

フラックス修正法による物質拡散の数値解法

小 笹 博 昭*・村 上 和 男**・森 川 雅 行***

1. ま え が き

環境問題が重大な社会問題になるにつれて、物質拡散の数値解法に対して多くの研究者より様々なアプローチがなされている。本論文では、基礎式の離散化を有限差分法で行う際の移流項の取扱いについて論じる。

従来から、移流項を空間に関して中央差分近似を行うと、負荷点付近に負の濃度が発生し自然な（滑らかな）濃度分布が得られないため、片側（上流）差分近似を行うことが多い。しかし、差分精度の観点からは、中央差分近似は2次のオーダーであるのに対し、上流差分近似は1次のオーダーであり問題が残る。そこで本研究では、精度が1次以上であり、かつ自然な濃度分布が得られるフラックス修正法を用いた物質拡散の数値解法を述べる。

2. 数値モデル

(1) 基礎式とその差分表示

図-1 に示す単位セルについて、物質の質量保存則を示す拡散方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial(c)}{\partial t} + \frac{1}{\Delta s} [(Q_u c)_{KE} - (Q_u c)_{KW} + (Q_v c)_{KN} - (Q_v c)_{KS}] \\ = (E - R) \frac{1}{\Delta s^2} + \left[d_{KE} \left(D_{XX} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{XY} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{KE} \right. \\ \left. - d_{KW} \left(D_{XX} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{XY} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{KW} \right] \frac{1}{\Delta s} \\ + \left[d_{KN} \left(D_{YX} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{YY} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{KN} \right. \\ \left. - d_{KS} \left(D_{YX} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{YY} \frac{\partial c}{\partial y} \right)_{KS} \right] \frac{1}{\Delta s} \dots\dots (1) \end{aligned}$$

と書き表わされる²⁾。ここで、 d は水深、 c は水深方向に平均した濃度、 Q_u 、 Q_v は x 、 y 方向の単位幅当たりの流量、 E 、 R は単位時間当たりの単位セルでの物質の湧出量、消失量、 Δs は格子幅である。また、添字の KE 、 KN 、 KW 、 KS はそれぞれ単位セルの東、北、西、南側

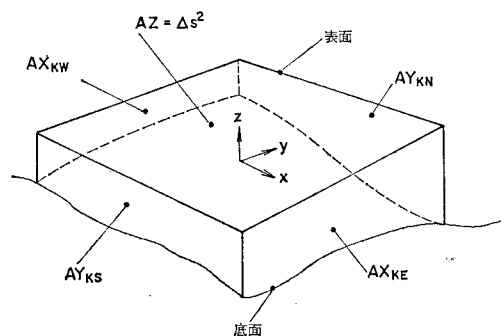


図-1 単位セル

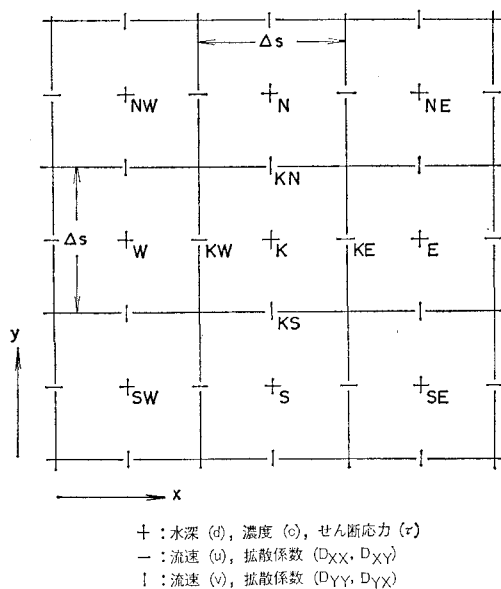


図-2 変数の位置

の4側面における諸量であることを示す。また、 D_{XX} 、 D_{XY} 、 D_{YX} 、 D_{YY} はそれぞれ分散係数 D_s と乱流拡散係数 ν_T とを組合わせた係数で、

$$\left. \begin{aligned} D_{XX} &= \nu_T + D_s \cdot u^2 / q^2, & D_{XY} &= D_s \cdot u \cdot v / q^2 \\ D_{YY} &= \nu_T + D_s \cdot v^2 / q^2, & D_{YX} &= D_s \cdot v \cdot u / q^2 \end{aligned} \right\} \dots\dots (2)$$

と定義される。ここで、 u 、 v は x 、 y 方向の断面平均流速、 $q^2 = u^2 + v^2$ である。図-2 に各変数を定義する位

* 正会員 工修 国際臨海開発研究センター

** 正会員 工修 運輸省港湾技術研究所
海洋水理部海水汚染水理研究室長

*** 正会員 工修 運輸省港湾技術研究所
海洋水理部海水汚染水理研究室

置を示す。

式(1)の左辺第2項は移流による物質の輸送を表わし、右辺第2項と第3項は拡散および分散による輸送を表わす。式(1)を移流項については空間に対して上流差分、時間に対してインプリシットの形で、拡散項についてはそれぞれ中央差分、エクスプリシットの形で差分化を行う。

いま、上流差分を取るための演算子を u_{KE} , u_{KW} , v_{KN} , v_{KS} の符号により、以下のように定義する。

$$A_X(Q_u c)_K = \frac{1}{\Delta s} [\{ H(u_{KE}) c_K + H(-u_{KE}) c_E \} Q_{u_{KE}} - \{ H(u_{KW}) c_W + H(-u_{KW}) c_K \} Q_{u_{KW}}] \quad \dots\dots\dots (3)$$

$$A_Y(Q_v c)_K = \frac{1}{\Delta s} [\{ H(v_{KN}) c_K + H(-v_{KN}) c_N \} Q_{v_{KN}} - \{ H(v_{KS}) c_S + H(-v_{KS}) c_K \} Q_{v_{KS}}] \quad \dots\dots\dots (4)$$

ここで、 H は Heaviside タイプの関数で

$$H(x) = 1; x > 0 \quad H(x) = 0; x \leq 0 \quad \dots\dots (5)$$

である。

これらの演算子を用いて、式(1)を次のように差分化する。

$$\begin{aligned} & \left(d^+ + \frac{1}{2} \Delta t A_X Q_u^0 + \frac{1}{2} \Delta t A_Y Q_v^0 \right) c^+ \\ & = \left(d^- - \frac{1}{2} \Delta t A_X Q_u^0 - \frac{1}{2} \Delta t A_Y Q_v^0 + D \Delta t \right) c^- \\ & + \Delta t (E - R) \frac{1}{\Delta s^2} \quad \dots\dots\dots (6) \end{aligned}$$

ここに、 Δt はタイムステップ、添字 $-$ はタイムステップの開始時の値、 $+$ は終了時の値、 0 はタイムステップ間で平均した値を示す。 D は拡散項の差分演算子で、

$$D = \frac{1}{\Delta s^2} [\delta_x \{ d(D_{XX} \delta_x + D_{XY} \delta_y) \} + \delta_y \{ d(D_{YX} \delta_x + D_{YY} \delta_y) \}] \quad \dots\dots (7)$$

と表わされる。 δ_x , δ_y は x , y 方向に中央差分を取る演算子である。移流項がインプリシットに表示されているため、式(6)は単位セル K について、5個の未知量 c_K^+ , c_W^+ , c_E^+ , c_N^+ , c_S^+ を含んでいる。この問題は1タイムステップを前半と後半とにわけ、前半で x 軸方向の成分をインプリシット、 y 軸方向成分をエクスプリシットの表示を行い、後半でインプリシット、エクスプリシットの表示を逆にするという ADI 法³⁾の手法を用いて解くことができる。こうして濃度を求める方法を本論文では上流差分法と呼ぶことにする。

(2) フラックス修正法

上流差分法で求めた濃度は、非負であり自然な濃度分布を示すが、その精度は空間、時間に関して1次のオーダーである。

時間に関して精度が1次なのは拡散項をエクスプリシットに表示しているためである。拡散項をインプリシットに表示することは可能であるが、 D_{XY} , D_{YX} という斜め方向の拡散係数を含んでおり、未知数が増加して ADI 法で取扱えなくなる。一般に時間に関する精度は、タイムステップ Δt が制約条件 ($\Delta t < \Delta s / (2 \cdot u_{\max})$) を満足していれば問題とならない。 $u_{\max}$ は領域内の最大平均流速である。

空間に関する精度が1次なのは、移流項を中央差分でなく、上流差分近似しているためである。いま、上流差分近似による誤差の構造を考えてみる。Heaviside タイプの関数には

$$xH(x) + xH(-x) = x, \quad xH(x) - xH(-x) = |x| \quad \dots\dots\dots (8)$$

の性質があり、式(3), (4)で示した上流差分演算子を書き直すと

$$A_X(Q_u c) = \frac{1}{\Delta s} \left\{ \delta_x(Q_u \mu_x(c)) - \frac{1}{2} \delta_x(|Q_u| \delta_x(c)) \right\} \quad \dots\dots\dots (9)$$

$$A_Y(Q_v c) = \frac{1}{\Delta s} \left\{ \delta_y(Q_v \mu_y(c)) - \frac{1}{2} \delta_y(|Q_v| \delta_y(c)) \right\} \quad \dots\dots\dots (10)$$

となる。ここで、 μ_x , μ_y は x , y 方向に空間平均を取る操作を示す。式(9), (10)から、式(1)の上流差分近似による空間についての1次のオーダーの打ち切り誤差は

$$\frac{1}{2} \Delta s \left\{ \frac{\partial}{\partial x} |Q_u| \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} |Q_v| \frac{\partial c}{\partial y} \right\} \quad \dots\dots (11)$$

であることがわかる。この誤差項は、数値計算上 $1/2 \cdot \Delta s |u|$, $1/2 \cdot \Delta s |v|$ の正の係数を持つ拡散項と同じ構造をしている。したがって、上流差分法で得た濃度から誤差を差引くという修正は、濃度の低い所から高い所へと物質のフラックスが移動するかのように作用する。そのため、濃度勾配は急になり、濃度の極値が強められるとともに、上流差分法で得た濃度分布で極値を示す点以外に、新たな極小値や極大値が形成され不自然な濃度分布となる可能性がある。また、物理的にありえない負の濃度が発生する可能性もある。そこで、修正するフラックスにある制約を設け、不自然な濃度分布が発生しないようにすればよい。これがフラックス修正法⁴⁾の考え方である。制約には、2種類のものが考えられる。ひとつは修正により新たな極小値が発生しないようにするものである。自然な分布を維持するためのみでなく負の濃度を発生させないためにも、この制約をフラックスは必ず満足しなければならない。他のひとつは、極小値に加えて新たな極大値が発生しないようにするものである。前者の方がフラックスの修正量に対する制約が緩いので弱フラックス修正法と呼び、後者を強フラックス修正法と呼ぶこ

とにする。

実際にフラックスの修正量がどのようになるか、1次元(x 方向)の場合について調べてみる。連続した4個のセル(C_W, C_K, C_E, C_{EE})について考える。濃度分布が、 $C_W > C_K < C_E$ の場合は C_K が濃度の極小値となっており、修正を行うと極小値が強められ、負の濃度が発生する可能性があるため修正は行わない。 $C_W < C_K < C_E$ の場合は、セル K の東の側面 KE で、式(11)により定義されるフラックスの修正量は

$$f_{KE} = \frac{\Delta t}{2\Delta s} \cdot |Q_{w_{KE}}| \cdot (C_E - C_K) \quad \dots\dots\dots(12)$$

である。この修正量 f_{KE} が

$$\Delta_{KW} = d_K \cdot (C_K - C_W) \quad \dots\dots\dots(13)$$

より大きければ、 $C_W > C_K < C_E$ となりフラックスの修正により新たな極小値が生じる。したがって、新たに極小値を生じさせないフラックスの修正量 f_{KE}^c は

$$f_{KE}^c = \min(\Delta_{KW}, f_{KE}) \quad \dots\dots\dots(14)$$

となる(弱フラックス修正法)。 f_{KE} による修正は、 C_E の濃度を増加させる。 $C_W < C_K < C_E < C_{EE}$ の場合、修正量 f_{KE} が

$$\Delta_{KEE} = d_E \cdot (C_{EE} - C_E) \quad \dots\dots\dots(15)$$

より大きければ、 $C_W < C_K < C_E > C_{EE}$ となり新たな極大値が生じる。したがって、フラックスの修正により新たに極小値および極大値を生じさせない修正量 f_{KE}^c は

$$f_{KE}^c = \min(\Delta_{KW}, \Delta_{KEE}, f_{KE}) \quad \dots\dots\dots(16)$$

となる(強フラックス修正法)。 $C_W < C_K < C_E > C_{EE}$ の場合は、 C_E が濃度の極大値となっており、修正を行うと異常な極大値となる可能性があるため、強フラックス修正法では修正を行わない。濃度分布が $C_{WW} > C_W > C_K > C_E$ の場合にも、 f_{KE}^c は同様に定義される。他の側面 KW における修正量 f_{KW}^c も同様に求められ、修正された濃度 C_K^c は

$$C_K^c = C_K - \frac{1}{d_K} \cdot (f_{KE}^c - f_{KW}^c) \quad \dots\dots\dots(17)$$

で与えられる。二次元の場合には、 y 軸方向にも同じ操作を行えばよい。

こうして得られた濃度は、濃度勾配が緩やかな部分では空間に関して2次のオーダーの精度を持つが、勾配が急な部分では修正するフラックスに制約が付き、2次のオーダーより若干悪くなる可能性がある。また、式(17)に示す修正は、境界部分を除いて物質の保存則を満たしている。

3. 数値モデルの検証

水理模型実験での流れや負荷量などの値を2.で示した数値モデルに適用し、結果に若干の考察を加えた⁵⁾。

水理実験は、実海域の水平縮尺 1/2000、鉛直縮尺 1/160 のひずみ模型を用いて、現地で観察される代表的な

3種類の流況パターンを廻流ポンプにより定常流として再現させて実施した。トレーサーとして、けい光染料であるフルオレッセンナトリウムを使用し、沖合の1地点から1時間連続して投入した。投入に際しては、染料濃度は 50 ppm、投入流量は 10 cm³/s とし、水深方向に均一に負荷されるように注意した。採水は、ガラス管を用い手作業により湾内約 30 地点で実施した。分析には、ターナー社のけい光光度計を使用した。図-3 に、トレーサー投入 60 分後の等濃度線を示す。実験は同一条件のものを2回行っており、等濃度線は2回の結果の平均に対して描いた。

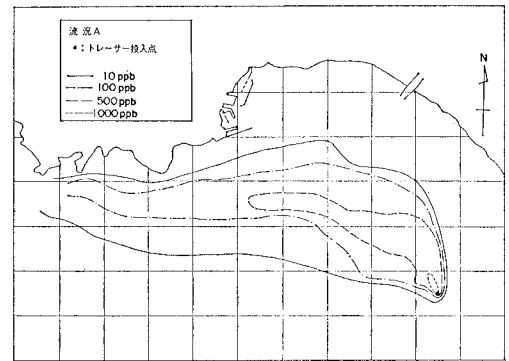


図-3 濃度分布図(実験結果)

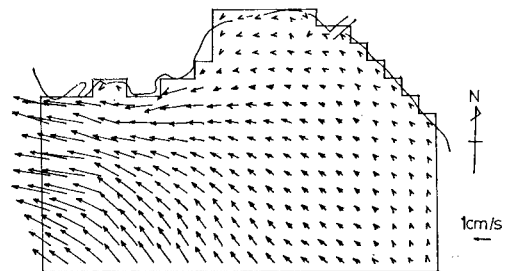


図-4 表面流速分布

数値計算で使用した流速データは、水理実験時に撮影したフロートの流跡から求めた流速分布を各单位セルについて連続の式を満足するように修正したものである。これを図-4に示す。拡散係数は、Elder, J. W. が二次元開水路に対して行った解析⁶⁾より、 $D_s = 5.86du_*$ 、 $\nu_T = 0.07du_*$ として求めた。ここで、 u_* は摩擦速度で $u/15.0$ として計算した。タイムステップ Δt は、計算の安定性および精度から決定される。上流差分法のフルスキームに対して、安定性の解析を実施するのは困難である。実際には、タイムステップは安定性よりも解の精度から制約を受ける。本計算では、格子幅として $\Delta s = 0.5$ m をとり、 $u_{\max} \approx 0.03$ m/s であるので $\Delta s / (2 \cdot u_{\max}) \approx 8$ s となる。模型実験での採水時間間隔を考慮して、 $\Delta t = 6$ s とした。投入負荷は、模型実験での投入点を含

む単位セル内に瞬時に均一に拡がるものとして取扱った。

負荷投入開始 60 分後の濃度分布を図-5、図-6、図-7 に示す。図-5 は上流差分法、図-6 は弱フラックス修正法、図-7 は強フラックス修正法による計算結果である。これらの図より、上流差分法による計算結果は、実験結果(図-3)に比べて、物質の拡がりが大きく、フラックスの修正を行うと、計算結果が実験結果に似てくることがわかる。また、弱と強のフラックス修正法による計算結果については、あまり差がみられないが、弱フラックス修正法による結果の方が修正するフラックスに対する制約が緩いので、濃度勾配が急なものになっている。

また、弱フラックス修正法では新たな極大値の形成を許容しているので、他の流況パターンで投入点セル以外に新たな濃度の極大値が発生した。このことから、負荷を投入するといった、濃度の極大値も極小値と同様に考慮する必要がある問題には強フラックス修正法が適しているといえる。また、均一に拡がった物質の流動といったような濃度の極大値の分布を考慮する必要がないものに対しては、強フラックス修正法より 2 次の精度に近い弱フラックス修正法が適していると考えられる。

本モデルとは別に、移流項を中央差分近似したモデルや Bella ら⁸⁾が明らかにした擬似拡散係数を導入したモデルで同様な計算を実施したが、負の濃度が発生して自然な濃度分布とならず、計算結果と実験結果はよい一致を示さなかった。これらのことから、フラックス修正法は移流項の取扱に関して優れた手法であると言える。

4. あとがき

本研究の主要な結論を要約すると以下のようなになる。

(1) 物質拡散の数値解法において、フラックス修正法は、自然でかつ空間についての精度が一次以上である濃度分布を与える。

(2) 水理実験での流れや負荷量などの値を数値モデルに適用した結果より、フ

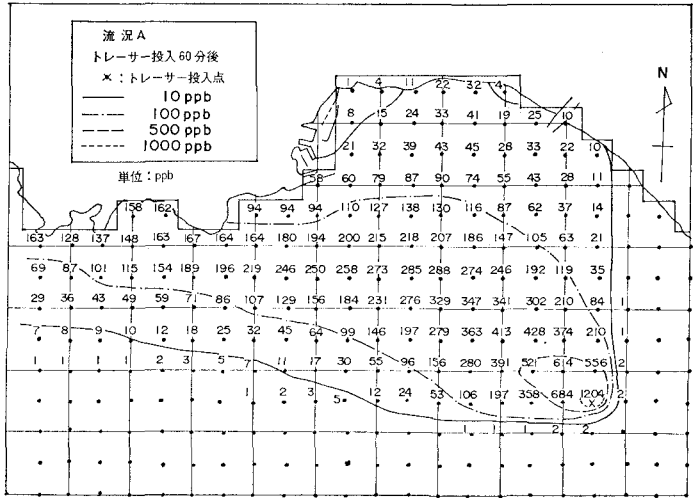


図-5 濃度分布図(上流差分法)

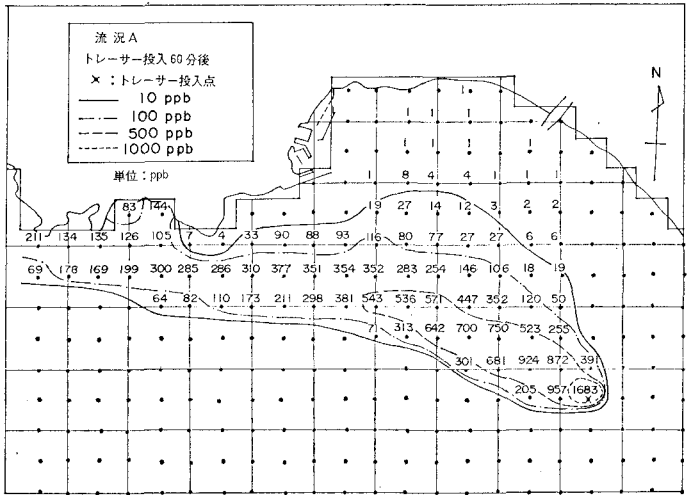


図-6 濃度分布図(弱フラックス修正法)

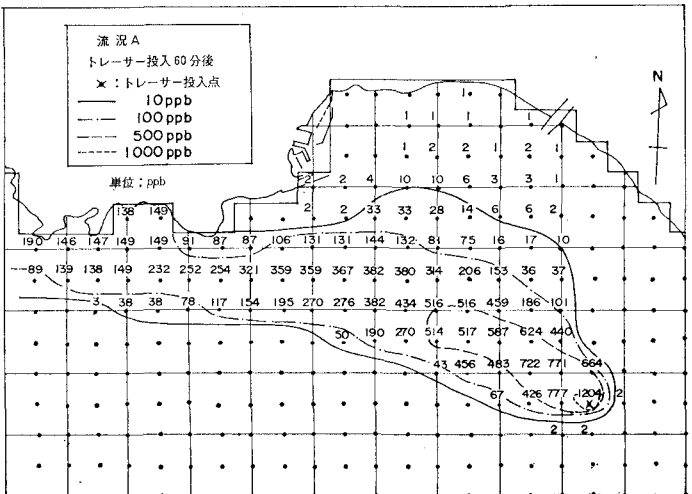


図-7 濃度分布図(強フラックス修正法)

ラックス修正法は移流項の取扱いについて優れた手法であることがわかった。

(3) 強・弱どちらのフラックス修正法を採用するかについては、対象とする問題によって検討する必要がある。

なお、本研究を進めるにあたっては運輸省第一・第三港湾建設局の関係者各位から多大な協力を得た。また、港湾技術研究所堀江毅海水浄化研究室長から貴重な助言や指導を戴いた。この場を借りて感謝の意を表します。

参 考 文 献

- 1) たとえば、堀江 毅：沿岸海域の水の流れと物質の拡散に関する水理学的研究，港研資料，No. 360, 222 p., 1980.
- 2) Hydraulics Research Station: A numerical model for background temperature fields, HRS Report Ex 806, 1978.
- 3) Leenderste, J. J.: Aspects of a computational model for long-period water wave propagation, RM-5295-PR, the Rand Corporation, 165 p., 1967.
- 4) Boris, J. P. and D. L. Book: Flux-corrected transport I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works, Journal of Computational Physics, Vol. 11, pp. 38~69, 1973.
- 5) 小笹博昭・森川雅行・村上和男・入尾野幸雄・白井正生：流れの場における微細土砂粒子の分散特性について——水理模型実験と数値計算による検討——，港研資料，No. 386, 46 p., 1981.
- 6) Elder, J. W.: The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow, Jour. Fluid Mech., Vol. 5, pp. 544~560, 1958.
- 7) 土木学会編：水理公式集，p. 155, 1961年.
- 8) Bella, D. A. and W. J. Grenney: Finite-difference convective errors, J. Sanitary Eng. Div., Proc. ASCE, Vol. 96, SA6, pp. 1361~1375, 1970.