

# 河川や沿岸部における物質拡散の数値計算法 Numerical Calculation of Pollutant Transport in Rivers and Coastlines.

九州大学 工学部 正員 ○小 松 利 光  
Iowa大学水理研究所 Forrest M. Holly Jr.

## 1. ま え が き

密度差をもたない拡散物質の河川や沿岸部における拡散問題を取扱うときは、移流による輸送と乱流拡散という性質の異なる2種類の輸送形式を含む偏微分方程式を解かねばならない。乱流拡散による輸送は種々の差分形式もしくは有限要素法を用いてかなり正確に計算することができる。一方、移流による輸送の数値計算においては、乱流拡散に匹敵する程の正確な計算は容易ではなく種々の工夫がなされている。大別すると、1つは移流と乱流拡散の計算を同時に行おうとするもので有限要素法を用いて試みられている。<sup>1)</sup>もう1つは移流と乱流拡散を別個に独立させて1 step毎に取扱おうとするもの(split-operator approach)で、それぞれのprocessに対し最適な計算方法を選択できるという大きな長所がある。特に後者では移流に対し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。

Holly-Preissmann<sup>2)</sup>は2-point 4th order methodを提案し、移流輸送の計算に関して従来の計算方法に較べると飛躍的に改善された結果を得た。この方法は拡散物質の濃度だけでなく、濃度の場所的な変化率も従属変数として移流拡散させるもので、1次元問題への適用は簡単であり、満足すべき結果が得られる。しかしながら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、境界条件の与え方もまた大きな問題となってくる。

本研究はHolly-Preissmannの方法にとって代わるべき計算方法を開発しようとするもので、計算精度を落とすことなく濃度の場所的な変化率を従属変数からはずそうとする試みがなされている。

## 2. 特性曲線法を用いた移流輸送の計算法

特性曲線法の1次元問題から2次元問題への拡張は比較的容易なので、ここでは簡単のため、次式のような1次元の拡散物質の移流方程式を考える。

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

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。(1)式は次のように書きかえられる。

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

すなわち、特性曲線 $dx/dt = u$ 上では $C = \text{const.}$ となる。

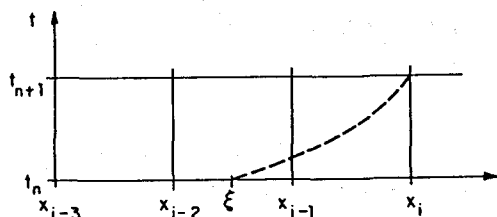


図-1 1次元問題の計算格子

したがって、図-1において時刻  $t = t_{n+1}$  における  $x_i$  点での濃度は

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

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  $n$  は時刻を表わす指標である。または格子点  $(x_i, t_{n+1})$  に至る特性曲線の  $t = t_n$  における  $x$  座標とする。そこで、既知の  $t = t_n$  の格子点上の濃度を用いて、如何に  $C_i^n$  の値を求めるかが次の課題となる。

$C_i^n$  を計算するために簡単な1次式を  $x_{i-1}$  と  $x_i$  の間で内挿しても、1st order の前方差分型と同様、artificial diffusion を生じ、実用には耐えられない。また、4点の既知の濃度を用いて3次のベキ関数を構成することにより4th order の計算方式を得ることができるが、その計算の結果は付加的な damping や振動また顕著な位相のズレを示し、移流される濃度分布は大きくひずむことが明らかにされている。<sup>3)</sup>

Holly-Preissmann は時刻  $t = t_n$  での2点  $x_i, x_{i-1}$  における濃度  $C$  とその微分  $\partial C / \partial x \equiv CX$  を用いて3次のベキ関数を構成し、それから  $C_i^n$  の値を求める方法を提案した。このHolly-Preissmann method は4th order schemeであり、1次元の場合は計算も簡単で精度も良いが、2次元問題に適用する際は4つの変量を従属変数として移流・拡散させなければならない。すなわち、 $C, \partial C / \partial x = CX, \partial C / \partial y = CY$  それに  $\partial^2 C / \partial x \partial y = CXY$  である。<sup>4)</sup> したがってこの場合は4つの変量の輸送問題を解くことになり、計算は大幅に複雑化するとともに、 $CX$  や  $CY, CXY$  の境界条件の与え方も大きな問題となってくる。この点をふまえて以下では  $t = t_n$  における特性曲線の位置に最も近い格子点の情報だけに基づいて内挿多項式を構成することを試みるが、従属変数として濃度の微分はとらない。

著者らのめざす計算方式は最終的な表現式が少くとも4th order でかつ簡潔でなければならない。最初  $t = t_n$  における特性曲線の位置に最も近い2つの格子点での  $CX$  や  $CXX$  を推定するため second order の差分近似をとり、それらの値と2点の  $C$  とで内挿多項式を構成し、 $C_i^n$  を求めた。これらの計算法では必要とされる濃度微分を推定するため、4点もしくは6点の  $C$  を使用している。4th order もしくは6th order の多くの計算方式が構成され、一定流速の1次元水路におけるGauss型濃度分布の移流モデルによりテストが行われた。しかしながらHolly-Preissmann method に匹敵する程の精度は得られなかった。その原因を詳細に検討した結果、差分による近似では  $CX$  や  $CXX$  を精度良く表わすことができないということが明らかになった。それでcubic spline functionを用いて濃度微分を推定することも試みたが、計算の複雑な割には計算精度の向上は見られなかった。そこで次に濃度微分  $CX$  の推定値の精度の向上を図る為、微分を必要とする点のまわりにTaylor級数展開を行いその点の近傍の3つの格子点の  $C$  を与えることにより3元連立方程式を得た。同様に  $C$  の組み合わせを変えることにより、いくつかの  $CX$  を計算し、荷重平均をとることにより  $CX$  の精度を高めた。このようにして求めた  $CX$  を用いて  $x_{i-1}$  から  $x_i$  間の内挿式を確立した。最終的な  $C_i^n$  の評価式は既知の8点の  $C$  を用いることになり、その形は必ずしも簡潔とは言えない。しかし、このようにして得られた計算法はHolly-Preissmann method に優るとも劣らぬ精度をもち、2次元問題への拡張も容易で簡単であることがわかった。種々の計算法が吟味されたが、次節に述べる方法は精度と計算の複雑さの観点から最良と思われるものである。

### 3. 1 従属変数に基づいた簡単な計算法

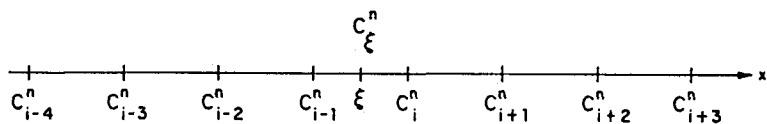


図-2

境界から離れた内部領域における 1 次元流れの格子点の模様を図-2 に示す。ここで格子点間隔は  $\Delta x = \text{const.}$  とする。  $x_{i-1}$  点のまわりに Taylor 級数に展開し 3 次の項までとると、  $C_{i-2}$ ,  $C_{i-3}$ ,  $C_{i-4}$  はそれぞれ次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} C_{i-2} &= C_{i-1} - CX_{i-1} \Delta x + \frac{1}{2!} CXX_{i-1} (\Delta x)^2 - \frac{1}{3!} CXXX_{i-1} (\Delta x)^3 \\ C_{i-3} &= C_{i-1} - CX_{i-1} (2\Delta x) + \frac{1}{2!} CXX_{i-1} (2\Delta x)^2 - \frac{1}{3!} CXXX_{i-1} (2\Delta x)^3 \\ C_{i-4} &= C_{i-1} - CX_{i-1} (3\Delta x) + \frac{1}{2!} CXX_{i-1} (3\Delta x)^2 - \frac{1}{3!} CXXX_{i-1} (3\Delta x)^3 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

上式で未知量は  $CX_{i-1}$ ,  $CXX_{i-1}$ ,  $CXXX_{i-1}$  であるから、連立させて解くことができる。得られた  $CX_{i-1}$  を

$$CX_{i-1}^{(1)} = f(C_{i-4}^n, C_{i-3}^n, C_{i-2}^n, C_{i-1}^n)$$

で表わすと、Taylor 級数で求める濃度の点をずらすことによって

$$CX_{i-1}^{(2)} = f(C_{i-3}^n, C_{i-2}^n, C_{i-1}^n, C_i^n)$$

$$CX_{i-1}^{(3)} = f(C_{i-2}^n, C_{i-1}^n, C_i^n, C_{i+1}^n)$$

や  $CX_{i-1}^{(4)}$  が得られ、また同様に  $CX_i^{(2)}$ ,  $CX_i^{(3)}$ ,  $CX_i^{(4)}$ ,  $CX_i^{(5)}$  も得られる。最終的な  $CX_{i-1}^n$  と  $CX_i^n$  の推定値は上の各々 4 つの推定値の荷重平均をとることにより次のように得られる。

$$\left. \begin{aligned} CX_{i-1}^n &= \frac{1}{(2+2\ell)} \left\{ CX_{i-1}^{(1)} + \ell \cdot CX_{i-1}^{(2)} + \ell \cdot CX_{i-1}^{(3)} + CX_{i-1}^{(4)} \right\} \\ CX_i^n &= \frac{1}{(2+2\ell)} \left\{ CX_i^{(2)} + \ell \cdot CX_i^{(3)} + \ell \cdot CX_i^{(4)} + CX_i^{(5)} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

これらの  $CX_{i-1}^n$ ,  $CX_i^n$  と  $C_{i-1}^n$ ,  $C_i^n$  を用いて<sup>5)</sup> Holly-Preissmann method と同様、3 次のベキ関数を構成し、 $C_\varepsilon^n$  の評価式を求めることができる。Gauss 型濃度分布を用いた移流モデル実験を行い Holly-Preissmann の結果と比較すると、peak 値の damping は減少するが、両 side で濃度は負値をとり、位相のズレも大きくなる。そこで内挿ベキ関数の精度を上げるため、格子中間点の微分  $CX_{i-1/2}^n$  も推定して用いることにする。 $X_{i-1/2}$  のまわりに Taylor 級数展開することにより、5 通りの推定値  $CX_{i-1/2}^{(1)} \sim CX_{i-1/2}^{(5)}$  が得られるが、 $CX_{i-1/2}^{(1)}$  と  $CX_{i-1/2}^{(5)}$  は精度が悪いと思われるのではなく、 $CX_{i-1/2}^{(2)} \sim CX_{i-1/2}^{(4)}$  から荷重平均を用いて求めることにする。

$$CX_{i-1/2}^n = \frac{1}{m+2} \left\{ CX_{i-1/2}^{(2)} + m CX_{i-1/2}^{(3)} + CX_{i-1/2}^{(4)} \right\} \quad (6)$$

$C_\varepsilon^n$  の表示式は  $C_{i-1}^n$ ,  $CX_{i-1}^n$ ,  $CX_{i-1/2}^n$ ,  $C_i^n$  により構成される 3 次のベキ関数と  $C_{i-1}^n$ ,  $CX_{i-1/2}^n$ ,  $C_i^n$ ,  $CX_i^n$  より構成される 3 次のベキ関数の平均から求めることにする。なお、荷重  $\ell$ ,  $m$  の値については試行的に種々の計算を行い、 $\ell = 4.5$ ,  $m = -1.1.0$  が最適値であることが明らかとなった。

最終的な  $C_i^{n+1}$  の表示式は次式で与えられる。

$$C_i^{n+1} = \sum_{k=1}^8 b_k C_{i+k-5}^n \quad (7)$$

ここで、 $b_1 = b_8 = (1/66) \alpha (\alpha - 1)$

$$b_2 = -(1/54) \alpha^3 - (71/792) \alpha^2 + (257/2376) \alpha$$

$$b_3 = (7/27)\alpha^3 + (97/792)\alpha^2 - (907/2376)\alpha$$

$$b_4 = -(37/54)\alpha^3 + (245/396)\alpha^2 + (1267/1188)\alpha$$

$$b_5 = (37/54)\alpha^3 - (569/396)\alpha^2 - (295/1188)\alpha + 1$$

$$b_6 = -(7/27)\alpha^3 + (713/792)\alpha^2 - (1523/2376)\alpha$$

$$b_7 = (1/54)\alpha^3 - (115/792)\alpha^2 + (301/2376)\alpha$$

$$\alpha = (x_i - \xi) / (x_i - x_{i-1})$$

#### 4. 計算結果の比較検討

図-3に示されているようなGauss型濃度分布の1次元の pure advection の計算を式(7)を用いて行う。開水路流れを考え、流速は一定で  $u = 0.5\text{m/s}$ 、Gauss分布の標準偏差は  $\sigma = 264\text{m}$ 、また、 $\Delta x = 200\text{m}$ 、 $\Delta t = 100\text{sec}$ とする。初期のGauss分布は  $u$ により下流に輸送されるが、 $t = 9600\text{sec}$ の濃度分布を計算しており、比較のためにHolly-

Preissmann methodやcubic spline

functionを使った場合の結果も図-4に示している。また、数値計算にとってはより条件の厳しい台形分布を初期条件とした場合の計算結果を図-5に示す。図-4および図-5より明らかなように、式(7)を用いることによりHolly-Preissmann methodと同程度かもしくはそれ以上の精度で移流による輸送を計算できることがわかる。

cubic splineを用いた場合もHolly-Preissmann methodとほぼ同程度の計算精度を示すが、その計算の煩雑さを考えると1次元問題の場合でも実用的とはいえない。なお、Taylor級数解析から、 $u$ と $\Delta x$ がconstantな値をとるときは、式(7)のtruncation errorの筆頭項はHolly-Preissmann methodと全く同じであることがわかった。すなわち、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} \\ &= -\alpha^2(\alpha-1)^2 \frac{\Delta x^4}{24\Delta t} \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \dots \end{aligned}$$

となる。

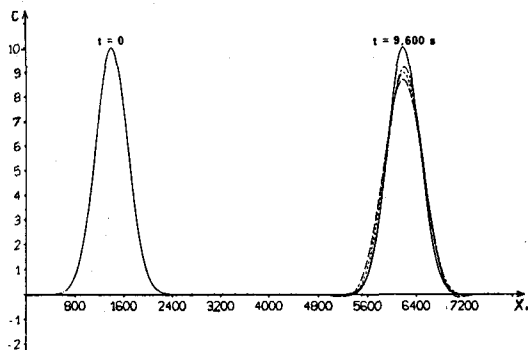


図-3 Gauss濃度分布の移流モデル計算

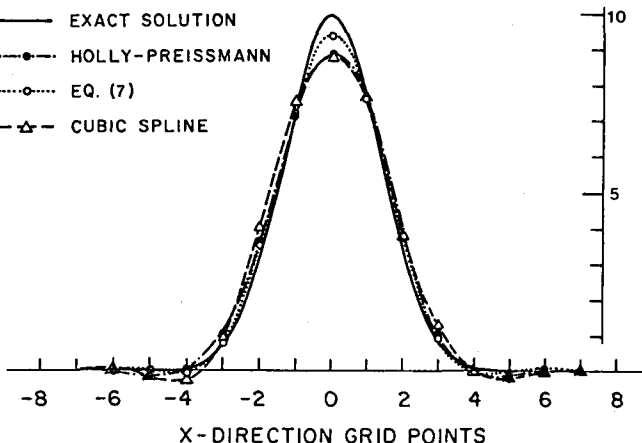


図-4 Gauss分布の移流計算結果

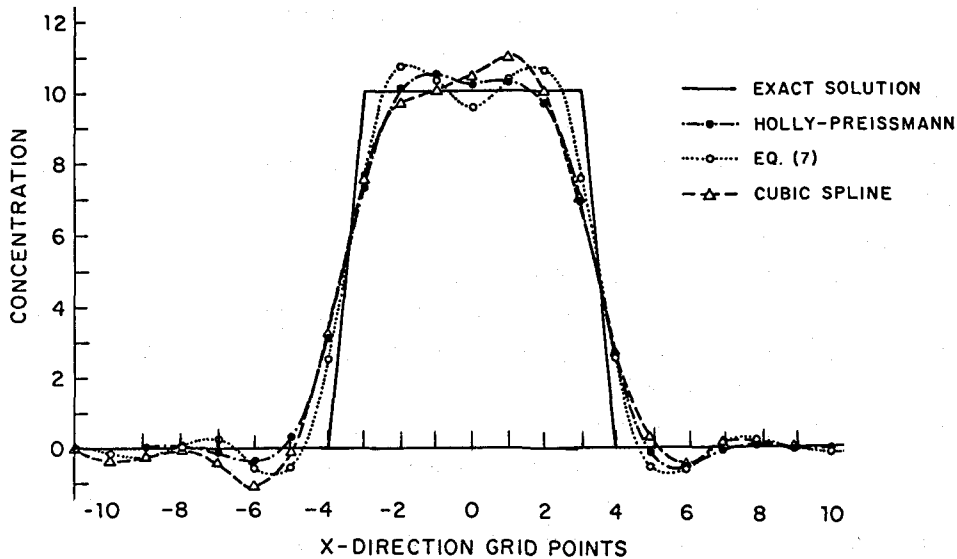


図-5 台形濃度分布の移流計算結果

## 5. 2次元問題への応用

前節で求めた式(7)の2次元問題への拡張を検討する。2次元の流れの場合は式(2)は次のようになる

$$\frac{dC}{dt} = 0 \quad \text{along} \quad \frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v \quad (8)$$

ここで  $v(x, y, t)$  は  $y$  方向の流速である。したがって求める解は次式で与えられる(図-6)。

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{\xi,\eta}^n$$

ここで  $j$  は  $y$  方向の格子点の指標であり、 $(\xi, \eta)$  は時刻  $t_n$  における  $x-y$  平面と特性曲線の交叉点の座標である。 $C_{\xi,\eta}^n$  を求めるには式(7)を1方向に8本の格子線に沿って適用し、得られた値について再度式(7)を直角方向に適用することにより得られる。形式的には次のように書くことができる。

$$C_{i,j}^{n+1} = \sum_{r=1}^8 \sum_{s=1}^8 b_{rs} C_{i+r-\xi, j+s-\eta}^n \quad (9)$$

次に式(9)を用いた2次元問題の計算例を示す。図-7に示されているように、剛体的に角速度  $\omega = 2\pi / 12000 \text{ sec}^{-1}$  で回転する流れの場を考え、初期条件として中心より600m離れた  $x, y$  の正負の座標軸上4ヶ所に標準偏差  $\sigma_x = \sigma_y = 200 \text{ m}$ 、peak値が10のGauss形を分布させる。乱流拡散のない pure advection を今考えているから、 $1/4$  回転後 ( $t = 3000 \text{ sec}$ ) の  $y$  軸上の分布は初期条件と一致しなければならない。  $\Delta x = \Delta y = 100 \text{ m}$ 、 $\Delta t = 100 \text{ sec}$  の条件のもとで式(9)を用いて計算した結果を図-8

に示す。同じ条件のもとで Holly-Preissmann

method を用いた場合の peak での誤差は1.8%であった。

一方式(9)に基づいた計算では peak での誤差は0.5%であり、精度の点で優れているだけでなく、計算方法も  $C$  だけを従属変数としていることではかに容易になっており、式(9)は実用的な計算法ということができる。

また、 $\Delta x, \Delta y$  を大きくとった場合の計算結果もプロットしているが、peakの誤差は増加する。その中で  $\Delta x$  だ

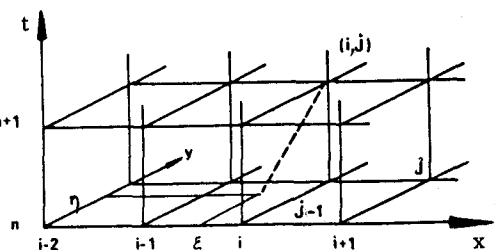


図-6 2次元問題の計算格子

けを 200m としたときの誤差が  $\Delta x, \Delta y$  とともに 200m としたときの誤差の丁度半分程度となっているのは興味深い。

## 6. む す び

濃度勾配  $C_x$  を既知の  $C$  を用いて精度良く推定することにより、 $C$  だけを従属変数とした拡散方程式の移流項の計算法を求めた。この計算法は 1 次元問題だけでなく 2 次元問題にも容易に適用され、精度良く計算できることが示された。

拡散方程式の移流項の計算については Holly-Preissmann が特性曲線法に基づいた 2 point 4th order method を提案し、飛躍的に計算精度を向上させたが、2 次元問題に適用する際は計算が複雑化しすぎて実用的とは言えなかった。今回、本文で提唱した式(7)は精度の点でも計算の容易さの点でも Holly-Preissmann method の短所を十分補っていると思われる。

ただし、式(7)は 8 点の  $C$  を用いるため、境界において境界外の 3 点の濃度を推定する必要があり、境界附近において  $C$  が大きく変化している場合は精度の劣化は免れ得ない。また  $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$  が場所的に変化する場合も計算が複雑となり、精度も低下すると思われる。

境界における問題については使用する  $C$  の数を精度を落とさずに減少させることが有力な対策となるが、 $\Delta x \propto \text{const}$  の場合と併せて今後の課題としたい。

## 参 考 文 献

- 1) Morton, K. W., "Finite Element Method for Non-Self-Adjoint Problems" Numerical Analysis Report 3/81, Dept. of Mathematics, Univ. of Reading, Reading, England, 1981.
- 2) Holly, F. M. Jr. and Preissmann, A., "Accurate Calculation of Transport in Two Dimension", JHYD, ASCE, vol. 103, No. HY 11, Nov. 1977.
- 3) Martin, B., "Numerical Representation which Model Properties of the Solution to the Diffusion Equation", Journal of Computational Physics, vol. 17, 1975.
- 4) Holly, F. M. Jr. and Usseglio-Polatera, J. M. "Dispersion Simulation in Two-Dimensional Tidal Flow", Submitted to JHYD, ASCE, July, 1982.
- 5) Glass, J. and Rodi, W., "A Higher Order Numerical Scheme for Scalar Transport", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 31, 1982.

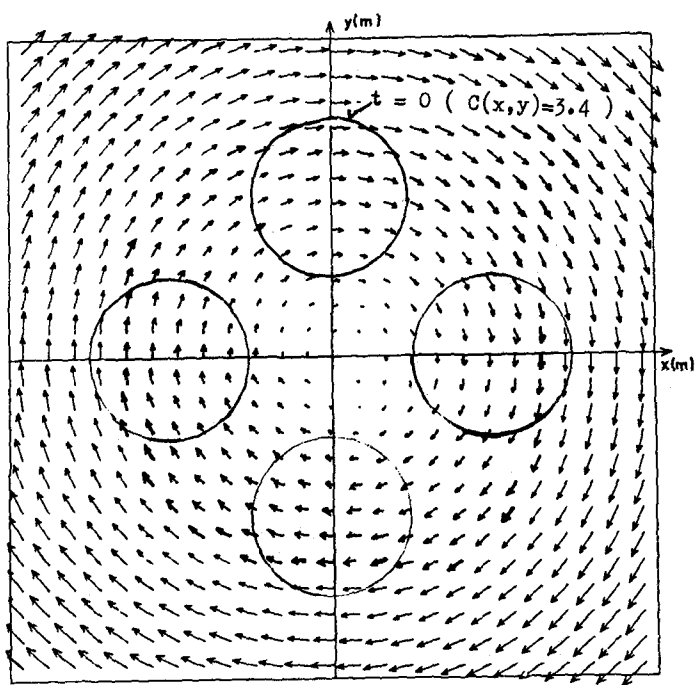


图-7

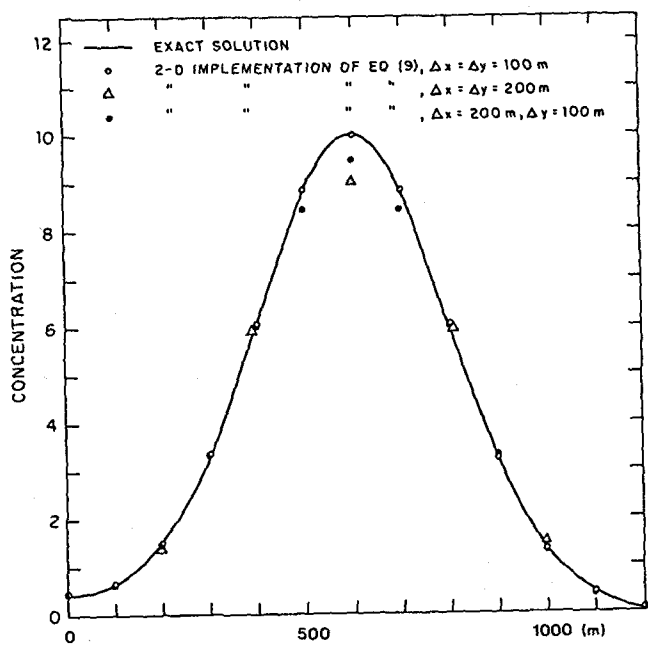


图-8