

拡散数値シミュレーションにおける最適計算格子間隔 の選定手法に関する研究

Method for Choosing the Most Suitable Computational Grid Size
in Diffusion Numerical Simulation

小松利光*・朝位孝二**・大串浩一郎***

By Toshimitsu KOMATSU, Koji ASAI and Koichiro OHGUSHI

If a computational grid size in numerical calculation is not selected appropriately, we can not make a diffusion simulation accurately even though a highly-accurate numerical scheme is used. We attempted to develop a method for choosing the most suitable computational grid size. All numerical diffusion terms were supposed to be replaced by a 2nd order numerical diffusion term and evaluated. The method was made up by utilizing the apparent coefficient of the 2nd order numerical diffusion term. Some diffusion simulations were carried out to examine the validity of the method proposed.

Keywords: diffusion simulation, numerical error, suitable grid size

1. まえがき

拡散数値シミュレーションを高精度で行うためには、支配方程式の離散化に起因する数値誤差を極力排除する必要がある。このため従来より様々な高精度計算スキームが提案されている。しかしながら、計算格子が適切な間隔を有していなければ、いかに高精度計算スキームを用いたとしても精度の良い解は得られない。

近年、計算格子間隔を適宜調節することによって精度の良い解を得ようとする適応型格子法 (Adaptive Grid Method) が提案されている。この手法は粗い格子分割による計算結果の誤差を評価し、誤差の大きい領域を細かい格子で分割しなおし再計算するという方法である。村上ら¹⁾は $k-\epsilon$ 乱流モデルを用いた建物周辺の気流解析にこの手法を用いている。また Kashiya and Kawahara²⁾は緩勾配方程式による波動場有限要素解析にこの方法を適用している。永野ら³⁾は線形長波方程式を用いた波動場解析において誤差評価を行い、計算格子間隔の選定について検討を行っている。この手法は計算結果の精度の格子分割への依存性を克服しうる手法であることから適応型格子法による解析事例は今後とも増えていくものと思われるが⁴⁾、最適な計算格子を設定するためには一度仮の計算格子で計算して誤差評価を行う必要があるため、計算時間やコストが掛かるのが欠点である。

数値計算を高精度で効率的に行うためには適切な計算格子間隔の設定が不可欠である。しかしながら、計算格子間隔の設定手法は著者の知る限り上述の適応型格子法以外にはあまり研究例はない。したがって、この種の研究の発展が強く望まれている。

* 正会員 工博 九州大学教授 工学部建設都市工学科 (〒812-81 福岡市東区箱崎6-10-1)

** 正会員 工博 九州大学助手 工学部建設都市工学科 (同上)

*** 正会員 工博 佐賀大学助教授 理工学部土木工学科 (〒840 佐賀市本庄町1番地)

著者らは拡散係数や流速などの流れの条件が与えられ、使用する計算スキームが決まっている場合に、所定の計算精度を満足する最適な計算格子間隔を選定する手法の開発を試みている⁵⁾。文献5)ではその手法の検討をガウス型濃度分布の一次元移流拡散問題に対してのみ行っているが、本論文では一般的な問題及び多次元問題に対してこの手法がどの程度適用可能なのか検討を行った。

2. 数値誤差についての考察⁵⁾

一次元移流拡散方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad (1)$$

(1) 式を何らかの差分法で離散化した場合、Taylor級数展開による誤差解析を行えば一般的に次のような式が得られる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_2 \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_3 \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} + \dots \quad (2)$$

(2) 式の右辺第二項以降の項が計算スキームの打ち切り誤差を表し、ここでは数値拡散項と呼ぶこととする。数値拡散項は無限に続く項であるが、これらすべてを二次の数値拡散項で表すことができるものとすれば以下のようになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + K \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = (D + K) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = D \Psi \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad (3)$$

ここで、 $\Psi \equiv D/(D+K)$ であり、 K は無限に続く数値拡散項を二次の項で代表させたときの見かけの数値拡散係数である。 Ψ は物理拡散係数(乱流拡散係数や移流分散係数など物理的メカニズムに基づく拡散係数を意味し、数値拡散係数と区別するために用いる)と数値拡散係数の相対的な強さを表すパラメーターである。

(1) 式を数値的に解くことは(3)式を厳密に解くことに対応している。物理拡散係数が数値拡散係数よりも相対的に大きければ Ψ は1に近づき、数値誤差は現れにくくなる。また K の値は使用する計算スキームに依存し、高精度計算スキームを用いれば K の値そのものが小さくなるため、比較的小さい物理拡散係数の場合でも Ψ は1に近づき誤差の少ない計算解を得ることができる。

3. 計算格子間隔の選定手法⁵⁾

3.1 数値拡散係数の評価

拡散項から生じる打ち切り誤差は移流項から生じる誤差と比較して小さいことが知られている。したがってここでは、移流項から生じる誤差のみを考慮すればよいものとし、以下に示す一次元純粋移流方程式について考察を進める。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

(2) 式と同様、(4) 式を離散化し、その打ち切り誤差を評価すれば次式が得られる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = k_2(\alpha) \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_3(\alpha) \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} + k_4(\alpha) \frac{\Delta x^4}{4! \Delta t} \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} + \dots \quad (5)$$

ここで、 α はクーラン数である。また $k_2, k_3, \dots$ は α の関数であり、その関数形はスキームによって異なる。(5) 式の右辺の無限に続く数値拡散項を(3)式と同様二次の項で代表させるものとすれば以下のようになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = K \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad (6)$$

ここで、(5) 式の右辺を $\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}$ でくくれば (7) 式を得る。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \left[\frac{k_2(\alpha)}{2!} + \frac{k_3(\alpha)\Delta x}{3!} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} / \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + \frac{k_4(\alpha)\Delta x^2}{4!} \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} / \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + \dots \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad (7)$$

上式を (6) 式と比較すれば K は以下の様に表現できる。

$$K = \left[\frac{k_2(\alpha)}{2!} + \frac{k_3(\alpha)\Delta x}{3!} \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} / \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + \frac{k_4(\alpha)\Delta x^2}{4!} \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} / \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + \dots \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (8)$$

(8) 式を無次元化すれば (9) 式が得られる。

$$\frac{K \Delta t}{\Delta x^2} = \frac{k_2(\alpha)}{2!} + \frac{k_3(\alpha)}{3!} \left(\frac{\Delta x}{B} \right) \left(\frac{\partial^3 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^3} / \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) + \frac{k_4(\alpha)}{4!} \left(\frac{\Delta x}{B} \right)^2 \left(\frac{\partial^4 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^4} / \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) + \frac{k_5(\alpha)}{5!} \left(\frac{\Delta x}{B} \right)^3 \left(\frac{\partial^5 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^5} / \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) + \dots \quad (9)$$

ここで、 $\Phi = \Phi_0 \tilde{\Phi}$ 、 $x = B \tilde{x}$ であり、 Φ_0 は代表濃度、 $\tilde{\Phi}$ は無次元濃度、 B は濃度分布の代表長さスケール、 $\tilde{x}$ は無次元座標である。

(9) 式は流れや計算の条件からつくられるパラメーター α 及び $\Delta x/B$ に依存しており、この係数 K の値から計算スキームの特性や精度を検査することができる。

図-1 は風上差分スキーム (時間微分項には一次精度オイラー法)、6-point スキーム及び QUICK スキーム (時間微分項には二次精度アダムス・バッシュフォース法) について $K \Delta t / \Delta x^2$ の値をクーラン数 0.5 に対して示したものである。(9) 式には未知量として無次元濃度微係数の比が残されているが、ここではガウス分布のピーク位置の微係数の値で代表させて評価した。なお、項数は 20 次まで考慮して K の値を計算した。

3.2 数値拡散係数と相対誤差

この節では、数値拡散係数 K とそれにより生じる数値解の誤差を関係づけることを考える。(3) 式において流速 u 、物理拡散係数 D 、数値拡散係数 K を一定と仮定すれば、瞬間点源に対する厳密解が以下のように得られる。

$$\Phi(x,t) = \frac{M}{\sqrt{2\pi(2D\Psi^{-1}t + \sigma^2)}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0-ut)^2}{2(2D\Psi^{-1}t + \sigma^2)}\right\} \quad (10)$$

ここで、 M は瞬間投入物質の質量、 σ は瞬間投入からある時間経過した後の基準時刻 (計算初期時刻 $t=0$ 時) における投入物質の分布の標準偏差、 x_0 は基準時刻時におけるピーク値の x 座標である。 $\Psi=1$ の時のピーク値を Φ_m 、 $\Psi \neq 1$ の時のピーク値を Φ'_m とすれば、数値解と厳密解のピーク値における相対誤差 $E_R(\%)$ は (10) 式から以下のように求められる。

$$E_R \equiv \left(\frac{\Phi_m - \Phi'_m}{\Phi_m} \right) \times 100 = \left(1 - \sqrt{\frac{(2t^* + 1)\Psi}{2t^* + \Psi}} \right) \times 100 \quad (11)$$

ここで、 $t^* = \frac{D t}{\sigma^2} = \frac{(2 \ln 2) D t}{B^2}$ で、基準時刻からの無次元拡散時間を表す。代表長さスケール B はここではピーク値の半値半幅で表すことにする。

(11) 式を Ψ に関して整理すると次式を得る。

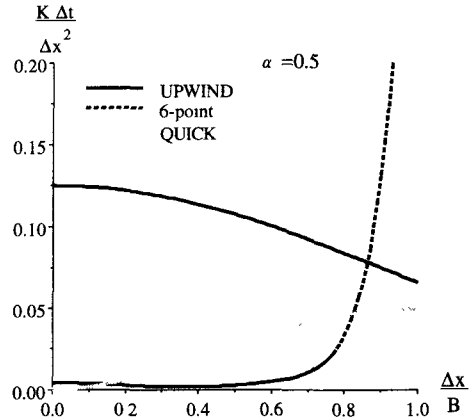


図-1 無次元数値拡散係数と $\Delta x/B$ の関係

$$\Psi = \frac{2t^* \left(1 - \frac{E_R}{100}\right)^2}{2t^* + 1 - \left(1 - \frac{E_R}{100}\right)^2} \quad (12)$$

(12) 式と Ψ の定義式 ($\Psi \equiv D/(D+K)$) から、任意の拡散計算時間後における相対誤差とそれを引き起こした数値拡散係数 K の関係が求められる。なお、本節で取り扱った相対誤差は厳密にはガウス分布のピーク値に関するものであるが、次節以降ではこの相対誤差を近似的に拡張して、任意の濃度分布の代表濃度の誤差を表す指標として取り扱うことにする。

3.3 計算格子間隔の選定手順

計算格子間隔の選定は下記の手順で行う。

- (1) 拡散シミュレーションにおいて、計算時間 t 内で許容される相対誤差 E_R 、物理拡散係数 D 、代表長さスケール B から (12) 式を用いてパラメーター Ψ の値を決定する。
- (2) 物理拡散係数 D 、パラメーター Ψ の値から Ψ の定義式 ($\Psi \equiv D/(D+K)$) を用いて、 E_R を生じる数値拡散係数 K の値を求める。
- (3) 図-1上において、 Δx 、 Δt を適宜変化させて試行し選定判断のための点 G ($\Delta x/B$ 、 $K \Delta t / \Delta x^2$) が、使用するスキームの判定曲線にできるだけ近かつその上に位置するように Δx 、 Δt を決定する。
- (4) 決定した計算格子間隔がCFL条件などの安定条件を満足していることを確認し、もし満足していなければ再び (3) に戻る。

図-1はクーラン数 $\alpha=0.5$ に対する図表であるが、 Δx 、 Δt が変化すればクーラン数も変化する。したがって、格子間隔の選定では図-1に対応する各クーラン数の図表が必要となる。しかしながら、クーラン数0.5は最も計算精度を低下させる値なので、図-1を用いれば安全側の選定が一応行える。手順の簡便性を考慮してここでは図-1で選定を行う。より詳細な選定を行う必要が有る場合や図-1にない他の移流項計算スキームを用いる場合は、そのスキームに対して計算された各クーラン数の選定図表を使用すればよい。これらの図表は文献6)の付録を参照すれば容易に作成できる。

4. モデル計算による検証

4.1 ガウス型濃度分布による検証

この節ではガウス型濃度分布の一次元移流拡散問題に対して計算格子の選定手法の検討を行う。

標準偏差200m、ピーク値10、ピーク値の初期位置が $x=1400\text{m}$ のガウス型濃度分布を、0.5m/secの速度で下流方向へ9600sec間移流拡散させる問題を考える。物理拡散係数については $1.172\text{m}^2/\text{sec}$ を与える。これは初期ピーク値10を9600sec後に厳密に8に減少させる拡散係数である。代表長さスケール B はピーク値の半値半幅を用い、この場合235.48mになる。使用する計算スキームは風上差分法、6-pointスキーム及びQUICKスキームである。時間微分項については、風上差分法では一次精度オイラー法、QUICKスキームでは二次精度アダムス・バシユフォース法を用いた。

許容相対誤差を10% (CASE-1) 及び1% (CASE-2) とした場合に、最適な計算格子間隔として推定された結果を表-1に示す。なお、両ケースともクーラン数が0.5となるように計算格子間隔を決定した。なお、風上差分法の1%の場合は、拡散項の安定条件からクーラン数0.5という条件下での最適な計算格子間隔を決定することはできなかった。

表-1 理論による最適計算格子間隔

Scheme	Upwind		6-point scheme		QUICK	
Relative error (%)	10	1	10	1	10	1
Δx (m)	5	-	100	20	50	20
Δt (sec)	5	-	100	20	50	20
$\Delta x/B$	0.0212	-	0.425	0.0849	0.212	0.0849
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.153	-	0.00764	0.0033	0.0153	0.0033
Relative error evaluated						
by calculated results (%)	8.41	-	1.75	1.12	2.63	0.149

図-2～4は採用した計算格子間隔による点Gと無次元数値拡散係数曲線の位置関係を示したものであり、それぞれ風上差分法、6-pointスキーム、QUICKスキームに対する図表である。実際の計算結果と厳密解のピーク値間の相対誤差も表-1に示している。計算結果の一例として風上差分法による結果を図-5に示す。他の計算結果の図は厳密解とほとんど一致しているため割愛する。

6-pointスキームのCASE-2の場合を除き、点Gは判定曲線よりも上方に位置しており予想通り許容誤差を満足している。6-pointスキームのCASE-2の場合は、点Gを判定曲線のやや下側に設定したため許容誤差1%を超えてはいるが、ほぼ1%に近い精度を得ている。

4.2 モデル湾による検証

著者らが提案している計算格子間隔の選定手法はガウス分布を基にして開発しているため、同じガウス型濃度分布を用いた検証では良い選定結果が得られ易くなる。したがってこの節では、ガウス型濃度分布とはならないモデル湾における移流拡散問題に対し本手法の適用性を検討する。

図-6に示しているモデル湾を対象に一次元移流拡散シミュレーションを行う。基礎方程式は以下に示す連続の式と一次元移流拡散方程式である。

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = q \quad (13)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(A D_L \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{q'}{A} - \frac{\Phi q}{A} \quad (14)$$

ここで、 Q は断面通過流量、 q は単位時間単位長さ当たりの淡水供給量、 Φ は拡散物質の濃度、 A は湾の断面積、 D_L は潮汐運動が加味された一次元分散係数、 q' は単位時間単位長さ当たりの拡散物質の供給量である。流速は(13)式から求めた。

ここで、以下に示す二ケースについてモデル計算を行った。

CASE-A: 湾口から4500m及び9500m離れた位置からそれぞれ500m³/secの淡水供給を行う。分散係数は10m²/secである。初期条件は湾口で濃度が1.0、湾奥で10.0となるような直線濃度分布を与え、 $t=12000$ secまで非定常計算を行う。

CASE-B: 拡散物質を淡水供給と同じ位置の2ヶ所から毎秒10.0の割合でそれぞれ連続投入する以外はCASE-Aと同じである。

図-7はモデル湾内の流速分布を示している。流速は湾口に向かって流れている。また湾口から9500mの地点よりも奥では流速は0であり、この領域では物質は拡散のみで輸送される。境界条件として、湾口では流出条件、湾奥では濃度フラックス0の条件を用いた。

許容相対誤差を10%として、風上差分法、6-pointスキーム、QUICKスキームの三種類の計算法について最適な計算格子間隔を選定する。分布の解像度の見地から空間方向の計算格子間隔 Δx は大きくても B の十分の程度であることが望ましい。したがってまず始めに $\Delta x/B$ を0.1程度に設定し、許容相対誤差を満足する Δt を決定す

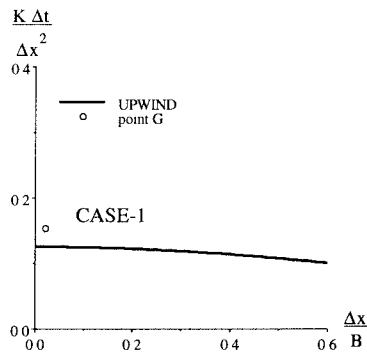


図-2 最適格子間隔の選定図表 (風上差分法)

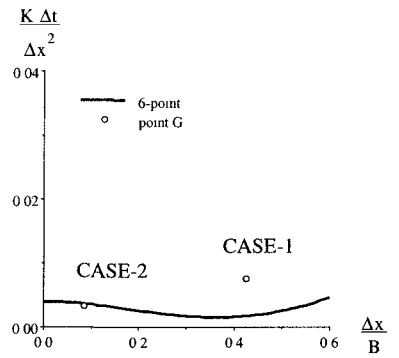


図-3 最適格子間隔の選定図表 (6-pointスキーム)

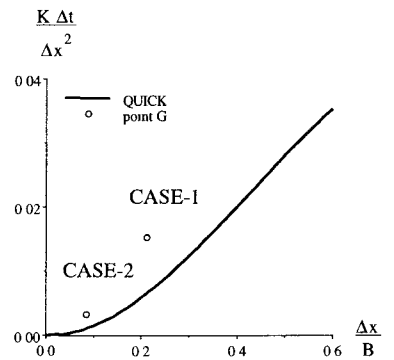


図-4 最適格子間隔の選定図表 (QUICKスキーム)

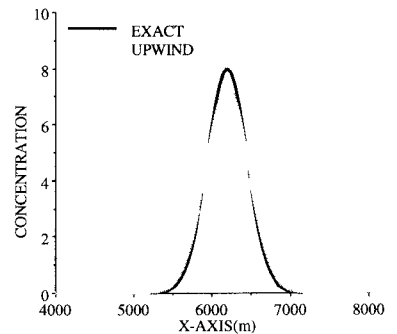


図-5 計算結果 (風上差分法)

ることにする。

初期濃度分布の半値半幅を代表長さスケール B とすれば、 $B=6000\text{m}$ となる。表-2に決定された計算格子間隔と選定判断に用いる点 G の座標 ($\Delta x/B, K \Delta t / \Delta x^2$) を示す。またこの時のクーラン数の絶対値の最大値も示している。点 G を選定図表上にプロットしたものが図-8である。図-9はクーラン数の絶対値の最大値に対してプロットされた選定図表である。拡散物質の供給源の有無は計算格子の選定の要素ではないのでCASE-A、CASE-B共に選定図表は同じものになる。いずれも判定曲線よりも上側に点 G が位置している。CASE-Aの計算結果を図-10に、CASE-Bの計算結果を図-11に示す。このモデル計算では厳密解を求めることが困難なため、6-pointスキームを用いて非常に小さな格子間隔である $\Delta x=1\text{m}$ 、 $\Delta t=0.01\text{sec}$ で計算した結果を厳密解に近い参照データ (REFERENCE) とした。計算結果とREFERENCEとの相対誤差を表-3の上段に示す。相対誤差は次式で評価した。

$$Relative\ error \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{|\Phi_{Rj} - \Phi_j|}{\Phi_{Rj}}$$

(15)

ここで、 N は計算格子の節点数、 Φ_R はREFERENCEの値、 Φ は計算結果である。判定手法の相対誤差はガウス分布のピーク値の相対誤差である。したがって、許容精度として前もって与える相対誤差と(15)式による相対誤差は直接同等には比較できない。しかしながら、ここでは(15)式を精度の定量的評価法として用いることにする。また表-3の下段は拡散物質の保存状況を確認するため、REFERENCEの分布を積分した値と計算解を積分した値の間の相対誤差を示している。数値積分にはシンプソン法を用いた。

QUICKスキームは通常保存形式 (Conservation) で用いられるが、ここでは対流形式 (Convection) による解も示している。

表-2 理論による最適計算格子間隔 ($B=6000\text{m}$)

Scheme	Upwind	6-point scheme	QUICK
Δx (m)	500	500	500
Δt (sec)	250	250	250
$\Delta x/B$	0.083	0.083	0.083
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.2562	0.2562	0.2562
$ u \Delta t / \Delta x$	0.1655	0.1655	0.1655

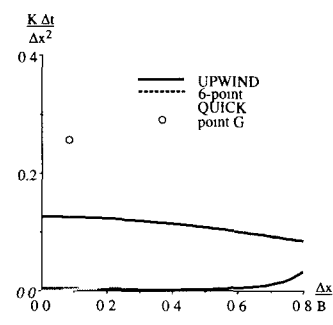


図-8 選定図表
(クーラン数 $\alpha=0.5$)

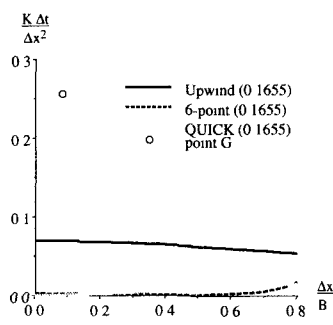


図-9 選定図表
(クーラン数 $\alpha=0.1655$)

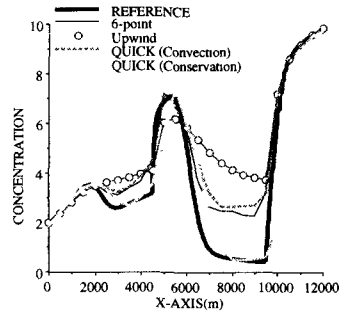


図-10 計算結果 (CASE-A)

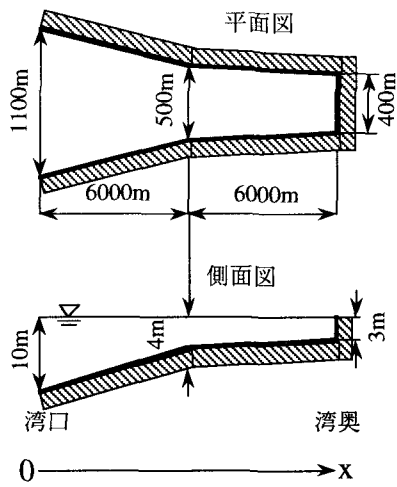


図-6 モデル湾の概要

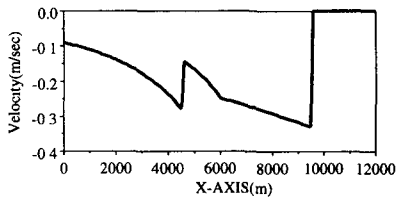


図-7 モデル湾内の流速分布

表-3 計算解の REFERENCE に対する相対誤差 (%)

	Scheme	Upwind	6-point scheme	QUICK*	QUICK**
Relative error	CASE-A	179.5	104.1	118.2	23.81
evaluated by Eq. (15)	CASE-B	5.137	3.233	3.619	14.63
Relative error of	CASE-A	29.47	18.12	20.78	2.212
conservation	CASE-B	3.961	2.193	2.486	0.111
* convection **conservation					

対流形式の QUICK スキームは以下の様になる。なお流速が一定の場合は対流形式も保存形式も同型となる。

$$u_i \frac{\partial \Phi}{\partial x} = u_i \frac{3\Phi_{i+1} + 3\Phi_i - 7\Phi_{i-1} + \Phi_{i-2}}{8\Delta x} \quad (16)$$

CASE-B は相対誤差が比較的小さく精度の良い結果が得られている。保存形の QUICK スキームによる計算結果はかなり大きなオーバーシュートやアンダーシュートが見られる。しかしながら、物質の保存については、ここで用いたスキームの中では最も良い保存性を示している。一方、CASE-A は保存形式の QUICK スキーム以外は (15) 式で評価された相対誤差が 100% を超え大きな数値誤差を示している。また拡散物質の保存も保存形式の QUICK スキームによる結果以外は誤差が大きい。

CASE-B では淡水供給と共に拡散物質の供給があるため、濃度分布はなだらかな形状となり代表長さスケールが時間が経過してもあまり変化せず、その結果格子間隔の選定は比較的精度良く行えたものと思われる。一方 CASE-A では、長さスケールが時間的、局所的に変化して小さくなったため初期の長さスケールだけでは十分な選定が行えなかったものと思われる。

図-12 は $\Delta x=500\text{ m}$ 、 $\Delta t=500\text{ sec}$ の格子間隔で風上差分による $t=1000\text{ sec}$ 時の計算結果及び REFERENCE の $t=1000\text{ sec}$ 時の計算結果である。淡水供給源のある $x=4500\text{ m}$ 、 9500 m 近傍で切れ込み状の分布となっているが、粗い計算格子を用いた場合ではこの分布は適切には再現されていない。物質の保存が良好な精度の良い解を得るためには、代表長さスケール B としてはむしろ計算初期の切れ込み状分布の半値半幅を用いるべきと思われる。紙面の都合上詳細は割愛するが、図-12 に示している風上差分による計算結果からスケール B を求め、最適格子間隔を選定したところ良好な結果が得られている。

5. 多次元問題への適用⁵⁾

一次元移流拡散方程式を対象に開発された本手法の多次元問題への拡張を試みる。三次元問題も同様であるため、ここでは簡単な二次元問題について考察する。二次元移流拡散方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) \quad (17)$$

ここで、 u は x 方向の流速、 v は y 方向の流速、 D_x は x 方向の物理拡散係数、 D_y は y 方向の物理拡散係数である。スプリット・オペレータ・アプローチを適用して (17) 式を移流方程式と拡散方程式に分離すれば次のようになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad (18) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) \quad (19)$$

これは図-13 において、時刻 $t=t_n$ に座標 (X_n, Y_n) にあったクラウドが時間間隔 Δt 後の $t=t_{n+1}$ には座標 (X_{n+1}, Y_{n+1}) に特性曲線に沿って移動し、その後物理拡散を受けることを意味している。ここで、実際の特性曲線から経路を変えて、最初に x 方向に移動し、同じタイムステップ内で y 方向に移動すると考えても同等である。この経路を通過するクラウドは次式で表される。

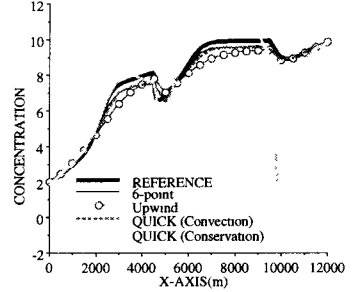


図-11 計算結果 (CASE-B)

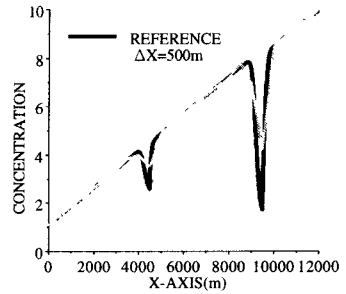


図-12 $t=1000\text{ sec}$ 時の計算結果 (CASE-A)

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (20) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad (21)$$

(20) 式、(21) 式は一次元の数値解法がそのまま適用できるため、二次元の移流計算は一次元移流計算の組み合わせに帰着できる。従って、本格子間隔選定手法もそのまま二次元に適用できる。図-13に示しているように1タイムステップ内で二方向を続けて計算するため数値解は一次元の場合よりも二倍の数値拡散を受けることになるが、物理拡散も二方向に作用してほぼ二倍の拡散になると考えられ、パラメータ Ψ は $\Psi \equiv 2D / (2D + 2K) = D / (D + K)$ となり一次元の場合と同じになる。従って物理拡散係数及び流速に各方向の平均値を用いれば一次元の場合と全く同様に取り扱うことができる。

5.1 二次元移流拡散問題の検証

4.1節と同様ガウス分布の二次元移流拡散問題に対して本手法の検証を行う。標準偏差がx方向、y方向とも200m、ピーク値10、ピーク値の初期位置 $x=1400\text{m}$ 、 $y=1400\text{m}$ のガウス型濃度分布をx方向、y方向とも0.5m/secの流速で、9600sec間下流方向に移流拡散させる。この時のx方向の拡散係数は $0.521\text{m}^2/\text{sec}$ 、y方向のそれは $2.083\text{m}^2/\text{sec}$ とする。判定に用いる物理拡散係数は平均値の $1.302\text{m}^2/\text{sec}$ 、長さスケールBはガウス分布のピーク値の半値半幅を用いて235.5mであり、これらより t_c は0.312となる。

使用する計算スキームをQUICKと6-pointスキームとし、許容相対誤差をそれぞれ10%、5%とした場合において、判定された最適な計算格子間隔を表-5に示す。このモデル計算では解析解を得ることが困難であるため、 $\Delta x = \Delta y = 5\text{m}$ 、 $\Delta t = 1\text{sec}$ という非常に細かい計算格子間隔を用いて移流のない拡散だけの計算を行い、その数値解を参照（REFERENCE）とした。計算解とREFERENCEのピーク値間の相対誤差も表-5に示す。なお、クーラン数 α が0.5となるように格子間隔を系統的に変化させたが、そのクーラン数で安定に計算できる格子間隔が見つからない場合にはクーラン数を変えて再び選定を行った。図-14はこの時の選定図表である。計算結果はいずれも設定精度よりも良い結果を示しており、本手法は多次元問題に対しても有効であると思われる。

6. むすび

格子間隔選定の精度を向上させるためには代表長さスケールの決定が重要である。淡水供給、負荷源、境界の形状などの要因が絡み、流速、拡散係数、初期条件が同じでも適切な代表長さスケールは問題によって異なる。適切な代表長さスケールの簡便な評価法については今後の課題であるが、実用的には簡単な予備計算で長さスケールの見込みをつければよい。これまで経験的に定められてきた格子間隔の選定に明確な指針を設けることができたと思われる。また多次元問題にも容易に適用できるため本手法の有用性は高いものと思われる。最後に、本論文の作製にあたって山崎智弘君（九州大学修士1年）並びに岩城紹君（九州大学工学部4年）の協力を得た。記して謝意を表します。

参考文献

- [1] 村上周三、持田灯、大和田淳、村上里美（1987）：建物周辺気流の数値予測（第7報）Adaptive Gridによる立方体モデル周辺の気流解析（その1）、日本建築学会関東支部研究報告集
- [2] Kashiyama, K and Kawahara, M（1987）：Adaptive Finite Element Method for Linear Water Wave Problems, Proc. of JSCE, No.387/II-8, pp.115-124
- [3] 永野修美・今村文彦・首藤伸夫（1989）：数値計算による沿岸域でのチリ津波の再現性、海岸工学論文集、第36巻、pp 183-187
- [4] 保原充・大宮司久明編（1992）：数値流体力学、東京大学出版会、pp 605-608
- [5] 小松利光・朝佐孝二・大串浩一郎・吉村耕市郎（1996）：拡散数値シミュレーションの最適計算手法に関する研究、土木学会論文集（印刷中）

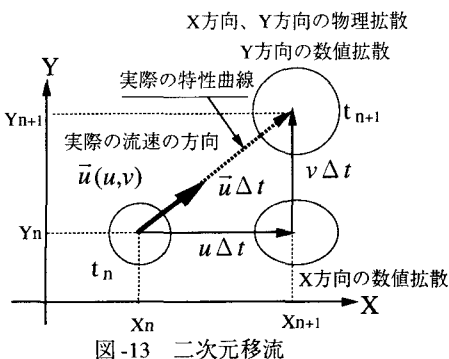


図-13 二次元移流

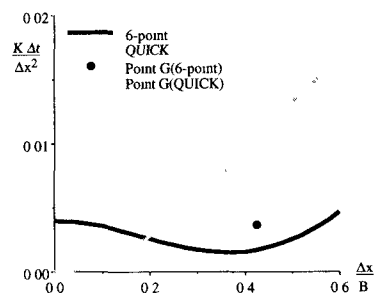


図-14 選定図表

6-point ($\alpha = 0.5$) QUICK ($\alpha = 0.25$)

表-5 理論による最適格子間隔

Scheme	QUICK	6-point scheme
Relative error (%)	10	5
Δx (m)	50	100
Δy (m)	50	100
Δt (sec.)	25	100
K (m^2 / sec)	0.7941	0.3657
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.007941	0.003657
$\Delta x / B$	0.212	0.425
Relative error evaluated		
by results (%)	5.13	3.805