

「G-CUP 法による物質相変化アルゴリズムの作成」

Advanced Algorithm & Systems

目 次

1. モデル化の方法	3
1.1 気体運動論モデルと巨視的モデル	3
1.2 多成分系のモデル方程式	8
2. アルゴリズム（時間積分法）	12
2.1 多相流基礎方程式	12
2.2 アルゴリズムの構造	13
2.3 散逸項の時間積分	13
2.4 GCUP 法の計算手順	14
2.5 初期値推定	18
3. 離散式	19
3.1 ラプラシアン	19
3.2 輸送係数の定義	21
3.3 ヤコビアン	22
4. コンパクト化	28
4.1 密度、温度修正ベクトルの消去	28
4.2 内部エネルギー項	30
4.3 圧力修正方程式	31
Appendix.1 内海、功刀モデルの GCUP 法	32
A1.1 モデルの背景	32
A1.2 モデルの問題点	33
A1.3 改良アルゴリズム	34
参考文献	39

1. モデル化の方法

1.1 気体運動論モデルと巨視的モデル

圧縮性 Navier-Stokes 方程式等に代表される巨視的方程式がより原初的な数学モデルからいかに導かれるかを知ることは、モデルの限界あるいは拡張を考える上で有益である。そこで、運動量およびエネルギーの各保存方程式がボルツマン方程式より導出されることを最初に確認しておく。

ボルツマン方程式は位相空間における統計集団の運動を記述するもので

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1.1)$$

但し、

$$f \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad ; \quad \text{分布関数} \quad (1.2a)$$

$$\mathbf{x} \equiv (x, y, z)^T \quad ; \quad \text{位相空間の座標、速度空間の位置ベクトル} \quad (1.2b)$$

$$\mathbf{v} \equiv (u, v, w)^T$$

$$\nabla_x \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)^T \quad ; \quad \text{座標、速度空間の勾配ベクトル} \quad (1.2c)$$

$$\nabla_v \equiv \left(\frac{\partial}{\partial u}, \frac{\partial}{\partial v}, \frac{\partial}{\partial w} \right)^T$$

$$\mathbf{F} \equiv f(F_x, F_y, F_z)^T \quad ; \quad \text{外力あるいは内部ポテンシャル勾配} \quad (1.2d)$$

である。

尚、ここでの速度は位相空間の座標そのものであり、流体における巨視的速度ではない。

また、右辺は衝突による分布関数の実質時間変化を時間微分に真似て形式的に記述したもので、本来積分形式で書かれるものを簡略化したものと理解されたい。

さらに、巨視的物理量を以下のように定義する。

$$n \equiv \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad ; \quad \text{実空間の粒子数密度} \quad (1.3a)$$

$$\bar{\mathbf{v}} \equiv \int \mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} / n \quad ; \quad \text{1粒子当りの平均速度} \quad (1.3b)$$

$$P_{ij} \equiv m \int (v_i - \bar{v}_i)(v_j - \bar{v}_j) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} / n \quad ; \quad \text{1粒子当りの平均応力} \quad (1.3c)$$

$$\varepsilon \equiv \frac{1}{2} m \int \mathbf{v}^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} / n \quad ; 1 \text{ 粒子当りの平均エネルギー} \quad (1.3d)$$

$$Q_i \equiv \frac{1}{2} m \int (v_i - \bar{v}_i)(\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}})^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad ; \text{平均エネルギー流束} \quad (1.3e)$$

巨視的物理量に関する各保存式は上記の定義を用いてボルツマン方程式の速度空間における 0~2 次のモーメントをとることで得られる。

1.1.1 0 次のモーメント (質量保存式)

ボルツマン方程式をそのまま速度空間全域にわたって積分する。すなわち、

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} + \int \mathbf{v} \cdot \nabla_x f d\mathbf{v} + \frac{1}{m} \int \mathbf{F} \cdot \nabla_v f d\mathbf{v} = \int \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} d\mathbf{v} \quad (1.4)$$

左辺の各項は、

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \int f d\mathbf{v} = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (1.5)$$

$$\int \mathbf{v} \cdot \nabla_x f d\mathbf{v} = \nabla_x \cdot \int (\mathbf{v}f) d\mathbf{v} = \nabla_x \cdot (n\bar{\mathbf{v}}) \quad (\because \nabla_x \mathbf{v} = 0) \quad (1.6)$$

$$\int \mathbf{F} \cdot \nabla_v f d\mathbf{v} = \int \nabla_v \cdot (\mathbf{F}f) d\mathbf{v} = \oint \mathbf{F}f \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (\because f \rightarrow 0 \text{ at } |\mathbf{v}| \rightarrow \infty) \quad (1.7)$$

となる。以上から 0 次モーメント方程式として

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_x \cdot (n\bar{\mathbf{v}}) = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll}} \quad (1.8)$$

が得られる。これに粒子の質量を掛ければ質量保存式になる。

また、右辺は衝突による局所的な物質の生成・消滅を意味し、例えば多成分系の化学反応等に対応する。但し、通常の単成分系の流体では恒常的にゼロである。

(\because 単純気体の場合、 $(1, \mathbf{v}, |\mathbf{v}|^2)$ の 5 つが衝突不変量となる。)

尚、(1.7) 式においては粒子に働く力が粒子速度によらないことを仮定している。

1.1.2 1 次のモーメント (運動量保存式)

1 次のモーメントは、

$$\int m\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} + \int m\mathbf{v}\mathbf{v} \cdot \nabla_x f d\mathbf{v} + \int \mathbf{v}\mathbf{F} \cdot \nabla_v f d\mathbf{v} = \int m\mathbf{v} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} d\mathbf{v} \quad (1.9)$$

である。

左辺第 1 項の積分は、

$$\int m\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} = m \frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{v} f d\mathbf{v} = m \frac{\partial}{\partial t} (n\bar{\mathbf{v}}) = \frac{\partial}{\partial t} (\rho\bar{\mathbf{v}}) \quad (1.10)$$

左辺第 2 項については、

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \delta\mathbf{v} \quad (1.11)$$

と分解すると、

$$\int \mathbf{v}\mathbf{v} f d\mathbf{v} = \int (\bar{\mathbf{v}}\bar{\mathbf{v}} + 2\bar{\mathbf{v}}\delta\mathbf{v} + \delta\mathbf{v}\delta\mathbf{v}) f d\mathbf{v} = n\bar{\mathbf{v}}\bar{\mathbf{v}} + 2n\bar{\mathbf{v}}\overline{\delta\mathbf{v}} + n\overline{\delta\mathbf{v}\delta\mathbf{v}} \quad (1.12)$$

が成立する。さらに、変位ベクトル、応力テンソルに関しては、

$$\overline{\delta\mathbf{v}} = 0 \quad (1.13)$$

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv n\hat{\mathbf{p}} = mn\overline{\delta\mathbf{v}\delta\mathbf{v}} \quad (1.14)$$

が成り立つので、

$$\begin{aligned} \int m\mathbf{v}\mathbf{v} \cdot \nabla_x f d\mathbf{v} &= m\nabla_x \cdot \int \mathbf{v}\mathbf{v} f d\mathbf{v} = m\nabla_x \cdot (n\bar{\mathbf{v}}\bar{\mathbf{v}}) + \nabla_x \cdot \hat{\mathbf{P}} \\ &= \nabla_x \cdot (\rho\bar{\mathbf{v}}\bar{\mathbf{v}}) + \nabla_x \cdot \hat{\mathbf{P}} \end{aligned} \quad (1.15)$$

第 3 項は、

$$\int \mathbf{v}\mathbf{F} \cdot \nabla_v f d\mathbf{v} = \int \nabla_v \cdot (\mathbf{v}\mathbf{F}f) d\mathbf{v} - \int \mathbf{F}f \nabla_v \cdot \mathbf{v} d\mathbf{v} = -n\mathbf{F} \quad (1.16)$$

と変形できる。以上から、1 次モーメント方程式として

$$\boxed{\frac{\partial \rho\bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho\bar{\mathbf{v}}\bar{\mathbf{v}}) + \nabla_x \cdot \hat{\mathbf{P}} - \frac{1}{m} \rho\mathbf{F} = \left(\frac{\partial \rho\bar{\mathbf{v}}}{\partial t} \right)_{coll}} \quad (1.17)$$

が得られる。但し特殊な物理過程を除いては、分子衝突によって運動量は保存されるので、右辺の運動量の生成・消滅項は通常ゼロであると考えて良い。

1.1.3 2 次のモーメント (エネルギー保存式)

エネルギーに関する保存式を得るために、気体粒子のエネルギー

$$\frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \quad (1.18)$$

についてのモーメントをとる。厳密には、エネルギーはテンソル量であるから

$$\frac{1}{2}m\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \quad (1.19)$$

とすべきであるが数値流体上はスカラーとして定義されている。

すると、2 次のモーメント方程式は、

$$\int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} + \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 (\mathbf{v} \cdot \nabla_x) f d\mathbf{v} + \int \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 \mathbf{F} \cdot \nabla_v f d\mathbf{v} = \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} d\mathbf{v} \quad (1.20)$$

と与えられる。

0 次、1 次同様に左辺各項を計算すると、

$$\int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 f d\mathbf{v} = \frac{\partial(n\varepsilon)}{\partial t} \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 (\mathbf{v} \cdot \nabla_x) f d\mathbf{v} &= \nabla_x \cdot \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \mathbf{v} f d\mathbf{v} \\ &= \nabla_x \cdot \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \bar{\mathbf{v}} f d\mathbf{v} + \nabla_x \cdot \int \frac{1}{2}m(\bar{\mathbf{v}}^2 + 2\bar{\mathbf{v}} \cdot \delta\mathbf{v} + \delta\mathbf{v}^2) \delta\mathbf{v} f d\mathbf{v} \end{aligned} \quad (1.22)$$

これで定義より、

$$\nabla_x \cdot \int \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 \bar{\mathbf{v}} f d\mathbf{v} = \nabla_x \cdot (n\varepsilon\bar{\mathbf{v}}) \quad (1.22a)$$

$$\nabla_x \cdot \int \frac{1}{2}m\bar{\mathbf{v}}^2 \delta\mathbf{v} f d\mathbf{v} = 0 \quad (1.22b)$$

$$\nabla_x \cdot \int m\bar{\mathbf{v}} \cdot \delta\mathbf{v} \delta\mathbf{v} f d\mathbf{v} = \nabla_x \cdot \left(\bar{\mathbf{v}} \int m \cdot \delta\mathbf{v} \delta\mathbf{v} f d\mathbf{v} \right) = \nabla_x \cdot (\hat{\mathbf{P}} \cdot \bar{\mathbf{v}}) \quad (1.22c)$$

$$\nabla_x \cdot \int \frac{1}{2}m\delta\mathbf{v}^2 \delta\mathbf{v} f d\mathbf{v} = \nabla_x \cdot \mathbf{Q} \quad (1.22d)$$

である。

力の項については部分積分により

$$\int \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f d\mathbf{v} = -n\bar{\mathbf{v}} \cdot \bar{\mathbf{F}} \quad (1.23)$$

となる。

以上から、2次モーメント方程式として

$$\boxed{\frac{\partial n\varepsilon}{\partial t} + \nabla_x \cdot (n\varepsilon\bar{\mathbf{v}}) + \nabla_x \cdot (\hat{\mathbf{P}} \cdot \bar{\mathbf{v}}) + \nabla_x \cdot \mathbf{Q} - n\bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{F} = \left(\frac{\partial n\varepsilon}{\partial t} \right)_{coll}} \quad (1.24)$$

が得られる。

右辺の衝突積分は、分子衝突によるエネルギーの生成・消滅に対応する。多成分系であれば、化学反応に伴うエンタルピー生成、単成分であれば非弾性衝突による並進エネルギーと回転・振動エネルギーの変換に対応するが、これらを考慮する場合は、ほかに回転および振動エネルギーに関する保存式を導出する必要がある。

このように、数値流体力学で使用されるモデルは分子気体モデルから機械的に導出することができる。それはすなわち、モデルの背景にはより厳密な方程式が恒に存在することを意味する。従って、Euler 方程式等の現象論方程式は必要に応じて修正、拡張することは可能である。例えば、多成分系、高速流での反応系で現れる多温度（並進、回転、振動）モデル、さらにはプラズマ、固体内の電子輸送（半導体デバイスシミュレーション）等への拡張など。

1.2 多成分系のモデル方程式

多成分系においても左辺の力学過程は変更されない。変更を受けるのは右辺の確率過程（衝突積分）である。

今、衝突積分をこれまでとおり形式的に書けば多成分系でのモデル方程式は

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) = \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}_i = \left(\frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1.26)$$

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} + \nabla \cdot (e_i \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot (\hat{\mathbf{P}}_i \cdot \mathbf{v}_i) + \nabla \cdot \mathbf{Q}_i = \left(\frac{\partial e_i}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1.27)$$

$(i=1,2,\dots,N)$ N : 化学種あるいは物質の種類

となる。ここで、外場と、巨視的速度を意味する $\bar{\mathbf{v}}$ は省略した。

多成分系においては、もはや質量、運動量、エネルギーは衝突不変量にはならないので右辺の衝突項はある種の生成項として機能する。

気体運動論より巨視的方程式としてモデル化することの保証は衝突が支配的であり、系は局所平衡にかなり接近していることにある。従って、このような状況のもとでは衝突積分を緩和時間で近似することで線形化が可能である（BGK 方程式）。

すなわち、

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{f_i^{eq} - f_i}{\tau_i} \quad (1.28)$$

である。

これを巨視的モデルに代入すると、

$$\left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} \right)_{coll} = \dot{\rho}_i \quad (1.29)$$

$$\left(\frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} \right)_{coll} = \mathbf{v}_i \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} \right)_{coll} + \rho_i \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} \right)_{coll} = \mathbf{v}_i \dot{\rho}_i + \rho_i \left(\frac{\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}_i}{\tau_{pi}} \right) \quad (1.30)$$

$$\left(\frac{\partial e_i}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{\bar{e} - e_i}{\tau_{ei}} \quad (1.31)$$

となる。

1.2.1 運動方程式

質量保存式を考慮して対流形式に変換する。

(1.26) 式の左辺第 1 項および第 2 項は、

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i) \\
 &= \mathbf{v}_i \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) \right) + \rho_i \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_i \right) \\
 &= \mathbf{v}_i \dot{\rho}_i + \rho_i \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_i \right)
 \end{aligned} \tag{1.32}$$

一方、右辺衝突項は、

$$\left(\frac{\partial \rho_i \mathbf{v}_i}{\partial t} \right)_{coll} = \mathbf{v}_i \dot{\rho}_i + \rho_i \left(\frac{\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}_i}{\tau_{pi}} \right) \tag{1.33}$$

従って、多成分系の運動方程式は、対流形式として

$$\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_i + \frac{1}{\rho_i} \nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}_i = \frac{\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}_i}{\tau_{pi}} \tag{1.34}$$

のように与えられる。

ここで、各成分が平衡に向う先として、例えば重心速度を仮定すれば、

$$\bar{\mathbf{v}} \equiv \bar{\mathbf{v}}_G = \frac{\sum_{i=1}^N \rho_i \mathbf{v}_i}{\sum_{i=1}^N \rho_i} \tag{1.35}$$

である。

1.2.2 エネルギー方程式

全エネルギーは内部エネルギー（単位質量当り）と運動エネルギーの和として、

$$e = \rho\varepsilon + \frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 \quad (1.36)$$

で与えられている。

従って、

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e\mathbf{v}) = \frac{\partial \rho\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon\mathbf{v}) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 \right) + \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 \right) \mathbf{v} \right) \quad (1.37)$$

内部エネルギーについては、

$$\frac{\partial \rho\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon\mathbf{v}) = \rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varepsilon \right) + \varepsilon \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_{coll} = \rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varepsilon \right) + \varepsilon \dot{\rho} \quad (1.38)$$

運動エネルギーについては、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 \right) + \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{2}\rho|\mathbf{v}|^2 \right) \mathbf{v} \right) \\ &= \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) \right) + \rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 \right) + \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 \right) \right) \\ &= \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 \dot{\rho} + \rho \left(\mathbf{v} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) \right) \\ &= \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 \dot{\rho} + \rho \left(-\frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}) + \frac{\mathbf{v} \cdot \bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{\tau_p} \right) \end{aligned} \quad (1.39)$$

である。

以上から、エネルギー方程式の対流形式は次式のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \varepsilon_i + \frac{1}{\rho_i} \hat{\mathbf{P}}_i : \nabla \mathbf{v}_i + \frac{1}{\rho_i} \nabla \cdot \mathbf{Q}_i \\ &= -\frac{\dot{\rho}_i}{\rho_i} \left(\varepsilon_i + \frac{1}{2}|\mathbf{v}_i|^2 \right) - \frac{\mathbf{v}_i \cdot (\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}_i)}{\tau_{pi}} + \frac{1}{\rho_i} \left(\frac{\partial e_i}{\partial t} \right)_{coll} \end{aligned} \quad (1.40)$$

但し、

$$\hat{\mathbf{P}}_i : \nabla \mathbf{v}_i \equiv P_v^\mu \frac{\partial v^\nu}{\partial x^\mu} \quad (1.41)$$

と定義する。

ここで、衝突積分は緩和時間近似の線形性からつぎのように分解可能である。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial e_i}{\partial t}\right)_{coll} &= \left(\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t}\right)_{coll} + \left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\rho_i |\mathbf{v}_i|^2\right)\right)_{coll} \\ &= \rho_i \left\{ \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t}\right)_{coll} + \left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}|\mathbf{v}_i|^2\right)\right)_{coll} \right\} + \left(\varepsilon_i + \frac{1}{2}|\mathbf{v}_i|^2\right) \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial t}\right)_{coll} \end{aligned} \quad (1.42)$$

さらに、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}|\mathbf{v}_i|^2\right)\right)_{coll} = \mathbf{v}_i \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{\mathbf{v}_i \cdot (\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}_i)}{\tau_{pi}} \quad (1.43)$$

これらを、(1.40) 式の衝突項に代入すると最終的に内部エネルギーに関する衝突項のみが生き残り、

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \varepsilon_i + \frac{1}{\rho_i} \hat{\mathbf{P}}_i : \nabla \mathbf{v}_i + \frac{1}{\rho_i} \nabla \cdot \mathbf{Q}_i = \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t}\right)_{coll} \quad (1.44)$$

が得られる。

ここで、右辺の衝突項の近似方法に関しては、熱力学変数としてどのようなセットを選択するかによって、計算上都合の良い表現を選ぶことが重要と考える。

例えば、内部エネルギーそのものが従属変数の場合は、

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon_i}{\tau_{ei}} \quad (1.45)$$

とするのが計算上都合が良いことは明白である。

あるいは、また圧力と温度を熱力学状態量にとれば、

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t}\right)_{coll} = \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p_i}\right) \left(\frac{\partial p_i}{\partial t}\right)_{coll} + \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}\right) \left(\frac{\partial T_i}{\partial t}\right)_{coll} = \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p_i}\right) \frac{\bar{p} - p_i}{\tau_{ei}} + \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}\right) \frac{\bar{T} - T_i}{\tau_{ei}} \quad (1.46)$$

と近似される。

2. アルゴリズム（時間積分法）

2.1 多相流基礎方程式

多相流の特殊事情としてボイド率（ α ）を考慮する必要がある。これは通常、気液 2 相流の気相、液相に関して用いられるが、ここでは物質 1 と物質 2 が混じりあわない仮定のもとで、有限セルにおける各物質相の占める体積率として使用する。

1 章で導出した方程式はボイド率を用いて再度書きかえる必要がある。

以下、結果のみ列記する。

各物質相の連続の式

$$\frac{D\alpha_i\rho_i}{Dt} + \alpha_i\rho_i\text{div}\mathbf{v}_i = 0 \quad (i=1,2) \quad (2.1)$$

各物質相の運動方程式

$$\frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} + \frac{1}{\alpha_i\rho_i}\text{grad}\alpha_i p_i - \frac{\bar{\mathbf{v}} - \mathbf{v}_i}{\tau_{pi}} - (\text{Viscous Dissipation Term})_i = 0 \quad (i=1,2) \quad (2.2)$$

各物質相のエネルギー方程式

$$\begin{aligned} \frac{DT_i}{Dt} + \frac{1}{\alpha_i\rho_i C_{vi}} T_i \left(\frac{\partial p_i}{\partial T_i} \right) \text{div}\mathbf{v}_i - \frac{1}{\alpha_i\rho_i C_{vi}} \text{div}(\alpha_i \lambda_i \text{grad} T_i) - \frac{\bar{\varepsilon} - \varepsilon_i}{C_{vi} \tau_{ei}} \\ - \frac{1}{\alpha_i\rho_i C_{vi}} (\text{Viscous Dissipation of Energy})_i = 0 \quad (i=1,2) \end{aligned} \quad (2.3)$$

状態方程式

$$f(\rho_i, p_i, \varepsilon_i) = 0 \quad (i=1,2) \quad (2.4)$$

多相が平衡に向う先としての速度は、混合物に関する連続の方程式との整合性から重心速度を選択する。つまり、以下の式で定義されるものとする。

$$\begin{aligned} \sum_i \left(\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \text{div} \alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i \right) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_i \alpha_i \rho_i \right) + \text{div} \sum_i \alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i \\ &= \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \text{div} \left(\bar{\rho} \frac{\sum_i \alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i}{\sum_i \alpha_i \rho_i} \right) = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \text{div} \bar{\rho} \bar{\mathbf{v}} \end{aligned} \quad (2.5)$$

内部エネルギーについても同様の処方により、

$$\overline{\rho \varepsilon} = \sum_i \alpha_i \rho_i \varepsilon_i \quad (2.6)$$

で定義されるものとする。

また、ボイド率の移流は重心速度で代用する。すなわち、

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \cdot \text{grad} \alpha_i = 0 \quad (2.7)$$

と近似する。

2.2 アルゴリズムの構造

本方程式系では異なる物質相の相互作用は衝突積分の緩和時間近似（BGK）と同じで実現されるようにモデル化されている。

つまり、アルゴリズムは

- ・ 単相部分
- ・ 相互作用部分

の 2 つのパートからなり、そのうち単相部分に関しては他の相を意識することなく完全に閉じたかたちでアルゴリズムが構成される。

これら性質を考慮し、以後のアルゴリズムの説明に関しては物質相をある特定のものに固定し物質を表わす添字は省略する。

2.3 散逸項の時間積分

ヤコビアン of 巨大化を回避することをねらい、はじめに散逸項に関係する部分を積分する。（但し、これに先立ち CIP 法による移流積分は完了しているものとする。）

$$\mathbf{v}^{**} = \mathbf{v}^* + \Delta t (\text{Viscous Dissipation Term}) \quad (2.8)$$

$$T^{**} = T^* + \Delta t \frac{1}{\alpha_i \rho_i C_{vi}} (\text{div}(\alpha_i \lambda_i \text{grad} T_i) + (\text{Viscous Dissipation of Energy})) \quad (2.9)$$

上記の計算式は陽的に書かれているが、数値的な安定性を考慮すると重み付き陰解法の採用が望ましい。

2.4 GCUP 法の計算手順

数値的な安定性と整合性を考えると極力陰的に扱うことが望ましい。しかし、一方計算コストと計算時間の現実性を考えるとヤコビアン行列が大きくなることは避けたい。そこで、今回は時間応答が速いと考えられる変数に絞って陰的に扱い、それ以外の係数等は陽的に処理することとする。

一例として以下のセットを GCUP 法の対象に選ぶ。

$$\frac{(\alpha\rho)^{n+1} - (\alpha\rho)^*}{\Delta t} + (\alpha\rho)^* \operatorname{div}\mathbf{v}^{n+1} = 0 \quad (2.10)$$

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho)^*} \operatorname{grad}(\alpha\rho)^{n+1} - \frac{\bar{\mathbf{v}}^{n+1} - \mathbf{v}^{n+1}}{\tau_p} = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{T^{n+1} - T^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho C_v)^*} T^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)^{**} \operatorname{div}\mathbf{v}^{n+1} - \frac{\bar{\varepsilon}^{n+1} - \varepsilon^{n+1}}{C_v^* \tau_e} = 0 \quad (2.12)$$

$$f(\rho^{n+1}, p^{n+1}, T^{n+1}) = 0 \quad (2.13)$$

すべてカップリングさせて同時に解く場合、スタaggerド格子特有の変数配置の複雑さからヤコビアン行列は必要以上に煩雑になる。そこで、本件では一部分離して収束計算を行なう。以下、その手順を示す。

時刻(n+1)を反復(k+1)で置きかえる

$$\frac{(\alpha\rho)^{(k+1)} - (\alpha\rho)^*}{\Delta t} + (\alpha\rho)^* \operatorname{div}\mathbf{v}^{(k+1)} = 0 \quad (2.14)$$

$$\frac{\mathbf{v}^{(k+1)} - \mathbf{v}^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho)^*} \operatorname{grad}(\alpha p)^{(k+1)} - \frac{\bar{\mathbf{v}}^{(k+1)} - \mathbf{v}^{(k+1)}}{\tau_p} = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{T^{(k+1)} - T^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho C_v)^*} T^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)^{**} \operatorname{div}\mathbf{v}^{(k+1)} - \frac{\bar{\varepsilon}^{(k+1)} - \varepsilon^{(k+1)}}{C_v^* \tau_e} = 0 \quad (2.16)$$

$$f(\rho^{(k+1)}, p^{(k+1)}, T^{(k+1)}) = 0 \quad (2.17)$$

速度の平均場を反復 1 回前の値で近似する

$$\frac{\mathbf{v}^{(k+1)} - \mathbf{v}^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho)^*} \operatorname{grad}(\alpha p)^{(k+1)} - \frac{\bar{\mathbf{v}}^{(k)} - \mathbf{v}^{(k+1)}}{\tau_p} = 0 \quad (2.18)$$

$$\left(1 + \frac{\Delta t}{\tau_p} \right) \operatorname{div}\mathbf{v}^{(k+1)} = -\Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{(\alpha\rho)^*} \operatorname{grad}(\alpha p)^{(k+1)} \right) + \frac{\Delta t}{\tau_p} \operatorname{div}\bar{\mathbf{v}}^{(k)} + \operatorname{div}\mathbf{v}^{**} \quad (2.19)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{v}^{(k+1)} = \frac{\Delta t}{\tau_p + \Delta t} \operatorname{div}\bar{\mathbf{v}}^{(k)} + \frac{\tau_p}{\tau_p + \Delta t} \left\{ -\Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{(\alpha\rho)^*} \operatorname{grad}(\alpha p)^{(k+1)} \right) + \operatorname{div}\mathbf{v}^{**} \right\} \quad (2.20)$$

計算ステップ概要

$$f(\rho^{(k+1)}, p^{(k+1)}, T^{(k+1)}) = 0 \quad (2.17)$$

$$g(\rho^{(k+1)}, p^{(k+1)}, T^{(k+1)}) = \frac{(\alpha\rho)^{(k+1)} - (\alpha\rho)^*}{\Delta t} + (\alpha\rho)^* \operatorname{div}\mathbf{v}^{(k+1)} \quad (2.21)$$

$$h(\rho^{(k+1)}, p^{(k+1)}, T^{(k+1)}) = \frac{T^{(k+1)} - T^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho C_v)^*} T^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)^{**} \operatorname{div}\mathbf{v}^{(k+1)} - \frac{\bar{\varepsilon}^{(k+1)} - \varepsilon^{(k+1)}}{C_v^* \tau_e} = 0 \quad (2.22)$$

とする。

Step 1) ヤコビアン行列を計算し、修正量を求める。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \rho^{(k)}} & \frac{\partial f}{\partial p^{(k)}} & \frac{\partial f}{\partial T^{(k)}} \\ \frac{\partial g}{\partial \rho^{(k)}} & \frac{\partial g}{\partial p^{(k)}} & \frac{\partial g}{\partial T^{(k)}} \\ \frac{\partial h}{\partial \rho^{(k)}} & \frac{\partial h}{\partial p^{(k)}} & \frac{\partial h}{\partial T^{(k)}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\rho^{(k)} \\ \delta p^{(k)} \\ \delta T^{(k)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f(\rho^{(k)}, p^{(k)}, T^{(k)}) \\ g(\rho^{(k)}, p^{(k)}, T^{(k)}) \\ h(\rho^{(k)}, p^{(k)}, T^{(k)}) \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \rho^{(k+1)} &= \rho^{(k)} + \delta\rho^{(k)} \\ p^{(k+1)} &= p^{(k)} + \delta p^{(k)} \\ T^{(k+1)} &= T^{(k)} + \delta T^{(k)} \end{aligned} \quad (2.24)$$

Step 2) 速度場、平均速度を修正する。

$$\mathbf{v}^{(k+1)} = \frac{\Delta t}{\tau_p + \Delta t} \bar{\mathbf{v}}^{(k)} + \frac{\tau_p}{\tau_p + \Delta t} \left(\mathbf{v}^{**} - \frac{\Delta t}{(\alpha\rho)^*} \operatorname{grad}(\alpha\rho)^{(k+1)} \right) \quad (2.25)$$

$$\bar{\mathbf{v}}^{(k+1)} = \frac{1}{\bar{\rho}^{(k+1)}} \left(\alpha_1^* \rho_1^{(k+1)} \mathbf{v}_1^{(k+1)} + \alpha_2^* \rho_2^{(k+1)} \mathbf{v}_2^{(k+1)} \right) \quad (2.26)$$

Step 3) 変数の更新 (一例)

$$\begin{aligned} \max(\beta_\rho |\delta\rho^{(k)}|, \beta_p |\delta p^{(k)}|, \beta_T |\delta T^{(k)}|) \leq eps \quad or \\ \max(\beta_f |f|, \beta_g |g|, \beta_h |h|) \leq eps \end{aligned} \tag{2.27}$$

であれば

$$\begin{aligned} \rho^{(n+1)} &= \rho^{(k+1)} \\ p^{(n+1)} &= p^{(k+1)} \\ T^{(n+1)} &= T^{(k+1)} \end{aligned} \tag{2.28}$$

とし反復計算を終了する。

(2.26) 式の条件が満たされない場合は、

$$\begin{aligned} \rho^{(k)} &\leftarrow \rho^{(k+1)} \\ p^{(k)} &\leftarrow p^{(k+1)} \\ T^{(k)} &\leftarrow T^{(k+1)} \end{aligned} \tag{2.29}$$

として、Step 1) に戻る。

2.5 初期値推定

Newton 法による反復では反復のスタートである初期値の推定が重要である。本件では初期値推定をつぎのような手順で行なう。

一般に流体系の時定数に比例して緩和時間は数桁小さいことが予想される。このことを配慮して緩和時間を微小パラメータとみなし摂動展開を施すと、第ゼロ次項として、

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \bar{\mathbf{v}} \\ \varepsilon_i &= \bar{\varepsilon} \end{aligned} \tag{2.30}$$

が得られる。従って、第ゼロ次摂動方程式は従来 of 1 速度 1 圧力モデルに相当する。これまでの、内海、功刀両氏の計算モデルが妥当とされる背景にはこのような物理的根拠があったと考えられる。つまり、本 GCUP 計算に先立ち、これまでの成果である内海らの計算モデルを初期値推定のアルゴリズムとして運用できる。但し、内海らのモデルは状態方程式との整合性は失われているのでその回復をあわせて考えなければならない。

内海らのモデルに関しては現在すでに実装されているので割愛する。また整合性の回復方法の具体的手続きに関しては Appendix (「内海、功刀モデルに関する GCUP 法」) で議論する。

3. 離散式

3.1 ラプラシアン

離散化する演算子の型

$$\boxed{\nabla \cdot (\alpha \nabla f) \text{ or } \operatorname{div}(\alpha \cdot \operatorname{grad} f)} \quad (3.1)$$

3次元直交構造格子 (セル中心変数)

立方体 ijk の各辺の長さを $(\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k)$ とする。

セル界面での流束は隣接点との差分で近似する。例えば、

$$\operatorname{grad} f \Big|_{i+1/2} = \alpha_{i+1/2} \cdot \frac{f_{i+1} - f_i}{(x_{i+1} - x_i)} \quad (3.2)$$

従って、Gauss の発散定理よりラプラシアンの離散化は

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial V} (\alpha \cdot \operatorname{grad} f) \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \left[\left(\alpha_{i+1/2, jk} \frac{f_{i+1, jk} - f_{i, jk}}{0.5(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i)} \right) - \left(\alpha_{i-1/2, jk} \frac{f_{i, jk} - f_{i-1, jk}}{0.5(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \right) \right] \Delta y_j \Delta z_k \\ &+ \left[\left(\alpha_{ij+1/2, k} \frac{f_{ij+1, k} - f_{ij, k}}{0.5(\Delta y_{j+1} + \Delta y_j)} \right) - \left(\alpha_{ij-1/2, k} \frac{f_{ij, k} - f_{ij-1, k}}{0.5(\Delta y_{j-1} + \Delta y_j)} \right) \right] \Delta x_i \Delta z_k \\ &+ \left[\left(\alpha_{ijk+1/2} \frac{f_{ijk+1} - f_{ijk}}{0.5(\Delta z_{k+1} + \Delta z_k)} \right) - \left(\alpha_{ijk-1/2} \frac{f_{ijk} - f_{ijk-1}}{0.5(\Delta z_{k-1} + \Delta z_k)} \right) \right] \Delta x_i \Delta y_j \end{aligned} \quad (3.3)$$

となる。

必要な場合はこれをセルの体積で割って通常の差分式に変換する。

7 項の帯行列 \mathbf{A} と $mx*my*mz$ 次元の列ベクトル \mathbf{f} の積として、

$$\operatorname{div}(\alpha \cdot \operatorname{grad} f) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{f} \quad (3.4)$$

成分表示では

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\alpha \cdot \operatorname{grad} f)_{ijk} &= A_{1ijk} f_{i,j,k-mx*my} + A_{2ijk} f_{i,j-mx,k} + A_{3ijk} f_{i-1,j,k} \\ &+ A_{4ijk} f_{i,j,k} \\ &+ A_{5ijk} f_{i+1,j,k} + A_{6ijk} f_{i,j+mx,k} + A_{7ijk} f_{i,j,k+mx+my} \end{aligned} \quad (3.5)$$

で与えられる。

各帯成分は離散式 (3.3) と比較して以下のようになる。

$$A_{1ijk} = \alpha_{ijk-1/2} \frac{2}{(\Delta z_k + \Delta z_{k-1}) \Delta z_k} \quad (3.6a)$$

$$A_{2ijk} = \alpha_{ij-1/2k} \frac{2}{(\Delta y_j + \Delta y_{j-1}) \Delta y_j} \quad (3.6b)$$

$$A_{3ijk} = \alpha_{i-1/2jk} \frac{2}{(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}) \Delta x_i} \quad (3.6c)$$

$$A_{4ijk} = -(A_{1ijk} + A_{2ijk} + A_{3ijk} + A_{5ijk} + A_{6ijk} + A_{7ijk}) \quad (3.6d)$$

$$A_{5ijk} = \alpha_{i+1/2jk} \frac{2}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) \Delta x_i} \quad (3.6e)$$

$$A_{6ijk} = \alpha_{ij+1/2k} \frac{2}{(\Delta y_j + \Delta y_{j+1}) \Delta y_j} \quad (3.6f)$$

$$A_{7ijk} = \alpha_{ijk+1/2} \frac{2}{(\Delta z_k + \Delta z_{k+1}) \Delta z_k} \quad (3.6g)$$

但し、セル体積で割ることで積分形式から微分形式に変換している。

3.2 輸送係数の定義

通常、輸送係数はセル中心で定義される。従って、セル界面上での値を何らかの近似によって求める必要がある。ここでは、物理的根拠として流束の連続性を仮定して近似式を求める。

セル $i, i+1$ の中心から界面までの距離をそれぞれ d_i, d_{i+1} とする。また、セル界面での物理量の値を f_m とする。このとき、界面での物質収支から次式が成り立つ。

$$\alpha_i \frac{f_m - f_i}{d_i} = \alpha_{i+1} \frac{f_{i+1} - f_m}{d_{i+1}} \quad (3.7)$$

これより、

$$f_m = \frac{d_{i+1} \alpha_i f_i + d_i \alpha_{i+1} f_{i+1}}{d_{i+1} \alpha_i + d_i \alpha_{i+1}} \quad (3.8)$$

一方、今勾配（1階微分）を隣接点間の差分で近似している。従って同様につきの式も成立しなければならない。

$$\alpha_{i+1/2} \frac{f_{i+1} - f_i}{d_i + d_{i+1}} = \alpha_i \frac{f_m - f_i}{d_i} \quad (3.9)$$

(8) 式の結果を (9) 式に代入して、共通項を消去すると、

$$\alpha_{i+1/2} = \frac{(d_i + d_{i+1}) \alpha_i \alpha_{i+1}}{d_{i+1} \alpha_i + d_i \alpha_{i+1}} \quad (3.10)$$

が得られる。

例えば、

$$\alpha = \frac{1}{\rho} \quad (3.11)$$

の場合は、

$$\left(\frac{1}{\rho} \right)_{i+1/2} = \frac{(d_i + d_{i+1}) \frac{1}{\rho_i} \frac{1}{\rho_{i+1}}}{d_{i+1} \frac{1}{\rho_i} + d_i \frac{1}{\rho_{i+1}}} = \frac{(d_i + d_{i+1})}{d_{i+1} \rho_{i+1} + d_i \rho_i} = \left(\frac{d_{i+1} \rho_{i+1} + d_i \rho_i}{d_i + d_{i+1}} \right)^{-1} \quad (3.12)$$

となり、密度に関しては従来の算術平均が物理的に正しいことが裏付けられる。

3.3 ヤコビアン

ヤコビアン行列の内部構造

ヤコビアン行列の内部構造は変数の並べ方に依存する。

いま、変数を各格子点ごとに各物質相ごと並べるものとする。すなわち、

$$\mathbf{q} = ((\delta\rho_1, \delta p_1, \delta T_1), \dots, (\delta\rho_N, \delta p_N, \delta T_N))^T \quad (3.13)$$

とする。このとき、方程式の対称性からヤコビアン行列のブロックの構造は

$$\begin{pmatrix} \mathbf{d}_1 & \mathbf{b}_{12} & & \\ \mathbf{b}_{21} & \ddots & & \\ & & \mathbf{d}_N & \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{d}_i \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f_i}{\partial \rho_i} & \frac{\partial f_i}{\partial p_i} & \frac{\partial f_i}{\partial T_i} \\ \frac{\partial g_i}{\partial \rho_i} & \frac{\partial g_i}{\partial p_i} & \frac{\partial g_i}{\partial T_i} \\ \frac{\partial h_i}{\partial \rho_i} & \frac{\partial h_i}{\partial p_i} & \frac{\partial h_i}{\partial T_i} \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_{ij} \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f_i}{\partial \rho_j} & \frac{\partial f_i}{\partial p_j} & \frac{\partial f_i}{\partial T_j} \\ \frac{\partial g_i}{\partial \rho_j} & \frac{\partial g_i}{\partial p_j} & \frac{\partial g_i}{\partial T_j} \\ \frac{\partial h_i}{\partial \rho_j} & \frac{\partial h_i}{\partial p_j} & \frac{\partial h_i}{\partial T_j} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

本件の場合、物質相は2つなので、 3×3 のブロック構造2つからなる 6×6 の行列が各格子点ごとに作られることになる。但し、 6×6 のうち、対角ブロック成分は全く同様の内容であり、非対角に関しても片方がわかれば添字の機械的な変換で得られる。従って、ヤコビアンとしては対角に関してはある特定の物質相に関する計算式がわかれば良い。また非対角についても物質1についての計算式を得るだけで済む。

物質1に関する離散式は、

$$f(\rho_{1ijk}^{(k+1)}, p_{1ijk}^{(k+1)}, T_{1ijk}^{(k+1)}) = 0 \quad (3.16)$$

$$g(\rho_{1ijk}^{(k+1)}, p_{1ijk}^{(k+1)}, T_{1ijk}^{(k+1)}) = \frac{(\alpha\rho)_{1ijk}^{(k+1)} - (\alpha\rho)_{1ijk}^*}{\Delta t} + (\alpha\rho)_{1ijk}^* \text{div}_{1ijk}^{(k+1)} = 0 \quad (3.17)$$

$$h(\rho_{1ijk}^{(k+1)}, p_{1ijk}^{(k+1)}, T_{1ijk}^{(k+1)}) = \frac{T_{1ijk}^{(k+1)} - T_{1ijk}^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha\rho C_v)_{1ijk}^*} T_{1ijk}^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^{**} \text{div}_{1ijk}^{(k+1)} - \frac{\bar{\varepsilon}_{1ijk}^{(k+1)} - \varepsilon_{1ijk}^{(k+1)}}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} = 0 \quad (3.18)$$

である。

ヤコビアン行列の全体構造

ヤコビアン行列の全体構造は 6×6 のセル行列（内部構造）をその成分とする 7 項の帯行列の形式で記述される。

すなわち、

$$\begin{aligned} & \mathbf{B}_{1ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i,j,k-mx*my} + \mathbf{B}_{2ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i,j-mx,k} + \mathbf{B}_{3ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i-1,j,k} + \mathbf{B}_{4ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i,j,k} \\ & + \mathbf{B}_{5ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i+1,j,k} + \mathbf{B}_{6ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i,j+mx,k} + \mathbf{B}_{7ijk} \cdot \Delta \mathbf{q}_{i,j,k+mx*my} = -\mathbf{R}_{ijk} \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\mathbf{q}_{ijk} = (\rho_{1ijk}, p_{1ijk}, T_{1ijk}, \rho_{2ijk}, p_{2ijk}, T_{2ijk})^T \quad (3.20)$$

となる。

本件が採用した計算ステップでは、空間項は速度場の発散項からしか発生しない。つまり、圧力による微分のみが非対角バンドに寄与し、それ以外はすべて対角ブロックとなる。また、物質相間の相互作用を与える項に関してもすべて対角ブロックのヤコビアン行列内部構造の問題として完結する。このことはのちに利用する。

非対角ブロック

$$\mathbf{B}_{1ijk} = \begin{pmatrix} \mathbf{d}_1 & \mathbf{b}_{12} \\ \mathbf{b}_{21} & \mathbf{d}_2 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$\mathbf{d}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta t (\alpha \rho)_{1ijk}^* \frac{2(\rho_{1ijk-1/2}^*)^{-1}}{(\Delta z_k + \Delta z_{k-1}) \Delta z_k} & 0 \\ 0 & -\Delta t \frac{T_{1ijk}^*}{(\alpha \rho C_v)_{1ijk}^*} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^* \frac{2(\rho_{1ijk-1/2}^*)^{-1}}{(\Delta z_k + \Delta z_{k-1}) \Delta z_k} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

\mathbf{d}_2 は \mathbf{d}_1 における添字の 1ijk を 2ijk に機械的に変更すると得られる。

また、内部非対角ブロックは本離散モデルでは前述のごとく、

$$\mathbf{b}_{12} = \mathbf{b}_{21} = \mathbf{0} \quad (3.23)$$

である。

尚、全体構造の他の非対角成分に関しても同様に得られる。

例えば、(3.22) の z を y に置きかえれば \mathbf{B}_{2ijk} が、 z の添字の $k-1$ を $k+1$ に置きかえ

れば \mathbf{B}_{7ijk} のヤコビアン行列が得られる。

対角ブロック

内部対角成分

$$\mathbf{d}_1 \equiv \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{\partial f_{1jk}}{\partial \rho_{1jk}^{(k)}} \\ a_{12} &= \frac{\partial f_{1jk}}{\partial p_{1jk}^{(k)}} \\ a_{13} &= \frac{\partial f_{1jk}}{\partial T_{1jk}^{(k)}} \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} a_{21} &= \frac{\alpha_{1jk}^*}{\Delta t} \\ a_{22} &= \Delta t (\alpha \rho)_{1jk}^* \left(\begin{aligned} & \frac{2(\rho_{1jk-1/2}^*)^{-1}}{(\Delta z_k + \Delta z_{k-1})\Delta z_k} + \frac{2(\rho_{1jk+1/2}^*)^{-1}}{(\Delta z_k + \Delta z_{k+1})\Delta z_k} \\ & + \frac{2(\rho_{1j-1/2k}^*)^{-1}}{(\Delta y_j + \Delta y_{j-1})\Delta y_j} + \frac{2(\rho_{1j+1/2k}^*)^{-1}}{(\Delta y_j + \Delta y_{j+1})\Delta y_j} \\ & + \frac{2(\rho_{1i-1/2jk}^*)^{-1}}{(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})\Delta x_i} + \frac{2(\rho_{1i+1/2jk}^*)^{-1}}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})\Delta x_i} \end{aligned} \right) \\ a_{23} &= 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned}
a_{31} &= \frac{1}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} \frac{1}{(\rho_{1ijk}^{(k)})^2} \left(\rho_{1ijk}^{(k)} - T_{1ijk}^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^{(k)} \right) \left(1 - \frac{\alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \right) \\
&\quad + \frac{\varepsilon_{1ijk}^{(k)}}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} \left(\frac{\alpha_{1ijk}^*}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(\frac{1}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} - 1 \right) \right) \\
a_{32} &= \frac{\Delta t}{(\alpha \rho C_v)_{1ijk}^*} T_{1ijk}^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^{**} \left(\begin{aligned} &+ \frac{2(\rho_{1ijk-1/2}^*)^{-1}}{(\Delta z_k + \Delta z_{k-1}) \Delta z_k} + \frac{2(\rho_{1ijk+1/2}^*)^{-1}}{(\Delta z_k + \Delta z_{k+1}) \Delta z_k} \\ &+ \frac{2(\rho_{1ij-1/2k}^*)^{-1}}{(\Delta y_j + \Delta y_{j-1}) \Delta y_j} + \frac{2(\rho_{1ij+1/2k}^*)^{-1}}{(\Delta y_j + \Delta y_{j+1}) \Delta y_j} \\ &+ \frac{2(\rho_{1i-1/2jk}^*)^{-1}}{(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}) \Delta x_i} + \frac{2(\rho_{1i+1/2jk}^*)^{-1}}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) \Delta x_i} \end{aligned} \right) \quad (3.27) \\
a_{33} &= \frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{\tau_{e1ijk}^*} \left(1 - \frac{\alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \right) \\
\bar{\rho}_{ijk}^{(k)} &= \alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} + \alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)}
\end{aligned}$$

※ \mathbf{d}_2 に関しては物質相の番号 1 を 2 に置きかえると得られる。

内部非対角成分 (クロス項)

$$\mathbf{b}_{12} \equiv \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} c_{11} &= 0 \\ c_{12} &= 0 \\ c_{13} &= 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} c_{21} &= 0 \\ c_{22} &= 0 \\ c_{23} &= 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} c_{31} &= -\frac{1}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} \frac{\alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \frac{1}{(\rho_{ikl}^{(k)})^2} \left(p_{1ijk}^{(k)} - T_{1ijk}^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^{(k)} \right) \\ &\quad + \frac{\varepsilon_{2ijk}^{(k)}}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} \left(\frac{\alpha_{2ijk}^*}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(\frac{1}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)} - 1 \right) \right) \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$c_{32} = 0$$

$$c_{33} = -\frac{1}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} \frac{\alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)} C_{v2ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}}$$

$$\bar{\rho}_{ijk}^{(k)} = \alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} + \alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)}$$

※ \mathbf{b}_{21} に関しては物質相の番号を表わす添字を

$$1 \Leftrightarrow 2$$

と交換すると得られる。

右辺残差ベクトル

残差ベクトルの構造も物質相ごとに同型となる。従って、物質相 1 のみ示す。

$$\mathbf{R}_{ijk} = (\mathbf{R}_{1ijk}^T, \mathbf{R}_{2ijk}^T)^T \quad (3.32)$$

$$\mathbf{R}_{1ijk} = \begin{pmatrix} f_{1ijk}(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)}) \\ g_{1ijk}(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)}) \\ h_{1ijk}(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)}) \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

すなわち、拘束条件として整合させたい方程式そのものである。

但し、Newton 法としての反復では残差ベクトルのマイナスが右辺にくることに注意されたい。

4. コンパクト化

系の行列は 6×6 の内部構造をもつ小行列を成分とする 7 項のバンド行列になる。このヤコビアン行列の問題を解き Newton 法を実行することは主記憶の負荷が大きく、かつ計算コストの増大を招く。

一方、先に述べたようにブロック行列の全体構造における非対角バンドは速度の発散項（圧力のラプラシアン項）からのみ生じる。

このことを考慮し、行列のコンパクト化をはかり、メモリーおよび計算時間の省力化を行なう。

4.1 密度、温度修正ベクトルの消去

状態方程式は各格子点上で独立に成立しており空間的結合を伴わない。従って、これより密度、圧力、温度の各修正量は代数的な線形方程式となる。これより、温度の修正量を他の修正量で陽的に与えることができる。

$$\delta T_{1ijk}^{(k)} = - \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial T_{1ijk}^{(k)}} \right)^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial \rho_{1ijk}^{(k)}} \right) \delta \rho_{1ijk}^{(k)} + \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial p_{1ijk}^{(k)}} \right) \delta p_{1ijk}^{(k)} + f_{1ijk}(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)}) \right\} \quad (4.1)$$

$$\delta T_{2ijk}^{(k)} = - \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial T_{2ijk}^{(k)}} \right)^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial \rho_{2ijk}^{(k)}} \right) \delta \rho_{2ijk}^{(k)} + \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial p_{2ijk}^{(k)}} \right) \delta p_{2ijk}^{(k)} + f_{2ijk}(\rho_{2ijk}^{(k)}, p_{2ijk}^{(k)}, T_{2ijk}^{(k)}) \right\} \quad (4.2)$$

また、連続の式に対応する拘束条件式は密度、圧力のみの関数となり、密度の空間項は存在しない。つまり、密度は圧力の関数として陽的に

$$\delta \rho_{1ijk}^{(k)} = (\Delta t)^2 \rho_{1ijk}^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{1ijk}^*} \operatorname{grad} \delta p_{1ijk}^{(k)} \right) - \frac{\Delta t}{\alpha_{1ijk}^*} g_{1ijk}(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)}) \quad (4.3)$$

$$\delta \rho_{2ijk}^{(k)} = (\Delta t)^2 \rho_{2ijk}^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{2ijk}^*} \operatorname{grad} \delta p_{2ijk}^{(k)} \right) - \frac{\Delta t}{\alpha_{2ijk}^*} g_{2ijk}(\rho_{2ijk}^{(k)}, p_{2ijk}^{(k)}, T_{2ijk}^{(k)}) \quad (4.4)$$

と与えることができる。

これを、先に得られた (4.1) および (4.2) にそれぞれ代入すると

$$\begin{aligned} \delta T_{1ijk}^{(k)} = & - \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial T_{1ijk}^{(k)}} \right)^{-1} \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial \rho_{1ijk}^{(k)}} \right) \left\{ (\Delta t)^2 \rho_{1ijk}^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{1ijk}^*} \operatorname{grad} \delta \mathbf{p}_{1ijk}^{(k)} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\Delta t}{\alpha_{1ijk}^*} \mathbf{g}_{1ijk} \left(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)} \right) \right\} \\ & - \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial T_{1ijk}^{(k)}} \right)^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial f_{1ijk}}{\partial p_{1ijk}^{(k)}} \right) \delta p_{1ijk}^{(k)} + f_{1ijk} \left(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \delta T_{2ijk}^{(k)} = & - \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial T_{2ijk}^{(k)}} \right)^{-1} \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial \rho_{2ijk}^{(k)}} \right) \left\{ (\Delta t)^2 \rho_{2ijk}^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{2ijk}^*} \operatorname{grad} \delta \mathbf{p}_{2ijk}^{(k)} \right) \right. \\ & \left. - \frac{\Delta t}{\alpha_{2ijk}^*} \mathbf{g}_{2ijk} \left(\rho_{2ijk}^{(k)}, p_{2ijk}^{(k)}, T_{2ijk}^{(k)} \right) \right\} \\ & - \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial T_{2ijk}^{(k)}} \right)^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial f_{2ijk}}{\partial p_{2ijk}^{(k)}} \right) \delta p_{2ijk}^{(k)} + f_{2ijk} \left(\rho_{2ijk}^{(k)}, p_{2ijk}^{(k)}, T_{2ijk}^{(k)} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.6)$$

が得られる。

以上から、密度および温度の修正ベクトルは圧力修正ベクトルに変換される。解くべき方程式は 2 つの圧力修正方程式に還元される。すなわち、 2×2 の小行列を成分とする 7 項のバンド行列の問題へコンパクト化されたことになる。メモリー的には 9 分の 1 に圧縮されたことになる。

4.2 内部エネルギー項

$$\begin{aligned}\delta\varepsilon &= \left(-p + T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \right) \delta V + C_v \delta T = \left(-p + T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \right) \delta \left(\frac{1}{\rho} \right) + C_v \delta T \\ &= \frac{1}{\rho^2} \left(p - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \right) \delta \rho + C_v \delta T\end{aligned}\quad (4.7)$$

この関係を本緩和項のヤコビアンに採用すると、各物質相については、

$$\delta\varepsilon_{1jk}^{(k)} = \beta_{1jk}^{(k)} \delta\rho_{1jk}^{(k)} + C_{v1jk}^{(k)} \delta T_{1jk}^{(k)} \quad (4.8)$$

$$\delta\varepsilon_{2jk}^{(k)} = \beta_{2jk}^{(k)} \delta\rho_{2jk}^{(k)} + C_{v2jk}^{(k)} \delta T_{2jk}^{(k)} \quad (4.9)$$

$$\beta_{1jk}^{(k)} \equiv \frac{1}{(\rho_{1jk}^{(k)})^2} \left(p_{1jk}^{(k)} - T_{1jk}^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1jk}^{(k)} \right) \quad (4.10)$$

$$\beta_{2jk}^{(k)} \equiv \frac{1}{(\rho_{2jk}^{(k)})^2} \left(p_{2jk}^{(k)} - T_{2jk}^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{2jk}^{(k)} \right) \quad (4.11)$$

となる。平均場の内部エネルギーに関するヤコビアンは定義より

$$\begin{aligned}\delta\varepsilon_{ijk}^{(k)} &= \frac{1}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(\alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} \delta\varepsilon_{1ijk}^{(k)} + \alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)} \delta\varepsilon_{2ijk}^{(k)} \right) \\ &\quad + \frac{\alpha_{1ijk}^* \varepsilon_{1ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(1 - \frac{\alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \right) \delta\rho_{1ijk}^{(k)} + \frac{\alpha_{2ijk}^* \varepsilon_{2ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(1 - \frac{\alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \right) \delta\rho_{2ijk}^{(k)}\end{aligned}\quad (4.12)$$

である。

これに (4.9)、(4.10) 式の結果を代入すると密度、温度の変分として

$$\begin{aligned}\delta\varepsilon_{ijk}^{(k)} &= \frac{\alpha_{1ijk}^*}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(\beta_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} + \frac{\alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)} \varepsilon_{1ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \right) \delta\rho_{1ijk}^{(k)} + \frac{\alpha_{2ijk}^*}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \left(\beta_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)} + \frac{\alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} \varepsilon_{2ijk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \right) \delta\rho_{2ijk}^{(k)} \\ &\quad + \frac{\alpha_{1ijk}^* \rho_{1ijk}^{(k)} C_{v1jk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \delta T_{1jk}^{(k)} + \frac{\alpha_{2ijk}^* \rho_{2ijk}^{(k)} C_{v2jk}^{(k)}}{\bar{\rho}_{ijk}^{(k)}} \delta T_{2jk}^{(k)}\end{aligned}\quad (4.13)$$

と与えられる。

4.3 圧力修正方程式

エネルギー方程式の Newton Scheme に前節までの結果を代入すると圧力の変分のみに関する線形方程式が得られる。

圧力修正方程式は複雑になるので物質 1 についてのみ導出過程をあきらかにし、物質 2 に関しては省略する。(物質 2 に関しては対称性から 1 と 2 の役割を変換すると得られる。)

$$h(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)}) = \frac{T_{1ijk}^{(k)} - T_{1ijk}^{**}}{\Delta t} + \frac{1}{(\alpha \rho C_v)_{1ijk}^*} T_{1ijk}^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^{**} \text{div} \mathbf{w}_{1ijk}^{(k)} - \frac{\bar{\varepsilon}_{1ijk}^{(k)} - \varepsilon_{1ijk}^{(k)}}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} \quad (4.14)$$

この方程式の Newton Scheme は

$$\delta T_{1ijk}^{(k)} + \frac{\Delta t}{(\alpha \rho C_v)_{1ijk}^*} T_{1ijk}^{**} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{1ijk}^{**} \text{div} \delta \mathbf{v}_{1ijk}^{(k)} - \frac{\Delta t (\delta \bar{\varepsilon}_{1ijk}^{(k)} - \delta \varepsilon_{1ijk}^{(k)})}{C_{v1ijk}^* \tau_{e1ijk}^*} = -\Delta t h(\rho_{1ijk}^{(k)}, p_{1ijk}^{(k)}, T_{1ijk}^{(k)})$$

$$\text{div} \delta \mathbf{v}_{1ijk}^{(k)} = -\Delta t \left(\text{div} \left(\frac{1}{\rho_{1ijk}^*} \text{grad} \delta p_{1ijk}^{(k)} \right) \right) \quad (4.15)$$

である。

これら各変分量にこれまでの結果を代入すると圧力の変分に関する修正方程式が得られる。この方程式系は内部自由度が 2×2 の行列構造をとる 7 項のバンド行列問題となる。

Appendix.1 内海、功刀モデルの GCUP 法

ここでの変数の表記は内海らの資料に準ずる。従って、密度関数（ボイド率）と速度の表記は本文のものと異なるので注意されたい。

A1.1 モデルの背景

現在のモデルでは従属変数として

$$(\rho_1, \rho_2, p, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \mathbf{u}) \text{ or } (\rho_1, \rho_2, p, T_1, T_2, \mathbf{u}) \quad (\text{A1.1})$$

が選ばれている。すなわち、物質相で異なるものとして密度と温度が考慮されている。この妥当性を本件の緩和時間近似モデルにおける議論から推察するとつぎのような裏付けが考えられる。

各物質相の速度、圧力、温度はそれぞれ固有の緩和時間で平衡値（混合相の平均値）に達すると考えられる。これらの時定数が今計算で設定された流体力学的な時間に比べて非常に小さければ、計算上は瞬時に平衡すると見なし物質相ごとの物理量は同一、すなわち混合相の平均値で代表させることができる。従って、各物理量の緩和時間がどの程度の大きさかを知ることは重要である。

一般に、運動量（速度）の緩和時間は固体・液体ではピコ秒、気体では衝突時間（ナノ秒）のオーダーで、エネルギーに関してはその数桁上とされている。一方、流体の時定数はせいぜいマイクロ秒である。これらを考えると速度場は 1 速度、温度場は 2 温度とすることは系の近似として充分妥当といえる。但し、何らかの状況により緩和時間が大きい場合、あるいは流体系の時定数が小さくなる場合にはこの変数系は物理的に破綻する（計算は可能であるが解けた結果の妥当性は保証されない）。

A1.2 モデルの問題点

変数として、密度 (ρ_1, ρ_2) 、温度 (T_1, T_2) 、および圧力 p とする。このとき現在のアルゴリズムでのこの部分に関わる支配方程式は、

$$\frac{D(\rho_1\phi_1)}{Dt} + \rho_1\phi_1\text{div}\mathbf{u} = 0 \quad (\text{A1.2})$$

$$\frac{D(\rho_2\alpha_2)}{Dt} + \rho_2\alpha_2\text{div}\mathbf{u} = 0 \quad (\text{A1.3})$$

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} + p\text{div}\mathbf{u} = 0 \quad (\text{A1.4})$$

$$f_1(\rho_1, p, T_1) = 0 \quad (\text{A1.5})$$

$$f_2(\rho_2, p, T_2) = 0 \quad (\text{A1.6})$$

が選ばれている。

但し、

$$\rho = \rho_1\phi_1 + \rho_2\phi_2 \quad (\text{A1.7})$$

$$\rho\varepsilon = \rho_1\phi_1\varepsilon_1 + \rho_2\phi_2\varepsilon_2 \quad (\phi_1 + \phi_2 = 1) \quad (\text{A1.8})$$

である。

また、

$$\frac{D\phi}{Dt} = 0 \quad (\text{A1.9})$$

が成立しているものとする。従って、連続の式 (A1.2)、(A1.3) は

$$\frac{D\rho_i}{Dt} + \rho_i\text{div}\mathbf{u} = 0 \quad (i=1,2) \quad (\text{A1.10})$$

と等価である。

内海らは、内部エネルギーを密度と圧力の関数として線形化して圧力方程式をもとめその解を次ステップの圧力値としているが、数値シミュレーションにおいては時間発展の刻み幅はある一定の値をもつため、解いて得られる圧力は状態方程式の解曲面上からはずれずれる。従って、これをもとに計算される密度、内部エネルギーは物理的にあり得ない経時変化をとる可能性がある。

このとき圧力の誤差は

$$\max \left\{ |\Delta\rho_i\Delta T_i|, (\Delta\rho_i)^2, (\Delta T_i)^2 \right\} \quad (\text{A1.11})$$

と推算される。

従って、温度変化、密度変化がそれほど問題にならない非圧縮の状況では内海らのアルゴリズムは有効に機能する。この状況は単相における CUP 法の議論と共通する。

A1.3 改良アルゴリズム

散逸項の時間積分

$$\frac{u^{**} - u^*}{\Delta t} = \frac{1}{\rho^*} \cdot \text{Viscous force}_x \quad (\text{A1.12})$$

$$\frac{v^{**} - v^*}{\Delta t} = \frac{1}{\rho^*} \cdot \text{Viscous force}_y \quad (\text{A1.13})$$

$$\frac{w^{**} - w^*}{\Delta t} = \frac{1}{\rho^*} \cdot \text{Viscous force}_z \quad (\text{A1.14})$$

$$\frac{T_i^{**} - T_i^*}{\Delta t} = \frac{1}{\phi_i^* \rho_i^* C_{vi}^*} \cdot \text{div}(\phi_i^* \lambda_i^* \text{grad} T_i^*)$$

or (A1.15)

$$\frac{T_i^{**} - T_i^*}{\Delta t} \cong \frac{1}{\rho_i^* C_{vi}^*} \cdot \text{div}(\lambda_i^* \text{grad} T_i^*)$$

他に体積力が存在する場合もこの段階で合わせて計算する。

拘束条件式

時間積分の繰り返しのなかで、保証されなければならない方程式は **Chain rule** で導き出された圧力方程式ではなく、保存方程式と状態方程式である。この方程式は系の時間発展における拘束条件式として機能し、ある一定範囲内で常に同時に成立していなければならない。

$$f_1(\rho_1, p, T_1) = 0 \quad : \text{EOS} \quad (\text{A1.16})$$

$$f_2(\rho_2, p, T_2) = 0 \quad : \text{EOS} \quad (\text{A1.17})$$

$$g_1(\rho_1, p) = \rho_1 - \rho_1^* + \Delta t \rho_1^* \left[\text{div} \mathbf{u}^{**} - \Delta t \text{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \text{grad} p \right) \right] = 0 \quad (\text{A1.18})$$

$$g_2(\rho_2, p) = \rho_2 - \rho_2^* + \Delta t \rho_2^* \left[\text{div} \mathbf{u}^{**} - \Delta t \text{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \text{grad} p \right) \right] = 0 \quad (\text{A1.19})$$

$$h(\rho_1, \rho_2, p, T_1, T_2) = \rho_{mix} \varepsilon - \rho_{mix} \varepsilon^{**} + \Delta t p \left[\text{div} \mathbf{u}^{**} - \Delta t \text{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \text{grad} p \right) \right] = 0 \quad (\text{A1.20})$$

圧力修正方程式

拘束条件式を状態 $(\rho_1^{(k)}, \rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}, T_2^{(k)})$ のまわりで線形化すると、

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial \rho_1}\right)\Delta\rho_1^{(k)} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial p}\right)\Delta p^{(k)} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial T_1}\right)\Delta T_1^{(k)} = -f_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}) \quad (\text{A1.21})$$

$$\left(\frac{\partial f_2}{\partial \rho_2}\right)\Delta\rho_2^{(k)} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial p}\right)\Delta p^{(k)} + \left(\frac{\partial f_2}{\partial T_2}\right)\Delta T_2^{(k)} = -f_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_2^{(k)}) \quad (\text{A1.22})$$

$$\Delta\rho_1^{(k)} + \Delta t \rho_1^* \left[-\Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) \right] = -g_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}) \quad (\text{A1.23})$$

$$\Delta\rho_2^{(k)} + \Delta t \rho_2^* \left[-\Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) \right] = -g_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}) \quad (\text{A1.24})$$

$$\begin{aligned} & (\phi_1^* \varepsilon_1^{(k)} \Delta\rho_1^{(k)} + \phi_2^* \varepsilon_2^{(k)} \Delta\rho_2^{(k)}) + \phi_1^* \rho_1^{(k)} \Delta\varepsilon_1^{(k)} + \phi_2^* \rho_2^{(k)} \Delta\varepsilon_2^{(k)} \\ & - \varepsilon^{**} (\phi_1^* \Delta\rho_1^{(k)} + \phi_2^* \Delta\rho_2^{(k)}) \\ & + \Delta t \left[\operatorname{div} \mathbf{u}^{**} - \Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} p^{(k)} \right) \right] \Delta p^{(k)} + \Delta t p^{(k)} \left[-\Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) \right] \\ & = -h(\rho_1^{(k)}, \rho_2^{(k)}, p, T_1^{(k)}, T_2^{(k)}) \end{aligned} \quad (\text{A1.25})$$

となる。

(A1.21) ~ (A1.24) より、密度および温度の変分量は圧力を用いて、

$$\Delta\rho_1^{(k)} = (\Delta t)^2 \rho_1^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) - g_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}) \quad (\text{A1.26})$$

$$\Delta\rho_2^{(k)} = (\Delta t)^2 \rho_2^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) - g_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}) \quad (\text{A1.27})$$

$$\begin{aligned} \Delta T_1^{(k)} = & - \left(\frac{\partial f_1}{\partial T_1} \right)^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial f_1}{\partial \rho_1} \right) \left((\Delta t)^2 \rho_1^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) - g_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}) \right) \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial f_1}{\partial p} \right) \Delta p^{(k)} + f_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A1.28})$$

$$\Delta T_2^{(k)} = -\left(\frac{\partial f_2}{\partial T_2}\right)^{-1} \left\{ \left(\frac{\partial f_2}{\partial \rho_2}\right) \left((\Delta t)^2 \rho_2^* \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) - g_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}) \right) + \left(\frac{\partial f_2}{\partial p_2}\right) \Delta p^{(k)} + f_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_2^{(k)}) \right\} \quad (\text{A1.29})$$

と陽的に書ける。

さらに内部エネルギーの変分はその熱力学関係式から

$$\Delta \varepsilon_1^{(k)} = \frac{1}{(\rho_1^{(k)})^2} \left(p^{(k)} - T_1^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right) \right) \Delta \rho_1^{(k)} + C_{v1}^{(k)} \Delta T_1^{(k)} \quad (\text{A1.30})$$

$$\Delta \varepsilon_2^{(k)} = \frac{1}{(\rho_2^{(k)})^2} \left(p^{(k)} - T_2^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right) \right) \Delta \rho_2^{(k)} + C_{v2}^{(k)} \Delta T_2^{(k)} \quad (\text{A1.31})$$

である。

これに先に得られた (A1.26) ~ (A1.29) を代入すると内部エネルギーの変分もまた圧力の変分のための陽的な関数となる。

以上より、エネルギー方程式からつぎの圧力方程式が導出される。これはあくまでも修正方程式であり、圧力方程式ではないことが重要である。

$$A_D \Delta p^{(k)} + A_{div} \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} \Delta p^{(k)} \right) = RHS \quad (\text{A1.32})$$

$$A_D \equiv \Delta t \left\{ \operatorname{div} \mathbf{u}^{**} - \Delta t \operatorname{div} \left(\frac{1}{\rho_{mix}^*} \operatorname{grad} p^{(k)} \right) \right\} - \sum_i \phi_i^* \rho_i^{(k)} C_{vi}^{(k)} \left(\frac{\partial f_i}{\partial T_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial f_i}{\partial p} \right) \quad (\text{A1.33})$$

$$A_{div} \equiv (\Delta t)^2 \left[-p^{(k)} + \sum_i \rho_i^* B_i \right] \quad (\text{A1.34})$$

$$\begin{aligned} RHS \equiv & -h(\rho_1^{(k)}, \rho_2^{(k)}, p, T_1^{(k)}, T_2^{(k)}) \\ & + \sum_i B_i g_i(\rho_i^{(k)}, p^{(k)}, T_i^{(k)}) + \sum_i \phi_i^* \rho_i^{(k)} C_{vi}^{(k)} \left(\frac{\partial f_i}{\partial T_i} \right)^{-1} f_i(\rho_i^{(k)}, p^{(k)}, T_i^{(k)}) \end{aligned} \quad (\text{A1.35})$$

$$B_i \equiv \phi_i^* \left[(\varepsilon_i^{(k)} - \varepsilon_i^*) + \rho_i^{(k)} \left\{ \frac{1}{(\rho_i^{(k)})^2} \left(p^{(k)} - T_i^{(k)} \left(\frac{\partial p}{\partial T_i} \right) \right) - C_{vi}^{(k)} \left(\frac{\partial f_i}{\partial T_i} \right)^{-1} \left(\frac{\partial f_i}{\partial p} \right) \right\} \right] \quad (\text{A1.36})$$

GCUP (General Constraint Universal Procedure)

Step.0) 移流積分および散逸項の積分後の値を反復の初期値とする。

$$\begin{aligned}\rho_i^{(0)} &= \rho_i^* \\ p^{(0)} &= p^* \\ T_i^{(0)} &= T_i^{**}\end{aligned}\tag{A1.37}$$

内部エネルギーの初期値は密度、温度等より計算する。

Step.1) 第 k 回目を既知として、第 $(k+1)$ 回目の更新を以下の手続きで行なう。

Step.1.1) 圧力修正方程式 (A1.32) を解き修正量 $\Delta p^{(k)}$ を求める。

Step.1.2) 密度場の修正量を (A1.26)、(A1.27) より求める。

Step.1.3) 温度場の修正量を (A1.28)、(A1.29) より求める。

Step.1.4) 熱力学量を更新する。

Step.2) 内部エネルギーを得られた更新値から計算する。

Step.3) 収束の判定を行なう。

例えば、

$$\max \left\{ \left\| \frac{\Delta \mathbf{q}^{(k)}}{\|\mathbf{q}^{(k)}\| + \delta} \right\| \right\} \leq eps \quad or \quad \max \left\{ \|\mathbf{R}^{(k)}\| \right\} \leq eps\tag{A1.38}$$

$$\mathbf{q}^{(k)} \equiv (\rho_1^{(k)}, \rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}, T_2^{(k)})^T\tag{A1.39}$$

$$R^{(k)} \equiv \begin{pmatrix} f_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}) \\ f_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_2^{(k)}) \\ g_1(\rho_1^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}) \\ g_2(\rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_2^{(k)}) \\ h(\rho_1^{(k)}, \rho_2^{(k)}, p^{(k)}, T_1^{(k)}, T_2^{(k)}) \end{pmatrix}\tag{A1.40}$$

Step.4) 収束の場合は $\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^{(k+1)}$ とする。収束が不十分な場合は Step.1) に戻る。

Step.5) 圧力の収束値 p^{n+1} から速度場を計算する。

参考文献

- [1] Wm. G. Hoover, Computational Statistical Mechanics
(Elsevier Science 1991)
- [2] K. Blotekjer, “Transport Equations for Electrons in Two-Valley
Semiconductors” IEEE Trans. Elect. Dev. Vol.ED-17, (1970)
- [3] 日本原子力学会編, 「気液二相流の数値解析」(朝倉書店 1993)
- [4] 日本機械学会, 第9回計算力学講演論文集, p.283, (1996)
- [5] M.Akamatsu and S.Fujii, private communications