土木学会西部支部研究発表会(1992.3)

拡散シミュレーションにおける計算スキームの選択基準について

九州大学　学生員　吉村耕市郎　九州大学　正　員　小松　利光
九州大学　正　員○朝位　孝二　佐賀大学　正　員　大串浩一郎

1．はじめに

移流拡散方程式の数値計算を行うときは、移流項の取扱いには慎重な配慮が必要となってくる。拡散項の計算は精度よく行えるのに対し、移流項の計算においては、風上差分などの通常の計算スキーム用いると、無視出来ない誤差が含まれるからである。しかしながら、物理拡散が強くなると移流項の計算スキームから生じる誤差は小さくなり、例えば風上差分でも比較的精度よく計算が行えることが知られている。したがって、拡散シミュレーションを精度よく実行するために採用できる計算スキームの種類は、拡散係数や流速等の水理条件及び計算格子の大きさ等の計算条件によって変わってくるものと思われる。拡散シミュレーションにおける最適な計算スキームを判断するための選択基準を作ることが本研究の目的である。

2．数値拡散係数

一次元移流拡散方程式を差分法で離散化したときに、Taylor級数展開による誤差解析を行えば、一般に次の様な式が得られる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+K_2(u,\Delta x,\Delta t)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+K_3(u,\Delta x,\Delta t)\frac{\partial^3 C}{\partial x^3}+\cdots \tag{1}$$

ここで、Cは物質濃度、uはx方向の流速、Dは拡散係数である。(1)式の右辺第2項以降の項が離散化によって生じた数値拡散項であり、K_2, K_3, ・・・は数値拡散係数である。数値拡散係数は流速u，計算格子間隔Δx、Δtの関数になる。例えば、差分スキームに風上差分を用いた場合は、K_2, K_3は次式の様になる。

$$K_2=\frac{(\alpha-\alpha^2)\Delta x^2}{2!\Delta t} \tag{2}$$

$$K_3=\frac{(\alpha-\alpha^3)\Delta x^3}{3!\Delta t} \tag{3}$$

ここでαはクーラン数とよばれu・Δt／Δxと定義される。

偶数次の数値拡散項は濃度Cのダンピングに関与し、奇数次のそれは位相のずれに関与していることが知られている[1]。いまここで無限に続く数値拡散項を、2次の項で代表できるものとしよう。UTOPIA Schemeのような3次精度のスキームでは、数値拡散項は4次の項から始まり、2次・3次の項はない。しかしながら、このような場合でも数値拡散項の和は2次の項で代表できるものとする。このとき(1)式は次のように書きあらわせる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=(D+K)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{4}$$

ここでKは全ての誤差項の和を2次の拡散項で代表させたときのみかけの数値拡散係数である。

式(4)を若干変形すると次式が得られる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=(D+K)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=D\Psi^{-1}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{5}$$

ここで$\Psi = D/(D+K)$である。Ψ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と解釈できる。物理拡散が相対的に強くなれば、Ψは1に近づき数値誤差は顕著には現れなくなる。

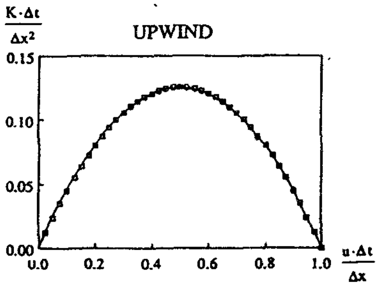
Ψは水理条件、計算条件でつくられるパラメータに依存すると思われる。またその関数形も計算スキームによって異なるはずである。そこで、ある水理条件、計算条件の下で、種々の計算スキームに対するΨの値をあらかじめ推定できれば、計算スキームの選択基準をつくることができる。

3．数値拡散係数の評価

Ψを評価する方法を考察する。Ψは物理拡散係数Dと数値拡散係数Kから成り立っていることから、Kの評価さえできればΨは評価できる。

前述のとおりKを含む項は、無限に続く数値拡散項を代表しているので、Taylor級数解析を用いた誤差解析からは評価できない。そこで数値実験からKを評価する。

数値実験に用いた式は、一次元純粋移流方程式である。初期条件にガウス分布を用いて、一定流速で一定時間の間、下流方向に移流させる。このとき計算結果は、純粋移流にもかかわらずあたかも物理的な拡散を受けたような解が得られる。これが数値拡散である。そこで、どのような拡散係数を与えれば初期時のガウス分布のピーク値が計算解のピーク値になるかを解析的に逆算し、求まった拡散係数をKの値とした。Kの値が水理条件や計算条件でどの様に変化するかを見るために、流速や計算格子間隔を種々変えて計算を行った。計算スキームに風上差分を使用したときの結果を図－1に示す。KをΔx，Δtで無次元化した量をクーラン数αに対してプロットしている。また比較のために（2）式を用いて得られる理論曲線も併せて図示している。風上差分の場合、数値実験値はほぼ（2）式のK_2値と一致することが分かる。これは無限に続く数値拡散項の内、第一項が卓越しているためだと考えられる。風上差分の場合、Kは$(\alpha-\alpha^2)\cdot\Delta x^2/(2\cdot\Delta t)$で表される。



図－1　風上差分を用いた場合の数値拡散係数

表－1 数値実験条件

	Δt (s)	Δx (m)
◇	100	100
△	200	100
○	50	100
□	100	200
■	100	50
—	式 (2)	

4．おわりに

風上差分以外のスキームについても同様の方法で解析を行ってみた。その結果Kは拡散スケールと格子間隔の比にも依存していることが明かとなった。詳細及び位相誤差について講演時に述べる。

5．参考文献

1）小松利光，大串浩一郎，朝位孝二，仲敷憲和：貯水池や河口部における移流拡散の高精度計算法，第32回水理講演会論文集，PP.287～292,1988