

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	圧縮性単相及び気液二相流れにおけるBVD原理に基づくハイブリッド型高解像度数値解法の研究
Title(English)	
著者(和文)	脇村 尋
Author(English)	Hiro Wakimura
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京科学大学, 報告番号:甲第264号, 授与年月日:2025年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:青木 尊之,肖 鋒,大西 領,伊井 仁志,門永 雅史
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Institute of Science Tokyo, Report number:甲第264号, Conferred date:2025/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Type(English)	Doctoral Thesis

令和6年度
機械系 機械コース 博士論文

圧縮性単相及び気液二相流れにおける
BVD原理に基づく
ハイブリッド型高解像度数値解法の研究

東京科学大学
工学院 機械系 機械コース

脇村 尋

指導教員

青木 尊之 教授

肖 鋒 教授

2025年1月29日

目次

第 1 章	序論	1
1.1	背景	1
1.2	本研究の目的	6
1.3	本論文の構成	6
第 2 章	圧縮性流れの支配方程式	9
2.1	単相圧縮性流れの支配方程式	9
2.1.1	ナビエストークス方程式	10
2.1.2	状態方程式と構成方程式	12
2.1.3	ナビエストークス方程式の無次元化	13
2.1.4	オイラー方程式	15
2.1.5	音速の導出	16
2.1.6	オイラー方程式の特性理論	18
2.2	気液二相圧縮性流れの支配方程式	20
2.2.1	シャープ界面モデルと拡散界面モデル	20
2.2.2	準安定状態と平衡状態	22
2.2.3	混合則	23
2.2.4	7 方程式モデル	24
2.2.5	6 方程式モデル	25
2.2.6	5 方程式モデル	27
2.2.7	4 方程式モデル	28
2.2.8	Stiffened gas 状態方程式	29
2.2.9	混合音速	31
2.3	2 章のまとめ	31
第 3 章	圧縮性流れの数値解法	33
3.1	構造格子と非構造格子	33

3.2	保存型数値解法	34
3.2.1	有限体積法	34
3.2.2	保存型有限差分法	35
3.3	数値解の散逸・分散誤差	37
3.3.1	線形移流方程式の分散関係式	37
3.3.2	修正方程式	37
3.3.3	散逸・分散誤差の解析	38
3.4	空間再構築法	39
3.4.1	線形多項式補間	40
3.4.2	MUSCL 補間	42
3.4.3	ENO 補間	48
3.4.4	WENO 補間	50
3.4.5	THINC 補間	51
3.5	リーマンソルバー	53
3.5.1	HLLC ソルバー	54
3.5.2	SLAU ソルバー	56
3.6	時間積分法	57
3.6.1	ルンゲクッタ法	57
3.6.2	時間刻みの計算	58
3.7	3章のまとめ	59
第4章	ハイブリッド型高解像度数値解法	61
4.1	BVD 原理	61
4.2	ハイブリッド型 BVD 解法	63
4.2.1	BVD 選択アルゴリズム	63
4.2.2	P_4T_2 -BVD 法	65
4.2.3	P_nT_m -BVD 法	66
4.3	勾配パラメータを可変とする高解像度 BVD 法	67
4.3.1	β 可変 THINC 補間	68
4.3.2	$P_4T_{\beta v}$ -BVD 法	69
4.3.3	5セル β 可変 THINC 補間	70
4.3.4	$P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法	72
4.4	オイラー方程式の数値結果	74
4.4.1	Sod 問題	74
4.4.2	Lax 問題	74

4.4.3	爆風問題	75
4.4.4	Le Blanc 問題	77
4.4.5	2次元リーマン問題	78
4.4.6	二重マッハ反射問題	80
4.5	ナビエストークス方程式の数値結果	81
4.5.1	粘性2次元衝撃波管問題	81
4.6	線形スカラー保存則の数値結果	83
4.6.1	Jiang and Shu の移流テスト	83
4.6.2	計算コストの比較	85
4.6.3	収束精度の検証	87
4.7	4章のまとめ	88
第5章	対称性保存数値解法	91
5.1	浮動小数点演算で成り立たない数学的特性	91
5.2	数値解の空間対称性	92
5.3	特性分解	97
5.4	空間再構築法	98
5.4.1	SF 再構築と SI 再構築	99
5.4.2	対称性保存線形多項式補間	99
5.4.3	対称性保存 THINC 補間	100
5.5	リーマンソルバー	101
5.5.1	対称性保存 HLLC ソルバー	101
5.6	数値結果	102
5.6.1	2次元レイリーテイラー不安定性問題	102
5.6.2	2次元リーマン問題	105
5.6.3	2次元爆縮問題	106
5.6.4	3次元爆縮問題	108
5.7	空間対称性を保存する意義および実用性について	109
5.8	5章のまとめ	110
第6章	気液二相圧縮性流れへの展開	111
6.1	フラクショナルステップ時間積分法	111
6.2	空間離散法	112
6.2.1	数値流束法	113
6.2.2	波動伝播法	113

6.3	気液二相流における高解像度空間再構築法	115
6.3.1	2次精度 BVD 再構築法	115
6.3.2	5セル型 β 可変 THINC 補間の適用可能性について	116
6.4	表面張力の計算 (5 方程式モデル)	117
6.4.1	CSF モデル	117
6.4.2	界面曲率の計算	117
6.5	リーマンソルバー	119
6.5.1	HLLC ソルバー	119
6.6	時間積分法	120
6.7	緩和項の計算 (6 方程式モデル)	121
6.7.1	圧力緩和	121
6.7.2	圧力・温度緩和	124
6.7.3	圧力・温度・ギブスエネルギー緩和	125
6.8	空間対称性を保存する計算手法	128
6.9	数値結果 (5 方程式モデル+表面張力)	129
6.9.1	液柱一衝撃波干渉問題	129
6.10	数値結果 (6 方程式モデル+相変化)	131
6.10.1	水キャビテーション管問題	132
6.10.2	水衝撃波管問題	134
6.10.3	リヒトマイヤーメッシュコフ不安定性問題	136
6.10.4	ドデカン蒸気泡圧縮問題	138
6.11	数値結果 (6 方程式モデル) と実現象の比較	142
6.11.1	衝撃波一ヘリウム気泡干渉問題	142
6.12	6 章のまとめ	144
第 7 章	非構造格子への展開	145
7.1	非構造格子における有限体積法	145
7.2	空間再構築法	147
7.2.1	MUSCL 補間	147
7.2.2	THINC/QQ 補間	149
7.2.3	BVD 選択アルゴリズム	151
7.3	リーマンソルバー	152
7.4	気液二相流における非保存項の離散化	152
7.5	時間積分法	155
7.6	非構造格子における空間対称性誤差	155

7.7	相変化あり 6 方程式モデルの数値結果	155
7.7.1	水キャビテーション管問題	156
7.7.2	水衝撃波管問題	157
7.7.3	ドデカン蒸気泡圧縮問題	159
7.7.4	高圧燃料噴射器	159
7.7.5	高速水中障害物	166
7.8	3次元空間への拡張を見据えた計算コストの比較	169
7.9	7章のまとめ	170
第 8 章	結論	171
8.1	本論文の結論	171
8.2	今後の課題	172
付録 A	境界条件の実装	175
A.1	構造格子	175
A.2	非構造格子	177
付録 B	線形多項式補間における係数の導出	179
B.1	数値解のテイラー展開に基づく線形多項式補間の係数の導出	179
B.2	線形多項式補間の誤差のオーダー	182
付録 C	二次方程式の求解における桁落ちの回避	183
参考文献		185
謝辞		203

目次

2.1	An example showing the difference between the sharp-interface model and diffused-interface model. The red and blue regions indicate the liquid and gas phases, respectively.	21
2.2	Conceptual diagram of determined physical variables in the two-fluid model considering equilibrium and non-equilibrium (metastable) states. .	22
2.3	The distributions of the sound speeds with respect to volume fraction. The SGEOS parameters are set as $\gamma_1 = 4.4$, $\gamma_2 = 1.4$, $\pi_1 = 6 \times 10^8$, $\pi_2 = 0$. The values of the physical variables are set as $\rho_1 = 1000$, $\rho_2 = 10$, $p = 10^5$.	32
3.1	Examples of the 2D structured grid (left) and 2D unstructured grid (right).	33
3.2	The reconstruction function of the 4th-order linear polynomial interpolation.	41
3.3	The reconstruction functions of the piecewise-linear interpolations from left- and right-biased stencils.	43
3.4	The reconstruction function on each substencil in the ENO or WENO method.	48
3.5	The reconstruction function of the THINC method.	52
3.6	Conceptual diagram of the Riemann problem.	54
3.7	Conceptual diagram of the HLLC solver.	54
4.1	Conceptual diagrams of the single- and multi-stage BVD selection algorithms.	64
4.2	A graph of relationship between β_i and the logarithmic gradient ratio $ \ln r_i $ in the beta-variable THINC method.	69
4.3	The schematic diagrams of the BVD selection algorithms of P_4T_2 -BVD scheme (top) and $P_4T_{\beta_v}$ -BVD scheme (bottom).	70
4.4	Schematic diagram of calculation of β_i^* using 5 cells.	71

4.5	A graph showing relationship between β_i^* and the gradient ratio r_k in the 5-cell beta-variable THINC method.	72
4.6	The schematic diagrams of the BVD selection algorithms of $P_n T_m$ -BVD scheme (top) and $P_n T_{\beta v 5c}$ -BVD scheme (bottom).	73
4.7	Numerical results of density at $t = 0.25$ in 1D Sod's shock tube problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.	75
4.8	Numerical results of density at $t = 0.15$ in 1D Lax's shock tube problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.	76
4.9	Numerical results of density at $t = 0.038$ in 1D two-interacting blast waves problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.	77
4.10	Numerical results of density at $t = 6$ in 1D Le Blanc problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.	78
4.11	Numerical results of density at $t = 0.3$ in the 2D Riemann problem (configuration 6). Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.	79
4.12	Numerical results of density at $t = 0.2$ in the double Mach reflection problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.	81
4.13	Numerical results of density at $t = 0.2$ in the double Mach reflection problem computed by the WENO-Z scheme. The top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results of mesh numbers 800×250 , 960×300 , 1600×500 , and 2400×750 respectively.	82

4.14	Numerical results of density at $t = 1$ in the 2D viscous shock-tube problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes respectively.	83
4.15	Numerical results at $t = 400$ (200 laps) in the 1D Jiang and Shu's test. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes respectively.	84
4.16	Same as Fig. 4.15, but at $t = 2000$ (1000 laps).	85
5.1	The three types of spatial symmetry patterns in 2D space.	94
5.2	The six types of spatial symmetry patterns in 3D space.	97
5.3	Numerical solutions of the Rayleigh-Taylor instability at $t = 1.95$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme).	104
5.4	Numerical solutions of the 2D Riemann problem config. 3 at $t = 0.8$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme).	105
5.5	Numerical solutions of the 2D Riemann problem config. 12 at $t = 0.25$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme, top: overall view, bottom: zoomed view).	106
5.6	Numerical solutions of the 2D implosion test at $t = 2.5$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme, top: density, bottom: pressure).	107
5.7	Time variation of density and pressure values at the center point of the computational domain in the 2D implosion test (left: density, right: pressure).	108
5.8	Numerical solutions of the 3D implosion test at $t = 2.5$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme, top: density, bottom: pressure).	109
6.1	A schematic diagram of the wave-propagation method.	114
6.2	Pseudo-color plots of volume fraction of water (top) and numerical schlieren plots (bottom) at $t = 12$ calculated by the MUSCL scheme in the Mach 3 shock-droplet interaction problem. The left and right results show the numerical results without and with surface tension respectively.	130
6.3	Same as Fig. 6.2, but calculated by the MUSCL-THINC-BVD scheme.	131

6.4	Same as Fig. 6.2, but calculated by the Adaptive THINC-BVD scheme.	132
6.5	Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of vapor at $t = 3.2$ ms in 1D water-cavitation tube problem with $u_0 = 2$ m/s. The top, middle, and bottom rows show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively.	133
6.6	Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of vapor at $t = 0.58$ ms in 1D water-cavitation tube problem with $u_0 = 500$ m/s. The top, middle, and bottom rows show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively.	134
6.7	Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of water at $t = 0.8$ ms in 1D water shock-tube problem with a mixture containing mainly water vapor. The top, middle, and bottom panels show the results of p-relaxation, p-pT-relaxation (without phase change), and p-pT-pTG-relaxation (with phase change) respectively.	135
6.8	Pseudo-color plots of the volume fraction of liquid (left) and pressure (right) at $t = 10.0$ ms in 2D cavitating Richtmyer-Meshkov instability problem without phase change. The top, middle, and bottom panels show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively.	137
6.9	Same as Fig. 6.8, but with phase change.	138
6.10	Pseudo-color plots of the mass fraction of vapor at $t = 1.4$ ms in 2D vapor-bubble compression problem without phase change. The left, middle, and right panels show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively. The bottom row shows enlarged views of vapor bubbles.	139
6.11	Same as Fig. 6.10, but with phase change.	140
6.12	Pseudo-color plots of the mass fraction of vapor in 2D vapor-bubble compression problem with phase change. The numerical results are computed by the Adaptive THINC-BVD scheme. Time passes from left to right and from top to bottom.	140

6.13	Pseudo-color plots and 1D distribution in cross-section at $y = 0.5$ m of the pressure in 2D vapor-bubble compression problem with phase change. The numerical results are computed by the Adaptive THINC-BVD scheme. Time passes from left to right and from top to bottom.	141
6.14	Experimental results [1] and numerical schlieren plots calculated by the MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes in the shock-bubble interaction problem.	143
7.1	Schematic diagram of 2D triangle mesh. The blue dots indicate the location of the Gaussian quadrature points on the cell boundary. The orange squares indicate the location of cell vertices.	146
7.2	The 2D reconstruction function of the MUSCL scheme for unstructured grid.	148
7.3	The 2D reconstruction function of the THINC/QQ scheme for unstructured grid.	149
7.4	A part of the computational domain and the triangle mesh for the water cavitation tube problem and the water shock tube problem.	156
7.5	Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of vapor at $y = 0.005$ m at $t = 3.2$ ms in water cavitation tube problem. The top and bottom rows show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.	157
7.6	Numerical results of pressure, velocity, volume fraction of water, and mass fraction of water at $y = 0.005$ m at $t = 0.8$ ms in water shock tube problem. The top, middle, and bottom panels show the results of p-relaxation, p-pT-relaxation, and p-pT-pTG-relaxation respectively.	158
7.7	Pseudo-color plots of the mass fraction of vapor at $t = 1.4$ ms in vapor-bubble compression problem without phase change (p-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively. The bottom row shows enlarged views of vapor bubbles.	160
7.8	Same as Fig. 7.7, but with phase change (p-pT-pTG-relaxation).	161
7.9	Contour plots of the mass fraction of vapor at $t = 1.4$ ms in vapor-bubble compression problem with phase change calculated with the MUSCL-THINC/QQ-BVD scheme. The left panel shows contour lines and their labels. The right panel shows contour lines and triangle mesh.	162

7.10	The computational domain and the triangle mesh for the high-pressure fuel injector problem. To improve visibility, the grid size is displayed at 10 times the size of the actual grid used in the calculations.	162
7.11	Pseudo-color plots of volume fraction of gas, mass fraction of gas, mixture density, and pressure at $t = 1400 \mu\text{s}$ in high-pressure fuel injector problem without phase change (p-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.	163
7.12	Same as Fig. 7.11, but with phase change (p-pT-pTG-relaxation) at $t = 800 \mu\text{s}$	164
7.13	Pseudo-color plots of mass fraction of gas at different time steps in high-pressure fuel injector problem with phase change (p-pT-pTG-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.	165
7.14	The computational domain and the triangle meshes for the high-velocity underwater projectile problem. To improve visibility, the grid size is displayed at 10 times the size of the actual grid used in the calculations. . .	166
7.15	Pseudo-color plots of volume fraction of gas, mass fraction of gas, mixture density, and pressure at $t = 10 \text{ ms}$ in high-velocity underwater projectile problem without phase change (p-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.	167
7.16	Same as Fig. 7.15, but with phase change (p-pT-pTG-relaxation).	168
A.1	A conceptual diagram of ghost cells for implementing boundary conditions.	176
A.2	A conceptual diagram of reflective boundary conditions on unstructured grids.	178

表目次

2.1	The SGEOS parameters of water for 300-500 K.	30
2.2	The SGEOS parameters of dodecane for 300-500 K.	30
3.1	Relation between the sign of the coefficient of the odd-order derivative term and the dispersion error of the numerical solution.	39
3.2	Relation between the sign of the coefficient of the even-order derivative term and the dissipation error of the numerical solution.	39
4.1	Computational times for the Jiang and Shu's test of WENO-Z, P_4T_2 -BVD, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, $P_{14}T_3$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes.	86
4.2	Number of accesses to large array per computation in a sub-step of the Runge-Kutta method for advection test of WENO-Z, P_4T_2 -BVD, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, $P_{14}T_3$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes. Assuming one-dimensional space, 200 grid points, and 10% modification ratio of the interpolation function in the BVD selection algorithm.	87
4.3	Numerical errors and convergence rates of P_4 , WENO-Z, P_4T_2 -BVD scheme, $P_4T_{\beta v}$ -BVD and $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD schemes.	88
5.1	Combinations of physical variables in yz -plane, zx -plane, and xy -plane symmetrical relationships.	95
5.2	Combinations of physical variables in xy -diagonal, yz -diagonal, and zx -diagonal symmetrical relationships.	96
5.3	Summary of the symmetry-preserving formulations for simulation of the 3D Euler equation in the finite-volume method.	103

6.1	Summary of the symmetry-preserving formulations for 3D two-phase flow simulations in the finite-volume method.	129
7.1	Two-dimensionality of each numerical result in the water cavitation tube problem.	157
7.2	Two-dimensionality of each numerical result in the water shock tube problem.	159
7.3	Number of accesses to large array per computation in a sub-step of the Runge-Kutta method for advection test of MUSCL(FVM), MUSCL-THINC/QQ-BVD(FVM), and DG(P1) schemes. Assuming a 10% modification ratio of the interpolation function in the BVD selection algorithm.	170

第1章

序論

単相および気液二相圧縮性流れにおける数値解法の研究背景と本研究の目的を述べる。本論文では、「高精度 (high accuracy)」、「高次精度 (high-order accuracy)」、「高解像度 (high resolution)」、「高忠実度 (high fidelity)」という用語を次の様に使い分ける。

「高精度 (high accuracy)」：数値解の厳密解に対する誤差が小さい。

「高次精度 (high-order accuracy)」：補間関数の誤差のリーディングタームの次数が高い。

「高解像度 (high resolution)」：数値解法の数値散逸誤差が小さく、細かい流れ構造を捉える。

「高忠実度 (high fidelity)」：同じ格子幅で滑らかな解と不連続解の両方に対して高精度。

1.1 背景

単相及び気液二相圧縮性流れは、超音速で飛行する航空機まわりの空力解析、ジェットエンジンやロケットエンジン内部の液体燃料の微粒化や燃焼特性の解明、水中プロペラ表面で発生する気泡崩壊によるエロージョンの評価、キャビテーションを利用した結石破碎シミュレーションなど、航空宇宙分野を中心として様々な分野で必要とされている。高マッハ数の圧縮性流れを伴う物理現象を実験する場合、一般的に実験コストが高く、物理量の正確な計測が困難な場合が多い。これらの問題を解消するために数値流体力学による解析が重要視されており、高精度な数値解法の研究が進められている。

圧縮性流れの数値計算手法では、衝撃波を含む流れ場を安定的に計算するために、人工的に粘性項を付加することが一般的である。人工粘性を導入することで衝撃波を適当な幅で連続的に表現する衝撃波捕獲法は、特に航空宇宙工学における高速気流の解析において必須の計算ツールとなっている。一方、計算安定化のために加えられた人工粘性は、その効果の調節が難しく、強すぎる人工粘性は接触不連続や小さい渦などの高波数の流れ構造を非物理的に拡散させてしまう。その結果、接触不連続は位置が特定できなくなり、小さい渦構造は消散してしまう。圧縮性乱流の直接数値計算においては、低波数から高波数へのエネルギー輸送を正しく再

現する必要性があるが、過剰な数値散逸誤差が計算精度を著しく劣化させる。この問題を解決するため、衝撃波近傍の計算安定性を確保しながら、高波数の解を大幅に拡散させることなく高解像度に捉えることが出来る数値解法の開発が求められている。また、超音速流れにおける音響計算においても、微小な圧力変動である音波と衝撃波が同時に存在する流れ場を解く必要があるため、高解像度数値解法が役立つと期待されている。具体的な応用分野としては、例えば航空機の揚力係数などの高精度な予測のための空力解析に必要とされている。不連続解を含まない单相圧縮性流れを離散化法の工夫により非散逸かつ安定的に計算する手法 [2-4] が提案されており、衝撃波を考慮する場合は局所的に人工粘性を導入する手法 [5] も研究されている。しかしながら、適切な人工粘性の値や長時間計算における性能は依然として明らかにされていない。安定かつ高解像度な数値解法の研究は、乱流を含む実際の物理現象を高精度に解析するために必ず解決しなければならない課題であると言える。

気液二相圧縮性流れでは、衝撃波や接触不連続に加えて気液界面も高解像度に捉える必要がある。気液界面の取り扱い方には、界面を厚みの無い不連続分布と見なし純粋な気体の相と液体の相を分ける幾何学的境界として扱うシャープ界面モデルと、界面を人工的に混合された領域で表現する拡散界面モデルの2種類が考えられる。圧縮性流れにおいては、界面が複雑に変形し得ること、单相流の計算手法を直接適用可能なことなどを考慮すると、拡散界面モデルの方が適していると言える。拡散界面モデルでは、計算領域全体で体積分率などの相関数を定義する。相関数の輸送方程式を解く際、数値解法に含まれる過剰な人工粘性が界面を表す混合領域を大幅に拡散させ、界面の位置を不明瞭にする。この問題は、表面張力や相変化といった界面特有の現象を再現不能にするため、気液二相圧縮性流れの数値解析において致命的な計算誤差となる。この問題を解決するために、单相圧縮性流れの問題と同様に、気液界面の計算安定性を保ちながら、界面の幅を大幅に拡散させずに高解像度に捉えられる数値解法が必要となる。例えば、ロケットエンジン内部の燃焼特性や振動特性を明らかにするために、燃料の流れ方や音波の伝播などについて数値解析が行われている [6-8]。液体燃料の表面張力や化学反応、衝撃波の伝播などを正しく再現する必要があるが、界面が人工粘性によって非物理的に拡散してしまうことで正しい燃焼特性および振動特性を得ることができない。また、船舶で用いられる水中プロペラは、高速で回転することでキャビテーションが発生し、気泡の崩壊により生成される高圧の衝撃波が部品を破損させることが知られている。プロペラのどの位置でキャビテーションが発生するか、キャビテーションを抑制するためにどのような形状のプロペラが有効か調べるために、数値解析が用いられている。さらに、人体内部に形成される結石を体外から衝撃波を当てることで破碎する装置が開発されているが、結石以外の組織に与える損傷の大きさは未だ解明されておらず、数値シミュレーションによる解析が行われている [9,10]。結石周辺の水分が体外衝撃波の干渉により負圧となることでキャビテーションが発生しており、キャビテーションの発生する位置を結石周辺になるようにコントロールすることができれば、結石破碎を効率化できる。しかし、既存の数値解法は散逸誤差により、流れの中で動的に生成

する気泡を忠実に再現できない。したがって、高解像度数値解法の開発は、単相と気液二相の両方の圧縮性流れの数値計算において重要な研究課題であり、その工学的意義も大きいと言える。

衝撃波や接触不連続、気液界面は、物理量が不連続的に変化する解と見なすことが出来る。この不連続解を支配方程式の解に含めるために、保存則の弱解の考え方に基づく数値解法が開発された。Godunov 法 [11] は、セル境界でリーマン問題を厳密に解く保存解法であり、現在の有限体積法の原型となっている。Godunov 法は物理量分布を区間一定値と仮定する 1 次精度の手法であるため、計算精度は不十分である。高次多項式関数を用いて物理量分布を補間する高次精度法が求められるが、線形の高次多項式補間は不連続解でルンゲ現象と呼ばれる数値振動誤差を引き起こす。Godunov の定理 [11] によれば、線形多項式補間で物理量分布の単調性を保持できる数値解法は 1 次精度解法のみである。

1970 年代から、Godunov 法の枠組みに基づき、数値振動を発生させない非線形高次精度解法の開発が盛んに進められてきた。MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Law) 法 [12,13] を含む TVD (Total Variation Diminishing) 法 [14] は、単調性を保持する勾配リミタを導入することで、数値振動を回避しながら単調解で 2 次精度を達成した。さらに、MUSCL 法の勾配リミタの概念を拡張し、ステンシルを複数のサブステンシルに分解して、最も滑らかな物理量分布を持つサブステンシルの補間関数を選択する ENO (Essentially Non-Oscillatory) 法 [15,16] が開発され、非単調な解も含めて任意高次精度を達成した。WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory) 法 [17–19] は、ENO 法のサブステンシルを解の滑らかさに応じて重み付けて足し合わせることで、セル境界で精度を向上させた。これらの数値解法は、不連続解付近の数値振動を抑制しつつ、滑らかな解では任意の高次精度を実現し、圧縮性流れにおける現在主流の数値解法とされている。

一方、MUSCL 法や WENO 法などの数値解法は非線形リミタを導入しているため、本来の線形多項式補間と比べて数値散逸誤差が多く含まれる。特に不連続解や小さい渦といった高波数の流れ構造は、数値散逸誤差による影響を受けやすく、長時間積分を行う計算では、数値散逸誤差は顕著に増大する。このような流れ構造の解像度低下を改善するため、様々な高解像度 WENO 系解法 [20–30] が提案されており、現在も重要な研究対象とされている。

多項式系補間法とは異なる補間法として、THINC (Tangent of Hyperbola for INterface Capturing) 法 [31–35] が提案されている。元々は混相流の移動界面捕獲法として開発された手法であり、従来の多項式関数に基づく補間ではなく、シグモイド型関数を用いて不連続解に特化した補間を行う。THINC 法の特徴は、シグモイド型関数の勾配パラメータ β の値に依存する [36,37]。 β が 1.1 程度の小さい値の時は、MUSCL 法 (van Leer リミタ) とほぼ同等の特性を示し、不連続解で数値振動を生じない。 β が 1.6 から 2.0 程度の大きい値の時は、高波数領域で MUSCL 法 (superbee リミタ) より優れた特性を示し、文献 [32] によれば不連続解を約 3~4 セルで解像できる。本論文では、このような THINC 法の特徴を区別するため、 β の

値が小さい場合は $\text{THINC}(\beta_s)$ 法, 大きい場合は $\text{THINC}(\beta_1)$ 法と表記する.

近年, 圧縮性流れにおける新しい高解像度数値解法として, BVD (Boundary Variation Diminishing) 法 [36–59] が提案されている. 数値散逸誤差はセル境界の左側及び右側の補間値の差 (Boundary Variation: BV) に依存しており, BV の値を小さくすることで数値散逸誤差を抑制するという考え方を BVD 原理 [38] と呼ぶ. これまで開発された BVD 法の多くは, BVD 原理に従い複数の既存解法を組み合わせたハイブリッド型解法 [36–38, 41, 43, 44, 47, 51, 52, 54] である. 例えば最も初期の WENO-THINC-BVD 法 [38] は, WENO 補間と $\text{THINC}(\beta_1)$ 補間を選択候補とし, 各セルにおいて BV の値が小さくなる補間関数を選ぶ. その結果, 滑らかな解では WENO 補間, 不連続解では $\text{THINC}(\beta_1)$ 補間が選択され, 最終的に滑らかな解と不連続解の双方を高忠実に計算することが出来る. BVD 法では, 選択候補とする補間関数は BVD 許容補間関数, 具体的な選択手順は BVD 選択アルゴリズムと呼ばれ, 高精度化の研究が進められている. また, BVD 原理の概念は普遍的で, 他の種類の許容補間関数 [51] や, 有限体積法以外のフレームワーク [46, 50, 60] においても有効に機能する.

代表的な BVD 法の一つである P_4T_2 -BVD (polynomial of 4-degree and THINC function of 2-level reconstruction based on BVD algorithm) 法 [43] は, 4 次線形多項式関数, $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数, $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数を BVD 許容補間関数とし, 2 段階 BVD アルゴリズムによって最終的な補間関数を決定する. 1 段階目では 4 次多項式関数と $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数を比較し, 2 段階目では 1 段階目で選んだ補間関数と $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数を比較する. このような手順で補間関数を決定することで, 1 段階目で 4 次多項式関数による数値振動を抑制し, 2 段階目で不連続解における数値散逸誤差を抑制する. P_4T_2 -BVD 法は, WENO-THINC-BVD 法とは異なり, 全ての許容補間関数において非線形リミタを用いていないため, 長時間計算において既存解法よりも滑らかな解で数値散逸誤差を抑制できるという特長を持つ. また, P_nT_m -BVD (polynomial of n -degree and THINC function of m -level reconstruction based on BVD algorithm) 法 [44, 61] は, P_4T_2 -BVD 法をさらに高い次数に拡張し, 滑らかな解で超高次精度, 多段階の BVD 選択アルゴリズムによる数値振動と数値散逸の抑制を実現した.

ハイブリッド型解法の計算性能を向上させるため, TENO (Targeted Essentially Non-Oscillatory) 法 [26, 28, 30] の枠組みで不連続解を検出し, 不連続解近傍でのみ THINC 法を計算することで計算コストを抑制する TENO-THINC 法 [62–66] が開発された. TENO 法におけるサブステンシルを切り替える方式を拡張することで正確な不連続検出が可能となり, 少ない格子数で高い解像度を達成している.

高解像度数値解法の開発が進む一方で, 数値散逸誤差が小さい故に発生する問題も存在する. 浮動小数点演算によって生じる丸め誤差は, 演算を行う度に微小な擾乱として解に加算されていく. このような擾乱は, 数値散逸誤差の大きい数値解法であればすぐに消散するが, 低散逸解法では消散せずに解に蓄積する. そして, 空間対称性を持つ流れの数値計算において, 蓄積された丸め誤差は対称性誤差を発生させ, 数値解の対称性を破壊することが報告されてい

る [26, 45, 46, 48, 67–74]. 本来, 初期条件と境界条件がともに空間対称であれば, 時間発展した数値解の空間対称性は保持されるべきである. 対称性誤差は計算手法の中で想定されていない誤差であるため, 回避することが望ましいと言える. 例えば, レイリーテイラー不安定性において, 重い流体が軽い流体の中に入り込む先端の位置は, 不安定性の成長速度を表す指標の一つとされているが, 数値解の対称性誤差が増大すると流体の進行方向は徐々に曲がり, 流体の先端の位置が本来の位置からずれてしまう. 圧縮性流れにおける高解像度数値解法の開発を進める上で, 対称性誤差への対処は重要である.

文献 [68] で, 対称性誤差の原因は浮動小数点演算による丸め誤差であることが最初に報告された. 後に, 対称性誤差を改善する WENO 法 [75, 76] が開発されたが, 対称性誤差の完全な排除には至っていない. また, 解の値を対称な位置にある解との平均値に置き換えることで対称解を生成する手法 [77] も報告されたが, 対称性誤差の問題を本質的には解決出来ていない. 文献 [78] では, 3つ以上の浮動小数点数による和や積の計算が非対称な丸め誤差を生成していると指摘した上で, W(T)ENO 法の計算手順に沿って修正すべき計算式を示した. 高解像度数値解法における対称性誤差の本質的な排除に成功した初の研究であると推察される.

実用性の観点から, 非構造格子上で高解像度な数値計算を行うことが重要である. 例えば, 水中プロペラやエンジン内部といった複雑形状の計算領域で数値解析を行う場合, 直交格子+カットセル法や, 座標変換による境界適合格子などを用いれば, 構造格子上で計算することも可能である. 一方で, 格子の形状や配置に規則性の無い非構造格子を用いることで, 特別な処理を行わずに複雑形状の計算領域を取り扱うことができる. 非構造格子における数値解法開発の課題として, 構造格子と異なり多次元的な空間再構築が要求されることによる, 計算手順の複雑化が挙げられる. 非構造格子における高次精度解法は, これまで主に不連続ガラーキン法 [79–82], スペクトル体積法 [83], スペクトル差分法 [84], 流束再構築法 [60, 85–87], マルチモーメント制約有限体積法 [88, 89] の枠組みで開発されてきた. また, 有限体積法の枠組みで, MUSCL 法の非構造格子への拡張 [90–98], WENO 法の非構造格子への拡張 [99–107] も盛んに研究されている.

これらの手法は, 構造格子の場合と同様に数値振動を回避するために非線形リミタを導入するため, 過剰な数値散逸誤差をもたらす. 非構造格子における BVD 法 [39, 40, 47, 108] はいくつか開発されており, 特に MUSCL-THINC/QQ-BVD 法 [47] は MUSCL 補間関数と THINC/QQ (THINC method with quadratic surface representation and Gaussian quadrature) 補間関数を組み合わせることで, 滑らかな解で 2 次精度を持ち, 不連続解の幾何学的形状を 2 次曲面で表現し, 不連続分布を低散逸で捉えることに成功した.

1.2 本研究の目的

P_4T_2 -BVD 法は、滑らかな解において4次多項式関数、不連続解において THINC(β_1) 法、不連続解の近傍では THINC(β_s) 法を選択することで、解の形状に近い補間関数を選択出来ていると考えられる。同様に P_nT_m -BVD 法も、滑らかな解において n 次多項式関数、不連続解において THINC(β_1) 法、不連続解の近傍では様々な値の β_s を持つ THINC(β_s) 法を選択することで、解の形状に近い補間関数を選択出来ていると考えられる。これらの BVD 法では、THINC 補間関数の勾配パラメータが $\beta_s = 1.1$, $\beta_1 = 1.6$ のような固定値であることを考慮すると、 β の値を解の形状に適合するように各セルで決定することが出来れば、より高忠実な補間を行うことが出来ると推測される。この仮説に基づき、解の滑らかさに応じて β の値を変化させることで、 P_4T_2 -BVD 法および P_nT_m -BVD 法よりも高解像度なハイブリッド型 BVD 法の開発を研究目的とする。

高解像度数値解法では流れの空間対称性を破るという問題が生じる。文献 [78] で対称性を保存する計算手法は提案されているが、この手法のみではソースコードの書き方によっては対称性を保存することが出来ない。加えて、高解像度 BVD 法が候補補間関数として持つ THINC 補間における対称性誤差を回避する手法は未だ開発されていない。文献 [78] で示されていない内容も含めて計算手順全体を見直すことで、有限体積法における対称性誤差の発生メカニズムとその対策法の解明を目指す。

気液二相圧縮性流れにおける衝撃波、接触不連続、気液界面の低散逸な計算にも高解像度数値解法は役立つと考えられる。特に界面特有の現象を正しく再現するためには、気液界面における数値散逸誤差を抑制し、界面の非物理的な拡散を回避する必要がある。本研究では、表面張力や相変化といった界面特有の現象を考慮する気液二相圧縮性流れにハイブリッド型 BVD 法を適用し、代表的な既存解法と比べて界面現象を正しく再現できることを検証する。

非構造格子におけるハイブリッド型 BVD 法を相変化を考慮する気液二相圧縮性流れに適用し、非構造格子において界面現象を正しく再現できることを検証する。高解像度数値解法の MUSCL-THINC/qq-BVD 法を用いて、非構造格子上で相変化により動的に生じる気液界面を MUSCL 法と比べて高解像度に捉えられることを数値テストの結果で明らかにする。

1.3 本論文の構成

本論文の以下の構成は次の通りである。第2章では、単相及び気液二相の圧縮性流れの支配方程式を導出し、特性理論について述べる。第3章では、圧縮性流れの数値解法について、一般的な計算手法の枠組みから説明し、各計算手順を開発された経緯に沿って導出する。第4章では、第3章で説明した数値解法のフレームワークに従い開発された新しい高解像度ハイブ

リッド BVD 法の計算方法を示し，単相圧縮性流れに適用した結果について議論する．第 5 章では，数値解の空間対称性を保存する計算手法を明らかにし，空間対称性を持つベンチマークテストを解くことで対称性が厳密に保存されることを示す．第 6 章では，高解像度数値解法を気液二相圧縮性流れへ展開する．表面張力および相変化を考慮し，それぞれにおいて高解像度数値解法を適用した結果を議論する．第 7 章では，非構造格子上で高解像度数値解法を構築し，相変化を考慮する気液二相の圧縮性流れのベンチマークテストに適用した結果を議論する．最後に第 8 章で本論文の結論をまとめる．

本論文では，変数の記号は斜体で表し，変数ではない記号（固有名詞など）は立体で表し区別する．ベクトルの表記について，次の様に定義する．

- 矢印付き：空間座標系のベクトル（速度ベクトル \vec{u} など）
- 太字：変数の集合としてのベクトル（保存変数の集合 \mathbf{U} など）
- 矢印付きかつ太字：空間座標系のベクトルの集合としてのテンソル（流束テンソル $\vec{\mathcal{F}}$ など）

また， \mathbb{R} は実数の集合， \mathbb{I} は単位テンソルを表す．

第 2 章

圧縮性流れの支配方程式

この章では、単相及び気液二相の圧縮性流れにおける 3 次元カーテシアン座標系の支配方程式について説明する。流体運動を記述する方程式モデルは、統計力学や分子運動論に基づく微視的なモデルと、流体を完全な連続体と見なす巨視的なモデルに分けられるが、本研究では後者の巨視的なモデルに着目する。流体運動は次の普遍的な 3 つの物理法則：連続の式、運動方程式（ニュートンの第二法則）、エネルギー方程式（熱力学第一法則）に従うことが一般的に知られている。これらの法則はそれぞれ、質量保存則、運動量保存則、エネルギー保存則に書き換えることができ、保存型の方程式として記述できる。保存型の方程式では、離散的に定義された数値解の保存性を厳密に（丸め誤差レベルで）保つことができるため、特に衝撃波といった不連続的な構造を含む流れの数値解析において都合の良い形式である。

普遍的な物理法則に加え、流体の物性を表す状態方程式や構成方程式を導入することで、支配方程式の系を閉じる。適切な状態方程式を用いて、粘性項等を除いた移流項のみの支配方程式が双曲型であると示すことができれば、数値流束の上流化が可能となり、圧縮性流れの安定な数値解析につながる。本章では支配方程式の特性理論についても議論する。

2.1 単相圧縮性流れの支配方程式

単相圧縮性流れでは、密度 ρ 、速度 $\vec{u} = (u, v, w)^T$ 、圧力 p などの状態量を基本変数として用い、各方程式を表現する。これらの状態量は時間 t と空間座標 $\vec{x} = (x, y, z)^T$ の変数である。初めにラグランジュ表現で連続の式、運動方程式、エネルギー方程式を導出し、それらをオイラー表現に変換し、最終的に保存型の支配方程式を導く。ラグランジュ微分（または全微分）を d/dt 、局所時間微分を $\partial/\partial t$ と表すこととする。

2.1.1 ナビエストークス方程式

- 連続の式

体積 Ω を持つ流体塊の質量 $\rho\Omega$ は、質量保存則より一定となるべきである。

$$\frac{d\rho\Omega}{dt} = \rho \frac{d\Omega}{dt} + \Omega \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (2.1)$$

流体塊の体積変化率 $(1/\Omega)(d\Omega/dt)$ は速度場の発散 $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ と等しいので、密度の全微分は (2.1) から、

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad (2.2)$$

と導かれる。ここで $\vec{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)^T$ は勾配演算子である。

- 運動方程式

単位体積の流体塊について、以下に示すニュートンの第二法則が成り立つ。

$$\rho \frac{d\vec{u}}{dt} = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \vec{f}_b \quad (2.3)$$

ただし、 $\boldsymbol{\tau}$ は流体塊の表面にはたらく粘性応力を表す 2 階テンソル、

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

\vec{f}_b は重力などの体積力ベクトルである。すなわち流体塊は、圧力勾配、粘性応力、重力などの体積力によって駆動される。

- エネルギー方程式

熱力学第一法則により、流体塊の内部エネルギーの増加量は、熱の流入量から流体塊が外部にした仕事を差し引いた量となる。流体塊の単位質量の内部エネルギーを e 、熱の流入量を \dot{Q} とすると、以下の式が成り立つ。

$$\rho \frac{de}{dt} = \dot{Q} - p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \quad (2.5)$$

熱の流入量 \dot{Q} は、粘性による熱散逸 $(\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{\nabla}) \cdot \vec{u}$ 、熱伝導 $\vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T)$ 、その他の熱源によって構成される。ここで、 κ は熱伝導率、 T は温度である。

上記のラグランジュ表現で導出した支配方程式は、流体塊に追従する座標系で成り立つ。一方で、空間に固定した座標系では、オイラー表現の支配方程式が用いられる。ラグランジュ微分 d/dt は、流体塊に追従する座標系を $\vec{x}_f(t)$ と表すと、次の様に局所時間微分に変換できる。

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\vec{x}_f(t)}{dt} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.6)$$

この変換をラグランジュ表現の各方程式 (2.2), (2.3), (2.5) に適用することで、オイラー表現の方程式が得られる。それぞれ質量、運動量、内部エネルギーの保存型の式に書き換えると次式を得る。

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I}) = \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \vec{f}_b \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho e \vec{u}) + p \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{u} + \kappa \vec{\nabla} T) + \rho \vec{f}_b \cdot \vec{u} \end{cases} \quad (2.7)$$

ただし、 \otimes はテンソル積、 \mathbb{I} は 2 階の単位テンソルを表す。ここで、全エネルギー（内部エネルギーと運動エネルギーの和）を $E = e + \frac{1}{2} \|\vec{u}\|^2 = e + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$ として導入し、式 (2.7) の内部エネルギーを全エネルギーに書き換えると、

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I}) = \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \vec{f}_b \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot ((\rho E + p) \vec{u}) = \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{u} + \kappa \vec{\nabla} T) + \rho \vec{f}_b \cdot \vec{u} \end{cases} \quad (2.8)$$

となり、保存型の支配方程式を得られる [109]。すなわち支配方程式 (2.8) を次の形式で表せる。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_v + \mathbf{S}, \quad (2.9)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}} = \begin{bmatrix} \rho \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}_v = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{u} + \kappa \vec{\nabla} T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho \vec{f}_b \\ \rho \vec{f}_b \cdot \vec{u} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

ただし、 $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^m$ は未知変数の集合、 $\vec{\mathcal{F}} \in \mathbb{R}^{m \times d}$ は非粘性流束テンソル、 $\vec{\mathcal{F}}_v \in \mathbb{R}^{m \times d}$ は粘性流束テンソル、 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^m$ は外力項を表す (m は未知変数の数、 d は空間の次元数)。式 (2.9) は 3 次元カーテシアン座標系で具体的に記述する場合、流束テンソルの各空間方向 (x, y, z) 成

分を $\vec{\mathcal{F}} = (\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H})^\top$, $\vec{\mathcal{F}}_v = (\mathbf{F}_v, \mathbf{G}_v, \mathbf{H}_v)^\top$ と表せば,

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}_v}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}_v}{\partial z} + \mathbf{S}, \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} U &= \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix}, & \mathbf{F} &= \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u u + p \\ \rho v u \\ \rho w u \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix}, & \mathbf{G} &= \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v v + p \\ \rho w v \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix}, & \mathbf{H} &= \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho u w \\ \rho v w \\ \rho w w + p \\ (\rho E + p)w \end{bmatrix}, \\ \mathbf{F}_v &= \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz} + \kappa \frac{\partial T}{\partial x} \end{bmatrix}, & \mathbf{G}_v &= \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ u\tau_{yx} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz} + \kappa \frac{\partial T}{\partial y} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{H}_v &= \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ u\tau_{zx} + v\tau_{zy} + w\tau_{zz} + \kappa \frac{\partial T}{\partial z} \end{bmatrix}, & \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} 0 \\ \rho f_{bx} \\ \rho f_{by} \\ \rho f_{bz} \\ \rho(u f_{bx} + v f_{by} + w f_{bz}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.12)$$

となる。保存型の支配方程式は、離散化された状態で数値解の保存性を保つことができるため、特に圧縮性流れの数値解析において重要な形式である。

3次元カーテシアン座標系のナビエーストークス方程式 (2.11) 及び (2.12) は、外力項を除いて、未知変数の数が保存変数 (ρ , ρu , ρv , ρw , ρE) と、圧力 p , 温度 T , 粘性応力 τ (3×3) の合計 16 個に対し、方程式の数は 5 本である。系を閉じるために、圧力 p , 温度 T , 粘性応力 τ を保存変数で表現する関係式が追加が必要である。次節でこのような関係式を与える状態方程式と構成方程式を導入する。

2.1.2 状態方程式と構成方程式

前節で示した質量、運動量、全エネルギーの保存則は、流体力学における普遍的な物理法則であり、あらゆる種類の流体について成り立つ。一方で、支配方程式に一意的な解を持たせるためには、流体の物性を表す法則として状態方程式と構成方程式を与える必要がある [109]。

状態方程式については、理想気体の状態方程式を考慮する。すなわち、

$$\begin{aligned} p &= \rho R T = \rho (C_p - C_v) \frac{e}{C_v} \\ &= (\gamma - 1) \rho e = (\gamma - 1) \rho \left(E - \frac{1}{2} \|\vec{u}\|^2 \right) = (\gamma - 1) \left(\rho E - \frac{1}{2} \frac{\|\rho \vec{u}\|^2}{\rho} \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

を支配方程式に加える。 R , C_v , C_p , γ はそれぞれ理想気体定数、定積比熱、定圧比熱、比熱比を表す。式 (2.13) 内で、マイヤーの関係式: $C_p = C_v + R$, 内部エネルギーと温度の関係

式： $e = C_v T$ ，比熱比の定義： $\gamma = C_p/C_v$ を用いている．この状態方程式を加えることで，保存則に含まれる圧力 p を保存変数 U の関数として置き換えられ，保存則の未知変数の数を減らすことができる．

構成方程式については，せん断応力がひずみ速度に比例するニュートン流体を仮定し，垂直応力が体積変化に関連付けられたモデルを用いる．すなわち式 (2.4) の粘性応力テンソル τ は次式で表される．

$$\begin{aligned} \tau &= 2\mu \mathbf{D} + \lambda \mathbb{I} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ &= 2\mu \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} & 0 & 0 \\ 0 & \vec{\nabla} \cdot \vec{u} & 0 \\ 0 & 0 & \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.14)$$

μ は粘性係数， λ は第二粘性係数， $\mathbf{D} = \frac{1}{2}((\vec{\nabla} \vec{u})^T + \vec{\nabla} \vec{u})$ はひずみ速度テンソルと呼ばれる．ここで，単原子分子における体積粘性率は気体の分子運動論からゼロであることが導かれていて，そのような条件を満たす μ と λ の関係式は $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ となる（ストークスの仮定）[110]．これを式 (2.14) に代入すると，粘性応力は

$$\begin{aligned} \tau &= 2\mu \mathbf{D} - \frac{2}{3}\mu \mathbb{I} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ &= \mu \begin{bmatrix} \frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \frac{\partial w}{\partial z} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & -\frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{4}{3} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \frac{\partial w}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} & -\frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{4}{3} \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.15)$$

となる．式 (2.15) はストークスの構成方程式と呼ばれ，シンプルな定式化でありながら単相流の粘性の効果を巨視的に精度良く近似しているため，粘性を考慮する圧縮性流れの構成方程式として広く用いられている．

2.1.3 ナビエストークス方程式の無次元化

多くの流体现象は，時間及び空間のスケールを変更しても，特定の無次元量が一定であれば同様の解を得られることが知られている（レイノルズの相似則）．方程式を無次元化することは，スケールに依存せず流体现象を解析できるという点でメリットがある．数値計算の観点からも，絶対値が極端に大きい数値と小さい数値同士の演算では情報落ちが発生するため，無次元化により数値間の差をある程度小さくして計算することが望ましいと言える [110]．

代表長さを L ，代表速度（のノルム）を U ，代表密度を ρ とし，各物理量をアスタリスク記

号 * を付して次の様に無次元化する.

$$\begin{aligned}
 x^* &= \frac{x}{L}, & y^* &= \frac{y}{L}, & z^* &= \frac{z}{L}, & u^* &= \frac{u}{U}, & v^* &= \frac{v}{U}, & w^* &= \frac{w}{U}, \\
 t^* &= \frac{t}{L/U}, & \vec{\nabla}^* &= \left(\frac{\partial}{\partial x^*}, \frac{\partial}{\partial y^*}, \frac{\partial}{\partial z^*} \right)^\top, \\
 \rho^* &= \frac{\rho}{\rho}, & p^* &= \frac{p}{\rho U^2}, & E^* &= \frac{E}{U^2}, & T^* &= \frac{p^*}{\rho^*}, & \vec{f}_b^* &= \frac{\vec{f}_b}{U^2/L}
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

これらの無次元量を用いて各保存則 (2.8) を書き換えると, 多少の演算の後に次式を得る.

$$\begin{cases}
 \frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \vec{\nabla}^* \cdot (\rho^* \vec{u}^*) = 0 \\
 \frac{\partial \rho^* \vec{u}^*}{\partial t^*} + \vec{\nabla}^* \cdot (\rho^* \vec{u}^* \otimes \vec{u}^* + p^* \mathbb{I}) = \frac{1}{Re} \vec{\nabla}^* \cdot \boldsymbol{\tau}^* + \rho^* \vec{f}_b^* \\
 \frac{\partial \rho^* E^*}{\partial t^*} + \vec{\nabla}^* \cdot ((\rho^* E^* + p^*) \vec{u}^*) \\
 \quad = \frac{1}{Re} \vec{\nabla}^* \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^* \cdot \vec{u}^* + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{1}{Pr} \vec{\nabla}^* T^* \right) + \rho^* \vec{f}_b^* \cdot \vec{u}^*
 \end{cases} \tag{2.17}$$

ただし, 無次元化された粘性応力 $\boldsymbol{\tau}^*$ は, 式 (2.16) で定義した無次元量のみを用いて

$$\boldsymbol{\tau}^* = ((\vec{\nabla}^* \vec{u}^*)^\top + \vec{\nabla}^* \vec{u}^*) - \frac{2}{3} \mathbb{I} \vec{\nabla}^* \cdot \vec{u}^* \tag{2.18}$$

と計算される. 理想気体定数 R や粘性係数 μ などの定数は, 無次元化する際に $R^* = 1$, $\mu^* = 1$ としている (粘性係数 μ の温度等に対する依存性はここでは無視することとする). 式 (2.17) で導入される無次元量のレイノルズ数 Re とプラントル数 Pr は次の様に定義される.

$$Re = \frac{\rho U L}{\mu}, \quad Pr = \frac{\mu C_p}{\kappa} \tag{2.19}$$

レイノルズ数は慣性力と粘性力の比, プラントル数は粘性の効果と伝熱の効果の比をそれぞれ表している.

無次元化されたナビエーストックス方程式 (2.17) ともとの式 (2.8) との違いは, 粘性項と伝熱項を除けば, 次元を持つ物理変数が対応する無次元の変数に置き換わっている点のみである. すなわち, 式 (2.17) からアスタリスク記号 * を取り除いた式は, 物理変数が次元を持つか否かに依らず成り立つ. 以下, 簡単に記述するためにアスタリスク記号 * は省略する. 最終的に

圧縮性ナビエーストックス方程式は次の様に表現する.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_v + \mathbf{S}, \quad (2.20)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}} = \begin{bmatrix} \rho \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad (2.21)$$

$$\vec{\mathcal{F}}_v = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \frac{1}{Re} \boldsymbol{\tau} \\ \frac{1}{Re} \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{u} + \frac{1}{Pr} \frac{\gamma}{\gamma-1} \vec{\nabla} T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ \rho \vec{f}_b \\ \rho \vec{f}_b \cdot \vec{u} \end{bmatrix}$$

2.1.4 オイラー方程式

圧縮性ナビエーストックス方程式は、流体现象の普遍的な数学モデルとして知られている。一方で、圧縮性が見られる気体流れでは、主流速度は大きく、粘性係数は比較的小さいため、慣性項の効果が粘性項の効果より大幅に強い場合が多い。壁面近傍で形成される境界層は非常に薄く、主流に及ぼす影響は無視できるほど小さい。そのため、ナビエーストックス方程式から粘性項を除き簡略化したオイラー方程式は、航空工学分野を中心に圧縮性空気力学の支配方程式として広く用いられている。オイラー方程式は双曲型の偏微分方程式であり、特性線に沿って波動方程式に分解できる。これにより、波の伝播方向を考慮することで上流化された数値解法を適用できる。

圧縮性ナビエーストックス方程式 (2.8) について、粘性、熱伝導、外力の項を除くと次の圧縮性オイラー方程式を得る。

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I}) = \vec{0} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot ((\rho E + p) \vec{u}) = 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

ナビエーストックス方程式 (2.9) と同様に、オイラー方程式 (2.22) も次のように保存型で表せる。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}} = \begin{bmatrix} \rho \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

3次元カーテシアン座標系のオイラー方程式は,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \mathbf{0}, \quad (2.25)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho v u \\ \rho w u \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho w v \\ \rho w v \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho w^2 + p \\ \rho v w \\ \rho w w + p \\ (\rho E + p)w \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

と表される. 未知変数の数は ρ, u, v, w, E, p の6個に対し, 方程式の数は5本である. 理想気体の状態方程式 (2.13) を方程式系に加え, 系を閉じる.

無次元化については, 2.1.3節で示した無次元化の手順をオイラー方程式 (2.22) にも同様に適用できる. 無次元化を施しても式 (2.22) の形は変わらないため, 式 (2.22) 中の各変数は無次元量として扱うことができる.

2.1.5 音速の導出

ここで, 1次元空間の質量保存則及び運動量保存則を用いて, 流体中を伝わる音波の伝播速度を導出する [110, 111]. オイラー方程式 (2.22) より, 1次元空間の場合は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2 + p)}{\partial x} = 0 \quad (2.28)$$

となる. 流体は静止していて, 各物理量に小さい摂動が与えられている状況を仮定する. すなわち, 密度 ρ と速度 u は

$$\rho(x, t) = \bar{\rho} + \tilde{\rho}(x, t), \quad u(x, t) = \tilde{u}(x, t) \quad (2.29)$$

の様に表現される. 変数の上のバーは空間および時間に対する平均, チルダは微小擾乱を表す. 擾乱が十分に小さければ等エントロピー変化と見なせるので, 圧力 p を密度 ρ のみの関数として表せる. $\rho = \bar{\rho}$ を中心とする圧力 p の1次までのテイラー展開は,

$$p(\rho) = p(\bar{\rho}) + \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\rho=\bar{\rho}} (\rho - \bar{\rho}) + \mathcal{O}((\rho - \bar{\rho})^2) \quad (2.30)$$

$$= p(\bar{\rho}) + \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\rho=\bar{\rho}} \tilde{\rho} + \mathcal{O}(\tilde{\rho}^2) \quad (2.31)$$

と表される．式 (2.29) と式 (2.31) を質量保存則 (2.27) と運動量保存則 (2.28) に代入して，2次以上の微小項を除くと，

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} = 0, \quad (2.32)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} + \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\rho=\bar{\rho}} \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial x} = 0 \quad (2.33)$$

を得る．式 (2.32) と式 (2.33) から \tilde{u} を消去する．

$$\frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial t^2} - \left. \frac{\partial p}{\partial \rho} \right|_{\rho=\bar{\rho}} \frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial x^2} = 0 \quad (2.34)$$

式 (2.34) は波動方程式と呼ばれる偏微分方程式であり，その波動の速度すなわち音速 c は，

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s} \quad (2.35)$$

と表される．式 (2.35) は音速の一般的な定義として知られている．

圧力変化 dp について，圧力を密度と内部エネルギーの関数，密度とエントロピーの関数と見なすことで，それぞれ次の全微分の式が成り立つ．

$$dp = \left(\frac{\partial p(\rho, e)}{\partial \rho} \right)_e d\rho + \left(\frac{\partial p(\rho, e)}{\partial e} \right)_\rho de, \quad (2.36)$$

$$dp = \left(\frac{\partial p(\rho, s)}{\partial \rho} \right)_s d\rho + \left(\frac{\partial p(\rho, s)}{\partial s} \right)_\rho ds \quad (2.37)$$

等エントロピー ($ds = 0$) のとき，式 (2.36) と (2.37) の差分から，

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_e + \left(\frac{\partial p}{\partial e} \right)_\rho \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_s \quad (2.38)$$

が得られる．また，エントロピーの定義：

$$ds = \frac{\delta q}{T} \quad (2.39)$$

から，等エントロピー ($ds = 0$) の仮定の下では，熱力学第一法則 (式 (2.5)) より

$$de + pd \left(\frac{1}{\rho} \right) = 0 \quad (2.40)$$

が得られ，内部エネルギーの密度に対する勾配は，

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_s = \frac{p}{\rho^2} \quad (2.41)$$

と計算される．式 (2.35) に (2.38) と (2.41) を代入し，次の音速の式を得る．

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e + \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho} \quad (2.42)$$

式 (2.42) は，質量保存則，運動量保存則，熱力学的関係式のみから導出されているため，あらゆる種類の流体について成り立つ．具体的な音速の式は，式 (2.42) に状態方程式を代入することで求められる．例えば，理想気体の状態方程式 (2.13) を代入すると，理想気体の音速：

$$c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} = \sqrt{\gamma RT} \quad (2.43)$$

を得る．気液二相流についても，2.2.8 節で述べる通り，対応する状態方程式を式 (2.42) に代入することで各相の音速が得られる．

2.1.6 オイラー方程式の特性理論

オイラー方程式 (2.22) は 1 次元の場合，

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{0}, \quad (2.44)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

と表される．式 (2.45) の流束 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ に理想気体の状態方程式 (2.13) を代入し，流束 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ を明示的に保存変数 \mathbf{U} の関数として表現すると，

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{bmatrix}, \quad (2.46)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} F_1(\mathbf{U}) \\ F_2(\mathbf{U}) \\ F_3(\mathbf{U}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho u \\ (\gamma - 1)\rho E - \frac{\gamma - 3}{2} \frac{(\rho u)^2}{\rho} \\ \frac{\gamma(\rho E)(\rho u)}{\rho} - \frac{\gamma - 1}{2} \frac{(\rho u)^3}{\rho^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_2 \\ (\gamma - 1)U_3 - \frac{\gamma - 3}{2} \frac{U_2^2}{U_1} \\ \frac{\gamma U_2 U_3}{U_1} - \frac{\gamma - 1}{2} \frac{U_2^3}{U_1^2} \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

となる． U_1, U_2, U_3 は互いに独立している変数として，流束関数 (2.47) より流束ヤコビアン行列 $\mathbf{A}(\mathbf{U}) \equiv \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}}$ を計算すると，

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{U}) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial U_1} & \frac{\partial F_1}{\partial U_2} & \frac{\partial F_1}{\partial U_3} \\ \frac{\partial F_2}{\partial U_1} & \frac{\partial F_2}{\partial U_2} & \frac{\partial F_2}{\partial U_3} \\ \frac{\partial F_3}{\partial U_1} & \frac{\partial F_3}{\partial U_2} & \frac{\partial F_3}{\partial U_3} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma - 3}{2} u^2 & -(\gamma - 3)u & \gamma - 1 \\ \frac{\gamma - 1}{2} u^3 - Hu & H - (\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.48)$$

となる． $H = E + p/\rho$ は単位質量の全エンタルピーを表す．流束ヤコビアン行列の定義を用いて，1次元オイラー方程式 (2.44) は

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.49)$$

と変形できる．このようにオイラー方程式 (2.44) は移流型と呼ばれる形 [109] に式変形できるため，準線形の偏微分方程式に分類される．また，流束関数 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ の斉次性により，

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{A}(\mathbf{U})\mathbf{U} \quad (2.50)$$

が成り立つ [109, 112, 113].

式 (2.48) で示した流束ヤコビアン行列 \mathbf{A} について固有値分解を行うと，固有値 λ は

$$\begin{aligned} \lambda &= u - \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}, \quad u, \quad u + \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \\ &= u - c, \quad u, \quad u + c \end{aligned} \quad (2.51)$$

と求まる．ただし c は式 (2.43) で求めた理想気体の音速である．密度 ρ と圧力 p が正であるという物理的制約から，固有値は全て実数である．したがって，オイラー方程式 (2.44) は双曲型の偏微分方程式である．

各固有値に対応する左固有ベクトル \mathbf{l} ，右固有ベクトル \mathbf{r} はそれぞれ

$$\begin{aligned} \mathbf{l}^{(u-c)} &= \left[\frac{1}{2} \left(b_1 + \frac{u}{c} \right) \quad -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} + b_2 u \right) \quad \frac{1}{2} b_2 \right], \\ \mathbf{l}^{(u)} &= \left[1 - b_1 \quad b_2 u \quad -b_2 \right], \\ \mathbf{l}^{(u+c)} &= \left[\frac{1}{2} \left(b_1 - \frac{u}{c} \right) \quad \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - b_2 u \right) \quad \frac{1}{2} b_2 \right], \\ \mathbf{r}^{(u-c)} &= \begin{bmatrix} 1 \\ u - c \\ H - uc \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}^{(u)} = \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ \frac{1}{2} u^2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}^{(u+c)} = \begin{bmatrix} 1 \\ u + c \\ H + uc \end{bmatrix} \\ &\left(b_1 = \frac{u^2}{2} \frac{\gamma - 1}{c^2}, \quad b_2 = \frac{\gamma - 1}{c^2} \right) \end{aligned} \quad (2.52)$$

と求まる [112]. よって，流束ヤコビアン行列 \mathbf{A} は次のように対角化できる．

$$\mathbf{L}\mathbf{A}\mathbf{R} = \mathbf{A} \quad (2.53)$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{l}^{(u-c)} \\ \mathbf{l}^{(u)} \\ \mathbf{l}^{(u+c)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \left(b_1 + \frac{u}{c} \right) & -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} + b_2 u \right) & \frac{1}{2} b_2 \\ 1 - b_1 & b_2 u & -b_2 \\ \frac{1}{2} \left(b_1 - \frac{u}{c} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - b_2 u \right) & \frac{1}{2} b_2 \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

$$\mathbf{R} = \left[\mathbf{r}^{(u-c)} \quad \mathbf{r}^{(u)} \quad \mathbf{r}^{(u+c)} \right] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - c & u & u + c \\ H - uc & \frac{1}{2} u^2 & H + uc \end{bmatrix} \quad (2.55)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} u - c & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & u + c \end{bmatrix} \quad (2.56)$$

この性質を用いて、 $L\partial U = \partial W$ とすると、式 (2.49) は特性変数 W に関する式に変形できる。

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \Lambda(W) \frac{\partial W}{\partial x} = 0, \quad (2.57)$$

$$W = \begin{bmatrix} W^{(u-c)} \\ W^{(u)} \\ W^{(u+c)} \end{bmatrix} \quad (2.58)$$

式 (2.49) と比べて、式 (2.57) は各固有値に対応する 3 本の波動方程式となっている。

$$\begin{aligned} \frac{\partial W^{(u-c)}}{\partial t} + (u-c) \frac{\partial W^{(u-c)}}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial W^{(u)}}{\partial t} + u \frac{\partial W^{(u)}}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial W^{(u+c)}}{\partial t} + (u+c) \frac{\partial W^{(u+c)}}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (2.59)$$

すなわち、3つの特性変数 $W^{(u-c)}, W^{(u)}, W^{(u+c)}$ がそれぞれ対応する特性速度 $u-c, u, u+c$ で輸送されていることが分かる。多次元空間の場合も、各次元方向について同様に特性分解を行うことが可能である。特性変数の概念は、特に高次の空間再構築において数値振動を回避するために用いられる [15, 114]。

2.2 気液二相圧縮性流れの支配方程式

ナビエストークス方程式やオイラー方程式といった単相の圧縮性流れの支配方程式をベースに、気液二相の圧縮性流れの支配方程式を導く。混相流の解析における最も重要な要素として、異なる相の接し合う境界面、すなわち界面をどのように取り扱うかが挙げられる。この界面モデルの違いにより、界面で満たすべき物理的条件を数学的にどのように表現するかも変わる。一般的には、単相圧縮性流れにおける数値解法を直接的に適用可能な拡散界面モデルが広く用いられている。この拡散界面モデルを取り入れた二相圧縮性流れの支配方程式として、 n 方程式モデル (n は 4~7 の整数) の開発が進められてきた。各方程式モデルの導出過程及び特性について説明する。ただしここでは非粘性、外力無しを仮定する。

2.2.1 シャープ界面モデルと拡散界面モデル

界面モデルには大きく分けて二種類あり、シャープ界面モデルと拡散界面モデルに分類することができる。図 2.1 に二種の界面モデルによる体積分率の値を示す。シャープ界面モデルでは、界面を厚みの無い不連続分布と見なし、純粋な気体の相と液体の相が界面を挟む形で存在している。界面の具体的な位置をラグランジュ的に追跡する必要があり、界面追跡法と呼ばれ

る計算手法が用いられる。例えば、VOF法 [115–117]、レベルセット法 [118,119]、フロントトラッキング法 [120,121] などが界面追跡法の主なフレームワークとして挙げられる。一方で、拡散界面モデルは、界面を人工的に混合された領域で表現し、計算領域全体で相関数（カラー関数）を定義することで各相を識別する。相関数には体積分率や質量分率などが用いられ、相関数の輸送式を解く際には界面捕獲法と呼ばれる計算手法が用いられる。各相の密度、速度、圧力といった物理量は計算領域全体で定義され、二相の混合量は適切な混合則によって計算される。

シャープ界面モデルは、二相がほとんど混合しない場合において物理的に整合性のあるモデルである。しかし、界面において境界条件を適切に計算する必要があること、圧縮性によって界面が複雑に変形すること、相変化により界面が動的に生成されることを考慮すると、圧縮性二相流ではシャープ界面モデルでの安定かつ高精度な計算は一般的に困難である。一方、拡散界面モデルでは、上記の問題を比較的解決しやすいため、圧縮性二相流における主流の界面モデルとして扱われている。特に、衝撃波と自由界面が交差するような問題において、シャープ界面モデルでは界面の位置や境界条件の計算が複雑になるが、拡散界面モデルでは複数の混合領域の交差を代数的に計算すれば良いため、不連続解同士の干渉を容易に再現できる。拡散界面モデルを用いる上で着目すべき点は、1) 人工的に二相が混合された領域で熱力学的な整合性が保たれているか、2) 混合された物理量の保存性は保たれているか、3) 数値散逸誤差により界面が非物理的に拡散していないか、の3点が挙げられる。これらの要素を満たす方程式モデル及び数値解法は、気液二相圧縮性流れの安定かつ高精度な数値解析の必要条件であると言える。

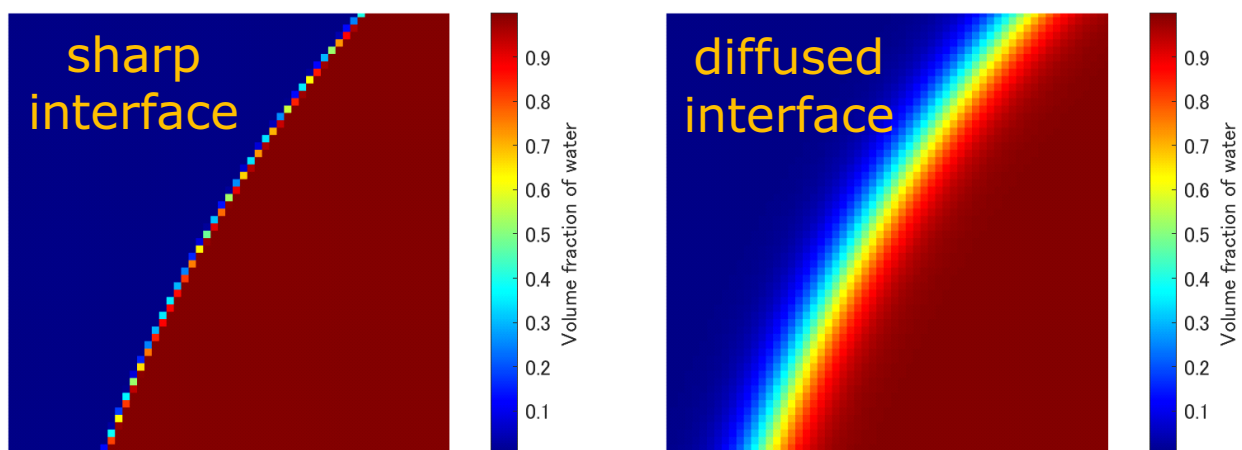


Fig. 2.1 An example showing the difference between the sharp-interface model and diffused-interface model. The red and blue regions indicate the liquid and gas phases, respectively.

2.2.2 準安定状態と平衡状態

拡散界面モデルにおいて、物理変数の定義の方法には一流体モデル及び二流体モデルがあるが、ここでは気相及び液相における各物理量を計算領域内で定義する二流体モデルを扱う。図 2.2 に二流体モデルで定義される物理量の概念図を示す。体積分率を α 、密度を ρ 、速度を u 、圧力を p 、温度を T 、ギブスエネルギー（化学ポテンシャル）を G と表記し、添え字 l, g, I はそれぞれ液相、気相、界面における物理量であることを表す。これらの変数はすべて独立的に定義されるので、図 2.2 の一番左の図のように、液相と気相における全ての物理量が一般に異なる値となっていて、全物理量について界面を挟んで非平衡状態または準安定状態であると言える。この状態を考慮して各保存則を立てると、合計 7 本の方程式が得られることから 7 方程式モデル [122–125] と呼ばれる支配方程式が導かれる。一方、速度・圧力・温度・ギブスエネルギーについては、物理的あるいは化学的なメカニズムとして、界面をまたいで特定の物理量が輸送されることで平衡状態に遷移することが知られている。速度と圧力は、表面張力などの粘性の効果を無視する場合、力学的な観点から $u_l = u_g = u_I$ 及び $p_l = p_g = p_I$ の平衡状態に向かう。温度は熱伝達の効果で $T_l = T_g = T_I$ の熱的平衡状態に向かう。ギブスエネルギーは相変化（または化学反応）によって $G_l = G_g = G_I$ の化学的平衡状態に向かう。7 方程式モデルでは、これらの物理的又は化学的メカニズムの効果を表現するため、ソース項として緩和項と呼ばれる式を支配方程式に追加している。緩和項の計算を行うことで、混合量の保存性を満たしながら、液相と気相の物理量をある一つの値に近づけさせ、平衡状態への遷移を再現することができる。

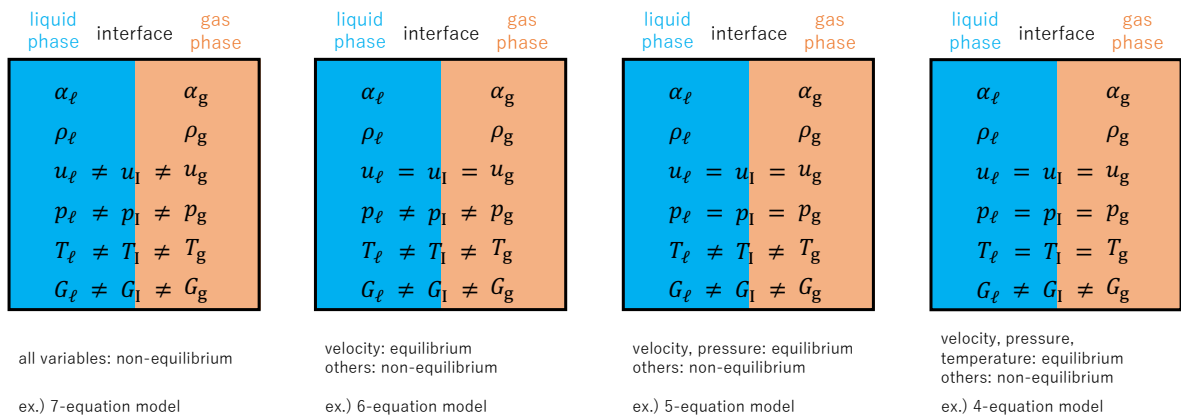


Fig. 2.2 Conceptual diagram of determined physical variables in the two-fluid model considering equilibrium and non-equilibrium (metastable) states.

緩和速度（または平衡状態に向かうスピード）が流体動力学で現れる速度よりもはるかに速い場合、緩和のプロセスが巨視的な流体の挙動にほとんど影響しないと仮定できる。この

時、緩和速度は ∞ と表現され、緩和項の計算は方程式の同次部と切り離してフラクショナルステップ法で計算されることになる。一方、ある物理量が液相と気相で常に平衡であるとするれば、その物理量を各相ではなく混合量として定義することができる。図 2.2 の左から 2 番目の図は、液相と気相と界面の速度を同じ値とする 1 速度モデルを表している。このような変数定義により、各相の運動量保存則は混合量の運動量保存則に置き換えられるため、方程式の数が 1 本減った 6 方程式モデルが導かれる。左から 3 番目の図は、液相と気相と界面の速度及び圧力をそれぞれ同じ値とする 1 速度 1 圧力モデルを表している。この変数定義では、運動量保存則とエネルギー保存則がともに混合量に対する方程式に置き換えられるため、5 方程式モデルとなる。一番右の図は、速度と圧力に加え温度も等しいと仮定する温度平衡モデルを表し、4 方程式モデルが導出される。

方程式の数を減らしたモデルでは、計算手順はシンプルになり、計算コストは低くなる。一方で、方程式の数が多きモデルは、緩和項の計算による数値安定性の向上、二相間の準安定状態の再現が可能 [126]、二相の混合領域における熱力学的な整合性を保つ [1] という点で優れている。これらの特性を把握し、問題に応じて適切な方程式モデルを選択することが重要となる。

2.2.3 混合則

拡散界面モデルでは、人工的に混合された拡散領域で、熱力学的な整合性を保つために適切な混合則を用いる必要がある。体積分率、密度、運動量、内部エネルギー、全エネルギーに関する混合則は、

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 + \alpha_2 &= 1, \\
 \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 &= \rho, \\
 \alpha_1 \rho_1 \vec{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \vec{u}_2 &= \rho \vec{u}, \\
 \alpha_1 \rho_1 e_1 + \alpha_2 \rho_2 e_2 &= \rho e, \\
 \alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_2 \rho_2 E_2 &= \rho E
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

と定義される。添え字の無い物理量は二相の混合量を表す。式 (2.60) から、質量分率 $Y_k = (\alpha_k \rho_k) / \rho$ 、混合速度 \vec{u} 、混合内部エネルギー e 、混合全エネルギー E について、

$$\begin{aligned}
 Y_1 + Y_2 &= 1, \\
 Y_1 \vec{u}_1 + Y_2 \vec{u}_2 &= \vec{u}, \\
 Y_1 e_1 + Y_2 e_2 &= e, \\
 Y_1 E_1 + Y_2 E_2 &= E
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

が成り立つ。圧力や温度などの他の物理量の混合則は、方程式モデルや状態方程式に応じて定められる。

2.2.4 7方程式モデル

相 k ($= 1, 2$) の界面移流式, 連続の式, 運動方程式, エネルギー方程式は, 粘性や外力を無視する場合それぞれ次式で表される [127].

$$\frac{d\alpha_k}{dt} = (\vec{u}_k - \vec{u}_I) \cdot \vec{\nabla} \alpha_k, \quad (\text{界面移流式}) \quad (2.62a)$$

$$\frac{d(\alpha_k \rho_k)}{dt} = -(\alpha_k \rho_k) \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k, \quad (\text{連続の式}) \quad (2.62b)$$

$$(\alpha_k \rho_k) \frac{d\vec{u}_k}{dt} = -\vec{\nabla}(\alpha_k p_k) + p_I \vec{\nabla} \alpha_k, \quad (\text{運動方程式}) \quad (2.62c)$$

$$(\alpha_k \rho_k) \frac{de_k}{dt} = -(\alpha_k p_k) \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k + p_I (\vec{u}_I - \vec{u}_k) \cdot \vec{\nabla} \alpha_k \quad (\text{エネルギー方程式}) \quad (2.62d)$$

ただし α_k は体積分率, ρ_k は密度, $\vec{u}_k = (u_k, v_k, w_k)^T$ は速度ベクトル, p_k は圧力, e_k は比内部エネルギーを表す. p_I と \vec{u}_I はそれぞれ界面における圧力および速度であり,

$$p_I = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2, \quad \vec{u}_I = Y_1 \vec{u}_1 + Y_2 \vec{u}_2 \quad (2.63)$$

と定義される [123, 127]. 式 (2.62) に $\alpha_k = 1$ を代入すると, 単相流の支配方程式 (2.2), (2.3), (2.5) に一致する. ラグランジュ形式をオイラー形式に変換 ($d/dt = \partial/\partial t + \vec{u}_k \cdot \vec{\nabla}$) すると, 以下の非平衡 7 方程式モデル [122–125] を得る.

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u}_I \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = 0, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k + \alpha_k p_k \mathbb{I}) - p_I \vec{\nabla} \alpha_k = \vec{0}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k e_k \vec{u}_k) + \alpha_k p_k \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_k - p_I (\vec{u}_I - \vec{u}_k) \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = 0 \end{cases} \quad (2.64)$$

計算領域が相 1 と相 2 の物質のみで満たされていれば $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ が成り立つので, α_1 は未知変数, α_2 は既知の変数として扱われる. よって式 (2.64) は 7 本の方程式 (界面移流式 $\times 1$, 質量保存則 $\times 2$, 運動量保存則 $\times 2$, エネルギー保存則 $\times 2$) で構成される. 各相の単位質量の運動エネルギー $K_k = \frac{1}{2} \|\vec{u}_k\|^2 = \frac{1}{2} (\vec{u}_k \cdot \vec{u}_k)$ に関する方程式は (2.64) より,

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k K_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k K_k \vec{u}_k) + \vec{u}_k \cdot \vec{\nabla} (\alpha_k p_k) - p_I \vec{u}_k \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = 0 \quad (2.65)$$

と計算されるので, 各相の全エネルギーに関する方程式は

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k) - p_I \vec{u}_I \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = 0 \quad (2.66)$$

と表される．速度，圧力，温度，ギブスエネルギーの緩和を考慮し，最終的に 7 方程式モデルは

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u}_I \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = -\mu(p_{k'} - p_k) + \frac{\theta(T_{k'} - T_k)}{\kappa} + \frac{\nu(G_{k'} - G_k)}{\rho_I}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k) = \nu(G_{k'} - G_k), \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k \vec{u}_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}_k \otimes \vec{u}_k + \alpha_k p_k \mathbb{I}) - p_I \vec{\nabla} \alpha_k \\ \quad = \lambda(\vec{u}_{k'} - \vec{u}_k) + \nu \vec{u}_I (G_{k'} - G_k), \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k) - p_I \vec{u}_I \cdot \vec{\nabla} \alpha_k \\ \quad = \lambda \vec{u}_I \cdot (\vec{u}_{k'} - \vec{u}_k) + \mu p_I (p_{k'} - p_k) + \theta(T_{k'} - T_k) + \nu E_I (G_{k'} - G_k) \end{array} \right. \quad (2.67)$$

と表される．このモデルを Saurel と Abgrall の 7 方程式モデル [123] と呼ぶ．ただし k' は k と対を成す相を表す ($k = 1$ のとき $k' = 2$, $k = 2$ のとき $k' = 1$)． λ , μ , θ , ν はそれぞれ速度緩和，圧力緩和，温度緩和，ギブスエネルギー緩和における緩和速度を表す． κ , ρ_I , E_I は界面上で定義される物理量である．これらの具体的な式は文献 [124] で導出されているが，緩和速度を全て ∞ とし各物理量が瞬時に緩和されると仮定する場合，これらの変数を直接計算する必要は無い [126]．

2.2.5 6 方程式モデル

7 方程式モデル (2.64) で，二相の速度が常に同じ ($\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_I = \vec{u}$) と仮定し，各相の運動量保存則を足し合わせて混合運動量の保存則とすると， $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ より，

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = 0, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}) = 0, \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) \mathbb{I}) = \vec{0}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k e_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k e_k \vec{u}) + \alpha_k p_k \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \end{array} \right. \quad (2.68)$$

となる．6 本の方程式 (界面移流式 $\times 1$, 質量保存則 $\times 2$, 運動量保存則 $\times 1$, エネルギー保存則 $\times 2$) で構成されるため，式 (2.68) を Saurel らの 6 方程式モデル [1, 124] と呼ぶ．混合運動量の式から混合運動エネルギー $K = \frac{1}{2} \|\vec{u}\|^2 = \frac{1}{2} (\vec{u} \cdot \vec{u})$ に関する方程式を導くと，

$$\frac{\partial K}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} K + \frac{\vec{u}}{\rho} \cdot \vec{\nabla} p = 0 \quad (2.69)$$

となる。この式を用いて各相の全エネルギー $E_k = e_k + K$ に関する方程式は

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + p_k) \vec{u}_k) - \vec{u} \cdot (Y_{k'} \vec{\nabla}(\alpha_k p_k) - Y_k \vec{\nabla}(\alpha_{k'} p_{k'})) = 0 \quad (2.70)$$

と導かれる [126, 128]。圧力，温度，ギブスエネルギーの緩和を考慮した6方程式モデルは

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \alpha_k = -\mu(p_{k'} - p_k) + \frac{\theta(T_{k'} - T_k)}{\kappa} + \frac{\nu(G_{k'} - G_k)}{\rho_1}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{u}) = \nu(G_{k'} - G_k), \\ \frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u} + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) \mathbb{I}) = \vec{0}, \\ \frac{\partial \alpha_k \rho_k E_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k (\rho_k E_k + p_k) \vec{u}) - \vec{u} \cdot (Y_{k'} \vec{\nabla}(\alpha_k p_k) - Y_k \vec{\nabla}(\alpha_{k'} p_{k'})) \\ = \mu p_1 (p_{k'} - p_k) + \theta(T_{k'} - T_k) + \nu E_1 (G_{k'} - G_k) \end{array} \right. \quad (2.71)$$

と表される。内部エネルギーの輸送式の代わりに全エネルギーの輸送式を用いたモデルは，Pelanti と Shyue の6方程式モデルと呼ぶ [126, 129]。

6方程式モデル (2.71) をコンパクトな形式として，

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \boldsymbol{\psi}_p(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\psi}_T(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\psi}_G(\mathbf{U}) \quad (2.72)$$

と表せる。未知変数 \mathbf{U} ，非粘性流束 $\vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U})$ ，非保存項 $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U})$ ，緩和項 $\boldsymbol{\psi}_p(\mathbf{U})$ ， $\boldsymbol{\psi}_T(\mathbf{U})$ ， $\boldsymbol{\psi}_G(\mathbf{U})$ はそれぞれ，

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho \vec{u} \\ \alpha_1 \rho_1 E_1 \\ \alpha_2 \rho_2 E_2 \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \vec{u} \\ \alpha_1 \rho_1 \vec{u} \\ \alpha_2 \rho_2 \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) \mathbb{I} \\ \alpha_1 (\rho_1 E_1 + p_1) \vec{u} \\ \alpha_2 (\rho_2 E_2 + p_2) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ \Upsilon \\ -\Upsilon \end{bmatrix}, \quad (2.73)$$

$$\boldsymbol{\psi}_p = \begin{bmatrix} -\mu(p_2 - p_1) \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ \mu p_1 (p_2 - p_1) \\ -\mu p_1 (p_2 - p_1) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\psi}_T = \begin{bmatrix} \frac{\theta(T_2 - T_1)}{\kappa} \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ \theta(T_2 - T_1) \\ -\theta(T_2 - T_1) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\psi}_G = \begin{bmatrix} \frac{\nu(G_2 - G_1)}{\rho_1} \\ \nu(G_2 - G_1) \\ -\nu(G_2 - G_1) \\ \vec{0} \\ \nu E_1 (G_2 - G_1) \\ -\nu E_1 (G_2 - G_1) \end{bmatrix}$$

となる。全エネルギーの式に含まれる非保存項の Υ は，

$$\Upsilon = -\vec{u} \cdot (Y_2 \vec{\nabla}(\alpha_1 p_1) - Y_1 \vec{\nabla}(\alpha_2 p_2)) \quad (2.74)$$

である。

2.2.6 5 方程式モデル

7 方程式モデル (2.67) で, 二相の速度と圧力がそれぞれ常に同じ ($\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_I = \vec{u}$, $p_1 = p_2 = p_I = p$) と仮定する. 7 方程式モデルを保存変数の式から基本変数 ($\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \vec{u}_1, p_1, \alpha_2 \rho_2, \vec{u}_2, p_2$) の式に変形し, 速度及び圧力の平衡状態に漸近的に近づけると, 次に示す Kapila らの 5 方程式モデルを得る [127, 128, 130].

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) + \sigma(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \psi_T(\mathbf{U}) + \psi_G(\mathbf{U}), \quad (2.75)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \alpha_1 \vec{u} \\ \alpha_1 \rho_1 \vec{u} \\ \alpha_2 \rho_2 \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \sigma(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -(\alpha_1 + K_{5\text{eq}}) \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\psi_T(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \frac{\theta(T_2 - T_1)}{\kappa} \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_G(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \frac{\nu(G_2 - G_1)}{\rho_I} \\ \nu(G_2 - G_1) \\ -\nu(G_2 - G_1) \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

ただし非保存項に現れる変数 $K_{5\text{eq}}$ は,

$$K_{5\text{eq}} = \frac{\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2}{\frac{\rho_1 c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\rho_2 c_2^2}{\alpha_2}} \quad (2.77)$$

と表される. c_k は後に示す各相の音速である.

また, 7 方程式モデル (2.67) または 6 方程式モデル (2.71) で, 二相の速度と圧力について $\vec{u}_1 = \vec{u}_2 = \vec{u}_I = \vec{u}$, $p_1 = p_2 = p_I = p$ を直接代入すると, Allaire らの 5 方程式モデルを得

る [131].

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \psi_{\text{T}}(\mathbf{U}) + \psi_{\text{G}}(\mathbf{U}), \quad (2.78)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \alpha_1 \vec{u} \\ \alpha_1 \rho_1 \vec{u} \\ \alpha_2 \rho_2 \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.79)$$

$$\psi_{\text{T}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \frac{\theta(T_2 - T_1)}{\kappa} \\ 0 \\ 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_{\text{G}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \frac{\nu(G_2 - G_1)}{\rho_1} \\ \nu(G_2 - G_1) \\ -\nu(G_2 - G_1) \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}$$

Kapila らの 5 方程式モデルと Allaire らの 5 方程式モデルの違いは、非保存項の中に $K_{5\text{eq}}$ が含まれているか否かである。文献 [132] で、Allaire らの 5 方程式モデルは変数 $K_{5\text{eq}}$ が無いために、界面における混合則の自己整合性を失い、球形気泡の圧縮および膨張のシミュレーションなどに適していないと報告されている。一方で、2.2.9 節で示す混合音速について、Allaire らの 5 方程式モデルの混合音速は体積分率に対して単調な分布を持つものに対し、Kapila らの 5 方程式モデルの混合音速は体積分率に対して非単調である。文献 [1] で、体積分率に対して非単調な混合音速は、界面領域において音速が小さくなり数値振動を引き起こすとされている。加えて、衝撃波や強い膨張波を扱う際に変数 $K_{5\text{eq}}$ が体積分率の値を負にしてしまうことも報告されている [1].

2.2.7 4 方程式モデル

Allaire らの 5 方程式モデルで、各相の密度保存則を足し合わせ、温度平衡 ($T_1 = T_2$) を用いると、4 方程式モデルを得る。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \psi_{\text{G}}(\mathbf{U}), \quad (2.80)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \alpha_1 \vec{u} \\ \rho \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.81)$$

$$\psi_{\text{G}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \frac{\nu(G_2 - G_1)}{\rho_1} \\ 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}$$

このモデルは、数学的な式変形によって、次式に示す完全保存型に書き換えることができる。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \psi_G(\mathbf{U}), \quad (2.82)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho Y_1 \\ \rho Y_2 \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho Y_1 \vec{u} \\ \rho Y_2 \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \psi_G(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \nu(G_2 - G_1) \\ -\nu(G_2 - G_1) \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.83)$$

完全保存型の4方程式モデルは、単相圧縮性流れの解法を直接適用できる点で他のモデルには無い長所を持つが、文献 [133] で uniform flow test と呼ばれる理論解析により定常流の仮定の下で数値的に圧力平衡を保てないことが明らかにされている。近年では離散化の工夫によって完全保存型の4方程式モデルで数値振動を回避する計算手法も検討されている [134]。

2.2.8 Stiffened gas 状態方程式

上述の気液二相圧縮性流れの支配方程式では、単相圧縮性流れの場合と同じく、未知変数の数が方程式の数より多く、系を閉じるために圧力および温度を計算する状態方程式が必要となる。ここでは気液二相圧縮性流れで広く用いられる stiffened gas 状態方程式 (stiffened gas equation of state: SGEOS) [135] を導入する。未知変数から計算される圧力および温度の stiffened gas 状態方程式は、

$$p_k(e_k, \rho_k) = (\gamma_k - 1)\rho_k(e_k - \eta_k) - \gamma_k \pi_k, \quad (2.84a)$$

$$T_k(p_k, \rho_k) = \frac{p_k + \pi_k}{(\gamma_k - 1)C_{vk}\rho_k} \quad (2.84b)$$

という形式で表現される。対応する比エントロピー s_k 、比エンタルピー h_k 、比ギブスエネルギー G_k はそれぞれ、

$$s_k(p_k, T_k) = C_{vk} \ln \frac{T_k^{\gamma_k}}{(p_k + \pi_k)^{\gamma_k - 1}} + \eta'_k, \quad (2.84c)$$

$$h_k(e_k, \rho_k) = e_k + \frac{p_k(e_k, \rho_k)}{\rho_k}, \quad (2.84d)$$

$$\begin{aligned} G_k(p_k, T_k) &= h_k - T_k s_k \\ &= (\gamma_k C_{vk} - \eta'_k) T_k - C_{vk} T_k \ln \frac{T_k^{\gamma_k}}{(p_k + \pi_k)^{\gamma_k - 1}} + \eta_k \end{aligned} \quad (2.84e)$$

と表される。ただし、 $\gamma_k, \pi_k, C_{vk}, \eta_k, \eta'_k$ は物質および相に依存するパラメータであり、 γ_k は比熱比、 C_{vk} は定積比熱を示し、 π_k, η_k, η'_k は実験データと整合するように導入される参照パラメータである。

パラメータ π_k は、液体の状態方程式を表現するために導入される参照圧力値である。温度

の式 (2.84b) から,

$$p_k = (\gamma_k - 1)C_{vk}\rho_k T_k - \pi_k \quad (2.85)$$

が得られ, $\pi_k = 0$ Pa のとき式 (2.85) は理想気体の状態方程式 (式 (2.13)) に一致する. また, 式 (2.85) を温度に対する圧力の一次関数とみなすと, 通常の液体は気体と比べて密度がはるかに大きいことから, 液体の場合は一次関数の勾配が非常に大きくなり, $\pi_k = 0$ Pa の理想気体の状態方程式では 300 K 程度の標準状態における液体の圧力が実際の値と比べて極めて大きい値に計算される. 標準状態における液体と気体の圧力および温度がそれぞれ近い値を取れるように, パラメータ π_k に適切な値が設定される [136]. また, パラメータ η_k は, 圧力の式 (2.84a) を実験データに整合させるための参照内部エネルギーである. ある温度における圧力, 密度, 内部エネルギーのデータを代入することで, パラメータ η_k の値を決めることができる. 比エントロピーの式 (2.84c) のパラメータ η'_k は, 300~500 K の間で飽和蒸気圧曲線が実験値と整合するように設定される.

$\gamma_k, \pi_k, C_{vk}, \eta_k, \eta'_k$ の具体的な値は, 水及び水蒸気の場合は表 2.1, ドデカンの場合は 2.2 の通りに定数を設定する [126, 130, 136].

phase	γ	π [Pa]	η [J/kg]	η' [J/(kg·K)]	C_v [J/(kg·K)]
liquid	2.35	10^9	-1167×10^3	0	1816
vapor	1.43	0	2030×10^3	-23.4×10^3	1040

Table. 2.1 The SGEOS parameters of water for 300-500 K.

phase	γ	π [Pa]	η [J/kg]	η' [J/(kg·K)]	C_v [J/(kg·K)]
liquid	2.35	4×10^8	-775.269×10^3	0	1077.7
vapor	1.025	0	-237.547×10^3	-24.4×10^3	1956.45

Table. 2.2 The SGEOS parameters of dodecane for 300-500 K.

SGEOS に対応する音速について, 圧力の密度及び内部エネルギーに対する勾配は, 圧力の式 (2.84a) より,

$$\left(\frac{\partial p_k}{\partial \rho_k} \right)_{e_k} = (\gamma_k - 1)(e_k - \eta_k), \quad \left(\frac{\partial p_k}{\partial e_k} \right)_{\rho_k} = (\gamma_k - 1)\rho_k \quad (2.86)$$

となるので, 音速の式 (2.42) に代入して,

$$c_k = \sqrt{\frac{\gamma_k(p_k + \pi_k)}{\rho_k}} \quad (2.87)$$

と求められる.

2.2.9 混合音速

Pelanti と Shyue の 6 方程式モデル (2.72) の同次部を固有値分解し得られる混合音速は、次式に示す frozen 音速 [137, 138] である.

$$c_{\text{frozen}} = \sqrt{Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2} \quad (2.88)$$

Kapila らの 5 方程式モデル (2.75) の同次部を固有値分解し得られる混合音速は、次式に示す Wood の音速である.

$$c_{\text{Wood}} = \frac{1}{\rho \sqrt{\frac{Y_1}{\rho_1^2 c_1^2} + \frac{Y_2}{\rho_2^2 c_2^2}}} \quad (2.89)$$

Allaire らの 5 方程式モデル (2.78) の同次部を固有値分解し得られる混合音速は、次式となる.

$$c_{\text{Allaire}} = \sqrt{\frac{\frac{Y_1}{\gamma_1 - 1} c_1^2 + \frac{Y_2}{\gamma_2 - 1} c_2^2}{\frac{\alpha_1}{\gamma_1 - 1} + \frac{\alpha_2}{\gamma_2 - 1}}} \quad (2.90)$$

これらの 3 種類の混合音速の体積分率に対する分布の例を図 2.3 に示す. frozen 音速と Allaire らのモデルの音速は体積分率に対して単調であるのに対し, Wood の音速は非単調であることが分かる. Wood の音速の式は実験により得られる気液混合相の音速と整合する一方, 体積分率に対して非単調な分布を持つため, 拡散界面モデルを扱う上で数値的に不安定性を引き起こす可能性がある. したがって本研究では, 表面張力を考慮する場合は Allaire らの 5 方程式モデル, 相変化を考慮する場合は Pelanti と Shyue の 6 方程式モデルを支配方程式として採用する.

2.3 2章のまとめ

単相および気液二相圧縮性流れの支配方程式を導出し, 各方程式モデルの特性について説明した. 単相圧縮性流れの支配方程式として初めにナビエ-ストークス方程式を導出し, 系を閉じるための状態方程式と構成方程式, 無次元化について述べた. 次に圧縮性流れの支配方程式として最もよく用いられる非粘性オイラー方程式を示し, 音速の導出や, 双曲型偏微分方程式としての特性理論を展開した. 気液二相圧縮性流れの支配方程式については, まず界面の取り扱い方としてシャープ界面モデルと拡散界面モデルの違いについて議論した. その後, 速度, 圧力, 温度, ギブスエネルギーについて準安定状態と平衡状態の違い, 混合則, そして n 方程式モデル ($n = 4, 5, 6, 7$) を導出した. 状態方程式として stiffened gas 状態方程式を導入し, 混合音速の体積分率に対する分布の単調性について議論した.

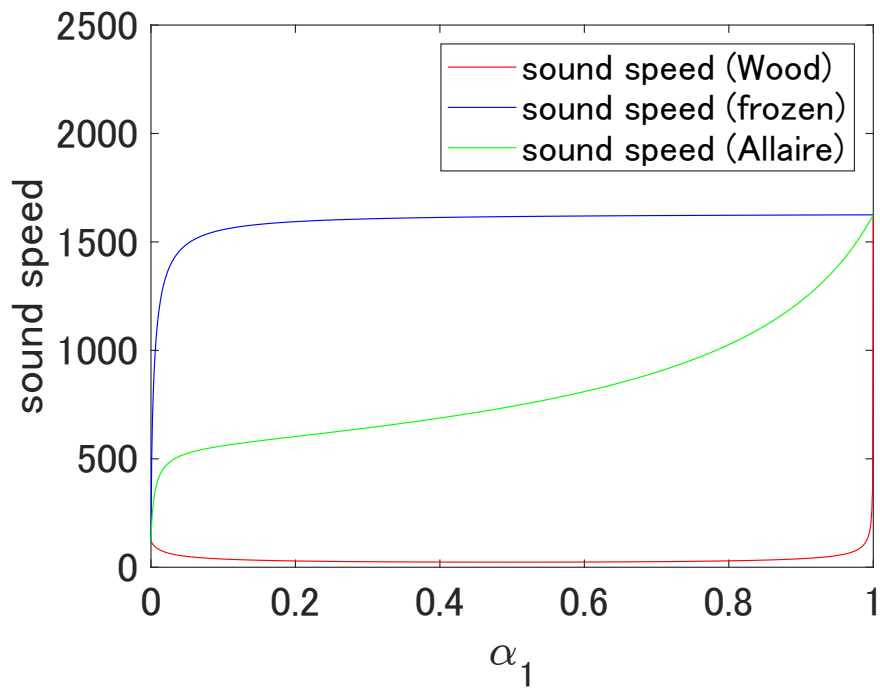


Fig. 2.3 The distributions of the sound speeds with respect to volume fraction. The SGEOS parameters are set as $\gamma_1 = 4.4$, $\gamma_2 = 1.4$, $\pi_1 = 6 \times 10^8$, $\pi_2 = 0$. The values of the physical variables are set as $\rho_1 = 1000$, $\rho_2 = 10$, $p = 10^5$.

第3章

圧縮性流れの数値解法

本章では、主にスカラー保存則をモデル方程式として、圧縮性流れの一般的な数値解法について説明する。計算領域を重ならない固定格子で分割し、各格子で離散化された方程式を解くことで数値解を計算する。格子の分割方法は本章では構造格子とし、有限差分法および有限体積法における代表的な計算手順および特性をまとめる。

3.1 構造格子と非構造格子

図 3.1 の左の図のような、格子が空間の次元に対応するインデックスで表現できる場合、構造格子と呼ぶ。空間が 2 次元の場合、格子点 (x_i, y_j) ($i = 1, 2, \dots, N_x; j = 1, 2, \dots, N_y$) における保存変数は $U_{i,j}$ と表記される。一方、図 3.1 の右の図のように、格子点の位置や形状に規則性が無い場合、非構造格子と呼ぶ。



Fig. 3.1 Examples of the 2D structured grid (left) and 2D unstructured grid (right).

構造格子では、空間再構築と呼ばれる物理量の補間を各次元方向に一次的に行うことができる。一方で非構造格子では多次元的な補間関数が必要となるため、その計算手順は構造格子よりも複雑となり、高解像度数値解法の開発は難易度が上がる。非構造格子における計算手法は7章で示し、本章では構造格子上で圧縮性流れの典型的な数値解法について説明する。

3.2 保存型数値解法

数値解法の説明を簡単に行うため、次の1次元スカラー保存則をモデル方程式として扱う。

$$\frac{\partial q(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(q(x, t))}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

ただし、 $q(x, t)$ は保存物理量、 $f(q(x, t))$ は流束を表す。特性速度は $a = \partial f(q)/\partial q$ と表す。また、格子形状については、1次元の計算領域を N 個の重ならないセル $\Omega_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, $i = 1, 2, \dots, N$ に分割し、格子間隔 $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ が計算領域全体で一定幅 Δx となる等間隔構造格子を仮定する。

3.2.1 有限体積法

有限体積法では、セル内の積分平均値を数値解とし、隣り合うセル間の流束を評価することで次の時間ステップの数値解を求める手法である。保存則 (3.1) を区間 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ で積分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x, t) dx &= - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial f(q(x, t))}{\partial x} dx \\ &= - \left(f \left(q \left(x_{i+1/2}, t \right) \right) - f \left(q \left(x_{i-1/2}, t \right) \right) \right) \end{aligned} \quad (3.2)$$

となり、弱形式と呼ばれる方程式が得られる。数値解は

$$\bar{q}_i(t) \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x, t) dx \quad (3.3)$$

と定義されるので、セル境界 $x = x_{i+1/2}$ を通過する流束 $f(q(x_{i+1/2}, t))$ の近似式を $\hat{f}_{i+1/2}$ とおくと、積分形の保存則 (3.2) は

$$\frac{d\bar{q}_i}{dt} = - \frac{1}{\Delta x} \left(\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2} \right) \quad (3.4)$$

のように半離散化される。 $\hat{f}_{i+1/2}$ は数値流束と呼ばれる補間誤差を含む流束である。空間に対して離散化されたため式 (3.4) は時間に対する常微分方程式である。よって式 (3.4) の右辺が得られれば、ルンゲクッタ法といった常微分方程式のソルバーを用いて数値解 \bar{q}_i を時間発

展させることができる．このように空間の離散化と時間積分の計算を別々に行う手法はライン法と呼ばれ，高次精度解法において広く用いられている．数値流束 $\hat{f}_{i+1/2}$ は，セル境界 $x = x_{i+1/2}$ における左側と右側の補間値 $q_{i+1/2}^L, q_{i+1/2}^R$ を用いて，リーマンソルバーと呼ばれる解法によって計算される．

$$\hat{f}_{i+1/2} = f^{\text{Riemann}}(q_{i+1/2}^L, q_{i+1/2}^R) \quad (3.5)$$

リーマンソルバーの計算により，セル境界の左右の物理量から上流にあたる情報を持つ流束が計算されるため，物理的な整合性を担保すると同時に，計算の安定性に寄与する．具体的には，スカラー保存則の場合，

$$\hat{f}_{i+1/2} = \begin{cases} f(q_{i+1/2}^L) & \text{if } a_{i+1/2} > 0 \\ f(q_{i+1/2}^R) & \text{if } a_{i+1/2} \leq 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

のように，特性速度の符号に基づき上流側のセル境界値を選択して数値流束を計算する．セル境界値 $q_{i+1/2}^L, q_{i-1/2}^R$ は，周辺の離散値の集合体 $\mathcal{S} = \{\dots, \bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}, \dots\}$ (ステンシル) を用いて構成される補間関数 $\mathcal{Q}_i(\{\mathcal{S}\}|x)$ によって求められる．この補間は空間再構築と呼ばれ，セル Ω_i における再構築関数を用いてセル境界値は次のように計算される．

$$\begin{cases} q_{i+1/2}^L = \mathcal{Q}_i(\{\mathcal{S}\}|x_{i+1/2}) \\ q_{i-1/2}^R = \mathcal{Q}_i(\{\mathcal{S}\}|x_{i-1/2}) \end{cases} \quad (3.7)$$

したがって，有限体積法の主な計算手順は，空間再構築によるセル境界値の補間 (3.7)，リーマンソルバーによる数値流束の評価 (3.5)，ルンゲクッタ法等による時間積分によって構成される．また，半離散式 (3.4) は，セル Ω_i 内の物理量 \bar{q}_i の変化量が，セル境界 $x_{i+1/2}$ を通過しセル Ω_i の外部に出ていく量 $\hat{f}_{i+1/2}$ とセル境界 $x_{i-1/2}$ を通過しセル Ω_i の内部に入る量 $\hat{f}_{i-1/2}$ の収支によって決まると解釈できる．セル境界を通過する流束を1つの値に定めることで，隣接するセル同士で同じ物理量が交換されるため，丸め誤差の影響を無視すれば物理量は厳密に保存される．このことから，有限体積法は保存型解法であると言える．

3.2.2 保存型有限差分法

有限差分法では，数値解を格子点上の解として定義する．セル中心位置 x_i の数値解を，

$$q_i(t) \equiv q(x_i, t) \quad (3.8)$$

と表す．この数値解に対応する時間発展式は保存則 (3.1) より，

$$\frac{dq_i(t)}{dt} = - \left. \frac{\partial f(q(x, t))}{\partial x} \right|_{x=x_i} \quad (3.9)$$

と導かれる。右辺の流束の空間微分を直接補間することで、半離散式 (3.9) はルンゲクッタ法等により数値解 q_i を時間発展させることができる。しかし、この定式は補間誤差が数値解の保存性に影響を及ぼすため、圧縮性流れの数値計算には適していない。ここで、関数 $h(x)$ を次式で陰的に定義する [18]。

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} h(\xi) d\xi = f(x) \quad (3.10)$$

ただし簡単に記述するため流束 f は空間のみの関数としている。流束の空間微分は式 (3.10) より

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{1}{\Delta x} \left(h\left(x + \frac{1}{2}\Delta x\right) - h\left(x - \frac{1}{2}\Delta x\right) \right) \quad (3.11)$$

となるので、有限差分法における半離散式 (3.9) は

$$\frac{dq_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{h}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{h}_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (3.12)$$

と計算される。ただし $\hat{h}_{i+1/2}$ は補間誤差を含む $h_{i+1/2}$ である。この定式では、有限体積法の定式 (3.4) と同様に、格子点の間を通過する物理量を $\hat{h}_{i+1/2}$ と定めているため、隣接する格子点の間で同じ物理量が交換され、数値解の保存性が保たれる。通常の有限差分法の定式 (3.9) が保存性を持たないことから、定式 (3.12) を保存型有限差分法と区別して呼ぶ。

計算安定性の観点から、流束の上流化を行う必要がある。セル Ω_i の流束 f_i を特性速度 a_i の符号に基づき $f_i = f_i^+ + f_i^-$ と分離する。ただし正方向の流束 f_i^+ と負方向の流束 f_i^- は

$$f_i^+ = \begin{cases} f_i & \text{if } a_i > 0 \\ 0 & \text{if } a_i \leq 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

$$f_i^- = \begin{cases} 0 & \text{if } a_i > 0 \\ f_i & \text{if } a_i \leq 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

と計算される。この流束分離に対応するように関数 $h(x)$ も分離する。すなわち $\hat{h}_{i+1/2} = \hat{h}_{i+1/2}^+ + \hat{h}_{i+1/2}^-$ と分離し、 $\hat{h}_{i+1/2}^+$ は正方向の流束、 $\hat{h}_{i+1/2}^-$ は負方向の流束とする。それぞれ周囲の離散した流束値の集合体 $\mathcal{S}^\pm = \{\dots, f_{i-1}^\pm, f_i^\pm, f_{i+1}^\pm, \dots\}$ をステンシルとして構成される再構築関数 $Q_i(x)$ によって次式のように補間される。

$$\begin{cases} \hat{h}_{i+\frac{1}{2}}^+ = Q_i(\{\mathcal{S}^+\}|x_{i+\frac{1}{2}}) \\ \hat{h}_{i-\frac{1}{2}}^- = Q_i(\{\mathcal{S}^-\}|x_{i-\frac{1}{2}}) \end{cases} \quad (3.15)$$

保存型有限差分法の主な計算手順は、流束分離 (3.13) および (3.14)、空間再構築 (3.15)、時間積分によって構成される。

3.3 数値解の散逸・分散誤差

圧縮性流れの最大の特徴は、流れの中で衝撃波といった不連続的な物理量分布が発生する点である。不連続解を高解像度で捉える数値解法を設計するうえで、数値誤差が特に不連続解近傍でどのように振る舞うか解析することが重要となる。フーリエ変換に基づく散逸誤差および分散誤差と数値誤差の関係について説明する。

3.3.1 線形移流方程式の分散関係式

スカラー保存則 (3.1) は、特性速度 $a = \partial f(q)/\partial q$ が空間および時間に対して一定であると仮定すると、次式で表される線形移流方程式となる。

$$\frac{\partial q(x, t)}{\partial t} + a \frac{\partial q(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (3.16)$$

初期値 $q(x, 0)$ を用いて、線形移流方程式 (3.16) の厳密解は $q(x, t) = q(x - at, 0)$ と表され、解が一定速度 a で移流することが分かる。ここで、線形移流方程式 (3.16) の解を次のようにフーリエ変換する [109]。

$$q(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{q}(k) \exp(ik(x - at)) dk \quad (3.17)$$

ただし i は虚数単位を表す。各波数 k の波

$$\tilde{q}(x, t; k) = \hat{q}(k) \exp(ik(x - at)) \quad (3.18)$$

は方程式 (3.16) を満たす基本解の一つである。波数 k の波が物理的に振幅 $\hat{q}(k)$ 、角周波数 $\omega(k)$ を持つとすると、

$$\tilde{q}(x, t; k) = \hat{q}(k) \exp(i(kx - \omega(k)t)) \quad (3.19)$$

と表せることから、角周波数 $\omega(k)$ と波数 k の関係式

$$\omega(k) = ak \quad (3.20)$$

が得られる。この式は線形移流方程式の分散関係式と呼ばれる。

3.3.2 修正方程式

微分方程式を離散的に解く際に、必ず数値誤差が導入される。有限体積法および有限差分法では、例えば空間再構築によるセル境界値の補間で、テイラー展開の打ち切り項に応じた補間

誤差が生じる。時間積分では数値積分法による誤差が発生する。数値解を q_h とし、線形移流方程式 (3.16) の数値計算で発生する全ての誤差について、

$$\frac{\partial q_h}{\partial t} + a \frac{\partial q_h}{\partial x} = \sum_{l=2}^{\infty} c_l \frac{\partial^l q_h}{\partial x^l} \quad (3.21)$$

という式で表現できると仮定する。すなわち、数値誤差を空間高次微分および係数 c_l で表現している。空間高次微分の項は、空間再構築でのテイラー展開の打ち切り誤差に加え、時間積分における打ち切り誤差も表している（時間微分項は式 (3.16) を用いて空間微分項に変換可能）ため、式 (3.21) の誤差項の表現は妥当であると言える。方程式 (3.21) は修正方程式 [139] と呼ばれ、数値解が厳密に満たす方程式である。

3.3.3 散逸・分散誤差の解析

数値解 q_h の波数 k の成分を、式 (3.19) と同様に、

$$\tilde{q}_h(x, t; k) = \hat{q}_h(k) \exp(i(kx - \omega_h(k)t)) \quad (3.22)$$

と表す。この式を修正方程式 (3.21) に代入し、数値解の角周波数 $\omega_h(k)$ について解くことで、修正方程式の分散関係式が得られる。

$$\begin{aligned} \omega_h(k) &= ak + i \sum_{l=2}^{\infty} c_l (ik)^l \\ &= ak + i \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m c_{2m} k^{2m} - \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m c_{2m+1} k^{2m+1} \end{aligned} \quad (3.23)$$

ここで、分散関係式の実部と虚部をそれぞれ計算することで、空間高次微分項が偶数次と奇数次に分かれていることに着目する。修正方程式の分散関係式 (3.23) を式 (3.22) に代入し、

$$\tilde{q}_h(x, t; k) = \hat{q}_h(k) \exp(ik(x - v(k)t)) \cdot \exp(d(k)t) \quad (3.24)$$

$$v(k) = a + c_3 k^2 - c_5 k^4 + c_7 k^6 - c_9 k^8 + \dots \quad (3.25)$$

$$d(k) = -c_2 k^2 + c_4 k^4 - c_6 k^6 + c_8 k^8 - \dots \quad (3.26)$$

を得る。 $v(k)$ および $d(k)$ はそれぞれ数値解の波数 k の波の移流速度と振幅増幅度を表している。係数 c_2, c_3, \dots が仮に全て 0 となる場合、 $v(k) = a$ 、 $d(k) = 0$ であり、波数 k の波は一定の振幅および速度で移流し、厳密解の振る舞いに一致する。また、式 (3.25) および (3.26) より、奇数次と偶数次の微分項の係数が、それぞれ分散誤差と散逸誤差に別々に寄与していることが分かる。各係数 c_l が数値解の分散誤差および散逸誤差に及ぼす定性的な影響について、表 3.1 と 3.2 に示す。ただし、加速 (acceleration)、減速 (deceleration)、増幅 (amplification)、減衰 (damping) と表記している。この様な特性から、数値誤差のリーディングタームが奇数

次か偶数次かに応じて、数値解の誤差が散逸的か分散的か決まることが分かる。圧縮性流れでは衝撃波などの不連続解が頻繁に発生することを踏まえると、不連続近傍で振動的な解をもたらす分散誤差は好ましくない。唯一物理的と見なせる誤差は、粘性を模擬できる可能性のある減衰誤差（散逸誤差）である。したがって、不連続的な分布を含む流れ場で、振動的な解を回避するためには、数値誤差が以下の条件を満たすことが望ましい。

- 数値誤差のリーディングタームは偶数次である。
- 偶数次微分項の係数が $c_2 \geq 0$, $c_4 \leq 0$, $c_6 \geq 0$, $c_8 \leq 0$, \dots を満たす。
- 奇数次微分項の係数の絶対値が十分小さい値である。

3.2 節で説明した有限体積法および保存型有限差分法のフレームワークでは、これらの条件を満たすように解法を設計できるため、不連続解を含む流れ場の計算に都合が良く、圧縮性流れにおける主流の数値解法とされている。

	c_3	c_5	c_7	c_9	\dots
+	accel.	decel.	accel.	decel.	\dots
-	decel.	accel.	decel.	accel.	\dots

Table. 3.1 Relation between the sign of the coefficient of the odd-order derivative term and the dispersion error of the numerical solution.

	c_2	c_4	c_6	c_8	\dots
+	damp.	ampl.	damp.	ampl.	\dots
-	ampl.	damp.	ampl.	damp.	\dots

Table. 3.2 Relation between the sign of the coefficient of the even-order derivative term and the dissipation error of the numerical solution.

3.4 空間再構築法

空間再構築法は有限体積法および保存型有限差分法のフレームワークの中で数値結果に最も強く影響を及ぼす計算ステップである。圧縮性流れでは渦や膨張波といった滑らかな解から衝撃波や接触不連続といった不連続的な解まで同時に存在するため、これらを解の形状に忠実に補間することは困難とされている。線形多項式関数は最もシンプルな再構築手法であり、滑らかな解では高次の収束精度を得られるが、不連続的な解ではルンゲ現象で知られる振動が生じる。この振動を抑制するために、補間関数の勾配を解の滑らかさに応じて抑制するリミタの研究が盛んに行われた。本節では圧縮性流れにおける代表的な再構築手法である MUSCL 法、

ENO 法, WENO 法について説明する. また, 移動界面捕獲のために開発された THINC 法が圧縮性流れの不連続解の計算に優れていることが明らかにされており, 圧縮性流れにおける THINC 法の定式についても説明する.

有限体積法では, 物理量 q の分布を, 周辺の物理量 q の積分平均値 (離散値) の情報から再構築する. 保存型有限差分法では, 陰的に定義された関数 $h^\pm(x)$ の分布を, 周辺の分離された流束 f^\pm の点値 (離散値) の情報から再構築する. 流束の点値 f_i^\pm は, 定義式 (3.10) より, 区間 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ における関数 $h^\pm(x)$ の積分平均値である. すなわち, 有限体積法と保存型有限差分法の空間再構築は, 再構築される対象が物理量 q と関数 h で異なるだけで, 周辺の積分平均値 (離散値) の情報に基づき再構築関数を計算するという点で共通している. したがって本節では, 再構築される対象を q と表現し, 周辺の離散した積分平均値 $\{\dots, \bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}, \dots\}$ の情報に基づく再構築関数の導出を説明する. 再構築される対象を h^\pm , 周辺の離散した積分平均値を $\{\dots, f_{i-1}^\pm, f_i^\pm, f_{i+1}^\pm, \dots\}$ と読み替えることで, 保存型有限差分法の空間再構築の説明とする.

3.4.1 線形多項式補間

線形補間とは, 補間値が周囲の解 \bar{q}_j , ($j = \dots, i-1, i, i+1, \dots$) の線形結合で表される補間を指す. すなわち, 線形補間関数による補間値 q^{linear} は, 定数 C_s を用いて,

$$q^{\text{linear}} = \sum_s C_s \bar{q}_{i+s} \quad (3.27)$$

と表現される. この定義に基づき, n 次多項式関数

$$\mathcal{Q}_i^{\text{P}^n}(x) = \sum_{k=0}^n a_k (x - x_i)^k \quad (3.28)$$

について, 係数 a_k 全てがそれぞれ周囲の解 \bar{q}_j の線形結合で表される場合に, 関数 (3.28) を線形多項式補間関数と呼ぶ. 例えば 4 次線形多項式補間関数は図 3.2 のように図示される. 係数 a_k の取り方は様々であるが, n 次線形多項式補間 (3.28) は最大 $(n+1)$ 次精度を得ることができ, そのような係数 a_k の取り方は 1 通りである. n を偶数と仮定すると, 次の条件式を解くことで $(n+1)$ 次精度の風上系補間関数の係数 a_k を求めることができる.

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mathcal{Q}_i^{\text{P}^n}(x) dx = \bar{q}_j, \quad \left(j = i, i \pm 1, \dots, i \pm \frac{n}{2} \right) \quad (3.29)$$

n が奇数の場合, $(n+1)$ 次精度の補間は中心系の補間となり, 3.3 節の解析から分散誤差が支配的となるため, 不連続解近傍で強い数値振動を引き起こす. 中心系補間は主に不連続を含まない乱流計算で用いられるが, 本研究では不連続の計算に優れる風上系補間 (n は偶数) を扱う. また, 線形多項式補間では $(n+1)$ 次精度となる係数 a_k を取るのが一般的であり, 本

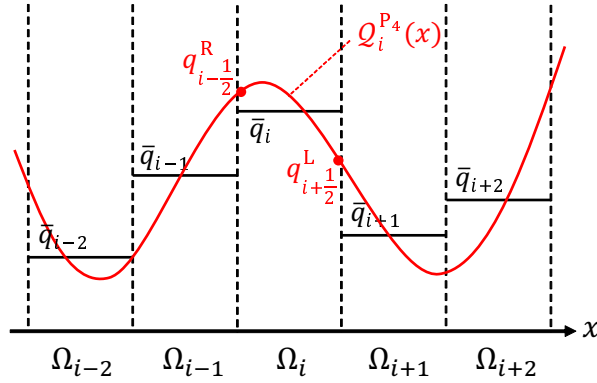


Fig. 3.2 The reconstruction function of the 4th-order linear polynomial interpolation.

研究で扱う線形多項式補間は常に $(n+1)$ 次精度を持つものとする．条件式 (3.29) は補間関数 $Q_i^{P_n}(x)$ のセル Ω_j , ($j = i, i \pm 1, \dots, i \pm n/2$) における積分平均値が解 \bar{q}_j に一致することを表す．条件式 (3.29) は係数 a_k に関する $(n+1)$ 元連立方程式であり，求めた係数 a_k を関数 (3.28) に代入することで補間関数が定まる．補間関数に $x = x_{i+1/2}$ 及び $x = x_{i-1/2}$ を代入することで，それぞれセル境界値 $q_{i+1/2}^{L,P_n}$, $q_{i-1/2}^{R,P_n}$ が得られる．例えば 4 次線形多項式補間で得られるセル境界値は，

$$\left\{ \begin{aligned} q_{i+1/2}^{L,P_4} &= Q_i^{P_4}(x_{i+1/2}) = \frac{1}{60}(2\bar{q}_{i-2} - 13\bar{q}_{i-1} + 47\bar{q}_i + 27\bar{q}_{i+1} - 3\bar{q}_{i+2}) \\ &= q_{i+1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^5), \\ q_{i-1/2}^{R,P_4} &= Q_i^{P_4}(x_{i-1/2}) = \frac{1}{60}(-3\bar{q}_{i-2} + 27\bar{q}_{i-1} + 47\bar{q}_i - 13\bar{q}_{i+1} + 2\bar{q}_{i+2}) \\ &= q_{i-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^5) \end{aligned} \right. \quad (3.30)$$

となる．14 次線形多項式補間の場合は，

$$\left\{ \begin{aligned} q_{i+1/2}^{L,P_{14}} &= Q_i^{P_{14}}(x_{i+1/2}) \\ &= \frac{1}{360360}(-7\bar{q}_{i-7} + 113\bar{q}_{i-6} - 867\bar{q}_{i-5} + 4229\bar{q}_{i-4} - 14881\bar{q}_{i-3} \\ &\quad + 41175\bar{q}_{i-2} - 98965\bar{q}_{i-1} + 261395\bar{q}_i + 216350\bar{q}_{i+1} - 63930\bar{q}_{i+2} \\ &\quad + 20154\bar{q}_{i+3} - 5326\bar{q}_{i+4} + 1044\bar{q}_{i+5} - 132\bar{q}_{i+6} + 8\bar{q}_{i+7}) \\ &= q_{i+1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^{15}), \\ q_{i-1/2}^{R,P_{14}} &= Q_i^{P_{14}}(x_{i-1/2}) \\ &= \frac{1}{360360}(8\bar{q}_{i-7} - 132\bar{q}_{i-6} + 1044\bar{q}_{i-5} - 5326\bar{q}_{i-4} + 20154\bar{q}_{i-3} \\ &\quad - 63930\bar{q}_{i-2} + 216350\bar{q}_{i-1} + 261395\bar{q}_i - 98965\bar{q}_{i+1} + 41175\bar{q}_{i+2} \\ &\quad - 14881\bar{q}_{i+3} + 4229\bar{q}_{i+4} - 867\bar{q}_{i+5} + 113\bar{q}_{i+6} - 7\bar{q}_{i+7}) \\ &= q_{i-1/2} + \mathcal{O}(\Delta x^{15}) \end{aligned} \right. \quad (3.31)$$

となる．セル境界値 (3.30) 及び (3.31) の式は，ともに式 (3.27) に示した線形補間の定義に一致しており，周囲の数値解 \bar{q}_j の線形結合で表される線形補間である．係数 C_s の具体的な導出方法について付録 B に記載する．

Godunov の定理 [140] によれば，線形多項式補間は $n = 0$ の場合に限り数値解の単調性を保持できるが， $n \geq 1$ の場合は単調性を保持できず，特に不連続解近傍で数値振動が発生する．ルンゲ現象で知られているように，等間隔のデータ点を結ぶラグランジュ補間は特定の関数に対して大きなオーバーシュートやアンダーシュートといった補間誤差を引き起こし，致命的な数値振動誤差に繋がる．一方で，数値解の単調性を保つ $n = 0$ の場合，すなわち

$$\mathcal{Q}_i^{P_0}(x) = \bar{q}_i, \quad (3.32)$$

$$\begin{cases} q_{i+\frac{1}{2}}^{L,P_0} = \mathcal{Q}_i^{P_0}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \bar{q}_i, \\ q_{i-\frac{1}{2}}^{R,P_0} = \mathcal{Q}_i^{P_0}\left(x_{i-\frac{1}{2}}\right) = \bar{q}_i \end{cases} \quad (3.33)$$

の場合，補間は 1 次精度となり非常に大きな数値散逸誤差をもたらす．したがって，高次精度かつ数値的に安定な補間を実現するためには，係数 a_k が数値解 \bar{q}_j に対して非線形的に表される，すなわち非線形補間が必要となる．

3.4.2 MUSCL 補間

MUSCL 法 [12,13] は，1 次多項式関数に勾配リミタを導入し，単調な分布では 2 次精度を持ち，不連続解近傍では数値振動を回避する数値解法である．1 次多項式関数の勾配を数値解の滑らかさに応じて変更することで，MUSCL 法は非線形補間となる．

ある時刻 $t = t^n$ における総変差 TV (Total Variation)

$$TV(\bar{q}^n) = \sum_i |\bar{q}_{i+1}^n - \bar{q}_i^n| \quad (3.34)$$

の値が，時間に対して単調減少 (Diminishing) する性質は TVD [14] と呼ばれ，物理量分布の単調性を保持できる．すなわち，

$$TV(\bar{q}^{n+1}) \leq TV(\bar{q}^n) \quad (3.35)$$

を満たすように設計される TVD 法は，時間発展によって数値振動を引き起こさないという特長を持つ．ただし TVD という性質は 1 次元線形移流方程式でのみ解析されており，TVD 法が多次元や非線形方程式で厳密に単調性を保持できるかは不明である．一方で多次元及び非線形方程式における多くのベンチマークテストで TVD 法による非振動的な数値結果が得られており，現在の圧縮性流れにおける代表的な計算手法の一つとされている．

セル Ω_i の中心位置 x_i 周りの 1 次までのテイラー展開は,

$$\begin{aligned} Q_i(x) &= q(x_i) + \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x=x_i} (x - x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ &= \bar{q}_i + \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x=x_i} (x - x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (3.36)$$

と表される. ここで 2 次精度の midpoint: $q(x_i) = \bar{q}_i + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ を用い変形したことで, セル Ω_i における関数 (3.36) の積分平均値が数値解 \bar{q}_i に一致する. セル中心の勾配 $\partial q / \partial x \Big|_{x=x_i}$ の値を 1 次以上の精度で補間することで, 1 次多項式関数 (3.36) は 2 次精度の補間関数となる. セル Ω_i 付近の数値解を用いて勾配 $\partial q / \partial x \Big|_{x=x_i}$ の値を補間する方法として, 図 3.3 に示す通り, 左側ステンシル $\{\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i\}$ または右側ステンシル $\{\bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}\}$ を用いる 2 種類の方法が考えられる. それぞれのステンシルで得られる勾配は, $x = x_i$ における勾配に対して 1 次の

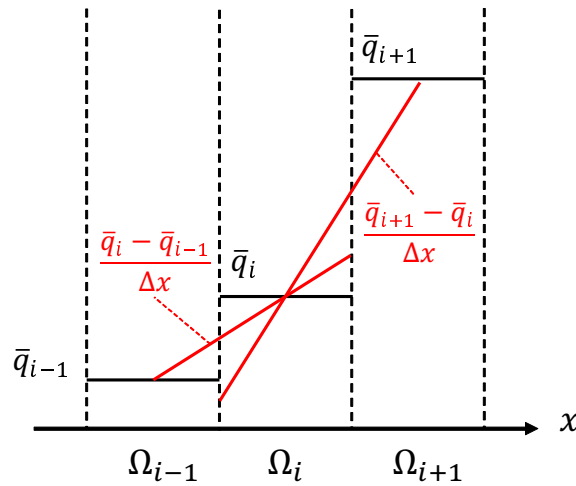


Fig. 3.3 The reconstruction functions of the piecewise-linear interpolations from left- and right-biased stencils.

補間精度であり,

$$\frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}}{\Delta x} = \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x=x_i} + \mathcal{O}(\Delta x), \quad (3.37)$$

$$\frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i}{\Delta x} = \frac{\partial q}{\partial x} \Big|_{x=x_i} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (3.38)$$

と表される. 勾配 (3.37) および (3.38) をそれぞれ 1 次多項式関数 (3.36) に代入すると,

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i^{\text{left}}(x) &= \bar{q}_i + \frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}}{\Delta x}(x - x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ &= \bar{q}_i + \Delta q_{i-\frac{1}{2}} X_i(x) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i^{\text{right}}(x) &= \bar{q}_i + \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i}{\Delta x}(x - x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ &= \bar{q}_i + \Delta q_{i+\frac{1}{2}} X_i(x) + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (3.40)$$

のように 2 種類の 1 次線形補間関数が得られる. ただし $\Delta q_{i+\frac{1}{2}} = \bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i$ は隣り合う数値解の差, $X_i(x) = (x - x_i)/\Delta x$ は各セルの局所座標を表す. 各補間関数によるセル境界値は,

$$q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,left}} = \mathcal{Q}_i^{\text{left}}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \bar{q}_i + \frac{1}{2}\Delta q_{i-\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.41)$$

$$q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,left}} = \mathcal{Q}_i^{\text{left}}\left(x_{i-\frac{1}{2}}\right) = \bar{q}_i - \frac{1}{2}\Delta q_{i-\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.42)$$

$$q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,right}} = \mathcal{Q}_i^{\text{right}}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \bar{q}_i + \frac{1}{2}\Delta q_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.43)$$

$$q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,right}} = \mathcal{Q}_i^{\text{right}}\left(x_{i-\frac{1}{2}}\right) = \bar{q}_i - \frac{1}{2}\Delta q_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (3.44)$$

となる. セル境界値 (3.41) と (3.44) は Beam-Warming 法, (3.43) と (3.42) は Lax-Wendroff 法と呼ばれる.

Godunov の定理により, 1 次線形補間関数である (3.39) および (3.40) はともに解の単調性を保持できない. (3.39) と (3.40) の差は, 補間関数の勾配を $\Delta q_{i-1/2}/\Delta x$ とするか $\Delta q_{i+1/2}/\Delta x$ とするかの違いであるが, ここで両方の勾配を用いて 1 つの勾配 $\Delta q_i^{\text{limit}}/\Delta x$ を定めることを考える. すなわち,

$$\mathcal{Q}_i(x) = \bar{q}_i + \Delta q_i^{\text{limit}} X_i(x) \quad (3.45)$$

という形式の補間関数で, $\Delta q_i^{\text{limit}}$ を $\Delta q_{i-1/2}$ と $\Delta q_{i+1/2}$ の関数として計算する. 数値振動誤差を回避するという観点から, 例えば $\Delta q_i^{\text{limit}} = \text{minmod}(\Delta q_{i-1/2}, \Delta q_{i+1/2})$ のように, 左右の勾配のうち小さい方を採用する手法などが考えられる. minmod 関数は次式で定義される.

$$\text{minmod}(a, b) = \begin{cases} 0, & \text{if } ab < 0, \\ a, & \text{if } |a| < |b|, \\ b, & \text{if } |b| \leq |a| \end{cases} \quad (3.46)$$

ここで, 勾配を制限するリミタ関数 $\Phi(r)$ を導入する. Lax-Wendroff 法のセル境界値 (3.43) と (3.42) は,

$$q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}} = \bar{q}_i + \frac{1}{2}\Phi\left(r_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}}\right)\Delta q_{i+\frac{1}{2}}, \quad (3.47)$$

$$q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R}} = \bar{q}_i - \frac{1}{2}\Phi\left(r_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R}}\right)\Delta q_{i-\frac{1}{2}} \quad (3.48)$$

となり, Beam-Warming 法のセル境界値 (3.41) と (3.44) は,

$$q_{i+\frac{1}{2}}^L = \bar{q}_i + \frac{1}{2}\Phi\left(r_{i-\frac{1}{2}}^R\right)\Delta q_{i-\frac{1}{2}}, \quad (3.49)$$

$$q_{i-\frac{1}{2}}^R = \bar{q}_i - \frac{1}{2}\Phi\left(r_{i+\frac{1}{2}}^L\right)\Delta q_{i+\frac{1}{2}} \quad (3.50)$$

となる. ただし r は勾配比を表し,

$$r_{i+\frac{1}{2}}^L = \frac{1}{r_{i-\frac{1}{2}}^R} = \frac{\Delta q_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta q_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}}{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i} \quad (3.51)$$

と計算される. リミタ関数 $\Phi(r)$ を導入した Lax-Wendroff 法の左境界値 (3.47) と右境界値 (3.48) が補間関数 (3.45) から計算されるとすると,

$$\Delta q_i^{\text{limit}} = \Phi\left(r_{i+\frac{1}{2}}^L\right)\Delta q_{i+\frac{1}{2}} = \Phi\left(r_{i-\frac{1}{2}}^R\right)\Delta q_{i-\frac{1}{2}} \quad (3.52)$$

という関係式を得る. この関係式が成り立てば, リミタ関数を導入した Lax-Wendroff 法の左境界値 (3.47) と右境界値 (3.48) が 1 つの勾配 $\Delta q_i^{\text{limit}}/\Delta x$ から計算されるため, その補間関数はセル中心で点対称となり, セル Ω_i における補間関数の積分平均値は数値解 \bar{q}_i に一致する. 式 (3.52) を満たすためにリミタ関数 $\Phi(r)$ に与えられる条件は,

$$\Phi(r) = r\Phi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.53)$$

となり, この式は対称性条件 [141] と呼ばれる (5 章の数値解の空間対称性に関する議論とは異なる). 関係式 (3.53) が満たされれば, リミタ関数を導入した Lax-Wendroff 法と Beam-Warming 法の左境界値および右境界値がそれぞれ同じ式になる. 本論文では Lax-Wendroff 法にリミタを付した式 (3.47) と (3.48) を用いて MUSCL 法の補間式を導く.

補間式 (3.47) と (3.48) が TVD 性を持つための勾配リミタ $\Phi(r)$ に与えられる条件を求め. スカラー保存則 (3.1) が線形の方程式と仮定し, $f_{i+1/2} = aq_{i+1/2}$ と表す. 有限体積法における半離散式 (3.4) に 1 次オイラー前進法を用いると, 時間発展式は

$$\bar{q}_i^{n+1} = \bar{q}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(a^+ \left(q_{i+\frac{1}{2}}^L - q_{i-\frac{1}{2}}^L \right) + a^- \left(q_{i+\frac{1}{2}}^R - q_{i-\frac{1}{2}}^R \right) \right) \quad (3.54)$$

となる. ただし $a^+ = \max(a, 0)$, $a^- = \min(a, 0)$ である. 式 (3.54) を

$$\bar{q}_i^{n+1} = \bar{q}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(C_{i+\frac{1}{2}}^- (\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) + C_{i-\frac{1}{2}}^+ (\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}) \right) \quad (3.55)$$

という形式に変形する. Harten の定理 [14, 109] によれば, 以下の条件を満たせば式 (3.35) が

満たされ TVD の性質を持つ.

$$C_{i-\frac{1}{2}}^+ \geq 0, \quad (3.56a)$$

$$C_{i+\frac{1}{2}}^- \leq 0, \quad (3.56b)$$

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(C_{i-\frac{1}{2}}^+ - C_{i+\frac{1}{2}}^- \right) \leq 1 \quad (3.56c)$$

Harten による TVD 条件 (3.56) は, 単調性保持解法に関する Godunov の定理 [109, 140] を時間発展式 (3.55) に適用し得られる条件と同値である. リミタ関数を導入した Lax-Wendroff 法のセル境界値 (3.47) および (3.48) を時間発展式 (3.54) に代入すると,

$$C_{i-\frac{1}{2}}^+ = a^+ \left(1 + \frac{1}{2} \left(\Phi \left(r_{i+\frac{1}{2}}^L \right) \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}^L} - \Phi \left(r_{i-\frac{1}{2}}^L \right) \right) \right), \quad (3.57)$$

$$C_{i+\frac{1}{2}}^- = a^- \left(1 - \frac{1}{2} \left(\Phi \left(r_{i+\frac{1}{2}}^R \right) - \Phi \left(r_{i-\frac{1}{2}}^R \right) \frac{1}{r_{i-\frac{1}{2}}^R} \right) \right) \quad (3.58)$$

を得るので, TVD 条件式 (3.56a) および (3.56b) を満たすリミタ関数 $\Phi(r)$ の十分条件として,

$$\begin{cases} \Phi(r) = 0, & \text{if } r \leq 0 \\ 0 \leq \Phi(r) \leq 2 \quad \text{and} \quad 0 \leq \frac{\Phi(r)}{r} \leq 2, & \text{if } r > 0 \end{cases} \quad (3.59)$$

を課すこととする. TVD 条件式 (3.56c) は時間刻み Δt の大きさに依存するため, 適切な CFL 条件を与えることで満たされる. したがって, リミタ関수에課される条件は TVD 条件 (3.59) と対称性条件 (3.53) であり, これらを満たすリミタ関数を用いてセル境界値を補間する計算手法は MUSCL 法と呼ばれる. 改めて MUSCL 法による補間関数とセル境界値を次式で表す.

$$\begin{aligned} Q_i^{\text{MUSCL}}(x) &= \bar{q}_i + \Delta q_i^{\text{limit}} X_i(x) \\ &= \bar{q}_i + \Phi \left(r_{i+\frac{1}{2}}^L \right) \Delta q_{i+\frac{1}{2}} X_i(x) \\ &= \bar{q}_i + \Phi \left(r_{i-\frac{1}{2}}^R \right) \Delta q_{i-\frac{1}{2}} X_i(x), \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,MUSCL}} = Q_i^{\text{MUSCL}}(x_{i+\frac{1}{2}}) \\ \quad = \bar{q}_i + \frac{1}{2}\Phi(r_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}})(\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) \\ \quad = \bar{q}_i + \frac{1}{2}\Phi(r_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R}})(\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}), \\ q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,MUSCL}} = Q_i^{\text{MUSCL}}(x_{i-\frac{1}{2}}) \\ \quad = \bar{q}_i - \frac{1}{2}\Phi(r_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R}})(\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}) \\ \quad = \bar{q}_i - \frac{1}{2}\Phi(r_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}})(\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) \end{array} \right. \quad (3.61)$$

MUSCL 法の代表的なリミタ関数 $\Phi(r)$ は,

$$\begin{aligned} \text{minmod リミタ} : \Phi_{\text{mm}}(r) &= \text{minmod}(1, r) = \max(0, \min(1, r)), \\ \text{superbee リミタ} : \Phi_{\text{sb}}(r) &= \max(0, \min(1, 2r), \min(2, r)), \\ \text{ultrabee リミタ} : \Phi_{\text{ub}}(r) &= \max(0, \min(2, 2r)), \\ \text{van Leer リミタ} : \Phi_{\text{vL}}(r) &= \frac{r + |r|}{1 + |r|} \end{aligned} \quad (3.62)$$

等が挙げられる [109, 111]. これらのリミタ関数は全て TVD 条件 (3.59) を満たすため, 1 次元線形移流方程式で解の単調性が保持される.

MUSCL 法の補間関数の精度について議論する. $r_{i+1/2}^{\text{L}} \leq 0$ または $r_{i-1/2}^{\text{R}} \leq 0$ のとき, すなわち $\bar{q}_i \geq \max(\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_{i+1})$ または $\bar{q}_i \leq \min(\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_{i+1})$ となる非単調な解では, (3.59) より勾配が 0 となるため補間精度は 1 次精度である. 単調な解すなわち $r > 0$ で 2 次精度を持つ条件は, 補間関数の勾配 $\Delta q_i^{\text{limit}}/\Delta x$ が 1 次精度を持つことなので, 左側ステンシル $\{\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i\}$ と右側ステンシル $\{\bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}\}$ から得られる勾配の線形結合で表されればよい. よって, (3.37) と (3.38) を用いて,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta q_i^{\text{limit}}}{\Delta x} &= \omega \frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}}{\Delta x} + (1 - \omega) \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i}{\Delta x} \\ &= \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=x_i} + \mathcal{O}(\Delta x) \end{aligned} \quad (3.63)$$

が満たされれば, 補間関数は単調な解で 2 次精度を持つ. ただし ω は実数である. 計算安定性の観点から, 補間関数の勾配の値は左側ステンシルと右側ステンシルによる勾配の値の間となるべきなので, ω について $0 \leq \omega \leq 1$ という条件が課される [141]. この条件をリミタ関数の式で表現すると,

$$\min(1, r) \leq \Phi(r) \leq \max(1, r) \quad (3.64)$$

となる. これまで開発された多くのリミタ関数は TVD 条件 (3.59) と 2 次精度条件 (3.64) をともに満たす. 例えば minmod リミタ, superbee リミタ, van Leer リミタは TVD を満たしながら単調解で 2 次精度を持つ.

MUSCL 法は 1 次元線形移流方程式で数値振動を回避し、単調な解では 2 次精度を得ることができる。一方、多次元空間や非線形方程式への TVD の概念の拡張および TVD 性を満たす解法は未だ明らかになっていない。また、単調な解では 2 次精度を持つことができるが、極値をもつ非単調な解 ($r \leq 0$) では TVD 条件から $\Phi(r) = 0$ となるため補間関数の勾配は 0 になり、補間精度は 1 次に下がる。この問題を解決するため、厳密な TVD 条件は考えず、複数のステンシルから得られる補間関数のうち勾配の小さい方を選ぶという考え方に基づいて、非単調な解でも高次精度を得る ENO 法が開発された。

3.4.3 ENO 補間

ENO 法 [15] は、複数のステンシルより得られる補間関数の滑らかさをそれぞれ評価し、最も滑らかな補間関数を 1 つ選択する手法である。例えば 2 次精度 ENO 法は、3 セルで構成されるステンシル $\mathcal{S} = \{\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}\}$ を 2 つのサブステンシル $\mathcal{S}^{(0)} = \{\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i\}$ と $\mathcal{S}^{(1)} = \{\bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}\}$ に分け、各サブステンシルで 1 次線形多項式関数を構築し、勾配の絶対値の大きさを比較して小さい方の関数をセル Ω_i における補間関数とする。MUSCL 法の minmod リミタとの違いは、TVD 性を失う代わりに非単調な解においても 2 次精度を得られる点である。さらに、MUSCL 法における TVD 性の議論は 2 次精度が一般的であるが、ENO 法のアプローチはステンシルを拡大することで任意の高次精度を得ることができる。ENO 法は一般に TVD 性を満たさないが、多くの圧縮性単相流のベンチマークテストで非振動的な数値解が得られている。

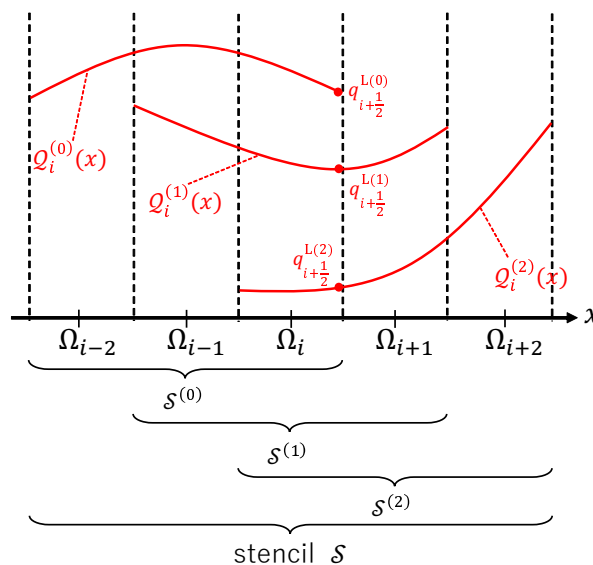


Fig. 3.4 The reconstruction function on each substencil in the ENO or WENO method.

3 次精度 ENO 法は、図 3.4 のように、5 セルで構成されるステンシル $\mathcal{S} =$

$\{\bar{q}_{i-2}, \bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}, \bar{q}_{i+2}\}$ を 3 つのサブステンシル $\mathcal{S}^{(0)} = \{\bar{q}_{i-2}, \bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i\}$, $\mathcal{S}^{(1)} = \{\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}\}$, $\mathcal{S}^{(2)} = \{\bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}, \bar{q}_{i+2}\}$ に分け, 各サブステンシルで 2 次線形多項式関数 $\mathcal{Q}^{(j)}(x)$, $j = 0, 1, 2$ を構築する. 構築された多項式関数によってセル境界 $x = x_{i+1/2}$ に補間される左境界値はそれぞれ,

$$\begin{cases} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(0)} = \mathcal{Q}_i^{(0)}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \frac{1}{6}(2\bar{q}_{i-2} - 7\bar{q}_{i-1} + 11\bar{q}_i) = q_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \\ q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(1)} = \mathcal{Q}_i^{(1)}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \frac{1}{6}(-\bar{q}_{i-1} + 5\bar{q}_i + 2\bar{q}_{i+1}) = q_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \\ q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(2)} = \mathcal{Q}_i^{(2)}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \frac{1}{6}(2\bar{q}_i + 5\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_{i+2}) = q_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \end{cases} \quad (3.65)$$

と計算される. 滑らかさ指標 (indicator of smoothness) と呼ばれる式を計算し, その値の大きさを比較して最も小さい 2 次関数をセル Ω_i における補間関数とする. 滑らかさ指標は, ニュートン補間における差商:

$$\begin{aligned} \Delta[\bar{q}_l] &= \bar{q}_{l+1} - \bar{q}_l, \\ \Delta^k[\bar{q}_l] &= \Delta^{k-1}[\bar{q}_{l+1}] - \Delta^{k-1}[\bar{q}_l] \end{aligned} \quad (3.66)$$

を用いて,

$$IS_i = \sum_{l=1}^{r-1} \left(\sum_{k=1}^l (\Delta^{r-l}[\bar{q}_{i-r+k}])^2 \right) / l \quad (3.67)$$

と計算される [15, 17]. ただし $r-1$ はサブステンシルにおける線形多項式補間関数の次数を表しており, 3 次 ENO 法の場合 $r=3$ である. サブステンシル $\mathcal{S}^{(j)}$ における IS の値を比較し, 最小値を取るサブステンシルの関数を ENO 法の補間関数とする. すなわち, ENO 法の補間関数および左境界値は,

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_i^{\text{ENO}}(x) &= \mathcal{Q}_i^{(j_{\min})}(x) = q(x) + \mathcal{O}(\Delta x^3), \\ q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,ENO}} &= q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(j_{\min})} = q_{i+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta x^3), \\ j_{\min} &= \operatorname{argmin}_{j \in \{0, 1, 2\}} (IS_{i-1+j}) \end{aligned} \quad (3.68)$$

と表される. 右境界値も同様に計算される.

ENO 法はステンシルをサブステンシルに分割し, それぞれ構築される補間関数のうち最も滑らかな分布のものを選択することで, 非単調な解でも高次精度を得ることができ, ステンシルの拡張により任意の高次精度も得られる. しかし, サブステンシルで構築された補間関数は全体のステンシルの情報を持たないため, 同じステンシルを持つ線形多項式補間と比べて精度が減少する. 例えば 3 次 ENO 法の場合, 全体のステンシルが 5 個のセルで構成されており, 4 次線形多項式補間 (3.30) が 5 次精度を持つのに対し, ENO 法の補間精度は 3 次に留まる. この精度減少の問題を解決するため, 各サブステンシルで構築された補間関数を滑らかさに基

づく重みで足し合わせ、セル境界において線形多項式補間と同じ精度を得る WENO 法が提案された。

3.4.4 WENO 補間

WENO 法 [17–19] は、ENO 法と同様にステンシルを複数のサブステンシルに分割し、各補間関数を適切な重みで足し合わせる手法である。ENO 法では最も滑らかな分布を持つサブステンシルを 1 つ選択するのに対し、WENO 法では各サブステンシルの分布の滑らかさに応じて重みを決定し、全てのサブステンシルで構築された線形多項式関数を足し合わせる。図 3.4 に示した 3 次 ENO 法と同じステンシルの WENO 法 ($r = 3$) では、補間関数および左境界値は次式で表される。

$$Q_i^{\text{WENO}}(x) = \omega_0 Q_i^{(0)}(x) + \omega_1 Q_i^{(1)}(x) + \omega_2 Q_i^{(2)}(x), \quad (3.69)$$

$$\begin{aligned} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,WENO}} &= Q_i^{\text{WENO}}\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) \\ &= \omega_0 q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(0)} + \omega_1 q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(1)} + \omega_2 q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}(2)} \end{aligned} \quad (3.70)$$

重み係数 ω_k ($k = 0, 1, 2$) は、滑らかさ指標の値を用いて、分布が滑らかであるほど大きい値となるように計算される。初期の WENO 法 [17] では式 (3.67) に示した IS が用いられていたが、後に Jiang と Shu [18] によって次の滑らかさ指標が提案された。

$$\beta_k = \sum_{l=1}^{r-1} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{d^l Q_i^{(k)}(x)}{dx^l} \right)^2 dx, \quad (k = 0, 1, 2) \quad (3.71)$$

この式を具体的に計算すると、

$$\begin{cases} \beta_0 = \frac{13}{12}(\bar{q}_{i-2} - 2\bar{q}_{i-1} + \bar{q}_i)^2 + \frac{1}{4}(\bar{q}_{i-2} - 4\bar{q}_{i-1} + 3\bar{q}_i)^2 \\ \beta_1 = \frac{13}{12}(\bar{q}_{i-1} - 2\bar{q}_i + \bar{q}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\bar{q}_{i-1} - \bar{q}_{i+1})^2 \\ \beta_2 = \frac{13}{12}(\bar{q}_i - 2\bar{q}_{i+1} + \bar{q}_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3\bar{q}_i - 4\bar{q}_{i+1} + \bar{q}_{i+2})^2 \end{cases} \quad (3.72)$$

という式が得られる。この滑らかさ指標 β_k を用いて、WENO-JS 法 [18] では

$$\alpha_k = \frac{d_k}{(\beta_k + \epsilon)^p}, \quad (k = 0, 1, 2) \quad (3.73)$$

を計算し、

$$\omega_k = \frac{\alpha_k}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2}, \quad (k = 0, 1, 2) \quad (3.74)$$

のように正規化し重み係数を求める。ここで、式 (3.73) の d_k は理想重み、 $\epsilon = 10^{-15}$ はゼロ除算を回避する項、 p は滑らかさ指標の影響度を調節するパラメータであり、WENO-JS 法で

は $p = 2$ と設定される. 仮に各サブステンシルの滑らかさが全て等しく $\beta_0 = \beta_1 = \beta_2$ となるとき, 重み係数は $\omega_k = d_k$ となる. 理想重み d_k はこのような場合にセル境界値が線形多項式補間による補間値と一致するように定められる. すなわち, 条件式

$$d_0 q_{i+\frac{1}{2}}^{L(0)} + d_1 q_{i+\frac{1}{2}}^{L(1)} + d_2 q_{i+\frac{1}{2}}^{L(2)} = q_{i+\frac{1}{2}}^{L,P_4} \quad (3.75)$$

に式 (3.30) と (3.65) を代入し, 過剰決定系であるが $d_0 = 0.1$, $d_1 = 0.6$, $d_2 = 0.3$ という解が得られる. この理想重みを設定することで, 各サブステンシルの滑らかさ指標の値の差が十分小さければ, WENO 法は 5 次精度に近い収束精度を得ることができる.

また, WENO 法のフレームワークで多くの数値解法が開発されてきた [20–22, 24–26, 142–146]. WENO-Z 法 [19] の場合, α_k を式 (3.73) の代わりに

$$\alpha_k = \left(1 + \frac{\tau_5}{\beta_k + \epsilon}\right) d_k, \quad \tau_5 = |\beta_0 - \beta_2| \quad (3.76)$$

と計算する. TENO 法 [26] の場合,

$$\begin{aligned} \alpha_k &= d_k \delta_k, \\ \delta_k &= \begin{cases} 0, & \text{if } \chi_k < C_T, \\ 1, & \text{otherwise,} \end{cases} \\ \chi_k &= \frac{\gamma_k}{\sum_k \gamma_k}, \\ \gamma_k &= \left(C + \frac{\tau_K}{\beta_{k,r} + \epsilon}\right)^q \end{aligned} \quad (3.77)$$

と計算する. パラメータ C_T , C , q の値や意味については [26] を参照する.

WENO 法はセル境界で線形多項式補間と同じ収束精度を得られるが, セル境界以外の場所では一般に理想重みは存在せず, 線形多項式補間と同じ収束精度を得られない. つまり, $r = 3$ の WENO 法はセル境界における補間値が 5 次精度で, 補間関数自体は基本的に 3 次精度である. 不連続解近傍では不連続を含むサブステンシルに対応する重みを減らすことで数値振動を概ね回避することができる. このような重み調節は MUSCL 法と同様にリミタとして機能するが, この非線形リミタは過剰な数値散逸誤差をもたらす事が知られている. 特に長時間計算では, 不連続解のみならず滑らかな解においても線形多項式補間と比べると散逸誤差が大きく, 最終的には解が空間全体でほぼ平坦になる. この問題は圧縮性流れに含まれる接触不連続の計算において顕著であり, 数値散逸誤差を抑制する計算手法の開発が求められている.

3.4.5 THINC 補間

THINC 法 [31, 32] は, もともと移動界面捕獲法として開発された補間法であり, 近年は圧縮性流れの不連続解を低散逸に捉えるために既存解法と THINC 法を組み合わせたハイブリッド

型解法が提案されている [36–38, 41, 43, 44, 46, 47, 49–52, 54, 55, 58, 62–66, 147–158]. THINC 法の補間関数は、図 3.5 に示すようなシグモイド型の形状を持つ. このような形状は線形多項式関数と異なり、不連続解を忠実に補間する.

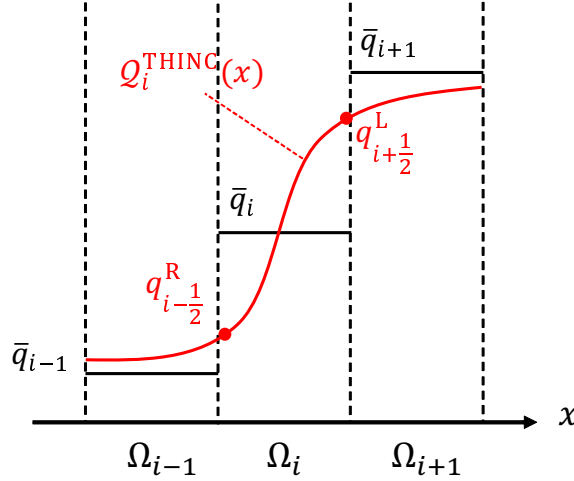


Fig. 3.5 The reconstruction function of the THINC method.

圧縮性流れに適用される THINC 法の補間関数は、双曲線正接関数 (\tanh) を用いて、両隣のセルの物理量 \bar{q}_{i-1} と \bar{q}_{i+1} の間が値域となるようにスケーリングし、セル Ω_i における積分平均値が \bar{q}_i に一致するようにジャンプ位置を合わせる. 非単調な解では、このような設計は不可能であるため、区間一定補間とする. よって、THINC 法の補間関数は次式のように表される [159].

$$Q_i^{\text{THINC}}(x) = \begin{cases} \bar{q}_{\min} + \frac{\Delta\bar{q}_i}{2}(1 + \theta \tanh(\beta(X_i(x) - d_i))), & \text{if } M_i > 0 \\ \bar{q}_i, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.78)$$

と表される. ただし,

$$\begin{aligned} \bar{q}_{\min} &= \min(\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_{i+1}), \quad \Delta\bar{q}_i = |\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_{i-1}|, \\ \theta &= \text{sgn}(\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_{i-1}), \quad X_i(x) = \frac{x - x_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}}, \quad M_i = (\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1})(\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) \end{aligned} \quad (3.79)$$

また、 β は補間関数の勾配を表すパラメータであり、THINC 法の計算特性を決める重要な変数である. 従来は β に固定値を設定する一方、 β の値を解の滑らかさに応じて可変とする補間法も開発されている [52] (4章で説明). d_i はジャンプ位置 (シグモイド関数の中心) を表しており、次の条件式を満たすように決定する.

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} Q_i^{\text{THINC}}(x) dx = \bar{q}_i \quad (3.80)$$

具体的な d_i の式は、式 (3.80) に補間関数 (3.78) を代入することで、

$$d_i = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1 - A_i}{1 + A_i}, \quad \left(A_i = \frac{\exp(\alpha_i \beta) / \cosh(\beta) - 1}{\tanh(\beta)} \right) \quad (3.81)$$

と解ける. α_i は不連続の位置の指標となる変数であり、

$$\alpha_i = \theta \left(2 \frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{\min} + \epsilon}{\Delta \bar{q} + \epsilon} - 1 \right) \quad (3.82)$$

と計算される. $\epsilon = 10^{-20}$ はゼロ除算を防ぐための微小値である. 式 (3.81) を補間関数 (3.78) に代入することで、最終的にセル境界値は、

$$\begin{cases} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,THINC}} = Q_i^{\text{THINC}}(x_{i+\frac{1}{2}}) = \bar{q}_{\min} + \frac{\Delta \bar{q}}{2} \left(1 + \theta \frac{\tanh(\beta) + A_i}{1 + A_i \tanh(\beta)} \right) \\ q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,THINC}} = Q_i^{\text{THINC}}(x_{i-\frac{1}{2}}) = \bar{q}_{\min} + \frac{\Delta \bar{q}}{2} (1 + \theta A_i) \end{cases} \quad (3.83)$$

と計算される.

勾配パラメータ β の値と THINC 法の特性の関係については、文献 [36,37] 等で議論されているが、圧縮性流れの空間再構築では 1.1~2.0 程度の値が用いられる. ADR (Approximate Dispersion Relation) 解析 [160] による THINC スキームの分散特性および散逸特性は、 β を小さい値とする THINC(β_s) 法は MUSCL 法とほぼ同等の特性を示す. β の値を大きい値とする THINC(β_l) 法は、不連続解を 3~4 セル程度の一定幅で解像できる [32]. また、 $\beta = \ln(3) \approx 1.0986$ の時 THINC 法は単調な解で 2 次精度となることが示されている [154].

THINC 補間関数 (3.78) および補間値 (3.83) は圧縮性流れの計算で広く用いられている形式であるが、空間対称性のある問題で対称性誤差を生じることが明らかになっている [53]. 対称性誤差を生じない新しい THINC 補間関数について 5 章で説明する.

3.5 リーマンソルバー

3.4 節の空間再構築を行うことで、セル境界値 $q_{i+1/2}^{\text{L}}, q_{i+1/2}^{\text{R}}$ が得られる. 一般に、 $q_{i+1/2}^{\text{L}}$ と $q_{i+1/2}^{\text{R}}$ は異なる値であり、セル境界の左側と右側で異なる値の物理量が与えられている状態である (図 3.6). このような初期状態から時間進行によって生じる解を求める問題はリーマン問題と呼ばれている. そして、式 (3.5) に示すように、有限体積法では近似リーマンソルバーという計算アルゴリズムを用いて、セル境界を通過する数値流束を求める. この節では、代表的な近似リーマンソルバーとして、HLLC(Harten-Lax-van Leer with Contact) ソルバー [111,161] の計算手順を示す.

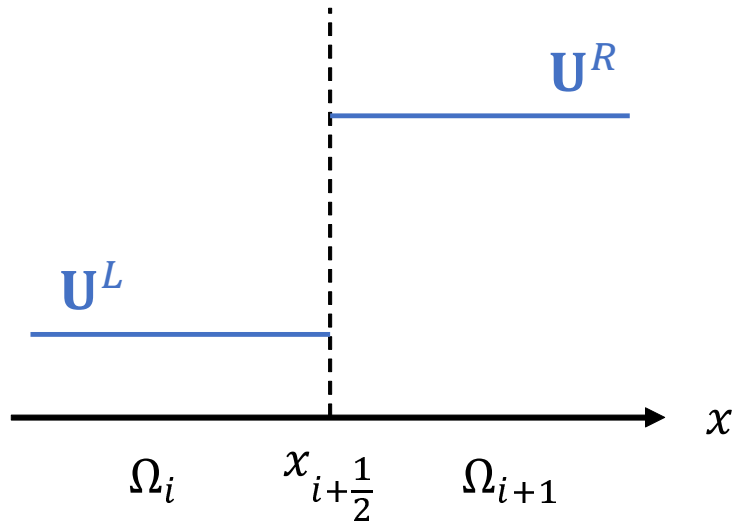


Fig. 3.6 Conceptual diagram of the Riemann problem.

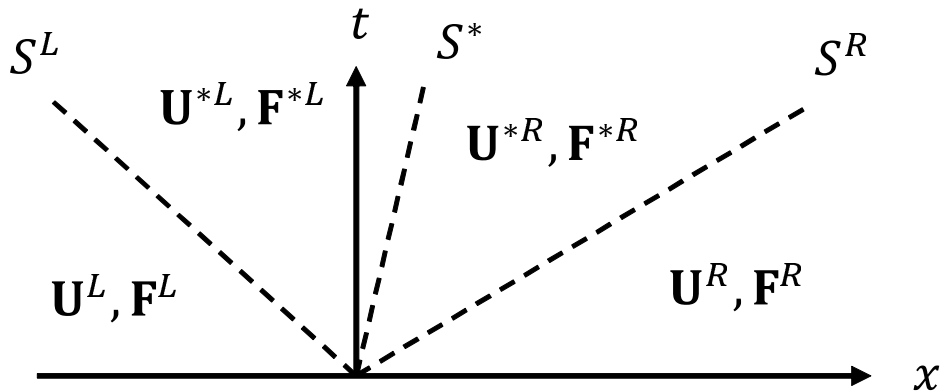


Fig. 3.7 Conceptual diagram of the HLLC solver.

3.5.1 HLLC ソルバー

HLLC ソルバー [111,161] は、図 3.7 の概念図に示すように、3つの波 S^L, S^*, S^R を考慮する。これらの波は、(2.59) で示した 3本の輸送方程式に対応している。特性線によって区切られる 4つの領域について、 U^L, U^R はそれぞれセル境界の左側及び右側の補間された物理量、 U^{*L}, U^{*R} はそれぞれリーマンファン内（特性速度 S^L と S^R の特性線に挟まれる範囲）における接触不連続面の左側及び右側の物理量を表す。リーマン問題の解を得るために、リーマンファン内の物理量 U^{*K} と流束 F^{*K} を求める必要があり、これらはランキンユゴニオ条件等

を用いて

$$\mathbf{U}^{*K} = \frac{S^K - u^K}{S^K - S^*} \begin{bmatrix} \rho^K \\ \rho^K S^* \\ \rho^K E^K + (S^* - u^K) \left(\rho^K S^* + \frac{p^K}{S^K - u^K} \right) \end{bmatrix} \quad (3.84)$$

$$\mathbf{F}^{*K} = \mathbf{F}^K + S^K (\mathbf{U}^{*K} - \mathbf{U}^K) \quad (3.85)$$

と導出される．ただし， $K = L$ or R である．また，接触不連続面に対応する波の速度 S^* については，

$$S^* = \frac{p^R - p^L + \rho^L u^L (S^L - u^L) - \rho^R u^R (S^R - u^R)}{\rho^L (S^L - u^L) - \rho^R (S^R - u^R)} \quad (3.86)$$

が成り立つ．残る未知変数は左右に進む特性線の速度 S^L および S^R であり，これらを近似的に計算する．計算方法にはいくつか種類が存在するが，ここでは PVRS (Primitive Variable Riemann Solvers) 法 [111] を用いる．リーマン問題の厳密解において，特性線の速度 S^L および S^R は

$$S^L = u^L - c^L q^L, \quad S^R = u^R + c^R q^R \quad (3.87)$$

と表現される．ただし q^K は，特性波が膨張波および衝撃波の両方の場合に対応する変数で，

$$q^K = \begin{cases} 1, & \text{if } p^* \leq p^K \\ \sqrt{1 + \frac{\gamma + 1}{2\gamma} \left(\frac{p^*}{p^K} - 1 \right)}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.88)$$

と表される．ここで， p^* はリーマンファン内の圧力を示し，PVRS 法では

$$p^* = \max \left(0, \frac{1}{2} (p^L + p^R) - \frac{1}{2} (u^R - u^L) \bar{\rho} \bar{c} \right), \quad (3.89)$$

$$\bar{\rho} = \frac{1}{2} (\rho^L + \rho^R), \quad \bar{c} = \frac{1}{2} (c^L + c^R)$$

と近似される．このような手順で，左右に進む特性線の速度 S^L および S^R が簡易的に計算され，リーマンファン内の物理量 \mathbf{U}^{*K} と流束 \mathbf{F}^{*K} が求められる．最終的に，HLLC ソルバーによる数値流束は風上化の考え方に基づき次の様に決定される．

$$\mathbf{F}^{\text{HLLC}} = \begin{cases} \mathbf{F}^L, & \text{if } 0 \leq S^L \\ \mathbf{F}^{*L}, & \text{if } S^L \leq 0 \leq S^* \\ \mathbf{F}^{*R}, & \text{if } S^* \leq 0 \leq S^R \\ \mathbf{F}^R, & \text{if } S^R \leq 0 \end{cases} \quad (3.90)$$

ここで注意すべき点として、式 (3.90) から分かるように、リーマン問題の解は通常 $S^L \leq S^* \leq S^R$ を仮定しているため、近似的に求めた S^L および S^R が不等式 $S^L \leq S^R$ を満たすことを確認すべきである。特に強い衝撃波が反射壁面に衝突する際などに、PVRS 法では $S^L \leq S^R$ が満たされない場合があり、質量が壁面を通過してしまうなどの深刻な計算誤差を引き起こす可能性がある。PVRS 法で $S^L \leq S^R$ が満たされない場合、TSRS (Two-Shock Riemann Solver) 法 [111, 162] や ANRS (Adaptive Noniterative Riemann Solver) 法 [111] などによる S^L および S^R の再計算、または衝撃波の安定的な計算に優れる SLAU (Simple Low-dissipation AUSM) ソルバー [163–165] への切り替えが有効である。

3.5.2 SLAU ソルバー

SLAU ソルバー [163–165] は衝撃波の計算で発生する異常解（カーバンクル現象など）を回避するために開発されたリーマンソルバーである。SLAU ソルバーにおける数値流束は、AUSM ソルバーと同じ枠組みで、

$$F^{\text{SLAU}} = \frac{\dot{m} + |\dot{m}|}{2} \Psi^L + \frac{\dot{m} - |\dot{m}|}{2} \Psi^R + P, \quad (3.91)$$

$$\Psi = \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ v \\ w \\ H \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} 0 \\ p_{1/2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.92)$$

という形式で計算される。ただし $H = E + p/\rho$ はエンタルピーを表す。SLAU ソルバーでは、質量流束 \dot{m} を

$$(\dot{m})^{\text{SLAU}} = \frac{1}{2} \left(\rho^L (u^L + |\bar{V}_n|^+) + \rho^R (u^R - |\bar{V}_n|^-) - \frac{\chi}{a_{1/2}} \Delta p \right), \quad (3.93)$$

$$|\bar{V}_n|^+ = (1 - g)|\bar{V}_n| + g|u^L|, \quad |\bar{V}_n|^- = (1 - g)|\bar{V}_n| + g|u^R|, \quad (3.94)$$

$$|\bar{V}_n| = \frac{\rho^L |u^L| + \rho^R |u^R|}{\rho^L + \rho^R}, \quad (3.95)$$

$$g = -\max(\min(M^L, 0), -1) \cdot \min(\max(M^R, 0), 1) \quad (3.96)$$

と計算する。ただし、

$$\chi = (1 - \hat{M})^2, \quad \hat{M} = \min\left(1, \frac{1}{a_{1/2}} \sqrt{K^L + K^R}\right), \quad (3.97)$$

$$M^K = \frac{u^K}{a_{1/2}} \quad (K = L \text{ or } R), \quad a_{1/2} = \frac{c^L + c^R}{2} \quad (3.98)$$

ここで $K = \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$ である。圧力流束 $p_{1/2}$ について、様々な計算方法が提案されている。初期に提案された方法 [163] では、圧力流束 $p_{1/2}$ は

$$p_{1/2}^{\text{SLAU}} = \frac{p^{\text{L}} + p^{\text{R}}}{2} + \frac{P^+ - P^-}{2}(p^{\text{L}} - p^{\text{R}}) + (1 - \chi)(P^+ + P^- - 1)\frac{p^{\text{L}} + p^{\text{R}}}{2} \quad (3.99)$$

$$P^\pm = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 \pm \text{sign}(M)), & \text{if } |M| \geq 1 \\ \frac{1}{4}(M \pm 1)^2(2 \mp M), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.100)$$

と計算される。次に SLAU ソルバーのロバスト性を向上させた SLAU2 ソルバー [164] では、

$$p_{1/2}^{\text{SLAU2}} = \frac{p^{\text{L}} + p^{\text{R}}}{2} + \frac{P^+ - P^-}{2}(p^{\text{L}} - p^{\text{R}}) + \sqrt{K^{\text{L}} + K^{\text{R}}}(P^+ + P^- - 1)\frac{\rho^{\text{L}} + \rho^{\text{R}}}{2}a_{1/2} \quad (3.101)$$

と計算される。さらに、高解像度な数値結果を得るために改善された HR-SLAU2 ソルバー [165] では、

$$p_{1/2}^{\text{HR-SLAU2}} = \frac{p^{\text{L}} + p^{\text{R}}}{2} + \frac{P^+ - P^-}{2}(p^{\text{L}} - p^{\text{R}}) + \gamma^{\text{HR}}\sqrt{K^{\text{L}} + K^{\text{R}}}(P^+ + P^- - 1)\frac{\rho^{\text{L}} + \rho^{\text{R}}}{2}a_{1/2} \quad (3.102)$$

と計算される。本研究では 4.4.6 節で二重マッハ反射問題を解く際にカーバンクル現象を回避するため HR-SLAU2 ソルバーを用いる。パラメータ γ^{HR} は 0.2 に設定した。

3.6 時間積分法

3.6.1 ルンゲクッタ法

数値流体力学の計算において広く用いられる SSPRK(Strong Stability-Preserving Runge-Kutta) 法 [166, 167] の計算手順を示す。

スカラー保存則 (3.1) を次の形で表現する。

$$\frac{dq}{dt} = \mathcal{L}(q) \quad (3.103)$$

$\mathcal{L}(q)$ は空間離散化オペレーターであり、有限体積法の場合、スカラー保存則の半離散式 (3.4) より

$$\mathcal{L}(\bar{q}_i) = -\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (3.104)$$

と表される。常微分方程式 (3.103) について、ある時刻 $t = t^n$ の解 q^n が与えられたときに、新しい時刻 $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ の解 q^{n+1} を求めることを考える。常微分方程式の代表的な数値解法である m 段ルンゲクッタ法 [166, 167] は、 q^n からスタートし $(m - 1)$ 個の中間解 $q^{(j)}$ ($j = 1, \dots, m - 1$) を計算した後に q^{n+1} に到達する。この計算アルゴリズムは

$$\begin{cases} q^{(0)} = q^n \\ q^{(j)} = \sum_{k=1}^j \left(A_{j,k} q^{(k-1)} + B_{j,k} \mathcal{L} \left(q^{(k-1)} \right) \Delta t \right) \quad (j = 1, 2, \dots, m) \\ q^{n+1} = q^{(m)} \end{cases} \quad (3.105)$$

と表される。係数 $A_{j,k}$ および $B_{j,k}$ は、3 次精度以下の場合には次の行列で設定される。

- オイラー前進法 (1 段 1 次) :

$$A = 1, \quad B = 1 \quad (3.106)$$

- 2 段 2 次 SSPRK 法 :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (3.107)$$

- 3 段 3 次 SSPRK 法 :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{2}{3} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \quad (3.108)$$

- 5 段 4 次 SSPRK 法 :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.444370493651235 & 0.555629506348765 & 0 & 0 & 0 \\ 0.620101851488403 & 0 & 0.379898148511597 & 0 & 0 \\ 0.178079954393132 & 0 & 0 & 0.821920045606868 & 0 \\ 0 & 0 & 0.517231671970585 & 0.096059710526147 & 0.386708617503269 \end{bmatrix}, \quad (3.109)$$

$$B = \begin{bmatrix} 0.391752226571890 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.368410593050371 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.251891774271694 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.544974750228521 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.063692468666290 & 0.226007483236906 \end{bmatrix} \quad (3.110)$$

3.6.2 時間刻みの計算

時間発展アルゴリズム (3.105) 中の時間刻み Δt は、CFL(Courant-Friedrichs-Lewy) 条件を満たす範囲で決定される。例えば 1 次元スカラー保存則 (3.1) の場合は、

$$\Delta t = \frac{CFL}{\max_i \left(\left| \frac{a_i}{\Delta x} \right| \right)} \quad (3.111)$$

と計算される. $a_i = \partial f / \partial q \big|_{x=x_i}$ は特性速度を表し, 計算領域内で最大の特性速度を用いる. CFL 数は, 式 (3.111) のように, 流れの物理的な伝達速度と数値的な伝達速度の比を表す無次元量であり, 1 次精度の解法では $0 \leq CFL \leq 1$ の範囲で計算安定となる. 3 次元スカラー保存則の場合は,

$$\Delta t = \frac{CFL}{\max_{i,j,k} \left(\left| \frac{a_{x,i,j,k}}{\Delta x} \right| + \left| \frac{a_{y,i,j,k}}{\Delta y} \right| + \left| \frac{a_{z,i,j,k}}{\Delta z} \right| \right)} \quad (3.112)$$

となる. 1 次元オイラー方程式の場合, 3.5 節のリーマンソルバーの計算で得られる波の速度 S^L および S^R の値を用いて, 次式で計算する.

$$\Delta t = \frac{CFL}{\max_i \left(\max \left(\left| \frac{S_i^L}{\Delta x} \right|, \left| \frac{S_i^R}{\Delta x} \right| \right) \right)} \quad (3.113)$$

3.7 3章のまとめ

圧縮性流れにおける数値解法の基本的な枠組みについて説明した. 未知変数の保存性を離散レベルで満たす保存型数値解法として, 有限体積法と保存型有限差分法の計算手順について述べた. どちらの計算手順においても必要となる空間再構築と呼ばれる物理量の補間について, 初めに最も単純な線形多項式補間を説明した. 次に, 1 次多項式関数の勾配を制限し, 単調解において 2 次精度で TVD 性を持つ MUSCL 法を導出した. MUSCL 法の minmod リミタを拡張することで, 非単調解も含めて任意高次精度を得る ENO 法を導出し, ENO 法のサブステンシルの補間関数を重み付けて足し合わせることでセル境界で精度を向上する WENO 法について説明した. さらに, 多項式関数ではなくシグモイド関数を用いて補間を行う THINC 法を導出した. 代表的なリーマンソルバーとして HLLC 法, 時間発展には SSPRK 法の計算手順を紹介した.

第 4 章

ハイブリッド型高解像度数値解法

本章では BVD 原理に基づく新しい数値解法を提案し，3 章で示した圧縮性流れにおける既存の数値解法より高解像度な数値解析を行う．複数の補間関数を候補に持つハイブリッド型 BVD 解法の枠組みで，勾配パラメータ β の値を可変とする THINC 補間法を提案し，線形多項式補間と組み合わせることで，新しい高解像度数値解法を構築する．单相圧縮性流れにおける典型的なベンチマークテストを用いて，新規解法と既存解法の数値結果を比較し，新規解法の低散逸性を示す．

4.1 BVD 原理

BVD 原理 [38] とは，セル境界における変動 (Boundary Variation: BV) の値が小さくなる (Diminishing) ように空間再構築手法を工夫することで，数値解法に含まれる数値散逸誤差を抑制する考え方である．セル境界における変動とは，セル境界を挟む左側と右側で補間されたセル境界値の差，すなわち $|q^R - q^L|$ を表し，この値がセル境界における数値流束に含まれる数値散逸誤差の大きさを決める．BVD 原理は，セル境界値 q^R と q^L の差を小さくするという抽象的な概念であることから，様々な双曲型の偏微分方程式の数値解析に適用可能であり，数値散逸誤差の抑制が見込める．加えて，非構造格子においてもセル境界値の差が数値散逸誤差の大きさを決めるため，BVD 原理は非構造格子における低散逸数値解法の設計指針として拡張できる．これらの特長を持つ BVD 原理は，様々な方程式モデル (スカラー保存則，单相，気液二相，磁性流体)，離散化手法 (有限体積法，有限差分法，有限要素法)，高次精度補間 (WENO 補間，TEN0 補間，線形多項式補間，HOCUS 補間)，格子形状などに対して適用されている [36–45, 47, 51]．

本章では，BVD 原理および高解像度数値解法の説明にあたり，式 (3.1) に示した 1 次元スカラー保存則を考慮して記述する．すなわち q を保存物理量， $f(q)$ を流束， a を特性速度として

表す. 式 (3.6) で示した数値流束 (風上流束) の計算式について, 次のような形で表現できる.

$$f^{\text{Riemann}}(q^L, q^R) = \frac{1}{2}(f(q^L) + f(q^R)) - \frac{1}{2}|a|(q^R - q^L) \quad (4.1)$$

式 (4.1) 右辺第 1 項は左右の流束値の平均であり, セル境界の流束に整合する項である. 右辺第 2 項は, 風上側の情報を用いた流束に調整する項である. ここで, 方程式を線形と仮定し ($a = \text{const.}$, $f = aq$), 1 次精度解法を用いた場合の数値流束及び半離散式を導出する. 1 次精度解法によるセル境界値 (3.33) を式 (4.1) に代入すると, セル境界 $x_{i+1/2}$ を通過する 1 次精度数値流束,

$$\hat{f}_{i+1/2} = \frac{a}{2}(\bar{q}_i + \bar{q}_{i+1}) - \frac{|a|}{2}(\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) \quad (4.2)$$

を得る. 1 次精度数値流束 (4.2) を半離散式 (3.4) に代入すると,

$$\frac{d\bar{q}_i}{dt} = -a \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_{i-1}}{2\Delta x} + |a| \frac{\bar{q}_{i+1} - 2\bar{q}_i + \bar{q}_{i-1}}{2\Delta x} \quad (4.3)$$

となる. セル Ω_i における物理量 q の空間 1 階微分及び 2 階微分の差分近似

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_i &\approx \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_{i-1}}{2\Delta x}, \\ \left. \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \right|_i &\approx \frac{\bar{q}_{i+1} - 2\bar{q}_i + \bar{q}_{i-1}}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (4.4)$$

を考慮すると, 式 (4.3) は,

$$\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} \approx -a \left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_i + \frac{|a|\Delta x}{2} \left. \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \right|_i \quad (4.5)$$

となり, 元のスカラー保存則 (3.1) に 2 階微分に比例する項を加えた形に収束することが分かる. この 2 階微分項は人工粘性項と呼ばれており, 3.3 節の散逸分散解析より粘性の効果をもたらすことが分かる. この人工粘性項の存在により, 数値計算の安定性が保たれる一方で, 数値散逸誤差として解の精度を低下させる.

式 (4.3) 及び (4.5) 右辺の 1 階微分項および 2 階微分項は, それぞれリーマンソルバーの式 (4.1) 右辺の第 1 項および第 2 項から生じている. すなわち, リーマンソルバーの式 (4.1) の第 2 項

$$-\frac{1}{2}|a|(q^R - q^L) \quad (4.6)$$

が人工粘性としての役割を持っている. したがって, 式 (4.6) の値を適切に小さくする事で, 数値散逸誤差を抑制できると考えられる. 式 (4.6) のうち, 特性速度 $|a|$ の大きさはリーマンソルバーによって, セル境界値変動 ($q^R - q^L$) の大きさは空間再構築法によって決まる. 特性

速度 $|a|$ の大きさは物理的特性を反映するため、リーマンソルバーの計算手法の違いによる値の大きさの変動は比較的小さい。一方で、セル境界値変動 ($q^R - q^L$) の値は空間再構築法によって大きく変わる可能性がある。よって、セル境界値変動の値が小さくなるように空間再構築法を工夫することが、数値散逸誤差の効果的な抑制につながる。セル境界値変動、すなわち BV を

$$BV \equiv |q^R - q^L| \quad (4.7)$$

と定義し、 BV の値が減少 (Diminishing) するように数値解法を工夫する考え方を BVD 原理と呼ぶ。

BVD 原理に基づく数値解法は、 BV の値が小さくなるように再構築法を工夫する一方で、必ずしも $q^R - q^L = 0$ となることを要求しているわけではない。例えば中心系の補間では、常に $q^R = q^L$ であり、数値散逸誤差を含まないことが知られている。中心系の補間は誤差のリーディングタームが分散誤差となり、3.3 節の散逸分散解析より、不連続解を含む流れ場では振動的な解をもたらす。一方 BVD 原理は、数値誤差のリーディングタームを散逸誤差としつつ、その散逸誤差をなるべく減らすことを要求している。この点において BVD 原理は中心系補間とは異なり、不連続解近傍で計算安定性を保ちながら、過剰な数値散逸誤差を抑制する。

4.2 ハイブリッド型 BVD 解法

これまで BVD 原理に基づき様々な高解像度数値解法が開発されている。特に、複数の既存再構築手法を組み合わせ、BVD 原理に基づき 1 つの再構築手法を選択するハイブリッド型解法が多く提案されている。例えば、WENO-THINC-BVD 法 [38] の場合、WENO 補間と THINC 補間の中から BV が小さくなる再構築関数を各セルで選択する。一般に、選択候補となる既存再構築関数は BVD 許容補間関数、補間関数選択の具体的な手順は BVD 選択アルゴリズムと呼ばれる。BVD 許容補間関数の数や組み合わせ、BVD 選択アルゴリズムの種類によって、様々な BVD 解法が構成される。

4.2.1 BVD 選択アルゴリズム

2 つの候補補間関数うち 1 つを選択する計算手順について説明する。文献 [168] で 4 種類の BVD 選択アルゴリズム (I~IV) が提案されている。選択アルゴリズム I は、最も初期の BVD 法で用いられた選択法 [38] で、WENO 法または TENO 法と THINC 法の組み合わせで有効である。選択アルゴリズム II は、MUSCL 法と THINC 法を組み合わせる解法で提案され [41]、気液二相流の計算で用いられている [41, 58, 169]。選択アルゴリズム III は、非構造格子で MUSCL 法や WENO 法と THINC 法を組み合わせるために開発され [40]、反応性オイラー方程式や粘性流、気液二相流の計算にも適用された [47, 108, 170]。選択アルゴリズム

IV は, リミタを用いない数値解法の開発のために提案された選択法 [36] で, 異なる値の勾配パラメータを持つ THINC 法の組み合わせや, 線形多項式と THINC 法の組み合わせなどで活用された [36, 43, 44]. 単相圧縮性流れにおいてこれまでに開発された BVD 法の多くは, シンプルさと精度の高さから選択アルゴリズム IV を用いており, 本章で提案する高解像度 BVD 法も選択アルゴリズム IV を用いる.

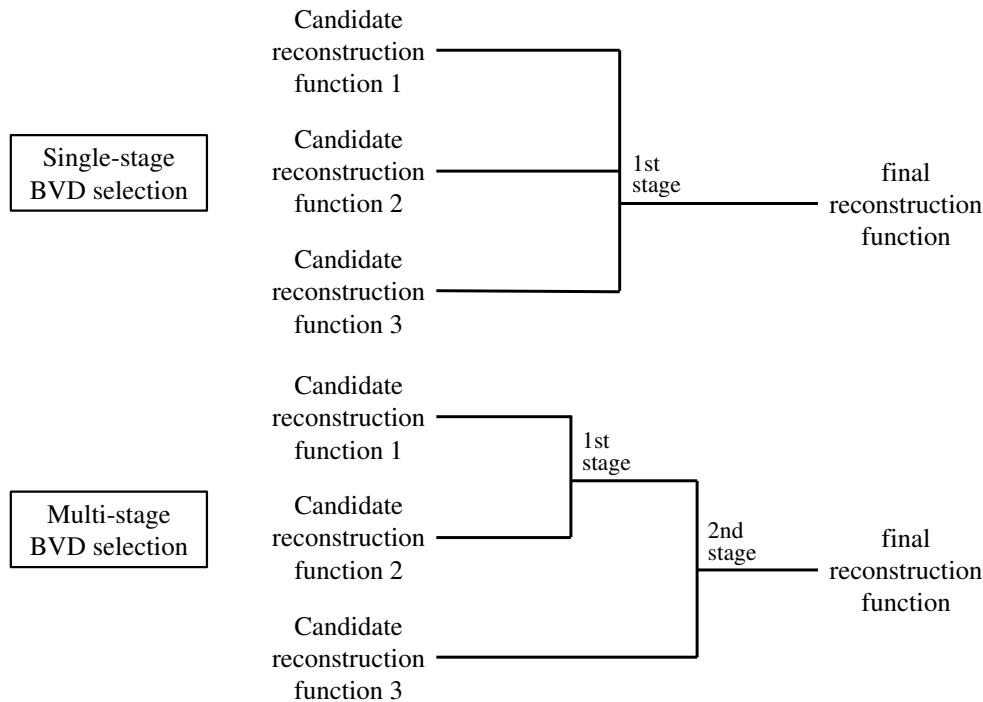


Fig. 4.1 Conceptual diagrams of the single- and multi-stage BVD selection algorithms.

候補補間関数の数が3つ以上の時, 1つの補間関数を選ぶ手順について, 図4.1の概念図に示すように一段型選択法と多段型選択法が考えられる. 一段型選択法は, 全ての候補補間関数を同時に比較し, 1回の選択で最終的な補間関数を決定するため, 計算コストに優れる [47]. 多段型選択法は, 候補補間関数を一つずつ比較し, 複数回の選択の後に最終的な補間関数を決定する. P_4T_2 -BVD法 [43] や P_nT_m -BVD法 [44, 61] で用いられており, 非線形リミタを用いずに各選択段階で数値振動誤差または数値散逸誤差が抑制される.

本章で示す構造格子上の BVD 選択アルゴリズムは, 1次元空間で計算される. 多次元空間における構造格子上の BVD 選択アルゴリズムは, 各次元方向で独立して実行される. x, y, z 方向でそれぞれ補間関数を比較するため, 一つのセルで各次元方向に異なる種類の補間関数が選択され得る. 7章で示す非構造格子上の BVD 選択アルゴリズムは一つのセルで一つの多次元的な補間関数を選択するという点で, 構造格子と非構造格子における BVD 選択アルゴリズムに違いが見られる.

4.2.2 P_4T_2 -BVD 法

P_4T_2 -BVD 法 [43] は、4 次線形多項式関数 (3.28), $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数 (3.78), $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数 (3.78) を選択候補として用いる. 3.4.5 節で説明したように, THINC 補間法は勾配パラメータ β の値によってその特性が変化する. P_4T_2 -BVD 法では, 勾配パラメータ β の値は $\beta_s = 1.1$, $\beta_1 = 1.6$ と設定される. 再構築関数の選択は, 文献 [36] で提案されたアルゴリズム IV を用いて, 2 段階選択法 [43] によって行われる. P_4T_2 -BVD 法におけるセル Ω_i の補間関数を選択する手順を以下に示す.

(I) 1 段階目

(I-1) セル Ω_i の初期補間関数として 4 次線形多項式関数を設定する.

$$Q_i^{(I)} = Q_i^{P_4} \quad (4.8)$$

(I-2) 4 次線形多項式補間関数及び $\text{THINC}(\beta_s)$ 補間関数による再構築を行い, Total BV(TBV) と呼ばれる指標をそれぞれ計算する.

$$\begin{aligned} TBV_i^{P_4} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,P_4} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,P_4} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,P_4} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,P_4} \right|, \\ TBV_i^{T_s} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,T_s} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,T_s} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,T_s} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,T_s} \right| \end{aligned} \quad (4.9)$$

(I-3) $TBV_i^{T_s} < TBV_i^{P_4}$ が成り立つ場合は, 両隣のセルも含めて補間関数を $\text{THINC}(\beta_s)$ に変更する.

$$Q_j^{(I)} = Q_j^{T_s} \quad (j = i-1, i, i+1), \quad \text{if } TBV_i^{T_s} < TBV_i^{P_4} \quad (4.10)$$

(II) 2 段階目

(II-1) $\text{THINC}(\beta_1)$ 補間関数による再構築を行い, 1 段階目で選択された補間関数 $Q_i^{(I)}$ と $\text{THINC}(\beta_1)$ 補間関数による TBV_i をそれぞれ計算する.

$$\begin{aligned} TBV_i^{(I)} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,(I)} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,(I)} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,(I)} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,(I)} \right|, \\ TBV_i^{T_1} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,T_1} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,T_1} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,T_1} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,T_1} \right| \end{aligned} \quad (4.11)$$

(II-2) $TBV_i^{T_1} < TBV_i^{(I)}$ が成り立つ場合は, セル Ω_i の再構築関数を $\text{THINC}(\beta_1)$ に変更する.

$$Q_i = \begin{cases} Q_i^{T_1}, & \text{if } TBV_i^{T_1} < TBV_i^{(I)} \\ Q_i^{(I)}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.12)$$

1 段目では、4 次線形多項式関数と $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数を比較する。4 次線形多項式関数は、滑らかな解に対しては 5 次精度を持つ優れた補間となる一方、不連続解の補間においてはルンゲ現象と呼ばれる振動的な補間誤差が発生するため、不連続解近傍では TBV の値が大きくなる。そのため、式 (4.10) に従い補間関数を選択することで、不連続解近傍でのみ $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数が適用され、滑らかな解の補間精度を維持しながら不連続解の数値振動を抑制できる。また 2 段目では、1 段目で選んだ関数と $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数を比較する。 $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数は特に不連続解において数値散逸誤差が大きく、 $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数の方が不連続解をシャープに捉えることが出来る。式 (4.12) に従い最終的な補間関数を決定することで、滑らかな解では 4 次線形多項式関数、不連続解では $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数、その近傍では $\text{THINC}(\beta_s)$ 関数が選択される。その結果、滑らかな解で 5 次精度を保ちながら不連続解を低散逸で計算可能となる。

4.2.3 $P_n T_m$ -BVD 法

$P_n T_m$ -BVD 法 [44, 61] は、 $P_4 T_2$ -BVD 法を一般化した数値解法であり、 n 次線形多項式関数 (3.28) と、 m 種類の値の β を持つ THINC 関数 (3.78) を選択候補として用いる。 β_k ($k = 1, \dots, m$) の値は、 β_m のみ大きい値とし、それ以外は小さい値とする。 $P_4 T_2$ -BVD 法では 2 段階の選択を行うのに対し、 $P_n T_m$ -BVD 法は m 段階の選択を行う。補間関数の比較は、 $P_4 T_2$ -BVD 法と同様に、 TBV を指標とする BVD 選択アルゴリズム IV を用いる。 $P_n T_m$ -BVD 法におけるセル Ω_i の補間関数を選択する手順を以下に示す。

(I) 1 段目

(I-1) セル Ω_i の初期補間関数として n 次線形多項式関数を設定する。

$$Q_i^{(1)} = Q_i^{P_n} \quad (4.13)$$

(I-2) n 次線形多項式補間関数及び $\text{THINC}(\beta_1)$ 補間関数による再構築を行い、 TBV_i をそれぞれ計算する。

$$\begin{aligned} TBV_i^{P_n} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L, P_n} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R, P_n} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L, P_n} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R, P_n} \right|, \\ TBV_i^{T_1} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L, T_1} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R, T_1} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L, T_1} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R, T_1} \right| \end{aligned} \quad (4.14)$$

(I-3) $TBV_i^{T_1} < TBV_i^{P_n}$ が成り立つ場合は、両隣のセルも含めて補間関数を $\text{THINC}(\beta_1)$ に変更する。

$$Q_j^{(1)} = Q_j^{T_1} \quad (j = i-1, i, i+1), \quad \text{if } TBV_i^{T_1} < TBV_i^{P_n} \quad (4.15)$$

(II) k 段目 ($k = 2, \dots, m-1$)

(II-1) THINC(β_k) 補間関数による再構築を行い, ($k-1$) 段目で選択された補間関数 $\mathcal{Q}_i^{(k-1)}$ と THINC(β_k) 補間関数による TBV_i をそれぞれ計算する.

$$\begin{aligned} TBV_i^{(k-1)} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,(k-1)} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,(k-1)} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,(k-1)} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,(k-1)} \right|, \\ TBV_i^{T_k} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,T_k} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,T_k} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,T_k} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,T_k} \right| \end{aligned} \quad (4.16)$$

(II-2) $TBV_i^{T_k} < TBV_i^{(k-1)}$ が成り立つ場合は, 両隣のセルも含めて補間関数を THINC(β_k) に変更する.

$$\mathcal{Q}_j^{(k)} = \mathcal{Q}_j^{T_k} \quad (j = i-1, i, i+1), \quad \text{if } TBV_i^{T_k} < TBV_i^{(k-1)} \quad (4.17)$$

(III) m 段目

(III-1) THINC(β_m) 補間関数による再構築を行い, ($m-1$) 段目で選択された補間関数 $\mathcal{Q}_i^{(m-1)}$ と THINC(β_m) 補間関数による TBV_i をそれぞれ計算する.

$$\begin{aligned} TBV_i^{(m-1)} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,(m-1)} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,(m-1)} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,(m-1)} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,(m-1)} \right|, \\ TBV_i^{T_m} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,T_m} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,T_m} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,T_m} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,T_m} \right| \end{aligned} \quad (4.18)$$

(III-2) $TBV_i^{T_m} < TBV_i^{(m-1)}$ が成り立つ場合は, セル Ω_i の再構築関数を THINC(β_m) に変更する.

$$\mathcal{Q}_i = \begin{cases} \mathcal{Q}_i^{T_m}, & \text{if } TBV_i^{T_m} < TBV_i^{(m-1)} \\ \mathcal{Q}_i^{(m-1)}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.19)$$

$P_n T_m$ -BVD 法では, $1 \sim (m-1)$ 段階目で n 次線形多項式関数と小さい値の β を持つ THINC 関数を比較し, 数値振動を抑制する. 複数の THINC 関数と多段階的に比較することで適切に数値振動を抑制できる. 最後の m 段階目で大きい値の β を持つ THINC 関数と比較することで数値散逸の抑制を行う. β の値は, 例えば $n = 6, 8, 10$ の場合, $\beta_1 = 1.2, \beta_2 = 1.1, \beta_3 = 1.8$ の 3 種類 ($m = 3$) が用いられる [44, 61]. また, $n = 10, 12, 14$ の場合, $\beta_1 = 1.4, \beta_2 = 1.1, \beta_3 = 1.8$ の 3 種類 ($m = 3$) が有効である.

4.3 勾配パラメータを可変とする高解像度 BVD 法

$P_n T_m$ -BVD 法は n 次線形多項式関数と m 種類の THINC 関数を選択候補としている. THINC 関数の勾配パラメータ β が固定値であることから, β の値を $1.1 \sim 1.8$ などの間で変化させることで不連続解近傍の様々な分布に適合した THINC 補間関数の構築が可能となる. したがって, 解に対して適切な β の値を算出する β 可変 THINC 法を新たに 2 つ定式化する. そして, $P_4 T_2$ -BVD 法および $P_n T_m$ -BVD 法で用いられている複数の THINC 補間関数

をまとめて β 可変 THINC 補間に置き換える $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法を提案する.

4.3.1 β 可変 THINC 補間

3.4.5 節で示した通り, THINC 法の特徴はシグモイド関数の勾配パラメータ β の値に依存している. 従来の THINC 法は β に 1.1 や 1.6 といった固定値を用いていた. 本節では, β の値を解の滑らかさに応じて連続的に変化させる β 可変 THINC 法の定式化を行う.

セル Ω_i の再構築で用いる勾配パラメータ β_i の値を次式で計算する.

$$\beta_i = \frac{\beta_s + \beta_1}{2} + \frac{\beta_1 - \beta_s}{2} \tanh(\varphi(|\ln r_i| + \delta)) \quad (4.20)$$

ただし, 各パラメータを

$$\beta_s = 1.1, \quad \beta_1 = 1.6, \quad \varphi = 2, \quad \delta = \frac{1}{4} \ln 2 \quad (4.21)$$

と設定する. また, r_i は MUSCL 法で用いられる勾配比 (3.51) であり,

$$r_i = \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i}{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}} \quad \text{or} \quad \frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}}{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i} \quad (4.22)$$

と計算される. セル Ω_i における勾配比 r_i の計算方法は 2 通りあるが, これらは逆数の関係になっているため, どちらで計算しても $|\ln r_i|$ の値は同じとなる. 滑らかな解では r_i の値は約 1 となるから, $|\ln r_i|$ は 0 に近い値となる. 一方, 不連続解近傍では r_i の値は小さい正数又は大きい正数となるため, $|\ln r_i|$ は大きい値となる. よって, $|\ln r_i|$ は解の不連続性が強いほど大きな値を取ることが分かる.

可変勾配パラメータ β_i と, 解の不連続性の指標となる式 $|\ln r_i|$ の関係について説明する. 図 4.2 に示す通り, β_i は $|\ln r_i|$ に対して単調増加し, $\beta_1 = 1.6$ に収束する. 従って β_i の値は, 滑らかな解の場合は $|\ln r_i| \approx 0$ より 1.28 程度の小さい値となり, 解の不連続性の強さに応じて 1.6 まで増加する. このような β の値の変化は THINC 補間法の特徴と整合しており, 解の分布に適合するような勾配パラメータを決定できると考えられる. β_i の計算式 (4.20) 中のパラメータを経験的に調節したことにより, β_i の値が $|\ln r_i| = 0$ において 1.1 ではなく 1.28 程度の値を取っているが, 線形多項式補間と β 可変 THINC 補間を BVD 原理で組み合わせることで, 滑らかな解 ($|\ln r_i| = 0$) で線形多項式補間が選択されるため, $\beta \approx 1.28$ の THINC 法による滑らかな解の精度への影響は少ないと考えられる.

式 (4.20) で求めた可変勾配パラメータ β_i を THINC 関数 (3.78) 内の β に使用することで, β 可変 THINC 補間関数を構築する.

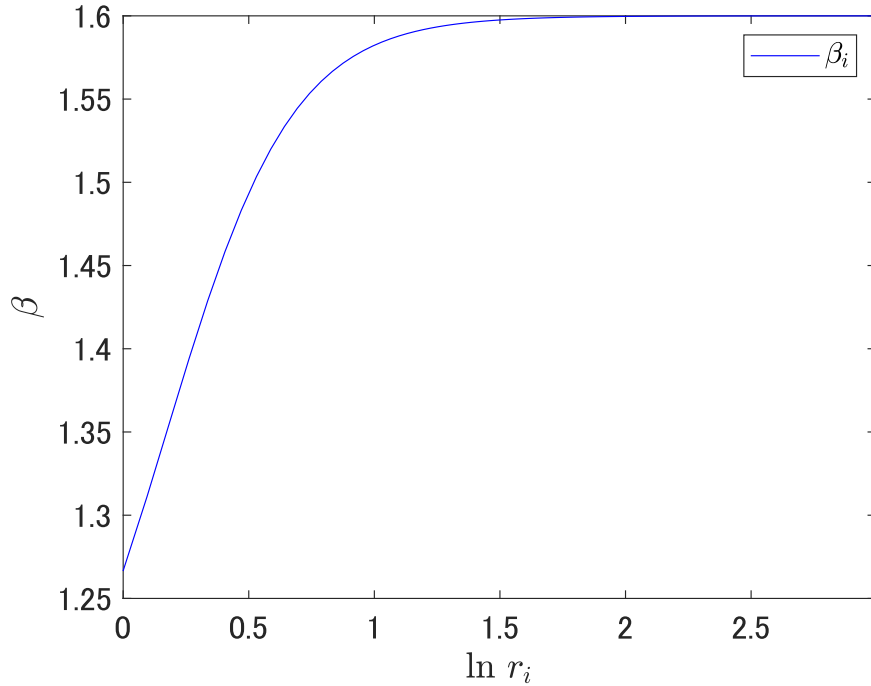


Fig. 4.2 A graph of relationship between β_i and the logarithmic gradient ratio $|\ln r_i|$ in the beta-variable THINC method.

4.3.2 $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法

β 可変 THINC 補間関数を用いて, 新しいハイブリッド型 BVD 法を提案する. 選択候補となる補間関数は 4 次線形多項式関数と β 可変 THINC 関数の 2 種類とし, 補間関数選択は次の手順で行う.

- (1) 4 次線形多項式関数及び β 可変 THINC 関数による再構築を行い, TBV_i をそれぞれ計算する.

$$\begin{aligned} TBV_i^{P_4} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,P_4} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,P_4} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,P_4} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,P_4} \right|, \\ TBV_i^{T_{\beta v}} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,T_{\beta v}} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,T_{\beta v}} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,T_{\beta v}} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,T_{\beta v}} \right| \end{aligned} \quad (4.23)$$

- (2) $TBV_i^{T_{\beta v}} < TBV_i^{P_4}$ が成り立つ場合は, 両隣のセルも含めて補間関数を β 可変 THINC 関数に変更する.

$$Q_j = Q_j^{T_{\beta v}} \quad (j = i-1, i, i+1), \quad \text{if } TBV_i^{T_{\beta v}} < TBV_i^{P_4} \quad (4.24)$$

この計算手順は, P_4T_2 -BVD 法の 2 段階 BVD アルゴリズムの 1 段階と同様の計算となっている. P_4T_2 -BVD 法では数値振動と数値散逸の抑制を別々に 2 段階で行うのに対し, $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法はこれらを 1 段階で行う (図 4.3). そのため, 計算手順の簡略化や計算

時間の短縮といった利点が見込まれる．加えて， P_4T_2 -BVD 法では 1.1 と 1.6 の 2 種類のみ
の β が使われていたのに対し， $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法では 1.1 から 1.6 の間の値も連続的に使用する
ことが出来る．よって，様々な解の分布に適合した補間関数が得られるため，より高忠実な数
値解法となる．

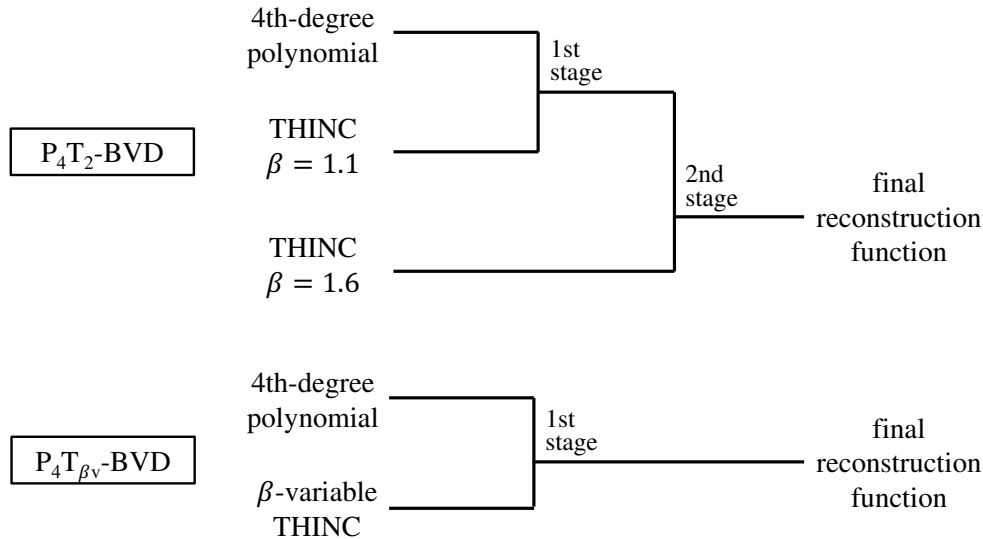


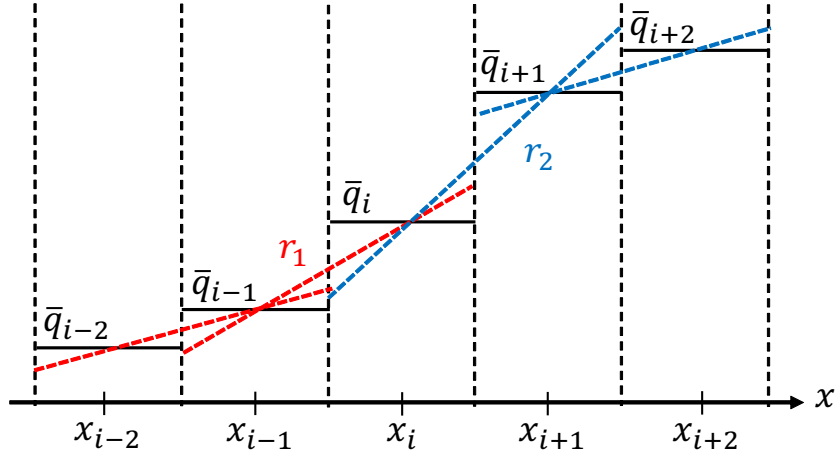
Fig. 4.3 The schematic diagrams of the BVD selection algorithms of P_4T_2 -BVD scheme (top) and $P_4T_{\beta v}$ -BVD scheme (bottom).

4.3.3 5セル β 可変 THINC 補間

上述の β 可変 THINC 補間では，勾配パラメータ β の値を解の滑らかさ勾配比 r_i の値に応
じて決定する．勾配比 r_i は隣接する 3 セルの解 $\bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}$ で計算される．しかし，一般に
解の滑らかさは 3 セルでは正しく評価できないことが知られている [171]．本節では，勾配パ
ラメータ β の値を隣接する 5 セルの解を用いて決定する 5 セル β 可変 THINC 補間を提案し，
BVD 法の性能向上を図る．

5 セル β 可変 THINC 補間では，図 4.4 に示すように，2 つのステンシル $\{\bar{q}_{i-2}, \bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i\}$ と
 $\{\bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}, \bar{q}_{i+2}\}$ 上でそれぞれ勾配比 r_k ($k = 1, 2$) を計算し，解の不連続性 A_k ($k = 1, 2$) を評
価する．勾配パラメータ β_i^* の値を次式で計算する．

$$\begin{aligned} \beta_i^* &= \beta^*(\bar{q}_{i-2}, \bar{q}_{i-1}, \bar{q}_i, \bar{q}_{i+1}, \bar{q}_{i+2}) \\ &= (1 - A_1 A_2) \beta_s + A_1 A_2 \beta_1 \end{aligned} \quad (4.25)$$

Fig. 4.4 Schematic diagram of calculation of β_i^* using 5 cells.

ただし、解の不連続性 A_k ($k = 1, 2$) の値は次式で計算する.

$$A_k = \max \left(\left(\frac{r_s}{r_1} \right)^p, \min \left(\left(\frac{r_k}{r_1} \right)^p, 1 \right) \right), \quad (4.26)$$

$$r_1 = \frac{\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}}{\bar{q}_{i-1} - \bar{q}_{i-2} + \epsilon_{i-\frac{1}{2}}}, \quad (4.27)$$

$$r_2 = \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i}{\bar{q}_{i+2} - \bar{q}_{i+1} + \epsilon_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (4.28)$$

$$\epsilon_{i-\frac{1}{2}} = \text{sgn}(\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1}) \times 10^{-15} \quad (4.29)$$

式 (4.25) と (4.26) 内の各パラメータの値は,

$$r_s = 1.5, \quad r_1 = 3.0, \quad p = 3, \quad \beta_s = \ln(3.0), \quad \beta_1 = 2.5 \quad (4.30)$$

と設定する. 式 (4.25) で与えられた β_i^* は, 2つのステンシル上で勾配比が等しい ($r_1 = r_2$) と仮定すると, 図 4.5 に示す分布を持つ. β_i^* は勾配比 r_k に対して β_s と β_1 の間で単調に増加する. このような β の値の変化は, 4.3.1 節の β 可変 THINC 法と同様に, 解の分布に適合する勾配パラメータを決定できると考えられる. β 可変 THINC 法は β の値を 3セルの解で求めるのに対し, 5セル β 可変 THINC 法は 5セルの解を用いるため, より高精度に勾配パラメータを決定できると期待される. 加えて, 3セルで求める β の式 (4.20) は計算式に対数を含むため計算コストがやや高いが, 5セルで求める β の式 (4.25) は基本的に四則演算のみで計算できるため, 計算コストの観点からも 5セル β 可変 THINC 法の方が優れている. 3セルの β 可変 THINC 法では, 滑らかな解で β_i の値が 1.28 程度の値となる一方で, 5セル β 可変 THINC 法は $\beta_i = \ln(3.0) \approx 1.1$ となるため, 5セル β 可変 THINC 法単体で滑らかな解から不連続解まで捉えられると期待される.

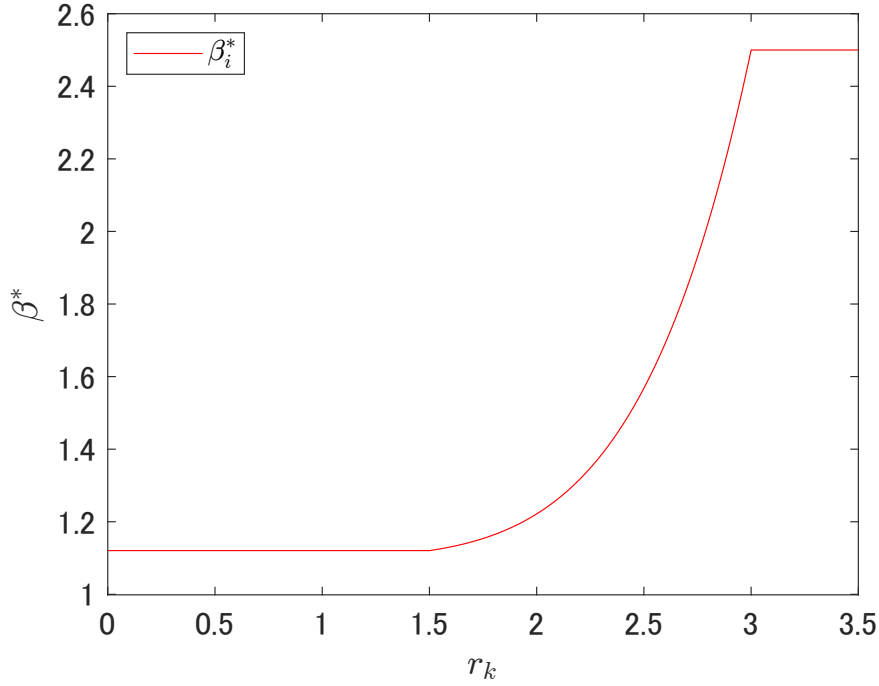


Fig. 4.5 A graph showing relationship between β_i^* and the gradient ratio r_k in the 5-cell beta-variable THINC method.

式 (4.25) で求めた可変勾配パラメータ β_i^* を THINC 関数 (3.78) 内の β に使用することで、5セル β 可変 THINC 補間関数を構築する。

4.3.4 $P_n T_{\beta v5c}$ -BVD 法

5セル β 可変 THINC 補間関数を用いて、新しいハイブリッド型 BVD 法を提案する。選択候補には n 次線形多項式関数と 5セル β 可変 THINC 関数の 2 種類とする。ここでは線形多項式関数の次数は 4 次または 14 次とする。補間関数の選択手順は、4.3.2 節の $P_4 T_{\beta v}$ -BVD 法と同様に、それぞれの候補補間関数で TBV_i の値を求め、小さい方を選択する。以下に具体的な選択手順を示す。

- (1) n 次線形多項式関数及び 5セル β 可変 THINC 関数による再構築を行い、 TBV_i をそれぞれ計算する。

$$\begin{aligned}
 TBV_i^{P_n} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,P_n} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,P_n} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,P_n} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,P_n} \right|, \\
 TBV_i^{T_{\beta v5c}} &= \left| q_{i-\frac{1}{2}}^{L,T_{\beta v5c}} - q_{i-\frac{1}{2}}^{R,T_{\beta v5c}} \right| + \left| q_{i+\frac{1}{2}}^{L,T_{\beta v5c}} - q_{i+\frac{1}{2}}^{R,T_{\beta v5c}} \right|
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

- (2) $TBV_i^{T_{\beta v5c}} < TBV_i^{P_n}$ が成り立つ場合は、セル Ω_j ($j = i, i \pm 1, \dots, i \pm i_n$) における補間関数を 5セル β 可変 THINC 関数に変更する。ただし i_n の値は、 $n = 4$ のとき

$i_n = 2$, $n = 14$ のとき $i_n = 3$ とする.

$$\mathcal{Q}_j = \mathcal{Q}_j^{T_{\beta v5c}} \quad (j = i, i \pm 1, \dots, i \pm i_n), \quad \text{if } TBV_i^{T_{\beta v5c}} < TBV_i^{P_n} \quad (4.32)$$

図 4.6 に $P_n T_m$ -BVD 法と $P_n T_{\beta v5c}$ -BVD 法の選択アルゴリズムを示す. $P_n T_m$ -BVD 法は, 1 段目から $(m-1)$ 段目で n 次線形多項式関数と小さい β の THINC 関数を比較し, n 次線形多項式関数による数値振動を抑制する. 最後の m 段目で大きい β の THINC 関数と比較し, 数値散逸を抑制する. 一方で $P_n T_{\beta v5c}$ -BVD 法は, 1 回の補間関数選択で数値振動と数値散逸の両方を同時に抑制する. そのため, $P_n T_m$ -BVD 法と比べて計算手順の簡略化および計算時間の短縮が見込まれる. また, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD 法では線形多項式関数の次数を 4 次のみ考慮していたが, $P_n T_{\beta v5c}$ -BVD 法では 4 次と 14 次を考慮している. 14 次といった超高次数に対応できる理由は, THINC 補間の勾配パラメータ β の値を 5 セルで計算することで 3 セルで計算する手法よりも適切な β の値が得られ, 解の分布に忠実に適合する THINC 補間関数が構築されるからであると考えられる.

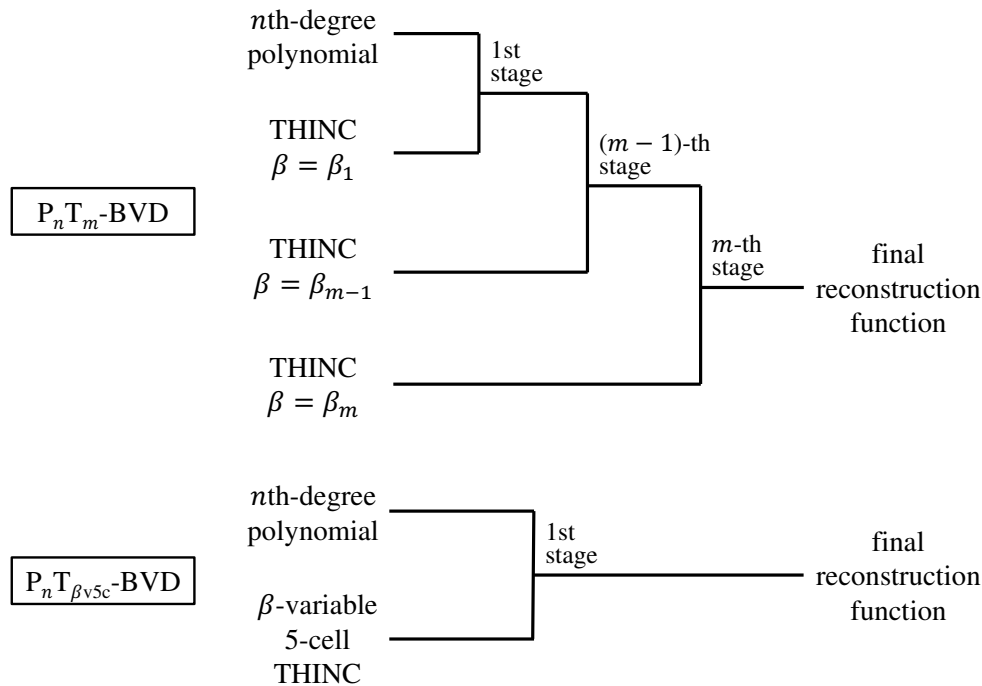


Fig. 4.6 The schematic diagrams of the BVD selection algorithms of $P_n T_m$ -BVD scheme (top) and $P_n T_{\beta v5c}$ -BVD scheme (bottom).

4.4 オイラー方程式の数値結果

提案手法である $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法と $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法の性能を検証するため、単相圧縮性流れの典型的なベンチマークテストを解く。現在主流の高解像度数値解法である 5 次精度 WENO-Z 法の数値結果と比較し、提案手法の低散逸性を示す。空間離散化について、 $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法は有限体積法、WENO-Z 法と $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法は有限差分法で計算を行う。空間再構築は特性変数に対して行う。リーマンソルバーは、有限体積法の場合は HLLC ソルバー [111,161]、有限差分法の場合は Harten ソルバー [14] を用いる。時間発展は、5 次精度解法の場合 5 段 4 次ルンゲクッタ法 [166]、15 次精度解法の場合 15 段 14 次ルンゲクッタ法 [167] を用いる。CFL 数は全ての問題で 0.5 とする。

4.4.1 Sod 問題

初めに、圧縮性流れで最もシンプルな数値テストとして 1 次元衝撃波管問題を計算する。Sod の衝撃波管問題 [172] では、膨張波、接触不連続、衝撃波といった圧縮性流れの基本的な流れ構造を確認できるため、これらを全て忠実に計算可能か検証することで数値解法の性能を評価する。計算領域は $x \in [0, 1]$ 、基本変数についての初期条件は、

$$(\rho_0, u_0, p_0) = \begin{cases} (1, 0, 1), & \text{if } 0 < x < 0.5 \\ (0.125, 0, 0.1), & \text{if } 0.5 < x < 1 \end{cases} \quad (4.33)$$

と表される。境界条件は流出境界とする。格子数は 200、比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。

Sod の衝撃波管問題における密度の数値結果を図 4.7 に示す。膨張波および衝撃波については、どの数値解法も高精度に計算できている。一方で接触不連続については、WENO-Z 法では 5 セル程度の幅に拡散しているが、 $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法では 3 から 4 セル、 $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法では 2 から 3 セル程度の幅で表現できている。このことから、提案手法である BVD 法は WENO-Z 法と比べて低散逸な手法であると言える。

4.4.2 Lax 問題

Lax 問題は、Sod の衝撃波管問題と同様に膨張波、接触不連続、衝撃波が発生するリーマン問題である。計算領域は $x \in [0, 1]$ 、基本変数についての初期条件は、

$$(\rho_0, u_0, p_0) = \begin{cases} (0.445, 0.698, 3.528), & \text{if } 0 < x < 0.5 \\ (0.5, 0, 0.571), & \text{if } 0.5 < x < 1 \end{cases} \quad (4.34)$$

と表される。境界条件は流出境界とする。格子数は 200、比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。

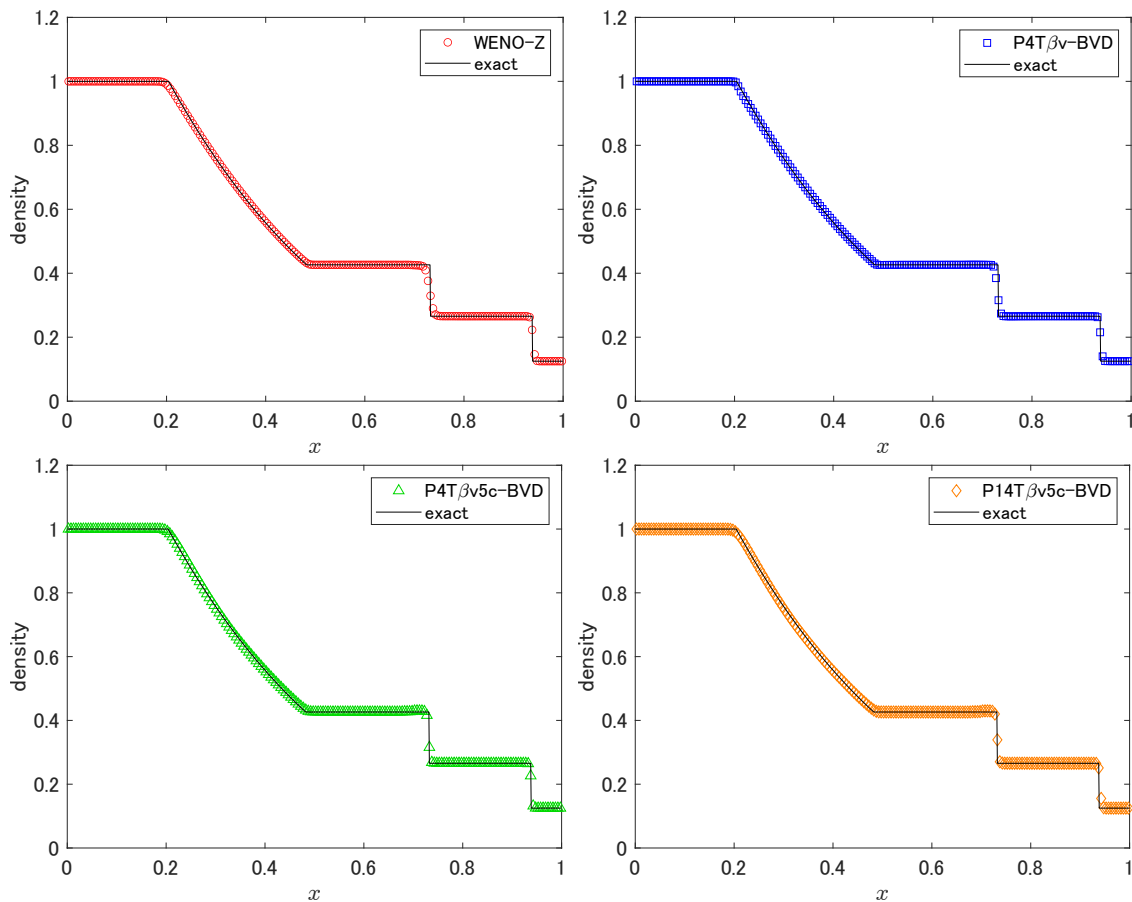


Fig. 4.7 Numerical results of density at $t = 0.25$ in 1D Sod's shock tube problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.

Lax 問題における密度の数値結果を図 4.8 に示す. BVD 法の結果はどれも接触不連続を少ないセル数で捉えているのに対し, WENO-Z 法の結果は BVD 法と比べて多くのセル数を必要としている. このような結果から, BVD 法は不連続解で適切に $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数を選択し, 既存解法と比べて数値散逸誤差を抑制出来ていることが分かる.

4.4.3 爆風問題

1 次元爆風問題 [173] は, 左右から進行する二つの衝撃波の衝突を模擬する問題である. 衝撃波, 接触不連続, 膨張波といった流れ構造が相互に複雑に干渉し合うため, 低波数から高波数まで幅広いスペクトルの解に対して高精度な計算が求められる. 計算領域は $x \in [0, 1]$, 基

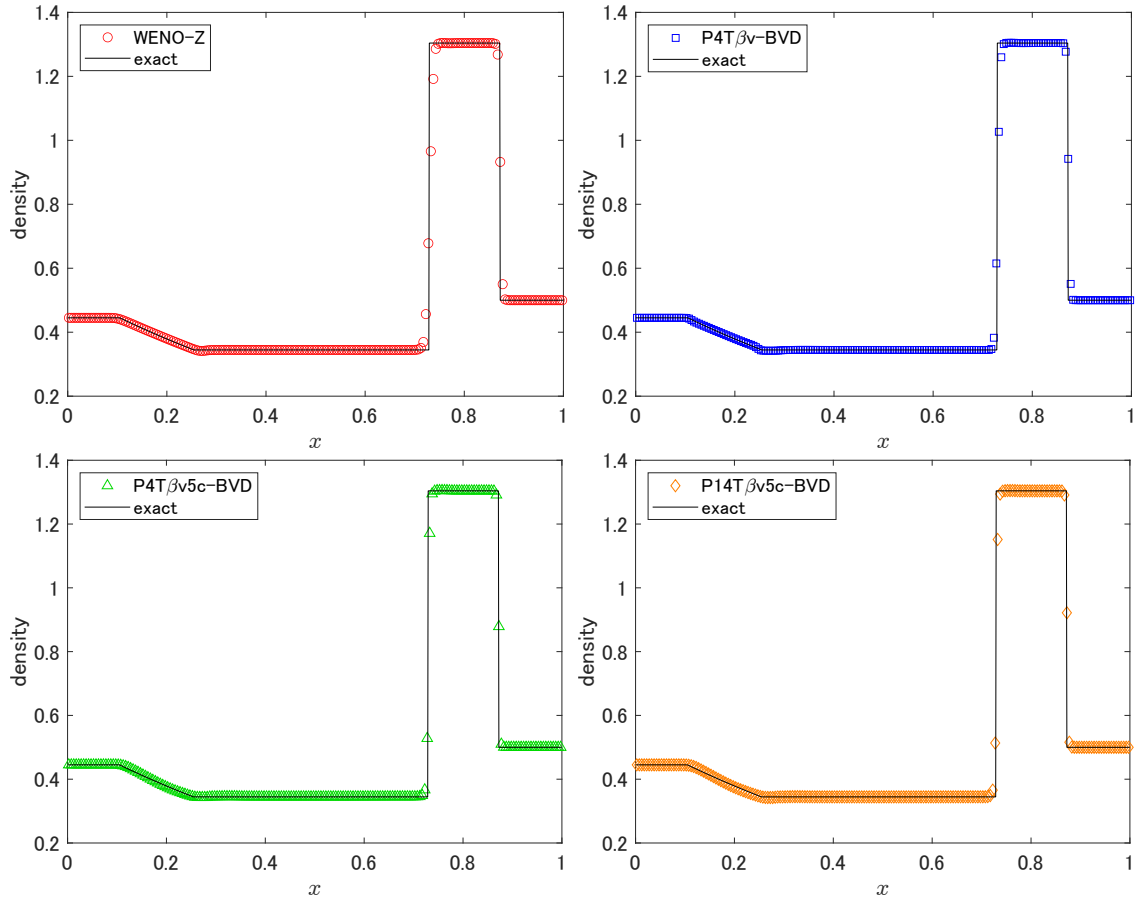


Fig. 4.8 Numerical results of density at $t = 0.15$ in 1D Lax's shock tube problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.

本変数についての初期条件は,

$$(\rho_0, u_0, p_0) = \begin{cases} (1, 0, 1000), & \text{if } 0 < x < 0.1 \\ (1, 0, 0.01), & \text{if } 0.1 < x < 0.9 \\ (1, 0, 100), & \text{if } 0.9 < x < 1 \end{cases} \quad (4.35)$$

と表される。境界条件は反射境界とする。格子数は 400, 比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。また, 参照解は格子数 8000 の MUSCL 法 (vanLeer リミタ) で計算した。

1次元爆風問題における密度の数値解を図 4.9 に示す。 $x = 0.6$ 付近の接触不連続に注目すると, $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法では約 3 セル, $P_nT_{\beta v 5c}$ -BVD 法では約 2 セルの幅で不連続を表現できている一方, WENO-Z 法では 10 セル以上の幅に拡散している。また, $x = 0.8$ 付近の不連続においても, BVD 法は WENO-Z 法と比べて少ない格子数で捉えている。さらに, $x = 0.75$ 付近の不連続について, $P_nT_{\beta v 5c}$ -BVD 法は $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法より低散逸に捉えている。衝撃波や接触不連続等が複雑に干渉する問題においても, BVD 法は既存解法の WENO-Z 法と比

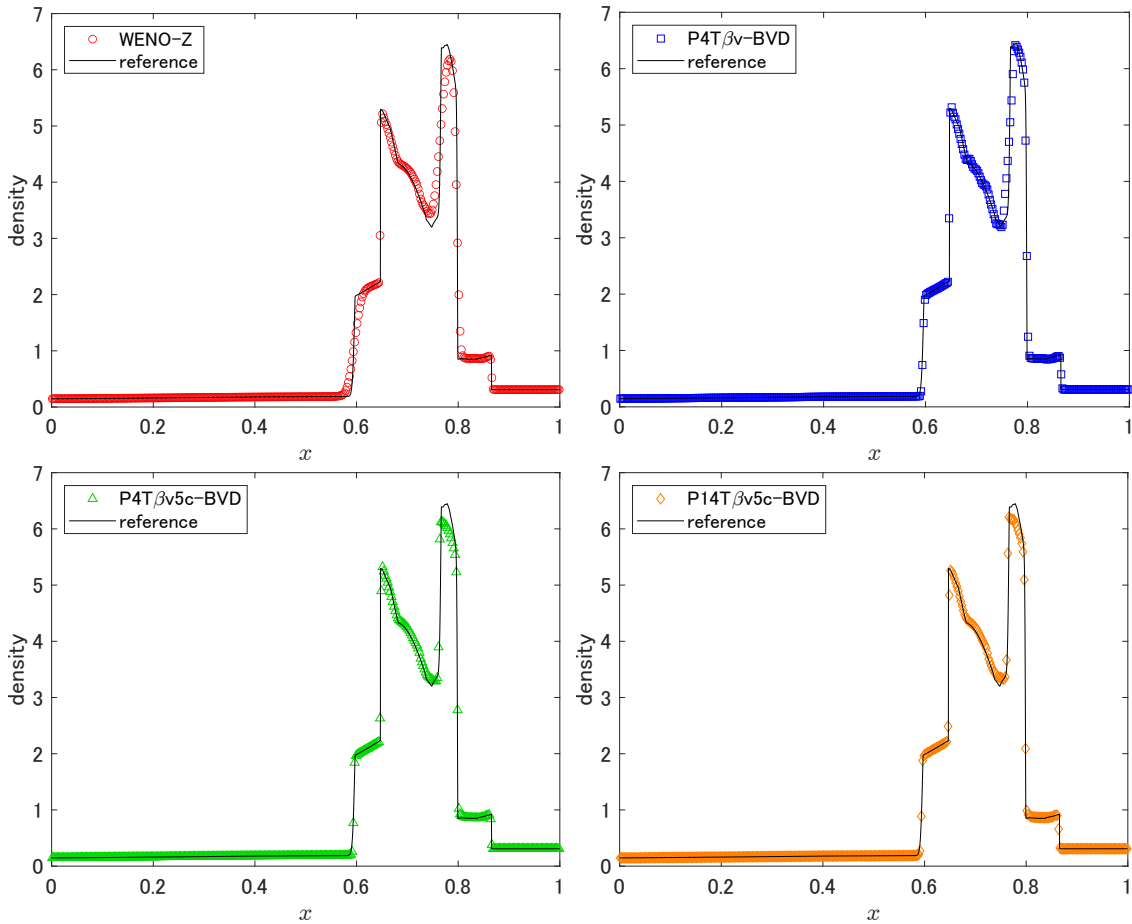


Fig. 4.9 Numerical results of density at $t = 0.038$ in 1D two-interacting blast waves problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.

べて不連続解を低散逸で捉えられることを示した。

4.4.4 Le Blanc 問題

Le Blanc 問題 [174] は、極めて大きい密度比と圧力比を持つ衝撃波管問題であり、高精度な計算の難しいベンチマークテストの一つである。計算領域は $x \in [0, 9]$ 、初期条件は、

$$(\rho_0, u_0, p_0) = \begin{cases} \left(1, 0, \frac{2}{3} \times 0.1\right), & \text{if } 0 < x < 3 \\ \left(0.001, 0, \frac{2}{3} \times 10^{-10}\right), & \text{if } 3 < x < 9 \end{cases} \quad (4.36)$$

と表される。境界条件は流境界とする。格子数は 600、比熱比は $\gamma = 5/3$ とする。また、この問題では $P_n T_{\beta v 5c}$ -BVD 法を有限体積法の枠組みで計算した。

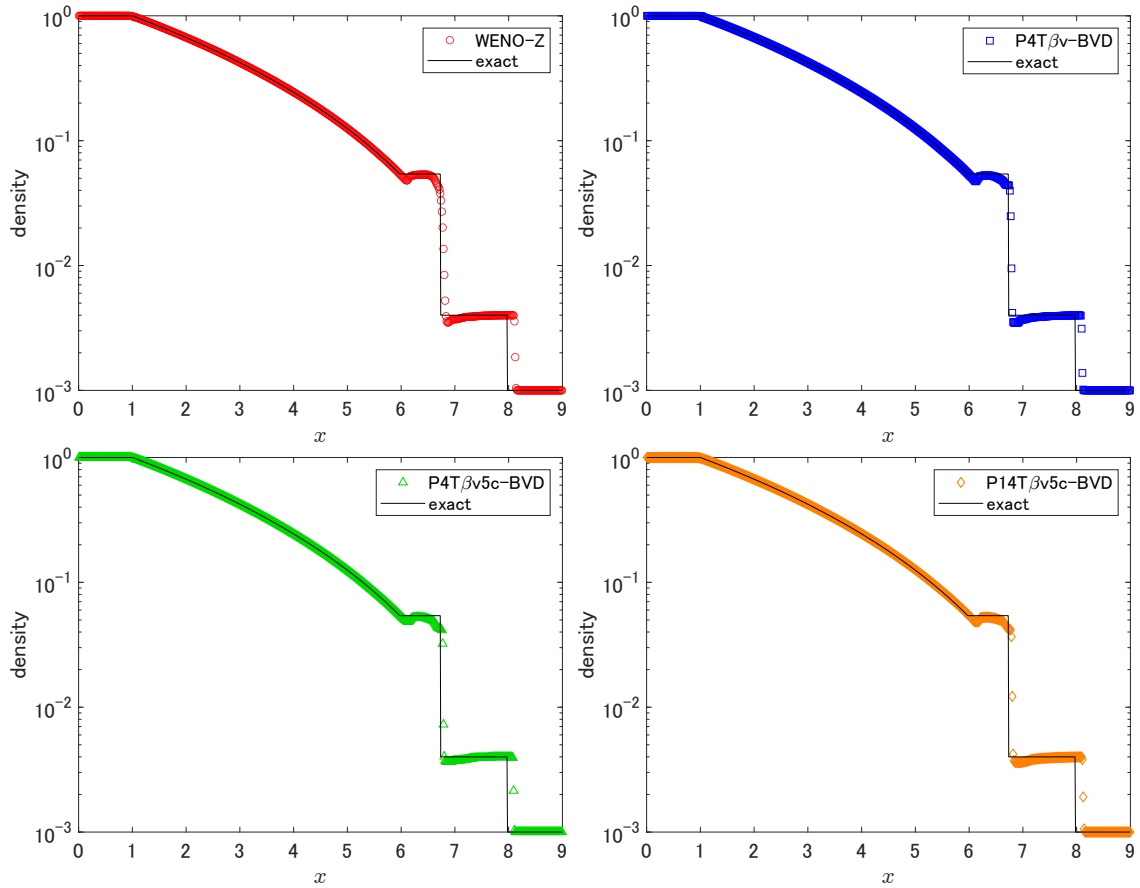


Fig. 4.10 Numerical results of density at $t = 6$ in 1D Le Blanc problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes respectively.

Le Blanc 問題における密度の数値解を図 4.10 に示す. $x = 6.7$ 辺りの接触不連続について, $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法と $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法は WENO-Z 法と比べて少ないセル数で不連続解を解像している. 高密度比, 高圧力比の問題においても, 提案手法である BVD 法は既存解法よりも不連続解を低散逸に捉えられることを示した.

4.4.5 2次元リーマン問題

2次元リーマン問題 [175] は, 正方形の計算領域を縦と横にそれぞれ二分割し, 4つの領域にそれぞれ一定の初期値を与える問題である. 初期値のパターンによって発生する流れ構造が様々に変化するが, ここでは文献 [175] の configuration 6 の問題を解く. 計算領域は

$x \in [-0.5, 0.5]$, $y \in [-0.5, 0.5]$, 基本変数についての初期条件は,

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (1, 0.75, -0.5, 1), & \text{if } x > 0, y > 0 \\ (2, 0.75, 0.5, 1), & \text{if } x < 0, y > 0 \\ (1, -0.75, 0.5, 1), & \text{if } x < 0, y < 0 \\ (3, -0.75, -0.5, 1), & \text{if } x > 0, y < 0 \end{cases} \quad (4.37)$$

と表される. 境界条件は流境界とする. 格子数は 600×600 , 比熱比は $\gamma = 1.4$ とする.

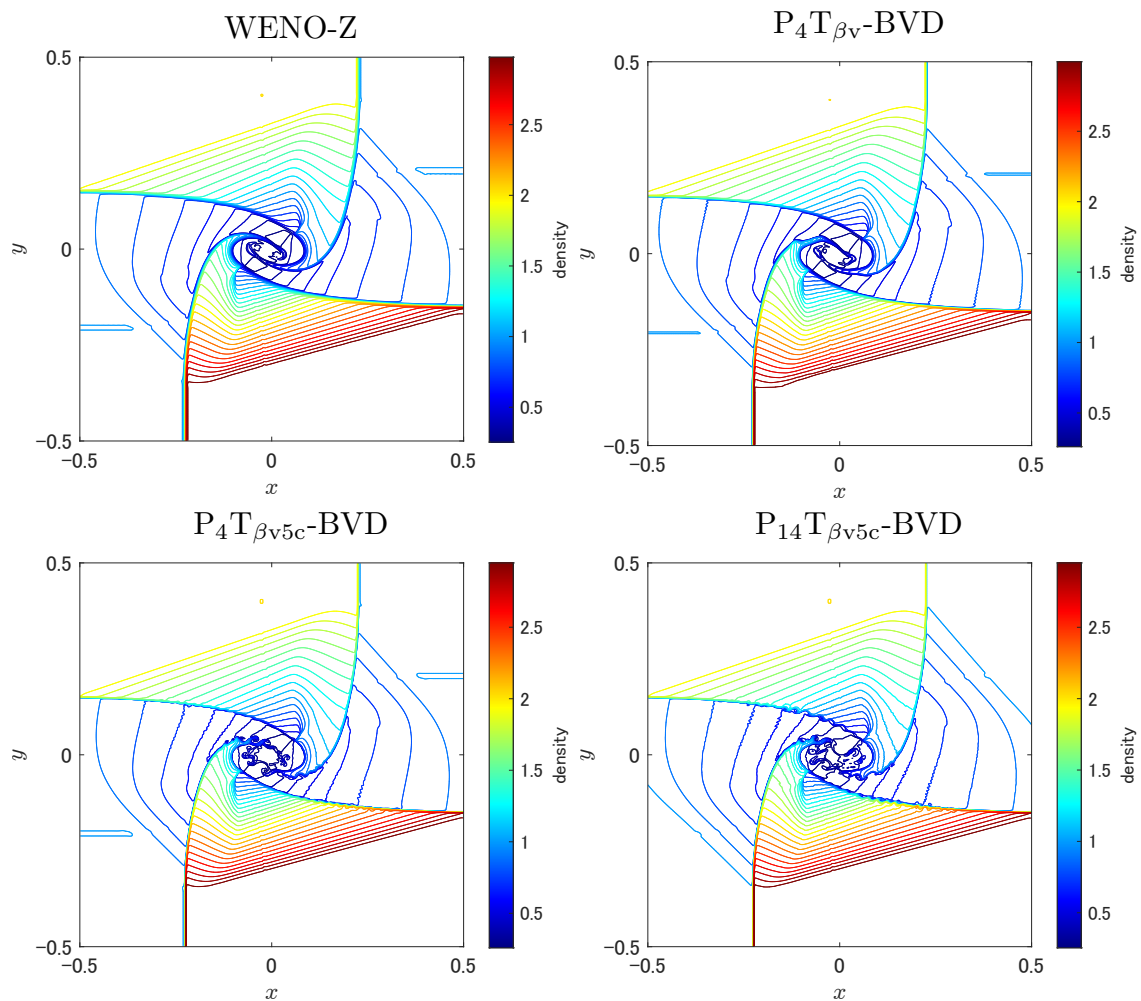


Fig. 4.11 Numerical results of density at $t = 0.3$ in the 2D Riemann problem (configuration 6). Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes respectively.

2次元リーマン問題 (conf. 6) における密度の数値解を図 4.11 に示す. 4つの領域の流体が計算領域中心部の大きな渦に引き込まれている様子が再現されている. $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD法の結果では, 4次と14次のどちらも密度不連続線上で小さな渦が複数発達している. $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD法の結果でも, 計算領域中心部で密度不連続線に歪みが見られる. これらは不連続を

またぐ速度差に起因するケルビンヘルムホルツ (KH) 不安定性により発生した流れ構造である。一方で WENO-Z 法の結果では、密度不連続線上の小さな渦や歪みの発達は見られない。WENO-Z 法では過剰な数値散逸誤差により KH 不安定性がぼやけて観測できないが、提案手法である BVD 法では数値散逸誤差を抑制することで小さな渦構造を捉え、高解像度な数値計算が可能となる。

4.4.6 二重マッハ反射問題

二重マッハ反射問題 [173] は、衝撃波を壁面に向かって斜めに入射させ、入射波と反射波の干渉によって複雑な流れ構造を発生させる数値テストである。オイラー方程式のような非粘性の方程式系において、風上系の数値解法に含まれる数値粘性が、接触不連続線で KH 不安定性に起因する渦を生成する。数値解法に過剰な数値散逸誤差が含まれている場合、この渦構造は発達することなく消えてしまう。渦構造の発達度合から数値解法に含まれる数値散逸誤差を検証および比較できるため、高解像度数値解法の開発において広く用いられているベンチマークテストである。計算領域は $x \in [0, 3.2]$, $y \in [0, 1]$, 初期条件は、

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} \left(8, 8.25 \cos\left(\frac{\pi}{6}\right), -8.25 \sin\left(\frac{\pi}{6}\right), 116.5\right), & \text{if } y > \sqrt{3}\left(x - \frac{1}{6}\right) \\ (1.4, 0, 0, 1), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.38)$$

と表される。境界条件は、右境界は流出境界、下境界の $x > 1/6$ の範囲は反射壁、それ以外は衝撃波の前方・後方に対応する初期値 (4.38) を与える。格子数は 800×250 , 比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。また、この問題では高い圧力比の衝撃波が壁面で反射する際に、カーバンクル現象と呼ばれる数値不安定性が頻繁に生じることが知られている [176]。ここでは、カーバンクル現象を回避するため、全ての数値解法を有限体積法の枠組みで解き、数値流束を 3.5.2 節で示した HR-SLAU2 ソルバー [165] で計算する。

二重マッハ反射問題における密度の数値解の拡大図を図 4.12 に示す。ただし等値線の本数は 30 本、範囲は $[1.4, 22.5]$ とした。各数値解法の結果を比較すると、 $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法の結果では KH 不安定性による渦構造が発達している一方で、WENO-Z 法の結果では渦構造の発達がほとんど見られない。このことから BVD 法は既存解法と比べて数値散逸誤差を抑制できていると言える。また、高い圧力比の衝撃波が壁面で反射し流れ構造が複雑に変化している中で、BVD 法は大きな数値振動誤差を引き起こさずに安定的に計算できている。このような数値振動と数値散逸の両方を一回の比較で抑制できていることから、 β 可変 THINC 補間が解の分布に忠実な補間を実現していることが分かる。

BVD 法が低散逸解法であることを明確にするため、格子解像度を上げた場合に WENO-Z 法の数値結果がどのように変化するか検証する。図 4.13 に 800×250 , 960×300 , 1600×500 ,

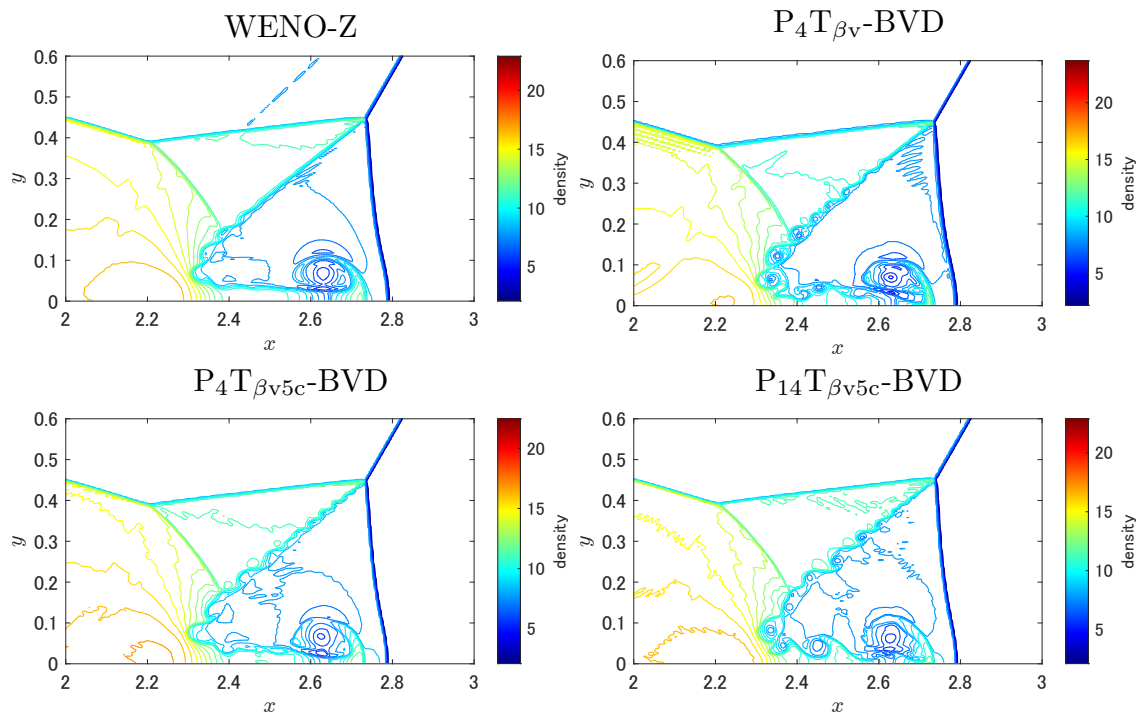


Fig. 4.12 Numerical results of density at $t = 0.2$ in the double Mach reflection problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes respectively.

2400 × 750 の 4 種類の格子数で WENO-Z 法を用いて計算した結果を示す。格子数を増加させることで、KH 不安定性による渦構造が発達していることが分かる。図 4.12 の $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法などの結果と比較すると、WENO-Z 法は格子数を 1600 × 500 や 2400 × 750 に増加させることで、格子数 800 × 250 の BVD 法と同等の結果が得られた。したがって、 $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法は WENO-Z 法と比べて低散逸であることを示した。

4.5 ナビエストークス方程式の数値結果

提案手法である $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法の粘性流における計算性能を検証するため、粘性項を含む圧縮性ナビエストークス方程式を計算する。粘性項の空間再構築法に α -ダンピング法 [177–179] を用いることで、線形多項式補間で高波数解から生じる数値振動を回避する。

4.5.1 粘性 2 次元衝撃波管問題

粘性 2 次元衝撃波管問題 [180] は、衝撃波、せん断層、境界層の相互干渉を再現する [54] 数値テストであり、圧縮性流れの数値解法の粘性流における計算性能の評価のためによく用いら

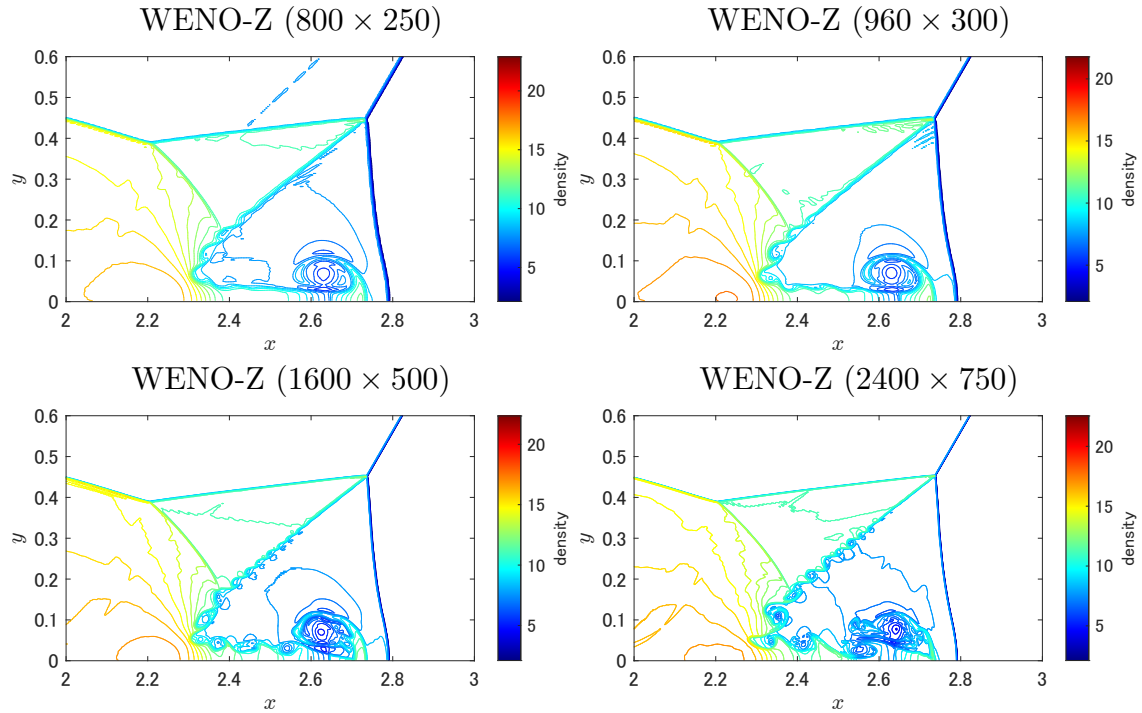


Fig. 4.13 Numerical results of density at $t = 0.2$ in the double Mach reflection problem computed by the WENO-Z scheme. The top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results of mesh numbers 800×250 , 960×300 , 1600×500 , and 2400×750 respectively.

れている。計算領域は $x \in [0, 1]$, $y \in [0, 0.5]$, 基本変数についての初期条件は,

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} \left(120, 0, 0, \frac{120}{\gamma}\right), & \text{if } 0 < x < 0.5 \\ \left(1.2, 0, 0, \frac{1.2}{\gamma}\right), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.39)$$

と表される。境界条件は、左境界を流境界、上境界を対称境界、他の境界を滑りなし壁面とする。レイノルズ数とプラントル数はそれぞれ $Re = 1000$, $Pr = 0.72$ とする。格子数は 500×250 , 比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。CFL 数はこの問題では 0.25 とする。

粘性 2 次元衝撃波管問題における密度の数値解を図 4.14 に示す。ただし等値線の本数は 30 本、範囲は $[23.0, 121.0]$ とした。これらの数値結果は、文献 [54, 180, 181] の結果と概ね一致している。また、各数値解法の結果の間に大きな差異は見られない。 $Re = 1000$ は圧縮性流れの中で比較的強い粘性であるため、数値解法に含まれる数値散逸誤差の効果はこの問題では弱く、WENO 法と BVD 法に顕著な差は表れなかったと考えられる。BVD 法は、粘性の効果強い流れに対しても計算を破綻させることなく実行できるため、実現象の数値解析において壁面近傍と遠方の両方で適用可能であると言える。

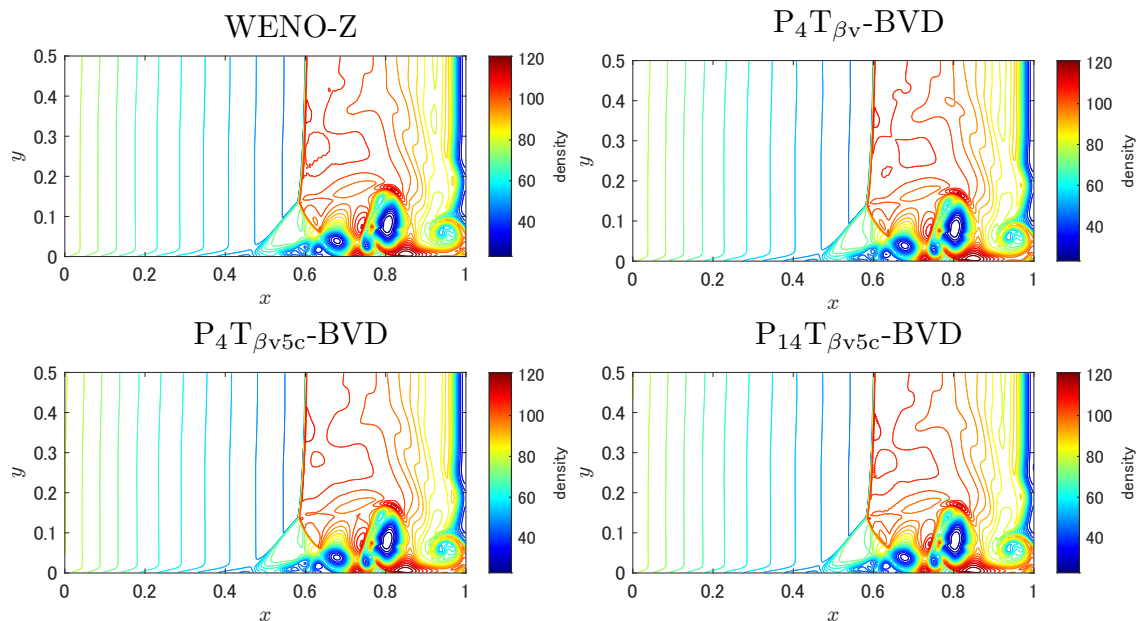


Fig. 4.14 Numerical results of density at $t = 1$ in the 2D viscous shock-tube problem. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta_v}$ -BVD, $P_4T_{\beta_{v5c}}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta_{v5c}}$ -BVD schemes respectively.

4.6 線形スカラー保存則の数値結果

4.6.1 Jiang and Shu の移流テスト

本研究の提案手法の $P_4T_{\beta_v}$ -BVD 法と $P_nT_{\beta_{v5c}}$ -BVD 法の低散逸性をより明確に示すために、Jiang と Shu によって提案された数値テスト [18] を用いた長時間計算を行う。このテストはガウス波、矩形波、三角波、楕円波の 4 つの形状を移流させることで、様々な形状の解における数値誤差を検証することができる。計算領域は $x \in [-1, 1]$ 、初期条件は、

$$q_0 = \begin{cases} \frac{1}{6}(G^{\text{JS}}(x, z - \delta) + 4G^{\text{JS}}(x, z) + G^{\text{JS}}(x, z + \delta)), & \text{if } -0.8 \leq x \leq -0.6 \\ 1, & \text{if } -0.4 \leq x \leq -0.2 \\ 1 - 10|x - 0.1|, & \text{if } 0 \leq x \leq 0.2 \\ \frac{1}{6}(F^{\text{JS}}(x, a - \delta) + 4F^{\text{JS}}(x, a) + F^{\text{JS}}(x, a + \delta)), & \text{if } 0.4 \leq x \leq 0.6 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.40)$$

と表される。ただし、

$$\begin{aligned} G^{\text{JS}}(x, z) &= \exp(-\beta(x-z)^2), \\ F^{\text{JS}}(x, a) &= \sqrt{\max(1 - (\alpha(x-a))^2, 0)}, \\ \beta &= (\ln 2)/(36\delta^2), \quad z = -0.7, \quad \alpha = 10, \quad a = 0.5, \quad \delta = 0.005 \end{aligned} \quad (4.41)$$

である。境界条件は周期境界とする。格子数は200とする。

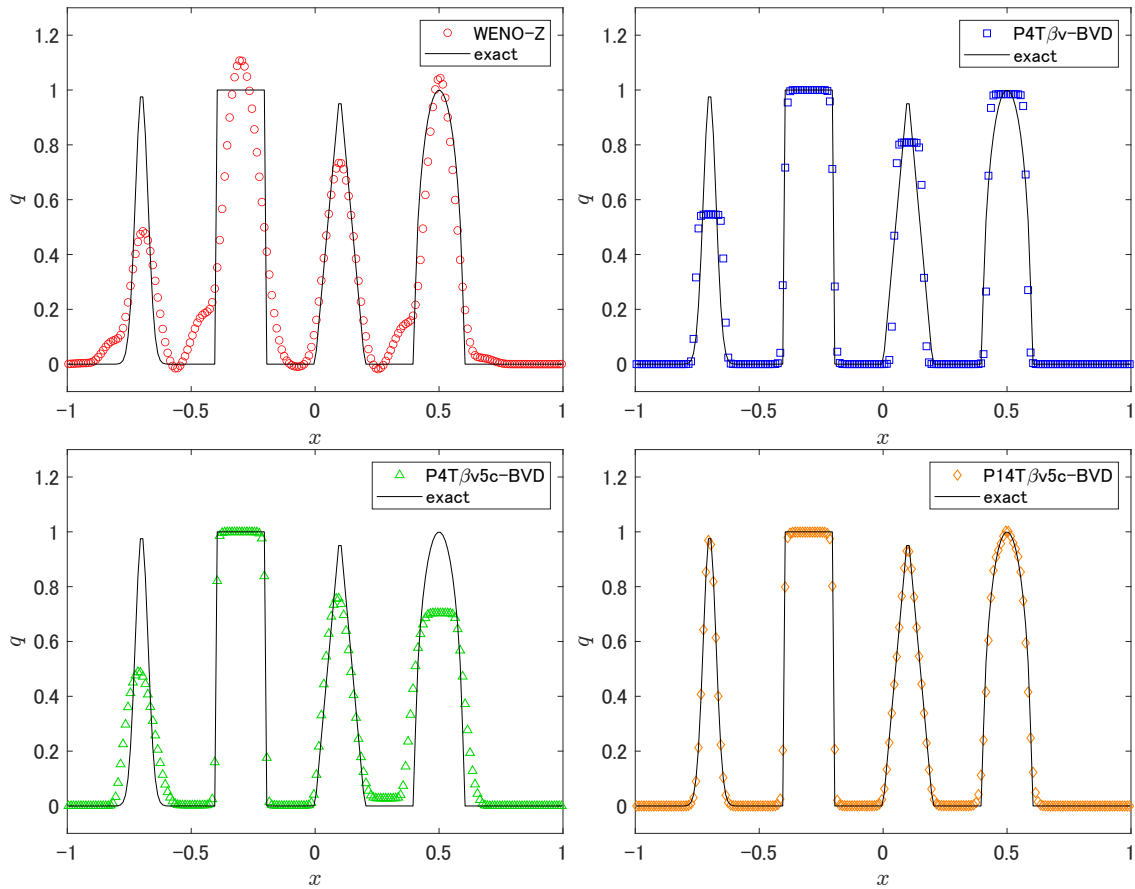


Fig. 4.15 Numerical results at $t = 400$ (200 laps) in the 1D Jiang and Shu's test. Top left, top right, bottom left, and bottom right panels show results computed by the WENO-Z, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v 5c}$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v 5c}$ -BVD schemes respectively.

初期解が計算領域を一定の移流速度 1 で 200 周および 1000 周した後の数値解をそれぞれ図 4.15 と 4.16 に示す。200 周の計算では、WENO-Z 法は特に矩形波の分布で大きく散逸し、全体的にオーバーシュートやアンダーシュートが見られる。 $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法では、矩形波は 3 から 4 セル程度の幅で捉えているが、他の滑らかな分布では負の散逸により不連続的な数値解となっており、スクエアリングエフェクトと呼ばれる誤差が生じている。この理由は滑らかな解で誤って $\text{THINC}(\beta_1)$ 関数を選択しているからであると考えられる。 $P_4T_{\beta v 5c}$ -BVD 法は、矩形波を 2 から 3 セルの幅で捕獲し、他の滑らかな分布をスクエアリングエフェクトな

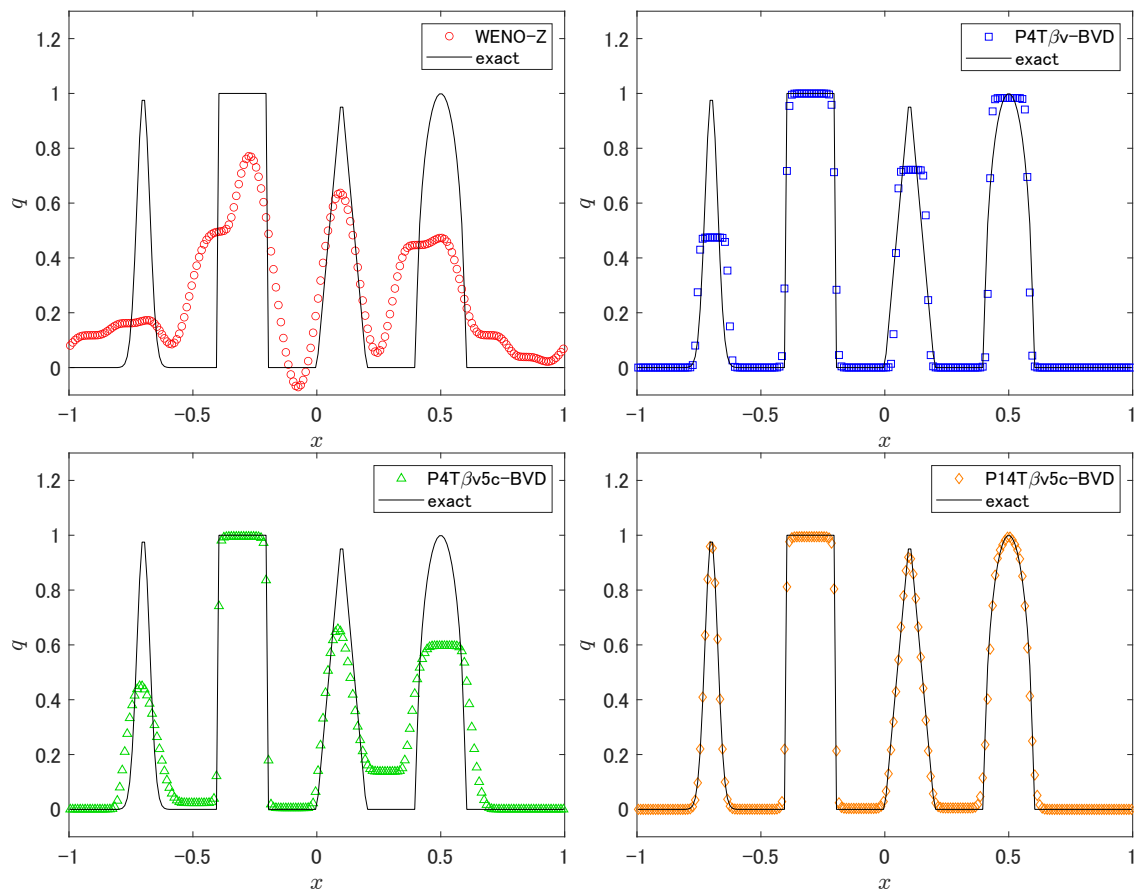


Fig. 4.16 Same as Fig. 4.15, but at $t = 2000$ (1000 laps).

して計算できている。 $P_{14}T_{\beta v 5c}$ -BVD 法は、全ての分布を高精度に捉えている。この結果から、5セル β 可変 THINC 補間は3セルの β 可変 THINC 補間と比べてより忠実に解の形状に適合する β の値を算出できていて、線形多項式関数と組み合わせた際により正しい補間関数選択が実現できていると考えられる。1000 周の計算では、200 周の計算と概ね同様の結果が得られている。ただし、WENO-Z 法の数値解は1000 周の方が散逸しており、同じ5次精度の $P_4T_{\beta v 5c}$ -BVD 法と比較して数値誤差が増加している。WENO-Z 法では非線形リミタにより滑らかな解から不連続解まで広範囲のスペクトルの解に対して過剰な数値散逸誤差が導入されるため、長時間計算ではリミタを持たない線形多項式関数が優れている。1000 周の結果は、非線形リミタを用いない BVD 法が既存非線形解法と比べて明確に誤差が小さく優れた数値解法であることを示している。

4.6.2 計算コストの比較

提案手法と既存手法における計算コストを比較する。計算条件は前節と同じ Jiang and Shu の移流テストとし、200 周の計算にかかった時間を計測する。使用した CPU は Intel(R)

Xeon(R) E5-2660 v3, 並列計算は OpenMP を用いた 32 スレッド並列とした. Jiang and Shu テストの計算にかかった時間を表 4.1 に示す.

Scheme	Computational time [sec]
WENO-Z	18.020
P_4T_2 -BVD	69.468
$P_4T_{\beta v}$ -BVD	50.015
$P_4T_{\beta v5c}$ -BVD	47.783
$P_{14}T_3$ -BVD	278.84
$P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD	137.44

Table. 4.1 Computational times for the Jiang and Shu's test of WENO-Z, P_4T_2 -BVD, $P_4T_{\beta v}$ -BVD, $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD, $P_{14}T_3$ -BVD, and $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD schemes.

P_4T_2 -BVD 法の計算時間は, WENO-Z 法と比べると約 3.86 倍となっている. これは P_4T_2 -BVD 法で用いられている THINC 関数が $\exp()$ や $\tanh()$ といった比較的計算コストの高い関数を使用しているためである. $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法は, THINC 関数の計算回数を 2 回から 1 回に減らした効果により, P_4T_2 -BVD 法と比べて約 28% の計算時間削減を達成した. $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD 法は, $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法の β の計算で用いていた $\log()$ の計算を排除したことにより, P_4T_2 -BVD 法と比べて約 31% の計算時間削減となった. $P_{14}T_3$ -BVD 法は, P_4T_2 -BVD と比べて約 4.01 倍の計算コストとなった. これは時間積分の段数が 5 段から 15 段に増えたこと, 比較的計算コストの高い THINC 補間関数の数が 2 つから 3 つに増えたことが主な要因と考えられる. $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD 法は, $P_{14}T_3$ -BVD 法と比べて約 51% の計算コストを削減した. これは $P_{14}T_3$ -BVD 法が 3 つの THINC 補間関数を計算するのに対し, $P_{14}T_{\beta v5c}$ -BVD 法が 1 つの THINC 補間関数の計算で済むことに起因する.

また, 昨今の CPU 性能の向上を踏まえ, 各数値解法のメモリアクセス回数についても比較を行った. 1 次元空間で格子数は 200, BVD 選択アルゴリズムによる補間関数の修正割合は 10% (20 セル) で発生すると仮定し, 線形移流方程式の解析でルンゲクッタ法のサブステップ 1 回分の計算中に大きな配列に対して読み書きを行う回数をカウントした. 表 4.1 に示した Jiang and Shu のテストを計算したソースコードにおける, 各数値解法における配列へのアクセス回数を表 4.2 に示す. ただしリーマンソルバーは風上法, 時間積分は空間精度に応じて 5 段 4 次ルンゲクッタ法または 15 段 14 次ルンゲクッタ法としている.

再構築, リーマンソルバー, 時間発展を含む全体の計算におけるメモリアクセスの回数は, 表 4.1 に示した実時間の計算コストと概ね同じ傾向が見られる. $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法と $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD 法は, P_4T_2 -BVD 法と比べて約 27% のメモリアクセス回数を削減している. これは P_4T_2 -BVD 法が補間関数を 3 種類計算するのに対し, $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法と $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD 法は

Scheme	Reconstruction	Riemann solver	Time integration	Total
WENO-Z	1200			4003
P ₄ T ₂ -BVD	6042	603	2200	8845
P ₄ T _{β_v} -BVD	3684			6485
P ₄ T _{β_{v5c}} -BVD	3684			6485
P ₁₄ T ₃ -BVD	10684	603	4200	15487
P ₁₄ T _{β_{v5c}} -BVD	5724			10527

Table. 4.2 Number of accesses to large array per computation in a sub-step of the Runge-Kutta method for advection test of WENO-Z, P₄T₂-BVD, P₄T_{β_v}-BVD, P₄T_{β_{v5c}}-BVD, P₁₄T₃-BVD, and P₁₄T_{β_{v5c}}-BVD schemes. Assuming one-dimensional space, 200 grid points, and 10% modification ratio of the interpolation function in the BVD selection algorithm.

2種類で済むためである。同様に、P₁₄T_{β_{v5c}}-BVD法は、P₁₄T₃-BVD法と比べて約32%のメモリアクセス回数削減を達成している。表4.1の実時間の計算コスト削減率は約51%であったのに対し、メモリアクセス回数削減率は約32%に減少している理由として、THINC法の計算コストの高さが実際の計算時間を増加させていることなどが挙げられる。

4.6.3 収束精度の検証

提案手法が滑らかな解で高次精度を持つことを検証する。次式に示す L_1 誤差と L_{inf} 誤差を用いて収束精度を測る。

$$L_1(N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\bar{q}_i - \bar{q}_{\text{exact},i}|, \quad (4.42)$$

$$L_{\text{inf}}(N) = \max_i |\bar{q}_i - \bar{q}_{\text{exact},i}| \quad (4.43)$$

格子数を N_1 から N_2 に変化させる時の収束率 CR は、

$$C = -\frac{\ln(L(N_2)/L(N_1))}{\ln(N_2/N_1)} \quad (4.44)$$

と計算される。

1次元線形スカラー保存則について、初期条件は $q_0 = \sin(\pi x)$ 、境界条件は周期境界、計算領域は $x \in [-1, 1]$ 、時間は初期分布が1周する $t = 2$ まで計算を行う。格子数 N を 100, 200, 400, 800 と変化させたときの、各格子数における L_1 誤差および L_{inf} 誤差とそれらの収束率を表4.3に示す。P₄T₂-BVD法とP₄T_{β_v}-BVD法は、ともにP₄法と完全に同じ誤差の値となった。THINC法は基本的に1次から2次精度なので、P₄T₂-BVD法とP₄T_{β_v}-BVD法は

滑らかな解で THINC 関数をほぼ一度も選ぶことなく常に 4 次線形多項式関数を選択することに成功していると言える. $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD 法は, 格子数 100 のケースを除いて P_4 法と同じ誤差値である. WENO 法は誤差値が常に P_4 法より大きく, 非線形リミタによって滑らかな解でも誤差が増加していることが分かる.

Scheme	N	L_1 error	CR_{L_1}	L_{inf} error	$CR_{L_{\text{inf}}}$
P_4	100	9.9896×10^{-3}	-	1.5769×10^{-2}	-
	200	3.2221×10^{-4}	4.95	5.0408×10^{-4}	4.97
	400	1.0222×10^{-5}	4.98	1.6054×10^{-5}	4.97
	800	3.3477×10^{-7}	4.93	5.2585×10^{-7}	4.93
WENO-Z	100	1.0837×10^{-2}	-	1.7141×10^{-2}	-
	200	3.2494×10^{-4}	5.06	5.2506×10^{-4}	5.03
	400	1.0231×10^{-5}	4.99	1.6209×10^{-5}	5.02
	800	3.3483×10^{-7}	4.93	5.2587×10^{-7}	4.95
P_4T_2 -BVD	100	9.9896×10^{-3}	-	1.5769×10^{-2}	-
	200	3.2221×10^{-4}	4.95	5.0408×10^{-4}	4.97
	400	1.0222×10^{-5}	4.98	1.6054×10^{-5}	4.97
	800	3.3477×10^{-7}	4.93	5.2585×10^{-7}	4.93
$P_4T_{\beta v}$ -BVD	100	9.9896×10^{-3}	-	1.5769×10^{-2}	-
	200	3.2221×10^{-4}	4.95	5.0408×10^{-4}	4.97
	400	1.0222×10^{-5}	4.98	1.6054×10^{-5}	4.97
	800	3.3477×10^{-7}	4.93	5.2585×10^{-7}	4.93
$P_4T_{\beta v5c}$ -BVD	100	1.8282×10^{-2}	-	2.8232×10^{-2}	-
	200	3.2221×10^{-4}	5.83	5.0408×10^{-4}	5.81
	400	1.0222×10^{-5}	4.98	1.6054×10^{-5}	4.97
	800	3.3477×10^{-7}	4.93	5.2585×10^{-7}	4.93

Table. 4.3 Numerical errors and convergence rates of P_4 , WENO-Z, P_4T_2 -BVD scheme, $P_4T_{\beta v}$ -BVD and $P_4T_{\beta v5c}$ -BVD schemes.

4.7 4章のまとめ

THINC 法の勾配パラメータ β の値を解の滑らかさに応じて算出する β 可変 THINC 法を 2 つ定式化した. 1 つ目は, THINC 法と同じ 3 セルのステンシルを用いて, 勾配比の対数の値を不連続性の指標として β の値を計算する. 2 つ目は, 解の滑らかさをより忠実に評価するため

にステンシルを5セルに広げ, 2つの勾配比の値から β の値を計算する. この β 可変 THINC 補間および5セル β 可変 THINC 補間を線形多項式補間と組み合わせ, BVD 原理に基づき1つの補間関数を選択するハイブリッド型 BVD 法を提案した. 解の形状に適合する再構築を行うことで, 複雑な流れ構造に対して高忠実度な計算が可能となり, 代表的な既存解法の WENO-Z 法と比べて数値散逸誤差を抑制した. 加えて, $P_n T_m$ -BVD 法と比較して THINC 関数の計算回数を減らしたことにより, $P_4 T_{\beta v}$ -BVD 法, $P_4 T_{\beta v 5c}$ -BVD 法, $P_{14} T_{\beta v 5c}$ -BVD 法はそれぞれ, Jiang and Shu の移流テストの計算時間を約 28%, 31%, 51% 削減した. 計算精度および計算コストを改善した $P_4 T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_n T_{\beta v 5c}$ -BVD 法は, 既存解法と比べて実用性の高い数値解法であると言える.

第 5 章

対称性保存数値解法

前章では单相圧縮性流れにおける新規高解像度数値解法を提案した。数値散逸誤差を抑制することで高精度な数値解が得られる一方で、空間対称性の崩壊という新しい問題が生じる。軸対称性を持つ流れを高解像度数値解法で計算すると、時間発展に伴い数値解の空間非対称性が増大する。このような対称性誤差が発生する主な原因は、浮動小数点演算による丸め誤差が非対称に生じるからである [68, 78]。倍精度浮動小数点演算の丸め誤差のオーダーは $10^{-15} \sim 10^{-16}$ 程度の小さい値であるが、高解像度数値解法では微小な擾乱が拡散せず数値解に蓄積するため、特に高解像度数値解法と細かい格子の組み合わせで長時間計算を行う際に、丸め誤差が解に与える影響は大きくなり、非対称な解が生成される。

この章では、初めに数値解の空間対称性について定義し、次に有限体積法において解の対称性を破るメカニズムとその対策となる計算手順を示す。文献 [78] で明らかにされているメカニズムおよび対策に加え、新たに対称性誤差の原因となる計算式を指摘する。また、文献 [78] では WENO 法を空間再構築手法に用いているが、本研究では、より対称性誤差の回避が困難である高解像度数値解法である P_4T_2 -BVD 法における対称性保存解法を構築する。提案手法によって対称性が厳密に保存されることを確認するため、対称性を持つ代表的なベンチマークテストを計算する。

5.1 浮動小数点演算で成り立たない数学的特性

丸め誤差が非対称に導入される主な原因は、3 つ以上の浮動小数点数による足し算や掛け算の結果がその計算順序によって変化することである [78]。すなわち、次に示す数学における結合則は、浮動小数点演算では一般的に成り立たない。

$$(a + b) + c \neq a + (b + c), \quad (5.1)$$

$$(a \times b) \times c \neq a \times (b \times c) \quad (5.2)$$

3つの数の足し算 (5.1) を浮動小数点演算で行う際、足す順序に依存せず1つの値を得る手法として、次の手順が考えられる [78].

$$SUM_{\text{consistent}}(a, b, c) = \frac{1}{2}(\max(s_1, s_2, s_3) + \min(s_1, s_2, s_3)), \quad (5.3)$$

$$s_1 = (a + b) + c,$$

$$s_2 = (b + c) + a,$$

$$s_3 = (c + a) + b$$

また、次に示す数学的な法則も浮動小数点演算では一般的に成り立たない。

$$a^{(b+c)} \neq (a^b) \times (a^c), \quad (5.4)$$

$$(a^b)^c \neq a^{(b \times c)}, \quad (5.5)$$

$$\log(a^b) \neq b \times (\log(a)), \quad (5.6)$$

$$\cos(\pi - a) \neq \cos(\pi + a) \quad (5.7)$$

よって対称性誤差を完全に排除するためには、数値解法内の全計算式を見直し、上述のような浮動小数点演算で失われる数学的特性に依存しない計算手順の定式化が必要となる。

5.2 数値解の空間対称性

数値解の空間対称性について、3次元空間の等間隔デカルト格子における計算を仮定して説明する。式 (2.25), (2.26) で示した3次元オイラー方程式を以下に再度示す。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \mathbf{0}, \quad (5.8)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u u + p \\ \rho v u \\ \rho w u \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v \\ \rho v v + p \\ \rho w v \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho u w \\ \rho v w \\ \rho w w + p \\ (\rho E + p)w \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

そして3次元オイラー方程式について2.1.6節で示した特性理論を展開する。 x, y, z 方向の固有値 $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \lambda_x &= u - c, u + c, u, u, u, \\ \lambda_y &= v - c, v + c, v, v, v, \\ \lambda_z &= w - c, w + c, w, w, w \end{aligned} \quad (5.10)$$

である．各固有値に対応する左固有ベクトル $\boldsymbol{l}^{(\lambda)}$ ，右固有ベクトル $\boldsymbol{r}^{(\lambda)}$ はそれぞれ，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}_x = \begin{pmatrix} \boldsymbol{l}^{(u-c)} \\ \boldsymbol{l}^{(u+c)} \\ \boldsymbol{l}^{(u_x)} \\ \boldsymbol{l}^{(u_y)} \\ \boldsymbol{l}^{(u_z)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(b_1 + \frac{u}{c} \right) & -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} + b_2 u \right) & -\frac{1}{2} b_2 v & -\frac{1}{2} b_2 w & \frac{1}{2} b_2 \\ \frac{1}{2} \left(b_1 - \frac{u}{c} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - b_2 u \right) & -\frac{1}{2} b_2 v & -\frac{1}{2} b_2 w & \frac{1}{2} b_2 \\ 1 - b_1 & b_2 u & b_2 v & b_2 w & -b_2 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -w & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= (\boldsymbol{l}_{x1} \quad \boldsymbol{l}_{x2} \quad \boldsymbol{l}_{x3} \quad \boldsymbol{l}_{x4} \quad \boldsymbol{l}_{x5}), \\
\boldsymbol{L}_y = \begin{pmatrix} \boldsymbol{l}^{(v-c)} \\ \boldsymbol{l}^{(v+c)} \\ \boldsymbol{l}^{(v_y)} \\ \boldsymbol{l}^{(v_z)} \\ \boldsymbol{l}^{(v_x)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(b_1 + \frac{v}{c} \right) & -\frac{1}{2} b_2 u & -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} + b_2 v \right) & -\frac{1}{2} b_2 w & \frac{1}{2} b_2 \\ \frac{1}{2} \left(b_1 - \frac{v}{c} \right) & -\frac{1}{2} b_2 u & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - b_2 v \right) & -\frac{1}{2} b_2 w & \frac{1}{2} b_2 \\ 1 - b_1 & b_2 u & b_2 v & b_2 w & -b_2 \\ -w & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -u & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.11) \\
&= (\boldsymbol{l}_{y1} \quad \boldsymbol{l}_{y2} \quad \boldsymbol{l}_{y3} \quad \boldsymbol{l}_{y4} \quad \boldsymbol{l}_{y5}), \\
\boldsymbol{L}_z = \begin{pmatrix} \boldsymbol{l}^{(w-c)} \\ \boldsymbol{l}^{(w+c)} \\ \boldsymbol{l}^{(w_z)} \\ \boldsymbol{l}^{(w_x)} \\ \boldsymbol{l}^{(w_y)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(b_1 + \frac{w}{c} \right) & -\frac{1}{2} b_2 u & -\frac{1}{2} b_2 v & -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} + b_2 w \right) & \frac{1}{2} b_2 \\ \frac{1}{2} \left(b_1 - \frac{w}{c} \right) & -\frac{1}{2} b_2 u & -\frac{1}{2} b_2 v & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{c} - b_2 w \right) & \frac{1}{2} b_2 \\ 1 - b_1 & b_2 u & b_2 v & b_2 w & -b_2 \\ -u & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&= (\boldsymbol{l}_{z1} \quad \boldsymbol{l}_{z2} \quad \boldsymbol{l}_{z3} \quad \boldsymbol{l}_{z4} \quad \boldsymbol{l}_{z5})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{R}_x = (\boldsymbol{r}^{(u-c)} \quad \boldsymbol{r}^{(u+c)} \quad \boldsymbol{r}^{(u_x)} \quad \boldsymbol{r}^{(u_y)} \quad \boldsymbol{r}^{(u_z)}) &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ u-c & u+c & u & 0 & 0 \\ v & v & v & 1 & 0 \\ w & w & w & 0 & 1 \\ H-uc & H+uc & K & v & w \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{R}_y = (\boldsymbol{r}^{(v-c)} \quad \boldsymbol{r}^{(v+c)} \quad \boldsymbol{r}^{(v_y)} \quad \boldsymbol{r}^{(v_z)} \quad \boldsymbol{r}^{(v_x)}) &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ v-c & v+c & v & 0 & 0 \\ w & w & w & 1 & 0 \\ H-vc & H+vc & K & w & u \end{pmatrix}, \\
\boldsymbol{R}_z = (\boldsymbol{r}^{(w-c)} \quad \boldsymbol{r}^{(w+c)} \quad \boldsymbol{r}^{(w_z)} \quad \boldsymbol{r}^{(w_x)} \quad \boldsymbol{r}^{(w_y)}) &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ w-c & w+c & w & 0 & 0 \\ H-wc & H+wc & K & u & v \end{pmatrix} \quad (5.12)
\end{aligned}$$

と表される．ただし $b_1 = K \frac{\gamma-1}{c^2}$ ， $b_2 = \frac{\gamma-1}{c^2}$ ， $K = \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$ である．また，同じ値の固有値を区別するために，固有値 u, v, w には添え字 x, y, z を付している．式 (5.11) 中の \boldsymbol{l}_{xm} ， \boldsymbol{l}_{ym} ， \boldsymbol{l}_{zm} ($m = 1, 2, 3, 4, 5$) は，それぞれ行列 \boldsymbol{L}_x ， \boldsymbol{L}_y ， \boldsymbol{L}_z の列ベクトルである．各方

向の特性変数は,

$$\mathbf{W}_x = \begin{bmatrix} W(u-c) \\ W(u+c) \\ W(u_x) \\ W(u_y) \\ W(u_z) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{W}_y = \begin{bmatrix} W(v-c) \\ W(v+c) \\ W(v_y) \\ W(v_z) \\ W(v_x) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{W}_z = \begin{bmatrix} W(w-c) \\ W(w+c) \\ W(w_z) \\ W(w_x) \\ W(w_y) \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

と表現する.

2次元空間における計算では, 図 5.1 に示すように, x 軸対称, y 軸対称, 対角線対称の3種類が典型的な空間対称パターンとなる. 点 A と B は対称な位置にあるセル又はセル境界を意味する. また, 3次元空間では図 5.2 に示すように, yz 平面对称, zx 平面对称, xy 平面对称, xy 対角線対称, yz 対角線対称, zx 対角線対称の6種類が典型的な空間対称パターンとして考えられる. 対称関係となる物理変数の組み合わせは, 表 5.1 と 5.2 に示すとおり, 対称パターンによって異なる. そのため, 対称性崩壊のメカニズム及びその対策法は, 各対称パターンを考慮して構築される. 運動エネルギー $K = \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$ は3つの値の足し算を含むが, 平面对称の場合は表 5.1 より対称位置にある速度成分 u, v, w が符号のみ変化するため, 和の値は変わらない. 一方で対角線対称の場合, 表 5.2 より速度成分の値が u, v, w の間で入れ替わるため, 計算の順序が変化し和の値も変化する. したがって, 対角線対称における対称性誤差を回避するため, 運動エネルギー K は式 (5.3) を用いて,

$$K = \frac{1}{2} \text{SUM}_{\text{consistent}}(u^2, v^2, w^2) \quad (5.14)$$

として計算する.

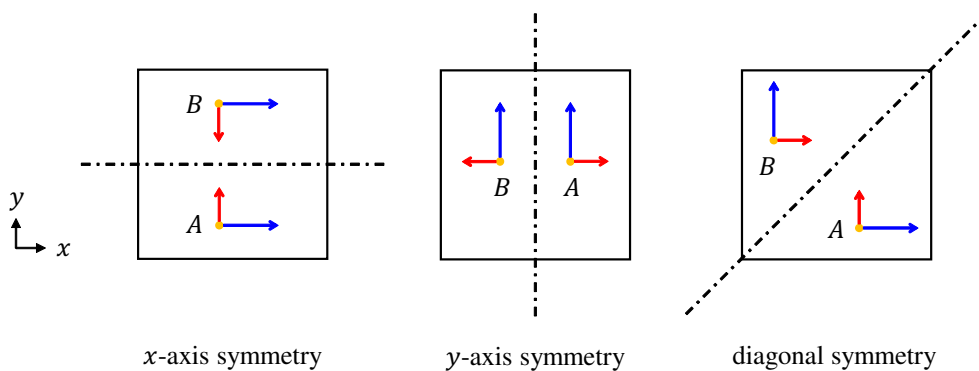


Fig. 5.1 The three types of spatial symmetry patterns in 2D space.

	<i>yz</i> -plane symmetry	<i>zx</i> -plane symmetry	<i>xy</i> -plane symmetry
conservative variables	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$
	$\rho u_A = -\rho u_B$	$\rho u_A = \rho u_B$	$\rho u_A = \rho u_B$
	$\rho v_A = \rho v_B$	$\rho v_A = -\rho v_B$	$\rho v_A = \rho v_B$
	$\rho w_A = \rho w_B$	$\rho w_A = \rho w_B$	$\rho w_A = -\rho w_B$
	$\rho E_A = \rho E_B$	$\rho E_A = \rho E_B$	$\rho E_A = \rho E_B$
primitive variables	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$
	$u_A = -u_B$	$u_A = u_B$	$u_A = v_B$
	$v_A = v_B$	$v_A = -v_B$	$v_A = u_B$
	$w_A = w_B$	$w_A = w_B$	$w_A = -w_B$
	$p_A = p_B$	$p_A = p_B$	$p_A = p_B$
characteristic variables	$W_A^{(u-c)} = W_B^{(u+c)}$	$W_A^{(u-c)} = W_B^{(u-c)}$	$W_A^{(u-c)} = W_B^{(u-c)}$
	$W_A^{(u+c)} = W_B^{(u-c)}$	$W_A^{(u+c)} = W_B^{(u+c)}$	$W_A^{(u+c)} = W_B^{(u+c)}$
	$W_A^{(u_x)} = W_B^{(u_x)}$	$W_A^{(u_x)} = W_B^{(u_x)}$	$W_A^{(u_x)} = W_B^{(u_x)}$
	$W_A^{(u_y)} = W_B^{(u_y)}$	$W_A^{(u_y)} = W_B^{(u_y)}$	$W_A^{(u_y)} = W_B^{(u_y)}$
	$W_A^{(u_z)} = W_B^{(u_z)}$	$W_A^{(u_z)} = W_B^{(u_z)}$	$W_A^{(u_z)} = W_B^{(u_z)}$
	$W_A^{(v-c)} = W_B^{(v-c)}$	$W_A^{(v-c)} = W_B^{(v+c)}$	$W_A^{(v-c)} = W_B^{(v-c)}$
	$W_A^{(v+c)} = W_B^{(v+c)}$	$W_A^{(v+c)} = W_B^{(v-c)}$	$W_A^{(v+c)} = W_B^{(v+c)}$
	$W_A^{(v_y)} = W_B^{(v_y)}$	$W_A^{(v_y)} = W_B^{(v_y)}$	$W_A^{(v_y)} = W_B^{(v_y)}$
	$W_A^{(v_z)} = W_B^{(v_z)}$	$W_A^{(v_z)} = W_B^{(v_z)}$	$W_A^{(v_z)} = W_B^{(v_z)}$
	$W_A^{(v_x)} = W_B^{(v_x)}$	$W_A^{(v_x)} = W_B^{(v_x)}$	$W_A^{(v_x)} = W_B^{(v_x)}$
	$W_A^{(w-c)} = W_B^{(w-c)}$	$W_A^{(w-c)} = W_B^{(w-c)}$	$W_A^{(w-c)} = W_B^{(w+c)}$
	$W_A^{(w+c)} = W_B^{(w+c)}$	$W_A^{(w+c)} = W_B^{(w+c)}$	$W_A^{(w+c)} = W_B^{(w-c)}$
	$W_A^{(w_z)} = W_B^{(w_z)}$	$W_A^{(w_z)} = W_B^{(w_z)}$	$W_A^{(w_z)} = W_B^{(w_z)}$
	$W_A^{(w_x)} = W_B^{(w_x)}$	$W_A^{(w_x)} = W_B^{(w_x)}$	$W_A^{(w_x)} = W_B^{(w_x)}$
	$W_A^{(w_y)} = W_B^{(w_y)}$	$W_A^{(w_y)} = W_B^{(w_y)}$	$W_A^{(w_y)} = W_B^{(w_y)}$

Table. 5.1 Combinations of physical variables in *yz*-plane, *zx*-plane, and *xy*-plane symmetrical relationships.

	<i>xy</i> -diagonal symmetry	<i>yz</i> -diagonal symmetry	<i>zx</i> -diagonal symmetry
conservative variables	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$
	$\rho u_A = \rho v_B$	$\rho u_A = \rho u_B$	$\rho u_A = \rho w_B$
	$\rho v_A = \rho u_B$	$\rho v_A = \rho w_B$	$\rho v_A = \rho v_B$
	$\rho w_A = \rho w_B$	$\rho w_A = \rho v_B$	$\rho w_A = \rho u_B$
	$\rho E_A = \rho E_B$	$\rho E_A = \rho E_B$	$\rho E_A = \rho E_B$
primitive variables	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$	$\rho_A = \rho_B$
	$u_A = v_B$	$u_A = u_B$	$u_A = w_B$
	$v_A = u_B$	$v_A = w_B$	$v_A = v_B$
	$w_A = w_B$	$w_A = v_B$	$w_A = u_B$
	$p_A = p_B$	$p_A = p_B$	$p_A = p_B$
characteristic variables	$W_A^{(u-c)} = W_B^{(v-c)}$	$W_A^{(u-c)} = W_B^{(u-c)}$	$W_A^{(u-c)} = W_B^{(w-c)}$
	$W_A^{(u+c)} = W_B^{(v+c)}$	$W_A^{(u+c)} = W_B^{(u+c)}$	$W_A^{(u+c)} = W_B^{(w+c)}$
	$W_A^{(u_x)} = W_B^{(v_y)}$	$W_A^{(u_x)} = W_B^{(u_x)}$	$W_A^{(u_x)} = W_B^{(w_z)}$
	$W_A^{(u_y)} = W_B^{(v_x)}$	$W_A^{(u_y)} = W_B^{(u_z)}$	$W_A^{(u_y)} = W_B^{(w_y)}$
	$W_A^{(u_z)} = W_B^{(v_z)}$	$W_A^{(u_z)} = W_B^{(u_y)}$	$W_A^{(u_z)} = W_B^{(w_x)}$
	$W_A^{(v-c)} = W_B^{(u-c)}$	$W_A^{(v-c)} = W_B^{(w-c)}$	$W_A^{(v-c)} = W_B^{(v-c)}$
	$W_A^{(v+c)} = W_B^{(u+c)}$	$W_A^{(v+c)} = W_B^{(w+c)}$	$W_A^{(v+c)} = W_B^{(v+c)}$
	$W_A^{(v_y)} = W_B^{(u_x)}$	$W_A^{(v_y)} = W_B^{(w_z)}$	$W_A^{(v_y)} = W_B^{(v_y)}$
	$W_A^{(v_z)} = W_B^{(u_z)}$	$W_A^{(v_z)} = W_B^{(w_y)}$	$W_A^{(v_z)} = W_B^{(v_x)}$
	$W_A^{(v_x)} = W_B^{(u_y)}$	$W_A^{(v_x)} = W_B^{(w_x)}$	$W_A^{(v_x)} = W_B^{(v_z)}$
	$W_A^{(w-c)} = W_B^{(w-c)}$	$W_A^{(w-c)} = W_B^{(v-c)}$	$W_A^{(w-c)} = W_B^{(u-c)}$
	$W_A^{(w+c)} = W_B^{(w+c)}$	$W_A^{(w+c)} = W_B^{(v+c)}$	$W_A^{(w+c)} = W_B^{(u+c)}$
	$W_A^{(w_z)} = W_B^{(w_z)}$	$W_A^{(w_z)} = W_B^{(v_y)}$	$W_A^{(w_z)} = W_B^{(u_x)}$
	$W_A^{(w_x)} = W_B^{(w_y)}$	$W_A^{(w_x)} = W_B^{(v_x)}$	$W_A^{(w_x)} = W_B^{(u_z)}$
	$W_A^{(w_y)} = W_B^{(w_x)}$	$W_A^{(w_y)} = W_B^{(v_z)}$	$W_A^{(w_y)} = W_B^{(u_y)}$

Table. 5.2 Combinations of physical variables in *xy*-diagonal, *yz*-diagonal, and *zx*-diagonal symmetrical relationships.

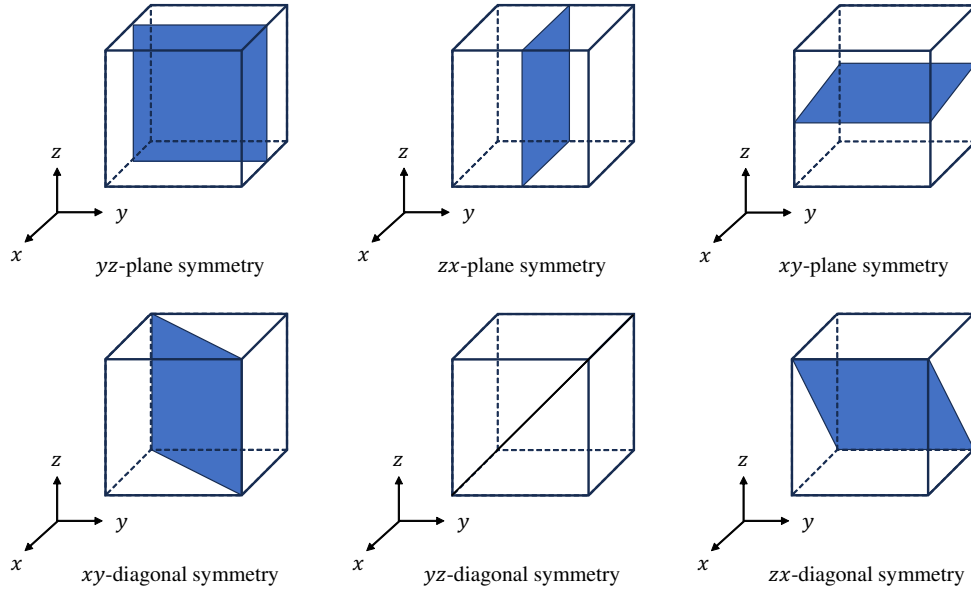


Fig. 5.2 The six types of spatial symmetry patterns in 3D space.

5.3 特性分解

単相圧縮性流れの数値解析では、WENO法やP₄T₂-BVD法といった高次精度解法を用いる場合に、再構築を行う変数は特性変数とするのが一般的である。保存変数 \bar{U} を特性変数 \bar{W} に変換し、空間再構築で得られる特性変数のセル境界値を保存変数に戻す。特性変数での再構築は数値振動の抑制に効果的であるが、対称性誤差を引き起こす要因を含む。以下、保存変数と特性変数間の変換において、対称性誤差の要因となる計算式とその対策について述べる。

保存変数 \bar{U} から特性変数 \bar{W} への変換は、各方向の左固有ベクトル L を用いて行われる。

$$\begin{aligned}
 \bar{W}_x &= L_x \cdot \bar{U} \\
 &= l_{x1}\bar{\rho} + l_{x2}\bar{\rho}u + l_{x3}\bar{\rho}v + l_{x4}\bar{\rho}w + l_{x5}\bar{\rho}E, \\
 \bar{W}_y &= L_y \cdot \bar{U} \\
 &= l_{y1}\bar{\rho} + l_{y2}\bar{\rho}u + l_{y3}\bar{\rho}v + l_{y4}\bar{\rho}w + l_{y5}\bar{\rho}E, \\
 \bar{W}_z &= L_z \cdot \bar{U} \\
 &= l_{z1}\bar{\rho} + l_{z2}\bar{\rho}u + l_{z3}\bar{\rho}v + l_{z4}\bar{\rho}w + l_{z5}\bar{\rho}E
 \end{aligned} \tag{5.15}$$

ここで、特性変数 \bar{W} が表5.1および5.2の対称関係を満たしているか確認する。式(5.1)で示したように、3つ以上の浮動小数点数の足し算ではその計算順序により和の値が異なる。対角線対称のパターンでは $\bar{\rho}u$, $\bar{\rho}v$, $\bar{\rho}w$ の値が点AとBで入れ替わることから、これらの項を

式 (5.3) を用いて先に足し合わせる必要がある。すなわち,

$$\begin{aligned}\overline{W}_x &= l_{x1}\bar{\rho} + SUM_{\text{consistent}}(l_{x2}\overline{\rho u}, l_{x3}\overline{\rho v}, l_{x4}\overline{\rho w}) + l_{x5}\overline{\rho E}, \\ \overline{W}_y &= l_{y1}\bar{\rho} + SUM_{\text{consistent}}(l_{y2}\overline{\rho u}, l_{y3}\overline{\rho v}, l_{y4}\overline{\rho w}) + l_{y5}\overline{\rho E}, \\ \overline{W}_z &= l_{z1}\bar{\rho} + SUM_{\text{consistent}}(l_{z2}\overline{\rho u}, l_{z3}\overline{\rho v}, l_{z4}\overline{\rho w}) + l_{z5}\overline{\rho E}\end{aligned}\quad (5.16)$$

と計算することで、点 A と B の特性変数は厳密に対称な値となり、対角線対称における対称性誤差を回避することが出来る。この修正については文献 [78] で既に提案されている。

また、特性変数のセル境界値 \mathbf{W} を保存変数に戻すときは、各方向の右固有ベクトル行列 \mathbf{R} を用いる。

$$\begin{aligned}U_x &= \mathbf{R}_x \cdot \mathbf{W}_x \\ &= \mathbf{r}^{(u-c)}W^{(u-c)} + \mathbf{r}^{(u+c)}W^{(u+c)} + \mathbf{r}^{(u_x)}W^{(u_x)} + \mathbf{r}^{(u_y)}W^{(u_y)} + \mathbf{r}^{(u_z)}W^{(u_z)}, \\ U_y &= \mathbf{R}_y \cdot \mathbf{W}_y \\ &= \mathbf{r}^{(v-c)}W^{(v-c)} + \mathbf{r}^{(v+c)}W^{(v+c)} + \mathbf{r}^{(v_y)}W^{(v_y)} + \mathbf{r}^{(v_z)}W^{(v_z)} + \mathbf{r}^{(v_x)}W^{(v_x)}, \\ U_z &= \mathbf{R}_z \cdot \mathbf{W}_z \\ &= \mathbf{r}^{(w-c)}W^{(w-c)} + \mathbf{r}^{(w+c)}W^{(w+c)} + \mathbf{r}^{(w_z)}W^{(w_z)} + \mathbf{r}^{(w_x)}W^{(w_x)} + \mathbf{r}^{(w_y)}W^{(w_y)}\end{aligned}\quad (5.17)$$

保存変数 U が表 5.1 および 5.2 の対称関係を満たすか確認する。平面对称のパターンでは $W^{(u/v/w-c)}$ と $W^{(u/v/w+c)}$ の値が点 A と B で入れ替わることから、これらの項を先に足し合わせる必要がある。また、対角線対称のパターンでは $W^{(u/v/w_x/y/z)}$ の値が入れ替わることから、これらを式 (5.3) を用いて別に足し合わせる必要がある。よって,

$$\begin{aligned}U_x &= \left(\mathbf{r}^{(u-c)}W^{(u-c)} + \mathbf{r}^{(u+c)}W^{(u+c)} \right) \\ &\quad + SUM_{\text{consistent}} \left(\mathbf{r}^{(u_x)}W^{(u_x)}, \mathbf{r}^{(u_y)}W^{(u_y)}, \mathbf{r}^{(u_z)}W^{(u_z)} \right), \\ U_y &= \left(\mathbf{r}^{(v-c)}W^{(v-c)} + \mathbf{r}^{(v+c)}W^{(v+c)} \right) \\ &\quad + SUM_{\text{consistent}} \left(\mathbf{r}^{(v_y)}W^{(v_y)}, \mathbf{r}^{(v_z)}W^{(v_z)}, \mathbf{r}^{(v_x)}W^{(v_x)} \right), \\ U_z &= \left(\mathbf{r}^{(w-c)}W^{(w-c)} + \mathbf{r}^{(w+c)}W^{(w+c)} \right) \\ &\quad + SUM_{\text{consistent}} \left(\mathbf{r}^{(w_z)}W^{(w_z)}, \mathbf{r}^{(w_x)}W^{(w_x)}, \mathbf{r}^{(w_y)}W^{(w_y)} \right)\end{aligned}\quad (5.18)$$

と計算することで、点 A と B の保存変数は厳密に対称となり、平面对称および対角線対称における対称性誤差を回避できる。

5.4 空間再構築法

次に、空間再構築で発生する対称性誤差について説明する。解の分布が対称であっても、平面对称パターンの場合、再構築から得られるセル境界値が非対称となり得る。この対称性誤差

が発生するメカニズムを議論するために、初めに SF 再構築と SI 再構築を定義する。対称性を保存する再構築の条件を確認した後、4 次多項式補間と THINC 補間における対称性保存法の定式化を行う。

5.4.1 SF 再構築と SI 再構築

対称な解の分布の再構築から得られるセル境界値が非対称となる原因は、反転したステンシルおよび物理量が逆符号のステンシルによるセル境界値が、元のステンシルのセル境界値と一致しないことにある。平面对称パターンの場合、点 A と B におけるステンシルは反転しており、対称面と垂直な速度成分に関しては符号も反転している。これらの反転ステンシルにおける再構築を、それぞれ SF(stencil-flipping) 再構築、SI(sign-inversion) 再構築と呼ぶ。

隣り合うセル $\{\Omega_j\}$ ($j = i - i_l, \dots, i - 1, i, i + 1, \dots, i + i_r$) のセル平均値で構成されるステンシルを $\{\bar{q}_j\}$ と表し、そのステンシルから得られるセル Ω_i における x 方向の再構築関数を $Q_i(\{\bar{q}_j\}, x)$ と書く。この表記を用いて、SF 再構築と SI 再構築の定義は次の様に記述される。

$$Q_i^{\text{SF}}(x) \equiv Q_i(\{\bar{q}_{j'}\}, x) \quad (5.19)$$

$$Q_i^{\text{SI}}(x) \equiv Q_i(\{-\bar{q}_j\}, x) \quad (5.20)$$

ただし、SF 再構築においてセル $\{\Omega_{j'}\}$ の順番は、 $j' = i - i_r, \dots, i - 1, i, i + 1, \dots, i + i_l$ のように反転している。そして、対称性を保存するためには、次の SF 再構築条件及び SI 再構築条件を満たす必要がある。

$$\text{SF 再構築条件} : \begin{cases} Q_i(x_{i+\frac{1}{2}}) = Q_i^{\text{SF}}(x_{i-\frac{1}{2}}) \\ Q_i(x_{i-\frac{1}{2}}) = Q_i^{\text{SF}}(x_{i+\frac{1}{2}}) \end{cases} \quad (5.21)$$

$$\text{SI 再構築条件} : \begin{cases} Q_i(x_{i+\frac{1}{2}}) = -Q_i^{\text{SI}}(x_{i+\frac{1}{2}}) \\ Q_i(x_{i-\frac{1}{2}}) = -Q_i^{\text{SI}}(x_{i-\frac{1}{2}}) \end{cases} \quad (5.22)$$

これらの両方の条件を浮動小数点演算で満たすように空間再構築の計算手順を工夫することで、平面对称パターンの対称性誤差を回避することができる。なお、対角線対称の場合は、各次元方向で同一の計算となるため、再構築手法による対称性誤差は発生しない。

5.4.2 対称性保存線形多項式補間

式 (3.30) で示した 4 次多項式法によるセル境界値は、SI 再構築条件 (5.22) は満たしているが、SF 再構築条件 (5.21) は満たしていない。SF 再構築条件を満たす計算手順の例として、次式のように左境界値と右境界値の計算でステンシルの左右逆方向から足し合わせる方法が考え

られる.

$$\begin{cases} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,P4}} = \mathcal{Q}_i^{\text{P4}}(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{60}(2\bar{q}_{i-2} - 13\bar{q}_{i-1} + 47\bar{q}_i + 27\bar{q}_{i+1} - 3\bar{q}_{i+2}) \\ q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,P4}} = \mathcal{Q}_i^{\text{P4}}(x_{i-\frac{1}{2}}) = \frac{1}{60}(2\bar{q}_{i+2} - 13\bar{q}_{i+1} + 47\bar{q}_i + 27\bar{q}_{i-1} - 3\bar{q}_{i-2}) \end{cases} \quad (5.23)$$

あるいは, ステンシルの外側から内側 (逆方向も可) に向かってセル平均値を足し合わせる方法も有効である.

$$\begin{cases} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,P4}} = \mathcal{Q}_i^{\text{P4}}(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{60}((2\bar{q}_{i-2} - 3\bar{q}_{i+2}) + (-13\bar{q}_{i-1} + 27\bar{q}_{i+1}) + 47\bar{q}_i) \\ q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,P4}} = \mathcal{Q}_i^{\text{P4}}(x_{i-\frac{1}{2}}) = \frac{1}{60}((-3\bar{q}_{i-2} + 2\bar{q}_{i+2}) + (27\bar{q}_{i-1} - 13\bar{q}_{i+1}) + 47\bar{q}_i) \end{cases} \quad (5.24)$$

このように足し算の順番を工夫することで, 4次多項式補間における SF 再構築条件が満たされ, 再構築による対称性誤差を排除できる.

5.4.3 対称性保存 THINC 補間

従来の THINC 法 (3.83) を SF 再構築条件 (5.21) と SI 再構築条件 (5.22) に当てはめると, どちらの条件も満たしていないことが分かる. この問題を解決するため, 新しい THINC 法の定式化を行う. 本研究で提案する対称性保存 THINC 法の再構築関数は,

$$\mathcal{Q}_i^{\text{THINC}}(x) = \begin{cases} q_{\text{a},i} + q_{\text{d},i} \tanh(\beta(X_i(x) - d_i)), & \text{if } (\bar{q}_i - \bar{q}_{i-1})(\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_i) > \epsilon \\ \bar{q}_i, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.25)$$

と表される. ただし,

$$q_{\text{a},i} = \frac{\bar{q}_{i+1} + \bar{q}_{i-1}}{2}, \quad q_{\text{d},i} = \frac{\bar{q}_{i+1} - \bar{q}_{i-1}}{2}, \quad X_i(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \quad (5.26)$$

$\epsilon = 10^{-20}$ は計算の破綻を防ぐために導入される微小値である. また, ジャンプ位置 d_i は条件式 (3.80) から次式のように導かれる.

$$d_i = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1 - T_{2,i}/T_1}{1 + T_{2,i}/T_1}, \quad (5.27)$$

$$T_1 = \tanh\left(\frac{\beta}{2}\right), \quad T_{2,i} = \tanh\left(\frac{\alpha_i\beta}{2}\right), \quad \alpha_i = \frac{\bar{q}_i - q_{\text{a},i}}{q_{\text{d},i}} \quad (5.28)$$

ここで α_i は, 従来 THINC 法の α_i (式 (3.82)) と同じ変数であるが, 式 (5.28) の α_i を計算することで対称性誤差を回避する. 最終的に, 対称性保存 THINC 補間によるセル境界値は次

式で計算する.

$$\begin{cases} q_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L,THINC}} = Q_i^{\text{THINC}} \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = q_{a,i} + q_{d,i} \frac{T_1 + T_{2,i}/T_1}{1 + T_{2,i}} \\ q_{i-\frac{1}{2}}^{\text{R,THINC}} = Q_i^{\text{THINC}} \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) = q_{a,i} - q_{d,i} \frac{T_1 - T_{2,i}/T_1}{1 - T_{2,i}} \end{cases} \quad (5.29)$$

この新しいセル境界値は、従来の THINC 法によるセル境界値 (3.83) と数学的に同値である。しかし、浮動小数点演算ではこれらの定式化による計算結果は異なり、新しいセル境界値は SF 及び SI 再構築条件を両方満たすことが出来る。

5.5 リーマンソルバー

5.5.1 対称性保存 HLLC ソルバー

対称性誤差の発生要因として、最後に HLLC リーマンソルバー [111, 161] について説明する。平面对称パターンについては、HLLC ソルバーの計算では S^* の計算式 (3.86) と流束の選択 (3.90)、PVRS 法による S^L および S^R が対称性誤差を発生させる可能性を持つ。式 (3.86) は、分子の計算式が 4 つの項の和であり、境界左側と右側の物理量を足し合わせる順番に偏りが生じている。文献 [78] にも報じられているが、次式のように足し算の順番を固定することで、対称性誤差を含まない S^* の値を求めることが出来る。

$$S^* = \frac{(p^R - p^L) + (\rho^L u^L (S^L - u^L) - \rho^R u^R (S^R - u^R))}{\rho^L (S^L - u^L) - \rho^R (S^R - u^R)} \quad (5.30)$$

また、式 (3.90) で S^L, S^*, S^R の符号に応じて流束を選択するとき、 $S^* = 0$ の場合に \mathbf{F}^{*L} と \mathbf{F}^{*R} のどちらを選択するかは未定義である。対称性保存の観点では、 $S^* = 0$ の場合は \mathbf{F}^{*L} と \mathbf{F}^{*R} の平均値を選択すべきである。すなわち、式 (3.90) の代わりに

$$\mathbf{F}^{\text{HLLC}} = \begin{cases} \mathbf{F}^L, & \text{if } 0 \leq S^L \\ \mathbf{F}^{*L}, & \text{if } S^L < 0 < S^* \\ (\mathbf{F}^{*L} + \mathbf{F}^{*R})/2, & \text{if } S^* = 0 \\ \mathbf{F}^{*R}, & \text{if } S^* < 0 < S^R \\ \mathbf{F}^R, & \text{if } S^R \leq 0 \end{cases} \quad (5.31)$$

として流束を選択することで、左右の偏りを排除できる。ただし、3.5.1 節で述べた通り、PVRS 法で計算された S^L および S^R が $S^L \leq S^R$ を満たすことを確認すべきである。または、次式のように文献 [78, 182] で示されているコンパクトな流束 \mathbf{F}^{HLLC} の式を用いることでも、

厳密に対称に流束を選択できる.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^{\text{HLLC}} = & \frac{1 + \text{sgn}(S^*)}{2} \{ \mathbf{F}^{\text{L}} + s^- (\mathbf{U}^{*\text{L}} - \mathbf{U}^{\text{L}}) \} \\ & + \frac{1 - \text{sgn}(S^*)}{2} \{ \mathbf{F}^{\text{R}} + s^+ (\mathbf{U}^{*\text{R}} - \mathbf{U}^{\text{R}}) \} \end{aligned} \quad (5.32)$$

ただし, $s^- = \min(S^{\text{L}}, 0)$, $s^+ = \max(S^{\text{R}}, 0)$ であり, 符号関数 $\text{sgn}()$ は引数が 0 の時 0 を返すこととする.

対角線対称パターンにおける対称性誤差は, 流束関数 \mathbf{F} , \mathbf{G} , \mathbf{H} の計算から生じる. 式 (5.2) に示すように, 3 つ以上の浮動小数点数の積は掛け合わせる順番によって結果が異なる. 対角線対称では点 A と B で速度成分 u, v, w の値が入れ替わることを考慮すると, 流束関数 \mathbf{F} , \mathbf{G} , \mathbf{H} は次式で計算すべきである.

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \boxed{\rho u u} + p \\ \boxed{\rho v u} \\ \boxed{\rho w u} \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \boxed{\rho v v} \\ \boxed{\rho v v} + p \\ \boxed{\rho w v} \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \boxed{\rho w w} \\ \boxed{\rho v w} \\ \boxed{\rho w w} + p \\ (\rho E + p)w \end{bmatrix} \quad (5.33)$$

特に, 四角形で囲った式は掛け算の順番に注意を払う必要がある.

5.6 数値結果

以上の対称性保存手法を検証するため, いくつかの空間対称性を持つ数値テストを解く. 対称性を保つために必要な手法を要約すると, 表 5.3 となる. ただし*を付した式番号は, 文献 [78] で既に報告されている手法である. 全ての提案手法を組み込んだ対称性保存法と従来法による計算結果を比較し, 対称性が保存されることを確認する. 空間再構築は P_4T_2 -BVD 法, 再構築変数は特性変数, リーマンソルバーは HLLC ソルバー, 時間積分は 3 段 3 次 RK 法, CFL は 0.6 とする.

5.6.1 2次元レイリーテイラー不安定性問題

レイリーテイラー不安定性問題は, 高解像度数値解法の検証に広く用いられるベンチマークテストである. 計算領域を $x \in [0, 0.25]$, $y \in [0, 1]$ とし, $y = 0.5$ を境界として重い流体と軽い流体が配置される. 外力によって重い流体が軽い流体の内部に入り込み, 接触面で不安定性が発達する. この問題は y 軸対称性を有しており, 高い格子解像度では y 軸について非対称な流れ構造が生じる.

		plane symmetry	diagonal symmetry
kinetic energy		(5.14)	-
characteristic decomposition		(5.18)	(5.16)* and (5.18)
P ₄ T ₂ -BVD reconstruction	P ₄ interpolation	(5.23) or (5.24)	-
	THINC interpolation	(5.29)	-
HLLC Riemann solver		(5.30)* and ((5.31) or (5.32)*)	(5.33)

Table. 5.3 Summary of the symmetry-preserving formulations for simulation of the 3D Euler equation in the finite-volume method.

基本変数についての初期条件は次式で表される.

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (2, 0, v_0(x), 2y + 1), & \text{if } y < 0.5 \\ (1, 0, v_0(x), y + 1.5), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.34)$$

ここで, $v_0(x)$ は一般的に,

$$v_0(x) = -0.025c \cos(8\pi x) \quad (5.35)$$

と設定されるが, この計算式では y 軸について非対称な初期分布となる [78]. 式 (5.7) に示した通り, 浮動小数点演算では $\cos(\pi + \epsilon) = \cos(\pi - \epsilon)$ が成り立たないことが原因である. 浮動小数点演算で厳密に対称な初期分布を与える計算式として,

$$v_0(x) = \begin{cases} -0.025c \cos(8\pi x), & \text{if } x < 0.125 \\ -0.025c \cos(8\pi(0.25 - x)), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.36)$$

が提案されている [78]. ただし $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$ は音速である.

境界条件は, 左右境界は反射境界, 上下境界はそれぞれ一定値 $(\rho, u, v, p)_{\text{top}} = (1, 0, 0, 2.5)$, $(\rho, u, v, p)_{\text{bottom}} = (2, 0, 0, 1)$ を与える. 格子数は 1024×4096 , 比熱比は $\gamma = 5/3$ とする. また, 重力 $\vec{g} = (0, 1)^\top$ を式 (2.7) 中の外力項 \vec{f}_b として加える.

密度の数値解を図 5.3 に示す. ただし, 密度値の表示範囲は $[0.85, 2.25]$ (青色, 赤色) とした. 図 5.3 の左側は従来法の結果であり, 流れ構造が y 軸に対して非対称となっていることが分かる. 対して右側の対称性保存解法の結果では, 高い格子解像度にもかかわらず y 軸対称性を完全に保持している. この結果から, 提案手法は y 軸 (平面) 対称性を破る原因となる計算式を全て適切に修正出来ていると言える.

従来手法

提案手法

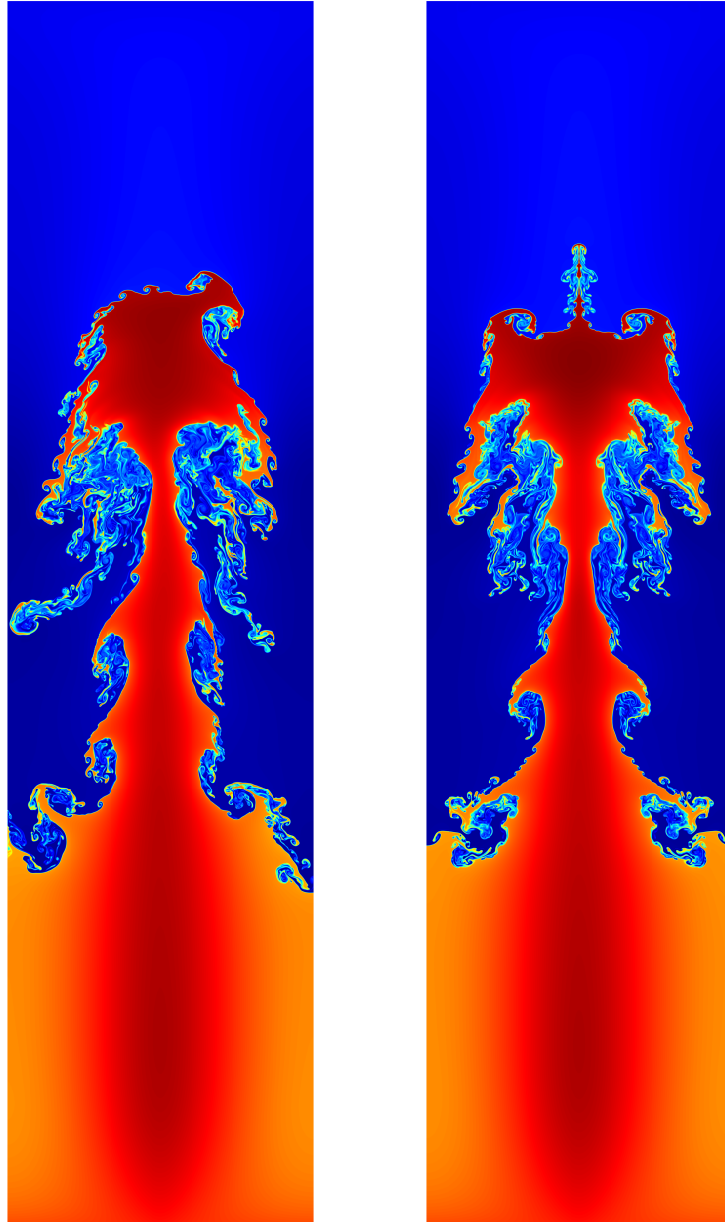


Fig. 5.3 Numerical solutions of the Rayleigh-Taylor instability at $t = 1.95$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme).

5.6.2 2次元リーマン問題

2次元リーマン問題は、計算領域 $x \in [-0.5, 0.5]$, $y \in [-0.5, 0.5]$ を4つの長方形領域に分割し、それぞれに一定値の物理量を与える。各領域の境界では、ケルビンヘルムホルツ不安定性により渦が発達する。文献 [175] で提案されている2次元リーマン問題のうち、 xy 対角線対称性を持つ config. 3 と 12 を解く。基本変数についての初期条件はそれぞれ、

Config. 3:

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (1.5, 0, 0, 1.5), & \text{if } x > 0.3, y > 0.3 \\ (0.5323, 1.206, 0, 0.3), & \text{if } x < 0.3, y > 0.3 \\ (0.138, 1.206, 1.206, 0.029), & \text{if } x < 0.3, y < 0.3 \\ (0.5323, 0, 1.206, 0.3), & \text{if } x > 0.3, y < 0.3 \end{cases} \quad (5.37)$$

Config. 12:

$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (0.5313, 0, 0, 0.4), & \text{if } x > 0, y > 0 \\ (1, 0.7276, 0, 1), & \text{if } x < 0, y > 0 \\ (0.8, 0, 0, 1), & \text{if } x < 0, y < 0 \\ (1, 0, 0.7276, 1), & \text{if } x > 0, y < 0 \end{cases} \quad (5.38)$$

と表される。境界条件は流境界とする。格子数は config. 3 で 1000×1000 , config. 12 で 4000×4000 , 比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。

従来手法

提案手法

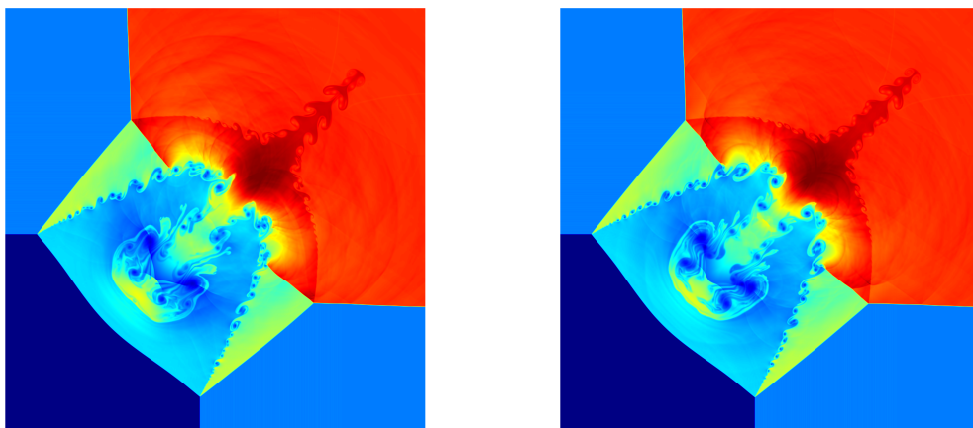
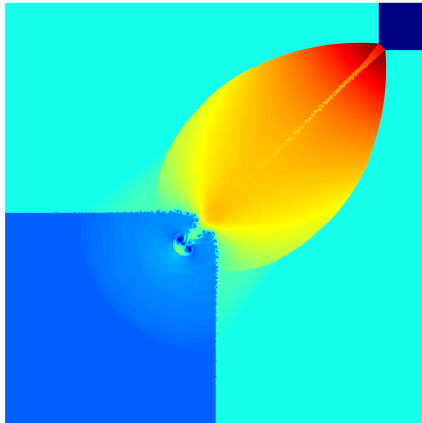


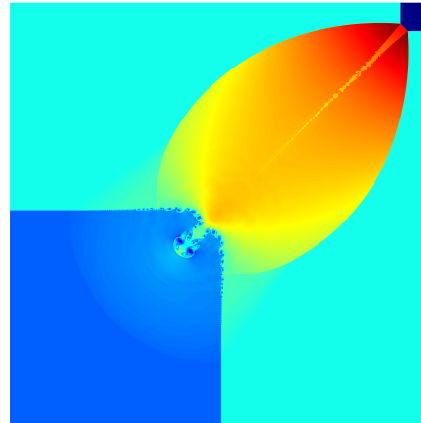
Fig. 5.4 Numerical solutions of the 2D Riemann problem config. 3 at $t = 0.8$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme).

2次元リーマン問題における密度の数値解を図 5.4(config. 3), 5.5(config. 12) に示す。ただし、密度値の表示範囲は、config. 3 では $[0.135, 1.75]$, config. 12 では $[0.55, 1.7]$ (青色, 赤

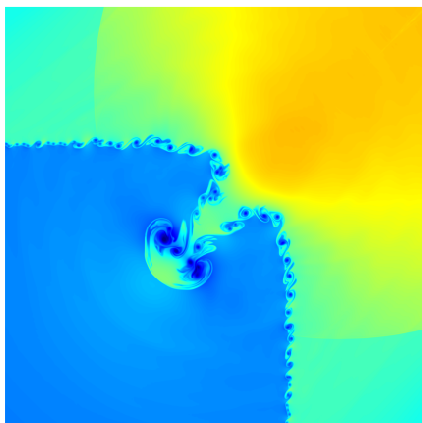
従来手法



提案手法



従来手法 (拡大図)



提案手法 (拡大図)

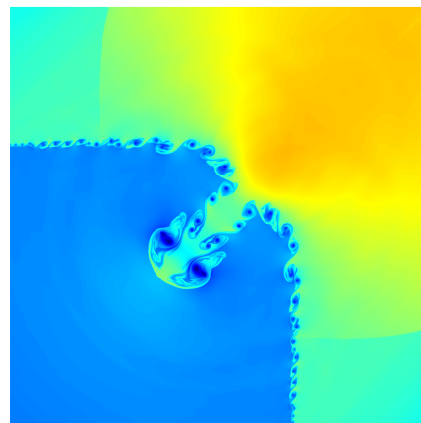


Fig. 5.5 Numerical solutions of the 2D Riemann problem config. 12 at $t = 0.25$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme, top: overall view, bottom: zoomed view).

色)とした。図 5.4, 5.5 において, 左側の従来法の結果では, 対角線を対称軸として非対称な渦構造が生じている。一方, 右側の対称性保存解法の結果では, 完全に対角線対称な渦構造となっている。よって提案手法は, 対角線対称性を破る原因を全て排除できていると言える。

5.6.3 2次元爆縮問題

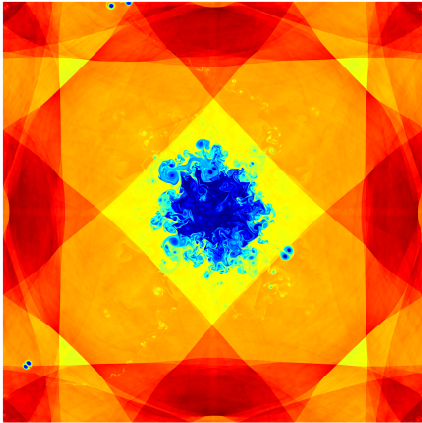
2次元爆縮問題 [69] は, 中心部の低圧流体が周囲の流体によって押しつぶされる爆縮現象を模擬する数値テストである。対角線方向に進む渦の軌道は対称性誤差による影響を受けやすいため, 対称な解の計算が困難な問題の一つである。計算領域は $x \in [-0.3, 0.3]$, $y \in [-0.3, 0.3]$,

基本変数についての初期条件は,

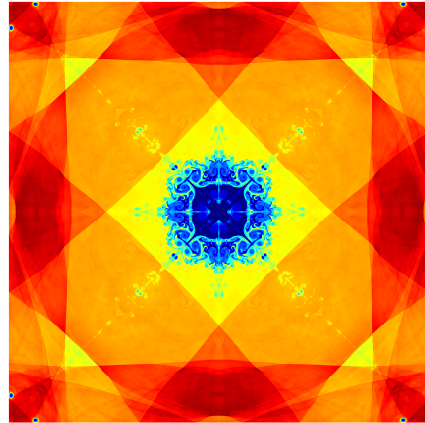
$$(\rho_0, u_0, v_0, p_0) = \begin{cases} (0.125, 0, 0, 0.14), & \text{if } |x| + |y| < 0.15 \\ (1, 0, 0, 1), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.39)$$

と表される. 境界条件は反射境界とする. 格子数は 1600×1600 , 比熱比は $\gamma = 1.4$ とする.

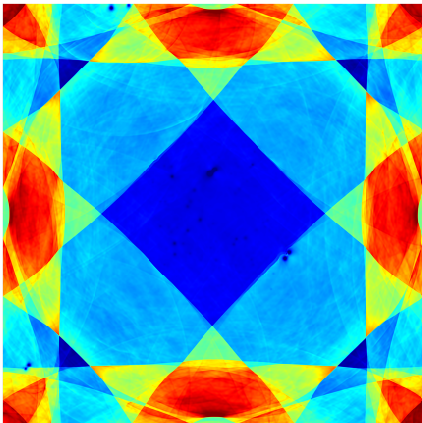
従来手法 (密度)



提案手法 (密度)



従来手法 (圧力)



提案手法 (圧力)

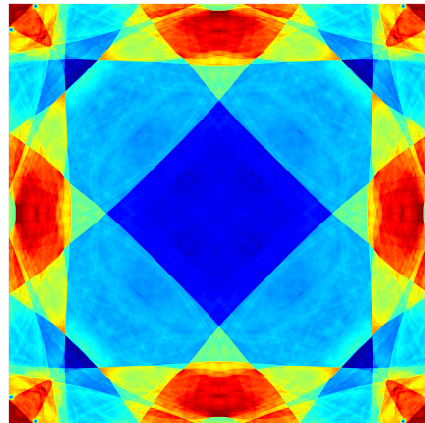


Fig. 5.6 Numerical solutions of the 2D implosion test at $t = 2.5$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme, top: density, bottom: pressure).

2次元爆縮問題における密度及び圧力の数値解を図 5.6 に示す. ただし, 密度値の表示範囲は $[0.41, 1.07]$, 圧力値の表示範囲は $[0.74, 1.1]$ (青色, 赤色) とした. 図 5.6 の左側は従来法, 右側は対称性保存解法による結果である. 従来法では, 渦の軌跡が対称性誤差によって曲がっているのに対し, 対称性保存解法では真っすぐ対角線方向に進んでいる. 中心部の渦構造につ

いても、対称性保存解法は x 軸対称性、 y 軸対称性、及び対角線対称性の全てを完全に保存できていることが分かる。

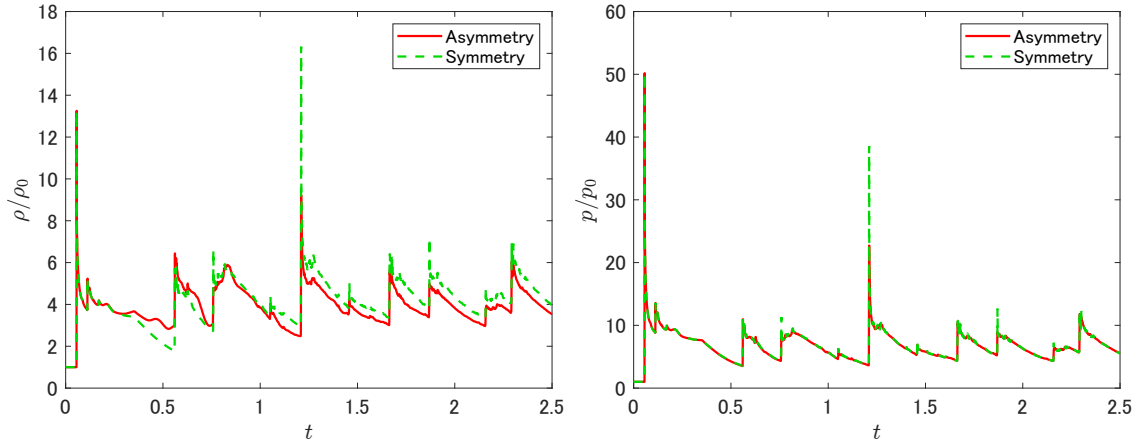


Fig. 5.7 Time variation of density and pressure values at the center point of the computational domain in the 2D implosion test (left: density, right: pressure).

計算領域の中心点における密度及び圧力の値の時間変化について、図 5.7 に示す。ただし密度と圧力の値はそれぞれ $t = 0$ の値で正規化されていて、格子数は 800×800 としている。2次元爆縮問題では、全境界に反射境界条件を適用しているため、衝撃波が複数回にわたって計算領域中心部に集束する。特に $t \approx 0.0566, 1.21$ で密度と圧力の値にピークが見られ、衝撃波が中心点に収束していることが分かる。対称性保存解法では、従来解法と比べて、密度及び圧力の2回目のピーク値にそれぞれ約 1.77 倍、1.70 倍の差が見られた。従来解法では、反射した衝撃波が対称性誤差によって中心部からわずかに逸れた領域で集束したことで、対称性保存解法と比べて密度及び圧力のピーク値が小さくなったと考えられる。このような特性により、例えば慣性核融合の数値解析において、従来解法ではエネルギーが中心部に集束せず分散し、エネルギー効率が低下する問題を対称性保存解法により解決できる可能性を示した。

5.6.4 3次元爆縮問題

2次元爆縮問題を3次元に拡張することで、3次元空間における対称性の保存性を検証できる [78]。計算領域は $x \in [-0.3, 0.3]$, $y \in [-0.3, 0.3]$, $z \in [-0.3, 0.3]$ 、基本変数についての初期条件は、

$$(\rho_0, u_0, v_0, w_0, p_0) = \begin{cases} (0.125, 0, 0, 0, 0.14), & \text{if } |x| + |y| + |z| < 0.15 \\ (1, 0, 0, 0, 1), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.40)$$

と表される。境界条件は反射境界とする。格子数は $100 \times 100 \times 100$ 、比熱比は $\gamma = 1.4$ とする。

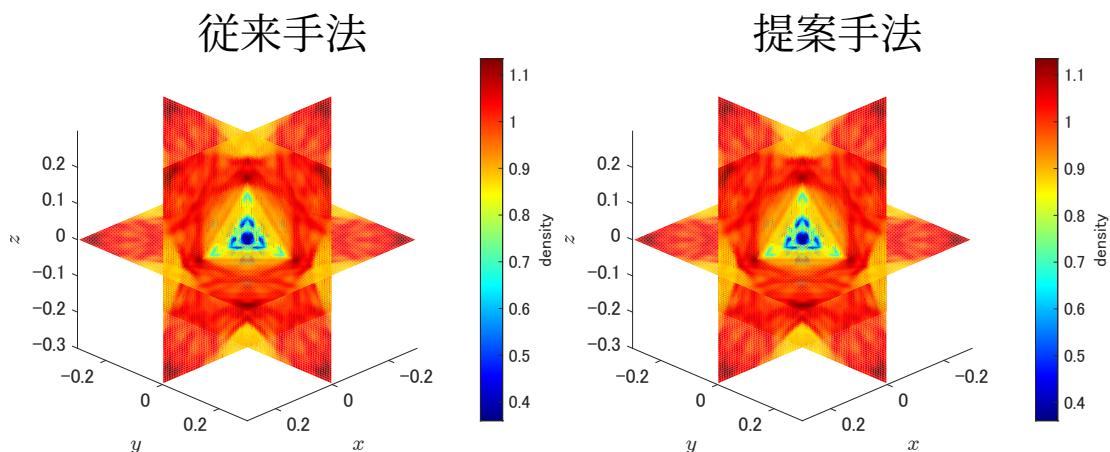


Fig. 5.8 Numerical solutions of the 3D implosion test at $t = 2.5$ (left: original scheme, right: symmetry-preserving scheme, top: density, bottom: pressure).

3次元爆縮問題における密度及び圧力の数値解を図5.8に示す。ただし、密度値の表示範囲は $[0.36, 1.13]$ （青色，赤色）とした。図5.8の左側は従来法，右側は対称性保存解法による結果である。従来法と対称性保存解法の間で大きな違いは見られないが，従来法の数値結果における密度の対称性誤差の計算領域における最大値は 4.26×10^{-2} となっており，対称性誤差が生じている。一方で，対称性保存解法では対称性誤差の最大値は0であり，3次元空間においても平面对称性および対角線対称性を完全に保存している。

5.7 空間対称性を保存する意義および実用性について

本章で説明した対称性保存解法の意義および実用性について，以下の観点で議論する。

- 対称な部分のみを取り出す従来手法による解析と，本章の対称性保存解法との数値解の比較
- 本章の対称性保存解法が重要となる実現象の例

一点目について，対称な部分のみを取り出す従来手法による解析では，完全対称な境界条件を適用することで，従来手法で空間対称性を厳密に保つ数値解が得られる。完全対称な境界条件とは，対称性を有する境界を通過する質量流束および全エネルギー流束を強制的に0とする手法を指す。この点において，本章の対称性保存解法では，対称面（または対称線）を通過する質量流束および全エネルギー流束は自動的に0となることから，対称な部分のみの解析と比べて丸め誤差レベルで異なる数値解が得られると予想される。この差が物理現象の再現にどのように影響するかの調査は今後の課題とする。

二点目の，対称性保存解法の実用性について議論する。例えばレイリーテイラー不安定性の解析では，軽い流体の内部に侵入する重い流体の先端位置が，不安定性の成長度合いの指標と

して用いられる。非線形性を考慮した不安定性の成長速度の解析には、高解像度での流れの数値計算が重要であるが、図 5.3 に示したように、対称性誤差によって流れが対称軸から曲がって進むことで、流れの先端位置の計算精度が悪化する。そのため、レイリーテイラー不安定性の成長速度の解析では空間対称性の保存が重要であると言える。また、慣性閉じ込め核融合のシミュレーションでは、中心点に向かって様々な方向からレーザーを照射し、高温高圧のプラズマを生成する。エネルギーが中心部に集中するようにレーザーを照射することで効率の良い燃焼を達成できるが、空間対称性誤差の含まれる数値解法で再現する場合、プラズマが非対称的に流動し、本来のエネルギー効率を正しく評価できない可能性がある。中心部にエネルギーが集束せず、圧力および温度の数値解が低い値となると、化学反応の再現も困難となる。レーザーを配置する位置によっては、対称な部分のみを取り出す解析が困難となる場合も考えられる。慣性閉じ込め核融合を高精度にシミュレーションするためには、空間対称性を保つ数値解法が重要であると言える。ただし、本研究で示した対称性保存解法は、 x, y, z 軸に対して垂直方向、および対角方向に関する対称性のみを考慮しているため、様々な方向の対称性を持つ問題に対してはさらなる改良が必要となる。

5.8 5章のまとめ

本章では、高解像度数値解法において顕著となる対称性誤差について議論した。初めに、2次元および3次元空間における対称性のパターンを平面对称性と対角線対称性に分類し、対称関係にある物理変数について表 5.1 と 5.2 で明示した。対称性誤差が発生する主な原因は、数学における和や積の結合性が浮動小数点演算では成り立たず、非対称な丸め誤差が導入されることにある。すなわち、3つ以上の浮動小数点数の和や積の計算について、その計算順序を指定することで、対称性誤差の主な原因を解消することが出来る。具体的には、表 5.3 に示した修正を行うことで、有限体積法における対称性誤差を根本的に排除することが出来る。いくつかの数値テストの結果から、提案する対称性保存法は2次元および3次元空間において平面对称性と対角線対称性の双方を保持できることを示した。

第6章

気液二相圧縮性流れへの展開

高解像度数値解析を気液二相圧縮性流れへ展開する。単相圧縮性流れと異なり，気液二相圧縮性流れでは支配方程式に非保存項や表面張力項，緩和項が含まれる。単相圧縮性流れと比べて計算手順が複雑化するため，安定かつ高解像度な数値解法の確立は数値流体力学分野における挑戦的な課題の一つとされている。特に，気液二相圧縮性流れでは数値振動を回避するために空間再構築法に MUSCL 法を用いることが一般的であるが，MUSCL 法は接触不連続や気液界面といった不連続解近傍で過剰な数値散逸誤差をもたらし，長時間計算で不連続的な流れ構造を非物理的に拡散させてしまう。このような大きな数値散逸誤差は，計算精度を劣化させるだけでなく，界面の位置が不明瞭になることで表面張力や相変化といった界面特有の物理現象を再現不能にしてしまう。本章では，高解像度の空間再構築法として MUSCL-THINC-BVD 法および Adaptive THINC-BVD 法を採用し，表面張力または相変化を考慮する気液二相圧縮性流れの数値解析に適用する。それぞれの代表的なベンチマークテストを解き，代表的な既存解法である MUSCL 法と比較して数値解法の性能を評価する。表面張力を考慮する Allaire らの 5 方程式モデルと，相変化を考慮する Pelanti と Shyue の 6 方程式モデルを支配方程式とし，高解像度数値解法の一連の計算手順を示す。

6.1 フラクショナルステップ時間積分法

2.2.2 節で準安定状態から平衡状態への遷移をモデル化する緩和について説明した。6 方程式モデル (2.72) の場合，圧力，温度，ギブスエネルギーの緩和項を含めることで，それぞれ力学的平衡，熱的平衡，化学的平衡が達成される。通常，緩和項の計算はそれ以外の項と切り離して別々に計算される。つまり，方程式モデルを次式のように同次部と緩和部に分けて，順番

に計算する.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) - \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}), \quad (\text{homogeneous part}) \quad (6.1a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = \boldsymbol{\psi}_p(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\psi}_T(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\psi}_G(\mathbf{U}) \quad (\text{relaxation part}) \quad (6.1b)$$

同次部の計算は、有限体積法などを用いて、時間刻み Δt で解を時間発展させる。緩和部の計算は、同次部の計算で得られた解（準安定状態）を用いて、緩和後の解を計算する。同次部と緩和部の計算オペレーターをそれぞれ $\mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t}$, $\mathcal{L}_{\text{relax}}$ と表記すると、時間ステップ t^n の解から t^{n+1} の解を得る計算は、

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathcal{L}_{\text{relax}} \mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t} \mathbf{U}^n \quad (6.2)$$

と表現される。このように同次部と緩和部を別々に時間発展させる解法は Strang split [123] と呼ばれ、気液二相圧縮性流れの緩和項の計算に頻繁に用いられるフラクショナルステップ時間積分法 [109] の一つである。6.2 節から 6.6 節までは同次部 (6.1a) の計算、6.7 節では緩和部 (6.1b) の計算手順について説明する。

6.2 空間離散法

気液二相圧縮性流れの方程式モデルの同次部 (6.1a) は、単相圧縮性流れと異なり非保存項を持つ。非保存項を含む方程式に対して、空間離散法は主に数値流束法、波動伝播法 (wave-propagation method) [41, 126, 129, 147, 183–185], 経路保存法 (path-conservative method) [94, 125, 186–192] などが挙げられる。ここでは数値流束法と波動伝播法の計算手順について説明する。

各空間離散法の説明を簡略化するため、6.2 節では方程式モデルを 1 次元空間として扱う。すなわち方程式の同次部 (6.1a) を

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} + \boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}\right) = \mathbf{0} \quad (6.3)$$

として、計算手順を説明する。 \mathbf{U} は未知変数、 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ は x 方向の流束、 $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \partial \mathbf{U} / \partial x)$ は非保存項を表す。これらの変数は、Allaire らの 5 方程式モデル [131] の場合、

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \alpha_1 u \\ \alpha_1 \rho_1 u \\ \alpha_2 \rho_2 u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \partial_x \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \partial_x u \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6.4)$$

Pelanti と Shyue の 6 方程式モデル [126] の場合,

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho u \\ \alpha_1 \rho_1 E_1 \\ \alpha_2 \rho_2 E_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \alpha_1 u \\ \alpha_1 \rho_1 u \\ \alpha_2 \rho_2 u \\ \rho u^2 + (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2) \\ \alpha_1 (\rho_1 E_1 + p_1) u \\ \alpha_2 (\rho_2 E_2 + p_2) u \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \partial_x \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \partial_x u \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \Upsilon \\ -\Upsilon \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

となる. ただし 6 方程式モデルの相全エネルギーの方程式に含まれる非保存項 Υ は,

$$\Upsilon = -u \left(Y_2 \frac{\partial(\alpha_1 p_1)}{\partial x} - Y_1 \frac{\partial(\alpha_2 p_2)}{\partial x} \right) \quad (6.6)$$

である.

6.2.1 数値流束法

単相圧縮性流れと同様に数値流束をセル境界で計算する手法を, 本研究では数値流束法と呼ぶ. 流束と非保存項の積分値を別々に評価し, 空間離散式を計算する. 具体的には, 支配方程式 (6.3) を区間 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ で積分する.

$$\frac{d\bar{\mathbf{U}}_i}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{\mathbf{F}}_{i-\frac{1}{2}} \right) - \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right) dx \quad (6.7)$$

ただし $\bar{\mathbf{U}}_i$ はセル Ω_i における積分平均値を表し,

$$\bar{\mathbf{U}}_i(t) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{U}(x, t) dx \quad (6.8)$$

として定義される. $\hat{\mathbf{F}}_{i+1/2}$ は数値流束を表し, 各セル境界でリーマンソルバーを用いて計算される.

$$\hat{\mathbf{F}}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{F}^{\text{Riemann}} \left(\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{L}}, \mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^{\text{R}} \right) \quad (6.9)$$

非保存項 $\boldsymbol{\sigma}$ の積分は, ガウス求積法などの数値積分で計算可能である. 数値流束法のコンセプトはシンプルであるが, 非保存項の計算において未知変数の勾配 $\partial \mathbf{U} / \partial x$ の補間や数値積分が必要となり, 余計な計算コストや計算誤差を発生させる可能性がある.

6.2.2 波動伝播法

支配方程式 (6.3) 中の非保存項 $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \partial \mathbf{U} / \partial x)$ が行列 $\mathbf{B}(\mathbf{U})$ を用いて

$$\boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{U}, \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right) = \mathbf{B}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \quad (6.10)$$

と表せるとき，支配方程式 (6.3) は次式の様な準線形の偏微分方程式として記述できる．

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (6.11)$$

ただしヤコビアン行列 \mathbf{A} は

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} + \mathbf{B}(\mathbf{U}) \quad (6.12)$$

と定義される．Allaire らの 5 方程式モデル (6.4) および Pelanti と Shyue の 6 方程式モデル (6.5) のどちらの場合もヤコビアン行列 \mathbf{A} を定義でき，全ての固有値が実数であることから 5 方程式モデルと 6 方程式モデルはともに双曲型偏微分方程式であることを確認できる．

準線形方程式 (6.11) を区間 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ で積分するとき，変動 (fluctuation) と呼ばれる変数 $\mathcal{A}^{\pm} \Delta \mathbf{u}_{i+1/2}$ と $\mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i$ を用いて，

$$\frac{d\bar{\mathbf{U}}_i}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{A}(\mathbf{U}) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} dx \quad (6.13)$$

$$= -\frac{1}{\Delta x} \left(\mathcal{A}^+ \Delta \mathbf{u}_{i-1/2} + \mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i + \mathcal{A}^- \Delta \mathbf{u}_{i+1/2} \right) \quad (6.14)$$

の様に計算される．変動について概略図を図 6.1 に示す． $\mathcal{A}^+ \Delta \mathbf{u}_{i+1/2}$ と $\mathcal{A}^- \Delta \mathbf{u}_{i+1/2}$ はそれ

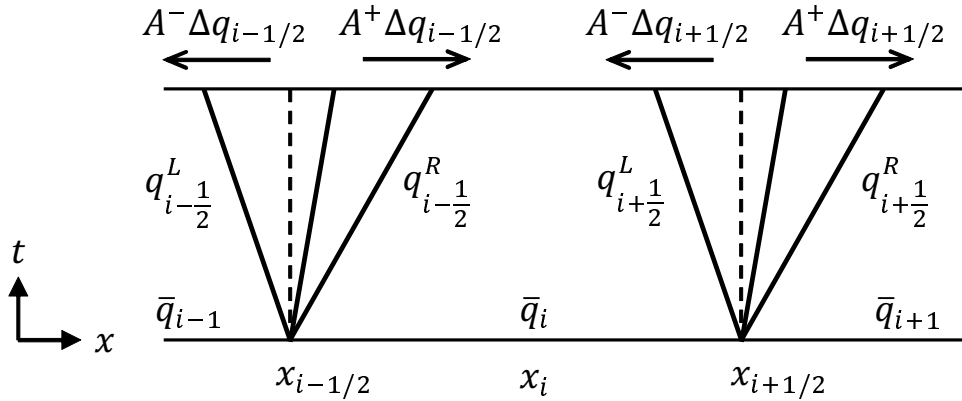


Fig. 6.1 A schematic diagram of the wave-propagation method.

ぞれセル境界 $x_{i+1/2}$ における正方向または負方向に進む変動を表し， $\mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i$ はセル境界 $x_{i-1/2}$ と $x_{i+1/2}$ の間すなわちセル内の変動の合計を表す．これらの変動はリーマン問題を解くことで計算される．例えば HLLC リーマンソルバーを用いる場合，図 3.7 に示すようにリーマン問題の解は 3 本の特性線と 4 つの状態で構成される．各特性線の速度を S^l ，特性線をまたぐ物理量の変化を \mathcal{W}^l ($l = 1, 2, 3$) とおくと，

$$S^1 = S^L, \quad S^2 = S^*, \quad S^3 = S^R, \quad (6.15)$$

$$\mathcal{W}^1 = \mathbf{U}^{*L} - \mathbf{U}^L, \quad \mathcal{W}^2 = \mathbf{U}^{*R} - \mathbf{U}^{*L}, \quad \mathcal{W}^3 = \mathbf{U}^R - \mathbf{U}^{*R}, \quad (6.16)$$

となる．セル境界の変動 $\mathcal{A}^\pm \Delta \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}$ は

$$\mathcal{A}^\pm \Delta \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{l=1}^3 \left(S_{i+\frac{1}{2}}^l \right)^\pm \mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^l \quad (6.17)$$

と計算される．ここで $(S)^\pm = (S \pm |S|)/2$ により特性速度がそれぞれ正方向および負方向に分離されている．また，セル内の変動 $\mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i$ は，セル境界値 $\mathbf{U}_{i-1/2}^R$ と $\mathbf{U}_{i+1/2}^L$ を用いたリーマン問題の解から計算される [147,185]．3つの特性線の速度 S^l ，特性線をまたぐ物理量の変化 \mathbf{w}^l ($l = 1, 2, 3$) を求め，

$$\mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i = \sum_{l=1}^3 S_i^l \mathbf{w}_i^l \quad (6.18)$$

と計算する．この計算方法は，古典的な波動伝播法 [183] と比べ，任意の再構築関数に対応している点で，THINC 補間関数を用いる本研究の計算手法に適している．

6.3 気液二相流における高解像度空間再構築法

6.2.1 節の数値流束法や 6.2.2 節の波動伝播法の計算では，セル境界値 $\mathbf{U}_{i+1/2}^{L/R}$ が必要となる．単相圧縮性流れでは，3章で述べたように，高次線形多項式関数と THINC 関数を組み合わせるハイブリッド型 BVD 法が有効な高解像度数値解法である．一方で気液二相圧縮性流れでは，僅かな数値振動でも計算が破綻するため，3次以上の高精度解法の適用は容易ではない．気液二相圧縮性流れの状態方程式は，問題によって複雑な定式化を必要とする場合があり，単相圧縮性流れに比べて特性変数の再構築が困難になることがある．本研究で使用する stiffened gas 状態方程式 (2.2.8 節) は比較的シンプルな定式であり，特性変数の再構築が可能である．しかし，経験的に，特性変数を用いたとしても，気液二相流において5次精度の解法では数値振動が生じることが確認されている [193]．したがって，気液二相圧縮性流れでは数値振動誤差を回避するため2次精度の解法が主流となっている．

6.3.1 2次精度 BVD 再構築法

本研究では，文献 [36,41] で提案された2次精度の MUSCL-THINC-BVD 法および Adaptive THINC-BVD 法を用いて空間再構築を行う．MUSCL-THINC-BVD 法は MUSCL 補間と THINC(β_1) 補間，Adaptive THINC-BVD 法は THINC(β_s) 補間と THINC(β_1) 補間を BVD 原理に基づき組み合わせる．補間関数の選択手順は，気液二相流では選択アルゴリズム IIの方がIVよりやや優れている．これらの数値解法はともに2次精度であるため致命的な数値振動を引き起こさず，不連続解近傍では THINC(β_1) 補間を適用することで不連続解を低散逸に捉える．以下，MUSCL-THINC-BVD 法および Adaptive THINC-BVD 法に

おけるセル Ω_i の補間関数の選択手順を示す．ただし， A, B は二つの候補補間関数を表し，MUSCL-THINC-BVD 法の場合は $A = \text{MUSCL}$ ， $B = \text{THINC}(\beta_1)$ ，Adaptive THINC-BVD 法の場合は $A = \text{THINC}(\beta_s)$ ， $B = \text{THINC}(\beta_1)$ として読み替える．

- (1) 補間法 A および補間法 B による再構築を行い，minimum TBV($mTBV$) の値をそれぞれ計算する．

$$mTBV_i^\xi = \min \left(\begin{aligned} & \left| q_{L,i-\frac{1}{2}}^A - q_{R,i-\frac{1}{2}}^\xi \right| + \left| q_{L,i+\frac{1}{2}}^\xi - q_{R,i+\frac{1}{2}}^A \right|, \\ & \left| q_{L,i-\frac{1}{2}}^A - q_{R,i-\frac{1}{2}}^\xi \right| + \left| q_{L,i+\frac{1}{2}}^\xi - q_{R,i+\frac{1}{2}}^B \right|, \\ & \left| q_{L,i-\frac{1}{2}}^B - q_{R,i-\frac{1}{2}}^\xi \right| + \left| q_{L,i+\frac{1}{2}}^\xi - q_{R,i+\frac{1}{2}}^A \right|, \\ & \left| q_{L,i-\frac{1}{2}}^B - q_{R,i-\frac{1}{2}}^\xi \right| + \left| q_{L,i+\frac{1}{2}}^\xi - q_{R,i+\frac{1}{2}}^B \right| \end{aligned} \right), \quad (6.19)$$

ただし ξ は A または B である．

- (2) 各補間法の $mTBV_i$ の値を比較し，小さい方の補間関数を選択する．

$$Q_i = \begin{cases} Q_i^A(x), & \text{if } mTBV_i^A < mTBV_i^B, \\ Q_i^B(x), & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (6.20)$$

式 (6.19) で再構築変数を一般的に q と表現した．気液二相圧縮性流れの数値計算では，基本変数 $\mathbf{q}^p = (\alpha_1, \rho_1, \rho_2, \vec{u}, p)^\top$ や準基本変数 $\mathbf{q}^{\text{qp}} = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \vec{u}, p)^\top$ について空間再構築を行う．また，THINC 補間の勾配パラメータの値は文献 [36] の解析に基づき $\beta_s = 1.1$ ， $\beta_1 = 1.6$ とする．

6.3.2 5セル型 β 可変 THINC 補間の適用可能性について

上述の2次精度 BVD 法の代わりに，4.3.3 節で示した5セル型 β 可変 THINC 補間法を適用することができれば，単一の2次精度補間関数で滑らかな解から不連続解まで捉えられるため，計算コストの削減につながる．気液二相圧縮性流れのベンチマークテストを5セル型 β 可変 THINC 補間法で計算し，1次元のテストでは概ね良好な数値結果が得られている一方で，多次元ではやや散逸的な結果となっている．勾配パラメータ β の計算方法に問題があると考えられ，多次元問題においても高解像度な結果を得られる β の計算手順の定式化が求められる．

6.4 表面張力の計算 (5 方程式モデル)

6.4.1 CSF モデル

表面張力は、分子粘性の効果により気液界面等で力学的平衡が保たれるように界面形状を変形させる力である。5 方程式モデルのように気液二相流れを連続体とみなし計算する際、表面張力はモデルとして実装される。特に界面を拡散領域で扱う際、表面張力を体積力として表現する Continuum Surface Force (CSF) モデル [194] が良く用いられる。5 方程式モデルに CSF モデルの表面張力項を追加する。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad (6.21)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_1 \rho_1 \\ \alpha_2 \rho_2 \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \alpha_1 \vec{u} \\ \alpha_1 \rho_1 \vec{u} \\ \alpha_2 \rho_2 \vec{u} \\ \rho \vec{u} \otimes \vec{u} + p \mathbb{I} \\ (\rho E + p) \vec{u} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} -\alpha_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma \kappa \vec{\nabla} \psi \\ -\sigma \kappa \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{u} \end{bmatrix} \quad (6.22)$$

ただし、 σ は表面張力係数、 κ は界面曲率、 ψ はカラー関数を表す。表面張力係数 σ は物質固有のパラメータとして与えられる。界面曲率 κ は体積分率などの値を用いて補間される（次節で計算手順を示す）。カラー関数 ψ は、体積分率や質量分率などの相を表す値である。体積分率や質量分率の分布は不連続的で補間誤差が大きいため、

$$\psi = \frac{(\alpha_1)^{0.1}}{(\alpha_1)^{0.1} + (\alpha_2)^{0.1}} \quad (6.23)$$

として滑らかな分布に修正する手法が有効である [195]。

6.4.2 界面曲率の計算

表面張力の計算において最も重要な要素は、解の曲率の計算である。曲率の値に大きな誤差が含まれると、界面を挟む圧力のバランスが保てず、界面近傍で spurious current と呼ばれる非物理的な流動が発生する。シャープ界面モデルにおける高精度な曲率計算法として、レベルセット法 [196] や高さ関数法 [197–201] などが知られている。

本研究では、文献 [148, 195] で提案された、拡散界面モデルにおいて spurious current を抑制する曲率計算法を用いる。この手法では、初めに曲率を次の様に界面の単位法線ベクトルの発散として計算する。

$$\kappa = -\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \psi}{\|\vec{\nabla} \psi\|} \right) \quad (6.24)$$

式 (6.24) における微分の離散空間での計算は、本研究では 2 次線形多項式補間で行う。具体的には、2 次元空間で構造格子上で計算する場合、セル $\Omega_{i,j}$ における勾配ベクトル $\vec{\nabla}\psi_{i,j}$ を、

$$\left. \frac{\partial\psi}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{-\psi_{i-1,j} + \psi_{i+1,j}}{2\Delta x}, \quad \left. \frac{\partial\psi}{\partial y} \right|_{i,j} = \frac{-\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j+1}}{2\Delta y} \quad (6.25)$$

と補間し、

$$\vec{n}_{i,j} = \frac{\vec{\nabla}\psi}{\|\vec{\nabla}\psi\|} \quad (6.26)$$

として勾配ベクトルを正規化し単位法線ベクトル $\vec{n}_{i,j}$ の値を計算する。ただし、 $\|\vec{\nabla}\psi\| < 10^{-20}$ では正規化は行わない。セル $\Omega_{i,j}$ における曲率の値 $\kappa_{i,j}$ を、 $\vec{n}_{i,j} = (n_{x,i,j}, n_{y,i,j})$ とし、

$$\kappa_{i,j} = -\left(\frac{-n_{x,i-1,j} + n_{x,i+1,j}}{2\Delta x} + \frac{-n_{y,i,j-1} + n_{y,i,j+1}}{2\Delta y} \right) \quad (6.27)$$

と計算する。

式 (6.27) で得られる曲率をそのまま用いて表面張力を計算することも可能であるが、spurious current と呼ばれる非物理的な流動を引き起こしやすいことが知られている [148, 195]。拡散界面モデルでは、界面を表現する領域内で一定の曲率値を与えることで、界面を挟む圧力のバランスが保たれ、spurious current を抑制できると期待される。この考え方にに基づき、体積分率の値が 0.5 に近い場所の曲率の値をフィルタリング操作により周囲のセルに伝播させることで、界面領域内の曲率値を一定に近づける。具体的には、全てのセルで式 (6.27) より曲率の値を求めた後、次式の計算で各セルの曲率値を更新する。

$$\kappa_{i,j}^{n+1} = \frac{\sum_m \omega_m \kappa_m^n}{\sum_m \omega_m} \quad (6.28)$$

ただし添え字 m は、セル $\Omega_{i,j}$ を格子点を共有するセルのインデックス $(i-1, j-1)$, $(i, j-1)$, $(i+1, j-1)$, $(i-1, j)$, (i, j) , $(i+1, j)$, $(i-1, j+1)$, $(i, j+1)$, $(i+1, j+1)$ を表す。重み係数 ω_m は、体積分率の値が 0.5 の時に最大値を取る関数であり、

$$\omega_m = (\alpha_{1,m}(1 - \alpha_{1,m}))^2 \quad (6.29)$$

が用いられる。式 (6.28) のフィルタリング操作を数回行うことで、体積分率の値が 0.5 に近い場所の曲率の値が周囲数セルの範囲にコピーされ、界面領域内の曲率値が一定値に近づき、spurious current が抑制される。

6.5 リーマンソルバー

6.5.1 HLLC ソルバー

気液二相流の HLLC ソルバーは、3.5.1 節で説明した单相流の HLLC ソルバーから拡張される、全ての特性波を考慮するリーマンソルバーである。Allaire らの 5 方程式モデルおよび Pelanti と Shyue の 6 方程式モデルは、ともに特性速度が $u - c$, u , $u + c$ の 3 種類であるため、特性線の本数などのリーマン問題の解の構造は单相流の場合 (図 3.7) と変わらない。ランキンユゴニオ条件を用いて、リーマンファン内の流束 \mathbf{F}^{*K} は

$$\mathbf{F}^{*K} = \mathbf{F}^K + S^K(\mathbf{U}^{*K} - \mathbf{U}^K) \quad (K = L \text{ or } R) \quad (6.30)$$

と計算され、リーマンファン内の物理量 \mathbf{U}^{*K} は 5 方程式モデル (+表面張力) の場合、

$$\mathbf{U}^{*K} = \begin{bmatrix} \alpha_1^K \\ (\alpha_1 \rho_1)^K \chi^K \\ (\alpha_2 \rho_2)^K \chi^K \\ \rho^K S^* \chi^K \\ \rho^K \chi^K \left(E^K + (S^* - u^K) \left(S^* + \frac{p^K - \sigma \kappa \alpha_1^K}{\rho^K (S^K - u^K)} \right) \right) \end{bmatrix} \quad (K = L \text{ or } R), \quad (6.31)$$

6 方程式モデルの場合、

$$\mathbf{U}^{*K} = \begin{bmatrix} \alpha_1^K \\ (\alpha_1 \rho_1)^K \chi^K \\ (\alpha_2 \rho_2)^K \chi^K \\ \rho^K S^* \chi^K \\ (\alpha_1 \rho_1)^K \chi^K \left(E_1^K + (S^* - u^K) \left(S^* + \frac{p^K}{\rho_1^K (S^K - u^K)} \right) \right) \\ (\alpha_2 \rho_2)^K \chi^K \left(E_2^K + (S^* - u^K) \left(S^* + \frac{p^K}{\rho_2^K (S^K - u^K)} \right) \right) \end{bmatrix} \quad (K = L \text{ or } R) \quad (6.32)$$

と導出される。ただし χ^K は、

$$\chi^K = \frac{S^K - u^K}{S^K - S^*} \quad (K = L \text{ or } R) \quad (6.33)$$

である。表面張力の計算で現れる曲率 κ のセル境界における値は、そのセル境界を挟む二つのセルで計算される曲率の平均、すなわち $\kappa_{i+1/2,j} = (\kappa_{i,j} + \kappa_{i+1,j})/2$ として計算する。6 方程式モデルの圧力 p^K は、 $p^K = (\alpha_1 p_1)^K + (\alpha_2 p_2)^K$ を表す。どちらのモデルにおいても、ランキンユゴニオ条件を用いる際に非保存項を無視していることに注意する。リーマンソルバーの計算の中で非保存項を無視してランキンユゴニオ条件を用いても数値解に大きな影響は無いことが報告されている [126, 182]。Pelanti と Shyue の 6 方程式モデルで非保存項を考慮した経路保存法 [192] が提案されているが、本手法と比較して計算精度の観点で大きな差は生じな

いことを数値テストで確認している．また，接触不連続面に対応する波の速度 S^* については，5 方程式モデル（+表面張力）の場合，

$$S^* = \frac{p^R - p^L + \rho^L u^L (S^L - u^L) - \rho^R u^R (S^R - u^R) - \sigma \kappa (\alpha_1^R - \alpha_1^L)}{\rho^L (S^L - u^L) - \rho^R (S^R - u^R)}, \quad (6.34)$$

6 方程式モデルの場合，

$$S^* = \frac{p^R - p^L + \rho^L u^L (S^L - u^L) - \rho^R u^R (S^R - u^R)}{\rho^L (S^L - u^L) - \rho^R (S^R - u^R)} \quad (6.35)$$

が成り立つ．残る未知変数は左右に進む特性線の速度 S^L および S^R であり，これらを近似的に計算する．単相流では PVRS 法を用いたが，気液二相流では別のシンプルかつ安定な計算方法として，Einfeldt [202] により提案された以下の式を用いる．

$$S^L = \min(0, u^L - c^L, \bar{u} - \bar{c}), \quad S^R = \max(0, u^R + c^R, \bar{u} + \bar{c}) \quad (6.36)$$

ただし $\bar{u} = (u^L + u^R)/2$ ， $\bar{c} = (c^L + c^R)/2$ である． S^L および S^R を用いて式 (6.34) および (6.35) の S^* の値が得られ，リーマンファン内の物理量 U^{*K} と流束 F^{*K} が計算される．波動伝播法を用いる場合，変動 (6.17) および (6.18) の計算において，リーマンファン内の物理量 U^{*K} のみ必要となる．数値流束法を用いる場合，次の様に上流側の流束を決定する．

$$F^{\text{HLLC}} = \begin{cases} F^L, & \text{if } 0 \leq S^L \\ F^{*L}, & \text{if } S^L \leq 0 \leq S^* \\ F^{*R}, & \text{if } S^* \leq 0 \leq S^R \\ F^R, & \text{if } S^R \leq 0 \end{cases} \quad (6.37)$$

6.6 時間積分法

数値流束法や波動伝播法などを用いて同次部 (6.1a) を空間で離散化し，6.1 節で導入した同次部の計算オペレーター $\mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t}$ の計算を行う．例えば波動伝播法の場合，

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t}(\mathbf{U}) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) - \sigma(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) \\ &= -\frac{1}{\Delta x} \left(\mathcal{A}^+ \Delta \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}} + \mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i + \mathcal{A}^- \Delta \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (6.38)$$

と計算される．この計算オペレーターを用いて，3.6.1 節で示したルンゲクッタ法により数値解を時間発展させる．ルンゲクッタ法の各サブステップで緩和を行うため，3 段 3 次のルンゲ

クッタ法の計算手順は次の様に表される。

$$\begin{aligned}\bar{U}_i^* &= \mathcal{L}_{\text{relax}}\left(\bar{U}_i^n + \mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t}(\bar{U}_i^n)\Delta t\right), \\ \bar{U}_i^{**} &= \mathcal{L}_{\text{relax}}\left(\frac{3}{4}\bar{U}_i^n + \frac{1}{4}\bar{U}_i^* + \frac{1}{4}\mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t}(\bar{U}_i^*)\Delta t\right), \\ \bar{U}_i^{n+1} &= \mathcal{L}_{\text{relax}}\left(\frac{1}{3}\bar{U}_i^n + \frac{2}{3}\bar{U}_i^{**} + \frac{2}{3}\mathcal{L}_{\text{hom}}^{\Delta t}(\bar{U}_i^{**})\Delta t\right)\end{aligned}\quad (6.39)$$

次節で緩和の計算オペレーター $\mathcal{L}_{\text{relax}}$ について説明する。

6.7 緩和項の計算 (6 方程式モデル)

6 方程式モデルの同次部を時間発展させた後の数値解は一般的に、圧力、温度、ギブスエネルギーが界面をまたいで非平衡となる。これらの物理量の平衡状態を達成するために追加される緩和項 (6.1b) の計算手順について説明する。圧力、温度、ギブスエネルギーの順に緩和速度が速いと仮定すると、考えられる緩和オペレーターの種類は、圧力緩和 \mathcal{L}_p 、圧力・温度緩和 \mathcal{L}_{pT} 、圧力・温度・ギブスエネルギー緩和 \mathcal{L}_{pTG} の 3 種類である。これらの緩和計算は、緩和部 (6.1b) のそれぞれ $\psi_p(\mathbf{U})$ 、 $\psi_p(\mathbf{U}) + \psi_T(\mathbf{U})$ 、 $\psi_p(\mathbf{U}) + \psi_T(\mathbf{U}) + \psi_G(\mathbf{U})$ の計算に対応している。式 (6.2) で示した緩和部の計算オペレーター $\mathcal{L}_{\text{relax}}$ は、各緩和オペレーターの順番や組み合わせ方によって決まる。具体的には、次の 4 通りのうち 1 つの緩和法を選ぶ [126]。

$$\mathcal{L}_{\text{relax}} = \mathcal{L}_p, \quad (\text{p-relaxation}), \quad (6.40a)$$

$$\mathcal{L}_{\text{relax}} = \mathcal{L}_{pT}\mathcal{L}_p, \quad (\text{p-pT-relaxation}), \quad (6.40b)$$

$$\mathcal{L}_{\text{relax}} = \mathcal{L}_{pTG} \mathcal{L}_p, \quad (\text{p-pTG-relaxation}), \quad (6.40c)$$

$$\mathcal{L}_{\text{relax}} = \mathcal{L}_{pTG}\mathcal{L}_{pT}\mathcal{L}_p, \quad (\text{p-pT-pTG-relaxation}) \quad (6.40d)$$

p 緩和法 (6.40a) は、圧力の緩和を行い、温度とギブスエネルギーの緩和は行わない。p-pT 緩和法 (6.40b) は、圧力と温度の緩和を行い、ギブスエネルギーの緩和は行わない。p 緩和法と p-pT 緩和法はともに化学的平衡を達成しないため、相変化は再現されない。一方、p-pTG 緩和法 (6.40c) と p-pT-pTG 緩和法 (6.40d) はギブスエネルギーの緩和を行うため、液相または気相の一部が蒸発または凝縮し質量輸送が再現される。

本研究では全ての緩和速度を無限大とするため、緩和方程式 (6.1b) は常微分方程式としてではなく代数方程式として計算される。3 種類の緩和 \mathcal{L}_p 、 \mathcal{L}_{pT} 、 \mathcal{L}_{pTG} の計算手順について、それぞれ 6.7.1、6.7.2、6.7.3 節で説明する。

6.7.1 圧力緩和

非粘性の仮定の下では、各相の圧力が同じとなることで力学的平衡が満たされる。しかし、6 方程式モデルの同次部を解き時間発展させた数値解は、一般に二相の圧力の値が異なる。同

次部で得られた解をもとに緩和方程式を解くことで、二相の圧力を緩和することができる。圧力緩和方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\mu(p_2 - p_1), \quad (6.41a)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} = 0, \quad (6.41b)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} = 0, \quad (6.41c)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} = \vec{0}, \quad (6.41d)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 E_1)}{\partial t} = \mu p_1 (p_2 - p_1), \quad (6.41e)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 E_2)}{\partial t} = -\mu p_1 (p_2 - p_1) \quad (6.41f)$$

ここで圧力緩和速度を $\mu \rightarrow \infty$ とし、瞬時に平衡状態に達すると仮定する。緩和前および後の物理量を上付き文字 0 および * で表すと、常微分方程式 (6.41) は次の様に書き換えられる。

$$p_1^* = p_2^* = p^*, \quad (6.42a)$$

$$(\alpha_1 \rho_1)^0 = (\alpha_1 \rho_1)^*, \quad (6.42b)$$

$$(\alpha_2 \rho_2)^0 = (\alpha_2 \rho_2)^*, \quad (6.42c)$$

$$(\rho \vec{u})^0 = (\rho \vec{u})^*, \quad (6.42d)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 E_1)}{\partial t} = -p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t}, \quad (6.42e)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 E_2)}{\partial t} = p_1 \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \quad (6.42f)$$

条件式 (6.42b)–(6.42d) は、 $\alpha_1 \rho_1$, $\alpha_2 \rho_2$, $\rho \vec{u}$ が圧力緩和の過程で一定であることを意味している。これらの条件から、混合則： $\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 = \rho$ を用いて、 $\rho^0 = \rho^*$, $\vec{u}^0 = \vec{u}^*$ を導ける。条件式 (6.42e) と (6.42f) は式 (6.41a), (6.41e), (6.41f) から得られる。式 (6.42e) と (6.42f) の和より混合全エネルギーは不変なので $(\rho E)^0 = (\rho E)^*$ となる。界面圧力 p_1 を一定と仮定すると、式 (6.42e) と (6.42f) の時間積分より、

$$(\alpha_k \rho_k E_k)^* - (\alpha_k \rho_k E_k)^0 = (\alpha_k \rho_k e_k)^* - (\alpha_k \rho_k e_k)^0 = -p_1 (\alpha_k^* - \alpha_k^0), \quad (k = 1, 2) \quad (6.43)$$

を得る。ここで関係式 $\left(\frac{1}{2} \rho \|\vec{u}\|^2\right)^0 = \left(\frac{1}{2} \rho \|\vec{u}\|^2\right)^*$ と $\partial \alpha_1 / \partial t + \partial \alpha_2 / \partial t = 0$ を用いている。式 (6.43) の相内部エネルギー $\rho_k e_k$ を stiffened gas 状態方程式 (2.84a) で計算すると、条件式 (6.43) から

$$\alpha_k^* = \frac{(\gamma_k - 1)p_1 + p_k^0 + \gamma_k \pi_k}{(\gamma_k - 1)p_1 + p^* + \gamma_k \pi_k} \alpha_k^0, \quad (k = 1, 2), \quad (6.44)$$

を得る。界面圧力を $p_I = p^*$ と仮定する [129] と, $\alpha_1^* + \alpha_2^* = 1$ より p^* に関する 2 次方程式が得られる。

$$a(p^*)^2 + bp^* + d = 0 \quad (6.45)$$

ただし各係数は,

$$a = \gamma_1 \alpha_2^0 + \gamma_2 \alpha_1^0, \quad (6.46a)$$

$$b = -\gamma_1 \alpha_2^0 (p_2^0 - \pi_1) - \gamma_2 \alpha_1^0 (p_1^0 - \pi_2), \quad (6.46b)$$

$$d = -\gamma_1 \alpha_2^0 p_2^0 \pi_1 - \gamma_2 \alpha_1^0 p_1^0 \pi_2 \quad (6.46c)$$

である。浮動小数点演算における桁落ち誤差を回避するため、緩和圧力 p^* を次の様に計算する (付録 C を参照)。

$$p^* = \begin{cases} \frac{2d}{-b - \sqrt{b^2 - 4ad}} & \text{if } b > 0, \\ \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ad}}{2a} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.47)$$

緩和圧力 p^* が得られれば, α_k^* は式 (6.44) から計算できる。その他の圧力緩和によって変化する物理量は次のように更新される。

$$\rho_k^* = \frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\alpha_k^*}, \quad (6.48)$$

$$e_k^* = \frac{p^* + \gamma_k \pi_k}{(\gamma_k - 1) \rho_k^*} + \eta_k, \quad (6.49)$$

$$E_k^* = e_k^* + \frac{1}{2} \|\vec{u}^0\|^2 \quad (6.50)$$

6.7.2 圧力・温度緩和

力学的平衡と熱的平衡を満たすためには、二相の圧力と温度をそれぞれ同じ値に緩和する必要がある。圧力・温度緩和方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\mu(p_2 - p_1) + \frac{\theta(T_2 - T_1)}{\kappa}, \quad (6.51a)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} = 0, \quad (6.51b)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} = 0, \quad (6.51c)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} = \vec{0}, \quad (6.51d)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 E_1)}{\partial t} = \mu p_1 (p_2 - p_1) + \theta(T_2 - T_1), \quad (6.51e)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 E_2)}{\partial t} = -\mu p_1 (p_2 - p_1) - \theta(T_2 - T_1), \quad (6.51f)$$

ここで圧力および温度緩和速度を $\mu, \theta \rightarrow \infty$ とし、瞬時に平衡状態に達すると仮定する。ただし計算コストを削減するため、温度緩和速度を次のように定義し、界面近傍でのみ温度緩和を行う。

$$\theta = \begin{cases} \infty & \text{if } \epsilon_1 \leq \alpha_1 \leq 1 - \epsilon_1, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (6.52)$$

ここで $\epsilon_1 = 10^{-4}$ は界面の幅を決めるパラメータである。緩和前および後の物理量を上付き文字 0 および ** で表すと、常微分方程式 (6.51) は次の様に書き換えられる。

$$p_1^{**} = p_2^{**} = p^{**}, \quad (6.53a)$$

$$T_1^{**} = T_2^{**} = T^{**}, \quad (6.53b)$$

$$(\alpha_1 \rho_1)^0 = (\alpha_1 \rho_1)^{**}, \quad (6.53c)$$

$$(\alpha_2 \rho_2)^0 = (\alpha_2 \rho_2)^{**}, \quad (6.53d)$$

$$(\rho \vec{u})^0 = (\rho \vec{u})^{**}, \quad (6.53e)$$

$$(\rho E)^0 = (\rho E)^{**} \quad (6.53f)$$

式 (6.53c) と (6.53d) から、圧力・温度緩和の過程で混合密度 $\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$ は一定で、同様に質量分率 $Y_k = \alpha_k \rho_k / \rho$ も一定である。式 (6.53e) と (6.53f) から、混合内部エネルギー ρe も一定である。よって、圧力・温度緩和後の混合則 (2.60) および (2.61) は、

$$\frac{Y_1^0}{\rho_1^{**}(p^{**}, T^{**})} + \frac{Y_2^0}{\rho_2^{**}(p^{**}, T^{**})} = \frac{1}{\rho^0}, \quad (6.54a)$$

$$Y_1^0 e_1^{**}(p^{**}, T^{**}) + Y_2^0 e_2^{**}(p^{**}, T^{**}) = e^0 \quad (6.54b)$$

と表せる．緩和後の相密度 ρ_k と相比内部エネルギー e_k は, stiffened gas 状態方程式 (2.84a), (2.84b) より, とともに緩和圧力 p^{**} と緩和温度 T^{**} の関数である．したがって, 式 (6.54) から T^{**} を消去し, p^{**} に関する二次方程式が得られる．

$$a'(p^{**})^2 + b'p^{**} + d' = 0 \quad (6.55)$$

ただし各係数は,

$$a' = Y_1^0 C_{v1} + Y_2^0 C_{v2}, \quad (6.56a)$$

$$b' = Y_1^0 C_{v1} (\gamma_1 \pi_1 + \pi_2 - (\gamma_1 - 1)(\rho \hat{e})^0) + Y_2^0 C_{v2} (\gamma_2 \pi_2 + \pi_1 - (\gamma_2 - 1)(\rho \hat{e})^0), \quad (6.56b)$$

$$d' = Y_1^0 C_{v1} \pi_2 (\gamma_1 \pi_1 - (\gamma_1 - 1)(\rho \hat{e})^0) + Y_2^0 C_{v2} \pi_1 (\gamma_2 \pi_2 - (\gamma_2 - 1)(\rho \hat{e})^0) \quad (6.56c)$$

である．ここで $(\rho \hat{e})^0 = (\rho e)^0 - ((\alpha_1 \rho_1)^0 \eta_1 + (\alpha_2 \rho_2)^0 \eta_2)$ を導入している．浮動小数点演算における桁落ち誤差を回避するため, 緩和圧力 p^{**} は次の様に計算される (付録 C を参照)．

$$p^{**} = \begin{cases} \frac{2d'}{-b' - \sqrt{b'^2 - 4a'd'}} & \text{if } b' > 0, \\ \frac{-b' + \sqrt{b'^2 - 4a'd'}}{2a'} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.57)$$

緩和圧力 p^{**} が得られれば, その他の圧力・温度緩和によって変化する物理量は次の様に更新される．

$$\alpha_1^{**} = \frac{C_{v1}(\gamma_1 - 1)(p^{**} + \pi_2)(\alpha_1 \rho_1)^0}{C_{v1}(\gamma_1 - 1)(p^{**} + \pi_2)(\alpha_1 \rho_1)^0 + C_{v2}(\gamma_2 - 1)(p^{**} + \pi_1)(\alpha_2 \rho_2)^0}, \quad (6.58)$$

$$\rho_k^{**} = \frac{(\alpha_k \rho_k)^0}{\alpha_k^{**}}, \quad (6.59)$$

$$e_k^{**} = \frac{p^{**} + \gamma_k \pi_k}{(\gamma_k - 1)\rho_k^{**}} + \eta_k, \quad (6.60)$$

$$E_k^{**} = e_k^{**} + \frac{1}{2} \|\vec{u}^0\|^2 \quad (6.61)$$

6.7.3 圧力・温度・ギブスエネルギー緩和

力学的平衡, 熱的平衡, 化学的平衡を満たすためには, 二相の圧力, 温度, ギブスエネルギーをそれぞれ同じ値に緩和する必要がある．圧力・温度・ギブスエネルギー緩和方程式は次

式で表される。

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\mu(p_2 - p_1) + \frac{\theta(T_2 - T_1)}{\kappa} + \frac{\nu(G_2 - G_1)}{\rho_1}, \quad (6.62a)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} = \nu(G_2 - G_1), \quad (6.62b)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} = -\nu(G_2 - G_1), \quad (6.62c)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} = \vec{0}, \quad (6.62d)$$

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1 E_1)}{\partial t} = \mu p_1(p_2 - p_1) + \theta(T_2 - T_1) + \nu E_1(G_2 - G_1), \quad (6.62e)$$

$$\frac{\partial(\alpha_2 \rho_2 E_2)}{\partial t} = -\mu p_1(p_2 - p_1) - \theta(T_2 - T_1) - \nu E_1(G_2 - G_1) \quad (6.62f)$$

ここで圧力，温度，ギブスエネルギー緩和速度を $\mu, \theta, \nu \rightarrow \infty$ とし，瞬時に平衡状態に達すると仮定する．ただし計算コストを削減するため，温度およびギブスエネルギー緩和速度を次のように定義し，界面近傍で液相温度が飽和温度より高い場合にのみ緩和を行う．

$$\theta = \begin{cases} \infty & \text{if } \epsilon_1 \leq \alpha_1 \leq 1 - \epsilon_1, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (6.63)$$

$$\nu = \begin{cases} \infty & \text{if } \epsilon_1 \leq \alpha_1 \leq 1 - \epsilon_1 \text{ and } T_{\text{liq}} > T_{\text{sat}}(p), \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (6.64)$$

ここで $\epsilon_1 = 10^{-4}$ は界面の幅を決めるパラメータである．緩和前および後の物理量を上付き文字 0 および \circledast で表すと，常微分方程式 (6.62) は次の様に書き換えられる．

$$p_1^{\circledast} = p_2^{\circledast} = p^{\circledast}, \quad (6.65a)$$

$$T_1^{\circledast} = T_2^{\circledast} = T^{\circledast}, \quad (6.65b)$$

$$G_1^{\circledast} = G_2^{\circledast}, \quad (6.65c)$$

$$\rho^0 = \rho^{\circledast}, \quad (6.65d)$$

$$(\rho \vec{u})^0 = (\rho \vec{u})^{\circledast}, \quad (6.65e)$$

$$(\rho E)^0 = (\rho E)^{\circledast} \quad (6.65f)$$

式 (6.65d)–(6.65f) より，混合内部エネルギー ρe は緩和過程で一定である．したがって，圧力・温度緩和の場合と同様に，緩和後の混合則 (2.60) および (2.61) から，

$$\frac{Y_1^{\circledast}}{\rho_1^{\circledast}(p^{\circledast}, T^{\circledast})} + \frac{Y_2^{\circledast}}{\rho_2^{\circledast}(p^{\circledast}, T^{\circledast})} = \frac{1}{\rho^0}, \quad (6.66a)$$

$$Y_1^{\circledast} e_1^{\circledast}(p^{\circledast}, T^{\circledast}) + Y_2^{\circledast} e_2^{\circledast}(p^{\circledast}, T^{\circledast}) = e^0 \quad (6.66b)$$

が成り立つ．圧力・温度緩和の場合と異なるのは，質量分率 Y_k が一定でないことである．式 (6.66) の Y_1^{\circledast} と Y_2^{\circledast} は， $Y_1^{\circledast} + Y_2^{\circledast} = 1$ を用いて消去できる．よって，緩和圧力 p^{\circledast} の関数と

しての緩和温度 T^* の二次方程式が得られる.

$$a_p(p^*)(T^*(p^*))^2 + b_p(p^*)T^*(p^*) + d_p(p^*) = 0 \quad (6.67)$$

ただし各係数は,

$$a_p(p^*) = \rho^0 C_{v1} C_{v2} ((\gamma_2 - 1)(p^* + \gamma_1 \pi_1) - (\gamma_1 - 1)(p^* + \gamma_2 \pi_2)), \quad (6.68a)$$

$$b_p(p^*) = C_{v2}(p^* + \pi_1)(p^* + \gamma_2 \pi_2 - (\gamma_2 - 1)\rho^0(e^0 - \eta_1)) \\ - C_{v1}(p^* + \pi_2)(p^* + \gamma_1 \pi_1 - (\gamma_1 - 1)\rho^0(e^0 - \eta_2)), \quad (6.68b)$$

$$d_p(p^*) = (\eta_2 - \eta_1)(p^* + \pi_1)(p^* + \pi_2) \quad (6.68c)$$

である. 浮動小数点演算における桁落ち誤差を回避するため, 緩和温度 $T^*(p^*)$ は次の様に計算される (付録 C を参照).

$$T^*(p^*) = \begin{cases} \frac{2d_p(p^*)}{-b_p(p^*) - \sqrt{b_p(p^*)^2 - 4a_p(p^*)d_p(p^*)}} & \text{if } b_p(p^*) > 0, \\ \frac{-b_p(p^*) + \sqrt{b_p(p^*)^2 - 4a_p(p^*)d_p(p^*)}}{2a_p(p^*)} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (6.69)$$

また, 式 (6.65c) は圧力と温度に関する飽和曲線を表しており, stiffened gas 状態方程式 (2.84e) を代入することで圧力と温度に関する次の関係式を得る.

$$A_s + \frac{B_s}{T^*(p^*)} + C_s \ln T^*(p^*) + D_s \ln(p^* + \pi_1) - \ln(p^* + \pi_2) = 0 \quad (6.70)$$

ただし定数係数 A_s, B_s, C_s, D_s はそれぞれ,

$$A_s = \frac{C_{p1} - C_{p2} + \eta'_2 - \eta'_1}{C_{p2} - C_{v2}}, \quad B_s = \frac{\eta_1 - \eta_2}{C_{p2} - C_{v2}}, \quad C_s = \frac{C_{p2} - C_{p1}}{C_{p2} - C_{v2}}, \quad D_s = \frac{C_{p1} - C_{v1}}{C_{p2} - C_{v2}} \quad (6.71)$$

である. 式 (6.69) を用いて式 (6.70) を計算することで, 緩和圧力 p^* のみの式を得ることができる. しかし p^* について解析的に解けないため, ニュートン法や割線法などを用いて数値的に p^* の値を求める. 緩和圧力 p^* の値が得られれば, T^* は式 (6.69) より計算できる. その他の圧力・温度・ギブスエネルギー緩和によって変化する物理量は次の様に更新される.

$$\rho_k^* = \frac{p^* + \pi_k}{(\gamma_k - 1)C_{vk}T^*}, \quad (6.72)$$

$$\alpha_1^* = \frac{\rho^0 - \rho_2^*}{\rho_1^* - \rho_2^*}, \quad (6.73)$$

$$e_k^* = \frac{p^* + \gamma_k \pi_k}{(\gamma_k - 1)\rho_k^*} + \eta_k, \quad (6.74)$$

$$E_k^* = e_k^* + \frac{1}{2} \|\vec{u}^0\|^2 \quad (6.75)$$

上記の様な反復法を用いた解法以外に, 近似ソルバー [203] を用いて緩和圧力および緩和温度を簡易的に求める手法も提案されている.

6.8 空間対称性を保存する計算手法

5章で説明した対称性保存解法を気液二相流に拡張し、数値解の空間対称性を保つために必要な計算アプローチを以下に示す。

- 初期条件として与える値が完全に空間対称か確認すべきである。特に、気液二相流で現れる典型的な円形（3次元では球形）の気泡または液滴を配置する初期条件では、丸め誤差等により非対称な初期分布が生じる場合があるため、対称軸を挟み片側の初期値を対応するもう一方の初期値に置き換えるなどの工夫が必要である。
- MUSCL-THINC-BVD法や Adaptive THINC-BVD法を用いる場合は、5.4.3節で述べた通り、対称性保存の THINC 補間を用いるべきである。
- 6.2.1の数値流束法を用いる場合、5.5.1で示した单相流における HLLC法で発生する対称性誤差に対処する必要がある。例えば5方程式モデル+表面張力の場合は、式(5.30)に従い、

$$S^* = \frac{(p^R - p^L) + (\rho^L u^L (S^L - u^L) - \rho^R u^R (S^R - u^R)) - \sigma \kappa (\alpha_1^R - \alpha_1^L)}{\rho^L (S^L - u^L) - \rho^R (S^R - u^R)}, \quad (6.76)$$

と計算すべきである。また、流束の選択は式(6.37)の代わりに式(5.32)を用いて対称に計算すべきである。多次元空間では式(5.33)に従い、3つ以上の積の計算順序を対角線対称となるように一致させるべきである。

- 6.2.2節の波動伝播法を用いる場合、いくつかの計算式が平面对称性を破る要因となる。式(6.14)の計算では3つの項の和が含まれており、対称性の観点から2つのセル境界における変動 $\mathcal{A}^+ \Delta \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}$ と $\mathcal{A}^- \Delta \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}$ を先に足し合わせるべきである。すなわち、

$$\frac{d\bar{\mathbf{U}}_i}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} \left((\mathcal{A}^+ \Delta \mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}} + \mathcal{A}^- \Delta \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i \right) \quad (6.77)$$

と計算すべきである。また、各変動の計算式(6.17)と(6.18)も HLLC法の場合は3つの項の和を含んでいる。平面对称性を保つため、次式のように、固有値 $u - c$ と $u + c$ に対応する成分を先に足し合わせる。

$$\mathcal{A}^\pm \Delta \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}} = \left((S_{i+\frac{1}{2}}^1)^\pm \mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^1 + (S_{i+\frac{1}{2}}^3)^\pm \mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^3 \right) + (S_{i+\frac{1}{2}}^2)^\pm \mathbf{w}_{i+\frac{1}{2}}^2, \quad (6.78)$$

$$\mathcal{A} \Delta \mathbf{u}_i = (S_i^1 \mathbf{w}_i^1 + S_i^3 \mathbf{w}_i^3) + S_i^2 \mathbf{w}_i^2 \quad (6.79)$$

- 表面張力の計算で、式(6.28)に示したフィルタリング操作を用いて界面曲率を計算する場合、2次元の場合は9個の値の総和を計算するため、計算順序の工夫が必要である。

式 (6.28) の分母の式について, 対称性を保存する計算例として,

$$\sum_m \omega_m = \left(\left(\omega_{i-1,j-1} + \omega_{i+1,j+1} \right) + \left(\omega_{i+1,j-1} + \omega_{i-1,j+1} \right) \right) \quad (6.80)$$

$$+ \left(\left(\omega_{i,j-1} + \omega_{i,j+1} \right) + \left(\omega_{i-1,j} + \omega_{i+1,j} \right) \right) + \omega_{i,j} \quad (6.81)$$

のように, 対称な位置関係にある値同士を先に足し合わせる手法が考えられる. 式 (6.28) の分子の式も同様に式 (6.81) の順序を適用する.

気液二相流で空間対称性を保存するために必要な手法を表 6.1 にまとめる.

	plane symmetry	diagonal symmetry
kinetic energy	(5.14)	-
THINC interpolation	(5.29)	-
HLLC Riemann solver	(6.76)* and ((5.31) or (5.32)*)	(5.33)
wave-propagation method	(6.77) and (6.79)	-
surface tension	(6.81)	(6.81)

Table. 6.1 Summary of the symmetry-preserving formulations for 3D two-phase flow simulations in the finite-volume method.

6.9 数値結果 (5 方程式モデル+表面張力)

6.9.1 液柱—衝撃波干渉問題

この問題は表面張力の計算手法の性能を評価するために提案された数値テスト [195] で, 液柱にマッハ 3 の衝撃波を衝突させる. 計算領域は $x \in [-5, 10]$, $y \in [-5, 5]$, 基本変数についての初期条件は,

$$(\alpha_1, \rho_1, \rho_2, u, v, p)_{t=0} = \begin{cases} (10^{-8}, 1000, 3.857, 2.629, 0, 10.333) & \text{for } -5 < x < -2/1.75, \\ \left(\left(1 + \exp \left(\frac{r-1}{0.72h} \right) \right)^{-1}, 1000, 1, 0, 0, 1 + \alpha_1/\sigma \right) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.82)$$

と表される. ただし $r(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$ である. 境界条件は流出境界とする. 格子数は 480×320 , stiffened gas 状態方程式のパラメータの値は, $\gamma_1 = 4.4$, $\gamma_2 = 1.4$, $\pi_1 = 6000$, $\pi_2 = 0$ とする. 表面張力係数の値は $\sigma = 1$, 式 (6.28) に示すフィルタリング操作を行う回数は 5 回とする.

この問題では、密度勾配の大きさを示す数値シュリーレン可視化法を用いて数値結果を比較する。弱い流れ構造を捉えるため、以下の式を用いて数値解を表示する [204].

$$S_{i,j} = \exp \left(-k(Y_{1,i,j}) \frac{\|\vec{\nabla} \rho\|}{\max_{i,j} \|\vec{\nabla} \rho\|} \right), \quad k(Y_{1,i,j}) = \begin{cases} 20 & \text{for } Y_{1,i,j} > 0.25, \\ 100 & \text{for } Y_{1,i,j} < 0.25 \end{cases} \quad (6.83)$$

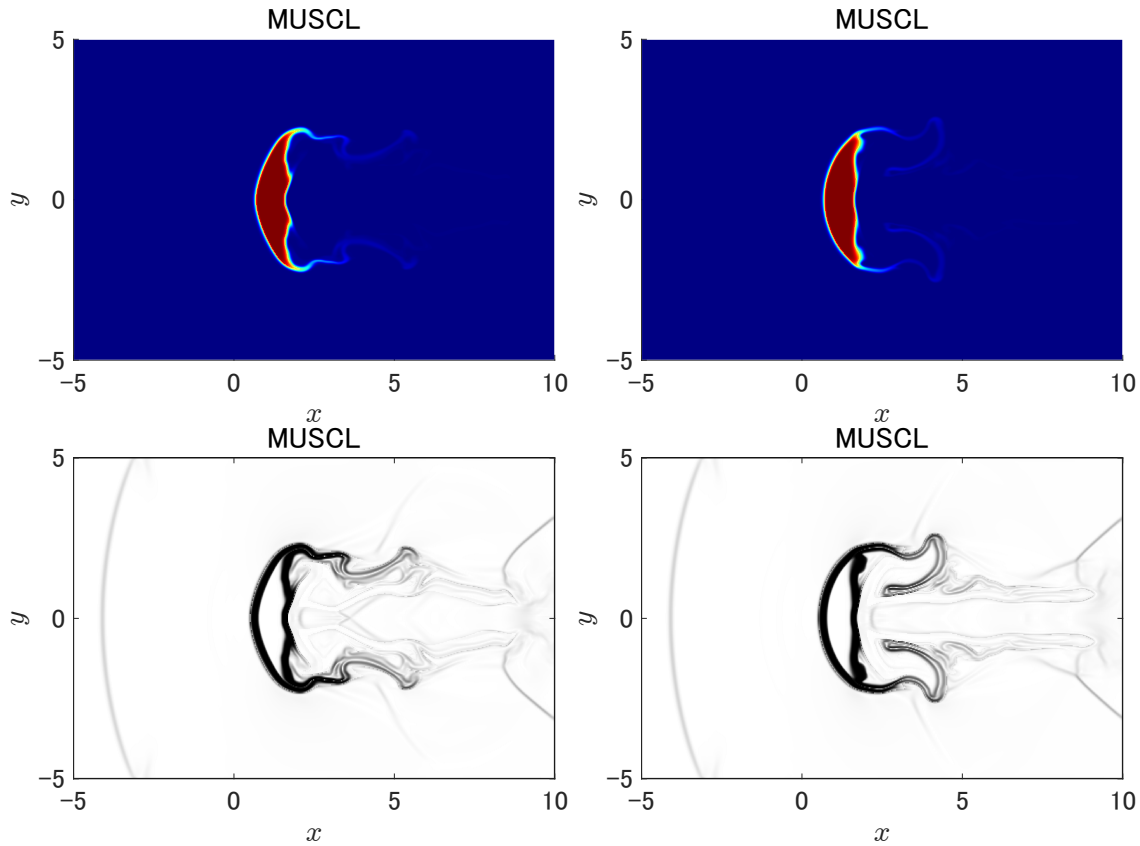


Fig. 6.2 Pseudo-color plots of volume fraction of water (top) and numerical schlieren plots (bottom) at $t = 12$ calculated by the MUSCL scheme in the Mach 3 shock-droplet interaction problem. The left and right results show the numerical results without and with surface tension respectively.

液柱－衝撃波干渉問題における水の体積分率と数値シュリーレン画像を図 6.2, 6.3, 6.4 に示す。図 6.2 は MUSCL 法によって計算された結果で、左側は表面張力なし、右側は表面張力ありの結果である。表面張力ありの結果は表面張力なしの結果に比べて気液界面が少し丸みがかっており、表面張力により界面曲率が均一化されている。図 6.3 と 6.4 はそれぞれ MUSCL-THINC-BVD 法および Adaptive THINC-BVD 法によって計算された結果で、MUSCL 法の結果と同様に、表面張力ありの結果は気液界面が丸みを帯びている。各数値解法の結果を比較すると、BVD 法の方が数値シュリーレン画像の黒い領域の幅が狭く、高解像度

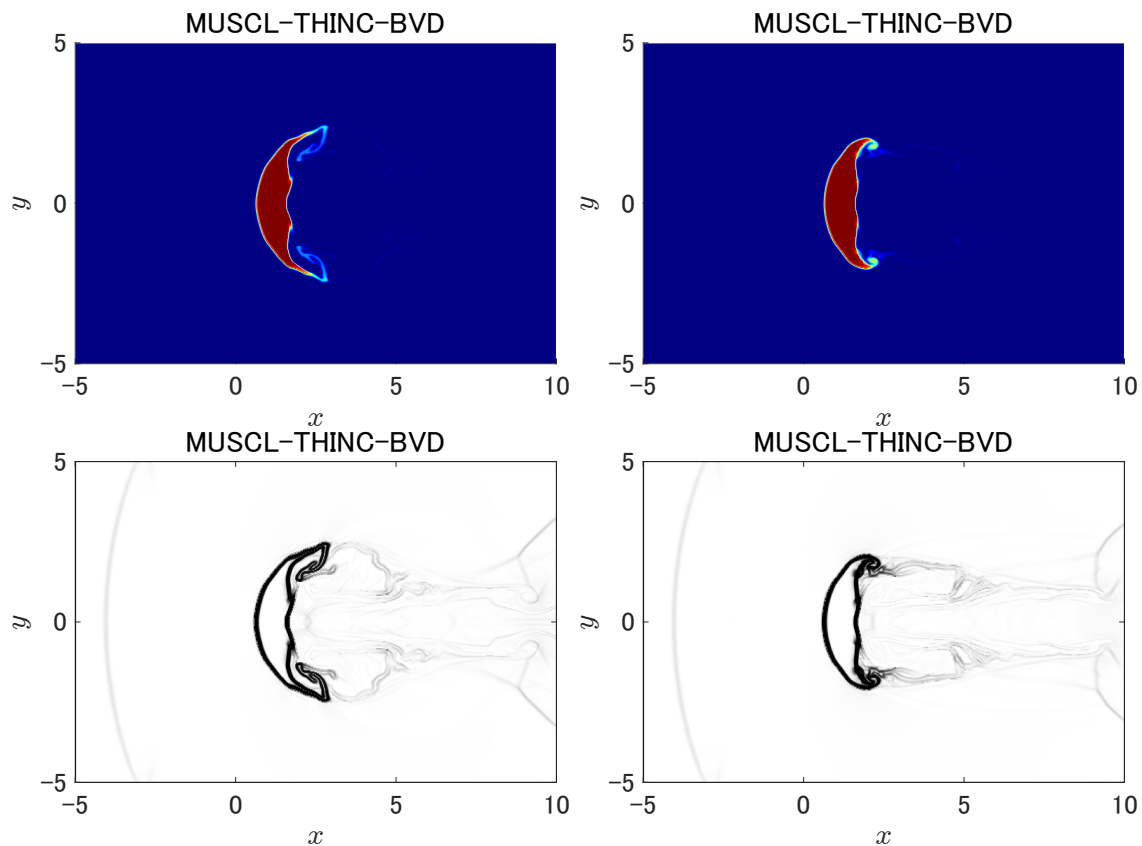


Fig. 6.3 Same as Fig. 6.2, but calculated by the MUSCL-THINC-BVD scheme.

に気液界面を捉えている。MUSCL 法の表面張力ありの結果は、BVD 法の表面張力ありの結果と比べて、液柱の後ろに気液界面が複雑に引き延ばされている構造が見られる。表面張力を考慮しているにもかかわらず複雑な界面形状が見られる理由として、MUSCL 法では過剰な数値散逸誤差により気液界面が拡散し、界面曲率が正しく計算できていないために、表面張力の効果が正しく反映されていないからであると考えられる。数値散逸誤差を抑制した高解像度数値解法を用いることで、気液界面を低散逸に捉え、表面張力といった界面特有の現象を正しく再現できることを示した。

また、この問題は $y = 0$ に対する x 軸対称性を持ち、各再構築法の体積分率および密度の数値解は厳密に空間対称性を保っている。このことから、6.8 節で示した対称性保存解法が有効に作用していることを示した。

6.10 数値結果 (6 方程式モデル+相変化)

相変化を含む気液二相圧縮性流れにおける高解像度数値解法の性能を検証するため、いくつかの典型的なベンチマークテストを解き、MUSCL 法、MUSCL-THINC-BVD 法、Adaptive THINC-BVD 法による計算結果を比較する。ベンチマークテストで用いる水およびドデカン

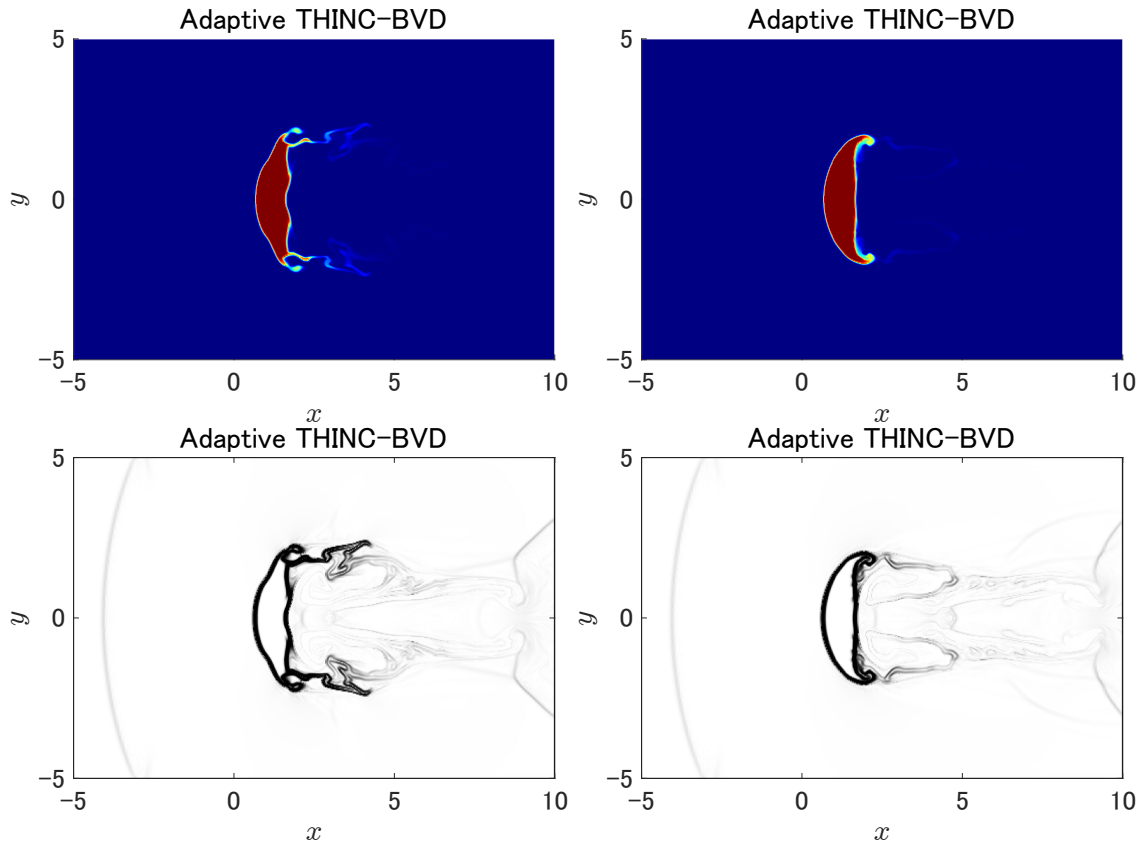


Fig. 6.4 Same as Fig. 6.2, but calculated by the Adaptive THINC-BVD scheme.

の stiffened gas 状態方程式におけるパラメータは表 2.1 および 2.2 の通り設定する．全ての問題で再構築変数は準基本変数 $\mathbf{q}^{\text{qp}} = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \vec{u}, p)^\top$ ，リーマンソルバーは HLLC ソルバー，時間発展は 3 段 3 次ルンゲクッタ法，CFL 数は 0.5 とした．

6.10.1 水キャビテーション管問題

このテストでは，1次元の管の中で水が左右両側に膨張波となって広がっていく様子を再現する [126,130]．計算領域は $x \in [0, 1 \text{ m}]$ とする．液体の体積分率は計算領域全体で $\alpha_1 = 0.99$ とする．計算領域中心部で圧力が降下することで，キャビテーションが発生する．初期圧力は 10^5 Pa ，液体の密度は $\rho_1 = 1150 \text{ kg/m}^3$ とする．液体の温度は $T_1 = 354.728 \text{ K}$ と計算され，液相と気相が等温と仮定すれば気体の密度は $\rho_2 = 0.63 \text{ kg/m}^3$ となる．水が両側に広がる速さを $u_0 \text{ [m/s]}$ とすると，基本変数についての初期条件は，

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_1, \rho_1 \text{ [kg/m}^3\text{]}, \rho_2 \text{ [kg/m}^3\text{]}, u \text{ [m/s]}, p \text{ [Pa]})_{t=0} = \\
 & \begin{cases} (0.99, 1150, 0.63, -u_0, 10^5) & \text{for } 0 \text{ m} < x < 0.5 \text{ m,} \\ (0.99, 1150, 0.63, u_0, 10^5) & \text{for } 0.5 \text{ m} < x < 1 \text{ m.} \end{cases} \quad (6.84)
 \end{aligned}$$

と表される. 境界条件は流出境界とする. 初期速さについて $u_0 = 2 \text{ m/s}$ と $u_0 = 500 \text{ m/s}$ の場合を検証する. 格子数は $u_0 = 2 \text{ m/s}$ のとき 500, $u_0 = 500 \text{ m/s}$ のとき 5000 とする. 強い膨張波に対応するため, $u_0 = 500 \text{ m/s}$ の問題では, BVD 法で THINC(β_1) 補間関数を選択する条件に $\partial u / \partial x < 0$ を加える.

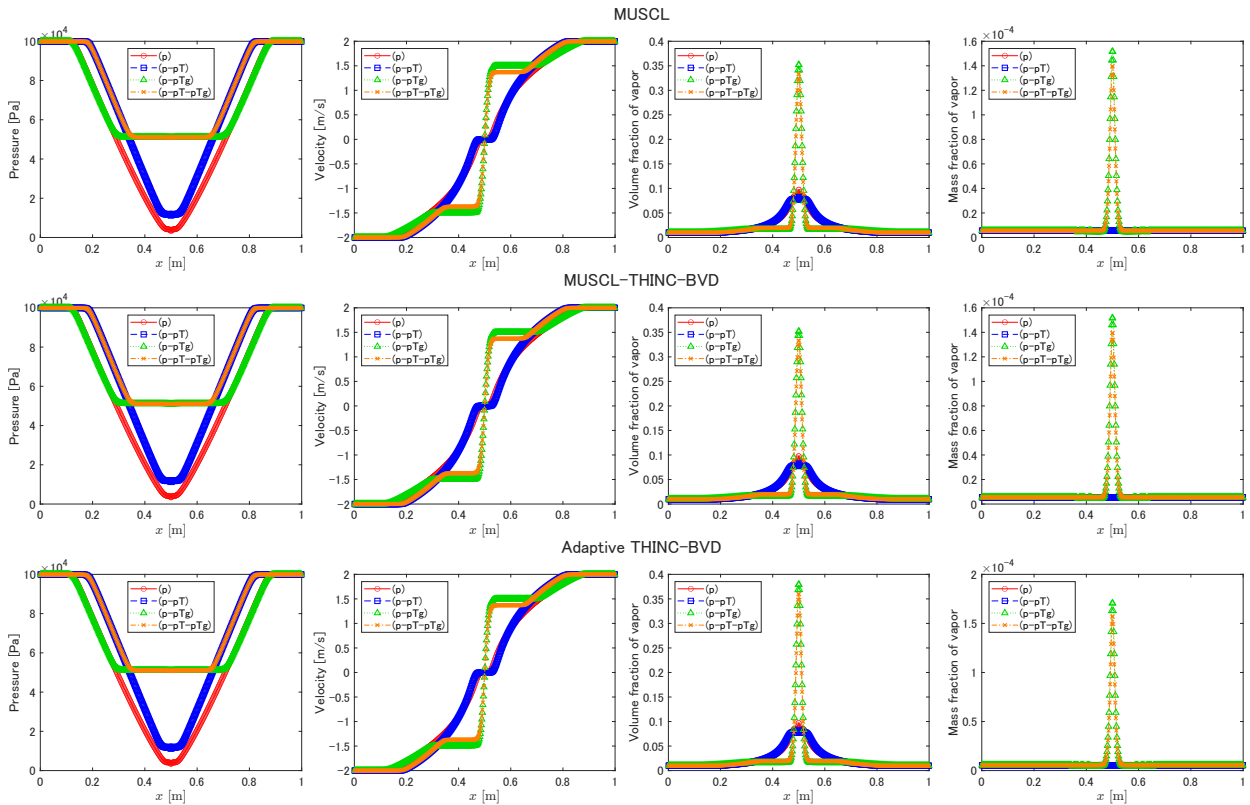


Fig. 6.5 Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of vapor at $t = 3.2 \text{ ms}$ in 1D water-cavitation tube problem with $u_0 = 2 \text{ m/s}$. The top, middle, and bottom rows show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively.

図 6.5 と 6.6 に, 式 (6.40) の 4 種類の緩和法, すなわち p 緩和 (赤, 丸, 実線), p-pT 緩和 (青, 四角, 破線), p-pTG 緩和 (緑, 三角, 点線), p-pT-pTG 緩和 (橙, バツ印, 鎖線) の数値結果を示す. 図 6.5 は $u_0 = 2 \text{ m/s}$, 図 6.6 は $u_0 = 500 \text{ m/s}$ の数値結果で, 4 種の緩和法の全てが文献 [126, 130] の結果におおむね一致している. 各数値解法の結果を比較すると, MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, Adaptive THINC-BVD 法のいずれも同様の数値解が得られており, 大きな違いは見られない. 実際, MUSCL 法と MUSCL-THINC-BVD 法における質量分率の差は $u_0 = 2 \text{ m/s}$ のとき最大で 1.49×10^{-6} , $u_0 = 500 \text{ m/s}$ のとき最大で 6.00×10^{-5} となっている. この問題の解は膨張波のみで構成されており, THINC(β_1) 補間関数を頻繁に選んでしまうと滑らかな解を矩形波に変形してしまう. すなわち, 各数値解法の間で顕著な違いが見られないことから, BVD 法が滑らかな解で正しく MUSCL 補間または

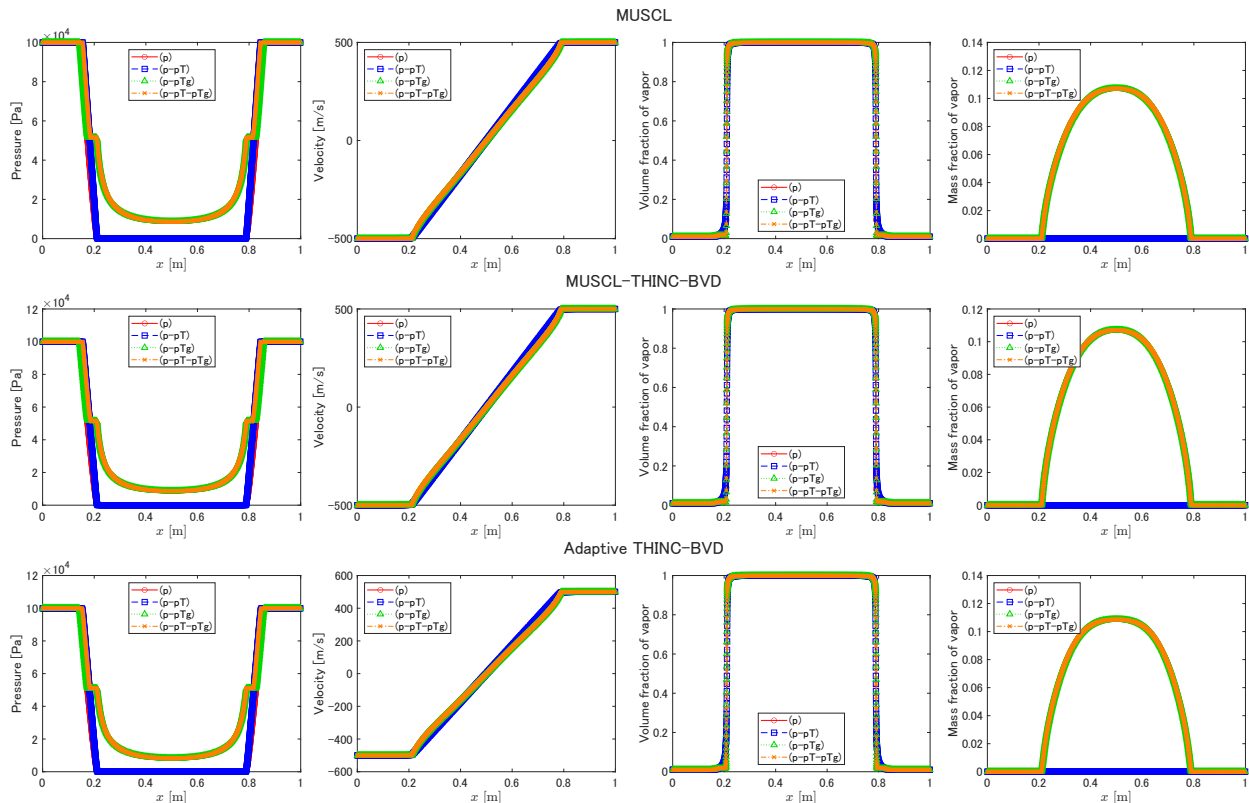


Fig. 6.6 Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of vapor at $t = 0.58$ ms in 1D water-cavitation tube problem with $u_0 = 500$ m/s. The top, middle, and bottom rows show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively.

THINC(β_s) 補間を選択できていて、BVD 選択アルゴリズムが正確に機能していることを示した。

6.10.2 水衝撃波管問題

この問題では、水で満たされた1次元管内で衝撃波、接触不連続、膨張波が発生する。この問題はもともと文献 [203] で4方程式モデルにおける化学的緩和の近似ソルバーの性能検証のために解かれているが、ここでは6方程式モデルで数値解法の低散逸性を検証するために計算する。計算領域は $x \in [0, 1]$ m とする。初期圧力は計算領域左側で 2×10^5 Pa、右側で 10^5 Pa とする。この圧力に対応する飽和温度は、左側で $T_1 = T_2 = 394.25$ K、右側で $T_1 = T_2 = 372.88$ K であり、温度が飽和温度になるように各相の密度を設定する。液相の質

量分率は領域全体で 0.2 とし、速度は 0 m/s とする。基本変数についての初期条件は、

$$(\alpha_1, \rho_1 [\text{kg/m}^3], \rho_2 [\text{kg/m}^3], u [\text{m/s}], p [\text{Pa}])_{t=0} = \begin{cases} (2.7399 \times 10^{-4}, 1034.8, 1.1344, 0, 2 \times 10^5) & \text{for } 0 \text{ m} < x < 0.5 \text{ m,} \\ (1.3702 \times 10^{-4}, 1094.0, 0.59969, 0, 10^5) & \text{for } 0.5 \text{ m} < x < 1 \text{ m.} \end{cases} \quad (6.85)$$

と表される。境界条件は流出境界とする。格子数は 200 (格子サイズは $\Delta x = 0.005 \text{ m}$) とする。相変化なし (温度非平衡), 相変化なし (温度平衡), 相変化ありの 3 パターンを検証するため、緩和法は p 緩和, p-pT 緩和, p-pT-pTG 緩和を用いる。

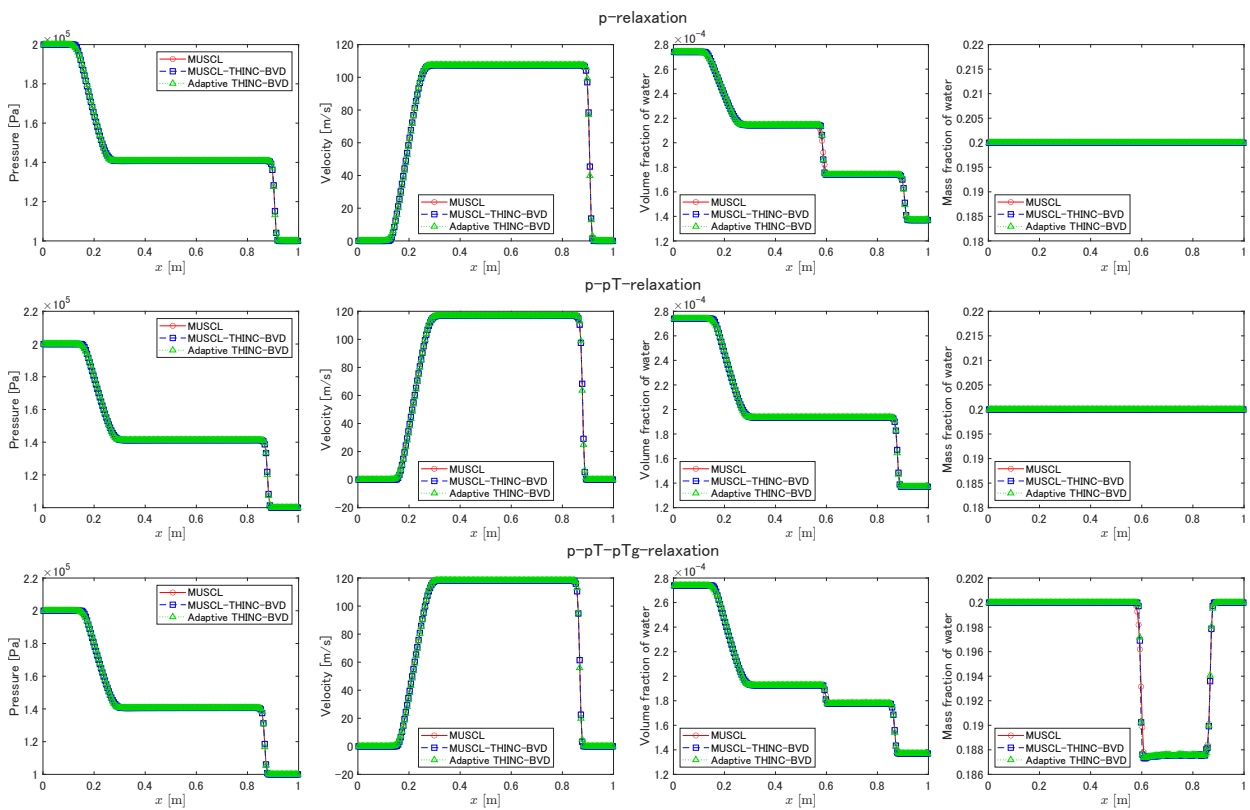


Fig. 6.7 Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of water at $t = 0.8 \text{ ms}$ in 1D water shock-tube problem with a mixture containing mainly water vapor. The top, middle, and bottom panels show the results of p-relaxation, p-pT-relaxation (without phase change), and p-pT-pTG-relaxation (with phase change) respectively.

数値結果を図 6.7 に示す。p-pT 緩和の計算は、文献 [203] の 4 方程式モデル (圧力温度平衡) の相変化なしの計算に対応しており、同様の数値結果が得られている。相変化ありの計算についても、式 (6.64) の通り本研究の相変化モデルが蒸発のみを扱うことを考慮すると、p-pT-pTG 緩和の計算結果と文献 [203] の相変化ありの結果は一致していると言える。

計算手法による数値結果の違いは、p 緩和の体積分率、p-pT-pTG 緩和の体積分率と質量分

率の分布に見られる。 $x \approx 0.6$ m に位置する接触不連続において、二つの BVD 法は不連続解を 3~4 セル分の幅で捕獲しているが、MUSCL 法は不連続解が 4 セル以上の幅で拡散している。このように BVD 法が高解像度な数値結果を示したことから、不連続解近傍で大きい値の β の THINC 補間関数を適切に選択できていることが分かる。

6 方程式モデルにおける衝撃波、膨張波、接触不連続、気液界面といった流れ構造の識別方法について言及する。6 方程式モデルの特性解析 [126] より、相変化等の緩和を考慮しない場合、系の固有値すなわち特性速度は $u - c, u, u + c$ の 3 種類のみであり、 $u \pm c$ の速度の波が衝撃波または膨張波、 u の速度の波が接触不連続および気液界面の伝播を表している。衝撃波では、密度と圧力と速度が不連続で、質量分率が一定である。接触不連続および気液界面では、密度と質量分率が不連続で、速度と混合圧力が一定である。したがって、図 6.7 の数値結果で $x \in [0.14, 0.25$ m] の領域が膨張波、 $x \approx 0.9$ m の不連続が衝撃波、 $x \approx 0.59$ m の不連続が接触不連続および気液界面である。相変化等を考慮しない場合に接触不連続と気液界面が常に同じ位置となる理由は、6 方程式モデルの導出で液相と気相の速度が常に同じと仮定したこと起因する。液相と気相の速度を区別する 7 方程式モデルでは、二相の接触不連続と気液界面は分離する [188]。また、圧縮性を考慮する気液二相流では、体積分率は保存量ではなく、速度の発散に応じて非保存的に分布が変化する。特に、図 6.7 のように、速度の発散が正となる膨張波の領域では、体積分率の分布は膨張し、気相と液相の位置を明確に区別することは原理的に不可能となる。このことから、気液界面の位置は、体積分率の変化する位置ではなく、速度と混合圧力が一定で密度や質量分率が不連続な位置を探すことで判別できる。

6.10.3 リヒトマイヤーメッシュコフ不安定性問題

この問題では、2次元空間における数値解法の性能を検証する。微小な乱れを持つ気液界面を衝撃波が通過することにより、リヒトマイヤーメッシュコフ不安定性 (RMI) と呼ばれる、マッシュルーム状の流れ構造を観測できる。このテストは文献 [1, 126] 等で用いられているが、相変化が考慮された例はない。本研究では、表 2.1 の水のパラメータを用いることでこの問題における相変化を計算する。

計算領域は $x \in [0, 3$ m] \times $y \in [0, 1$ m] とし、基本変数についての初期条件は、

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_1, \rho_1 [\text{kg/m}^3], \rho_2 [\text{kg/m}^3], u [\text{m/s}], v [\text{m/s}], p [\text{Pa}])_{t=0} = \\
 & \begin{cases} (1 - 10^{-6}, 1000, 100, -200, 0, 10^5) & \text{for } x < 1.2 \text{ m and } r(x, y) > 0.6 \text{ m,} \\ (10^{-6}, 1000, 100, -200, 0, 10^5) & \text{otherwise,} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{6.86}$$

と表される。ただし $r(x, y) = \sqrt{(x - 1.2)^2 + (y - 0.5)^2}$ である。境界条件は右境界を流出条件、それ以外を滑り壁面とする。格子数は 300×100 (格子サイズは $\Delta x = \Delta y = 0.01$ m) とする。相変化なしと相変化ありの場合を計算するため、緩和法は p 緩和と p-pT-pTG 緩和を

用いる。

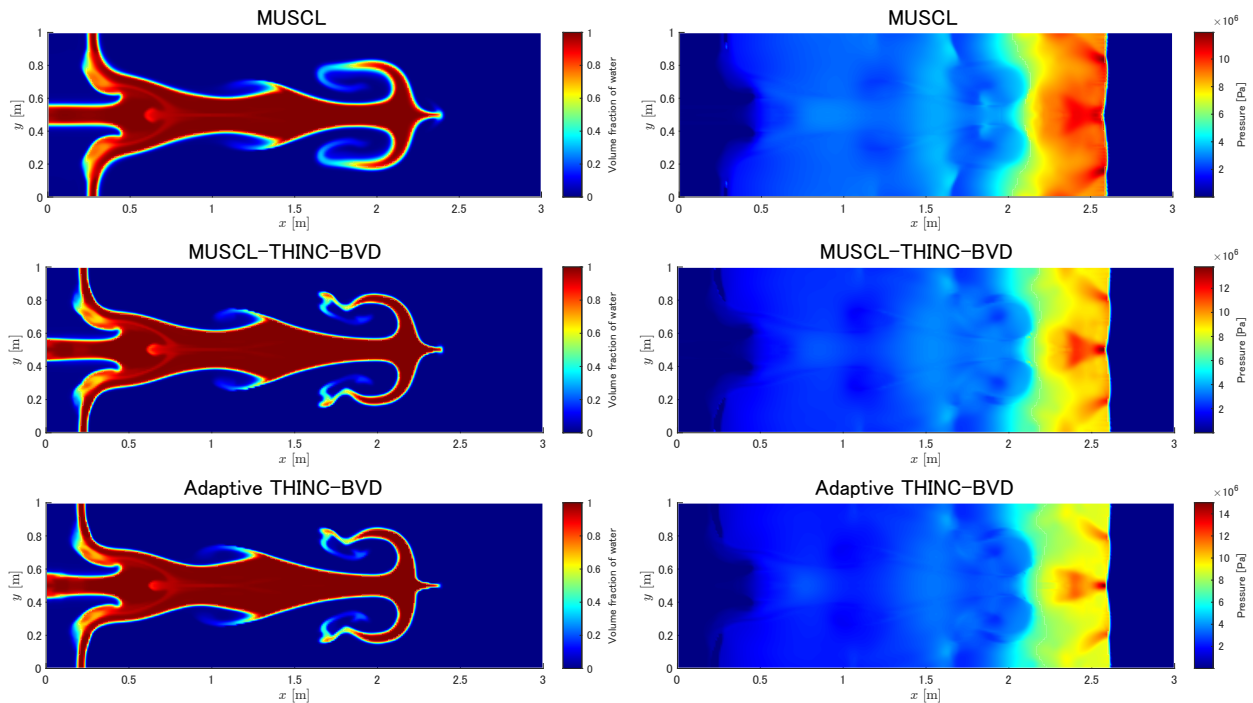


Fig. 6.8 Pseudo-color plots of the volume fraction of liquid (left) and pressure (right) at $t = 10.0$ ms in 2D cavitating Richtmyer-Meshkov instability problem without phase change. The top, middle, and bottom panels show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively.

各数値解法による液相の体積分率と圧力の数値結果を図 6.8 と 6.9 に示す。相変化なし (図 6.8) の結果は、左側壁面の近傍にキャビテーションポケットと呼ばれる気相が見られる。気液界面は、RM 不安定性の発達によりマッシュルーム状に広がっている。これらの流れ構造は文献 [1, 126] の結果と一致している。相変化あり (図 6.9) の結果は、相変化なしと同様にキャビテーションポケットや RM 不安定性の発達が見られるが、相変化なしと比べて左側壁面の近傍で液相がより蒸発している。

各数値解法の結果を比較すると、相変化なしとありの両方で、BVD 法の方が RM 不安定性がより発達している。この違いは、BVD 法の方が MUSCL 法と比べて数値散逸誤差が少ないことを表している。また、各数値解法の結果で圧力分布に数値振動は見られない。よって、BVD 法は多次元空間の問題においても安定かつ低散逸な数値解法であると言える。

また、この問題は $y = 0.5$ m に対する x 軸対称性を持ち、各再構築法および緩和法の体積分率および圧力の数値解は厳密に空間対称性を保っている。このことから、6.8 節で示した対称性保存解法が有効に作用していることを示した。

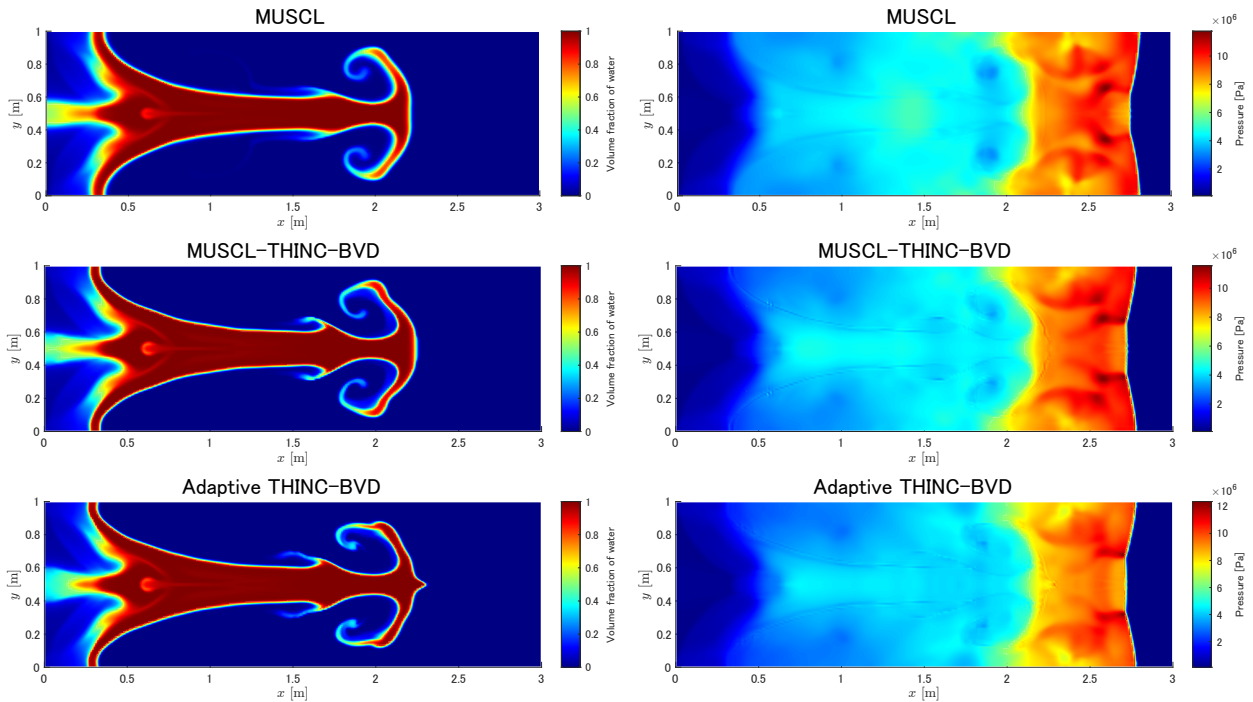


Fig. 6.9 Same as Fig. 6.8, but with phase change.

6.10.4 ドデカン蒸気泡圧縮問題

この問題では、液体のドデカンの内部に配置されたドデカン気泡をピストンで圧縮する。文献 [126, 205–207] 等で、主に多次元空間において圧力振動などが発生しないことを検証するために計算されている。文献 [207] では相変化を考慮した計算も行われている。本研究では、文献 [207] より長い時間で相変化を考慮した計算を行うことで、気液界面が動的に生成される現象を再現する。

計算領域は $x \in [0, 1 \text{ m}] \times y \in [0, 1 \text{ m}]$ とする。初期圧力および温度はそれぞれ 10^5 Pa と 600 K とし、気泡の半径は 0.2 m とする。気泡内部と周囲の液相における液体の体積分率はそれぞれ 10^{-6} , $1 - 10^{-6}$ とする。初期速度は 0 m/s とする。基本変数についての初期条件は、

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_1, \rho_1 [\text{kg/m}^3], \rho_2 [\text{kg/m}^3], u [\text{m/s}], v [\text{m/s}], p [\text{Pa}])_{t=0} = \\
 & \begin{cases} (1 - 10^{-6}, 458.338, 3.408, 0, 0, 10^5) & \text{for } r(x, y) > 0.2 \text{ m,} \\ (10^{-6}, 458.338, 3.408, 0, 0, 10^5) & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (6.87)
 \end{aligned}$$

と表される。ただし $r(x, y) = \sqrt{(x - 0.5)^2 + (y - 0.5)^2}$ である。境界条件は、左境界を 100 m/s で動くピストンとし、それ以外の境界を固定された反射壁とする。ピストン壁面の境界条件の取り扱いについては、本論文の付録 A や文献 [111, 208] 等で記載されている手法で計算する。動くピストンを忠実に再現する代わりに、境界から計算領域内部に強制的に流体を流

入させ、ピストンによる圧縮を模擬する。この手法により、計算領域を変化させることなくピストン壁面の境界条件を適用できる。格子数は 200×200 (格子サイズは $\Delta x = \Delta y = 0.005$ m) とする。緩和法は、p 緩和 (相変化なし) と p-pT-pTG 緩和 (相変化あり) を用いる。

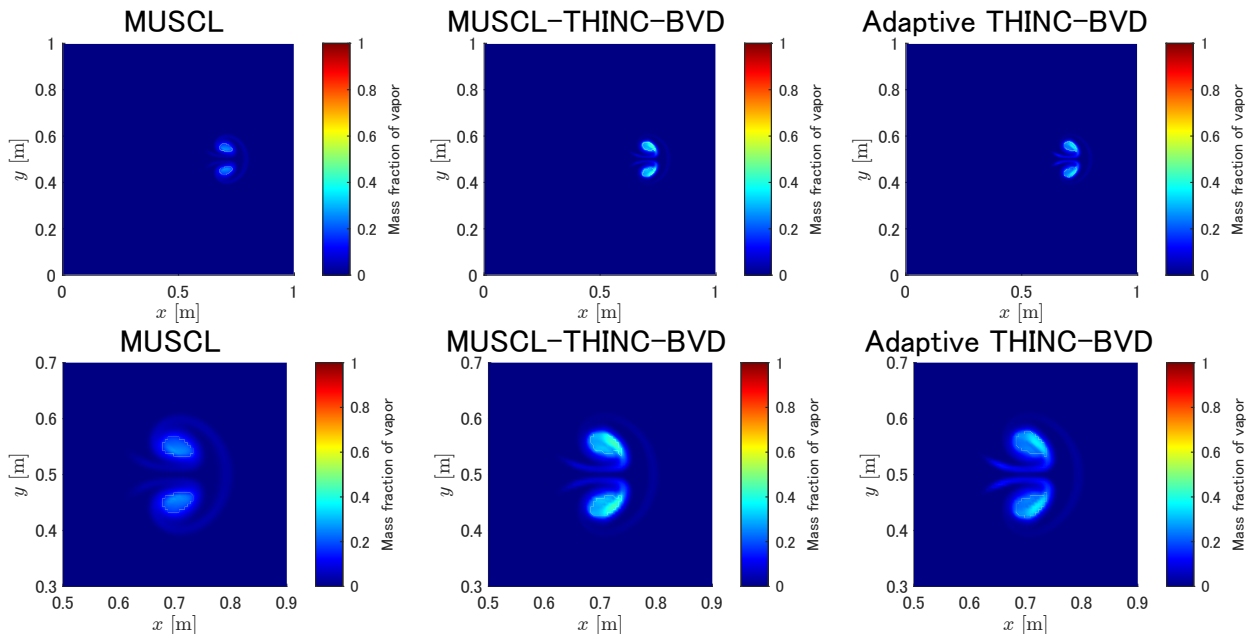


Fig. 6.10 Pseudo-color plots of the mass fraction of vapor at $t = 1.4$ ms in 2D vapor-bubble compression problem without phase change. The left, middle, and right panels show the numerical results of MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes respectively. The bottom row shows enlarged views of vapor bubbles.

気相の質量分率の数値結果を図 6.10 と 6.11 に示す。 $t = 1.4$ ms では、ピストンにより気泡が押しつぶされた後の様子が再現されている。相変化なし (図 6.10) と相変化あり (図 6.11) の結果を比較すると、相変化なしではほぼ液体のみ存在しているが、相変化ありでは気泡が観測でき、圧力降下に伴うキャビテーション現象が再現されている。数値解法間で結果を比較すると、相変化なしでは MUSCL 法と BVD 法の結果の間に大きな差は見られない。一方で相変化ありの場合、気相質量分率の最大値が BVD 法では 1 に近い値を取るのに対し、MUSCL 法では著しく小さい値となっている。このような差が生じたことから、キャビテーション現象で動的に生成された気液界面が、MUSCL 法では数値散逸誤差により大幅に拡散している一方、MUSCL-THINC-BVD 法と Adaptive THINC-BVD 法では低散逸で捉えていると言える。すなわち、数値散逸誤差を抑制した高解像度数値解法は、キャビテーションのような気泡および気液界面が動的に生成される現象の再現に有効であることを示した。

相変化により気液界面が動的に生成されるメカニズムについて、Adaptive THINC-BVD 法によって得られる様々な時刻の数値解を用いて議論する。図 6.12 と 6.13 に、それぞれ様々な

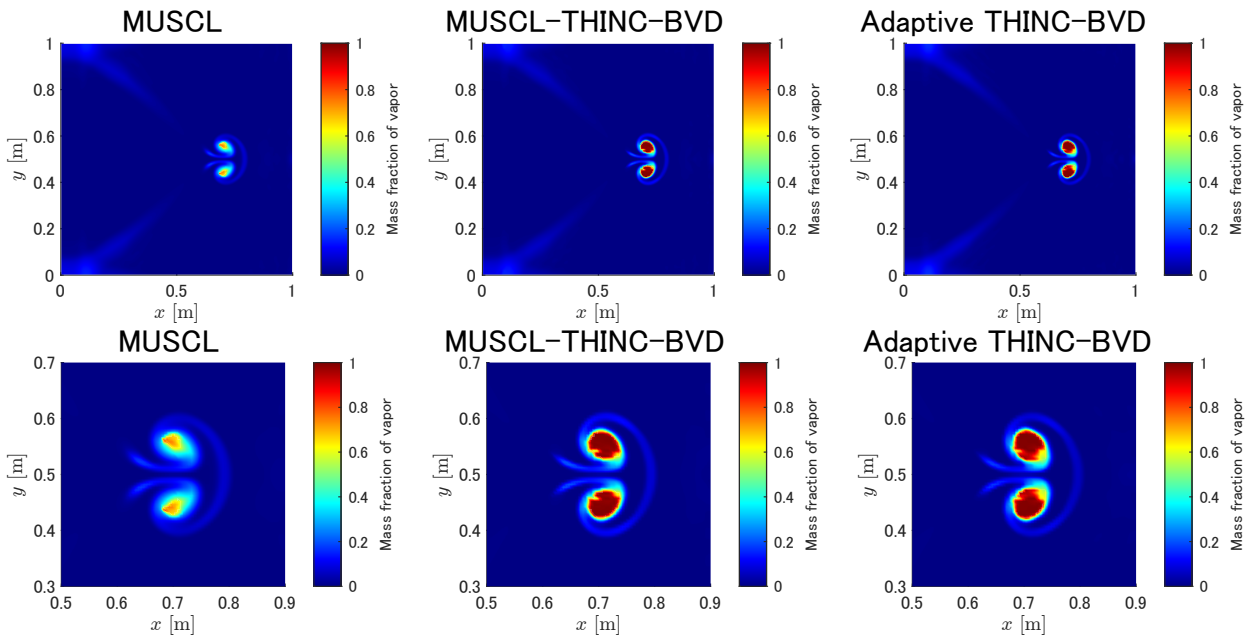


Fig. 6.11 Same as Fig. 6.10, but with phase change.

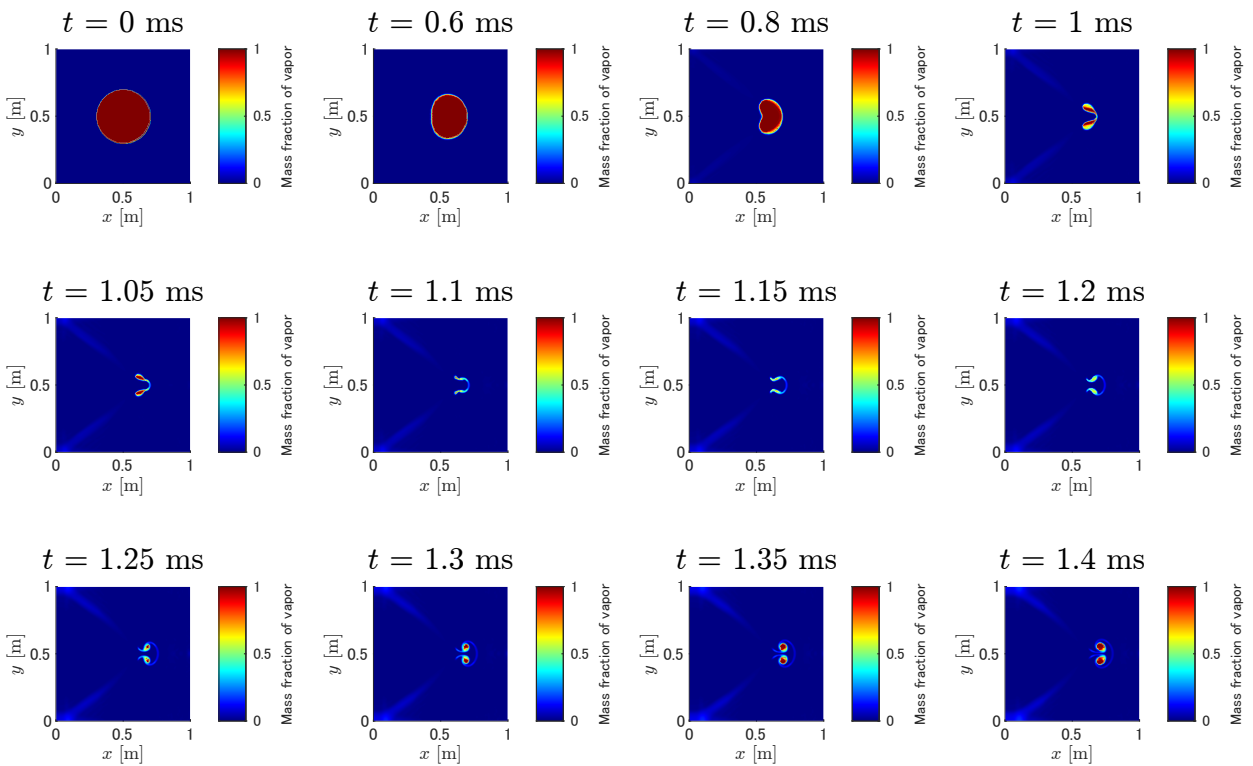


Fig. 6.12 Pseudo-color plots of the mass fraction of vapor in 2D vapor-bubble compression problem with phase change. The numerical results are computed by the Adaptive THINC-BVD scheme. Time passes from left to right and from top to bottom.

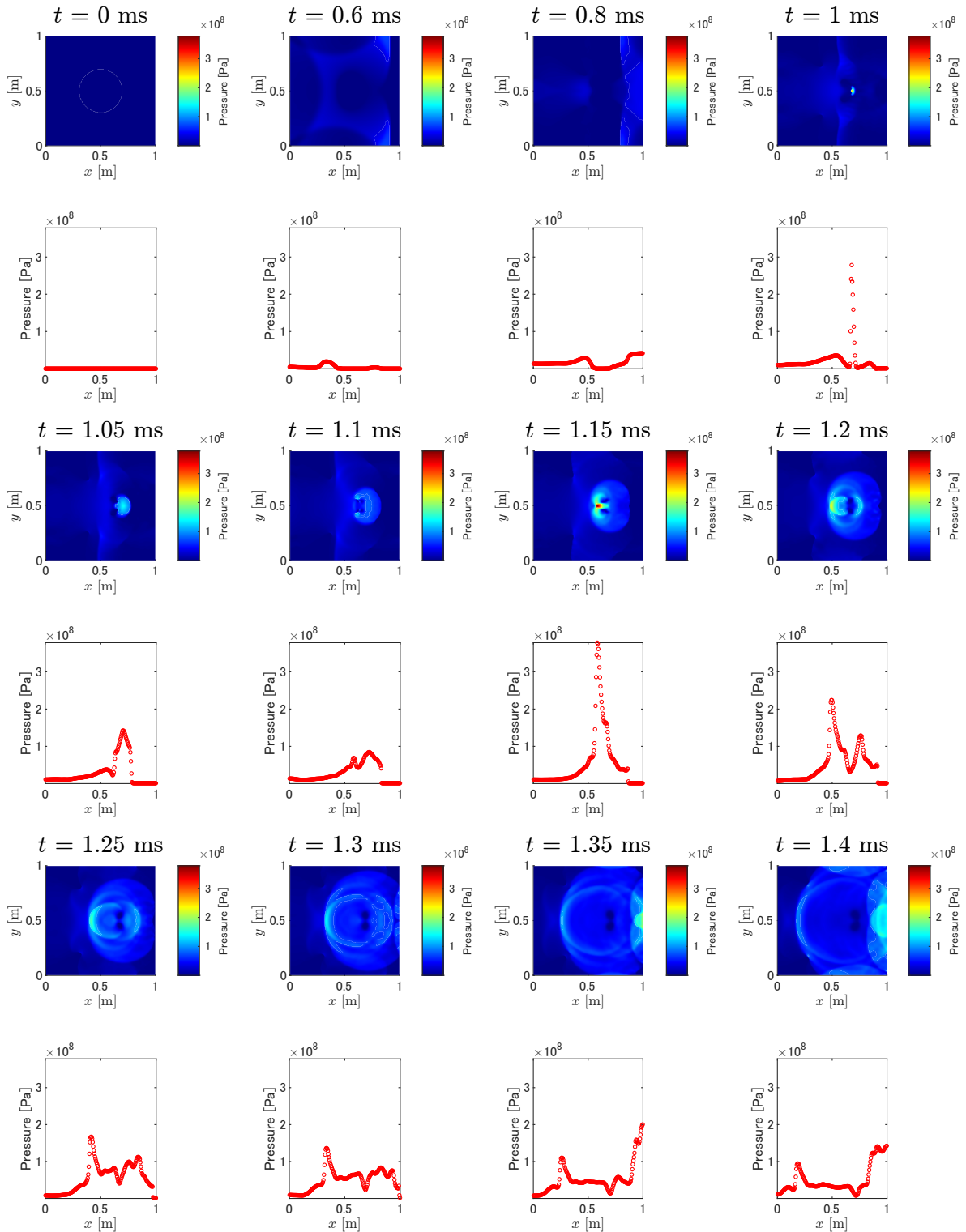


Fig. 6.13 Pseudo-color plots and 1D distribution in cross-section at $y = 0.5$ m of the pressure in 2D vapor-bubble compression problem with phase change. The numerical results are computed by the Adaptive THINC-BVD scheme. Time passes from left to right and from top to bottom.

時刻の気相質量分率および圧力の数値結果を示す。気相質量分率の結果より、 $t = 0$ ms から 1.2 ms にかけて気泡は圧縮され、 $t = 1.2$ ms から 1.4 ms で新しい気泡が生成されていることが分かる。圧力の結果を見ると、 $t = 1$ ms と 1.15 ms の時に圧力値の大きなピークが見られる。 $t = 1$ ms の圧力ピークは、ピストンの圧縮により生じた衝撃波が容器の各壁面に衝突した後、その反射波が $x = 0.7$ m, $y = 0.5$ m 付近の点で集中した事により発生したと考えられる。次の圧力ピークが見られる $t = 1.15$ ms では、 $t = 1$ ms の圧力波が周囲に伝播し、後方で再度集中する様子が見られる。その間に、高圧領域の隣に二つの低圧領域が $y = 0.5$ m の軸に対称に生成されている。これらの低圧領域は時間発展の中で連続的に成長し、飽和圧力を下回ることで、液体から気体への相変化が発生し、気液界面が動的に生成される。このような物理的過程により液体が蒸発しており、数値計算手法はこの動的に生成される界面を明瞭に捉えることが望ましいと言える。しかし、図 6.11 で示した通り、代表的な既存解法の MUSCL 法では動的に生成される界面が数値散逸誤差によりぼやけていて、相変化現象の再現に失敗している。MUSCL-THINC-BVD 法および Adaptive THINC-BVD 法といった高解像度数値解法を用いることで、相変化現象を正しく再現可能となる。

また、この問題は $y = 0.5$ m に対する x 軸対称性を持ち、各再構築法および緩和法の体積分率および圧力の数値解は各時刻において厳密に空間対称性を保っている。このことから、6.8 節で示した対称性保存解法が有効に作用していることを示した。

6.11 数値結果（6 方程式モデル）と実現象の比較

6.11.1 衝撃波—ヘリウム気泡干渉問題

MUSCL-THINC-BVD 法及び Adaptive THINC-BVD 法の数値結果を実験結果と比較するため、ヘリウム気泡に衝撃波を衝突させる多成分流れの数値テストを解く。この問題は実験結果 [1, 209] が報告されており、数値結果の実現象との整合性を検証することが可能である。計算領域は $x \in [0, 0.32$ m], $y \in [0, 0.08$ m], マッハ 1.5 の場合の基本変数についての初期条件は、

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_1, \rho_1 [\text{kg/m}^3], \rho_2 [\text{kg/m}^3], u [\text{m/s}], v [\text{m/s}], p [\text{Pa}])_{t=0} = \\
 & \begin{cases} (1 - 10^{-8}, 0.167, 1.29, 0, 0, 101325) & \text{if } r(x, y) < 0.02 \text{ m,} \\ (10^{-8}, 0.167, 1.29, 0, 0, 101325) & \text{if } x < 0.3 \text{ m,} \\ (10^{-8}, 0.3110, 2.402, -230.2, 0, 249091) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.88)
 \end{aligned}$$

と表される。ただし $r(x, y) = \sqrt{(x - 0.28)^2 + (y - 0.04)^2}$ である。流体 1 がヘリウム、流体 2 が空気を表している。境界条件は左右境界を流出境界、上下境界を反射境界とする。格子数は 800×200 、stiffened gas 状態方程式のパラメータの値は、 $\gamma_1 = 1.67$, $\gamma_2 = 1.4$, $\pi_1 = 0$ Pa, $\pi_2 = 0$ Pa とする。

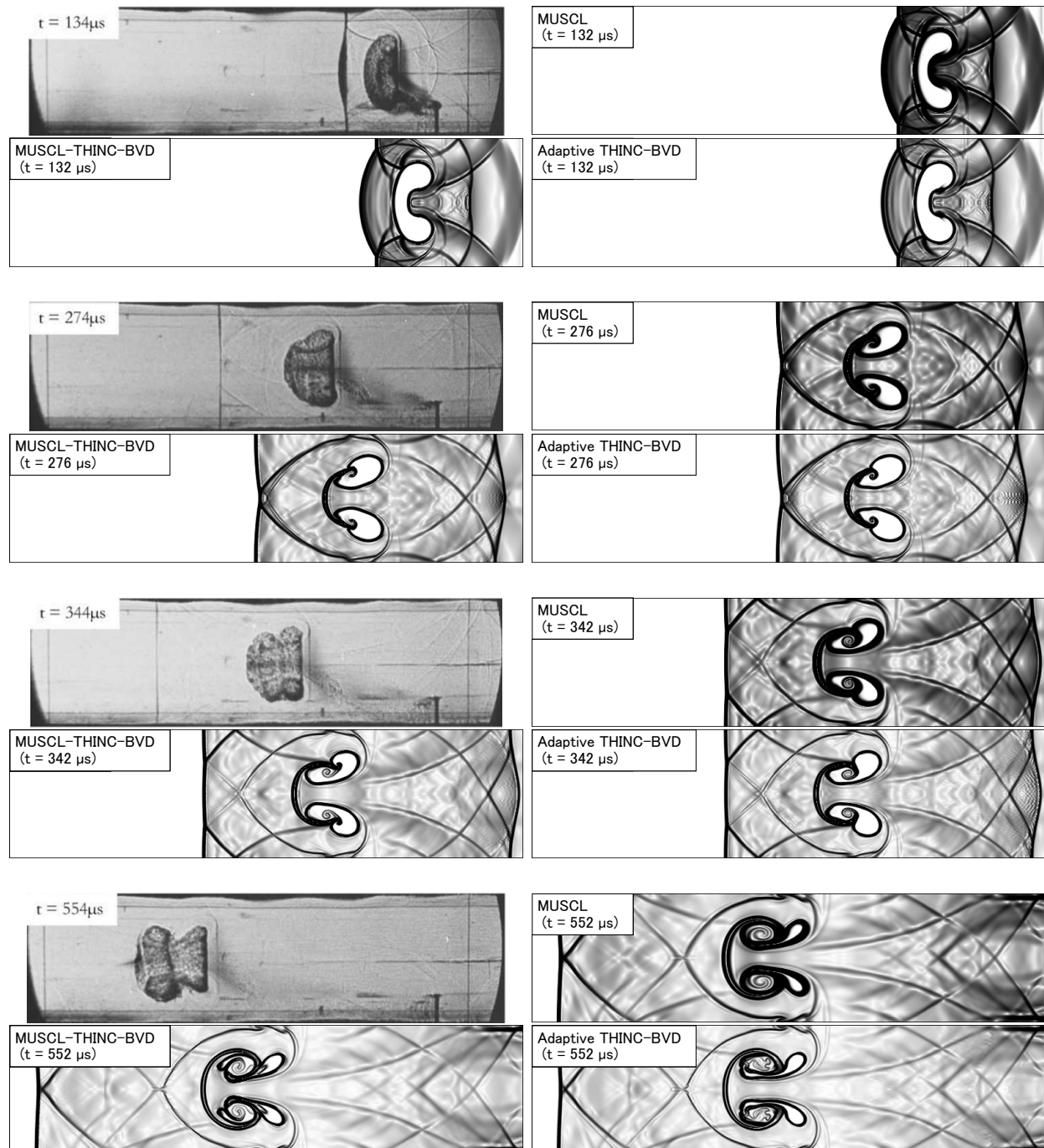


Fig. 6.14 Experimental results [1] and numerical schlieren plots calculated by the MUSCL, MUSCL-THINC-BVD, and Adaptive THINC-BVD schemes in the shock-bubble interaction problem.

実験結果 [1] と各手法の数値結果を図 6.14 に示す。ただし数値シュリーレン画像は式 (6.83) を用いて生成した。各数値解法の結果を比較すると、MUSCL 法は BVD 法の結果と比べて界面の幅が厚く、数値散逸誤差によって界面が拡散していることが分かる。また、各数値解法で得られたヘリウム気泡の形状は、実験結果の図と概ね一致していると言える。THINC(β_1) 補間法を滑らかな解に適用した際に、矩形波のような形状に変形させてしまうスクエアリングエフェクトと呼ばれる効果が知られているが、今回の実験結果と比較する限り、そのような効果は見られなかった。このことから、BVD 選択アルゴリズムによって THINC(β_1) 補間関数は不連続解でのみ適用されていると考えられる。これらの結果から、BVD 法が気液二相圧縮性流れの実現象解析に適していることを示した。

6.12 6章のまとめ

表面張力および相変化を考慮した気液二相圧縮性流れにおける高解像度数値解法の計算手順を説明し、典型的なベンチマークテストを用いて既存解法の数値結果と比較した。また、5章の単相圧縮性流れでの空間対称性保存解法を気液二相流に拡張し、追加で必要となる計算手法を明らかにした。表面張力を含む計算では、MUSCL-THINC-BVD 法は MUSCL 法と比べて気液界面を高解像度に捉えることで、衝撃波が衝突した後の液滴において表面張力の効果を忠実に再現した。相変化を含む計算では、接触不連続や気液界面といった不連続解を BVD 法は低散逸に捉え、特にドデカン蒸気泡圧縮問題では相変化により動的に生じる気液界面を再現することに成功した。また、空間対称性を持つ数値テストでは、完全に対称な数値解が得られ、本手法により気液二相流においても丸め誤差等に起因する対称性誤差を排除できることが分かった。界面現象を効果的に再現するために、気液界面を非物理的に拡散させないことが重要であり、高解像度数値解法は界面を含む物理現象全般において役に立つことが明らかとなった。

第7章

非構造格子への展開

実現象に即した数値流体解析では、計算領域が複雑な形状を取ることが多い。例えば飛行物体周りの空気や水の流れや、燃焼エンジン内部の燃料流れなど、複雑形状を持つ領域の圧縮性流れは様々な工学的場面で観測される。このような複雑形状の計算領域について、直交格子+カットセル法や、座標変換による境界適合格子などにより、構造格子上で計算することも可能である。一方で、格子の形状や配置に規則性の無い非構造格子を用いることで、特別な処理を行わずに複雑形状の計算領域を取り扱うことができる。本章では、相変化を含む気液二相流における高解像度数値解法を非構造格子に展開し、実用性の高い数値解法の開発を目指す。

7.1 非構造格子における有限体積法

非構造格子を用いた数値解析は主に有限体積法または有限要素法が用いられるが、本研究では有限体積法の枠組みで計算を行う。図 7.1 に 2 次元空間における三角形格子の概念図を示す。三角形セル Ω_i は、セル境界 Γ_{ij} ($j = 1, 2, 3$)、セル頂点 θ_{ik} ($k = 1, 2, 3$) によって構成され、他のセルとは互いに重ならないと仮定する。

非構造格子における有限体積法の計算手順について、次の 2 次元オイラー方程式を用いて説明する。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad (7.1)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho u & \rho v \\ \rho u u + p & \rho u v \\ \rho v u & \rho v v + p \\ (\rho E + p)u & (\rho E + p)v \end{bmatrix} \quad (7.2)$$

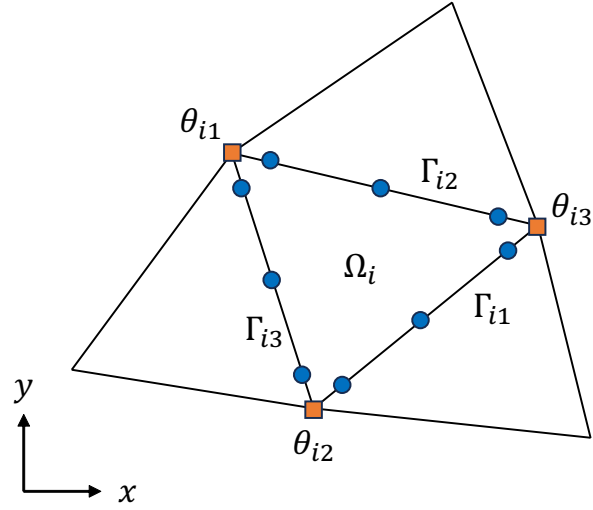


Fig. 7.1 Schematic diagram of 2D triangle mesh. The blue dots indicate the location of the Gaussian quadrature points on the cell boundary. The orange squares indicate the location of cell vertices.

この式をセル Ω_i の領域上で積分し，半離散式

$$\begin{aligned}
 \frac{d\bar{U}_i}{dt} &= -\frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(U) d\Omega_i \\
 &= -\frac{1}{|\Omega_i|} \oint_{\Gamma_i} \vec{\mathcal{F}}(U) \cdot \vec{n}_{\Gamma_i} d\Gamma_i \\
 &= -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\int_{\Gamma_{ij}} \vec{\mathcal{F}}(U) \cdot \vec{n}_{\Gamma_{ij}} d\Gamma_{ij} \right) \\
 &= -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\sum_g \omega_g \hat{\mathcal{F}}_{n,ijg} |\Gamma_{ij}| \right) \tag{7.3}
 \end{aligned}$$

を得る．ただしインデックス g および係数 ω_g はそれぞれセル境界上のガウス求積点の番号および重みを示す． $\vec{n}_{\Gamma_{ij}}$ はセル境界 Γ_{ij} の外向き単位法線ベクトルを表し， $\hat{\mathcal{F}}_{n,ijg}$ は法線方向の1次元的なリーマンソルバーから得られる数値流束を表す．この数値流束は，1次元スカラー保存則の数値流束の式 (3.5) と同じ形式で，

$$\hat{\mathcal{F}}_{n,ijg} = \mathbf{T}_n^{-1} \mathcal{F}^{\text{Riemann}}(\mathbf{T}_n \mathbf{U}_{ijg}^L, \mathbf{T}_n \mathbf{U}_{ijg}^R) \tag{7.4}$$

と計算される．ただし回転行列 \mathbf{T}_n は保存変数のうち運動量ベクトルのみを法線方向に回転させる行列であり，2次元オイラー方程式の場合，単位法線ベクトル \vec{n} の x 成分 n_x および y 成

分 n_y を用いて,

$$\mathbf{T}_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_x & n_y & 0 \\ 0 & -n_y & n_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{T}_n^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_x & -n_y & 0 \\ 0 & n_y & n_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (7.5)$$

と表される. 式 (7.4) の $\mathbf{U}_{ijg}^L, \mathbf{U}_{ijg}^R$ はそれぞれセル境界 Γ_{ij} の左側および右側のセルで構築された再構築関数により補間される保存変数を表している. 構造格子の場合と同様に, 非構造格子の場合も周辺の離散値 (セル平均値) をステンシルとして再構築関数を構築する.

7.2 空間再構築法

滑らかな解と不連続解を同時に捕獲するため, MUSCL 法と THINC/QQ 法を組み合わせるハイブリッド解法を用いる. 各セルで BVD 原理に基づき適切な補間関数を選択する. オイラー方程式の場合は基本変数 $\mathbf{q}^p = (\rho, \vec{u}, p)^T$, 6 方程式モデルの場合は準基本変数 $\mathbf{q}^{qp} = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \vec{u}, p)^T$ に対して空間再構築を行う. 本節では再構築される変数を簡略に q と表記する.

7.2.1 MUSCL 補間

非構造格子における MUSCL 補間法は, 勾配を制限する 1 次多項式関数を用いて補間を行うことで, 滑らかな解で 2 次精度を持ち, 不連続解近傍で数値振動を回避する. 構造格子では TVD 条件を用いて勾配リミタを構築したが, 非構造格子での TVD 条件の適用法は未だ明らかになっていない. 様々な勾配リミタ [90–98] が非構造格子向けに提案されているが, 本研究では MLP リミタ [95, 96] を採用する. MLP リミタは次式に示す最大値原理を満たすように勾配を制限し, 数値振動を回避する.

$$\bar{q}_{i,\text{neighbor}}^{\min,n} \leq \bar{q}_i^{n+1} \leq \bar{q}_{i,\text{neighbor}}^{\max,n} \quad (7.6)$$

ここで $\bar{q}_{i,\text{neighbor}}^{\min/\max,n}$ は, セル Ω_i と少なくとも一つ以上の頂点を共有するセルの集合における最小値及び最大値を示す. 2 次元三角形格子の場合, 各セル頂点 θ_{ik} ($k = 1, 2, 3$) に補間される値 \hat{q}_{ik} が, その頂点を共有するセルの集合における積分平均値の最小値と最大値の範囲内にあるとき, すなわち

$$\bar{q}_{ik}^{\min} \leq \hat{q}_{ik} \leq \bar{q}_{ik}^{\max} \quad (k = 1, 2, 3) \quad (7.7)$$

が満たされる時, 適切な CFL 条件下で最大値原理 (7.6) が満たされることが示されている [95]. この定理は 3 次元四面体格子の場合も成り立つ [96].

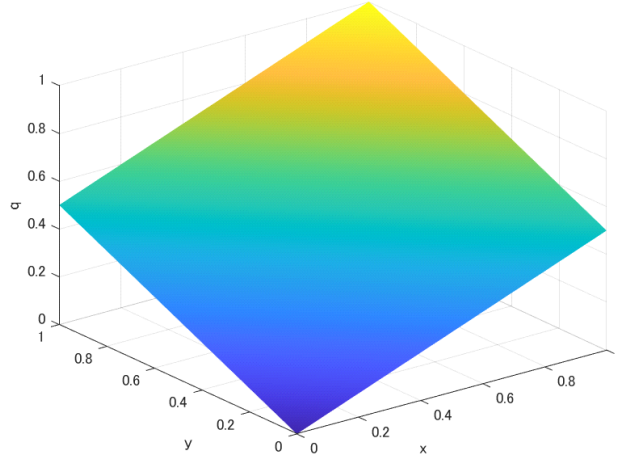


Fig. 7.2 The 2D reconstruction function of the MUSCL scheme for unstructured grid.

2次元空間における MUSCL 法の補間関数 (図 7.2) は次式で表される.

$$Q_i^{\text{MUSCL}}(x, y) = \bar{q}_i + \phi_i(q_{xic}(x - x_{ic}) + q_{yic}(y - y_{ic})) \quad (7.8)$$

ただし $(\vec{\nabla}q)_{ic} = (q_{xic}, q_{yic})$ はセル Ω_i の中心点における勾配ベクトルであり, 最小二乗法などを用いて計算される. ϕ_i は勾配を調節するパラメータであり, $\phi_i = 1$ のとき滑らかな解で 2 次精度が期待でき, $\phi_i = 0$ のとき 1 次精度となる. $0 \leq \phi_i \leq 1$ の範囲内で ϕ_i の値を調節することで, 数値解の安定性を保つことができる. 条件式 (7.7) を補間関数 (7.8) に適用すると, $\hat{q}_{ik} = Q_i^{\text{MUSCL}}(x_{ik}, y_{ik})$ より, ϕ_i に関する不等式

$$\min(R_{ik}^{\min}, R_{ik}^{\max}) \leq \phi_i \leq \max(R_{ik}^{\min}, R_{ik}^{\max}) \quad (k = 1, 2, 3) \quad (7.9)$$

を得る. ただし勾配比 $R_{ik}^{\min/\max}$ は

$$R_{ik}^{\min/\max} = \frac{\bar{q}_{ik}^{\min/\max} - \bar{q}_i}{(\vec{\nabla}q)_{ic} \cdot \vec{r}_{ik}} \quad (7.10)$$

と表される. \vec{r}_{ik} はセル Ω_i の中心からセル頂点 θ_{ik} を指す位置ベクトルである. あるセル頂点 θ_{ik} について $(\vec{\nabla}q)_{ic} \cdot \vec{r}_{ik} = 0$ となる時, セル頂点 θ_{ik} への補間値は ϕ_i の値に関わらず 1 次精度となり, 最大値原理を満たす. $\bar{q}_{ik}^{\min} \leq \bar{q}_i \leq \bar{q}_{ik}^{\max}$ より R_{ik}^{\min} と R_{ik}^{\max} は異符号なので, $\min(R_{ik}^{\min}, R_{ik}^{\max})$ は 0 以下, $\max(R_{ik}^{\min}, R_{ik}^{\max})$ は 0 以上の値となる. この関係を踏まえて, $0 \leq \phi_i \leq 1$ の範囲内で不等式 (7.9) は

$$0 \leq \phi_i \leq \min(1, R_{ik}) \quad (k = 1, 2, 3) \quad (7.11)$$

となる. ただし $R_{ik} = \max(R_{ik}^{\min}, R_{ik}^{\max})$ である. 条件式 (7.11) は全セル頂点 θ_{ik} ($k =$

1, 2, 3) に対して満たされる必要があり, 最終的に勾配パラメータ ϕ_i は次式で計算される.

$$\phi_i = \min_k \begin{cases} \Phi(R_{ik}), & \text{if } (\vec{\nabla}q)_i \cdot \vec{r}_{ik} \neq 0, \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7.12)$$

ただし $\Phi(R)$ は勾配リミタ関数を表し, $0 \leq \Phi(R) \leq \min(1, R)$ を満たすように設計される. MLP-u1 リミタ, MLP-u2 リミタはそれぞれ,

$$\Phi_{\text{MLPu1}}(R) = \min(1, R), \quad (7.13)$$

$$\Phi_{\text{MLPu2}}(R) = \frac{R^2 + 2R + \epsilon}{R^2 + R + 2 + \epsilon}, \quad \epsilon = 10^{-15} \quad (7.14)$$

と表される [95].

これらの MLP リミタ関数を用いて ϕ_i を計算することで, 各セル頂点の補間値はその頂点を共有するセルの集合の最小値と最大値の間に入り, 最大値原理 (7.6) を満たすことができる. MLP リミタを用いた MUSCL 補間は, 不連続解近傍で数値振動を回避できる一方で, 過剰な数値散逸誤差が導入される.

7.2.2 THINC/QQ 補間

THINC/QQ 法 [35, 210] は, 3.4.5 節で示した THINC 法を基に開発された, 非構造格子における界面捕獲法である. THINC/QQ 法は界面を 2 次関数で表現するため, THINC 法と比べて界面の幾何学的形状をより高精度に計算できる. 圧縮性流れにおける空間再構築にも適用され [47, 59, 108], 衝撃波や接触不連続等の不連続解を低散逸に捉えられることが報告されている.

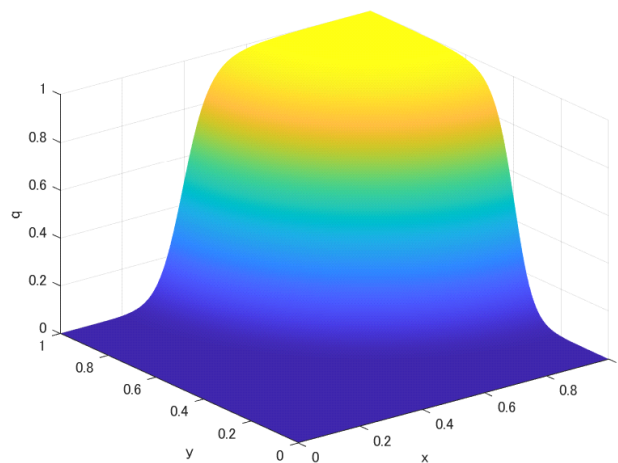


Fig. 7.3 The 2D reconstruction function of the THINC/QQ scheme for unstructured grid.

THINC/QQ法の空間再構築関数は次式で示される (図7.3).

$$Q_i^{\text{THINC/QQ}}(x, y) = \frac{\bar{q}_i^{\min} + \bar{q}_i^{\max}}{2} + \frac{\bar{q}_i^{\max} - \bar{q}_i^{\min}}{2} \tanh\left(\frac{\beta}{L_i}(P_i(x, y) + d_i)\right) \quad (7.15)$$

ただし $\bar{q}_i^{\min/\max}$ はセル Ω_i と少なくとも一つ以上の頂点を共有するセルの集合における最小値および最大値を示す. L_i はセルの長さにあたるパラメータであり, 本研究では三角形セルの外接円の直径とする. 多項式関数 $P_i(x, y)$ は不連続分布の幾何学的形状を表現し, 特に $P_i(x, y) + d_i = 0$ は不連続解の位置を示す曲線 (3次元空間の場合は曲面) の式となる. THINC/QQ法では次式に示す2次多項式関数

$$\begin{aligned} P_i(x, y) &= \sum_{\substack{s, t \geq 0, \\ 1 \leq s+t \leq 2}} a_{st}(x - x_{ic})^s (y - y_{ic})^t \\ &= a_{10}(x - x_{ic}) + a_{01}(y - y_{ic}) \\ &\quad + a_{20}(x - x_{ic})^2 + a_{11}(x - x_{ic})(y - y_{ic}) + a_{02}(y - y_{ic})^2 \end{aligned} \quad (7.16)$$

を用いる. (x_{ic}, y_{ic}) はセル Ω_i の中心位置の座標である. 係数 a_{st} は, 多項式関数 $P_i(x, y)$ が不連続分布の法線や曲率に整合するように計算される. 具体的には, 多項式関数 $P_i(x, y)$ が

$$\left\{ \begin{array}{l} \left. \frac{\partial P_i(x, y)}{\partial x} \right|_{ic} = \varphi_{x, ic}, \\ \left. \frac{\partial P_i(x, y)}{\partial y} \right|_{ic} = \varphi_{y, ic}, \\ \left. \frac{\partial^2 P_i(x, y)}{\partial x^2} \right|_{ic} = \varphi_{xx, ic}, \\ \left. \frac{\partial^2 P_i(x, y)}{\partial x \partial y} \right|_{ic} = \frac{1}{2}(\varphi_{xy, ic} + \varphi_{yx, ic}), \\ \left. \frac{\partial^2 P_i(x, y)}{\partial y^2} \right|_{ic} = \varphi_{yy, ic} \end{array} \right. \quad (7.17)$$

を満たすように計算される. $(\varphi_x, \varphi_y)_{ic} = (\vec{\nabla}q)_{ic}/|(\vec{\nabla}q)_{ic}|$ は単位法線ベクトル, $\varphi_{ab, ic}$ ($(a, b) \in (x, y)$) は曲率テンソルを表し, 周囲の数値解を用いて最小二乗法により計算される. 条件式 (7.17) より, 係数 a_{st} は

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{10} = \varphi_{x, ic}, \quad a_{01} = \varphi_{y, ic}, \\ a_{20} = \frac{1}{2}\varphi_{xx, ic}, \quad a_{11} = \frac{1}{2}(\varphi_{xy, ic} + \varphi_{yx, ic}), \quad a_{02} = \frac{1}{2}\varphi_{yy, ic} \end{array} \right. \quad (7.18)$$

と求まる.

補間関数 (7.15) 内の d_i は, シグモイド関数のジャンプ位置を調節するパラメータであり, 補間関数 (7.15) のセル Ω_i 内の積分平均値が数値解 \bar{q}_i に一致するように定められる. すな

わち,

$$\frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} Q_i^{\text{THINC/QQ}}(x, y) dx dy = \bar{q}_i \quad (7.19)$$

を解くことで d_i の値が得られる. この条件式から解析的に d_i の式を導くことは出来ないため, ガウス求積とニュートン反復法を用いて数値的に d_i を求める [35, 211].

最後に, 勾配パラメータ β の値を設定し, THINC/QQ 法の補間関数 (7.15) が完成する. 不連続捕獲性能と計算安定性を両立するため, 本研究では $\beta = 1.8$ と設定する.

7.2.3 BVD 選択アルゴリズム

MUSCL 補間は滑らかな解で 2 次精度を持ち, 不連続解近傍では数値振動を回避する. THINC/QQ 補間は不連続解の幾何学的形状を 2 次曲線として表現し, 低散逸で不連続解を捕獲する. すなわち, 滑らかな解では MUSCL 補間, 不連続解近傍では THINC/QQ 補間を選択することで, 高忠実な補間が達成される. 複数の候補補間関数のうち, セル境界における補間値の差を小さくする BVD 原理に基づき選択する. 非構造格子におけるセル Ω_i の補間関数の具体的な選択アルゴリズムを以下に示す [47, 59].

- (i) 初めに, 各候補補間関数を用いて, セル境界上のガウス求積点の補間値を計算する.

$$q_{ijg}^{\Xi} = Q_i^{\Xi}(x_{ijg}, y_{ijg}), \quad (7.20)$$

ここで候補補間関数 Ξ は MUSCL および THINC/QQ 法である. ijg はセル Ω_i の j 番目のセル境界上の g 番目のガウス求積点を示す.

- (ii) 次に, 各セル境界で各候補補間関数の境界値変動 BV_{ij}^{Ξ} を計算する.

$$\begin{aligned} BV_{ij}^{\Xi} &= \left| \int_{\Gamma_{ij}} (Q_{ijR}^{\Xi}(x, y) - Q_{ijL}^{\Xi}(x, y)) d\Gamma_{ij} \right| \\ &= \left| \sum_g \omega_g (q_{ijgR}^{\Xi} - q_{ijgL}^{\Xi}) \right| |\Gamma_{ij}| \quad (j = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (7.21)$$

ここで $Q_{ijR/L}^{\Xi}(x, y)$ はセル境界 Γ_{ij} の左右のセルの補間関数を表す. ω_g はガウス求積の重み係数, $|\Gamma_{ij}|$ はセル境界線の長さである. セル Ω_i の持つ全てのセル境界の BV の合計値として, total BV (TBV) を計算する.

$$TBV_i^{\Xi} = \sum_j BV_{ij}^{\Xi} \quad (7.22)$$

- (iii) 最後に, 各候補補間関数の TBV_i の値を比較し, 小さい値の方をセル Ω_i の補間関数とし

て選択する.

$$Q_i(x, y) = \begin{cases} Q_i^{\text{MUSCL}}(x, y) & \text{if } TBV_i^{\text{MUSCL}} < TBV_i^{\text{THINC/QQ}}, \\ Q_i^{\text{THINC/QQ}}(x, y) & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (7.23)$$

この手順で補間関数を選択することで、数値流束に含まれる BV および人工粘性項の影響を最小化でき、過剰な数値散逸誤差を抑制できる.

7.3 リーマンソルバー

本研究では、セル境界を通過する流束の計算について、セル境界上のガウス求積点で1次元的なリーマン問題を解くことで求める. 式 (7.4) に示したように、ガウス求積点上に補間された両側のセル境界値を用いて数値流束を計算する. 多次元的なリーマン問題を解く計算手法も提案されている [212] が、ここでは構造格子の場合と同様の流束計算を行う. よって本論文の 3.5.1 節および 6.5.1 節で示す構造格子におけるリーマンソルバーの計算手順を非構造格子における計算に適用する. ただし、次節で述べる気液二相流における非保存項の計算では、リーマンソルバーを用いて流束の他に速度や圧力の値を求める必要がある.

7.4 気液二相流における非保存項の離散化

5 方程式モデルや 6 方程式モデルなどの気液二相圧縮性流れの支配方程式に含まれている非保存項について、非構造格子における計算手順を示す. 構造格子では、波動伝播法や経路保存法を用いることで、非保存項を直接計算することなく空間離散化を行うことができた. 一方で、波動伝播法の非構造格子への拡張は困難であり、経路保存法の非構造格子への拡張はいくつか報告されている [94, 187] が、セル内部のガウス求積点で非保存項の値を評価する必要がある. 非保存項 $\sigma(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U})$ の評価には保存変数の勾配が必要であり、勾配の補間を行うと、計算精度減少や計算コスト増大につながる. 文献 [94, 187] ではロンバーグ積分を行うことで保存変数の勾配の直接的な計算を回避 [213, 214] しているが、計算アルゴリズムの複雑化や計算コストの顕著な増大は避けられない. 文献 [182] で、5 方程式モデルで 6.2.1 節で示した数値流束法の空間離散化を用いて、2 次精度を保ちながら比較的少ない計算コストで非保存項を計算する手法が提案された. この手法は非保存項に含まれる保存変数の勾配を直接評価する必要が無く、リーマンソルバーで得られる情報を再利用して非保存項を評価するため、計算コストの抑制や、上流化に伴う高い計算安定性といった特長を持つ. 6 方程式モデルの非構造格子へ適用された例は無いため、本研究で、上述の非保存項の計算手順の概念を 6 方程式モデルに拡張する.

6.2.1 節で示した数値流束法の空間離散化を非構造格子に適用すると、次の半離散式を得る。

$$\frac{d\bar{U}_i}{dt} = -\frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) d\Omega_i - \frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \sigma(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) d\Omega_i \quad (7.24)$$

式 (7.24) の流束の発散の積分項 (右辺第 1 項) は、式 (7.3) と同様にセル境界における周回積分に変換できるため、セル境界上のガウス求積点で数値流束を計算することで求められる。一方で非保存項の積分項は、直接的に計算する場合、セル内部のガウス求積点で非保存項の値を評価し求めることになる。しかし、この手法は計算精度低下や計算コスト増大につながる。ここで文献 [182] で提案された 5 方程式モデルの非保存項の計算手順を説明する。Allaire らの 5 方程式モデルの非保存項 (式 (2.79)) の $\alpha_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ の空間積分を、中点則を用いて α_1 と $\vec{\nabla} \cdot \vec{u}$ のそれぞれの空間積分の積として計算する。この操作により積分値は 2 次精度となるが、セル内の空間積分がセル境界上の周回積分に変換されるため、リーマンソルバーで得られる情報を再利用して非保存項を計算できる。具体的には、次式に示す式変形を経て、セル境界上のガウス求積点の値を用いて計算する。

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \alpha_1 \vec{\nabla} \cdot \vec{u} d\Omega_i &= \left(\frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \alpha_1 d\Omega_i \right) \cdot \left(\frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla} \cdot \vec{u} d\Omega_i \right) + \mathcal{O}(h^2) \\ &= \frac{\bar{\alpha}_{1i}}{|\Omega_i|} \oint_{\Gamma_i} \vec{u} \cdot \vec{n}_{\Gamma_i} d\Gamma_i + \mathcal{O}(h^2) \\ &= \frac{\bar{\alpha}_{1i}}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\int_{\Gamma_{ij}} u_{n,ij} d\Gamma_{ij} \right) + \mathcal{O}(h^2) \\ &= \frac{\bar{\alpha}_{1i}}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\sum_g \omega_g u_{n,ijg} |\Gamma_{ij}| \right) + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned} \quad (7.25)$$

ここで h は代表セル長さ、 $u_{n,ijg}$ はセル Ω_i の j 番目のセル境界上の g 番目のガウス求積点における速度のセル境界外向き法線成分を表す。 $u_{n,ijg}$ はリーマンソルバーの計算の中で値を求める。式 (7.25) は、非構造格子における 5 方程式モデルの計算でよく用いられている [215–217]。このような式変形を 6 方程式モデルの全エネルギーの方程式に含まれる非保存項 \mathcal{Y} に対して適用する。非保存項 \mathcal{Y} の式 (2.74) の積分を、中点則を用いて次式のように変形

する.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \gamma d\Omega_i &= \frac{1}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} (-\vec{u} \cdot Y_2 \vec{\nabla}(\alpha_1 p_1) + \vec{u} \cdot Y_1 \vec{\nabla}(\alpha_2 p_2)) d\Omega_i \\
&= -\bar{\vec{u}}_i \cdot \frac{\bar{Y}_{2i}}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla}(\alpha_1 p_1) d\Omega_i + \bar{\vec{u}}_i \cdot \frac{\bar{Y}_{1i}}{|\Omega_i|} \iint_{\Omega_i} \vec{\nabla}(\alpha_2 p_2) d\Omega_i + \mathcal{O}(h^2) \\
&= -\bar{\vec{u}}_i \cdot \frac{\bar{Y}_{2i}}{|\Omega_i|} \oint_{\Gamma_i} (\alpha_1 p_1) \vec{n}_{\Gamma_i} d\Gamma_i + \bar{\vec{u}}_i \cdot \frac{\bar{Y}_{1i}}{|\Omega_i|} \oint_{\Gamma_i} (\alpha_2 p_2) \vec{n}_{\Gamma_i} d\Gamma_i + \mathcal{O}(h^2) \\
&= -\bar{\vec{u}}_i \cdot \frac{\bar{Y}_{2i}}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\int_{\Gamma_{ij}} (\alpha_1 p_1)_{ij} d\Gamma_{ij} \right) \vec{n}_{\Gamma_{ij}} \\
&\quad + \bar{\vec{u}}_i \cdot \frac{\bar{Y}_{1i}}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\int_{\Gamma_{ij}} (\alpha_2 p_2)_{ij} d\Gamma_{ij} \right) \vec{n}_{\Gamma_{ij}} + \mathcal{O}(h^2) \\
&= -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_j \left(\left(\sum_g \omega_g (\bar{Y}_{2i} (\alpha_1 p_1)_{ijg} - \bar{Y}_{1i} (\alpha_2 p_2)_{ijg}) \right) |\Gamma_{ij}| (\bar{\vec{u}}_i \cdot \vec{n}_{\Gamma_{ij}}) \right) + \mathcal{O}(h^2)
\end{aligned} \tag{7.26}$$

ただし $(\alpha_k p_k)_{ijg}$ ($k = 1, 2$) はセル Ω_i の j 番目のセル境界上の g 番目のガウス求積点における相 k の相圧力を表し, リーマンソルバーの計算の中で値を求める. $\bar{\vec{u}}_i$ および \bar{Y}_{ki} ($k = 1, 2$) はそれぞれ速度ベクトルと質量分率のセル平均値であり, 未知変数のセル平均値 \bar{U}_i の値から直接計算すれば 2 次精度で求められる. このような 6 方程式モデルの非保存項の計算手順はこれまで定式化された例が無いので, 本研究で式 (7.26) による計算の妥当性を検証する.

セル境界上で求める $u_{n,ijg}$ および $(\alpha_k p_k)_{ijg}$ ($k = 1, 2$) について, HLLC 法を例に具体的な計算手順を示す. 文献 [182] で, HLLC 法における速度 u の解は,

$$u^{\text{HLLC}} = \frac{1 + \text{sign}(S^*)}{2} (u^L + S^{L-} (\chi^L - 1)) + \frac{1 - \text{sign}(S^*)}{2} (u^R + S^{R+} (\chi^R - 1)) \tag{7.27}$$

として与えられており, 本研究でも同じ式を用いる. 相圧力 $\alpha_k p_k$ の解は, HLLC 法の流束の計算式に倣い,

$$(\alpha_k p_k)^{\text{HLLC}} = \begin{cases} (\alpha_k p_k)(\mathbf{U}^L) & \text{if } 0 \leq S^L, \\ (\alpha_k p_k)(\mathbf{U}^{*L}) & \text{if } S^L \leq 0 \leq S^*, \\ (\alpha_k p_k)(\mathbf{U}^{*R}) & \text{if } S^* \leq 0 \leq S^R, \\ (\alpha_k p_k)(\mathbf{U}^R) & \text{if } S^R \leq 0 \end{cases} \tag{7.28}$$

とする. すなわち, 特性線で区切られた 4 つのステートのうち特性速度の符号に応じて 1 つ選び, そのステートの物理量を用いて相圧力 $\alpha_k p_k$ を計算する. 具体的には, 状態方程式 (2.84a)

から,

$$(\alpha_k p_k)(\mathbf{U}^K) = (\gamma_k - 1) \left((\alpha_k \rho_k E_k)^K - (\alpha_k \rho_k)^K \left(\frac{1}{2} \frac{((\rho u)^K)^2 + ((\rho v)^K)^2}{((\alpha_1 \rho_1)^K + (\alpha_2 \rho_2)^K)^2} + \eta_k \right) \right) - (\alpha_k)^K \gamma_k \pi_k \quad (7.29)$$

と計算する. ただし $K \in \{L, *L, *R, R\}$ である. このようにリーマンソルバーの計算の中で数値流束と合わせて速度と相圧力の値を求めることで, 式 (7.25) と (7.26) から非保存項を計算することができる.

7.5 時間積分法

数値流束と非保存項を計算し, 式 (7.24) を用いて数値解を時間発展させる. 6.6 節で示した通り, ルンゲクッタ法を各セルに適用することで, 構造格子の場合と同様に新しい時刻の数値解を得られる. ただし時間刻みは, 文献 [210] を参考に,

$$\Delta t = \text{CFL} \times \min_i \left(\frac{|\Omega_i|}{\frac{1}{2} \sum_j |\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij} \pm c_{ij}| |\Gamma_{ij}|} \right) \quad (7.30)$$

と計算する.

7.6 非構造格子における空間対称性誤差

5 章および 6 章では, それぞれ単相及び気液二相流における空間対称性を構造格子上で厳密に保存する数値解法を示した. 一方で非構造格子上では, 格子の非対称性などにより, 足し算の順序の工夫などで空間対称性を保つことは原理的にほぼ不可能と考えられる. したがって, 本章のベンチマークテストの数値結果では対称性誤差が見られるが, 5 章で述べた通り数値解法が低散逸であるほど対称性誤差は増大するため, 数値結果の非対称性を数値解法の低散逸性の指標として扱うことができる.

7.7 相変化あり 6 方程式モデルの数値結果

非構造格子上での相変化を含む気液二相圧縮性流れの高解像度数値解法の性能を検証するため, いくつかの典型的なベンチマークテストを解き, MUSCL 法と MUSCL-THINC/QQ-BVD 法による計算結果を比較する. ベンチマークテストで用いる水およびドデカンの stiffened gas 状態方程式におけるパラメータは表 2.1 および 2.2 の通り設定する. 全ての問題で再構築変数は準基本変数 $\mathbf{q}^{\text{qp}} = (\alpha_1, \alpha_1 \rho_1, \alpha_2 \rho_2, \vec{u}, p)^\top$, リーマンソルバーは HLLC ソルバー, 時間発展は 3 段 3 次ルンゲクッタ法, CFL 数は 0.5 とした.

7.7.1 水キャビテーション管問題

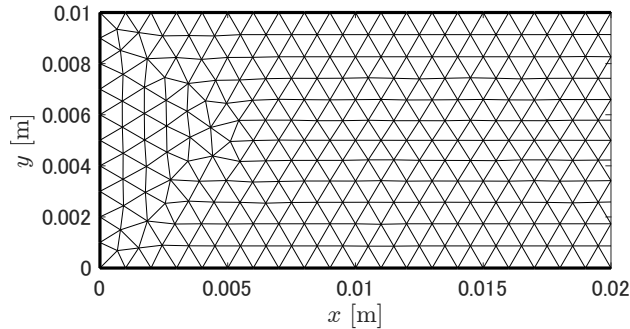


Fig. 7.4 A part of the computational domain and the triangle mesh for the water cavitation tube problem and the water shock tube problem.

6.10.1 節で計算した 1 次元の管内で水のキャビテーション現象を再現する問題 [126,130] を、細長い 2 次元領域で非構造格子を用いて計算する。計算領域は $x \in [0, 1 \text{ m}] \times y \in [0, 0.01 \text{ m}]$ 、格子長さは $h \approx 1/1000 \text{ m}$ 、格子数は 23992 とする。図 7.4 に計算領域と三角形格子の一部を示す。格子は主流方向である x 方向に沿っていないため、計算結果は純粋な 1 次元の計算結果とは一般に異なる。一方で、計算結果の 2 次元性を評価し、計算結果が十分 1 次元であることを確認する。初期条件は 6.10.1 節で示した $|u_0| = 2 \text{ m/s}$ の場合と同じとする。境界条件は、左右境界を流出境界、上下境界を周期境界とする。緩和法は p 緩和、p-pT 緩和、p-pTG 緩和、p-pT-pTG 緩和を検証する。

計算領域の中心線 $y = 0.005 \text{ m}$ 上の圧力、速度、蒸気体積分率、蒸気質量分率の数値結果を図 7.5 に示す。4 種類の緩和法による結果の違いを見ると、p 緩和および p-pT 緩和は計算領域中心部で圧力値が大きく降下しているが、p-pTG 緩和および p-pT-pTG 緩和は圧力降下がある値で止まっており、液体から気体への相変化が見られる。また、p-pT 緩和および p-pT-pTG 緩和による膨張波の進行速度は p 緩和と p-pTG 緩和と比べて遅く、圧力・温度緩和による混合音速の減少 [138] が再現されている。これらの数値結果は純粋な 1 次元領域の計算結果 [58, 126, 130] とおおむね一致しており、細長い 2 次元領域を非構造格子で分割した計算においても 1 次元的な計算が出来ていると言える。

MUSCL 法と MUSCL-THINC-BVD 法の結果を比べると、顕著な差は観測されなかった。実際、質量分率の値の二つの解法間の差の最大値は 10^{-6} のオーダーである。この問題では、衝撃波や接触不連続といった不連続解が存在せず、膨張波といった滑らかな分布のみで解が構成される。滑らかな分布で THINC/QQ 補間関数を選択すると階段状の分布に劣化してしまうため、図 7.5 の結果から MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は滑らかな解で正しく MUSCL 補間関数を選択出来ていることが分かる。

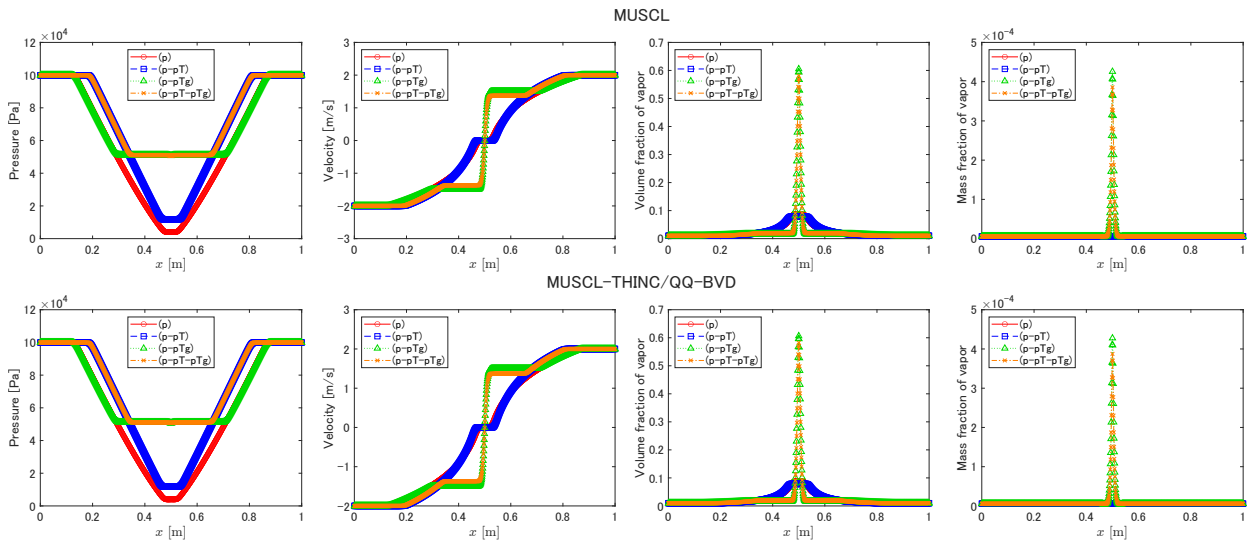


Fig. 7.5 Numerical results of pressure, velocity, volume fraction, and mass fraction of vapor at $y = 0.005$ m at $t = 3.2$ ms in water cavitation tube problem. The top and bottom rows show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.

さらに、各数値結果の二次元性について、速度の x 成分の最大値に対する速度の y 成分の最大値の比 $r = \max_i(|v_i|)/\max_i(|u_i|)$ を評価する。表 7.1 に示す通り、どの数値結果も y 方向の速度成分は主流方向成分の数パーセント程度である。したがって、計算結果はほとんど 1 次元的であると言える。

	MUSCL	MUSCL-THINC/QQ-BVD
p-relaxation	3.46×10^{-2}	3.46×10^{-2}
p-pT-relaxation	3.50×10^{-2}	3.50×10^{-2}
p-pTG-relaxation	2.58×10^{-2}	2.56×10^{-2}
p-pT-pTG-relaxation	2.72×10^{-2}	2.71×10^{-2}

Table. 7.1 Two-dimensionality of each numerical result in the water cavitation tube problem.

7.7.2 水衝撃波管問題

6.10.2 節で計算した 1 次元水衝撃波管問題 [203] を、前節の水キャビテーション管問題と同様に、細長い 2 次元領域で非構造格子を用いて計算する。計算領域や格子、境界条件は前節と同じとする。緩和法は p 緩和、p-pT 緩和、p-pT-pTG 緩和を用いる。

計算領域の中心線 $y = 0.005$ m 上の圧力、速度、液体体積分率、液体質量分率の数値結果を図 7.6 に示す。p-pT 緩和の計算は、文献 [203] の 4 方程式モデル（圧力・温度平衡、相変化な

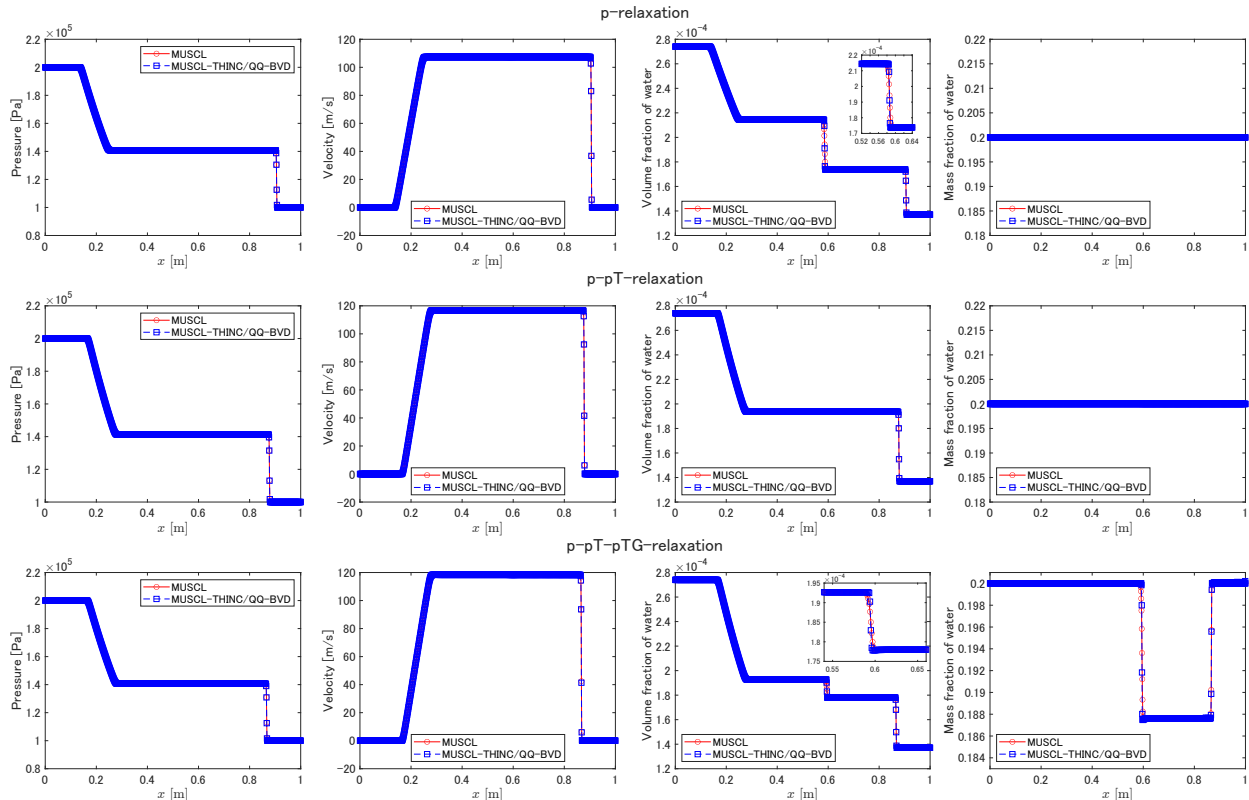


Fig. 7.6 Numerical results of pressure, velocity, volume fraction of water, and mass fraction of water at $y = 0.005$ m at $t = 0.8$ ms in water shock tube problem. The top, middle, and bottom panels show the results of p-relaxation, p-pT-relaxation, and p-pT-pTG-relaxation respectively.

し)の計算に対応しており、文献の結果と一致している。p緩和とp-pT-pTG緩和の計算結果についても、6.10.2節の1次元の計算結果と一致している。

MUSCL法とMUSCL-THINC/QQ-BVD法の結果を比較すると、p-pT緩和では解が膨張波と衝撃波のみで構成されるため大きな違いは見られないが、p緩和とp-pT-pTG緩和では $x \approx 0.6$ m付近の接触不連続で体積分率と質量分率の分布に顕著な違いが見られる。MUSCL-THINC/QQ-BVD法は接触不連続を3~4セルの幅で捕獲しているが、MUSCL法はより多くのセルの幅に拡散している。このことから、MUSCL-THINC/QQ-BVD法は接触不連続や相変化により生成される気液界面を低散逸で捉えられることを示した。

各数値結果の二次元性について、前節と同様に、速度の x 成分の最大値に対する速度の y 成分の最大値の比を評価する。表7.2に示す通り、どの数値結果も y 方向の速度成分は主流方向成分の数パーセント程度であり、計算結果はほとんど1次元的であると言える。

	MUSCL	MUSCL-THINC/QQ-BVD
p-relaxation	3.02×10^{-2}	3.03×10^{-2}
p-pT-relaxation	3.06×10^{-2}	3.13×10^{-2}
p-pT-pTG-relaxation	3.07×10^{-2}	3.16×10^{-2}

Table. 7.2 Two-dimensionality of each numerical result in the water shock tube problem.

7.7.3 ドデカン蒸気泡圧縮問題

ドデカン蒸気泡圧縮問題 [126, 205–207] を、非構造格子を用いて計算する。文献 [58] や 6.10.4 節で示されている通り、この問題では $t = 1.4$ ms においてキャビテーションにより動的に気液界面が生成される。このような相変化現象は数値解法に含まれる数値散逸誤差の影響を受けやすく、過剰な数値散逸誤差を含む既存の数値解法では相変化現象を明瞭に再現できない。よって、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の低散逸性および相変化現象の計算性能を検証するため、ドデカン蒸気泡圧縮問題を非構造格子上で計算する。計算領域 $x \in [0, 1 \text{ m}] \times y \in [0, 1 \text{ m}]$ を、格子幅 $h \approx 1/200$ m の三角形格子で分割する。格子数は 90804 である。初期条件および境界条件は 6.10.4 節で示した通りである。緩和法は p 緩和と p-pT-pTG 緩和を用いる。

図 7.7 と 7.8 にそれぞれ相変化なしと相変化ありの場合の気相質量分率の数値結果を示す。相変化なしの場合、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は MUSCL 法より僅かに高い気相質量分率の値を示しているが、大きな違いは見られない。一方、相変化ありの場合、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は動的に生成される気泡および気液界面を明瞭に捉えているのに対し、MUSCL 法は気液界面がぼやけている。MUSCL 法は過剰な数値散逸誤差を含むため、相変化により生成される気液界面がすぐに拡散してしまう。不連続捕獲に優れる THINC/QQ 補間関数を選択候補に持つ BVD 法は、不連続近傍で数値散逸誤差を抑制し、相変化により生成される新しい気液界面を高解像度で捉えることができる。

図 7.9 に MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の数値結果のコンター図を示す。図 7.9 の左図に示すように、赤線、緑線、青線はそれぞれ気相質量分率が 0.9, 0.5, 0.1 であることを表す。図 7.9 右図より、赤線と青線の間隔は最も狭い所で 3~4 個の三角形セル分の幅であることが分かる。このことから、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は相変化により動的に生成される気液界面を比較的少ない格子数で捕獲できていることが分かる。

7.7.4 高圧燃料噴射器

この問題では、高圧液体燃料（ドデカン）で満たされたタンクから、大気圧下のチャンバーに燃料が噴射されるという現象を再現する [126, 130]。図 7.10 にノズル形状の計算領域を示

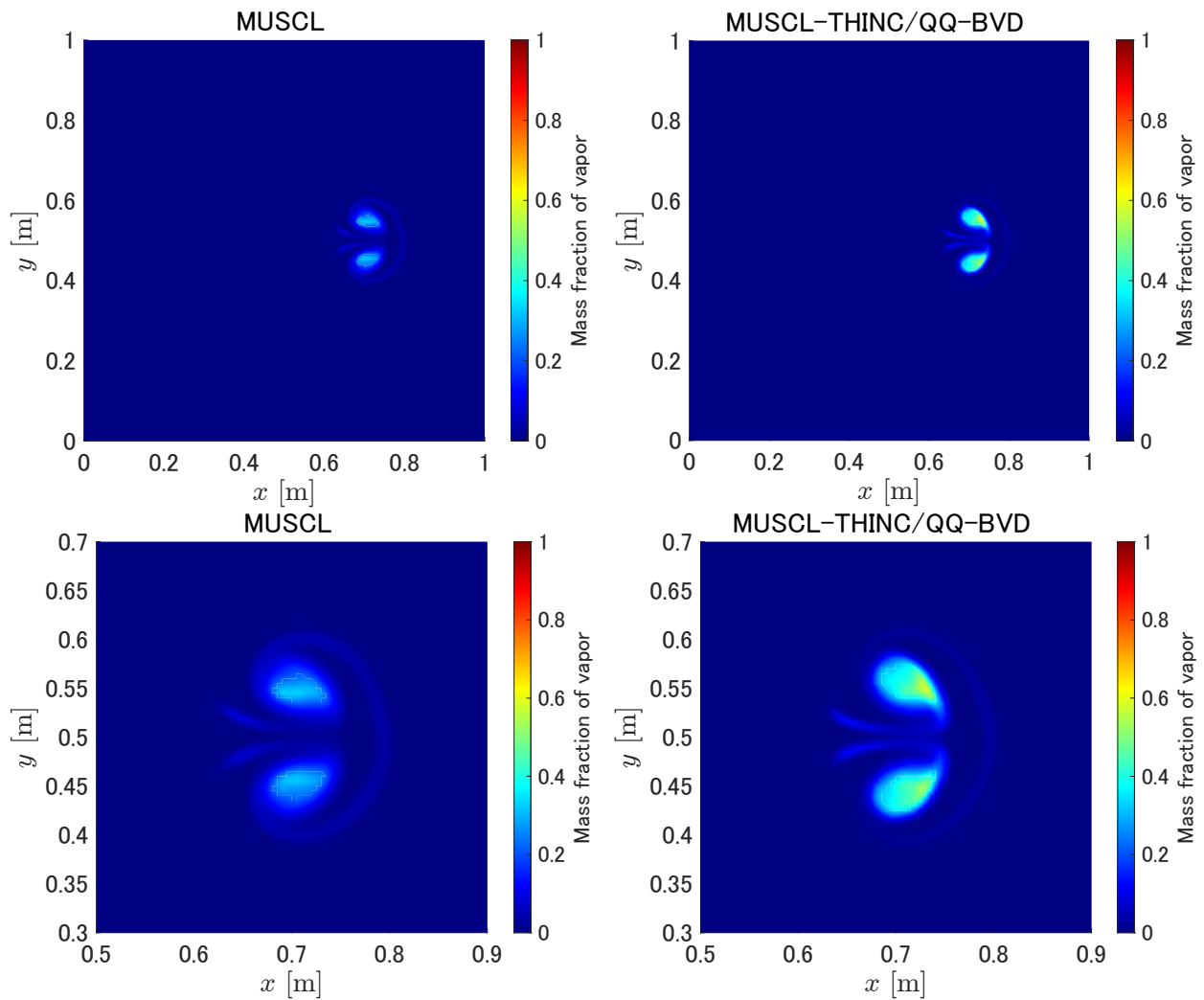


Fig. 7.7 Pseudo-color plots of the mass fraction of vapor at $t = 1.4$ ms in vapor-bubble compression problem without phase change (p-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/qq-BVD schemes respectively. The bottom row shows enlarged views of vapor bubbles.

す。ノズルの長さは 10 cm, 高さは 4 cm, スロートの幅は 1.2 cm とし, 収束及び発散チャンバの水平方向に対する角度はそれぞれ 45° 及び 10° とする。計算に用いる三角形格子の大きさは図 7.10 の格子の 10 分の 1 である $h \approx 1/4000$ m とし, 格子数は 98856 である。タンク内部 ($x < 0.6$ cm) は液体ドデカン ($\alpha_1 = 1 - 10^{-4}$) で満たされていて, 圧力と温度はそれぞれ 10^8 Pa, 640 K とする。チャンバ内はドデカン蒸気で満たされていて, 圧力と温度はそ

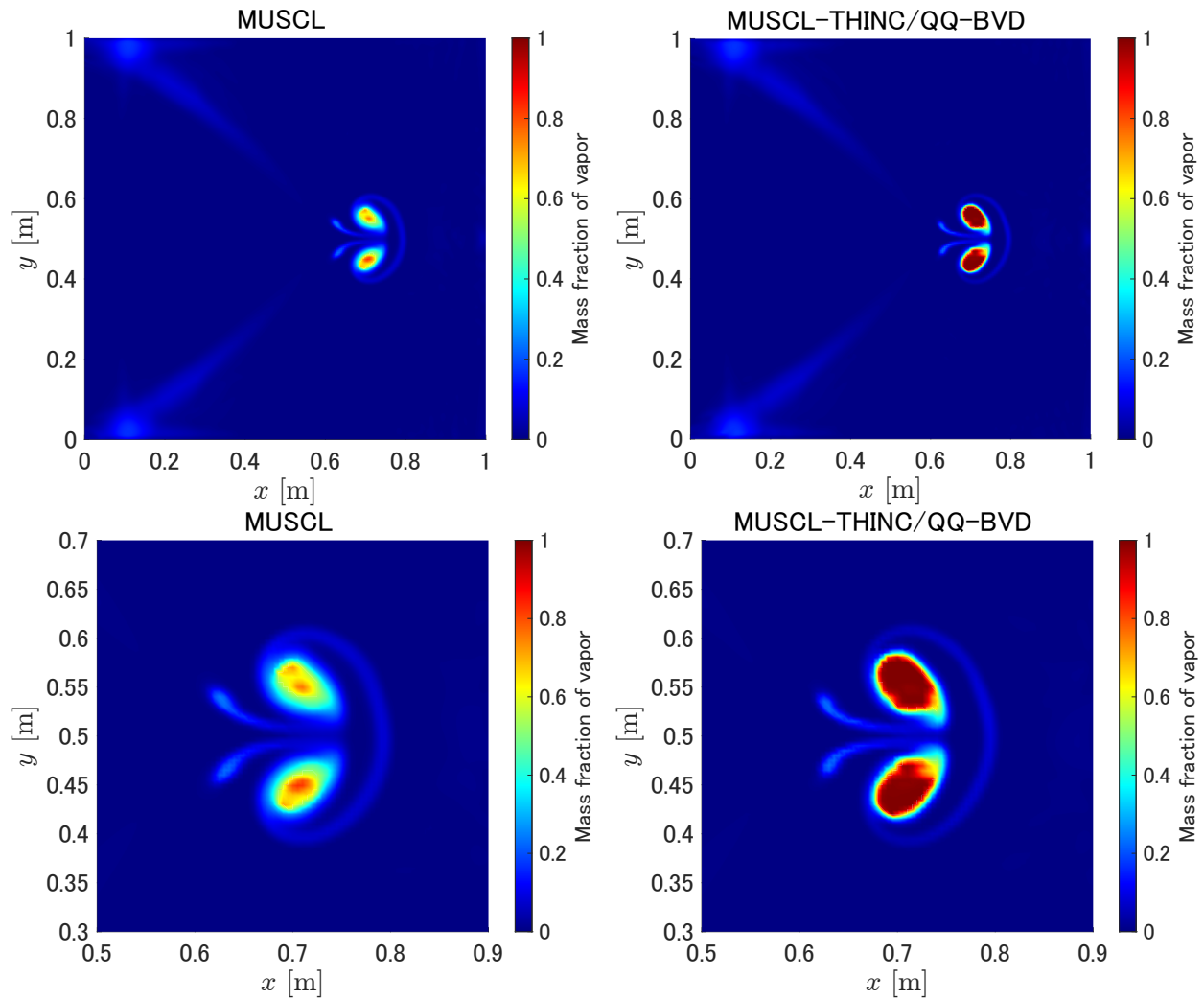


Fig. 7.8 Same as Fig. 7.7, but with phase change (p-pT-pTG-relaxation).

それぞれ 10^5 Pa, 300 K とする。このとき、基本変数についての初期条件は、

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_1, \rho_1 [\text{kg/m}^3], \rho_2 [\text{kg/m}^3], u [\text{m/s}], v [\text{m/s}], p [\text{Pa}])_{t=0} = \\
 & \begin{cases} (1 - 10^{-4}, 536.99, 3.1946 \times 10^3, 0, 0, 10^8) & \text{for } x < 6 \times 10^{-3} \text{ m} \\ (10^{-4}, 916.68, 6.8151, 0, 0, 10^5) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7.31)
 \end{aligned}$$

と表される。境界条件は、左境界を流入境界、右境界を流出境界、他の境界を反射境界とする。計算安定性を保つため CFL 数は 0.2 とする。緩和法は、p 緩和（相変化なし）と p-pT-pTG 緩和（相変化あり）を用いる。

図 7.11 と 7.12 にそれぞれ相変化なしと相変化ありの数値結果を示す。相変化なしの場合、MUSCL 法と MUSCL-THINC/QQ-BVD 法に大きな違いは無く、文献 [126, 130] の結果と一致している。一方で相変化ありの場合、数値解法間で特に質量分率の分布に差が見られる。MUSCL-THINC/QQ-BVD 法では、発散チャンバの上部壁面近傍で気体質量分率が 1

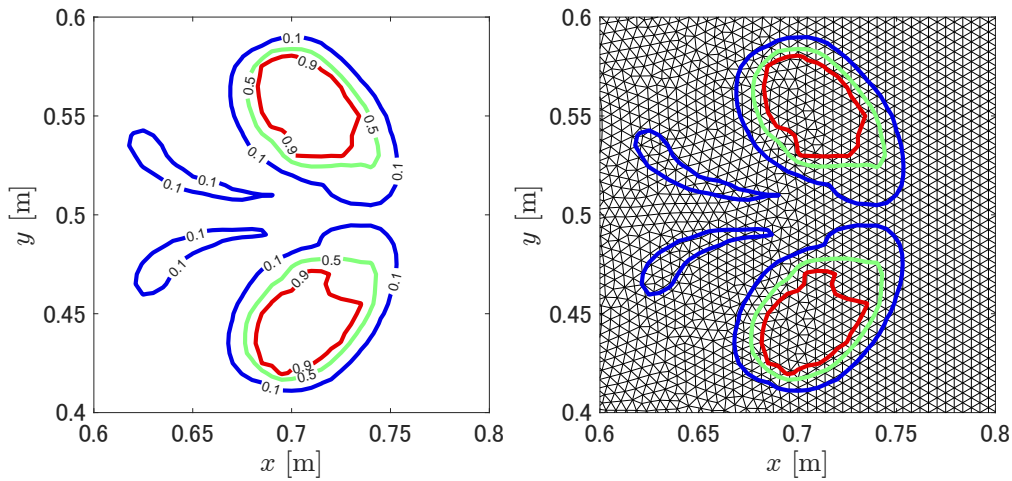


Fig. 7.9 Contour plots of the mass fraction of vapor at $t = 1.4$ ms in vapor-bubble compression problem with phase change calculated with the MUSCL-THINC/QQ-BVD scheme. The left panel shows contour lines and their labels. The right panel shows contour lines and triangle mesh.

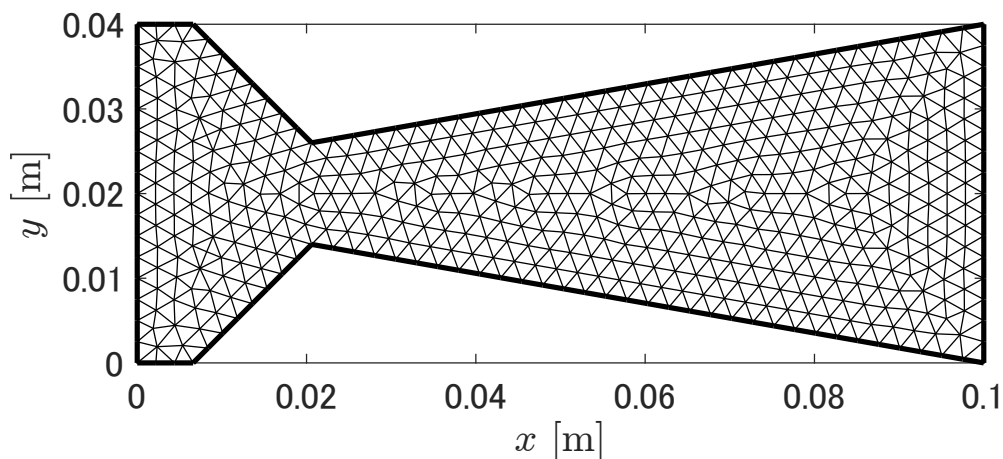


Fig. 7.10 The computational domain and the triangle mesh for the high-pressure fuel injector problem. To improve visibility, the grid size is displayed at 10 times the size of the actual grid used in the calculations.

に近い値を取っているのに対し、MUSCL法では0.6程度の小さい値となっている。MUSCL-THINC/QQ-BVD法で気体質量分率の値が上昇している理由は、スロート領域 ($x \approx 2.1$ cm) を通過した液体ジェットが低圧となりキャビテーションが発生したからであると考えられる。MUSCL法では過剰な数値散逸誤差によりこのキャビテーション現象を十分に再現できていない一方、MUSCL-THINC/QQ-BVD法では特に上部壁面近傍で気液界面をシャープに保っている。このような結果から、数値散逸誤差を抑制したMUSCL-THINC/QQ-BVD法は、流れの中で動的に生成される気液界面を拡散させずに保つことができる。

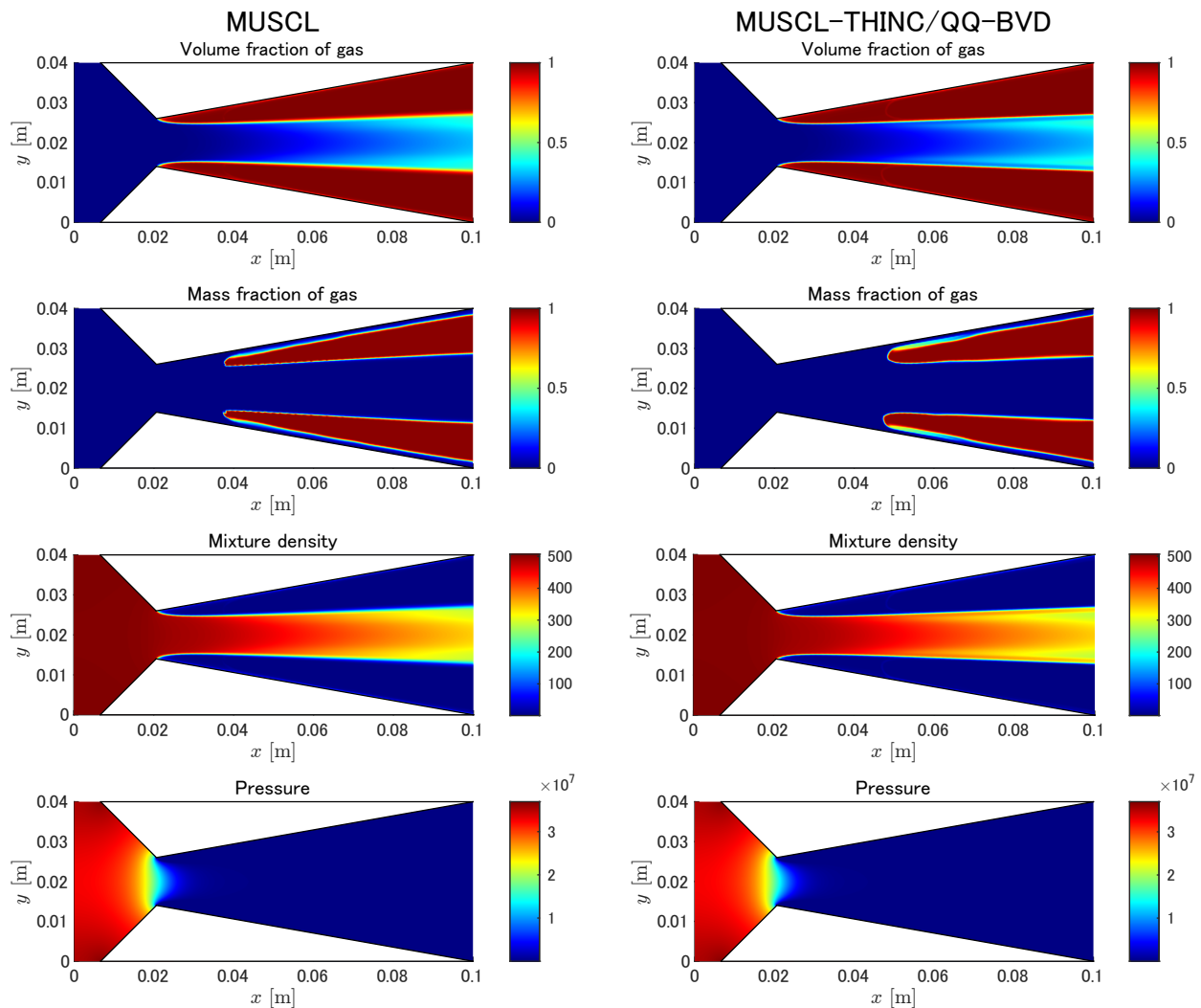


Fig. 7.11 Pseudo-color plots of volume fraction of gas, mass fraction of gas, mixture density, and pressure at $t = 1400 \mu\text{s}$ in high-pressure fuel injector problem without phase change (p-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.

この問題では $y = 0.02 \text{ m}$ を対称軸とする空間対称性があるが、MUSCL-THINC/QQ-BVD法の気体質量分率の数値結果では非対称な分布が生じた。このような結果は、7.6節で述べた通り、格子の非対称性と数値解法の低散逸性によるものである。文献 [58] や本論文の 6.8 節で、構造格子の場合に非対称な丸め誤差を発生させない計算順序を実装することで、完全な空間対称な解を得られることが報告されている。一方、空間非対称な非構造格子の場合、数値解の空間対称性の保持は困難である。また、空間対称性誤差は数値解法が低散逸であるほど顕著になることも本論文 5 章で示している。したがって、図 7.12 のように MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の数値結果が空間非対称となるのは自然であると言える。

図 7.13 は、MUSCL 法および MUSCL-THINC/QQ-BVD 法による気体質量分率の時間発

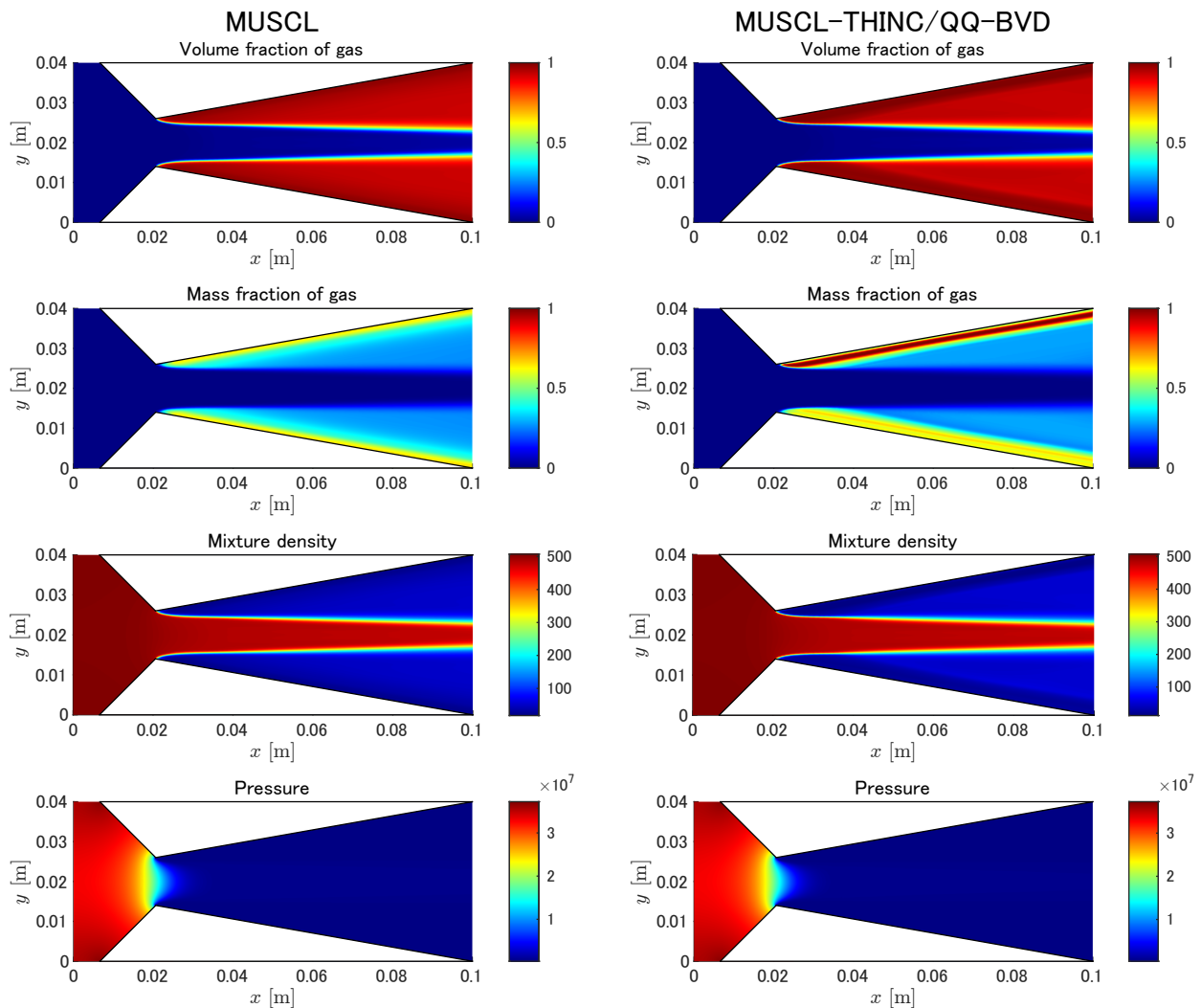


Fig. 7.12 Same as Fig. 7.11, but with phase change (p-pT-pTG-relaxation) at $t = 800 \mu\text{s}$.

展を表す。MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の結果を見ると、 $t = 104 \mu\text{s}$ で既に非対称な流れが見られる。 $t = 160 \mu\text{s}$ では、スロート上部 ($x \approx 2.1 \text{ cm}$, $y \approx 2.6 \text{ cm}$) で気体質量分率の値が 1 になっていて、キャビテーション現象が発生している。スロートの上部と下部で、圧力や温度などの物理量分布のわずかな差でも化学的緩和が適用されるか否かが決まるため、流れの空間非対称性によって上部と下部でキャビテーションの有無に差が生じ得ると考えられる。 $t = 240 \mu\text{s}$ 以降は、スロートの上部で相変化により蒸気が発生し続け、チャンバー後方まで続く気体の層が生成されている。一方、MUSCL 法の結果は MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の結果と比べて全体的に質量分率の分布はぼやけていて、スロート付近のキャビテーションも観測できない。

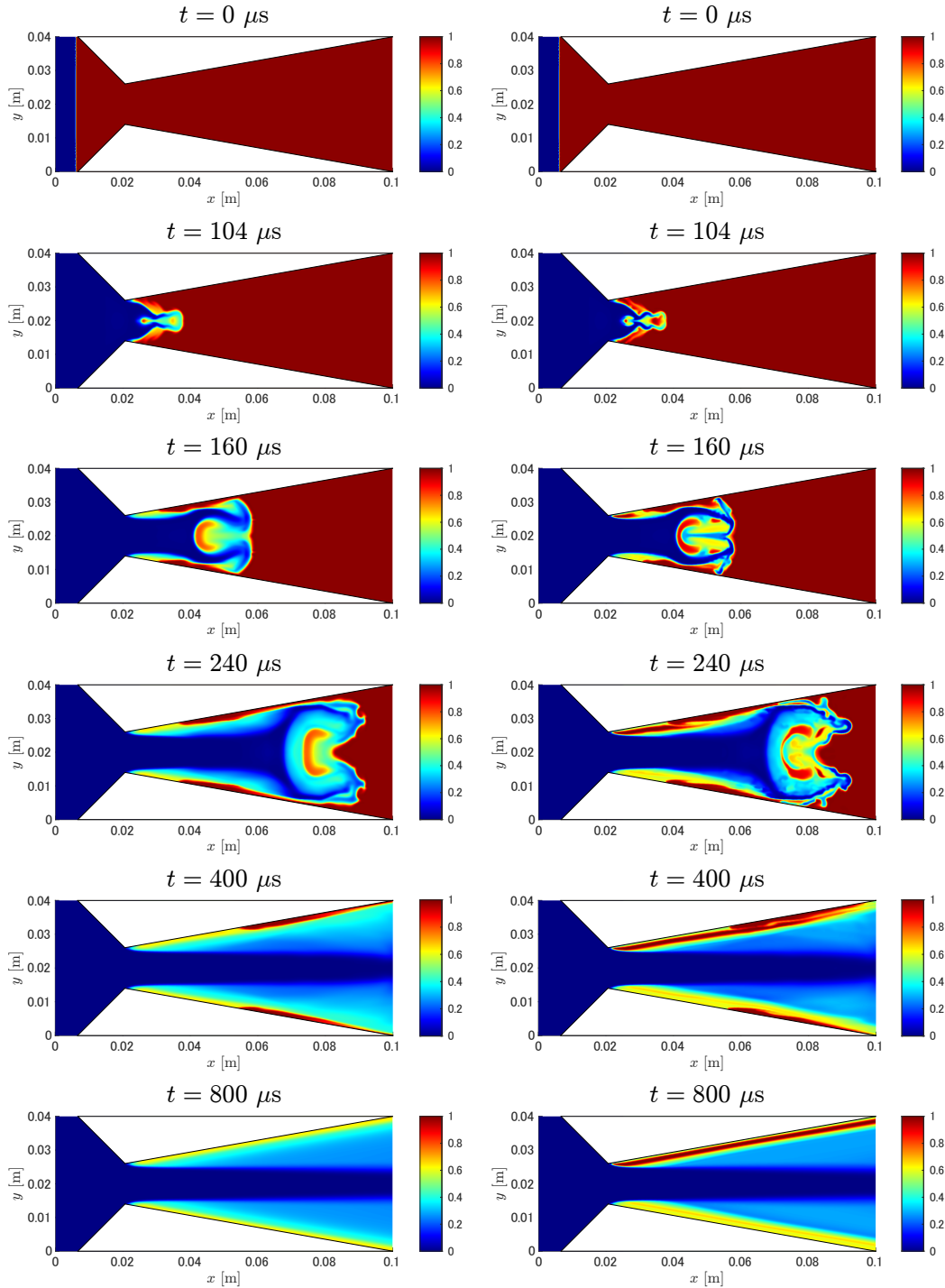


Fig. 7.13 Pseudo-color plots of mass fraction of gas at different time steps in high-pressure fuel injector problem with phase change (p-pT-pTG-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/QQ-BVD schemes respectively.

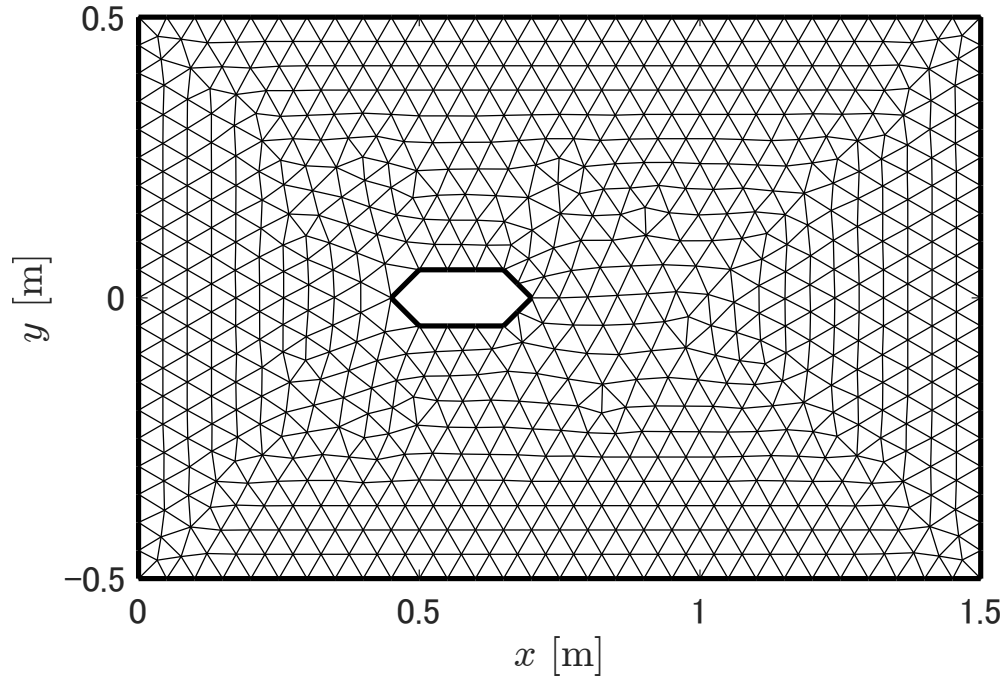


Fig. 7.14 The computational domain and the triangle meshes for the high-velocity underwater projectile problem. To improve visibility, the grid size is displayed at 10 times the size of the actual grid used in the calculations.

7.7.5 高速水中障害物

この問題 [126, 130] では、高速の水の流れの中に六角形の固定された障害物を設置する。計算領域を図 7.14 に示す。計算に用いる三角形格子の大きさは図 7.14 の格子の 10 分の 1 である $h \approx 1/200$ m とし、格子数は 134276 である。障害物後方では、キャビテーションポケットと呼ばれる領域が形成される。この領域では圧力が下がるため、相変化を考慮する計算ではキャビテーションが観測される。液体の速度は 600 m/s、圧力は大気圧の 10^5 Pa、液体密度は 1150 kg/m^3 とする。このとき、液体温度は 354.73 K となり、気体温度が液体温度と等しくなる気体密度は 0.6304 kg/m^3 と計算される。液体中には微小の蒸気 ($\alpha_1 = 10^{-3}$) が含まれる。基本変数についての初期条件は、

$$\begin{aligned} & (\alpha_1, \rho_1 [\text{kg/m}^3], \rho_2 [\text{kg/m}^3], u [\text{m/s}], v [\text{m/s}], p [\text{Pa}])_{t=0} \\ & = (1 - 10^{-3}, 1150, 0.6304, 600, 0, 10^5). \end{aligned} \quad (7.32)$$

と表される。境界条件は左境界を流入境界、障害物の境界を反射境界、他の境界を流出境界とする。緩和法は、p 緩和（相変化なし）と p-pT-pTG 緩和（相変化あり）を用いる。

図 7.15 と 7.16 にそれぞれ相変化なしと相変化ありの数値結果を示す。大まかな流れ構造は、文献 [126, 130] の結果と一致している。相変化なしの場合で MUSCL 法と MUSCL-

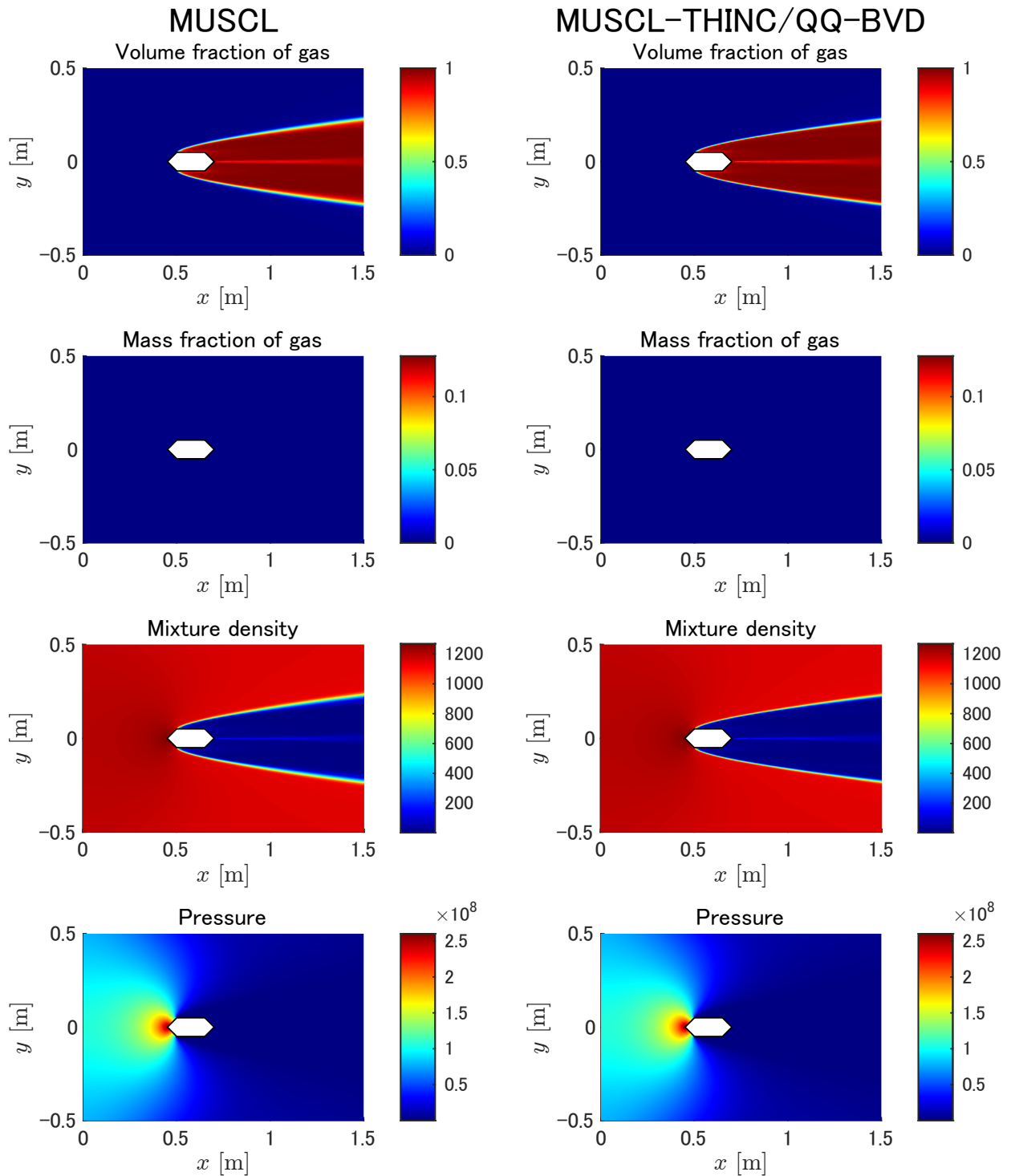


Fig. 7.15 Pseudo-color plots of volume fraction of gas, mass fraction of gas, mixture density, and pressure at $t = 10$ ms in high-velocity underwater projectile problem without phase change (p-relaxation). The left and right panels show the numerical results of MUSCL and MUSCL-THINC/qq-BVD schemes respectively.

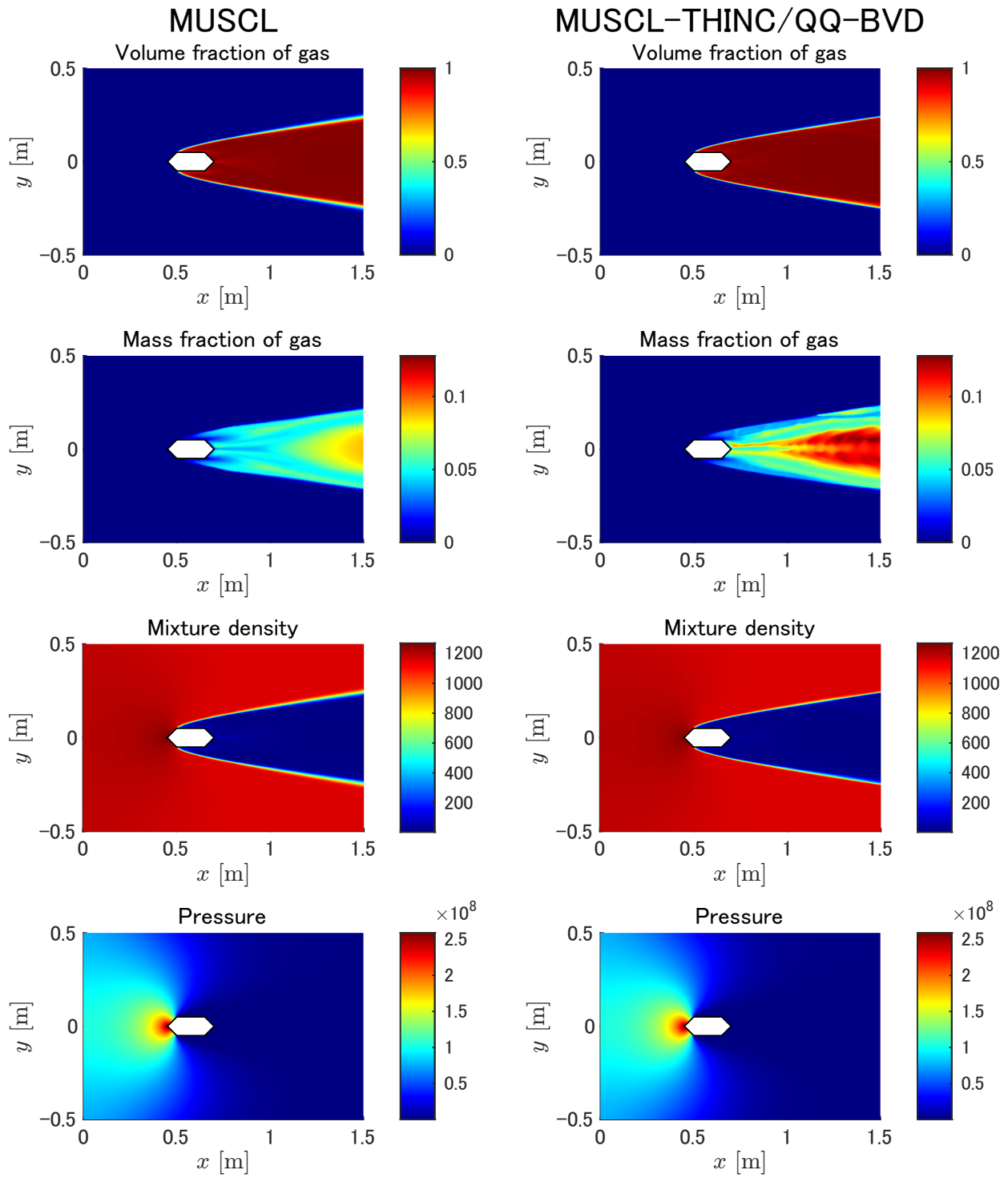


Fig. 7.16 Same as Fig. 7.15, but with phase change (p-pT-pTG-relaxation).

THINC/QQ-BVD 法の結果を比較すると、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の結果の方が、気体体積分率と混合密度における不連続をわずかにシャープに捉えている。この不連続では圧力差があるにもかかわらず、MUSCL 法の結果では数値散逸誤差による不連続面の拡散が見られる。相変化ありの場合では、MUSCL 法と MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の間で顕著な違いが表れる。障害物の後方において、二つの数値解法の結果でともに気体質量分率の値が周囲より上昇しており、圧力低下に伴うキャビテーション現象が再現されている。気体質量分率の最大値は、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の方が MUSCL 法よりも高い値を示している。このような結果は MUSCL-THINC/QQ-BVD 法の低散逸性によるものと考えられる。動的に生成された気液界面は、MUSCL 法では数値散逸誤差によって拡散しぼやけている一方、MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は高解像度で捉えている。したがって、低散逸な MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は既存法と比べて相変化現象の再現に適していると言える。

7.8 3次元空間への拡張を見据えた計算コストの比較

本研究では2次元空間のベンチマークテストを用いて非構造格子における高解像度数値解法の計算性能を検証した。非構造格子は複雑形状の計算領域を取り扱いやすく、実現象解析に優れている。多くの実現象解析は3次元空間での計算を要するため、本手法を3次元空間に拡張する場合に想定される計算コストについて言及する。

4.6.2 節で行ったメモリアクセス回数の比較を、2次元および3次元の非構造格子上での有限体積法と2次精度 DG 法を対象に行う。2次元の場合、計算領域は $x \in [0, 1] \times y \in [0, 1]$ 、格子形状は三角形、格子幅は $h \approx 1/100$ とする。3次元の場合、計算領域は $x \in [0, 1] \times y \in [0, 1] \times z \in [0, 1]$ 、格子形状は四面体、格子幅は $h \approx 1/100$ とする。このとき、3次元の格子数は2次元の約360倍である。線形移流方程式の解析でルンゲクッタ法のサブステップ1回分の計算中に大きな配列に対して読み書きを行う回数をカウントした。各数値解法における配列へのアクセス回数を表7.3に示す。ただし、THINC/QQ法で単調な分布として \tanh による補間を行う割合を30%、BVD選択アルゴリズムで補間関数の変更が起こる割合を10%と仮定し、リーマンソルバーは風上法、時間積分は3段3次ルンゲクッタ法としている。

MUSCL(FVM) と MUSCL-THINC/QQ-BVD(FVM) のメモリアクセス回数を比較すると、2次元と3次元のどちらの場合も BVD 法の方が MUSCL 法と比べて2倍強の回数となった。BVD 法では全てのセルで補間関数を2回計算し、BVD 選択アルゴリズムによる補間関数の選択を行うため、このような結果は妥当であると言える。また、DG 法 (P1) は MUSCL-THINC/QQ-BVD 法 (FVM) と比べて、2次元では高回数、3次元では低回数となった。これは THINC/QQ 法が物理量分布の2階微分まで参照しているため、1階微分まで DG 法 (P1) と比べて3次元化による計算量の上昇幅が大きいことに起因する。各数値解法のメモリアクセス回数は、2次元から3次元に拡張することで、全て約1000倍の増加となってい

	Scheme	Reconstruction	Riemann solver	Time integration	Total
2D	MUSCL(FVM)	2.523×10^6	2.079×10^5	5.283×10^5	3.259×10^6
	MUSCL-THINC/QQ				
	-BVD(FVM)	6.276×10^6	2.079×10^5	5.283×10^5	6.990×10^6
	DG(P1)	5.535×10^6	2.079×10^5	1.608×10^6	7.351×10^6
3D	MUSCL(FVM)	2.861×10^9	1.324×10^8	3.311×10^8	3.324×10^9
	MUSCL-THINC/QQ				
	-BVD(FVM)	6.766×10^9	1.324×10^8	3.311×10^8	7.230×10^9
	DG(P1)	4.751×10^9	1.324×10^8	1.333×10^9	6.216×10^9

Table. 7.3 Number of accesses to large array per computation in a sub-step of the Runge-Kutta method for advection test of MUSCL(FVM), MUSCL-THINC/QQ-BVD(FVM), and DG(P1) schemes. Assuming a 10% modification ratio of the interpolation function in the BVD selection algorithm.

る。格子数が 360 倍に増加し、3 次元化による基底関数の増加等を考慮すれば順当な結果であると言える。1000 倍の計算コスト増加に対応するためには、GPU (Graphics Processing Unit) 上での大規模並列計算が求められる。分散メモリ環境では、高い空間局所性を持つ DG 法の枠組みで計算することが望ましい。THINC 法と DG 法の組み合わせに関する先行研究 [50, 66, 218, 219] を参考に、DG 法の枠組みで適切に THINC 補間法を組み込み、高次精度補間法と組み合わせる高解像度数値解法の開発を今後の課題とする。

7.9 7 章のまとめ

6 章で示した高解像度数値解法による気液二相圧縮性流れの相変化現象の効果的な再現を非構造格子に展開した。MLP リミターを用いた MUSCL 補間と、界面を 2 次曲線で表す THINC/QQ 補間を BVD 原理に基づき組み合わせ、非構造格子における高解像度再構築法を構築した。Pelanti と Shyue の 6 方程式モデルの非構造格子における計算手法について、非保存項を 2 次精度の近似によりシンプルで低コストな計算手順を考案した。MUSCL-THINC/QQ-BVD 法は MUSCL 法と比べて、接触不連続や気液界面といった不連続解を低散逸に捉え、特にドデカン蒸気泡圧縮問題、高圧燃料噴射器、高速水中障害物の問題では相変化により動的に生じる気液界面を再現することに成功した。非構造格子上で高解像度数値解法を用いることで、気液界面を低散逸に捉え、相変化といった界面特有の現象の忠実な再現に成功し、実用性の高い数値解法であることを示した。

第 8 章

結論

8.1 本論文の結論

単相及び気液二相の圧縮性流れにおいて、BVD 原理に基づく高解像度数値解法を改良し、典型的なベンチマークテストを解き既存解法よりも高解像度な数値結果を得た。

単相圧縮性流れでは、 P_4T_2 -BVD 法および P_nT_m -BVD 法といった多段階選択型のハイブリッド型 BVD 法のアイデアに基づき、THINC 補間の勾配パラメータ β の値を解の滑らかさに応じて可変とする手法を開発し、線形多項式補間と組み合わせることで新しいハイブリッド型 BVD 法を構築した。提案手法である $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法は、代表的な既存解法である WENO-Z 法と比較して、接触不連続や小さい渦構造を高解像度で捉えられることを示した。 P_4T_2 -BVD 法および P_nT_m -BVD 法と比べて、候補補間関数および BVD 選択段数を減らしたことにより、計算コストを最大 51% 削減した。提案手法は圧縮性乱流の直接数値計算や衝撃波を含む航空機周りの空力解析等の実問題で役立つことが見込まれる。

高解像度数値解法において表れる空間対称性誤差について、浮動小数点演算において成り立たなくなる数学的特性に着目し、計算手順に含まれる対称性誤差を発生させる要因を全て特定し、それぞれの対処法を提案した。3次元空間で対称性を持つ数値テストを計算し、細かい格子上の計算において提案手法が完全に空間対称性を保存できることを示した。空間対称性を保つ高解像度数値解法は、レイリーテイラー不安定性の成長速度の解析や、乱流特性量のより正しい評価が可能になると期待される。

表面張力および相変化を考慮する気液二相圧縮性流れに高解像度数値解法を適用し、その重要性を明らかにした。MUSCL-THINC-BVD 法および Adaptive THINC-BVD 法は、代表的な 2 次精度既存解法である MUSCL 法と比較し、接触不連続や気液界面を低散逸に捉え、特に表面張力や相変化といった界面特有の現象を忠実に再現することに成功した。高解像度数値解法は、界面を低散逸に捉え、界面特有の現象を再現するうえで重要な要素であることを示した。

相変化を考慮する気液二相圧縮性流れの高解像度数値解法による計算を非構造格子に展開し、数値解法の実用性の高さを示した。特に、ドデカン蒸気泡圧縮問題、高圧燃料噴射器、高速水中障害物の問題で、相変化により動的に生じる気液界面を再現することに成功した。この結果から、例えばロケットエンジン内部やプロペラといった複雑形状を持つ計算領域に対し、非構造格子を用いて高解像度で相変化現象を捉えることができ、ハイブリッド型 BVD 法の開発が大きな工学的意義を持つことを明らかにした。

8.2 今後の課題

本研究の今後の進展として、ハイブリッド型 BVD 法のさらなる高精度化および低コスト化、様々な圧縮性流れへの適用、実問題を対象とした高精度な解析および現象解明への貢献を挙げる。

本研究で開発した $P_4T_{\beta v}$ -BVD 法および $P_nT_{\beta v5c}$ -BVD 法は、全ての候補補間関数を全てのセルで計算する。一方、実際は THINC 補間関数は不連続解近傍でのみの適用で十分であるため、候補補間関数の計算を行う前に不連続解を確実に検出することができれば、各セルで 1 つの補間関数の計算で済み、計算コストが大幅に抑制される。例えば、MUSCL-THINC-BVD 法について、ニューラルネットワークを用いた機械学習で BVD 選択アルゴリズムをモデル化し、計算コストの抑制に成功している [220]。また、 β 可変 THINC 補間における β の計算式、および BVD 選択アルゴリズムの改善により、さらに高精度なハイブリッド型 BVD 法の開発も期待される。現状、BVD 法の補間関数選択の正しさについて、数学的には保障されておらず、部分的に誤った選択をしている可能性がある。特に高波数の解については、不連続解か乱流かの判別が難しく、連続的な分布に対して THINC 法を適用するとスクエアリングエフェクトによる非物理的な圧縮が生じる。補間の立場だけでなく、計算手順を全体的に俯瞰し、近年発展している機械学習の技術も考慮しながら、有限体積法といった計算フレームワークの見直しが必要である。

本研究ではハイブリッド型 BVD 法を用いて单相および気液二相圧縮性流れの計算を行ったが、ハイブリッド型 BVD 法による空間再構築の手順は、他の双曲型偏微分方程式にも直接的に適用できる。例えば 3 種類以上の多成分流れや固気液三相流などの数値計算に適用することで、より複雑な混相流現象を高解像度で計算し、界面現象を忠実に再現できると考えられる。圧縮性磁性流体の数値解析では、例えば核融合反応の再現において、接触面を低散逸に捉えることで化学反応の発生の有無を正しく判別できる可能性がある [57,170]。

ハイブリッド型 BVD 法は様々な圧縮性流れを含む実問題において既存解法よりも高精度な数値解析を可能とするが、特にインパクトのある実問題として、ロケットエンジン内部の燃焼流れの数値解析が挙げられる。近年、高い燃焼安定性を持つピントル型噴射器を用いたロケットエンジンの開発が進められている [221] が、様々な形状のピントル型噴射器に対してどのよ

うに流れ場が変化するかは未解明である [7]. 高精度な数値解析技術の開発は発展途上であり, 特に亜臨界燃焼における気液界面での化学反応を正しく再現するために, 気液界面を高解像度で捉えることが必要条件となる. 文献 [8] のように燃焼モデルを考慮した液体酸素と気体水素の噴流をハイブリッド型 BVD 法で計算し, より忠実に燃焼特性を再現することで, 高解像度数値解法の工学的重要性を明らかにすることを今後の課題とする.

付録 A

境界条件の実装

有限体積法における境界条件の実装について説明する.

A.1 構造格子

構造格子では, 図 A.1 のように, 計算領域の外部にゴーストセルと呼ばれる仮想的なセルをいくつか配置し, 境界条件の種類に応じてゴーストセルに適切な値を設定することで, 境界条件を考慮する. ゴーストセルの数は, 再構築関数のステンシルの長さやハイブリッド型 BVD 解法の補間関数の選択段数に応じて決まる. 具体的には, BVD 法の持つ候補補間関数 (風上系補間) のうち最も長いステンシルのセル数を n_s , BVD 法の選択段数を n_B とすると, 必要なゴーストセルの数 n_g は,

$$n_g = \frac{n_s + 1}{2} + n_B \quad (\text{A.1})$$

と表される. この数は, 計算領域内部の全てのセルで時間発展に必要な情報が得られ, かつ BVD 選択の効果が適用される条件によって導かれる. ゴーストセルに設定する具体的な値は, 次の様に境界条件に応じて決める. ここでは単相流の 3 次元ナビエストークス方程式を考慮し, 数値解を \bar{U}_i として表現する.

- ディリクレ境界条件 (流入境界) では, 各変数に対応する定数 C を与える.

$$\bar{U}_0 = C, \quad \bar{U}_1 = C \quad (\text{A.2})$$

- 勾配ゼロのノイマン境界条件 (流出境界) では, 計算領域の境界に最も近い領域内部のセルの解を与える.

$$\bar{U}_0 = \bar{U}_2, \quad \bar{U}_1 = \bar{U}_2 \quad (\text{A.3})$$

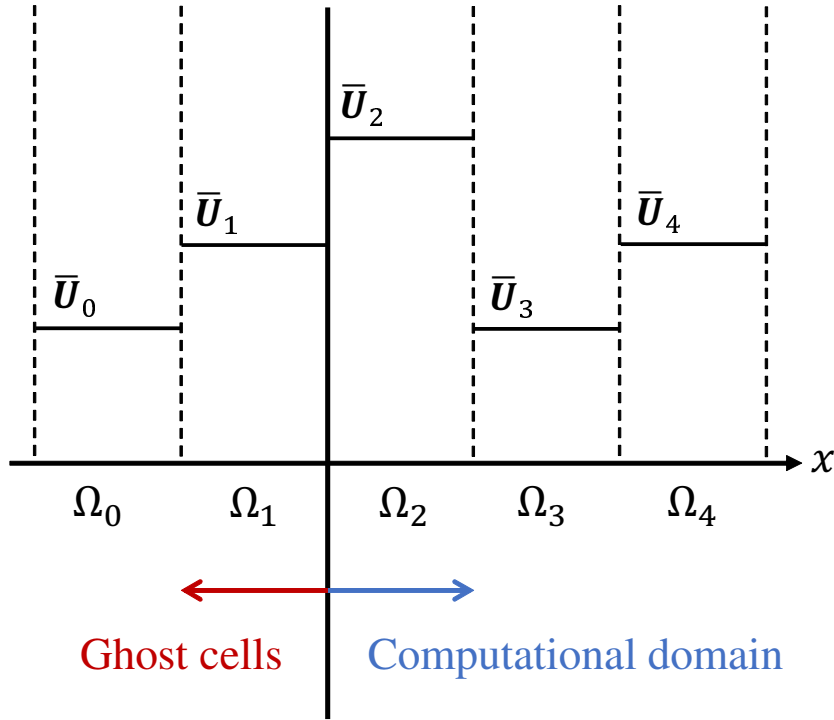


Fig. A.1 A conceptual diagram of ghost cells for implementing boundary conditions.

- 対称境界条件（反射境界，滑り壁面）では，計算領域の境界に対して対称になるように計算領域内部の解を設定する．ただし次元方向に応じて速度を反転させる． x 方向に延びるゴーストセルでは次式のように設定する．

$$\begin{bmatrix} \rho_0 \\ \rho u_0 \\ \rho v_0 \\ \rho w_0 \\ \rho E_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_3 \\ -\rho u_3 \\ \rho v_3 \\ \rho w_3 \\ \rho E_3 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho u_1 \\ \rho v_1 \\ \rho w_1 \\ \rho E_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_2 \\ -\rho u_2 \\ \rho v_2 \\ \rho w_2 \\ \rho E_2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$

また，滑りなし壁面の場合は，次式のように全ての速度成分を反転させる．

$$\begin{bmatrix} \rho_0 \\ \rho u_0 \\ \rho v_0 \\ \rho w_0 \\ \rho E_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_3 \\ -\rho u_3 \\ -\rho v_3 \\ -\rho w_3 \\ \rho E_3 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho u_1 \\ \rho v_1 \\ \rho w_1 \\ \rho E_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_2 \\ -\rho u_2 \\ -\rho v_2 \\ -\rho w_2 \\ \rho E_2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

滑り移動壁面（移動速度 u_{wall} ）では，壁面に対する相対速度が壁面両側で異符号にな

るように設定する [111, 208].

$$\begin{bmatrix} \rho_0 \\ \rho u_0 \\ \rho v_0 \\ \rho w_0 \\ \rho E_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_3 \\ 2\rho u_{\text{wall}} - \rho u_3 \\ \rho v_3 \\ \rho w_3 \\ \rho E_3 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho u_1 \\ \rho v_1 \\ \rho w_1 \\ \rho E_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_2 \\ 2\rho u_{\text{wall}} - \rho u_2 \\ \rho v_2 \\ \rho w_2 \\ \rho E_2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

- 周期境界条件では、計算領域の外部に同じ計算領域があると仮定し、対応するセルの値を与える。すなわち、計算領域内部の x 方向の格子数を n_x とすると、次式のように設定される。

$$\bar{U}_i = \bar{U}_{n_x+i}, \quad i = 0, \dots, n_g - 1 \quad (\text{A.7})$$

このようなゴーストセルへの値の代入を空間再構築の直前に行うことで、計算領域の境界付近の再構築で境界条件が適用される。

A.2 非構造格子

非構造格子では、一般的に上述のようなゴーストセルの配置は困難である。本研究では、計算領域の境界を成すセル境界における領域外側のセル境界値を境界条件に応じて決める事で、境界条件を実装した。例えば勾配ゼロのノイマン境界条件（流出境界）では、セル Ω_i のセル境界 Γ_{ij} 上の g 番目のガウス求積点におけるセル境界値について、

$$U_{ijg,\text{out}} = U_{ijg,\text{in}} \quad (\text{A.8})$$

と設定する。in と out はそれぞれ計算領域内部および外部のセル境界値であることを表す。滑り反射壁面の場合、

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}_{ijg,\text{out}} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u}_{\text{ref,slip}} \\ \rho E \end{bmatrix}_{ijg,\text{in}} \quad (\text{A.9})$$

と設定する。ただし $\vec{u}_{\text{ref,slip}}$ は、図 A.2 の左図に示すような壁面法線成分のみ反転する速度ベクトルであり、壁面単位法線ベクトルを \vec{n} として、

$$\vec{u}_{\text{ref,slip}} = \vec{u} - 2(\vec{u} \cdot \vec{n})\vec{n} \quad (\text{A.10})$$

と計算される。滑りなし反射壁面の場合は、図 A.2 の右図に示すような全成分が反転する速度ベクトル $\vec{u}_{\text{ref,non-slip}} = -\vec{u}$ を用いて、

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u} \\ \rho E \end{bmatrix}_{ijg,\text{out}} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \vec{u}_{\text{ref,non-slip}} \\ \rho E \end{bmatrix}_{ijg,\text{in}} \quad (\text{A.11})$$

と計算する。このように、計算領域内部の空間再構築で得られたセル境界値を用いて計算領域外部の値を与えることで、全てのセル境界でリーマンソルバーによる数値流束が計算できるようになり、境界条件が再現される。ただし、高次精度の補間を行う際に周囲のセルの解を参照する場合、計算領域の境界付近のセルは周囲のセルが少ないため、補間精度が減少する可能性があることに注意する。

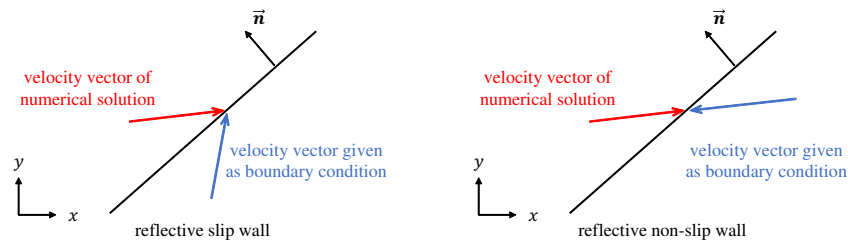


Fig. A.2 A conceptual diagram of reflective boundary conditions on unstructured grids.

付録 B

線形多項式補間における係数の導出

3.4.1 節で導入した線形多項式補間について、数値解 q_j に対する係数 C_s の具体的な導出方法を説明する。既に述べた通り、周囲の数値解に整合するように線形多項式関数を構築し、その関数に補間点の座標を代入することで、線形多項式補間による補間値が得られる。一方で、線形多項式関数を構築する代わりに、離散化された数値解のテイラー展開を用いて、低次の誤差が消去されるように直接的に係数 C_s を求める方法も存在する。これらの2種類の計算方法は数学的に等価であるが、数値解のテイラー展開に基づく方法では微分値の補間や誤差の検証等が簡便に行えるという利点があるため、以下にその計算手順を示す。

B.1 数値解のテイラー展開に基づく線形多項式補間の係数の導出

物理量分布 $q(x)$ は、常に無限回微分可能で、テイラー展開の収束半径も無限と仮定する。この物理量分布に対して、初めに格子点上に離散的に定義された物理量の値 $q_j = q(x_j)$ (j は整数) を用いた補間について考える。格子点の区間は簡単のため Δx で一定とする。補間点を $x = x_{i+l} = x_i + l\Delta x$ (i は整数, l は実数) とし、点値 q_j ($j = i-r, i-r+1, \dots, i+s-1, i+s$) の線形結合で補間点の物理量の値 $q_{i+l} = q(x_{i+l})$ を近似する (r, s は0以上の整数)。この補間値を q^{linear} とすると、定数係数 C_p を用いて

$$q^{\text{linear}} = \sum_{j=i-r}^{i+s} C_{j-i} q_j = \sum_{p=-r}^s C_p q_{i+p} \quad (\text{B.1})$$

と表せる. $p = j - i$ は整数である. 点値の数は $n = s + r + 1$ である. ここで, $x = x_{i+l}$ 中心での $(n - 1)$ 次までのテイラー展開を点値 q_j に施し,

$$\begin{aligned} q_j &= q(x_j) \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} \left(\frac{1}{m!} \frac{\partial^m q(x)}{\partial x^m} \Big|_{x=x_{i+l}} (j-i-l)^m (\Delta x)^m \right) + \mathcal{O}(\Delta x^n) \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} b_{m,p} D_m + \mathcal{O}(\Delta x^n) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

と計算される. ただし,

$$\begin{aligned} b_{m,p} &= \frac{1}{m!} (p-l)^m, \\ D_m &= \frac{\partial^m q(x)}{\partial x^m} \Big|_{x=x_{i+l}} (\Delta x)^m \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

である. テイラー展開された点値 q_j (B.2) を補間式 (B.1) に代入し,

$$\begin{aligned} q^{\text{linear}} &= \sum_{p=-r}^s C_p \sum_{m=0}^{n-1} b_{m,p} D_m \\ &= \begin{bmatrix} D_0 \\ D_1 \\ \vdots \\ D_{n-2} \\ D_{n-1} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} b_{0,-r} & b_{0,-r+1} & \cdots & b_{0,s-1} & b_{0,s} \\ b_{1,-r} & b_{1,-r+1} & \cdots & b_{1,s-1} & b_{1,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ b_{n-2,-r} & b_{n-2,-r+1} & \cdots & b_{n-2,s-1} & b_{n-2,s} \\ b_{n-1,-r} & b_{n-1,-r+1} & \cdots & b_{n-1,s-1} & b_{n-1,s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{-r} \\ C_{-r+1} \\ \vdots \\ C_{s-1} \\ C_s \end{bmatrix} \\ &= \mathbf{D}^T \mathbf{B} \mathbf{C} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

を得る. 式 (B.3) の定義より $D_0 = q_{i+l}$ であるので, 補間点の物理量の値 q_{i+l} を近似する係数 C_p は, 式 (B.4) を用いて

$$q^{\text{linear}} = D_0 \quad (\text{B.5})$$

を \mathbf{D} に関する恒等式として解くことで得られる. すなわち,

$$\mathbf{B} \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

を解くことで, n 次精度の補間値 $q^{\text{linear}} = q_{i+l} + \mathcal{O}(\Delta x^n)$ を得る係数 C_p が求められる. 行列 \mathbf{B} が正則であることは, ラグランジュ補間の一意性により保障されている.

行列 \mathbf{B} の逆行列を一度計算すれば、補間点における物理量の $m (< n)$ 階微分値 $\partial^m q(x)/\partial x^m \big|_{x=x_{i+l}}$ を近似する係数 C_p は簡単に求められる。例えば 1 階微分値を近似する係数 C_p は、恒等式

$$q^{\text{linear}} = D_1 \quad (\text{B.7})$$

すなわち

$$\mathbf{BC} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.8})$$

を解くことで得られる。高階微分値の場合も同様である。得られた係数 C_p を用いて、 $m (< n)$ 階微分値は

$$\begin{aligned} \frac{\partial^m q(x)}{\partial x^m} \bigg|_{x=x_{i+l}} &\approx \frac{q^{\text{linear}}}{(\Delta x)^m} \\ &= \frac{1}{(\Delta x)^m} \sum_{p=-r}^s C_p q_{i+p} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

と近似される。

数値解を積分平均値 $\bar{q}_j = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} q(x) dx$ としても同様の議論が可能である。補間点を $x = x_{i+l} = x_i + l\Delta x$ とし、セル平均値 \bar{q}_j ($j = i-r, i-r+1, \dots, i+s-1, i+s$) の線形結合で補間点の物理量の値 $q_{i+l} = q(x_{i+l})$ を近似する。この補間値を q^{linear} とすると、定数係数 C_p を用いて

$$q^{\text{linear}} = \sum_{j=i-r}^{i+s} C_{j-i} \bar{q}_j = \sum_{p=-r}^s C_p \bar{q}_{i+p} \quad (\text{B.10})$$

と表せる。セル平均値 \bar{q}_j に $x = x_{i+l}$ 中心での $(n-1)$ 次までのテイラー展開を施し、

$$\begin{aligned} \bar{q}_j &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} q(x) dx \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \left(\sum_{m=0}^{n-1} \left(\frac{1}{m!} \frac{\partial^m q(x)}{\partial x^m} \bigg|_{x=x_{i+l}} (x - x_{i+l})^m \right) + \mathcal{O}((x - x_{i+l})^n) \right) dx \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} b_{m,p} D_m + \mathcal{O}(\Delta x^n) \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

と計算される。ここで現れる $b_{m,p}$ は、数値解が点値の場合 (式 (B.3)) とは異なり、

$$b_{m,p} = \frac{1}{(m+1)!} \left(\left(p - l + \frac{1}{2} \right)^{m+1} - \left(p - l - \frac{1}{2} \right)^{m+1} \right) \quad (\text{B.12})$$

となる。テイラー展開されたセル平均値 \bar{q}_j (B.11) を補間式 (B.10) に代入し、上述の式 (B.4) と同じ式を得る。係数 C_p の求め方は、点値の場合と同様に、 D に関する恒等式を解くことで得られる。

B.2 線形多項式補間の誤差のオーダー

n 個の数値解から構築される線形多項式補間では、補間点の物理量の値 q_{i+l} は n 次精度で得られる一方、補間点の物理量の $m (< n)$ 階微分値は一般に $(n-m)$ 次精度に減少する。ただし、中心系の補間では奇数次微係数が打ち消し合い偶数次精度となるためこの限りではない。具体的には、 $l=0$ かつ $s=r$ 、または $l=\frac{1}{2}$ かつ $s=r+1$ などの中心補間の場合に、 $(n-m)$ が奇数であれば $(n-m+1)$ 次精度となる。このような補間精度の変化について、テイラー展開を n 次以上に拡張することで検証できる。

式 (B.2) のテイラー展開を n 次以上に拡張した場合に、式 (B.6) を解いて得られる係数 C_p による補間値では、

$$\begin{aligned} q^{\text{linear}} &= \sum_{p=-r}^s C_p q_{i+p} \\ &= q_{i+l} + E_n D_n + E_{n+1} D_{n+1} + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

のように、 n 次以上の項が表れる。ここで E_n は、

$$E_n = \sum_{p=-r}^s b_{n,p} C_p \quad (\text{B.14})$$

であり、 n 次の誤差の係数を表す。 $m (< n)$ 階微分値の補間では、

$$\begin{aligned} \frac{q^{\text{linear}}}{(\Delta x)^m} &= \frac{\partial^m q(x)}{\partial x^m} \Big|_{x=x_{i+l}} + E_n \frac{\partial^n q(x)}{\partial x^n} \Big|_{x=x_{i+l}} (\Delta x)^{n-m} \\ &\quad + E_{n+1} \frac{\partial^{n+1} q(x)}{\partial x^{n+1}} \Big|_{x=x_{i+l}} (\Delta x)^{n-m+1} + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

となる。このとき、 $E_n = 0$ であれば、 m 階微分値の補間精度が $(n-m)$ 次から $(n-m+1)$ 次上がることを確認できる。

付録 C

二次方程式の求解における桁落ちの回避

二次方程式 $ax^2 + bx + c = 0$ の実数解は次の様に表される.

$$x_1 = \frac{-b - \sqrt{D}}{2a}, \quad x_2 = \frac{-b + \sqrt{D}}{2a}, \quad (D \equiv b^2 - 4ac \geq 0). \quad (\text{C.1})$$

浮動小数点演算では、式 (C.1) による計算では桁落ちと呼ばれる大きな誤差が発生しうる。これは $-b \pm \sqrt{D} \approx 0$ の時に発生するので、以下の計算式を用いることで改善される [222].

$$x_1 = \begin{cases} \frac{-b - \sqrt{D}}{2a} & \text{if } b > 0, \\ \frac{2c}{-b + \sqrt{D}} & \text{otherwise,} \end{cases} \quad x_2 = \begin{cases} \frac{2c}{-b - \sqrt{D}} & \text{if } b > 0, \\ \frac{-b + \sqrt{D}}{2a} & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

この様な手順で計算することで、例えば気液二相圧縮性流れの緩和 (6.7 節) で現れる二次方程式の解を高精度に計算でき、正しく緩和された物理量の値を得ることができる。ただし、式 (C.2) を用いたとしても、 $D \approx 0$ のようなほぼ重解を持つ場合など、桁落ちを完全には回避できないことに注意する。

参考文献

- [1] Richard Saurel, F. Petitpas, and R. A. Berry. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multi-phase mixtures. *Journal of Computational Physics*, 228(5):1678–1712, 2009.
- [2] Y. Kuya, K. Totani, and S. Kawai. Kinetic energy and entropy preserving schemes for compressible flows by split convective forms. *Journal of Computational Physics*, 375:823–853, 2018.
- [3] Y. Kuya and S. Kawai. High-order accurate kinetic-energy and entropy preserving (KEEP) schemes on curvilinear grids. *Journal of Computational Physics*, 442:110482, 2021.
- [4] Y. Tamaki, Y. Kuya, and S. Kawai. Comprehensive analysis of entropy conservation property of non-dissipative schemes for compressible flows: KEEP scheme redefined. *Journal of Computational Physics*, 468:111494, 2022.
- [5] Y. Tamaki and S. Kawai. Wall-Modeled Large-Eddy Simulation of Transonic Buffet over NASA-CRM Using FFVHC-ACE. *AIAA Journal*, pages 1–16, 4 2024.
- [6] A. Murrone and C. Le Touze. Eulerian coupling of two-phase flow models for the large eddy simulation of the atomization in cryogenic combustion chamber. In *Progress in Propulsion Physics – Volume 11*, volume 11, pages 195–224, Les Ulis, France, 2 2019. EDP Sciences.
- [7] Y. Chang, J. Zou, Q. Li, P. Cheng, and K. Zhou. *Numerical study on combustion and heat transfer of a GOX/GCH₄ pintle injector*, volume 459. Springer Singapore, 2019.
- [8] X. Deng and P. Boivin. Diffuse interface modelling of reactive multi-phase flows applied to a sub-critical cryogenic jet. *Applied Mathematical Modelling*, 84:405–424, 2020.
- [9] T. Ikeda, S. Yoshizawa, M. Tosaki, J. S. Allen, S. Takagi, N. Ohta, T. Kitamura, and Y. Matsumoto. Cloud cavitation control for lithotripsy using high intensity

- focused ultrasound. *Ultrasound in Medicine and Biology*, 32(9):1383–1397, 2006.
- [10] X. Zhang, J. Chen, Y. Zhang, and C. Wei. Numerical Simulation of ESWL with Single-pulse and Dual-pulse Based on 2D Unstructured Grid CE / SE Method. 2(3):48–53, 2012.
- [11] S. K. Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Math. Sb.*, 47(3):271–306, 1959.
- [12] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics*, 23(3):276–299, 1977.
- [13] B. Van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov’s Method. *Journal of Computational Physics*, 32(1):101–136, 1979.
- [14] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49(3):357–393, 3 1983.
- [15] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, and S. R. Chakravarthy. Uniformly High Order Accurate Essentially Non-Oscillatory Schemes III. *Journal of Computational Physics*, 71:231–323, 1987.
- [16] C.-W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2):439–471, 8 1988.
- [17] X.-D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Computational Physics*, 115(115):200–212, 1994.
- [18] G.-S. Jiang and C.-W. Shu. Efficient implementation of weighted ENO schemes. *Journal of Computational Physics*, 126:202–228, 1996.
- [19] R. Borges, M. Carmona, B. Costa, and W. S. Don. An improved weighted essentially non-oscillatory scheme for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 227(6):3191–3211, 2008.
- [20] A. K. Henrick, T. D. Aslam, and J. M. Powers. Mapped weighted essentially non-oscillatory schemes: Achieving optimal order near critical points. *Journal of Computational Physics*, 207(2):542–567, 2005.
- [21] G. A. Gerolymos, D. Sénéchal, and I. Vallet. Very-high-order WENO schemes. *Journal of Computational Physics*, 228(23):8481–8524, 2009.
- [22] X. Y. Hu, Q. Wang, and N. A. Adams. An adaptive central-upwind weighted essentially non-oscillatory scheme. *Journal of Computational Physics*, 229(23):8952–8965, 2010.
- [23] Y. Ha, C. Ho Kim, Y. Ju Lee, and J. Yoon. An improved weighted essentially

-
- non-oscillatory scheme with a new smoothness indicator. *Journal of Computational Physics*, 232(1):68–86, 2013.
- [24] P. Fan, Y. Shen, B. Tian, and C. Yang. A new smoothness indicator for improving the weighted essentially non-oscillatory scheme. *Journal of Computational Physics*, 269:329–354, 2014.
- [25] F. Acker, R. B. Borges, and B. Costa. An improved WENO-Z scheme. *Journal of Computational Physics*, 313:726–753, 2016.
- [26] L. Fu, X. Y. Hu, and N. A. Adams. A family of high-order targeted ENO schemes for compressible-fluid simulations. *Journal of Computational Physics*, 305:333–359, 2016.
- [27] C. H. Kim, Y. Ha, and J. Yoon. Modified Non-linear Weights for Fifth-Order Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *Journal of Scientific Computing*, 67(1):299–323, 2016.
- [28] L. Fu, X. Y. Hu, and N. A. Adams. Targeted ENO schemes with tailored resolution property for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 349:97–121, 2017.
- [29] S. Rathan and G. Naga Raju. A modified fifth-order WENO scheme for hyperbolic conservation laws. *Computers and Mathematics with Applications*, 75(5):1531–1549, 2018.
- [30] L. Fu, X. Y. Hu, and N. A. Adams. A new class of adaptive high-order targeted ENO schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 374:724–751, 2018.
- [31] F. Xiao, Y. Honma, and T. Kono. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 48(9):1023–1040, 2005.
- [32] F. Xiao, S. Ii, and C. Chen. Revisit to the THINC scheme: A simple algebraic VOF algorithm. *Journal of Computational Physics*, 230(19):7086–7092, 2011.
- [33] S. Ii, B. Xie, and F. Xiao. An interface capturing method with a continuous function: The THINC method on unstructured triangular and tetrahedral meshes. *Journal of Computational Physics*, 259:260–269, 2014.
- [34] B. Xie, S. Ii, and F. Xiao. An efficient and accurate algebraic interface capturing method for unstructured grids in 2 and 3 dimensions: The THINC method with quadratic surface representation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 76(12):1025–1042, 2014.
- [35] B. Xie and F. Xiao. Toward efficient and accurate interface capturing on arbitrary

- hybrid unstructured grids: The THINC method with quadratic surface representation and Gaussian quadrature. *Journal of Computational Physics*, 349:415–440, 2017.
- [36] X. Deng, B. Xie, R. Loubère, Y. Shimizu, and F. Xiao. Limiter-free discontinuity-capturing scheme for compressible gas dynamics with reactive fronts. *Computers and Fluids*, 171:1–14, 2018.
- [37] S. Tann, X. Deng, Y. Shimizu, R. Loubère, and F. Xiao. Solution property preserving reconstruction for finite volume scheme: a boundary variation diminishing+multidimensional optimal order detection framework. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, (December), 2019.
- [38] Z. Sun, S. Inaba, and F. Xiao. Boundary Variation Diminishing (BVD) reconstruction: A new approach to improve Godunov schemes. *Journal of Computational Physics*, 322:309–325, 2016.
- [39] X. Deng, B. Xie, and F. Xiao. A finite volume multi-moment method with boundary variation diminishing principle for Euler equation on three-dimensional hybrid unstructured grids. *Computers and Fluids*, 153:85–101, 2017.
- [40] B. Xie, X. Deng, Z. Sun, and F. Xiao. A hybrid pressure–density-based Mach uniform algorithm for 2D Euler equations on unstructured grids by using multi-moment finite volume method. *Journal of Computational Physics*, 335:637–663, 2017.
- [41] X. Deng, S. Inaba, B. Xie, K. M. Shyue, and F. Xiao. High fidelity discontinuity-resolving reconstruction for compressible multiphase flows with moving interfaces. *Journal of Computational Physics*, 371:945–966, 2018.
- [42] X. Deng, P. Boivin, and F. Xiao. A new formulation for two-wave Riemann solver accurate at contact interfaces. *Physics of Fluids*, 31(4), 2019.
- [43] X. Deng, Y. Shimizu, and F. Xiao. A fifth-order shock capturing scheme with two-stage boundary variation diminishing algorithm. *Journal of Computational Physics*, 386:323–349, 2019.
- [44] X. Deng, Y. Shimizu, B. Xie, and F. Xiao. Constructing higher order discontinuity-capturing schemes with upwind-biased interpolations and boundary variation diminishing algorithm. *Computers and Fluids*, 200:104433, 2020.
- [45] S. Tann, X. Deng, R. Loubère, and F. Xiao. Solution property preserving reconstruction BVD+MOOD scheme for compressible euler equations with source terms and detonations. *Computers & Fluids*, 206:104594, 6 2020.
- [46] Y. Ruan, X. Zhang, B. Tian, and Z. He. A flux split based finite-difference two-stage

- boundary variation diminishing scheme with application to the Euler equations. *Computers and Fluids*, 213:104725, 2020.
- [47] L. Cheng, X. Deng, B. Xie, Y. Jiang, and F. Xiao. Low-dissipation BVD schemes for single and multi-phase compressible flows on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 428:110088, 3 2021.
- [48] Y. Li, L. Fu, and N. A. Adams. A low-dissipation shock-capturing framework with flexible nonlinear dissipation control. *Journal of Computational Physics*, 428:109960, 2021.
- [49] Q. Li, K. Yokoi, Z. Xie, S. Omar, and J. Xue. A fifth-order high-resolution shock-capturing scheme based on modified weighted essentially non-oscillatory method and boundary variation diminishing framework for compressible flows and compressible two-phase flows. *Physics of Fluids*, 33(5), 2021.
- [50] Z.-H. Jiang, X. Deng, F. Xiao, C. Yan, J. Yu, and S. Lou. Hybrid Discontinuous Galerkin/Finite Volume Method with Subcell Resolution for Shocked Flows. *AIAA Journal*, 59(6):2027–2044, 2021.
- [51] A. S. Chamarthi and S. H. Frankel. High-order central-upwind shock capturing scheme using a Boundary Variation Diminishing (BVD) algorithm. *Journal of Computational Physics*, 427:110067, 2021.
- [52] 脇村尋, Deng, Xi, 阿部圭晃, 肖鋒. BVD 原理に基づく β 可変 THINC 法による衝撃波捕獲スキーム. *日本航空宇宙学会論文集*, 69(3):113–121, 2021.
- [53] H. Wakimura, S. Takagi, and F. Xiao. Symmetry-preserving enforcement of low-dissipation method based on boundary variation diminishing principle. *Computers & Fluids*, 233:105227, 1 2022.
- [54] X. Deng, Z. h. Jiang, P. Vincent, F. Xiao, and C. Yan. A new paradigm of dissipation-adjustable, multi-scale resolving schemes for compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 466:111287, 2022.
- [55] J. Li, C. Liu, and Z. Li. A revised WENO - THINC scheme for the general structured mesh and applications in the direct numerical simulation of compressible turbulent flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 95(9):1372–1403, 9 2023.
- [56] Y. Majima, H. Wakimura, T. Aoki, and F. Xiao. A new high-fidelity Total Variation Diminishing scheme based on the Boundary Variation Diminishing principle for compressible flows. *Computers and Fluids*, 266:106070, 2023.
- [57] C. Pan, S. Song, C. Chen, X. Li, X. Shen, and F. Xiao. A high-fidelity finite volume scheme for ideal magnetohydrodynamics equations using boundary variation

- diminishing algorithm. *Physics of Fluids*, 36(11), 11 2024.
- [58] H. Wakimura, T. Li, K. M. Shyue, T. Aoki, and F. Xiao. High-resolution boundary variation diminishing scheme for two-phase compressible flow with cavitation and evaporation. *Journal of Computational Physics*, 513(May):113164, 2024.
- [59] H. Wakimura, T. Aoki, and F. Xiao. A low-dissipation numerical method based on boundary variation diminishing principle for compressible gas–liquid two-phase flows with phase change on unstructured grid. *Physics of Fluids*, 37(1), 1 2025.
- [60] Y. Abe, Z. Sun, and F. Xiao. Boundary variation diminishing algorithm for high-order local polynomial-based schemes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 93(3):892–907, 2020.
- [61] X. Deng, Z. H. Jiang, F. Xiao, and C. Yan. Implicit large eddy simulation of compressible turbulence flow with PnTm – BVD scheme. *Applied Mathematical Modelling*, 77:17–31, 2020.
- [62] S. Takagi, L. Fu, H. Wakimura, and F. Xiao. A novel high-order low-dissipation TENO-THINC scheme for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 452:110899, 3 2022.
- [63] T. Liang, F. Xiao, W. Shyy, and L. Fu. A fifth-order low-dissipation discontinuity-resolving TENO scheme for compressible flow simulation. *Journal of Computational Physics*, page 111465, 7 2022.
- [64] S. Takagi, H. Wakimura, L. Fu, and F. Xiao. High-Order Low-Dissipation Shock-Resolving TENO-THINC Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *Communications in Computational Physics*, 34(4):1043–1078, 6 2023.
- [65] Q. Li and L. Fu. A family of TENOA-THINC-MOOD schemes based on diffuse-interface method for compressible multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 519(February):113375, 12 2024.
- [66] H. Huang, X. Li, and L. Fu. A new high-order RKDG method based on the TENO-THINC scheme for shock-capturing. *Journal of Computational Physics*, 520(April 2024):113459, 1 2025.
- [67] J. Shi, Y. T. Zhang, and C. W. Shu. Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures. *Journal of Computational Physics*, 186(2):690–696, 2003.
- [68] J. F. Remacle, J. E. Flaherty, and M. S. Shephard. An adaptive discontinuous Galerkin technique with an orthogonal basis applied to compressible flow problems. *SIAM Review*, 45(1):53–72, 2003.
- [69] R. Liska and B. Wendroff. Comparison of several difference schemes on 1D and

-
- 2D test problems for the Euler equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(3):995–1017, 2003.
- [70] Y. Ha, C. L. Gardner, A. Gelb, and C. W. Shu. Numerical simulation of high mach number astrophysical jets with radiative cooling. *Journal of Scientific Computing*, 24(1):597–612, 2005.
- [71] G. Zhao, M. Sun, S. Xie, and H. Wang. Numerical dissipation control in an adaptive WCNS with a new smoothness indicator. *Applied Mathematics and Computation*, 330(1):239–253, 2018.
- [72] H. Zhang, G. Wang, and F. Zhang. A multi-resolution weighted compact nonlinear scheme for hyperbolic conservation laws. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 34(3):187–203, 2020.
- [73] L. Li, H. B. Wang, G. Y. Zhao, M. B. Sun, D. P. Xiong, and T. Tang. An Efficient Low-Dissipation Hybrid Central/WENO Scheme for Compressible Flows. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 34(10):705–730, 2020.
- [74] J. Peng, S. Liu, S. Li, K. Zhang, and Y. Shen. An efficient targeted ENO scheme with local adaptive dissipation for compressible flow simulation. *Journal of Computational Physics*, 425:109902, 2021.
- [75] W. S. Don, P. Li, K. Y. Wong, and Z. Gao. Improved symmetry property of high order weighted essentially non-oscillatory finite difference schemes for hyperbolic conservation laws. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 10(6):1418–1439, 2018.
- [76] W. S. Don, D. M. Li, Z. Gao, and B. S. Wang. A Characteristic-wise Alternative WENO-Z Finite Difference Scheme for Solving the Compressible Multicomponent Non-reactive Flows in the Overestimated Quasi-conservative Form. *Journal of Scientific Computing*, 82(2):1–24, 2020.
- [77] B. S. Wang, W. S. Don, N. K. Garg, and A. Kurganov. Fifth-order A-WENO finite-difference schemes based on a new adaptive diffusion central numerical flux. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 42(6):A3932–A3956, 2020.
- [78] N. Fleischmann, S. Adami, and N. A. Adams. Numerical symmetry-preserving techniques for low-dissipation shock-capturing schemes. *Computers and Fluids*, 189:94–107, 2019.
- [79] B. Cockburn and C. W. Shu. The Runge–Kutta Discontinuous Galerkin Method for Conservation Laws V. *Journal of Computational Physics*, 141(2):199–224, 1998.
- [80] L. Krivodonova, J. Xin, J. F. Remacle, N. Chevaugeon, and J. E. Flaherty. Shock detection and limiting with discontinuous Galerkin methods for hyperbolic conser-

- vation laws. *Applied Numerical Mathematics*, 48(3-4):323–338, 2004.
- [81] M. Dumbser, D. S. Balsara, E. F. Toro, and C. D. Munz. A unified framework for the construction of one-step finite volume and discontinuous Galerkin schemes on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 227(18):8209–8253, 2008.
- [82] J. Zhu, X. Zhong, C. W. Shu, and J. Qiu. Runge-Kutta discontinuous Galerkin method using a new type of WENO limiters on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 248(2010):200–220, 2013.
- [83] Z. Wang. Spectral (Finite) Volume Method for Conservation Laws on Unstructured Grids. Basic Formulation. *Journal of Computational Physics*, 178(1):210–251, 5 2002.
- [84] Z. J. Wang, Y. Liu, G. May, and A. Jameson. Spectral difference method for unstructured grids II: Extension to the Euler equations. *Journal of Scientific Computing*, 32(1):45–71, 2007.
- [85] H. T. Huynh. A Flux Reconstruction Approach to High-Order Schemes Including Discontinuous Galerkin Methods. In *18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, 2007.
- [86] F. D. Witherden, A. M. Farrington, and P. E. Vincent. PyFR: An open source framework for solving advection-diffusion type problems on streaming architectures using the flux reconstruction approach. *Computer Physics Communications*, 185(11):3028–3040, 2014.
- [87] T. Haga and S. Kawai. On a robust and accurate localized artificial diffusivity scheme for the high-order flux-reconstruction method. *Journal of Computational Physics*, 376:534–563, 2019.
- [88] S. Ii and F. Xiao. High order multi-moment constrained finite volume method. Part I: Basic formulation. *Journal of Computational Physics*, 228(10):3669–3707, 6 2009.
- [89] F. Xiao, S. Ii, C. Chen, and X. Li. A note on the general multi-moment constrained flux reconstruction formulation for high order schemes. *Applied Mathematical Modelling*, 37(7):5092–5108, 2013.
- [90] V. Venkatakrishnan. Convergence to Steady State Solutions of the Euler Equations on Unstructured Grids with Limiters. *Journal of Computational Physics*, 118(1):120–130, 4 1995.
- [91] M. E. Hubbard. Multidimensional Slope Limiters for MUSCL-Type Finite Volume Schemes on Unstructured Grids. *Journal of Computational Physics*, 155(1):54–74, 1999.
- [92] M. S. Darwish and F. Moukalled. TVD schemes for unstructured grids. *International*

-
- Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(4):599–611, 2003.
- [93] L. x. Li, H. s. Liao, and L. j. Qi. An improved r-factor algorithm for TVD schemes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(3-4):610–617, 2008.
- [94] M. J. Castro Díaz, E. D. Fernández-Nieto, A. M. Ferreiro, and C. Parés. Two-dimensional sediment transport models in shallow water equations. A second order finite volume approach on unstructured meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(33-36):2520–2538, 2009.
- [95] J. S. Park, S. H. Yoon, and C. Kim. Multi-dimensional limiting process for hyperbolic conservation laws on unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 229(3):788–812, 2010.
- [96] J. S. Park and C. Kim. Multi-dimensional limiting process for finite volume methods on unstructured grids. *Computers & Fluids*, 65:8–24, 7 2012.
- [97] D. Zhang, C. Jiang, L. Cheng, and D. Liang. A refined r-factor algorithm for TVD schemes on arbitrary unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 80(2):105–139, 2016.
- [98] J. Li, Q. Zhang, Z. Q. Zhai, X. Sun, and S. Liao. An improved r-factor algorithm for total variational diminishing (TVD) schemes on two-dimension non-uniform unstructured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 93(5):1446–1467, 2021.
- [99] C. Hu and C.-W. Shu. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes on Triangular Meshes. *Journal of Computational Physics*, 150(1):97–127, 3 1999.
- [100] M. Dumbser, M. Käser, V. A. Titarev, and E. F. Toro. Quadrature-free non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for nonlinear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 226(1):204–243, 9 2007.
- [101] M. Dumbser and M. Käser. Arbitrary high order non-oscillatory finite volume schemes on unstructured meshes for linear hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 221(2):693–723, 2007.
- [102] Y. T. Zhang and C. W. Shu. Third order WENO scheme on three dimensional tetrahedral meshes. *Communications in Computational Physics*, 5(2-4):836–848, 2009.
- [103] W. Li and Y.-X. Ren. High - order k - exact WENO finite volume schemes for solving gas dynamic Euler equations on unstructured grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 70(6):742–763, 10 2012.
- [104] Y. Liu and Y. T. Zhang. A robust reconstruction for unstructured WENO schemes. *Journal of Scientific Computing*, 54(2-3):603–621, 2013.

- [105] A. J. Christlieb, Y. Liu, Q. Tang, and Z. Xu. High order parametrized maximum-principle-preserving and positivity-preserving WENO schemes on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 281:334–351, 2015.
- [106] Z. Ji, T. Liang, and L. Fu. A Class of New High-order Finite-Volume TENO Schemes for Hyperbolic Conservation Laws with Unstructured Meshes. *Journal of Scientific Computing*, 92(2):1–39, 2022.
- [107] Z. Ji, T. Liang, and L. Fu. High-Order Finite-Volume TENO Schemes with Dual ENO-Like Stencil Selection for Unstructured Meshes. *Journal of Scientific Computing*, 95:76, 2023.
- [108] B. Xie, X. Deng, S. J. Liao, and F. Xiao. High-order multi-moment finite volume method with smoothness adaptive fitting reconstruction for compressible viscous flow. *Journal of Computational Physics*, 394:559–593, 2019.
- [109] 肖鋒, 長崎孝夫. **数値流体解析の基礎**. コロナ社, 2020.
- [110] 後藤仁志. **流れの方程式**. 森北出版, 2022.
- [111] E. F. Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2009.
- [112] 藤井孝蔵. **流体力学の数値計算法**. 東京大学出版会, 1994.
- [113] 藤井孝蔵, 立川智章. **Python で学ぶ流体力学の数値計算法**. オーム社, 2020.
- [114] J. Qiu and C. W. Shu. On the construction, comparison, and local characteristic decomposition for high-order central WENO schemes. *Journal of Computational Physics*, 183(1):187–209, 2002.
- [115] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39:201–225, 1981.
- [116] D. B. Kothe and W. J. Rider. Reconstructing Volume Tracking. *Journal of Computational Physics*, 141(2):112–152, 1998.
- [117] S. W. Welch and J. Wilson. A Volume of Fluid Based Method for Fluid Flows with Phase Change. *Journal of Computational Physics*, 160(2):662–682, 2000.
- [118] W. Mulder, S. Osher, and J. A. Sethian. Computing interface motion in compressible gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 100(2):209–228, 1992.
- [119] M. Sussman. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1):146–159, 1994.
- [120] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100(1):25–37, 1992.
- [121] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y. J. Jan. A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase

-
- Flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):708–759, 2001.
- [122] M. R. Baer and J. W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (ddt) in reactive granular materials. *International Journal of Multiphase Flow*, 12(6):861–889, 1986.
- [123] R. Saurel and R. Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. *Journal of Computational Physics*, 150(2):425–467, 1999.
- [124] A. Zein, M. Hantke, and G. Warnecke. Modeling phase transition for compressible two-phase flows applied to metastable liquids. *Journal of Computational Physics*, 229(8):2964–2998, 2010.
- [125] N. T. Nguyen and M. Dumbser. A path-conservative finite volume scheme for compressible multi-phase flows with surface tension. *Applied Mathematics and Computation*, 271:959–978, 2015.
- [126] M. Pelanti and K. M. Shyue. A mixture-energy-consistent six-equation two-phase numerical model for fluids with interfaces, cavitation and evaporation waves. *Journal of Computational Physics*, 259:331–357, 2014.
- [127] A. Murrone and H. Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *Journal of Computational Physics*, 202(2):664–698, 2005.
- [128] A. K. Kapila, R. Menikoff, J. B. Bdzil, S. F. Son, and D. S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials: Reduced equations. *Physics of Fluids*, 13(10):3002–3024, 2001.
- [129] M. Pelanti and K. M. Shyue. A numerical model for multiphase liquid–vapor–gas flows with interfaces and cavitation. *International Journal of Multiphase Flow*, 113:208–230, 2019.
- [130] R. Saurel, F. Petitpas, and R. Abgrall. Modelling phase transition in metastable liquids: application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607:313–350, 7 2008.
- [131] G. Allaire, S. Clerc, and S. Kokh. A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *Journal of Computational Physics*, 181(2):577–616, 2002.
- [132] A. Tiwari, J. B. Freund, and C. Pantano. A diffuse interface model with immiscibility preservation. *Journal of Computational Physics*, 252:290–309, 2013.
- [133] R. Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach. *Journal of Computational Physics*, 125(1):150–160, 1996.

- [134] Y. Fujiwara, Y. Tamaki, and S. Kawai. Fully conservative and pressure-equilibrium preserving scheme for compressible multi-component flows. *Journal of Computational Physics*, 478:111973, 2023.
- [135] F. H. Harlow and A. A. Amsden. Fluid Dynamics. A LASL Monograph. 1971.
- [136] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers. *Journal of Computational Physics*, 205(2):567–610, 2005.
- [137] D. J. Picard and P. R. Bishnoi. Calculation of the thermodynamic sound velocity in two-phase multicomponent fluids. *International Journal of Multiphase Flow*, 13(3):295–308, 1987.
- [138] T. Flåtten and H. Lund. Relaxation two-phase flow models and the subcharacteristic condition. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 21(12):2379–2407, 2011.
- [139] R. Warming and B. Hyett. The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods. *Journal of Computational Physics*, 14(2):159–179, 2 1974.
- [140] S. Godunov and I. Bohachevsky. Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 47(89)(3):271–306, 1959.
- [141] P. K. Sweby. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(5):995–1011, 10 1984.
- [142] D. S. Balsara and C. W. Shu. Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *Journal of Computational Physics*, 160(2):405–452, 2000.
- [143] S. Liu, Y. Shen, F. Zeng, and M. Yu. A new weighting method for improving the WENO-Z scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 87:271–291, 2018.
- [144] Y. Wang, B.-s. Wang, and W. S. Don. Generalized sensitivity parameter free fifth order WENO finite difference scheme with Z-type weights. *Journal of Scientific Computing*, 81:1329–1358, 2019.
- [145] M. Yuan. A new weighted essentially non-oscillatory WENO-NIP scheme for hyperbolic conservation laws. *Computers and Fluids*, 197:104168, 2020.
- [146] B. S. Wang and W. S. Don. Affine-invariant WENO weights and operator. *Applied Numerical Mathematics*, 181:630–646, 2022.
- [147] K. M. Shyue and F. Xiao. An Eulerian interface sharpening algorithm for compressible two-phase flow: The algebraic THINC approach. *Journal of Computational*

-
- Physics*, 268:326–354, 2014.
- [148] D. P. Garrick, W. A. Hagen, and J. D. Regele. An interface capturing scheme for modeling atomization in compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 344:260–280, 2017.
- [149] Z. He, B. Tian, Y. Zhang, and F. Gao. Characteristic-based and interface-sharpening algorithm for high-order simulations of immiscible compressible multi-material flows. *Journal of Computational Physics*, 333:247–268, 2017.
- [150] C. Liu and C. Hu. Adaptive THINC-GFM for compressible multi-medium flows. *Journal of Computational Physics*, 342:43–65, 2017.
- [151] P. T. Barton. An interface-capturing Godunov method for the simulation of compressible solid-fluid problems. *Journal of Computational Physics*, 390:25–50, 2019.
- [152] K. Schmidmayer, S. H. Bryngelson, and T. Colonius. An assessment of multicomponent flow models and interface capturing schemes for spherical bubble dynamics. *Journal of Computational Physics*, 402:109080, 2020.
- [153] T.-y. Chiu, Y.-y. Niu, and Y.-j. Chou. Accurate hybrid AUSMD type flux algorithm with generalized discontinuity sharpening reconstruction for two-fluid modeling. *Journal of Computational Physics*, 443:110540, 2021.
- [154] Z. He, Y. Ruan, Y. Yu, B. Tian, and F. Xiao. Self-adjusting steepness-based schemes that preserve discontinuous structures in compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 463:111268, 8 2022.
- [155] F. Zhang and J. Cheng. A bound-preserving and positivity-preserving finite volume WENO scheme for solving five-equation model of two-medium flows. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 114:106649, 2022.
- [156] W. Zhang, N. Fleischmann, S. Adami, and N. A. Adams. A hybrid WENO5IS-THINC reconstruction scheme for compressible multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 498(August 2023):112672, 2023.
- [157] G. Fukushima and K. Kitamura. Improved hybrid approach of monotonic upstream-centered scheme for conservation laws and discontinuity sharpening technique for steady and unsteady flows. *Physics of Fluids*, 36(4), 2024.
- [158] Y. Jiao, S. J. Schmidt, and N. A. Adams. An all-Mach consistent numerical scheme for simulation of compressible multi-component fluids including surface tension, cavitation, turbulence modeling and interface sharpening on compact stencils. *Computers and Fluids*, 274(January):106186, 2024.
- [159] D. A. Cassidy, J. R. Edwards, and M. Tian. An investigation of interface-sharpening schemes for multi-phase mixture flows. *Journal of Computational*

- Physics*, 228(16):5628–5649, 2009.
- [160] S. Pirozzoli. On the spectral properties of shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 219(2):489–497, 2006.
- [161] E. F. Toro, M. Spruce, and W. Speares. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver. *Shock Waves*, 4(1):25–34, 1994.
- [162] E. F. Toro. Direct Riemann solvers for the time-dependent Euler equations. *Shock Waves*, 5(1-2):75–80, 1995.
- [163] E. Shima and K. Kitamura. Parameter-Free simple Low-Dissipation AUSM-Family scheme for all speeds. *AIAA Journal*, 49(8):1693–1709, 2011.
- [164] K. Kitamura and E. Shima. Towards shock-stable and accurate hypersonic heating computations: A new pressure flux for AUSM-family schemes. *Journal of Computational Physics*, 245:62–83, 2013.
- [165] K. Kitamura. *Advancement of Shock Capturing Computational Fluid Dynamics Methods*. Springer, 2020.
- [166] S. Gottlieb, C.-w. Shu, and E. Tadmor. Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods. *SIAM Review*, 43(1):89–112, 1 2001.
- [167] S. Gottlieb. On High Order Strong Stability Preserving Runge-Kutta and Multi Step Time Discretizations. *Journal of Scientific Computing*, 25:105–128, 2005.
- [168] X. Deng, B. Xie, and F. Xiao. Some practical versions of boundary variation diminishing (BVD) algorithm. 2017.
- [169] Y. Y. Niu, Y. C. Chen, T. Y. Yang, and F. Xiao. Development of a less-dissipative hybrid AUSMD scheme for multi-component flow simulations. *Shock Waves*, 29(5):691–704, 2019.
- [170] X. Deng, B. Xie, H. Teng, and F. Xiao. High resolution multi-moment finite volume method for supersonic combustion on unstructured grids. *Applied Mathematical Modelling*, 66:404–423, 2019.
- [171] A. Suresh and H. Huynh. Accurate Monotonicity-Preserving Schemes with Runge-Kutta Time Stepping. *Journal of Computational Physics*, 136(1):83–99, 9 1997.
- [172] G. A. Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 27(1):1–31, 1978.
- [173] P. Woodward and P. Colella. The Numerical Simulation of Two-Dimensional Fluid Flow with Strong Shocks. *Journal of Computational Physics*, 54:115–173, 1984.
- [174] X. Y. Hu, N. A. Adams, and C. W. Shu. Positivity-preserving method for high-order conservative schemes solving compressible Euler equations. *Journal of Computa-*

-
- tional Physics*, 242:169–180, 2013.
- [175] A. Kurganov and E. Tadmor. Solution of two-dimensional Riemann problems for gas dynamics without Riemann problem solvers. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 18(5):584–608, 2002.
- [176] F. Kemm. Heuristical and numerical considerations for the carbuncle phenomenon. *Applied Mathematics and Computation*, 320:596–613, 2018.
- [177] H. Nishikawa. Beyond Interface Gradient: A General Principle for Constructing Diffusion Schemes. In *40th Fluid Dynamics Conference and Exhibit*, Reston, Virginia, 6 2010. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- [178] A. S. Chamarthi, S. Bokor, and S. H. Frankel. On the importance of high-frequency damping in high-order conservative finite-difference schemes for viscous fluxes. *Journal of Computational Physics*, 460:111195, 2022.
- [179] A. S. Chamarthi, H. C. K., N. Hoffmann, S. Bokor, and S. H. Frankel. On the role of spectral properties of viscous flux discretization for flow simulations on marginally resolved grids. *Computers & Fluids*, 251(November 2022):105742, 1 2023.
- [180] V. Daru and C. Tenaud. Evaluation of TVD high resolution schemes for unsteady viscous shocked flows. *Computers and Fluids*, 30(1):89–113, 2000.
- [181] V. Daru and C. Tenaud. Numerical simulation of the viscous shock tube problem by using a high resolution monotonicity-preserving scheme. *Computers and Fluids*, 38(3):664–676, 2009.
- [182] E. Johnsen and T. Colonius. Implementation of WENO schemes in compressible multicomponent flow problems. *Journal of Computational Physics*, 219(2):715–732, 2006.
- [183] R. J. LeVeque. Wave propagation algorithms for multidimensional hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 131(2):327–353, 1997.
- [184] K. M. Shyue. An Efficient Shock-Capturing Algorithm for Compressible Multicomponent Problems. *Journal of Computational Physics*, 142(1):208–242, 1998.
- [185] D. I. Ketcheson, M. Parsani, and R. J. Leveque. High-order wave propagation algorithms for hyperbolic systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(1):1–25, 2013.
- [186] S. Rhebergen, O. Bokhove, and J. J. van der Vegt. Discontinuous Galerkin finite element methods for hyperbolic nonconservative partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 227(3):1887–1922, 2008.
- [187] M. Dumbser, A. Hidalgo, M. Castro, C. Parés, and E. F. Toro. FORCE schemes on unstructured meshes II: Non-conservative hyperbolic systems. *Computer Methods*

- in Applied Mechanics and Engineering*, 199(9-12):625–647, 2010.
- [188] S. A. Tokareva and E. F. Toro. HLLC-type Riemann solver for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 229(10):3573–3604, 2010.
- [189] M. Dumbser and E. F. Toro. A simple extension of the Osher Riemann solver to non-conservative hyperbolic systems. *Journal of Scientific Computing*, 48(1-3):70–88, 2011.
- [190] B. Tian, E. F. Toro, and C. E. Castro. A path-conservative method for a five-equation model of two-phase flow with an HLLC-type Riemann solver. *Computers and Fluids*, 46(1):122–132, 2011.
- [191] M. Dumbser and D. S. Balsara. A new efficient formulation of the HLLEM Riemann solver for general conservative and non-conservative hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 304:275–319, 2016.
- [192] M. De Lorenzo, M. Pelanti, and P. Lafon. HLLC-type and path-conservative schemes for a single-velocity six-equation two-phase flow model: A comparative study. *Applied Mathematics and Computation*, 333:95–117, 2018.
- [193] V. Coralic and T. Colonius. Finite-volume WENO scheme for viscous compressible multicomponent flows. *Journal of Computational Physics*, 274:95–121, 2014.
- [194] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, 1992.
- [195] D. P. Garrick, M. Owkes, and J. D. Regele. A finite-volume HLLC-based scheme for compressible interfacial flows with surface tension. *Journal of Computational Physics*, 339:46–67, 2017.
- [196] A. Du Chéné, C. Min, and F. Gibou. Second-order accurate computation of curvatures in a level set framework using novel high-order reinitialization schemes. *Journal of Scientific Computing*, 35(2-3):114–131, 2008.
- [197] J. Hernández, J. López, P. Gómez, C. Zanzi, and F. Faura. A new volume of fluid method in three dimensions-Part I: Multidimensional advection method with face-matched flux polyhedra. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 58(8):897–921, 11 2008.
- [198] S. Afkhami and M. Bussmann. Height functions for applying contact angles to 2D VOF simulations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 57(4):453–472, 6 2008.
- [199] S. Popinet. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228(16):5838–5866, 2009.

-
- [200] J. López, C. Zanzi, P. Gómez, R. Zamora, F. Faura, and J. Hernández. An improved height function technique for computing interface curvature from volume fractions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(33-36):2555–2564, 2009.
- [201] T. Abadie, J. Aubin, and D. Legendre. On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within Volume of Fluid and Level Set frameworks. *Journal of Computational Physics*, 297:611–636, 2015.
- [202] B. Einfeldt, C. D. Munz, P. L. Roe, and B. Sjögren. On Godunov-type methods near low densities. *Journal of Computational Physics*, 92(2):273–295, 1991.
- [203] A. Chiapolino, P. Boivin, and R. Saurel. A simple phase transition relaxation solver for liquid–vapor flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 83(7):583–605, 2017.
- [204] A. Marquina and P. Mulet. A flux-split algorithm applied to conservative models for multicomponent compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 185(1):120–138, 2003.
- [205] F. Caro, F. Coquel, D. Jamet, and S. Kokh. A Simple Finite-Volume Method for Compressible Isothermal Two-Phase Flows Simulation. *International Journal on Finite Volumes*, 6(1), 2006.
- [206] G. Faccanoni, S. Kokh, and G. Allaire. Modelling and simulation of liquid-vapor phase transition in compressible flows based on thermodynamical equilibrium. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 46(5):1029–1054, 2012.
- [207] J. Zhang. A simple and effective five-equation two-phase numerical model for liquid-vapor phase transition in cavitating flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 132:103417, 2020.
- [208] R. J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2004.
- [209] G. Layes and O. Le Métayer. Quantitative numerical and experimental studies of the shock accelerated heterogeneous bubbles motion. *Physics of Fluids*, 19(4), 2007.
- [210] D. Chen, B. Xie, and F. Xiao. Revisit to the THINC/QQ scheme: Recent progress to improve accuracy and robustness. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 94(7):719–755, 2022.
- [211] R. Kumar, L. Cheng, Y. Xiong, B. Xie, R. Abgrall, and F. Xiao. THINC scaling method that bridges VOF and level set schemes. *Journal of Computational Physics*, 436:110323, 2021.
- [212] D. S. Balsara, M. Dumbser, and R. Abgrall. Multidimensional HLLC Riemann

- solver for unstructured meshes - With application to Euler and MHD flows. *Journal of Computational Physics*, 261:172–208, 2014.
- [213] J. Lyness and U. Rüde. Cubature of integrands containing derivatives. *Numerische Mathematik*, 78(3):439–461, 1 1998.
- [214] S. Noelle, N. Pankratz, G. Puppo, and J. R. Natvig. Well-balanced finite volume schemes of arbitrary order of accuracy for shallow water flows. *Journal of Computational Physics*, 213(2):474–499, 2006.
- [215] A. Chiapolino, R. Saurel, and B. Nkonga. Sharpening diffuse interfaces with compressible fluids on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 340:389–417, 2017.
- [216] P. Tsoutsanis, E. M. Adebayo, A. C. Merino, A. P. Arjona, and M. Skote. CWENO Finite-Volume Interface Capturing Schemes for Multicomponent Flows Using Unstructured Meshes. *Journal of Scientific Computing*, 89(3):1–27, 2021.
- [217] V. Maltsev, M. Skote, and P. Tsoutsanis. High-order hybrid DG-FV framework for compressible multi-fluid problems on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 502(January):112819, 4 2024.
- [218] A. K. Pandare, W. Li, J. Waltz, J. Bakosi, and H. Luo. A THINC-DG Method for Multi-Material Fluid Flow. *AIAA Science and Technology Forum and Exposition, AIAA SciTech Forum 2022*, pages 1–12, 2022.
- [219] X. Zhao, D. Shi, S. Song, and S. Zou. A high-order limiter-free arbitrary Lagrangian–Eulerian discontinuous Galerkin scheme for compressible multi-material flows. *Applied Mathematics Letters*, 153(2023):109076, 2024.
- [220] M. Huang, L. Cheng, and W. Ying. A structure-preserving reconstruction scheme for compressible single- and multi-phase flows based on artificial neural networks. pages 1–35, 2024.
- [221] 角銅洋実, 榊和樹, 中谷辰爾, 津江光洋, 金井竜一郎, 稲川貴大, 平岩徹夫. エタノール/液体酸素ロケットエンジン燃焼室における 平面ピントル型噴射器の推進剤噴射運動量比が燃焼挙動に及ぼす影響. *日本航空宇宙学会論文集*, 65(1):1–9, 2017.
- [222] 伊理正夫, 藤野和建. **数値計算の常識**. 共立出版, 1985.

謝辞

本論文の執筆にあたり、多くの方々にご指導、ご支援を賜りましたことを誠に感謝申し上げます。

肖鋒教授には、圧縮性流れの数値計算手法全般について多くのご助言を頂きました。特に学術論文の執筆時には、論文の構成や表現方法に至るまで丁寧にご指導いただき、研究者としての基本姿勢を学ぶ貴重な機会となりました。先生の熱心なご指導と本質を追究する指導方針は、今後の私のキャリアにおいて大変参考になる指針になると確信しております。研究の面白さを教えていただいたこと到大変感謝しております。この6年間で私にとって大変貴重な経験をさせていただきました。心より感謝申し上げます。

青木尊之教授には、修士課程2年次の後期から主指導教員を務めていただき、博士後期課程への進学を受け入れて下さりました。学会参加時には、研究内容を効果的に発表するための心得についてご教示いただき、大変参考になりました。本研究の遂行にあたり、粘性流や表面張力の計算手法においても大変有益なご助言を頂きました。本論文の審査では、計算コストの計測方法や対称性保存解法の意義などについても本質的な指摘を頂きました。心から感謝いたします。

本論文の審査をお引き受けくださった伊井仁志教授、門永雅史教授、大西領教授には、審査の過程で数々の貴重なご指摘やご助言を頂きました。本研究の理解を深めるだけでなく、議論の不足していた点を補う大きな助けとなりました。また、本研究から新たに浮かび上がった課題や今後の展望についても明確に認識することができました。お忙しい中、多くの時間と労力を割いて丁寧にご審査いただいたことに、心よりお礼申し上げます。

井上裕嗣教授と井上剛良教授には、修士課程2年次に私の進路に関する問題解決にご尽力いただきました。おかげさまで博士後期課程に進学でき、本論文を完成させることができました。誠に感謝いたします。

東北大学の阿部圭晃准教授には、学術論文執筆の際に正確な文章の書き方についてご指導いただき、本論文の執筆においても参考にさせていただきました。学会等でのご助言や研究内容に関する議論を通じ、知見を深めることができました。誠に感謝申し上げます。

宇宙航空研究開発機構の芳賀臣紀博士には、圧縮性混相流の数値解析に関する専門的な議論

をさせていただきました。特にロケットエンジン内部の燃焼流れに関する課題や対処法など、本研究の応用可能性にも関連する知識を提供していただきました。深くお礼申し上げます。

肖研究室および青木研究室の秘書である岡様、吉田様、金子様、杉本様には、日常業務の面で多大なサポートをいただきました。特に岡様には、修士2年次の進路選択の際に手厚い支援をいただきました。大変感謝しております。

肖研究室のメンバーである Siengdy さん、程さん、熊さん、李さん、武石さん、高木君、真島君、富永君には、研究内容に関する専門的な議論及び学生生活におけるアドバイスをいただきました。誠に感謝いたします。

他の方々にも様々な面でお世話になりました。この場を借りて感謝申し上げます。

また、本研究は JSPS (Japan Society for the Promotion of Science) 科研費 22J21252, 22KJ1331 の助成を受けて実施されました。

本論文の執筆を無事完了することが出来たのは、皆様方からの温かいご協力があったおかげです。お世話になったすべての方々にも心より感謝の意を表し、謝辞に代えさせていただきます。