

II-260

スペクトル法による移流-拡散方程式の解析手法に関する研究 I
- δ 関数のスペクトル解析における平滑化に関する数値実験○ 京都大学 学生員 金 善泰
京都大学 正員 平岡 正勝

1. はじめに

最近流体方程式の偏微分項の数値解析法の一つとしてスペクトル法がよく利用されている。スペクトル法は対象格子点の全区間を同時に解析するのが特徴で、その正確性を目指して現在まで様々な分野に適用されてきた。しかし非周期、不連続関数に対しては振動現象、Gibbs現象、なおかつ時間差分の時間間隔の厳しさなど数々の問題点も存在している状態である。

特に大気拡散の解析の際、よく使われるデルタ関数のような不連続関数に対するスペクトル解析の結果はその振動現象のため非現実値である負の値が出て来る。この振動現象による負の値は計算が繰り返されるにつれ、段々なくなるがリアルタイムのシミュレーションの場合は何らかの処理が必要であろう。そこで本研究の目的は非周期、不連続のデルタ関数の擬スペクトル解析(以下スペクトル解析と略)における振動現象の平滑化に関する数値実験とする。なお、数値実験はミニスーパーグラフィックコンピュータのTITAN UNIXシステムを用いて行った。

2. 数値実験の基本式

数値実験の対象式は式(1)のような1次元の移流方程式とした。 $u=1$ として一定とし、対象区間は $[0, 0.2]$ の標準化された座標を、初期条件は $x=0$ の際 $c=1$ であり、他の区間ではすべて0のデルタ関数の形を与えた。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(cu) \quad (1)$$

偏微分のスペクトル解析にはフーリエ変換の代わりにChebyshev変換を主に利用することにした。偏微分のChebyshev変換による解析の基本式は次のようである。

$$u(x_n) = \sum_{k=0}^N \hat{u}_k T_k(x_n) \quad (2)$$

$$\hat{u}_k = \frac{2}{N} \sum_{n=0}^N u(x_n) T_k(x_n) \quad (3)$$

式(2)がChebyshev変換式、式(3)がChebyshev逆変換式であり、次の式(4)によりChebyshev1次微分係数が求められる。

$$\hat{u}_{N+1}^{(1)}(t) = 0$$

$$\begin{aligned} \hat{u}_N^{(1)}(t) &= 0 \\ \bar{c}_k \hat{u}_k^{(1)}(t) &= \hat{u}_{k+2}^{(1)}(t) + 2(k+1)\hat{u}_{k+1} \\ k &= N-1, N-2, \dots, 0 \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \bar{c}_j &= 2 & k=0 \text{ or } N \\ &= 1 & 1 \leq j \leq N-1 \end{aligned}$$

である。

Chebyshev変換と逆変換は複素数高速フーリエ変換(FFT)の代わりに実数のデータのための前後処理付き実数FFTアルゴリズム¹を利用して計算した。時間変数については1回の計算には前進差分法を、繰り返し計算ではAdams予測子-修正子法を用いた。

3. 解析結果及び平滑化

3.1 スペクトル法の精度と振動現象

スペクトル法の振動現象を示す前にスペクトル法の正確性について一つの例を上げる。Tab. Iは $\cos(x)$ の1次微分である $\sin(x)$ の解析解とChebyshev変換によるスペクトル解、2次精度の陽解差分法、4次精度の陰解差分法による解析結果で、スペクトル法が最も良い精度を持っているのがわかる。一般的にスペクトル法は周期、連続の関数の際特に精度が高いと言える。しかしデルタ関数のような不連続、非周期関数の場合はかえって最も振動現象が大きい。

3.2 後処理法

Fig. 1の実線はデルタ関数に対する移流方程式のスペクトル解析結果である。時間間隔 $DT=0.01$ 、格子点の数 $n=16$ の場合のことで、相当の振動現象とそれによる非現実の負の値が出るのがわかる。この計算結果の後処理の平滑化法として陽値化、移動平均化法、風下借り法、非線形平滑化法等²があるが、その中で最もよく使われるのが移動2項平均による平滑化法で、Fig. 1の点線と破線のような。破線はChebyshev微分係数を2項平均により平滑化した後計算した結果であり、

¹Claudio Canuto, M. Yousuff Hussaini, Alfio Quarteroni, Thomas A. Zang, Spectral Methods in Fluid Dynamics, Springer-Verlag, 1988. Appendix B.

²G. J. McRae, W. R. Goodin and J. H. Seinfeld, Numerical Solution of the Atmospheric Diffusion Equation for Chemically Reacting Flows, J. Comp. Phys. 45(1982)1-42.

点線は濃度を平滑化したものである。図からわかるように濃度を平滑化する方法が完全に負の値をなくすことはできないが最も良い平滑化法といえる。

3.3 前処理による平滑化法

前処理による平滑化の方法としてよく使われるのが Mirror Image 法と RTP(Reduction to Periodicity) 法である。しかしデルタ関数のような非周期、不連続関数の平滑化の場合は Mirror-Image 法と RTP 法ともそれほど適切な方法とは言えない。

振動現象の平滑化または陽値化と関連して、 z 変換によるデルタ関数の指数平滑化法がある。この方法はデルタ関数を z 変換により、スペクトル変換の際、振動現象が出ないように滑らかにする方法で、デルタ関数の z 変換による指数平滑化式は次のようである。

$$x(t) = \delta(t) \longrightarrow f_1(t) = \alpha(1 - \alpha)^t \quad (5)$$

α を小さくすると振動現象はなくなるが、実際のデータから離れる可能性があるし、なお α の値が大きくなると実際のデータを忠実に反映する面はあるが、振動現象がある程度残る。解析格子点の数が多くなると振動現象の出ない平滑化パラメータ α の値は大きくなる。しかし計算時間はさらにかかるので、これは計算時間と正確性との trade-off の関係であろう。

Tab. 1 The comparison of spectral and FDM results for 1st partial difference of $\cos(x)$ on interval $[-1.0, 1.0]$.

x	analytical	spectral	2th differ	4th differ
-1.00	0.84147096	0.84146881	-	-
-0.98	0.83093452	0.83093506	0.8201050758	0.8221120834
-0.92	0.79794592	0.79794550	0.7863902450	0.7911821008
-0.83	0.73892236	0.73892182	0.7266390324	0.7315006852
-0.71	0.64963692	0.64963871	0.6372223496	0.6426490545
-0.56	0.52742779	0.52742714	0.5160582662	0.5212367773
-0.38	0.37341115	0.37341070	0.3645981550	0.3687533736
-0.20	0.19385506	0.19385499	0.1890179664	0.1913386136
0.00	0.00000004	0.00000039	0.0000000000	0.0000000112
0.20	-0.19385515	-0.19385454	-0.1890179515	-0.1913385689
0.38	-0.37341121	-0.37341124	-0.3645982444	-0.3687534332
0.56	-0.52742797	-0.52742833	-0.5160583854	-0.5212368965
0.71	-0.64963692	-0.64963609	-0.6372225881	-0.6426493526
0.83	-0.73892242	-0.73892391	-0.7266391516	-0.7315010428
0.92	-0.79794598	-0.79794955	-0.7863898277	-0.7911815047
0.98	-0.83093452	-0.83092690	-0.8201047778	-0.8221117258
1.00	-0.84147096	-0.84149170	-	-

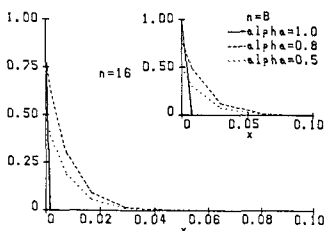


Fig. 2 Results of smoothing by z transform for delta function.

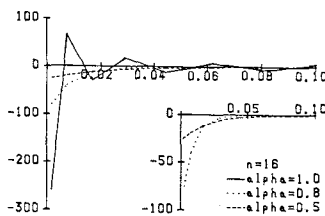


Fig. 3 Results of Chebyshev collocation coefficients at different smoothing parameter.

Fig. 2 はデルタ関数の z 変換による平滑化の結果である。平滑化パラメータ α の値が小さくなると、良い平滑化関数になるわけであるが実際のデルタ関数から離れてしまう。格子点の数が 16 の場合は $\alpha = 0.8$ くらいで振動現象の出ない平滑化になるが、格子点の数が多くなると振動現象の出ないパラメータの値は次第に大きくなる。

Fig. 3 は Chebyshev 変換による 1 次微分係数の解析結果で、Fig. 4 はそれによる濃度計算結果である。元のデルタ関数の場合は振動現象が見られ、平滑化された関数についての解析結果は振動現象はなくなるが数値拡散の恐れが生じるのがわかる。しかし計算時間がある程度進むとほとんど差はなくなる。

4. おわりに

大気拡散の解析におけるデルタ関数のスペクトル解析の結果、あまり大きな振動現象は見られなかった。しかしリアルタイムのシミュレーションのための平滑化の場合、移動 2 項平均による後処理法と指数平滑化の前処理法が比較的良好な方法であると考えられる。なお、指数平滑化法の場合、格子点の数が増えると前処理の平滑化パラメータの値が大きくなり、より良い精度が出るだろうと考えられる。これからのスペクトル解析に関連する研究課題としては、時間変数の安定性の問題と複雑地形状でのスペクトル法の適用問題が上げられる。

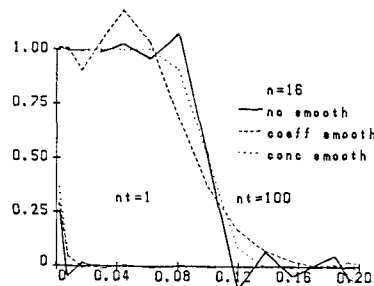


Fig. 1 Results of analysis of advection with postsmoothing for delta function.

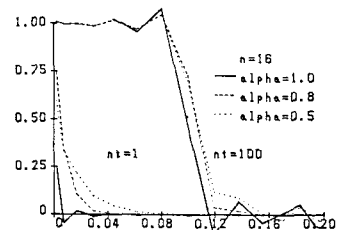


Fig. 4 Results of analysis of advection with presmoothing for delta function at different parameter.