

二次元拡散数値シミュレーションにおける最適計算格子間隔の選定法

九州大学 学生員○岩城 紹 九州大学 正会員 小松 利光

九州大学 正会員 朝位 孝二 九州大学 学生員 山崎 智弘

1. はじめに 拡散数値シミュレーションを高精度で行うためには、支配方程式の離散化に起因する数値誤差を極力排除する必要がある。そのため種々の高精度計算スキームが提案されている。しかしながら、計算格子が適切な間隔を有していなければ、たとえ高精度計算スキームを使用していても精度の良い数値解が得られるとは限らない。著者らは一次元拡散問題に対して最適な計算格子間隔を選定する手法を開発している¹⁾。本研究ではその手法の多次元問題への拡張を検討した。

2. 最適計算格子間隔の選定手順 最適計算格子間隔の選定の詳細な説明は文献1)に譲るとして、ここではその手順を以下に示す。

- 1) 拡散シミュレーションにおいて許容される計算値の真値に対する相対誤差 $E_R(\%)$ 、物理拡散係数 D 、代表拡散長さスケール B （ここでは濃度分布の半値半幅を用いる）、拡散計算時間 t を用いて(1)式よりパラメータ Ψ の値を決定する。

$$\Psi = \frac{2t \left(1 - \frac{E_R}{100}\right)^2}{2t + 1 - \left(1 - \frac{E_R}{100}\right)^2} \quad \cdots(1) \quad \Psi = \frac{D}{D+K} \quad \cdots(1)'$$

ここで t_* ($\equiv 2 \ln 2 \frac{D}{B^2}$) は無次元拡散時間である。

- 2) 物理拡散係数 D と(1)式で求めたパラメータ Ψ の値から(1)'式を用いて数値拡散係数 K の値を求める。
- 3) 格子間隔選定のための図表(図-1)上において $(\Delta t, \Delta x)$ を適宜変化させ、選定判断のための点 $G(\Delta x/B, K \Delta t / \Delta x^2)$ が、使用するスキームの判定曲線にできるだけ近かつその上に位置するように $(\Delta t, \Delta x)$ を決定する。

- 4) 決定した計算格子間隔がCFL条件などの安定条件を満足していることを確認し、もし満足していなければ3)にもどる。

ところで図-1はクーラン数 $\alpha=0.5$ に対する図表であるが、 $(\Delta t, \Delta x)$ が変化すれば α も変化する。したがって格子間隔の選定では図-1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、クーラン数0.5は多くの場合、最も計算精度を低下させる値なので、図-1を用いれば安全側となるが一応選定が行える。より厳密な選定を行う必要がある場合は各クーラン数の選定図表を作って使用すれば良い。

3. 二次元問題への拡張 一次元移流拡散問題を対象として開発された前述の選定手法を多次元問題へ拡張することを考える。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。

二次元移流拡散方程式は次式で表わされる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + q \quad \cdots(2)$$

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 方向の物理拡散分散係数であり、 q は拡散物質のソース項である。スプリット・オペレータ・アプローチを適用して(2)式を純粹移流方程式と拡散の式に分離すれば次のようになる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad \cdots(3)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + q \quad \cdots(4)$$

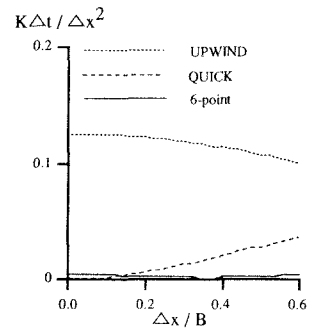


図-1 選定図表 ($\alpha=0.5$)

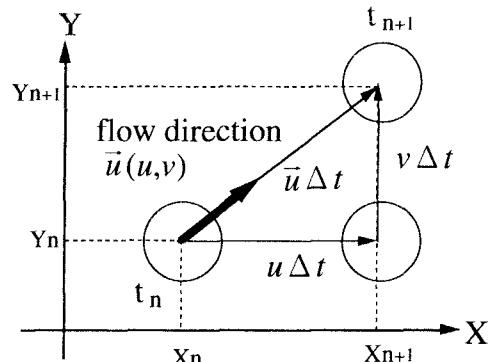


図-2 二次元純粹移流

ここで二次元純粋移流方程式について次のように考察する。(3)式は図-2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が時間間隔 Δt だけ経過した $t=t_{n+1}$ には座標 (X_{n+1}, Y_{n+1}) に移動する事を示している。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内でY方向に移動すると考える。この経路を通過する流体塊は次式で表わされる。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad \cdots (5) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} + v \frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad \cdots (6)$$

(5)式、(6)式については一次元の数値解法がそのまま適用できるため、二次元純粋移流計算は一次元純粋移流計算の組み合わせに帰着できる。したがって、前述の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 Ψ は $\Psi \approx 2D/(2D+2K)=D/D+K$ となり一次元の場合と同じになる。従って物理拡散係数および流速に各方向の平均値を用いれば一次元の場合と全く同様に選定を行うことができる。

4. 二次元移流拡散問題による検証

ここではガウス型濃度分布の二次元移流拡散問題に対して計算格子の選定手法の検証を行う。

標準偏差がX方向、Y方向ともに200m、ピーク値10、ピーク値の初期位置が $X=1400\text{m}$ 、 $Y=1400\text{m}$ のガウス型濃度分布をX方向、Y方向の流速がそれぞれ0.5m/secである流れ場で、9600sec間下流方向に移流拡散させる。このときのX方向の拡散係数は0.521m²/sec、Y方向は2.083m²/secとする。物理拡散係数Dは各方向の平均値として1.302m²/secを用いる。長さスケールBは235.5(m)であり、これらより無次元拡散時間 t_e は0.312となる。用いた計算スキームはQUICKスキーム、風上差分法、6-pointスキームである。許容相対誤差をそれぞれ20%、10%、5%とした場合において、判定された最適な計算格子間隔および計算解と厳密解のピーク値間の相対誤差を表-1に示す。なお、クーラン数が0.5となる様に $(\Delta t, \Delta x)$ を系統的に変化させたが、そのクーラン数で安定に計算できる格子間隔が見つけれない場合にはクーラン数を変えて再び選定を行った。

図-3～5は点Gと無次元数値拡散係数の位置関係を示したものである。

QUICKスキーム、6-pointスキームによる計算

結果は設定精度よりも良い結果を示している。風上差分法の場合は許容相対誤差を若干越えているがほぼ20%に近い精度を得ている。以上の結果により本選定手法がガウス型濃度分布の二次元移流拡散問題に対して有効であると思われる。今後、他の問題においても本手法の有効性を確かめる予定である。

5. 参考文献 1)小松利光・朝位孝二・大串浩一郎：拡散数値シミュレーションにおける最適計算格子間隔の選定手法に関する研究、水工学論文集、第40巻、1996

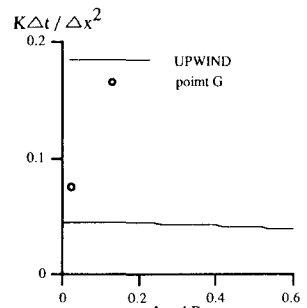


図-3 選定図表 ($\alpha=0.1$)
(風上差分法)

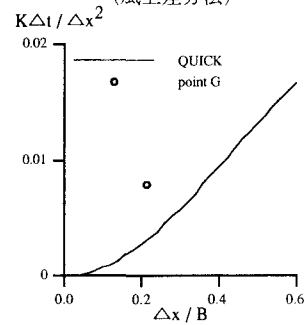


図-4 選定図表 ($\alpha=0.25$)
(QUICK スキーム)

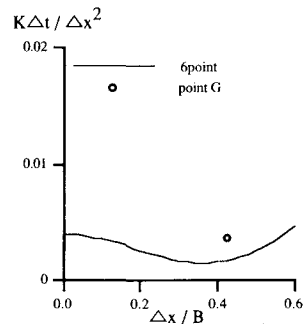


図-5 選定図表 ($\alpha=0.5$)
(6-point スキーム)

表-1 理論による最適計算格子間隔

Scheme	Upwind	QUICK	6-point scheme
Relative error (%)	20	10	5
Δx (m)	5	50	100
Δy (m)	5	50	100
Δt (sec.)	1	25	100
K (m ² /sec)	1.9042	0.7941	0.3657
$K \Delta t / \Delta x^2$	0.07617	0.007941	0.003657
$\Delta x / B$	0.0212	0.212	0.425
Relative error evaluated by results (%)	25.79	5.13	3.805