

2次元水域における汚濁物質の拡散予測法

Numerical Prediction of Pollutant Transport in
Two-Dimensional Flow Fields

九州大学工学部 正員 小松利光

長崎大学工学部 正員 古本勝弘

九州大学大学院 学生員 仲敷憲和

九州大学大学院 学生員 大串浩一郎

1. まえがき

水域において、流れに影響を与えない passive な物質の拡散問題を電算機を用いて数値的に取り扱うときは、advection と diffusion という数学的にも物理的にも性質の異なる 2 種類の輸送型式をもつ偏微分方程式（拡散方程式）を解かねばならない。特に advection の計算は簡単な差分などを用いるだけでは到底無視できない程の誤差を生じることが知られており、その計算には十分な注意が必要とされている。¹⁾ diffusion の小さな湾などの計算では、advection の計算から生じた numerical diffusion が turbulent diffusion に比べて大きいため、計算の正否の判別も比較的容易であるが、diffusion の大きな河川などでは numerical diffusion と turbulent diffusion が区別がつかず拡散を過大評価してしまうことになる。一方、計算結果と現況を比較して拡散係数を決定しようとすると、逆に拡散係数を過小評価することになる。

この拡散方程式の有力な計算法として提案された Split operator approach は advection と diffusion を 1 step 毎に別個に独立させて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利点がある。

Holly-Preissmann(1977)²⁾ 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)^{3), 4)} 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開いた。その後、Komatsu-Holly-Nakashiki(1984)⁵⁾ 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次元問題を問わず平均流による拡散物質の輸送が容易に精度良く計算できることを示した。その後、著者ら⁶⁾ は 6-point method を1次元問題に具体的に適用する際の境界付近の計算法や diffusion の計算法について検討を加え、流速や格子間隔が変化する場合でも 6-point method で十分精度良く計算できることを示した。

本論文では、まず1次元問題で河川が合流する場合について、6-point method を用いた具体的な advection-diffusion の計算方法について述べ、次に2次元水域での境界付近の取り扱い方と pure advection のモデル計算で2次元問題への 6-point method の適用性を検討し、最後に2次元の advection-diffusion の計算例を示す。

2. 6-point method について

2.1 特性曲線法を用いた advection の計算

特性曲線法では1次元から2次元への拡張は比較的容易なので簡単のためここでは1次元の輸送方程式を考える。

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

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)は次のように書き変えられる。

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

すなわち、特性曲線 $dx/dt = U$ 上で $C = \text{const.}$ となり、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

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

で与えられる。ここで添字 i は計算格子点の場所を添字 n は時刻を表わす指標である。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 座標を表わす。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 の値を精度良く求めるかが決定的な課題となるわけである。

2.2 6-point method とその境界付近への適用

Komatsu-Holly-Nakashiki⁵⁾ は C_ξ^n を精度良く求める方法として 6-point method を提案した。そして

1 次元、2 次元問題においても Holly-Preissmann

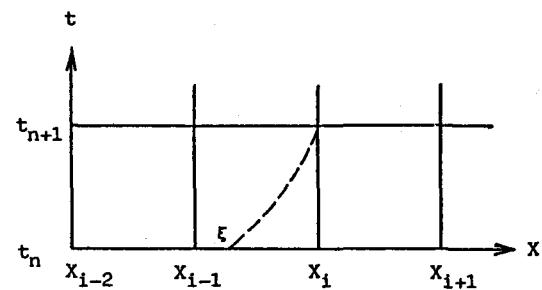


図-1 1次元問題の計算格子

法、8-point method とほぼ同程度の精度で著しく容易に advection による輸送が計算できることを示した。6-point method の最終的な計算式は以下のようである。

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

$$\text{ここで, } b_1 = -0.01806\alpha^3 - 0.03828\alpha^2 + 0.05633\alpha$$

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

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

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

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

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

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

ここで参考のために 6-point method を用いた Gauss 型濃度分布の 1 次元 pure advection の簡単な計算例を示す。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 $t = 9,600 \text{ sec}$ の濃度分布を計算しており、比較のために(1)式を次のように差分化して計算した結果も図-2 に示す。

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + U \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \quad (5)$$

(5)式の差分式から得られた計算結果は numerical diffusion のため damping が著しいのに対し、6-point method は高い精度で advection の計算ができることがわかる。

6-point method を境界付近に適用する際は、濃度の境界条件が要求される境界も要求されない境界もともに境界外の 2 点の濃度 C を推定することが必要である（図-3）。著者は前報⁶⁾ で 1 次元の場合の境界外の推定式を境界においても advection の式が成立するとして求めた。そして境界条件が重要な役割を果たす場合も、その推定された濃度を用いて advection を精度良く計算できることを示した。推定式の結果を特性

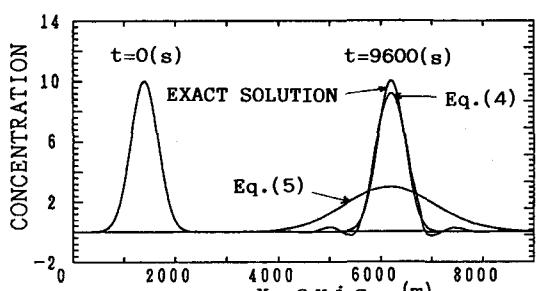


図-2 Gauss 型濃度分布の pure advection の計算

曲線が計算領域に入ってくる境界について記すと以下のようである。

$$\left. \begin{aligned} C_0^n &= \frac{\alpha+1}{2\alpha^2} C_1^{n-2} - \frac{2\alpha+1}{\alpha^2} C_1^{n-1} \\ &+ \frac{(2\alpha+1)(\alpha+1)}{2\alpha^2} C_1^n \\ C_{-1}^n &= \frac{\alpha+2}{\alpha^2} C_1^{n-2} - \frac{4(\alpha+1)}{\alpha^2} C_1^{n-1} \\ &+ \frac{(\alpha+1)(\alpha+2)}{\alpha^2} C_1^n \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

なお、特性曲線が計算領域から出していく境界については、

(6)式の α を $-\alpha$ と置き換えるだけで得られる。

3. 合流河川への 6-point method の適用

1次元の拡散問題のうち複雑な場合として河川の合流や分岐の問題がある。両者の取り扱い方はほぼ同じなので、ここでは河川の合流問題に 6-point method を適用する場合について述べる。図-4 に示すように、断面積 A_1 、流速 U_1 、拡散係数 D_1 をもつ河川(I)が A_2 、 U_2 、 D_2 の河川(II)と合流(点M)して A_3 、 U_3 、 D_3 の合流河川(III)となって流出する場合を考える。河川(I)、河川(II)については濃度に関する境界条件はそれぞれ上流側で与えられるので、上流端と合流点を境界として 6-point method を用いて計算すれば良い。その際、境界の外側にそれぞれ 2 点ずつ仮想点が必要であるが、それらの点の濃度は式(6)より推定できる。一方、河川(III)の拡散を計算するためには合流点Mで境界条件を与えなければならない。図-5 の斜線部分で完全に混合しているものとして拡散物質の保存則が成立するから、時刻 $t = t_n$ で

$$\left. \begin{aligned} \left\{ U_1 A_1 C_1(M) - A_1 D_1 \left(\frac{\partial C_1}{\partial x_1} \right)_M \right\} + \left\{ U_2 A_2 C_2(M) - A_2 D_2 \left(\frac{\partial C_2}{\partial x_2} \right)_M \right\} \\ = \left\{ U_3 A_3 C_3(M) - A_3 D_3 \left(\frac{\partial C_3}{\partial x_3} \right)_M \right\} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

となる。ここで $C_1(M)$ 、 $C_2(M)$ は河川(I)、(II)の計算から得られた M 点での濃度を意味する。上式で微分を差分化して表わし、 $(\partial C_3 / \partial x_3)_M$ だけは $t = t_n$ では表わせないので $t = t_{n-1}$ の濃度で近似すると、 $C_3(M)$ が $t = t_n$ で次式のように求まる。

$$C_3^n(M) = \frac{1}{U_3 A_3} \left[U_1 A_1 C_1^n(M) + U_2 A_2 C_2^n(M) - A_1 D_1 \frac{C_1^n(M) - C_1^n(M-1)}{(\Delta x)_1} - A_2 D_2 \frac{C_2^n(M) - C_2^n(M-1)}{(\Delta x)_2} + A_3 D_3 \frac{C_3^{n-1}(M+1) - C_3^{n-1}(M)}{(\Delta x)_3} \right] \quad (8)$$

河川(III)の計算においても合流点M点の外側に 2 点だけ濃度の仮想値が必要となるが式(6)より計算される。境界条件 $C_3(M)$ が与えられた以上、後の計算は容易である。具体的な計算例として、 $U_1 = 0.5 \text{ m/s}$ 、 $U_2 = 1.0 \text{ m/s}$ 、 $U_3 = 1.5 \text{ m/s}$ で断面積と拡散係数は河川(I)～(III)を通じて一定で $D = 3.78 \text{ m}^2/\text{s}$ の場合のモデル計算を行なう。今、簡単の為、全区間を通じて $\Delta x = 200 \text{ m}$ 、 $\Delta t = 100 \text{ sec}$ は一定とする。初期条件(図-6)として河川(I)に合流点より $2,000 \text{ m}$ 上流側に中心がある $C_{\max} = 1.0$ 、 $\sigma = 264 \text{ m}$ のGauss型濃度

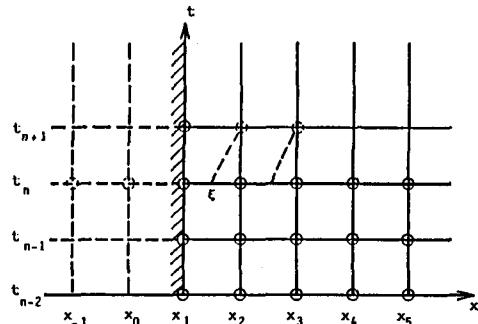


図-3 特性曲線が計算領域に入ってくる境界

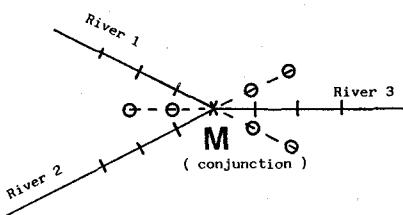


図-4 1次元河川の合流

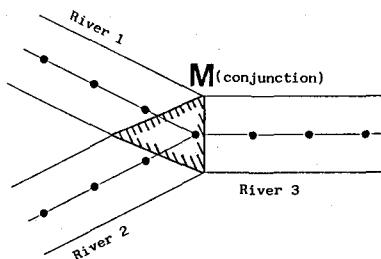


図-5 合流部の模式図

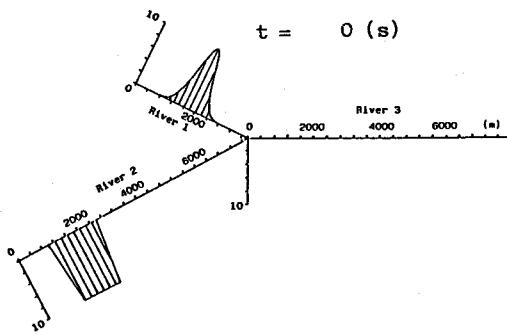


図-6 初期 ($t = 0$) の濃度分布

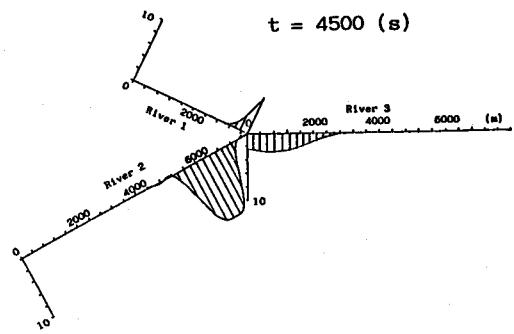


図-7 $t = 4,500$ sec の濃度分布

度分布を、河川(II)に合流点より $6,000\text{ m}$ 上流に中心がある幅 $1,200\text{ m}$, $C = 10$ の矩形分布（実際は離散量で与えるため底辺 $1,600\text{ m}$ の台形分布となる）を与えた。Split operator approach では、advection の計算は 6-point method, diffusion は“一般化された Crank-Nicholson の差分形式”を用いた。 $t = 4,500\text{ sec}$, $t = 7,500\text{ sec}$ の濃度の分布をそれぞれ図-7, 図-8 に示す。矩形分布は diffusion により滑らかな分布へと移行し、合流によって新たな濃度分布を形成する様子が良くわかる。

4. 2 次元水域への 6-point method の適用

4.1 2 次元問題への拡張

2 次元の流れの場では式(2)は次のようになる。

$$\frac{dx}{dt} = U, \quad \frac{dy}{dt} = V \quad \text{上で} \quad \frac{dC}{dt} = 0 \quad (9)$$

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得られる（図-9）。

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{\xi,\eta}^n \quad (10)$$

ここで j は y 方向の格子点の指標であり、 (ξ, η)

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(4)を一方向に 6 本の格子線に沿って適用し、得られた値について直角方向にもう一度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。

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{\xi,\eta}^n = \sum_{r=1}^6 \sum_{s=1}^6 b_{rs} C_{i+r-4, j+s-4}^n \quad (11)$$

4.2 境界外の濃度の推算式

2 次元の計算領域においても、境界外において境界に沿って 2 点ずつ濃度の推定値が要求される（図-10）。今、 (x_i, y_j, t_n) のまわりに x に関して Taylor 級数に展開すると次式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} C_{i-2,j}^n &= C_{i,j}^n - 2\Delta x \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{i,j,n} + \dots \\ C_{i-1,j}^n &= C_{i,j}^n - \Delta x \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{i,j,n} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

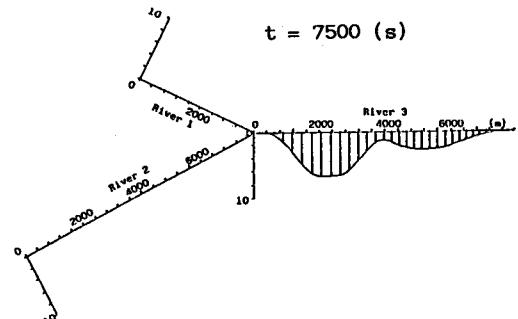


図-8 $t = 7,500$ sec の濃度分布

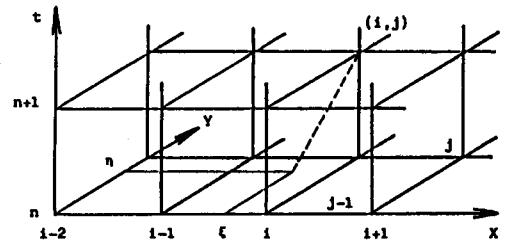


図-9 2 次元問題の計算格子

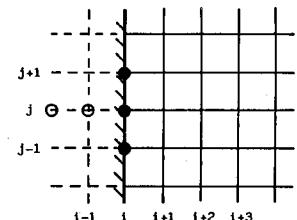


図-10 2 次元境界領域 ($t = t_n$)

境界において濃度は pure advection の式を満足するとして

$$\frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{i,j,n} + U(x_i, y_j, t_n) \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{i,j,n} + V(x_i, y_j, t_n) \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{i,j,n} = 0$$

となり、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{i,j,n} &= -\frac{1}{U(x_i, y_j, t_n)} \frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{i,j,n} \\ &\quad - \frac{V(x_i, y_j, t_n)}{U(x_i, y_j, t_n)} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{i,j,n} \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、 (x_i, y_j, t_n) のまわりに t について Taylor 級数に展開して $C_{i,j}^{n-1}$, $C_{i,j}^{n-2}$ を求め、3 次以上の項を微小として無視したこれらの式を逆に $\partial C / \partial t \Big|_{i,j,n}$, $\partial^2 C / \partial t^2 \Big|_{i,j,n}$ を未知数として連立させて解くと

$$\frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{i,j,n} = \frac{1}{2\Delta t} (3C_{i,j}^n - 4C_{i,j}^{n-1} + C_{i,j}^{n-2}) \quad (14)$$

が得られる。一方 $\partial C / \partial y \Big|_{i,j,n}$ については中央差分をとると次のようになる。

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{1}{2\Delta y} (C_{i,j+1}^n - C_{i,j-1}^n) \quad (15)$$

式(14), (15)を式(13)に代入し、その結果を改めて式(12)に代入すると境界外の濃度の推算式として

$$\left. \begin{aligned} C_{i-2,j}^n &= \frac{dx}{U} \left[\frac{1}{4t} (3C_{i,j}^n - 4C_{i,j}^{n-1} + C_{i,j}^{n-2}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{V}{4y} (C_{i,j+1}^n - C_{i,j-1}^n) \right] + C_{i,j}^n \\ C_{i-1,j}^n &= \frac{dx}{2U} \left[\frac{1}{4t} (3C_{i,j}^n - 4C_{i,j}^{n-1} + C_{i,j}^{n-2}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{V}{4y} (C_{i,j+1}^n - C_{i,j-1}^n) \right] + C_{i,j}^n \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

が得られる。図-10 の左右が逆の場合や x 座標に沿って境界がある場合も同様の考察を行なえば良い。

4.2 計算結果の比較検討

次に式(11), (16)を用いた 2 次元問題の計算例を示す。

図-11 に示されているように剛体的に角速度 $\omega = 2\pi/12,000 \text{ sec}^{-1}$ で回転する流れの場を考え、初期条件として中心より 600 m 離れた x , y の正負の座標軸上 4 カ所に標準偏差 $\sigma_x = \sigma_y = 200 \text{ m}$, peak 値が 1.0 の

Gauss 型濃度分布を与える。この計算では計算領域が図-11 からわかるように縦横 $1,400 \text{ m}$ の正方形で区切られているため、濃度の輸送に境界条件が大きな役割を果たすことになる。今、pure advection を考えており $1/4$ 回転後 ($t = 3,000 \text{ sec}$) の分布は初期条件と一致しなければならない。 $\Delta x = \Delta y = 100 \text{ m}$, $\Delta t = 100 \text{ sec}$ の計算条件のもとで式(11), (16)を用いて計算した結果を図-12 に示す。同じ条件のもとで H-P 法を用いて計算した場合の peak の誤差は 1.8 % であった。今回の計算結果は初期条件と十分良く一致しており peak の誤差も 1 % であった。次に一様流速で x 軸に 45° の角度で流入して来る 2 次元水域で、数値計

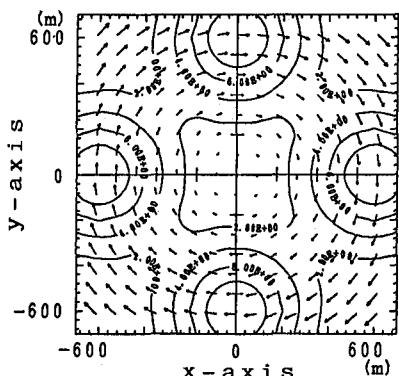


図-11 2 次元回転流れ場

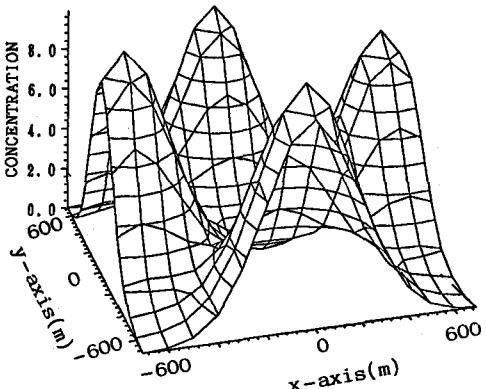


図-12 $t = 3,000 \text{ sec}$ の濃度分布

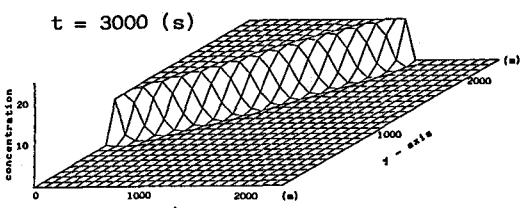


図-13 step 状濃度分布の輸送

算にとつてはより条件の厳しい step 関数を境界条件が示すときの計算を式(1), (6)を用いて行なう。 $\Delta x = \Delta y = 100\text{m}$, $\Delta t = 100\text{sec}$, $U = 0.5\text{m/s}$, $V = -0.5\text{m/s}$ で $t = 3,000\text{sec}$ のときの濃度分布を図-13に示すが sharpな形状をほぼ維持している。

最後に advection-diffusion の計算例として、流速が $U = -ax$, $V = ay$ (ここで $a = 3 \times 10^{-4}$) で表わされる 2 次元の流れの場を考える。これは図-14 に示されているように直角部を回る流れを表わす。拡散係数を単純に流速の絶対値と水深 (= const.) に比例するとして $D = 20\sqrt{U^2 + V^2}$ とおき、境界条件として $t = 0$ で $x = -3,500\text{m}$, $y = 1,300\text{m}$ に中心をもち $C_{\max} = 10$, $\sigma_x = \sigma_y = 200\text{m}$ である 2 次元 Gauss 型濃度分布が $U = 0.5\text{m/s}$, $V = 0\text{m/s}$ で一様に x 軸の正の方向に流れるとき, $x = 2,500\text{m}$ の計算領域の境界で検出される濃度分布を境界条件として input した。 $t = 3,000\text{sec}$, $t = 4,000\text{sec}$ の計算結果を図-14, 15 に示す。Gauss 分布は advection によって変形し、diffusion によって拡散していく様子が良く示されている。

5. むすび

以上示したように advection に 6-point method を用い、diffusion に “一般化された Crank-Nicholson の方法” を用いた Split operator approach は Holly-Preissmann 法と比べて精度が優れているだけでなく、計算方法がはるかに容易でかつ計算時間も少なくて済む、十分実用的な計算法であることがわかった。境界付近の取り扱いも式(6)や(10)を用いることによりほとんど精度の劣化は見られなかった。したがって、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 6-point method を用いることにより容易にかつ高い精度で計算できることがわかった。

最後に、本研究は昭和 59 年度(財)日本証券奨学財団の研究助成を受けて行なわれたものである。ここに記して深甚なる謝意を表します。

参考文献

- 1) Martin, B. : Numerical Representation which Model Properties of the Solution to the Diffusion Equation, Journal of Computational Physics, vol. 17, 1975.
- 2) Holly, F. M. Jr. and A. Preissmann : Accurate calculation of transport in two dimensions, JHYD, ASCE, vol. 103, 1977.
- 3) 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.
- 4) 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.
- 5) 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.
- 6) 小松利光, 仲敷憲和, 大串浩一郎 : 河川や沿岸部における拡散物質の輸送拡散の計算法, 第 31 回海岸講演会論文集, 1984.

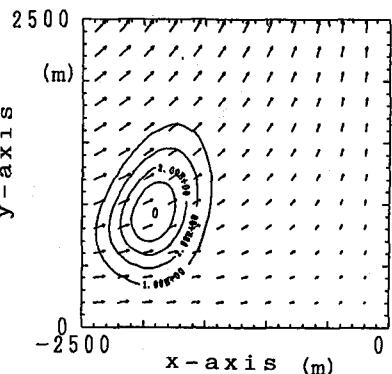


図-14 直角部の流れ

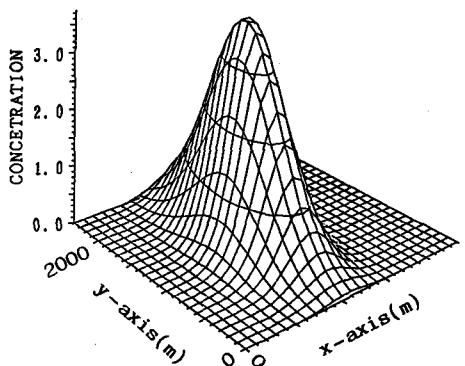


図-15 $t = 4,000\text{sec}$ の濃度分布