II-280 拡散シミュレーションにおける計算スキームの選択基準について

九州大学　正　員　朝位　孝二　九州大学　正　員　小松　利光
九州大学　学生員　吉村耕市郎　佐賀大学　正　員　大串浩一郎

１．はじめに

移流拡散方程式の数値計算を行うときには、移流項の取扱いに慎重な配慮が必要となってくる。拡散項の計算は精度よく行えるのに対し、移流項の計算においては、風上差分などの通常の計算スキームを用いると、無視出来ない誤差が含まれるからである。しかしながら、物理拡散が強くなると移流項の計算スキームから生じる誤差は小さくなり、風上差分でも比較的精度よく計算が行える場合もある。したがって、拡散シミュレーションを精度よく実行するために採用できる計算スキームの種類は、拡散係数や流速等の水理条件及び計算格子の大きさ等の計算条件によって変わってくるものと思われる。拡散シミュレーションにおける最適な計算スキームを判断するための選択基準を作ることを本研究の目的とし、その考え方をここで述べる。

２．数値拡散係数

拡散項から生じる誤差は非常に小さいので、ここでは移流項から生じる誤差を対象に考察する。一次元移流拡散方程式を無次元化すると次式の様になる。

$$\frac{\partial\tilde{C}}{\partial\tilde{t}}+\tilde{U}\frac{\partial\tilde{C}}{\partial\tilde{x}}=\tilde{D}\frac{\partial^2\tilde{C}}{\partial\tilde{x}^2} \tag{1}$$

ここで、$C=C_0\tilde{C}$、$x=\sigma\tilde{x}$、$u=u_0\tilde{u}$、$t=\sigma/u_0\tilde{t}$、$D=u_0\sigma\tilde{D}$、C_0は代表濃度、u_0は代表流速、σは拡散の代表長さスケール、Dは拡散係数であり、～の付いた量が無次元量である。(1) 式を差分法で離散化したときに、Taylor級数展開による誤差解析を行えば、一般に次の様な式が得られる。

$$\frac{\partial\tilde{C}}{\partial\tilde{t}}+\tilde{U}\frac{\partial\tilde{C}}{\partial\tilde{x}}=\tilde{D}\frac{\partial^2\tilde{C}}{\partial\tilde{x}^2}+K_2(\tilde{U},\Delta\tilde{x},\Delta\tilde{t})\frac{\partial^2\tilde{C}}{\partial\tilde{x}^2}+K_3(\tilde{U},\Delta\tilde{x},\Delta\tilde{t})\frac{\partial^3\tilde{C}}{\partial\tilde{x}^3}+\dots \tag{2}$$

ここで、$\Delta\tilde{x}=\Delta x/\sigma$、$\Delta\tilde{t}=u\Delta t/\sigma$である。(2) 式の右辺第２項以降の項が、移流項の差分化から生じた数値拡散項であり、K_2、K_3、・・・は数値拡散係数である。数値拡散係数は無次元流速$\tilde{u}$、無次元計算格子間隔$\Delta\tilde{x}$、$\Delta\tilde{t}$の関数になる。次元量に戻せば、数値拡散係数はu、σ、Δx、Δtの関数になる。

いまここで、無限に続く数値拡散項を、２次の項で代表できるものとする。UTOPIA Schemeのような３次精度のスキームでは、数値拡散項は４次の項から始まり、２次・３次の項はない。しかしながら、このような場合でも数値拡散項は２次の項で代表できるものとする。このとき数値計算のために離散化される一次元移流拡散方程式は (3) 式のように書きあらわせる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}=D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+K\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{3}$$

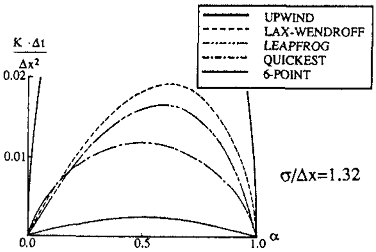
$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}=(D+K)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=D\psi^{-1}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{4}$$

ここでKは、全ての誤差項の和を２次の数値拡散項で代表させたときの、みかけの数値拡散係数である。このとき、Kは次元解析より$K\Delta t/\Delta x^2=f(\sigma/\Delta x、\alpha)$とおくことができる。ここで$\alpha$はクーラン数であり、$\alpha\equiv u\Delta t/\Delta x$と定義される。(3) 式を若干変形すると (4) 式が得られる。ここで$\Psi=D/(D+K)$である。Ψは物理拡散の数値拡散に対する相対的な強さを表すパラメータと解釈できる。物理拡散が相対的に強くなれば、Ψは1に近づき数値誤差は顕著には現れなくなる。

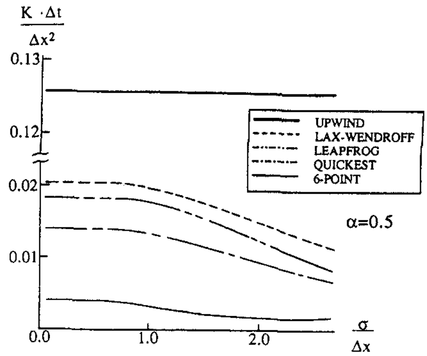
３．数値拡散係数の評価

Ｋを含む項は、無限に続く数値拡散項を代表しているので、Taylor級数解析を用いた誤差解析からは評価できない。そこで数値実験からＫを評価する。

数値実験に用いた式は一次元純粋移流方程式である。初期条件にガウス型濃度分布を用いて、一定流速で一定時間の間、下流方向に移流させる。このとき計算結果は、純粋移流にもかかわらず、あたかも物理的な拡散を受けたような解が得られる。そこで、どのような拡散係数を与えれば、初期時のガウス分布のピーク値が計算解のピーク値になるかを解析的に逆算し、求まった拡散係数をＫの値とした。Ｋの値が水理条件や計算条件でどの様に変化するかを見るために、流速や計算格子間隔を種々変えて計算を行った。計算スキームは風上差分、QUICKEST、Lax-Wendroff、Leapfrog、6-Pointを使用した。図－１は$\sigma/\Delta x=1.32$に固定して$K\Delta t/\Delta x^2$をαに対してプロットしている。この図より、風上差分は他のスキームと比較して大きな数値拡散係数を持つことが分かる。図－２はαを0.5に固定して$K\Delta t/\Delta x^2$を$\sigma/\Delta x$に対してプロットしている。風上差分を除いてどのスキームも$\sigma/\Delta x$が大きくなるほど数値拡散係数が０に近づくことが分かる。なおここでは、σには初期条件のガウス分布の標準偏差を用いた。



図－１　数値拡散係数Ｋとαの関係



図－２　数値拡散係数Ｋと$\sigma/\Delta x$の関係

４．計算スキームの選択

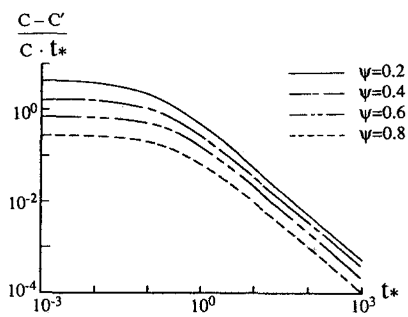
（5）式で与えられる拡散方程式の瞬間点源に対する解は（6）式のようになる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D\psi^{-1}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \qquad (5) \qquad C(x,t)=\frac{M}{\sqrt{2\pi\{2D\psi^{-1}t+\sigma^2\}}}\exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\left(2D\psi^{-1}t+\sigma^2\right)}\right\} \qquad (6)$$

$\Psi=1$のときの理論解のピークの値Ｃと$\Psi=\Psi$のときの理論解のピークの値Ｃ’から次式を得る。

$$\frac{C-C'}{C\cdot t_*}=\left\{1-\sqrt{\frac{(2t_*+1)\psi}{2t_*+\psi}}\right\}\Big/ t_* \qquad (7)$$

ここで$t_*=Dt/\sigma^2$である。（7）式は無次元拡散単位時間当たりの誤差発生率を表す。図－３はΨをパラメータにして（7）式をt_*に対してプロットしたものである。拡散シミュレーションにおいて、無次元拡散時間t_*後に要求される計算精度から許容誤差発生率が決定され、図－３からそのときのΨを求めることができる。Ψ値とＤ値から許容数値拡散係数Ｋが得られるので、図－２上における点（$K\Delta t/\Delta x^2$、$\sigma/\Delta x$）の位置が決定される。その点よりも下位にある移流項の計算スキームは全て要求される計算精度に対して使用できることになる。



図－３　無次元拡散単位時間当たりの数値誤差発生率