

10 数値流体計算

今回と次回は流体計算を数値的に解く方法について学ぶ。

10.1 流体の方程式

流体計算は、連続の式、運動量保存の式、エネルギー保存の式、を解くことで可能となる。

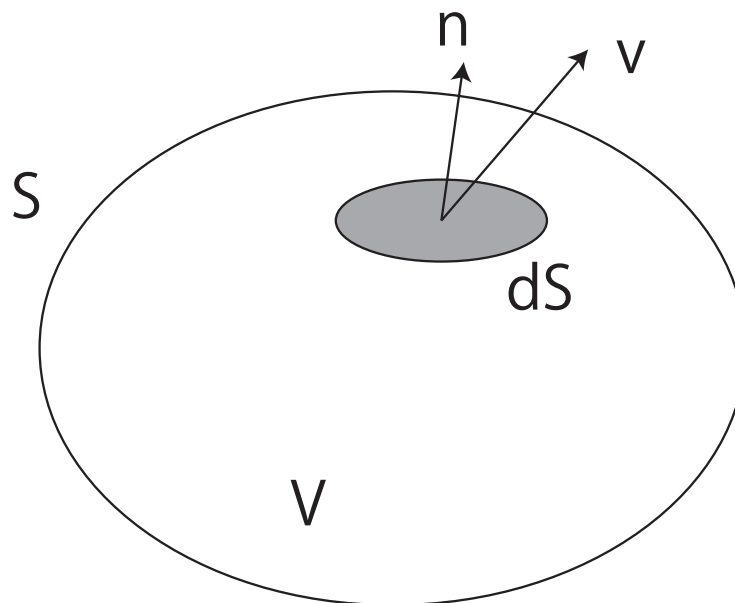


図 1: 閉空間と閉曲面

まず、図 1 のような閉曲面 S に囲まれた体積 V の閉空間を考えよう。この体積中の質量は、

$$M = \int_V \rho dV \quad (1)$$

と書ける。ここで、流体が図のような速度 \vec{v} で微小な面要素 dS を通って閉空間外に流れ出すとすると、流れ出す質量は $\rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS$ (ここで \vec{n} は dS の法線ベクトル) であるので、

$$\frac{\partial M}{\partial t} = - \int_S \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (2)$$

と書け、ガウスの定理を用いると

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_V \nabla \cdot (\rho \vec{v}) dV \quad (3)$$

となり、これが任意の体積 V で成り立つので、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{v}) \quad (4)$$

と書ける。これが連続の式である。

次にこの流体の持つ運動量についても考えよう。この流体は、運動量

$$\vec{p} = \int_V \rho \vec{v} dV \quad (5)$$

を持つ。運動量は、質量と同じように閉空間を出入りする運動量によって変化する。その他、運動量は力を受けることによって変化し、圧力勾配が存在すれば、圧力の高いほうから低い方向へ押されることになる。よって、圧力を P とすると i 方向の運動量の変化量は

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = - \int_S (\rho v_i) \vec{v} \cdot \vec{n} dS - \int_V (\nabla P)_i dV \quad (6)$$

となる。これを連続の式と同様に計算すると、

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho v_i \vec{v}) - (\nabla P)_i \quad (7)$$

となる。

最後にエネルギー保存を考えよう。この流体の持つエネルギーは、単位質量当たりの内部エネルギーを ε とすると、

$$E = \int_V \rho \left(\frac{1}{2} v^2 + \varepsilon \right) dV \quad (8)$$

と書ける。エネルギーに関して、閉空間を出入りするエネルギーによって変化し、また、流体が力を受け力の方向へ移動すると、仕事をされ、その分エネルギーを受け取る。流体は圧力勾配によって力を受け、単位時間当たりに \vec{v} 移動するので、その変化量は、

$$\frac{\partial E}{\partial t} = - \int_S e \vec{v} \cdot \vec{n} dS - \int_V \nabla \cdot (P \vec{v}) dV \quad (9)$$

となる。ここで $e = \rho \left(\frac{1}{2} v^2 + \varepsilon \right)$ であり、断熱を仮定した。これを計算すると、

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot (e \vec{v}) - \nabla \cdot (P \vec{v}) \quad (10)$$

$$= -\nabla \cdot \{ (e + P) \vec{v} \} \quad (11)$$

となる。

以上をまとめると、流体計算にあたって解くべき方程式は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{v}) \quad (12)$$

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho v_i \vec{v}) - (\nabla P)_i \quad (13)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot \{ (e + P) \vec{v} \} \quad (14)$$

となり、3次元の場合は5本、1次元の場合は3本の連立方程式を解けばよい。

ここで、簡単のために1次元の場合について考えると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ e \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + P \\ (e + P)v \end{pmatrix} = 0 \quad (15)$$

という方程式となる。ここで、変数は ρ, v, P, e の4つであり、式は3本なので、変数を独立に求めるためにはあと1つ式が必要となる。そこで用いられるのが状態方程式であり、例えば断熱変化の場合は比熱比 γ を用いて、圧力と内部エネルギーを結び付けることができ

$$\varepsilon = \frac{P}{(\gamma - 1)\rho} \quad (16)$$

と書ける。

10.2 特性方程式

式(15)を変数として、ベクトル $\vec{f} = (\rho, v, P)$ と行列 A を用いて

$$\frac{\partial \vec{f}}{\partial t} + A \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = 0 \quad (17)$$

のように書きなおすと、

$$A = \begin{pmatrix} v & \rho & 0 \\ 0 & v & 1/\rho \\ 0 & \gamma P & v \end{pmatrix} \quad (18)$$

となる。これを λ_i ($i = 1, 2, 3$) を用いて、

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial Q_i}{\partial x} = 0 \quad (19)$$

と書こうとすると、これは、行列 A を対角化することに対応する。よって、

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (20)$$

$$\det \begin{pmatrix} v - \lambda & \rho & 0 \\ 0 & v - \lambda & 1/\rho \\ 0 & \gamma P & v - \lambda \end{pmatrix} = 0 \quad (21)$$

となる λ を求める。行列式は

$$(v - \lambda)^3 - (v - \lambda) \left(\frac{\gamma P}{\rho} \right) = 0 \quad (22)$$

と書け、音速 $c = \sqrt{\gamma P / \rho}$ を用いると、

$$(v - \lambda)(v - \lambda - c)(v - \lambda + c) = 0 \quad (23)$$

よって、

$$\lambda_1 = v - c \quad (24)$$

$$\lambda_2 = v \quad (25)$$

$$\lambda_3 = v + c \quad (26)$$

となる。この右固有行列を R とし、 $R^{-1}AR = \Lambda$ すると、

$$R^{-1} \frac{\partial \vec{f}}{\partial t} + R^{-1} A R R^{-1} \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = 0 \quad (27)$$

$$R^{-1} \frac{\partial \vec{f}}{\partial t} + \Lambda R^{-1} \frac{\partial \vec{f}}{\partial x} = 0 \quad (28)$$

となる。よって、 R^{-1} が微小時間、微小空間で一定とすると、

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\rho c^2} (P - \rho c v) \\ \frac{1}{\rho c^2} (\rho c^2 - P) \\ \frac{1}{2\rho c^2} (P + \rho c v) \end{pmatrix} \quad (29)$$

となり、式 (17) が式 (19) の形に書き直せたということになる。

この式は、

$$dF = \frac{\partial F}{\partial t} dt + \frac{\partial F}{\partial x} dx \quad (30)$$

$$= \left(\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial F}{\partial x} \right) dt \quad (31)$$

に注意すると、 $\frac{\partial x}{\partial t} = \lambda_i$ に沿って Q_i が一定、ということの意味している。また、 λ_i を特性速度と呼ぶ。

10.3 一次元移流方程式の差分化

ここからは簡単のために速度 c 一定の一次元移流方程式

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + c \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (32)$$

を考えよう。この式は式 (19) と同じ形をしており、この移流方程式を解くことができれば流体の方程式を解くことが可能となる。ここで、 i 番目のメッシュの座標を x_i と記述する。

時間微分を差分化する場合、現在の値を使って未来の値を求めたいわけなので、

$$\frac{\partial f(x_i, t)}{\partial t} \simeq \frac{f(x_i, t + \Delta t) - f(x_i, t)}{\Delta t} \quad (33)$$

という形になる。

一方、空間微分の差分化については、以下の前進差分、後進差分、中央差分の3通り選べる。

前進差分

$$\frac{\partial f(x_i, t)}{\partial x} \simeq \frac{f(x_{i+1}, t) - f(x_i, t)}{\Delta x} \quad (34)$$

後進差分

$$\frac{\partial f(x_i, t)}{\partial x} \simeq \frac{f(x_i, t) - f(x_{i-1}, t)}{\Delta x} \quad (35)$$

中央差分

$$\frac{\partial f(x_i, t)}{\partial x} \simeq \frac{f(x_{i+1}, t) - f(x_{i-1}, t)}{2\Delta x} \quad (36)$$

それぞれ、 i 番目と $i+1$ 番目のメッシュ、 $i-1$ 番目と i 番目のメッシュ、 $i-1$ 番目と $i+1$ 番目のメッシュ、を用いて差分化している。

よって、前進差分

$$f(x_i, t + \Delta t) \simeq f(x_i, t) - c \frac{\Delta t}{\Delta x} [f(x_{i+1}, t) - f(x_i, t)] \quad (37)$$

後進差分

$$f(x_i, t + \Delta t) \simeq f(x_i, t) - c \frac{\Delta t}{\Delta x} [f(x_i, t) - f(x_{i-1}, t)] \quad (38)$$

中央差分

$$f(x_i, t + \Delta t) \simeq f(x_i, t) - c \frac{\Delta t}{2\Delta x} [f(x_{i+1}, t) - f(x_{i-1}, t)] \quad (39)$$

となる。

それでは計算コードを見てみよう。

この計算コードを使って、 $c = 1$ として、初期値として、

$$f(x, 0) = \begin{cases} 1 & (x \leq 1/2) \\ 0 & (x > 1/2) \end{cases} \quad (40)$$

と与えて、計算してみよう。

10.4 安定性

計算結果で見たように、後進差分では波が右へ進んでいくのが見えるが、前進差分、中央差分では振動が起こって、まともに計算できない。そこで、Von Neumann の安定性解析を用いてその理由を考えてみよう。時刻 k 、座標 j の物理量 $f_j^{(k)}$ を $f_j^{(k)} = g^{(k)} \exp(ij\theta)$ として、前進差分、後進差分、中央差分を用いて時刻 $k+1$ の物理量を求めてみよう。ここで $\nu = c \frac{\Delta t}{\Delta x}$ 、 $g = g^{(k+1)}/g^{(k)}$ とする。

前進差分

$$g^{(k+1)} \exp(ij\theta) = g^{(k)} \exp(ij\theta) - \nu [g^{(k)} \exp(i\{j+1\}\theta) - g^{(k)} \exp(ij\theta)] \quad (41)$$

$$g = 1 - \nu(e^{i\theta} - 1) \quad (42)$$

$$g = 1 + \nu - \nu \cos \theta - i\nu \sin \theta \quad (43)$$

後進差分

$$g^{(k+1)} \exp(ij\theta) = g^{(k)} \exp(ij\theta) - \nu[g^{(k)} \exp(ij\theta) - g^{(k)} \exp(i\{j-1\}\theta)] \quad (44)$$

$$g = 1 - \nu(1 - e^{-i\theta}) \quad (45)$$

$$g = 1 - \nu + \nu \cos \theta - i\nu \sin \theta \quad (46)$$

中央差分

$$g^{(k+1)} \exp(ij\theta) = g^{(k)} \exp(ij\theta) - \frac{1}{2}\nu[g^{(k)} \exp(i\{j+1\}\theta) - g^{(k)} \exp(i\{j-1\}\theta)] \quad (47)$$

$$g = 1 - \frac{1}{2}\nu(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \quad (48)$$

$$g = 1 + i\nu \sin \theta \quad (49)$$

ここで、 $g^{(k)}$ は時刻 k での物理量 $f_j^{(k)}$ の振幅を表し、時刻 k から時刻 $k+1$ へ時間が進むと、振幅が g だけ大きくなることを意味している。 $k \rightarrow \infty$ でも発散しないためには $|g| \leq 1$ でなければならない。

前進差分

$$|g|^2 = 1 + 2\nu(\nu + 1)(1 - \cos \theta) \quad (50)$$

後進差分

$$|g|^2 = 1 + 2\nu(\nu - 1)(1 - \cos \theta) \quad (51)$$

中央差分

$$|g|^2 = 1 + \nu^2 \sin^2 \theta \quad (52)$$

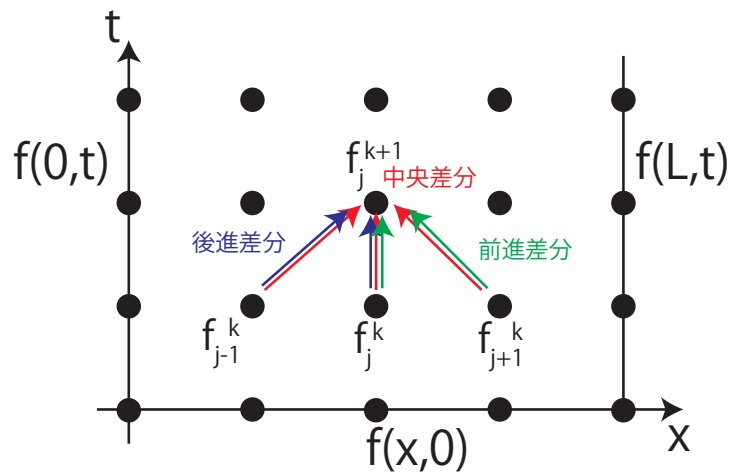


図 2: 格子点

$\nu > 0$ の時、 $\theta = 0$ でなければ、前進差分、中央差分では必ず $|g| > 1$ となり、後進差分では $\nu \leq 1$ を満たしていれば任意の θ に対して $|g| \leq 1$ が成り立つので、安定に計算できる。一方、 $\nu < 0$ の時は、前進差分は $\nu \geq -1$ であれば任意の θ に対して $|g| \leq 1$ となり安定に計算できるが、後進差分、中央差分は不安定になってしまう。

またそれぞれの差分は図2のような時刻 k の情報を用いて計算を行っている。今考えている $c > 0$ の流れの場合、流体は左から右へ進むので、左側の情報を用いて時刻 $k+1$ の物理量を計算しなければならない。そういう意味でも、後進差分が $c > 0$ の流れを解くのに必要であることがわかる。

10.5 提出課題

c の符号によって場合分けを行うことにより、 $c > 0$ の流れも $c < 0$ の流れも解くことができる計算コードを作成せよ。このように、流れのやってくる方向の情報を用いて行う差分を風上差分と呼ぶ。

その計算コードを用いて、左右反転させた初期条件を用意し、 $c > 0$ の流れ、 $c < 0$ の流れを計算せよ。その結果から、左右反転している点以外は同じであることを示せ。また、計算領域の長さを L とし、

$$f(x, 0) = \begin{cases} 1 & (\frac{3}{8}L < x < \frac{5}{8}L) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (53)$$

の初期値を持ち、

$$c = \begin{cases} 1 & (\frac{1}{2}L \leq x) \\ -1 & (x < \frac{1}{2}L) \end{cases} \quad (54)$$

であるような流れを解け。

提出期限：次回授業開始時