

高度近似差分式による拡散方程式の数値解析

1・まえがき 線型微分方程式を解く場合に重合法によって適当な次数まで含む多項式になおし、この多項式を共通に満たす差分方程式を作成する方法がある。一方、移流拡散または分散方程式の数値解法には、現在、差分法とFEMがあるが、計算精度は十分なものとはいえない。そこで、我々は移流分散方程式を必要な精度まで数値解析する目的で、その線型性をいかした必要な精度を満足する差分式(以後高度近似差分式と称する)を導いた。次に、導いた高度近似差分法を/次元移流分散方程式の厳密解、および現在よく使用されているいくつかの差分解法の結果と比較している。また、2次元拡散水理模型における移流分散への応用をおこなう上での若干の見解を述べた。

2・移流拡散方程式の高度近似差分式 移流拡散方程式の高度近似差分式を以下に従って求める。ここで解析の対象問題は3次元あるいは平面2次元の場合であるが、今簡単のために/次元の場合を考えると

$$\frac{\partial(CA)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial CA}{\partial x} \right) - \frac{\partial(CAV)}{\partial x} + N \dots (1)$$

が得られる。ここに、C:濃度、V:流速、K:拡散係数、N:非保存項、A:断面積。残差法モデルを想定し

C、H、V、Kを一潮時の平均値として、CH=Gとおくと、

$$\frac{\partial G}{\partial t} = K \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} - (V - \frac{\partial K}{\partial x}) \frac{\partial G}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} G + N \dots (2)$$

となる。ここで、 $V - \frac{\partial K}{\partial x}$ をV、 $-\frac{\partial V}{\partial x}$ をMで置き代

$$\frac{\partial G}{\partial t} = K \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} - V \frac{\partial G}{\partial x} + MG + N \dots (3)$$

となる。つぎに、式(3)の近似基本解を $\Delta x = \alpha h$ 、 $\Delta t = h^2$ として $(\Delta x)^4$ まで求めれば

$$\begin{aligned} G^{(0)}(X, t) &= 1 + (M+N)t + \frac{1}{2}M(M+N)t^2 + \frac{1}{6}M^2(M+N)t^3 \\ &\quad + \frac{1}{24}M^3(M+N)t^4 + \dots \\ G^{(1)}(X, t) &= X + (MX - V+N)t + \frac{1}{2}M(MX - 2V+N)t^2 + \frac{1}{6}M^2(MX \\ &\quad - 3V+N)t^3 + \frac{1}{24}M^3(MX - 4V+N)t^4 + \dots \\ G^{(2)}(X, t) &= X^2 + (MX^2 - 2VX + 2K+N)t + \frac{1}{2}(M^2X^2 - 4VMX + 2V^2 \\ &\quad + 4KM + MN)t^2 + \frac{1}{6}(M^3X^2 - 6VM^2X + 6V^2M + 6KM^2 \\ &\quad + M^2N)t^3 + \frac{1}{24}(M^4X^2 - 8VM^3X + 12V^2M^2 + 8KM^3 \\ &\quad + M^2N)t^4 + \dots \\ G^{(3)}(X, t) &= X^3 + (MX^3 - 3VX^2 + 6KX + N)t + \frac{1}{2}(M^2X^3 - 6VMX^2 \\ &\quad + 6V^2X + 12KMX - 12KV + MN)t^2 + \frac{1}{6}(M^3X^3 \\ &\quad - 9VM^2X^2 + 18V^2MX + 18KM^2X - 6V^3 - 36KVM \\ &\quad + M^2N)t^3 + \frac{1}{24}(M^4X^3 - 12VM^3X^2 + 36V^2M^2X \\ &\quad + 24KM^3X - 24V^3M - 72KVM^2 + M^3N)t^4 + \dots \\ G^{(4)}(X, t) &= X^4 + (MX^4 - 4VX^3 + 12KX^2 + N)t + \frac{1}{2}(M^2X^4 \\ &\quad - 8VMX^3 + 12V^2X^2 + 24KM^2X - 48KVX + 24K^2 \\ &\quad + MN)t^2 + \frac{1}{6}(M^3X^4 - 12VM^2X^3 + 36V^2MX^2 \\ &\quad + 36KM^2X^2 - 144KVMX - 24V^3X + 72KV^2 \\ &\quad + 72K^2M + M^2N)t^3 + \frac{1}{24}(M^4X^4 - 16VM^3X^3 \\ &\quad + 72V^2M^2X^2 + 48KM^3X^2 - 96V^3MX - 288KVM^2X \end{aligned} \quad (4)$$

東 和 大 学 正 会 員 〇 空 閑 幸 雄
九 州 産 業 大 学 正 会 員 加 納 正 道、赤 坂 順 三
九 産 大 伊 野 波 盛 哲 譜 久 山 朝 功 松 尾 浩 旨

$$\begin{aligned} &+ 216KV^2M + 144K^2V^2M + 144K^2M^2 + 24V^4 \\ &+ M^3N)t^4 + \dots \end{aligned}$$

のように無限級数となる。つぎに、 $(\Delta x)^4$ 程度の誤差を許して高度近似差分式を求めるには、式(3)の近似基本解として上記の $G^{(0)}(X, t) \sim G^{(4)}(X, t)$ の5個を

考え、差分方程式に

5個の未定係数をも

たせて図-1の差分

モデルに示す6点で

差分をとる。即ち、

$$\begin{aligned} G(i, k) &= P_{-1}^{-1}G(i-1, k-1) + P_{-1}^0G(i-1, k) \\ &+ P_{-1}^1G(i, k-1) + P_{-1}^2G(i+1, k-1) + P_{-1}^3G(i+1, k) \dots (5) \end{aligned}$$

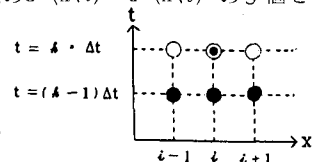


図-1 差分化モデル
●・・・既知点 ○・・・未知点
◎・・・求めようとする点

$$\begin{bmatrix} A_0 & 1 & A_0 & A_0 & 1 & P_{-1}^{-1} & 1 \\ A_1+B_1 & -\alpha h & A_1 & A_1-B_1 & \alpha h & P_{-1}^0 & 0 \\ A_2+B_2+D_2 & \alpha^2 h^2 & A_2 & A_2+B_2-D_2 & \alpha^2 h^2 & P_{-1}^1 & 0 \\ A_3+B_3+D_3 & -\alpha^3 h^3 & A_3 & A_3-B_3+D_3 & \alpha^3 h^3 & P_{-1}^2 & 0 \\ A_4+B_4+D_4 & \alpha^4 h^4 & A_4 & A_4-B_4-D_4 & \alpha^4 h^4 & P_{-1}^3 & 0 \end{bmatrix} \dots (6)$$

となる。 P_{-1}^{-1} 、 P_{-1}^0 、 P_{-1}^1 、 P_{-1}^2 、 P_{-1}^3 を決定するには式

(5)が式(4)を満足するように作成した上の連立方程式、式(6)を解けばよい。但し、式(6)中の $A_0 \sim D_4$ は次に示すとおりである。

$$\begin{aligned} A_0 &= 1 - (M+N)h^2 + \frac{1}{2}M(M+N)h^4 - \frac{1}{6}M^2(M+N)h^6 \\ A_1 &= Vh^2 - Nh^2 - MVNh^4 + \frac{1}{2}MNh^4 + \frac{1}{2}M^2Vh^6 \\ &\quad - \frac{1}{6}M^2Nh^6 \\ B_1 &= -\alpha h + Mah^3 - \frac{1}{2}M^2ah^5 + \frac{1}{6}M^3ah^7 \\ A_2 &= -2Kh^2 - Nh^2 + V^2h^4 + 2KMh^4 + \frac{1}{2}MNh^4 \\ &\quad - V^2Mh^6 - M^2Kh^6 - \frac{1}{6}M^2Nh^6 \\ B_2 &= \alpha^2 h^2 - Ma^2h^4 + \frac{1}{2}M^2a^2h^6 - \frac{1}{6}M^3a^2h^8 \\ D_2 &= -2Vah^3 + 2MVah^5 - M^2Vah^7 \\ A_3 &= -Nh^2 - 6KVh^4 + \frac{1}{2}MNh^4 + V^3h^6 + 6KVMh^6 \\ &\quad - \frac{1}{6}M^2Nh^6 \\ B_3 &= -\alpha^3 h^3 + 6Kah^3 + Ma^3h^5 - \frac{1}{2}M^2a^3h^7 \\ &\quad - 3V^2ah^5 - 6KMah^5 + \frac{1}{6}M^3a^3h^9 \\ &\quad + 3V^2Mah^7 + 3KM^2ah^7 \\ D_3 &= 3V\alpha^2 h^4 - 3VM\alpha^2 h^6 + \frac{3}{2}VM^2\alpha^2 h^8 \\ A_4 &= -Nh^2 + 12K^2h^4 + \frac{1}{2}MNh^4 - 12KV^2h^6 \\ &\quad - 12K^2Mh^6 - \frac{1}{6}M^2Nh^6 \\ B_4 &= \alpha^4 h^4 - Ma^4h^6 - 12K\alpha^2 h^4 + \frac{1}{2}M^2\alpha^4 h^8 \\ &\quad + 6V^2\alpha^2 h^6 + 12KM\alpha^2 h^6 - \frac{1}{6}M^3\alpha^4 h^{10} \\ &\quad - 6V^2M\alpha^2 h^8 - 6KM^2\alpha^2 h^8 \\ D_4 &= -4V\alpha^3 h^5 + 4VM\alpha^3 h^7 + 24KVah^5 \\ &\quad - 2VM^2\alpha^3 h^9 - 24KVMah^7 - 4V^3\alpha h^7 \end{aligned} \quad (7)$$

3・厳密解および他の差分解との比較

(1)厳密解 流速および拡散係数一定で沈殿・減

衰などの非保存項がない場合に、x方向のみの/次

元で考えれば式(3)は $\frac{\partial C}{\partial t} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \dots (8)$

となる。ここで、

$X=x-Ut$ とおくと上式は $\frac{\partial C}{\partial t} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ となり、初期条件、 $C(X, t=0) = \text{EXP}(\frac{X}{\sqrt{K}})$ 、境界条件、 $C(X=0, t) = \text{EXP}(t)$ 、 $C(X=\infty, t)=0$ を満足する式(8)の解の一つは $C = \text{EXP}(\frac{X}{\sqrt{K}} + t)$ 即ち、 $C = \text{EXP}(\frac{X}{\sqrt{K}} + (1 + \frac{U}{\sqrt{K}})t)$ (9) となる。

(2) 従来の差分式による解法 従来の差分式は、

$$\frac{G_i^{A+1} - G_i^A}{\Delta t} = \frac{U_i}{\Delta x} \{ (1-r)G_{i-1}^{A+0} - (1-2r)G_i^{A+0} - rG_{i+1}^{A+0} \} + \frac{K_{X,i}}{(\Delta x)^2} (G_{i-1}^{A+0} - 2G_i^{A+0} + G_{i+1}^{A+0}) \dots (10)$$

ここで
陽形式では $\theta=0$; 後方差分では $r=0$
陰形式では $\theta=1$; 中央差分では $r=1/2$
半陰形式では $\theta=1/2$; 前方差分では $r=1$ 2) で示される。

(2) - (i) D. A. Bellの補正(DN) 式(10)において、未知量である $(G_{i+1}^A) \Delta t$ 時刻の濃度を算定する場合に、同式の第1項で、数値拡散誤差があらわれる。これは、 $U_i \Delta t$ を Δx に等しく決定することが困難なためにおこるものである。これを補正するには、式(10)の第2項は $(K_{X,i} - D_{NX,i}) \frac{G_{i-1}^{A+1} - 2G_i^{A+1} + G_{i+1}^{A+1}}{(\Delta x)^2} \dots (11)$

となる。すなわち数値拡散係数 $D_{NX,i}$ は

$$D_{NX,i} = \begin{cases} \frac{U_i \cdot \Delta x}{2} (1 - \frac{U_i \cdot \Delta t}{\Delta x}) & \text{後方差分} \\ -\frac{1}{2} U_i^2 \cdot \Delta t & \text{中央差分} \\ -\frac{U_i \cdot \Delta x}{2} (1 - \frac{U_i \cdot \Delta t}{\Delta x}) & \text{前方差分} \end{cases} \quad (12)$$

(2) - (ii) 数値移流係数による補正(CN) 数値移流による補正は、次式を用いた。

$$\left. \begin{aligned} G_i^{A+1} &= G_i^A - \left(\frac{U_i \cdot \Delta t}{\Delta x} - C_{NX,i} \right) (G_i^A - G_{i-1}^A) + \frac{\Delta t \cdot K_{X,i}}{(\Delta x)^2} (G_{i-1}^{A+1} - 2G_i^{A+1} + G_{i+1}^{A+1}) \\ C_{NX,i} &= \begin{cases} \frac{U_i \cdot \Delta t}{2\Delta x} (1 - \frac{U_i \cdot \Delta t}{\Delta x}) & U_i \geq 0 \\ \frac{U_i \cdot \Delta t}{2\Delta x} (1 + \frac{U_i \cdot \Delta t}{\Delta x}) & U_i < 0 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

以上のようにして算出された値を表にしたものが表-1である。表-1によれば、高度近似差分式の解は、最も誤差の大きい場合でも、 $x=20\Delta x$ 、 $t=40\Delta t$ において厳密解との相対誤差は 5.0×10^{-4} であり、これは $0(\Delta x^4) = 1.6 \times 10^{-3}$ を十分満足している。また、DNの補正、補正なし、およびCNによる補正に比べると非常に高い精度を得た。また、DNの補正ならびに補正なしによる誤差は約17%である。また、今回の $U\Delta t/\Delta x = 0.05$ 、 $K\Delta t/\Delta x^2 = 0.0625$ の場合には、数値移流係数による補正では、補正過多となり精度を落

T	X	DNによる補正	誤差	補正なし	誤差	厳密解
5 Δt	5 Δx	0.356958E+00	0.02	0.357222E+00	0.02	0.349938E+00
	20 Δx	0.884872E-03	0.02	0.885531E-03	0.02	0.867408E-03
20 Δt	5 Δx	0.585625E+00	0.06	0.586946E+00	0.06	0.548812E+00
	20 Δx	0.147328E-02	0.08	0.147767E-02	0.08	0.136037E-02
40 Δt	5 Δx	0.109328E+01	0.09	0.109648E+01	0.09	0.100000E+01
	20 Δx	0.290730E-02	0.17	0.292467E-02	0.17	0.247875E-02

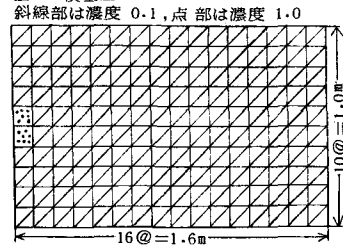
T	X	高度近似差分式	誤差	CNによる補正	誤差
5 Δt	5 Δx	0.349917E+00	6.0E-05	0.337898E+00	0.03
	20 Δx	0.867353E-03	6.3E-05	0.837611E-03	0.03
20 Δt	5 Δx	0.548718E+00	1.7E-04	0.480190E+00	0.12
	20 Δx	0.136003E-02	2.4E-04	0.120313E-02	0.11
40 Δt	5 Δx	0.999781E+00	2.1E-04	0.782056E+00	0.21
	20 Δx	0.247750E-02	5.0E-04	0.202643E-02	0.18

表-1

4・安定な差分分解のための条件 3節の計算例で高度近似差分式の精度が $(\Delta x)^4$ を十分満足することを知った。ここでは、差分式の安定条件、収束条件を調べる。これらは、理論的に求めることが困難なので図-2に示す、2次元拡散水理模型の応用において検討する。簡単のため流速 U, V 、拡散係数 K を模型内で一様にし、 $U, V, K, \Delta x (= \phi h)$ 、 $\Delta t (= h^2)$ をいろいろな組合わせで変化させ、半無限計算水域の初期値を0.1、一端の濃度負荷点の濃度を1.0と与えた試算により、0.1未満濃度が発生しない条件、および差分式(5)の $P_{i-1}^1 - P_i^1$ の係数に負が生じない条件を搜した。その結果は、

$$U\Delta t \leq \Delta x, (\Delta x)^2/6 \leq K\Delta t \leq (\Delta x)^2 \dots (14)$$

である。式(14)の安定条件のうち $(\Delta x)^2/6 \leq K\Delta t$ は現在よく用いられている他の差分法においては、必要とされない。この理由は、移流項の差分に使用する式(10)の右辺第1項の差分式が、誤差は大きい、この誤差の中に強い安定性をもつからであろう。



5・むすび 高度差分式による移流分散方程式の解は、他の差分では得られない、 $(\Delta x)^4$ を満足する精度の高い結果が得られた。また、差分分解の安定条件に $(\Delta x)^2/6 \leq K\Delta t \leq (\Delta x)^2$ が必要となる。

参考文献

- 渡部信夫：線型微分方程式に近似な階差方程式を得る一つの方法、九州大学工学彙報、第2/巻第4号
- 加納・崎山：湾域における汚濁物質の解析について、土木学会第4回環境シンポジウム講演集 / 976