

河川や沿岸部における拡散物質の輸送拡散の計算法

小松利光*・仲敷憲和**・大串浩一郎**

1. ま え が き

密度差を持たない拡散物質の水域における拡散問題を取り扱うときは、平均流による輸送と移流分散・乱流拡散という数学的にも物理的にも性質の異なる2種類の輸送形式を含む偏微分方程式（拡散方程式）を解かねばならない。そのための有力な計算法として提案された Split operator approach は、平均流による輸送と移流分散・乱流拡散を別個に独立させて 1 time step 毎に計算しようとするもので、それぞれの process に対して最適な計算方法を選択できるという大きな長所がある。特に前者の計算に対しては、特性曲線法を用いることにより境界条件を自然な形で取り入れることができる。しかしながら、移流分散・乱流拡散における輸送は種々の差分形式で精度良く計算できるのに対して、平均流による輸送の正確な計算は容易ではなく種々の工夫が必要とされている。

Holly-Preissmann (1977)¹⁾ は、2-point 4th order method を提案し、平均流による輸送の計算に関して従来の計算方法と比べると飛躍的に改善された結果を得た。しかし、2次元問題への適用は非常に煩雑でかつ計算時間を要し、とても実用的とは言えなかった。

Holly-Komatsu (1983)^{2),3)} は、精度の点でも計算の容易さの点でも H-P 法の短所を十分補った 8-point method を提案し、2次元問題適用への道を拓いた。その後、Komatsu-Holly-Nakashiki (1984)⁴⁾ は、8-point method を更に改良してほとんど計算精度を落とすことなく使用する点を減らした 6-point method を提案し、1次元、2次元問題を問わず容易に精度良く平均流による拡散物質の輸送が計算できることを示した。

本論文では、6-point method の具体的な適用の仕方について述べ、境界付近の計算法や移流分散・乱流拡散のある場合の計算の仕方、また格子間隔 $\Delta x \approx \text{const}$ 、平均流速 $U \approx \text{const}$ の場合について検討を加えている。

2. 6-point method について

2.1 特性曲線法を用いた平均流による輸送の計算
まず 1 次元の輸送方程式を考える。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad \cdots \cdots \cdots (1)$$

ここで、 $C(x,t)$ は拡散物質の濃度であり、 $U(x,t)$ は x 方向の流速である。式 (1) は次のように書き換えられる。

$$\frac{dx}{dt} = U \quad \text{上で} \quad \frac{dC}{dt} = 0 \quad \cdots \cdots \cdots (2)$$

すなわち、特性曲線 $dx/dt=U$ 上で $C=\text{const}$ となる。したがって、図-1 において時刻 $t=t_{n+1}$ における x_i 点での濃度 C_i^{n+1} は、

$$C_i^{n+1} = C_\xi^n \quad \cdots \cdots \cdots (3)$$

で与えられる。ここで添字 i は計算格子点の場所を表わす指標であり、添字 n は時刻を表す指標である。また ξ は格子点 (x_i, t_{n+1}) に到る特性曲線の $t=t_n$ における x 座標を表す。そこで既知の $t=t_n$ の格子点上の濃度を用いて、いかに C_ξ^n の値を求めるかが次の大きな課題となる。

2.2 6-point method

Holly-Preissmann²⁾ は、 C_ξ^n 求める方法として 2-point 4th order method を提案し飛躍的に改善された結果を得た。これは拡散物質の濃度 C だけでなく、濃度の場所的な変化率 $CX (= \partial C / \partial x)$ も従属変数として輸送拡散させるもので、 ξ に最も近い2つの格子点における量から濃度を評価したものである。この H-P 法は、1次元の

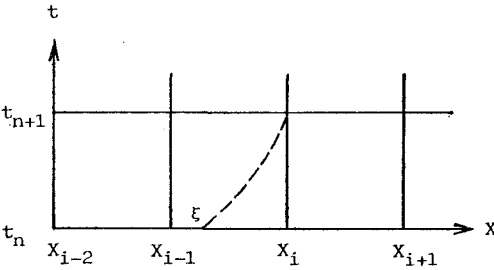


図-1 1次元計算格子

* 正 会 員 工博 九州大学助教授 工学部水工土木学科
** 学生会員 九州大学大学院 水工土木学専攻修士課程

拡散問題では計算もそれ程煩雑でなく計算結果も優れたものであった。しかしながら、2次元の拡散問題への適用は C , CX だけでなく CY ($\partial C/\partial y$), CXY ($=\partial^2 C/\partial x \partial y$) も従属変数として輸送、拡散させなければならず、計算は複雑化して計算時間も要し、とても実用的な計算法とは言い難かった。

Holly-Komatsu^{2),3)} は、2次元問題における H-P 法の欠陥を補うため 8-point method を開発し提案した。これは CX を従属変数として用いず、8点の既知の濃度 C を用いて CX_i , CX_{i-1} , $CX_{i-1/2}$ をその都度推定し、それらの量を用いてベキ関数を構成するもので、濃度の導関数の輸送を必要としない。そのため計算手順が著しく簡便化されて、計算結果も H-P 法に優るとも劣らないものであった。ただ8点を用いるため、境界において境界外の3点の濃度を仮定しなければならず、また2次元問題では $8 \times 8 = 64$ 点の濃度を用いて 1 time step 先の1点の濃度を計算しなければならなかった。

Komatsu-Holly-Nakashiki⁴⁾ は、8-point method の概念を拡張して、計算を更に簡単にするため、使用する濃度の数を減らすことを試み、6-point method を提案した。そして1次元、2次元問題においても、H-P 法、8-point method とほぼ同程度の精度で、著しく容易に平均流による輸送が計算できることを示した。特に2次元拡散問題の際、 $6 \times 6 = 36$ 点で 1 time step 先の濃度が求まることになり、8-point method に比べると用いる点はほぼ半分で済むことになる。また境界においてもその取扱いは一般的に容易なものとなっている。6-point method の最終的な計算式は以下ようになる。

$$C_i^{n+1} = b_1 C_{i-3}^n + b_2 C_{i-2}^n + b_3 C_{i-1}^n + b_4 C_i^n + b_5 C_{i+1}^n + b_6 C_{i+2}^n \dots \dots \dots (4)$$

ここで

$$b_1 = -0.01806\alpha^3 - 0.03828\alpha^2 + 0.05633\alpha$$

$$b_2 = 0.2570\alpha^3 + 0.05276\alpha^2 - 0.3097\alpha$$

$$b_3 = -0.6806\alpha^3 + 0.6480\alpha^2 + 1.033\alpha$$

$$b_4 = 0.6806\alpha^3 - 1.394\alpha^2 - 0.2869\alpha + 1$$

$$b_5 = -0.2570\alpha^3 + 0.8236\alpha^2 - 0.5667\alpha$$

$$b_6 = 0.01806\alpha^3 - 0.09245\alpha^2 + 0.07439\alpha$$

$$\alpha = (x_i - \xi) / (x_i - x_{i-1}) = U \cdot \Delta t / \Delta x$$

3. 境界付近への 6-point method の適用

3.1 境界外の濃度の推算式

前報⁴⁾では、境界条件が重要な役割を果たしていない場合の1次元、2次元の計算例を用いて、平均流による拡散物質の輸送の計算における精度の良さや簡便さを示した。しかし、実際の多くの拡散問題においては境界条件が決定的な役割を果たしており、6-point method を境界付近へ適用する際の境界外の濃度の推定方法の確立はまず早急に解決しなければならない問題である。種々の推

定法が吟味されたが、次に述べる方法は精度と計算の容易さの点から最良と思われるものである。 (x, t) 平面における計算領域に特性曲線が入ってくる境界では、境界条件もしくは初期条件が要求され(図-2(a))、逆に計算領域から特性曲線が出ていく境界では、濃度に関する条件は何ら要求されない(図-2(b))。

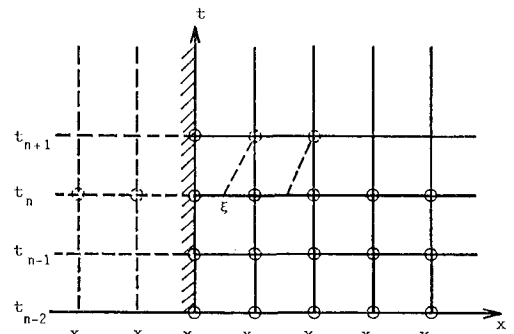
まず境界条件が与えられている図-2(a)の場合について考えてみる。 $t=t_{n+1}$ における濃度を計算する際、 C_1^{n+1} は境界条件として与えられているので C_2^{n+1} から始めることになるが、 C_2^{n+1} を求めるために 6-point method を適用すると、 $t=t_n$ における $x_{-1} \sim x_4$ の濃度 $C_{-1}^n \sim C_4^n$ が必要であり、 C_{-1}^n , C_0^n の2つの境界外の濃度を推定しなければならない。 $x=x_1$ のまわりに Taylor 級数に展開して、 C_{-1}^n , C_0^n を求めると

$$\left. \begin{aligned} C_{-1}^n &= C_1^n - 2 \cdot CX_1^n \Delta x + 2CX_1^n \Delta x^2 + \dots \\ C_0^n &= C_1^n - CX_1^n \Delta x + \frac{1}{2} CX_1^n \Delta x^2 + \dots \end{aligned} \right\} \dots (5)$$

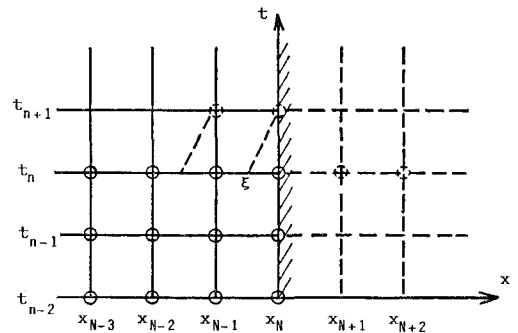
となる。境界においても濃度は移流方程式(1)を満足するとして、

$$\frac{\partial C}{\partial t} \bigg|_{x_1} + U(x_{1,t}) \frac{\partial C}{\partial x} \bigg|_{x_1} = 0$$

が成立し、その結果



(a) 特性曲線が計算領域に入ってくる境界



(b) 特性曲線が計算領域から出ていく境界

図-2 境界付近の計算

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x_1, t_n} &= \frac{-1}{U(x_1, t_n)} \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{x_1, t_n} \\ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \Big|_{x_1, t_n} &= \frac{1}{(U(x_1, t_n))^2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_{x_1, t_n} \\ &\quad + \frac{1}{(U(x_1, t_n))^2} \frac{\partial U}{\partial t} \Big|_{x_1, t_n} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x_1, t_n} \\ &\quad - \frac{1}{U(x_1, t_n)} \frac{\partial U}{\partial x} \Big|_{x_1, t_n} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x_1, t_n} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6)$$

となる。ここに $\partial U / \partial t|_{x_1, t_n}$, $\partial U / \partial x|_{x_1, t_n}$ は流れの状態が既知であるので前もって与えられるが、ここでは簡単のため境界上で $U = \text{const}$ の場合を考えると、式 (6) は簡単化されて次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} CX_1^n &= -\frac{1}{U} \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{x_1, t_n} \\ CXX_1^n &= \frac{1}{U^2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_{x_1, t_n} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7)$$

次に C_1^n のまわりに時間に関して Taylor 級数に展開して、 C_1^{n-1} , C_1^{n-2} を求めると、

$$\left. \begin{aligned} C_1^{n-1} &= C_1^n - \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{x_1, t_n} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_{x_1, t_n} \Delta t^2 \\ C_1^{n-2} &= C_1^n - 2 \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{x_1, t_n} \Delta t + 2 \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_{x_1, t_n} \Delta t^2 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (8)$$

となり、上式を連立させて未知量 $\partial C / \partial t|_{x_1, t_n}$, $\partial^2 C / \partial t^2|_{x_1, t_n}$ について解くと、

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{x_1, t_n} &= \frac{1}{2\Delta t} (C_1^{n-2} - 4C_1^{n-1} + 3C_1^n) \\ \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \Big|_{x_1, t_n} &= \frac{1}{\Delta t^2} (C_1^{n-2} - 2C_1^{n-1} + C_1^n) \end{aligned} \right\} \dots\dots (9)$$

となる。式 (9) を (7) に代入し、その結果を更に式 (5) に代入すると、 C_1^n , C_0^n の表示式として、

$$\left. \begin{aligned} C_1^n &= \frac{\alpha+2}{\alpha^2} C_1^{n-2} - \frac{4(\alpha+1)}{\alpha^2} C_1^{n-1} + \frac{(\alpha+1)(\alpha+2)}{\alpha^2} C_1^n \\ C_0^n &= \frac{\alpha+1}{2\alpha^2} C_1^{n-2} - \frac{2\alpha+1}{\alpha^2} C_1^{n-1} + \frac{(2\alpha+1)(\alpha+1)}{2\alpha^2} C_1^n \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (10)$$

が与えられ、 C_1^{n-2} , C_1^{n-1} , C_1^n は全て既知の量であるから C_1^n , C_0^n の推定値が計算できることになる。

図-2 (b) の境界条件が与えられない場合も C_{N+1}^n を計算するために C_{N+1}^n , C_{N+2}^n の2つの濃度が必要であるが、その評価式は全く同様の手法で求められ次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} C_{N+1}^n &= \frac{-(\alpha-1)}{2\alpha^2} C_N^{n-2} + \frac{2\alpha-1}{\alpha^2} C_N^{n-1} \\ &\quad + \frac{(2\alpha-1)(\alpha-1)}{2\alpha^2} C_N^n \\ C_{N+2}^n &= \frac{-(\alpha-2)}{\alpha^2} C_N^{n-2} + \frac{4(\alpha-1)}{\alpha^2} C_N^{n-1} \\ &\quad + \frac{(\alpha-1)(\alpha-2)}{\alpha^2} C_N^n \end{aligned} \right\} \dots\dots (11)$$

なお、境界における $U(x_1, t)$, $U(x_N, t)$ が時間的に一定でない時は式 (7) の代りに式 (6) を用いればよい。

3.2 計算結果の比較検討

式 (10), (11) の境界外濃度の推算式の有用性を検証するため 図-3 に示すような Gauss 型濃度分布の1次元 pure advection の計算を行う。開水路流れを考え、流速は一定で $U=0.5$ (m/s), Gauss 分布の標準偏差は $\sigma=264$ (m), また $\Delta x=200$ (m), $\Delta t=100$ (s) とする。初期の Gauss 分布は U により下流に輸送されるが、ここでは、 $t=4700$ (s) の濃度分布を計算している。計算領域の上流側の境界を $x=0$ (m) にとると、境界条件が計算領域にほとんど影響を与えない場合に相当し、近似的に $C_1^n = C_0^n = C_1^n \approx 0$ とおける。一方上流側の境界を $x=2800$ (m) にとると、境界条件は、図-4 に示すようになり、下流側に対して決定的な役割を果たす。 $x=0$ (m)

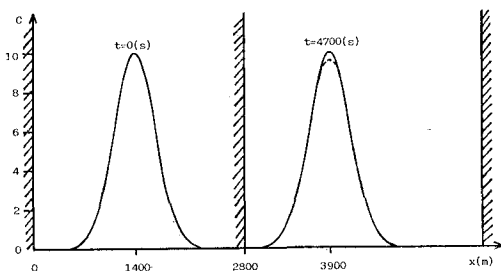


図-3 Gauss 濃度分布の移流モデル計算

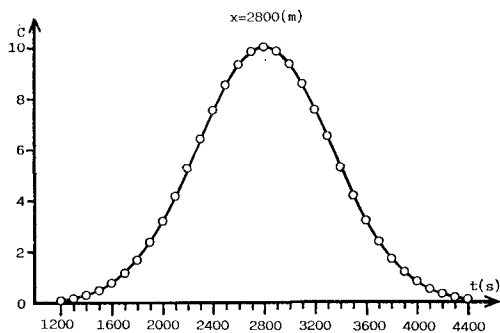


図-4 境界条件 ($x=2800$ (m)) が境界の場合

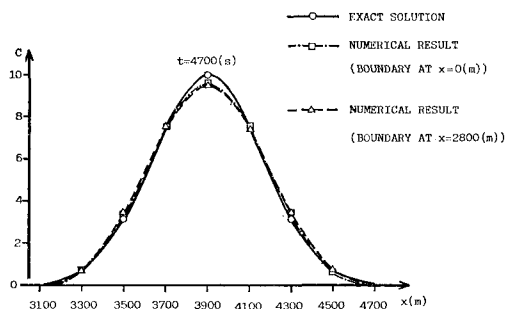


図-5 Gauss 分布の移流計算結果

に境界がある場合の移流計算結果と、 $x=2800$ (m) に境界があり、図-4 の境界条件及び式 (10), (11) を用いて 6-point method を適用した結果を exact solution と併せて 図-5 に示す。両者の間に顕著な差異は見られず、式 (10), (11) は精度良く境界外の濃度を推定していることがわかる。なお最初の 1~2 time step の計算において式 (10), (11) を適用する時、初期条件以前の濃度データが必要となる。しかし近似的に初期条件と同じ値を仮定しても大きな誤差は生じず、数 time step で消えてしまうため、実用上は問題ない。

4. 一般的な拡散問題への応用

4.1 $U(x, t) \neq \text{const}$ の場合

今までは、 $U(x, t) = \text{const}$ の場合について 6-point method を適用し計算を行ってきたが、 $U(x, t) \neq \text{const}$ の場合の適用も容易である。式 (4) の $\alpha = U(x, t) \cdot \Delta t / \Delta x$ の値が $U(x, t)$ に応じて変化するだけである。例えば簡単な例として、図-6 に示すように $x=3200$ (m)~ 4400 (m) の区間で $U=1$ (m/s)、他の区間では $U=0.5$ (m/s) の流速を持つ移流のモデル計算を行い、 $t=7200$ (s) の濃度分布を求めよう。他の諸量は 3 節と同じである。全領域で流速が変化せず $U=0.5$ (m/s) となる場合の $t=7200$ (s) の濃度分布も共に 図-7 に示しているが、流速の変化による顕著な変形や差異は見られず、 $U(x, t) \neq \text{const}$ の場合も 6-point method によって、平均流による濃度の輸送を精度良く計算できることがわかる。

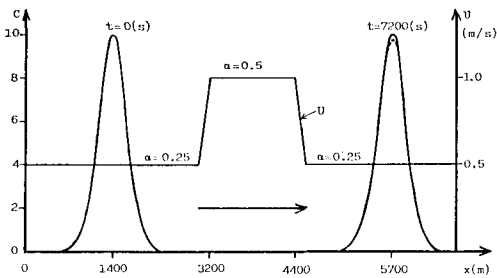


図-6 $U \neq \text{const}$ の場合の移流モデル計算

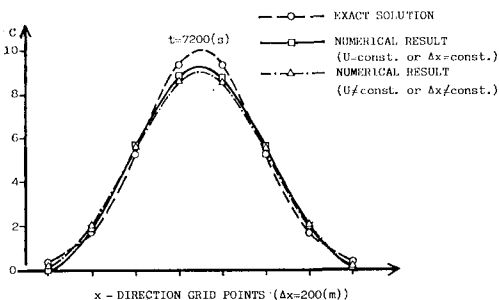


図-7 $U \neq \text{const}$ の場合の移流計算結果

4.2 $\Delta x \neq \text{const}$ の場合

実際の拡散問題を取り扱うときは計算時間の短縮を図るため、流れの状態や地形また拡散物質濃度の変化の緩急などに応じて格子間隔を変化させることが通常行なわれている。6-point method は、その誘導の過程において $\Delta x = \text{const}$ を前提として導き出されており、厳密な意味では $\Delta x \neq \text{const}$ の場合については使えない。しかしながら、今までの経過から Δx が一挙に大幅に変化しない限りは 6-point method でもかなりの精度で計算できることが期待される。例えば 図-6 において $x=3200$ (m)~ 4400 (m) の区間で $\Delta x=100$ (m) とし、他の区間では $\Delta x=200$ (m) としよう。流速は全区間に渡り $U=0.5$ (m/s) $= \text{const}$ で、他の諸量は 4.1 と同じである。 $\Delta x \neq \text{const}$ の場合も $\alpha = U \cdot \Delta t / \Delta x$ の値が Δx に応じて変化するだけで、 α の変化がたまたま 4.1 の例と一致することから、計算結果も 図-7 に完全に一致する。この計算例からも明らかなように、 Δx が場所的に急激に大きく変化しない限りは、 $\Delta x \neq \text{const}$ の場合においても 6-point method は十分実用的であると言えよう。

4.3 移流分散・乱流拡散のある場合

1 次元拡散方程式は、

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad \dots\dots\dots (12)$$

で表わされる。ここに D は移流分散、乱流拡散を含む拡散係数である。式 (12) を単純に差分化したのでは濃度の damping や位相のずれ、また artificial dispersion が大き過ぎて実用面では使えないことがわかっている。Split operator approach では、1 time step 毎に左辺の平均流による輸送と右辺の拡散を便宜的に分離して、まず最初に次式に従って濃度 C を輸送させる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad \dots\dots\dots (13)$$

6-point method により新しい時間 step における濃度 C_a^{n+1} の分布を求める。続いて次式を解くことにより、

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_a}{\partial x} \right) \quad \dots\dots\dots (14)$$

Δt 時間に拡散された最終的な濃度 C^{n+1} を求める。

式 (14) の計算は式 (13) に比べると容易で、例えば“一般化された Crank-Nicholson の方法”でも精度良く計算できる。簡単な為、 $D = \text{const}$ として式 (14) を差分化すると、

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_{a,i}^{n+1}}{\Delta t} &= \frac{\theta D}{\Delta x^2} \{ C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1} \} \\ &\quad + \frac{(1-\theta)D}{\Delta x^2} \{ C_{a,i+1}^{n+1} - 2C_{a,i}^{n+1} + C_{a,i-1}^{n+1} \} \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (15)$$

となる。ここで θ は重みを表すパラメータで $0 \leq \theta \leq 1$ である。 $\theta=0$ のときは“explicit”、 $\theta=1$ のときは“im-

plicit” な計算となる。安定条件として $0 \leq \theta < 1/2$ に対しては、

$$\frac{D \cdot \Delta t}{4x^2} \leq \frac{1}{2-4\theta} \quad \dots\dots\dots(16)$$

が満足されなければならない。一方 $\theta \geq 1/2$ に対しては無条件に安定であるので、 $\theta = 1/2$ がよく用いられている。

強い拡散が存在する場合 ($D=10.89 \text{ (m}^2/\text{s)}$) の計算例を図-8に、それ程拡散が強くない場合 ($D=3.778 \text{ (m}^2/\text{s)}$) を図-9に示す。流れの条件は3節と同じであり、 $t=9600 \text{ (s)}$ での濃度分布を求め、解析解と一緒に示している。両者とも解析解と良く一致しており、移流の計算に 6-point method を用いた Split operator approach が拡散問題の解析に十分適用できることがわかる。なお、いくつかの計算例から、拡散係数が大きい程解析解

と計算値は良く一致しており、平均流による輸送計算の誤差が吸収される傾向があると言える。

5. む す び

Split operator approach における移流輸送の計算法として提案された 6-point method の妥当性を検討した。境界外の2点の濃度を推定しなければならないことが 6-point method 適用の最大の難点だった訳であるが、境界においても移流輸送方程式が成立するとして濃度の場所的導関数を求め、境界で展開された Taylor 級数に代入することにより境界外の濃度が精度良く得られることがわかった (式 (10), (11))。流速 U が場所的、時間的に変化する水域の拡散問題への適用も容易で、精度良く計算できる。また格子間隔 $4x$ が一定でない場合も急激に大幅に $4x$ を変えない限りは、十分適用でき、実用上の問題はない。

移流輸送だけでなく分散、拡散のある流れについても計算を行ない解析解と比較検討した。その結果、計算値は解析解と良い一致を示し、Split operator approach ならびに 6-point method の有用性、実用性が確立された。1次元問題の式 (10), (11) は2次元問題にも同様の方法で拡張できることから、流水域の流れの情報さえ得られれば、1次元、2次元を問わず拡散問題は H-P 法、8-point method と比べて大幅に容易にかつ高い精度で計算できることが明らかになった。

参 考 文 献

- 1) Holly, F. M. Jr. and A. Preissmann: Accurate calculation of transport in two dimension, JHYD, ASCE, Vol. 103, pp. 1259~1277, 1977.
- 2) Holly, F. M. Jr. and T. Komatsu: Derivative approximations in the two-point fourth-order method for pollutant transport, Proceedings of the Conf. on Frontiers in Hydraulic Engineering ASCE, 1983.
- 3) 小松利光, F. M. Holly Jr.: 河川や沿岸部における物質拡散の数値計算法, 第 28 回水理講演会論文集, 1984.
- 4) Komatsu, T., F. M. Holly Jr. and N. Nakashiki: Numerical calculation of pollutant transport in rivers and coastlines, Proceedings of Fourth Congress of APD, IAHR, Chiangmai, Thailand, 1984.

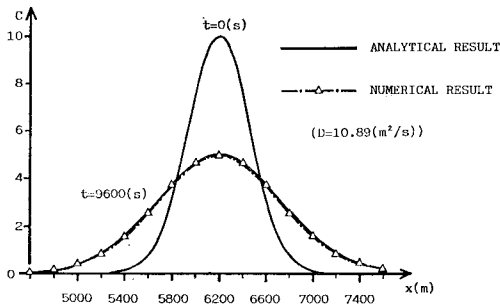


図-8 $D=10.89 \text{ (m}^2/\text{s)}$ の場合の計算結果

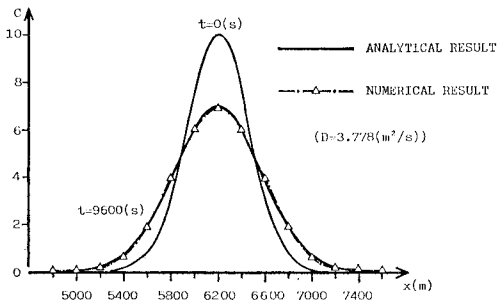


図-9 $D=3.778 \text{ (m}^2/\text{s)}$ の場合の計算結果