移流拡散方程式の有限要素解析と境界条件に関する2, 3の考察

長谷川 賢 一　曽 田 京 三　安 藤 晴 夫
(非常勤研究員)

1　はじめに

海域における水質汚濁現象の解析や予測に，現在では数値シミュレーションという手段が普通に用いられている。しかも，シミュレーションモデルは，計算機の飛躍的な性能向上に伴って，徐々にではあるが高度化されつつある。例えば，

i）シミュレーションモデルの三次元化
ii）温度・塩分による密度流の導入
iii）生態系モデルの導入

などは，その典型的な例であろう。

さて，この種の数値シミュレーションに適用される代表的な計算手法としては，差分法（Finite Difference Method, F. D. M）及び有限要素法（Finite Element Method, F. E. M）があげられる。これら，両方法はそれぞれに特徴があり，その長所，短所を理解し，要請される問題の性質に応じて，より親和的な手法を選択し使い分けることとなろう。ここではF. D. MとF. E. Mについて論じるのではなく，計算手法の一つであるF. E. Mを通じて，移流拡散方程式の物理的解釈を行い，実際に数値シミュレーションを実施する場合の参考に資することを目的としている。

説明に用いる基礎方程式は，二次元単層モデルという空間表現の中で記述される移流拡散方程式である。ここに，二次元単層モデルとは，平面的な広がりを持つ海域を想定し，

i）海水中の圧力は静水圧分布とする。
ii）鉛直方向の流速は，水平方向の流速にくらべ十分に小さく，これを省略する。
iii）鉛直断面における水平方向流速の変化は小さいため，これを平均流速で代表させる。
iv）鉛直断面における汚濁物質濃度の変化は省略し，断面内の平均濃度で代表させる。

などの仮定を導入することにより二次元化したモデルであり，この種の数値シミュレーションモデルとしては，最も単純なモデルの一つである。

2　基礎方程式と境界条件

解析の対象として海域Ωを考える。Ωの全境界を$\partial\Omega$とおく。領域Ωにおける水深をH（x, y, t)，x方向平均流速をu（x, y, t），y方向平均流速をv（x ,y ,t）とし，濃度をC（x, y, t）とすると，物質の移流拡散方程式は，

$$\frac{\partial(HC)}{\partial t}+u\frac{\partial(HC)}{\partial x}+v\frac{\partial(HC)}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial x}\left[k\frac{\partial(HC)}{\partial x}\right]-\frac{\partial}{\partial y}\left[k\frac{\partial(HC)}{\partial y}\right]=0 \qquad (1)$$

とあらわされる。ここに，kは渦動拡散係数であり，上式では等方性を仮定している。

式(1)で，左辺第2, 3項は移流項と称され，これは海水の流れ（u, v）によって，物質が輸送される現象をあらわしている。また，左辺第4, 5項は拡散項と称される項であり，海水の流動に伴う乱れによって物質が拡がる現象をあらわしており，これは，分子拡散にくらべて時，空間スケールのオーダーがはるかに大きい現象である。

次に境界条件について考える。図1に示す海域Ωの全境界$\partial\Omega$が，$\partial\Omega^{(1)}$，$\partial\Omega^{(2)}$及び$\partial\Omega^{(3)}$によって構成されるものと考えよう。$\partial\Omega^{(1)}$～$\partial\Omega^{(3)}$は互いに重ならないものとする。ここで，$\partial\Omega^{(1)}$は連続的に外海へ広がる海域のうち，Ωという特定の海域を解析の対象として設定した場合，仮想的に定められた境界を示す。$\partial\Omega^{(2)}$は海域Ωへの河川の流入を示す。河口では河川流入量と併せて流入負荷量が与えられることになる。$\partial\Omega^{(3)}$は護岸や汀線等に該当する境界で，この境界上では，一切の物質の出入りが起こらないものとする。

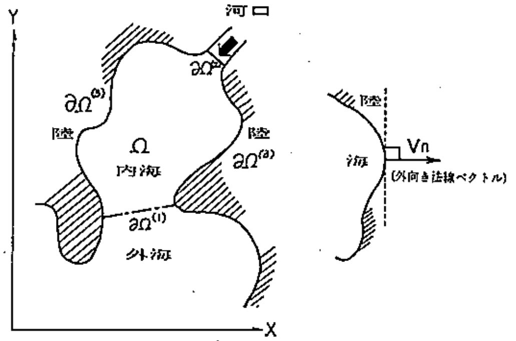

図1　境界の構成

次に，それぞれの境界条件の近似についてあらかじめ考えておく。外海との仮想境界の$\partial\Omega^{(1)}$を実際の物理現象に即して与えることは容易ではない。この境界は，海域に仮に設定したものであり，もともとこの境界上の濃度$C\Omega^{(1)}$も未知量である。しかしながら，境界値問題の解析に際して境界条件が設定できないというのは，自己矛盾に陥ってしまうことになり，何らかの工学的判断のもとに仮定せざるを得ない。そのためには，$\partial\Omega^{(1)}$の位置を問題となる海域から「十分に」遠ざけて設定することが必須の条件となる。この「十分に」が意味する内容は，$\partial\Omega^{(1)}$境界の設定内容が，多少現実からはずれているとしても，検討対象とする着目海域の解がほとんど影響を受けない程度ということになろう。さて，そのような条件を満足する境界$\partial\Omega^{(1)}$においては，境界濃度$\hat{C}\Omega^{(1)}$を与えるのが，最も単純な方法であろう。この際，境界値$\hat{C}\Omega^{(1)}$は現地観測値等に基づいて与えられる。更に，この境界値を実態に即して，上げ潮時には$\alpha_1\hat{C}\Omega^{(1)}$，下げ潮時には$\alpha_2\hat{C}\Omega^{(2)}$（$0<\alpha_1\leq 1\leq\alpha_2$）と設定するのも一つの方法であろう。いずれにしても$\partial\Omega^{(1)}$境界上では境界濃度を設定する必要がある。

$\partial\Omega^{(2)}$で与え得るのは，一般に流量$\hat{Q}$と汚濁負荷量$\hat{q}$である。一方，このような境界では，境界上で内向き直交成分の流速Vnが流量$\hat{Q}$及び潮位η (x, y, t) に対応して与えられているはずである。今，この境界における拡散項の影響（後述）を省略して考えると，

$$q=\int_A Vn\cdot CdA \tag{2}$$

なる関係が成立する。ここに，Aは$\Omega^{(2)}$の断面積であり，Cは$\partial\Omega^{(2)}$境界上の計算濃度（未知量）である。

一方，$\partial\Omega^{(3)}$境界ではすべての物質の出入りが無いことから，$\partial\Omega^{(3)}$上における移流項によるフラックスについて

$$Vn\cdot C=0 \tag{3}$$

および拡散項によるフラックスについて

$$k\cdot C,\ n=0 \tag{4}$$

なる関係が成立しなければならない。ここにC, nは濃度Cの外向き法線濃度の微分をあらわしている。

3　拡散方程式の重みつき残差方程式

F.E.Mによる解析を行うための有限要素方程式を導くためには，基礎方程式を領域全体で積分した形式を基本とする。この際，濃度ベクトルCに対する重み関数をC^*とすると，式(1)にこの重み関数を乗じて領域Sについて積分すれば，

$$\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial t}ds+\int C^*u\frac{\partial(HC)}{\partial x}ds+\int C^*v\frac{\partial(HC)}{\partial y}ds$$
$$-\int C^*\frac{\partial}{\partial x}\left[k\frac{\partial(HC)}{\partial x}\right]ds-\int C^*\frac{\partial}{\partial y}\left[k\frac{\partial(HC)}{\partial y}\right]ds=0 \tag{5}$$

とあらわされる。

ここで，左辺第4，5項に部分積分を施し，ガウスの発散定理を用いると，

$$\int C^*\frac{\partial}{\partial x}\left[k\frac{\partial(HC)}{\partial x}\right]ds+\int C^*\frac{\partial}{\partial y}\left[k\frac{\partial(HC)}{\partial y}\right]ds$$
$$=k\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial x}n_x dl+k\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial y}n_y dl$$
$$-k\int\frac{\partial C^*}{\partial x}\frac{\partial(HC)}{\partial x}ds-k\int\frac{\partial C^*}{\partial y}\frac{\partial(HC)}{\partial y}ds \tag{6}$$

とあらわされる。ここに，n_x, n_yは境界上の外向き法線ベクトルのx, y方向余弦であり，またdlは境界線に関する線積分を示す。式(6)を式(5)に代入すると，

$$\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial t}ds+\int C^*u\frac{\partial(HC)}{\partial x}ds+\int C^*v\frac{\partial(HC)}{\partial y}ds$$
$$+k\int\frac{\partial C^*}{\partial x}\frac{\partial(HC)}{\partial x}ds+k\int\frac{\partial C^*}{\partial y}\frac{\partial(HC)}{\partial y}ds$$
$$=k\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial x}n_x dl+k\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial y}n_y dl \tag{7}$$

なる積分方程式（重みつき残差方程式と呼ばれる）が得られる。

今，領域Ωを三角形（有限要素）の部分領域に分割し，一つの三角形要素内の任意の点（x，y）における諸量を，三角形の頂点（節点）における値を用いて以下に示すように内挿する。

$$\left.\begin{aligned} C^*(x,y,t) &= \sum_{\alpha=1}^{3} \phi_\alpha C^*_\alpha(x,y,t) \\ C(x,y,t) &= \sum_{\alpha=1}^{3} \phi_\alpha C_\alpha(x,y,t) \\ u(x,y,t) &= \sum_{\alpha=1}^{3} \phi_\alpha u_\alpha(x,y,t) \\ v(x,y,t) &= \sum_{\alpha=1}^{3} \phi_\alpha v_\alpha(x,y,t) \\ H(x,y,t) &= \sum_{\alpha=1}^{3} \phi_\alpha H_\alpha(x,y,t) \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

ここに$\phi\alpha$は内挿関数であり，αは三個の節点をあらわしている。式(8)を式(7)に代入し，領域Ωの全ての要素について積分し，更にC^*の任意性を利用することにより，一般的な有限要素方程式が導かれる。本文は，有限要素方程式の解法を導くことが目的ではないので，この種の操作については割愛する。

4　境界条件の表現と物理的意味

式(7)にみられる境界積分

$$k\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial x}n_x\,dl + k\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial y}n_x\,dl \tag{9}$$

は境界における拡散項によるフラックスk（HC），nをあらわしている。領域Ω内部の隣り合う要素の境界では，式(9)の絶対値は等しく符号が逆になるので，互にキャンセルして自動的に零になるため，方程式からこの項を消去してさしつかえない。

さて，$\partial\Omega^{(1)}$の境界では先述したように境界濃度$\hat{C}$が与えられるとしよう。そうするとこの境界では与えられた濃度$\hat{C}$に応じて式(9)も満足する形式で，

$$q = Vn \cdot H\hat{C} + k(H\hat{C}),n$$

なるフラックスの流入出が生じることになる。ここに，Vnは$\partial\Omega^{(1)}$境界上の外向き法線方向流速ベクトルである。その結果，このような境界では流れによる物質の流入出$Vn \cdot H\hat{C}$と拡散による物質の流入出$k(H\hat{C}),n$の両者によって物質が移動していることが理解される。一般には，$Vn \cdot H\hat{C}$によって境界上の物質の移動が行われると受け取られがちであるが，流れが停止している領域に負荷量が与えられている場合を想定すると流れによる物質移動は零となり，拡散による物質の移動がなければ領域内の濃度は一方的に上昇することになり，現実からかけはなれてしまうことが理解されよう。このように，仮想境界上では拡散によってもk$(H\hat{C})$, nなる形式で物質の出入りが行われるのである。

次に，$\partial\Omega^{(3)}$上の境界を考える。この境界では，物質の出入りがいっさい行われないように条件を設定しなければならない。移流拡散方程式の解を求めるに際しては，事前に流れの場u（x，y，t），v（x，y，t）が求められるが，この際，$\partial\Omega^{(3)}$上の境界では$\mathbf{V},n=0$として計算が既に実行されているはずである。すなわち，流れによる流入出$\mathbf{V}n \cdot HC$は，もともと零である。一方，式(9)に示した拡散によるフラックスの項は，この項を式(6)から省略することによって自動的に満足される。このように，$\partial\Omega^{(3)}$境界上では，特別の操作や入力を施すことなく，

$$q = \mathbf{V}n \cdot HC + k(HC),n = 0 \qquad \text{on} \quad \partial\Omega^{(3)} \tag{10}$$

なる関係が容易に満足されるのである。

三番目に，$\partial\Omega^{(2)}$上の境界を検討しよう。これまで述べた境界条件では，$\partial\Omega^{(2)}$上はk（HC），n＝0となっており，拡散項によるフラックスの出入りが無い状態である。ここで式(7)の左辺第2，3項に再び部分積分を施し，ガウスの発散定理を用いると，

$$\int C^*u\frac{\partial(HC)}{\partial x}ds + \int C^*v\frac{\partial(HC)}{\partial y}ds = -\int\frac{\partial C^*}{\partial x}(uHC)ds - \int\frac{\partial C^*}{\partial y}(vHC)ds + \int C^*(uHC\cdot n_x + vHC\cdot n_y)dl \tag{11}$$

とあらわされる。ここで，$\partial\Omega^{(2)}$の属する要素について，式(7)の移流項を式(11)におきかえると，

$$\begin{aligned} &\int C^*\frac{\partial(HC)}{\partial t}ds - \int\frac{\partial C^*}{\partial x}(uHC)ds - \int\frac{\partial C^*}{\partial y}(vHC)ds \\ &\quad + k\int\frac{\partial C^*}{\partial x}\frac{\partial(HC)}{\partial x}ds + k\int\frac{\partial C^*}{\partial y}\frac{\partial(HC)}{\partial y}ds \\ &= -\int C^*(uHC\cdot n_x + vHC\cdot n_y)dl \\ &\quad + k\int C^*\left\{\frac{\partial(HC)}{\partial x}n_x + \frac{\partial(HC)}{\partial y}n_y\right\}dl \end{aligned} \tag{12}$$

となる。$\partial\Omega^{(2)}$上で与えられる単位長さ当たりの流入負荷量$\hat{q}$を式(12)右辺と等しいとおけば，

$$\hat{q} = -(uHC\cdot n_x + vHC\cdot n_y) + k\int C^*\left[\frac{\partial(HC)}{\partial x}n_x + \frac{\partial(HC)}{\partial y}n_y\right]dl \qquad (13)$$

となり，正に移流項及び拡散項によって，負荷量$\hat{q}$が流入することに該当し，物理的な現象と調和的な境界条件の表現がなされていることが理解されよう。

一方，このような式の変形を施した要素の境界（辺）のうち，他の要素と隣り合う境界については，隣接する要素に適用される方程式について式(11)の変形がなされていないので，この辺上で物質の収支がとれない。そこで，このような辺については，式(12)の右辺第一項を左辺に移項し，隣り合う要素との間で物資の収支を満足するように方程式を修正しなければならない。このような操作は$\partial\Omega^{(2)}$境界に属する辺を有する要素についてのみなされればよいのである。

さて，一般に河川等から流入する汚濁負荷量は流量に着目地点の濃度を乗じたものと考えがちである。実際には式(13)の形式の方が厳密であり，F.E.Mの利点の一つは，基礎式を積分表示することにより，境界条件の物理性を損なうことなく，容易にこのような条件を表現できる点にあると思われる。式(13)の方が厳密であることは，流れが停止しており，物質だけが投入される状態を想像すれば容易に解釈されるであろう。但し，一般には流れによって流入する負荷量の方がはるかにオーダーが大きいので，上述したような考え方がとられるのである。

5 むすび

移流拡散方程式の数値計算に際しての境界条件について，F.E.Mを用いて考察し，海水中の物質の境界における移動には，移流によるものと拡散によるものとがあることを示した。境界における汚濁負荷量の流入出に関して移流，拡散の両現象を考慮しなければならないということは，沿岸海域の数値シミュレーションを行おうとする場合や数値シミュレーションを用いた環境アセスメント結果を審査したりするうえで大切なことである。