式化から明らかなようにソース点を固定しておいてソース強度を時間変化させることも可能である。すなわち放物型偏微分方程式の基礎式に N 個のソース項 S_i を付加して、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Pu + f + \sum_{i=1}^N S_i(t)\delta(x - x_i) \quad (15)$$

とする。ここで P は線形偏微分作用素とする。この式は境界点 x_i 以外では基礎式そのものである。この境界点のソース S_i の強度を調整して境界で、次の境界条件、

$$u(x_i, t) = \phi(x_i, t) \quad \text{at } x = x_i \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (16)$$

を充たすようにすることを考える。つまり基礎式の定義域を全空間に拡張して、境界条件をいわば関数 u の束縛条件として取り扱おうということである。

これまでと同様に基礎式を空間についてフーリエ変換して、時間について差分近似すれば、

$$\hat{u}(\xi, t) = \left(-P(i\xi) + \frac{1}{\Delta t}\right)^{-1} \left(\frac{\hat{u}(\xi, t - \Delta t)}{\Delta t} + \hat{f}(\xi, t) + \frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^N S_i(x_i) \exp(-i\xi x_i)\right) \quad (17)$$

が得られる。実空間における関数はフーリエ逆変換して得られるが、境界条件を充たすとは、

$$\phi(x_i, t) = u(x_i, t) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x, t) \delta(x - x_i) dx \quad (18)$$

の式が成り立つようにすることであるから、結局、境界 x_i において

$$\sum_{j=1}^N S_j(x_j) \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(-P(i\xi) + \frac{1}{\Delta t}\right)^{-1} \frac{1}{2\pi} \exp(-i\xi x_j) \right] \exp(i\xi x_i) d\xi \quad (19)$$

$$= \phi(x_i, t) - \int_{-\infty}^{\infty} \left(-P(i\xi) + \frac{1}{\Delta t}\right)^{-1} \left(\frac{\hat{u}(\xi, t - \Delta t)}{\Delta t} + \hat{f}(\xi, t)\right) \exp(i\xi x_i) d\xi \quad (20)$$

となる。この連立 1 次方程式を解けば境界条件を充たす適切なソース強度 S_i が定まる。

Neumann 問題も本質的には Dirichlet 問題と同じ操作で求めることが出来る。すなわち、今度はソース強度を調節して境界点の右近傍あるいは左近傍の微係数を Neumann 条件を充たすように調節すればよい。また、境界ソース項は必ずしも格子点上にある必要はない。

5. Burgers 方程式

1 次元の Navier-Stokes 方程式とも解釈され、数値解法のテストに用いられる Burgers 方程式の場合を見てみる。

基礎式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (21)$$

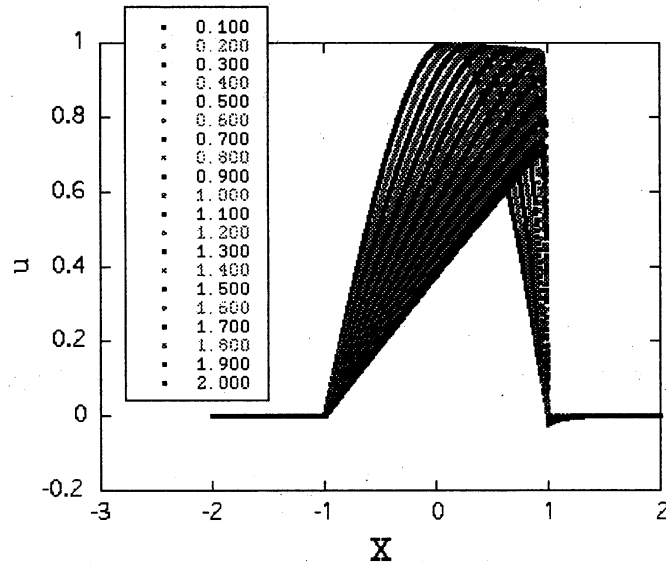


Fig. 3. Burgers 方程式

である。初期値が $\sin$ 曲線、

$$u(x, 0) = \sin\left(\frac{\pi}{2}(x+1)\right) \quad (22)$$

で与えられ、境界条件が、

$$u(-1, t) = u(1, t) = 0 \quad (23)$$

の場合を考える。

この問題の計算スキームは次式になる。

$$\hat{u} = \frac{1}{\left(\nu\xi^2 + \frac{1}{\Delta t}\right)} \left[F\left(\frac{u(x, t - \Delta t)}{\Delta t} - u(x, t) \frac{u(x + \Delta x, t) - u(x - \Delta x, t)}{2\Delta t}\right) + \frac{S_1(t) \exp(i\xi) + S_2(t) \exp(-i\xi)}{2\pi} \right] \quad (24)$$

ここで F は Fourier 変換演算を表す。また、非線形項の部分はあらかじめ実空間で計算してから FFT を用いて周波数空間に移す。両辺に未知関数 u が含まれているが、これは逐次近似法により所定の誤差に収まるまで収束させる。ここで、 $S_1(t)$ と $S_2(t)$ は境界値を充たすように導入されたソース項である。これらのソース項の強度を前述の方法により各時間ステップ毎に調節することで、境界条件 (23) 式を充たすことができる。

拡散係数 $\nu = 0.01$ としたときの計算結果の一例を Fig.3 に示す。計算例は領域を 1024 分割し、 $\Delta t = 0.001$ で時間刻み 2000 ステップまで計算した結果である。Fig.3 の右境界点 $x = 1$ において $u = 0$ であり境界条件を充たしている。しかし、 $1 < x$ の領域では u が負の値を持っている。これは左側から流入してくる u を打ち消すために右境界点 $x = 1$ に付

加した境界ソース項の影響と考えられる。本方法ではこの境界点の外側の領域でも Burgers 方程式を解いている。解析的に境界積分を行ったときにはこの $1 < x$ の領域では関数値は恒等的に 0 になるが、計算結果では異なる。その理由は、時間について差分近似にある。数値解析でも $\Delta t \rightarrow 0$ となるように十分に小さな時間刻みにすれば、このような影響は減少する。例えば、流入が少ない左境界点 $x = -1$ の付近では、数値解析結果は解析的解とよく一致する挙動を示す。

6. Poisson 方程式

Poisson 方程式は拡散方程式の定常問題と考えることができる。例えば、境界値問題の設定を放物型方程式のときと同様にしたときの、1 次元の場合の Poisson 方程式は、

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = f(x) + \sum_{i=1}^N S_i \delta(x - x_i) \quad (25)$$

である。この場合にはフーリエ空間の原点でフーリエ表現された基本解が無大となるため、本来は拡散方程式と同様に扱うことは出来ない。しかし、これを解析的な取り扱いに類似して、十分に小さい虚数 $i\varepsilon$ を導入することで、

$$\hat{u}(\xi) = \frac{1}{-\xi^2 + i\varepsilon} \left(\hat{f}(\xi) + \frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^N S_i \exp(-i\xi x_i) \right) \quad (26)$$

と近似する。もちろん超関数の意味で導入される ε は無限小であるが、数値計算で導入される ε は計算の桁落ちを考慮した有限の値でなければいけない。また、虚数 $i\varepsilon$ の代わりに実数 ε を導入すると放物型方程式の時間の差分近似で大きな時間刻みを採用したことに相当する。

数値計算ではフーリエ空間で離散化された数列を扱うことになるが、その刻み幅 $\Delta\xi$ に比較して十分に小さな $i\varepsilon$ を採用すると、この導入項の影響は事実上 $\xi = 0$ の格子点だけに限られる。従って $\xi = 0$ において (26) 式右辺の $\{\}$ 内の和がゼロのとき上記の表現は意味を持ち、Poisson 方程式の近似解を与えることが期待できる。

例えば、

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = -\sin(\pi x) \quad (27)$$

で

$$u(0) = 0 \quad (28)$$

$$u(1) = 0$$

の境界条件が与えられた場合を解いてみる。

この問題の解は、

$$u(x) = \frac{1}{\pi^2} \sin(\pi x) \quad (29)$$

であることが知られている。

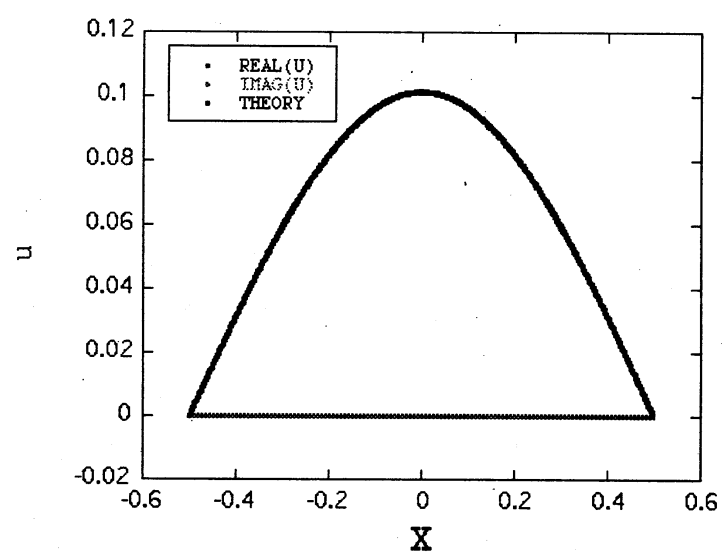


Fig. 4. Poisson 方程式

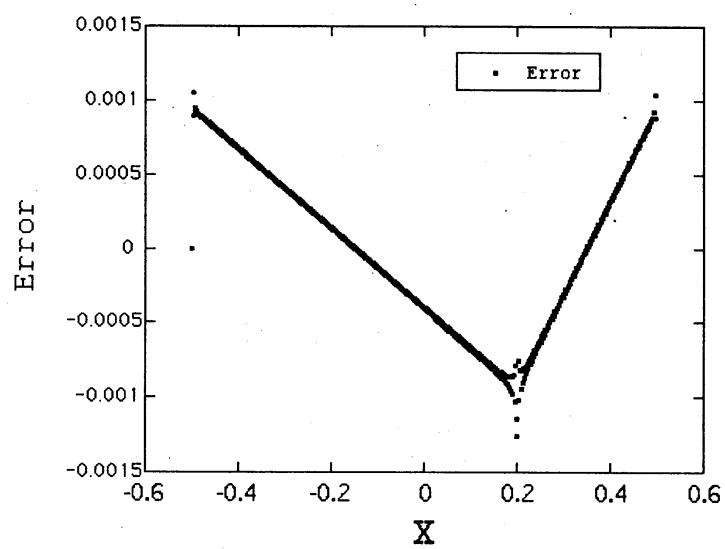


Fig. 5. 相对誤差

Fig.4 に計算結果を、Fig.5 に理論解と比較した誤差を示す。この例では $\hat{f}(0)$ はけっしてゼロではない。しかし、数値計算の途中経過をみると、ソース項を加えた $\{\}$ 内全体ではゼロとなっているので数値解が得られていることが分かる。このように作用素のフーリエ表現の逆元が0となることを避けるために、小さい虚数 $i\epsilon$ を導入することで数値解を得ることが可能な場合もあることが分かる。

7. おわりに

非線形偏微分方程式を時間について差分近似した上で、定係数作用素の部分とそれ以外の部分に分離して定係数作用素のフーリエ表現つまり全表象を利用して、積分演算を離散化されたフーリエ空間における代数積で行うことで数値解を得る計算方法について幾つかの例で説明した。

本方法では、ソース項として空間中の任意の点にデルタ関数を与えて数値計算できることを示した。つまり実空間を離散化した格子点空間中の任意点に、離散化した意味でのデルタ関数を与えて、その伝播関数を計算できることを示した。この延長として、Dirichlet 境界値問題を境界上に置かれたソース強度の問題として解けることを示した。信号解析で知られているように、格子点に離散化された空間ではデルタ関数の組み合わせで任意の関数が表現できる。つまり多くの問題がデルタ関数の伝播を求めることに帰着される。このことにより本方法では、種々の問題を単純にデルタ関数の空間分布を変えるだけで表現でき、ほとんど同じプログラムコードで計算できる。このことも本方法の利点の1つである。しかし、計算精度はそれほど高いとは言えないようである。その原因は高速フーリエ変換 FFT の数値積分が方形近似であり、積分公式としての計算精度がよくないためであろう。

本報告では述べなかったが、熱源移動問題や KdV 方程式への適用も可能で、また多次元問題への拡張に何の困難もない。さらに、連立偏微分方程式系のときには作用素行列表現を用いることで解法を拡張できる。但し、境界点の数が多くなる境界値問題を解くには、連立1次方程式の解法に若干の工夫を要する。しかし本方法では、境界要素法などの境界積分法のもつ利点の幾つか、例えば境界面近傍での計算精度を失うことになる。その代わり、一度開発したプログラムは基礎式の形式に縛られることなく広範囲に利用できることが期待できる。

参 考 文 献

- [1] 日本機械学会編、“流れの数値シミュレーション”、コロナ社 (1988).
- [2] 登坂宣好、“ナビエ・ストークス方程式の境界要素解析”、数理科学 263 号、pp. 52-61 (1988).
- [3] 今村 勤、“物理とグリーン関数”、岩波全書 (1978).
- [4] 倉島紀夫、“楕円型偏微分作用素”、紀伊国屋書店 (1978).
- [5] 佐川雅彦、貴家仁志、“高速フーリエ変換とその応用”、昭晃堂 (1992).
- [6] 佐 G.L. ラム, Jr., 戸田盛和 監訳、“高ソリトン 理論と応用”、培風館 (1983).
- [7] 高木貞治、“代数学講義 改訂新版”、共立出版株式会社、pp. 40-43 (1965).
- [8] 山口昌哉、野木達夫、“数値解析の基礎”、共立出版株式会社 (1969).

- [9] 森 正武、“数値計算プログラミング”、岩波書店 (1986).
- [10] 今井 功、“応用超関数論 I”、サイエンス社、pp. 39-42 (1986).
- [11] Stanley J. Farlow、“Partial Differential Equations for Scientists and Engineers”、John Wiley and Sons, Inc (1982).