

# 移流拡散方程式の高精度数値計算手法 に関する研究

朝位孝二<sup>1</sup>・小松利光<sup>2</sup>・大串浩一郎<sup>3</sup>・羽田野袈裟義<sup>4</sup>

<sup>1</sup>正会員 工博 山口大学講師 工学部社会建設工学科 (〒755-8611 宇部市常盤台2557)

<sup>2</sup>フェロー会員 工博 九州大学教授 工学部建設都市工学科 (〒812-8581 福岡市東区箱崎6-10-1)

<sup>3</sup>正会員 工博 佐賀大学助教授 理工学部都市工学科 (〒840-8502 佐賀市本庄町1番地)

<sup>4</sup>正会員 工博 山口大学助教授 工学部社会建設工学科 (〒755-8611 宇部市常盤台2557)

拡散数値シミュレーションを精度よく行うための新しい計算スキームを開発・提案し、Implicit HORNETスキームと名付けた。Implicit HORNETスキームはスプリット・オペレータ・アプローチに基づく解法であり、多次元問題、非線形問題に適用可能である。また、スキームに含まれているパラメータを調節することにより容易にスキームの精度の次数を変えることができる。このことを利用して、Implicit HORNETスキームを局所的に一次精度風上差分にすることで数値振動を抑制することも試みた。

**Key Words** : diffusion simulation, numerical calculation, advection term, Implicit HORNET

## 1. 序論

河川、湖沼、沿岸海域あるいは浸透流などにおける水質汚濁や大気汚染などの環境汚染は我々の生活に直結した問題である。快適で健全な生活を営むためには、汚染が生じ環境が悪化する前に詳細な環境アセスメントや防止策を検討する必要がある。またすでに環境汚染が生じてしまった地域については、早急に有効な改善策を講じることが強く望まれる。

環境汚染の防止策や改善策を検討するには汚濁物質の拡散を正確に予測することがまず必要である。流体中の拡散現象を規定する支配方程式は移流拡散方程式と呼ばれる偏微分方程式である。この方程式は極めて単純な条件の下以外では解析解を得ることは一般的に困難である。したがって、実際にはコンピュータを用いた数値解析が主力となる。特に近年のコンピュータの進歩は目覚ましいものがあり、最近のパーソナル・コンピュータやエンジニアリング・ワークステーションは数世代前の大型計算機に匹敵する大容量・高速演算を実現している。また複数のワークステーションを同時に使用して並列計算を行うことにより、膨大な計算量を高速に実行する手法などが提案されている。このため、複雑で大規模な拡散シミュレーションがかなり低価格で手軽に行

えるようになってきた。また大型計算機の発達も著しく、超並列計算機の登場でGCM (General Circulation Model) を駆使した地球規模での気候の変化の予測も可能となってきた。

また方法論においても大きな発展があり、最近特に注目されているのはTVDスキーム<sup>1)</sup>と呼ばれる衝撃波獲得法である。これは高解像度スキームとも呼ばれ、衝撃波など物理量の不連続面をすどく捉えることができ、航空工学の分野で大いに用いられている。また水工学の分野においても段波や跳水のシミュレーションに利用されている<sup>2)</sup>。しかしながら、後述のようにスカラー量の輸送問題に対してはあまり有効ではない場合がある。したがって拡散シミュレーション、特に移流項の計算に対しては高解像度スキームよりもむしろ高精度スキームが必要と思われる。

高精度スキームとしては従来より様々なスキームが提案されているが、いずれの手法も長所・短所を有しており、決定版といえるものはまだなくこの分野での更なる発展が望まれている<sup>3)</sup>。そこで本論文で新たに高精度スキームを開発・提案するものである。

## 2. Implicit HORNETスキーム

高い計算精度，高い安定性，単調性の保証（数値振動を引き起こさない），簡便性（アルゴリズムの簡単さやプログラミングの容易さ），コンパクト性（スキームに取り込む格子点数が少ないことを意味し，境界近傍での処理が容易となる）等の性質を有する計算スキームを目指して多くの研究者や技術者が努力を重ねている．しかしながら，これらすべての性質を合わせ持つスキームを開発することは容易ではない．なぜなら一つの性質を満足させるためには別の性質が犠牲になることが度々要求されるからである．例えばガウス型濃度分布のピーク値を再現するためにはスキームは高次精度であることが要求されるが，高次精度は一般的に解の単調性を保証せず，新たな極値が発生し数値振動を引き起してしまう．本論文では，陽解法の持つ簡便性を多少犠牲にして，高い計算精度とコンパクト性を重視した陰的なスキームを開発・提案する．

### (1) スキームの誘導

新しく提案するスキームは6-pointスキーム<sup>4)</sup>やSOWMACスキーム<sup>5)</sup>と同様スプリット・オペレータ・アプローチの使用を前提とするので，解くべき基礎式は次式の1次元移流方程式で十分である．

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

ここで， $\Phi$ は拡散物質の濃度， $u$ は $x$ 方向の流速である．簡単のため $u$ は一定値として計算スキームの定式化を行う．

移流項を $n+1$ ステップにおける一次精度風上差分と $n$ ステップにおけるそれとの荷重平均で近似すれば， $u$ が正の場合式(1)は以下のように離散化される．この形は一般化されたCrank-Nicolson法と同じである．

$$\frac{\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n}{\Delta t} + u \left[ \theta \frac{\Phi_i^{n+1} - \Phi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + (1-\theta) \frac{\Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n}{\Delta x} \right] = 0 \quad (2)$$

ここで， $\theta$ は荷重パラメータ， $\Delta x$ は空間座標の計算格子間隔， $\Delta t$ は時間座標の計算格子間隔である．

Taylor級数解析を用いて式(2)の数値拡散項を評価すれば次式の様になる．

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ &= \left[ -\alpha^2 + 2\alpha^2\theta + \alpha \right] \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \end{aligned}$$

$$+ \left[ \alpha^3 - 3\alpha^3\theta - 3\alpha^2\theta - \alpha \right] \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3}$$

$$+ \left[ -\alpha^4 + 4\alpha^4\theta + 6\alpha^3\theta + 4\alpha^2\theta + \alpha \right] \frac{\Delta x^4}{4! \Delta t} \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4}$$

+ H.O.T.

(3)

ここで， $\alpha$ はクーラン数（ $\equiv u \Delta t / \Delta x$ ）である．

式(3)の右辺第1項，第2項，第3項をそれぞれ2次，3次，4次の数値拡散項と呼ぶことにする．なおこの論文では数値拡散係数との区別を明確にするため，乱流拡散や移流分散など物理的機構に基づく拡散を物理拡散と呼ぶことにする．

式(2)を高精度計算スキームとするためには，右辺の数値拡散項を極力小さくする必要がある．ここでは次の要領で2次，3次及び4次の数値拡散項を消去する．2次の数値拡散項と3次の数値拡散項は人工拡散係数を導入して打ち消し，4次の項はその係数が恒等的に0となるよう $\theta$ の値を決定する．

ところで，3階の空間微分を離散量を用いて定式化するためには通常は少なくとも空間軸方向に格子点が4点必要となる．しかしながら，ここではコンパクトなスキームの開発を念頭に置いているため，空間軸方向に使用する格子点の数は多くとも3個としたい．そこで，3次の数値拡散項は次式に示すように時間と空間の交差微分で表すことにする．式(1)に2次と3次の人工数値拡散項を付加すれば次式のようになる．

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = K_2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + K_3 \frac{\partial^3 \Phi}{\partial t \partial x^2} \quad (4)$$

式(4)の左辺は式(2)と同様に，右辺は次のように離散化する．

$$\begin{aligned} & \frac{\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n}{\Delta t} + u \left[ \theta \frac{\Phi_i^{n+1} - \Phi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + (1-\theta) \frac{\Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n}{\Delta x} \right] \\ &= K_2 \frac{\Phi_{i+1}^n - 2\Phi_i^n + \Phi_{i-1}^n}{\Delta x^2} \\ &+ K_3 \frac{\Phi_{i+1}^{n+1} - 2\Phi_i^{n+1} + \Phi_{i-1}^{n+1} - \Phi_{i+1}^n + 2\Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n}{\Delta t \Delta x^2} \end{aligned} \quad (5)$$

改めて式(5)の数値拡散項をTaylor級数解析により評価すれば次式の様になる．

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x}$$

$$\begin{aligned}
&= [-\alpha^2 + 2\alpha^2\theta + \alpha + 2\beta] \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \\
&+ [-\alpha^2 + 3\alpha^2\theta + 3\alpha\theta + 1 + 6\gamma] \frac{\Delta x^2}{3!} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial t \partial x^2} \\
&+ [-\alpha^4 + 4\alpha^4\theta + 6\alpha^3\theta + 4\alpha^2\theta + 12\alpha^2\gamma + \alpha + 2\beta] \\
&\quad \times \frac{\Delta x^4}{4! \Delta t} \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} + H.O.T. \quad (6)
\end{aligned}$$

ここで,

$$\beta = \frac{K_2 \Delta t}{\Delta x^2}, \quad \gamma = \frac{K_3 \Delta t}{\Delta t \Delta x^2}$$

式 (6) の右辺の第1項および第2項の係数を恒等的に0とするように  $\beta$ ,  $\gamma$  を決定すれば以下のようになる。

$$\beta = \frac{-\alpha + \alpha^2 - 2\alpha^2\theta}{2} \quad (7)$$

$$\gamma = \frac{(1 + \alpha)(-1 + \alpha - 3\alpha\theta)}{6} \quad (8)$$

式 (6) の右辺第3項の係数を0とおいた式に式 (7), 式 (8) を代入し整理すれば次式を得る。

$$\alpha^2(\alpha^2 - 1)(2\theta - 1) = 0 \quad (9)$$

式 (9) を恒等的に0にするという条件より  $\theta = 1/2$  が決定され, 最終的に次式が得られる。

$$\begin{aligned}
&p_1 \Phi_{i-1}^{n+1} + p_2 \Phi_i^{n+1} + p_3 \Phi_{i+1}^{n+1} \\
&= p_4 \Phi_{i-1}^n + p_5 \Phi_i^n + p_6 \Phi_{i+1}^n \quad (10)
\end{aligned}$$

(Implicit HORNETスキーム)

ここで,

$$\begin{aligned}
p_1 &= -\alpha\theta - \gamma, \quad p_2 = 1 + \alpha\theta + 2\gamma, \quad p_3 = -\gamma, \\
p_4 &= \alpha(1-\theta) + \beta - \gamma, \quad p_5 = 1 - \alpha(1-\theta) - 2\beta + 2\gamma,
\end{aligned}$$

$$p_6 = \beta - \gamma, \quad \theta = \frac{1}{2}$$

流速  $u$  が負の場合はスキームの対称性から係数は以下のようになる。

$$\begin{aligned}
p_1 &= -\gamma, \quad p_2 = 1 + |\alpha|\theta + 2\gamma, \quad p_3 = -|\alpha|\theta - \gamma, \\
p_4 &= \beta - \gamma, \quad p_5 = 1 - |\alpha|(1-\theta) - 2\beta + 2\gamma, \\
p_6 &= |\alpha|(1-\theta) + \beta - \gamma, \quad \theta = \frac{1}{2},
\end{aligned}$$

$$\beta = \frac{-|\alpha| + \alpha^2 - 2\alpha^2\theta}{2}, \quad \gamma = \frac{(1 + |\alpha|)(-1 + |\alpha| - 3|\alpha|\theta)}{6}$$

式 (10) が本論文で提案する式 (1) を計算するためのスキームで, Implicit HORNETスキーム (Implicit

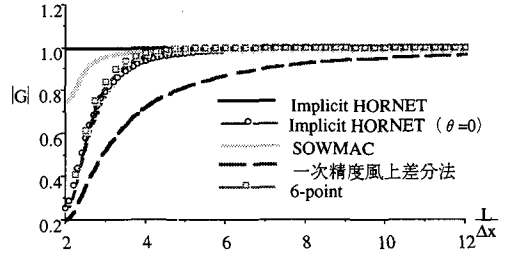


図-1 スキームの増幅係数と波長の関係 ( $\alpha = 0.6$ )

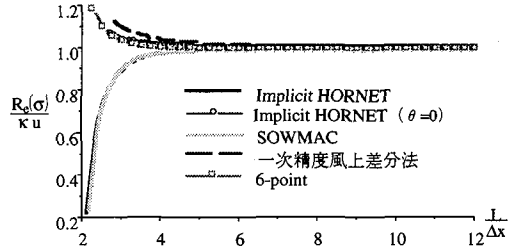


図-2 スキームの相対位相速度と波長の関係 ( $\alpha = 0.6$ )

High Order accuracy scheme by Reducing Numerical Error Termsと呼ぶことにする。精度は時間, 空間ともに4次精度である。なお, このスキームは  $\theta = 0$ ,  $\gamma = 0$  とすれば二次精度Lax-Wendroffスキームに,  $\theta = 0$ ,  $\beta = 0$ ,  $\gamma = 0$  とすれば一次精度風上差分に帰着する。

## (2) 安定解析

本節では, 前節で提案したImplicit HORNETスキームの特性をvon Neumannの安定解析を用いて調べる<sup>6)</sup>。フーリエ成分を式 (10) に代入して整理すれば式 (11) が得られる。

$$|G| = |e^{-j\sigma\Delta t}| = \sqrt{\left(\frac{B_1 B_3 + B_2 B_4}{B_1^2 + B_2^2}\right)^2 + \left(\frac{B_1 B_4 - B_2 B_3}{B_1^2 + B_2^2}\right)^2} \quad (11)$$

ここで,

$$\begin{aligned}
B_1 &= p_1 \cos \kappa \Delta x + p_2 + p_3 \cos \kappa \Delta x \\
B_2 &= -p_1 \sin \kappa \Delta x + p_3 \sin \kappa \Delta x \\
B_3 &= p_4 \cos \kappa \Delta x + p_5 + p_6 \cos \kappa \Delta x \\
B_4 &= -p_4 \sin \kappa \Delta x + p_6 \sin \kappa \Delta x
\end{aligned}$$

$\sigma$  は角速度,  $\kappa$  ( $\equiv 2\pi/L$ ) は波数,  $L$  は波長である。

式 (11) は恒等的に1になることが分かった。これはLeap-Frogスキームと同様偶数次の数値拡散項がす

べて0となっているためと思われる。図-1はクーラン数0.6の場合の増幅係数と $L/\Delta x$ の関係を示したものである。比較のためSOWMACスキーム、6-pointスキーム、風上差分および $\theta=0$ の場合のImplicit HORNETスキーム（時間・空間とも3次精度）の結果も併せて示している。 $\theta=0$ の場合のImplicit HORNETスキームと高精度と言われる6-pointスキームはほぼ同様の特性を持つことが分かる。

次に相対位相速度について検討を行う。Implicit HORNETスキームの相対位相速度は次式で表される。

$$\frac{Re(\sigma)}{k u} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\alpha} \frac{L}{\Delta x} \tan^{-1} \left( \frac{B_2 B_3 - B_1 B_4}{B_1 B_3 + B_2 B_4} \right) \quad (12)$$

クーラン数0.6の場合の相対位相速度と $L/\Delta x$ の関係を図-2に示す。Implicit HORNETスキームとSOWMACスキームは同じ特性を示している。また $\theta=0$ の場合のImplicit HORNETスキームは6-pointスキームと同様の結果を示している。

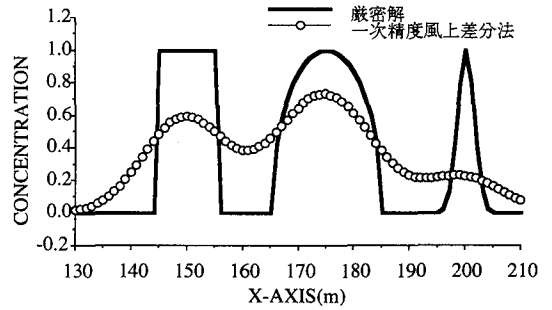
ところでImplicit HORNETスキームは原理的には振幅誤差は生じないスキームである。しかしながら、 $L/\Delta x$ が小さい領域（ $\Delta x$ が一定の場合は濃度変動の高波数領域に相当する）で相対位相速度が1ではないため、勾配の急な濃度分布の近傍で高波数の数値振動が生じる可能性がある。物理拡散が弱い場合には発生した数値振動を抑制する働きも弱いため、解の挙動に注意が必要である。

### 3. Implicit HORNETスキームを用いたモデル計算

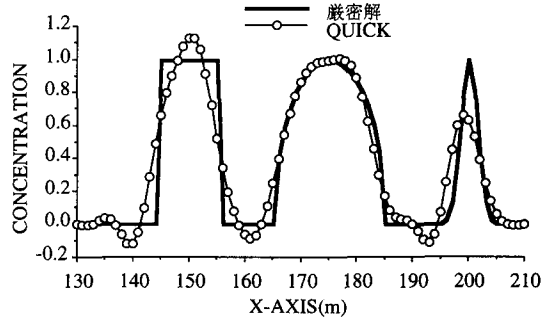
#### (1) HORNETスキームと他のスキームの比較

移流モデル計算によって他の計算スキームと精度の比較を行った。初期条件として用いた濃度分布はガウス分布、半楕円分布、矩形分布の3種類が連続したものである。これらの分布は計算スキームを検証する上でそれぞれ重要な特徴を持っている。ガウス分布は極値（最大値）の再現性の検討に最適である。半楕円分布は勾配の急な変化と緩やかな変化の組み合わせから成り立っており、様々な勾配に対する検討を行うことができる。矩形分布は不連続面近傍の数値振動の検討を行うのに適している。

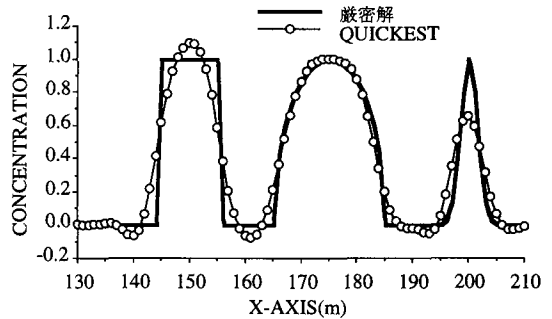
ピーク値1、標準偏差1.5m、中心位置 $x=150$ mのガウス分布、中心位置 $x=125$ m、流れ方向の半径10m、ピーク値1の半楕円分布及び中心位置 $x=100$ m、上辺の長さ10m、高さ（濃度）1の矩形分布の重ね合わせを一定流速0.5m/secで100sec間移流させる。計算格子間隔は $\Delta x=1.0$ m、 $\Delta t=0.2$ secである。この時クーラ



(a) 一次精度風上差分法による計算結果



(b) QUICKスキームによる計算結果

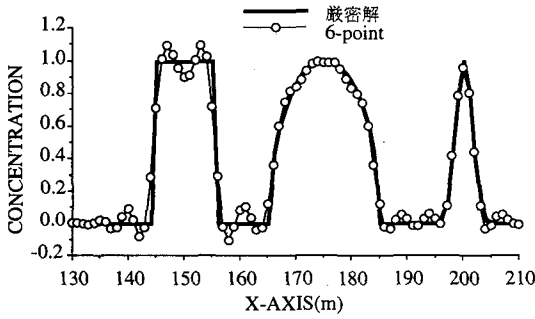


(c) QUICKESTスキームによる計算結果

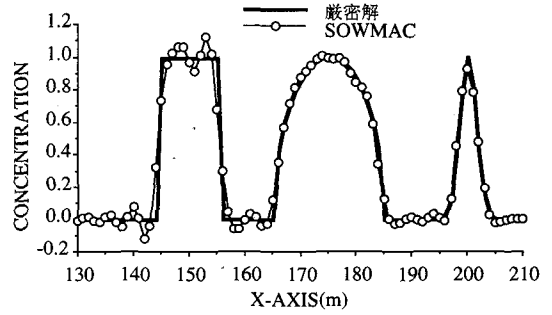
数は0.1である。計算結果を図-3に示す。比較のために用いたスキームは、1次精度風上差分法（時間積分には1次精度オイラー法）、QUICKスキーム（時間積分には2次精度Adams-Bashforth法）<sup>7)</sup>、QUICKESTスキーム<sup>7)</sup>、6-pointスキーム、SOWMACスキーム、TVD Lax-Wendroffスキーム（流束制限関数にはRoeのsuperbee）<sup>8)</sup>、SMARTアルゴリズム<sup>9)</sup>である。また、参考のため $\theta=0$ の場合のImplicit HORNETスキームによる結果も示す。

1次精度風上差分はTVDスキームであるため数値振動は生じていない。しかしながら、大きな数値拡散を受け初期分布を再現できていない。

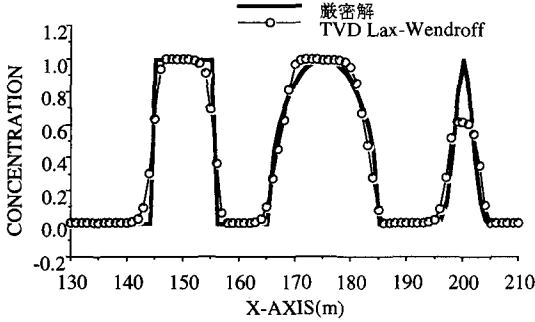
QUICKスキームは顕著な数値振動は引き起こして



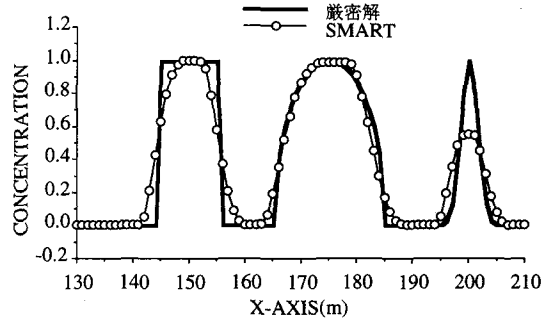
(d) 6-pointスキームによる計算結果



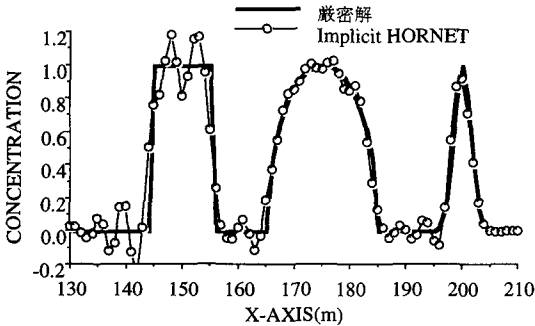
(e) SOWMACスキームによる計算結果



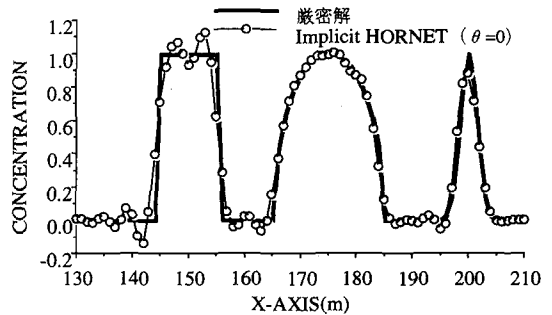
(f) TVD Lax-Wendroffスキームによる計算結果



(g) SMARTアルゴリズムによる計算結果



(h) Implicit HORNET ( $\theta = 1/2$ )



(i) Implicit HORNET ( $\theta = 0$ )

図-3 HORNETスキームと他のスキームの比較

いないが、オーバーシュートやアンダーシュートが見られる。また半楕円分布の頂点近傍で左右の対称性が崩れており位相誤差も見られる。

QUICKESTスキームはQUICKスキームと同様の結果を示しているが、位相誤差はかなり改善されている様である。

6-pointスキームとSOWMACはガウス分布の極値の再現性は極めて良好であるが、矩形分布の不連続点の前後では非物理的振動が比較的大きい。また半楕円分布の頂点近傍で解が少し乱れている。

上述の風上差分が1次精度のTVDスキームであるのに対しTVD Lax-Wendroffスキームは2次精度のTVDスキームである。数値振動は生じておらず分布

形状もガウス分布のピーク値を除けばある程度再現できている。

SMARTアルゴリズムはHigher-order Bounded Discretization Schemeと呼ばれる手法<sup>10)</sup>に属する解法で、解の単調性を維持するアルゴリズムでありTVDスキームの一種と見なすことができるが、TVD理論とは独立に開発された手法である。元々楕円型偏微分方程式を対象として開発されているが、ここでは双曲型偏微分方程式を解くため時間積分には2次精度Adams-Bashforth法を用いた。計算結果は概ねTVD Lax-Wendroffスキームと同様であるが、解像能力(不連続面の再現能力)はTVD Lax-Wendroffスキームの方が若干優れている。両者とも半楕円分布とガウス

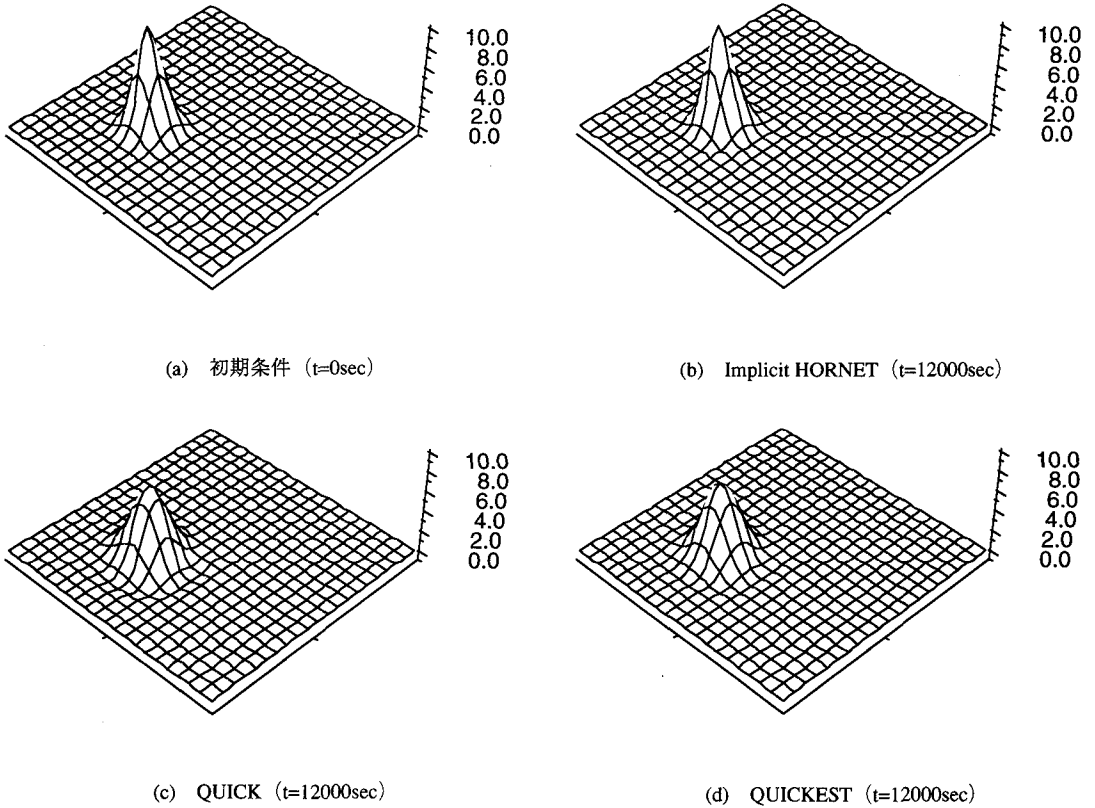


図-4 2次元移流計算結果

分布の頂点近傍で解は平らになっており、特にガウス分布のピーク値の再現性は良くない。このことは、高解像度スキームは瞬間投入の拡散物質の非定常計算などにおいて濃度分布の最大値を必要以上に低下させる可能性があることを示しており、その適用には十分な注意が必要であると思われる。

今回提案のImplicit HORNETスキームはガウス分布のピーク値の再現性は良いが矩形分布において数値振動が強く現れている。一方 $\theta=0$ の場合のImplicit HORNETスキームは6-pointスキームやSOWMACスキームと同様の良好な結果を得ている。このことから、移流だけの場合や物理拡散が弱い場合にはImplicit HORNETスキームのパラメータを調整すればよいことが示唆される。パラメータの調整法については4章で述べる。

## (2) 2次元移流モデル計算

次に多次元問題への適用を検討する。多次元問題への拡張はSOWMACスキームの場合と同様、基礎式

を各方向に分割して1次元の式の組み合わせに帰着させ、それぞれにImplicit HORNETスキームを適用すればよい<sup>5)</sup>。

この節では2次元のモデル計算の例を示す。2次元平面で角速度 $\omega=2\pi/12000$  ( $\text{sec}^{-1}$ )で剛体回転する流れ場を考える。初期条件は図-4 (a)に示すガウス分布でピーク値10、ピーク位置(1400m, 1400m)、標準偏差200mである。 $\Delta x=\Delta y=100\text{m}$ ,  $\Delta t=50\text{sec}$ の計算条件で12000sec間(1回転)計算を行った。その結果を図-4 (b)に示す。比較のため2次元QUICKスキーム<sup>11)</sup>とQUICKESTスキームによる結果も示している。なおQUICKESTスキームの直接の多次元問題への適用は計算結果が不安定となるため<sup>12)</sup>, Implicit HORNETスキームと同様分割法を用いて計算を行った。図-4よりImplicit HORNETスキームはほぼ初期条件を再現できているが、2次元QUICKスキームおよびQUICKESTスキームによる解は大きな数値拡散を受けていることが分かる。Implicit HORNETスキームは

表-1 各スキームによる計算結果の比較

SCHEME	最大値	最小値	誤差のR.M.S
厳密解	10.0	0.0	0.0
Implicit HORNET	9.768	-0.035	0.042
QUICK	6.614	-0.408	0.274
QUICKEST	6.767	-0.169	0.221

多次元問題にも高精度で適用可能であることが分かった。表-1は各スキームによる計算結果の最大値と最小値および厳密解と計算解の誤差の根二乗平均(R.M.S)を示している。なお、3次元問題でも同様の結果が得られている。

### (3) 段波の計算

この節では、線形移流問題においては精度良く計算を行うことのできるImplicit HORNETスキームの非線形移流問題への適用の可能性を検討する。非線形移流問題の一例として段波の計算を取り上げる。

段波の支配方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (13)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{2Q}{A} \frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{Q^2}{A^2} \frac{\partial A}{\partial x} + gA \left( \frac{\partial h}{\partial x} - S_0 + S_f \right) = 0 \quad (14)$$

または、

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial (uQ)}{\partial x} + gA \left( \frac{\partial h}{\partial x} - S_0 + S_f \right) = 0 \quad (15)$$

ここで、 $A$ は断面積、 $Q$ は流量、 $u$ は流速 ( $u=Q/A$ )、 $g$ は重力加速度、 $h$ は水深、 $S_0$ は河床勾配、 $S_f$ は摩擦勾配である。式(15)は式(14)を保存形式で書き換えたものである。

Implicit HORNETスキームの式(13)、式(14)への適用は次のように行った。

第1段階として式(14)の左辺第3項、4項を除いた式に対して以下の様にImplicit HORNETスキームを適用する。

$$\begin{aligned} & \frac{Q_i^* - Q_i^n}{\Delta t} + \frac{2Q_i^n}{A_i^n} \left[ \theta \frac{Q_i^* - Q_{i-1}^*}{\Delta x} + (1-\theta) \frac{Q_i^n - Q_{i-1}^n}{\Delta x} \right] \\ & = K_2 \frac{Q_{i+1}^n - 2Q_{i-1}^n + Q_{i-1}^n}{\Delta x^2} \\ & + K_3 \frac{(Q_{i+1}^* - 2Q_i^* + Q_{i-1}^*) - (Q_{i+1}^n - 2Q_i^n + Q_{i-1}^n)}{\Delta t \Delta x^2} \end{aligned} \quad (16)$$

ここで、

$$K_2 = \frac{-\alpha + \alpha^2 - 2\alpha^2\theta}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t},$$

$$K_3 = \frac{(\alpha+1)(\alpha-1-3\alpha\theta)}{6} \frac{\Delta t \Delta x^2}{\Delta t},$$

$$\alpha = 2 \frac{Q_i^n}{A_i^n} \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad \theta = \frac{1}{2}$$

第2段階として上式で求めた $Q^*$ を用いて、式(14)の左辺第2項を除いた式から $n+1$ ステップの流量 $Q$ を以下の様にして求める。

$$\frac{Q_i^{n+1} - Q_i^*}{\Delta t}$$

$$= \left( \frac{Q_i^n}{A_i^n} \right)^2 \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2\Delta x} - g A_i^n \left( \frac{h_{i+1}^n - h_{i-1}^n}{2\Delta x} - S_0 + S_f \right) \quad (17)$$

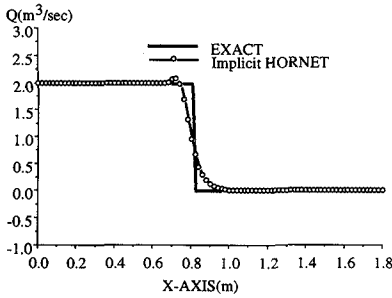
第3段階として以下に示す離散化された連続の式から $n+1$ ステップの断面積 $A$ を求める。

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\Delta t} + \frac{Q_{i+1}^{n+1} - Q_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0 \quad (18)$$

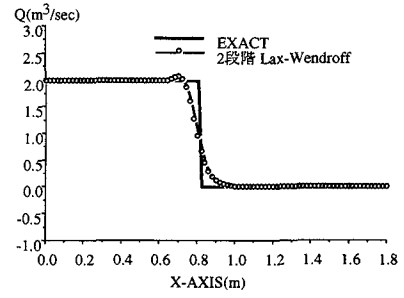
モデル計算の条件は次の通りである。摩擦のない水平な一定幅(幅1m)の開水路に水深1mで水が貯まっている所へ、上流端より流量 $2\text{m}^3/\text{sec}$ の水が突然解放されて供給され続ける場合を考える。計算条件は $\Delta x=0.02\text{m}$ 、 $\Delta t=0.0005\text{sec}$ である。水が解放された瞬間を $t=0\text{sec}$ とし $0.2\text{sec}$ まで計算を行った。比較のため2段階Lax-Wendroffスキームによる計算も行った。この場合は支配方程式として式(15)を用いている。ところで、Implicit HORNETスキーム、2段階Lax-Wendroffスキームは共にTVDスキームではないため不連続面近傍で数値振動が生じる。従来より数値振動の発生を抑制するため種々の人工粘性項の導入が提案されているが、ここでは各スキームとも各タイムステップ毎に連続の式から求めた断面積 $A$ だけにスムージングを施すことにする。その理由はここではImplicit HORNETスキームの非線形問題への適用の可否を確認するのが目的であるため、直接 $Q$ にスムージングを掛けてしまうとImplicit HORNETスキームの妥当性が直接検討できなくなると判断したためである。スムージングは次式で行った。

$$A_i^{n+1} = A_i^* + \omega (A_{i+1}^* - 2A_i^* + A_{i-1}^*) \quad (19)$$

ここで $A^*$ は連続の式を解くことで得られるスムージングを掛ける前の断面積 $A$ である。 $\omega$ はスムージングファクターである。



(a) Implicit HORNET ( $\omega=0.1$ )



(b) 2step Lax-Wendroff ( $\omega=0.1$ )

図-5 段波の計算結果

図-5に $\omega=0.1$ の場合の計算結果を示す。Implicit HORNETスキームと2段階Lax-Wendroffスキームはほぼ同じ結果を示しており、数値振動も小さく安定な解が得られている。

以上の結果からImplicit HORNETスキームは非線形問題にも適用可能であることが分かったが、段波の様に不連続面を持つ流れ場の計算では適切な人工粘性項の導入が必要である。

#### 4. 数値振動の抑制

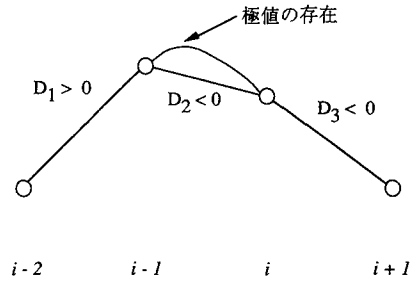
3章1節のモデル計算例で示されているように、Implicit HORNETスキームはTVDスキームではないので勾配の急な分布の手前で数値振動を引き起してしまう。一方、TVDスキームは新たな極値は発生せず数値振動は起こらないものの、ガウス分布のピーク値の様に物理的に意味を持つ極値も減衰 (clipping error と呼ぶ) させている。したがって、数値振動の様な物理的意味を持たない極値は抑制するが、物理的意味を持つ極値は減衰させないようにすることが必要である。

この章では、Implicit HORNETスキームに含まれるパラメータ $\theta$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ の値を0にすることで、容易に本スキームが一次精度風上差分に帰着することを利用して、数値振動の抑制を試みる。

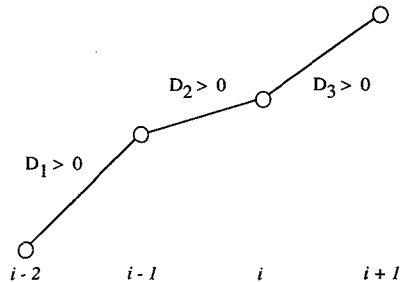
##### (1) Discriminatorのアルゴリズム

まず始めに、物理的意味を持つ極値とそうではない極値を区別するアルゴリズムが必要である。

Leonard and Niknafs<sup>13)</sup>はこの種のアルゴリズムを開発しdiscriminatorと名付けた。Yu and Li<sup>14)</sup>もLeonardらとは異なるdiscriminatorを提案している。彼らの手法は有限体積法に基づくもので、セル界面のフラックスを計算する際にフラックス制限関数を作用させる



(a) 極値が存在する分布の例 ( $D_1 \times D_3 < 0$ )



(b) 単調増加の例 ( $D_1 \times D_3 > 0, D_1 \times D_2 > 0$ )

か否かの判断をdiscriminatorを用いて行うものである。一方、Implicit HORNETスキームにおいては、discriminatorで極値を持つ領域及び単調な領域を判断し、極値を持つ領域においてはImplicit HORNETスキームをそのまま適用し、それ以外の領域ではパラメータを0に調節しスキームを一次精度風上差分にして適用する。

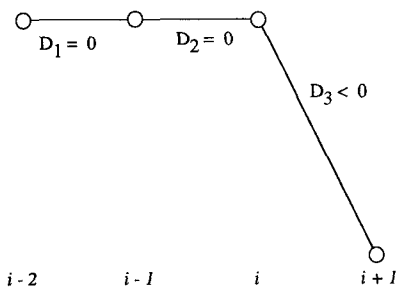
Discriminatorのアルゴリズムは以下の通りである。

$$D_1 = \Phi_{i-1}^n - \Phi_{i-2}^n, \quad D_2 = \Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n,$$

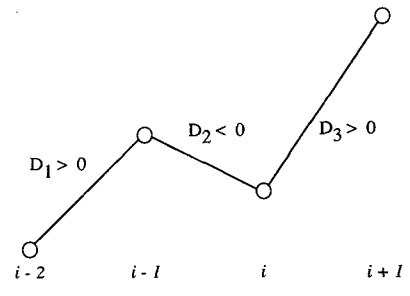
$$D_3 = \Phi_{i+1}^n - \Phi_i^n, \quad D_4 = \Phi_{i+2}^n - \Phi_{i+1}^n$$

(i)上式を計算する。



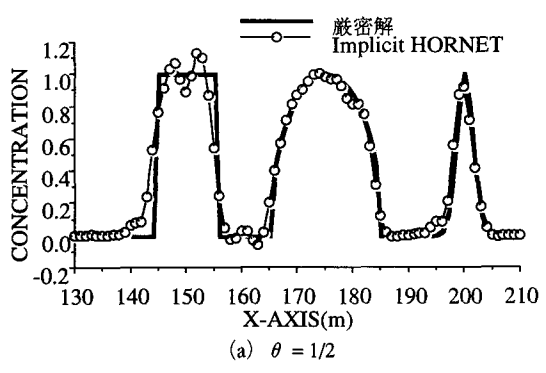


(c) 急勾配分布の例 ( $D_1 \times D_3 = 0$ )

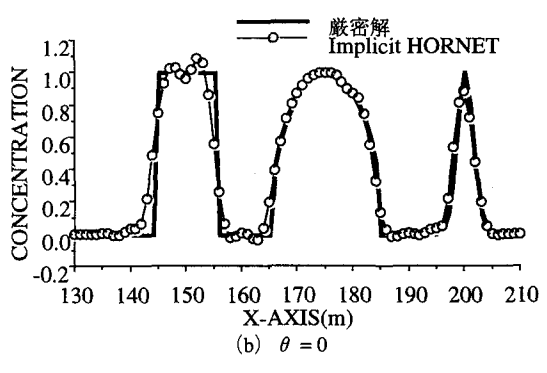


(d) 振動している分布の例 ( $D_1 \times D_3 > 0, D_1 \times D_2 < 0$ )

図-6 各種分布形状の模式図



(a)  $\theta = 1/2$



(b)  $\theta = 0$

図-7 移流計算結果 (discriminatorを用いた場合)

(ii)  $D_1 \times D_3 < 0$  の場合は区間  $i \sim i-1$  に極値が存在するものと判断し、Implicit HORNET スキームをそのまま適用し以下の手順を省略して飛ばす。 $D_1 \times D_3 = 0$  の場合は手順 (iii) へ、 $D_1 \times D_3 > 0$  の場合は手順 (iv) へ進む。

(iii) パラメータ  $\theta, \beta, \gamma$  をすべて 0 にした Implicit HORNET スキームを適用し以下の手順を飛ばす。

(iv)  $D_1 \times D_2 \leq 0$  の場合は手順 (iii) へ進む。 $D_1 \times D_2 > 0$  の場合は区間  $i+1 \sim i-2$  は単調増加 (減少) 領域と見なし、Implicit HORNET スキームをそのまま適用する。

流速が負の場合は手順 (ii) において、積  $D_1 \times D_3$  を積  $D_4 \times D_2$  に置き換え、手順 (iv) において積  $D_1 \times D_2$  を積  $D_4 \times D_3$  に置き換えればよい。

図-6 (a) は極値が存在する場合、図-6 (b) は単調増加の場合、図-6 (c), (d) はそれら以外の場合の分布形状の例を模式的に示したものである。図-6 (d) に示している様な半波長が  $2\Delta x$  の小さな振動は、一次精度風上差分で減衰させてしまうアルゴリズムとなっている。

## (2) モデル計算

5章1節と同じ条件でモデル計算を行い、discriminatorの有効性を検討した。図-7 (b) はパラメータ  $\theta$  を常時0にして計算した結果である。図-3 (i), (j) と比較すれば、各分布の裾の近傍での数値振動が小さくなっているが、ガウス分布のピーク値の再現性は良好のままであることが分かる。また図-7 (a) と図-7 (b) を比較すればパラメータ  $\theta$  を常時0にした場合の方が、数値振動が若干小さくなっている。

## 5. 結語

本論文ではコンパクトな高精度移流項計算スキームを開発・提案し、Implicit HORNETスキームと名付けた。得られた主要な結論は以下の通りである。

- (1) 2次および3次の数値拡散項を打ち消す人工数値拡散項を導入し、4次の数値拡散項の係数を恒等的に0となるようパラメータ  $\theta$  を決定することで、空間的・時間的に4次の精度を持つ陰形式スキームを新たに開発した。(Implicit HORNET スキーム)

- (2) Implicit HORNETスキームは、3次の数値拡散項を1階時間微分と2階空間微分の交差微分で表しているため、空間的に3点しか使用しないコンパクトなスキームとなっている。
- (3) Implicit HORNETスキームに含まれているパラメータ  $\theta$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  を適宜調節することにより、容易にスキームの精度の次数を変えることができる。
- (4) Implicit HORNETスキームは多次元問題においても簡便に精度良く計算が行えることが分かった。
- (5) 非線形移流問題にもImplicit HORNETスキームは適用可能であることが分かった。
- (6) 物理的意味を持つ極値とそうではない極値（数値振動）を区別するアルゴリズム（discriminator）を導入し、ガウス分布のピーク値は減衰させずに数値振動だけを抑制することができた。しかしながら、今のところTVDスキームのように完全に数値振動を除去できるまでには到っていない。非線形問題への適用も含めてImplicit HORNETスキームの完全なるTVD化は今後の課題としたい。

#### 参考文献

- 1) 例えば、保原充，大宮司久明編：数値流体力学-基礎と応用，pp.49-82，1992。
- 2) 河村三郎，中谷剛：TVD-MacCORMAC法による常・射流混在流の数値計算法，水工学論文集，第37巻，pp.763-768，1993。
- 3) 小松利光，朝位孝二，大串浩一郎：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。
- 4) 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。
- 5) 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。
- 6) 例えば，Cunge, J.A., Holly, F.M., Jr. and Verway, A.: *Practical Aspects of Computational River Hydraulics*, Chapter 3, Inst. of Hydraul. Res., Univ. of Iowa, Iowa City, IA, USA, 1986
- 7) Leonard, B.P. : A stable and convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, 19, pp.59-98, 1979.
- 8) Yee, H.C. : Construction of explicit and implicit symmetric TVD scheme and their application, *J. Comp. Phys.*, 68, pp.151-179, 1987.
- 9) Gaskell, P.H. and Lau, A.K.C. : Curvature-compensated convective transport : SMART, A new boundedness-preserving transport algorithm, *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 8, pp.617-641, 1988.
- 10) Zhu, J. : On the higher-order bounded discretization scheme for finite volume computations of incompressible flows, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, 98, pp.345-360, 1992
- 11) 例えば，土木学会構造工学委員会耐風設計研究小委員会耐風工学数値実験分科会編：構造工学シリーズ5 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，pp.45-46，1992。
- 12) Falconer, R.A., Liu, S.Q. and Chen, Y. : Application of higher order accurate schemes for advective transport in a 2-D water quality model, *Proc. the 2nd int. conf. on Hydraulic and Environmental Modelling of Coastal, Estuarine and River Water*, Vol.1, pp.241-252, 1992.
- 13) Leonard, B.P. and Niknafs, H.S. : Sharp monotonic resolution of discontinuities without clipping of narrow extrema, *Comput. Fluids*, Vol.19, No.1, pp.141-154, 1991.
- 14) Yu, T.S. and Li, C.W. : Efficient higher-order backward characteristics scheme for transient advection, *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 19, pp.997-1012, 1994.

(1996.8.19 受付)

## STUDY ON HIGHLY-ACCURATE NUMERICAL METHOD FOR ADVECTION-DIFFUSION EQUATION

Koji ASAI, Toshimitsu KOMATSU, Koichiro OHGUSHI and Kesayoshi HADANO

A new computational scheme is proposed in order to compute an advection term accurately. This scheme is an implicit scheme and named the Implicit HORNET scheme. The Implicit HORNET scheme is based on the split operator approach and can be applied to a multi dimensional problem and a nonlinear problem. The accuracy of this scheme can be changed easily by regulating the values of the parameters included in this scheme. By utilizing this feature, we have attempted to reduce an numerical oscillation.