

Lagrange 二次要素による三次元拡散の数値解析について

○ 眞柄建設(株) 正員 石川精一
神户大学工学部 正員 松梨順一郎

大阪湾, 東京湾, 琵琶湖など, いわゆる内水域における水質汚濁の解明は, 重要な社会的要請の一つである。二つような水域における富栄養化の現象には, 底部の堆積汚泥の巻き上げによる効果が大きいといわれながら三次元解析がまだ進んでいない。一般に数値解析には差分法と有限要素法があるが, 両者ともに, 特に差分法は計算機の容量とCPU時間の長さ, すなわち経費についての制約がなければ, 原理的にはその数値解法はすべてに確立されているとしてよい。しかし, 実際にはこれらについて大きい制約を受けるために, ごく限られた簡単な問題のみが処理されているのが現状である。本研究は拡散方程式の解法に有限要素法を用い, 大きい計算機容量と長いCPU時間の短くなるようなアルゴリズムの開発を目標とし, 若干の検討と試みについてその大要を報告する。

1. 基礎方程式

現象を保存系とし, 三次元拡散の基礎方程式とつぎのように設定する。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial C}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial C}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial C}{\partial z}) = 0 \quad (1)$$

こゝに, $C(x, y, z, t)$ は汚染質の濃度, u, v, w および D_x, D_y, D_z はそれぞれ流速および拡散係数の x, y, z 軸方向の成分とする。原点と瞬間点源とし, その瞬間負荷と M とする。簡単のために, $D_x = D_y = D_z = D = \text{const.}$ とし, $u = v = w = 0$ とし, 拡散現象を非対称とすると, 図-1 のように, 境界条件は

$$\left. \begin{aligned} \text{面 } x=0 \\ \text{面 } y=0 \\ \text{面 } z=0 \end{aligned} \right\} \text{上で } \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad (2)$$

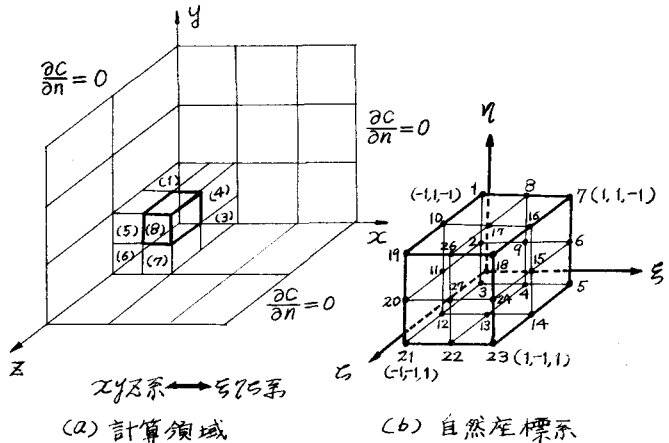
$$\begin{aligned} &\text{球面 } (x^2 + y^2 + z^2 = r^2) \text{ 上の} \\ &r = \infty \text{ 上で } \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad (3) \end{aligned}$$

となる。なお初期条件は

$$[C]_{t=0} = 0 \quad (4)$$

保存系の条件は $t > 0$ で

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty C \cdot 4\pi r^2 dr = M \quad (5)$$



こゝに, n は境界面における外向法線とする。

図-1 XYZ系とξηζ系の対応

2. ガラーキン有限要素法による定式化

図-1の(a)のように計算領域を有限個の微小立方体で分割する。こゝに Ω は立方体 Ω_0 。一般的には図-2のような大つの曲面よりなる任意の微小体ではない。これらのそれぞれにLagrange二次要素を適用すると図-2のような節点配置となる。各要素ごとに C の近似関数, $C_a = \sum_{j=1}^8 C_j(t) N_j(x, y, z) \quad (6)$ と導入する。

Ishikawa Seich, Matsunashi Junzaburo

(4)式において C の代りに $C_a(x, y, z, t)$ を代入して残差を求め、ガラーキン有限要素法と適用すると、

$$\sum_e \iiint N_a \left\{ \frac{\partial C_a}{\partial t} - D_x \frac{\partial^2 C_a}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C_a}{\partial y^2} - D_z \frac{\partial^2 C_a}{\partial z^2} \right\} dx dy dz = 0 \quad (7)$$

Gaussの定理によつて二階微分項を變形すると、

$$\sum_e \left[\iiint (N_a \frac{\partial C_a}{\partial t} + D_x \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial C_a}{\partial x} + D_y \frac{\partial N_a}{\partial y} \frac{\partial C_a}{\partial y} + D_z \frac{\partial N_a}{\partial z} \frac{\partial C_a}{\partial z}) dV - \iint N_a D_n \frac{\partial C_a}{\partial n} dS \right] = 0 \quad (8)$$

== 即ち、 dV, dS はそれぞれ小体積素分および小面積素分であり、 D_n は n 方向の乱流拡散係数とする。境界条件式(2)、(3)より、 $\sum_e \iint N_a D_n \frac{\partial C_a}{\partial n} dS = 0$ であり、 C_a の内容として式(6)と代入すると、

$$\sum_e \left[\iiint (N_a N_p \frac{\partial C_p}{\partial t} + D_x C_p \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial N_p}{\partial x} + D_y C_p \frac{\partial N_a}{\partial y} \frac{\partial N_p}{\partial y} + D_z C_p \frac{\partial N_a}{\partial z} \frac{\partial N_p}{\partial z}) dV \right] = 0 \quad (9)$$

(9)式に含まれる積分の実行と容易にするために、図-1(a)の各要素、すなわち、図-2の要素と変数変換によつて図-1(b)のような自然座標系(各要素は原点を中心にして ξ, η, ζ の立方体となる。)に変換する。アインシュタインの要素とし、変換が

$$x = \sum_{\alpha=1}^N N_\alpha(\xi, \eta, \zeta) \cdot x_\alpha, \quad y = \sum_{\alpha=1}^N N_\alpha(\xi, \eta, \zeta) \cdot y_\alpha, \quad z = \sum_{\alpha=1}^N N_\alpha(\xi, \eta, \zeta) \cdot z_\alpha, \quad N=27 \quad (10)$$

で与えられるとする。こゝに、 $N_\alpha (\alpha=1, 2, \dots, N)$ は一般に自然座標系で定義される。変換後の各項と数値積分するわけであるが、その手法には Newton-Cotes の方法と Gauss-Legendre の方法がある。前者の一つである Simpson の 3 分の 1 の公式を用いると、たとえば、式(9)の左辺第 1 項は、要素の 27 節点と 27 節点の積分値が完全に一致するために、

$$\dot{C}_p \iiint N_a N_p dx dy dz = \dot{C}_p \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} N_a N_p \cdot \det[J^0] \cdot d\xi d\eta d\zeta = \dot{C}_p \sum_{i=1}^{27} (N_a N_p)_i \cdot \det[J^0]_i \cdot W(i) = \dot{C}_a \cdot \det[J^0]_a \cdot W(a) \quad (11)$$

となる。こゝに、 $W(i)$ は重みであり、 $\det[J^0]$ はアインシュタイン行列 $[J^0]$ の行列式である。(9)式の他の項に含まれる

$$[J] = \begin{bmatrix} \partial x / \partial \xi & \partial y / \partial \xi & \partial z / \partial \xi \\ \partial x / \partial \eta & \partial y / \partial \eta & \partial z / \partial \eta \\ \partial x / \partial \zeta & \partial y / \partial \zeta & \partial z / \partial \zeta \end{bmatrix} \quad (12) \quad \begin{bmatrix} \partial N_a / \partial x \\ \partial N_a / \partial y \\ \partial N_a / \partial z \end{bmatrix} = [J]^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \partial N_a / \partial \xi \\ \partial N_a / \partial \eta \\ \partial N_a / \partial \zeta \end{bmatrix} \quad (13)$$

$\partial N_a / \partial x, \dots$ など式(13)によつて与えられる。(9)式の各項を計算して整理すると、

$$\sum_e \left[\dot{C}_a \det[J^0]_a W(a) + \left\{ \sum_{i=1}^{27} \left(C_p \frac{\partial N_p}{\partial x} \right)_i \frac{\partial N_a}{\partial x} + \sum_{i=1}^{27} \left(C_p \frac{\partial N_p}{\partial y} \right)_i \frac{\partial N_a}{\partial y} + \sum_{i=1}^{27} \left(C_p \frac{\partial N_p}{\partial z} \right)_i \frac{\partial N_a}{\partial z} \right\}_i \det[J^0]_i W(i) \right] = 0 \quad (14)$$

各要素について式(14)の[]内を計算し、すべての要素にわたつてこゝから加算すると、式(14)は

$$C \dot{\mathcal{G}} + F \mathcal{G} = 0 \quad (15)$$

となる。 $\mathcal{G}$ は $C_i (i=1, 2, \dots, K)$ からなる未知量ベクトル、 $\dot{\mathcal{G}}$ はその時間微分である。こゝに K は計算領域内全節点数とする。 C は式(11)の $\dot{C}_a$ の係数からなる $K \times K$ の行列、 F は残差の項に依存する $K \times K$ の行列である。式(14)より明らかであるように、この数値積分によつて、 C は必然的に対角行列となり、時間積分として陽差分法、例えは Leap-frog 法と適用すると、式(15)となり、計算効率のよいアルゴリズムが構成される。これら計算結果、Gauss 積分法によるものは表 2 に表す。図-3 は瞬間点源の A-D-I 差分法による計算結果である。

$$C \mathcal{G}_{k+1} = C \mathcal{G}_k - \Delta t F_k \mathcal{G}_k \quad (16)$$

表 2 が構成される。これら計算結果、Gauss 積分法によるものは表 2 に表す。図-3 は瞬間点源の A-D-I 差分法による計算結果である。

参考文献 1) O.C. ツェンヤウ・ウィット著、吉沢・山田共訳“マトリックス有限要素法”，培風館，昭和 50 年。

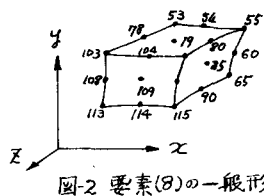


図-2 要素(8)の一般形

