

(7) 底泥からの溶出物質の拡散解析

○神戸大学工学部 正員 松梨順三郎
神戸大学工学部 正員 藤 信 明

まえがき

大阪湾・播磨灘など、いわゆる閉水域における富栄養化の現象には、底部の堆積汚泥の巻きあげによる寄与が大きいといわれている。本研究は底部における溶出物質の鉛直方向への拡散に注目し、これにガラーキン有限要素法を適用して、三次元拡散方程式の数値解析を実施して若干の成果を得た。ここにその大要を報告する。

1. 基礎方程式

図-1のような三次元の閉水域モデルを想定し、底泥から溶出した汚染質が水域内で三次元的に拡散していく現象過程に注目する。この場合の基礎方程式をつぎのように設定した。

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} + V \frac{\partial c}{\partial y} + W \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + Q_0 - K_r c \quad (1) \end{aligned}$$

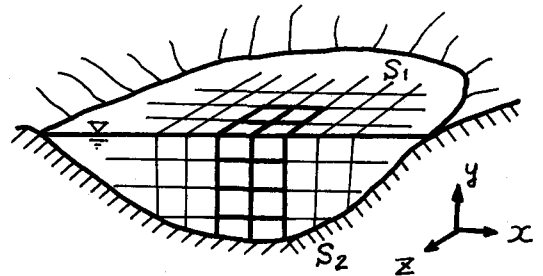


図-1 閉水域モデル

ここに、 c は汚染質の無次元濃度、 U, V, W および D_x, D_y, D_z はそれぞれ x, y, z 軸方向の流速成分および拡散係数とする。 Q_0 は単位時間、単位体積あたりの汚染質の領域内生成量、 $K_r c$ はその減衰量で、 K_r は減衰係数である。

計算領域の体積を V 、全表面積を S とし、 S は自由表面 S_1 と底面 S_2 からなるとする。三次元の有限要素法ではこの計算領域を一般に曲面でかこまれた多数の微小立体要素に分割する。本研究では、図-1のように自由表面 S_1 を多数の微小な四曲辺要素に分割し、 S_1 上の各節点を通る鉛直線を想定して、これを2～4点で分割することにより、領域全体を多数の六曲面からなる微小立体に分割する。

初期条件および境界条件をつぎのように設定する。

- a) 初期条件 $[c]_{t=0} = 0$
- b) 境界条件 S_1 上で、 $q_n = \hat{q}_n = 0$
 S_2 上で、 $q_n = \hat{q}_n \neq 0$

ここに、 q_n は計算領域の境界面における外向単位法線 $n (l_x, l_y, l_z)$ の方向の拡散流束であり、 $\hat{q}_n$ は q_n の既知量とする。

2. ガラーキン有限要素法による定式化

有限要素法では要素内の未知量 c, U, V, W をその要素内の N 個の点での値、 $c_\beta, U_\beta, V_\beta, W_\beta$ ($\beta=1, 2, \dots, N$) によってそれぞれ補間する。すなわち、次のように近似関数を設定する。本研究では $N=27$ とした。

$$\left. \begin{aligned} c_a &= N_\beta(x, y, z) \cdot c_\beta(t) \\ U_a &= N_\beta(x, y, z) \cdot U_\beta(t) \\ V_a &= N_\beta(x, y, z) \cdot V_\beta(t) \\ W_a &= N_\beta(x, y, z) \cdot W_\beta(t) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

ここに、 U, V, W は既知量であるが、計算の形式を統一するために未知量と同様の取り扱いをした。なお、総和規約を適用し、式(2)の右辺の表現は $\beta=1, 2, \dots, N$ についての総和を与えるものと

する。 $N_\alpha (X, Y, Z)$ は補間関数である。式 (2) を式 (1) に代入し、ガラーキン有限要素法によって基礎方程式の定式化を行うと次式をうる。

$$\iiint_V N_\alpha \left[\frac{\partial c_a}{\partial t} + U_\alpha \frac{\partial c_a}{\partial x} + V_\alpha \frac{\partial c_a}{\partial y} + W_\alpha \frac{\partial c_a}{\partial z} - Q_\alpha + K_r c_a - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c_a}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c_a}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c_a}{\partial z} \right) \right] dx dy dz = \iint_{S_2} N_\alpha \left(\hat{q}_n - D_n \frac{\partial c_a}{\partial n} \right) dS_2 \quad (3)$$

ここに、 V_e は有限要素の体積を表わす。なお底面上の任意点 (X, Y, Z) における汚染質の流束ベクトルを q (q_x, q_y, q_z) とすると、この法線 $\mathbf{n}$ (l_x, l_y, l_z) 方向への成分 q_n は次式で与えられる。

$$q_n = -D_n \frac{\partial c_a}{\partial n} = l_x q_x + l_y q_y + l_z q_z \quad (4)$$

$$= - \left(l_x D_x \frac{\partial c_a}{\partial x} + l_y D_y \frac{\partial c_a}{\partial y} + l_z D_z \frac{\partial c_a}{\partial z} \right) \quad (5)$$

次に式 (3) の右辺 [] 内の第 7, 8, 9 項は 2 階微分形であるが、ガウスの定理によって微分階数を低下すると、

$$\iiint_V N_\alpha \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c_a}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c_a}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c_a}{\partial z} \right) \right] dx dy dz = \iint_{S_e} N_\alpha \left(l_x D_x \frac{\partial c_a}{\partial x} + l_y D_y \frac{\partial c_a}{\partial y} + l_z D_z \frac{\partial c_a}{\partial z} \right) dS_e - \iiint_V \left(D_x \frac{\partial c_a}{\partial x} \frac{\partial N_\alpha}{\partial x} + D_y \frac{\partial c_a}{\partial y} \frac{\partial N_\alpha}{\partial y} + D_z \frac{\partial c_a}{\partial z} \frac{\partial N_\alpha}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (6)$$

ここに、 S_e は要素の表面積を表わす。式 (4), (5) を式 (6) に代入し、結果を式 (3) に代入すると次式をうる。

$$\left[\iiint_V \left\{ N_\alpha \left(\frac{\partial c_a}{\partial t} + U_\alpha \frac{\partial c_a}{\partial x} + V_\alpha \frac{\partial c_a}{\partial y} + W_\alpha \frac{\partial c_a}{\partial z} - Q_\alpha + K_r c_a \right) + D_x \frac{\partial c_a}{\partial x} \frac{\partial N_\alpha}{\partial x} + D_y \frac{\partial c_a}{\partial y} \frac{\partial N_\alpha}{\partial y} + D_z \frac{\partial c_a}{\partial z} \frac{\partial N_\alpha}{\partial z} \right\} dx dy dz \right] + \Gamma_\alpha = 0 \quad (7)$$

ここに、 Γ_α は次式で与えられる。

$$\Gamma_\alpha = - \iint_{S_e} N_\alpha \hat{q}_n dS_2 \quad (8)$$

3. ラグランジュ族二次要素の適用

一般に $x y z$ 座標系において、六つの微小曲面よりなる微小立体図形は変数変換式

$$\left. \begin{aligned} x &= N_\alpha (\xi, \eta, \zeta) \cdot x_\alpha \\ y &= N_\alpha (\xi, \eta, \zeta) \cdot y_\alpha \\ z &= N_\alpha (\xi, \eta, \zeta) \cdot z_\alpha \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

によって $\xi \eta \zeta$ 座標系の微小図形 $A B C D - E F G H$ に変換することができる。ここに、この図形は図-2 のように座標の原点を中心とする辺長 2 の立方体とする。すなわち、 $\xi \eta \zeta$ 系は自然座標であり、 $N_\alpha (\xi, \eta, \zeta)$ はこの場合の形状関数である。なおこの場合、 ξ, η, ζ 軸方向は $x y z$ 軸方向と対応しており、図-2 の要素の 27 個の節点 ($\xi_\alpha, \eta_\alpha, \zeta_\alpha$; $\alpha=1, 2, \dots, 27$) は $x y z$ 系の微小立方体の 27 個の節点 ($x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$; $\alpha=1, 2, \dots, 27$) に対応している。

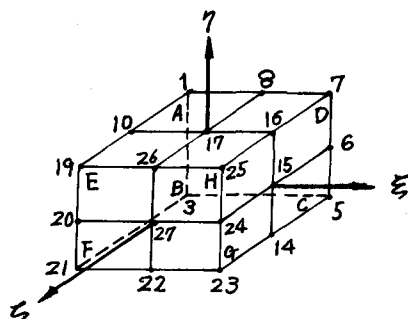


図-2 自然座標系 (/)

三次元のラグランジ族二次要素では自然座標系における立方体の8個の頂点、各辺の中点、各面および立体の重心など合計27個の節点の値によって要素内部の点の未知量を補間する。図-3はこの要素の節点番号とその座標を示す。本研究ではアイソパラメトリック要素を用い、式(2)の補間関数 N_β は式(9)の形状関数 N_α と一致するものとする。ラグランジ族二次要素の形状関数 N_α ($\alpha=1,2,\dots,N=27$)の具体的関数形は文献(2)による。

4. 空間積分

式(7)に式(2)を代入し、式(9)によって自然座標系に変換すると次式をうる。

$$\begin{aligned} & \int_{\xi}^+ [\dot{C}_\beta \int_{-1}^+ N_\alpha N_\beta \det[J] d\xi d\eta d\zeta + C_\beta \int_{-1}^+ \{ N_r U_r N_\alpha \frac{\partial N_\beta}{\partial x} \\ & + N_r V_r N_\alpha \frac{\partial N_\beta}{\partial y} + N_r W_r N_\alpha \frac{\partial N_\beta}{\partial z} + K_r N_\alpha N_\beta + D_x \frac{\partial N_\alpha}{\partial x} \frac{\partial N_\beta}{\partial x} \\ & + D_y \frac{\partial N_\alpha}{\partial y} \frac{\partial N_\beta}{\partial y} + D_z \frac{\partial N_\alpha}{\partial z} \frac{\partial N_\beta}{\partial z} \} \det[J] d\xi d\eta d\zeta - Q_0 \cdot \\ & \int_{-1}^+ N_\alpha \det[J] d\xi d\eta d\zeta] + \Gamma_\alpha = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

ここに $\dot{C}_\beta$ の・記号は時間微分を示し、 $\det[J]$ はヤコビアン行列 $[J]$ の行列式であり、行列 $[J]$ は次のように与えられる。

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_\alpha}{\partial \xi} x_\alpha & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \xi} y_\alpha & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \xi} z_\alpha \\ \frac{\partial N_\alpha}{\partial \eta} x_\alpha & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \eta} y_\alpha & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \eta} z_\alpha \\ \frac{\partial N_\alpha}{\partial \zeta} x_\alpha & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \zeta} y_\alpha & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \zeta} z_\alpha \end{bmatrix} \quad (11)$$

なお、形状関数 $N_\alpha(\xi, \eta, \zeta)$ は式(9)によって x, y, z の関数でもあり、 N_α を ξ, η, ζ について微分したのち、 $\partial N_\alpha / \partial x, \partial N_\alpha / \partial y, \partial N_\alpha / \partial z$ について解くと次式をうる。

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_\alpha}{\partial x} & \frac{\partial N_\alpha}{\partial y} & \frac{\partial N_\alpha}{\partial z} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} J \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial N_\alpha}{\partial \xi} & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \eta} & \frac{\partial N_\alpha}{\partial \zeta} \end{bmatrix}^T \quad (12)$$

式(11)、(12)によって式(10)に含まれる被積分関数は要素内の任意点 (ξ, η, ζ) に関する既知関数となるが、これの積分は一般に困難で、普通、Newton-Cotes, Gauss-Legendre法などの数値積分法が用いられる。ここでは精度上ですぐれている後者の方法を用いる。要素内積分点の個数を $L=27$ とし、この方法を式(10)に適用すると

$$\begin{aligned} & \int_{\xi}^+ [\dot{C}_\beta \sum_{i=1}^L \{ N_\alpha N_\beta \det[J] W_i \} + C_\beta \sum_{i=1}^L \{ (N_r U_r N_\alpha \frac{\partial N_\beta}{\partial x} + N_r V_r N_\alpha \frac{\partial N_\beta}{\partial y} + N_r W_r N_\alpha \frac{\partial N_\beta}{\partial z} \\ & + K_r N_\alpha N_\beta + D_x \frac{\partial N_\alpha}{\partial x} \frac{\partial N_\beta}{\partial x} + D_y \frac{\partial N_\alpha}{\partial y} \frac{\partial N_\beta}{\partial y} + D_z \frac{\partial N_\alpha}{\partial z} \frac{\partial N_\beta}{\partial z}) \det[J] W_i \} \\ & - Q_0 \sum_{i=1}^L (N_\alpha \det[J] W_i)] + \Gamma_\alpha = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

ここに、 W は各積分点の重みを表わす²⁾。なお図-3に積分点 $\otimes$ の配置を示した²⁾。

5. 時間積分

式(13)の $[\]$ 内は要素ごとに評価される量であるが、かりにこれを M_α とおくと次式をうる。

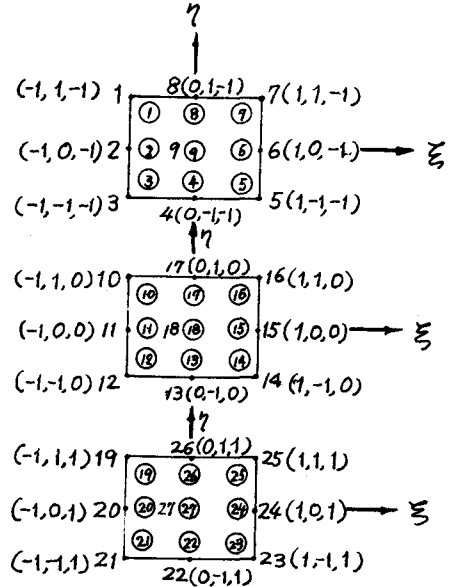


図-3 節点番号と座標

$$C_{\alpha\beta} \cdot \dot{C}_\beta + F_{\alpha\beta} \cdot C_\beta + E_\alpha \stackrel{\Delta}{=} M_\alpha \quad (14)$$

ここに、 $C_{\alpha\beta}$ および $F_{\alpha\beta}$ はそれぞれ $\dot{C}_\beta$ および C_β の係数行列であり、 E_α は C_β について定数である。時間積分に Forward Implicit Scheme を採用すると

$$\{C_{\alpha\beta, k+1} + \Delta t F_{\alpha\beta, k+1}\} C_{\beta, k+1} - \{C_{\alpha\beta, k}\} C_{\beta, k} + \Delta t E_{\alpha, k+1} \stackrel{\Delta}{=} \Delta t M_\alpha \quad (15)$$

この関係を式 (13) に代入して M_α を消去すると

$$\sum_e \{C_{\alpha\beta, k+1} + \Delta t F_{\alpha\beta, k+1}\} C_{\beta, k+1} = \sum_e \{C_{\alpha\beta, k} \cdot C_{\beta, k} - \Delta t E_{\alpha, k+1}\} - \Gamma_\alpha \Delta t \quad (16)$$

ここに、 k は時間レベルを表わす。

6. 溶出流束

底面からの溶出流束による寄与は式 (8) で与えられるが、底面 S_2 を細分して面要素 S_{2*} に分割すると、式 (8) は次式となる。

$$\Gamma_\alpha = - \iint_{S_2} N_\alpha \hat{q}_n dS_2 = - \sum_{e*} \iint_{S_{2*}} N_\alpha \hat{q}_n dS_{2*} \quad (17)$$

この場合、立体要素はその極限と考えられる一曲面要素によっておきなおすることができる。すなわち、上式は

$$\Gamma_\alpha = - \sum_{e*} \iint N_\alpha \hat{q}_n dS_{2*} \quad (18)$$

図-4 は一曲面微小要素 e_* の自然座標系による要素表現であり、
この場合の形状関数 $N_{\alpha*}$ ($\alpha = 1, 2, \dots, 9$) はもとの立体要素の関係形状関数 $N_1, N_{12}, N_3, N_4, N_5, N_{14}, N_{23}, N_{22}, N_{13}$ において、 $7 = -1$ とおくことによってえられる。²⁾

この場合の変数変換は、

$$\left. \begin{aligned} \chi &= N_{\alpha*}(\xi, \zeta) \chi_\alpha \\ z &= N_{\alpha*}(\xi, \zeta) z_\alpha \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

で与えられ、ヤコビアン行列 $[J]_*$ は次式のようにになる。

$$[J]_* = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{\alpha*}}{\partial \xi} \chi_\alpha & \frac{\partial N_{\alpha*}}{\partial \xi} z_\alpha \\ \frac{\partial N_{\alpha*}}{\partial \zeta} \chi_\alpha & \frac{\partial N_{\alpha*}}{\partial \zeta} z_\alpha \end{bmatrix} \quad (20)$$

$\hat{q}_n$ を一定とし、式 (19), (20) を用いて、式 (18) を自然座標系に変換すると、

$$\Gamma_\alpha = - \sum_{e*} \hat{q}_n \iint_{S_{2*}} N_{\alpha*} dS_{2*} = - \sum_{e*} \hat{q}_n \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} N_{\alpha*} \det[J]_* d\xi d\zeta \quad (21)$$

となり、Gauss-Legendre の数値積分法を用いると、

$$\Gamma_\alpha = - \sum_{e*} \hat{q}_n \sum_{i=1}^{L*} [N_{\alpha*} \det[J]_* W_*]_i \quad (22)$$

ここに、 $L_* = 9$ および W_* は積分点の個数および重みである。²⁾ なお、図-4 に節点番号 ($\alpha = 1, 2, \dots, 9$) の配置とその座標および積分点 $\textcircled{\alpha}$ の配置を示した。

7. 計算

図-1 に示すように、例えば大阪湾全域を計算領域とすることが

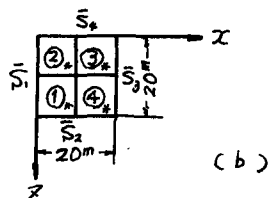
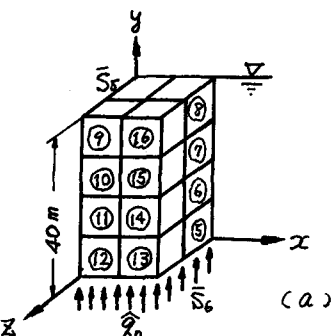
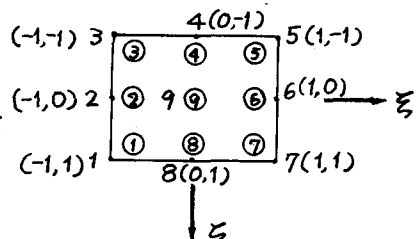


図-5 水柱モデル

目標であるが、本研究ではその前段階として、次の条件のもとで計算を実行した。

7. / 計算条件

a) モデルの設定 図- / の閉水域モデルを鉛直水柱の集合体であるとみなし、その部分水域として図- 5 のような水底面20m × 20m、水深40m の水柱モデルを設定した。立体要素数16、節点数225で、底面要素数4、節点数25である。

b) 初期条件 $[c]_{t=0} = 0$

c) 境界条件 底泥からの溶出物質として $\text{NH}_4^+ - \text{N}$ をとりあげた。海底からの溶出についての二三の実測結果によると、溶出の最大流量は $\hat{q}_{n, \max} = 55 \sim 80 \text{ mg/m}^2 \cdot \text{day}$ である⁴⁾。本研究ではこれを考慮して、 $\hat{q}_n = 50 \text{ mg/m}^2 \cdot \text{day}$ とした。

図- 5 に示すように水柱モデルの全表面積を $\bar{S} = \bar{S}_1 + \bar{S}_2 + \bar{S}_3 + \bar{S}_4 + \bar{S}_5 + \bar{S}_6$ として、境界条件をつぎのように設定した。

1) $\bar{S}_1 + \bar{S}_2 + \bar{S}_3 + \bar{S}_4 + \bar{S}_5$ で $q_n = \hat{q}_n = 0$

2) $\bar{S}_6$ で、 $q_n = \hat{q}_n = 50 \text{ mg/m}^2 \cdot \text{day}$

d) $U = V = W = 0, Q_0 = 0, K_r = 0$

7. 2 計算結果

拡散係数 D_x, D_y, D_z の設定は不明の点が多く、そのこと自体が大きな研究課題である。近海域の実測値によると $D_x = 5 \sim 20 \text{ m}^2/\text{sec}$ 程度の値が報告されている。本研究では計算の出発点として、 $D_x = D_y = D_z = 20 \text{ m}^2/\text{sec} = 1.728 \times 10^6 \text{ m}^2/\text{day}$ を使い、 D_y のみを三段階にかえ、 $D_y = 1.728 \times 10^3, 1.728 \times 10^2, 1.728 \times 10 \text{ m}^2/\text{day}$ とした。時間ステップを $\Delta t = 0.5 \text{ day}$ として計算を実行した。底面の中心点を通る鉛直線上の濃度分布を示すと、それぞれ図- 6, 7, 8 となる。濃度分布の特性は底面上の各節点を通る鉛直線上でこれらの図と同一となった。すなわち、X 方向および Z 方向には完全拡散とみてよい。これらの図によると、図- 6 の $D_y = 1.728 \times 10^3 \text{ m}^2/\text{day}$ では Y 方向（水深方向）にはほぼ完全拡散されているが、

図- 7 とくに図- 8 の $D_y = 1.728 \times 10 \text{ m}^2/\text{day}$ となると、各時刻の濃度分布が顕著に現われ、拡散が著しく遅滞することがわかる。つぎに図- 9 は拡散開始後4.5 dayのみの資料をとり、 D_y をパラメーターとして、水深方向の濃度分布を示した。これによると、 D_y が増大すると、 $y = 15 \text{ m}$ 附近を限度として、 $y < 15 \text{ m}$ では濃度が減少し、 $y > 15 \text{ m}$ ではそれが増大することがわかる。このことは図- 10によってより明らかである。図- 10は図- 9と同じ資

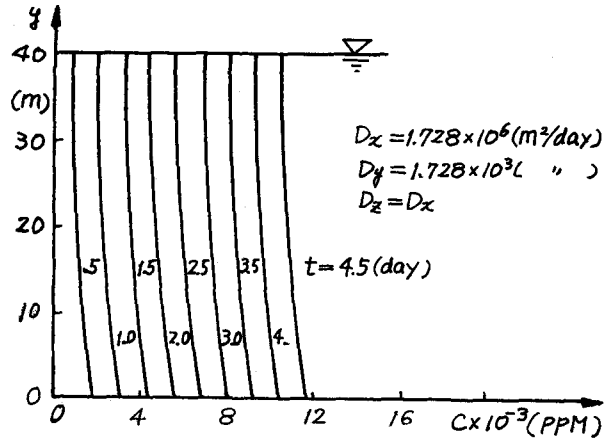


図- 6 y 方向の濃度分布 (1)

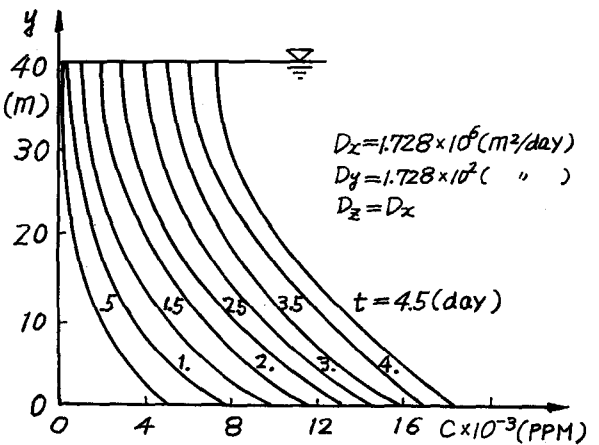


図- 7 y 方向の濃度分布 (2)

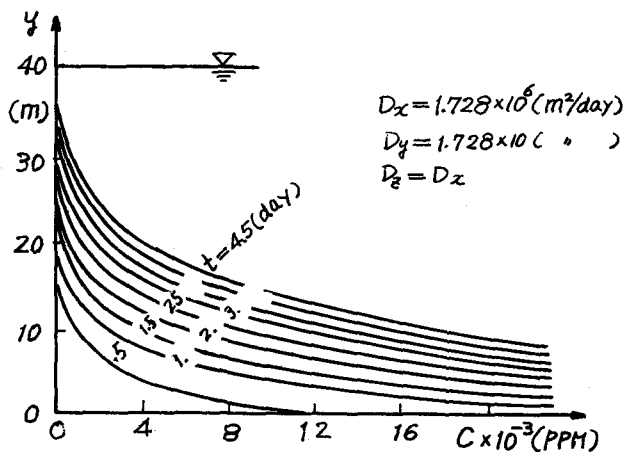


図- 8 y 方向の濃度分布 (3)

料を用いて、 Dy を横軸、 y 座標をパラメーターとして濃度分布を示した。 Dy が増加すると水底、 $y = 0\text{ m}$ では濃度 C は減少し、水面近く、 $y = 25\text{ m}$ では反対に濃度が增大することがわかる。 $Dy > 2.0 \times 10^3 \text{ m}^2/\text{day}$ の状態では y 座標に関係なく濃度は一定となり、完全拡散の状態となる。したがって濃度分布の出現は $Dy \leq 2.0 \times 10^3 \text{ m}^2/\text{day}$ の状態でのみ期待できることがわかる。一方、底泥の実資料によって汚染質の溶出実験を実施したとする。この場合、溶出開始後のある時点での深さ方向の濃度分布を測定すれば、その資料を図-10の上にプロットすることにより、この場合の Dy の値を図解によって推定することができる。図-11は水底における濃度の時間の経過による増加の状況を Dy をパラメーターとして示した。 Dy が減少するほど濃度が急速に増大することがわかる。

8. 結論

1) $Dy > 2.0 \times 10^3 \text{ m}^2/\text{day}$ では水深方向には完全拡散の状態となる。実際の水域では水深方向に濃度分布をもつのが一般であり、このことから、 Dy は $1.0 \times 10^2 \text{ m}^2/\text{day}$ のオーダーであると考えられる。

2) 実測による水深方向の濃度を図-10の上にプロットすることにより、この場合の水深方向の拡散係数 Dy を図上で概算することができる。

3) 底泥からの溶出がある場合の三次元水域における拡散現象に、ガラーキン有限要素法を適用し、限られた条件下であるが、一応のアルゴリズムを完成した。

参考文献

- 1) 松梨順三郎, 中井茂喜, 春名誠治, FEMによる大阪湾・湾内・湾外の潮流解析, (財)建設工学研究所報告, 第21号, 昭和54年11月.
- 2) 松梨順三郎, 藤信明, 底泥からの溶出物質の三次元拡散について, (財)建設工学研究所報告, 第22号, 昭和55年11月.
- 3) Zienkiewicz O. C.: The Finite Element Method, Third Edition, MCGRAW-HILL, 1977.
- 4) 中西弘, 浮田正夫, 底泥からの窒素・リンの溶出機構について, 土木学会第29回年講, 昭和49年.

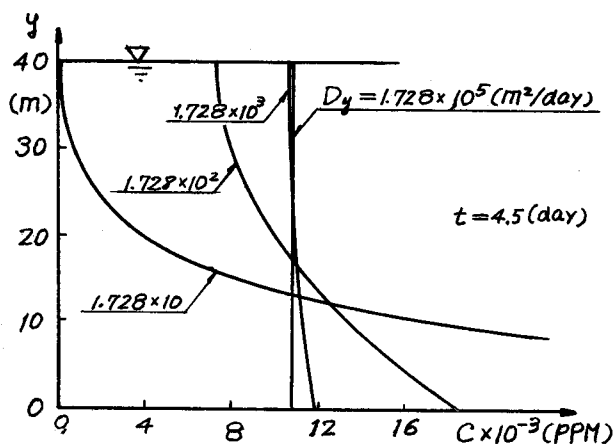


図-9 y 方向の濃度分布 (4)

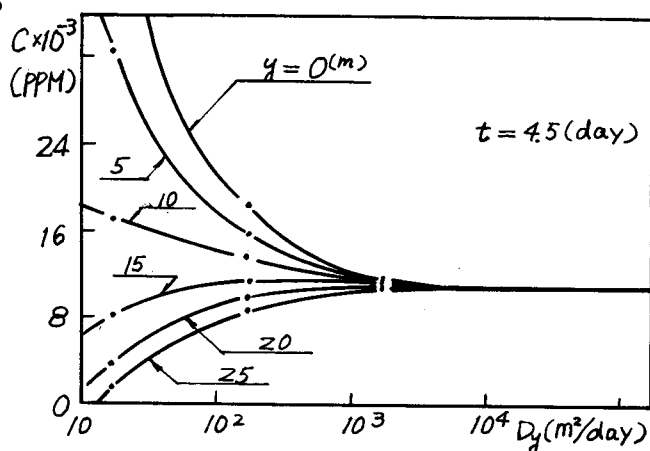


図-10 Dy の変化による濃度分布の変化

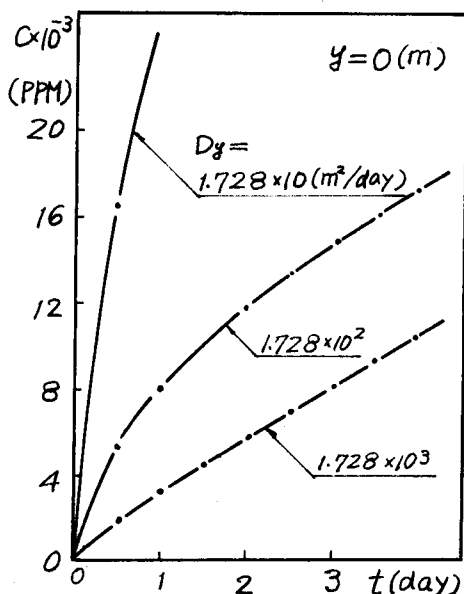


図-11 水底濃度の時間的变化