Logarithm conformation representationによる 圧縮性流体ソルバーの開発

中澤 嵩（大学MMDS）

Compressible fluid solver based on Logarithm conformation representation

NAKAZAWA Takashi (MMDS, Osaka university, Japan)

ABSTRACT

This paper introduces new numerical scheme for compressible Euler equation based on Logarithm conformation representation. With using Adaptive Mesh Refinement, the author shows some numerical calculation results about Sod Shock tube.

1. はじめに

航空工学や自動車工学では非定常・圧縮性（高レイノルズ数）流体を扱う必要があるため，圧縮性 Navier-Stokes 方程式が支配方程式として多く利用されるが，時間方向・空間方向の高精度な離散化を担保する必要があるため計算コストが膨大となる．そこで，最適設計を行う際には，圧縮性 Navier-Stokes 方程式と比較して計算コストを抑制することが可能な、式(1)に記述している保存系圧縮性 Euler 方程の利用が一般的である．

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

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

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot \{(\rho E + p)\boldsymbol{u}\} = 0. \tag{1-c}$$

この圧縮性流体を扱う際, 非圧縮性流体と比較して，時空間に複雑な応力分布が発生し，局所的に密度が集中する衝撃波が発生する．このような場合には, 衝撃波を高精度に捕捉する必要があるため, 界面を高精度に解像することが可能な有限体積法や不連続ガラーキン法等を用いた空間離散化が行われるが, 形状最適化を行う際には順問題だけでなく逆問題を解く必要があるためアルゴリズムが非常に煩雑となることが予想される．

近年，Multi Fidelity 設計を考慮したアプローチが注目を集めつつある．ここで，圧縮性 Navier-Stokes 方程式を用いた設計を High-Fidelity 設計とする．一方，圧縮性 Euler 方程式に対して何らかの数学的な操作を行った際に得られる簡易な数理モデルを用いた設計をLow-Fidelity設計とすることで（厳密に圧縮性 Euler 方程式を解いていないが），膨大な計算コストを緩和しつつ妥当な最適形状が得られると考えられる．ここでは，Low- Fidelity 設計を行う際の支配方程式として式(2)に記述している F. De Vuyst が提案している数理モデルを活用する．便宜上，本原稿では FDV 方程式と呼ぶこととする．

$$\frac{D a_\rho}{D t} + \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, a_\rho = \log(\rho), \tag{2-a}$$

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt}+\frac{p}{\rho}\nabla a_p=0, \tag{2-b}$$

$$\frac{Da_p}{Dt}+\gamma\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0, a_p=\log(p). \tag{2-c}$$

当該数理モデルでは, ガラーキン法で離散化が可能であり, 更に移流項については直接法で演算が可能な特性曲線法を用いることで, 計算コストを大幅に抑制することが可能となる.

2. 導出

FDV 方程式(2)の導出には，非保存系圧縮性Euler 方程(3)を利用することが便利である.

$$\frac{D\rho}{Dt}+\rho(\nabla\cdot\boldsymbol{u})=0, \tag{3-a}$$

$$\frac{D\boldsymbol{u}}{Dt}+\frac{1}{\rho}\nabla p=0, \tag{3-b}$$

$$\frac{Dp}{Dt}+\rho c^2(\nabla\cdot\boldsymbol{u})=0. \tag{3-c}$$

$a_\rho=\log\rho, a_p=\log p, e^{a_\rho}=\rho, e^{a_p}=p$を非保存系圧縮性Euler方程式(3)に代入することで，FDV方程式(2)が用意に得られる.

3. 位相速度・適合方程式・保存料

まず初めに，位相速度を調べることにする．qを下記のベクトルとすると,

$$q=\left[a_\rho,u,a_p\right]^{\mathrm{T}}$$

FDV 方程式(2)は式(4)のように記述し直すことが可能である.

$$q_t+Aq_x=0,\ A=\begin{bmatrix}u & 1 & 0\\ 0 & u & \frac{p}{\rho}\\ 0 & \gamma & u\end{bmatrix}. \tag{4}$$

位相速度は行列Aの固有値λとして評価することで,

$$\begin{aligned}&|A-\lambda I|\\ &=\begin{vmatrix}u-\lambda & 1 & 0\\ 0 & u-\lambda & \frac{p}{\rho}\\ 0 & \gamma & u-\lambda\end{vmatrix}\\ &=(u-\lambda)\{(u-\lambda)^2-c^2\}\\ &=(u-\lambda)(u-\lambda-c)(u-\lambda+c)\end{aligned}$$

$\lambda=u,u-c,u+c$となる．これは，非保存系圧縮性 Euler 方程(3)の位相速度と一致する． 次に，適合方程式を導出する．行列Aを対角化する際に得られる左固有行列をLとして,

$$A=\begin{bmatrix}u & 1 & 0\\ 0 & u & \frac{p}{\rho}\\ 0 & \gamma & u\end{bmatrix}=L\Lambda R, \Lambda=\begin{bmatrix}u & 0 & 0\\ 0 & u+c & 0\\ 0 & 0 & u-c\end{bmatrix},$$

$$L=\begin{bmatrix}1 & 0 & -\frac{1}{\gamma}\\ 0 & 1 & \frac{c}{\gamma}\\ 0 & 1 & -\frac{c}{\gamma}\end{bmatrix}.$$

式(4)に左固有行列Lを作用させることで，下記のODE が得られる.

$$D_1a_\rho-\frac{1}{\gamma}D_1a_p=0, \tag{5-a}$$

$$D_2u+\frac{c}{\gamma}D_2a_p=0, \tag{5-b}$$

$$D_3u-\frac{c}{\gamma}D_3a_p=0. \tag{5-c}$$

その際，D_iは下記である.

$$D_i=\frac{\partial}{\partial t}+\lambda_i\frac{\partial}{\partial x}, \lambda_1=u, \lambda_2=u+c, \lambda_3=u-c$$

式(5)を変数変換することで式(6)が得られるが, これは非保存系圧縮性 Euler 方程(3)の適合方程

式と一致する.

$$D_1\rho-\frac{1}{c^2}D_1p=0, \quad \text{(6-a)}$$

$$D_2u+\frac{1}{\rho c}D_2p=0, \quad \text{(6-b)}$$

$$D_3u-\frac{1}{\rho c}D_3p=0. \quad \text{(6-c)}$$

このことから，FDV 方程式(2)が特性線上に限りリーマン不変量(7)を保存することは明らかである.

$$\frac{p}{\rho^\gamma}, \quad \text{(7-a)}$$

$$u+\frac{2}{\gamma-1}c, \quad \text{(7-b)}$$

$$u-\frac{2}{\gamma-1}c. \quad \text{(7-c)}$$

しかしながら，非保存系圧縮性 Euler 方程(3)と同様に FDV 方程式(2)もまた保存系圧縮性 Euler 方程(1)の保存料(8)やエントロピー(9)を全て保存する訳ではない.

$$\int_\Omega \frac{\partial\rho}{\partial t}dx=0, \quad \text{(8-a)}$$

$$\int_\Omega \frac{\partial\rho u}{\partial t}dx=0, \quad \text{(8-b)}$$

$$\int_\Omega \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{p}{\gamma-1}+\frac{1}{2}\rho u^2\right)dx=0, \quad \text{(8-c)}$$

$$\int_\Omega \frac{\partial}{\partial t}\left(\log\frac{p}{\rho^\gamma}\right)dx=0, \quad \text{(9)}$$

式(8-a)は保存することが自明であるが，式(8-b),(8-b),が保本量であることは一般に示せない．また(9)は特性線上で保存することは示せるが，その他の領域では保存しないこととなる. このような事情から，保存料(8,9)は Adaptive Mesh Refinement (AMR)を用いて高精度に近似することにする.

(8-a):

$$\begin{aligned}\int_\Omega \frac{\partial\rho}{\partial t}dx &:= \int_\Omega \rho\frac{\partial a_\rho}{\partial t}dx\\ &=-\int_\Omega \rho\left[u\cdot\nabla a_\rho+(\nabla\cdot u)\right]dx\\ &=-\int_\Omega \left[u\cdot\nabla\rho+\rho(\nabla\cdot u)\right]dx\\ &=-\int_\Omega \nabla\cdot(\rho u)\,dx=0.\end{aligned}$$

(8-b):

$$\begin{aligned}\int_\Omega \frac{\partial\rho u}{\partial t}dx &= \int_\Omega \rho\frac{\partial u}{\partial t}dx+\int_\Omega u\frac{\partial\rho}{\partial t}dx\\ &\le \int_\Omega \rho\frac{\partial u}{\partial t}dx+\|u\|_{L^2}^2\left(\int_\Omega \frac{\partial\rho}{\partial t}dx\right)^2\\ &=-\int_\Omega \rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}\,dx-\int_\Omega \nabla\cdot(pI)\,dx\\ &=-\int_\Omega \rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}\,dx\neq 0.\end{aligned}$$

(8-c):

$$\begin{aligned}&\int_\Omega \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{p}{\gamma-1}+\frac{1}{2}\rho u^2\right)dx\\ &=\frac{1}{\gamma-1}\int_\Omega \frac{\partial p}{\partial t}dx+\frac{1}{2}\|u\|_{L^2}^2\left(\int_\Omega \frac{\partial\rho u}{\partial t}dx\right)^2\\ &\le\frac{1}{\gamma-1}\int_\Omega p\left(u\cdot\nabla a_p+\gamma(\nabla\cdot u)\right)dx\\ &\qquad+\frac{1}{2}\|u\|_{L^2}^2\left(-\int_\Omega \rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}\,dx\right)\\ &=\frac{1}{\gamma-1}\int_\Omega \{u\cdot\nabla p+\gamma p(\nabla\cdot u)\}\,dx\\ &\qquad+\frac{1}{2}\|u\|_{L^2}^2\left(-\int_\Omega \rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}\,dx\right)\neq 0.\end{aligned}$$

(9):

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t}\left(\log\frac{p}{\rho^{\gamma}}\right) dx = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t}\left(a_p - \gamma a_\rho\right) dx$$

$$= -\int_{\Omega} \left(u \cdot \nabla a_p + \gamma(\nabla \cdot u)\right) dx$$

$$+ \int_{\Omega} \gamma \left(u \cdot \nabla a_\rho + (\nabla \cdot u)\right) dx$$

$$= \int_{\Omega} \left(-u \cdot \nabla a_p + \gamma u \cdot \nabla a_\rho\right) dx$$

$$= \int_{\Omega} u \cdot \nabla\left(a_p - \gamma a_\rho\right) dx \neq 0.$$

4. Adaptive Mesh Refinement

本研究では，Freefem++にインプリメントされている AMR solver を利用する．この AMR solver は, 有限要素法における誤差解析を利用している. 任意の関数uを有限要素空間に射影する作用素Π_hとすると$\Pi_h u(\boldsymbol{x})$は基底関数$\psi_i(\boldsymbol{x})$を用いて下記のように記述できる.

$$\Pi_h u(\boldsymbol{x}) = u_h(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} u(\boldsymbol{p}_i)\, \psi_i(\boldsymbol{x}).$$

そして，連続空間における関数uと有限要素空間における関数$\Pi_h u(\boldsymbol{x})$とのL^{∞}ノルムは下記のように評価することが可能である.

$$\|u - \Pi_h u\|_{L^{\infty}(K)} \leq \frac{\lambda^2}{2} \max_{x \in K} \max_{i=1,2,3} \langle \boldsymbol{e}_i, |H_u(\boldsymbol{x})| \boldsymbol{e}_i \rangle.$$

その際，$\boldsymbol{e}_i$は三角形要素おけるエッジのベクトル，H_uは関数uのヘッシアンである. このL^{∞}ノルムを最小化するように三角形要素を生成する．なお，関数uを保存料(8,9)と置き換えて AMR を施すことで，非保存系圧縮性 Euler 方程(3)から導出された FDV 方程式(2)を計算する際に，保存料(8,9)を高精度に近似することが期待される.

5. 数値計算モデルの導出

本研究では，時間方向に対してC^1級 2 次精度の数理モデルを導出する． 初めに，密度について考察する．$\boldsymbol{x}$を解析領域における座標として，ρ^{n-1}を上流点$\boldsymbol{y}$においてテイラー展開すると

$$\rho^{n-1}(\boldsymbol{y}) = \rho^{n-1}(\boldsymbol{x}) - \Delta t \boldsymbol{k} \cdot \nabla \rho^{n-1}(\boldsymbol{x}). \quad (10)$$

となる．そこで，評価点$(\boldsymbol{x}, t^n)$における速度場$\boldsymbol{k}$を時間 2 次精度で近似することで$\boldsymbol{k} = u^n = 2u^{n-1} - u^{n-2}$得られる．また，評価点$(\boldsymbol{x}, t^n)$と評価点$(\boldsymbol{y}, t^{n-1})$における微小領域の関係式は下記のように記載できる.

$$dy = \left(1 - \Delta t\, \nabla \cdot \boldsymbol{k} + \Delta t^2 \det[(\nabla \boldsymbol{k}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}] + o(\Delta t^3)\right) dx. \quad (11)$$

そして，式(10,11)を下記の積分に代入する.

$$\int_{\Omega(\boldsymbol{y})} \rho^{n-1}(\boldsymbol{y}) dy$$

$$= \int_{\Omega(\boldsymbol{x})} \begin{bmatrix} \rho^{n-1}(\boldsymbol{x}) - \Delta t\{\boldsymbol{k} \cdot \nabla \rho^{n-1} + (\nabla \cdot \boldsymbol{k})\rho^{n-1}\} \\ +\Delta t^2\{(\nabla \cdot \boldsymbol{k})\boldsymbol{k} \cdot \nabla \rho^{n-1} + \det[(\nabla \boldsymbol{k}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}]\rho^{n-1}\} \end{bmatrix}$$

最終的に，下記のように時間方向に対してC^1級 2 次精度の物質微分を近似する.

$$\frac{D\rho^n}{Dt} = \frac{\rho^n(\boldsymbol{x}) - \rho^{n-1}(\boldsymbol{x})}{\Delta t} + \boldsymbol{k} \cdot \nabla \rho^{n-1} + (\nabla \cdot \boldsymbol{k})\rho^{n-1} - \Delta t\{(\nabla \cdot \boldsymbol{k})\boldsymbol{k} \cdot \nabla \rho^{n-1} + \det[(\nabla \boldsymbol{k}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}]\rho^{n-1}\}. \quad (12)$$

次に，$a_\rho = \log \rho, e^{a_\rho} = \rho$に加え，時間微分項を時間方向に離散化した下記の式を用いることで

$$\frac{\rho^n(\boldsymbol{x})-\rho^{n-1}(\boldsymbol{x})}{\Delta t}\approx\rho^{n-1}\frac{a_\rho{}^n(\boldsymbol{x})-a_\rho{}^{n-1}(\boldsymbol{x})}{\Delta t}$$

a_ρに関する支配方程式が得られる．

$$\frac{Da_\rho{}^{n-1}}{Dt}+(\nabla\cdot\boldsymbol{k})$$
$$-\Delta t\left\{(\nabla\cdot\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}\cdot\nabla a_\rho{}^{n-1}+det[(\nabla\boldsymbol{k}^T)^T]\right\}=0$$

ここで，D/Dtは物質微分であり特性曲線法を用いて近似するが，1 次精度と 2 次精度が既に提案されている．

1 次精度：

$$\frac{D\phi}{Dt}(\boldsymbol{x},t^n)=\frac{\phi^n(\boldsymbol{x})-\phi^{n-1}(\boldsymbol{y})}{\Delta t}+o(\Delta t),$$

2 次精度：

$$\frac{D\phi}{Dt}(\boldsymbol{x},t^n)=\frac{3\phi^n(\boldsymbol{x})-4\phi^{n-1}(\boldsymbol{y})-\phi^{n-1}(\boldsymbol{z})}{2\Delta t}+o(\Delta t^2)$$

その際，$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-\Delta t\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}\approx 2\boldsymbol{u}^{n-1}-\boldsymbol{u}^{n-2},\boldsymbol{z}=\boldsymbol{x}-2\Delta t\boldsymbol{k}$である．他の支配方程式に対しても同様の手続きで導出することが可能である．

6. 弱形式

ここでは，FDV 方程式(2)の弱形式と時間方向に対してC^1級 2 次精度の数理モデル（Modified FDV 方程式）の弱形式を記載する．

FDV 方程式

Density:

$$\int_\Omega\frac{a_\rho^n(\boldsymbol{x})-a_\rho^{n-1}(\boldsymbol{y})}{\Delta t}vdx-\int_\Omega\boldsymbol{u}^n\cdot\nabla vdx=0$$

Velocity:

$$\int_\Omega\frac{\boldsymbol{u}^n(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{u}^{n-1}(\boldsymbol{y})}{\Delta t}\cdot\boldsymbol{v}dx+\int_\Omega\frac{p^n}{\rho_*^{n-1}}\nabla a_\rho^n\cdot\boldsymbol{v}dx=0$$

Pressure:

$$\int_\Omega\frac{a_p^n(\boldsymbol{x})-a_p^{n-1}(\boldsymbol{y})}{\Delta t}wdx-\int_\Omega\gamma\boldsymbol{u}^n\cdot\nabla wdx=0$$

Modified FDV 方程式

Density:

$$\int_\Omega\frac{D}{Dt}\left(a_\rho^n(\boldsymbol{x}),a_\rho^{n-1}(\boldsymbol{y}),a_\rho^{n-2}(\boldsymbol{z}),\boldsymbol{k}\right)vdx-\int_\Omega\boldsymbol{u}^n\cdot\nabla vdx=0$$

Velocity:

$$\int_\Omega\frac{D}{Dt}(\boldsymbol{u}^n(\boldsymbol{x}),\boldsymbol{u}^{n-1}(\boldsymbol{y}),\boldsymbol{u}^{n-2}(\boldsymbol{z}),\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{v}dx+\int_\Omega\frac{p^n}{\rho_*^{n-1}}\nabla a_\rho^n\cdot\boldsymbol{v}dx=0$$

Pressure:

$$\int_\Omega\frac{D}{Dt}\left(a_p^n(\boldsymbol{x}),a_p^{n-1}(\boldsymbol{y}),a_p^{n-2}(\boldsymbol{z}),\boldsymbol{k}\right)wdx$$
$$-\int_\Omega\boldsymbol{u}^n\cdot\nabla wdx+\int_\Omega(\gamma-1)\frac{p^n}{p^{n-1}}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})wdx=0$$

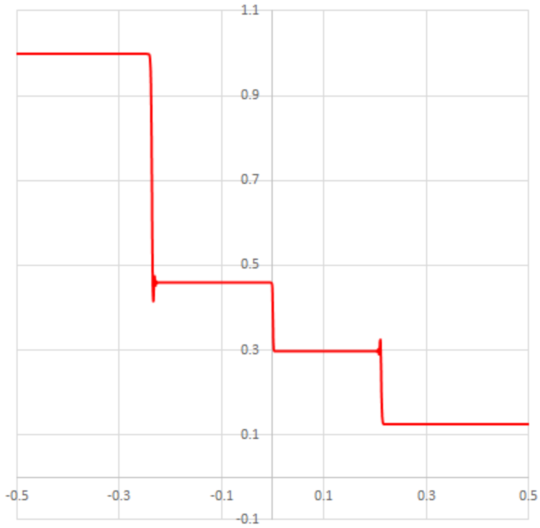
そこで，

$$\frac{D}{Dt}(a^n(\boldsymbol{x}),a^{n-1}(\boldsymbol{y}),a^{n-2}(\boldsymbol{z}),\boldsymbol{k})$$
$$=\frac{3a^n(\boldsymbol{x})-4a^{n-1}(\boldsymbol{y})+a^{n-2}(\boldsymbol{z})}{2\Delta t}$$
$$-\Delta t\{(\nabla\cdot\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}\cdot\nabla a+\det[(\nabla\boldsymbol{k}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}]\},$$

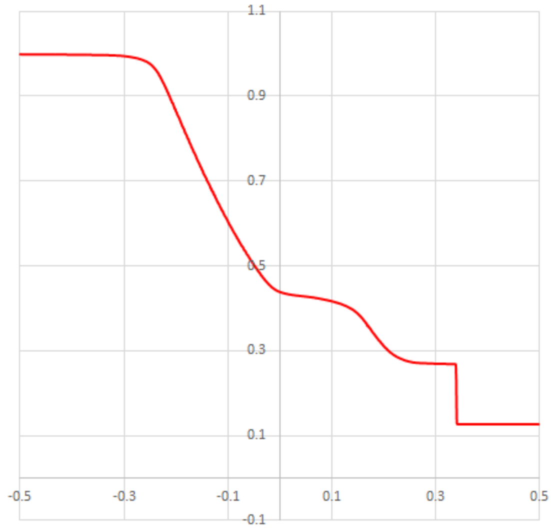
である．

7. 数値計算例：Sod Shock Tube

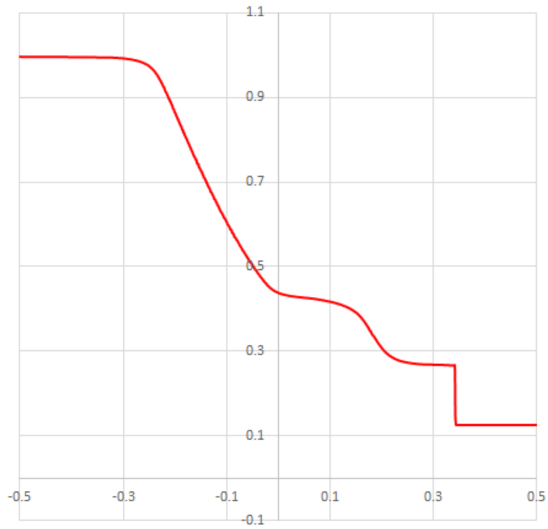
ここで，7 case の AMR を行った結果を図示する．Case (1)は AMR を行わなかった計算結果であるが全く異なった結果となった．Case (2,3)は衝撃波については概ね妥当な結果となったが，接触不連続面が鈍った分布となった．次に，Case (4)では接触不連続面を精度よく解像するために，エントロピーを用いた．その結果，接触不連続面は精度よく解像出来たものの，衝撃波が全く異なる結果となった．次に，Case (5)では特性線上の不変量を精度よく近似するために，リーマン不変量を用いたが，接触不連続面が鈍った分布となった．次に，Case (6)では式(8)を用いて AMR を行ったが，衝撃波でオーバーシュートが発生した．Case (7)では式(8,9) を用いて AMR を行ったが，オーバーシュートが発生することもなく妥当な結果が得られた．



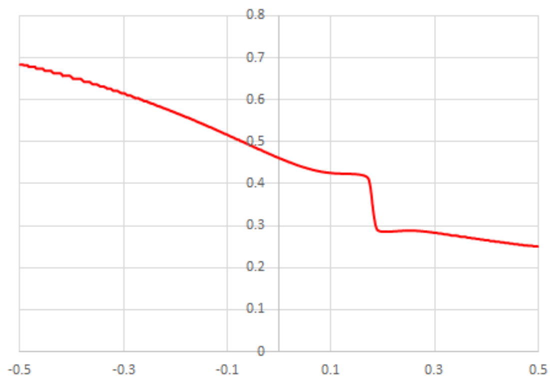
Case (1) AMR なし



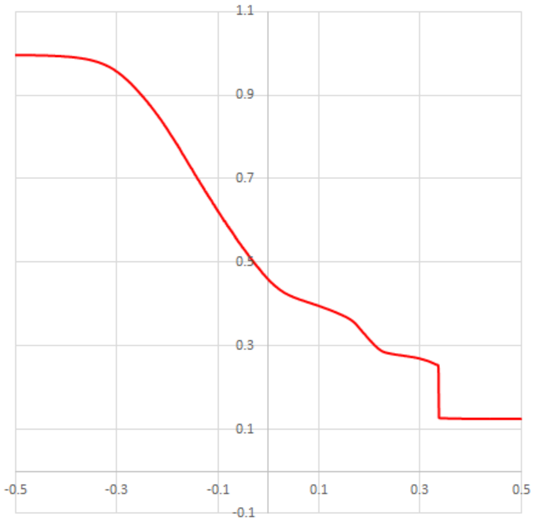
Case (2) AMR あり:ρ, u, p



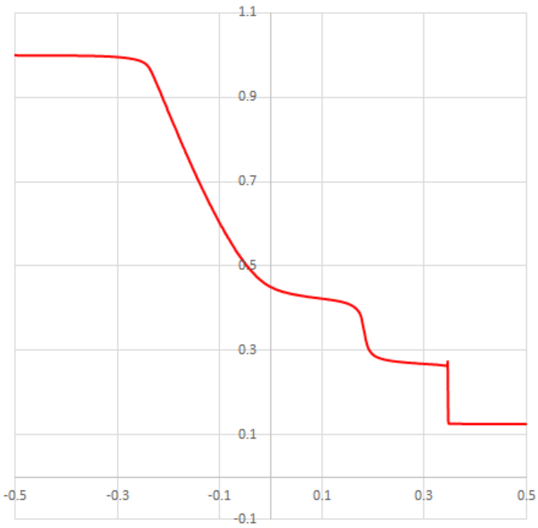
Case (3) AMR あり:a_ρ, u, a_p



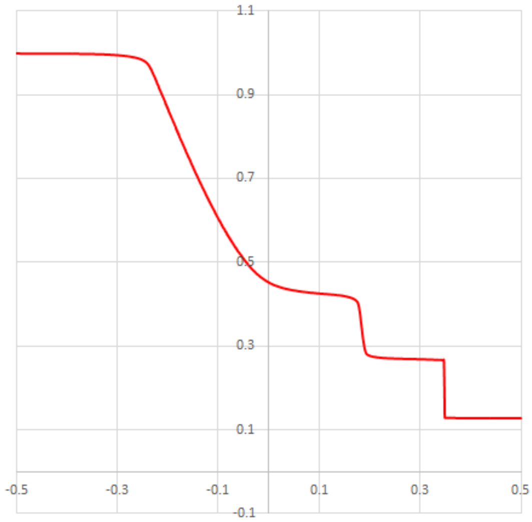
Case (4) AMR あり:$a_p - \gamma a_\rho$



Case (5) AMR あり:Riemann Invariant



Case (6) AMR あり:$\rho, \rho u, \frac{p}{\gamma-1}+\frac{1}{2}\rho u^2$



Case (7) AMR あり:$\rho, \rho u, \frac{p}{\gamma-1}+\frac{1}{2}\rho u^2, a_p - \gamma a_\rho$

図１． Sod Shock Tube の数値計算結果.

8. まとめ

本講演では，Logarithm conformation representation による圧縮性流体ソルバーに関して，圧縮性 Euler 方程式に関して数値計算アルゴリズムを構築した．そして，Sod Shock tube の計算結果を通して適切な AMR 法も併せて提案した．今後は，Shu Osher Shock tube や Double Mach Reflection 等の代表的な問題に対して適用し，その妥当性を数値的に検証する．

参考文献

(1) F. De Vuyst, HAL Id : cel-00842234, ver. 1.