

硫化反応を記述する非線形モデルの1次元シミュレーション

東京都立大学大学院理学研究科数学専攻
小林可奈

1 はじめに

大気汚染の影響による歴史的建築物の劣化は重要な問題である。炭酸カルシウムと SO_2 や NO_3 との反応は、硫酸塩や硝酸塩を生成し、雨水により流されるか、もしくは、地殻を徐々にはがしていく。歴史的建築物の化学的なダメージを阻止するためにも、有効なシミュレーションは不可欠である。炭酸カルシウムと二酸化硫黄の反応を記述する空間1次元の偏微分方程式は次のようになる:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - kuv, & 0 < x < 1, 0 < t \leq 1 & (1.1a) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = -kuv, & & (1.1b) \\ u(x, 0) = 0, \quad v(x, 0) = v_0, \quad (v_0 \text{は正の定数}) & & (1.1c) \\ u(0, t) = \varphi(t). & & (1.1d) \end{cases}$$

ここで $u(x, t)$ は二酸化硫黄の濃度, $v(x, t)$ は炭酸カルシウムの密度を表している。本論文では反応速度 k を変化させた時の解の挙動を数値シミュレーションにより調べた。

2 差分法による計算方法

数値実験には差分法の陽解法と陰解法を用いた $\Delta x, \Delta t$ をそれぞれ x, t に関する格子点の幅, $M\Delta x = 1, N\Delta t = 1$ とし, $x_j = j\Delta x, t_n = n\Delta t, \alpha = \Delta t/(\Delta x)^2$ とする。さらに、微分解 $u(x_j, t_n), v(x_j, t_n)$ に対応する差分解を U_j^n, V_j^n と表わす。

2.1 陽解法

陽解法による1次オーダーの差分方程式は次のようになる:

$$\begin{cases} U_j^{n+1} = \alpha U_{j+1}^n + (1 - 2\alpha)U_j^n + \alpha U_{j-1}^n - k\Delta t U_j^n V_j^n & (0 \leq n \leq N, 1 \leq j \leq M-1) & (2.1a) \\ V_j^{n+1} = V_j^n - k\Delta t U_j^n V_j^n & (0 \leq n \leq N, 1 \leq j \leq M-1) & (2.1b) \end{cases}$$

2.2 陰解法

陰解法による2次オーダーの差分方程式は次のようになる:

$$\begin{cases} \left(1 + \alpha + \frac{1}{2}k\Delta t V_j^n\right) U_j^{n+1} - \frac{\alpha}{2} (U_{j-1}^{n+1} + U_{j+1}^{n+1}) = (1 - \alpha)U_j^n + \frac{\alpha}{2} (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n) - \frac{1}{2}k\Delta t U_j^n V_j^n \\ V_j^{n+1} = V_j^n - k\Delta t U_j^n V_j^n & (0 \leq n \leq N, 1 \leq j \leq M-1) \end{cases} \quad (2.2)$$

3 数値実験結果

3.1 陽解法

陽解法を用いた場合の実験結果は次のようになった。

$k = 1$ のときの U

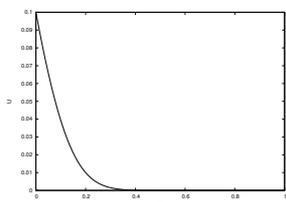


図 1: $t=0.2$

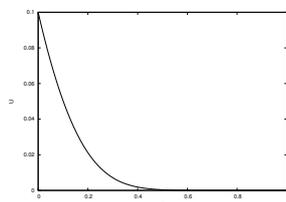


図 2: $t=0.4$

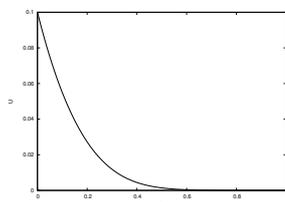


図 3: $t=0.6$

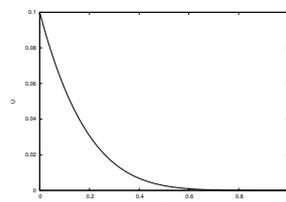


図 4: $t=0.8$

$k = 1$ のときの V

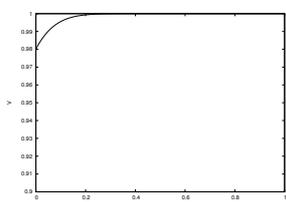


図 5: $t=0.2$

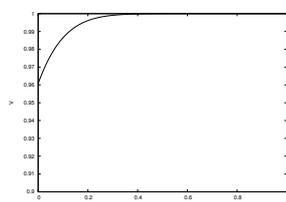


図 6: $t=0.4$

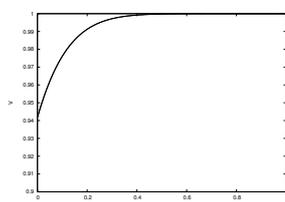


図 7: $t=0.6$

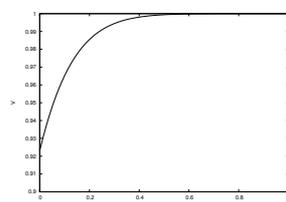


図 8: $t=0.8$

$k = 2000$ のときの U と V

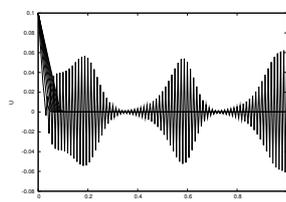


図 9: U

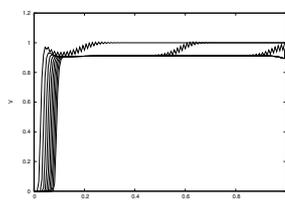


図 10: V

図 9 と図 10 は t を 0.1 づつ表示している。数値実験は $\Delta x = 1/32$, $\Delta t = 1/3000$ として計算した。 U が減少すると同時に V は増加しているが、決まった量の SO_2 があるところで炭酸カルシウムが溶かされている様子であると解釈できる。 $k = 2000$ で破綻が起きたのは、計算スキームの安定性を保証するフォンノイマンの条件

$$|g| \leq 1 + K\Delta t \text{ を満たす定数 } K \text{ が存在する。} \quad (3.1)$$

が満たされなかったからである。ここで g は Δt と Δx を含む数である。陽解法では Δx と Δt の関係に条件がついてしまう。

3.2 陰解法

陰解法を用いた場合は $k = 2000$ を超えても安定して計算をすることができた。

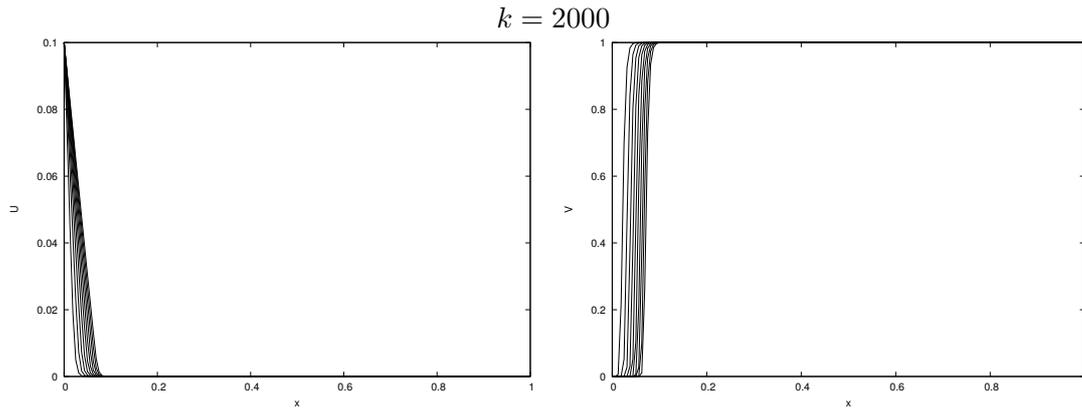


図 11: U

図 12: V

$t = 0.1$ づつ表示している. 安定した計算を進められたのは, 陰解法には Δx と Δt の関係に制限がなく無条件に安定だからである.

4 考察

本論文では反応速度 k に対する解の挙動と, 実験に用いた計算方法の安定性について調べた. 時間が経つにつれて U, V それぞれのグラフは右に移動し, t に依存して変化する自由境界上で収束している様子がわかった. 数値実験の際, 陽解法では $k = 2000$ 以降は安定して計算が行えなかったが, 精度の高い陰解法を用いることで安定して計算を進めることができた. 今後の課題として, 高次元での数値シミュレーションをより良いスキームで行うこと, そのための精度の高いスキームの開発が挙げられる. また, 実社会では反応に影響する触媒物質が少なからず存在するので, そこまで考慮した非線形モデルを考えることも課題である.

参考文献

- [1] D.AREGBA-DRIOLLET, F.DIELE, and R.NATALINI, *A Mathematical Model for The Sulphur Dioxide Aggression to Calcium Carbonate Stones: Numerical Approximation and Asymptotic Analysis*, SIAM J. Appl. Math. Vol.64, No.5, pp. 1636-1667.
- [2] C.GIAVARINI, M.INCITTI, M.L.SANTARELLI, R.NATALINI, and V.FURUHOLT, *A Nonlinear Model of Sulphation of Calcium Carbonate Stones: Numerical Simulations and Preliminary Laboratory Assessments*, IAC report 19.
- [3] F.R. GUARGUAGLINI, and R.NATALINI, *FAST REACTION LIMIT AND LARGE TIME BEHAVIOR OF SOLUTIONS TO A NONLINEAR MODEL OF SULPHATION PHENOMENA*, Preprints, 2004.
- [4] D.Hilhorst, R.van der Hout, and L.A.Peletier, *The Fast Reaction Limit for a Reaction-Diffusion System*, Nonlinear Anal.,41(1996), pp.803-823.