

九州大学 工学部 正員 上田 年比古

○正員 神野 健二

学生員 藤野 和徳

1. まえがき

一次元移流分散方程式の差分解と特性曲線法で求める場合の誤差および安定性につき考察する。そのために他の計算法の誤差、安定性と比較し計算例を示した。また特性曲線法の長短と思われる点についても考察した。

2. 誤差の評価について

$\Delta x = \Delta t = h$ とする。分散方程式の解析解 $C(x, t)$ は必要なだけ連続微分可能で有界な関数とする。Taylor展開により $C(x+h, t) = C(x, t) + \frac{\partial C}{\partial x}h + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}h^2 + \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 C}{\partial x^3}h^3 + O(h^4)$, $C(x, t+h) = C(x, t) + \frac{\partial C}{\partial t}h + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}h^2 + O(h^3)$ であるから、一次元移流分散方程式 $\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, u : 実質流速(一定値), D : 分散係数(一定値) ー(1)

は次のように離散化することができる。

$$\frac{1}{h}\{C(x, t+h) - C(x, t)\} + \frac{u}{2h}\{C(x+h, t) - C(x-h, t)\} - \frac{D}{h^2}\{C(x+h, t) - 2C(x, t) + C(x-h, t)\} = \frac{h}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{uh^2}{6}\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} - \frac{Dh^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (2)$$

差分法の精度は(2)式の右辺の値の大小によってきまる。流速が大きいときには第2項が、分散係数が大きいときには第3項が影響を及ぼすことになる。さて簡単な explicit 法を例にとり離散化誤差を考えてみる。差分解 U_{ij} は

$$(2) \text{式の右辺を無視して } U_{ij} = \left(\frac{RD}{h^2} - \frac{uR}{2h}\right)U_{ij} + \left(1 - \frac{2RD}{h^2}\right)U_{ij} + \left(\frac{RD}{h^2} + \frac{uR}{2h}\right)U_{i-j} \quad (3)$$

離散化誤差の大きさを V_{ij} は $V_{ij} = U_{ij} - C(x, t)$, $x=iR, t=jR$ ー(4)

$$\text{で表わされ, } V_{ij} = \left(\frac{RD}{h^2} - \frac{uR}{2h}\right)V_{ij} + \left(1 - \frac{2RD}{h^2}\right)V_{ij} + \left(\frac{RD}{h^2} + \frac{uR}{2h}\right)V_{i-j} - \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{uh^3}{6}\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + \frac{RDh^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (5)$$

次に分散項の差分法につき考察する。分散項 $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ は離散化すると(2)式に示すように

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}\{C(x+h, t) - 2C(x, t) + C(x-h, t)\} - \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (6) \text{で表わされるが, 二つと次に定義する関数}$$

$$f_1 = \frac{1}{h^2}\{C(x+h, t) - 2C(x, t) + C(x-h, t)\} \quad (7) \text{と比べてみると}$$

$$f_1 - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (8) \text{だけ値が違ふ。次に新しく } f_1 \text{ に対応する関数として次式を定義する。}$$

$$f_2 = \frac{1}{h}\left\{\frac{1}{h}\int_{x-\frac{1}{2}h}^{x+\frac{1}{2}h} C(x, t)dx - \frac{2}{h}\int_{x-\frac{1}{2}h}^{x+\frac{1}{2}h} C(x, t)dx + \frac{1}{h}\int_{x-\frac{1}{2}h}^{x+\frac{1}{2}h} C(x, t)dx\right\}, C(x, t) = C_{ij} + (i-j)\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{2}(i-j)^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{6}(i-j)^3\frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + \frac{1}{24}(i-j)^4\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (9)$$

$$\text{と置き } f_2 \text{ を計算しておいて } f_2 - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{1}{24}\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - 2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right) + \frac{h^2}{1920}\left(\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} - 2\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 C}{\partial x^4}\right) + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (9')$$

あるいは(9)式の右辺第1項 $\approx \frac{h^2}{24}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, 第2項は無視できて $f_2 - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{h^2}{24}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} \quad (9'')$ 次に区間を n 個の微小区間に分割して積分をさすおきかえると(9)式の f_2 は(9')式に対応して $f_2 - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{h^2}{24}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial x^4} - \frac{h^2}{24n^2}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (9''')$

表-1 は(1)式において $u=0$ の場合で境界, 初期条件が $C(0, t)=1.0$, $C(\infty, t)=0.0$, $C(x, 0)=0.0$ の解析解を例にとり(8)式と(9)式とを計算したものである。この結果(8)式と(9)式とではせいぜい1%のオーダーの違いであることがわかる。

表-1

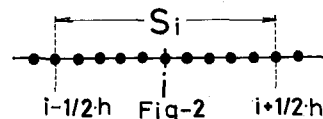
3. 粒子を配置する計算方法

Pinder らは塩水楔を数値計算するにあたって特性曲線法を導入した。誤差についての評価はなされていないので著者らはこの誤差を評価するためにモデルに一次元移流分散現象を考えた。方程式(1)式において変数変換 $X=x-ut, \tau=t$ を行なうと $\frac{\partial C}{\partial \tau}(X, \tau) = D\frac{\partial^2 C}{\partial X^2}(X, \tau) \quad (10)$ したがって $\delta C(X, \tau) = \delta C(x, t) = \delta \tau D\frac{\partial^2 C}{\partial X^2}(X, \tau) = \delta \tau D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x, t) \quad (11)$

Fig-2 に示すように X の区間の全領域に N 個の粒子を配置する。この粒子は δX の間隔をおき流速 u で移動し濃度 $C(X)$ をもつものとする。 K は粒子番号で

K の (x, t) 空間での座標値を $X(K)$ とすると $(i+1)$ 時刻では

$$X^{i+1}(K) = X(K) + uR \quad (12) \text{である。また, 区間 } [(i-\frac{1}{2})R, (i+\frac{1}{2})R] \text{ を格子点 } i \text{ の}$$



領域 \$S_i\$ と定義する。粒子 \$K\$ が \$S_i\$ 内にあるときには \$x(K) \in S_i\$ であることがみたまわっている。いま \$S_i\$ の中に \$n_i\$ 個の粒子があるとき(11)式の右辺の分散項は次式で計算する。即ち \$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{1}{n_i} (C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1})\$, \$C_{i,j} = \frac{1}{n_i} \sum_{K \in S_i} C(K)\$, \$x(K) \in S_i, \dots (13)\$ したがって(11)式は \$\delta C_{i,j} = \frac{\partial D}{\partial x} (C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}) \dots (14)\$, 格子点 \$i\$ の \$j+1\$ 時の濃度は \$C(i,j+1) = C_{i,j} + \delta C_{i,j} \dots (15)\$ また \$C(K) = C(i,j) + \delta C_{i,j}\$, \$x(K) \in S_i\$ (\$K=1, 2, \dots, n_i\$) \$\dots (16)\$ 計算の flow-chart は Fig-3 に示す。

4. 安定性について

従来の差分法は格子点の濃度の時間経過が差分法の安定性の問題となったが、本法では(16)式からわかるように空間 \$X, T\$、すなわち粒子の濃度が問題となるであろう。そこで(16)式をもさらに詳しくみてみよう。便宜上 \$S_{i+1}, S_i, S_{i-1}\$ にはそれぞれ \$n\$ 個の粒子があるものとする。Fig-4 のとき(16)式は次のようにかけよう。

\$C^n(K) = C(K) + \frac{\partial D}{\partial x} (\sum_{j=1}^n C(i,j) - 2\sum_{j=1}^n C(i,j) + \sum_{j=1}^n C(i,j)) = \sum_{j=1}^n a_j C(i,j) \dots (17)\$ さて差分法の安定性の問題では差分法の増幅因子を考察する必要がある。たとえ(3)式の場合、フーリエ変換 \$\hat{C}(n) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x) e^{inx} dx\$ をおこなうと(3)式は波数空間で次のようになる。

$$\hat{C}(n)_{j+1} = (a+ib) \hat{C}(n)_j, a = 1 - \frac{2\partial D}{\partial x} (1 - \cos n\Delta x), b = -\frac{\partial D}{\partial x} \sin n\Delta x \dots (18)$$

増幅因子 \$|a+ib|\$ が \$|a| \leq 1\$ のための必要十分条件は \$\frac{\partial D}{\partial x} \leq \frac{1}{2}\$, \$\frac{\partial D}{\partial x} \leq 1 \dots (19)\$ である。したがって Fig-4 のモデルにつき(17)式を空間 \$X, T\$ でフーリエ変換 \$\hat{C}(n) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x) e^{inx} dx\$ をおこなうと \$n\$ が十分大きいときには \$\hat{C}(n) = \hat{Q} \hat{C}(n)\$, \$\hat{Q} = A+B\$, \$A = 1 - \frac{4\partial D \sin^2 \frac{n\Delta x}{2}}{n\Delta x (1 - \cos n\Delta x)}\$, \$B = -\frac{4\partial D \sin^2 \frac{n\Delta x}{2}}{n\Delta x} \dots (20)\$

いま \$|Q| \leq 1\$ について考えてみよう。\$\theta = \frac{n\Delta x}{2}\$, \$\alpha = \frac{4\partial D \sin^2 \frac{n\Delta x}{2}}{n\Delta x (1 - \cos n\Delta x)}\$ とおくと \$A = 1 - \alpha \sin \theta\$, \$B = -\alpha (1 - \cos \theta)\$, \$\therefore A^2 + B^2 \leq 1\$ の条件は \$\frac{2\partial D}{\partial x} \frac{2}{n\Delta x} \sin^2 \frac{n\Delta x}{2} \leq \frac{\sin \theta}{\theta}\$

と \$n\$ が十分大きいときには \$\theta \approx 0\$, ゆえに \$\varphi = \frac{\theta}{2}\$ とおくとこの条件は \$\frac{2\partial D}{\partial x} \frac{\sin^2 \varphi}{\varphi} \leq 1\$ となる必要がある。\$g(\varphi) = \frac{\sin^2 \varphi}{\varphi}\$ なる関数が \$g(\varphi) \geq 0\$ をみたす \$\varphi\$ に対し最大値 \$g(\varphi_0)\$ は \$\varphi_0 = \frac{\pi}{2.3725} = 1.324\$ のとき \$g(\varphi_0) = 0.7\$ となる。したがって \$n\$ が十分大きい場合には \$\frac{\partial D}{\partial x} \leq 0.725 \dots (21)\$ であればよいことがいえる。ただし実際問題としては

\$n\$ が大きくなることはできないので(20)式から再検討することが必要である。

得られた結果を要約すると①移流項が卓越する場合(1)粒子数が多いとき計算時間の問題があるが精度は高い(2)少ないとき(19)式のような制約がつくであろう②分散項が卓越する場合にはあまり適さない。粒子数 \$n\$ と制約条件は今後検討を要しよう。以上の結果は次の計算結果表-2, Fig-5, 6 からみえる。

5. 計算例

表-2 (\$u=0\$)

%	anal	C-N	expl	characteristic		
				50	200	300
1	82.92	82.89	82.34		82.91	82.94
3	51.75	51.70	52.04		51.40	51.58
5	28.07	28.09	28.36	値	27.24	27.57
7	13.10	13.20	13.28	値	12.01	12.45
9	5.22	5.34	5.29	値	4.41	4.67
11	1.76	1.86	1.77	値	1.30	1.44
13	0.50	0.56	0.50	explicit	0.31	0.36
15	0.12	0.15	0.11		0.06	0.07

Fig-6 は \$u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\$, \$C(0,y) = 10\$ (\$-\infty < y \leq 0\$)

\$C(0,y) = 0.0\$ (\$0 < y < \infty\$) \$\frac{\partial C}{\partial y} = 0.0\$ (\$y = \pm \infty, x \geq 0\$) の

解, \$C(x,y) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\frac{y}{2\sqrt{Dx}})\$ である。

参考文献

- 1) 偏微分方程式の差分法による近似解法(上) P.I.I.O. ノンマス・ワッソ、藤野精一、吉田晋也
- 2) A numerical Technique for Calculating the Transient Solution of the Salt Front
G.F. Pinder, H.H. Cooper, Water Resources Research, Vol. 3, 1970, June.

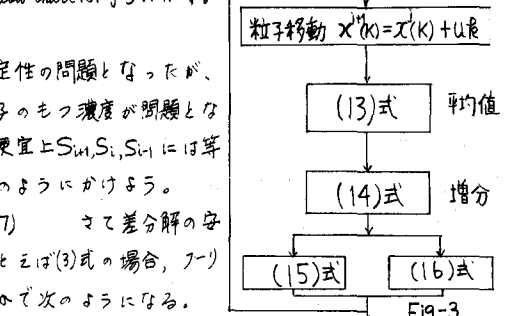


Fig-3

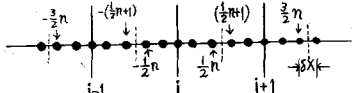


Fig-4

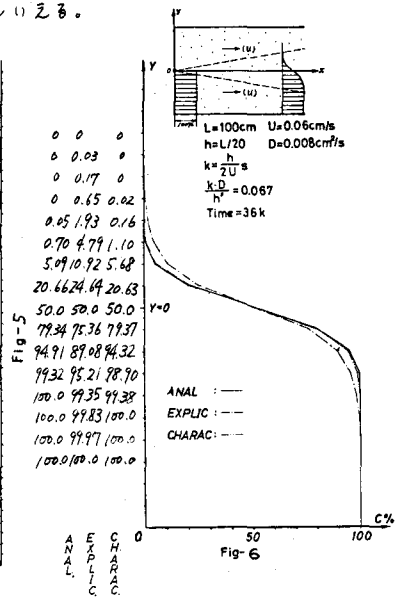


Fig-6