数値流体解析における境界条件の統一的な取扱いについて

A Unified Treatment of Boundary Conditions in Numerical Analysis of Fluids

北海道大学工学部 水田 洋 Yo MIZUTA

In computational fluid dynamics, various boundary conditions are used, and some of them have required special treatments. Free surfaces, density interfaces, and open boundaries encountered in hydraulic numerical analysis are those examples. On the basis of a deformable-cell method, in which cells dividing the incompressible fluid can deform according to the moving boundaries, most boundary conditions are considered on a "generalized boundary equation," and they can be treated in a unified manner. The density stratified shear flow at a river mouth is simulated numerically by this method, and each boundary is shown to behave as expected.

Keywords: numerical analysis, free surface, density interface, open boundary, stratified flow

1. はじめに

水理学, 海岸工学などの分野における数値解析では, 様々な種類の境界条件を扱うことが多い. たとえば河口密度流の問題で, 自由表面と密度界面の形が河川流量や河口潮位の時間変化の影響を受けてどのように変わるのかを調べる場合には, 次のような境界条件に出会う.

(NV)河床, 流入など境界上の法線流速が既知, (NP)自由表面, 流出など境界上の圧力が既知, (NI)密度界面など境界上の法線流速と圧力が共に未知だが連続, (NZ)塩水先端のように長さのない境界, (SV)滑りのない壁面のように接線流速が既知, (SS)滑りのある壁面や風応力がある場合のように接線応力が既知, (SI)密度界面などで連続な接線流速を内挿. さらに数値解析領域を関心の領域に限ると, (NO)(SO)開いた境界, も必要になる. ここで()内は, 境界条件の種類を示すために本研究で用いている記号である.

従来, このうちの自由表面・密度界面などは, MAC法などで行われているように, 他の境界とは異なる方法によって扱われてきた. それは主に, これらの境界は時間と共に形を変えるのに, 流体を分けている格子が規則的で変形しないからである. しかし, 流体を変形可能なセルに分け, 数値解析式を積分型の保存則から導く「変形可能セル法」を用いると, 自由表面・密度界面・開いた境界なども含めて各種の境界条件が統一的に扱われるようになる [1-4]. 本論文では, まず変形可能セル法の概要をまとめ, 次いで境界条件を統一的に扱うために基本となる考え方を述べる. 特に, 現在議論の多い「開いた境界」が, この考え方でどのように扱われるかを紹介する. 最後に, 河口密度流に関する数値解析の実行結果を報告する.

2. 変形可能セル法の概要

変形可能セル法の主要な部分を整理してまとめると, 次のようになる [1-4]. 流体を図1のような任意形状の変形可能セル (小胞) に分ける. 流体の厚みはセル毎に変わっていてもよい. セルの形は一般四角形としておくのが便利である. ここでセルには, そのセルが受け持つ流体の体積 V , 質量 M , 運動量 Mv とそれらから求めた流体の密度 $\rho_0 = M/V$, 速度 $v_0 = Mv/M$ などを割り当て, 添え字 $c=A, B, \dots$ をつける. 一方頂点 (格子点) には, ρ_0, v_0 の内挿から求めた ρ_v, v_v , 頂点の移動速度 u_v , 圧力 p_v などを置き, $v=1, 2, \dots$ で識別する.

数値解析式は, 体積, 質量, 運動量に対する積分型の保存則から導く. セルにおける質量, 運動量保存則は, 時間ステップ n における量から時間 Δt だけ後のステップ $n+1$ における量を求めるために用いる.

$$M^{n+1} = M^n + \left[\oint dS \cdot (u-v) \rho \right]^n \Delta t + (\text{拡散項})^n \Delta t, \quad (1)$$

$$(Mv)^{(n)} = (Mv)^n + \left[\oint dS \cdot (u-v) \rho v \right]^n \Delta t + [(\text{粘性項}) + (\text{重力項})]^n \Delta t, \quad (2)$$

$$(Mv)^{n+1} = (Mv)^{(n)} - \left(\oint dSp \right)^{n+1} \Delta t. \quad (3)$$

表面積分 $\oint dS$ の範囲はセルの全表面にわたり、紙面に垂直な側面と、紙面に平行に近い上面・下面とに分かれる。側面の積分は、流体の厚さ、側面内の微小変位ベクトルの紙面内成分、紙面に垂直な単位ベクトルを b, dr, z とすれば線積分 $\oint bdr \times z$ で置き換えられる。一方上面・下面の積分は、表面上で $u=v=0$ となる対流束項や後述の体積保存則では 0 となる。

式(3)の両辺に $(b/M)^{n+1}$ をかけて、次のような積分流速 q^{n+1} を定義する。

$$q_{A,B,C,D}^{n+1} = q_{A,B,C,D}^{(n)} - f_{A,B,C,D}^{n+1} \Delta t, \quad (4)$$

$$q^{n+1} \equiv \left[\frac{b}{M} (Mv) \right]^{n+1}, \quad q^{(n)} \equiv \left(\frac{b}{M} \right)^{n+1} (Mv)^{(n)}, \quad f_C \equiv \left(\frac{b}{M} \oint dSp \right)_C = \left(\frac{b^2}{2M} \right)_C \left[\begin{matrix} p_5 r_{24} + p_2 r_{15} \\ + p_4 r_{51} + p_1 r_{42} \end{matrix} \right] \times z.$$

ここで、圧力項 f の表面積分のうち、側面積分を先に述べたように線積分で置き換える。また上面・下面の積分は、 b が各頂点で等しければ、値が 0 となる。このとき、 f は上の式のように単純になる。ただし、点 24 間の変位ベクトルを r_{24} のように表している。 b の大きさが頂点毎に異なるなら、上面・下面の積分も値を持つので f の形はもっと複雑になるが、セル周囲の 4 頂点上の圧力 (f_C では $p_{1,2,4,5}$) の線型結合で表されることに変わりはない。

ところで非圧縮性流体では、以下の式(5)の第 1 辺、第 2 辺で表される体積保存則が成り立っている。これをセルにおいてではなく、図 1 に破線で示すような、頂点を囲む体積保存則適用領域で考える。第 2 辺の側面上の積分を線積分になおし、式(4)で定義した積分流速を使うと、これは第 4 辺のように $q_{A,B,C,D}$ の線型結合で表される。式(6)は、式(5)第 4 辺の各々の q^{n+1} に式(4)を代入したものである。特に第 2 項を各々の f に 4 つずつ含まれている p について整理すれば、 p_{1-9} の線型結合になる。

$$0 = \left(\oint dS \cdot v \right)^{n+1} = \left(\oint q \times dr \right)^{n+1} \cdot z = \Delta V(\{q^{n+1}\}) \quad (5)$$

$$= \Delta V(\{q^{(n)}\}) - \Delta V(\{f^{n+1}\}) \Delta t, \quad (6)$$

$$\Delta V(\{q\}) \equiv \frac{1}{2} \left[\begin{matrix} q_A \times r_{DB} + q_D \times r_{CA} \\ + q_B \times r_{AC} + q_C \times r_{BD} \end{matrix} \right] \cdot z, \quad \Delta V(\{f\}) \equiv \frac{1}{2} \left[\begin{matrix} f_A \times r_{DB} + f_D \times r_{CA} \\ + f_B \times r_{AC} + f_C \times r_{BD} \end{matrix} \right] \cdot z = \frac{1}{2} \left[\begin{matrix} A_9 p_9 + A_6 p_6 + A_3 p_3 \\ + A_8 p_8 + A_5 p_5 + A_2 p_2 \\ + A_7 p_7 + A_4 p_4 + A_1 p_1 \end{matrix} \right].$$

式(4)の $q^{(n)}$ は体積保存則を満たさないで、これに圧力項 f^{n+1} を加えて、 q^{n+1} が体積保存則を満たすようにしたい。 f^{n+1} の計算に必要な各頂点上の圧力 p はこの段階ではまだ未知である。式(6)は p を求めるための「圧力方程式」であり、右辺第 1 項は既知、第 2 項は 9 つの未知量を含む。数値解析領域内の頂点を囲む全ての体積保存則適用領域から導いた圧力方程式を連立させて解き p を求めるが、このとき未知量と方程式の数は常に一致している。

3. 一般化された境界方程式と各境界条件の扱い方

ここでは、図 2 のような境界近傍の領域で、表 1, 2 のような各種の境界条件を考える。図 2 では、矢印右側の太線領域に着目するが、密度界面も境界の一つに扱うので、この場合は、矢印左側の領域を補って考える。表 1, 2 に掲げた境界条件には、2 文字の英字による記号を次のようにつけてある。最初の英字 N, S は、各境界に 1 つずつ互いに独立に与えられる法線および接線境界条件を表す。次の英字は主に、流速

図1. 領域内の体積保存則適用領域 (破線)

(Velocity) と圧力 (Pressure) または応力 (Stress) のいずれを既知とするかを示したものであるが、界面 (Interface) , 長さ 0 (Zero) , 開いた境界 (Open) も含まれている。この表には、それぞれの境界条件の既知量と未知量も示してある。

境界上の流速 $q_{A,B}$ が未知な場合は、図 2 で内側の流速 $q_{D,C}$ あるいは $q_{E,F}$ が定まった後に、これから境界上の流速を求めなければならない。このとき、境界でもやはり体積保存則を成立させるには、圧力方程式から p を求める際に、既に境界条件が考慮されていなければならない。ここでは、このために必要な「一般化された境界方程式」を導く。

図 2. 境界上の体積保存則適用領域 (破線)

表 1. 法線境界条件

境界条件	流速 q_n°, q_n	圧力 p
NV	○	×
NP	×	○
NI	×	×
NZ	×	×
NO	○×	×

○:既知, ×:未知

表 2. 接線境界条件

境界条件	流速 q_s	応力 σ_s
SV	○	×
SS	×	○
SI	×	×
SO	×	×

○:既知, ×:未知

表 3. 各種境界条件の境界条件関数と圧力項係数

境界条件	境界条件関数 $C_{n,s}(Q_D, Q_E)$	圧力項係数 $(K_{n,s})_A$	圧力項係数 $(K'_{n,s})_A$
SV	q_s	0	0
SS	$\left(\frac{b\sigma_s \Delta n}{\mu}\right)_A + \frac{b_A}{b_D} s_A \cdot Q_D$	$\frac{b_A}{b_D} s_A$	0
SI	$s_A \cdot \frac{r_{AE} Q_D + r_{DA} Q_E}{r_{DE}}$	$\frac{r_{AE}}{r_{DE}} s_A$	$\frac{r_{DA}}{r_{DE}} s_A$
NO	$(q_{n,s})_A^n + (\pm \nabla q_{n,s})_A^n$	$(\pm \nabla q_{n,s})_A^n$	0
SO	$\times L_D^n \cdot (Q_D - q_D^n)$	$\times L_D^n$	

図 2 に破線で示すような、境界に接する体積保存則適用領域で、式(5)を考える。このとき、境界の法線および接線単位ベクトルを n, s として、境界上の積分流速を $q = (q_n^\circ + q_n)n + q_s s$ と表しておく。ここで法線流速のうち、 q_n° は既知量として与えられるか内側の流速に直接には依存せず求められる部分である。法線流速の残りの部分 q_n および接線流速 q_s は、表 1, 2 に示すとおり、既知であることも、未知で内側の流速に依存することもあるが、いずれであっても、次の式(7)の 1 行目のように、 $q_{n,s}$ を内側の流速に関する一次式から求める形に表すことができる。

$$\begin{aligned}
 (q_{n,s})_A^{n+1} &= (q_{n,s})_A^{<n>} + (K_{n,s})_A \cdot q_D^{n+1} + (K'_{n,s})_A \cdot q_E^{n+1} \equiv C_{n,s}(q_D^{n+1}, q_E^{n+1}) \\
 &= (q_{n,s})_A^{(n)} - (K_{n,s})_A \cdot f_D^{n+1} \Delta t - (K'_{n,s})_A \cdot f_E^{n+1} \Delta t, \\
 (q_{n,s})_A^{(n)} &\equiv C_{n,s}(q_D^{(n)}, q_E^{(n)}).
 \end{aligned} \tag{7}$$

ここでは q_n の形を q_s に揃えてあるが、 q_n は専ら (NO) で使われるので、実際には q_E には依存することなく、 K'_n も 0 である。表 3 に、各種の境界条件に対する境界条件関数 $C_{n,s}(Q_D, Q_E)$ および圧力項係数 $(K_{n,s})_A$ 、 $(K'_{n,s})_A$ の具体的な形をまとめてある。ところで内側の流速は、式(4)のように圧力項を含む。このため $(q_{n,s})_A^{n+1}$ も、 f_D^{n+1} または f_E^{n+1} に依存することになるが、それは式(7)の 2 行目のように表される。なおここでは、 $(q_{n,s})_A, q_D, q_E$ について述べたが、 $(q_{n,s})_B, q_C, q_F$ の間にももちろん同様の関係がある。

以上の関係をもとに、式(5)第 4 辺の ΔV を変形する。まず、境界上の流速 $q_{A,B}$ を法線および接線流速で表して、式(8)のようにまとめる。更に、これに式(7)を(4)と共に代入して、式(9)を導く。こうして得られた

のが次の「一般化された境界方程式」である。

$$0 = \Delta V(\{q^{n+1}\}) = \Delta V_B(\{q^{n+1}\}) + (q_n^0 \Delta S)_B^{n+1} \quad (8)$$

$$= \Delta V_B(\{q^{(n)}\}) + (q_n^0 \Delta S)_B^{n+1} - \Delta V_B(\{f^{n+1}\}) \Delta t, \quad (9)$$

$$\Delta V_B(\{q\}) \equiv \frac{1}{2} \left[(q_n \Delta S - q_B \Delta n)_A + (q_D \times r_{CA}) \cdot z \right] + (q_n \Delta S + q_B \Delta n)_B + (q_C \times r_{BD}) \cdot z, \quad (q_n^0 \Delta S)_B \equiv \frac{(q_n^0 \Delta S)_A + (q_n^0 \Delta S)_B}{2},$$

$$\Delta V_B(\{f\}) = \frac{1}{2} \left[(-K'_B \Delta n)_A \cdot f_B + \{(K_n \Delta S - K_B \Delta n)_A + r_{CA} \times z\} \cdot f_D \right] + \{(K'_B \Delta n)_B \cdot f_F + \{(K_n \Delta S + K_B \Delta n)_B + r_{BD} \times z\} \cdot f_C\} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} A_6 p_6 + A_5 p_5 \\ + A_5 p_5 + A_2 p_2 \\ + A_4 p_4 + A_1 p_1 \end{bmatrix},$$

$$\Delta S_A \equiv S_A \cdot r_{DB}, \quad \Delta n_A \equiv n_A \cdot r_{DB}, \quad \Delta S_B \equiv S_B \cdot r_{AC}, \quad \Delta n_B \equiv -n_B \cdot r_{AC}, \quad \Delta S_B \equiv (\Delta S_A + \Delta S_B)/2.$$

境界方程式の第3項は、(SI)以外では K'_B が0となるので、 p_{1-6} の線型結合となる。第1項は既知なので、これは第2項の $(q_n^0)_B^{n+1}$ と p_{1-6} を未知量とする方程式である。この境界方程式は、圧力方程式と連立させて解く際にどの境界でも共通に用いられるが、その扱いは、以下に述べるように境界条件毎に異なっている。

(NV) q_n^0 を既知として圧力方程式と境界方程式を解けば、 p_{4-6} が求められる。(NP)圧力方程式を解く時は p_{4-6} を既知とし、 $q_{D,C}$ と $(q_B)_{A,B}$ が決まった後に式(8)から q_n^0 を求める。(NI)対になる図2矢印左側の領域との間で p_{4-6} と q_n^0 の連続条件を仮定し、圧力と同時に法線流速も求める。(NZ)計算領域の境界上にある複数の頂点とその上の圧力は、物理領域では全て同一である。未知量と方程式の数を一致させるため、この境界上の境界方程式の総和式を改めて圧力方程式と連立させる。(SS)式(7)における仮の接線流速 $(q_B)_{A,B}^{(n)}$ で境界方程式の第1項を計算し、圧力を求めた後に、 $q_{D,C}^{n+1}$ から真の $(q_B)_{A,B}^{n+1}$ を計算し直す。(SI)界面をはさんで対になる体積保存則適用領域を考えると、2本の境界方程式は、もともと相手方の領域の圧力を含んでいる。しかし、これらから連続な q_n^0 を消去して得た1本の式を、再び、 $q_{D,C}$ だけあるいは $q_{B,F}$ だけを含む2本の式に分離して、各々の式が相手方の領域の圧力を含まないようにできる。こうすれば、未知量に関しては式(9)と構造が同じになり、圧力方程式の解法が簡単になる。 q_n^0 は $q_{D,C}$ と $(q_B)_{A,B}$ が決まった後に式(8)から求める。なお、(N0)(S0)については、次の節で述べる。

圧力方程式と境界方程式を連立させて解くに当たっては、これらがちょうど差分化されたPoisson方程式と同じ構造となっているため、各種の直接解法、反復解法を利用できるが、ここでは、直接解法の一つであるEVP法[4,5]を使っている。

4. 開いた境界について

開いた境界(N0)(S0)の扱い方を考えるため、ここでは特性曲線法から入り、他の方法と関連づけながら数値解析式を導く。法線流速、接線流速などの物理量を F 、境界付近の波速(情報伝達速度)ベクトルを c 、 F の勾配 ∇F と平行な単位ベクトルを k とすれば、時刻 $t + \Delta t$ における境界上の点 r_A での F を求めるためには、時間で Δt だけ前へ空間で $-c \Delta t$ だけ内側へ遡ればよい。このことは、下の式(10)のように表されるが、 Δt が小さいとしてTaylor展開を行うと、これは更にSommerfeldの放射条件 $\frac{\partial F}{\partial t} + c \cdot \nabla F = 0$ の差分形にあたる式(11)のようになる。すなわち、開いた境界付近で F に対して(12)のような関数形を仮定することになる。

$$F_A^{n+1} = F(r_A, t + \Delta t) = F(r_A - c \Delta t, t) \quad (10)$$

$$\approx F(r_A, t) - c \Delta t \cdot \nabla F(r_A, t) = F_A^n - c \Delta t \cdot k (\pm |\nabla F|)_A^n \quad (11)$$

$$F = F(\theta), \quad \theta = k \cdot (r - ct). \quad (12)$$

波速ベクトルの決め方が次に問題となるが、そのために、 r_A と一つ内側の点 r_D で c, k が等しいことを仮定する。この時、法線流速と接線流速とで波速が異ならないようにこれらを対称的に含む $G = q_n^2 + q_B^2$ に着目し、また c 自身の代わりに c と k の内積を求める。

$$-c \Delta t \cdot k = \frac{G_D^{n+1} - G_D^n}{(\pm |\nabla G|)_D^n} = L_D^n \cdot (q_D^{n+1} - q_D^n), \quad L \equiv \frac{1}{\pm |\nabla G|} \frac{\delta G}{\delta q} = \pm \frac{2q}{|\nabla G|}. \quad (13)$$

これを式(11)に代入し、 F を $q_{n,s}$ で置き換え、式(7)と比較すれば、表3に示した境界条件関数と圧力項係数が導かれる。こうして、開いた境界が統一的な境界条件の一つとなっていることが示された。

開いた境界を扱うもう一つの方法は、式(12)を前提として、内挿法で関数 $F(\theta)$ の形と共に波速の大きさを決めるものである。波速ベクトルと F の勾配が境界に垂直で、DA間で F は二次関数で内挿できると仮定する。このとき、 $F_A^n, F_D^n, (F^n - F^{n-1})_A, (F^n - F^{n-1})_D$ の値を4つの条件として、内挿関数の3つのパラメータの値と波速の大きさ $|c|\Delta t$ を決めることができる。この $|c|\Delta t$ を式(11)に代入して求めた $(q_{n,s}^{n+1})_A$ は、前の方法とは対照的に q_D^{n+1} を含まないので、開いた境界は、(NV)(SV)と同等に扱うことができる。

これらの方法で波速を計算する際は、 F や G の勾配が0に近くなった場合、あるいは計算された波速が内向きになったり、大きくなってCourant条件を満たさなくなる場合の適切な処理が必要になる。ここでは、前者については勾配が0から離れるまでそれ以前のステップの波速を使い、後者については0より小さかったり、DA間の距離より大きい $|c|\Delta t$ の値は限界値で置き換えるようにしている。さきに述べた2つの方法にこれらの処理を取り込むとき、先の方法より後の方法の方が q_D^{n+1} を含まない分だけ容易なため、ここでは後の方法を採用している。

ところで、長波方程式を用いる場合の開いた境界についてはいくつかの方法が知られているが[6]、それらは、ここで出発点にした特性曲線法、あるいはSommerfeldの放射条件を用いることと等価である[7]。したがって、ここに示した方法は、長波方程式で扱われる波浪や津波などの問題にとっても充分なものになっている。なお、開いた境界は、数値解析領域内部からの波や流れを外へ出すばかりでなく、外部流速、外部圧力を領域内に入れる機能も持つものである。これは、式(10)-(13)の F や G に外部からの寄与を除く部分を用いることで実現できるとみられるが、この点は現在検討中である。

5. 河口密度流の数値解析

これまで述べてきた方法を用い、図3のような領域で河口密度流の数値解析を行った。淡水は左端（上流）から右端（河口）まで存在するが、塩水は右端から領域の途中までしか侵入していないため、自由表面、密度界面、一層領域、二層領域、塩水先端部、剪断流などが混在することになる。この図には、法線および接線境界条件も記入してある。河口潮位の変化として、右端で表面と界面の高さを最初から4時間後までは上昇、その後下降させて8時間後に元に戻す場合を、 $\Delta t = 30$ 秒で計算した。図4は、このときの表面（左図）と界面（右図）の形の時間変化を示しているが、これによれば、上流境界は表面波に対して開いた境界としての性質を備えていることがわかる。また、潮位の上昇と共に遡上した塩水先端部は、潮位の下降後もその場に留まっている。ただ、この時先端付近で塩水の厚さは極めて薄く、定常的な流れがあると速やかに下流へ移動するものと思われる。図5は、左端表面の波速と水平流速、および各地点の水位と界面高の時間変化である。計算された波速は、ここでは割合落ち着いた値となっている。なお最初の変動は、静水状態を初期条件としたことによる。河口潮位が下がると塩水の体積が減少するため、体積保存則を満たすように淡水が右端からだけでなく、左端からも領域内に引き込まれる。左端の水平流速が6時間より後に負になるのは、このような理由による。

6. 結 論

河口密度流の数値解析にみられるような各種の境界条件は、変形可能セル法に基づく一般化された境界方程式を用いた定式化により、統一的に扱えることを示すことができた。これにより、プログラム作成、デバッグの労力が減り、計算精度の予測が容易になって計算時間やメモリーを必要以上に費やさずにすむ。また、一旦作成したプログラムを別の問題で再利用したり、より洗練された方法の発見へつなぐことも可能であろう。

図3. 数値解析領域と境界条件

図4. 表面(左)と界面(右)の形の時間変化

図5. 波速, 水平流速, 水位, 界面高の時間変化

参考文献

- [1] 水田 洋, "Lagrange-Euler混合法による自由表面及び密度界面の数値解析", 第29回水理講演会論文集, pp.721-726 (1985).
- [2] 水田 洋, "Lagrange-Euler混合法による河口密度流の数値解析", 第31回水理講演会論文集, pp.515-520 (1987).
- [3] Y.Mizuta, "A Deformable-Cell Method Used for Incompressible Density Stratified Flows", Proc.Int.Conf. on Computational Method in Flow Analysis held at Okayama, eds. H.Niki and M. Kawahara, Okayama Univ. of Science, pp.373-380 (1988).
- [4] Y.Mizuta, "Generalized Boundary Conditions on the Basis of a Deformable-Cell Method —Free Surfaces, Density Interfaces and Open Boundaries—", Proc.Int.Symp. on Computational Fluid Dynamics-Nagoya, pp.1001-1006 (1989).
- [5] P.J.Roache, "Computational Fluid Dynamics", Hermosa Pub. Inc., Albuquerque, New Mexico (1976) (コンピュータによる流体力学(上)(下), 高橋亮一他訳, 構造計画研究所, 東京, p.191 (1978)).
- [6] 日野幹雄, 仲座栄三, "数値波動解析における新しい無反射境界スキームの平面二次元問題への適用", 第35回海岸工学論文集, pp.262-266 (1988).
- [7] 水田 洋, "数値流体解析における開いた境界の基礎的な解析と考察", 第3回数値流体力学シンポジウム講演論文集, pp.287-290 (1989).