cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式の安定性解析
STABILITY ANALYSIS CONVECTION-DIFFUSION EQUATION
WITH CROSS DIFFUSION平岡 久司*
Hisashi HIRAOKA

This paper reports a way to compute Differential Stress Model stably. Differential Stress Model belongs a kind of convection-diffusion equation with cross-diffusion term. We showed how to determine a stable time step for an equation of this sort, based on the Hirt's heuristic stability analysis, with which a time step is calculated easily. The Hirt's method was supported by the Neumann's Fourier series analysis.

Keywords : stability analysis, differential stress model, cross diffusion, Hirt's method, Neumann's method

安定性解析, 応力方程式モデル, cross diffusion, Hirt の方法, Neumann の方法

1. 緒 言

この研究の目的は, cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式の安定性解析を Hirt の heuristic (発見的) な方法により行うことである。

応力方程式モデルを MAC 法のような非定常計算法で解く場合, 安定性解析によりタイムステップを決める必要がある。このような安定性解析では Neumann のフーリエ級数法が理論的ではあるが, 2次元, 3次元場ではタイムステップを解析的に求めることが困難になる。数值的に求めることも過大な計算量が必要になる。一方, Hirt の安定性解析は理論的ではないが, タイムステップの決定が容易である。Hirt の安定性解析を用いて比較的簡単に安定なタイムステップを求めることができれば, 実際の数値計算に役立つ。また, 応力方程式モデル (ここでは IPM を採用する³⁾) の基本的な方程式型は, cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式である。このような方程式の安定性解析はまだ研究されていない。本研究では応力方程式モデルを解くために, このような cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式の安定性解析を Hirt の方法により行い, 安定なタイムステップを求める方法について考察する。

MAC 法のような非定常陽解法で計算するとき, タイムステップを大きく取ると計算が不安定になり発散してしまう。ある値以下のタイムステップでは計算は安定になり収束する。このようなタイムステップを安定性解析

により決定することは, 計算効率を高めることになり, 短い cpu タイムで計算を収束させる利点をもつ。本研究ではこのような安定性を保証するタイムステップの決定方法について考察を行う。また, この研究では低メッシュ Re 数をも含めたすべてのメッシュ Re 数での安定性解析を行った。その理由は, 風洞実験や模型実験では乱れがコントロールされており, 比較的小さい乱流強度になっているため, 移流支配型の安定性解析から決定されたタイムステップのみを用いても計算は収束するが, 実際の自然風などのように乱流強度が大きい場合には拡散支配型 (熱伝導型) の安定性解析から決定されたタイムステップによって流れ場全体のタイムステップが決定されることがしばしば生じるためである。

2. cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式

cross diffusion 項を持つ移流拡散方程式は次式で表わされる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \nu_{ij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \dots\dots\dots (1)$$

粘性マトリックスを次式で定義する。

$$[\nu] = \begin{bmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} & \nu_{13} \\ \nu_{12} & \nu_{22} & \nu_{23} \\ \nu_{13} & \nu_{23} & \nu_{33} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (2)$$

ここで, 対称な粘性マトリックス (ν_{ij}) は正定値と仮定する。この仮定は拡散項が楕円型 (物理的に拡散性を

* 京都大学工学部環境地球工学科 助手・工修

Research Assoc., Dept. of Global Environment Engineering, Faculty of Engineering, Kyoto Univ., M. Eng.

示す) になるためのものであり ([Appendix-1] 参照), また, 安定性解析においては正のタイムステップが取れるための条件でもある⁵⁾。流速 U_i は一定とする。応力方程式モデルでは, ϕ はレイノルズ応力, 粘性消散率を表す。平均流の式に Huang らの pseudo-viscosity 表現²⁾ を施せば, ϕ は平均流をも示す。

3. 2次元移流拡散方程式の安定性解析

3.1 Neumann のフーリエ級数法による安定性解析

以後の解析のために, 粘性と流速を次のように表す。

$$U_1 = U, \quad U_2 = \alpha U, \quad |\alpha| \leq 1 \quad (3)$$

$$\nu_{11} = \nu, \quad \nu_{22} = \gamma \nu, \quad \nu_{12} = \beta \sqrt{\gamma} \nu, \quad |\beta| < 1, \quad \gamma > 0$$

$$\dots\dots\dots(4)$$

(1) 式を時間微分に関して前進差分 (タイムステップ Δt), 空間微分に関して中心差分 (格子幅 h) を取れば, 以下のような差分方程式になる。

$$\begin{aligned} & \frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} + U_1 \frac{\phi_{i+1,j}^n - \phi_{i-1,j}^n}{2h} + U_2 \frac{\phi_{i,j+1}^n - \phi_{i,j-1}^n}{2h} \\ &= \nu_{11} \frac{\phi_{i+1,j}^n + \phi_{i-1,j}^n - 2\phi_{i,j}^n}{h^2} + \nu_{22} \frac{\phi_{i,j+1}^n + \phi_{i,j-1}^n - 2\phi_{i,j}^n}{h^2} \\ &+ 2\nu_{12} \frac{\phi_{i+1,j+1}^n - \phi_{i+1,j-1}^n - \phi_{i-1,j+1}^n + \phi_{i-1,j-1}^n}{4h^2} \\ &\dots\dots\dots(5) \end{aligned}$$

3.2 Neumann の方法によるタイムステップの決定

(5) 式を Neumann のフーリエ級数法により安定性解析を行えば, タイムステップ Δt は次式で表される。

$$\Delta t < \text{cof}_{cN}(\alpha, \beta, \gamma, \text{Re}) \frac{2\nu}{U^2} = \text{cof}_{aN}(\alpha, \beta, \gamma, \text{Re}) \frac{h^2}{4\nu} \quad (6)$$

ただし,

$$\begin{aligned} & \text{cof}_{cN}(\alpha, \beta, \gamma, \text{Re}) \\ &= \min_{\substack{-\pi \leq \theta_1 \leq \pi \\ -\pi \leq \theta_2 \leq \pi}} \left\{ \frac{2a(\theta_1, \theta_2, \beta, \gamma)}{\text{Re}^2 a^2(\theta_1, \theta_2, \beta, \gamma) + (\sin \theta_1 + \alpha \sin \theta_2)^2} \right\} \\ &\dots\dots\dots(7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{cof}_{aN}(\alpha, \beta, \gamma, \text{Re}) \\ &= \min_{\substack{-\pi \leq \theta_1 \leq \pi \\ -\pi \leq \theta_2 \leq \pi}} \left\{ \frac{16a(\theta_1, \theta_2, \beta, \gamma)}{4a^2(\theta_1, \theta_2, \beta, \gamma) + \text{Re}^2 (\sin \theta_1 + \alpha \sin \theta_2)^2} \right\} \\ &\dots\dots\dots(8) \end{aligned}$$

$$a(\theta_1, \theta_2, \beta, \gamma) = 1 + \gamma - (\cos \theta_1 + \gamma \cos \theta_2) + \beta \sqrt{\gamma} \sin \theta_1 \sin \theta_2 \quad (9)$$

$$\text{Re} = \frac{Uh}{\nu} \quad (10)$$

ここで, (6) 式の右辺の表現を拡散型表現, 第2項の表現を移流型表現と呼ぶことにする。(7), (8) 式から明らかなように, フーリエ級数法による表現ではタイムステップはメッシュ Re 数に依存する。(7), (8) 式は解析的に導出するのが困難なため, 数値計算により係数値を求めることにする。

3.3 Hirt の安定性解析

3.3.1 移流型表現

(5) 式の第1微分方程式近似 (たとえば, 文献¹⁾参照, 用語は文献⁶⁾に従った) は次式で表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \nu_{ij}^e \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \quad (11)$$

ただし,

$$\nu_{ij}^e = \nu_{ij} - \frac{\Delta t}{2} U_i U_j \quad (12)$$

「(12) 式の実効粘性係数 ν_{ij}^e (用語は文献⁷⁾に従った) によって作られる, 実対称なマトリックスが正定値を取ること」が Hirt の方法による安定性の条件 (文献⁵⁾参照) である^{注1)}。タイムステップを求めると次式となる。

$$\begin{aligned} & \Delta t_{cH} < \frac{2[\nu_{11}\nu_{22} - (\nu_{12})^2]}{\nu_{22}U_1^2 + \nu_{11}U_2^2 - 2\nu_{12}U_1U_2} \\ &= \text{cof}_{cH}(\alpha, \beta, \gamma) \frac{2\nu}{U^2} \quad (13) \end{aligned}$$

$$\text{cof}_{cH} = \frac{\gamma(1-\beta^2)}{\gamma + \alpha^2 - 2\alpha\beta\sqrt{\gamma}} \quad (14)$$

Re が十分大きい ($\text{Re} > 7$) ときの Neumann の移流型表現 ((7) 式) と (14) 式を比較した図を図-1 に示す。Hirt の方法と Neumann の方法とは, Re が十分大きいとき一致するのがわかる (この結果は文献⁵⁾でも示した)。

3.3.2 拡散型表現

(5) 式の第1微分方程式近似は次式でも表される (たとえば, 文献¹⁾参照)。

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nu_{ij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{\partial \phi}{\partial t} + U_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = 0 \quad (15)$$

(15) 式の下線部の波動方程式を考察する。Hirt の安定性の条件は, 「原点を基準として Δt 後に, (15) 式下線部の波動方程式の特性錐 (の断面) が差分格子の領域内に入っていること」である [Appendix-2] 参照)。

差分格子の領域を, 図-2 に示す9点を含む, 正方形 (12341) とした場合 (cross diffusion 項を含んだ領域) の安定性の条件は次式になる ([Appendix-3] 参照)。

図-1 2次元移流型表現 (Hirt と Neumann の方法の結果)

(1) 9点差分格子の場合

$$\Delta t_{d(9)H} < \text{cof}_{d(9)H} \frac{h^2}{4\nu} \quad (16)$$

ただし,

$$\text{cof}_{d(9)H} = \min \left\{ 2, \frac{2}{\gamma} \right\} \quad (17)$$

差分格子の領域を, 図-2 に示す 5 点を含む, 正方形 (ENWSE) とした場合 (diagonal diffusion 項のみを含んだ領域), 安定性の条件は次式になる ([Appendix-4] 参照)。

(2) 5点差分格子の場合

$$\Delta t_{d(5)H} < \frac{h^2}{2(\nu_{11} + \nu_{22})} = \text{cof}_{dH} \frac{h^2}{4\nu} \quad (18)$$

ただし,

$$\text{cof}_{dH} = \frac{2}{1+\gamma} \quad (19)$$

Re が十分小さい ($\text{Re} \rightarrow 0$) ときの Neumann の拡散型表現 ((8) 式) と Hirt の拡散型表現 ((17) 式と (19) 式) を比較した図を図-3 に示す。

diagonal diffusion 項のみを考慮した (19) 式と Neumann の方法とは一致するのがわかる。拡散型表現ではどれも β に依存しない。 γ だけの関数となる。(17) 式の cross diffusion 項を含んだ場合の安定性の条件は常に (19) 式や (8) 式よりも緩やかである。

3.4 Hirt の方法によるタイムステップの決定

この節では, Neumann の方法によるタイムステップの Re 依存性について検討する。

図-4 に (6.) 式で表される係数 (移流型表現 cof_{cN} と拡散型表現 cof_{dN}) の Re 依存性を示す。Re が大きいとき移流型表現 ((7) 式) は Re に依存しなくなる。一方, Re が小さいとき拡散型表現 ((8) 式) は Re に依存しなくなる。Re を大きく (小さく) していったとき, 係数が Re 依存性を示さなくなった Re を critical Re number と言うことにする。係数が拡散型 (cof_{dN}) の場合の critical Re number を Re. d で, 係数が移流型

(cof_{cN}) の場合の critical Re number を Re. c で表すことにする。図-4 に示すように, $\beta=0$ の場合は Re. d と Re. c は一致する。このような場合には, Hirt の方法と Neumann の方法は一致する。 $\beta=0.5$ のとき Re. d と Re. c と一致しない。このような Re の範囲では Hirt の方法は有効でない。タイムステップを過大に見積もってしまう。

図-5 に critical Re number がパラメータ (α, β, γ) によってどのように変化するかを示す。大抵の場合 Re. c と Re. d とが一致しているが, $\gamma=1$ や 0.1 などのとき Re. c と Re. d とが一致しない領域が生じているのがわかる。このような領域では Hirt の方法を用いてタイムステップを決定するにはなんらかの補正が必要になる。以下ではその補正方法について考察する。

図-6 に示すように, (6) 式の係数に適当な値の係数 coe を掛けてやり, $\text{cof}_{cN}(\text{Re}) > \text{coe} \cdot \text{cof}_{cH}$ のとき, 係数 cof_c を $\text{cof}_c = \text{coe} \cdot \text{cof}_{cH}$ とする。係数 cof_d の場合も同様。そして, $\text{Re. d} \geq \text{Re. c}$ となるようにしてやる。このようにしてやればすべての Re で Hirt の方法が使用できる。

たとえば図-6 において, $\text{Re} = \text{Re. l}$ では安定なタイムステップの上限 $\Delta t_{ex}(\text{Re. l})$ は次式。

$$\begin{aligned} \Delta t_{ex}(\text{Re. l}) &= \text{cof}_{cN}(\alpha, \beta, \gamma, \text{Re. l}) \frac{2\nu}{U^2} \\ &= \text{cof}_{dN}(\alpha, \beta, \gamma, \text{Re. l}) \frac{h^2}{4\nu} \quad (20) \end{aligned}$$

ここで, 上記の補正を用いてやれば, 移流型表現でのタイムステップ $\Delta t_c(\text{Re. l})$ と拡散型表現でのタイムステップ $\Delta t_d(\text{Re. l})$ は各々次のように書ける。

$$\Delta t_c(\text{Re. l}) = \text{coe} \cdot \text{cof}_{cH} \frac{2\nu}{U^2} \quad (21)$$

$$\Delta t_d(\text{Re. l}) = \text{coe} \cdot \text{cof}_{dH} \frac{h^2}{4\nu} \quad (22)$$

3つのタイムステップの関係は次式となる。

$$\Delta t_d(\text{Re. l}) < \Delta t_{ex}(\text{Re. l}) < \Delta t_c(\text{Re. l}) \quad (23)$$

図-2 拡散項の差分点 (2次元)

図-3 2次元拡散型表現 (Hirt と Neumann の方法の結果)

図-4 critical Re number の位置

図—5 critical Re number

図—6 係数 coe を求める説明図

図—7 Re_d と Re_c の等高線

したがって、実際に取るべきタイムステップ Δt は次の関係から決定される。

$$\Delta t \leq \min \{ \Delta t_d(Re_1), \Delta t_c(Re_1) \} < \Delta t_{ex}(Re_1) \quad (24)$$

$Re = Re_2$ では、次の大小関係がなりたつ。

$$\Delta t_d(Re_2) < \Delta t_{ex}(Re_2) \quad (25)$$

$$\Delta t_c(Re_2) < \Delta t_{ex}(Re_2) \quad (26)$$

したがって、実際に取るべきタイムステップ Δt は次の関係から決定される。

$$\Delta t \leq \min \{ \Delta t_d(Re_2), \Delta t_c(Re_2) \} < \Delta t_{ex}(Re_2) \quad (27)$$

以上で Hirt の方法を使用する場合の補正方法を示した。次に、係数 coe の値がどの程度が妥当かを調べる。図—7 に coe を変化させた場合の Re_d と Re_c のグラフを示す。 $coe = 0.7$ 程度にしておけば、すべての領域で $Re_d \geq Re_c$ となり Hirt の方法が使用できる。

以上をまとめると、タイムステップは Hirt の方法から次式で得られる。

$$\Delta t < \min \left\{ coe \cdot cof_{ah} \frac{h^2}{4\nu}, coe \cdot cof_{ch} \frac{2\nu}{U^2} \right\} \quad (28)$$

$$cof_{ah} \frac{h^2}{4\nu} = \frac{h^2}{2(\nu_{11} + \nu_{22})} \quad (29)$$

$$cof_{ch} \frac{2\nu}{U^2} = \frac{2[\nu_{11}\nu_{22} - (\nu_{12})^2]}{\nu_{22}U_1^2 + \nu_{11}U_2^2 - 2\nu_{12}U_1U_2} \quad (30)$$

$Re < 7$ では $coe = 0.7$ 程度、 $Re \geq 7$ では $coe = 1$ とすればよい。

4. 3次元移流拡散方程式の安定性解析

4.1 Neumann のフーリエ級数法によるタイムステップの決定

以後の解析のために、粘性と流速を次のように表す。

$$\left. \begin{aligned} U_1 &= U, & U_2 &= c_2 U, & U_3 &= c_3 U \\ \nu_{11} &= \nu, & \nu_{22} &= \alpha \nu, & \nu_{33} &= \beta \nu \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

$$\left. \begin{aligned} \nu_{12} &= \gamma_{12} \sqrt{\alpha} \nu, & \nu_{13} &= \gamma_{13} \sqrt{\beta} \nu, & \nu_{23} &= \gamma_{23} \sqrt{\alpha\beta} \nu \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

ただし、(2) 式の粘性マトリックス $[\nu]$ が正定値とな

るため以下の条件を設ける。

$$|\gamma_{12}| < 1, \quad |\gamma_{13}| < 1, \quad |\gamma_{23}| < 1 \quad (33)$$

$$|\gamma| = \begin{vmatrix} 1 & \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{12} & 1 & \gamma_{23} \\ \gamma_{13} & \gamma_{23} & 1 \end{vmatrix} > 0 \quad (34)$$

$$\alpha > 0, \quad \beta > 0, \quad \nu > 0 \quad (35)$$

2次元の場合と同様に、(1) 式を時間微分に関して前進差分 (タイムステップ Δt)、空間差分に関して中心差分 (格子幅 h) を用いた差分方程式を考える。この差分方程式をフーリエ級数法により安定性解析を行えば、タイムステップ Δt は次式で表される。

$$\begin{aligned} \Delta t &< cof_{cN}(c_2, c_3, \alpha, \beta, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23}, Re) \frac{2\nu}{U^2} \\ &= cof_{dN}(c_2, c_3, \alpha, \beta, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23}, Re) \frac{h^2}{6\nu} \quad (36) \end{aligned}$$

ただし、

$$cof_{cN} = \min_{\substack{|\theta_1| \leq \pi \\ |\theta_2| \leq \pi \\ |\theta_3| \leq \pi}} \left\{ \frac{2a(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \alpha, \beta, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23})}{\frac{4}{Re^2} a^2 + b^2(\theta_1, \theta_2, \theta_3, c_2, c_3)} \right\} \quad (37)$$

$$cof_{dN} = \min_{\substack{|\theta_1| \leq \pi \\ |\theta_2| \leq \pi \\ |\theta_3| \leq \pi}} \left\{ \frac{24a(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \alpha, \beta, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23})}{4a^2 + Re^2 b^2(\theta_1, \theta_2, \theta_3, c_2, c_3)} \right\} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} a &= (1 - \cos \theta_1) + \alpha(1 - \cos \theta_2) + \beta(1 - \cos \theta_3) \\ &\quad + \gamma_{12} \sqrt{\alpha} \sin \theta_1 \sin \theta_2 + \gamma_{13} \sqrt{\beta} \sin \theta_1 \sin \theta_3 \\ &\quad + \gamma_{23} \sqrt{\alpha\beta} \sin \theta_2 \sin \theta_3 \quad (39) \end{aligned}$$

$$b = \sin \theta_1 + c_2 \sin \theta_2 + c_3 \sin \theta_3 \quad (40)$$

2次元の場合と同様に、(36) 式の右辺の表現を拡散型表現、第2項の表現を移流型表現と呼ぶことにする。係数 (37) と (38) は数値計算で求める。

4.2 Hirt の安定性解析

4.2.1 移流型表現

差分方程式の第1微分方程式近似は、2次元の場合と同様に、(11) 式で表される。実行粘性係数 ν_{ij}^* も (12) 式で表される。ただし、この場合は3次元となる。移流型表現での Hirt の安定性条件は実効粘性マトリックス $[\nu^*]$ が正定値をとることである。タイムステップを求め

ると次のようになる。

$$\Delta t_1 < \frac{2\nu_1}{U_1^2} \quad (41)$$

かつ

$$\Delta t_2 < \frac{2(\nu_{11}\nu_{22} - \nu_{12}^2)}{\nu_{22}U_1^2 + \nu_{11}U_2^2 - 2\nu_{12}U_1U_2} \quad (42)$$

かつ

$$\Delta t < \frac{2|\nu|}{A} \quad (43)$$

ただし,

$$|\nu| = \begin{vmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} & \nu_{13} \\ \nu_{12} & \nu_{22} & \nu_{23} \\ \nu_{13} & \nu_{23} & \nu_{33} \end{vmatrix} \quad (44)$$

$$A = U_1^2 \begin{vmatrix} \nu_{22} & \nu_{23} \\ \nu_{23} & \nu_{33} \end{vmatrix} + U_2^2 \begin{vmatrix} \nu_{11} & \nu_{13} \\ \nu_{13} & \nu_{33} \end{vmatrix} + U_3^2 \begin{vmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} \\ \nu_{12} & \nu_{22} \end{vmatrix} - 2U_1U_2 \begin{vmatrix} \nu_{12} & \nu_{23} \\ \nu_{13} & \nu_{33} \end{vmatrix} - 2U_2U_3 \begin{vmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} \\ \nu_{13} & \nu_{23} \end{vmatrix} - 2U_1U_3 \begin{vmatrix} \nu_{22} & \nu_{12} \\ \nu_{23} & \nu_{13} \end{vmatrix} \quad (45)$$

(41)~(43) 式を書き直すと次式のようにになる。

$$\Delta t_1 < \text{cof}_{CH}^{(1)} \frac{2\nu}{U^2} \quad (46)$$

$$\text{cof}_{CH}^{(1)} = 1 \quad (47)$$

かつ

$$\Delta t_2 < \text{cof}_{CH}^{(2)} \frac{2\nu}{U^2} \quad (48)$$

$$\text{cof}_{CH}^{(2)} = \frac{1 - \gamma_{12}^2}{1 + t_1^2 - 2\gamma_{12}t_1} \quad (49)$$

かつ

$$\Delta t < \text{cof}_{CH} \frac{2\nu}{U^2} \quad (50)$$

$$\text{cof}_{CH} = \frac{|\gamma|}{f + at_1^2 + ct_2^2 + 2(dt_1 + bt_1t_2 + et_2)} \quad (51)$$

図—8 3次元移流型表現 (Hirt と Neumann の方法の結果)

(a)

(b)

図—9 拡散項の差分点 (3次元)
(a) 対角項によって作られる多面体
(b) cross 項によって作られる面

ただし,

$$a = 1 - \gamma_{13}^2 \quad (52)$$

$$b = \gamma_{12}\gamma_{13} - \gamma_{23} \quad (53)$$

$$c = 1 - \gamma_{12}^2 \quad (54)$$

$$d = \gamma_{13}\gamma_{23} - \gamma_{12} \quad (55)$$

$$e = \gamma_{12}\gamma_{23} - \gamma_{13} \quad (56)$$

$$f = 1 - \gamma_{23}^2 \quad (57)$$

$$t_1 = \frac{c_2}{\sqrt{a}}, \quad t_2 = \frac{c_3}{\sqrt{b}}, \quad -\infty < t_1 < \infty, \quad -\infty < t_2 < \infty \quad (58)$$

ここで, 係数 (49) と (51) はともに正の値をとる ([Appendix-5] 参照)。係数 (47), (49), (51) の大小関係は次式となる ([Appendix-6] 参照)。

$$\text{cof}_{CH} \leq \text{cof}_{CH}^{(2)} \leq \text{cof}_{CH}^{(1)} \quad (59)$$

したがって, タイムステップ Δt は (43) あるいは (50) 式で決定される。

Re は十分大きいときの Neumann の移流型表現 ((37) 式) と Hirt の移流型表現 ((51) 式) とを比較した図を図—8 に示す。Hirt の方法と Neumann の方法とは, Re が十分大きいとき一致するのがわかる。

4.2.2 拡散型表現

差分方程式の第 1 微分方程式近似は, 2次元の場合と同様に, (15) 式でも表される。ただし, この場合は 3次元となる。以下では (15) 式下線部の波動方程式を考察する。3次元の場合の (1) 式の拡散項の差分格子点を図—9 に示す。図—9 で, ○印は diagonal diffusion 項の差分格子点, ×印は cross 項の差分格子点を表す。cross 項の領域は多面体を構成しない。

diagonal diffusion 項の差分格子点のみが多面体を構成する。したがって, 拡散表現での Hirt の安定性条件を考えると, diagonal diffusion 項のみをとりあげれば良いと推定される。diagonal 項のみを考慮した Hirt の安定性条件は次式の様になる ([Appendix-7] 参照)。

図—10 3次元拡散型表現 (Hirt と Neumann の方法の結果)

$$\Delta t < \frac{1}{\nu_{11} + \nu_{22} + \nu_{33}} \frac{h^2}{2} = \text{cof}_{ah} \frac{h^2}{6\nu} \dots\dots\dots (60)$$

ただし,

$$\text{cof}_{ah} = \frac{3}{1 + \alpha + \beta} \dots\dots\dots (61)$$

Re が十分小さいときの Neumann の拡散型表現 ((38) 式) と Hirt の拡散型表現 ((60) 式) とを比較した図を図-10 に示す。Neumann の方法と Hirt の方法とは一致する。拡散型表現においては, Neumann の方法, Hirt の方法ともに γ_{12} , γ_{13} , γ_{23} に依存しない, α と β だけの関数となる。

4.3 Hirt の方法によるタイムステップの決定

2次元の場合と同様に3次元の場合にも critical Re number の Re. d と Re. c とが一致しない領域が存在する。このような領域では Hirt の方法は有効でない。

2次元の場合と同様に, Re. d $\geq$ Re. c となるように補正係数 coe の値を決める必要がある。3次元の場合には変化させるパラメータの数が多いため, 2次元の場合のように図式的に coe を決定することは難しい。したがって, この場合には大型計算機を利用することにする。 coe を決定するフローチャートを図-11 に示す^{註2)}。

実際の計算では, Re. d $\geq$ Re. c の条件は以下の条件 ([条件A] とする) で置き換えた。

[条件A]:

$$\text{cof}_{cm}(c_2, c_3, \alpha, \beta, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23}, \text{Re}) < \text{coe} \cdot \text{cof}_{ch} \dots\dots\dots (62)$$

図-11 補正係数 coe を求めるフローチャート

かつ

$$\text{cof}_{am}(c_2, c_3, \alpha, \beta, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23}, \text{Re}) < \text{coe} \cdot \text{cof}_{ah} \dots\dots\dots (63)$$

上記の条件を満たせば, Re. d < Re. c となる。すべてのパラメータで上記の条件を満たさない最大の coe が求める coe 値である。計算結果は $\text{coe} = 0.6$ となった。

以上をまとめると, 3次元の場合, タイムステップは Hirt の方法から次式で得られる。

$$\Delta t < \min \left\{ \text{coe} \cdot \text{cof}_{ah} \frac{h^2}{6\nu}, \text{coe} \cdot \text{cof}_{ch} \frac{2\nu}{U^2} \right\} \dots\dots\dots (64)$$

ただし,

$$\text{cof}_{ah} \frac{h^2}{6\nu} = \frac{h^2}{2(\nu_{11} + \nu_{22} + \nu_{33})} \dots\dots\dots (65)$$

$$\text{cof}_{ch} \frac{2\nu}{U^2} = \frac{2|\nu|}{A} \dots\dots\dots (66)$$

ただし, $|\nu|$ は (44) 式, A は (45) 式で表される。ここで, coe の値は 0.6 程度でよい。

5. 結 論

(1) cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式の安定性解析では, Hirt の方法と Neumann の方法では必ずしも一致しない。ただし, cross diffusion 項のない場合には, 2, 3次元場でも Hirt の方法と Neumann の方法は一致することが Neumann の方法の数値解から分かる。cross 項のない場合には, Re. c = Re. d となるためである。

(2) Hirt の安定性解析を用いて cross diffusion 項をもつ移流拡散方程式のタイムステップを決定するには, 2次元の場合は (28) 式, 3次元の場合は (64) 式を用いればよい。補正係数 coe の値は, 2次元では 0.7, 3次元では 0.6 程度とすればよい。

謝 辞

文献3)は東大生産技術研究所 村上教授よりいただいた。記して, ここに謝意を表す。

注

- 1) Hirt の原論文では cross diffusion 項を考慮していない。前進差分によって生じる cross diffusion 項による安定性をも考慮していない。実効粘性係数の diagonal diffusion 項のみが正となることを安定性の条件としている。Hirt の結果は Neumann の方法とは一致しない。
- 2) c_2 , c_3 の探索範囲の妥当性は, α , β , γ_{12} , γ_{13} , γ_{23} , θ_1 , θ_2 , θ_3 の探索範囲から理解できる。 $c_2 < 0$ のときは, cof_{am} , cof_{cn} の値は $\gamma_{12} = -\gamma_{12}$, $\gamma_{23} = -\gamma_{23}$, $\theta_2 = -\theta_2$ のときと一致する (条件 (34), (39), (40) 式を参照)。 $c_3 \leq c_2$ の探索範囲は $0.1 < \alpha < 10$, $0.1 < \beta < 10$ のため, どちらか一方を大きい方にしておけばよい。

[Appendix-1]

以下のような2階線形偏微分方程式をとりあげる。

$$\nu_{ij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} + \Phi(x, \phi, \text{grad } \phi) = 0 \quad (\text{ap 1.1})$$

ここで、 ν_{ij} は実対称行列で、正定値を取るものとする。行列 $[\nu]$ の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ とする。実対称行列 $[\nu]$ は正定値行列のため、固有値はすべて正である⁴⁾。

座標軸を回転させる座標変換 ($|y|=[\alpha]|x|$, $|x|=[\beta]|y|$, $[\beta]=[\alpha]^{-1}=[\alpha]^t$) を行う。 $\phi(x(y))=\tilde{\phi}(y)$ と表せば、(ap 1.1)式は

$$\tilde{\nu}_{ij} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial y_i \partial y_j} + \tilde{\Phi}(y, \tilde{\phi}, \text{grad } \tilde{\phi}) = 0 \quad (\text{ap 1.2})$$

ここで、

$$\tilde{\nu}_{ik} = \nu_{ij} \alpha_{ji} \alpha_{ik} = \beta_{ji} \nu_{ij} \beta_{jk} = \beta_{ji}^t \nu_{ij} \beta_{jk} \quad (\text{ap 1.3})$$

$[\beta]$ は直交行列であり、固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ に対応する固有ベクトルによって生成される。(ap 1.3)式をマトリックス形で表せば次式となる。

$$[\tilde{\nu}] = [\beta]^t [\nu] [\beta] = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \quad (\text{ap 1.4})$$

したがって、(ap 1.2)式は以下のように、正の固有値を拡散係数とする対角成分のみの2階偏微分方程式になる。

$$\lambda_j \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial y_j^2} + \tilde{\Phi}(y, \tilde{\phi}, \text{grad } \tilde{\phi}) = 0 \quad (\text{ap 1.5})$$

固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ は正であるから、次のような座標のスケーリングを行えば、

$$z_1 = \frac{y_1}{\sqrt{\lambda_1}}, \quad z_2 = \frac{y_2}{\sqrt{\lambda_2}}, \quad z_3 = \frac{y_3}{\sqrt{\lambda_3}} \quad (\text{ap 1.6})$$

(ap 1.1)式は結局は次のような楕円型の微分方程式になる。

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial z_j^2} + \hat{\Phi}(z, \hat{\phi}, \text{grad } \hat{\phi}) = 0 \quad (\text{ap 1.7})$$

ここで、

$$\hat{\phi}(y(z)) = \hat{\phi}(z) \quad (\text{ap 1.8})$$

[Appendix-2]

(15) 式下線部の波動方程式を考える。

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nu_{ij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} = 0 \quad (\text{ap 2.1})$$

[Appendix-1]と同様に座標の回転とスケーリングをおこなえば、(ap 2.1)式は最終的に次のような波動方程式になる。

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \hat{\phi}}{\partial z_j^2} = 0 \quad (\text{ap 2.2})$$

ここで、

$$\phi(x(y)) = \hat{\phi}(y(z)) = \hat{\phi}(z) \quad (\text{ap 2.3})$$

原点0を通る(ap 2.2)式の特性錐Kは次式で表される。

$$K: c^2 t^2 - z_j^2 = 0 \quad (\text{ap 2.4})$$

ここで、

$$c = \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \quad (\text{ap 2.5})$$

$t = \Delta t$ のとき、特性錐Kの断面は半径 r の球S(2次元の場合は円)となる。

$$S: z_j^2 = r^2 \quad (\text{ap 2.6})$$

ここで、

$$r = c \Delta t = \sqrt{2 \Delta t} \quad (\text{ap 2.7})$$

この特性錐Kの断面が差分格子によって作られる多面体の内部に含まれることが、Hirtの方法による拡散型表現の安定性条件になる。

[Appendix-3]

2次元の場合をとりあげる。実対称粘性マトリックス(ν_{ij})を次式で表す。

$$[\nu] = \begin{bmatrix} \nu & \beta \sqrt{\gamma} \nu \\ \beta \sqrt{\gamma} \nu & \gamma \nu \end{bmatrix} \quad (\text{ap 3.1})$$

ただし、マトリックス $[\nu]$ は正定値をとるように、以下の条件を課する。

$$|\beta| < 1, \quad \gamma > 0 \quad (\text{ap 3.2})$$

マトリックス $[\nu]$ の固有値を λ_1, λ_2 とする。 λ_i に対する固有ベクトルを v^i とする。(ap 3.1)に対する λ_i と v^i は各々つぎのようになる。

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \nu (1 + \gamma) + \sqrt{s} \quad (\text{ap 3.3})$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \nu (1 + \gamma) - \sqrt{s} \quad (\text{ap 3.4})$$

$$v^1 = (v_1^1, v_2^1) = \left(\left[\frac{\sqrt{s} + (1 - \gamma)}{2\sqrt{s}} \right]^{\frac{1}{2}}, \frac{2\beta\sqrt{\gamma}}{[2\sqrt{s} \{ \sqrt{s} + (1 - \gamma) \}]^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (\text{ap 3.5})$$

$$v^2 = (v_1^2, v_2^2) = \left(- \left[\frac{\sqrt{s} - (1 - \gamma)}{2\sqrt{s}} \right]^{\frac{1}{2}}, \frac{2\beta\sqrt{\gamma}}{[2\sqrt{s} \{ \sqrt{s} - (1 - \gamma) \}]^{\frac{1}{2}}} \right) \quad (\text{ap 3.6})$$

ただし、

$$s = (1 - \gamma)^2 + 4\beta^2 \gamma \quad (\text{ap 3.7})$$

また、[Appendix-1]で示した座標の回転マトリックス $[\alpha]$ は固有ベクトルを用いて次式で表される。

$$[\alpha] = \begin{bmatrix} v_1^1 & v_1^2 \\ v_2^1 & v_2^2 \end{bmatrix} \quad (\text{ap 3.8})$$

x 座標から z 座標への変換式は次式。

$$\begin{Bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{a_{11}}{\sqrt{\lambda_1}} & \frac{a_{12}}{\sqrt{\lambda_1}} \\ \frac{a_{21}}{\sqrt{\lambda_2}} & \frac{a_{22}}{\sqrt{\lambda_2}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} \quad (\text{ap 3.9})$$

付図-1に示すように、 x 座標での点1, 2, 3, 4で作られる正方形は、 z 座標では平行四辺形に変換される。 z 座標で、点3から点4へのベクトルをA、点3から点2へのベクトルをBとする。Aの長さ $|A|$ 、Bの長さ $|B|$ は各々次式で表される。

$$|A| = 2h \sqrt{\frac{\gamma \nu}{\lambda_1 \lambda_2}} \quad (\text{ap 3.10})$$

$$|B| = 2h \sqrt{\frac{\nu}{\lambda_1 \lambda_2}} \quad (\text{ap 3.11})$$

平行四辺形の面積Sは(ap 3.12)式で表されるため、距離 d_A, d_B は次式となる。

$$S = \frac{4h^2}{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}} \quad (\text{ap 3.12})$$

付図-1 座標の回転とスケーリング

$$d_A = \frac{2h}{\sqrt{\nu}} \dots\dots\dots (\text{ap 3.13})$$

$$d_B = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{2h}{\sqrt{\nu}} \dots\dots\dots (\text{ap 3.14})$$

[Appendix-2] から安定性の条件は次式となる。

$$r < \min \left\{ \frac{d_A}{2}, \frac{d_B}{2} \right\} \dots\dots\dots (\text{ap 3.15})$$

上式を書き直すと、最終的に安定性の条件は次式となる。

$$\Delta t < \text{cof}_{d(9)H} \frac{h^2}{4\nu} \dots\dots\dots (\text{ap 3.16})$$

$$\text{cof}_{d(9)H} = \min \left\{ 2, \frac{2}{\gamma} \right\} \dots\dots\dots (\text{ap 3.17})$$

(ap 3.16), (ap 3.17) 式が, cross diffusion 項の差分格子を考慮したときの, Hirt の方法による拡散形の安定性条件である。

[Appendix-4]

diagonal diffusion 項の差分格子点 E, N, W, S, O のみを考慮するときは, [Appendix-3] と異なり座標軸の回転は必要ない。対角成分の粘性係数での座標のスケーリングのみを行う。付図-2 に示すように, x 座標での正方形 (ENWSE) は z 座標では菱形になる。この菱形の内部に特性錐の断面 (円) が含まれることが安定性の条件となる。導出方法は, [Appendix-3] と同様にすればよい。

付図-2 座標のスケーリング

[Appendix-5]

(1) $|\gamma_{12}| < 1$ から, $\text{cof}_{CH}^{(2)} > 0$ は明らか。

(2) cof_{CH} の分子は $|\gamma| > 0$ ((34) 式) であるから, cof_{CH} の分母は正であることを以下に示す。 cof_{CH} の分母を $B(t_1, t_2)$ で表すと, B が最小となる t_1, t_2 を t_1^*, t_2^* とすると,

$$\begin{Bmatrix} t_1^* \\ t_2^* \end{Bmatrix} = \frac{1}{|\gamma|} \begin{bmatrix} c & -b \\ -b & a \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} -d \\ -e \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \gamma_{12} \\ \gamma_{13} \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (\text{ap 5.1})$$

ここで, 以下の関係を用いた。

$$ac - b^2 = |\gamma| \dots\dots\dots (\text{ap 5.2})$$

$$be - cd = \gamma_{12} |\gamma| \dots\dots\dots (\text{ap 5.3})$$

$$bd - ae = \gamma_{13} |\gamma| \dots\dots\dots (\text{ap 5.4})$$

したがって, $B(t_1^*, t_2^*) = B(\gamma_{12}, \gamma_{13}) = |\gamma| > 0$ となり, cof_{CH} は正である。

[Appendix-6]

(1) $|\gamma_{12}| < 1$ から, $\text{cof}_{CH}^{(2)} \leq \text{cof}_{CH}^{(1)}$ は明らか。

(2) 以下では, $\text{cof}_{CH} \leq \text{cof}_{CH}^{(2)}$ を証明する。 cof_{CH} , $\text{cof}_{CH}^{(2)}$ の分母, 分子はすべて正であるため,

$$\begin{aligned} & (\text{cof}_{CH} \text{ の分子}) \times (\text{cof}_{CH}^{(2)} \text{ の分母}) - (\text{cof}_{CH} \text{ の分母}) \\ & \times (\text{cof}_{CH}^{(2)} \text{ の分子}) \geq 0 \dots\dots\dots (\text{ap 6.1}) \end{aligned}$$

を証明すればよい。(ap 5.2) と (ap 5.3) の関係式と $f_c - |\gamma| = e^2$ の関係を用いると, (ap 6.1) を証明するには,

付図-3 z 座標での原点から多面体への距離

$$b^2 t_1^2 + 2 b e t_1 + c^2 t_2^2 + 2 b c t_1 t_2 + 2 c e t_2 + e^2 \geq 0 \dots\dots\dots (\text{ap 6.2})$$

を証明すればよい。

(ap 6.2) 左辺が最小となる t_1, t_2 を t_1^*, t_2^* とすると,

$$t_1^* = t_2^* = -\frac{e}{b+c} \dots\dots\dots (\text{ap 6.3})$$

上式を (ap 6.2) 左辺に代入すると, (ap 6.2) 左辺=0 となる。したがって, $\text{cof}_{CH} \leq \text{cof}_{CH}^{(2)}$ は常に満たされる。

[Appendix-7]

2次元の [Appendix-2] と同様に, 以下のように対角成分の粘性係数で座標のスケーリングを行う。

$$z_\alpha = \frac{x_\alpha}{\sqrt{\nu_{\alpha\alpha}}} \dots\dots\dots (\text{ap 7.1})$$

(α : no summation, $\alpha=1,2,3$)

波動方程式 (ap 2.2) の特性錐の断面は, (ap 2.6) で表される半径 r の球となる。付図-3 より, 拡散表現での Hirt の安定性条件は次式となる。

$$r < d \dots\dots\dots (\text{ap 7.2})$$

$$d = \frac{h}{\sqrt{\nu_{11} + \nu_{22} + \nu_{33}}} \dots\dots\dots (\text{ap 7.3})$$

したがって, (ap 2.7) を考慮すると, (ap 7.2) は (60) 式となる。

参考文献

- 1) Hirt, C.W. : Heuristic stability theory for finite-difference equations, J. Computational Physics, Vol. 2, pp. 339~355, 1968
- 2) Huang, P.G. and Leschziner, M.A. : Stabilization of recirculating-flow computations performed with second-moment closures and third-order discretization, 5th Symposium on Turbulent Shear Flows, pp.20. 7~20. 12, 1985
- 3) Launder, B.E. : Second-moment closure, methodology and practice. Univ. Manchester Institute of Sci. and Tech. Rep., No.TFD/82/4, 1983
- 4) 佐武一郎: 行列と行列式, 裳華房
- 5) 平岡久司, 中村素人: MAC 法による応力方程式モデルの解法, 日本建築学会計画系論文報告集, 第 431 号, pp.1~10, 1992
- 6) 矢嶋信男, 野木達夫: 発展方程式の数値解析, 岩波書店, 1977
- 7) ローチェ: コンピュータによる流体力学, 構造解析研究所

(1992 年 5 月 25 日原稿受理, 1992 年 9 月 30 日採用決定)