《論　文》

論 9-8

境界要素法による3次元非定常移流拡散方程式の解法†

河村隆二*・福間通人**

ABSTRACT Advective diffusion analyses have been applied to many fields of science and engineering, such as dispersion of chemically reacting substances, thermal conduction in fluid, electromagnetic field by a moving magnet, and migration of nuclides in groundwater flow. In solving non-static advection diffusion equations by the boundary element method, however, time integrations appear in the boundary integral equation, which makes the BEM application to advection diffusion problems difficult. Therefore, the method has been approximated in the past relevant publications. This paper describes the method to carry out the time integrals analytically, and the usefullness of the technique is demonstrated with some examples of practical engineering interests. The results obtained from the examples were compared with the analytical solutions or with the results from other numerical codes.

1. まえがき

移流拡散問題は媒体中に流れが存在する場合の拡散現象を記述するものであり，化学反応，熱伝導，移動磁気，あるいは放射性核種の移行解析等多方面にわたる応用が可能である．この解法として近年境界要素法が着目されているが[1)2)3)]非定常移流拡散問題を取り扱うにはその移流項のために，基本解の時間に関する直接積分が困難である．したがって，従来の解法では，移流項を右辺にもってきてソース項として取り扱ったり[1)]，またはGreen関数を近似する[2)3)]ことによりこの困難さを避けてきているが，その為多少の誤差が生じている場合がある．

本解析では，これらの移流項を含む基本解を直接時間積分することにより定式化し，これに基づく3次元非定常移流拡散解析コードを開発した．また，このコードを用いて，既存の3ケースの例題1)静的及び動的境界値問題2) 1次元パイプ型のソースのある場合の移流拡散問題3) 2次元核種移行の単純な問題のFEMと同様な計算を行い，それぞれの結果を比較・検討した．

2. 定式化

流体中の熱伝導，化学反応または放射性崩壊を伴う物質の移流拡散等を記述する方程式は一般に次式で与えられる．

$$L[C]\equiv\frac{\partial C}{\partial t}+(\vec{v}\cdot\nabla C)+\lambda C-K\nabla\cdot\nabla C=S(\bar{r},t) \quad (1)$$

ここでCは求める量（温度，核種濃度，等），Sはソース項である．λはCが放射性核種濃度の場合は放射崩壊定数であり，化学反応（一次）を伴う化学種の濃度場合は反応速度定数である．熱伝導を対象としている場合はλは存在しない．$\vec{v}$は（>0）移流速度であり，ここでは場所に依存しない定数とする．また，$K(>0)$は実効的な拡散係数でこれも定数とする．非圧縮性流体中の熱伝導の場合，Kは熱拡散率（$=k/\rho c_p$）：ここで，kは熱伝導率，ρは密度，c_pは定圧比熱）である．核種の地中移行の場合，地下水流，分散・拡散係数，遅延係数，および，ソース項をそれぞれ$\vec{u}, D, R$，および，Fとして，$\vec{v}=\vec{u}/R,\ K=D/R,\ S=F/R$とすればよい．

初期条件は，

$$C(x,y,z,t=0)=C_0(x,y,z) \quad (2)$$

とし，境界条件は，

$$C(x_1,y_1,z_1,t),\ (\text{Dirichlet 条件}) \quad (3)$$

または，勾配

$$-K\frac{\partial C(x_1,y_1,z_1,t)}{\partial\vec{r}}\cdot\vec{n}\equiv q(x_1,y_1,z_1,t), \quad (\text{Neumann 条件}) \quad (4)$$

で与えられるものとする．ここで点（x_1, y_1, z_1）は境界上にあるものとし，$\vec{n}$はこの境界点における外向き法線ベクトルである．

Analysis of Three-Dimensional Transional Advective Difusion by Boundary Element Method. By *Ryuji Kawamura* (Information and Mathematical Science Laboratory, Inc.) and *Mitsuto Fukuma* (Japan Research Institute, Ltd.)

*㈱情報数理研究所
**㈱日本総合研究所

†1988年6月27日受付　1988年9月7日再受付

(1)の演算子 L の随伴演算子,

$$L^+ \equiv -\frac{\partial}{\partial t} - (\vec{v}\cdot\nabla) + \lambda - K\nabla\cdot\nabla \qquad (5)$$

の基本解は方程式

$$L^+ \Psi^+(\vec{r}, t) = \delta(\vec{r})\delta(t) \qquad (6)$$

の解として定義され,

$$\Psi^+(\vec{r}, t) = \frac{\theta(-t)}{(4\pi K|t|)^{3/2}} \exp\left(-\frac{v^2|t|}{4K} - \lambda|t| - \frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K} - \frac{r^2}{4K|t|}\right) \qquad (7)$$

で与えられる．ここで $\theta(-t)$ はヘビサイド階段関数である．考察点を (r_i, τ) とし,（1）式に

$$\Psi^+(\vec{r}-\vec{r}_i, t-\tau)$$

を乗じて全領域 Ω と全時間区間で積分し，部分積分を行うことにより，考察点 $(\vec{r}_i, \tau)$ についての次の境界積分方程式が得られる．

$$\Theta_i C(\vec{r}_i, \tau) - \int_0^\tau dt \oint_\Gamma d\Gamma \Phi^+(\vec{r}-\vec{r}_i, t-\tau) C(\vec{r}, t)$$
$$= -\int_0^\tau dt \oint_\Gamma d\Gamma \Psi^+(\vec{r}-\vec{r}_i, t-\tau) q(\vec{r}, t)$$
$$+ \int_\Omega d\Omega \Psi^+(\vec{r}-\vec{r}_i, -\tau) C_0(\vec{r})$$
$$+ \int_0^\tau dt \int_\Omega d\Omega \Psi^+(\vec{r}-\vec{r}_i, t-\tau) S(\vec{r}, t) \qquad (8)$$

ここで，Γ は領域 Ω の境界，Θ_i は考察点 $(\vec{r}_i, \tau)$ で決まる係数であり，また,

$$\Phi^+(\vec{r}, t)$$
$$\equiv \vec{n}\cdot\{-K\nabla\Psi^+(\vec{r}, t) - \vec{v}\Psi^+(\vec{r}, t)\}$$
$$= \frac{\theta(-t)}{2(4\pi K|t|)^{3/2}} \vec{n}\cdot\left(-\vec{v} + \frac{\vec{r}}{|t|}\right)$$
$$\times \exp\left(-\frac{v^2|t|}{4K} - \lambda|t| - \frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K} - \frac{r^2}{4K|t|}\right) \qquad (9)$$

である．

ここで τ が十分小さいものとして時間積分中の C と q の時間変化を無視して,（8）式の時間積分を実行する．

$$C_0^+(\vec{r}, \tau) \equiv \int_0^\tau \Psi^+(\vec{r}, t-\tau)\, dt$$
$$= \frac{1}{(4\pi K)^{3/2}} \frac{\sqrt{(\pi K)}}{r} \exp\left(-\frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K}\right)$$
$$\times \left[erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}}, \sqrt{\left(\lambda\tau + \frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\} + erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}}, -\sqrt{\left(\lambda\tau + \frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}\right], \qquad (10)$$

および,

$$p_0^+(\vec{r}, \tau) \equiv \int_0^\tau \Phi^+(\vec{r}, t-\tau)\, dt$$
$$= \vec{n}\cdot\{-K\nabla C_0^+(\vec{r}, \tau) - \vec{v} C_0^+(\vec{r}, \tau)\}$$
$$= \frac{\sqrt{(\pi K)}}{(4\pi K)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K}\right) \vec{n}$$
$$\cdot\left[\left\{-\frac{\vec{v}}{2r} + \frac{\vec{r}}{r^2}\left(\frac{K}{r} - \frac{\sqrt{(v^2+4K\lambda)}}{2}\right)\right\}\right.$$
$$\times erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}}, \sqrt{\left(\lambda\tau + \frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}$$
$$+ \left\{-\frac{\vec{v}}{2\vec{r}} + \frac{\vec{r}}{r^2}\left(\frac{K}{r} + \frac{\sqrt{(v^2+4K\lambda)}}{2}\right)\right\}$$
$$\left.\times erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}}, -\sqrt{\left(\lambda\tau + \frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}\right]$$
$$+ \frac{2K(\vec{n}\cdot\vec{r})}{(4\pi K)^{3/2} r^2 \sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{v^2|t|}{4K} - \lambda|t| - \frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K} - \frac{r^2}{4K|t|}\right) \qquad (11)$$

とおく．ただし,

$$erfx(x, y) \equiv erfc(x+y) \exp(2xy)$$
$$\sim \frac{\exp(-x^2-y^2)}{\sqrt{\pi}\cdot(x+y)} \quad (x+y \gg 1),$$
$$erfc(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty \exp(-z^2)\, dz$$

とする．

結果（8）式はこれらを用いて,

$$\Theta_i C(\vec{r}_i, \tau) - \oint_\Gamma d\Gamma p_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i, \tau) C(\vec{r}, \tau)$$
$$= -\oint_\Gamma d\Gamma C_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i, \tau) q(\vec{r}, \tau)$$
$$+ \int_\Omega d\Omega \Psi^+(\vec{r}-\vec{r}_i, -\tau) C_0(\vec{r})$$
$$+ \int_\Omega d\Omega C_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i, \tau) S(\vec{r}, \tau) \qquad (12)$$

と書ける．ここで N を表面要素の総数，M を体積要素の総数とし,（12）式の離散化を行えば次式を得る．

$$\Theta_i C_i(\tau) - \sum_{j=1}^{N} C_j(\tau) \oint_{\Gamma_j} p_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i, \tau)\, d\Gamma$$
$$= -\sum_{j=1}^{N} q_j(\tau) \oint_{\Gamma_j} C_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i, \tau)\, d\Gamma$$
$$+ \sum_{j=1}^{M} C_{0,j} \int_{\Omega_j} \Psi^+(\bar{r}-\bar{r}_i, -\tau)\, d\Omega$$
$$+ \sum_{j=1}^{M} S_j(\tau) \int_{\Omega_j} C_0^+(\bar{r}-\bar{r}_i, \tau)\, d\Omega. \qquad (13)$$

（13）式の行列方程式を解くことにより解が求められ

る．

定常の場合（$\lambda=0$ とする）および流れのない拡散だけの場合の時間積分後の基本解は以下のようになる．

(10)式，(11)式で $\tau\to\infty$ と置くことにより，

$$C_0^+(\bar{r},\infty)=\frac{1}{4\pi Kr}\exp\left(-\frac{\bar{r}\cdot\bar{v}+vr}{2K}\right), \tag{14}$$

$$p_0^+(\bar{r},\infty)=\frac{1}{4\pi K}\bar{n}\cdot\left\{-\frac{\bar{v}}{2r}+\frac{\bar{r}}{r^2}\left(\frac{K}{r}-\frac{v}{2}\right)\right\}\times\exp\left(-\frac{\bar{r}\cdot\bar{v}+vr}{2K}\right) \tag{15}$$

となり，大西による文献(1)の(12)式の基本解と一致する．

流れのない熱伝導の場合，(10)および(11)式で $v=0$, $\lambda=0$ と置くことにより

$$C_0^+(\bar{r},\tau)=\frac{1}{4\pi Kr}\,erfc\left(\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}}\right), \tag{16}$$

および

$$p_0^+(\bar{r},\tau)=\frac{(\bar{n}\cdot\bar{r})}{4\pi r^2}\left[\frac{1}{\sqrt{(\pi K\tau)}}\exp\left(-\frac{r^2}{4K\tau}\right)+\frac{1}{r}\,erfc\left(\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}}\right)\right] \tag{17}$$

となり，流れのない熱伝導の場合の C. P. HONG らの文献(4)の(10)式の基本解と一致している．

さらに，ラプラス方程式またはポアソン方程式の基本解は，(14)，(15)式で $v\to 0$，または，(16)，(17)式で $\tau\to\infty$ とすることにより得ることができる．

$$C_0^+(\bar{r},\infty)=\frac{1}{4\pi Kr}, \tag{18}$$

$$p_0^+(\bar{r},\infty)=\frac{\bar{r}\cdot\bar{n}}{4\pi r^3}. \tag{19}$$

最後に，今までは時間積分中の C と q の時間依存性を無視してきたが，近似をさらに良くするため，C と q の時間に関して一次の変化までを考慮した場合を考える．すなわち，

$$C(\bar{r},t)\doteq C(\bar{r},\tau)+\frac{\tau-t}{\tau}(C(\bar{r},0)-C(\bar{r},\tau)), \tag{20}$$

$$q(\bar{r},t)\doteq q(\bar{r},\tau)+\frac{\tau-t}{\tau}(q(\bar{r},0)-q(\bar{r},\tau)) \tag{21}$$

とおき，(8)式にこれらを代入し時間積分を実行する．

$$\begin{aligned}C_1^+(\vec{r},\tau)&\equiv\int_0^\tau\frac{(\tau-t)}{\tau}\Psi^+(\vec{r},t-\tau)\,dt\\&=\frac{1}{(4\pi K)^{3/2}}\frac{\sqrt{(\pi K)}}{\tau\sqrt{(v^2+4\lambda K)}}\exp\left(-\frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K}\right)\\&\quad\times\left[-erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}},\sqrt{\left(\lambda\tau+\frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}+erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}},-\sqrt{\left(\lambda\tau+\frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}\right],\end{aligned} \tag{22}$$

および

$$\begin{aligned}p_1^+(\vec{r},\tau)&\equiv\int_0^\tau\frac{(\tau-t)}{\tau}\Phi^+(\vec{r},t-\tau)\,dt\\&=\vec{n}\cdot\{-K\nabla C_1^+(\vec{r},\tau)-\vec{v}C_1^+(\vec{r},\tau)\}\\&=\frac{\sqrt{(\pi K)}}{2\tau(4\pi K)^{3/2}}\exp\left(-\frac{\vec{r}\cdot\vec{v}}{2K}\right)\vec{n}\\&\quad\cdot\left[\left\{\frac{\vec{r}}{r}+\frac{\vec{v}}{\sqrt{(v^2+4K\lambda)}}\right\}\times erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}},\sqrt{\left(\lambda\tau+\frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}\right.\\&\quad\left.+\left\{\frac{\vec{r}}{r}-\frac{\vec{v}}{\sqrt{(v^2+4K\lambda)}}\right\}\times erfx\left\{\frac{r}{\sqrt{(4K\tau)}},-\sqrt{\left(\lambda\tau+\frac{v^2\tau}{4K}\right)}\right\}\right],\end{aligned} \tag{23}$$

とおくことにより，境界積分方程式

$$\begin{aligned}&\Theta_i C(\vec{r}_i,\tau)-\oint_\Gamma d\Gamma p_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i,\tau)C(\vec{r},\tau)\\&-\oint_\Gamma d\Gamma p_1^+(\vec{r}-\vec{r}_i,\tau)(C(\vec{r},0)-C(\vec{r},\tau))\\&=-\oint_\Gamma d\Gamma C_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i,\tau)q(\vec{r},\tau)\\&-\oint_\Gamma d\Gamma C_1^+(\vec{r}-\vec{r}_i,\tau)(q(\vec{r},0)-q(\vec{r},\tau))\\&+\int_\Omega d\Omega\Psi^+(\vec{r}-\vec{r}_i,-\tau)C(\vec{r},0)\\&+\int_\Omega d\Omega C_0^+(\vec{r}-\vec{r}_i,\tau)S(\vec{r},\tau)\\&+\int_\Omega d\Omega C_1^+(\vec{r}-\vec{r}_i,\tau)(S(\vec{r},0)-S(\vec{r},\tau))\end{aligned} \tag{24}$$

を得る．これを離散化すれば境界要素法のスキームが得られる．以下では(13)式のスキームに基づいて作成したコードによる計算結果を示す．(24)式に基づく計算コードは未だ作成しておらず，これは今後の課題である．

3. 解析結果

(13)式の定式化に基づき，3次元移流拡散のプログラムを作成し，以下の3ケースについて解析を行った．

1)定常・非定常境界値問題，2)ソースがある場合の1次元問題，3)2次元核種移行での FEM との比較．

1) 定常・非定常境界値問題

図1—1及び**1—2**に示す体系モデルにおいて境界条件を $C(0, y, z, t)=1$, $C(1, y, z, t)=0$，他は反射境界条件 $\{\partial C(x, 0, z, t)/\partial y=\partial C(x, 1, z, t)/\partial y=\partial C(x, y, 0, t)/\partial z=\partial C(x, y, 1, t)/\partial z=0\}$ とし定常および非定常の境界値問題を解析した．ペクレ数 $Pe=v\Delta x/K=0.05$，及び0.25とした定常の場合の結果を**図2-1**及び**図2-2**に示す．○印は解析解，実線は BEM の解である．初期条件 $C(x, y, z, 0)=\cos(x)$ とした非定常の場合は，拡散数 $Dc=K\Delta t/(\Delta x)^2=0.04$，クーラン数 $Cc=v\Delta t/\Delta x=0.04$ 及び0.2とした結果を図**3-1**及び図**3-2**に示す．また**図3-3**は $t=0.005$ での解の等高線図である．境界値問題で非定常の場合は若干の補正が必要である．

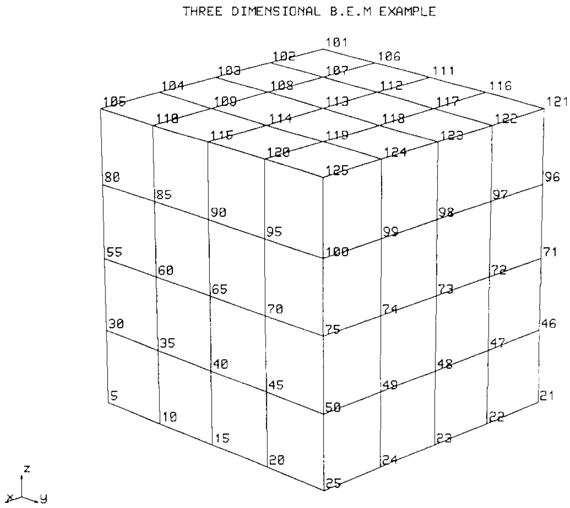

図1-1 境界値問題節点図

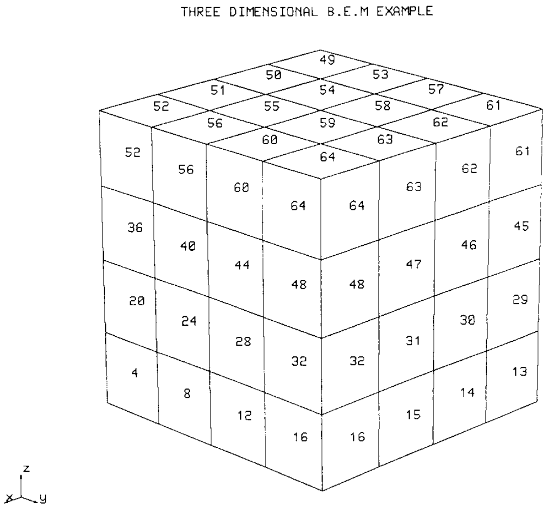

図1-2 境界値問題要素図

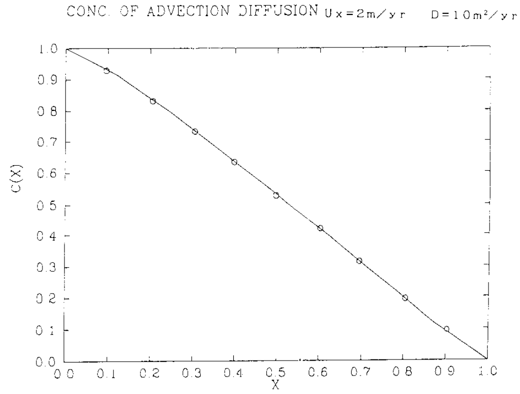

図2-1 境界値定常問題

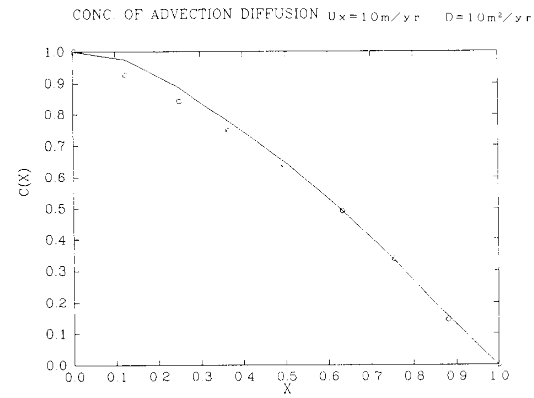

図2-2 境界値定常問題

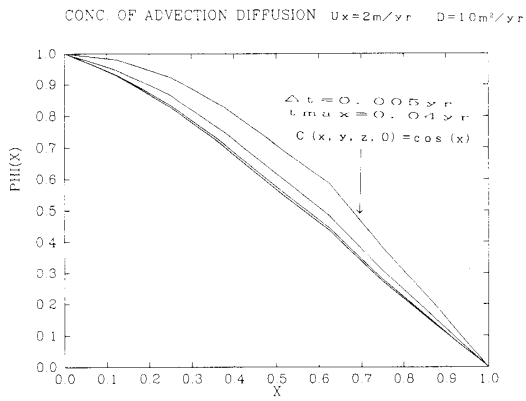

図3-1 境界値非定常問題

2) ソースがある場合の1次元問題

次に**図4**のモデルの非定常の場合で，単位断面長さ20 m の四角形型パイプの中心にソースがある問題であり，境界条件は全て反射である．初期条件 $C(x, y, z, 0)=0$ とし，$Pe=0.1$, $Dc=10$, $Cc=1$ で，**図5-1**に示す，時間ステップ $\Delta t=1$ yr で計算し，○印は $t=13$ yr での解析解[5]である．結果は解析解と若干の不一致を示している．**図5-2**は $t=1$ yr での等濃度線図であ

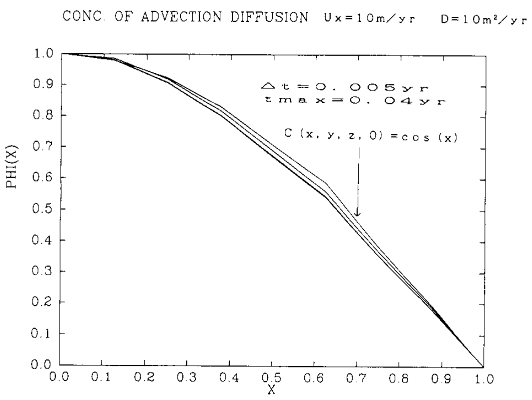

図3-2 境界値非定常問題

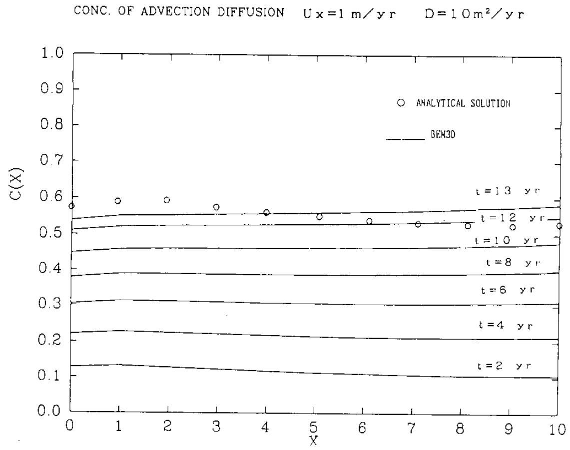

図5-1 ソースのある場合
1次元非定常問題の結果

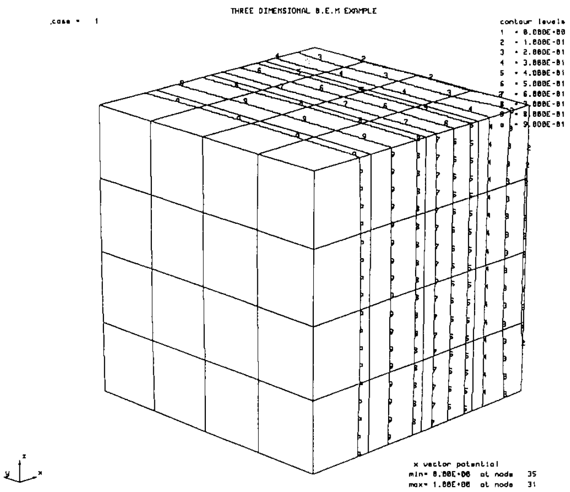

図3-3 境界値非定常問題等温度線図

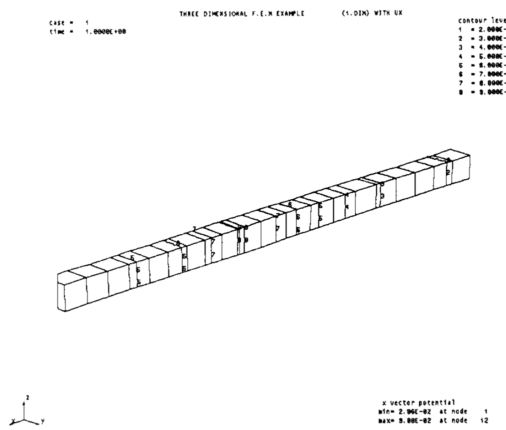

図5-2 ソースのある場合
1次元非定常問題の等濃度線図

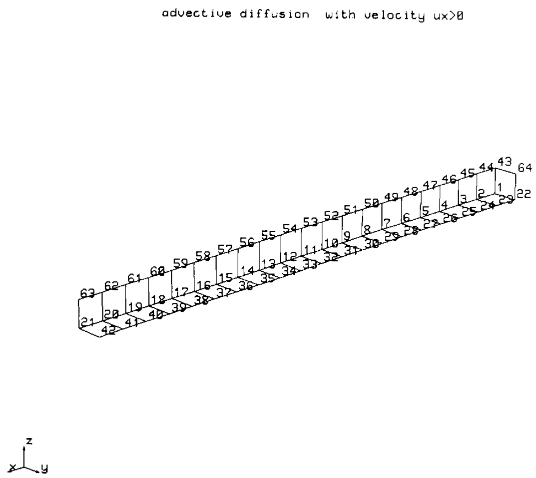

図4 ソースのある場合
1次元非定常問題の節点図

る．

3) 2次元核種移行での FEM との比較

放射性廃棄物の地層処分において，固化体から放射性核種が地層中に放出され，地下水流とともに移流拡散する場合について，**図6**に示す体系を考えた．計算領域は，x方向に（-40 m, 240 m），z方向に（0 m, 80 m）また，y方向に有限の広がりがあるが，3次元コードで扱うため単位厚さ（0 m, 1 m）とした．放射性廃棄物の処分点，すなわち点源として（0 m, 0.5 m, 0 m）の位置で境界値を1とした．また他は境界条件は，ソース点を除きすべて反射境界とし，地下水流はx軸に平行に，正の方向に向かって速度 110 m/yr を持っているものとした．ここでは U^{234} の崩壊を含む移流拡散の結果を**図7-1**に示す．実線は LBL[6] での2次元 FEM の結果であり，MARK ×○△は3次元

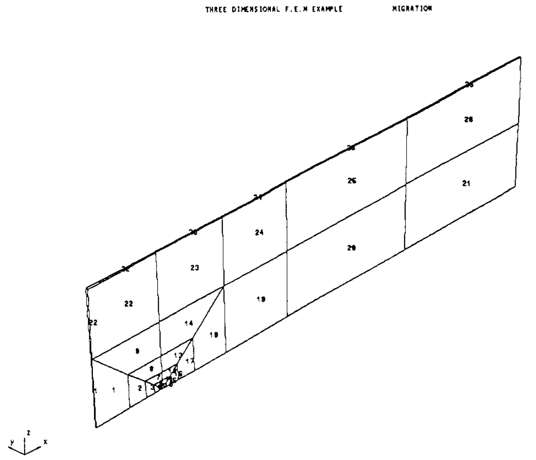

図6　2次元核種移行問題の要素図

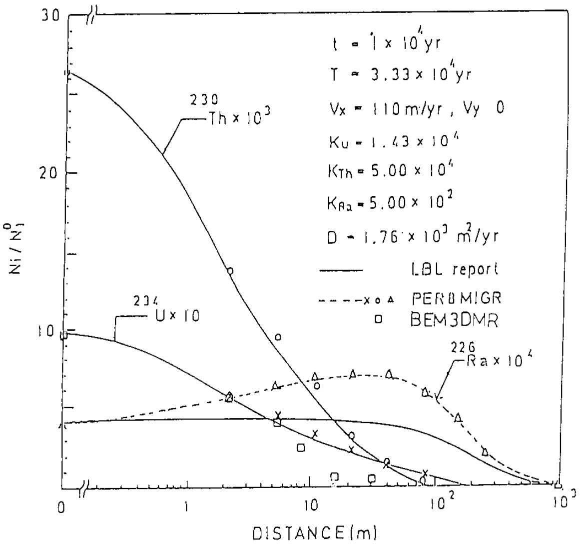

図7-1　2次元核種移行問題の FEM との比較

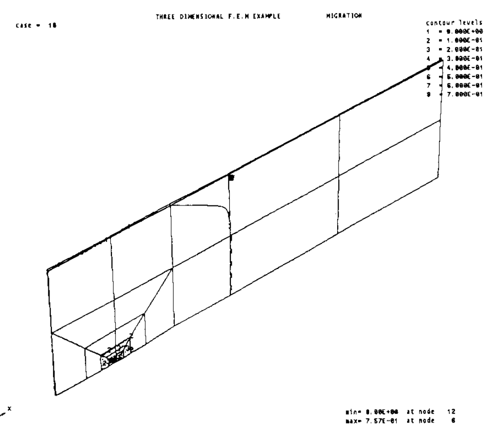

図7-2　2次元核種移行問題の等濃度線図

FEM の結果[7]であり、□は BEM の結果である．**図7-2**は $t=10^4$ yr での U^{234} の等濃度線図である．時間ステップは $\Delta t=10^3 yr$ であるが，この場合距離が10 m 以上となると精度が悪くなっている．FEM の場合の結果と異なり，2)のソースのある場合ペクレ数がかなり大きくても，良い結果が得られるが拡散数が大きいと結果が小さくなる．すなわち時間 Step を大きくとることができない．また，ソース項がある場合は補正が必要である．これは初期値及び特異性を含む体積積分を $4\times4\times4$ 点のガウス積分で行った近似の悪さによるものであると思われる．

4. 結　　論

3次元移流拡散の解析において，基本解の時間積分を解析的に行うことにより定式化できた．これにより，その他の一般的な移流拡散解析に適用ができる．また従来の放物型の偏微分方程式の基本解が導出できた．精度が良くない点は時間ステップ及び体積積分によることがわかった．さらに特異性を含む体積積分の改良が必要と考えられる．

今後この直接解法により，大規模放射性廃棄物処分解析のために，a) Decay Chain のある場合，b) 地下水流の BEM 解析との結合，c) 処分場の近傍は BEM，遠方は FEM による連結解析が可能となろう．また，今後トリクロルエチレン及び重金属の投棄に対する評価解析が可能である．

参　考　文　献

1) 大西和栄：非定常拡散問題，数理科学，254, 37 (1984).
2) 田中康博，本間利久：定常・定速度移流に伴う三次元拡散方程式の混合境界要素解析，日本シミュレーション学会シンポジウム，215 (1988).
3) 池内雅紀，田中正隆：非定常移流拡散問題の境界要素解の安定性と精度について，日本シミュレーション学会シンポジウム，167 (1985).
4) C. P. Hong, T. Umeda and Y. Kimura: Application of the Boundary Element Method to Solidification Problems, Conf. on the 'Modeling of Coating and Welding Process, 1 (1983).
5) R. Kawamura and T. Ishihara: Three-Dimensional Code of Groundwater Flow and Advection Diffusion with a Decay Chain of Radioactive Materials Using Finite Element Method, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **112**, 351 (1988).
6) Pigford and et. al.: Migration of Radionuclides through Sorbing Media Analytical Solution, UCB Report, (1983).
7) R. Kawamura: Three-Dimensional Groundwater Flow and Advection Diffusion Code for Treating Decay Chain of Radioactive Materials by Finite Element Method, J. N. S. T. **24**, 937 (1987).