

物質輸送の高精度かつ高解像度計算スキームの開発

山口大学工学部 正会員 朝位孝二

1. はじめに

水域の水質変動の原因となる栄養塩や溶存酸素などの物質の輸送を精度良くシミュレートすることは、環境アセスメントの立場から重要なことである。このため従来より物質輸送を精度良く解くための高精度計算スキームが数多く提案されている。高精度スキームは例えばガウス型濃度分布のように極値を有する分布の再現性は良好であるが、分布の勾配が急激なところでは物理的に意味のない数値振動が発生してしまう。一方最近注目されている高解像度スキーム（TVDスキーム）においては、数値振動は発生しないが極値の再現性に問題が生じる。本研究は両者の長所を合わせ持つ計算スキームの開発を試みたものである。

2. 6-point scheme

物質輸送の支配方程式は1次元の場合式（1）もしくは式（2）である。なお以下では流速 u は一定として議論を進めることとする。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (1) \quad \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial u \Phi}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

式（1）は特性曲線表示ができ、それに基づく解法が数多く提案されている。その一つにKomatsuらが提案した6-point schemeがある¹⁾。6-point schemeは次式で表される。

$$\Phi_i^{n+1} = P_1 \Phi_{i-3}^n + P_2 \Phi_{i-2}^n + P_3 \Phi_{i-1}^n + P_4 \Phi_i^n + P_5 \Phi_{i+1}^n + P_6 \Phi_{i+2}^n \quad (3)$$

ここで、

$$P_1 = -\frac{13}{720} \alpha^3 - \frac{3877}{101280} \alpha^2 + \frac{17117}{303840} \alpha \quad P_2 = \frac{37}{144} \alpha^3 + \frac{1069}{20256} \alpha^2 - \frac{18821}{60768} \alpha \quad P_3 = -\frac{49}{72} \alpha^3 + \frac{6563}{10128} \alpha^2 + \frac{31373}{30384} \alpha$$

$$P_4 = \frac{49}{72} \alpha^3 - \frac{4705}{3376} \alpha^2 - \frac{8717}{30384} \alpha + 1 \quad P_5 = -\frac{37}{144} \alpha^3 + \frac{5561}{6752} \alpha^2 - \frac{34435}{60768} \alpha \quad P_6 = \frac{13}{720} \alpha^3 - \frac{3121}{33760} \alpha^2 + \frac{22603}{303840} \alpha$$

α はクーラン数（ $\alpha = u \Delta t / \Delta x$ ）である。このスキームは非常に高精度で物質輸送を計算することができるが、後述するように急勾配前面で数値振動を引き起こしてしまう。数値振動を抑制し急勾配分布を再現するためには、フラックス制限アルゴリズムを導入しスキームをTVD化する必要がある。式（3）のままではフラックス制限アルゴリズムの導入は困難であり、6-point schemeを保存形式である式（2）に適応出来るように修正しなければならない。次節で6-point schemeの保存形式表示を試みる。

3. 保存形式 6-point scheme

式（2）を有限体積法で離散化すれば次式を得る。

$$\frac{\Phi_i^{n+1} - \Phi_i^n}{\Delta t} + \frac{u \Phi_{i+1/2}^n - u \Phi_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (4)$$

式（4）を整理すれば式（5）のようになる。

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_i^n - (\alpha \Phi_{i+1/2}^n - \alpha \Phi_{i-1/2}^n) \quad (5)$$

$\Phi_{i\pm 1/2}^n$ はコントロールボリュームの界面濃度を表している。式（3）と式（5）を比較すれば界面濃度を次式のように定義できる。

$$\Phi_{i+1/2}^n = C_1 \Phi_{i+2}^n + C_2 \Phi_{i+1}^n + C_3 \Phi_i^n + C_4 \Phi_{i-1}^n + C_5 \Phi_{i-2}^n \quad (6)$$

ここで、

$$C_1 = -\frac{13}{720} \alpha^2 + \frac{3121}{33760} \alpha - \frac{22603}{303840} \quad C_2 = \frac{43}{180} \alpha^2 - \frac{6171}{8440} \alpha + \frac{37393}{75960} \quad C_3 = -\frac{53}{120} \alpha^2 + \frac{53}{80} \alpha + \frac{187}{240}$$

$$C_4 = \frac{43}{180} \alpha^2 + \frac{367}{25320} \alpha - \frac{19247}{75960} \quad C_5 = -\frac{13}{720} \alpha^2 - \frac{3877}{101280} \alpha + \frac{17117}{303840}$$

$\Phi_{i-1/2}^n$ については $i \rightarrow i-1$ とすれば良い。式(5)および式(6)が保存形式の6-point schemeである。

3. モデル計算

次のようなモデル計算をおこなった。初期条件としてピーク値10、ピーク位置1400m、標準偏差264mのガウス分布とピーク値6.5、ピーク位置2400m、標準偏差264mのガウス分布を重ね合わせた濃度分布、濃度10、上辺の距離が2200m、中心位置6000mの矩形濃度分布、ピーク値10、流れ方向の半径2000m、中心位置11000mの半楕円濃度分布の重ねせを与え、一定流速0.5m/secで下流側に9600sec間輸送させる。計算格子間隔は $\Delta x=200\text{m}$ 、 $\Delta t=100\text{sec}$ である。図-1は保存形式の6-point schemeによる計算結果である。この図からガウス分布の極値の再現性は良好であるが矩形分布や各分布の裾の近傍では数値振動が発生していることが分かる。

高精度スキームはフラックス制限アルゴリズムを導入することで高解像度スキームにすることができる。ここではuniversal limiter²⁾を用いて保存形式6-point schemeのTVD化を図ることとする。図-2にその計算結果を示す。数値振動は除去され矩形分布を良好に再現しているが、ガウス分布の再現能力は逆に悪化している。また半楕円分布の頂上あたりが平らになっている。

universal limiterは矩形分布の再現には適しているがガウス分布の再現には問題がある。そこでガウス分布の極値など物理的に意味のある極値と数値振動を区別するdiscriminatorを導入し、意味のある極値ではuniversal limiterを作用させず、それ以外では作用させることでガウス分布の再現性を高めることにする。discriminatorはYu and Liが提案してものを採用した。その計算結果を図-3に示す。ガウス分布に対する計算解は多少改善されてはいるが改良の余地がまだ残されている。

4. まとめ

6-point schemeを保存形式表示させuniversal limiterとdiscriminatorを導入することで高精度かつ高解像度スキームを開発することを試みた。今後はdiscriminatorの改良を行っていく予定である。

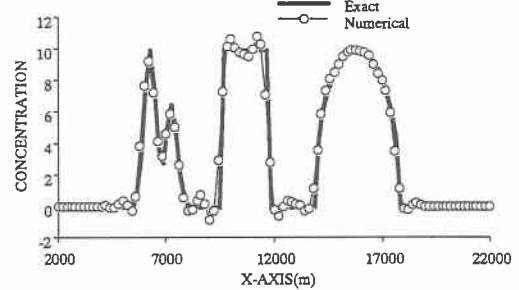


図-1 計算結果 (保存形式6-point scheme)

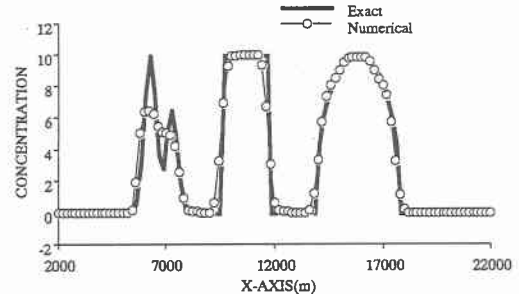


図-2 計算結果 (universal limiter)

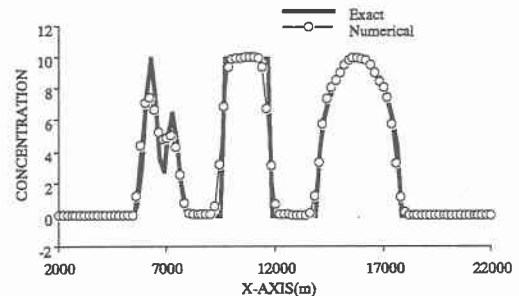


図-3 計算結果 (universal limiter and discriminator)

参考文献

- 1) Komatsu, T., Holly Jr. F.M., Nakashiki, N. and Ohgushi, K. : Numerical calculation of pollutant transport in one and two dimensions, *J. Hydrosci. and Hydraul. Eng.*, JSCE, Vol.3, No.2, pp.15-30, 1985.
- 2) Leonard, B.P. and Niknafs, H.S. : Sharp monotonic resolution of discontinuities without clipping of narrow extrema, *Computers & Fluids*, Vol.19, No.1, pp.141-154, 1991
- 3) Yu, T.S. and Li, C.W. : Efficient higher-order backward characteristics scheme for transient advection, *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 19, pp.997-1012, 1994.