CS－48　移流拡散方程式の簡便かつ高精度な計算スキームの開発

九州大学工学部　正会員　朝位孝二
九州大学工学部　正会員　小松利光
（株）鹿島　　　正会員　塩見尚潔

1. はじめに

移流拡散方程式を数値的に解く場合、移流項の取扱いには慎重な配慮が必要である。一次精度風上差分のような単純なスキームを用いると移流項から生じる誤差のため必要以上に拡散を受けたような解が発生してしまう。このため移流項計算のための高精度計算法がいくつか提案されており、精度の向上が図られてきた。しかしながら、一般的に高精度計算スキームはスキーム中に取り込む格子点の数が多く簡便性に欠ける傾向があり、また拡散に比べて移流が強くなると非物理的な解が生じる場合がある。本研究は空間方向に使用する格子点の数が3点と少数で、なおかつ安定で高精度な新しいスキームの開発を試みたものである。

2. 新スキームの誘導

一次元移流拡散方程式は次式で表される。

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

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）式の移流項の差分形をn stepとn-1 stepで表される風上差分の荷重平均で表すと次式のようになる。

$$\frac{\Phi_i^{n+1}-\Phi_i^n}{\Delta t}+u\left[\theta\frac{\Phi_i^n-\Phi_{i-1}^n}{\Delta x}+(1-\theta)\frac{\Phi_i^{n-1}-\Phi_{i-1}^{n-1}}{\Delta x}\right]=D\frac{\Phi_{i+1}^n-2\Phi_i^n+\Phi_{i-1}^n}{\Delta x^2} \tag{2}$$

uおよびDを定数として（2）式のテイラー級数による誤差解析を行う。その際時間微分および時間と空間のクロス微分を空間微分に置き換える必要がある。（1）式を用い、また四次以上の微分を無視すれば次式を得る。

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2}=u^2\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}-2uD\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \quad (3)、\quad \frac{\partial^3 \Phi}{\partial t^3}=-u^3\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \quad (4)、\quad \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t\partial x}=-u\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}+D\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \quad (5)$$

$$\frac{\partial^3 \Phi}{\partial t^2\partial x}=u^2\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \quad (6)、\quad \frac{\partial^3 \Phi}{\partial t\partial x^2}=-u\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \quad (7)$$

（3）式～（7）式を用いて（2）式の誤差項を三次まで求めれば以下のようになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}+u\frac{\partial \Phi}{\partial x}=D\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}+\left[\alpha-\alpha^2(3-2\theta)\right]\frac{\Delta x^2}{2!\Delta t}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}+\left[6\alpha\beta(2-\theta)-\alpha^3(2-3\theta)+\alpha\left\{3\alpha(1-\theta)-1\right\}\right]\frac{\Delta x^3}{3!\Delta t}\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \tag{8}$$

ここで、$\alpha=\dfrac{u\Delta t}{\Delta x}$：クーラン数、$\beta=\dfrac{D\Delta t}{\Delta x^2}$：拡散数である。

これらの誤差項のうち二次の項は人工拡散係数Kを導入して消去し、三次の項は係数が恒等的に0になるようにθを決めて取り除くことにする。最終的にこのスキームの差分形は以下のように表され、三次精度のスキームとなる。

$$\Phi_i^{n+1}=(\beta+K)\Phi_{i+1}^n+(1-\alpha\theta-2\beta-2K)\Phi_i^n+(\alpha\theta+\beta+K)\Phi_{i-1}^n-\alpha(1-\theta)\Phi_i^{n-1}+\alpha(1-\theta)\Phi_{i-1}^{n-1} \tag{9}$$

ここで、$K=-\frac{1}{2}\left[\alpha-\alpha^2(3-2\theta)\right]$、$\theta=\frac{2\alpha^2-3\alpha+1-12\beta}{3(\alpha^2-\alpha-2\beta)}$

このスキームは$\theta=1$のときLax-Wendroffスキームと、$\theta=1$かつK=０のとき一次精度風上差分と一致する。以後このスキームをHORNET（High Order accuracy scheme by Reducing Numerical Error Term）と呼ぶことにする。

3. モデル計算

HORNETの精度を検討するために二種類のモデル計算を行った。Case-1として、ピーク値10、標準偏差264m、ピーク位置x=1400mのガウス型濃度分布とピーク値6.5、標準偏差264m、ピーク位置x=2400mのガウス型濃度分布の重ね合わせを初期条件として流速0.5m/sで9600sの間下流へ純粋移流させる一次元モデル計算を計算条件Δx=200m、Δt=100sの下で行った。またCase-2としては、x=2200mまでは濃度10を持ちそれ以遠は0である段波型の濃度分布を初期条件としてCase-1と同様の計算条件下でモデル計算を行った。これらの計算結

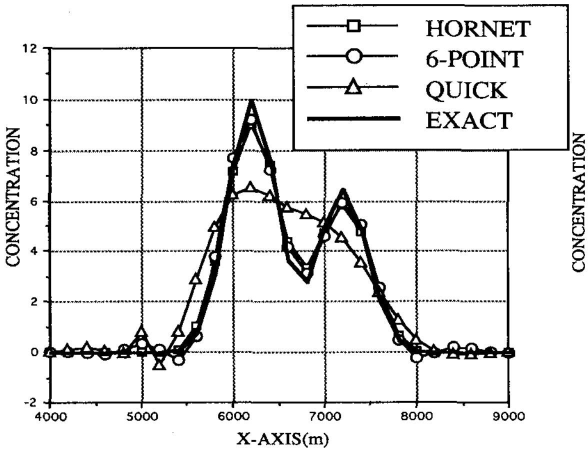

図-1　計算結果（Case-1）

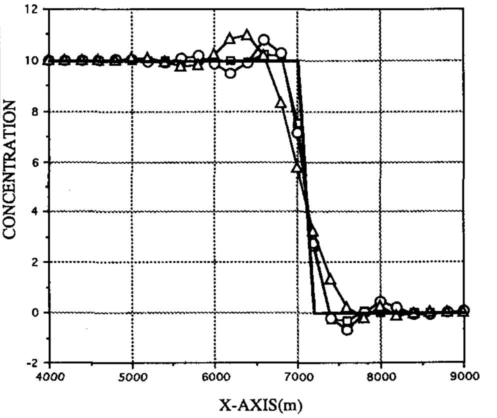

図-2　計算結果（Case-2）

果を図-1、2に示す。また比較のため図中には移流項にQUICKスキーム、時間積分には二次精度Adams-Bashforth法を用いた計算結果および6-POINTスキームによる計算結果も示している。

図-1より、QUICKを用いた計算では初期分布を再現できていないが、HORNETは6-POINTスキームとほぼ同等の計算精度を有することが分かる。また図-2においては、段波の前面近傍ではどのスキームによる計算結果もオーバーシュートやアンダーシュートをおこしていることが示されている。しかしながらHORNETによる計算結果が最も非物理的振動が小さく安定である。このことからHORNETは簡便で比較的安定な計算結果を得ることのできるスキームであるといえる。

4. おわりに

HORNETは流速および拡散係数が一定と仮定して定式化されている。しかしながら流速や拡散係数が時間的あるいは空間的に変化する場合でも、その変化が急激でなければある程度の精度で計算できることが数値実験より確かめられた。今後は多次元問題への拡張を含めて更にスキームの改善を行う予定である。

5. 参考文献

1）風工学のための流れの数値シミュレーション法入門、土木学会、1992
2）小松利光：環境水理学における拡散問題、（第26回）水工学に関する夏期研修会講義集、Aコース、pp.A-3-1～A-3-25、1990