

## 混相流体における複雑移流拡散現象を表す数学モデルの展開と 数値計算の信頼性解析

研究代表者	研 究 員	大 春 慎之介	(中央大学理工学部)
共同研究者	研 究 員	杉 山 高 一	(中央大学理工学部)
共同研究者	研 究 員	松 下 貢	(中央大学理工学部)
共同研究者	研 究 員	山 田 正	(中央大学理工学部)
共同研究者	客員研究員	小 林 良 和	(新潟大学工学部)
共同研究者	客員研究員	高 橋 匡 康	(宇宙航空研究開発機構)
共同研究者	客員研究員	有 馬 敏 幸	(本田技術研究所)
共同研究者	客員研究員	松 浦 義 則	(広島市立大学情報科学部)
共同研究者	準 研 究 員	テブス ダンカン	(中央大学理工学部)

### 1 はじめに

高度に進化し多様化した現代社会においては、益々深刻化しつつある海洋汚染や大気汚染などの環境問題、広く先端医療に関連して注目されている生命科学の問題、人類社会の国際化とグローバル化に伴って組織的に対処する必要がある感染症の問題など、人類が総力を上げて取り組まなければならない多くの問題が生じている。

本 2002 年度共同研究では、これらの問題に対処するための 1 つの有効な接近法として、これらの問題に特有の現象を数学モデルとして表現して解析し、計算機シミュレーションを援用して現象のメカニズムや支配法則を理解することにより有効な対策法を提案していくことについて検討した。このような数学的接近法は、延いては人類の存続を支える現代科学技術を健全な形で発展させ、現代社会に寄与していく上で 1 つの有効な方法であることが期待される。本研究においては、地球環境に様々な形態で存在する混相流体に関する数学理論を高度化し、併せて混相流体における移流反応拡散現象を記述する数学モデルを開発すると共に、これらのモデルに基づく数値シミュレーションの手法と数値計算の信頼性解析について理論的研究を進めた。

本報告では、特に海洋汚染に起因する沿岸海洋における微生物の生態系異変の典型である赤潮の形成に関する話題、並びに環境流体中の汚染現象の評価・予測と生物による環境修復技術の開発に焦点を当て、これらの現象のダイナミクスを数学モデルの形に表現し、実在に近い状況で数値シミュレーションを行い、そのメカニズムを解明する体系的な研究の方法と実際の対策法を提案することについて考察した。

環境に関する問題は、大別して大気に関するもの、大地に関するもの、海洋に関するものがあり、すべてに涉って

その環境劣化の状況は重大かつ深刻化している。これらの問題は、地球環境という複雑な構造を持ち多様に変動する大規模物理系の中で生じている現象に関するものであるが、その中の多くは人類社会の発展のために高度化した科学技術や社会制度に基づく大規模な生産・消費活動により顕在化したものであり、いずれも人類が自らその解決に向けて努力するべきものである。他方、自然界における現象は様々な素過程が複雑な形で関係しながら推移するものと理解されているが、それらの研究には素過程という部品に分解できてその結合体の働きとして考える機械論と、全体として動き要素に分解して研究することは無理であるとする有機体論の 2 つの立場がある。本研究では、対象とする現象は限定するものの有機体論の立場から現象を捉え、これに対して数学的接近を試みようとするものである。これらの大規模複雑現象については、いずれの問題にしてもその体系的な取り扱いには科学技術全分野を横断する協力が必要である。

### 2 赤潮形成予測モデルの開発

海洋は、その塩分濃度や温度分布の不均質性に加え、様々な成分が含まれていることから、典型的な多成分混相流体である。本研究では、まず、沿岸海洋動態を特徴付ける海洋動態モデルを開発すると共に、沿岸海洋動態と微生物の生態系異変に多様な相互作用を持つ生物の生態系の一例として、沿岸海洋における有害赤潮プランクトンの生態モデルについて検討した。赤潮プランクトンが生息する沿岸海洋は複雑な環境流体であるため、その生態は大気・海洋の相互作用、海水の温度分布と塩分濃度の変化、栄養塩の産生過程と濃度分布の変化、循環流など、季節変化にも密接に関係する様々な環境流体因子に強く依存する。ここでは、

このような生命現象を記述する数学モデルと海洋モデルを結合させて赤潮形成予測モデルを開発し、海洋汚染や赤潮による沿岸漁業が受ける被害に対する対策法を立案し、具体的な環境保全修復法を提案していくことについて研究を進めた。

有害赤潮プランクトンとして知られる渦鞭毛藻の 1 種ヘテロカプサは、植物性で光合成により澱粉を合成する。日中は海面付近に移動し、夜間は栄養塩を摂取するために海底に向かって沈降する。夏季における沿岸海洋の安定成層形成期においては、海水の湧昇運動が生じにくい。従って、栄養塩は上層において少なく下層において豊富になるので、この種のプランクトンにとってこのような日周鉛直運動は重要である。増殖は一日約一回主として夜間に行われる。光合成と栄養塩の摂取は、ヘテロカプサにとって細胞分裂を行う上で必須である。また、細胞分裂は遺伝子が主要な役割を演じる現象であり、これを記述する数学モデルを立てることはこの方面における研究の主要課題の 1 つになっている。また、このような生命現象が進行している環境流体においては成層の形成を始め、渦や乱れの時間発展の解析は興味ある課題であり、これらの複雑現象を研究するためには精度保障付き数値計算が必須である。

ヘテロカプサの生態は、その生活史を含めて十分に解明されていない。従って、その生態系モデルは現在得られている知見や観測結果のみに基づいて定式化する必要がある。生態系は季節変化に伴う環境因子に依存するので、その数学モデルは赤潮プランクトンの生態を記述する生物モデルと沿岸海洋動態を特徴付ける混相流体モデルを結合させて定式化する。このようなモデルに基づく数値シミュレーションを行うことにより、沿岸海洋におけるヘテロカプサの生態や生活史を現象論的に研究できるようになる。

ここで用いる数学モデルは、

- (1) 多成分流体としての沿岸海洋の動態モデル、
- (2) 生命現象が進行している領域の境界を定める境界条件と境界データ、
- (3) プランクトンの生態系モデル、

を組み合わせで定式化される。

(1) の海洋動態モデルとしては、非圧縮性流体の基礎方程式に、流体の流れ場に依存する塩分濃度と温度の移流拡散方程式、自由表面である海面の運動を定める界面方程式を導入し、これらの方程式系に、静水圧平衡の条件や状態方程式、コリオリ力などの地球規模の力の効果を組み合わせ、流体運動に伴う様々なエネルギーの散逸効果を表し方程式系に含まれる拡散係数を定めるための乱流モデルを導入したものをを用いた。元来乱流モデルは、流体の支配方程

式によって決定論的に定まる渦運動や複雑な乱れを統計力学的に取り扱おうとする付加的モデルとして理解されるが、数値流体力学の観点から見れば数値計算の数値的安定性を得る上で有効なものと考えられて居り、今後さらに研究を進めていく必要がある。

(2) の境界モデルは、海洋の自由表面である海面、河川や陸地によって形成される陸岸、様々な沈殿物の生物化学反応現象が進行する海底、またヘテロカプサの密度が低い沖合いを現象が進行する領域の境界を、海底における反応拡散系、地形を表す物理的境界条件、大気と海洋の相互作用を表す自由表面の境界条件を用いて定式化したものである。現象に適合する物理パラメータを選定し境界データを同定することは、現象の観測の立場からも数値シミュレーションを行う立場からもとくに重要であり、赤潮形成予測モデルに含まれる係数を定める上で最も労力と時間を要する作業である。

(3) の本研究で新しく開発した赤潮形成モデルは、文献 [2] に記述したように、ヘテロカプサ活性相及び休眠相の珪藻類に加えて動物性プランクトンの細胞の密度分布の時間変化を中心とし、河川や海底から供給される栄養塩の分布、珪藻類や動物性プランクトンとの生物間相互作用、植物性プランクトンの光合成と溶存酸素の分布、デトリタスの沈殿反応過程、底泥からの栄養塩の産生と溶出過程などプランクトンを中心とする沿岸海洋の中での生命活動を支える生物化学的な相互作用などを考慮し、プランクトンの生態系モデルを物質循環系の立場から包括的に記述する 13 の移流反応拡散方程式系として定式化される。このモデルにおいては、プランクトンや栄養塩、溶存酸素や沈殿物などの移流は主として海水の動きによって定められ、生態系の時間発展に大きな影響を与えている。本研究で開発した赤潮形成シミュレータを用いて数値シミュレーションを行い、ヘテロカプサの日周鉛直運動を再現した他、1999 年 9 月 20 日から 10 月 2 日まで広島県江田島湾で観測された赤潮の形成から消滅までの全過程をほぼ完全に再現することに成功した。詳細については文献 [1] と [2] を参照されたい。今後はさらにモデルの改良を進め、来年度以降の赤潮形成の予測を行う予定である。

### 3 環境流体モデル(環境流体解析と植物による環境修復技術への応用の試み)

環境流体は、大気や海洋のように多成分流体で温度や密度が一様でないために不均質で複雑な構造を持ち、その運動も一般に複雑である。例えば、大気中の水分は氷の状態にある固相、雨の水粒の状態にある液相、水蒸気の状態に

ある気相にあり、相転位をくり返して複雑な気象を呈している。前節に述べたように、海洋における海水の温度分布と塩分濃度は、成層の形成や密度流を促して複雑な海洋動態と海洋構造の形成の要因となっている。このような環境流体の性質と運動を把握してその中に存在する物体周りの解析や生物の生態系の研究を行うために、数理的接近法は他の接近法と比較しても重要かつ有効であることが期待される。

この研究の目的は、海洋・河川・大気・大地に様々な形で存在する環境流体に関わる現象を数値流体解析の手法を用いて解析し、自然環境や生態系に劣化や異変を及ぼす要因（ここではこれらの要因を総称して環境ディスラプターと呼ぶ）に対する対策・保全・修復・制御のための、安全で具体的な方法を提案することである。ここでは、環境流体中の構造体周りの流れ解析を行うための数学モデルに焦点を絞り、このような数学モデルの定式化とこれに基づく数値シミュレーション、それらの計算結果を利用した可視化を行って複雑な混相流体の挙動について検討した。

我々の数学モデルは、

- (1) 引力や温度分布に起因する浮力を考慮した流体の運動を記述する基礎方程式系、温度分布や物質輸送を考慮した移流拡散方程式系、
- (2) 対象とする構造体を包んでいる環境流体の部分領域を、外側の領域と隔絶することなく切り取った状態で扱うために領域の境界上に設ける自然な制約条件、
- (3) 対象とする部分領域における流体の運動を観測し始める時刻における環境流体の流れの初期設定、

を組み合わせることによって定式化した。数値流体が占める計算領域は、構造体の形状や配置の仕方に応じて適宜定められる。ここで用いる基礎方程式としては、

質量保存則：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

運動量保存則：

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right\} = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v} - \rho \beta (T - T_0) \mathbf{g}$$

温度方程式：

$$\rho C_p \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T \right\} = \nabla \cdot (k \nabla T) + S_T$$

物質の移流拡散方程式：

$$\rho \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) c \right\} = -\nabla \cdot (\rho D \nabla c) + S_c$$

を採用した。

ここで、 $\mathbf{v} = \mathbf{v}(t, \mathbf{x})$  は時刻  $t$ 、位置  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  における流体の速度、 $\rho = \rho(t, \mathbf{x})$  は流体の密度、 $T = T(t, \mathbf{x})$

は温度、 $c = c(t, \mathbf{x})$  は流体中の環境汚染物質の濃度を表している。汚染物質は流体の流れ  $\mathbf{v}$  によって輸送され、流体の物性に依存して拡散する。 $c$  の値が高い領域ではそこに汚染物質が集積していることを意味している。パラメータ  $p = p(t, \mathbf{x})$  は時刻  $t$ 、位置  $\mathbf{x}$  における圧力を表している。圧力  $p$  と密度  $\rho$  は多成分混相流体の構造を調べる上で重要である。係数  $\beta$  は体積膨張率、 $k$  と  $D$  は各々温度  $T$  と汚染物質  $c$  の拡散係数を表し、 $S_T$  は領域外からの熱の供給、 $S_c$  は汚染物質の供給を表す。

上に挙げた基礎方程式系は流体を連続体と考えて定式化された流体の連続モデルである。流体は、空気のような圧縮性流体と水のような非圧縮性流体に大別されるが、環境流体は一般にこれらが混在するのみならず、多成分からなるため、より複雑な数学モデルを立てる必要がある。上に述べた質量保存則は、非圧縮性流体の場合、非圧縮性条件：

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

として取り扱われる。また、運動量保存則の右辺第 1 項は圧力勾配、第 2 項は粘性係数  $\mu$  を伴う粘性項、第 3 項は引力と温度分布に依存する浮力項を表している。これに加えて、計算領域の境界における物理的に自然な制約条件として、

流入条件：

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\text{in}}, p_n = 0, T = T_0, c_n = 0$$

流出条件：

$$\mathbf{v}_n = 0, p = 0, T_n = 0, c_n = 0$$

付着条件：

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\text{wall}}, p_n = 0, c = c_{\text{wall}} = 0.$$

$$T_n = 0, \text{ もしくは } T = T_{\text{wall}}$$

すべり条件：

$$\mathbf{v} // \partial \Omega, p_n = 0, T_n = 0 \text{ もしくは } T = T_{\partial \Omega}, c_n = 0$$

を課して検討した。ここで、 $\mathbf{v}_{\text{in}}$  は領域に流入する流体の速度ベクトルを表し、 $p_n$  は境界の法線方向の圧力の強さ、 $T_n$  は法線方向の熱の出入りを表す。さらに、観測開始時刻における流体の初期設定として次の 5 つの条件：

$$\mathbf{v} = 0, p = 0, \rho = \rho_0, T = T_0, c = c_0$$

を加えて 1 つの数学モデルが得られることになる。このような連続体の数学モデルを数値流体モデルとして立て直し、それを計算機に実装するために、

- (i) 物体適合座標系を用いて離散的な媒質としての数値流体を定義し，  
(ii) 例えば，運動方程式は単位時間を  $h$  として対流項と粘性項を含むように陰的スキームとして

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{h} + (\mathbf{v}^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{n+1} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \Delta \mathbf{v}^{n+1} - \rho \beta (T - T_0)$$

の形にし，さらに右辺第 1 項の取り扱いを簡単にするために非線形項の線形化

$$(\mathbf{v}^{n+1} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{n+1} \rightarrow (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^{n+1}$$

を行った。他の方程式系や制約条件も同様に離散化して安定に計算が実行できるように数値モデルを定式化した。上に述べた流体の基礎方程式系そのものは未だに解決されていない数学上の大問題であるが，物理的に近似していると考えられている数値流体力学の理論を用いて数学モデルを立てて数値的に流体の解析を実行することを試みた。

様々な時間・空間スケールを有する渦干渉を伴う流体運動を取り扱うための数値流体シミュレーションを目的に，連続体に対するナビエ・ストークス方程式を基に数値流体モデルとそれを数値的に解くための数値計算スキームの検討を行った。本研究では，離散化された数値流体モデルにおいては，元の連続体モデルでは運動量の移流項は非線形であるが，時間の一方方向性の性質から離散化された時間間隔内では局所的には線形になることが合理的であると考え，新たに本数値モデルを数値流体力学における基礎方程式として採用し，数値モデルに対する安定性を以って可解性を検証する立場をとった。

本研究による数値的基礎方程式は時間に対して完全に陰的に時間発展し無条件安定であるため，解析対象とする大小様々なスケールの渦運動を伴う乱流現象を数値的に再現することが可能になる。次に，数値流体モデルに基づく数値シミュレーションを行うためには，計算領域をなめらかに大きさ・形が変化する四角形計算格子で分割する必要性があるため計算格子形成法の検討を行った。

本研究では予め対象領域を領域内の障害物の境界に沿って幾つかの単連結領域に分割し，分割された領域の境界で格子の間隔や格子の辺が滑らかに繋がるように楕円形方程式を利用してその非同次項と境界条件を反復的に与えて数値的に解くことによって計算格子を生成する手法を開発した。本研究により開発した数値流体解析の手法は海洋，大気，河川等の環境流体に関わる現象へ適応することにより環境修復技術の開発への応用が期待できる。その第一歩として高速道路の街路樹周りの自動車から排出される排気ガ

スの空気中への移流・拡散現象や赤潮発生時の海中での力キ筏の周りの赤潮プランクトンの移流拡散過程等を定性的に再現することを目的に，「端を有する円柱周りの流動現象」について計算機シミュレーションを実施し，その複雑な流体運動を観察検証した。

## 参 考 文 献

- [1] Shinnosuke Oharu, Yoshio Taniguchi and Mineo Yamaguchi, "Ecological models of red tide plankton and computer simulation" in the Proceeding of the 4th Eurosim 2001 Congress: SHAPING FUTURE WITH SIMULATION (CD-ROM), ISBN 90-806441-1-0, Aula Conference Centre, Delft, The Netherlands, June, (2001)
- [2] 脇本淳子，大春愼之助，松浦義則，谷口吉男，珪藻類の相変位と栄養塩の産生過程を考慮した赤潮の生態系モデル：数値シミュレーションによる評価，地球環境レポート，9(2003)，刊行予定
- [3] 有馬敏幸，大春愼之助，環境流体中の構造物周りの流れ解析と環境修復技術への応用の試み，日本応用数理学会環境数理研究部会第 3 回環境数理研究会講究録 (2002)