UDC 628.5：551.584.5
517.949

特集3・6

汚染拡散問題の解析と重みつき残差法

Computer Analysis of Diffusion Problems of Various Refuse

川　井　忠　彦*
Tadahiko KAWAI

1. 緒　　言

大気汚染問題を中心として都市における廃棄物公害問題は国家的見地から綜合的な対策が進められているが，依然としてその抜本的解決は将来に残された問題である．

そもそも環境汚染問題は人間の生活活動や社会的活動の結果必然的に生じるものであるから，そこに人間の活動度と環境基準の間にある調整が必要となって来る．

その場合に客観的でかつ正確な判断資料を提出することが科学者，技術者の仕事である．第2次臨時事業の目標の一つはこのような各種環境汚染状態の迅速かつ正確な計測技術（物理的および化学的）の開発とその空間的時間的に収集される大量のデータあるいは情報を処理し，その情報を入力として，汚染物質の拡散状況のコンピューターシミュレーションを行い，汚染状況の予測をして，環境基準と比較を行い，人間の社会的活動度を制御するのが公害対策の基本的考え方であろう．

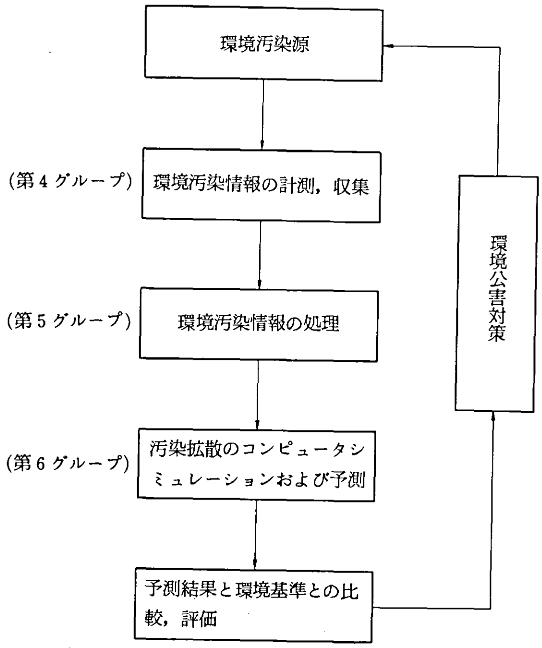

図1　環境公害対策の基本的考え方

著者の研究室においては，上述の公害対策の最終段階にあるコンピューターシミュレーションの新らしい手法として，有限要素解析プログラムの基礎的研究を続けているが，最近この分野で注目されている重みつき残差法（method of weighted residuals）を用いた解析法について検討しているので，現状のあらましをここに紹介したい．

2. 汚染公害問題の本質

一口に汚染公害といっても汚染源は千差万別であり，その拡散の仕方もさまざまであるが，その代表的な汚染物質の拡散公害の例をあげれば次のようになるのではなかろうか．

(a) 大気汚染（工場煤煙，自動車排気ガス等による）
(b) 水質汚濁（産業廃棄物，農薬，放射性物質等による）
(c) 温排水拡散（原子力，火力発電所）
(d) 海洋汚染（石油タンク破壊，タンカー海難事故等による）
(e) 土壌汚染（産業廃棄物，放射性廃棄物による）
(f) 火災時の火焔，煙の伝播，拡散

これらの汚染公害の数学的モデルは発生源や拡散のタイプによって異なり，統一的モデルを作ることは不可能であるが総じて云えることはこれらの汚染拡散問題は次のような諸問題が複合された極めて複雑な非線形問題である．

(i) 物質移動問題（拡散問題）
(ii) 流れの問題（風，海洋，河川の流れ）
(iii) 熱伝達問題（伝導，対流，輻射等）
(iv) 化学反応過程（光化学反応，ガスの燃焼等）

これらの分野は最近移動現象（transport phenomena）と呼ばれる統一的立場からの体系化が進んでいる様である．一般に移動変換現象においては運動量，エネルギ，質量などの物理量はつねに保存されるという大原則がある．また一方これらの物理量の流れる場合（flux）とその原動力となる一般化力（generalized forces）との間には，現象論的関係式（phe-

* 東京大学生産技術研究所　第2部

nomenological equation) と呼ばれる線形法則があり，これら二つの法則を組合せることによって移動現象の数学的定式化が可能となるのである.(図2参照)

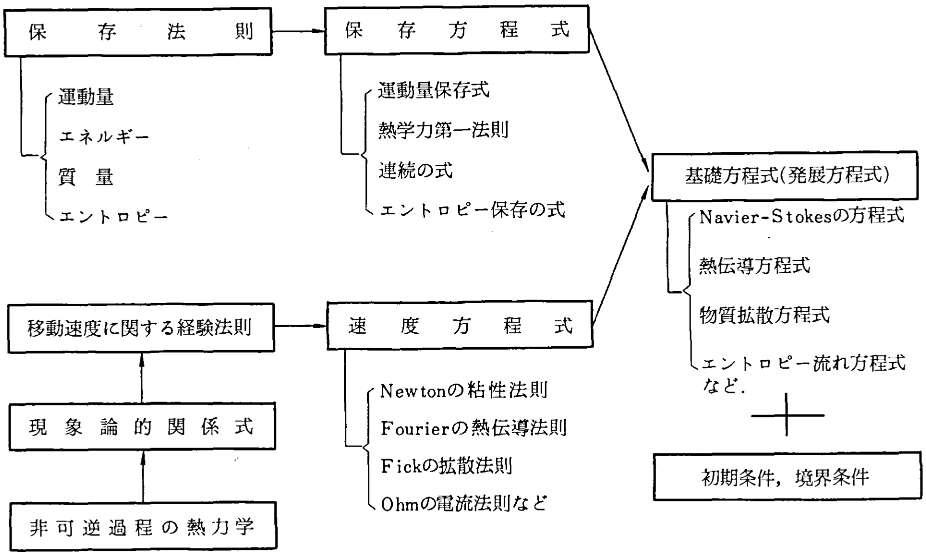

図2　移動現象の数学的定式化
(平岡正勝・田中幹也著「移動現象論」朝倉書店)

拡散方程式の標準形はベクトル記号を用いて次式のごとき準調和方程式 (quasi-harmonic equation) で表わされる.

$$\frac{\partial c}{\partial t}+div(cv)=div(D\ grad\ c)+\overline{Q} \quad \cdots\cdots\cdots(1)$$

ここにcは求める物理量 (温度や濃度など)，Dは現象論的関係式における比例定数で通常対称2次のテンソル，$\overline{Q}$はcの移動をひき起す一般化された体積力を表わすR. T. Chengに従うと(1)式は表1に示すような種々の移動現象の支配方程式を表わしている.

(1)式を直角座標で表わせば次式のごとく書き表わせる.

$$L(c)=\left\{\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}(cu_i)\right\}-\left\{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}\right)+\dot{q}\right\}$$
$$=0 \quad \cdots\cdots\cdots(2)$$

こゝに

$$D_{ij}=D_{ij}'+M\delta_{ij}$$

でδ_{ij}はKroneckerのデルタ，D_{ij}'は分散係数を表わす2次のテンソルで乱流または機械的混合による濃度の再分布を示す項であり，流体の物理常数だけでなく流れの状態の関数でもある．Mは分子拡散係数を表わし，通常の場合$D_{ij}'\gg M$でMはD_{ij}に比して無視できる．$\dot{q}$は主要流の単位質量および時間当りの濃度cの湧き

表1　一般的な拡散方程式

	C	D	$\overline{Q}$	備　考
1	ρ 密　度	O	$\rho\dot{s}$ (湧出しと吸込み)	連続の式
2	ρu, ρv, ρw x, y, z方向の単位体積当りの運動量	$(\varepsilon_M+\frac{\mu}{\rho})$ ε_M：渦粘性 μ：粘性係数	F_x, F_x, F_z 圧力勾配と物体力	運動量方程式 (Navier–Stokesの方程式)
3	ζ_x, ζ_y, ζ_z 渦　度	$(\varepsilon_M+\frac{\mu}{\rho})$	O	渦度方程式 ($\rho=const$)
4	Ψ 流れ関数	I	ζ	回転運動方程式 $\frac{\partial\psi}{\partial t}=0$; $v=0$
5	ρc 解離成分の分子数	$(D'+MI)$ 分散係数	$\rho\dot{q}$ 化学又は生物学的反応項	解離成分系 (汚染) の輸送方程式
6	ρh又は$\rho c_p T$ エンタルピー	$\left(\varepsilon_T+\frac{k}{\rho}\right)$ ε_T：熱的渦拡散係数 k：熱伝導係数	$\rho\dot{q}_T$：熱や種々の逸散および機械的仕事の湧出源又は吸出し	エネルギー方程式 (熱伝達問題を含む)

出し (source または吸込み (sink) 表わしている.

方程式(2)は輸送項あるいは輸送係数Dが密度，圧力，流速等いくつかの従属変数の関数でもあるために一般に非線形であり，その解析は困難である.

そこでこれらの問題の解析に，複雑な構造問題の解析でその偉力を実証した有限要素法が適用できないだろうかと考えるのは当然のなりゆきである. 構造問題の場合にはその解析のエネルギ原理という名で呼ばれている変分原理が厳然と存在しており，この原理を基礎として有限要素法が展開されてきたのであるが，今問題にしている移動現象問題ではこのような普遍的な変分原理は一般に存在しない. そうだとすると基礎微分方程式とその付帯境界条件だけから有限要素法の基礎となっているような変分方程式 (variational equation) が導けないだろうか? 実はこのような変分方程式を導くことは一般に可能なのである. これが本小論で論じようとしている重みつき残差法の考え方であり次節でその中の代表的方法となっているGalerkin法を例にとって説明する.

3. 重みつき残差法による移動現象問題の解析

移動現象問題を支配する主要方程式は流れの方程式と拡散方程式である. 前節で述べたようにこれらの方程式は(1)式で統一的に取扱うことができるが，ここでは別々に取扱ってそれぞれの問題に対応する変分方程式を導いてみよう.

(i) 流れの問題におけるGalerkin方程式

Newton力学の基礎となっている並進運動に関する運動量保存の方程式は，テンソル記号を用いて次式のごとく表わされる.

$$\rho(\dot{v}_i+v_j v_{i,j})=\rho f_i+\sigma_{ij,i} \quad \cdots\cdots(3)$$

ここにρは物質の密度，v_iは速度ベクトルのi成分，f_iは物体力のi成分，σ_{ij}は応力テンソルの成分を表わしている. いま(3)式のすべての項を左辺に集めてその式を$L(v_i)$で表わし，それに仮想速度δv_iを掛け合せ，与えられた領域全体について積分を行なえば，つぎのような方程式が得られる.

$$\int_V L(v_i)\delta v_i dV=\int_V \rho(\dot{v}_i+v_j v_{i,j})\delta v_i dV$$
$$-\int_V \rho\bar{f}_i\delta v_i dV-\int_V \sigma_{ij,j}\delta v_i dV=0 \quad \cdots\cdots(4)$$

さて(4)式左辺の第3項の積分をGaussの定理を用いて変換，整理すればつぎのような方程式が得られる.

$$\int_V \rho(\dot{v}_i+v_j v_{i,j})\delta v_i dV+\int_V \partial_{ij}\delta v_{i,j} dV$$
$$-\int_S \sigma_{ij}n_j\delta v_i ds-\int_V \rho\bar{f}_i\delta v_i dV=0 \quad \cdots\cdots(5)$$

いま境界面Sを二つの部分$S_1 S_2$に分け，つぎのような境界条件を考える.

$$\left.\begin{array}{lll} v_i=v_i \;\; or \;\; \delta v_i=0 & on & S_1 \\ \sigma_{ij}n_j=\bar{T}_i & on & S_2 \end{array}\right\} \quad \cdots\cdots(6)$$

ここに$S=S_1+S_2$，$\bar{T}$は表面力のi成分を表わす. この境界条件(6)式を(5)式に代入すれば，結局つぎのようなGalerkin方程式がえられる.

$$\int_V \rho(\dot{v}_i+v_j v_{i,j})\delta v_i dV+\int_V \sigma_{ij}\delta v_{i,j} dV$$
$$-\int_{S_2} \bar{T}_i\delta v_i ds-\int_V \rho\bar{f}_i\delta v_i dV=0 \quad \cdots\cdots(7)$$

(7)式は流体力学におけるEulerの運動方程式の変分方程式 (Galerkin方程式) 表示ということが出来る.

(ii) 拡散問題に対するGalerkin方程式

移動現象問題において最も重要な方程式は，拡散方程式であり，その標準形は求める物理量 (温度や濃度など) をϕとして次式で与えられる.

$$\rho(\phi+v_i\phi_{,j})=(k_{ij}\ \phi_{,j})_{,j}+\bar{Q}=0 \quad \cdots\cdots(8)$$

ここに (k_{ij}) は現象論的関係式における比例定数マトリックス，Qはϕの移動をひき起こす一般化された体積力である. 前節(1)式との対応を考えると容易に

$C=\rho\phi$, $D=[k_{ij}]$

であることが判るであろう. この方程式の右辺の項を左辺に集めて，両辺に$\delta\phi$を掛け，ふたたびϕの定義域全体にわたって積分すればつぎのような方程式が得られる.

$$\int_V \rho(\phi+v_j\phi_{,j})\delta\phi dV-\int_V (k_{ij}\phi_{,i})_{,j}\delta\phi dV$$
$$-\int_V \bar{Q}\delta\phi dV=0 \quad \cdots\cdots(9)$$

さて上の左辺第二項の積分にGaussの定理を適用し，変換すれば結局つぎのようなGalerkin方程式が得られる.

$$\int_V \rho\phi\delta\phi dV+\int_V \rho v_i\phi_{,i}\delta\phi dV+\int_V k_{ij}\phi_{,i}\delta\phi_{,j} dV$$
$$-\int_V \bar{Q}\delta\phi dV-\int_S k_{ij}\phi_{,i}n_j\delta\phi dS=0 \quad \cdots\cdots(10)$$

ここでつぎのような二つの表面境界条件を考える.

$$\left.\begin{array}{lll} \phi=\bar{\phi} \;\; or \;\; \delta\phi=0 & on & S_1 \\ \bar{q}_n=k_{ij}\phi_{,i}n_j & on & S_2 \end{array}\right\} \quad \cdots\cdots(11\text{—a})$$
$$S=S_1+S_2 \quad \cdots\cdots(11\text{—b})$$

この境界条件(10)式を (11—a) 式に代入すればつぎのような変分方程式が得られたことになる.

$$\int_V \rho\phi\delta\phi dV+\int_V \rho v_i\phi_{,i}\delta\phi dV$$
$$+\int_V k_{ij}\phi_{,i}\delta\phi_{,j} dV-\int_V \bar{Q}\delta\phi dV$$
$$-\int_{S_2} \bar{q}_n\delta\phi dS=0 \quad \cdots\cdots(12)$$

この方程式において，定常で対流項v_iの存在しない場合の微分方程式を準調和方式 (quasi-harmonic equation)と呼び,熱伝導,多孔性物体内における物質の拡散,理想流体の渦無しの流れ,静電あるいは磁気ポテンシャル場の解析などにおいて現われる重要な方程式である.またその特別な場合としてよく知られたLaplace やPoissonの方程式が含まれており,物理や工学の諸問題の解析に大きな貢献がなされていることはいうまでもないことである.

さて(12)式の離散化の方法について考えてみよう.今求める解は少なくとも (11—a) の幾何学的境界条件だけは満足する既知関数例$\phi_i(x, y, z)$を用いて次のごとく表わさせると仮定しよう.

$$\phi(x, y, z, t)=\sum_{i=1}^{n} c_i(t)\phi_i(x, y, z) \quad \cdots\cdots (13)$$

(13)式を(12)式に代入しδc_Kについての変分が常に零であることを考えると次のような方程式が容易に導ける.

$$\sum_{i=1}^{\infty}\Big[\dot{c}_J(t)\int_V \rho\phi_J\phi_K dV+c_J(t)\Big\{\int_V \rho v_i\phi_{J,i}\phi_K dV + \int_V k_{rs}\phi_{J,r}\phi_{K,s}dV\Big\} - \int_V \bar{Q}\phi_K dV - \int_{S_2}\bar{q}_n\phi_K ds\Big]=0 \quad \cdots\cdots (14)$$

$$(k=1, 2, 3\cdots\cdots n)$$

(14)式はまたマトリックスを用いて次式のように簡潔に表現することができる.

$$[H]\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\}+([K]+[S])\{C\}=\{\Omega\}+\{\Lambda\} \quad \cdots\cdots (15)$$

こゝに

$$\left.\begin{array}{ll} [H]=[H_{JK}] & H_{JK}=\int_V \rho\phi_J\phi_K dV \\ [K]=[K_{JK}] & K_{JK}=\int_V k_{rs}\phi_{J,r}\phi_{K,s}dV \\ [S]=[S_{JK}] & S_{JK}=\int_V \rho v_i\phi_{J,i}\phi_K dV \\ \{\Omega\}=\{\Omega_K\} & \Omega_K=\int_V \bar{Q}\phi_K dV \\ \{\Lambda\}=\{\Lambda_K\} & \Lambda_K=\int_{S_2}\bar{q}_n\phi_K ds_s \end{array}\right\} \quad \cdots\cdots (16)$$

である.

ここで述べておきたいのは(15)式は一般化座標$c_n(t)$に対する有限要素法の基礎式と見ることができる.構造問題と同じような有限要素解析の基礎式はこの式を一般化座標系から実際の領域内にとられた節点座標系への座標変換して求めてもよく,また有限要素法の標準的手法に従って直接(2)式を離散化して求めてもよい.以上述べたと同じ様な方法で流れに関するEuler方程式の離散化もできるが紙面の関係上省略する.

(15)式は時間tに関する一階連立常微分方程式となるから適当な方法を用いて解くことができる.

ところで(14)または(15)式は(8)式を変形して

$$L(\phi)=\rho(\dot{\phi}+\nu_J\phi_{,J})-(k_{IJ}\phi_{,J})_{,J}-\bar{Q}=0 \quad \cdots\cdots (17)$$

とおいて

$$\int_V L(\phi)\phi_K dV=0 \quad \cdots\cdots (18)$$

とした式に他ならない.これは拡張されたRitz-Galerkinの方法ということができる.この式はϕ (x, y, z, t) を(13)式のごとく仮定し,その中に含まれる未知数$c_i(t)$ を,$L(\phi)$ に重み関数ϕ_Kを掛けた値が与えられたϕの全定義域において平均的に零になるように決定することを要求していることを意味する.

これが重みつき残差法の骨子である,この場合重み関数として(13)式に仮定した試験関数列をとったわけであるが,必ずしもその必要はなく問題に応じて適宜選択することが可能である.従って重みつき残差法(以後MWRと略記する)の一般式は

$$\int_V L(\phi)w_K dV=0 \quad \cdots\cdots (19)$$

という形で与えられることになる.

このようにMWRでは現象を支配する微分方程式とその境界条件が与えられさえすれば,たとえその問題と等価な変分原理が求められなくても,Galerkin法と類似の定式化が可能であることがわかるであろう.このように有限要素法の定義を拡張して基礎となる変分方程式のなかにMWRをも含めて考えることにすれば,有限要素法の構造力学以外の応用はさらに一段と期待がもてることになる.

MWRの利点は次の3点に集約されよう.

① 解析法の原理がきわめて簡明直截であること.
② 変分原理の存在と無関係に適用できること.
③ 線型問題だけでなく非線型問題にも全く同じように適用できること.

ところでMWRを有効に適用して問題を解いてゆく上での重要な因子は,試験関数と重み関数の選択である.

紙面の制約のためにこれらの点を詳細に論ずることができないが,重み関数$w_J(x, y, z)$ の選び方によりGalerkin法と並んで選点法 (collocation method) や最小自乗法などもMWRの一方法であると言うことができるし,MWRの先駆者であるZienkiewicz教授によれば差分法もまたこの中に入れることができると言っている.

次に試験関数の選び方について考えると,境界条件は満足するが,微分方程式は必ずしも満足しない試験関数列を用いる内部法 (interior method),この全く逆の微分方程式は満足するが,境界条件は満足しないような試験関数を用いる境界法 (boundary method) とその中間の混合法 (mixed method) があり,Zienkiewicz教授はMWRをFEMの一般化という観点から研究しているので内部法を用いているのに対し,Finlayson教授は境界法を選択の基礎とし,

解析解にできるだけ近い形で解を求めようとしているのが誠に対照的である．

さて以上説明したように重みつき残差法は微分方程式の解析解を求める方法とその対応汎関数を極値化させる変分法との中間に存在する最も一般的な数値解析法であると云えるが，この方法によれば，用いる試験関数のとり方如何によっては，いくらでも解析解に近い解を求めることも出来るし，また与えられた領域を細分し，各小領域に対する形状関数を低次の多項式にとれば有限要素解析にもなり得ることは第3図を見れば明らかであろう．

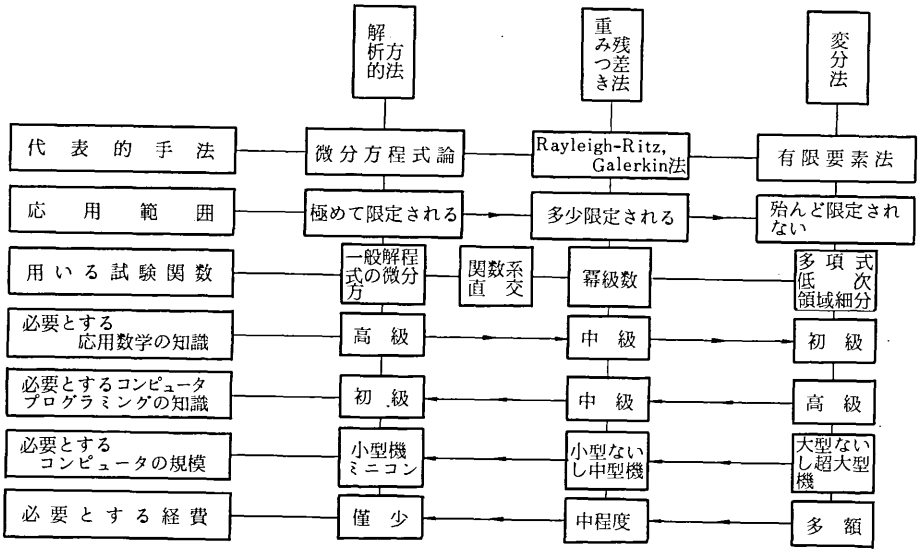

図3　重みつき残差法を中心とした数値解析法の比較
(矢印はのぞましい方向を示す)

4．重みつき残差法による環境汚染問題解析の基礎

前節で述べたように移動現象問題は一般に物質，運動量，エネルギ等の移動変換が連成して起る複雑な非線形非定常の現象であって現象を支配する変分原理は一般に存在しない．しかもこの現象の中に現れる諸物質定数は物質の種類だけでなく温度，圧力，濃度等の複雑な関数であって，構成方程式に問題が多い．また基礎微分方程式の特異性を数値解析を行うに当って入念に検討する必要があろう．

以上のような諸点を考えると図3より判るように次のような一般的方針に従って解析を進めて行くのが最も実用的であると考える．

(i) 解析法としては繰返し法(iteration method)か増分法 (incremental method) を採用して非線形解を逐次近似的に組立てて行く．

(ii) 試験関数としてはできるだけもとの方程式に近い線形近似された方程式の一般解を用い，境界積分法 (Boundary intergral method)によって近似解を述めて行く．

(iii) 境界形状が複雑でしかも混合境界条件の場合境界積分（表面積分ないしは線積分）の数値計算の信頼性が問題になるが，それには有限要素法で開発されている種々の新らしい手法が役に立つであろう．

(iv) 基礎微分方程式に内在する特異性について予め十分な研究を境界積分法等を用いて行っておくべきである．この特異性が正確に把握できていれば，線形方程式の場合にはこの特異解を一般解と重ね合せて高精度の解が得られるであろう．これがいわゆる特異解法 (singnlarity method) である．また非線形微分方程式の場合でも(i)により線形解を重ね合せてその解を求めようとする限りこの手法は有用であろう．

(v) 移動現象問題の有限要素解を行う場合その特異性を考慮して亀裂問題の有限要素解析で提案されているクラック要素と同じ思想でその特異性を埋めこんだ特殊要素を開発することは実用的に重要であると思われる．このような要素を組み込んだ有限要素解析を行えば通常の方法よりも収束性の良好な解が得られるものと思われる．

以上述べたような方針に従って拡散や流れ方程式を境界積分法で取扱うのが最も実用的であると考えており，その線に沿って次の二つの研究を進めている．

(i) Navier-stokesやFickの拡散方程式の比較的簡単な境界値問題の境界積分法による解析的な取扱い（特異解の導出，非定常問題を含む）

(ii) 上記方程式の有限要素法による汎用プログラム開発の基礎的研究（解の精度や収束性の検討，特殊要素の研究等）

以下に流れと拡散問題に対するこれまで行われている研究の現状と著者の所で行っている研究について簡単に述べてみたい．

(A) 拡散方程式の解析

拡散方程式の有限要素解析はまず熱伝導問題を中心に始められたといっても過言ではない．この問題の変分学的基礎づけに関してはM. A. Biotの仕事がある．

Zienkiewiczは熱伝導問題をも包含する準調和方程式の変分法的定式化を行い，熱伝達問題を始めとして浸透流，圧密，電気泳動と地下水の流れの連成，相変化を伴う熱伝達問題など数多くの拡散問題の解析結果を与えている．我が国においては藤野が早くから熱伝導問題の有限要素解析を行っており，実用的な教科書も書いている．また岩城は熱伝導問題の解析に三角差分法という一つの解法を提案し，その方法をFEMとの比較を行ない，解の収束性や物理的意味の相関性について論じている．庄子・佐々木らは非定常熱伝導問題について差分法と直接法の比較を行っている．上田はLNG地下貯蔵タンクの温度分布を結氷時の潜熱を考慮に入れて有限要素解析法を展開している．著者の研究室では藤谷，木原らはこの方法をイオン拡散問題の解析に応用して種々の一次元拡散問題について有限要素解析を行い，解析解と比較して良好な一致を確認しており，2次元イオン拡散問題解析の実例も示している．彼等はまた反応を伴う場合の一次元拡散問題にも研究し，実験結果との良好な一致を見たことを述べている．原子炉の設計においては中性子の拡散問題が重要な研究課題の一つとなっているがこの問題を厳密に取扱おうとすればBoltzmannの輸送方程式を解かねばならなくなり非常に煩雑となる．そこでそれを近似化した拡散方程式を解くのが普通であり，水町と大西はこの問題の有限要素法による解析法を研究している．特に大西はいくつかのエネルギ群の拡散が連成した中性子輸送問題の変分方程式について研究し，最終的に得られる超多元連立一次方程式の解法としてポイントSOR法（point successive over relaxation method）に基づく解法や原子炉工学でよく知られている粗いメッシュの変分法（coarse mesh variational method）の修正を検討している．

一般に非定常拡散問題の解析において変数分離の方法によって時間因子を分離すれば等方性の拡散問題の場合次のようなよく知られたHelmholzの方程式が得られる．

$$\Delta\phi+\lambda^2\phi=0 \quad\cdots\cdots (20)$$

こゝにΔは3次元のLaplicanである．

今考えている領域が座標原点を含む滑かな三次元閉曲面外の領域であるとすると(20)式の極座標系による一般解は次式で与えられる．

$$\phi(r,\ \theta,\ \varphi)=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{\lambda}^{\infty}r^m[(A_{m\lambda}P_\lambda^m(x)+B_{m\lambda}Q_\lambda^m(x))\cos m\varphi+(C_{m\lambda}P_\lambda^m(x)+D_{m\lambda}Q_\lambda^m(x))\sin m\varphi] \quad\cdots (21)$$

こゝに$P_\lambda^m(x)$, $Q_\lambda^m(x)$は$(m,\ \lambda)$ 次の第1種および第2種Legendreの陪関数を表わす．またλは次式で与えられる常数である．

$$\lambda^2=\ell(\ell+1)+k^2$$

この問題に付帯する二種の最も普通に用いられる境界条件は次の通りである．

(i) 境界上でϕの値が規定されている場合
すなわち

$$\phi=f(r,\ \theta,\ \varphi)\ on\ S_1 \quad\cdots\cdots (22)$$

(ii) 境界上でフラックスの値が規定されている場合

$$k\frac{\partial\phi}{\partial n}+q+\alpha\phi=0 \qquad on\ \ S_2 \quad\cdots\cdots (23)$$

こゝにnは境界面において外側に向って引かれた法線の方向を表わし，k, q, αは既知関数であるとする．但し$S_i(i=1,\ 2)$曲面それぞれ$r=g_i(\theta,\ \varphi)$のごとく表わされると仮定する．(22)式はいわゆる幾何学的境界条件であり，(23)式は力学的境界条件（自然境界条件）である．従って$w_i(\theta,\ \varphi)$ を表面S_1上で定義された既知重み関数とすれば(22)式の代りに

$$\iint_{S1}(\phi(r,\ \theta,\ \varphi)-f(r,\ \theta,\ \varphi))w_i(\theta,\ \varphi)dS=0 \cdots (25)$$

とおくことができる．こゝに$i=1,\ 2,\ 3\cdots\cdots$である．

また(24)式に対応する境界積分として次式の条件が得られる．

$$\iint_{S2}(k\frac{\partial\phi}{\partial n}+q+\alpha\phi)\delta\phi\ dS=0 \quad\cdots\cdots (26)$$

さて(25)および(26)式に(21)式を代入し，未定係数$A_{m\lambda}$～$D_{m\lambda}$を決定するに必要なだけの重み関数$w_i(\theta,\varphi)$をとってこれらの係数に関する連立一次方程式を導くことができる．以上の解析において常数kは簡単のために等方性を仮定したが，異方性の場合への拡張もそれ程困難でない．この定式化において導入した重み関数$w_i(\theta,\varphi)$のとり方が一つの問題点となるが，著者は(21)式の関数列を考えている．

（すなわちGalerkin法である．）

これらの方程式群を導く際に現れる曲面積分の数値計算を如何に能率よくしかも高精度に行うかがこの問題の最も重要なポイントになるが，FEMを中心として高度に開発の進んでいる数値計算技法を用いればそれ程困難な問題ではないと思われる．

以上に述べたのは流れの速度（u, v, w）が既知として与えられる場合の線形拡散方程式の解法であったが非線形拡散問題の場合でも与えられた方程式を適当に線形化した場合の一般解を作り，その関数を試験関数にとった標準的な重みつき残差法といわゆる増分法（incremental procedure）を組合せて解析を進めて行くことができる.

(B) Navier-Stokesの方程式の解析

Navier-Stokes方程式の重みつき残差法による解析は熱伝導問題と並んでその有限要素解析法の開発が世界的に注目を集めている．この問題の解析もZienkiewicz教授によって先鞭がつけられた．彼は先づ2次元のNavier-Stokesの方程式を解くため，流れ関数Ψを導入し，圧力pを消去して次の方程式を得た.

$$2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\left(\mu\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y}\right)+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\mu\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\mu\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right)$$
$$+\rho\frac{\partial Y}{\partial x}-\rho\frac{\partial X}{\partial y}+\rho Q(\Psi)=0 \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (27)$$

ここに＼

$$Q(\Psi)=\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial\Delta\Psi}{\partial y}\right)-\left(\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial\Delta\Psi}{\partial x}\right)+\frac{\partial\Delta\Psi}{\partial t}\cdots\cdots (28)$$

である.

この式をGauβの定理を用いて変換し重みつき残差法を適用して(27)式に対する変分方程式を導き，各種境界条件の場合について論じている.

これに対し池の内らは流れ関数Ψと温度wを独立変数として扱い，2つの関数に関する2階連立非線形偏微分方程式をMWRで解く方法を提案し，二三の簡単な問題に応用して良好な結果を得ている．すなわち次の形に表わされたNavier-Stokesの方程式に

$$\left.\begin{array}{l}-\dfrac{\partial}{\partial t}\Delta\Psi+\dfrac{\partial(w,\Psi)}{\partial(x,y)}-\nu\Delta w=0\\ \Delta\Phi+w=0\end{array}\right\}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (29)$$

に対し

$$\left.\begin{array}{l}\displaystyle\iint_D\left\{-\frac{\partial}{\partial t}\Delta\Psi\cdot\Delta\Phi+\frac{\partial(w,\Psi)}{\partial(x,y)}\Phi+\nu\Delta w\cdot\Delta\Phi\right\}\\ dxdy=0\\ \displaystyle\iint_D(-\Delta\Psi\cdot\Delta\Omega+w\Omega)dxdy=0\end{array}\right\}\cdots (30)$$

のような変分方程式を導き，これを離散化して有限要素解析を行っている．こゝに$\Phi(x,y)$および$\Omega(x,y)$は重み関数で，前者には境界上で零になる条件を課している.

一般の3次元流に対してはOden教授の先駆的研究以来数多くの研究が発表されているが，この小論で紹介したのは川原，吉村らの行ったGalerkin法を用いた定式化である．彼等は離散化された非線形連立方程式（定常問題の場合）を解く方法として繰返し代入法，Newton-Raphson法および摂動法の3つの方法を検討し，流速が遅い場合を除いて，繰返し法は不適当であり，Newton-Rephson法は係数が非対称となる欠点があるが，比較的流速が速い場合の計算が可能であること，また摂動法によればReynolds数の低い部分から順次計算を進めていくためその計算の途中結果の推移がわかり，また乱流の場合でも，いわゆるReynolds方程式から出発して，有限要素法の定式化が可能であると述べている.

その他数多くの研究報告がなされているが，その大部分のものははじめから離散化して行く方法であり，かなりの成果があげられているが，流れの方程式に内在する非線形性の強さを考えるとできるだけ解析解に近い解を境界積分法を用いて求める方法を検討すべきではなかろうか．このような観点に立って著者はOseenの方程式の精密解を境界積分法を用いて求める研究を進めている．すなわち静止した物体に速さUのx軸方向の一様流があたる場合のOseenの方程式は次式で与えられる.

$$div\,\mathbf{v}=0\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (31)$$

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}+U\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial x}=-\frac{1}{\rho}grad\ p+\nu\Delta\mathbf{v}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (32)$$

また渦度方程式は次のようになる.

$$\frac{\partial\mathbf{w}}{\partial t}+U\frac{\partial\mathbf{w}}{\partial x}=\nu\Delta\mathbf{w}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (33)$$

この問題の定常解としてLambは次のような解を与えている.

$$\left.\begin{array}{l}u=-\dfrac{\partial\phi}{\partial x}+\dfrac{1}{2k}\dfrac{\partial\chi}{\partial \chi}-\chi\\ v=-\dfrac{\partial\phi}{\partial y}+\dfrac{1}{2k}\dfrac{\partial\chi}{\partial y}\\ w=-\dfrac{\partial\phi}{\partial z}+\dfrac{1}{2k}\dfrac{\partial\chi}{\partial z}\end{array}\right\}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (34)$$

ここに

$$p=\rho U\frac{\partial\phi}{\partial x},\quad k=\frac{U}{2\nu}\quad\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (35)$$

でχおよびϕは

$$\left.\begin{array}{l}\Delta\chi-2k\dfrac{\partial\chi}{\partial x}=0\\ \Delta\phi=0\end{array}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (36)$$

を解いて求められる関数である.

そして渦動ベクトル$\mathbf{w}$の成分（ξ, η, ζ）は関数χを用いて次式のごとく与えられる.

$$\left.\begin{array}{l}\xi=\dfrac{\partial w}{\partial y}-\dfrac{\partial v}{\partial z}=0\\ \eta=\dfrac{\partial u}{\partial z}-\dfrac{\partial w}{\partial x}=-\dfrac{\partial\chi}{\partial z}\\ \zeta=\dfrac{\partial v}{\partial x}-\dfrac{\partial u}{\partial y}=\dfrac{\partial\chi}{\partial y}\end{array}\right\}\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (37)$$

今極座標による(36)式の一般解を求めると

$$\chi=Ue^{\xi\eta}\sum_{m=0}^{\infty}B_m X_m(\xi)P_m(\eta) \cdots\cdots (38)$$

こゝに

$$\left.\begin{aligned}&\xi=kr,\ \eta=\cos\theta\\&X_m(\xi)=(2m+1)\sqrt{\frac{\pi}{2\xi}}K_{m+\frac{1}{2}}(\xi)\end{aligned}\right\} \cdots\cdots (39)$$

$K_{m+\frac{1}{2}}(\xi)$は半奇数次の変形Bessel関数，また$P_m(p)$はm次の第1種Legendre関数である．

次に調和関数ϕに対してはA_nを積分常数として

$$\phi=U\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A_n}{r^{n+1}}P_n(\eta) \cdots\cdots (40)$$

のように表わされる．

これらの式の中に含まれる未定係数A_n, B_nは表面における境界条件

$$\left.\begin{aligned}&u=-U,\ v=w=0\\&\text{あるいは}\\&u_r=-U\cos\theta,\ u_\theta=U\sin\theta,\ u_\varphi=0\end{aligned}\right\} \cdots\cdots (41)$$

により決定される．

ところで

$$\left.\begin{aligned}&u_r=-\frac{\partial\phi}{\partial r}+\frac{1}{2k}\frac{\partial\chi}{\partial\gamma}-x\cos\theta\\&u_\theta=-\frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}+\frac{1}{2k}\frac{1}{r}\frac{\partial\chi}{\partial\theta}+x\sin\theta\\&u_\varphi=0\end{aligned}\right\} \cdots\cdots (42)$$

であり，これらの変位に対する境界力（F_r, F_θ, F_φ）の式は次のようになる．

$$\left.\begin{aligned}&F_r=-pn_r+\mu\frac{\partial u_\gamma}{\partial n}\\&F_\theta=-pn_\theta+\mu\frac{\partial u_\theta}{\partial n}\\&F_\varphi=-pn_\varphi+\mu\frac{\partial u_\varphi}{\partial n}\end{aligned}\right\} \cdots\cdots (34)$$

従って，(42)および(43)式を用いてこの問題に対する一つの境界積分式として次式を提案することができる．

$$\iint(u_r+U\cos\theta)\delta F_r dS=0 \cdots\cdots (44)$$

$$\iint(u_\theta-U\sin\theta)\delta F_\theta dS=0 \cdots\cdots (45)$$

そこで以上の二式に(38)および(40)式を代入して，未定数A_n, B_mに関する連立方程式が導けるからそれらの方程式を逐次近似的に解いて，3次元物体の周りの流れの様子が知れることになる．

現在著者の研究室では先づ精密解の求められている円壔のまわりの2次元流や球のまわりの3次元流について解析を進め，この方法の実用性を検討中である．

この方法では基礎方程式の一般解を試験関数にとっているから計算の精度および収束性はよい筈である．また解の中に含まれるべき特異性もそのまゝ内在しているので特異点近傍の挙動も十分追随できるものと思われる（*FEM*はこの点が一番の泣き所である.）しかしこの方法は複雑な領域内の流れ等を扱うには得策でないという欠点があり，どの程度の複雑な問題にまで実用的に適用できるか検討する予定である．

海洋汚染問題に関連して無視できないのは波の問題である．最近港湾や海洋構造物周辺における波浪問題の解析に有限要素法が広く用いられるようになってきたが，その大部分のものは定常波の問題であってHelmholzの方程式の有限要素解析といった形になっている．波動現象は本質的には非定常と考えるべきであり，しかも有限振幅の非線形波動問題に関してはその重要性にもかかわらずほとんど組織的な研究が行われていなかった．そこで著者の研究室ではこれら非線形波動方程式のMWRによる解析法の研究をはじめ，いわゆるKdv方程式を解析して完全流体の非線形浅水波の問題につきある程度の成果をあげることができたが，その記述は紙面の都合で省略する．

以上に述べた研究はすべて基礎的研究であって実際の汚染拡散解析に使用し得るものでないが，近年このような汚染拡散解析用の実用プログラムの開発が漸く盛んになりかけている．わが国でも既にいくつかのプログラム開発が公的私的機関において行われている．中でも自動車の排気ガスによる広域汚染予測用プログラムAPPS (Air Pollution Prediction System) が1969年より2年間の計画で日本機械学会において行われたし（これは差分法がベースになっている)，また湖流による汚染物質の拡散についてはニューヨーク州立大（バッファロー分校）のR. T. Chengやコーネル大のR. H. Gallagherの行ったエリー湖の循環流解析が報告されているが，わが国でも田中らが粘性流体の基礎方程式から出発して風力などを考慮に入れた境界条件を用いて湖流方程式を導き，重みつき残差法を適用して離散化するプログラムを開発している．このプログラムには拡散方程式の有限要素解析ルーチンも当然のことながら組み込まれて，水質汚濁や自然熱対流の解析も行える汎用性の高いプログラムになっているようである．紙面の都合でこれらの内容について紹介できないのが誠に残念である．

5. 結　　言

汚染物質の拡散移動のコンピュータシミュレーションの一手法として，有限要素法を一般化した重みつき残差法の研究開発の現状と見通しにつき簡単に紹介した．

(1976年1月17日　受理)

参考文献

1) 川井忠彦，“有限要素法の非構造問題への応用”，第12回生研講習会テキスト（第2回マトリックス法の応用）(昭和48年10月)
2) 平岡正勝，田中幹也，“移動現象論”，朝倉書店（昭和46年3月）

3) Y. C. Fung著，大橋，村上，神谷共訳，"固体の力学/理論"，培風館 (昭和45年)
4) 寺沢寛一編 "自然科学者のための数学概論 (応用編)"，岩波書店 (昭和35年)
5) P. M. Morse and H. Feshbach, "Methods of Theoetical Physics", Part Ⅰ & Ⅱ, McGraw-Hill Book Co. (1953)
6) O. C. Zienkiewicz, "The Finite Element Method in Engineering Science", McGraw-Hill, London (1971)
7) O. C. Zienkiewicz, "Weighted Residual Processes in Finite Element with Particular Reference to some Transient and Coupled Problems", Lecture on Finite Element Methods in Continuum Mechanics, NATO Symp., Lisbon, 1971, UAH, pp, 415～458 (1973)
8) B. A. Finlayson著，鷲津，山本，川井共訳，"重みつき残差法と変分原理"，培風館 (昭和49年12月)
9) J. T. Oden, "Finite Element of Nonlinear Continua", McGraw-Hill Book Co. (1972)
10) 藤野勉，"熱伝導と熱応力"，コンピュータによる構造工学講座 Ⅱ―4―B，培風館 (昭和47年7月)
11) R. H. Gallagher, J. T. Oden, C. Taylor and O. C. Zienkiewicz, "Finite Elements in Fluids", Vol. 1, Vol. 2, Johe Wiley & Sons, Ltd. 1975
12) 日本鋼構造協会第7回大会研究集会論文集 (昭和48年6月)
13) 第22回応用力学連合講演会論文抄録集 (昭和47年12月)
14) 数理科学特集 "有限要素法"，サイエンス社，(昭和50年6月)
15) 数理科学特集 "拡散汚染"，サイエンス社 (昭和50年8月)