

## 移流分散解析入門

### 8. オイラリアン・ラグランジアン法による移流分散解析

菱 谷 智 幸 (ひしや ともゆき)

(株)ダイヤコンサルタント ジオエンジニアリング事業部

#### 8.1 はじめに

水溶性汚染物質が地盤中を移動・拡大する移流分散現象を予測・評価する代表的な解析方法として、6章ではLagrangeの方法である粒子追跡法と7章ではEulerの方法である有限要素法について説明された。粒子追跡法は地下水流速が早く移流が卓越した現象の評価に適した手法であり、有限要素法のようなEuler法は地下水流速が比較的遅く分散が卓越した現象の評価に適した手法である。この両者の長所を組み合わせた解析手法として特性曲線法<sup>1)</sup>(Method of Characteristic)やオイラリアン・ラグランジアン法<sup>2),3)</sup>(Eulerian-Lagrangian Numerical Method)（以下、EL法）がある。移流項に対して移動粒子、分散項に対して差分法を用いるのが特性曲線法である。これと比較して移流項に対して有限要素メッシュの節点を移動粒子として扱い、分散項を有限要素法で求めるのがEL法である。EL法では移流項、分散項ともに有限要素メッシュの有効利用が可能であり、見かけ上、有限要素法と同様に使うことが出来る。ここでは、EL法による移流分散解析の解析手法について説明する。

#### 8.2 EL法の基礎

ここで取り扱う移流分散方程式を式(8.1)に示す。

$$R\theta\rho \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \theta\rho v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - R\theta\rho\lambda c - Q_c \quad (8.1)$$

ここに、 $R$ ：遅延係数 $[-]$ 、 $\theta$ ：体積含水率 $[-]$ 、 $\rho$ ：流体密度 $[ML^{-3}]$ 、 $D_{ij}$ ：分散テンソル $[L^2T^{-1}]$ 、 $c$ ：濃度（正規化濃度、比濃度） $[-]$ 、 $v_i$ ：間隙内流速 $[LT^{-1}]$ 、 $\lambda$ ：減衰定数 $[T^{-1}]$ 、 $Q_c$ ：源泉項（解析領域内の湧出し、吸出し） $[ML^3T^{-1}]$ 、 $t$ ：時間 $[T]$

##### 8.2.1 移流と分散の分離

式(8.1)をNeuman<sup>2)</sup>の手法を用いて移流項と分散項を分離する。移流項を計算するには、「移流分散解析入門 6. 粒子追跡法による移流分散解析」で説明された運動している流体とともに移動するLagrange座標系による流体力学的微分（式(8.2)）を用いると取り扱いやすい。

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (8.2)$$

式(8.2)の流速 $v_i$ の代わりに遅延係数を含めた $v_i/R$ を用いると流体力学的微分は式(8.3)となる。

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{v_i}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (8.3)$$

式(8.1)の濃度 $c$ に対して式(8.3)を用いてLagrange座標系に変換すると式(8.4)となる。

$$\begin{aligned} R\theta\rho \left( \frac{dc}{dt} - \frac{v_i}{R} \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \theta\rho v_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - R\theta\rho\lambda c - Q_c \end{aligned} \quad (8.4)$$

式(8.4)の左辺第2項と右辺第2項は等しいことから、濃度 $c$ の時間 $t$ に対する全微分は式(8.5)となる。

$$R\theta\rho \frac{dc}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - R\theta\rho\lambda c - Q_c \quad (8.5)$$

ここで、濃度 $c$ を移流に関する濃度と分散に関する濃度に分けると仮定する（式(8.6)）。

$$c(x_i, t) = \bar{c}(x_i, t) + \tilde{c}(x_i, t) \quad (8.6)$$

式(8.5)の移流に関する項に式(8.6)を代入すると式(8.7)となる。

$$\begin{aligned} R\theta\rho \frac{d(\bar{c} - \tilde{c})}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - R\theta\rho\lambda(\bar{c} - \tilde{c}) - Q_c \\ R\theta\rho \frac{d\bar{c}}{dt} + R\theta\rho \frac{d\tilde{c}}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right) - R\theta\rho\lambda\bar{c} - R\theta\rho\lambda\tilde{c} - Q_c \end{aligned} \quad (8.7)$$

式(8.7)から移流による濃度 $\bar{c}$ の項のみ取り出し（左辺第1項と右辺第2項），整理すると移流項が抽出された移流の式(8.8)が得られる。

$$\frac{d\bar{c}}{dt} = -\lambda\bar{c} \quad (8.8)$$

また、式(8.4)を用いて式(8.5)から式(8.8)に相当する移流による濃度を除いた分散方程式は次式となる。

$$R\theta\rho \left( \frac{dc}{dt} - \frac{d\bar{c}}{dt} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \right) - R\theta\rho\lambda(c - \bar{c}) - Q_c \quad (8.9)$$

##### 8.2.2 初期条件と境界条件

式(8.8)、(8.9)のように分離された移流項と分散項に対して、移流項の式の条件を先に満足させてからその残りである分散の式の初期条件、境界条件を満足させる。

###### (1) 移流項

式(8.8)に与える初期条件は式(8.10)とし、移流の濃度の初期濃度は全濃度の初期分布に等しいとする。

$$\bar{c}(x_i, 0) = c(x_i, 0) \quad (8.10)$$

また、境界条件は式(8.11)とする。

$$v_i \bar{c}(x_i, t) \hat{n} + \alpha \{c(x_i, t) - c_b(x_i, t)\} = Q_b(x_i, t) \quad (8.11)$$

## 講 座

ここで、 $\hat{n}$ は法線方向の単位ベクトル、 $c_b$ は境界濃度、 $Q_b$ は境界での源泉項（湧出し、吸出し）、である。 $\alpha$ は境界の濃度が既知 ( $\alpha=\infty$ ) か流入出量が既知 ( $\alpha=0$ ) かの条件を表す。

## (2) 分散項

式(8.9)に与える初期条件は式(8.12)とし、分散の濃度の初期濃度はゼロとする（式(8.13)）。

$$R\theta\rho \frac{dc}{dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) - R\theta\rho\lambda\bar{c} - Q_b + \bar{g}$$

$$\bar{g} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) - R\theta\rho\lambda\bar{c} \quad \dots \dots \dots \quad (8.12)$$

$$\bar{c}(x_i, 0) = 0 \quad \dots \dots \dots \quad (8.13)$$

また、境界条件を式(8.14)に示す。

$$-\left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} - v_i \bar{c} \right) \hat{n} + \alpha c = \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) \hat{n} \quad \dots \dots \dots \quad (8.14)$$

このように移流項に対して式(8.10)、(8.11)を先に満足させてから、式(8.12)、(8.13)を分散項に与えることで順次移流分散方程式を移流と分散、それぞれの初期値・境界値問題に分離して解く。

## 8.3 離散化

## 8.3.1 移流方程式の離散化

移流による濃度を求めるため、Single-Step Reverse Particle Tracking (以下、SRPT 法) を用いる<sup>3)</sup>。以下に一次元の場合を例にして図-8.1にその手順を示す。

図-8.1の縦軸が濃度、横軸が一次元方向の  $x$  座標を表している。図中上段の縦軸・横軸がこれから求める時間  $t^{k+1}$  における一次元モデルであり、白丸の  $n_1 \sim n_6$  の節点と①～⑤の要素から構成されている。下段は上段の前時間  $t^k$  における一次元の濃度分布を表している。流速  $v_x$  は図中右方向への流れを設定している。EL 法では、各節点を移動粒子に見立てて移流による濃度分布を求める。SRPT 法では、上段の時間  $t^{k+1}$  の時、各節点座標  $x_n$  に位置する移動粒子は下段の前時間  $t^k$  のどの位置

（初期座標）から移流してきたか（軌跡の後退／逆送）を考える。この移流に対する逆経路を示しているのが、上段から下段に向けられた実線黒矢印である（例えば上段の節点  $n_4$  の座標  $x_4$  から、下段の要素③にある座標  $x_4^k$  への逆経路）。この逆経路による初期座標は次式で求められる。

$$x_n^k = x_n - \int_k^{k+1} \frac{v}{R} dt \quad \dots \dots \dots \quad (8.15)$$

次に式(8.15)で求められた各節点に対応した初期座標  $x_n^k$  を含む要素に着目し、時間  $t^k$  における濃度分布（下段点線）から  $x_n^k$  における濃度を次式のように要素を構成する  $M$  個の節点濃度に対する形狀関数  $N$  を用いた補間により初期濃度  $c_n^k$  を求める。

$$c_n^k(x_i, t) = \sum_{m=1}^M c_m(t) N_m(x_i) \quad \dots \dots \dots \quad (8.16)$$

例えば下段の初期座標  $x_4$  は、要素③に含まれ、要素③を構成する節点  $n_3, n_4$  の濃度  $c_3^k, c_4^k$  から一次元要素の形狀関数を用いて補間し、初期濃度  $c_4^k$  を求める（下段、上向きの実線白矢印）。この初期濃度  $c_4^k$  が上段の時間  $t^{k+1}$  における節点の  $n_4$  に移流により輸送された濃度  $\bar{c}_4^{k+1}$  となる。この移流の経路の過程で減衰により変化する移流の濃度は、式(8.8)を式(8.17)のように変数分離し、時間  $t^k$  から  $t^{k+1}$  で積分することで式(8.18)のように求めることが出来る（下段から上段への破線黒矢印）。

$$\frac{1}{\bar{c}} d\bar{c} = -\lambda dt \quad \dots \dots \dots \quad (8.17)$$

$$\bar{c}_n^{k+1} = c_n^k \exp \left( - \int_k^{k+1} \lambda dt \right) \quad \dots \dots \dots \quad (8.18)$$

上記の手順を全節点に対して行うことにより、移流による濃度変化を求めることが出来る。

## 8.3.2 分散方程式の離散化

式(8.9)で示した移流による濃度変化を除いた分散方程式を式(8.12)～(8.14)の初期条件、境界条件を満足するため、ガラーキン法（移流分散解析入門 7. オイラー法による移流分散解析—有限要素法—参照）を用いると

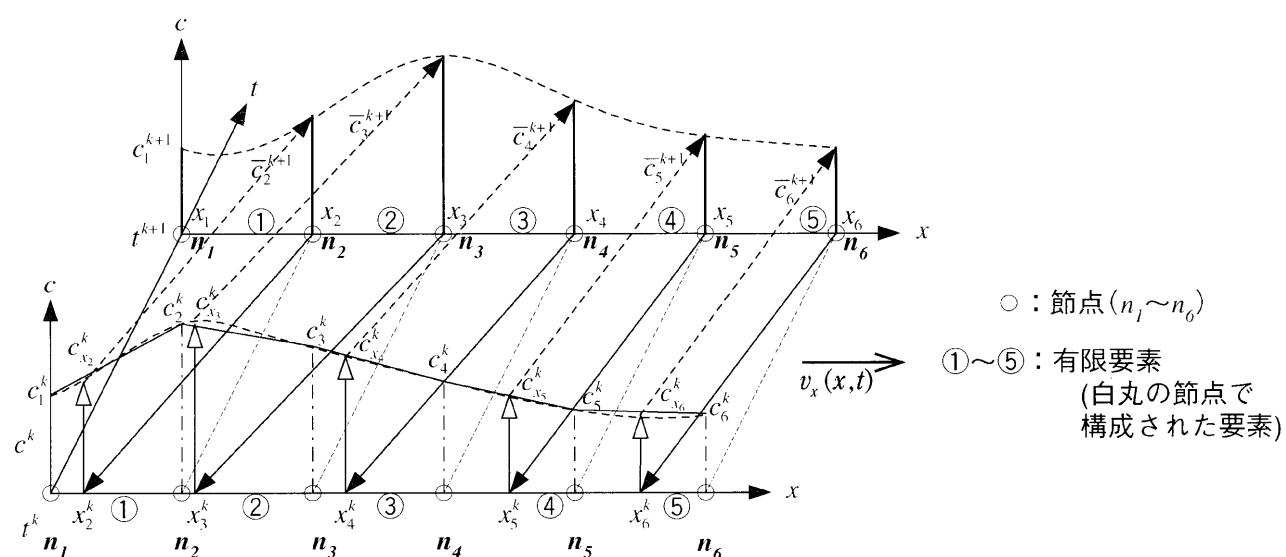


図-8.1 一次元モデルによる SRPT 法の概略

式(8.19)となる。

$$\int_v N_n \left[ R\theta\rho \left( \frac{dc}{dt} - \frac{d\bar{c}}{dt} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta\rho D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + R\theta\rho \lambda (c - \bar{c}) - Q_c \right] dv = 0 \quad \dots \dots \dots (8.19)$$

ここに,  $N_n$ : 形状関数

式(8.19)の左辺第1項を式(8.20)のように近似する。

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{dc_n}{dt} - \frac{d\bar{c}_n}{dt} \right) dv \quad \dots \dots \dots \quad (8.20)$$

また、式(8.20)の右辺の時間項を式(8.21), (8.22)で近似する。

式(8.19)の左辺第2項にグリーンの第1定理を用いると式(8.23)が得られる。

次に式(8.19)の左辺第3項を次式で近似する。

$$\int_v N_n \theta \rho \lambda R(c - \bar{c}) dv \doteq (c_n - \bar{c}_n) \int_v N_n (\theta \rho \lambda R) dv \quad \dots \quad (8.24)$$

最後に式(8.19)に式(8.20)～(8.24)を用いてマトリクス表示すると式(8.25)が導かれる。

$$\left. \begin{aligned}
 W_{nm} &= \left( \frac{dc_m}{dt} - \frac{d\bar{c}_m}{dt} \right) - G_{nm} c_m + L_{nm} (c_m - \bar{c}_m) - Q c_n = 0 \\
 G_{nm} &= \sum_{e=1}^M \theta_k \rho_l D_{ij} \int_V N_k N_l \frac{\partial N_n}{\partial x_i} \frac{\partial N_m}{\partial x_j} dv \\
 W_{nm} &= \sum_{e=1}^M R^e \theta_k \rho_l \int_V N_k N_l N_n N_m dv \\
 L_{nm} &= \sum_{e=1}^M R^e \lambda^e \theta_k \rho_l \int_V N_k N_l N_n N_m dv \\
 Q c_n &= \sum_{e=1}^M \left\{ \hat{N} N_n \theta_k \rho_l \left( -N_k N_l D_{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x_i} \right) d\Gamma \right\} \dots \dots \quad (8.25)
 \end{aligned} \right\}$$

### 8.3.3 時間項の取扱い

式(8.25)は特定の時間に対してガラーキン法を用いて定式化したものであり、時間とともに変化する現象を取り扱うため時間微分項に何らかの近似を行う必要がある。このため、時間微分項を式(8.26), (8.27)のように時間増分  $\Delta t$  を用いて差分近似を行う。

$$\frac{dc_m}{dt} = \frac{\omega c_m^{k+1} + (1-\omega)c_m^k}{At^k} \quad \dots \quad (8.26)$$

$$\frac{d\bar{c}_m}{dt} = \frac{\omega \bar{c}_m^{k+1} + (1-\omega) \bar{c}_m^k}{At^k} \quad \dots \quad (8.27)$$

ここに,  $k$ : 時間ステップ ( $\Delta t^k = t^{k+1} - t^k$ ),  $\omega = 1/2$ : 中央差分,  $\rho = 1$ : 後退差分

式(8.25)に式(8.26), (8.27)を代入すると次式となる。

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \omega (G_{nm} + L_{nm}) + \frac{W_{nm}}{\Delta t} \right\} c_m^{k+1} \\
 & = - (1 - \omega) (G_{nm} + L_{nm}) c_m^k + \left( \omega L_{nm} + \frac{W_{nm}}{\Delta t} \right) \} \bar{c}_m^{k+1} \\
 & + (1 - \omega) L_m \bar{c}_m^k - Q_{Cn} \quad \dots \dots \dots \quad (8.28)
 \end{aligned}$$

移流項と分散項を分離しないオイラーの手法では、式(8.28)の  $G_{nm}$  に相当する係数マトリクスに式(8.1)右辺第2項の移流項が含まれるため非対称となるが、EL法では分散項のみの対称マトリクスであり、すべての係数マトリクスが対称になるため、計算に必要なメモリー容量が半分となるメリットがある。

## 8.4 計算方法

ここでは、前節で説明してきた EL 法による移流分散方程式の計算手順について示す。図-8.2 にフロー図を示す。

- Step0 移流分散解析を行うために必要な地下水水流速度分布の設定を原位置調査結果や浸透流解析から行う。

Step1 解析領域の地盤構造、有限要素分割、物性値、境界条件など解析条件に関する情報を設定。

Step2 時間増分から計算時間を設定する ( $t = t + \Delta t$ )。

Step3 移流による節点濃度を計算するための対象節点の設定 ( $n = n + 1$ )。

Step4 SRPT 法を用いて、節点の座標には移流によりどこから濃度が運ばれてきたか初期座標  $x_n^k$  の計算を行う (式(8.15))。

Step5 初期座標を含む要素の形状関数を用いて要素構成節点濃度から初期座標における初期濃度  $c_n^k$  を求める (式(8.16))。

Step6 初期濃度  $c_n^k$  が移流の軌跡間で起こる減衰による濃度変化を計算し、対象節点の移流の濃度  $\bar{c}_n^{k+1}$  を求める (式(8.17), (8.18))。

Step7 Step3 に戻って、移流による濃度を Step4~6 の手順で行う。全節点について計算したら次のステップに進む。

Step8 オイラー法（有限要素法）を用いて分散方程式を解くため、移流による濃度を初期条件として設定する。

Step9 対象要素の設定 ( $m = m + 1$ )。

Step10 各要素係数マトリクス  $G_{nm}$ ,  $W_{nm}$ ,  $L_{nm}$  を計算し、全体マトリクスに組み込む。

Step11 Step9 に戻り、次の要素について Step10, 11 の手順を繰り返し、全要素について計算が終わったら次のステップに進む。

Step12 全体マトリクスに境界条件を考慮する。

Step13 対称マトリクスを解き、濃度  $c_n^{k+1}$  を求める。

Step14 Step2 に戻り、濃度  $c_n^{k+2}$  を求めるために Step3~13 を計算する。最終計算時間まで進んだら終了する。

## 講 座

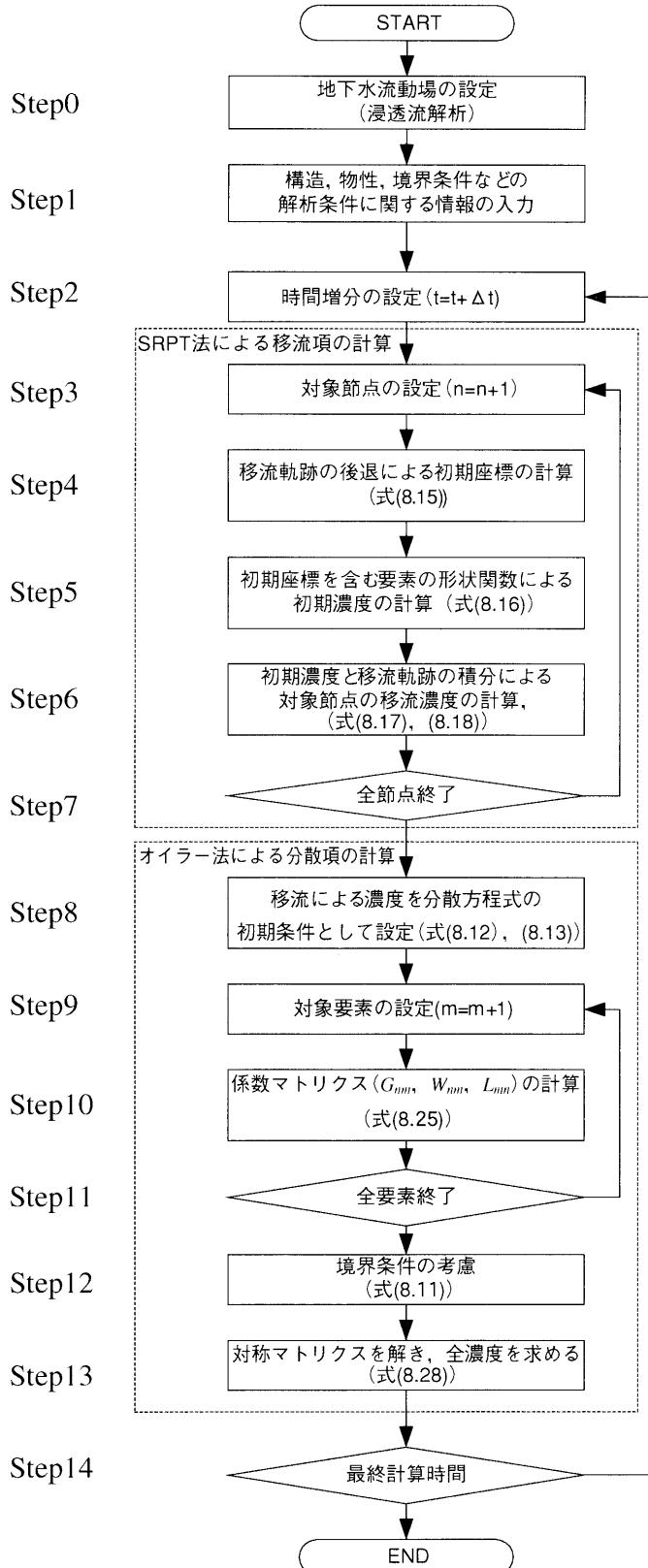


図-8.2 EL 法による計算手順

## 8.5 解析精度の向上

移流分散解析の解析精度を向上するためには、濃度分布が急変するような領域に対して細かい有限要素分割が必要となる。しかし地下水の流れとともに濃度分布の急変部も移動するため、細かい有限要素分割が必要な領域も移動してしまう。このような状況に対してオイラー法

では、解析領域全体を細かく要素分割することで対応可能であるが、解析規模が増大するため実際に計算することが困難である。

ここでは、解析領域全体を細かく要素分割するのではなく、EL 法による移流分散解析の解析精度を効率良く向上させる手法として Modified Continuous Forward Particle Tracking 法（以下、MCFPT 法）について説明する<sup>4)</sup>。

図-8.1 に示す SRPT 法では、初期座標における初期濃度の補間精度は要素分割の精度に支配されてしまう。このため、図-8.3 に示すように濃度分布が要素分割の間で急変するような場合、急変部に黒丸で示す連続移動粒子を元々の有限要素分割に配置し、この連続移動粒子を追加節点と見なし、有限要素分割の細分割を行うことで補間精度を向上することが出来る。以下に、図-8.3 を用いてその手順を示す。

図-8.3 の縦軸が濃度、横軸が一次元方向の  $x$  座標を表しており、図-8.1 の要素②～④を取り出している。図中上段の縦軸・横軸がこれから求める時間  $t^{k+1}$  における一次元モデルであり、下段は上段の前時間  $t^k$  における一次元の濃度分布を表している。図-8.1 と異なるのは下段濃度分布が要素③で急変しており、白丸の節点のみでは濃度分布を正確に扱えない状況を想定していることである。MCFPT 法では、この要素③の濃度急変部に黒丸の連続移動粒子 ( $n_{3-1} \sim n_{3-3}$ ) を追加配置し ( $x_{p1}^k \sim x_{p3}^k$ )、濃度分布が正確に扱えるように連続移動粒子に対して濃度分布 ( $c_{p1}^k \sim c_{p3}^k$ ) を事前に与えておく。

次に連続移動粒子を内側に含む要素③を節点  $n_3$ 、連続移動粒子  $n_{3-1}(p1), n_{3-2}(p2), n_{3-3}(p3)$ 、節点  $n_4$  を用いて要素(3-1), (3-2), (3-3)に細分割しておく。この細分割された要素分割をベースに SRPT 法を行う。

上段の節点  $n_4$  の初期座標を SRPT 法で  $x_4^k$  と求め、初期濃度を要素③ではなく、細分割された要素(3-2)の構成節点  $n_{3-1}, n_{3-2}$  の濃度  $c_{p1}^k, c_{p2}^k$  に対して要素(3-2)の形状関数を用いて初期濃度  $c_{p4}^k$  を求めることで、濃度の急変部に対応した精度良い初期濃度を求めることが出来る。

この SRPT 法による時間  $t^{k+1}$  の移流濃度の計算が終わったら、この連続移動粒子を今度は逆送ではなく流速分布に乗せ、図中上段の時間  $t^{k+1}$  における位置まで移動させる。この作業により、濃度分布の急変部に対応するための連続移動粒子を濃度分布も含めて自動的に時間  $t^{k+1}$  の濃度急変部に再配置することが出来る。

最後に時間  $t^{k+1}$  (図中上段) で再配置された連続移動粒子が含まれる要素③, ④で要素ごとに、要素③では節点  $n_3$ 、連続移動粒子  $n_{3-1}(p1)$ 、節点  $n_4$  で要素(3-1), (3-2)に、要素④では節点  $n_4$ 、連続移動粒子  $n_{4-1}(p2), n_{4-2}(p3)$ 、節点  $n_5$  を用いて(4-1), (4-2), (4-3)に細分割し、この要素ごとに細分割された有限要素分割に対して式(8.28)の分散方程式を解くことで、濃度分布の急変部に対応した精度良い濃度分布を求めることが出来る。

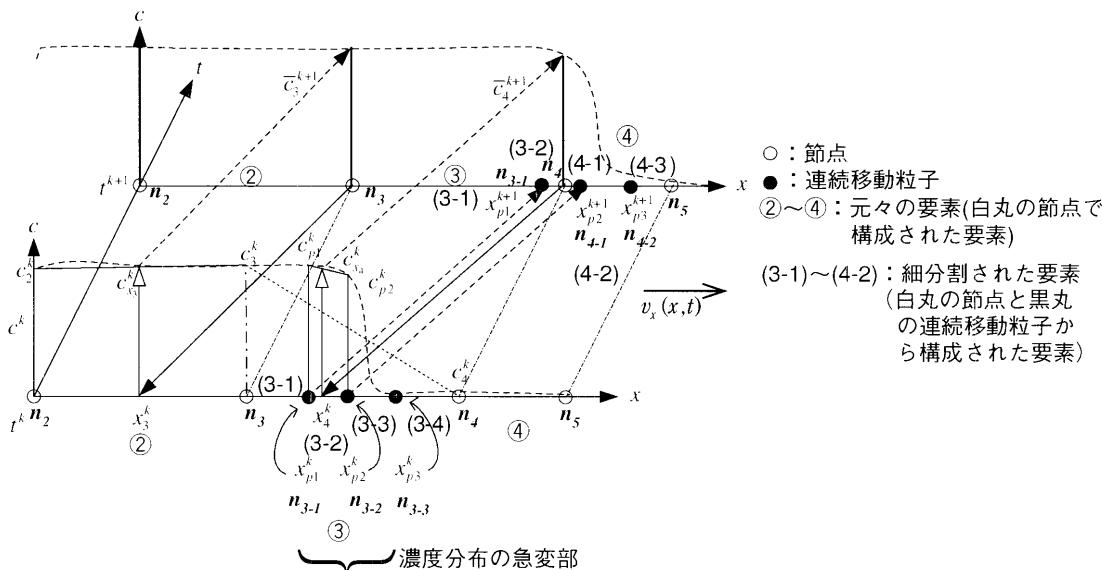


図-8.3 一次元モデルによる MCFPT 法の概略

なお、要素ごとに細分割を行うのは、地盤の不均質性を考慮するため、要素で設定された物性値（土質境界、物性境界等）を細分割に反映させるためである。このように MCFPT 法を各時間で繰り返すことで濃度分布に対して時間的・空間的に適切な離散化を行うことが出来る。この手順を図-8.2 の EL 法による計算手順に当てはめると以下のように手順が追加される。

Step1' 初期濃度分布が大きく変化する付近（例えば、汚染源周辺）に連続移動粒子を配置する。

Step4' MCFPT 法(1)：初期座標を含む要素に連続移動粒子がある場合、要素を節点と連続移動粒子を使って細分割する。

Step7' MCFPT 法(2)：すべての連続移動粒子を流れ場とともに時間  $t^{k+1}$  の位置まで移動させる。

Step7" MCFPT 法(3)：時間  $t^{k+1}$  において連続移動粒子を含む要素を要素単位で細分割し、オイラー法による分散項の計算のため、有限要素分割を再構成する。

## 8.5 おわりに

本章では EL 法で移流分散方程式を解く場合の Lagrange の方法と Euler の方法を組み合わせる基本的な考え方について説明した。ここでは、一次元モデルを用いて説明した。EL 法では、一見扱う時間が前後し複雑そうな手順であるが、移流と分散を分離し、移流に

して分散と同様に有限要素分割を有効利用した直感的な手法と言える。

EL 法は計算精度や数値安定性が良い反面、計算時間がかかっていたが、計算効率の向上がなされオイラー法と同等の計算時間で解析が可能になってきている<sup>5)</sup>。また、二次元や三次元モデルによる解析コードも公開されていることから、他の解析手法と比べながら地下水汚染予測解析などに利用していただきたい<sup>6)</sup>。

## 参考文献

- 1) 神野健二編著：地下水中の物質輸送数値解析、九州大学出版会, pp. 13~46, 2001.
- 2) Neuman, S.P.: A Eulerian-Lagrangian Numerical Scheme for Dispersion-Convection Equation Using Conjugate Space-Time Grids, J. of Computation Physics, 41, pp. 270~294, 1981.
- 3) 西垣 誠：地下水数値計算法(13) 2-4. 物質輸送のその他の解析法—オイラリアン・ラグランジアン法 (EL 法) 一, 地下水学会誌, pp. 265~276, 1991.
- 4) 西垣 誠・菱谷智幸・橋本 学・河野伊一郎：飽和・不飽和領域における物質移動を伴う密度依存地下水の数値解析手法に関する研究, 土木学会論文集, No. 511/III-30, pp. 135~144, 1995.
- 5) 菱谷智幸・西垣 誠・橋本 学：物質移動を伴う密度依存地下水の三次元数値解析手法に関する研究, 土木学会論文集, No. 638/III-49, pp. 59~69, 1999.
- 6) <http://gel.civil.okayama-u.ac.jp/download/>