II-245　三次元大気拡散問題に対する各種有限差分法の適用性

豊橋技術科学大学　正　員　北田 敏廣
豊橋技術科学大学　学生員　○住尾 博幸
豊橋技術科学大学　学生員　高村 誠人

（はじめに）

大気汚染に関連して大規模な汚染物拡散の数値計算（都市規模から地球規模まで）[1][2][3][4]が行なわれるに到った。現実の計算では，計算機の記憶容量や計算時間に制約があり，時間刻みや空間刻みに任意の大きさを選べるわけではない。したがって，許容される刻み幅などの範囲で，どのスキームが最も良い性質（計算時間，安定性，phase error）を示すかを調べるのは重要な課題である。一次元および二次元の移流方程式に対しては，Molenkamp[5]，Crowley[6]，Carmichael[7]らによって種々のスキームが比較されているが，境界条件を持つ三次元問題に対しては，その例がない。

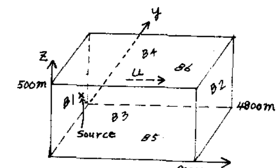

図 1

大気汚染物質は，大気中で複雑な反応を伴なうことが多く，したがって，しばしば非線形性の強い（空間多次元）拡散方程式を連立して解かねばならない。このことから，explicit な方法および Fractional steps の方法（特に L.O.D.）[8][9]が有望なものと思われる。explicit な方法（FTCS，Leapfrog，Leith，Fromm 等）は，流体の運動の数値計算にしばしば用いられているが[10]，非線形性の強い現象（たとえば光化学スモッグ反応項を含むものなど）では，許容できる時間刻みの範囲で安定した解が得られない可能性がある。一方，fractional steps では，たとえば反応項をある一つの空間変数に関する式に含めて，その式だけを implicit な方法で解くこともでき，時間刻みに関する制約をゆるめられるが，中間ステップの境界条件の設定に問題があり[8][9]，誤差を生じる可能性がある。

以上のことをふまえて，第一歩として本報では，線形なモデル問題に対し，explicitな方法および fractional steps の代表として，FTCS（Forward‐Time Centered‐Space），upwind‐FTCS，Dufort‐Frankel leapfrog，Leith，2 step Lax‐Wendroff，Fromm's zero average phase error，explicit or implicit‐LOD（Locally One Dimensional），upwind‐explicit or implicit‐LOD を適用して結果を比較した。

（テスト用モデル）　図1が計算領域である。

i) 基礎式　$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} = D_H\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right) + D_V\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + S$　(1)

ii) 境界条件　B1, B2で $\left|uc - D_H\frac{\partial c}{\partial x}\right|^{n+1} = \left|uc - D_H\frac{\partial c}{\partial x}\right|^{n}$，

B3, B4で $\left|D_H\frac{\partial c}{\partial y}\right|^{n+1} = \left|D_H\frac{\partial c}{\partial x}\right|^{n}$，B5で $D_V\frac{\partial c}{\partial z} = 0$，

B6で $\left|D_V\frac{\partial c}{\partial z}\right|^{n+1} = \left|D_V\frac{\partial c}{\partial z}\right|^{n}$

iii) その他　初期条件はいたる所で濃度0とした。排出項は次式で与え，1時間の周期を持つものとする。

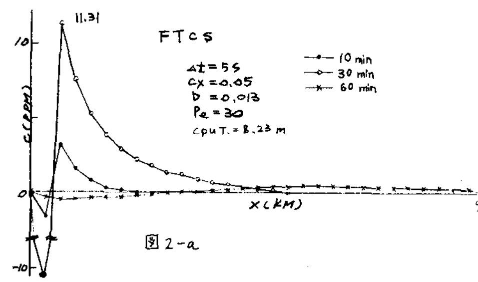

図2-a

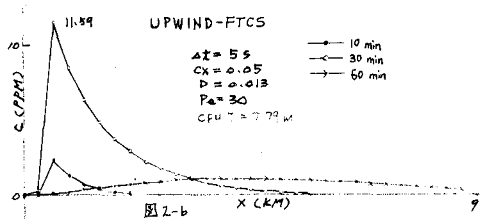

図2-b

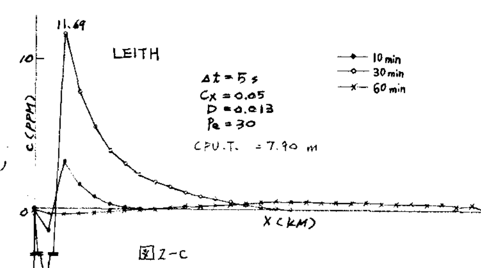

図2-c

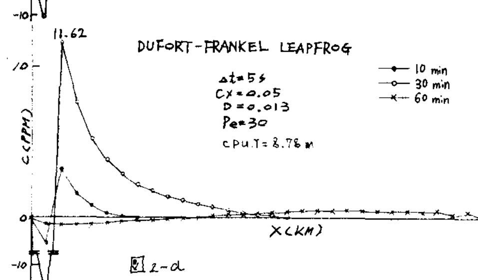

図2-d

$S = Q\{1-\sin(\frac{2\pi t}{3600}+\frac{\pi}{2})\}\delta(x-x_s)\delta(y-y_s)\delta(z-z_s)$

ここに $x_s=300m$, $y_s=2400m$, $z_s=250m$。空間キザミは $\Delta x=\Delta y=300m$, $\Delta z=50m$。拡散係数および風速は $D_H=30m^2/s$, $D_V=5m^2/s$, $u=3m/s$ である。

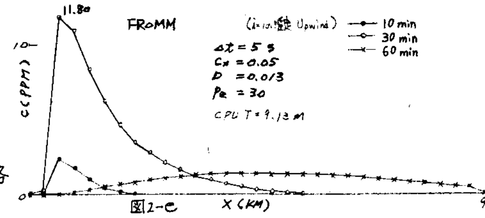

図2-e

（Explicitな方法） 図2-a～eが，Δt=5secとしたときの各種のexplicitな方法による煙軸上濃度の計算結果である。Leith, Fromm, 2-step Lax-Wendroffによる計算に際して，拡散項は中心差分によって近似した。図中C_xはx方向のCourant数($=\frac{u\Delta t}{\Delta x}$), Dは拡散数($=\frac{D_H\Delta t}{\Delta x^2}+\frac{D_H\Delta t}{\Delta y^2}+\frac{D_V\Delta t}{\Delta z^2}$), Peはx方向の局所Peclet数($=\frac{u\Delta z}{D_V}$)である。FTCSにおいてΔt=60秒の場合にはシミュレーション開始後1時間で煙軸上の全域にわたり計算値は振動する。Δtを小さくして行けばこの振動は消えるが，排出源の風上側における負の値はΔt=5秒(図2-a)であってもなくならない。移流項にだけ風上差分を用いたUpwind-FTCSを用いれば，排出源の風上側の負の値はなくなり(図2-b), Δt=60秒であっても安定した解が得られた。FTCSの安定性をみたす必要十分条件は拡散数DとPe数を制限することによって得られるが，[10]風上差分はこのPe数に関する制限を除くことに寄与すると考えられる。DuFort-Frankel LeapfrogはFTCSの場合と違ってΔt=60秒でも図2-d(Δt=5秒)と同様の安定した解が得られた。ただし，排出源の風上側での負の値は1ステップ目の計算法にupwind-FTCSを用いても解消されなかった。Leithの場合も，Δt=60秒で図2-c(Δt=5秒)と同様の結果が得られた。LeithおよびDuFort-Frankel Leapfrogの場合，排出源の風上側での負の値は，局所ペクレ数を満足させる空間刻みを選ぶことによってしか解消されないと思われる。Frommの方法では，x=0の境界から一つ内側の点を計算するのにUpwind-FTCS, FTCSのいづれを用いるかによって風上側の負の値が除かれたり(図2-e)，あらわれたりした。

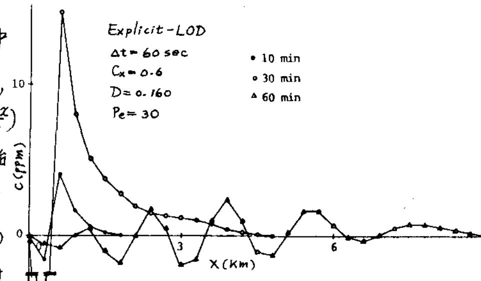

図3-a

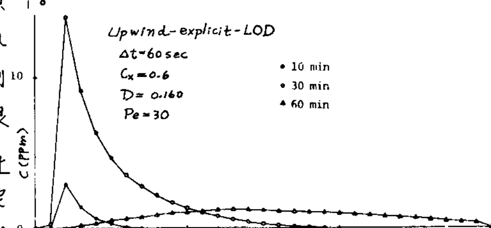

図3-b

（Fractional Steps-L.O.D.） LODは空間多次元の式をいくつかの一次元式に分解して，各々について順次解き，1ステップ先の解を得る方法である。図3a-dがいくつかのLOD法を(1)式に適用した時の結果である。図3-aはExplicit-LODの場合であるが，FTCS(Δt=60秒)の結果とよく似ている。upwind-implicit LOD(図3-d)は，時間および空間刻み幅の制限からfreeであった。LOD法は多次元の問題をimplicitに解かねばならない時，有効な方法と思われるが，LODによる結果は1ステップのexplicit法に較べて大きなピーク値(図2-3)，排出項Sの扱い方による計算値の違い等を示し，まだ調べるべき点が多い。**（おわりに）** 本報のすべてのスキームで，時間刻みに関するものより局所Pe数に関するる制限が重要であった。Upwind-implicit LODはimplicit法の良さを持つ一つの簡便な方法である。LODに対する中間ステップの境界条件設定の影響は，はっきりあらわれなかった。1ステップexplicitとLODタイプのスキームの優劣については，まだ確言できない。

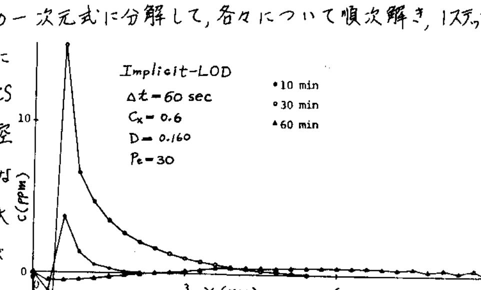

図3-c

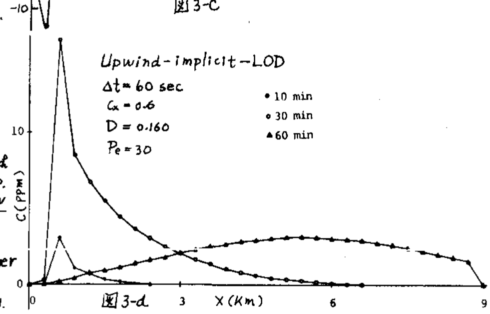

図3-d

(1) Hino (1968): Atmos. Environ. 2, 541-58
(2) Reynolds, Roth, Seinfeld (1973): Atmos. Environ. 7, 1033-61
(3) Peters, Jouvanis (1979): Atmos. Environ. 13, 1443-62
(4) Kitada, Peters (1980): Rept. to NASA on Research Grant NSG-1424, in prep.
(5) Molenkamp (1968): J. Appl. Meteorology 7, 160-167
(6) Crowley (1968): Monthly Weather Review 96, 1-11
(7) Carmichael, Kitada, Peters (1980): Computers & Fluids, in press.
(8) Yanenko (1971): The Method of Fractional Steps. Springer
(9) Mitchell (1969): Computational Methods in Partial Diff. Eqs. Wiley
(10) Roache (1976): Computational Fluids Dynamics. Revised ed.