多群連成拡散方程式の境界要素法による解析

福井大学大学院　正会員　　福井 卓雄

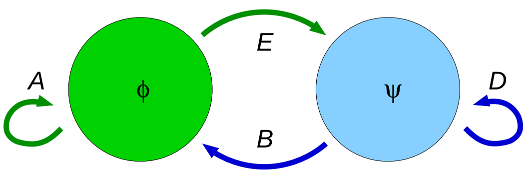
1　はじめに

Lubich による演算子積分法 [1] は各種の時間領域境界要素法を定式化する強力な手段である。その特徴は, 離散化された境界要素法の安定性が良いこと, 時間領域問題の基本解の Laplace 変換だけを用いるので, 基本解が閉じた形で決定できない（たとえば粘弾性波動問題など）時間領域問題も容易に定式化できることなどである。

著者らは前報 [2] において, 上の第二の特徴を利用して, 物質の吸収と生成をともなう拡散方程式の時間領域境界要素法の定式化を行った。本報告では, これを発展させて, 二つ以上の拡散物質が互いに影響し合いながら拡散する連成問題の解法を提案する。

2　2 群連成拡散問題

ここでは, 二つの拡散物質の連成問題を扱う。二つ以上の物質の拡散問題についても取り扱いは同様である。ここで扱う拡散問題は, 第一の物質の吸収が第二の物質を生成させ, 同時に, 第二の物質の吸収が第一の物質を生成させる拡散問題である (図–1)。



図–1　2 群拡散問題

二つの物質の濃度を ϕ, ψ とするとき, 連成拡散問題の支配方程式は

$$\left(\nabla^2 - A^2\right)\phi + B^2\psi + s = \frac{1}{C^2}\frac{\partial \phi}{\partial t} \tag{1}$$

$$\left(\nabla^2 - D^2\right)\psi + E^2\phi = \frac{1}{F^2}\frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{2}$$

となる。ここに, A, B, C, D, E, F は定数であると仮定する。ここでは, ϕ の吸収により生成される ψ の発生項を $E^2\phi$ とし, ψ の吸収による ϕ の発生項を $B^2\psi$ として, 2 群を連成させている。s は環境から生成される ϕ の発生項である。

キーワード：連成拡散問題, 時間領域境界要素法
連絡先：〒 910-8507 福井市文京 3-9-1 福井大学大学院工学研究科原子力・エネルギー安全工学専攻, Tel. 0776-27-8596

3　対分布ポテンシャルによる境界要素法

方程式 (1), (2) の初期値境界値問題を解くことを考える。解析の方法としては二通りの方法が考えられる。ひとつは, 生成項 $B^2\psi$, $E^2\phi$ を与えられた非同次の項として, ϕ, ψ を時間ステップごとに, それぞれ独立に解析する方法である。この方法では体分布ポテンシャルを計算する必要があるが, 前報で開発された手法をそのままの形で利用できる点が有利である。もうひとつの方法は, 連立微分方程式 (1), (2) の基本解（演算子積分法を用いる場合にはその Laplace 変換）を求めて ϕ, ψ を連立方程式の解として求める方法である。ここでは, 前者の方法についてのべ, 次節で後者の方法についてのべる。

3.1　境界積分方程式

いま, 境界 ∂B 上において, 境界値の組（$\phi(\boldsymbol{x},t)$ または $\partial\phi(\boldsymbol{x},t)/\partial n$）および（$\psi(\boldsymbol{x},t)$ または $\partial\psi(\boldsymbol{x},t)/\partial n$）のどちらか一方ずつが与えられているとする。この問題の解は, 境界値の繰り込み積の形で

$$\begin{aligned}C(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x},t) &= \int_{\partial B} G_\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * \frac{\partial\phi(\boldsymbol{y},t)}{\partial n}\,dS_y \\ &\quad - \int_{\partial B} S_\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * \phi(\boldsymbol{y},t)\,dS_y \\ &\quad + \int_B G_\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * \left[B^2\psi(\boldsymbol{y},t) + s(\boldsymbol{y},t)\right] dV_y \\ &\quad + \int_B G_\phi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t)\phi(\boldsymbol{y},0)\,dV_y \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}C(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t) &= \int_{\partial B} G_\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * \frac{\partial\psi(\boldsymbol{y},t)}{\partial n}\,dS_y \\ &\quad - \int_{\partial B} S_\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * \psi(\boldsymbol{y},t)\,dS_y \\ &\quad + \int_B G_\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t) * E^2\phi(\boldsymbol{y},t)\,dV_y \\ &\quad + \int_B G_\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},t)\psi(\boldsymbol{y},0)\,dV_y \end{aligned} \tag{4}$$

と表現することができる。ここに, $C(\boldsymbol{x})$ は自由項であり, $G(\boldsymbol{x}, y, t)$, $S(\boldsymbol{x}, y, t)$ は基本解および二重層核である。(3) および (4) は, $\boldsymbol{x}$ を境界に近付けるとき, 未知の境界値に関する境界積分方程式となる。数値解析の場合には, 体分布ポテンシャルの項は, 一つ前のステップまでの値を使って解析を進めることにする。

3.2 演算子積分法による境界要素法の定式化

Lubich の演算子積分法 [1] を使って境界積分方程式 (3), (4) の繰り込み積を和の形に離散化する。手順は前報 [2] の場合とまったく同じである。まず, 基本解の Laplace 変換が必要である。(1) の Laplace 変換は

$$\left[\nabla^2 - \left(A^2 + \frac{p}{C^2}\right)\right] \hat{\phi}(\boldsymbol{x}, p) = \left[\nabla^2 - \kappa(p)^2\right] \hat{\phi}(\boldsymbol{x}, p) = 0 \tag{5}$$

である。ここに, p は変換パラメータであり, $\hat{\phi}$ は ϕ の Laplace 変換である。また, $\kappa^2 = A^2 + p/C^2$ と定義した。p は複素数となるので, κ もまた複素数である。

(5) の基本解および二重層核は, 2 次元問題のとき

$$\hat{G}_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, p) = \frac{1}{2\pi} K_0(\kappa r) \tag{6}$$

$$\hat{S}_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, p) = \frac{\partial \hat{G}_\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{y}, p)}{\partial n_y} = -\frac{\kappa}{2\pi} K_1(\kappa r) \frac{\partial r}{\partial n_y} \tag{7}$$

となる。ここに, $r = |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|$ とおいた。また, K_n は第 2 種の変形 Bessel 関数である。これらの基本解は, 前報 [2] で用いたものと形式的にはまったく同じであり, 離散化の手順も同じとなる。

4 連立積分方程式による境界要素法

連立微分方程式 (1), (2) の基本解（演算子積分法を用いる場合にはその Laplace 変換）を求めて ϕ, ψ を連立方程式の解として求める方法について考えよう。

4.1 連立境界積分方程式

境界 ∂B 上において, 境界値の組 $(\phi(\boldsymbol{x}, t), \psi(\boldsymbol{x}, t))$ または（$\partial\phi(\boldsymbol{x}, t)/\partial n$, $\partial\psi(\boldsymbol{x}, t)/\partial n$）のどちらかが与えられているとするとき, 問題の解は

$$\begin{aligned} C(\boldsymbol{x}) \begin{pmatrix} \phi(\boldsymbol{x}, t) \\ \psi(\boldsymbol{x}, t) \end{pmatrix} &= \int_{\partial B} \Gamma(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t) * \begin{pmatrix} \partial\phi(\boldsymbol{y}, t)/\partial n \\ \partial\psi(\boldsymbol{y}, t)/\partial n \end{pmatrix} dS_y \\ &\quad - \int_{\partial B} \Sigma(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t) * \begin{pmatrix} \phi(\boldsymbol{x}, t) \\ \psi(\boldsymbol{x}, t) \end{pmatrix} dS_y \\ &\quad + \int_B \Gamma(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t) * \begin{pmatrix} s(\boldsymbol{y}, t) \\ 0 \end{pmatrix} dV_y \\ &\quad + \int_B \Gamma(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, t) \begin{pmatrix} \phi(\boldsymbol{x}, 0) \\ \psi(\boldsymbol{x}, 0) \end{pmatrix} dV_y \end{aligned} \tag{8}$$

と表現することができる。ここに, Γ, Σ は連立方程式 (1), (2) の基本解および二重層核である。

4.2 連立方程式の基本解

連立微分方程式 (1), (2) の同次系の Laplace 変換

$$\begin{pmatrix} \nabla^2 - \kappa_\phi^2 & B^2 \\ E^2 & \nabla^2 - \kappa_\psi^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\phi} \\ \hat{\psi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

について考える。ここに, $\kappa_\phi^2 = A^2 + p/C^2$ および $\kappa_\psi^2 = D^2 + p/F^2$ である。

上の方程式系の基本解は Hölmander の方法によって求めることができる。まず, 左辺の係数行列 (作用素行列) の行列式は

$$\mathbf{L} = \left(\nabla^2 - \kappa_\phi^2\right)\left(\nabla^2 - \kappa_\psi^2\right) - B^2 E^2 \tag{10}$$

となる。つぎに, 微分作用素 $\mathbf{L}$ による微分方程式

$$\mathbf{L} U = 0 \tag{11}$$

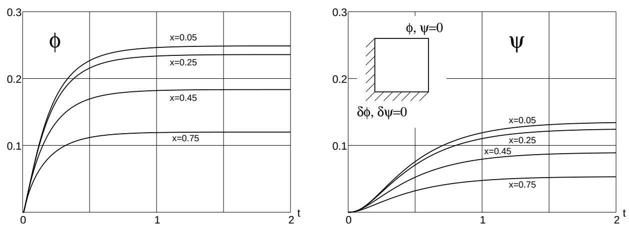
の基本解を求める。基本解を U_G とすれば, (9) の基本解の各成分は

$$\hat{\Gamma}_{\phi\phi} = \left(\nabla^2 - \kappa_\psi^2\right) U_G, \qquad \hat{\Gamma}_{\phi\psi} = -E^2 U_G \tag{12}$$

$$\hat{\Gamma}_{\psi\phi} = -B^2 U_G, \qquad \hat{\Gamma}_{\psi\psi} = \left(\nabla^2 - \kappa_\phi^2\right) U_G \tag{13}$$

により与えられる。

数値解析例



図–2 2 群拡散問題における濃度の時間変化

参考文献

[1] C. Lubich : Convolution quadrature and discretized operational calculus I, II, *Mumer. Math.*, **52**, pp. 129–145, 413–425, 1988.

[2] 浦 勝一, 福井卓雄 : 拡散型方程式の時間領域境界要素解析への離散作用素積分法の応用, 第 60 回年次学術講演会講演概要集, CS6-004, 2005.