

移流シミュレーションに対する GALモデルの高精度化とその適用性

二瓶泰雄¹・灘岡和夫²

¹正会員 修士(工) 東京工業大学助手 大学院情報理工学研究科情報環境学専攻
(〒152 東京都目黒区大岡山2丁目12-1)

²正会員 工博 東京工業大学教授 大学院情報理工学研究科情報環境学専攻

著者らが最近提案している新たな混相乱流モデル, GAL-LESモデルをさらに発展させるために, GALモデルの移流シミュレーションへの適用性について詳細な検討を行った. その際に, GALモデルの“濃度の再配分操作”の計算精度において重要な格子内の粒子存在確率分布設定法を改良することによりGALモデルを高精度化することを試みた. このモデルの有効性を検討するために, ガウス型と矩形型濃度分布の一次元及び二次元移流問題に関するモデル計算を行い, 従来まで提案されている移流項に関する差分スキームの計算結果との比較を行った. その結果, GALモデルは従来の差分スキームと異なり, クーラン数に依存せずに高精度で安定な移流計算を行うことができることが示された.

Key Words: GAL-LES model, reallocation procedure, convective numerical simulation, numerical stability, numerical diffusion

1. はじめに

著者らは, ここ数年来, 土石流や流砂などの「大規模・高濃度」混相乱流場をも含んだ一般的な混相乱流場に適用し得るような, 高精度で汎用性の高い数値モデルを開発・発展させている. そこでは, 混相乱流のLES化を実現するために, 既存のオイラー型とラグランジュ型モデルのそれぞれの長所を合理的に取り入れた新しい分散相粒子モデル, GALモデル(Grid-Averaged Lagrangian model)を開発し, それに基づく形で混相乱流LESの基本的な枠組み(GAL-LESモデル)を構築している. このGAL-LESモデルは, 固体粒子群沈降問題¹⁾, 固液粒子ブルーム²⁾, ³⁾, 混相乱流変調問題⁴⁾, 水平管高濃度流動層⁵⁾, 一様密度中および連続成層中のBubble Plume⁶⁾, ⁷⁾に適用され, GAL-LESモデルの基本的な妥当性や有効性が確認されている.

新たに提案されているGALモデルは, 灘岡ら¹⁾~³⁾で詳述しているように, 粒子濃度追跡の際に濃度値の各格子への再配分操作を含んだ形で構成されており, 通常の移流拡散方程式に対する数値計算法とは大きく異なっている. したがって, 簡単な移流拡散問題に関する検討を通して, GALモデルの基本的な数値的特性を把握し, そこで抽出した問題点に関して改善することは, 今後, GAL-LESモデルの高精度

化・汎用化を進めていく上で極めて重要となる. その意味での基本的特性の検討は, 一次元拡散問題に関して簡単に行っているが²⁾, 計算精度を支配する重要なポイントとなる移流シミュレーションに関する適用性の検討はこれまでのところ全く行っていない.

そこで本論文では, 移流シミュレーションにおいて生じるGALモデルの問題点を抽出して, それを改善するための手法を新たに提案することを試みる. 具体的には, GALモデルの“濃度の再配分操作”の計算精度において重要となる粒子群内(格子内)の粒子存在確率分布に着目し, それの新たな設定法を提案することを試みる. また, 改善された設定法を取り込んだGALモデルの移流シミュレーションに対する有効性や妥当性を検証するために, 厳密な理論解が得られるガウス型と矩形型濃度分布の一次元および二次元移流問題に関して, GALモデルと, 線形移流方程式の移流項に対して従来より提案されている差分スキーム⁸⁾~¹⁰⁾を適用し, そこで得られる数値解について比較・検討を行うことを試みる.

2. GALモデルの概要

(1) GALモデルの基本的な枠組み

汎用的な混相乱流LESを構築するために提案され

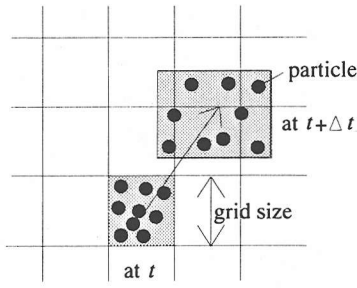


Fig. 1 Treatment of particle movement in the GAL model.

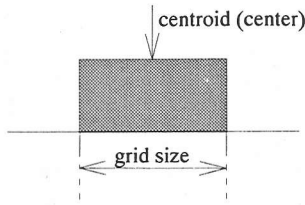


Fig. 2 Probability distribution of a particle position in a grid volume in the previous scheme²⁾.

た分散相粒子モデルであるGALモデルは、超多粒子系の運動を物理特性を踏まえた形で合理的に取り扱い、かつ、LESの枠組みにうまく適合するように定式化されている。この定式化に際しては、ラグランジュ型の運動方程式を基礎式として、格子内に位置する全粒子に対して格子空間平均操作を施して、分散相粒子運動を格子平均成分と分散成分に代表化させている。これにより、GALモデルでは、粒子群の移流拡散を、Fig. 1に模式的に示すように、時刻 t での格子内粒子群について、 Δt 時間後の重心のラグランジュ的な移動と、矩形形状を保ったままの重心回りの分散という形で表現することになる。

具体的な粒子濃度の追跡方法は、1) 格子平均速度を用いて粒子群の重心をラグランジュ的に移動させ、粒子速度分散により粒子群の広がり幅を決定し、2) 粒子濃度などを各格子点に再配分をする、という形で構成されている。なお、粒子運動に関する基礎方程式系に関しては、本論文では用いないので、その詳細については灘岡ら²⁾を参照されたい。

(2) 再配分操作とその問題点について

再配分操作を行う際に用いる式及びその基本的な考え方について以下に述べる。まず、 Δt 時間後の粒子群の重心位置と位置分散の変化量、 $\Delta \bar{x}$ 、 $\overline{\Delta x'^2}$ は平均移流速度 U と拡散係数 ν を用いることにより、

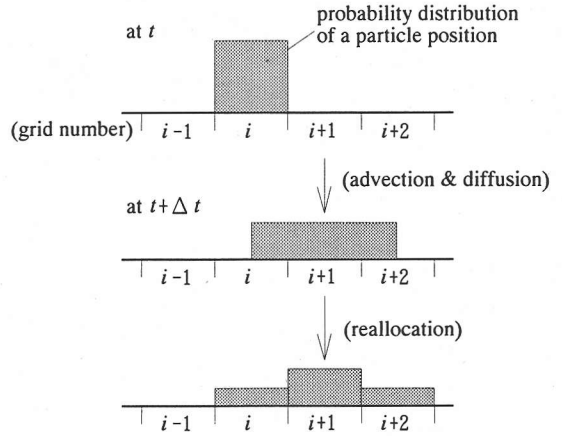


Fig. 3 Schematic illustration of the reallocation procedure based on the uniform probability distribution.

以下のように定式化される²⁾。

$$\Delta \bar{x} = U \Delta t \quad (1)$$

$$\overline{\Delta x'^2} = 2\nu \Delta t \quad (2)$$

また、再配分操作の際に重要となる粒子群内の粒子存在確率分布に関しては、再配分操作の幾何学的な容易性を考慮して、Fig. 2に示すような矩形分布を与えている。このように取り扱うことにより、粒子群の重心位置は、粒子群の存在範囲の中心位置と一致することになる。なお、GALモデルは、基礎式を導く際に格子空間平均操作を施しているが、このことから、再配分操作をする前の粒子群の初期サイズは計算格子間隔と一致しており、粒子群内の粒子存在確率分布は格子内の分布を表すことになる。

具体的な再配分操作をFig. 3に模式的に示す。図中に示されているように、時刻 t において格子 i に位置する粒子群が Δt 時間の間に移流・拡散することにより、粒子群は複数の格子にまたがって存在する形になるが、再配分過程では、粒子の存在確率分布を変形させて、粒子が各格子内で一様に存在するように再配分される。

このルーチンに基づいて粒子濃度分布の時間発展を記述するには、格子 i に位置した粒子群が Δt 時間後に格子 j に存在する確率 $f(i, j)$ を求める必要があり、これにより、再配分操作後の粒子濃度 $C^{n+1}(j)$ は、以下のように定式化される。

$$C^{n+1}(j) = \sum_{i=1}^{imax} C^n(i) f(i, j) \quad (3)$$

ここで、 $imax$ は計算格子数、 n は計算時間ステップ数である。

本論文では、移流シミュレーションに焦点を絞っているため、以下では移流のみを対象として議論を進める。いま、簡単のために、移流速度 U が全空間にわたって一定の場合の一次元移流問題を考えると、この $f(i, j)$ は、クーラン数 $\alpha (= U\Delta t/\Delta x, \Delta x$: 計算格子間隔)が1以下の場合には、以下のような形で与えられる。

$$\begin{aligned} f(i, i) &= 1 - \alpha \\ f(i, i+1) &= \alpha \\ f(i, j) &= 0 \quad (j \neq i, i+1) \end{aligned} \quad (4)$$

また、より一般的な表記として、 $m \leq \alpha \leq m+1$ ($m=0,1,2,\dots$)というクーラン数の場合には、 $f(i, j)$ は以下のようなになる。

$$\begin{aligned} f(i, i+m) &= 1 - \alpha + m \\ f(i, i+m+1) &= \alpha - m \\ f(i, j) &= 0 \quad (j \neq i+m, i+m+1) \end{aligned} \quad (5)$$

当然のことながら、 $m=0$ の場合には、式(5)は式(4)と一致する。この式(5)を式(3)に代入すると、計算時間ステップ数 $n+1$ 、格子 j における粒子濃度 $C^{n+1}(j)$ は、以下のように表される。

$$C^{n+1}(j) = (1 - \alpha + m)C^n(j-m) + (\alpha - m)C^n(j-m-1) \quad (6)$$

そこで、式(6)のように記述されるGALモデルの解の安定性を見るために、この式(6)に対してvon Neumannの安定性解析⁸⁾を行ったところ、以下のような複素増幅率 g が導出された。

$$\begin{aligned} g &= \{(1 - \alpha + m)\cos m\theta + (\alpha - m)\cos(m+1)\theta\} \\ &\quad - I\{(1 - \alpha + m)\sin m\theta + (\alpha - m)\sin(m+1)\theta\} \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、 θ は位相角、 I は虚数単位である。したがって、数値解の増幅率 $|g|$ は、以下のようなになる。

$$|g| = \sqrt{1 + 2(\alpha - m)(1 - \alpha + m)(-1 + \cos\theta)} \leq 1 \quad (8)$$

以上のことから、GALモデルは、このような移流問題に対して、クーラン数に関係なく無条件安定であることがわかる。このような安定性は、再配分操作の中で、粒子群の重心位置をラグランジュ的に追跡していることに起因しているものと考えられ、オイラー・ラグランジュ混合型で記述されているGALモデルの特筆すべき利点と言える。

しかしながら、この式(6)は、 $m=0$ の場合には、一次元の線形移流方程式を一次精度風上差分で離散化した差分式と一致していることがわかる⁸⁾。したがって、GALモデルを移流シミュレーションに適用

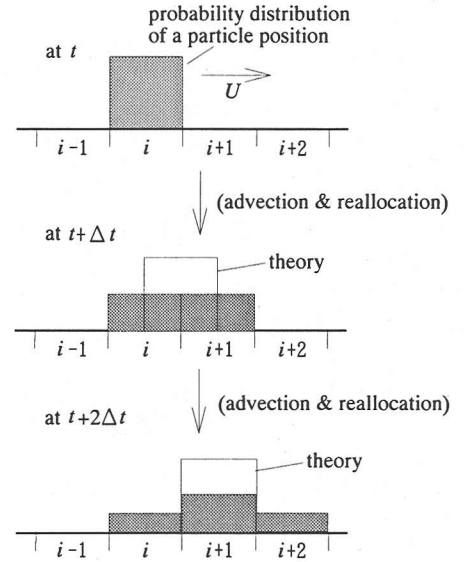


Fig. 4 Illustration of numerical diffusion in an advection process by the GAL model with the uniform distribution.

した場合には、一次精度の風上差分と同程度の数値拡散が生じ、数値解の精度が低下してしまうものと思われる。

以上のように、GALモデルを移流シミュレーションに適用する際には、再配分時に生じる数値拡散を如何に減らすか、ということが重要になるので、その点について以下に検討を行う。

(3) 数値拡散軽減のための新たな改善手法の提案

このようなGALモデルにおいて生じる数値拡散の原因は、格子内の粒子存在確率分布をFig. 2に示されるような空間的に一様な矩形分布として仮定している点にある。このことを模式的に説明するために、移流計算で数値拡散が生じる一例をFig. 4に示す。図中には、3計算時間ステップにわたり一方向に粒子濃度が移流した場合において、再配分操作によって表される粒子濃度分布が理論的に算出される濃度分布とともに模式的に示されている。これを見ても明らかなように、一連の再配分操作を繰り返すと、格子内の粒子存在確率分布を一様分布と仮定したために、本来なら到達していないような位置においても粒子が存在してしまうことになり、結果的に数値拡散が生じることになる。

そこで、このような数値拡散を減少させるために、これまで格子内の中心位置と一致させていた粒子群の重心位置を直接計算して求めて、重心位置を反映させた格子内の粒子存在確率分布を与えることを試

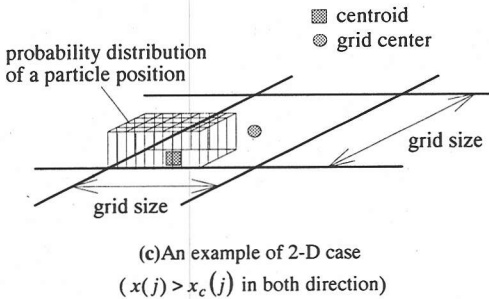
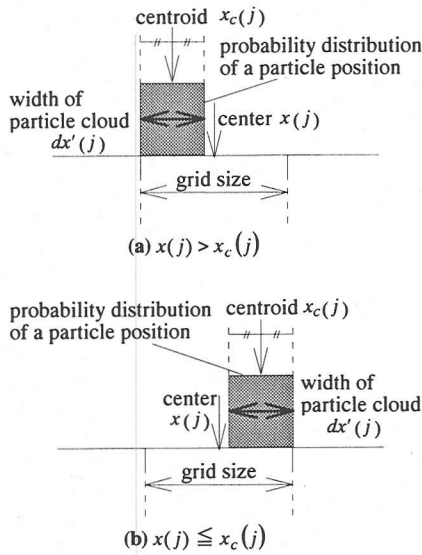


Fig. 5 New assumption of probability distribution of a particle position in a grid volume.

みる。具体的には、Fig. 5に示すように、再配分操作の容易性を考慮して矩形分布形状はそのまま用いるものの、重心位置を考慮して、格子内において非一様な粒子存在確率分布を仮定する。ここでの格子内粒子存在確率分布は、重心位置を考慮した矩形形状となるために、格子 j での重心位置 $x_c(j)$ と格子中心位置 $x(j)$ の相対位置関係により、Fig. 5(a), (b)のように定義されている。また、そこでの粒子群幅 $dx'(j)$ は、以下のように設定されている。

$$\begin{aligned} & \cdot x_c(j) < x(j) \\ & dx'(j) = 2\{x_c(j) - 0.5[x(j) + x(j-1)]\} \quad (9a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \cdot x_c(j) \geq x(j) \\ & dx'(j) = 2\{0.5[x(j+1) + x(j)] - x_c(j)\} \quad (9b) \end{aligned}$$

また、これまで一次元分布についてのみ議論してきたが、二次元の場合についても、Fig. 5(c)にその一例が示されているように、一次元の場合と同様な

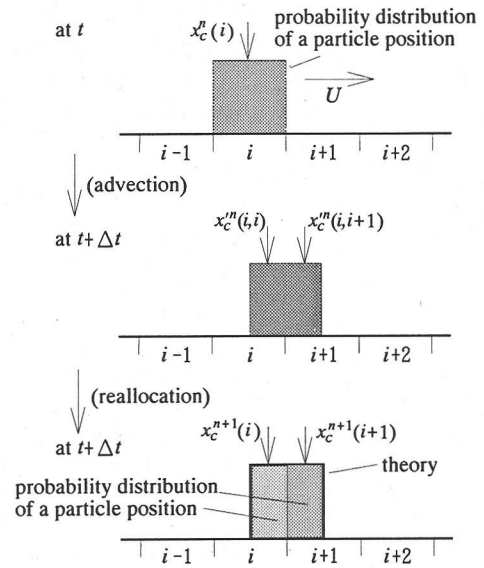


Fig. 6 Improved reallocation procedure for 1-D advection process.

ルールに従って、格子内粒子存在確率分布が設定されている。

このような設定法を用いることにより、Fig. 4に示されたような数値拡散が抑えられる過程を説明するためにFig. 6を示す。これは、Fig. 4における時刻 t から $t+\Delta t$ の間の再配分過程に相当しているものであるが、時刻 $t+\Delta t$ において再配分する際に、Fig. 5に示されているような新しい格子内粒子分布設定法を適用すれば、格子内の粒子存在分布は一様とならずに、重心位置を考慮した非一様矩形分布となる。こうすることにより、格子 $i, i+1$ においては数値拡散が発生せず、数値解が理論解と一致することが分かる。なお、重心位置 $x_c(j)$ に関しては、粒子速度などと同様に以下のように与えられる。

$$x_c^{n+1}(j) = \sum_{i=1}^{i_{\max}} x_c^n(i, j) \frac{C^n(i) f(i, j)}{C^{n+1}(j)} \quad (10)$$

ここで、 $x_c^n(i, j)$ は n ステップのときに格子 i に位置した粒子群が、 $n+1$ ステップのときに格子 j に存在する場合において、その粒子群の格子 j での重心位置を表している (Fig. 6)。なお、ここで提案している格子内粒子分布設定法を適用した場合の安定性に関しては、濃度の再配分操作で用いる式が式(6)と比べて複雑な形になるので、ここではvon Neumann解析を行わずに、後で示すようなモデル計算を通じて検証を行う。

3. 一次元移流問題に関するGALモデルの適用性

以上のような重心位置を考慮した新しい粒子存在確率分布設定法を導入したGALモデルを、一次元移流シミュレーションに適用して、その基本的な有効性を検証する。ここでは、空間的に一樣な移流速度を有し、拡散が無視できるような場合における、粒子濃度分布がガウス型分布と矩形型分布のときの一次元移流問題を計算対象とする。また、従来より提案されている移流項の差分スキームの中でも代表的なものとして、一般的に広く用いられている一次精度風上差分⁸⁾と高精度差分スキームとして提案されている6-point scheme⁹⁾とQUICKEST method¹⁰⁾による数値解も同時に求めて、GALモデルの計算結果と比較・検討している。なお、一次精度の風上差分に関しては、時間の離散化には一次精度のオイラー陽解法を適用し、また、6-point schemeやQUICKEST methodの差分スキームに関しては、それぞれ、Komatsu et al.⁹⁾、Leonard¹⁰⁾と同様に設定している(これらの差分スキームは付録に詳述している)。これらの差分スキーム以外にも、様々な移流項の高精度差分スキームが提案されているが、それらの差分精度や適用性などに関しては、小松ら¹¹⁾や岡永ら¹²⁾の詳細な検討結果を参考にされたい。

(1) ガウス型濃度分布の場合

まず、小松ら¹¹⁾、¹³⁾と同様に、典型的な一次元移流問題としてよく取り上げられるガウス型濃度分布に関する移流シミュレーションを行う。ここでは、濃度ピーク値 C_0 が1.0、ピークの初期位置が0にあるガウス型濃度分布を、一定速度 $U=0.5\text{m/s}$ で移流させる場合を計算対象とする。計算条件としては、格子間隔 $\Delta x=100\text{m}$ 、計算格子数100とし、また、両端の境界条件を開放条件(空間に関する各諸量の1階微分を0とする)として設定している。小松ら¹¹⁾は、クーラン数 α と、格子幅 Δx と濃度分布の代表長さスケール B (ガウス型分布の場合には濃度の半値半幅)の比、 $\Delta x/B$ 、という二つの無次元パラメータが、移流シミュレーションにおいて発生する数値拡散に多大な影響を与えるということを指摘している。したがって、ここでは、計算時間間隔 Δt と濃度半値幅 B を変化させることで、上記の2つのパラメータを変えて計算を行い、幅広い条件下におけるGALモデルの移流計算に関する適用性について検討した。

Fig. 7は、クーラン数を0.5 ($\Delta t=100\text{s}$)と一定と

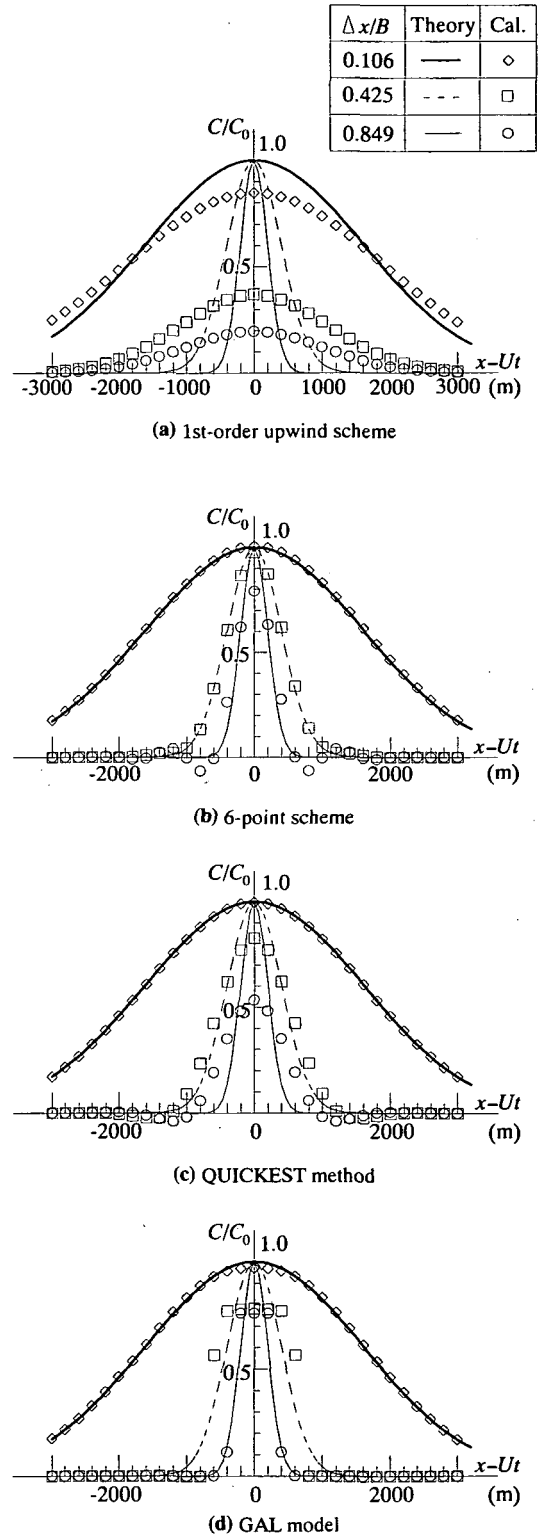


Fig. 7 Computational results for Gaussian distribution (Courant number $\alpha = 0.5$).

し、 $\Delta x/B$ を0.106, 0.425, 0.849の3ケースの場合における100step後の計算結果を示したものである。図中の横軸は、計算初期の濃度ピーク位置からの距離 x から移流に伴う移動距離 Ut (t : 計算時間)を差し引いた移動座標系で、縦軸は濃度 C を計算初期において与えられた濃度最大値 C_0 で無次元化して表示している。まず、一次精度風上差分について見てみると (Fig. 7(a)), すべてのケースに関して、理論解よりもピーク値が小さく、しかも、なだらかな濃度分布になっており、いわゆる数値拡散が生じていることがわかる。また、その数値精度の $\Delta x/B$ に対する依存性に関しては、 $\Delta x/B$ が大きくなるとともに数値解と理論解の差が大きくなっていることがわかる。なお、重心位置を考慮した新しい格子内粒子存在確率分布設定法 (Fig. 5) を用いずに、格子内で一様となるような従来の粒子存在確率分布設定法 (Fig. 2) を用いたGALモデルの計算結果は、一次精度風上差分の結果と一致していることが確認されたが、ここでは、紙面の都合上、省略する。

次に、6-point schemeによる計算結果に着目すると (Fig. 7(b)), $\Delta x/B=0.106, 0.425$ の場合には良好に理論解と一致しているが、 $\Delta x/B=0.849$ の場合には濃度ピーク値が理論解よりもわずかに小さくなるとともに、 $x-Ut=\pm 1000\text{m}$ 近傍において濃度が負になるという数値振動が生じているなど、理論値との違いが見られる。また、Fig. 7(c)に示されているQUICKEST methodによる結果に関しては、 $\Delta x/B=0.106$ のケースではほぼ完全に理論値と一致する結果が得られるものの、 $\Delta x/B$ が大きくなるとともに濃度ピーク値が小さくなるなど、理論値との差が大きくなっていることがわかる。このように $\Delta x/B$ が大きくなるとともに各差分スキームの計算精度が低下するという傾向は、小松ら¹¹⁾の行った結果と定性的に一致している。

また、GALモデルでの計算結果 (Fig. 7(d)) は、 $\Delta x/B=0.106$ の場合には理論解と良好に一致するものの、 $\Delta x/B=0.425, 0.849$ の計算ケースについては、濃度ピーク付近では、平坦な分布形になり、そこでのピーク値も理論値の80%程度になっていることがわかる。このGALモデルの計算結果を他の差分スキームと比較してみると、一次精度風上差分に関しては、すべてのケースについてGALモデルの計算精度が大幅に上回っている。それに対して、6-point schemeに関しては、 $\Delta x/B=0.425$ に関してはGALモデルの精度が若干劣るものの、 $\Delta x/B=0.106, 0.849$ の場合にはほぼ同程度の結果が得られている。また、QUICKEST methodを用いた場合の計算結果に関しては、GALモデルの計算精度は全てのケースに

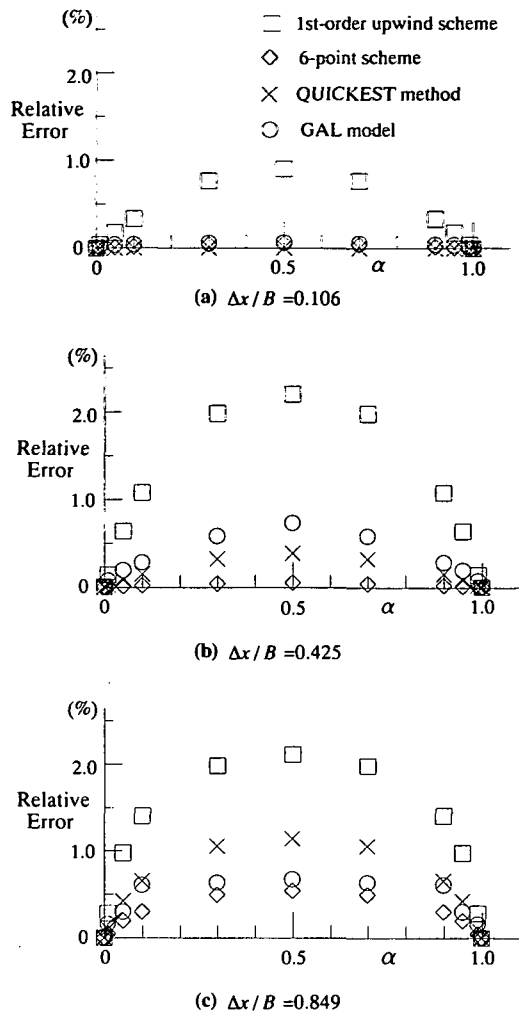
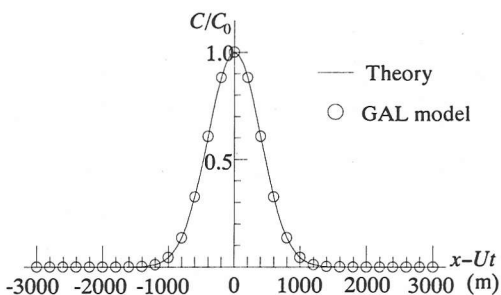


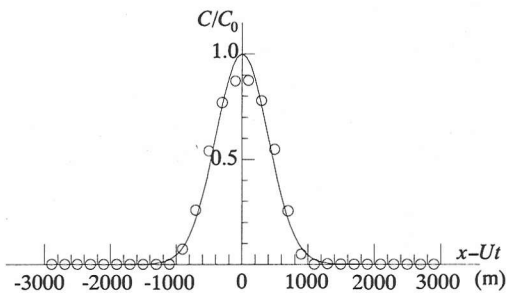
Fig. 8 Effect of Courant number on the computational results for Gaussian distribution.

関して同程度かやや上回る傾向にあることが分かる。これらのことから、本研究で提案している重心位置を考慮した新しい格子内粒子存在確率分布設定法を用いることにより、数値拡散を大幅に減少させることができることから、GALモデルの移流シミュレーションに関する精度が大幅に増加することがわかる。

次に、各スキームのクーラン数 α の依存性に関して検討するために、 $0 \leq \alpha \leq 1$ の範囲における様々なクーラン数の場合の計算結果をまとめたものをFig. 8に示す。ここでは、各差分スキームによる計算値の理論解からのずれを定量的に表記するために、以下に定義されるRelative Errorを用いて図中に示している。



(a) $\alpha = 2.0$



(b) $\alpha = 1.3$

Fig. 9 Computational results of the GAL model for Gaussian distribution when Courant number $\alpha > 1$ ($\Delta x/B = 0.425$).

$$\text{Relative Error} = 100 \times \frac{1}{i_{\max}} \sum_{i=1}^{i_{\max}} \frac{|C_c(i) - C_t(x_i)|}{C_0} \quad (11)$$

ここで、 C_c 、 C_t は、それぞれ、数値計算、理論により求められる濃度、 x_i は格子*i*における位置を表している。なお、計算結果としては、すべて計算開始から25step後の結果が用いられている。これを見ると、すべての $\Delta x/B$ 、差分スキームに関して、クーラン数が0.5付近において数値誤差が最大になるという傾向は、既存の検討結果¹¹⁾と一致している。また、GALモデルと他の差分スキームの計算結果を比較すると、GALモデルの結果は、一次風上差分よりは計算誤差が小さく、6-point schemeについては $\Delta x/B = 0.425$ の場合には計算精度が劣るものの、その他のケースについてはほぼ同程度の精度が得られている。さらに、QUICKEST methodに関しては、 $\Delta x/B$ が大きくなるとともに計算精度の低下が顕著になり、特に $\Delta x/B = 0.849$ の場合にはGALモデルの方が相対誤差が小さくなっており、Fig. 7と同様の結果が得られていることがわかる。

さきの2. (2)で、従来のGALモデルがクーラン数1以上の移流計算に対しても無条件安定であることをvon Neumannの安定性解析によって理論的に示したが、ここでは、新たな粒子存在確率分布設定

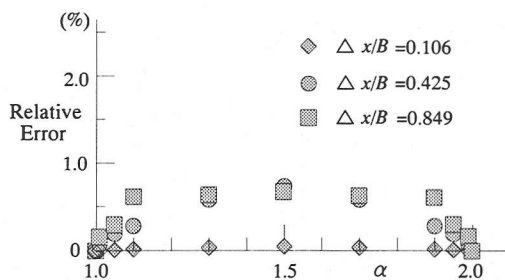


Fig. 10 Relative Error of the GAL model when Courant number $\alpha > 1$.

法によって改良されたGALモデルに対する数値的安定性について検討する。ただし、改良モデルの差分式がやや複雑であるため、von Neumannの安定性解析を適用することが困難であることから、ここでは、クーラン数 α が1以上の場合の計算を実際に行うことにより、その結果から安定性について検討した。そこで得られた計算結果の一例をFig. 9に示す(25step後、 $\Delta x/B = 0.425$)。なお、本研究で比較計算のために使用した差分スキームは、いずれも安定性の問題から大きな数値振動を生じ、非現実的な結果を与えてしまうことが確認されたことから、ここでは、GALモデルのみの結果を示す。まず、クーラン数 α が整数である場合には(Fig. 9(a))、計算結果は理論解と完全に一致している。これは、式(8)に関して、クーラン数 α が整数の場合には増幅率が1になる、というvon Neumannの安定性解析から得られた結果と符号している。また、クーラン数 α が非整数の場合には(Fig. 9(b))、Fig. 7(d)と同様な数値拡散が若干生じているものの、それほど顕著な影響は見られない。

また、クーラン数 α が1から2の範囲におけるGALモデルの計算結果と理論解に対するRelative Error(式(11))をFig. 10に示す。この図を見ると、すべての $\Delta x/B$ に対して、Relative Errorのクーラン数 α に対する依存性は、それぞれのクーラン数の小数点以下の部分の値のクーラン数に対する結果(Fig. 8)と完全に一致していることがわかる。このことは、従来のGALモデルに関して、数値解の増幅率に関する式(8)が、クーラン数の小数点以下の部分 $\alpha - m$ のみによって記述されていることと符合している。以上のことより、新しい格子内粒子存在確率分布設定法を導入したGALモデルは、従来のGALモデルと同様に1以上の大クーラン数においても安定に、しかも、高精度に移流シミュレーションを行えることが検証された。

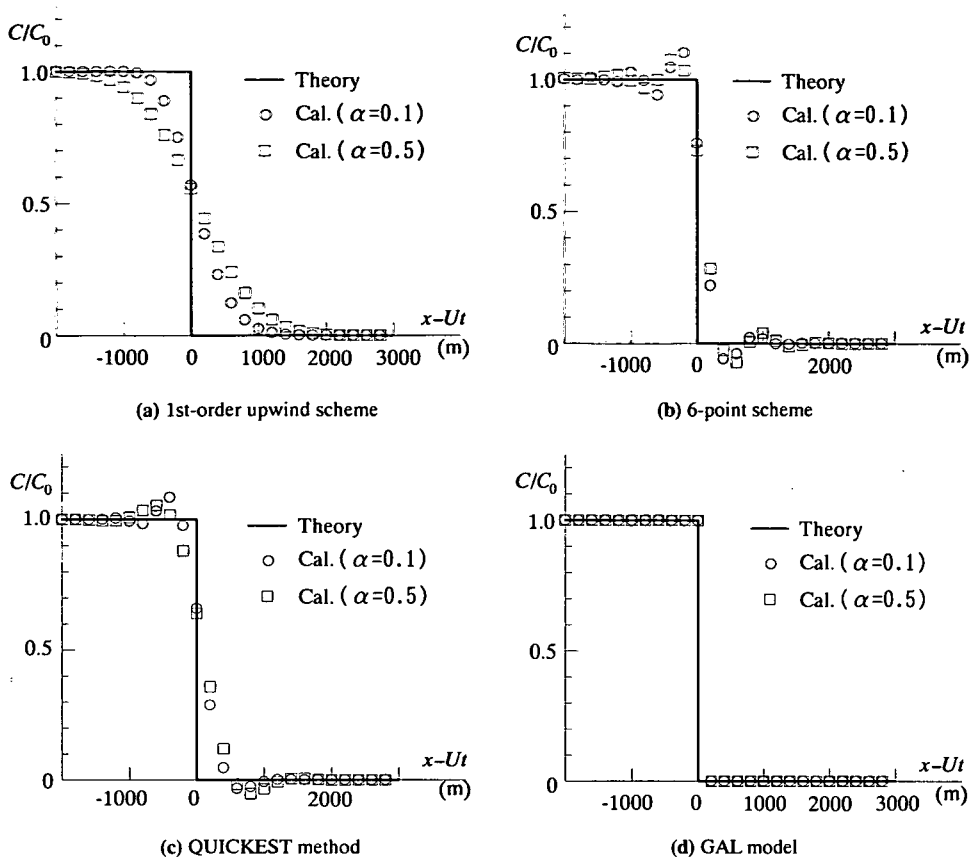


Fig. 11 Computational results for step distribution.

(2) 矩形型濃度分布

次に、ガウス型濃度分布と同様に、移流シミュレーションに対するモデル計算において用いられることの多い矩形型濃度分布¹⁰⁾を対象にして一次元移流計算を行う。この矩形型濃度分布の場合には、初期値は以下のように与えられる。

$$C(0, x) = C_0 \quad (x \leq 0), \quad C(0, x) = 0 \quad (x > 0) \quad (12)$$

ガウス型分布の場合と同じ計算諸条件に基づいて、50ステップ計算した時の計算結果をFig. 11に示す。ここでは、クーラン数 α が0.1と0.5の場合におけるGALモデルと各移流項の差分スキームに関する結果を示している。これらを見ると、6-point schemeやQUICKEST methodについては、 $x-Ut=0$ 近傍において数値振動が発生し、また、一次精度風上差分に関しては、数値拡散が大きいいため、なだらかな分布になっており、理論値とのずれがかなり生じていることがわかる。それに対して、GALモデルでは、すべてのケースに関して理論値と完全に一致しているこ

とがわかる。これは、格子内の粒子存在確率分布を矩形に設定していることと、重心位置を考慮したために矩形型濃度分布の先端部を正確に追跡することが可能になったことによるものと考えられる。また、Fig. 12に示しているような、クーラン数 α が2の場合においても、同様に、GALモデルの計算結果は理論値と良好に一致していることから、GALモデルは濃度分布形に関係なく大クーラン数の移流問題へ適用可能であることが検証された。

以上のことから、本研究で新たに提案された格子内粒子分布設定法に基づくGALモデルでは、濃度値の空間的な急変部の移流挙動はほぼ完璧に追跡できるものの、ガウス型分布のような明瞭なピークを持つ濃度分布形の場合には、そのピーク値がややならされてしまう傾向があることが明らかとなった。このことは、ここで提案している格子内粒子分布設定法が、現実の格子内の濃度分布に対して、どれほどの近似精度を持つかに依存している。すなわち、本研究で提案している矩形型の格子内粒子分布設定法では、濃度値の空間的な急変部の移流挙動に関する

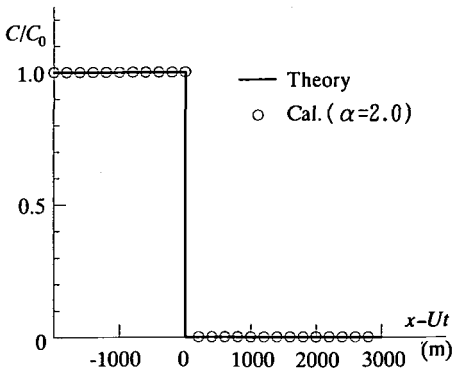


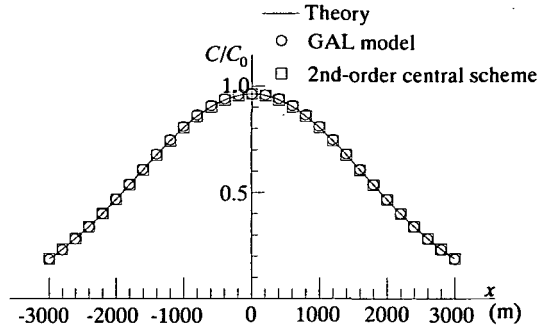
Fig. 12 An example of the GAL model computation for a step distribution of concentration under flow condition of $\alpha > 1$.

高精度計算を可能にするものの、ガウス型分布のような場合には近似精度が低下するため、ピーク値がややならされてしまうことになる。この近似精度を向上させるためには、格子内粒子分布設定法のさらなる改良が必要となるが、これは今後の課題とする。

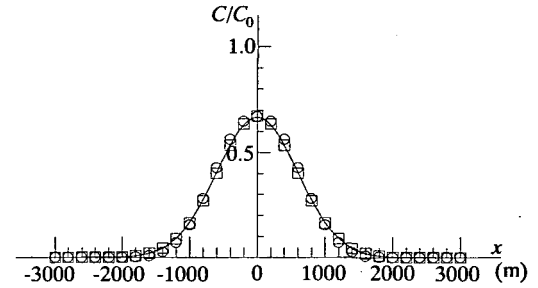
また、ここでは示していないが、濃度値急変部に関する挙動をも正確に記述できる高精度差分スキームとして提案されているCIP (Cubic-Interpolated Propagation) 法¹⁴⁾では、様々な改良によって、1以上の大クーラン数においても安定に計算を行うことが可能となっている¹⁵⁾、¹⁶⁾。しかしながら、大クーラン数の場合には、顕著な数値拡散が生じ、クーラン数が小さい場合と比べて計算誤差が大きくなっており、その点で、クーラン数に依存しないGALモデルの方がかなり有利な方法となっている。

4. 拡散シミュレーションに対する検証

ここまでは、移流シミュレーションを対象とした解析結果のみを示したが、新たな粒子存在確率分布設定法に基づくGALモデルのシンプルな拡散シミュレーションに対する適用性についても検討しておく必要がある。そこで、移流シミュレーションと同様に、初期濃度波形がガウス型の場合における一次元拡散問題に関するシミュレーションを行うことを試みる。計算条件としては、格子間隔 $\Delta x = 100\text{m}$ 、計算格子数 100、計算時間間隔 $\Delta t = 100\text{s}$ 、拡散係数 $\kappa = 5\text{m}^2/\text{s}$ とし、 $\Delta x/B$ を 0.106 と 0.425 の 2 ケース 設定した。また、ここでは、GALモデルの数値解に関する計算精度の検討を行うために、拡散方程式中の拡散項の差分スキームとして代表的な空間二次精度の中央差分を適用した場合の数値解と、さらに、以下に示すような理論解も同時に算出している。



(a) $\Delta x/B = 0.106$



(b) $\Delta x/B = 0.425$

Fig. 13 Computational results for a 1-D diffusion process.

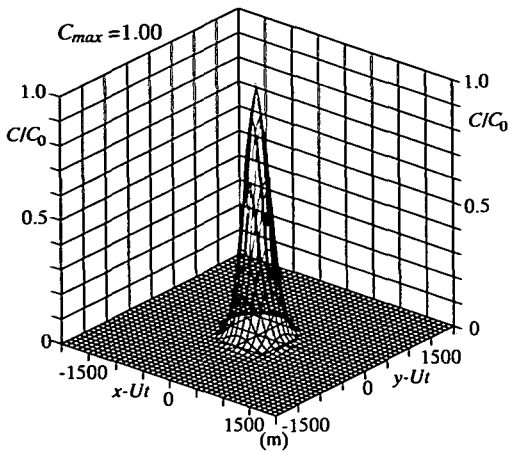
$$\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{1 + 2\kappa t/\sigma^2}} \exp\left[\frac{-x^2}{2(\sigma^2 + 2\kappa t)}\right] \quad (13)$$

ここで、 σ^2 は計算初期の濃度値の分散に相当しており、濃度半値幅 B とは、 $B^2 = 2\sigma^2 \ln 2$ という関係になっている。

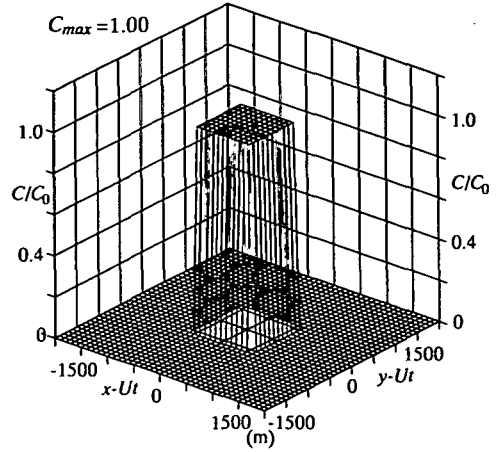
Fig. 13は、計算開始50step後における拡散シミュレーションに関する結果を示している。これらを見ると、 $\Delta x/B = 0.425$ に関しては、濃度値ピーク近傍において、わずかに濃度分布がならされる傾向にあるものの、両ケースに関するGALモデルの計算結果は、概ね、理論解や空間二次精度を用いた数値解と一致している。他の計算条件についても同様な結果が得られていることから、新しい格子内粒子分布設定法に基づくGALモデルは、拡散シミュレーションについても十分な精度で計算を行うことが可能であることが検証された。

5. 多次元移流シミュレーションに対する検証

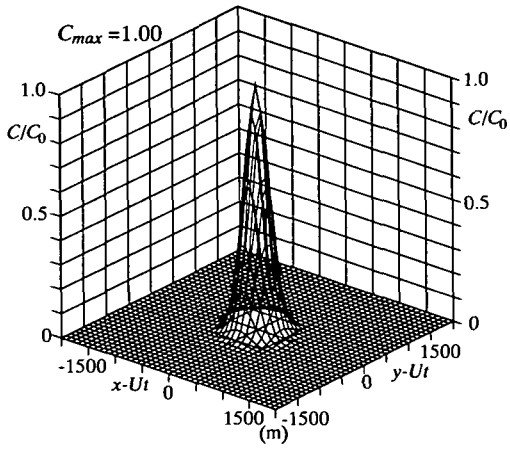
次に、GALモデルの有効性の検証対象を、多次元移流問題へ拡張するために、二次元移流シミュレーションに対して検証することを試みる。ここでの計算条件は、計算メッシュ数 80×80 、計算格子間隔



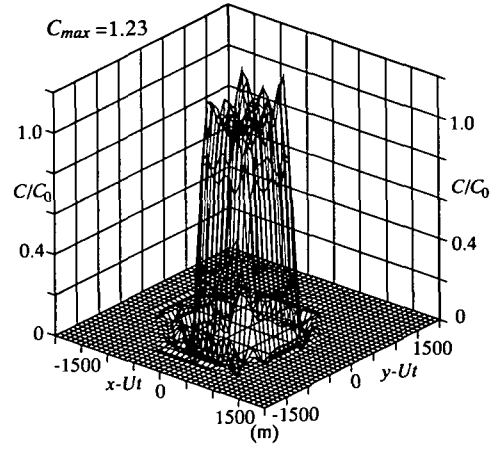
(a) Theory



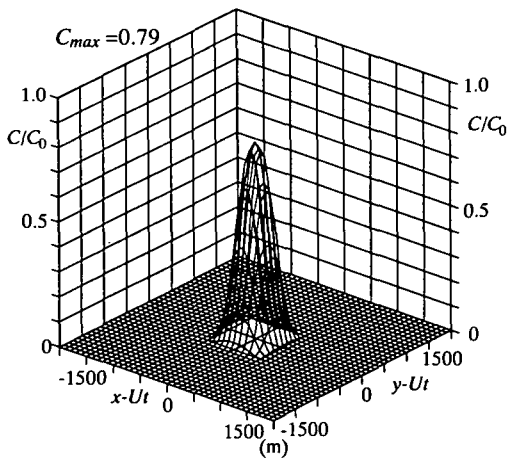
(a) Theory



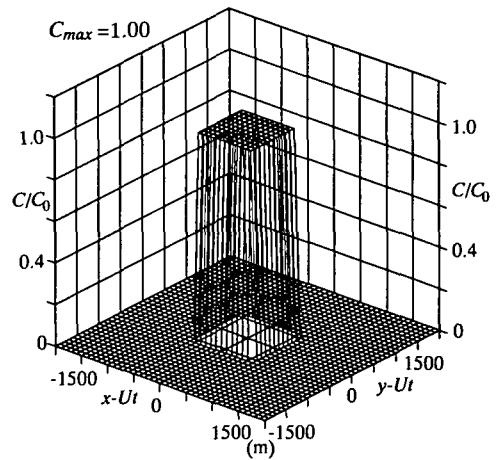
(b) 6-point scheme



(b) 6-point scheme



(c) GAL model



(c) GAL model

Fig. 14 Computational results for Gaussian distribution in a 2-D advection process.

Fig. 15 Computational results for step distribution in a 2-D advection process.

100mとし、二方向に一定速度 $U=0.5\text{m/s}$ で移流し、拡散は無視するものとする。

まず、初期濃度波形をガウス型分布とした場合の二次元移流シミュレーション結果の一例をFig. 14に示す。ここでは、クーラン数 α を0.1 ($\Delta t=20\text{s}$)として、 $\Delta x/B=0.425$ のケースに関して計算を行っている。なお、図中にはGALモデルと6-point schemeを用いた場合の50step後の計算結果を理論解とともに示している。これらを見ると、6-point schemeの場合には、理論解と良好に一致しているのに対して、GALモデルの場合には計算結果のピーク値が理論値の80%程度となっていることがわかる。

次に、同様な計算条件で、計算初期波形を矩形型濃度分布とした場合の計算結果をFig. 15に示す。これから、6-point schemeの場合には数値振動が生じ理論結果との差が生じているのに対して、GALモデルの場合には、完全に理論解と一致していることがわかる。

これらの結果は3. で検討した一次元移流シミュレーションの結果と一致しており、本研究で提案している新たな粒子存在確率分布設定法を取り入れたGALモデルの移流シミュレーションに対する適用性が二次元問題に関しても確認された。

6. 結論

著者らが開発してきた新しい分散相粒子モデルであるGALモデルを移流シミュレーションに対して高精度化し、その適用性に関して詳細な検討を行った。その主要な結果は以下に示すとおりである。

(1) 従来まで大きな数値拡散が生じていたGALモデルを改善するために、これまで一様分布を与えていた格子内の粒子存在確率分布の設定方法を、濃度の重心位置を考慮したものに改良することを試みた。それにより、シンプルな一次元および二次元移流問題に関して数値シミュレーションを行ったところ、移流項に対して提案されている既存の高精度差分スキームによる結果とほぼ同程度の計算精度が得られたことから、新たに提案した格子内粒子分布設定法の有効性が検証された。

(2) 移流シミュレーションにおけるGALモデルの安定性を検討するために、まず従来の格子内粒子存在確率分布設定法に基づく濃度の差分式に対してvon Neumann安定性解析を行ったところ、すべてのクーラン数に対して無条件安定であることが理論的に示された。つぎに、新たな格子内粒子存在確率分布設定法に関して、実際に移流シミュレーションを行うことを通じて安定性を検討したところ、クーラ

ン数1以上でも安定となるという上記の利点が新しい設定法に関しても保持されることが実証された。この点はほとんどの既存の高精度差分スキームの安定性がクーラン数に依存していることと比べて、本モデルの大きな長所となっている。

(3) 矩形型濃度分布に関する移流シミュレーションの結果から、GALモデルは空間的な濃度急変部の移流挙動をほぼ完璧に追跡できることが示された。

GALモデルは、混相乱流の新たなLES計算の枠組みの構築を目指して、そのための合理的な分散相モデルとして考案されたものであるが、本論文からもわかるように、GALモデル自体は、混相流計算に限らず、一般的な移流拡散計算に用いることができる。本文中に詳述したように、このGALモデルでは、ガウス型分布のように明瞭なピークを持つ濃度分布形の場合には、ピーク値がややならされる傾向があるものの（これについては、格子内存在確率分布の設定法を今後さらに検討する必要がある）、濃度値の空間的な急変部の挙動をほぼ完璧に追跡することができる。このことのもつ意義は極めて大きい。というのは、空間的な濃度急変部は、密度成層界面や水の波などで見られ、GALモデルが矩形型分布の移流計算をほぼ完璧に行うことができるということは、これらの境界面挙動を正確に追跡し得る可能性があることを意味しているからである。このことは、GALモデルが、移流拡散シミュレーションモデルとしてのみならず、移動境界追跡シミュレーションモデルとしても有効な手法となり得ることを示唆している。

さらに、本論文のもう一つの大きなポイントは、GALモデルでは、移流シミュレーションに際して、安定性や計算精度がクーラン数に依存しない、ということが理論的・数値的に示されたことである。これは、Fig. 1にも模式的に示されているように、GALモデルでの粒子群（または、移流・拡散される保存物質）の取り扱いが、「粒子群の重心をラグランジュ的に追跡して、濃度値を各格子に再配分する」、というオイラー・ラグランジュ混合型の記述に基づいている、ということに本質的に起因している。これらのことは、粒子群運動の物理的特性を反映し易くすることと計算効率の両面を考慮して考案されたGALモデルの基本的な枠組みが、移流計算の精度向上や安定性の面でも極めて有効であることを示すものである。

謝辞：本研究は文部省科学研究費奨励研究(A)（研究代表者：二瓶泰雄，No.08750623）による成果の

一部であることを付記し、ここに謝意を表す。

付録

本研究で比較のために用いた一次元線形移流方程式に対する移流項の差分スキームは、以下に示すとおりである。

・ First-order upwind scheme

$$C^{n+1}[i] = C^n[i] - \alpha(C^n[i] - C^n[i-1])$$

・ 6-point scheme

$$C^{n+1}[i] = P_1 C^n[i-3] + P_2 C^n[i-2] + P_3 C^n[i-1] \\ + P_4 C^n[i] + P_5 C^n[i+1] + P_6 C^n[i+2]$$

ここで、

$$P_1 = -0.01806\alpha^3 - 0.03828\alpha^2 + 0.05633\alpha$$

$$P_2 = 0.2570\alpha^3 + 0.05276\alpha^2 - 0.3097\alpha$$

$$P_3 = -0.6806\alpha^3 + 0.6480\alpha^2 + 1.033\alpha$$

$$P_4 = 0.6806\alpha^3 - 1.394\alpha^2 - 0.2869\alpha + 1$$

$$P_5 = -0.2570\alpha^3 + 0.8236\alpha^2 - 0.5667\alpha$$

$$P_6 = 0.01806\alpha^3 - 0.09245\alpha^2 + 0.07439\alpha$$

・ QUICKEST method

$$C^{n+1}[i] = C^n[i] \\ - \frac{\alpha}{6}(2C^n[i+1] + 3C^n[i] - 6C^n[i-1] + C^n[i-2]) \\ + \frac{\alpha^2}{2}(C^n[i+1] - 2C^n[i] + C^n[i-1]) \\ - \frac{\alpha^3}{6}(C^n[i+1] - 3C^n[i] + 3C^n[i-1] - C^n[i-2])$$

参考文献

- 1) 瀬岡和夫, 八木宏, 二瓶泰雄: 高濃度固液混相流におけるオイラー・ラグランジュ混合型乱流モデルの開発 - 混相乱流のLESモデル化に向けて -, 乱流シンポジウム, Vol.25, pp.140-143, 1993.
- 2) 瀬岡和夫, 二瓶泰雄, 八木宏: 新しい固相モデルに基づく固体-流体混相乱流LESモデルの開発, 土木学会論文集, No.533/II-34, pp.61-73, 1996.
- 3) Nadaoka, K., Nihei, Y. and Yagi, H.: A new framework for LES modeling of solid-fluid phase turbulent flow - A mixed Euler-Lagrangian approach, *Proc. 2nd Int. Conf.*

Multiphase Flow'95-KYOTO, pp.71-74, 1995.

- 4) 二瓶泰雄, 瀬岡和夫: 粒子混入に伴う乱流変動に関する数値的検討, 混相流シンポジウム, Vol.14, pp.120-123, 1995.
- 5) 二瓶泰雄, 瀬岡和夫, 八木宏: 新しい混相乱流モデルを用いた高濃度流動層に関する数値シミュレーション, 海岸工学論文集, Vol.42, No.1, pp.526-530, 1995.
- 6) 二瓶泰雄, 瀬岡和夫: Bubble Plumeの大規模渦構造に関する数値シミュレーション, 水工学論文集, Vol.40, pp.637-642, 1996.
- 7) 二瓶泰雄, 瀬岡和夫: GAL-LESモデルに基づく連続成層中のBubble Plumeに関する数値解析, 海岸工学論文集, Vol.43, No.2, pp.1136-1140, 1996.
- 8) 藤井孝蔵: 流体力学の数値計算法, 東京大学出版会, 1994.
- 9) Komatsu, T., Holly Jr F. M., Nakashiki, N. and Ohgushi, K.: Numerical calculation of pollutant transport in one and two dimensions, *J. Hydrosci. and Hydraul. Eng., JSCE*, Vol.3, No.2, pp.15-30, 1985.
- 10) Leonard, B. P.: A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, Vol.19, No.1, pp.59-98, 1979.
- 11) 小松利光, 朝位孝二, 大串浩一郎, 吉村耕市郎: 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, No.539/II-35, pp.53-68, 1996.
- 12) 岡永博夫, 山本泰, 棚橋隆彦: 差分法による移流方程式の高精度計算について, 日本機械学会論文集 (B編), Vol.56, No.522, pp.433-440, 1990.
- 13) 小松利光, 大串浩一郎, 朝位孝二: 拡散シミュレーションにおける移流輸送の高精度計算法の開発, 土木学会論文集, No.456/II-21, pp.37-46, 1992.
- 14) Takewaki, H., Nishiguchi, A. and Yabe, T.: Cubic interpolated pseudo-particle method (CIP) for solving hyperbolic-type equations, *J. of Comput. Phys.*, Vol.61, pp.261-268, 1985.
- 15) Ida, M. and Yabe, T.: Implicit CIP (Cubic-Interpolated Propagation) method in one dimension, *Comput. Phys. Commun.*, Vol.92, pp.21-26, 1995.
- 16) 矢部孝: 固体, 液体, 気体の統一解法を目指すCIP法, *ながれ*, Vol.15, No.5, pp.367-375, 1996.

(1996.11.22受付)

IMPROVEMENT OF GAL MODEL FOR CONVECTIVE NUMERICAL SIMULATION

Yasuo NIHEI and Kazuo NADAOKA

The accuracy of GAL model, recently developed by the authors for a new formulation of dispersed-phase motion in a multiphase turbulent flow, is examined for numerical simulation of convective transport. To reduce numerical diffusion inherent in the previous scheme of reallocation procedure of the GAL model, a new reallocation scheme is presented. The performance of the GAL model with the new scheme is confirmed through numerical simulation for simple cases of convective transport and comparison with the computational results obtained by 1st-order upwind scheme, QUICKEST method and 6-point scheme. Among these the GAL model with the improved reallocation procedure is found to have relatively higher accuracy, being comparable to 6-point scheme. More importantly the improved GAL model has high numerical stability even for the flow condition of Courant number greater than one, and can precisely simulate evolution of a distribution with a sharp front.