

直交選点有限要素法による拡散反応方程式の数値計算

Numerical calculation of diffusion-reaction equation by orthogonal collocation finite element method

函館高専環境都市工学科 正員 大久保孝樹 (Takaki Okubo)

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ているのが一般的である¹⁾。大久保らは、非線形の1次元生物膜モデル（拡散反応モデル）を重みつき残差法の一つである直交選点法で区別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 が非定常1次元拡散方程式（偏微分方程式）に時空間における直交選点法を用いた例が挙げられる。また、流体力学分野においても有限要素法の考え方を取り入れた時間の離散化がなされている。この時空間の離散化の問題は、数学において時間と空間の区別をせずに時空間を一つつの同じ座標軸として認識していることを考えれば、空間の離散化手法を時間の離散化手法に応用できることは当然と言えよう。

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、時間の離散化の直交選点有限要素法の応用としては、解析解が知られている初期値問題の2階線形微分方程式と2次元の非線形拡散反応方程式を例にとった。直交選点法の利点は、境界値問題の場合、内部選点において正解とほとんど同じ解が得られるということである。将来は、Navier-Stokes 方程式の数値解法に直交選点有限要素法を応用し研究を進めていく考えである。

2. 対象とする偏微分方程式

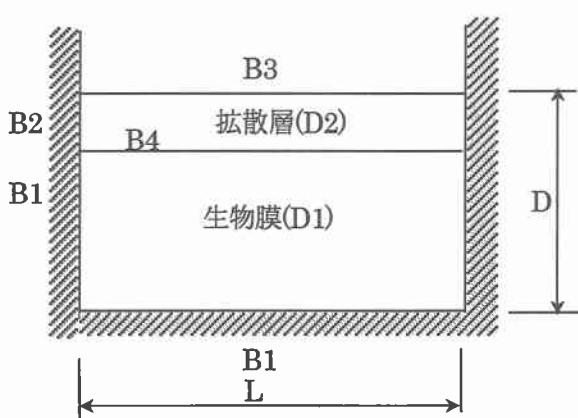


図-1 2次元生物膜モデルの概略図

本研究では好酸性鉄酸化バクテリア (*Thiobacillus Ferroxidans*) 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(溶存酸素濃度) : 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、図-1に示すように好酸性鉄酸化バクテリアの集合体である生物膜 D1 内で $\text{Fe}^{2+}(S)$ と DO(C) が消費($r_s(S, C)$)され、生物膜の上部に拡散層 D2 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]

$$\begin{aligned} u \frac{\partial S}{\partial x} + v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xg} \frac{\partial S}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yg} \frac{\partial S}{\partial y} \right) + r_s(S, C) = 0 \\ u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xg} \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yg} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + r_c(S, C) = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

[拡散層内]

$$\begin{aligned} u \frac{\partial S}{\partial x} + v \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) = 0 \\ u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

[境界条件]

B1 境界条件

$$\begin{aligned} \left(uS - D_{xg} \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left(vS - D_{yg} \frac{\partial S}{\partial y} \right) m = 0 \\ \left(uC - D_{xg} \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left(vC - D_{yg} \frac{\partial C}{\partial y} \right) m = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

B2 境界条件

$$\begin{aligned} \left(uS - D_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left(vS - D_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) m = 0 \\ \left(uC - D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left(vC - D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) m = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

B3 境界条件

$$\begin{aligned} S = S^* \\ C = C^* \end{aligned}$$

B4 境界条件

$$\begin{aligned} \left(uS - D_{xg} \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left(vS - D_{yg} \frac{\partial S}{\partial y} \right) m = \left(uS - D_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) l + \left(vS - D_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) m \\ \left(uC - D_{xg} \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left(vC - D_{yg} \frac{\partial C}{\partial y} \right) m = \left(uC - D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) l + \left(vC - D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) m \end{aligned} \quad (5)$$

(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。

$$\begin{aligned} r_s(S, C) &= \frac{v_{s\max} S}{K_s + S} \frac{C}{K_C + C} X_f \\ r_c(S, C) &= \frac{\alpha v_{c\max} S}{K_s + S} \frac{C}{K_C + C} X_f \end{aligned} \quad (6)$$

$v_{s\max}$: 最大比基質消費速 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¹⁾

選点法は重みつき残差法の一種であり、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。直交選点法は、その選点の位置を直交多項式の根としている。

いま、 Z の乗べき項で表される直交多項式を考え、補間関数(試行関数、形状関数)を次式のように表す。なお、 Z が $[0, 1]$ 区間で補間されるものとする。

$$y(z) = b + cz + z(z-1) \sum_{i=1}^N a_i P_{i-1}(z) \quad (7)$$

ここで、多項式 $P_i(Z)$ は、次式によって定義される。

$$\int_0^1 w(z) P_n(z) P_m(z) dz = 0 \quad n \neq m \quad n, m = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (8)$$

直交選点法として、 N 個の選点の位置は $P_N(z)$ の式によって求めるが、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。

$$P_N(z) = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \binom{n+r}{r} z^r \quad (9)$$

上式より、 Z を求めるとよい。

(7)式は、次式で表される多項式として同等に表される。

$$y(z) = \sum_{i=1}^{N+2} d_i z^{i-1} \quad (10)$$

以上のことと踏まえ、座標 $\xi - \eta$ 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。

$$S = \left(\sum_{i=1}^{n_1+2} a_i \xi^{i-1} \right) \left(\sum_{j=1}^{n_2+2} b_j \eta^{j-1} \right) \quad (11)$$

上式は、次式と同等である。

$$S = \sum_{i=1}^{n_1+2} \sum_{j=1}^{n_2+2} d_{ij} \xi^{i-1} \eta^{j-1} \quad (12)$$

上式の直交選点(1m点)での第1微分と第2微分を求める。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial \xi} \Big|_{\xi_l \eta_m} &= \sum_{i=1}^{n_1+2} \sum_{j=1}^{n_2+2} (i-1) \xi^{i-2} \eta^{j-1} d_{ij} \quad \frac{\partial S}{\partial \eta} \Big|_{\xi_l \eta_m} = \sum_{i=1}^{n_1+2} \sum_{j=1}^{n_2+2} (j-1) \xi^{i-1} \eta^{j-2} d_{ij} \\ \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} \Big|_{\xi_l \eta_m} &= \sum_{i=2}^{n_1+2} \sum_{j=1}^{n_2+2} (i-1)(i-2) \xi^{i-3} \eta^{j-1} d_{ij} \quad \frac{\partial^2 S}{\partial \eta^2} \Big|_{\xi_l \eta_m} = \sum_{i=1}^{n_1+2} \sum_{j=2}^{n_2+2} (j-1)(j-2) \xi^{i-1} \eta^{j-3} d_{ij} \\ \frac{\partial S}{\partial \xi \partial \eta} \Big|_{\xi_l \eta_m} &= \sum_{i=1}^{n_1+2} \sum_{j=1}^{n_2+2} (i-1)(j-1) \xi^{i-2} \eta^{j-2} d_{ij} \end{aligned} \quad (13)$$

ベクトルと行列で表すと、次式のようになる。

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \bar{Q} \bar{d} & \frac{\partial \bar{S}}{\partial \xi} &= \bar{D}_\xi \bar{d}, & \frac{\partial \bar{S}}{\partial \eta} &= \bar{D}_\eta \bar{d} \\ \frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial \xi^2} &= \bar{E}_\xi \bar{d}, & \frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial \eta^2} &= \bar{E}_\eta \bar{d}, & \frac{\partial \bar{S}}{\partial \xi \partial \eta} &= \bar{F}_{\xi \eta} \bar{d} \end{aligned} \quad (14)$$

ここで、

$$\begin{aligned} Q_{lm} &= \xi_l^{i-1} \eta_m^{j-1} & n &= (n_1 + 2)(n_2 + 2) \\ D_{\xi l m} &= (i-1) \xi_l^{i-2} \eta_m^{j-1} & l &= 1, 2, \dots, n \\ D_{\eta l m} &= (j-1) \xi_l^{i-1} \eta_m^{j-2} & m &= 1, 2, \dots, n \\ E_{\xi l m} &= (i-1)(i-2) \xi_l^{i-3} \eta_m^{j-1} & i &= 1, 2, \dots, (n_1 + 2) \\ E_{\eta l m} &= (j-1)(j-2) \xi_l^{i-2} \eta_m^{j-3} & j &= 1, 2, \dots, (n_2 + 2) \\ F_{\xi \eta m} &= (i-1)(j-1) \xi_l^{i-2} \eta_m^{j-2} \end{aligned} \quad (15)$$

(14)式より、 \bar{Q} の逆行列を用いると直交多項式の係数 \bar{d}

は次式によって表される。

$$\bar{d} = \bar{Q}^{-1} \bar{S} \quad (16)$$

(14)式に(16)式を代入すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{S}}{\partial \xi} &= \bar{D}_\xi \bar{Q}^{-1} \bar{S} = \bar{A}_\xi \bar{S} & \frac{\partial \bar{S}}{\partial \eta} &= \bar{D}_\eta \bar{Q}^{-1} \bar{S} = \bar{A}_\eta \bar{S} \\ \frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial \xi^2} &= \bar{E}_\xi \bar{Q}^{-1} \bar{S} = \bar{B}_\xi \bar{S} & \frac{\partial^2 \bar{S}}{\partial \eta^2} &= \bar{E}_\eta \bar{Q}^{-1} \bar{S} = \bar{B}_\eta \bar{S} \\ \frac{\partial \bar{S}}{\partial \xi \partial \eta} &= \bar{F}_{\xi \eta} \bar{Q}^{-1} \bar{S} = \bar{C}_{\xi \eta} \bar{S} \end{aligned} \quad (17)$$

と表示される。

よって、 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。

[生物膜内]

$$\begin{aligned} \mu_l \bar{A}_{\xi lm} + v_l \bar{A}_{\eta lm} - D_{xif} \bar{B}_{\xi lm} - D_{yif} \bar{B}_{\eta lm} \\ + \frac{v_{smax}}{K_s + S_l} \frac{C_l}{K_c + C_l} X_f \bar{E} \bar{S} = 0 \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \mu_l \bar{A}_{\xi lm} + v_l \bar{A}_{\eta lm} - D_{xif} \bar{B}_{\xi lm} - D_{yif} \bar{B}_{\eta lm} \\ + \frac{\alpha \gamma_{max} S_l}{K_s + S_l} \frac{1}{K_c + C_l} X_f \bar{E} \bar{C} = 0 \end{aligned}$$

[拡散層内]

$$\begin{aligned} \mu_l \bar{A}_{\xi lm} + v_l \bar{A}_{\eta lm} - D_{xs} \bar{B}_{\xi lm} - D_{ys} \bar{B}_{\eta lm} \\ + \frac{\alpha \gamma_{max} S_l}{K_s + S_l} \frac{1}{K_c + C_l} X_f \bar{E} \bar{C} = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

[境界条件] B4

$$\begin{aligned} \left[\mu_l - D_{xif} \bar{A}_{\xi lm} \right] l + \left[v_l - D_{yif} \bar{A}_{\eta lm} \right] m \bar{S} = 0 \\ \left[\mu_l - D_{xs} \bar{A}_{\xi lm} \right] l + \left[v_l - D_{ys} \bar{A}_{\eta lm} \right] m \bar{S} = 0 \\ \left[\mu_l - D_{xif} \bar{A}_{\xi lm} \right] l + \left[v_l - D_{yif} \bar{A}_{\eta lm} \right] m \bar{C} = 0 \\ \left[\mu_l - D_{xs} \bar{A}_{\xi lm} \right] l + \left[v_l - D_{ys} \bar{A}_{\eta lm} \right] m \bar{C} = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

[係数行列の重ね合わせと数値解法]

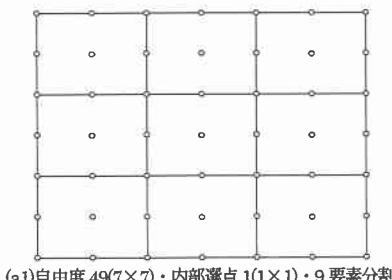
要素-節点番号を定義し、要素の重ね合わせをすると、連立方程式が得られる。連立方程式は反応項が非線形であるため、直接反復法による繰り返し計算で解いた。直接反復法では、良い収束が得られている。

4. 計算例

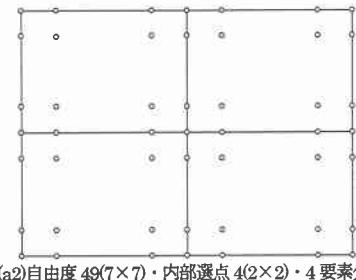
1次元生物膜モデルと2次元生物膜の整合性を確認するために、拡散層なしの2次元生物膜モデル(図-1参照)で数値計算を行った。

直交選点有限要素法において、自由度を49(7×7)と169(13×13)の2種類とし、要素分割の影響を見るためそれぞれにおいて要素分割を9, 4, 1とした。これらの選点と要素の配置関係を図-2、図-3に示す。

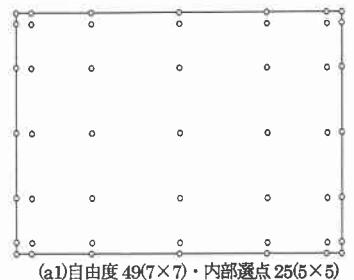
ここにおける生物膜モデルの数値計算に用いたパラメータおよび変数を表-1に示す。表-1に示すように、(a1) (a2) (a3)に比べ、(b1) (b2) (b3)の場合の方が膜厚が厚くなってしまい厳しい条件となっている。図-4に(a1) (a2) (a3)の条件下における計算結果を示す。図中の実線と破線は、1次元の生物膜モデルにおいて、



(a1)自由度 49(7×7)・内部選点 1(1×1)・9要素分割

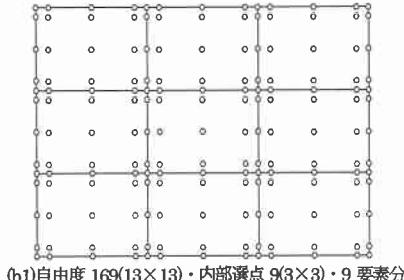


(a2)自由度 49(7×7)・内部選点 4(2×2)・4要素分割

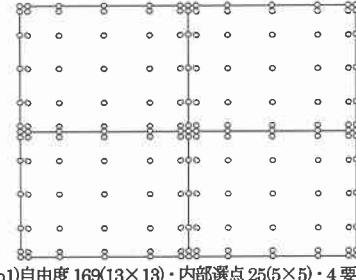


(a3)自由度 49(7×7)・内部選点 25(5×5)

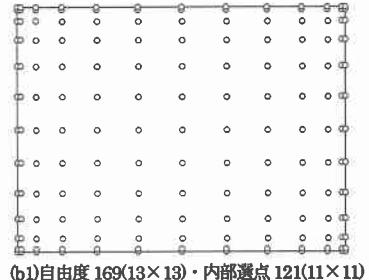
図-2 要素と選点の配置(自由度 49(7×7))



(b1)自由度 169(13×13)・内部選点 9(3×3)・9要素分割



(b2)自由度 169(13×13)・内部選点 25(5×5)・4要素分割



(b3)自由度 169(13×13)・内部選点 121(11×11)

図-3 要素と選点の配置(自由度 169(13×13))

対称のルジャンドル多項式を用い内部選点数 20 点とした場合の直交選点法による数値解である。図中の点は、ケース(a1), ケース(a2), ケース(a3)要素分割なし, の場合をプロットしたものである。ケース(a-)の場合は、膜厚が $100\mu\text{m}$ で緩やかに濃度プロファイルが変化しており、(a1)(a2)(a3)の場合において 1 次元の数値計算の値とほとんど同じになっている。数値的に見た場合は(a3)の方が 1 次元の数値計算の値に最も近くなっている。図-5 に(b1)(b2)(b3)の条件下における計算結果を示す。図-5 では膜厚が $500\mu\text{m}$ 、境界濃度が $\text{Fe}^{2+}=50\text{mg/l}$, $D=1.0\text{mg/l}$ で、厳しい条件の場合である。図中の点は、ケース(b1), ケース(b2), ケース(b3)要素分割なし, ケース(a1)の場合をプロットしたものである。ケース(b-)の場合、内部選点を多くして自由度が大きくなっているので、1 次元の数値計算の値とほとんど一致している。ケース(a1)は自由度が低く 1 要素の内部選点が 1(2 次式)であり、要素の境界上での値がかなり異なる値をとっている。しかし、内部選点での値は 1 次元の数値計算とほぼ一致している。これは、直交選点法では内部選点でのみ微分方程式の残差がゼロであり、要素境界上では境界条件のみを満たし微分方程式の条件は満たしていないからである。

特に、直交選点法では数学的な理論から、内部選点で微分方程式の残差がゼロとなることより、内部選点で正解が得られることが知られている。このことを利用すれば、直交多項式の曲線値を用いる代わりに、内部選点での値をスムーズに補間するような高度のスプライン補間によって、他の値を補間することが可能である。また、上の結果では、要素を分割せず高次の直交関数を用いて計算をしたほうが良いように考えられるが、拡散方程式の領域内で拡散係数や微生物密度などが異なる場合は、要素分割の有用性があるものと考えられる。連立方程式の計算では、IMSL の DLSARG(線形解析)を用いているが、今後は多要素に順応した skyline 法を用いる考え方である。

5. 直交選点有限要素法による時間の離散化

ここでは、一般的に空間の離散化手法として考えられていた直交選点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。この試みは、流体力学や物質移動を統一して表示している移流拡散方程式の時間の離散化への応用へと発展するものと思われる。

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。

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial y_1}{\partial t} = f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{\partial y_2}{\partial t} = f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \dots \\ \dots \\ \frac{\partial y_n}{\partial t} = f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{array} \right. \quad (21)$$

いま、刻み幅 Δt 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 Δt (要素) と $[0, 1]$ は容易に変換できる。従属変数を直交多項式として以下のように表す。また、 t に関する微分は以下のように表される。

$$y_1(t) = \sum_{i=1}^{N+2} d_{1i} t^{i-1}$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N+2} (i-1) t_j^{i-2} d_{1i}$$

$$y_2(t) = \sum_{i=1}^{N+2} d_{2i} t^{i-1} \quad (22)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N+2} (i-1) t_j^{i-2} d_{2i} \quad (23)$$

\vdots

\vdots

$$y_n(t) = \sum_{i=1}^{N+2} d_{ni} t^{i-1}$$

$$\frac{\partial y_n}{\partial t} = \sum_{i=1}^{N+2} (i-1) t_j^{i-2} d_{ni}$$

行列で表すと以下のようになる。

$$\begin{aligned} \bar{y}_1 &= \bar{Q} \bar{d}_1 & Q_{ji} &= t_j^{i-1} \\ \bar{d}_1 &= \bar{Q}^{-1} \bar{y}_1 & \\ \frac{\partial \bar{y}_1}{\partial t} &= \bar{C} \bar{d}_1 & C_{ji} &= (i-1) t_j^{i-2} \\ & \therefore \frac{\partial \bar{y}_1}{\partial t} = \bar{C} \bar{Q}^{-1} \bar{y}_1 = \bar{A} \bar{y}_1 & \end{aligned} \quad (24)$$

発展方程式は以下のように表される。

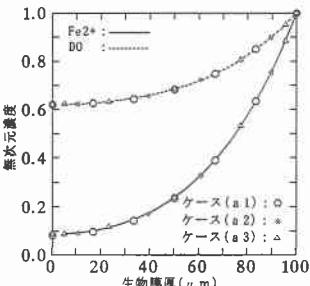


図-4 直交選点有限要素法で計算された濃度プロファイル(膜厚 100 μm, S=20mg/l, C=2mg/l)

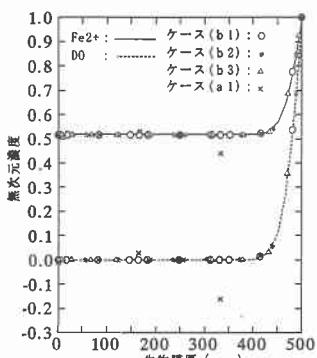


図-5 直交選点有限要素法で計算された濃度プロファイル(膜厚 500 μm, S=50mg/l, C=1mg/l)

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{A}\bar{y}_1 = \bar{f}_1(t, \bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \\ \bar{A}\bar{y}_2 = \bar{f}_2(t, \bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \\ \vdots \\ \bar{A}\bar{y}_n = \bar{f}_n(t, \bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \end{array} \right. \quad (25)$$

$j=1$ では、 $y_{11}, y_{21}, \dots, y_{n1}$ が初期条件として与えられている。連立方程式を解いて $y_{12}, y_{13}, \dots, y_{1N}, y_{22}, y_{23}, \dots, y_{2N}, \dots, y_{n2}, y_{n3}, \dots, y_{nN}$ を求める。次の Δt をステップして $y_{11}, y_{21}, \dots, y_{n1}$ に前のステップの $y_{1N}, y_{2N}, \dots, y_{nN}$ を代入($j=1$)して、同様に繰り返す。

6. 初期値問題における直交選点有限要素法の例

6.1. 簡単な二階常微分方程式(初期値問題)の例(厳密解)

微分方程式

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} + 2a \frac{dy}{dt} + by = 0 \quad (26)$$

は、よく知られた運動の方程式である。

厳密解は、係数の条件によって異なるが以下に示す2ケースについて比較を行った。

1) $a=0$ のとき

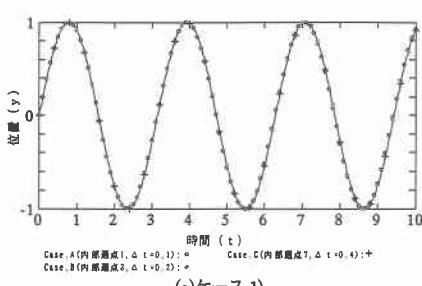
$$y = A \sin\left(\sqrt{\frac{b}{m}} t + B\right) \quad (27)$$

2) $a > 0$ のとき

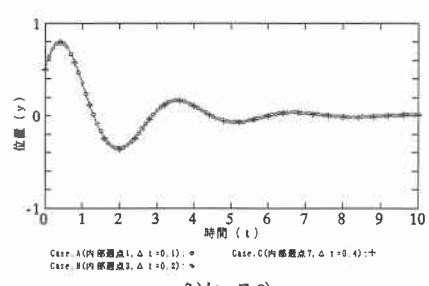
$a^2 < bm$ のとき

$$y = Ae^{\alpha t} \sin(\beta t + B) \quad \alpha = -\frac{a}{m}, \beta = \frac{\sqrt{bm - a^2}}{m} \quad (28)$$

いま、2階常微分方程式(26)式を以下のように変形する。



(a) ケース 1)



(b) ケース 2)

図-6 2階常微分方程式(初期値問題)の数値解と厳密解の比較

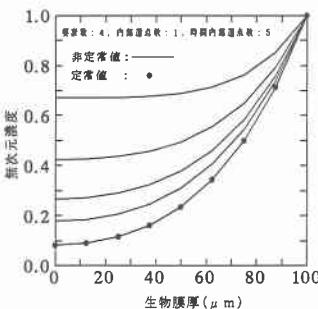


図-7 直交選点有限要素法で計算された非定常値と定常値の確認(膜厚 100 μm, S=20mg/l, C=2mg/l)

表-1 生物膜モデルのパラメータおよび変数⁵

Fe ²⁺ の生物膜内での拡散係数	D _{sf}	0.246cm ² /hr
DOの生物膜内での拡散係数	D _{cf}	0.246cm ² /hr
最大比基質消費速度(Fe ²⁺)	v _{max}	0.314×10 ⁻⁴ mg/cell·hr
化学量論比 DO/Fe ²⁺	a	0.143
Fe ²⁺ に関する飽和定数	K _s	13.1mg/l
DOに関する飽和定数	K _c	0.052mg/l
微生物密度(cell/l)	X _f	0.14×10 ¹⁴
移流	u, v	0.0cm/hr
生物膜厚 ケース(a・)	L, D	100 μm
ケース(b・)		500 μm
液本体基質濃度ケース(a・) (Fe ²⁺ , DO)	S ^a , C ^a	20mg/l, 2mg/l
ケース(b・)		50mg/l, 1mg/l

$$y = y_1 \quad \left. \begin{array}{l} \frac{dy_1}{dt} = y_2 \\ \frac{dy_2}{dt} = -\frac{2a}{m} y_2 - \frac{b}{m} y_1 \end{array} \right\} \text{とおくと(26)式は} \quad \text{となる。}$$

上式において、 $t=0$ のときの y_1, y_2 が与えられれば、時間発展方程式(21)式を解くことと同じことである。ケース 1), ケース 2)の場合において、厳密解のパラメータと初期条件を同一にし計算した数値計算解と厳密解の結果を図-6 に示す。2つのケースにおいて、刻み幅 Δt 内の内部選点数を 1, 3, 7 として Δt の間隔をそれぞれ 0.1, 0.2, 0.4 とおき Case. A, Case. B, Case. Cとした。これは、ある一定間隔、例えば 0.4 において 3 つの条件で自由度(全選点数)が 9 となるようにし一定としている。このようにすれば Δt (要素) の分割と内部選点数の影響を見ることができる。 $t=10$ まで計算した。図-6 のケース 1) は、sin カーブであるが、全条件においてほぼ厳密解に一致している。内部選点数 1 の場合を除き、有効数字 6 術以上で厳密解と一致していた。図-6 のケース 2) の減衰振動の場合では最終値($t=10$)で、内部選点数 1 の場合を除き有効数字 5 術以上で厳密解と一致していた。 Δt と内部選点の次数を調整すれば、さらに厳密解に近くすることが可能となるであろう。

6.2. 非定常拡散反応方程式の直交選点法の数値解

(2)式を非定常問題として、まず空間を直交選点有限要素法で離散化し、それによってできた時間発展方程式を時間の離散化の直交選点有限要素法で定式化した。(図-7)に要素数 16、要素内の内部選点 1、時間 Δt 内の選点数 1 の場合の結果を示す。 t が大きい値で定常値に達するが、定常問題の値とほとんど一致している。

(参考文献)

- B. A. フィンレイソン著、鷲津・山本・川井共訳：重みつき残差法と変分原理および流体力学・伝熱・物質移動への応用、培風館