スカラー輸送方程式

春日 悠

2013 年 10 月 27 日

目 次

1 はじめに

輸送方程式は，熱伝導や物質の拡散，流体の運動など，移動現象一般を表す方程式の「型」である．ここではスカラー輸送方程式を導く．

2 レイノルズの輸送定理

物体上の量の体積積分の変化を求めるとき，物体が静止しているのであれば，何も難しいことはない．物体が移動・変形している場合は，移動・変形前後で積分領域が変わるわけだから，単純ではなくなる．運動する物体上の量の体積積分の時間導関数を考えるには，レイノルズの輸送定理を利用する．

物体 B があるとする．ある時点において B が占める領域を Ω_0 としてこれを B の基準配置とする．そのときの物質点の位置ベクトルを $\boldsymbol{X}$ とする．一方，時刻 t における変形後の B が占める領域を Ω としてこれを B の現在配置とし，そのときの物質点の位置ベクトルを $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{X}, t)$ とする (図 1)．変形勾配テンソルを F とし，その成分を

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} \tag{1}$$

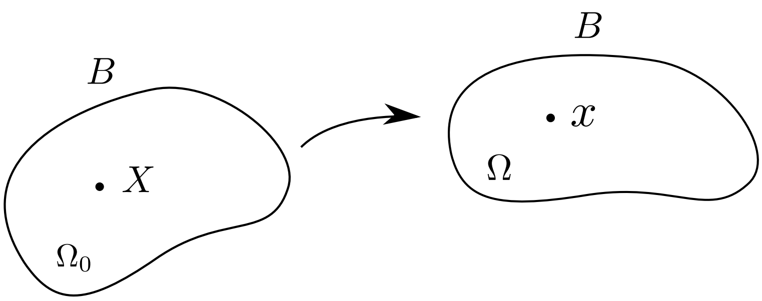

図 1: 物体の運動

とする．変形前の B 上の微小ベクトル $d\boldsymbol{X}$ が，変形後 $d\boldsymbol{x}$ になったとすると

$$d\boldsymbol{x} = F \cdot d\boldsymbol{X} \tag{2}$$

と書ける．

物体 B におけるスカラー場 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ の体積積分の物質時間導関数を，次式で定義する．

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \phi(\boldsymbol{x}, t) dv = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{\Omega'} \phi(\boldsymbol{x}, t + \Delta t) dv - \int_{\Omega} \phi(\boldsymbol{x}, t) dv \right) \tag{3}$$

ここで Ω' は時刻 $t + \Delta t$ において B が占める領域を表す．スカラー場 ϕ を物質表示で考えると

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \phi(\boldsymbol{x}, t) dv &= \frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \phi(\boldsymbol{X}, t) dv \\ &= \frac{D}{Dt}\int_{\Omega_0} \phi(\boldsymbol{X}, t) J dV \\ &= \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial t}(\phi J) dV \\ &= \int_{\Omega_0} (\dot{\phi} J + \phi \dot{J}) dV \end{aligned} \tag{4}$$

ここで dV は基準配置における微小体積を表す．J はヤコビアンであり，$J = \det F$ である．現在配置における微小体積 dv は，座標変換の考え方からヤコビアンにより $dv = J dV$ と表される．

式変形を進める前に，ここでちょっと準備をする．$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ をそれぞれベクトルとすると，スカラー 3 重積 $\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c})$ を次のように表す．

$$|\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}| = \boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}) = \epsilon_{ijk} a_i b_j c_k \tag{5}$$

ここで ϵ_{ijk} はエディントンのイプシロン

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & (i, j, k \text{ が } 1, 2, 3 \text{ の偶置換}) \\ -1 & (i, j, k \text{ が } 1, 2, 3 \text{ の奇置換}) \\ 0 & (i, j, k \text{ のうちどれか } 2 \text{ つが等しい}) \end{cases} \tag{6}$$

である．総和規約を用いている．

A をテンソルとして，$\boldsymbol{a}' = A\cdot\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}' = A\cdot\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}' = A\cdot\boldsymbol{c}$ とすると

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{a}' \quad \boldsymbol{b}' \quad \boldsymbol{c}'| &= |A\cdot\boldsymbol{a} \quad A\cdot\boldsymbol{b} \quad A\cdot\boldsymbol{c}| \\
&= \epsilon_{ijk}A_{il}a_l A_{jm}b_m A_{kn}c_n \\
&= \frac{1}{6}\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn}A_{il}A_{jm}A_{kn}\epsilon_{lmn}a_l b_m c_n \\
&= \det A|\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}|
\end{aligned} \tag{7}$$

ここで $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk} = 6$ および

$$\det A = \frac{1}{6}\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn}A_{il}A_{jm}A_{kn} \tag{8}$$

を用いた．また

$$\begin{aligned}
&|\boldsymbol{a}' \quad \boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}| + |\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b}' \quad \boldsymbol{c}| + |\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}'| \\
&\quad = |A\cdot\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}| + |\boldsymbol{a} \quad A\cdot\boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}| + |\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b} \quad A\cdot\boldsymbol{c}| \\
&\quad = \epsilon_{ijk}A_{il}a_l b_j c_k + \epsilon_{ijk}a_i A_{jl}b_l c_k + \epsilon_{ijk}a_i b_j A_{kl}c_l \\
&\quad = \epsilon_{ljk}A_{li}a_i b_j c_k + \epsilon_{ilk}a_i A_{lj}b_j c_k + \epsilon_{ijl}a_i b_j A_{lk}c_k \\
&\quad = (\epsilon_{ljk}A_{li} + \epsilon_{ilk}A_{lj} + \epsilon_{ijl}A_{lk})a_i b_j c_k \\
&\quad = \frac{1}{6}(\epsilon_{ijk}\epsilon_{ljk}A_{li} + \epsilon_{ijk}\epsilon_{ilk}A_{lj} + \epsilon_{ijk}\epsilon_{ijl}A_{lk})\epsilon_{ijk}a_i b_j c_k \\
&\quad = \frac{1}{6}(2\delta_{il}A_{li} + 2\delta_{jl}A_{lj} + 2\delta_{kl}A_{lk})\epsilon_{ijk}a_i b_j c_k \\
&\quad = A_{ll}\epsilon_{ijk}a_i b_j c_k \\
&\quad = \mathrm{tr}A|\boldsymbol{a} \quad \boldsymbol{b} \quad \boldsymbol{c}|
\end{aligned} \tag{9}$$

ここで δ_{ij} はクロネッカーのデルタ

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{10}$$

であり，$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$ を利用した．$\mathrm{tr}A$ はテンソル A のトレースであり $\mathrm{tr}A = A_{ii}$ である．

さて，準備が整ったので式変形を続ける．ヤコビアンの物質時間導関数の項 $\dot{J}dV$ を求めよう．B の初期配置における微小ベクトルを $d\boldsymbol{X}$, $d\boldsymbol{Y}$, $d\boldsymbol{Z}$ とし，その現在配置におけるベクトルを $d\boldsymbol{x}$, $d\boldsymbol{y}$, $d\boldsymbol{z}$ とすると，dv, dV はそれぞれの配置の微小ベクトルのスカ

ラー 3 重積で表されるので

$$
\begin{aligned}
\dot{J}dV &= \frac{\partial}{\partial t}(JdV) \\
&= \frac{\partial}{\partial t}(\det F|d\boldsymbol{X} \quad d\boldsymbol{Y} \quad d\boldsymbol{Z}|) \\
&= \frac{\partial}{\partial t}|F\cdot d\boldsymbol{X} \quad F\cdot d\boldsymbol{Y} \quad F\cdot d\boldsymbol{Z}| \\
&= |\dot{F}\cdot d\boldsymbol{X} \quad F\cdot d\boldsymbol{Y} \quad F\cdot d\boldsymbol{Z}| + |F\cdot d\boldsymbol{X} \quad \dot{F}\cdot d\boldsymbol{Y} \quad F\cdot d\boldsymbol{Z}| \\
&\quad + |F\cdot d\boldsymbol{X} \quad F\cdot d\boldsymbol{Y} \quad \dot{F}\cdot d\boldsymbol{Z}| \\
&= |L\cdot F\cdot d\boldsymbol{X} \quad F\cdot d\boldsymbol{Y} \quad F\cdot d\boldsymbol{Z}| + |F\cdot d\boldsymbol{X} \quad L\cdot F\cdot d\boldsymbol{Y} \quad F\cdot d\boldsymbol{Z}| \\
&\quad + |F\cdot d\boldsymbol{X} \quad F\cdot d\boldsymbol{Y} \quad L\cdot F\cdot d\boldsymbol{Z}| \\
&= |L\cdot d\boldsymbol{x} \quad d\boldsymbol{y} \quad d\boldsymbol{z}| + |d\boldsymbol{x} \quad L\cdot d\boldsymbol{y} \quad d\boldsymbol{z}| + |d\boldsymbol{x} \quad d\boldsymbol{y} \quad L\cdot d\boldsymbol{z}| \\
&= \mathrm{tr}L|d\boldsymbol{x} \quad d\boldsymbol{y} \quad d\boldsymbol{z}| \\
&= dv\,\mathrm{tr}L
\end{aligned} \tag{11}
$$

ここで L は変形速度テンソルであり，物体 B の速度ベクトル場を $\boldsymbol{u}$ とするとその成分は

$$
L_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{12}
$$

である．$L = \dot{F}\cdot F^{-1}$ と表される．また，$\mathrm{tr}L = \nabla\cdot\boldsymbol{u}$ であるので

$$
\dot{J}dV = dv\nabla\cdot\boldsymbol{u} \tag{13}
$$

したがって

$$
\begin{aligned}
\frac{D}{Dt}\int_\Omega \phi(\boldsymbol{x},t)dv &= \int_{\Omega_0}(\dot{\phi}J + \phi\dot{J})dV \\
&= \int_\Omega(\dot{\phi} + \phi\nabla\cdot\boldsymbol{u})dv
\end{aligned} \tag{14}
$$

結局

$$
\frac{D}{Dt}\int_\Omega \phi(\boldsymbol{x},t)dv = \int_\Omega\left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)dv \tag{15}
$$

上式を，レイノルズの輸送定理という．レイノルズの輸送定理はスカラー場に限らず，ベクトル場やテンソル場に対しても成り立つ．

これはつぎのようにも書ける．

$$
\begin{aligned}
\frac{D}{Dt}\int_\Omega \phi(\boldsymbol{x},t)dv &= \int_\Omega\left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)dv \\
&= \int_\Omega\left(\frac{\partial\phi}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi + \phi\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)dv \\
&= \int_\Omega\left\{\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\phi\boldsymbol{u})\right\}dv
\end{aligned} \tag{16}
$$

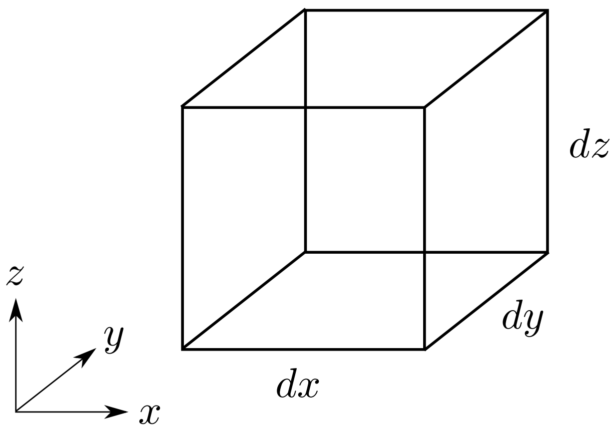

図 2: 微小立方体

物体 B の密度を $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ とすると，B の質量 m は

$$m = \int_{\Omega} \rho(\boldsymbol{x}, t) dv \tag{17}$$

と表される．$\dot{m}$ を求めると，レイノルズの輸送定理を用いて

$$\begin{aligned}
\dot{m} &= \frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho(\boldsymbol{x}, t) dv \\
&= \int_{\Omega} \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) dv \\
&= \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) dv \\
&= \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) \right\} dv
\end{aligned} \tag{18}$$

質量保存の法則は $\dot{m} = 0$ で表されるので，これから連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{19}$$

が得られる．

3 拡散方程式

静止場における熱伝導について考えよう．物体内のある点の微小立方体を考える．空間にデカルト座標が設定されているとして，立方体のそれぞれの面が座標軸に垂直であるとする (図 2)．x 軸に垂直な 2 枚の面に着目し，x 軸の負側の面から立方体に流れ込む単位時間当たりの熱量を Q_x^-，x 軸の正側の面から立方体の外に流れ出す単位時間

当たりの熱量を Q_x^+ としよう．熱流束を q_x とすると

$$
\begin{aligned}
Q_x^- &= q_x dydz \\
Q_x^+ &= \left(q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \right) dydz \\
Q_x^- - Q_x^+ &= -\frac{\partial q_x}{\partial x} dxdydz
\end{aligned}
\tag{20}
$$

である．y, z 軸方向も同様に考えることができる．立方体に単位時間に発生する単位体積当たりの熱量を S とする．エンタルピーを h とすると，静止場における単位体積当たりの全エネルギーは ρh と表されるので，単位時間当たりのエネルギーのバランスは次のようになる．

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) dxdydz &= Q_x^- - Q_x^+ + Q_y^- - Q_y^+ + Q_z^- - Q_z^+ + Sdxdydz \\
&= -\frac{\partial q_x}{\partial x} dxdydz - \frac{\partial q_y}{\partial y} dxdydz - \frac{\partial q_z}{\partial z} dxdydz + Sdxdydz \\
&= -\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) dxdydz + Sdxdydz \\
&= (-\nabla \cdot \boldsymbol{q} + S) dxdydz
\end{aligned}
\tag{21}
$$

したがって，次式が成り立つ．

$$
\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} + S \tag{22}
$$

温度を T，熱伝導率を k として，フーリエの法則

$$
\boldsymbol{q} = -k \nabla T \tag{23}
$$

を導入すると

$$
\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S \tag{24}
$$

エンタルピー h は，定圧比熱を c_p とすると

$$
h = \int_{T_0}^{T} c_p dT \tag{25}
$$

と表すことができる．ここで T_0 は参照温度である．c_p を定数とすると

$$
h = c_p (T - T_0) \tag{26}
$$

これより

$$
c_p \frac{\partial}{\partial t}(\rho T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S \tag{27}
$$

また，連続の式より，静止場においては次式が成り立つ．

$$
\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{28}
$$

これから

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + S \tag{29}$$

$\alpha = k/(\rho c_p)$, $s = S/(\rho c_p)$ と定義すると

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + s \tag{30}$$

ここで α は熱拡散率と呼ばれる (ちなみに “熱拡散係数” と言うと別のものになる).

熱伝導の代わりに，静止物体中の物質の濃度拡散を考えよう．物質の質量分率を c とする．物質を含めて考えた物体の密度を ρ とすると，微小立方体中の全質量 dM は

$$dM = \rho dxdydz \tag{31}$$

である．微小立方体中の物質の質量を dm とすると，質量分率 c は

$$c = \frac{dm}{dM} \tag{32}$$

と表される．したがって，dm は，次式のように書ける．

$$dm = \rho c dxdydz \tag{33}$$

このことに注意して，エネルギーの代わりに質量のバランスを考え，フーリエの法則の代わりにフィックの法則を導入すると，次式が得られる．

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) = \nabla \cdot (k \nabla c) + S \tag{34}$$

ここで k は物質の拡散係数に流体の密度をかけたものである．連続の式を適用すると

$$\rho \frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla c) + S \tag{35}$$

$D = k/\rho$, $s = S/\rho$ と定義すると

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla c) + s \tag{36}$$

となり，熱伝導の式と同じ形のものが得られる．ここで D は物質の拡散係数である．

一般のスカラー場 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ について，次式で表される方程式を，拡散方程式という．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla \phi) + s \tag{37}$$

4　スカラー輸送方程式

運動している物体中における物質の拡散を考えよう．物質の質量 m は，次式のように書ける．

$$m = \int_\Omega \rho c dv \tag{38}$$

物質の質量の時間変化率は，物質時間導関数で表す必要がある．したがって，単位時間当たりの物質の質量のバランスは，次式のようになる．

$$\frac{D}{Dt}\int_\Omega \rho c dv = \int_\Omega \{\nabla\cdot(k\nabla c)+S\}\,dv \tag{39}$$

物体の速度を $\boldsymbol{u}$ として，上式の左辺にレイノルズの輸送定理を適用すると

$$\int_\Omega \left\{\frac{\partial}{\partial t}(\rho c)+\nabla\cdot(\rho c\boldsymbol{u})\right\}dv = \int_\Omega \{\nabla\cdot(k\nabla c)+S\}\,dv \tag{40}$$

これより

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c)+\nabla\cdot(\rho c\boldsymbol{u}) = \nabla\cdot(k\nabla c)+S \tag{41}$$

一般のスカラー場 $\phi(\boldsymbol{x},t)$ について，次式で表される方程式を，スカラー輸送方程式という．

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)+\nabla\cdot(\rho\phi\boldsymbol{u}) = \nabla\cdot(k\nabla\phi)+S \tag{42}$$

左辺第 1 項を非定常項，第 2 項を対流項といい，右辺第 1 項を拡散項，第 2 項を生成項という．

上式の左辺の微分項を展開すると

$$\begin{aligned}
&\phi\frac{\partial\rho}{\partial t}+\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla(\rho\phi)+\rho\phi\nabla\cdot\boldsymbol{u}\\
&\qquad=\phi\frac{\partial\rho}{\partial t}+\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}+\phi\boldsymbol{u}\cdot\nabla\rho+\rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi+\rho\phi\nabla\cdot\boldsymbol{u}\\
&\qquad=\phi\left\{\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u})\right\}+\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}+\rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi
\end{aligned} \tag{43}$$

連続の式より，右辺の最後の第 1 項は 0 になるので，スカラー輸送方程式は次のように書ける．

$$\rho\frac{\partial\phi}{\partial t}+\rho\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi = \nabla\cdot(k\nabla\phi)+S \tag{44}$$

ここで，$D=k/\rho$, $s=S/\rho$ と定義すると

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla\phi = \nabla\cdot(D\nabla\phi)+s \tag{45}$$

上式を対流拡散方程式という．

5　スカラー輸送方程式 2

スカラー輸送方程式を天下り式に求める．ある量 Q を考える．

$$Q=\int_\Omega \rho\phi dv \tag{46}$$

量 Q の時間変化は

$$\dot{Q}=\frac{D}{Dt}\int_\Omega \rho\phi\,dv = -\int_\Gamma \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}ds+\int_\Omega S dv \tag{47}$$

ここで $\boldsymbol{q}$ は流束ベクトル，$\boldsymbol{n}$ は領域境界面の外向き法線ベクトルである．レイノルズの輸送定理より

$$\int_\Omega \left\{ \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla\cdot(\rho\phi\boldsymbol{u}) \right\} dv = -\int_\Gamma \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n} ds + \int_\Omega S dv \tag{48}$$

右辺第 1 項に発散定理を適用すると

$$\int_\Omega \left\{ \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla\cdot(\rho\phi\boldsymbol{u}) \right\} dv = -\int_\Omega \nabla\cdot\boldsymbol{q} dv + \int_\Omega S dv \tag{49}$$

これより

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla\cdot(\rho\phi\boldsymbol{u}) = -\nabla\cdot\boldsymbol{q} + S \tag{50}$$

流束 $\boldsymbol{q}$ を

$$\boldsymbol{q} = -k\nabla\phi \tag{51}$$

として

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla\cdot(\rho\phi\boldsymbol{u}) = \nabla\cdot(k\nabla\phi) + S \tag{52}$$

より一般化して，拡散項の ϕ を ϕ_q と表すと

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla\cdot(\rho\phi\boldsymbol{u}) = \nabla\cdot(k\nabla\phi_q) + S \tag{53}$$

たとえば，エンタルピーを変数としたエネルギー保存方程式は，非定常項，対流項の ϕ と 拡散項の ϕ は同じにならない．

参考文献

[1] 石原繁：テンソル -科学技術のために-，裳華房 (1991).

[2] 久田俊明：非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎，丸善 (1992).