上流重み関数を用いた移流拡散解析

−−マイコン版有限要素法プログラムの開発−−

佐賀大学　学生員　○中西正幸
正員　古賀勝喜
正員　荒牧軍治

1．はじめに

移流拡散方程式と呼ばれる偏微分方程式で記述される物理現象は数多く存在する。媒質が動いている熱拡散，流れ場における物質の拡散はその代表的なものである。その他流体の運動量保存を示すナビア．ストークス方程式は移流拡散と非圧縮性（あるいは圧縮性状）との連成式であり，半導体内の不純物イオンの質量保存則，輸送方程式も拡散方程式の形をしている。

有限要素法を用いた移流拡散解析の試みは多くの研究者によってなされ，大きな成果をあげてきた。特に上流側重み関数の採用及びペナルティー法の開発は流れの速い場における解析に大きな威力を発揮した。また３次元問題の解析を念頭においた反復計算法，ＰＣＧ法，ＩＣＧ法等が開発されている。

一方マイクロコンピューターの発達はめざましいものがあり，１，２年の間に各研究者は自分のデスクで手軽に大容量，高速の計算ができるようになることは明らかである。研究者，技術者が手軽に使えるプログラムを用いて解析してみることは現象理解の第一ステップとして重要である。

本研究は上流重み関数を用いたマイコン版有限要素法解析プログラムを開発し，その有効性及び問題点を明らかにしようとするものである。

2．基礎方程式

移流拡散の基本式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}=\mathrm{div}\,(-k\nabla\phi+u\phi)+Q \qquad (1)$$

領域Ωを有限要素に分割し要素内のϕを形状関数N_eを用いて表わし，弱形式の重み付き残差法を用いると次式のような有限要素式を求めることができる。

$$C_e\frac{d\Phi_e}{dt}+(k_e+d_e)\,\Phi_e=f \qquad (2)$$

ただし

$$k_e=\int k\left(\frac{\partial W_e^T}{\partial x}\frac{\partial N_e}{\partial x}\quad\frac{\partial W_e^T}{\partial y}\frac{\partial N_e}{\partial y}\right)d\Omega$$

$$C_e=\int_{\Omega_e} W_e^T N_e\,d\Omega$$

$$d_e=\int_{\Omega_e} W_e^T u_x\frac{\partial N_e}{\partial x}+W_e^T u_y\frac{\partial N_e}{\partial y}\;)\,d\Omega \qquad (3)$$

$$f_e=\int_{\Omega_e} Q\,W_e^T d\Omega\quad\int_{\Gamma_e} q\,W_e^T d\Gamma$$

ただしq_nは境界におけるフラックスを，Qは要素内において単位時間内に発生する量を示しているW_eは重み関数であり次式で示される。

$$W_e=N_e+\alpha F_e \qquad (4)$$

F_eは上流重み関数である。$\alpha=0$の時は$W_e=N_e$となり通常のBubrov-Galerkin法であり，$\alpha=0$の時は上流側に重みのついた関数となりPetrov-Galerkin法と呼ばれる。

Christe等は1次元棒要素に対して次の上流重み関数を与えている。

$$F_e=[\;3(\xi^2-\xi)\quad -3(\xi^2+\xi)\;] \qquad (5)$$

またHeinrich等は四辺形要素に対して次の上流重み関数を与えた.

$$W^i=W_i(\xi)W_i(\eta)$$
$$W_i(\xi)=N_i(\xi)+\alpha_{ij}3(1-\xi)(1+\xi)/4 \qquad (6)$$
$$W_i(\eta)=N_i(\eta)+\beta_{ik}3(1-\eta)(1+\eta)/4$$

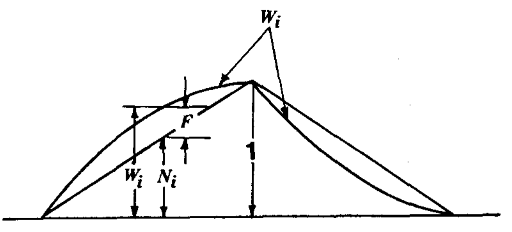

Fig.1 上流重み関数

3．有限要素法プログラム

ここで作製した移流拡散有限要素法プログラムは上流重み関数を用いて解の安定化をはかっているが，それ以外に次のような特徴を持つ。

1)剛性マトリックスはバンドマトリックスに格納し，記憶量及び計算量の減少をはかっている。2)連立方程式の解法としてＬＵ分解法を用い，繰り返し演算における計算量を減少させている。3)時間方向差分は前進，後退，Crank-Nicholson法のいずれかを選択出来る．4)流速は各要素内で一定と仮定している。

4．数値計算例

上流重み関数と通常のGalerkin法との違いを見るため，Huebner等が解析した問題と同じ１次元定常問題を解析した。要素長さ１，流速ｕ及び拡散係数ｋの比で与えられるペクレ数により挙動が異なる。ペクレ数が２以下の範囲では$\alpha=0$でもほぼ正解に一致する。ペクレ数が２を越える通常の方法では解が振動するが，上流重み関数を用いると解は安定する。Zienkiewicz等が示した最適重み係数$\alpha_0=\cot\gamma/2-\gamma/2$を用いるといずれの場合も正解に完全に一致する。

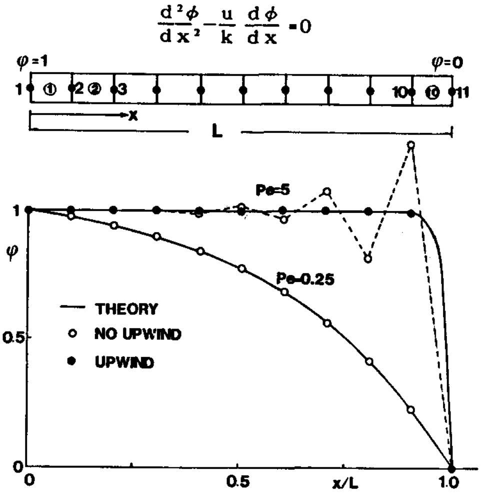

Fig.2　１次元定常問題

次に２次元非定常問題の計算例を示す。ｘ方向に一定の流速場を考える。時刻ｔ＝０に単位長さ当り質量Ｍの物質が瞬間放流される問題の解は次の正規分布で与えられる。

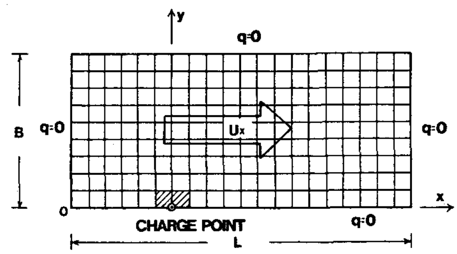

Fig.3　２次元有限要素モデル

$$\phi=\frac{M}{\rho}\ \frac{1}{4\pi kt}\ \exp\left(1-\frac{x_1{}^2+y^2}{4kt}\right)\qquad (x_1=x-u_x t)\qquad (7)$$

ただしM/ρは濃度ϕを全領域で積分したものである。有限要素法の計算では瞬間放流問題を次のように考える。初期条件として$x=y=0$の節点のみに濃度$\phi=1$を与え，他の点は全て０とする。形状関数の性質からFig.4に示す初期濃度分布を与えたことになる。形状関数の要素における積分値が1/4であることを考えれば，M/ρはa^2*1となる．ただしa^2は要素の面積である。Fig.5に時間方向に後退差分を用いて解いたＦＥＭ解と理論解との比較を示す。

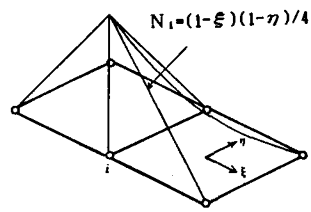

Fig.4　初期濃度分布

ＦＥＭ解は初期の段階で左側にふくらんだ形となっている。これは点源放流と分布源放流の差が現れたものと考えられる。時間がたつにつれて両方の解は次第に一致してくる。上流重み関数を用いない場合は解の振動が起こる個所があり，かつ初期の段階で分布形がいびつになる。

時間差分の種類による解の安定性，精度の検証及び実際問題の解析が今後の問題である。

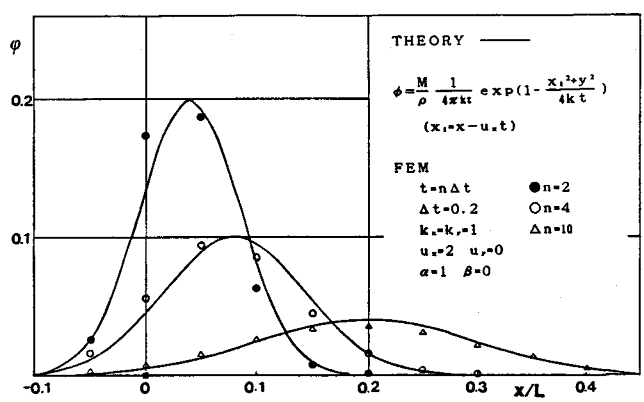

Fig.5　各時間ステップの濃度分布