

移流拡散方程式の高精度数値計算法

金 山 進*・清水琢三*・近藤浩右**

1. ま え が き

海上工事による汚濁拡散やシルテーションなどの予測に用いられる移流拡散方程式は、移流項と拡散項という数学的にも物理的にも性質の異なる2種類の項を有しており、数値計算を行う場合、固定格子点上の値を用いた移流計算によって生じる誤差(誤差数値拡散、数値分散)が計算精度に多大な影響を及ぼすことが古くから知られている。拡散係数などの入力パラメーターを十分な精度で与えること自体が難しいという現状から数値計算の精度をあまり深く追求することを疑問視する立場もあるが、数値誤差という不合理な要因はできる限り取り除かれるべきである。近年、小松ら¹⁾、加納・上田²⁾などのように多くの格子点をアルゴリズム中に組み込んだ高精度の差分計算方法が提案されており、移流計算の精度向上という課題が再び脚光を浴びている。

本研究では、まず、数値誤差項を高次オーダーまで消去した計算方法を一般的な形で取り扱い、その特性を検討した。さらに、小笹ら³⁾と同様に、これらにフラックスレベルでの補正を施すことによって、差分法による高精度移流計算の重要な問題である負の濃度の発生を防いだ計算方法を提案し、高精度移流拡散計算への一助とする。なお、今回は移流計算の高精度化に主眼を置き、拡散については、Split operator approach¹⁾によって取り扱うという立場をとった。

2. 高次正確度スキーム

2.1 高次正確度スキームの一般形

1次元の移流方程式、

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \quad \dots\dots\dots (1)$$

に対して Δx , Δt の高次オーダーまで打ち切り誤差を消去した差分表示を導出する。式(1)中、 $S(x, t)$ は拡散物質の濃度、 $u(x, t)$ は x 方向の流速である。 Δx , Δt は、それぞれ空間、時間の格子間隔である。

ここでは、次に示す形の陽形式スキームに対象を限定

する。

$$S_i^{n+1} = \sum_{m=m_1}^{m_2} a_m \cdot S_{i+m}^n \quad \dots\dots\dots (2)$$

すなわち、時間ステップ n における i 点の周囲のいくつかの点上の変数値を用いて、 $n+1$ ステップにおける i 点上の変数値を求めるものである。 n ステップの変数値を N 個用いる場合、式(2)中の m_1 , m_2 は、

N が偶数の場合

$$m_1 = -N/2, \quad m_2 = N/2 - 1 \quad \dots\dots\dots (3)$$

N が奇数の場合

$$m_1 = -(N-1)/2, \quad m_2 = (N-1)/2 \quad \dots\dots (4)$$

で与えられるものとする。

式(2)中の係数 a_m は以下の様にして決定する。

時間ステップ n における i 点上の濃度 S およびその微係数 $\partial^l S / \partial t^l$, $\partial^l S / \partial x^l$ を用いて、差分式中に現れる全ての変数をテイラー級数表示して式(2)に代入し、さらに式(1)より得られる関係、

$$\frac{\partial^l S}{\partial t^l} = (-u)^l \frac{\partial^l S}{\partial x^l} \quad \dots\dots\dots (5)$$

を用いると、

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} (-u)^l \frac{\partial^l S}{\partial x^l} \Delta t^l = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=m_1}^{m_2} a_m \frac{m^l}{l!} \frac{\partial^l S}{\partial x^l} \Delta x^l \quad \dots\dots\dots (6)$$

となる。 $\partial^l S / \partial x^l$ の項について整理すると、

$$(-c)^l = \sum_{m=m_1}^{m_2} a_m \cdot m^l \quad \dots\dots\dots (7)$$

なる関係が得られる。ここで $c (=u \Delta t / \Delta x)$ は、クーラン数である。

0 から $N-1$ までの l に対して式(7)をたてることにより、 $\partial^{N-1} S / \partial x^{N-1}$ 以下の誤差項を消すようにすると N 個の a_m に対する連立方程式となるが、この解は、

$$a_m = \frac{(-1)^{m-m_1} \prod_{l=m_1}^{m_2} (c+l)}{(m-m_1)!(N-m+m_1-1)!(c+m)} \quad \dots\dots\dots (8)$$

となる。このようにして求められた a_m を用いて式(2)の差分式を組み立てると、その擬似微分方程式³⁾は、

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} = \sum_{l=N}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\sum_{m=m_1}^{m_2} m^l a_m - (-c)^l \right)$$

* 正会員 工修 五洋建設(株) 土木設計部

** 正会員 工修 五洋建設(株) 技術部技術企画課

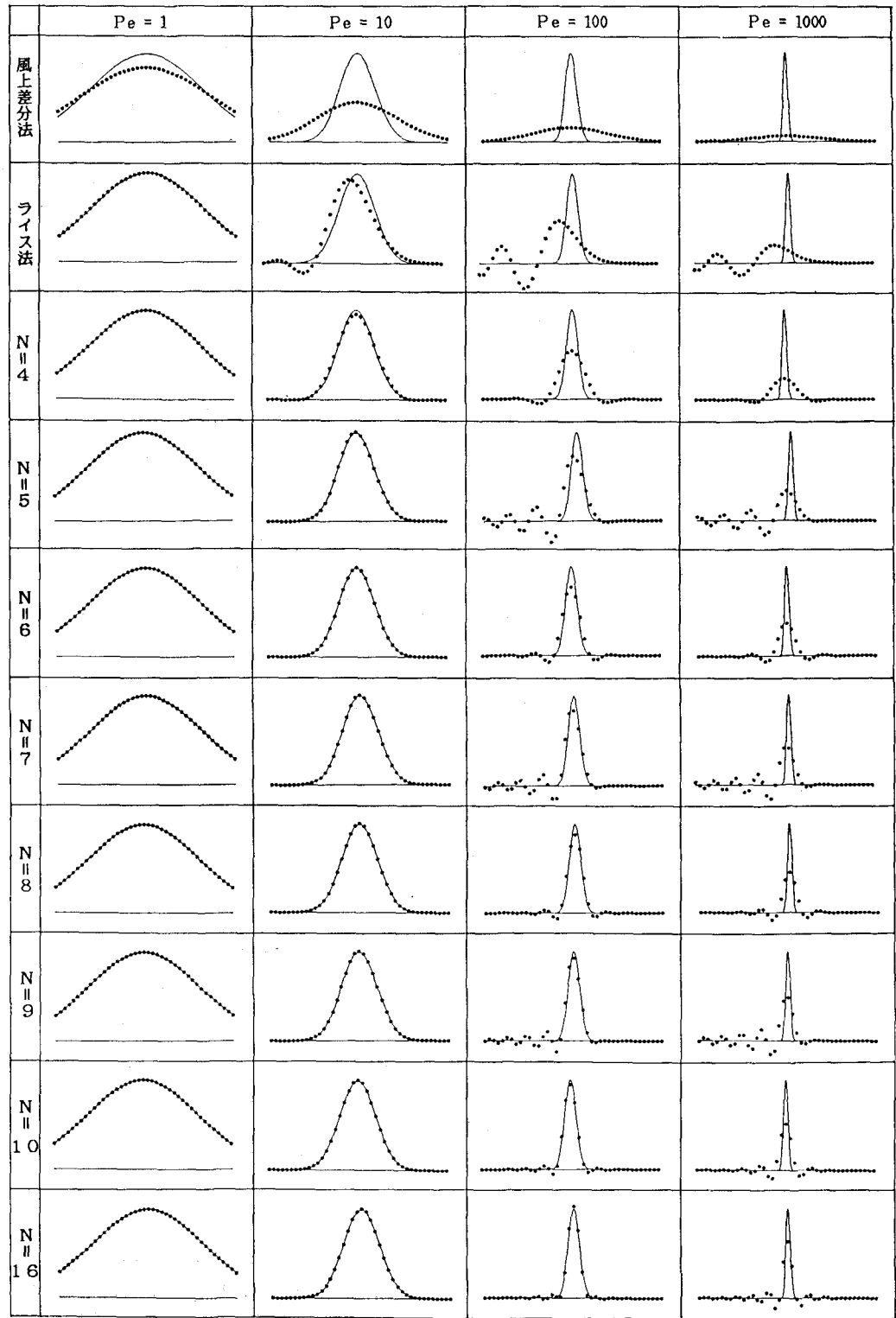


図-1 高次正確度スキームのテスト計算

$$\frac{u}{c} \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Delta x^{N-1} \dots \dots \dots (9)$$

と表され、 N 個の点を用いたスキームは $N-1$ 次の正確度を示すことがわかる。ただし、式 (4) は Δx^{N-1} までの正確度しか有していないので、式 (9) の右辺は筆頭項のみ正しく、それ以降の項は若干の誤差を含む。なお、 N を偶数にすると流速の正負によって switching を行わなくてはならない。

2.2 テスト計算結果

$N=2 \sim 10$ および 16 とした 10 種類のスキームを対象に、一定流速場での瞬間点源投入という条件でテスト計算を行った結果を図-1に示す。風上差分法およびこれに擬似拡散補正を施したライス法⁵⁾は、それぞれ $N=2$ および 3 の場合に対応する。

$u=0.2$ m/s, $\Delta x=5$ m, $\Delta t=5$ s, 拡散係数 K としては、0.001, 0.01, 0.1, 1.0 m²/s という条件を設定した。したがって、クーラン数 c は 0.2, ペクレ数 $Pe (=u\Delta x/K)$ は、1000, 100, 10, 1 となる。 Pe が大きいほど、拡散項に対する移流項の相対的な効果が大きい。

拡散の計算には、Split operator approach を適用した。今回は陽形式の中央差分を採用しており、

$$S_{i+1}^{n+1} = \sum_{m=1}^{m_2} a_m (dS_{i+m-1}^n + (1-2d)S_{i+m}^n + dS_{i+m+1}^n) \dots \dots \dots (10)$$

によって計算を行っている。ここに、 $d (=K\Delta t/\Delta x^2)$ は拡散数である。

図-1 において黒丸が計算値、実線は解析解である。移流方向は右向きであり、計算ステップ数は 400 である。 $Pe=1, 10$ の場合、 $N=5$ 以上の高次正確度法による計算結果は解析解にほぼ完全に一致しているが、 Pe が 100, 1000 と大きくなってくると、数値分散、数値拡散による誤差が顕著となる。

N が奇数の場合、後方に見られるさざなみ状の振動がかなり目立つ。これは、式 (9) の右辺筆頭項によるもので、 N が奇数の場合は波数分散を表す項となり、成分波の伝播速度が波数によって異なるという性質を示すためである。一方、 N が偶数の場合の筆頭誤差項は波数別の振幅減衰効果をもたらす性質を持っているが、図-1 をみる限り、 N が奇数の場合の数値分散による誤差に比べるとそれほど目立たない。

偶数のものだけに注目すると、ある程度までは N が大きくなるほど解析解との整合が良好となる傾向が認められるが、 $N=10$ 以上では正確度をあげてもそれほど明確な精度の向上は見られないようである。

いずれにしても、高次正確度差分法の精度は風上差分法、ライス法に比べて格段に良いことは明らかである。

2.3 高次正確度スキームの誤差解析

Neumann の方法⁵⁾によって、高次正確度スキームの振

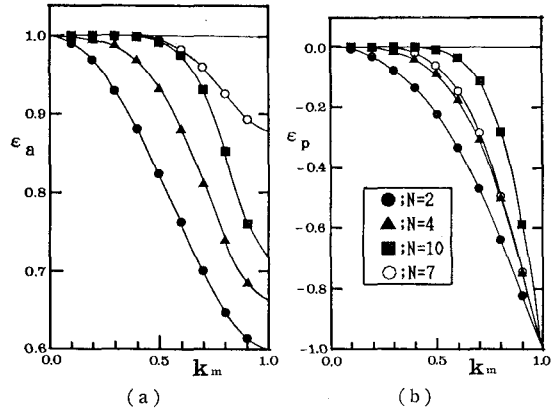


図-2 振幅、位相誤差と伝播波数

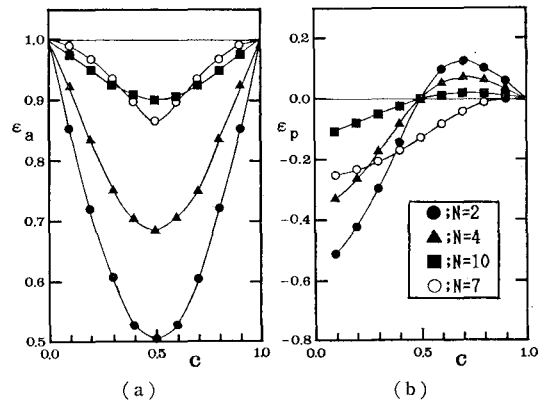


図-3 振幅、位相誤差とクーラン数

幅誤差、位相誤差を調べたものが図-2 および 図-3 である。この際、拡散係数 K は 0 とした。図-2 は $c=0.2$ の場合の振幅、位相誤差を成分波数に対して整理したものである。図中の横軸 $k_m (=k\Delta x/\pi)$ は、格子のナイキスト波数 $\pi/\Delta x$ で無次元化された波数であり、0~1 の値をとる。図-3 は、 $k_m=2/3$ 、すなわち、 Δx の 6 倍の波長を有する成分について、振幅、位相誤差をクーラン数 c に対して整理したものである。 N として、偶数の 2, 4, 10 および奇数の 7 を例にとった。振幅誤差 ϵ_a 、位相誤差 ϵ_p は、式 (1) に対する単一成成分波の解、 $\exp\{ik(x-ut)\}$ に対して

$$\epsilon_a \exp\{ik(x-u(1+\epsilon_p)t)\} \dots \dots \dots (11)$$

なる形で定義されるものとする。

図-2 (a) に注目すると、 N が偶数の場合、10, 4, 2 の順に振幅誤差が小さくなっているが、奇数の 7 はこの傾向に従わず、その振幅誤差は $N=10$ よりもさらに小さい。一方、(b) の位相誤差に注目すると $N=7$ は $N=4$ とあまり変わらない。 N が奇数のものは、偶数のものに比べて振幅誤差は小さいが位相誤差は大きいということになり、図-1 の結果と符合する。

図-1の計算結果は $c=0.2$ に対するものであるが、移流計算の誤差は c によって変化する。図-3は、この点を検討するために整理したものである。スキームが安定となる $c \leq 1$ の範囲を対象とした。いずれのスキームも $c=0.5$ で最も大きな振幅誤差を示し、これを中心に対称な関数形となっていることが(a)よりわかる。また、(b)によれば、 N が偶数のスキームは $b=0.5$ および 1.0 で、位相誤差が0となるが、 $N=7$ のスキームは、 $c=0.9$ 近傍のわずかの領域を除いて常に遅れ位相誤差を示す。

3. フラックス補正による負濃度発生回避

3.1 フラックス補正スキーム

正確度を上げた差分式を用いて計算を行うと、条件によっては、図-1に見られるように数値分散波による負濃度の発生という物理的な矛盾を生じる。一般には、計算領域内のクーラン数 c 、ペクレ数 Pe は空間的、時間的に変化するものであり、全領域で負濃度の発生しない条件を設定するためには、 Δx 、 Δt をかなり小さくとらなければならない。このため、 Pe が大きい領域では数値拡散のために精度は悪くなるが、負濃度を生じないという特性を有する風上差分が広く用いられているのが現状である。

計算アルゴリズムに以下に示す簡単な補正を加えることによって、負の濃度が発生しないという利点を高次正確度スキームにも与えることができる。これは、物質の移流フラックスを高次の正確度で差分表示し、その収支から濃度を求める段階で補正を行い、物質収支の保存を損うことなく負の濃度の発生を防ぐものである。

移流フラックス FL_i^{n+1} は、

$$FL_i^{n+1} = \sum_{m=m_1}^{m_2-1} b_m S_{i+m} \quad \dots\dots\dots (12)$$

で表される。係数 b_m は式(8)の a_m を用いて、

$$b_m = \sum_{l=m_1}^m a_l \quad ; \quad m < 0 \quad \dots\dots\dots (13)$$

$$= \sum_{l=m_2}^m a_l - 1 \quad ; \quad m \geq 0 \quad \dots\dots\dots (14)$$

で与えられる。フラックス FL の定義点は図-4に示す通りである。

フラックス FL から濃度 S への変換は、

$$S_i^{n+1} = S_i^n - FL_i^n + FL_{i-1}^n \quad \dots\dots\dots (15)$$

によって行いが、 $S_i^{n+1} < 0$ となった場合には、

$$FL_i^{n+1} = FL_i^{n+1} + \frac{1}{2} S_i^{n+1} \quad \dots\dots\dots (16)$$

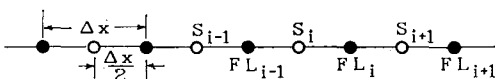


図-4 変数定義位置

$$FL_{i-1}^{n+1} = FL_{i-1}^{n+1} - \frac{1}{2} S_i^{n+1} \quad \dots\dots\dots (17)$$

なる補正を施す。

以上のアルゴリズムを用いて計算を行えば、元のスキームよりも正確度が下がり、数値拡散に類似した効果を若干示す場合もあるが、負の濃度はピーク値のたかだか0.1%程度にとどまり、殆んど無視できるようになる。

3.2 テスト計算結果

$N=4, 7, 8, 10, 16$ の5種類のフラックス補正スキームを対象に2.2と同様の条件でテスト計算を行った結果を図-5に示す。ペクレ数 Pe としては、図-1で負の濃度が発生していた $Pe=100$ および 1000 を対象とした。ピーク値の整合は元のスキームよりも若干悪くなっているが、負の濃度の発生という物理的矛盾は生じていない。

$N=7$ の場合、元のスキームにおいて顕著であったピーク背後の数値分散波が消えている。図-5には示していないが、他の奇数スキームについても同様であった。

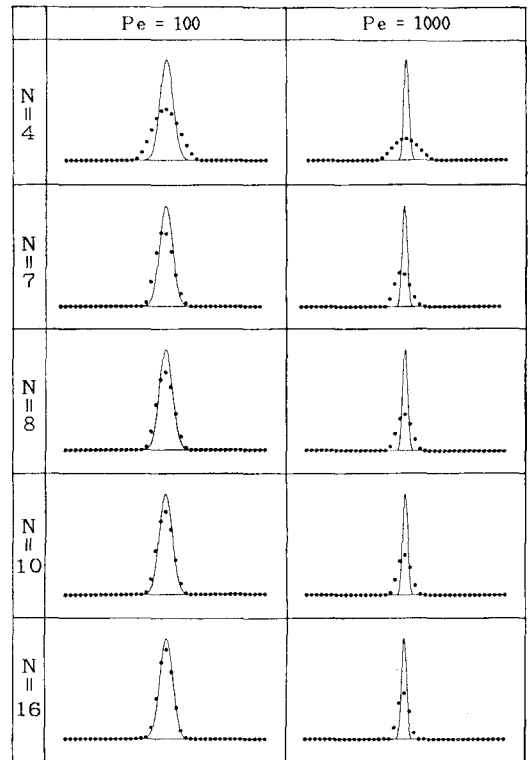


図-5 フラックス補正スキームのテスト計算

4. 2次元、3次元への拡張および境界の取り扱い

4.1 2次元、3次元計算への拡張

これまで1次元で取り扱ってきた計算方法は、Split operator approach によって2次元、3次元へと容易に拡

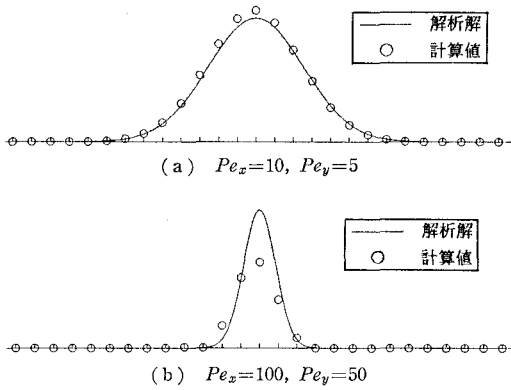


図-6 2次元テスト計算結果 ($N=16$, フラックス補正)

張できる。2次元でのテスト計算結果を図-6に示す。 x 方向、 y 方向のクーラン数をそれぞれ $c_x=0.2$ 、 $c_y=0.1$ とし、ペクレ数については $Pe_x=10$ 、 $Pe_y=5$ のケースと $Pe_x=100$ 、 $Pe_y=50$ のケースの2通りを設定した。初期条件は瞬間点源投入とし、 $N=16$ のフラックス補正スキームを用いて計算を行った。図-6の出力は80ステップ経過後のピークを横切る y 方向の濃度分布である。演算回数が増え、誤差の蓄積が早いいためか、同程度のペクレ数の下でも、1次元の場合に比べて若干精度が落ちるようであるが、高次正確度フラックス補正スキームの2次元計算への適用性を裏付けるに足る結果であると言える。

4.2 境界の取り扱いについて

これまでのテスト計算は、十分大きな計算領域内での瞬間点源投入を対象としており、領域外の濃度、境界でのフラックスをともに0として行った。しかしながら、

一般的な移流拡散問題においては、領域外の濃度を外挿し、境界上のフラックスを計算する必要がある、 N が大きくなるほどこの点の取り扱いが難しくなる。

高次正確度スキームに対して一般的な条件下へ適用できる境界処理を行うことは、今後、急務とするところである。

5. あとがき

高次の打ち切り誤差項までを消去した高次正確度スキームとフラックスレベルでの補正を組み合わせ、負の濃度を発生しないまま精度を上げた移流拡散計算法について検討を行った。単純な条件下でのテスト計算においては、その適用性、精度に十分な裏付けが得られたが、一般的な流況下への適用に際しては、使用点数 N の最適値、境界近傍の取り扱いなどに関する問題が残されている。

参考文献

- 1) 小松利光・仲敷憲和・大串浩一郎：河川や沿岸部における拡散物質の輸送拡散の計算法，第31回海岸工学講演会論文集，pp. 635～639，1984。
- 2) 加納正道・上田年比古：重み付き差分式による一次元移流分散方程式の数値解について，土木学会論文集，第357号/II-3，pp. 97～104，1985。
- 3) 小笹博昭・村上和男・森川雅行：フラックス修正法による物質拡散の数値解法，第28回海岸工学講演会論文集，pp. 500～504，1981。
- 4) 今村文彦・後藤智明：差分法による津波数値計算の打ち切り誤差，土木学会論文集，第375号/II-6，pp. 241～250，1986。
- 5) たとえば，P. J. ローチェ：コンピュータによる流体力学(上)，構造計画研究所，310 p.，1968。