

移流拡散方程式の数値解の安定性解析

STABILITY ANALYSIS OF NUMERICAL SOLUTIONS FOR
THE DIFFUSION-CONVECTION EQUATION

平岡正勝*・古市徹**・田中宏明***

By Masakatsu HIRAOKA, Tohru FURUICHI and Hiroaki TANAKA

1. ま え が き

環境汚染問題等において、汚染物質の環境中を伝播するプロセスを記述する偏微分方程式としての移流拡散方程式は、一般に解析解を求めることが困難であるので、現実的には数値計算によって近似解を求めることになる。数値解法としては、有限差分法 (FDM) や有限要素法 (FEM) などによって微分方程式を代数方程式に離散化して解いている。このとき離散化された式は時間と空間の離散量で規定される、離散系に固有の速さに関連するパラメーター (クーラン数 $F=udt/dx$, 拡散数 $G=Ddt/dx^2$, ここに、 u : 流速, D : 拡散係数, dt : 時間差分, dx : 空間差分) を含んでいる。したがって、元の微分方程式を特徴付ける速さを、離散系に固有の速さでどれだけ近似できるかを示すパラメーター F, G によって差分スキーム (scheme: 離散化された式の構成) の収束性、安定性等が議論されることはよく知られているところである¹⁾。収束性は Lax の同等定理によって、安定性の議論に置き換えられるので、本研究では、議論の明確さのため次元の非定常移流拡散方程式の安定性解析について、基礎的な考察を行ったものである。数値解の誤差評価は重要なポイントではあるが、数値的分散、初期条件、境界条件とも関連し、次のステップの研究であると考えている²⁾。

従来、移流方程式 (CE) と拡散方程式 (DE) のそれぞれの安定性解析から移流拡散方程式 (DCE) の安定性が議論されているが、DCE そのものについて直接解析されたものは少ない³⁾。これは種々のスキームに対して、増幅係数の計算が困難なためである。しかし本研究では、増幅係数を数値計算してグラフ化することによ

り、DCE の安定性解析においては、CE と DE の個別の場合の類推からだけでは不十分な結果しか出せないことを示すことができた。またこの図により、パラメーター F, G の変化によって安定領域がどのように変わるかを、移流項と拡散項のそれぞれの時間についての離散化の仕方を通して、視覚的に理解することができた。

以下 2. では、FDM や FEM を用いてそれぞれ空間的に離散化された種々のスキーム (離散スキームと総称する) を対象にして、時間については FEM を用いることにより、explicit 型、Crank-Nicholson 型、implicit 型を任意に構成できるようなパラメーターを導入することによって、一般的スキームを導いた。さらに、移流項と拡散項を分離して考えるかどうかによって、単一ステップスキームと分ステップスキームとした。3. では、2. で導かれた各スキームについて安定性解析を行った。4. では、その計算結果を図示することによって、従来の結果との比較や、各スキームの特色について議論をした。最後に 5. で、得られたいくつかの結果をまとめ、今後の研究方向を検討した。

本研究は、移流拡散方程式を解くために現在いろいろなスキームが提案されているが、その選択原理が確立されていないので、その判定のための第一段階としての安定性解析を試みたものである。

2. 離散スキームの定式化

本章では、単一ステップスキーム (US スキーム) と分ステップスキーム (FS スキーム) の構成の仕方について考察する。

(1) US スキームの構成

一次元の非定常移流拡散方程式としては、移流効果と拡散効果を含む最も簡単な保存式として次の形のものを考える。

* 正会員 工博 京都大学教授 工学部衛生工学科

** 正会員 京都大学助手 工学部衛生工学科

*** 正会員 建設省

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \dots\dots\dots (1)$$

ここに、 $c(x, t)$ は物質濃度、 $v(x, t)$ は流速、 $D(x, t)$ は拡散係数である（議論の簡潔さのために、以下では v, D は一定であるとする）。

まず、拡散項を考えない次の移流方程式の一般的表示について検討する。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + v \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \dots\dots\dots (2)$$

式(2)を空間について次の形に離散化し、そのときの近似解を $U_j(t)$ とする⁴⁾。すなわち、

$$\frac{\partial U_j}{\partial t} = P_1 U_{j+1} + P_0 U_j + P_{-1} U_{j-1} \dots\dots\dots (3)$$

パラメーター P_1, P_0, P_{-1} を決定するために、 $U_{j\pm 1}$ を U_j のまわりに Taylor 展開すると、空間差分間隔を h として、

$$\frac{\partial U_j}{\partial t} = (P_1 + P_0 + P_{-1}) U_j + h(P_1 - P_{-1}) \frac{\partial U_j}{\partial x} + O(h^2) \dots\dots\dots (4)$$

となり、式(2)と係数を比較することにより次のように求められる。

$$\begin{aligned} P_1 &= (d_1 - F_1)/2, \quad P_{-1} = (d_1 + F_1)/2 \\ \text{ただし, } d_1 &= -P_0, \quad F_1 = v/h \\ \frac{dU_j}{dt} &= \frac{1}{2}(d_1 - F_1)U_{j+1} - d_1 U_j \\ &\quad + \frac{1}{2}(d_1 + F_1)U_{j-1} \dots\dots\dots (5) \end{aligned}$$

次に、式(5)を時間について FEM で離散化することによって、以下のよ
うに2段スキーム（時間ステップの段数が2段のもの）を構成する。図-1に示すように、時間ステップ $n, n+1$ を一次の形状関数で内挿する。すなわち、時間差分間隔を k として、

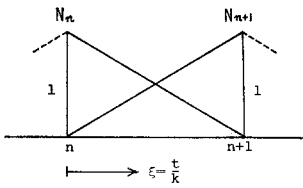


図-1 時間についての形状関数

$$N_n(\xi) = 1 - \xi, \quad N_{n+1}(\xi) = \xi \dots\dots\dots (6)$$

ここで、 $\xi = t/k, 0 \leq \xi \leq 1$ 形状関数を時間に関して微分すると、

$$\dot{N}_n = -1/k, \quad \dot{N}_{n+1} = 1/k \dots\dots\dots (7)$$

$U_j(t)$ は、 $(n, n+1)$ 要素で次のように近似される。ただし、 U_j^* は $U_j(t)$ の $t = nk$ での値である。

$$U_j(t) = N_n U_n^* + N_{n+1} U_{n+1}^* \dots\dots\dots (8)$$

重み付き残差法の考え方に従って、式(8)を式(5)に代入し重み関数 $W_j(\xi)$ をかけることにより、 $0 \leq \xi \leq 1$ で積分すると次のようになる⁵⁾。

$$\int_0^1 W_j \left[(\dot{N}_{n+1} U_{j+1}^* + \dot{N}_n U_j^*) - \left\{ \frac{1}{2}(d_1 - F_1) U_{j+1}^* \right. \right.$$

$$\begin{aligned} &\left. - d_1 U_j^{*+1} + \frac{1}{2}(d_1 + F_1) U_j^{*+1} \right\} N_{n+1} \\ &- \left\{ \frac{1}{2}(d_1 - F_1) U_{j+1}^* - d_1 U_j^* \right. \\ &\left. + \frac{1}{2}(d_1 + F_1) U_{j-1}^* \right\} N_n \Big] d\xi = 0 \dots\dots\dots (9) \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} \theta &= \int_0^1 W_j \xi d\xi / \int_0^1 W_j d\xi \\ d_1 k &= d, \quad F_1 k = F \quad (\text{クーラン数}) \end{aligned}$$

とおくことにより、式(9)は次のように変形される。

$$\begin{aligned} U_j^{*+1} - U_j^* &= \left\{ \frac{1}{2}(d - F) U_{j+1}^* - d U_j^* \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(d + F) U_{j+1}^* \right\} \theta + \left\{ \frac{1}{2}(d - F) U_{j+1}^* \right. \\ &\quad \left. - d U_j^* + \frac{1}{2}(d + F) U_{j-1}^* \right\} (1 - \theta) \dots\dots\dots (10) \end{aligned}$$

ここでパラメーター θ は、時間の離散化において次のような意味もっている。

$\theta = 0$ ($W_j = \delta(\xi)$ とおいたとき)	}	: explicit		
$\theta = \frac{1}{2}$ ($W_j = \delta(\xi - \frac{1}{2})$ とおいたとき)			: Crank-Nicholson	
$\theta = 1$ ($W_j = \delta(\xi - 1)$ とおいたとき)				: implicit

.....(11)

ここに、 $\delta(\xi)$ はデルタ関数である。さらに、パラメーター d は空間の離散化に関し、従来の差分スキームと次のような対応関係にある。

$d = 0$	中心差分	}(12)
$d = 1$	Friedrichs-Lax		
$d = F$	風上差分		
$d = -F$	風下差分		
$d = F^2$	Lax-Wendroff		

次に、拡散項を考慮した式(1)を考え、上述の Taylor 展開の方法で空間について離散化すると、次式が導かれる。

$$\begin{aligned} \frac{dU_j}{dt} - \frac{1}{2}(d_1 - F_1)U_{j+1} + d_1 U_j - \frac{1}{2}(d_1 + F_1)U_{j-1} \\ + G_1(U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}) = 0 \dots\dots\dots (13) \end{aligned}$$

ここに、 $G_1 = D/h^2$ である。次に、式(13)を時間について FEM で離散化する。形状関数等は前と同様であるが、重み関数については移流項と拡散項について、それぞれ W_j^1, W_j^2 と違えている。すなわち、

$$\begin{aligned} \int_0^1 W_j^1 \left[(\dot{N}_{n+1} U_{j+1}^* + \dot{N}_n U_j^*) - \left\{ \frac{1}{2}(d_1 - F_1) U_{j+1}^* \right. \right. \\ \left. \left. - d_1 U_j^{*+1} + \frac{1}{2}(d_1 + F_1) U_{j-1}^* \right\} N_{n+1} \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\left\{ \frac{1}{2}(d_1 - F_1)U_{j+1}^n - d_1 U_j^n \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}(d_1 + F_1)U_{j-1}^n \right\} N_n \\
 & + W_j^2 [G_1 (U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) N_{n+1} \\
 & + G_1 (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n) N_n] d\xi = 0 \dots (14)
 \end{aligned}$$

ここで、

$$\left. \begin{aligned}
 B &= \int_0^1 W_j \xi d\xi / \int_0^1 W_j d\xi \\
 R &= \int_0^1 W_j^2 \xi d\xi / \int_0^1 W_j^2 d\xi \\
 d_1 k &= d, F_1 k = F, G_1 k = G
 \end{aligned} \right\} \dots (15)$$

とおくことにより、式(14)は次のように変形される。

$$\begin{aligned}
 U_j^{n+1} - U_j^n &= \left[\frac{1}{2}(d - F)U_{j+1}^{n+1} - dU_j^{n+1} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2}(d + F)U_{j-1}^{n+1} \right] B + \left[\frac{1}{2}(d - F)U_{j+1}^n \right. \\
 & \left. - dU_j^n + \frac{1}{2}(d + F)U_{j-1}^n \right] (1 - B) \\
 & + G \{ (U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) R \\
 & + (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n) (1 - R) \} \dots (16)
 \end{aligned}$$

結局、式(16)の一般的な表示によるスキームでは、パラメーター B, R を独立に変化させることによって、移流項と拡散項で explicit, Crank-Nicholson, implicit と独立に変えることができる。このように定式化することの意味付けは、4. の計算結果のところで議論されるであろう。

式(16)は、パラメーター d の取り方によってたかだか h^3 のオーダーの打ち切り誤差であるが、 h^4 のオーダーまで残したものととして Fromm のスキームがある⁹⁾。このスキームは、分散的誤差(解析解と差分解の位相のずれから生じる)をなくすように工夫されたスキームであり、時間についての離散化を式(16)と同様にすると次のように表わされる。

$$\begin{aligned}
 U_j^{n+1} - U_j^n &= \left\{ \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j+2}^{n+1} + \left(\frac{5F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_{j+1}^{n+1} \right. \\
 & \left. + \left(-\frac{3F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_{j+1}^{n+1} + \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j+1}^{n+1} \right\} B \\
 & + \left\{ \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j-2}^n + \left(\frac{5F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_{j-1}^n \right. \\
 & \left. + \left(-\frac{3F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_j^n + \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j+1}^n \right\} (1 - B) \\
 & + G \{ (U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) R \\
 & + (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n) (1 - R) \} \dots (17)
 \end{aligned}$$

最後に、空間の離散化を FEM によって行うスキームを導く。一次の区分多項式(ピラミッド関数)を形状関数に用い、式(1)を Galerkin 法で定式化すると次式が得られる。

$$\frac{1}{6} \frac{dU_{j+1}}{dt} + \frac{4}{6} \frac{dU_j}{dt} + \frac{1}{6} \frac{dU_{j-1}}{dt}$$

$$= -v \delta_j U_j + D \delta_j^2 U_j \dots (18)$$

ここに、 δ_j, δ_j^2 はそれぞれ一次と二次の中心差分を表わす。次に、形状関数を二次関数とすると次式のようになる。

$$\begin{aligned}
 & \frac{9}{70} \frac{dU_{j+1}}{dt} + \frac{52}{70} \frac{dU_j}{dt} + \frac{9}{70} \frac{dU_{j-1}}{dt} \\
 & = -v \delta_j U_j + \frac{6}{5} D \delta_j^2 U_j \dots (19)
 \end{aligned}$$

式(18)、式(19)からわかるように、FEM による空間離散化は中心差分に対応するものである。

特に、移流項が中心差分であるスキームは、不安定になりやすいので⁷⁾、風上差分に対応する UPW-FEM が有効であるとされている⁸⁾。これは、Galerkin 法で重み関数を次のようにとるものである。図-2 にその形状を示している。

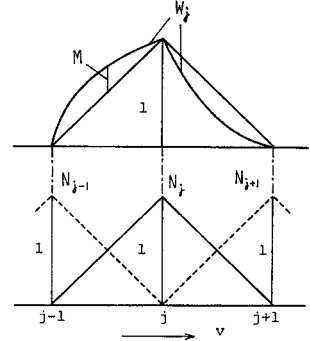


図-2 UPW-FEM の形状関数

$$\left. \begin{aligned}
 W_j(x) &= N_j(x) \pm \alpha M(x) \\
 M(x) &= -3x(x-h)/h^2
 \end{aligned} \right\} \dots (20)$$

ここに、 $N_j(x)$ は形状関数で、 α は定数である。形状関数を一次とし、UPW-FEM で定式化すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{6} \left(1 - \frac{3}{2} \alpha \right) \frac{dU_{j+1}}{dt} + \frac{4}{6} \frac{dU_j}{dt} + \frac{1}{6} \left(1 + \frac{3}{2} \alpha \right) \frac{dU_{j-1}}{dt} \\
 & = \frac{v}{2h} \{ (\alpha - 1) U_{j+1} - 2\alpha U_j + (\alpha + 1) U_{j-1} \} + D \delta_j^2 U_j \\
 & = -v \delta_j U_j + (D + v\alpha) \delta_j^2 U_j \dots (21)
 \end{aligned}$$

$\alpha = 0$ のときは、式(18)に一致する。式(21)の右辺の最後の項からわかるように、これは擬似拡散項が加わったものとみなせる。式(18)、(19)、(21)についても、(15)で導入したパラメーター B, R によって時間について同様に離散化できる。

以上導かれた各 US スキームについて、3., 4. で増幅係数を求め安定性解析を行う。

(2) FS スキームの構成

元の移流拡散方程式を分割する方法として、たとえば移流項と拡散項を分離して計算する Bella⁹⁾ らの方法や、多次元の場合一次元の問題に分割する LOD (Locally One Dimensional) 法¹⁰⁾ などがある。前者は、おもに数値拡散を減少させるためであり、後者は、計算機の容量、計算時間を減少させるためである。本研究では、Bella らの考えに基づく移流項と拡散項を分離して計算

することの妥当性を、解析解と比較することによって示す。さらに、移流と拡散の時間的離散化をそれぞれ独立にとって、USスキームのパラメーター B, R によるものと比較して安定性解析を行う。

移流拡散方程式 (1) が、次のように分離できるものとする。パラメーター r は、 $0 < r < 1$ である。

$$r \frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} \dots\dots\dots(22)$$

$$(1-r) \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \dots\dots\dots(23)$$

初期条件としては、

$$c(x, 0) = \exp[i\beta x] \dots\dots\dots(24)$$

とする。これは、 β は波数として任意の初期値は、この形のフーリエ成分をもつからである。このような条件下で $0 \leq t_1 \leq t_2$ として、 t_1 までは式 (22) の移流だけで、次に t_1 から t_2 までは式 (23) の拡散だけで物質が輸送されるものとした解析解を求める。次に、この解と式 (1) の $t=t_2$ での解析解とを比較することにより次の結果が得られる。ただし、 $t_2=k$ としている。

$$\begin{cases} r \frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} & (0 \leq t \leq rk) \dots\dots\dots(22)' \\ (1-r) \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} & (rk \leq t \leq k) \dots\dots\dots(23)' \end{cases}$$

すなわち、時間を 1 ステップ k だけ進めて計算するとき、式 (1) を解く代わりに最初の rk は式 (22) を解き、次の $(1-r)k$ は式 (23) を解いても厳密に同じ解が得られることがわかる。

式 (22)', (23)' を空間について FDM, 時間について FEM によって離散化する。ただし、時間については、

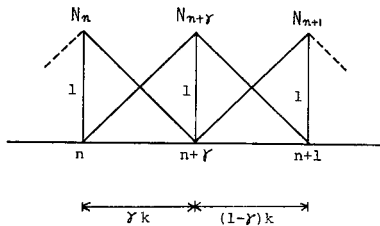


図-3 FSスキームの時間についての形状関数

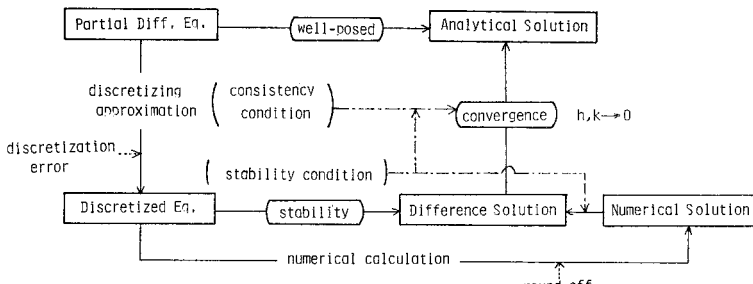


図-4 解析解, 離散解, 数値解の相互関係

図-3 のようにそれぞれ $\xi = t/rk, \xi = t/(1-r)k$ とし、ほかは同様である。

$$U_j^{n+r} - U_j^n = \left\{ \frac{1}{2} (d-F) U_{j+1}^{n+r} - d U_j^{n+r} + \frac{1}{2} (d+F) U_{j-1}^{n+r} \right\} B + \left\{ \frac{1}{2} (d-F) U_{j+1}^{n+r} - d U_j^{n+r} + \frac{1}{2} (d+F) U_{j-1}^{n+r} \right\} (1-B) \dots\dots\dots(25)$$

$$U_j^{n+1} - U_j^{n+r} = G \{ (U_{j+1}^{n+1} - 2 U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) R + (U_{j+1}^{n+r} - 2 U_j^{n+r} + U_{j-1}^{n+r}) (1-R) \} \dots\dots\dots(26)$$

これらの式で、時間間隔 $rk, (1-r)k$ は陽に現われないので、 $t=(n+r)k$ での値は $nk \leq t \leq (n+1)k$ での任意の時刻のものと考えることができる。したがって、Bella らの方法による、移流現象と拡散現象の各時間ステップでの重ね合わせという物理的な考え方も、以上の定式化は説明し得ることになる。

FEM による空間離散化での FS スキームの定式化も、US スキームと同様に行えるが、ここでは省略して安定性解析のところでの結果についてのみ議論する。

3. 安定性解析

解析解、離散解 (離散スキームを厳密に解いた解)、数値解の相互関係をまとめたものが図-4 である。この図からも Lax の同等定理¹²⁾により収束性を安定性で置き換えられることがわかる。

安定性解析の方法としては、離散的摂動による方法、Neumann による方法、Hirt による方法などがよく知られている²⁾。

本研究では、Neumann の方法に基づいて安定性解析を行う。元来、Neumann の方法は差分方程式に適用されている方法であるが、FEM による離散化された式をも含めた離散スキームに対して、この方法を用いることにする¹³⁾。

拡散方程式で、空間について中心差分、時間について前進差分をとった次の離散スキームを例にとって説明する。

$$U_j^{n+1} = G U_{j+1}^n + (1-2G) U_j^n + G U_{j-1}^n \dots\dots\dots(27)$$

初期値にだけ誤差が入ったときの安定性解析については、式 (27) の線形性により増幅係数を計算して、次のように安定条件が求められる¹⁴⁾。

$$G \leq 1/2 \dots\dots\dots(28)$$

現実には各時間ステップで誤差が発生するから、それらの誤差の線形和としての全累積誤差を考えなければならぬ。式(27)の数値解 N_j^n は次の関係を満たす。

$$N_j^{n+1} = GN_j^{n+1} + (1-2G)N_j^n + GN_{j-1}^n + \epsilon_j^{n+1} \dots (29)$$

ここに、 ϵ_j^{n+1} は $(j, n+1)$ 格子点において発生した丸め誤差である。全累積誤差 $E_j^n = N_j^n - U_j^n$ とすれば、条件(28)を考慮して、次の評価式が成立する。

$$\begin{aligned} \text{Max}_j |E_j^n| &\leq \text{Max}_j |E_j^{n-1}| + \text{Max}_j |\epsilon_j^n| \\ &\leq \sum_{m=0}^n \text{Max}_j |\epsilon_j^m| \leq (n+1) \text{Max}_{j,m} |\epsilon_j^m| \dots (30) \end{aligned}$$

すなわち、初期値に関する安定性の解析方法は、実は離散スキームそのものの全累積誤差が、指数関数的に増大せず、ただだか各時間ステップでの丸め誤差とステップ数のべきの形(この場合では1乗)でしか増大しないということを示すのに用いられることがわかった。

上述のように、安定性は丸め誤差を成長させないために要請されたが、丸め誤差は離散化誤差に比べて解への影響がずっと小さいことを考えると、安定性よりも収束性の方が重要ではないかという疑問が生じる。しかし、Lax の同等定理により安定性と収束性が同等であることが示されるので、検証がしやすい安定性の検討がより重要となる。結局、安定性の概念は、離散化誤差と数値誤差の両方に関係していることになる。

安定性に関してもう1つ重要な概念として、擬似微分方程式がある。これは、離散スキームの解が満たす微分方程式のことであるが、移流拡散方程式(1)を例にとってこのことを説明する。式(1)の解析解の格子点での値

C_{j+1}^n, C_{j-1}^n を点 (jh, nk) で Taylor 展開して、式(1)に代入すると次の関係が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{k}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + O(k^2, h^2) \\ = \frac{C_{j+1}^{n+1} - C_j^n}{k} + v \frac{C_{j+1}^n - C_{j-1}^n}{2h} \\ - D \frac{C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n}{h^2} \dots (31) \end{aligned}$$

式(31)で解析解 C を近似解 U で置き換え、右辺=0としたものが離散スキーム(いまの場合、空間中心差分、時間前進差分)である。そして、その結果左辺=0となる式が擬似微分方程式といわれるものであり、高次の項を省略して次式のようにかける。

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -v \frac{\partial U}{\partial x} + \tilde{D} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \quad \tilde{D} = D - \frac{v^2 k}{2} \dots (32)$$

\tilde{D} は、いわゆる擬似拡散係数といわれるものである。もちろん、 \tilde{D} は各スキームによって異なり、実際の数値計算では \tilde{D} による数値拡散を小さくする工夫がなされている¹⁵⁾。一般に擬似微分方程式が、次のように表現されるものとする¹⁾。

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \sum_{p=0}^{\infty} \mu_{2p+1} \frac{\partial^{2p+1} U}{\partial x^{2p+1}} + \sum_{p=1}^{\infty} \mu_{2p} \frac{\partial^{2p} U}{\partial x^{2p}} \dots (33)$$

ここで、次の形の解を考える。

$$U(x, t) = \exp[\alpha t + i\beta x] \dots (34)$$

式(34)を式(33)に代入して整理すると、時間的進化に関係するパラメーター α は、

$$\alpha = \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p \beta^{2p} \mu_{2p} + i \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \beta^{2p+1} \mu_{2p+1} \dots (35)$$

となり、 $\alpha = a(\beta) + ib(\beta)$ と簡略してかくことにする。

表-1 各スキームの増幅係数

離散スキーム	増幅係数	
USスキーム	FDM	$\frac{\{1 - (1-B)d - 2(1-R)G\} + \{(1-B)d + 2(1-R)G\} \cos \beta h - i(1-B)F \sin \beta h}{(1+Bd+2RG) - (Bd+2RG) \cos \beta h + iBF \sin \beta h}$
	FROMM	$\frac{(B-1)(F^2/4 - F/4) \cos 2\beta h + \{(B-1)F + 2(R-1)G\} \cos \beta h + \{(B-1)(-3/4 F - F^2/4) - 1 - 2(R-1)G\} + i\{(1-B)(F^2/4 - F/4) \sin 2\beta h + (B-1)(-3/2 F + F^2/2) \sin \beta h\}}{B(F^2/4 - F/4) \cos 2\beta h + (BF + 2RG) \cos \beta h + B(-3/4 F - F^2/4) - 1 - 2RG + i\{-B(F^2/4 - F/4) \sin 2\beta h + B(-3/2 F + F^2/2) \sin \beta h\}}$
	FEM (1次)	$\frac{\{4 + 2 \cos \beta h + 12(G + F\alpha)(1-R)(\cos \beta h - 1)\} - i\{3\alpha + 6F(1-B)\} \sin \beta h}{\{4 + 2 \cos \beta h - 12(G + F\alpha)R(\cos \beta h - 1)\} - i\{3\alpha - 6FB\} \sin \beta h}$
	FEM (2次)	$\frac{\{26 + 9 \cos \beta h + 84G(1-R)(\cos \beta h - 1)\} - i\{35F(1-B) \sin \beta h\}}{\{26 + 9 \cos \beta h - 84GR(\cos \beta h - 1)\} + i\{35FB \sin \beta h\}}$
FSスキーム	FDM	$\frac{\{1 - (1-B)d\} + (1-B)d \cos \beta h - i(1-B)F \sin \beta h}{(1+Bd) - Bd \cos \beta h + iBF \sin \beta h} \times \frac{\{1 - 2G(1-R)\} + 2(1-R)G \cos \beta h}{(1+2RG) - 2RG \cos \beta h}$
	FROMM	$\frac{(B-1)(F^2/4 - F/4) \cos 2\beta h + (B-1)F \cos \beta h + \{(B-1)(-3/4 F - F^2/4) - 1\} + i\{(1-B)(F^2/4 - F/4) \sin 2\beta h + (B-1)(-3/2 F + F^2/2) \sin \beta h\}}{B(F^2/4 - F/4) \cos 2\beta h + BF \cos \beta h + B(-3/4 F - F^2/4) - 1 + i\{-B(F^2/4 - F/4) \sin 2\beta h + B(-3/2 F + F^2/2) \sin \beta h\}} \times \frac{\{1 - 2G(1-R)\} + 2(1-R)G \cos \beta h}{(1+2RG) - 2RG \cos \beta h}$
	FEM (1次)	$\frac{\{4 + 2 \cos \beta h + 12F\alpha(\cos \beta h - 1)\} - i\{3\alpha + 6F(1-B)\} \sin \beta h}{\{4 + 2 \cos \beta h - 12F\alpha R(\cos \beta h - 1)\} - i\{3\alpha - 6FB\} \sin \beta h} \times \frac{\{4 + 2 \cos \beta h + 12G(1-R)(\cos \beta h - 1)\} - i\{3\alpha \sin \beta h\}}{\{4 + 2 \cos \beta h - 12GR(\cos \beta h - 1)\} - i\{3\alpha \sin \beta h\}}$
	FEM (2次)	$\frac{\{26 + 9 \cos \beta h\} - i\{35F(1-B) \sin \beta h\}}{\{26 + 9 \cos \beta h\} + i\{35FB \sin \beta h\}} \times \frac{\{26 + 9 \cos \beta h + 84G(1-R)(\cos \beta h - 1)\}}{\{26 + 9 \cos \beta h - 84GR(\cos \beta h - 1)\}}$

$a > 0$ ならば、誤差（解も）は指数関数的に増大するので、安定であるためには $a \leq 0$ でなければならない。Neumann の安定性の条件から考えると増幅係数 Z （複素数）は、

$$Z = |Z|e^{i\varphi} \dots\dots\dots (36)$$

とかけるので、式 (33) の 1 ステップ k 後の増幅係数と次のように関係付けられる。

$$\left. \begin{aligned} |Z| &= e^{a(\beta)k} \\ \varphi &= b(\beta)k \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (37)$$

(37) の関係から、分散性を考えるときの位相のずれ φ は、擬微分方程式の奇数階の導関数の係数 μ_{2p+1} にだけ関係していることがわかる。他方、安定性に関する $|Z|$ の方は、偶数階の導関数の係数 μ_{2p} にだけ関係している。式 (32) で考えると、 \tilde{D} は安定性に関係してくることになることがわかる。

以上より、安定性の議論が重要であることがわかったので、2. において導いた各スキームの増幅係数を計算することにより、安定性解析を行う。ただし、離散解のフーリエ級数の各成分は、

$$U_j^n = Z^n e^{i\beta(jh)} \dots\dots\dots (38)$$

とかけるので、式 (38) を各スキームに代入して増幅係数 Z について解いてまとめたものが表-1 である。

4. 計算結果

従来の安定性解析においては、CE, DE または簡単な場合の DCE についての離散スキームの安定条件を、解析的に explicit に解いて求めている。そして、この条件のもとでのパラメーター F, G を用いてシミュレーションを行っている。しかし一般に、DCE の離散スキームの安定条件を explicit に解くことは困難であるので、CE, DE についての安定条件から類推しているのが実情である。したがって、本研究では DCE の各スキームの増幅係数を数値計算によって求め、パラメーター F, G により安定性がどのように変化するかを図示することによって検討した。

この $F-G$ 図を用いる安定性解析の利点としては、次の点が挙げられる。

- i) explicit に増幅係数が求めにくいスキームについても安定領域が示せる。
- ii) 視覚的に安定領域がわかり、安定なパラメーター F, G の組合せを見つけやすい。
- iii) 各スキームの安定性の比較が容易である。
- iv) $F-G$ 図の原点を通る直線の傾きの逆数 ($F/G = \nu h/D$) は P_e 数である。 P_e 数が既知のとき、図より安定な場合の最大の時間差分間隔 k を決定できる。
- v) パラメーター B, R を変化させることにより、

移流項、拡散項の時間についての離散化の仕方による安定性への効果をみることができる。

以上の利点を踏まえて、以下各スキームの特徴を安定性解析を通して議論する。ただし、 $F-G$ 図の領域については、CE, DE のそれぞれのスキームの安定条件を考慮して、 $0 \leq F, G \leq 1$ として計算した。

(1) 各スキームの特徴

パラメーター B, R の組合せに対応する図の番号は、表-2 のようにする。

a) 中心差分

図-5 に US スキームのときの安定領域を示している。⑥~⑨については、 $0 \leq F, G \leq 1$ では全安定であったので図には示していない。 $G=0$ のときは CE の場合に対応するが、 $B=0$ すなわち移流項を explicit にすると不安定になることがわかる。これは、CE に対する従来の解析結果に一致する。FS スキームについては、ほぼ同じようであったが、少し安定領域が広がった。

b) 風上差分

図-6 に US スキーム、図-7 に FS スキームの場合を示している。どちらも、④~⑨については全安定であった。中心差分に比べて、 $R \neq 0$ すなわち拡散項を implicit, Crank-

表-2 パラメーター B, R の組合せと $F-G$ 図の対応

$B \backslash R$	0	0.5	1.0
0	①	④	⑤
0.5	②	⑥	⑦
1.0	③	⑧	⑨

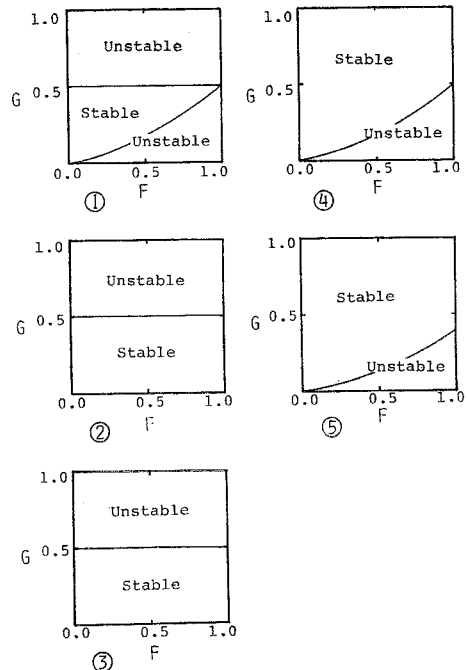


図-5 中心差分の安定領域 (US スキーム)

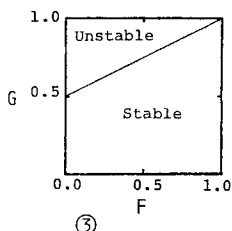
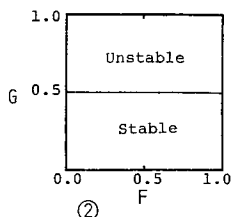
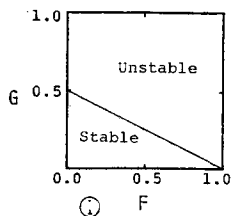


図-6 風上差分の安定領域 (US スキーム)

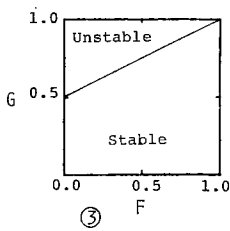
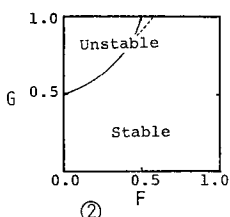
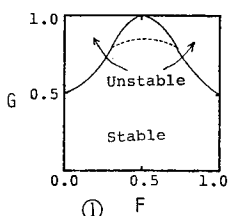


図-7 風上差分の安定領域 (FS スキーム)

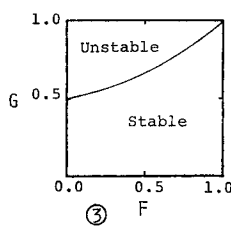
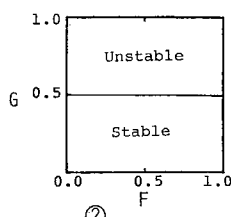
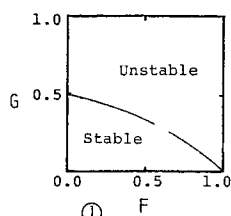


図-8 Lax-Wendroff の安定領域 (US スキーム)

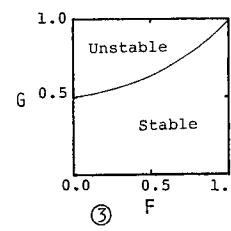
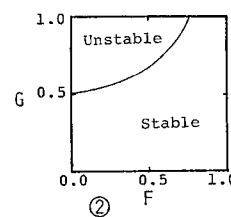
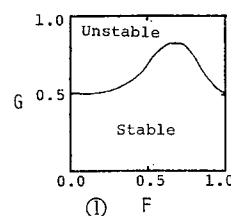


図-9 Lax-Wendroff の安定領域 (FS スキーム)

Nicholson にすると全安定になり、また $G=0$ のときの CE については全安定となり、スキームとして改善されていることがわかる。FS スキームにした方が、US スキームに比べて安定領域が広がっている。

c) Lax-Wendroff

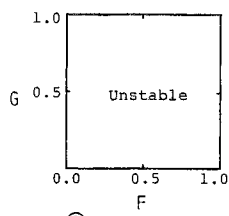
図-8 に US スキーム、図-9 に FS スキームの場合を示しているが、風上差分と同じような傾向にある。

d) Fromm

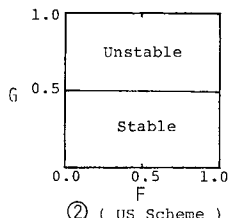
風上差分とほぼ同じであり、FS スキームの ①、② の場合に安定領域がわずかに狭くなっているだけである (図-7 の点線)。

e) Friedrichs-Lax

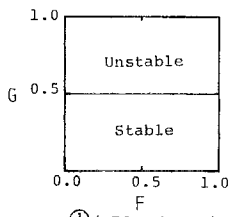
図-10 に US スキームの ①、② の場合と、FS スキームの ① の場合を示している。他の場合は全安定であった。上述の a)~d) の他の差分スキームとは異なった傾向を示している。US スキームの ① の場合は、 $G=0$ のときのみが安定であった。US スキームに比べて、FS スキームにした方が安定領域が広がっているといえる。



① (US Scheme)

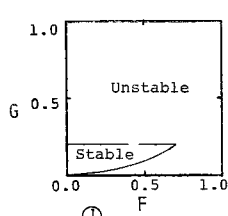


② (US Scheme)

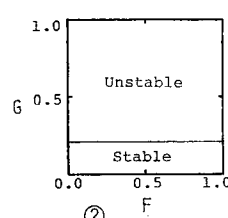


① (FS Scheme)

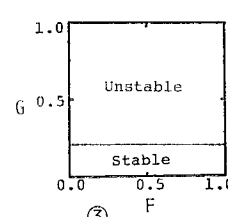
図-10 Friedrichs-Lax の安定領域



①

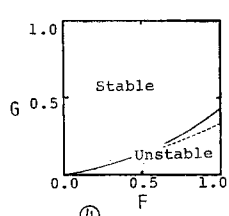


②

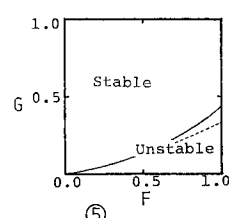


③

図-11 FEM (一次) の安定領域 (US スキーム)



④



⑤

f) FEM

図-11 に形状関数を一次とした US スキームの場合を示している。⑥~⑨ については全安定であった。ま

た、形状関数を二次にしたものは、一次のものと同じであった。これは、形状関数の次数は安定性に影響を与えないことを示している。FEM は空間離散化で中心差分に対応するので、 $B=0, G=0$ で不安定となっている。FS スキームについては、US スキームとほぼ同じであるが、少し安定領域が狭くなった(図-11の④と⑤の点線)。

g) UPW-FEM

図-12に式(21)のパラメーター α を 0.5 とした US スキームの場合を示している。⑥~⑨については全安定であった。UPW-FEM は、普通の FEM($\alpha=0$) と比べて、安定領域は $R=0$ のときは狭くなるが、 $R \neq 0$ のときは逆に広がっている。これは、UPW-FEM が移流項を風上差分的にしているためと考えられる。 α を参考のために負にしてみると、いままで全安定であった⑥~⑨に不安定な領域ができてきた。

(2) 計算結果の検討

F - G 図を計算することによって、一種の数値実験を試みたことになる。(1)で各スキームの特徴を述べたが、以下では離散スキーム全般について検討を行う。

④ F - G 図による安定領域は DCE について計算されたものである。しかし、CE や DE の安定領域を解析的に求めた結果を包括している。たとえば、風上差分の図-6をみると、 $B=R=0$ のときの $G=0$ (CE に対応)あるいは $F=0$ (DE に対応)から安定条件である $0 \leq F \leq 1, 0 \leq G \leq 1/2$ が導ける。逆に、CE, DE だけの安定条件からだけでは推測できない不安定領域をも示し得る(たとえば、上の例で、 $F=G=1/2$ のとき)。

⑤ 拡散項を implicit, Crank-Nicholson にすると安

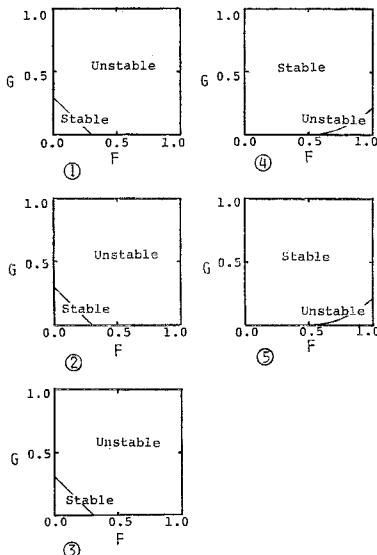


図-12 UPW-FEM($\alpha=0.5$)の安定領域 (US スキーム)

定性が向上するといわれている¹⁶⁾。本研究の数値実験によると、 $R \neq 0$ とすることであるが、明らかに各スキームにおいてこのことが示された。

⑥ すべてのスキーム (UPW-FEM で $\alpha < 0$ を除く)において、 $B \neq 0, R \neq 0$ とすると全安定になる。

⑦ P_e 数は時間差分間隔 k を含まないので、 k によって安定性を改善するためには用いることができない。これは、パラメーター F, G によることの必要性を示している。

⑧ FEM は FDM に比べて、全般に安定領域が狭くなっている。

⑨ US スキームによるより FS スキームにする方が、安定性は向上するといえる。

⑩ UPW-FEM は、本研究の計算結果に限れば、安定性に関してはあまり有効とはいえない(むしろ誤差の分散性に関係するのであろう)。パラメーター B, R をコントロールした方が安定性は向上される。

5. 結 論

本研究は、汚染物質が環境中を拡散伝播していくプロセスを正確に計算でき、環境アセスメントに十分に信頼性をもって使用できるような数値計算法を開発することを目指している。そのために、一次元定数係数の非定常移流拡散方程式の離散スキームについて、その安定性解析を Neumann の方法を拡張して行ったものである。

以下に、これまで述べてきたことの要約とともに、今後の研究方向について検討する。

(1) 従来の研究では、移流拡散方程式が簡単な場合以外、移流方程式、拡散方程式の安定性解析をそれぞれ独立に行い、それから元の移流拡散方程式の安定条件を類推していた。本研究では、一貫した方法で安定性解析が行えることが示された。

(2) 風上差分、中心差分、Lax-Wendroff、Friedrichs などの各差分スキームを、パラメーターを導入することによって統一的に表現できるスキームとした。さらに、このスキームを移流項と拡散項をそれぞれ独立に、時間について離散化する方法を示した。これは空間についての離散化では、簡便なスキーム構成法を用いたことと、時間についての離散化では FEM が有効であることを示し、これらを結合したことの結果である。

(3) 移流項と拡散項の時間離散化を、それぞれ独立に explicit, Crank-Nicholson, implicit とした 9 つの組合せについて安定領域を図示した。この安定性に関する F - G 図により、各スキームの安定性の傾向、時間離散化の影響を直観的にとらえることができるようになる。

(4) 安定条件の操作因子として、クーラン数 F と

拡散数 G が支配的であることがわかった。そして、本方法によると移流方程式、拡散方程式のそれぞれから導かれる安定条件を包括し得ること、さらにそれぞれの安定条件からだけでは推測できない不安定領域をも発見できることが示された。

(5) FS スキームについては、解析解と比較することによって、元の移流拡散方程式を移流方程式と拡散方程式とに理論的に分割できることが示された。さらに、FS スキームは安定性を向上させるといわれているが³⁾、これを示すことができた。

(6) FS スキームにおいて、移流方程式の増幅係数は複素数、拡散方程式の増幅係数は実数 (UPW-FEM は除く) となるので、拡散方程式は安定性にのみ関係 (移流方程式は位相のずれすなわち数値的分散にも関係) することがわかった。これより、擬似拡散項を加えることは、数値的分散による誤差を生じることなく安定性を向上させる効果があることがわかった。

(7) 可能なフーリエモードの最小波長は、空間差分間隔 h の 2 倍であり、離散スキームである限りこれ以下の波長は伝達されない。またこの最小波長 $2h$ のときは、数値的減衰 (散逸) が最も大きくなる⁴⁾。さらに、

各波数 β についての安定領域を計算して、それから共通部分として $F-G$ 図を作成しているが、波数が大きくなる (波長は小さくなる) ときの方が安定性を支配することがわかった。これは、図-13 の (a), (b) に示している Lax-Wendroff の場合の最大波数 $\beta = \pi/h$ と $\beta = \pi/4h$ のときの例からも理解できる。このような波数の違いによる安定性の相違のように、 $F-G$ 図の内部構造については言及していないが、精度の高い計算をするためには議論されるべきであろう。

(8) 数値的分散性など誤差評価についての議論が、実現象のシミュレーションでは重要であり、今後の研究課題である。

なお、使用した計算機は京都大学大型計算機センターの FACOM, M-200 である。

参考文献

- 1) Richtmyer, R.D. and K.W. Morton: Difference Methods for Initial Value Problems, 2nd Ed., Interscience Publisher, 1967.
- 2) Roache, P.J.: Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers Inc., 1976.
- 3) 村岡浩爾・中辻啓二: 河川流の非定常拡散解析における数値誤差の評価, 土木学会論文報告集, No. 213, pp. 7~16, 1973 年 5 月.
- 4) 矢嶋信男・野木達夫: 発展方程式の数値解析, 応用数学叢書, 岩波書店, 1977.
- 5) Zienkiewicz, O.C.: The Finite Element Method, 3rd Ed., McGraw-Hill, London, 1977.
- 6) Fromm, J.E.: Practical investigation of convective difference approximations of reduced dispersion, The Physics of Fluids Supplement II, pp. 3~12, 1969.
- 7) Spalding, D.B.: A novel finite difference formulation for differential equations involving both first and second derivatives, Int. J. num. Meth. Engng., Vol. 4, pp. 551~559, 1972.
- 8) Heinrich, J.C. et al.: An 'upwind' finite element scheme for two-dimensional convective-transport equation, Int. J. num. Meth. Engng., Vol. 11, pp. 131~143, 1977.
- 9) Bella, D.A. and W.E. Dobbins: Difference modeling of stream pollution, Proc. of A.S.C.E., Vol. 94, SA 5, 1968.
- 10) Yanenko, N.N.: The Method of Fractional Steps, Springer-Verlag, 1971.
- 11) 伊藤 剛編: 数値解析の応用と基礎, アテネ出版, 1971.
- 12) 山口昌哉・野木達夫: 数値解析の基礎, 共立出版, 1968.
- 13) 平岡正勝・古市 徹・田中宏明: 移流拡散方程式の有限要素解析についての検討, 土木学会第 34 回年次学術講演会講演概要集, II-203, pp. 405-406, 1979.
- 14) 野木達夫: 差分スキームの安定性, 土木学会誌, 数値解析法講座 18, No. 6, pp. 69~79, 1973.
- 15) 村上 健: 拡散方程式の数値計算方法の紹介, 下水道協会誌, Vol. 9, No. 100, pp. 43~48, 1972.
- 16) 村上 健: 非定常拡散方程式の数値計算方法 (その 2), 土木学会衛生工学研究討論会講演集, pp. 77~80, 1974. (1981.1.13・受付)

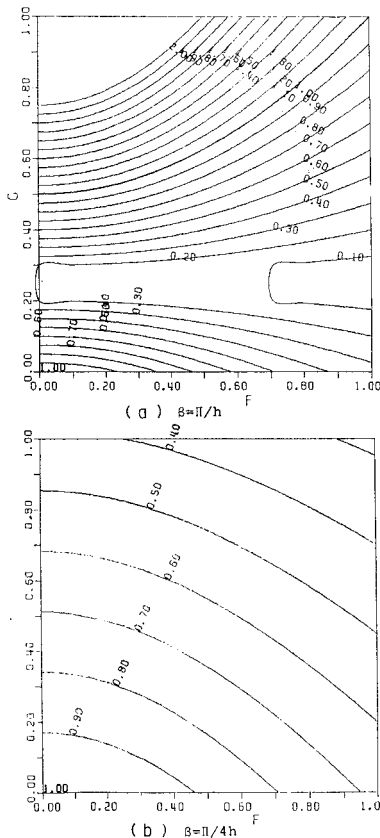


図-13 Lax-Wendroff (FS スキーム, $B=1.0, R=0.0$ のとき)の波数の違いによる安定領域の相違