

工学演習における偏微分方程式の差分法について

矢北 孝一

熊本大学工学部 技術部

1. はじめに

当工学部の社会環境工学科では、4年生を対象に工学演習が開講されている。そこでは、時・空間的に連続な偏微分方程式(不定流計算, 移流拡散方程式, 浅水方程式等)の数値解析手法が講義される。この講義は、有限の時・空間で離散化する差分法を主に用い Fortran90 言語でプログラミングすることで、数値解析を修得する事を目的とする。技術部では、受講する学生に対し、解析手法を理解させるための技術支援を行っている。しかし、学生に対する的確な技術的助言等を行うためには、偏微分方程式から離散式への変換, 初期・境界条件の設定, プログラミング, 計算結果の可視化等, その一連の過程を把握することが必要となる。そこで、本報告では偏微分方程式の離散化の概略を示し、解析例を示すことで差分法について簡単に紹介する。

2. 偏微分方程式の離散化手法

偏微分方程式は、ある物理量が、時間、空間、温度等に依存する度合い、形態の変化量を記述する。一例を示すと、ポアソン・ラプラス・波動・熱伝導・移流拡散方程式等がある^[1]。図-1 に示すように、これらの偏微分方程式を満たす解は無限に存在するため、何らかの境界条件, 初期条件 A を適切に設定しないと解が求められない。偏微分方程式の数値解析は、問題の一般化が容易、膨大な量の計算が必要、という特徴がある。しかし、PCへのGPU実装による高速化、HDの大容量化等によって計算コストが省力化され、数値流体力学等多くの学問領域で応用されている。離散化手法には、有限・境界要素法等もあるが、演習で用いられる有限差分法 FDM(Finite Difference Method)は、最も根源的、素直な方法であり、多くの数値解法では歴史が古く、汎用性が高いことが知られている。

3. 差分方程式

FDM では、PC 等で連続関数の極限を取ることが不可能のため、導関数を近似し偏微分方程式を離散化した差分方程式を用いる。その概念を図-2 に示し、一例として式(1)に一次元拡散方程式を示す。図-2 の概念を基に式(1)を差分近似した式(2)のように、近似は濃度 C の時間変化と比較し Δx , Δt が十分に小さければ微分係数と等価とする。図-3 は、FDM による時・空間方向の離散化の概略を示す。図より現在の時刻を k, 空間方向の濃度を C_i として、時刻 k+1 濃度の算出を示している。それを差分方程式で示すと式(3)と表せる。この式に濃度の初期値, 境界条件を与え、時間進行させる事で時・空間方向の濃度が求まる。この式(3)で空間方向は、左右点を使用する中央差分, 時間方向は、次の時刻との差を使用している前進差分の陽解法が用いられる。この他に、時間進行, 空間差分の安定性を考慮し、陰解法, 風上差分等の手法が提案されている。

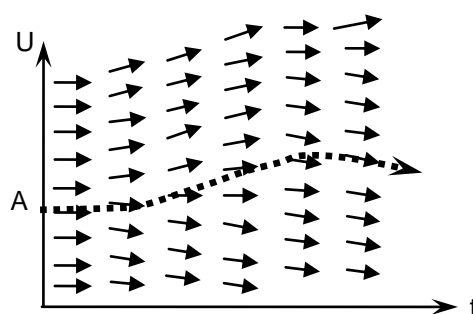


図-1 解曲線

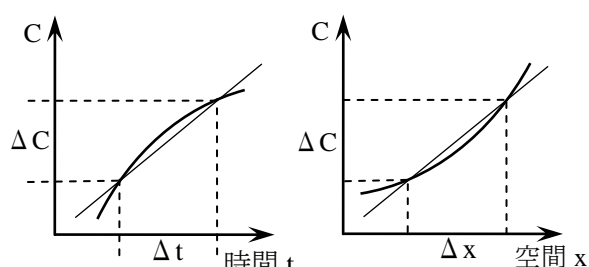


図-2 近似と差分の概念

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1)$$

$$\frac{\Delta C}{\Delta t} \cong D \frac{\Delta(\frac{\Delta C}{\Delta x})}{\Delta x} \quad (2)$$

ここで、C:濃度, D:拡散係数

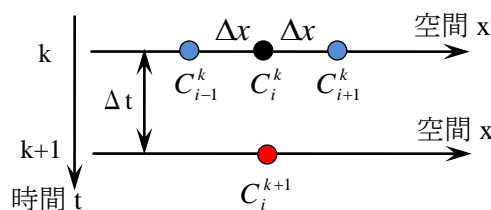


図-3 FDM による離散化の概略

$$\frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} = D \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{C_{i+1}^k - C_i^k}{\Delta x} - \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{\Delta x} \right)$$

$$C_i^{k+1} = C_i^k + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4)$$

$$C_i^{k+1} = C_i^k - u \frac{\Delta t}{\Delta x} (C_i^k - C_{i-1}^k) + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) \quad (5)$$

ここで、k:時間方向
i:空間方向
 Δx , Δt は一定

4. 移流拡散方程式の解析

一次元の移流拡散方程式は、式(1)に移流項を付加し移流速度 u , D を定数として式(4)に示し、差分方程式を式(5)に示す。式(5)での移流項は、計算の安定性を考慮し1次の風上差分、拡散項には中心差分を用いている。また、移流項の安定性を考慮したクーレン数 $1 < u \Delta t / \Delta x$, 拡散項では $D \Delta t / \Delta x^2 < 0.5$ の条件が示されており^[2], これらの条件を許容し計算を行う。式(3)と式(5)に示した拡散と移流拡散を比較するため、初期条件として x 中央濃度が 10mg/L の三角形分布を与え、両端境界は流出条件として計算した。なお、物質拡散の解析解との比較を行い、良好な結果を得ている。図-4(a),(b)に、各条件で終了時間2秒まで0.4秒毎の結果を示す。図より物質拡散と移流拡散との相違、移流速度によって濃度ピークが x 方向に移動している様子が捉えられている。また、移流速度は、+値だけとは限定されないため、式(6)に示すように u の正負に対応する形に記述でき、式(7)に示すように、拡散係数を調和平均し要素の境界で与えることで、壁面の境界条件を簡略化できる。さらに移流項は、非線形であるため二次元、三次元に拡張する場合、3次の風上差分等の採用が必要となる。以上を基に、二次元への拡張は、式(5)に y 方向の移流・拡散項を追加する。図-5(a),(b)に、濃度 10mg/L を $x=y=36\text{m}$ に与え、その他の領域濃度は0の初期条件で、二次元空間の30分後の濃度分布を示す。図-5(b)は領域に个体壁を設け $D=u=v=0$ となる領域を設定した。ただし、移流速度を一定としているため壁面による流向流速の変化は考慮していない。

5. 浅水方程式の解析

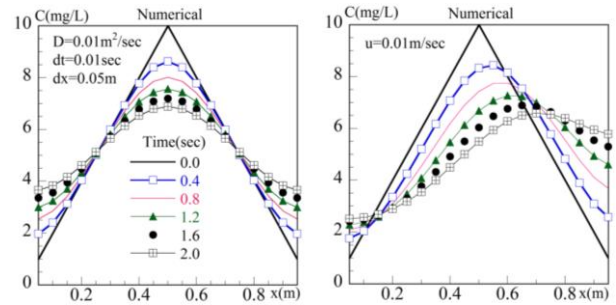
浅水方程式における連続の式と運動方程式を式(8), 式(9), (10)に示す。ここでは、密度 $\rho=1$, マニング粗度係数を一定とし、運動方程式の分散・減衰項は考慮していない。なお、差分方程式は紙面の都合で割愛する。図-6, 図-7に示すように領域中央に配置された壁が瞬時に消えるダム崩壊問題で、座標系をスタガード格子、時間進行を Leap-Frog 法、移流項に3次風上差分を用いた^[2]。図-6の計算域を 1km 正方形領域、一辺 800m 角柱の水位 1m , 周辺水位 0.4m , 水深 5m で、境界条件は流出条件とし 300 秒まで計算を行った。図-7に崩壊 120 秒後の水位分布を示す。図より、段波によるフロント部の形状が捉えられており、不連続面での数値振動もなく安定した結果が得られている。しかし浅水方程式では、干潟等の干出する沿岸域を対象にした数値計算は、不可能となっているため、各手法が提案されている。

6. おわりに

学生は、一次元の数値計算は容易に理解するが、次元が上がるに従って、境界条件等の設定をイメージできない。また偏導関数 ∂ をイメージできない学生が多い。今後は、これらの課題を克服していく予定である。

参考文献

- [1] 和達三樹: 物理のための数学, pp195-198, 岩波書店, 1999
- [2] 梶島岳夫: 乱流の数値シミュレーション, pp43-111, 養賢堂, 1999



(a) 物質拡散 (b) 移流拡散

図-4 拡散と移流拡散の比較

$$C_i^{k+1} = C_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ \frac{u + |u|}{2} (C_i^k - C_{i-1}^k) + \frac{u - |u|}{2} (C_{i+1}^k - C_i^k) - \frac{D}{\Delta x} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) \right\} \quad (6)$$

$$D_{i+1/2} = \frac{2D_i \cdot D_{i+1}}{(D_i + D_{i+1})} \quad (7)$$

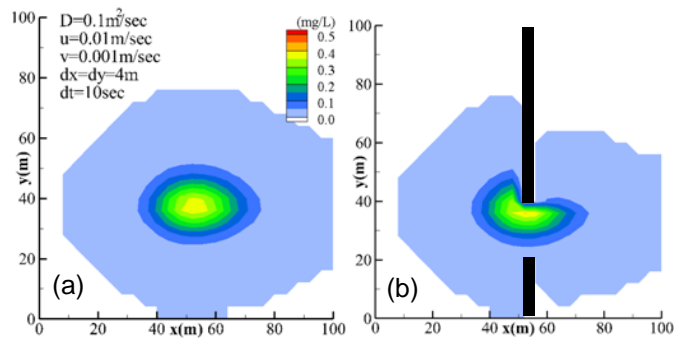


図-5 二次元移流拡散

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \frac{\partial uM}{\partial x} + \frac{\partial vM}{\partial y} = -gh \frac{\partial H}{\partial x} - \frac{g n^2 \rho u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}} \quad (9)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial uN}{\partial x} + \frac{\partial vN}{\partial y} = -gh \frac{\partial H}{\partial y} - \frac{g n^2 \rho v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{1/3}} \quad (10)$$

ここで、 M , N : x, y 方向の流量フラックス ($\text{m}^3/\text{s}/\text{m}$)
 u, v : x, y 方向の流速 (m/s), $g=9.8\text{m}/\text{s}^2$, n : マニング粗度係数, h : 水位, H : 全水深 $H=h+B$, B : 水深 (m)

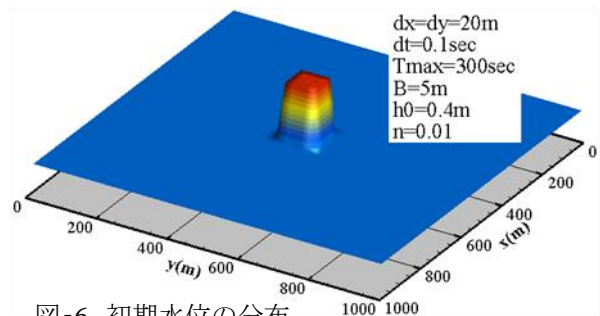


図-6 初期水位の分布

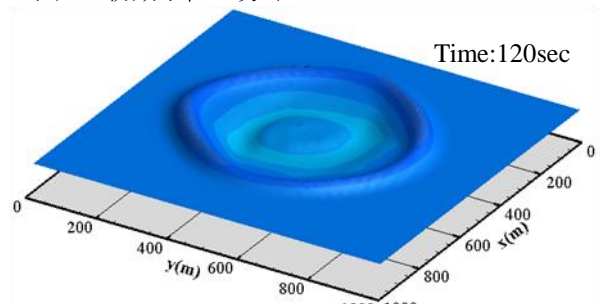


図-7 崩壊後の水位分布