

# 土壌中の水分・溶質移動解析への 汎用 PDE ソルバーの適用

登 尾 浩 助\*

## Application of a General PDE Solver for Analyzing Water and Solute Transport in Soil

Kosuke NOBORIO\*

\* Faculty of Agriculture, Iwate University, Morioka 020-8550, Japan

### Abstract

For the proper management of water and fertilizer resources, distributions of water and solute in soil should be precisely predicted. The movement of water and solute in soil may be expressed with partial differential equations (PDEs). The PDEs should be numerically solved for real world applications because of complex initial and boundary conditions and high non-linearity in some cases. The recent development of a general PDE solver using the finite element method enabled us to more easily solve these PDEs governing water and solute transport in soil. FlexPDE Lite can be freely obtained through the Internet, and its applicability to solve water and solute transport in soil was investigated. FlexPDE Lite successfully simulated water infiltration into Haverkamp's sandy soil with  $\leq 2\%$  of mass balance errors. However, it failed to calculate water infiltration into dry loamy sand when initial pressure head was  $< -60$  cm. Results of simulating solute transport with FlexPDE Lite also agreed well with analytical solutions especially when the convective transport was not dominant. Therefore, FlexPDE Lite, although its performances were purposely limited, could be an ideal tool for a training purpose or a small-scale simulation.

**Keywords:** numerical solution, finite element method, soil water movement, solute transport, simulation model

### 1. はじめに

水の有効利用や肥料分・汚染物質等の移動予測を行う際には、土壌中における水分・溶質の空間的・時間的な変動を把握する必要がある。土壌中におけるこれらの移動は、通常、偏微分方程式 (PDE) で表される。特に土壌 (多孔質体) 中における物質・エネルギー輸送を表す PDE は、拡散方程式、移流-分散方程式、熱伝導方程式と呼ばれ、古くから様々な解法が研究されてきた。

簡単な初期条件と境界条件を持つ線形 PDE は解析的に解を得ることができるが、初期条件や境界条件が複雑な場合や係数が非常に非線形の場合には、解析解を得る

ことが極めて困難なので数値解法を用いる必要がある。たとえば、層ごとに水分特性が異なる成層土壌や地表面が複雑な形状である畝・畝間土壌中の水分や溶質の移動現象を扱う場合には数値計算法による解法に頼らざるを得ない。さらに、土壌中の水分移動は、土壌の不飽和透水係数が土壌水分量または圧力水頭に対して非常に強い非線形性を有する為に、現在までに一般的な解析解は得られていない。

数値解を得るのに通常、差分法 (FDM) と有限要素法 (FEM) が使われる。FDM では、比較的簡単なプログラムを作成する事で PDE を解くことが可能であるが、複雑な形状の境界条件を扱うためにはプログラムの変更を

\* 岩手大学農学部 〒020-8550 盛岡市上田 3 丁目 18-8

e-mail address: noboriok@iwate-u.ac.jp

キーワード: 数値解, 有限要素法, 水分移動, 溶質輸送, モデル

要求されるなど、汎用性の高いプログラムの構築には不向きであると言われている。一方、FEMを使うと汎用性の高いプログラムの開発が可能であると言われているが、プログラム開発自体が差分法に比べて煩雑であるといった特徴がある。

近年、パソコン上で動作する有限要素法を使った汎用PDEソルバーが開発されてきた。本報では、FlexPDE Liteを取り上げて、土壌中の水分・溶質移動問題への汎用PDEソルバーの適用性を検討する。このソルバーは、接点数約400以下の2次元2変数問題まで扱うことが可能である。

## 2. 理 論

### a. 土壌中の水分移動

均質土壌中の2次元水分移動は、Richards (1931) の式で表される。

$$C_h \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( -K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( -K \frac{\partial \phi}{\partial y} - K \right) \quad (1)$$

または、

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( -K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( -K \frac{\partial \phi}{\partial y} - K \right) \quad (2)$$

ここに、 $C_h$ は水分容量 (1/L)、 $\phi$ は圧力水頭 (L)、 $\theta$ は体積水分量 ( $L^3/L^3$ )、 $K$ は透水係数 (L/T)、 $x$ と $y$ はそれぞれ水平方向と鉛直方向の座標 (L)、 $t$ は時間 (T) である。

### b. 土壌中の溶質移動

溶質は水理学的分散と移流によって土壌中を移動する。均質土壌中における溶質の2次元分布は移流-分散方程式により次式で表される (Javandel ら, 1984)。

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} \quad (3)$$

ここに、 $R$ は遅延係数、 $C$ は溶質濃度 (mol/M)、 $D_x$ 、 $D_y$ はそれぞれ $x$ 、 $y$ 方向の水理学的分散係数 ( $L^2/T$ )、 $v_x$ 、 $v_y$ はそれぞれ $x$ 、 $y$ 方向の平均間隙流速 (L/T) である。

## 3. 解析方法

### a. 水分移動

FlexPDE Lite, 2次元水分移動用FEMプログラム (Noborio ら, 1996), 1次元水分移動用FDMプログラムの3つの異なった解析プログラムを使って計算した水分分布をHaverkamp ら (1977) の求めた砂質土壌に対する実験値・準解析解と比較した。土壌カラム上端においてノイマン型 (フラックスが既知) 境界条件を用いたときには実験値と、ディリクレ型 (値が既知) 境界条件

を使ったときには準解析解と比較した。

解析に用いた砂質土壌の水分特性曲線は、

$$\theta = \theta_r + \frac{\alpha(\theta_s - \theta_r)}{\alpha + |\phi|^\beta} \quad (4)$$

で表され、 $\theta_s = 0.287$ ,  $\theta_r = 0.075$ ,  $\alpha = 1.611 \times 10^6$ ,  $\beta = 3.96$  である。また、不飽和透水係数は次式で表される。

$$K = K_s \frac{A}{A + |\phi|^\gamma} \quad (5)$$

ここに、 $K_s = 34$  cm/h,  $A = 1.175 \times 10^6$ ,  $\gamma = 4.74$  である。このような水分特性の砂質土壌を均一に充填した長さ80 cmの土壌カラムを想定して数値計算を行った。FlexPDE LiteとFEMプログラムでは、幅1.0 cm深さ80.0 cmの土壌を想定した。この土壌カラムの初期条件と境界条件は、

$$\begin{aligned} \text{初期条件: } \phi &= -61.5 \text{ cm for } t=0, \\ &0 \leq z \leq 80 \text{ cm} \end{aligned} \quad (6)$$

$$\text{境界条件: } \phi = -61.5 \text{ cm for } t>0, z=80 \text{ cm} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \text{ノイマン型 } J_w &= 13.69 \text{ cm/h for } t>0, \\ &z=0 \text{ cm} \end{aligned} \quad (8)$$

または

$$\begin{aligned} \text{ディリクレ型 } \phi &= -20.73 \text{ cm for } t>0, \\ &z=0 \text{ cm} \end{aligned} \quad (9)$$

$J_w$ は水分フラックス密度

と設定した。

### b. 溶質輸送

定常な水分フラックスが存在する条件下における1次元と2次元溶質輸送に対する解析解とFlexPDE Liteによる数値解とを比較した。

式(3)を1次元溶質輸送問題として次のような初期・境界条件下で解く。

$$\text{初期条件: } C=0 \text{ for } t=0, 0 \leq x \leq \infty \quad (10)$$

$$\text{境界条件: } \partial C / \partial x = 0 \text{ for } t>0, x = \infty \quad (11)$$

$$C = C_0 \text{ for } t>0, x=0 \quad (12)$$

$C_0$ は置換溶液の溶質濃度

式(3)の解析解 (van Genuchten と Wierenga, 1986) は、

$$\begin{aligned} C_c(x, t) &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[ \frac{Rx - v_x t}{2(D_x R t)^{1/2}} \right] \\ &+ \frac{1}{2} \exp \left( \frac{v_x x}{D_x} \right) \operatorname{erfc} \left[ \frac{Rx + v_x t}{2(D_x R t)^{1/2}} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

と表さる。ここに、 $C_e$ は初期濃度に対する相対濃度を、 $\operatorname{erfc}$ は余誤差関数を表す。

FlexPDE Liteでは、4.0 m × 200.0 mの鉛直方向に長い計算領域を想定して土壌カラム始端から20.0 m下方での溶質濃度変化を経時的に出力した。この時、 $v_x = 0.15$  m/d,  $R = 1.0$ は一定であるとして与えた。 $D_x$ の値を

0.2, 0.1, 0.05, 0.02 m<sup>2</sup>/d と変化させて、解析解と比較した。これに対応する P/ΔL の値は 0.75, 1.5, 3.0, 7.5 となり、ここで P (P=v<sub>x</sub>ΔL/D<sub>x</sub>) はペクレ数で、移流/分散の割合 (P が大きければ移流による溶質の移動が分散による移動よりも卓越していることを意味する) を示し、ΔL は三角形要素の最大長さを表す。FlexPDE Lite では、三角形要素の大きさが自動的に変化して ΔL を特定できないので、P/ΔL をもって移流/分散割合の目安とした。

2次元溶質移動に対する式(2)の解析解は、2a 幅の帯状供給源から溶質が流れ出る場合、次の初期・境界条件下において、式(19)のように表される (Javandel ら, 1984)。

$$\begin{aligned} \text{初期条件: } C=0 \text{ for } t=0, -\infty \leq x < \infty, \\ 0 \leq y \leq \infty \end{aligned} \quad (14)$$

$$\text{境界条件: } \partial C / \partial x = 0 \text{ for } t > 0, x = \pm \infty \quad (15)$$

$$\partial C / \partial y = 0 \text{ for } t > 0, y = \infty \quad (16)$$

$$C = C_0 \text{ for } t > 0, y = 0, -a \leq x \quad (17)$$

$$\begin{aligned} C = 0 \text{ for } t > 0, y = 0, -\infty < x < -a, \\ a < x < \infty \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} Ce(x, y, t) = & \frac{y}{4(\pi D_y t)^{1/2}} \exp\left(-\frac{v_y y}{2D_y} t\right) \\ & \int_0^t \exp\left[-\left(-R + \frac{v_y^2}{4D_y}\right)\tau - \frac{y^2}{4D_y \tau}\right] \tau^{-3/2} \\ & \left\{ \operatorname{erfc}\left[\frac{a-x}{2(D_x \tau)^{1/2}} + \frac{v_x}{2}\left(\frac{\tau}{D_x}\right)^{1/2}\right] \right. \\ & \left. + \operatorname{erfc}\left[\frac{a+x}{2(D_x \tau)^{1/2}} - \frac{v_x}{2}\left(\frac{\tau}{D_x}\right)^{1/2}\right] \right\} d\tau \end{aligned} \quad (19)$$

FlexPDE Lite では、Noborio ら (1996) にならって a=10.0 m, D<sub>x</sub>=D<sub>y</sub>=1.0 m<sup>2</sup>/d, v<sub>x</sub>=0 m/d, v<sub>y</sub>=0.1 m/d, R=1.0 の条件下で幅 40.0 m, 長さ 50.0 m の矩形土壌断面中における溶質濃度分布の経時変化を計算した。

#### 4. 結果と考察

##### a. 水分移動

地表面においてディリクレ型とノイマン型境界条件を用いたときの 1 次元土壌カラム中の水分分布を比較したのが Fig. 1 (A) と 1 (B) である。どちらの境界条件の場合も FlexPDE Lite と FEM は、L<sub>x</sub>=1.0 cm, L<sub>y</sub>=-80 cm の計算領域を使った。各解析プログラムによる計算結果は、計算時間全域に渡って Haverkamp ら (1977) が示した準解析解値 (Fig. 1 (A)) とまた実験値 (Fig. 1 (B)) と良く一致した。FlexPDE Lite の計算結果は、FEM と FDM による計算結果とも良く一致した。特に FDM と比較すると、図中ではほとんど違いがわからな

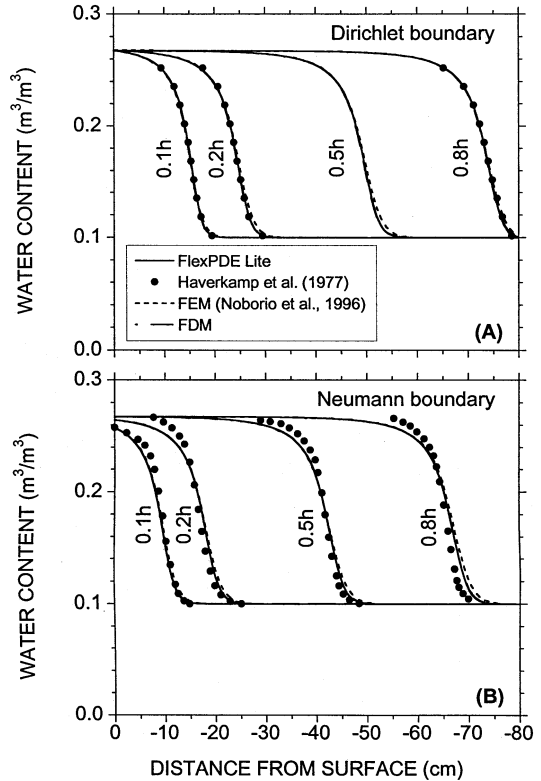


図-1 (A) ディリクレ型境界条件と (B) ノイマン型境界条件下における各解析プログラムによる土壌水分分布の経時的変化の比較

Fig. 1 Comparison of water distribution calculated by FlexPDE Lite, FEM (Noborio *et al.*, 1996), and FDM with results of Haverkamp *et al.* (1977) during water infiltration under (A) the Dirichlet, and (B) the Neumann boundary conditions.

いくらいに一致した。FEM は、他のプログラムに比較して、浸潤前線を若干大きめに計算する傾向が見られた。特に乾燥領域でこの計傾向が顕著であった。FEM の出力時間が表示時間と正確に一致していないことが原因の一つに考えられる。

質量収支は、計算領域中の総質量増加量に対する領域への総流入量の比として表され (Celia ら, 1990), シミュレーションプログラムの性能評価にしばしば用いられる。水分移動を例に取れば、計算機の中で土壌中の水分が生成も消失もしないことを表し、Celia ら (1990) は許容される質量収支誤差を 10% 以下とした。ノイマン型境界条件下での各解析プログラムの質量収支誤差は、表-1 に示す通りいずれも 10% 以下と満足すべき結果であった。FEM の質量収支誤差が非常に小さいのは、

表-1 解析プログラム別の計算方法と Haverkamp ら (1977) の水分浸潤に対する計算時間の比較

Table 1 Comparison of calculating methods and calculation time for water infiltration into the soil of Haverkamp *et al.* (1977) using three programs (FlexPDE Lite, FEM and FDM)

解析プログラム名	適用支配 方程式	計算アルゴリズム	ノード間隔 dx, dy	計算時間 きざみ間隔 dt	計算結果	
					相対計算時間 <sup>†</sup>	質量収支誤差
FlexPDE Lite	(1)	修正ニュートン・ ラプソン法	dx=自動分割 dy=自動分割	自動設定	1.0	≤2%
FEM* (Noborioら, 1996)	(2)	修正ピカード 繰り返し法	dx=1.0 cm dy=1.0 cm	自動設定	0.3	≤0.2%
FDM**	(3)	陽 解 法	dy=1.0 cm	0.0001 h	5.0	≤6%

\* FEM プログラムの実行にはマイクロソフト社の FORTRAN PowerStation 4.0 を使用した。

\*\* FDM プログラムの実行にはマスソフト社の MathCAD 2000 を使用した。

<sup>†</sup> FlexPDE Lite の計算時間を 1.0 として他の解析プログラムの計算時間を相対的に示した。

Celia ら (1990) が質量収支誤差の低減をするために提案した混合型水分移動方程式 (式(2)) と修正ピカード繰り返し法との組み合わせを適用しているためである。

計算時間は、FORTRAN コンパイラを使っている FEM が圧倒的に短かった (表-1)。しかし、計算結果の表示には、別のプログラムを使う必要がある。FDM を実行しているのは MathCAD と呼ばれる汎用数値計算プログラムで、インタープリタ言語を実行するために、他の解析プログラムに比較して計算時間が長かかった。中位の計算時間だった FlexPDE Lite は、リアルタイムで計算結果をグラフに表示していたので、グラフ表示をしない場合には計算時間はもっと短くなると思われる。いずれの解析プログラムも境界条件の違いが計算時間へ及ぼす影響はほとんどなかった。

各解析プログラムの計算方法と計算時間を比較したのが表-1 である。式(1)(2)は数学的には等価であるが、数値計算上は  $C_h$  が非線形であるために式(1)を使うと質量収支誤差を小さくすることが困難であると言われている (Celia ら, 1990)。しかし、FlexPDE Lite では、式(2)を適用すると計算不能となったので、式(1)で示される圧力水頭型と呼ばれる水分移動方程式を解き、その他のプログラムでは式(2)で示される混合型と呼ばれる水分移動方程式の解法を行った。未知数の解を見つける方法は表のように3者3様である。本報で使用した FDM には、簡便性から陽解法を使った。用いた FEM と FDM は機能上、適切な計算接点間隔を、また FDM は適切な計算時間きざみ間隔を使用者が設定する必要があった。しかし、FlexPDE Lite はこれらを自動的に最適間隔に設定する機能を有しているため、その必要はなかった。

表-2 では、FlexPDE Lite と FEM の砂質土壌への水分浸潤問題に対する性能の比較を行った。式(1)(2)中の

表-2 乾燥砂質土壌\* への水分浸潤問題に対する解析プログラムの性能比較

Table 2 Performances of FlexPDE lite and FEM (Noborio *et al.*, 1996) for simulating water infiltration into a dry sandy soil\*

初期条件 ( $t=0$ ) for $0 \leq y \leq -80$ cm		相対計算時間 <sup>†</sup>	
$\Psi_i$ (cm)	対応する $\theta$ ( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ )	FlexPDE Lite	FEM (Noborioら, 1996)
-60	0.084	>>50	0.3
-100	0.071	NG	0.3
-1000	0.058	NG	0.3
-5000	0.05709	NG	0.3
-10000	0.05704	NG	NG

境界条件:  $\Psi=0$  cm for  $t>0, y=0$  cm

$\Psi=\Psi_i$  for  $t>0, y=-80$  cm

\* 供試砂質土壌に対する van Genuchten (1980) パラメータの値:  $\theta_s=0.41 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ,  $\theta_r=0.057 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ,  $\alpha=0.124 \text{ cm}^{-1}$ ,  $n=2.28$ ,  $K_s=350.2 \text{ cm/h}$

<sup>†</sup> 表-1 に示した Haverkamp ら (1977) の砂質土壌への水分浸潤計算に対する FlexPDE Lite の計算時間を 1.0 として計算時間を相対的に示した。

注: NG は計算不能を示す。

係数は、砂質土壌に対するものほどその非線形性が大きくなる。特に、乾燥砂質土壌への飽和水分浸潤は極めて非線形であるので、数値解法的には再現が困難な現象である。FEM は、絶乾に近い初期条件 ( $\phi_i=-5000$  cm) まで計算可能であった。一方、FlexPDE Lite は、ほ場容水量付近の初期条件 ( $\phi_i=-60$  cm) までに対してなら計算可能であった。しかし、計算時間は非常に長かかった。

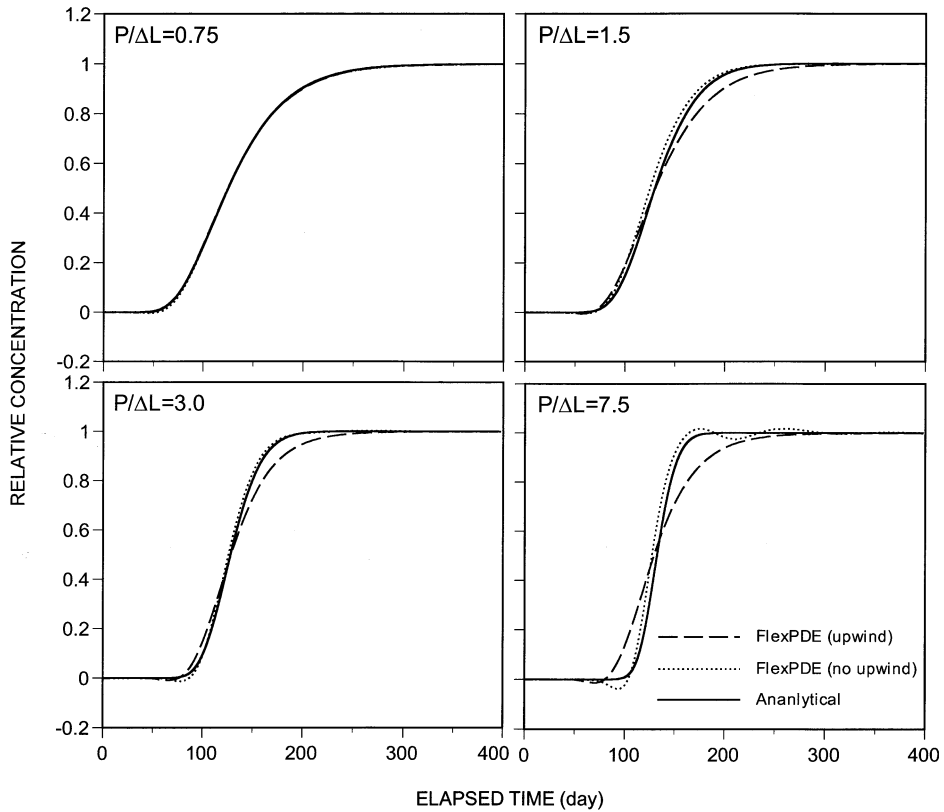


図-2 FlexPDE と解析解 (Eq. 13) による溶質前線の比較

Fig. 2 Solute front calculated with the analytical solution (Eq. 13) and FlexPDE Lite with and without the upwind weighted scheme.

た。また、FEMでは初期条件の違いによる計算時間への影響はほとんどなかった。初期条件を  $\phi_i = -10000$  cm とさらに乾燥した状態を想定すると、どちらの解析プログラムも解が得られなかった。

**b. 溶質輸送**

図-2は、 $P/\Delta L$ の大きさが溶質前線の計算結果に与える影響を表す。 $P/\Delta L$ が小さい時は、FlexPDE Liteの計算結果は、解析解と非常に良く一致した。 $P/\Delta L$ が大きくなるに伴って、溶質前線の計算結果が不安定になった(振動し始めた)。さらに $P/\Delta L$ が大きくなると、振幅がより大きくなった。このように解が振動する現象は、FlexPDE Liteに固有の問題ではなく、移流-分散型方程式の持つ特性に起因する。

このような解の振動を軽減するために、FlexPDEは簡便な1階微分風上重み付け法(Huyakorn and Nilkuha, 1979)を採用している。式(3)中の $v_x$ ,  $v_y$ の寄与を決定する際に、特定の接点に対してより大きな寄与の重み付けをする方法である。しかし、この重み付け法

は、 $P/\Delta L$ の増加と共に大きくなる解の振動を効果的に抑制するが、溶質前線に人為的な分散を導入する欠点がある(図-2)。人為的な分散は、 $P/\Delta L$ の増加に伴って大きくなった。したがって、移流が卓越するような溶質輸送問題を扱う際には、解の振動と人為的分散のどちらの影響が解析結果に対して有害かを見極める必要がある。FlexPDEのデフォルト設定では、風上重み付けが自動的に適用されるので、特に注意が必要である。

2次元土壌断面中の溶質輸送によって生じる入力溶液濃度に対する相対濃度の分布を解析解と比較したのが図-3である。この計算例では $P/\Delta L=0.1$ であるので、解の振動や重み付けによる人為的分散はほとんど生じないと予想された。FlexPDE Liteは、 $t=50$  dではy軸方向の溶質前線付近で若干の過大評価をしたが、x軸方向では解析解と良く一致した。また、 $t=200$  dではy軸方向の溶質前線の一部に過大評価が見られたが、全体としては非常に良く解析解と一致した。

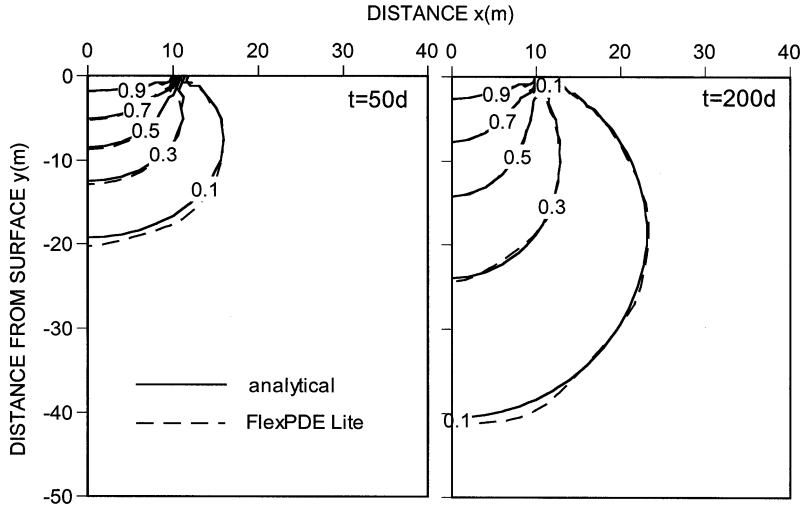


図-3 FlexPDE Lite と解析解 (式 19) による 2 次元溶質移動によって生じる相対濃度分布の比較

Fig. 3 Two-dimensional distribution of relative solution concentration in soil calculated by analytical equation (Eq. 19) and FlexPDE Lite.

## 5. おわりに

土壌中の水分と溶質の移動解析に対する汎用 PDE ソルバーの適用性を検討した。水分浸潤問題に対しては、実験値、準解析解値と良い一致を見た。また、ノイマン型境界条件下では質量収支誤差が 2% 以下であり、他の FEM・FDM 解析プログラムと比較しても十分高精度であった。しかし、非常に乾燥した状態の砂質土壌への飽和水分浸潤問題では解が得られなかった。

溶質輸送問題に対しても、解析解と非常によい一致を見た。P/ΔL が大きく (移流項が優勢) になると、溶質前線に移流-分散型方程式に特有な解の振動が起こった。この振動を軽減するために FlexPDE Lite でデフォルト設定として使われる風上重み付け法は、溶質前線に人為的分散を導入するので注意が必要である。

FlexPDE Lite は、取り扱える接点数を約 400 以下に機能が限定されている。したがって、広範囲の移動現象を精度良く計算するためには接点数が不足し、計算精度が低下する恐れがあるが、トレーニング目的や小規模な土壌水分・溶質移動問題に対しては十分な精度で適用可能と思われる。比較的簡単なマクロ言語で計算問題を記述でき、計算結果をリアルタイムでグラフに表す機能を有しているので、特に、学生演習用のプログラムとしては最適であろうと思われる。FlexPDE Lite は、<http://www.pdesolutions.com/> のウェブサイトから無料で入手可能である。

## 引用文献

- Celia, M.A., Bouloutas, E.T. and Zarba, R.L. (1990): A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation, *Water Resour. Res.*, **26**: 1483-1496.
- Haverkamp, R., Vauclin, M., Bouma, J., Wierenga, P.J. and Vachaud, G. (1977): A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **41**: 285-294.
- Huyakorn, P.S. and Nilkuha, K. (1979): Solution of transient transport equation using an upstream finite element scheme, *Appl. Math. Modelling*, **3**: 7-17.
- Javandel, I., Doughty, C. and Tsang, C.F. (1984): *Groundwater transport: Handbook of mathematical models*, Water Resour. Monogr. **10**, Am Geophys. Union, Washington, D.C.
- Noborio, K., McInnes, K.J. and Heilman, J.L. (1996): Two-dimensional model for water, heat, and solute transport in furrow-irrigated soil: I. Theory, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **60**: 1001-1009.
- Richards, L.A. (1931): Capillary conduction of liquids through porous media, *Physics*, **1**: 318-333.
- van Genuchten, M.Th. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of

unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J., **44** : 892-898.

van Genuchten, M.Th. and Wierenga, P. (1986): Solute dispersion coefficients and retardation factors, pp. 1025-1054, In A. Klute (ed.) Methods

of soil analysis. Part 1, 2<sup>nd</sup> ed. Agron. Monogr. **9**, ASA and SSSA, Madison, WI.

受稿年月日：1999年6月17日

受理年月日：2001年3月30日