一般座標の格子構成が有する打切り誤差の理論的評価とその最適化手法

新潟大学工学部　学生会員　○中土 紘作
新潟大学大学院自然科学研究科　学生会員　星野　剛
新潟大学災害・復興科学研究所　正会員　安田 浩保

1.　はじめに

境界適合に一般座標を導入した河川の流況や河床変動の解析法は、格子構成の自由度の高さから解析対象の飛躍的な拡張に多大な貢献を果たしてきた。この数値解析法は、精密な数値水理モデルと適切な格子構成が一対となってはじめて性能が最大化される。水理モデルとしての研究はこれまでに高精度の差分スキームを導入したり高次の物理項を導入したりなどを中心に行われてきた。一方で、対になる格子の生成法は水理モデルの高度化とは独立にいくつか提案されてきた。しかし、水理モデルと格子生成法の交点である、格子構成の良否と解の応答特性については、数値解析の信頼性に根幹的な影響を及ぼすにもかかわらずほとんど研究されていない。両者の関心が十分に交わることなく現在に至り、学問的な空白域のままとなっている。

境界適合の対象の幾何学形状が複雑なほど一般座標による境界適合の効果が発揮される。直交格子からのそれぞれの格子の歪曲の程度はメトリックスにより規定される。数値計算におけるメトリックスの計算は、水理の支配方程式と同様に差分計算されるため、Taylor 展開に由来する打切り誤差が不可避なことに注意を払わなければならない。このため、メトリックスの打切り誤差が大きな格子構成ではたとえ数値的な水理計算をどれだけ厳密に行っても方程式を満たす解が得られないばかりか、クーラン数と無関係な計算不安定に見舞われることさえある。また、このことが原因となり、一般座標による格子構成には無限のパターンが原理的に存在するもののそれらから一意の解が得られないことは、重大な問題として広く認識されるべきである。

安定に解を得るためには歪曲が小さく滑らかな格子構成が経験的に優れるとされ、滑らかな格子の生成法は Thompson ら[1)]により体系化されたことはよく知られた事実である。しかし、彼らのものをはじめとする格子生成法がメトリックスの打切り誤差の緩和に効果を発揮することが予見されるにもかかわらず、このようにして得られた格子構成と計算の安定性の対応関係について理論的な根拠が過去に示されたことはないようである。著者らは、このために、Thompson らなどの格子構成法が有効に活用されず、例えば河川の流況解析では格子構成の理論的条件から乖離した格子構成が散見される実状に繋がっていると考えている。

本研究では、上述までの問題の明確化と解決のため、まず、一般座標の格子構成が内包する打切り誤差の定量的な算定法を示し、続いてこのような誤差を緩和するための格子構成の理論的な根拠を有した最適化手法について論じる。

2.　メトリックスの打切り誤差

はじめに簡単のため１次元の座標変換

$$f_x = \frac{f_\xi}{x_\xi} \tag{1}$$

が行われたときの関数値 f の１階の微分の差分計算を考える。ここで、x は物理面の座標、ξ は計算面の座標である。計算面の離散間隔を１として (i, j) の中央差分を考えると

$$f_x = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \tag{2}$$

なる差分式を得る。

この式を Taylor 展開と対比すると、明らかに f_x が近似的に計算されているだけで f_{xx} より高次の項を完全に無視した計算に等しいことが分かる。f_{xx} より高次の項は、f の勾配が大きかったり離散間隔が広く設定されている場合に重要な役割を果たし、このような条件のもとでは解析結果に対して打切り誤差として少なからずの役割を果たす。

ここで、f_{i+1}, f_{i-1} を Taylor 展開したのちに式 (2) に代入すると打切り誤差として

$$T = -\frac{1}{2} x_{\xi\xi} f_{xx} - \frac{1}{6} x_\xi^2 f_{xxx} + O(\Delta\xi^4) \tag{3}$$

が得られる。右辺の第１項は格子間隔が不規則の場合に現れるものである。誤差を集中させる負の拡散項と成り得ることから格子間隔を不用意に増減させることが得策でないことが分かる。

２次元における１階の微係数の一般座標変換は周知のとおり

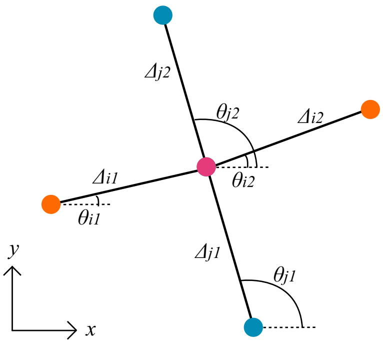
$$f_x = \frac{1}{J}\left[y_\eta f_\xi - y_\xi f_\eta \right] \tag{4}$$

$$f_y = \frac{1}{J}\left[-x_\eta f_\xi + x_\xi f_\eta \right] \tag{5}$$

のように与えられる。ここで、x, y は物理面の座標、ξ, η は計算面の座標、両者の間には $x = x(\xi, \eta), y = y(\xi, \eta)$、また $\xi = \xi(x, y), \eta = \eta(x, y)$ の対応関係があるものとする。J は変換のヤコビアンで $x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi$ である。

f_η, f_ξ をそれぞれ Taylor 展開し、式 (4)、(5) に代入

Key Words: 一般座標，格子構成，打切り誤差，浅水流方程式，最適化格子
〒 950-2181 新潟市西区五十嵐 2 の町 8050　　TEL 025-262-7053



図–1　一般座標の幾何学的関係

すると

$$T_x = \frac{1}{2J}\left[\left(y_\xi x_\eta x_{\eta\eta} - y_\eta x_\xi x_{\xi\xi}\right) f_{xx} + \left(y_\xi y_\eta y_{\eta\eta} - y_\eta y_\xi y_{\xi\xi}\right) f_{yy} + \left\{ y_\xi \left(x_\eta y_{\eta\eta} + y_\eta x_{\eta\eta}\right) - y_\eta \left(x_\xi y_{\xi\xi} + y_\xi x_{\xi\xi}\right)\right\} f_{xy} \right] + O(\Delta\xi^3, \Delta\eta^3) \quad (6)$$

$$T_y = \frac{1}{2J}\left[\left(-x_\xi x_\eta x_{\eta\eta} + x_\eta x_\xi x_{\xi\xi}\right) f_{xx} + \left(-x_\xi y_\eta y_{\eta\eta} + x_\eta y_\xi y_{\xi\xi}\right) f_{yy} + \left\{ -x_\xi \left(x_\eta y_{\eta\eta} + y_\eta x_{\eta\eta}\right) + x_\eta \left(x_\xi y_{\xi\xi} + y_\xi x_{\xi\xi}\right)\right\} f_{xy} \right] + O(\Delta\xi^3, \Delta\eta^3) \quad (7)$$

が得られる[1)]。ここで、T_x, T_y はそれぞれ式 (4)、(5) が内包する打切り誤差である。これらの打切り誤差は合計で 8 種のメトリックスから構成される。

一般座標の計算格子の交差点に着目すると**図–1** に示すような幾何学形状となる。この関係に基づきメトリックスを辺長と角度によって表現すると、

$$x_\xi = \frac{1}{2}(\Delta i_1 \cos\theta_{i1} + \Delta i_2 \cos\theta_{i2}) \quad (8)$$

$$x_\eta = \frac{1}{2}(\Delta j_1 \cos\theta_{j1} + \Delta j_2 \cos\theta_{j2}) \quad (9)$$

$$x_{\xi\xi} = \Delta i_2 \cos\theta_{i2} - \Delta i_1 \cos\theta_{i1} \quad (10)$$

$$x_{\eta\eta} = \Delta j_2 \cos\theta_{j2} - \Delta j_1 \cos\theta_{j1} \quad (11)$$

などと表せ、辺長間隔 $\Delta i, \Delta j$ や格子辺の角度 θ_i, θ_j が各メトリックスの大きさを規定していることがわかる。特に $x_{\xi\xi}$ などの二階の微分係数については辺長間隔と格子辺の角度の変化率が値の大きさを決定していることがわかる。

3.　誤差評価式による誤差の定量評価

式 (6),(7) の打切り誤差式に基づき格子構成がもたらす誤差量について定量的に評価する。各メトリックスは物理座標上の計算点の座標値から式 (8)〜(11) などにより算出した。ここで式 (6) の f_{xx}, f_{yy}, f_{xy} に関する項の係数をそれぞれ T_{x1}, T_{x2}, T_{x3} とする。式 (7) に関しても同様に T_{y1}, T_{y2}, T_{y3} とした。また、f_{xx}, f_{yy}, f_{xy} は解析事例によって異なるため定数扱いとした。合計誤差量 T_{xy} は、

$$T_{xy}(i,j) = \frac{1}{\Delta x(i,j)}(|T_{x1}(i,j)| + |T_{y1}(i,j)|) + \frac{1}{\Delta y(i,j)}(|T_{x2}(i,j)| + |T_{y2}(i,j)|) + \frac{1}{\sqrt{\Delta x(i,j)\Delta y(i,j)}}(|T_{x3}(i,j)| + |T_{y3}(i,j)|) \quad (12)$$

として求めた。ここで $\Delta x = x_\xi + x_\eta$, $\Delta y = y_\xi + y_\eta$ とした。以降に示す誤差量はすべてこの式より導出した。

4.　格子構成の最適化手法

実河川の幾何学形状を一般座標により境界適合する場合、河道測量の際に設定された測線を基準にした格子構成が一般的な方法となっているようである。本章では、測量測線を基準として生成された格子構成の打切り誤差を抑制する種々の最適化手法を提案する。評価指標は前章で述べた打切り誤差の評価式 (12) とし実河川の境界適合を対象に格子形状に由来する誤差量を評価する。

境界適合の対象とした河川は新潟県長岡市を貫流する塩谷川の河口から 5km から 7km の区間とする。この区間を対象としたのは曲率の大きい連続した蛇行部を有しており、手作業により誤差を抑制した格子の生成が困難となることが予想されるためである。

(1)　測量測線に基づく計算格子

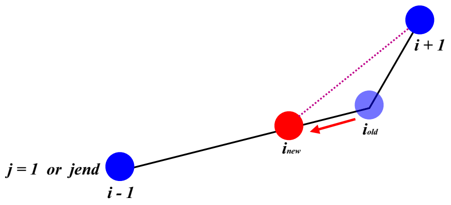
図–4 中の (a) に測量測線に基づく格子構成と誤差分布図を示した。この格子構成は縦断方向の格子の分割間隔が不規則で、式 (6) や式 (7) から予見されるとおり、分割間隔が不規則な箇所でメトリックスの打切り誤差がそれ以外の地点に比べて格段に大きくなっていることがよくわかる。

この計算格子において洪水時流量 $650m^3/s$ を与え続けた定常計算を実施すると、解析結果は定常状態とならず、水位の変動量の標準偏差を求めると**図–5** のようになる。**図–4**(a) の誤差量と見比べると誤差量の大きい箇所よりも下流で水面の変動が大きいことがわかる。これは上流で発生した振動が下流に伝播、増幅することや今回採用した誤差式では区別していない誤差量の正負が関係しているのではないかと考えられる。

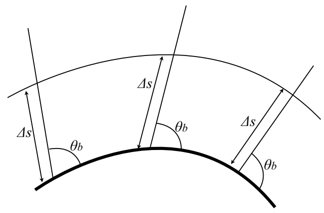
(2)　ラプラス方程式に基づく最適化手法

a)　最適化の概要

一般座標の計算格子は、座標軸同士の交差角が大きく滑らかに変形する歪曲が小さい格子が経験的に望ましいとされている。ここでは、これまでに提案されてきた格子生成法のうち、楕円型の偏微分方程式に基づく格子生成法[2)]を測量測線を基準とした格子構成の数学的な最適化手法として採用する。この方法の採用の理由は、楕円型の偏微分方程式を満たす調和関数では、2 次元平面なら同心円の円周上の関数値の算術平均を解とする球面平均の定理が保証されるためである。球面平均の定理は、分布間隔の局所的な均一性そのものである。



図–2 境界上 $(j=1, j=jend)$ 上の計算点再配置



図–3 境界上の格子幅と傾き

楕円型の偏微分方程式に基づく格子生成法の支配方程式は、

$$\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} = 0 \tag{13}$$

$$\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} = 0 \tag{14}$$

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2 \tag{15}$$

$$\beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \tag{16}$$

$$\gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2 \tag{17}$$

である。

この方法では、係数を通して2本の偏微分方程式を結びつけられているため、x と y が相互に作用し合う解が得られる。式 (13) と (14) の楕円型の偏微分方程式は適当な初期条件を与えて収束計算を行うことで解が得られる。本章の目的である数学的に最適化された格子構成を得るためには、初期条件に測線を基準として作られた格子構成の平面座標、境界条件に境界適合の対象となる格子端の座標を与えればよい。

b) 格子構成と誤差評価

図–4(b) は縦断方向の境界上の格子間隔は**図–4**(a) と同じとしながらも計算格子の内部が曲線状に変形した結果、**図–4**(a) と比べると打切り誤差が全体的に減少していることが分かる。**図–4**(b) は一般座標の高い自由度が発揮された格子構成と言える。

この格子において先ほどと同様の定常計算を行うと収束した解を得た。このことからもラプラス方程式による最適化が効果的であったことがわかる。また、これ以降の計算格子についても同様に収束した解を得ることができ、格子の最適化が効果的であることが明らかとなった。

(3) ラプラス方程式の境界条件の修正

a) 最適化の概要

前項に示した楕円型の偏微分方程式に基づく格子生成法は境界値問題として解かれ、解析領域の内部の値のみが支配方程式に従って決定される。つまり、前節の手法が効果的に機能してメトリックスが小さくなるように格子構成が最適化されるためには適切な境界条件が不可欠となる。

測線に基づく格子構成では境界上の座標値は不等間隔であるため境界条件自体に $x_{\xi\xi}$ などの2階の微分係数を大きくする要因が含まれ、これが格子の最適化の際に格子内部へ波及することは自明である。そこで、境界条件と格子内部の $x_{\xi\xi}$ を抑制するために、

$$0.8 < \lambda < 1.2 \tag{18}$$

の関係を満たすように境界上の座標値を再配置する修正を導入する。ここで、λ は格子の分布間隔の比率である。この修正は λ を満たすように数値的に収束計算を行えばよく、格子数を増加させることなく格子の全体で $x_{\xi\xi}$ を抑制した格子構成が式 (13)、(14) から得られることが期待できる。境界上での計算点の再配置例を**図–2** に示す。この図からもわかるように計算点の再配置に伴い計算領域の形状が変わってしまう欠点は存在する。ただし、河道形状程度の曲率において、この λ の範囲での移動量がもたらす変形は極めて小さい。

b) 格子構成と誤差評価

図–4(c) の格子は**図–4**(b) と比べて境界近傍での格子間隔が緩和され、格子全体で格段に打切り誤差が減少していることが分かる。つまり、境界の再配置が極めて重要であると判断できる。ただし、湾曲部においては内岸と外岸の間で格子サイズの変化が大きく、それに伴う打切り誤差も生じる。

(4) ポアソン方程式に基づく境界条件の修正

a) 最適化の概要

前述のような湾曲部での問題の解決法として下に示す部分的な格子制御が可能な式 (19),(20) のポアソン型の偏微分方程式が有効である。

$$\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} = -\frac{1}{J^2}\left[P(\xi,\eta)x_\xi + Q(\xi,\eta)x_\eta\right] \tag{19}$$

$$\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} = -\frac{1}{J^2}\left[P(\xi,\eta)y_\xi + Q(\xi,\eta)y_\eta\right] \tag{20}$$

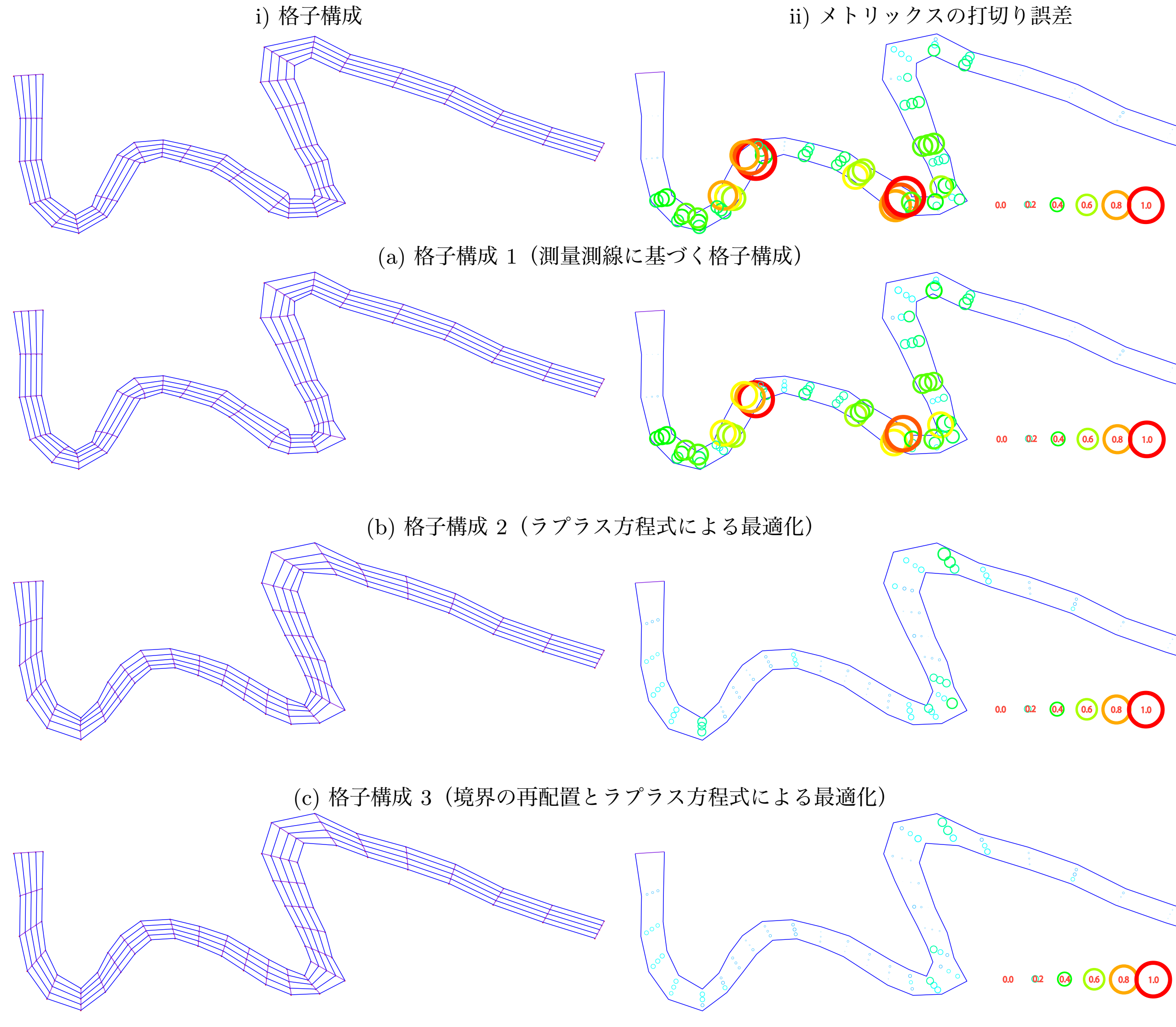
本研究では式中の右辺 $P(\xi,\eta), Q(\xi,\eta)$ の求め方については Steger and Sorenson[4]の方法を用いた。彼らの方法では**図–3** に示す境界上の格子幅 Δs と傾き θ_b とを直接与えることが可能となる。本手法ではそれらの値を一意に決定するために横断軸を分割数で除した平均長さと横断軸の始点と終点を結んだ線と境界線分との交差角を与えた。これにより蛇行部の内岸と外岸との間の格子密度差が改善され、前述の境界の再配置を組み合わせると格子の辺長差を極めて小さくすることが可能となる。また、Δs と θ_b が一意に決定されることから、ポアソン型の格子の最適化手法において境界条件である河道形状が入力されることで格子の自動的な最適化が可能となる。

b) 格子構成と誤差評価

図–4(d) は**図–4**(c) に比べ、蛇行部での格子間の密度差が緩和されたことで、打切り誤差が軽減している。また、ここまでに示した格子の中で打切り誤差が最小となり最も計算格子に向いていると判断できる。

5. おわりに

一般座標による写像は言うまでもなく理論的には無謬であり、本論文で取り上げたメトリックスの打切り誤差



(a) 格子構成 1（測量測線に基づく格子構成）

(b) 格子構成 2（ラプラス方程式による最適化）

(c) 格子構成 3（境界の再配置とラプラス方程式による最適化）

(e) 格子構成 4（境界の再配置とポアソン方程式による最適化）

図–4 格子構成、メトリックスの打切り誤差

図–5 横断測線に基づいた格子での水位振動の標準偏差

は数値解析にのみ見られる特有の問題である。

本研究では、まず、メトリックスの打切り誤差の評価式を応用することで、格子構成毎の解の安定性を水理計算を実施することなく理論的に推定できることを示すとともに、一般座標による境界適合を実施してもメトリックスの打切り誤差が大きな格子構成では支配方程式を満足する解を得られないことを示した。つぎに、広く用いられている横断測線を基準とした実河川の格子構成は、数学的な最適化手法の導入によって解の安定性を大幅に向上させられることを示した。このような格子構成では、空間と時間の分割間隔の細分化が不要なために計算効率においても有利となる。また、本研究で示した格子の最適化手法は格子形状を一意に決定できるとともに河道形状を入力情報として自動的に最適化が行えるため、手作業での格子修正が必要なく、計算時間だけでなく計算格子の準備時間の削減においても極めて有効である。

参考文献

1) Joe F. Thompson, Z.U.A. Warsi and C. Wayne Mastin, Numerical Grid Generation Foundations and Applications, www.hpc.msstate.edu/publications/gridbook/.
2) Thompson, J. F.; Mastin, C. W.; Thames, F. C., Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies, doi:10.1016/0021-9991(74)90114-4, *J Compt Phys*, pp. 299-319, 1974.
3) iRic, http://i-ric.org/
4) Steger, J.L. and Sorenson, R.L. , Automatic mesh-point clustering near a boundary in grid generation with elliptic partial differential equation, *J Compt Phys*, pp.405-410, 1979.