

## 不適切な熱伝導問題の数値解析について

日本IBM 棚町芳弘 (Yoshihiro Tanamachi)

東京工業大学 高橋亮一 (Ryoichi Takahashi)

## 1. 背景と目的

原子炉の安全性解析では、気液の2相流現象を2流体モデルとして取り扱う。このモデルは1次元連立双曲型偏微分方程式として定式化されるが、この方程式系は初期値問題として数学的に不適切であるといわれている。<sup>[1]</sup>

2流体モデルを記述する偏微分方程式は次式のように書くことができる。

$$A \partial U / \partial t + B \partial U / \partial x = 0 \quad (1)$$

$$U = (\alpha_g, p, v_g, v_l, s_g, s_l)^T \quad (2)$$

$$A = \begin{bmatrix} \rho_g & \alpha_g/c_g^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\rho_l & \alpha_l/c_l^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

$$B = \begin{bmatrix} \rho_g v_g & \alpha_g v_g/c_g^2 & \rho_g & 0 & 0 & 0 \\ -\rho_l v_l & \alpha_l v_l/c_l^2 & 0 & \rho_l & 0 & 0 \\ p & \alpha_g & \rho_g v_g & 0 & 0 & 0 \\ -p & \alpha_l & 0 & \rho_l v_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_l \end{bmatrix} \quad (4)$$

ここで、 $\alpha, p, v, s, c$  はそれぞれポア率、圧力、流速、エンロピー、断熱音速である。

また、 $g, l$  はそれぞれ気相、液相を表す。

文献[1]では、式(1)の固有方程式 ( $|A\lambda + B| = 0$ ) が複素根を持つことから、この双曲型偏微分方程式系で記述される2流体モデルは数学的に不適切であるとしている。

しかし、原子炉事故時の過渡現象に対する2相流の実際のコンピュータコードによる数値計算においては、多くの場合、実験とも比較的に合う数値解が得られている。

これは何故か。

通常次のように理解されている。

「差分近似による数値拡散の効果が不適切な系を適切な系に変化させたのだろう」

そこで、不適切な問題における数値解の挙動を明らかにする手がかりを掴むため、現象としてよく分かっていて数値解法も平明な熱伝導を取り上げ、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た。<sup>[2]</sup>

問題の定式化とその解を第2節に、その結果を第3節に示す。

## 2. 問題の定式化とその解

以下の1次元熱伝導問題を考える。

基礎方程式：1次元熱伝導方程式

$$\partial u / \partial t = \alpha \partial^2 u / \partial x^2, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0 \quad (5)$$

初期条件

$$u(x, 0) = \sin \pi x \quad (6)$$

境界条件

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (7)$$

熱伝導係数  $\alpha$  は時間依存とし、パラメータ  $a, b$  によって次のように定義される。

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

この時、問題の厳密解は次のように得られる。

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \exp[-\pi^2(g(t))] \cdot \sin \pi x \\ g(t) &= at + b(1 - \cos \pi t) / \pi \end{aligned} \quad (9)$$

## 3. 不適切な時間領域を含む熱伝導問題：数値実験 I <sup>[2]</sup>

文献[2]で実施した数値実験のケースとその結果は以下の通りである。

### テスト・ケース と結果

(1) 不適切な領域のパラメータと不適切性の度合いの影響。

-  $a=1.0, b=-1.2, -1.4$  (適切→不適切→適切)

この場合は、再び適切領域に入ると、単精度の数値解も安定に戻るように見える。すなわち、

$\alpha = \alpha(t) = a + b \sin \pi t$ ,  $a=1.0, b=-1.2$  の場合を考えると、

演算精度が短精度の時には、 $\alpha(t)$  が負となる不適切領域に入った初期には、厳密解と陽解法による数値解との間の誤差は小さいが、 $t=0.686$  で誤差が最大になる。しかし、これをすぎて  $\alpha(t)$  が正となり、 $t=0.755$  以降になると誤差は

小さくなり、厳密解と数値解は再び一致してくる。ただし、演算精度を倍精度にすると、誤差はほとんど見られない。すなわち、方程式が不適切になっても、すぐに数値解と厳密解の差は大きくなり、不適切領域から適切領域に再び入ると不適切領域で生じた誤差も縮小し、数値解と厳密解の一致が良くなる傾向がある。なお、不適切の度合を大きくして、たとえば  $a=1.0$ ,  $b=-1.4$  とすると、倍精度でも誤差が生じて不適切領域から適切領域に戻ると誤差が小さくなる「元に戻る」現象がここでも見られる。この場合にも演算精度をあげて、有効桁40桁で計算を行うと誤差は生じない。(図1, 図2参照)

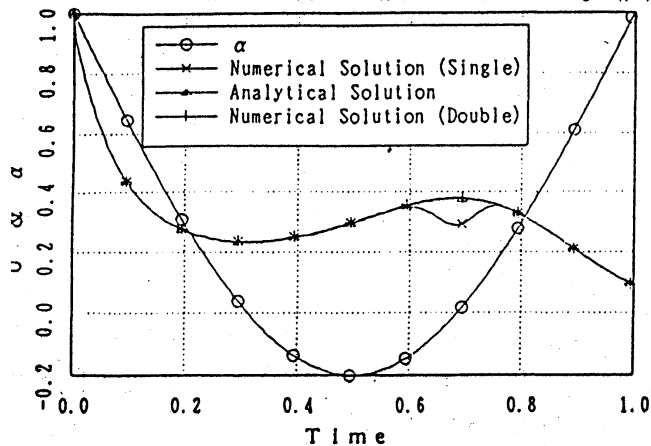


図1 陽解法による数値解の比較  
( $A=1.0$ ,  $B=-1.2$ )

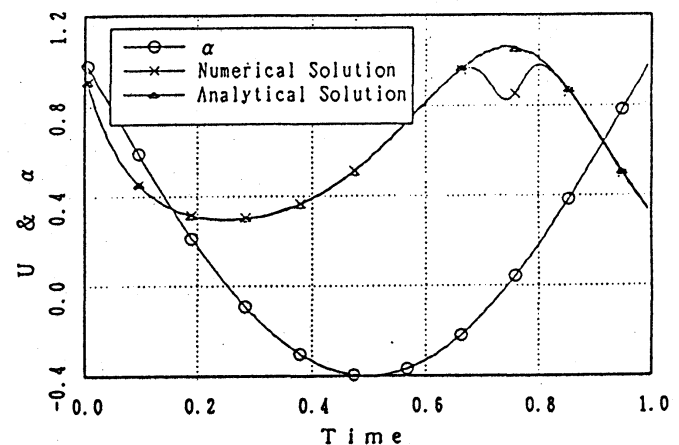


図2 陽解法による数値解の比較  
( $A=1.0$ ,  $B=-1.4$ )

-  $a = -0.5$ ,  $b = 0.7$  (不適切→適切→不適切)

この場合は、再び不適切領域に入っても、数値解は適切領域の安定挙動を継続するように見える。(図3参照)

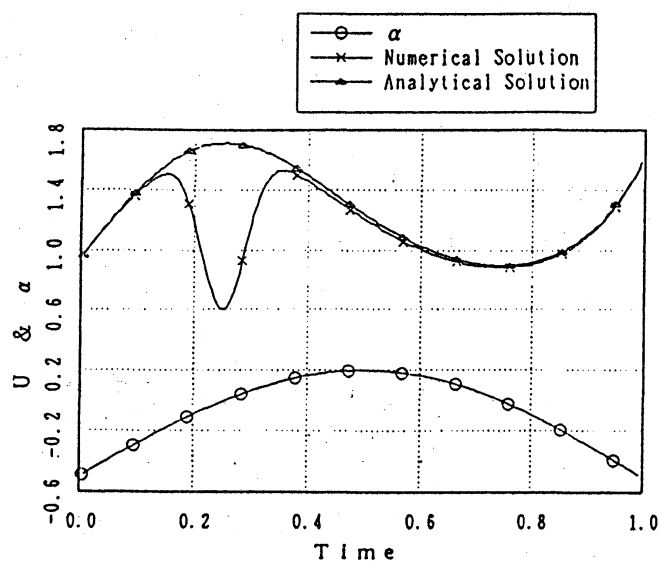


図3 陽解法による数値解の比較  
( $A=-0.5$ ,  $B=0.7$ )

## (2) 数値アルゴリズムの影響 : 陽解法、陰解法

- 陽解法よりも陰解法の方が不適切性の影響を強く受ける。
- 陽解法では安定な解が得られる場合でも、陰解法では数値解が破綻する。

## (3) 非線形係数の影響

- 線形係数よりも非線形係数の方が不適切性の影響を強く受ける。
- 非線形係数の場合、不適切領域では数値解は発散する。

## 4. 不適切な時間領域を含む熱伝導問題 : 数値実験 II

本稿の以下の節では、文献[2]の数値実験結果をより正確に理解するために、3節の

(1)の「不適切な領域のパターンと不適切性の度合い」を取り扱う。

すなわち、不適切な領域の 2つのパターン「適切→不適切→適切」と「不適切→適切→不適切」について、前者における「安定に戻る現象」と後者における「安定挙動が継続する現象」の意味を明らかにする。

数値計算では、 $t[0,1]$ を $n$ 等分し、 $x[0,1]$ を $J$ 等分して差分法を用いる。

$\Delta t=1/n$ ,  $\Delta x=1/J$ , として  $u(x, t)$  の差分近似を  $\{u^k_j\}$  とする。ここで、 $x_j=j\Delta x$ ,  $t_k = k\Delta t$ ,  $d_k = \alpha(t_k)\Delta t/(\Delta x)^2$  とする。この差分近似解を次の陽解法で求める。

$$u^{k+1}_j = u^k_j + d_k(u^{k}_{j-1} - 2u^k_j + u^{k}_{j+1}), \quad k=0,1,\dots, \quad j=1,\dots,J$$

$$u^{k_0}_j = u^0_j = 0, \quad k=0,1,\dots, \quad u^0_j = \sin(\pi x_j), \quad j=1,\dots,J$$

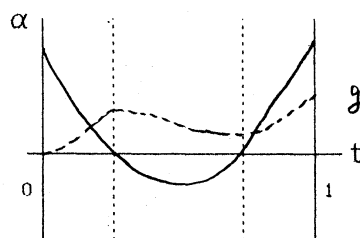
ただし、 $d \leq 0.5$ となるように  $J$ を決めることにする。

数値実験は次の項目の組み合わせで行う。

## - パラメータと不適切領域パターン

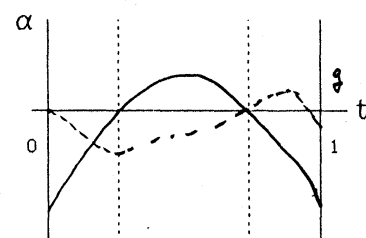
(i)  $a = 1.0$ ,  $b = -1.2$

(ii)  $a = -0.5$ ,  $b = 0.7$



0.3136    0.6864

$\alpha > 0$      $\alpha < 0$      $\alpha > 0$   
A            B            C



0.2532    0.7468

$\alpha < 0$      $\alpha > 0$      $\alpha < 0$   
D            E            F

- 計算機の演算精度

- (1) 単精度演算
- (2) 倍精度演算

- 演算方式

- (1) 点演算(通常のFortran演算)
- (2) 区間演算(ACRITH-XSC)

実施した数値実験の全ケースは以下の通りである。

| <u>ケース</u> | <u>不適切領域パターン</u> | <u>パラメータ</u>    | <u>演算方式</u> | <u>計算機演算精度</u> |
|------------|------------------|-----------------|-------------|----------------|
| 1)         | A-B-C            | $a=1.0, b=-1.2$ | 点           | 単精度            |
| 2)         | A-B-C            | $a=1.0, b=-1.2$ | 点           | 倍精度            |
| 3)         | A-B-C            | $a=1.0, b=-1.2$ | 区間          | 単精度            |
| 4)         | A-B-C            | $a=1.0, b=-1.2$ | 区間          | 倍精度            |
| 5)         | D-E-F            | $a=-0.5, b=0.7$ | 点           | 単精度            |
| 6)         | D-E-F            | $a=-0.5, b=0.7$ | 点           | 倍精度            |
| 7)         | D-E-F            | $a=-0.5, b=0.7$ | 区間          | 単精度            |
| 8)         | D-E-F            | $a=-0.5, b=0.7$ | 区間          | 倍精度            |

### 数値実験結果

$\Delta t = 0.005$ に対して、数値解と厳密解の差の様子を見る。

- ケース 1) A-B-C;  $a=1.0$ ,  $b=-1.2$ ; 点; 単精度  
不適切領域Bに入って次第に誤差が大きくなり、 $\alpha(t)$ の積分 $g(t)$ が極小値をとる $t_m=0.686$ 付近でピークになる。適切領域Cに戻ると誤差は再び減少する。
- ケース 2) A-B-C;  $a=1.0$ ,  $b=-1.2$ ; 点; 倍精度  
ほとんど誤差はない。
- ケース 3) A-B-C;  $a=1.0$ ,  $b=-1.2$ ; 区間; 単精度  
不適切領域Bの途中から解の区間幅が広がり始め、時刻 $t_m=0.685$ 付近で最大となり、適切領域Cに戻ると区間幅が狭まりかける。
- ケース 4) A-B-C;  $a=1.0$ ,  $b=-1.2$ ; 区間; 倍精度  
ほとんど誤差はない。解の区間幅もない。
- ケース 5) D-E-F;  $a=-0.5$ ,  $b=0.7$ ; 点; 単精度  
不適切領域Dの途中から誤差が大きくなり、 $\alpha(t)$ の積分である $g(t)$ が極小値をとる $t_m=0.25$ 付近で最大となり、適切領域Eに戻ると、誤差は次第に減少するが、不適切領域Fに入ると途中から誤差が少しづつ目立つようになる。
- ケース 6) D-E-F;  $a=-0.5$ ,  $b=0.7$ ; 点; 倍精度  
ケース 5)と同じパターンであるが、変動量が非常に小さい。
- ケース 7) D-E-F;  $a=-0.5$ ,  $b=0.7$ ; 区間; 単精度  
ケース 5)と同じパターンであるが、ケース 区間演算の特徴から、誤差のある時点で生じた数値解の区間幅の広がりが最後まで狭まらない。
- ケース 8) D-E-F;  $a=-0.5$ ,  $b=0.7$ ; 区間; 倍精度  
ケース 6)と同じパターンであるが、不適切領域Fの終わり付近で解の区間幅が少しある。

## 5. 結果の検討

数値実験結果から言えることを整理する。ただし、  
単精度の点演算で $\Delta t=0.005$ の場合を基本とする。

i) 不適切領域 $\rightarrow$  :  $A \rightarrow B \rightarrow C$  (適切 $\rightarrow$ 不適切 $\rightarrow$ 適切)の場合

- (1) 不適切領域の途中から適切領域の始めにかけて、不適切性に起因すると思われる厳密解と数値解の差が見られ、 $\alpha(t)$ の積分である $g(t)$ の極小値を取る時点でその差は最大になる。
- (2) 倍精度にすると(単精度 $\rightarrow$ 倍精度)、数値解と厳密解の差はほとんどなくなる。
- (3) しかし、 $\Delta t$ を小さくすると、数値解と厳密解の差が大きいところでは、その差はさらに大きくなる。
- (4) 区間演算を行った場合(点演算 $\rightarrow$ 区間演算)、点演算での数値解と厳密解との差を反映した形で区間幅が広がる。

次のような[疑問点]が残る。すなわち、「不適切領域」から「適切領域」に戻るに伴い、不安定な解の振舞い(数値解と厳密解の差が生じる)が、安定に戻っている(数値解の誤差が減少または消滅する)ように見えるがそれは本当か?、またその理由は何か? この問いに対する回答としては次のようなことが言える。すなわち、今回の数値実験結果の範囲内では「戻っている」と考えられる。

「戻っている理由」は以下のように考えればよい。

- 厳密解がある。また、適切な問題において、それに適合する差分システムによる安定な解は厳密解に収束する(Laxの同等定理)。
- このことは、厳密解に対する数値計算の誤差に伴う数値解の振舞いを検討することによって、明らかになる。

$$\text{厳密解 : } u(x, t) = \exp(-\pi^2 g(t)) \times \sin \pi x \quad (10)$$

$$g(t) = at + b/\pi \times (1 - \cos \pi x) \quad (11)$$

数値計算における誤差が初期条件での摂動によるものとする。

$$u^{\sim}(x, 0) = \sin \pi x + \epsilon \sin(n \pi x) \quad (12)$$

摂動部

$\epsilon$  : 小

この時、初期条件  $u^{\sim}(x, 0)$  に対する厳密解は次の形に書ける。

$$u^{\sim}(x, t) = \underbrace{\exp(-\pi^2 g(t)) \times \sin \pi x}_{\text{正しい解}} + \epsilon \underbrace{\exp(-n^2 \pi^2 g(t)) \times \sin(n \pi x)}_{\text{幻影解}} \quad (13)$$

$g(t) < 0$  のとき、 右辺第2項が成長、第1項が隠れる。

$g(t) > 0$  のとき、 右辺第2項は減衰、第1項の正しい解が現れる。

- 実際の差分法による数値解においては、上記の厳密解に対する $g(t)$ と対応する $\alpha(t)$ が働き、それによって解の安定および不安定が生じるものと考えられる。

しかしながら、不適切な領域を含む問題に対しては、微分方程式の解の初期データに対する連続性を問う必要がある。つまり、「どの初期データに関しても」その微小変化が解に微小な変化しか与えないという意味で、Hadamardの適切性を考慮する必要がある。そのためには、有限個の初期関数 $\{\sin m\pi x, m=1\sim M\}$ からなる関数空間ではなく、限りなく大きな周波数の初期関数をも含む一般的な関数空間で取り扱わなければならない。<sup>[4]</sup>

## ii) 不適切領域パターン $D \rightarrow E \rightarrow F$ (不適切 $\rightarrow$ 適切 $\rightarrow$ 不適切)の場合

- (1) 不適切領域の途中( $\alpha(t)$ の積分である $g(t)$ の極小値を取る時点)で数値解は厳密解と離れはじめる。  
適切領域の途中から数値解は厳密解に近づく。再び不適切領域に入って、両者は次第に離れる。
- (2) 倍精度にすると(単精度 $\rightarrow$ 倍精度)、数値解と厳密解の差は非常に小さくなる(ほとんどなくなる)。
- (3) しかし、 $\Delta t$ を小さくすると、数値解と厳密解の差が大きいところでは、その差はさらに急激に大きくなる。
- (4) 区間演算を行った場合(点演算 $\rightarrow$ 区間演算)、点演算での数値解と厳密解との差を反映した形で区間幅が広がる。

ここでの[疑問点]は次のようなものである。すなわち、「適切領域」から「不適切領域」に再入しても、安定な解の振舞い(数値解の誤差がないか、小さい)が継続されているか?、またその理由は何か?

これに対する答えは「継続していない」と考えられる。

「継続しない理由」は以下のように考えればよい。すなわち、

- 厳密解はある。しかし、不適切な問題に対しては、これに適合する差分形式で安定なものはない(Richtmyer & Morton)<sup>[3]</sup>。
- 不適切領域パターン i)の場合と同様の空間で考えれば、負の $g(t)$ に対して、因子 $\exp\{-(m\pi)^2 g(t)\}$ で増大するため、解は発散する。
- 従って、不適切領域を含む問題としては不適切領域パターン i)も ii)も解の振舞いに本質的な差異はない。

つぎに、この不適切な熱伝導問題に対してACRITHを適用したケースの結果について整理しておく。

- ACRITHの方法は区間演算と高精度演算の機能によって、「計算された答の精度が疑わしい時」、または「問題の入力データまたはパラメータが不確定である時」等に結果の精度保証を実現するものとして、利用できる。

本研究へのACRITH-XSCの適用の結果、以下の知見を得た。

- 「点演算」による数値解はいつも「区間演算」の区間解に包含されている。
- 「不適切領域」における解の不安定・発散が(解区間の拡大・爆発の形で)明確に示される。ただし、区間演算の特徴から、一旦広がった解区間が点演算と同じ形で縮小されにくいという問題がある。
- このことは「不適切な問題に対して適合する差分スキームで安定なものはない」と言う前述のRichtmyer&Mortonの主張をより正確に反映している。

## 6. 結論

本研究の結果、得られた知見は以下の通りである。

- (1) 不適切領域と適切領域を含む問題の厳密解の意味が明確になった。すなわち、
  - ここで考えた問題(5)~(8)に対しては、数学的な意味の解は存在する。
  - また、その解が一意的であることを示すことができる。<sup>[4]</sup>
- (2) 不適切領域と適切領域を含む問題の数値解の振舞いについて、以下のことが明確になった。すなわち、前述のように数値解の挙動は厳密解の挙動に対応するため
  - 数値解は上記の意味の厳密解に追従する。
  - さらに、演算精度を上げれば上げるほど数値解はこの厳密解に近づく。
 つまり、 $g(t) < 0$ のときの高次の項による幻影解は演算精度に応じて減少すると考えられる。
  - ただし、不適切性の度合いが高くなれば、この高次の項による幻影解が可能な演算精度の範囲で消滅しきれなくなり、解が不安定となる。すなわち、本来の不適切性が顕在化する。
- (3) ACRITH-XSCによる区間解は不適切領域を含む問題に対する数値解の振舞いを、より正確に表現しているように思われる。

## 参考文献

- [1] R.W.Lyczkowski, Characteristics and Stability Analysis of Transient one dimensional Two-phase flow Equations and Their Finite Difference-Approximations, Nucl.Sci.Eng., 66(1978).
- [2] 高橋. 藪下. 村上、不適切な条件における熱伝導方程式の数値解、日本機械学会論文集-B編(印刷中).
- [3] R.D.Richtmyer, K.W.Morton, Differnce methods for Initialvalue Problems, 2nd Edition(1967), John Wiley & Sons.
- [4] 野木達夫 (Private Communication)