

有限要素法による非定常拡散方程式の数値解析
ON THE FINITE ELEMENT ANALYSIS OF THE TRANSIENT
CONVECTIVE DIFFUSION PROBLEMS

中沢晶平* 西田寿夫** 川原睦人*

はじめに

港湾や海洋など、水深に比べて水平面の広がり大きな水域の中に、系の外部から投入された環境負荷物質の挙動を、2次元の乱流拡散現象として近似して得た移流拡散方程式を用いて記述し、これらを数値的な方法で取り扱うことは、大規模な水理模型実験などと並んで、有力な解析手法となっていると評価されよう。電子計算機の高速度化、記憶容量の増大に伴ない、はじめ差分法が主として用いられてきたが、現在では有限要素法もよく用いられるようになった。

有限要素法は、海岸線の入り組んだ海域などの、複雑な形状を有する水域での現象を取り扱うとき、離散モデルの設定がもとの問題に極めて忠実に組み立てられるという利点を有する。このため、離散モデルとして等方一様格子を用いる差分法に代って、種々の計算例が報告されるに至っている。また、差分法との比較により、本法の実用性に関する検討を行なった結果もいくつか報告されるに至っている〔1〕〔2〕。

既に、川原らは、河川や港湾、海洋などに対して、水域の流動特性を求めるために有限要素法を適用することを詳細に検討し〔3〕〔4〕、環境アセスメントを目的として水質の変化を含めた具体的な計算を行なっている。例えば、森平・片岡らは、これらの手法によって、信濃川河口部を対象として導流堤の撤去に伴う流況の変化を調べた。また、このとき、同時に拡散方程式を取り扱い、水質汚濁の将来予測のための定常解析が行なわれた〔5〕。

しかるに、潮汐流が拡散現象に及ぼす影響が大きい場合、また、化学反応項として取り扱われる現象の性質が強い場合などで、拡散方程式の定常解の存在が保証されないことも多い〔6〕。

既に、著者らは、2次元移流拡散方程式が非線形の化学反応項を有する場合に、系の定常解を直接求めることは困難であるとして、非定常拡散方程式を逐次時間積分して数値解を求めてゆく方法について、境界条件の処理や、数値解の安定性・収束性などについて検討した〔7〕。

ここで、化学反応項とは、対象水域で、着目している物質の指標に、拡散とは独立して強い影響を及ぼす、内部生産または自浄効果を表現する項であり、通常、着目している物質の濃度の非線形の関数となる。

本論文では、最も簡単な、線形移流拡散方程式に着目し、文献〔7〕で提案した方法、すなわち、空間の変数を有限要素法で離散近似して得た連立常微分方程式に対して、時間に対して適当な差分近似を導入して逐次積分して解く方法について検討する。特に、空間に対する離散モデルに対して生ずる時間刻みの取り方を数値解の安定の意味で論じてゆく。

例題としては、主として1次元問題を用いる。既に、これ迄の研究結果よりは1次元問題に対して得られた数値解の安定条件は、2次元問題に対しても直ちに適用して差支えないことが知られている〔8〕。ここでも、1次元問題に対して得られた結果を用いて2次元問題を取り扱った例を示しておくことにする。

1. 有限要素法

拡散方程式(1)、及び移流拡散方程式(2)が R^n に属する有界領域 Ω で定義されているとする。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(E_j \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{j=1}^n \alpha_j \frac{\partial u}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_j} \left(E_j \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) \quad (2)$$

* 正員 中央大学理工学部土木工学科

** 正員 ㈱富士通フアコム技術システム部

ここで、 u は着目している物質の濃度を示し、 E_j は領域内部で与えられる物質の乱流拡散係数を示す。また、 v_j は、領域内部で与えられる十分滑らかな流速ベクトルの j 方向成分を示す。 E は等方かつ Ω の到る所で一定であるとする。このとき、 Ω の全境界を $\partial\Omega$ とおけば、次の初期条件及び境界条件

$$u = u_0 \quad \text{in } \Omega \quad \text{at } t=0 \quad (2)$$

$$u = u_1 \quad \text{on } \partial\Omega \quad \text{at } t>0 \quad (3)$$

を考慮し、内積 (u, v) を

$$(u, v) = \int_{\Omega} u v \, dx$$

と定義して、重み関数 w に対して、(2)式の Galerbin 形式が

$$(w, \frac{\partial u}{\partial t}) + \sum_{j=1}^n (w, v_j \frac{\partial u}{\partial x_j}) + E \sum_{j=1}^n (\frac{\partial w}{\partial x_j}, \frac{\partial u}{\partial x_j}) = 0 \quad (4)$$

となる。領域 Ω の三角形分割を考え、要素上で形状関数を

$$u^N = \sum_{j=1}^M \phi_j u_j \quad (5)$$

ここで、 M は 1 個の要素における節点数であり、最も簡単な 1 次要素に対しては $M = n+1$ である。上付きの大文字の添字は、値が要素毎に与えられるものであることを示す。重み w 、及び流速 v_j に対しても同様に

$$w^N = \sum_{j=1}^M \phi_j w_j \quad (6)$$

$$v_j^N = \sum_{j=1}^K \phi_j v_{j,j} \quad (7)$$

などとおけば、(5)式は、各要素毎には

$$\begin{aligned} (\phi_I, \phi_J) \frac{du_J}{dt} + \sum_{j=1}^M (\phi_I, \phi_K v_{j,K} \frac{\partial \phi_J}{\partial x_j}) u_J \\ + E \sum_{j=1}^n (\frac{\partial \phi_I}{\partial x_j}, \frac{\partial \phi_J}{\partial x_j}) u_J = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

と書くことができる。(8)式を各節点毎に加え合わせて得た連立常微分方程式を、総和規約を用いて

$$M_{IJ} \frac{du_J}{dt} + K_{IJ,k} v_{j,k} u_J + S_{IJ} u_J = 0 \quad (9)$$

と置く。ここでは、以上の計算の結果得られた半離散方程式に、集中質量型の部分近似を持ち込み、これを時間に関して逐次積分する方法について、 $n=1$ の場合についてやや詳細に検討する。既に、波動方程式や浅海波の方程式に逐次時間積分型有限要素法を用いる場合には、1次元の方程式に Neumann の判定条件を適用すれば、得られた離散モデルの安定性に関する情報を、2次元問題に拡張しても、ほぼ同程度の安定が得られることが確かめられている。

2. 逐次時間積分スキーム

簡単のため、区間 $(0, L)$ で定義される方程式(1)について予め検討する。区間 $(0, L)$ を m 等分して

$$h = L/m \quad (10)$$

とおき、小区間 $(nb, (n+1)b)$ で 1 次の形状関数を仮定すれば、(9)式は

$$(h/6) \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{u}_n \\ \dot{u}_{n+1} \end{Bmatrix} - (E/h) \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} \begin{Bmatrix} u_n \\ u_{n+1} \end{Bmatrix} \quad (12)$$

または、マトリックス表示して

$$[M] \{\dot{u}\} = [K] \{u\} \quad (13)$$

と書くことができる。このとき、集中質量行列 $[\tilde{M}]$ は

$$[\tilde{M}] = (h/6) \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} \quad (14)$$

となる。ここで、添字 $M, M+1$ はそれぞれ点 $x = nh$ 、及び $x = (n+1)h$ に設けられた節点の指標である。また、上付きの $\cdot$ を用いて時間微分を示すものとする。次に、左辺の時間微分を差分商で置き換え、いくつかの逐次積分公式を導く。例えば、前方差分商を用いれば、時間刻み Δt に対して近似は以下の通りである。

$$[M] \{\dot{u}\} \doteq (1/\Delta t) \{ [M] \{u^{(t+\Delta t)}\} - [M] \{u^{(t)}\} \} \quad (15)$$

$$[M] \{\dot{u}\} \doteq (1/\Delta t) \{ [\tilde{M}] \{u^{(t+\Delta t)}\} - [\tilde{M}] \{u^{(t)}\} \} \quad (16)$$

$$[M] \{\dot{u}\} \doteq (1/\Delta t) \{ [\tilde{M}] \{u^{(t+\Delta t)}\} - [\tilde{M}] \{u^{(t)}\} \} \quad (17)$$

これらの近似に対して Neumann の条件による安定性を調べる [9]。近似 (15) に対しては、準陽型 Euler スキーム

$$[M] \{u^{(t+\Delta t)}\} = [M] \{u^{(t)}\} + \Delta t [K] \{u^{(t)}\} \quad (18)$$

を得る。このとき

$$\mu = (E \Delta t / h^2) \quad (19)$$

とおけば、若干の計算の結果、スキーム (18) は、

$$\mu \leq 1/3$$

のとき安定であるとしてよいことがわかる。時刻 $t + \Delta t$ における U の節点値に対して集中化した Euler の公式は

$$[\tilde{M}] \{u^{(t+\Delta t)}\} = [\tilde{M}] \{u^{(t)}\} + \Delta t [K] \{u^{(t)}\} \quad (20)$$

となる。このとき、安定の範囲は、整合な係数マトリックスのみを用いたスキーム (18) と同様に

$$\mu \leq 1/3$$

となる。更に、時刻 t における U の節点値を集中化した係数マトリックスを用いて表現した Euler の公式は

$$[\tilde{M}] \{u^{(t+\Delta t)}\} = [\tilde{M}] \{u^{(t)}\} + \Delta t [K] \{u^{(t)}\} \quad (21)$$

と書くことができる。スキーム (22) に対しては、安定条件が

$$\mu \leq 1/2 \quad (24)$$

となる。以上の結果よりは、拡散方程式 (1) に対して逐次積分スキームを前進差分を用いて構成してゆく場合には、集中質量型の部分近似を持ち込めば、全く逆行列を計算することなく各時刻の数値解が求められる点で有利であり、Neumann の意味での安定も悪くないことが明らかとなった。特に、前進差分商の両側に集中質量近似を持ち込むスキーム (23) は数値解の安定のみならず、計算時間及び記憶容量の点からも有利であるといえよう。

次に、移流拡散方程式 (2) について同様の検討を行なう。前の例題と同様に、区間 $(0, L)$ において、

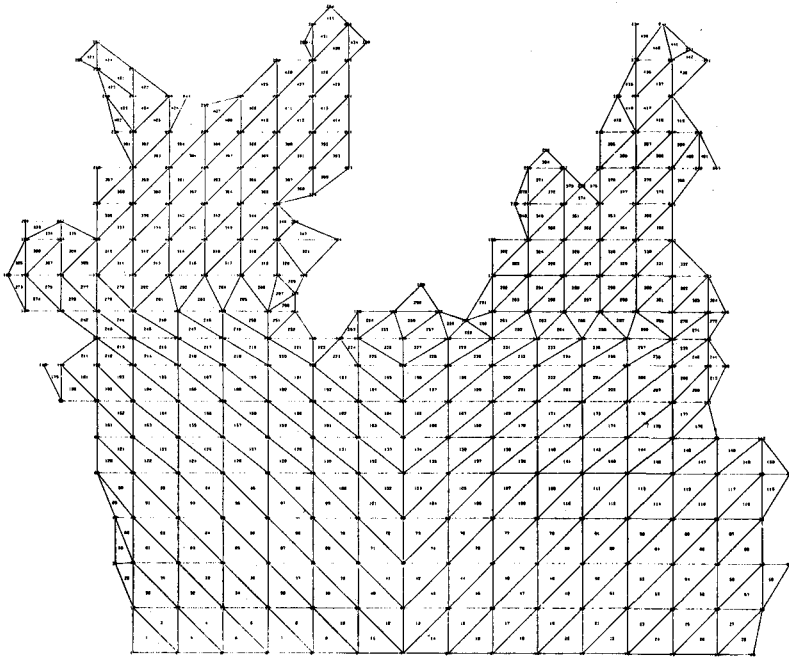


Fig.1 Finite Element Model of Kamaishi Bay

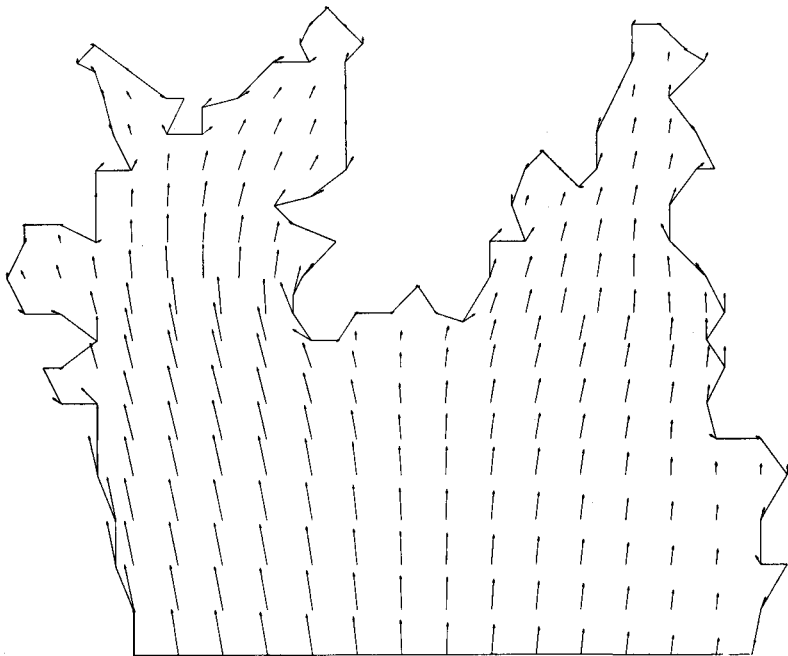


Fig.2 Computed Velocity Distribution

$x = 0$ の点より、 x の正方向に区間内で一定の流速 U_α が与えられるものとしよう。このとき、小区間 $(m\Delta x)$ 、 $(n+1)\Delta x$ において、有限要素法は

$$(25) \quad \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{u}_m \\ \dot{u}_{m+1} \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} E/\Delta x - U_\alpha/2 & -E/\Delta x + U_\alpha/2 \\ -E/\Delta x - U_\alpha/2 & E/\Delta x + U_\alpha/2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_m \\ u_{m+1} \end{Bmatrix}$$

として与えられる。(13) 式と同様にして次のマトリックス表示を用いる。すなわち

$$[M]\{\dot{u}\} = [\tilde{K}]\{u\} \quad (26)$$

ここで、 $[\tilde{K}]$ は、第(10)式の記法に従えば

$$[\tilde{K}] = K_{ijjk} v_{jk} + S_{ijij} \quad (27)$$

である。主として、スキーム(23)を用いて離散モデルの安定条件を明らかにしてゆこう。

すなわち

$$[\tilde{M}]\{u^{(t+\Delta t)}\} = [\tilde{M}]\{u^{(t)}\} + \Delta t [\tilde{K}]\{u^{(t)}\} \quad (28)$$

において、文献[8]で与えられる増幅因子 Q は、 μ, α をそれぞれ

$$\mu = E\Delta t/\Delta x^2 \quad (29) \quad \alpha = U_\alpha \Delta t/\Delta x \quad (30)$$

とおけば

$$Q = 1 - \mu(2 - 2\cos\omega) - i\alpha \sin\omega \quad (31)$$

すなわち

$$|Q|^2 = \{1 - \mu(2 - 2\cos\omega)\}^2 - \alpha^2 \sin^2\omega \quad (32)$$

これより

$$(1 - 2\mu)^2 \leq 1 - \alpha^2 \quad (33)$$

が成り立つならば、スキーム(28)は安定であるといえる。

次に、1次元移流拡散方程式に対して、陽型の Leap Frog スキームを用いることを考えよう。この場合、時間微分は、中央差分で書き換えられる。すなわち

$$[M]\{\dot{u}\} \doteq (1/2\Delta t) ([\tilde{M}]\{u^{(t+\Delta t)}\} - [\tilde{M}]\{u^{(t-\Delta t)}\}) \quad (34)$$

より、スキーム

$$[\tilde{M}]\{u^{(t+\Delta t)}\} = [\tilde{M}]\{u^{(t-\Delta t)}\} + (1/2\Delta t)[K]\{u^{(t)}\} \quad (35)$$

を得る。このとき、安定条件は、スキームに関する固有方程式の根に対して

$$|\lambda| = |(-b + \sqrt{b^2 + 4a})/2| \leq 1 \quad (36)$$

ただし

$$a = \frac{2}{3} + \frac{1}{3}\cos\omega \quad ; \quad b = 2\mu(2 - 2\cos\omega) \quad (37)$$

となる。すなわち、妨物型の方程式に対しては Leap frog 法は無条件不安定となる。しかるに、双曲型の方程式に対しては無条件安定であることが知られており、流速の大きな領域では、よい結果が期待できる。

3. 数値計算例

いくつかの陽型の差分スキームを用いて数値実験を行なったうち、陽型 Leap-frog 公式を用いた例を示す。釜石湾を対象として、第1図に示すような要素分割を行なった。このときの要素数は442、節点数は289である。湾口に潮位を境界条件として与え、Tuco-Sep Lax Wendaoiffによって3潮汐の潮流計算を行ない、得られた最大流速 U_{max} を用いて、湾内の節点流速を

$$v_j = v_{fmax} \sin \omega t \quad (38)$$

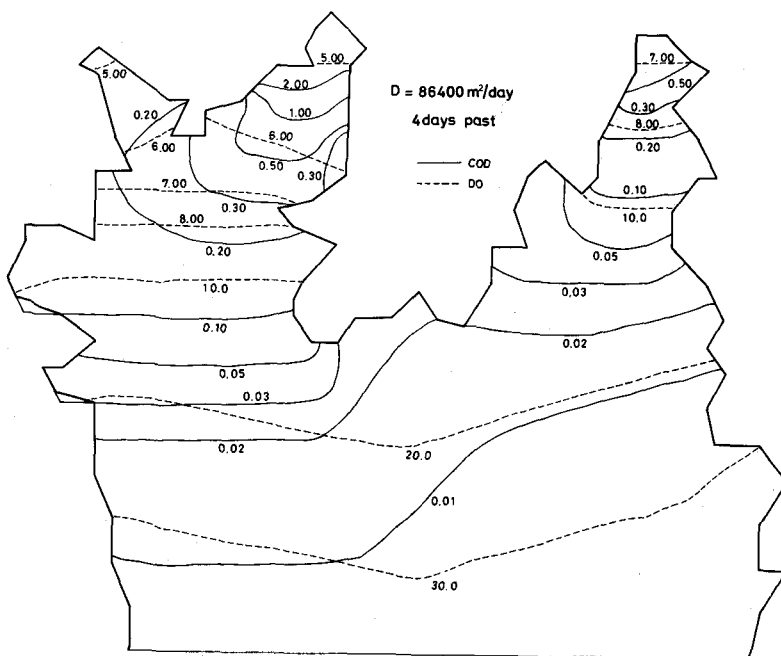


Fig.3 Computed Instantaneous Concentration Profile (1)

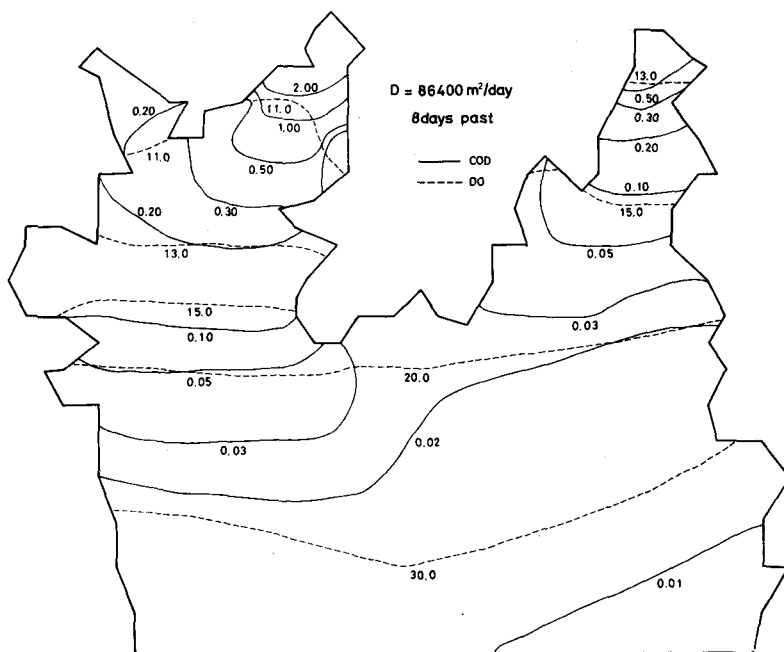


Fig.4 Computed Instantaneous Concentration Profile (2)

と仮定した。また、拡散係数は領域の内部で全方向に一定値を取るものと仮定し、湾奥の都市より系内に投入される負荷物質の濃度の指標としてはCODを用いた。また、海水中の溶存酸素濃度DOについて着目し、これらの間に簡単な反応モデルを設定して計算を進めた。

系内に負荷されるCODの濃度 u_1 は、

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \sum_{j=1}^2 v_j \frac{\partial u_1}{\partial x_j} = E_1 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_j^2} - (k_1 + k_2) u_1 - p \quad (39)$$

また、溶存酸素濃度 u_2 に対しては、次式が成り立つものとする。

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \sum_{j=1}^2 v_j \frac{\partial u_2}{\partial x_j} = E_2 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_j^2} - k_1 u_1 + k_2 (u_3 - u_2) + d \quad (40)$$

境界条件は、境界負荷が投入されると考えられる節点においては文献[7]の方法を用いて節点濃度を評価し、その他の境界では

$$q_1 = E_1 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial u_1}{\partial x_j} n_j = 0 \quad (41)$$

を用いた。また、要素毎に水深は一定であるとし、水深方向への濃度勾配は無いものとして、 $\Delta t = 0.01$ dayとして逐次積分して得られた結果の一部を第3図、第4図に示す。ここで、溶存酸素濃度DOについては、外洋との境界では、水温 15°C において飽和濃度に達しているものと仮定し、この値を境界値として入力した他は、全ての境界節点で、

$$q_2 = E_2 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial u_2}{\partial x_j} n_j = 0 \quad (42)$$

を与えた。

なお、第2図には、潮流計算を行なった結果、各節点で求められた漲潮時の最大流速をベクトル表示している。

ここで示した範囲では、時回積分にLeap-frog法を用いた有限要素法を用いてほぼ安定な数値解が求められることが知られた。

おわりに

移流項を含む拡散方程式に着目して、前進差分に基礎をおく陽的な時間積分スキームについて、集中集量型の部分近似を持ち込んだ場合の安定性について検討した。

これらの結果より、時間微分を差分商で近似する場合に、両側の係数マトリックスを集中化する方法が最も効率がよいことが確かめられた。

無条件安定であることより、拡散方程式によく用いられる、陰型のCaanb-Utcolson法による有限要素法は、適正な時間刻みの選択に対して十分な注意が必要であることが知られており、ここで述べた方法は、安定な範囲ではよい数値解が得られる点で、その実用性は高いものと思われる。

謝 辞

本論文をまとめるにあたり、流況の解析には中央大学大学院大森駿介君の協力を得た。また、拡散方程式の解析には中央大学中里敏夫君の協力を得た。記して感謝の意を表する。

参 考 文 献

1. Gray, W.G., G.F.Pindel, and C.A. Brebbia(eds), Finite Elements in Water Resowces , Pentech Paess, 1977
2. Gallagher, R.H., J.T.Oden, C. Tayeor, ando, C.Zienbiewcy(eds) Finite Elements tn Fluids, John Wiley and Sons, Cool, 1, 1975. Cool.3, 1977.
3. 川原睦人・川上俊雄・船越晴世・長谷川賢一、有限要素法と摂動法を用いた流動及び拡散計算手法の開発、第23回土木学会海岸工学講演会、1976、
4. Kawahara, M., and K.Hasegawa, Periodic Galerbin Finite Element Method for Tidal Flow Analysis, to appear in Int.J.Num.Meth, Engng., 1977.
5. 森平倫生・片岡真二・安井誠人・川原睦人・長谷川賢一、有限要素法による淡水海水二層流域の潮流と水質の解析、第24回土木学会海岸工学講演会、1977。
6. 中川友康・牛島照夫・池田勉、半線形方程式の爆発解の有限要素解析、日本鋼構造協会第11回研究集会マトリックス解析法シンポジウム、1977。
7. 中沢晶平・川原睦人、有限要素法による化学反応を伴う汚染拡散解析、第24回土木学会海岸工学講演会、1977。
8. 川原睦人、逐次時間積分型有限要素法とその安定性について、第24回土木学会海岸工学講演会、1977。
9. 矢嶋信夫・野木達夫、発展方程式の数値解析、岩波書店、1977。