

単調性保存スキーム - 非定常線形問題 - Monotonicity Preserving Schemes - Unsteady & Linear problems -

酒井勝弘, 埼玉工業大学大学院, 〒369-0293 埼玉県大里郡岡部町大字普濟寺 1690, sakai@sit.ac.jp
木村 功, 埼玉工業大学大学院, 〒369-0293 埼玉県大里郡岡部町大字普濟寺 1690, sys00002@sit.ac.jp
渡部大志, 埼玉工業大学工学部, 〒369-0293 埼玉県大里郡岡部町大字普濟寺 1690, dw@sit.ac.jp
Katsuhiro Sakai, Saitama Institute of Technology, 1690 Fusaiji, Okabe, Saitama 369-0293
Isao Kimura, Saitama Institute of Technology, 1690 Fusaiji, Okabe, Saitama 369-0293
Daishi Watabe, Saitama Institute of Technology, 1690 Fusaiji, Okabe, Saitama 369-0293

We have derived a solution to an initial value problem of unsteady linear advection-diffusion equations by applying the spectral technique. The resulting solution is suitable for constructing a numerical scheme fully explicit with respect to time. Based on the solution, a new numerical scheme renormalizing advection-diffusion properties of transport equations is proposed, which is absolutely stable for any large velocity and for any steep gradient of transported quantities. Numerical experiments for both uniform velocity and nonuniform velocity fields showed good solutions.

1. 序

1.1 目的

我々は対流項を有する輸送方程式に対し、数値粘性を導入しない第 1 原理的方法で、単調性を維持する計算スキームを目指している。その基本は、解くべき輸送方程式に対するモデル方程式の理論解の構造をできる限り計算スキームに取り込むことである。

モデル方程式として移流拡散方程式を選び、その初期値問題に対して、その時間発展部分に対し連続空間変数のスペクトル法を適用して、モデル方程式の理論解を導出する。この解に基づき、数値粘性を導入することなく、差分係数の正値性条件と有界性条件を満たす単調性保存スキームを構築する。

1.2 背景

輸送方程式の数値計算に於いて移流項の取り扱い、数値解の安定性と精度に重要な役割を演ずる。特に固定したオイラー座標系の場合、移流項の離散化は重要である。今物理量 $f(t, x)$ に対する非保存形移流方程式の場合、速度 u に対し局所的に定数とする近似の下で解は $f(t+\Delta t, x) = f(t, x - u\Delta t)$ の性質を持つ。従って新時刻に於ける格子点上の x_i における解を見出す問題は、格子点内部の $x_i - u\Delta t$ に於ける旧時刻の解を、如何にして見出すかに帰着する。これまで Leith 法等種々の方法が提案されているが、中でも CIP 法¹⁾は、格子点上の f の他にその微分情報も取り込むことで、最隣接格子点だけを用いて、3 次精度の内挿式で解を見出すことに成功している。

元来 QUICK スキームのように、定数係数を有する線形の高次差分法は、ゴドノフの定理に抵触し、 f の勾配が大きい場合その解は数値振動を誘起する。しかし CIP 法のように非線形スキームの場合でも、数値粘性の導入無しでは数値振動を避けられない。こうした従来の研究経過を鑑案すると、離散格子点における物理量を用いた内挿法では、何らの数値粘性を導入しないで、数値振動を誘起しない高次スキームを構築することは困難と思われる。

そこで我々は移流拡散方程式の初期値問題に対して、その時間発展部分に対し連続空間変数のスペクトル法を適用して、移流拡散方程式の解を見出した²⁾。この解は時間進行の計算アルゴリズムを組むのに都合の良い構造を有している。本研究では上記の解に基づき、数値粘性を導入しないで、Semi-Lagrange 法での安定な計算スキームを構築した。初期に矩形分布を有する移流拡散方程式に対し、一様速度の場合と速度に空間分布を有する場合についての数値実験について報告する。

2. 単調性保存条件

2.1 正係数条件

本シンポジウムに於ける最初の論文で言及したように、単調性保存の意味(定義)は「ある時刻 t' における解 $f(t', x)$ が空間座標 x の単調増加(減少)関数であれば、それ以後の時刻 t においても解 $f(t, x)$ は x の単調増加(減少)関数である」³⁾。

時間に関し単段階陽解法の差分スキームは一般に(2.1)で表されるが、これが単調性を保存するための必要十分条件は、最初の論文で議論したように差分係数 a の正値性条件(2.2)で与えられる。

$$f(t + \Delta t, x) = \sum_{\ell} a_{\ell} f(t, x + \ell \Delta x) \quad (2.1)$$

$$a_{\ell} \geq 0 \quad (2.2)$$

2.2 TVD 条件

処で上記の単調性保存の定義では、ある過去時刻 t' における解 $f(t', x)$ が空間座標 x の単調増加(減少)関数としているが、もし、初期値が増加減少を繰り返す一般の関数の場合を考えると、空間全域の変動即ち全変動(2.3)に着目し、その時間発展を考察する。移流速度が一定の双曲型移流方程式(2.4)の場合、

$$TV(f) \equiv \int \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| dx \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (2.4)$$

初期の分布が一定の移流速度で移流していくので、任意時刻の解 f の最大値、最小値及び全変動 $TV(f)$ は一定に保たれる。全変動を差分式で表すと次式となる。正の拡散係数を有する拡散項が移流方程式に加わった一般的な移流拡散方程式の場合、

$$TV(f^n) = \sum_i |f_{i+1}^n - f_i^n| \quad (2.5)$$

理論解の $TV(f)$ は時間と共に減少することはあっても増加する事はない。そこでこの性質即ち次のTV非増加条件(所謂TVD条件)を差分式に要請する。

$$TV(f^{n+1}) \leq TV(f^n). \quad (2.6)$$

次に先の単調性条件(2.2)とTVD条件(2.6)の関係を見てみよう。

(2.1)より、

$$\begin{aligned} TV(f^{n+1}) &= \sum_i |f_{i+1}^{n+1} - f_i^{n+1}| \\ &= \sum_i \left| \sum_{\ell} a_{\ell} [f(t, x_{i+1} + \ell \Delta x) - f(t, x_i + \ell \Delta x)] \right| \\ &\leq \sum_i \sum_{\ell} a_{\ell} |f(t, x_{i+1} + \ell \Delta x) - f(t, x_i + \ell \Delta x)|. \end{aligned} \quad (2.7a)$$

ここで、 $i + \ell = j$ とおき、 i に関する和を j についての和に置き換えると、上式の右辺は(2.7b)となる。(有限計算体系で境界部分の取り扱いで、違いが生じる可能性があるが、メッシュ数が大きいとその違いは小さくかつ絶対値自身は大きくなる傾向である事と、周期計算体系の場合は問題ない) 一方差分スキームは適合性の条件(2.8)を満たすように構成されるので、(2.7c)が得られ、結局(2.7d)を得る。

$$= \sum_j \sum_{\ell} a_{\ell} |f(t, x_{j+1}) - f(t, x_j)| \quad (2.7b)$$

$$= \sum_j |f(t, x_{j+1}) - f(t, x_j)| \quad (2.7c)$$

$$= TV(f^n), \quad (2.7d)$$

$$\sum_{\ell} a_{\ell} = 1. \quad (2.8)$$

こうして、{ 単調性保存条件(2.2) & 適合性条件(2.8) } は TVD条件(全変動非増加条件)を包含する(必ずしも同値というわけではない)ことが解る。即ち適合性条件がキープされている限り(差分スキームは必ずキープしている)、単調性保存条件を満たしていれば必ずTVD条件を満たす。

2.3 有界性条件との関係

処で数値的安定性には、上で議論した単調性保存条件の他に、時間進行や反復計算の過程で計算機による丸め誤差が蓄積しておこる発散を抑制するための有界性条件がある。

今、解 f を次の離散フーリエ級数で展開する。

$$f(t, x_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} F_k^{n'} \exp[I 2\pi k i / N]. \quad (2.9)$$

上添字 n' は古い時刻 t を表す。(2.9)式を(2.1)式に代入して(2.10)式を得る。上添字 n は新しい時刻 $t + \Delta t$ をあらわす。(2.10)式より(2.11)式で定義される増幅係数が(2.12)で得られる。

$$\sum_{k=0}^{N-1} \left\{ F_k^n - F_k^{n'} \sum_{\ell=-m}^m a_{j+\ell} \exp[I 2\pi k (j+\ell-i)/N] \right\} \exp[I 2\pi k i / N] = 0 \quad (2.10)$$

$$A_k \equiv |F_k^n / F_k^{n'}| \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} &= \left| \sum_{\ell} a_{j+\ell} \exp[I 2\pi k (j+\ell-i)/N] \right| \\ &\leq \sum_{\ell} |a_{j+\ell}|. \end{aligned} \quad (2.12)$$

一方、差分スキームは適合性の条件(2.13) (既述の適合性条件(2.8)に対し、メッシュ点 j に依存するより一般的な形をここでは考えている)を満たすように構成されるので、単調性条件(2.2)と(2.12)から(2.14)を即ち有界性条件が得られる。

$$\sum_{\ell} a_{j+\ell} = 1, \quad (2.13)$$

$$A_k \equiv |F_k^n / F_k^{n'}| \leq 1. \quad (2.14)$$

以上により、正係数条件(単調性保存条件)と適合性条件が満たされれば、全フーリエモードに対して必ずフォンノイマンの安定性条件は満たされる即ち単調性保存条件(2.2)は有界性の為の十分条件となっていることがわかる。

3. 数学的定式化

次の移流拡散方程式を考える。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}. \quad (3.1)$$

ここで、 u, n はそれぞれ輸送速度、拡散係数で空間的に変化がないものとする。有限計算領域 $[a, b]$ で正規直交完備性を有している(3.2)式の連続フーリエ級数を用いて、解 $f(t, x)$ を展開し、それを(3.1)式に代入して展開係数に対する常微分方程式を解いて、(3.3)式を得る²⁾。

$$f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(I \frac{2\pi k x}{L}\right), \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (3.2)$$

$$f(t, x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi n(t-t')}} \int_a^b f(t', x') \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x-x'-U+kL)^2}{4n(t-t')}\right] dx' \quad (3.3)$$

$$\text{ここで、} I \equiv \sqrt{-1}, L \equiv b-a, U \equiv \int_{t'}^t u dt.$$

通常のスペクトル法で矩形波の伝播問題を扱う場合、矩形波

の級数展開で高次モードが効いてきてギブス振動の問題に苦しむが、本スペクトル法は初期値以降の移流・拡散による時間発展部分のみに適用している為、後の数値実験で議論するように高次モードの影響は小さい。そこで、フーリエモード k_c に対してカットオフモード k を導入する。更に x' に関する積分に平均値の定理を適用して次の離散近似解を得る。

$$f(t, x_i) = \sum_{j=1}^N f(t', x_{j'}) A(t, t' | i, j'), \quad (3.4)$$

$$A(t, t' | i, j') \equiv \sum_{k=-k_c}^{k_c} \int_{x_{j'} - \Delta x/2}^{x_{j'} + \Delta x/2} D_k(t, t' | x_i, x') dx', \quad (3.5)$$

$$D_k(t, t' | x_i, x') \equiv \exp \left[-\frac{(x_i - x' - U + kL)^2}{4n(t-t')} \right] / \sqrt{2\pi n(t-t')} \quad (3.6)$$

(3.6)式の $D(t, t' | x_i, x')$ は一種の伝播関数である。(3.4)式中の $f(t', x_{j'})$ は $[x_{j'} - \Delta x/2, x_{j'} + \Delta x/2]$ 間の平均値である。ここで x' を次式で X に変数変換すると、

$$X \equiv (x' - x_i + U - kL) / \sqrt{2\pi n(t-t')} \quad (3.7)$$

(3.5)式の係数 $A(t, t' | i, j')$ は次式のようにになる。

$$\begin{aligned} A(t, t' | i, j') &= \sum_{k=-k_c}^{k_c} \frac{1}{\sqrt{p}} \int_{(x_{j'} - \Delta x/2 - x_i + U - kL)/\sqrt{2\pi n(t-t')}}^{(x_{j'} + \Delta x/2 - x_i + U - kL)/\sqrt{2\pi n(t-t')}} \exp \{-X^2\} dX \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=-k_c}^{k_c} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j'} + \Delta x/2 - x_i + U - kL}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j'} - \Delta x/2 - x_i + U - kL}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.8)$$

但し、 $\operatorname{erf}(z)$ は次式で定義される誤差関数である。

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{p}} \int_0^z \exp\{-y^2\} dy \quad (3.9)$$

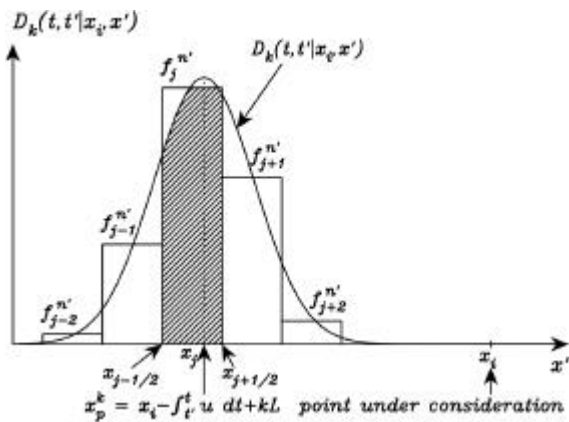


図1 伝播関数 $D_k(t, t' | x_i, x')$.

(3.5)式の D 関数は、(3.10)式をみたす x_p^k でピークとなり、かつ $|x' - x_i + U + kL| > 2\sqrt{n(t-t')}$ の x' では、急激に 0 となる為、

(11)式で決まる計算セル j の近傍の解 $f(t', x_{j'})$ が(3.4)式で有効に寄与する(図1)。

$$x_p^k = x_i - U + kL, \quad (3.10)$$

$$x_j - \frac{\Delta x}{2} \leq x_p^k \leq x_j + \frac{\Delta x}{2} \quad (3.11)$$

そこで Semi-Lagrange 法を適用し、まず新時刻 t に於ける着目点 x_i を与え、次に x_p^k を(3.10)式から決めた後、(3.11)式を満たす x_j を決める。しかる後に、その両側に m 個 ($2 \leq m \leq (N-1)/2$) 合計 $(2m+1)$ 個のステンシルをとる。この結果(3.4)式は次式で近似される。

$$f(t, x_i) = \sum_{\ell=-m}^m a_{j+\ell} f(t', x_{j+\ell}), \quad (3.12)$$

$$a_{j+\ell} = \frac{1}{S} \sum_{k=-k_c}^{k_c} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j+\ell} + \Delta x/2 - x_i + U - kL}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j+\ell} - \Delta x/2 - x_i + U - kL}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} \right] \quad (3.13)$$

$$S \equiv \sum_{k=-k_c}^{k_c} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j+m} + \Delta x/2 - x_i + U - kL}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j-m} - \Delta x/2 - x_i + U - kL}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} \right] \quad (3.14)$$

ここで(3.12)式の計算スキームが適合性の条件を満たすように、(3.14)式で与えられる S で各係数を規格し、その結果

$\sum_{\ell=-m}^m a_{j+\ell} = 1$ となる。差分係数 $a_{j+\ell}$ はいかなる $u, n, \Delta t$ に対しても

も常に正であり、パタンカーの正係数条件を満たすので、解の単調性が保証される。差分係数の正值条件と適合性条件が満たされていると、必ずフォンノイマンの安定性条件が満たされるので、解の有界性も保証される(付録参照)。即ちこのスキームはいかなる $u, n, \Delta t$ に対し絶対安定なスキームで、ANO (Absolutely Non-Oscillatory) スキームと称する。

次に、局所的定数近似を用いて、(3.12)式を輸送速度 u が空間的に変化する場合への拡張を試みる。

(3.15)式の関係を用いると(3.16)式を得る。

$$dx = u(x) dt, \quad (3.15)$$

$$\int_{t'}^t dt = t - t' = \int_{x_p^k}^{x_i + kL} \frac{dx}{u(x)}. \quad (3.16)$$

t, t', x_i を与えて、伝播関数のピークの位置 x_p^k を(3.16)式より求める。その際に(3.16)式の右辺の積分にはシンプソンの公式を用いる。(3.16)式は、一様速度の時の(10)式に対応する次式と等価である。

$$x_p^k + \int_{t'}^t u(x) dt = x_i + kL. \quad (3.17)$$

(3.13), (3.14), (3.17)式から次の差分係数を得る.

$$a_{j+\ell} = \frac{1}{S} \sum_{k=-k_c}^{k_c} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j+\ell} + \Delta x / 2 - x_p^k}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j+\ell} - \Delta x / 2 - x_p^k}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} \right], \quad (3.18)$$

$$S \equiv \sum_{k=-k_c}^{k_c} \left[\operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j+m} + \Delta x / 2 - x_p^k}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} - \operatorname{erf} \left\{ \frac{x_{j-m} - \Delta x / 2 - x_p^k}{2\sqrt{n(t-t')}} \right\} \right]. \quad (3.19)$$

(3.3)式から(3.12)式に至る過程で、幾つかの近似を用いているが、計算スキームはあくまでも1つの近似的計算法であり、ここで採用した近似の妥当性を含む本スキームの有効性は、次の数値実験で検証する.

以上の定式化に於いて、初期時刻 t' の取り方には任意性がある. 通常の単段階的計算アルゴリズムでは、1時刻前即ち $t' = t - \Delta t$ とし、逐次的に時間進行を行う. ところで座標を固定したオイラー系の場合、被輸送量は座標間を移動し、その移動地点が必ずしも計算格子点上にこないで、当該計算セル内で平均ないしは内挿操作が行われ、その度毎に数値拡散が生じそれが時間的に積分される. しかしANOスキームの場合、初期時刻 t' の解と新時刻 t の解の間の伝搬関数が得られていて、移流・拡散性が差分係数に取り込まれているので、 t' の取り方は任意である. そこで新時刻 t から1タイムステップ過去に遡る即ち $t' = t - t\Delta t$ に取ることが可能で、これにより無用な数値拡散を抑制できる. 次の数値実験では約20以上の t で数値解の変化は無くなった.

ナビエ・ストークス方程式等のシステム方程式に本手法を適用する場合、CIP法の時間分割法の応用として移流・拡散項と他の項に分離し、前者にANOを適用する.

3. 数値実験

計算領域 $L=1$, $x=0.15$ を中心とする矩形波を初期値とし、拡散が大きい場合 ($n=10^{-4}$) と小さい場合 ($n=10^{-8}$) について数値実験を行う. 合計ステンシル数 $2m+1=5$ 即ち $m=2$, 過去に遡るタイムステップ数 $l=20$ とした. 高次モードの影響に関するサーベイ計算の結果、影響がなかったので $k_c=0$ とした. 尚、計算結果の比較のため、CIP⁽¹⁾, TVD⁽⁴⁾ スキームを用いた計算も行う.

3.1 輸送速度 u が一定 ($u=1$) な場合

1) 参照解 $\Delta t = 1.33 \times 10^{-5}$, 詳細計算格子 ($N=5001$) を用い、TVD (3次精度 MUSCL) スキームの数値解を、優劣を比較する為の参照解とする. その結果を図2,3に示す.

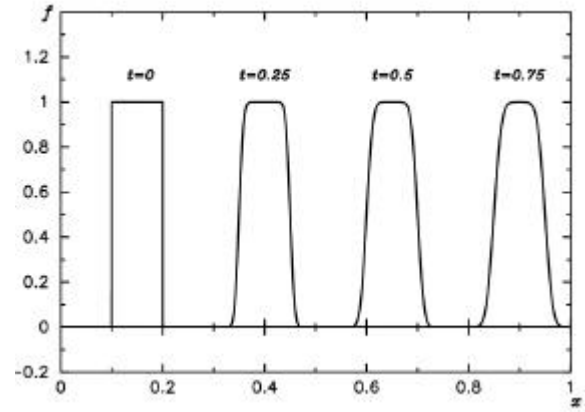


図2 参照解(一様速度, $n = 10^{-4}$).

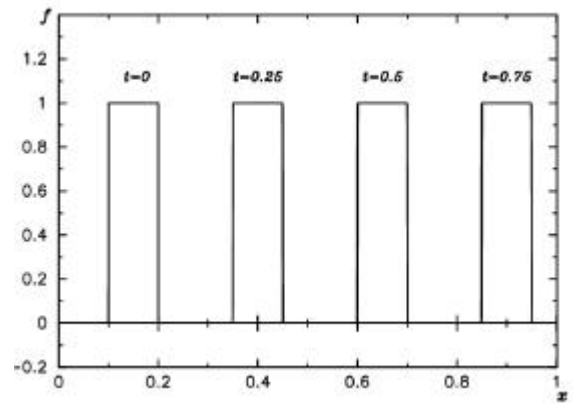


図3 参照解(一様速度, $n = 10^{-8}$).

2) 数値解 メッシュ数 $N=201$, $\Delta t = 5.0 \times 10^{-4}$ を用いた時のCIP, TVD, ANO スキームの計算結果を図4,5に示す. 図4の n が大きい場合、各スキームとも数値振動がなく、特にANO, CIP スキームは参照解と良好な一致が見られる. 図5の n が小さい場合、CIP スキームは数値振動が発生し、TVD スキームは多少拡散が起きている. 一方ANO スキームは数値振動もなく初期の矩形波の形を維持して移流しており良好な結果が得られている.

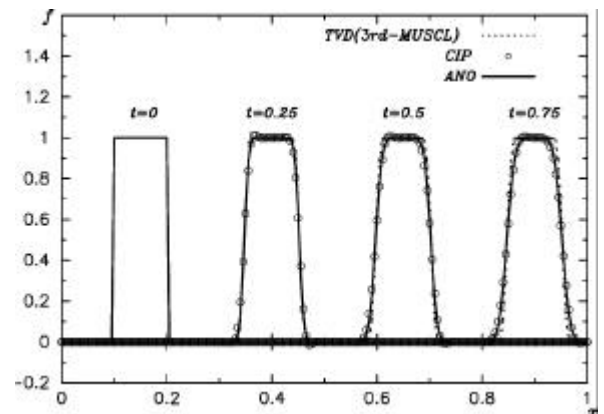


図4 数値解(一様速度, $n = 10^{-4}$).

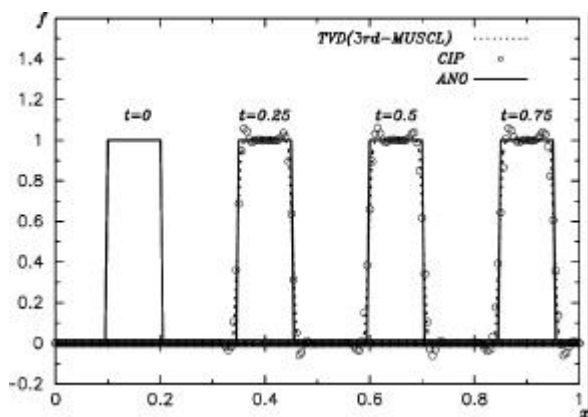


図5 数値解(一様速度, $n = 10^{-8}$) .

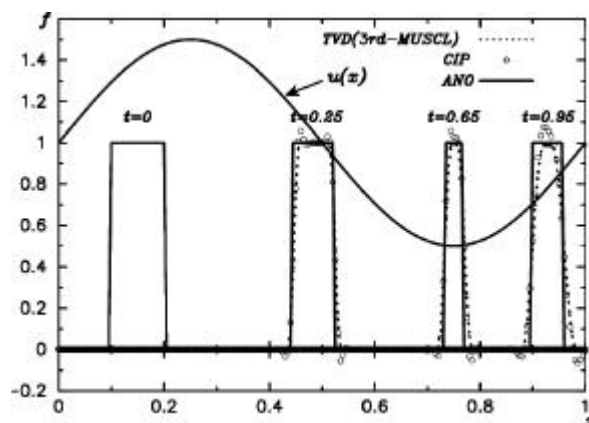


図7 数値解(非一様速度, $n = 10^{-8}$) .

3.2 輸送速度 u に空間分布がある場合

輸送速度の空間分布を次式で与える .

$$u(x) = 1 + 0.5 \sin(2\pi x/L) . \quad (3.20)$$

メッシュ数 $N = 5001$, $\Delta t = 1.33 \times 10^{-5}$ を用いた TVD スキームの $n = 10^{-8}$ の時の参照解を図6に示す . メッシュ数 $N = 201$, $\Delta t = 3.33 \times 10^{-4}$ を用いた時の計算結果を図7に示す . CIP スキームは数値振動が発生しており, TVD スキームは数値拡散が起きている . 一方 ANO スキームは数値振動もなく参照解と良好な一致が見られる . $t = 0.25, 0.65$ では, 矩形波の左側速度より右側速度が遅い為, 矩形波の圧縮が, $t = 0.65$ を過ぎると, 右側速度が速くなり, 矩形波の膨張が見られる . TVD はクーラン数 $C > 1$ で発散するのに対し, ANO は C の大きさに関係なく計算できる利点がある .

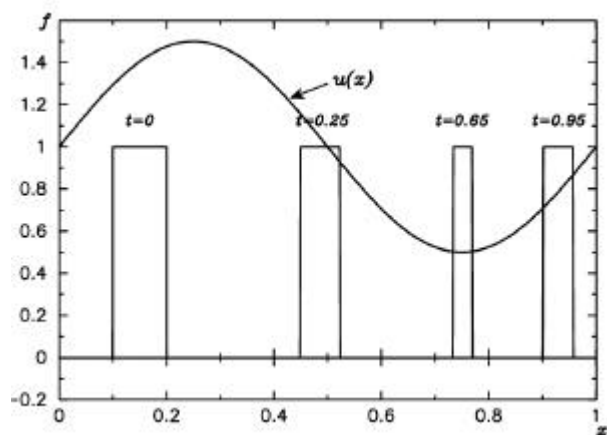


図6 参照解(非一様速度, $n = 10^{-8}$) .

4. 結論

輸送方程式の移流性・拡散性を取り込んだ計算スキーム ANO を構築した . 本スキームは, 速度, 拡散係数や被輸送量の勾配, Δt の大きさに依らず差分係数の正值条件と数値解の有界性条件を満たし, その意味で絶対安定性を有する . 速度が一定と分布のある場合の矩形波伝搬に関する数値実験の結果, 良好な結果を得た .

今後実用解析への適用性等の検討課題がある .

引用文献

- 1) T.Yabe & E.Takei: J.Phys.Soc.Japan, vol.57, No.8 (1988) 2598-2601.
- 2) K.Sakai(1999), A Nonoscillatory Numerical Scheme Based on A General Solution of 2-D Unsteady Advection-Diffusion Equations, J.Comput. and Applied Math, Vol.108, pp.145-156
- 3) 矢島, 野木, “ 発展方程式の数値解析 ”, p.50, 岩波書店 (1977) .
- 4) A.Harten: J.Comput.Phys.vol.49, (1983) 357-393.