不適切な条件における熱伝導方程式の数値解*

高橋 亮一^{*1}, 藪下 幸久^{*2}, 村上 高^{*3}Numerical Solution of Heat-Conduction Equation
under Ill-Posed Condition

Ryoichi TAKAHASHI, Yukihisa YABUSHITA and Takashi MURAKAMI

Two-phase flow dynamics plays an important role in understanding the kinetics of a nuclear reactor and boilers. The difficulty has been reported in obtaining the numerical solution of the two-phase flow by the two-fluid model which was described as ill-posed. Few papers have studied the difficulty under the ill-posed condition. The present paper aims at practical discussion of the property of the numerical solution of the well-defined heat-conduction equation under the above condition, comparing these solutions with the exact solution as functions of the round-off error, the mesh size and the difference scheme. The present paper can serve as an alternative in understanding the ill-posedness of the two-fluid model.

Key Words: Numerical Analysis, Finite Difference Method, Heat-Conduction Equation, Ill-Posedness, Two-Fluid Model

1. は じ め に

二相流現象は、水冷却型原子炉、各種のボイラなどの内部で見られ、工学的に重要な物理現象である。この流れは、流動の多様さゆえにその流動を記述するパラメータが非常に多く、統一的に流れの場を規定する方法は提案されていない。

流れを解析するために数学モデルによる定式化が必要である。定式化はさまざまな形で行われてきたが、現在でもよく用いられるものとして、均質流モデル、ドリフトフラックスモデル、二流体モデルなどがある。どのモデルも時間と空間の平均量に対して定義され、質量、運動量、エネルギーに対する保存式から構成される連立微分方程式と二相流は現象的に複雑であるがゆえに、相関式または構成式が加えられて記述される。

実験の観察から得られた二流体モデルは、Hadamard による適切性の条件を満たしていないことが報告⁽¹⁾されている。つまり、二相流における物理

現象を最も精密に記述しようとしたモデルが数学的に不適切であるということになる。原子炉の事故時における過渡状態の二相流の数値計算において、安定な解を得ることが難しい場合が多いことが知られていたが、その原因の一つがこの不適切さにあることが報告⁽²⁾されている。

この不適切な問題に対しては、仮想質量や粘性項などの付加項を加えたりして、基礎方程式の形を変えて不適切性を緩和して数値解をどうにか得ているのが現状である。それにしても変係数の初期値問題、特に非線形方程式の適切さを一般に議論する数学的方法がいまだ不十分で、定係数の議論を局所的に適用している。つまり、ある時刻の従属変数の状態空間の注目点のごく近傍に話を限って、その係数を定数として扱い、Hadamard の定理に従って適切さを調べている。

二相流の数学モデルとして最近頻繁に使用されている二流体モデルは、流量や圧力のある範囲で不適切な問題設定となることが知られており⁽¹⁾、数値解法によって得られたその解に疑問が持たれている。しかし、数学の理論からすれば、不適切な系の解は意味がないはずであるが、現実には差分法による近似解法で得られた解は実際の物理現象をかなりよく模擬しているという矛盾が存在する。

* 原稿受付 平成4年7月23日。

^{*1} 正員、東京工業大学 (〒152 東京都目黒区大岡山 2-12-1)。^{*2} (株)アイ・イー・エー・ジャパン (〒105 東京都港区新橋 6-9-6)。^{*3} 東京ガス(株) (〒105 東京都港区海岸 1-5-20)。

そこで、現象としても平明で、数値解法としてもよくわかっている熱伝導問題⁽³⁾を取りあげ、不適切な条件を設定して数値実験的に解の振舞いを調べる。今まで、不適切な方程式を意識的に作って数値解を求め、その解の挙動を検討した例はあまり見られない。こうすることによって、二相流に対する二流体モデルの不適切性と数値解との関連に別の視点からの解釈を与える可能性がある。これが本論文の動機と目的である。時間と空間について部分的に不適切となるように設定した熱伝導方程式をモデルとして、不適切な条件下における数値解の振舞いに影響を及ぼすファクタについて検討を行う。

2. 数 学 的 準 備

不適切な問題では数値解が不安定になって得られない。実際のところ不適切さが数値解に与える影響はよくわかっていない。そこで簡単なモデルを用いて、不適切な条件での数値解の振舞いを調べよう。

数学モデルは、一次元熱伝導方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq 1, t \geq 0) \quad (1)$$

$$u(0, t) = u(1, t) \quad (2)$$

$$u(x, 0) = \sin \pi x \quad (3)$$

を考える。係数 α が正定数であるときの厳密解は、

$$u(x, t) = e^{-\pi^2 \alpha t} \sin \pi x \quad (4)$$

である。

式(1)に対する Hadamard による適切条件とは、次の方程式から実数 ξ に対する固有値 λ を求めて、

$$-\alpha \xi^2 - \lambda = 0 \\ \therefore \lambda = -\alpha \xi^2 \quad (5)$$

固有値 λ が

$$\operatorname{Re}[\lambda(\xi)] = -\alpha \xi^2 \leq 0 \quad (6)$$

を満たせばすべての実数 ξ に対して Hadamard の条件を満たす⁽⁴⁾ ことである。 $\lambda = -\alpha \xi^2 \leq 0$ を解いて、

$$\alpha \geq 0 \quad (7)$$

となる。つまり、式(7)を満足すれば方程式(1)は適切であるという。

3. 変係数の熱伝導方程式の数値解(1)⁽³⁾

変係数の熱伝導を考え、係数を加工して意識的に方程式(1)を不適切にする。このとき条件式(7)は、係数 α が負の場合に、その解に意味がないことを示しているが、ここでは係数 α が変数で不適切域となる場合を考える。二相流などの数学モデルで扱う方程式は変係数で、それが従属変数の関数となるので似通った意味で興味がある。

まず、 α が独立変数のみの関数として表せる場合について数値実験を試みる。変係数は次の形とする。

$$\alpha = a + b \cdot \sin \pi t \quad (8)$$

この定義により、係数値は独立変数 t のみにより変化する。拡散や熱伝導の場合には、物理的意味から必ず $\alpha > 0$ であるが、式(8)の定義により a と b の選び方で、 α を意識的に負とすることができる。

方程式(1)に式(8)を代入して変数分離法で解くと、次の厳密解が得られる。

$$u(x, t) = e^{-\pi^2 (at + b(1 - \cos \pi t))/\pi^2} \sin \pi x \quad (9)$$

ところが条件(7)から、 α が負の場合には熱伝導方程式は不適切になる。つまり、その場合には解自体に意味がないことになる。この不適切な方程式の解を数値解がどのように近似するのかということに興味を持たれる。

a が部分的に負となる領域を持つように式(8)の a と b を選んで、そのときの厳密解と数値解を比較して、不適切域での数値解の振舞いについて調べる。

式(1)の陽解法の差分式は次のように表せる。

$$u_j^{n+1} = u_j^n + d \cdot (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \\ d = \alpha \Delta t / \Delta x^2 \quad (10)$$

熱伝導方程式(1)の係数(8)を $a=1.0$, $b=-1.20$ として代入し、陽解法、単精度、10 メッシュ、最大の拡散数 $d=0.50$ で計算した典型例の結果を図1に示す。拡散数は $d_{\max} = \alpha_{\max} \cdot \Delta t / \Delta x^2$ であり、陽解法の計算条件では安定性の確保のために、

$$d \leq 0.5 \quad (11)$$

である必要がある。この例では、初期状態では $\alpha \geq 0$ で適切であるが、計算途中の $t=0.315$ から $t=0.685$ で不適切域となる。厳密解 $u_E(x, t)$ と数値解 $u(x_j, t_n)$ の相対誤差 ε

$$\varepsilon = \{ |u_E(x, t) - u(x_j, t_n)| / u_E(x, t) \}$$

は図2に示すように、過渡状態の初期では厳密解と数値解は誤差2%以下でほぼ一致している。 $t=0.6$ 付近で両者の差が大きくなり、 α が負値から正値へ変わると条件が適切になり厳密解と数値解の差が減少する。 $t=0.685$ で誤差が23.5%と最大となるが、やがて誤差は減少し、 $t=0.755$ 以降厳密解と数値解は再び一致している。

図1に倍精度の結果を+印で示す。単精度では不適切さに起因すると思われる厳密解と数値解の差が見られたが、倍精度の計算では両者はほぼ一致している。図2に示すように不適切さによる誤差が増大していないことがわかる。つまり、不適切さに起因する数値解の挙動は丸め誤差に非常に敏感である。したがって、以降の計算はすべて倍精度で行う。

図2で示したように、方程式が不適切になってもすぐに数値解と厳密解の差が大きくなならない。また、不適切域から適切域に戻ると、不適切域で生じた誤差は縮小し、数値解と解析解の一致がよくなる傾向がある。この傾向を数値実験的に確認するために、係数の条件、メッシュ数、解法などに着目し、それが数値解の振舞いに、どのように影響を与えているかを調べた。

(1) 変係数が負になる度合いの大きさ 変係数(8)の a, b を次の3とおりに変え、 x 方向10メッシュで倍精度の陽解法(10)を用いて計算した。

- (i) $\alpha \geq 0 (t \geq 0)$
- (ii) $\alpha \geq 0 (t \leq T_1, T_2 \leq t)$
 $\alpha < 0 (T_1 < t < T_2)$
- (iii) $\alpha < 0 (t \leq T_1, T_2 \leq t)$
 $\alpha \geq 0 (T_1 < t < T_2)$

ここに、 T_1, T_2 は a, b の指定によっておのずと定まる定数である。(ii)と(iii)は、 $\alpha < 0$ の領域で数値解に影響が生じることが予測できる。

図1 陽解法による数値解の比較 ($a=1.0, b=-1.2$)

計算は次のとおりである。つまり、(i)の場合には a と b の選び方にかかわらず、不適切とはならないため、数値解と厳密解が一致した。しかし、 α が負となる不適切域を含む(ii)と(iii)の場合には明らかな相違が見られた。まず、(ii)の例として図3に $a=1.0, b=-1.4$ とした場合の計算を示す。図1ではほぼ厳密解と一致していた倍精度の計算も図3では明らかな相違が見られる。つまり、係数 α の負の割合、言い替えると不適切さの度合いが増加すると厳密解と数値解の差が大きくなる。

誤差成長の過程を空間的に図4に示す。空間の各点で振動が生じないで、あるメッシュ点では単調増加、その隣の点では単調減少というように、あたかも静的安定性⁽⁵⁾に類似の挙動を示す。

次に(iii)の例として図5に $a=-0.5, b=0.7$ とした場合の計算を示す。初期状態から不適切な状態設定を行っているが、初期には厳密解と数値解の差はほとんどなく、 $t=0.1$ ごろから誤差が急増している。 α が正、すなわち適切な条件になると(ii)の場合と同様に誤差は減少し、数値解は厳密解と一致する。

図3 陽解法による数値解の比較 ($a=1.0, b=-1.4$)

図2 単精度と倍精度の誤差比較

図4 不適切域での u の空間分布 ($a=1.0, b=-1.4$)

以上をまとめると、不適切域では誤差が生じやすく、かつ不適切の度合いが大きいほど誤差発生が生じやすいことがわかる。また、静的不安定性では逸走して数値的破局に至るが、不適切域から適切域に戻ると、誤差が小さくなるのが特徴である。

(2) メッシュとの関係(1) 一般に、基礎方程式とその差分方程式について論じられていることは、差分方程式のメッシュサイズを細かくすると、差分方程式はよりその元の基礎方程式に近づく。そうならば基礎方程式が不適切な場合には、メッシュサイズを小さくしたほうが、その特徴を顕著に示すことになる。

ここでは、空間メッシュサイズを変えて、不適切さの数値解への影響を検討した。式(8)の a を 1.0 に固定して、 b を変えることにより、不適切さの度合いを変えて 5 分割、10 分割、20 分割の場合について数値実験を行った。数値解と解析解が 10% 以上ずれる場合の b の値を表 1 に示す。

ここでは、メッシュ分割数に応じて数値計算としての計算条件が変わらないように、つまり拡散数 d が変わらないようにして計算した。表 1 から明らかなように、メッシュサイズを細かくすることにより、その差分解は元の方程式の不適切さをより顕著に示した。

(3) メッシュとの関係(2) ここでは差分方程式の時間刻み幅が不適切域の解の挙動に与える影響を検討するために、 Δt をパラメータとして計算した。

一般に、微分方程式を差分化して得られる差分式は元の方程式に存在していなかった項が付加される。ここで、微分方程式(1)を差分化して得られる差分方程式(10)をテイラー展開を用いて逆変換を行うと、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \Delta t / 2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^2} \dots\dots\dots (12)$$

となる。差分という手続きからの追加項は係数が

$-\Delta t / 2$ で時間についての二次微分項である。これは、 $\partial^2 u / \partial t^2 > 0$ であるからヒートシンクとして作用するため、 a が負となる不適切な条件下においても、ある程度不適切さによる外乱を緩和する働きがある。また、この緩和項は Δt に比例しているため、 Δt を小さくすると、図 6 のように不適切さを緩和する作用が小さくなるがわかる。

多くの計算結果において、誤差が急増する場所は、 $da/dt=0$ の付近から a が再び正に移行する間である。この点は差分化によって付加された項が正になる、つまりヒートソースとなる点に一致している。 a が正、すなわち適切な条件になると誤差は減少し、数値解は再び厳密解と一致している。

(4) 解法との関係 これまでは、すべて陽解法の計算について述べてきた。方程式(1)に対する陽解法の安定条件は式(11)で与えられる。それに対して陰解法では各ステップごとに連立一次方程式を解く必要があるが、時間メッシュを比較的自由に選べ、その解の安定が保証される。

ここでは、連立一次方程式の解法に直接法としての Gauss 消去法と反復法としての SOR 法を選び、解法が不適切な条件下における解に与える影響を検討した。陰解法は

$$d \cdot u_j^{n+1} - (1+2d)u_j^n + d \cdot u_{j+1}^n = -u_j^n \dots\dots\dots (13)$$

である。図 7 に直接法と反復法を用いた結果を示す。解法による結果の相違はあまりない。いずれにしても、

表 1 メッシュとの関係

	5 nodes	10 nodes	20 nodes
b value	-1.6	-1.37	-1.12

図 5 陽解法による数値解の比較 ($a=-0.5, b=0.7$)

図 6 時間刻み幅を小さくしたケース

図1に示した陽解法のほうが精度がよく、陰解法は計算回数が多くなる分だけ不適切さに鋭敏となることがわかる。図8に Δt を1/25にした結果を示す。 Δt を細かくすると、精度は向上しているが、同じ条件の図1と比較しても明かなように、陽解法よりも不適切さに対して鋭敏になることがわかる。陰解法では、式(12)と同様に差分による追加項を調べると、

$$\partial u / \partial t = \alpha \partial^2 u / \partial x^2 + \Delta t / 2 \partial^2 u / \partial t^2 \quad (14)$$

となって、追加項はヒートソース項として作用することになる。陽解法では、 Δt を小さくするほうが不適切さの影響が出やすかったのに対して、陰解法では逆に Δt を小さくするほうが不適切さの影響を抑える効果があることが推測される。

4. 変係数の熱伝導方程式の数値解(2)

熱伝導方程式の係数を、

(a) 陰解法による計算(直接法)

(b) 陰解法による計算(反復法)

図7 陰解法による計算

$$\alpha = a + b \cdot u \cdot \sin \pi t \quad (15)$$

のように従属変数の関数とする。

$$\partial u / \partial t = \partial / \partial x (\alpha \partial u / \partial x)$$

$$(0 \leq x \leq 1, t \geq 0) \quad (16)$$

$$u(0, t) = u(1, t) \quad (17)$$

$$u(x, 0) = \sin \pi x \quad (18)$$

この方程式は非線形であるため、厳密解は求められない。また、式(13)に対応する差分方程式を、

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \Delta t / \Delta x^2 \{ \alpha_{j+1/2} u_{j+1}^n - (\alpha_{j+1/2} + \alpha_{j-1/2}) u_j^n + \alpha_{j-1/2} u_{j-1}^n \}$$

$$\alpha_{j+1/2} = \{ \alpha(u_{j+1}^n) + \alpha(u_j^n) \} / 2$$

$$\alpha_{j-1/2} = \{ \alpha(u_{j-1}^n) + \alpha(u_j^n) \} / 2$$

.....(19)

とする。非線形方程式の解は線形方程式の解に比べて、変化が激しく、特に不適切の場合には解の連続性が保証されていないことから、安定した解を得ることが困難とされる。非線形方程式の解法には3章の経験を踏まえて、倍精度の陽解法で求める。

当然のこととして、 $a > 0$ の条件下ではすべての場合について安定した解が得られた。しかし、 $a < 0$ を含む条件下では、式(15)で定義される α の値が u の値の分布を助長し、直ちに数値的破局となった。典型的な例として、 $a = 0.5, b = -1.44$ として行った計算を図9に示す。計算の初期にはすべてのセルで $\alpha > 0$ であり、 u の分布は単調に平坦化に向かうが、 $t = 0.3$ 以降 $\alpha < 0$ となるため、空間セルの一部分が不適切となり、頂部がより盛り上がる。このため、 α の負の値はより大きな負となり、助長されていく。この過渡期の空間分布の挙動を図10に示す。3章で述べた場合と比べて特徴的に異なるのは、式(14)で定義される α の値はひとたび負になると、再び正に復帰することはなく、 u の値は最終的にオーバーフローに至ることである。

図8 陰解法による計算(細かい Δt)

図 9 非線形の α の計算 (経時変化) 図 10 非線形の α の計算 (空間分布)

5. ま と め

熱伝導率 $\alpha < 0$ とした熱伝導は物理として無意味である。その数学モデルは不適切となる。これが Hadamard の定理の意味である。このことを意識して数値実験を行ってその解の振舞いを調べた。その数値実験で以下のことがわかった。

(1) 不適切域での微分方程式の解を数値的に求めると、解は不適切域においても、不安定振動を生じるものではなく、静的不安定性のように単調減少もしくは単調増加といった連続的な挙動を示す。

(2) 不適切域から適切域へ状態が移行すると、不適切さにより生じていた誤差が減少する。これは静的不安定性と大きく異なる特徴である。

(3) 不適切域の数値解は丸め誤差や、時間刻み幅、解法に対して鋭敏であり、

(i) 倍精度のほうが単精度より不適切さの影響を受けにくい、

(ii) 陽解法では、時間刻み幅を小さくすると、差分化により追加されたヒートシンク項が減少して不適切さの影響を受けやすい、

(iii) 陰解法では、時間刻み幅を小さくすると、差分化により追加されたヒートソース項が減少して不適切さの影響を抑える、

傾向が見られた。

二相流に対する二流体モデルは不適切であるが、数値解は求まり、しかも物理現象を比較的良好に模擬しているという事実は、主として双曲型方程式が差分化により放物性に性質が変わっていると説明されている。しかし、本論文の計算例に見られるように、不適切でも数値解が求まる場合があることがわかった。したがって、実際の二相流の不適切問題においても、幸運にも数値解が求まっているものの、この論文の場合のように、計算の途中で数値解が空間的に、時間的にも部分的な不適切さのためにひずめられることが生じているかもしれない。不適切な条件下での解を吟味する手段を検討する必要があるものと考えられる。

本論文について、日本アイ・ビー・エム(株)棚町芳弘氏に多くの有益な議論をいただいた。記して謝意を表す。

文 献

- (1) Robert, W. Lyczkowski., ほか 3 名, Characteristics and Stability Analyses of Transient One-Dimensional Two-Phase Flow Equations and Their Finite Difference Approximations, *Nucl. Sci. Eng.*, **66**(1978), 378-396.
- (2) 秋元・平野・成合, 過渡二相流数値解析の現状, 原子力学会誌, **29-5**(1987), 385-391.
- (3) Richtmyer, R. D. and Morton, K. W., *Difference Methods for Initial-Value Problems*, (1967), 185-201, Interscience Publishers.
- (4) 高橋・棚町, 差分法, (1991), 51-53, 培風館.
- (5) Roache, P. J. (高橋・ほか訳), コンピュータによる流体力学(上),(下), (1976(原著)), (1978(訳著)), 構造計画研究所.