

移流拡散方程式の中心差分法による数値解の平滑化に関する研究†

齋藤 明** 川合 敏雄**

移流拡散方程式は、さまざまな応用分野に登場し、数値的に解かれている。一方、中心差分法や、その不規則形状領域への拡張ともいえる有限要素法は、Laplace, Poisson 型方程式には数多く適用され実績をあげている。中心差分法を移流拡散方程式に適用すると、セルペクレ数条件の厳しい制約により莫大な数の空間格子点が必要となる。セルペクレ数条件が満たされないと、数値解のギザつき現象が生ずるため、著しく精度が低下するからである。この対策として、さまざまな差分法が工夫されたが標準的方法はない。本論文では、ギザつき現象を生じた数値解に対する平滑化の手法を提案し、中心差分法が標準的方法として使用できることを示す。平滑化は、数値解のギザつきを抑えるように決定された重み係数による重み付き平均の操作を意味し、その実装は容易である。例題に適用した結果、高ペクレ数においては他の差分法に勝る精度が得られた。今後、中心差分法と類似した数値的性質を持ち現在多用されている有限要素法への適用、評価が期待される。

1. ま え が き

移流拡散方程式は、さまざまな応用分野に登場する重要な方程式である。

ところがこれを数値的に解くときに困難が生ずることが多く、その対策としていろいろな工夫が提案されてきた。本研究の目的は、最も標準的と思われる簡単で精度の良い解法を提案することにある。

無次元化された二次元の移流拡散方程式は次のように表現される。

$$0 = -Pe_x \frac{\partial u}{\partial x} - Pe_y \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + q \quad (1)$$

ここで、 Pe_x, Pe_y はペクレ (Peclet) 数と呼ばれるパラメータである。

(1)式に中心差分法を適用して、

$$\begin{aligned} 0 = & -Pe_x \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \\ & - Pe_y \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} \\ & + \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \\ & + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \\ & + q_{i,j} \end{aligned}$$

を解くと、セルペクレ数条件

$$\max(Pe_x \Delta x, Pe_y \Delta y) < 2$$

を満たすように空間格子間隔 $\Delta x, \Delta y$ をとらないと一般に図1のように数値解がギザつき、著しく精度が低下することが知られている¹⁾。

Pe_x, Pe_y の値は実用上の問題では非常に大きいことが多いので、中心差分法を用いると $\Delta x, \Delta y$ を小さくする必要があり、計算量の負担が大きい。

そこで、さまざまな差分法が提案されている²⁾ が、標準的な方法はない。

2. 平滑化の手法

平滑化の手法は、Penalty 法による流れ場計算などで数値解のギザつきを抑えるために用いられている³⁾。

セルペクレ数条件に違反してギザつきを生じた場合にも、平滑化の手法を利用して数値解の精度を保つことが期待できる。

本研究では、以下の各条件を満たすように数値解を平滑化した。

(イ) 図2に示すように対称的に隣接9点の値の重み付き平均をとる操作とする。

(ロ) 数値解の周期性を仮定したとき、最高調波成分が0となるようにする。

(ハ) 数値解の空間和が平滑化操作の前後で変わらないようにする。

以上の条件から平滑化の手法は(2)式に示すように一意に決定された。

† On the Smoothing of the Numerical Solution of the Convection-Diffusion Equation by the Central Difference Method by AKIRA SAITO and TOSHIO KAWAI (Department of Science and Technology, Faculty of Physics, Keio University).

** 慶応義塾大学理工学部物理学科

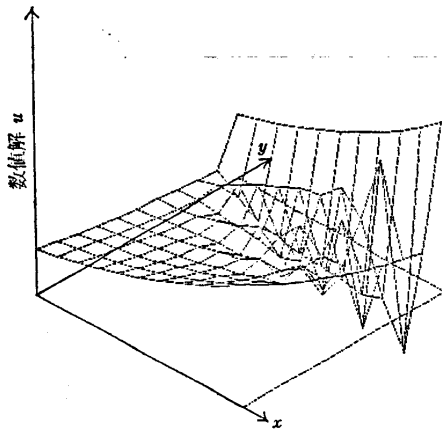


図 1 ギザついた数値解

Fig. 1 Numerical solution with spatial oscillation.

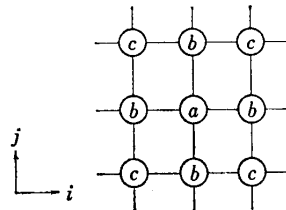


図 2 重み係数の分布

Fig. 2 Distribution of the weighting factors.

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i,j} &= \frac{1}{4} u_{i,j} \\ &+ \frac{1}{8} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) \\ &+ \frac{1}{16} (u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j-1} \\ &+ u_{i-1,j-1}) \end{aligned} \quad (2)$$

ただし、 $u_{i,j}$: 中心差分法による数値解

$\hat{u}_{i,j}$: 平滑化された数値解

この操作は境界以外の全点で適用される。

以下に、(2)式の導出手順を示す。

(イ) 対称的な隣接9点の値の重み付き平均とは次式を意味する。

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i,j} &= a u_{i,j} \\ &+ b (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}) \\ &+ c (u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}). \end{aligned} \quad (3)$$

ここに三つのパラメータ、 a, b, c が現れた。

(ロ) 周期的な数値解の離散 Fourier 展開は次式のように複素表現される。

$$u_{i,j} = \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{l=0}^{L-1} U_{k,l} \varepsilon^{(vi+wj)} \quad (4)$$

ただし $\varepsilon = e^{\sqrt{-1}}$, $v = 2\pi k \Delta x$, $w = 2\pi l \Delta y$

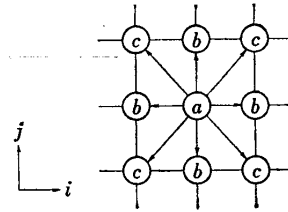


図 3 平滑化による分散

Fig. 3 Contributions of the smoothed value.

U_{kl} : 複素係数

Δx : x 方向格子間隔

Δy : y 方向格子間隔

$2K$: x 方向格子点数

$2L$: y 方向格子点数

(4)式の第 (k, l) Fourier 成分だけを考えることにして(3)式に代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i,j}^* &= U_{k,l} \varepsilon^{(vi+wj)} \{ a \\ &+ b (\varepsilon^v + \varepsilon^{-v} + \varepsilon^w + \varepsilon^{-w}) \\ &+ c (\varepsilon^{v+w} + \varepsilon^{-v+w} + \varepsilon^{v-w} + \varepsilon^{-v-w}) \} \\ &= [a + 2b (\cos v + \cos w) \\ &+ 2c \{ \cos(v+w) \\ &+ \cos(v-w) \}] u_{i,j}^* \\ &\equiv F u_{i,j}^* \end{aligned} \quad (5)$$

最高調波、 $k=K$ または $l=L$ が対応するのは $v=\pi$ または $w=\pi$ である。

(5)式において、この条件のもとで $F=0$ となるためには、対称性により、(5)式に $v=\pi$ を代入した次式が y にかかわらず成立すればよい。

$$0 = a - 2b + 2(b - 2c) \cos y$$

よって次の条件を得る。

$$\begin{aligned} a &= 2b, \\ b &= 2c \end{aligned} \quad (6)$$

(ハ) 第 (i, j) 点の数値解 $u_{i,j}$ は、平滑化の操作(3)式によって図3に示すように分散する。

よって、数値解の保存性が満たされるためには、重み係数の総和を1にする、すなわち

$$a + 2b + 4c = 1 \quad (7)$$

が必要である。

(3), (6), (7)式より、

$$a = \frac{1}{4}, \quad b = \frac{1}{8}, \quad c = \frac{1}{16}$$

が得られる。

よって(5)式より

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{16} [4 + 4 (\cos v + \cos w) \\ &+ \{ \cos(v+w) + \cos(v-w) \}] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4}(1 + \cos v)(1 + \cos w)$$

3. 数値解の精度評価

平滑化の手法と他の差分法による数値解の相対誤差の大きさを比較するために、(1)式において以下を仮定した。

- (イ) Pe_x, Pe_y は正定数とする。
- (ロ) 周期的境界条件とする。
- (ハ) 一辺1の正方形領域とする。
- ($\Delta x = \Delta y, K=L, 2K\Delta x = 2L\Delta y = 1$)

このとき存在し得る第 (k, l) Fourier 波は、

$$e^{\sqrt{-1}(2\pi k\Delta x i + 2\pi l\Delta y j)}$$

である。

振幅 $q^{k,l}$ をもつ q の成分に対して解 u の振幅 $u^{k,l}$ は、

$$u^{k,l} = \frac{q^{k,l}}{f}$$

ただし

f : 離散式によって導出される複素係数; k, l の関数

$q^{k,l}$: ソース項 q の第 (k, l) Fourier 成分となる。ここに f は離散式によりそれぞれ異なる。

(イ) 連続解

$$f_c = \{ \sqrt{-1}(Pc_x v + Pc_y w) + (v^2 + w^2) \} / (\Delta x)^2$$

$$Pc_x = Pe_x \Delta x$$

$$Pc_y = Pe_y \Delta y$$

(ロ) 中心差分法による数値解

$$f_{dc} = \{ \sqrt{-1}(Pc_x \sin v + Pc_y \sin w) + 2(2 - \cos v - \cos w) \} / (\Delta x)^2$$

(ハ) 平滑化された中心差分法による数値解

$$f_{d \text{ smooth}} = f_{dc} / F$$

$$= \frac{4f_{dc}}{(1 + \cos v)(1 + \cos w)(\Delta x)^2}$$

(ニ) 風上差分法による数値解

$$f_{d \text{ upwind}} = \{ \sqrt{-1}(Pc_x \sin v + Pc_y \sin w) + (2 + Pc_x)(1 - \cos v) + (2 + Pc_y)(1 - \cos w) \} / (\Delta x)^2$$

(ホ) Power-law 法⁴⁾による数値解

(1)式を、次のように離散化する。

$$0 = Pe_x \frac{u_{i-1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + Pe_y \frac{u_{i,j-1} - u_{i,j}}{\Delta y}$$

$$+ X_m \frac{(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})}{(\Delta x)^2}$$

$$+ Y_m \frac{(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1})}{(\Delta y)^2}$$

$$+ q_{i,j}$$

ただし

$$X_m = 2 * \max \{ 0, (1 - 0.1Pc_x)^5 \},$$

$$Y_m = 2 * \max \{ 0, (1 - 0.1Pc_y)^5 \}$$

よって、

$$f_{d \text{ power}} = \{ \sqrt{-1}(Pc_x \sin v + Pc_y \sin w) + (X_m + Pc_x)(1 - \cos v) + (Y_m + Pc_y)(1 - \cos w) \} / (\Delta x)^2$$

このように、離散式に対応する複素係数 f を $Pc_x, Pc_y, \Delta x$ をパラメータとして求めることができる。

いま特にソース項 q の第 (k, l) Fourier 成分がすべて1であるような例題を考える。

$$q_{i,j} = \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=0}^{K-1} \varepsilon^{(vi+wj)}$$

その他の計算条件は本章の初めに述べたとおりとする。このとき連続解 u_c と数値解 u_d の相対誤差 E は、 $2K * 2K$ 格子点の問題で

$$E^2 = \sum_{i=0}^{2K-1} \sum_{j=0}^{2K-1} |u_c - u_d|^2 / \sum_{i=0}^{2K-1} \sum_{j=0}^{2K-1} |u_c|^2$$

$$= \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=1}^{K-1} \left| \frac{1}{f_c} - \frac{1}{f_d} \right|^2 / \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=1}^{K-1} \left| \frac{1}{f_c} \right|^2 \quad (8)$$

と表現される。

(8)式は Δx の値に依存しないので、既に求めた f を用いて、 Pc_x, Pc_y, K をパラメータとして E を求めることができる。

(8)式を用いて、中心差分法、中心差分法と平滑化、風上差分法、Power-law 法の各方法につき、 $K=10$ における Pc_x, Pc_y と E の関係を図4に示す。

図より、平滑化を用いた中心差分法による数値解の精度は、風上差分法、Power-law 法に匹敵するほどであることがわかる。これは、例題の規模 K が10以上について確かめられた。

一方、平滑化は収束した解は1回適用するのみであり、反復計算に比し計算量は無視できるので、計算量の負担は特に増加しない。

4. むすび

平滑化の手法は、本論文において設定した問題に関して一般に中心差分法による数値解の精度を他の方法に匹敵するほど向上させることがわかった。

この結果から平滑化の手法は、中心差分法と類似し

た数値的性質をもち現在多用されている有限要素法にも、有効であることが期待される。

実用化にむけて、さらに境界条件の考慮、不規則形状領域への適用法の確立、が必要である。

本研究にあたって、プログラム図式によるソフトウェア開発ツール、PADETの利用を快諾してくださった浜田雅樹氏に感謝する。

参 考 文 献

- 1) Roache, P.J.: *Computational Fluid Dynamics*, p. 161, Hermosa Publishers, Albuquerque (1972).
- 2) Chow, L.C. and Tien, C.L.: An Examination of Four Differencing Schemes for Some Elliptic-Type Convection Equations, *Numer. Heat Trans.*, Vol. 1, pp. 87-100 (1978).
- 3) Kikuchi, N.: On a Smoothing Scheme of Penalty/Finite Element Methods for Stokes Flow Analysis, in *Finite Element Flow Analysis*, pp. 45-50, University of Tokyo Press, Tokyo (1982).
- 4) Patankar, S.V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, p. 90, McGraw-Hill, New York (1982).

(昭和60年6月6日受付)

(昭和60年12月19日採録)



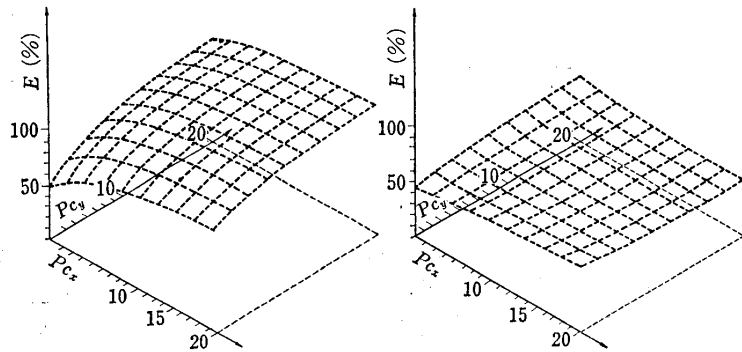
斎藤 明 (正会員)

1960年生。1985年慶応義塾大学大学院理工学研究科修士課程修了。同年日本IBM社に入社。現在大和研究所に勤務。



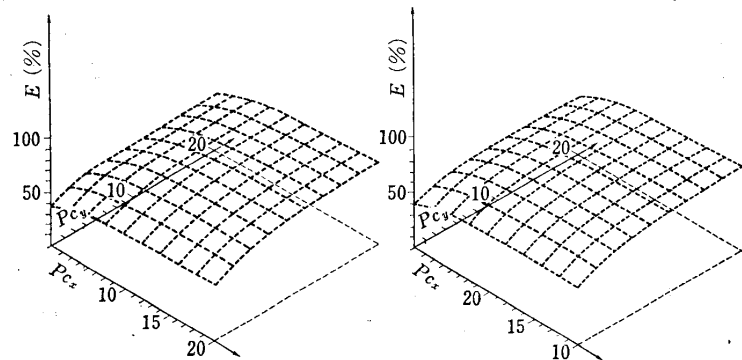
川合 敏雄 (正会員)

1932年生。1955年東京大学理学部物理学科卒業。(株)日立製作所において原子力工学の研究と設計に従事した。この間コンピュータ・ユーザとして、性能の桁違いの向上と、プログラムが他人に見えることの必要性を痛感した。この対策として超並列型コンピュータと、PADプログラミングの普及につとめている。1981年より慶応義塾大学理工学部物理学科教授。著書に「スーパーコンピュータへの挑戦」, 「PADプログラミング」(岩波書店), 訳書に「パーソナルコンピュータによる量子力学」(サイエンス社)がある。物理・原子力・ソフトウェア科学, 流体力学会などの会員。



(a) 中心差分法
Central difference method.

(b) 中心差分法と平滑化
Central difference method with smoothing.



(c) 風上差分法
Upwind difference method.

(d) Power-law 法
Power-law method.

図4 各差分法における Pc_x, Pc_y と E の関係 ($K=10$)

Fig. 4 Relations between cell-Peclet-numbers (Pc_x, Pc_y) and relative error E on the difference methods ($K=10$).