

1D03 圧縮性流れ圧力平衡維持スキームにおける 人口粘性項の構築

○伊藤開, 寺島洋史（北海道大学）

Pressure-Equilibrium-Preserving Scheme with Consistent Numerical Diffusivity for Compressible Real-Fluid Flows
Kai ITO, Hiroshi Terashima (Hokkaido University)

Key Words: Pressure-Equilibrium, Real-Fluid Equation of State, Consistent Numerical Diffusivity

Abstract

This study proposes numerical diffusivity terms for non-conservative formulations that preserve velocity and pressure equilibrium at fluid interfaces, enabling robust simulations of compressible real-fluid flows. The numerical diffusivity terms are consistently derived to maintain the velocity and pressure equilibrium conditions, and their coefficients are constructed based on the total variation diminishing (TVD) concept. The capability of the proposed scheme is demonstrated through one-dimensional interface advection flow simulations, including cases with large density gradients.

1. はじめに

非粘性流れでは流体界面において、「速度平衡」および「圧力平衡」が物理的に成立する。ここでは「平衡」を、非粘性流れにおいて、ある時刻で速度と圧力が空間に一樣であるならば、次の時間ステップでもそれらは維持されるという物理現象と定義する。しかし、多成分流や超臨界流のように熱力学的性質（密度、温度、比熱比等）が大きく変化する場合、通常の保存形式の支配方程式を用いると、圧力・速度平衡は保たれず、流体界面において虚偽（非物理的な）の圧力振動が発生することがよく知られている⁽¹⁾（図1参照）。この問題を解決するために、様々な手法が提案されてきた。Abgrall⁽¹⁾は、多成分熱量の完全気体に対して比熱比の輸送方程式を導入し、圧力平衡を維持する計算手法を提案した。また、Terashimaら⁽²⁾は圧力発展方程式を導入することで、超臨界圧下においても圧力平衡を維持する計算手法を提案した。しかし、これらの提案された手法は支配方程式に対して追加の輸送方程式、もしくはエネルギー保存方程式の代わりに圧力発展方程式を解く必要があった。しかし近年、Fujiwaraら⁽³⁾により、圧力平衡を離散的に満たすための数値流束の条件、「圧力平衡条件」が導かれ、これを陰的に満たす数値流束が提案された。その結果、支配方程式を解くだけで圧力平衡を満たすことに成功した。しかし、構築された数値流束は熱量の完全気体に限定されていた。そこで、Terashimaら⁽⁴⁾は、Fujiwaraらの考えを任意の状態方程式にも拡張し、近似的に圧力平衡を満足する（APEC：approximately pressure equilibrium preserving under conservation）を開発した。APECは超臨界シミュレーションにおいて圧

力平衡特性を向上させることに成功した。しかし、これらの数値手法は初期条件において密度や温度等の物理量が空間に対して十分に解像されている場合に限定されており、これらの物理量が初期条件において急峻な勾配を持つ場合には、密度や温度場に数値振動が生じるという問題がある。そこで、我々は、圧縮性非理想流体に対して圧力平衡を維持しつつ、堅牢な数値シミュレーションを可能とする計算手法の開発を行っている。APECの堅牢化が最終目標となるが、本研究では、まず圧力平衡を完全に満足するエネルギー非保存型の数値手法PEqC（Pressure Equilibrium preserving with quasi-Conservation scheme）⁽⁴⁾を用い、圧力平衡を維持する数値粘性項の構築とその評価を行う。

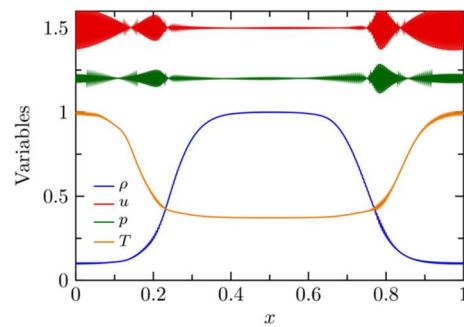


図1 虚偽振動発生時の各物理量分布（緑：圧力）

2. 計算手法

2. 1 支配方程式および人口粘性項

一般的に、数値流体解析において数値振動を抑制する手法として、人工粘性項を流体の支配方程式に追加するという手法がよく用いられてきた⁽⁵⁾。本研究

でも同様の方向性で進めた．本研究では流体の支配方程式は一次元圧縮性 Euler 方程式とし，式（1）に人工粘性項を含めた支配方程式を示す．

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} &= \frac{\partial A_p}{\partial x} \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u u + p)}{\partial x} &= \frac{\partial A_{pu}}{\partial x} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E + p)u}{\partial x} &= \frac{\partial A_{pE}}{\partial x}\end{aligned}\quad (1)$$

ここで，Euler方程式の右辺にある各項が人工粘性項を表す．今，人工粘性項を追加したことにより圧力と速度平衡を満たされない可能性がある．したがって各支配方程式の人工粘性項は圧力・速度平衡を満足するように構築する必要がある．詳細な導出はここでは示さないが，圧力と速度平衡を満たす人工粘性項は式（2）のようになる．

$$\begin{aligned}\frac{\partial A_p}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial A_{pu}}{\partial x} &= \frac{\partial u A_p}{\partial x} \\ \frac{\partial A_{pE}}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{uu}{2} A_p \right) + \epsilon \frac{\partial A_p}{\partial x}, \quad \epsilon = \left(\frac{\partial \rho e}{\partial \rho} \right)_p \\ \chi &= \max \left(\frac{\Delta x}{2} |u| [1 - \psi(r)], 0 \right)\end{aligned}\quad (2)$$

ここで，式（3）は人工粘性係数の定義であり， $\psi(r)$ は流束制限関数である，不連続界面を捉える手法として従来広く用いられてきたLAD（Localized Artificial Diffusivity）法⁽⁵⁾は，低次の中心差分スキームと組み合わせた場合，流体界面における数値振動を十分に抑制できないことが，Mirjaliliら⁽⁶⁾の最近の研究により明らかにされた．本研究ではこの問題を解消するために彼らが導入したTVD（Total Variation Diminishing）法をベースとした人工粘性係数を式（2）の人工粘性項と組み合わせる．本研究では，式（3）の流束制限関数はMirjaliliら⁽⁶⁾と同様のものを採用しており，次式により表される．

$$\psi(r) = 1 + \tanh \left(\frac{r-1}{\lambda} \right) \quad (4)$$

ここで， r はセル界面における質量流束の勾配比， λ はTVD領域を調整するパラメータであり，本研究では1.95と設定している．

2. 2 数値計算手法のまとめ

本研究で用いた数値計算手法をまとめる．支配方程式は人工粘性項を導入した一次元圧縮性Eulerであり，各数値流束は2次精度のsplit form⁽⁷⁾により離散化される．また，内部エネルギー流束には，圧力平衡条件を陰的に満たすPEqC⁽⁴⁾の考えを適用しており，非保存型となっている．これは圧力平衡を保証した状態で，数値粘性項を構築するためである．状態方程式には，非理想性を考慮したSoave-Redlich-

Kwong (SRK)状態方程式⁽⁸⁾を使用し，時間積分法は3rd-order TVD Runge-Kutta法⁽⁹⁾を使用した．式（5）に本研究で用いた支配方程式と状態方程式を示す．

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u u + p)}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(u \chi \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\rho \frac{uu}{2} + p \right) u \right] &+ \epsilon \frac{\partial \rho u}{\partial x} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{uu}{2} \chi \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \\ p &= \frac{\rho R_u T}{M - b\rho} - \frac{\rho^2 a \alpha(T)}{M(M + b\rho)}\end{aligned}\quad (5)$$

3. 結果

3. 1 初期条件

超臨界圧下における一次元N₂-N₂接触面移流問題によって提案手法の性能を評価する．本問題では極低温のN₂が常温のN₂に流体界面で接し，それが移流する．計算領域は $x = [0 : 1]$ mで評価され，格子点数は501点，Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)数は0.6とし，境界には周期境界条件を与えた．各物理量の初期条件を式（6）に示す．初期分布を図2に示す．

$$\begin{pmatrix} \left(\rho_{N_2}^{(1)} \right)_0 \\ \left(\rho_{N_2}^{(2)} \right)_0 \\ u_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\rho_{N_2, \infty}^{(1)}}{2} [1 - \tanh(k(r - r_c))] \\ \frac{\rho_{N_2, \infty}^{(2)}}{2} [1 + \tanh(k(r - r_c))] \\ u_\infty \\ p_\infty \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$\begin{aligned}\left(\rho_{N_2}^{(1)} \right)_0 &= 500 \text{ kg/m}^3 \\ \left(\rho_{N_2}^{(2)} \right)_0 &= 50 \text{ kg/m}^3 \\ u_0 &= 100 \text{ m/s} \\ p_0 &= 5.0 \text{ MPa}\end{aligned}$$

ここで， r は $r = |x - x_c|$ で定義され， x_c は波中心位置， r_c は波中心から流体界面までの距離を示す． k は双曲線正接分布の滑らかさを決めるパラメータであり，値が大きいほど初期分布は急峻な勾配を持つ．今回の計算ではそれぞれ， $x_c = 0.5$ m， $r_c = 0.25$ m， $k = 60$ とした．また，式（6）に示される密度・圧力の初期条件は，流体界面を通じて臨界温度を跨ぐ領域（遷臨界領域）が計算領域に含まれていることを示す．

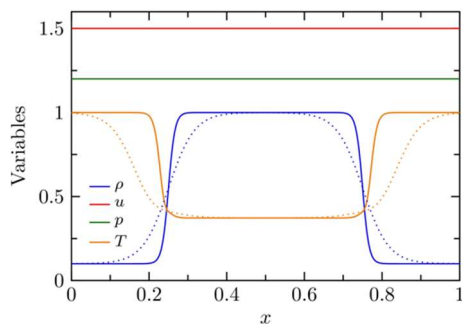
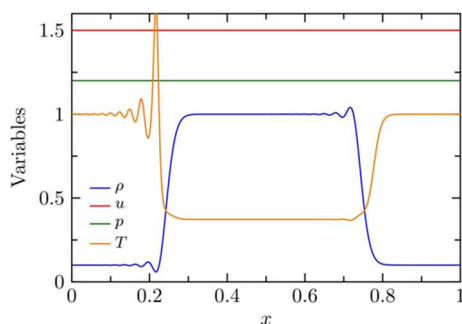


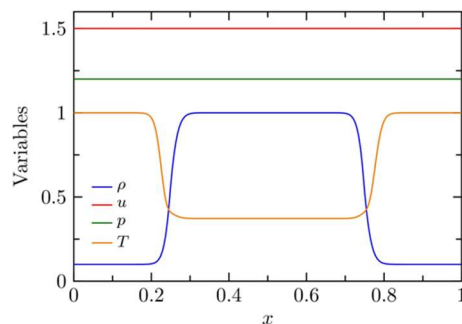
図2 初期の各物理量分布，点線： $k=15$ の場合は滑らかな勾配分布，実線： $k=60$ の場合は急峻な勾配分布

3. 2 初期条件

図3に計算結果を示す．図3に示される各物理量（青：密度，赤：速度，緑：圧力，橙：温度）の分布は $t = 0.01$ sにおけるものであり，初期分布から周期境界を通じて1周した結果を示す．図3（a）は従来のPEqC（人工粘性なし）を用いて計算した結果であり，密度や温度場に顕著な数値振動が発生していることが分かる．ただし，圧力・速度平衡は維持されていることに注意されたい．一方，今回提案した手法（人工粘性あり）では，密度や温度場に数値振動は発生させず，また圧力・速度平衡は維持されている．また，より厳しい条件においても提案手法が正確にシミュレーションできるかどうかを確認するため，初期条件における密度比を $10 \rightarrow 20$ （低温側の密度を 1000 kg/m^3 ）に変更した場合も検討した．その結果を図4に示す．こちらの結果も前述の結果と同様で，密度や温度場に数値振動は発生させず，安定にシミュレーションが行えていることが分かる．また，ここでは示さないが格子点数が十分でない場合や初期分布に不連続点を含む場合でも同様に，圧力・速度平衡を維持しつつ堅牢なシミュレーションが行えることが分かっている．本研究では，エネルギー方程式に対して，非保存形であるので全エネルギーは保存されていないことに注意されたい．



(a) PEqC⁽⁴⁾（人工粘性なし）



(b) 提案手法

図3 各物理量分布の比較（1周後）

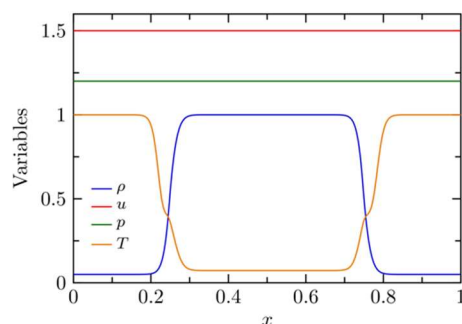


図4 密度比が20倍のケースでの各物理量分布（1周後）

4. まとめ

本研究では，非保存型の圧縮性非理想流体方程式に対して，圧力と速度平衡を維持する人工粘性項を導出した．また，それらをTVD法をベースとした人工粘性係数と組み合わせた．一次元接触面移流問題を通して，提案手法によって，圧力と速度平衡を維持しつつ，密度や温度場の数値振動を抑制できることを示した．また，提案手法は高密度比といった厳しい条件においてもパラメータチューニングなしで堅牢な計算を行えることが示された．圧力平衡が満足された場合，数値粘性を導入することで，堅牢な計算が行えることがわかった．今後は，今回の結果を踏まえて，保存型であるAPECの圧力平衡の精度向上，数値粘性項の導入による堅牢性の向上を目指して，研究を進めていく．

参考文献

- (1) Abgrall, R., “How to Prevent Pressure Oscillations in Multicomponent Flow Calculations: A Quasi Conservative Approach”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 125, No. 1 (1996), pp. 150-160.
- (2) Terashima, H. and Koshi, M., “Approach for simulating gas-liquid-like flows under supercritical pressures using a high-order central differencing scheme”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 231, No. 20 (2012), pp. 6907-6923.

- (3) Fujiwara, Y., Tamaki, Y., and Kawai, S., “Fully conservative and pressure-equilibrium preserving scheme for compressible multi-component flows”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 478 (2023), p. 111973.
- (4) Terashima, H., Ly, N., and Ihme, M., “Approximately pressure-equilibrium-preserving scheme for fully conservative simulations of compressible multi-species and real-fluid interfacial flows”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 524 (2025), p. 113701.
- (5) Terashima, H., Kawai, S., and Koshi, M., “Consistent numerical diffusion terms for simulating compressible multicomponent flows”, *Computers & Fluids*, Vol. 88 (2013), pp. 484-495.
- (6) Mirjalili, S., Taverniers, S., Collis, H., Behandish, M., and Mani, A., “A localized artificial diffusivity approach inspired by TVD schemes and its consistent application to compressible flows”, *Center for Turbulence Research, Stanford University*, (2021), pp. 169-182.
- (7) Shima, N., Kuya, Y., Tamaki, Y., and Kawai, S., “Preventing spurious pressure oscillations in split convective form discretization for compressible flows”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 427 (2021), p. 110060.
- (8) Soave, G., “Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 27, No. 6 (1972), pp. 1197-1203.
- (9) Gottlieb, S. and Shu, C.-W., “Total variation diminishing Runge-Kutta schemes”, *Mathematics of Computation*, Vol. 67 (1998), No. 221, pp. 73-85.