

## 全表象を利用した偏微分方程式系の数値解法 (II)

米谷道夫 (Michio Yoneya) \*

東北工業技術研究所金属素材部基礎物性研究室

Tohoku National Industrial Research Institute, Sendai 983-8551 Japan

### 1 はじめに

物理現象を保存則で定式化したとき偏微分方程式系で表されることが多いが、このとき現象に応じて楕円型、放物型、双曲型のタイプに分かれる。また、実際的な問題は複合現象で様々な要件が絡み合うことも多い。このようなときに、方程式のタイプの違いを意識することなく計算できたり、あるいは現象が複雑になっても計算コードの変更が少なく済むような数値解析法の開発を目標としている。その方法として、解析的に解を求めることに使われる全表象 (total symbol) (島倉 [1]) つまり線形作用素の基本解のフーリエ表現を用いて、周波数空間で数値解析する方法を提案してきた。この方法では、代用電荷法 (岡本, 桂田 [2]) と同じく、境界面の外側にも領域があるとしてそこにソース点 (電荷点) を配置して、ソース強度を調整することで境界条件を満たすように操作する。この方法を Cavity 流れなどの数値解析に適用して来たが、必ずしも Neumann 境界条件の取り扱いが十分に満足できるものではなかった。[4, 5] そこで Dirichlet 境界と Neumann 境界が混在する場合について、計算手法を改善したので報告する。

### 2 数値解析の方法

非線形偏微分方程式で、線形項を左辺に残して、非線形項等はすべて右辺  $f$  の中に繰り込むことを考える。そうすると、未知関数を  $u$  としたとき、定数係数線形作用素  $A$  に関する次式に変形できる。

$$Au(x) = f(x) + \sum_s S_s \delta(x - x_s) \quad (1)$$

ここで  $S_s$  はソース (電荷) 項で、境界条件が与えられたときに、 $u(x)$  がその境界条件を満たすように大きさを調節する。線形作用素  $A$  が定数係数なので両辺をフーリエ変換したとき、

$$\hat{u}(\xi) = \frac{1}{A(i\xi)} \left( \hat{f}(\xi) + \sum_s \frac{1}{(2\pi)^n} S_s e^{-i\xi \cdot x_s} \right) \quad (2)$$

である。この  $\hat{u}(\xi)$  や  $\hat{f}(\xi)$  を周波数空間の格子点で離散化して数値計算を行う。このとき計算効率を上げるため、 $u(x)$  を周期関数と仮定して、繰り返し周期条件を適用することで、数値離散フーリエ変換に高速フーリエ変換 (FFT) が利用できるようにする。

Dirichlet 型境界では境界上の点  $x_B$  で関数値  $u_B$  が既知である。従って (2) 式をフーリエ逆変換して

$$u_B = \int_{\Omega} A^{-1} \hat{f} e^{i\xi \cdot x_B} d\xi + \sum_s \left[ \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^n} A^{-1} e^{-i\xi \cdot x_s} \right\} e^{i\xi \cdot x_B} d\xi \right] S_s \quad (3)$$

\*email: yoneya@tniri.go.jp

となる。

Neumann 型境界のときは点  $x_B$  で関数の傾きが与えられるが、勾配を定めるのに 2 点差分近似公式を用いると

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_B} = \int_{\Omega} A^{-1} f \frac{e^{i\xi \cdot x_N} - e^{i\xi \cdot x_B}}{\Delta x} d\xi + \sum_S \left[ \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^n} A^{-1} e^{-i\xi \cdot x_S} \right\} \frac{e^{i\xi \cdot x_N} - e^{i\xi \cdot x_B}}{\Delta x} d\xi \right] S_S \quad (4)$$

となる。ここで点  $x_N$  は境界点  $x_B$  から距離  $\Delta x$  だけ内側の点である。どちらの境界条件でも未知数はソースの強度  $S_S$  で、境界点  $x_B$  の数と同じ個数のときに連立 1 次方程式を解いて  $S_S$  を決めることができる。もちろん 2 つの境界条件型が混在していてもよく、計算式は異なるがソース (電荷) 強度を求める計算手順は同じである。このとき式 (3)(4) の右辺第 2 項中の括弧 [ ] 内の数値積分は、高速フーリエ変換 (FFT) での数値積分と計算方法を一致させるために台形公式で行う。

式 (1) のソース項  $S_S$  が格子点上にある場合、デルタ関数を矩形近似することで計算速度を向上させることが可能である。

$$S_S \delta(x - x_S) = \begin{cases} S_S \frac{1}{\Delta x} & \text{at } x = x_S \quad (x_S \text{ is on grid}) \\ 0 & \end{cases} \quad (5)$$

として、

$$A \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) u(x) = f(x) + \sum_S S_S \frac{\delta_S(x_S)}{\Delta x} \quad (6)$$

とする。ここで  $\delta_S(x_S)$  は格子点  $x_S$  を中心とする幅  $\Delta t$  の区間で  $1/\Delta x$  の値をとりそれ以外では 0 であるような、デルタ関数の矩形近似を考える。このときフーリエ変換形は

$$\hat{u}(\xi) = \frac{1}{A(i\xi)} \left[ \int_R \left\{ f(x) + \sum_S S_S \frac{\delta_S(x_S)}{\Delta x} \right\} e^{-i\xi \cdot x} dx \right] \quad (7)$$

となり、 $f(x)$  と一緒にしてデルタ関数も高速フーリエ変換 (FFT) で数値フーリエ変換することができる。

式 (3)、(4) の未知変数であるソース (電荷点) 強度を決めるときソース点の数の次数の連立 1 次方程式を解かないといけないが、3 次元問題のように境界が面になるとソース点数が格段に増えるため、この連立 1 次方程式を解くのに計算時間が消費されるようになる。そこでソース点 (電荷点) を、例えば一つ置き毎に、2 組に分けて各々の組毎に式 (3)、(4) からソース強度を求めることを考える。そうすると次数が半分の 2 つの連立 1 次方程式を解けばよいので計算量は削減されると期待できる。しかし、このままではソース強度を過大に評価することになり全体としては境界条件を充たすことはできない。そのためソース項を  $S_S = S_S^0 + S_S'$  のように既知部分  $S_S^0$  と未知部分  $S_S'$  に分割する。

$$u(x) = \int_{\Omega} \frac{1}{A(i\xi)} \left[ \int_R \left\{ f(x, u) + \sum_S \frac{S_S^0}{\Delta x} \delta_S \right\} e^{-i\xi \cdot x} dx \right] e^{i\xi \cdot x} d\xi \quad (8)$$

$$+ \sum_S \left[ \int_{\Omega} \frac{1}{(2\pi)^n} \frac{1}{A(i\xi)} e^{-i\xi \cdot x_S} e^{i\xi \cdot x_B} d\xi \right] S_S' \quad (9)$$

ここで  $\alpha < 0.5$  として、 $S_S^0 + \alpha S_S' \rightarrow S_S^0$  と、ソース強度  $S_S^0$  を段階的に修繕するような手順を考えると、ソース点を 2 組に分割して交互に収束させることが可能となる。

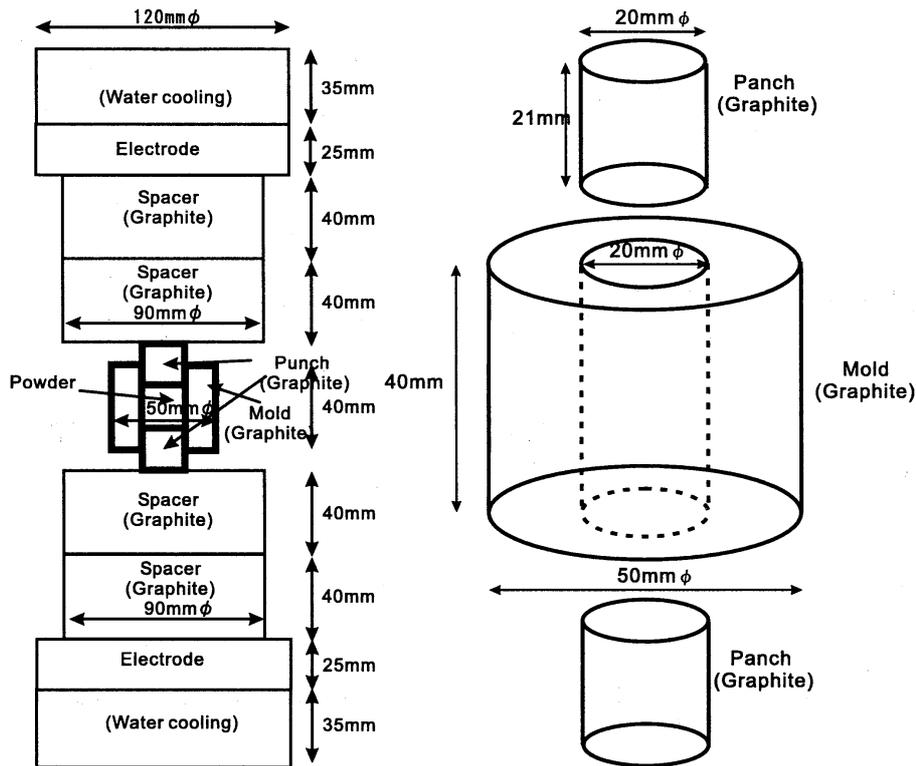


図 1: Apparatus.

### 3 計算方法の適用例

本数値解法を適用した具体例として、パルス通電加圧焼結法を紹介する。パルス通電加圧焼結法は、ジュール熱を使って金属/金属酸化物粉体の焼結を行う方法である。パンチ (黒鉛製中空円筒形状容器) 中に粉体を置き、上下からパンチ (円柱形状の黒鉛) で挟み上下から油圧で圧力を加えることで粉体を圧縮する。この状態でパンチをスペーサー (円盤状黒鉛) を介して電極 (黒鉛) に接触させ、電流を流してジュール熱を発生させる。この方法は、焼結粉体の近くでのみ加熱を行うので、少ない電気エネルギーで製品が作れることから省エネルギー効果が期待されている。焼結体 (製品) の品質を向上させるには焼結部分を均一な温度に保つことが大切で、製造過程での正確な温度場を求めることが数値計算の目的である。パルス通電加圧焼結装置の概念図を Fig.1 に示す。ここではテスト用の粉末試料として、金属粉末の銅粉末を用いた。

#### 3.1 物性値の変化

モールド/パンチの構成材料であるグラファイトと金属焼結体の物性値を Fig.2 に示す。これらの密度、電気抵抗、熱拡散係数は東北工業技術研究所の Fangwei らが測定したものである。それぞれの物性値を温度に対してプロットしてあるが、金属焼結体は温度が上がったとき焼結により緻密化するので、温度変化そのものよりも緻密化することの影響が大きい。

グラファイトのようなバルク固体では体積膨張係数が小さいので、密度はほとんど変化しない。しかし焼結体では、焼結の進展に伴う緻密化により空隙が少なくなり粉体 (焼結体) の密度は大きくなる。例えば、室温での銅粉末の空隙率は 44% であるが、1000K では緻密化がほぼ終了している。金属固体の

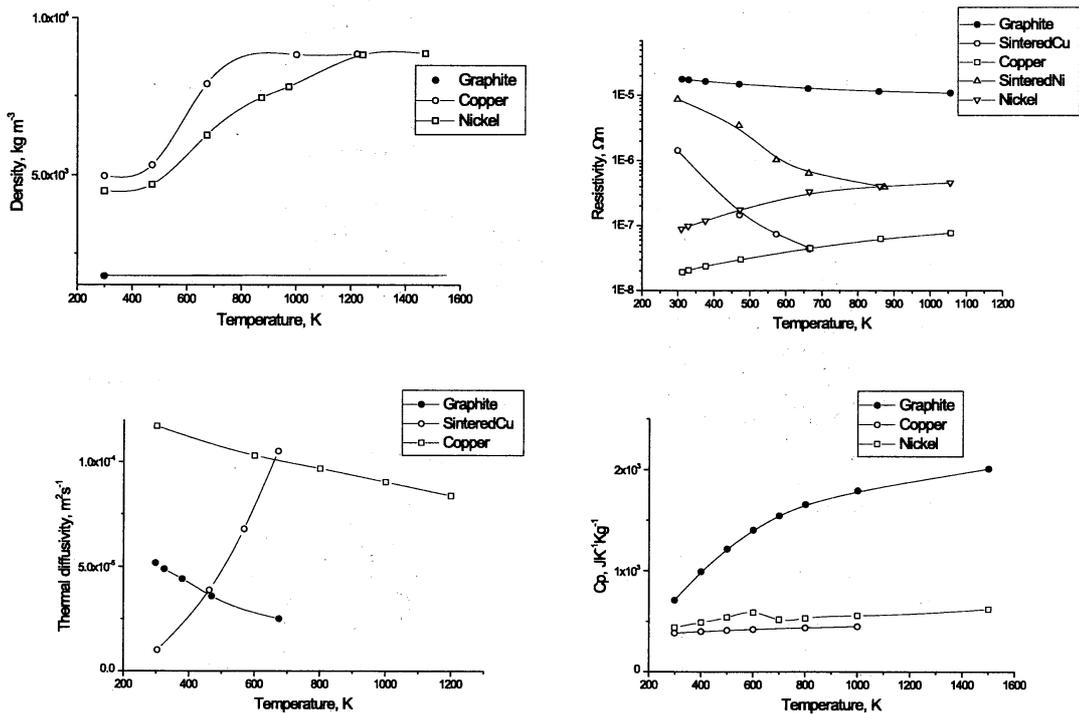


図 2: Properties.

電気抵抗は温度が高くなると大きくなることが知られているが、焼結を行うときには、まず焼結による緻密化に伴って電気抵抗が小さくなり、次第に金属としての性質を示すようになる。例えば、銅粉末の場合 660K くらいの温度で金属銅と同じ値を示す。なお、電気伝導率は電気抵抗の逆数である。室温では金属粉末の熱拡散係数はグラファイトより小さいが、温度が上がるに従い焼結体が密になり、670K あたりの温度で金属銅の物性値になる。単位重量当たりの定圧比熱は空隙の有無にあまり影響を受けないと考えられるので、熱容量は化学便覧 [3] のデータを用いた。

### 3.2 Poisson 方程式

電気伝導率を  $\kappa$  としたとき、電位分布は Kirchhoff 則により Poisson 方程式で決まる。基礎式に境界条件を満たすためのソース項 (電荷) を付加して定式化すると、

$$\operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} \phi) = \sum_s S_s \delta(x - x_s) \quad (10)$$

となる。電極に接している部分は Dirichlet 境界条件、その他の部分は Neumann 境界となるので、ソース (電荷) の強度  $S_S$  は、

$$\phi = \phi_1 \quad \text{or} \quad \phi_2, \quad \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (11)$$

の境界条件を充たすようなものとする。

パルス通電加圧焼結法の問題では異なる材料から構成されているので場所で物性値が異なる。また温度変化や焼結に伴い電気抵抗値が変化することを考慮して、電気伝導率を  $\kappa = \kappa_0 + \kappa'$  と定数項と変動

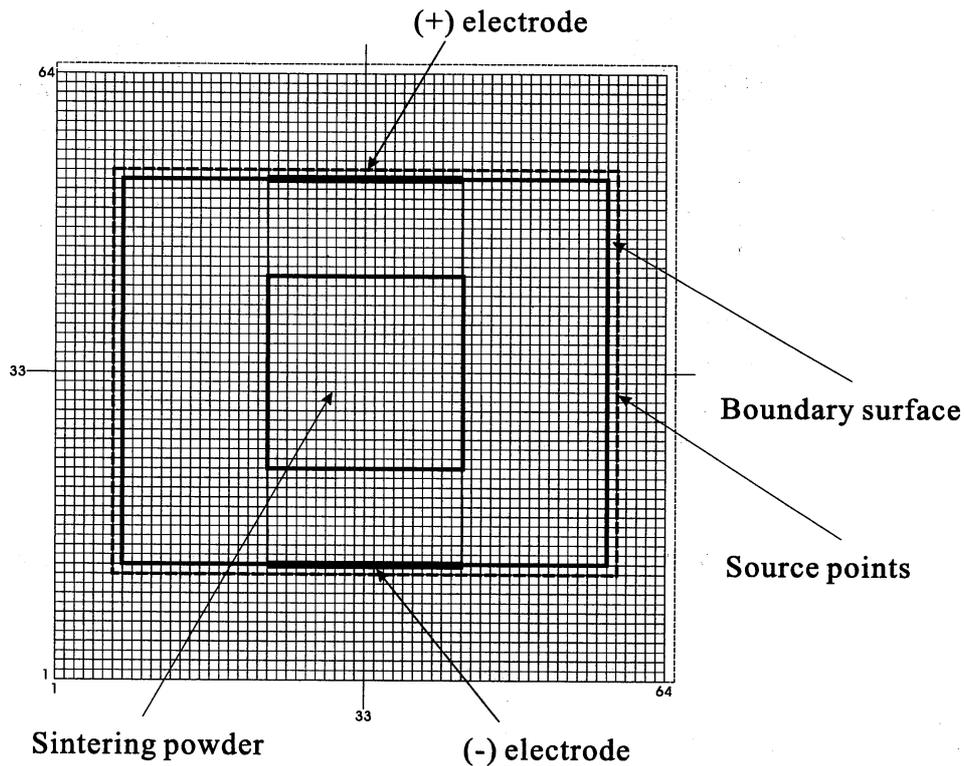


図 3: Calculation coordinates.

項に分離する。さらにモールドパンチの形状が円筒形なので、円周方向については均一であることを仮定して、円筒座標系で定式化すると、

$$A\phi(r, z) = f(r, z) + \sum_S \frac{S}{\kappa_0} \delta(r - r_S) \delta(z - z_S) \quad (12)$$

$$A = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (13)$$

$$f(r, z) = -\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} - \frac{\kappa'}{\kappa_0} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{\kappa_0} \left( \frac{\partial \kappa'}{\partial r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial \kappa'}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \quad (14)$$

が解くべき支配方程式になる。ここで  $f(r, z)$  は実空間で函数を離散化して数値微分で求める。形式的には定数項  $\kappa_0$  は任意の値を取ることができるが、数値解が収束するためには  $|\kappa'| < |\kappa_0|$  の必要がある。また周波数空間でのラプラシアン  $A$  の逆数を、

$$\frac{1}{A(i\xi, i\eta)} \equiv \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{-\xi^2 - \eta^2 + i\varepsilon} + \frac{1}{-\xi^2 - \eta^2 - i\varepsilon} \right] \quad (15)$$

と近似した。なお、数値計算では  $\varepsilon = 10^{-20}$  とした。

Fig.3 に計算座標を示すが、計算では計算対象をモールドとその内部のみとし境界形状を単純化した。全計算領域を  $64 \times 64$  の格子点、格子点間隔は実寸法で  $1\text{mm}$  で表した。図中の太実線上の格子点に境界点(拘束点)を、その一路外側の太点線上の格子点にソース点(電荷点)を配置する。最内側の太実線内部に金属粉体などの焼結試料を配置し、その外は境界面のさらに外側まで含めて全てグラファイトであるとする。また図中の太い横棒線は電極の位置を示す。図中の境界面から内側が物理的に意味のある領域で、その外側は計算上の仮想的な領域である。

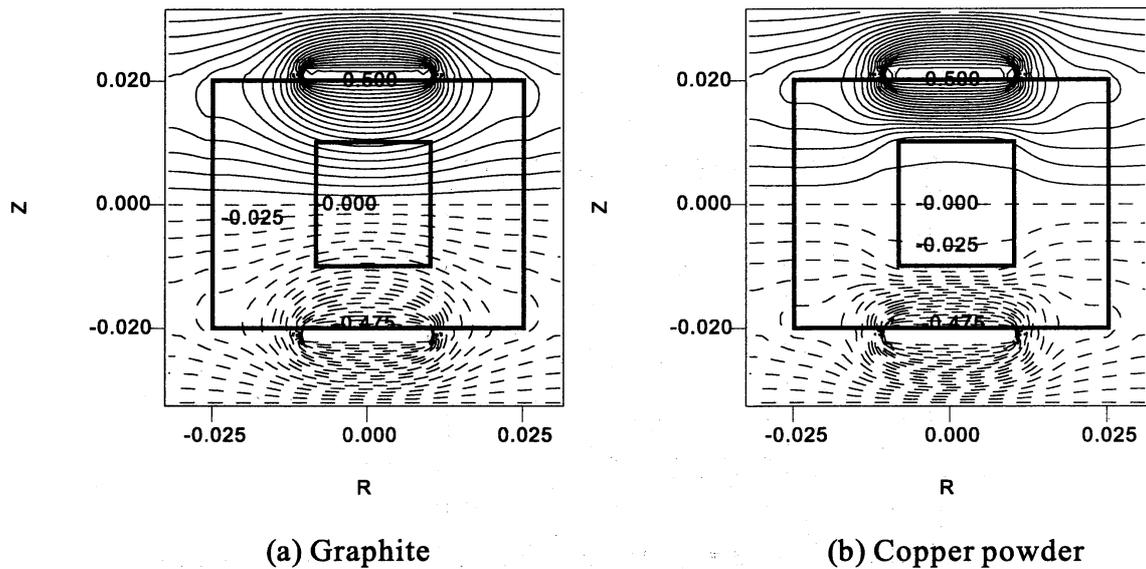


図 4: Voltage distribution.

303.15K の時の計算結果の一例を Fig.4 示す。左図が試料部も Graphite のとき、右図は試料部が銅焼結体 (粉末) のときの電位分布である。ここでの計算では、境界値 (拘束点) を充たすためのソース点を 1 つのグループにして、全てのソース強度を同時に求めた。また、ソース点 (電荷点) は境界点 (拘束点) の 1 路外側に配置した。倍精度計算で逐次近似回数 5000 段目までテストしたが、変移幅 (逐次近似前段との数値の差) は順次小さくなり逐次近似回数 88 段目で格子点 (7,52) で  $-0.532907 \times 10^{-14}$  を示し、それ以降は絶対値で  $0.3 \times 10^{-14} \sim 0.1 \times 10^{-14}$  の間に収まっていた。このことから構成物質がグラファイトのみのときのように導関数が滑らかな場合は、スムーズに収束することが分かる。

比較のためにソース点 (電荷点) を 2 つに分割する方法をテストしたところ  $\alpha = 0.25$  として収束させた場合、逐次近似回数 100 段目で格子点 (24,12) で  $0.551399 \times 10^{-3}$ 、と収束性がかなり劣り、ソース点 (電荷点) のところで値がふらついているようであった。これでは同じ精度を求めるときには、かえって計算量を増大させることになる。また境界面の 4 隅付近の収束が悪く、そこに真電荷があるかのような数値解が得られるケースもあった。これは、厳密解として存在し得なくても Neumann 境界条件を充たすような近似解を探しているような挙動である。一般的に、ソース点 (電荷点) を境界点 (拘束点) 上に置くよりも、境界面の外側に置いた方が計算精度が良くなるようで、これらの問題点はソース点 (電荷点) の配置を工夫することで改善できた。

銅粉体のときは、グラファイトのみの場合と比較して収束性が格段に悪くなった。例えばソース点を境界点の一路外側に配置しても、逐次近似回数 735 段目のときの格子点 (59,20) での変移幅が最小の  $0.460947 \times 10^{-9}$  で、それ以降は逐次近似を進めるとかえって変移幅が大きくなってしまい、数値解は漸近級数に類似した挙動を示し完全には収束はしなかった。この原因の 1 つは、電気伝導率が極端に異なる材料で構成されるためと思われる。電気伝導率  $\kappa$  や電位勾配  $\partial\phi/\partial x$  が不連続になるが、異なる構成材料間の界面では算術平均値をとり、微分値は不連続な点も含めて全て中心差分商で近似して数値計算したことも関係すると考えられる。このような不連続点を厳密に取り扱うためには、界面に付加的なソースを導入して界面での接続条件を充たすような操作の導入を考える必要がある。なお結果は  $\epsilon$  の数値の取り方には依存していなかった。

次節での Poisson 方程式の計算では逐次近似回数 50 あるいは 100 で計算を打ちきって近似解とした。

### 3.3 熱伝導方程式

パルス通電加圧焼結法では、電極間に電流が流れることにより Joule 熱が発生する。電位分布  $\phi$  が与えられたとき場所毎の Joule 熱は次式で与えられる。

$$q = \mathbf{i} \cdot \mathbf{E} = \kappa(\text{grad } \phi)^2 \quad (16)$$

このときの温度分布は、発熱量を定める Poisson 方程式と、発熱源  $q$  を加味した熱伝導方程式を連立して解くことで求まる。

$$C_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad } T) + q + \sum_s S_s \delta(x - x_s) \quad (17)$$

また、境界条件は電極と接している部分は冷却されており Robin 境界とし、その他では Stefan-Boltzmann 則で放射冷却しているとした。

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=x_B} = h(u_B - u_\infty) \quad , \quad \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=x_B} = \sigma(u_B^4 - u_\infty^4) \quad (18)$$

Poisson 方程式のときと同様に、物性値が変化するので定数項と変動項に分離する。このとき円筒座標系で支配方程式を定式化すると、時間について差分近似したとき、

$$AT(r, z) = f(r, z) + \sum_s \frac{S_s}{\lambda_0} \delta(r - r_s) \delta(z - z_s) \quad (19)$$

となる。ここで、

$$A = \frac{1}{\lambda_0} \frac{1}{\Delta t} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (20)$$

$$f(r, z) = \frac{1}{\lambda_0} \frac{1}{\Delta t} T_{t-\Delta t} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{c_{p0} \rho_0 - c_p \rho}{\lambda_0} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (21)$$

$$+ \frac{\lambda'}{\lambda_0} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\lambda}{\lambda_0} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\lambda}{\lambda_0} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{q}{\lambda_0} \quad (22)$$

である。

### 3.4 グラファイト

試料部もグラファイト、つまりモールド/パンチ/試料のすべてがグラファイトのときの計算例を Fig.5 に示す。Poisson 方程式のときと同様、図の最外枠の内部が全計算領域で、その中にある黒線枠が境界条件が与えられた境界面である。図は左から、温度分布、発熱量分布、電位分布で、電極での総括伝熱係数が  $h = 25/\lambda_0$ 、電極に加える電圧が  $V = \pm 0.3$  で、時間ステップ  $\Delta t = 1$  秒で  $t = 500$  秒のときの計算結果である。なお、物性値の定数項つまり基準物性値としては、 $\kappa_0 = 1/0.5 \times 10^{-5}$ 、 $\rho_0 = 8.97 \times 10^3$ 、 $C_{p0} = 24.45/63.546 \times 10^{-3}$ 、 $\alpha_0 = 1.17 \times 10^{-4}$  と電気伝導度以外の熱物性値には金属銅の物性値を用いた。

図からパンチからモールドへと断面積が広がるので電極付近の電位勾配が大きく、そのために電極付近での発熱量が大きいことが読みとれる。また、電極から強制冷却されているため温度勾配も電極付近が大きくなっている。一方、全体が同じ材料で構成され温度差による抵抗値変化がそれほど大きくなく、また各部での温度がほとんど同じなので、電位分布は室温の Fig.4 左図と大差ない。

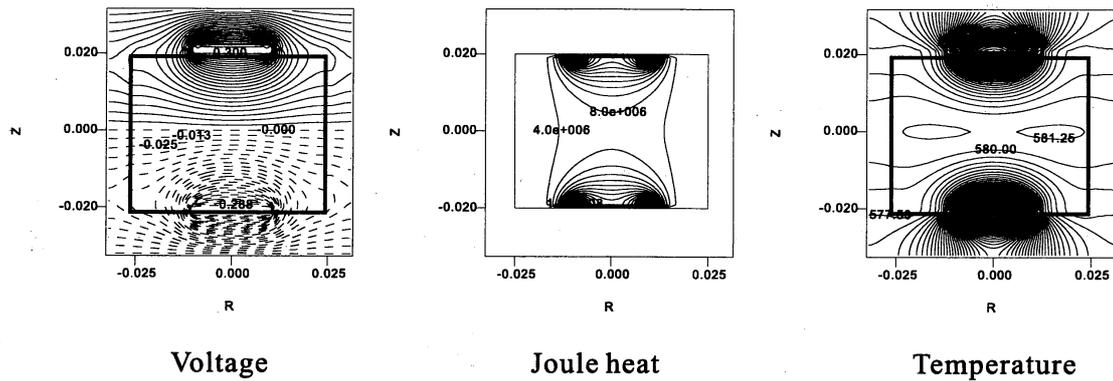


図 5: Graphite.

実際には PID 制御により一定昇温速度で実験を行っているが、計算では電極間に一定電圧が与えられたものとしている。そのため初期の温度上昇は速いが、次第に緩やかになり、最終的に発熱と放熱がバランスして定常状態となった。単一の材料で構成されているこのケースでは、計算は安定して時間発展した。本解法の特長の1つは線形問題のときの時間発展についての計算安定性にあり、例えば線形熱伝導方程式なら空間刻みと関係なく時間刻みを与えることができる。上記の計算で他の条件を同じくして、時間ステップを  $\Delta t = 10$  秒としたときも計算は安定して進んだ。

### 3.5 銅焼結体

Fig.6 に銅焼結体のときの計算結果を示す。上3図は、初期温度を  $500K$  として、電極での総括伝熱係数が  $h = 25/\lambda_0$ 、電極に加える電圧が  $V = \pm 0.3$  のときの時間ステップ  $\Delta t = 1$  で  $t = 50$  秒での計算結果で、それぞれ温度分布、発熱量分布、電位分布である。下3図は同じ計算条件で、 $h = 75/\lambda_0$  としたときの結果である。銅焼結体では電気抵抗変化が大きいので、電気伝導度  $\kappa_0$  については時間発展に応じて各時間ステップ毎に基準値を取り直して計算を進めた。また、銅焼結体ではグラファイトとの界面で物性値が急激に変化するが、この界面格子点での物性値は両者の算術平均値とし物性値の微分値は中心差分商で求めた。

図は、銅焼結体の電気伝導率が高いので、発熱がパンチ部分で起こっていることを示している。冷却具合によっても若干温度分布に違いがあり、電極から強く冷却したほうが中心部分の温度勾配は緩くなるようである。いずれのケースでも、銅は電氣的にも熱的にも良伝導体なので、電極付近のパンチでのみ急な温度勾配をもつが、試料部やモールドでは温度はあまり変化しないことが分かる。一方、発熱量分布を詳細に見ると界面格子点での発熱量の誤差が大きく、数値微分の取り扱い方法に問題がありそうである。室温付近ではグラファイトと銅焼結体の電気抵抗の比が12倍程度であるが、 $660K$  付近では280倍になるため、温度が高くなるに従い電気伝導度の微分値の影響が拡大していったことも考えられる。

## 4 おわりに

これまで開発してきた数値解法を Dirichlet 型境界と Neumann 型境界が混在するときにも適用可能なように拡張して、パルス通電加圧焼結法をモデルとした偏微分方程式系に適用した。構成材料がグラファイトのみの場合は、導関数が滑らかであり Poisson 方程式の数値解を求めることができた。さらに、ジュール発熱の付加項を介してこれと連立する熱伝導方程式も安定して解けることを示した。しかし銅

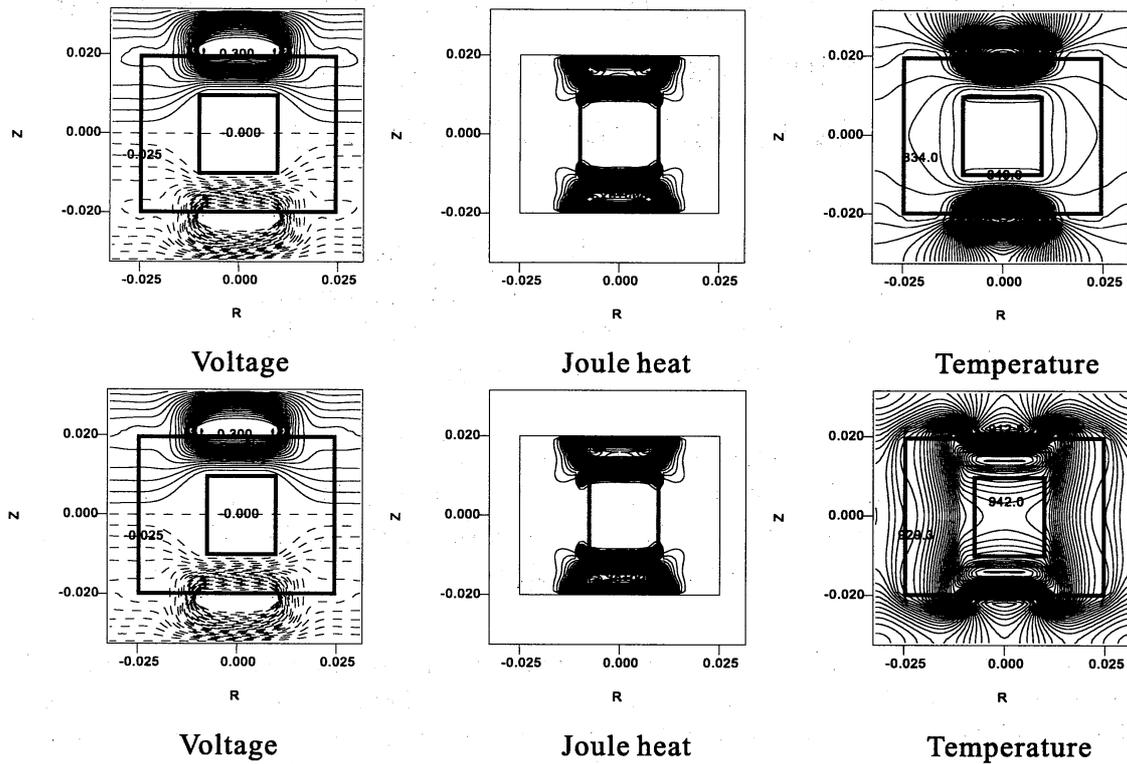


図 6: Copper.

焼結体の場合は、Poisson 方程式の漸近的な数値解しか得られず、さらに改善する必要があることが明らかになった。その原因としては、物性値が急激に変化するグラファイトと金属焼結体の界面での導関数の取り扱いが不十分であることなどが考えられる。また、物性値の定数項(基準物性値)の選択に任意性があり、その最適な選択方法が分かっていない。このような問題点は残っているが、銅焼結体のとき、時間発展に応じて各時刻毎に電気伝導度の基準値を取り直して計算を進めることにより粗い近似解としての温度分布等の傾向を示すことはできた。

## 参考文献

- [1] 島倉紀夫, 楕円型偏微分作用素. 紀伊國屋書店, 1978
- [2] 岡本 久, 桂田祐史, ポテンシャル問題の高速解法, 応用数理, **2** (1992), 212-230.
- [3] 日本化学会編, 化学便覧 基礎編 I, II., 1975
- [4] 米谷道夫, 定係数偏微分作用素のフーリエ表現を用いた数値解法, 数理解析研究所講究録, **1038** (1998), 96-105.
- [5] 米谷道夫, A numerical method for partial differential equations using the total symbol, 数理解析研究所講究録, **1145** (2000), 263-269.