

Title	Full Discretization Process for Advection-Diffusion-Reaction Equations
Author(s)	Doan, Duy Hai
Citation	大阪大学, 2012, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/27582
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

【15】

氏名	ドアン デュイ ハイ Doan Duy Hai
博士の専攻分野の名称	博士 (工学)
学位記番号	第 25629 号
学位授与年月日	平成 24 年 9 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科精密科学・応用物理学専攻
学位論文名	Full Discretization Process for Advection-Diffusion-Reaction Equations (移流・拡散・反応方程式に対する全離散化法)
論文審査委員	(主査) 教授 八木 厚志 (副査) 教授 笹井 秀明 教授 森川 良忠

論文内容の要旨

This thesis is intended to present a full discretization process to solving numerically advection-diffusion-reaction (ADR) equations and to show how to apply to various practical models. Our approach for discretization for ADR equations bases on method-of-lines (MOLs), which consists of two phases, spatial and temporal discretizations. The first phase is to discretize space variables and its result is a system of ordinary differential equations (ODEs). This system is numerically integrated in time variables afterward in the second phase of discretization process. Here we employ discontinuous Galerkin (DG) methods in the former and Rosenbrock strong stability-preserving ones in the latter phase.

The DG methods are able to be considered as an extension of classical finite element (FE) methods. The idea of FE methods in general and DG methods in particular is to divide computational domain into small pieces called elements and then to approximate the exact solution on each element by easy-to-compute functions (e.g. polynomials, wavelets). The main difference between these two kind of methods is that the numerical

solutions using the DG methods are allowed to be discontinuous element-to-element while they are required to be continuous on the whole domain if the classical FE methods is in used. Such discontinuities offer more degree of freedoms (DOFs) and therefore allow us more flexibility to design different discretization schemes for different terms in ADR equations. The main difficulty of using discontinuous functions in DG methods is how to transfer information such as fluxes in between elements. This task is quite trivial in classical FE methods because the numerical solution is continuous and hence the information is automatically shifted between elements. For DG methods, because of discontinuity, transferring information has to be done manually by carefully designing so-called numerical fluxes. With well-designed numerical fluxes, the DG methods are able to attain high order of accuracy and stability as well.

The spatial phase results a huge system of ODEs consisting of three discretized terms from advections, diffusion, and reaction. Each of these terms has completely different properties that require special treatment in the temporal phase. The discretized term corresponding to advection part as one will see is although non-stiff but containing in itself non-smooth operators. The non-stiffness and non-smoothness properties require an explicit solver. Meanwhile, the discretized term associated with diffusion and reaction parts is smooth but very stiff. These facts mean that our solver must be explicit with the discretized advection term and be implicit with the rest while it should be stable enough to preserve the positivity of our problems and fast enough to be realistically applicable.

This thesis is divided into four chapters. The first chapter introduces ADR equations and several models that lead to such kinds of mathematical equations. It also mentions several numerical solvers dealing with such kind of problems so far and our motivation to propose a whole new discretization procedure for ADR equations. The second chapter is concerned with the spatial discretization. Several numerical fluxes for advection and diffusion equations are investigated in this chapter. The most suitable ones are chosen to put together and fulfill the first phase of our procedure. The third phase is completed in the third chapter. A new class of temporal integration methods with respect to special properties of the semi-discretized system obtained in the previous chapter is proposed. Numerical results of the new discretization procedure are given in the last chapter. By these results, the strength and shortcomings regarding efficiency, accuracy, and robustness of our methods are given.

論文審査の結果の要旨

物理学、化学、生物学、工学の多くの問題は、移流・拡散・反応方程式としてモデル化される。一般に自己組織化と呼ばれる現象は、拡散と、移流および反応との相反する効果の絶妙なバランスの上に実現するものと考えられている。そのような現象の特徴は、当然のことながらモデル方程式にも投影されており移流・拡散・反応方程式の数値計算においてもそれぞれの効果が有する特徴に十分注意を払った離散化法の構成が求められる。本研究では、空間変数については不連続ガレルキン法を、時間変数についてはローゼンブロック法をそれぞれ基礎としてそれらを発展し組み合わせることにより新しい全離散化法を開発しており、その成果は以下の3点に集約できる。

1. 空間変数の離散化に関する不連続ガレルキン法は、1982年に Chavent-Salzano により主に非線形移流方程式の数値計算のために開発された。有限要素間の各境界において流れに一定の不連続性を許す離散化法である。本研究では、これらの方法を拡散項も含む移流・拡散・反応方程式へも適用できるような形式へと拡張している。さらに、このような発展型離散化法について、その安定性を解析的に示している。

2. 時間変数の離散化に関するローゼンブロック法は、1963年に Rosenbrock により非線形常微分方程式の数値計算のために開発された。非線形方程式にルンゲ・クッタ法を適用するに当たり適当な線形化方程式で近似する方法を考案した。本研究では、不連続ガレルキン法で空間離散された後の大規模常微分方程式系に対して、拡散・反応に由来する項と移流に由来する項に分別しステップな拡散由来項については陰的ローゼンブロック法を適用しノンステップな移流由来項については陽的ローゼンブロック法を適用して離散化する統合的方法を考案している。さらに提案離散化法についてその精度を多重ツリー理論により計算するとともに、その強安定性を示している。

3. 提案全離散化法の応用として、誘引化学物質を分泌することにより顕著な集合体を形成するバクテリア集団に関連してその集合体形成過程を記述する方程式を扱っている。このような現象のマクロモデルは、バクテリアと誘引物質の拡散、バクテリアの走化性による移流、バクテリアの個体数の増殖（反応）を含む移流・拡散・反応方程式として得られる。走化性の係数が大きい場合、従来の全離散化法では計算の安定性が失われることが知られていた。本研究では、同係数が大きくなった場合でも提案法の安定性が保たれることを検証するとともに、実際の数値計算により同係数の増大とともに出現パターンがカオス状から定常斑点型に変化することを見出している。

以上のように、本論文は移流・拡散・反応方程式に対する全離散化法について研究したもので計算科学、特に計算数学に寄与するところが大きい。

よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。