

有限要素法による移流分散方程式の解析

東北大学工学部 正員 岩崎敏夫
東北大学大学院 学生員 O江塚利彦

1 緒言

汚染物質の拡散, 浸透層内の塩分分散などのシミュレーションに, 移流分散(拡散)方程式の数値解析が用いられる。有限要素法は, ①不等な任意形状の取り扱いが容易である, ②境界条件の処理が容易である, という利点のため応用の広いものである。しかも, 有限要素法は, 差分法と本質的には同等なものであり, 安定性の判断などに差分法の知識が使える。ここでは, 移流分散方程式の有限要素解について, 安定性, 誤差の検討を行なう。なお, 数値解の例は, 浸透流における移流分散を対象としたものである。

2 基礎式の定式化と計算スキーム

1次元移流分散方程式(1)を考える。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \dots (1)$$

(1)を, 空間方向には, 重み付き残差法による離散化, 時間方向には, 差分法による離散化を行なう。

右図のような1次要素を用い, (2)のよう

な試行関数を仮定する。

$$C = \sum_{j=1}^2 C_j \phi_j \quad \dots (2)$$

$$\text{ここで, } \phi_1 = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}, \quad \phi_2 = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \quad \dots (3)$$

(1)に重み付き残差法を適用すると,

$$\sum_{i=1}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(D C_j \frac{d^2 \phi_j}{dx^2} - u C_j \frac{d \phi_j}{dx} - \phi_j \frac{d C_j}{dt} \right) W_i dx = 0 \quad \dots (4)$$

$W_i = \phi_i$ とすれば, Galerkin法であり, 等間隔メッシュとすると, 次式が得られる。

$$[B] \frac{d[C]}{dt} + [A][C] = 0 \quad \dots (5)$$

$$\text{ここで, } [B] = \frac{\Delta x}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad [B] = \frac{\Delta x}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$[A] = \begin{bmatrix} \frac{D}{\Delta x} - \frac{u}{2} & -\frac{D}{\Delta x} + \frac{u}{2} \\ -\frac{D}{\Delta x} - \frac{u}{2} & \frac{D}{\Delta x} + \frac{u}{2} \end{bmatrix}$$

[B]は, 整合マトリックス[B]を, 集中化(lumped)したマトリックスである。

次に, (5)を時間方向に差分法で離散化する。

$$[B] \frac{[C]_{t+\Delta t} - [C]_t}{\Delta t} + [A] \left[\varepsilon [C]_{t+\Delta t} + (1-\varepsilon) [C]_t \right] = 0 \quad \dots (6)$$

ここで, 次の4つの計算スキームを考えられる。

(S-1); (6)式で $\varepsilon = 0$ とする (S-2); (6)式で $\varepsilon = 0.5$ とする。

(S-3); (6)式で [B] に [B] を用い, $\varepsilon = 0$ とする。

(S-4); (6)式で [B] に [B] を用い, $\varepsilon = 0.5$ とする。

このうち完全に場に乗けるのは, (S-3)のみである。

要素マトリックス方程式(6)を重ね合わせることにより,

(7)のような差分式が得られる。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \left[\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta t} + 4 \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta t} + \frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{\Delta t} \right] \\ & + u \left[\varepsilon \frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + (1-\varepsilon) \frac{C_{i+1}^n - C_{i-1}^n}{2\Delta x} \right] \\ & - D \left[\varepsilon \frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + (1-\varepsilon) \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right] = 0 \quad \dots (7) \end{aligned}$$

集中化マトリックス[B]を用いた場合には, 時間微分項が, $\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t}$ となる。

次に, 重み関数として(8)を考える。

$$W_i = \begin{cases} \phi_i + \alpha F(x) & \text{for } \textcircled{2} \text{ element} \\ \phi_i - \alpha F(x) & \text{for } \textcircled{1} \text{ element} \end{cases} \quad \dots (8)$$

$F(x)$ は, 節点で0の正値関数で,

$\int_0^{\Delta x} F(x) dx = \frac{\Delta x}{2}$ を満たすものとする。

$$F(x) = -\frac{3}{\Delta x^2} (x - x_i)(x - x_{i+1} - \Delta x) \quad \dots (9)$$

とする。技巧的だが, (4)において時間微分項のみ $W_i = \phi_i$

とすると, (5)における[A]は次のようになる。

$$[A] = \begin{bmatrix} \frac{D}{\Delta x} - (1-\alpha)\frac{u}{2} & -\frac{D}{\Delta x} + (1-\alpha)\frac{u}{2} \\ -\frac{D}{\Delta x} - (1+\alpha)\frac{u}{2} & \frac{D}{\Delta x} + (1+\alpha)\frac{u}{2} \end{bmatrix} \quad \dots (10)$$

この場合に導かれる差分式は, (7)において移流項を(11)のようにしたものである。

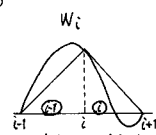
$$\begin{aligned} & u \left[\varepsilon \frac{(1-\alpha)C_{i+1}^{n+1} + 2\alpha C_i^{n+1} - (1+\alpha)C_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right. \\ & \left. + (1-\varepsilon) \frac{(1-\alpha)C_{i+1}^n + 2\alpha C_i^n - (1+\alpha)C_{i-1}^n}{2\Delta x} \right] \quad \dots (11) \end{aligned}$$

$\alpha = 1$ とすると, 移流項に後退差分をとったことになる。

これは UPWIND Scheme と呼ばれる。

3 計算スキームの安定性について

(7)式のような差分式が得られたので, Von Neumann の



条件により安定性を検討する。この結果、Implicit-Scheme (S-2, S-4) は、無条件安定、(S-1), (S-3) の安定性はほぼ同じであることがわかった。(S-1), (S-3) の安定条件は、それぞれ (2) 式、(3) 式のものである。

$$12\mu^2(1-\cos\omega)^2 + 3\lambda^2\sin^2\omega \leq 4\mu(1-\cos\omega)(2+\cos\omega) \quad \dots (12)$$

$$4\mu^2(1-\cos\omega)^2 + \lambda^2\sin^2\omega \leq 4\mu(1-\cos\omega) \quad \dots (13)$$

ここで、 $\mu = D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ 、 $\lambda = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$ 、 $|\omega| \leq \pi$ である。

4. 計算スキームの誤差について

(7) のように得られた差分式の各項を $C_i^* = C_i(t, x)$ のまわりで Taylor 展開し、打ち切り誤差を評価する。その結果、1次の誤差(数値粘性項)、2次の誤差(数値分散項)は次のようになる。

Scheme	1次の誤差(数値粘性項)	2次の誤差(数値分散項)
S-1	$-\frac{\Delta t}{2} u^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	$(\Delta t u D - \frac{\Delta t^2}{3} u^3) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$
S-2	0	$(\Delta t u D - \frac{\Delta t^2}{6} u^3) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$
S-3	$-\frac{\Delta t}{2} u^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	$(\Delta t u D - \frac{\Delta t^2}{6} u^3 - \frac{\Delta t^3}{3} u^3) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$
S-4	0	$(\Delta t u D - \frac{\Delta t^2}{6} u^3 - \frac{\Delta t^3}{6} u^3) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$

UPWIND Scheme の数値粘性項は、 $\frac{\Delta x}{2} u \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ である。

このため、UPWIND Scheme は、局所マクレ数 $Pe = \frac{u \Delta x}{D}$ が大きい(物流が卓越する)場合にも、安定は得られるが、誤差が大きくなり分散効果を正しく評価できない。

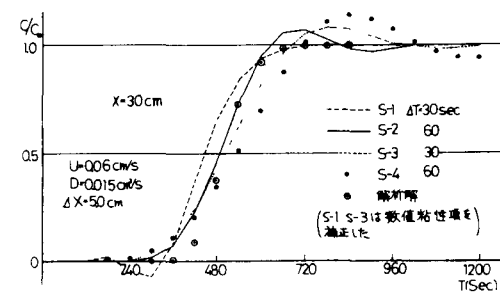


図-1

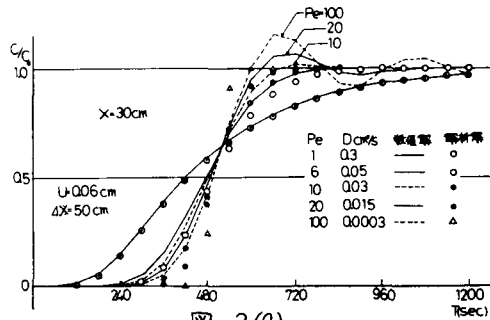


図-2 (a)

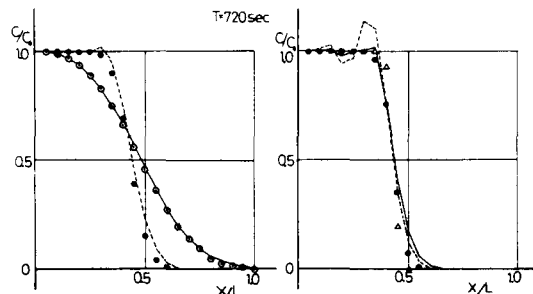


図-2 (b)

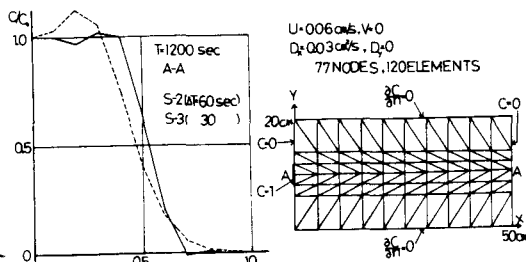


図-3

集中化マトリックスを用いたスキーム (S-3, S-4) に現われる数値分散項 $(-\frac{\Delta x^2}{6} u \frac{\partial^2 C}{\partial x^2})$ は、 Pe が大きいほど大きく(負値)なり、この結果解の位相が遅れる。また、無条件安定である Implicit Scheme でも数値分散項のため無制限に Δt を大きくできない。

5. 計算例

一様流中に連続源のある問題を扱った。図-1は、 $Pe=20$ の場合について各計算スキームによる解を比較したものである。S-2 による解が最も良好である。図-2は、種々の Pe の場合に対する S-2 による解である。良好な解が得られるのは $Pe < 10$ 程度であることがわかる。

図-3は、2次元移流分散方程式の解析例である。空間方向には、三角形1次要素による有限要素近似、時間方向には、上述と同じ差分近似を用いた。2次元の場合にも、規則的な三角形要素では、1次元の場合と同様のことが言えるが、図-3のように集中化マトリックスを用いたスキームの位相の遅れがより顕著である。

<参考文献>

- (1) 菊地文雄: 有限要素法概説, サイエンス社, 1980
- (2) Heinrich, H., Zienkiewicz, J.: An 'UPWIND' Finite Element Scheme for Two-Dimensional Convective Transport Equation, Int. J. for Num. Meth. in Eng. Vol. 11, 1977
- (3) 矢野, 野本: 発展方程式の数値解析, 岩波書店, 1977