

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

小松利光*・大串浩一郎**・朝位孝二***

本論文で、拡散シミュレーションの移流計算における従来の問題点を解消した新しい高精度計算スキームを開発・提案する。精度や安定性に優れた2階導関数の差分の特性に着目し、1階の移流方程式の代わりに2階の波動方程式を解くという全く新しい概念を用いている。この移流計算スキームは種々の計算法と比較しても、多次元への拡張が容易でかつ境界付近の取り扱いも簡単な、安定性に優れた高精度計算法であることが明らかとなった。

Keywords : 1st order advection equation, 2nd order wave equation, split operator approach, characteristics method, SOWMAC

1. 序 論

自然の河川や湖沼、海洋等の水質変化を予測するためには、流れと物質輸送の両方をコンピューターを用いて数値的に解かなければならない。物質輸送を規定する移流拡散方程式は、平均流による輸送すなわち移流と乱流拡散（もしくは移流分散）という全く性質の異なる2種類の輸送形態を包含している。

スプリット・オペレーター・アプローチは移流と拡散の計算を分離し、短い時間ステップ毎に交互に計算を繰り返すものである。この手法は、移流と拡散の各々に対して別個に最適な計算スキームを選択できるというメリットがある。拡散の計算は比較的精度良く行えるのに対し、移流の計算に関しては従来より多くの計算法が提案されているにもかかわらず、それらのスキームを用いた計算結果に無視できない誤差が含まれているのが実状であった。

近年、この移流のための高精度計算法がいくつか提案されてきており、精度の向上が図られてきた。例えば、Holly-Preissmannスキーム¹⁾、小松らのSix-pointスキーム²⁾、改良型Six-pointスキーム³⁾等が挙げられる。いずれも特性曲線法を利用し格子間で高精度の内挿多項式を構成して導いた計算法である。しかしながら、Holly-Preissmannスキームは2次元、3次元問題への拡張が困難であるため実用性に乏しく、一方Six-pointスキームや改良型Six-pointスキームは境界での取り扱いがやや煩雑であった。

本研究では、精度や安定性に優れた2階導関数の差分の特性に着目し、1階の移流方程式の代わりに2階の波

動方程式を解くという全く新しい概念を用いて、従来の問題点を解消した移流のための新しい高精度計算スキームを開発・提案する。

2. 拡散シミュレーション

(1) 移流拡散方程式の計算について

大気中や水域における汚染物質の拡散シミュレーションを行う場合、汚染物質の存在が流れに影響を与えるときは流れと物質輸送のそれぞれを規定する基礎式を連立して解かなければならない。一方、汚染物質が流れに影響を及ぼさない passive contaminant の場合には、流れ場の計算後に物質輸送に関して移流拡散方程式を解けば良い。この物質輸送を規定する移流拡散方程式は3次元の場合次式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \dots (1) \end{aligned}$$

ここで、 C は濃度、 U, V, W は流速、 D_x, D_y, D_z は拡散係数である。

式(1)の移流項を解くための差分法として、従来より風上差分スキーム、Lax-Wendroffスキーム、leap-frogスキーム、QUICK法等が用いられてきたが、計算精度に関しては後述のように、無視できない誤差を含んでいるのが実状であった。一方、スプリット・オペレーター・アプローチにおける特性曲線法に基づいた移流計算のためのスキームは、比較的精度の良い計算法として知られている。中でも、Holly-PreissmannスキームやSix-pointスキーム、改良型Six-pointスキームは前者の差分法に比べ画期的な精度の改善が得られた高精度の計算法である。

(2) スプリット・オペレーター・アプローチ

スプリット・オペレーター・アプローチによって式

* 正会員 工博 九州大学教授 工学部水工土木学科 (〒812 福岡市東区箱崎 6-10-1)

** 正会員 工博 佐賀大学助手 理工学部土木工学科

*** 正会員 工修 九州大学助手 工学部水工土木学科

(1) を移流の計算と拡散の計算に分離する。すなわち、1 タイムステップの中で

(i) first step として次式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \dots\dots\dots (2)$$

を用いて純粋移流の計算を行い、その結果をもとに

(ii) second step として次式を用いた拡散の計算を行う。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \dots\dots\dots (3)$$

式(3)の計算は、中央差分を用いて比較的精度良く計算を行うことができる。このことから、2階の空間導関数の数値計算は安定で精度の良いものであることが示唆される。これに対し、前述のように式(2)の純粋移流方程式を精度良く計算することは容易ではない。この式は1階の空間導関数から成り立ち、風上差分や中央差分では無視できない数値分散を引き起こしたり、計算を発散させたりすることが知られている。

特性曲線法に基づいて式(2)の計算法として最近提案された Holly-Preissmann スキームや Six-point スキーム、改良型 Six-point スキームは、高精度な移流の計算を可能にした。しかしながら、Holly-Preissmann スキームは従属変数として濃度及び濃度勾配を用いており、それらの移流計算を必要とするため2次元・3次元問題への拡張が非常に煩雑となる^{4),5)}。また、Six-point スキームや改良型 Six-point スキームは、従属変数として濃度のみを移流させるため多次元への拡張は簡単であるが、計算格子点を6点用いているため境界付近における取り扱いがやや面倒になる。このことから、純粋移流のための計算法は、今なお確立されているとは言えず、多次元への拡張が容易で、かつ境界付近の取り扱いも簡単な新しい高精度計算スキームの開発が緊急な課題となっている。

3. 移流方程式の新しい計算法の開発

(1) 2階の波動方程式の導入

簡単のため式(2)の代わりに1次元の純粋移流方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \dots\dots\dots (4)$$

を考える。後述するように1次元から2次元・3次元問題への展開は容易である。第2章で述べたように2階の導関数の計算が安定で精度良く行えるのに比べ、1階の導関数の数値計算はたびたび発散や無視できない数値分散を引き起こす。したがって、式(4)を t で微分した式と式(4)を x で微分した式から得られる2階の波動方程式

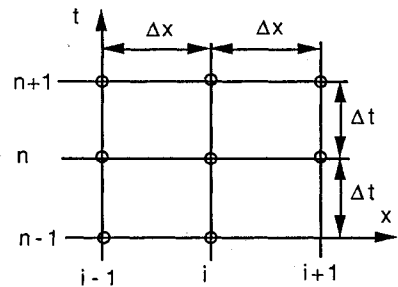


Fig.1 Computational grids

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - U^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \dots\dots\dots (5)$$

は数値計算上、式(4)よりもはるかに有利であることが期待される。ただし、ここで流速 U は近似的に一定としている。

式(5)の解は dynamic wave で、下流に伝播する前進波と上流へ伝播する後退波の重ね合わせである。一方、式(4)の解は下流へのみ伝播する前進波だけである。したがって式(4)の代わりに式(5)を解く場合は、解として前進波のみが得られるような条件を強制的に与えてやらなければならない。

(2) 2階の波動方程式の差分化

式(5)の差分式は数多く考えられるが、試みに Fig.1 に示す $x=x_i$ を中心として空間的に左右対称なスキームをいくつか用いて対称な濃度分布の伝播の計算を行ったところ、計算結果に左右非対称な歪みが生じることが分かった。このことは、移流という現象が上流から下流へ向かって伝わる一過性の左右非対称な輸送形態であることに起因しているものと思われる。そこで、左右非対称な計算スキームを採用することにし、上流側の情報量が多く取り入れられるように工夫を行った。

本研究で採用された空間的に左右非対称な差分スキームは implicit 形式となり、クーラン数を $\alpha (\equiv U\Delta t/\Delta x)$ とすれば以下のように表わされる。

$$\begin{aligned} & (1-\kappa)(C_i^{n+1} - 2C_i^n + C_i^{n-1}) \\ & + \kappa(C_i^{n+1} - 2C_i^n + C_i^{n-1}) - \alpha^2 \{ \theta(C_i^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_i^{n+1}) \\ & + (1-\theta)(C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n) \} = 0 \dots\dots\dots (6) \end{aligned}$$

ここで、 κ , θ はそれぞれ時間2階微分及び空間2階微分を最適に評価するためのパラメーターであり、0から1までの範囲に限定されるものではない。

このスキームを用いて移流の計算をいくつか試みた結果、パラメーター κ と θ の適当な組み合わせを用いれば高い精度の計算が可能なが分かった。このスキームは既知量として n 及び $(n-1)$ タイムステップの濃度を必要とし、この2つのタイムステップの濃度の与え方次第で1方向の伝播波のみを再現することができる。

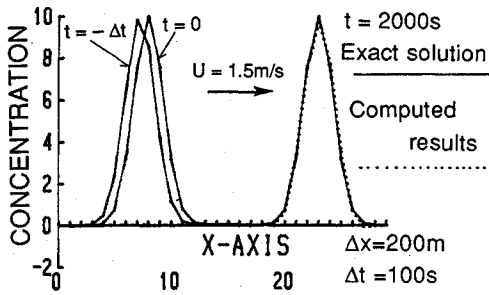


Fig.2 Calculation of Eq.(6) with initial conditions that make the distribution propagate downstream only

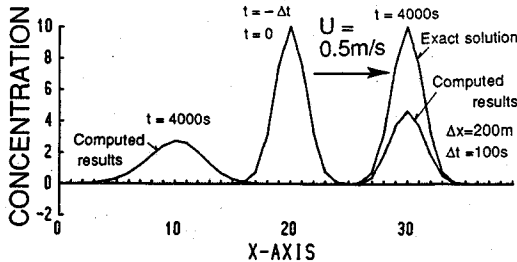


Fig.3 Calculation of Eq.(6) when the initial distributions at $t = -\Delta t$ and $t = 0$ are same

例えば、Fig.2に示すように $t = -\Delta t$ と $t = 0$ で、下流にのみ伝わる波が満たすように初期条件を与えると、下流側に向けての移流の計算が精度良く行える。一方、 $t = -\Delta t$ と $t = 0$ で全く同じ濃度分布を初期条件として与えると、Fig.3のように2つの波が上下流へそれぞれ伝わるという結果が得られる。したがって、波が下流へのみ伝えられるような条件を $(n-1)$ ステップと n ステップで容易に与えることが可能ならば問題ないが、 $(n-1)$ ステップと n ステップの条件の間で移流輸送としての整合性がとれていない場合、Fig.3のように unnecessary 波の成分が上流へ伝播することになる。

この問題を解決するために、 $(n-1)$ ステップの濃度の代わりに Fig.4 に示す $(n-1)'$ ステップの濃度を用いることにする。ここでは、与えられた格子幅、流速の下で (i, n) 、 $(i+1, n)$ の格子点を下流側へ向かって通過する特性曲線を考え、これらの特性曲線がそれぞれ $(i-1)$ 軸、 i 軸を横切る時刻 $(n\Delta t - \Delta x/U)$ を $(n-1)'$ タイムステップとした。 $(n-1)'$ ステップの濃度は特性曲線概念から以下のように求められる。

$$C_i^{(n-1)'} = C_i^n, \quad C_{i+1}^{(n-1)'} = C_{i+1}^n$$

時間に関する濃度の2階微分は、時間方向の3点の濃度を用いて最終的に次式の差分式で近似できる。

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_{i-1} = \frac{1}{\Delta t^2} (b_1 C_{i-1}^{n+1} + b_2 C_{i-1}^n + b_3 C_{i-1}^{n-1})$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_i = \frac{1}{\Delta t^2} (b_1 C_i^{n+1} + b_2 C_i^n + b_3 C_i^{n-1})$$

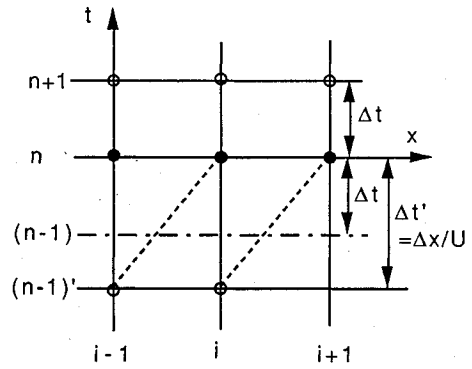


Fig.4 Estimation of concentrations at previous time step $(n-1)'$

ここで、

$$b_1 = \frac{2\alpha}{\alpha+1}, \quad b_2 = -2\alpha, \quad b_3 = \frac{2\alpha^2}{\alpha+1}$$

である。

式(5)の差分式は新たに次式で与えられる。

$$\begin{aligned} & 2(1-\kappa) \{ C_i^{n+1} - (\alpha+1)C_i^n + \alpha C_i^{n-1} \} \\ & + 2\kappa \{ C_{i+1}^{n+1} - (\alpha+1)C_{i+1}^n + \alpha C_{i+1}^{n-1} \} \\ & = \alpha(\alpha+1)\theta (C_{i+1}^{n+1} - 2C_{i+1}^n + C_{i+1}^{n-1}) \\ & + \alpha(\alpha+1)(1-\theta) (C_{i-1}^{n+1} - 2C_{i-1}^n + C_{i-1}^{n-1}) \dots (7) \end{aligned}$$

式(7)のスキームは最終的には n タイムステップの C_{i-1} 、 C_i 、 C_{i+1} だけを既知量として使用している。 $(n-1)'$ ステップの C の値を流速 U に乗った特性曲線から求めていることから、この差分スキームは前進波のみを計算の対象とするという条件を自動的に含んでいることになる。

(3) パラメーター κ 、 θ の決定

式(7)の最適な κ 、 θ の値はクーラン数 α と共に変化する。 κ と θ の α に関する関数形を求めるために、Taylor 級数解析を用いると、式(7)は最終的に以下のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - U^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = & [(4-6\kappa)\alpha - 6(\theta+\kappa-1)\alpha^2 \\ & + (2-6\theta)\alpha^3] \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t^2} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + [4(\kappa-1)\alpha \\ & + 2(6\kappa-5)\alpha^2 + 4(3\theta+2\kappa-2)\alpha^3 \\ & + 2(6\theta-1)\alpha^4] \frac{\Delta x^4}{4! \Delta t^2} \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots \dots \dots (8) \end{aligned}$$

式(8)の右辺が式(5)を式(7)のように差分化したときの打ち切り誤差である。この誤差項は無級数であり、これらの和をゼロにすることができれば厳密な移流の計算が可能である。現実にはそれは不可能であるので、誤差項をトータルとしてできるだけ小さくするように κ と θ を決めることが望ましい。式(8)右辺の各

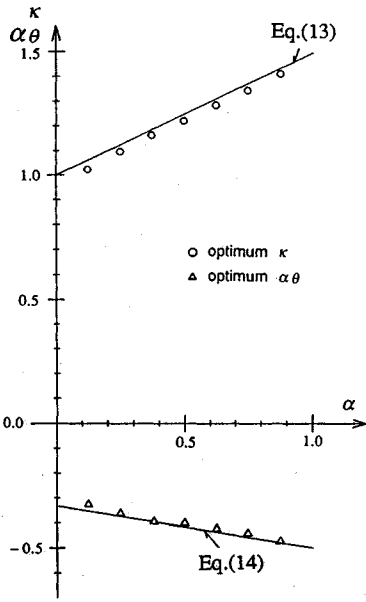


Fig.5 Relations between κ , θ and α

項の係数は、artificial dispersion coefficientと呼ばれる。これらの artificial dispersion coefficient を J_3, J_4, \dots とおく。

$$J_3 = [(4-6\kappa)\alpha - 6(\theta + \kappa - 1)\alpha^2 + (2-6\theta)\alpha^3] \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t^2} \dots (9)$$

$$J_4 = [4(\kappa - 1)\alpha + 2(6\kappa - 5)\alpha^2 + 4(3\theta + 2\kappa - 2)\alpha^3 + 2(6\theta - 1)\alpha^4] \frac{\Delta x^4}{4! \Delta t^2} \dots (10)$$

⋮

ここで未知量のパラメータは κ, θ の二個なので、筆頭項と準筆頭項の J_3, J_4 を最小にする条件を採用する。(9), (10) の両式をゼロとおくと、 α は常にゼロとなるわけではないので、次式が求まる。

$$(4-6\kappa)\alpha - 6(\theta + \kappa - 1)\alpha^2 + (2-6\theta)\alpha^3 = 0 \dots (11)$$

$$4(\kappa - 1)\alpha + 2(6\kappa - 5)\alpha^2 + 4(3\theta + 2\kappa - 2)\alpha^3 + 2(6\theta - 1)\alpha^4 = 0 \dots (12)$$

式(11), (12) を連立して解くことにより、パラメータ κ, θ の関数形が以下のように求まる。

$$\kappa = \frac{\alpha + 2}{2} = 0.5\alpha + 1 \dots (13)$$

$$\alpha\theta = \frac{-(\alpha + 2)}{6} = -0.1666\alpha - 0.3333 \dots (14)$$

理論解として求められた式(13), (14) は5次以降の誤差項を考慮していないために、若干の修正が必要であると思われる。そこで、式(7)を用いた移流の数値実験を数多く行い、 κ と θ の最適値を試算的に求めた。得られた結果と式(13), (14) を Fig.5 に示す。

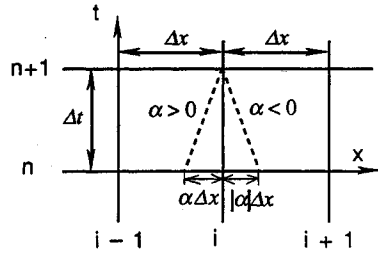


Fig.6 Symmetrical feature of the scheme with respect to $\alpha \geq 0$ and $\alpha \leq 0$

最適値と理論解はほぼ一致しているが、わずかのずれが見られる。これは前述のように理論解の算出の際、5次以降の高次の項の影響を考慮に入れていないためである。したがって、試算的に得られた κ, θ の最適値から、式(13), (14) を基本として若干の補正を加えて最終的な関数形を求めることにする。その際、式(7)より $\alpha = 1$ で $\kappa + \theta = 1$ が成立しなければならないという条件を付加して最小2乗法により求めると、パラメータ κ, θ が決定され次のようになる。

$$\kappa = 0.5155\alpha + 0.9688 \dots (15)$$

$$\alpha\theta = -0.1691\alpha - 0.3152 \dots (16)$$

(4) SOWMAC 法

前節で、パラメータ κ, θ の最適値が式(15), (16) のように求められたので、移流計算スキームの最終形が決定できる。

ところで、これまでではクーラン数 α は正であることを前提として話を進めてきたが、実際の自然現象では、潮流流、局所流等場所や時間によってクーラン数 α が負になるケースも多く見られる。Fig.6 に示すように、 α の正負に関し $x = x_i$ を中心としてスキームは左右対称であることから、式(7)において

$$i+1 \rightarrow i-1, i-1 \rightarrow i+1, \alpha \rightarrow |\alpha|$$

とおくことにより、負のクーラン数に対する計算スキームが求められる。

計算スキームの最終的な表示形は、クーラン数の正負に関係なく使用できる形式がプログラムの制作上便利である。したがって、一次元純粋移流方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

に対する最終的な計算スキームが正負の α に対して統一された形で以下のように求められる。

$$p_1 C_i^{n+1} + p_2 C_i^{n+1} + p_3 C_i^{n+1} = p_4 C_{i-1}^n + p_5 C_i^n + p_6 C_{i+1}^n$$

$$(SOWMAC 法) \dots (17)$$

ここに、 $p_1 = 0.3776\alpha_0 + 0.3152\alpha_0 -$

$$-0.5467\alpha_1 + 0.4843\alpha_1 - 0.1691\alpha^2$$

$$p_2 = 1.3072 + 0.0624|\alpha| - 0.3382\alpha^2$$

$$p_3 = 0.3152\alpha_0 + 0.3776\alpha_0 -$$

$$\begin{aligned}
 &+0.4843\alpha_{1+}-0.5467\alpha_{1-}+0.1691\alpha^2 \\
 p_4 &= 0.3776\alpha_{0+}+0.3152\alpha_{0-} \\
 &+0.5157\alpha_{1+}-0.4533\alpha_{1-}+0.1381\alpha^2 \\
 p_5 &= 1.3072-0.0624|\alpha|-0.2762\alpha^2 \\
 p_6 &= 0.3152\alpha_{0+}+0.3776\alpha_{0-} \\
 &-0.4533\alpha_{1+}+0.5157\alpha_{1-}+0.1381\alpha^2
 \end{aligned}$$

$$\alpha_{0+} = \text{AINT} \left\{ \frac{\alpha+1}{|\alpha|+1} \right\}$$

$$\alpha_{0-} = \text{AINT} \left\{ \frac{1-\alpha}{1+|\alpha|} \right\}$$

$$\alpha_{1+} = \frac{|\alpha|+\alpha}{2}$$

$$\alpha_{1-} = \frac{|\alpha|-\alpha}{2}$$

$$\alpha = \frac{U\Delta t}{\Delta x}$$

ここで、AINTはFORTRANで用いられる小数切り捨ての組み込み関数である。

この式(17)を本研究で提案する最終的な計算スキームとする。以下、このスキームをSOWMAC法(Second Order Wave equation Method for Advective Calculation)と呼ぶことにし、次節以降で安定性、精度の検証、またその応用例について述べる。

(5) 安定解析

前節で提案したSOWMAC法について、Von Neumannの安定解析^{(6),(7)}によってその特性を調べる。

a) 増幅係数に関する解析

式(4)の解をフーリエ級数で表わせれば次式のようになる。

$$C(x,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m \exp\{-j\sigma_m t\} \exp\{jk_m x\} \dots (18)$$

ここで、 σ_m, k_m はそれぞれ m 番目の波の成分の角周波数、波数であり、 j は虚数単位 ($j=\sqrt{-1}$) である。基礎方程式((4)式)が線形であることから、解の重ね合わせの原理が成立する。したがって任意の波の成分

$$C(x,t) = A \exp\{-j\sigma t\} \exp\{jkx\} \dots (19)$$

も解の1つとなり式(4)を満足する。簡単のためクーラン数 α を正とし、式(19)を式(17)のSOWMAC法に代入し整理すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 e^{-j\sigma\Delta t} &= \frac{p_4 e^{-jk\Delta x} + p_5 + p_6 e^{jk\Delta x}}{p_1 e^{-jk\Delta x} + p_2 + p_3 e^{jk\Delta x}} \\
 &= \frac{B_3 + jB_4}{B_1 + jB_2} \dots (20)
 \end{aligned}$$

したがって、SOWMAC法の増幅係数は次のように表される。

$$|G| = |e^{-j\sigma\Delta t}| = \sqrt{\left(\frac{B_1 B_3 + B_2 B_4}{B_1^2 + B_2^2}\right)^2 + \left(\frac{B_1 B_4 - B_2 B_3}{B_1^2 + B_2^2}\right)^2} \dots (21)$$

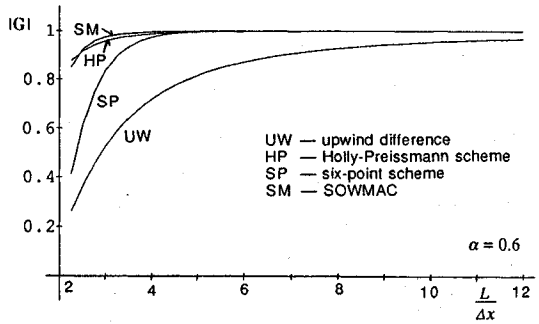


Fig.7 Amplitude portraits for several schemes ($\alpha=0.6$)

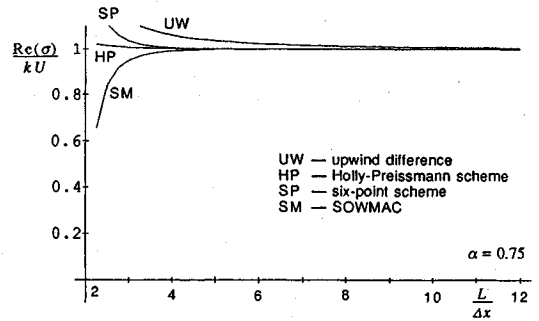


Fig.8 Phase portraits for several schemes ($\alpha=0.75$)

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

この増幅係数は、必ずしも1とは限らず、クーラン数 α 及び波長と格子幅の比 $L/\Delta x$ の2つの量に依存する。 $\alpha=0.6$ における $|G|$ の $L/\Delta x$ に関する変化を Fig.7 に示す。比較のために1次精度風上差分スキーム、Six-pointスキーム及びHolly-Preissmannスキームの $|G|$ を同図に示している。

SOWMAC法は $L/\Delta x$ の広い範囲で厳密解の $|G|=1$ と一致しており、 $L/\Delta x$ の小さい領域においても高い精度を保ち、Holly-Preissmannスキームの特性に近い。

b) 位相誤差に関する解析

角周波数 σ の複素数表示として

$$\sigma = \text{Re}(\sigma) + j\text{Im}(\sigma) \dots (22)$$

とおいて式(20)に代入する。右辺と左辺の実部、虚部がそれぞれ等しいことから伝播速度は最終的に次式のように求まる。

$$\frac{\text{Re}(\sigma)}{k} = \frac{1}{k\Delta t} \tan^{-1} \left(\frac{B_2 B_3 - B_1 B_4}{B_1 B_3 + B_2 B_4} \right) \dots (23)$$

式(23)と厳密解の伝搬速度 U との比

$$\frac{\text{Re}(\sigma)}{kU} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\alpha} \frac{L}{\Delta x} \tan^{-1} \left(\frac{B_2 B_3 - B_1 B_4}{B_1 B_3 + B_2 B_4} \right) \dots (24)$$

は位相誤差に関する指標となり、この値が1から離れる

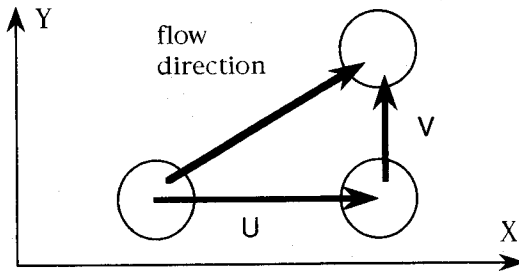


Fig.9 Adaptation of SOWMAC to two-dimensional problem by 2-step advection calculation

程, 数値分散を引き起こす. この指標もまたクーラン数 α と $L/\Delta x$ に依存して変化する. $\alpha=0.75$ における伝播速度比を $L/\Delta x$ に対してプロットしたものが Fig.8 である. $L/\Delta x$ の幅広い範囲において伝播速度比は 1 に近い値を示しており, また $L/\Delta x$ の小さい領域においても SOWMAC 法は Six-point スキーム程度の高精度を有することが分かる.

$0 \leq \alpha \leq 1$ の場合には, 上述のクーラン数以外の場合でも Fig.7, Fig.8 とほぼ同様の結果が得られた. しかしながら, $\alpha > 1$ の場合は不安定となることが分かった. SOWMAC 法はクーラン数が負の場合でも計算可能であることから, SOWMAC 法の安定条件は $|\alpha| \leq 1$ となる.

(6) 多次元問題への展開

a) 2次元問題

1次元問題で開発された SOWMAC 法の 2次元問題への拡張は容易である. 2次元の純粋移流方程式は次式で表される.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \dots\dots\dots (25)$$

特性曲線上では濃度は変化せずそのまま保存されるが, 短い 1 タイムステップ内に流体粒子が移動する経路を, 計算上は特性曲線の経路から変えて, Fig.9 に示すように最初に X 方向に移動した後, Y 方向に移動するという手法を用いることにする. すなわち 1 タイムステップ後に特性曲線が到達する地点までの移流の計算を次に示すように 2 段階に分けて, 1 タイムステップ内で 1 次元の計算を 2 度行う.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \dots\dots\dots (26)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \dots\dots\dots (27)$$

式 (26), (27) は両式とも 1 次元純粋移流方程式であるので式 (17) の SOWMAC 法がそのまま適用できる. 解法としては, 式 (26) を最初に解いた後, その結果を用いて同一タイムステップ内で式 (27) を解けば良い. この方法により, SOWMAC 法は implicit な計算スキーム

ムであるにもかかわらず, 2次元問題でも ADI スキーム⁸⁾等と同様に計算量を大幅に減らすことができる. 例えば計算領域の格子点が $N_x \times N_y$ 個の場合, implicit なスキームで解くには通常 $N_x \times N_y$ 元の連立方程式を解く必要がある. 一方, SOWMAC 法の 2次元展開においては, N_x 元の連立方程式を N_y 回解いた後, 直角方向に N_y 元の連立方程式を N_x 回解くだけで 1 ステップの全領域の計算が終了する. しかも, SOWMAC 法で使用する格子点は 3 点であるため解くべきマトリックスは 3 重対角行列となり, 解を求めるのが非常に容易である.

b) 3次元問題

3次元の場合も a) と同様同一タイムステップ内で, x 方向, y 方向, z 方向の移流に対しそれぞれ分離して SOWMAC 法を個別に適用すれば良い.

4. モデル計算による SOWMAC 法の検証

(1) 1次元モデル計算

SOWMAC 法を検証するために以下の初期条件の下で移流計算を行った. 初期条件として 2 つのピークをもつ濃度分布 (ピーク値 10, 標準偏差 264 m, 中心位置 $x=1400$ m の Gauss 型濃度分布と, ピーク値 6.5, 標準偏差 264 m, 中心位置 $x=2400$ m の Gauss 型濃度分布を重ね合わせたもの) が無限長水路を流速 $U=0.5$ m/s で下流へ 9600 s の間純粋移流したときの計算結果を Fig.10 に示す³⁾.

Fig.10 には, 比較のため同じ条件下で, Table 1 に示すような 6 種類の計算スキームを用いた純粋移流の計算結果を示している. 図中の太い実線が厳密解である. スキームによっては大きなダンピングや無視できない程の位相誤差を生じているのが分かる. SOWMAC 法は用いている格子点が僅か 3 点であるにもかかわらず, Six-point スキーム程度の高精度を保ち, 位相誤差もほとんど見られない.

(2) $U \approx \text{const.}, \Delta x \approx \text{const.}$ の場合

流速 U , 格子幅 Δx は近似的に一定であるとして SOWMAC 法は誘導・定式化された. しかしながら自然界の拡散シミュレーションにおいては流れの場は場所的, 時間的に変化することが多い. また, 計算格子幅 Δx も計算の効率化や現象の緩急に応じて場所毎に変えられることが望ましい.

式 (7) を導く過程でこれらの変化の影響を考慮してスキームを構成するのは可能である. しかしながらその場合, スキームはより複雑になり, 本来の簡便で高精度なスキームの開発という目的から離れてくる. したがって, 用いている格子点が僅か 3 点であるからこの格子点間では $U, \Delta x$ とともに近似的に一定であるとして誘導された SOWMAC 法をここでは適用することにする. $U, \Delta x$ が変化する場合も急激な変化がない限りかなり良い

Table 1 Several schemes and their accuracies

	空間方向差分法	時間方向差分法	空間方向の精度	時間方向の精度
CASE-1	1次精度風上法	1次精度オイラー法	1次	1次
CASE-2	Lax-Wendroff Scheme		2次	2次
CASE-3	QUICK Scheme	2次精度Adams-Bashforth法	2次	2次
CASE-4	QUICK Scheme	Crank-Nicolson法	2次	2次
CASE-5	QUICKEST Scheme		3次	3次
CASE-6	Six-Point Scheme		1次	1次
CASE-7	SOMMAC Scheme		2次	2次

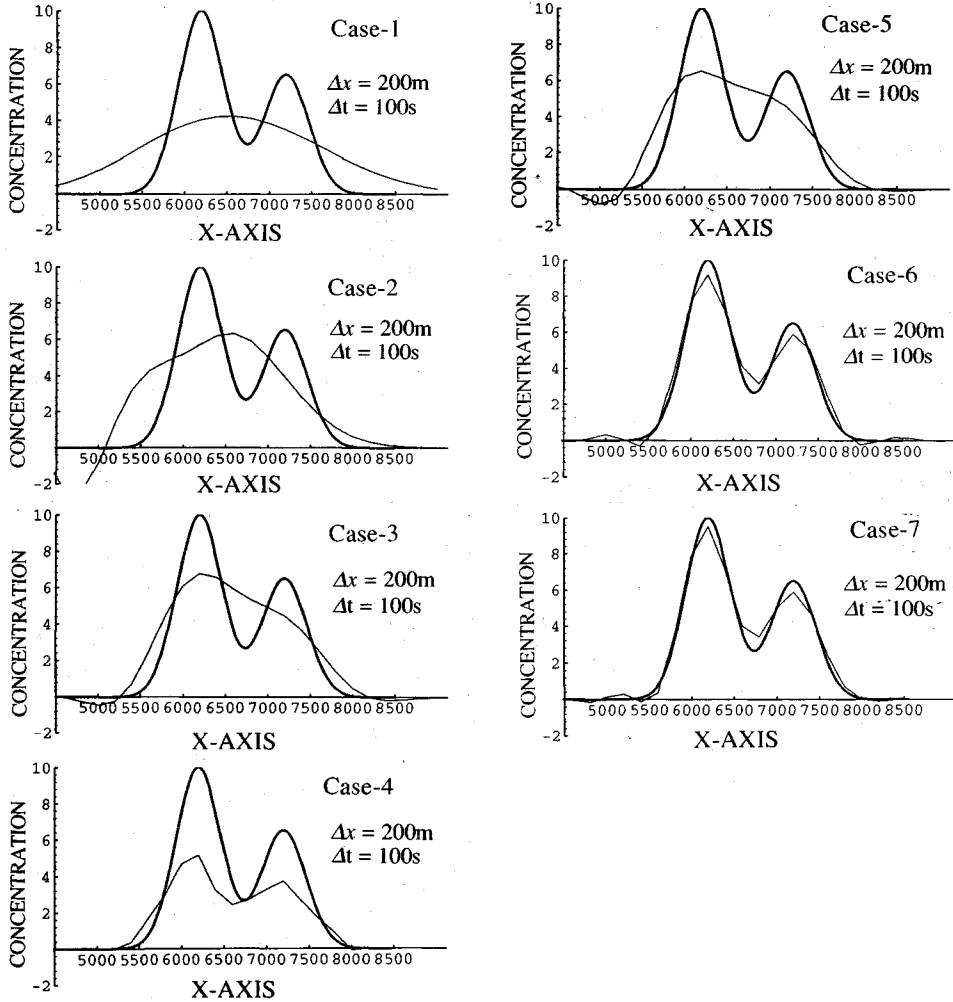


Fig.10 Comparison of calculated results obtained by various schemes proposed for pure advection

計算精度が期待できるものと思われる。

流速 U 、格子幅 Δx が変化する場合に式 (17) において次の代表流速、代表格子幅を用いることにする。

$$U = U_i \dots \dots \dots (28)$$

$$\Delta x = \frac{\Delta x_{i-1,i} + \Delta x_{i,i+1}}{2} \dots \dots \dots (29)$$

ここで、 $\Delta x_{i-1,i} = x_i - x_{i-1}$ 、 $\Delta x_{i,i+1} = x_{i+1} - x_i$ である。

Fig.11 (a) に示すような加速域、減速域を含む流れや、Fig.12 (a) のような流速が局所的に変化する流れ場において計算した結果を Fig.11 (b) と Fig.12 (b) に示す。また、Fig.13 (a) に示すように格子幅が $\Delta x = 200$ m から 100 m へ変化し、再び $\Delta x = 200$ m に戻るような格子

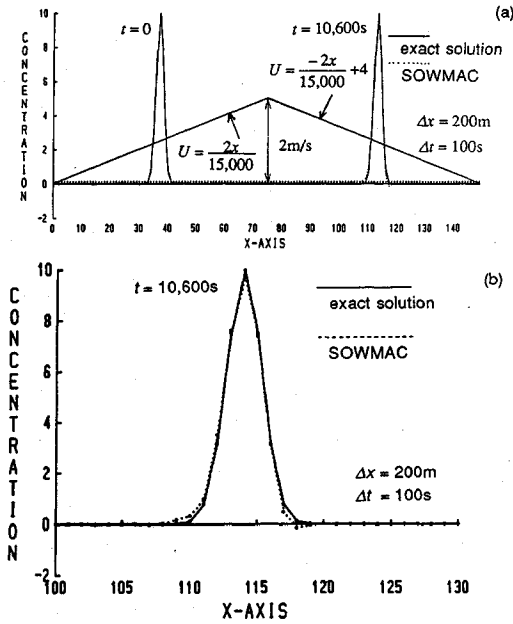


Fig.11 Calculation of pure advection in accelerated-decelerated flow

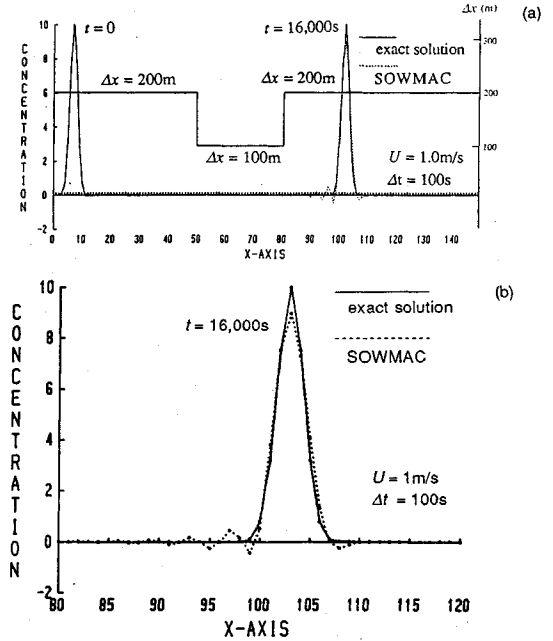


Fig.13 Calculation of pure advection when Δx is suddenly changed

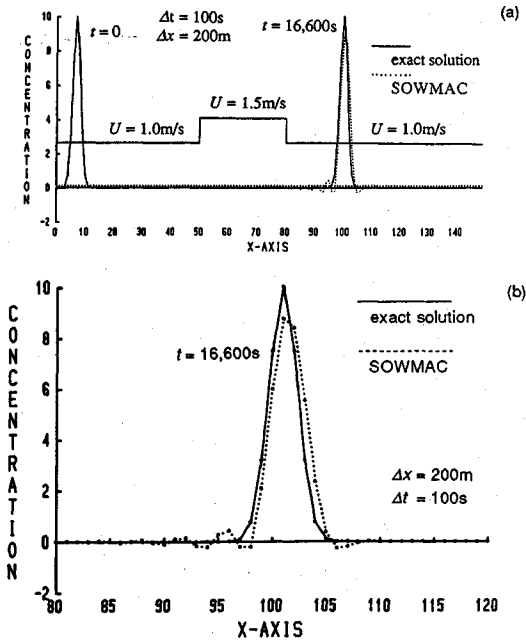


Fig.12 Calculation of pure advection in rapidly velocity varied flow

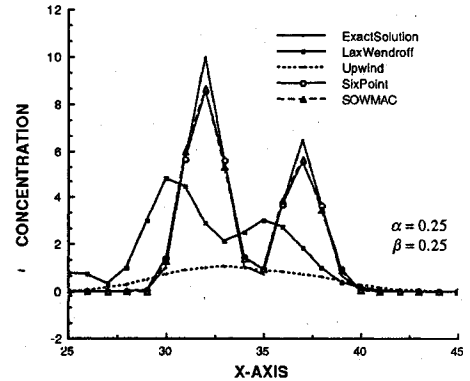


Fig.14 Comparison of several schemes two-dimensional pure advection (along the line $y=x$)

間隔を用いた場合の計算結果を Fig.13 (b) に示す。

これらの計算例から、SOWMAC 法は流速や格子幅が変化する場合も精度良く計算できることが明らかとなった。

(3) 2次元モデル計算

a) 一様流れ場におけるモデル計算

2次元移流のモデル計算として、4. (1) と同様に2つの Gauss 型濃度分布の重ね合わせで表される初期濃度分布が、2次元無限平面上で一定流速 $U=0.5 \text{ m/s}$, $V=0.5 \text{ m/s}$ で下流に輸送される場合を考える。2つの平面 Gauss 型分布の初期のピークの位置座標は $(x, y) = (1400, 1400)$, $(2400, 2400)$ でそれぞれのピーク値は 10.0 と 6.5, また標準偏差はそれぞれ 264 m である。

Fig.14 は種々の計算スキームによる2次元移流の計算結果を直線 $y=x$ 上での濃度分布として表したものであ

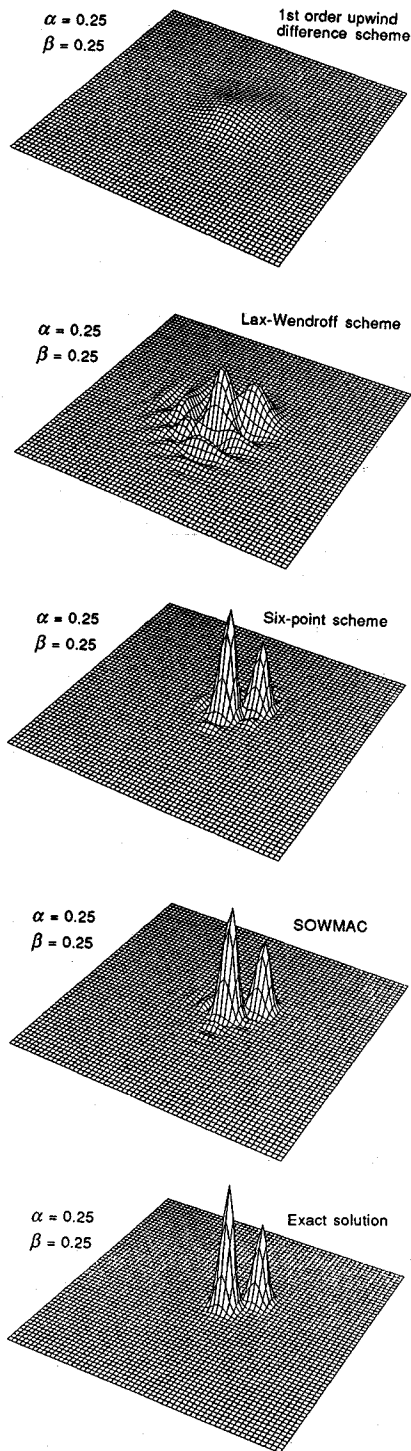


Fig. 15 Comparison of several schemes for two-dimensional pure advection (by 3-D graphics)

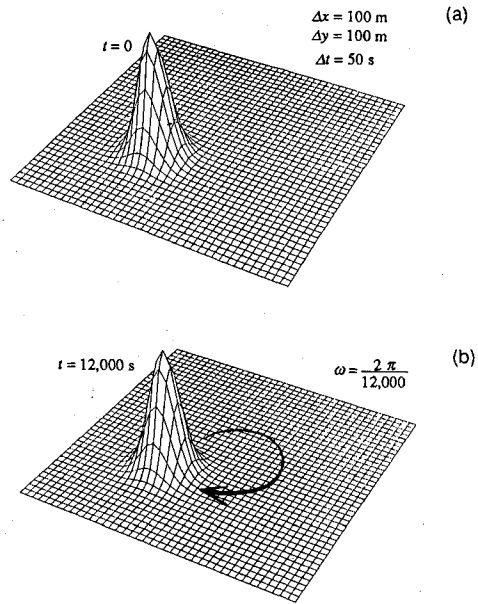


Fig.16 Calculation of advection in rigid body rotation velocity field ($\omega=2\pi/12\,000\text{ s}^{-1}$)

る。図中の β は y 方向のクーラン数で、 $\beta = V\Delta t/\Delta y$ である。

Fig.15 は同じ計算結果を 3 次元グラフィックスにより表現したものである。これらの図よりスキーム間の精度の違いが容易に識別できる。

2次元移流の計算においては、SOWMAC法は1点の計算当たり x 方向に3点、 y 方向に3点の計6点の値を用いるが、Six-pointスキームは1点の計算のために36点を使用する。SOWMAC法はその使用点数が少ないにもかかわらず、Six-pointスキームとほぼ同程度の精度を有している。

b) 剛体回転する流れ場におけるモデル計算

次に、2次元平面で角速度 $\omega = 2\pi/12\,000\text{ (s}^{-1}\text{)}$ で剛体回転する流れの場を考える。これは各象限で x 方向もしくは y 方向の流速の符号が変化する流れ場である。初期条件として Fig.16 (a) のような Gauss 型濃度分布を与える。計算領域は $4\,000\text{ m} \times 4\,000\text{ m}$ の2次元平面で、初期条件は、ピークの値10、ピーク的位置 (1400 m, 1400 m)、標準偏差200 mで、計算条件は $\Delta x = \Delta y = 100\text{ m}$ 、 $\Delta t = 50\text{ s}$ とした。 $t = 12\,000\text{ s}$ (1回転後) の濃度分布を Fig.16 (b) に示す。初期条件と同じような濃度分布で剛体回転しているのが分かる。厳密解は初期条件と一致するが、得られた計算結果も良い一致を示しており (計算解のピークの値は9.66)、SOWMAC法は流速の変化する2次元流れ場においても高い精度で移流の計算ができることが分かった。

5. 結 論

本論文において、精度や安定性に優れた2階導関数の差分の特性に着目し、1階の移流方程式の代わりに2階の波動方程式を解くという新しい概念を用いて、従来の問題点を解消した移流のための新しい高精度計算スキームである SOWMAC 法を開発・提案することができた。得られた主な結論は以下の通りである。

- (1) 1階の移流方程式の代わりに2階の波動方程式を解くという新しい概念を用いて、移流項の数値計算が安定で精度良く行えることが分かった。
- (2) 2階の波動方程式は解として前進波と後退波を持つが、このうち前進波のみを解として得られるような移流計算スキームを特性曲線法を利用して求めることができた。
- (3) スキーム中に現れるパラメーター k , θ を計算スキームの Taylor 級数解析によってクーラン数 α の関数として理論的に求めることができた。
- (4) 計算スキームの形は、クーラン数の正負に関わりなく用いることができるように最終的に1つの式にまとめられた (SOWMAC 法)。
- (5) Von Neumann の安定解析により $|\alpha| \leq 1$ の範囲で SOWMAC 法の高い精度と安定性が確認され、また種々の計算スキームとの比較でも Six-point スキーム程度の高精度を有することが分かった。
- (6) SOWMAC 法は用いている格子点が僅か3点であるため、境界付近での取り扱いが容易である。
- (7) 流速 U や格子幅 Δx が一定でない場合の移流の計算においても SOWMAC 法は十分高い精度で適用できることが分かった。
- (8) 2次元・3次元問題への展開も特性曲線の経路を分離することにより少ない計算量で容易に精度良く計算できることが分かった。

以上、数値計算の困難な移流の計算のための全く新しい高精度計算スキームを提案したが、この SOWMAC 法は上述のように多くの長所を有することから、今後実用面で大いに活用されるものと思われる。なお、このスキームは非線型慣性項等の計算にも応用できるものと思われる。今後の研究課題としたい。

参 考 文 献

- 1) Holly, F.M. Jr. and A. Preissmann : Accurate calculation of transport in two dimensions, J. Hydraul. Div., Proc. ASCE, Vol.103, No. HY11, pp.1259-1277, 1977.
- 2) Komatsu, T., Holly Jr. F.M., Nakashiki, N. and K. Ohgushi : Numerical calculation of pollutant transport in one and two dimensions, J. Hydrosci. and Hydraul. Eng., JSCE, Vol.3, No.2, pp.15-30, 1985.
- 3) Komatsu, T., Ohgushi, K., Asai, K. and F.M. Holly Jr. : Accurate numerical simulation of scalar advective transport, J. Hydrosci. and Hydraul. Eng., JSCE, Vol.7, No.1, pp.63-73, 1989.
- 4) Glass, J. and W. Rodi : A higher order numerical scheme for scalar transport, Comput. Methods Appl. Mech. and Eng. Vol.31, pp.337-358, 1982.
- 5) Holly, F.M., Jr. and J.M. Usseglio-Polatera : Dispersion simulation in two-dimensional tidal flow, J. Hydraul. Eng., ASCE, Vol.110, No.7, pp.905-926, 1984.
- 6) Cunge, J.A., Holly, F.M., Jr. and A. Verway : Practical Aspects of Computational River Hydraulics, Chapter 3, Inst. of Hydraul. Res., Univ. of Iowa, Iowa City, IA, USA, 1986.
- 7) Baptista, A.M., Adams, E.E. and K.D. Stolzenbach : Comparison of several Eulerian-Lagrangian models to solve the advection-diffusion equation, Turbulence Measurements and Flow Modeling (Eds. C.J. Chen, L.D. Chen & F.M. Holly, Jr.) pp.345-354, Springer-Verlag, Berlin, 1987.
- 8) 大野豊・磯田和男 : 数値計算ハンドブック, pp.338-339, オーム社, 1990.

(1991.11.7 受付)

DEVELOPMENT OF REFINED NUMERICAL SCHEME FOR ADVECTIVE TRANSPORT IN DIFFUSION SIMULATION

Toshimitsu KOMATSU, Koichiro OHGUSHI and Koji ASAI

Taking into account, the highly accurate and stable features of the finite difference of second order derivative the new refined scheme for advection is developed based on the concept of solving 2nd order wave equation instead of 1st order advection equation. Characteristics method is used in order to get accurate solution propagating downstream only. From Taylor series analysis and many numerical experiments, parameters involved in this method could be determined as functions of Courant number. Comparison of this scheme with the other various ones in model calculations and Von Neumann stability analysis prove its superior accuracy and stability. This scheme can easily be applied to multidimensional practical problem by separating characteristic curve each component directions. This proposed scheme uses only three computational grid points so that there is no need to pay much attention to the treatment at the boundary.