

(8) 波数伝達特性からみた移流拡散方程式の数値解の誤差解析

ERROR ANALYSIS OF NUMERICAL SOLUTION FOR
THE CONVECTIVE DIFFUSION EQUATION FROM A
VIEWPOINT OF WAVE NUMBER TRANSFER PROPERTY

古 市 徹*, 平 岡 正 勝*, 田 中 宏 明**
Tohru FURUICHI*, Masakatsu HIRAOKA*, Hiroaki TANAKA**

ABSTRACT: In environmental pollution problems, the contamination is predicted by the convective diffusion equation (CDE) as a mathematical model. Nowadays many discretized schemes are proposed for solving the CDE exactly. Then the stability analysis as a necessary condition is firstly implemented to formulate the selection criteria for their schemes. Even though the schemes are stable, there are probably some cases which produce innegligible numerical errors. Therefore the error analysis of numerical solution is necessary for the next step of the stability analysis. The purpose of this studies is to apply the system control theory to the error analysis and then to analyze the wave number transfer properties of the several schemes by taking the influence of the initial value into consideration. In this paper the one-dimensional unsteady CDE is employed for the simplicity of discussion and a new error estimation index is proposed. This index is related to both the amplification factor and the initial value, and its availability is investigated by a simple example.

KEYWORDS: Error Analysis, Convective Diffusion Equation, Error Estimation Index, Wave Number, System Control Theory.

1. ま え が き

拡散・伝播プロセスが、移流拡散方程式を数学モデルとして用いることにより解析できるような現象は、環境汚染問題等においてもよく見かけられる。そしてこのような、環境に放出された汚染物質の挙動を精確に計算するという立場から環境汚染の状況を的確に予測し把握することは、ひいては環境を保全し管理することにつながり重要と考えられる。

このとき、移流拡散方程式が正確に解かれることが前提であるが、解析解を求めることが困難なため、一般には数値計算によって近似解を求めることになる。したがって数値計算の信頼性が問題となる。すなわち数値解の収束性、安定性等を考慮して、数値計算をすることによって生じる誤差の評価が議論されなければならない。しかし正確には、誤差は解析解が求まらなければ評価できないので、離散スキームの解が解析解に収束するかをLaxの同等定理から、安定性の議論に置きかえて考えるのが一般的な方法である。離散スキームの安定性、すなわち精確な計算ができるための必要条件についてはすでに多くの研究があり、著者らも安定領域をグラフ化する方法を提示した。¹⁾したがって、本研究は先般の研究¹⁾を踏まえて、たとえ安定なスキームであっても、実際計算してみると無視しえないような誤差が生じるかどうかを検討するものである。具体的には安定なスキームについて、数値計算による誤差がどのように生じたどの程度になるかを、初期値を構成する各波数が、種々のスキームによってどのようにゆがんで伝えられるかという、伝達特性に注目することにより解析しようとするものである。すなわち、議論の明確さのため次元の非定常移流拡散方程式について、その解析解と種々の離散スキームの増幅係数をそれぞれ計算し、波数伝達特性を初期値の影響を考慮して比較することにより、誤差解

*京都大学 Univ. of Kyoto, **建設省 Ministry of Construction

析を試みようとするものである。また、初期値の種類により波数成分の構成が異なること、および局所ペクレ数 $Pe (= v\Delta x/D$, ここに、 v ; 流速、 D ; 拡散係数、 Δx ; 空間メッシュサイズ) の違いによって各波数の伝達特性が異なることから、初期値を考慮した、増幅係数に関する誤差評価の指標を新しく提案し、この指標の有効性についても検討する。

2. 離散スキームとフーリエ変換

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。

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

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、以下では v 、 D は一定であるとする)。

さて、式(1)を有限要素法(FEM)および有限差分法(FDM)によって離散化した代数方程式系を、離散スキームということにする。時間についてFEM、空間についてFDMを用いることにより、次のような一般的な表示による離散スキームが既に導かれている。¹⁾

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

ここに、 U_j^n は、 $c(x, t)$ の $x = j\Delta x$ 、 $t = n\Delta t$ (Δt は時間メッシュサイズ) における近似解であり、 $F = v\Delta t/\Delta x$ はクーラン数、 $G = D\Delta t/\Delta x^2$ は拡散数といわれるものである。またパラメーター B, R は、時間の離散化において次のような意味をもっている。

$$B, R = 0 ; \text{explicit} \quad B, R = \frac{1}{2} ; \text{Crank-Nicholson} \quad B, R = 1 ; \text{implicit} \quad \dots\dots\dots (3)$$

さらに、パラメーター d は移流項の空間離散化に関係し、従来の差分スキームと次のような対応関係にある。

$$\left. \begin{array}{lll} d = 0 ; \text{中心差分} & d = 1 ; \text{Friedrichs-Lax} & d = F ; \text{風上差分} \\ d = F^2 ; \text{Lax-Wendroff} & & \end{array} \right\} \quad \dots\dots\dots (4)$$

式(2)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。

式(2)は、パラメーター d の取り方によってたかだか Δx^3 のオーダーの打ち切り誤差であるが、 Δx^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。²⁾ 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(2)と同様にすると次のように表わされる。

$$U_j^{n+1} - U_j^n = \left\{ \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j-2}^{n+1} + \left(\frac{5F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_{j-1}^{n+1} + \left(-\frac{3F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_j^{n+1} + \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j+1}^{n+1} \right\} B \\ + \left\{ \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j-2}^n + \left(\frac{5F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_{j-1}^n + \left(-\frac{3F}{4} - \frac{F^2}{4} \right) U_j^n + \left(\frac{F^2}{4} - \frac{F}{4} \right) U_{j+1}^n \right\} (1-B) \quad \dots\dots\dots (5) \\ + G \{ (U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}) R + (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n) (1-R) \}$$

最後に、空間の離散化を FEM によって行うスキームについて述べる。一次の区分多項式 (ピラミッド関数) を形状関数 $N_j(x)$ に用い、Fig. 1 のような重み関数 $\bar{N}_j(x)$ によって式(1)を Galerkin 法で定式化すると次式が得られる。

$$\frac{1}{6} \left(1 - \frac{3}{2} \theta \right) \frac{dU_{j+1}}{dt} + \frac{4}{6} \frac{dU_j}{dt} + \frac{1}{6} \left(1 + \frac{3}{2} \theta \right) \frac{dU_{j-1}}{dt} = \frac{v}{2\Delta x} \{ (\theta-1)U_{j+1} - 2\theta U_j + (\theta+1)U_{j-1} \} + D\delta_j^2 U_j \\ = -v\delta_j U_j + (D+\theta v\Delta x)\delta_j^2 U_j \quad \dots\dots\dots (6)$$

ここに、 δ_j, δ_j^2 はそれぞれ一次と二次の中心差分の演算子を表わす。また、重み関数 $W_j(x)$ は次のようにとっている。

$$\left. \begin{aligned} W_j(x) &= N_j(x) \pm \theta M(x) \\ M(x) &= -3x(x-\Delta x)/\Delta x^2 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7)$$

式(6)からわかるように、FEMによる空間離散化は移流項を中心差分にとることに対応し、これは一般にスキームが不安定となるため、⁸⁾式(7)のように重み関数をとる風上差分に対応するUPW-FEMとすることが有効とされている⁴⁾。またこれは、式(6)の最後の項からわかるように、擬似拡散項を加える手法であるとも考えられる。 $\theta = 0$ のときは、もちろん普通のFEMに一致する。式(6)についても、式(2),(5)と同様にしてパラメーター B, R によって時間について離散化できる。

以上導かれた離散スキームは、式(1)を直接離散化するという意味で単一ステップスキーム(USスキーム)という。これに対して、式(1)を等価な移流式と拡散式の系に分割し、各USスキームに対応して同様な離散化の方法により分ステップスキーム(FSスキーム)を導入することができる¹⁾。

次に、式(1)をフーリエ変換することによって、解析解の増幅係数を求める。⁵⁾式(1)は空間座標 x に関して、次のようにフーリエ変換される。

$$\frac{d\hat{c}(k, t)}{dt} + v \cdot i k \hat{c}(k, t) = -D \cdot k^2 \hat{c}(k, t) \dots\dots\dots (8)$$

ただし、 $\hat{c}(k, t)$ は $c(x, t)$ をフーリエ変換したものであり、 k は波数である。 t に関する常微分方程式である式(8)の解の、波数領域での Δt ごとの伝達特性は、次のような式(8)から計算される増幅係数 z_a によって表現される。

$$z_a = \exp[-D k^2 \Delta t] \cdot \exp[-i v k \Delta t] \dots\dots\dots (9)$$

一般に増幅係数を次のようにかくものとする。

$$z = |z| e^{i\phi} \dots\dots\dots (10)$$

解析解に対する増幅係数 z_a の $|z_a|$ と ϕ_a は、それぞれ式(9)から次のようになる。

$$|z|_a = \exp[-D k^2 \Delta t] \quad , \quad \phi_a = -v k \Delta t \dots\dots\dots (11)$$

すなわち、濃度分布の波数 k の成分は式(11)のように、振幅が $|z|_a$ 、位相が ϕ_a で伝達されることになる。式(11)からわかるように、各波数 k ごとに振幅、位相が異なり波数の伝達特性が異なる。

先に述べた各離散スキーム(の厳密解)についても、離散スキームをフーリエ変換することにより増幅係数 z を求めることができる。実際の計算においては、式(12)を各離散スキームに代入し、増幅係数 z を求めることになる。

$$U_j^n = z^n \exp[i k(j \Delta x)] \dots\dots\dots (12)$$

そして、求めた増幅係数 z の振幅 $|z|$ が次の条件を満たすとき、各離散スキームは安定であるという。

$$|z| \leq 1 \dots\dots\dots (13)$$

このような安定性解析の方法をNeumannの方法という⁶⁾。一例として、式(2)で表現できる離散スキームの増幅係数 z を計算すると次のように求められる。

$$\begin{aligned} z &= P/Q \\ P &= \{1 - (1-B)d - 2(1-R)G\} + \{(1-B)d + 2(1-R)G\} \cos k \Delta x - i(1-B)F \sin k \Delta x \\ Q &= (1+Bd + 2RG) - (Bd + 2RG) \cos k \Delta x + iBF \sin k \Delta x \end{aligned} \dots\dots\dots (14)$$

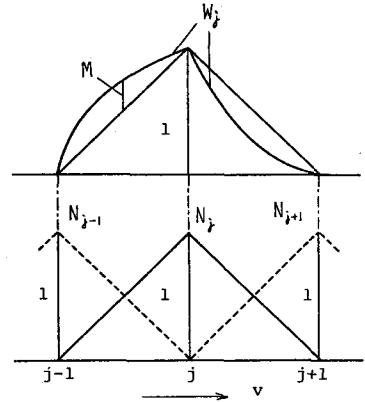


Fig. 1 Shape function and weight function for UPW-FEM

3. 波数伝達特性と誤差指標

3.1 波数伝達特性について

移流拡散方程式を数値計算するとき誤差が生じるのは、各離散スキームの波数伝達特性が、解析解の波数伝達特性と異なったパターンをもつためと考えられる。したがって各波数ごとに増幅係数 α を計算して、振幅および位相について解析解と各離散スキームとを比較することにより、誤差の特性が把握できることになる。

増幅係数 α は一般にクーラン数 F 、拡散数 G 、および局所ペクレ数 P_e の関数となる。しかし F 、 G 、および P_e の間には $P_e = F/G$ なる関係がある。例えば、解析解については式(11)をかきかえれば、次のように F および P_e の関数となることわかる。

$$|\alpha|_a = \exp \left[-\frac{F}{P_e} \left(\pi \frac{k}{k_m} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots (15)$$

$$\phi_a = -F \left(\pi \frac{k}{k_m} \right) \quad \dots\dots\dots (16)$$

ただし、 k_m は、 $k_m = \pi/\Delta x$ であり、 $k \leq k_m$ の関係を満す最大波数である。なぜなら、離散スキームにおいては $2\Delta x$ 以下の波長は識別できないし、打ち切り誤差の範囲に入ると考えられるので、最大波数 k_m 以下の派数について考慮すればよいからである。各離散スキームの誤差を評価するための前提としては、スキームが安定であることが必要条件である。今 $P_e = 1, 10, 100, \infty$ の範囲で考えるとして、このとき各離散スキームが安定となる F の範囲を解析的に求めることは困難なので、¹⁾ほぼ各スキームが安定となる $F = 0.5$ を本研究においては用いることにする。式(15)から解析解の振幅を計算し、 P_e の違いによる振幅 $|\alpha|_a$ と波数との関係を示したものがFig. 2である。 $P_e = \infty$ ($D=0$ に対応)のときは全波数で $|\alpha|_a = 1$ となり、移流のみの影響を当然示すこととなる。また P_e が小さくなるに従って、高い波数の振幅が減衰しやすいことがわかる。解析解の位相 ϕ_a は P_e に関係せず、波数が高くなるに従って遅れてきて、 $k = k_m$ では $k=0$ のときに比べて $\pi/2$ 遅れることになる。

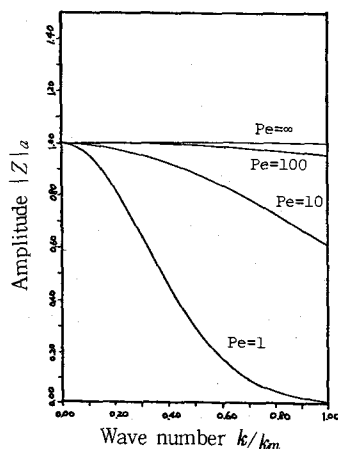


Fig. 2 Change of amplitude $|Z|_a$ by Peclet number Pe (Analytical Solution)

次に、各離散スキームが安定となる $B = R = 1$ (移流項、拡散項ともに implicit にする) のときの各スキームを例にとって、その振幅 $|\alpha|$ と位相 ϕ について述べる。解析解においては、位相は F だけの関数であるが、式(14)からもわかるように離散スキームの位相においては一般に F と P_e の関数となる。Fig. 3に各離散スキームの振幅 $|\alpha|$ と波数との関係を実線で示している。図中に比較のため、解析解の振幅 $|\alpha|_a$ を記入している。(Fig. 2と対応している) $|\alpha|$ と $|\alpha|_a$ との差が、数値的減衰による誤差として表われてくる。Fig. 3より次のようなことがわかる。

- ① 各スキームとも高い波数の方が、 $|\alpha|$ と $|\alpha|_a$ との差が大きくなる。(ただし中心差分、FEM ($\theta = 0$ と2次)で $P_e = 100, \infty$ のときは除く)
- ② P_e が大きい程、 $|\alpha|$ と $|\alpha|_a$ との差も大きくなる。Fig. 3 (a)の中心差分 (FEMは移流項を中心差分したことに対応するからFig. 3 (f),(h)についても同様)は傾向が異なり、 P_e の違いが $|\alpha|$ と $|\alpha|_a$ との差に影響を与えない。このことは移流項が拡散項より卓越する(P_e が大きい)とき、風上差分の方が中心差分より誤差が生じにくい³⁾という一般に認められていることに反することになる。しかし $B = 0$ (移流項をexplicit にする)、 $R = 1$ のときの振幅 $|\alpha|$ を示すFig. 4を見ると、中心差分の方は P_e が大きくなると $|\alpha| > 1$ と不安定になり風上差分の方が優れていることがわかる。すなわち、中心差分の傾向が異なる理由として、 $B = 1$ と移流項をimplicit にすることにより、中心差分でも他のスキームより優れたもののできるからと考えられる。
- ③ P_e が100以上になると、ほぼ $P_e = \infty$ の移流項だけのスキームと同じ特性を示す。

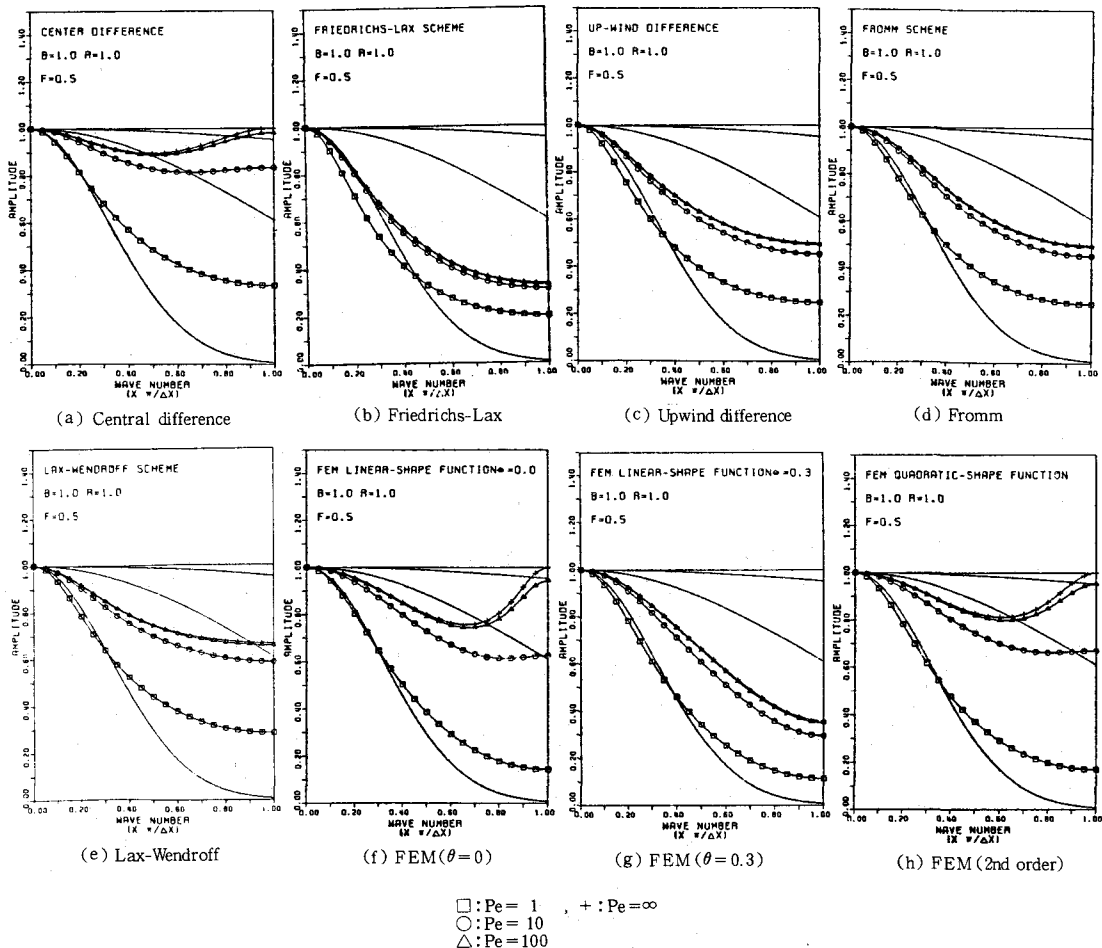


Fig. 3 Amplitude $|Z|$ of each scheme ($B=R=1$)

Fig. 5 に各離散スキームの基準化した位相のずれ $(\phi - \phi_a)/\phi_a$ と波数との関係を示しており、次のようなことがわかる。

- ① 各スキームとも解析解の位相 ϕ_a よりも遅れる傾向にある。
- ② 波数が高い程、各スキームの位相の遅れが大きくなる。
- ③ P_e が小さい程、解析解の位相 ϕ_a よりも大きく遅れ、数値的分散が起りやすいことがわかる。一般には P_e が大きい (位相のずれを生じさせやすい移流項が卓越する) 方が ϕ_a より大きく遅れるが、この傾向は Fig. 6 (a) の $B=R=0$ のときの中心差分に見られる。すなわち、 $B=R=1$ としたことが、 P_e の違いによる位相の遅れに影響を与えている。そのもうひと

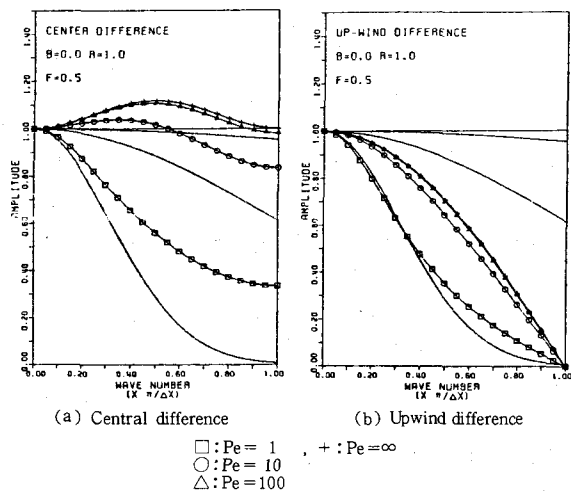


Fig. 4 Amplitude $|Z|$ of central difference and upwind difference ($B=0, R=1$)

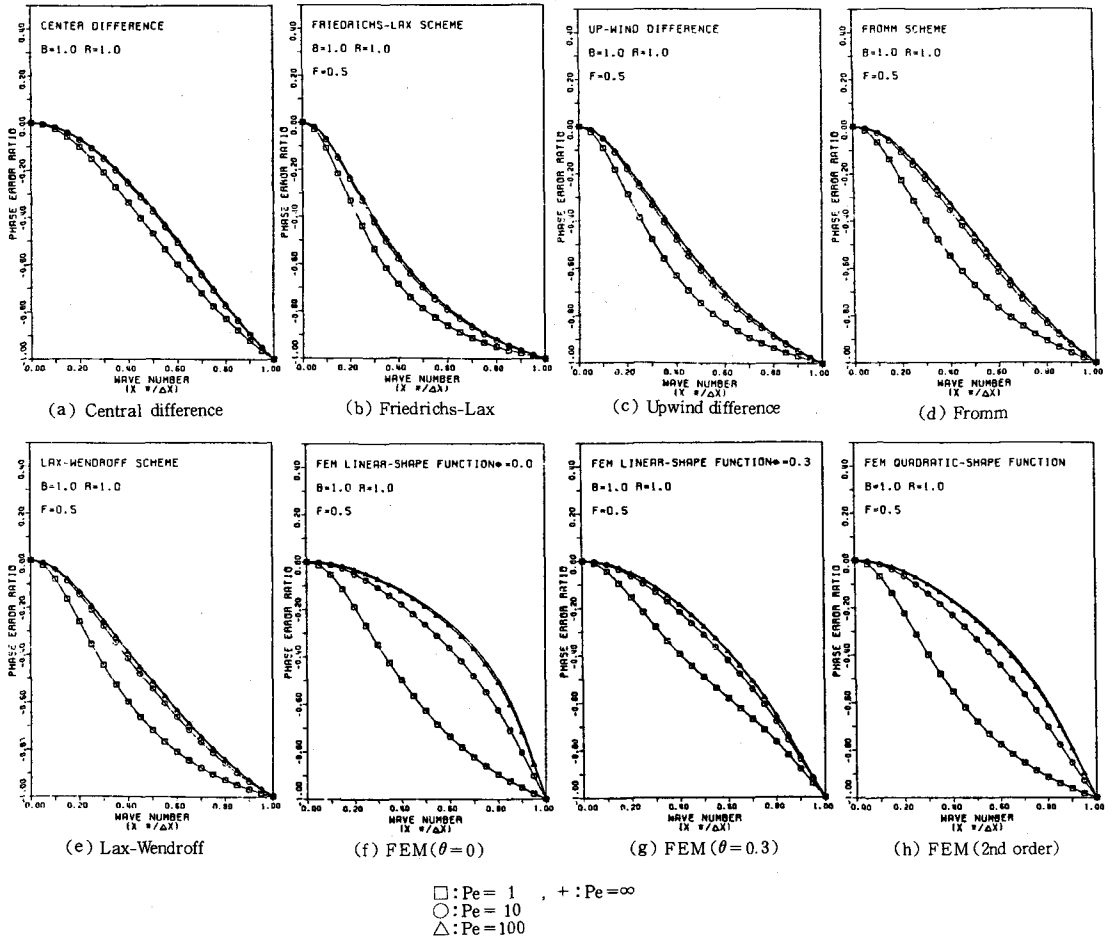


Fig. 5 Phase error $(\phi - \phi_a)/\phi_a$ of each scheme ($B=R=1$)

つの例として、 $B=0$ 、 $R=1$ のときのFrommのスキームをFig. 6 (b)に示している。Frommのスキームは位相のずれをなくすように工夫されたスキームであるが、Fig. 6 (b)はこの傾向を示している。

最後に、分ステップスキーム (FSスキーム) について述べる。FSスキームは、USスキームに比べて安定性を向上させるが、¹⁾ 振幅1の傾向はUSスキームと同様である。位相 ϕ に関しては、 P_e の違いによる影響をなくす傾向にあり、特に $B=R=0$ のときの風上差分は ϕ_a との位相のずれがなくなることがFig. 7よりわかる。

3.2 初期値を考慮した誤差指標

前節で各離散スキームにおいて波数伝達特性に一番影響を与える因子は、高い波数成分であることが

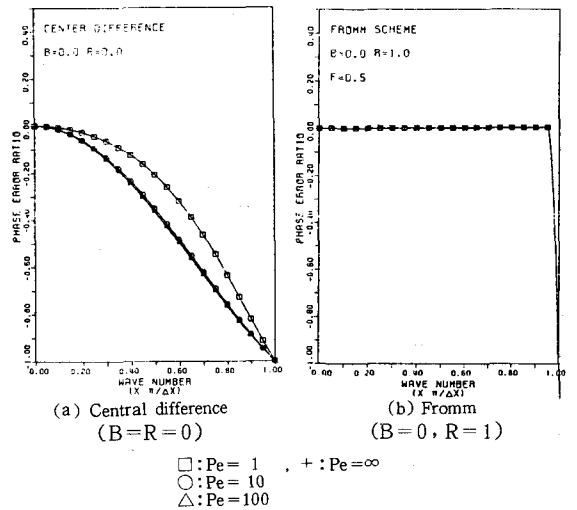


Fig. 6 Phase error $(\phi - \phi_a)/\phi_a$

わかった。すなわち、波数が高い程、振幅 $|z|$ と $|z|_a$ との差が大きく、かつ位相 ϕ の ϕ_a からのずれも大きかった。したがって数値計算によって誤差が生じるのは初期値の高波数な成分が、計算時間のステップが進むに従ってゆがみそれが蓄積されるからと考えられる。次の段階の問題として、各離散スキームの誤差の評価をするために、前節の視覚的な図から一歩進めて定量的な方法が必要となってくる。

さて、偏微分方程式である移流拡散方程式をシステムと考え、初期値を入力とし、ある時刻での解析解を出力とするという見方をしたら、数値計算は、離散スキームをシステムと考え、離散化された初期値を入力とし、出力としての数値解を求めることになる。そしてこれを空間領域 x ではなく波数領域 k について、波数伝達特性（増幅係数）を各離散スキームについて調べているのが本研究の立場である。したがって、誤差評価も波数領域で行うのが自然であり、前述のようなシステム制御理論の観点から、解析解と離散スキームとの増幅係数の差異を誤差の評価のための指標として考えることにする。このとき、システムの波数伝達特性にのみ注目した誤差指標の研究はいくつかみられる⁷⁾。しかし、入力としての初期値の種類に応じて、初期値を波数分解したときの各波数のフーリエ係数は一般に異なる（このとき、フーリエ係数を全波数で一定として扱うことは、 δ 関数的初期値を想定することになる）。したがって解くべき問題の初期値ごとに各波数の比重が異なり、その各波数ごとに伝達特性が異なることを考えると、既存の指標では δ 関数的初期値を対象としており不適当であるといえる。また実際に、誤差として評価したいのは初期値を与えたときの解析解と数値解との差であるので指標は初期値を考慮した波数伝達特性を考えるのがより現実的といえる。

以上の理由から、初期値と波数伝達特性を同時に考慮した次のような指標を新しく提案する。

$$E_A = \sqrt{\sum_k^{N-1} w_k \{ |z(k)| - |z(k)|_a \}^2} \quad \dots\dots\dots (17)$$

$$E_P = \sqrt{\sum_k^{N-1} w_k \{ \phi(k)/\phi_a(k) - 1 \}^2} \quad \dots\dots\dots (18)$$

ここに、 w_k は初期値を考慮したことによるウェイトであり、次のように定義する。

$$w_k = \frac{|a_k|}{\sum_i^{N-1} |a_i|} \quad \dots\dots\dots (19)$$

ただし、 a_i は初期値を離散型フーリエ級数に展開したときのフーリエ係数であり、 N は格子点の数である。Fig. 8 に初期値を $A \exp\{-\alpha x^2\}$ のガウス分布形として、パラメータ α をいくつか変化させたときの波数分布を示している。指標 E_A は振幅面での誤差を評価し、指標 E_P は位相面での誤差を評価すると考えられる。これらの指標を各離散スキームに適用したものが Fig. 9 である。 $\alpha = 200/\pi^2$ 、 $P_e = 100$ 、 $B = R = 1$ として、横軸にクーラン数 F をとって E_A を太い実線、 E_P を細い実線で示している。 E_A 、 E_P の誤差評価の観点からいうと、各スキームとも F が小さい方が誤差が小さくなるのがわかる。また F によって、振幅による誤差の方が位相による誤差よりも大きく変化することがわかる。

次に、 P_e による違いをみるために Fig. 10 に、Fig. 9 の Lax-Wendroff のスキームで P_e のみ、0.1、1、10 と変えたものを示している。 P_e を大きくすると、位相による誤差は小さくなるが、振幅による誤差は F が大きい場合に逆に大きくなるのがわかる。

最後に、初期値による違いをみるために Fig. 11 に、Fig. 9 の Lax-Wendroff のスキームで α のみ $40/\pi^2$ と変えたものを示

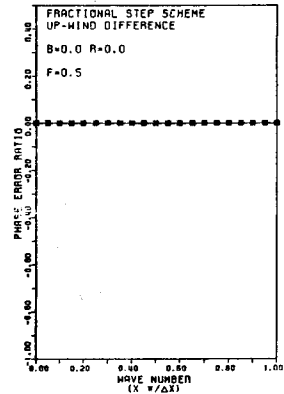


Fig. 7 Phase error $(\phi - \phi_a)/\phi_a$ (Upwind difference, $B=R=0$)

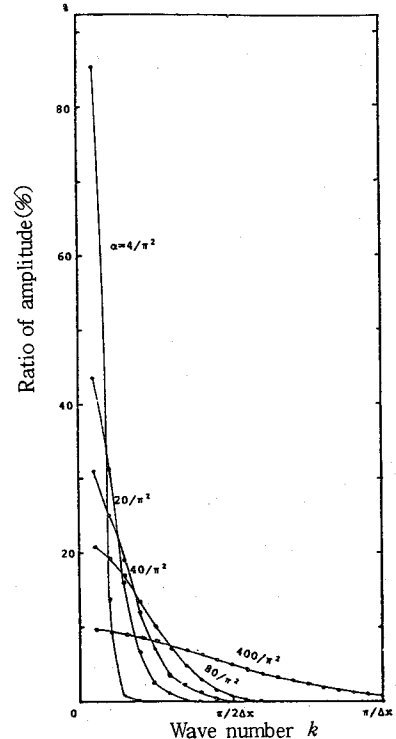
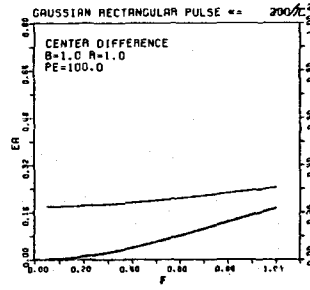
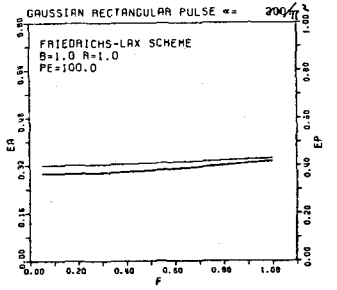


Fig. 8 Wave number distribution of initial value (Gaussian distribution)

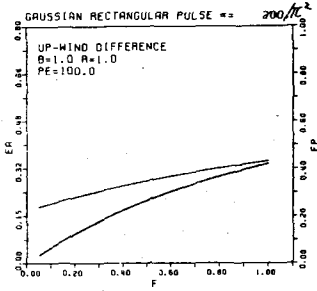
している。初期値に含まれる高波数の成分が減る (Fig. 7 を参照) 方が、 E_A および E_P がともに小さくなる。これは、各離散スキームの波数伝達特性のところで述べたように、高波数成分での解析解と数値解との波数伝達特性の大きな差異が、高波数成分の減少によりあまり目だたなくなったためと考えられる。このことより、初期値に高波数成分が少なくなるように数値モデル化することにより、誤差をコントロールできる可能性があると考えられる。



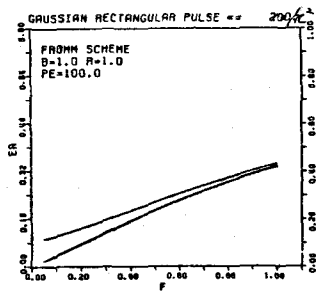
(a) Central difference



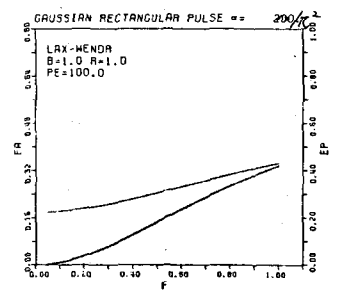
(b) Friedrichs-Lax



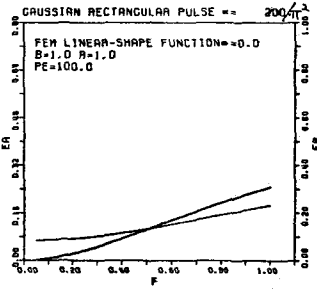
(c) Upwind difference



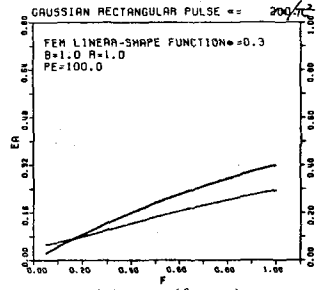
(d) Fromm



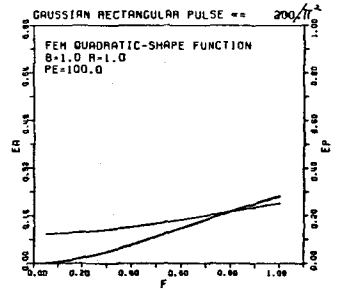
(e) Lax-Wendroff



(f) FEM($\theta=0$)

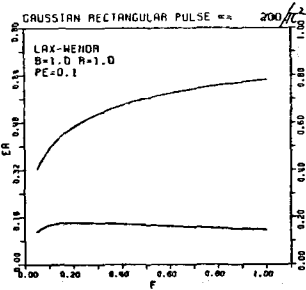


(g) FEM($\theta=0.3$)

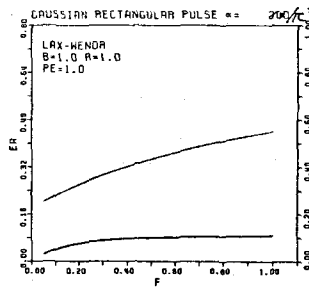


(h) FEM(2nd order)

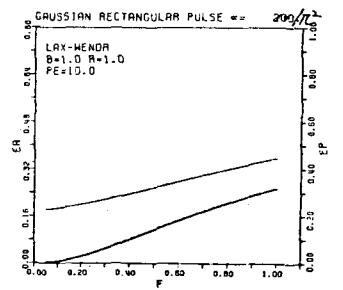
Fig. 9 E_A and E_P of each scheme ($\alpha=200/\pi^2$, $Pe=100$, $B=R=1$)



(a) $Pe=0.1$



(b) $Pe=1$



(c) $Pe=10$

Fig. 10 E_A and E_P with different Pe (Lax-Wendroff, $\alpha=200/\pi^2$)

4. 計算例による検討

誤差指標 E_A , E_P がどれだけ実際の誤差を反映しているかを、簡単な例によって検討する。

式(1)の移流拡散方程式を、次のような初期条件、境界条件で解くことを考える。

$$\left. \begin{array}{l} \text{I.C.} \quad C(x, 0) = f(x) \\ \text{B.C.} \quad C(\infty, t) = C(-\infty, t) = 0 \end{array} \right\} \quad \dots\dots\dots (20)$$

このとき解析解は次の形となる。

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-(x-\xi)^2/4Dt} d\xi \quad \dots\dots\dots (21)$$

$f(x)$ が次のような矩形パルスとする。

$$f(x) = \begin{cases} 1 & |x| \leq \Delta x/2 \\ 0 & |x| > \Delta x/2 \end{cases} \quad \dots\dots\dots (22)$$

そうすると、式(21)は次のように計算できる。

$$C(x, t) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta x/2 - (x-vt)}{2\sqrt{Dt}} \right\} + \operatorname{erf} \left\{ \frac{\Delta x/2 + (x-vt)}{2\sqrt{Dt}} \right\} \right] \quad \dots\dots (23)$$

今、初期値 $f(x)$ をガウス分布としたときの、解析解と数値解とを比較する。数値計算では $f(x)$ を離散化しなければならないので、解析解の方も $f(x)$ を矩形パルスの和として表わし、 $f(x)$ の近似による誤差を除いて考えることにする。このとき解析解は、式(1)の線形性により式(23)を重ね合わせて求めることができる。一方、数値計算は無限領域ではできないので、20区間に分けた有限領域で行うものとする。数値計算の境界条件については、解析解の値を計算時間ステップごとに与えて、有限領域にしたことによる境界条件から生じる誤差が入らないようにしている。

誤差の指標として、各格子点上での解析解と数値解との差の2乗和を考え、次のようにとるものとする。

$$\epsilon^2 = \sum_i^{18} \left(\frac{C_i - C_{ai}}{C_{ai}} \right)^2 \quad \dots\dots\dots (24)$$

ここに、 C_i は数値解、 C_{ai} は解析解の格子点 i における値である。 $F = 0.5$, $P_e = 100$ の場合について、各離散スキームの10ステップ後の ϵ^2 の計算をした。 ϵ^2 と E_A , E_P との対応を、パラメーター B , R の組合わせに対して、風上差分と Lax-Wendroff のスキームについて示したのが Table 1 である。この表でみれば、風上差分は ϵ^2 と E_P が、Lax-Wendroff のスキームは ϵ^2 と E_A が、比較的良好に対応しているといえる。Fig. 12 に $B=R=1$ のときの風上、Lax-Wendroff, FEM ($\theta=0$ のとき) の各スキームについて、ガウス分布の広がりのパラメーター α の違いによる ϵ^2 と P_e の関係を示している。この図より次のようなことがわかる。

- ① 各スキームとも、 α が小さい (高波数成分が少ない) 程、 ϵ^2 は小さくなっている。これは先に述べた、 E_A , E_P と高波数成分との関係と同様な理由と考えられる。
- ② ϵ^2 は、 P_e が1付近で最小となり、1から隔たるに従って大きくなる。これも先に述べたように、 P_e が大きくなると $|z|$ と $|z|_0$ との差が大きくなる (E_A が大きくなる) ことに対応している。 P_e が1以下で ϵ^2 が大きくなるのは、スキームが不安定になるためと考えられる。

次に P_e が小さいと、高波数成分の振幅が大きく減衰するため、初期値の形に関

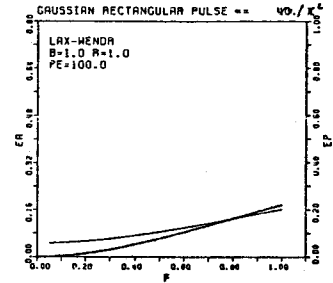
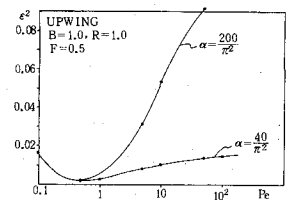


Fig. 11 E_A and E_P ($\alpha=40/\pi^2$)

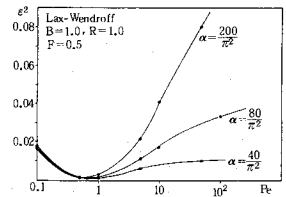
Table 1 Comparison of ϵ^2 with E_A and E_P (Upwind difference, Lax-Wendroff)

	B	R	E_A	E_P	ϵ^2
Upwind Difference	0.0	0.0	0.18290	0.08345	0.51056 E-01
	0.0	0.5	0.18300	0.08596	0.51042 E-01
	0.0	1.0	0.18307	0.00000	0.51036 E-01
	0.5	0.0	0.21686	0.20772	0.86011 E-01
	0.5	0.5	0.21604	0.20955	0.86067 E-01
	0.5	1.0	0.21522	0.21137	0.86126 E-01
	1.0	0.0	0.21258	0.34609	0.11108 E 00
	1.0	0.5	0.21190	0.34685	0.11114 E 00
Lax-Wendroff	1.0	1.0	0.21122	0.34760	0.11119 E 00
	0.0	0.0	0.02288	0.07319	0.34430 E-01
	0.0	0.5	0.02294	0.07447	0.35201 E-01
	0.0	1.0	0.02299	0.07574	0.35970 E-01
	0.5	0.0	0.06598	0.11015	0.62176 E-01
	0.5	0.5	0.06580	0.11126	0.62473 E-01
	0.5	1.0	0.06561	0.11236	0.62773 E-01
	1.0	0.0	0.09601	0.17387	0.92772 E-01
	1.0	0.5	0.09573	0.17464	0.93115 E-01
	1.0	1.0	0.09545	0.17541	0.93259 E-01

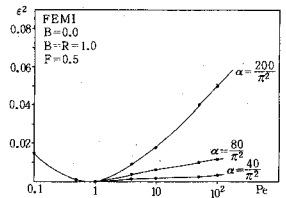
Fig. 12 Relation between ϵ^2 and P_e with different α



(a) Upwind difference



(b) Lax-Wendroff



(c) FEM ($\theta=0$)

係なく時間の経過に従って ϵ^2 がほぼ同じになる例をFig. 13 (a)に示す。一方、 P_e が大きいと初期値の形(波数成分の構成)が影響し、高波数の振幅がそれ程減衰せずFig. 13 (b)のようになる。Fig. 13は、 $B=R=0$ のLax-Wendroffのスキームで $F=0.05$ 、 P_e を(a)で1、(b)で100としたときのものである。また、縦軸は ϵ^2 を対数で示し、横軸は時間ステップ数である。初期値としては、 $\alpha=40/\pi^2$ と $\alpha=200/\pi^2$ のガウス分布を近似した矩形パルスの和と、 Δx の矩形パルスと三つの場合を示している。

最後に、FEMの θ の効果をFig. 14に示している。これは $B=R=0.5$ とし初期値に $\alpha=80/\pi^2$ のガウス分布を近似した矩形パルスの和を与えた時、 $F=0.5$ として θ を変化させたものである。 $P_e=1$ ではほとんど θ による差はないが、 P_e が大きいときは $\theta=0.0$ とするのが一番 ϵ^2 が小さくなる。これはFig. 9の(f)と(g)での E_A 、 E_P による評価と対応している。(一般に $\theta>0$ のUPW-FEMの方が安定性、収束性が $\theta=0$ より良いといわれているが、⁴⁾これは $B=R=0$ のときの議論であり、時間についての離散化

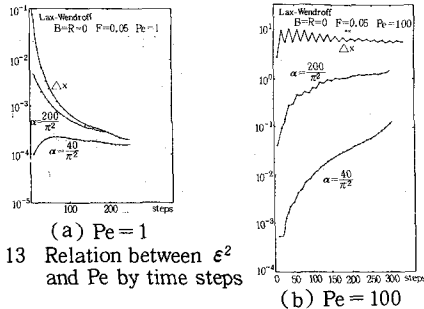


Fig. 13 Relation between ϵ^2 and P_e by time steps

をexplicit 以外にすると必ずしもそうはならないことが、本研究においては示された。)

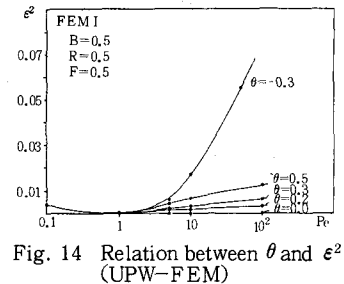


Fig. 14 Relation between θ and ϵ^2 (UPW-FEM)

5. 結 論

移流拡散方程式を正確に解くために、現在多くの離散スキームが提案されている。そしてその選択原理を確立するため、必要条件としての安定性解析が第一ステップとして行われる。しかし安定なスキームであっても、数値誤差が無視しえない程度に生じるならば、特に環境問題等のアセスメントには信頼して用いるわけにはいかない。したがって、安定性解析の次のステップとしての誤差解析が必要となる。本研究は、移流拡散方程式の数値解の誤差解析を、システム制御理論の考えを援用して種々の離散スキームの波数伝達特性に注目(増幅係数を解析)して行なったものである。誤差解析は、考慮すべき多くの因子が複雑に関係合っているので、決定的な解析方法を見つけることは現在のところ困難である。しかし、本研究を通じて得られた結論を述べると以下のようなものである。

- (1) 数値計算をシステム制御理論の観点からながめ、増幅係数による波数伝達特性を初期値を考慮して解析することにより、誤差解析を行う方法を示した。
- (2) 初期値と波数伝達特性を同時に考慮した誤差評価の指標を新しく提案し、簡単な計算例により実際の誤差とよく対応することがわかった。
- (3) 高波数成分は伝達特性が悪く、誤差生成の原因となることがわかった。したがって、初期値を物理的に許容できる範囲で近似的に離散化するとき、そのモデル化において高波数成分をなるべく含まないようにすれば、誤差をコントロールできる可能性があると考えられる。
- (4) 局所ペクレ数が数値誤差に大きく影響することがわかり、現実問題でよく起る P_e が大きい場合の方が、本研究の誤差指標 E_A 、 E_P によってより良く誤差評価できることがわかった。

参 考 文 献

- 1) 平岡正勝・古市 徹・田中宏明：移流拡散方程式の数値解の安定性解析，土木学会論文報告集，第319号，pp. 77～85，1982。
- 2) Fromm, J. E. : Practical investigation of convective difference approximations of reduced dispersion, The Physics of Fluids Supplement II, pp. 3～12, 1969.
- 3) 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.
- 4) 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.
- 5) Pinder, G. F. and Gray, W. G. : Finite element Simulation in surface and subsurface hydrology, Academic Press, 1977.
- 6) 矢嶋信男・野木達夫：発展方程式の数値解析，応用数字叢書，岩波書店，1977。
- 7) 松田安弘・堀川 明：有限要素法による拡散・流動問題の解析(第1報，非定常二次元拡散問題への変形ガラーキン法の提案) 日本機械学会論文集，Vol. 45, No. 395, 1979。