14

流体方程式の離散化モデルの適合性·非適合性と CFD 信頼性検証

相曽 秀昭 (AISO, Hideaki)　高橋 匡康 (TAKAHASHI, Tadayasu) *

We are concerned with the reliability of numerical simulation technology. Numerical simulation consists of several procedures between the phenomenon that is analyzed and the result that is understood by people. In some sense there are several convert of problems between two different categories, *i.e.* the problem is converted from phenomenon in physics to numerical model that is usually continuous model, then to discrete model, to program, to numerical result, and finally to the result like visualized picture by which people understands the phenomenon.

Mathematical analysis should be very useful to analyze the relation between the continuous and discrete model, while the problem still includes some difficulties. Here, we understand this problem from the concept of consistensy and discuss in which direction our research should progress.

数値シミュレーションの信頼性について考察する。数値シミュレーションと一言でいってもその中に多くの要素が含まれており、信頼性の議論は多くの異なる分野の知識が必要であることはいうまでもない。

しかし、問題を分析的に見れば、数値シミュレーションでは考察対象となる現象から結果に至るまでに、問題の変換が何回か行われていることに注目し得る。数学的な視点からは、特に連続的な問題 (連続モデル) から離散的な問題 (離散モデル) への問題の変換が妥当に行われているか否かについて考察を行うことで、数値シミュレーションの信頼性をより高めることが可能である。

本稿では、例も交えつつ適合性という概念を利用して連続モデルと離散モデルの関係を把握し、更に、今後どの様な方向性の数学的な研究が数値シミュレーションの信頼性の確立のために必要であるかを議論したい。

1. 数値シミュレーションをとらえる分析的な視点

数値シミュレーションを自然現象の解明 (近年は社会現象の解明にも利用されるが、基本的な思考の枠組みは同様である) に利用する場合、それは次のような手順で実行される。

(1) 現象の機構の数式による記述。(現象のモデル化)

自然現象の場合、この数式は偏微分方程式である事が多い。我々の興味の対象である CFD もその例に漏れず Euler 方程式、Navier-Stokes 方程式等の数式を用いている。モデル化の状況に応じ、乱流モデルの様な付加的なモデルもこの中に含まれていると解釈できる。

(2) 数値計算用のモデルの構成。(離散化)

(1) の偏微分方程式をそのまま数値計算は出来ない。

偏微分方程式では独立変数 (流体方程式の場合は空間座標を表す x, y, z や時刻を表す t) は連続変数である。現在の計算機では数値を連続

* 航空宇宙技術研究所 CFD 技術開発センター, CFD Research Center, National Aerospace Laboratory JAPAN, (E-mail: aiso@nal.go.jp, takahasi@nal.go.jp)

的に扱うことは不可能であり、またある従属変数 (例えば u) について連続な独立変数 x, y, z, t の全てに対する値 $u(x, y, z, t)$ を計算機の中で扱うことも不可能である。また、極限の概念も扱えず、その帰結として微分操作もできない。

以上の理由から、離散的な有限個 (理論的に考える場合には可算個の場合もあるが) の値をとる独立変数とそれらに対する従属変数による数式を構成する。差分方程式近似 (差分近似、又は計算の為の方法として意識される場合、差分スキームとも呼ばれる) や有限体積近似·有限要素近似と呼ばれるものがこれである。

(注) 広い意味では、

- 現象のモデル化で得られた (1) のモデル、
- そのモデルの離散化で得られた (2) のモデル、

のどちらも数理モデルと呼び得るものであり、概念上それらを区別するために、現象のモデル化で得られた (1) の偏微分方程式等を**連続モデル**と呼び、その連続モデルの離散化で得られた (2) のモデルを**離散モデル**と呼ぶことにする。

(3) 計算機による (2) で得られたモデルに基づく計算の実行。

この過程は、プログラムのコーディング技法の部分と、桁落ち誤差が不可避である計算機による計算の部分に分けて考えることも可能である。

(4) 数値計算結果の理解の為の情報の加工 (処理)、例えば可視化等。

数値計算黎明期には出力された計算結果の数値を直接に見たり実験と比較する事で数値計算の意味するところを理解し得たが、現在の大規模数値計算においては何らかの加工 (可視化等) を数値計算結果に施さねばならないことが殆どである。

以上を簡単な図式にすれば、

現象
⇓ **数理モデル化**
連続モデル
⇓ **離散化**
離散モデル
⇓ **計算実行**
(生の) 数値計算結果
⇓ **後処理**
(現象理解の為の) 結果

のようになる。信頼性の確保の為には、上の過程の全てにおいて十分な信頼性を確保することが必要である。しかし、工学における現実的な問題に数値計算の手法を適用する場合、上の図に示された全ての過程においてその手法の妥当性や信頼性を完全に担保することは困難である場合が多い。

そのような問題に於いては、数値計算以外の手法 (実験、理論的解析) で得られた結果と数値計算で得られた結果を比較することで信頼性の確保を図る必要性も生じる。

これらの状況から、数値計算という研究開発手法の信頼性確保には、数値計算の各段階の信頼性確保の為の研究という分析的な視点と他の手法との比較によって数値計算を比較し信頼性の実情を考察するという包括的な視点の両方が必要となることが理解される。当然ながら、包括的な視点によって信頼性上の問題点が明らかになった場合にはそれが数値計算のどの過程に起因するものかを考察し問題点の改善が必要とされる訳で、これらの 2 つの視点からの考察は常に有機的関連を保っていなければならない。

本稿では、分析的な視点に立ち、数学的な手法を数値計算の信頼性確保に利用するにはどのような形で問題を把握すべきかについて論じたい。

尚、包括的な視点からの信頼性の検討については、一般的な議論は発散しがちで困難である。しかし、航空宇宙技術研究所においては次世代超音速機プロジェクトに関連し、その実験機形状の空力解析を設計段階から数値計算と実験の 2 つの手法で行い、現在それらの詳細な比較と発見された問題点の検討の為の再実験や再計算を行っている。この試みについては [4] を参照されたい。

2. 連続モデルと離散モデルの間

前節の図の中に示した各過程は数値計算を構成する要素として相互に関連してはいるが、個別にきちんとした考察がなされなければならない。

よく起こりがちな誤りとして次のようなものが

あるが、信頼性を追及する立場からは厳に排除されるべきである。

(1) ある現象において、おおよそ定常的ではあるが、微小な時間的振動現象が起こることが実験等により知られている。

(2) この現象を数値計算したいが、定常的な挙動にしか興味がないので微小な現象を起こすメカニズムについては考慮せずに数理モデル (連続モデル) の偏微分方程式を構成した。

(3) この数理モデルを妥当と思われる方法で離散化しその離散モデルを元に数値計算を行ったところ数値計算には微小な時間的振動が見受けられた。

(4) 微小振動は元々の現象において観測されることなので、数値計算においてそのような振動が生じることも妥当であるとして結論した。

この場合、数理モデルの中に微小振動現象を記述する機構を記述しなかったにもかかわらず、計算結果に振動が現れた事象 (計算における不都合現象かもしれない) を「元の現象にも似た様なことがあるから良いであろう」といわゆる「結果オーライ」的な思考をしてしまっていることに問題がある。万が一、微小振動現象を考慮せずに構成した連続モデルの偏微分方程式自体の解がそのような振動現象を有しない場合には、その「結果オーライ」は、実はある誤りとそれを打ち消すもう一つの誤りが起こったことによる幸運のもたらしたものでしかなく、その2つの誤りが相互に誤差を打ち消し合うことについて妥当な説明が出来ない限り (この場合、結果的には連続モデルについての考察が不足していたこととなる)、その数値計算が正しいものであるということは出来ない。

数値計算の目的は、殆どの場合、現象の理解をすることであり、また、その為により良い数値計算結果を得る事にある。この目的意識自体は全く妥当なものであり何ら否定されるべきものではないが、考察対象の現象と数値計算結果に目を奪われてしまい、その間にいくつかのモデル化が入って問題が変換されている事実をつい忘れがちな事に注意する必要がある。数値計算を行うために現象を数式化する以上「数理モデル」の存在は意識しつつも、その中では連続モデルと離散モデルの2段階を経ている事について、時として認識が不足しがちであることに注意しなければならない。

勿論、考察の対象である現象の数理モデルとして十分妥当な連続モデルを構成する数理モデル化の重要性は言うまでもないが、その連続モデルから離散モデルを得る離散化についてもその重要さを認識する必要がある。ちなみに数理モデル化においては数値計算による考察の対象に関する知識と数理モデルである偏微分方程式の両方に関する知識 (例えば流体力学と数学) が必要であるが、離散化の過程の妥当性の考察は連続モデル·離散モデル共に数式の性質の考察であり、いわゆる数学の範疇に属する。

実際、連続モデルから離散モデルを構成する過程については、次のような注意が必要である。

(1) 離散化を細かくする極限に於いて離散モデルの数式が形式的に連続モデルの数式に収束すれば良い訳ではない。

結果的に正しいこともあるが、離散モデルで得られた近似解が連続モデルの解 (厳密解) に収束する事は離散モデルの式が連続モデルの式に収束する事とは別問題であり (式としての収束が解の収束の必要条件ではあるが)、他に安定性、近似解の族のコンパクト性といった考察が必要である。

(2) 収束以外にも問題も考察する必要がある。

離散化の方法論の妥当性の考察の中で近似解の厳密解への収束は重要であり、証明されないまでも (証明が困難なことも多い) 収束を信ずるに足る状況 (多くの数値実験からの帰結など) は必要である。しかし、現実の計算では十分に細かい離散化が不可能な場合があり、この場合、連続モデルの解と離散化モデルの解の挙動の間にどの程度の差が存在するのかについて考察する必要性が生じる。誤差解析も広い意味ではこのような問題意識から来ているが、誤差のような「量的」な差ではなく「質的」な差が問題となる場合も多い。連続モデルと離散モデルの差異が数値計算による考察の対象の性質 (安定性等) に関わっている場合には特に注意が必要である。

3.　連続モデルと離散モデルの適合性

前節で述べたように、連続モデルと離散モデルの間の関係を考察するのに重要なことは、数値計算により考察する性質について連続と離散の2つ

のモデルが同様の性質を有している (別の言い方では、離散モデルが連続モデルから当該の性質を継受している) か否かである。また、離散モデルが連続モデルに由来しない性質を有している場合に、その性質を連続モデルの性質と混同しない為の考察も重要である。

このように、連続モデルのある性質が離散モデルに継受されているか否か、もしくは、離散モデルのある性質が連続モデルに由来するか否かを問題にする場合、一般的に**適合性**という概念を用いる。適合性というのは広く用いられる概念であり、「××の性質に関する連続モデルと離散モデルの適合性」というような言い方をする。

離散モデルから得られる近似解の連続モデルの厳密解に収束も適合性の一種であるが、適合性という語を用いる場合には単に収束では議論できない性質について議論する事が多い。

適合性の例としては

- 衝撃波の捕獲の為の単調性や単調性保存性、又は全変動減少性の様な性質
- より高精度の計算を行う為の打切り誤差の高精度性

のようなものも適合性の範疇に含まれ、また、もう少し詳細なものとしては、

- 音速点付近での数値挙動改善の為の Oleĭnik の E 条件への適合性 [1]

などがある。

4. カーバンクル適合性に関する適合性の議論

ここでは、従来数値計算上の問題としてよく知られた問題が離散モデルの連続モデルに対する適合性の観点からより明確に理解できる一例を示す。

カーバンクル (Carbuncle) 現象は、1994 年に Quirk[2] により発見された。[2] では、超音速流中の鈍頭物体の前に生じる衝撃波の数値計算において衝撃波の最先端に振動現象が起こる事が報告されている。その後、平面状衝撃波の数値計算において時間発展に伴い衝撃波面に沿って振動を生じ、場合によってはその振動は急速な発達を遂げて数値計算の破綻をもたらす例も報告され (例えば [3] を参照)、これもカーバンクル現象と呼ばれる。

カーバンクル現象が起こる状況について、次のようなことが知られている。

(1) 衝撃波面はある 1 つの座標軸 (2 次元の場合) 又は 2 つの座標軸の構成する面 (3 次元の場合) に平行している。

(2) これらの振動現象は、物理現象には由来しない何らかの数値的理由により生じ、初期の数値的な誤差は衝撃波面に平行する (衝撃波を横切る主流とは垂直の方向の) 速度成分に生じ、それが増幅されつつ他の成分の誤差に波及する。

(3) 離散モデルの計算が全くの誤差なく行われた場合、特に直交 2 次元格子で 1 つの格子座標軸に平行な衝撃波が進行するような場合には、このような誤差の生じる余地はない。この事実から、この現象のきっかけは計算機の桁落ち誤差であると推測されるが、誤差の成長の早さから考えて桁落ち誤差の集積のみでこのような目に見える形での振動が起こるとは考えられない。(桁落ち誤差のようなストカスティックな誤差の集積の場合、誤差の成長の速さは時間の 2 分の 1 乗オーダー程度で多くとも 1 乗を超えないと推測されるが、現実のカーバンクル現象は明らかにそれより速く成長する。)

しかし、本現象について、振動 (誤差) の発生及び成長の機構の説明は困難であるとされてきた。実際、本現象の抑制の為には数値粘性を付加することが有効であることが経験的に知られるが、その抑制機構についての合理的な説明も得られておらず、それ故にどの程度の数値粘性の不可が必要かを理論的に見積もる方法も開発されていない。(数値粘性の付加は、衝撃波捕獲等の計算の品質の劣化要素ともなり得るので、必要最小限の数値粘性はどの程度かを知る必要がある。)

そこで、ここに新たな手法によるカーバンクル現象の機構の解析とその解析に基づく現象の抑制を紹介し、その考察において離散モデルの適合性の観点が重要であることを説明する。

2 次元空間 (xy-平面) において、y-軸に平行な平面状 (直線状) 衝撃波がその波面と垂直な方向 (x-軸方向) に進行する問題を考える。このために、次の 2 次元圧縮性 Euler 方程式を支配方程式とし

て仮定する。(γは比熱比である。)

$$U_t + F(U)_x + G(U)_y = 0,$$

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{bmatrix},\ F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e+p)u \end{bmatrix},\ G = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (e+p)v \end{bmatrix},$$

但し、状態方程式は $e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2)$. (1)

また、数値計算法としてはRiemann厳密解と密接に関連するGodunov法とする。

$$U^{i,j} = U_{i,j} - \tfrac{\Delta t}{\Delta x}\left\{F(\bar{U}_{i-\frac{1}{2},j}) - F(\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j})\right\} - \tfrac{\Delta t}{\Delta y}\left\{G(\bar{U}_{i,j-\frac{1}{2}}) - G(\bar{U}_{i,j+\frac{1}{2}})\right\}. \quad (2)$$

, ここで、各 $U_{i,j} = {}^t(\rho_{i,j}, \rho_{i,j}u_{i,j}, \rho_{i,j}v_{i,j}, e_{i,j})$ は保存変数ベクトルUの格子点$(i\Delta x, j\Delta y)$によって代表される有限体積$((i-\frac{1}{2})\Delta x, (i+\frac{1}{2})\Delta x) \times ((j-\frac{1}{2})\Delta y, (j+\frac{1}{2})\Delta y)$における平均量の近似であり、上付きの添字の利用$U^{i,j}$で$\Delta t$だけ時間発展を行った後の同様の平均量を表すものとする。

また、x-方向の数値流束を定めるための各$\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j}$はRiemann問題

$$U_t + F(U)_x = 0,\ U(x,t) = \begin{cases} U_{i,j}, & x < 0 \\ U_{i+1,j}, & x > 0. \end{cases} \quad (3)$$

の定める厳密 Riemann 解 $U = W(x;t) = W(x/t; U_{i,j}, U_{i+1,j})$ により、

$$\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j} = W(0; U_{i,j}, U_{i+1,j}) \quad (4)$$

で定められる。同様にy-方向の数値流束を定める$\bar{U}_{i,j+\frac{1}{2}}$は次のRiemann問題

$$U_t + G(U)_y = 0,\ U(y,0) = \begin{cases} U_{i,j}, & y < 0 \\ U_{i,j+1}, & y > 0. \end{cases} \quad (5)$$

の厳密解から同様の方法に定められる。

更に次の状況を仮定する。

(仮定 A) x, y各軸方向の速度成分u, vについて、

(A1) $v = 0$であり、

(A2) uについては至る所で$u+c, u, u-c \geq 0$ (但し、cは$c = \left(\frac{\gamma p}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}$で定められる音速である。)

の条件が成立しているとする。

Godunov法を導くRiemann解の性質により、上の仮定から次が導かれる。

(P1) x-方向の数値流束$F(\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j})$は完全上流性から$F(\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j}) = F(U_{i,j})$で計算される。

(P2) y-方向の数値流束$F(\bar{U}_{i,j+\frac{1}{2}})$はに対しては線形近似を利用することが出来る。

ここで、各有限体積上の速度要素$v_{i,j}$に微小誤差が与えられた場合、それらが時間発展に伴いどのように増幅されるかについては上の(P1)及び(P2)を利用して

$$v^{ij} = v_{ij} - \tfrac{\Delta t}{\Delta x}\left\{\tfrac{\rho_{ij}}{\rho^{ij}}c_{ij}\tfrac{v_{i-1j} - 2v_{ij} + v_{i+1j}}{2} + \tfrac{p_{ij-1} - p_{ij+1}}{\rho^{i,j}} + \tfrac{\rho_{i-1j}}{\rho^{i,j}}u_{i-1j}(v_{i-1j} - v_{ij})\right\} + o(v) \quad (6)$$

なる公式が得られる。[1] ここで、$v_{i,j}$の誤差のない場合の値が0であるので、$v_{i,j}$をそのまま誤差を表す値として利用している。

この公式は、仮定Aが満たされていれば成立するが、特に密度勾配が急な部分を考えると式(6)中の比$\frac{\rho_{i,j}}{\rho^{i,j}}, \frac{\rho_{i-1,j}}{\rho^{i,j}}$, が大きくなり、$v_{i,j}$の誤差を増幅する状況が出現する。特に、Quirk[2]により指摘されているカーバンクル現象において一般にodd-even property(隣接有限体積でのvの誤差の符号が異なり、特にy軸方向では誤差が交互に繰り返しているような状況)が観察される状況を鑑み

$$v^{i,j} = \tilde{v}(-1)^{i+j},\ p_{i,j-1} = p_{i,j+1} \quad (7)$$

の仮定を付け加えた場合には、(??)式は

$$v^{i,j} = \left\{1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}2\left(\frac{\rho_{i,j}}{\rho^{i,j}}c_{i,j} + \frac{\rho_{i-1,j}}{\rho^{i,j}}u_{i-1,j}\right)\right\}v_{i,j} + o(v) \quad (8)$$

のようになり、誤差の増幅状況がより明快に説明される。

ただ、式(6)、(8)は項$o(v)$の示す通り線形化解析を経て導かれているため、その過程での打切誤差$o(v)$による現実の数値計算メカニズムと近似公式(6)又は(8)の間にある違いがどの程度かを考察する必要がある。この考察を純理論的に行うことは未だ困難である為に、仮定Aの条件を満たす強い衝撃波や接触不連続の伝播の数値計算において公式(6)で得られる$v^{i,j}$と実際のCFD計算で

1

得られる $v^{i,j}$ との相対誤差の比較を確かめる数値実験を遂行中である。現在までのところ、かなりの範囲に於いて数パーセント以下の相対誤差で (6) 式が $v_{i,j}$ の成長の機構を記述していることが確かめられている。どの程度の範囲で式 (6) が有効であるかについては、カーバンクル現象を引き起こす誤差の成長がどの程度まで線形的であるか、という問題にも関連するので、より詳細な数値実験を重ね、後日発表することとしたい。

また、仮定 A の (A2) が成立しない場合 (亜音速領域が存在する場合) についても、離散モデルでの時間発展の機構がより複雑とはなるが、ほぼ同様の誤差増幅機構の存在が推測される。

さて、カーバンクル現象を離散モデルの連続モデルへの適合性の観点から考えよう。上で行った解析の要点は、離散モデル (ここでは有限体積モデル) の場合、離散化に起因する誤差の増幅機構が現われてしまったことである。現実の時間的に変化していく物理現象においては各有限体積の状態がおおよそ均一の状態ではあっても真に単一の状態である事は一般的には生じ得ない。しかし、有限体積モデルにおいては各有限体積には単一の状態が分布し、隣接有限体積の境界において状態が突然に変化する状況を仮定している。そのため、ある有限体積上の情報 (例えば誤差) が伝播していく場合は Δt の時間発展の後に実際の特性速度に関わりなく突然に隣接の有限体積にその情報が伝わるという不自然な状況が生じる。即ち、この有限体積モデルの性質が連続モデルとの情報伝播機構の適合性を満たさずにカーバンクル現象のような不都合を生じている、という解釈ができる。

勿論、有限体積に基づく保存的な方法により衝撃波の位置や伝播速度の正確な把握が出来るという事実があり、このような面においては有限体積法による離散モデルは連続モデルに対し良い適合性を有している訳であり、この節での議論が有限体積モデルの否定に結びつくわけではない事に注意したい。離散モデルの性質をよりよく知った上で、それを数値計算による現象のより良い把握に役立てることが必要なのである。

5. まとめ

現在、連続モデルと離散モデルの適合性の観点からの考察は、十分に行われているとは言えない。その主な理由として、

1. 数学的な考察では、連続モデルと離散モデルの間を収束という概念で連結してしまい、暗黙のうちに「無限小」や「連続」という現実の数値計算では実現し得ない概念を仮定して議論することで、現実の数値計算から遊離してしまう側面があったこと。

2. 現実の数値計算からの問題意識では、計算法としてのスキームや格子生成の話題は盛んに議論されながらも、それらを総合した形で離散モデルとして把握した上で連続モデルと離散モデルの間を切り分けて議論する機会が少なかったこと。

があると思われる。今後、数学的な議論を行うための道具 (極限等の概念に頼らない形での離散モデルの性質の把握を行う方法) の整備と共に、現実の数値計算での問題点を離散モデルの適合性の観点から把握する事が重要になると思われる。

参考文献

1) H. Aiso. Oleĭnik's E-Condition from the Viewpoint of Numerics. In Toro, E. F., editor, *Godunov Methods: Theory and Applications*, pages 1–25. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2001.

2) J. Quirk. A contribution to the great Riemann solver debate. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 18:555–574, 1994.

3) J.-Ch. Robinet, J. Gressier, G. Casalis, and J.-M. Moschetta. Shock Wave Instability and Carbuncle Phenomenon: same intrinsic origin? . *J. Fluid Mechanics*, 417:237–263, 2000.

4) 高木亮治、山本一臣、吉田憲司. NEXST-1 周りの流れの CFD 解析結果の比較–第 3 回 SST-CFD-WS でのコンペティションの結果の詳細検討– . In 航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム運営委員会, editor, 航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム *2002* 論文集 . 独立行政法人 航空宇宙技術研究所.