移流輸送の高精度かつ高解像度 数値計算手法の開発

DEVELOPMENT OF NUMERICAL TECHNIQUE FOR ADVECTION WITH HIGH-ACCURACY AND RESOLUTION

朝位孝二¹・小松利光²・大串浩一郎³・羽田野袈裟義⁴

Koji ASAI, Toshimitsu KOMATSU, Koichiro OHGUSHI, Kesayoshi HADANO

¹正会員 博士(工学) 山口大学講師 工学部社会建設工学科(〒755-8611 宇部市常盤台2557)

²フェロー 工博 九州大学大学院教授 工学研究科海洋システム工学専攻(〒812-8581 福岡市東区箱崎6-10-1)

³正会員 博士(工学) 佐賀大学助教授 理工学部都市工学科(〒840-8502 佐賀市本庄町1番地)

⁴正会員 工博 山口大学助教授 工学部社会建設工学科(〒755-8611 宇部市常盤台2557)

This paper deals with development of a new numerical technique with high-accuracy and resolution for advection. The 6-point scheme, which is a numerical solver based on the characteristics method for advection, is modified in order to make it possible to be applied to the conservative advection equation. The modified 6-point scheme is named the conservative 6-point scheme. The universal limiter and a new discriminator are incorporated in the conservative 6-point scheme to obtain numerical solutions which are not only high-accurate but also free from numerical oscillations. It is found that the numerical technique presented in this paper is able to give good numerical results.

Key Words: advection, the conservative 6-point scheme, universal limiter, discriminator

1. はじめに

河川や湖沼などの水域の水質変動を予測するためには水温、栄養塩、溶存酸素などの挙動を解析する必要がある。これらの挙動は移流拡散方程式を解くことで把握することができるが、通常は解析解を得ることは極めて困難である。したがってコンピュータで数値的に解くことが一般的手法となっている。

移流拡散方程式の拡散項は比較的精度良く計算することができるが、移流項の計算では計算誤差が発生しやすいことが知られている。このため、移流項を高精度で解くことのできる高精度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に対しては効果的であるが、分布の勾配が急なところでは数値振動を引き起こしてしまう。

一方近年注目を集めているスキームに TVD スキームがある。このスキームは航空工学の分野で開発されたもので衝撃波などの不連続な現象を捉えることができ、高解像度スキームとも呼ばれる。このスキームでは数値振動が発生せず安定した数値解を得ることができる。しかしながら分布の極値近傍までが平らになってしまうため極値の再現能力は高いとは言えない¹⁾。本研究は、高精度スキームと高解像度スキームのそれぞれの長所を合わせ持つ新しい数値計算手法の開発を試みたものである。

2. 保存形式 6-point scheme

(1) 6-point scheme

1次元の物質の移流輸送の支配方程式は式(1)もしくは式(2)である。

図-1 特性曲線

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

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

式 (1) は特性曲線表示ができ以下ようになる。

$$\frac{d\Phi}{dt} = 0 \quad \text{on} \quad \frac{dx}{dt} = u$$

これは特性曲線 $\frac{dx}{dt} = u$ 上で濃度に変化しないことを意味する。すなわち図-1に示す時空間の計算格子において、時刻 $n+1$ における場所 i 点の濃度は時刻 n における場所 ξ 点の濃度に等しい。したがって、時刻 $n+1$ の i 点の濃度を求める問題は特性曲線法によって時刻 n の ξ 点の濃度を内挿によって求める問題に帰着される。Komatsu らは i 点近傍の6点を使用する6-point schemeを提案した²⁾。このスキームは1次精度ながら高精度な数値解を得ることができ、以下のように示される。

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

ここで、

$$P_1 = -\frac{13}{720} \alpha^3 - \frac{3877}{101280} \alpha^2 + \frac{17117}{303840} \alpha$$

$$P_2 = \frac{37}{144} \alpha^3 + \frac{1069}{20256} \alpha^2 - \frac{18821}{60768} \alpha$$

$$P_3 = -\frac{49}{72} \alpha^3 + \frac{6563}{10128} \alpha^2 + \frac{31373}{30384} \alpha$$

$$P_4 = \frac{49}{72} \alpha^3 - \frac{4705}{3376} \alpha^2 - \frac{8717}{30384} \alpha + 1$$

$$P_5 = -\frac{37}{144} \alpha^3 + \frac{5561}{6752} \alpha^2 - \frac{34435}{60768} \alpha$$

$$P_6 = \frac{13}{720} \alpha^3 - \frac{3121}{33760} \alpha^2 + \frac{22603}{303840} \alpha$$

$$\alpha = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \quad ; \quad \text{クーラン数}$$

Δt , Δx はそれぞれ時間方向の計算格子間隔、空間方向の計算格子間隔である。

(2) 保存形表示

6-point scheme は高精度で物質輸送を計算することができるが後述のように急勾配分布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、フラックス制限関数を導入しスキームをTVD化する必要がある。しかしながらフラックス制限関数を直接式 (3) に導入することは困難である。したがってまず保存形で記述された式 (2) に適応できるように6-point schemeを修正することを考える。

流速 u を一定と仮定して式 (2) を有限体積法で離散化すれば次式が得られる。

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

ここで $\Phi_{i \pm 1/2}^n$ はコントロールボリュームの界面濃度である。式 (4) を整理すれば以下ようになる。

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

界面濃度が未定係数 C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 を用いて以下のように5点の濃度で近似できるものとする。

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

$$\begin{aligned} \Phi_{i-1/2}^n &= C_1 \Phi_{i-3}^n + C_2 \Phi_{i-2}^n + C_3 \Phi_{i-1}^n \\ &\quad + C_4 \Phi_i^n + C_5 \Phi_{i+1}^n \end{aligned} \quad (7)$$

これらを式 (5) に代入し整理すれば式 (8) のようになる。

$$\begin{aligned} \Phi_i^{n+1} &= \alpha C_1 \Phi_{i-3}^n + \alpha (-C_1 + C_2) \Phi_{i-2}^n \\ &\quad + \alpha (-C_2 + C_3) \Phi_{i-1}^n + \{\alpha (-C_3 + C_4) + 1\} \Phi_i^n \\ &\quad + \alpha (-C_4 + C_5) \Phi_{i+1}^n - \alpha C_5 \Phi_{i+2}^n \end{aligned} \quad (8)$$

式 (8) と式 (3) が等しいとおけば未定係数は以下のように決定される。

$$C_1 = -\frac{13}{720} \alpha^2 - \frac{3877}{101280} \alpha + \frac{17117}{303840}$$

$$C_2 = \frac{43}{180} \alpha^2 + \frac{367}{25320} \alpha - \frac{19247}{75960}$$

$$C_3 = -\frac{53}{120} \alpha^2 + \frac{53}{80} \alpha + \frac{187}{240}$$

$$C_4 = \frac{43}{180} \alpha^2 - \frac{6171}{8440} \alpha + \frac{37393}{75960}$$

$$C_5 = -\frac{13}{720} \alpha^2 + \frac{3121}{33760} \alpha - \frac{22603}{303840}$$

界面濃度はQUICKEST schemeと同様クーラン数の関数となる。式 (5), (6), (7) を保存形式6-point scheme (Conservative 6-point scheme) と呼ぶことにする。

図-2 コントロールボリューム

図-3 流速が変化する場合の計算結果

3. モデル計算

保存形式 6-point scheme は流速一定の場合では従来型の 6-point scheme と一致する。そこで流速が変化する場合における保存形式 6-point scheme の有効性について検討する。

流速が変化する場合の保存形式 6-point scheme の適用は次のように行う。図-2 に示すようにコントロールボリュームの右側界面の流速を $u_{i+1/2}$ 、左側界面の流速を $u_{i-1/2}$ とする。またそれぞれの界面流速で定義されるクーラン数を $\alpha_{i+1/2}$ 、 $\alpha_{i-1/2}$ とする。界面濃度はクーラン数の関数であるので、それぞれの界面でのクーラン数を式 (6)、式 (7) に代入して界面濃度を評価する。また界面濃度フラックスは界面濃度と界面流速の積となる。式で表せば以下のような。

$$\Phi_i^{n+1} = \Phi_i^n - (\alpha_{i+1/2} \Phi_{i+1/2}^n - \alpha_{i-1/2} \Phi_{i-1/2}^n) \quad (9)$$

ここで、

$$\Phi_{i+1/2}^n = f(\alpha_{i+1/2}) \quad , \quad \Phi_{i-1/2}^n = f(\alpha_{i-1/2})$$

保存形式 6-point scheme の検証として、拡散が存在せず流速が場所的に変化する場における1次元移流問題を考える。この問題では、拡散項は存在しなくても

場所的な流速の違いによって初期分布が移流とともに変形する。初期濃度分布として次式で表される準ガウス型濃度分布を採用した³⁾。

$$C(x, 0) = \frac{M_0}{x \sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{[\ln(x/x_0)]^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (10)$$

ここで、 $M_0=10$ 、 $\sigma=0.2$ 、 $x_0=0.2$ である。この分布を場所的に線形に変化する流速 $u=u_0 x$ で下流側に $t=20$ まで輸送させる。ここで $u_0=0.1$ とした。計算格子間隔は $\Delta x=0.05$ 、 $\Delta t=0.02$ である。境界条件として $x=0$ において濃度 $C(0, t)=0$ を与えた。厳密解は式 (11) で与えられる³⁾。

$$C(x, t) = \frac{M_0}{x \sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{[\ln(x/x_0) - u_0 t]^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (11)$$

図-3 は保存形式 6-point scheme と QUICKEST scheme による計算結果である。保存形式 6-point scheme の係数は流速一定の条件のもとで決定されているが、流速が場所的に変化する場合でも精度良く計算が行えることが分かる。

4. 数値振動の抑制

(1) universal limiter の導入

前章で保存形式 6-point scheme により高精度で移流計算が行えることを確認したが、図-3 から分かるように分布の裾の近傍で数値振動が発生している。これは高次精度スキームに特有に現象である。数値振動の発生を抑制するためにはスキームを TVD 化が必要がある。前述のように高次精度スキームはフラックス制限関数を導入することで TVD 化することができる。ここでは Leonard and Niknafs の universal limiter⁴⁾ を用いて保存形式 6-point scheme の TVD 化を行った。

モデル計算としてガウス型濃度分布と矩形濃度分布の移流計算を行った。中心位置 1400m、標準偏差 264m、最大値 10 のガウス分布と中心位置 2400m、標準偏差 264m、最大値 6.5 のガウス分布を重ね合わせた分布を初期条件とし、一定流速 0.5m/sec で 9600sec 間下流に移流させる。また矩形分布については、中心位置 6000m、上辺の長さが 2000m、濃度 10 の初期濃度分布をガウス分布の場合と同様に一定流速 0.5m/sec で 9600sec 間移流させる。このモデル計算では拡散は考慮していないので、初期分布を形状を変えずに 4800m だけ進行方向に移動させたものが厳密解となる。

図-4, 5 はそれぞれ limiter を施さない場合のガウス型濃度分布の計算結果と矩形濃度分布の計算結果である。いずれも数値振動が発生していることが分かる。

図-4 ガウス型濃度分布の計算結果
(no limiter)

図-5 矩形濃度分布の計算結果
(no limiter)

つぎに universal limiter を導入して計算した結果を図-6, 7に示す. 両ケースとも数値振動は発生していないが, 二つのガウス分布のピーク値は減衰しており極値の再現性に問題が残る.

(2) discriminator の導入

a) Yu and Li の discriminator ⁵⁾

6 point scheme の極値の再現能力を維持したままで数値振動だけを抑制するには, 全ての計算格子点において limiter を作用させるのではなく, 物理的に意味のある極値近傍では limiter を作用させないようにする工夫が必要である. このためには物理的意味を持つ極値と数値振動を区別するアルゴリズムが必要である. Leonard and Niknafs はこのアルゴリズムを discriminator と呼んでいる ⁴⁾. Leonard らの discriminator は 7 個の格子点を使用しているが, Yu and Li はそれを改良して 5 個の格子点を使用する discriminator を提案した. そのアルゴリズムを図-8に示す. ここで, D_1, D_2, D_3, D_4 はそれぞれ区間 $i-1 \sim i-2$, 区間 $i \sim i-1$, 区間 $i \sim i+1$, 区間 $i+1 \sim i+2$ の濃度勾配である.

このアルゴリズムではまず初めに計算点近傍の状況が上に凸の分布であるかどうかを判定する. 次に図-9(a)に示すように勾配の大きさが徐々に小さくなり

図-6 ガウス型濃度分布の計算結果
(universal limiter)

図-7 矩形濃度分布の計算結果
(universal limiter)

$$D_1 = \Phi_{i-1}^n - \Phi_{i-2}^n, D_2 = \Phi_i^n - \Phi_{i-1}^n$$

$$D_3 = \Phi_{i+1}^n - \Phi_i^n, D_4 = \Phi_{i+2}^n - \Phi_{i+1}^n$$

図-8 Yu and Li の discriminator のアルゴリズム

極値近傍を過ぎると勾配の大きさが徐々に大きくなるような分布であるかどうかを判定する. もしこのような分布ならば格子点 $i-1, i, i+1$ の濃度を計算する際には limiter を作用させないようにするものである. つまり点 $i-3/2, i-1/2, i+1/2, i+3/2$ における界面濃度を評価する際には limiter を作用させない. 図-9(b)のように上に凸の分布であっても緩勾配から急勾配に変わる場合は数値振動と判断され limiter を作用させる. なお図-8は上に凸の分布に対

(a) 極値をもつ分布

(b) 数値振動

図-9 Yu and Li の discriminator の概念図

するアルゴリズムを示しているが、下に凸の分布の場合も同様の操作を行う。

図-10, 11はそれぞれ Yu and Li の discriminator を用いた場合のガウス型濃度分布, 矩形濃度分布の計算結果である。図-10において、数値振動を発生することなくガウス分布の二つの山と谷の再現性が向上したことが分かる。しかしながら、極値の再現性に関してはまだ改良の余地が残されている。

b) 新しい discriminator

本研究では図-12に示す discriminator を提案する。図-13のように分布が左から右へ移動していく場合を考える。もし勾配 D_1 と D_3 の符号が逆であれば区間 $i-1 \sim i$ に勾配 0 の極値が存在するはずである。言い換えればこの区間では分布は単調的ではない。したがって格子点 i の濃度を計算する際には limiter を作用させない。つまり点 $i-1/2$, $i+1/2$ の界面濃度を評価する際に limiter を作用させない。また、勾配 D_1 と D_3 の符号が逆であっても、勾配 D_2 が勾配 D_1 よりも大きい場合は数値振動と判定し limiter を作用させる。

図-10 ガウス型濃度分布の計算結果
(universal limiter and Yu-Li's discriminator)

図-11 矩形濃度分布の計算結果
(universal limiter and Yu-Li's discriminator)

図-12 新しい discriminator のアルゴリズム

図-13 新しい discriminator の概念図
(極値をもつ分布)

新しいdiscriminatorを用いてガウス型濃度分布に対して計算した結果を図-14に、矩形濃度分布に対する計算結果を図-15に示す。ガウス型濃度分布については、数値振動が発生しておらず、しかも極値の再現性も非常に良好であることが分かる。矩形分布に対しては、裾の近傍の数値振動は発生していないが分布上部で僅かな乱れが生じている。

著者らのdiscriminatorが極値の再現に対して良好な結果を得たのは次のような理由によるものと思われる。Yu and Liのdiscriminatorが正確に機能するためには、極値が存在する分布形状の再現に少なくとも5点必要である。一方著者らのdiscriminatorにおいては分布形状の再現に必要な最小点数は4点でよい。例えば図-16に示される分布はYu and Liのdiscriminatorでは極値のある分布とは見なされずlimiterが作用する。著者らのdiscriminatorでは極値のある分布と見なされlimiterは作用しない。このことが極値の再現性を向上させているものと思われる。

5. おわりに

本研究では高精度スキームの一つである6-point schemeにフラックス制限関数と新しいdiscriminatorを導入することで、高精度化かつ高解像度化を図った。得られた主要な結論は以下の通りである。

- (1) 6-point schemeを保存形式にすることによりフラックス制限関数 (universal limiter) の導入を可能にした。
- (2) 保存形式6-point schemeは流速一定の条件のもとで係数が決定されているが、流速が変化する場合においても精度良く計算が行える。
- (3) 本論文で提案した discriminator と universal limiterを用いれば、数値振動が発生することなく極値を良好に再現できることが分かった。

矩形分布において若干の振動が生じている。今後さらに discriminatorの改善を行っていく予定である。なお、本研究では基本となる高精度スキームに6-point schemeを用いているが、QUICKESTをはじめ他の保存形式のスキームにも適用可能である。

参考文献

- 1) 朝位孝二, 小松利光, 大串浩一郎, 羽田野袈裟義: 移流拡散方程式の高精度数値計算手法に関する研究, 土木学会論文集, No.586/II-42, pp.13-22, 1998.
- 2) Komatsu, T., Holly Jr. F.M., Nakashiki, N. and Ohgushi, K.: Numerical calculation of pollutant transport in one and two dimensions, *J. Hydrosoci. and Hydraul. Eng.*, JSCE, Vol.3,

図-14 ガウス型濃度分布の計算結果
(universal limiter and present discriminator)

図-15 矩形濃度分布の計算結果
(universal limiter and present discriminator)

図-16 区間 $i-2 \sim i+1$ に極値を有する分布

No.2, pp.15-30, 1985.

- 3) Zoppou, C. and Knight, J. H.: Analytical solutions for advection and advection-diffusion equations with spatially variable coefficients, *J. Hydraul. Eng.*, Vol.123, No.2, pp.144-148, 1997.
- 4) 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
- 5) 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.

(1998. 9. 30 受付)