高分子レオロジーと成形加工 CAE の基礎 —その中身と周辺問題—

(2) 差分法と有限体積法による数値流体解析の基礎

姫 野 武 洋*

1. 数値流体解析

流体や固体などの連続体に関し、理論的予測と実験的再現が共に難しい物理現象を詳細に調べる第三の手段として、数値解析の援用が期待される。

数値解析の手順は、①物理法則や仮定に基づく微分方程式や数学モデルから成る支配方程式で現象を記述し、②対象とする系全体を有限個の要素に分割したうえで、③支配方程式を各要素の内部状態と相互関係を規律する離散的な差分方程式で近似した後、④計算機を用いて解を求める、という作業から成っている。近年、計算機性能の向上と商用コードの普及に伴い、数値解析は、これらの手順を意識せずとも解を得られる、敷居の低い技術となった感がある。しかし、手順に含まれる暗黙の仮定や近似、離散手法や誤差源に関する知識を持つことが、解法の選択、結果の解釈、手法の改良など、数値解析をより上手に使いこなすために重要であるという点は今後変わらないだろう。

このような認識に立ち、本稿では熱流動現象の数値解析に関する基礎として、まず、様々な物理現象に共通する拡散現象と移流現象について、支配方程式を差分法に基づいて離散化する手順と、その際の要点を述べる。そのうえで、熱流動現象の支配方程式である Navier-Stokes 方程式 (N-S 方程式) の数値解析手法として、様々な状態方程式に従う流体を解析対象にできる CCUP 法を例にとり、その考え方を熱力学の観点から交えつつ解説する。

2. 拡散方程式と移流方程式の解法

2.1 移流拡散方程式の解析解

時間 t と空間座標 x の関数である物理量 $Q(x, t)$ に関する 1 次元の非定常移流拡散方程式、

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + u \frac{\partial Q}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}, \quad (1)$$

を考える。左辺第 2 項は、 Q が速度 u で上流から下流へ一方的に輸送される移流現象を、右辺は Q の分布が拡散

係数 ν で等方的に平均化される拡散現象を表している。 (u, ν) が共に正の定数である場合、初期条件として、時刻 $t = t_0$ で $Q(x, t_0)$ の分布が既知ならば、 $t > t_0$ における $Q(x, t)$ の解析解は、

$$Q(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\hat{\xi}^2) \cdot Q(\hat{x}, t_0) \cdot d\hat{\xi} \quad (2)$$

$$\hat{\xi} = -\frac{(x - \hat{x}) - u(t - t_0)}{2\sqrt{\nu(t - t_0)}} \quad (3)$$

で与えられる¹⁾。簡単な例として、 $t = 0$ で、

$$Q(x, 0) = 1, \quad (x < 0) \quad (4)$$

$$Q(x, 0) = 0, \quad (x \geq 0) \quad (5)$$

なるステップ関数で初期条件を与えた場合には、

$$Q(x, t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - ut}{2\sqrt{\nu t}} \right) \right\} \quad (6)$$

$$\text{誤差関数: } \operatorname{erf}(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\xi \exp(-\hat{\xi}^2) \cdot d\hat{\xi} \quad (7)$$

となる。ここで理解のために、 (u, ν) をそれぞれ $(0, 1/1000)$, $(1, 0)$, および $(1, 1/1000)$ とした場合について、時刻 $t = \Delta t$ での $Q(x, \Delta t)$ を示すと図 1 を得る。

$u = 0$ とした場合、式(1)は単に拡散方程式 (放物型偏微分方程式) となる。このとき、 $x = 0$ での不連続は時間経過と共に減衰し、勾配が $\sqrt{\nu \Delta t}$ に反比例して小さくなるのが見て取れる。 $\nu = 0$ の場合、式(1)は移流方程式 (双曲型偏微分方程式) となり、初期条件での分布形状が $u \Delta t$ だけ平行移動されるのが分かる。そして、移流拡散方程式の場合には、以上 2 つの演算が重ね合わさった分布になることが理解される。

2.2 差分法と有限体積法

次に、式(1)を離散化して数値的に解くことを考える。まず、図 2 に示すように、計算領域を Δx の幅を持つ要素に分割し、第 i 要素の重心位置 $x_i = i \Delta x$ を第 i 格子点と呼び、時間についても刻み幅 Δt を考え、時刻 $t = n \Delta t$ を第 n 時刻と呼ぶと約束する。

第 i 格子点の第 n 時刻に対応する変数 Q_i^n をどう解釈す

* Himeno, Takehiro
東京大学大学院 工学系研究科 航空宇宙工学専攻
東京都文京区本郷 7-3-1 (〒113-8656)
2005. 2. 3 受理

Fig.1 Exact solutions for diffusion, advection and advective diffusion equation ; $\Delta t = 0.5$

Fig.2 Grid points for finite difference method

るかによって、離散化の手順は、差分法、有限体積法、有限要素法などに分類される。本稿では差分法と有限体積法の違いを説明するとともに、有限要素法などの説明は次稿以降に願うする。

a. 差分法

差分法に基づくと、 Q_i^n は第 i 格子点における物理量 Q の値そのもの、すなわち、

$$Q_i^n = Q(i\Delta x, n\Delta t) \quad (8)$$

と解釈される。そのうえで空間微分は近傍格子点の変数を用いた差分商 ΔQ で置換され、式(1)は、

$$\frac{\partial}{\partial t} + u(\Delta Q)_i^n = v \cdot \{\Delta(\Delta Q)\}_i^n \quad (9)$$

のように離散化される。 x_i 近傍で Q の Taylor 展開を考えれば、

$$Q_{i+1}^n = Q_i^n + \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x_i} \cdot \Delta x + \frac{1}{2!} \cdot \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} \Big|_{x_i} \cdot \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \quad (10)$$

Table 1 Examples of finite difference method

1 次精度風上差分 : for $u > 0$.

$${}^1U(\Delta Q)_i^n = \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x}$$

2 次精度中心差分

$${}^2C(\Delta Q)_i^n = \frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

2 次精度風上差分 (QUICK) : for $u > 0$.

$${}^2U(\Delta Q)_i^n = \frac{3Q_{i+1}^n + 3Q_i^n - 7Q_{i-1}^n + Q_{i-2}^n}{8\Delta x}$$

3 次精度風上差分 (UTOPIA) : for $u > 0$.

$${}^3U(\Delta Q)_i^n = \frac{2Q_{i+1}^n + 3Q_i^n - 6Q_{i-1}^n + Q_{i-2}^n}{6\Delta x}$$

2 次精度中心差分

$${}^2C\{\Delta(\Delta Q)\}_i^n = \frac{Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n}{\Delta x}$$

あるいは、

$$Q_{i-1}^n = Q_i^n - \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x_i} \cdot \Delta x + \frac{1}{2!} \cdot \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} \Big|_{x_i} \cdot \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \quad (11)$$

となる。式(11)の関係を用いれば、差分商 ΔQ を、

$$(\Delta Q)_i^n = \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x_i} = \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x} + O(\Delta x) \doteq \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (12)$$

により評価できる。近似の際に Δx 程度の誤差が含まれているので、この ΔQ は 1 次精度である。また、式(10)から式(11)を引いて変形すると、

$$(\Delta Q)_i^n = \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x_i} = \frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \doteq \frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{2\Delta x} \quad (13)$$

と評価できる。この場合、 ΔQ は 2 次精度になる。

これら差分スキームの例を表 1 に掲げる。 ΔQ の評価法には、様々なものが提案されている。 $u < 0$ の場合を含む、 ΔQ の一般的な数式表現や、様々な差分スキームの精度と安定性、時間方向の離散化などに関しては、文献 2) に良く整理されている。

b. 有限体積法

他方、解かれるべき支配方程式が、式(1)のような非保存形から保存形、

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(uQ - v \frac{\partial Q}{\partial x} \right) = 0, \quad (14)$$

に書き直せる場合、有限体積法に基づく離散化を適用できる。式(14)を要素内部で空間積分し、Gauss の発散定理により体積分を面積分へ変形すれば、

$$\frac{\partial}{\partial t} (Q_i^n \Delta x) + \{ (uQ - v \Delta Q)_{i+1/2}^n - (uQ - v \Delta Q)_{i-1/2}^n \} = 0, \quad (15)$$

を得る。有限体積法では、図 3 に示すように、 Q_i^n は第 i 要素における Q の空間平均値、

$$(Q_i^n \Delta x) = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} Q(x, n\Delta t) \cdot dx \quad (16)$$

と解釈され、空間微分は要素境界 ($i \pm 1/2$ 位置) におけ

Fig. 3 Control volume for finite volume method

Table 2 Examples of numerical flux

Roe 法 (1 次精度風上差分) : for $u > 0$.

$$f_{i+1/2}^n = (uQ)_i^n = f_i^n$$

Lax-Wendroff 法 : for $u > 0$.

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}^n &= \frac{1}{2} (f_{i+1}^n + f_i^n) + \frac{c}{2} \cdot u (Q_{i+1}^n - Q_i^n) \\ &= f_{i+1/2}^n + \frac{1}{2} (1-c) \cdot u (Q_{i+1}^n - Q_i^n) \end{aligned}$$

TVD 法 : for $u > 0$.

$$f_{i+1/2}^n = f_{i+1/2}^n + \frac{1}{2} (1-c) \cdot u (Q_{i+1}^n - Q_i^n) \cdot B$$

る Q_i^n の数値流束

$$f_{i\pm 1/2}^n = (uQ)_{i\pm 1/2}^n, \text{ および } f_{vi\pm 1/2}^n = -(\nu \Delta Q)_{vi\pm 1/2}^n, \quad (17)$$

の差で置換される。要素境界の数値流束 $f_{i\pm 1/2}^n$ を推定する各種差分スキームも様々なものが提案されているが、そのうち幾つかの例を表 2 に掲げる。

有限体積法に基づく離散化は、 u と ν および Δx が一定の場合、差分法のそれと同じ結果となる。一方、それ以外の場合でも、有限体積法では、第 i 要素から減じられた数値流束が必ず第 $i+1$ 要素へ加えられるため、全体として Q が保存されるという利点がある。従って、質量と運動量およびエネルギーの保存則で表される物理現象の支配方程式を解くには、有限体積法に基づく離散化が有効である。

2.3 拡散方程式

まず、式 (14) で $u=0$ とした場合の拡散方程式について、離散化の要点を説明する。そもそも拡散項は、 Q の分布を一様に平均化しよう作用するので、 $i+1/2$ 位置の数値流束 $f_{i+1/2}^n$ の評価には、その両側の情報を等しい重みで含む、等方的な中心差分を用いるのが理に適っている。

a. 陽解法

式 (15) の ΔQ を中心差分で評価すれば、

$$\frac{Q_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t} \cdot \Delta x = \nu \cdot \frac{Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (18)$$

なる差分方程式を得る。このように、 $n+1$ 時刻の未知数を 1 つだけ含む代数方程式に帰着する手順を陽解法と呼ぶ。この場合、物理的に意味のある解を得る（計算が発散しないようにする）ためには、時間刻み Δt を、

$$\text{拡散数} : d = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \quad (19)$$

に制限しなくてはならない。紙面の制約により直観的な説

明になるが、情報を獲得するために参照される 3 点の幅 $(x_{i+1} - x_{i-1}) = 2\Delta x$ が、図 1 に示した減衰の代表幅 $2\sqrt{2}\nu\Delta t$ を包含する必要があるのだと理解すればよい。

b. 陰解法

一方、 ΔQ を $n+1$ 時刻で評価すれば、

$$\frac{Q_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t} \cdot \Delta x = \nu \cdot \frac{Q_i^{n+1} - 2Q_i^{n+1} + Q_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} \quad (20)$$

なる差分方程式を得る。このように、未知数を複数含む連立方程式に帰着する手順を陰解法と呼ぶ。陰解法は、多元連立方程式（この場合 3 項間漸化式）を解くため、陽解法に比べて計算上の煩雑さは増すが、数値解の決定に計算領域全体の情報が反映されるため、 Δt を式 (19) の制限に関わらず大きくできるという利点がある。特に、過渡状態ではなく、定常状態に達した Q の分布を知りたい場合には有効である。

2.4 移流方程式

次に、式 (14) で $\nu=0$ とした移流方程式について、計算例を示しながら離散化の要点を説明する。移流項は、 Q の分布を上流から一方的に平行移動するよう非等方的に作用するので、数値流束 $f_{i+1/2}^n$ の評価にも、上流側の情報をより重く扱う風上差分を適用するのが理に適っている。

a. 散逸誤差

$f_{i+1/2}^n$ を 1 次精度風上スキームである Roe スキームにより評価し、陽解法を適用する場合、時間刻み Δt は、

$$\text{Courant 数} : c = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (21)$$

に制限される。このことは、情報を獲得するために参照される 2 点に挟まれた幅 $(x_i - x_{i-1}) = \Delta x$ の範囲が、 x_i から上流側へ $u\Delta t$ だけ遡った点を包含する必要があるのだと理解すればよい。

実際に $c=0.5$ とした場合の計算結果を図 4 に示す。Roe スキームを用いた場合、数値解は破線で示された解析解に比べ、過剰な減衰が作用してしまっているのが見て取れる。ここで、

$$\begin{aligned} \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{\Delta x} &= u \cdot \frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{2\Delta x} \\ &\quad - \left\{ c \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \right\} \cdot \frac{Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \end{aligned} \quad (22)$$

と変形すると判るように、この差分式には c に比例した拡散係数を伴う中心差分が隠れている。この過大な数値粘性が散逸誤差を生じる原因になっている。

b. 分散誤差

L-W スキームは、 x_i と x_{i+1} の間で、

$$L-W f(x) = \frac{1}{2} (f_{i+1} + f_i) + \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \cdot (x - x_{i+1/2}) \quad (23)$$

と線形補間で Q の流束 f の分布を近似したうえで、

$$L-W f_{i+1/2}^n = L-W f(x_{i+1/2} - u\Delta t/2) \quad (24)$$

により要素境界での数値流束を推定したもので、2 次精度のスキームである。同様に数値解を図示すると、散逸誤差

Fig.4 Numerical solutions for convection equation by various schemes ; Roe scheme, Lax-Wendroff scheme, TVD scheme with Van Leer's flux limiter and CIP scheme ; $t=0.5$, $c = u \Delta t / \Delta x = 0.5$

は小さくなるが、不連続の前後に数値振動が発生して解の単調性が失われているのが見て取れる。これは、

$$\frac{L-W f_{i+1/2}^n - L-W f_{i-1/2}^n}{\Delta x} = u \cdot \frac{Q_{i+1}^n - Q_{i-1}^n}{2 \Delta x} - \left\{ c^2 \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2 \Delta t} \right\} \cdot \frac{Q_{i+1}^n - 2 Q_i^n + Q_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (25)$$

より判るように、L-Wスキームの数値粘性は c^2 に比例して過小であり、式(25)右辺第1項が生じる数値振動を減衰できないことが分散誤差の原因である。

c. 数値粘性の調節

単調な解を得られるが過剰減衰を含む Roe スキーム、高精度だが数値振動を生じやすい L-W スキームと一長一短がある。これらに対し、TVD スキームは、数値振動が生じた部分で数値粘性が大きく、数値解が単調な部分で小さくなるよう工夫されている。

TVD スキームの詳細は、文献 3) に詳しく説明されているが、本稿ではその一例として数値粘性を調節する制限関数 B を、Van Leer 型と呼ばれる、

$$B(r) = \frac{r + |r|}{1 + r}, \quad \text{ここで} \quad r = \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{Q_{i+1}^n - Q_i^n} \quad (26)$$

とした場合について数値解を示すにとどめる。数値振動が生じた部分で $r < 0$ となり、 $^{TVD}f_{i+1/2}^n$ は $^{Roe}f_{i+1/2}^n$ に一致する。図 4 に示したように B を適切に与えると、解の散逸誤差と分散誤差を共に抑えつつ不連続の移流を捕捉できる。

d. 解析解の利用

上述のように、 Q の数値流束を推定する問題に帰着する離散化に対し、 Q の分布を推定する方法も近年注目されている。

非保存形の移流方程式を解く CIP 法は、差分法の一つと見なせるが、各格子点で Q^n だけでなく空間微分値 ∂Q_i^n も変数とする。すると、 n 時刻の区間 $[x_{i-1}, x_i]$ における Q の分布は、 x の 3 次関数を用いて、

$$^{CIP}Q^n(x) = C_3 \cdot x^3 + C_2 \cdot x^2 + \partial Q_i^n \cdot x + Q_i^n \quad (27)$$

$$C_3 = \frac{\partial Q_{i-1}^n + \partial Q_i^n}{(\Delta x)^2} - 2 \frac{Q_{i-1}^n - Q_i^n}{(\Delta x)^3}$$

$$C_2 = 3 \frac{Q_{i-1}^n - Q_i^n}{(\Delta x)^2} - \frac{\partial Q_{i-1}^n + \partial Q_i^n}{\Delta x}$$

のように内挿補間できる。ここで、移流方程式の厳密解が平行移動で与えられることを利用すれば、 $n+1$ 時刻の Q_i^{n+1} および ∂Q_i^{n+1} が、

$$Q_i^{n+1} = ^{CIP}Q^{n+1}(x_i) = ^{CIP}Q^n(x_i - u \Delta t) \quad (28)$$

$$\partial Q_i^{n+1} = \frac{\partial ^{CIP}Q^n}{\partial x} \Big|_{x=x_i - u \Delta t} \quad (29)$$

と求まる。CIP 法は、保存則を厳密には満足しないものの、解析解を利用するため理解し易く、精度の高い数値解を得られるスキームである。CIP 法の詳細、および、保存則を満足する改良 CIP 法については、文献 4) を参照されたい。

2.5 まとめ

本章では、拡散方程式と移流方程式を例として差分法と有限体積法の基礎を要約して述べた。離散化に際しては物理的考察に基づいて中心差分か風上差分かを選択すべきだということ、差分スキームの精度と数値粘性によって数値解が大きく影響されるという点が重要である。

3. Navier-Stokes 方程式の解法

熱流動現象の支配方程式である N-S 方程式の数値解析法としては、特性理論に基づいて流れ場における対流現象と音響現象を同時に解き、比較的高速の流れ場を対象とする圧縮性流体解法³⁾と、両現象を部分段階的に分離して解き、比較的低速の流れ場を対象とする非圧縮性流体解法⁵⁾に大別され、数値流体力学 (CFD) の分野でそれぞれ独自に発展を遂げてきた。

本稿では、成形加工過程に関係が深いと考えられる部分段階的解法でありながら、非圧縮流体に限らず、様々な実在流体を解析対象にできる拡張性を持つ CCUP 法⁶⁾について、熱力学的視点から説明を試みる。なお、本章で用いる記号については、後ろの一覧表にまとめたので適宜参照されたい。

3.1 局所熱平衡の仮定

流体粒子の運動と内部状態量の変化を記述した、質量と運動量およびエネルギーに関する非保存形の N-S 方程式を式(30)～(32)に示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \rho = -\rho \nabla \cdot \vec{u}, \quad (30)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \nabla : \vec{\Pi} + \rho \vec{g}, \quad (31)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho (\vec{u} \cdot \nabla) e = (\vec{\Pi} : \nabla) \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{q}, \quad (32)$$

ここで、応力テンソル $\vec{\Pi}$ と熱流速 $\vec{q}$ は

$$\vec{\Pi} = -p \mathbf{I} + \mathbf{T}_v, \quad (33)$$

$$\vec{q} = -k \nabla T \quad (34)$$

であり、Newton 流体の粘性応力テンソル $\mathbf{T}_v$ は、

$$\mathbf{T}_v = \lambda (\nabla \cdot \vec{u}) \mathbf{I} + \mu (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T), \quad (35)$$

と仮定される。

これらに加えて、圧力や密度や温度など流体粒子内部の状態量相互の関係を記述した

$$\rho = f(p, T) \quad (36)$$

のような状態方程式を仮定すれば方程式系を閉じることができる。状態方程式は、熱平衡状態にある単相系の内部状態量の自由度は2であるという、熱力学の相律を表現したものである。運動する流体は一般に熱平衡状態にはないが、微小時間に生じる内部状態量の局所の変化は準静的であると見なし、局所熱平衡を仮定することで、状態方程式をはじめとする古典熱力学の概念と諸法則を動員して数値解法を構築することができる。

3.2 段階分割

N-S 方程式は、物理的に解釈すると、流体粒子の移動を表す対流項、運動量と熱エネルギーの無秩序な一様化を表す拡散項、そして音波による情報伝播を表す圧力項から成っており、これら各項の効果がせめぎ合い釣り合うことで流れ場が決まっていくことを意味している。

このような解釈に基づくと、N-S 方程式の各項を、移流と拡散および音響の各段階に分別し、流れ場の微小変化を、図5に描くように、

- ・流体粒子の空間的移動に伴う変化
- ・運動量と熱の拡散に伴う状態量の等容変化
- ・音波の伝播に伴う状態量の等エントロピ変化

の3段階に分けて近似的に捉えることができる。部分段階の解法では、これら各段階の変化を順次計算し、全体として有限小の時間刻み Δt を構成する。

3.3 CCUP 法

以下、変数の組を $\vec{Q} = (T, p, \vec{u})^T$ とする TCUP 法 (Temperature-based CCUP)⁷⁾ の考え方を説明する。計算の第 n 時間刻みにおける $\vec{Q}$ の変化について、それぞれの段階を経た後の値を、 $\vec{Q}^*$ 、 $\vec{Q}^{**}$ および $\vec{Q}^{n+1}$ と表記し、拡散段階と音響段階をまとめて非移流段階と呼ぶ。

a. 移流段階の解法

流体粒子の並進的な移動に伴う流れ場の変化は、 $\vec{Q}$ の移流方程式

Fig.5 Algorithm of CCUP scheme

$$\frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + \vec{u} \frac{\partial \vec{Q}}{\partial x} + \vec{v} \frac{\partial \vec{Q}}{\partial y} + \vec{w} \frac{\partial \vec{Q}}{\partial z} = \vec{0} \quad (37)$$

で表現される。移流段階では、各項の係数である $\vec{u}$ を凍結して式(37)を局所的に線形近似したうえでCIP法を適用する。具体的には、注目する格子点と風上側隣接7点の情報を使い、3次多項式で内挿補間された $\vec{Q}$ の空間分布を、

$$\vec{Q}_i^* = {}^{CIP} \vec{Q}^n(x_i - u_i^n \Delta t, y_i - v_i^n \Delta t, z_i - w_i^n \Delta t) \quad (38)$$

に従って平行移動し、各変数の値を更新する。

b. 拡散段階の解法

続く非移流段階では、流体粒子どうしの力学的および熱的な相互作用に伴う変化を計算する。非移流段階を通じた $\vec{Q}$ の変化は、局所熱平衡を仮定すれば、相律に従い、

$$\vec{Q}^{n+1} - \vec{Q}^* = \left(\frac{\partial \vec{Q}}{\partial S} \right)_p \Delta S + \left(\frac{\partial \vec{Q}}{\partial \rho} \right)_s \Delta \rho \quad (39)$$

のように、流体粒子表面を通じた運動量と熱の交換に伴う拡散段階と、流体粒子の断熱的な圧縮膨張に伴う音響段階の変化に分割して考えることができる。

拡散段階には、N-S 方程式右辺の粘性項と伝熱項が関係し、その変化は、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (40)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \nabla : \mathbf{T}_v \quad (41)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = (\mathbf{T}_v : \nabla) \cdot \vec{u} - \nabla \cdot \vec{q} \quad (42)$$

で表される等容変化となる。まず、式(41)を要素 Ω について空間積分し、Gauss の発散定理を用いると、

$$\rho_i^* \frac{(\vec{u}_i^{**} - \vec{u}_i^*)}{\Delta t} = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial \Omega} \mathbf{T}_v^* : d\vec{S} \quad (43)$$

を得る。 $\mathbf{T}_v$ を $\vec{Q}^*$ により評価して、中心差分で離散化すると、陽解法により、直ちに速度変化を計算できる。次に、式(41)に $\vec{u}$ を乗じて式(42)に辺々加え、等容変化の条件(40)を用いて整理すると、

$$\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{T}_v : \vec{u}) - \nabla \cdot \vec{q} - \frac{\rho}{2} \frac{\partial \vec{u}^2}{\partial t} \quad (44)$$

となる。右辺第1項および第2項は、粘性散逸と熱伝導に

伴う熱入力の時間あたり量を表す．右辺を Ω について空間積分した値を，

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (\mathbf{T}_v^* : \vec{u} - \vec{q}^*) \cdot d\vec{S} - \frac{\rho_i^* (\vec{u}_i^{**} - \vec{u}_i^{*2})}{2 \Delta t} \equiv \dot{\Theta} \quad (46)$$

と表せば，

$$(\rho C_p)^* (T_i^{**} - T_i^*) = \gamma_i^* \dot{\Theta} \Delta t \quad (47)$$

により，熱入力に伴う温度変化が求まる．

最後に，拡散段階の圧力変化を求める．一般に， e および h の変化は，

$$\Delta e = T \Delta S + \frac{p}{\rho^2} \Delta \rho = C_v \Delta T + \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_T \Delta \rho \quad (48)$$

$$\Delta h = T \Delta S + \frac{\Delta p}{\rho} = C_p \Delta T - C_p \mu_J \Delta p \quad (49)$$

と記述できる．両式における第 2 表現は熱力学の第 1 法則と第 2 法則に対応し，第 3 表現は熱力学の相律に対応している．ここで，式(48)と(49)の辺々を引き，等容変化の条件を用いて整理すれば，

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \cdot \frac{\rho C_p}{(\rho C_p \mu_J + 1)} \quad (50)$$

の関係が導かれる．従って，圧力変化は，

$$p_i^{**} - p_i^* = \frac{\gamma_i^* - 1}{\gamma_i^*} \cdot \frac{(\rho C_p)_i^*}{(\rho C_p \mu_J + 1)_i^*} \cdot (T_i^{**} - T_i^*) \quad (51)$$

と定まり，式(43)および(47)と併せて，拡散段階を経た後の $\dot{Q}^{**}$ を算出することができる．

c. 音響段階の解法

音響段階には，N-S 方程式右辺の圧力項と重力項が関係し，その変化は，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \nabla \cdot \vec{u}, \quad (52)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\nabla p + \rho \vec{g}, \quad (53)$$

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} = -p \nabla \cdot \vec{u} \quad (54)$$

によって記述される．この過程は等エントロピー変化であり，式(52)と(54)は音速を用いて，ともに，

$$\frac{1}{\rho C_s^2} \frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{u} \quad (50)$$

と変形される．この式の右辺を陰的に評価して CFL 条件を緩和し，両辺を Ω について空間積分するとともに，式(53)の関係を用いれば，次式，

$$\frac{p_i^{n+1} - p_i^{**}}{(\rho C_s^2)_i^{**} \Delta t} = -\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \left(\vec{u}^{**} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{**}} \Delta t \right) \cdot d\vec{S} \quad (55)$$

となる．右辺の圧力勾配に中心差分を適用して離散化すれば，次の時刻 ($n+1$ 時刻) の圧力に関する連立一次方程式が得られる．この方程式は反復法によって解かれる．

Table 3 Procedure of TCUP, Temperature-based CCUP

• Variant	: $\vec{Q} = (T, p, \vec{u})^T$
• Advection Phase	: $\vec{Q}^n \rightarrow \vec{Q}^*$ $\vec{Q} \frac{\partial \vec{Q}}{\partial t} + u \frac{\partial \vec{Q}}{\partial x} + v \frac{\partial \vec{Q}}{\partial y} + w \frac{\partial \vec{Q}}{\partial z} = \vec{0}$
• Diffusion Phase	: $\vec{Q} \rightarrow \vec{Q}^{**}$ $\vec{u} \int_{\Omega} \rho^* \frac{\vec{u}^{**} - \vec{u}^*}{\Delta t} dV = \int_{\Omega} \mathbf{T}_v^* : d\vec{S}$ $T \frac{T^{**} - T^*}{\Delta t} = \frac{\gamma^*}{(\rho C_p)^*} \dot{\Theta}$ $p \frac{p^{**} - p^*}{\Delta t} = \frac{\gamma^* - 1}{(1 + \rho C_p \mu_J)^*} \dot{\Theta}$
• Acoustic Phase	: $\vec{Q}^{**} \rightarrow \vec{Q}^{n+1}$ $p \int_{\Omega} \frac{p^{n+1} - p^{**}}{(\rho C_s^2)^{**} \Delta t} dV = - \int_{\Omega} \left(\vec{u}^{**} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{**}} \Delta t \right) \cdot d\vec{S}$ $\vec{u} \frac{\vec{u}_{i+1/2}^{n+1} - \vec{u}_{i+1/2}^{**}}{\Delta t} = \left(-\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{**}} + \vec{g} \right)_{i+1/2} \Delta t$ $T \frac{T^{n+1} - T^{**}}{(\rho C_p)^{**} \Delta t} = \frac{(1 + \rho C_p \mu_J)^{**}}{(\rho C_p)^{**}} (p^{n+1} - p^{**})$

次に，式(55)との一貫性を保つべく， Ω の各表面における加速を考え，例えば x 方向について，

$$(\vec{u}_{i+1/2}^{n+1} - \vec{u}_{i+1/2}^{**}) \cdot d\vec{S} = \left\{ \left(-\frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{**}} + \vec{g} \right)_{i+1/2} \cdot d\vec{S} \right\} \Delta t \quad (56)$$

のように，各面を通過する体積流量の増減を計算する．そのうえで，線形補間を用いて格子点における速度変化を算出する．

最後に，式(49)に等エントロピー変化の条件を課し，

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_s = \frac{\rho C_p}{(\rho C_p \mu_J + 1)} \quad (57)$$

の関係を導けば，既に求めた圧力変化を用いて，

$$T_i^{n+1} - T_i^{**} = \frac{(\rho C_p \mu_J + 1)_i^{**}}{(\rho C_p)_i^{**}} \cdot (p_i^{n+1} - p_i^{**}) \quad (58)$$

のように，温度変化を算出できる．こうして，式(55)および(56)と併せ，音響フェイズを経た後の $\vec{Q}^{n+1}$ を算出することができる．

e. 物性値の算出

ここで，TCUP 法の手続きを表 3 にまとめる．計算で必要となる，流体の圧縮性に関する物性値は，次式に状態方程式を代入することで， (T, p) の関数として与えることができる．

$$C_p(T, p) = \frac{\partial h(T, p_0)}{\partial T} - \int_{p_0}^p T \left\{ \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right\}_p dp \quad (59)$$

$$C_v(T, p) = C_p(T, p) + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right)_p \quad (60)$$

$$C_s^2(T, p) = \frac{C_p(T, p)}{C_v(T, p)} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T = \gamma(T, p) \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \quad (61)$$

$$\mu_j(T, p) = -\frac{1}{\rho C_p} \left\{ \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln T} \right)_p + 1 \right\} \quad (62)$$

但し、式(59)により C_p を求める場合、基準圧力 p_0 における h の温度依存性を実験式などに基づいて与える必要がある。

3.4 まとめ

以上に述べた数値解法の導出過程では、非圧縮流体や理想気体の仮定を先決的に用いず、必要な物性値を (T, p) の関数として表し、且つ状態方程式との一貫性を保っているため、様々な種類の実在流体を解析対象にできるという拡張性に富む。

逆に、状態方程式として ρ が一定と仮定すれば $C_s = \infty$ となり、TCUP 法は部分段階的 MAC 法 (Projection 法) と同等の手続きとなる。両者を対比することで、MAC 法をはじめとする非圧縮性流体解法のどの部分に、非圧縮流体の近似が入り込んでいるのかを理解することができる。

関連する事項として、非圧縮流体の数値解法については文献 5) を、大規模連立 1 次方程式の反復解法については文献 8) を参照されたい。また、本稿で触れなかった、特性理論に基づく圧縮性流体に対する数値解析法については文献 3) を、乱流現象とモデル化については文献 9) を参照されたい。

4. 計算事例

ここでは、TCUP 法を適用して様々な熱流動問題を数値的に模擬した事例を紹介する。

4.1 キャビティ内自然対流

a. 計算条件

図 6 に示すような、通常重力環境の鉛直面内に置かれた一辺 $L = 0.040$ m の二次元正方形容器の内部に、理想気体に仮定された空気を封入したうえで、上下を断熱壁、右壁を 283.15 (K) の低温壁、左壁を $283.15 + \Delta T$ (K) の高温壁とした場合を想定し、粘性と熱伝導性を考慮して N-S 方程式を解いた。温度伝導係数 α_T と体膨張係数 β_T を用いて、次式、

$$Ra = \frac{\beta_T g \Delta T L^3}{\alpha_T \nu} \quad (63)$$

で定義される Rayleigh 数の値は 1.0×10^4 である。初期条件では流体を静止させ、均一に $T = 283.15$ (K) および $p = 1.0$ (atm) と与え、重力加速度 $g = 9.8$ (m/s²) を加えた。

Fig. 6 Grid system in a square cavity ; $L = 0.040$ m ; 100×100 stencils in the vertical section.

b. 計算結果

自然対流が発達し、流れ場が定常に至った時点の様子を温度の等高線で可視化して図 7 に示す。画中、左側に TCUP 法の計算結果を、右側に同条件で計算されたベンチマーク結果¹⁰⁾を示した。

両者の結果は良好に一致しており、浮力に誘起された時計回りの循環流と熱伝導による熱輸送が平衡に達して、温度分布が形成されている。ベンチマーク計算では、作動流体を非圧縮と仮定したうえで、

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla : \mathbf{\Pi} - \rho \beta_T (T - T_{ref}) \mathbf{g} \quad (64)$$

のように、重力項から浮力の効果のみを抽出する近似を施している。他方、今回の計算では、重力は式(31)に直接加えていて、熱伝導に伴う温度分布が、状態方程式を介して密度分布を生じさせ、これが静水圧分布と干渉して浮力の効果が発生している。

このように、重力を直接評価しても安定に計算ができることは、後述する自由表面流の数値解析で重要となる。

4.2 超音速錐状流

a. 計算条件

次に、図 8 に示すような半頂角 $\varphi_c = 20.0$ (deg) の正円錐が、標準静止大気中を Mach 数 $M_\infty = 3.0$ かつ迎角 0.0 (deg) で超音速飛行する場合を模擬した。流れ場は軸対称であるが、計算手法の検証のため、周方向にも複数の格子点を配置した計算領域を考え、周囲大気を理想気体と仮定された非粘性の空気として三次元 Euler 方程式を解いた。

Temperature ; Present and benchmark.

Fig. 7 Natural convection in a square cavity ; Temperature contours at the steady state, numerical results calculated by TCUP compared with benchmark¹⁰⁾ ; $Ra = 1.0 \times 10^4$

Fig. 8 Computational domain and grid system around a right circular cone ; $\varphi_c = 20.0$ deg ; 100×100 stencils in a meridian section and 7 stencils in circular direction

Fig. 9 Numerical results of supersonic flow around a right circular cone at zero angle of attack ; Contours of static pressure in a meridian section at the steady state ; $M_{\infty} = 3.0$

b. 計算結果

流れ場がほぼ定常状態に達した時点の静圧分布を、計算領域の子午断面内に描いた等高線で可視化して図 9 に示す。図中、頂点から放射状に伸びる等圧線が描かれており、頂点に付着した斜め衝撃波と、その下流の圧縮領域を確認できる。破線で示された、衝撃波角の厳密解¹¹⁾は $\varphi_s^* = 29.6$ (deg) であり、計算結果との間に良好な一致を確認できる。

この結果から、TCUP 法が三次元一般曲線座標系へ拡張でき、流体粒子の運動と内部状態量の変化が互いに影響する圧縮性流体に特徴的な現象を適切に模擬できる可能性が確認されたと言える。

4.3 自由表面流解法への発展

最後に、様々な種類の流体を扱える TCUP 法の特徴を活かし、気体と液体が共存する自由表面流を解析する手法として提案された CIP-LSM¹²⁾を紹介する。

a. 解析手法

自由表面流を数値解析する難点は、気液界面の位置が決定的に与えられず、解の一部として決まることである。そこで、計算領域のある点が気液どちらの相に属するかを表す変数として、

$$\begin{aligned} H_s &= 0.5 \text{ (液相に属する)} \\ H_s &= 0 \text{ (界面に属する)} \\ H_s &= -0.5 \text{ (気相に属する)} \end{aligned} \quad (65)$$

なる識別関数 H_s を導入する。相変化を考えなければ、 H_s は流体粒子と共に対流するので、

$$\frac{\partial H_s}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla H_s = 0 \quad (66)$$

に従う。有限体積的な離散化を試みると、

$$\frac{H_{Si}^{n+1} - H_{Si}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} (\vec{u} H_s) \cdot d\vec{S} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (H_s \nabla \cdot \vec{u}) dV \quad (67)$$

を得る。速度場が非圧縮であれば右辺は 0 である。

CIP-LSM では、識別関数のような二値関数の移流と保存性に優れた MARS 法¹³⁾を適用して式(67)を解く。識別関数を導入することで、変形しながら移動する液面を、固定格子上で H_s のゼロ等値面として陰的に捕捉し、追跡することができる。その際、各格子点の物性値は、

$$\rho_i^n = (0.5 - H_{Si}^n) \rho_{Liq}^n + (0.5 + H_{Si}^n) \rho_{Gas}^n \quad (68)$$

Fig. 10 Sloshing in the model tank without antislosh devices ; Experiment and CFD

などと、 H_{Si} の重み付き線形和で与えられ、式(30)～(32)と同じ形で表現された均質二相流の N-S 方程式が TCUP 法により解かれる。

b. 計算例

計算の一例として、横方向加速度を受ける小容器内部におけるスロッシングと碎波現象を CIP-LSM により模擬した結果を、対応する実験結果と比較して図 10 に示す¹⁴⁾。

$H_s = 0$ の等高面として可視化された液面に注目すると、計算でも、(b) : 0.24(sec) 後の波頭形状、(c) : 0.48(sec) 後に液体がタンク頂部へ達する様子、(d) : それに続く碎波現象が明瞭に再現されており、(C) と (D) に示す実験結果ともよく一致している。今回、液面が複雑に分裂合体しているにも関わらず、 H_{Si} を基に算出した液相体積の増減は、初期体積に対し 1% 以内に納まっていた。

本事例に見るように、自由表面流の数値解法は重力と表面張力を考慮しつつ、動的に変化する加速度環境で、三次元的に大変形し大移動する液面挙動を、かなり正確に追跡できる段階に達しつつある。

5. む す び

本稿の後半では、様々な熱流動現象を計算機によって模擬できる可能性を強調した。しかし、それより先、計算結果を分析し、得られた知見を総合し、価値へ結実する作業は、計算機ではなく脳味噌の出番である。乱流現象、相変化、化学反応、粘弾性流体など、依然として難しいとされる熱流動現象を今後上手に利用していくためには、計算機を活用しながら、理論、実験、数値解析、モデリングなど

を組み合わせ、対象とする物理現象の本質把握へ向けて、多角的なアプローチを試みるのが重要だと思う。

記 号 表

ρ	: 密度	(kg/m ³)
p	: 圧力	(Pa)
T	: 温度	(K)
e	: 内部エネルギー	(J/kg)
h	: エンタルピー	(J/kg)
S	: エントロピー	(J/(kg·K))
$\vec{u}$	: 速度	(m/s)
$\vec{g}$	: 重力加速度	(m/s ²)
q	: 熱流束	(W/m ²)
C_p, C_v	: 定圧比熱および定積比熱	(J/(kg·K))
γ	: 比熱比	(-)
C_s	: 音速	(m/s)
μ_J	: Joule-Thomson 係数	(K/Pa)
μ, λ	: 第 1 および第 2 粘性係数	(Pa·s)
k	: 熱伝導係数	(W/(m ² ·K))
x, y, z	: 空間座標	(m)
Ω	: 要素体積	(m ³)
∇	: ナブラ演算子	(1/m)

参 考 文 献

- 1) 伊藤清三：拡散方程式—紀伊国屋数学叢書 17(1979), 紀伊国屋書店
- 2) 棚橋隆彦：はじめての CFD(1996), コロナ社
- 3) 藤井孝蔵：流体力学の数値計算法(1994), 東京大学出版会
- 4) 矢部 孝, 内海隆行, 尾形陽一：CIP 法(2003), 森北出版
- 5) 保原 亮, 大宮司久明：数値流体力学(1992), 東京大学出版会
- 6) Yabe, T. and Wang, P. Y.: *J. Phys. Soc. Japan*, **60**, 2105(1991)
- 7) 姫野武洋, 渡辺紀徳：低重力環境における熱流体管理に関する研究(第 1 報), 日本機械学会論文集, 69-678, B, 266(2003)
- 8) 藤野清次, 張紹良：反復法の数理(1996), 朝倉書店
- 9) 梶島岳夫：乱流の数値シミュレーション(1999), 養賢堂
- 10) Davis, G.: *Int. J. Numer. Methods Fluids*, **3**, 249(1983)
- 11) Sims, J. L.: NASA SP-3004(1964)
- 12) 姫野武洋, 渡辺紀徳：低重力環境における熱流体管理に関する研究(第 2 報), 日本機械学会論文集, 69-687, B, 2400(2003)
- 13) 功刀資彰：自由界面を含む多相流の直接数値解析法, 日本機械学会論文集, 63-609, B, 1576(1997)
- 14) Himeno, T., Nonaka, S., Naruo, Y., Inatani, Y. and Watanabe, T.: Prediction of Sloshing in the Propellant Tank of Reusable Rocket Vehicle, AIAA-Paper-2003-4894(2003)