

流体現象の数値シミュレーションにおける人工粘性のもつ意味について

熊本大学・大学院自然科学研究科 畑上 到 (Itaru Hataue)
Graduate School of Science and Technology,
Kumamoto University

1 緒言

近年の電子計算機の進歩により、いろいろな種類の流れの解析を数値的に行えるようになってきた。特に高レイノルズ数領域のナビエーストークス方程式の直接シミュレーションも、ある種の人工的な粘性項を導入することにより、数値的な発散を伴わないで計算できるようになっている。しかしながら、得られた数値解がもと偏微分方程式の解であるかどうかは大部分の場合、まだわからないままである。さて、非線形の数値解析の分野ではよく知られているように、連続系の微分方程式を離散化して数値的に解を求める際に新たに加わった離散パラメータの大きさによっては、不安定化が誘起され、「幻影解」と呼ばれるもとの微分方程式では現れない解が発現することがある。^{1)–8)} この幻影解の性質については、常微分方程式の場合には理論的にもかなり詳細な研究が行われているが、⁹⁾ 実際の流体シミュレーション計算のような複雑な場合には、理論的な解析は不可能に近い。したがって実際のシミュレーション結果の中に幻影解が現れるのかどうか、またもし現れるとしたらそれらはどのような性質を持っているかについては未解決のままである。したがって工学や産業上の問題の解析において実際に計算された結果が妥当であるかどうかは、対象となる現象についての実験結果や、あるいは確立された理論に照らし合わせて評価することによって行われている。すなわち、頼りとなるのは個々の研究者の直感や経験による部分が大きいわけである。以上から、この幻影解について調べることは、シミュレーション計算結果の信頼性についての重要な情報を与えることになる。さて、著者らはこれまで、「より信頼性の高い数値計算結果を得るためには何が必要か」という問題を考察するため、いくつかの非線形微分方程式の「幻影解」の構造やパラメータ依存性を研究し、そこで利用された解析手法が実際の流体力学計算結果の解析に応用できることを示してきた。その結果、現在頻繁に利用されている風上差分系の数値スキームを利用した場合にでも、幻影解は出現し、特に準定常的な解が計算格子や時間刻みに大きく依存することがわかってきた。この風上差分というのは、人工粘性項と呼ばれる項を付加することによって、計算を安定に進めるものであるが、これにより高レイノルズ数領域のような不安定化の原因となる高波数成分を効果的に取り除くことができるスキームである。しかしながら連続系の方程式中に存在しない項を付加するわけであるので、その選択には十分気をつけなければならない。過去の研究から、「離散化は系を不安定化させる」だけでなく、「系を安定化させる」場合もあること¹⁰⁾から、いくら計算が安定に進んでも、本来不安定な解（例えば乱流解のような非周期的で複雑な挙動をする解）が得られる場合に、これと異なる安定な解を得ても仕方がないのである。このことをふまえ、本研究では、これまでの研究を発展させ、エイリシング誤差に起因する非線形不安定性を取り除くために導入されている4次の人工粘性項の大きさが物理的な2次の粘性

項に対してどのような関係があるかどうかについて研究した。この点を詳細に調べるためには、得られた数値計算結果の動的特性を詳細に解析し、物理的に分岐して発現する複雑な構造と数値的な不安定性により生じる幻影解との比較を行うことが必要となるが、本研究では、流体計算モデルとして最も標準的な2次元円柱周りの流れ解析を採用し、Pullium らによって報告されている分岐過程に対する研究¹¹⁾を参考に、2次と4次の粘性の大きさのパラメータが変化したときの分岐過程に着目し、それらの違いや解の構造不安定性の違いを議論した。具体的には、3次精度風上差分における4次人工粘性項の大きさとレイノルズ数を変化させたときの抵抗係数の時系列から得られた近似的な不変集合の分岐過程を詳細に調べることによって、2種類の粘性項の効果の差について考察した。

一方、高レイノルズ数の流れは周期的構造を持たない「乱流」構造をもつが、数値的な不安定性に起因される複雑な構造をもつ「幻影解」が存在することが、著者らによって明らかにされてきた。一見、同じように複雑な構造をもつ2者を比較する方法として、いくつかのものを提案されてきているが、本研究では、よく知られたウェーブレット解析の手法¹⁴⁾を応用してこれらの違いについて検討した。

2 数値アルゴリズム

無次元化された非圧縮性ナヴィエストークス方程式を連続の式と連立させて数値的に解くわけであるが、ここで一般座標系に変換し、さらにMAC法¹²⁾と呼ばれる方法を導入する。すなわち、式(1)に示すように、ナヴィエストークス方程式から圧力のポアソン方程式を導き、これを反復法により解くことにより圧力場をもとめる。

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}p = & -\frac{(y_{\eta}u_{\xi} - y_{\xi}u_{\eta})^2 + 2(x_{\xi}u_{\eta} - x_{\eta}u_{\xi})(y_{\eta}v_{\xi} - y_{\xi}v_{\eta}) + (x_{\xi}v_{\eta} - x_{\eta}v_{\xi})^2}{J^2} \\ & -\frac{y_{\eta}u_{\xi} - y_{\xi}u_{\eta} + x_{\xi}v_{\eta} - x_{\eta}v_{\xi}}{J\Delta t}, \end{aligned} \quad (1)$$

ここで J は座標変換のヤコビアンである。次に得られた圧力場から差分化されたナヴィエストークス方程式を時間発展させて速度場をもとめるという手順をとる。本研究では時間発展にはオイラーの一次陰解法を採用した。対流項を除く微分項の差分化には中心差分を採用し、対流項にはよく知られた以下の(2)式に示すような3次精度の風上差分を採用した。¹³⁾

$$f \frac{\partial u}{\partial \xi} = \frac{f_i(-u_{i+2} + 8u_{i-1} - 8u_{i+1} + u_{i-2})}{12\Delta\xi} + \varepsilon \frac{|f_i|(u_{i+2} - 4u_{i-1} + 6u_i - 4u_{i+1} + u_{i-2})}{4\Delta\xi^4}. \quad (2)$$

本研究の目的は付加された4次の人工粘性項が数値解の構造に与える影響を調べることであるので、右辺第2項の大きさを ε というパラメータでその寄与の大きさを変化させた。

3 結果と考察

まず数値シミュレーションで得られた解の構造について議論するために、十分時間が経過して初期条件の影響がなくなり、近似的に不変集合に漸近した数値解のについて考える。本研究では、系を代表する積分量である抵抗係数の時系列を無次元時間が3000から4000までについてのサンプリング

し、それから得られる近似的不変集合の分類を試みる。このサンプリングした無次元時間において、得られた数値解が不変集合に十分漸近しているかどうかの保証はないが、経験上この程度の無次元時間においては初期条件の影響はほとんど減衰していると考えられる。またそれぞれの近似的不変集合の決定については、時系列データの様子やそれから計算されたパワースペクトルの結果等から総合的に決定した。これまでの実験等の研究から知られているように、非常に小さいレイノルズ数で生じた双子渦（これは近似的不変集合としては平衡点に相当する）がレイノルズ数の増加に伴い成長し、ある点でホップ分岐が発生して交互にうねるような流れ（カルマン渦）が生じる。このような流れは、抵抗係数の時系列から構成された近似的不変集合としては極限閉軌道（リミットサイクル）を示すが、さらにレイノルズ数がおおきくなると複雑な挙動を示すような解に再度分岐する。本研究では、このレイノルズ数の増加によって周期的な解が不安定化する領域（具体的には、レイノルズ数が 1000 から 6000 あたりまでの領域）について調べた。図 1 は 4 次の粘性係数パラメータ (ϵ) を 0.85 と固定した場合に、それぞれの時間刻み Δt におけるレイノルズ数を変化させた場合の近似的不変集合の変化の様子をサンプリング時間内で平均された抵抗係数の値の変化として示したものである。レイノルズ数を大きくすることは、物理的な 2 次の粘性係数を小さくすることに相当する。図中の白抜きの印は 2 周期もしくは極限閉軌道といった低次元の不変集合を示し、黒丸はそれ以外の多周期軌道や準周期軌道さらには非周期の複雑な高次元の不変集合が得られたことを示す。これらからわかるように、全体的にレイノルズ数の増加とともに抵抗係数は増加することがわかる。しかしながらその様子は単調ではなく、極端に大きい値や逆に小さい値をとる場合があることがわかる。時間刻みという離散系でのパラメータは、レイノルズ数という物理的な連続系でのパラメータと何らかの相関を持った効果があると推測され、これによって計算システム（離散力学系）にレイノルズ数を変えることと似た影響を与える可能性もあると考えられるので、すべての時間刻みの計算の場合に対して一定の大きさの 4 次の人工粘性項を同様に用いることがよいかどうかには疑問がある。また比較的時刻間が大きいときには非常に多種多様な周期解や準周期解、さらにより高次の近似的不変集合が得られるが、一方で時間刻みを小さくした場合には、より精度の高い計算が得られるという予想に反して、低レイノルズ数でも準周期解が得られるという複雑な依存性を示した。また分岐点付近では、リアプノフ指数が零に近くなるため、収束の速度が遅くなると考えられ、したがって近似的不変集合の種類の決定にはさらに十分な計算時間が必要となる。またこの領域では、いくつかのタイプの近似的不変集合が共存することもあるため、初期条件をいろいろと変えて計算するなど、注意深い検討が必要となると思われる。レイノルズ数が大きくなると、2 周期解が分岐した非周期解は「間欠性」を示す振動が比較的周期性をもった領域の間に生じるようになるが、さらにレイノルズ数が大きくなると、この間欠的な不規則な振動の領域が広くなり、2 周期に近い領域が消え、最終的に不規則な領域だけが見られるようになる。

さて次に、レイノルズ数を 2000 に固定して 4 次の人工粘性項を変化させた場合の抵抗係数の平均値の変化を図 2 に示す。時刻間が大きい場合と逆に小さい場合には、4 次の粘性の寄与を大きくしていくと抵抗係数は単調に低下し、また中間的な場合にはある領域で局所的に最小の値をとる点が存在することがあることがわかるが、今回の計算結果において、抵抗係数の最小の値をとる領域で得られた近似的不変集合はこれまでの実験等からの報告に物理的に近いものであった。したがって、こ

のことが今後抵抗係数のような流れ場の性質を代表する物理変数のパラメータ依存性を詳細に検討することによって、信頼性の高い解を得るうえで重要な情報が得られるのではないかと期待できる。一方、4次の寄与が小さくなると概して高次の周期解や準周期解等の高次元の近似的不変集合が発現し、抵抗係数の大きさもかなり高くなる。また4次の寄与が大きくなると2周期解や極限閉軌道に近い近似的不変集合が得られるが、さらにある値を大きくしていくとあるところで数値的な発散が起こる。一方、 $\Delta t=0.005$ の場合には ε の増加に対して局所的な最小値をとることはなく、単調に減少し、ある値で不安定化した。このように、すべての場合で局所的に最小値をとることばかりではないが、局所的な最小値をとらない場合でも最小の値をとるときの近似的不変集合はやはり極限閉軌道であることがわかった。次に図3にレイノルズ数を3000に固定して4次の人工粘性項を変化させた場合の抵抗係数の平均値の変化を示す。この場合には、図2の場合とは逆に、大きな時間刻み、すなわち $\Delta t=0.02$ の場合に ε の増加に対して局所的な最小値をとることはなく、単調に減少し、ある値で不安定化した。この場合に特筆すべきは、それ以外の時間刻みの場合、 ε が大きければ低次元の近似的不変集合が現れるのは図2の場合と同様であるが、 ε を小さくしていくと、一度高次元の近似的不変集合が出現し、さらに小さくするとまた低次元のものが出現するという複雑な分岐過程を呈することである。また、この高次元の近似的不変集合が現れる領域での抵抗係数の平均値は局所的に小さい領域になっており、このレイノルズ数においてこの不変集合が真の解であるかどうかは断定はできないが、やはり局所的な最小値の領域のもつ意味は重要であろう。しかしながら、さらに ε が小さくなると複雑な時系列の挙動を示すようになる。

さて、それではレイノルズ数が大きくなり（2次の粘性係数が小さくなり）非周期的となった解と4次の粘性係数が小さくなって数値的に非周期となった解との差はあるのであろうか？以下に物理的な不安定性から生じたと考えられる非周期的な解と数値的な不安定性から生じたと考えられる非周期的な解について、ウェーブレット変換を用いて解析した結果を示す。図4は $\varepsilon=0.85$ で $Re=6000$ の場合（(a) 物理的に不安定であると考えられる場合）と $\varepsilon=0.555$ で $Re=2000$ の場合（(b) 数値的に不安定であると考えられる場合）について、メキシカンハット型のウェーブレット変換の結果と高速フーリエ変換を行ってパワースペクトル密度で比較したものを示す。(b)の場合には、比較的鋭いピークがあり、倍音のピークも見られるのに対し、(a)の場合には逆に分布が広がって連続的な性質をもっているように見える。またウェーブレット解析の図において、黒い部分は正の相関を示し、白い部分は負の相関を示す領域である。(b)の場合には、低周波数領域から中周波数領域にかけて周期的な様子が見えるが、(a)においては中周波数領域から高周波数領域にかけて非周期的な構造が見え、2つの構造の違いは明らかである。数値的な不安定性から生じる非周期的な構造は単純な高周波数の合成によって引き起こされていると推測され、したがって一見時系列の様子は非周期的のようであるが、ウェーブレット解析を行ってみると高周波数領域に周期的な部分が残る、本質的に乱流の構造とは異なることがわかる。

4 結論

実際の流体シミュレーション計算においては、連続系である偏微分方程式にはない数多くのパラメータが付加され、その漸近解の構造を理解することが非常に難しくなる。また非線型方程式を扱う

場合、ほとんどの場合において離散化されたことによる不安定化を補うため、系を安定化させる項を付加する必要性が生ずる。このことはすなわち、「数値計算の信頼性」ということ、また最善のパラメータの選択という本質的な問題と関連している。一般的には、離散化によって生じるパラメータを小さくしていけば、極限としては連続系の真の解に収束することを期待して計算を行っていくわけであるが、本研究で示したように、計算機での解析はやはり極限としては扱えないこと、さらに安定に計算を行うために導入しなければならない付加項の寄与によってさらに問題が複雑になってしまうこととなる。したがってこの数値的アプローチを離散力学系の問題としてとらえ、解析する必要がある。数値解析の分野に、カオス理論や分岐理論といった数学的な概念を導入して「数値計算の信頼性」を考察しなければならないのはこのためである。また複雑な挙動をする乱流解のもつ特性を解析することが、工学的にも産業的にも最大の研究課題である以上、一見同じように複雑に見える解の本質がいかにか違うか、また真なる物理的な性質を内在した解はどうあるべきか、を明らかにする上でもやはり数学的アプローチが必要不可欠である。本研究で紹介した例はほんの一例に過ぎないものであり、より工学的には、乱流モデルの是非や格子生成の重要性、さらには離散的境界条件の設定の問題等、すべてを結合して考えられるべきであり、これらは今後の課題である。

REFERENCES

- 1) Yee, H. C. , Sweby, P. K. and Griffiths, D. F.:Dynamical approach study of spurious steady-state numerical solutions of nonlinear differential equations. I. The dynamics of time discretization and its implications for algorithm development in computational fluid dynamics, *J. Comput. Phys.*, **97**(1991), pp.249-310.
- 2) Griffiths, D. F., Sweby, P. K. and Yee, H. C.:On spurious asymptotic numerical solutions of explicit Runge-Kutta methods, *IMA J. Num. Anal.*, **12**(1992), pp.319-338.
- 3) Lafon, A. and Yee, H. C.:On the numerical treatment of nonlinear source terms in reaction-convection equations, *AIAA Paper*,92-0419(1992).
- 4) Humphries, A. R. :Spurious solutions of numerical methods for initial value problems, *IMA J. Num. Anal.*, **13**(1993), pp.263-290.
- 5) Griffiths, D. F., Stuart, A. and Yee, H. C.:Numerical wave propagation in hyperbolic problems with nonlinear source terms, *SIAM J. Num. Anal.*, **29**(1992), pp.1244-1260.
- 6) Hataue, I.:Spurious numerical solutions in higher dimensional discrete systems, *AIAA J.*,**33** (1995), pp.163-164.
- 7) Hataue, I.:Ghost numerical solutions in upwind difference scheme and effects of linearization, *AIAA-Paper*,97-0870(1997).
- 8) Hataue, I.:Mathematical and Numerical Analyses of Dynamical Structure of Numerical Solutions of Two-Dimensional Fluid Equations, *J. of Phys. Soc. Japan*, Vol.67, No.6, pp.1895-1911 (1998).
- 9) Maeda, Y.:Euler's Discretization Revisited, *Proc. Japan Acad.*, **71**, Ser. A, No.3, pp.133-149(1995).

- 10) 三村昌泰:「微分方程式と差分方程式－数値解は信用できるか?－」, 入門現代の数学 2, 数値解析と非線型現象 (数学セミナー増刊), 日本評論社, 第3章 (1981), pp.55-74.
- 11) Pullium, T. H. and Vastano, J. A.: Transition to chaos in an open unforced 2D flow, *J. Comput. Phys.*, **105**(1993), pp.133-149.
- 12) Harlow, F. H. and Welch, J. E.: Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *Phys. Fluids*, **8**(1965), pp.2182-2189.
- 13) Kawamura, T. and Kuwahara, K. : Computation of high Reynolds number flow around a circular cylinder with surface roughness, *AIAA Paper*, 84-0340(1984).
- 14) Grossmann, A. et. al. , Mathematics+Physics, (L.Streit ed.)vol.1, World Scientific(1985).

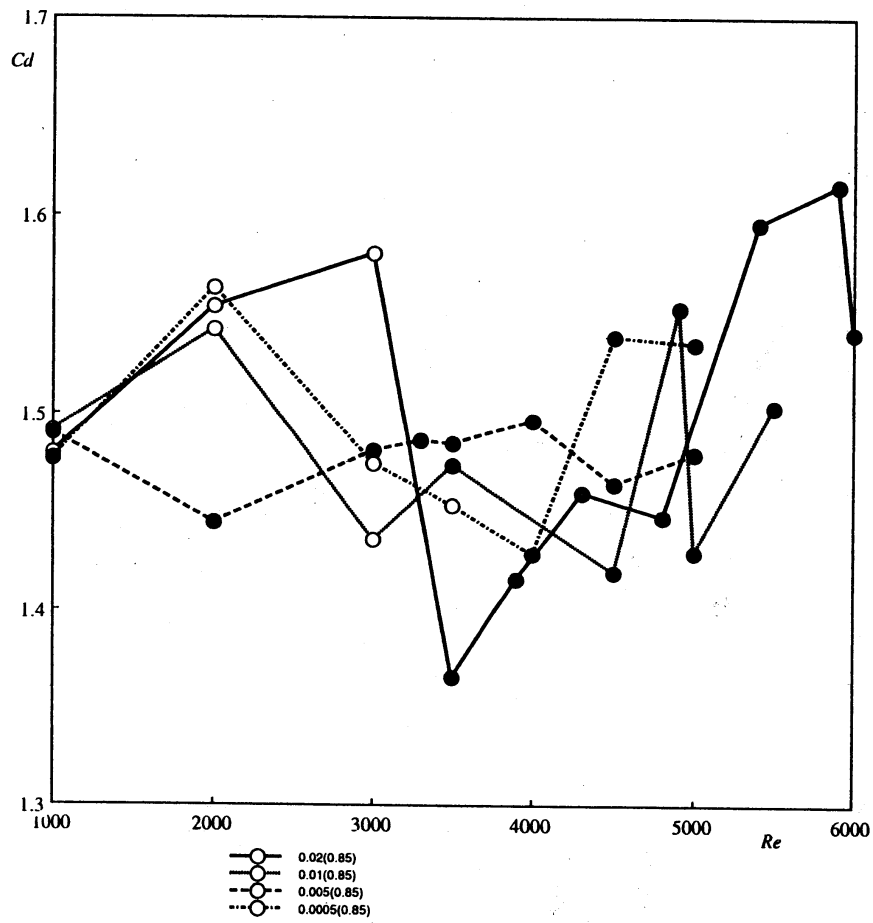


Figure 1: Comparison of structure of asymptotic solutions which shows the dependence of averaged drag coefficient on the Reynolds number under the constant condition of $\varepsilon = 0.85$.

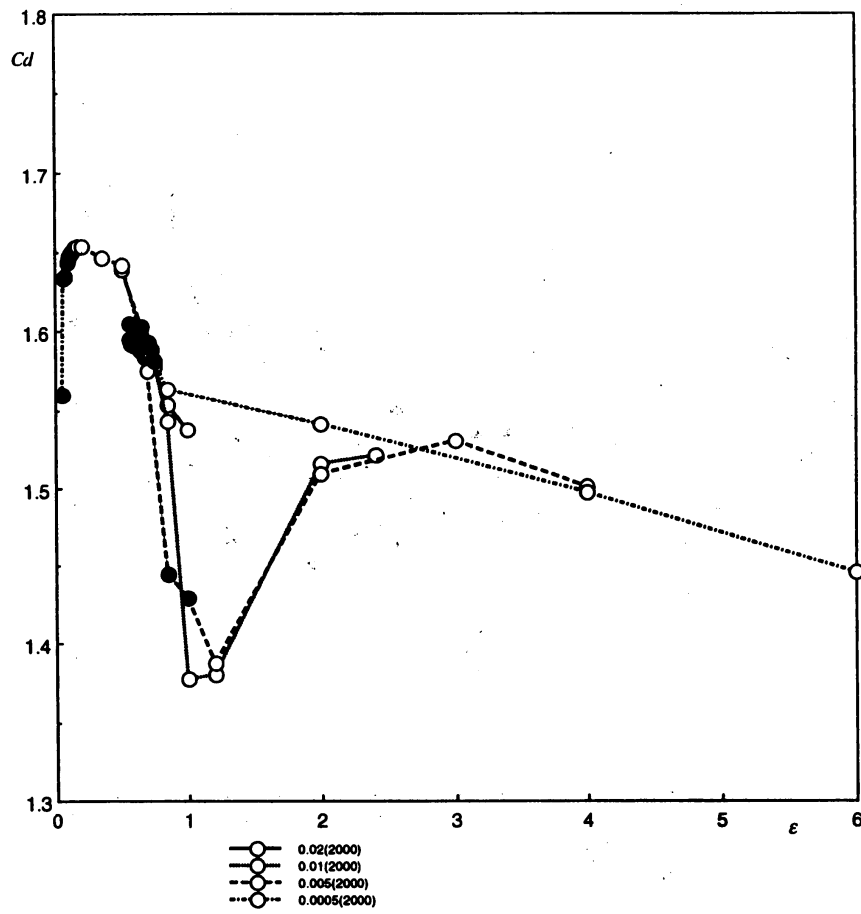


Figure 2: Comparison of structure of asymptotic solutions which shows the dependence of averaged drag coefficient on amplitude of the fourth order viscosity term under the constant condition of $Re=2000$.

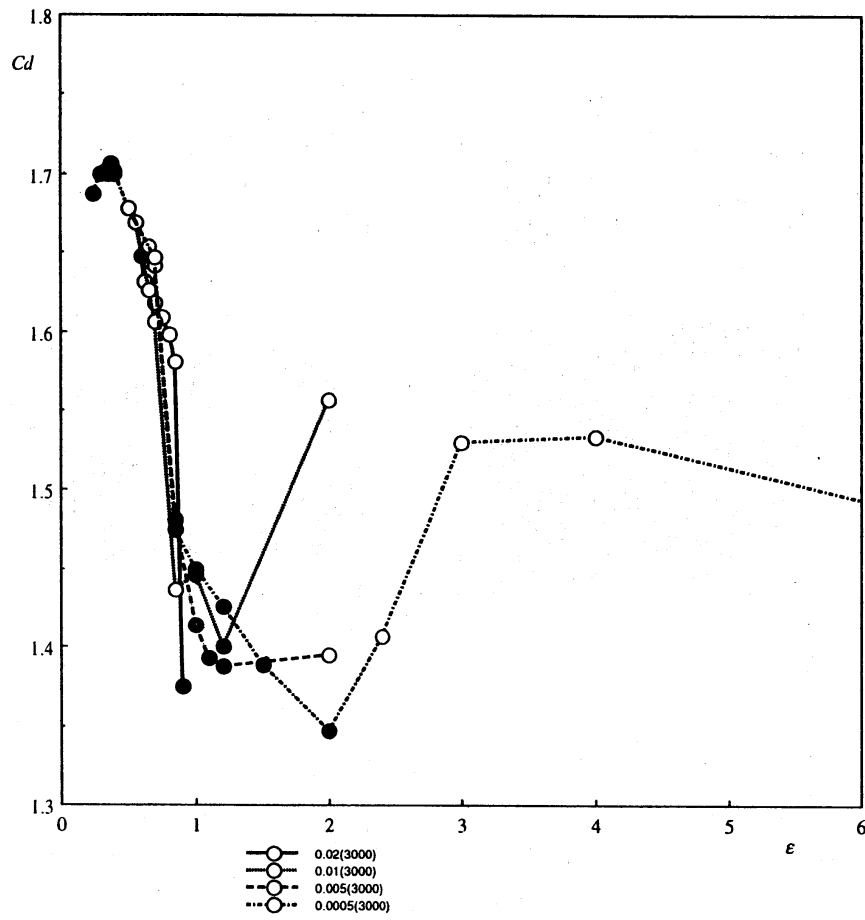


Figure 3: Comparison of structure of asymptotic solutions which shows the dependence of averaged drag coefficient on amplitude of the fourth order viscosity term under the constant condition of $Re=3000$.

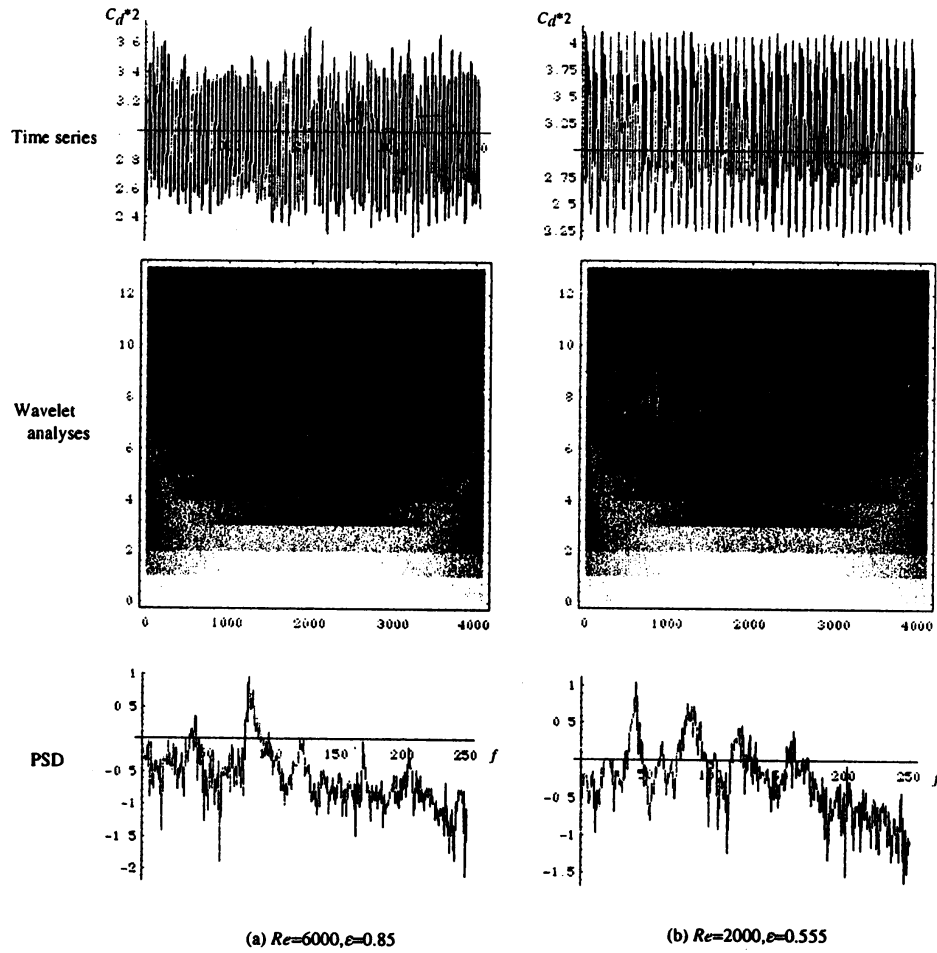


Figure 4: Comparison of structure of reconstructed attractors of C_d data on second- and fourth-order viscosity.