

空間離散化を用いない新たな流体計算法の試み

Yonghao Yue¹

岩崎 慶²

陳 炳宇³

土橋 宜典⁴

西田 友是¹

¹ 東京大学

² 和歌山大学

³ 国立台湾大学

⁴ 北海道大学

概要

流体のダイナミクスを忠実に表現するには、流体の挙動を記述したナビエ-ストークス方程式を正確に解くことが重要である。ナビエ-ストークス方程式は時間微分と空間微分を含む方程式である。一般的な解法では空間微分を扱うために、空間を格子もしくは粒子を用いて離散化し、差分によって近似して解く。しかし、空間離散化によって数値拡散や数値振動の問題が発生する。そこで、本研究では、数値拡散や数値振動を伴わない新たな流体シミュレーション手法の開発をめざす。提案法は空間離散化を行わないので、空間差分に起因する誤差が発生せず、したがって時間とともに蓄積することもない。また、理論上任意の空間解像度の解を得ることができる。提案法を用いることによって、よりナビエ-ストークス方程式に忠実な解を得ることができる。

1 はじめに

煙、炎、雲など、我々の身近には多くの流体が存在する。こうした流体のダイナミクスは視覚的に印象的であるため、様々な流体現象をCGでリアルに再現する研究が盛んに行われている。流体のダイナミクスを忠実に表現するには、流体の挙動を記述したナビエ-ストークス方程式を正確に解くことが重要である。本研究では、非圧縮の流体の挙動を記述したナビエ-ストークス方程式の解法に焦点を当てる。

ナビエ-ストークス方程式は時間微分と空間微分を含む方程式である。一般的な解法では空間微分を扱うため、空間を格子もしくは粒子を用いて離散化し、差分によって近似して解く。しかし、空間離散化によって数値拡散や数値振動の問題が発生したり、また空間分解能の制限を受ける。数値拡散が起こると解は‘なまり’、数値振動が起こると解に不要な振動が現れる。さらに、数値拡散や数値振動による誤差はしばしば時間発展とともに蓄積する。こうした誤差は、主として非線形項の差分近似において生じ(すなわち移流計算)、CG分野だけでなく計算物理の分野でも問題となる。数値拡散や数値振動による誤差を低減するため、これまでに多くの移流スキームが開発されてきた。有名な移流スキームとしては、中心差分 [3, 6], 風上差分 [11, 15], セミラグランジュアン [13], ENO [4], WENO [7] などがあり、各々について、様々なバリエーションが存在する。例えば、低次から高次までの近似オーダー、圧縮性や非圧縮性のそれぞれの場合、低速の場合や音速に近い場合など、様々なバリエーションの組み合わせがあり、実に、1,000 を越す論文が存在する。

本研究では、数値拡散や数値振動を伴わない新たな流体シミュレーション手法の開発をめざす。提案法は空間離散化を行わないので、空間差分に起因する誤差が発生せず、したがって時間とともに蓄積することもない。また、理論上任意の空間解像度の解を得ることができる。提案法を用い

ることによって、よりナビエ-ストークス方程式に忠実な解を得ることができる。

本研究の基本的な考え方は、第一に、シミュレーション空間を実空間からフーリエ空間に変換することによって、空間微分の演算子を代数演算子に変換する。この変換により、微分演算を一切の近似なしに計算できる。また、非圧縮の制約を課す操作も、単純な行列演算となり、誤差が発生しない。第二に、積分方程式としてのナビエ-ストークス方程式を紹介し、その方程式の形が関与媒質のレンダリング方程式と類似することを示す。提案法では、積分方程式としてのナビエ-ストークス方程式を時間に関してのみ離散化して支配方程式を得、レンダリングの分野で利用されるモンテカルロ法概念に基づいて、この支配方程式を統計的に不偏な形で解く。提案法により、フーリエ空間におけるあらゆる周波数の波を確率的に扱うことができる。

提案法では、複数のシミュレーションを並列に実行する。各シミュレーションにおける時間発展は乱数を用いて計算され、各々のシミュレーションは独立して行われる(すなわちシミュレーション間での同期や通信は必要ない)。得られた複数のシミュレーションの平均値を取ると、その期待値は求める速度場になっている。統計的に不偏なサンプリング法を用いることにより、真値との差は分散を計算することによって推定できる。また、シミュレーションの並列数を増やすことにより、統計誤差を任意に小さくできる。

以下では、まずナビエ-ストークス方程式を示し、次に関連研究を示す。その後提案法を述べ、結果、まとめと今後の課題を述べる。

2 ナビエ-ストークス方程式

本研究では、下記に示す無次元化されたナビエ-ストークス方程式を扱う。

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = -(\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla) \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{R_e} \nabla^2 \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{f}(t, \mathbf{x}), \quad (2)$$

ここで、 t は時刻、 \mathbf{x} は空間座標、 \mathbf{u} は速度場を表し、 ∇ は空間微分を表す演算子であり、二次元の場合には $(\partial/\partial x, \partial/\partial y)$ 、三次元の場合には $(\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ で定義される。 ρ は流体密度で、位置によらず定数とする。 p は圧力、 R_e はレイノルズ数、すなわち、(代表長さ) \times (代表速度)/(動粘性係数)を表し、 \mathbf{f} は外力を表す。周期境界条件を考え、空間の各座標は -0.5 から 0.5 の値をとるように正規化する。

2.1 フーリエ変換

$\phi(x)$ を、実空間で区間 $[-0.5, 0.5]$ で定義された、一次元の周期関数 ($\phi(-0.5) = \phi(0.5)$) とする。この関数のフーリエ変換 $\hat{\phi} = \mathcal{F}(\phi)$ は次のように、

$$\hat{\phi}(\xi) = \int_{-1/2}^{1/2} \phi(x) e^{-2\pi i \xi x} dx \quad (3)$$

と表される。 $\hat{\phi}(\xi)$ は複素数、 ξ は整数¹であり周波数を表す。また、逆フーリエ変換は、

$$\phi(x) = \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}(\xi) e^{2\pi i \xi x} \quad (4)$$

と表される²。

関数 $\phi(x)$ の微分 $d\phi/dx$ のフーリエ変換 $\mathcal{F}(d\phi/dx)$ を $\hat{\psi}$ とすると (付録 A.1 参照)、

$$\hat{\psi}(\xi) = 2\pi i \xi \hat{\phi}(\xi) \quad (5)$$

と表される。つまり、フーリエ空間での微分計算は、周波数を乗算するという代数演算となり、計算には空間離散化が不要で、誤差が生じない。

2.2 フーリエ空間におけるナビエ-ストークス方程式

フーリエ空間におけるナビエ-ストークス方程式は、

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}(t, \xi)}{\partial t} = H(\xi) \left(\hat{\mathbf{f}}(t, \xi) - 2\pi i \hat{\mathbf{c}}(t, \xi) \right) - 4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\xi|^2 \hat{\mathbf{u}}(t, \xi) \quad (6)$$

と表されることが知られている [10] (付録 B.1 参照)。ここで、 $\hat{\mathbf{f}}$ と $\hat{\mathbf{u}}$ はそれぞれフーリエ変換された外力と速度場を表す。 ξ は、空間座標それぞれについての周波数からなるベ

¹空間の幅を 1 に正規化しているため、整数倍の波しか存在できない。周波数は正負の符号をとれる。周波数の絶対値が同じで符号が異なる二つの波は、周期は同じであるが、位相が異なる。

²周波数は整数値しか取らないので、右辺は積分の形ではなく和の形で表される

表 1: 積分方程式としてのナビエ-ストークス方程式 (式 (10)) と関与媒質のレンダリング方程式 (式 (11)) の類似性。

	式 (10)	式 (11)
変数	速度場	輝度
右辺第一項	波の減衰	光の減衰
右辺第二項	外力+波の相互作用	発光+光の相互作用 (散乱)

クトルを表し、二次元の場合 (ξ_1, ξ_2) であり、三次元の場合 (ξ_1, ξ_2, ξ_3) であり、 ξ_1, ξ_2, ξ_3 は、それぞれ x, y, z 成分に対応する周波数で、整数である。 $\hat{\mathbf{c}}(t, \xi)$ は、

$$\hat{\mathbf{c}}(t, \xi) = \sum_{\zeta} (\xi \cdot \hat{\mathbf{u}}(t, \zeta)) \hat{\mathbf{u}}(t, \xi - \zeta) \quad (7)$$

と表される。ここで、 ζ は ξ と同様に周波数のベクトルを表す。 $\hat{\mathbf{c}}(t, \xi)$ は、式 (2) の右辺の非線形項に対応しており、実空間での乗算は、フーリエ空間では畳込計算となる (付録 A.2 参照)。後述のように、この畳込計算は、二つの波から新たな波が生成される効果を表しており、特にこの計算をカスケード計算と呼ぶ。 $H(\xi)$ は、非圧縮の制約を課す Helmholtz-Hodge 分解を表す行列であり、二次元の場合、

$$H(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \begin{bmatrix} \xi_2^2 & -\xi_1 \xi_2 \\ -\xi_1 \xi_2 & \xi_1^2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

で表され、三次元の場合は

$$H(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \begin{bmatrix} \xi_2^2 + \xi_3^2 & -\xi_1 \xi_2 & -\xi_1 \xi_3 \\ -\xi_1 \xi_2 & \xi_1^2 + \xi_3^2 & -\xi_2 \xi_3 \\ -\xi_1 \xi_3 & -\xi_2 \xi_3 & \xi_1^2 + \xi_2^2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

と表される。ただし、 $\xi = 0$ の場合、 $H(0) = E$ (単位行列) と定める (すなわち、 $\partial \hat{\mathbf{u}}(t, 0) / \partial t = \hat{\mathbf{f}}(t, 0)$ となる)。フーリエ空間でのナビエ-ストークス方程式では、式 (6) の右辺はすべて代数演算子のみで構成されることに注目されたい。

式 (6) をさらに変形すると、下記の積分方程式の形のナビエ-ストークス方程式を導くことができる [5] (付録 B.2 参照)。

$$\hat{\mathbf{u}}(t, \xi) = e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(0, \xi) + H(\xi) \int_0^t e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{s}{R_e}} \left[\hat{\mathbf{f}}(s, \xi) - 2\pi i \hat{\mathbf{c}}(s, \xi) \right] ds \quad (10)$$

2.3 研究動機

本研究の動機の一つは、式 (10) が次に示す関与媒質のレンダリング方程式に非常に似ていることである。

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = e^{-\tau(\mathbf{x}, \mathbf{y})} L_0(\mathbf{y}, \boldsymbol{\omega}) + \int_0^{|\mathbf{y}-\mathbf{x}|} e^{-\tau(\mathbf{x}, \mathbf{x}+s\boldsymbol{\omega})} \left[k_a(\mathbf{x}) L_e(\mathbf{x} + s\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}) + \frac{k_s(\mathbf{x})}{4\pi} \int_{S^2} p(\mathbf{x} + s\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}') L(\mathbf{x} + s\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}') d\boldsymbol{\omega}' \right] ds \quad (11)$$

ここで、 L は位置 \mathbf{x} における $\boldsymbol{\omega}$ 方向の輝度を表し、 \mathbf{y} は位置 \mathbf{x} から $\boldsymbol{\omega}$ 方向に向かう光線と関与媒質のバウンディングボックス (シミュレーション領域) との交点を表し、 $\tau(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は二点 \mathbf{x} と \mathbf{y} の間の光学的深さを表す。また、 L_0 はシミュレーション領域の外部から入射する直接光、 s は位置 \mathbf{x} からの距離、 k_a は吸収係数、 L_e は関与媒質の発光、 k_s は散乱係数、 S^2 は球面上の全方向を表す集合、 p は位相関数、 $\boldsymbol{\omega}'$ は散乱後の方向を表す。

式 (10) と式 (11) はどちらも再帰的な積分方程式で、さらに表 1 に示した類似点がある。この類似性のため、レンダリング方程式を解くために用いられているモンテカルロ法を、ナビエ-ストークス方程式を解くために応用できるのではないかと考えたのが本研究の研究動機である。なお、本稿で記述する理論はすべて三次元の場合に対応しているが、現時点での実験は二次元で行っている。

3 関連研究

フーリエ空間での微分方程式 (式 (6)) を数値解法で解く従来法として、スペクトル法 [10] や擬似スペクトル法 [12] が知られている。これらの方法では、取り扱う周波数を有限個で打ち切り、一定周波数以上を考慮しない。これによって、エリアシングの問題が起こりうる事が知られている。また、フーリエ空間上でカスケード計算 (非線形項の計算) を行うと計算量が大きいため、逆フーリエ変換で一旦実空間に戻って計算する必要がある。

式 (10) に示した積分方程式としてのナビエ-ストークス方程式を解く方法は、ミレニアム懸賞問題の一つである「ナビエ-ストークス方程式の解を求める問題」に対するアプローチとして研究されている。Jan ら [5] は、分岐を伴うモンテカルロ法 [9] (レンダリング分野のパストレーシング法に似た方法) を用いて、時間を遡る形で計算する方法を提案した。Jan らの方法は、空間的にも時間的にも離散化を行わない計算法であるが、ごく短時間の解しか得られず、また大きな粘性係数しか扱えない等の問題がある。改良法として、Borel summation を利用した方法 [2] や Picard iteration を利用した方法 [8] を含め、様々な方法 [1, 14] が提案された

が、空間離散化を伴うか、前述の Jan らの方法の問題を大きく解決するには至っていない。

時間と空間の双方を離散化しない方法はまだ難しいので、本研究ではその一つ前の段階として、空間離散化を行わない解法の開発を目指す。提案法では、時間については離散化し、forward Euler の要領で順方向に時間発展 (レンダリング分野のライトトレーシング (逆方向パストレーシング) に似ている) しながらナビエ-ストークス方程式を解く。提案法では、新たに後述のアンサンブルという概念を導入し、ナビエ-ストークス方程式の時間発展を離散時間マルコフ過程として解く。

提案法を用いることによって、無限個³の周波数を確率的にすべて扱うことができる。また、提案法ではカスケード計算を工夫することにより、すべての計算をフーリエ空間上で行うことができる。さらに、解析時間が長くて (すなわち大きな t でも) 解をえることができ、小さな粘性係数を扱うこともできる。

4 提案法

4.1 支配方程式

提案法では、まず式 (10) において、初期時刻を t_n に置き換え、求めたい状態の時刻を t_{n+1} に置き換えて、下記の式を得る。

$$\hat{\mathbf{u}}(t_{n+1}, \boldsymbol{\xi}) = e^{-4\pi^2 |\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{\Delta t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) + H(\boldsymbol{\xi}) \int_0^{\Delta t} e^{-4\pi^2 |\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{s}{R_e}} \left[\hat{\mathbf{f}}(t_n + s, \boldsymbol{\xi}) - 2\pi i \hat{\mathbf{c}}(t_n + s, \boldsymbol{\xi}) \right] ds. \quad (12)$$

ここで、 $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ は時間の刻み幅である。次に、時刻 t_n から t_{n+1} の間、速度場と外力の変化が小さいと仮定し、下記のように時間に関して forward Euler の方法で離散化した式を得る (付録 C 参照)。

$$\hat{\mathbf{u}}(t_{n+1}, \boldsymbol{\xi}) = H(\boldsymbol{\xi}) e^{-4\pi^2 |\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{\Delta t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) + H(\boldsymbol{\xi}) \frac{1 - e^{-4\pi^2 |\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{\Delta t}{R_e}}}{4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\boldsymbol{\xi}|^2} \left[\hat{\mathbf{f}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) - 2\pi i \hat{\mathbf{c}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) \right]. \quad (13)$$

ただし、 $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{0}$ のとき、 $(1 - e^{-4\pi^2 |\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{\Delta t}{R_e}}) / (4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\boldsymbol{\xi}|^2) = 1$ と定める。以下では、時間の離散化による誤差は無視し、式 (13) を解くべき支配方程式として扱う。

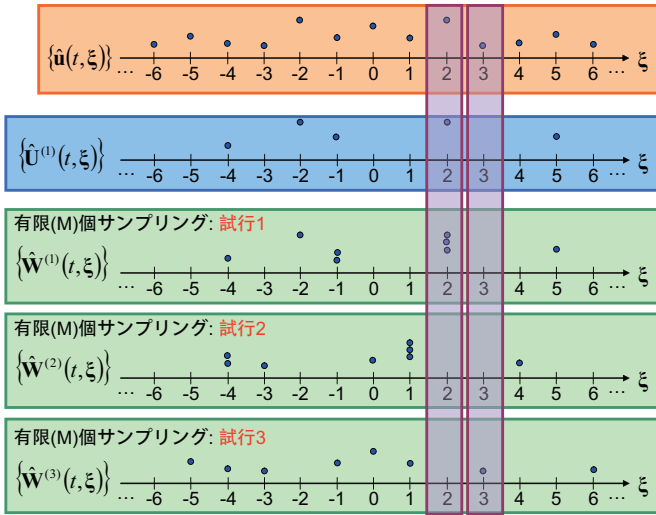


図 1: フーリエ空間での速度 (橙色の枠内) および提案法における確率変数 (青色の枠内) とアンサンブル (緑色の枠内) の概念図. 各々の枠内において, 横軸は周波数 (実際には二次元や三次元), 縦軸は値 (実際には複素数) を概念的に示している. フーリエ変換した速度場については, 一般に値がゼロでない周波数は無限個存在する. 一方で, 提案法で考える確率変数の集合の要素数とアンサンブルの要素数は有限個である. 各周波数ごとに見ると, 確率変数の期待値は, 対応する周波数のフーリエ変換した速度に等しい. アンサンブルの場合は, 周波数が同じである要素の値を合計すると, その合計値の期待値が, 対応する周波数のフーリエ変換した速度に等しい.

4.2 基本的考え方

提案法では, まず期待値が $\hat{u}(t, \xi)$ となるような確率変数 $\hat{U}(t, \xi)$ を考える. すなわち,

$$\langle \hat{U}(t, \xi) \rangle = \hat{u}(t, \xi) \quad (14)$$

である. ここで記号 $\langle \rangle$ は, 期待値をとることを意味する.

次にアンサンブルを定義する. 時刻 t_n における $\hat{u}(t_n, \xi)$ は, 周波数についての一種の分布とみなすことができる. この分布から M 個の要素をランダムにサンプリングしたものを考え, この要素の集団をアンサンブルと呼ぶことにする. 具体的には, アンサンブルは, 有限個 (個数を M とする) の複素数ベクトルからなる集合 $\{\hat{W}(t, \xi_j)\}$ であり,

$$\left\langle \sum_{j, \xi_j = \xi} \hat{W}(t, \xi_j) \right\rangle = \langle \hat{U}(t, \xi) \rangle = \hat{u}(t, \xi) \quad (15)$$

を満たすものとする. なお, $\sum_{j, \xi_j = \xi}$ は, 周波数が ξ である要素をすべて足し合わせることを意味する. 図 1 に式 (15) の意味を直感的に説明した.

複数のアンサンブルの要素が, 同一の周波数をとることができ, またある周波数については, アンサンブルの要素

がなくてもよい. ここで重要な性質の一つは, アンサンブルは有限個の要素から構成されているが, それらの期待値として, 無限個の周波数を確率的に扱えることである. すなわち, 式 (15) を満たすアンサンブルを複数ランダムに選び $\{\hat{W}^{(i)}(t, \xi_j)\}$ とする. i はアンサンブルの番号で, j が i 番目のアンサンブルの j 個目の要素を表す, 選ぶ回数 (すなわち i) を増やしていけば,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j, \xi_j = \xi} \hat{W}^{(i)}(t, \xi_j) = \hat{u}(t, \xi) \quad (16)$$

となり, 正しい値に収束する. さらに, アンサンブルの逆フーリエ変換を

$$\mathcal{IF}(\hat{W})(t, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^M \hat{W}(t, \xi_j) e^{2\pi i \xi_j \cdot \mathbf{x}} \quad (17)$$

と定義すると,

$$\langle \mathcal{IF}(\hat{W})(t, \mathbf{x}) \rangle = \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \quad (18)$$

となる (付録 D 参照). すなわち, アンサンブルを選ぶ回数を増やせば, それらを逆フーリエ変換して平均値を取ると, 正しい速度場に収束する.

提案法では, まず初期時刻 t_0 において, アンサンブルの各要素の初期値を式 (15) を満たすように選び, 次に, 各時刻において, 式 (15) が満足されるように, 時間発展の計算法を構成する. 提案法を用いたシミュレーションの概念図は, 図 2 に示すように, 複数のシミュレーションを並列に走らせることで行われる. 個々のシミュレーションは独立して行われ, シミュレーション間での同期は一切必要ない. 複数のシミュレーションを行った結果を, 各時刻について集計して平均を取るにより, 求める速度場を得る. 以下では, 初期値のサンプリング法と時間発展の計算法を順次説明する.

4.3 初期値のサンプリング法

周波数は無限個あり, 提案法ではそれらの周波数をすべて統計的に不偏な形で扱いたい. したがって, 任意の周波数は有限の確率で選ばなければならない. 初期値をサンプリングするため, 提案法ではまずある確率分布にしたがって周波数を定め, 次にアンサンブルの各要素の値を定める.

一般に周波数の絶対値が大きくなると, その波のエネルギーは小さくなる. この点に着目し, 本研究では, 周波数 ξ の各成分 (ξ_1, ξ_2, ξ_3) を独立にサンプリングし, ξ をサンプリングする確率 $p(\xi)$ として $1/|\xi|^2$ の形に近いものを選ぶ. $\xi = 0$ も扱いたいので, $1/|\xi + 1|^2$ の形を考え, さらに分布

³空間の幅を 1 に正規化しているので, 周波数は整数しか取れない.

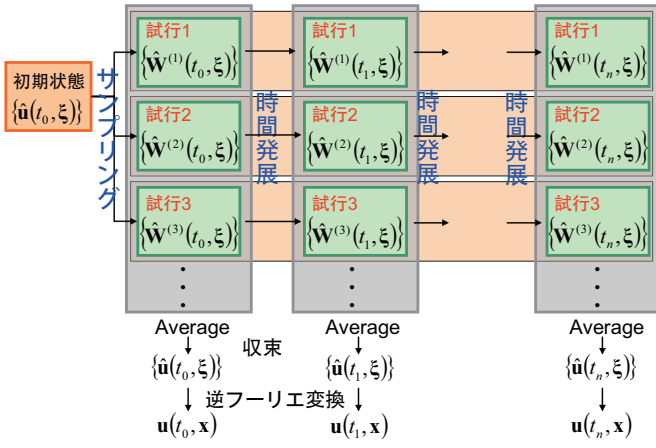


図 2: シミュレーションの概念図. 提案法では複数のシミュレーション (試行) を並列に走らせる. 各々の時刻で, 複数の試行で求めた速度場を平均する. 試行数を増やすことにより, 正しい速度場に収束する.

関数を解析的に求めたいので, 提案法では,

$$p(\xi) = \int_{\xi-1/2}^{\xi+1/2} \frac{dq}{q^2+1} = \frac{1}{\pi} (\arctan(\xi+1/2) - \arctan(\xi-1/2)) \quad (19)$$

を用いる. これにより, 分布関数 $CDF(\xi)$ は,

$$CDF(\xi) = \frac{1}{\pi} \arctan(\xi+1/2) + \frac{1}{2} \quad (20)$$

となるので, r を $[0, 1]$ 間の乱数とすると,

$$\xi = \lceil \tan(\pi(r - \frac{1}{2})) - \frac{1}{2} \rceil \quad (21)$$

によりサンプリングできる.

アンサンプルの要素の値は,

$$\hat{W}(t_0, \xi) = \frac{\hat{u}(t_0, \xi)}{Mp(\xi_1)p(\xi_2)p(\xi_3)} \quad (22)$$

と定める. 提案法では, 初期の速度場が空間的に離散的に与えられている場合でも, 連続的な関数として与えられている場合でも扱うことができる. 初期の速度場 $u(t_0, x)$ が連続的な場合, $\hat{u}(t_0, \xi)$ を解析的に求められない場合もあるが, その場合, $\hat{u}(t_0, \xi)$ の代わりにモンテカルロ推定値

$$\tilde{u}(t_0, \xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{-2\pi i \xi \cdot \mathbf{X}_k} u(t_0, \mathbf{X}_k) \quad (23)$$

を用いる. ここで, \mathbf{X}_k はシミュレーション領域内から選んだランダムな点であり, それを N 個ランダムに選ぶことで $\tilde{u}(t_0, \xi)$ を推定する. この結果,

$$\langle \tilde{u}(t_0, \xi) \rangle = \hat{u}(t_0, \xi) \quad (24)$$

となり, 式 (15) の条件が満たされる.

4.4 時間発展計算法

時間発展計算では, 時刻 t_n において, 式 (15) が満足されているとき, 時刻 t_{n+1} においても式 (15) が満足されるように, $\{\hat{W}(t_n, \xi_j)\}$ から $\{\hat{W}(t_{n+1}, \xi_j)\}$ を求めたい. 以下その方法を順次説明する.

提案法ではまず, 時刻 t_n において,

$$\hat{U}(t_n, \xi) = \sum_{j, \xi_j = \xi} \hat{W}(t_n, \xi_j) \quad (25)$$

を求める. 次に, 時刻 t_{n+1} における $\hat{U}(t_{n+1}, \xi)$ を次式のように計算する (導出は付録 E を参照).

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_{n+1}, \xi) = & H(\xi) e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{\Delta t}{Re}} \hat{U}(t_n, \xi) \\ & + H(\xi) \frac{1 - e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{\Delta t}{Re}}}{4\pi^2 \frac{1}{Re} |\xi|^2} \left(\hat{f}(t_n, \xi) \right. \\ & \left. - 2\pi i \sum_{\zeta} (\xi \cdot \hat{U}(t_n, \zeta)) \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \right). \end{aligned} \quad (26)$$

式 (26) を用いることにより, $\langle \hat{U}(t_{n+1}, \xi) \rangle = \hat{u}(t_{n+1}, \xi)$ が満足される. 式 (26) と式 (13) は, \hat{u} を \hat{U} に置き換えただけに見えるが, 大きな違いは式 (13) では無限個の周波数を考慮する必要があるのに対し, 式 (26) では時刻 t_n における有限個の波の情報から, 時刻 t_{n+1} における (有限個の) 波の情報を統計的に不偏に推定できるところにある.

アンサンプルの各要素を得るには, $\{\hat{U}(t_{n+1}, \xi)\}$ を周波数に関する分布とみなして, $\{\hat{W}(t_{n+1}, \xi)\}$ を統計的に不偏にサンプリングすればよい. 具体的には, まず, $\hat{U}(t_{n+1}, \xi_j)$ のエネルギー $E(t_{n+1}, \xi_j)$ を

$$E(t_{n+1}, \xi_j) = \sqrt{\hat{U}(t_{n+1}, \xi_j) \cdot \hat{U}^*(t_{n+1}, \xi_j)} \quad (27)$$

と定義する. ここで, \hat{U}^* は \hat{U} の各成分について複素共役をとったベクトルである. 次に, エネルギーに関してインポートランスサンプリングする. すなわち, 周波数 ξ をサンプリングする確率 $p(\xi)$ を $p(\xi) = E(t_{n+1}, \xi) / \sum_j E(t_{n+1}, \xi_j)$ とする. サンプリングの結果, 周波数 ξ が得られたら, アンサンプルの要素の値 $\hat{W}(t_{n+1}, \xi)$ は,

$$\hat{W}(t_{n+1}, \xi) = \frac{1}{M} \frac{\hat{U}(t_{n+1}, \xi)}{p(\xi)} \quad (28)$$

とする.

4.5 効率的なカスケード計算法

式 (26) の計算について考える. まず, 式 (26) の右辺第一項は, 波の減衰を表している. 時刻 t_n におけるアンサンプルの要素数は M であるので, $\hat{U}(t_n, \xi_j)$ の要素数は高々 M である. したがって, すべての要素についての波の減衰の計算量は, $O(M)$ である.

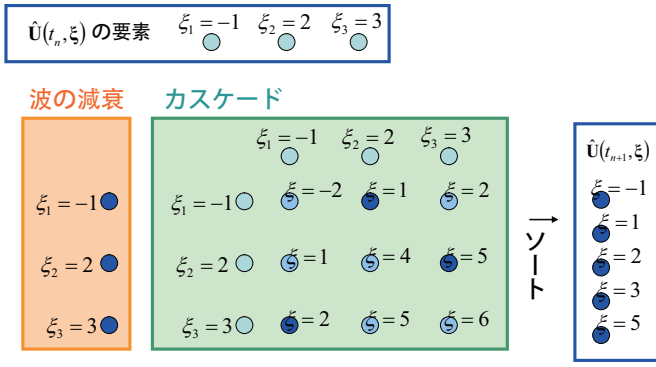


図 3: 時間発展計算の概念図. 例として, 時刻 t_n では, $\{\hat{U}(t_n, \xi_j)\}$ の要素は三個で, それぞれの周波数は, 左上に示すとおりとする (簡単のため, 一次元の場合を示している). 波の減衰はすべての要素について計算する. カスケード計算では, すべての組み合わせについて計算するのではなく, 青色の円で示した組をランダムに $O(M)$ 組選び, 計算する. 計算の結果, 周波数が同じ波については値を合算する. この合算のために, 各要素を周波数についてソートする.

次に, 第二項について考える. なお, 簡単のため外力は作用していないものとする. ここで, $(\xi \cdot \hat{U}(t_n, \zeta)) \hat{U}(t_n, \xi - \zeta)$ という項を, 周波数 ζ と周波数 $\xi - \zeta$ によるカスケードと呼ぶことにする. この項は, $\hat{U}(t_{n+1}, \xi)$ のカスケード計算で現れるので, 周波数 ζ と周波数 $\xi - \zeta$ の波が, 周波数 ξ の波に寄与することを意味している. 式 (26) を用いてカスケード計算すると, すべての波の組によるカスケードを考慮する必要があるので, 計算量は $O(M^2)$ となり, 計算コストが高い.

そこで, 提案法では, 式 (26) のカスケード計算をすべての項について行う代わりに, インポータンスサンプリングを用いたモンテカルロ推定により, $\langle \hat{U}(t_{n+1}, \xi) \rangle = \hat{u}(t_{n+1}, \xi)$ という性質を保ったまま, 計算量を削減する.

まず, 基本的な考え方を説明する. 簡単な例として, $I = \sum_{j=1}^N A_j$ という和の計算を考える. A_j を j が 1 から N までの場合についてすべて足せば, もちろん求めたい値 I を得ることができるが, 次のようにして, $\langle \tilde{I} \rangle = I$ となるような推定値 \tilde{I} を得る方法もある. 各項 A_j を確率 p_j によって足すかどうか決め, 足す場合に A_j の代わりに A_j/p_j を足すことにする. すると, 各項の期待値は $p_j \times A_j/p_j = A_j$ となり, 推定値 \tilde{I} の期待値は I となる.

次に, この考え方を拡張して, 提案法では図 3 に示すように, すべての波の組を計算する代わりに, $O(M)$ 個の組を選んで計算する. 具体的には, 周波数の組 (ξ_l, ξ_m) をサンプリングする確率 $p(\xi_l, \xi_m)$ を

$$p(\xi_l, \xi_m) = \frac{E(\xi_l)}{\sum_k E(\xi_k)} \cdot \frac{E(\xi_m)}{\sum_k E(\xi_k)} \quad (29)$$

とする. このような周波数の組を aM 個 (a は正定数で, 本

稿の実験では 4 とした) 選び, 周波数の組 (ξ_l, ξ_m) によるカスケードの推定値 $\tilde{C}(\xi_l, \xi_m)$ を

$$\tilde{C}(\xi_l, \xi_m) = \frac{((\xi_l + \xi_m) \cdot \hat{U}(t_n, \xi_l)) \hat{U}(t_n, \xi_m)}{aMp(\xi_l, \xi_m)} \quad (30)$$

とする. こうして選んだ aM 個の周波数の組のみを用いてカスケードの推定値を計算しさらに, 波の減衰を表す第一項を (確率 1 で) 計算する. 計算の結果, 周波数が同じ波が現れたら, 値をすべて足し合わせる. この手順で計算すると, $\{\hat{U}(t_{n+1}, \xi_j)\}$ の推定値 $\{\tilde{U}(t_{n+1}, \xi_j)\}$ を求めたことになり,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{U}(t_{n+1}, \xi) \rangle &= \langle \langle \tilde{U}(t_{n+1}, \xi) \rangle \rangle \\ &= \langle \hat{U}(t_{n+1}, \xi) \rangle = \hat{u}(t_{n+1}, \xi) \end{aligned} \quad (31)$$

が成り立つ. 計算量は, 周波数が同じ波を集計するため, 周波数についてのソートが必要となるものの, 全体で $O(M \log M)$ となり, ほぼ線形に抑えることができる.

4.6 計算の収束性

アンサンブルの要素数 M は計算の収束性を左右する. 直感的には, 各タイムステップごとに, モンテカルロ法によって (期待値 0 の) 統計的誤差が導入されるが, M を大きくとるほど, 統計的誤差を小さくできる. 統計的誤差が十分小さいならば, 粘性によって統計的誤差が減衰するため, シミュレーション時間で長時間たっても安定的に計算できる. 逆に, 粘性によって統計的誤差を吸収できなければ, 計算はやがて発散する. したがって, 粘性が小さいほど, M を大きくとる必要がある. 今後の課題として, 計算が収束するための最小の要素数 M を解析したい.

5 結果

提案法では, 局所的に外力を設定するために, 下記に定義する関数を利用する. まず, 図 4(a) に示す, a, b, c をパラメータとする一次元の関数 $\phi_1(x; a, b, c)$ を付録 F に示すとおり定義する. 次に,

$$\phi_2(\mathbf{x}; \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) = \phi_1(x_1; a_1, b_1, c_1) \phi_1(x_2; a_2, b_2, c_2) \quad (32)$$

という二次元の関数を定義する (図 4(b)). ここで, $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$, $\mathbf{b} = (b_1, b_2)$, $\mathbf{c} = (c_1, c_2)$ である.

提案法の実験では, $\mathbf{a} = (0.02, 0.1)$, $\mathbf{b} = (0.005, 0.025)$, $\mathbf{c} = (0.0, -0.25)$ とし, 外力 \mathbf{f} は, $\mathbf{f} = (0.0, 0.4\phi_2(\mathbf{x}; \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}))$ とした. また, 初期速度場は, すべての場所で速度を 0 とした. なお実験には, Intel Core i7 965 extreme の CPU と, 6GB の主記憶を搭載した計算機を用いた.

図 5 に速度場のシミュレーション結果を時刻ごとに表示した. 本実験では, M は百万としており, シミュレーショ

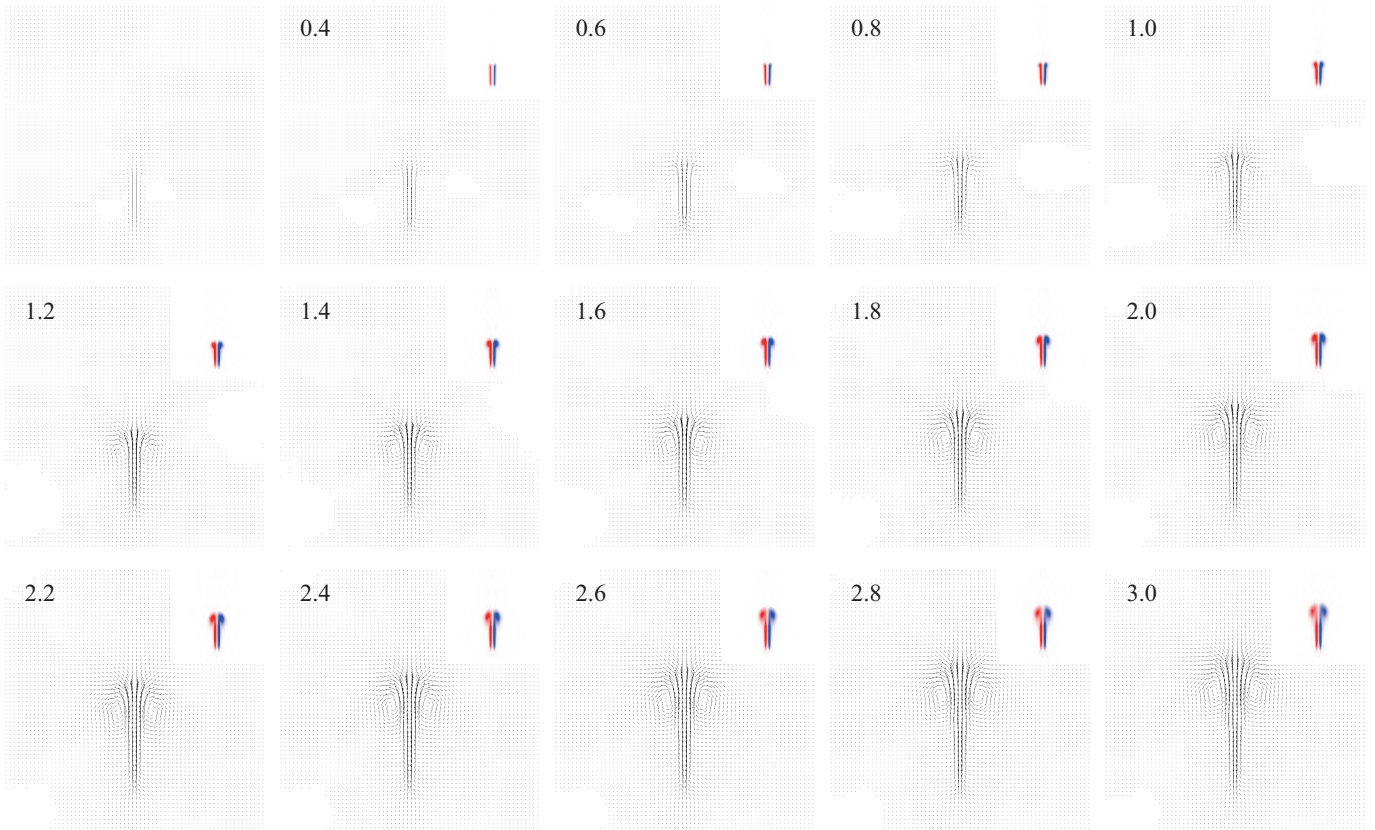


図 5: シミュレーション例. シミュレーション時間 t が 0.2 ずつ増加した場合の速度場を矢印を用いて描いている. なお, 各々の図の左上には t を, 右上には渦度を表示した. 渦度は, 赤が反時計回りの渦, 青が時計回りの渦を意味しており, 色が濃いほど渦度が大きいことを表す.

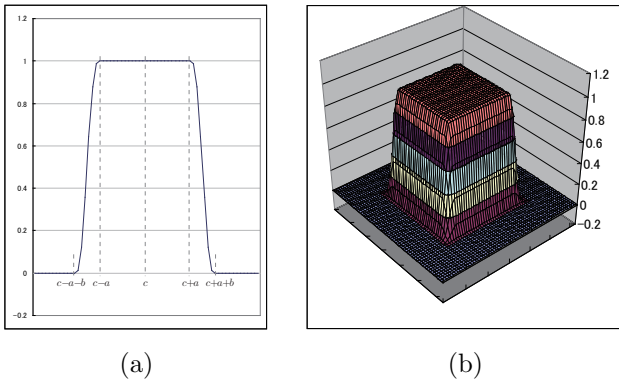


図 4: 局所的に値を設定するための基本関数. (a): 一次元の基本関数 $\phi_1(x; a, b, c)$. c を中心とし, 中心から左右 $\pm a$ の範囲内は値が 1, その外側の幅 b の領域では滑らかに 1 から 0 に減衰する. さらにその外側では値は 0 である. (b): (a) の関数を利用し, $\phi_2(x; a, b, c) = \phi_1(x_1; a_1, b_1, c_1)\phi_1(x_2; a_2, b_2, c_2)$ として, 二次元に拡張した関数.

の並列度は 3 とした. なお, $t = 3.0$ の場合の拡大図を図 6 に示す.

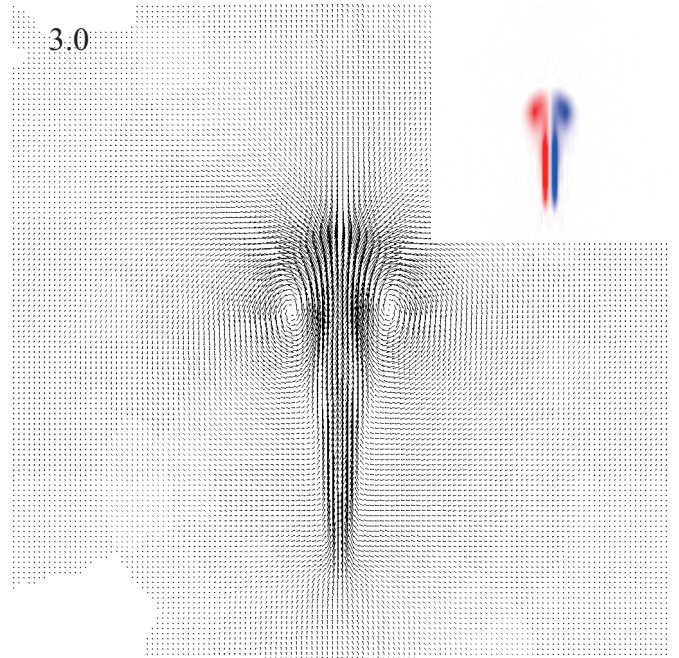


図 6: 図 5 における $t = 3.0$ の場合の拡大図.

6 まとめと今後の課題

本稿では, 空間離散化を用いない新たな流体計算法を提案した. 提案法では, まずフーリエ空間における積分方程

式としてのナビエ-ストークス方程式を紹介し、時間に関してのみ離散化を行った式を発展方程式とした。フーリエ空間で解くことにより、空間微分は代数演算となり、一切の誤差なしに計算できる。また、非圧縮制約は、簡単な行列演算を行うだけで課すことができる。すなわち、非圧縮制約を課すために、ポアソン方程式を解く必要がなく、かつ誤差なしに計算できる。次に、この発展方程式をモンテカルロ法を用いて解くための方法を提案した。提案法では、アンサンブルという概念を導入し、時間に関して順方向にシミュレーションを行った。提案法はアンサンブルの離散時間マルコフ過程とみなすことができる。シミュレーションで得られたアンサンブルを逆フーリエ変換すると、得られる場の期待値は正しい速度場に等しい。このため、シミュレーションを複数並列に走らせ、その平均を取ることで、目的の速度場が推定できる。統計的に不偏なサンプリング法を利用することにより、真値との差は分散を用いて推定でき、シミュレーションの並列数を増やすことで、統計誤差を任意に小さくできる。

今後の課題として、必要最低限のアンサンブルの要素数を解析することが挙げられる。また、ペナルティ法を用いて壁などの境界条件を導入することも考えられる。他に、三次元での実験や、フーリエ空間ではなく、他の関数空間を用いた定式化等も考えられる。時間離散化については、ルンゲクッタを用いる方法が考えられる。また、空間離散化だけでなく、時間離散化も必要としない解法が可能かどうかも検討していきたい。

参考文献

- [1] Rabi N. Bhattacharya, Larry Chen, Scott Dobson, Ronald B. Guenther, Chris Orum, Mina Ossiander, Enrique Thomann, and Edward C. Waymire. Majorizing kernels and stochastic cascades with applications to incompressible Navier-Stokes equations. *Transactions of the American Mathematical Society*, 355(12):5003–5040, 2003.
- [2] Ovidiu Costin, Guo Luo, and Saleh Tanveer. Divergent expansion, Borel summability and three-dimensional Navier-Stokes equation. *Philosophical Transactions of The Royal Society A*, 366(1876):2775–2788, 2008.
- [3] Murli M. Gupta. A survey of some second-order difference schemes for the steady-state convection-diffusion equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3(4):319–331, 1983.
- [4] Ami Harten, Bjorn Engquist, Stanley Osher, and Sukumar R. Chakravarthy. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, 111. *J. Comput. Phys.*, 71(2):231–303, August 1987.
- [5] Y. Le Jan and A. S. Sznitman. Stochastic cascades and 3-dimensional Navier-Stokes equations. *Probability Theory and Related Fields*, 109(3):343–366, 1997.
- [6] Alexander Kurganov and Eitan Tadmor. New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations. *Journal of Computational Physics*, 160(1):241 – 282, 2000.
- [7] Xu-Dong Liu, Stanley Osher, and Tony Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *J. Comput. Phys.*, 115(1):200–212, November 1994.
- [8] Jorge M. and Ramirez. Multiplicative cascades applied to PDEs (two numerical examples). *Journal of Computational Physics*, 214(1):122–136, 2006.
- [9] I. Medvedev and G. Mikhailov. Study of weighted Monte Carlo algorithms with branching. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 49(3):428–438, 2009.
- [10] Steven A. Orszag. Numerical methods for the simulation of turbulence. *The Physics of Fluid Supplement II*, 12:250–257, 1969.
- [11] Stanley Osher and Fred Solomon. Upwind difference schemes for hyperbolic systems of conservation laws. *Mathematics of Computation*, 38(158):339–374, 1982.
- [12] Joseph E. Pasciak. Spectral and pseudo spectral methods for advection equations. *Mathematics of Computation*, 35(152):1081–1092, 1980.
- [13] Wen-Yih Sun, Kao-San Yeh, and Rueen-Yuh Sun. A simple semi-lagrangian scheme for advection equations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 122(533):1211–1226, 1996.
- [14] Edward C. Waymire. Probability & incompressible Navier-Stokes equations: An overview of some recent developments. *Probability Surveys*, 2:1–32, 2005.
- [15] Yousef H. Zurigat and Afshin J. Ghajar. Comparative study of weighted upwind and second order upwind difference schemes. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 18(1):61–80, 1990.

A 微分計算と乗算のフーリエ空間での表現

本付録では、実空間での微分計算がフーリエ空間では代数演算となること、実空間での乗算がフーリエ空間では畳み込み計算となることを示す。簡単のため、一次元の場合を考える。

A.1 フーリエ空間における実空間での微分計算

関数 $\phi(x)$ の微分 $d\phi/dx$ のフーリエ変換 $\mathcal{F}(d\phi/dx)$ を $\hat{\phi}$ とすると、フーリエ変換の定義より、

$$\hat{\phi}(\xi) = \int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\phi}{dx}(x) e^{-2\pi i \xi x} dx \quad (33)$$

と表される。ここで、式 (33) に部分積分を適用すると、

$$\begin{aligned} \int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\phi}{dx}(x) e^{-2\pi i \xi x} dx &= \left[\phi(x) e^{-2\pi i \xi x} \right]_{-1/2}^{1/2} \\ &\quad + 2\pi i \xi \int_{-1/2}^{1/2} \phi(x) e^{-2\pi i \xi x} dx \quad (34) \end{aligned}$$

となる。ここで、 ϕ は周期関数なので、右辺第一項は 0 である。右辺第二項は、 $2\pi i \xi \hat{\phi}(\xi)$ であるから、式 (5) を得る。

A.2 フーリエ空間における実空間での乗算

関数 $\phi_1(x)$ と $\phi_2(x)$ の積で定義される関数 $\phi_{12}(x) = \phi_1(x)\phi_2(x)$ のフーリエ変換 $\mathcal{F}(\phi_{12})$ を $\hat{\phi}_{12}$ とおくと、フーリエ変換の定義より、

$$\hat{\phi}_{12}(\xi) = \int_{-1/2}^{1/2} \phi_1(x)\phi_2(x) e^{-2\pi i \xi x} dx \quad (35)$$

と表される。ここで、 ϕ_1 と ϕ_2 がそれぞれ $\hat{\phi}_1$ と $\hat{\phi}_2$ にフーリエ変換されるとすると、フーリエ逆変換より、

$$\phi_1(x) = \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}_1(\xi) e^{2\pi i \xi x}, \quad (36)$$

$$\phi_2(x) = \sum_{\xi=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}_2(\xi) e^{2\pi i \xi x}, \quad (37)$$

であるから、式 (36) と (37) を式 (35) に代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{12}(\xi) &= \int_{-1/2}^{1/2} \left(\sum_{\xi_1=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}_1(\xi_1) e^{2\pi i \xi_1 x} \right) \\ &\quad \cdot \left(\sum_{\xi_2=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}_2(\xi_2) e^{2\pi i \xi_2 x} \right) e^{-2\pi i \xi x} dx \\ &= \sum_{\xi_1=-\infty}^{\infty} \sum_{\xi_2=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}_1(\xi_1) \hat{\phi}_2(\xi_2) \int_{-1/2}^{1/2} e^{2\pi i (\xi_1 + \xi_2 - \xi) x} dx \quad (38) \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\int_{-1/2}^{1/2} e^{2\pi i (\xi_1 + \xi_2 - \xi) x} dx = \begin{cases} 1 & (\xi_1 + \xi_2 - \xi = 0) \\ 0 & (\xi_1 + \xi_2 - \xi \neq 0) \end{cases} \quad (39)$$

より、式 (38) は、

$$\hat{\phi}_{12}(\xi) = \sum_{\zeta=-\infty}^{\infty} \hat{\phi}_1(\zeta) \hat{\phi}_2(\xi - \zeta) \quad (40)$$

と表される。

B フーリエ空間におけるナビエ-ストークス方程式

本付録では、フーリエ空間における微分方程式としてのナビエ-ストークス方程式 (式 (6)) の導出とフーリエ空間における積分方程式としてのナビエ-ストークス方程式 (式 (10)) の導出を簡単に示す。

B.1 微分方程式

まず、連続の式 (式 (1)) の左辺のフーリエ変換は、式 (5) の結果を用いると、

$$\mathcal{F}(\nabla \cdot \mathbf{u}) = 2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi}) \quad (41)$$

と表される。よって、

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi}) = 0 \quad (42)$$

を得る。

次に、式 (2) のフーリエ変換を考える。まず、非線形項 $((\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla) \mathbf{u}(t, \mathbf{x}))$ のフーリエ変換を考える。式 (5) と式 (40) を利用すると、

$$\mathcal{F}((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}) = 2\pi i \sum_{\zeta} (\hat{\mathbf{u}}(t, \zeta) \cdot (\boldsymbol{\xi} - \zeta)) \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi} - \zeta) \quad (43)$$

を得る。連続の式 $\zeta \cdot \hat{\mathbf{u}}(t, \zeta) = 0$ を利用すると、式 (43) は

$$\mathcal{F}((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}) = 2\pi i \sum_{\zeta} (\hat{\mathbf{u}}(t, \zeta) \cdot \boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi} - \zeta) \quad (44)$$

と変形できる。したがって、式 (2) のフーリエ変換は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi})}{\partial t} &= -2\pi i \sum_{\zeta} (\hat{\mathbf{u}}(t, \zeta) \cdot \boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi} - \zeta) \\ &\quad - \frac{2\pi i \boldsymbol{\xi}}{\rho} \hat{p}(t, \boldsymbol{\xi}) - 4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\boldsymbol{\xi}|^2 \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi}) + \hat{\mathbf{f}}(t, \boldsymbol{\xi}) \quad (45) \end{aligned}$$

となる. $\hat{p}(t, \boldsymbol{\xi})$ を求めるために, まず, 式 (2) の両辺に $\nabla \cdot$ を作用させると, $\nabla \cdot \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = 0$ より,

$$\frac{1}{\rho} \nabla^2 p(t, \mathbf{x}) = -\nabla \cdot ((\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla) \mathbf{u}(t, \mathbf{x})) + \nabla \cdot \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) \quad (46)$$

を得る. 次に, 式 (46) をフーリエ変換して整理すると,

$$\begin{aligned} \hat{p}(t, \boldsymbol{\xi}) = & -\frac{\rho}{|\boldsymbol{\xi}|^2} \sum_{\boldsymbol{\zeta}} (\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\zeta})) \cdot (\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\zeta})) \\ & + \frac{\rho}{2\pi i |\boldsymbol{\xi}|^2} (\boldsymbol{\xi} \cdot \hat{\mathbf{f}}(t, \boldsymbol{\xi})) \end{aligned} \quad (47)$$

を得る. 式 (47) を式 (45) に代入して整理すると, 式 (6) を得る.

ここで, 式 (6) における行列 $H(\boldsymbol{\xi})$ に関して補足する. 式 (6) において, 行列 $H(\boldsymbol{\xi})$ を乗算する操作には, 速度場の発散成分を取り除くという意味がある. すなわち, ある速度場 \mathbf{v} を, $\mathbf{v} = \nabla\phi + \nabla \times \mathbf{A}$ というように, 発散成分 ($\nabla\phi$) と非圧縮成分 ($\nabla \times \mathbf{A}$) に分けたいとき, \mathbf{v} をフーリエ変換し, 行列 $H(\boldsymbol{\xi})$ を乗算し, さらに逆フーリエ変換することで, 非圧縮成分を取り出せる. 式で概念的に書くと下記のように表せる.

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathcal{IF}(H(\boldsymbol{\xi})\mathcal{F}(\mathbf{v})(\boldsymbol{\xi})). \quad (48)$$

また,

$$H(\boldsymbol{\xi}) = H(\boldsymbol{\xi})H(\boldsymbol{\xi}) \quad (49)$$

が成立する. つまり, すでに非圧縮制約の課された場に H を作用させても, 場は変わらない.

B.2 積分方程式

式 (6) の両辺に $e^{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{t}{R_e}}$ を乗算し, 時刻 t について 0 から T まで積分する. 左辺は, 部分積分を用いて,

$$\begin{aligned} \int_0^T e^{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{t}{R_e}} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi})}{\partial t} dt = & \left[e^{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi}) \right]_0^T \\ & - \frac{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2}{R_e} \int_0^T e^{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi}) dt \end{aligned} \quad (50)$$

となり, 右辺は,

$$\begin{aligned} \int_0^T e^{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{t}{R_e}} H(\boldsymbol{\xi}) (\hat{\mathbf{f}}(t, \boldsymbol{\xi}) - 2\pi i \hat{\mathbf{c}}(t, \boldsymbol{\xi})) dt \\ - \frac{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2}{R_e} \int_0^T e^{4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(t, \boldsymbol{\xi}) dt \end{aligned} \quad (51)$$

となる. 両辺において粘性項 (第二項) が現れるのでキャンセルし, 式を整理すると, 式 (10) を得る.

C 支配方程式の導出

式 (12) において, 時刻 t_n から t_{n+1} の間, 外力と速度場は, その変化が微小だと仮定すれば, 時刻 t_n における値を用いて定数と近似でき, 積分の外に出せる. すなわち,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}}(t_{n+1}, \boldsymbol{\xi}) = & e^{-4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{\Delta t}{R_e}} \hat{\mathbf{u}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) \\ & + H(\boldsymbol{\xi}) \left[\hat{\mathbf{f}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) - 2\pi i \hat{\mathbf{c}}(t_n, \boldsymbol{\xi}) \right] \\ & \cdot \int_0^{\Delta t} e^{-4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{s}{R_e}} ds \end{aligned} \quad (52)$$

と変形できる. 積分は,

$$\int_0^{\Delta t} e^{-4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{s}{R_e}} ds = \frac{1 - e^{-4\pi^2|\boldsymbol{\xi}|^2 \frac{\Delta t}{R_e}}}{4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\boldsymbol{\xi}|^2} \quad (53)$$

と計算できる. なお, 式 (13) では, さらに第一項に $H(\boldsymbol{\xi})$ を乗算している. 速度場がすでに非圧縮制約を満足していれば, $H(\boldsymbol{\xi})$ を乗算しても値が変わらないので, 数学的にはなくても構わない. 本稿では, 下記二点の目的のため, あえて式中に導入している. 一点目は, 入力された初期速度場が非圧縮制約を満足していないときに, 非圧縮制約を課すためである (この目的だけのためならば, 時刻 t_0 でのみ乗算すればよい). 二点目は, コンピュータによる数値誤差によって, 非圧縮制約が崩れないようにするためである.

D アンサンプルの逆フーリエ変換の期待値

本付録では, 式 (18) が成立することを示す. まず, アンサンプルの逆フーリエ変換の定義より,

$$\langle \mathcal{IF}(\hat{\mathbf{W}})(t, \mathbf{x}) \rangle = \left\langle \sum_{j=1}^M \hat{\mathbf{W}}(t, \boldsymbol{\xi}_j) e^{2\pi i \boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{x}} \right\rangle \quad (54)$$

である. 次に, 周波数が同じものを足し合わせると,

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{j=1}^M \hat{\mathbf{W}}(t, \boldsymbol{\xi}_j) e^{2\pi i \boldsymbol{\xi}_j \cdot \mathbf{x}} \right\rangle &= \left\langle \sum_{\boldsymbol{\xi}} \left(\sum_{\boldsymbol{\xi}'=\boldsymbol{\xi}} \hat{\mathbf{W}}(t, \boldsymbol{\xi}') \right) e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{\boldsymbol{\xi}} \hat{\mathbf{U}}(t, \boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \right\rangle \end{aligned} \quad (55)$$

となる. 式 (55) 中の $\boldsymbol{\xi}$ についての和は, 有限個の項 (アンサンプルの要素の周波数が有限個なので) の和であるが, 次式のように, 和をとる対象を整数全体に拡張できる (ただし, 対応する要素がない場合, その項は 0 とする).

$$\left\langle \sum_{\boldsymbol{\xi}} \hat{\mathbf{U}}(t, \boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \mathbf{N}^D} \hat{\mathbf{U}}(t, \boldsymbol{\xi}) e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} \right\rangle. \quad (56)$$

ここで, \mathbf{N} は整数全体の集合を表し, D は次元数を表す. 次に, 期待値計算と加算は計算順序を入れ替えできるとを

利用すると,

$$\left\langle \sum_{\xi \in \mathbb{N}^D} \hat{U}(t, \xi) e^{2\pi i \xi \cdot \mathbf{x}} \right\rangle = \sum_{\xi \in \mathbb{N}^D} \left\langle \hat{U}(t, \xi) \right\rangle e^{2\pi i \xi \cdot \mathbf{x}} \quad (57)$$

となり, さらに式 (14) より,

$$\sum_{\xi \in \mathbb{N}^D} \left\langle \hat{U}(t, \xi) \right\rangle e^{2\pi i \xi \cdot \mathbf{x}} = \sum_{\xi \in \mathbb{N}^D} \hat{u}(t, \xi) e^{2\pi i \xi \cdot \mathbf{x}} \quad (58)$$

となる. 右辺は $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ のフーリエ変換の定義であるので, 式 (18) が成立することが示せた.

E 時間発展計算の導出

時刻 t_n において, $\hat{U}(t_n, \xi) = \sum_{j, \xi_j = \xi} \hat{W}(t_n, \xi_j)$ を求めると, 式 (15) より $\langle \hat{U}(t_n, \xi) \rangle = \hat{u}(t_n, \xi)$ なので,

$$\begin{aligned} \hat{u}(t_{n+1}, \xi) &= H(\xi) e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{\Delta t}{R_e}} \langle \hat{U}(t_n, \xi) \rangle \\ &+ H(\xi) \frac{1 - e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{\Delta t}{R_e}}}{4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\xi|^2} \left(\hat{f}(t_n, \xi) \right. \\ &\quad \left. - 2\pi i \sum_{\zeta} (\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle \right) \end{aligned} \quad (59)$$

を得る.

ここで, $\{\hat{U}(t_n, \zeta)\}$ の各周波数の要素が独立で, 速度場が非圧縮であるとき,

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta} (\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle &= \\ \left\langle \sum_{\zeta} (\xi \cdot \hat{U}(t_n, \zeta)) \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \right\rangle \end{aligned} \quad (60)$$

が成立することを示す. まず, 式 (60) の和において, $\zeta \neq \xi - \zeta$ である項と $\zeta = \xi - \zeta$ となる項 (すなわち, $\zeta = \xi/2$) とに分けて計算すると,

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta} (\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle &= \\ \sum_{\zeta \neq \xi - \zeta} (\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle &+ (2 \cdot (\xi/2) \cdot \langle \hat{U}(t_n, \xi/2) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi/2) \rangle \end{aligned} \quad (61)$$

となる. なお, $\xi/2$ が整数でないときは, 第一項だけとなる. 非圧縮制約 (式 (42)) より, $(\xi/2) \cdot \hat{U}(t_n, \xi/2) = 0$ は常に成立するので, 結局

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta} (\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle &= \\ \sum_{\zeta \neq \xi - \zeta} (\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle \end{aligned} \quad (62)$$

となる. \hat{U} の各要素は独立であり, $\zeta \neq \xi - \zeta$ であるから,

$$\begin{aligned} &(\xi \cdot \langle \hat{U}(t_n, \zeta) \rangle) \langle \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \rangle \\ &= \left\langle (\xi \cdot \hat{U}(t_n, \zeta)) \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \right\rangle \end{aligned} \quad (63)$$

が成り立つ. 加算と期待値計算の計算順序を交換すれば, 式 (60) を得る.

なお, X を確率変数とすると, 一般には $\langle X \rangle^2 \neq \langle X^2 \rangle$ なので, 式 (60) が成り立つことは大変興味深く, 提案法の核心となる性質である.

式 (60) を式 (59) に代入し, さらに加算と期待値計算の計算順序を交換すれば,

$$\begin{aligned} \hat{u}(t_{n+1}, \xi) &= \left\langle H(\xi) e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{\Delta t}{R_e}} \hat{U}(t_n, \xi) \right. \\ &+ H(\xi) \frac{1 - e^{-4\pi^2 |\xi|^2 \frac{\Delta t}{R_e}}}{4\pi^2 \frac{1}{R_e} |\xi|^2} \left(\hat{f}(t_n, \xi) \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\pi i \sum_{\zeta} (\xi \cdot \hat{U}(t_n, \zeta)) \hat{U}(t_n, \xi - \zeta) \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (64)$$

を得る.

したがって, 式 (26) により $\hat{U}(t_{n+1}, \xi)$ を計算すれば, $\langle \hat{U}(t_{n+1}, \xi) \rangle = \hat{u}(t_{n+1}, \xi)$ が満足される.

F 実験に使用した補助関数

5 節で述べた関数 $\phi_1(x; a, b, c)$ を下記のように定義する.

$$\phi_1(x; a, b, c) = \begin{cases} 0 & C1 \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi}{b}(x - c + a)\right) & C2 \\ 1 & C3 \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi}{b}(x - c - a)\right) & C4 \\ 0 & C5 \end{cases} \quad (65)$$

ここで, $C1 \sim C5$ は x の値に関する場合わけを表しており, 次のように定義する.

$$\begin{cases} C1: x < c - a - b \\ C2: c - a - b \leq x \leq c - a \\ C3: c - a < x < c + a \\ C4: c + a \leq x \leq c + a + b \\ C5: c + a + b < x \end{cases} \quad (66)$$

この関数は, 単一の矩形波に似た形をしており, 立ち上がりと立下りを滑らかにつないだものである. なお, b を小さくすれば, 滑らかにつなぐ部分の幅が狭くなり, より矩形波に近い形となる.