研究論文

933. 流れの数値解法における高次差分法の 数値的安定性と数値振動

富山明男*, 高橋亮一**

(1989年 6月15日 受理), (1989年 11月21日 再受理)

*Numerical Stability and Numerical Oscillation of Higher Order
Difference Methods for Computational Fluid Dynamics*

By Akio TOMIYAMA and Ryoichi TAKAHASHI

Since numerical stability and accuracy of solutions are much affected by difference methods for convection terms of transport equations, many methods have been proposed to solve fluid flows efficiently. In recent years, higher-order upstream difference methods have been recognized as accurate methods for solving high Reynolds number flows. There is however little information on the conditions for the occurrence of numerical instability or numerical oscillation when the higher-order difference methods are adopted. In the present study, spectral radii and spectral norms of difference operators were examined analytically or numerically to make the stability conditions of four higher-order difference methods clear. For the one-dimensional linear transport equation under various boundary conditions, the necessary and sufficient conditions of the stability defined by Lax & Richtmyer were derived using the spectral norms, and those of the stability defined by the boundedness of the solution as time nears infinity were obtained using the spectral radii. It was also shown by examination of eigenvalues of the spatial difference operators that the higher-order difference methods are subject to numerical oscillation when the cell Reynolds number exceeds a value of about two.

KEYWORDS: *computational fluid dynamics, eigenvalues, higher-order upstream difference method, numerical solution, numerical oscillation, numerical stability, spectral norm, spectral radius*

1. 緒 言

原子炉の安全性評価や設計を行う際には、複雑な熱流体力学的現象を精度良く評価する手法が不可欠である。熱流体力学的現象を記述する基礎方程式は非線形性に富むため、解析的に解くことは困難である。このため数値的に解く試みが数多くなされており、現象を記述するモデルの改良や数値計算法の高度化が精力的に進められている⁽¹⁾。

特に流れによる物理量の輸送を表わす対流項の数値的取扱いは、数値解の精度および安定性に大きな影響を及ぼすため、種々の対流項の離散化手法⁽²⁾⁻⁽⁴⁾が提案されている。流れの差分法に限定すると、現在、対

流項を高次の上流差分法⁽⁵⁾⁽⁶⁾で離散化する手法が主流になりつつある。この方法は、従来の1次精度の風上差分法に比べ、数値粘性が少なく精度も高いことが数値実験的に確認されている⁽⁵⁾⁽⁶⁾。このため、高レイノルズ数の流れを乱流モデルを用いずに高次差分法で模擬する試み⁽⁷⁾もなされている。

しかし、高次差分法は数値的不安定性や分散性に起因する局所的数値振動が生じ易いという問題も報告されており、実用化に際しては、これらの数値的現象の発生条件を明確にしておく必要がある。前川⁽⁸⁾もこの

* 神戸大学工学部 (Fac. of Eng., Kobe Univ.)

** 東京工業大学原子炉工学研究所 (Res. Lab. for Nucl. Reactors, Tokyo Inst. of Technol.)

点に着目し、高次差分法の数値粘性や数値振動について検討している。しかし、解析精度の検討が主目的であったため、不安定性や振動の発生条件は明確に把握されていない。

高次差分法の一つである QUICK⁽³⁾ を提案した Leonard は、von Neumann の安定性解析法⁽⁴⁾ によって得られる安定条件を満たさない条件でも数値的に安定な解が得られることを、数値実験的に示した。その後、高次差分法の安定条件はほとんど調べられておらず、安定な解を得るための時間刻み幅 Δt の設定に関する指針がない状況にある。このため、現状ではいくつかの Δt で計算を実行して、数値解の妥当性や安定性を確認せざるをえない。

そこで本研究では、高次差分法の安定条件と分散性に起因する数値振動の発生条件を、境界条件の影響も含めて明らかにすることを目的とした。以下、Lax と Richtmyer による安定性の定義⁽⁵⁾⁽⁶⁾ に基づいて、差分作用素のスペクトルノルム、差分作用素の固有値を用いて高次差分における 2 種の安定条件を導出した結果、および差分方程式の空間差分作用素の固有値が実数であるか否かに基づいて数値振動発生条件を調べた結果について報告する。

II. 差分分解の安定性のもつ 2 つの側面

従来、差分分解の安定性は主に von Neumann の安定性解析法によって調べられてきた。しかし、Leonard が示したように von Neumann の安定条件を満たさなくとも安定な解が得られることがある。本章では、Lax と Richtmyer による安定性の定義に基づいて、von Neumann の安定性解析法を違反しても安定な解が得られる原因を考察する。

1. 数学的準備

本節では、安定性の考察に必要な数学的知識を文献(8),(9)に基づいて整理しておく。以下、流れの数値解法を考察する際の基礎式である 1 次元線形移動方程式⁽²⁾

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (u, \alpha \geq 0 \text{ の定数}) \quad (1)$$

ただし、 f : 輸送される物理量

u : 流速

α : 拡散係数

t : 時刻

x : 位置

を対象とする。この方程式は線形の放物型偏微分方程式であり、初期値問題として適切であることが保証さ

れている。ここで、適切とは偏微分方程式の解がただ一つ存在し、初期値の変化に対して任意の時刻 t における解が連続的に変化することを意味する。

(1) 式を第 1 図に示す空間刻み幅 Δx の 1 次元メッシュ上で差分化すると次式となる。

$$f^{n+1} = A f^n + b \quad (2)$$

ただし、 f : 離散値 f_i を成分とするベクトル

A : 差分化に伴う係数行列(差分作用素)

b : 境界条件によって構成されるベクトル

添字 n : 時刻 $t = n\Delta t$, i : 位置 $x = i\Delta x$

第 1 図 1 次元メッシュ

(2) 式は適合性を持つと仮定する。すなわち、 Δt , $\Delta x \rightarrow 0$ としたとき、差分方程式(2)が偏微分方程式(1)に一致するように差分化されているとする。

Lax と Richtmyer は線形の初期値問題における差分分解の安定性を、「 $t = n\Delta t$ を固定して Δt , $\Delta x \rightarrow 0$ としたときに、時刻 t における差分分解が有界であること」と定義した。この安定性の必要十分条件は(2)式の行列 A を用いて表わすと、

$$\|A\| \leq 1 \quad (3)$$

となる。ただし、 $\| \cdot \|$ はノルムを意味する。行列のノルムの定義は考える関数空間によって異なるが、ここではスペクトルノルム

$$\|A\| = \sqrt{\rho(A^* A)} \quad (4)$$

を採用する。上式で、 $\rho(\cdot)$ は行列の絶対値が最大の固有値の絶対値、すなわちスペクトル半径を意味する。また、 A^* は A の転置行列である。

(3) 式で安定性を安易すると、Lax の同等定理⁽⁷⁾ が成立し、適切な初期値問題に対する適合性のある差分方程式において、安定性と差分分解の偏微分方程式の解への収束が同値となる。

もし、 A が正規行列($A^* A = A A^*$ を満たす行列)であれば、スペクトルノルムと行列 A のスペクトル半径 $\rho(A)$ の間に次式が成り立つ。

$$\|A\| = \rho(A) \quad (5)$$

したがって、

$$\rho(A) \leq 1 \quad (6)$$

が安定性の必要十分条件となり、差分作用素 A の固有値から安定性を調べられる。

一方、一般の行列の場合は、

$$\|A\| \geq \rho(A) \quad (7)$$

が保証されているだけなので、(6)式は安定のための必要条件としか言いえない。

しかし、(6)式は、 Δt を固定して $t \rightarrow \infty (n \rightarrow \infty)$ としたときに、差分解が有界であるための必要十分条件となっている。これは、(2)式を反復収束過程とみなしたとき(6)式が反復収束のための必要十分条件となっている⁽¹¹⁾ことから理解できる。したがって、 A が正規行列でない場合、(6)式はLaxとRichtmyerの定義した安定性の意味では必要条件であり、任意の時刻 t において差分解が偏微分方程式の解に収束することは保証されないが、 $t \rightarrow \infty$ における解の有界性は保証される。

2. 境界条件による安定条件の相違

von Neumannの安定性解析法⁽²⁾は(6)式に基づく方法である。ただし、無限空間あるいは周期的境界条件を仮定したとき、 A の固有関数がフーリエ級数で表わせることを利用している。周期的境界条件の場合、1次元線形移動方程式から得られる行列 A は単純巡回行列(Circulant matrix)⁽¹¹⁾

$$\begin{pmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ a_m & a_0 & a_1 & \cdots & a_{m-1} \\ a_{m-1} & a_m & a_0 & \cdots & a_{m-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

の形となる。単純巡回行列は正規行列なので(5)式が成立し、von Neumannの安定性解析法はLaxとRichtmyerの意味での安定性の必要十分条件を与える。

しかし、流れ解析において対象とする問題は、空間の両端で f の値を指定するDirichlet問題、一端がDirichlet条件、一端がNeumann条件の混合問題の2種が大部分である。Leonardがvon Neumannの安定条件を違反してもQUICKは安定であると主張した数値実験もDirichlet問題である。

周期的境界条件以外では、一般に A の固有関数はフーリエ級数では表わせない。また、 A は正規行列とはならない。このためvon Neumannの安定性解析法では、LaxとRichtmyerの意味での安定性を調べられない。したがって、von Neumannの安定条件を違反しても安定に解が得られた原因は境界条件である可能性がある。

そこで、LaxとRichtmyerの意味での安定条件の境界条件による相違を、時間に関して前進差分、空間に関して中心差分化するFTCS法⁽²⁾を対象として調べてみる。(1)式を第1図に示すメッシュ上でFTCS法を用

いて離散化すると、

$$f_i^{n+1} = \left(d + \frac{c}{2}\right) f_{i-1}^n + (1-2d) f_i^n + \left(d - \frac{c}{2}\right) f_{i+1}^n \quad (9)$$

となる。ここで、 d は拡散数、 c はクーラン数

$$d = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}, \quad c = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \quad (10)$$

を意味する。

周期的境界条件では von Neumann の安定性解析により、安定性の必要十分条件として次式が得られる⁽²⁾。

$$c^2 \leq 2d \leq 1 \quad (11)$$

他の境界条件における安定性の必要十分条件は、 $A^T A$ の固有値を対称行列の固有値解法であるHouseholder法⁽¹²⁾によって数値的に求めて導出する。境界条件は以下のように与える。

(Dirichlet問題)

$$f_0 = \text{const.}, \quad f_{IM} = \text{const.} \quad (12)$$

(混合問題)

$$f_0 = \text{const.}, \quad f_{IM}^n = f_{IM}^{n-1} \quad (13)$$

c, d をおおの0~2の範囲で0.005刻みで変化させ、 $\rho(A^T A) \leq 1$ となる条件を調べた。この際、ノード数 IM を20以上とすると安定条件に差はなかったので、 $IM=20$ とした。

第2図に、各種境界条件に対して得られた安定条件を (c, d) 平面における安定領域の形で示す。すべての境界条件の安定領域に有為な差はなく、LaxとRichtmyerの意味での安定性の必要十分条件は、(11)式と考えてよいことがわかった。

第2図 Lax, Richtmyerの意味での安定領域の境界条件による変化

以上より、von Neumannの安定条件を違反しても安定な原因は、境界条件ではないことがわかる。

3. 差分作用素の固有値に基づく安定条件

von Neumannの安定条件を違反しても、安定である

原因が境界条件ではないとすると、原因は安定性の定義の相違にある可能性がある。第II-1節に示したように、(6)式で表わされる差分作用素の固有値に基づく安定性解析法は、LaxとRichtmyerの安定性の意味では必要条件を与え、かつ $t \rightarrow \infty$ における解の有界性を保証するという意味の安定性(以下、便宜上 $t \rightarrow \infty$ の安定性と呼ぶ)の必要十分条件を与える。

以下、 $t \rightarrow \infty$ の安定条件を、FTCS法を対象に各種境界条件の下で求める。周期的境界条件の場合は、 A が正規行列なので(11)式となる。Dirichlet問題の場合は、一様な3重対角行列の固有値⁽⁶⁾に関する公式より、 A の固有値 $\lambda_k (1 \leq k \leq IM-1)$ は次式で与えられる。

$$\lambda_k = 1 - 2d + \operatorname{sgn}\left(d - \frac{c}{2}\right) \sqrt{4d^2 - c^2} \cos \frac{k\pi}{IM} \quad (14)$$

これより安定条件(6)式を満たす c, d の範囲を求めると、

$$\frac{c^2}{4} \leq d \leq \frac{c^2 + 4}{8} \leq 1 \quad (15)$$

となる。混合問題の場合は解析的に求められないので、一般行列の固有値解法であるダブルQR法⁽¹³⁾を用いて数値的に $\rho(A) \leq 1$ となる条件を調べた。調べた方法は第II-2節と同じである。

第3図に得られた安定領域を示す。第2図と第3図とを比較すると、周期的境界条件以外の境界条件で、 $t \rightarrow \infty$ の安定性の条件は、任意の時刻 t における差分解が有界というLaxとRichtmyerの安定条件より広い安定領域を保有していることがわかる。

第3図 $t \rightarrow \infty$ の安定領域の境界条件による変化

以上の考察結果を具体的に確認するため、内点の f の初期値をすべてゼロとし、境界条件を両端で f の値を固定するDirichlet条件

$$f_0=1, \quad f_{IM}=0 \quad (16)$$

として、FTCS法で(1)式を解いた。この問題はLeonardがvon Neumannの安定条件を違反してもQUICKが安定であることを示すために行なった問題である。計算結果を第4図に示す。この計算の c, d はおおの1.2, 0.5であり、LaxとRichtmyerの意味では不安定であるが、 $t \rightarrow \infty$ の安定性は保証される条件である。差分解が定常状態に至る過程での解は物理的に無意味であるが、無限大に発散することなく $n \geq 43$ で有界な解からなる定常状態に達している。定常状態に至る各時刻における差分解が物理的に無意味であるのは、任意の時刻 t において差分解が偏微分方程式の解に収束することを保証するLaxとRichtmyerの安定条件を満たしていないためと考えられる。

第4図 数値解の定常状態への接近過程の一例

以上より、計算結果を解釈する際に安定性の定義を $t \rightarrow \infty$ の安定性に置き換えてしまうと、Dirichlet問題や混合問題の場合 von Neumannの安定条件を違反しても安定という結論が得られることがわかる。

4. 安定性のもつ2つの側面

LaxとRichtmyerの安定条件を厳守しても、実際の計算で Δt をゼロに近づけることはないので、各時刻 t における差分解は偏微分方程式の解に完全には収束しないが、それほど大きく2つの解に差は生じない。したがって、各時刻における解を精度良く求めたい場合、すなわち非定常流れを解析する場合は、LaxとRichtmyerの安定条件を厳守すべきといえる。また、第2図に示したように、各種境界条件におけるLaxとRichtmyerの意味での安定条件には有為な差がない。第2図はFTCS法に関する結果であるが、第III章で示すように各種の高次差分法でもLaxとRichtmyerの安定条件は境界条件による差がない。

一方、周期的境界条件では、von Neumannの安定性解析法はLaxとRichtmyerの意味での安定性の必要

十分条件を与える。したがって、von Neumann の安定条件を厳守すれば、Lax と Richtmyer の意味での安定性が各種境界条件において確保できる。以上より、非定常流れ解析を行う場合は、von Neumann の安定条件を厳守すればよいといえよう。

時間進行法で定常解を求めることが解析の目的であり、最終的に有界な解が得られればよいのであれば、 $t \rightarrow \infty$ の安定性を厳守すればよい。この場合、 Δt を大きく設定できるので計算効率は良くなる。ただし、差分の偏微分方程式の解への収束は保証されないもので、解の信頼性は低い。解が定常に近づいたときに von Neumann の条件を満たすように Δt を小さくすれば、解の精度向上が図れる。なお、乱流解析における乱流エネルギーの輸送計算のように、負になると計算が持続できない保存量の計算では、 $t \rightarrow \infty$ の安定性の条件では時間進行中に解が負になる確率が高いので、定常解計算でも von Neumann の条件を守るべきであろう。

実際に計算を行う際には、上記 2 種の安定性に注意しなければならない。例えば、前川⁽⁶⁾ は高次差分法の特性を調べるために、QUICK を用いて非定常流れの一例である Karman 渦の計算を行なっているが、計算結果には下流側で渦の増幅が見られる。前川はこれを分散性に起因する局所数値振動と関連づけているが、実際は Lax と Richtmyer の意味で不安定な条件で数値実験を行なったために、下流側で不安定性が顕著になったものと解釈できる。

また、従来、差分スキームの特性を調べるために、数多くの数値実験の研究やベンチマーク問題の選定等⁽⁷⁾が行われているが、2 つの安定性の相違に注意しているものはほとんどない。定常解に帰着する問題があるクーラン数で安定に解けても、同じクーラン数で非定常流れを安定に解けるとはいえない。今後、数値実験的に差分スキームの検討を行う際には、2 つの安定性の相違に注意すべきと考える。

II. 高次差分法の数値的安定性の評価

本章では、前章の考察結果を踏まえて高次差分法の安定性評価を行う。ただし、時間に関しては前進差分とする。対象とする差分法は第 1 表に示す代表的 4 種の高次差分法⁽⁸⁾⁽⁹⁾⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾とする。この表の係数 a_i は、(1) 式の流れ項を高次差分法で拡散項を中心差分で離散化した式を

$$f_i^{n+1} = f_i^n - c \sum_j a_j f_j^n + d(f_{i-1}^n - 2f_i^n + f_{i+1}^n) \quad (17)$$

と表わしたときの係数で、 a_{i-3} のように表にない値はすべてゼロである。

第 1 表 考察する高次差分法の係数

j	a_j				
	$i+2$	$i+1$	i	$i-1$	$i-2$
2 次風上	0	0	3/2	-4/2	1/2
QUICK	0	3/8	3/8	-7/8	1/8
3 次風上	0	2/6	3/6	-6/6	1/6
Kawamura	1/6	-2/6	9/6	-10/6	2/6

1. Lax と Richtmyer の意味での安定条件

周期的境界条件の場合は、von Neumann の安定条件が安定性の必要十分条件となる。安定条件は複素平面上の実軸 1 における増幅係数の曲率と単位円の曲率の比較⁽²⁾により容易に求められるので、ここでは結果のみを示す。

(1) 2 次風上差分

$$c^2 \leq 2d \leq 1 - 2c \quad (18)$$

(2) QUICK

$$c^2 \leq 2d \leq 1 - \frac{c}{2} \quad (19)$$

(3) Kawamura スキーム

$$c^2 \leq 2d \leq 1 - 2c \quad (20)$$

(4) 3 次風上差分

$$c^2 \leq 2d \leq 1 - \frac{2}{3}c \quad (21)$$

以上の結果は、1 次元問題の場合である。多次元問題の場合は、便宜的に、例えば 2 次元ならば各方向のクーラン数や拡散数を用いて、上式の c や d を

$$\left. \begin{aligned} c &= c_x + c_y = \frac{u \Delta t}{\Delta x} + \frac{v \Delta t}{\Delta y} \\ d &= d_x + d_y = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

に置き換えればよい。ここで、 u, v はおのおの x, y 方向の最大流速、 $\Delta x, \Delta y$ は空間刻み幅を意味する。(18)~(21) 式を (c, d) 平面上に整理した結果を第 5 図に示す。比較のため、同図には中心差分の安定領域も示してある。

Dirichlet 問題と混合問題に関しては、 $\rho(A^T A) \leq 1$ となる条件を第 II-2 節と同様に数値的に求める。ただし、高次差分法を使用する際に Dirichlet 条件を設定する方法には 1 次外挿、2 次外挿の 2 つの方法がある。これらは、第 1 図に示すノード $i=0$ において、以下のよう表わせる。

(1 次外挿)

$$f_{-1} = 2f_0 - f_1 \quad (23)$$

第5図 各種差分法の周期的境界条件における Lax, Richtmyerの意味での安定領域

(2次外挿)

$$f_{-1} = 3f_0 - 3f_1 + f_2 \quad (24)$$

これらの境界条件式は、 f_0 の値を境界値として固定し、 $i=1$ における内点の差分式と上記の境界条件式から f_{-1} を消去して使用する。

①両端とも1次外挿のDirichlet条件とするDirichlet問題、②両端とも2次外挿のDirichlet条件とするDirichlet問題、③下流側をNeumann条件、④上流側を1次ないし2次外挿のDirichlet条件とする混合問題、の4種の境界条件に対して、数値的にLaxとRichtmyerの意味の安定条件を求めた。その結果、安定条件はすべての境界条件において第5図と有為な差がなかった。したがって、LaxとRichtmyerの意味での安定性の必要十分条件は、境界条件による差はほとんどなく、von Neumannの安定性解析で得られた(18)~(21)式と考えてよいことが確認できた。

第5図から、高次差分法の中では、QUICKが最も広い安定領域を持つことがわかる。これは、過去に行われた高次差分法の数値実験的比較においてQUICKが良い結果を与えている理由の1つと考えられる。また、2次風上差分やKawamuraスキームは安定領域が狭いため、同じ Δt で計算した場合不安定になり易いことがわかる。

(18)~(21)式からセルレイノルズ数 Re_c

$$Re_c = \frac{c}{d} = \frac{u\Delta x}{\alpha} \quad (25)$$

と、安定限界のクーラン数 c_{max} との関係を求めた結果を第6図に示す。(11), (18)~(21)式より $Re_c \geq 4.83$ において中心差分と全高次差分の c_{max} は

$$c_{max} = \frac{2}{Re_c} \quad (26)$$

となるため、 Re_c の増加に伴い急激に c_{max} は減少する。

したがって、高レイノルズ数の非定常流れ解析をLaxとRichtmyerの意味での安定条件内で行うには、中心差分の場合と同様に非常に小さな時間刻み幅と細かなメッシュ分割が必要といえる。

第6図 Lax, Richtmyerの意味での安定限界のクーラン数 c_{max} と Re_c との関係

2. $t \rightarrow \infty$ の安定条件

本節では、 $t \rightarrow \infty$ で解が有界であるという意味での安定性の必要十分条件を、周期的境界条件、Dirichlet問題、混合問題の3種の境界条件に対して求める。

周期的境界条件では、 $t \rightarrow \infty$ の安定条件はLaxとRichtmyerの安定条件に一致するので、(18)~(21)式が各高次差分法の安定条件となる。他の境界条件の場合は、ダブルQR法を用いて数値的に $\rho(A) \leq 1$ となる条件を調べた。その結果、FTCS法の場合と同様に、Dirichlet問題と混合問題の安定条件に有為な差がないことを確認した。周期的境界条件の場合の安定領域は第5, 6図と同じである。

Dirichlet問題と混合問題における c_{max} と Re_c との関係を第7図に示す。第6図と第7図とを比較すると、Dirichlet問題、混合問題において、 $t \rightarrow \infty$ の安定性はLaxとRichtmyerの意味の安定性より広い安定領域を保有

第7図 Dirichlet問題、混合問題における $t \rightarrow \infty$ の安定性の c_{max} と Re_c との関係

することがわかる。これは、定常流れのベンチマーク問題⁽¹⁾において、高次差分法が良い結果を与えた原因の1つといえよう。

以上、LaxとRichtmyerの意味での安定性の必要十分条件と、 $t \rightarrow \infty$ で解が有界という意味での安定性の必要十分条件を、線形移動方程式に対する代表的4種の高次差分法に関して境界条件の影響も含めて明らかにした。これらの安定条件は、実際の流れ解析を行う上での数値解の安定性に関する指針として考えねばならない。実際の問題は非線形性を含むため、以上の結果がそのまま当てはまるものではない。例えば、ナビエ・ストークス式を解く場合、通常、流速の推定値を陽解法で求めた後に連続の式を満たすように圧力と流速を補正する。このため、流速の推定値に不安定性が生じていても、補正によって精度の良い解が得られることも考えられる。この場合、不安定性は圧力補正に要する反復計算量増加の原因になるであろう⁽⁹⁾。

Ⅳ. 差分解の数値振動と空間差分作用素の固有値

前章までは、差分解の安定性についてのみ議論したが、実際には安定であっても物理的に信頼性の高い解が得られるわけではない。分散性(位相誤差)に起因する数値振動⁽²⁾は解の信頼性を低下させる。以下では、高次差分法の数値振動発生条件について考察する。なお、数値振動が生じても差分解が有界であれば安定性は保証されるので、ここで考察する数値振動は、安定性とは別の問題であることを注意しておく。

1. オーバーシュートなしの条件

数値解の振動を回避するための条件として従来使用されてきたものは、ThomanとSzewczyk⁽¹⁶⁾によるオーバーシュートなしの条件と、Patankarの著書⁽¹⁷⁾にある正係数の条件である。この2つの条件は同値なので、ここでは正係数の条件のみを取り上げる。

正係数の条件とは、定常流れの方程式

$$u \frac{df}{dx} = \alpha \frac{d^2 f}{dx^2} \quad (27)$$

の差分式を

$$f_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} f_j \quad (28)$$

と表わしたときに、すべての係数 a_{ij} が正となることを要請するものである。このように、数値振動の発生条件は定常流れの方程式で考察できるもので、安定性とは別の問題である。

一例として、QUICKを考えると、

$$f_i = \frac{1}{16+3Re_c} [-Re_c f_{i-2} + (8+7Re_c)f_{i-1} + (8-3Re_c)f_{i+1}] \quad (29)$$

となり、 Re_c をいかに調節しても対流が存在する限り負の係数を取り除くことはできない。したがって、正係数の条件によればQUICKは常に振動することになる。

しかし、第8図に示すように、QUICKを用いて内点のノード数 $I_n=9$ 、 $Re_c=2$ として第Ⅱ-3節の数値実験と同じ境界条件(16)式で行なった計算結果に数値振動は見られない。

したがって、高次差分法の数値振動の発生条件を調べるには、従来の方法とは別の方法が必要である。

第8図 $Re_c=2$ におけるQUICKの解の一例

2. 移動方程式の固有値

差分による数値計算を、初期値を入力して新しい時刻における解を出力するシステムとみなせば、システムの特徴はシステム行列の固有値によって把握できるはずである。差分解と連続体の解の性質が一致するには、連続体の式が持つ固有値と数値計算系のシステム行列の固有値が同じ性質を持つことが必要十分条件といえる。そこで、本節では移動方程式の固有値の性質を整理しておく。

(1)式の f を

$$f(x, t) = \xi(t)\eta(x) \quad (30)$$

と変数分離すると、以下に示す固有値問題を得る。

$$\frac{d\xi}{dt} = -\gamma\xi \quad (31)$$

$$\frac{d^2\eta}{dx^2} - \frac{u}{\alpha} \cdot \frac{d\eta}{dx} = -\gamma \frac{\eta}{\alpha} \quad (32)$$

ここで、 γ : 固有値

(32)式は定数係数の常微分方程式なので、よく知られているように正則なSturm-Liouville型固有値問題⁽¹⁸⁾となる。自己随伴形に書き換えると、

$$\frac{d}{dx} \left[\exp \left(-\frac{ux}{\alpha} \right) \frac{d\eta}{dx} \right] = -\gamma \frac{\exp \left(-\frac{ux}{\alpha} \right)}{\alpha} \eta \quad (33)$$

となり, $\exp(-ux/\alpha)$ が任意の x で正, かつ連続微分可能であるため固有値, 固有関数は以下の2つの性質を持つ。

- ① 固有値 γ は正の実数(正定値)
- ② 固有値, 固有関数は加算無限個存在し, すべて異なる(非縮退)。

この性質は, 移動方程式の解の性質を考える上で重要である。固有値は一般に複素数を含むので,

$$\gamma = \phi + j\psi \quad (j \equiv \sqrt{-1}) \quad (34)$$

と考えると, (31)式より $\xi(t)$ は

$$\xi(t) = \beta e^{-\gamma t} = \beta e^{-\phi t} e^{-j\psi t} \quad (35)$$

ただし, β : 積分定数

となる。上式より, 実部 ϕ が正であれば $\xi(t)$ は時間的に減少し, 逆に負であれば無限大に発散すること, 虚部 ψ が0でなければ $\xi(t)$ の符号が時間的に変化(振動)することがわかる。したがって, 性質①は移動方程式の解が時間的に単調減少することを意味している。

以上より, 数値振動発生条件は, γ に対応する数値計算系の固有値が複素数となる条件として求めればよいことがわかる。次節では, 数値的にこの条件を求める。

3. 数値振動発生条件

(32)式を離散化すると, 以下の固有値問題となる。

$$B\eta = -\frac{\lambda}{\alpha} \eta \quad (36)$$

ここで, λ : 固有値

η : η_i からなるベクトル

また, B は空間差分化に伴う係数行列で, その要素は Re_c の関数になる。 B は安定性の考察に用いた差分作用素 A とは異なることを注意しておく。

(1)式の空間微分項を差分化した式を表わすと,

$$\frac{df}{dt} = \alpha Bf \quad (37)$$

となる。上式を外入力がいない場合の線形時不変システムの表現とみれば, αB はシステム行列に対応する。 α は実数なので, α によって αB の固有値が複素数であるか否かは変化しない。そこで以下では, 行列 B の固有値 λ を数値的に調べて λ が実数から複素数になる条件を求める。

行列 B の性質に寄与するパラメータは, 行列の次数を決める内点のノード数 I_{in} と Re_c のみなので, I_{in} と固有値の実数性が保証される最大の Re_c , Re_{cmax} の関係

を調べることにする。第9図に, 境界条件をDirichlet問題とし, 1次外挿法を用いた場合の結果を示す。この図から, I_{in} が10~40の範囲では, 2次風上, 3次風上, QUICK, Kawamuraスキームの順に数値振動が発生しにくいことがわかる。この順番は, 第7図に示した $t \rightarrow \infty$ の安定性の安定領域の広い順と一致している。

第9図 数値振動を生じない最大のセルレイノルズ数 Re_{cmax} と内点のノード数 I_{in} の関係 (1次外挿条件を用いたDirichlet問題の場合)

また, 実際の流体解析では I_{in} が少なくとも30以上となることを考えると, 数値振動を抑えるためには Re_c を2程度以下に設定する必要があるといえる。実際, $Re_c=4$, $IM=10$, $f_0=1$, $f_{IN}=0$ として求めた定常解には, 第10図に示すように, 2次風上差分を除き f の勾配が急峻な部分に数値振動が見られる。

第11図は, QUICKの Re_{cmax} の境界条件による変化

第10図 高次差分法の数値振動の一例

を調べた結果である。Dirichlet条件として2次外挿を用いると、 Re_{cmax} はさらに小さくなることがわかる。

第11図 QUICKの Re_{cmax} の境界条件による変化

従来、FTCS法は $Re_c > 2$ の領域で数値振動を呈するため、高レイノルズ数の流れ解析には不適と考えられてきた。この考え方に基くと、高次差分法も高レイノルズ数流れの解析に不適といえる。これは、高次差分法が高レイノルズ数の流れ解析に適するという現状の熱流動数値解析研究における考え方と相反する結果である。

定常流れを求める場合、高次差分の高周波の数値振動が顕著となるのは物理量 f の分布が急峻となる位置、例えばDirichlet条件を課した境界の近傍である。この位置における数値振動があたかも流れの乱れと同じ働きをするため良い結果を与えるのか、もしくは連続の式を満たすように流速を補正する過程で数値振動がなまされてしまうのかは、現時点ではわからない。いずれにせよ、線形移動方程式で考える限り、 Re_c を約2以上にすると、もとの方程式にはない数値振動が発生することは事実である。今後、本報で示した安定条件範囲内で高次差分法による数値解の正当性をさらに検討していく必要がある。

V. 結 言

流れの差分解析において、対流項を差分化する方法は解の安定性や精度に大きな影響を及ぼす。このため、多くの差分法が提案されており、近年では高次の上流差分法が目玉されている。しかし、高次差分法の数値的安定性や数値振動発生条件は明らかにされていないため、実際に使用する際には試行錯誤的に安定に計算できる条件を調べねばならないという問題があった。

本研究では、1次元線形移動方程式を時間に関して前進差分、空間に関して高次差分化した線形差分方程

式を対象として、差分解析の安定条件と数値振動発生条件を境界条件の影響を含めて考察し、以下の結論を得た。

- (1) LaxとRichtmyerが定義した任意の時刻 t における差分解析の有界性に基づく安定性の必要十分条件は、境界条件による有為な差が生じないことを数値実験的に確認した。したがって、無限空間と周期的境界条件においてのみLaxとRichtmyerの安定性の必要十分条件となるvon Neumannの安定条件を、Dirichlet問題および混合問題においてもLaxとRichtmyerの安定性の必要十分条件とみなすことができる。
- (2) von Neumannの安定性解析法では、 $t \rightarrow \infty$ における差分解析が有界であるという意味の安定性の定義を用いている。この安定性の必要十分条件は境界条件によって大きな差を生じ、Dirichlet問題および混合問題における安定条件は、周期的境界条件における安定条件よりも制約が緩いことを数値実験的に確認した。
- (3) 実用上、LaxとRichtmyerの安定性は非定常流れ解析における安定性、 $t \rightarrow \infty$ の安定性は時間進行法で定常解を求める際の安定性とみなすことができる。従来、高次差分法はvon Neumannの安定条件を違反しても数値的に安定であることが数値実験的に示されていたが、これはDirichlet問題における $t \rightarrow \infty$ の安定性の必要十分条件が広い安定領域を持つためであり、非定常解析で各時刻における解を精度良く求めたい場合は、von Neumannの安定条件を厳守すべきであることを示した。
- (4) 上記2種の安定性の相違に注意して、代表的4種の高次差分法である2次風上差分、3次風上差分、QUICK、Kawamuraスキームの安定条件を、非定常流れ計算の場合(LaxとRichtmyerの安定条件)と、時間進行法で定常解を求める場合($t \rightarrow \infty$ の安定条件)のおおのに対して、境界条件の影響を含めて定量的に明らかにした。
- (5) 数値振動発生条件を、空間差分作用素の固有値が複素数となる条件として求めた。その結果、上記4種のすべての差分法が、 Re_c が約2以上になると、物理的に意味のない数値振動を呈することがわかった。

— 参考文献 —

- (1) 例えば日本原子力学会「熱流動数値解析」特別専門委編:
“原子炉における熱流動数値解析の現状, (I)~(II)”,
(1986~88).
- (2) ROACHE, P.J. (高橋亮一, 他訳): “コンピュータによる
流体力学(上), (下)”, (1978), 構造計画研究所.
- (3) LEONARD, B.P.: *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*,
19, 59 (1979).
- (4) KAWAMURA, T., KUWAHARA, K.: *AIAA-84-0340*,
(1984).
- (5) 前川 勇: 原子力誌, 28[5], 444 (1986).
- (6) 河合理文, 安藤安則: 機 論, 52, 477, B (1986).
- (7) KAWAMURA, T., KUWAHARA, K.: *AIAA-85-0376*,
(1985).
- (8) SMITH, G.D.: “Numerical Solution of Partial Dif-
ferential Equations, Finite Difference Methods”,

- (3rd Ed.), (1986), Clarendon Press, Oxford.
- (9) LAX, P.D., RICHTMYER, R.D.: *Comm. Pure Appl.
Math.*, 9, 267 (1956).
- (10) LAX, P.D.: *ibid.*, 11, 175 (1958).
- (11) VARGA, R.S.: “*Matrix Iterative Analysis*”, (1962),
Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- (12) 山本哲朗: “数値解析入門”, (1976), サイエンス社.
- (13) FRANCIS, J.G.F.: *Comput. J.*, 4, 265 (1961).
- (14) ATIAS, M., et al.: *AIAA J.*, 15[2], 263 (1977).
- (15) AGARWAL, R.K., *AIAA Paper*, No. 81-0112, (1981).
- (16) THOMAN, D.C., SZEWCZYK, A.A.: *Tech. Rep.*, 66-14,
Univ. of Notre Dame, (1966).
- (17) PATANKAR, S.V.: “*Numerical Heat Transfer and
Fluid Flow*”, (1980), Hemisphere.
- (18) COURANT, R., HILBERT, D.: “*Methoden der Ma-
thematischen Physik*, I, II, (1931, 1937).

◇6th Int. Topical Mtg. on◇ LWR Fuel Performance

1991年4月21~24日 (Avignon, France)

Topics

- Fuel performance in commercial reactors
- Fuel reliability
- Cladding waterside corrosion
- Integral fuel rod behavior
- Advanced designs and materials for fuel and
core components
- Operating experience with fuel failure
identification and location
- MOX and REPU fuel behaviors
- Fuel performance modelling

国内テクニカルプログラム委員 三島良積氏(東大名誉)

“2nd Announcement”は在本会事務局。

◇AI 91: Frontiers in Innovative◇ Computing for the Nuclear Industry

主催 ANS, 後援 ENS, 本会

1991年9月15~18日 (Jackson, Wyoming, USA)

Subject Areas and Topics

Applications

- Adverse operating conditions and accidents
- Fuel management, • Inspection
- Data base mining, • Separation and manufacturing
- Transportation of radioactive materials
- Issues and resolutions
- Research reactors, • Instrumentation
- Diagnosis and prognosis and off-normal operations

- Robotic/remote systems, • Maintenance
- Computer-aided engineering
- Alarm handling and signal validation
- Equipment diagnostics, • Regulation and licensing
- Technical specifications management
- Plant life extension
- Computerized operational procedures
- On-line plant information and management systems
- Fault diagnosis

New Technologies (Research & Applications)

- Neural networks and genetic algorithms
- Fuzzy control, • Pattern recognition
- Intelligent plant control systems
- Visualization, • Expert systems, • Hypermedia
- 3-D intelligent modeling, • Chaos
- Other innovative computing techniques

Implementation

- Gaining acceptance of new technologies in operating
environments
- Potential benefits for AI applications in commercial
nuclear power
- Fault tolerance issues, • Intelligent interfaces
- Evaluation and comparative assessment of AI and
conventional approaches
- Control room design methods, • Tools
- The role of the operator, • Knowledge acquisition
- Verification and validation of software
- Distributed networks/distributed computing
- Problems with automation

サマリー締切 (1,500~2,000語) 1991年1月18日

著者確定 // 4月15日

本論文(カメラレディー) // 6月15日

連絡先 Richard W. Lindsay

Argonne National Laboratory,

P.O. Box 2528, Idaho Falls, ID 83403-2528.

For more information call (208) 526-7754, or FAX (208) 526-7623.

本会代表委員は矢川元基氏(東大)です。

“Call for Papers”は在本会事務局。