

拡散の数値解法における差分化について

堀 口 孝 男*

1. ま え が き

水域における物質拡散の現象を、拡散方程式の数値解法によって近似する方法は、1960年代の末頃からかなりの成果をみるに至っている。拡散方程式の差分化は、加速 Liebmann 法による解法といい、共役傾斜法によるものといい、あるいは Peaceman-Rachford の解法に導くものといい、きわめて多数の元を有する連立一次方程式を解くことにある。したがって近似度がよく、計算時間が短い計算方式が尊重されることはいうまでもない。

この小論においては、拡散方程式の差分化とそれら差分方程式の解法を見直し、また差分化によって発生してくる誤差に検討を加えて、今後、この分野においてますます必要とされる数値解法の simulation について、参考に供しようとするものである。

2. 陰形式の差分化とその解法

保存系の場合における、水深方向に平均化した物質の拡散方程式は次のようになる。

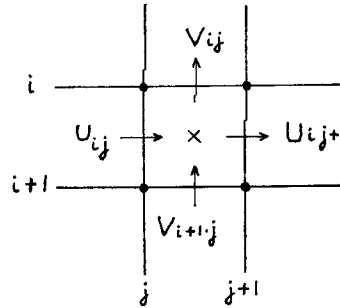
$$\begin{aligned} \frac{\partial(HS)}{\partial t} = & -\frac{\partial(HUS)}{\partial x} - \frac{\partial(HVS)}{\partial y} \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x H \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y H \frac{\partial S}{\partial y} \right) \\ & \dots\dots\dots (1) \end{aligned}$$

ここで、 H : 水深
 U, V : x, y 方向の流速
 S : 物質の濃度
 K_x, K_y : x, y 方向の拡散係数

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x H \frac{\partial S}{\partial x} \right) = & \frac{1}{\Delta s} \left\{ K_{xij+1} H_{xij+1}^{n+1} \frac{S_{ij+1}^{n+1} - S_{ij}^{n+1}}{\Delta s} - K_{xij} H_{xij}^{n+1} \frac{S_{ij}^{n+1} - S_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta s} \right\} \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y H \frac{\partial S}{\partial y} \right) = & \frac{1}{\Delta s} \left\{ K_{yij} H_{yij}^{n+1} \frac{S_{i,j+1}^{n+1} - S_{ij}^{n+1}}{\Delta s} - K_{y,i+1,j} H_{y,i+1,j}^{n+1} \frac{S_{ij}^{n+1} - S_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta s} \right\} \end{aligned}$$

したがって、

$$\begin{aligned} S_{ij}^{n+1} \left\{ H_m^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta s} M_{ij+1}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta s} N_{ij}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{xij+1} H_{xij+1}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{xij} H_{xij}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{yij} H_{yij}^{n+1} \right. \\ \left. + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{y,i+1,j} H_{y,i+1,j}^{n+1} \right\} + S_{ij+1}^{n+1} \left\{ -\frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{xij+1} H_{xij+1}^{n+1} \right\} \\ + S_{i,j-1}^{n+1} \left\{ -\frac{\Delta t}{\Delta s} M_{ij}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{xij} H_{xij}^{n+1} \right\} + S_{i-1,j}^{n+1} \left\{ -\frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{yij} H_{yij}^{n+1} \right\} \\ + S_{i+1,j}^{n+1} \left\{ -\frac{\Delta t}{\Delta s} N_{i+1,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{y,i+1,j} H_{y,i+1,j}^{n+1} \right\} = H_m^n S_{ij}^n \dots\dots\dots (2) \end{aligned}$$



● 水深点
× 濃度点

図-1 座標系の表示

いま図-1 に示すような座標表示で差分化し、かつ

$$\begin{aligned} H_m &= \frac{1}{4} (H_{ij} + H_{ij+1} + H_{i+1,j} + H_{i+1,j+1}) \\ M_{ij} &= \frac{1}{2} (H_{ij} + H_{i+1,j}) U_{ij} = H_{xij} U_{ij} \\ N_{ij} &= \frac{1}{2} (H_{ij} + H_{i,j+1}) V_{ij} = H_{yij} V_{ij} \end{aligned}$$

とすると、implicit の表現による式 (1) の差分化は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(HS)}{\partial t} &= \frac{H_m^{n+1} S_{ij}^{n+1} - H_m^n S_{ij}^n}{\Delta t} \\ \frac{\partial(H \cdot U \cdot S)}{\partial x} &= \frac{M_{ij+1}^{n+1} S_{ij}^{n+1} - M_{ij}^{n+1} S_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta s} \\ \frac{\partial(H \cdot V \cdot S)}{\partial y} &= \frac{N_{ij}^{n+1} S_{ij}^{n+1} - N_{i+1,j}^{n+1} S_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta s} \end{aligned}$$

* 正会員 運輸省港湾局防災課

式(2)においては移流項が M_{ij+1}^{n+1} , M_{ij}^{n+1} , N_{ij}^{n+1} , $N_{i+1j}^{n+1} \geq 0$ なる場合を表現しているが, $M_{ij+1}^{n+1} < 0$ の場合には,

$$\frac{\partial(H \cdot V \cdot S)}{\partial x} = \frac{M_{ij+1}^{n+1} S_{ij+1}^{n+1} - M_{ij}^{n+1} S_{ij-1}^{n+1}}{\Delta s} \quad (3)$$

と S_{ij}^{n+1} から S_{ij+1}^{n+1} に変形した, いわゆる switching の操作を施す。この switching の操作は, 負の濃度発生を押さえるのに有効な手段である。他の M_{ij}^{n+1} , N_{ij}^{n+1} , N_{i+1j}^{n+1} についても同様に, 流向による switching の操作を施すとき, 一般的に式(2)は次のように表わされる。

$$AS_{ij}^{n+1} + BS_{ij+1}^{n+1} + CS_{ij-1}^{n+1} + DS_{i-1j}^{n+1} + ES_{i+1j}^{n+1} = H_m^n S_{ij}^n \quad (4)$$

ここで

$$\begin{aligned} A &= H_m^{n+1} + \frac{\Delta t}{\Delta s} \{ (1-k_1)M_{ij+1}^{n+1} \\ &\quad - (1+k_2)M_{ij}^{n+1} + (1+k_3)N_{ij}^{n+1} - (1+k_4)N_{i+1j}^{n+1} \} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} \{ K_{xij+1}H_{xij+1}^{n+1} + K_{xij}H_{xij}^{n+1} \\ &\quad + K_{yij}H_{yij}^{n+1} + K_{yij+1}H_{yij+1}^{n+1} \} \\ B &= -\frac{\Delta t}{\Delta s} k_1 M_{ij+1}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{xij+1}H_{xij+1}^{n+1} \\ C &= -\frac{\Delta t}{\Delta s} (-k_2)M_{ij}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{yij}H_{yij}^{n+1} \\ D &= \frac{\Delta t}{\Delta s} (-k_3)N_{ij}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{yij}H_{yij}^{n+1} \\ E &= -\frac{\Delta t}{\Delta s} k_4 N_{i+1j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta s^2} K_{yij+1}H_{yij+1}^{n+1} \end{aligned}$$

ただし,

$$\begin{aligned} k_1 &= \begin{cases} 0 & M_{ij+1} \geq 0 \\ 1 & < 0 \end{cases} \\ k_2 &= \begin{cases} -1 & M_{ij} \geq 0 \\ 0 & < 0 \end{cases} \\ k_3 &= \begin{cases} 0 & N_{ij} \geq 0 \\ -1 & < 0 \end{cases} \\ k_4 &= \begin{cases} 1 & N_{i+1j} \geq 0 \\ 0 & < 0 \end{cases} \end{aligned}$$

式(4)は未知項として5項を含む多元連立方程式となるから, 解法には反復法を利用するのが便利である。反復法のうち, 加速 Liebmann 法を用いたものは, いわゆる S.O.R. 法 (Successive over relaxation method) とよばれるものである。式(4)のように表示した場合, S.O.R. 法による誤差量は小さく, 近似の度合はかなり改善される。

一方, 1950年代のなかば頃, 他の反復法の一つとして共役傾斜法 (Conjugate gradient method) に基づく解法が開発されている。この解法は一時期非常に活用されたもので, これを拡散方程式に利用する傾向が近頃で

きている。共役傾斜法は次のような手順に従う。

未知数のベクトルを $\mathbf{x}$, 係数の行列を A , 右辺のベクトルを $\mathbf{k}$ として方程式を

$$A\mathbf{x} = \mathbf{k} \quad (5)$$

と書く。ただし A は対称で正の定符号としておく。

第 i 次の近似解を $\mathbf{x}_i$ とするとき, 残差のベクトル $\mathbf{r}_i$ は

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{k} - A\mathbf{x}_i \quad (6)$$

$\mathbf{x}_i$ に対して修正ベクトル $\mathbf{p}_i$ を加えて, 第 $(i+1)$ 次の近似解は $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + a_i \mathbf{p}_i$ となる。このとき誤差関数 $f(\mathbf{x}_{i+1}) = (A^{-1}\mathbf{r}_{i+1} \cdot \mathbf{r}_{i+1})$ を最小にするには

$$a_i = \frac{(\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_i)}{(\mathbf{p}_i \cdot A\mathbf{p}_i)} \quad (7)$$

また新しい残差ベクトル $\mathbf{r}_{i+1}$ は $\mathbf{p}_i$ と直交する結果が得られる。 $\mathbf{p}_i$ を残差ベクトル $\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i$ の張る空間にとつて, $\mathbf{x}_{i+1}$ が誤差関数を最小にするようにとると,

$$(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j) = 0 \quad i \neq j \quad (8)$$

となり, 残差ベクトルは直交性を有する。

修正ベクトルの一つを $\mathbf{q}_i$ とし, 次のように表わす。

$$\mathbf{q}_i = a_i \mathbf{r}_i + a_{i-1} \mathbf{r}_{i-1} + \dots + a_0 \mathbf{r}_0 \quad (9)$$

このとき, 第 $(i+1)$ 次近似解 $\mathbf{x}_{i+1}$ は

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \mathbf{q}_i$$

となり,

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - A\mathbf{q}_i \quad (10)$$

と表わせる。

ここで式(8)の関係をを用い, また A が対称であることから

$$(\mathbf{q}_i \cdot A\mathbf{q}_j) = (\mathbf{q}_j \cdot A\mathbf{q}_i) = 0 \quad (i \neq j) \quad (11)$$

式(10), (11)の関係から

$$(\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}_0) = (\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}_1) = \dots = (\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}_i) \quad (12)$$

再び式(8)を利用すると

$$\mathbf{q}_i = a_i \left(\mathbf{r}_i + \frac{|\mathbf{r}_i|^2}{|\mathbf{r}_{i-1}|^2} \mathbf{r}_{i-1} + \dots + \frac{|\mathbf{r}_i|^2}{|\mathbf{r}_0|^2} \mathbf{r}_0 \right) \quad (13)$$

が得られる。

$$\mathbf{q}_i = A_i \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_i = \mathbf{r}_i + \frac{|\mathbf{r}_i|^2}{|\mathbf{r}_{i-1}|^2} \mathbf{r}_{i-1} + \dots + \frac{|\mathbf{r}_i|^2}{|\mathbf{r}_0|^2} \mathbf{r}_0 \quad (14)$$

と表わすとき,

$$(\mathbf{r}_j \cdot A\mathbf{q}_i) = (\mathbf{r}_j \cdot A a_i \mathbf{p}_i) = a_i (\mathbf{r}_j \cdot A\mathbf{p}_i) \quad (15)$$

残差ベクトルの直交性から

$$(\mathbf{r}_j \cdot A\mathbf{p}_i) = \begin{cases} |\mathbf{r}_i|^2/a_i & j=i \\ -|\mathbf{r}_{i+1}|^2/a_i & j=i+1 \\ 0 & (\text{その他のとき}) \end{cases}$$

また式(14)から

$$(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{A} \mathbf{p}_i) = (\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \mathbf{p}_i) = \frac{|\mathbf{r}_i|^2}{d_i} \dots \dots \dots (16)$$

すなわち(7)と同じく

$$a_i = \frac{|\mathbf{r}_i|^2}{(\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \mathbf{p}_i)}$$

以上のことから、任意の第0次近似を $\mathbf{x}_0$ とするとき $\mathbf{r}_0 = \mathbf{k} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0$, $\mathbf{C}_0 = |\mathbf{r}_0|^2$, $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$ とし、第 i 次の近似解では $\mathbf{x}_i$, $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{C}_i = |\mathbf{r}_i|^2$, $\mathbf{p}_i$ が得られるものとする。

次に $\mathbf{A} \mathbf{p}_i$ を求めて

$$\begin{aligned} d_i &= (\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \mathbf{p}_i), \quad a_i = \mathbf{C}_i / d_i, \quad \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + a_i \mathbf{p}_i, \\ \mathbf{r}_{i+1} &= \mathbf{r}_i - a_i \mathbf{A} \mathbf{p}_i, \quad \mathbf{C}_{i+1} = |\mathbf{r}_{i+1}|^2, \quad b_i = \mathbf{C}_{i+1} / \mathbf{C}_i \\ \mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{r}_{i+1} + b_i \mathbf{p}_i \end{aligned}$$

を計算する。これらを繰り返してさらに近似度の高い解を求めてゆく。

行列 $\mathbf{A}$ が対称でないときは、転置行列を左から掛けて

$$\mathbf{A}' \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}' \mathbf{k} \dots \dots \dots (17)$$

とすると、 $\mathbf{A}' \mathbf{A}$ は対称行列となる。

共役傾斜法は、拡散方程式の場合のように行列に0の項が多いときには有利で、かなり収束が早いことが期待できる。ただし $\mathbf{A}$ が正則でない場合には、 $\mathbf{r}_m \neq 0$ としても $\mathbf{A} \mathbf{p}_m = 0$ となり、ここまでで解がそれ以上進行しなくなることがある。この点に注意すべきであろう。

3. A. D. I. 法による差分化とその解法

Alternative direction implicit method, 略してA. D. I. 法とよばれる解法は、Conjugate gradient 法と同様に1950年代の中頃、Peaceman あるいは Rachford によって開発されたもので、この方法を用いて拡散方程式を取り扱ったのが Rand Corporation の Leendertse である。

A. D. I. 法による差分化は、まず x 軸方向に implicit の表示を行ない、 y 軸方向は explicit に表わす。このとき時間の進行ステップ Δt は $\Delta t/2$ に改めておく。次にさらに $\Delta t/2$ 進行したときには、今度は y 軸方向を implicit で差分表示し、 x 軸方向は explicit で表わし、これで計算サイクルを完結させる。これを繰り返して計算を進める。図—1と同様にして差分式で表わすとき、式(2)に対応するものは次のようになる。

$$\begin{aligned} S_{ij}^{n+1/2} & \left\{ H_m^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2\Delta s} M_{i,j+1}^{n+1/2} \right. \\ & + \frac{\Delta t}{2\Delta s^2} K_{xij+1} H_{xij+1}^{n+1/2} \\ & + \frac{\Delta t}{2\Delta s^2} K_{xij} H_{xij}^{n+1/2} \left. \right\} \\ & + S_{ij+1}^{n+1/2} \left\{ -\frac{\Delta t}{2\Delta s^2} K_{xij+1} H_{xij+1}^{n+1/2} \right\} \\ & + S_{ij-1}^{n+1/2} \left\{ -\frac{\Delta t}{2\Delta s} M_{ij}^{n+1/2} \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{\Delta t}{2\Delta s^2} K_{xij} H_{xij}^{n+1/2} \left. \right\} \\ & + S_{i-1j}^n \left\{ -\frac{\Delta t}{2\Delta s^2} K_{yij} H_{yij}^n \right\} \\ & + S_{i+1j}^n \left\{ -\frac{\Delta t}{2\Delta s} N_{i+1j}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta s^2} K_{y,i+1j} H_{y,i+1j}^n \right\} \\ & - H_m^n S_{ij}^n = 0 \dots \dots \dots (18) \end{aligned}$$

式(18)を要約すれば

$$t = n\Delta t \text{ から } t = (n+1/2)\Delta t \text{ に対して} \\ AS_{ij}^{n+1/2} + BS_{ij+1}^{n+1/2} + CS_{i-1j}^{n+1/2} + D = 0 \quad (19)$$

$$t = (n+1/2)\Delta t \text{ から } t = (n+1)\Delta t \text{ に対しては} \\ A'S_{ij}^{n+1} + B'S_{i-1j}^{n+1} + C'S_{i+1j}^{n+1} + D' = 0 \dots (20)$$

式(19), (20)は x 方向, y 方向と繰り返しながら計算を進めることを示しており、また各式は未知項が3項となる連立方程式である。このような3項方程式の解法には、消去法によるのが簡単である。消去法では掃出し法が用いられるが、普通の直接消去法でも比較的簡単である。

村上の方法は A. D. I. 法の手順をとりながら、式(4)の5項方程式を3項方程式に分解した一つの変形法とみられる。村上の式は次のようになる。

$$\begin{aligned} & H_m^{n+1} S_{ij}' - H_m^n S_{ij}^n \\ & = -\frac{\Delta t}{\Delta s} \{ M_{i,j+1}^n S_{ij}^n - M_{ij}^n S_{i,j-1}^n \} \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} \{ (K_{xij+1} - D_{xij+1}) H_{xij+1}^{n+1} (S_{i,j+1}' - S_{ij}') \\ & - (K_{xij} - D_{xij}) H_{xij}^{n+1} (S_{ij}' - S_{i,j-1}') \} \dots (21) \\ & H_m^{n+1} S_{ij}^{n+1} - H_m^n S_{ij}' \\ & = -\frac{\Delta t}{\Delta s} \{ N_{ij}^n S_{ij}^n - N_{i+1j}^n S_{i+1j}^n \} \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta s^2} \{ (K_{yij} - D_{yij}) H_{yij}^{n+1} (S_{i,j-1}^{n+1} - S_{ij}^{n+1}) \\ & - (K_{y,i+1j} - D_{y,i+1j}) H_{y,i+1j}^{n+1} (S_{ij}^{n+1} - S_{i+1j}^{n+1}) \} \end{aligned}$$

ここで D_x, D_y は疑似拡散項

式(21), (22)からわかるように、 x 方向, y 方向の計算をするとき、その方向のみの差分をとり、 $t = (n+1/2)\Delta t$ のステップを省略して、移流項にはその前のステップの濃度、すなわち explicit の形式を採用したものである。したがって、原方程式を x 方向と y 方向に分解した差分式とみられるから、逆に式(21)と(22)を加えれば、左辺において parameter として使われる S_{ij}' は消去されて、移流項に explicit の表現を用いた式(4)に対応する差分表示となることがわかる。

4. 誤差の処理

式(1)を差分化して数値計算を行なうときには、当然のことながら誤差の発生と蓄積が問題となる。これらを検討するため、いま一定水深の平面海域をとり、原方程式は

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -u \frac{\partial S}{\partial x} - v \frac{\partial S}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ K \frac{\partial S}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ K \frac{\partial S}{\partial y} \right\} \dots\dots\dots (23)$$

で表わしておく。移流項に中心差分を用いれば式(23)を implicit で表示した差分式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} + v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ K \frac{\partial S}{\partial x} \right\} - \frac{\partial}{\partial y} \left\{ K \frac{\partial S}{\partial y} \right\} \\ = \frac{S_{ij}^{n+1} - S_{ij}^n}{\Delta t} + u_{ij}^{n+1} \frac{S_{ij+1}^{n+1} - S_{ij-1}^{n+1}}{2\Delta s} + v_{ij}^{n+1} \frac{S_{i-1j}^{n+1} - S_{i+1j}^{n+1}}{2\Delta s} \\ - \frac{1}{\Delta s} \left\{ \frac{K_{ij+1} + K_{ij}}{2} \frac{S_{ij+1}^{n+1} - S_{ij}^{n+1}}{\Delta s} - \frac{K_{ij} + K_{ij-1}}{2} \frac{S_{ij}^{n+1} - S_{ij-1}^{n+1}}{\Delta s} \right. \\ \left. - \frac{1}{\Delta s} \left\{ \frac{K_{i-1j} + K_{ij}}{2} \frac{S_{i-1j}^{n+1} - S_{ij}^{n+1}}{\Delta s} - \frac{K_{ij} + K_{i+1j}}{2} \frac{S_{ij}^{n+1} - S_{i+1j}^{n+1}}{\Delta s} \right\} \right. \\ \left. - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} - u \frac{(\Delta s)^2}{6} \frac{\partial^3 S}{\partial x^3} - v \frac{(\Delta s)^2}{6} \frac{\partial^3 S}{\partial y^3} + \frac{(\Delta s)^2}{4} \frac{\partial^2 K}{\partial x^2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{(\Delta s)^2}{4} \frac{\partial^2 K}{\partial y^2} \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + \dots\dots\dots = 0 \right. \\ \left. \dots\dots\dots (24) \right\} \end{aligned}$$

式(23)より

$$\frac{\partial}{\partial t} = -u \frac{\partial}{\partial x} - v \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial K}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + K \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial K}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} + K \frac{\partial^2}{\partial y^2} \dots\dots\dots (25)$$

であるから、式(25)を用いて $\partial^2 S / \partial t^2$ を検討し、影響の大きい項のみをとると、

$$\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \sim \frac{\Delta t}{2} \left[\left\{ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right\} \frac{\partial S}{\partial x} + \left\{ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right\} \frac{\partial S}{\partial y} + u^2 \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + v^2 \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + 2uv \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial y} \right] \dots\dots\dots (26)$$

式(24)へ式(26)を代入すれば

$$\begin{aligned} \text{差分式} = & \frac{\Delta t}{2} \left\{ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right\} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2} \left\{ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right\} \frac{\partial S}{\partial y} + \frac{\Delta t}{2} u^2 \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\Delta t}{2} v^2 \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \\ & + \Delta t u \cdot v \frac{\partial^2 S}{\partial x \partial y} + u \frac{(\Delta s)^2}{6} \frac{\partial^3 S}{\partial x^3} + v \frac{(\Delta s)^2}{6} \frac{\partial^3 S}{\partial y^3} - \frac{(\Delta s)^2}{4} \frac{\partial^2 K}{\partial x^2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{(\Delta s)^2}{4} \frac{\partial^2 K}{\partial y^2} \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \\ & + \dots\dots\dots (27) \end{aligned}$$

となり、式(27)の右辺が誤差である。右辺第1項、第2項は移流項の誤差修正に用いることができるし、第3項、第4項は拡散項の修正に用いられる、いわゆる疑似拡散項に該当するものである。第5項は平面拡散のため生じてくる誤差で、やはり一種の疑似拡散項である。

いま、C.G.S. 単位で

$$\left. \begin{aligned} \Delta t &\sim 10^2 \sim 10^3 \\ u, v &\sim 10^1 \\ \Delta s &\sim 10^5 \\ K &\sim 10^5 \end{aligned} \right\}$$

の Order とするとき、右辺の各項は次のような Order となる。

$$\begin{aligned} \text{第1項, 第2項} &\sim 10^{-6} \sim 10^{-5} \\ \text{第3項, 第4項, 第5項} &\sim 10^{-6} \sim 10^{-5} \\ \text{第6項, 第7項} &\sim 10^{-5} \\ \text{第8項, 第9項} &\sim 10^{-5} \end{aligned}$$

このようにみると、疑似拡散項の Order は特に大きいということではなく、問題となるのは、tidal cycle の繰返しで pattern が定常的になると、一方的に累積することである。しかしながら全体としての誤差量は、他の項の影響をうけて単純ではない様相を呈することが予想される。また拡散現象では、advection の影響が diffusion

の影響よりも大きくするのが普通で、海域の拡散係数のように、その order は確定してもその値の精度が確立していない場合、疑似拡散項による修正が直ちに現象に対する近似度を増したものとさえいえない。

A.D.I. 法による誤差は、 $t=(n+1/2)\Delta t$ における x 方向による誤差と、 $t=(n+1)\Delta t$ における y 方向の差分化によって発生する誤差との和と考えればよいので、その差分化に基づく誤差は、陰形式のものと比較した場合、time step に基づく差が表われてくるものの、本質的には陰形式と同様の差分となるから、order は同等のものとなることが予想される。

図-2 は式(4)に基づく S.O.R. 法による東京湾の計算結果で、格子間隔は湾口に近い部分が 2 km、湾奥 1 km になっている。誤差修正には、筆者が第16回海岸工学講演集で説明した物質量の保存が保たれる smoothing 法を用いた。図-3 は同じ東京湾で、図-2 と全く同様な条件のもとで村上の方法に基づいた A.D.I. 法の計算結果である。ただし格子間隔は接続ができないので、湾全域を 1.5 km にしている。図から見るように、汚濁物質の排出点のごく近傍を除いてはほとんど同じ拡散の pattern を示している。

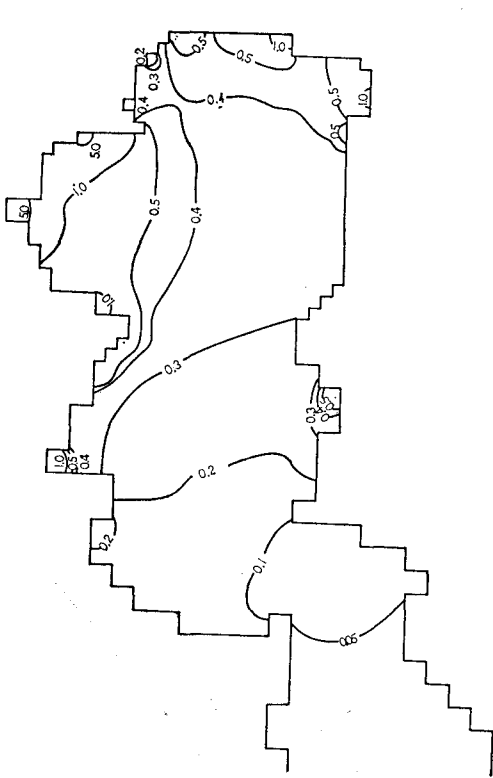


図-2 SOR 法による拡散 (20 cycles)

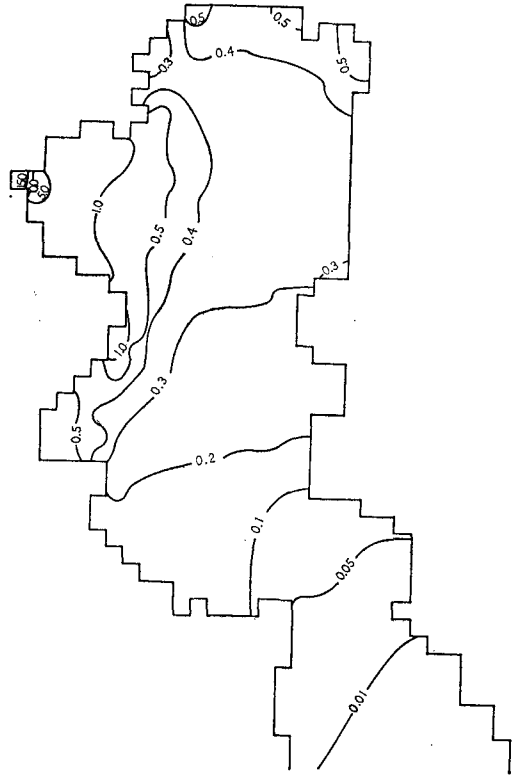


図-3 A.D.I. 法による拡散 (20 cycles)

5. む す び

1973 年は、海域における水質および底質の汚染が、魚貝類の汚染との関係においてもっとも追求され、再検討を要請された年である。ここで分析した種々の計算法は、海域の環境保全計画に有効な手段としてすでに活用されつつあり、今後ますます手法の開発、改良につとめる必要がある。なお本論で行なった計算は、日本 I.B.M. 社の協力をうけている。

参 考 文 献

- 1) Leendertse, J. J., Gitton, E. C.: A water quality simulation model for well mixed estuaries and coastal seas, Vol. II. Computation procedures. The New York City, Rand Institute, 1971.
- 2) 電算機による偏微分方程式の解法, スミス著, サイエンス社.
- 3) 村上 健: 非定常拡散方程式の数値計算法, 第 19 回海岸工学講演会論文集, 1972.
- 4) Bella, D. A., Dobbins, W. E.: Difference modeling of stream pollution, SA 5, Proc. of A. S. C. E., Oct., 1968.
- 5) 森口繁一・高田 勝: 数値計算法 I, II, 岩波講座, 現代応用数学, 1958.