

# 有限要素法による化学反応を伴う汚染拡散解析

中 澤 晶 平\*・川 原 睦 人\*

## 1. 緒 言

本論文では、港湾および海洋への、沿岸の工場や河川などより流入する汚染物質の拡散過程の数値解析について、ガレルキン法にもとづく有限要素法の適用を考えてゆく。

ある海域を対象として拡散現象を考えてゆくために、その海域の水理的な特性をかなり正確に把握することが必要になる。既に、有限要素法によれば、港湾内の潮流流などを実用上十分な精度で数値的に求められることがよく知られている<sup>1)</sup>。

環境負荷として海域に流入する汚染物質が拡散してゆく過程は、適当な時・空間スケールを選択すれば、混合拡散問題として取り扱われるが、そのパラメータの決定は容易ではない。また、汚染物質の化学的な性質は多くの成分から成っており常に変動してゆく。実測によれば環境負荷量が減少しても対象海域の中では必ずしも汚染物質の濃度の減少は一意ではなく、系の挙動は明らかに化学反応に起因する非線形性を有していると推定できよう。また、海洋に投棄される重金属塩を含む廃棄物はあらかじめ海水に含まれている種々のイオンとの間で反応を生じ、その挙動を記述する方程式が非線形となることは明らかである。

非線形な化学反応項を含む拡散方程式の有限要素近似の多成分系への拡張に関しては既に若干の数値実験の結果、十分実用的であることが示されている<sup>2)</sup>。海洋汚染の問題に対しても、解析の対象となっている成分の濃度が十分希薄であることに着目すれば、系を支配する物理定数が決定されるならば、同様の取扱いが可能となること、数値解析が十分効率よく進められることを示すのは容易である。

ここで、解くべき方程式は移流項を潮流流を用いて評価する非自己随伴連立半線形発展系と考えられる。このような方程式は、潮流流の流速が大きくなり、拡散項に比べて移流項の寄与が著しくなると、空間に対しての楕円型の性質に比べ双曲型の性質が卓越するため、有限要

素近似の安定性が失われてゆく。離散近似の安定性を維持してゆくために、差分法における上流差分商に類する概念を用いた方法が既に提案されている<sup>3)</sup>。本論文では、一般的な1次の内挿関数を用いる有限要素法を用いて解析を進めてゆき、その適用限界を明らかにすることを試みる。

多くの場合に、拡散問題は非定常問題としての取扱いが必要となる。ここでは、時間方向への近似には差分法を用いて計算を進めてゆくものとし、特に集中質量行列を用いた陽的なスキームについて安定性と精度を調べておく。既に、一様な流れの中での拡散問題に対しては、オイラーの前進差分に基礎をおく方法や予測子・修正子法の予測子のみを用いる方法が検討されよい結果が得られている。本論文ではこれらの方法を潮流流を含む系に拡張してゆく。

## 2. 基礎方程式

解析の対象として海域  $\Omega$  を考える。 $\Omega$  の全境界を  $\partial\Omega$  とおく。領域  $\Omega$  における水深の分布が関数  $H(x, y; t)$  で与えられるものとしておく。潮位  $\eta(x, y; t)$  は水深に比べて十分小さいと考えよう。

また、着目する汚染物質の濃度が十分に小さいとき、混合拡散係数  $E_x, E_y$  及び化学反応速度式のパラメータは濃度によらず一定とおくことができる。更に、濃度が十分に小さく化学反応や拡散による海水の密度や反応熱

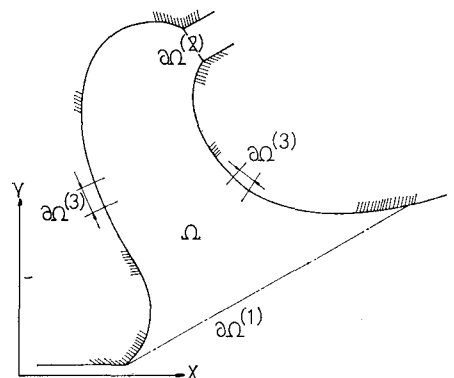


Fig. 1 Model Definition

\* 正会員 中央大学理工学部土木工学科

による系内の温度変化を無視してもよい。このとき、 $N$ 成分からなる汚染物質の海域  $\Omega$  内での拡散過程は、第  $K$  番目の成分の濃度を  $C^K$  などと書けば

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(C^K H)}{\partial t} + U_x \frac{\partial(C^K H)}{\partial x} + U_y \frac{\partial(C^K H)}{\partial y} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left( E_x \frac{\partial(C^K H)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( E_y \frac{\partial(C^K H)}{\partial y} \right) \\ &+ R^K(C^1, C^2, \dots, C^N) \dots\dots\dots (1) \end{aligned}$$

なる半線形連立発展系により表わすことができる。以下簡単のため、未知の濃度ベクトル  $C$  を

$$C = [(C^1 H), (C^2 H), \dots, (C^N H)]^T \dots\dots\dots (2)$$

とおき第 (1) 式を次のように書き換えておく。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -AC + BC + RC \dots\dots\dots (3)$$

ここで、 $x=x_1$ ,  $y=y_1$  とおくと、 $A$ ,  $B$  はそれぞれ

$$\begin{aligned} A &= \sum_{j=1}^2 u_j \frac{\partial}{\partial x_j}; & B &= \sum_{j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left( E_{x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \\ &\dots\dots\dots (4) \end{aligned}$$

なる線形微分作用素を示すものとしておく。

次に境界条件について考える。図-1 に示すような海域  $\Omega$  の全境界  $\partial\Omega$  が

$$\partial\Omega = \bigcup_{i=1}^4 \partial\Omega^{(i)}; \quad \partial\Omega^{(i)} \cap \partial\Omega^{(j)} = \phi \dots\dots\dots (5)$$

によって分類されるものと考えよう。ここで、 $\partial\Omega^{(1)}$  は他の海域との間に仮想的に定めた境界を示し、 $\partial\Omega^{(2)}$  は海域  $\Omega$  への河川の流入を示す。河口では予め与えられた流速が与えられると同時に、環境負荷量が濃度ベクトル  $C$  の既知関数で与えられるものとする。また、 $\partial\Omega^{(3)}$  上では、環境負荷量が物質流束  $q$  の関数で与えられるものとする。境界  $\partial\Omega$  に立てた単位法線ベクトルの足をそれぞれ  $n_x$ ,  $n_y$  とおけば

$$\begin{aligned} q &= E_x \frac{\partial(C^N H)}{\partial x} n_x + E_y \frac{\partial(C^N H)}{\partial y} n_y = \hat{q}(x, y; t) \\ &\dots\dots\dots (6) \end{aligned}$$

ここで、上付きの記号  $\hat{\phantom{x}}$  は既知関数を示すものとしておく。

その他の境界  $\partial\Omega^{(4)}$  上では一切の物質収支が起らないものとしておく。

次に、それぞれの境界条件の近似についてあらかじめ考えておく。海域  $\Omega$  の適当な有限要素モデル  $\tilde{\Omega}$  を

$$\Omega \doteq \tilde{\Omega} = \bigcup_{e=1}^M \Omega_e; \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \phi \quad (e \neq f) \dots\dots\dots (7)$$

とおく。ここで  $\Omega_e$  は任意の鋭角三角形要素である。一般に、境界  $\partial\Omega^{(3)}$  上で与えられる境界条件は、沿岸に立地する工場などより排出される廃棄物の寄与を示しておりその規模は海域の規模に比べると著しく小さいので、点源としての取り扱いの方が計算精度上有利である。 $\partial\Omega^{(3)}$  が  $\partial\Omega$  に比べて十分小さく、その区間が長さ  $d$  の直線で近似でき、また有限要素モデルのメッシュの代表

長さ  $h$  に対しても、 $\partial\Omega$  に対すると同様に

$$d \ll h \dots\dots\dots (8)$$

とおけるならば、 $\partial\Omega^{(3)}$  における平均水深  $H_{av}$  とともに、

$$C^K = \frac{\hat{q}d}{H_{av}} \dots\dots\dots (9)$$

とおいて近似的に節点値と考えられるので、数値的な取り扱いを簡単にすることができる。

自由境界  $\partial\Omega^{(1)}$  の取扱いは容易ではない。一般に、 $\partial\Omega^{(1)}$  の外側の海洋で汚染物質の濃度を予め与えることは物理的によい近似ではない。次節で第 (3) 式に対する有限要素法を導き、ここで再び  $\partial\Omega^{(1)}$  に対する境界条件の近似について検討する。

### 3. 有限要素法

第 (3) 式に対するガレルキン形式を導く。濃度ベクトル  $C$  に対する重み関数を

$$C^* = [C^{1*} H, C^{2*} H, \dots, C^{N*} H]^T \dots\dots\dots (10)$$

とおく。ただし

$$C^* = 0 \quad \text{on } \partial\Omega^{(2)} \cap \partial\Omega^{(3)} \dots\dots\dots (11)$$

ここで、 $\Omega$  上で定義される関数空間  $H$  で内積及びノルムをそれぞれ

$$\langle u, v \rangle = \iint_{\Omega} uv dx dy \dots\dots\dots (12)$$

$$\|u\| = \left( \iint_{\Omega} u^2 dx dy \right)^{1/2} \dots\dots\dots (13)$$

とおけば、第 (3) 式に対するガレルキン形式は

$$\begin{aligned} \left\langle C^*, \frac{dC}{dt} \right\rangle &= -\langle C^*, AC \rangle + \langle C^*, BC \rangle \\ &+ \langle C^*, RC \rangle \dots\dots\dots (14) \end{aligned}$$

右辺第 1 項及び第 2 項に部分積分をほどこすとき

$$\begin{aligned} \left\langle C^*, \frac{dC}{dt} \right\rangle &- \langle C, AC^* \rangle + b \langle C^*, C \rangle + \langle C^*, RC \rangle \\ &= \Pi(C^*) \dots\dots\dots (15) \end{aligned}$$

ここで

$$b \langle C^*, C \rangle = \iint_{\Omega} \sum_{j=1}^2 \left( E_{x_j} \frac{\partial C^*}{\partial x_j} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) dx dy$$

$$\begin{aligned} \Pi(C^*) &= \iint_{\partial\Omega^{(3)}} \left\{ C^* C (u_x n_x + u_y n_y) \right. \\ &\quad \left. + C^* \left( \frac{\partial C}{\partial x} n_x + \frac{\partial C}{\partial y} n_y \right) \right\} dS \end{aligned}$$

である。次に第 (15) 式の有限要素近似を導く。三角形要素  $\Omega_e$  の頂点を節点として、濃度ベクトル  $C$  及び  $C^*$  を、節点における値  $C_\alpha$  ( $\alpha=1, 2, 3$ ) を用いて

$$\begin{aligned} C^K(x, y; t) &= \varphi_\alpha(x, y) C_\alpha^K; & C^{K*} &= \varphi_\alpha C_\alpha^{K*} \\ &\dots\dots\dots (16) \end{aligned}$$

などとおく。また、同一の有限要素分割を用いて潮流流の流速分布が与えられるものと考えれば、節点流速を用いて第 (16) 式と同様に

$$u_j(x, y; t) = \varphi_\alpha(x, y) \hat{u}_\alpha(t) \dots\dots\dots (17)$$

と置くことができる。第(15)式に(16),(17)式を代入すれば解くべき連立方程式は

$$M_{\alpha\beta} \frac{dC_{\beta}}{dt} + (-A_{\alpha\beta} \hat{u}_r + B_{\alpha\beta}) C_{\beta} + M_{\alpha\beta} R_{\beta} = \Pi_{\alpha} \quad (18)$$

と置くことができる。ここで、化学反応による非線形項はその厳密な取り扱いが極めて困難であるため、図-2

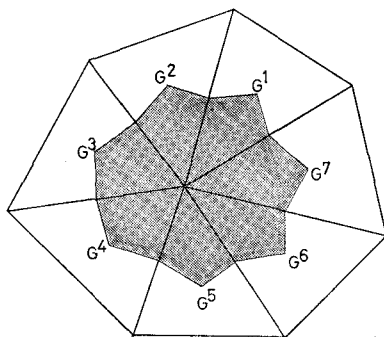


Fig. 2 Lumped Mass Approximation

のような集中質量型の近似を行なうことは極めて実用的である。また第(18)式左辺第1項に対しても集中質量型の係数行列を用いるものとしておく。既に、1次の形状関数を有する“定歪”三角形要素に対しては質中質量行列が充分安定に用いられ得ることはよく知られている。

再び境界条件について検討する。 $\partial\Omega^{(2)}$ ,  $\partial\Omega^{(3)}$  に対しては前節迄の考察により、節点濃度の時刻歴が既知であるとして取り扱うことができる。また、 $\partial\Omega^{(3)}$  に対しては、境界より外側の一切の汚染物質が流出してゆかないことより、 $\partial\Omega^{(4)}$  に沿った物質流速の積分が常に零であると考えられるので、“等価節点荷重”  $\Pi_{\alpha}$  に対して

$$\Pi_{\alpha} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega^{(3)} \cup \partial\Omega^{(3)} \cup \partial\Omega^{(4)} \quad (19)$$

と置くことができる。すなわち、本節の主たる目的は自由境界  $\partial\Omega^{(1)}$  における等価節点荷重  $\Pi_{\alpha}$  を正しく定めることである。

$\partial\Omega^{(1)}$  上での流速ベクトル  $u_j^{(1)}$  の方向に応じて2つの場合に分けて考えてゆく。境界  $\partial\Omega^{(1)}$  上で潮流が海域の外に向うとき、すなわち

$$u_x n_x + u_y n_y > 0 \quad (20)$$

の場合には、汚染物質は流れに乗って解析対象の海域の外へ流出してゆく。移流項に比べて拡散項の寄与が十分に小さく、仮想的に定められた自由境界  $\partial\Omega^{(1)}$  より対象海域の外側への混合拡散による物質移動が生じないものとおけば、たかだか

$$q = \sum_{j=1}^2 E_{x_j} \frac{\partial C}{\partial x_j} n_j = 0 \quad (21)$$

となるに過ぎない。このとき、等価節点力項  $\Pi_{\alpha}$  は、境界上での未知濃度を変数として含んでしまう。

次に、対象としている海域  $\Omega$  に  $\partial\Omega^{(1)}$  より潮流が流れ込む場合について考えておく。すなわち

$$u_x n_x + u_y n_y \leq 0 \quad (22)$$

なる場合には系外から濃度未知の物質が系内に流入してしまう。ここでは、境界における流速が滑らかな時間の関数となることを用いてゆく。すなわち

$$u_{ia}(t) = u_{ia}^{(0)} + u_{ia}^{(1)} \{a \sin \omega t + b \cos \omega t\} \quad (23)$$

などとおけば、境界上で法線方向への流速が0となる時刻が必ず存在する。法線流速が正から0に近づき0となったときの境界濃度を  $C^{(+)}$  とおけば、系外からの流入は、境界濃度を希釈すると考えられるので、希釈係数  $k$  をパラメータとして

$$C_{\alpha}(t) = k C_{\alpha}^{(+)} \quad (24)$$

として処理することが可能になる。

以上の検討の結果、 $\partial\Omega^{(1)}$  上の境界条件の境界流速による変化を考慮して、第(18)式を時間に対して逐次積分してゆく算法が得られた。

#### 4. 時間積分法

前節迄に、仮想境界  $\partial\Omega^{(1)}$  上での境界条件の変化を含めて有限要素法を導き、抽象的に逐次積分に対する算法を定めることができた。

ここでは、非線形連立常微分方程式(18)に対する初期値問題の数値的な取り扱いについて検討する。微小な時間刻み  $\Delta t$  を考え、時刻  $t$  より  $t + \Delta t$  の関係の挙動が一定であると見做しておく。このとき

$$M_{\alpha\beta} \frac{dC_{\beta}}{dt} \doteq \frac{1}{\Delta t} M_{\alpha\beta} (C_{\beta}^{t+\Delta t} - C_{\beta}^t) \quad (25)$$

とおけば、オイラーの前進差分公式を得る。すなわち、 $M_{\alpha\beta}$  が集中質量行列であり  $M_{\alpha\beta}^{-1}$  が陽に与えられるので

$$F_{\beta}^t = M_{\alpha\beta}^{-1} \{ (A_{\alpha\beta} \hat{u} - B_{\alpha\beta}) C_{\beta}^t + \Pi_{\alpha} \} - R_{\beta}^t \quad (26)$$

とおけば

$$C_{\beta}^{t+\Delta t} = C_{\beta}^t + \frac{1}{\Delta t} F_{\beta}^t \quad (27)$$

ここで、精度の改善のため、 $F_{\beta}^{t-\Delta t}$  などの既に計算された値を用いる方法について考えてゆく。既往のテイラー展開に基礎をおく方法など<sup>5)</sup>では、解の精度を上げるためには各時間刻みの中で関数  $F_{\beta}$  の評価を繰り返して行なうことが必要になる。しかるに、移流項を有する拡散方程式において、流速が時間の関数として与えられる系に対しては、行列  $A_{\alpha\beta} \hat{u}_i^t$  の評価に要する計算時間が大きく必ずしも実用的ではない。

ここでは、予測子・修正子法の予測子のみを用いる方法について若干の数値実験を行ない、たかだか  $F^{t-\Delta t}$  迄を用いるアダムスバッシュフォース法が、潮流の影響を受

ける拡散現象に対しても有力な計算手法であることを確かめた。すなわち

$$C_{\beta}^{t+\Delta t} = C_{\beta}^t + \frac{1}{\Delta t} \{ (3/2)F_{\beta}^t - (1/2)F_{\beta}^{t-\Delta t} \} \dots\dots(28)$$

とおき、時刻  $t$  において  $F_{\beta}$  の値を評価するとともに、既に求められた  $F_{\beta}^{t-\Delta t}$  を記憶しておき加え合わせる。この方法によれば、計算時間はオイラー法に比べてたかだか 20% 程多くを要するに過ぎない。また、安定性について実験的に検討し、ほぼオイラー法と同程度であることの結果を得た。

また、初期値  $C_{\beta}^0$  に対しては  $F_{\beta}^{t-\Delta t}$  に  $F_{\beta}^t$  の値を用いるものとした。すなわち、第 1 ステップのみはオイラー法により計算を行ない算法の単純さを維持するものとしておく。

時間積分の安定性は、数値実験の結果よりは、無次元数  $P_e$  を、系の代表長さ  $D$  に対して

$$P_e = \max_{i=1,2} \left( \frac{u_i^{(0)} + u_i^{(1)} \sqrt{a^2 + b^2}}{E_{x_i}} \cdot D \right) \dots\dots(29)$$

とおけば、 $O(10)$  の  $P_e$  に対しては  $O(1)$  の  $C$  が定まり、次式で与えられる。

$$\Delta t \leq \frac{C}{P_e} h^2 \dots\dots(30)$$

化学反応項が存在するとき、 $R$  の符号の正負により安定性は著しく異なるが、化学反応速度定数と拡散係数が同じオーダーであるときにはほぼ第 (30) 式が十分であることが知られた。また、反応項が負である場合には安定の範囲は第 (30) 式より広くなる。

種々の境界条件で数値実験を行なった結果、数値積分の安定性は解くべき微分方程式のパラメータのみならず境界濃度の与えられ方や局所的な流速分布により著しく影響を受けることが認められた。

## 5. 精 度

空間の離散化に対する精度を検討した結果、離散化誤差に対する評価式

$$\|C - C_h\| < O(h^2) \dots\dots(31)$$

が線形問題に対してはほぼ成立することが確かめられた。第 (31) 式において  $C$  は正解、 $C_h$  は近似解を示す。図—3 に示すように、 $h$  がある値を越えると離散化誤差に比べ丸め誤差が卓越し数値解の精度は減少し、安定を失なうことが明らかとなった。

この結果より、要素分割には 2 種類の制約が存在することが明らかとなった。すなわち、対象海域に対して予め想定された混合拡散現象のスケールに対して十分に大きくない要素分割に対する数値解は物理的に意味を持たないことが既によく知られている。さらに、数値解析上は最も精度のよい近似解を与える要素分割が存在すること、整合性のよくない要素分割に対しては解の精度が著

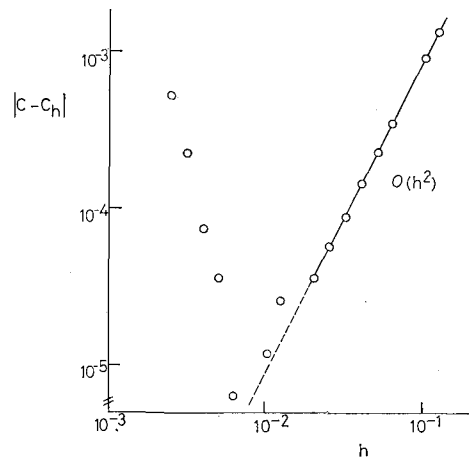


Fig. 3 Convergence of Finite Element Solution

しく悪くなることがある。

## 6. 結 言

海洋汚染に関する非線形拡散現象に着目して、空間を有限要素近似により、また時間を差分商によって近似して数值的に解析を行なうことを試みた。若干の数値実験を行ない、近似解法の安定性・整合性・収束性などについて検討した結果、これらの性質は対象海域、汚染物質の排出源など問題固有の性質に強く依存することが知られた。同時に、代表的な境界条件に対する近似を統一的に検討し、現象の非定常な取り扱いに対する実用的な算法を導いた。

今後、本解析法の環境アセスメントへの実用のためには、実測値との比較にもとづく各物理定数の正確な推定及び環境素過程のより精密なモデル化などについて更に検討することが必要である。

## 参 考 文 献

- 1) Kawahara, M.: Steady and Unsteady Finite Element Analysis of Incompressible Viscous Fluid, to appear in Finite Elements in Fluid, vol. 3, Wiley-Interscience, London.
- 2) 中澤晶平・上田隆宣・藤谷義信: 有限要素法による化学反応を伴う移動現象問題の解析について、日本鋼構造協第11回研究集会マトリックス解析法シンポジウム講演論文集 (1977).
- 3) Henrich, J. C., Huyakorn, P. S., Zienkiewicz, O. C. and Michell, A. R.: An 'Upwind' Finite Element Scheme for Two-Dimensional Convective Transport Equation, Int. J. num. Meth. Engng., **11**, 131-143 (1977).
- 4) Strang, G. and Fix, G. J.: An Analysis of Finite Element Method, Prentice-Hall, New Jersey (1973).
- 5) Kawahara, M., Takeuchi, N. and Yoshida, T.: Two Step Explicit Finite Element Method for Tsunami Wave Propagation Analysis, to appear in Int. J. num. Meth. Engng.