1 次元移流拡散方程式

1 次元移流拡散方程式とは以下のような方程式である.

$$\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} + c\frac{\partial U(x,t)}{\partial x} = \kappa\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2}. \tag{1}$$

ここで c は移流速度, κ は拡散係数である.

ここからは境界条件と初期条件を与えて (1) 式を解いていく.

1 次元移流拡散方程式の解析解

今回は境界条件として周期条件, 初期条件として $f(x)$ という関数を与える. 解く方程式系を以下にまとめる.

$$\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} + c\frac{\partial U(x,t)}{\partial x} = \kappa\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2},$$

$$\text{境界条件} : U(0,t) = U(1,t) \quad (0 \leq x \leq 1), \tag{2}$$

$$\text{初期条件} : U(x,0) = f(x). \tag{3}$$

周期境界条件なので $U(x,t)$ をフーリエ級数展開する.

$$U(x,t) = \mathrm{Re}\left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} u_k(t)\exp(i2\pi kx)\right]. \tag{4}$$

(4) 式を (1) 式に代入すると,

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty}\frac{du_k(t)}{dt}\exp(i2\pi kx) = -\sum_{k=-\infty}^{\infty} ci2\pi k u_k(t)\exp(i2\pi kx) - \sum_{k=-\infty}^{\infty}(2\pi k)^2\kappa u_k(t)\exp(i2\pi kx)$$

となる. この式の両辺に $\exp(-i2\pi mx) \quad (m = -\infty, \cdot\infty)$ を掛けて 0 から 1 までで積分すると三角関数の直交性から波数 m 成分だけ取り出せる. よって,

$$\int_0^1 \sum_{k=-\infty}^{\infty}\frac{du_k(t)}{dt}\exp(i2\pi\{k-m\}x)dx = -\int_0^1 \sum_{k=-\infty}^{\infty}(ci2\pi k + (2\pi k)^2\kappa)u_k(t)\exp(i2\pi\{k-m\}x)dx,$$

$$\frac{du_m(t)}{dt} = -(ci2\pi m + (2\pi m)^2\kappa)u_m(t).$$

したがって

$$u_m(t) = u_m(0)\exp\left[-(ci2\pi m + (2\pi m)^2\kappa)t\right] \tag{5}$$

となる. $u_m(0)$ は初期条件から求めることができて,

$$U(x,0) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} u_k(0)\exp(i2\pi kx),$$
$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} u_k(0)\exp(i2\pi kx).$$

この式も先と同様に波数 m 成分だけ取り出すと,

$$u_m(0) = \int_0^1 f(x)\exp[-i2\pi mx]dx \tag{6}$$

よって, (4) 式は

$$\begin{aligned} U(x,t) &= \mathrm{Re}\left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} u_k(0)\exp(i2k\pi\{x-ct\} - \{2\pi k\}^2\kappa t)\right] \\ u_k(0) &= \int_0^1 f(x)\exp[-i2\pi kx]dx \end{aligned} \tag{7}$$

となる. この解は速度 $2k\pi c$ で移流しながら, $(2\pi k)^2\kappa$ の緩和時間で減衰していく.

実際に初期条件の関数を与えて解いてみる. 今回は初期条件として次の二つの式を考える.

$$f(x) = \sin(2\pi x), \tag{8}$$
$$f(x) = \exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25}\right)^2\right]. \tag{9}$$

初期条件:$f(x) = \sin(2\pi x)$ の場合

(6) 式に (8) 式を代入して解いてみる.

$$\begin{aligned} u_m(0) &= \int_0^1 \sin(2\pi x)\exp[-i2\pi mx]dx \\ &= \int_0^1 \sin(2\pi x)(\cos(2\pi mx) - i\sin(2\pi mx))dx \\ &= \int_0^1 (\cos(2\pi mx)\sin(2\pi x) - i\sin(2\pi mx)\sin(2\pi x))dx \end{aligned}$$

途中の式変形ではオイラーの公式を使用した. 三角関数の直行性から $m=1$ 以外は 0 になるので,

$$\begin{aligned} u_{m=1}(0) &= -i\int_0^1 \sin^2(2\pi x)dx \\ &= -i\left[\frac{x-\cos^2(2\times 2\pi x)}{2}\right]_0^1 \\ &= -\frac{i}{2}. \end{aligned} \tag{10}$$

(12) 式を (7) 式に代入すると解析解がわかって,

$$U(x,t) = \mathrm{Re}\left[-\frac{i}{2}\exp(i2\pi\{x-ct\} - \{2\pi\}^2\kappa t)\right] \tag{11}$$

$$= \frac{1}{2}\sin(2\pi\{x-ct\} - \{2\pi\}^2\kappa t) \tag{12}$$

となる.

初期条件:$f(x) = \exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25}\right)^2\right]$ の場合

(6) 式に (9) 式を代入して解いてみる.

$$\begin{aligned} u_m(0) &= \int_0^1 \exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25}\right)^2\right]\exp[-i2\pi mx]dx \\ &= \int_0^1 \exp\left[-\left(4^2x^2-4^2x+4\right)^2\right]\exp[-i2\pi mx]dx \\ &= \int_0^1 \exp\left[-\left(4^2x^2-(4^2-i2\pi m)x+4\right)^2\right]dx \\ &= \int_0^1 \exp\left[-4^2\left(x-\frac{1-\frac{i2\pi m}{4^2}}{2}\right)^2 - 4 + 4\left(1-\frac{i2\pi m}{4^2}\right)^2\right]dx \\ &= \int_0^1 \exp\left[-4^2\left(x-\frac{1-\frac{i2\pi m}{4^2}}{2}\right)^2\right]\exp\left[-i\pi m - \frac{(\pi m)^2}{4^2}\right]dx \\ &= \exp\left[-i\pi m - \frac{(\pi m)^2}{4^2}\right]\int_0^1 \exp\left[-4^2\left(x-\frac{1-\frac{i2\pi m}{4^2}}{2}\right)^2\right]dx. \end{aligned} \tag{13}$$

(13) 式の右辺はガウス関数の 0 から 1 の範囲を表している[1]. (**??**) 式を (7) 式に代入すると,

$$
\begin{aligned}
U(x,t) &= \mathrm{Re}\left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} u_k(0)\exp(i2k\pi\{x-ct\}-\{2\pi k\}^2\kappa t)\right] \\
u_k(0) &= \exp\left[-i\pi k-\frac{(\pi k)^2}{4^2}\right]\int_0^1 \exp\left[-4^2\left(x-\frac{1-\frac{i2\pi k}{4^2}}{2}\right)^2\right]dx
\end{aligned}
\tag{14}
$$

[1]ガウス関数とは

$$g(x) = a\exp[-\frac{x-b^2}{2c}]$$

という形の関数で $x=b$ を中心とした左右対称な偶関数で, 釣鐘の形をしていて, 分布確率を表す関数である. このガウス関数を全領域で積分した形はガウス積分という. 今, $a=1, b=1, c=\frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$ とすると, ガウス積分は

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty}\exp[-\alpha x^2]dx$$

となる. この値は解析的に求められる. 今から簡易的にガウス積分の値を求める.
I の二乗値を考える. 積分範囲をそれぞれ x,y とすると,

$$
\begin{aligned}
I^2(\alpha) &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp[-\alpha x^2]\exp[-\alpha y^2]dxdy \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp[-\alpha(x^2+y^2)]dxdy.
\end{aligned}
$$

ここで, $x=r\cos\theta$,$y=r\sin\theta$ と座標変換すると,

$$
\begin{aligned}
I^2(\alpha) &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\exp[-\alpha r^2]rdrd\theta \\
&= \int_0^{2\pi}d\theta\int_0^{\infty}r\exp[-\alpha r^2]dr.
\end{aligned}
$$

$\frac{d(\exp[-\alpha r^2])}{dr} = -2\alpha r\exp[-\alpha r^2]$ なので右辺の積分は求められて,

$$
\begin{aligned}
I^2(\alpha) &= \int_0^{2\pi}d\theta\left[-\frac{1}{2\alpha}\exp[-\alpha r^2]\right]_0^{\infty} \\
&= 2\pi\cdot\frac{1}{2\alpha}(\exp[0]-\exp[-\infty]) \\
&= \frac{\pi}{\alpha}
\end{aligned}
$$

となる. よって,

$$I(\alpha) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

となってガウス積分が求められる.

となる.

1 次元移流拡散方程式の数値解

(1) 式を数値解法で解を求める. 今回は空間方向の離散化中心差分を用いた. さらに時間方向には 3 つの場合で行った. それぞれ, ①全ての項にオイラースキームを用いた場合, ②移流解にリープフロッグスキーム, 拡散解にオイラースキームを用いた場合, ③移流解にリープフロッグスキームとタイムフィルターとしてアセランフィルターを使い, 拡散項はオイラースキームを用いた場合の 3 つである. また, 初期条件は先に使った 2 つの初期条件を用いてそれぞれについて解く. 用いたスキームを表 1 にまとめる.

番号	項	スキーム
①	移流項	オイラースキーム
	拡散項	
②	移流項	リープフロッグスキーム
	拡散項	オイラースキーム
③	移流項	リープフロッグスキーム & アセランフィルタ
	拡散項	オイラースキーム

表 1: それぞれの項に用いたスキーム. さらに 2 つの初期条件について数値解法を行っているので計 6 回行った.

さらに, それぞれのスキームでは用いたパラメータは同じである. 用いたパラメータを表 2 にまとめる.

移流速度 c	拡散係数 κ	フィルタ係数 ν	時間格子間隔 Δt	空間格子間隔 Δx
$1.0\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{s}$	$0.01\,\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}$	0.25	$0.0125\,\mathrm{s}$	$0.1\,\mathrm{m}$

表 2: 今回行った数値計算のパラメータ.

二つの初期条件の図をそれぞれ図 1, 図 2 に載せる.

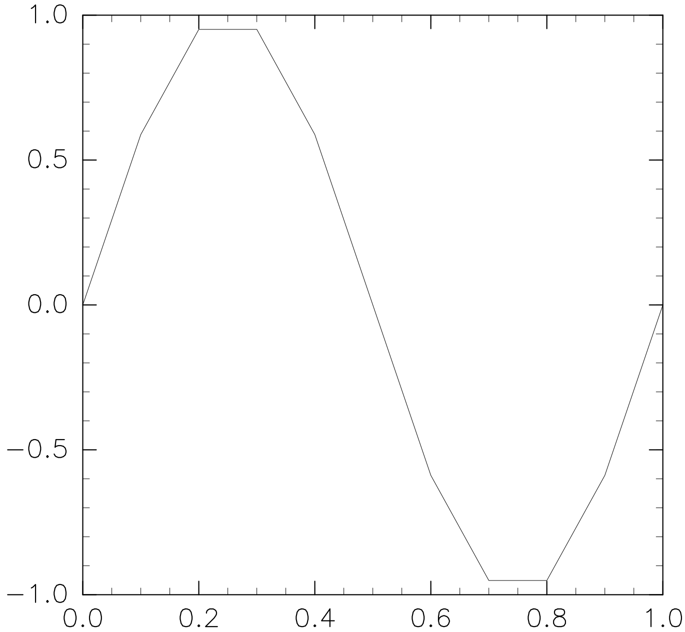

図 1: 初期条件 $f(x) = \sin(2\pi x)$ の図.

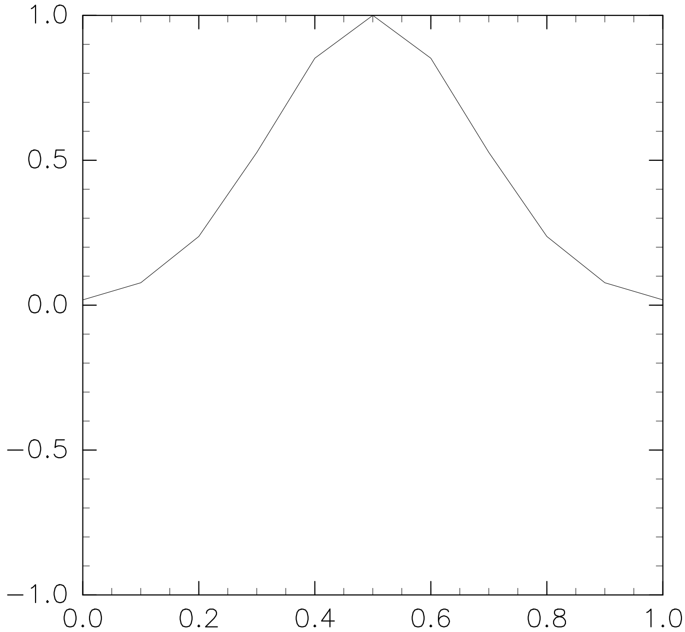

図 2: 初期条件 $f(x) = \exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25}\right)^2\right]$ の図.

①の場合

(1) 式を空間方向には中心差分, 時間方向にはオイラースキームを用いて離散化する. $U(i\Delta x, n\Delta t) = U_i^n$ とすると,

$$
\begin{aligned}
\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} &= -c\frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\kappa}{\Delta x}\left(\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}}^n - \left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}^n \right) \\
&= -c\frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\kappa}{\Delta x}\left(\frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x} - \frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x} \right) \\
&= -\frac{c}{2\Delta x}(U_{i+1}^n - U_{i-1}^n) + \frac{\kappa}{(\Delta x)^2}\left(U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n \right).
\end{aligned}
$$

よって,

$$
U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x}(U_{i+1}^n - U_{i-1}^n) + \frac{\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n \right). \qquad (15)
$$

(15) 式を用いて数値計算した結果が図 3 と図 4 である. それぞれ初期条件を $f(x) = \sin(2\pi x)$ と $f(x) = \exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25} \right)^2 \right]$ とした場合である. どちらも表 2 のパラメータで $t = 10$ まで数値的に計算した.

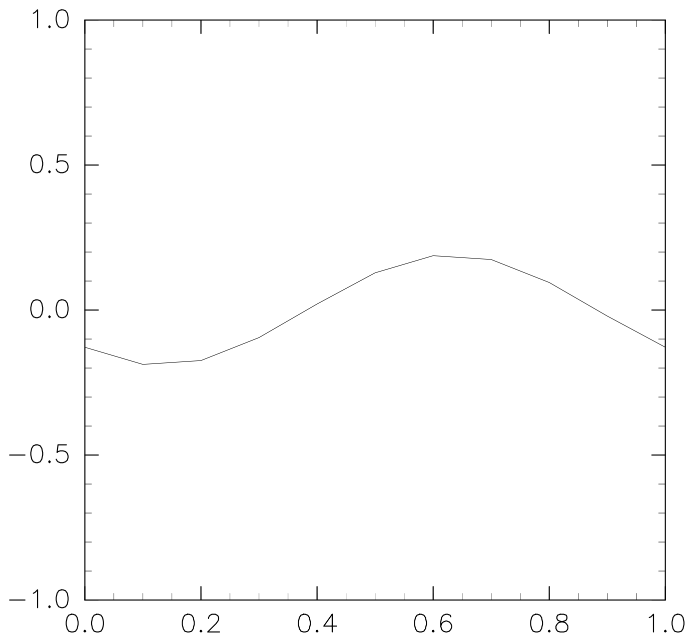

図 3: $f(x) = \sin(2\pi x)$ で,$\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0125$, $t = 10$ での図.

Δt を Δx に対して十分小さくとっているので発散せず計算が終わっている. しかし, Δt が Δx に対して十分小さくないと発散してしまう. これはオイラースキー

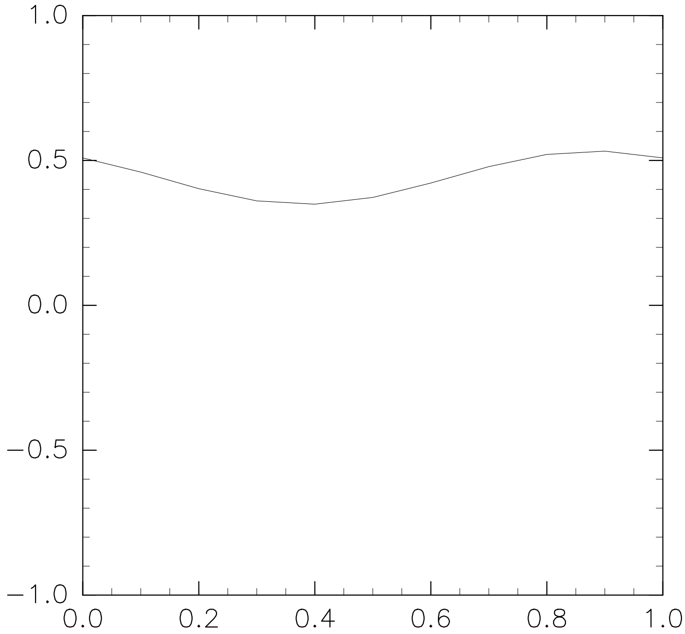

図 4: $f(x) = \sin(2\pi x)$ で,$\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0125$, $t = 10$ での図.

ムでは 1 次元移流方程式で不安定であるためである. オイラースキームの 1 次元移流方程式の安定性は 第 10 章 1 次元移流方程式の数値解法: 付録 1 (Mesinger and Arakawa,1976: Chapt3) より

$$
\begin{aligned}
|\lambda| &= \sqrt{1 + \left(c\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2} \\
&= \sqrt{1 + \left(\frac{0.0125}{0.1}\right)^2} \\
&= \sqrt{1.015625} \\
&\approx 1
\end{aligned}
$$

なので今回は発散しなかったが常に増幅率が 1 より大きいので不安定である.

②の場合

(1) 式を空間方向には中心差分, 時間方向には移流項にリープフロッグスキーム, 拡散項にオイラースキームを用いて離散化すると,

$$\begin{aligned}
\frac{U_i^{n+1}-U_i^{n-1}}{2\Delta t} &= -c\frac{U_{i+1}^n-U_{i-1}^n}{2\Delta x}+\frac{\kappa}{\Delta x}\left(\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}}^{n-1}-\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}^{n-1}\right)\\
&= -c\frac{U_{i+1}^n-U_{i-1}^n}{2\Delta x}+\frac{\kappa}{\Delta x}\left(\frac{U_{i+1}^{n-1}-U_i^{n-1}}{\Delta x}-\frac{U_i^{n-1}-U_{i-1}^{n-1}}{\Delta x}\right)\\
&= -\frac{c}{2\Delta x}(U_{i+1}^n-U_{i-1}^n)+\frac{\kappa}{(\Delta x)^2}\left(U_{i+1}^{n-1}-2U_i^{n-1}+U_{i-1}^{n-1}\right).
\end{aligned}$$

よって,

$$U_i^{n+1}=U_i^{n-1}-\frac{c\Delta t}{\Delta x}(U_{i+1}^n-U_{i-1}^n)+\frac{2\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(U_{i+1}^{n-1}-2U_i^{n-1}+U_{i-1}^{n-1}\right). \qquad (16)$$

(16) 式を用いて数値計算した結果が図 7 と図 8 である. それぞれ初期条件を $f(x)=\sin(2\pi x)$ と $f(x)=\exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25}\right)^2\right]$ とした場合である. どちらも表 2 のパラメータで $t=10$ まで数値的に計算した.

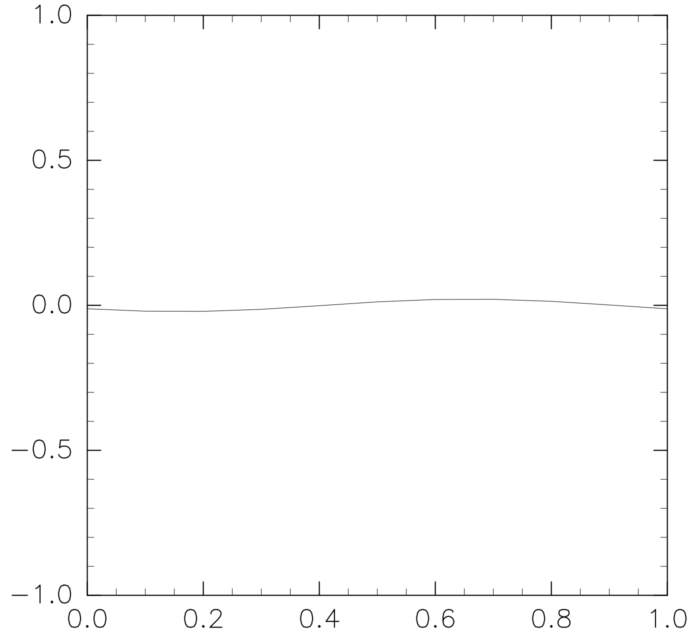

図 5: $f(x)=\sin(2\pi x)$ で,$\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.0125$, $t=10$ での図.

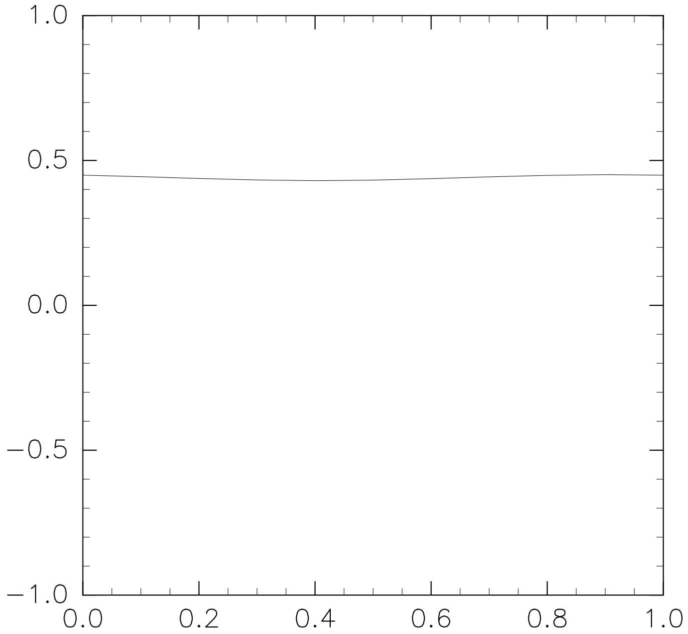

図 6: $f(x) = \sin(2\pi x)$ で,$\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0125$, $t = 10$ での図.

安定して計算はできている. オイラースキームに比べて減衰が大きく起こっている. リープフロッグスキームの 1 次元移流方程式に対する安定性は

$$2\pi\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

である. 今回は

$$2\pi\frac{\Delta t}{\Delta x} \approx 0.785$$

なので満たしている. オイラースキームの拡散方程式に対する安定性は

$$0 < \kappa\left(\frac{2\pi}{\Delta x}\right)^2 \Delta t \leq 1$$

今回の場合は

$$\kappa\left(\frac{2\pi}{\Delta x}\right)^2 \Delta t \approx 0.493$$

であるので今回はリープフロッグスキームの安定性条件に縛られている.

$$c > \kappa\frac{2\pi}{\Delta x}$$

のときリープフロッグスキームの安定性条件によって制約される.

③の場合

基本は③と同じだが移流項にアセランフィルタを用いる. 時刻 $(n-1)\Delta t$ に時間フィルタをかける. U^* はフィルターを掛ける前の値を示す. (16) 式にフィルタを掛けると,

$$U_i^{n+1,*} = U_i^{n-1} - \frac{c\Delta t}{\Delta x}(U_{i+1}^{n,*} - U_{i-1}^{n,*}) + \frac{2\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(U_{i+1}^{n-1} - 2U_i^{n-1} + U_{i-1}^{n-1}\right), \tag{17}$$

$$U_i^n = U_i^{n,*} + 0.5\mu(U_i^{n+1,*} - 2U_i^{n,*} + U_i^{n-1}) \tag{18}$$

(17) 式, (18) 式を用いて数値計算した結果が図**??**と図**??**である. それぞれ初期条件を $f(x) = \sin(2\pi x)$ と $f(x) = \exp\left[-\left(\frac{x-0.5}{0.25}\right)^2\right]$ とした場合である. どちらも表 2 のパラメータで $t = 10$ まで数値的に計算した.

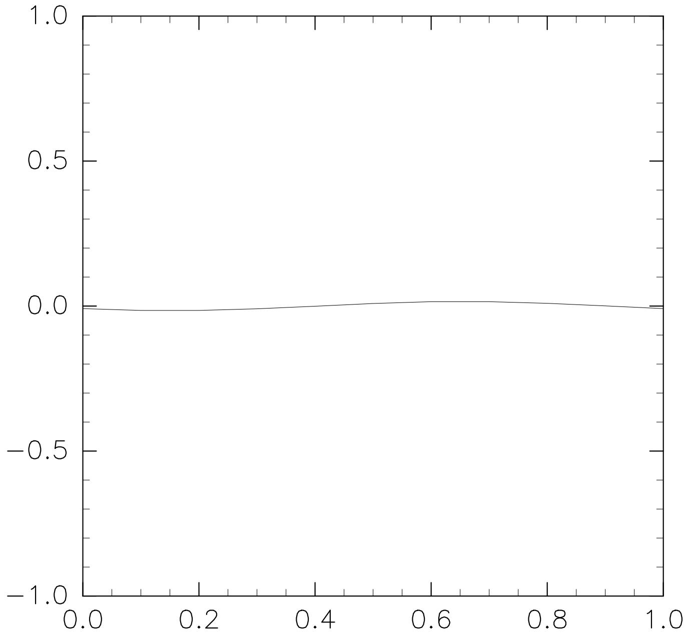

図 7: $f(x) = \sin(2\pi x)$ で,$\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0125$, $t = 10$ での図.

安定して計算できた.

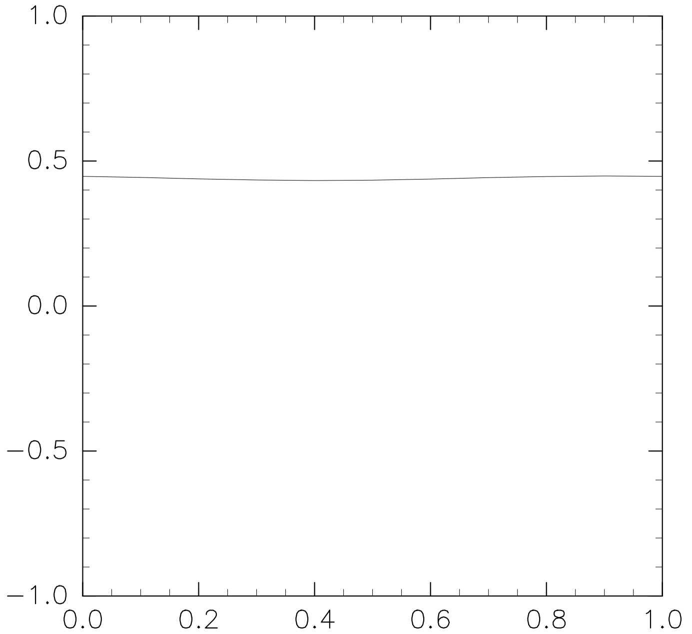

図 8: $f(x) = \sin(2\pi x)$ で,$\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0125$, $t = 10$ での図.

参考文献

石岡 圭一, 2004,「スペクトル法による数値計算入門」, 東京大学出版会, ISBN:4130613057

荻原 弘尭, 2010,「スペクトル法を用いた数値計算– 一次元線形移流方程式の場合–」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/∼psg/doc2011/ogihara_B/ogihara_B.pdf

川畑拓也, 2010,「第 10 章 1 次元移流方程式の数値解法: 付録 1 (Mesinger and Arakawa,1976: Chapt3)
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/ gfdlab/comptech/y2010/resume/0106/2011_0106-takuya.pdf

荻原 弘尭, 2011,「時間差分スキーム (2)」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/g̃fdlab/comptech/resume/0804/2011_0803-ogihara.pdf

荻原 弘尭, 2012,「摩擦方程式」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/g̃fdlab/comptech/resume/0112/2012_0112-ogihara.pdf

荻原 弘尭, 2012,「1 次元拡散方程式」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/g̃fdlab/comptech/resume/0119/2012_0202-ogihara.pdf