

拡散シミュレーションにおける 高精度差分スキームについて

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
九州大学工学部 正 朝位 孝二

1. まえがき

近年、拡散シミュレーションにおける高精度の移流の計算法が開発されてきた。Holly-PreissmannスキームやSix-pointスキーム¹⁾、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、移流のための計算法として、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高精度計算法にはまだ決定版と言えるものが見当たらず、開発の余地が十分残されていると言えよう。

前報²⁾では、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た、移流のための新しい差分スキームについて開発・提案した。しかしながらその計算法では、時間方向に3つのタイムステップの格子点を用いていたので、初期条件の与え方が難しく、多次元問題への適用の際にも大きな問題点を残していた。

本研究では、特性曲線法を利用して上記の問題点を解決した、移流のための高精度差分スキームを開発し、提案する。

2. SOWMACスキーム

1次元の純粹移流方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

前報²⁾では、式(1)を解く代わりに、式(1)を t で微分した式と式(1)を x で微分した式から得られる2階の波動方程式（ここで流速 U は近似的に一定としている）

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

を以下のように差分化し、空間的に左右非対称なimplicitスキームを提案した。

$$(1-\kappa)(C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^n + C_{i-1}^n) + \kappa(C_i^{n+1} - 2C_{i+1}^n + C_{i+2}^n) \\ - \alpha^2(\theta(C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^n + C_{i-1}^n) + (1-\theta)(C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n)) = 0 \quad (3)$$

ここで、 α ($\equiv U \Delta t / \Delta x$) はクーラン数、 κ 、 θ は各々空間及び時間に関する重みである。

式(2)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(1)の解は下流へのみ伝播する前進波である。したがって式(1)の代わりに式(2)を解く場合、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なければならない。前報²⁾では、重み κ と θ を適当に組み合わせて波を下流へのみ伝播させる計算が可能なことを示した。しかしながら、もし、 $(n-1)$ タイムステップと n タイムステップの濃度分布形状の間で、波が下流へのみ伝わるような条件が与えられなかった場合、不必要的波の成分が上流へ伝播することが分かった。

本研究では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 $(n-1)'$ ステップの濃度を用いた（図-1）。ここでは、与えられた格子幅、流速の下で (i, n) 、 $(i+1, n)$ の格子点を下流側に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の概念から以下のように求められる。

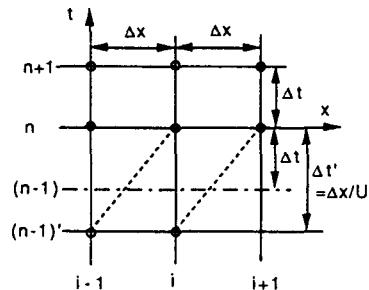


図-1 1次元計算格子

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

したがって、時間方向の2階の差分に($n+1$), n , $(n-1)'$ の3つのタイム・ステップの値を用いて、式(3)の差分式は新たに次式で与えられる。

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

式(4)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 に乘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ことになる。

式(4)の最適な κ , θ はクーラン数 α と共に変化する。式(4)のTaylor級数解析から得られる数値誤差項のうち、筆頭項と準筆頭項の3次、4次の項の係数の2乗をそれぞれ最小にするように κ , θ を求める。

$$\kappa = 0.5155\alpha + 0.9688 \quad (5)$$

$$\alpha\theta = -0.1691\alpha - 0.3152 \quad (6)$$

が得られた。正負の α に対して最終的なスキームの形は以下のように求められる。

$$p_1 C_{i-1}^n + p_2 C_i^n + p_3 C_{i+1}^n = p_4 C_{i-1}^n + p_5 C_i^n + p_6 C_{i+1}^n \quad (\text{SOWMACスキーム}) \quad (7)$$

$$p_1 = 0.3776\alpha_0 + 0.3152\alpha_0 - 0.5467\alpha_1 + 0.4843\alpha_1 - 0.1691\alpha^2$$

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

$$p_3 = 0.3152\alpha_0 + 0.3776\alpha_0 - 0.4843\alpha_1 - 0.5467\alpha_1 + 0.1691\alpha^2$$

$$p_4 = 0.3776\alpha_0 + 0.3152\alpha_0 + 0.5157\alpha_1 - 0.4533\alpha_1 + 0.1381\alpha^2$$

$$p_5 = 1.3072 - 0.0624|\alpha| - 0.2762\alpha^2$$

$$p_6 = 0.3152\alpha_0 + 0.3776\alpha_0 - 0.4533\alpha_1 + 0.5157\alpha_1 + 0.1381\alpha^2$$

$$\alpha_0 = \text{AINIT}\left\{\frac{\alpha+1}{|\alpha|+1}\right\}$$

$$\alpha_0 = \text{AINIT}\left\{\frac{1-\alpha}{1+|\alpha|}\right\}$$

$$\alpha_1 = \frac{|\alpha|+\alpha}{2}$$

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

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

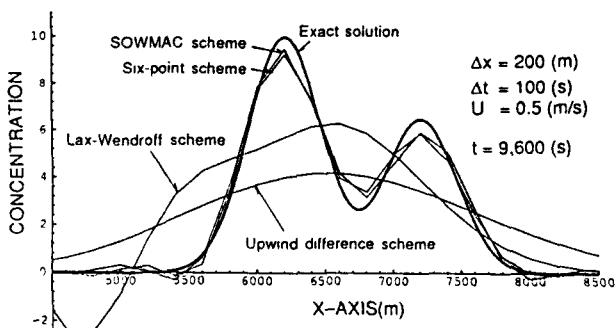


図-2 1次元純粹移流計算における各種スキームの精度比較

ここで、AINITはFORTRANで用いられる小数切り捨ての組み込み関数である。このスキームをSOWMACスキーム(Second Order Wave equation Method for Advection Calculation)と呼ぶこととする。

3. SOWMACスキームの検証とモデル計算

式(7)の有効性を試すため1次元純粹移流の計算を行い(図-2)、各種スキームとの精度の比較を行った。また、Von Neumannの安定解析によりダンピング誤差や位相誤差に関しても比較検討した。その結果、SOWMACスキームは精度の面でも計算の容易さの面でも、他の計算スキームと比較して非常に優れた有力な計算法であることが明らかとなった。紙面の都合により、計算結果の比較の詳細は発表当日に報告する予定である。

- 参考文献 1) Komatsu et al.: J. Hydroscience and Hydraulic Eng., Vol. 3, No. 2, pp. 15-30, 1985.
2) 大串・小松・朝位: 土木学会西部支部研究発表会講演概要集, pp. 230-231, 1991.