

## 移流方程式に対するエルミート特性有限要素法の評価

総合情報基盤センター 奥村 弘

This paper presents a new characteristic finite element formulation, named SLG (semi-Lagrange Galerkin) method, on unstructured triangle / tetrahedral meshes to solve two- or three-dimensional advection equations / hyperbolic flow problems. In the present method, the calculation procedure is divided into two phases which are advection and non-advection phases. The advection phase is computed by the semi-Lagrange procedure using a 10 or 20 degrees of freedom triangular / tetrahedral element which consists of complete cubic polynomials given by function values and first order derivatives on each vertex and a function value on barycenter of triangle surface. The non-advection phase is calculated by the Galerkin finite element procedure using the 3 DOF triangular or 4 DOF tetrahedral linear elements.

キーワード：移流方程式、特性有限要素法、エルミート要素、semi-Lagrange Galerkin

### 1. はじめに

移流方程式は自然現象の数理モデリングとして様々な科学技術分野で広く用いられており、この方程式は双曲型に分類され応用数学的にも数値計算上もその計算の高精度化・高安定化に関する研究が盛んに行われている。特に、非構造格子（三角形や四面体など）を用いた有限要素法による高精度かつ精緻な空間モデリングが必要となる。また、数値波動水槽における自由表面（界面）流れ解析では、VOF 法や Level set 法を用いた界面捕捉法が一般的に用いられ、界面の挙動を正確に表現する移流計算が必要である。本研究では、未知関数の空間 1 階微係数も考慮できる完全 3 次精度の Hermite 要素 (Ciarlet, 2001) を用いた SLG (Semi-Lagrange Galerkin) 法に着目する (奥村ら(2009), 金山ら(2013))。SLG 法では、Hermite 要素を移流・非移流計算に適用することによって、CIP 法の考えを非構造格子に拡張でき、非移流計算でも高精度化が可能である。また、Hermite 要素には自由度に導関数値が含まれることから、CIP 法および CIP 法から派生した手法 (multi-moment 法) (Aoki(1997), Ii ら(2005)) のように支配方程式を 1 階微分した 1 階導関数値に関する時間発展方程式を導出する必要がない。本研究では 3 次元 Hermite 要素を SLG 法に適用し幾つか純移流問題により数値特性を検証する。

### 2. 移流方程式と特性法

$N_d$ 次元領域  $\Omega \subset \mathbb{R}^{N_d} (d = 2, 3)$ において、スカラー関数  $u(\mathbf{x}, t)$  に関する純移流方程式を考える。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla u = 0 \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{a}$  は移流速度ベクトルであり、式(1)に対する初期条件  $u(\mathbf{x}, 0) = u^0, \mathbf{x} \in \Omega$  が与えられるものとする。

時間  $t \in (0, T)$  に位置  $\mathbf{x}$  にある仮想流体粒子の時間  $\tau$  での位置を  $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t; \tau)$  とすると ( $T \in \mathbb{R}^+$  は終端時刻)、特性曲線上の軌跡は次の常微分方程式によって表される。

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}}{d\tau} = \mathbf{a}(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t; \tau), \tau), \\ \mathbf{X}(\mathbf{x}, t; t) = \mathbf{x} \end{cases} \quad (2)$$

式(1)の時間微分項 (第 1 項) と移流項 (第 2 項) は、次式の Lagrange 微分の形式で表すこともできる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla u = \frac{d}{d\tau} u(\mathbf{X}(\mathbf{x}, t; \tau), \tau) \Big|_{\tau=t} \quad (3)$$

特性法では、時間増分量を  $\Delta t$  として、式(3)を以下のように近似する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{a} \cdot \nabla u \approx \frac{u^{n+1}(\mathbf{x}) - u^n(\mathbf{x})}{\Delta t} \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{x})$ は  $t^{n+1} (\equiv (n+1)\Delta t)$  でのスカラー関数、 $\mathbf{u} \circ \mathbf{X}^n(\mathbf{x})$  は  $t^n (\equiv n\Delta t)$ における  $\mathbf{x}$  を起点とした上流点の位置  $\mathbf{X}^n(\mathbf{x}) (\equiv \mathbf{X}(\mathbf{x}, t^{n+1}; t^n))$  でのスカラー関数であり、合成関数として表される。このとき、上流点の位置  $\mathbf{X}^n(\mathbf{x})$  は、式(2)を時間積分することによって求められる。全時間での移流速度  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)$  が既知であれば時間高次精度の Runge-Kutta 法などを用いることができるが、Navier-Stokes 方程式のように移流項が非線形になる場合には、反復計算なしに移流速度  $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t^{n+1})$  を得ることができない。そこで、本論文では今後の研究展開を考慮し、以下のような時間 2 次精度の Adams-Bashforth 法による多段法により  $\mathbf{X}^n(\mathbf{x})$  を求める。

$$\mathbf{a}^*(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{2}(3\mathbf{a}^n(\mathbf{x}) - \mathbf{a}^{n-1}(\mathbf{x})) \quad (5)$$

上流点の位置を求めるには、中間点での移流速度を次の反復計算によって求める。

$$\begin{cases} \mathbf{a}^{(m)} = \mathbf{a}^* \left( \mathbf{x} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{a}^{(m-1)} \right) & (m = 1, 2, \dots), \\ \mathbf{a}^{(0)} = \mathbf{a}^*(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (6)$$

このとき、 $m = 1$  でも時間 2 次精度となるため、 $m$  は少ない反復回数で十分である（本論文の計算では  $m = 2$ ）。次に、時間 2 次精度の上流点の位置が次式により決まる。

$$\mathbf{X}^n(\mathbf{x}) \approx \mathbf{x} - \mathbf{a}^{(m)} \Delta t \quad (7)$$

### 3. Semi-Lagrange Galerkin (SLG) 法

移流方程式(1)に対する SLG 法では、近似式(4)により陽的な解の更新だけで移流計算を行うことができる。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u} \circ \mathbf{X}^n(\mathbf{x}) \quad (8)$$

移流計算を精度良く行うためには、CIP 法の考えに従い、物理量の分布を高次の補間関数を用いて近似する必要がある。本論文では、この高次補間に Lagrange 要素を用いるのではなく、有限要素法による構造解析分野の板曲げ問題において考案された導関数値を自由度に含む Hermite 型要素を適用する。この方法によれば（奥村ら(2009)）、要素の自由度に導関数値が含まれるため、CIP 法のように、支配方程式を 1 階微分した 1 階導関数値に関する時間発展方程式を導出する必要がなくなる。計

算効率の面では、連立 1 次方程式を解かない点において優れている。また、移流計算では、 $\mathbf{X}^n(\mathbf{x})$  が  $\mathbf{x}$  と大きく離れていても解の更新が可能である。よって、CFL 条件に制約されない大きな時間増分量  $\Delta t$  を選ぶことができ、安定性の面でも優れている。

### 4. 完全 3 次 Hermite 要素による有限要素近似

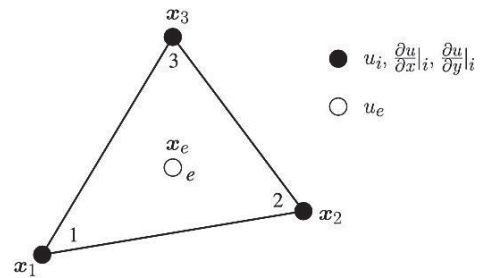
本論文では、 $N_d$ 次元の完全 3 次 Hermite 要素 ( $N_d = 2$ では三角形メッシュ、 $N_d = 3$ では四面体メッシュ)におけるスカラー関数  $u$  の有限要素近似は次式のように統一表現することができる。

$$\begin{aligned} u = \sum_i \left( -2\lambda_i^3 + 3\lambda_i^2 - 7\lambda_i \sum_{j < k, j \neq i, k \neq i} \lambda_j \lambda_k \right) u(x_i) \\ + 27 \sum_{i < j < k} \lambda_i \lambda_j \lambda_k u(\hat{x}_{ijk}) \\ + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j (2\lambda_i + \lambda_j - 1) \partial_i u(x_i) (x_j - x_i) \end{aligned} \quad (1 \leq i < j < k \leq N_d + 1) \quad (9)$$

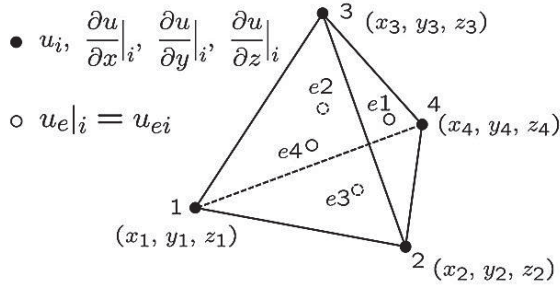
ここで、 $(i, j, k)$  は偶置換とし、図-1 (a)と(b)に示すように、 $x_i$  は要素頂点での座標、

$\hat{x}_{ijk} = (x_i + x_j + x_k)/3$  は面重心点  $\mathbf{e}_i$  での座標、

$\partial_i = \partial/\partial x_i$  は微分作用素である。また、式(9)は、面積（体積）座標  $\lambda_i$  を用いて陽的に表現されているため、有限要素法における積分を、数値積分することなしに、代数演算により解析的に求めることができる。また、式(8)の節点  $k$  における 1 階導関数値の更新は、CIP 法のように移流方程式を 1 階微分した 1 階導関数値に関する時間発展方程式から求めるのではなく、1 階導関数値の補間として次式から得られる。



(a) 三角形要素内の関数・導関数と節点配置



(b) 四面体要素内の関数・導関数と節点配置

図-1 完全3次 Hermite 要素

一般的に、2 流体や気液混相流体などの自由表面（界面）を有する流れ問題では、複雑な自由表面形状を高精度に表現（捕捉）する移流計算（界面捕捉）法が求められる。界面捕捉法の代表的な手法である VOF 法に基づく自由表面流れ解析では、VOF 関数は、液体であれば 1、気体であれば 0、自由表面上であれば 0.5 となる。このとき、VOF 関数の分布は界面近傍で急峻な勾配を有するステップ関数となるため、VOF 関数の移流計算精度が高い場合でも、数値的安定性がもたらす数値拡散の影響を最小限にとどめるため、何らかの界面鋭敏化を施す必要がある。この章では以下 5 章の数値実験で用いる界面鋭敏化手法について言及する。正接(tangent)関数変換による方法について明瞭なアルゴリズムを言及することは読者にとって重要であると判断した。この方法は、VOF 関数  $u$  に代わり正接関数変換したある関数  $\phi(u)$  の移流計算を行い、時間ステップ毎の逆正接(arctan)関数変換により VOF 関数を求める。このとき、SLG 法では時間ステップ  $n = 0, 1, 2, \dots, [T/\Delta t]$  に対し、以下のアルゴリズムが得られる。

$$\phi(x) = \tan \left[ (1 - \varepsilon) \pi \left( u^n(x) - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (11)$$

$$\phi^{n+1}(x) = \phi \circ X^n(x) \quad (12)$$

$$u^{n+1}(x) = \frac{\arctan \phi^{n+1}}{(1-\varepsilon)\pi} + \frac{1}{2} \quad (13)$$

ここで、 $\varepsilon$  は VOF 関数の鋭敏化を調整するパラメータ ( $0 < \varepsilon < 1$ ) であり、一般的に  $\varepsilon = 0.01$  が用いられる。

## 5. 数値実験

### (1) 回転移流場での移流計算

3 次元空間領域  $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1) \times (-1, 1)$  において、回転移流場  $\mathbf{a} = (-2\pi y, 2\pi x, 0)$  とし、以下の初期条件を与える (Jiang ら, 1996)。

$$u^0(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{6}(G(r_1 + \delta, \beta) + G(r_1 - \delta, \beta) + 4G(r_1, \beta)) & \text{in } |r_1| \leq 0.2, \\ 1 & \text{in } |x| \leq 0.2, -0.8 \leq y \leq -0.4, \\ 1 - |5r_2| & \text{in } |r_2| \leq 0.2, \\ \frac{1}{6}(F(r_3 + \delta, \alpha) + F(r_3 - \delta, \alpha) + 4F(r_3, \alpha)) & \text{in } |r_3| \leq 0.2, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (15)$$

ここで、

$$\begin{aligned} r_1 &= \sqrt{(x + 0.6)^2 + y^2}, \\ r_2 &= \sqrt{(x - 0.6)^2 + y^2}, \\ r_3 &= \sqrt{x^2 + (y - 0.6)^2} \\ G(r, \beta) &= \exp(-\beta r^2) \\ F(r, \alpha) &= \sqrt{\max(1 - \alpha^2 r^2)}, \\ r &= \sqrt{x^2 + y^2} \end{aligned}$$

また、定数は  $\delta = 0.01$ ,  $\alpha = 5$ ,  $\beta = \log 2 / (36\delta^2)$  である。空間のメッシュ分割は  $x, y, z$  軸とも均等 200 分割を与え、流れ場平均のクーラン数が  $\pi$  (最大で  $2\pi$ ) となるよう時間増分量  $\Delta t = 1/100$  を与えた。

図-2 に 1 周期後 ( $T = 1$ ) の計算結果 ( $z = 0$  面での鳥瞰図)を示す。なお、計算結果の比較のため、一般的に有限要素流体解析で用いられる SUPG 法 (Tezduyar, 1999) の計算結果も掲載した。SUPG 法の結果では、解が大きく減衰し、大きな位相誤差が発生している。一方、SLG 法はステップ状の不連続解や尖端の急峻な関数分布に対しても、高精度な移流計算結果が得られている。クーラン数の低い箇所若干の振幅誤差が見られるが、時間発展によらず増幅しないため数値安定性にも優れる。

### (2) Zalesak Rotating Disk Problem

Zalesak's rotating disk problem (Zalesak, 1979) は、移流計算の評価と VOF 法への適用性検証に広く用いられるベンチマーク問題である。3 次元空間領域  $\Omega = (0, 100) \times (0, 100) \times (-50, 50)$  の  $x-y$  面にスロット (長穴) を有する半径 15 の円盤 (1 の値を取るステップ関数, 円盤外では 0) を初

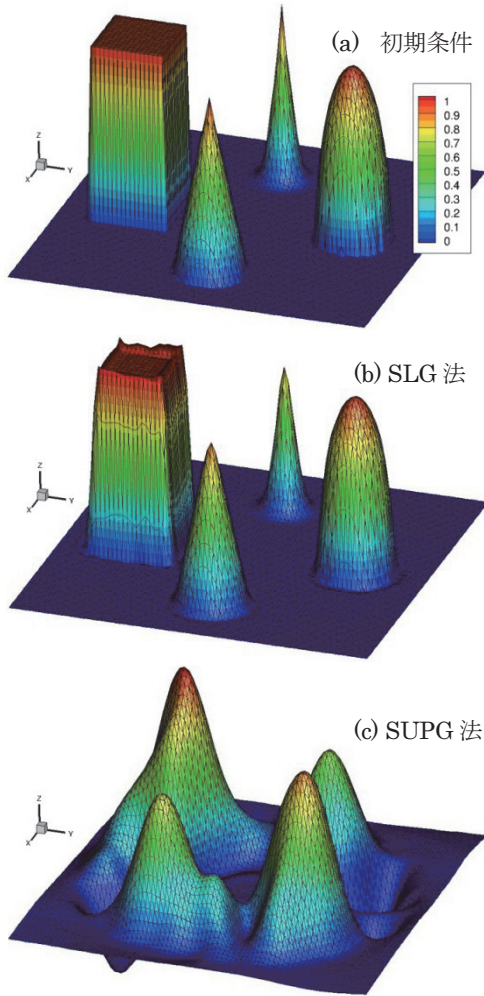


図-2 回転移流場での計算結果の $z = 0$ 面での鳥瞰図  
(流れ場の平均クーラン数は $\pi$ , 最大で $2\pi$ )

期条件として与え、回転流れ場における1周期後まで計算を行う。幅5、長さ25の長方形スロットを有する直径30の円盤の $x-y$ 面中心座標は $(50, 75)$ とし、移流速度 $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ は次式により与えられる。

$$\begin{cases} a_x = (\pi/314)(50 - y) \\ a_y = (\pi/314)(x - 50) \\ a_z = 0 \end{cases} \quad (16)$$

計算メッシュは $x, y, z$ 方向に均等200分割を与え、1周期の計算が628時間ステップとなるよう時間増分量を設定する。図-3において、厳密解は(a)の初期条件である。(a)SLG法の移流計算では全く位相誤差は見られず、界面形状の保存性も高い。さらに、(d)SLG法に正接関数変換を用いた場合、界面の保存性・鋭敏性が厳密解とほぼ一致している。

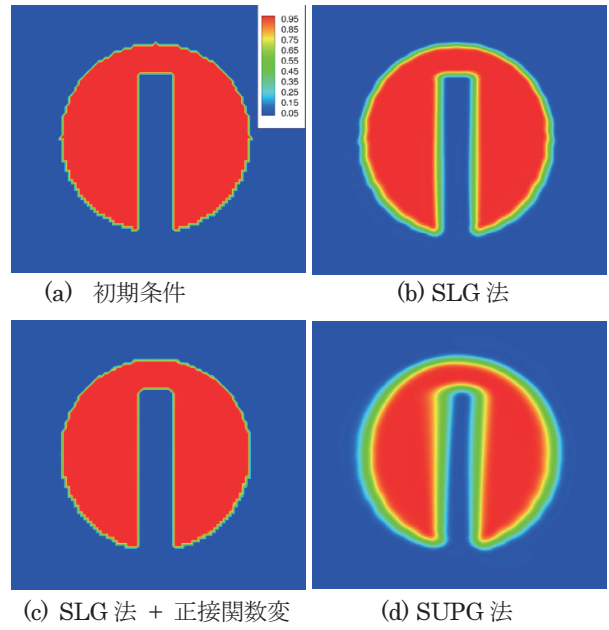


図-3 Zalesak's rotating disk 問題の計算結果 ( $z = 0$ 面でのコンター図 (流れ場のクーラン数は最大で $2\pi$ ))

#### (4) Disk Stretching Problem

この問題は single vortex あるいは vortex in-a-box problem と呼ばれ、LeVeque (1996) によって提案された移流計算のベンチマークである。円盤を初期条件として細いフィラメント状関数のストレッチ時間発展の捕捉には高解像かつ界面形状の鋭敏性・保存性 (VOF 法への適用性) に優れた移流計算が求められるため、第3節で取り上げた Zalesak's rotating disk problem よりもシビアな問題である。このとき、3次元空間 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1) \times (-0.5, 0.5)$ において、時間依存する移流速度 $\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = (a_x, a_y, a_z)$ が次式のように与えられる。

$$\begin{cases} a_x = \sin(2\pi y) \sin^2(\pi x) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ a_y = -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \\ a_z = 0 \end{cases} \quad (16)$$

ここで、 $T = 8$  は流れ場が初期状態に戻るまでの周期であり、厳密解は円盤ストレッチの時間発展が一周期後には初期条件の円盤に戻る。図-4 は、時刻 $t = 0, T/4, T/2, 3T/4, T$ におけるSLG法による計算結果である。SLG法の与える移流計算は高精度であり、体積保存性と界面の鋭敏化に優れている。

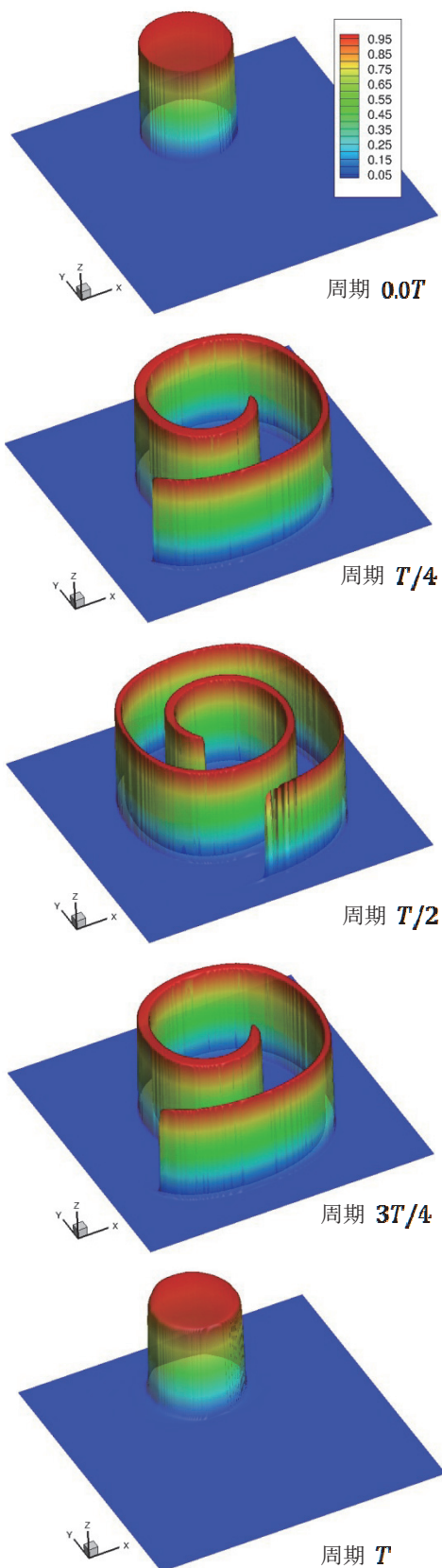


図-5 Disk stretching problem の計算結果

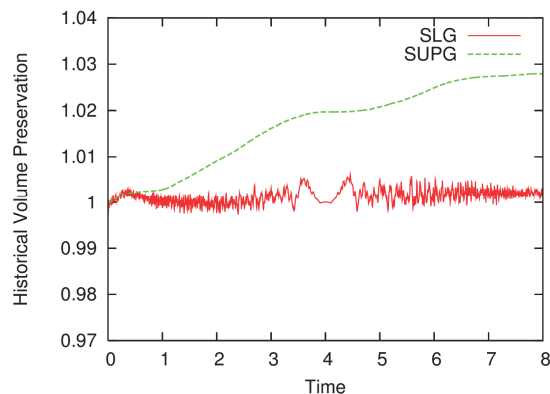


図-5 体積変化率の時刻歴 (disk stretching problem)

### 5. おわりに

本論文では、3次元 Hermite 要素に基づく陽的有限要素法として SLG (Semi-Lagrange Galerkin) 法を開発し、移流計算の精度を界面の解像能力・保存性・鋭敏性の観点から数値的に検証した。また、検証に選んだ数値実験のベンチマークは、VOF 法による自由表面流れ解析に対する SLG 法の適用性を同時に検証するためである。SLG 法は陽解法にも関わらず、時間増分量に対して無条件安定である。図-4 および図-5 に示す体積変化率の時刻歴からも分かるように、SLG 法の与える移流計算は高精度であり、体積保存性と界面の解像能力・鋭敏化に優れている。第 2 章で述べた上流点の検索に高次のアルゴリズムを用いれば更なる高精度化が期待できる。

### 参 考 文 献

Ciarlet, P.G. (2001): The Finite Element Method for Elliptic Problems, SIAM.

Ii, S., M. Shimuta, F. Xiao (2005): A 4th-order and Single-Cell-Based Advection Scheme on Unstructured Grids using Multi-Moments, Comput. Phys. Commun., Vol.173, 17-33.

Zalesak, S. T. (1979): Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, Commun. in Numerical Methods in Engineering, Vol.20, pp.639-646.

LeVeque R. (1996): High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol.33, pp.627-665.