

非粘性の圧縮性流体：衝撃波のシミュレーション

1. 非粘性圧縮性流体とオイラーの方程式

流体の速度が音速に近づくと非圧縮流体としての近似が成り立たなくなる。そのため、流体の運動を議論するためには、流体を圧縮性流体として取り扱う必要がある。ここでは、空気のような粘性率の小さい流体を考え、粘性の影響を無視する。すなわち、流体を非粘性流体としてあつかう。

1.1 高速流体と非粘性圧縮性流体の方程式

非粘性の圧縮性流体を記述するには、連続 (質量保存) の式、運動量保存の式、エネルギー保存の式の3つの方程式の他、状態方程式が必要である。これらの式を、オイラー的な保存形式で書くと次のようになる。

(1) 質量保存の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

(2) 運動量保存の式

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P \quad (2)$$

(3) エネルギー保存の式

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{u}) \quad (3)$$

(4) 状態方程式：理想気体

$$p = (\gamma - 1) \rho C_v T \quad (4)$$

ここで、 ρ は流体の密度、 \mathbf{v} は速度、 p は圧力、 T は温度である。 γ と C_v は比熱比および定積比熱である。 e は単位質量当りのエネルギー (エネルギー密度) を表す。エネルギー密度は内部エネルギーと運動エネルギーの和で、単位体積当たりの値である。理想気体の場合には、

$$e = \rho C_v T + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2 + w^2) \quad (5)$$

と表される。

1.2 オイラーの方程式

それぞれの式を速度の成分

$$\mathbf{v} = (u, v, w) \quad (6)$$

で書き、圧力の入っている項を左辺に移項すると、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w u)}{\partial z} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + p)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w v)}{\partial z} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2 + p)}{\partial z} = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial[u(e+p)]}{\partial x} + \frac{\partial[v(e+p)]}{\partial y} + \frac{\partial[w(e+p)]}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

の5つの式になる。この式はベクトルで書くと、

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = 0 \quad (8)$$

のように表される。この式をオイラーの式という。ただし、

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho v u \\ \rho w u \\ (e+p)u \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v^2 + p \\ \rho w v \\ (e+p)v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho u w \\ \rho v w \\ \rho w^2 + p \\ (e+p)w \end{bmatrix} \quad (9)$$

である。

2. 非粘性圧縮性流体の数値解法

非粘性の圧縮性流体を数値的に解く方法の1つである HLLC 法を紹介する。

2.1 Harten-Lax-van Leer 法

ここでは、簡単のため1次元のオイラー方程式

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} = 0 \quad (11)$$

の数値解法を考える。このとき、領域 $x_1 \leq x \leq x_2, t_1 \leq t \leq t_2$ における積分形の保存則は、

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathbf{U}(x, t_2) dx - \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{U}(x, t_1) dx + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{E}(x_2, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{E}(x_1, t) dt = 0 \quad (12)$$

と与えることができる。

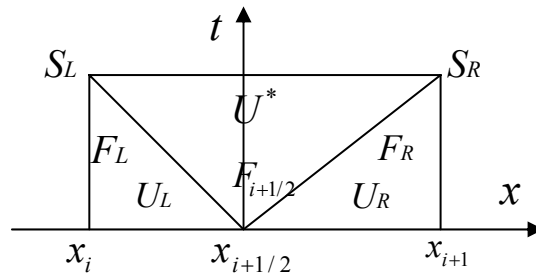


図1 HLL法におけるリーマン・ファン

いま、図1のような $x-t$ 空間を考える。 S_R と S_L はそれぞれ、 $x_{i+1/2}$ における右向きと左向き最大の情報伝達速度である。図中の扇形の領域

$$S_L \Delta t \leq x \leq S_R \Delta t \quad (13)$$

は情報がすでに伝わった領域、すなわち、リーマン・ファンを表す。図中の U_L, F_L は左側、 U_R, F_R は右側の物理量およびその流束を表す。Harten et al. (1983) は、リーマン・ファン内の物理量を中間状態の一定値で近似することを提案した。その値は、式(12)の保存則を考慮すると、

$$U^* = \frac{S_R U_R - S_L U_L - F_R + F_L}{S_R - S_L} \quad (14)$$

と表すことができる。これを利用して、

$$0 \leq x \leq S_R \Delta t \quad (15)$$

における保存則を考えると、流束は

$$\begin{aligned}
F_{i+1/2} &= F_R + S_R(U^* - U_R) \\
&= F_R + S_R \left(\frac{S_R U_R - S_L U_L - F_R + F_L}{S_R - S_L} - U_R \right) \\
&= \frac{S_R F_L - S_L F_R + S_R S_L (U_R - U_L)}{S_R - S_L}
\end{aligned} \tag{15}$$

と表わされる。この方法を Harten-Lax-van Leer (HLL)法という。もし、 S_R と S_L が、同符号すなわち超音速ならば、 $F_{i+1/2}$ は上流側の流束と一致する。 S_R と S_L は関して本研究では、Davis(1988)によってなされた次のような評価を用いている。

$$S_L = \min(u_L - c_L, u_R - c_R) \tag{16}$$

$$S_R = \min(u_L + c_L, u_R + c_R) \tag{17}$$

ここで、 c_R と c_L は右方向と左方向への音速である。

HLL法は、コーディングが非常に簡単で、計算時間も短いという長所を持つ。しかし、リーマン・ファン内を単一の状態で近似したため、接触不連続面を鋭く分解できないという短所も持っている。

2.1 Harten-Lax-van Leer-Contact surface 法

Toro et al. (1994)は、HLL法における短所を取り除くために、リーマン・ファン内を図2のように速度 S_M の接触不連続面を挟んだ2状態で近似することを提案した。この方法は Harten-Lax-van Leer-Contact surface (HLLC)法と呼ばれる。

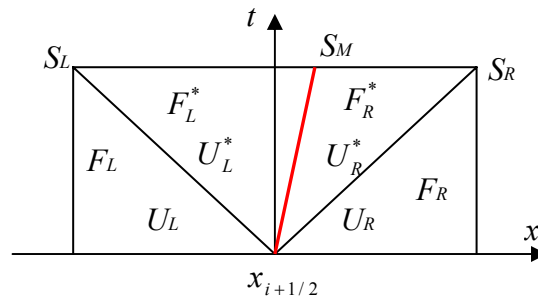


図2 HLLC法における接触境界面の表現

リーマン・ファン内左側領域の物理量とその流束を U_L^* と F_L^* 、右側領域では U_R^* と F_R^* とすると、ランキン・ユゴニオ関係式より、

$$F_L^* = F_L + S_L(U_L^* - U_L) \tag{21}$$

$$F_R^* = F_R + S_R(U_R^* - U_R) \quad (22)$$

が成り立つ。このとき，中間点の数値流束は

$$F_{i+1/2} = \begin{cases} F_L & S_L > 0 \\ F_L^* & S_L \leq 0 \leq S_M \\ F_R^* & S_M \leq 0 \leq S_R \\ F_R & S_R < 0 \end{cases} \quad (23)$$

と与えられる。ただし，リーマン・ファン内における速度と圧力は，一定として

$$u_R^* = u_L^* = S_M \quad (24)$$

$$p_R^* = p_L^* = p_M \quad (25)$$

により与えられると仮定する。Batten et al. (1997)によれば， S_M は HLL 法における中間状態 U^* を用いて，

$$S_M = \frac{(\rho u)^*}{\rho} = \frac{(S_R - u_R)\rho_R u_R - (S_L - u_L)\rho_L u_L - p_R - p_L}{(S_R - u_R)\rho_R - (S_L - u_L)\rho_L} \quad (26)$$

と与えられる。さらに式(25)を式(21)(22)に代入することで，左右のランキン・ユゴニオ関係式を満足するように p_M が決定される。すなわち，

$$\begin{aligned} p_M &= p_L + \rho_L(S_L - u_L)(S_M - u_L) \\ &= p_R + \rho_R(S_R - u_R)(S_M - u_R) \\ &= \frac{(S_R - u_R)\rho_R p_L - (S_L - u_L)\rho_L p_R + \rho_L \rho_R (S_R - u_R)(S_L - u_L)(u_R - u_L)}{(S_R - u_R)\rho_R - (S_L - u_L)\rho_L} \end{aligned} \quad \dots(27)$$

である。これらを用いれば，中間状態におけるその他の物理量は式(22)(23)から以下のように求めることができる。

$$\rho_\alpha^* = \frac{S_\alpha - u_\alpha}{S_\alpha - S_M} \rho_\alpha \quad (28)$$

$$e_\alpha^* = \frac{(S_\alpha - u_\alpha)e_\alpha - p_\alpha u_\alpha + p_M S_M}{S_\alpha - S_M} \quad (29)$$

ここで，添字 α は L または R を表す。これらを用いると，流束 F_R^* は

$$F_\alpha^* = \begin{cases} \rho_\alpha^* S_M \\ \rho_\alpha^* S_M^2 + p_M \\ (e_\alpha^* + p_M) S_M \end{cases} \quad (30)$$

と表すことができる。HLLC 法は接触不連続面を分解できるだけでなく、HLL 法由来の圧力の値が負にならないという良い性質を持つ (三好, 2004)。

3. 衝撃波の計算例

ここでは、HLLC 法を用いた非粘性圧縮流体の計算を紹介する。

3.1 1次元衝撃波管問題

計算例として1次元衝撃波管問題 (Sod, 1978; 巽, 1982) を取り上げる。衝撃波管とは、両端を閉じた細長い管の中に薄膜による仕切りを設け、片側に高圧気体、他の側には低圧気体を封入したものである。ある時刻に膜を破ると、高圧室の気体が低圧室へ流入する。その結果、低圧室内に衝撃波が伝播し、その後を高圧気体と低圧気体の境にあった接触不連続面が追いかける。その一方で、高圧室内には膨張波が発生する。この問題はリーマン問題ともよばれ、解析解をもつ。そのため、圧縮性流体のシミュレーションコードのテスト問題によく用いられる。

図3は初期条件を

$$(p(x,0), v(x,0), \rho(x,0)) = \begin{cases} (p_1, 0, \rho_1) = (1, 0, 1), & 0 \leq x \leq L/2 \\ (p_2, 0, \rho_2) = (0.1, 0, 0.125) & L/2 \leq x \leq L \end{cases} \quad (41)$$

とおいたときの解析解である。密度の段差が衝撃波面および接触境界面を表している。

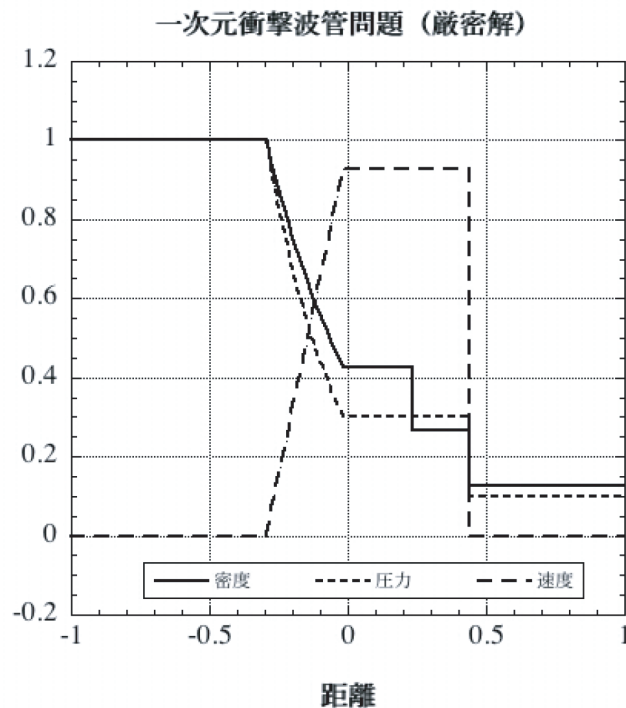


図3 衝撃波管問題の解析解 (篠原, 2006)

3.2 衝撃波管のシミュレーション

HLLC 法によるコードの例は

<https://home.hiroshima-u.ac.jp/nakakuki/others/HLLC.tar>

にある。このコードでは3次元コードの1方向だけを使って衝撃波管問題をシミュレートしている。図4は密度の時間変化と最終ステップにおける圧力と速度を示している。衝撃波面や接触不連続面を HLLC 法がシャープに捉え、解析解をよく再現していることが分かる。

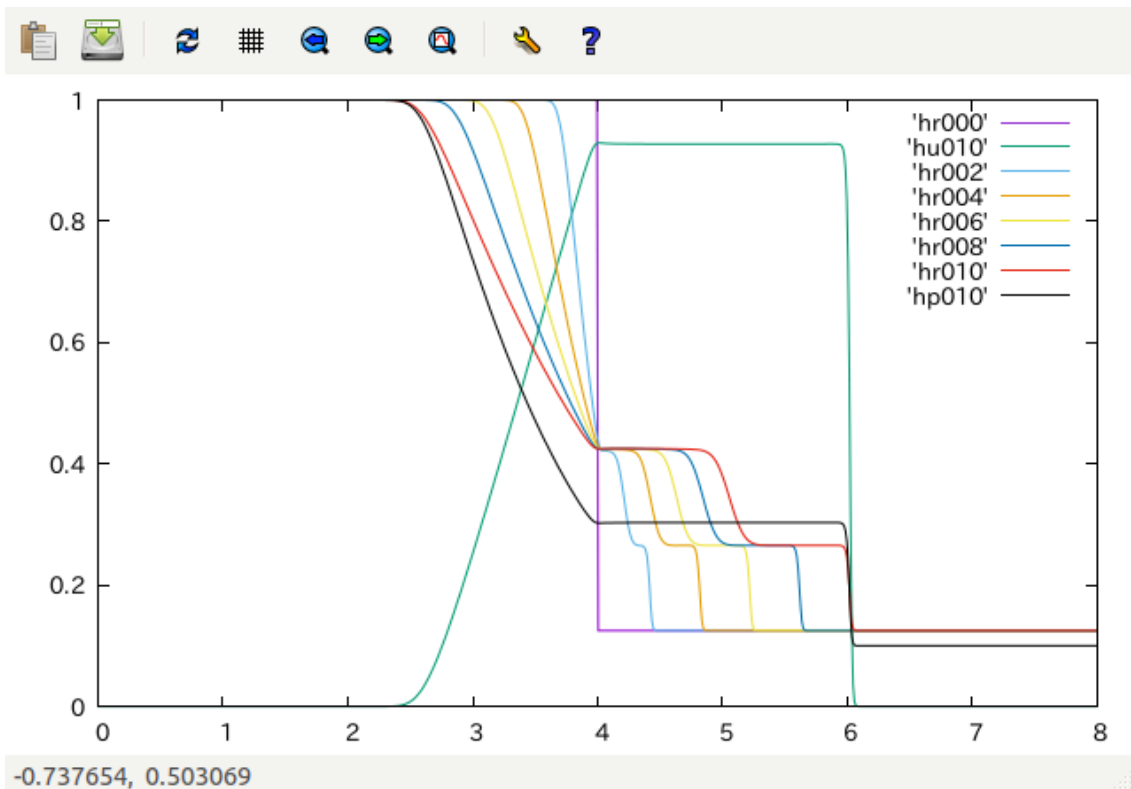


図4 HLLC 法コードの計算例

hr000-010: 密度, hp010: 圧力, hu010: 速度

参考文献

- P. Batten, N. Clarke, C. Lambert, D. M. Causon, *SIAM J. Sci. Comput.* **18**, 1553-1570, 1997.
- S. F. Davis, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **9**, 445-473, 1988.
- A. Harten, P. D. Lax, B. van Leer, *SIAM Rev.*, **25**, 35-61, 1983.
- 三好隆博, 圧縮性 MHD シミュレーションの高精度数値手法に関する研究, 委託研究調査報告書, 2004.
- 篠原 卓, 広島大学理学部卒業論文, 2006.
- G. A. Sod, *J. Comput. Phys.*, **27**, 1-31, 1994.
- 巽 友正, 流体力学, 培風館, 1982.
- E. F. Toro, M. Spruce, W. Speares, *Shock Waves*, **4**, 25-34, 1994.

4. 衝撃波管問題を HLLC 法で解くプログラム

ここでは、HLLC 法プログラムのサブルーチンの概要について解説する。下記はプログラムの名前はすべて HL_ で始まるようになっている。プログラムは1つのメインプログラムと複数のサブルーチン・プログラム、モジュール・プログラムからなっている。

4.1 メインルーチンとサブルーチン

HL_main.f90	メインプログラム。サブルーチンを次々に呼び出し、 時間進行を制御する
HL_init.f90	密度 ρ , 速度 (u, v, w) , 圧力 p の初期条件を設定する
HL_energyi.f90	内部エネルギーを計算する
HL_calcU1_5.f90	速度とエネルギーに密度をかけてベクトル U を計算する
HL_OUTPUT.f90	計算結果を出力する 出力ファイルはバイナリ形式で、r000 など番号順の名前がつく
HL_soundV.f90	音速を計算する
HL_BC_Prm.f90	密度・速度・温度など原始変数の境界条件を与える
HL_calc_EFG_st.f90	オイラーの方程式のベクトル E, F, G を計算する
HL_BC_EFG.f90	E, F, G の周期的境界条件を与える
HL_calcDT.f90	CFL 条件を満たすタイムステップ幅を計算する
HL_calcU.f90	オイラーの方程式から1つ未来の U を計算する
HL_calcU_Prm.f90	U から密度・速度・エネルギーを計算する
HL_temp.f90	内部エネルギーから温度を計算する
HL_press.f90	圧力を計算する

4.2 モジュール

HL_mod_grd_num.f90	コントロールボリューム数に関するパラメータを宣言する 格子点数はここで設定する ny=1 を指定すると2次元問題 として扱う
HL_mod_grd_xyz.t.f90	dx や dt などの時間および計算空間に関する変数を型宣言する
HL_mod_ibc_var.f90	境界条件や初期条件に関する変数を型宣言する
HL_mod_phys_con.f90	物理定数 C_v や γ の型を宣言する
HL_mod fldvar_Prm.f90	原始変数 (ρ, u, v, w, p) の型を宣言する
HL_mod fldvar_SLR.f90	情報伝達速度に関する変数の型を宣言する
HL_mod fldvar_EFG.f90	ベクトル E, F, G に関する変数の型を宣言する

HL_mod fldvar_U.f90 ベクトル U に関する変数の型を宣言する

4.3 コンパイル関係

Makefile コンパイルの手続きを自動的に行うためのファイル

4.4 出力フォーマットの変換プログラム

conv_GMT.f GMT など可視化ツールで利用するため、出力のバイナリ
 ファイルをテキスト形式に変換する。Fortran の固定形式で書
 かれている

4.5 入力パラメータのデータファイル

HL_prm_grid.data 時間進行の回数や境界条件を指定する必要なデータ

HL_prm_physbc.data 物理定数やモデルの大きさ、初期条件を与えるデータ

入力パラメータの説明

(1) HL_mod_grd_num.f90

```
! *****  
! *   type definitions of field variables                               *  
! *****  
  
module mod_grid_num  
  
    implicit none  
  
    integer, parameter:: nx = 800, nx1 = nx+1  
    integer, parameter:: ny =  1, ny0 =  1, ny1 = 1  
    integer, parameter:: nz = 400, nz1 = nz+1  
  
end module mod_grid_num
```

コントロールボリュームの数を nx , ny , nz に代入文として入力する。

2次元の場合はこの例のように

$ny = 1$, $ny0 = 1$, $ny1 = 1$

とする。3次元のときは

```
ny = 400, ny0 = 0, ny1 = ny+1
```

のように書き換える。

(2) HL_prm_grd_num.f90

```
'# (1) Run number'  
'Run 01'  
'# (2) number of time step'  
1000  
'# (3) interval to save results on grid'  
50  
'# (4) switch of x-boundary condition'  
2  
'# (5) switch of y-boundary condition'  
2  
'# (6) switch of z-boundary condition'  
2  
'# (7) number of CVs in x-direction'  
800  
'# (8) number of CVs in y-direction'  
1  
'# (9) number of CVs in z-direction'  
400
```

(1) Run の名前

(2) 計算するタイムステップ数

(3) CV 上の値を出力するタイムステップの間隔

(4) (5) (6) x, y, z 方向の境界条件 1: 周期的境界, 2: 反射境界

(7) (8) (9) 使用していない。CV 数は HL_mod_grd_num.f90 で与える。

(3) HL_prm_physbc_num.f90

'# (1) Specific heat ratio Gamma'

1.4d0

'# (2) Specific heat with constant volume Cv'

717.0d0

'# (3) X-direction length'

8.0d0

'# (4) y-direction length'

1.0d0

'# (5) z-direction length'

4.0d0

'# (6) Velocity of area 1'

0.0d0

'# (7) Velocity of area 2'

0.0d0

'# (8) Pressure of area 1'

1.0d0

'# (9) Pressure of area 2'

0.125d0

'# (10) Density of area 1'

1.0d0

'# (11) Density of area 2'

0.1d0

(1) 比熱比 γ

(2) 定積比熱 C_v

(3) (4) (5) x, y, z 方向の長さ

(6) (7) 領域 1, 2 での速度

(8) (9) 領域 1, 2 での圧力

(10) (11) 領域 1, 2 での密度