

# 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

小松利光<sup>1</sup>・朝位孝二<sup>2</sup>・大串浩一郎<sup>3</sup>・吉村耕市郎<sup>4</sup>

<sup>1</sup>正会員 工博 九州大学教授 工学部建設都市工学科（〒812-81 福岡市東区箱崎6-10-1）

<sup>2</sup>正会員 工博 九州大学助手 工学部建設都市工学科（同上）

<sup>3</sup>正会員 工博 佐賀大学助教授 理工学部土木工学科（〒840 佐賀市本庄町1番地）

<sup>4</sup>正会員 工修 （株）熊谷組（〒162 東京都新宿区津久戸町2-1）

地球環境問題から身近な地域の環境問題や工学的諸問題に至るまで拡散数値シミュレーションの重要性は近年益々大きくなっている。拡散シミュレーションを精度よくかつ効率的に行うためには、使用する計算スキームと計算格子間隔の決定に慎重な配慮が必要である。高精度な数値解を得るために使用できるスキームは水理条件や計算格子間隔によって変わってくる。一方、使用する計算スキームが決定されれば高精度数値解を得るために最も効率的な計算格子間隔が存在する。本研究では、無限に続く打ち切り誤差項を二次の数値拡散項に代表させたときの数値拡散係数の概念を用いて、高精度拡散数値シミュレーションのための最適計算手法の開発を行っている。

**Key Words :** diffusion simulation, numerical calculation, advection term, truncation error

## 1. 序論

地球環境予測用の大スケールのGCM (General Circulation Models) から我々の身近な地域の環境問題や工学的諸問題に応用される小スケールの拡散モデルまで、様々な計算モデルを用いた数値シミュレーションが熱や拡散物質の輸送・拡散に対して近年活発に行われるようになってきた。最近のコンピューター技術の発達に伴いかなり大規模な計算まで可能となってきたが、それでも地球レベルの計算では分解能がまだ不十分であり、また我々の身近な水域の拡散計算等においても詳細な三次元の長時間計算は計算機の容量や演算速度、コストの面でまだ困難な場合が多い。このような状況のもとで研究者や技術者達はそれぞれ与えられたハード機器を駆使して、その能力の限界ぎりぎりのレベルで計算を行っているのが実状である。従って与えられた環境や条件のもとで拡散数値シミュレーションを最も効率的かつ高精度に行うための最適計算手法の簡便な選択・決定を可能にすることは極めて重要であり、拡散数値シミュレーションの実務面、研究面で資するところは非常に大きいと思われる。

熱や拡散物質の挙動は移流拡散方程式として知ら

れる偏微分方程式で記述される。与えられた初期条件及び境界条件のもとで、流れのデータを用いてこの方程式を解くことにより拡散物質の挙動の予測を行なうことができるが、解を解析的に求めることは一般的には困難であり、コンピューターによる数値解法が実用的手法となっている。しかしながら、数値解法では新たな問題が生じる。コンピューターが有限桁数で計算するために生じる丸め誤差と微分方程式の離散化にともなう打ち切り誤差である。丸め誤差については倍精度、4倍精度など有効桁数を上げればほぼ解決される問題である。一方打ち切り誤差は数値シミュレーションについてまわる本質的な困難である。

打ち切り誤差を軽減させる最も簡単な方法は計算スキームの安定条件を壊さないように離散間隔を小さくすることである。しかしながら離散間隔を小さくすれば計算量が多くなり、コンピューターの記憶容量や演算速度の面からこの方法による精度の改善には限界がある。

一方、数値解の精度を向上させるもう一つの方法として高精度計算スキームの使用が考えられる。移流拡散方程式の場合、拡散項からの打ち切り誤差よりも移流項からの打ち切り誤差が卓越するため、移

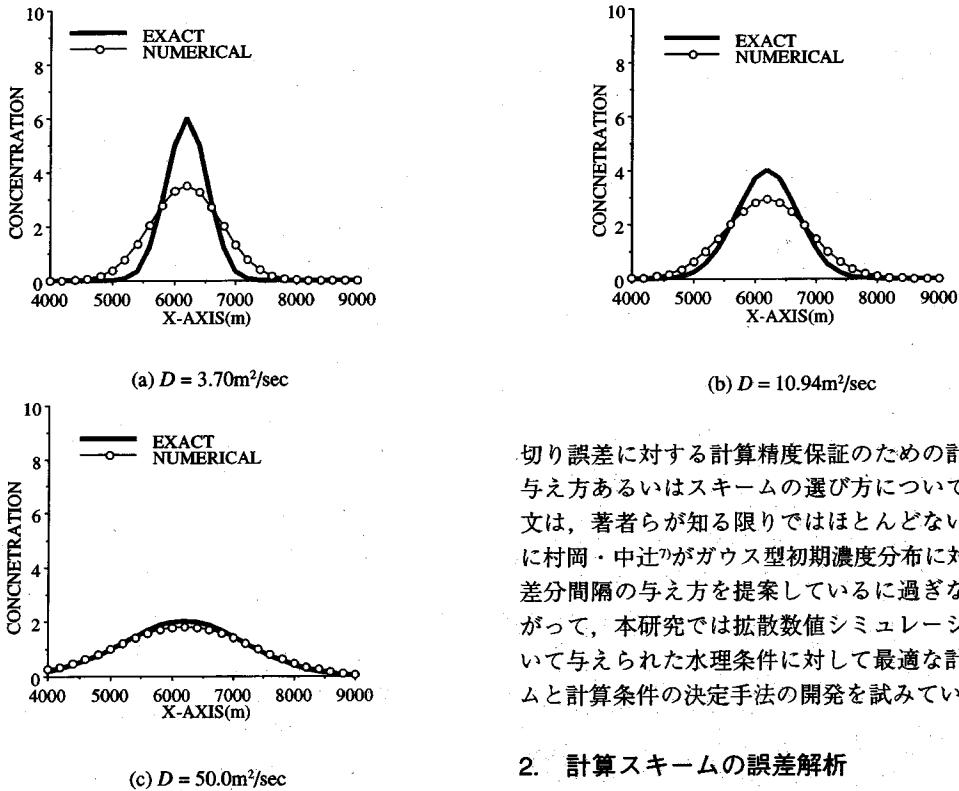


Fig.1 One-dimensional diffusion simulation using the upwind scheme

流項に対して高精度計算スキームを用いればよい。代表的なスキームとしては、QUICK, QUIKEST<sup>1)</sup>, Holly-Preissmann scheme<sup>2)</sup>, 6-Point Scheme<sup>3)</sup>, SOWMAC<sup>4)</sup>等が挙げられる。しかしながら、後述のように拡散項が大きくなってくれば数値拡散の大きい一次精度風上差分でも精度的に充分な計算結果が得られるし、前述のように離散間隔が充分小さければ高精度計算スキームをわざわざ使用する必要性も希薄となってくる。したがって、拡散数値シミュレーションを精度良く実行するために採用できる計算スキームの種類は、拡散係数や流速などの水理条件及び計算格子の大きさなどの計算条件に依存して変わることになる。また逆に、使用する計算スキームの方を決定すれば、それに応じて許容誤差範囲内で計算解が得られるために最も効率の良い計算格子間隔が存在するはずである。しかしながら、今までのところ計算格子間隔や計算スキームの決定の仕方は経験や簡単なモデル計算に基づくことが多く、明確な指標がないのが実状である。

既往の研究は、数値解の精度の問題をスキームの安定性に置き換えて議論される場合が多く<sup>5), 6)</sup>、打ち

切り誤差に対する計算精度保証のための計算条件の与え方あるいはスキームの選び方について述べた論文は、著者らが知る限りではほとんどない。わずかに村岡・中辻<sup>7)</sup>がガウス型初期濃度分布に対する最適差分間隔の与え方を提案しているに過ぎない。したがって、本研究では拡散数値シミュレーションにおいて与えられた水理条件に対して最適な計算スキームと計算条件の決定手法の開発を試みている。

## 2. 計算スキームの誤差解析

### (1) 数値拡散の一般的性質

拡散数値シミュレーションを行う場合、物質輸送を規定する移流拡散方程式を数値的に解かなければならない。一次元の場合、移流拡散方程式は次のようにになる。

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

ここで、 $\Phi$ は拡散物質の濃度、 $u$ は $x$ 方向の流速、 $D$ は物理拡散係数（通常あまりこういう呼び方はしないが、ここでは後述の数値拡散係数と区別するために取て用いる。乱れや速度・濃度の分布等によって生じる乱流拡散・移流分散の程度を表す）である。

今ここで、式(1)の時間微分項には一次精度オイラー法、移流項に一次精度風上差分、拡散項には二次精度中央差分を用いて数値計算を行ってみる。初期条件としてピーク位置 $x=1400\text{m}$ 、ピーク値10、標準偏差200mのガウス型濃度分布を与え、流速 $u=0.5\text{m/sec}$ で9600秒間下流方向に移流・拡散させる。拡散係数は、 $3.70 \text{m}^2/\text{sec}$ ,  $10.94 \text{m}^2/\text{sec}$ ,  $50.0 \text{m}^2/\text{sec}$ の三種類を与えた。それぞれ、9600秒後にピーク値10を6, 4, 2に厳密に減少させる拡散係数である。計算格子間隔は時間間隔 $\Delta t=10\text{sec}$ 、空間間隔 $\Delta x=50\text{m}$ である。計算結果をFig.1に示す。これらの計算結果より、数値解は与えられた物理拡散以上の拡散作用を

受けで大きく減衰していることが分かる。いわゆる数値拡散と呼ばれる現象である。しかしながら、物理拡散が強くなるほど厳密解と数値解の一致の程度が良くなることが分かる。次にこの理由を考察してみよう。

差分法で離散化した式(1)に対して、Taylor級数展開による誤差解析を行えば、一般的に次のような式が得られる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_2 \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_3 \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} + H.O.T. \quad (2)$$

式(2)の右辺第二項以降の項は計算スキームの打ち切り誤差を表す項である。本論文ではこれらの項を数値拡散項と呼ぶこととする。数値拡散項は無限に続く項であるが、二次の項のみに全てを含ませて代表させるものとすれば以下のようにになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + K \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \\ &= (D + K) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = D \Psi^{-1} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 $\Psi \equiv D/(D+K)$ であり、 $K$ は無限に続く数値拡散項を二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 $\Psi = D/(D+K)$ は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ーである。式(1)を数値計算することは式(3)を厳密に解くことに対応する。式(3)から物理拡散が相対的に強くなれば、 $\Psi$ は1に近づき数値誤差は顕著には現れなくなり、逆に物理拡散が小さい場合は $\Psi$ は0に近づき式(3)の拡散係数 $D\Psi^{-1}$ は本来の $D$ よりも大きくなる。これはFig.1の結果と一致する。以上のことから数値拡散係数 $K$ そのものの大小よりも物理拡散係数 $D$ に対する相対的な $K$ の大小が計算精度を支配することが分かる。

## (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（またはフラクショナル・ステップ法<sup>5)</sup>）は移流拡散方程式を純粋移流方程式と拡散だけの式に分割して解く手法である。この手法の利点は比較的計算が安定に行えること<sup>5)</sup>、それの方程式に対して独立に最適な計算スキームを使用できること<sup>3)</sup>等である。

ここでは簡単のため式(1)の一次元移流拡散方程式について考察を行う。式(1)を一次元移流方程式と一次元拡散方程式に形式上分割すれば以下のようになる。

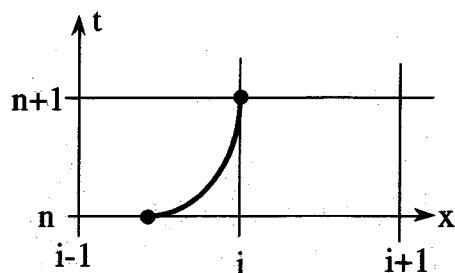


Fig.2 The computational grid and characteristics

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

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

これら両式を一組として1タイムステップ内で順次解いてゆく手法がスプリット・オペレーター・アプローチである。

ところで式(1)を別の観点からみてみると、式(1)は特性曲線法が適用でき、次式のように表される(Fig.2)。

$$\frac{d\Phi}{dt} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad \text{along} \quad \frac{dx}{dt} = u \quad (6)$$

式(6)を $(\xi, t_n)$ から $(x_i, t_{n+1})$ まで特性曲線に沿って積分すれば次式を得る。

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_\xi^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} dt \quad (7)$$

ここで、 $n$ 及び*i*はそれぞれ時間格子点、空間方向の計算格子点を表す。また $\xi$ は $(x_i, t_{n+1})$ を通る特性曲線の $t=t_n$ における足の座標であり、常に計算格子点上にあるとは限らない。式(7)より $\Phi_i^{n+1}$ を求めるためには $\Phi_\xi^n$ を求めておく必要がある。そこで次に式(1)において $D=0$ の純粋移流の場合（式(4)に対応）を考えれば式(7)は式(8)のように簡単になる。

$$\Phi_\xi^n = \Phi_{i,a}^{n+1} \quad (8)$$

ここで $\Phi_{i,a}^{n+1}$ は一次元移流方程式の $(x_i, t_{n+1})$ における解である。

式(8)を式(7)に代入すれば次のようになる。

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_{i,a}^{n+1} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} dt \quad (9)$$

式(9)を解いて $\Phi_{i,a}^{n+1}$ を求めるためには、まず式(4)を解いて $\Phi_{i,a}^{n+1}$ を求めた後その値を用いて式(5)（式(9)）を解けばよいことになる。この手順はスプリット・オペレーター・アプローチと全く

同じである。このことからスプリット・オペレーター・アプローチは単なる数値計算上の近似操作ではなく、この計算法に数学的・物理的根拠を与えることが分かる。

拡散項の計算から生じる誤差は小さいことが分かっているので、計算結果の精度は  $\phi_{\text{out}}$  の値の精度に依存してくる。つまり移流方程式（式（4））の計算を如何に精度よく行えるかが高精度な解を得る鍵となる。

### (3) 数値拡散項によるスキームの精度評価

前節でも述べたように拡散項から生じる打ち切り誤差は一般的に小さいため、移流項から生じる誤差のみを対象として考察すれば良い。また多次元の移流の問題も後述のように一次元の移流の重ね合わせと考えられる<sup>4)</sup>ので、ここでは、式（4）で表される一次元移流方程式について考察をすすめる。

式（4）を離散化し、Taylor級数展開による誤差解析を行なえば、式（10）を得る。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = k_2(a) \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_3(a) \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} + H.O.T. \quad (10)$$

式（10）の右辺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る。 $k_2(a) \Delta x^2 / (2! \Delta t)$ 、 $k_3(a) \Delta x^3 / (3! \Delta t)$ 、…は数値拡散係数である。ここで  $a$  はクーラン数とよばれ、 $a \equiv u \Delta t / \Delta x$  で定義される。無限に続く数値拡散項を分散を引き起こす偶数次の項と位相誤差の原因となる奇数次の項に分けそれを筆頭項である二次の項と三次の項で代表させるものとすれば以下のようなになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = K_2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + K_3 \frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3} \quad (11)$$

ここで、 $K_2$  は無限に続く数値拡散項の偶数次の項を二次の項で代表させたときの見かけの数値拡散係数であり、 $K_3$  は同様に三次の見かけの数値拡散係数である。 $K_2, K_3$  は以下のようにまとめられる。

$$K_2 = \left[ \frac{k_2(a)}{2!} + \frac{k_4(a) \Delta x^2}{4!} \left( \left( \frac{\partial^4 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^4} \right) \left( \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) \right) + \dots \right] \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (12)$$

$$K_3 = \left[ \frac{k_3(a)}{3!} + \frac{k_5(a) \Delta x^2}{5!} \left( \left( \frac{\partial^5 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^5} \right) \left( \frac{\partial^3 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^3} \right) \right) + \dots \right] \frac{\Delta x^3}{\Delta t} \quad (13)$$

式（12）および式（13）を無次元化すれば次のようになる。

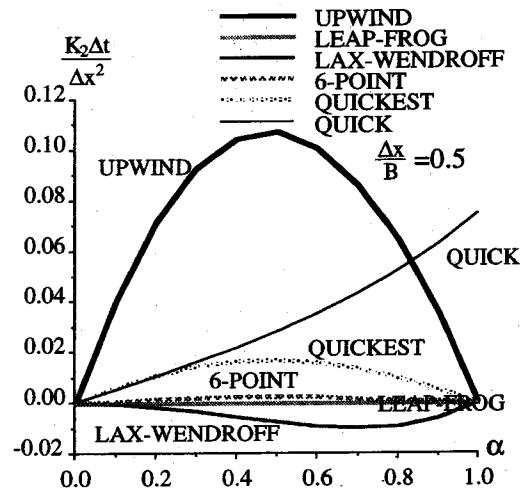


Fig.3 Relationship between non-dimensional 2nd-order numerical diffusion coefficient and  $\alpha$

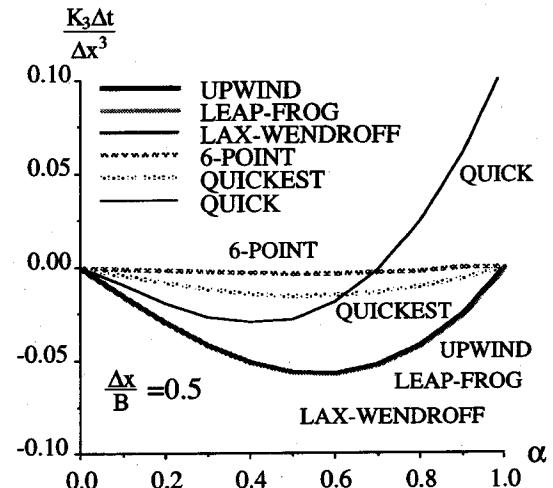


Fig.4 Relationship between non-dimensional 3rd-order numerical diffusion coefficient and  $\alpha$

$$\begin{aligned} \frac{K_2 \Delta t}{\Delta x^2} &= \frac{k_2(a)}{2!} + \frac{k_4(a) (\Delta x)^2}{4!} \left( \left( \frac{\partial^4 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^4} \right) \left( \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) \right) \\ &\quad + \frac{k_6(a) (\Delta x)^4}{6!} \left( \left( \frac{\partial^6 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^6} \right) \left( \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^2} \right) \right) + H.O.T. \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{K_3 \Delta t}{\Delta x^3} &= \frac{k_3(a)}{3!} + \frac{k_5(a) (\Delta x)^2}{5!} \left( \left( \frac{\partial^5 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^5} \right) \left( \frac{\partial^3 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^3} \right) \right) \\ &\quad + \frac{k_7(a) (\Delta x)^4}{7!} \left( \left( \frac{\partial^7 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^7} \right) \left( \frac{\partial^3 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{x}^3} \right) \right) + H.O.T. \end{aligned} \quad (15)$$

ここで、 $\Phi = \Phi_0 \tilde{\Phi}$ 、 $x = B \tilde{x}$  であり、 $\Phi_0$  は代表濃度、 $\tilde{\Phi}$  は無次元濃度、 $B$  は濃度分布の代表長さスケール、

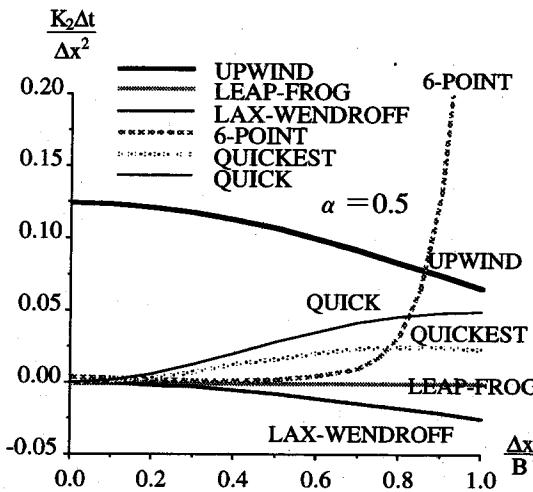


Fig.5 Relationship between non-dimensional 2nd-order numerical diffusion coefficient and  $\Delta x/B$

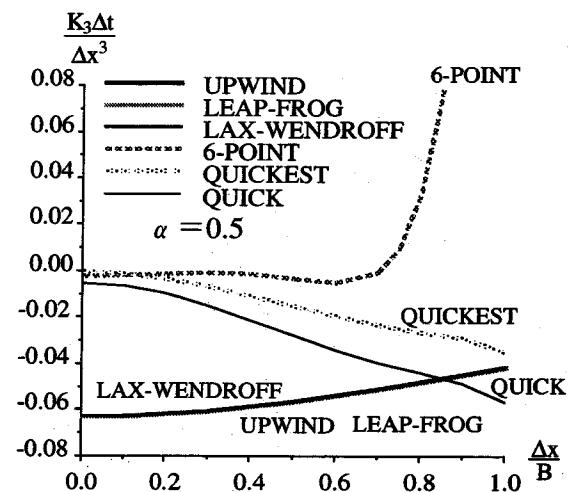


Fig.6 Relationship between non-dimensional 3rd-order numerical diffusion coefficient and  $\Delta x/B$

$\tilde{x}$  は無次元座標である。これらの数値拡散係数は、流れの水理条件、計算条件によってつくられるパラメーター  $\alpha$  および  $\Delta x/B$  に依存しており、これらの係数の値から種々の条件下における計算スキームの特性や精度を検証することができる。式(14)、式(15)には未知量として無次元濃度微係数の比が残されているが、この比は自然界でも最も一般的な濃度分布と思われるガウス分布のピーク位置における微係数の比で代表させることとする。このとき代表長さ  $B$  はガウス分布のピーク値の半値半幅を用いることにする。

上式を用いて upwind scheme, leap-frog scheme, Lax-Wendroff scheme, 6-point scheme, QUICK scheme, QUICKEST scheme を移流項に適用した場合の数値拡散係数を求めた。なお、upwind scheme と QUICK scheme については、時間積分項に一次精度オイラー法および二次精度 Adams-Basforth 法をそれぞれ採用した。スキームの詳細は付録 A に示す。Fig.3 は  $\Delta x/B = 0.5$  の時の  $K_2 \Delta t / \Delta x^2$  と  $\alpha$  の関係であり、Fig.4 には同じく  $\Delta x/B = 0.5$  の時の  $K_3 \Delta t / \Delta x^3$  と  $\alpha$  の関係を示している。なお、 $K_2 \Delta t / \Delta x^2$  は項数を 20 次まで、 $K_3 \Delta t / \Delta x^3$  は項数を 19 次まで考慮して値を計算した。なお、Fig.4において upwind scheme, leap-frog scheme および Lax-Wendroff scheme の奇数次の数値拡散項は同型になるため三次の見かけの無次元数値拡散係数は同じ値をとる。後述の Fig.6 も同様である。これらの図から各計算スキームの精度が一目瞭然に判明する。一次精度風上差分は他のスキームと較べても大きな数値拡散係数をもつことが分かる。スキームによって多少傾向は異なるが、 $\alpha = 0.5$  付近で

無次元数値拡散係数の絶対値は最大になることが多い。このことから、 $\alpha$  が 0.5 近傍の値をとるとときが一番計算の精度を落すことが分かる。

Fig.5 は  $\alpha = 0.5$  の時の  $K_2 \Delta t / \Delta x^2$  と  $\Delta x/B$  の関係を示している。upwind scheme の場合  $\Delta x/B$  が 1 に近づくにつれて  $K_2 \Delta t / \Delta x^2$  の値が多少減少する傾向にあるが、Lax-Wendroff scheme を除く他のスキームは一様にその値が増加し、 $\Delta x/B$  が大きくなると精度が悪くなる。一方、Lax-Wendroff scheme の  $K_2 \Delta t / \Delta x^2$  の値は常に負である。これは負の拡散係数を附加していることに相当するため、このことから物理拡散がないかもしくは弱い場合は、離散間隔  $\Delta x$  が大きくなると解は不安定になることが示唆される。また leap-frog scheme には偶数次の数値拡散項が存在しないため、二次の見かけの無次元数値拡散係数の値は 0 である（付録 B 参照）。

Fig.6 には  $\alpha = 0.5$  の時の  $K_3 \Delta t / \Delta x^3$  と  $\Delta x/B$  の関係を示している。一般に二次の数値拡散項は数値分散を発生させ、三次の数値拡散項は位相誤差の原因となる。leap-frog scheme は奇数次の項のみで二次の数値拡散項が存在しないため、発生した位相誤差を減衰させることができない。従って物理拡散が強くなっている場合は、Lax-Wendroff scheme と同様解は不安定になりやすい。

### 3. 最適計算手法の決定法

#### (1) 数値拡散係数と誤差

前述のように式(1)を数値的に解くことは式(3)を厳密に解くことと等価である。つまり、 $\Psi \neq$

1の時の式(3)の厳密解は何らかの数値誤差を含む場合の数値計算解に相当する。したがって、 $\Psi=1$ の場合の厳密解と $\Psi=1$ の場合の厳密解を比較することによって、数値拡散係数 $K$ により生じる数値解の誤差を評価することができる。ここでは拡散場として厳密解を求めることができない様流中の瞬間面源からの濃度拡散場を採用し、数値拡散係数 $K$ とそれによつて生じる誤差の間の関係を量化する。

$x$ 方向に一様流速 $u$ 、一定の拡散係数 $D\Psi^2$ をもつ流れ場に拡散物質が面源から（単位面積当たり $M$ の質量）瞬間に放出されると、流下しながら拡散してガウス型濃度分布が形成される。このとき得られる濃度分布の解析解の $(x,t)$ 座標を移動させて $t=0$ でピーク位置が $x_0$ 、標準偏差 $\sigma$ となるように書き直すと、式(3)の厳密解として次式が得られる。

$$\Phi(x,t) = \frac{M}{\sqrt{2\pi(2D\Psi^{-1}t + \sigma^2)}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0-ut)^2}{2(2D\Psi^{-1}t + \sigma^2)}\right\} \quad (16)$$

$\Psi=1$ で数値誤差がない時の濃度分布の最大値を $\Phi_m$ 、 $\Psi\neq1$ の時の最大値を $\Phi'_m$ とすれば、数値解と厳密解の間の相対誤差 $E_R(\%)$ は式(16)を用いて次のように表される。

$$E_R = \left( \frac{\Phi_m - \Phi'_m}{\Phi_m} \right) \times 100 = \left( 1 - \sqrt{\frac{(2t^* + 1)\Psi}{2t^* + \Psi}} \right) \times 100 \quad (17)$$

ここで、 $t^* = Dt/\sigma^2 = (2\ln 2)Dt/B^2$ で、 $t^*$ は基準時刻( $t=0$ )からの無次元拡散時間を表し、代表長さ $B$ はピーク値の半幅である。

式(17)を $\Psi$ に関して変形しなおせば式(18)が得られる。

$$\Psi = \frac{2t^*\left(1 - \frac{E_R}{100}\right)^2}{2t^* + 1 - \left(1 - \frac{E_R}{100}\right)^2} \quad (18)$$

この式と $\Psi$ の定義式から、任意の時刻における相対誤差とそれを引き起こした見かけの数値拡散係数 $K$ の関係が求められる。自然界の複雑な拡散現象も短時間の局所的な拡散現象の重ね合わせと考えれば、このように簡単なガウス分布を用いても、得られた数値拡散係数と相対誤差の関係についてはかなり高い近似度が期待できるものと思われる。

## (2) 移流項計算スキームの選択手法

本節では与えられた水理条件、計算条件及び許容誤差のもとで使用可能な移流項計算スキームの選択手法の開発を行う。ところで、前章では無限に続く

数値拡散項を偶数次と奇数次の項に分離し、それぞれを二次と三次の項に代表させて各スキームの精度を議論した。しかしながら、式(3)や式(18)から評価される量は、すべての誤差項を二次の項で代表させたときの見かけの数値拡散係数 $K$ である。そこで、すべての誤差項を二階の微係数で除して二次の項にまとめ直せば次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{K\Delta t}{\Delta x^2} &= \frac{k_2(a)}{2!} + \frac{k_3(a)}{3!} \left( \frac{\Delta x}{B} \right) \left\{ \left( \frac{\partial^3 \tilde{\Phi}}{\partial x^3} \right) \left( \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial x^2} \right) \right\} + \frac{k_4(a)}{4!} \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^2 \\ &\quad \times \left\{ \left( \frac{\partial^4 \tilde{\Phi}}{\partial x^4} \right) \left( \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial x^2} \right) \right\} + \frac{k_5(a)}{5!} \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^3 \left\{ \left( \frac{\partial^5 \tilde{\Phi}}{\partial x^5} \right) \left( \frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial x^2} \right) \right\} \\ &\quad + H.O.T. \end{aligned} \quad (19)$$

ここで式(19)中の微係数の比を再びガウス分布のピーク位置における値で代表させて評価する。このとき奇数階の微係数はすべて0になるため、結果的に式(19)は式(14)と一致することになる。計算精度が最も低下する $a=0.5$ の場合を対象として式(19)から計算した結果を $\Delta x/B$ に対してプロットしたFig.7(Fig.5に対応する)を用いて下記の手順でスキームの選択を行う。

- 1) 拡散シミュレーションにおいて、計算時間 $t$ 内で許容される相対誤差 $E_R$ 、物理拡散係数 $D$ 、濃度の代表拡散長さスケール $B$ から式(18)を用いてパラメータ $\Psi$ の値を決定する。
- 2) 物理拡散係数 $D$ 、パラメーター $\Psi$ の値から $\Psi$ の定義式を用いて許容できる数値拡散係数 $K$ の値を求める。
- 3) 得られた $K$ の値を用いて判定基準のための点G( $\Delta x/B, K\Delta t/\Delta x^2$ )をFig.7上にプロットする。
- 4) Fig.7上で点Gよりも下に位置するスキームであれば全てこの場合は使用可能となる。
- 5) それらのスキームの中からスキーム自身の簡便さや使用格子点の数が少ないとこと、また境界条件の取り扱いの容易さなどを考慮して一つを選択すればよい。

## (3) 計算条件の決定手法

使用する移流項計算スキームが先に決められている場合は、所定の精度を満足するような計算解を得るために計算格子間隔 $\Delta x$ 、 $\Delta t$ をFig.7から決定することができる。上述の手順の1)、2)までを同様に行い、それ以降を次の手順で行えば良い。

- 3) Fig.7上において、 $\Delta x, \Delta t$ を適宜変化させて使用するスキームの判定曲線にできるだけ近くかつ上に点Gが位置するように $\Delta x, \Delta t$ を決定する。

- 4) 決定した計算格子間隔が CFL 条件等の安定条件を満足していることを確認し、もし満足していないなければ再び 3) に戻る。

ところで計算スキームの使用可否の判定については、最も数値拡散が大きくなると思われる  $\alpha=0.5$  を対象として判定が行われるが、計算格子間隔の判定ではクーラン数は採用する格子間隔によって様々な値をとる。したがって、判定を行う際には、Fig.7に対応する各クーラン数の図表が必要となる。しかしながら、Fig.7を用いれば安全側となるが一応判定ができるということ、また各クーラン数の図表は付録Bに記載されている二次の無次元数値拡散係数を参照すれば容易に作成できるということから本論文では割愛する。

流速、拡散係数が時間的・場所的に変化する場合は、数値誤差を最大にする可能性のある最大流速と最小物理拡散係数を代表量として用いればよいと思われるが、拡散項の安定性は最大物理拡散係数で考慮しなければならないことに注意が必要である。

#### 4. 最適計算手法の検証

##### (1) ガウス型濃度分布による検証

上述の手順に従って移流項計算スキームの選択を具体的にガウス型濃度分布の移流拡散計算に対して行ってみよう。標準偏差200m、ピーク値10、ピークの初期位置  $x=1400\text{m}$  のガウス型濃度分布を一定流速  $0.5\text{m/sec}$  で  $9600\text{sec}$  間移流させる。拡散係数  $D$  の値は  $1.172\text{m}^2/\text{sec}$  である。これは  $9600\text{sec}$  後にピーク値10を8に厳密に減少させる拡散係数である。代表長さスケール  $B$  はガウス型濃度分布のピーク値の半值半幅である  $235.5\text{m}$  を用いる。この場合  $t_*$  は  $0.281$  となる。計算格子条件はTable 1に示す4通りである。どのケースもクーラン数は  $0.5$  となるようにしている。また  $9600\text{sec}$  後の許容相対誤差を  $10\%$  と設定したときの  $\psi$ 、許容できる数値拡散係数  $K$  および  $K \Delta t / \Delta x^2$  の値も同表に示す。

Table 1の  $\Delta x/B$  とその時の  $K \Delta t / \Delta x^2$  を Fig.5 上にプロットした結果が Fig.7 である。この図から相対誤差  $10\%$  以内で使用できるスキームが明らかとなりその結果を Table 2 に示す。Table 2 中の○印は使用可能を示し × 印が使用不可能を示す。また、実際に計算した結果から判断したスキームの適用の可否を Table 3 に示す。括弧の中の数字はピーク値における実際の計算解と厳密解の相対誤差を示している。Fig.8 は各種スキームで計算した結果を示している。Fig.7 の判断基準の対象スキームにはなっていないが参考のために小松・大串・朝位によって開発された SOWMAC

Table 1 Computational conditions and non-dimensional numerical diffusions

$\Delta x(\text{m})$	100	50	10	5
$\Delta t(\text{sec})$	100	50	10	5
$\Delta x/B$	0.425	0.212	0.0425	0.0212
$\Psi$	0.6054	0.6054	0.6054	0.6054
$K (\text{m}^2/\text{sec})$	0.7636	0.7636	0.7636	0.7636
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.007636	0.01527	0.07636	0.1527

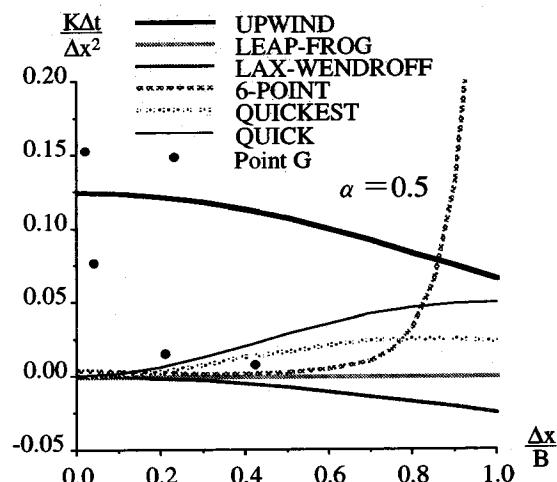


Fig.7 Diagram of criterion for selecting the usable schemes

schemeによる計算結果も示している。ここで、upwind scheme以外の図においては  $\Delta x/B = 0.0212$  の計算結果は厳密解とあまり差がないので割愛している。また、leap-frog schemeとQUICK schemeはこの場合計算が発散したため適用不可となっている。これは拡散項の計算に対する安定性の問題と思われる。なお、leap-frog scheme、Lax-Wendroff scheme、6-point schemeおよびSOWMAC schemeについても移流項の計算と拡散項の計算を分離して行なうスプリット・オペレーター・アプローチを採用した。

前章で leap-frog scheme と Lax-Wendroff scheme は解が不安定になりやすいことを述べたが、計算結果もそのことを示している。特に leap-frog scheme は位相誤差が大きく、判定基準では使用可能であっても実際は使用不可能な場合があった。このように位相誤差が顕著に表れやすいスキームについては Fig.6 の  $K$  の値を参照して判定を行う必要がある。唯、leap-frog scheme に関して言えば、高精度が要求される場合にはその使用は避けたほうが無難であると思われる。

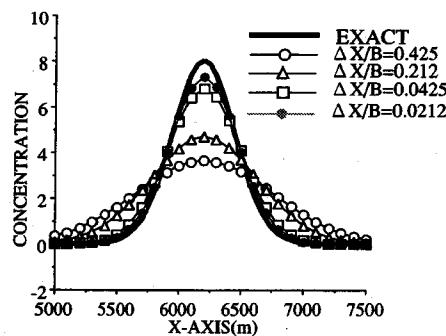
本研究のスキームの選択基準は拡散項の計算の安定性は考慮していないために  $\Delta x/B = 0.0212$  の場合の leap-frog scheme と QUICK scheme のように判定ミスを

Table 2 The usable schemes judged from the theory

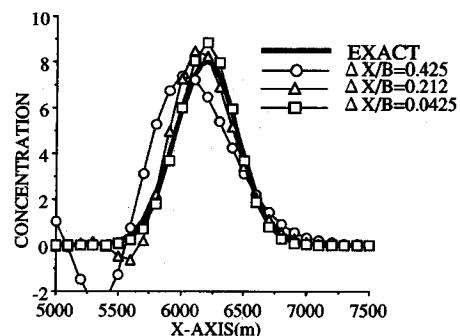
$\Delta x/B$	Upwind	Leap-frog	Lax-Wendroff	6-point	QUICKEST	QUICK	SOWMAC
0.425	X	O	O	O	X	X	-
0.212	X	O	O	O	O	O	-
0.0425	X	O	O	O	O	O	-
0.0212	O	O	O	O	O	O	-

Table 3 The usable schemes judged from the numerical results

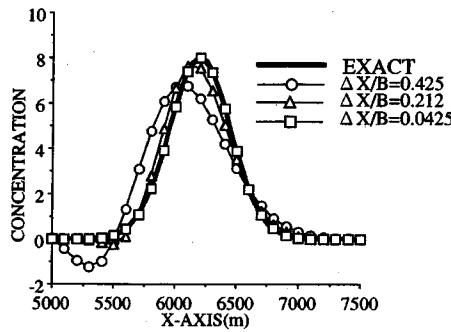
$\Delta x/B$	Upwind	Leap-frog	Lax-Wendroff	6-point	QUICKEST	QUICK	SOWMAC
0.425	X (54.61)	O (7.660)	X (15.71)	O (1.751)	X (9.435)	X (8.550)	O (0.042)
0.212	X (41.51)	O (6.330)	O (3.330)	O (2.044)	O (1.741)	O (1.782)	O (0.084)
0.0425	X (15.00)	X (10.42)	O (0.026)	O (0.595)	O (0.014)	O (0.016)	O (0.002)
0.0212	O (8.409)	-	O (0.005)	O (0.402)	O (0.003)	-	O (0.001)



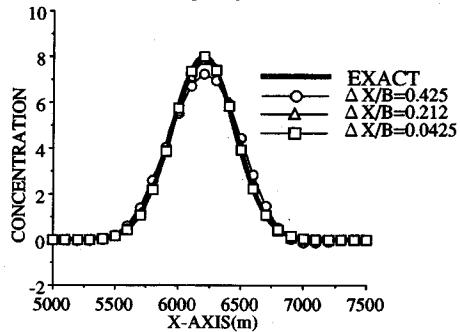
(a) Upwind scheme



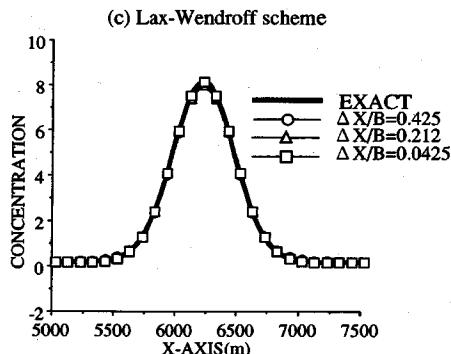
(b) Leap-frog scheme



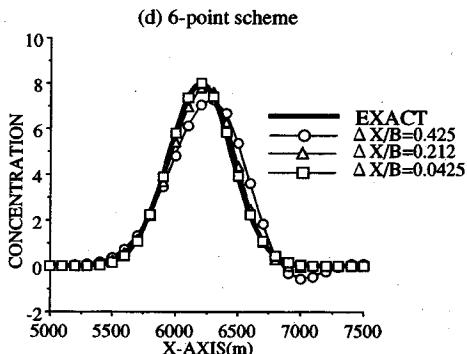
(c) Lax-Wendroff scheme



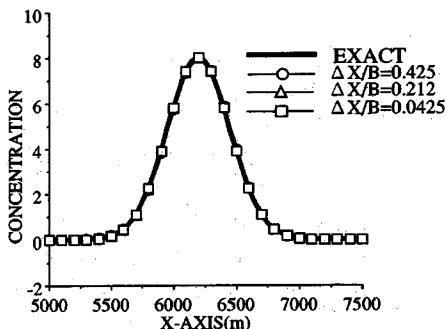
(d) 6-point scheme



(e) QUICKEST scheme



(f) QUICK scheme



(g) SOWMAC scheme

Fig.8 Computational results of test problem

犯す場合があるが、概ね判定通りの結果が得られている。

なお、SOWMAC schemeは一階の移流方程式ではなく二階の波動方程式に基づく解法であるため、2章3節に述べている解析方法ではSOWMAC schemeの精度を直接他のスキームと比較することはできない。しかしながら、SOWMAC schemeは6-point schemeと同様もしくはそれ以上の計算精度を示すことから、判定の基準として6-point schemeの場合を参照すればほぼ問題ないと思われる。

## (2) モデル湾における移流拡散計算による検証

選択手法はガウス型濃度分布に基づいて構築されているため、同じガウス型の濃度分布による検証では判定通りの結果を得るのはむしろ容易と言える。したがって、この節ではモデル湾における移流拡散計算でスキームの選択手法の検証を行う。

Fig.9に示しているモデル湾を対象にして一次元移流拡散シミュレーションを行った。基礎方程式は連続の式と一次元移流分散方程式であり、それぞれ式(20)および式(21)に示す。

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = q \quad (20)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left( AD_L \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{d}{A} - \frac{\Phi}{A} q \quad (21)$$

ここで $Q$ は断面通過流量、 $q$ は単位時間単位長さ当たりの淡水流入量、 $\varphi$ は拡散物質の濃度、 $A$ は湾の断面積、 $D_L$ は潮汐運動の影響が加味された一次元分散係数、 $q'$ は単位時間単位長さ当たりの拡散物質の供給質量である。流速は式(20)から求めた。

以下に示す二ケースについてモデル計算を行った。

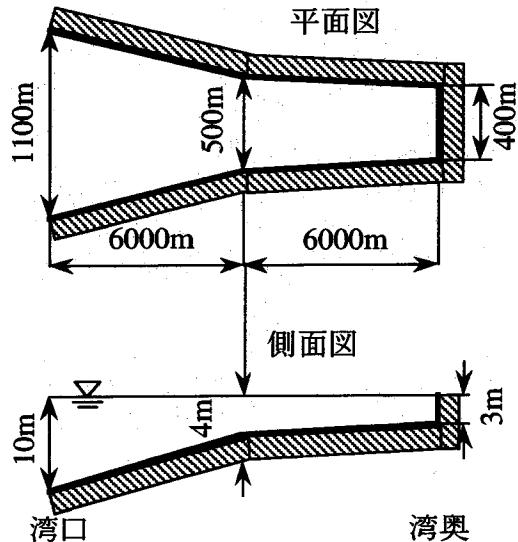


Fig.9 Sketch of model bay

Table 4 Non-dimensional numerical diffusion coefficients

Relative error (%)	1	10
$\Psi$	0.3108	0.03757
$K$ ( $m^2/sec$ )	22.17	256.2
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.04434	0.5123

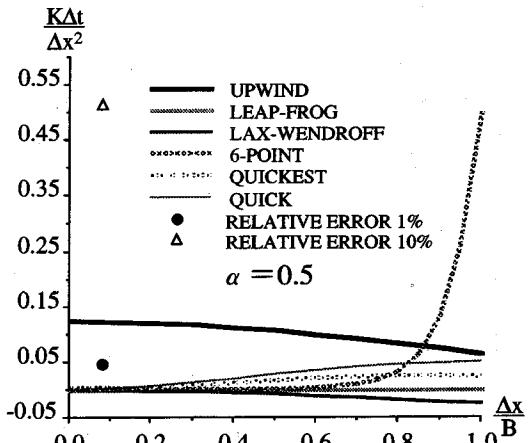


Fig.10 Diagram of criterion for selecting the usable schemes  
(for model bay)

CASE-1：湾口から4500mおよび9500mの位置からそれぞれ $500m^3/sec$ の淡水供給を行う。拡散係数は $10m^2/sec$ である。初期条件として湾口で1.0、湾奥で10.0となるような直線濃度分布を与えた。計算格子間隔は $\Delta x=500m$ 、 $\Delta t=500sec$ で、 $t=12000sec$ まで非定常計算を行う。

CASE-2：水理条件、計算条件ともCASE-1と同様で

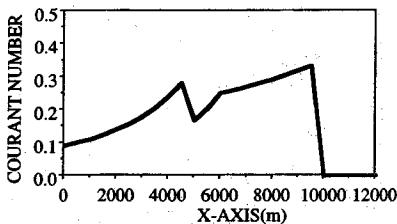


Fig.11 Courant number of model bay

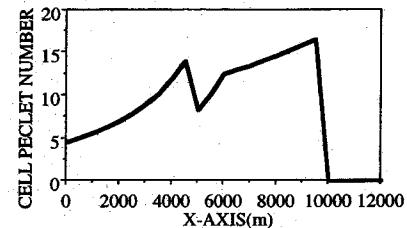


Fig.12 Cell Péclet number of model bay

Table 5 Relative errors of numerical results to REFERENCE (%)

	Upwind	Leap-frog	Lax-Wendroff	6-point	QUICKEST	QUICK	SOWMAC
CASE-1	149.5	124.0	111.1	77.77	117.6	98.36	78.75
CASE-2	4.609	6.625	4.184	2.799	3.522	3.322	2.612

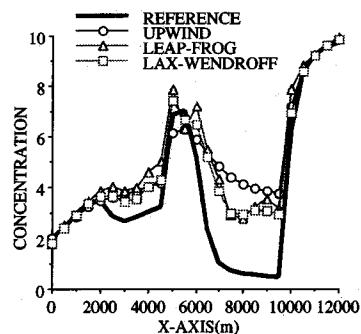
あるが、拡散物質を淡水供給と同じ位置の2カ所から毎秒10.0の割合でそれぞれ連続投入する。

境界条件は湾口では流出条件、湾奥では濃度フラックスが0の条件を用いた。

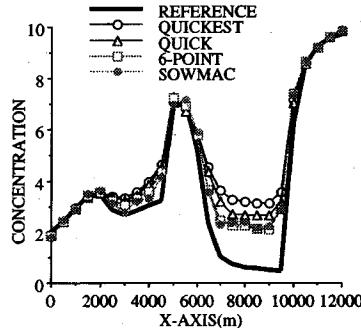
判定の対象としたスキームは4章1節の場合と同様である。このモデル計算では厳密解を求めることができないため、6-point schemeを用いて $\Delta x=10m$ ,  $\Delta t=0.1sec$ という非常に細かい計算格子間隔で計算した結果を厳密解に近い参考データ(REFERENCE)とした。QUICK schemeおよびQUICKEST schemeは通常保存形式で用いられるが、ここでは局所的に流速は一定として非保存形式(対流形式)で計算を行った。

許容相対誤差を1%および10%として3章の手順に従ってスキームの選択を行ってみる。長さスケールを今仮に初期濃度分布のピーク値の半値半幅とすれば $B=6000m$ となる。無次元拡散時間は $t^*=0.00462$ となり、これらの値を用いて $\Psi$ 、許容できる数値拡散係数 $K$ 及び無次元数値拡散係数 $K\Delta t/\Delta x^2$ を求めた結果をTable 4に示す。また判定基準となる点G( $\Delta x/B$ 、 $K\Delta t/\Delta x^2$ )をFig.5上にプロットしたものがFig.10である。この図より相対誤差が10%の場合はすべてのスキームが使用可能となり、相対誤差が1%の場合はupwind scheme以外は使用可能であると判断される。なお、CASE-1と2の相違点は拡散物質の連続供給の有無だけであるが、それは判定の要素には入っていないので、判定基準となる図表は両者とも同じになる。

Fig.11及び12はそれぞれクーラン数、格子ペクレ数を示している。正のクーラン数は湾口に向かう方向の流速に対応する。格子ペクレ数の定義式は $u\Delta x/D$ であり、これは移流項と拡散項の比を表す。このモデル計算では、移流が拡散よりも約10倍程度大きい



(a) Results obtained by upwind, leap-frog and Lax-Wendroff schemes

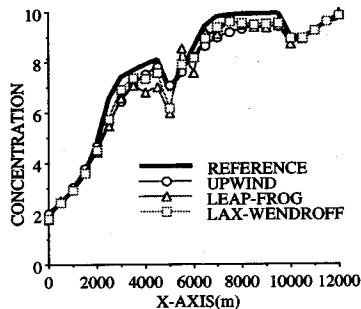


(b) Results obtained by QUICKEST, QUICK, 6-point and SOWMAC schemes

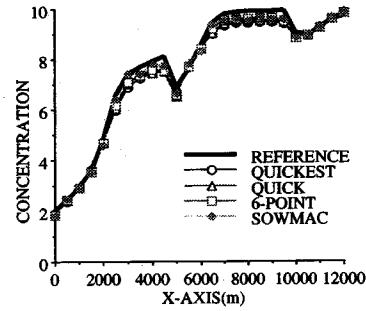
Fig.13 Numerical results for CASE-1

ことが示されている。湾口から9500m地点より奥側では流速は0であるため拡散物質は拡散のみで輸送されることになる。

Fig.13, 14にCASE-1, CASE-2の計算結果を示す。Fig.13において7000mから9000mの位置で計算結果はREFERENCEよりも大きな値を示しており、湾外に流出した物質の質量はREFERENCEのそれよりもかなり少なく物質保存が成立していないようと思われる。またFig.4においても湾内にとどまっている物質



(a) Results obtained by upwind, leap-frog and Lax-Wendroff schemes



(b) Results obtained by QUICKEST, QUICK, 6-point and SOWMAC schemes

Fig.14 Numerical results for CASE-2

の質量は計算解とREFERENCEでは異なっている。この理由は次のように考えられる。計算初期時において点源淡水・物質供給により局所的な濃度分布の急激な変化が生じる。しかしながら、ここで用いた計算格子間隔はこの濃度分布の急激な変化を捉えることができるほど小さくなかったため、湾内に供給される淡水量や投入物質量を正しく評価することができず、それが数値誤差として蓄積されたものと思われる。

各スキームによる計算結果とREFERENCEとの相対誤差をTable 5に示す。ここでは次式で定義される相対誤差を用いた。

$$\text{Relative error} \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{|\Phi_R j - \Phi_j|}{\Phi_R j} \quad (22)$$

ここで、 $N$ は500m間隔でのノード数、 $\Phi_R$ はREFERENCEの解、 $\Phi$ は計算結果である。

CASE-1については、どのスキームによる計算結果もかなり大きな相対誤差を示し、判定はすべて空振りに終ってしまった。これは長さスケールが時間的、空間的に淡水の流入により局所的に大きく変化したため、初期条件の長さスケールだけでは充分な判定ができなかったためである。一方、CASE-2については全てのスキームが10%の許容相対誤差は満たしているものの1%の相対誤差までは満足していない。CASE-2では淡水供給地点で拡散物質の連続供給があるため、濃度分布は比較的なだらかな形状となり、初期の長さスケールがそれ程大きく変化しなかつたためCASE-1の場合よりも判定に近い結果が得られている。

この例からも分かるように判定の精度を向上させるためには拡散長さスケール $B$ に対する注意深い決定が必要である。簡単なスキームを用いて予備計算を行い、得られた概略の濃度分布から局所的な拡散長

Table 6 The effective computational grid size judged from theory

Relative error (%)	10	5
$\Delta x(m)$	5	2
$\Delta t(sec)$	5	2
$\Delta x/B$	0.02123	0.008493
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.1207	0.1389
Relative error evaluated by results(%)	10.31	4.53

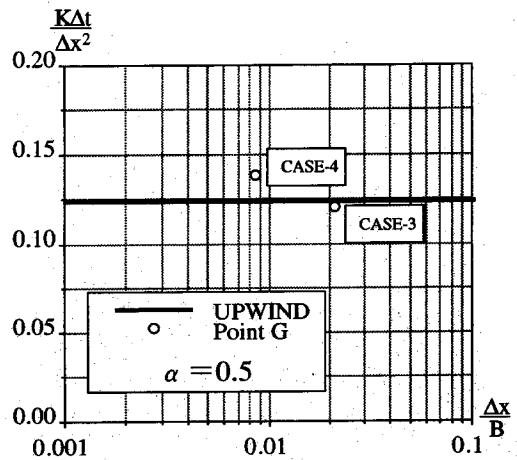


Fig.15 Diagram of criterion for selecting the effective computational grid size

さスケール $B$ の見込みをつけ、それらの内最も小さい値を $B$ として用いて選択手法を適用することにより良い結果が得られている。

### (3) 計算条件の決定に対する検証

前節では計算スキームの選択手法に対する検討を行ったが、本節では使用する計算スキームが予め決められている場合の最適計算格子間隔の決定につい

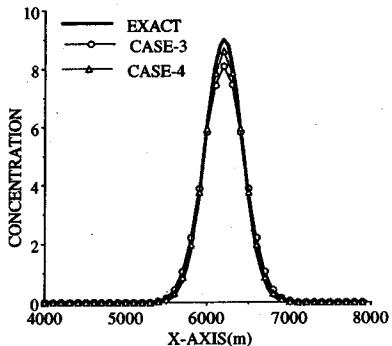


Fig.16 Computational results obtained by Upwind scheme

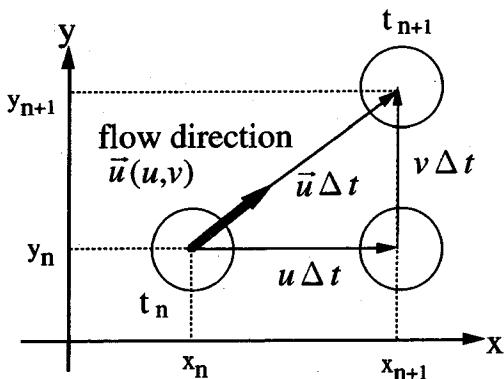


Fig.17 2-dimensional pure advection

て検証を行う。

(1) 節と同様に、標準偏差200m、ピーク値10、ピーク値の初期位置が $x=1400$ mのガウス型濃度分布を0.5m/secの速度で下流方向へ9600sec間移流拡散させる問題を考える。拡散係数については0.4887m<sup>2</sup>/secを与える。これは初期ピーク値10を9600秒後に厳密に9に減少させる拡散係数である。使用する計算スキームをupwind schemeとして、所定の精度で計算可能な計算格子間隔の決定を3章3節の手順に従って行った。

許容相対誤差を10% (CASE-3) 及び5% (CASE-4) とした場合に最適な計算格子間隔として推定された結果をTable 6に示す。なお、両ケースともクーラン数が0.5になるように計算格子間隔を決定した。Fig.15は採用した計算格子間隔による点Gとupwind schemeの無次元数値拡散係数の位置関係を示したものである。点Gの座標及びピーク値における計算解と厳密解との相対誤差をTable 6に示す。またFig.16には計算結果を示している。CASE-3については、点Gは理論曲線よりも若干下側に位置しているため相対誤差は10.3%となり、ややオーバーしているがほぼ所定通りの精度が得られていると言える。CASE-4の場合点Gは理論曲線よりも若干上側にあるため、相対

Table 7 The effective computational grid size judged from the theory

Relative error (%)	10	5
CASE-3		
$\Delta x/B$	0.849	
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.00397	0.00183
Relative error judged from result(%)		
CASE-4		
$\Delta x/B$	0.425	
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.00183	0.00366
Relative error judged from result(%)		

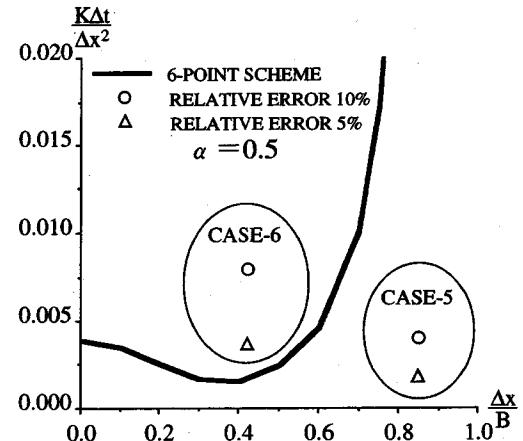


Fig.18 Diagram of criterion for selecting the usable schemes

誤差は4.5%となって所定の精度よりも良い結果を示している。いずれのケースも所定通りの精度が得られており、この手法が最適格子間隔の決定に応用できることが分かる。

## 5. 多次元問題への拡張

本章では一次元移流拡散方程式を対象として開発された本論の最適計算手法を多次元問題へ拡張する。三次元問題も同様であるので、簡単のためここでは二次元問題について考察する。

二次元の移流拡散方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + q \quad (23)$$

ここで $u$ は $x$ 方向の流速、 $v$ は $y$ 方向の流速である。 $D_x$ 、 $D_y$ はそれぞれ $x$ 方向、 $y$ 方向の物理拡散係数であり、 $q$ は拡散物質のソース項である。スプリット・オ

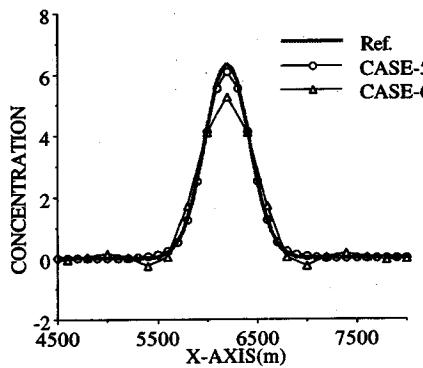


Fig.19 Result obtained by 6-point scheme (along  $x$ -axis passing through the peak)

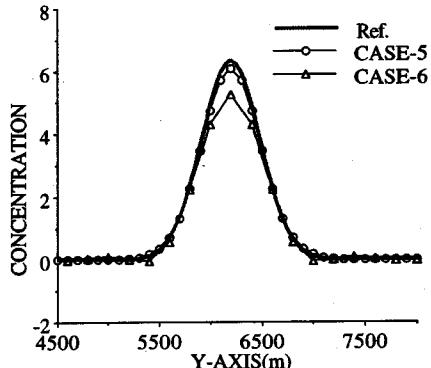


Fig.20 Result obtained by 6-point scheme (along  $y$ -axis passing through the peak)

ペレーター・アプローチを適用して移流方程式と拡散の式に分離すれば次のようになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + q \quad (25)$$

ここで二次元の移流方程式について次のように考察する。式 (24) は Fig.17において時刻  $t=t_n$  に座標  $(x_n, y_n)$  の位置にあった流体塊（拡散物質）が時間間隔  $\Delta t$ だけ経過した  $t=t_{n+1}$  時には座標  $(x_{n+1}, y_{n+1})$  に移動することを示している。ここでこの1タイムステップ内に流体塊が移動する経路を計算上は特性曲線の経路から変えて、最初  $x$  方向に移動した後同じタイムステップ間で  $y$  方向に移動すると考えても  $\Delta t$  後の結果は同じである。この経路を通過する流体塊は次式で記述される。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad (27)$$

式 (26), 式 (27) に対しては一次元の数値解法がそのまま適用できるため、結局二次元移流計算は一次元移流計算の組み合わせに帰着させることができる。したがって、本最適計算手法もそのまま二次元問題に適用できることになる。1タイムステップ内で二方向を続けて計算するため数値解は一次元の場合よりも二倍の数値拡散を受けることになるが、物理拡散もまた二方向に作用してほぼ二倍の拡散になると考えられるのでパラメータ  $\psi$  は  $\psi = 2D / (2D + 2K) = D / (D + K)$  となり一次元の場合と同じになる。従って  $D$  として各方向の物理拡散係数の平均値をまたクーラン数も各方向の平均値を用いれば一次元

の場合と全く変わることなく本手法を用いることができる。

次に具体的な二次元移流拡散問題に適用して本最適計算手法の検証を行う。 $x$  方向及び  $y$  方向の流速がそれぞれ  $0.5 \text{ m/sec}$  で初期条件がピーク値  $10$ 、標準偏差が  $x$  方向、  $y$  方向ともに  $200 \text{ m}$  のガウス型濃度分布を  $9600 \text{ sec}$  間移流拡散させる。 $x$  方向の拡散係数は  $0.521 \text{ m}^2/\text{sec}$ 、 $y$  方向の拡散係数は  $2.083 \text{ m}^2/\text{sec}$  である。計算格子間隔を  $\Delta x = \Delta y = 200 \text{ m}$ 、 $\Delta t = 200 \text{ sec}$  (CASE-5) 及び  $\Delta x = \Delta y = 100 \text{ m}$ 、 $\Delta t = 100 \text{ sec}$  (CASE-6) としたときに6-point schemeによる計算解が所定の許容誤差内に入っているかどうかを調べた。

なお、二次元の場合も手順は一次元の場合と同様である。本例題の様に物理拡散係数が異方的な場合は平均値を用いることとする。Fig.18は許容相対誤差を  $10\%$  及び  $5\%$  としたときの判定基準図である。この図は CASE-5 については  $5\%$  はおろか  $10\%$  の相対誤差も満足できないことを、一方 CASE-6 については  $5\%$  以下の相対誤差に収まることが期待できることを示している。ところで、この問題は厳密解を求めることが困難なため、計算格子間隔の非常に小さい  $\Delta x = \Delta y = 10 \text{ m}$ 、 $\Delta t = 1 \text{ sec}$  を用いて移流なしの拡散計算を行い、その結果得られた数値解を厳密解に近い参照データ (Ref.) とした。Figs.19, 20に計算結果を示す。Fig.19は  $x$  軸に平行でかつピークを通る線上での濃度分布を示し、Fig.20は  $y$  軸に平行でかつピークを通る線上での濃度分布を示している。実際の計算結果から求められた相対誤差を Table 7 に示す。CASE-5 の相対誤差は  $17.1\%$  であり  $10\%$  の許容相対誤差を満たしてはいない。一方 CASE-6 では相対誤差は  $3.75\%$  で判定通り  $5\%$  の許容相対誤差を満足している。

三次元問題も二次元問題と同様の手法で行える。

## 6. 結語

本論では、数値拡散係数の概念を用いて高精度拡散数値シミュレーションのための最適計算手法の決定法を提案した。得られた主要な結論は以下のとおりである。

- (1) スプリット・オペレーター・アプローチは単なる計算上の近似操作ではなく、明確な物理的意味をもつことを特性曲線法の概念を用いて説明することができた。
- (2) 無限に続く数値拡散項を偶数次の項と奇数次の項に分け、それぞれを二次と三次の項にまとめることによって各移流項計算スキームの精度特性を検討することができた。
- (3) 拡散数値シミュレーションの精度は数値拡散係数の大きさそのものではなく、物理拡散係数に対する相対的な値の大小に依存するを数式的に示した。
- (4) 許容相対誤差及び拡散長さスケールと計算格子間隔が与えられれば、使用可能な移流項計算スキームを選択できる手法がTaylor級数誤差解析にもとづいて開発された。拡散長さスケールの決め方にやや手数を要する場合もあるが、これまで経験的に決められていた計算スキームの選択に簡便な指標を設けることができた。
- (5) 拡散の長さスケール、計算スキームが与えられれば許容誤差内におさまる計算解を得るために最も効率的な計算格子間隔を決定する手法が確立された。
- (6) 二次元、三次元の拡散シミュレーションに対しても、物理拡散係数とクーラン数に各方向の平均値を用いることで一次元の手法がそのまま適用できるため、応用面での有用性も高いものと思われる。

本論文における最適計算手法の決定法の開発にはガウス型濃度分布を基本分布型として用いているため当然万能ではないが、自然界の拡散現象は限られた領域、限られた時間内ではガウス型濃度分布となることが多く、全体的にはこれらの濃度分布の重ね合わせと考えられるので、自然界の複雑な拡散現象に対しても本手法はかなりの程度まで適用可能であると思われる。例えば場全体が時空間的に激しく変化するような問題に対しては、数値誤差の最も大きな発生源となると思われる場所（方向）や時刻にこの手法を適用すればよいものと思われる。

なお、本論文では取り扱っていない他の移流項計算スキームやこれから将来に渡って新たに開発され

るであろう高精度計算スキームについても同様にして数値拡散係数を求め、Fig.4やFig.5に書き加えれば本手法がそのまま使えることになる。

### 付録A

本研究で用いたスキームを以下に示す。なお、 $\alpha$ はクーラン数 ( $\equiv u \Delta t / \Delta x$ ) である。

Upwind scheme (for space) and Euler method (for time)

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_i^n - \alpha (\Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n)$$

Leap-frog scheme

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_i^{n-1} - \alpha (\Phi_{i+1}^n - \Phi_{i-1}^n)$$

Lax-Wendroff scheme

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_i^n - \frac{\alpha}{2} (\Phi_{i+1}^n - \Phi_{i-1}^n) + \frac{\alpha^2}{2} (\Phi_{i+1}^n - 2\Phi_i^n + \Phi_{i-1}^n)$$

6-point scheme

$$\begin{aligned} \Phi_i^{n+1} = & P_1 \Phi_{i-3}^n + P_2 \Phi_{i-2}^n + P_3 \Phi_{i-1}^n \\ & + P_4 \Phi_i^n + P_5 \Phi_{i+1}^n + P_6 \Phi_{i+2}^n \end{aligned}$$

ここで、

$$P_1 = -\frac{13}{720} \alpha^3 - \frac{3877}{101280} \alpha^2 + \frac{17117}{303840} \alpha$$

$$P_2 = \frac{37}{144} \alpha^3 + \frac{1069}{20256} \alpha^2 - \frac{18821}{60768} \alpha$$

$$P_3 = -\frac{49}{72} \alpha^3 + \frac{6563}{10128} \alpha^2 + \frac{31373}{30384} \alpha$$

$$P_4 = \frac{49}{72} \alpha^3 - \frac{4705}{3376} \alpha^2 - \frac{8717}{30384} \alpha + 1$$

$$P_5 = -\frac{37}{144} \alpha^3 + \frac{5561}{6752} \alpha^2 - \frac{34435}{60768} \alpha$$

$$P_6 = \frac{13}{720} \alpha^3 - \frac{3121}{33760} \alpha^2 + \frac{22603}{303840} \alpha$$

QUICKEST scheme

$$\begin{aligned} \Phi_i^{n+1} = & \Phi_i^n - \frac{\alpha}{6} (2\Phi_{i+1}^n + 3\Phi_i^n - 6\Phi_{i-1}^n + \Phi_{i-2}^n) \\ & + \frac{\alpha^2}{2} (\Phi_{i+1}^n - 2\Phi_i^n + \Phi_{i-1}^n) \\ & - \frac{\alpha^3}{6} (\Phi_{i+1}^n - 3\Phi_i^n + 3\Phi_{i-1}^n - \Phi_{i-2}^n) \end{aligned}$$

QUICK scheme (for space) and Adams-Bashforth method (for time)

$$\begin{aligned} \Phi_i^{n+1} = & \Phi_i^n - \frac{3}{2} \frac{\alpha}{8} (3\Phi_{i+1}^n + 3\Phi_i^n - 7\Phi_{i-1}^n + \Phi_{i-2}^n) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{8} (3\Phi_{i+1}^{n-1} + 3\Phi_i^{n-1} - 7\Phi_{i-1}^{n-1} + \Phi_{i-2}^{n-1}) \end{aligned}$$

### SOWMAC scheme

$$C_1 \Phi_{t-1}^{n+1} + C_2 \Phi_t^n + C_3 \Phi_{t+1}^{n+1} = \\ C_4 \Phi_{t-1}^n + C_5 \Phi_t^n + C_6 \Phi_{t+1}^n$$

ここで、

$$C_1 = \frac{3776}{10000} \alpha_0 + \frac{3152}{10000} \alpha_0 - \frac{5467}{10000} \alpha_1 + \\ + \frac{4843}{10000} \alpha_1 - \frac{1691}{10000} \alpha^2$$

$$C_2 = \frac{6536}{5000} + \frac{312}{5000} |\alpha| - \frac{1691}{5000} \alpha^2$$

$$C_3 = \frac{3152}{10000} \alpha_0 + \frac{3776}{10000} \alpha_0 - \frac{4843}{10000} \alpha_1 + \\ - \frac{5467}{10000} \alpha_1 - \frac{1691}{10000} \alpha^2$$

$$C_4 = \frac{3776}{10000} \alpha_0 + \frac{3152}{10000} \alpha_0 - \frac{5157}{10000} \alpha_1 + \\ - \frac{4533}{10000} \alpha_1 - \frac{1381}{10000} \alpha^2$$

$$C_5 = \frac{6536}{5000} - \frac{312}{5000} |\alpha| - \frac{1381}{5000} \alpha^2$$

$$C_6 = \frac{3152}{10000} \alpha_0 + \frac{3776}{10000} \alpha_0 - \frac{4533}{10000} \alpha_1 + \\ + \frac{5157}{10000} \alpha_1 - \frac{1381}{10000} \alpha^2$$

$$\alpha_0+ = AINT\left\{\frac{\alpha+1}{|\alpha|+1}\right\} \quad \alpha_0- = AINT\left\{\frac{1-\alpha}{1+|\alpha|}\right\}$$

$$\alpha_1+ = \frac{|\alpha|+\alpha}{2} \quad \alpha_1- = \left| \frac{\alpha-|\alpha|}{2} \right|$$

AINTは小数点の切捨てを表すFORTRANの組み込み関数である。

### 付録B

各スキームに対する見かけの二次及び三次の無次元数値拡散係数は以下のようになる。

### 二次の無次元数値拡散係数

$$\frac{K_2 \Delta t}{\Delta x^2} = \frac{k_2(\alpha)}{2!} - \frac{3(\sqrt{2 \ln 2})^2}{4!} k_4(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^2 \\ + \frac{15(\sqrt{2 \ln 2})^4}{6!} k_6(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^4 - \frac{105(\sqrt{2 \ln 2})^6}{8!} k_8(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^6 \\ + \frac{945(\sqrt{2 \ln 2})^8}{10!} k_{10}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^8 \\ - \frac{10395(\sqrt{2 \ln 2})^{10}}{12!} k_{12}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{10}$$

$$+ \frac{135135(\sqrt{2 \ln 2})^{12}}{14!} k_{14}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{12} \\ - \frac{202702(\sqrt{2 \ln 2})^{14}}{16!} k_{16}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{14} \\ + \frac{34459425(\sqrt{2 \ln 2})^{16}}{18!} k_{18}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{16} \\ - \frac{654729075(\sqrt{2 \ln 2})^{18}}{20!} k_{20}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{18}$$

### 三次の無次元数値拡散係数

$$\frac{K_3 \Delta t}{\Delta x^3} = \frac{k_3(\alpha)}{3!} - \frac{5(\sqrt{2 \ln 2})^2}{5!} k_5(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^2 \\ + \frac{35(\sqrt{2 \ln 2})^4}{7!} k_7(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^4 - \frac{315(\sqrt{2 \ln 2})^6}{9!} k_9(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^6 \\ + \frac{3465(\sqrt{2 \ln 2})^8}{11!} k_{11}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^8 \\ - \frac{45045(\sqrt{2 \ln 2})^{10}}{13!} k_{13}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{10} \\ + \frac{67575(\sqrt{2 \ln 2})^{12}}{15!} k_{15}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{12} \\ - \frac{11486475(\sqrt{2 \ln 2})^{14}}{17!} k_{17}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{14} \\ + \frac{218243025(\sqrt{2 \ln 2})^{16}}{19!} k_{19}(\alpha) \left( \frac{\Delta x}{B} \right)^{16}$$

Upwind scheme (for space) and Euler method (for time)

$$k_n(\alpha) = (-1)^n \alpha - (-\alpha)^n \quad n \geq 2$$

### Leap-frog scheme

$$k_n(\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{for even} \\ \alpha^n - \alpha & \text{for odd} \end{cases} \quad n \geq 3$$

### Lax-Wendroff scheme

$$k_n(\alpha) = \begin{cases} \alpha^2 - \alpha^n & \text{for even} \\ \alpha^n - \alpha & \text{for odd} \end{cases} \quad n \geq 3$$

### 6-point scheme

$$k_n(\alpha) = -(-\alpha)^n + (-3)^n P_1 + (-2)^n P_2 + (-1)^n P_3 \\ + P_5 + 2^n P_6 \quad n \geq 2$$

### QUICKEST scheme

$$k_n(\alpha) = -(-\alpha)^n + (-2)^n \left( -\frac{\alpha}{6} + \frac{\alpha^3}{6} \right) \\ + (-1)^n \left( \alpha + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{2} \right) + \left( \frac{\alpha}{3} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{6} \right) \quad n \geq 4$$

### QUICK scheme (for space) and Adams-Bashforth method (for time)

$$k_n(\alpha) = \frac{3\alpha}{16} \{ -3 + (-1)^n 7 - (-2)^n \} \\ + \frac{\alpha}{16} \{ (1+\alpha)^n + \alpha^n - (-1)^n 7 (1-\alpha)^n + (-1)^n (2-\alpha)^n \} \\ - (-\alpha)^n \quad n \geq 3$$

### 参考文献

- 1) Leonard, B.P. : A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic interpolation, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, Vol.19, No.1, pp.59-98, 1979.
- 2) Holly, F.M. Jr. and A. Preissmann : Accurate calculation of transport in two dimensions, *J. Hydraul. Div., Proc. of ASCE*,

Vol.103, No. HY11, pp.1259-1277, 1977.

- 3) 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.
- 4) 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.
- 5) 平岡正勝, 古市徹, 田中宏明 : 移流拡散方程式の数値解の安定解析, 土木学会論文報告集, No.319, pp.77-85, 1982.
- 6) 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, 日本国際学会論文集(B編), 56卷522号, pp.433-440, 1990.
- 7) 村岡浩爾, 中辻啓二 : 河川流の非定常拡散解析における数値誤差の評価, 土木学会論文報告集, No.213, pp.7-16, 1973.
- 8) スハス V. バタンガ : コンピュータによる熱移動と流れの数値解析, 水谷幸夫, 香月正司共訳, 森北出版, 1985.

(1995.4.12 受付)

## STUDY ON THE MOST SUITABLE COMPUTATIONAL METHOD FOR DIFFUSION NUMERICAL SIMULATION

Toshimitsu KOMATSU, Koji ASAII, Koichiro OHGUSHI  
and Koichiro YOSHIMURA

On making accurately and effectively a numerical diffusion simulation, one should pay much attention to both the computational scheme for calculating the advection term and the computational grid size. The usable schemes for obtaining the highly-accurate results depend on not only computational conditions such as grid intervals on time and space but also hydraulic conditions such as physical diffusion and velocity, while there will be the most effective grid size to get an accurate solution within the allowable margin of error if the scheme used for the numerical simulation is chosen. We have attempted to develop a criterion for selecting the most usable scheme to calculate the advection term and deciding the most effective computational grid size. We made a 2nd order numerical diffusion term represent the truncation error terms, which is a infinite series. The criterion was made up by utilizing the 2nd order numerical diffusivity. Some one-dimensional test diffusion simulations have been carried out to inspect the validity of the criterion.