

近似的リーマン解法 — 流体計算 —

山下和之

千葉大学総合メディア基盤センター
yamasita@imit.chiba-u.ac.jp

2001/Sep/12

目次

第1章	基礎方程式	1
第2章	1次元問題	2
2.1	行列	2
2.2	流束差分法	3
2.3	数値流束	4
2.4	Roe法	5
2.5	膨張波に関する補正	9
第3章	空間高次精度化	16
3.1	MUSCL法	16
3.1.1	内挿法	16
3.1.2	制限関数	18
3.1.3	内挿に用いる物理量	21
3.2	Chakravarthy-Osherの方法	22
第4章	時間2次精度化	33
第5章	3次元問題	40
5.1	行列	40
5.2	数値流束	41
5.3	オペレータ分離法	43
付録A	プログラム—1次元流体	48
A.1	変数	48
A.2	時間1次精度	49
A.3	時間2次精度	50
A.4	Roe法	51
A.5	時間発展	52
A.6	セル境界での物理量	53

A.7	行列	54
A.8	その他	55
A.8.1	初期条件	55
A.8.2	要素の取り出し	56
A.8.3	音速	57
A.8.4	Chakravarthy-Osher 法の数値流束の補正項の追加	57
A.8.5	配列のコピー	58
A.9	補足	58

第1章 基礎方程式

流体力学の方程式を差分法を用いて解くための手法の一つとして、近似リーマン解法である Roe 法 [1] をとりあげる。この方法は、セル境界での数値流束を評価するために、境界の両側の物理量に対するリーマン問題を厳密に解いて求めた物理量を用いる代わりに、Roe 平均と呼ばれる操作で簡単に求めた量を用いるものである。Roe 法は、良い近似を与えることと、計算が簡単で CPU コストが小さいことから、近年よく用いられている。

取り扱う方程式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j + p \delta_{ij}) &= 0, \\ \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(e + p)u_i &= 0\end{aligned}\tag{1.1}$$

である。ここで、 $i, j = x, y, z$ で、各式で第 2 項は i に関して縮約をとる。 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。これらは、まとめて

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} = 0\tag{1.2}$$

と表すことができる。

第2章 1次元問題

2.1 行列

まず、簡単のため、1次元問題、すなわち x 方向のみに物理量が変化し速度成分を持つ場合を考える。このとき式 (1.2) は、 x 方向の微分だけが残り、

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

となり¹、その 0 でない成分のみを示すと

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (e + p)u \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

である ($u = u_x$)。また、式 (2.1) は、ヤコビ行列 $A = \partial F / \partial Q$ を用いて、形式的に

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + A \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (2.3)$$

という形に書き直すことができる。行列 A は具体的には、速度 u と エンタルピー $H = (e + p) / \rho$ のみの関数として、

$$A = A(u, H) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma - 3)u^2/2 & (3 - \gamma)u & \gamma - 1 \\ \{(\gamma - 1)u^2/2 - H\}u & H - (\gamma - 1)u^2 & \gamma u \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

と表される²。ここで、 γ は比熱比の定数である。さらに、行列 A は、音速 c を用いて ($c^2 = (\gamma - 1)(H - u^2/2)$)、3つの右固有ベクトル r_1, r_2, r_3 からなる行列

$$\begin{aligned} R &= \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & r_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ u - c & u & u + c \\ H - cu & u^2/2 & H + cu \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.5)$$

¹ F につくべき添字 x を省略した。

²オイラーの同次関係から $F = AQ$ という関係が成り立つ [8]。

により、

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} = R^{-1}AR \quad (2.6)$$

のように対角化される³。ここで、

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u + c \quad (2.7)$$

は行列 A の固有値である。なお、行列 R の逆行列は

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} (\eta u^2/2 + u/c)/2 & -(\eta u + 1/c)/2 & \eta/2 \\ -\eta u^2/2 + 1 & \eta u & -\eta \\ (\eta u^2/2 - u/c)/2 & -(\eta u - 1/c)/2 & \eta/2 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

と表される。ここで $\eta = (\gamma - 1)/c^2$ と置いた。

2.2 流束差分離法

式 (2.1) は、流束差を用いて

$$Q_k^{n+1} = Q_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta F_k \quad (2.9)$$

のように形式的に書ける。ここで、 n は時間ステップを表し、 k はセルのインデックスである。以下では、 n 番目の時間ステップを表す添字は省略する。流束差分離法 (Flux Difference Splitting (FDS) 法) [8],[9] を用いて空間 1 次精度の上流差分法を適用するときには、式 (2.9) は、

$$Q_k^{n+1} = Q_k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\Delta F_{k-1/2}^+ + \Delta F_{k+1/2}^-) \quad (2.10)$$

と表される。ここで、半整数の $k + 1/2$, $k - 1/2$ はセル境界の位置で評価することを表している。上添字の $+$ と $-$ はそれぞれ、右 (プラス) 方向へ伝播する波、左 (マイナス) 方向へ伝播する波を表す。セル境界 $k + 1/2$ の左側と右側の物理量を $Q_{k+1/2}^L$ と $Q_{k+1/2}^R$ とするとき、

$$\Delta F_{k+1/2}^\pm = \{F(Q_{k+1/2}^R) - F(Q_{k+1/2}^L)\}^\pm \quad (2.11)$$

を意味し (セル境界 $k - 1/2$ についても同様)、

$$\Delta F_{k+1/2} = F(Q_{k+1/2}^R) - F(Q_{k+1/2}^L) = \Delta F_{k+1/2}^+ + \Delta F_{k+1/2}^- \quad (2.12)$$

の関係がある。

³右固有ベクトルは、 $c \neq 0$ であることから、線形独立である。

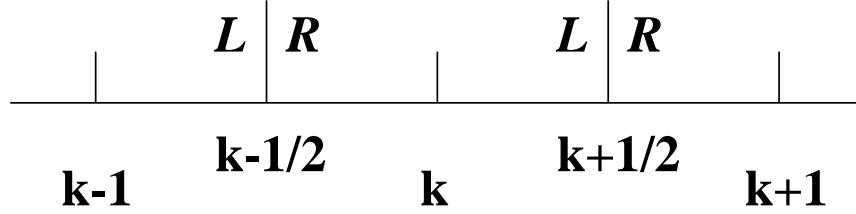


図 2.1: セルと境界。境界での Q_L, Q_R はそれぞれの L, R の位置で評価される。

2.3 数値流束

式 (2.1) の保存則を忠実に再現するためには、時間発展を

$$Q_k^{n+1} = Q_k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (G_{k+1/2} - G_{k-1/2}) \quad (2.13)$$

のように差分して表さなければならない。この $G_{k+1/2}$ は数値流束と呼ばれる。Godunov 法では、セル境界の両側で $Q_{k+1/2}^L$ と $Q_{k+1/2}^R$ を持つ衝撃波管問題 (リーマン問題) を厳密に解き、得られた境界での値を \tilde{Q} として $G_{k+1/2} = F(\tilde{Q})$ によって数値流束を与える。Roe 法では、FDS 法に基づいて数値流束を

$$G_{k+1/2} = \frac{1}{2} \{F(Q_{k+1/2}^L) + F(Q_{k+1/2}^R)\} - \frac{1}{2} (\Delta F_{k+1/2}^+ - \Delta F_{k+1/2}^-) \quad (2.14)$$

と対称化して表す⁴。式 (2.14) を用いると、式 (2.10) と式 (2.13) の流束差部分は、

$$(G_{k+1/2} - G_{k-1/2}) - (\Delta F_{k-1/2}^+ + \Delta F_{k+1/2}^-) = F(Q_{k+1/2}^L) - F(Q_{k-1/2}^R) \quad (2.15)$$

だけ異なる。この項は、空間に関して高次精度化した際にはたらくものである。空間 1 次精度の場合には、セル境界の両側の物理量 $Q_{k+1/2}^L, Q_{k+1/2}^R$ はそれぞれ Q_k, Q_{k+1} と与えればよく、 $Q_{k+1/2}^L = Q_{k-1/2}^R = Q_k$ となるので、流束差は等しい。なお、MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws) 法 [8], [9] によって高次精度化する場合には、セル境界の両側の物理量は $k, k+1$ 以外のセルも参照して Q_k や Q_{k+1} に補正を加えたものを用いる。

⁴Chakravarthy-Osher 法 [2], [8] で高次精度化する場合には、各セル境界でこのように評価された数値流束 $G_{k+1/2}$ に対して、さらにその前後のセル境界での流束差による補正を施して求められた数値流束を時間発展に用いる。

2.4 Roe 法

以下では $k+1/2$ のセル境界に注目するので Q につけられる $k+1/2$ を省略し、 $Q_L = Q_{k+1/2}^L$, $Q_R = Q_{k+1/2}^R$ と表す。

Roe 法では、次の Property U (Uniform validity across discontinuities) という性質：

(i) $Q_L \rightarrow Q$, $Q_R \rightarrow Q$ のとき、 $\tilde{A}(Q_L, Q_R) \rightarrow A(u, H)$ となる (A はヤコビ行列)。

(ii) 任意の Q_L, Q_R に対して

$$F(Q_R) - F(Q_L) = \tilde{A}(Q_L, Q_R)(Q_R - Q_L). \quad (2.16)$$

(iii) \tilde{A} の固有ベクトルは線形独立である。

を満たす行列 \tilde{A} によって、流束差 $\Delta F_{k+1/2}$ が求められる。これによって、式 (2.14) の流束差で表された項は

$$\Delta F_{k+1/2}^+ - \Delta F_{k+1/2}^- = |\tilde{A}(Q_L, Q_R)|(Q_R - Q_L) \quad (2.17)$$

となる。ここで、絶対値記号は、行列 \tilde{A} を固有値からなる対角行列とそれ以外の行列 (左右固有ベクトルの行列) の積に分解したとき、固有値に対して絶対値をとることを意味する。この操作により上流差分が得られる。

行列 $\tilde{A}(Q_L, Q_R)$ は、次のようにして求められる。

まず、物理量 Q と流束ベクトル F をある量の同次式で表す。そのような量は

$$W = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho} \\ \sqrt{\rho} u \\ \sqrt{\rho} H \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

で、これをパラメータベクトルと呼ぶ。これを用いて物理量 Q を表すと

$$Q = \begin{pmatrix} w_1^2 \\ w_1 w_2 \\ \frac{1}{\gamma} w_1 w_3 + \frac{\gamma-1}{2\gamma} w_2^2 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

となり、流束ベクトルは

$$F = \begin{pmatrix} w_1 w_2 \\ \frac{\gamma-1}{\gamma} w_1 w_3 + \frac{\gamma+1}{2\gamma} w_2^2 \\ w_2 w_3 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

となる。実際、 Q と F のすべての項は、 W の2次式で表されている。

任意の p_L, p_R, q_L, q_R に対して、次の恒等式が成り立つ。

$$\begin{aligned} (p_R + q_R) - (p_L + q_L) &= (p_R - p_L) + (q_R - q_L), \\ (p_R q_R) - (p_L q_L) &= \frac{p_L + p_R}{2}(q_R - q_L) + \frac{q_L + q_R}{2}(p_R - p_L), \\ (1/p_R) - (1/p_L) &= -\frac{1}{p_L p_R}(p_R - p_L). \end{aligned} \quad (2.21)$$

これは、差を $\Delta(\cdot) = (\cdot)_R - (\cdot)_L$ で表し、算術平均 $\{(\cdot)_L + (\cdot)_R\}/2$ を $\bar{(\cdot)}$ で、幾何平均 $\sqrt{(\cdot)_L(\cdot)_R}$ を $(\cdot)^*$ で表すと、

$$\begin{aligned} \Delta(p + q) &= \Delta p + \Delta q, \\ \Delta(pq) &= \bar{p}\Delta q + \bar{q}\Delta p, \\ \Delta(1/p) &= -\Delta p/p^{*2} \end{aligned} \quad (2.22)$$

となる。この関係を用いると⁵、

$$\begin{aligned} \Delta Q &= Q_R - Q_L \\ &= \begin{pmatrix} \Delta(w_1^2) \\ \Delta(w_1 w_2) \\ \Delta(\frac{1}{\gamma} w_1 w_3 + \frac{\gamma-1}{2\gamma} w_2^2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2\bar{w}_1 \Delta w_1 \\ \bar{w}_2 \Delta w_1 + \bar{w}_1 \Delta w_2 \\ \frac{1}{\gamma} \bar{w}_3 \Delta w_1 + \frac{\gamma-1}{\gamma} \bar{w}_2 \Delta w_2 + \frac{1}{\gamma} \bar{w}_1 \Delta w_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.23)$$

と表され、これは、行列

$$\bar{B} = \begin{pmatrix} 2\bar{w}_1 & 0 & 0 \\ \bar{w}_2 & \bar{w}_1 & 0 \\ \frac{1}{\gamma} \bar{w}_3 & \frac{\gamma-1}{\gamma} \bar{w}_2 & \frac{1}{\gamma} \bar{w}_1 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

を用いて

$$\Delta Q = \bar{B} \Delta W \quad (2.25)$$

と書くことができる。また、 ΔF についても同様にして、行列

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} \bar{w}_2 & \bar{w}_1 & 0 \\ \frac{\gamma-1}{\gamma} \bar{w}_3 & \frac{\gamma+1}{\gamma} \bar{w}_2 & \frac{\gamma-1}{\gamma} \bar{w}_1 \\ 0 & \bar{w}_3 & \bar{w}_2 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

⁵式 (2.22) の3番目の式は使われない。

を用いて

$$\begin{aligned}\Delta F &= F_R - F_L \\ &= \bar{C}\Delta W\end{aligned}\quad (2.27)$$

と表される。行列 \bar{B} の逆行列 \bar{B}^{-1} を用いて⁶、式 (2.25) と式 (2.27) から

$$\Delta F = \bar{C}\bar{B}^{-1}\Delta Q \quad (2.28)$$

と表すことができる。この式を式 (2.16) と比較することにより、

$$\tilde{A}(Q_L, Q_R) = \bar{C}\bar{B}^{-1} \quad (2.29)$$

と与えればよいことがわかる。実際これを計算してみると、

$$\begin{aligned}\bar{C}\bar{B}^{-1} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\gamma-3}{2}\bar{w}_2^2/\bar{w}_1^2 & (3-\gamma)\bar{w}_2/\bar{w}_1 & \gamma-1 \\ (\frac{\gamma-1}{2}\bar{w}_2^2/\bar{w}_1^2 - \bar{w}_3/\bar{w}_1)\bar{w}_2/\bar{w}_1 & \bar{w}_3/\bar{w}_1 - (\gamma-1)\bar{w}_2^2/\bar{w}_1^2 & \gamma\bar{w}_2/\bar{w}_1 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.30)$$

となるが、式 (2.23), (2.26) 等において

$$\begin{pmatrix} \bar{w}_1 \\ \bar{w}_2 \\ \bar{w}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R})/2, \\ (\sqrt{\rho_L}u_L + \sqrt{\rho_R}u_R)/2, \\ (\sqrt{\rho_L}H_L + \sqrt{\rho_R}H_R)/2 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

であることを用い、Roe 平均と呼ばれる量 \tilde{u}, \tilde{H}

$$\begin{aligned}\tilde{u} &= \bar{w}_2/\bar{w}_1 \\ &= \frac{\sqrt{\rho_L}u_L + \sqrt{\rho_R}u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}},\end{aligned}\quad (2.32)$$

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \bar{w}_3/\bar{w}_1 \\ &= \frac{\sqrt{\rho_L}H_L + \sqrt{\rho_R}H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}.\end{aligned}\quad (2.33)$$

を導入すると、

$$\bar{C}\bar{B}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ (\gamma-3)\tilde{u}^2/2 & (3-\gamma)\tilde{u} & \gamma-1 \\ \{(\gamma-1)\tilde{u}^2/2 - \tilde{H}\}\tilde{u} & \tilde{H} - (\gamma-1)\tilde{u}^2 & \gamma\tilde{u} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

⁶行列 B の行列式は、 $\det(\bar{B}) = 2\bar{w}_1^3/\gamma \neq 0$ ($\because \bar{w}_1 = (\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R})/2 > 0$) であることから、逆行列 \bar{B}^{-1} は存在する。

と表すことができる。

式 (2.34) は、式 (2.4) と同形であるので、結局、Roe 平均によって表された \tilde{u} と \tilde{H} をヤコビ行列 A に適用して

$$\tilde{A}(Q_L, Q_R) = A(\tilde{u}, \tilde{H}) \quad (2.35)$$

と求めればよいことがわかる。このような \tilde{A} は、次のように Property U を満たすことが示される。

- (i) $Q_L \rightarrow Q$ ($u_L \rightarrow u$, $H_L \rightarrow H$), $Q_R \rightarrow Q$ ($u_R \rightarrow u$, $H_R \rightarrow H$) のとき、式 (2.32) と式 (2.33) から $\tilde{u} \rightarrow u$, $\tilde{H} \rightarrow H$ となるので、 $\tilde{A}(Q_L, Q_R) = A(\tilde{u}, \tilde{H}) \rightarrow A(u, H)$ 。
- (ii) 式 (2.29) の導出により自明。
- (iii) ヤコビ行列 A の右固有ベクトルが線形独立であることから明らか。

数値流束は、式 (2.6)、(2.14)、(2.17)、(2.35) から

$$G_{k+1/2} = \frac{1}{2} \{F(Q_{k+1/2}^L) + F(Q_{k+1/2}^R)\} - \frac{1}{2} \tilde{R} |\tilde{\Lambda}| \tilde{R}^{-1} (Q_{k+1/2}^R - Q_{k+1/2}^L) \quad (2.36)$$

と求められる。ここで、 \tilde{R} , $\tilde{\Lambda}$, \tilde{R}^{-1} は、それぞれ式 (2.5), (2.6), (2.8) に対して Roe 平均を用いて評価する。音速 c も式 (2.32), (2.33) の Roe 平均から

$$\tilde{c}^2 = (\gamma - 1) \left(\tilde{H} - \frac{\tilde{u}^2}{2} \right) \quad (2.37)$$

として得られたものを用いなければならない。また、 $|\tilde{\Lambda}|$ は、

$$|\tilde{\Lambda}| = \begin{pmatrix} |\tilde{\lambda}_1| & 0 & 0 \\ 0 & |\tilde{\lambda}_2| & 0 \\ 0 & 0 & |\tilde{\lambda}_3| \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

のように固有値の絶対値をとることを意味する。ここで、固有値

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{u} - \tilde{c}, \quad \tilde{\lambda}_2 = \tilde{u}, \quad \tilde{\lambda}_3 = \tilde{u} + \tilde{c} \quad (2.39)$$

も Roe 平均から求められる。

密度の Roe 平均 $\tilde{\rho}$ は、

$$\Delta(\rho u) = \tilde{u} \Delta \rho + \tilde{\rho} \Delta u \quad (2.40)$$

という関係を満たすものとして、 \tilde{u} に Roe 平均を用いて、

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \quad (2.41)$$

と求められる。この $\tilde{\rho}$ を用いれば、

$$\Delta(\rho u^2) = \tilde{u} \Delta(\rho u) + (\tilde{\rho} u) \Delta u \quad (2.42)$$

から⁷

$$(\tilde{\rho} u) = \tilde{\rho} \tilde{u} \quad (2.43)$$

が得られ、これにより、

$$\Delta e = \frac{1}{2} \tilde{u}^2 \Delta \rho + \tilde{\rho} \tilde{u} \Delta u + \frac{\Delta p}{\gamma - 1} \quad (2.44)$$

という関係を導くことができる。なお、行列 A や Λ 、および上で定義した R , R^{-1} には密度が陽に現れないので、数値流束を求める上では密度の Roe 平均を必要としない。

Roe 法による衝撃波管問題の計算結果を図 2.2 に示す。比熱比は $\gamma = 7/5$ とし、初期条件として、 $\rho_L = 1.0$, $p_L = 1.0$, $u_L = 0$ を $i < 50$ の格子点に、 $\rho_R = 0.1$, $p_R = 0.125$, $u_R = 0$ を $i \geq 50$ の格子点に与えた。

2.5 膨張波に関する補正

近似リーマン解法である Roe 法では、Godunov 法などと異なり、セル境界のリーマン問題において生じる膨張波を単純波に置き換えて境界の物理量を求めている。このため、境界に膨張波の領域が位置する (特に、一定時間滞在する) ような状況を正しく計算することができない (図 2.3)。これは、境界の物理量の不連続を拡散させるはたらきをする膨張波が Roe 法ではとらえられていないため、本来ならば消えていくはずの境界の不連続が消えないで残ってしまうという問題である [1], [4]。このような状況は、具体的には $(\lambda_l)_L < 0 < (\lambda_l)_R$ のときに生じる ($l = 1, 2, 3$)。これを解決する方法は、そのようなセル境界では、式 (2.36) の $|\tilde{\Lambda}|$ の中で該当する成分を次のいずれかのように修正して数値流束を求めることである (Chakravarthy [3],[4],[6])。

⁷これとは異なる展開式 $\Delta(\rho u^2) = (\tilde{u}^2) \Delta \rho + \tilde{\rho} \Delta(u^2)$ から $(\tilde{u}^2) = (\sqrt{\rho_L} u_L^2 + \sqrt{\rho_R} u_R^2) / (\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R})$ を定義することもできるが、その場合には展開式の第 2 項で $\Delta(u^2) = 2\tilde{u} \Delta u$ のように u に対して (Roe 平均ではなく) 算術平均を用いなければならない。また、音速を求めるときなどにこの (\tilde{u}^2) を用いるのは誤りである。

(A) Harten と Hyman による方法。

$$\epsilon = \max(0, \lambda_l - (\lambda_l)_L, (\lambda_l)_R - \lambda_l) \quad (2.45)$$

とし、

$$|\lambda_l|_{\text{mod}} = \begin{cases} \epsilon & \text{if } |\lambda_l| \geq \epsilon \\ |\lambda_l| & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.46)$$

(B) 同じく Harten と Hyman による方法であるが、微分が連続になるように工夫したもの。式 (2.45) を用いて、

$$|\lambda_l|_{\text{mod}} = \begin{cases} \frac{1}{2}(\lambda_l^2/\epsilon + \epsilon) & \text{if } |\lambda_l| \geq \epsilon \\ |\lambda_l| & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.47)$$

(C) Chakravarthy の開発したより簡便な修正法

$$|\lambda_l|_{\text{mod}} = \begin{cases} |\lambda_l| + \frac{1}{2}\{(\lambda_l)_R - (\lambda_l)_L\} & \text{if } (\lambda_l)_L < 0 < (\lambda_l)_R \\ |\lambda_l| & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2.48)$$

付け加えられた補正項が人工粘性としてはたらき、不連続の拡散を疑似的に再現する (図 2.4, 2.5, 2.6)。

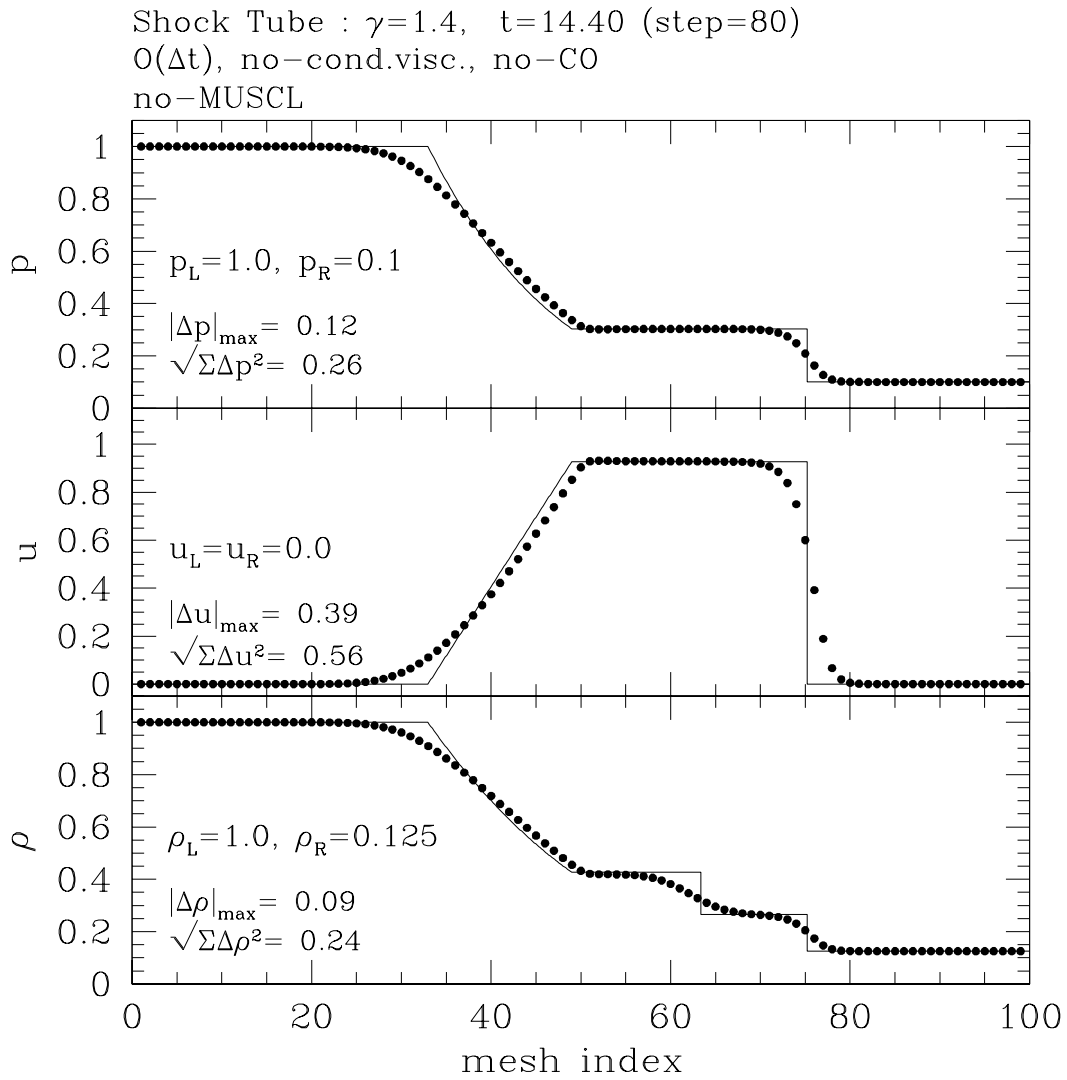


図 2.2: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。時間と空間に関して 1 次精度の Roe 法で、条件的人工粘性は入れていない。初期条件等は図中に示した。

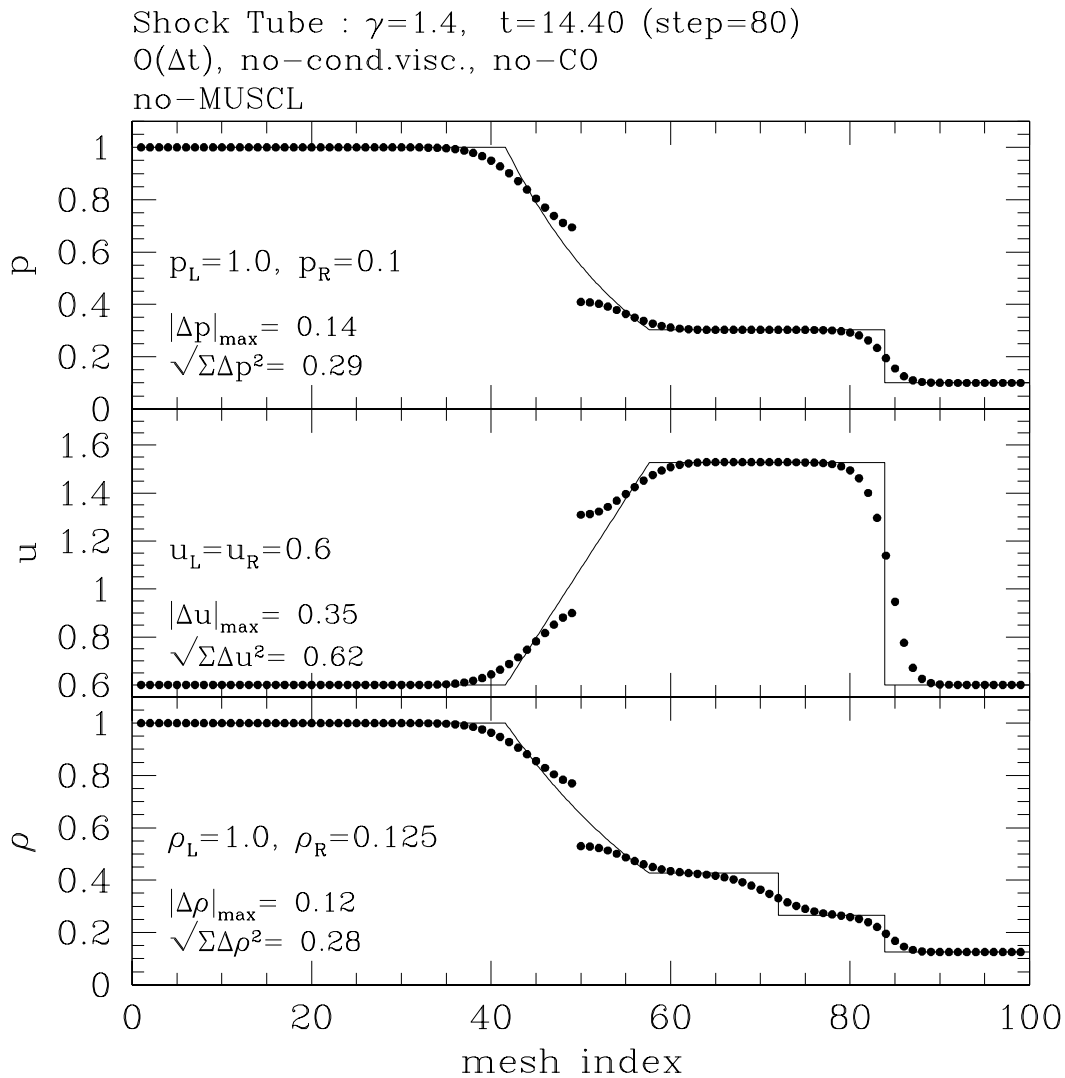


図 2.3: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。時間と空間に関して 1 次精度の Roe 法で、条件的人工粘性は入れていない。初期条件等は図中に示した。図 2.2 の結果を速度 $u = 0.6$ で右に平行移動させたものにならないが、mesh=50 での初期不連続の痕跡が膨張波領域にはっきりと残ってしまう。

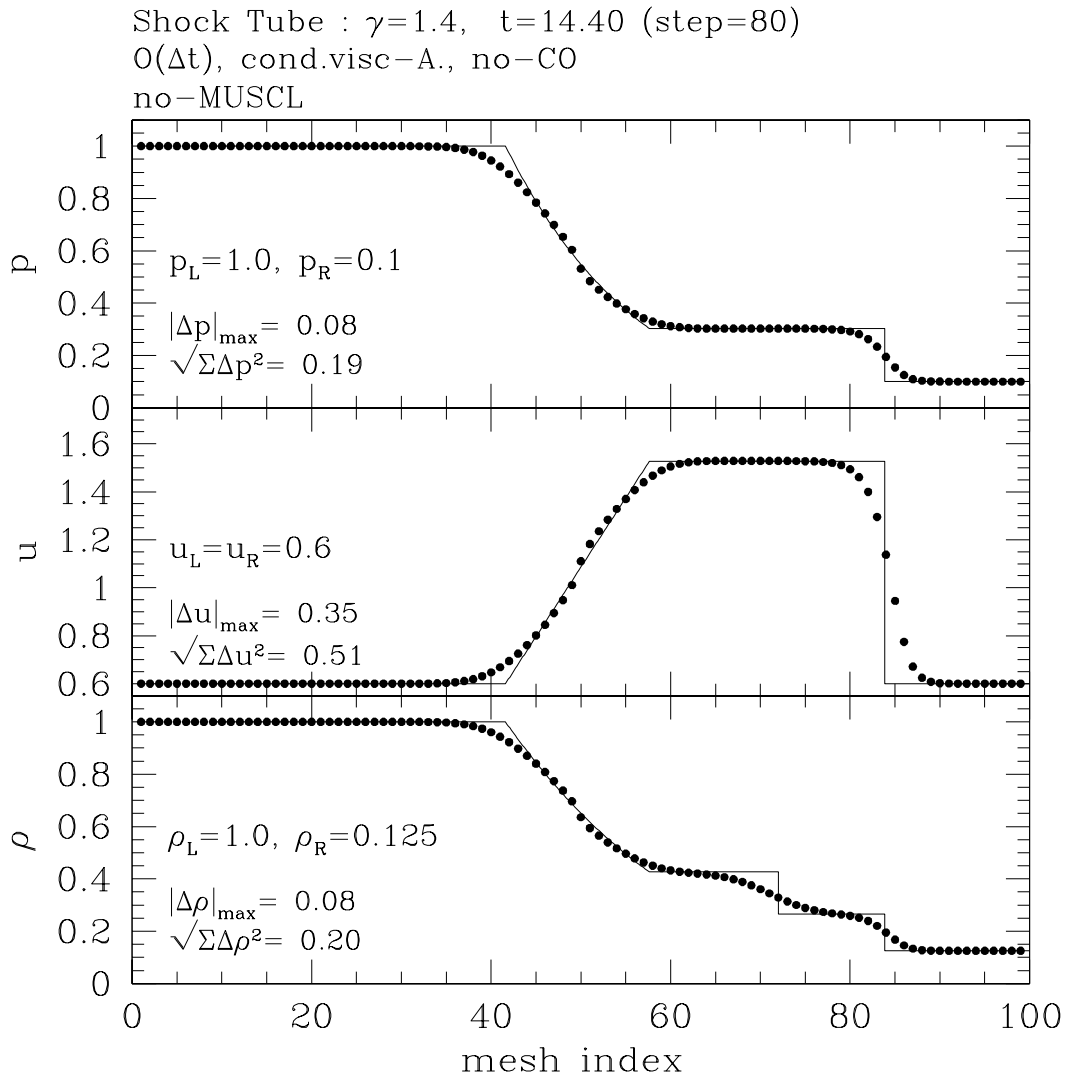


図 2.4: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。式 (2.46) の条件的人工粘性を入れた。それ以外では 図 2.3 の計算と同じ。mesh=50 での初期不連続の痕跡は少ししか残らない。

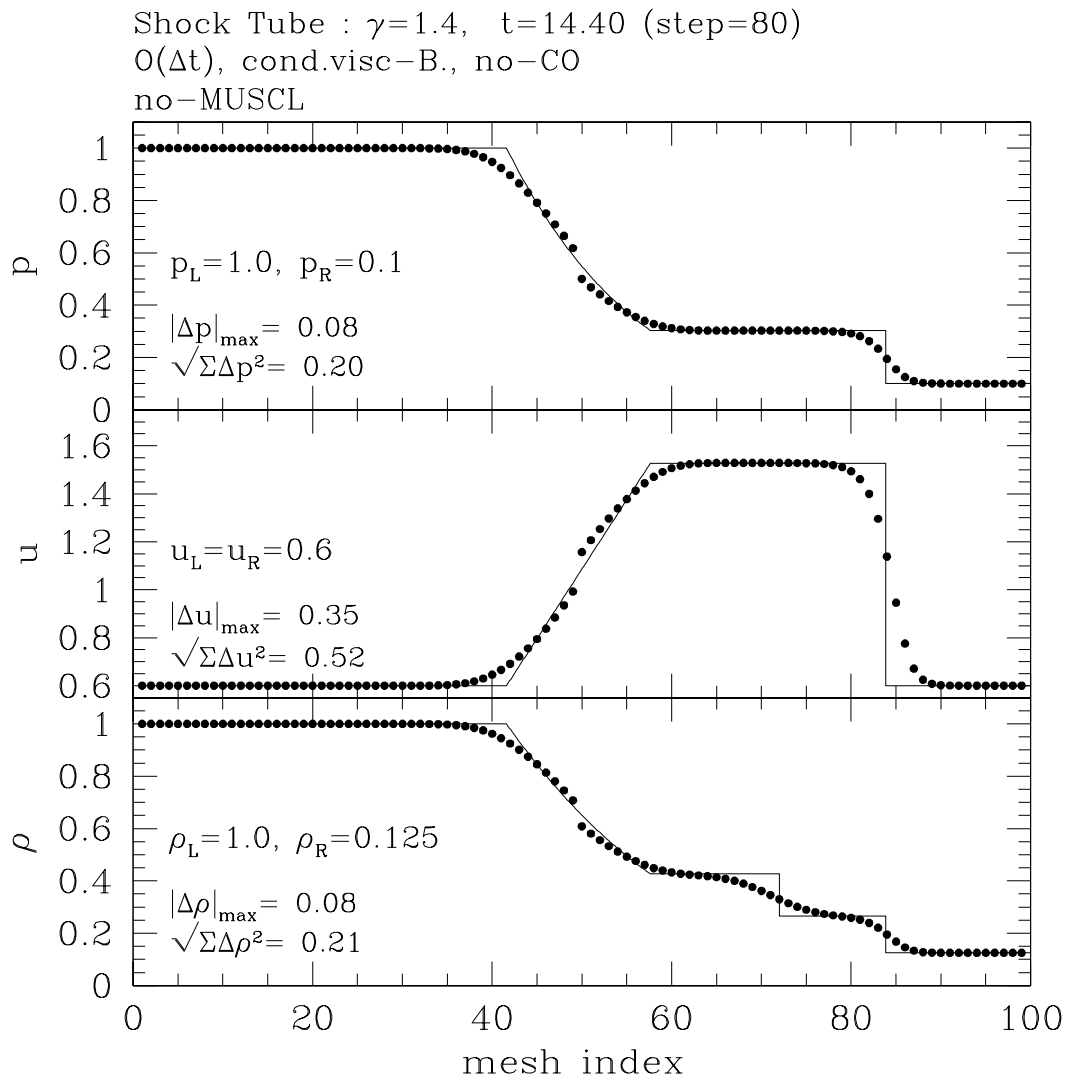


図 2.5: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。式 (2.47) の条件的人工粘性を入れた。それ以外では 図 2.3 の計算と同じ。mesh=50 での初期不連続の痕跡は 図 2.4 より少し多めに残る。

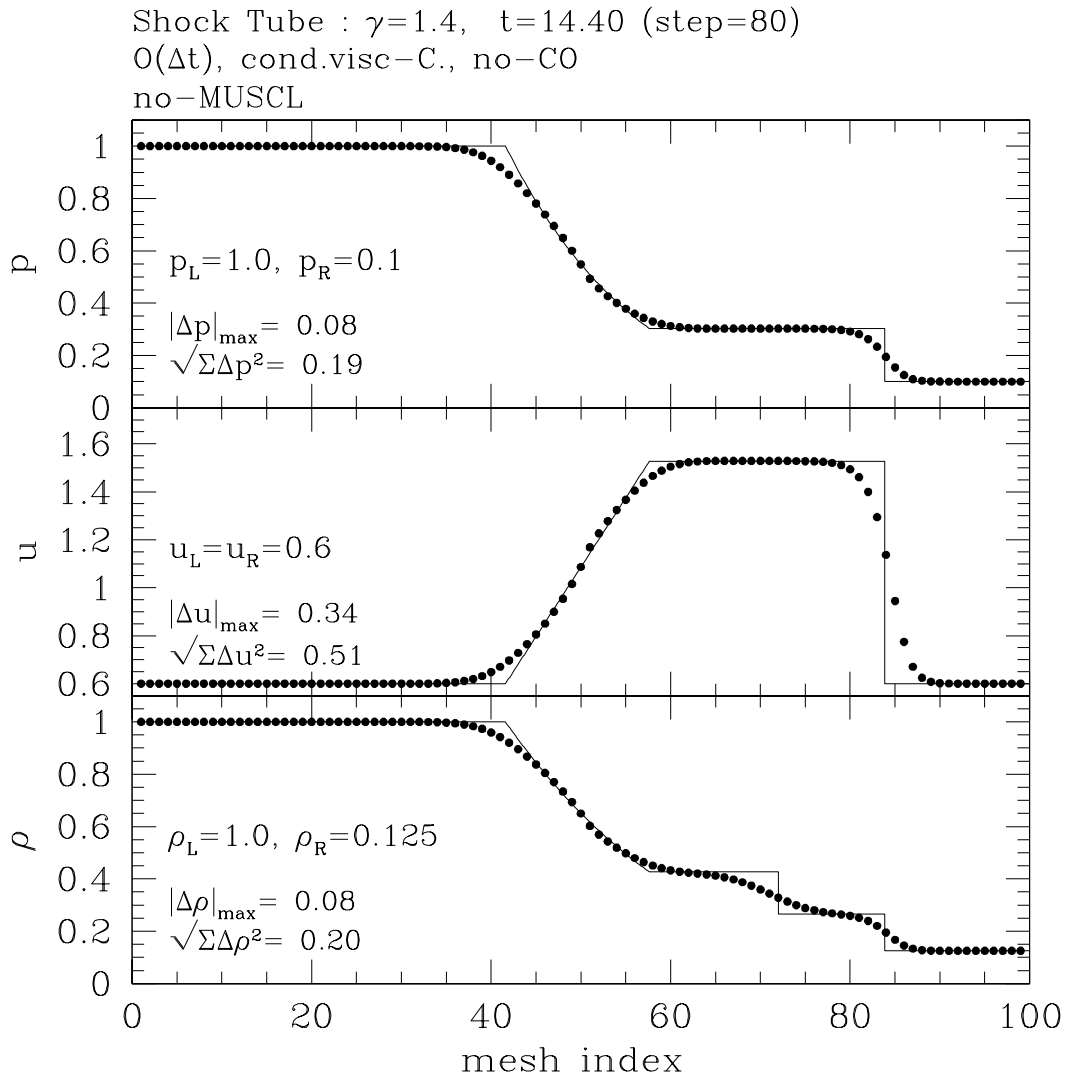


図 2.6: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。式 (2.48) の条件的人工粘性を入れた。それ以外では 図 2.3 の計算と同じ。mesh=50 での初期不連続の痕跡は残らない。

第3章 空間高次精度化

空間的な精度を高めるための方法は、数値流束 $G_{k+1/2}$ を高い精度で求めることに相当するが、それには

- A) セル境界 $k + 1/2$ の両側の物理量 $Q_{k+1/2}^L, Q_{k+1/2}^R$ を、境界に接するセルでの値そのものとするのではなく、さらに隣のセルでの値 ($Q(k-1), Q(k+2)$ など) を用いて定めたセル内部の物理量の分布関数によって求め、その内挿により数値流束を得る方法、
- B) セル境界 $k + 1/2$ の両側の物理量 $Q_{k+1/2}^L, Q_{k+1/2}^R$ を境界に接するセルでの値 ($Q_{k+1/2}^L = Q(k), Q_{k+1/2}^R = Q(k+1)$) として1次精度の数値流束を求めておき、隣のセル境界 ($k - 1/2, k + 3/2$ など) での1次精度数値流束も用いてセル内部の数値流束の分布関数を求め、その内挿から高次精度のセル境界での数値流束を得る方法

という2つがある。前者は流束を評価する前の段階で高次精度化することから、pre-processing 法と呼ばれることがあるのに対して、後者は各セル境界で1次精度で求めた数値流束を内挿処理して高次精度化することから post-processing 法と呼ばれることがある。ここでは、前者の代表的な一つ MUSCL 法と後者の一つ Chakravarthy-Osher の方法を紹介する。いずれも、単純な内挿だけでは数値振動が発生してしまうので、それを避けるために内挿を制限する関数が用いられる。その制限の基準となるものは、TVD である。

3.1 MUSCL 法

3.1.1 内挿法

ここでは、簡単のため

$$\frac{\partial U}{\partial t} + a \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

という微分方程式を差分化したときのセル境界の値を求める方法について考えることにする。

物理量 U の分布関数を $x_{k-1/2} \leq x \leq x_{k+1/2}$ の範囲で

$$U(x) = U(x_k) + (x - x_k)U'(x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^2U''(x_k) + O(\Delta x^3) \quad (3.2)$$

とテーラー展開する¹。MUSCL 法では、関数 $U(x)$ のセルでの平均値、すなわち $x_{k-1/2} \leq x \leq x_{k+1/2}$ の範囲での平均値が、セルでの値に等しいとする。

$$U_k = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} U(x) dx. \quad (3.3)$$

この積分を実行すると

$$U_k = U(x_k) + \frac{\Delta x^2}{24}U''(x_k) + O(\Delta x^4) \quad (3.4)$$

と求められる。関数 $U(x)$ の1階、2階導関数は

$$U'(x) = U'(x_k) + (x - x_k)U''(x_k) + O(\Delta x^2) \quad (3.5)$$

$$U''(x) = U''(x_k) + O(\Delta x^2) \quad (3.6)$$

であるが、これらのセルでの平均値 U'_k, U''_k は、積分により

$$U'_k = U'(x_k) + O(\Delta x^2) \quad (3.7)$$

$$U''_k = U''(x_k) + O(\Delta x^2) \quad (3.8)$$

となる。式 (3.2) から $U(x_k), U'(x_k), U''(x_k)$ を消去すると、

$$U(x) = U_k + (x - x_k)U'_k + \frac{1}{2}\{(x - x_k)^2 - \frac{\Delta x^2}{12}\}U''_k + O(\Delta x^3) \quad (3.9)$$

と表される。セル境界での物理量は、 $U_{k+1/2}^L = U(x_{k+1/2}), U_{k-1/2}^R = U(x_{k-1/2})$ と定義すれば、

$$U_{k+1/2}^L = U_k + \frac{\Delta x}{2}U'_k + \frac{\Delta x^2}{12}U''_k + O(\Delta x^3) \quad (3.10)$$

$$U_{k-1/2}^R = U_k - \frac{\Delta x}{2}U'_k + \frac{\Delta x^2}{12}U''_k + O(\Delta x^3) \quad (3.11)$$

と求められる。これらの式を一般化して、セル境界の物理量は、

$$U_{k+1/2}^L = U_k + \frac{\Delta x}{2}U'_k + \frac{\kappa\Delta x^2}{4}U''_k \quad (3.12)$$

$$U_{k-1/2}^R = U_k - \frac{\Delta x}{2}U'_k + \frac{\kappa\Delta x^2}{4}U''_k \quad (3.13)$$

¹プライム記号は微分を表し、 $\Delta x = x_{k+1/2} - x_{k-1/2}$ とした。このような近似式に基づくものを2次 MUSCL 法と呼ぶ。さらに高次までとれば3次以上の MUSCL 法が得られるが、そのときには内挿に必要なセルの数が増える。

と定義される²。

式 (3.3) と差分近似

$$U'(x) = \frac{U(x + \Delta x) - U(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (3.14)$$

$$U''(x) = \frac{U(x + \Delta x) - 2U(x) + U(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (3.15)$$

を用いると、 U'_k, U''_k は

$$U'_k = \frac{1}{2\Delta x}(U_{k+1} - U_{k-1}) + O(\Delta x^2) \quad (3.16)$$

$$U''_k = \frac{1}{\Delta x^2}(U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}) + O(\Delta x^2) \quad (3.17)$$

と求められ、これによって、式 (3.12), (3.13) と同じ精度で

$$U_{k+1/2}^L = U_k + \frac{1 - \kappa}{4}\Delta U_{k-1/2} + \frac{1 + \kappa}{4}\Delta U_{k+1/2} \quad (3.18)$$

$$U_{k-1/2}^R = U_k - \frac{1 - \kappa}{4}\Delta U_{k+1/2} - \frac{1 + \kappa}{4}\Delta U_{k-1/2} \quad (3.19)$$

が得られる。ここで、 $\Delta U_{k+1/2} = U_{k+1} - U_k$ である。

3.1.2 制限関数

式 (3.18), (3.19) が MUSCL 法の基礎となる。しかし、式 (3.18) によると

$$U_{k+1} - U_{k+1/2}^L = \frac{3 - \kappa}{4}\Delta U_{k+1/2} - \frac{1 - \kappa}{4}\Delta U_{k-1/2} \quad (3.20)$$

であるが、たとえば $\Delta U_{k+1/2} = U_{k+1} - U_k > 0$ で $\kappa < 1$ のとき、大きい $\Delta U_{k-1/2}$ に対して $U_k < U_{k+1} < U_{k+1/2}^L$ となり、内挿によって余計な極大が発生してしまう。したがって、式 (3.18) や 式 (3.19) のままでセル境界の物理量を求めるのではなく、これらの式で U_k から延長するときの傾きを示す $\Delta U_{k-1/2}$ や $\Delta U_{k+1/2}$ の部分に極大が発生しないように、次のような修正を施す必要がある。

$$U_{k+1/2}^L = U_k + \frac{1 - \kappa}{4}\Phi(r)\Delta U_{k-1/2} + \frac{1 + \kappa}{4}\Phi(1/r)\Delta U_{k+1/2} \quad (3.21)$$

$$U_{k-1/2}^R = U_k - \frac{1 - \kappa}{4}\Phi(1/r)\Delta U_{k+1/2} - \frac{1 + \kappa}{4}\Phi(r)\Delta U_{k-1/2}. \quad (3.22)$$

² $\kappa = 1/3$ のとき、3 次精度となる。

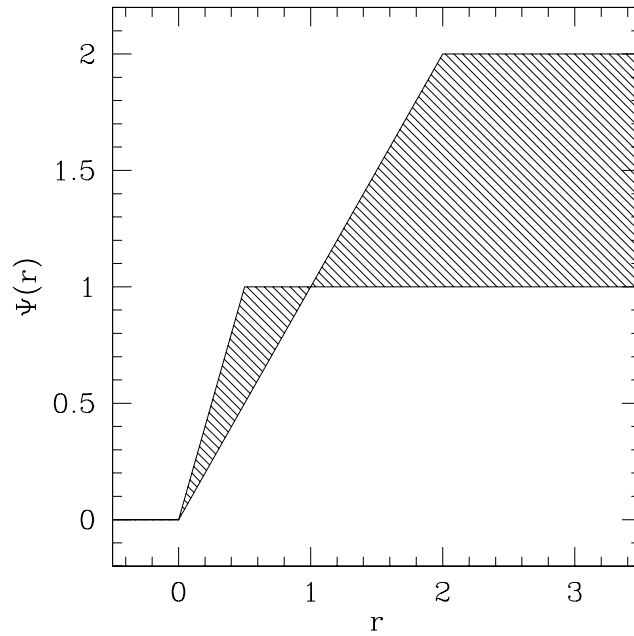


図 3.1: 時間 2 次精度の TVD 条件による $\Psi(r)$ の取り得る領域 (斜線部分)。

ここで導入した Φ を制限関数と呼び、セル k に隣接するセル $k-1, k+1$ との間
の物理量の差分の比に依存するとして、引数に用いられる r は

$$r = \frac{\Delta U_{k+1/2}}{\Delta U_{k-1/2}} \quad (3.23)$$

ととられる。また、式 (3.21), (3.22) は、

$$U_{k+1/2}^L = U_k + \frac{1}{2}\Psi(r)\Delta U_{k-1/2} \quad (3.24)$$

$$U_{k-1/2}^R = U_k - \frac{1}{2}\Psi(1/r)\Delta U_{k+1/2} \quad (3.25)$$

と表すこともできる。ここで、

$$\Psi(r) = \frac{1-\kappa}{2}\Phi(r) + \frac{1+\kappa}{2}r\Phi(1/r) \quad (3.26)$$

である。

関数 $\Psi(r)$ の取り得る範囲は、時間 2 次精度に拡張したときの TVD 条件³から求
められ、図 3.1.2 の斜線の領域のようになる。このような $\Psi(r)$ を用いれば、セル境

³変数 U に対して TVD 条件を課すことができるのは、この変数が式 (3.1) に従うからである。

界に極値を持たないための条件 $U_k \leq U_{k+1/2}^L \leq U_{k+1}$ あるいは $U_k \geq U_{k+1/2}^L \geq U_{k+1}$ を満たすことは、 $\Psi(r) < 2r$ から示される。

制限関数の代表的なものを示す。

(A) Chakravarthy と Osher の minmod 制限関数

$$\Phi(r) = \text{minmod}(r, b). \quad (3.27)$$

ここで、

$$\text{minmod}(x, y) = \text{sgn}(x) \max[0, \min\{|x|, \text{sgn}(x)y\}] \quad (3.28)$$

であり、 b は $1 \leq b \leq (3 - \kappa)/(1 - \kappa)$ の定数である。

(B) Roe の superbee 制限関数

$$\Phi(r) = \text{superbee}(r, b). \quad (3.29)$$

ここで、

$$\text{superbee}(x, y) = \max\{0, \min(xy, 1), \min(x, y)\} \quad (3.30)$$

であり、 b は $1 \leq b \leq 2$ の定数である。

式 (3.27) や (3.29) で用いられる b は圧縮パラメータ (compression parameter) と呼ばれ、 $b > 1$ を与えることにより、衝撃波や接触不連続面を鋭くとらえることができる。なお、 $\text{sgn}(x)$ は x の符号を求める関数で、FORTRAN では標準関数により $\text{sign}(1.0, x)$ と記述すればよい。

実際の数値計算では $r = 0$ のとき $1/r$ によって計算が破綻しないように注意する。たとえば、minmod 制限関数を採用する場合には、

$$\text{minmod}\left(\frac{p}{q}, b\right) q = \text{minmod}(p, bq) \quad (3.31)$$

という関係が成り立つことから、

$$\text{limiter}(x, y, b) = \text{minmod}(x, by) \quad (3.32)$$

とにおいて、

$$\begin{aligned} U_{k+1/2}^L &= U_k + \frac{1 - \kappa}{4} \text{limiter}(\Delta U_{k+1/2}, \Delta U_{k-1/2}, b) \\ &\quad + \frac{1 + \kappa}{4} \text{limiter}(\Delta U_{k-1/2}, \Delta U_{k+1/2}, b) \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$U_{k-1/2}^R = U_k - \frac{1-\kappa}{4} \text{limiter}(\Delta U_{k-1/2}, \Delta U_{k+1/2}, b) - \frac{1+\kappa}{4} \text{limiter}(\Delta U_{k+1/2}, \Delta U_{k-1/2}, b) \quad (3.34)$$

という表式を計算に用いる。また、superbee 制限関数の場合には、式 (3.33), (3.34) に対して

$$\text{limiter}(x, y, b) = \text{sgn}(y) \max[0, \min\{\text{sgn}(y) b x, |y|\}, \min\{\text{sgn}(y) x, b|y|\}] \quad (3.35)$$

という表式を用いればよい。

3.1.3 内挿に用いる物理量

以上のようにして、制限関数を用いて物理量を内挿することによりセル境界での値を決めることができる。ところが、実際に流体力学の問題に適用しようとする際に、保存変数 $(\rho, \rho u, e)$ や基本変数 (ρ, u, p) などの幾通りもの変数の組があり、内挿に用いる変数の選び方が一意に定まらないように思える。しかし、制限関数が TVD 条件を満足するように選ばれたということに注意すれば、内挿に用いるべき「物理量」は、特性変数であることがわかる。なぜなら、TVD 条件を課すためには、微分方程式が式 (3.1) のように表されている必要があるからである。実際、式 (2.3), (2.6) から

$$R^{-1} \frac{\partial Q}{\partial t} + \Lambda R^{-1} \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (3.36)$$

となり、微小な Δt と Δx で R^{-1} を一定とおき、特性変数 $W = R^{-1}Q$ によって

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial W}{\partial x} = 0 \quad (3.37)$$

とできる⁴。また、この変数を用いて内挿を行う際に注意しなければならないのは、行列 R, R^{-1}, Λ は場所によって異なるが、式 (2.3) をセル k に適用する際には、

$$\frac{\partial Q_k}{\partial t} + A_k \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_k = 0 \quad (3.38)$$

とするので、セル k を元に内挿を行う場合にはセル k での物理量 Q_k から求められた行列 R_k, R_k^{-1}, Λ_k を用いなければならないということである。

⁴Roe 平均を導く際に用いた W ではない。

以上のことから、セル境界での保存変数 $Q_{k+1/2}^L$, $Q_{k-1/2}^R$ は、特性変数の差分

$$\begin{pmatrix} (\Delta w_1)_{j+1/2} \\ (\Delta w_2)_{j+1/2} \\ (\Delta w_3)_{j+1/2} \end{pmatrix} = \Delta W_{j+1/2} = R_k^{-1} \Delta Q_{j+1/2} \quad (3.39)$$

($j = k - 1, k$) を各成分について制限関数を使って内挿することによって、

$$\begin{aligned} Q_{k+1/2}^L &= Q_k + \frac{1-\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{(\Delta w_i)_{k+1/2}, (\Delta w_i)_{k-1/2}, b\} r_i \\ &\quad + \frac{1+\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{(\Delta w_i)_{k-1/2}, (\Delta w_i)_{k+1/2}, b\} r_i \quad (3.40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_{k-1/2}^R &= Q_k - \frac{1-\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{(\Delta w_i)_{k-1/2}, (\Delta w_i)_{k+1/2}, b\} r_i \\ &\quad - \frac{1+\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{(\Delta w_i)_{k+1/2}, (\Delta w_i)_{k-1/2}, b\} r_i \quad (3.41) \end{aligned}$$

と求められる。ここで、 r_i ($i = 1, 2, 3$) はセル k で評価された右固有ベクトル

$$(r_1 \ r_2 \ r_3) = R_k \quad (3.42)$$

であり、 R_k^{-1} もセル k で評価されていることに注意しなければならない⁵。

数値計算では、式 (3.40), (3.41) を使って、まずすべての k に対して $Q_{k+1/2}^L$ と $Q_{k-1/2}^R$ を求めておく。その次に、数値流束 $G_{k+1/2}$ を、 $Q_{k+1/2}^L$ と $Q_{k-1/2}^R$ を式 (2.36) に代入することにより計算する。このとき、数値流束の $\tilde{R}|\tilde{\Lambda}|\tilde{R}^{-1}$ は、 $Q_{k+1/2}^L$ と $Q_{k-1/2}^R$ の Roe 平均によって求める。こうして求めた数値流束は空間 2 次精度のもの $G_{k+1/2}^{(2)}$ となる ($\kappa = 1/3$ では 3 次精度)。

3.2 Chakravarthy-Osher の方法

Chakravarthy と Osher による方法では、空間 1 次精度で求められた数値流束を内挿することにより高次精度の数値流束を得る。

導出を省略すると、空間 2 次精度の数値流束 $G_{k+1/2}^{(2)}$ は

$$G_{k+1/2}^{(2)} = G_{k+1/2} + \frac{1-\kappa}{4} \text{limiter}(\Delta F_{k-1/2}^+, \Delta F_{k+1/2}^+, b)$$

⁵ $Q_{k+1/2}^R$ を求める際には、セル $k+1$ での行列を用いる。

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1 + \kappa}{4} \text{limiter}(\Delta F_{k+1/2}^+, \Delta F_{k-1/2}^+, b) \\
 & - \frac{1 - \kappa}{4} \text{limiter}(\Delta F_{k+3/2}^-, \Delta F_{k+1/2}^-, b) \\
 & - \frac{1 + \kappa}{4} \text{limiter}(\Delta F_{k+1/2}^-, \Delta F_{k+3/2}^-, b) \quad (3.43)
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、前節で与えた制限関数 $\text{limiter}(x, y, b)$ が用いられる。右辺の各項には空間1次精度で求めたものを用いる。セル境界の物理量は $Q_{k+1/2}^L = Q_k$, $Q_{k+1/2}^R = Q_{k+1}$ とすればよく、

$$G_{k+1/2} = \frac{1}{2} \{F(Q_k) + F(Q_{k+1}) - (\Delta F_{k+1/2}^+ - \Delta F_{k+1/2}^-)\} \quad (3.44)$$

である。流束差の評価に Roe 法を採用すれば、式 (3.43), (3.44) の $\Delta F_{j+1/2}^\pm$ ($j = k-1, k, k+1$) は、 $\Delta Q_{j+1/2} = Q_{j+1} - Q_j$ において

$$\begin{aligned}
 \Delta F_{j+1/2}^\pm &= A_{k+1/2}^\pm \Delta Q_{j+1/2} \\
 &= (R\Lambda^\pm R^{-1})_{k+1/2} \Delta Q_{j+1/2} \\
 &= R_{k+1/2} \Lambda_{k+1/2}^\pm R_{k+1/2}^{-1} \Delta Q_{j+1/2}
 \end{aligned}$$

と求められる。このとき、 $\Delta F_{k-1/2}^\pm$ や $\Delta F_{k+3/2}^\pm$ に対しても、セル境界 $k+1/2$ での Roe 平均から得た行列 $A_{k+1/2}$, $R_{k+1/2}$, $\Lambda_{k+1/2}$, $R_{k+1/2}^{-1}$ が使われることに注意する。行列 $\Lambda_{k+1/2}^\pm$ は、 $k+1/2$ での固有値 λ_i ($i = 1, 2, 3$) により

$$\Lambda_{k+1/2}^\pm = \begin{pmatrix} \lambda_1^\pm & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^\pm & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^\pm \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_1 \pm |\lambda_1|}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\lambda_2 \pm |\lambda_2|}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda_3 \pm |\lambda_3|}{2} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

とする。制限関数は、右固有行列 R を乗じる前のベクトルの各成分に対して作用させる。すなわち、

$$(r_1 \ r_2 \ r_3) = R_{k+1/2} \quad (3.46)$$

である右固有ベクトル r_i と特性変数の差分

$$\begin{pmatrix} (\Delta w_1)_{j+1/2} \\ (\Delta w_2)_{j+1/2} \\ (\Delta w_3)_{j+1/2} \end{pmatrix} = \Delta W_{j+1/2} = R_{k+1/2}^{-1} \Delta Q_{j+1/2} \quad (3.47)$$

によって、式 (3.43) に現れる $\text{limiter}(\Delta F_{j+1/2}^\pm, \Delta F_{m+1/2}^\pm, b)$ ($j, m = k-1, k, k+1$) を

$$\text{limiter}(\Delta F_{j+1/2}^\pm, \Delta F_{m+1/2}^\pm, b) = \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{\lambda_i^\pm (\Delta w_i)_{j+1/2}, \lambda_i^\pm (\Delta w_i)_{m+1/2}, b\} r_i \quad (3.48)$$

と評価する。これもやはり、式 (3.37) に基づいた TVD 条件から流束が制限され
ことによる。なお、 $\kappa = 1/3$ のとき、空間 3 次精度となる。

以上をまとめると Chakravarthy-Osher の方法の高次精度数値流束は、該当する
セル境界 $k + 1/2$ の Roe 平均によって表された行列を用いて、

$$\begin{aligned}
 G_{k+1/2}^{(2)} = G_{k+1/2} &+ \frac{1-\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{\lambda_i^+(\Delta w_i)_{k-1/2}, \lambda_i^+(\Delta w_i)_{k+1/2}, b\} r_i \\
 &+ \frac{1+\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{\lambda_i^+(\Delta w_i)_{k+1/2}, \lambda_i^+(\Delta w_i)_{k-1/2}, b\} r_i \\
 &- \frac{1-\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{\lambda_i^-(\Delta w_i)_{k+3/2}, \lambda_i^-(\Delta w_i)_{k+1/2}, b\} r_i \\
 &- \frac{1+\kappa}{4} \sum_{i=1}^3 \text{limiter}\{\lambda_i^-(\Delta w_i)_{k+1/2}, \lambda_i^-(\Delta w_i)_{k+3/2}, b\} r_i
 \end{aligned}
 \tag{3.49}$$

と求められる。

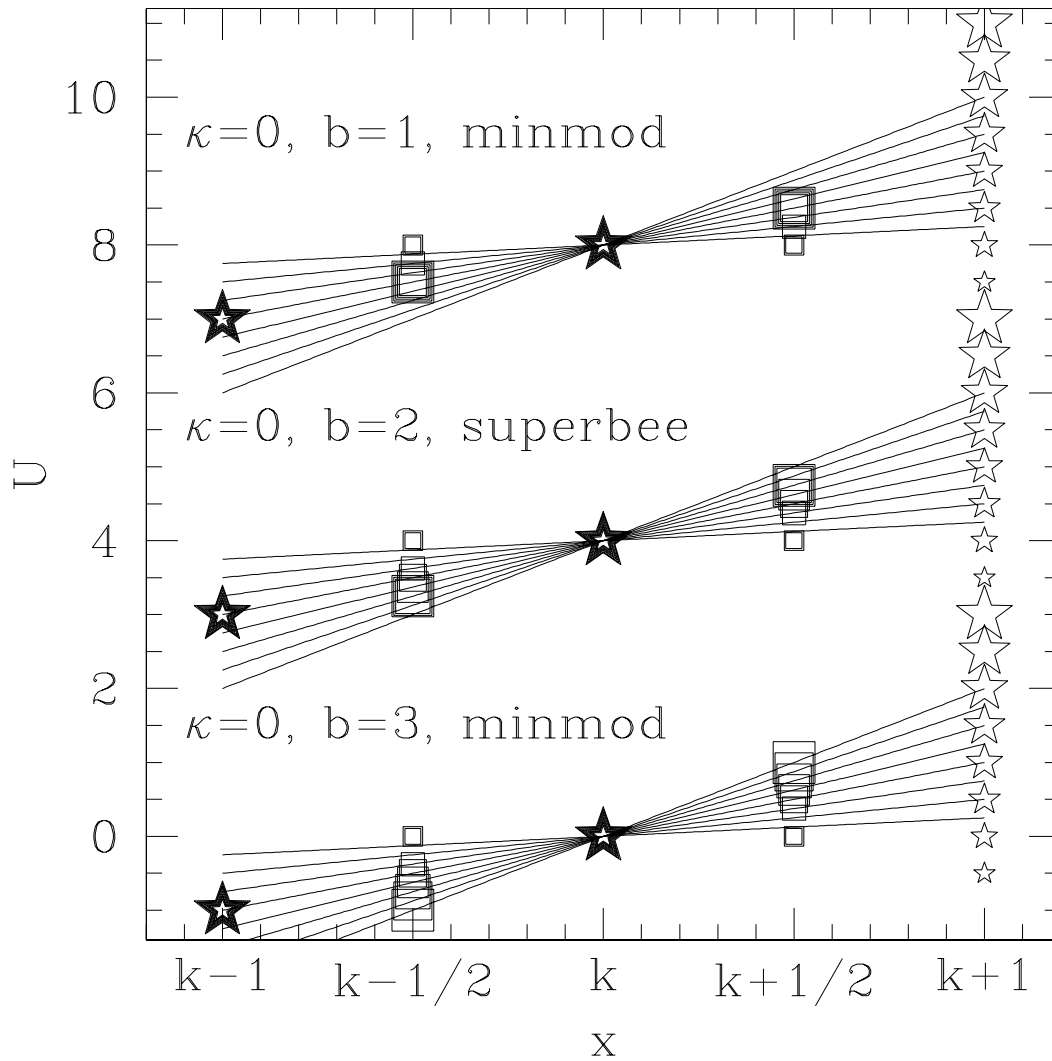


図 3.2: MUSCL 法から求められた境界での値。記号のものが求められた $U_{k-1/2}^R$ と $U_{k+1/2}^L$ で、記号はセルに与えた値 U_{k-1}, U_k, U_{k+1} である。 $\kappa = 0$ と固定し、 U_{k+1} と b や制限関数を変えた。制限関数を施さない場合の内挿 (物理量の分布) を実線で表した。

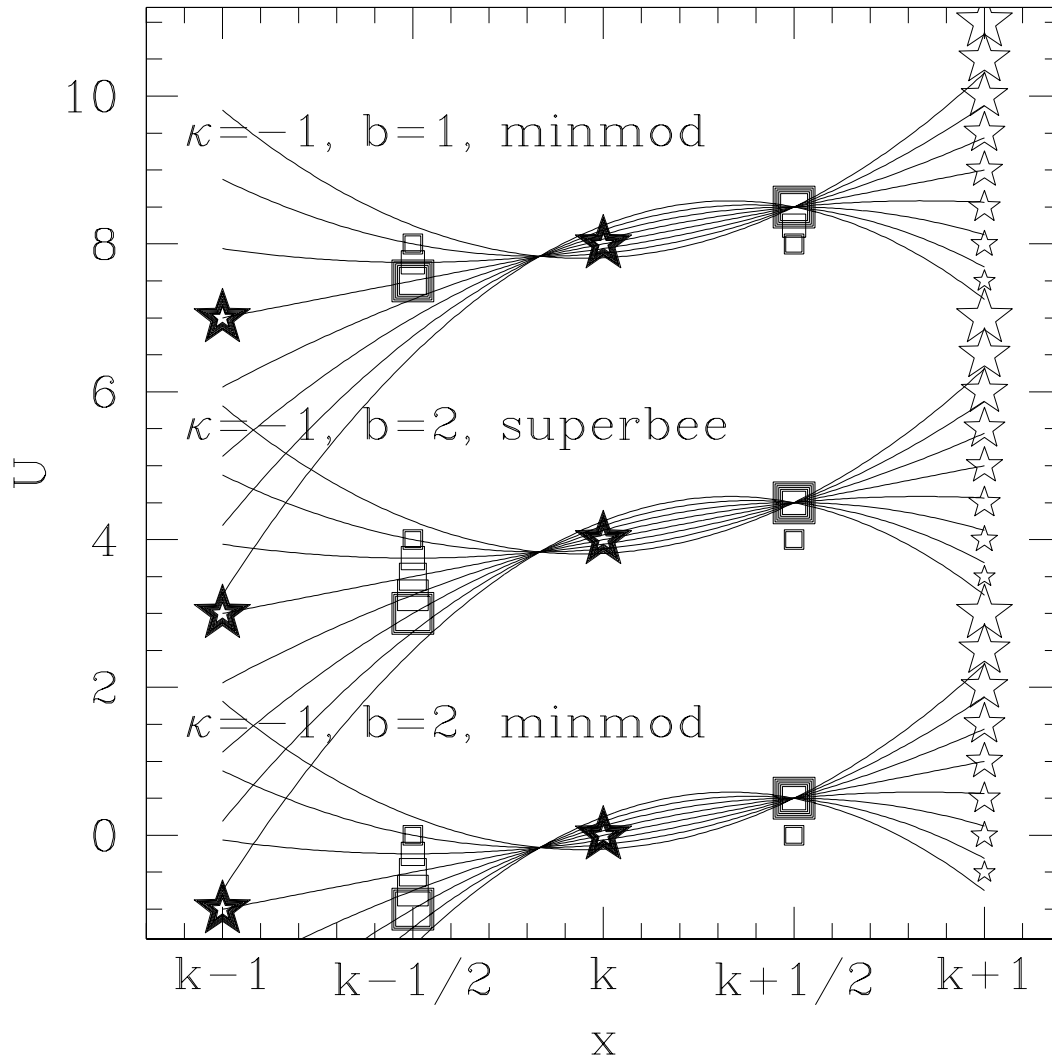


図 3.3: MUSCL 法から求められた境界での値。 $\kappa = -1$ とした。

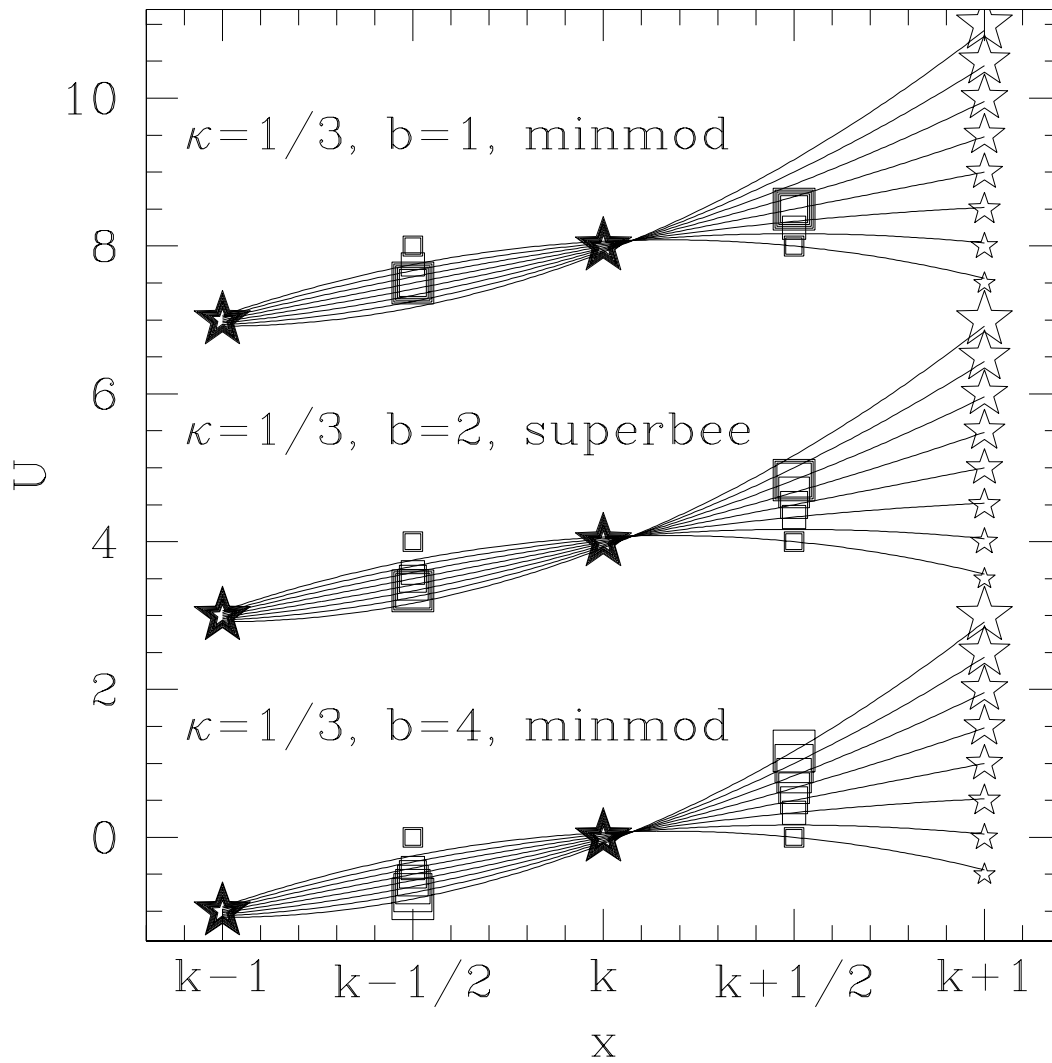


図 3.4: MUSCL 法から求められた境界での値。 $\kappa = 1/3$ とした。

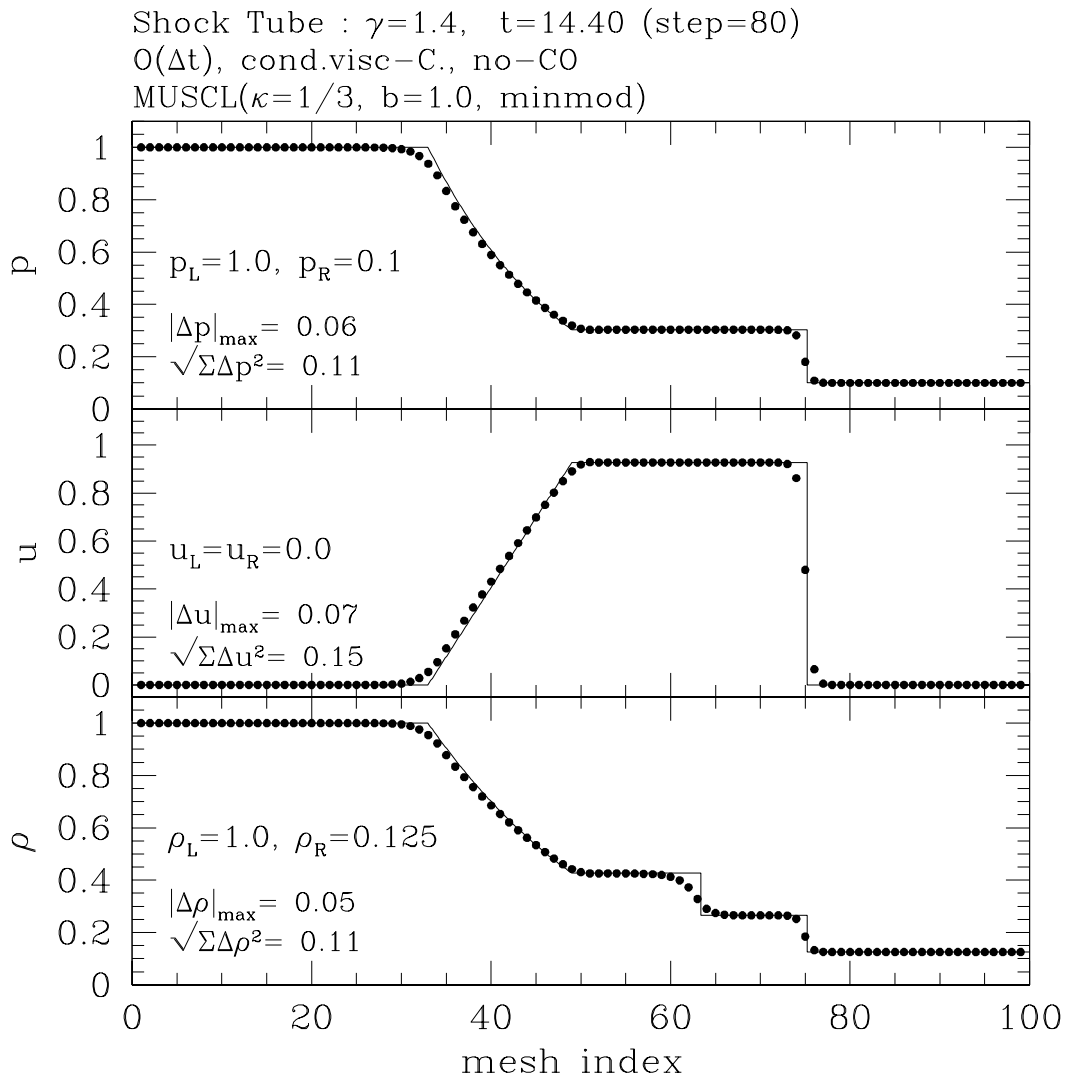


図 3.5: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。特性変数に対して MUSCL を適用し、制限関数に minmod を用いて ($b=1$)、Roe 法により数値流束を計算した。時間に関しては 1 次精度、空間に関しては 3 次精度である。式 (2.48) の条件の人工粘性を入れた。初期条件等は図中に示した。

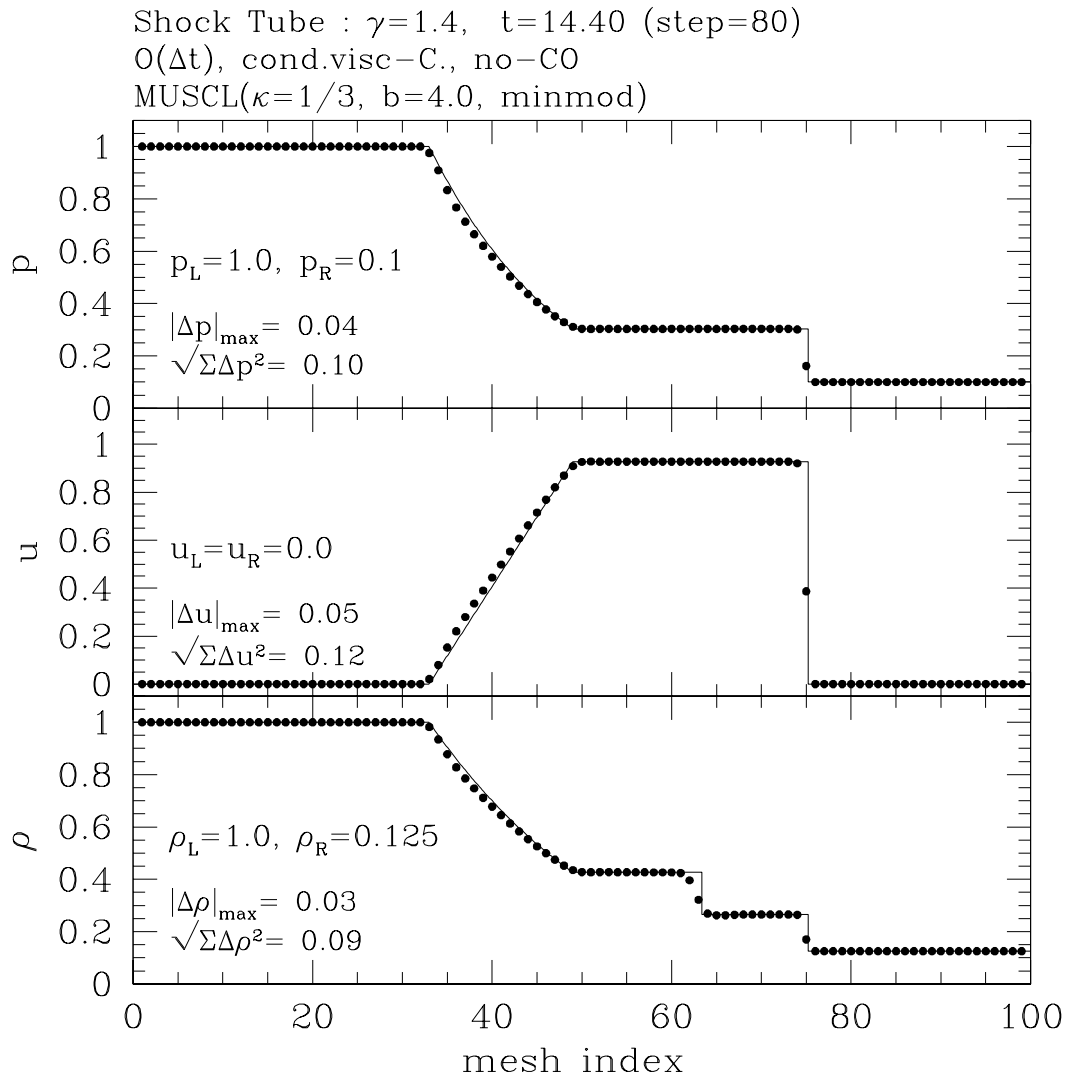


図 3.6: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。minmod で圧縮パラメータを $b=4$ にとった以外は図 3.5 と同じ。

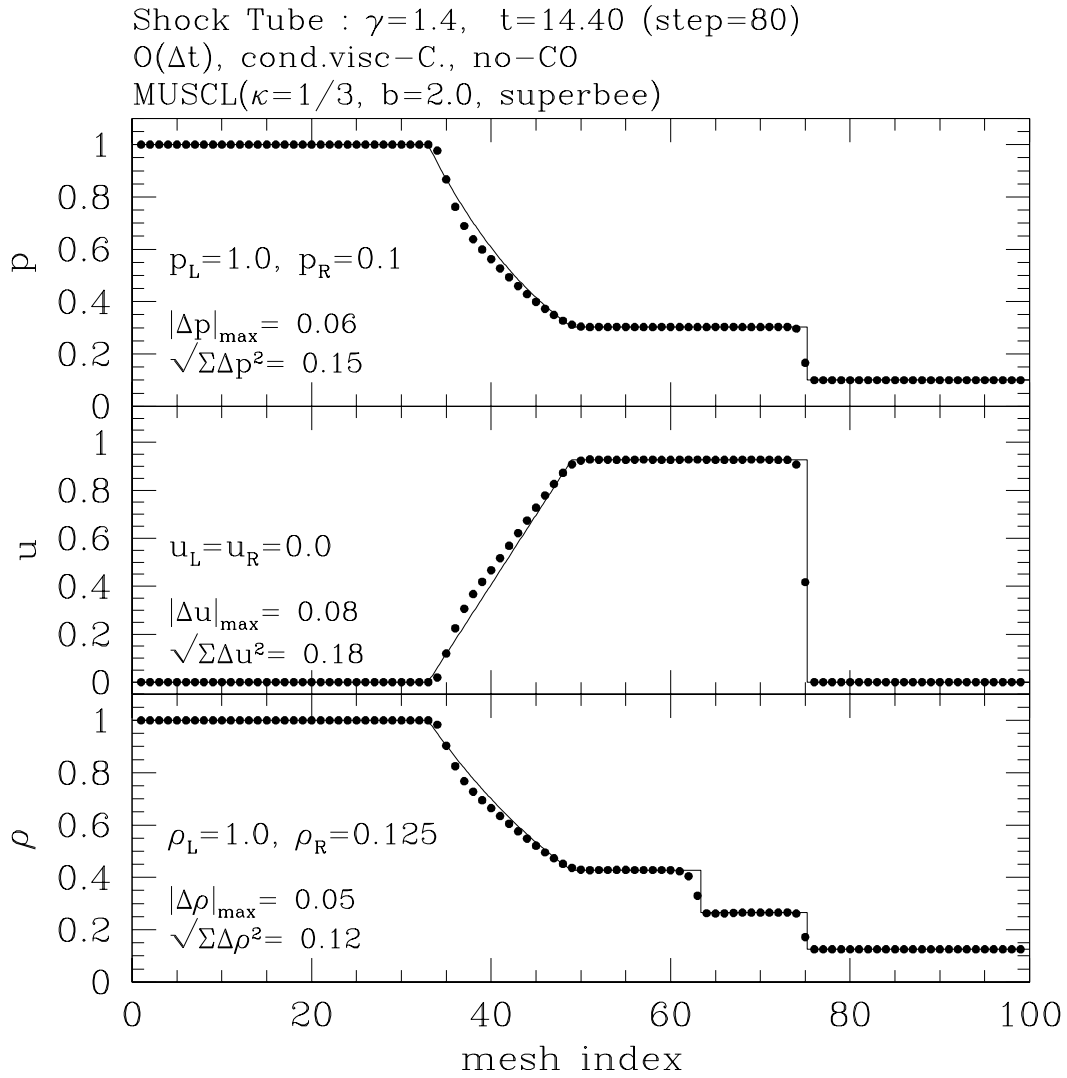


図 3.7: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。MUSCL の適用で、制限関数には superbee ($b = 2$) を用いた。それ以外では、図 3.5 の計算と同じ。

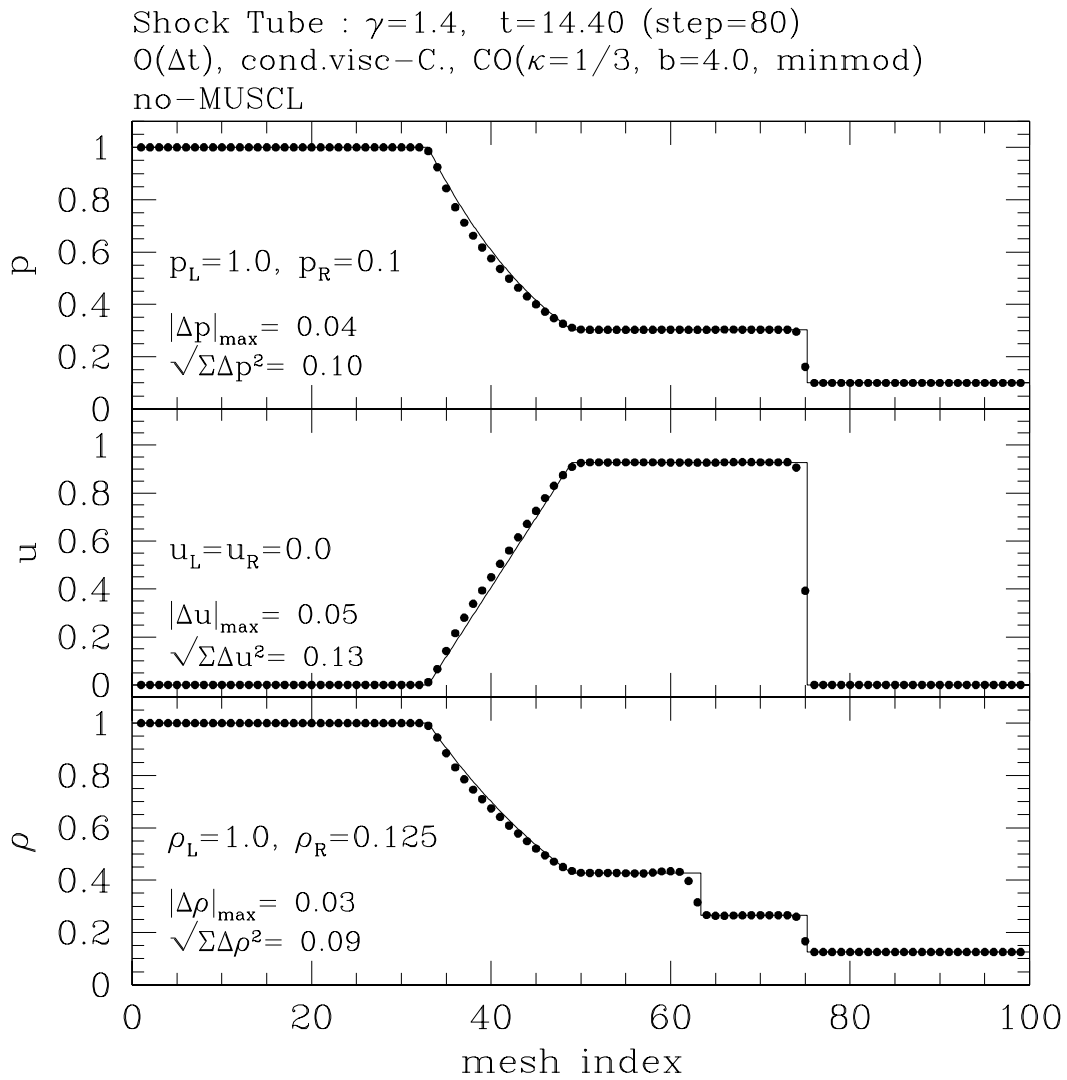


図 3.8: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。数値流束に対して Chakravarthy-Osher の方法を適用し、時間 1 次精度、空間 3 次精度で計算した。流束制限関数に minmod を用いて、人工的圧縮を機能させた。それ以外では、図 3.5 の計算と同じ。

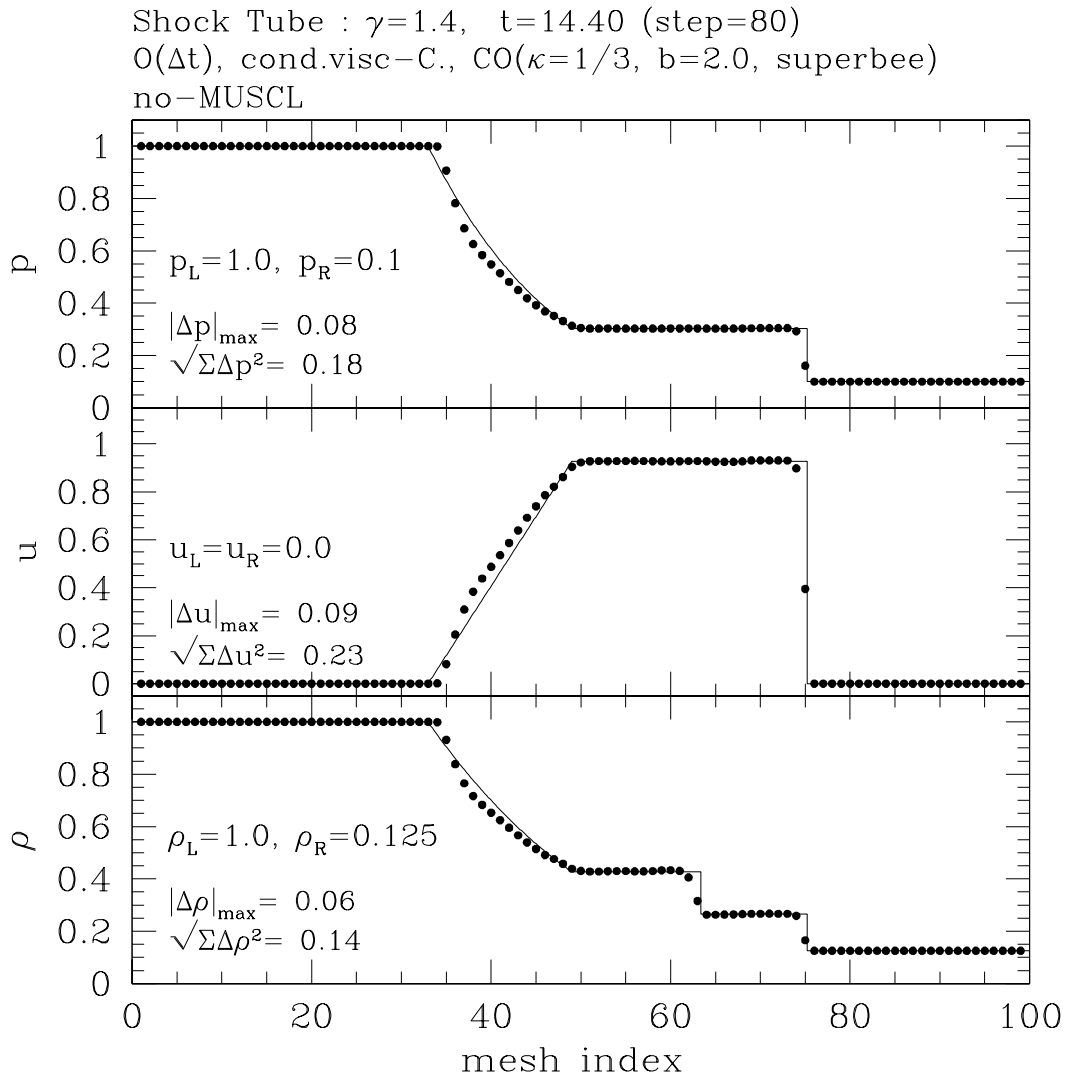


図 3.9: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。Chakravarthy-Osher の方法による計算。流束制限関数に superbee を用いて、人工的圧縮を機能させた。それ以外では、図 3.8 の計算と同じ。

第4章 時間2次精度化

式 (2.13) で数値流束 $G_{k+1/2}$, $G_{k-1/2}$ を時刻 n ステップの物理量で直接評価すると、時間精度は1次となり、時間に関する打ち切り誤差は

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t} - \frac{Q_k^{n+1} - Q_k^n}{\Delta t} &= -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial t^2} \\ &= -\frac{a^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (4.1)$$

となる¹。一方、MUSCL 法などの空間高次精度スキームを用いると、

$$\begin{aligned} Q_{k+1/2}^R - Q_{k+1/2}^L &= -\frac{1-\kappa}{4}(Q_{k+2} - 3Q_{k+1} - 3Q_k + Q_{k-1}) \\ &= -\frac{1-\kappa}{4} \frac{\partial^3 Q}{\partial x^3} \Delta x^3 + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (4.2)$$

などのように、2階以下の微分が含まれないため、時間に関する打ち切り誤差を消すことができず、不安定が発生しやすい。そこで、時間に関して高次精度化する。

その手法は、まず空間1次精度の数値流束によって $\Delta t/2$ だけ先の時刻での物理量 $Q^{n+1/2}$ を求め、それを元に計算される高次精度の数値流束によって、元の Q^n から dt だけ時間を進めるというものである。

具体的には次のような手順となる [6]。

¹簡単のため、 $a = \partial F / \partial Q = \text{const}$ とした。

1. $Q_{k+1/2}^L = Q_{k-1}^n$, $Q_{k+1/2}^R = Q_k^n$ として求めた空間1次精度の数値流束により時間 $\Delta t/2$ だけ進ませて $Q^{n+1/2}$ を得る。

$$Q_k^{n+1/2} = Q_k^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(G_{k+1/2}^m - G_{k-1/2}^m). \quad (4.3)$$

2. 空間高次精度の数値流束 $G^{(2):n+1/2}$ を求める。

- MUSCL 法の場合

(a) 式 (3.40), (3.41) のようにして物理量の内挿を行い、 Q^L, Q^R を求める。ただし、そのとき、右辺第1項の Q_k にのみ $Q_k^{n+1/2}$ を用い、残りの項は時刻 n での物理量 Q^n だけから評価する。

(b) 式 (2.36) に (a) で求めた Q^L, Q^R を代入して $G^{(2):n+1/2}$ を得る。

- Chakravarthy-Osher の方法の場合

式 (3.49) のようにして $G^{(2):n+1/2}$ を得る。ただし、そのとき、右辺第1項の空間1次精度の数値流束 $G_{k+1/2}$ のみを時刻 $n+1/2$ での物理量 $Q^{n+1/2}$ から求め、残りの項は元の時刻 n での物理量 Q^n だけから評価する。

3. 時刻 $n+1$ の物理量 Q^{n+1} を求める。

$$Q_k^{n+1} = Q_k^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(G_{k+1/2}^{(2):n+1/2} - G_{k-1/2}^{(2):n+1/2}). \quad (4.4)$$

厳密に求められた場合の展開式

$$\bar{Q}_k^{n+1} = Q_k^n - a\Delta t \frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{a^2\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} - \frac{a^3\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 Q}{\partial x^3} + O(\Delta t^4) \quad (4.5)$$

と比較して打ち切り誤差を調べる。時間2次精度で MUSCL 法や Chakravarthy-Osher の方法を適用すると、

$$Q_k^{n+1} = Q_k^n - a\Delta t \frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{a^2\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + \left\{ \frac{(1-3\kappa)a\Delta t\Delta x^2}{12} - \frac{a^2\Delta t^2\Delta x}{2} \right\} \frac{\partial^3 Q}{\partial x^3} \quad (4.6)$$

という展開となり、打ち切り誤差は

$$Q_k^{n+1} - \bar{Q}_k^{n+1} = \left\{ \frac{(1-3\kappa)a\Delta t\Delta x^2}{12} - \frac{a^2\Delta t^2\Delta x}{2} - \frac{a^3\Delta t^3}{6} \right\} \frac{\partial^3 Q}{\partial x^3} + O(\Delta t^4) \quad (4.7)$$

となる。一方、時間1次精度では

$$Q_k^{n+1} = Q_k^n - a\Delta t \frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{(1-3\kappa)a\Delta t\Delta x^2}{12} \frac{\partial^3 Q}{\partial x^3} \quad (4.8)$$

という展開に相当し、その場合打ち切り誤差は

$$Q_k^{n+1} - \bar{Q}_k^{n+1} = -\frac{a^2 \Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + \left\{ \frac{(1-3\kappa)a\Delta t \Delta x^2}{12} - \frac{a^3 \Delta t^3}{6} \right\} \frac{\partial^3 Q}{\partial x^3} + O(\Delta t^4) \quad (4.9)$$

となって、負の拡散項が残る。

なお、時間2次精度で計算が安定であるためには

$$0 < \frac{a\Delta t}{\Delta x} < 1 - \kappa \quad (4.10)$$

を満たすように時間の刻み幅をとらなければならないことが、Von Neumann の安定性解析から示される。

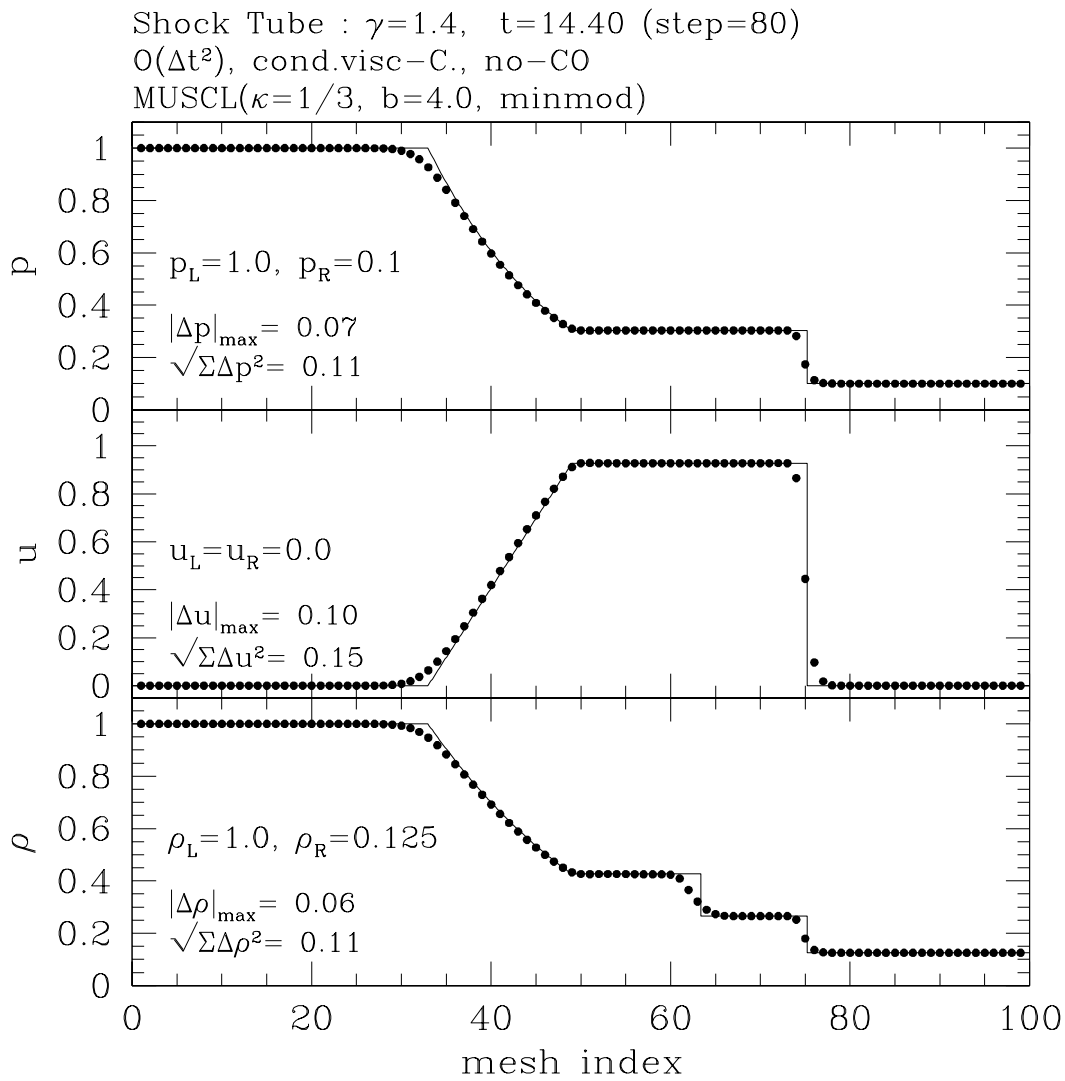


図 4.1: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。MUSCL (minmod) の空間3次精度の方法で、2ステップ法により時間に関して2次精度にした。それ以外では、図 3.6 の計算と同じ。

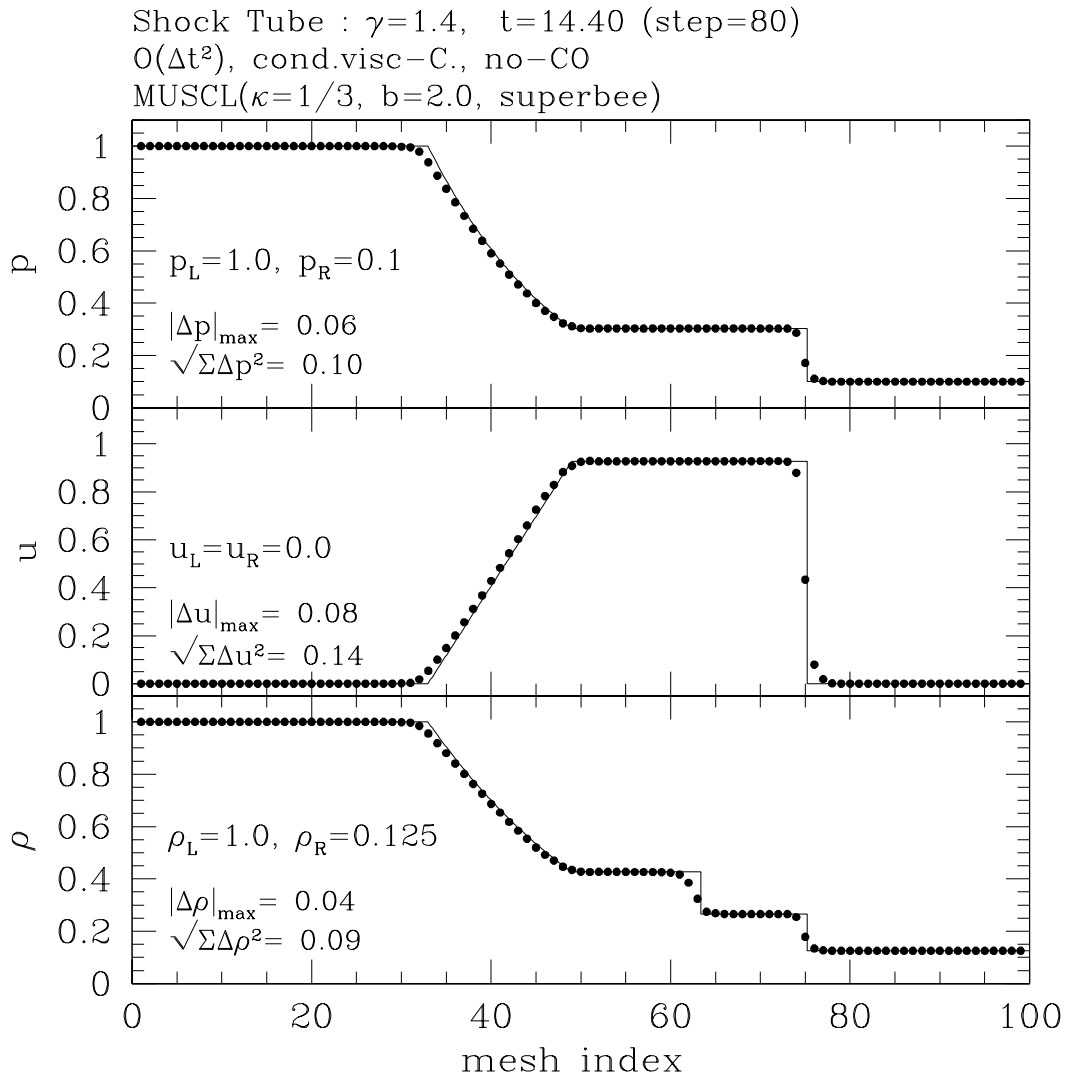


図 4.2: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。MUSCL (superbee) の空間3次精度の方法で、2ステップ法により時間に関して2次精度にした。それ以外では、図 3.7 の計算と同じ。

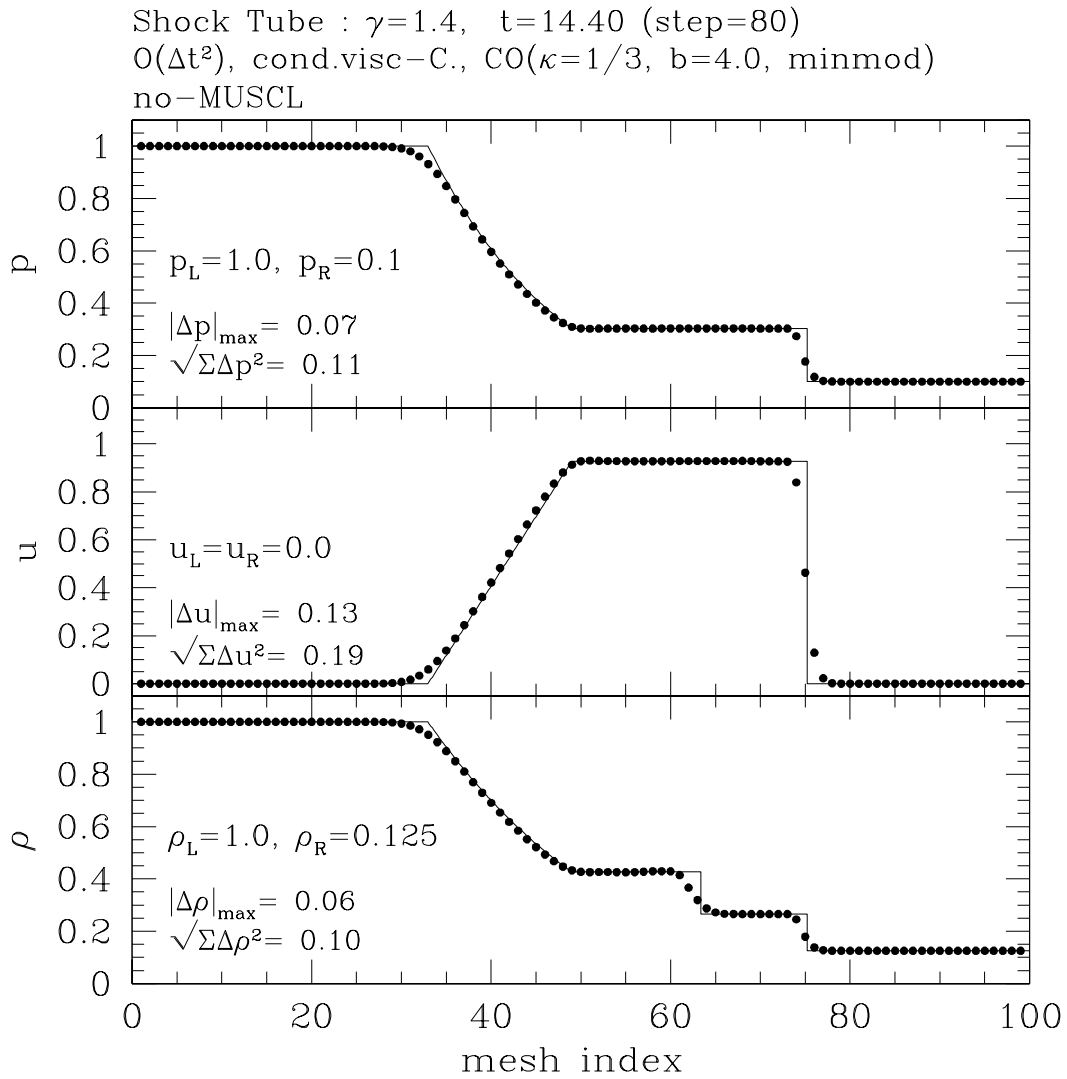


図 4.3: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。Chakravarthy-Osher の空間 3 次精度の方法 (minmod) で、2 ステップ法により時間に関して 2 次精度にした。それ以外では、図 3.8 の計算と同じ。

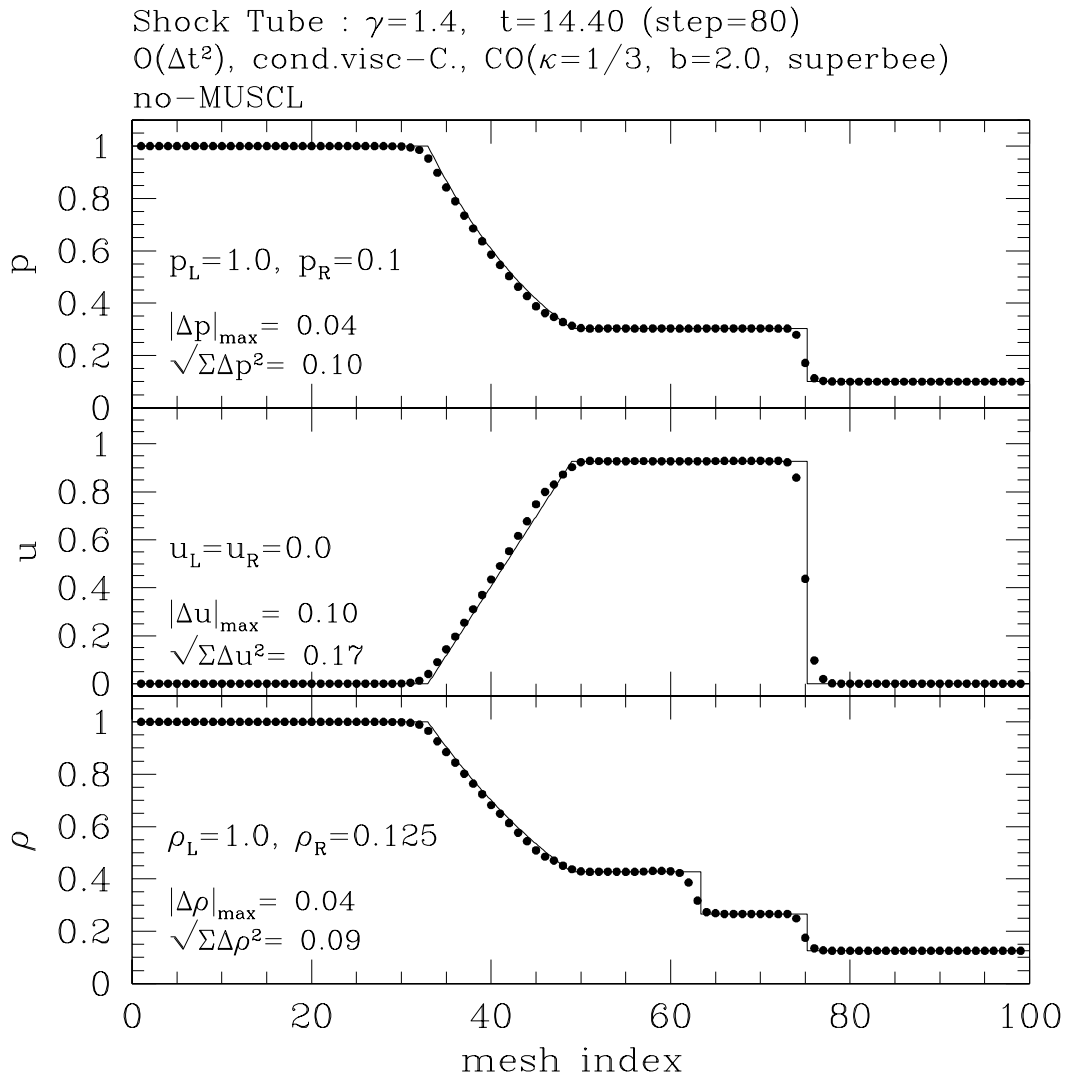


図 4.4: 衝撃波管問題の解 (実線は解析解、点が計算値)。Chakravarthy-Osher の空間 3 次精度の方法 (superbee) で、2 ステップ法により時間に関して 2 次精度にした。それ以外では、図 3.9 の計算と同じ。

第5章 3次元問題

式 (1.1)、(1.2) に戻り、3次元空間での流体力学の方程式に Roe 法を適用することを考える。このとき、変数の数が増えることと時間発展の式で空間微分が x だけではなく、 y と z についても現れるという点が1次元問題との違いである。ここでは各方向 x, y, z について前章までに述べた1次元問題の解法を順次適用するオペレータ分離法を用いる。

5.1 行列

物理量 Q や 流束は、 $u = u_x, v = u_y, w = u_z$ として

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \end{pmatrix}, \quad F_x = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (e + p)u \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

$$F_y = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (e + p)v \end{pmatrix}, \quad F_z = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (e + p)w \end{pmatrix}$$

と表される。また、 x 方向に関するヤコビ行列 $A_x = \partial F_x / \partial Q$ は、 $\theta = u^2 + v^2 + w^2$ とおいて、

$$A_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\gamma-1}{2}\theta - u^2 & -(\gamma-3)u & -(\gamma-1)v & -(\gamma-1)w & \gamma-1 \\ -uv & v & u & 0 & 0 \\ -uw & w & 0 & u & 0 \\ (\frac{\gamma-1}{2}\theta - H)u & H - (\gamma-1)u^2 & -(\gamma-1)uv & -(\gamma-1)uw & \gamma u \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

で ($H = (e + p)/\rho$ はエンタルピー)、 x 方向に関する右固有ベクトルは、

$$r_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ u - c \\ v \\ w \\ H - cu \end{pmatrix}, \quad r_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ v \end{pmatrix}, \quad r_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ w \end{pmatrix},$$

(5.3)

$$r_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ v \\ w \\ \theta/2 \end{pmatrix}, \quad r_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ u + c \\ v \\ w \\ H + cu \end{pmatrix}$$

となり (c は音速で、 $c^2 = (\gamma - 1)(H - \theta/2)$)、それらから構成される行列 $R = (r_1 \ r_2 \ r_3 \ r_4 \ r_5)$ の逆行列は、

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} (\eta\theta/2 + u/c)/2 & -(\eta u + 1/c)/2 & -\eta v/2 & -\eta w/2 & \eta/2 \\ -v & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -w & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\eta\theta/2 + 1 & \eta u & \eta v & \eta w & -\eta \\ (\eta\theta/2 - u/c)/2 & -(\eta u - 1/c)/2 & -\eta v/2 & -\eta w/2 & \eta/2 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

である ($\eta = (\gamma - 1)/c^2$)。対応する固有値は、

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_2 = u, \quad \lambda_3 = u, \quad \lambda_4 = u, \quad \lambda_5 = u + c \quad (5.5)$$

で、これを用いて、固有対角行列は

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5 \end{pmatrix} = R^{-1} A_x R \quad (5.6)$$

と求められる。

5.2 数値流束

x 方向の数値流束は、セル境界の両側での物理量 Q_L, Q_R から

$$G_{k+1/2}^x = \frac{1}{2} \{ F_x(Q_{k+1/2}^L) + F_x(Q_{k+1/2}^R) \} - \frac{1}{2} \tilde{R} |\tilde{\Lambda}| \tilde{R}^{-1} (Q_{k+1/2}^R - Q_{k+1/2}^L) \quad (5.7)$$

と求める¹。MUSCL 法を用いる場合には、式 (3.40), (3.41) によってセル境界の物理量を得る。そのとき、差分 Δ は x 方向の隣り合うセルの物理量に関してとる²。ここで、チルダのついた変数は Roe 平均

$$\tilde{u} = \frac{\sqrt{\rho_L}u_L + \sqrt{\rho_R}u_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad (5.8)$$

$$\tilde{v} = \frac{\sqrt{\rho_L}v_L + \sqrt{\rho_R}v_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad (5.9)$$

$$\tilde{w} = \frac{\sqrt{\rho_L}w_L + \sqrt{\rho_R}w_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad (5.10)$$

$$\tilde{H} = \frac{\sqrt{\rho_L}H_L + \sqrt{\rho_R}H_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (5.11)$$

を用いて評価する。この数値流束を式 (2.13) に適用して x 方向の流束による時間発展をさせる³。時間 2 次精度の場合には、第 4 章に述べた方法をとる。

y 方向の数値流束 G^y は、式 (5.1) における各成分の対称性⁴のために、次のように求められる。サブルーチン numflux によって、 x 方向の数値流束 $G^x = (gx1, gx2, gx3, gx4, gx5)$ が物理量 $Q = (q1, q2, q3, q4, q5)$ から

```
call numflux(q1,q2,q3,q4,q5, gx1,gx2,gx3,gx4,gx5)
```

のようにして求められるとき、サブルーチンに渡す引数のうち、物理量と数値流束の第 2 成分から第 4 成分まで (運動量の x, y, z 成分に相当) を

```
call numflux(q1, q3, q4, q2, q5, gy1, gy3, gy4, gy2, gy5)
```

のように取り換えて呼び出せば、 $G^y = (gy1, gy2, gy3, gy4, gy5)$ が得られる。同様に z 方向については、

```
call numflux(q1, q4, q2, q3, q5, gz1, gz4, gz2, gz3, gy5)
```

とすれば $G^z = (gz1, gz2, gz3, gz4, gz5)$ が得られる。

¹空間 1 次精度の場合もしくは MUSCL 法による場合の表式である。Chakravarthy-Osher の方法の場合には式 (3.49) を用いる。

² y, z 方向の数値流束を求めるときには、それぞれ y 方向、 z 方向の隣り合うセルに対して差分をとる。

³実際はオペレータ分離法に従って、時間ステップを細かく刻んで、 y 方向と z 方向についても交替に発展させていかなければならない。

⁴ $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$ という座標軸の回轉的交換に関する対称性。

5.3 オペレータ分離法

まず簡単のため 2 次元の場合の

$$Q_t + AQ_x + BQ_y = 0 \quad (5.12)$$

という方程式について考える。ここで、下添字はその変数に関する微分を表し、 A 、 B はヤコビ行列 $A = \partial E / \partial Q$ 、 $B = \partial F / \partial Q$ である。微小時間 Δt の間 A と B は変化しないとすると、この式を t で微分して

$$\begin{aligned} Q_{tt} &= -A(Q_x)_t - B(Q_y)_t = -A(Q_t)_x - B(Q_t)_y \\ &= A(AQ_x + BQ_y)_x + B(AQ_x + BQ_y)_y \\ &= A(AQ_x)_x + A(BQ_y)_x + B(AQ_x)_y + B(BQ_y)_y \end{aligned} \quad (5.13)$$

が得られる。テーラー展開

$$Q^{n+1} = Q^n + \Delta t Q_t^n + \frac{\Delta t^2}{2} Q_{tt}^n + O(\Delta t^3) \quad (5.14)$$

に Q_t と Q_{tt} を代入して、時間 2 次精度での解

$$\begin{aligned} Q^{n+1} &= Q^n - \Delta t (AQ_x^n + BQ_y^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \{A(AQ_x^n)_x + A(BQ_y^n)_x + B(AQ_x^n)_y + B(BQ_y^n)_y\} \end{aligned} \quad (5.15)$$

を得る。

式 (5.12) を x 方向と y 方向に分離し、

$$\bar{Q}_t + A\bar{Q}_x = 0 \quad (5.16)$$

$$\hat{Q}_t + B\hat{Q}_y = 0 \quad (5.17)$$

と表す。解は、それぞれ

$$\bar{Q}^{n+1} = \bar{Q}^n - \Delta t A\bar{Q}_x^n + \frac{\Delta t^2}{2} A(A\bar{Q}_x^n)_x \quad (5.18)$$

$$\hat{Q}^{n+1} = \hat{Q}^n - \Delta t B\hat{Q}_y^n + \frac{\Delta t^2}{2} B(B\hat{Q}_y^n)_y \quad (5.19)$$

となる。これらを Δt だけ時間発展させるオペレータ $L_x(\Delta t)$ と $L_y(\Delta t)$ を用いて

$$\bar{Q}^{n+1} = L_x(\Delta t)\bar{Q}^n \quad (5.20)$$

$$\hat{Q}^{n+1} = L_y(\Delta t)\hat{Q}^n \quad (5.21)$$

と表す。

ここで $\bar{Q}^n = Q^n$, $\hat{Q}^n = \bar{Q}^{n+1}$ とおいて \hat{Q}^{n+1} を求めると、

$$\begin{aligned}\hat{Q}^{n+1} &= L_y(\Delta t)L_x(\Delta t)Q^n \\ &= Q^n - \Delta t(AQ_x^n + BQ_y^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2}\{(A^2Q_x^n)_x + 2B(AQ_x^n)_y + (B^2Q_x^n)_x\} + O(\Delta t^3)\end{aligned}\quad (5.22)$$

となり、この表式は式 (5.15) と一致しないので、 $\hat{Q}^{n+1} = Q^{n+1}$ とすることはできないことがわかる。一致しない原因は、 $A(BQ_y^n)_x$ が $B(AQ_x^n)_y$ に置き換わっていることによるもので、この計算方法では、 y 方向の時間発展 L_y の後に x 方向の時間発展 L_x を作用させる計算が抜けていることに起因している。

これを解決する一つの方法は、順序を逆にして計算したものの同土を平均することである。

$$Q^{n+1} = \frac{1}{2}\{L_x(\Delta t)L_y(\Delta t) + L_y(\Delta t)L_x(\Delta t)\}Q^n. \quad (5.23)$$

しかし、この方法では、それぞれの順序で計算されたものをメモリ上に保存しておかなければならず、余分なメモリを必要としてしまう。

そこで、 L_y の後に L_x を作用させる次のような計算を行ってみる。ただし、作用させるときの時間は順に Δt_1 , Δt_2 , Δt_3 とする。

$$\begin{aligned}&L_x(\Delta t_3)L_y(\Delta t_2)L_x(\Delta t_1)Q^n \\ &= Q^n - \{(\Delta t_1 + \Delta t_3)AQ_x^n + \Delta t_2BQ_y^n\} \\ &\quad + \frac{1}{2}\{(\Delta t_1 + \Delta t_3)^2 A(AQ_x^n)_x + 2\Delta t_1\Delta t_2B(AQ_x^n)_y \\ &\quad + 2\Delta t_2\Delta t_3A(BQ_y^n)_x + \Delta t_3^2B(BQ_y^n)_y\} + O(\Delta t^3).\end{aligned}\quad (5.24)$$

ここで、 $\Delta t_1 = \Delta t/2$, $\Delta t_2 = \Delta t$, $\Delta t_3 = \Delta t/2$ とおけば、式 (5.15) と一致することがわかる。したがって、時間2次精度で2次元の問題では、各方向に関する時間発展のオペレータを順に x 方向に $\Delta t/2$, y 方向に Δt , x 方向に $\Delta t/2$ だけ作用させて、

$$\begin{aligned}Q^{n+1} &= L^{2D} \\ &= L_x\left(\frac{\Delta t}{2}\right)L_y(\Delta t)L_x\left(\frac{\Delta t}{2}\right)Q^n\end{aligned}\quad (5.25)$$

として Q^{n+1} を与えることにより、解くことができる。この方法では、式 (5.23) とは異なり、余分なメモリを必要としない。

以下では $L_x = L_x(\Delta t)$, $L_x^\alpha = L_x(\alpha\Delta t)$ ($\alpha < 1$) などと表す。式 (5.25) のオペレータ L^{2D} は、

$$L_y^{1/2} L_y^{1/2} = L_y \quad (5.26)$$

という関係から、

$$L^{2D} = L_x^{1/2} L_y L_x^{1/2} = L_x^{1/2} L_y^{1/2} \cdot L_y^{1/2} L_x^{1/2} \quad (5.27)$$

という分解ができる。これは、 x 方向と y 方向の時間発展の順番の互いに異なる組合せ $\{L_x L_y, L_y L_x\}$ を用意し、 Δt を組合せの数で割った時間 $\Delta t/2$ だけ各組合せを順に作用させるという意味に解釈することができる。また、1 ステップ進ませるときの L^{2D} の最初と最後のオペレータ $L_x^{1/2}$ も同じであるから、 Q^{n+k} ($k > 1$) を

$$Q^{n+k} = L_x^{1/2} L_y \overbrace{L_x L_y \cdots L_x L_y L_x L_y}^{(L_x L_y)^{k-1}} L_x^{1/2} Q^n \quad (5.28)$$

のように、 L_x を作用させる回数を少なくして⁵求めることもできる。ただし、式 (5.28) によって Q^{n+k} を求める途中で得られている物理量は、 x 方向と y 方向の時間発展に関して同じ時刻にないことに注意しなければならない。

以上のことから、

$$Q_t + A Q_x + B Q_y + C Q_z = 0 \quad (5.29)$$

という3次元の問題に対する時間発展法が求められる。方向 x, y, z の時間発展オペレータをそれぞれ L_x, L_y, L_z と表すと、時間発展の順番の組合せは $\{L_x L_y L_z, L_x L_z L_y, L_y L_x L_z, L_y L_z L_x, L_z L_x L_y, L_z L_y L_x\}$ の6通りある。式 (5.29) の時間発展オペレータ L^{3D} は、これらを $\Delta t/6$ の時間で作用させたものとして定義することができ、また式 (5.26) の関係を利用して、作用させる数を減らすように工夫すれば、

$$\begin{aligned} L^{3D} &= L_x^{1/6} L_y^{1/6} L_z^{1/6} \cdot L_z^{1/6} L_x^{1/6} L_y^{1/6} \cdot L_y^{1/6} L_x^{1/6} L_z^{1/6} \\ &\quad \cdot L_z^{1/6} L_y^{1/6} L_x^{1/6} \cdot L_x^{1/6} L_z^{1/6} L_y^{1/6} \cdot L_y^{1/6} L_z^{1/6} L_x^{1/6} \\ &= L_x^{1/6} L_y^{1/6} L_z^{1/3} L_x^{1/6} L_y^{1/3} L_x^{1/6} L_z^{1/3} L_y^{1/6} L_x^{1/3} L_z^{1/6} L_y^{1/3} L_z^{1/6} L_x^{1/6} \quad (5.30) \end{aligned}$$

と与えればよいことがわかる⁶。ここでも、 L^{3D} の最初と最後のオペレータ L_x は

⁵ Q^{n+1}, Q^{n+2}, \dots と1ステップずついねいに求めていくと、 L_x を作用させる回数は $2k$ 回であるが、式 (5.28) によって求めると $k+1$ 回である。 L_y も合わせた回数としては、前者は $3k$ 回、後者は $2k+1$ 回である。

⁶各組合せの順番の選び方はこれ以外にもあるが、本質的な違いはない。

等しいので、 Q^{n+k} ($k > 1$) を求めるときに作用させる L_x の回数を $5k$ 回 から $4k + 2$ 回に減らすことができるが、 L_x, L_y, L_z を作用させる回数の合計から考えると $13k$ 回が $12k + 2$ 回になる程度なので、 L_x の回数を減らす利点はほとんどない。

関連図書

本文中に示した箇所以外でも、一般的に下記の文献を参考にした。

- [1] ROE, P. L., “Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes”, *Journal of Computational Physics*, 1981, **43**, pp.357–372.
- [2] CHAKRAVARTHY, S. R., & OSHER, S., “A New Class of High Accuracy TVD Schemes for Hyperbolic Conservation Laws”, *AIAA*, 1985, 85-0363.
- [3] CHAKRAVARTHY, S. R., “The versatility and reliability of Euler solvers based on high-accuracy TVD formulations”, *AIAA*, 1986, 86-0243. (Sonic expansion の取り扱いについて Sawada et al. [4] で引用されているもの。)
- [4] SAWADA, K., SHIMA, E., & MATSUDA, T., “A TVD scheme using Roe’s flux and the ambient boundary condition”, *京都大学工学部紀要*, 1989(?)
- [5] SAWADA, K., *unpublished notebook*, 1989(?).
- [6] HIRSCH, C., “Numerical Computation of Internal and External Flows (Vol.2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows)”, *A Wiley-Interscience Publication*, 1992.
- [7] 保原充, 大宮司久明 編, 「数値流体力学 — 基礎と応用」, 東京大学出版会, 1993.
- [8] 大宮司久明, 三宅裕, 吉澤徹 編, 「乱流の数値流体力学—モデルと計算法—」, 東京大学出版会, 1998.
- [9] 富阪幸治, 「数値流体力学サマースクール」講習会テキスト, <http://th.nao.ac.jp/~tomisaka/>, 2000.

付録A プログラム—1次元流体

Roe 法を用いた 1 次元流体力学の解法プログラムの一部を示す。これは、時間 1-2 次精度、空間 1-3 次精度に対応するものである。

A.1 変数

主プログラムの最初はこのように書かれ、各種変数、定数が宣言されているとする。

配列と common 変数

```

1      program roe
2      implicit real*8 (a-h,o-z)
3      parameter(nt=80)
4      parameter(nx=100)
5      parameter(itorder=1)
6      parameter(gamma=1.40d0)
7      dimension q(3,0:nx),ql(3,nx),qr(3,nx)
8      dimension flx(3,nx),flxco(3,nx)
9      dimension qt(3,0:nx)
10     common /flag/imuscl, imusclsuperbee, ico, icosuperbee
11
12 C initial condition etc.
13     ...

```

ここで nt は最終結果を得るまでの時間ループの回数で、 nx はセルの数である。また、定数 $itorder$ は時間精度の値を示す定数で、時間 1 次精度とするならば 1、時間 2 次精度とするならば 2 を与えるようにする。比熱比 γ を定数 $gamma$ に与える。配列 $q(i,k)$ は保存量 Q_k とし、 $ql(i,k)$, $qr(i,k)$ はそれぞれセル境界での保存量 $Q_{k-1/2}^L$, $Q_{k-1/2}^R$ とする。配列 $flx(i,k)$ は数値流束 $G_{k-1/2}$ で、 $flxco(i,k)$ は Chakravarthy-Osher の方法を採用したときに用いる数値流束の補正項を表す。また、 $qt(i,k)$ は時間発展に用いる保存量の一時的変数である。これらの配列の $i = 1, 2, 3$ は、それぞれ密度 ρ 、運動量密度 ρu 、エネルギー密度 e に対応した成分とする。

主プログラムではこれら以外の配列を必要とせず、またサブルーチン副プログ

ラム内部ではセルの数 n_x に依存するような局所配列は用いられない。

ここでは MUSCL 法と Chakravarthy-Osher の方法のいずれの方法にも対応する試験的なものとしてプログラムを作成しているため、用意した配列が冗長となっている。現実的なプログラムでは、どちらかの方法のみを採用する。MUSCL 法を用いない場合には q_l, q_r を用いずにコーディングすることができ、Chakravarthy-Osher の方法を用いない場合には $flxco$ は必要としないですむ。また、時間 2 次精度にしない場合には qt を用いずにコーディングすることができる。

MUSCL 法を用いるかどうかを表すフラグを $imuscl$ とし、Chakravarthy-Osher の方法を用いるかどうかを表すフラグを ico とする。それぞれ、用いる場合には 0 でない整数を時間に関するループの前に与えておく。なお、両方の方法を同時に採用することはできないものとする。これらのフラグは `common` による宣言がなされ、次節で用いる `makeleftright()` や `roescheme()` の内部でも参照される。同じ `common` の中に格納した `imusclsuperbee` と `icosuperbee` は、それぞれ MUSCL 法と Chakravarthy-Osher の方法での制限関数の種類を指定するための変数である。どちらの方法についても、変数の値が 1 であれば `superbee` 関数を用い、0 であれば `minmod` 関数を用いる。

A.2 時間 1 次精度

時間 1 次精度で計算する場合の時間に関するループは次のように記述する。

```

1      if (itorder.eq.1) then
2 C 1st order in time
3      do it=1,nt
4          call copyvariable(nx,q,qt)
5          call makeleftright(nx,gamma,q,qt,ql,qr)
6          call roescheme(nx,gamma,ql,qr,flx,flxco)
7          if (ico.ne.0) then
8              call addcoflux(nx,flxco,flx)
9          endif
10         call advance(nx,dtdx,flx,qt,q)
11         t=t+dt
12     enddo
13     endif

```

時間 1 次精度ループ

ここで $itorder$ は時間精度の値を示す定数で、 $itorder=1$ のときこの部分が実行される。サブルーチン `copyvariable()` は第 2 引数を第 3 引数にコピーするためのものである。サブルーチン `makeleftright()` では、セルでの値 q と qt を用いてセル境界での値 q_l, q_r が計算される。MUSCL 法を用いる場合の内挿はこのサ

ブルーチンで行われる。ここで、 q と qt という2つの量が用いられるのは、時間2次精度で MUSCL 法を用いた計算を行う場合、第2段階の計算で、第1段階の計算の前後の物理量 (それぞれ q と qt) を必要とするからである。サブルーチン `roescheme()` では、式 (2.36) によって Roe 法の数値流束 flx が計算されるとともに、Chakravarthy-Osher の方法を用いる場合には数値流束の補正項 $flxco$ が式 (3.49) の $G_{k+1/2}$ を除いた項により求められる。このサブルーチンで flx に式 (2.46) か (2.47), (2.48) のいずれかの膨張波に関する修正を施す。Chakravarthy-Osher の方法を用いる場合には、サブルーチン `addcoflux()` が呼び出され、 $flxco$ が flx に加えられる。サブルーチン `advance()` は、式 (2.13) によって、数値流束 flx と第4引数に与えられた Q^n から次の時刻の物理量 Q^{n+1} を第5引数として求めるものである。このとき、第2引数に数値流束の差分に乘じる係数 $\Delta t/\Delta x$ を与える。

A.3 時間2次精度

時間2次精度で計算する場合の時間に関するループは、前節で用いたサブルーチンにより次のように記述する。

```

1          if (itorder.eq.2) then
2 C 2nd order in time
3          do it=1,nt
4 C first step
5              imuscl2=imuscl
6              imuscl=0
7              call copyvariable(nx,q,qt)
8              call makeleftright(nx,gamma,q,qt,ql,qr)
9              call roescheme(nx,gamma,ql,qr,flx,flxco)
10             call advance(nx,dtdx/2.0d0,flx,q,qt)
11             imuscl=imuscl2
12 C second step
13             ico2=ico
14             ico=0
15             call makeleftright(nx,gamma,q,qt,ql,qr)
16             call roescheme(nx,gamma,ql,qr,flx,flxco)
17             if (ico2.ne.0) then
18                 call addcoflux(nx,flxco,flx)
19             endif
20             call copyvariable(nx,q,qt)
21             call advance(nx,dtdx,flx,qt,q)
22             ico=ico2
23             t=t+dt

```

時間2次精度ループ

(continue)

```

24|         endddo
25|     endif
26|C output etc.
27|     ...
28|
29|     stop
30|     end

```

時間 2 次精度ループ

ここで `itorder` は時間精度の値を示す定数で、`itorder=2` のときこの部分が実行される。第 1 段階 (5 行目から 11 行目まで) では、MUSCL 法による物理量の内挿は行われずに数値流束が求められる。一方、Chakravarthy-Osher の方法を用いた場合、数値流束の補正項は第 1 段階で求めておく。しかし、この段階で `flx` にその補正は加えられない。第 1 段階で求めた中間の物理量 $Q^{n+1/2}$ は、サブルーチン `advance()` によって `qt` に格納される。MUSCL 法を用いた場合、第 2 段階 (13 行目から 23 行目まで) では `makeleftright()` により、中間の物理量 `qt` に対する、元の物理量 `q` による補正として物理量の内挿を行う。一方、Chakravarthy-Osher の方法を用いた場合には、第 2 段階の `roescheme()` では補正項 `flxco` を計算せず、第 1 段階で求めておいた `flxco` を第 2 段階で求めた `flx` に `addcoflux()` で加える。整数型変数 `imuscl2` と `ico2` はいずれも、各段階で補正のための計算を切替えるために用いられるものである。

時間に関するループから抜けると、データを出力してプログラムを終了させる¹。

A.4 Roe 法

Roe 法による数値流束の計算は次のような手順で行う。

```

1|     subroutine roescheme(nx,gamma,ql,q,flx,flxco)
2|     implicit real*8 (a-h,o-z)
3|     dimension ql(3,nx),qr(3,nx),flx(3,nx),flxco(3,nx)
4|     dimension rm(3),sr(3,3),sl(3,3)
5|     dimension fl(3),fr(3),fa(3)
6|     common /flag/imuscl, imusclsuperbee, ico, icosuperbee
7|
8|     gam1=gamma-1.0d0

```

Roe 法
(continue)

¹必要に応じて時間ループの中でもデータを書き出す。

```

9          do i=1,nx
10         call variables(nx,i,ql,gamma,rl,ul,el,pl,hl)
11         call variables(nx,i,qr,gamma,rr,ur,er,pr,hr)
12         call roeaverage(rl,ul,hl,rr,ur,hr,au,ah)
13 C left(sl), right(sr) eigen vectors, eigen values(rm)
14         call makematrix(gam1,au,ah,sl,sr,rm)
15         call fluxatmesh(rl,ul,pl,el,fl)
16         call fluxatmesh(rr,ur,pr,er,fr)
17         call soundspeed(gamma,pl,rl,cl)
18         call soundspeed(gamma,pr,rr,cr)
19         call fluxabsA(rm,sl,sr,rl,ul,el,cl,rr,ur,er,cr,fa)
20         do j=1,3
21             flx(j,i)=(fl(j)+fr(j)-fa(j))/2.0d0
22         enddo
23         if (ico.ne.0) then
24             call coscheme(nx,i,ql,qr,sl,sr,rm,flxco)
25         endif
26     enddo
27     return
28     end

```

Roe 法

サブルーチン `variables()` は、セル境界での物理量である `ql` や `qr` から必要な要素 `i` を抜きだして、密度 ρ 、速度 u 、エネルギー密度 e 、圧力 p 、エンタルピー h をそれぞれ第5引数から第9引数として求めている。これらの量を用いて、サブルーチン `roeaverage()` で、変数 `au`, `ah` に速度とエンタルピーの Roe 平均が求められる。サブルーチン `makematrix()` で、固有値と右固有ベクトル、左固有ベクトルが計算される。セル境界の両側での流束 `fl` と `fr` はサブルーチン `fluxatmesh()` で求められる。サブルーチン `fluxabsA()` では、Roe 平均による $|A|\Delta Q$ を計算し、それに膨張波に関する補正を施したものを求め、配列 `fa` として返す。この補正でセル境界の両側での速度 (`ul`, `ur`) と音速 (`cl`, `cr`) が用いられる。セル境界の両側での音速はサブルーチン `soundspeed()` で求めておく。数値流束は20行目から22行目までで計算する。Chakravarthy-Osherの方法を採用したとき (`ico` \neq 0) の数値流束に対する補正項 `flxco` はサブルーチン `coscheme()` で求める。ただし、時間2次精度の第2段階では、`ico=0` となっているので、`coscheme()` は呼び出されない。

A.5 時間発展

次の時刻の物理量を求める計算は次のサブルーチンで行う。

```

1      subroutine advance(nx,dt dx,flx,qp,qn)
2      implicit real*8 (a-h,o-z)
3      dimension qp(3,0:nx),qn(3,0:nx),flx(3,nx)
4 C flx(i)=FLUX(i-1/2)
5      do i=1,nx-1
6          do j=1,3
7              qn(j,i)=qp(j,i)-dt dx*(flx(j,i+1)-flx(j,i))
8          enddo
9      enddo
10     return
11     end

```

時間発展

このサブルーチンは、数値流束 flx を用いて係数 $dt dx$ によって物理量の配列 qp を時間発展させた結果を qn として返す。時間 1 次精度では $dt dx$ を $\Delta t/\Delta x$ としてこのサブルーチン呼び出すが、時間 2 次精度では、第 1 段階のとき $dt dx = \Delta t/2\Delta x$ とし、第 2 段階のとき $dt dx = \Delta t/\Delta x$ とする。数値流束の配列は $flx(*,k) = G_{k-1/2}$ のように定義されていないなければならない。

A.6 セル境界での物理量

セル境界の左右での物理量 ql, qr は次のようにして求める。

```

1      subroutine makeleftright(nx,gamma,q,qt,ql,qr)
2      implicit real*8 (a-h,o-z)
3      dimension q(3,0:nx),qt(3,0:nx),ql(3,nx),qr(3,nx)
4      common /flag/imuscl, imusclsuperbee, ico, icosuperbee
5
6 C ql(i)=QL(i-1/2), qr(i)=QR(i-1/2)
7
8      if (imuscl.eq.0) then
9 C no-MUSCL
10     do i=1,nx
11         do j=1,3
12             ql(j,i)=qt(j,i-1)
13             qr(j,i)=qt(j,i)
14         enddo
15     enddo
16     return
17     endif

```

セル境界での物理量

(continue)


```

18|C MUSCL
19|    call muscl(nx,gamma,q,qt,ql,qr)
20|    return
21|    end

```

セル境界での物理量

このサブルーチンには主に MUSCL 法を用いない場合が記述されている。MUSCL 法による内挿の計算は、 $imuscl \neq 0$ のときに行い、その本体はサブルーチン $muscl()$ である。これらのサブルーチンで計算する ql, qr はそれぞれ $ql(*,k) = Q_{k-1/2}^L, qr(*,k) = Q_{k-1/2}^R$ である。また、サブルーチン $muscl()$ では、式 (3.40), (3.41) の計算を行うが、そのとき、特性変数の差分によって表される補正項を q から求めて、それを qt に加えるようにする。この変数 q と qt の区別は、時間 2 次精度の第 2 段階で必要となるものである。MUSCL 法を用いた場合でも、時間 2 次精度の第 1 段階では $imuscl=0$ となっているので、 $muscl()$ は呼び出されない。

A.7 行列

固有値 λ と右固有ベクトルからなる行列 R 、およびその逆行列 (左固有ベクトルからなる行列) R^{-1} は、速度 u とエンタルピー h から次のようにして求める。

```

                                     固有値、右固有ベクトル、左固有ベクトル
1|    subroutine makematrix(gam1,u,h,s1,sr,rm)
2|    implicit real*8 (a-h,o-z)
3|    dimension rm(3),sr(3,3),s1(3,3)
4|C temporary
5|    c=dsqrt((h-u**2/2.0d0)*gam1)
6|    eta=gam1/c**2
7|C eigen values
8|    rm(1)=u-c
9|    rm(2)=u
10|   rm(3)=u+c
11|C
12|C right eigen vectors
13|C sr1
14|    sr(1,1)=1.0d0
15|    sr(2,1)=(u-c)
16|    sr(3,1)=(h-c*u)
17|C sr2
18|    sr(1,2)=1.0d0
19|    sr(2,2)=u
20|    sr(3,2)=u**2/2.0d0

```

(continue)

```

21|C sr3
22|    sr(1,3)=1.0d0
23|    sr(2,3)=(u+c)
24|    sr(3,3)=(h+c*u)
25|C
26|C left eigen vectors
27|C sl1
28|    sl(1,1)=(eta/2.0d0*u**2+u/c)/2.0d0
29|    sl(1,2)=-(eta*u+1.0d0/c)/2.0d0
30|    sl(1,3)=eta/2.0d0
31|C sl2
32|    sl(2,1)=-eta*u**2/2.0d0+1.0d0
33|    sl(2,2)=eta*u
34|    sl(2,3)=-eta
35|C sl3
36|    sl(3,1)=(eta/2.0d0*u**2-u/c)/2.0d0
37|    sl(3,2)=-(eta*u-1.0d0/c)/2.0d0
38|    sl(3,3)=eta/2.0d0
39|C
40|    return
41|    end

```

固有値、右固有ベクトル、左固有ベクトル

ここで $\text{gam1} = \gamma - 1$ である。配列 $\text{rm}(i)$, $\text{sr}(j,i)$, $\text{sl}(i,j)$ ($i, j = 1, 2, 3$) が、それぞれ Λ の対角成分、 R 、 R^{-1} である。各固有値 $\text{rm}(i)$ に対応する右固有ベクトルは $\text{sr}(*,i)$ で、対応する左固有ベクトルは $\text{sl}(i,*)$ である。

A.8 その他

A.8.1 初期条件

衝撃波管問題の初期条件は、次のようにして与えられる。

```

1|    subroutine initial(nx,gamma,rho0,rho1,p0,p1,u0,u1,q)
2|    implicit real*8 (a-h,o-z)
3|    dimension q(3,0:nx)
4|
5|C standard shock tube :  u0=0.0d0
6|    u0=0.0d0
7|C sonic point check :  u0=0.60d0
8|c    u0=0.60d0
9|    u1=u0

```

衝撃波管問題の初期条件

(continue)

衝撃波管問題の初期条件

```

10
11     rratio=0.1250d0
12     pratio=0.10d0
13
14     rho0=1.0d0
15     rho1=rho0*rratio
16     p0=1.0d0
17     p1=p0*pratio
18
19     do i=0,nx
20         if (i.lt.nx/2) then
21             q(1,i)=rho0
22             q(2,i)=rho0*u0
23             q(3,i)=rho0*u0**2/2.0d0+p0/(gamma-1.0d0)
24         else
25             q(1,i)=rho1
26             q(2,i)=rho1*u1
27             q(3,i)=rho1*u1**2/2.0d0+p1/(gamma-1.0d0)
28         endif
29     enddo
30     return
31     end

```

A.8.2 要素の取り出し

保存量を表すある配列 qq から空間の i 番目の要素の密度 rho, 速度 u, エネルギー密度 e, 圧力 p, エンタルピー h を取り出すには、次のサブルーチンを用いる。

要素の取り出し

```

1     subroutine variables(nn,i,qq,gamma,rho,u,e,p,h)
2     implicit real*8 (a-h,o-z)
3     dimension qq(3,nn)
4     rho=qq(1,i)
5     u=qq(2,i)/rho
6     e=qq(3,i)
7     p=(e-rho*u**2/2.0d0)*(gamma-1.0d0)
8     h=(e+p)/rho
9     return
10    end

```

配列が q1(3,nx) のように宣言されているものに対しては、

```
call variables(nx,k,q1,gamma,rho,u,e,p,h)
```

として $q1(*,k)$ に関する量を取り出すことができるが、 $q(3,0:nx)$ のように宣言された配列に対して $q(*,k)$ という要素から各種の量を得るには、

```
call variables(nx+1,k+1,q,gamma,rho,u,e,p,h)
```

のように呼び出さなければならない。

A.8.3 音速

音速は次のサブルーチンで求められる。

```
1  subroutine soundspeed(gamma,p,rho,c)
2  implicit real*8 (a-h,o-z)
3  c=dsqrt(gamma*p/rho)
4  return
5  end
```

音速

ただし、セル境界での Roe 平均から求める音速は、これとは別にサブルーチン `makematrix()` で速度とエンタルピーから計算されてその内部で使われている。

A.8.4 Chakravarthy-Osher 法の数値流束の補正項の追加

時間に関するループの中で用いた、Chakravarthy-Osher の方法での数値流束の補正項を数値流束に加えるためのサブルーチン `addcoflux()` は、次のように与える。

```
Chakravarthy-Osher 法の数値流束の補正項の追加
1  subroutine addcoflux(nx,flxco,flx)
2  implicit real*8 (a-h,o-z)
3  dimension flxco(3,nx),flx(3,nx)
4  do i=1,nx
5      do j=1,3
6          flx(j,i)=flx(j,i)+flxco(j,i)
7      enddo
8  enddo
9  return
10 end
```

A.8.5 配列のコピー

時間に関するループの中で用いた配列のコピーは次のようにする。

		配列のコピー
1	subroutine copyvariable(nx,q,qt)	
2	implicit real*8 (a-h,o-z)	
3	dimension q(3,0:nx),qt(3,0:nx)	
4	do i=0,nx	
5	do j=1,3	
6	qt(j,i)=q(j,i)	
7	enddo	
8	enddo	
9	return	
10	end	

A.9 補足

プログラムを完成させるには、時間ループ以外の主プログラムと下記のサブルーチン副プログラム

- roeaverage() : Roe 平均の計算... 式 (2.32), (2.33)
- fluxatmesh() : 流束の計算... 式 (2.2)
- fluxabsA() : 膨張波に関して修正された $|A|\Delta Q$ の計算
... 式 (2.36) の後ろの項および式 (2.46)–(2.48)
- muscl() : MUSCL 法による物理量の内挿... 式 (3.40), (3.41) および第 4 章
- coscheme() : Chakravarthy-Osher 法による数値流束に対する補正項の計算
... 式 (3.49) の第 2 項以降

が必要である。これらの内で、roeaverage(), fluxatmesh(), fluxabsA() を作成すれば時間 1-2 次精度、空間 1 次精度の Roe 法が完成する。さらに、muscl() を作成すれば MUSCL 法による空間 3 次精度までの解法、あるいは coscheme() を作成すれば Chakravarthy-Osher による空間 3 次精度までの解法が完成する。

これらの作成は演習課題とする。