

移流分散現象の数値シミュレーションにおける 排出条件と境界条件について

中 辻 啓 二*・和 手 信 泰**・安 永 通 晴***

1. はじめに

沿岸海域での移流分散過程の数値シミュレーションは支配方程式が線型であり、しかも未知物理量は濃度のみであることから、差分近似法を用いた数多くの計算が行われてきた。加えて、近年では定式化の明快さ、境界形状の表現の簡便さから有限要素法の適用も種々試みられているようである¹⁾。しかし実際に現象をシミュレートしようとする際に問題となるのは、汚濁物質の放出点のような特異点の処理であり、また排出条件をいかなる形で与えるかという点である。内湾域での水質汚染、あるいは恒流成分の挙動との関連で拡散現象を議論する場合においては、これらの問題点に対する厳密さの欠如は拡散係数の空間的な評価によって充分補い得たものと思われる。しかしながら、海岸工学的見地にたつて沿岸海域での水質汚濁を議論する際、たとえば、埋立造成にともなう流況変動の水質分散過程に与える影響、あるいは場染源の位置・構造等による影響範囲の変化を予測する汚合には、地形形状や排出条件に対する正確な表現が要求される。

有限要素法はこのような点で差分近似法よりも優れているとされているが、それらは積分方程式に変換する定式化の過程において形式的に配慮されるのが通例であり、有限要素法のもつ基本的な性質および境界条件、排出条件等の数値解に与える影響等定量的な評価について論じられた例は少ないようである。そこで、本論においては従来形式的に扱われていた負荷条件に検討を加え、有限要素法の特性を生かした排出要素による統一的な負荷の与え方を提案し、その適用例を示した。

2. 基礎方程式と負荷条件

一般に、有限水域 Ω における汚濁物質収支は次式で示される水深方向に積分された二次元移流拡散方程式で与えられる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y}$$

$$- \frac{1}{h} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(h \cdot K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(h \cdot K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right\} + k_n C^n - Q = 0 \dots\dots\dots (1)$$

ここに、 U, V, C はそれぞれ水深方向に平均化した流速の x, y 成分と濃度、 h は平均水位である。また、 K_x, K_y は x 方向、 y 方向の分散係数、 k_n は n 次反応速度定数および Q は系に負荷される単位時間当りの物質排出量である。

境界条件は、境界で濃度一定とする Dirichlet 的固定境界 Γ_D と境界を横切る物質量フラックスを一定とする Neumann 的自然境界 Γ_N とからなり、さらに一般的にはその混合形が考えられる。

また、排出量の負荷を与える方法としては前述の境界条件に加えて要素内で排出量を与える方法が考えられ、いま境界での外向き法線方向余弦を x_i 軸に対して l_i とすれば、負荷条件はそれぞれ次式のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} \text{(I)} \quad C &= C_B(x_i, t), & x, y &\in \Gamma_D \\ \text{(II)} \quad q &= K_x \frac{\partial C}{\partial x} l_x + K_y \frac{\partial C}{\partial y} l_y, & x, y &\in \Gamma_N \\ \text{(III)} \quad Q &= Q_{\text{given}}, & x, y &\in \Omega_E \text{ or } \Gamma_E \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (2)$$

以下の項では負荷条件の数値解に与える影響を基礎的に議論するために、数学的に簡単化して定常問題として取り扱う。また、水深および拡散係数を一定とすることにより基礎方程式は微分演算子 L で表わされることになる。

$$L[C] = U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} - K \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - Q = 0 \dots\dots\dots (3)$$

3. 定式化の方法

(1) 基礎方程式の積分変換と有限要素近似

有限要素を用いた空間的離散化手法として、重み付き残差法の一種である Galerkin 法の適用を行なう。この解法は、まず対象とする領域 Ω を m 個の節点から構成される要素群に分割し、各要素 E で近似した解の誤差に重み関数を掛けて対象領域全域における重み付き残差が平均的に零となるような近似解を求める方法である。

* 正会員 工修 大阪大学講師 工学部土木工学科
** 正会員 工修 日本情報サービス(株) 科学計算部
*** 日本情報サービス(株) 科学計算部

Galerkin 法ではこの重み関数として要素内の内挿補間関数 $G_i(x, y)$ を用いることに特色があり、各要素毎に未知節点値の数に対応する m 個の連立方程式を得る。すなわち、

$$\begin{aligned} & \iint_E G_j(x, y) \cdot L[C] dx dy \\ &= \iint_E G_j(x, y) \left\{ U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} \right. \\ & \quad \left. - K \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - Q \right\} dx dy \\ &= 0, \quad j=1, 2, \dots, m \dots\dots\dots (4) \end{aligned}$$

ここに、 C は各節点において定義される内挿補間関数 $G_i(x, y)$ と未知節点濃度 $\tilde{C}_i$ より次式のように表わされる近似解である。

$$C(x, y) = \sum_{i=1}^m \tilde{C}_i \cdot G_i(x, y) \dots\dots\dots (5)$$

$G_i(x, y)$ は要素 E の形状および座標位置により異なった値となり、式 (4) の積分演算に際しては新しい座標系 $(\xi-\eta)$ に座標変換して行なう必要がある。すなわち、図-1 に示すように $(x-y)$ 座標系の任意の四角形

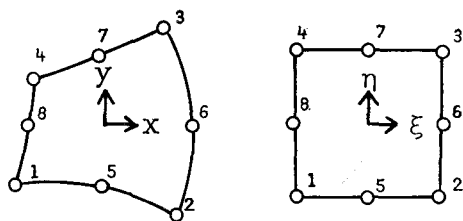


図-1 アイソパラメトリック要素

を $(\xi-\eta)$ 座標系上の正方形に写像することにより積分演算は極めて容易になる。座標変換は区分的多項式を用いることにより、次のように表現される。

$$\left. \begin{aligned} x(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^m S_i(\xi, \eta) \cdot x_i \\ y(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^m S_i(\xi, \eta) \cdot y_i \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6)$$

上記の内挿補間関数 $G_i(x, y)$ と座標変換のための補間関数 $S_i(x, y)$ とを同じ多項式に選ぶとき、その要素はアイソパラメトリック要素と称される。本論文で導入した要素は $m=8$ である 8 節点二次要素であり、その形状関数 $S_i(\xi, \eta)$ は次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} \text{隅 節 点: } S_i &= (1+\xi_0)(1+\eta_0)(\xi_0+\eta_0+1)/4 \\ \text{辺上節点: } S_i &= \begin{cases} (1-\xi^2)(1+\eta_0)/2 & \text{for } \eta=\pm 1 \\ (1+\xi_0)(1-\eta^2)/2 & \text{for } \xi=\pm 1 \end{cases} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7)$$

ここに、 $\xi_0=\xi_i \cdot \xi$ 、 $\eta_0=\eta_i \cdot \eta$ であり、 ξ_i 、 η_i は節点 i での ξ 、 η の値である。 S_i は節点 i でのみその値が 1 であり、他の節点では 0 となる ξ 、 η に関して高々 2 次の多項式である。その概形を辺上 2-5-1 で示せば、図-1

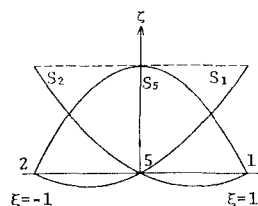


図-2 補間関数 $S_i(\xi, \eta)$

2 のようになる。

その結果、要素毎の積分・微分は Jacobi の行列式 $J = x_{\xi} \cdot y_{\eta} - x_{\eta} \cdot y_{\xi}$ を用いて、次のように変換される。

$$\left. \begin{aligned} \iint_E G_i(x, y) dx dy &= \iint S_i(\xi, \eta) \cdot |J| \cdot d\xi d\eta \\ \frac{\partial}{\partial x} &= |J|^{-1} \cdot \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} &= |J|^{-1} \cdot \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (8)$$

(2) 境界条件 I, II について

式 (4) に物質フラックスに関する境界条件 II を導入するために、拡散項に関し Green の定理を用いて次式のように変形する。

$$\begin{aligned} & \iint_E G_j \cdot K \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) dx dy \\ &= K \iint_E \left(\frac{\partial G_j}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial G_j}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial y} \right) dx dy \\ & \quad - \oint_S G_j \cdot K \left(\frac{\partial C}{\partial x} l_x + \frac{\partial C}{\partial y} l_y \right) ds \dots\dots\dots (9) \end{aligned}$$

上式右边第 2 項は要素 E の閉曲線 S に沿う線積分であるから有限要素展開する場合には境界上の要素だけに効いてくる項であって、この被積分関数を境界条件 II で与えられる $q=K(\partial C/\partial x \cdot l_x + \partial C/\partial y \cdot l_y)$ と置き換えることにより直接表現することができる。これは、差分法には見られない特徴であり、アイソパラメトリック要素と組み合わせることにより効果的な陸岸形状の表現が可能となる。

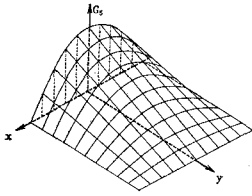
他方、固定濃度に関する条件 I は、定式化の結果得られる行列方程式において未知数ベクトルの該当成分に既知濃度を代入することにより簡単に配慮できる。

(3) 排出条件 III について

従来より排出条件についても固定濃度の場合と同様に排出量を各節点における Q_i で与える方法が用いられてきた。したがって、式 (4) の排出項の積分は次のように与えられ計算される。

$$\iint G_j \cdot Q dx dy = \sum_{i=1}^8 \left[\iint G_j \cdot G_i dx dy \right] Q_i \dots\dots\dots (10)$$

しかしながら、上式によれば、たとえば図-2 における節点 5 に排出量 Q_5 を負荷するということは、補間関数



図—3 内挿補間関数 $G_s(x, y)$

$G_s(x, y)$ により要素内の $\xi-\eta$ 平面に排出量を図—3 のように分布させることになる. それゆえ式 (10) の積分値で表わされる排出量は節点での排出量に増して過剰に評価されることになり, 要素の大きさにも関係するという奇妙な結果になる.

このような点源排出の表現として, $Q = \sum_{i=1}^m Q_i \delta_i$ のように節点 i でのみ値が 1 となるデルタ関数を用いた表示²⁾も提案されているが, その方法によれば濃度勾配が急峻になり高波数の雑音が介在して解が不安定になる可能性があるので適当な方法であるとはいえない.

そこで, 著者らは排出量 Q を要素内に均等に分布させ, その要素の形状で排出源を表現する「排出要素」を提案する. すなわち, 排出要素の面積を A_E とするならば, 式 (10) は次式のようになり, 境界条件はいかなる形状, あるいは大きさの排出要素をどの位置に配置するかという問題として, 境界条件 I, II を含めて統一的に扱うことができる.

$$\iint_E G_j Q dx dy = \bar{Q} \iint_E G_j dx dy$$

ここに, $\bar{Q} = Q / \iint_E dx dy = Q / A_E \dots\dots (11)$

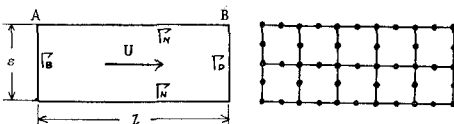
4. 数値計算例による検証

上述の排出要素の考え方を数値計算例に適用して, 境界条件で与えた場合との等価性, 特異点の扱い方等について考察する.

(1) 線源による負荷

排出要素の妥当性を検証するために, 境界において物質フラックスを与えた場合と, 線状の排出要素を境界に配置した場合の数値解を求め比較検討した. 数値計算は簡単化して図—4 に示す流速 $U=0.1$ m/sec で一様に流れる一次元水路 ($S=40$ m $\times$ $l=100$ m) を想定し, 10 要素で要素分割した. Γ_D での境界条件による負荷の表現は次の 2 種を考える.

$$\begin{cases} \text{BC-I に対して} & C=2.5 \text{ g/m}^3 \\ \text{BC-II に対して} & q=0.025 \text{ g/m}\cdot\text{sec} \end{cases}$$



図—4 計算条件と要素分割

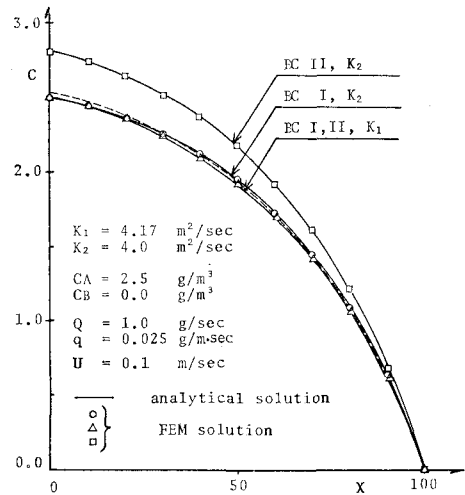
また, 排出負荷のない境界 Γ_D, Γ_N に対してはそれぞれ $C=0, q=0$ を与えた. BC-II を与える場合, 物質濃度 C の分布形は流速 U と拡散係数 K の関数により決定されるので, 解析解との比較の面から次の 2 種を用いた.

(i) $K_1 = 10 / \ln 11 \doteq 4.17 \text{ m}^2/\text{sec}$

(ii) $K_2 = 4.0 \text{ m}^2/\text{sec}$

ここに, K_1 は境界条件として BC-I, II を与えた場合のそれぞれの分布形状が一致するように解析解から逆算した値である.

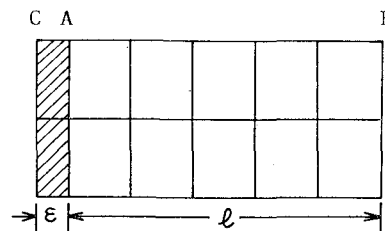
以上の条件下で計算した有限要素解と対応する解析解を示したのが, 図—5 である. この計算例では Péclet 数



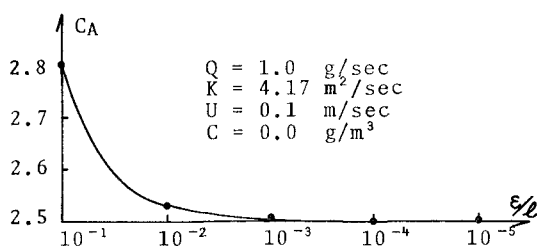
図—5 有限要素解と解析解との比較

$Pe = U \cdot \Delta x / K$ は約 0.5 程度であり, 数値計算上の安定条件内に入っており有限要素解は滑らかに分布している. また, 解析解との一致は極めて良い. 特に, $K_1=4.17 \text{ m}^2/\text{sec}$ のように境界条件として BC-I に等価に選んだ場合には, その分布形は同一になる.

また, 同図の破線は, この水路に対し図—6 の斜線部で示すような排出要素を排出源として配置し, 拡散係数 $K_1, \epsilon=0.01 \cdot l$ として計算した結果であり, BC-I, BC-II の境界条件で排出量を負荷した場合の計算値とよく一致している. 図中に現われている誤差は排出要素幅 ϵ を 0 に近づけることにより十分小さくすることができる. そ



図—6 排 出 要 素

図-7 排出要素幅の相対比 ε/l と収束性

の収束性を境界 Γ_B における濃度 C_A を用いて示したのが図-7 であり、 $\varepsilon/l < 10^{-3}$ の範囲に ε を選べばその誤差は無視できる程小さくなる。

従来、境界条件による負荷と排出項による負荷については定量的な確認のないままに主に前者を用いた排出量の負荷が計算過程において配慮されてきたが、上述の論議によりそれが本来全く等価なものであることが数値的に明確になった。

(2) 点源による負荷

前例においては排出源が境界上に分布しているの、境界条件として与えることができた。しかし一般には点

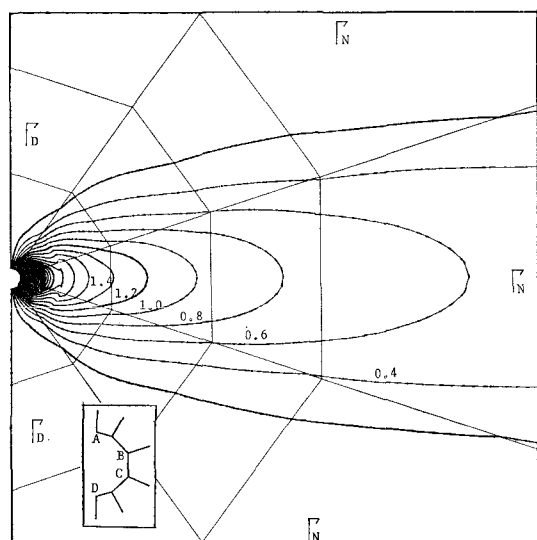


図-8 拡散解析例 (境界条件負荷の場合)

源、あるいは面源として排出項で濃度分布形状を表現することが多く、しかも通常はデルタ関数のような不連続関数で表わされる。本項では一様流中に置かれた点源の問題を、まず領域を上流側と下流側とに分割することにより境界条件で与えてみた。図-8 は要素分割ならびに計算の結果得られた等濃度線図である。境界条件は前例と同様に境界 Γ_N , Γ_D で $q=0$, $C=0$ をそれぞれ与え、また排出点近傍については同図中

に示した拡大図における辺 $\overline{AB}$, $\overline{BC}$, $\overline{CD}$ に対し次のように与えた。

$$\begin{cases} q=8.09 \text{ g/m} \cdot \text{sec} & \text{on } \overline{BC} \\ C=0.0 & \text{on } \overline{AB} \text{ and } \overline{CD} \end{cases}$$

計算に用いた流速、拡散係数はそれぞれ 0.2 m/sec, 0.5 m²/sec であり、点源近傍を比較的細かく分割することにより妥当な定常解を得ている。

次に、排出要素を用いて上・下流側を合せた解析を行なってみた。この種の計算は解析的にはデルタ関数に対するグリーン関数を見出さねばならない点で、また差分法においては数値的不安定を引き起こすという点で、一般的にいて数値解を求めることは困難とされていた。しかし、次に示すように排出要素を用いることにより一般的な取扱いを可能にし、また数値的にも安定な解を得ることができる。

図-9 は要素分割図であり、黒く塗り潰した部分が排

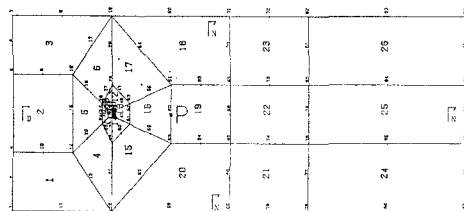


図-9 要素分割図 (排出要素による負荷の場合)

出要素である。境界条件は Γ_N , Γ_D の2種だけであり、境界における節点の配置もはるかに単純となっている。流速、拡散係数はともに前例と同じ値とし、排出量は等価な $Q=10 \text{ g/sec}$ に与えて計算した。計算結果を示したのが図-10 であり、得られた等濃度線は十分に滑らかであり排出要素の妥当性がみとれる。

最後に、排出量が点源負荷される場合の非定常な拡散解析を排出要素を用いて行なった。計算条件は図-10 の定常解析と同一である。図-11 は時間経過毎の等濃度線図を示しており、点源から排出物質濃度が流速 U で移動しながら次第に拡散範囲を拡げている様相がうまく表われている。時間離散化間隔 Δt は 50 秒であり、25 計算ステップ後の濃度分布は図-10 の定常解と同一の

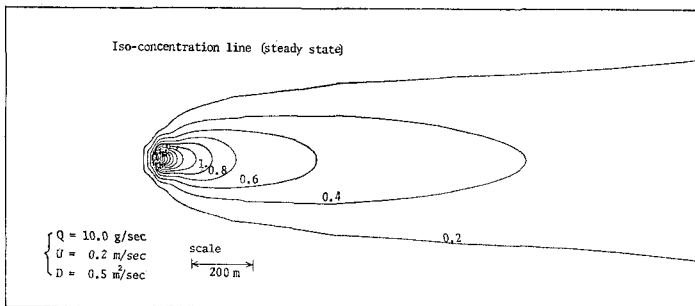


図-10 排出要素負荷による定常拡散解析例

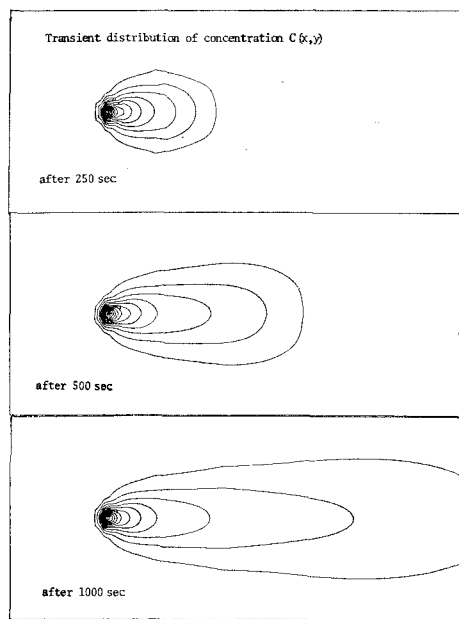
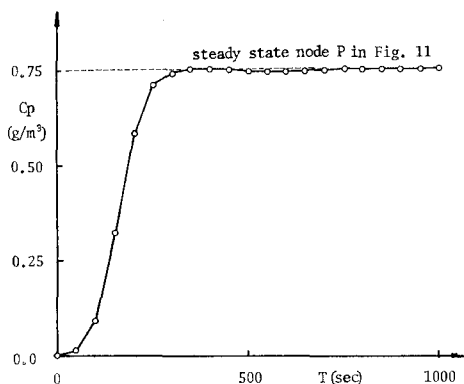


図-11 非定常拡散解析例

図-12 濃度 C_P の経時変化

パターンを描いている。

この定常状態への経緯を調べたのが図-12である。図-9の点 P における濃度の時間変化を示したものであり、排出源から 30m 下流側の点 P では約 350 秒後には定常状態に達しているようである。非定常解析の漸近値が図中の破線で示した定常解析の値をやや上まわる傾向にあるが、これは Δt が比較的大きいためである。

5. あとがき

移流分散現象のシミュレーション解析の結果、一般にデルタ関数のような不連続関数で表現される排出条件は有限要素法解析での排出要素を用いることにより統一的に無理なくモデル化できることを示した。また、境界に置かれた線源としての排出要素は境界条件としての物質質量フラックスと基本的に等価であり、さらに点源、線源を問わず排出要素を用いた場合には境界条件で負荷を与えるより数値的安定性がよいことがわかった。

適用例は全て単純な形状を用いたが、有限要素法においては座標変換により任意形状の解析も可能であり何ら一般性を失うものではない。近年、潮流・拡散解析に有限要素法が種々試みられる傾向にあるが、本文で述べたような有限要素の特徴を生かした適用が望ましいと考える。

最後に、本研究を進めるにあたり大阪大学工学部榎木亨教授から有益な御助言と御鞭撻を賜わった。ここに記して深甚の謝意を表する次第である。

参考文献

- 1) たとえば, Muraoka, K. and K. Nakatsuji: Water quality routing of unsteady river flow by finite element method, Technol. Repts. of Osaka Univ., Vol. 24, No. 1225, pp. 827-845, 1974.
- 2) Connor, J. J. and C. A. Brebbia: Finite element techniques for fluid flow, Butterworths & Co. Ltd., pp. 258-280, 1976.