

環境汚染解析における Reaction Load の計算の必要性

奈良工業大学

正会員

二神 種弘

1. まえがき

経済活動の進展にもよる、環境質（水系水質や大気質）の悪化は深刻な状態となっており、この悪化防止のための対策や研究がいろいろとなされている。いろいろなモデルや解析手法を用いた環境汚染物質の挙動に関する研究が多く、研究者によっておこなわれている。特に、最近の、大型計算機を用いた、差分法、有限要素法、フーリエ級数による解法などによる、拡散シミュレーションに関する研究の進展は目を見はるもののものである。（しかしながら、環境（水系や大気系）のようなシミュレーションの対象は、その領域が広大であるため、適当にその部分領域を取り出し、その境界に対し、適当な境界条件を与えて解析しているのが多くの現状である。この適当な境界条件を与えるということは非常に意味深長であり、境界条件の与えかたで、いろいろな意図に従って計算結果を得ていることにもなっている。適当な境界条件を与えて計算しただけで、与えた境界条件が妥当であったかどうかのチェックは十分なされていないことが多い。与えた境界条件（仮定した境界条件）が妥当でない場合には、境界の内部と外部の環境質の連続性を保つために、無理な Reaction Load が発生しているものと思われる。普通、土木構造物の設計学においては、Load が荷重等によるものと、境界（支点など）に作用する Reaction Load を計算しておくのが、構造力学の常識である。環境汚染物質の拡散シミュレーションにおいても、構造設計などにおけると同様に、与えた境界条件（仮定した境界条件）の妥当性をチェックするために、境界において発生する Reaction Load を計算しておく必要があるものと思われる。

2. 拡散に関する基礎的な方程式系とその境界条件

環境汚染物質の拡散モデルとして、次のような微分方程式系がしばしば用いられている。

微分方程式（2次元非定常状態）

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - u \frac{\partial \phi}{\partial x} - v \frac{\partial \phi}{\partial y} - k \phi + Q = 0 \quad (1)$$

初期条件

$$\phi(x, y, t=0) = \phi^0(x, y) \quad (2)$$

境界条件

拘束境界条件

$$\phi(x=X, y=Y) = \phi_b(x, y) \quad (3)$$

自由境界条件

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{(x=X, y=Y)} = 0 \quad (4)$$

ここで、 ϕ = 環境質（水質、大気質など）、 D_x, D_y = 拡散係数、 u, v = 流速、 k = 減衰要素、 $Q = \text{Load}$ 、 ϕ^0 = 初期値、 ϕ_b = 境界値、 x, y = 座標、 X, Y = 境界の座標、 t = 時間。

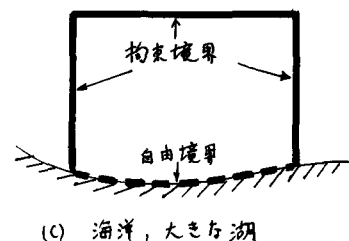
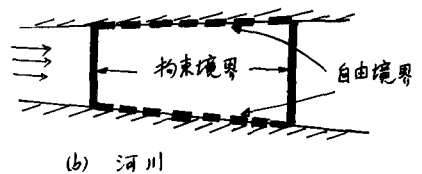
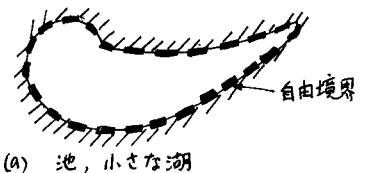


図1 いろいろな境界条件モデル

境界条件の記述の仕方がいろいろ考えられるが、図1にその代表例を示す。図1において太点線で示した拘束境界というのは、この境界では環境質の値も(3)式のように既知として与えるものである。また太点線で示した自由境界というのは環境質の変化率(たとえば濃度勾配)が0である非伝導(非伝達性)境界のことである。

拘束境界条件の1つは既知境界条件といわれるものであるが、この既知境界条件というのは、環境質解析においては、人為的に既知とみなした適当な値を境界値として与えるものである。したがって既知というのは、あくまでも仮定である場合が多いことである。したがって、この仮定の妥当性をチェックする必要がある。

3. 拘束境界条件による Reaction Load の発生

たとえば、2次元定常状態の場合、有限要素法(あるいは差分法)を用いて、(4)式の自由境界条件のもとに(1)式を離散化すると、次のような連立1次方程式系が得られる。

$$[A]\{\phi\} = \{Q\} \quad (5)$$

つまり、

$$a_{11}\phi_1 + a_{12}\phi_2 + \dots + a_{1n}\phi_n = Q_1 \quad (5-1)$$

$$a_{21}\phi_1 + a_{22}\phi_2 + \dots + a_{2n}\phi_n = Q_2 \quad (5-2)$$

$$\dots \dots \dots$$

$$a_{i1}\phi_1 + a_{i2}\phi_2 + \dots + a_{in}\phi_n = Q_i \quad (5-4)$$

$$a_{j1}\phi_1 + a_{j2}\phi_2 + \dots + a_{jn}\phi_n = Q_j \quad (5-5)$$

$$\dots \dots \dots$$

$$a_{m1}\phi_1 + a_{m2}\phi_2 + \dots + a_{mn}\phi_n = Q_m \quad (5-m)$$

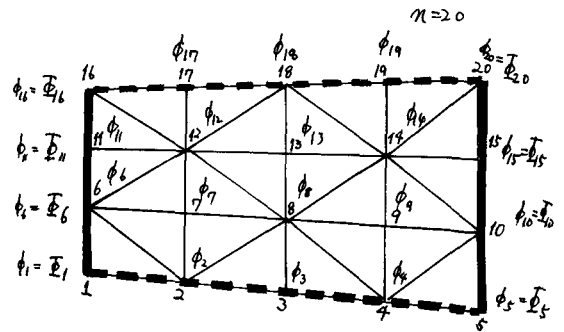


図2 有限要素法による河川のモデル化

ところが、拘束境界上の点(図2の節点1, 5, 6, 10, 11, 15, 16, 20)においては、(3)式で与えられる境界条件を満足しなくてはならないので(5)式の連立1次方程式は次のように修正される。

$$a_{11}\phi_1 + a_{12}\phi_2 + \dots + a_{1n}\phi_n = Q_1 \rightarrow \phi_1 = \bar{\phi}_1 \quad (l=1, 5, 6, 10, 11, 15, 16, 20) \quad (6)$$

したがって、修正された連立1次方程式は、次のようになる。

$$[A']\{\phi\} = \{Q'\} \quad (7)$$

(6)式を解くと求めた環境質 $\{\phi\}$ が得られる。

(5)式の[A]と(7)式より求めた $\{\phi\}$ をかけあわせると Reaction Load $\{Q^R\}$ が逆の符号に得られる。

$$[A]\{\phi\} = \{Q^R\} \quad (8)$$

ここで注意すべきことは(5)式の Load $\{Q\}$ と(8)式の Reaction Load $\{Q^R\}$ は、一般には異なりである。つまり、拘束境界点においては、与えられた Load Q と求めた Reaction Load Q^R が必ずしも一致しないことである。 Q と Q^R の差が少なければ少ないほど(Q と Q^R が一致すればよいほど)、既知とみなした境界値(仮定の境界値)の与え方が妥当であったということである。逆に Q と Q^R の差が大きければ大きいほどその境界値が不適当であったこととなる。

4. まとめ

数値的計算上、くわしい計算結果を示すことができないが、環境条件設定の妥当性の検討が十分になされていない現状において、本研究で提案した Reaction Load は環境汚染物質の挙動解析において、境界条件設定の妥当性のチェックのための一助となるものと思われ。