50
数値データのＴＶ－安定性検証方式の概念検討

高橋匡康* 、中村絹代*

Conceptional Study on the Inspection of TV-Stability of Numerical Data

by
Tadayasu TAKAHASHI* , Kinuyo NAKAMURA *

ABSTRACT

In this article we propose a method on the inspection of TV(Total Variation)-stability of numerical data(solutions of difference equations). The key information in our method are critical points and extremums of physical quantities , and those information are used to get mathematical rigidity required for computational fluid dynamics. In case of the one-dimensional Euler equations , admissibility criteria for difference schemes are given. It is remarked that those criteria are deduced from the mathematical structure of Euler equations.

１．はじめに

本報告においては、計算対象物理量の臨界点と極値の点検による計算結果の検証法を提案する。

臨界点と極値が有界変動関数の最小かつ核的情報であることに注意すると、本検証法により科学計算における以下の目標の達成が可能となる。

(1)数値解が微分方程式の解の近似であることを確認すること。

(2)差分スキームの高精度化に必要な具体的な情報を獲得すること。

(3)数学的に保証される範囲内でのデータ補正の明確化を図ること。

さて、計算機の性能の向上並びに数値解法の進歩に伴い、ＣＦＤ等科学計算によって算出される数値データに対しては、以下の条件が一層厳しく要求されることになる。

（i）数学的厳密性を確保していること。

（ii）物理現象を高精度で模擬していること。

（iii）工学的データとして高品質であること。

これらの条件は必ずしも同等ではなく論理的には次のような包含関係を有している。

高品質性 ⊂ 高精度性 ⊂ 厳密性

この包含関係からも数学的厳密性を確保することが先決であることは明白であろう。

数学的詳細については省略するが、オイラー方程式に代表される双曲型保存系の解の存在と一意性に関する研究は近年急速に進展し、解の一意性は解決され、解の存在の解決も時間の問題となっている。本報告で述べられる空間１次元オイラー方程式に対する検証法はこのような数学的背景に基づくものであることを付記する。

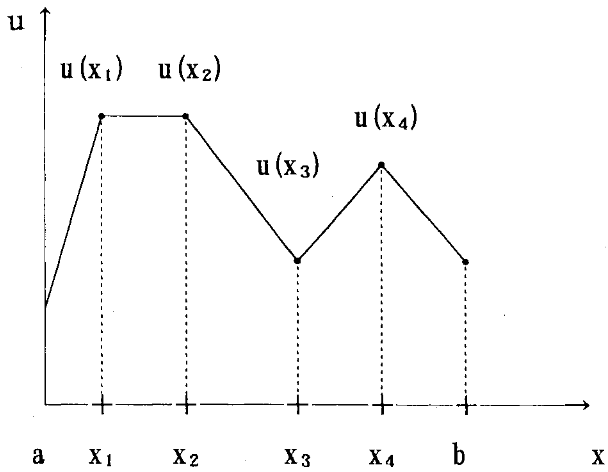
２．臨界点と極値

少なくとも圧縮性流体の計算においては、（局所的）有界変動関数の枠組で議論すれば十分である。有界変動関数の枠組に限定すると、上で述べ

＊航空宇宙技術研究所計算科学研究部

た厳密性の確保の問題は、すべての計算過程における全変動量安定性（TV-stability）の確保の問題に帰着される。

さて、u(x)を区間[a,b] 上で定義された以下のような関数とする。



この場合、 x_i が関数u(x)の"臨界点(critical point)" と呼ばれ、 $u(x_i)$ が"極値(extremum)" と呼ばれる。すなわち、極値は局所的最大値あるいは局所的最小値を意味し、臨界点は極値を与える空間点を意味する。

u(x)の[a,b] における全変動量(Total Variation) は、臨界点と極値により次式で定義される。

$$TV(u;[a,b]) = \sum_{i=0}^{4} | u(x_{i+1}) - u(x_i) |$$

$$(x_0=a, x_5=b)$$

この定義より、臨界点の個数と極値の大きさが全変動量を規定していることがわかる。したがって、臨界点と極値を計算機上で追跡することにより全変動量の変動を解析することが可能となる。ここで、臨界点と極値に着目したことが、本報告の1つのキーポイントであることを述べておく。

3．オイラー方程式における検証法

圧縮性流体を対象とする現実の計算は、一般曲線座標系のもとで実行される。このような状況においても空間1次元オイラー方程式に対する差分スキームが基本となる。実際、一般曲線座標系の問題への拡張が可能であるため、以下では空間1次元オイラー方程式における検証法を述べることとする。また、本検証法は、非粘性流れにおいてはオイラー方程式、粘性流れにおいてはナビエ・ストークス方程式の対流項を念頭としていることを付記しておく。

さて、時間発展的に実行される科学計算においては、計算対象物理量の臨界点は発生・移動・消滅し、極値の大きさも変化する。非線形波動の観点では、臨界点や極値の変化は離散的な波の干渉に起因するものと解釈される。例えば、オイラー方程式によって支配される波（流れ）においては、臨界点の発生は波の干渉の始まりを意味し、臨界点の消滅は波の干渉の終わりを意味する。繰り返し的ではあるが、このことからも臨界点と極値の重要性が認識できるものと思われる。

3．1．空間1次元オイラー方程式

空間1次元オイラー方程式をベクトル形で記述すると以下となる。

$$U_t + F(U)_x = 0, \quad t > 0, \quad \infty < x < \infty.$$

ここで、

$$U = (\rho, m, E)^t$$

$$F(U) = (m, m^2/\rho + P, m(E+P)/\rho)^t$$

ρ：密度

m：運動量

E：全エネルギー

u：速度

P：圧力

$$P = (\gamma - 1)(E - m^2/2\rho)$$

流束Fのヤコビアン行列∇Fの3個の固有値および5個のリーマン不変量のうち3個を以下に列挙する。

固有値：

λ_1=u-c, λ_2=u, λ_3=u+c, ; $c=\sqrt{\gamma P/\rho}$

リーマン不変量：

u, P, P/ρ^{γ}（エントロピー）

固有値は波の分類に使用され、リーマン不変量は波を識別するために使用される。特に速度uと圧力Pは、非線形波の干渉において数学的に保証されない臨界点の判定にも使用され、本検証法において本質的な役割を演じる物理量であることを強調しておく。

3．2．差分スキームに対する数学的要件

本報告では、保存型差分スキームを対象として議論を進める；

$$U_i^{n+1}=U_i^n-\frac{\Delta t}{\Delta x}[F_{i+1/2}^n-F_{i-1/2}^n]$$

ここで、Δx＞0は格子幅、Δt＞0は時間刻み幅であり、Δt／Δxは一定とする。また、$F_{i+1/2}^n$ は数値流束と呼ばれるものである。

さて、差分スキームに対しては以下の数学的要件が要求される。

(R1)　全変動量が格子幅に関して一様に有限であること。

(R2)　数学的エントロピー条件を満足すること。

要件(R1)は、前に述べた全変動量安定性（TV-stability）を要求する条件である。また、オイラー方程式の場合には、要件(R2)は速度が増加する空間領域において不連続波が発生しないことと同等となる。

差分法等によるオイラー方程式の解の存在は、現時点では未解決である。このような状況においては、上記要件、特に(R1)を工学的な観点で調べることが必要であり重要となる。

3．3．波の分類と識別

オイラー方程式によって支配される波は、定性的には次のように分類される（表1）。

表1．波の分類

	固有値	不連続波	連続波
線形波	u	接触不連続波	接触連続波
非線形波	u－c	衝撃波	膨張波 圧縮波
	u＋c	衝撃波	膨張波 圧縮波

また、連続波は、リーマン不変量の単調性により次のように識別することができる（表2）。

表2．リーマン不変量による連続波の識別

	単調性
接触連続波	P/ρ^{γ} (単調性保存)
（u－c）－膨張波	u：増加　，P：減少
（u＋c）－膨張波	u：増加　，P：増加
（u－c）－圧縮波	u：減少　，P：増加
（u＋c）－圧縮波	u：減少　，P：減少

ここで、P/ρ^{γ} の臨界点は固有値uの変化に応じて移動するが、発生あるいは消滅することはないことを注意する。また、連続波には線形波と2種類の非線形波が混在しており、（u－c）－膨張波等の表現は便宜的なものであることに注意する。

4．全変動量安定性の検証

全変動量安定性の検証は、ベクトル量

$$\{U_i^n\} = \{(\rho_i^n, m_i^n, E_i^n)^t\}$$

$$(n \geqq 1,\ 1 \leqq i \leqq N)$$

の各成分において発生あるいは消滅する臨界点を対象とする。また、検証の目的を臨界点と極値の言葉で述べ直すと以下となる。

(1)数学的に保証されない臨界点の判定と解消法

(2)極値の大きさが不十分な場合の改良法

(3)差分スキームの再構築方針の具体化

参考として、波の干渉と臨界点の挙動の関係を述べておく（表３）。

表３．波の干渉と臨界点の挙動

	臨界点の挙動
干渉開始	発生
干渉中	移動
干渉終了	消滅

4．1．非許容臨界点の判定法と解消法

数値ノイズおよび臨界点の許容性（admissibility）・非許容性(inadmissibility) に関する定義を以下に与える。

定義１(Numerical Noise).

臨界点が次の性質を持つとき、対応する物理量分布を数値ノイズと呼ぶ；

(ｉ) 臨界点が隣接していること。

(ii) 次の計算においても対応する臨界点が隣接していること。

数値ノイズの識別は、乱流等の複雑な流れの解明においては特に重要となる。なお、性質（ii）は膨張も圧縮も起きないことを意味している。

定義２(Admissibility of Critical Points).

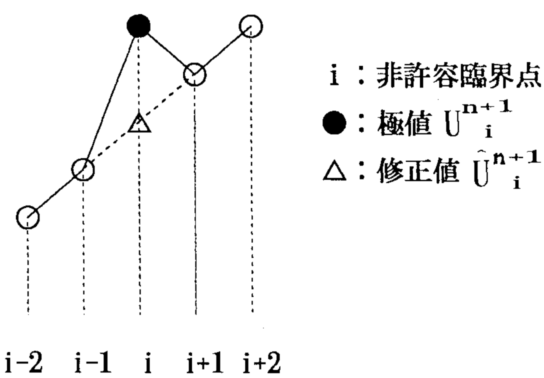
$\{U_i^n\}$ の臨界点が、速度、圧力のいずれかの単調領域においてのみ発生あるいは消滅するとき、許容臨界点と呼ぶ。逆に、$\{U_i^n\}$ の発生あるいは消滅した臨界点が速度と圧力の両方の臨界点となるとき、非許容臨界点と呼ぶ。

詳細については省略するが、臨界点の許容性・非許容性は、いわゆるリーマン問題の解の性質から導出されることを注意する。

さて、数値ノイズあるいは臨界点が非許容であると判定された場合には、補間等により極値を修正することが必要となる。例として、線形補間による修正を以下に示す。

$$U_i^{n+1} \rightarrow \hat{U}_i^{n+1} = (1-\theta)\,U_{i-1}^{n+1} + \theta\,U_{i+1}^{n+1}$$

$$(0 < \theta < 1)$$

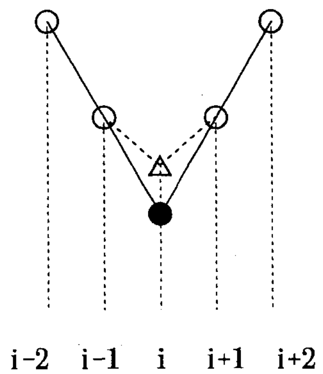


4．2．極値の精度不十分性の改良法

強い膨張波の干渉においては、密度が負の値で計算される可能性が高くなる。密度が負になるということは、極値が下向きに過大に計算されることを意味している。いずれにしても、極値が過大あるいは過少に計算された場合には、内挿補間あるいは外挿補間により極値を修正することが必要となる。例として、内挿補間による修正を以下に示す。

内挿補間

$$U^{n+1}_{i} \xrightarrow{\qquad} \hat{U}^{n+1}_{i}$$



i：対象臨界点
●：過大極値 U^{n+1}_{i}
△：修正値 $\hat{U}^{n+1}_{i}$

4．3．差分スキームの再構築手順

臨界点が非許容あるいは極値が不十分であると判定された場合には、計算で得られている数値に基づいて差分スキーム、実際的には数値流束の見直しを行うことが必要となる。

具体的な手順を以下に示す。

① 算出されたデータ U^{n+1}_{i} に基づいて望ましい極値 $\hat{U}^{n+1}_{i}$ を予測する。

② 数値流束に対する修正量 $\delta^{n}_{i-1/2}$, $\delta^{n}_{i+1/2}$ を算定する。

$$\hat{U}^{n+1}_{i}=U^{n}_{i} - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left[\left(F^{n}_{i+1/2}+\delta^{n}_{i+1/2}\right) - \left(F^{n}_{i-1/2}+\delta^{n}_{i-1/2}\right) \right]$$

③ 流束制限子等を調整し、対応する数値流束の定式化を行う：

$$\hat{F}^{n}_{i+1/2}= F^{n}_{i+1/2} + \delta^{n}_{i+1/2}$$

④ 再計算を実行し、$\hat{U}^{n+1}_{i}$ が得られることを確認する。

5．おわりに

本報告における結果および今後の課題等を以下にまとめる。

(a) 臨界点と極値が有界変動関数の最小情報であることに着目し、差分スキームの全変動量安定性が連続波に対する次の条件を調べることに帰着できることを示した：

(i) 数値ノイズが発生しないこと。

(ii) エントロピー P/ρ^{γ} の単調性が保存されること。

(iii) 計算対象物理量の臨界点は、速度、圧力のいずれかの単調領域においてのみ発生あるいは消滅すること。

なお、これらの条件の一義的決定は、オイラー方程式の解の一意性が解決されたことに依るものである。

(b) 数値ノイズを含む非許容臨界点が客観的に定義されたため、臨界点と極値を追跡・監視することにより、非許容臨界点に関する「発生時と発生位置」および「起因する干渉の種類」等の情報を獲得することが可能となった。

(c) 差分スキームを対象とする"キャリブレーション"を実行するための方法論と理論的根拠が与えられた。

(d) 臨界点と極値による点検法はＣＦＤ技術等の高精度化・高信頼化への新しいアプローチ法として期待できるものであり、臨界点と極値の解析を新しい機能とする可視化システムの充実が不可欠である。また、多次元問題における臨界点と極値の表示法等の検討が重要である。

最後に、臨界点と極値の視点で分析した圧縮性流体計算における堅牢性障害と分解能障害に関する表と二、三の注意を以下に示す（表４）。

表４． 圧縮性流体計算における堅牢性障害と分解能障害

Ⅰ．計算スキーム（格子＆差分スキーム）における問題点

	流れの種類	障害の種類		障害の主原因	障害の解消法
堅牢性	強い膨張波	正値性（$\rho > 0$）	極値の過大性	双曲性の退化	流束の修正
	境界層等の亜音速流れ	非圧縮性（$\rho =$ 一定）	臨界点の非許容性	非圧縮性への退化	流束の修正
分解能	斜め衝撃波等	過大平滑化	臨界点の位置	多次元性	風上性の強化
	よどみ点等	カーバンクル現象	臨界点の非許容性	数値的特異性	風上性の強化
	渦流れ	過大平滑化	極値の過小性	多次元性	風上性の強化
	乱流等の最小渦	過大平滑化	極値の過小性	平均化の均一性	流束の修正

Ⅱ．圧縮性ＮＳの計算解法における問題点

- 対流項の線形化が１次精度差分スキームに基づく場合、数値ノイズが発生する可能性が大きいので注意が必要である。
- 運動量方程式の粘性項は

  ”速度では線形　”　だが　”運動量では非線形　”

  となる。従って、計算対象変数を運動量とする場合には粘性項の取り扱いに注意が必要である。