

拡散現象の高精度数値シミュレーション

Accurate Numerical Simulation of Diffusion Phenomena

小 松 利 光

Toshimitsu KOMATSU

1. はじめに

河川、湖沼、海などの自然水域における物質の拡散・分散過程については近年多くの研究成果が発表されている。しかしながら自然水域の複雑な幾何学的形状や多くの力学的要因の故に全体的なパラメーターから拡散・分散過程を特定して拡散係数を完全に予知するまでには至っていない。

自然水域においては流れの要因の多さや拡散メカニズムの複雑さの故に、拡散方程式の解析解を期待するのはほとんど不可能であり、数値計算に頼らざるを得ない。従って、自然水域における拡散・分散過程を良好に予知・把握するためには(1)高精度な数値計算法の開発と(2)高精度な拡散・分散係数の予測が不可欠となっている。

物質輸送を規定する移流拡散方程式は、平均流による輸送すなわち移流と乱流拡散（もしくは移流分散）という全く性質の異なる2種類の輸送形態を包含している。

スプリット・オペレーター・アプローチは移流と拡散の計算を分離し、短い時間ステップ毎に交互に計算を繰り返すものである。この手法には、移流と拡散の各々に対して別個に最適な計算スキームを選択できるということと、1次元の計算手法を2次元、3次元に容易に拡張出来るというメリットがある。拡散の計算は比較的精度良く行えるのに対し、移流の計算に関しては従来より多くの計算法が提案されているにもかかわらず、それらのスキームを用いた計算結果に無視できない誤差が含まれているのが実状であった。

近年、この移流のための高精度計算法がいくつか提案されてきており、精度の向上が図られてきた。例えば、Holly-Preissmannスキーム¹⁾、Six-pointスキーム²⁾、改良型Six-pointスキーム³⁾等が挙げられる。いずれも特性曲線法を利用し格子間で高精度の内挿多項式を構成して導いた計算法である。

ここでは(1)のテーマについてこの難問の移流項の計算に比較的好く使われるスキーム及び最近提案されたいくつかの計算法を紹介する。また、(2)のテーマに関して海域における分散係数の推定に関する最近の研究を紹介する。

2. 拡散数値シミュレーション

2.1 移流拡散方程式

大気中や水域における汚染物質の拡散シミュレーションを行う場合、汚染物質の存在が流れに影響を与えるときは流れと物質輸送のそれぞれを規定する基礎式を連立して解かなければならない。一方、汚染物質が流れに影響を及ぼさないpassive contaminantの場合には、流れ場の計算の後に物質輸送に関して移流拡散方程式を解けば良い。この物質輸送を規定する移流拡散方程式は3次元の場合、次式で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (1)$$

ここで、Cは濃度、U、V、Wは流速、 D_x 、 D_y 、 D_z は拡散係数である。

式(1)の移流項を解くための差分法として、従来より風上差分スキーム、Lax-Wendroffスキーム、leapfrogスキーム、QUICK法等がよく用いられてきたが、計算精度に関しては後述のように、無視できない誤差を含んでいるのが実状であった。一方、スプリット・オペレーター・アプローチにおける特性曲線法に基づいた移流計算のためのスキームは、比較的精度の良い計算法として知られている。

2.2 スプリット・オペレーター・アプローチ

スプリット・オペレーターにより式(1)を移流の計算と拡散の計算に分離する。すなわち、1タイムステップの中で

(i) first step として次式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

を用いて純粋移流の計算を行い、その結果をもとに

(ii) second step として次式を用いた拡散の計算を行う。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (3)$$

式(3)の計算は、中央差分を用いて比較的精度良く計算を行うことができる。このことから、2階の空間導関数の数値計算は安定で精度の良いものであることが示唆される。これに対し、前述のように式(2)の純粋移流方程式を精度良く計算することは容易ではない。この式は1階の空間導関数から成り立ち、風上差分や中央差分では無視できない数値分散を引き起こしたり、計算を発散させたりすることが知られている。

特性曲線法に基づいて式(2)の計算法として提案されたHolly-PreissmannスキームやSix-pointスキーム、改良型Six-pointスキームは、高精度な移流の計算を可能にした。しかしながら、Holly-Preissmannスキームは従属変数として濃度及び濃度勾配を用いており、それらの移流計算を必要とするため2次元・3次元問題への拡張が非常に煩雑となる。また、Six-pointスキームや改良型Six-pointスキームは、従属変数として濃度のみを移流させるため多次元への拡張は簡単であるが、計算格子点を6点用いているため境界付近における取り扱いがやや面倒になる。

2.3 多次元問題への適用

スプリット・オペレーター・アプローチにおいては3次元問題の場合は式(1)を、2次元問題の場合は次式の純粋移流方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (4)$$

を先ず解かなければならない。後に述べるように、移流項の計算のために提案されているスキームには(2)式や(4)式をそのまま差分化して計算することが可能なスキームと1次元の純粋移流方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

の計算を対象として開発されたスキームがあり、後者のスキームを2次元・3次元問題に適用するには以下に示すような若干の工夫(方向分離計算法)⁴⁾が必要である。

2.3.1 2次元問題

2次元の純粋移流方程式(4)は特性曲線を用いて次のように書き表される。

$$\frac{dx}{dt} = U, \quad \frac{dy}{dt} = V \quad \text{上で} \quad \frac{dC}{dt} = 0 \quad \text{すなわち} \quad C = \text{const.} \quad (6)$$

特性曲線(図-1)上では濃度は変化せずそのまま保存される。短い1タイムステップ内に流体粒子が移動する経路を特性曲線の経路から変えて、図-1に示すように最初x方向に移動した後、y方向に移動するという手法を用いる。

すなわち1タイムステップ後に流体粒子が到達する地点までの移流の計算を次に示すように2段階に分けて、1タイ

ムステップ内で1次元の計算を2度行う。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (8)$$

式(7)、(8)は両式とも1次元純粹移流方程式であるので1次元の計算法がそのまま適用できる。解法としては、式(7)を最初に解いた後、その結果を用いて同一タイムステップ内で式(8)を解けば良い。

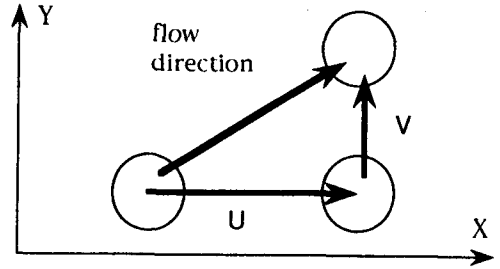


図-1 2次元純粹移流の計算

2.3.2 3次元問題

3次元の場合も2.3.1と同様に同一タイムステップ内で、x方向、y方向、z方向の移流に対してそれぞれ1次元計算法を個別に適用すれば良い。

2次元・3次元の移流方程式である(2)式、(4)式をそのまま差分化することが可能なスキームにおいても、計算の高精度化を図る過程で複雑化して取扱いが煩雑となるため、取扱いの簡単な1次元の計算を上述の方向分離計算法を用いて繰返した方が有利となることも多い。

2.4 移流方程式の計算法

移流方程式に対して提案され、比較的良好に使われてきた代表的な差分スキームについて簡単に述べる。唯、Holly-Preissmannスキーム、Six-pointスキーム、改良型Six-pointスキームについては1990年の夏期研修会テキスト³⁾に詳述されているので本稿では省略する。

2.4.1 1次精度の風上差分

図-2に示すような計算格子を用いて1次元移流方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

に対し差分化を行って次式を求める。

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + U \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (U > 0) \quad (9)$$

ここで、流速Uの正負に応じて

$$U \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \begin{cases} U \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x} & (U > 0) \\ U \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta x} & (U < 0) \end{cases} \quad (10)$$

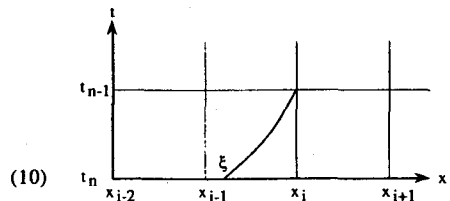


図-2 計算格子

とおいたものが1次精度の風上差分である。

C_i のまわりにTaylor級数展開して C_{i-1} を求め、式(10)の上の式に代入すると

$$U \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x} = U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{U}{2} \Delta x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{U}{6} \Delta x^2 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + O(\Delta x^3) \quad (11)$$

となり、1次精度であることが分かる。式(11)の右辺第2項以降が数値誤差を表す。このスキームは強い安定性を持つことから従来よりよく用いられてきたが、後の計算例に示されているように、数値拡散により到底無視することのできない damping を引き起こすことになる。

2.4.2. 3次精度の風上差分^{8,9)}

$U > 0$ のとき C_i のまわりにTaylor級数展開して C_{i-1}, C_{i-2} を $O(\Delta x^2)$ の項まで求め、連立させて $\partial C / \partial x$ を計算し、 $U < 0$ のときは C_{i+1}, C_{i+2} を求めて同様に $\partial C / \partial x$ を計算すると

$$U \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow \begin{cases} U \frac{3C_i - 4C_{i-1} + C_{i-2}}{2\Delta x} & (U > 0) \\ U \frac{-3C_i + 4C_{i+1} - C_{i+2}}{2\Delta x} & (U < 0) \end{cases} \quad (12)$$

となるが、式(12)は統一的に次のように書き直される。

$$U \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow U \frac{-C_{i+2} + 4C_{i+1} - 4C_{i-1} + C_{i-2}}{4\Delta x} + |U| \frac{C_{i+2} - 4C_{i+1} + 6C_i - 4C_{i-1} + C_{i-2}}{4\Delta x} \quad (13)$$

(13)式の右辺第1項及び第2項をTaylor展開するとそれぞれ

$$U \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{U}{3} \Delta x^2 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + O(\Delta x^4), \quad |U| \frac{\Delta x^3}{4} \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + O(\Delta x^5)$$

となる。このことから式(13)の差分形は2次精度であることが分かる。

ここで更に1次だけ精度を向上させるために式(13)の右辺第1項を

$$U \frac{-C_{i+2} + 8C_{i+1} - 8C_{i-1} + C_{i-2}}{12\Delta x}$$

と置き換えたものが河村スキームである。このスキームのTaylor展開は

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + |U| \frac{\Delta x^3}{4} \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} - \frac{U}{30} \Delta x^4 \frac{\partial^5 C}{\partial x^5} + O(\Delta x^5)$$

となり、3次精度であることが分かる。

河村スキームの4階微分の数値拡散項を1/3に減少させるために、第2項を

$$|U| \frac{C_{i+2} - 4C_{i+1} + 6C_i - 4C_{i-1} + C_{i-2}}{4\Delta x} \rightarrow |U| \frac{C_{i+2} - 4C_{i+1} + 6C_i - 4C_{i-1} + C_{i-2}}{12\Delta x}$$

に置き換えたものがUTOPIAスキームである。

河村スキーム、UTOPIAスキームをまとめて次のように表す。

$$U \frac{\partial C}{\partial x} \rightarrow U \frac{-C_{i+2} + 8C_{i+1} - 8C_{i-1} + C_{i-2}}{12\Delta x} + \theta |U| \frac{C_{i+2} - 4C_{i+1} + 6C_i - 4C_{i-1} + C_{i-2}}{12\Delta x} \quad (14)$$

($\theta=1$: UTOPIA, $\theta=3$: 河村スキーム)

従って、UTOPIAは4点の濃度を、河村スキームは5点の濃度を用いて空間微分を表すことになる。

2.4.3 Cubic-spline 内挿法

式(5)の1次元純粋移流方程式は特性曲線法により記述すると次のように書き換えられる。

$$\frac{dx}{dt} = U \text{ 上で} \quad \frac{dC}{dx} = 0$$

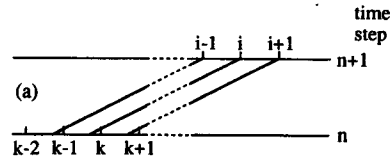
すなわち特性曲線 $dx/dt=U$ 上で $C=\text{const.}$ となり、図-2において時刻 $t=t_{n+1}$ における x_i 点での濃度 C_i^{n+1} は

$$C_i^{n+1} = C_\xi^n$$

で与えられる。ここで 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 座標を表わす。従って既知の $t=t_n$ の格子点上の濃度を用いて精度良く C_ξ^n を推定することが課題となる。

Holly-PreissmannスキームやSix-pointスキーム、改良型Six-pointスキームは C_ξ^n を推定するための高精度計算法である。

最近 Schohl & Holly⁶⁾ は内挿法として cubic spline を用いた計算法を提案している。計算精度は Holly-Preissmannスキームよりやや劣るが計算時間を短縮できることが報告されている。



2.4.4 Minimax 特性曲線法

Li⁷⁾ は minimax 近似の概念を用いて簡便な計算法を提案している。図-3(a)に示すように $(n+1)$ time step のときの各格子点上の C の値を求めるために、各格子点を通過する特性曲線が n time step で横切る点の回りの4点の値を用いる。 $(n+1)$ time step のときの各格子間の濃度分布を n time step の濃度分布との誤差の絶対値が極大値をもつ位置 (n time step のときの格子の位置) と両格子点の位置で同じ値を持つような直線分布で近似する。 $(n+1)$ time step の各格子点の濃度の値は両 side の格子間を近似する直線が異なるため不連続となる (図-3(b)参照) が両者の平均を取って格子点上の値とする。

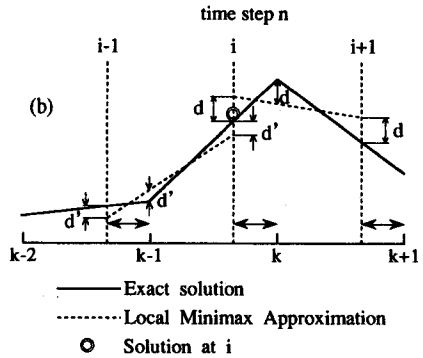


図-3 Minimax特性曲線法の説明

最終的な計算式は以下のように与えられる。

$$C_i^{n+1} = -0.25v(1-v)C_{k-2}^n + (1.25v - 0.25v^2)C_{k-1}^n + (1 - 0.75v - 0.25v^2)C_k^n - 0.25v(1-v)C_{k+1}^n \quad (15)$$

ここで v はクーラン数 ($\alpha = U\Delta t/\Delta x$) の小数部分の値をとる。 $0 < \alpha < 1$ のときは $k=i$ となる。

後述の計算例に示されているように、格子間を直線で近似している割には予想以上の精度を示しているが、最近開発されている高精度計算スキーム程の精度は期待できない。

2.4.5 SOWMAC法

差分スキームの長所は使い易さ、理解のし易さであろう。しかしながら拡散方程式の移流項の計算に関しては特性曲線法を用いたいくつかのスキームに匹敵するような高精度の差分スキームは見あたらない。ここでは特性曲線法を部分的に取り入れた簡便で高精度の新しい差分スキーム(SOWMAC法)⁹⁾を紹介する。

前述のように、式(1)の1次導関数を含む左辺の移流の計算は容易ではないが、右辺の拡散計算はそれ程難しくはな

く、簡便で高精度の計算が可能である。このことから2次の導関数の計算は安定で、おとなしく振舞うことが示唆される。そこで純粋移流の式(5) ($U=\text{const.}$ の場合)を t もしくは x で微分した式より得られる次式

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - U^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \quad (16)$$

は数値計算上、式(5)よりも有利であることが期待される。式(16)は良く知られた2階の波動方程式であり、その解の1つが式(5)の解と一致する。

式(16)の差分化の仕方は、数多く考えられるが、 $x=x_i$ を中心として空間的に左右対称な形のスキームを用いて移流の計算を行うと、計算結果に左右非対称な歪みが生じる。これは、移流という現象そのものが、上流から下流へ向かって伝わる、一過性の左右非対称な現象であることから生じるものと思われる。そこで、左右非対称な計算スキームを使用することにし、また上流側の情報量が多く取り入れられるように以下のような計算スキームを採用した。

$$(1-\kappa)(C_{i-1}^{n+1} - 2C_{i-1}^n + C_{i-1}^{n-1}) + \kappa(C_{i+1}^{n+1} - 2C_{i+1}^n + C_{i+1}^{n-1}) - \alpha^2 \{ \theta(C_{i+1}^{n+1} - 2C_{i+1}^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}) + (1-\theta)(C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n) \} = 0 \quad (17)$$

ここで、 κ, θ はそれぞれ空間及び時間平均に関する重みである。

このスキームを用いて移流の計算を行ったところ、 κ と θ の値の組み合わせによっては非常に高い精度の計算が可能なのが分かった。このスキームは過去の $(n-1)$ ステップの拡散していない濃度を必要とする。なぜなら、解くべき方程式が2階の波動方程式であり、その解は上流方向と下流方向へそれぞれ伝わるような波動解であるからである。もし $(n-1)$ ステップと (n) ステップでうまく上流から下流にだけしか伝わらないような条件を与えることが可能ならば問題ないが、 $(n-1)$ ステップと (n) ステップの条件の間で整合性がとれていない場合、不必要な波の成分が上下流へ伝播する恐れがある。

この問題を解決するために、図-4に示すように $(n-1)$ ステップの濃度の代りに $(n-1)'$ ステップの濃度を用いた。つまり、与えられた格子幅、流速の下で (i, n) 、 $(i+1, n)$ の格子点を通る特性曲線を考え、これらの特性曲線がそれぞれ $i-1$ 軸、 i 軸を横切る時刻 $(n \Delta t - \Delta x/U)$ を $(n-1)'$ とした。従って $(n-1)'$ の濃度は以下のように求められる。

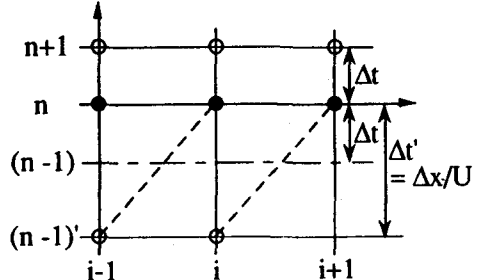


図-4 SOWMACの計算格子

$$C_{i-1}^{(n-1)'} = C_i^n, \quad C_i^{(n-1)'} = C_{i+1}^n \quad (18)$$

式(17)に式(18)を代入したスキームは最終的には n タイムステップの $C_{i-1}^n, C_i^n, C_{i+1}^n$ だけを既知量として使用しており、 $(n-1)'$ の C の値を流速 U に乗った特性曲線から求めていることから、自動的に式(16)の2つの正負の波動解のうち正の波動解のみを表す差分スキームとなっている。

最適な κ, θ のパラメータ値はクーラン数 α と共に変化する。 κ と θ の α に関する関数形を求めるため、Taylor 級数解析を行なうと最終的な結果は以下になる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - U^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = & [(4-6\kappa)\alpha - 6(\theta+\kappa-1)\alpha^2 + (2-6\theta)\alpha^3] \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t^2} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \\ & + [4(\kappa-1)\alpha + (12\kappa-10)\alpha^2 + (12\theta+8\kappa-8)\alpha^3 + (12\theta-2)\alpha^4] \frac{\Delta x^4}{4! \Delta t^2} \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

式(19)の右辺が式(17)の打ち切り誤差である。この誤差項は無限級数であり、これを零にすることができれば厳密な計算が可能である。現実にはそれは不可能であるが、誤差項がトータルとしてできるだけ小さくなるように κ と θ を決めることが望ましい。

式(19)右辺第1項、第2項の artificial dispersion coefficient が最小となる条件から κ, θ を決定し、計算スキームを整理すると、1次元純粋移流方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

に対する最終的な計算スキームが implicit な形で次式で与えられる。

$$P_1 C_{i-1}^{n+1} + P_2 C_i^{n+1} + P_3 C_{i+1}^{n+1} = P_4 C_{i-1}^n + P_5 C_i^n + P_6 C_{i+1}^n \quad (20)$$

ここで

$$P_1 = 0.3776\alpha_{0+} + 0.3152\alpha_0 - 0.5467\alpha_{1+} + 0.4843\alpha_1 + 0.1691\alpha^2$$

$$P_2 = 1.3072 + 0.0624|\alpha| - 0.3382\alpha^2$$

$$P_3 = 0.3152\alpha_{0+} + 0.3776\alpha_0 + 0.4843\alpha_{1+} - 0.5467\alpha_1 + 0.1691\alpha^2$$

$$P_4 = 0.3776\alpha_{0+} + 0.3152\alpha_0 + 0.5157\alpha_{1+} - 0.4533\alpha_1 + 0.1381\alpha^2$$

$$P_5 = 1.3072 - 0.0624|\alpha| - 0.2762\alpha^2$$

$$P_6 = 0.3152\alpha_{0+} + 0.3776\alpha_0 - 0.4533\alpha_{1+} + 0.5157\alpha_1 + 0.1381\alpha^2$$

$$\alpha_{0+} = \text{AINT} \left(\frac{\alpha+1}{|\alpha|+1} \right), \quad \alpha_0 = \text{AINT} \left(\frac{1-\alpha}{1+|\alpha|} \right)$$

$$\alpha_{1+} = \frac{|\alpha| + \alpha}{2}, \quad \alpha_1 = \frac{|\alpha| - \alpha}{2}, \quad \alpha = \frac{U \Delta t}{\Delta x}$$

AINTはFortranの小数切捨ての組み込み関数である。このスキームはSOWMAC法 (Second Order Wave equation Method for Advective Calculation) と呼ばれている。

2.5 モデル計算による移流計算スキームの検証

計算スキームの精度検証のために以下の初期条件のもとで移流計算を行った。初期条件として2つのピークをもつ濃度分布 (ピーク値10, 標準偏差264m, 中心位置 $x=1,400\text{m}$ のGauss型濃度分布と、ピーク値6.5, 標準偏差264m, 中心位置 $x=2,400\text{m}$ のGauss型濃度分布を重ね合わせたもの) が無限長水路を流速 $U=0.5\text{m/s}$ で下流へ9,600sの間純粋移流したときの計算結果を求めた。

図-5には、比較のため同じ条件下で、表-1に示すような11種類の計算スキームを用いた純粋移流の計算結果を示している。図中の太い実線が厳密解である。スキームによっては大きなダンピングや無視できない程の位相誤差を生じているのが分かる。

精度の高い順番を挙げると 1. 改良型 Six-pointスキーム、2. SOWMAC法、3. Six-pointスキーム、4. Holly-Preissmannスキーム、5. Cubic spline内挿法となっており、Minimax特性曲線法はQUICKESTスキームと同程度の精度となっている。

2.6 移流計算スキームの選択について

同一の移流計算スキームを用いても拡散係数や流速等の水理条件及び計算格子の大きさ等の計算条件により誤差の表れ方は変わってくる。一次元移流拡散方程式を離散化した式に対して、Taylor級数展開による誤差解析を行え

表-1 計算スキームの種類

	空間方向差分法	時間方向差分法
CASE-1	1次精度風上法	1次精度オイラー法
CASE-2	Lax-Wendroff Scheme	
CASE-3	QUICK Scheme	2次精度Adams-Bashforth法
CASE-4	QUICK Scheme	Crank-Nicolson法
CASE-5	QUICKEST Scheme	
CASE-6	Six-Point Scheme	
CASE-7	改良型 Six-Point Scheme	
CASE-8	Holly-Preissmann Scheme	
CASE-9	SOWMAC Scheme	
CASE-10	Minimax 特性曲線法	
CASE-11	Cubic-spline 内挿法	

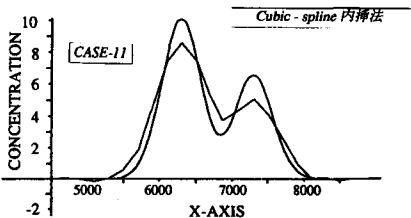
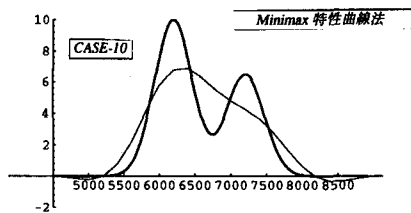
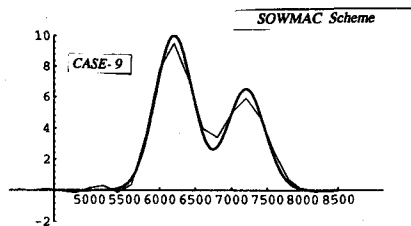
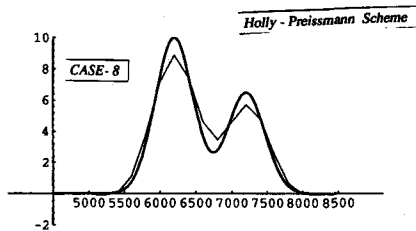
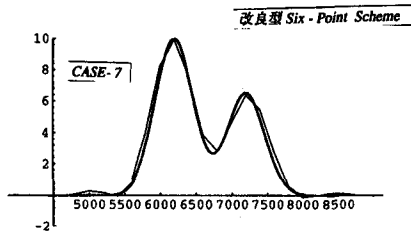
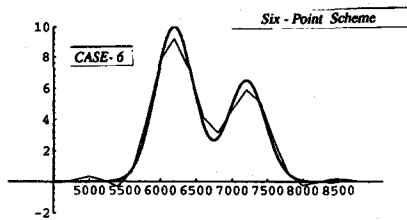
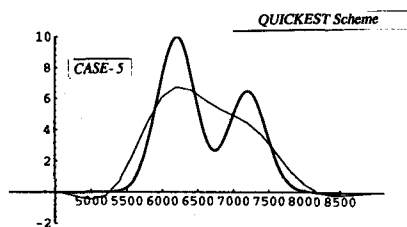
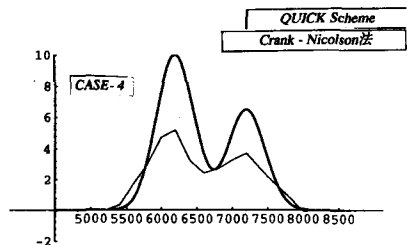
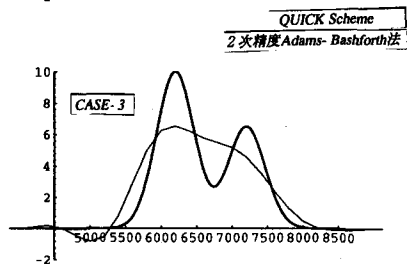
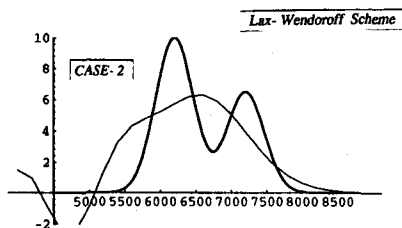
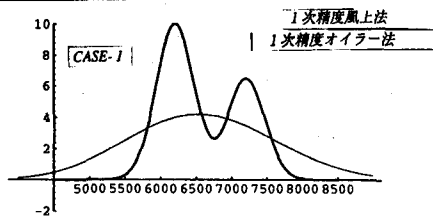


図-5 移流計算結果の比較

ば、一般的に次の様な式が得られる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + k_2(\alpha) \frac{\Delta x^2}{2! \Delta t} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + k_3(\alpha) \frac{\Delta x^3}{3! \Delta t} \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + \dots \quad (21)$$

ここで、Dは物理拡散係数である。(21)式右辺第2項以降は時間項と移流項の離散化によって生じた数値拡散項であり、 $k_2(\alpha) \cdot \Delta x^2 / (2! \Delta t)$ 、 $k_3(\alpha) \cdot \Delta x^3 / (3! \Delta t)$ 、 $\dots$ は数値拡散係数である。無限に続く数値拡散項の和を2次の項で代表できるものとすれば、(21)式は(22)式のように表すことができる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = (D + K) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = D\Psi^{-1} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (22)$$

Kは無限に続く数値拡散項を2次の項で代表させたときの見かけの数値拡散係数である。また、 $\Psi = D / (D + K)$ であり、 Ψ は物理拡散の数値拡散に対する相対的な強さを表すパラメータと解釈できる。物理拡散が相対的に強くなれば、 Ψ は1に近づき数値誤差は顕著に現れなくなる。したがって、精度の低い移流計算スキームでも誤差はそれ程問題とならないが、物理拡散が相対的に弱く Ψ が零に近い時は現象は純粋移流に近くなり、高精度の移流計算スキームが要求されることになる。

3. 内湾や沿岸域における分散係数の推定

実際の水域における物質の拡散現象は3次元の拡がりを示すが、電算機の容量などの制約から平面2次元拡散シミュレーションが現在のところ主流となっている。流れや拡散・分散過程をシミュレーションにより良好に予知・把握するためには、高精度な拡散・分散係数の予測が不可欠となっている。しかしながら、シミュレーションを行うにあたっては、これらの係数を適当に仮定したり、限られた地点の乱れの実測結果から推定したり、また一定値を仮定して計算を行い、得られた結果を実測値にfittingさせることにより試算的に求めているのが実状である。拡散・分散係数の簡単な正確な推定法はまだ確立されているとは言えない。一方、2次元・3次元の拡散シミュレーションを行う際の開境界における境界条件の決定も多くの場合困難を伴っており、簡便な決定法の開発が望まれている。

3.1 1次元分散係数の推定¹⁰⁾

細長い地形の湾などにおける一次元的な取扱いは分解能は高くはないが、長期的予測や既略の数値を得たいとき、また局所的な多次元解析のための境界条件を定めるときなどには非常に有用である。1次元分散方程式における分散係数の高精度推定法として、場所毎の代表流速と代表長さの積から評価する試みがある。代表流速として M_2 潮最大流速、代表長さとして海面幅とtidal excursionの2種類を用い、実際の湾の塩分濃度分布の実測値に最も良く一致するように比例定数を決定しているが、この比例定数は各々の湾の地形の影響を受けるため、それぞれ地形的な特徴をもつ内湾を用いて、地形の複雑さのパラメーターによる比例定数の関数型表示を行なっている。

図-6に示すように、湾の中心軸に沿ってx軸を定義する。保存性物質の濃度(単位質量の海水に含まれる物質の質量)を $C(x,t)$ 、断面積を $A(x)$ 、分散係数を $D(x)$ とする。 $D(x)$ には断面平均流速 $U(x)$ (恒流)による移流以外の混合拡散に関与する全ての要因(潮流運動も含む)が含まれている。内湾の長さをL、湾奥 $x=0$ を通過して単位時間に流入する水量を Q_0 、単位長さ当たり単位時間に供給される淡水の量を $q(x)$ 、放出物質の

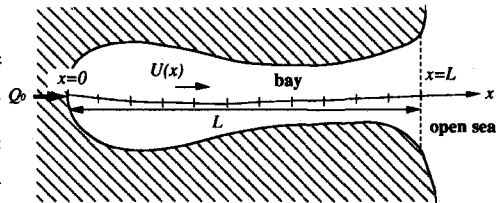


図-6 1次元座標

質量を $m(x)$ とすると、一次元の連続の式と分散方程式は次の様になる。

$$U(x) = \frac{1}{A(x)} \left\{ Q_0 + \int_0^x q(\xi) d\xi \right\} \quad (23)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(A D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{1}{A} q C + \frac{m}{\rho A} \quad (24)$$

定常の場合

$$UAC - AD \frac{\partial C}{\partial x} = \left[UAC - AD \frac{\partial C}{\partial x} \right]_{\text{boundary}} + \frac{R(x)}{\rho}, \quad R(x) = \int_0^x m(\xi) d\xi \quad (25)$$

ここで境界条件は、(24)式については $C_{x=0} = C(0)$ もしくは (濃度flux) $_{x=0}$ と $C_{x=L} = C(L)$ が与えられ、(25)式に対しては $C_{x=L} = C(L)$ が与えられる。

分散係数は代表長さとして代表速度の積で表されるものとし、代表長さとして tidal excursion もしくは海面幅を採用することにして次式の様に評価する。

$$D_a(x) = \alpha V_M(x)^2 T \quad (26)$$

$$D_b(x) = \beta V_M(x) B(x) \quad (27)$$

ここで、 $V_M(x)$ は各断面内の M_2 潮最大流速、 $B(x)$ は海面幅、 $V_M(x)T$ は tidal excursion に比例する長さ、 T は M_2 潮周期(12.42hr)、 α, β は比例定数である。また、ここで用いる海面幅 B の評価方法としては図-7に示すように断面内に島がある場合は、幅の広い方 (B_1) を採用する。

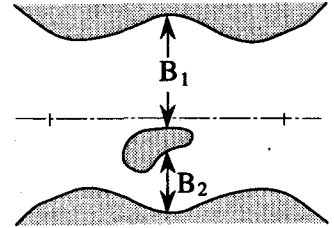


図-7 海面幅の定義

湾によっては(26)式の分散係数 D_a を用いる方が良い計算結果を示す場合と、(27)式の分散係数 D_b を用いる方が良い場合があった。そこで、(26)式と(27)式で用いられた代表長さの湾平均値の比 λ を次の様に定義することにする。

$$\lambda = \frac{\overline{V_M T}}{\bar{B}} \quad (28)$$

ここに、 $\bar{B}$ は湾全体の平均海面幅で、

$\overline{V_M T}$ は湾全体の平均の tidal excursion に比例する量である。

(26)式及び(27)式を用いて得られた塩分の濃度分布と実測値との詳細な比較検討から、 $\lambda < 1$ の場合は D_a 、 $\lambda \geq 1$ の場合は D_b を用いると良い計算結果が得られることが分かった。しかしながら比例定数 α, β は普遍定数ではなく、地形の複雑さの影響を受けて変化すると思われるので、図-8に示す様に、海域の計算範囲内の海岸線の長さを L_c 、内湾の長さを L として、海岸線の複雑さを表すパラメータ Ψ を次式のように定義して導入した。

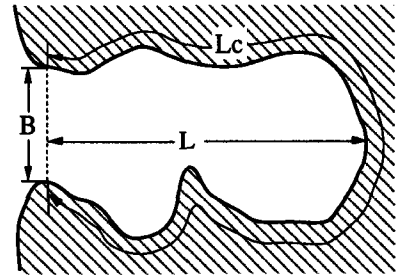


図-8 L_c と L の定義

$$\Psi = \frac{L_c}{(2L + \bar{B}) \text{ or } (2L)} - 1 \quad (29)$$

ここで、分母は湾が両端開口の場合は $(2L)$ 、片端開口の場合は $(2L + \bar{B})$ とする。つまり、湾が完全な矩形の場合には $\Psi = 0$ となり、海岸線の長さ L_c が増加して地形が複雑になるにつれて、 Ψ の値もまた増加することを示している。 α と β の値を Ψ に対してプロットしたのが図-9, 10である。 α と β はともに Ψ に対して一義的な関係を示しており、 Ψ の増加につれて増加する。Fig-9, 10 から Ψ の値が分かれば α 及び β の値が決定されることになる。

以上を要約すると、分散係数は代表流速と代表長さの積に比例するものとし、代表流速として湾の各断面内の M_2 潮最大流速、代表長さとして海面幅とtidal excursionの2種類を用いる。比例定数 α, β の優劣の決定には、判別パラメータ λ を導入し、 $\lambda < 1$ の場合には α を、 $\lambda \geq 1$ の場合には β を採用すると良いことが分かった。これは分散係数が小さい方の長さのスケールに規定されることを示している。また、比例定数 α, β は普遍定数ではなく、地形の複雑さに強く依存しており、地形の複雑さのパラメータ Ψ から一義的に決定される。このことから α, β は成層度の影響はそれ程受けていないと思われる。これらの結果を用いることにより、内湾における潮流運動などの影響も含む場所毎の1次元分散係数が容易にかつ精度良く推定できることになる。

3.2 2次元分散係数の推定⁽¹⁾

水深方向に積分して得られた2次元単層非定常モデルの場所毎の水平2次元粘性係数 ν_t ・水平方向分散係数 ϵ_t は代表流速と代表長さの積に比例するものと考え。 ν_t, ϵ_t は流速と濃度が水深方向に分布を持つことによって生じる移流分散効果を含むので、代表流速として場所毎の潮流最大流速 V_m を、代表長さとしては場所毎の時間平均水深 h を採用し、比例定数を α として以下の様に表す。

$$\nu_t = \epsilon_t = \alpha V_m h \quad (30)$$

計算座標は水平方向に x, y 軸、平均水表面を原点として鉛直上向きに z 軸をとる。計算に用いる平面2次元単層非定常モデルの基礎式を以下に示す。

x, y 方向の運動方程式

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \frac{M}{h+\zeta} \frac{\partial M}{\partial x} + \frac{N}{h+\zeta} \frac{\partial M}{\partial y} - fN = -g(h+\zeta) \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \frac{\partial M}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \frac{\partial M}{\partial y} \right) - \frac{\gamma^2}{(h+\zeta)^2} M \sqrt{M^2 + N^2} \quad (31)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{M}{h+\zeta} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{N}{h+\zeta} \frac{\partial N}{\partial y} + fM = -g(h+\zeta) \frac{\partial \zeta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_t \frac{\partial N}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_t \frac{\partial N}{\partial y} \right) - \frac{\gamma^2}{(h+\zeta)^2} N \sqrt{M^2 + N^2} \quad (32)$$

連続の式

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} = q \quad (33)$$

拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{1}{h+\zeta} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left\{ (h+\zeta) \epsilon_t \frac{\partial C}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ (h+\zeta) \epsilon_t \frac{\partial C}{\partial y} \right\} + q' - qC \right] \quad (34)$$

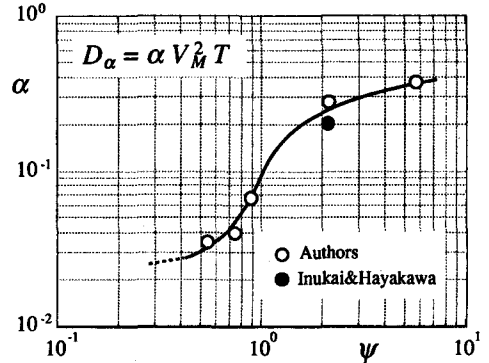


図-9 α と Ψ の関係 ($\lambda < 1$)

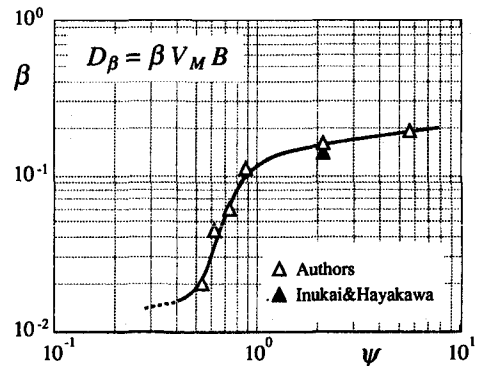


図-10 β と Ψ の関係 ($\lambda \geq 1$)

ここで、 $U(x,y,t), V(x,y,t)$ は x, y 方向の水深平均流速、 $\zeta(x,y,t)$ は潮位、 $M(x,y,t)=(h+\zeta)U$ 、 $N(x,y,t)=(h+\zeta)V$ はそれぞれ x, y 方向の線流量、 $C(x,y,t)$ は保存物質の水深平均濃度、 $q(x,y)$ は流入水量、 $q'(x,y)$ は負荷流入量、 f はコリオリ係数、 γ^2 は海底摩擦係数である。

計算手順を、図-11のフローチャートに示す。(30)式の v_t の推定式の中の V_m が最初は未知量であるため、先ず v_t を一定として適当な値を仮定する。(31)~(33)式を差分化して潮流計算を行い、場所毎の潮流最大流速 V_m を求め、(30)式より場所毎の v_t を推定する。新しく得られた v_t を用いて再び潮流計算を行い、新たに得られた V_m により v_t を再度推定する。

このプロセスを繰り返し行うことにより v_t の収束値を求める。最終的に収束して求まった v_t を用いて潮流計算を行い、その計算結果を水質拡散シミュレーションに用いる。水質拡散シミュレーションでは、保存拡散物質として塩素イオン濃度を対象とし、場所毎の分散係数 ε_t は近似的に $\varepsilon_t \approx v_t$ とおき拡散計算を行なう。

各湾においてこの一連の計算を種々の比例定数 α について行い、その計算結果と実測データを比較検討し、最も現況をよく再現している α をその湾における比例定数とした。潮流の計算結果は2次元粘性係数の変化に対して応答が鈍くほとんど変化しないこと、また潮流の実測結果に高い精度が期待できないことから、実測値との比較検討は拡散シミュレーションの計算値と塩素イオン濃度（もしくは塩分濃度）の実測値を用いた。拡散シミュレーションは分散係数の変化に敏感に反応するため、 α の決定に際し高い精度が期待できる。

ところが各湾において最適値として求められた比例定数 α は期待に反しそれぞれ異なる値となった。 α には各湾における成層の程度や吹送流による分散効果への影響が含まれているものと思われる。そこで、湾における成層度を表すパラメーターと吹送流による効果を表すパラメーターを導入して α と関連づけることを試みた。

成層化の度合を表すパラメーターは従来より様々考えられているが、本研究ではFischerにより提案されたEstuarine Richardson numberを採用した。成層度パラメーターとしてのEstuarine Richardson number Ψ は次式の様に定義される。

$$\Psi = \frac{\Delta\rho}{\rho} \frac{g Q_T}{B V_T^3} \quad (35)$$

ここで、 $\Delta\rho/\rho (=0.02)$ は淡水と海水の相対密度差、 Q_T は単位時間当たりの淡水流入量、 B は湾口の幅、 V_T は湾口における潮流流速の1周期間のroot mean squareである。

一方、風により生じる吹送流が分散能に与える影響を表すパラメーター Φ を次式の様に表す。

$$\Phi = \frac{\rho_a \gamma^3 V_w^3 A_{bay}}{\rho_w Q_T V_T^2} \quad (36)$$

ここで、 $\rho_a = 1.293 \text{ (kg/m}^3\text{)}$ は空気の密度、 ρ は海水の密度、 U_w は湾における年平均風速、 $\gamma = \sqrt{0.0026}$ は水表面上での風の摩擦速度 U_{*w} と U_w との比、 A_{bay} は湾の表面積、 Q_T は潮汐により湾口から湾内へ流入する入潮量の半周期平均値である。 Φ は風による水表面でのせん断応力が湾全体に及ぼす仕事量 $\rho_a \gamma^2 U_w^2 \cdot \gamma U_w \cdot A_{bay}$ と潮汐が湾に与える運動エネルギー $\rho Q_T V_T^2$ の比として表現されている。

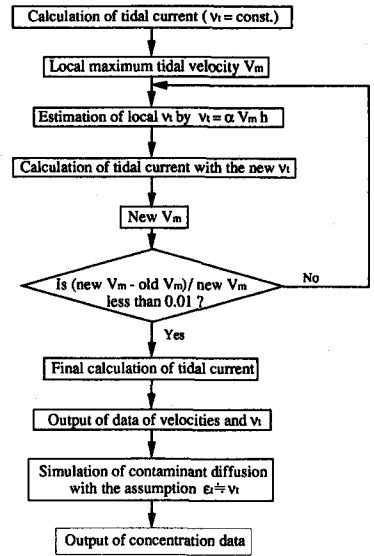


図-11 計算の手順

α と Ψ , Φ の間の関係を種々検討した結果、図 -12 に示されているように比例定数 α が成層パラメーター Ψ と吹送流パラメーター Φ とにより次式のように関数表示できることが分かった。

$$v_t \approx \varepsilon_t = 70 \Psi^{1/4} \Phi^{1/6} V_m h \quad (37)$$

この結果を用いることにより境界条件としての流れや濃度の情報が与えられるだけで、平面 2 次元単層モデルによる潮流・拡散シミュレーションが、(37) 式と図 -11 の計算手順を用いることにより手軽で容易にかつ高精度に行なえることになる。

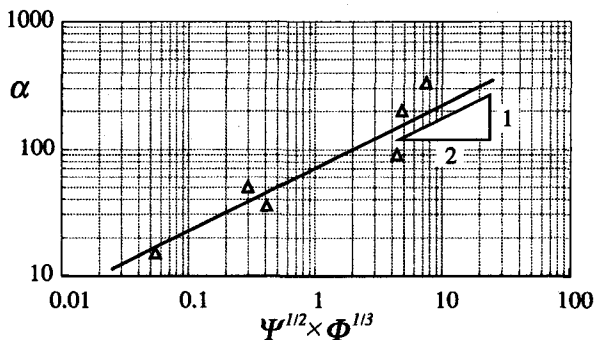


図 -12 α と Ψ , Φ の関係

4. むすび

以上、拡散数値シミュレーションにおける移流項の計算スキームと 1 次元・2 次元の分散係数の推定に関する最近の研究について述べてきた。従来より難問であった移流項の計算も最近の活発な研究により高精度化が図られ、拡散項（分散項）並の計算精度が得られるのも近い将来ではないと思われる。

また、コンピュータの発達により将来は多層モデルや 3 次元拡散モデルが主流になっていくものと思われるが、その際用いられる拡散係数や層間の交換係数などに関する研究の蓄積は乏しい状況である。流れの計算における粘性係数と異なり、拡散の計算においては拡散係数の果たす役割は大きく、拡散係数の推定精度がそのまま拡散数値シミュレーションの精度を左右しかねない。このことから拡散係数の推定法の研究の推進と早急な蓄積が当面の課題といえよう。今後の研究の進展を期待したい。

最後に本稿の作成に当たり献身的な協力を惜しまなかった九州大学 柴田敏彦 技官に深甚なる謝意を表します。

参考文献

- 1) Holly, F.M. Jr. and A. Preissmann : Accurate calculation of transport in two dimension, JHYD, ASCE, Vol.103, 1977.
- 2) Komatsu, T., F.M. Holly, Jr., N. Nakashiki and K. Ohgushi : Numerical calculation of pollutant transport in one and two dimensions, JHHE, Vol.3, No.2, 1985.
- 3) Komatsu, T., K. Ohgushi, K. Asai and F.M. Holly, Jr. : Accurate numerical simulation of scalar advective transport, JHHE, Vol.7, No.1, 1989.
- 4) 小松利光・大串浩一郎・朝田孝二：拡散シミュレーションにおける移流輸送の高精度計算法の開発, 土木学会論文集, No.456/II-21, 1992.
- 5) 小松利光：環境水理学における拡散問題, 水工学シリーズ, 90-A-3, 土木学会水理委員会, A-3-1～A-3-25.
- 6) Schohl, G.A. and F.M. Holly, Jr. : Cubic-Spline Interpolation in Lagrangian Advection Computation, Journal of Hydraulic Engineering, Vol.117, No.2, ASCE, pp.248-253., 1991
- 7) Li, C.W. : Advection Simulation by Minimax-Characteristics Method, Journal of Hydraulic Engineering, Vol.116, No.9, ASCE, pp.1138-1144., 1990
- 8) 池田駿介 [編著] : 流体の非線形現象 — 数理解析とその応用 —, 5.2 流れの数値計算法 (細田尚著), 朝倉書店, 1992, pp.106-117.

- 9) 大野豊・磯田和男 [監修] : 数値計算ハンドブック, オーム社, 1990, pp. 340-344.
- 10) 小松利光・相良誠・矢野真一郎・朝位孝二 : 内湾における一次元分散係数の推定に関する研究, 水工学論文集, 第37巻, 1993.
- 11) 小松利光・矢野真一郎・朝位孝二・松永康司 : 内湾における二次元粘性・分散係数の推定に関する研究, 水工学論文集, 第37巻, 1993.