第 33 回数値流体力学シンポジウム
D07-4

流束再構築法を用いた圧縮性多成分・熱的完全気体に対する界面平衡スキーム

Numerical Scheme for Satisfying Equilibrium at Interfaces in Compressible Multicomponent and Thermally Perfect Gas Using a Flux-Reconstruction Method

○ 芳賀 臣紀，JAXA, 神奈川県相模原市中央区由野台 3-1-1, E-mail： haga.takanori@jaxa.jp
清水 太郎，JAXA, 神奈川県相模原市中央区由野台 3-1-1, E-mail： shimizu.taro@jaxa.jp
Takanori Haga, JAXA, 3-1-1 Yoshinodai, Chuo, Sagamihara, Kanagawa
Taro Shimizu, JAXA, 3-1-1 Yoshinodai, Chuo, Sagamihara, Kanagawa

The flux-reconstruction method has been developed for compressible, multi-component and turbulent non-premixed reacting flows. The double flux (DF) model is introduced to overcome non-physical pressure/velocity oscillations at the interface of mixtures of non-calorically perfect gases, i.e. $\gamma = \gamma(T, Y_i)$. In order to suppress numerical oscillations at steep gradient of discontinuities, the localized artificial diffusivity (LAD) is incorporated with the DF model by ensuring the consistency between the governing equations. The computations for 1D benchmark cases display that the proposed scheme can achive sub-cell resolution of a discontinuity while maintaining equilibrium at interfaces.

1. 緒言

熱力学的に異なる流体の界面（接触不連続面や物質界面）において、支配方程式を保存形で解くと圧力や速度の虚偽振動が発生することが知られている [1]．Karni [2] は原始変数（密度、速度、圧力）の時間発展を解く非保存型方程式を採用し，虚偽振動を回避した．Abgrall [3] は通常の保存則（質量、運動量、エネルギー）に加え、比熱比（熱量的完全気体を仮定）の輸送方程式を解く準保存系スキームを提案し，その後他グループによる様々なスキームへの拡張が行われている．Abgral & Karni [1] は更に double flux (DF) モデルと呼ばれるよりシンプルな方法を提案している．DF モデルでは、支配方程式は通常の保存則と変わらず，離散化には任意のスキームを用いることができる．多成分の熱的完全気体 ($\gamma = \gamma(T, Y_i)$) および反応流れにも拡張されており [4]，汎用性が高いモデルと言える．高次精度の非構造スキームである discontinuous Galerkin (DG) 法への拡張も Lv & Ihme [5] によって行われている．

本研究では，高次精度・非構造スキームの中でも DG 法に比べ構築が容易な流束再構築法（flux-reconstruction (FR) 法）を用い，DF モデルを導入することにより圧縮性多成分・熱的完全気体に拡張する．DF モデルにより界面の虚偽振動を回避することができるが，衝撃波や接触面などの急勾配では高次精度補間による数値振動の発生が懸念される．DG 法や FR 法は高次精度化のために計算セル内に複数の解定義点（自由度）を持ち，これら内点を使った急勾配の高解像度捕獲（サブセル解像）が期待される．Lv & Ihme [5] は WENO ベースのリミッターを用いたが，本リミッターはサブセル解像の向上が 3 次精度 ($p2$) に留まり，非構造格子への拡張が困難という制約がある [6]．本研究では、サブセル解像が可能かつ非構造格子にも適用可能な局所人工拡散（localized artificial diffusivity （LAD）） [7] を用いる．LAD の多成分熱的完全気体への拡張にあたり，エネルギー式に対する人工拡散係数を適切に評価することが界面平衡の保持に必要であることを示す．

2. 計算手法

2.1 支配方程式

非粘性流を仮定した圧縮性多成分・熱的完全気体の支配方程式は以下のように書ける．

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u} + P \underline{\boldsymbol{\delta}}) = 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho e_t + P)\, \boldsymbol{u}] = 0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} Y_i) = 0, \text{for } i = 1, ..., N_s - 1, \tag{4}$$

ここで ρ は密度， $\boldsymbol{u}$ は速度， P は圧力， $\underline{\boldsymbol{\delta}}$ は単位テンソル， e_t は単位質量あたりの全エネルギー（比全エネルギー）， $\boldsymbol{Y}_i$ は i 番目の化学種の質量分率である．化学種数は N_s とする．本研究では，理想気体の状態方程式を仮定し方程式系を閉じる．

混合気体の比全エネルギーは次式で表される．

$$e_t = \sum_i^{N_s} Y_i \left(h_{f,i}^0 + \int_{T_0}^{T} c_{p,i} dT \right) - \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2} \boldsymbol{u}^2, \tag{5}$$

ここで T は温度，$h_{f,i}^0$ は化学種 i の生成エンタルピーである．各化学種の定圧比熱 $c_{p,i} = c_{p,i}(T)$ は NASA 多項式 [8] により与える．以降の定式化を簡潔にするため，平均定圧比熱 [5] を導入する．

$$c_{p,i}^*(T) = \frac{1}{T - T_0} \int_{T_0}^{T} c_{p,i} dT, \tag{6}$$

ここで基準温度を $T_0 = 0$[K] と定義すると，比全エネルギーは以下のような熱量的完全気体に類似した表式で書ける．

$$e_t = \sum_i^{N_s} Y_i h_{f,i}^0 + \frac{1}{(\gamma^* - 1)} \frac{P}{\rho} + \frac{1}{2} \boldsymbol{u}^2, \tag{7}$$

ここで $\gamma^* = c_p^*/(c_p^* - R)$ は温度と化学種の関数である（R は混合気体の気体定数）．右辺第一項は温度に依らない生成エンタルピーであり，熱力学特性の変化は γ^* に含まれる．

Copyright © 2019 by JSFM

2.2 流束再構築法

本研究では，テンソル積ベースの FR 法を採用する（2D では四角セル，3D ではヘキサセル）．簡単のために 1 次元の離散化を以下に示す．物理空間のセル Ω_j は計算空間の基準セル $\hat{\Omega} := \{\xi| -1 \le \xi \le 1\}$ に変換される．セル内の変数 (原始変数) および流束関数を多項式近似するため，基準セル内に solution points (SPs) が導入される．本稿ではガウス点を用いる．セル Ω_j の計算空間における流束関数 $\hat{E}_j = J[\rho U, \rho U^2 + \hat{P}, (\rho e_t + P)U]^T$ ($J = \partial x/\partial \xi, U = (\partial \xi/\partial x)u, \hat{P} = (\partial \xi/\partial x)P$) の多項式近似は次式で与えられる．

$$I^K[\hat{E}_j] = \sum_{k=0}^{K} \hat{E}^{SP}_{j;k} \phi^K_k(\xi), \tag{8}$$

セル境界では，左右のセルで補間された流束は異なり不連続となる．セル境界における流束を一意に定めるため，近似リーマン解法によって数値流束 $\hat{E}^{com}_{j\pm1/2}$ を求める．本稿では HLLC スキームを用いる．FR 法では，このセル境界の数値流束を利用して，元のセル内補間を修正する．

$$\begin{aligned} \hat{E}^C_j = I^K[\hat{E}_j](\xi) &+ \left[\hat{E}^{com}_{j-1/2} - I^K[\hat{E}_j](-1)\right] g_L(\xi) \\ &+ \left[\hat{E}^{com}_{j+1/2} - I^K[\hat{E}_j](1)\right] g_R(\xi), \end{aligned} \tag{9}$$

ここで g_L はセルの左端で 1，右端で 0 となる多項式で修正関数と呼ばれる (g_R は g_L の原点対称な関数)．FR 法は，$K+1$ 個の SP による K 次多項式補間により $K+1$ 次精度のスキームとなる．以下，K 次多項式を用いるスキームを pK スキームと呼ぶ．

2.3 Double flux (DF) モデル

Billet & Abgrall [4] の解析に従い，1 次精度 ($p0$) スキームの時間発展を考える．時間ステップ n において速度（非ゼロ）と圧力を一定とすると，質量と運動量の式は以下になる．

$$\begin{aligned} \delta\rho &= -\sigma u \Delta\rho, \\ \delta(\rho u) &= -\sigma u^2 \Delta\rho, \end{aligned} \tag{10}$$

ここで $\sigma = \Delta t/\Delta x$，$\delta(\cdot) = (\cdot)^{n+1}_j - (\cdot)^n_j$，$\Delta(\cdot) = (\cdot)^n_{j+1/2} - (\cdot)^n_{j-1/2}$ である．上式より 1 ステップ後の速度は不変となることがわかる．

$$u^{n+1}_j = u^n_j. \tag{11}$$

式 (7) と式 (10) より，エネルギーの時間発展は以下のように書ける．

$$\begin{aligned} &\delta\left(\rho h^0_f\right) + P\delta\left(\frac{1}{\gamma^*-1}\right) + \frac{1}{\gamma^*-1}\delta P \\ &= -\sigma u \left[\Delta\left(\rho h^0_f\right) + P\Delta\left(\frac{1}{\gamma^*-1}\right)\right], \end{aligned} \tag{12}$$

ここで $h^0_f = \sum_i^{N_s} Y_i h^0_{f,i}$ である．従って，時空間ステンシルの領域 $[j-1/2, j+1/2] \times [n, n+1]$ において γ^* と ρh^0_f が一定であれば圧力は不変となる．DF モデルの原理はこの結果に基づいており，次の 2-Step で構成される．

2.3.1 Step 1（凍結 $\overline{\gamma^*}$，$\overline{\rho h^0_f}$ による圧力の時間発展）

(1) 時間ステップ n において，各セルで γ^* 及び ρh^0_f のセル平均値 $\overline{\gamma^*}^n, \overline{\rho h^0_f}^n$ を計算する．

(2) セル境界における数値流束を左右のセルそれぞれに対して計算する (double flux)．即ち左のセルに対しては $\overline{\gamma^*}^L$ 及び $\overline{\rho h^0_f}^L$ を用い，右のセルに対しては $\overline{\gamma^*}^R$ 及び $\overline{\rho h^0_f}^R$ を用いて数値流束を計算する．

(3) 保存量を $n+1$ ステップに時間発展させる．本研究では 3 次精度の TVD Runge-Kutta 法を用いる．

(4) 圧力を次式によって更新する．

$$P^{n+1} = \left(\overline{\gamma^*}^n - 1\right)\left((\rho e_t)^{n+1} - \overline{\rho h^0_f}^n - \frac{1}{2}(\rho \boldsymbol{u}^2)^{n+1}\right), \tag{13}$$

2.3.2 Step 2（更新 $\overline{\gamma^*}$，$\overline{\rho h^0_f}$ による全エネルギーの修正）

(1) $\overline{\gamma^*}$ および $\overline{\rho h^0_f}$ を $n+1$ ステップに更新する．この際に必要な温度は状態方程式より求める．

(2) 更新された熱力学的状態に整合するように全エネルギーを修正する．

$$(\rho e_t)^{n+1} = \overline{\rho h^0_f}^{n+1} + \frac{P^{n+1}}{\overline{\gamma^*}^{n+1} - 1} + \frac{1}{2}(\rho \boldsymbol{u}^2)^{n+1}, \tag{14}$$

上記 Step 1 及び Step 2 の手順 (2) においてエネルギー保存に誤差が発生する．質量、運動量の保存については適切な数値流束を選ぶことで満たされる．

2.4 Localized artificial diffusivity (LAD)

多成分の熱量的完全気体については Terashima ら [9] によってコンシステントな陽的数値拡散モデルが提案されている．さらに Kawai ら [10] は圧力発展を解く方程式系に本モデルを用い，超臨界圧における遷臨界乱流の高精度解析に成功している．圧力発展式と整合する全エネルギー式の数値拡散項として以下が導出される (文献 [10] の式 (20))．

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho e_t}} = \left[e + \rho\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^2\right] \nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}}, \tag{15}$$

ここで比内部エネルギー $e = h^0_f + P/[\rho(\gamma^*-1)]$ であり，人工質量拡散流束は次式で定義される．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}} &= \chi \nabla \rho, \\ \chi &= C_\chi \overline{\frac{c_s}{\rho}\left|\sum_{l=1}^{n_d} \frac{\partial^r \rho}{\partial \xi_l^r} (\Delta \xi_l)^r \Delta_{l,\chi}\right|}, \end{aligned} \tag{16}$$

ここで C_χ はユーザ指定のモデル定数，n_d は空間の次元，c_s は音速である．上付きバーは平滑化フィルターを表し，FR 法では多項式フィルターを用いる [7]．不連続を検知する偏微分の階数は $r=2$ とする．

界面における速度平衡および DF モデルによる生成エンタルピーの凍結を仮定すると，式 (15) は以下のように簡略化される．

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho e_t}} = \nabla \cdot \left[\left(h^0_f + \frac{1}{2}\boldsymbol{u}^2\right)\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}}\right]. \tag{17}$$

Copyright © 2019 by JSFM

最終的に，人工拡散を右辺に付加した支配方程式は以下となる．

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}}, \tag{18}$$

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u} + P \underline{\boldsymbol{\delta}}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}} \otimes \boldsymbol{u}), \tag{19}$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho e_t + P) \boldsymbol{u}] = \nabla \cdot \left[\left(h_f^0 + \frac{1}{2} \boldsymbol{u}^2 \right) \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}} \right], \tag{20}$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} Y_i) = \nabla \cdot (Y_i \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\boldsymbol{\rho}}). \tag{21}$$

3. 計算結果

3.1 接触不連続面の移流問題

空気とヘリウムの接触不連続面の移流を DF モデルを適用した FR 法により計算し，速度と圧力の平衡が保たれるか検証する．初期条件は以下で与える．

$$(\rho, u, P, Y_{Air}, Y_{He}) = \begin{cases} (14, 1, 1, 1, 0) & 0.25 < x < 0.75, \\ (1, 1, 1, 0, 1) & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{22}$$

計算領域は $(0 \leq x \leq 1)$ である．分割セル数は 100 とし，周期境界条件とした．LAD のモデル定数は $p2, p3, p4$ の各スキームについて，それぞれ $0.4, 0.2, 0.1$ とした．1 周後 $(t = 1)$ の計算結果を Fig. 1 に示す．DF モデルを用いることにより虚偽圧力振動を生じないことがわかる．本稿では割愛するが速度についても平衡が維持されていることを付記する．密度および温度の不連続についても LAD を付加することにより数値振動を抑制することに成功している．本計算ではセル数は固定であるが，高次のスキームほど界面をよりシャープに捉えており，サブセル解像が可能であることを示している．

3.2 衝撃波管問題

DF モデルではエネルギー保存は厳密には満たされないが，衝撃波を正確に捉えることができるか空気-ヘリウムの衝撃波管問題で検証する．初期条件は以下で与える．

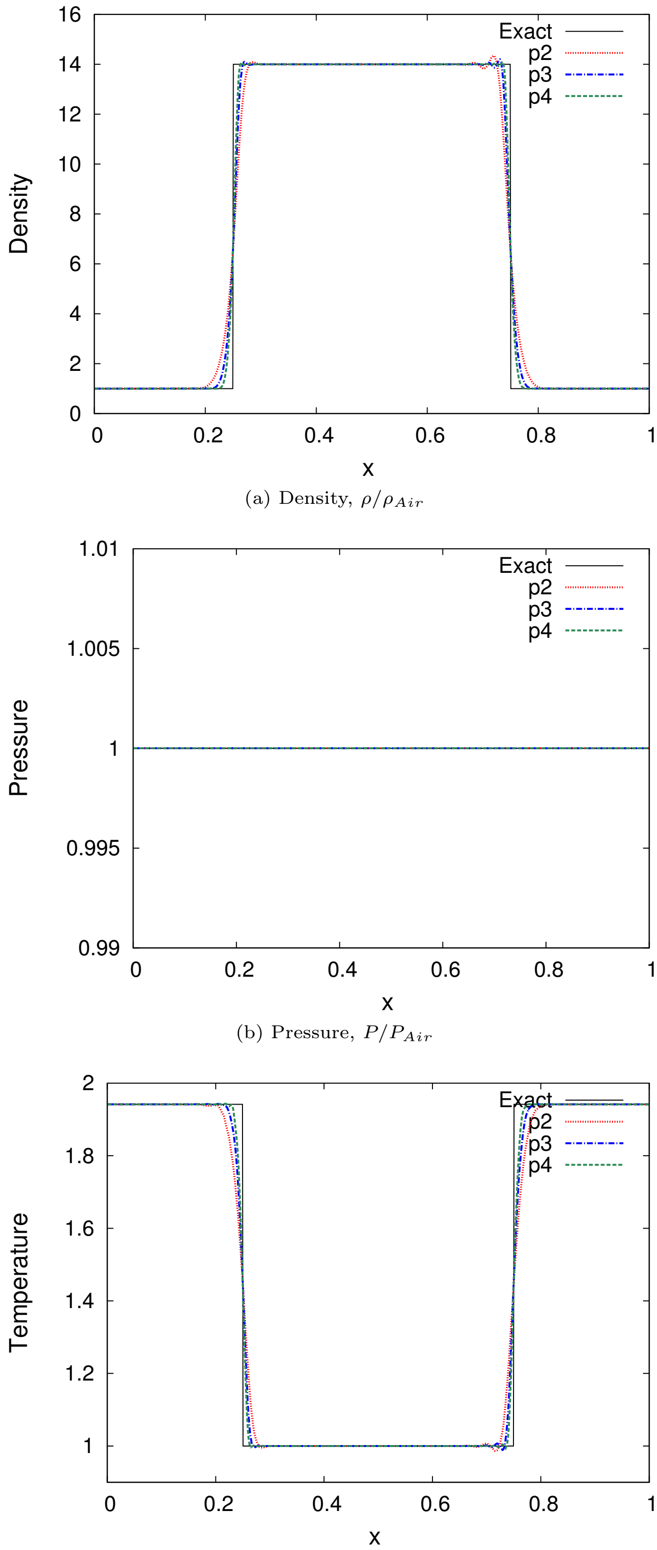
$$(\rho, u, P, Y_{Air}, Y_{He}) = \begin{cases} (1, 0, 1, 1, 0) & 0 \leq x < 0.5, \\ (0.125, 0, 0.1, 0, 1) & 0.5 \leq x \leq 1, \end{cases} \tag{23}$$

計算領域は $(0 \leq x \leq 1)$ である．分割セル数は 100 とし，境界条件は計算領域内部から 1 次外挿とした．比較のため，DF モデルを用いた計算と完全保存 (FC) スキームによる計算を行った．FC に LAD を付加すると数値不安定となり計算ができなかったため，DF モデルの計算のみ LAD を付加した．LAD のモデル定数は前ケースと同じである．$t = 2$ の計算結果を Fig. 2 に示す．FC の計算結果は衝撃波および接触面で数値振動が生じている．これは界面平衡を維持できないことに加え，LAD を付加していないためと考えられる．一方，DF モデルによる計算結果ではこれらの数値振動が抑えられている．衝撃波面は FC に比べて傾きが若干緩やかになっているが，保存誤差のの影響を受けやすい衝撃波位置は FC とほぼ一致している．

4. 結言

高次精度・非構造スキームの一つである流束再構築法を圧縮性多成分・熱的完全気体に拡張した．

- Double flux (DF) モデルを導入することにより界面の虚偽振動を回避することができる．



(a) Density, ρ/ρ_{Air}

(b) Pressure, P/P_{Air}

(c) Temperature, T/T_{Air}

Fig. 1: Profiles of the advection of a contact discontinuity at $t = 1.0$ with the DF model.

Copyright © 2019 by JSFM

- DF モデルを適用した方程式系とコンシステントな人工拡散項 (LAD) を導入することにより，界面平衡を維持すると同時に衝撃波や接触面のような急峻な勾配においても数値振動を抑制することが可能である．
- DF モデルと LAD を用いることにより．高次精度スキーム（本稿では $p4$ まで）でも不連続のサブセル解像が可能である．

本稿では一次元の計算結果のみ示したが，テンソル積ベースの FR 法の多次元への拡張は容易であり，3 次元非構造ヘキサセルへの拡張が完了している．今後は反応モデルを導入することにより，高効率な圧縮性乱流燃焼ソルバーの構築を目指す．

謝辞

本研究にあたり東北大学の河合宗司先生および北海道大学の寺島洋史先生に貴重なご助言を頂いた．ここに記して感謝の意を表する．

参考文献

(1) Remi Abgrall and Smadar Karni. Computations of compressible multifluids. *Journal of Computational Physics*, 169:594 – 623, 2001.

(2) Smadar Karni. Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm. *Journal of Computational Physics*, 112:31 – 43, 1994.

(3) Remi Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: a quasi conservative approach. *Journal of Computational Physics*, 125:150 – 160, 1996.

(4) G. Billet and R. Abgrall. An adaptive shock-capturing algorithm for solving unsteady reactive flow. *Computers & Fluids*, 32:1473 – 1495, 2003.

(5) Yu Lv and Matthias Ihme. Discontinuous galerkin method for multicomponent chemically reacting flows and combustion. *Journal of Computational Physics*, 270:105 – 137, 2014.

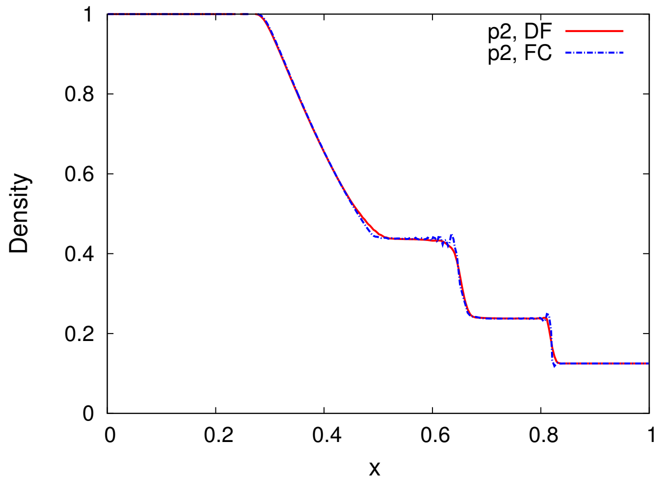
(6) 芳賀 and 河合. 高次精度非構造格子法は本当に高精度か?: 衝撃波捕獲法の問題点と提案. 第 27 回数値流体力学シンポジウム C04-3, 2013.

(7) Takanori Haga and Soshi 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.

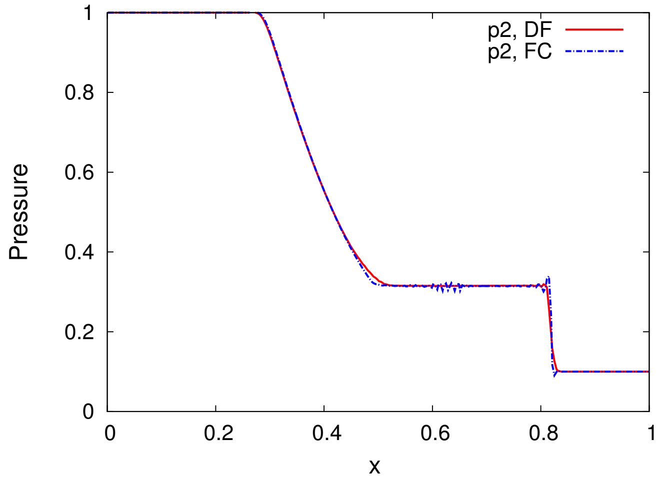
(8) B.J. McBride, M.J. Zehe, and S. Gordon. Nasa glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species. TP-2002-211556, NASA, 2002.

(9) Hiroshi Terashima, Soshi Kawai, and Mitsuo Koshi. Consistent numerical diffusion terms for simulating compressible multicomponent flows. *Computers & Fluids*, 88:484 – 495, 2013.

(10) Soshi Kawai, Hiroshi Terashima, and Hideyo Negishi. A robust and accurate numerical method for transcritical turbulent flows at supercritical pressure with an arbitrary equation of state. *Journal of Computational Physics*, 300:116 – 135, 2015.



(a) Density, ρ/ρ_{Air}



(b) Pressure, P/P_{Air}

Fig. 2: Profiles of the shock tube problem at $t = 2.0$.

Copyright © 2019 by JSFM