# II-1　物質拡散における移流輸送の数値計算法

九州大学工学部　正員　○小松　利光
九州大学工学部　正員　柴田　敏彦
九州大学大学院　学生員　仲敷　憲和
九州大学工学部　学生員　大串　浩一郎

## 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。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。

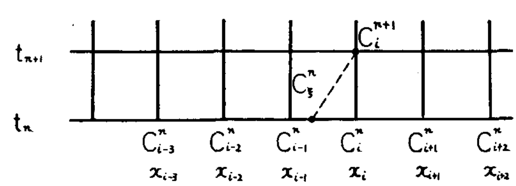
Holly-Preissmann は 2-point 4th order method を提案し、移流輸送の計算に関して従来の計算方法に較べると飛躍的に改善された結果を得た。この方法は拡散物質の濃度だけでなく、濃度の場所的な変化率も従属変数として移流拡散させるもので、1次元問題への適用は簡単であり、満足すべき結果が得られる。しかしながら、2次元問題への適用は非常に煩雑でかつ計算時間を要し、境界条件の与え方もまた大きな問題となってくる。

小松・Holly は H-P 法の欠点を補うため、濃度の場所的変化率を従属変数からはずした 8-point method を開発し、2次元問題でも計算精度を落とすことなく容易に計算できることを示した。しかし、境界において3点の値を仮定しなければならず、2次元問題では1時間 step 先の値を評価するのに 64 点もの濃度を用いることになる。

本文では 8-point method の長所を活かしながら、使用する点を減らすことを検討し、6-point method を提案する。この計算法では2次元問題において 36 点を用いることになり 8-point の場合と較べるとほぼ半減する。

## 2. 6-point method

図-1において $x_{i-1}$ 点のまわりに濃度に関して Taylor 級数に展開して $C_{i-3}$, $C_{i-2}$, $C_i$ を表わす式を求める。3次の項までとると、未知数は $CX_{i-1} (\equiv \partial C/\partial x)$, $CXX_{i-1} (\equiv \partial^2 C/\partial x^2)$, $CXXX_{i-1} (\equiv \partial^3 C/\partial x^3)$ となり、連立させて解くことにより $CX_{i-1}$ を決定することができる。同様に他の C の組み合わせからも以下のように $CX_{i-1}$ が求まる。




図－1　1次元問題の計算格子

$$\left.\begin{aligned} &CX_{i-1}^{(1)} = f_1(C_{i-3}, C_{i-2}, C_{i-1}, C_i), \quad CX_{i-1}^{(2)} = f_2(C_{i-2}, C_{i-1}, C_i, C_{i+1}) \\ &CX_{i-1}^{(3)} = f_3(C_{i-1}, C_i, C_{i+1}, C_{i+2}) \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

同様にして、$CX_i^{(1)}$, $CX_i^{(2)}$, $CX_i^{(3)}$ が得られる。最終的な $CX_{i-1}^m$ と $CX_i^m$ の推定値はこれらの荷重平均をとることにより、次のように決定する。

$$\left.\begin{aligned} CX_{i-1}^m &= \frac{1}{2\ell+1}\left\{\ell \cdot CX_{i-1}^{(1)} + \ell \cdot CX_{i-1}^{(2)} + CX_{i-1}^{(3)}\right\} \\ CX_i^m &= \frac{1}{2\ell+1}\left\{CX_i^{(1)} + \ell \cdot CX_i^{(2)} + \ell \cdot CX_i^{(3)}\right\} \end{aligned}\right\} \quad \ell\text{は荷重} \quad (2)$$

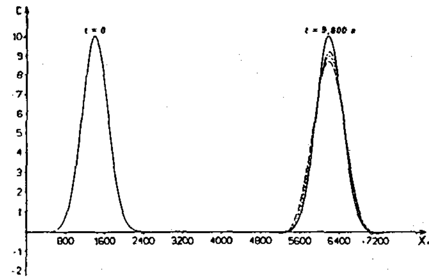
以上のように、$CX_{i-1}^{m}$，$CX_i^m$は$C_{i-3}^m$〜$C_{i+2}^m$の6点のCを用いて表示される。

同様にして、$CX_{i-\frac{1}{2}}^m$も6点のCを用いて次式のように表わされる。

$$CX_{i-\frac{1}{2}}^m=\frac{1}{n+2}\left\{CX_{i-\frac{1}{2}}^{(1)}+n\cdot CX_{i-\frac{1}{2}}^{(2)}+CX_{i-\frac{1}{2}}^{(3)}\right\} \qquad (3)$$

$C_\xi^n$を求めるための$x_{i+1}$〜$x_i$間の内插式として3次のベキ関数を採用する。

$$\left.\begin{aligned} &C_i^{n+1}=C_\xi^n=Y(\alpha)=A\alpha^3+B\alpha^2+D\alpha+E \\ &\alpha=(x_i-\xi)/(x_i-x_{i-1}) \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$



図－2　Gauss濃度分布の移流モデル計算

係数A，B，D，Eを決定する条件は

$$Y(0)=C_i^n\ ,\quad Y(1)=C_{i-1}^n \qquad (5)$$

および

$$\dot{Y}(0)=CX_i^n\ ,\quad \dot{Y}(\tfrac{1}{2})=CX_{i-\frac{1}{2}}^n\ ,\quad \dot{Y}(1)=CX_{i-1}^n \qquad (6)$$

である。　但し、(5)は確定的な条件であるが、(6)は推定された値であって確定的な条件でないことを考慮して，(6)については最小二乗法を用いる。　すなわち、

$$S\equiv\left[\left\{\dot{Y}(1)-CX_{i-1}\right\}^2+\left\{\dot{Y}(\tfrac{1}{2})-CX_{i-\frac{1}{2}}\right\}^2+\left\{\dot{Y}(0)-CX_i\right\}^2\right]$$

において、$\partial S/\partial A=0$，$\partial S/\partial B=0$　および(5)の条件より A，B，D，Eが決定される。

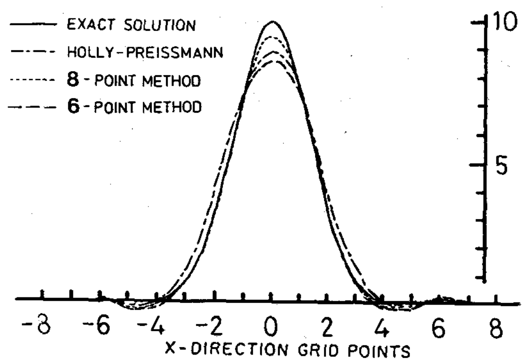
なお、(4)式についての Taylor 級数解析から$\Delta x$ と Uが const. の場合は(4)式は次のようになる。

$$\frac{\partial C}{\partial t}+U\frac{\partial C}{\partial x}=\left[-\alpha^4+2\alpha^3-\frac{2l+7}{2l+1}\alpha^2+\frac{6}{2l+1}\alpha\right]\frac{\partial^4 C}{\partial x^4}\cdot\frac{(\Delta x)^4}{24}$$
$$+\left[\qquad \chi(\alpha,l,n)\qquad\right]\frac{\partial^5 C}{\partial x^5}\cdot\frac{(\Delta x)^5}{120}+\cdots\cdots$$

右辺の[　　　]はそれぞれ4次と5次の artificial dispersion coefficient であり、極力小さい値をとることが望ましい。　4次と5次の artificial dispersion coefficientの2乗を$\alpha$の0から1まで積分した値$\int_0^1[\quad]^2 d\alpha$が最小となるように荷重$l$と$n$を決定すると$l=13.5$，$n=-1.56$が得られる。

## 3．計算結果の比較検討

図－2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 6-point method を用いて行なう。　開水路流れを考え、流速は一定で$U=0.5$m/s，Gauss分布の標準偏差は$\sigma=264$m，また$\Delta x=200$m，$\Delta t=100$sec とする。　初期の Gauss 分布は U により下流に輸送されるが、$t=9600$sec の濃度分布を計算している。比較のため、Holly-Preissmann method，8-point method の結果も図－3に示している。



図－3　Gauss分布の移流計算結果

6-point method の場合は peak の damping がやや大きく、両すそでの負値の絶対値も若干大きくなっており、計算精度は H-P 法，8-point method に較べるとやや劣化している。しかし乍ら、計算は大幅に容易になっており、2次元問題や計算繰り返し回数の比較的少ない拡散物質の数値計算において大いに有用であると思われる。