第 23 回数値流体力学シンポジウム
G2-5

時間逆解析での数値安定性確保についての研究

Study on improving the numerical stability in reverse simulation

○ 安部 諭，東大生研，東京都目黒区駒場 4-6-1Cw403, bearsato@iis.u-tokyo.ac.jp
加藤 信介，東大生研，東京都目黒区駒場 4-6-1Cw403, kato@iis.u-tokyo.ac.jp
Satoshi Abe, Institute of Industrial Science, Cw403, Komaba, Meguro-ku, Tokyo, Japan
Shinsuke kato, Institute of Industrial Science, Cw403, Komaba, Meguro-ku, Tokyo, Japan

Reverse simulation seems to be a promising topic in term of environmental research. The process of negative time advancing in transport equation (reverse simulation) is equivalent to that of positive time advancing with negative convection and diffusion. However, there is a numerical instability problem in solving negative diffusion term. This paper performs a method to improving numerical stability in reverse simulation

１．はじめに

大気中に危険性の物質が拡散した場合、その拡散源を特定し即座に対応する必要がある。過去には発電所や工場からの拡散事故により多くの人命が失われた。最も有名な 1986 年のチェルノブイリ原発事故や世界最悪の科学工場事故といわれるインドの 1984 年のボパール化学工場事故である。日本においても 1999 年の東海村臨海事故などが挙げられる。特に近年は都市部が拡大、人口増加による拡散源の増大・複雑化やアジア地域における急速な経済発展に伴う原子力発電所や工場の増加により拡散源特定の要請は高まりつつあるといえる[1]。さらに、近年は日本においても地下鉄サリン事件(1995 年)に代表されるようなテロ攻撃が増加し、その被害者が増えている現状を考えても拡散源特定手法の開発は急務であるといえる。

拡散源を特定する手法はこれまでに多く開発されてきた。最も多く使用されている手法は逆流跡線解析法である。Bagtzoglou ら[2]は下水道の拡散源特定に応用した。この手法は粒子の動きを測定点から時間に遡って追跡する手法であり、迅速に解を求めることができる一方、乱流拡散の効果を計算することができない。また、解析的手法としては Islam ら[3]はガウスのプルームモデルを応用して解析的に拡散源推定する手法を開発した。下水道の汚染源特定に関しては、一次元流れに関しては Alapati ら[4]、二次元の均一流に関しては Ala ら[5]が解析的アプローチにより拡散源特定に成功している。大気拡散においても、Kathirgamanathan ら[6]は解析的手法が効果的であることを示した。しかし、この手法は均一流などシンプルな問題のみ有効であり、使用できる状況は限られたものに留まっている。

拡散源特定手法として考えられるものの一つとしては、拡散物質の輸送方程式を時間に対して逆方向に解くこと(reverse simulation)が考えられる[7]。しかし、リバースシミュレーションの大きな問題点は負の拡散の影響による数値不安定性である。それを除去し安定性を確保するために様々な試みが行われてきた。数値安定性確保の手法としては拡散項の二次微分を四時微分に変更し、安定性を確保する Quasi-reversibility method という手法がある[8][9]。Zhang ら[10] は Quasi-reversibility method を用いて航空機内やオフィス内の拡散源特定に応用している。この手法は安定的に逆解析ができる一方で、正確な輸送方程式でないために拡散項が卓越するような流れ場においては正確な解が得られないことが欠点として挙げられる。

以上より、本研究では RANS(Reynolds-averaged numerical simulation)解析のリバースシミュレーションによる拡散源特定を目指す。大きな問題点となる数値不安定性の除去についてはローパスフィルターを施し安定性を確保し解析を進めることを目的とする。まずは、シンプルな平面上および単体建物周りの流れ場・拡散場を解析対象とする。

２．解析手法

２．１．RANS 基礎方程式

RANS 解析の基礎方程式として、レイノルズ平均され連続の式、Navier-Stokes 方程式、乱流エネルギー(k)、乱流散逸(ε)の輸送方程式に加え、拡散物質(C)の輸送方程式を用いる。また、拡散場に関しては流れ場の影響がないことを想定するパッシブスカラーとして取り扱う。乱流モデルに関しては、2 方程式標準 k-ε モデルを用いる。以下に基礎方程式を示す。

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(P + \frac{2}{3}k\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\nu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\right\} \tag{2}$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_1}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + P_k - \varepsilon \tag{3}$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_2}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right) + \frac{\varepsilon}{k}C_1 P_k - C_2\frac{\varepsilon}{k} \tag{4}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_3}\frac{\partial C}{\partial x_j}\right) \tag{5}$$

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{6}$$

$$P_k = \nu_t\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)\frac{\partial U_i}{\partial x_j} \tag{7}$$

$$\sigma_1 = 1.0,\quad \sigma_2 = 1.3,\quad \sigma_3 = 1.0,$$
$$C_\mu = 0.09,\quad C_1 = 1.44,\quad C_2 = 1.92$$

２．２．リバースシミュレーション解析手法

本解析ではシンプルな流れ場、拡散場である平面上・単体建物周りの拡散場を解析する。時間逆解析での拡散物質の輸送方程式

は(8)式のようになる。本解析では、この式を変更し時間順方向解析で、負の移流・拡散とした(9)式を用いる。

$$-\frac{\partial C}{\partial t}+U_j\frac{\partial C}{\partial x_j}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_3}\frac{\partial C}{\partial x_j}\right) \tag{8}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}-U_j\frac{\partial C}{\partial x_j}=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_3}\frac{\partial C}{\partial x_j}\right) \tag{9}$$

また、リバースシミュレーション実現のために、濃度場にローパスフィルターを施す。以下にローパスフィルターの概要を示す。

本解析で使用するフィルターは(10)式で示すような LES 解析などで多く使われるガウシアンフィルターである。なお、フィルター操作はオーバーラインで示し、簡略化のためここでは一次元で表現する。また、Δはフィルター幅を表し、適切にフィルター幅を設定することによりリバースシミュレーションを実現する。

$$\begin{aligned}\overline{C}(x)&=\int_{-\infty}^{\infty}G(r)C(x-r)dr\\ G(r)&=\sqrt{\frac{6}{\pi\Delta^2}}\exp\frac{-6r^2}{\Delta^2}\end{aligned} \tag{10}$$

２．３．数値計算法

Navier-Stokes 方程式については、空間離散化について移流項は一次精度風上差分、拡散項は 2 次制度中心差分で行い、時間進行は移流項、拡散項共に二次精度 Adams-Bashforth 法を適用する。さらに、スカラー量である乱流エネルギー、乱流散逸、拡散物質の輸送方程式に関しても空間離散化ついて移流項は一次精度風上差分、拡散項は二次精度中心差分、時間進行法は二次精度 Adams-Bashforth 法を適用する。なお、濃度に関しては負値の場合は 0 に置換するクリッピング法を用いる。計算アルゴリズムは ABMAC 型の圧力・速度同時緩和法を用いる。

リバースシミュレーションにおけるローパスフィルターについて数値解析上では、近似的に(10)式をテイラー展開したときの(11)式の 3 項までを表現した 5 点中心差分を用いた(12)式を用いる。

$$\begin{aligned}\overline{C}(x)&=C(x)\\ &+\frac{C''(x)}{2}\int_{-\infty}^{\infty}r^2G(r)dr+\frac{C^{(4)}(x)}{24}\int_{-\infty}^{\infty}r^4G(r)dr+\cdots\end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned}\overline{C}_i&=C_i+\frac{\Delta^2}{288}\frac{-C_{i-2}+16C_{i-1}-30C_i+16C_{i+1}-C_{i+2}}{\Delta x^2}\\ &+\frac{\Delta^4}{1152}\frac{C_{i-2}-4C_{i+1}+6C_i-4C_{i+1}+C_{i+2}}{\Delta x^4}\end{aligned} \tag{12}$$

境界付近において定義できない点が存在する場合は free-slip 条件を課すように設定する。さらに、拡散場の解析時には流れ場は定常状態を仮定し、拡散場のみ解析を行う。

３．リバースシミュレーション解析モデル

３．１．境界条件

本研究での解析モデルにおける境界条件を以下に示す。また、本解析では、主流方向を x_1、スパン方向を x_2、鉛直方向を x_3 とする。流れ場の流入条件に関して、主流方向速度は 1/4 乗の power law を与え、鉛直、スパン方向速度は 0 とする。乱流エネルギーの流入条件は風洞実験値を参考に(13)式で示すような関数で流入させる。乱流散逸に関しては流入面において局所平衡が成立するように(14)式で与える。ここで、H_b は基準高さを示し、本解析では放出源高さをそれとする。U_b は H_b での流速を表している。

$$\begin{aligned}&x_3/H_b\le 1.0\quad k(x_3)=0.018\left(\frac{x_3}{H_b}\right)^{1/2}+0.015\\ &x_3/H_b\ge 1.0\quad k(x_3)=-0.013\left(\frac{x_3}{H_b}\right)+0.046\end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon(x_3)&=C_\mu k(x_3)^{3/2}/\ell(x_3)\\ \ell(x_3)&=4\{C_\mu\cdot k(x_3)\}^{1/2}\frac{H_b^{1/4}}{U_b}x_3^{3/4}\end{aligned} \tag{14}$$

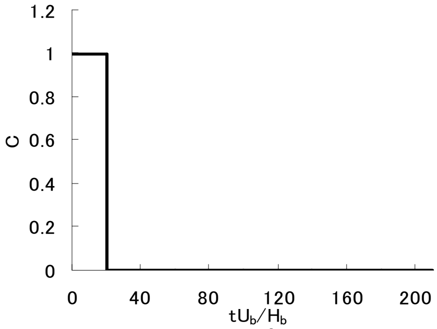

Fig.1 Source concentration as a function against time

側面の境界条件に関して、スパン方向の流速は 0、その他の流速、乱流エネルギー、乱流散逸、拡散物質に関してはノイマン条件とする。上方はすべての物理量に関して、ノイマン条件を課す。次に底面、建物壁面の境界条件に関しては、流れ場は generalized log law を与え、乱流エネルギーはノイマン条件、乱流散逸は壁法則、拡散場はノイマン条件を適用する。拡散物質の拡散源については、点源放出によりある一定時間、一定濃度を放出する。これは定常流れで、拡散源が定常的に発生する場合は拡散方程式も定常的でありリバースシミュレーションの対象とはならないためである。Fig.1 に拡散物質放出の時間変化を示す。解析領域は H_b を基準として、主流方向 24H_b、スパン方向は 10.5 H_b、鉛直方向に 10.0 H_b とする。計算格子数は主流方向に 121、スパン方向に 54、鉛直方向に 50 とする。また、主流方向は等間隔格子、鉛直方向は不等間隔格子を用いる。解析時間については、tU_b/H_b=100 まで時間順方向拡散解析を行い、その後 tU_b/H_b=110 の間リバースシミュレーションを実行する。

リバースシミュレーションにおけるフィルター幅について平面上での流れ場では、としてΔ=0.2Δx_i、0.3Δx_i の 2 ケースについて解析を行う。単体建物周りの流れ場についての解析はΔ=0.2Δx_i、0.3Δx_i、0.5Δx_i の 3 ケースについて解析を行う。

４．解析結果

４．１．平面上でのリバースシミュレーション

まず、平面上でのリバースシミュレーションの解析結果について述べる。Fig.2 に時間方向に順解析を行った結果、つまりリバースシミュレーションにおける入力条件の濃度コンター図を示す。白い部分ほど高濃度を表している。解析領域の中心部に拡散物質が集中し、パフの形状を良く再現しているといえる。Fig.3 にΔ=0.2Δx_i の結果、Fig.4 にΔ=0.3Δx_i の結果の濃度コンター図を示す。両方ともにフィルター操作を施したために、数値不安定性による振動は見られず、安定した解が得られている。しかし、点源からの放出にもかかわらず解が拡散的になり空間的な広がりを持っている。また、フィルター幅の違いにより濃度分布の広がりが大きく変化し、フィルター幅が大きいほど解がより拡散的になっていることが分かる。Fig..5 に濃度の重心の時間変化を示す。ここで、tU_b/H_b=0～100 は時間順方向解析で、tU_b/H_b=100~210 はリバースシ

Fig.2 Side view of initial condition for reverse simulation

Fig.3 Side view of calculation result (Δ=0.2 Δx_i)

Fig.4 Side view of calculation result (Δ=0.3 Δx_i)

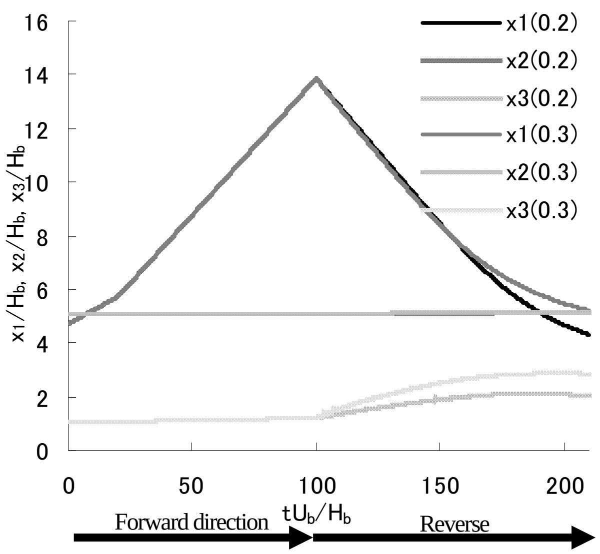

Fig.5 concentration center

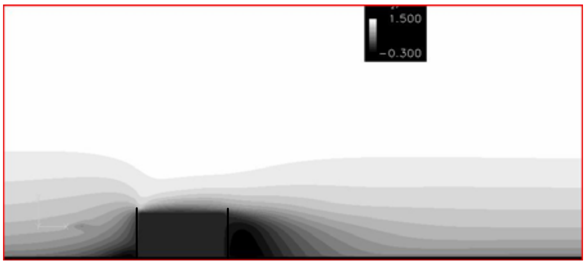

Fig.6 Side view of stream velocity

Fig.7 Side view of initial condition for reverse simulation

Fig.8 Side view of calculation result(Δ=0.2 Δx_i)

Fig.9 Side view of calculation result(Δ=0.3 Δx_i)

Fig.10 Side view of calculation result(Δ=0.5 Δx_i)

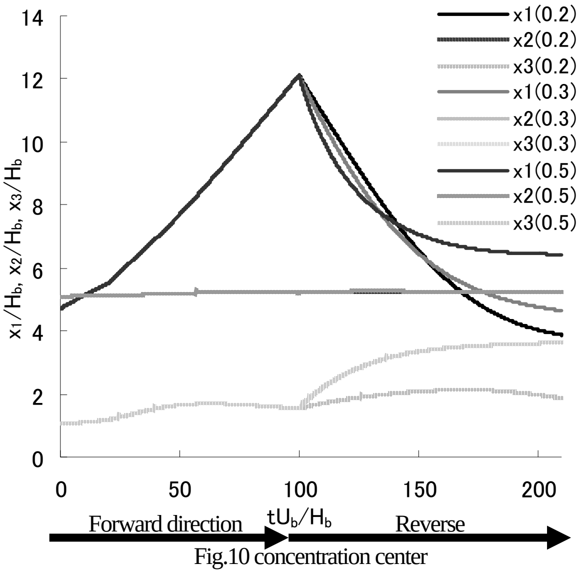

Fig.10 concentration center

ミュレーションの時間を表す。主流方向の重心変化に関しては順方向解析と比較するとtU_b/H_b=100 を軸として対称的となっており、良い精度で解析できているといえる。フィルター幅の違いについては解析の後半において違いが生じている。スパン方向の重心変化についても同様によい精度で解析できていることが分かる。鉛直方向の重心変化については、順方向解析時に比べ、リバースシミュレーション時は上方へシフトしていることが分かり、この様子はフィルター幅が大きいほど大きく現れる。

４．２．単体建物周りでのリバースシミュレーション

次に、単体建物周りのリバースシミュレーションの解析結果について述べる。Fig.6 に建物付近での主流方向の流速コンターを示す。建物の後流域による大規模な渦も再現され、建物上方の剥離も再現できており適切に建物周りの流れを再現できているといえる。Fig.7 にリバースシミュレーションの入力条件である順方向拡散解析の濃度コンター図を示す。建物前方の地表面付近において、高濃度部分が現れていること、さらに後流域の影響により拡散物質が建物後方に周りこんでいる様子が確認できる。これらは既往の研究結果と定性的に一致しており、建物周りの拡散の様子を良く再現しているといえる。Fig.8 に$\Delta=0.2\Delta x_i$、Fig.9 に$\Delta=0.3\Delta x_i$、Fig.10 に$\Delta=0.5\Delta x_i$の解析結果の濃度度コンター図を示す。平面上の解析と同様に、数値不安定による分散的な振動解は見られず安定してリバースシミュレーションが実行できている。これは、本解析で施したフィルター操作が建物周りの拡散場においても有用であることを示している。しかし解は拡散的になり空間的に濃度が拡がっていることが分かる。さらに、フィルター幅が大きいほど拡散的になり、上方へ拡散物質がシフトしていることが Fig.8〜Fig.10 の比較から分かる。また、平面上での解析と比較すると建物付近において高濃度が集中おり、その様子はフィルター幅が大きいほど顕著に現れている。これは建物付近では循環領域などが存在し移流効果より拡散効果の方が卓越しているためにフィルター操作が他の領域よりも大きく影響しているためと考えられる。Fig.11 に濃度の重心位置の時間変化を示す。順方向解析時であるtU_b/H_b=50 前後において z 方向重心が建物の影響により上方へ移動している様子が見られる。x 方向の重心変化はフィルター幅が大きいほど、リバースシミュレーション開始直後において重心位置が大きく変化している様子が見られる。これはフィルター操作の影響により解が拡散的になることが影響しているためである。さらに、解析終盤においてはフィルター幅が大きいほど重心位置の変化が小さくなっている。この原因は可視化図よりフィルター操作による拡散効果のために、解析領域の境界まで濃度が速く拡がってしまっているためと考えられる。y 方向重心はどのフィルター幅においても適切に重心位置が変化している。z 方向重心に関しては、$\Delta=0.5\Delta x_i$ は方法へ大きくシフトしていることが分かる。これはフィルター操作の影響が強すぎ、上方へ大きく拡散したことが原因である。$\Delta=0.3\Delta x_i$ と $0.2\Delta x_i$ の差はなく順方向解析と比べて緩やかではあるが、建物の影響による重心位置の変化も捉えることができている。

以上より、リバースシミュレーションの数値安定性を確保するために適切なフィルター幅のローパスフィルターを施すことは有効であることが示された。しかし、可視化に結果や重心位置の変化よりフィルター幅を方向毎に変えるなどの改善が必要であり、リバースシミュレーションによる拡散源特定への大きな課題であるといえる。

５．おわりに

RANS 解析により平面上および単体建物周りでの拡散に対するリバースシミュレーションを行った。その結果、本解析で施したガウシアンフィルターによるフィルター操作は数値安定性確保に有効であることが示された。しかし、フィルター幅が大きすぎると解が拡散的になりすぎ適切にリバースシミュレーションが実行できないことが分かった。今後は方向毎にフィルター幅を変えることなどの改善が必要であると考えられる。さらに、解析領域の大きさも適切にリバースシミュレーションを実行するのに重要であることが分かった。

参考文献

(1)古野朗子、芹野政道、山澤弘実、「緊急対応のための長距離待機拡散計算による放出源推定手法の開発」、日本原子力学会和文論文誌、vol.5, No.3, (2006) pp. 229-240

(2)Bagtzoglou, A., Dougherty, D. and Tompson, A. “Application of particle methods to reliable identification of groundwater pollution sources”, Water Resources Management, vol. 6, (1992), pp.15-23

(3)Islam, M., “Application of a Gussin Plume Model to determaine the location of an unknown emission source”, Water and Soil Pollution, vol. 112, (1999), pp. 241-245

(4)Alapati, S., Kabala, Z. J., “Recovering the release history of a groundwater contaminant using a non-linear least-squares method”, Hydrol. Process., vol. 14, (2000), pp. 1003-1016

(5)Ala, N.K., Domenico, P. A., “Inverse analytical techniques applied to coincident contaminant distributions at Otis air force base”, Ground water, vol. 30, (1992), pp.212-218

(6) Kathirgamanathan, P., Mckibbin, R., Mclachlan, R. I., “Source term estimation of pollution from an instaneous point source”, Res. Lett. Inf. Math. Sci., vol.3 (2002), pp. 59-67

(7)Bady, M., Kato, S. and Huang, H., “identification of Pollution Sources in Urban Areas Using Reverse Simulation with Reversed Time Marchig Method”, Journal of Asian Architecture and Building Engineering, vol. 8, (2009), no.1, pp. 1-8

(8)Clark, G. W., Oppenheimer, S. F., “Quasireversibility methods for non-well-posed problems”, Electronic Journal of Differential Equations, vol. 1994, (1994), no.8, pp. 1-9

(9)Skaggs, T.H., Kabala, Z. J., “Recovering the history of a groundwater contaminant plume : Method of quasi-reversibility”, Water Resources Reserch, vol.31, (1995), no. 11, pp. 2669-2673

(10)Zhang, T., Chen, Q., “Identification of contaminant sources in enclosed environments by inverse CFD modeling” Indoor Air, vol. 17, (2007), pp. 167-177