拡散シミュレーションにおける移流計算スキームの誤差評価について

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

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。移流項のための計算スキームは種々提案されているが、それらのスキームにおいて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りどの程度の誤差が生じてくるのかをあらかじめ推定することができれば、拡散シミュレーションにおいて要求される精度に対する最適な計算スキームを選択することが可能となる。本研究では、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ために、水理条件,計算条件が計算スキームの精度に及ぼす影響の評価式の開発を試みた。

2．数値拡散項について

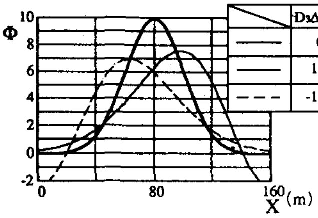
一次元純粋移流方程式を差分法で離散化したときに、Taylor級数展開による誤差解析を行えば、一般に次の様な式が得られる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}+U\frac{\partial \Phi}{\partial x}=k_2(\alpha)\frac{\Delta x^2}{2!\Delta t}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}+k_3(\alpha)\frac{\Delta x^3}{3!\Delta t}\frac{\partial^3 \Phi}{\partial x^3}+\cdots \tag{1}$$

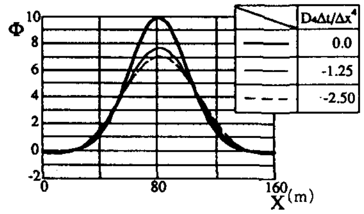
ここで、Φは拡散物質の濃度、uはx方向の流速である。(1)式右辺の項が離散化によって生じた数値拡散項であり、$k_2(\alpha)\cdot\Delta x^2/(2!\Delta t)$, $k_3(\alpha)\cdot\Delta x^3/(3!\Delta t)$, ･･･は数値拡散係数である。αはクーラン数とよばれ$\alpha=u\cdot\Delta t/\Delta x$と定義されており、$k_2(\alpha)$, $k_3(\alpha)$, ･･･はαの関数である。無限に続く数値拡散項のそれぞれの項の特性を調べる為に、次式を用いて数値実験を行った。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}=D_n\frac{\partial^n \Phi}{\partial x^n} \tag{2}$$

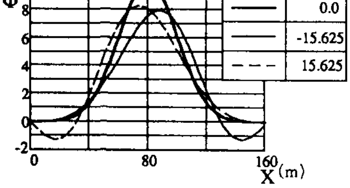
この式を計算することによって、n次の拡散項がどの様な効果をもつのかを検討した。3次から5次の項について計算を行った。初期濃度として、標準偏差 200(m)、ピーク値 10、ピークの中心が$x=80$(m)に位置するガウス分布を与え、$\Delta x=20$(m)、$\Delta t=2.0$(sec)でD_nの値を種々与えて1000(sec)後の濃度分布を求めた。



図－1　3次の拡散項の影響



図－2　4次の拡散項の影響



図－3　5次の拡散項の影響

これらの図より偶数次の数値拡散項は濃度Φのダンピングに関与し、奇数次の項は主として位相のずれに関与するものと考えられる。

3．数値拡散係数について

以上の考察から､(1)式における右辺の無限に続く数値拡散項のうち、偶数次の項は筆頭項の2次の項に、奇数次の項は同じく筆頭項の3次の項で代表させると次の様な式になる。

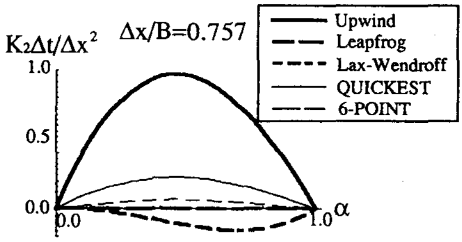
$$\frac{\partial\Phi}{\partial t}+U\frac{\partial\Phi}{\partial x}=K_2\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}+K_3\frac{\partial^3\Phi}{\partial x^3} \tag{3}$$

ここで、K_2, K_3はそれぞれ偶数次,奇数次の誤差項の和を2次及び3次の拡散項で代表させたときの見かけの拡散係数である。(1)式と(3)式より、K_2, K_3は無次元型で次式の様に書くことができる。

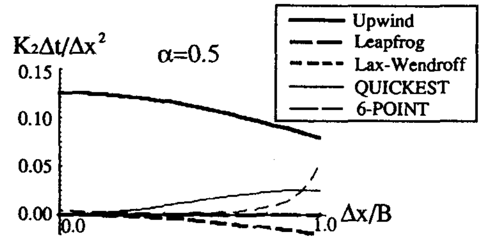
$$\frac{K_2\Delta t}{\Delta x^2}=\frac{1}{2!}k_2(\alpha)+\frac{1}{4!}k_4(\alpha)\left(\frac{\Delta x}{B}\right)^2\left(\frac{\partial^4\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^4}\Big/\frac{\partial^2\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^2}\right)+\frac{1}{6!}k_6(\alpha)\left(\frac{\Delta x}{B}\right)^4\left(\frac{\partial^6\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^6}\Big/\frac{\partial^2\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^2}\right)+\cdots \tag{4}$$

$$\frac{K_3\Delta t}{\Delta x^3}=\frac{1}{3!}k_3(\alpha)+\frac{1}{5!}k_5(\alpha)\left(\frac{\Delta x}{B}\right)^2\left(\frac{\partial^5\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^5}\Big/\frac{\partial^3\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^3}\right)+\frac{1}{7!}k_7(\alpha)\left(\frac{\Delta x}{B}\right)^4\left(\frac{\partial^7\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^7}\Big/\frac{\partial^3\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{x}^3}\right)+\cdots \tag{5}$$

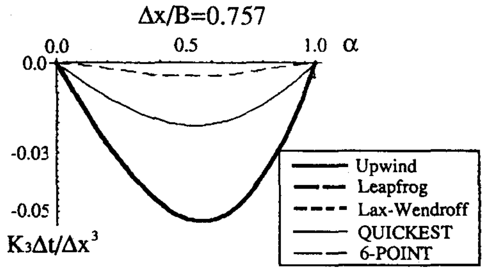
ここで、$\Phi=\Phi_0\tilde{\Phi}$, $x=B\tilde{x}$、Φ_0は代表濃度,$\tilde{\Phi}$は無次元濃度,Bは代表拡散スケール,$\tilde{x}$は無次元長さである。これらの係数は、水理条件,計算条件によってつくられるパラメーターα及び$\Delta x/B$に依存しており種々の条件下におけるスキームの精度が評価できる。しかしながら、(4)式,(5)式は未知量として無次元濃度微係数の比が残されている。この比はガウス分布のピーク位置における微係数で評価することとする。無次元拡散係数とα, $\Delta x/B$の関係を図－4～7に示す。但し、ここではBはガウス分布の標準偏差で代表させている。



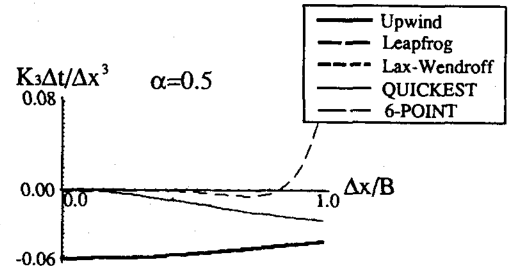
図－4　$K_2\Delta t/\Delta x^2$とαの関係($\Delta x/B=0.757$)



図－5　$K_2\Delta t/\Delta x^2$と$\Delta x/B$の関係($\alpha=0.5$)



図－6　$K_3\Delta t/\Delta x^3$とαの関係($\Delta x/B=0.757$)



図－7　$K_3\Delta t/\Delta x^3$と$\Delta x/B$の関係($\alpha=0.5$)

4．おわりに

拡散数値シミュレーションにおいて、要求される計算精度からK_2, K_3の許容範囲が決定され、また水理条件,計算条件からα及び$\Delta x/B$を求めることができる。そして、α, $\Delta x/B$およびK_2, K_3の許容範囲より図－5,7を用いて、要求される計算精度を満足する計算スキームを選択することが可能となる。

5．参考文献

1) 朝位孝二, 小松利光, 吉村耕市郎, 大串浩一郎：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, 土木学会第47回年次学術講演会概要集第2部, PP.610～611, 1992