

オイラー・ラグランジュ法による吸着をともなう土壌内浸透現象の数値解析

広島県庁 正会員 ○川仁 昭広
広島大学工学部 正会員 余越正一郎

1. はじめに

吸着をともなう土壌内浸透現象は吸着項を含む移流分散方程式により記述される。移流分散方程式の数値解析において移流が分散よりも卓越するときには数値的な振動が濃度のフロント部の近傍で生じ計算が困難に陥る。数値的な振動は濃度のフロント部の形状が急なほど厳しくなる傾向にある。オイラー・ラグランジュ法はこのような場合に有効であり、固定格子の簡便さをもつオイラー法とバクレ数が大きい領域で有効なラグランジュ法を結びつけたものである。Cheng et al.¹⁾によると、オイラー・ラグランジュ法は新しい考え方でなく、特性曲線の固定格子法、風上差分法、風上有限要素法において用いられてきた。オイラー・ラグランジュ法は移流項を固定オイラー格子上でラグランジュ的に、分散項をオイラー的にあるいはラグランジュ的に扱うものである。このようなオイラー法とラグランジュ法を結び付ける基礎的考え方は、特性曲線の固定格子法と同じものであり、同様に、風上差分法は移流項がラグランジュ形式に強くかたよったオイラー・ラグランジュ法と考えられる。そのため、風上差分法と同様に、オイラー・ラグランジュ法も数値的な分散を導入して数値的な振動を抑制しているといえる。本研究では、吸着項をもつ移流分散方程式に、オイラー・ラグランジュ法を適用して土壌内浸透現象の数値解析を行った。

2. 基礎式および計算方法

土壌のような多孔質体における物質輸送方程式（無次元）は、ラグランジュ微分を用いて、(1)式のよう表される。

$$\frac{D C^*}{D t^*} + \frac{\partial S^*}{\partial t^*} = D^* \frac{\partial C^*}{\partial x^*} \quad (1) \quad \frac{D}{D t^*} = \frac{\partial}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial}{\partial x^*} \quad (2)$$

ただし、 $C^* = C/C_0$, $S^* = S/C_0$, $t^* = t U_0/x_0$, $x^* = x/x_0$, $D^* = D/U_0 x_0$, $U^* = U/U_0$

ここに、 C : 濃度、 S : 吸着量、 D : 分散係数、 U : 流速、 x : 座標、 t : 時間であり、 C_0 : 流入境界で与える濃度、 U_0 : 土壌内の平均流速、 x_0 : 土壌カラムの長さ、 $*$ は無次元量を示す。

(1)式においては、 C^* は空間上、時間上のある点の濃度を示すものではなく、以下の特性曲線に沿って動く流体の濃度を示すものである。

$$D x^* = U^* D t^* \quad (3)$$

ここに、 x^* : 流体粒子の座標を示す。

(1)式の差分化にあたって、吸着量 S^* の取り扱いが問題となる。本研究では、吸着量 S^* を吸着等温式を用いて濃度 C^* の関数 G として表し、以下の処理を行った。

$$S = G(C^*) \quad (4) \quad (\text{exp. \text{ヘンリー式 } S^* = H C^*, \text{ラングミュア式 } S^* = a C^* / (1 + b C^*)})$$

$$\frac{D C^*}{D T^*} + g(C^*) \frac{\partial C^*}{\partial T^*} = D \frac{\partial^2 C^*}{\partial X^{*2}} \quad (5) \quad \text{ただし、} \quad g(C^*) = \frac{\partial G}{\partial C^*} \quad (6)$$

$$\text{差分式} \quad \frac{C_i^{n+1, k+1} - C_i^n}{\Delta t} + g^k \frac{C_i^{n+1, k+1} - C_i^n}{\Delta t} = D^* \frac{C_i^n - 2C_i^n + C_i^n}{\Delta x^2} \quad (7)$$

$$\text{ただし、} \quad g^k = g(0.5(C_i^{n+1, k} + C_i^n)) \quad (8)$$

であり、 k : 繰り返しの重み係数、 H : ヘンリー一定数、 a , b : ラングミュア定数である。濃度 C_i は時刻 $n+1$ に位置 i に存在する流体の時刻 n における濃度である。

濃度 nC_i の位置 nx_i を求めるのに(3)式から次の式を誘導した。

$$^nx_i = x_i^{n+1} - \int_{t_n}^{t_{n+1}} U \cdot D \, t \quad (9)$$

位置 nx_i の周辺の格子点濃度 C_{s-1}^n, C_s^n を用いて、(10)式から濃度 nC_i を決定した。

$$^nC_i = (1-\xi) C_{s-1}^n + \xi C_s^n \quad (10)$$

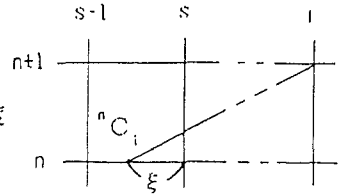


図1 補間法

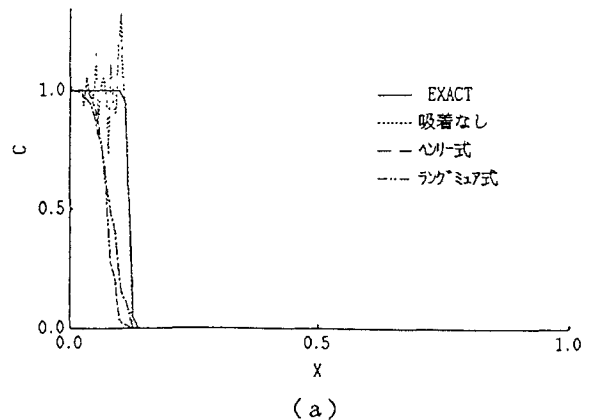
ただし、 ξ は図1の値を用いた。この補間を用いるとき、もし、クーラン数が1未満で $i=s$ ならば風上差分法と同一視できる。¹⁾

3. 結果および考察

吸着項がない場合および吸着式にヘンリー式あるいはラングミュア式を用いた場合の検討を行った。ヘンリー式、ラングミュア式は(11)式(12)式を用いた。

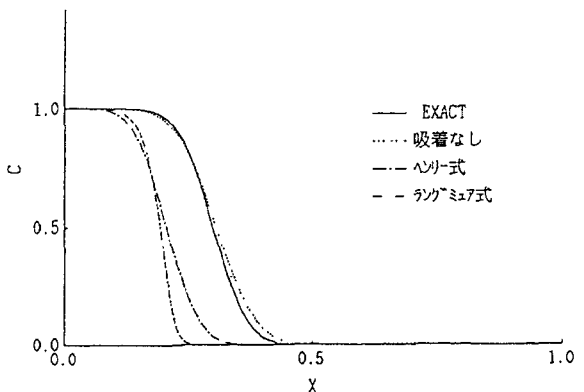
$$\text{ヘンリー式} \quad S = 0.5C \quad (11) \quad \text{ラングミュア式} \quad S = \frac{1.75C}{1.0+2.0C} \quad (12)$$

図2(a)は数値解析上のパラメータとして $\Delta t=0.024, \Delta x=0.005, U=1.0, D=0.00015$ のときの時間 $t=0.12$ の濃度分布である。このときの移流分散方程式の数値解析を特徴づける無次元量は、ペクレ数 $Pe=U\Delta x/D=33.3$ 、とクーラン数 $Cr=U\Delta t/\Delta x=4.8$ 、と拡散数 $df=D\Delta t/\Delta x^2=0.144$ である。この図をみると、吸着がない場合振動をおこしている。また、ヘンリー式、ラングミュア式は多少乱れているがこれは反復回数が小さいためである。



(a)

つぎに、図2(b)は数値解析上のパラメータとして $\Delta t=0.001, \Delta x=0.005, U=1.0, D=0.005$ のときの時間 $t=0.2$ の濃度分布である。このときのペクレ数 $Pe=1.0$ 、クーラン数 $Cr=0.2$ 、拡散数 $df=0.2$ である。吸着がない場合をみると、フロント先端部でオーバー・シュートしている。ヘンリー式は吸着がない場合に比べて、進行が遅延しているのがわかる。また、ラングミュア式の場合、進行が遅延し分散が小さくなっているがみとめられる。



(b)

数値解析の結果、オイラー・ラグランジュ法は陽的差分において、拡散数により制限されることがわかった。また、吸着項が含まれることにより制限が軽減されるが、反復計算により精度が落ちるが認められた。。

参考文献

- 1). Cheng, R.T., Casulli, V., and Milford, S.N., Water Resources Research, Vol.20, No.7, July 1984, pp.944-952

図2 濃度分布