拡散方程式における移流項の高精度差分近似について

佐賀大学理工学部　正　大串浩一郎
九州大学工学部　正　小松 利光
九州工業大学工学部　正　朝位 孝二

1．まえがき

河口や湖沼、貯水池等の水質変化を数値的に予測する場合、流れと物質輸送の両方をコンピューターで解かなければならない。輸送される物質が流れに影響を及ぼさないpassiveな場合は、流れ場が分かった後に別個に移流拡散方程式を解くことにより物質輸送を予測できる。この移流拡散方程式は２種類の異なる性質をもつ輸送形態を含んでいる。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である。近年、スプリット・オペレーター・アプローチと呼ばれる、移流と拡散を近似的に別個に交互に解く手法が使われてきた。この手法は、移流と拡散が独立に扱え、各々最も適した計算法を選択することが可能である。数値的に取り扱う場合、移流の計算は拡散の計算と比較して格段に難しいとされているが、近年、この移流に焦点を当てた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のスキーム[1]、小松らの6-pointスキーム[2]等の特性曲線法に基づいた計算法が挙げられよう。一方、差分法は移流方程式の計算法について見る限り、あまり精度的に優れたものは見当らない。差分法の長所は、使いやすさ、理解のしやすさであろう。本研究では、前述の特性曲線法に基づいたスキーム程度の精度を保ち、かつ、差分法の使いやすさを合わせもつ新しい計算法を提案する。

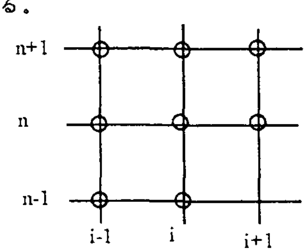
2．移流方程式の差分について

河口や貯水池において拡散現象を規定する式は１次元の場合(1)式で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right) \tag{1}$$

スプリット・オペレーター・アプローチによって移流と拡散を別個に扱うものとして、移流だけに焦点を当てると解くべき方程式は１次元移流方程式の(2)式となる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}=0 \tag{2}$$



図－１　差分に用いる格子点

この方程式の高精度数値計算は容易ではない。この式は１次導関数を含み、しばしば計算を発散させる。一方、拡散の計算は安定なことが多く、２次導関数が常におとなしく振舞うことを示唆している。以上のことに留意すると、(2)式を時間ｔ及び距離ｘで微分した式より得られる次式

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}-U^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=0 \tag{3}$$

は数値計算上、(2)式よりも有利であることが期待される。ただし、ここで流速Ｕは一定と仮定している。(3)式は良く知られた２階の波動方程式であり、その解の１つが(2)式の解である。(3)式の差分式は、数多く考えられるが、空間的に左右対称な形のスキームを用いて移流の計算を行うと、計算結果に左右非対称な歪みが生じる。これは、移流という現象そのものが、上流から下流へ向かって伝わる、一過性の左右非対称な現象であることから生じると思われる。そこで、図－１のような左右非対称で上流側の情報量が多く取り入れられるような差分を考案した。

この差分スキームはimplicit形式であり、クーラン数を$\alpha(\equiv U\Delta t/\Delta x)$とすれば次式のように表わされる。

$$\begin{aligned}&(1-\kappa)(C_{i-1}^{n+1}-2C_{i-1}^{n}+C_{i-1}^{n-1})+\kappa(C_{i}^{n+1}-2C_{i}^{n}+C_{i}^{n-1})\\&\quad-\alpha^2\{\theta(C_{i+1}^{n+1}-2C_{i}^{n+1}+C_{i-1}^{n+1})+(1-\theta)(C_{i+1}^{n}-2C_{i}^{n}+C_{i-1}^{n})\}=0\end{aligned} \tag{4}$$

ここで、κ、θはそれぞれ空間及び時間に関する重みであり、αに密接に関連しているものと思われる。

3．パラメーターκ、θの決定

κ、θを決めるため、(4)式のTaylor級数解析を行なう。C_{i-1}^{n+1}を点(x_i, t_n)の周りにTaylor級数展開すると次式が得られる。

$$C_{i-1}^{n+1}=\sum_{r=0}^{\infty}\frac{1}{r!}\left(-\Delta x\frac{\partial}{\partial x}+\Delta t\frac{\partial}{\partial t}\right)^r C_i^n=C_i^n+\left(-\Delta x\frac{\partial C}{\partial x}+\Delta t\frac{\partial C}{\partial t}\right)+\frac{1}{2!}\left(\Delta x^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-2\Delta x\Delta t\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial t}+\Delta t^2\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}\right)+\cdots$$

他の６点のＣも同様に点(x_i, t_n)の周りに展開し、(4)式に代入することにより、(4)式の誤差を求めることができる。最終的な結果のみ記すと次式のようになる。

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - U^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \left[-\theta\alpha^3 - (1-\kappa)\alpha^2\right]\frac{\Delta x^3}{\Delta t^2}\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + \left[-\alpha^4 + 6\theta\alpha^3 + (6\kappa-5)\alpha^2\right]\frac{1}{12}\frac{\Delta x^4}{\Delta t^2}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \cdots \qquad (5)$$

(5)式の右辺が(4)式の打ち切り誤差である。この誤差項をトータルとしてできるだけ小さくなるようにκとθを決めることが望ましい。クーラン数αが$0 \leqq \alpha \leqq 1$の間を任意に変化するものとして、(5)式の誤差項が$0 \leqq \alpha \leqq 1$の範囲で最小となるようにκとθを決定する。(5)式右辺の各項の係数の２乗をJ_3、J_4、… のように表し、κもしくはθで偏微分したものをゼロとおくことにより(6)、(7)式が得られる。

$$\alpha\theta + 1 - \kappa = 0 \qquad (6) \qquad , \qquad -\alpha^2 + 6\theta\alpha + 6\kappa - 5 = 0 \qquad (7)$$

この式はパラメーターκ、θの最適な値がクーラン数により変化することを示している。これよりJ_3、J_4を最小とするκ、θが求まるが、良好な計算結果が得られる(κ, θ)は必ずしもこれらの値とは一致しなかった。その理由は、(4)式のTaylor級数解析における５次以上の高次の打ち切り誤差項を評価していないためであると考えられる。したがって数値実験を数多く行うことによってクーラン数α毎のκ、θの最適値を決定した。最適なκはクーラン数とともに直線的に変化し、最適なθはκとは異なる特性を示した。これらの関係を式化すると次式のように表わされる。

$$\kappa = 0.85 - 0.2\,\alpha \quad , \quad \begin{cases} \theta = 1/(8.26\times10^{-3} + 6.96\alpha - 8.09\alpha^2) & (0 \leq \alpha \leq 0.15) \\ \theta = 0.314\alpha^{-0.71} & (0.15 \leq \alpha \leq 1) \end{cases} \qquad (8)$$

図－２の初期条件の下で式(4)と式(8)を用いた移流の計算結果を 同図 に示す。使用する空間格子点の数がわずか３点と少ないにも拘らず非常に精度の高い計算が可能なことが分かった。

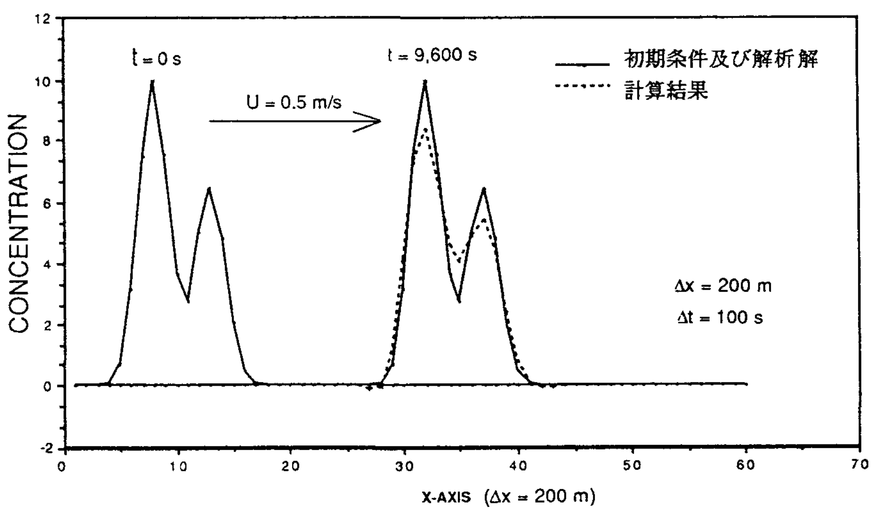


図-2 式(4)、(8)を用いた移流の計算(α =0.25)

４．結論

１次元の移流方程式を解く代わりに２階の波動方程式を差分化することによって、少ない格子点で非常に精度良く１次元移流の計算ができることが分かった。パラメーターκ、θは、計算スキームのTaylor級数解析からある程度の見当はついたが、高次の項を考慮に入れていないため必ずしも計算結果と直接的には結びつかなかった。しかし、多くの数値実験の結果、κとθはαと密接に関連しており、αの関数として普遍表示することができた。この結果、高精度を有し、かつ差分法の使いやすさを合わせ持ったスキームとして、移流の数値計算の際非常に有力な計算法であることが明らかとなった。

参考文献
1) Holly, F.M Jr. and A Preissmann Accurate calculation of transport in two dimensions, JHYD, 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. Hydroscience and Hydraulic Eng , Vol.3, No 2, pp.15-30, 1985.