数値計算における界面アルゴリズムの開発

福山芳人*·西野信博*·加賀光太郎*·井塚高彰*

Development of the interface algorithm in numerical computation

Yoshito FUKUYAMA, Nobuhiro NISHINO, Kotaro KAGA, Takaaki IZUKA

The essential interface algorithm has been developed in the numerical calculation. We define a position and a few physical quantities on the interface to calculate more accurately. To solve the position and physical quantities on the interface with Lagrange scheme, the present scheme solves the fluid equation of Lagrangian description. Time step is progressed by using Low Storage Runge-Kutta (LSRK). In the hypervelocity flow, a better result has been obtained.

Key Words: Hypervelocity flow, shockwave, Interface, Two values, Lagrangian

1. はじめに

数値計算において界面(異なる物性の境界面)のある計算を行うとき、直接差分で解くと数値拡散が起こり、界面の見分けが付かなくなる。その解決策として、VOF法¹⁾や Tangent変換²⁾、Level Set法³⁾などが用いられている。しかし、これらの方法を使用しても局所的に界面はぼやけており、本質的に界面の正確な位置や物理量を計算することはできない。

そこで、本研究では従来の方法とは異なる計算スキームの開発を行っている。流体方程式は Euler 的に解くのが一般的であるが、我々の計算スキームでは界面を Lagrange 的 に追跡するので、流体方程式も Lagrange 的に解く必要がある。Lagrange 点上に物理量とその空間 1 次微分値を配置し、Lagrange 点上の値を時間進展した後、3 次 Hermite 補間を用いて Euler 格子点上に値を補間する。いわゆる Semi-Lagrange スキームの一種と言える。

計算モデルは流体中で剛体が超音速飛行する場合を考え る。よって、支配方程式は圧縮性流体と剛体の運動である。 また、界面には2値を持たせ、界面の値と界面近傍の値を 正確に計算させる手法の開発を行っている。

この計算スキームを用いて、超音速流れの数値計算を行 い、流体と剛体の間にある界面を正確に追跡するためのテ ストを行った。

2. 支配方程式

Do

2.1 流体の保存則(圧縮性非粘性流体)

Lagrange 記述された流体の保存則

$$\frac{Dp}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (質量保存則)$$
$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \qquad (運動方程式)$$
$$\frac{Dp}{Dt} = -\gamma p \nabla \cdot \mathbf{u} \qquad (圧力の移流式)$$

ここで、密度は ρ 、速度は \mathbf{u} 、圧力はp、比熱比は γ とする。

2.2 剛体の運動

剛体は流体から受ける力Fによって運動する。

$$\frac{D\mathbf{u}_{R}}{Dt} = \frac{\mathbf{F}}{m_{R}}$$

ここで、 \mathbf{u}_{R} は剛体速度、 m_{R} は剛体質量とする。

3. 計算手法

3.1 計算コードの概要

我々の開発したコードでは、大まかに言って3つの計算 を行う。

①移流項の計算は、Lagrange 記述された支配方程式を解 くので Lagrangian 移流となり、物理量を変化させるこ となく点のみ移流させることができる。

②非移流項の計算は、2次精度中心差分を用いた。

③Lagrange 点上の物理量を Euler 格子点上に補間するするとき、3次 Hermite 補間を用いる。詳しくは 3.4 節で述べる。

3. 2 Low Storage Runge-Kutta 法

時間精度を上げるために、J.H.Williamson によって提案された3段階 Runge-Kutta法⁴⁾を採用する(以下 LSRK 法と略す)。

Runge-Kutta 法で時間発展させる基本式 df/dt = v(f)に対して、LSRK 法での一般形は次のように表される。

$$q_i = \beta_i q_{i-1} + v(f_{i-1})$$

 $i = 1,2,3$

 $f_i = f_{i-1} + \alpha_i \Delta t q_i$ ここで、時間精度は係数 α, β の取り方によって変化する。 ここでは、4 次精度となる以下の係数を用いる。

$$\begin{pmatrix} \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{3}, \frac{15}{16}, \frac{8}{15} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1, \beta_2, \beta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, -\frac{5}{9}, -\frac{153}{128} \end{pmatrix}$$

LSRK 法の特徴は、 $f & f_0 \rightarrow f_1, f_1 \rightarrow f_2, f_2 \rightarrow f_3$ と時間発展させる点である。下記の計算スキームでは流体と剛体とその界面を Lagrange 的に解くため、この特徴は都合が良い。

3.3 界面の取り扱い

界面における数値拡散の要因は、界面近傍の値を計算する時に異相の値を用いて計算するためである。よって、本研究では、界面座標 *x_{cp}*を定義し、界面を Lagrange 的に追

跡する。また、界面上に流体領域の値と剛体の値をそれ ぞれ与え、界面2値とする(Fig.1)。

界面の値(f_{cpL} , f_{cpR})は界面近傍の値($f_{x_{icp}}$, $f_{x_{icp+1}}$)を 求める際に必要になる。界面近傍の値の時間進展は、同じ 相の界面の値を用いて計算する。

さらに、界面の値はそれぞれ同じ相における片側差分に より時間進展させる。



Fig.1 Two values given on an interface of a fluid and a rigid body

3. 4 3次 Hermite 補間

本計算スキームでは、離散化された Lagrange 点上の物理 量を 3 次 Hermite 補間で Euler 格子点上に補間する。3 次 Hermite 補間とは点と点の間を 3 次関数で補間する補間法 である。Fig.3 のように物理量 f_{x_i} とその勾配 $\partial_x f_{x_i}$ を定義す る。 今、Lagrange 点である x_i 上の物理量 f_{x_i} とその勾配 $\partial_x f_{x_i}$ と x_{i-1} 上の物理量 $f_{x_{i-1}}$ から、Euler 格子点である *i* 点上の物理量 f_i とその勾配 $\partial_x f_i$ を補間す る場合を考える。

$$F(x) = a(x - x_i)^3 + b(x - x_i)^2 + c(x - x_i) + d$$
4つの拘束条件から

$$\begin{aligned} F(x_i) &= f_{x_i} \\ \frac{\partial F(x_i)}{\partial x} &= \partial_x f_{x_i} \\ F(x_{i-1}) &= f_{x_{i-1}} \\ \frac{\partial F(x_{i-1})}{\partial x} &= \partial_x f_{x_{i-1}} \end{aligned}$$

4つの未知数 a,b,c,d が決定される。

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{2}{\Delta x^3} (f_{x_i} - f_{x_{iup}}) + \frac{1}{\Delta x^2} (\partial_x f_{x_i} + \partial_x f_{x_{iup}}) \\ b_i &= \frac{-3}{\Delta x^2} (f_{x_i} - f_{x_{iup}}) - \frac{1}{\Delta x} (2\partial_x f_{x_i} + \partial_x f_{x_{iup}}) \\ c_i &= \partial_x f_{x_i} \\ d_i &= f_{x_i} \end{aligned}$$

ただし、

$$\begin{split} \Delta x &= x_{iup} - x_i \\ iup &= \begin{cases} i-1 & u_i \geq 0 \\ i+1 & u_i < 0 \end{cases} \end{split}$$

3 次多項式を x で微分すると勾配 $\partial_x f_{x(i)}$ の時間進展が求まる。よって、 $f_{x(i)}$ と $\partial_x f_{x(i)}$ の時間進展は以下のようになる。

$$\begin{split} f_i^{n+1} &= a_i \xi^3 + b_i \xi^2 + c_i \xi + d_i \\ &\partial_x f_i^{n+1} = a_i \xi^2 + b_i \xi + c_i \\ & \mathbb{L} \subseteq \mathbb{C}, \quad \xi = -(x_i - i \cdot \Delta t) ~ \mathbb{C} \not \otimes \mathfrak{Z}_\circ \end{split}$$



Fig.3 The Hermite interpolation to interpolate between a point and points

3.5 計算スキーム

流体部分と界面が Lagrange 的に時間発展した後、各物理 量を Euler 格子点に補間するという手順の一例を 1 次元ス キームのフローチャートで Fig.2 に示す。



Fig.2 Flow chart of the calculation with the interface algorithm

4.超音速流れの数値計算

4.1 超音速流れの理論解との比較

開発したコードの信頼性を得るために、超音速流れの理 論解⁵⁾の比較を行った。

超音速流れの初期状態は、剛体を挟んで左側に高圧流体、 右側に真空を配置した状態である。超音速流れのモデルを Fig.4 に示す。剛体は左側の高圧流体から受ける圧力 P₃ に よって加速される。この時、剛体の左側では膨張波が発生 し、左側へ進行していく。



超音速流れの理論解

$$\frac{P_3}{P_4} = \left[1 - \frac{\gamma_4 - 1}{2} \frac{u_3}{a_4}\right]^{\frac{2\gamma_4}{\gamma_4 - 1}}$$

ここで、 a₄ は高圧流体の初期音速である。

初期条件として、高圧流体は空気 ($\gamma_4 = 1.4$) とし理想気体 を仮定、剛体右側は真空とした時の結果を Fig.5 に示す。数 値解の P_3 は界面上の流体圧力 $P_{cpL(1)}$ を用いてプロットし た。その結果、理論解と良好に一致し、界面における物理 量の計算が可能であると考える。



Fig.5 Comparison with theoretical solution in the hypervelocity flow

4.2 衝撃波が発生する場合の超音速流れ

この節では、界面アルゴリズムを導入することによって、 界面と衝撃波が時々刻々正確に再現されることを示す。

Fig.6 に示すように、初期状態は、剛体を挟んで左側に高 圧流体、右側に低圧流体を配置した状態である。超音速流 れの理論に加えて、剛体の右側に衝撃波が発生し、右側へ 進行していく。



初期条件として、高圧低圧流体ともに空気 ($\gamma_4 = \gamma_1 = 1.4$) とし理想気体を仮定とした。

高圧流体 $(\rho_4, u_4, p_4) = (1.0, 0.0, 1.0)$

低圧流体 $(\rho_1, u_1, p_1) = (0.1, 0.0, 0.1)$

剛体 $(\rho_R, u_3, p_R) = (10.0, 0.0, 0.0001)$

無次元時間 *t* = 0,100,400,800 における密度・圧力・速度の計算結果をそれぞれ Fig.7、Fig.8、Fig.9 に示す。

従来法では界面を正確に再現することができなかったが、 本手法では正確に界面を時々刻々再現していることがわか る。

Fig.10は、衝撃波が発生していることを示すために、Fig.7 の流体部分をクローズアップさせた密度の時間進展である。 衝撃波面を見ると、時間の経過とともに徐々に不連続面へ と近づいていく様子が再現された。

剛体の密度や圧力に関しては、今回は移流のみ計算させ た。しかし、弾性体など固体内部の計算を行いたい場合で も、本手法を用いれば界面に固体領域の値を保持している ので、正確に解くことが可能であると考えている。

5. まとめと今後の展開

流体と剛体の界面を正確に計算するスキームを開発した。 本手法による超音速流れの計算において理論解と良好に一 致する結果が得られた。このことから、界面における物理 量の計算が可能であることが示された。

今後は界面アルゴリズムに関する多次元への拡張を目指 す。1次元での界面は「点」で表されたが、2次元では「線」、 3次元では「面」となる。質量保存を満たすような本来の 線や面を再現することが課題となる。

参考文献

1) C.W.Hirt and B.D.Nichols, J.Comput.Phys. 39 (1981) 201-225.

- 2) T.Yabe and F.Xiao, J.Phys.Soc.Japan 62 (1993) 2537-2540
- 3) S.Osher and J.A.Sethian, J.Comput.Phys. 79 (1988) 12-49.
- 4) J.H.Williamson, J.Comput.Phys. 35 (1980) 48-56.

5) Irvinei.Glass and J.P.Sislian, "Nonstationary flows and

shock wave", CLARENDON PRESS $\boldsymbol{\cdot}$ OXFORD, pp.100-136

平成19年10月31日受理



Fig.7 Time progress of Density in the hypervelocity flow at t = 0, 100, 400, 800



Fig.8 Time progress of Pressure in the hypervelocity flow at t = 0, 100, 400, 800



Fig.9 Time progress of Velocity in the hypervelocity flow at t = 0, 100, 400, 800



Fig.10 The graph that closed up the fluid of Fig.7 to show shockwave