

1. 序. 本報では移流分散方程式を特性曲線法を用いて数値計算するときの数値解や安定性について解析した。著者らは特性曲線による計算方法の誤差の性質や解の安定性について検討してきたが<sup>1)</sup>、ここではそれらの結果を簡単にのべ、一・二次元の移流分散方程式についての安定性およびこの計算法の修正について報告する。

2. 粒子を移動させる計算法. ここでは次元の一次元移流分散方程式について粒子移動の方法(特性曲線法ともいわれる。以後粒子法とよぶ)を簡単にのべる。Cは塩分濃度、uは浸透層内の実質流速、Dはx方向の分散係数とすれば、 $\partial C/\partial t + u(\partial C/\partial x) = D(\partial^2 C/\partial x^2) \dots (1)$  or  $dc/dt = D(\partial^2 c/\partial x^2) \dots (2)$  流速uが一定の場合には(2)式は変数変換:  $X = x - ut$ ,  $T = t$  によって(1)式が  $\partial c/\partial T = D(\partial^2 c/\partial X^2)$  と書けることと同じ意味であり、この場合粒子の配置は速度uの移動座標X軸に固定したものとなる。図-1のように初めに全浸透領域にある濃度を与えたN個の粒子を $\delta X$ の間隔で配置し粒子番号をKとする。またX軸上に $\delta X = h$ の等間隔に固定格子点をしめ、この区分領域を $S_i$ とし、 $S_i$ の中にK個の粒子が入っているものとする。また時間間隔を $\delta t = \tau$ 、 $t = j \cdot \tau$ 、jは時間ステップ数、 $C^j(K)$ はある時刻j・ $\tau$ のK粒子の濃度を表わすものとする。また(2)式の右辺の分散項 $D(\partial^2 c/\partial x^2)$ は微分項を  $\partial^2 c/\partial x^2 = (C_{i+1}^j - 2C_{ij}^j + C_{i-1}^j)/h^2 \dots (3)$

で計算する。ここに  $C_{ij}^j = (1/n) \sum_{K=1}^n C^j(K_i)$  ( $K_i$ は $S_i$ 区間内だけで単独につけた粒子番号) (2)式を差分化すると  $\delta C_{ij} = (hD/h^2) \cdot (C_{i+1}^j - 2C_{ij}^j + C_{i-1}^j) \dots (4)$

まず粒子を流速uで $\tau$ 時間が移動させ、その結果各格子点区間に入った粒子をとってそれらの粒子濃度の平均値を求めこれから格子点の時刻(j+1)・ $\tau$ の濃度を次のようにする。  $C_{i+1}^{j+1} = C_{ij}^j + \delta C_{ij} \dots (5)$  また領域 $S_i$ に含まれる粒子の時刻(j+1)・ $\tau$ の濃度を次のようにする。  $C^{j+1}(K) = C^j(K) + \delta C_{ij} = C^j(K) + (hD/h^2)(C_{i+1}^j - 2C_{ij}^j + C_{i-1}^j) \dots (6)$

計算のフローチャートを図-2に示す。

3. 誤差の評価. (1)式をexplicit差分法で計算する場合と粒子法で計算する場合とを比較し粒子法の誤差について考察しよう。

$C(x, t+h) = C(x, t) + \partial C/\partial t \cdot h + \partial^2 C/\partial t^2 \cdot h^2/2 + \dots$  ゆえに、

$\partial C/\partial t = \{C(x, t+h) - C(x, t)\}/h - \partial^2 C/\partial t^2 \cdot h/2$ ,  $C(x+h, t)$  に

いても同様に(1)式を離散化すると

$$\begin{aligned} & \{C(x, t+h) - C(x, t)\} + (u \cdot h/2) \{C(x+h, t) - C(x-h, t)\} \\ & - (hD/h^2) \{C(x+h, t) - 2C(x, t) + C(x-h, t)\} \\ & = (h^2/2) \partial^2 C/\partial t^2 + (uhh/6) \partial^3 C/\partial x^3 - (hDh^2/12) \partial^4 C/\partial x^4 \dots (7) \end{aligned}$$

もっとも簡単なexplicit差分法では(7)式の右辺を無視してしまうので非定常性の強い場合、流速が大きい場合、分散係数が大きい場合などに依りて離散化誤差が発生するが、粒子法では(2)式によるもので移流項がなく、したがって(7)式右辺第2項無視による誤差がなくなり移流項が卓越する場合には従来の差分法よりも精度がよいと考えられる。

次に分散項  $D\partial^2 C/\partial x^2$  に関する誤差を検討する。 $\partial^2 C/\partial x^2$ は離散化すると

$\partial^2 C/\partial x^2 = \{C(x+h, t) - 2C(x, t) + C(x-h, t)\}/h^2 - (h^2/12) \partial^4 C/\partial x^4 \dots (8)$  explicit差分法では  $\partial^2 C/\partial x^2$  の値を近似的に次のようにおく。  $f_1 = \{C(x+h, t) - 2C(x, t) + C(x-h, t)\}/h^2 \dots (9)$  すなわちその離散化誤差は

$f_1 - \partial^2 C/\partial x^2 = (h^2/12) \partial^4 C/\partial x^4 \dots (10)$  粒子法では前述のようにある固定点の濃度としてその区間領域 $S_i$ 内にある粒子の濃度の平均値を用いて  $\partial^2 C/\partial x^2$ の値を  $f_2 = (C_{i+1}^j - 2C_{ij}^j + C_{i-1}^j)/h^2 \dots (1)$  とする。いま

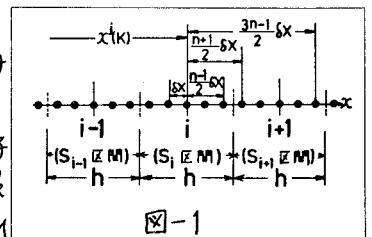


図-1

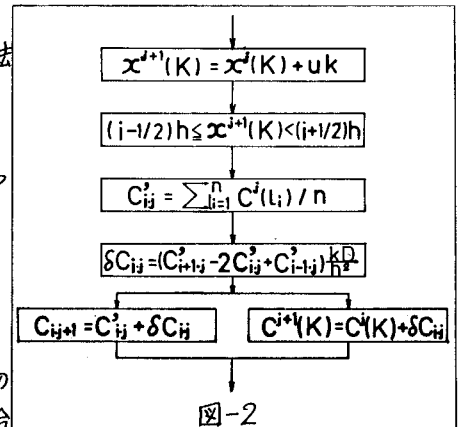


図-2

このための誤差を考えてみよう。まず(9)式右辺の離散化を図-3に示すように \$S\_i\$ 区間の連続関数の平均値 \$C'\_{ij}\$ で表わす場合を考える。 \$C(x,t) = C\_{ij} + (x-i\hbar)\partial C/\partial x|\_{ij} + (x-i\hbar)^2/2 \cdot \partial^2 C/\partial x^2|\_{ij} + \dots\$ として

$$C'_{ij} = 1/\hbar \int_{i\hbar-h/2}^{i\hbar+h/2} C(x,t) dx = C_{ij} + (\hbar^2/24) \partial^2 C/\partial x^2|_{ij} + (\hbar^4/1920) \partial^4 C/\partial x^4|_{ij} + \dots$$

$$C'_{i+1,j} = 1/\hbar \int_{(i+1)\hbar-h/2}^{(i+1)\hbar+h/2} C(x,t) dx = C_{i+1,j} + (\hbar^2/24) \partial^2 C/\partial x^2|_{i+1,j} + (\hbar^4/1920) \partial^4 C/\partial x^4|_{i+1,j} + \dots$$

したがって誤差は(11)式と(8)との差をとって、(10)式に対して、

$$f_2 - \partial^2 C/\partial x^2 \approx (\partial^2 C/\partial x^2)|_{i+1,j} - 2\partial^2 C/\partial x^2|_{ij} + \partial^2 C/\partial x^2|_{i-1,j} / 24 + \hbar^2/12 \cdot \partial^4 C/\partial x^4|_{ij} \dots (12)$$

次に上述の積分計算を図-3の柱状図に示すように \$S\_i\$ 区間を \$n\$ 個の小区間に分けて部分求積で平均値 \$C'\_{ij}\$ を求め(11)式に対応した \$f\_2\$ を計算し、再び(8)式との差をとれば

$$f_2 - \partial^2 C/\partial x^2 = (1-1/n^2)(\partial^2 C/\partial x^2)|_{i+1,j} - 2\partial^2 C/\partial x^2|_{ij} + \partial^2 C/\partial x^2|_{i-1,j} / 24 + (\hbar^2/12) \partial^4 C/\partial x^4|_{ij} \dots (13)$$

差は(3)式で示す \$S\_i\$ 区間内の \$n\$ 個の粒子の濃度の平均値と点の離散値とする粒子法の分散項の誤差に相当すると考えられる。(12)式の右辺第1項はほぼ、

$$\hbar^2/24 \partial^2 C/\partial x^2|_{ij} \text{ となり、(13)より } f_2 - \partial^2 C/\partial x^2 \approx \hbar^2/24 \partial^2 C/\partial x^2|_{ij} + \hbar^2/12 \cdot \partial^4 C/\partial x^4|_{ij} \dots (14)$$

同様に

$$\text{して(13)より } f_2' - \partial^2 C/\partial x^2 \approx \hbar^2(1-1/n^2)/24 \partial^2 C/\partial x^2|_{ij} + \hbar^2/12 \cdot \partial^4 C/\partial x^4|_{ij} \dots (15) \text{ すなわち(10)}$$

、(14)、(15)式を比較すると explicit 差分法より、粒子法の場合がやや誤差が大きくなるが、いずれもオーダー的には \$\hbar^2\$ であって大差はないと考えられる。表-1は(1)式の \$u=0\$ の場合で、境界条件 \$C(0,t)=1.0\$ , \$C(\infty,t)=0\$、初期条件 \$C(x,0)=0\$ の解析解 \$C(x,t) = \text{erfc}(x/2\sqrt{Dt})\$ を用いて(10)式と(12)式の右辺の微分項を理論解析解を用いて求めたものであり(12)式が(10)式よりやや大きいとその差は

小さいことがわかる。

#### 4. 解の安定性

ここでは粒子法の安定性を考える。このため、

差分方程式をフーリエ変換して増幅因子を検討してみよう。いま(6)

式において粒子 \$K\$ の濃度 \$C^i(K)\$ のフーリエ変換は、 \$I^2 = -1\$、また

\$X = K \cdot \Delta x = K \cdot \hbar/n\$ として \$\hat{C}^i(n) = \int\_{-\infty}^{\infty} e^{-iXx} C^i(K) dx\$ また

\$(K+m)\$ 番目の粒子濃度 \$C^i(K+m)\$ のフーリエ変換は

$$\hat{C}^{i(K+m)} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iXx} C^i(K+m) dx = e^{-iXm\Delta x} \hat{C}^i(K) \text{ したがって}$$

(6)式のフーリエ変換は \$\hat{C}^{i(K)} = \{1 - 4\sin^2(\frac{\theta\hbar}{2}) / \sin(\frac{\theta\hbar}{2}) \cdot \frac{\hbar D}{n^2}\} \hat{C}^i(K) \dots (16)\$

したがって粒子の濃度が時間が経過しても発散しないためには

(16)式の増幅因子(右辺中括弧内)の絶対値が1以下の必要があり、 \$\hbar D/n^2\$

のとりうる範囲は \$0 \le \hbar D/n^2 \le \min f(\theta, n)\$ ここに \$\theta = \sigma\hbar/2\$

\$f(\theta, n) = 2n / \{4\sin^2\theta / \sin(\theta/n)\}\$、 \$\min f(\theta, n)\$ は \$f(\theta, n)\$ の最小値 \$\dots (17)\$

次に2次元では粒子の配置は図-4

のように \$M\_1 \times M\_2\$ 個の粒子を用いる。この場合 \$dc/dt = \partial C/\partial t + u\partial C/\partial x + v\partial C/\partial y = D\_1 \partial^2 C/\partial x^2 + D\_2 \partial^2 C/\partial y^2 \dots (18)\$

を基礎式とする。また \$u\$、 \$v\$ は \$x\$ 方向、 \$y\$ 方向の流速で一定値とする。一次元の場合と同様に固定格子点 \$(i, j)\$

の濃度増分 \$\delta C\_{i,j}\$ が計算される。すなわち \$\Delta x = \hbar\_1\$、 \$\Delta y = \hbar\_2\$ として

$$\delta C_{i,j} = \frac{D_1}{M_1 M_2 \hbar_1^2} \left\{ \sum_{S_{ix}, i, j}^{M_1, M_2} C(l_{ix+1}, i, j) - 2 \sum_{S_{ix}, i, j}^{M_1, M_2} C(l_{ix}, i, j) + \sum_{S_{ix}, i, j}^{M_1, M_2} C(l_{ix-1}, i, j) \right\} + \frac{D_2}{M_1 M_2 \hbar_2^2} \left\{ \sum_{S_{ix}, i, j}^{M_1, M_2} C(l_{ix}, i, j+1) - 2 \sum_{S_{ix}, i, j}^{M_1, M_2} C(l_{ix}, i, j) + \sum_{S_{ix}, i, j}^{M_1, M_2} C(l_{ix}, i, j-1) \right\} \dots (19)$$

したがって粒子 \$K\$ については \$C^{i(K)} = C^i(K) + \delta C\_{i,j} \dots (20)\$ この式

に2重フーリエ変換 \$\hat{C}^i(K) = \int\_{-\infty}^{\infty} \int\_{-\infty}^{\infty} e^{-iXx} e^{-iYy} C^i(K) dx dy\$ を行なうと、

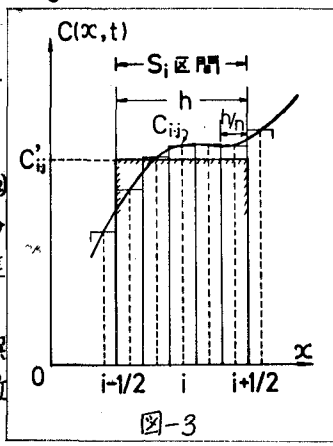


図-3

| No | (10)式   |         | (12)式   |         |
|----|---------|---------|---------|---------|
|    | t=5k    | t=10k   | t=5k    | t=10k   |
| 1  | -0.1062 | -0.0221 | -0.1517 | -0.0322 |
| 2  | -0.0700 | -0.0267 | -0.1027 | -0.0393 |
| 3  | 0.0096  | -0.0148 | 0.0112  | -0.0221 |
| 4  | 0.0293  | -0.0002 | 0.0423  | -0.0006 |
| 5  | 0.0146  | 0.0069  | 0.0222  | 0.0101  |
| 6  | 0.0037  | 0.0067  | 0.0060  | 0.0099  |
| 7  | 0.0005  | 0.0039  | 0.0010  | 0.0058  |
| 8  | 0.0001  | 0.0016  | 0.0001  | 0.0024  |
| 9  | 0.0     | 0.0005  | 0.0     | 0.0008  |
| 10 |         | 0.0001  |         | 0.0002  |
| 11 |         | 0.0     |         | 0.0     |

表-1

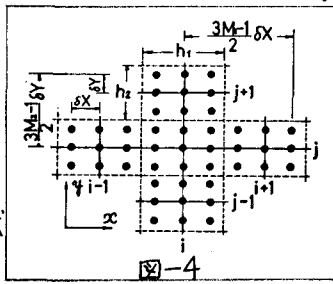


図-4

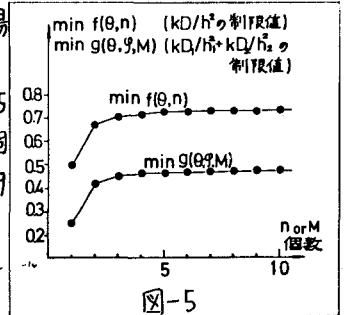
(17)式に対応する式として  $\hat{c}^{H(k)} = \hat{Q} \hat{c}^i(k)$  , ここに

$$\hat{Q} = 1 - 4\{D_1/h^2 \sin(\phi h/2) \sin^2(\phi h/2) + D_2/h^2 \sin(\phi h/2) \sin^2(\phi h/2)\} / (M_1 M_2 \sin(\phi h/2 M_1) \cdot \sin(\phi h/2 M_2)) \cdots (22)$$

(22)式において、いま  $\lambda = R D_1/h^2 = R D_2/h^2$  と、 $M_1 = M_2 = M$  の場合について  $-1 \leq \hat{Q} \leq 1$  の条件を求めると、

$$0 \leq \lambda \leq \min g(\theta, \varphi, M), \quad g(\theta, \varphi, M) = \{f \sin(\theta M) \sin(\varphi M) / (\sin \theta \sin \varphi (\sin^2 \theta + \sin^2 \varphi))\} / 2, \quad \theta = \phi h/2, \quad \varphi = \phi h/2 \cdots (23)$$

図-5には  $f(\theta, n)$  と  $g(\theta, \varphi, M)$  の最小値を示している。粒子の個数が1個の場合は  $f(\theta, 1)$  の最小値は0.5、 $g(\theta, \varphi, 1)$  の最小値は0.25 でありいずれも explicit 差分法の流速がない場合の安定条件に一致している。また  $\lim_{n \rightarrow \infty} \min f(\theta, n) = 0.725$ 、および  $\lim_{M \rightarrow \infty} \min g(\theta, \varphi, M) = 0.476$  となる。またこの図から配置する粒子の個数は区間領域につき次元の場合ではせいぜい3個、二次元の場合でも  $3 \times 3 = 9$  個で十分であるといえよう。



5. 計算の修正. いま(6)式の固定点での濃度増分  $\delta C_{ij}$  を  $S_i$  内の粒子に等しく加えずに粒子  $K$  に付加する濃度増分  $\delta C(K, j)$  を  $\delta C_{ij}$  に修正項を加えた、

$$\delta C(K, j) = \delta C_{ij} + \xi \partial(\delta C) / \partial x_{ij} \quad \text{ここに } \xi = x^i(K) - i \cdot h \cdots (24) \quad \text{とする。また濃度増分の変化率}$$

$$\partial(\delta C) / \partial x_{ij} = (\delta C_{i+1, j} - \delta C_{ij}) / h \quad (\xi \geq 0 \text{ のとき}), \text{ or } (\delta C_{ij} - \delta C_{i-1, j}) / h \quad (\xi \leq 0 \text{ のとき}) \quad \text{したがって時刻}(j+1) \text{ での粒子の濃度は}$$

$$c^{H(k)} = c^i(k) + \delta C(K, j) = c^i(k) + \delta C_{ij} + \xi \cdot \partial(\delta C) / \partial x_{ij} \cdots (25)$$

6. 計算による検討. 著者らは、粒子法は移流分散方程式の中の移流項の差分化がないためこれによる誤差がなく、したがって流速が大きい場合には explicit 差分法などに比べて精度がよいことを示した。ここでは粒子法とそれを修正した方法(25)式と解析解の計算結果を示す。粒子法および修正法では  $h = 3.4 \text{ cm}$  (全長の50等分) につき  $n$  (粒子個数) = 5個と配置した。表-2は  $kD/h^2$  の値が0.5より大きい場合、粒子法は(6)式によるので解が発散するが、修正法は3.4で解析したモデルにより近いので安定である。修正法は  $kD/h^2$  の値が大きくても安定性が高いことが確かめられた。図-6は(25)式による粒子番号10と20の粒子濃度時間曲線と  $kD/h^2$  の増加とともに粒子濃度が不安定になり発散してゆくことがわかる。また、ある時間での粒子空間  $(X, T)$  の濃度分布も4で解析した安定条件にほぼしたがうことも確かめられた。

表-2

| No. | k=h/u=739 sec |         |              |         |              |         |
|-----|---------------|---------|--------------|---------|--------------|---------|
|     | $kD/h^2=0.5$  | $t=10k$ | $kD/h^2=0.6$ | $t=10k$ | $kD/h^2=0.7$ | $t=10k$ |
| 1   | 100.00        | 100.00  | 100.00       | 100.00  | 100.00       | 100.00  |
| 2   | 99.96         | 99.90   | 99.94        | 99.93   | 99.92        | 99.86   |
| 3   | 99.83         | 99.84   | 99.76        | 99.70   | 100.69       | 99.56   |
| 4   | 99.45         | 98.93   | 99.25        | 99.13   | 95.00        | 98.77   |
| 5   | 98.53         | 98.40   | 98.06        | 97.92   | 105.17       | 97.20   |
| 6   | 96.62         | 94.53   | 95.70        | 95.65   | 77.97        | 94.39   |
| 7   | 93.12         | 92.42   | 91.58        | 91.84   | 115.94       | 89.90   |
| 8   | 87.44         | 82.81   | 85.13        | 86.06   | 44.12        | 83.40   |
| 9   | 79.22         | 77.89   | 76.22        | 78.10   | 124.29       | 74.85   |
| 10  | 68.56         | 62.31   | 65.09        | 68.12   | 6.55         | 64.52   |
| 11  | 56.16         | 54.92   | 52.58        | 56.72   | 112.63       | 53.10   |
| 12  | 43.18         | 37.70   | 39.84        | 44.79   | 14.21        | 41.46   |
| 13  | 30.16         | 30.31   | 28.13        | 33.38   | 77.69        | 30.53   |
| 14  | 20.57         | 17.19   | 18.38        | 23.37   | 14.41        | 21.10   |
| 15  | 12.62         | 12.27   | 11.05        | 15.31   | 38.30        | 13.60   |
| 16  | 7.12          | 5.47    | 6.08         | 9.36    | 6.84         | 8.14    |
| 17  | 3.68          | 3.36    | 3.04         | 5.33    | 12.73        | 4.49    |
| 18  | 1.74          | 1.07    | 1.37         | 2.82    | 1.76         | 2.27    |
| 19  | 0.75          | 0.55    | 0.56         | 1.38    | 2.58         | 1.04    |
| 20  | 0.20          | 0.10    | 0.20         | 0.63    | 0.20         | 0.43    |
| 21  | 0.11          | 0.04    | 0.02         | 0.27    | 0.24         | 0.16    |

7. 結び 本研究でえた結果を要約すると、粒子法およびその修正法は移流項が他の項に比べて卓越する場合に適した計算法であり安定性も高い。これは粒子法が特性曲線上を計算してゆくことから、 $u$  に関する安定条件 (すなわち explicit 差分法では  $h u / h \leq 1$ ) が不要となり、地下密度流のように移流項が大きい場合の数値計算に適するものと考えられる。また Pinder<sup>2)</sup> の計算法を修正した修正法は各粒子の濃度増分を同一区間内で変化させているのでさらに安定性が高いことがわかった。

#### 参考文献

- 1) 上田・神野：“地下密度流における分散方程式の数値解の精度について”，九大工学集報，vol.47, N03, June, 1974
- 2) G.F. Pinder and H.H. Cooper：“A Numerical Technique for Calculating the Transient Position of the Salt-water Front”，Water Resources Research vol. 6-3, June 1970.

