

B-81 物質移動問題における移流項への新規の直交選点有限要素法を用いた数値計算の考察

— 1 次元移流問題を用いた考察 —

○大久保 孝樹*¹・宗山 航太¹

¹函館工業高等専門学校環境都市工学科 (〒042-8501 函館市戸倉町14-1)

* E-mail: ohkubo@hakodate-ct.ac.jp

1. はじめに

水環境の汚染物質による移流拡散現象を数値計算で解く事は、現在、差分法や有限要素法などによって行われており、その現象が実際とほぼ同じであることにより、それらの数値計算手法の有用性を示している。実験や自然現象を良く表しているということで、数値計算の精度が良いということができようか？ 実験や自然現象には多くのパラメータがありそれらの不確定性要素そのものによって現象が現れている。ここでは、実験や自然現象との比較ではなく、よく言われている移流の数値拡散による移流項のなまりについて考察し、風上差分や高精度差分と新規の直交選点有限要素法を比較検討することを目的としている。

2. 1 次元移流問題の各種の定式化

(1) 1 次元移流問題

1 次元移流問題は (2.1) 式に示すように、空間と時間の 2 次元の数学問題である。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

この方程式は、 ϕ を保存して、下流にそのままの形で流下することを意味している。

(2) 風上差分による定式化

風上差分は、流速 u の符号を判断して、風上側の 2 点を使って差分スキームを定式化する。

$$\phi_i^{n+1} = \begin{cases} \phi_i^n - u\Delta t \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} & u \geq 0 \\ \phi_i^n - u\Delta t \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_i^n}{\Delta x} & u < 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

クーラン数は $\alpha = u\Delta t / \Delta x$ で表され、1 以下であること

が条件となる。風上差分は、1 次精度であり移流の他にテーラー級数展開における 2 次の項である数値拡散が入り、実際の移流の形をなまらしたものとなる。

(3) 保存形式 4 次精度 6-point scheme

保存形式 4 次精度 6-point scheme は高解像度と高次精度を同時に満たすことを試みた朝位ら¹⁾ の開発した差分スキームである。

移流方程式を保存形式で表示すると以下ようになる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u\phi}{\partial x} = 0 \quad (2.3)$$

式 (2.3) を有限体積法で離散化すると式 (2.4) のようになる。

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + \frac{u\phi_{i+1/2}^n - u\phi_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0$$

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \alpha (\phi_{i+1/2}^n - \phi_{i-1/2}^n) \quad (2.4)$$

$\phi_{i+1/2}^n, \phi_{i-1/2}^n$ はコントロールボリュームの界面濃度であるが、これらを未定係数 $C_1 \sim C_5$ をもちいて、以下のように 5 点の濃度で近似できるものとする。

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2}^n &= C_1 \phi_{i-2}^n + C_2 \phi_{i-1}^n + C_3 \phi_i^n + C_4 \phi_{i+1}^n + C_5 \phi_{i+2}^n \\ \phi_{i-1/2}^n &= C_1 \phi_{i-3}^n + C_2 \phi_{i-2}^n + C_3 \phi_{i-1}^n + C_4 \phi_i^n + C_5 \phi_{i+1}^n \end{aligned} \quad (2.5)$$

4 次精度 6-point scheme では、以下のように $C_1 \sim C_5$ が決定される。

$$\begin{aligned} C_1 &= -\frac{1}{24}\alpha + \frac{1}{24} \\ C_2 &= \frac{1}{24}\alpha^3 + \frac{1}{12}\alpha^2 + \frac{1}{8}\alpha - \frac{1}{4} \\ C_3 &= -\frac{1}{8}\alpha^3 - \frac{1}{12}\alpha^2 + \frac{3}{8}\alpha + \frac{5}{6} \\ C_4 &= \frac{1}{8}\alpha^3 - \frac{1}{12}\alpha^2 - \frac{11}{24}\alpha + \frac{5}{12} \\ C_5 &= -\frac{1}{24}\alpha^3 + \frac{1}{12}\alpha - \frac{1}{24} \end{aligned} \quad (2.6)$$

ここで、 $\alpha = u\Delta t / \Delta x$ でクーラン数である。

(4) 直交選点有限要素法による定式化

直交選点有限要素法は、有限要素内で重み付き残差法として直交選点法を用いた数値計算方法である。直交選点法の特徴は、直交選点(例えば、ルジャンドルの直交多項式の根)において、偏微分方程式の残差がゼロになるように、偏微分方程式にフィットした直交多項式を決定するもので、ある変換によって偏微分が微分作用素行列によって表され、未知数を直交多項式の係数とするのではなく、解を未知数とすることができる。この微分作用素行列によって、偏微分方程式を容易に解である未知数の表示に定式化することができる。

ϕ の空間 x による偏微分の微分作用素行列表示は

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{nx+2} A_{xij} \phi_j \quad (2.7)$$

となる。(2.7) を (2.1) に代入すると、移流方程式は、時間の偏微分によって以下ようになる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t_i} + \sum_{j=1}^{nx+2} A_{xij} \phi_j = 0 \quad (2.8)$$

(2.8) 式は、時間発展の連立微分方程式と見れるので、この連立微分方程式を時間に関して、直交選点法で定式化すると以下ようになる。

$$\sum_{j=1}^{nx+2} A_{xij} \phi_{ij} + \sum_{j=1}^{nx+2} A_{xij} \phi_{jk} = 0 \quad (2.9)$$

A_{xij} , A_{ikl} は、それぞれ空間と時間の微分作用素行列で、次数が同じであれば、局所座標の微分作用素行列は同じとなる。以下に、空間の微分作用素行列の誘導を示す。

ϕ が以下の直交多項式で表示できるものとする、

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{nx+2} x_i^{j-1} d_j \quad (2.10)$$

となり、 d が直交多項式の係数となる。 x_i は直交選点である。この式を、 x に関して1階微分すると

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \sum_{j=2}^{nx+2} (j-1) x_i^{j-2} d_j \quad (2.11)$$

となる。(2.10) と (2.11) をそれぞれ行列表示すると以下のようになる。

$$\bar{\phi} = \bar{Q} \bar{d} \quad \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} = \bar{C} \bar{d}$$

ここで、

$$Q_{ij} = x_i^{j-1} \quad C_{ij} = (j-1) x_i^{j-2}$$

である。

ゆえに、 $\bar{d} = \bar{Q}^{-1} \bar{\phi}$ であるから、

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} = \bar{C} \bar{Q}^{-1} \bar{\phi} = \bar{A}_x \bar{\phi}$$

となり、空間の微分作用素行列が誘導される。

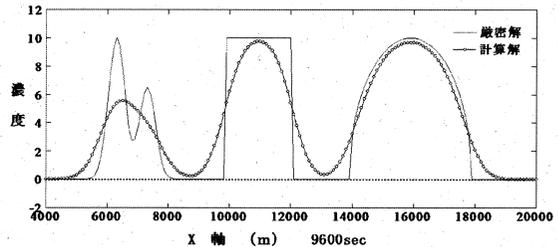
時間の微分作用素行列も同様に求まる。

(5) 計算条件

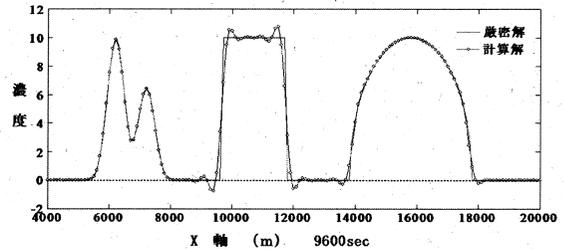
1次元移流問題における初期条件として、2個のピークを持ったガウス分布(中心位置 $x=1400\text{m}$ でピーク値10、標準偏差 264m のガウス分布および中心位置 2400m でピーク位置6.5、標準偏差 264m のガウス分布の重ね合わせ)、矩形分布(中心位置 $x=5800\text{m}$ 、幅 2200m 、濃度10)、半楕円型分布(中心位置 $x=11000\text{m}$ でピーク値10、 x 方向の半径 2000m)を設定し、この分布が流下時間とともに如何に保たれていくかを調べた。ガウス分布はピークの再現性、矩形分布は不連続(急変化)の再現性、楕円型分布は様々な勾配を有する分布の再現性を見ることができる。空間の格子間隔は、 200m 、 100m 、 25m の場合を設定し、時間間隔はそれぞれ 100sec 、 100sec 、 25sec とし、流速は 0.5m/s としたので、格子間隔 200m 時間間隔 100sec の場合はクーラン数が 0.25 、格子間隔 100m 、 25m 、時間間隔 100sec 、 25sec の場合はクーラン数が 0.5 となる。流下時間は、 9600sec 後および 192000sec 後とし、それらの結果について考察した。

3. 結果と考察

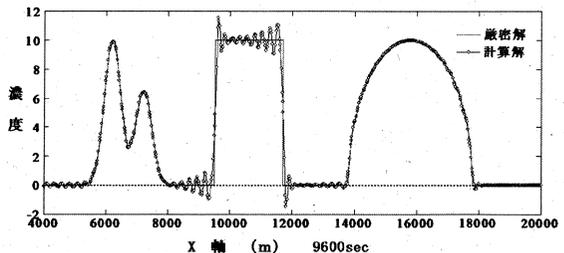
図-1に格子間隔 100m 時間間隔 100sec 流速 $u=0.5\text{m/s}$ の条件における 9600sec 後の各数値計算手法別の分布再現性を示す。



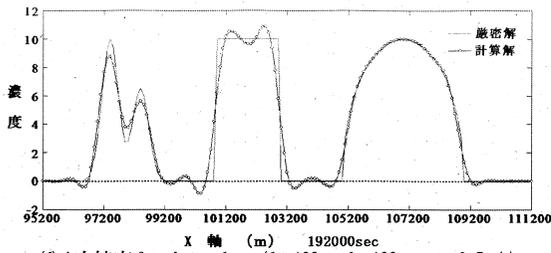
(a) 風上差分 ($dx=100\text{m}$, $dt=100\text{sec}$, $u=0.5\text{m/s}$)



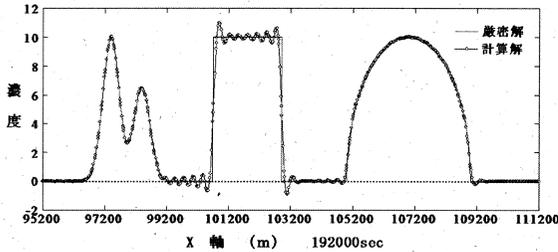
(b) 4次精度 6-point scheme ($dx=100\text{m}$, $dt=100\text{sec}$, $u=0.5\text{m/s}$)



(c) 直交選点有限要素法 ($dx=100\text{m}$, $dt=100\text{sec}$, $u=0.5\text{m/s}$)
(空間内部選点3, 時間内部選点2)



(d) 4次精度 6-point scheme (dx=100m, dt=100sec, u=0.5m/s)

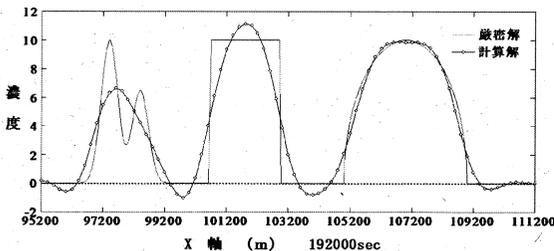


(e) 直交選点有限要素法 (dx=100m, dt=100sec, u=0.5m/s)
(空間内部選点3, 時間内部選点2)

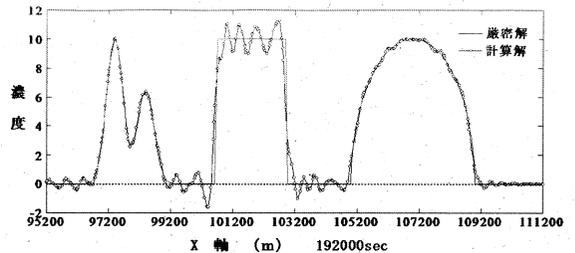
図-1 計算結果 (dx=100m, dt=100sec, 9600 秒後, 192000 秒後)

図-1は、風上差分、4次精度6-point schemeと直交選点有限要素法(空間内部選点数3:4次精度に相当)の比較を行ったものである。9600秒後の(a)の風上差分(1次精度)では、数値拡散が現れ各分布がなまっている様子が示されている。(b)(9600秒後)の朝位らの4次精度6-point schemeでは、分布はなまっていないが急変点で小さな振動が現れている。(c)(9600秒後)の本研究の対象である直交選点有限要素法では、分布はなまっていないが、急変点で振動が生じており、今後、この振動の除去を考慮してプログラムを開発する必要がある。(d)(e)はそれぞれ長時間192000秒後の4次精度6-point schemeと直交選点有限要素法の結果示したものであり、4次精度6-point schemeではガウス分布のピークになまりがあり、直交選点有限要素法ではガウス分布のピークをきれいにあらわしていることが示されているが、直交選点法では急変点で振動が現れている。

次に、dx=200m, dt=100sec, u=0.5m/sの条件化での192000sec後の、4次精度6-point schemeと直交選点有限要素法の比較したものを図-2に示す。



(a) 4次精度 6-point scheme (dx=200m, dt=100sec, u=0.5m/s)

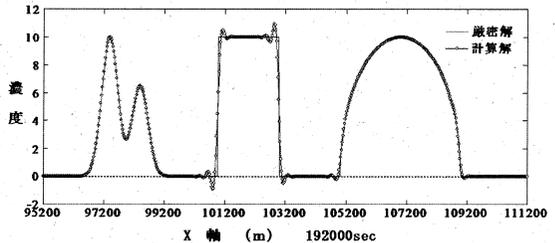


(b) 直交選点有限要素法 (dx=200m, dt=100sec, u=0.5m/s)
(空間内部選点3, 時間内部選点2)

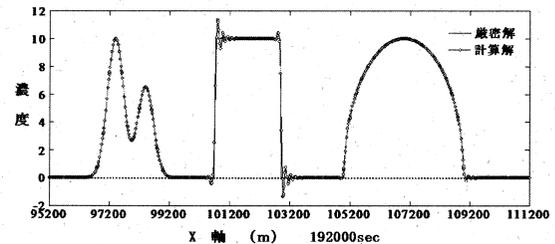
図-2 計算結果 (dx=200m, dt=100sec, 192000 秒後)

(a)の4次精度6-point schemeでは、dx=200mの条件で192000sec間流下させており、分布のなまりが大きくなっている様子が示されている。一方、直交選点有限要素法では分布のなまりはないが大きく振動が生じている。次に、格子間隔dx=25m, 時間間隔dt=25secの条件下での4次精度6-point schemeとdx=200m, dt=100secの条件下での空間内部選点数8, 時間内部選点数3の直交選点有限要素法における流下時間192000secの場合を図-3に示す。

両者ともなまりはほとんどなく、急変点で小さな振動が現れていることが示されている。



(a) 4次精度 6-point scheme (dx=25m, dt=25sec, u=0.5m/s)



(b) 直交選点有限要素法 (dx=200m, dt=100sec, u=0.5m/s)
(空間内部選点8, 時間内部選点3)

図-3 計算結果 (a) dx=25m, dt=25sec, (b) dx=200m, dt=100sec)

4. まとめ

4次精度6-point schemeと直交選点有限要素法はほぼ同程度の高精度の数値計算手法であることが示された。しかし、直交選点有限要素法は4次以上の高次の計算を自動的に次数を変えるだけで高精度として計算ができるので、より有用な計算手法であると考えられる。

参考文献: 1) 朝井, 坪郷, 小松: 土木学会論文集No. 803/II-73, 29-44, 2005, 11