

II-141

拡散シミュレーションにおける移流計算スキームの選択方法について

九州大学 学生員○吉村耕市郎 九州大学 正 員 小松 利光

九州大学 正 員 朝位 孝二

1. はじめに 移流拡散方程式の数値計算を行うとき、移流項の取扱いには慎重な配慮が必要である。このため種々の移流項の計算スキームが開発された。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り同一の計算スキームを用いても誤差の現れ方は変化する。そのため水理条件及び計算条件により最適なスキームが存在するものと思われる。本研究では、水理条件、計算条件が計算スキームの精度に及ぼす影響を評価し、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方法の開発を試みたものである。

2. 数値拡散係数について 一次元移流拡散方程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、一般的に次の様な式が得られる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_2(\alpha) \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_3(\alpha) \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} + \dots \quad (1)$$

ここで、 Φ は拡散物質の濃度、 u は x 方向の流速、 D は物理拡散係数である。(1)式右辺第2項以降は時間項と移流項の離散化によって生じた数値拡散項であり、 $k_2(\alpha) \cdot \Delta x^2 / (2! \Delta t)$, $k_3(\alpha) \cdot \Delta x^3 / (3! \Delta t)$, ... は数値拡散係数である。ここで α はクーラン数とよばれ $\alpha = u \cdot \Delta t / \Delta x$ と定義される。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れば、(1)式は(2)式のように表すことができる。

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

K は無限に続く数値拡散項を2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。また、 $\Psi = D / (D + K)$ であり、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現れなくなる。(1)式右辺第2項以降の項を2階の微係数で除することによって次式の様に形式的に2次の項にまとめることができる。

$$K = \left[\frac{1}{2!} k_2(\alpha) + \frac{1}{3!} k_3(\alpha) \Delta x \left(\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \right) / \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + \frac{1}{4!} k_4(\alpha) \Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} \right) / \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + \dots \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (3)$$

(3)式を無次元化すれば

$$\frac{K \Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{2!} k_2(\alpha) + \frac{1}{3!} k_3(\alpha) \left(\frac{\Delta x}{B} \right) \left(\frac{\partial^3 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^3} \right) / \left(\frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) + \frac{1}{4!} k_4(\alpha) \left(\frac{\Delta x}{B} \right)^2 \left(\frac{\partial^4 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^4} \right) / \left(\frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) + \dots \quad (4)$$

ここで、 $\Phi = \Phi_0 \tilde{\Phi}$, $x = B \tilde{x}$, Φ_0 は代表濃度、 $\tilde{\Phi}$ は無次元濃度、 B は代表拡散スケール、 $\tilde{x}$ は無次元長さである。これらの係数は、水理条件、計算条件によってつくられるパラメーター α 及び $\Delta x / B$ に依存しており種々の条件下におけるスキームの精度を検証することができる。しかしながら、(3)式は未知量として無次元濃度微係数の比が残されている。この比はガウス分布のピーク位置における微係数の値で代表させる。無次元拡散係数と α , $\Delta x / B$ の関係を図-1、2に示す。但し、ここでは B はガウス分布の標準偏差で代表させている。

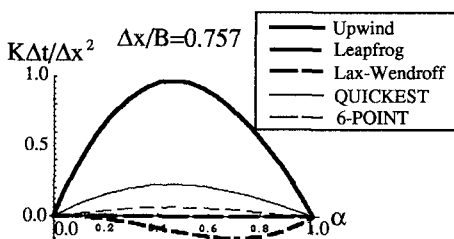


図-1 $K \Delta t / \Delta x^2$ と α の関係 ($\Delta x / B = 0.757$)

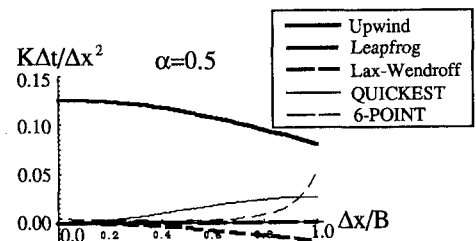


図-2 $K \Delta t / \Delta x^2$ と $\Delta x / B$ の関係 ($\alpha = 0.5$)

3. 相対誤差について (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)式の様になる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = D \Psi^{-1} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad (5)$$

$$\Phi(x,t) = \frac{M}{\sqrt{2\pi(2D\Psi^{-1}t + \sigma^2)}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2(2D\Psi^{-1}t + \sigma^2)}\right\} \quad (6)$$

$\Psi = 1$ のときの理論解のピーク値 Φ と $\Psi = \Psi$ のときの理論解のピーク値 Φ' から次式を得る。

$$\frac{\Phi - \Phi'}{\Phi} = 1 - \sqrt{\frac{(2t_* + 1)\Psi}{2t_* + \Psi}} \quad (7)$$

ここで $t_* \equiv Dt/\sigma^2$ である。(7)式は厳密解と数値解の相対誤差を表している。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。

4. 計算スキームの選択 拡散シミュレーションにおいて要求される真値との相対誤差、水理条件、計算条件から、図-3を用いて Ψ が決定される。 Ψ の定義式から許容数値拡散係数 K が得られるので、図-2上にプロットされる判定規準のための点 ($\Delta x/B$, $K\Delta t/\Delta x^2$) の位置が決定される。

その点より下位にある計算スキームは要求される計算精度を満足している。この手順で計算スキームを選択することが可能であるか調べてみた。初期濃度に標準偏差 200(m)、ピーク値 10のガウス分布を与えて9600(s)間移流拡散させる問題について考える。計算条件として $\alpha=0.5$ となるよう $U=0.5$ (m/s), $\Delta x=10$ 0(m), $\Delta t=100$ (s)を用いた。拡散係数 D は9600(s)後にピーク値10が8になるような値($D=1.1719$)を与えた。このとき t_* の値は0.888となる。許容相対誤差を0.1とすれば図-3において許容相対誤差と t_* の交点Fを通過する Ψ の値は0.73178となる。 Ψ の定義式より K は0.764となる。この値と Δx , Δt , B を用いれば図-2上に点G ($\Delta x/B$, $K\Delta t/\Delta x^2$) がプロットできる。図-4にGの位置を示す。

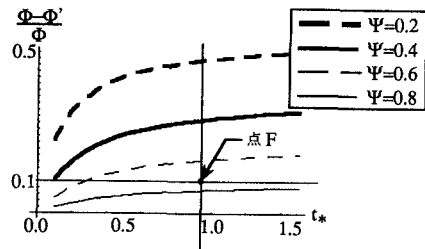


図-3 相対誤差と t_* の関係

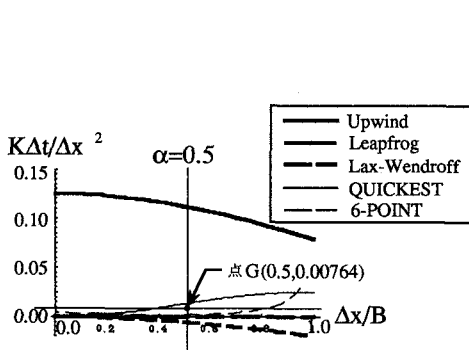


図-4 点Gの位置

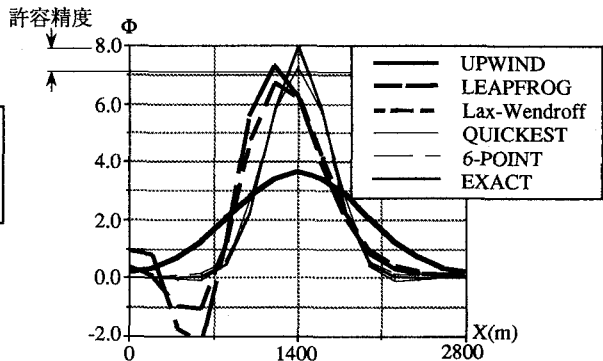


図-5 9600(S)後の濃度分布

図-4から使用できる計算スキームは6-POINT, LEAPFROG, Lax-Wendroffということになるが、図-5において許容精度を満たしているのは6-POINT, LEAPFROG, QUICKESTとなっている。また、LEAPFROGはピーク値を見る限りでは許容精度を満たしているが位相のずれが発生していて本来ピークがくるところでは許容精度を満たしていない。位相誤差についても同様の評価を行わなければならない。また今後、他の条件下での検討も行い、より正確な選択方法を作る必要がある。

5. 参考文献 1) 朝位孝二, 小松利光, 吉村耕市郎, 大串浩一郎: 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, 土木学会第47回年次学術講演会概要集第2部, PP.610~611, 1992