

圧縮性流れの CFD から計算数理学へ

東北大学大学院情報科学研究科 山本 悟

1. はじめに

圧縮性流れの CFD (数値流体力学、Computational Fluid Dynamics) と言え、一般的に解かれている支配方程式は、圧縮性ナビエ・ストークス方程式 (Compressible Navier-Stokes equations, 以下 NS 方程式と呼ぶ) である。この NS 方程式を計算スキーム (Scheme) で解くことにより、その流れ場を把握することができる。より正確に言えば、NS 方程式は、非線形の方程式系 (system of nonlinear equations) であり、質量保存則、運動量保存則、そしてエネルギー保存則から成り立っている連立方程式であり、これらの方程式を連立して解くことにより、解を得ることができる。圧縮性流れの CFD を理解する上で欠かせない知識は、1) NS 方程式が、圧縮性粘性流れを支配する非線形方程式系であり、NS 方程式から粘性項・熱流束項を取り除いた方程式が圧縮性オイラー方程式 (Compressible Euler equations) であること、そして、2) 1次元の圧縮性オイラー方程式が、双曲型の非線形偏微分方程式系 (A system of hyperbolic nonlinear partial differential equations) であるという点である。圧縮性流れの計算スキームは、そのほとんどが、2) の数学的背景に根ざしている。また、2) でのみ証明される数学的手法が、ほぼそのまま、1) の NS 方程式、特に多次元 NS 方程式に対して同様に用いられている。したがって、圧縮性流れの CFD を理解する上で、双曲型偏微分方程式系の数学的な理解はたいへん参考になる。逆にこれを理解していないと圧縮性流れの CFD で提案されている数多くの計算スキームを理解するのは難しいかもしれない。

本講義では、まず 1次元圧縮性オイラー方程式について、その双曲型方程式の性質を見出すための基本的な考え方について説明する。次に、圧縮性流れの計算スキームの基礎ならびに、それら計算スキームの圧縮性 NS 方程式への展開について説明する。最後に、複雑系流れを計算するための基礎方程式とその計算スキーム、ならびに前処理型の基礎方程式や非理想気体状態方程式の導入方法についても触れる。

2. 1次元圧縮性オイラー方程式

そもそも偏微分方程式には、楕円型 (Elliptic)、放物型 (Parabolic)、そして双曲型 (Hyperbolic) の 3種類の型があり、たとえばそれぞれ代表的な方程式に、ラプラス方程式 (Laplace equation)、熱伝導方程式 (Equation of heat conduction)、波動方程式 (Wave equation) があげられる。数学的には、それぞれを支配する特性方程式 (Characteristic equation) の根 (root) が、異なる複素根、重根、異なる実根になる。そして、型ごとに数学的性質に合わせて、固有の計算スキームが提案されている。ここでは、1次元圧縮性オイラー方程式が、いかに双曲型の性質、すなわち、波動方程式の性質を有しているかを示すため、特性の理論 (Theory of Characteristics) に基づき、この方程式を分解してみる。

いま、1次元圧縮性オイラー方程式を保存形で表すと次式のようなになる。

$$Q_t + F_x = 0 \quad (1)$$

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (e + p)u \end{bmatrix} \quad (2)$$

ただし、 Q は未知変数ベクトル、 F は流束ベクトルであり、 ρ 、 u 、 e 、 p はそれぞれ、密度、速度、単位体積当たりの全内部エネルギー、そして静圧を表す。式 (1) は、

$$Q_t + A Q_x = 0 \quad (3)$$

のようにも書き表すことができる。ここで、 A はヤコビ行列で、 $A = \partial F / \partial Q$ で定義され、これを計算すれば、

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -(3 - \gamma)u^2/2 & (3 - \gamma)u & \tilde{\gamma} \\ \tilde{\gamma}u^3 - \gamma ue/\rho & \gamma e/\rho - 3\tilde{\gamma}u^2/2 & \gamma u \end{bmatrix} \quad (4)$$

ただし、 γ は比熱比で、 $\tilde{\gamma} = \gamma - 1$ 。 A を計算する際に注意しなければならないことは、未知変数 ρu を、あくまで 1 つの変数として取り扱わなければならないという点である。 Q のみならず、 F 内の ρu を何か別の記号、たとえば m などに置き換えて計算するとよい。

興味深いのは、このヤコビ行列 A を用いて、 AQ を計算すると、

$$F = AQ \quad (5)$$

となり、結局、

$$F_x = AQ_x = (AQ)_x \quad (6)$$

が成り立つことになる。このように、 F と A の間で成り立つ関係を、オイラーの同次関係 (Euler's homogeneity relation) という。この関係、すなわち、ヤコビ行列 A が偏微分演算子に影響を受けないという性質は、以下の理論の展開においてもきわめて重要である。

一方、式 (1)、もしくは式 (3) は次式のように非保存形に変換することができる。

$$\tilde{Q}_t + \tilde{A}\tilde{Q}_x = 0 \quad (7)$$

ただし、 \tilde{Q} は非保存形の未知変数ベクトル。 \tilde{A} は非保存形のヤコビ行列で、

$$\tilde{Q} = \begin{bmatrix} \rho \\ u \\ p \end{bmatrix}, \quad \tilde{A} = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & 1/\rho \\ 0 & \rho c^2 & u \end{bmatrix} \quad (8)$$

c は音速。式 (7) は非保存形への変換行列 $N = \partial\tilde{Q}/\partial Q$ を式 (3) の両辺に左側から演算することにより導出することができる。 \tilde{A} は非保存形のヤコビ行列であり、 $\tilde{A} = NAN^{-1}$ の関係が成り立つ。特性の理論は非保存形の式 (7) に対して適用され、特性方程式が次式のように得られる。

$$|\tilde{A} - \lambda I| = 0 \quad (9)$$

ここで、式 (9) の根 $\lambda_k (k = 1, 2, 3)$ は \tilde{A} の固有値 (特性速度) であり、計算により、 $\lambda_1 = u$, $\lambda_2 = u + c$, $\lambda_3 = u - c$ が得られる。これら 3 つの固有値は異なる実数であることから式 (7) は全双曲型である。それぞれの固有値は、解曲面上における 1 パラメータ族の特性曲線 (の傾斜) dx/dt に等しく、物理的には波の位相速度 (特性速度) を表しており、 λ_1 は流跡線、 λ_2, λ_3 は圧力波 (音波) に対応する。式 (9) を構成している行列 $\tilde{A} - \lambda I$ は、3 個の行ベクトルまたは列ベクトルからなり、これらすべてに直交するベクトル ℓ^k が存在する。すなわち、

$$\ell^k (\tilde{A} - \lambda_k I) = 0 \quad (10)$$

このベクトルは、 \tilde{A} の固有値 λ_k に対する左固有ベクトルであり、 ℓ^k からなる行列を \tilde{L} 、固有値からなる対角行列を Λ とすれば、次式のように導出される。

$$\Lambda = \begin{bmatrix} u & & \\ & u+c & \\ & & u-c \end{bmatrix}, \quad \tilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1/c^2 \\ 0 & 1 & 1/\rho c \\ 0 & 1 & -1/\rho c \end{bmatrix} \quad (11)$$

結局、 $\tilde{A} = \tilde{L}^{-1}\Lambda\tilde{L}$ が成り立つ。なお、 $\tilde{A} = NAN^{-1}$ であったから、結局、 $A = N^{-1}\tilde{L}^{-1}\Lambda\tilde{L}N$ 。

いま、式 (7) の両辺の左側から \tilde{L} を演算し、特性変数 $\delta W = \tilde{L}\delta\tilde{Q}$ を用いて変形すれば次式が得られる。

$$W_t + \Lambda W_x = 0 \quad (12)$$

Λ は特性曲線 dx/dt からなる対角行列であるから、式 (12) は結局、各特性曲線上で成り立つ常微分方程式系 $dW = 0$ に等しい。各常微分方程式の未知変数は、熱力学の法則や等エントロピーの仮定を用いて特性変数を各特性曲線上で積分することにより導出され、最終的に次のような常微分方程式系が導出される。

$$\begin{aligned} s_t + us_x &= 0 \\ (r^+)_t + (u+c)(r^+)_x &= 0 \\ (r^-)_t + (u-c)(r^-)_x &= 0 \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、 s はエントロピー。また、 $r^\pm = u \pm 2c/\tilde{\gamma}$ はリーマン変数もしくはリーマン不変量 (Riemann invariants) と呼ばれる。これらを物理的に解釈すれば、流跡線に沿ってエントロピー、圧力波に沿ってリーマン変数がそれぞれ保存されるということになる。すなわち、1次元圧縮性オイラー方程式は、特性の理論により各特性曲線上で成り立つ、エントロピーとリーマン不変量の独立した3つの常微分方程式に変換されることになる。現在一般的に使われている圧縮性流れの衝撃波捕獲法 (Shock capturing method) はまさにこの考え方を基本としている。厳密には、ここで紹介したものはあくまで2独立変数の場合の特性の理論であり、多次元問題には厳密には適用できない。しかしながら、実際には2独立変数の特性の理論が、多次元問題、特に多次元のNS方程式にも適用されている事実も知っておく必要がある。

3. 流束分離 (Flux Splitting)

先に紹介した、エントロピーならびにリーマン変数からなる常微分方程式系は、非保存形でかつ等エントロピー流れが仮定されているため、実際にはこれを直接解いて圧縮性流れを計算する事例はほとんどない。これまでに提案された計算スキームのほとんどは、むしろ保存形の1次元圧縮性オイラー方程式に対して、特性の理論に基づきながら構築されている。その中でも、流束分離 (Flux splitting) の考え方はその根底をなすものであり、圧縮性流れのCFDを理解する上で、これまたその理解は欠かせない。その中でも、流束ベクトル分離法 (Flux-vector splitting method) の構成式は、特性の理論にほぼ忠実に導出することができる。

まず、式 (1) は、空間方向に保存形で次のように離散化される。

$$Q_t = -(F_{j+1/2} - F_{j-1/2})/\Delta x \quad (14)$$

$F_{j\pm 1/2}$ は数値流束であり、特性の理論に基づいた計算スキームにより計算される。

Steger-Warmingの流束ベクトル分離法⁽¹⁾では、流束ベクトル F を固有値の符号にしたがって次のように分離する。

$$\begin{aligned} F &= F^+ + F^- \\ F^\pm &= A^\pm Q = N^{-1} \tilde{L}^{-1} \Lambda^\pm \tilde{L} N Q \end{aligned} \quad (15)$$

Λ^\pm は固有値の対角行列をその符号によって分離したもので、

$$\Lambda^\pm = \begin{bmatrix} \lambda_1^\pm & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^\pm & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^\pm \end{bmatrix} \quad (16)$$

ただし、 $\lambda_k^\pm = (\lambda_k \pm |\lambda_k|)/2$ 。式 (15) の流束ベクトル F^\pm は、最終的に次のようなサブベクトルの和として導出される。

$$F^\pm = \frac{\tilde{\gamma}}{\gamma} \rho \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ u^2/2 \end{bmatrix} \lambda_1^\pm + \frac{\rho}{2\gamma} \begin{bmatrix} 1 \\ u+c \\ h+cu \end{bmatrix} \lambda_2^\pm + \frac{\rho}{2\gamma} \begin{bmatrix} 1 \\ u-c \\ h-cu \end{bmatrix} \lambda_3^\pm \quad (17)$$

ただし、 $h = (e+p)/\rho$ 。この流束ベクトル F^\pm を構成する固有値の符号にしたがって数値流束 $F_{j+1/2}$ は上流化される。たとえば、すべての固有値が正の値、すなわち超音速の場合に1次精度で、

$$F_{j+1/2} = F_j^+ = F_j \quad (18)$$

のように計算され、結局上流の点 j の流束ベクトル F_j が数値流束の値として与えられることになり、すべての方程式に対して完全に上流化され、特性の理論に忠実に計算することができる。

しかしながら、この方法はマッハ数 $M = -1, 0, 1$ で数値流束の勾配が不連続になる点が指摘されており、遷音速領域にはそのまま適用することができない。van Leerはこれを克服するために、流束ベクトル F がなめらかに変化する分離流束 F^\pm を提案した⁽²⁾。ただし、この方法も、あくまで亜音速領域が適用範囲で、超音速領域には、Steger-Warmingの方法を用いる。いずれの方法も、粘性流れに適用した場合に境界層内で過度の数値粘性が生じることも指摘されている。これは一見これら方法の欠点のようにも思えるが、よくよく考えてみると、特性の理論は1次元圧縮性オイラー方程式に対してのみ厳密であ

り、NS 方程式はそもそも適用範囲外である。ユーザーはむしろ計算スキームが持っているこのような限界をよく知った上でこれらの方法を利用することが要求される。

4. 流束差分法 (Flux Difference Splitting)

Steger-Warming や van Leer の方法が、流束そのものを固有値の符号に応じて分離し上流化したのに対し、流束差分法では、流束の差分が分離され上流化される。Roe が提案した流束差分法⁽³⁾では固有値の符号に応じて分離されたヤコビ行列 A^\pm により流束差を次のように定義している。

$$\Delta F = A^+ \Delta Q + A^- \Delta Q \quad (19)$$

これを、式 (1) の空間方向の離散化に適用すれば 1 次精度上流差分の形で次のようになる。

$$Q_t = -[(A^+ \Delta Q)_{j-1/2} + (A^- \Delta Q)_{j+1/2}] / \Delta x \quad (20)$$

ただし、 $\Delta Q_{j+1/2} = Q_{j+1} - Q_j$ 。特性の理論から、左右に伝播する波を表している $A^\pm \Delta Q$ は次のように変形される。

$$\begin{aligned} A^\pm \Delta Q &= L^{-1} \Lambda^\pm L \Delta Q \\ &= L^{-1} \Lambda^\pm \Delta W \\ &= \sum_k \lambda_k^\pm \Delta w_k r^k \end{aligned} \quad (21)$$

ここで、 $L = \tilde{L}N$ は保存形の左固有ベクトルの行列。 $\Delta W = (\Delta w_1, \Delta w_2, \Delta w_3)$ は特性変数のベクトル。 r^k は右固有ベクトルの成分を表す。Roe の方法では、 A^\pm が Q_j と Q_{j+1} のみの関数と定義され、式 (19) の保存性ならびに非線形性を満足するために次のような特殊な平均操作 (Roe 平均) を施している。

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \sqrt{\rho_{j+1} \rho_j} \equiv R_{j+1/2} \rho_j \\ \bar{u} &= \frac{(u\sqrt{\bar{\rho}})_{j+1} + (u\sqrt{\bar{\rho}})_j}{\sqrt{\bar{\rho}_{j+1}} + \sqrt{\bar{\rho}_j}} = \frac{R_{j+1/2} u_{j+1} + u_j}{R_{j+1/2} + 1} \\ \bar{h} &= \frac{(h\sqrt{\bar{\rho}})_{j+1} + (h\sqrt{\bar{\rho}})_j}{\sqrt{\bar{\rho}_{j+1}} + \sqrt{\bar{\rho}_j}} = \frac{R_{j+1/2} h_{j+1} + h_j}{R_{j+1/2} + 1} \\ \bar{c}^2 &= \bar{\gamma}(\bar{h} - \bar{u}^2/2) \end{aligned} \quad (22)$$

これらを用いて、固有値ならびに右固有ベクトルは次のように計算される。

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_1 &= \bar{u}, \quad \bar{\lambda}_2 = \bar{u} + \bar{c}, \quad \bar{\lambda}_3 = \bar{u} - \bar{c} \\ \bar{r}^1 &= \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} \\ \bar{u}^2/2 \end{bmatrix}, \quad \bar{r}^2 = \frac{\bar{\rho}}{2\bar{c}} \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} + \bar{c} \\ \bar{h} + \bar{c}\bar{u} \end{bmatrix}, \quad \bar{r}^3 = -\frac{\bar{\rho}}{2\bar{c}} \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{u} - \bar{c} \\ \bar{h} - \bar{c}\bar{u} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (23)$$

また、特性変数は、

$$\begin{aligned} (\Delta w_1)_{j+1/2} &= \Delta \rho_{j+1/2} - \Delta p_{j+1/2} / \bar{c}^2 \\ (\Delta w_2)_{j+1/2} &= \Delta u_{j+1/2} + \Delta p_{j+1/2} / \bar{\rho} \bar{c}^2 \\ (\Delta w_3)_{j+1/2} &= \Delta u_{j+1/2} - \Delta p_{j+1/2} / \bar{\rho} \bar{c}^2 \end{aligned} \quad (24)$$

ただし、 $\Delta(\cdot)_{j+1/2} = (\cdot)_{j+1} - (\cdot)_j$ 。Roe の方法では、最終的に空間方向が次式のように離散化される。

$$Q_t = -\left[\sum_k (\bar{\lambda}_k^+ \Delta w_k \bar{r}^k)_{j-1/2} + \sum_k (\bar{\lambda}_k^- \Delta w_k \bar{r}^k)_{j+1/2} \right] / \Delta x \quad (25)$$

Steger-Warming や van Leer の流束分離法が粘性流れに適用された場合に境界層内で過度の数値粘性が生じることを説明したが、Roe の流束差分法では、この問題は生じない。しかしながら、この方法では極超音速流れの離脱衝撃波をうまく計算できないという別の問題が指摘されている。Liou ら⁽⁴⁾は、これら欠点を克服するために対流と圧力の項を分離して考える AUSM (Advection Upstream Splitting Method) を提案した。AUSM は式が簡単でかつ頑丈 (robust) なので特に極超音速粘性流れの計算に適している。ところが、この方法についても問題点がいくつか指摘されており、改良版が提案されている。

また、超音速領域では、やはり Steger-Warming 法が用いられる。このように、完璧な計算スキームなどはなく、それぞれ得意不得意や適用範囲があることから、その事実を知っておくことも重要である。

5. リーマン問題 (Riemann Problem)

リアマン問題は局所的な 1 次元衝撃波管問題である。流れ場を局所的なセル $[x_{j-1/2}, x_{j+1/2}]$ に分割し、各セルに初期値 $\tilde{Q}(x_j, t^n)$ を与えた場合の、 $\tilde{Q}(x_j, t^{n+1})$ を求める。ただし、 \tilde{Q} は一般式で次のように定義される。

$$\tilde{Q}_j = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \tilde{Q}(x) dx \quad (26)$$

セル境界 $x_{j+1/2}$ の左右では、一般的に異なる値 \tilde{Q}_L, \tilde{Q}_R になる。 $\Delta \tilde{Q} = \tilde{Q}_R - \tilde{Q}_L$ は解の跳びであり、この境界からエントロピー波と 2 つの圧力波が発生するとして固有値の符号に応じた上流化が施される。Godunov スキーム⁽⁵⁾ は \tilde{Q}_j を区分的定数値関数とした。この方法は 1 次精度ではあるが特性の理論に忠実に計算するため厳密リアマン解を得る。PPM(Piecewise Parabolic Method)⁽⁶⁾ は、 \tilde{Q}_j を多項式近似して Godunov スキームを高次精度に拡張した方法である。しかしながら、これらの解法は計算アルゴリズムがかなり複雑である。Osher スキーム⁽⁷⁾ や前述の Roe の流束差分法は、特性の理論を近似的に取り扱うため近似リアマン解法と呼ばれる。この場合に数値流束 $F_{j+1/2}$ は、 \tilde{Q}_L, \tilde{Q}_R の関数として計算され、たとえば Roe の近似リアマン解法では、一般的に式 (25) の代わりに対称性を考慮した次式を用いる。

$$\begin{aligned} F_{j+1/2} &= [F(\tilde{Q}_L) + F(\tilde{Q}_R)]/2 + |A(\tilde{Q}_L, \tilde{Q}_R)| (\tilde{Q}_R - \tilde{Q}_L)/2 \\ &= [F(\tilde{Q}_L) + F(\tilde{Q}_R)]/2 + \sum_k |\bar{\lambda}_k| \Delta w_k \bar{r}^k / 2 \end{aligned} \quad (27)$$

\tilde{Q} は式 (7) と同じく、初期変数ベクトル (ρ, u, p) 。一方、流束分離法にリアマン解法を適用すると、

$$F_{j+1/2} = F^+(\tilde{Q}_L) + F^-(\tilde{Q}_R) \quad (28)$$

となる。

6. MUSCL 補間

衝撃波を正確に捕獲するためには、数値流束 $F_{j\pm 1/2}$ を高次精度でかつ安定に計算する必要がある。MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws)⁽⁸⁾ は、定数値であった Godunov スキームの区分的関数を 1 次関数に拡張し、数値流束を構成する初期変数 (ρ, u, p) を高次精度で補間する方法である。式 (27) の \tilde{Q}_L, \tilde{Q}_R は、次式により計算される。

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_L &= \tilde{Q}_j + \frac{1-\kappa}{4} \Delta \tilde{Q}_{j-1/2} + \frac{1+\kappa}{4} \Delta \tilde{Q}_{j+1/2} \\ \tilde{Q}_R &= \tilde{Q}_{j+1} - \frac{1-\kappa}{4} \Delta \tilde{Q}_{j+3/2} - \frac{1+\kappa}{4} \Delta \tilde{Q}_{j+1/2} \end{aligned} \quad (29)$$

ここで、 $\kappa = -1$ で 2 次精度上流差分、 $\kappa = 1/3$ で 3 次精度重み付き上流差分となる。また、AUSM の初期変数も MUSCL により高次補間される。筆者らは、区分的関数に高次関数を用いた 4 次 (最大 5 次) 精度 MUSCL を提案している⁽⁹⁾。

7. TVD 条件と制限関数

von Neumann の安定性理論は線形のスカラー方程式の安定条件であるのに対し、TVD (Total Variation Diminishing) 条件は非線形のスカラー方程式に対する安定性理論のひとつである。TVD 条件を満足する計算スキームのことを TVD スキームという。Harten⁽¹⁰⁾ は、1 次元スカラー保存則の TVD 条件を導出し、それを満足する TVD スキームを提案した。

いま、次の 1 次元スカラー保存則を考える。

$$u_t + f_x = 0 \quad (30)$$

u は未知変数で、 $f = f(t, x, u)$ は非線形の関数である。TV すなわち全変化量は、次のように定義される。

$$TV \equiv \int \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| dx \quad (31)$$

離散量で表せば

$$TV(u) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |u_{j+1} - u_j| \quad (32)$$

これより TVD 条件は次のように定義される。

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (33)$$

この不等式が成り立つ場合に TV 安定もしくは TVD 条件が満足されたことになる。これは TV 安定のもとでは、初期値問題の計算の過程で最大値の増加、最小値の減少、新たな極値の発生を許さないことを意味する。ただし、TVD 条件は必ずしもエントロピー条件を満足しないため、次のようなエントロピー条件を併用している。

$$a_R < C < a_L \quad (34)$$

ここで、 C は不連続の伝播速度、 a_L, a_R は不連続の左側と右側領域の特性に沿って伝播する波の位相速度である。この式は、不連続が圧縮波の中に形成されることを認め、逆に膨張波の中に形成されることを認めないというものである。次に式 (30) の空間方向のみを差分近似すれば

$$\begin{aligned} u_t &= -(\tilde{f}_{j+1/2} - \tilde{f}_{j-1/2})/\Delta x \\ &\equiv (C_{j+1/2}^- \Delta u_{j+1/2} + C_{j-1/2}^+ \Delta u_{j-1/2})/\Delta x \end{aligned} \quad (35)$$

ただし、

$$\begin{aligned} C_{j+1/2}^- \Delta u_{j+1/2} &= \tilde{f}_{j+1/2} - f_j, & C_{j-1/2}^+ \Delta u_{j-1/2} &= f_j - \tilde{f}_{j-1/2} \\ C_{j+1/2}^+ + C_{j+1/2}^- &= \frac{f_{j+1} - f_j}{\Delta u_{j+1/2}} \equiv a_{j+1/2} \end{aligned} \quad (36)$$

式 (35) を陽的オイラー前進法で時間積分すれば、

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \tau(C_{j+1/2}^- \Delta u_{j+1/2} + C_{j-1/2}^+ \Delta u_{j-1/2})^n \quad (37)$$

$\tau = \Delta t / \Delta x$ 。これより、

$$TV(u^{n+1}) = \sum_j |u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}|, \quad TV(u^n) = \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n| \quad (38)$$

を計算して互いに比較すれば、結局、

$$\tau(C_{j+1/2}^+ - C_{j+1/2}^-) \leq 1, \quad C_{j+1/2}^- \leq 0, \quad C_{j+1/2}^+ \geq 0 \quad (39)$$

を満足すれば、 $TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$ となり TVD 条件を満足することになる。条件式 (39) の中で最初の条件は、線形安定性理論から導き出される CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件に等しく、TVD 条件

を満足するとは、CFL 条件を満足し、かつ $C_{j+1/2}^- \leq 0$, $C_{j+1/2}^+ \geq 0$ を満足するということである。1 次精度上流差分スキームはこの TVD 条件を無条件で満足する TVD スキームである。TVD スキームは、あくまで 1 次元スカラー保存則に対して厳密なものであるが、実際には多次元のオイラーならびに NS 方程式に対しても用いられているのが現状である。

一方、高次精度の差分スキームで TVD 条件を満足するためには、制限関数 (limiter function) が導入される。2 次精度上流差分スキーム、Lax-Wendroff (L-W) スキーム⁽¹¹⁾ ならびに Warming-Beam (W-B) スキーム⁽¹²⁾ などから、TVD 条件を満足するための制限関数の十分条件が求められて、これを満足する Minmod limiter⁽¹⁰⁾、van Leer's limiter⁽¹³⁾、Roe's Superbee limiter⁽¹⁴⁾、Chakravarthy-Osher's (C-O) limiter⁽¹⁵⁾ などの制限関数が提案されている。筆者らは 2 段階の制限関数を導入することで 4 次精度 MUSCL を TVD スキームに拡張している⁽⁹⁾。

8. 圧縮性 NS 方程式

上述のように、実際の圧縮性流れは、三次元の圧縮性 NS 方程式を解いて初めてその流れが把握できる。また、上述の各種計算スキームは、ほぼそのままこの方程式系に適用されているのも事実である。その三次元圧縮性 NS 方程式は、デカルト座標系で次のように定義される。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} = 0 \quad (40)$$

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ e \end{bmatrix}, \quad F_j = \begin{bmatrix} \rho u_j \\ \rho u_1 u_j + \delta_{1j} p - \tau_{j1} \\ \rho u_2 u_j + \delta_{2j} p - \tau_{j2} \\ \rho u_3 u_j + \delta_{3j} p - \tau_{j3} \\ (e + p) u_j - \tau_{jk} u_k - \kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \end{bmatrix}, \quad (j = 1, 2, 3)$$

ここで、 $\rho, u_i (i = 1, 2, 3), e$ はそれぞれ、密度、物理速度成分、単位体積当りの全内部エネルギー。 $p, \tau_{jk} (j, k = 1, 2, 3), \kappa, T$ はそれぞれ、全圧、粘性応力テンソル成分、熱伝導率、静温。

9. 一般曲線座標系への変換

測度と呼ばれる ξ_x, ξ_y, \dots などの関係式と変換のヤコビアン J を用いて、デカルト座標系の基礎方程式 (40) は以下のように変形される。

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}_j}{\partial \xi_j} + \hat{S} = 0 \quad (41)$$

$$\hat{Q} = J \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ e \end{bmatrix}, \quad \hat{F}_j = J \begin{bmatrix} \rho U_j \\ \rho u_1 U_j + (\partial \xi_j / \partial x_1) p \\ \rho u_2 U_j + (\partial \xi_j / \partial x_2) p \\ \rho u_3 U_j + (\partial \xi_j / \partial x_3) p \\ (e + p) U_j \end{bmatrix}, \quad (j = 1, 2, 3)$$

$$\hat{S} = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \sigma_j \end{bmatrix}$$

$U_i (i = 1, 2, 3)$ は反変速度で、 $U_i = (\partial \xi_i / \partial x_j) u_j$ 。また、 $\sigma_j = \tau_{j\ell} u_\ell + \kappa \frac{\partial T}{\partial x_j}$ 。

10. 基礎方程式の追加

熱化学非平衡とか非平衡凝縮流れなどを解くためには、圧縮性 NS 方程式 (41) に新たな支配方程式や数理モデルを追加して解かなければならない。たとえば、次式のような方程式系を定義することができる。なお、簡単化のためははずしてある。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \mathcal{F}(Q) = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial \xi_j} + S + H = 0 \quad (42)$$

$$Q = J \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ e \\ q_s \end{bmatrix}, \quad F_j = J \begin{bmatrix} \rho U_j \\ \rho u_1 U_j + \partial \xi_j / \partial x_1 p \\ \rho u_2 U_j + \partial \xi_j / \partial x_2 p \\ \rho u_3 U_j + \partial \xi_j / \partial x_3 p \\ (e + p) U_j \\ q_s U_j \end{bmatrix}, \quad (j = 1, 2, 3)$$

$$S = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \sigma_j \\ \sigma_{sj} \end{bmatrix}$$

Q は未知変数ベクトル。 F_j ならびに S は流束ベクトルならびに拡散ベクトル。 H は生成ベクトル。未知変数ベクトル Q は、たとえば非平衡凝縮流れの場合には、 $q_s (s = 1, 2, 3)$ に対して、 $(q_1, q_2, q_3) = (\rho_v, \rho\beta, \rho n)$ 。 ρ_v は水蒸気の密度、 β は液滴の質量分率、 n は液滴の数密度。また、生成ベクトルは、 $H = -J[0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ -\Gamma_c \ \Gamma_c \ \rho I_c]^T$ 。 Γ_c は凝縮により発生した液滴の質量生成率、 I_c は均一核生成率と定義することができる。 σ_{sj} は、追加される基礎方程式の拡散項。ただし、ここで説明する非平衡凝縮流れの場合にはゼロ。

11. 流束ベクトル分離

式 (42) は、時間進行法 (Time-marching method) により連立して解かれる。ここでは、まず空間方向の離散化手法として、流束ベクトル分離法を式 (42) に適用する。

各座標方向 ($i = 1, 2, 3$) における区分的領域 ℓ と $\ell + 1$ のインターフェース $\ell + 1/2$ で、数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は、特性速度の符号により、 $(F_i^\pm)_{\ell+1/2}$ に流束分離することができる。 F_i と Q の間には 1 次の同次関係が成り立つので、 $F_i = A_i Q$ ならびに $\delta F_i = A_i \delta Q$ 。ただし、 A_i はヤコビ行列。このとき、数値流束 $(F_i^\pm)_{\ell+1/2}$ ならびに $(\delta F_i^\pm)_{\ell+1/2}$ は、 $(A_i^\pm)_{\ell+1/2}$ ならびに Q^M を用いて一般形で表すことができる。 Q^M の添え字 M は、MUSCL 補間の方向 L もしくは R を意味する。 $(A_i^\pm)_{\ell+1/2} Q^M$ は、最終的には 3 つのサブベクトルの和により次式のように変形される。

$$(A_i^\pm)_{\ell+1/2} Q^M = \lambda_{i1}^\pm Q^M + \frac{\lambda_{ia}^\pm}{c\sqrt{g_{ii}}} Q_{ia} + \frac{\lambda_{ib}^\pm}{c^2} Q_{ib} \quad (43)$$

$$\lambda_{i1} = U_i, \quad \lambda_{i4} = U_i + c\sqrt{g_{ii}}, \quad \lambda_{i5} = U_i - c\sqrt{g_{ii}}$$

$$\lambda_{ij}^\pm = (\lambda_{ij} \pm |\lambda_{ij}|)/2, \quad \lambda_{ia}^\pm = (\lambda_{i4}^\pm - \lambda_{i5}^\pm)/2$$

$$\lambda_{ib}^\pm = (\lambda_{i4}^\pm + \lambda_{i5}^\pm)/2 - \lambda_{i1}^\pm$$

$$Q_{ia} = \bar{p} Q_{ic} + \Delta \bar{m}_i Q_d, \quad Q_{ib} = (\Delta \bar{m}_i c^2 / g_{ii}) Q_{ic} + \bar{p} Q_d$$

$$\bar{p} = Q_p \cdot Q^M, \quad \Delta \bar{m}_i = Q_{im} \cdot Q^M$$

ここで、 $g_{ii} = \nabla \xi_i \cdot \nabla \xi_i$ 。サブベクトル Q_{ic} , Q_p , Q_{im} ならびに Q_d は、以下のように定義される。

$$Q_{ic} = [0 \ \partial \xi_i / \partial x_1 \ \partial \xi_i / \partial x_2 \ \partial \xi_i / \partial x_3 \ U_i \ 0]^T$$

$$Q_p = [\phi^2 \ -\tilde{\gamma} u_1 \ -\tilde{\gamma} u_2 \ -\tilde{\gamma} u_3 \ \tilde{\gamma} \ 0]^T$$

$$Q_{im} = [-U_i \ \partial \xi_i / \partial x_1 \ \partial \xi_i / \partial x_2 \ \partial \xi_i / \partial x_3 \ 0 \ 0]^T$$

$$Q_d = [1 \ u_1 \ u_2 \ u_3 \ (\chi^2 + c^2) / \tilde{\gamma} \ q_s / \rho]^T$$

ここで、非平衡凝縮流れの場合には、 $\phi^2 = \tilde{\gamma}u_j u_j/2 - h_{0m}$. h_{0m} は凝縮に伴う生成エンタルピー、いわゆる潜熱。 $(\chi^2 + c^2)/\tilde{\gamma} = (e + p)/\rho$. なお、これら式変形の方法については、文献 [16][17] にも説明している。また、非平衡凝縮に関する筆者らの研究は、文献 [18][19] などに報告している。

12. 流束差分法

式 (42) に、Roe の近似リーマン解法⁽³⁾ に基づく流束差分法を適用してみる。その際、前述の流束ベクトル分離式 (43) に基づき数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は次式のように導出できる。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = \frac{1}{2}[F_i(Q_{\ell+1/2}^L) + F_i(Q_{\ell+1/2}^R) - |(A_i)_{\ell+1/2}|(Q_{\ell+1/2}^R - Q_{\ell+1/2}^L)] \quad (44)$$

$|(A_i)_{\ell+1/2}| Q^M$ ($i = 1, 2, 3, M = L, R$) は Roe 平均を施して次式で計算される。

$$|(A_i)_{\ell+1/2}| Q^M = |\bar{\lambda}_{i1}| Q^M + \frac{|\bar{\lambda}_{ia}|}{\bar{c}\sqrt{g_{ii}}} \bar{Q}_{ia} + \frac{|\bar{\lambda}_{ib}|}{\bar{c}^2} \bar{Q}_{ib} \quad (45)$$

ただし、

$$|\bar{\lambda}_{ia}| = \frac{1}{2}(|\bar{\lambda}_{i4}| - |\bar{\lambda}_{i5}|), \quad |\bar{\lambda}_{ib}| = \frac{1}{2}(|\bar{\lambda}_{i4}| + |\bar{\lambda}_{i5}|) - |\bar{\lambda}_{i1}|$$

また、

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{ia} &= \bar{p}\bar{Q}_{ic} + \Delta\bar{m}_i\bar{Q}_d, \quad \bar{Q}_{ib} = (\Delta\bar{m}_i\bar{c}^2/g_{ii})\bar{Q}_{ic} + \bar{p}\bar{Q}_d \\ \bar{p} &= \bar{Q}_p \cdot Q^M, \quad \Delta\bar{m}_i = \bar{Q}_{im} \cdot Q^M \end{aligned}$$

ここで、 $\bar{\cdot}$ の付いた変数は Roe 平均される。

13. LU-SGS スキーム

Yoon らにより提案された LU-SGS スキーム⁽²⁰⁾ にニュートン反復法とクランク・ニコルソン法を組み込んだ、時間最大 2 次精度 LU-SGS スキームを時間積分に適用してみると、次式が導出される⁽²¹⁾。

$$\begin{aligned} D\Delta Q^{*m} &= RHS^m + \theta_L \Delta t G^+(\Delta Q^{*m}) \\ \Delta Q^m &= \Delta Q^{*m} - D^{-1}\theta_L \Delta t G^-(\Delta Q^m) \\ G^+(\Delta Q^{*m}) &= (A_1^+ \Delta Q^{*m})_{i-1,j,k} + (A_2^+ \Delta Q^{*m})_{i,j-1,k} + (A_3^+ \Delta Q^{*m})_{i,j,k-1} \\ G^-(\Delta Q^m) &= (A_1^- \Delta Q^m)_{i+1,j,k} + (A_2^- \Delta Q^m)_{i,j+1,k} + (A_3^- \Delta Q^m)_{i,j,k+1} \end{aligned} \quad (46)$$

ただし、

$$\begin{aligned} D &= I + \Delta t[r(\hat{A}_i) + d(S + H)] \\ r(\hat{A}) &= \alpha_c \max[\lambda(\hat{A})] \\ \Delta Q^m &= Q^{m+1} + Q^m \\ RHS^m &= -(Q^m - Q^n) - \Delta t[\mathcal{F}(\hat{Q}^m) + \mathcal{F}(\hat{Q}^n)]/2 \end{aligned}$$

α_c は経験定数で、 $\alpha_c \geq 1.0$. $\lambda(\hat{A})$ は \hat{A} の固有値を意味する。 $d(S + H)$ は、厳密には粘性・拡散項や生成項のヤコビ行列のスペクトル半径であるが、ここでは、 $\alpha_v(\mu + \mu_t + \kappa)g_{ii}/(\rho\Delta\xi_i)$ と近似する。ただし、 α_v は経験定数であるが、筆者らは 2.0 としている。下添字 (i, j, k) は、時間差分項が定義されている空間格子点。これら非対角項の計算にも、前述の流束ベクトル分離式を用いることができる。その際、式 (43) の Q^M を ΔQ に置き換えた式を用いる。

流束ベクトル分離式 (43) は、上述のようにきわめて汎用性の高い式であり、導出のノウハウを一旦身に付けてしまえば、新たな複雑系流れ問題を解くための支配方程式の追加の際にも簡単に式を導出することができる。筆者らは、熱化学非平衡流れ、非平衡凝縮流れに加えて、電磁プラズマ流れの流束ベクトル分離式もすでに導出して実際の流れを計算した。この場合には、マクスウェル方程式とオームの法則から導出される磁場の誘導方程式が新たに支配方程式として追加される。

14. 前処理法 (Preconditioning method)

非平衡凝縮流れの基礎方程式を非圧縮流れもしくは非常に遅い流れに適用するために、前処理法に基づく流束ベクトル分離式を導出したので次に説明する。非圧縮性流れの数値計算には、これまでMAC法に基づく方法が一般的に使用されて、食い違い格子上で運動方程式から導出された圧力のポアソン方程式が解かれた。一方では、圧縮性流れの計算コードに擬似密度を導入した擬似圧縮性法なども使用されているが、Choi and Merkle⁽²²⁾ は、擬似圧縮性法をさらに改良した前処理法を提案している。Weiss and Smith⁽²³⁾ は、この方法をさらに一般化した。ここでは、Weissらの方法に忠実に前処理型の基礎方程式を導出する。すなわち、式(42)は、前処理行列 Γ を用いて次式のように変形される。

$$\Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \mathcal{F}(\hat{Q}) = \Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial \xi_j} + S + H = 0 \quad (47)$$

ただし、

$$\hat{Q} = J[p \ u_1 \ u_2 \ u_3 \ T \ q_s/\rho]^T$$

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \theta & 0 & 0 & 0 & \rho_\Gamma & 0 \\ \theta u_1 & \rho & 0 & 0 & \rho_\Gamma u_1 & 0 \\ \theta u_2 & 0 & \rho & 0 & \rho_\Gamma u_2 & 0 \\ \theta u_3 & 0 & 0 & \rho & \rho_\Gamma u_3 & 0 \\ \theta h - 1 & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho u_3 & \rho_\Gamma h + \rho C_p & 0 \\ \theta q_s/\rho & 0 & 0 & 0 & \rho_\Gamma & q_s/\rho \end{bmatrix}$$

θ は前処理パラメータで、 $\theta = (1/U_r^2 - \rho_\Gamma/\rho C_p)$ で定義される。たとえば、式(43)は、次式のように変形される。

$$\begin{aligned} (\hat{A}_i^\pm)_{\ell+1/2} \hat{Q}^M &= (\Gamma L_i^{-1} \Lambda_i^\pm L_i)_{\ell+1/2} \hat{Q}^M \\ &= \hat{\lambda}_{i1}^\pm \Gamma \hat{Q}^M + \frac{\hat{\lambda}_{ia}^\pm}{\hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}} \hat{Q}_{ia} + \frac{\hat{\lambda}_{ib}^\pm}{\hat{c}_i^2} \hat{Q}_{ib} \end{aligned} \quad (48)$$

ただし、 $F_j = \hat{A}_j \hat{Q}$ 。いま、ここでは、Roeの近似リーマン解法に基づく流束差分式をベクトル形で導出することにすれば、数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は次式で表される。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = \frac{1}{2} [F_i(Q_{\ell+1/2}^L) + F_i(Q_{\ell+1/2}^R) - |(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}| (\hat{Q}_{\ell+1/2}^R - \hat{Q}_{\ell+1/2}^L)] \quad (49)$$

$|(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}| \hat{Q}^M$ ($i = 1, 2, 3, M = L, R$) はサブベクトルの和の形で次式のように導出される。

$$|(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}| \hat{Q}^M = |\hat{\lambda}_{i1}| \Gamma \hat{Q}^M + \frac{|\hat{\lambda}_{ia}|}{\hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}} \hat{Q}_{ia} + \frac{|\hat{\lambda}_{ib}|}{\hat{c}_i^2} \hat{Q}_{ib} \quad (50)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}_{i1} &= U_i \\ \hat{\lambda}_{i4} &= \frac{(1+\alpha)U_i}{2} + \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}} \\ \hat{\lambda}_{i5} &= \frac{(1+\alpha)U_i}{2} - \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}} \\ |\hat{\lambda}_{ia}| &= \frac{1}{2} (|\hat{\lambda}_{i4}| - |\hat{\lambda}_{i5}|), \quad |\hat{\lambda}_{ib}| = \frac{(\ell_i^- |\hat{\lambda}_{i4}| - \ell_i^+ |\hat{\lambda}_{i5}|)}{\ell_i^- - \ell_i^+} - |\hat{\lambda}_{i1}| \\ \hat{c}_i &= \frac{1}{2} \sqrt{U_i^2 (1-\alpha)^2 / g_{ii} + 4U_r^2} \\ \ell_i^\pm &= \frac{\rho U_r^2}{U_i(\alpha-1)/2 \pm \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}} \\ \alpha &= U_r^2 (\rho_p + \frac{\rho_\Gamma}{\rho C_p}) \end{aligned}$$

また、

$$\begin{aligned}\hat{Q}_{ia} &= \hat{q}_1 Q_{ic} + \rho \hat{U}_i Q_d \\ \hat{Q}_{ib} &= (\rho \hat{U}_i \hat{c}_i^2 / g_{ii}) Q_{ic} + (\hat{q}_1 \hat{c}_i^2 / U_r^2) Q_d \\ \hat{U}_i &= (\partial \xi_i / \partial x_j) \hat{q}_{j+1} \quad (j = 1, 2, 3)\end{aligned}$$

ここで、 \hat{q}_j は、 \hat{Q} の j 番目の要素。 Q_{ic}, Q_d は、式 (43) で使用しているものと同様のものが使用できる。前処理法は、LU-SGS スキームにも適用することができる。すなわち、

$$\Gamma D \Delta \hat{Q}^* = RHS + \Delta t G^+ (\Delta \hat{Q}^*) \quad (51)$$

$$\Delta \hat{Q} = \Delta \hat{Q}^* - \Gamma^{-1} D^{-1} \Delta t G^- (\Delta \hat{Q}) \quad (52)$$

対角行列 D ならびに RHS は、

$$\begin{aligned}D &= I + \Delta t [r(\hat{A}_i) + d(S + H)] \\ r(\hat{A}) &= \alpha_c \max[\lambda(\hat{A})] \\ RHS &= -\Delta t \mathcal{F}(\hat{Q}^n)\end{aligned}$$

G^\pm は、非対角項からなる流束の時間差分項で、

$$\begin{aligned}G^+(\Delta \hat{Q}^*) &= (\hat{A}_1^+ \Delta \hat{Q}^*)_{i-1,j,k} + (\hat{A}_2^+ \Delta \hat{Q}^*)_{i,j-1,k} + (\hat{A}_3^+ \Delta \hat{Q}^*)_{i,j,k-1} \\ G^-(\Delta \hat{Q}) &= (\hat{A}_1^- \Delta \hat{Q})_{i+1,j,k} + (\hat{A}_2^- \Delta \hat{Q})_{i,j+1,k} + (\hat{A}_3^- \Delta \hat{Q})_{i,j,k+1}\end{aligned}$$

ここで、下添字 (i, j, k) は、時間差分項が定義されている空間格子点。これらの項は、式 (48) において、 \hat{Q}^M を $\Delta \hat{Q}$ に置き換えることにより導出された式を用いて計算することができる。前処理法ならびに、前処理法の凝縮流れへの展開に関する筆者らの研究は、文献 [24][25] などが新しい。

15. 非理想気体状態方程式の導入

ここまででは、理想気体、すなわち、理想気体の状態方程式 $p = \rho RT$ を仮定した流れを前提にして式が導出されてきたが、理想気体を逸脱した流れの場合にはどうすべきかについて簡単に説明する。ただし、あくまで理想気体の状態方程式に置き換わる非理想気体の状態方程式が必要であるので、ここでは、三次方程式型の状態方程式として知られている van der Waals 型の状態方程式を用いて説明する。van der Waals 型の状態方程式としては、

- van der Waals 状態方程式 (WA)

$$(p + a\rho^2)(1 - b\rho) = \rho RT$$

- Redlich-Kwong 状態方程式 (RK)

$$\left(p + \frac{a\rho^2}{1 + b\rho}\right)(1 - b\rho) = \rho RT$$

- Peng-Robinson 状態方程式 (PR)⁽²⁶⁾

$$\left(p + \frac{a\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2}\right)(1 - b\rho) = \rho RT$$

が知られている。これら状態方程式は、分子間力や分子の大きさが考慮されている。パラメータ a が掛かった項は分子間力による圧力減少を、またパラメータ b は分子の大きさを考慮した排除体積である。これらパラメータは、気・液・固体の物性値などにに基づき経験的に決定されているため、これらの式は各相を区別することなく超臨界領域も含む三相間の状態変化を 1 つの方程式で記述することができる。特に、高温・高圧の超臨界領域においては、密度ならびにエンタルピーは温度のみならず圧力に依存している。すなわち、 $\rho = \rho(p, T)$, $h = h(p, T)$ 。たとえば、超臨界流体の音速は次式を用いて計算しなければならない。

$$c = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}} = \sqrt{\frac{\rho h_T}{\rho_T(1 - \rho h_p) + \rho \rho_p h_T}} \quad (53)$$

ρ_p, ρ_T, h_p, h_T は、密度ならびにエンタルピーの圧力もしくは温度による偏導関数。また、前処理法を、超臨界流体に適用する際には、前処理行列 Γ は次式のように定義される。

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \theta & 0 & 0 & 0 & \rho_T & 0 \\ \theta u_1 & \rho & 0 & 0 & \rho_T u_1 & 0 \\ \theta u_2 & 0 & \rho & 0 & \rho_T u_2 & 0 \\ \theta u_3 & 0 & 0 & \rho & \rho_T u_3 & 0 \\ \theta h - (1 - \rho h_p) & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho u_3 & \rho_T h + \rho h_T & 0 \\ \theta q_s / \rho & 0 & 0 & 0 & \rho_T & q_s / \rho \end{bmatrix}$$

さらに、

$$\theta = \left(\frac{1}{U_r^2} - \frac{\rho_T(1 - \rho h_p)}{\rho h_T} \right), \quad \alpha = U_r^2 \left(\rho_p + \frac{\rho_T(1 - \rho h_p)}{\rho h_T} \right)$$

16. まとめ

今回紹介した内容は、圧縮性流れの CFD 分野で提案されている計算スキームのほんのごく一部であり、その全体像を把握するには情報が少なすぎるかもしれない。しかし、今回紹介した特性の理論に基づく式の展開や流束分離の考え方は、圧縮性流れの CFD を理解するために最低限必要な知識であるともいえる。広く浅く知識を吸収する一方で、この分野の本質となる基礎を理解することもきわめて重要である。また、前処理法への展開、基礎方程式の追加、ならびに非理想気体への拡張は、今後の、いわゆる「計算数理学」研究を展開する上での、土台作りに位置づけられる。

文献

1. Steger, J.L. and Warming, R.F., J. Comp. Phys., 40(1981), p.263.
2. van Leer, B., Lecture Notes in Physics, 170(1982), p.507, Springer-Verlag.
3. Roe, P.L., J. Comp. Phys., 43(1981), p.357.
4. Liou, M.-S. and Steffen, C.J., J. Comp. Phys., 107(1993), p.23.
5. Godunov, S.K., Matematicheskii Sbornik(in Russian), 47(1959), p.271.
6. Woodward, P.R. and Colella, P., J. Comp. Phys., 57(1984), p.174.
7. Osher, S. and Chakraverthy, S.R., J. Comp. Phys., 50(1983), p.447.
8. van Leer, B., J. Comp. Phys., 32(1979), p.101.
9. Yamamoto, S. and Daiguji, H., Computers & Fluids, 22-2/3(1993), p.259.
10. Harten, A., J. Comp. Phys., 49(1983), p.357.
11. Lax, P.D. and Wendroff, B., Comm. Pure and Applied Mathematics, 17(1964), p.381.
12. Warming, R.F. and Beam, R. W., AIAA Journal, 24 (1976), p.1241.
13. van Leer, B., J. Comp. Phys., 14(1974), p.361.
14. Roe, P.L., Proc. 1983 AMS-SIAM Summer Seminar on Large Scale Computing in Fluid Mechanics, 22(1985), p.163.
15. Chakraverthy, S. R. and Osher, S., AIAA Paper 83-1943, (1983).
16. 山本悟・大宮司久明, 4.2 特性の理論と流束分離, 乱流の数値流体力学, 東京大学出版会, 1998.
17. 山本悟, 特集・熱流体の数値計算, 数値解析手法, 日本ガスタービン学会誌, 26-102(1998).
18. Yamamoto, S., Hagari, H. and Murayama, M., Trans. JSASS, 42(2000), p.182.
19. Yamamoto, S., AIAA Journal, 41-9(2003), p.1832.
20. Yoon, S. and Jameson, A., AIAA Journal, 26(1988), p.1025.
21. Yamamoto, S., Kano, S. and Daiguji, H., Computers & Fluids, 27-5/6(1998), p.571.
22. Choi, Y.-H. and Merkle, C.L., J. Comp. Phys., 105(1993), p.207.
23. Weiss, J.M. and Smith, W.A., AIAA Journal, 33(1995), p.2050.
24. Yamamoto, S., Niiyama, D. and Shin, B.-R., Int. J. Heat and Mass Transfer, 47(2004), p.5777.
25. Yamamoto, S., J. Comp. Phys., 207-1(2005), p.240.
26. Peng, D.-Y. and Robinson, D.B., Ind. Eng. Chem. Fundam., 15(1976), p.59.