SPMODEL サンプルプログラム

1 次元移流拡散方程式モデル

advdiff1.f90, advdiff2.f90, advdiff3.f90

竹広 真一, 小高 正嗣

2004 年 3 月 19 日

目 次

1 概要 2

2 支配方程式系 3
2.1 支配方程式系 3
2.2 境界条件 3

3 離散化 4
3.1 水平離散化 4
3.2 水平方向のスペクトル表現 4
3.3 時間積分 5
3.3.1 Euler スキーム 5
3.3.2 Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキーム 5

4 使用モジュールとその他の設定 6

5 数値実験 7

6 参考文献 11

謝辞 12

1　概要

SPMODEL サンプルプログラム『advdiff1.f90』, 『advdiff2.f90』および『advdiff3.f90』に用いられている基礎方程式と境界条件, および, このプログラムを用いた数値実験の方法について解説する. 基礎方程式は, 1 次元の移流拡散方程式である. 計算はスペクトル法を用いて行い, 展開はフーリエ級数を用いて行う. 波数切断は三角切断である. スペクトル変換と逆変換および微分演算には, SPMODEL ライブラリ (spml) を用いている. 時間積分法は『advdiff1.f90』では Euler スキーム, 『advdiff2.f90』と『advdiff3.f90』では移流項に Adams-Bashforth スキームを用い, 拡散項には Crank Nicholson スキームを用いる. 『advdiff3.f90』では, 移流項と拡散項を計算する時刻レベルをずらして方法 (operator splitting method) を用いた. 数値実験では初期にデルタ関数的な分布を与えた場合の時間発展を計算する.

プログラム名

advdiff1.f90, advdiff2.f90, advdiff3.f90

プログラム取得元

http://www.gfd-dennou.org/arch/spmodel/1d-cyclic-e/advection-diffusion/SIGEN.htm

SPMODEL サンプルプログラム目次

http://www.gfd-dennou.org/arch/spmodel/sample.htm

SPMODEL の使い方

http://www.gfd-dennou.org/arch/spmodel

2　支配方程式系

ここでは支配方程式系と境界条件を記す.

2.1　支配方程式系

支配方程式は 1 次元の移流拡散方程式である.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \tag{1}$$

各記号は以下の量をあらわす. 以下では u は定数とする.

記号	変数/物理定数
x	水平位置
t	時間
u	流速
C	振幅
D	拡散係数

表 1: 変数, 物理定数の定義

2.2　境界条件

水平方向の境界条件は周期境界条件である. すなわち, 水平計算領域を x_m とすると,

$$C(x + x_m) = C(x),$$

である.

3　離散化

この節では方程式系の空間離散化および使用した時間積分法について説明, プログラム内で実際に用いられている方程式を記述する.

3.1　水平離散化

支配方程式の離散表現は以下のようになる.

$$\frac{\partial C_i(t)}{\partial t} + u\frac{\partial C_i(t)}{\partial x} = D\frac{\partial^2 C_i(t)}{\partial x^2}. \tag{2}$$

ここで下付き添字 i は水平格子点 x_i 上での値を示す.

3.2　水平方向のスペクトル表現

空間離散化した支配方程式 (2) をスペクトル法を用いて表現する. 空間方向のスペクトル展開はフーリエ級数を用いて行う. 以下では k を x 方向波数, K を切断波数, I を x 方向格子点数とする.

$C_i(t)$ はスペクトル逆変換によって以下のように展開される:

$$C_i(t) = \sum_{k=0}^{K} \exp\left(\frac{2\pi i k x_i}{x_m}\right)\hat{C}_k. \tag{3}$$

スペクトル係数 $\hat{C}_k$ は以下のスペクトル変換によって与えられる:

$$\hat{C}_k = \frac{1}{I}\sum_{i=0}^{I-1} \exp\left(-\frac{2\pi i k x_i}{x_m}\right)C_i. \tag{4}$$

(3), (4) より, (2) のスペクトル表現は以下のようになる.

$$\frac{\partial \hat{C}_k}{\partial t} = -u\left(\frac{2\pi i k}{x_m}\right)\hat{C}_k + D\left(\frac{2\pi i k}{x_m}\right)^2\hat{C}_k. \tag{5}$$

3.3　時間積分

ここでは時間積分法について記述し, プログラム内で実際に用いられている方程式を記述する. 以下では Δt を時間格子間隔, 時刻 $\tau\Delta t$ における $\hat{C}_k$ の値を $\hat{C}_k^\tau$ 等と表す.

3.3.1　Euler スキーム

Euler スキームを用いて (5) 式を時間方向に離散化すると, 以下のように表される.

$$\hat{C}_k^{\tau+1} = \hat{C}_k^\tau + \Delta t \left\{ -u \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right) \hat{C}_k^\tau + D \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right)^2 \hat{C}_k^\tau \right\}. \tag{6}$$

3.3.2　Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキーム

移流項に Adams-Bashforth スキーム, 拡散項には Crank Nicholoson スキームを適用して (5) 式を時間方向に離散化する.

$$\frac{\hat{C}_k^{\tau+1} - \hat{C}_k^\tau}{\Delta t} = -\frac{u}{2} \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right) \left(3\hat{C}_k^\tau - \hat{C}_k^{\tau-1} \right) + \frac{D}{2} \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right)^2 \left(\hat{C}_k^{\tau+1} + \hat{C}_k^\tau \right) \tag{7}$$

したがって,

$$\left\{ 1 - \frac{D\Delta t}{2} \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right)^2 \right\} \hat{C}_k^{\tau+1} = \hat{C}_k^\tau - \frac{u\Delta t}{2} \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right) \left(3\hat{C}_k^\tau - \hat{C}_k^{\tau-1} \right) + \frac{D\Delta t}{2} \left(\frac{2\pi ik}{x_m} \right)^2 \hat{C}_k^\tau \tag{8}$$

となる.

4　使用モジュールとその他の設定

スペクトル変換と逆変換, 微分演算は SPMODEL ライブラリ (spml) の ae_module に含まれる関数を用いて行う. spml が下位で使用する ISPACK の仕様から, 格子点数 I は偶数で, かつ $I/2 = 2^a 3^b 5^c$ (a, b, c は 0 または整数) でなければならない. 非線形項の計算によって生じるエリアジングを防ぐため, 格子点数 I と切断波数 K は $I > 3K$ を満たすように与える.

5　数値実験

x 方向無限領域での (1) 式の解析解の一つとして

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2\sqrt{\pi D t}} \exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}\right] \tag{9}$$

が存在する. これは初期状態 $t=0$ で $x=0$ にデルタ関数的な分布が, 時間がたつにつれて移流されつつ拡散し分布が広がっていく解である.

そこで, 初期条件として

$$C(x,0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D t_0}} \exp\left[-\frac{(x-0.25x_m)^2}{4Dt_0}\right] \tag{10}$$

を与えることにする. ここで $t_0 = 10^{-2}$ とした. 水平計算領域の大きさ x_m は $x_m = 5.0$ とする. その他のパラメータ u, D はそれぞれ $u = 10.0, D = 1.0$ とする.

格子点数 I と切断波数 K はそれぞれ $I = 64, K = 31$ とする. 時間格子間隔は, 『advdiff1.f90』(Euler スキームを用いる場合) では $\Delta t = 10^{-4}$ sec, 『advdiff2.f90』と『advdiff3.f90』(Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキームを用いる場合) では $\Delta t = 10^{-3}$ sec である. 計算ステップ数はそれぞれ 2,000 と 200 である.

計算結果を図 1∼図 6 に示す. 図 1, 図 3, 図 5 では解析解を破線で示しているが, 数値解とほぼ一致しているため図中では区別ができないことに注意されたい.

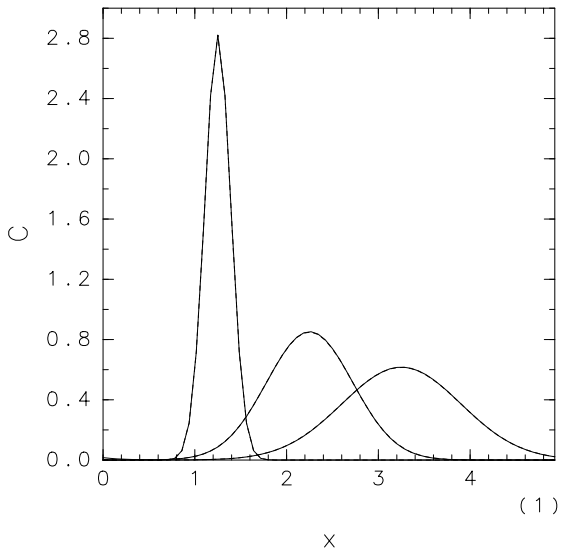

図 1: Euler スキームを用いた場合の数値計算の結果. $t = 0.0, 0.1, 0.2$ における分布. 破線は解析解を表す.

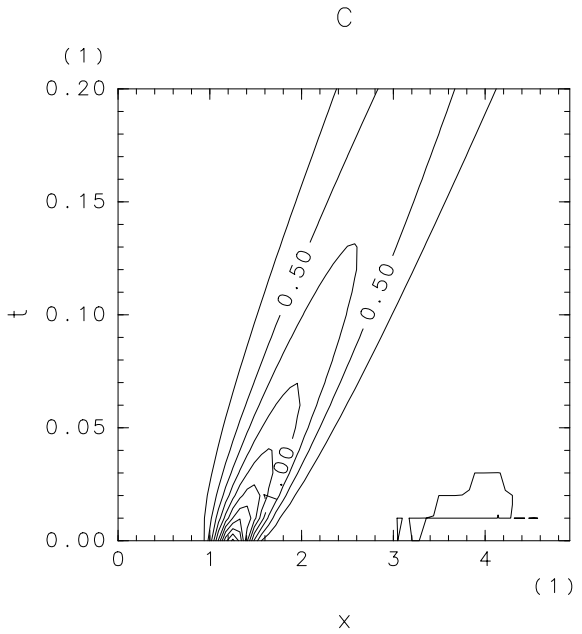

図 2: Euler スキームを用いた場合の数値計算の結果. x-t 断面図.

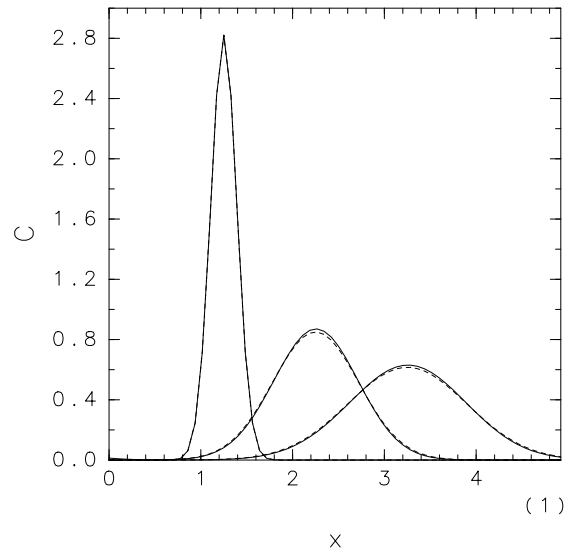

図 3: Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキームを用いた場合の数値計算の結果. $t = 0.0, 0.1, 0.2$ における分布. 破線は解析解を表す.

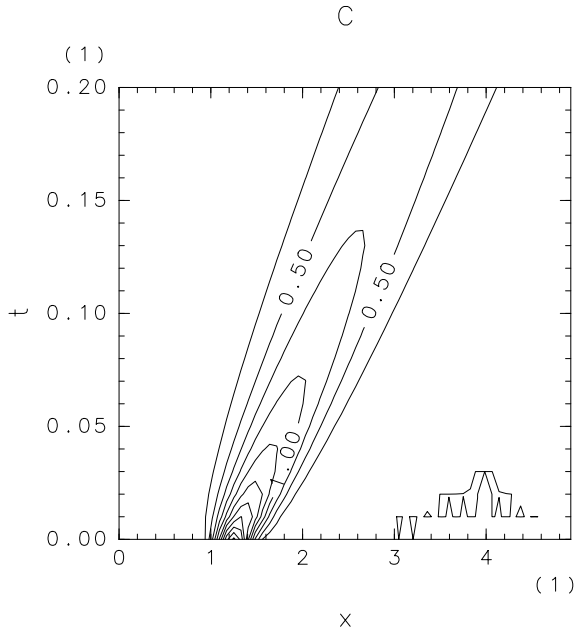

図 4: Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキームを用いた場合の数値計算の結果. x-t 断面図.

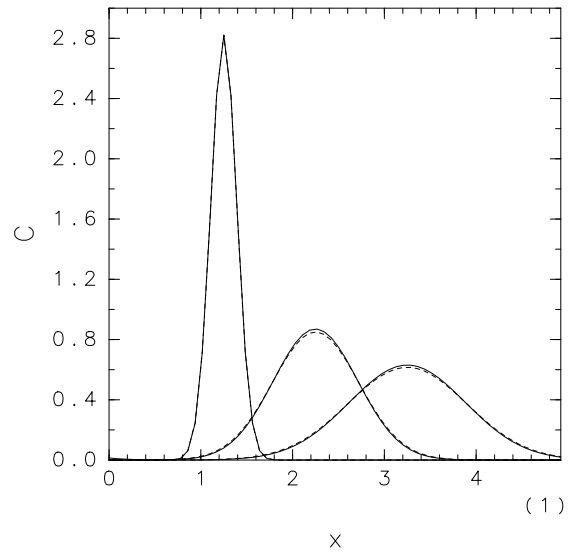

図 5: Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキームと operator splitting 法を用いた場合の数値計算の結果. $t = 0.0, 0.1, 0.2$ における分布. 破線は解析解を表す.

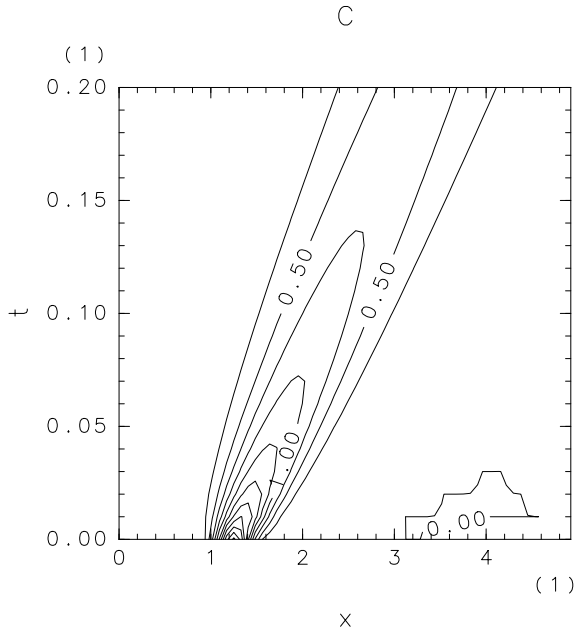

図 6: Adams-Bashforth + Crank Nicholson スキームと operator splitting 法を用いた場合の数値計算の結果. x-t 断面図.

6　参考文献

竹広真一, 石岡圭一, 森川靖大, 小高正嗣, 石渡正樹, 林祥介, SPMODEL 開発グループ, 2004: 階層的地球流体力学スペクトルモデル集 (SPMODEL), http://www.gfd-dennou.org/arch/spmodel/, 地球流体電脳倶楽部.

Spiegelman, M., 2002: Myth & Methods in Modelling, http://www.ldeo.columbia.edu/~spieg/mmm/

謝辞

本資源は, 地球流体電脳倶楽部のインターネット上での学術知識の集積と活用の実験の一環として

http://www.gfd-dennou.org/arch/spmodel/

において公開されているものである (©地球流体電脳倶楽部スペクトルモデルプロジェクト spmodel@gfd-dennou.org 2002.). 本資源は, 著作者の諸権利に抵触しない (迷惑をかけない) 限りにおいて自由に利用していただいて構わない. なお, 利用する際には今一度自ら内容を確かめることをお願いする (無保証無責任原則).

本資源に含まれる元資源提供者 (図等の版元等を含む) からは, 直接的な形での WEB 上での著作権または使用許諾を得ていない場合があるが, 勝手ながら, 「未来の教育」のための実験という学術目的であることをご理解いただけるものと信じ, 学術標準の引用手順を守ることで諸手続きを略させていただいている. 本資源の利用者には, この点を理解の上, 注意して扱っていただけるようお願いする. 万一, 不都合のある場合には

spmodel@gfd-dennou.org

まで連絡していただければ幸いである.