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　学生会員　○　浦　勝一
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 [2] 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、時間領域問題の特異解の 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 [1] において、上の第二の特徴を利用して拡張された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。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。この問題の境界要素法による定式化には二通りの方法が考えられるが、ここでは、異なる物質に起因する生成項を既知の物質発生源として取り扱う手法を提案する。この方法では物質発生源の効果を体分布ポテンシャルとして扱う必要があり、計算量が大きくなる可能性があるが、前報の定式化をほとんどそのまま利用できる利点を有する。

2 連成拡散型方程式の時間領域境界要素法

前報 [1] においては、拡張された拡散型方程式

$$\left(\nabla^2 - \alpha^2 + \beta^2\right)\phi = \frac{1}{\gamma^2}\frac{\partial \phi}{\partial t} \tag{1}$$

の時間領域境界要素法を Lubich の演算子積分法 [2] によって導いた。ここでは、吸収項 $\alpha^2\phi$ または生成項 $\beta^2\phi$ をとおして二相の場の関数 ϕ、ψ が連成する問題

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

について考える。ここに、$\phi(\boldsymbol{x},t)$ および $\psi(\boldsymbol{x},t)$ は場のポテンシャルである。また、A、B、C、D、E、F は定数であると仮定する。

方程式 (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、連立微分方程式 (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。もうひとつは、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。ここでは、後者の方法で解析を進めることにする。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。

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。第二の方法をとるとき、この問題の解は、境界値の繰り込み積の形で

$$C(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x},t) = \int_B G_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},t) * B^2\psi(\boldsymbol{y},t)\,dV_y + \int_{\partial B} G_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},t) * \frac{\partial\phi(\boldsymbol{y},t)}{\partial n}\,dS_y - \int_{\partial B} S_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},t) * \phi(\boldsymbol{y},t)\,dS_y \tag{3}$$

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

と表現することができる。ここに、$C(\boldsymbol{x})$ は自由項であり、$G(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},t)$、$S(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},t)$ は基本解および二重層核である。初期値 $\phi(\boldsymbol{x},0)$、$\psi(\boldsymbol{x},0)$ に関する項は省略しているが、体分布ポテンシャルの項と同様に扱うことができる。(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 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 [2] を使って境界積分方程式 (3) の繰り込み積を和の形に離散化する。まず、基本解の Laplace 変換が必要である。$(2)_1$ の Laplace 変換は

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

である。ここに、$\hat{\phi}$ は ϕ の Laplace 変換である。また、$\kappa^2 = A^2 + s/C^2$ と定義した。s 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, 3 次元問題のとき

$$\hat{G}_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},s) = \frac{e^{-\kappa r}}{4\pi r}, \qquad \hat{S}_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},s) = \frac{\partial \hat{G}_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},s)}{\partial n_y} = -\frac{(1+\kappa r)e^{-\kappa r}}{4\pi r^2}\frac{\partial r}{\partial n_y} \tag{6}$$

2 次元問題のとき

$$\hat{G}_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},s) = \frac{1}{2\pi}K_0(\kappa r), \qquad \hat{S}_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},s) = \frac{\partial \hat{G}_\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},s)}{\partial n_y} = -\frac{\kappa}{2\pi}K_1(\kappa r)\frac{\partial r}{\partial n_y} \tag{7}$$

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 [1] で用いたものとまったく同じである。しかしながら、この問題の場合には、生成項 $\beta^2\phi$ を含まないので、数値解は時間増分 Δt の影響を受けず、常に安定である。

離散方程式は、境界関数を近似基底 β_i により近似して

$$\phi(\boldsymbol{x},t) = \sum_i \beta_i(\boldsymbol{x})\phi_i(t), \qquad \frac{\partial\phi(\boldsymbol{x},t)}{\partial n} = \sum_i \beta_i(\boldsymbol{x})\sigma_i(t) \tag{8}$$

とおく。境界積分方程式 (3) に (8) を代入し、演算子積分法 [2, 1] により繰込み積の重みを決定すれば、離散化方程式

$$C(\boldsymbol{x})\sum_i \beta_i(\boldsymbol{x})\phi_i(\Delta t) = B^2\sum_I\sum_{k=0}^{n-1} G_I^{n-k}(\boldsymbol{x})\psi_I(k\Delta t) + \sum_i\sum_{k=1}^{n} G_i^{n-k}(\boldsymbol{x})\sigma_i(k\Delta t) - \sum_i\sum_{k=1}^{n} S_i^{n-k}(\boldsymbol{x})\phi_i(k\Delta t) \tag{9}$$

が得られる。ここに、i は境界要素の番号を、I は領域要素の番号を表す。G_i^m、S_i^m は影響関数であり、境界要素において

$$G_i^m(\boldsymbol{x}) = \frac{\rho^{-m}}{L}\sum_{l=0}^{L-1}\left[\int_{\partial B}\hat{G}_\phi\left(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},\frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right)\phi_i(\boldsymbol{y})dS_y\right]e^{-2\pi iml/L} \tag{10}$$

$$S_i^m(\boldsymbol{x}) = \frac{\rho^{-m}}{L}\sum_{l=0}^{L-1}\left[\int_{\partial B}\hat{S}_\phi\left(\boldsymbol{x};\boldsymbol{y},\frac{\delta(\zeta_l)}{\Delta t}\right)\phi_i(\boldsymbol{y})dS_y\right]e^{-2\pi iml/L} \tag{11}$$

である。領域要素の影響関数 G_I^m は (10) における積分を領域要素上で実行する。以上は積分方程式 (3) における離散化の手順であるが、積分方程式 (4) の場合にも、拡散方程式の係数が異なるだけであるので、まったく同じ離散化ができる。

高速多重極法の適用に関する考察

ここで提案した解析法の最も大きな問題点は、領域積分を繰り返し実行しなければならないことである。実際、領域積分の繰込み積のための影響関数の計算に多大な計算時間を要すると同時に非常に大きな記憶領域を必要とする。領域積分を効率的に評価する方法はいろいろと提案されているが、現在は、高速多重極法を導入することを検討している。著者らはすでに、2 次元波動問題の演算子積分法を用いた時間領域境界要素法において、高速多重極法の適用を実現している [3]。この方法をここで取り上げた拡散方程式に適用することを予定している。

詳細な計算結果については発表当日報告する。

参考文献

[1] 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.

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

[3] 福井卓雄、岡山美央：演算子積分法を用いた時間領域境界要素法における高速多重極法の適用, 計算工学講演会論文集, **10**(2), pp. 587–590, 2005.