

偏微分方程式数値解法のための直交選点有限要素法の開発

正会員 函館高専 大久保孝樹

1. はじめに

有限要素法における各要素の補間関数(試行関数, 形状関数)の係数を求める方法として, 変分法あるいは重みつき残差法が用いられるのが一般的である. 大久保らは, 非線形の1次元の生物膜モデル(物質移動拡散モデル)を重みつき残差法の一つである直交選点法で区分的に空間を離散化し, 時間をk段階のRunge-Kutta法で計算し, 良い結果を得ている. これは, 空間の離散化に対してのみ, 有限要素法と重みつき残差法の手法を用いているが, 時間を対象とした初期値問題に関しても, 同様の考え方をを用いることができる. 時間の離散化の問題に関しては, 1960年代の化学工学関連のVilladsenによる拡散方程式(偏微分方程式)の時空間における直交選点法を用いた離散化手法が挙げられる. 本研究では, 空間の離散化への直交選点有限要素法の応用として, 2次元の非線形拡散反応方程式である生物膜モデルの数値解析を例に取った. ここでの直交選点有限要素法は, 各要素の補間関数として直交関数であるルジャンドルの直交多項式を用い, 重みつき残差法として直交選点法を用いている. また, 時間の離散化への直交選点有限要素法の応用としても, 非定常の非線形拡散反応方程式を例に取った.

2. 対象とする偏微分方程式

本研究では好酸性鉄酸化バクテリア(*Thiobacillus Ferrooxidans*)によって形成された生物膜モデルを表す2次元2変数の偏微分方程式を対象としている. 従属変数としては, Fe^{2+} (第一鉄濃度): SとDO(溶存酸素): Cである. 好酸性鉄酸化バクテリアは第一鉄を基質としてDO(溶存酸素)を用いて酸化しエネルギーを得ているバクテリアである. このモデルでは, 好酸性鉄酸化バクテリアの集合体である生物膜内で Fe^{2+} (S)とDO(C)が消費($r_s(S, C)$)され, 生物膜の上部に拡散層が存在する形となっている.

以下に, 偏微分方程式群と境界条件を示す.

〔生物膜内〕

$$u \frac{\partial S}{\partial x} + v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xyf} \frac{\partial S}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{ysf} \frac{\partial S}{\partial y} \right) + r_s(S, C) = 0 \quad (1)$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xcf} \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{ycf} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + r_c(S, C) = 0$$

〔拡散層内〕

$$u \frac{\partial S}{\partial x} + v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xs} \frac{\partial S}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{ys} \frac{\partial S}{\partial y} \right) = 0$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xc} \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yc} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = 0 \quad (2)$$

〔境界条件例〕

$$\left(uS - D_{xyf} \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left(vS - D_{ysf} \frac{\partial S}{\partial y} \right) m = \left(uS - D_{xs} \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left(vS - D_{ys} \frac{\partial S}{\partial y} \right) m$$

$$\left(uC - D_{xcf} \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left(vC - D_{ycf} \frac{\partial C}{\partial y} \right) m = \left(uC - D_{xc} \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left(vC - D_{yc} \frac{\partial C}{\partial y} \right) m \quad (3)$$

(1)式の生物膜内部での消費項 $r_s(S, C)$ は, 経験によってダブルモノータイプの反応式によって表示される.

$$r_s(S, C) = \frac{v_{smax} S}{K_s + S} \frac{C}{K_c + C} X_f \quad (4)$$

$$r_c(S, C) = \frac{\alpha v_{smax} S}{K_s + S} \frac{C}{K_c + C} X_f$$

v_{smax} : 最大比基質消費速度 K_s : Fe^{2+} に関する基質飽和定数 K_c : DO(酸素)に関する基質飽和定数

X_f : 微生物密度 α : Fe^{2+} と酸素(O_2)の化学量論比

3. 直交選点法による定式化(空間の離散化)

選点法は重みつき残差法の一つであり, 多項式によって作られた微分方程式の残差を選点で0となるようにする. 直交選点法として, N個の選点の位置は $P_N(z)$ の式の根として求めるが, この式は $W(z)=1$ であるルジャンドルの直交多項式として次式によって表される.

$$P_N(z) = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \binom{n+r}{r} z^r \quad (5)$$

座標 z を用い, 基質S, 酸素Cを直交関数で表現すると2次元の直交多項式は1次元の直交多項式の積として表される. 以下, Sのみに関して表示するが, Cに関しても同様の表示となる.

$$S = \sum_{i=1}^{n_1+2n_2+2} \sum_{j=1}^{n_1} d_{ij} \xi^{i-1} \eta^{j-1} \quad (6)$$

上式の直交選点(1m点)での第1微分と第2微分を求める.

$$\begin{aligned} \overline{S} &= \overline{Qd} & \frac{\partial S}{\partial \xi} &= \overline{D_\xi Q}^{-1} \overline{S} = \overline{A_\xi S} \\ \frac{\partial S}{\partial \xi} &= \overline{D_\xi d}, & \frac{\partial S}{\partial \eta} &= \overline{D_\eta d} & \frac{\partial S}{\partial \eta} &= \overline{D_\eta Q}^{-1} \overline{S} = \overline{A_\eta S} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} &= \overline{E_\xi d}, & \frac{\partial^2 S}{\partial \eta^2} &= \overline{E_\eta d} & \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} &= \overline{E_\xi Q}^{-1} \overline{S} = \overline{B_\xi S} \\ & & & & \frac{\partial^2 S}{\partial \eta^2} &= \overline{E_\eta Q}^{-1} \overline{S} = \overline{B_\eta S} \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} Q_{lm} &= \xi_l^{i-1} \eta_m^{j-1} \\ D_{\xi lm} &= (i-1) \xi_l^{i-2} \eta_m^{j-1} \\ D_{\eta lm} &= (j-1) \xi_l^{i-1} \eta_m^{j-2} \\ E_{\xi lm} &= (i-1)(i-2) \xi_l^{i-3} \eta_m^{j-1} \\ E_{\eta lm} &= (j-1)(j-2) \xi_l^{i-1} \eta_m^{j-3} \end{aligned}$$

Sの微分が選点でのSの値によって表示されることがわかり, 行列A, Bは, 線形代数における微分作用素の働きをしている. これらの微分表示を, 2節で説明した定常状態の偏微分方程式に代入すると, 次式のように表される.

キーワード: 直交選点法, 有限要素法, 偏微分方程式, 定常問題, 非定常問題

連絡先: 042-8501 函館市戸倉町14-1 函館高専環境都市工学科 TEL.(FAX)0138-59-6487

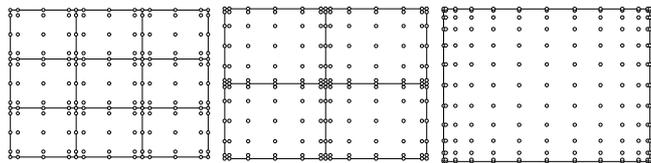


図1 生物膜内部の要素分割と直交選点配置例

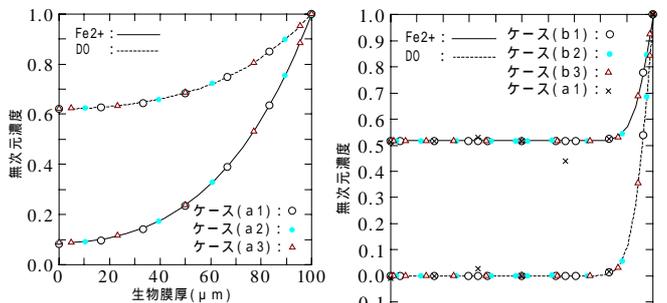


図2 自由度 49 における要素分割の影響 (S=20mg/l,C=2mg/l,L=100 μm)

図3 自由度 169 における要素分割の影響 (S=50mg/l,C=1mg/l,L=500 μm)

$$\begin{cases} \text{〔生物膜内〕} \\ \left[u_1 \bar{A}_{\xi lm} + v_1 \bar{A}_{\eta lm} - D_{xsf} \bar{B}_{\xi lm} - D_{ysf} \bar{B}_{\eta lm} \right. \\ \left. + \frac{v_{s \max} C_l}{K_s + S_l} \frac{C_l}{K_C + C_l} X_f \bar{E} \right] \bar{S} = 0 \\ \left[u_1 \bar{A}_{\xi lm} + v_1 \bar{A}_{\eta lm} - D_{xsf} \bar{B}_{\xi lm} - D_{ysf} \bar{B}_{\eta lm} \right. \\ \left. + \frac{\alpha v_{s \max} S_l}{K_s + S_l} \frac{1}{K_C + C_l} X_f \bar{E} \right] \bar{C} = 0 \end{cases} \quad (8)$$

4. 直交選点有限要素法による時間の離散化

ここでは、直交選点有限要素法を時間による変化を表示した発展方程式の離散化に応用することを試みた。時間に関する発展方程式を以下のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1}{\partial t} &= f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) & \bar{A}y_1 &= \bar{f}_1(t, \bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \\ \frac{\partial y_2}{\partial t} &= f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) & \bar{A}y_2 &= \bar{f}_2(t, \bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \\ & \dots & & \vdots \\ & \dots & & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial t} &= f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n) & \bar{A}y_n &= \bar{f}_n(t, \bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \end{aligned}$$

いま、刻み幅 τ 内の独立変数 t と従属変数 y_1, y_2, \dots, y_n について直交選点法を用いる。刻み幅 τ (要素)と[0,1]は容易に変換できる。

5. 計算例

図-1 は、矩形の生物膜内部の自由度を 169 とした要素分割と直交選点の配置例である。ここで行った検証は、1 次元の生物膜モデルの数値計算結果(直交選点法・内部選点 20)を正解としている。検証は、空間の離散化と非定常問題の定常値で行っている。図-2 は、自由度 49 における要素分割の影響を示したものであるが、生物膜の条件がゆるいので内部選点数 1, 2, 5 全てで正解に一致している。図-3 は、自由度 169 で生物膜の条件が厳しい場合である。ケース(a1)の自由度 49 の内部選点数 1 の場合(x)を自由度 169 の場合と比較すると、要素境界で正解からずれ内部選点で正解に

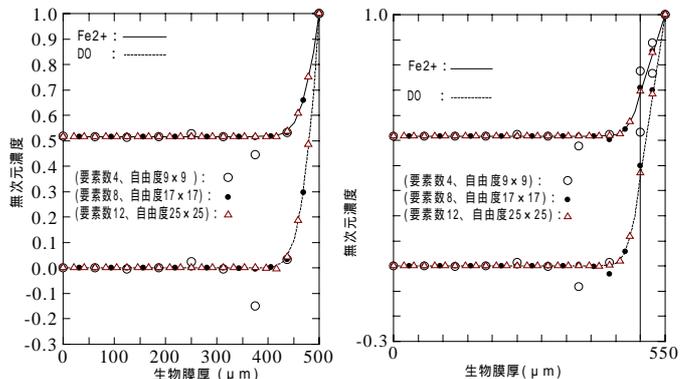


図4 内部選点 1 のときの要素分割の影響 (S=50mg/l,C=1mg/l,L=500 μm)

図5 内部選点 1 のときの要素分割の影響 (S=50mg/l,C=1mg/l,L=500 μm,l=50 μm)

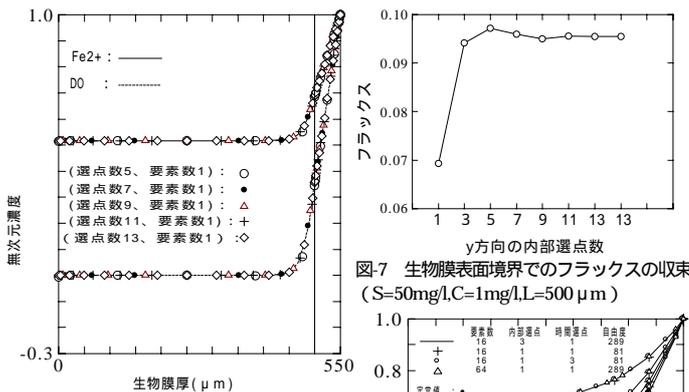


図6 1 要素における内部選点数の影響 (S=50mg/l,C=1mg/l,L=500 μm,l=50 μm)

図7 生物膜表面境界でのフラックスの収束 (S=50mg/l,C=1mg/l,L=500 μm)

一致している。このことは直交選点法の理論で、直交選点位置でほぼ正解に一致することが知られているからである。図-4、図-5 は、内部選点数を 1 とし要素分割を $4 \times 4, 8 \times 8, 12 \times 12$ とした場合の結果である。図-4 の拡散層のない場合は急変している要素境界上の点(O)の位置がずれているが内部選点では正解に一致している。図-5 の拡散層がある場合は少数要素のとき拡散層の内部選点で正解からずれているが、これは拡散層の方程式の解が 1 次式であるという拘束と生物膜表面境界の微分の精度が影響したためである。図-6 は、一要素で直交選点数が高次の場合であり、ほとんど正解と一致している。図-7 は、生物膜表面の微分から計算されたフラックスの収束を表したものであり、選点数 11 で収束している。

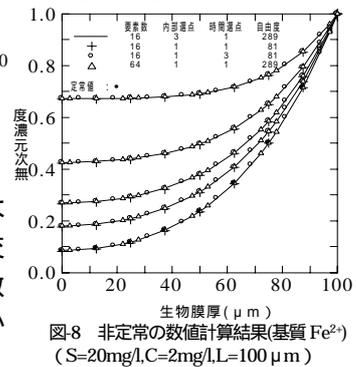


図8 非定常の数値計算結果(基質 Fe²⁺) (S=20mg/l,C=2mg/l,L=100 μm)

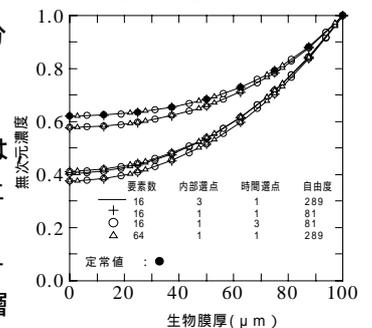


図9 非定常の数値計算結果(溶存酸素 O₂) (S=20mg/l,C=2mg/l,L=100 μm)

一致している。図-8、図-9 は、非定常の拡散反応方程式の数値計算結果である。図-8 が基質(Fe²⁺)、図-9 が溶存酸素(DO)の非定常解であるが、両者とも定常値に収束している。

6. おわりに

今後、直交選点有限要素法を Navier-Stokes の方程式と生物膜の増殖力学方程式に展開する考えである。