

水域における移流拡散物質の高精度数値計算について

九州大学 学生員 相良 誠 佐賀大学 正 員 大串浩一郎
九州大学 正 員 小松利光 九州大学 学生員 朝位孝二

1. はじめに 河海や湖沼において passive な汚染物質の拡散の予測を行うには、移流拡散方程式を解く必要がある。数値的にこの方程式を解く場合 split operator approach は有効な手法である。この手法は、移流と拡散を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。この手法では拡散は精度よく計算できるのに対し、移流はかなりの誤差を伴う。小松ら¹⁾が提唱した 6-point scheme は移流を精度よく計算できるが多次元問題になると使用回数が飛躍的に増大するため精度は悪くなる。本研究では 6-point scheme に修正項を加えることにより精度の改善を検討した。

2.6-point scheme の修正 一次元の移流方程式は次式で表される。

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

式(1)を6-point schemeで計算すると打ち切り誤差のため次式のような数値拡散項が現れる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2! \Delta t} + D_3 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^3}{3! \Delta t} + D_4 \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \frac{(\Delta x)^4}{4! \Delta t} + \dots \quad (2)$$

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

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

$$D_4 = -\alpha^4 + 2\alpha^3 - 2.26\alpha^2 + 1.26\alpha \quad \alpha = u \Delta t / \Delta x$$

式(2)の右辺が数値拡散項であるが、この項は無限に続くので単純にこの項を差し引くことはできない。

数値拡散項の特性を調べると、2次の項は通常の乱流拡散項や移流分散項と同様の性質を持ち、3次の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周波の振動を生ずることがわかった。そこで、無限に続く誤差項をその筆頭項である2次の数値拡散項と準筆頭項である3次の数値拡散項に代表させる。

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

ここに、

$$\gamma = \frac{A}{|A|} \quad A = -\left(\frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \cdot \frac{\partial^5 C}{\partial x^5}\right) \quad A \neq 0$$

$$\gamma = 0$$

$$A = 0$$

$$a = -0.076$$

よって修正された6-point schemeは次のようになる。

$$C_i^{n+1} = b'_1 C_{i-3}^n + b'_2 C_{i-2}^n + b'_3 C_{i-1}^n + b'_4 C_i^n + b'_5 C_{i+1}^n + b'_6 C_{i+2}^n \quad (4)$$

ここに、

$$b'_1 = b_1 + \alpha a D_3 / 12$$

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

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

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

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

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

係数 $b_1, b_2, \dots$ は文献1)を参照されたい。

修正された6-point schemeを用いてモデル計算を行う。単位幅の無限長水路において拡散物質が、一定流速0.5m/secで9600秒間下流側に移流させる場合を考える。計算条件は、 $\Delta x = 200\text{m}$ 、 $\Delta t = 100\text{sec}$ であり、初期条件は、ピーク10、標準偏差264m、ピークの中心が $x = 1400\text{m}$ の位置にあるガウス型濃度分布とピーク6.5、標準偏差264m、ピークの中心が $x = 2400\text{m}$ の位置にあるガウス型濃度分布を線形に重ね合わせた濃度分布を考える。その計算結果を図-1に示す。また比較のため6-point schemeと風上差分、Leapfrog scheme による計算も併せて図-1に示す。従来の差分スキームでは初期濃度分布を再現できないほどの計算誤差が生じているが、6-point schemeによる計算結果は厳密解とよく一致している。しかしながら、time step数が大きくなると修正項の2次の項の影響により解が不安定になってくる。解を安定にするために次のような修正を導入する。

$$\gamma D_2(\beta) \frac{n}{\partial x^2} \frac{\partial^2 C}{\partial t} \frac{(\Delta x)^2}{2! \Delta t} + \alpha D_3 \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \frac{(\Delta x)^3}{3! \Delta t} \quad (5)$$

ここに、 n : time step数

β : 1以下の定数

数値実験により β の値を $\beta = 0.994$ に決定した。

3. 純粋移流のモデル計算 修正項に式(5)を用いて前述の計算条件で、また初期条件は、ピーク10、標準偏差264m、ピークの中心が $x = 1400\text{m}$ の位置にあるガウス型濃度分布を用いて純粋移流の計算を行った。その結果は図-2の□印である。図中の○印と△印はそれぞれ修正項に式(3)を用いた改良型6-point schemeと従来の6-point schemeを用いた計算結果である。修正項に式(5)を用いたスキームはピークに大きなダンピングが見られずまた、負値の濃度も小さい。

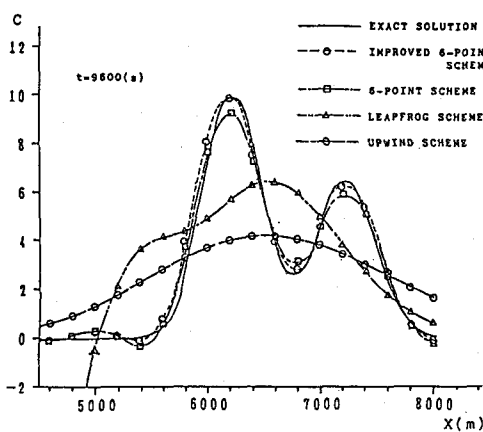


図-1 1次元移流計算結果の比較

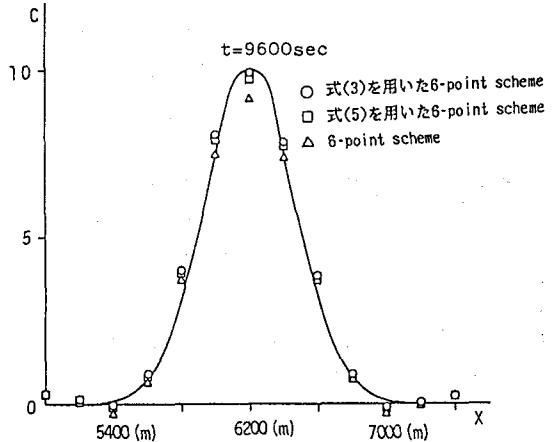


図-2 1次元移流計算結果

4. 結論 本研究では、修正項を導入することにより6-point schemeが改善されることを示した。しかしながら、濃度勾配の大きいところでは誤差が大きいこと、細かな振動が依然として現れていることなどからこの修正項にもまだ改良の余地が残っている。

5. 参考文献

- 1) Komatsu, T., Holly, F.M. Jr., Nakashiki, N. and Ohgushi, K. (1985). Journal of Hydroscience and Hydraulic Engineering, 3, No. 2, 15-30
- 2) 小松, 大串, 朝位, 仲敷: 貯水池や河口部における移流拡散の高精度計算法, 第32回水講演文集