

数値 Laplace 変換を用いた非定常拡散解析

小林 三男*・荒木 正夫**・富所 五郎***

1. 序 論

近年、都市生活が多様化し、また産業活動の発展により、河川、湖沼、海域などの環境水域の水質汚濁が深刻なものとなっている。これに対して、環境アセスメントの立場から、水質汚濁の現状を把握し、また将来の水質予測を行うことが重要な課題となっている。このような予測問題に対して、最近では、電子計算機による数値シミュレーションが行われるようになってきた。この方法は、現象の支配微分方程式をある境界・初期条件のもとに解き、数値的に現象を表現するものである。本論では、水質汚濁を予測するのに、支配微分方程式として、乱流拡散方程式を用いる。数値シミュレーションを行うにあたって一般に行われている方法は、空間に関して有限要素法を用い、時間に関しては適当な漸化式を用いて離散化し、step-by-step に解いていく方法である。この方法では、時間増分の取り方が演算時間、解の精度に大きく影響し、最適な時間増分を決定することが課題となる。これに対して本論では、つぎの様な方法を考える。支配微分方程式をラプラス変換し、ラプラス像空間上で有限要素法を適用し、像空間での解を求め、その解を逆変換し、原空間での解を求める。この方法では、時間依存の解が関数形で求められるので、step-by-step に解く必要はない。

2. 基礎方程式

二次元拡散場を支配する方程式は、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + K_1 \phi - \phi_s = 0 \quad \dots\dots\dots (1)$$

ϕ は (x, y, t) の関数で、 $\phi = \phi(x, y, t)$ のように表われる。これにラプラス変換を施し、

$$\bar{\phi}(x, y, s) = \int_0^\infty \phi(x, y, t) \cdot e^{-st} dt \quad \dots\dots\dots (2)$$

の変数を考える。式(1)の両辺に e^{-st} を乗じて積分する

と、式(1)のラプラス変換された式は、

$$\bar{\phi} \cdot s + u \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} \right) + K_1 \bar{\phi} - \bar{\phi}_s = 0 \quad \dots\dots\dots (3)$$

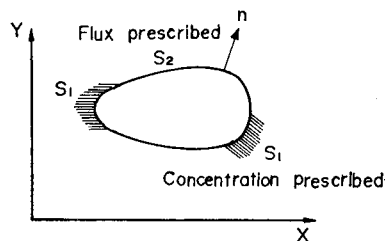
となる。ここに $\bar{\phi}$: ラプラス変換された未知数 (拡散される濃度), s : ラプラス変換パラメータ, u, v : 流速成分, D_x, D_y : 拡散係数, K_1 : 減衰定数, ϕ_s : 濃度のソースまたはシンクである。式(3)は時間 t に関する項が消えた $\bar{\phi}(x, y, s)$ だけの関係式となる。したがって

$$u \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} \right) + (K_1 + s) \bar{\phi} - \bar{\phi}_s = 0 \quad \dots\dots\dots (4)$$

となり、定常問題における式と同様になる。

3. 境界条件, 初期条件

境界条件は、次のように考える。



図一 境界条件

$$\phi = \phi_a \quad \text{on } S_1 \quad \dots\dots\dots (5)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = \frac{\partial \phi}{\partial x} n_x + \frac{\partial \phi}{\partial y} n_y = \left(\frac{\partial \phi}{\partial n} \right)^p \quad \text{on } S_2 \quad \dots\dots\dots (6)$$

式(5)に対しても、ラプラス変換を施して、

$$\left. \begin{aligned} \bar{\phi}_a &= \int_0^\infty e^{-st} \phi_a dt = \frac{\phi_a}{s} \quad \text{on } S_1 \\ \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial n} &= \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} n_x + \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} n_y = \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial n} \right)^p \quad \text{on } S_2 \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (7)$$

とする。初期条件は

$$\phi(x, y, t=0) = 0 \quad \dots\dots\dots (8)$$

4. 有限要素法

ラプラス像空間での解 $\bar{\phi}(x, y, s)$ を求めるにあた

* 正会員 工修 (株)ユニック 数値解析研究室

** 正会員 工博 信州大学教授 工学部土木工学科

*** 正会員 工修 信州大学助手 工学部土木工学科

て, Galerkin 法を用いて (4) 式の離散化を行う. 解析する領域を有限個の三角形要素に分割して, その要素での未知数 $\bar{\phi}^e$ を節点での未知数 $\bar{\phi}_i$ と形状関数 N_i とで, 次のように内挿近似する.

$$\bar{\phi}^e = \bar{\phi}_i N_i \quad (i=1 \sim 3) \quad \dots\dots\dots (9)$$

N_i を重み関数として, 式(4)に乗じて, 領域 V で積分し, D_x, D_y を要素内で一定とすると

$$\int_V N_i \left\{ u_k N_k \frac{\partial \bar{\phi}_j N_j}{\partial x} + v_k N_k \frac{\partial \bar{\phi}_j N_j}{\partial y} - D_x \frac{\partial^2 \bar{\phi}_j N_j}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 \bar{\phi}_j N_j}{\partial y^2} + (K_1 + s) \bar{\phi}_j N_j - \bar{\phi}_s \right\} dV = 0 \quad \dots\dots\dots (10)$$

式(10)より, 次の要素マトリックスが得られる.

$$k_{ij} = \int_V \left\{ u_k N_k \frac{\partial N_j}{\partial x} N_i + v_k N_k \frac{\partial N_j}{\partial y} N_i + D_x \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + D_y \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + (K_1 + s) N_i N_j \right\} dV \quad \dots\dots\dots (11)$$

$$f_i = \int_V \bar{\phi}_s dV + \int_S N_i \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial n} \right)^p dS \quad \dots\dots\dots (12)$$

各要素からの寄与を集めると, 解析する領域全体について, 次のマトリックス方程式が得られる.

$$[K]\{\bar{\phi}\} = \{F\} \quad \dots\dots\dots (13)$$

上式を, ラプラス変換パラメータ s_i について解けば, 像空間での未知数 $\bar{\phi}(s_i)$ が決定される.

5. ラプラス逆変換

式(13)で得られるラプラス像空間上での解 $\bar{\phi}(x, y; s)$ を何らかの形で逆変換することが可能であれば, 原空間での解 $\phi(x, y; t)$ が決定される. 原空間での解を得るための逆変換の過程は複雑さを伴い, 特に, 変換形がパラメータの関数形としてではなく, 単に数値的にのみしか与えられないような場合には, 逆変換表などの利用はできず, いわゆる数値逆変換を行う必要がある. これには種々の方法が考えられるが, 本論では Schapery が粘弾性の解析で用いた方法²⁾によった.

時間依存の解を定常解 ϕ_0 と Diriclet 級数 $a_j e^{-b_j t}$ との和で表わす. すなわち

$$\phi(t) = \phi_0 + a_j e^{-b_j t} \quad (j=1 \sim n) \quad \dots\dots\dots (14)$$

式(14)にラプラス変換を施すと,

$$\int_0^\infty \phi(t) e^{-st} dt = \int_0^\infty (\phi_0 + a_j e^{-b_j t}) \cdot e^{-st} dt$$

したがって

$$s\bar{\phi}(s) = \phi_0 + \frac{a_j}{1 + \frac{b_j}{s}} \quad \dots\dots\dots (15)$$

定数 b_j とラプラス変換パラメータをどのように取るかの問題が残る. Schapery はこれに対して,

$$b_j = s_j \quad \dots\dots\dots (16)$$

$$s_{j+1}/s_j = r \quad (r \text{ は一定の値}) \quad \dots\dots\dots (17)$$

のように, b_j を変換パラメータ s_j に等しく取り, s_j は等比級数の形で表わす時, 最適な結果が得られるとしている. このようにする時, 未定係数 a_j について, 次のような n 元の連立方程式が成立する.

$$\begin{cases} \phi_0 + \frac{a_1}{1 + \frac{s_1}{s_1}} + \frac{a_2}{1 + \frac{s_2}{s_1}} + \dots + \frac{a_n}{1 + \frac{s_n}{s_1}} = s_1 \bar{\phi}(s_1) \\ \vdots \\ \phi_0 + \frac{a_1}{1 + \frac{s_1}{s_i}} + \frac{a_2}{1 + \frac{s_2}{s_i}} + \dots + \frac{a_j}{1 + \frac{s_j}{s_i}} + \dots + \frac{a_n}{1 + \frac{s_n}{s_i}} = s_i \bar{\phi}(s_i) \\ \vdots \\ \phi_0 + \frac{a_1}{1 + \frac{s_1}{s_n}} + \frac{a_2}{1 + \frac{s_2}{s_n}} + \dots + \frac{a_n}{1 + \frac{s_n}{s_n}} = s_n \bar{\phi}(s_n) \end{cases} \quad \dots\dots\dots (18)$$

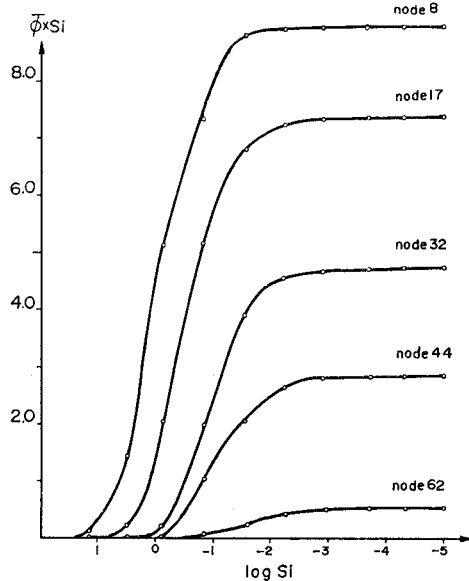
式(18)は, $h_{ij} = 1/(1 + s_j/s_i)$, $f_i = s_i \bar{\phi}(s_i) - \phi_0$ と置く時,

$$[H]\{a\} = \{f\} \quad \dots\dots\dots (19)$$

となる. 式(19)の連立方程式を解けば, 未定係数 a_j が決定され, 式(14)により, 原空間での時間依存の解 $\phi(t)$ が求められる.

6. 解析例

本論による解析の妥当性を検討するために, まず次元の問題を取り扱った.



図—2 ラプラス変換された値

(1) 変換パラメータ s の取り方

変換パラメータ s の取り方は、逆変換の精度と大いに関係がある。 s の値の取り方の目安としては、種々の s に対して、式(13)により $\bar{\phi}(x, y; s)$ を計算し、図-2のように $s \leftrightarrow s \times \bar{\phi}$ の関係を図示し、曲線が両端共に収束するような s の値を一応の目安とする³⁾。 s の値の範囲は図からもわかるようになり大きく、数少ない s の個数でこれをカバーするには、式(17)のように、等比級数の形で変換パラメータを取る。 s の個数を増せば、精度は増すわけであるが、計算の経済性といった面を考慮すると、 s の個数は、せいぜい 10~10 数個であると思われる。以上のことを考慮して本論では、 $s_1 = 1.0 \times 10^{-5}$ 、 $s_i = s_1 \times r^{(i-1)}$ 、 $i = 1 \sim 10$ として、計算を行なった。

(2) 解析例

解析を (a) 拡散成分が卓越する場合、(b) 移流成分が卓越する場合の二ケースに分けて計算し、本論による解析の特性を調べた。解析に用いた物質定数は表-1に示すようである。また $\phi(0, y; t) = 10.0$ ($t > 0$) とした。図-3は拡散成分が、図-4は移流成分が卓越する場合の解析結果である。実線は本論による Laplace 変換を用いた結果で、破線は、時間軸方向に二次形状関数を用いた Galerkin 法による解析結果である。この結果より次の事がわかる。拡散成分が卓越する場合、二つの解析法

表-1 物質定数

	(a)	(b)
D_x	10.0 m ² /s	1.0 m ² /s
u	2.0 m/s	1.5 m/s
K_1	0.1	0.01

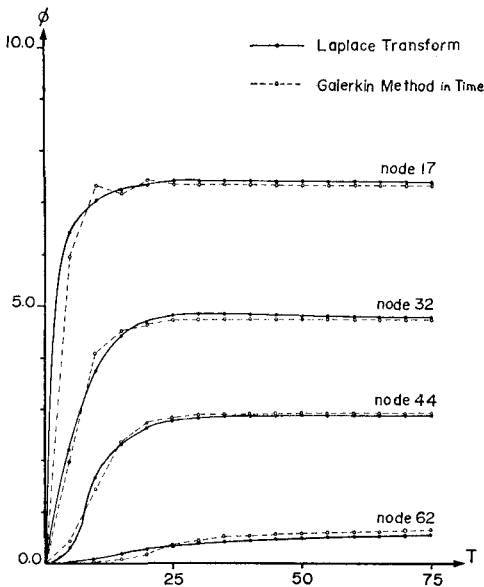
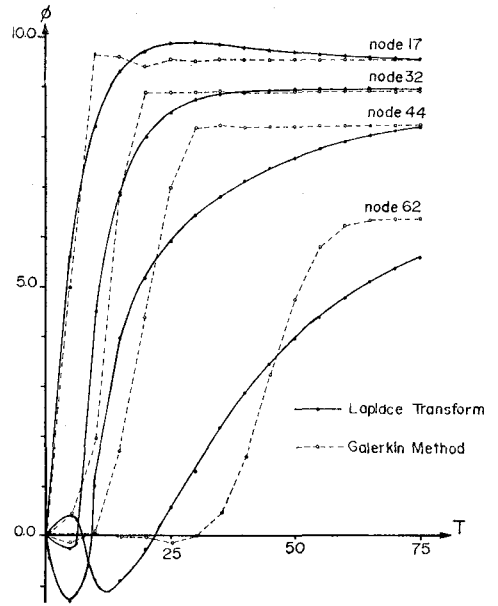
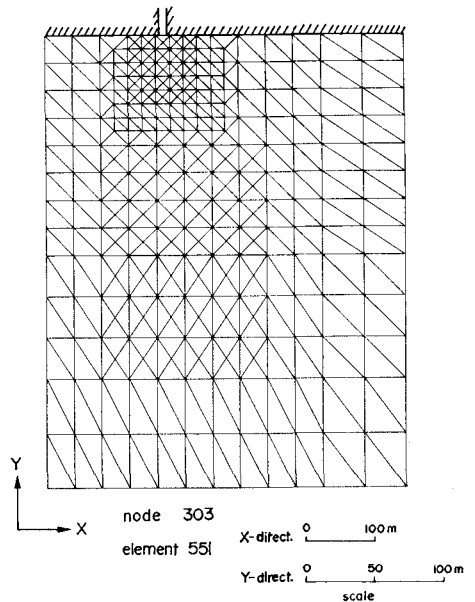
図-3 解の比較
(ケース a)図-4 解の比較
(ケース b)

図-5 二次元要素分割

による結果はよく一致し、Laplace 変換による方法では、step-by-step による解析法で見られるような解の振動は見られない。これに対して、移流成分が卓越している場合は、濃度負荷が与えられる附近の節点 (node 17, node 32) では、両者の解析結果は、比較的良好一致しているが、拘束節点を離れるにつれて (node 44, node 62), Laplace 変換による方法では、濃度変化の時間的遅れを十分に表現できず、解析の初期において、解が振動し、

負の大きな濃度が現われている。これは次の理由によるものと思われる。逆ラプラス変換する過程において、時間依存の解を式 (14) のような形で表わしているために、解が $t=0$ より、すぐ立ち上がるような熱伝導型の問題に近い、拡散成分が卓越するような場合には、精度よく解析が行われるが、移流成分が卓越し、濃度変化の time-lag が現われる場合は、これをうまく表現し得ない。また変換パラメータ s を場所に関係なく同一の値としていることと、ラプラス変数 s の実数部分しか考えていないなどの理由による。

以上の一次元結果を考慮して、モデル領域を用いて、二次元解析を行なった。解析条件は、 $u=0.1$ m/s, 放出

流速 1.5 m/s, 放出口で $\phi(t)=10.0$ ($t>0$), 拡散係数を放出口付近で $100 \text{ m}^2/\text{s}$, 周辺で $10 \text{ m}^2/\text{s}$ とした。図—5 は、解析に用いた要素分割図である。図—6 は、本論による解析結果と、時間軸方向に二次の形状関数を用いた Galerkin 法による結果との比較を代表的な節点での経時変化として示したものである。これより、両者の結果は、非常によく一致しており、数値 Laplace 変換を用いた方法は、step-by-step の方法が持つ、初期段階での振動は見られず、よい結果を与えている。図—7 に、拡散のパターンを示す。この例は拡散成分が卓越している例で、両者の結果は、完全によく一致している。

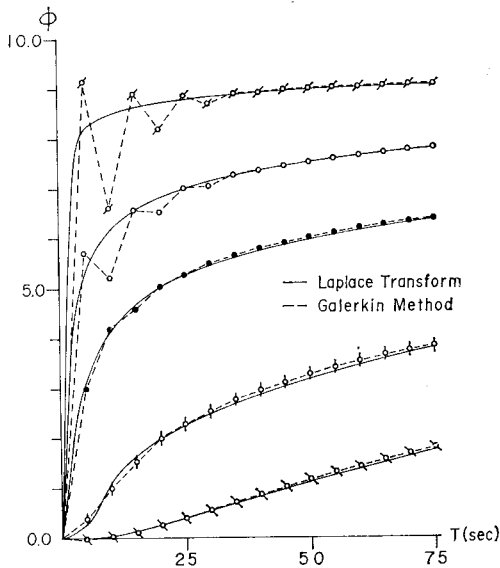
7. 結 論

本論は、初期値問題を数値的に解く上で、一般的に行われている step-by-step の解析法に代って、数値 Laplace 変換を用いて、解析を行おうとしたものである。本論による方法では、時間依存の解が時間 t の関数形として表わされるため、逐時的に計算を行う必要はなく、長時間の予測を行うには、有利な方法といえる。しかし、最適な変換パラメータを決定することが計算の精度、経済性の上で非常に重要になる。特に移流現象が卓越する場合は、場所によって変換パラメータを変えなければならない。この点で、本解析法が持つ特徴が薄れる。この点に関して、今後さらに検討を要する。

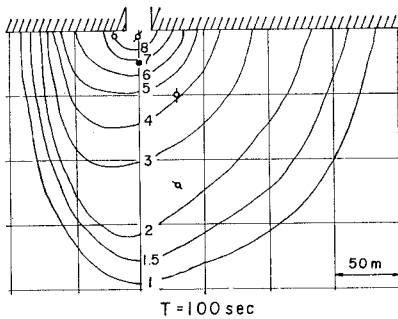
最後に、本研究を行うにあたり、信州大学工学部草間孝志教授より数々の御教授を頂きました。ここに深く感謝の意を表するしだいです。なお、数値計算には、信州大学データステーションを経由して、東大計算センター HITAC 8800/8700 を使用した。

参 考 文 献

- 1) Loziuk, L. A. and J. C. Anderson; Transient Hydrothermal Analysis of Small Lakes, Journal of the Power Division, ASCE, Vol. 99, No. PO. 2, pp. 349-364, 1973.
- 2) Thomas, L. C.; Approximate Laplace Transform Inversions in Viscoelastic Stress Analysis, AIAA Journal, Vol. 2, No. 12, pp. 2157-2166, 1964.
- 3) Liggett, A. J. and et al.; Transient Finite Element Shallow Lake Circulation, Journal of the Hydraulics Division, ASCE, Vol. 103, No. HY2, pp. 109-121, 1977.
- 4) Zienkiewicz, O. C.; The Finite Element Method Third Edition, McGraw-Hill, 1977.



図—6 解の比較
(符号は 図—7 の位置を示す)



図—7 濃度の分布