

## 15. 風による物質輸送のシミュレーション

この章では、2次元の風速分布を元に、大気中を広がってゆく物質の輸送をシミュレーションする。また、シミュレーション結果をgnuplotを用いて画像に変換し、時々刻々の変化を動画として表示することで、シミュレーション結果を理解する。

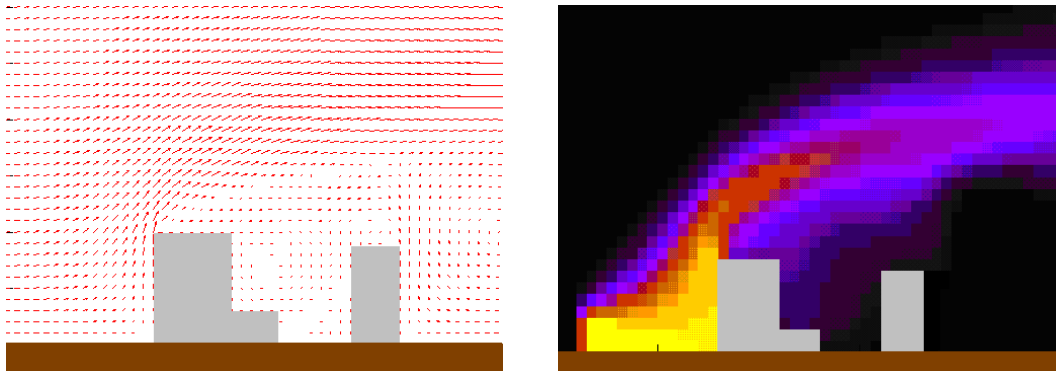


図1 建物周りの風の様子と物質の拡散の様子

### (課題1) 2次元風速分布のベクトル表示

講義のホームページに掲載されている2次元風速データ “Wind.dat” をダウンロードし、データ形式を変換して、gnuplotを使って風速の分布をベクトルで表示しなさい。なお、風速データのフォーマットと、gnuplotによる2次元ベクトルの表示法はそれぞれ以下の通りである。

<風速データ “Wind.dat” のフォーマット>

各行に「x方向流速, y方向流速」という順の2列のデータが記述されており、x方向51点×y方向31点の合計1581行のデータとなっている。行方向のデータの並びは、x方向に並んだ51点(y座標一定)のデータが連続して記述されており、それらがy座標の順に31回並んでいる(x方向のループが内側:以下の例参照)。

なお、データの空間解像度はx,y方向共に2.0m間隔である。

(例)

0.99986202	0.00025106	← 1行目: (x, y) = (0.0, 0.0)の点の流速データ
0.99449599	0.00126753	← 2行目: (x, y) = (2.0, 0.0)の流速
:	:	(3~50行の48行分)
-0.83975899	0.00048001	← 51行目 (x, y) = (100.0, 0.0)の流速
0.99986202	0.00200768	← 52行目 (x, y) = (0.0, 2.0)の流速
0.99451399	0.01011920	← 53行目 (x, y) = (0.0, 4.0)の流速
:	:	
:	:	
1.86940002	0.04397210	← 1581行目 (x, y) = (100.0, 60.0)の流速

<gnuplotによるベクトル表示の仕方>

gnuplotのplotコマンドに対するオプションで、”with vector”を指定する。この時、 $x$ 座標、 $y$ 座標、ベクトルの $x$ 方向成分、同 $y$ 方向成分の4列のデータが必要となる。各データ列の指定は、”using”オプションを使用して、「using ( $x$ 座標の記述された列):( $y$ 座標の記述された列):( $x$ 方向成分の記述された列):( $y$ 方向成分の記述された列)」の順に指定する。

(例)  $x,y$ 座標が1,2列目、ベクトルの $x,y$ 方向成分が3,4列目に記述されたデータファイル”velocity.dat”によってベクトル図を書く場合

```
gnuplot> plot "velocity.dat" using 1:2:3:4 with vector
```

(”velocity.dat”の例)

```
0.0    0.0  0.99986202  0.00025106
2.0    0.0  0.99449599  0.00126753
:      :      :          :
100.0  0.0 -0.83975899  0.00048001
0.0    2.0  0.99986202  0.00200768
0.0    2.0  0.99451399  0.01011920
:      :      :          :
:      :      :          :
100.0  60.0 1.86940002  0.04397210
```

(課題1の描画例)

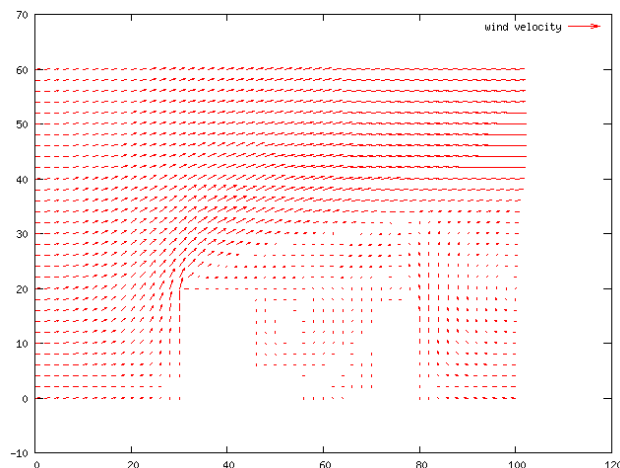


図2 風速データの2次元ベクトル表示

表示したベクトル分布より $x$ 方向に(図左から右へ)吹いている風が、建物に衝突して上方へと流れ、建物背面には渦が出来ている様子がわかる。

(物質拡散シミュレーションの説明)

大気中で風が吹いている状況では、物質（例えば煙や有毒ガス）は、風によって流されつつ（移流）、空間中に分散してゆく（拡散）。このような現象を表す方程式は、以下のような”移流拡散方程式”と呼ばれる偏微分方程式になる（ただしここでは、化学反応や密度差による浮力などを無視している。）。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} = D \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)$$

式中の各項はそれぞれ物質の濃度 $f$ が風に流される現象(左辺2、3項)や空間中に分散する現象(右辺項)を表しており、この方程式を「コンピュータを使って数値的に解く」ことが、すなわち「大気中の物質輸送の数値シミュレーションを行う」ということになる(ここで、 $t$ :時刻、 $x,y$ :空間座標、 $D$ :濃度拡散の速さを表すパラメータ)。

さて、どのようにすればこの微分方程式を数値的に解くことができるだろうか？

コンピュータは足し算や引き算のような計算は得意だが、解析的な微分などは非常に苦手である。そこで、時間や空間を“細切れ”にして、その中で微分を引き算や割り算で近似した計算を行うことにする。

それでは、実際にどのような近似を行うか？先程の“移流拡散方程式”の中の、左辺の2つの項を例にとろう。

まず第1項は時間 $t$ による偏微分  $\frac{\partial f}{\partial t}$  について、微分が「関数の勾配」であることを考えれば、この項は時間方向の濃度 $f$ の勾配という事になる。ある期間に濃度が増えた量をその期間で割ってやればその時間の平均的な勾配が得られるから、「現在」の濃度 $f_t$ と「直後の瞬間（時間 $\Delta t$ 秒後）」の濃度 $f_{t+\Delta t}$ を使って、次のように近似をする事が出来る。

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{(f_{t+\Delta t} - f_t)}{\Delta t}$$

これは、図3に示すように図式的に理解する事も出来る。

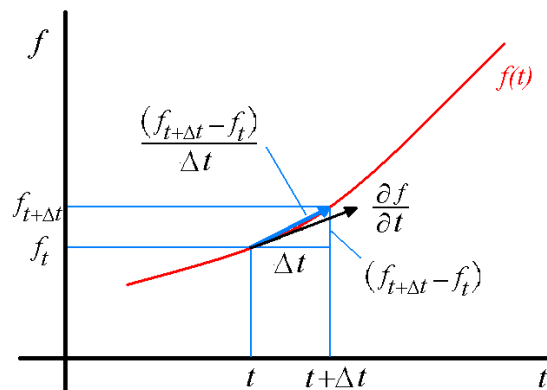


図3 微分の近似概念図

このような近似によって、方程式の左辺第1項は「現在」と「直後の瞬間（ $\Delta t$ 秒後）」の濃度の関係を表す項となる。これはつまり、時間に対し「連続関数」だった濃度 $f$ について、時間を $\Delta t$ という間隔で分割し、各時刻の濃度 $f$ の数値を元に次の時刻（ $\Delta t$ 秒後）の濃度を推定する事ができるようになった、ということの意味する。

次に“移流拡散方程式”の第2項以降を考えると、こちらは空間座標 $x, y$ による偏微分である。これらも時間と同じように「今見ている点」と「 $\pm \Delta x$ （もしくは $\pm \Delta y$ ）だけ離れたごく近くの点」の濃度の数値を使って近似する。空間の場合は、時間のように「過去」⇒「未来」の一方通行ではないので両隣の点の濃度を使って近似してやる事ができて\*、たとえば以下のような近似を用いる。（※実は流れの方向を考えて近似に使う点を選択する手法もある（そのような近似手法は“風上差分”と呼ばれる））

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{(f_{x+\Delta x} - f_{x-\Delta x})}{2\Delta x} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{\left[ \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x+\frac{1}{2}\Delta x} - \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x-\frac{1}{2}\Delta x} \right]}{\Delta x} = \frac{\left[ \frac{(f_{x+\Delta x} - f_x)}{\Delta x} - \frac{(f_x - f_{x-\Delta x})}{\Delta x} \right]}{\Delta x} \\ &= \frac{(f_{x+\Delta x} - 2f_x + f_{x-\Delta x})}{(\Delta x)^2}\end{aligned}$$

以上の近似により“移流拡散方程式”を書き換えてやれば、「ごく近くの隣り合った点」の濃度を元に、「直後の瞬間」に現れる濃度を計算する事が可能になる。

$$\begin{aligned}\frac{(f_{t+\Delta t} - f_t)}{\Delta t} + u \frac{(f_{x+\Delta x} - f_{x-\Delta x})}{2\Delta x} + v \frac{(f_{y+\Delta y} - f_{y-\Delta y})}{2\Delta y} \\ = D \left[ \frac{(f_{x+\Delta x} - 2f_x + f_{x-\Delta x})}{(\Delta x)^2} + \frac{(f_{y+\Delta y} - 2f_y + f_{y-\Delta y})}{(\Delta y)^2} \right] \\ \Rightarrow f_{t+\Delta t} = f_t + \Delta t \left[ -u \frac{(f_{x+\Delta x} - f_{x-\Delta x})}{2\Delta x} - v \frac{(f_{y+\Delta y} - f_{y-\Delta y})}{2\Delta y} \right] \\ + \Delta t D \left[ \frac{(f_{x+\Delta x} - 2f_x + f_{x-\Delta x})}{(\Delta x)^2} + \frac{(f_{y+\Delta y} - 2f_y + f_{y-\Delta y})}{(\Delta y)^2} \right]\end{aligned}$$

このような微分を引き算で近似して微分方程式を解く方法を「差分法」と呼ぶ。これまでの数多くの研究によって、より正確に方程式を解くための様々な「差分」のための近似手法が提案されており、また多くの教科書が出版されているので、興味があれば是非参照してもらいたい。

ところで、空間微分の近似では隣り合う点の値を使っていたが、隣の点が無い空間の端ではどのような処理をすればよいだろうか？空間の端、すなわち境界である条件を与えて計算を行うことになる。このとき与える条件が“境界条件”である。たとえば、隣り合った濃度の差が無い（つまり濃度の空間勾配が無い）状態を境界条件とする場合（これは濃度の拡散”が起こらない条件に相当する）には、空間の端の点の濃度とさらにその外側の濃度が同じであるように扱ってやればよい。プログラム上ではこのような条件を与えやすくするため、近似式で値を計算する点のひとつ外側に境界条件を与えるための点を定義することが多い（たとえば、空間を1方向に分割するid個の点を定義したとき、1番目とid番目の点は境界条件を与えるための点とし、実際に近似式を使って次の時刻の値を計算するのは2番目～id-1番目の点とする）。

ここまでで説明した考え方に基づいて、移流拡散方程式を数値的に解くためのプログラムを考えると、プログラム中のおおまかな処理の流れは次のようになる。

1. 解析において空間、時間を分割する間隔等、計算のための条件を設定する（先の近似式中の  $\Delta t$  ,  $\Delta x$  ,  $D$  や分割点数などの値を設定）
2. 最初の瞬間の濃度と流速のデータを与える（濃度の設定と流速データの読み込み）（ここではプログラム中のデータの取り扱いに2次元配列を使う。x方向にi番目、y方向にj番目の点のデータを2次元配列の(i, j)に記録する）
3. 空間を分割した各点において先に述べた移流拡散方程式の近似式を用い、与えられた流速と現在の濃度から次の瞬間の各点での濃度を計算する
4. 境界条件を満足するように、境界で次の瞬間の濃度を与える（たとえばi=2の値を元に、i=1の値を決め、i=id-1の値を元にi=idの値を決める）
5. 次の瞬間が現在となり、さらに次の瞬間の計算をするため3.に戻る（次の瞬間の値の配列を、現在の値を保存するための配列に移す）
6. 3.～5.の繰り返しの中で、適当な時間おきに計算で得られた濃度を出力する
7. 決められた時間分の計算を終えたら、終了

## (課題2)

講義のホームページから課題用プログラム”sokuryo15.f”をダウンロードし、コメント中の課題で指示された処理を追加して、大気中の物質の広がりシミュレートするプログラムを完成させなさい。講義のホームページから移流拡散方程式を数値的に解析するためのプログラム”sokuryo15\_solve.f”をダウンロードし、コンパイルして実行しなさい。なお、ダウンロードしたプログラムでは、「次の時刻の濃度計算」を2000回計算し、100回毎に計算結果をファイルに出力するように設定されている。また、次の時刻までの間隔dtは0.1[s]としてある。したがって、全部で200秒分の計算を行い、10秒おきのシミュレーション結果を出力することになる。なお、出力ファイルは、時刻ループの回数を名前に含んだ”dens0100.dat”、“dens0200.dat”・・・”dens2000.dat”の20個のファイルとなる。



**(課題3)**

課題2のプログラムを実行することで得られた結果ファイル”dens(ループ回数).dat”から、gnuplotを使って濃度の空間分布を時間を追って表示せよ。なお、順次グラフの描画をすることで、時間変化を動画のように表示する方法を以下に説明する。

<gnuplotで時間変化を動画で表示する方法>

gnuplotでは、ひとまとまりのコマンドをテキストファイルに記入しておき、それをloadすることで、一気に処理を行うことが可能である。ここでは、その”load”を利用する。Geditなどのエディタを起動し、以下のようなテキストファイル”plot.txt”を作成する。

(“plot.txt”の中身)

```

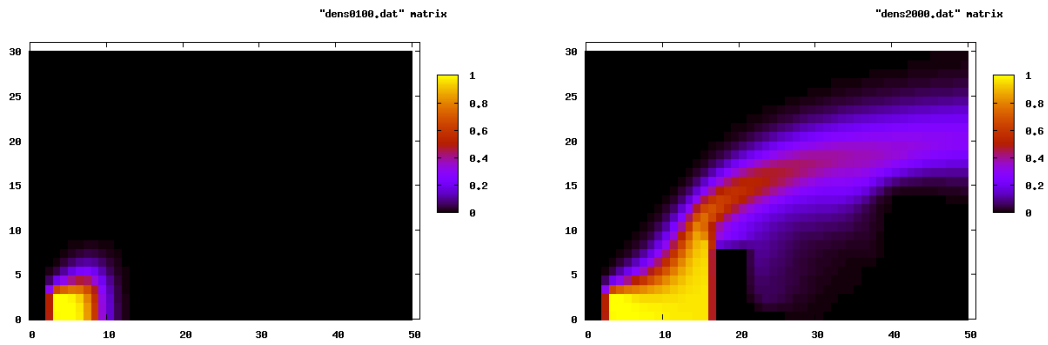
reset | 設定の初期化
set xrange [0:51] |
set yrange [0:31] |
set zrange [0:1] | 濃度は[0,1]の値をとるので、zの範囲を[0:1]に。
set pm3d map |
splot “dens0100.dat” matrix | 100回の時間ループで得られた解析結果を表示
pause 0.2 | 0.2秒待つ
splot “dens0200.dat” matrix | 200回の時間ループで得られた解析結果を表示
pause 0.2 | 0.2秒待つ
splot “dens0300.dat” matrix | 300回の時間ループで得られた解析結果を表示
pause 0.2 | 0.2秒待つ
:
:
:
splot “dens2000.dat” matrix | 2000回の時間ループで得られた解析結果を表示
(“plot.txt”の中身・ここまで)

```

続いて、gnuplot を起動し、コマンドラインから” plot.txt” を” load” する。

(実行例)

```
gnuplot> load "plot.txt"
```



(課題4) 課題2のプログラム内で、拡散物質の源の場所 isrc, jsrc を変更して計算を再実行し、課題3と同じように動画を表示しなさい。