

伸長座標変換における2次元ラプラス方程式の解の誤差

平津 忍[†], 坪井 一洋[‡], 石黒 美佐子[‡]

物理量が急激に変化する現象に対する問題を差分法で解くことを考える。その際には、空間内に配置する格子数を増加させることなく精度の良い解を得ることが重要である。本研究では、そのような現象に対する1つの問題として、2次元ラプラス方程式に対し“伸長座標変換”によって値の変化が急激な部分に格子を集中させる。そして、得られる差分近似解と2次元ラプラス方程式の基本解との誤差を考察し、誤差と格子集中の程度を決定する座標変換パラメータとの関係を明らかにする。

Numerical Error of 2D-Laplace Equation in Stretching Coordinate Transformation

Shinobu HIRATSU[†], Kazuhiro Tsuboi[‡], and Misako Ishiguro[‡]

We consider to solve the problem with finite difference method, in which physical values vary drastically toward the boundary. In this case, it is important to obtain the accurate solutions without increasing the number of grids in space. For a problem in such phenomena, so called as “stretching coordinate transformation” is used to concentrate the grids toward the boundary with the drastic increase or decrease of values. And we investigate the numerical error between approximate solution and exact solution of 2D-Laplace equation, and make clear the relationship between the error and the coordinate stretching parameter for the grid concentration.

1. はじめに

数値流体力学の発展において、物体適合格子と呼ばれる座標変換に基づいた計算格子の使用が画期的な役割を果たした。この方法は、対象となる物体形状に沿った座標系（物理空間座標）と差分式を構成しやすい等間隔直交座標系（計算空間座標）を一般的な座標変換によって結び付けるものである。

物理量が急激に変化する現象に対して、物理空間領域に格子を等間隔に配置すると、急激に変化する

部分での値の誤差が大きくなる。また、この誤差を減少させるために格子数を増やすと計算量が膨大になる。したがって、格子数を増やすことなく値の変化が大きい部分を精度良く計算するために、格子点間隔を変化させることで格子を集中させる必要がある。

そのような現象に対する格子配置に関する取り組みとしては、チェビシェフ擬似スペクトル法を用いて境界層に格子点を密集させ、境界層を高精度で解析するものが報告されている^[1]。本研究では、基本的な問題として、2次元ラプラス方程式のディリクレ問題を考え、境界条件は2次元ラプラス方程式の基本解に沿うように設定する。この問題に対して“伸長座標変換”^[2]という座標変換を適用して格子を集中させる。この格子を中心差分で離散化して構成した連立方程式をBi-CGSTAB法によって解を求め、

[†]茨城大学大学院理工学研究科

Major of Systems Engineering, Graduate School of Science and Engineering, Ibaraki University

[‡]茨城大学工学部

Department of Systems Engineering, Faculty of Engineering, Ibaraki University

正解との誤差を考察する。また、この誤差が最小となるような格子集中の指針を求める。

2. 伸長座標変換

ここで用いる伸長座標変換は、物理空間座標 (x, y) と計算空間座標 (ξ, η) 間の関係で表される次のような座標変換である^[2]。

$$x = x(\xi) = \frac{a_x^\xi - 1}{a_x^{N_x} - 1}, \quad y = y(\eta) = \frac{a_y^\eta - 1}{a_y^{N_y} - 1};$$

$$x, y \in [0, 1], \quad \xi \in [0, N_x], \quad \eta \in [0, N_y]. \quad (1)$$

この変換において、 ξ - η 座標系で整数値を持つ座標 $i(i=0, 1, \dots, N_x)$, $j(j=0, 1, \dots, N_y)$ を離散化時の格子点に対応させる。上式における $a_x, a_y (\geq 1)$ が座標変換パラメータであり、この値が大きい程、物理空間座標の原点での格子集中が強くなる(図1)。また、 N_x, N_y は x, y 軸方向の格子数である。ここでは、 a_x, a_y をそれぞれ(2)式の形に置き換え、 α, β を改めて座標変換パラメータと定義する。以後の数値実験では、 α, β を変化させることで格子集中の程度を決定している。

$$a_x = e^\alpha, \quad a_y = e^\beta. \quad (2)$$

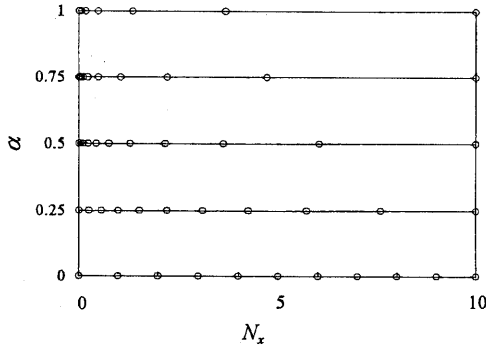


図1 伸長座標変換による格子点間隔

3. 基礎方程式と離散化

3.1 基礎方程式

本研究では、解が急激に変化する問題の中でも基本的なものとして、2次元ラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0, \quad x, y \in [0, 1] \quad (3)$$

の基本解

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2} \ln \left\{ (x+p)^2 + (y+q)^2 \right\} \quad (4)$$

を取り上げる。そして、この式に適応するために基本境界条件を次のように設定する。

$$\begin{aligned} x=0 \text{ 上で } & \phi = 1/2 \ln \{ p^2 + (y+q)^2 \}, \\ x=1 \text{ 上で } & \phi = 1/2 \ln \{ (1+p)^2 + (y+q)^2 \}, \\ y=0 \text{ 上で } & \phi = 1/2 \ln \{ (x+p)^2 + q^2 \}, \\ y=1 \text{ 上で } & \phi = 1/2 \ln \{ (x+p)^2 + (1+q)^2 \}. \end{aligned} \quad (5)$$

(4)式の p, q は、 $\phi(x, y)$ が原点付近で急激に減少するように設定する。 $p=q=e^{-1/\sqrt{2}}$ における基本解を図2に示す。本研究では、基本解から得られる正解と2次元ラプラス方程式の差分近似解との誤差を考察する。

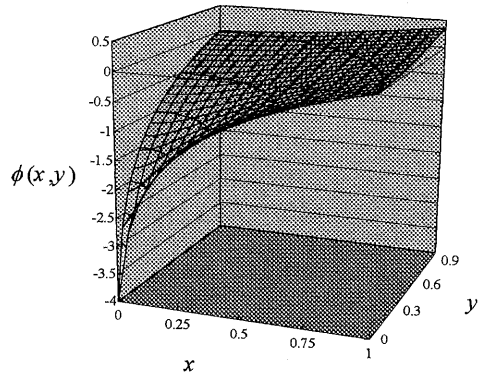


図2 2次元ラプラス方程式の基本解 ($N_x=N_y=20$)

3.2 差分の方法

中心差分によって離散化するものとして、差分の方法は2通りある。1つは、(1)式によって構成された不間隔格子 (x, y) 上で直接中心差分を適用する方法である。例えば、 x 方向において、格子点 x_{i-1}, x_i, x_{i+1} 上の値を $\phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}$ とし、 $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $\Delta x_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ とすると次のように差分近似式が得られる。

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{\Delta x_{i+1} \phi_{i-1} + \Delta x_i \phi_{i+1} - (\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) \phi_i}{1/2 \Delta x_i \Delta x_{i+1} (\Delta x_i + \Delta x_{i+1})}. \quad (6)$$

ここで、 Δx の計算について示す。(1)式から、 $i=1$ に対する物理空間座標 x_i が次式で与えられる。

$$x_1 = \frac{a_x - 1}{a_x^{N_x} - 1} = 1 / \sum_{k=0}^{N_x-1} a_x^k. \quad (7)$$

上式により、一般的な物理空間座標 x_i が次のように表わされる。

$$x_i = \frac{a_x^i - 1}{a_x^{N_x} - 1} = x_1 \sum_{k=0}^{i-1} a_x^k. \quad (8)$$

したがって、 Δx_i が以下のように求められる。

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1} = x_1 \left(\sum_{k=0}^{i-1} a_x^k - \sum_{k=0}^{i-2} a_x^k \right) = x_1 a_x^{i-1}. \quad (9)$$

$\partial^2 \phi / \partial y^2$ についても(6)式と同様に離散化し、 Δy_j についても(9)式と同様に計算する。これらをまとめ、(2)式の関係を用いれば、2次元ラプラス方程式の差分近似式が得られる。

$$\frac{e^\alpha \phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} - (1+e^\alpha) \phi_{i,j}}{x_1^2 e^{\alpha(2i-1)} (1+e^\alpha)} + \frac{e^\beta \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1} - (1+e^\beta) \phi_{i,j}}{y_1^2 e^{\beta(2j-1)} (1+e^\beta)} = 0. \quad (10)$$

もう1つの差分の方法は、(3)式を(11)式のように変換し、変換メトリック $\partial x / \partial \xi$, $\partial y / \partial \eta$ 等を別に求めて、等間格子(ξ, η)上でのみ中心差分する方法である。

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^{-2} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^{-2} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} - \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^{-1} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] = 0 \quad (11)$$

ここで、変換メトリックの値は次のように計算される^[2]。

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{x_1}{2} a_x^{i-1} (a_x + 1), \quad \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} = x_1 a_x^{i-1} (a_x - 1);$$

$$\frac{\partial y}{\partial \eta} = \frac{y_1}{2} a_y^{j-1} (a_y + 1), \quad \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} = y_1 a_y^{j-1} (a_y - 1). \quad (12)$$

以上の2手法をそれぞれ適用し数値実験を行った結果、(10)式の精度よりも(11)式の精度が高いことが分かった(4.2参照)。したがって、数値実験は(11)式を用いて行う。

物理空間領域に x 軸方向、 y 軸方向それぞれ N_x, N_y 個の格子を配置して近似式を構成すると、連立方程式の係数は $N \times N$ ($N=(N_x-1)(N_y-1)$) で非対称な5重対角行列となる。これを対角成分で正規化して用いる。

4. Bi-CGSTAB 法の誤差

4.1 誤差ノルム

差分式を Bi-CGSTAB 法で解いて得られる近似解 ϕ' と、ラプラス方程式の基本解(3)式から得られる正解 ϕ との誤差ノルムを次式で定義する。

$$E = \sqrt{\sum_{i,j} (\phi_{i,j} - \phi'_{i,j})^2}. \quad (13)$$

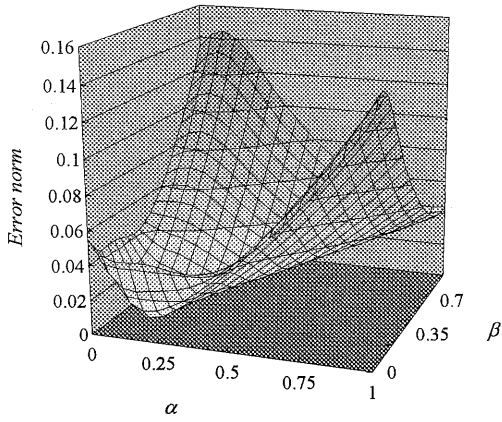
4.2 座標変換パラメータと誤差ノルム

まず、(10)、(11)両式で与えられる離散化方法の違いを、誤差ノルムを計算することによって比較する。ここでは、(4)式において $p=q=e^{-1/\sqrt{2}}$ 、(10)、(11)式において $N_x=N_y=20$ と設定する。図3(a)、(b)には、(10)、(11)式それぞれに対する $\alpha, \beta \in [0, 1]$ の範囲での誤差ノルムを示す。これらの図を比較すると、(b)では格子集中が強まるにつれて、最大誤差が(a)の1/2程度に縮小されていることが分かる。この原因は、(10)式を導く際に、 N_x や N_y 付近で Δx や Δy が大きくなり、テイラー展開の打ち切り誤差が大きくなることによる。したがって、以後の議論は、(11)式の離散化法による誤差ノルムに注目して進める。

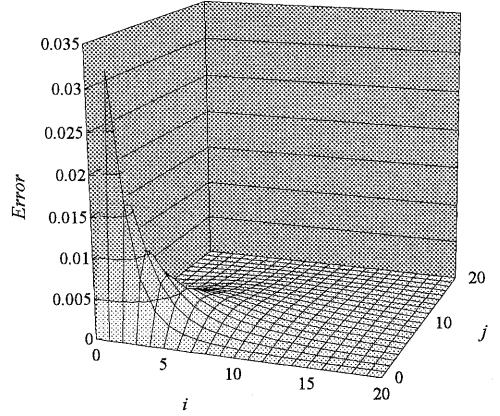
図3では、 $\alpha=\beta$ のところで誤差ノルムが最小となることが示されている。また、誤差ノルムが最小となる α, β が存在することも分かる。より明確にするために、誤差ノルムが最小となる $\alpha=\beta$ の部分における断面を図4に示す。この問題においては、 $\alpha=\beta=0.16$ のときに最小誤差ノルムが生じる。

そこで、物理空間に格子を等間隔に配置した場合 ($\alpha=\beta=0$) と格子集中を強めた場合 ($\alpha=\beta=1$)、そして最小誤差ノルムが得られるときの格子配置にした場合 ($\alpha=\beta=0.16$) について、 $|\phi_{i,j} - \phi'_{i,j}|$ を図5(a)、(b)、(c)にそれぞれ示す。

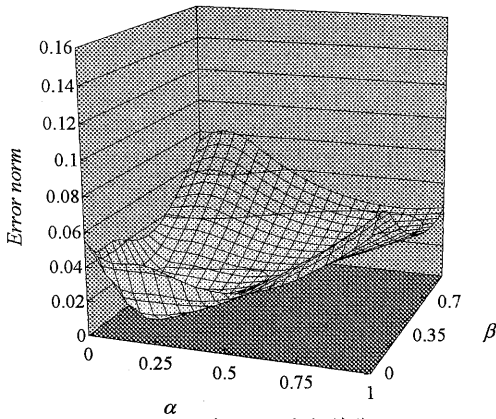
(a)では、値が急激に変化する原点付近で誤差が大きくなることが分かる。(b)は、(a)と比較すると、格子集中を強めたために原点付近の誤差が減少するが、格子点間隔が大きくなる (N_x, N_y) 付近での誤差が大きくなる。(c)は、最大誤差が(a)、(b)と比べて全体的に1/20~1/30程度に小さくなる。そこで、図では、誤差のスケールを1/10にして表示している。また、(c)で示す結果から、最小誤差ノルムを与える座標変換パラメータによって格子を配置することで、(a)、(b)で生じる誤差が緩和されることが分かる。以後、この座標変換パラメータを最適座標変換パラメータと呼び、 α_{opt} と表わすことにする。



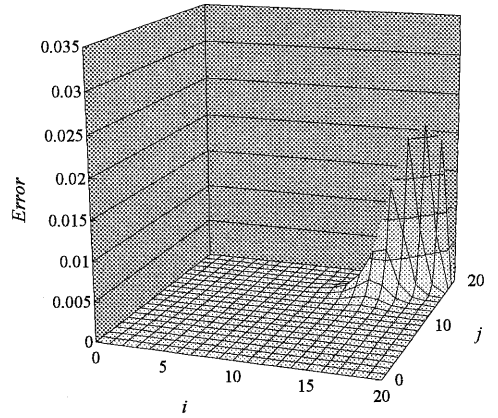
(a) (10)式による中心差分



(a) $\alpha=\beta=0$



(b) (11)式による中心差分



(b) $\alpha=\beta=1$

図3 Bi-CGSTAB法の近似解と正解との誤差ノルム ($N_x=N_y=20$)

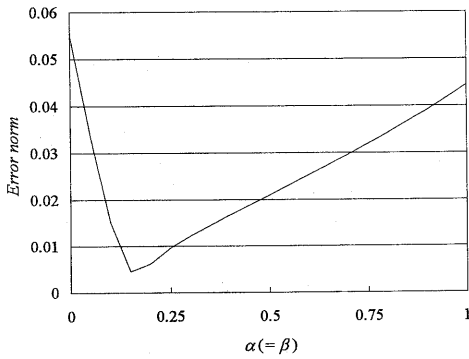
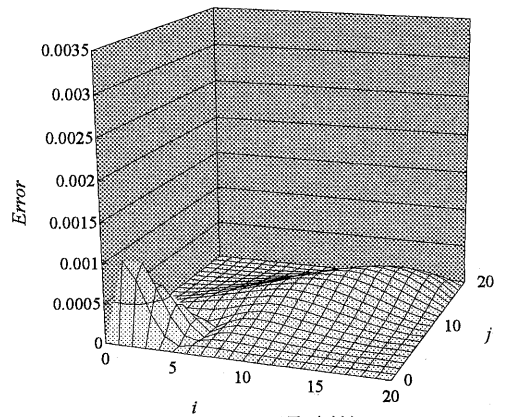


図4 $\alpha=\beta$ のときの誤差ノルム ($N_x=N_y=20$)



(c) $\alpha=\beta=0.16$ (最適値)

図5 近似解と正解との誤差

4.3 格子数と最適座標変換パラメータ

$p=q=e^{-4}/\sqrt{2}$ としたまま、 $N_x=N_y=10, 20, \dots, 70$, と格子数を変化させる。それぞれの格子数において、座標変換パラメータ $\alpha, \beta \in [0, 1]$ における最小誤差ノルム E_{min} を求める。また、 E_{min} を与える最適座標変換パラメータ $\alpha_{opt} (= \beta_{opt})$ を求める。図 6 には、左右の軸に α_{opt}, E_{min} の目盛をそれぞれ示す。図では、 N_x が小さいほど α_{opt} の値は大きくなる傾向が示されている。すなわち、格子数が少ない場合に誤差ノルムを縮小するためには格子集中を強めなければならないと言える。また、当然ではあるが、格子数の増加につれて最小誤差ノルムが減少する。

また、この図から N_x と E_{min} , N_x と α_{opt} の間はそれぞれ反比例の関係にあることが分かる。

$$E_{min} N_x = 8.0 \times 10^{-2}, \quad \alpha_{opt} N_x = 3.2. \quad (14)$$

しかし、この関係は扱う問題に依存する。

そこで、(4)式の p, q を小さくすることで境界付近における解の変化を厳しくさせ、 N_x と α_{opt} との関係进行调查する。図 7 には $p=q=e^{-4}/\sqrt{2}, e^{-6}/\sqrt{2}, e^{-8}/\sqrt{2}$ に対する N_x と α_{opt} の関係をそれぞれ示す。この図から、解の変化が厳しくなる (p, q が小さくなる) につれて α_{opt} が大きくなり、格子集中を強める必要が生じる。このときは(14)式と同様の関係とはならず、次式のように表される。

$$\alpha_{opt} N_x^d = c \quad (c, d \text{ は正の定数}) \quad (15)$$

E_{min} についても N_x と α_{opt} の関係と同様の傾向の値を持つ。

4.3 格子集中による格子数の減少効果

格子集中の適用によって物理空間に配置する格子数をどの程度減少させることができるかを、誤差ノルムを指標として調査する。ここでは、 $N_x=N_y=10 \sim 70$ における最小誤差ノルムを基準とし、等間隔格子において同程度の誤差ノルムを得るためにはどれほどの格子数が必要となるかを求め、表 1 に示す。なお、表の空欄は、格子数が多すぎるため計算できなかった部分である。

その結果、例えば $N_x=N_y=20$ に注目すると、最小誤差ノルム $E_{min} = 4.04 \times 10^{-3}$ とほぼ等しい誤差ノルムで計算するためには、等間隔格子の場合では $N_x=N_y=399$ が必要となり、 α_{opt} を適用して格子間隔を最適化したときの約 20 倍となる。2次元問題では、等間隔での格子数は、 α_{opt} を適用したときの格子数の約 400 倍になる。また、この倍率は格子数にかかわらず一定である。

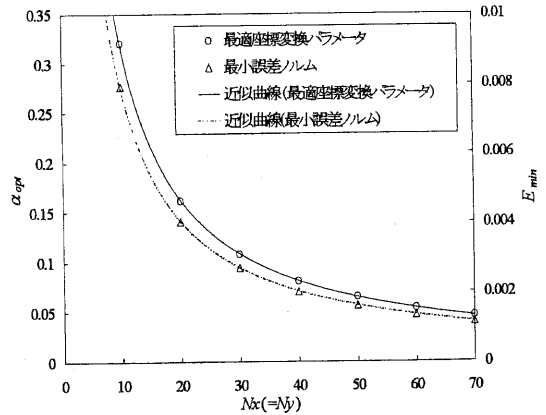


図 6 軸方向の格子数と最小誤差ノルム、最適座標変換パラメータ ($p=q=1/\sqrt{2}e^{-4}$)

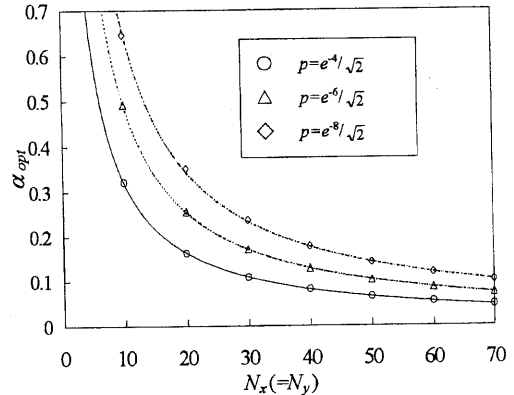


図 7 p, q の変化による最小誤差ノルムと最適座標変換パラメータへの影響

5. まとめ

本研究では物理量が境界付近において急激に変化する現象に対する問題を取り上げた。物理空間領域を“伸長座標変換”し、2次元ラプラス方程式を差分法によって離散化した。そして得られる連立方程式の近似解と正解との誤差ノルムと伸長座標変換パラメータとの関係を調査した。

(1) ラプラス方程式の基本解に関しては、 $\alpha=\beta$ のときに誤差ノルムが最小となる。また、最小誤差ノルムを導く最適な座標変換パラメータ α_{opt} が存在することが確認できた。また、正解と近似解との絶対誤差を調査した結果、 α_{opt} によって格子を集中させることで、等間隔格子にお

表1 最小誤差ノルムと等しい誤差ノルムを等間隔格子で得るときに要する格子数

$N_x(=N_y)$ (格子集中)	E_{min}	$N_x(=N_y)$ (等間隔)	E	(等間隔) (格子集中)
10	7.92×10^{-3}	203	7.90×10^{-3}	20.3
20	4.04×10^{-3}	399	4.03×10^{-3}	19.9
30	2.70×10^{-3}	598	2.69×10^{-3}	19.9
40	2.03×10^{-2}	797	—————	19.9
50	1.62×10^{-2}	997	—————	19.9
60	1.35×10^{-2}	1197	—————	20.0
70	4.64×10^{-2}	1398	—————	20.0

ける誤差と格子集中を強めたときの誤差を緩和し、誤差が全体として約1/30になることを確認した。

(2) 軸方向の格子数 N_x と最小誤差ノルム E_{min} , N_x と α_{opt} との関係それぞれ調査した。それらの関係は $p=q=e^{-4/\sqrt{2}}$ において反比例の関係になる。

(3) 境界付近における値の変化を厳しくするにつれて α_{opt} が大きくなり、格子集中を強める必要が生じる。このときの N_x と α_{opt} との関係は(15)式の関係となる。(15)式の定数 c と d は $p(=q)$ の値と何らかの関係があると思われるので、今後、考察する。

(4) α_{opt} による格子集中によって生じた最小誤差ノルム E_{min} と等間隔格子によって生じる誤差ノルムが同程度の大きさとなるとき、配置する格子数にどれ程の差があるかを調べた。その結果、2次元問題において、等間隔格子で計算するためには格子間隔を最適化したときの格子数のおよそ400倍必要とすることが分かった。また、この倍率は格子数にかかわらず一定となる。

参考文献

- [1] Tao Tang, and Manfred R. Trummer: Boundary Layer Resolving Pseudospectral Methods for Singular Perturbation Problems, SIAM J. Sci. Comput., Vol.17, No. 2, pp. 430-438(1996).
- [2] 坪井一洋: 伸長座標変換における三重対角行列の条件数(投稿中).
- [3] 平津忍, 坪井一洋, 石黒美佐子: 伸長座標変換における差分法行列の条件数と解の誤差, 情報処理学会第57回全国大会講演論文集1, pp.4-5.