

海洋の汚濁拡散問題の数値的な取扱いについて

中澤 晶平*・川原 陸人*・西田 寿夫** 長谷川 賢一**

1. 緒 言

海洋や港湾における種々の現象の性質を調べるとき、模型実験に代って大規模な数値実験を行なうことがある。特に、近年、差分法に代って有限要素法を使用することが、一般に、よく行われている。

本論文では、海洋や港湾における環境汚濁物質の挙動を記述する数値モデルとして2次元及び3次元の移流拡散方程式を有限要素法を用いて解くことを考える。すでに、通常の Galerkin 法にもとづき有限要素法によって空間を離散化した連立偏微分方程式を、集中質量型の部分近似のもとで陽型の差分公式で更に離散近似して逐次時間積分する方法が論じられている¹⁾。この方法では、解の安定性に関するやや強い制約の存在すること、また、ある条件のもとでは、計算がほぼ安定に進むことが知られた²⁾。

このような問題に対する既往の研究の多くは、解析の対象となる水域で、現象を記述する3次元の方程式を適当な仮定のもとで水深について積分し、得られた2次元モデルを数値的に解く方法で進められてきた³⁾。また、この方法を拡張し、未知量の鉛直方向への分布に適当な仮定を置いて、いくつかの層からなるモデルを設定して解く多層流に対しても有限要素法の適用が試みられている⁴⁾。しかるに、特に海岸水域では流れの鉛直方向への構造が明らかにされつつあり、これらと共に、完全に3次元問題として現象を取り扱うことが必要となる場合も多い。

実海域を対象としてこれらの方法で数値解析を進めるとき、問題の基本的な性質に対する検討の他、計算上生じて来る若干の問題についても調べておくことが必要になる。特に、多くの物質が連成する沿岸生態系のモデルなどを取り扱う場合には、基本的な問題の土木工学的な側面からの検討を行って適当な数値モデルが設定されるであろう。このとき、重要なパラメータは、対象海域に負荷される物質の拡散に関する情報を基本として、他の物質への変化率、解析の対象としている系の外部への消

失などである。一旦現象を記述するモデルが確立された後は、これらの方程式系に固有の性質を調べ、安定に解くアルゴリズムを確立することが次の問題として生じてくる。一般に、汚濁拡散に関する問題に対しては、基本的な方程式の性質が明らかとなっており、アルゴリズムの確立に対して検討すべき項目は、パラメータの取り得る値の範囲と離散モデルの規模などに着目した、計算の実行可能性である。

2. 移流拡散方程式の離散近似と境界条件

工学的な問題を取り扱うことを目的とした数値解析手法を導くためには、問題を記述する微分方程式と考え得る境界条件の基本的な性質について検討しておく。最も簡単な一次元の移流拡散方程式

$$-v \frac{dy}{dx} + \nu^2 \frac{d^2 y}{dx^2} - ky = 0 \quad x \in (0, 1) \quad \cdots \cdots (1)$$

を考える。区間 $[0, 1]$ で流速 v は一定であるとしよう。 $x=0$ の点が排出源であるとき、文献 1) の手順に従えば、この点での境界条件は

$$y(0) = y_0 \quad \cdots \cdots (2)$$

と置いてよい。解析領域の出口では、流速 v が正値を取る場合には

$$\nu^2 \frac{dy}{dx} = 0 \quad \cdots \cdots (3)$$

が与えられよう。このとき、区間 $[0, 1]$ を n 等分し、各小区間の長さを h とおけば、1 次の形状関数を用いた有限要素スキームは中央差分と全く同じ結果

$$-\frac{v}{2}(-y_{i-1} + y_{i+1}) - \frac{\nu^2}{h}(-y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1}) = 0 \quad \cdots \cdots (4)$$

を得る。式(4)は、(2)、(3)の境界条件のもとでは格子間隔 h に独立に無条件に正解 y を各節点で表示することがわかる。ここで、簡単のため自浄係数 k の寄与する項の影響については無視しておくが、領域の内部で着目成分が消費される系に対して、反応に集中質量型の部分近似を用いる場合には、上記の性質が近似的に満たされる。 v が負値を取る場合には、境界条件 (3) が

$$y(1) = y_1 \quad \cdots \cdots (3')$$

* 正会員 中央大学理工学部土木工学科

** 正会員 (株)ニエック数値解析研究室

の形で与えられることより、格子幅に対して次の制約条件が課せられる⁵⁾。

$$h > \frac{2\nu^2}{v} \dots\dots\dots(5)$$

この条件は反応項が集中型で扱われる限りは自浄係数 k に影響されない。以上の検討の結果は、容易に非線形の反応メカニズムを有する系の場合に拡張することができる。すなわち、反応項の近似が集中質量型である限り、空間の離散化に対する指標としては (5) が充分である。

式 (5) の制約を緩和するために差分法でよく用いられる上流差分と同様の概念が、特に2次の形状関数を用いた有限要素法に対して提案されている⁶⁾。しかし、実海域の問題では、例えば定常問題であっても、複雑な流況を再現するために、十分要素分割を細かくすることを余儀なくされることが多く、殆んどの要素で条件 (5) を満たす近似を行うのが実用上有利である。

特に、1次の形状関数を用いた有限要素法に対しても離散最大値原理に基礎をおく部分近似のアルゴリズム⁷⁾が提案されているが、精度上好ましくない点、また、要素総数が多くなった場合の計算の複雑さなどの点からも充分な実用性の検証が行われているとはいえない。

3. 時間に依存する問題の取扱い

次に、非定常移流拡散方程式を考える。海域の一部を取り出して計算を進めるとき、解析領域の内部では流速の分布は通常時間の関数ともなっている。また、海域に負荷される汚濁物質の量の時間変化、自浄作用など化学反応の非可逆性などの点から定常解が存在しない場合、存在してもその工学的な意味づけが困難である場合も多い。そこで、非定常解を逐次求める計算を行うことが必要になる。簡単のため1次元問題

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -v \frac{\partial y}{\partial x} + \nu^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - ky \quad x \in (0, 1); t > 0 \dots\dots\dots(6)$$

を考える。空間変数に対しては前節の離散モデルを用いれば、式 (6) の有限要素近似を形式的に

$$\frac{dy_j}{dt} = f_1(y_i) + f_2(y_i) + f_3(y_i) \dots\dots\dots(7)$$

と書くことができる。ここで、 $f_1(y_i)$ 、 $f_2(y_i)$ 、 $f_3(y_i)$ はそれぞれ移流項、拡散項、反応項を集中質量で除したものである。逐次時間積分公式として、精度、安定の点から最も適切と考えられるものの一つとして、Adams-Bashforth Scheme を用いたとき、すなわち

$$y^{t+\Delta t} = y^t + \Delta t \left(\frac{3}{2} \dot{y}^t - \frac{1}{2} \dot{y}^{t-\Delta t} \right) \dots\dots\dots(8)$$

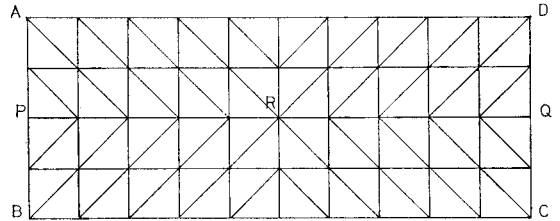
ならば、空間の離散化に対する制約 (5) のもとで、安定条件が、およそ

$$\Delta t \leq \frac{ch^2}{\nu^2(1+\nu h)} \dots\dots\dots(9)$$

となった。ただし、 c は自浄係数、反応速度を与える方程式の形に依存する非負の定数である。 c は自浄係数 k の値に比例して増大する。

4. 数値解析例

最も簡単な多成分系の例題として 図—1 に示す長方形領域で3成分からなる反応拡散解析を試みた。ここで、



図—1 2次元長方形領域の有限要素分割

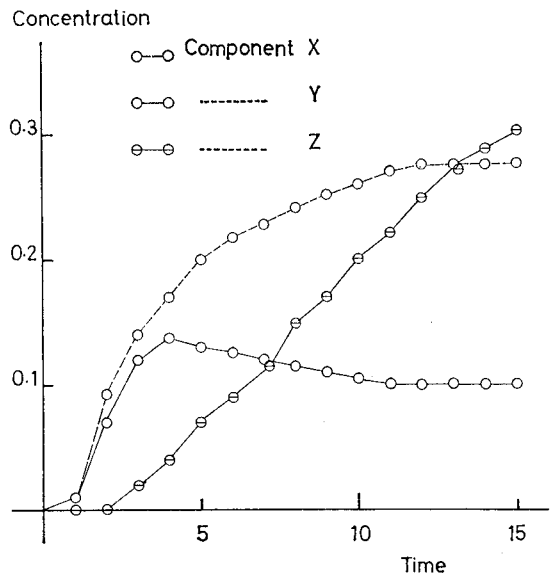
境界条件としては、辺 AB より負荷物質 X が濃度 C_X^0 で与えられている。また、辺 CD より、境界の中に常に存在する物質 Y が濃度 C_Y^0 で供給されている。このとき、負荷 X が Y の影響を受け、速度 R_X で物質 z を生成するものとする。ただし

$$R_X = k_X C_X^2 C_Y \dots\dots\dots(10)$$

このとき、成分 Y は、速度

$$R_Y = k_Y C_X^2 C_Y \dots\dots\dots(11)$$

で消費される。このとき、 $k_x = 2k_y$ となる。このようなメカニズムは、例えば、生態系を含む海洋の汚染の問題を扱う場合に、栄養塩の植物プランクトンの発生への寄与などを考えるときしばしば生ずる典型的な非線形の化学反応モデルである。成分 X に対して辺 CD で濃度 D また成分 Y に対しては辺 AB で濃度 D とおく。



図—2 点 R における計算された濃度の時刻歴

また、成分 z に対しても、辺 AB, CD で濃度 D となるように系外へ持ち出されるものと仮定して、式 (7) で与えられる算法を用いて数値解析を行なったときの点 P における濃度の時刻歴を 図-2 に示す。

ここで取り扱われた非線形連立方程式

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial C_X}{\partial t} &= \left(\frac{\partial^2 C_X}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_Y}{\partial y^2} \right) - R_X \\ \frac{\partial C_Y}{\partial t} &= \left(\frac{\partial^2 C_Y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_X}{\partial x^2} \right) - R_Y \end{aligned} \right\} \dots\dots (12)$$

に着目すると、図-1 に示すような単純な系であってもその解を解析的に求めることは困難である。また、用いた算法 (7) は、時刻 t 及び $t-\Delta t$ を用いて、区間 Δt の間では現象を線形化しておりその精度に関する直接の保証を明らかにすることも容易ではない。

そこで、解の妥当性の検証のために、各時刻毎の物質収支に着目して Δt を変化させて数値実験を行なった。すなわち、成分 X に着目すれば

$$R(C_X) = \int_0^t \int_{AB} \frac{\partial C_X}{\partial n} dS dt - \int_0^t \int_{CD} \frac{\partial C_X}{\partial n} dS dt + \int_0^t \int_{\square ABCD} C_X dx dy dt = 0 \dots\dots (13)$$

が近似的に全ての時刻 $n\Delta t$ で成り立つこと、また、 $\Delta t \rightarrow 0$ で $R(C_X) \rightarrow 0$ が成り立つことが期待できればよい。式 (13) を用いた結果よりは、 Δt が十分小さいとき、物質収支は t の増加とともに減少する。条件 (9) に対する最大の時間刻みより出発して 10^{-3} まで Δt を減ざると、ほぼ残差は丸め誤差と同程度となる。

次に、メカニズム (11), (12) に更に逆反応が伴う例について検討した。すなわち、生成物がその濃度に比例する速度でもとの物質 X と Y に分解される場合である。逆反応の速度が正方応に比べて十分に小さくないとき、すなわち、メカニズム

$$R_X = k_X C_X^2 C_Y - 2k_z C_z \dots\dots (14)$$

$$R_Y = k_Y C_X^2 C_Y - k_z C_z \dots\dots (15)$$

において、 k_z がある値より大きくなると定常解が存在

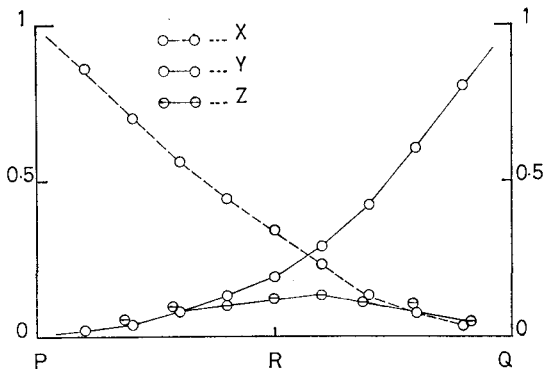


図-3 定常濃度分布の計算例

する場合がある。図-3 には、このような系に対して求められた定常解の一例を示す。この例では、 $k_z=0.5k_Y$ が用いられた。定常解は

$$\sum_{i=1}^N \{ (C_X^{i+\Delta t})^2 - (C_X^i)^2 \} \leq \epsilon \dots\dots (16)$$

で判定した。全ての成分に対して、適当な時刻で ϵ が計算の有効桁の範囲では 0 となる。

次に、実海域に対する非定常拡散解析の例として釜石湾の栄養塩の拡散問題を取り扱う。図-4 に解析領域の概略を示す。この海域では、釜石市北方の港湾より系内に栄養塩が負荷されることが知られている (図中 A-A)。すでにこの海域の潮汐流が Two Step Lax Wendroff 有限要素法で計算されており、12 時間周期の成分のみを考慮して求めた漲潮時の速度分布は 図-5 のようになる。このときの有限要素分割は、最大要素の最大辺長が 500 m、最大水深が 80 m で、流速を求めるためには時

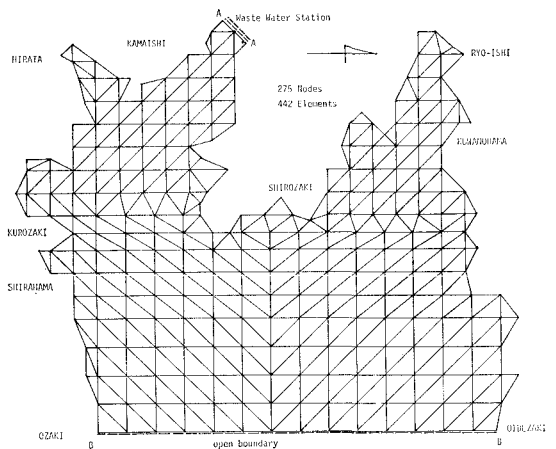


図-4 釜石湾の有限要素モデル

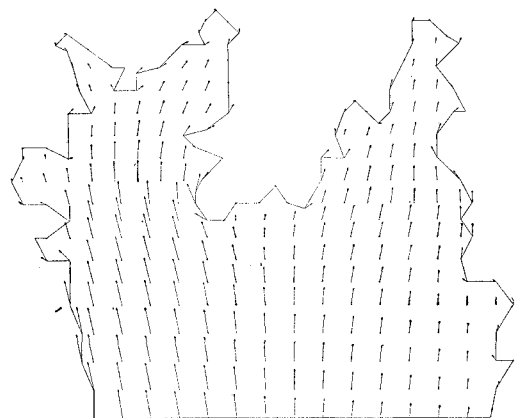


図-5 速度分布の計算結果

間増分の大きさは、およそ 20 秒であった。得られた最大流速は 0.07 m/sec となった。拡散係数として 100 m²/sec を用いるとき、拡散計算のための適正な時間増分は

$$\Delta t \leq \frac{Ch^2}{\nu^2(1+\nu h)} = 23.14C \dots \dots \dots (17)$$

となる。水深を考慮する場合には拡散係数に水深を乗じたものを ν^2 の値として用いる。最も条件の悪い要素の最も条件の悪い個所に対する時間増分の制約が式 (17) であって、領域内で平均的に見れば Δt の上界値はおよそ 60C ほどとなる。Neumann の安定条件を用いて得た定数 $C=1/3$ などより $\Delta t=20$ 秒として求めた数値解を図-6(a) 及び (b) に示す。ここで、反応項は線形として取り扱い、自浄係数は拡散係数の 1/10 の値を取るものとした。また、反応項が線形であれば解くべき方程式は完全に線形であることから、図中の等濃度線は入口濃度を用いて無次元化した値で表示してある。

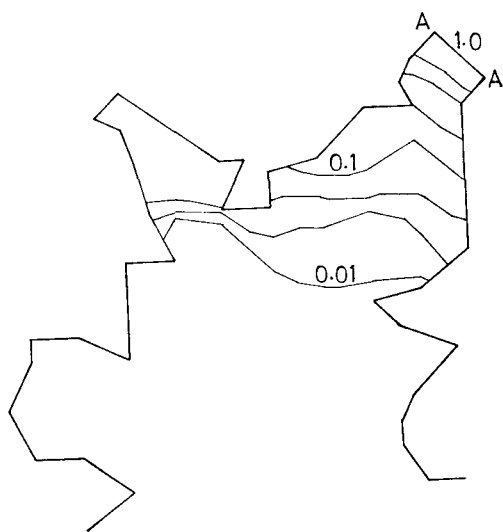


図-6(a) 濃度分布 (6 時間後)

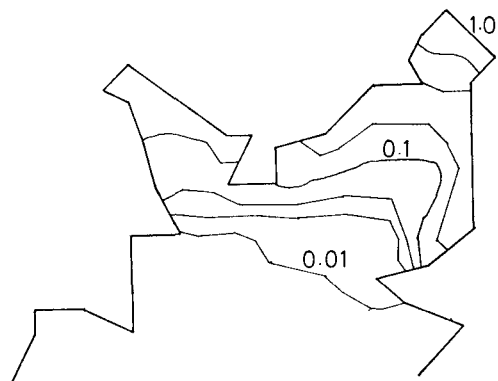


図-6(b) 濃度分布 (12 時間後)

5. 計算手法の評価

以上の数値解析例により、ここで論じて来た方法を用いて海洋の汚濁の問題に対する数値解析が可能であることが明らかとなった。次に、これらの方法に対する実用性の評価を試みる。ここで、実用性の評価の指標としては、アルゴリズムを実現することの容易さ、記憶容量及び計算時間の適切さである。

5.1 アルゴリズムの実現

漸化式 (8) を用いて連立常微分方程式 (7) の解を逐次求めるとき、有限要素法の特徴を考慮すれば、各係数マトリックスの非零成分のみを用いた計算を実現するコードを生成することが最も容易であり、この場合に計算量も最小となる。陰型の逐次時間積分法に比べれば、本法は、連立方程式を組み立てる作業が不要となる。また、各時間刻み毎の線形化より、境界条件を逐次代入によって処理できるなどの著しい利点があり、これらの点からは、アルゴリズムの実現が容易であると評価できる。

5.2 記憶容量および計算時間の評価

要素数 m 、節点数 n からなる有限要素分割に対して、陽型のアルゴリズムを用いる場合に、必要な記憶容量は各要素が 1 次の 3 角形要素であるとき、 l 成分からなる移流拡散方程式を解くためには、たかだか

$$(3l+1)n+66m \dots \dots \dots (18)$$

となる。特に、陽型の逐次時間積分型有限要素法では、単精度 (1 語長 32 ビット) の計算で 6 000 要素を越える非線形方程式が十分に取扱われることより、実用的な範囲の要素分割に対しては、多倍長計算の必要性は全く認められない⁶⁾。

前節の数値解析例では、中央大学計算センターの FACOM 230-48 を用いた。いずれの例題においても、計算時間は、1 要素 1 時間増分あたり 0.9 m/sec 程度である。

ここで述べた方法によれば、係数マトリックスの非零成分を全ての要素に対して評価することになるので、計算回数最小のアルゴリズムとして各節点毎に非零成分を評価するものを想定すれば、計算の冗長さの目安として

$$r=3m-n \dots \dots \dots (19)$$

を得る。計算量の評価 (19) は、係数マトリックスの非零成分に対する演算の結果が直ちに節点に対応する次元の配列に繰り込まれるので、データの性質に強く依存して定まるバンド幅の影響からは完全に独立となる。また、これらの演算は要素を指標として、順次 1 次元的に進められるので、FORTRAN コンパイラ最適化機能を用いれば、得られるオブジェクトコードの効率が向上し易いことも確かめられた。

6. 結 言

海洋の汚濁物質の挙動に関する移流拡散方程式の数値解析のために、空間を離散化する手法として有限要素法を用いることを検討した。この方法を用いると、流速と離散パラメータ h との間にやや厳しい安定条件が存するが、実海域を対象とした解析では、十分細かい要素分割に対して計算が安定となる。特に空間の離散化に対する安定性は境界条件に強く依存することが知られた⁹⁾。恒流成分のみから成る移流拡散問題に対しては、ほとんど至る所で境界条件は、安定な形のものを用いられると期待してよい。

時間に依存する問題に対して、非線形な反応項を含む場合、流速が時間の関数となる場合に注目して、完全に陽型式で Adams-Bashforth 法を用いて逐次時間積分して解析を進める方法について検討した。反応項に、時間微分項に対応するマトリックスと同様の集中質量型の部分近似を用いれば、計算のアルゴリズムが極めて簡明となる他、物質収支に着目すれば、十分な精度の解が得られることが知られた。

実海域に対する解析例として、釜石港近傍の栄養塩負荷の拡散問題を取扱い、時間増分に対して適当な制約条件のもとで安定に計算が進むことを示した。

また、計算量について検討したところ、計算時間、主記憶容量の点のみならず、アルゴリズムの実現が容易であるという点からも、陰型の時間積分公式を用いる場合¹⁰⁾に比べて、ここで示した方法の効率が高いことが確かめられた。

今後、空間に対する離散パラメータ h 、時間に対する離散パラメータ Δt に課せられる制約を緩和し、更に安定かつ精度の高いアルゴリズムに関する検討が必要であろう。ここで、アルゴリズムの簡明さを失わないという点からは、上流差分型の部分近似は必ずしも適切では

ない。

参 考 文 献

- 1) 中澤晶平・川原睦人：有限要素法による化学反応を伴う汚染拡散解析，第24回海岸工学講演会論文集，p. 448 (1977)。
- 2) 中澤晶平・西田寿夫・川原睦人：有限要素法による非定常拡散方程式の数値解析，第22回水理講演会論文集，p. 139 (1978)。
- 3) Zienkiewicz, O. C.: The Finite Element Method 3rd ed., McGraw-Hill, London, p. 607 (1977)。
- 4) 森平倫生・片岡真二・安井誠人・川原睦人・長谷川賢一：有限要素法による淡水海水二層流域の潮流と水質の解析，第24回海岸工学講演会論文集，p. 452 (1977)。
- 5) Mitchell, A. R. and R. Wait: The Finite Element Method in Partial Differential Equations, John Wiley & Sons, London p. 184 (1977)。
- 6) Heinrich, J. C., P. S. Huyakorn, O. C. Zienkiewicz and A. R. Mitchell: An 'Upwind' Finite Element Scheme for Two Dimensional Convective Transport Equation, Int. J. Num. Meth. Engng., **11**, 131 (1977)。
- 7) Kikuchi, F.: Discrete Maximum Principle and Artificial Viscosity in Finite Element Approximations to Convective Diffusion Equations, Institute of Space and Aeronautical Science, Univ. of Tokyo, Report No. 550 (1977)。
- 8) Kawahara, M., S. Nakazawa and K. Hasegawa: Tsunami Wave Propagation Analysis by the Finite Element Method, Proceedings of the 2nd International Conference on Finite Elements in Water Resources, London, July (1978)。
- 9) Gartling, D. K.: Some Comments on the Papers by Heinrich, Huyakorn, Zienkiewicz, and Mitchell, Int. J. Num. Meth. Engng., **12**, 187 (1978)。
- 10) Smith, I. A.: Integration in Time of Diffusion and Diffusion Convection Equations, Finite Elements in Water Resources (Gray, Pinder, Brebbia eds.) Pentech Press, 1.3-1.20 (1977)。