

〔特集〕注目研究 in 年会 2014

気体論スキームの衝撃波捕獲における堅牢性の起源

*京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻

大和田 拓†

京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻(院)

中村 太一

文献[JCP 255 (2013) 106-129]の気体論スキームは、カーバンクル現象やポストショック振動等の衝撃波異常現象に対して高い堅牢性を示し、さらに境界層を合理的な解像度で正確に捉えることができる。本記事ではこの気体論スキームから本質的でない要素を削ぎ落として単純化し、その高い性能を生み出す起源に迫りたい。単純化されたスキームの性能は種々の問題で評価し、既存の衝撃波捕獲スキームとの比較も併せて行う。

Origin of robustness of kinetic schemes in shock-capturing

Taku OHWADA, Graduate School of Engineering, Kyoto University

Taichi NAKAMURA, Graduate School of Engineering, Kyoto University (Graduate student).

Kinetic Lax-Wendroff scheme of [JCP 255 (2013) 106-129] exhibits strong resistance against shock anomalies, such as carbuncle phenomenon and post-shock oscillations. Moreover the scheme is able to capture boundary-layers accurately with reasonable resolutions. In this article, the key to its high performance is revealed by chipping off unessential parts of the scheme. The performance of the stripped-down scheme is demonstrated in the problems of the modified odd-even decoupling, a hypersonic inviscid flow past a blunt body, and stationary and moving contact discontinuities. Comparisons are also made with some prevailing shock-capturing schemes.

(KEY WORDS): Euler equations, shock-capturing, kinetic scheme, carbuncle phenomenon, post-shock oscillations

1 はじめに

衝撃波の厚みは一般に気体分子の平均自由行程程度であり、常圧下でそれはコンママイクロンの大きさになる。その内部は強い非平衡領域であり、その構造を正しく求めるには気体論(Boltzmann 方程式)が必要で、圧縮性 Navier-Stokes 方程式系に基づく場合を遥かに凌ぐ膨大な計算をしなければならなくなる。弾道飛翔体や宇宙機等の大きさが数メートルから数十メートルの物体周りの高速気流解析で衝撃波の内部構造まで求めることは、たとえ衝撃波近傍の微視的計算の必要性に目をつぶって巨視的な計算だけで済ませるとしても、かなり野心的と言わざるを得ない。計算機が大幅に発達したおかげで多重スケール解析というキーワードが巷で喧しく聞こえる現在においてさえ、衝撃波を不連続面として見なす妥協の合理性は些かも失われていないのである。

解の滑らかさを仮定する初等的な差分法で不連続な解を求めようとすると不連続の近傍で偽の振動が発生する

ことはよく知られている。偽の振動を抑制し不連続を数点の格子点で捕獲する計算法(衝撃波捕獲)の研究は 1980 年代に入って本格化し、現在までに HLL 系や AUSM 族といった有限体積法における数値フラックスの生成法や MUSCL, ENO, WENO といった物理量の空間分布の再構成法等の成果が齎されている。また理論的研究の成果としては 1980 年代に一世を風靡した TVD の理論が挙げられるだろう。しかしこれらの先進的なスキームや理論の出現によって衝撃波捕獲スキームの研究は終わったと思うのは早計である。これは航空宇宙工学において極超音速領域における堅牢性と境界層捕獲のための低散逸性を兼ね備えた圧縮性流体の計算法の出現が未だに望まれていることから解るだろう。HLL 系の HLLC は接触不連続面や境界層を合理的な解像度で正しく計算できる衝撃波捕獲スキームであるが、強い衝撃波の場合に現れる数値的異常現象の一つであるカーバンクル現象に対しては極めて脆弱である。HLLC よりも散逸的な HLLC_e や、いくつもの改良版が提案されてきた AUSM 族に対して

*〒615-8530 京都市西京区京都大学桂

†E-mail: ohwada@kuaero.kyoto-u.ac.jp

も同じことが言える. HLLC よりもさらに散逸的な Local Lax-Friedrichs (Rusanov)スキームですら, 強い衝撃波の後流に振動(ポストショック振動)が生じ, 空間精度が二次になるとたとえ TVD スキームの制限関数を導入してもカーバンクル現象から免れないのである.

衝撃波捕獲スキームの数値フラックスはフラックスベクトルのセル境界の前後の値の単純な平均ではなく, なんらかの非線形平均になっている. 例えば HLL 系では Riemann 問題の近似解が用いられ, AUSM 族ではフラックスを圧力とそれ以外に分離してそれぞれ独立に平均化する方法が採用され, 以下で取り上げる気体論スキームでは Boltzmann 方程式の特性方向が使われている. このように非線形平均の方法は様々であるが, 非線形平均が陰的に含むなんらかの散逸性を利用している点は共通する. 圧縮性 Euler 方程式の気体論スキームの原型は, Boltzmann 方程式の確率的解法である DSMC 法を模倣して開発された Equilibrium Flux Method (EFM)¹⁾に見られる. このスキームは先に述べた衝撃波の異常現象に対して極めて高い堅牢性を持つが, 高速粘性流の計算ではその散逸性のために境界層は著しく鈍ったものになり, 高速飛翔体へのエネルギー伝達の解析では使い物にならない. この困難さは Boltzmann 方程式のモデルである BGK 方程式を使った Gas-Kinetic-BGK スキーム²⁾や気体論を使って堅牢化した Lax-Wendroff 法と EFM とのハイブリッドである Kinetic Lax-Wendroff 法(KLW)^{3,4)}の開発によって基本的に解決された. しかし境界層捕獲という性能を兼ね備えたことと引き換えにその堅牢性は EFM には及ばず, これら先進的な気体論スキームは衝撃波異常現象に対して脆弱であることは否めない. 幸い最近になって衝撃波近傍で EFM の堅牢性を引き出す簡単な対策が提案され⁵⁾, これより衝撃波異常現象を工学上問題ない程度にまで抑制できるようになった. なお同じ対策を HLL 系や AUSM 族のスキームに施しても残念ながら衝撃波異常現象は無視できるほどに抑制できない.

気体論スキームは極超音速領域までの高い堅牢性と境界層捕獲の為の低散逸性が両立する航空宇宙流体解析に十分使えるツールにまで成熟したが, 「気体論の何がその高い性能を引き出すのか?」というアカデミックな疑問が残っている. 本記事では気体論スキームから本質的でない部分を削ぎ落とし単純化することで, その疑問に対する解答に迫りたい.

2 気体論スキームの導出

本節では無次元化された二次元圧縮性 Euler 方程式系に対する KLW の導出を説明する.

2.1. 基礎方程式と記号

時間を t , 空間直交座標を (x, y) と表す. 密度, 流速の x, y 方向成分, 圧力をそれぞれ ρ, u, v, P とし, これら気体力学的変数(プリミティブ変数)をまとめて $\mathbf{h} = (\rho, u, v, P)^T$ と略記する. 理想気体を仮定し, 温度 T は状態方程式 $T = P/\rho$ に従うとする. 二次元圧縮性 Euler 方程式系(外力なし, 無次元)は次式で表される.

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \mathbf{0}. \quad (1)$$

ここに $\tilde{\mathbf{h}}$ は保存量であり, γ を気体の比熱比とすると, $\tilde{\mathbf{h}} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho(u^2 + v^2)/2 + P/(\gamma - 1))^T$ で定義される. Φ および Ψ はプリミティブ変数 \mathbf{h} (あるいは保存量 $\tilde{\mathbf{h}}$) の関数で,

$$\Phi = \left(\rho u, \rho u^2 + P, \rho uv, \rho u \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{\gamma P u}{\gamma - 1} \right)^T,$$

$$\Psi = \left(\rho v, \rho uv, \rho v^2 + P, \rho v \frac{u^2 + v^2}{2} + \frac{\gamma P v}{\gamma - 1} \right)^T,$$

で与えられ, 以下ではこれらをフラックス関数と呼ぶことにする. なお単位質量あたりの気体定数を R として T を RT と読み換えると, 無次元量を使った説明を有次元量に対するものとして読むことができる.

2.2. 有限体積法

KLW は有限体積法に分類される. この数値解法では空間領域は有限個のセルに分割され, セル内の保存量の時間発展が保存則から求められる. セル境界から時間ステップ Δt の間にセルへ流入する正味の保存量(数値フラックス)はその周辺のセルの中心における \mathbf{h} の離散的な値から近似的に求められ, これよりセル内の保存量が更新され, その平均値からセル中心の \mathbf{h} の更新値が決定される. 数値フラックスの計算の説明はセル境界の法線が x 軸方向の場合を考えれば十分であろう. これは各セル境界毎にその法線方向を x 軸とする流体力学方程式系を考えることに相当し, 流体力学方程式系は並進および回転普遍性を満たすからである.

単位長さ当たりの数値フラックス \mathbf{F} は次式で定義される.

$$\mathbf{F} = \int_0^{\Delta t} \Phi dt. \quad (2)$$

時間に関して二次精度を達成するためには被積分関数 Φ を $t = 0$ の周りに一次まで Taylor 展開すればよい. その際, Φ の時間微分 $\partial \Phi / \partial t$ は基礎方程式(1)より空間微分に変換できる(Cauchy-Kowalevskaya の手法). すなわち

$$\mathbf{F} = \Delta t \Phi - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{\mathbf{h}}} \cdot \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right). \quad (3)$$

ここに右辺の Δt の各べきに対する係数は時刻 $t = 0$ における値である。さらにフラックス関数 Φ および Ψ を \mathbf{h} あるいは $\tilde{\mathbf{h}}$ の関数とみると、式(3)は次のように変形される。

$$\mathbf{F} = \Delta t \Phi - \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{\mathbf{h}}} \cdot \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{\mathbf{h}}} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{\mathbf{h}}} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial y} \right). \quad (4)$$

\mathbf{F} を具体的に計算するにはセル境界上の物理量およびその傾きの値が必要になる。例えば、等間隔直交格子系でセル境界に隣り合うセルの中心における物理量の値を直線で結んだ連続な分布を用いるならば、良く知られたLax-Wendroffスキームが導かれる。KLWでは離散的な物理量からその分布をセル境界で不連続を許して再構成する方法が用いられる。 $x = 0$ にセル境界があるとして、セル境界における \mathbf{h} およびその導関数 $\partial \mathbf{h} / \partial s$ ($s = x, y$)の左右の極限值を次のように略記する。

$$\mathbf{h}^L = \lim_{x \rightarrow -0} \mathbf{h}, \quad \mathbf{h}^R = \lim_{x \rightarrow +0} \mathbf{h}, \quad (5)$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial s} \right)^L = \lim_{x \rightarrow -0} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial s}, \quad \left(\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial s} \right)^R = \lim_{x \rightarrow +0} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial s} \quad (6)$$

$$(s = x, y).$$

不連続を許す再構成の場合の数値フラックスの計算ではRiemann問題の近似解がよく用いられるが、気体論スキームでは数値フラックスをBoltzmann方程式の簡単な特性の理論を利用して計算する。以下ではその方法を説明する。

2.3. 気体論の導入

気体論スキームの導出にはたった二つの気体論の初等的事実だけが予備知識として必要である。説明の簡単さのために気体は単原子分子気体としよう。第一の予備知識は、平衡分布(Maxwell分布)を表す速度分布関数(平衡分布関数)である $g(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z)$ に関するもので、保存量 $\tilde{\mathbf{h}}$ とEuler方程式系のフラックス関数 Φ および Ψ がそのモーメントによって与えられることである。すなわち分子速度の x, y, z 方向成分をそれぞれ ξ_x, ξ_y, ξ_z とすると

$$\tilde{\mathbf{h}} = \int \psi g(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z) d\xi_x d\xi_y d\xi_z, \quad (7)$$

$$\begin{pmatrix} \Phi \\ \Psi \end{pmatrix} = \int \begin{pmatrix} \xi_x \\ \xi_y \end{pmatrix} \psi g(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z) d\xi_x d\xi_y d\xi_z, \quad (8)$$

が成り立つ。ここに

$$\psi = (1, \xi_x, \xi_y, (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)/2)^T, \quad (9)$$

$$g(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \quad (10)$$

$$\times \exp\left(-\frac{(\xi_x - u)^2 + (\xi_y - v)^2 + \xi_z^2}{2T}\right),$$

であり、積分領域は全分子速度空間(\mathbf{R}^3)である。第二の予備知識はBoltzmann方程式の特性方向に関するもので、セル境界の左極限への情報伝達は $\xi_x > 0$ の分子によってなされ、セル境界の右極限への情報伝達は $\xi_x < 0$ の分子によってなされるという、極めて当たり前の事実それは帰着される。EFMでは上記の二つの予備知識に基づき次のような不連続な平衡分布関数を数値フラックスの計算に用いる。

$$g_D = \begin{cases} g(\mathbf{h}^L, \xi_x, \xi_y, \xi_z) & \xi_x > 0 \\ g(\mathbf{h}^R, \xi_x, \xi_y, \xi_z) & \xi_x < 0 \end{cases} \quad (11)$$

この g_D を g として式(8)で Φ を計算し、式(2)の時間積分を一次精度で計算すればEFMの数値フラックスが得られる。KLWではさらに次のような連続な平衡分布関数を導入する。

$$g_C = g(\mathbf{h}^C, \xi_x, \xi_y, \xi_z). \quad (12)$$

ここに \mathbf{h}^C は

$$\tilde{\mathbf{h}}^C = \int \psi g_D(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z) d\xi_x d\xi_y d\xi_z, \quad (13)$$

によって定義される保存量 $\tilde{\mathbf{h}}^C$ に対するプリミティブ変数 \mathbf{h} である。これら二つの平衡分布関数から次式で定義される f を構成する。

$$f = \alpha g_D + (1 - \alpha) g_C - t \left(\frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{h}}} \right)_C [(\Delta \Phi)_D + (\Delta \Psi)_D], \quad (14)$$

$$\begin{pmatrix} (\Delta \Phi)_D \\ (\Delta \Psi)_D \end{pmatrix} = \int \psi \begin{pmatrix} \xi_x \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)_D \\ \xi_y \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)_D \end{pmatrix} d\xi_x d\xi_y d\xi_z. \quad (15)$$

ここに $(\partial g / \partial s)_D$ ($s = x, y$)の定義は式(11)と同様である。式(14)の右辺第三項の t の係数は、 \mathbf{h} がEuler方程式(1)に従って時間変化する場合の平衡分布関数 g の時間微分に対応する。数値フラックスは、式(14)の f を g として式(8)で Φ を求め、式(2)でそれを時間積分すれば得られる。すなわち

$$\mathbf{F} = \int_0^{\Delta t} \int \xi_x \psi f d\xi_x d\xi_y d\xi_z dt. \quad (16)$$

式(14)において g_D と g_C の重みを決定するパラメータ α の値は $0 \leq \alpha \leq 1$ の範囲にある。 g_D からは大きな散逸性を伴う数値フラックスが得られ、 g_C からは低散逸の数値フラックスが得られる。従って α の値はこれらの数値フラックスの配分を与え、衝撃波近傍では前者の寄与が大きく、解が滑らかな領域では後者の寄与が大きくなるようにブレンドすればよい。筆者らは α の値を各セル境界の圧力の跳びから次の式を使って自動的に計算されるようにしている。

$$\alpha = 1 - \exp\left(-C \frac{|P^L - P^R|}{P^L + P^R}\right). \quad (17)$$

ここに C は正の定数で、実際の数値計算では $C = 10$ とした。

2.4. 多原子分子への拡張

参考までに多原子分子気体への拡張を簡単に説明しておく。分子の回転エネルギーを表す変数 E を導入し、 $g(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z)$ を $g(\mathbf{h}, \xi_x, \xi_y, \xi_z)H(E, T)$ と形式的に置き換える。ここに関数 $H(E, T)$ は

$$\int_0^\infty \left(\frac{1}{E}\right) H(E, T) dE = \left(\frac{1}{\gamma-1} - \frac{3}{2}\right) T, \quad (18)$$

を満たす仮想的な関数で、その具体的な関数形は結果に影響しない。さらに式(9)を

$$\boldsymbol{\psi} = (1, \xi_x, \xi_y, (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)/2 + E)^T, \quad (19)$$

に置き換え、式(7), (8), (13), (15), (16)において E に関する $(0, \infty)$ の範囲の積分を追加すればよい。

2.5. 数値フラックスの公式

KLWの数値フラックス F は次式で与えられる。

$$F = \Delta t(\alpha F^D + (1 - \alpha)F^C) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \boldsymbol{\Phi}_t. \quad (20)$$

F^D は g_D に対する数値フラックスで次式で与えられる。

$$F^D = \frac{\boldsymbol{\Phi}^L + \boldsymbol{\Phi}^R}{2} + \frac{a^L \boldsymbol{\Phi}^L - a^R \boldsymbol{\Phi}^R}{2} + b^L \hat{\mathbf{h}}^L - b^R \hat{\mathbf{h}}^R. \quad (21)$$

ここに $\boldsymbol{\Phi}^H, a^H, b^H$ および $\hat{\mathbf{h}}^H (H = L, R)$ は次式で定義される。

$$\boldsymbol{\Phi}^H = \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{h}^H) \quad (H = L, R), \quad (22)$$

$$a^H = a\left(\frac{u^H}{\sqrt{2T^H}}\right), \quad b^H \quad (23)$$

$$= \sqrt{T^H} b\left(\frac{u^H}{\sqrt{2T^H}}\right) \quad (H = L, R),$$

$$a(x) = \text{erf}(x), \quad b(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2), \quad (24)$$

$$\hat{\mathbf{h}}^H = \tilde{\mathbf{h}}^H + (0, 0, 0, P^H/2)^T \quad (H = L, R). \quad (25)$$

F^C は g_C に対する数値フラックスで、

$$F^C = \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{h}^C), \quad (26)$$

で定義される。ここにプリミティブ変数 \mathbf{h}^C は以下の式から決まる保存量 $\tilde{\mathbf{h}}^C$ から計算される。

$$\tilde{\mathbf{h}}^C = \frac{1 + a^L}{2} \tilde{\mathbf{h}}^L + \frac{1 - a^R}{2} \tilde{\mathbf{h}}^R + b^L \mathbf{d}^L - b^R \mathbf{d}^R, \quad (27)$$

$$\mathbf{d}^H = (0, \rho^H, 0, \rho^H u^H/2)^T \quad (H = L, R). \quad (28)$$

時間微分項 $\boldsymbol{\Phi}_t (= \partial \boldsymbol{\Phi} / \partial t)$ は次式で定義される。

$$\boldsymbol{\Phi}_t = -\mathbf{L}(\mathbf{h}^C)(\Delta \boldsymbol{\Phi} + \Delta \boldsymbol{\Psi}). \quad (29)$$

ここに

$$\Delta \boldsymbol{\Phi} = \frac{1 + a^L}{2} \mathbf{M}^L \mathbf{h}_x^L + \frac{1 - a^R}{2} \mathbf{M}^R \mathbf{h}_x^R \\ + b^L \mathbf{W}^L \mathbf{h}_x^L - b^R \mathbf{W}^R \mathbf{h}_x^R, \quad (30)$$

$$\Delta \boldsymbol{\Psi} = \frac{1 + a^L}{2} \mathbf{N}^L \mathbf{h}_y^L + \frac{1 - a^R}{2} \mathbf{N}^R \mathbf{h}_y^R \\ + b^L \mathbf{Z}^L \mathbf{h}_y^L - b^R \mathbf{Z}^R \mathbf{h}_y^R, \quad (31)$$

であり、 $\mathbf{h}_x, \mathbf{h}_y$ はそれぞれ $\partial \mathbf{h} / \partial x, \partial \mathbf{h} / \partial y$ を略記したもので、 $\Delta \boldsymbol{\Phi}, \Delta \boldsymbol{\Psi}$ はそれぞれ $\partial \boldsymbol{\Phi} / \partial x, \partial \boldsymbol{\Psi} / \partial y$ に相当し、 $\mathbf{M}^H, \mathbf{N}^H, \mathbf{W}^H, \mathbf{Z}^H$ はそれぞれ $\mathbf{M}(\mathbf{h}^H), \mathbf{N}(\mathbf{h}^H), \mathbf{W}(\mathbf{h}^H)$ および $\mathbf{Z}(\mathbf{h}^H) (H = L, R)$ を意味し、 $\mathbf{L}(\mathbf{h}), \mathbf{M}(\mathbf{h}), \mathbf{N}(\mathbf{h}), \mathbf{W}(\mathbf{h}), \mathbf{Z}(\mathbf{h})$ は次式で定義される行列である。

$$L(\mathbf{h}) = \frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{\mathbf{h}}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{(\gamma-3)u^2 + (\gamma-1)v^2}{2} & (3-\gamma)u & (1-\gamma)v & \gamma-1 \\ -uv & v & u & 0 \\ u\left(\frac{\gamma-2}{2}(u^2+v^2) - \frac{\gamma}{\gamma-1}P\right) & \frac{(3-2\gamma)u^2 + v^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma-1}P & (1-\gamma)uv & \gamma u \end{bmatrix} \quad (32)$$

$$M(\mathbf{h}) = \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{h}} = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ u^2 & 2\rho u & 0 & 1 \\ uv & \rho v & \rho u & 0 \\ u\frac{u^2+v^2}{2} & \rho\frac{3u^2+v^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma-1}P & \rho uv & \frac{\gamma}{\gamma-1}u \end{bmatrix}, \quad (33)$$

$$N(\mathbf{h}) = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} = \begin{bmatrix} v & 0 & \rho & 0 \\ uv & \rho v & \rho u & 0 \\ v^2 & 0 & 2\rho v & 1 \\ v\frac{u^2+v^2}{2} & \rho uv & \rho\frac{u^2+3v^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma-1}P & \frac{\gamma}{\gamma-1}v \end{bmatrix}, \quad (34)$$

$$W(\mathbf{h}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{\rho}{2P} \\ u & 2\rho & 0 & 0 \\ \frac{v}{2} & 0 & \rho & \frac{\rho v}{2P} \\ \frac{1}{4}\left(2u^2+v^2 - \frac{\gamma+1P}{\gamma-1}\right) & \frac{3}{2}\rho u & \rho v & \frac{1}{4}\left(\frac{\rho}{P}v^2 + \frac{3(\gamma+1)}{\gamma-1}\right) \end{bmatrix}, \quad (35)$$

$$Z(\mathbf{h}) = \begin{bmatrix} \frac{\rho uv}{2P} & \frac{\rho^2 v}{P} & 0 & -\frac{\rho^2 uv}{2P^2} \\ \frac{v}{2} & 0 & \rho & \frac{\rho v}{2P} \\ \frac{u}{2}\left(\frac{\rho}{P}v^2+1\right) & \rho\left(\frac{\rho}{P}v^2+1\right) & 0 & -\frac{\rho u}{2P}\left(\frac{\rho}{P}v^2+1\right) \\ \frac{uv}{4}\left(\frac{\rho}{P}v^2 + \frac{3\gamma-1}{\gamma-1}\right) & \frac{\rho v}{2}\left(\frac{\rho}{P}v^2 + \frac{3\gamma-1}{\gamma-1}\right) & \frac{\rho u}{2} & -\frac{\rho uv}{4P}\left(\frac{\rho}{P}v^2 + \frac{\gamma+1}{\gamma-1}\right) \end{bmatrix}. \quad (36)$$

なお文献 5 における K LW の数値フラックスの公式にはタイプがあるのでここで指摘しておく．式(33)の \mathbf{h}^L および \mathbf{h}^R はそれぞれ $\tilde{\mathbf{h}}^L$ および $\tilde{\mathbf{h}}^R$ が正しく，式(34)の \mathbf{h}^L および \mathbf{h}^R はそれぞれ $\tilde{\mathbf{h}}^L$ および $\tilde{\mathbf{h}}^R$ が正しい．式(A.4)の $1+\mathbf{a}^R$ は $1-\mathbf{a}^R$ が正しい．これらの修正は上の公式で反映されている．

3. K LW の骨組みおよび簡単化

K LW の堅牢性はおもに式(21)で定義される \mathbf{F}^D の散逸性から生じる． \mathbf{F}^D の定義式と数値フラックスの標準的な形

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2}(\Phi^L + \Phi^R) + \frac{A}{2}(\Phi^L - \Phi^R) + \frac{B}{2}(\tilde{\mathbf{h}}^L - \tilde{\mathbf{h}}^R), \quad (37)$$

とを比較してみよう．標準形では数値フラックスの近似がパラメータ A の値($-1 \leq A \leq 1$)によって中心から風上に変わる．さらにパラメータ B の値によって数値粘性の大きさがコントロールされる．H L L E や Rusanov スキームの数値フラックスの公式はこのカテゴリーに属する．一方， \mathbf{F}^D では $\tilde{\mathbf{h}}$ は

$\tilde{\mathbf{h}}$ になっており，さらにコントロールパラメータの数は標準形の場合の二つではなく，四つある．これら四つのパラメータ $\mathbf{a}^H, \mathbf{b}^H (H = L, R)$ は符号付きの局所 Mach 数の関数であり，局所 Mach 数が 0 のとき数値フラックスは中心近似となり，付加される数値粘性の大きさをコントロールする関数 $b(x)$ は最大値をとる[式(23), (24)]．局所 Mach 数の大きさが無限大になれば，数値フラックスは風上近似によって計算され，このとき $b(x)$ の値は 0 になり，数値粘性は風上近似が陰的に持つものだけになる．

\mathbf{F}^D において引数を単純平均することで $\mathbf{a}^L = \mathbf{a}^R$ あるいは $\mathbf{b}^L = \mathbf{b}^R$ としてもスキームの堅牢性は顕著に変わらないが，衝撃波はオーバーシュートを伴うようになる．また $\tilde{\mathbf{h}} = \tilde{\mathbf{h}}$ としてもスキームの性能は低下しない．しかし \mathbf{F}^C において $\mathbf{a}^L = \mathbf{a}^R$ あるいは $\mathbf{b}^L = \mathbf{b}^R$ と変更すると非物理的な振動が発生する． \mathbf{F}^C は \mathbf{h}^C を引数とするフラックス関数 Φ の値として定義され， \mathbf{h}^C は $\tilde{\mathbf{h}}^C$ から計算されるが， $\tilde{\mathbf{h}}^C$ は $\tilde{\mathbf{h}}^L$ と $\tilde{\mathbf{h}}^R$ を用いた中心近似から風上近似へと局所 Mach 数に応じて変化する非線形平均[式(27)第一，

第二項]に散逸項[式(27)第三, 第四項]を付加したものである. この散逸項は衝撃波近辺で F^D と F^C の配合を決定するパラメータ α の値が変わって数値フラックスが散逸的な F^D から低散逸な F^C へと急変する際にクッションのような役割を果たすと考えられる. d^H の第四成分はなくてもよいが, セル境界に垂直な方向の運動量成分(第二成分)がないと非物理的な振動を伴ってしまう. 接触不連続面や境界層近傍では F^C が支配的になるが, そこではこの散逸項が働かないように修正することも可能である. つまり d^H および \tilde{h}^C の定義における b^H をそれぞれ次式で定義されるベクトル \bar{d}^H および b_*^H に変更すればよい(F^D における b^H は変更しない).

$$\bar{d}^H = \kappa(0, P^H/T_*, 0, 0)^T, \quad (38)$$

$$b_*^H = \sqrt{T_*}b(u^H/\sqrt{2T_*}). \quad (39)$$

ここに T_* はセル境界の左右両側で共通の温度であり, セル境界における T の左右の両極限値の平均

$$T_* = \frac{T^L + T^R}{2}, \quad (40)$$

をここでは採用した. κ は散逸項の大きさを調整する正の定数で, ここでは $\kappa = 0.9$ とした. この変更によってセル境界で流速の垂直成分と圧力の跳びがない場合(接触不連続面近傍), 修正された散逸項 $b_*^L \bar{d}^L - b_*^R \bar{d}^R$ は消滅する. 時間微分項 ϕ_t においては, 式(32), (33)で定義される行列 W と Z を含む項を省略できる(省略しなければ κ の値は元の値である1でよいが, 省略する場合は $\kappa = 0.9$ のほうがより良好な結果が得られる). パラメータ $a^H, b^H (H = L, R)$ を制御する関数 $a(x)$ および $b(x)$ は式(24)の関数に制限されない. $a(x)$ は $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} a(x) = \pm 1$ を満たす滑らかな単調増加関数の中から適切に選ばばよく(例えば双曲線正接関数), $b(x)$ は二重指数関数を模擬する適当な関数(例えば有理関数)でも十分である. 式(24)の $a(x)$ および $b(x)$ の関数形はMaxwell分布から導かれるものであるが, それ以外の関数形でもよいことは正統な気体論が気体論スキームにおいて本質的でないことを示唆する. 以下では $\hat{h} \rightarrow \tilde{h}$, $d^H \rightarrow \bar{d}^H$, \tilde{h}^C の定義において $b^H \rightarrow b_*^H$, さらに $W \rightarrow \mathbf{0}$ と $Z \rightarrow \mathbf{0}$ の修正を施したKLWをSKLWと呼ぶことにしよう.

4. SKLWの性能検証

ここではSKLWの性能の検証を行う. 数値計算は文献5で提案された衝撃波の近傍でEFMの堅牢性を引き出す簡単な対策を施して行う. この対策では, 各セル境界で定義されたパラメータ α の値がその周辺のセル境界の α の値の最大値で置き換えられ, 置き換わった α の値に応じてそれが大きいほど先に計算した勾配 h_x, h_y がその絶対値が小さくなるように制限される. この対策によって衝撃波近傍で F^D の配合が増し, さらに空間近似は一次精度に近づき, スキームは堅牢性が極めて高い一次精度のEFMに近づく. 数値計算には再構成法として最も簡単な方法の一つであるMUSCLを用いた. 比較のためにHLLやRusanovスキームの計算も行うが, 公平を期すために同じ対策で勾配 h_x, h_y の制限を行った. KLWおよびSKLWは時間に関して二次精度であるので, HLLとRusanovスキームの時間積分は二段階で行った. なお数値計算結果は二原子分子理想気体($\gamma = 1.4$)に対するものである.

4.1. 単純化されたodd-even decoupling

一定速度で進行する垂直衝撃波をグリッド線が流れ方向と衝撃波波面に平行な等間隔直交格子で数値計算しても二次元性は現れないが, それ以外の場合ではその限りではない. Odd-even decouplingは計算スキームの衝撃波異常現象に対する堅牢性の評価のために文献6でQuirkによって提案された試験問題で, 上の等間隔直交格子の流れ方向に平行なグリッド線の一本を僅かに歪ませた格子系が用いられる. この問題では厳密解が衝撃波近傍以外では一様であるため, 衝撃波近傍での数値解の異常な挙動をその周辺の散逸性によって抑え込む効果が小さいと考えられる. このテストの本質を残しつつ単純化したものがDumbserらによって提案されており(文献7), ここではこれを試験問題として用いる. 単純化されたテストでは進行する衝撃波の代わりに静止垂直衝撃波を考え, グリッド線を歪ませる代わりに初期条件として与える厳密解に約 10^{-6} 倍程度のランダムな擾乱を与える. 衝撃波上流のMach数を6とし, 衝撃波を x 軸に垂直に配置する場合のセルのアスペクト比 $\Delta y/\Delta x$ を0.5, 1, 2の三つの値に対する三通り, セルのアスペクト比を $\Delta y/\Delta x = 1$ に固定して y 軸と波面がなす角 θ が $\tan \theta = 3/5, 1$ となるように衝撃波を配置する2通りの, 計5ケースの計算を行った. なお衝撃

波を斜めに配置する場合は初期において擾乱を与える必要はない。時間ステップ Δt は $0.07\Delta x$ とした。ここではポストショック振動だけに着目し、それに関する結果のみを示す。振動の大きさの指標として次の式で定義される Res を用いる。

$$Res(n) = \frac{1}{S(\Omega)\rho_{up}} \quad (41)$$

$$\times \int_{\Omega} |\rho(x, y, (n+1)\Delta t) - \rho(x, y, n\Delta t)| dx dy.$$

ここに $S(\Omega)$ は計算領域 Ω の面積、 ρ_{up} は衝撃波上流の密度である。いずれのケースにおいても 20000 ステップ程度で Res はある値の近傍を振動するようになった。その値を表 1 に示す。SKLW の結果は KLW の結果とほとんど変わらない。表 1 では参考までに HLLE および Rusanov スキームの結果も併せて示してある。HLLE は衝撃波が傾いている場合には SKLW よりよい結果を示すものの、衝撃波面がグリッド線と平行の場合には SKLW よりもはるかに大きなポストショック振動を発生させる。後述するように Rusanov スキームで捕獲された衝撃波の厚みは SKLW の場合の二倍程度であり、SKLW よりも散逸性が大きく高い堅牢性を有すると予想されるが、ポストショック振動に関しては SKLW よりもはるかに脆弱である。

Table 1. Res at 20000 steps.

| | $\Delta y/\Delta x=2$ | $\Delta y/\Delta x=1$ | $\Delta y/\Delta x=0.5$ | $\tan\theta=3/5$ | $\tan\theta=1$ |
|----------------|-----------------------|-----------------------|-------------------------|------------------|----------------|
| original-KLW | 1.E-16 | 1.E-16 | 3.E-16 | 1.E-07 | 4.E-07 |
| simplified-KLW | 9.E-17 | 1.E-16 | 3.E-16 | 1.E-07 | 2.E-07 |
| Rusanov | 3.E-04 | 3.E-04 | 3.E-04 | 2.E-04 | 1.E-04 |
| HLLE | 1.E-03 | 3.E-03 | 4.E-03 | 4.E-09 | 5.E-09 |

4. 2. 円筒を過ぎる極超音速流

円筒を過ぎる極超音速流の問題は、カーバンクル現象が発生する典型的な問題として多くの文献で取り上げられている。ここでは上流の Mach 数を 6 とし、曲線座標を使って作った構造格子を用いて数値計算を行った。格子系は円筒の前方に形成される弓状衝撃波になるべくグリッド線が沿うように調整した格子系 (Mesh-A) と、この格子系に比べ衝撃波が多くのグリッド線をまたぐ格子系 (Mesh-B) の二つの格子系を用い、それぞれに対して半径方向の分割数 n_{ξ} と周方向の分割数 n_{η} を変えて計算を行った。KLW の結果(実線)と SKLW の

結果(破線)を図 1 ~ 3 に示す。両者の結果はいずれの格子系でもほとんど同じであり(等高線の違いは図では識別できない)、カーバンクル現象やポストショック振動も完全に抑制されている。参考までに HLLE と Rusanov スキームの結果(衝撃波近傍で勾配を制限する対策を施したもの)をそれぞれ図 4 および図 5 に示す。HLLE ではカーバンクル現象は完全には抑制されておらず、さらに衝撃波後方から下流にかけて不自然な皺が発生している。Rusanov スキームではカーバンクルや皺の発生は見られないが(対策がなければカーバンクルは発生する)、図 6 に示すように衝撃波の厚みは SKLW の場合の二倍程度である。

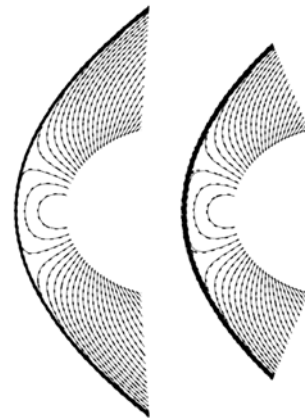


Fig. 1: Isopycnic lines. Solid lines: original KLW, dashed lines: SKLW. Left: Mesh-A, right: Mesh-B. $(n_{\xi}, n_{\eta}) = (120, 480)$.

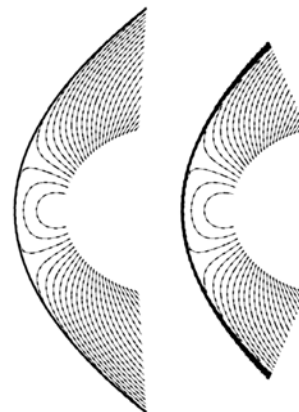
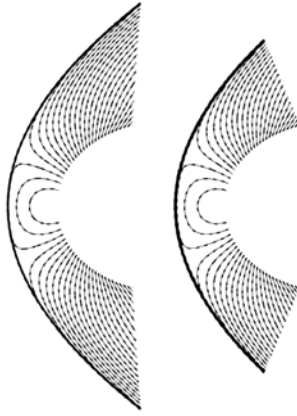
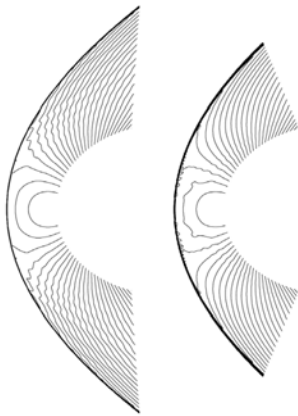
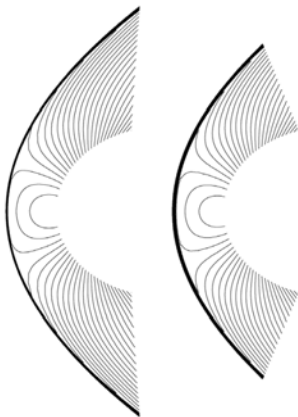
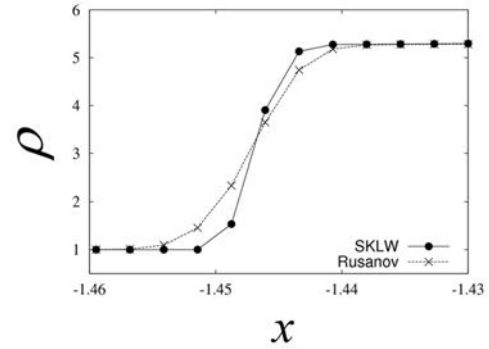


Fig. 2: $(n_{\xi}, n_{\eta}) = (240, 160)$.

Fig. 3: $(n_{\xi}, n_{\eta}) = (240, 480)$.Fig. 4: HLLE. $(n_{\xi}, n_{\eta}) = (240, 480)$.Fig. 5: Rusanov. $(n_{\xi}, n_{\eta}) = (240, 480)$.Fig. 6. Density distribution on the axis of symmetry. $(n_{\xi}, n_{\eta}) = (240, 480)$.

4.3. 接触不連続面

図7に密度比10の静止接触不連続面の計算結果(等間隔格子, $\Delta t = 0.1\Delta x$)を示す. KLV では接触不連続面は厚みを持つのに対し, SKLV は HLLCと同様に静止接触不連続面を内分点なしにシャープに捉えることができる. これは接触不連続面近傍で F^c の散逸項が消滅して数値フラックスが接触不連続面の前後で完全に釣り合うからである(HLLC のようにもう一つの波を考慮して Riemann問題の近似を精密化するような高級なことをしたからではない). また HLLC および Rusanov スキームが捉えた接触不連続面は KLV の場合よりも鈍い. 図8にこの接触不連続面が速度0.1で進行する場合の結果を示す. KLV および SKLV いずれの場合も捉えられた接触不連続面は厚みを持つ. しかしその厚みは HLLC および Rusanov スキームの場合よりもはるかに小さい. なお HLLC は静止接触不連続面をシャープに捉えることができるが, 移動接触不連続面の結果は SKLV の結果とほとんど変わらない(図なし).

5. まとめ

SKLV は衝撃波異常現象に対する堅牢性や接触不連続面における低散逸性において HLL スキームや Rusanov スキームと同等以上の性能を示す. SKLV は KLV と同様に粘性計算の場合にも容易に拡張でき, 本記事では示さなかったが, 例えば円筒を過ぎる極超音速粘性流の問題では境界層を少ない格子点で正確に捉え, 円筒表面のエネルギー伝達を正しく求めることができる. このスキームの数値フラックスは散逸性の高いフラックスと低散逸なフラックスを組み合わせたもので, それぞれのフラックスは局所マッハ数によって中心近

似から風上近似へと変化する非線形平均である。同スキームの高い性能は非線形平均と散逸項をコントロールするパラメータの数が標準形と異なることと FC に付加された散逸項にあると考えられる。気体論はそのひな型を提供したに過ぎず、本質的な役割を果たしていない。SKLWの数値フラックスの式の各項がどのようなメカニズムで堅牢化に寄与するかは興味深い。例えば局所マッハ数が衝撃波の上流と下流でどちらも極超音速であるといった極端な場合にはSKLWはただの風上近似のスキームと変わらない。従ってその特徴は衝撃波の上流が超音速で下流が亜音速である場合に顕著になるはずである。この検討は今後の課題としたい。なお衝撃波異常現象の理論的研究として例えば文献7のスペクトル解析が挙げられる。それによればHLLCスキームでは衝撃波異常現象は抑制されるはずであるが、実際の数値計算は予想に反する結果を与える。線形安定性の枠組みでは解答が得られない可能性が示唆される。

衝撃波捕獲スキームの研究は von Neumann と Richtmyer が行った人工粘性の研究から出発し、Riemann 問題や気体論等を使った様々なスキームへと展開した。しかしこれら一見先進的に見えるスキーム開発のバックヤードで行われていたのは、実は古人が行ったのと変わりなく、有用な散逸項(およびその制御法)の経験論的な探索であろう。Godunov が半世紀以上前に思いついた Riemann 問題の解の導入や2節で説明した気体論による導出は有用な散逸性を見つける為の手段に過ぎない。従ってそれが見つかればその手段は用済みである。気体論に拘らず数値フラックスの標準形から出発して導出すれば、SKLW は学部学生の教材にもなりえるであろう。これは近似 Riemann 解法の場合と対照的である。

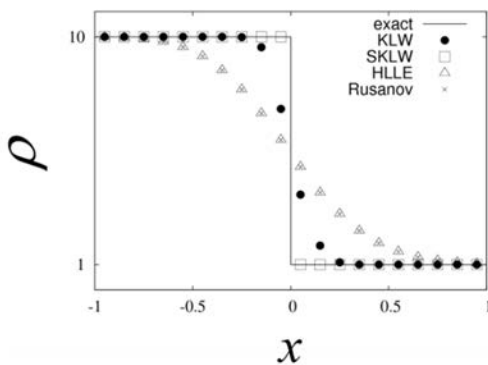


Fig. 7: Stationary contact discontinuity.

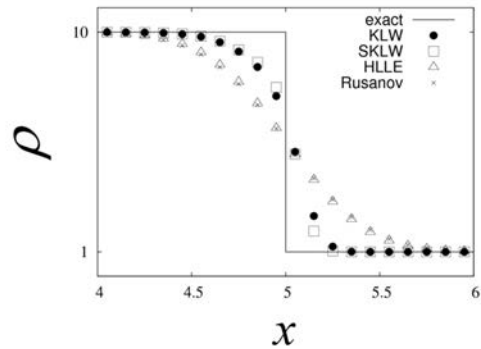


Fig. 8: Moving contact discontinuity.

引用文献

- (1) D.I. Pullin, Direct simulation methods for compressible inviscid ideal-gas flow, *J. Comput. Phys.* 34 (1980) 231-244.
- (2) K. Xu, A gas-kinetic BGK scheme for the Navier-Stokes equations and its connection with artificial dissipation and Godunov method, *J. Comput. Phys.* 171 (2001) 289-335.
- (3) T. Ohwada and S. Kobayashi, Management of discontinuous reconstruction in kinetic schemes, *J. Comput. Phys.* 197 (2004) 116-138.
- (4) T. Ohwada, S. Fukata, Simple derivation of high-resolution schemes for compressible flows by kinetic approach, *J. Comput. Phys.* 211 (2006) 424-447.
- (5) T. Ohwada, R. Adachi, K Xu, J Luo, On the remedy against shock anomalies in kinetic schemes, *J. Comput. Phys.* 255 (2013) 106-129.
- (6) J.J. Quirk, A contribution to the great Riemann solver debate, *Int. J. Numer. Methods Fluids* 18 (1994) 555-574.
- (7) M. Dumbser, J.-M. Moschetta, J. Gressier, A matrix stability analysis of the carbuncle phenomenon, *J. Comput. Phys.* 197 (2004) 647-670.