

貯水池や河口部における移流拡散 の高精度計算法

A Refined Numerical Scheme of Advective Diffusion in Reservoir and Estuary

九州大学 工学部 正 員	小松 利光	T.Komatsu
佐賀大学理工学部 正 員	大串 浩一郎	K.Ohgushi
九州大学 大学院 学生員	朝位 孝二	K.Asai
電力中央研究所 正 員	仲敷 憲和	N.Nakashiki

1. まえがき

河口部や湖沼において passiveな汚染物質の拡散の予測を行なうには、移流拡散方程式を解く必要がある。この方程式は2種類の相異なる輸送形式、すなわち移流と拡散を含む偏微分方程式である。数値的にこの移流拡散方程式を解く場合、一つの有力な手法として split operator approachが挙げられる。この手法は、全く異なる現象である移流と拡散を分離し、短い時間ステップごとに交互に計算を繰り返すものである。この split operator approachの長所は、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点である。

拡散は、種々のFDM、FEMを用いて比較的正確に数値計算できるのに対し、移流の計算については、従来より多くの計算法が提案されてきたにもかかわらず、そのスキームに無視できない誤差が含まれているのが実状であった。

Holly と Preissmann¹⁾が提唱した Two-point fourth-order method (H-P法)は1次元の移流の数値計算においてそれまでの計算法と比較して飛躍的な改善を得た。しかしながら、この方法は、従属変数として濃度だけでなく、濃度の空間微分も一緒に移流する必要があったため、2次元、3次元問題においては、著しく煩雑でコストの高い計算法であった²⁾。

その後、小松ら³⁾が提唱した six-pointスキームは、H-P法の欠点を十分補う精度の高い計算法であった。six-pointスキームの主な特色としては、以下の通りである。

- (1) 従属変数として濃度のみを扱う。(2) 特性曲線法に基づいており、境界条件が容易に自然な形で取り込める。(3) 1次元問題の計算は、十分正確に、しかも簡単に行なうことができる。
- (4) 2次元、3次元問題への適用も容易である。

このように簡便で精度のよいsix-pointスキームも、2次元、3次元と次元が高くなるにつれて計算回数が飛躍的に増加し、数値的な誤差が蓄積するので、1次元問題に比較して精度は悪くなる。もし、2次元、3次元への適用においても高精度を期待するのであれば、six-pointスキームに改善の余地がまだ残されていると言えるであろう。

本文では、truncation errorを打ち消すための修正項を新たに加える^{4,5)}ことにより、six-pointスキームの計算精度を大幅に改善することができたので報告する。

2. Six-Pointスキームによる移流方程式の解法

2.1 特性曲線法に基づく移流の計算法

移流の特性曲線法による解法は、1次元問題において容易に説明することができ、2次元、3次元への拡張も簡単である。1次元移流方程式は次式で表わされる。

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

ここに、 $C(x, t)$ = 拡散物質の濃度、 x = 空間座標、 t = 時間、 $U(x, t)$ = 平均流速である。式(1)は特性曲線法によって常微分化され、次式のようになる。

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

式(2)は、図-1のような $x-t$ 平面上における特性曲線(破線)上での濃度が時間的に変化しないことを表わしている。したがって、格子点 (x_i, t_{n+1}) に到達する濃度は次式で表わされる。

$$C^{n+1}_i = C^n_\xi \quad (3)$$

ここに、添字 n は時間 t_n を、添字 i は計算

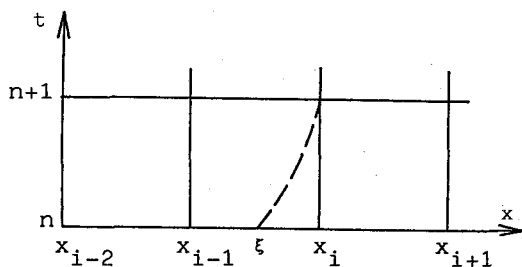


図-1 1次元計算格子

点 x_i を、 ξ は (x_i, t_{n+1}) に到達する特性曲線の $t = t_n$ における足の x 座標を表わす。式(3)によって、次の時間ステップの濃度 C の値を求める問題は、現時点での格子の間の濃度をいかに格子上の既知の値で評価するかという問題に変換されるわけである。

2.2 Six-Pointスキームと1次元の移流問題

小松ら(1985)が提唱した six-pointスキームは、 $t = t_n$ における ξ のまわりの6点の既知の濃度を用いて C^n_ξ を計算する方法である。誘導その他詳細については文献 3)に譲るとして、最終的な six-pointスキームは次のようである。

$$C^{n+1}_i = C^n_\xi = b_1 C^{n-3}_i + b_2 C^{n-2}_i + b_3 C^{n-1}_i + b_4 C^n_i + b_5 C^{n+1}_i + b_6 C^{n+2}_i \quad (4)$$

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

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

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

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

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

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

$$\alpha = U \Delta t / (x_i - x_{i-1}) ; \text{クーラン数}$$

ここで、six-pointスキームの有効性を示すために、濃度の1次元のpure advectionの計算例を示す。単位幅の無限長水路において拡散物質が、一定流速 $U = 0.5\text{m/s}$ で下流へ9,600sec間移流される場合を考える。計算条件は、 $\Delta x = 200\text{m}$ 、 $\Delta t = 100\text{s}$ であり、初期条件は、図-2に示すように $x = 1,400\text{m}$ に中心を持ち、ピーク濃度 $C = 10$ 、標準偏差 $\sigma = 264\text{m}$ のガウス型分布と $x = 2,400\text{m}$ に中心を持ち、ピーク濃度 $C = 6.5$ 、標準偏差 $\sigma = 264\text{m}$ のガウス型分布を線形に重ね合わせた濃度分布を用いた。six-pointスキームによる計算結果とともに、従来より拡散方程式の移流項の計算によく用いられている風上差分、Leapfrogスキーム、Lax-Wendroffスキーム、Staggeredスキームによる計算結果も併せて図-2～6に示す。従来の差分スキームでは到底無視できないほどの計算誤差が生じているが、six-pointスキームによる計算結果は厳密解とよく一致していることがわかる。

2.3 多次元の問題への適用

six-pointスキームの2次元、3次元問題への適用はごく簡単である。2次元の場合、隣接した6本の格子線に沿って式(4)を適用し、最後にその方向と垂直な方向にもう1度式(4)を使用することによって計算される。したがって2次元問題において一つの新しい濃度を計算するために、six-pointスキーム(式(4))は計7回使われることになる。2次元問題の適用例は、無限の広さを持つ2次元平面において、 $(1400\text{m}, 1400\text{m})$ に中心が有り、ピーク濃度 $C = 10$ 、標準偏差 $\sigma_x =$

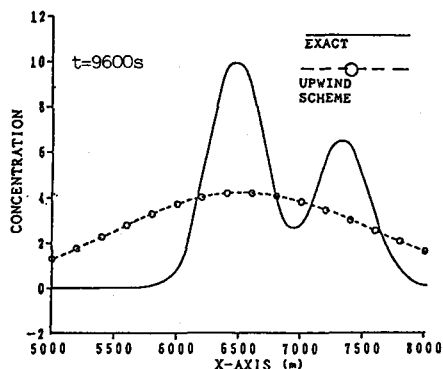


図-2 1次元計算結果(UPWIND)

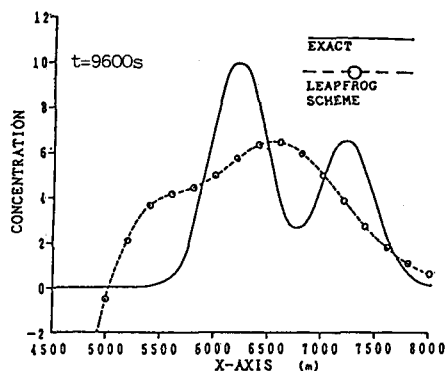


図-3 1次元計算結果(LEAPFROG)

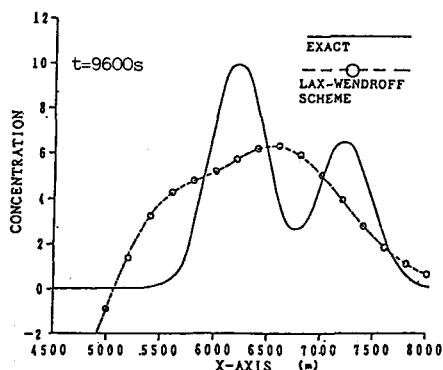


図-4 1次元計算結果(LAX-WENDROFF)

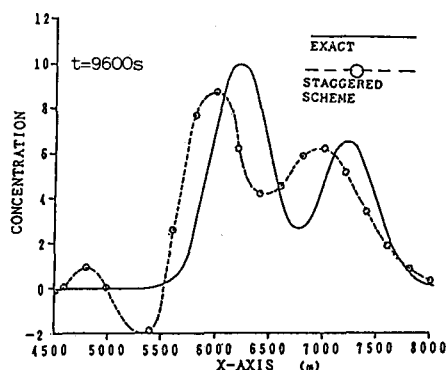


図-5 1次元計算結果(STAGGERED)

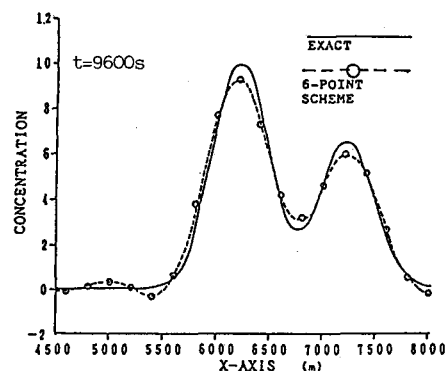


図-6 1次元計算結果(SIX-POINT)

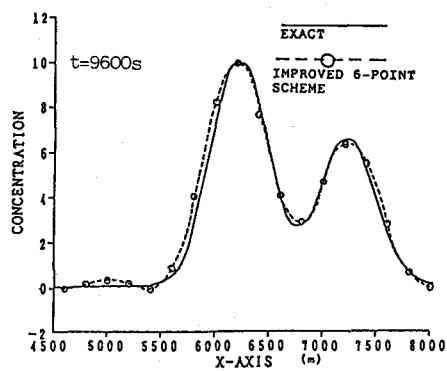


図-7 1次元計算結果(IMPROVED SIX-POINT)

$\sigma_y = 264\text{m}$ のガウス型濃度分布の純粋移流の計算である。流速は、 $U = V = 0.5\text{m/s}$ 、計算格子は、 $\Delta x = \Delta y = 200\text{m}$ 、 $\Delta t = 100\text{s}$ とし、9,600s後の計算結果を厳密解と一緒に図-8に示す。

3次元問題の計算においては、2次元で構成された計算方式を6つの隣接する水平面に適用し、最後に鉛直な方向に式(4)を1度適用することになる。したがって、未知の1点の濃度を計算するために式(4)は43回繰り返し用いられる。six-pointスキームの3次元における計算例として、1次元、2次元と同様に、無限の3次元空間において(1400m、1400m、1400m)に中心があり、ピーク濃度 $C = 10$ 、標準偏差 $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 264\text{m}$ のガウス型濃度分布の純粋移流を計算する。流速は、 $U = V = W = 0.5\text{m/s}$ 、計算格子は、 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 200\text{m}$ 、 $\Delta t = 100\text{s}$ とし、9,600s後の計算結果を厳密解と共に図-9に示す。

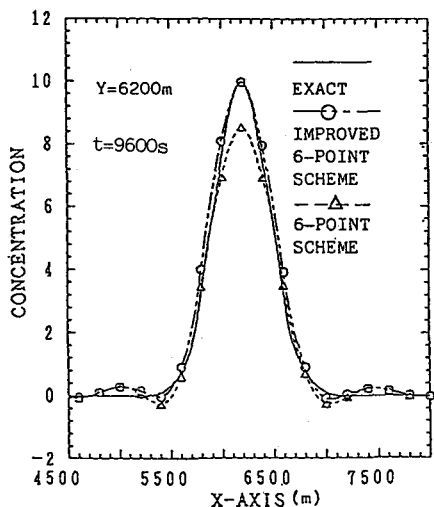


図-8 2次元の移流計算結果

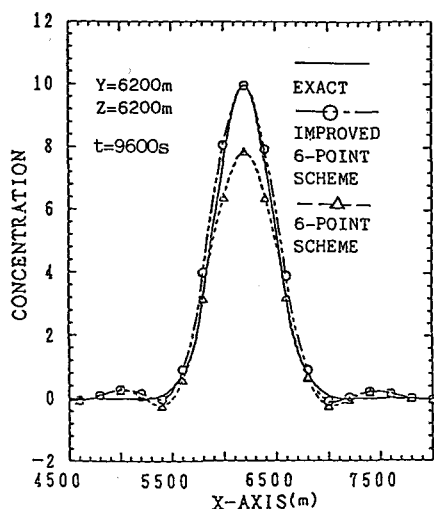


図-9 3次元の移流計算結果

1次元の計算結果に比べて2次元、3次元と次数が増加するにつれて、1次元で精度のよかったsix-pointスキームもだんだんと顕著な誤差が生じてきているのがわかる。これは式(4)の繰り返し使用による誤差の蓄積の結果である。高精度な純粋移流計算が、多次元問題においても可能な実用的な計算スキームの開発が必要である。

3. Six-Pointスキームの改良

3.1 改良型six-pointスキームの定式化

式(1)において、 $U = \text{CONST.}$ ならば、濃度の時間微分は濃度の空間微分と関係づけられる。

$$\frac{\partial^k C}{\partial t^k} = (-U)^k \frac{\partial^k C}{\partial x^k} \quad (K=1,2,3,\dots) \quad (5)$$

式(5)を用いて式(4)をTaylor級数解析すると次式ようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = & D_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2! \Delta t} + D_3 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^3}{3! \Delta t} + D_4 \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \frac{(\Delta x)^4}{4! \Delta t} \\ & + D_5 \frac{\partial^5 C}{\partial x^5} \frac{(\Delta x)^5}{5! \Delta t} + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

ここに、 $D_2 = -3.16 \times 10^{-2} \alpha^2 + 3.16 \times 10^{-2} \alpha$

$D_3 = 4.74 \times 10^{-2} \alpha^2 - 4.74 \times 10^{-2} \alpha$

$D_4 = -\alpha^4 + 2\alpha^3 - 2.26\alpha^2 + 1.26\alpha$

$D_5 = \alpha^5 - 2.83\alpha^3 + 4.83\alpha^2 - 3.0\alpha$

式(6)の右辺は、six-pointスキームのtruncation errorを表わし、数値拡散として誤差の原因となっている。したがて、これらの項を人為的に差し引いてやれば six-pointスキームの誤差の問題は一挙に解決する筈である。そこでこの数値拡散項の特性を調べるため、1項ずつ取り出して拡散の数値計算を行なってみた。計算結果を図-10、11、12に示す。

式(6)の右辺の2次の数値拡散項は通常の乱流拡散や移流分散と同様の性質を持ち、3次の数値拡散項は位相誤差を生じさせて歪を引き起こす。また、4次の数値拡散項は振幅の増幅と高波数の振動を生ずる。また図には示していないが、5次の数値拡散項は3次とは逆方向へ位相誤差と歪を

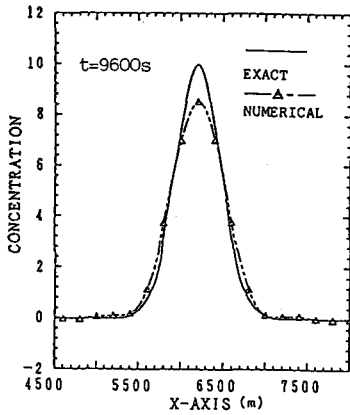


図-10 2次の誤差項の拡散特性

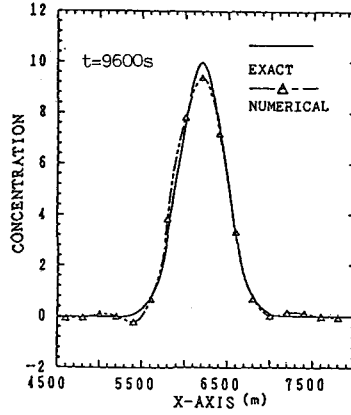


図-11 3次の誤差項の拡散特性

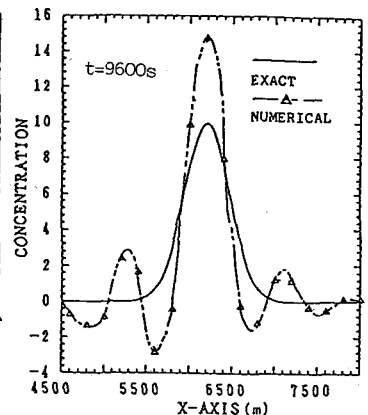


図-12 4次の誤差項の拡散特性

生じさせた。ところで式(6)の右辺の誤差項は無限級数なので、直接そのまま差し引くことは不可能である。そこで、濃度の damping 誤差は筆頭項である2次の数値拡散項で代表させ、位相誤差や歪は準筆頭項である3次の数値拡散項で代表させることにすると、

$$(6) \text{式の右辺} \sim \gamma D_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2! \Delta t} + a D_3 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^3}{3! \Delta t} \quad (7)$$

と近似できる。ここで、 γ は3次の拡散項以外の拡散項の影響を含む係数で、

$$\gamma = \text{Func} \left(\frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \frac{\partial^4 C}{\partial x^4}, \dots \right), a \text{は補正係数とする。}$$

無限級数の数値拡散項を近似した式(7)をsix-pointスキームから差し引くことにより、six-pointスキームの計算精度が飛躍的に改善されることが期待される。

$$C_i^{n+1} = C_i^n = b_1 C_{i-3}^n + b_2 C_{i-2}^n + b_3 C_{i-1}^n + b_4 C_i^n + b_5 C_{i+1}^n + b_6 C_{i+2}^n - \gamma D_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2!} - a D_3 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^3}{3!} \quad (8)$$

式(6)の右辺各項の特性のより詳細な調査と多くの数値実験から、補正係数 γ と定数 a の最終的な形を次のように決定した。

$$\gamma = \begin{cases} \frac{\omega}{|\omega|} & (\omega \neq 0) \\ 0 & (\omega = 0) \end{cases} \quad a = -0.076 \quad (9)$$

ここに、 $\omega = (-\partial C / \partial x \cdot \partial^2 C / \partial x^2 \cdot \partial^4 C / \partial x^4 \cdot \partial^5 C / \partial x^5)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial x} &= \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x}, \quad \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C_{i+1} - C_i - C_{i-1} + C_{i-2}}{2(\Delta x)^2}, \\ \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} &= \frac{C_{i+2} - 3C_{i+1} + 2C_i + 2C_{i-1} - 3C_{i-2} + C_{i-3}}{2(\Delta x)^4}, \\ \frac{\partial^5 C}{\partial x^5} &= \frac{C_{i+2} - 5C_{i+1} + 10C_i - 10C_{i-1} + 5C_{i-2} - C_{i-3}}{(\Delta x)^5} \end{aligned}$$

ω が0でないとき、 γ は1か-1のどちらかの値を取り、2次の補正項が常に濃度の damping の補正項としての役割を果たすように調節する。

したがって、改良型six-pointスキームの最終的な表現式は以下のようになる。

$$C_i^{n+1} = C_i^n = b'_1 C_{i-3}^n + b'_2 C_{i-2}^n + b'_3 C_{i-1}^n + b'_4 C_i^n + b'_5 C_{i+1}^n + b'_6 C_{i+2}^n \quad (10)$$

ここに、 $b'_1 = b_1 + \alpha a D_3/12$

$$b'_2 = b_2 - \alpha \gamma D_2/2 - (-1+3\alpha) a D_3/12$$

$$b'_3 = b_3 - (1-3\alpha) \gamma D_2/2 - (1-\alpha) a D_3/6$$

$$b'_4 = b_4 - (-2+3\alpha) \gamma D_2/2 + \alpha a D_3/6$$

$$b'_5 = b_5 - (1-\alpha) \gamma D_2/2 - (-2+3\alpha) a D_3/12$$

$$b'_6 = b_6 - (1-\alpha) a D_3/12$$

3.2 改良型six-pointスキームの適用

前述の条件で初期分布としてガウス濃度分布を採用し、移流の計算を行なった。1次元の計算結果を図-13に示す。従来のsix-pointスキームと比較しても濃度のdampingや負値の誤差が大幅に改善されており位相誤差も全く見られない。また従来の他の計算スキームとの比較のため、2個のガウス濃度分布の線形和を初期分布とした移流計算を行なった。その結果を図-7に示す。2次元、3次元の移流計算の結果を図-8、9に示す。これらの結果から改良型 six-pointスキームは多次元の移流計算においても十分高精度を保っていることがわかる。なお、従来の風上差分やLeapfrog、Lax-Wendroff、Staggeredなどの計算スキームを用いて2次元、3次元の計算も行なってみたが初期分布をほとんど留めない程に計算誤差が生じることがわかった。

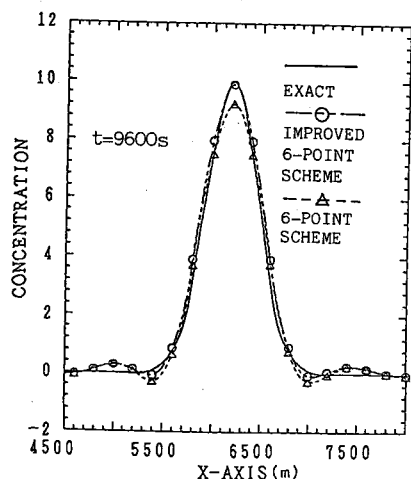


図-13 1次元の移流の計算

4. むすび

six-pointスキームをTaylor級数解析することにより明らかとなった数値拡散項を補正項を導入して消去することにより格段に精度の向上した改良型six-pointスキームを開発することができた。このスキームを適用することにより1次元だけでなく、2次元、3次元の移流問題も精度良く計算できるようになったため、拡散の計算に、例えばCrank-Nicholsonのスキームを併用したsplit operator approachを採用すれば、貯水池や河口等における拡散物質の数値計算が、高精度でかつ容易に実行できることになる。

最後に、この研究に対し数多くの貴重な御意見を頂きました九州大学粟谷陽一教授、アイオワ大学水理研究所 F.M.Holly教授に心から感謝の意を表します。また本研究の遂行に当たり御助力を願った当時4年生の小永吉秀男君(現 P.S.コンクリート(株))に深甚なる謝意を表わします。

6. 参考文献

- 1) Holly, F.M. Jr. and Preissmann, A. (1977). JHYD, ASCE, 103, No. HY11, 1259-1277
- 2) Holly, F.M. Jr. and Usseglio-Polatera, J.M. (1984). JHYD, ASCE, 110, No. 7, 905-926
- 3) Komatsu, T., Holly, F.M. Jr., Nakashiki, N. and Ohgushi, K. (1985). Journal of Hydroscience and Hydraulic Engineering, 3, No. 2, 15-30
- 4) Boris, J.P. and Book, D.L., (1973). Flux corrected transport I. SHASTA, Journal of Computational Physics, 11, 38-69
- 5) Book, B.L., Boris, J.P. and Hain, K. (1975). Flux corrected transport II. Journal of Computational Physics, 18, 248-283