

## B-1 環境分野におけるモデルシミュレーション数値解析のための

## 直交選点有限要素法の新規開発と応用

函館工業高等専門学校環境都市工学科

○大久保孝樹

## 1. はじめに

現在、一般的な数値計算手法として、差分法と有限要素法が主に用いられている。有限要素法は、境界が曲線でも追従できることと境界条件の設定が容易なことが利点であるが、差分法に比べ安定性に劣ることが言われており、両者において一長一短がある。

本研究では、古典的な重み付き残差法的一种である直交選点法を有限要素法に応用し、2次元空間と時間の離散化手法としての直交選点有限要素法を開発した。直交選点法の利点として、非線形の定式化が容易なこと、直交選点において正解に近い値が得られること、任意形状の要素を作成できること、高精度である高次の計算が容易であることなどがあげられる。我々が扱っている環境分野では、水や気体の流れを記述する運動方程式と保存式、物質の移流拡散反応を記述する物質保存式、熱を扱うエネルギー保存式、微生物集塊の増殖を表す運動方程式(力学方程式)と保存式などがモデル式として用いられる。環境分野におけるこれらのモデル式は、物質・微生物の多様性により複雑に連成されたモデルとなることが多く、モデルを詳細に記述しようとするとき非線形性を無視できなくなる。直交選点法における非線形性の記述の容易さを考えると、今後、複雑な環境分野の諸現象を記述するモデルの数値計算において、利便性をもたらすものと考えられる。

ここでは、移流拡散反応方程式の直交選点有限要素法に定式化について説明するとともに、2基質制限の拡散層を含んだ生物膜モデルを応用例に挙げる。応用例については、今後、より難易度の高い偏微分方程式に直交選点有限要素法を用いていく考えである。

## 2. 直交選点有限要素法について

## 2.1. 直交選点法による定式化

直交選点法は重みつき残差法的一种であり、直交多項式によって作られた微分方程式の残差を選点で0となるようにする。直交選点法は、その選点の位置を直交多項式の根としている。ここでは、ルジャンドルの直交多項式の根を用いた。座標 $\xi-\eta$ を用い、式(4)における無次元移流拡散反応方程式の基質S、酸素Cを直交関数で表現すると、2次元の直交多項式は1次元の直交多項式の積として表される。以下、Sのみに関して表示するが、Cに関しても同様の表示となる。

$$S = \left( \sum_{i=1}^{n_1+2} a_i \xi^{i-1} \right) \left( \sum_{j=1}^{n_2+2} b_j \eta^{j-1} \right) \quad (1)$$

上式は、次式と同等である。

$$S = \sum_{i=1}^{n_1+2} \sum_{j=1}^{n_2+2} d_{ij} \xi^{i-1} \eta^{j-1} \quad (2)$$

式(3)は、(2)式における直交多項式のベクトルと行列による偏微分表示であり、基質Sの偏微分が偏微分作用素行列A, B, Cによって容易に表示されていることがわかる。

式(3)を、式(4)の無次元移流拡散方程式に代入すると偏微分が偏微分作用素行列に置き換わり、

$$\begin{array}{ll} \frac{\partial S}{\partial \xi} = \overline{D_\xi Q}^{-1} \overline{S} = \overline{A_\xi} \overline{S} & \overline{S} = \overline{Q} \overline{d} \\ \frac{\partial S}{\partial \eta} = \overline{D_\eta Q}^{-1} \overline{S} = \overline{A_\eta} \overline{S} & \frac{\partial S}{\partial \xi} = \overline{D_\xi} \overline{d}, \quad \frac{\partial S}{\partial \eta} = \overline{D_\eta} \overline{d} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} = \overline{E_\xi Q}^{-1} \overline{S} = \overline{B_\xi} \overline{S} & \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} = \overline{E_\xi} \overline{d}, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial \eta^2} = \overline{E_\eta} \overline{d} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \eta^2} = \overline{E_\eta Q}^{-1} \overline{S} = \overline{B_\eta} \overline{S} & \frac{\partial S}{\partial \xi \partial \eta} = \overline{F_\xi} \overline{d} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi \partial \eta} = \overline{F_\xi Q}^{-1} \overline{S} = \overline{C_\xi} \overline{S} & \end{array}$$

式(3) : (2)式における多項式の偏微分表示行列A,B,Cが偏微分作用素となっている

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial t} + P_{ecu} u \frac{\partial S}{\partial x} + P_{ecu} v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + \phi_1 R_S &= 0 \\
D_{sfc} \frac{\partial C}{\partial t} + P_{ecu} u \frac{\partial C}{\partial x} + P_{ecu} v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \phi_2 R_S &= 0 \\
D_{sfs} \frac{\partial S}{\partial t} + P_{ecu} u \frac{\partial S}{\partial x} + P_{ecu} v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} &= 0 \\
D_{sfc} \frac{\partial C}{\partial t} + P_{ecu} u \frac{\partial C}{\partial x} + P_{ecu} v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} &= 0 \\
\left( P_{ecu} u S - \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left( P_{ecu} v S - \frac{\partial S}{\partial y} \right) m \\
= \left( \frac{P_{ecu} u C}{D_{sfs}} - \frac{1}{D_{sfs}} \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left( \frac{P_{ecu} v C}{D_{sfs}} - \frac{1}{D_{sfs}} \frac{\partial S}{\partial y} \right) m \\
\left( P_{ecu} u C - \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left( P_{ecu} v C - \frac{\partial C}{\partial y} \right) m \\
= \left( \frac{P_{ecu} u C}{D_{sfc}} - \frac{1}{D_{sfc}} \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left( \frac{P_{ecu} v C}{D_{sfc}} - \frac{1}{D_{sfc}} \frac{\partial C}{\partial y} \right) m
\end{aligned}$$

式(4)：生物膜・拡散層・境界条件における  
無次元移流拡散反応方程式モデル

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial S}{\partial \xi} \\ \frac{\partial S}{\partial \eta} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \eta^2} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi \partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} & \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} & \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 & \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 & 2 \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \\ \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} & \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} & \left( \frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 & \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 & 2 \left( \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} & \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} & \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left( \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) & \left( \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left( \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) & \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial S}{\partial x} \\ \frac{\partial S}{\partial y} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi \partial \eta} \end{bmatrix}$$

式(6)：局所座標系から一般座標系への変換  
マトリックス

(5)式のように定式化される。任意形状の要素に  
対応するため、局所座標系から一般座標系への  
座標変換マトリックスを直交選点法によって、  
式(6)のように作成した。式(4)を式(3)(6)を用い  
て一般座標系で直交選点法によって定式化すると  
式(7)のようになる。

## 2.2. 有限要素法による重ね合わせ

ガラーキン法のような積分表示された有限要素  
法では、要素周辺の境界条件が線積分で表示され  
ており、重ね合わせられることによって線積分が  
自動的に相殺され満足されることになる。直交選  
点有限要素法では、偏微分方程式は境界上で満足  
されず、境界条件で要素間をつなぐことになる。  
ここで、直交選点上の境界条件式の数と偏微分方  
程式の数の合計と未知数の数の整合性を取ると、

$$\begin{aligned}
\bar{S} + \left[ P_{ecu} u_i \bar{A}_{\xi lm} + P_{ecu} v_i \bar{A}_{\eta lm} - \bar{B}_{\xi lm} - \bar{B}_{\eta lm} + \phi_1 \frac{C_i(K_1+1)(K_2+1)}{(K_1+S_i)(K_2+C_i)} \bar{E} \right] \bar{S} &= 0 \\
D_{sfc} \bar{C} + \left[ P_{ecu} u_i \bar{A}_{\xi lm} + P_{ecu} v_i \bar{A}_{\eta lm} - \bar{B}_{\xi lm} - \bar{B}_{\eta lm} + \phi_2 \frac{S_i(K_1+1)(K_2+1)}{(K_1+S_i)(K_2+C_i)} \bar{E} \right] \bar{C} &= 0 \\
D_{sfs} \bar{S} + \left[ P_{ecu} u_i \bar{A}_{\xi lm} + P_{ecu} v_i \bar{A}_{\eta lm} - \bar{B}_{\xi lm} - \bar{B}_{\eta lm} \right] \bar{S} &= 0 \\
D_{sfc} \bar{C} + \left[ P_{ecu} u_i \bar{A}_{\xi lm} + P_{ecu} v_i \bar{A}_{\eta lm} - \bar{B}_{\xi lm} - \bar{B}_{\eta lm} \right] \bar{C} &= 0 \\
\left[ \left( P_{ecu} u_i \bar{E} - \bar{A}_{\xi lm} \right) l + \left( P_{ecu} v_i \bar{E} - \bar{A}_{\eta lm} \right) m \right] \bar{S} &= \\
1/D_{sfs} \left[ \left( P_{ecu} u_i \bar{E} - \bar{A}_{\xi lm} \right) l + \left( P_{ecu} v_i \bar{E} - \bar{A}_{\eta lm} \right) m \right] \bar{S} & \\
\left[ \left( P_{ecu} u_i \bar{E} - \bar{A}_{\xi lm} \right) l + \left( P_{ecu} v_i \bar{E} - \bar{A}_{\eta lm} \right) m \right] \bar{C} &= \\
1/D_{sfc} \left[ \left( P_{ecu} u_i \bar{E} - \bar{A}_{\xi lm} \right) l + \left( P_{ecu} v_i \bar{E} - \bar{A}_{\eta lm} \right) m \right] \bar{C} &
\end{aligned}$$

式(5)：直交選点法による無次元移流拡散反応方  
程式モデルの定式化

$$\begin{aligned}
\left[ S_i \right] + P_{ecu} u_i \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] S & \\
+ P_{ecu} v_i \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] S & \\
- \left[ J_{131} \bar{A}_{\xi lm} + J_{132} \bar{A}_{\eta lm} + J_{133} \bar{B}_{\xi lm} + J_{134} \bar{B}_{\eta lm} + J_{135} C_{\xi \eta} \right] S & \\
- \left[ J_{141} \bar{A}_{\xi lm} + J_{142} \bar{A}_{\eta lm} + J_{143} \bar{B}_{\xi lm} + J_{144} \bar{B}_{\eta lm} + J_{145} C_{\xi \eta} \right] S & \\
+ \phi_1 \frac{C_i(K_1+1)(K_2+1)}{(K_1+S_i)(K_2+C_i)} E[S] &= 0 \\
D_{sfc} \left[ C_i \right] + P_{ecu} u_i \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] C & \\
+ P_{ecu} v_i \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] C & \\
- \left[ J_{131} \bar{A}_{\xi lm} + J_{132} \bar{A}_{\eta lm} + J_{133} \bar{B}_{\xi lm} + J_{134} \bar{B}_{\eta lm} + J_{135} C_{\xi \eta} \right] C & \\
- \left[ J_{141} \bar{A}_{\xi lm} + J_{142} \bar{A}_{\eta lm} + J_{143} \bar{B}_{\xi lm} + J_{144} \bar{B}_{\eta lm} + J_{145} C_{\xi \eta} \right] C & \\
+ \phi_2 \frac{S_i(K_1+1)(K_2+1)}{(K_1+S_i)(K_2+C_i)} E[C] &= 0 \\
D_{sfs} \left[ S_i \right] + P_{ecu} u_i \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] S & \\
+ P_{ecu} v_i \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] S & \\
- \left[ J_{131} \bar{A}_{\xi lm} + J_{132} \bar{A}_{\eta lm} + J_{133} \bar{B}_{\xi lm} + J_{134} \bar{B}_{\eta lm} + J_{135} C_{\xi \eta} \right] S & \\
- \left[ J_{141} \bar{A}_{\xi lm} + J_{142} \bar{A}_{\eta lm} + J_{143} \bar{B}_{\xi lm} + J_{144} \bar{B}_{\eta lm} + J_{145} C_{\xi \eta} \right] S &= 0 \\
D_{sfc} \left[ C_i \right] + P_{ecu} u_i \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] C & \\
+ P_{ecu} v_i \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] C & \\
- \left[ J_{131} \bar{A}_{\xi lm} + J_{132} \bar{A}_{\eta lm} + J_{133} \bar{B}_{\xi lm} + J_{134} \bar{B}_{\eta lm} + J_{135} C_{\xi \eta} \right] C & \\
- \left[ J_{141} \bar{A}_{\xi lm} + J_{142} \bar{A}_{\eta lm} + J_{143} \bar{B}_{\xi lm} + J_{144} \bar{B}_{\eta lm} + J_{145} C_{\xi \eta} \right] C &= 0 \\
\left( P_{ecu} u_i S_i + \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] S \right) l & \\
+ \left( P_{ecu} v_i S_i + \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] S \right) m & \\
= \left( \frac{P_{ecu} u_i S_i}{D_{sfs}} + \frac{1}{D_{sfs}} \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] S \right) l & \\
+ \left( \frac{P_{ecu} v_i S_i}{D_{sfs}} + \frac{1}{D_{sfs}} \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] S \right) m & \\
\left( P_{ecu} u_i C_i + \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] C \right) l & \\
+ \left( P_{ecu} v_i C_i + \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] C \right) m & \\
= \left( \frac{P_{ecu} u_i C_i}{D_{sfc}} + \frac{1}{D_{sfc}} \left[ J_{111} \bar{A}_{\xi lm} + J_{112} \bar{A}_{\eta lm} + J_{113} \bar{B}_{\xi lm} + J_{114} \bar{B}_{\eta lm} + J_{115} C_{\xi \eta} \right] C \right) l & \\
+ \left( \frac{P_{ecu} v_i C_i}{D_{sfc}} + \frac{1}{D_{sfc}} \left[ J_{121} \bar{A}_{\xi lm} + J_{122} \bar{A}_{\eta lm} + J_{123} \bar{B}_{\xi lm} + J_{124} \bar{B}_{\eta lm} + J_{125} C_{\xi \eta} \right] C \right) m &
\end{aligned}$$

式(7)：一般座標系での直交選点法による(5)式の定  
式化

節点上での重ね合わせは、3要素以上重ね合わさっている場合でも、どれかの要素との1条件の重ねあわせで満足されることが、本研究で経験的にわかっている。しかし、このことは数学的に解明する必要がある。

### 2.3. 時間の離散化

本研究では直交選点法を時間刻み $\Delta t$ 要素内に用いて、直交選点有限要素法の手法を開発した。ここで用いられた従属変数 $S$ (基質)と $C$ (酸素)をひとつにまとめ $y$ という従属変数で表すことにすると、時間に関する発展方程式と直交選点法による定式化は、式(8)のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1}{\partial t} &= f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) & \overline{A}y_1 &= \overline{f}_1(t, \overline{y}_1, \overline{y}_2, \dots, \overline{y}_n) \\ \frac{\partial y_2}{\partial t} &= f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) & \overline{A}y_2 &= \overline{f}_2(t, \overline{y}_1, \overline{y}_2, \dots, \overline{y}_n) \\ &\vdots & & \\ &\vdots & & \\ \frac{\partial y_n}{\partial t} &= f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n) & \overline{A}y_n &= \overline{f}_n(t, \overline{y}_1, \overline{y}_2, \dots, \overline{y}_n) \end{aligned}$$

式(8): 時間に関する発展方程式と直交選点法による定式化

$$\begin{aligned} S &= s/S_0, \quad C = c/C_0, \quad x = x/L, \quad y = y/L \\ u &= u/U_0, \quad v = v/U_0 \\ P_{csu} &= \frac{U_0 L}{D_{cf}}, \quad P_{ecu} = \frac{U_0}{D_{cf}}, \quad P_{csD} = \frac{U_0 L}{D_c}, \quad P_{ecuD} = \frac{U_0 L}{D_c} \\ K_1 &= K_s/S_0, \quad K_2 = K_c/C_0, \\ \phi_1 &= \frac{L^2}{D_{cf} S_0} r(S_0, C_0), \quad \phi_2 = \frac{L^2}{D_{cf} C_0} \omega(S_0, C_0) \\ R_s &= \frac{r(S, C)}{r(S_0, C_0)} = \frac{SC(K_1+1)(K_2+1)}{(K_1+S)(K_2+C)} \\ D_{qcf} &= \frac{D_{cf}}{D_{cf}}, \quad D_{qf} = \frac{D_{cf}}{D_s}, \quad D_{qkc} = \frac{D_{cf}}{D_c}, \quad D_{qkc} = \frac{D_{cf}}{D_c} \\ t &= t/T_0, \quad T_0 = \frac{L^2}{D_{cf}} \end{aligned}$$

無次元化の定義式

### 3. 環境分野における応用例

グルコースと酸素の2基質制限の生物膜モデルを用い、生物膜の形態は図-1に示したものをを用いた。

#### 3.1. 膜分離活性汚泥法におけるメンブレン上の生物膜のモデル

メンブレン上の生物膜に与えるろ過の影響を調べるために、ろ過速度0m/dayと0.5m/dayについてシミュレーションを行った。拡散層を含めた生物膜モデルの厚さは35 $\mu$ mで、生物膜は25 $\mu$ m程度の凹凸を呈し分離した状態となっている。液本体の基質と酸素の濃度はそれぞれ10mg/l、2mg/lである。ろ過速度0.5m/dayの方が、メンブレン上で基質濃度が小さくなっているのが分かり、膜分離活性汚泥法で低濃度の処理水が得られる理由ではないかと考えられる。

#### 3.2. 回転円板法における非定常問題

図-3は回転円板法における水中出口部を初期条件として、基質の濃度プロファイルの変化を計算したものである。条件は、付着水を含めた生物膜モデルの厚さが280 $\mu$ m、生物膜厚200 $\mu$ m程度である。

16秒後では、空中からの酸素の浸入によって生物膜上部で基質が消費されている。これらの濃度プロファイルは条件によって異なるものである。

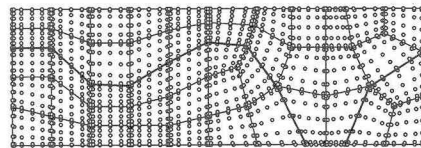


図-1 生物膜と拡散層の要素接点配置

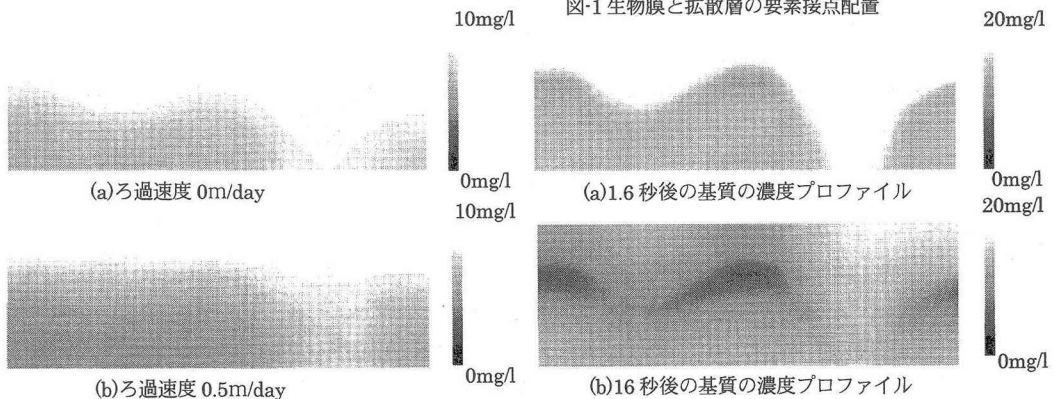


図-2 メンブレン上の生物膜・拡散層内の濃度プロファイル

図-3 回転円板法における非定常問題 (水中出口部)