様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２７ 年　 ６ 月 １６ 日現在

機関番号：３２６８９
研究種目：基盤研究(C)
研究期間：2011～2014
課題番号：２３５４０１６６

研究課題名（和文）ハミルトニアンに基づく粒子法の非平衡統計力学的理論に関する研究

研究課題名（英文）A study on the non-equilibrium statistical mechanics of particle methods based on Hamiltonian mechanics

研究代表者
鈴木　幸人（Suzuki, Yukihito）

早稲田大学・理工学術院・主任研究員

研究者番号：９０５９６９７５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,600,000円

研究成果の概要（和文）：非平衡熱力学の一つの理論的枠組みとして提唱されているGENERICと呼ばれる定式化に基づいて粒子法を構成することを試みた。具体的には流れのオイラー記述に対するポアソン括弧に基づく粒子法と呼べるような計算アルゴリズムを考案し検査計算を行った。また二次元渦度方程式をGENERICの枠組みで定式化し離散変分法を用いて離散化することによって、運動エネルギーとエンストロフィーが非粘性のときには正確に保存し、粘性がある場合には正しく散逸するような数値計算手法を開発した。

研究成果の概要（英文）：A particle method based on the GENERIC formalism which is a theoretical framework for non-equilibrium thermodynamics has been studied. Indeed, a particle method based on the Poisson bracket defined on the state space of the Eulerian description of fluid flow has been developed and some numerical experiments have been done. In addition, the two-dimensional vorticity equation has been formulated within the GENERIC formalism and discretized using the discrete variational derivative method. The thus-obtained numerical method preserves or dissipates the kinetic energy and enstrophy depending on whether the flow is inviscid or viscid.

研究分野：数値流体力学

キーワード：粒子法　ハミルトン力学　非平衡熱力学

１．研究開始当初の背景

粒子法は連続体の運動を離散粒子群の運動として近似する数値計算手法であり、これにより飛沫を伴う砕波、固体の破砕など非常に複雑な現象が解析できるようになると期待されている。特に、連続体の解析力学に基づき、そのラグランジアンを直接離散化することによってハミルトニアンに基づく粒子法を構成することができる。それにハミルトン系のシンプレクティック構造を保存する数値時間積分法を適用することによって、運動量や力学的エネルギーなどの保存量を精度良く計算することが可能となる。一方、非平衡熱力学および非平衡統計力学の分野でハミルトニアンに支配される分子スケールの動力学と偏微分方程式で記述される連続体の動力学との橋渡しをする試みが行われている。そのようなアイデアを上記のハミルトニアンに基づく粒子法に適用することによって、粒子法の改良あるいは拡張を行うことができるのではないかと考えられる。

２．研究の目的

ハミルトニアンに基づく粒子法は力学的エネルギー等の保存量が精度良く保存する特長をもつ一方、計算が進行するとともに微小振動が発生するようになる粒子法特有の欠点を抱えている。本研究では、粒子法計算アルゴリズムを非平衡熱力学あるいは非平衡統計力学的なアプローチから再検討することによって、その理論的な基礎付けを行うとともに上記の欠点を解決することを目的とする。

３．研究の方法

非平衡統計力学的手法と連続体の解析力学的手法を調査し、粒子法の動力学と連続体の動力学の橋渡しを行うのに適した概念および手法を抽出する。その後、それらの概念および手法を用いて、粒子法の動力学と連続体の動力学を結びつける理論を構築する。

４．研究成果

(1)Euler 座標上の Poisson 構造

三次元 Euclid 空間 E^3 の滑らかな境界をもつ有界な部分領域 Ω_{ref} を基準配置とする連続体の許容される変形（微分同相写像） $q\in C^\infty(\Omega_{\mathrm{ref}},E)$ 全体の集合を $\mathcal{M}$ とし、滑らかな１パラメータ群 $\mathcal{G}_t:\mathcal{M}\to\mathcal{M}\big(t\in[0,\infty)\big)$ を連続体の運動の全体とする。また連続体の変形 $q\in\mathcal{M}$ と速度場 $\dot q\in T_q\mathcal{M}$ と双対な運動量場 $p\in T_q^*\mathcal{M}$ の組 $z=(q,p)$ の全体 $T^*\mathcal{M}$ を連続体の運動の相空間とする。$T^*\mathcal{M}$ 上には Hamiltonian $\mathcal{H}\in C^\infty(T^*\mathcal{M},\mathbb{R})$ （任意の階数の Fréchet 微分が存在すると仮定する）が定義されており、運動方程式が

$$\dot q=\left.\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta p}\right|_z,\ \ \dot p=\left.\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta q}\right|_z \tag{1}$$

と表されるものとする。

滑らかな汎関数 $\mathcal{F},\mathcal{G}\in C^\infty(T^*\mathcal{M},\mathbb{R})$ に対して、Poisson 括弧 $\{\cdot,\cdot\}:C^\infty(T^*\mathcal{M},\mathbb{R})\times C^\infty(T^*\mathcal{M},\mathbb{R})\to C^\infty(T^*\mathcal{M},\mathbb{R})$ を

$$\{\mathcal{F},\mathcal{G}\}(z)=\int_{\Omega_{\mathrm{ref}}}\left(\left.\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta q}\right|_z\cdot\left.\frac{\delta\mathcal{G}}{\delta p}\right|_z-\left.\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta p}\right|_z\cdot\left.\frac{\delta\mathcal{G}}{\delta q}\right|_z\right)da \tag{2}$$

と定義する。これを用いると、運動方程式：(1)式を（ $q^i:(q,p)\mapsto q^i, p_i:(q,p)\mapsto p_i$ を $T^*\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ なる汎関数とみて）

$$\dot q^i=\{q^i,\mathcal{H}\},\ \ \dot p_i=\{p_i,\mathcal{H}\}\ \ (i=1,2,3) \tag{3}$$

と表すことができる。

連続体の運動 $t\mapsto(q_t,p_t)\in T^*\mathcal{M}$ は等エントロピー過程であるとする。そのとき時刻 $t\in[0,\infty)$ における現配置 $\Omega_t=q_t(\Omega_{\mathrm{ref}})$ 上の質量密度 $\rho_t\in C^\infty(\Omega_t,\mathbb{R}_{\geq 0})$，運動量密度 $M_t\in C^\infty(\Omega_t,\mathbb{R}^3)$ およびエントロピー密度 $S_t\in C^\infty(\Omega_t,\mathbb{R})$ を（ $r\in\Omega_t$ に対して）

$$\rho_t(r)=\int_{\Omega_{\mathrm{ref}}}\delta\big(r-q_t(a)\big)\rho_0(a)da,$$

$$M_t(r)=\int_{\Omega_{\mathrm{ref}}}\delta\big(r-q_t(a)\big)p_t(a)da,$$

$$S_t(r)=\int_{\Omega_{\mathrm{ref}}}\delta\big(r-q_t(a)\big)S_0(a)da \tag{4}$$

と定義する（右辺が全て滑らかな関数を与えると仮定する）。ここで $\rho_0\in C^\infty(\Omega_{\mathrm{ref}},\mathbb{R}_{\geq 0})$ と $S_0\in C^\infty(\Omega_{\mathrm{ref}},\mathbb{R})$ はそれぞれ基準配置上の質量密度とエントロピー密度である。連続体の等エントロピー運動は変数の組 (ρ,M,S) によって一意的に記述（Euler 記述）されるから

$$\mathcal{M}_E=\{(\rho,M,S)|\rho\in C^\infty(\Omega_t,\mathbb{R}_{\geq 0}),\\ M\in C^\infty(\Omega_t,\mathbb{R}^3),S\in C^\infty(\Omega_t,\mathbb{R})\}$$

を Euler 記述による状態空間として採用することができる。そのとき上記(4)式は Lagrange 記述による相空間の点 $z_t=(q_t,p_t)\in T^*\mathcal{M}$ を Euler 記述による状態空間の点 $Z_t=(\rho_t,M_t,S_t)\in\mathcal{M}_E$ に写す写像 $\varphi:T^*\mathcal{M}\to\mathcal{M}_E$ を定義する。したがって、この写像によって $T^*\mathcal{M}$ 上（の汎関数）に定義された Poisson 括弧：(2)式を $\mathcal{M}_E$ 上に写す（push-forward）ことができる。すなわち（ $\mathcal{A},\mathcal{B}\in C^\infty(\mathcal{M}_E,\mathbb{R})$ に対して）

$$\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}_E(Z)=\{\varphi^*\mathcal{A},\varphi^*\mathcal{B}\}(z) \tag{5}$$

により $\{\cdot,\cdot\}_E:C^\infty(\mathcal{M}_E,\mathbb{R})\times C^\infty(\mathcal{M}_E,\mathbb{R})\to C^\infty(\mathcal{M}_E,\mathbb{R})$ を定義する。ただし

$$(\varphi^*\mathcal{A})(z)=\mathcal{A}\big(\varphi(z)\big)\ \ \big(\forall\mathcal{A}\in C^\infty(\mathcal{M}_E)\big)$$

である。この $\mathcal{M}_E$ 上の Poisson 括弧は、具体的には

$$\mathcal{L}(r,r')=\begin{pmatrix}0 & L_{\rho M} & 0\\ L_{M\rho} & L_{MM} & L_{MS}\\ 0 & L_{SM} & 0\end{pmatrix} \tag{6}$$

ただし

$$L_{\rho M} = \{\rho(r), M(r')\} = -\rho(r')\nabla\delta(r-r'),$$

$$L_{M\rho} = \{M(r), \rho(r')\} = \rho(r)\nabla\delta(r'-r),$$

$$L_{MM} = \{M(r), M(r')\}$$

$$= \nabla\delta(r'-r) \otimes M(r)$$

$$- M(r') \otimes \nabla\delta(r-r'),$$

$$L_{MS} = \{M(r), S(r')\} = S(r)\nabla\delta(r'-r),$$

$$L_{SM} = \{S(r'), M(r')\} = -S(r')\nabla\delta(r-r')$$

なる線型作用素を用いて

$$\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}_E = \int_{\Omega_t}\int_{\Omega_t} \frac{\delta\mathcal{A}}{\delta Z}(r) \cdot \mathcal{L}(r,r') \frac{\delta\mathcal{B}}{\delta Z}(r')\, dr' dr \tag{7}$$

ただし

$$\frac{\delta\mathcal{A}}{\delta Z} = \begin{pmatrix} \delta\mathcal{A}/\delta\rho \\ \delta\mathcal{A}/\delta M \\ \delta\mathcal{A}/\delta S \end{pmatrix}$$

と表される。

非粘性等エントロピー流れの Hamiltonian は Lagrange 記述の相空間 $T^*\mathcal{M}$ 上で

$$\mathcal{H}(q,p) = \int_{\Omega_{\mathrm{ref}}} \left\{ \frac{|p|^2}{2\rho_0} + \rho_0 u\left(\frac{1}{\rho_0}\det\frac{\partial q}{\partial a}, \frac{S_0}{\rho_0}\right) \right\} da \tag{8}$$

と表される（この Hamiltonian に対して運動方程式：(1)式または(3)式は非エントロピー流れの支配方程式に一致する）。ここで $u \in C^2(\mathbb{R}_{>0} \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$ は流体の内部エネルギーである。(8)式は座標変換 $r = q(a)$ によって $\mathcal{M}_E$ 上の汎関数

$$\mathcal{H}_E(\rho, M, S) = \int_{\Omega_t} \left\{ \frac{|M|^2}{2\rho} + \rho u\left(\frac{1}{\rho}, \frac{S}{\rho}\right) \right\} dr \tag{9}$$

に変換することができる。これは Euler 記述の状態空間 $\mathcal{M}_E$ 上の Hamiltonian となる。実際、(5)式で定義した Poisson 括弧を用いて、運動方程式を（写像 $\rho(r): (\rho, M, S) \mapsto \rho(r)$, $M^i(r): (\rho, M, S) \mapsto M^i(r), S(r): (\rho, M, S) \mapsto S(r)$ を $\mathcal{M}_E$ 上の汎関数とみて）

$$\dot{\rho}_t(r) = \{\rho_t(r), \mathcal{H}_E\}_E,$$

$$\dot{M}_t^i(r) = \{M_t^i(r), \mathcal{H}_E\}_E,$$

$$\dot{S}_t(r) = \{S_t(r), \mathcal{H}_E\}_E \tag{10}$$

と定義すると、これは非エントロピー流れの支配方程式にに一致する。この運動方程式は(6)式で定義される作用素を用いると

$$\frac{dX}{dt} = \int_{\Omega_t} \mathcal{L}(r,r') \frac{\delta\mathcal{H}_E}{\delta X}(r') dr' \tag{11}$$

ただし

$$X = \begin{pmatrix} \rho \\ M \\ S \end{pmatrix}$$

と表すことができる。

(2)Euler 座標上の Poisson 構造に基づく粒子法の定式化

Lagrange 記述の相空間 $T^*\mathcal{M}$ から Euler 記述の状態空間への変換：(4)式は

$$\mathrm{supp}\, f_\delta \subset \{r \in \mathbb{R}^3 \,|\, |r| < \delta\}, \ \int_{\mathbb{R}^3} f_\delta(r) dr = 1$$

なる関数 $f_\delta \in C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$ を用いて

$$\rho_t(r) = \lim_{\delta\to 0} \int_{\Omega_{\mathrm{ref}}} f_\delta(r - q_t(a)) \rho_0(a) da,$$

$$M_t(r) = \lim_{\delta\to 0} \int_{\Omega_{\mathrm{ref}}} f_\delta(r - q_t(a)) p_t(a) da,$$

$$S_t(r) = \lim_{\delta\to 0} \int_{\Omega_{\mathrm{ref}}} f_\delta(r - q_t(a)) \rho_0(a) da \tag{12}$$

と表すことができる。基準配置 $\Omega_{\mathrm{ref}} \subset \mathbb{R}^3$ を

$$\Omega_{\mathrm{ref}} = \bigcup_{I=1}^{N} \Omega_I, \ I \neq J \Rightarrow \Omega_I \cap \Omega_J = \emptyset$$

と分割し、$a_I \in \Omega_I$ $(I = 1, \dots, N)$ を適当に選ぶ（あるいは複数の点を選んで数値積分公式を用いることも可能である）と、(12)式は

$$\tilde{\rho}_t(r) = \sum_{I=1}^{N} m_I f_\delta(r - q_I(t)),$$

$$\tilde{M}_t(r) = \sum_{I=1}^{N} p_I(t) \frac{m_I}{\rho_{0I}} f_\delta(r - q_I(t)),$$

$$\tilde{S}_t(r) = \sum_{I=1}^{N} S_{0I} \frac{m_I}{\rho_{0I}} f_\delta(r - q_I(t)) \tag{13}$$

ただし

$$q_I(t) = q_t(a_I), \ p_I(t) = p_t(a_I),$$

$$\rho_{0I} = \rho_0(a_I), \ S_{0I} = S_0(a_I), \ m_I = \rho_{0I}|\Omega_I|$$

と離散化することができる（ここで $|\Omega_I|$ は微小領域 $\Omega_I \subset \mathbb{R}^3$ の体積を表す）。これは Lagrange 記述による相空間の離散近似空間 $\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ の点 $\tilde{z} = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ を Euler 記述による状態空間の点 $Z_t = (\rho_t, M_t, S_t) \in \mathcal{M}_E$ に写す写像 $\tilde{\varphi}: \mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N} \to \mathcal{M}_E$ を定義する。この写像によって $\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ 上（の関数）に定義された Poisson 括弧を $\mathcal{M}_E$ 上に写すことができる。$\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$ 上の Poisson 括弧は(2)式を離散化して

$$\{F, G\}_D = \sum_{I=1}^{N} \left(\frac{\partial F}{\partial q_I} \cdot \frac{\partial G}{\partial p_I} - \frac{\partial F}{\partial p_I} \cdot \frac{\partial G}{\partial q_I} \right) \frac{m_I}{\rho_{0I}}$$

と定義する。これに対応する $\mathcal{M}_E$ 上の Poisson 括弧は $\mathcal{A}, \mathcal{B} \in C^\infty(\mathcal{M}_E, \mathbb{R})$ に対して

$$\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}_{ED}(Z)=\{\tilde{\varphi}^*\mathcal{A},\tilde{\varphi}^*\mathcal{B}\}_D(\tilde{z}) \tag{14}$$

と定義され、具体的には

$$\mathcal{L}_D(r,r')=\begin{pmatrix} 0 & \tilde{L}_{\rho M} & 0 \\ \tilde{L}_{M\rho} & \tilde{L}_{MM} & \tilde{L}_{MS} \\ 0 & \tilde{L}_{SM} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\tilde{L}_{\rho M}&=\{\rho(r),M(r')\}_D,\\ \tilde{L}_{M\rho}&=\{M(r),\rho(r')\}_D,\\ \tilde{L}_{MM}&=\{M(r),M(r')\}_D,\\ \tilde{L}_{MS}&=\{M(r),S(r')\}_D,\\ \tilde{L}_{SM}&=\{S(r'),M(r')\}_D\end{aligned} \tag{15}$$

なる線型作用素を用いて

$$\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}_{ED} =\int_{\Omega_t}\int_{\Omega_t}\frac{\delta\mathcal{A}}{\delta Z}(r)\cdot\mathcal{L}_D(r,r')\frac{\delta\mathcal{B}}{\delta Z}(r')\,dr'dr$$

と表される。この Poisson 括弧を用いると((10)式と同様に) 運動方程式

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_t(r)&=\{\rho_t(r),\mathcal{H}_E\}_{ED},\\ \dot{M}_t^i(r)&=\{M_t^i(r),\mathcal{H}_E\}_{ED},\\ \dot{S}_t(r)&=\{S_t(r),\mathcal{H}_E\}_{ED}\end{aligned} \tag{16}$$

を定義することができるが、一方で(13)式を直接時間微分すると

$$\tilde{\rho}_t(r)=-\sum_{I=1}^{N}m_I\nabla f_\delta\big(r-q_I(t)\big)\cdot\dot{q}_I(t),$$

$$\tilde{M}_t(r)=\sum_{I=1}^{N}\dot{p}_I(t)\frac{m_I}{\rho_{0I}}f_\delta\big(r-q_I(t)\big) -\sum_{I=1}^{N}p_I(t)\frac{m_I}{\rho_{0I}}\nabla f_\delta\big(r-q_I(t)\big)\cdot\dot{q}_I(t),$$

$$\tilde{S}_t(r)=-\sum_{I=1}^{N}S_{0I}\frac{m_I}{\rho_{0I}}\nabla f_\delta\big(r-q_I(t)\big)\cdot\dot{q}_I(t)$$

が得られる。これと(16)式を比較すると

$$\begin{aligned}\dot{q}_I&=\int_{\Omega_t}\frac{\tilde{M}(r)}{\tilde{\rho}(r)}f_\delta(r-q_I)dr,\\ \frac{\dot{p}_I}{\rho_{0I}}&=\int_{\Omega_t}\left[\left(\frac{p_I}{\rho_{0I}}-\frac{\tilde{M}}{2\tilde{\rho}}\right)\cdot\frac{\tilde{M}}{\tilde{\rho}}+h\right]\nabla f_\delta(r-q_I)dr,\\ \dot{S}_{0I}&=0\end{aligned} \tag{17}$$

ただし

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}&=\sum_{I=1}^{N}m_I f_\delta(r-q_I),\\ \tilde{M}&=\sum_{I=1}^{N}p_I\frac{m_I}{\rho_{0I}}f_\delta(r-q_I),\\ \tilde{S}&=\sum_{I=1}^{N}S_{0I}\frac{m_I}{\rho_{0I}}f_\delta(r-q_I)\end{aligned} \tag{18}$$

が成り立たなければならないことが分かる。なお $h=h\big(1/\tilde{\rho},\tilde{S}/\tilde{\rho}\big)$ は流体のエンタルピーである。

この(17)式を粒子法の運動方程式として採用することができる。そのとき、その結果として得られる $(q_I,p_I,S_{0I}), I=1,\dots,N$ を用いて(18)式により空間上の質量密度、運動量密度およびエントロピー密度を定義すると、それらは運動方程式 (16) 式を満たすことになる。ただし(17)式は空間座標に関する積分を含んでいるため、具体的に計算を行うためにはさらにその積分を離散化する必要がある。本研究では空間座標上に格子を生成し、その上で数値積分を行うことによって積分を評価した。適当な方法を用いると(空間方向の離散化の)結果として得られる常微分方程式系を ((9)式をある方法で離散近似した Hamiltonian をもつ) Hamilton 系として定式化することが可能であることが分かる。したがって、その Hamilton 系の数値時間積分法に symplectic スキームを適用することによって運動エネルギーなどの保存量を精度良く保存するような数値計算手法を構築することができる。本研究ではこの方針に則り幾つかの方法を試みたが、十分な数値安定性をもつ計算手法を構築するには至らなかった。一つの難点は Euler 記述に基づく離散化手法で Hamilton 系の構造を保存するようなものが存在しないため、上記の空間座標の離散化において理論的な指針を得ることが難しいことである。そこで、この難点を解決するため Euler 記述に基づく流れの構造保存型数値解法を検討することとした。

(3) 二次元渦度方程式の GENERIC 定式化と離散変分法

Euler 記述に基づく流れの構造保存型数値解法を確立するその第一歩として、非圧縮二次元粘性流れに対する渦度方程式を GENERIC (General Equation for the Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling) と呼ばれる非平衡熱力学の一つの理論的枠組みに基づいて定式化し、それに離散変分法と呼ばれる構造保存型数値解法を適用して、運動エネルギーとエンストロフィー(渦度の L_2 ノルム)が非粘性流れの場合には正確に保存し、粘性流れの場合には正しく散逸するような数値計算手法を開発した。GENERIC とは、系の時間進展がエネルギー汎関数 $\mathcal{H}$ の汎関数微分 $\delta\mathcal{H}/\delta X$ に歪対称線型作用素 $\mathcal{L}$ を作用させたものとエントロピー汎関数 $\mathcal{S}$ の汎関数微分 $\delta\mathcal{S}/\delta X$ に対称な半正定値線型作用素 $\mathcal{M}$ を作用させたものの和として

$$\frac{dX}{dt} = \mathcal{L}\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta X} + \mathcal{M}\frac{\delta\mathcal{S}}{\delta X}$$

と表されるものとして定式化するものである。

渦度方程式の場合には、滑らかな境界をもつ二次元有界領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ 上にエネルギー汎関数

$$\mathcal{H} = \int_\Omega \frac{1}{2}|\nabla\psi|^2 d\Omega$$

とエントロピー汎関数

$$\mathcal{S} = -\int_\Omega \frac{1}{2}\omega^2 d\Omega$$

を定義すると、歪対称の線型作用素

$$\mathcal{L} = \frac{\partial\omega}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial\omega}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}$$

と半正定値対称の線型作用素

$$\mathcal{M} = -\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

を用いて

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} = \mathcal{L}\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\omega} + \mathcal{M}\frac{\delta\mathcal{S}}{\delta\omega}$$

と定式化することができる。ここで ψ と ω はそれぞれ二次元流れ場 (u,v) の流れ関数と渦度であり Re は Reynolds 数である。このとき $\mathcal{L}$ と $\mathcal{M}$ を用いて歪対称の双一次形式 $\{\cdot,\cdot\}$ と半正定値対称の双一次形式 $[\cdot,\cdot]$ を（任意の滑らかな汎関数 $\mathcal{F},\mathcal{G}$ に対して）

$$\{\mathcal{F},\mathcal{G}\} = \int_\Omega \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega}\mathcal{L}\frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\omega}d\Omega,$$

$$[\mathcal{F},\mathcal{G}] = \int_\Omega \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega}\mathcal{M}\frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\omega}d\Omega$$

と定義すると、汎関数 $\mathcal{F}$ の時間進展は

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \{\mathcal{F},\mathcal{H}\} + [\mathcal{F},\mathcal{S}]$$

と表される。これらの双一次形式に対して（適当な境界条件のもとで）

$$[\mathcal{H},\mathcal{S}] = -\frac{1}{\mathrm{Re}}\int_\Omega \omega^2 d\Omega \le 0,$$

$$\{\mathcal{S},\mathcal{H}\} = \int_\Omega \psi\mathcal{L}\omega d\Omega = 0$$

なる性質が成り立つから

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \{\mathcal{H},\mathcal{H}\} + [\mathcal{H},\mathcal{S}] = [\mathcal{H},\mathcal{S}] \le 0,$$

$$\frac{d\mathcal{S}}{dt} = \{\mathcal{S},\mathcal{H}\} + [\mathcal{S},\mathcal{S}] = [\mathcal{S},\mathcal{S}] \ge 0$$

が得られる。これらは運動エネルギー $\mathcal{H}$ とエンストロフィー $-\mathcal{S}$ の散逸則（非粘性すなわち $\mathrm{Re} = \infty$ の場合には保存則）を表している。

離散変分法を用いると、以上の定式化の構造を保持するような差分方程式を得ることができる。実際、二次元矩形領域 $\Omega = [0,L_x] \times [0,L_y]$ を $N_{\mathrm{cell}} = N_x \times N_y$ 個の小矩形 $\Delta\Omega_{ij} = [x_i,x_{i+1}] \times [y_j,y_{j+1}]$ に分割し、格子点 (x_i,y_j) における渦度と流れ関数の近似値をそれぞれ $\omega_{ij}^n \approx \omega(n\Delta t,x_i,y_j)$ と $\psi_{ij}^n \approx \psi(n\Delta t,x_i,y_j)$ とする（ $i = 1,\ldots,N_x, j = 1,\ldots,N_y$ ）。ただし Δt は時間刻み幅である。また $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ と $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$ をそれぞれ x 方向と y 方向の空間格子幅とし、$|\Delta\Omega_{ij}| = \Delta x_i \Delta y_j$ を小矩形の面積とする。そのときエネルギー汎関数とエントロピー汎関数を（適当な境界条件のもとで）

$$H^n = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_x}\sum_{j=1}^{N_y}\psi_{ij}^n\omega_{ij}^n|\Delta\Omega_{ij}|,$$

$$S^n = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_x}\sum_{j=1}^{N_y}(\omega_{ij}^n)^2|\Delta\Omega_{ij}|$$

ただし

$$|\tilde{\nabla}\tilde{\psi}^n|^2 = (m_y\delta_x\tilde{\psi}^n)^2 + (m_x\delta_y\tilde{\psi}^n)^2$$

と離散化すると（適当な境界条件のもとで）

$$\frac{H^{n+1} - H^n}{\Delta t} = \langle\frac{\delta H}{\delta\tilde{\omega}},\frac{\tilde{\omega}^{n+1} - \tilde{\omega}^n}{\Delta t}\rangle,$$

$$\frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} = \langle\frac{\delta S}{\delta\tilde{\omega}},\frac{\omega^{n+1} - \omega^n}{\Delta t}\rangle$$

ただし

$$\langle f,g\rangle = \sum_{i=2}^{N_x}\sum_{j=2}^{N_y} f_{ij}g_{ij}|\Delta\Omega_{ij}^*|$$

となるような $\delta H/\delta\tilde{\omega}, \delta S/\delta\tilde{\omega} \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ を ψ_{ij}^n と ω_{ij}^n の関数として構成することができる。ここで $\tilde{\psi}^n, \tilde{\omega}^n \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ はそれぞれ $\psi_{ij}^n, \omega_{ij}^n$ を成分とする $N_{\mathrm{grid}} = (N_x - 1) \times (N_y - 1)$ 次元のベクトル、$|\Delta\Omega_{ij}^*| = (\Delta x_i + \Delta x_{i-1})(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})/4$ は格子中心を頂点とする小矩形の面積であり（ $f \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ に対して）

$$(\delta_x f)_{ij} = \frac{f_{i+1,j} - f_{ij}}{\Delta x_i},\ (\delta_y f)_{ij} = \frac{f_{i,j+1} - f_{ij}}{\Delta y_j},$$

$$(m_x f)_{ij} = \frac{f_{i+1,j} + f_{ij}}{2},\ (m_y f)_{ij} = \frac{f_{i,j+1} + f_{ij}}{2}$$

は差分作用素と平均化作用素である。さらに、微分作用素 $\mathcal{L}$ の離散化として（適当な境界条件のもとで任意の $f,g \in \mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ に対して）

$$\langle f,Lg\rangle = -\langle Lf,g\rangle,\ \langle\frac{\delta H}{\delta\tilde{\omega}},L\frac{\delta S}{\delta\tilde{\omega}}\rangle = 0$$

を満たすような線型写像 $L\colon \mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}} \to \mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ を、また微分作用素 $\mathcal{M}$ の離散化として（適当な

境界条件のもとで任意の $f,g\in\mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ に対して）

$$\langle f,Mg\rangle=\langle Mf,g\rangle,$$

$$\langle f,Mf\rangle=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\left\|m_y\delta_x f\right\|^2+\left\|m_x\delta_y f\right\|^2\right)\geq 0$$

および

$$\langle\frac{\delta H}{\delta\widetilde{\omega}},M\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}}\rangle=-\frac{1}{\mathrm{Re}}\langle m_t\widetilde{\omega},m_t\widetilde{\omega}\rangle\leq 0$$

ただし

$$\|f\|^2=\sum_{i=1}^{N_x}\sum_{j=1}^{N_y}f_{ij}^2\left|\Delta\Omega_{ij}\right|\quad(f\in\mathbb{R}^{N_{\mathrm{cell}}})$$

を満たすような線型写像 $M:\mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}\to\mathbb{R}^{N_{\mathrm{grid}}}$ を得ることができる。以上より渦度方程式を

$$\frac{\widetilde{\omega}^{n+1}-\widetilde{\omega}^n}{\Delta t}=L\frac{\delta H}{\delta\widetilde{\omega}}+M\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}}\tag{19}$$

と離散化すれば

$$\frac{H^{n+1}-H^n}{\Delta t}=\langle\frac{\delta H}{\delta\widetilde{\omega}},L\frac{\delta H}{\delta\widetilde{\omega}}+M\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}}\rangle$$

$$=-\frac{1}{\mathrm{Re}}\langle m_t\widetilde{\omega},m_t\widetilde{\omega}\rangle\leq 0$$

および

$$\frac{S^{n+1}-S^n}{\Delta t}=\langle\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}},L\frac{\delta H}{\delta\widetilde{\omega}}+M\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}}\rangle$$

$$=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\left\|m_y\delta_x\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}}\right\|^2+\left\|m_x\delta_y\frac{\delta S}{\delta\widetilde{\omega}}\right\|^2\right)\geq 0$$

が成り立つ。これは離散運動エネルギー H と離散エンストロフィー $-S$ の散逸則（非粘性すなわち $\mathrm{Re}=\infty$ の場合には保存則）を表している。渦度と流れ関数の関係は

$$\widetilde{\omega}_{ij}^n=-\left(\delta_x^*\delta_x+\delta_y^*\delta_y\right)\widetilde{\psi}_{ij}^n$$

ただし

$$(\delta_x^* f)_{ij}=\frac{f_{ij}-f_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1/2}},\ \ \Delta x_{i-1/2}=\frac{\Delta x_{i-1}+\Delta x_i}{2},$$

$$\left(\delta_y^* f\right)_{ij}=\frac{f_{ij}-f_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1/2}},\ \ \Delta y_{j-1/2}=\frac{\Delta y_{j-1}+\Delta y_j}{2}$$

と離散化できる。これにより(19)式は $\widetilde{\psi}^{n+1}$ に関する非線型代数方程式となり、標準的な Newton 法を用いて解くことができる。本計算手法を用いて周期渦列の計算を行った。離散エネルギーと離散エンストロフィーについて、非粘性流れの場合には初期値からの誤差を図１に示し、粘性流れの場合にはそれらの値を図２に示す。計算されたエネルギーとエンストロフィーは非粘性流れの場合には正確に保存し粘性流れの場合には指数関数的に減衰していることが確認できる。

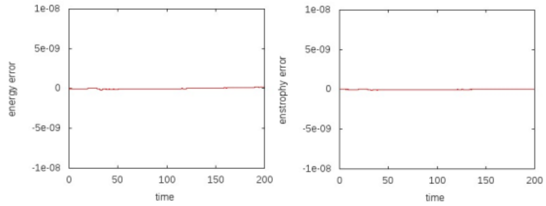

図１　エネルギー誤差(左)とエンストロフィー誤差(右)の時間変化（ $\mathrm{Re}=\infty$ ）

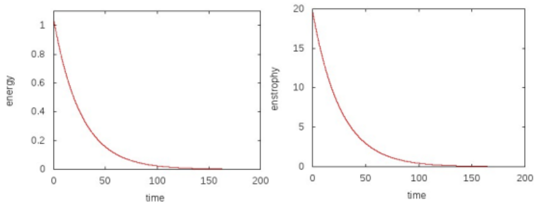

図２　エネルギー（左）とエンストロフィー（右）の時間変化（ $\mathrm{Re}=1000$ ）

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　１件）

<u>Y. Suzuki</u>, M. Ohnawa, “GENERIC formalism and discrete variational derivative method for the two-dimensional vorticity equation”, Journal of Computational and Applied Mathematics（査読有）submitted.

〔学会発表〕（計　１件）

<u>鈴木幸人</u>,大縄将史,及川一誠,“離散変分法による渦度方程式の数値解法”,日本応用数理学会 2014 年度年会, 2014 年 9 月 3 日, 政策研究大学院大学.

６．研究組織

(1)研究代表者

鈴木　幸人（SUZUKI, Yukihito）
早稲田大学理工学術院・主任研究員
研究者番号：90596975

(2)研究分担者

（　　　）

研究者番号：

(3)連携研究者

柴田　良弘（SHIBATA, Yoshihiro）
早稲田大学理工学術院・教授
研究者番号：50114088
吉村　浩明（YOSHIMURA,Hiroaki）
早稲田大学理工学術院・教授
研究者番号：40247234
伊藤　公久（ITO, Kimihisa）
早稲田大学理工学術院・教授
研究者番号：10159866