

非定常拡散方程式の数値計算方法

村 上 健*

1. はじめに

河川の感潮区間や湾など潮汐の影響を受ける水域の計算方式は、比較的最近までは種々の条件を非常に単純化した形にして取り扱うものが主体であった。たとえば、潮汐の作用は2潮時を周期としてほぼ周期的であるため、1周期ごとの水質を考えて時間的に水質が変化しない(定常的)ものとみなして計算する方法などであり、ケッチャムのタイダルブリズム法、チームズ方式、オコーナーの方法などがその代表的なものである。しかし、このような方法では計算精度に限界があること、水質汚濁の観点からすれば水質の平均値を知るだけでは十分ではなく、時々刻々の変化を知ることが望ましいこと、湾や海域のように少なくとも平面的に2次元で考える必要があるときには上記の方法を用いるのがむずかしいことなどの理由により、非定常の拡散方程式を数値的に解く試みが行なわれ始めている^{1)~3)}。しかし、これら既存の方法には計算時間や計算精度の点で不満足な面もあるので、比較的簡単な計算方式の開発を試みた。

2. 拡散方程式の一般形

流速 V 、拡散係数 D 、河積 A または水深 H が時間的にも場所的にも変化するとした場合の拡散方程式の一般形は1次元、2次元についてそれぞれ次のようである。

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \frac{\partial(AVC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) \dots\dots\dots(1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(HC)}{\partial t} + \frac{\partial(HV_x C)}{\partial x} + \frac{\partial(HV_y C)}{\partial y} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \dots\dots\dots(2) \end{aligned}$$

ここで、 C は濃度、 t は時間、 x, y はそれぞれ距離の座標であり、水理量の添字 x, y はそれぞれの成分を区分するためのものである。

2次元の場合、拡散係数がテンソルだとすれば、 D_{xy} 、 D_{yx} の項を含める必要があるが、実用的には、これらの項を含めると計算が困難になるのでここでは含めないこととする。

3. 数値計算上の問題点

(1) 擬似拡散

擬似拡散は移流項の差分表示が不適切な場合、あたかも拡散係数を大きく、または小さくしたのと同じような計算誤差として表われるもので、Bella⁶⁾ によって明らかにされた概念である。この誤差を拡散係数の形で表わしたものを擬似拡散係数 (D_N) と呼んでいるが、 D_N の大きさは移流項の差分表示方法によって異なっており、陽形式については Bella⁷⁾ が、陰形式の中央差分については Prych⁸⁾ が与えている。他の場合について Prych と同様な方法で計算し、1次元の場合の一般形として示すと次のようになる。

$$\text{陽形式表示} \quad D_N = \frac{V\Delta x}{2} \left(1 - 2\gamma - \frac{V\Delta t}{\Delta x} \right) \quad (3)$$

$$\text{半陰形式表示} \quad D_N = \frac{V\Delta x}{2} (1 - 2\gamma) \dots\dots\dots(4)$$

$$\text{陰形式表示} \quad D_N = \frac{V\Delta x}{2} \left(1 - 2\gamma + \frac{V\Delta t}{\Delta x} \right) \quad (5)$$

上式において、 γ は差分をとる位置を表わすパラメータであり、 $\gamma=0$ で後方差分、 $\gamma=1/2$ で中央差分、 $\gamma=1$ で前方差分になる。

擬似拡散の補正を行なうには、条件として与える拡散係数 (D_G) のかわりに $D_G - D_N$ を拡散係数として計算すればよいわけであるが、この補正によって、差分表示方法が実質上変わってくることに注目する必要がある。一例として、式(1)の1次元拡散方程式で流速、河積、拡散係数を一定とし、陽形式で差分表示する場合を考えると、後方、中央、前方差分のいずれの場合も同一の式になり、次のように表わされる。

$$\begin{aligned} C_{i,k+1} - C_{i,k} = \frac{V\Delta t}{\Delta x} \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{V\Delta t}{2\Delta x} \right) C_{i-1,k} \right. \\ \left. - \frac{V\Delta t}{\Delta x} C_{i,k} + \left(-\frac{1}{2} + \frac{V\Delta t}{2\Delta x} \right) C_{i+1,k} \right] \\ + \frac{D_G \Delta t}{\Delta x^2} (C_{i-1,k} - 2C_{i,k} + C_{i+1,k}) \\ \dots\dots\dots(6) \end{aligned}$$

ただし、 $i\Delta x = x$ 、 $k\Delta t = t$ である。

同様に、半陰形式、陰形式の場合にも、擬似拡散の補正を行なえば、差分式はそれぞれについて唯一のものに

なり、後方、中央、前方差分の区別はなくなってしまう。また、式(6)は水理量が一定の場合であるが、水理量が時間的または場所的に変化する量であっても同様なことがいえる。したがって、擬似拡散の補正は移流項の差分表示を、移流項の差分表示の観点からして最も適切な形に補正することとみなすことができる。

(2) 計算の振動など

前項で述べた擬似拡散の補正を行なっても誤差の改善には限度があり、陽形式の場合には濃度分布のひずみや計算の振動が起り、また、半陰形式の場合に程度は小さいが同様な問題がある。陰形式の場合には両端で境界条件を与え、逆行列を利用して解くという方式では、拡散係数が小さいときに分母が0に近い形の計算を行なうことになり、計算結果の振動が起きる。したがって、陰形式は考慮の対象にしないこととし、まず、陽形式の場合について誤差が生じる原因を検討してみる。最も簡単な1次元で水理量一定、 $V = \Delta x / \Delta t$ の場合を考えると差分式は次のようになる。

$$C_{i,k+1} = C_{i-1,k} + (C_{i-1,k} - 2C_{i,k} + C_{i+1,k})D \cdot \Delta t / \Delta x^2 \quad (7)$$

いま、 $k\Delta t$ 時刻の濃度分布の下流側の先端が $(i-2)$ 区間にあるとし

$$C_{i+m,k} = \begin{cases} = 0, & m \geq -1 \\ > 0, & m \leq -2 \end{cases} \quad (8)$$

であると仮定すると、時刻 $k\Delta t$ 時に $(i-2)$ 区間にあった濃度は時刻 $(k+1)\Delta t$ 時には $(i-1)$ 区間に移り、かつ、その一部は i 区間に拡散しているはずである。しかし、式(7)によれば右辺の項はすべて0であるため $C_{i,k+1}$ は0であり、式(12)のような差分表示では濃度分布の下流端での拡散が表現できないことを意味している。一方、濃度分布の上流端については、濃度分布の上流端が i 区間にあり、

$$C_{i+m,k} = \begin{cases} = 0, & m \leq -1 \\ > 0, & m \geq 0 \end{cases} \quad (9)$$

とすると、 Δt 時刻後には i 区間にあった濃度は $(i+1)$ 区間に移動し、その一部は拡散によって i 区間に残留しているはずである。しかし、式(9)の仮定から式(7)は、

$$C_{i,k+1} = (-2C_{i,k} + C_{i+1,k}) \cdot D \cdot \Delta t / \Delta x^2$$

となり、常に $C_{i,k} \leq (1/2)C_{i+1,k}$ でないかぎり負の濃度が生じ、計算の振動が起きる。

半陰形式の場合には陽形式のようなはっきりとした形でその原因をつかむことはできないが、差分式の中の $k\Delta t$ 時刻の部分陽形式表示と同じ作用を持っているため同様な性質の誤差が生じるものと推定される。

4. 差分表示方法

(1) 1次元の場合

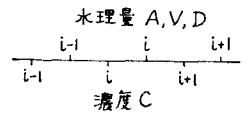
前項でみたように擬似拡散の補正を行なった後に残る

問題は、移流項と拡散項の差分表示のつり合いがとれていないことによると考えられるので、移流項と拡散項に別々の差分表示法を用いることによって、よりよい数値解が得られる可能性がある。移流項の表示方式として、先に述べた理由から陰形式表示を用いないとすれば、組合せとしては移流項に陽形式表示を用い、拡散項に半陰形式または陰形式表示を用いる方式と、移流項に半陰形式、拡散項に陰形式を用いる方式が考えられる。

これらの方式の優劣をみるためにいくつかの試算を行なって解析解と比較してみたところ、移流項陽形式・拡散項陰形式の方式で計算したときに非常に解析解に近い数値解が得られるのに反し、他の方式では種々の誤差が生じた。この方式によって式(1)を差分式で表わすと次のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{A_{i-1,k+1} + A_{i,k+1}}{2} C_{i,k+1} - \frac{A_{i-1,k} + A_{i,k}}{2} C_{i,k} \\ &= (D/\Delta x) (A_{i-1,k+1/2} V_{i-1,k+1/2} C_{i-1,k} \\ & \quad - A_{i,k+1/2} V_{i,k+1/2} C_{i,k}) \\ & \quad + (D/\Delta x^2) \{ A_{i-1,k+1/2} (D G_{i-1,k+1/2} \\ & \quad - D N_{i-1,k+1/2}) (C_{i-1,k+1} - C_{i,k+1}) \\ & \quad + A_{i,k+1/2} (D G_{i,k+1/2} - D N_{i,k+1/2}) \\ & \quad \times (C_{i+1,k+1} - C_{i,k+1}) \} \quad (10) \end{aligned}$$

ただし、上式では水理量を与える位置と濃度を与える位置とは 図-1 に示すように $\Delta x/2$ ずつずらしている。また、上式は流速 V が正のとき



には移流項の差分を $(i+1)$ 区間と i 区間とでとらなければならない。擬似拡散係数は拡散項の差分表示には無関係で、移流項の差分表示によって定まり、式(3)で $\gamma=0$ とおいた式を用いる。ただし、 V としては $(k+1/2)$ 時刻の値を用い、また、 V が負になることを考慮して絶対値を用いる。

なお、式(10)で計算する場合、 $|V| \leq \Delta x / \Delta t$ なる条件が満足されなければならない。また、式(10)を $C_{i,k+1}$ について解くには Line Inversion 法⁹⁾を用いる。

(2) 2次元の場合

2次元の計算は式(2)を直接差分表示する方法ではなく、計算を x 方向と y 方向とにわけ、まず、片方の方向のみを考えて移流・拡散の計算を行なって濃度分布を求め、次に、この濃度分布を用いて他の方向について移流・拡散させる方式を採用する。このような方式によれば、個々の計算を1次元としてできるので計算が簡単になるばかりでなく、少なくとも移流項を陽形式で表わすかぎり、式(2)を直接差分表示する方式よりも、よい結果が得られる。いま、最初に計算する方向を x 方向とした場合、この方式による差分式は次の2組の方程式になる。

$$\begin{aligned} & \frac{H_{x: i-1, j, k+1} + H_{x: i, j, k+1}}{2} C'_{i, j} \\ & - \frac{H_{x: i-1, j, k} + H_{x: i, j, k}}{2} C_{i, j, k} \\ & = (\Delta t / \Delta x) (H_{x: i-1, j, k+1/2} V_{x: i-1, j, k+1/2} C_{i-1, j, k} \\ & - H_{x: i, j, k+1/2} V_{x: i, j, k+1/2} C_{i, j, k}) \\ & + (\Delta t / \Delta x^2) \{ H_{x: i-1, j, k+1/2} (D G_{x: i-1, j, k+1/2} \\ & - D N_{x: i-1, j, k+1/2}) (C'_{i-1, j} - C'_{i, j}) \\ & + H_{x: i, j, k+1/2} (D G_{x: i, j, k+1/2} \\ & - D N_{x: i, j, k+1/2}) (C'_{i+1, j} - C'_{i, j}) \} \dots\dots (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{H_{y: i, j-1, k+1} + H_{y: i, j, k+1}}{2} C_{i, j, k+1} \\ & - \frac{H_{y: i, j-1, k} + H_{y: i, j, k}}{2} C'_{i, j} \\ & = (\Delta t / \Delta y) (H_{y: i, j-1, k+1/2} V_{y: i, j-1, k+1/2} C'_{i, j-1} \\ & - H_{y: i, j, k+1/2} V_{y: i, j, k+1/2} C_{i, j, k}) \\ & + (\Delta t / \Delta y^2) \{ H_{y: i, j-1, k+1/2} (D G_{y: i, j-1, k+1/2} \\ & - D N_{y: i, j-1, k+1/2}) (C_{i, j-1, k+1} - C_{i, j, k+1}) \\ & + H_{y: i, j, k+1/2} (D G_{y: i, j, k+1/2} \\ & - D N_{y: i, j, k+1/2}) (C_{i, j+1, k+1} - C_{i, j, k+1}) \} \dots\dots (12) \end{aligned}$$

式 (11), (12) において, $i \Delta x = x$, $j \Delta y = y$, $k \Delta t = t$ である。ただし、水理量を与える位置と濃度を与える位置とが x, y 方向についてそれぞれ $\Delta x/2, \Delta y/2$ ずつずれており、また、流速 V_x, V_y が負のときには移流項の差分をかえるのも一次元の場合と同様である。

5. 計算誤差

(1) 1次元の場合

a) 誤差の現われ方

拡散方程式の数値計算においては、図-2 に示するような単一区間のみに濃度があ
り、他の区間では濃度が0で
あるような初期分布のときに
誤差が最大になる⁷⁾。したが
って以下の誤差の議論ではこ
のような初期条件で、境界条
件を $x = \pm \infty$ で $C = 0$ とし
た場合の誤差に限ることとす
る。計算誤差を調べるためには解析解と比較する必要があるが、上記の初期、境界条件の下での式 (1) の解は、河積 A が一定、流速 V および拡散係数 D が時間のみの関数の場合次のように与えられる^{6), 10)}。

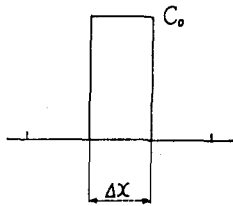


図-2 初期濃度分布

$$\begin{aligned} C = & \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta x/2 - \left(x - \int_0^t V dt \right)}{2\sqrt{\int_0^t D dt}} \right\} \right. \\ & \left. + \operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta x/2 + \left(x - \int_0^t V dt \right)}{2\sqrt{\int_0^t D dt}} \right\} \right] \dots\dots (13) \end{aligned}$$

ただし、 x は C_0 なる初期濃度がある区間の中央からとった距離である。

誤差の現われ方を見るために、 $\Delta x = 0.2$ km, $\Delta t = 0.1$ hr, $V = 2$ km/hr, $D = 0.1$ km²/hr, $C_0 = 100$ の条件で計算を行ない、解析解と比較すると図-3 のようになる。ただし、数値解、解析解ともに濃度分布の図心の位置を中心として左右対称になるので、図には片側の分布のみを示した。図からわかるように、ピーク濃度の付近では数値解の方が解析解より大きく、少し離れた所では逆に数値解の方が小さく

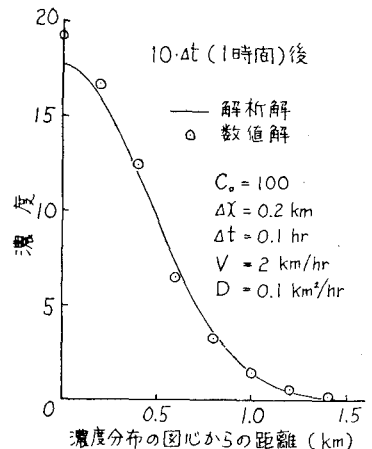


図-3 解析解と数値解との比較 (1次元)

くなっており、さらに離れて濃度分布の先端に近くなると再び数値解の方が大きいという傾向になる。実際に応用するにあたっては負荷が連続に流入することを想定する機会が多いので、誤差の大小を議論するには絶対値の差が最も大きい濃度のピークの位置での相対誤差 E_p を指標とすればよい。

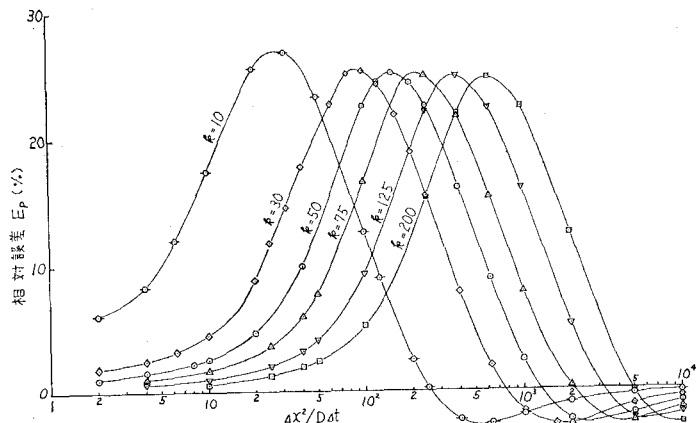
$$E_p = \frac{\text{数値解ピーク濃度} - \text{解析解ピーク濃度}}{\text{解析解ピーク濃度}} \times 100$$

b) 水理量が一定の場合

計算誤差の性質を見るために、まず、流速、水深、拡散係数が一定の場合について種々に条件を変えて E_p の大きさを調べたところ、 E_p は計算時間ステップ数 k と無次元数 $\Delta x^2 / D \cdot \Delta t$ のみの関数であり、図-4 のように表わされることがわかった。図によれば、同じ時間ステップ数で誤差を比較すれば、 $\Delta x^2 / D \cdot \Delta t$ がある程度大きくなった時に E_p が最大になっている。見方を変えれば、 $\Delta x^2 / D \cdot \Delta t$ が一定であればある程度計算が進んだ時に E_p が最大になるわけであるが、これは次のように説明できる。すなわち、最初 ($k=0$ のとき) は同一の濃度分布であるため E_p は 0 であり、計算が進むにつれて誤差が生じる。一方、数値解が解析解に収斂するとすれば、 k が大きくなると E_p は必ず小さくなるはずで、 E_p は k がある値のときに最大値をとらなければならない。実際、図-4 において E_p が最大になっているときには、数値解のピーク濃度が C_0 の約 1/2 になっており、拡散がある程度進んだ時に E_p が最大になるといえる。

c) その他の場合

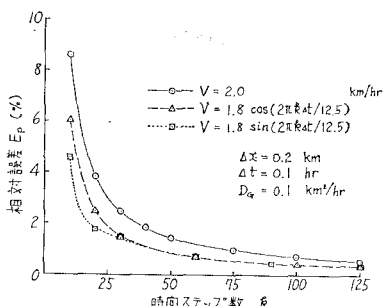
流速が時間変化する場合は誤差を調べるために、流速



図—4 相対誤差 E_p と $\Delta x^2/D \cdot \Delta t$ との関係 (1次元)

を時間の正弦および余弦関数として与え、流速が一定の場合との E_p を比較すると 図—5 のようになり、流速

が一定の場合よりも誤差が小さくなっている。ただし、この場合には擬似拡散の補正が行なっており、また、 E_p の計算にあたっては必ずしも数値解



図—5 流速を周期関数で与えた場合の誤差 (1次元)

のピークの位置と解析解のピークの位置が一致しないので、数値解のピークの位置で E_p が計算してある。図—5 によれば流速が時間の周期関数であっても、その誤差は Δx と Δt から定まる特性流速 ($V = \Delta x/\Delta t$) で定常な流れがあるとした場合の誤差を越えることはないといえる。

次に、流速を時間の正弦関数とし拡散係数をも時間の関数とした場合の誤差を調べたが、拡散係数が時間的に変化しても $\int_0^t D dt$ が拡散係数一定の場合の Dt に等しければ、 E_p もほぼ同じであることがわかった。さらに、減衰項の差分表示について検討したところ $(k+1)\Delta t$ 時刻の値で表わすのが適当であり、減衰項を含めても E_p は同程度であった。なお、水深の変化、流速および水深の場所的変化も誤差の大きさに関係するはずであるが、適当な解析解が得られないので検討しなかった。

また、物質の保存に関しては、125 ステップの計算で $\pm 0.0015\%$ 程度の増減があり完全には保存されないが、truncation 誤差と考えられ無視し得る程度であった。

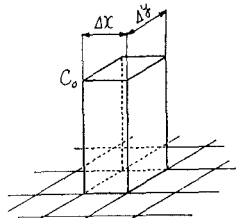
以上の検討より、1次元の場合の計算誤差は水理量が一定の場合の 図—4 でほぼ代表できるものと思われる。

なお、図—4 では E_p が最大 25% にもなっているが、これは初期条件が 図—2 のように極端な場合であって、初期条件が滑らかな分布であれば誤差ははるかに小さくなる。

(2) 2次元の場合

a) 誤差の現われ方

2次元の場合の計算誤差も、1次元の場合の類推からして 図—6 のような初期分布のときに最大になると考えられる。



図—6 初期濃度分布

このような初期条件で、境界条件が $x = \pm\infty, y = \pm\infty$ で $C=0$ という場合、式 (2) で水深一定、流速および拡散係数が時間のみの関数とすれば、解析解は次式で与えられる¹⁰⁾。

$$C = \frac{C_0}{4} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta x/2 - \left(x - \int_0^t V_x dt \right)}{2\sqrt{\int_0^t D_x dt}} \right\} + \operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta x/2 + \left(x - \int_0^t V_x dt \right)}{2\sqrt{\int_0^t D_x dt}} \right\} \right] \times \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta y/2 - \left(y - \int_0^t V_y dt \right)}{2\sqrt{\int_0^t D_y dt}} \right\} + \operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta y/2 + \left(y - \int_0^t V_y dt \right)}{2\sqrt{\int_0^t D_y dt}} \right\} \right] \quad (14)$$

ただし、式 (14) において、 x, y は初期濃度 C_0 がある区間の中央からとった座標である。

誤差の一般的傾向をみるために、流速、水深、拡散係数が一定の場合を考え、 $\Delta x = \Delta y = 0.2$ km, $\Delta t = 0.1$ hr, $V_x = V_y = 2$ km/hr, $D_{gx} = D_{gy} = 0.1$ km²/hr, $C_0 = 100$ として計算した数値解と、式 (14) で計算した解析解とを比較すると 図—7 のようになる。数値解としては、 x, y の両軸方向のみならず濃度のピークの位置から対角線方向の値も示してある。解析解は、初期分布が点対称ではないので、両軸方向の分布と対角線方向との分布は全く同じではないが、差が非常に小さいので図には1本の線で示してある。

図—7 によれば、2次元の場合にも誤差の傾向は1次元の場合と同じであるから、誤差の大きさを表わす指標としては1次元のときと同様、濃度のピークの位置で

の相対誤差 E_p を用いてよい。

b) 水理量が一定の場合

1次元の場合と比較するために Δx と Δy とを等しくとって Δs とおき、また、

流速および拡散係数を等しくして水理量一定の条件で相対誤差 E_p の大きさを調べると 図-7 に示すようになり、

時間ステップ

数 k と無次元

数 $\Delta s^2/D \cdot \Delta t$ の

みの関数であ

った。 図-8

に示した $\Delta s^2/D \cdot \Delta t$ の範囲

は 図-4 に較

べると非常に

狭く、また 図

-8 の横軸は

対数軸ではないので 図-4

とは表示方法

が異なっているが、 E_p の

値そのものを

較べてみると

2次元では1

次元の値のほ

ぼ2倍になっ

ていることが

わかる。

c) その他の場合

流速が時間的に変化する場合の影響を調べるために、流速を時間の正弦関数として与えた場合と一定の場合との E_p の値を比較すると 図-9 のようになり、流速が時間変化する場合の方が誤差が小さい。図には比較のために対応する1次元の場合の E_p も示してあるが、傾向は全く同じであり、2次元の E_p が1次元の場合のちようど2倍になっていることがわかる。以上の結果より、 $\Delta x = \Delta y$ で等方性の拡散である限り、2次元の場合の E_p

は対応する1次元の場合の E_p の2倍と考えることができよう。

2次元の計

算を実際に応

用するにあた

っては、 D_x と

D_y とを等し

くしないのが

通常なのでこ

の場合の誤差

も検討してみ

た。その結果、

たとえば $D_y > D_x$ としたとき、相対誤差 E_p は D_y/D_x

の値が大きくなるにつれて 図-8 の値から 図-4 の1次元

の場合の値に近づき、 D_y/D_x が40程度になるとほと

んど1次元の値に等しくなることがわかった。

6. ま と め

(1) 1次元の非定常拡散方程式の差分表示方法について検討し、擬似拡散係数の補正を行えば移流項の前方、中央、後方差分の区別はなくなることと、また、移流項を陽形式、拡散項を陰形式で差分表示する方式でよい結果が得られることを明らかにした。

(2) 2次元の場合には、計算を x 方向と y 方向とにわけ、上記の差分表示方法をそのまま用いることによって比較的簡単に行なえることがわかった。

(3) 上記の計算方式による計算誤差は主として計算の時間ステップ数 k と無次元数 $\Delta s^2/D \cdot \Delta t$ によって定まり、 Δs および Δt を適切に選ぶことによって必要な精度の計算を行なうことができる。

参 考 文 献

- 堀口孝男：汚染物質拡散の数値解法について、第16回海岸工学講演会講演集など
- 和田 明：二成層潮汐モデルによる工業用水取排水問題の展開、第16回海岸工学講演会講演集など
- Thoman, R. V.: Proc. ASCE, Vol. 89, SA5, 1963
- Harleman, D. R. F. et al.: Proc. ASCE, Vol. 94, SA5, 1968
- Leendertse, J. J.: Memorandum M-6230-RC, The Rand Corporation, 1970
- Bella, D. A. et al.: Proc. ASCE, Vol. 94, SA5, 1968
- Bella, D. A. et al.: Proc. ASCE, Vol. 96, SA6, 1970
- Prych, E. A.: Proc. ASCE, Vol. 95, SA5, 1969
- Ralston, A. et al.: "Mathematical Methods for Digital Computers Vol. 1", John Wiley & Sons, 1960
- Crank, J.: "Mathematics of Diffusion", Oxford Press, 1967

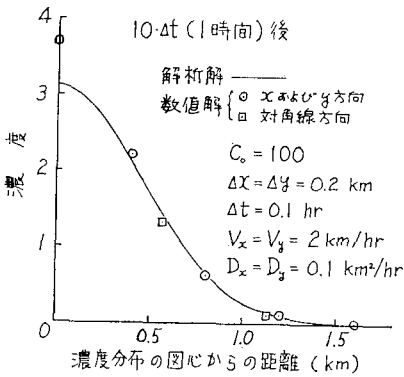


図-7 解析解と数値解との比較 (2次元、等方性拡散)

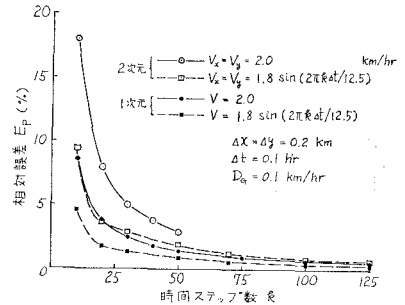


図-9 流速を周期関数で与えた場合の誤差

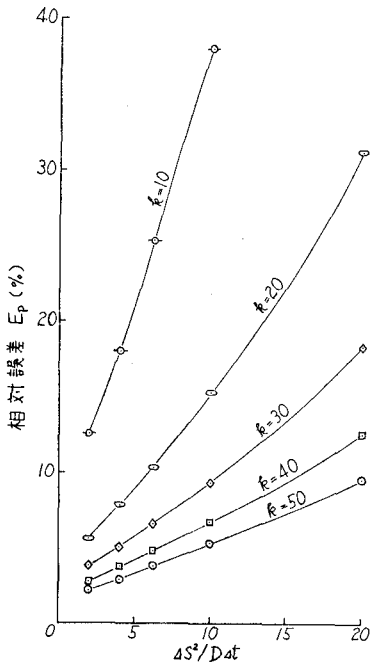


図-8 相対誤差 E_p と $\Delta s^2/D \cdot \Delta t$ との関係 (2次元、等方性拡散)