三次元移流拡散方程式の、有限要素法による
新しい定式化

(誤差解析手法によるアプローチ)

松田 安弘^{*1}, 小野寺 郁人^{*2}
市川 到^{*3}, 邵 長 城^{*4}New Formulation using the Finite Element Method
for the Three-Dimensional Convection-Diffusion Equation
(Approach using the Error Analysis Technique)Yasuhiro MATSUDA, Ikuhito ONODERA,
Itaru ICHIKAWA and Changcheng SHAO

The unsteady convection-diffusion equation is one of the most important equation in heat and fluid analysis. One of the authors developed the modified Galerkin method (MGM) for the one-dimensional convection-diffusion equation. In this paper, this modified Galerkin method was proposed for three-dimensional convection-diffusion equation using an error analysis technique based on the Fourier series. The correction coefficients of several numerical methods were obtained for various kinds of three-dimensional nodes, and they were used for correcting numerical methods using the implicit and explicit methods. Then all of these methods were investigated from the viewpoints of phase error and dissipation error. The MGM for a regular hexahedra element was proven to be the most efficient numerical method. Through numerical experiments using the implicit and explicit methods, we confirmed the effectiveness of our correction method and the general correspondence between the error analysis and numerical simulation.

Key Words: Three-Dimensional Convection-Diffusion Equation, Finite Element Method, Error Analysis, Modified Galerkin Method

1. 緒 言

非定常移流拡散方程式は、熱流体解析の中で最も基本的な方程式の一つであり、その効率的な数値解法の研究は重要である。本論文では一次元⁽¹⁾および二次元移流拡散問題⁽²⁾について提案した有限要素法(変形ガレルキン法⁽¹⁾)の補正方式を三次元移流拡散問題に拡張したものである。すなわちフーリエ級数による誤差解析手法を用いて、有限要素法に補正係数を導入し、陰解法および陽解法の各解法について六面体一次要素と四面体一次要素についての新しい定式化を提案し、誤差解析の観点から比較・検討を行った。また、数値実験により誤差解析との対応関係を調べた。

なお、本論文では次の三次元非定常移流拡散方程式を対象としている。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad \cdots \cdots (1)$$

ただし、 t :時間、 C :濃度、 u, v, w : x, y, z 方向の流速、 K_x, K_y, K_z : x, y, z 方向の拡散係数である。

2. 誤差解析手法による数値解法の補正方法

2.1 一般解についての定式化 流速 u, v, w および拡散係数 K_x, K_y, K_z が定数である場合に式(1)は変数分離法によって解くことができる。その一般解はフーリエ級数で表現され、その成分の一つは次式で表される。

$$C = A \exp \{ -(\beta_x^2 K_x + \beta_y^2 K_y + \beta_z^2 K_z) t + i[\beta_x(x - ut) + \beta_y(y - vt) + \beta_z(z - wt)] \} \quad \cdots \cdots (2)$$

ただし、 A :複素定数、 $\beta_x, \beta_y, \beta_z$: x, y, z 方向の波数である。

ここで、 $t = m \Delta t$, $x = n_x h_x$, $y = n_y h_y$, $z = n_z h_z$, $b_x = u \Delta t / h_x$, $b_y = v \Delta t / h_y$, $b_z = w \Delta t / h_z$, $r_x = K_x \Delta t / h_x^2$, $r_y = K_y \Delta t / h_y^2$, $r_z = K_z \Delta t / h_z^2$ とすれば、式(2)より次式を得る。ただし m :時間方向の添字、 n_x, n_y, n_z : x, y, z 方向の添字、 h_x, h_y, h_z : x, y, z 方向のメッシュ幅、 Δt :タイムステップ、である。

$$C_{n_x, n_y, n_z}^m = A(\xi_A)^m \exp \{ i(\beta_x n_x h_x + \beta_y n_y h_y + \beta_z n_z h_z) \} \quad \cdots \cdots (3)$$

$$\xi_A = P_1 + iP_2 \quad \cdots \cdots (4)$$

* 原稿受付 平成4年10月21日。

^{*1} 正員、信州大学工学部 (〒380 長野市若里500)。^{*2} 准員、TDK(株)。^{*3} (株)INAX。^{*4} 正員、信州大学大学院。

$$\begin{aligned} P_1 &= \exp \{ -(\beta_x h_x)^2 r_x - (\beta_y h_y)^2 r_y - (\beta_z h_z)^2 r_z \} \cos (b_x \beta_x h_x + b_y \beta_y h_y + b_z \beta_z h_z) \\ P_2 &= -\exp \{ -(\beta_x h_x)^2 r_x - (\beta_y h_y)^2 r_y - (\beta_z h_z)^2 r_z \} \sin (b_x \beta_x h_x + b_y \beta_y h_y + b_z \beta_z h_z) \} \dots\dots\dots (5) \end{aligned}$$

ここで C_{n_x, n_y, n_z}^m は時刻 $t = m\Delta t$ での座標 $x = n_x h_x$, $y = n_y h_y$, $z = n_z h_z$ における濃度であり、 ξ_A は一般解における増幅因子である。

2・2 数値解についての定式化と、その補正方法 一方、式(1)に適当な数値解法を適用し、得られた離散化式の変数 C_{n_x, n_y, n_z}^m に $\xi^m \exp \{ i(\beta_x n_x h_x + \beta_y n_y h_y + \beta_z n_z h_z) \}$ を代入して整理すると、数値解の増幅因子 ξ は一般に次のように表すことができる。

$$\xi = \frac{Q_1 + Q_2 + Q_3 + i\{Q_4 + Q_5 + Q_6\}}{Q_7 + Q_8 + Q_9 + i\{Q_{10} + Q_{11} + Q_{12}\}} \dots\dots\dots (6)$$

ここで、 $Q_1, Q_4, Q_7, Q_{10} : \beta_x h_x, \beta_y h_y, \beta_z h_z$ の関数、 $Q_2, Q_5, Q_8, Q_{11} : r_x, r_y, r_z$ と $\beta_x h_x, \beta_y h_y, \beta_z h_z$ の関数、 $Q_3, Q_6, Q_9, Q_{12} : b_x, b_y, b_z$ と $\beta_x h_x, \beta_y h_y, \beta_z h_z$ の関数である。ここで精度の向上のために、拡散項と流移項に補正係数 f および g を導入し、次式のように補正した ξ を考える。

$$\xi = \frac{Q_1 + fQ_2 + gQ_3 + i\{Q_4 + fQ_5 + gQ_6\}}{Q_7 + fQ_8 + gQ_9 + i\{Q_{10} + fQ_{11} + gQ_{12}\}} \dots\dots\dots (7)$$

したがって式(4)と式(7)とを等値すれば補正係数 f, g を求めることができるが、この際 $\beta_x h_x, \beta_y h_y, \beta_z h_z$ に依存しない係数を求めるために、 $\beta_x h_x \rightarrow 0, \beta_y h_y \rightarrow 0, \beta_z h_z \rightarrow 0$ の極限を考えると次式を得る。

$$\begin{aligned} f &= \lim \left\{ \frac{(Q_3 - P_1 Q_9 + P_2 Q_{12})(Q_4 - P_1 Q_{10} - P_2 Q_7) - (Q_6 - P_1 Q_{12} - P_2 Q_9)(Q_1 - P_1 Q_7 + P_2 Q_{10})}{(Q_6 - P_1 Q_{12} - P_2 Q_9)(Q_2 - P_1 Q_8 + P_2 Q_{11}) - (Q_5 - P_1 Q_{11} - P_2 Q_8)(Q_3 - P_1 Q_9 + P_2 Q_{12})} \right\} \\ g &= \lim \left\{ \frac{(Q_1 - P_1 Q_7 + P_2 Q_{10})(Q_5 - P_1 Q_{11} - P_2 Q_8) - (Q_4 - P_1 Q_{10} - P_2 Q_7)(Q_2 - P_1 Q_8 + P_2 Q_{11})}{(Q_6 - P_1 Q_{12} - P_2 Q_9)(Q_2 - P_1 Q_8 + P_2 Q_{11}) - (Q_5 - P_1 Q_{11} - P_2 Q_8)(Q_3 - P_1 Q_9 + P_2 Q_{12})} \right\} \dots\dots\dots (8) \end{aligned}$$

したがって、逆に式(8)で求めた f と g を式(7)に適用することによって、数値解における ξ を補正することができる。

3. 有限要素法の陰解法による定式化とその補正

3・1 ガレルキン法による定式化 式(1)をガレルキン法により定式化すると、式(9)の関係式を考慮してマトリックス形で式(10)のように表すことができる。

$$(1 - \theta)\{\dot{C}\}^{m-1} + \theta\{\dot{C}\}^m = \frac{\{C\}^m - \{C\}^{m-1}}{\Delta t} \dots\dots\dots (9)$$

$$\left\{ \frac{[P]}{\Delta t} + \theta[D] \right\} \{C\}^m = \left\{ \frac{[P]}{\Delta t} - (1 - \theta)[D] \right\} \{C\}^{m-1} \dots\dots\dots (10)$$

ただし、

$$\begin{aligned} [P] &= \sum_{V_e}^M \left\{ \int_{V_e} N_i N_j dx dy dz \right\} \\ [D] &= \sum_{V_e}^M \left\{ \int_{V_e} \left(N_i u \frac{\partial N_j}{\partial x} + N_i v \frac{\partial N_j}{\partial y} + N_i w \frac{\partial N_j}{\partial z} + \frac{\partial N_i}{\partial x} K_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} K_y \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z} K_z \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) dx dy dz \right\} \end{aligned}$$

θ : タイムスキームパラメータ、 V_e : 一要素領域、 N_i : 形状関数、 M : 総要素数である。

(1) 四面体一次要素の節点 TH1 の場合[GT1(C)] この場合、図1(a)に示されるような六面体を五つの四面体要素に分割することができる。図1(b)は、この中の一つの要素であるが、2種類の節点が存在する。ここで、図1(b)に示されるような節点 TH1 の節点番号が kp である場合は、式(10)の第 kp 代数方程式は次式ようになる。

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{4}{5} + 8\theta(r_x + r_y + r_z) \right\} C_{n_x, n_y, n_z}^{m+1} + \left\{ \frac{1}{5} - 4\theta r_x \right\} (C_{n_x-1, n_y, n_z}^{m+1} + C_{n_x+1, n_y, n_z}^{m+1}) \\ & + \left\{ \frac{1}{5} - 4\theta r_y \right\} (C_{n_x, n_y-1, n_z}^{m+1} + C_{n_x, n_y+1, n_z}^{m+1}) + \left\{ \frac{1}{5} - 4\theta r_z \right\} (C_{n_x, n_y, n_z-1}^{m+1} + C_{n_x, n_y, n_z+1}^{m+1}) \\ & = \left\{ \frac{4}{5} - 8(1 - \theta)(r_x + r_y + r_z) \right\} C_{n_x, n_y, n_z}^m + \left\{ \frac{1}{5} + 4(1 - \theta)r_x \right\} (C_{n_x-1, n_y, n_z}^m + C_{n_x+1, n_y, n_z}^m) \\ & + \left\{ \frac{1}{5} + 4(1 - \theta)r_y \right\} (C_{n_x, n_y-1, n_z}^m + C_{n_x, n_y+1, n_z}^m) + \left\{ \frac{1}{5} + 4(1 - \theta)r_z \right\} (C_{n_x, n_y, n_z-1}^m + C_{n_x, n_y, n_z+1}^m) \\ & - b_x \{ C_{n_x+1, n_y, n_z}^m - C_{n_x-1, n_y, n_z}^m \} - b_y \{ C_{n_x, n_y+1, n_z}^m - C_{n_x, n_y-1, n_z}^m \} - b_z \{ C_{n_x, n_y, n_z+1}^m - C_{n_x, n_y, n_z-1}^m \} \dots\dots\dots (11) \end{aligned}$$

式(11)の C_{n_x, n_y, n_z}^m に $\xi^m \exp \{ i(\beta_x n_x h_x + \beta_y n_y h_y + \beta_z n_z h_z) \}$ を代入し、 ξ について整理すると式(7)の $Q_1 \sim Q_{12}$ は、

図 1 三次元要素の形状

次式のようになる。

$$\begin{aligned}
 Q_1 &= 4 + 2\{\cos(\beta_x h_x) + \cos(\beta_y h_y) + \cos(\beta_z h_z)\} \\
 Q_2 &= -40(1-\theta)\{r_x[1 - \cos(\beta_x h_x)] + r_y[1 - \cos(\beta_y h_y)] + r_z[1 - \cos(\beta_z h_z)]\} \\
 Q_6 &= -10(1-\theta)\{b_x \sin(\beta_x h_x) + b_y \sin(\beta_y h_y) + b_z \sin(\beta_z h_z)\} \\
 Q_8 &= 40\theta\{r_x[1 - \cos(\beta_x h_x)] + r_y[1 - \cos(\beta_y h_y)] + r_z[1 - \cos(\beta_z h_z)]\} \\
 Q_{12} &= 10\theta\{b_x \sin(\beta_x h_x) + b_y \sin(\beta_y h_y) + b_z \sin(\beta_z h_z)\} \\
 Q_7 &= Q_1, \quad Q_3 = Q_4 = Q_5 = Q_9 = Q_{10} = Q_{11} = 0
 \end{aligned}$$

よって、これら $Q_1 \sim Q_{12}$ を式(8)に代入して次式の補正係数 f および g を得る。

$$f = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2}(1-2\theta) \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \right\}, \quad g = 1 \quad (12)$$

(2) 四面体一次要素の節点 TH2 の場合 [GT2(C)] 同様に補正係数 f および g を示す。

$$f = \frac{5}{4} \left\{ 1 + \frac{1}{2}(1-2\theta) \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \right\}, \quad g = 1 \quad (13)$$

(3) 六面体一次要素の場合 [GH(C)] 図 1(c) に示す節点 HH の補正係数 f および g を示す。

$$f = 1 + \frac{1}{2}(1-2\theta) \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z}, \quad g = 1 \quad (14)$$

3.2 変形ガレルキン法による定式化 式(1)左辺の移流項を右辺に移し外力項として扱い、境界条件を考慮して定式化すると次式を得る⁽¹⁾。

$$\left\{ \frac{[P]}{\Delta t} + \theta[D] \right\} \{C\}^m = \left\{ \frac{[P]}{\Delta t} - (1-\theta)[D] \right\} \{C\}^{m-1} - \{F(C^{m-1})\} \quad (15)$$

ただし、

$$\begin{aligned}
 [D] &= \sum_{v_e}^M \left\{ \int_{v_e} \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} K_x \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} K_y \frac{\partial N_j}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z} K_z \frac{\partial N_j}{\partial z} \right) dx dy dz \right\} \\
 [F] &= \sum_{v_e}^M \left\{ \int_{v_e} N_i \left(u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right) dx dy dz \right\}
 \end{aligned}$$

である。

ガレルキン法の場合と同様に図 1 に示される各点での補正係数 f を示す。ただしすべての場合について $g = 1$ となった。

(1) 四面体一次要素の節点 TH1 の場合 [MGT1(C)]

$$f = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \right\} \quad (16)$$

(2) 四面体一次要素の節点 TH2 の場合 [MGT2(C)]

$$f = \frac{5}{4} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \right\} \quad (17)$$

(3) 六面体一次要素の場合 [MGH(C)]

$$f = 1 + \frac{1}{2} \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \quad (18)$$

3.3 移流拡散方程式の補正 三次元移流拡散方程式(1)は補正係数 f および g により次式のように補正される。

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial C}{\partial t} + g \left(u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\
 &= f \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right\} \quad (19)
 \end{aligned}$$

補正の結果、拡散係数 K_x, K_y, K_z は fK_x, fK_y, fK_z となるが、たとえば $K_x = K_y = K_z = K$ および $h_x = h_y = h_z = h$ という条件下での、変形ガレルキン法 [MGH(C)] の場合には拡散係数は次式のようになる。

$$fK_x, fK_y, fK_z = K + \frac{\Delta t}{6}(u+v+w)^2 \dots\dots\dots (20)$$

4. 有限要素法の陽解法による定式化とその補正

式(10)において、 $\theta=0$ とし、左辺のマトリックス $[P]$ を集中化させると次式のような陽解法による定式化を得る。

$$[\bar{P}]\{C\}^m = \{[P] - \Delta t[D]\}\{C\}^{m-1} \dots\dots\dots (21)$$

ここで、 $[\bar{P}]$ は $[P]$ の集中マトリックスであり、 $[D]$ は移流項と拡散項を含むマトリックスである。

図1に示される各点での補正係数 f は式(8)より、次式のように得られる。ただし、すべての場合について $g=1$ となった。

(1) 四面体一次要素の節点 TH1 の場合 [EXT1(C)]

$$f = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \right\} - \frac{3}{20} \frac{1}{r_x + r_y + r_z} \dots\dots\dots (22)$$

(2) 四面体一次要素の節点 TH2 の場合 [EXT2(C)]

$$f = \frac{5}{4} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} \right\} - \frac{27}{40} \frac{1}{r_x + r_y + r_z} \dots\dots\dots (23)$$

(3) 六面体一次要素 [EXH(C)] の場合

$$f = 1 + \frac{1}{2} \frac{(b_x + b_y + b_z)^2}{r_x + r_y + r_z} - \frac{1}{2} \frac{1}{r_x + r_y + r_z} \dots\dots\dots (24)$$

5. 各種有限要素法の誤差解析結果

5.1 誤差解析の前提条件 三次元問題での各数値解法の増幅因子 ξ と一般解の増幅因子 ξ_A とを比較することにより、各解法の精度を評価することができ

る。そこで精度を評価するために次式のような理論誤差指標を用いている。

$$E_t = \sqrt{E_P^2 + E_A^2} \dots\dots\dots (25)$$

$$\begin{cases} E_P = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_1^N \left(\frac{\Delta \varphi}{\Delta \varphi_A} - 1 \right)^2} \\ E_A = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_1^N \{ |\xi| - |\xi_A| \}^2} \end{cases}$$

ここで、 $\Delta \varphi_A = -2\pi(b_x/k_x + b_y/k_y + b_z/k_z)$, $\Delta \varphi = \tan^{-1} \{ (\xi \text{ の虚数部}) / (\xi \text{ の実数部}) \}$, $N = (k_x \text{ の数}) \times (k_y \text{ の数}) \times (k_z \text{ の数}) \times (b_x \text{ の数})$ であり、 $k_x = 2\pi/\beta_x h_x$, $k_y = 2\pi/\beta_y h_y$, $k_z = 2\pi/\beta_z h_z$ である。数値解法が安定条件 ($|\xi| \leq 1$) を満たしている場合には、 E_t が小さいほど、その計算精度が高いといえる。いま、 $k_x, k_y, k_z = 3, 4, 6, 8, 10$ のように、独立に変化するものとし、 b_x としては (a) $b_y = b_z = 0$ (一方向流れ) と (b) $b_x = b_y = b_z$ (三方向流れ) の2とおりを考える。

図1(a)に示されるそれぞれ2種類の節点 (TH1 と TH2) は、数値実験では領域全体で同じ個数だけ現れるのでこれら節点の誤差 E_{t1} (TH1) と E_{t2} (TH2) は次のような一つの誤差 E_t にまとめて考える。

$$E_t = \sqrt{\frac{E_{t1}^2 + E_{t2}^2}{2}} \dots\dots\dots (26)$$

したがって、ガレルキン法の四面体要素については、2種類の節点を式(26)によりまとめてGTとして評価した。同様に、変形ガレルキン法ではMGT(C)、陽解法では、EXT (補正なしの場合)、EXT(C) (補正ありの場合) の記号を用いて一つの誤差にまとめた。

5.2 誤差解析の結果

(1) 陰解法の場合 表1および表2に陰解法の各要素形状に関して、 $r_x = r_y = r_z = 0 \sim 1.0$ のもとで、 $b_x = 0.05 \sim 0.3$ (0.05 きざみ) および $b_x = 0.1 \sim 0.7$ (0.1 きざみ) としたときの $b_y = b_z = 0$ および $b_x = b_y = b_z$ における誤差 E_t を示す。表3および表4には、安定域において誤差 E_t が最小の値となる $0 \sim 1.0$ の範囲での最適タイムスキームパラメータ θ_{opt} (0.1 きざみ) を示す。この結果から、一般にMGH(C)が良い精度を与え、

表1 陰解法の理論誤差 E_t
($b_y = b_z = 0$ の場合)

Parameters Methods	$b_x = 0.05 \sim 0.3$ (0.05Step)				$b_x = 0.1 \sim 0.7$ (0.1Step)			
	$r_x = r_y = r_z$				$r_x = r_y = r_z$			
	0	0.1	0.3	1.0	0	0.1	0.3	1.0
GH	0.085	0.108	0.551	0.855	0.110	0.115	0.554	0.855
GT	0.520	0.586	0.755	0.896	0.501	0.594	0.756	0.897
MGH(C)	—	0.073	0.161	0.169	—	0.128	0.212	0.216
MGT(C)	—	0.375	0.388	0.393	—	0.475	0.484	0.489

(Here, " — " shows $|\xi| > 1$.)

表2 陰解法の理論誤差 E_t
($b_x = b_y = b_z$ の場合)

Parameters Methods	$b_x = 0.05 \sim 0.3$ (0.05Step)				$b_x = 0.1 \sim 0.7$ (0.1Step)			
	$r_x = r_y = r_z$				$r_x = r_y = r_z$			
	0	0.1	0.3	1.0	0	0.1	0.3	1.0
GH	0.125	0.119	0.454	0.857	0.256	0.224	0.409	0.860
GT	0.370	0.581	0.759	0.897	0.385	0.539	0.763	0.898
MGH(C)	0.114	0.077	0.168	0.244	0.203	0.192	0.310	0.416
MGT(C)	—	0.359	0.370	0.378	—	0.387	0.393	0.472

(Here, " — " shows $|\xi| > 1$.)

六面体要素が四面体要素より高い精度となることがわかる。これは六面体要素が図1(a)のように、1個の正四面体要素と4個の四面体要素〔図1(b)〕に分割された際に、図1(b)の四面体要素が“いびつな”形状となることに起因していると思われる。すなわち、同じ節点数で考えれば一般に六面体要素のほうが5個の四面体要素に分割する場合に比べて高い精度を与えることがわかる。

(2) 陽解法の場合 表5および表6に陽解法の各要素形状についての安定域における $b_{x\max}$ を示す。この際 b_x を0.1から1まで0.1きざみで変化させて検討した。なお、表5, 6中、EXHおよびEXTは、式(21)を六面体一次要素および四面体一次要素により、補正項なしで定式化した場合であり、EXH(C)およびEXT(C)はその補正方式である。表5, 6から六面体一次要素で安定域の広いことがわかる。陽解法では陰解法に比べ安定域が狭いので、 $b_x=0.05\sim 0.2$ (0.05きざみ) および $b_x=0.1\sim 0.5$ (0.1きざみ) での場合の誤差 E_t を表7および表8に示した。表1, 2, 7および表8において下線を付した数値は、その $r_x=r_y=r_z$ での最小値であることを示している。これより $r\leq 0.02$ ではEXHが、 $0.04\leq r\leq 0.3$ ではEXH(C)が最高の精度を与えることがわかる。なおEXT(C)では、これらのどの範囲でも不安定となった。

表3 最適タイムスキームパラメータ
($b_y=b_z=0$ の場合)

Parameters Methods	$b_x = 0.05\sim 0.3$ (0.05Step)				$b_x = 0.1\sim 0.7$ (0.1Step)			
	$r_x = r_y = r_z$				$r_x = r_y = r_z$			
	0	0.1	0.3	1.0	0	0.1	0.3	1.0
GH	0.6	0.6	0.9	1.0	0.6	0.6	0.9	1.0
GT	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
MGH(C)	—	0.9	1.0	1.0	—	0.9	1.0	1.0
MGT(C)	—	1.0	1.0	1.0	—	1.0	1.0	1.0

(Here, " — " shows $|\xi| > 1$.)

表4 最適タイムスキームパラメータ
($b_x=b_y=b_z$ の場合)

Parameters Methods	$b_x = 0.05\sim 0.3$ (0.05Step)				$b_x = 0.1\sim 0.7$ (0.1Step)			
	$r_x = r_y = r_z$				$r_x = r_y = r_z$			
	0	0.1	0.3	1.0	0	0.1	0.3	1.0
GH	0.6	0.6	0.8	1.0	0.6	0.6	0.8	1.0
GT	0.6	0.9	1.0	1.0	0.6	0.8	0.9	1.0
MGH(C)	0.3	0.8	0.9	1.0	0.5	0.7	0.9	1.0
MGT(C)	—	1.0	1.0	1.0	—	1.0	1.0	1.0

(Here, " — " shows $|\xi| > 1$.)

6. 三次元移流拡散問題の数値計算例

6.1 計算条件 5章での結果をふまえて、三次元移流拡散問題の数値計算を行った。無限遠での濃度が零であるような一方向の流れ場において $(2Dx)\times(2Dy)\times(2Dz)$ の大きさの直方体に一定濃度 C_B を瞬間的に与えた際の非定常移流拡散問題を考える。しかし、このような不連続な条件を初期条件として数値計

表5 陽解法の安定域での $b_{x\max}$.
($b_y=b_z=0$ の場合)

Methods	$r_x = r_y = r_z$					
	0.01	0.02	0.04	0.1	0.2	0.3
EXH	0.9	0.9	0.9	1.0	1.0	1.0
EXT	0.7	0.7	0.8	—	—	—
EXH(C)	0.7	0.8	0.9	1.0	1.0	1.0

(Here, " — " shows $b_{x\max} < 0.1$.)

表6 陽解法の安定域での $b_{x\max}$.
($b_x=b_y=b_z$ の場合)

Methods	$r_x = r_y = r_z$					
	0.01	0.02	0.04	0.1	0.2	0.3
EXH	0.3	0.3	0.4	0.4	0.5	0.5
EXT	0.2	0.3	0.3	—	—	—
EXH(C)	0.5	0.5	0.5	0.5	0.4	0.4

(Here, " — " shows $b_{x\max} < 0.1$.)

表7 陽解法の理論誤差 E_t
($b_y=b_z=0$ の場合)

Parameters Methods	$b_x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ 0.1 Step					
	$r_x = r_y = r_z$					
	0.01	0.02	0.04	0.1	0.2	0.3
EXH	0.521	0.490	0.540	4.218	10.923	13.457
EXT	0.870	0.965	3.295	—	—	—
EXH(C)	0.527	0.504	0.460	0.313	0.491	7.664

(Here, " — " shows $|\xi| > 1$.)

表8 陽解法の理論誤差 E_t
($b_x=b_y=b_z$ の場合)

Parameters Methods	$b_x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ 0.05 Step					
	$r_x = r_y = r_z$					
	0.01	0.02	0.04	0.1	0.2	0.3
EXH	0.509	0.475	0.477	2.204	5.552	7.123
EXT	0.611	0.729	1.280	—	—	—
EXH(C)	0.529	0.504	0.458	0.302	0.402	3.924

(Here, " — " shows $|\xi| > 1$.)

算に直接導入するのは困難であるので、解析解により、微小時間 δt だけ移流拡散させた後の時刻を $t=0$ とし、その時刻での濃度分布を初期条件として数値計算を行う。この際の初期条件と境界条件は次式で表される。

$$\begin{aligned} C(x, y, z, -\delta t) &= C_B, \quad |x+U^*| \leq Dx, \\ |y+V^*| \leq Dy, \quad |z+W^*| \leq Dz \\ C(x, y, z, -\delta t) &= 0, \quad |x+U^*| > Dx, \\ |y+V^*| > Dy, \quad |z+W^*| > Dz \\ C(\infty, \infty, \infty, t) &= 0, \quad t \geq -\delta t \end{aligned}$$

ただし、

$$U^* = \int_{-\delta t}^0 u(t) dt,$$

$$V^* = \int_{-\delta t}^0 v(t) dt,$$

$$W^* = \int_{-\delta t}^0 w(t) dt$$

である。したがって、数値計算を開始する時点 ($t=0$) 以降の解析解は、次式で表される。

$$\begin{aligned} C_A(x, y, z, t) \\ = \frac{C_B}{8} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Dx - (x - U)}{2\sqrt{K_x(t + \delta t)}} \right] \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \operatorname{erf} \left[\frac{Dy + (y - V)}{2\sqrt{K_y(t + \delta t)}} \right] \Big\} \\ &\times \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Dy - (y - V)}{2\sqrt{K_y(t + \delta t)}} \right] + \operatorname{erf} \left[\frac{Dy + (y - V)}{2\sqrt{K_y(t + \delta t)}} \right] \right\} \\ &\times \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Dz - (z - W)}{2\sqrt{K_z(t + \delta t)}} \right] + \operatorname{erf} \left[\frac{Dz + (z - W)}{2\sqrt{K_z(t + \delta t)}} \right] \right\} \\ &(-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t \geq 0) \\ &\dots\dots\dots (27) \end{aligned}$$

ただし、

図 2 計算対象
($16 \times 8 \times 8$ メッシュ: 1377 節点 1024 要素)

(a) $\Delta t = 0.05$ の場合
($b_x = 0.2, b_y = b_z = 0$)
($r_x = r_y = r_z = 0.1$)

(b) $\Delta t = 0.1$ の場合
($b_x = 0.4, b_y = b_z = 0$)
($r_x = r_y = r_z = 0.2$)

図 3 数値計算結果

図4 θ と E_t および E_r との関係
($r_x=r_y=r_z=0.1$, $b_x=0.2$, $b_y=b_z=0$)

$$U = \int_0^t u(t) dt, \quad V = \int_0^t v(t) dt, \quad W = \int_0^t w(t) dt$$

である。また、数値計算の数値誤差は次式で定義する。

$$E_r = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{C_{Ai}^j - C_i^j}{C_{Amax}^j} \right| \times 100 [\%] \quad \cdots (28)$$

ここで、 C_{Ai} : 解析解, C_i : 数値解, C_{Amax} : 解析解の最大値, L : 繰返し回数, N : 総節点数である。

計算領域は図2に示すような直方体領域 ($-1 < x < 1$, $0 < y < 1$, $0 < z < 1$) を考え、図1(c)に示すような六面体一次要素を用いて数値計算を行う。ここで連立方程式は、SOR法により解いている(加速パラメータ: 1.1, 収束判定定数: 10^{-4})。

ただし、計算条件は、

- $u=0.5$, $v=w=0$,
- $K_x=K_y=K_z=0.03125$
- $\Delta x=\Delta y=\Delta z=0.125$
- $\Delta t=0.05$ および 0.1
- $\theta=0.9$ (表3)

- 境界条件: すべての境界面で $\frac{\partial C}{\partial n_B} = 0$

($\partial/\partial n_B$: 境界での外向き法線方向の微分)

[ただし、この境界条件は式(27)の解析解を利用するために便宜的に使用したものである。境界付近(たとえば $x \approx 1.0$)では近似の式となる。]

- $C_B=100$
- $Dx=Dy=Dz=0.05$
- $K_x \delta t = K_y \delta t = K_z \delta t = 0.0192$

である。

6.2 数値計算結果 図3(a), (b)に陰解法[変形ガレルキン法-MGH(C)]と陽解法[補正あり-EXH

(a) 陰解法(変形ガレルキン法)の場合

(b) 陽解法の場合

図5 誤差解析結果との対応 ($b_x=0.2$, $b_y=b_z=0$)

(C)、補正なし-EXH]の、(a) $\Delta t=0.05$ および (b) $\Delta t=0.1$ における計算結果 ($y=0$, $z=0$, $x \geq 0$) を示す。なお、誤差解析では各解法において図3(a), (b)の場合、安定となった。この結果、陰解法の精度がやや高いこと、陽解法では補正係数により、精度を大幅に改善できることを確認した。

6.3 誤差解析結果との対応 六面体一次要素での理論誤差 E_t と数値誤差 E_r [%] との比較を行った。この場合、MGH(C)とEXH(C)を取り上げ、6.2節と同じ計算条件(ただし、 $\Delta t=0.05$)で計算した。なお、数値計算での境界条件は当然ながら解析解とは異なるので、この影響を除くために計算は $t=0.5$ までとした。

図4に陰解法(変形ガレルキン法)六面体一次要素でのタイムスキームパラメータによる影響を示したが、これより理論誤差の最適値 θ_{opt} と数値実験での θ_{opt} とは等しく 0.9 となった。これは誤差解析アプローチの妥当性を示していると考えられる。

また、図5(a), (b)では、 r (すなわち拡散係数 K)

を変化させた。陰解法の $r=0.001$ では、誤差解析において $|\xi|>1$ となったためプロットしていない。まず陽解法では理論誤差と数値誤差の挙動は、きわめて良く対応している。陰解法では陽解法ほどには対応度合は良くないが、この原因には誤差解析において境界条件や初期条件の影響が考慮されていないことなどが考えられる。

7. 結 論

三次元非定常移流拡散方程式について誤差解析手法により有限要素法の各種陰解法および陽解法に関する補正係数を導出し、以下の結果を得た。

(1) 誤差解析の結果によれば、陰解法では変形ガレルキン法による六面体一次要素が数値的安定性と計

算精度の点で最適である。また、陽解法では六面体一次要素に補正方式を導入した場合が $0.04 \leq r \leq 0.3$ で最適となった。

(2) 有限要素法の陰解法と陽解法による数値実験により、数値計算結果と誤差解析結果とがほぼ対応すること、および、本論文で提案された三次元問題に関する補正方式の有効性を確認した。

本研究の遂行にあたり協力いただいた、信州大学大学院の今村克彦君と北 則近君に感謝申し上げる。

文 献

- (1) 松田, 機論, 56-522, B(1990), 441.
- (2) 松田・邵・加藤, 機論, 58-556, B(1992), 3625.