有限要素法とその応用

渡 辺 正* 本 多 健 一**

1. は じ め に

有限要素法(Finite Element Method : FEM)は別名マトリックス構造解析法(matrix methods of structural analysis)とも呼ばれ、1950年代にアメリカにおいて航空機の構造解析用の手段として開発されて以後、その使い易さと電子計算機の進歩とのために、主として機械部品、各種建造物、船舶などの構造解析(応力や変形の分布、振動解析等)用に広範に適用されることになった。最近では、これら本来の分野のみにとどまらず、流体力学、熱伝達、物質移動などの物理、工学の他の分野への応用が活発に検討される段階に到っている。

本稿は、FEMの方法論の基礎的事項を解説することを第1の目的とし、FEMの計算手続きに力点をおいて述べる。応用例として、筆者らが電気化学におけるイオン拡散問題に本法を適用した結果を紹介する。FEMはその特性として、例えば固体力学において現われるような不規則な境界条件を持つ有限領域内の境界値問題の解析に、他法と比較して特に威力を発揮するのであるから、本稿で紹介するような簡単な系に適用したのではFEM本来の利点が生かされないののであるが、筆者らの専門は化学であるためその点ご諒解いただきたい。複雑な問題のFEM解析については、多くの成書^{(1)~(3)}、解説^{(4)~(6)}があるのでそちらを参照されたい。

2. FEMの位置づけ

理工学において遭遇するさまざまな系を解析する手段としては、通常、大きくわけて次の2つが考えられる。

- (a) 微分方程式的手法
- (b) 変分法的手法

(a) は系を支配する微分方程式を種々の境界条件を考慮しながら解析するやり方で、これには解析解を導出する方法、差分法、数値積分法、モンテカルロ法などが含まれる。

(b) は、変分原理を基礎とし、求めるべき物理量を含んだある汎関数 $\mathcal{X}$ (通常はエネルギー積分)が停留値をとる($\delta\mathcal{X}=0$)という条件を直接にマトリックス方程式に変換して場(応力場、温度場、濃度場など)を計算する方法で、これにはRayleigh-Ritzの方法[†]、有限要素法その他が含まれる。手続き上の細かい点については次節で述べる。

実際の工学的問題においては、解析解が求まることはまれであり、多くの場合に数値計算が必要となる。数値計算を実行する上でのFEMの利点を挙げれば次のようになる。

- (1) マトリックス計算として組織化されているため、既成のマトリックス処理法が有効に利用できる。
- (2) 場全体が一度に解析できる。マトリックスのサイズが極めて大きくなる場合の扱いについては適当な教科書の⁷⁾を参照されたい。
- (3) 解析領域の要素分割の仕方に大きな自由度がある。たとえば2次元場の分割を行なう際、ある部分は三角形要素に、他の部分は四角形要素に分割してもよいし、重要な部分は密に、重要でない部分は粗に分割しても取り扱いにさほどの困難はない。このため、複雑な境界を有する場の解析が容易となる。この点、例えば従来の差分法だと、元来が矩形分割に適した方法であるため、境界が複雑な場の解析にはかなりの計算技術を要する(これを改良するための三角形差分法⁽⁸⁾が最近検討されている)。

なお、(a)と(b)との中間に属するものとして、最近注

† 力学の分野では、種々のエネルギー原理が存在し、一般に、ある求めるべき物理量 $f(x)$ は、 $f(x)$ の2次形式で表わされるエネルギー汎関数 $\pi(f(x))$ を最小にするものであるという形で定式化される。このとき $f(x)$ を、たとえば

$$f(x) = \sum_{n=0}^m a_n x^n, \text{ または } f(x) = \sum_{n=0}^m a_n \sin nx$$

で関数近似する。次いで、汎関数 π の停留条件より、次のような a_n に関する $m+1$ 元連立1次方程式

$$\frac{\partial \pi}{\partial a_n} = 0 \quad (n=0, 1, 2, \dots, m)$$

を作って未定係数 a_n を求め、関数 $f(x)$ の形を近似的に求める方法がRayleigh-Ritzの方法と呼ばれる。

* 東京大学技官；工学部工業化学科

** 東京大学教授；工学部工業化学科

Finite Element Method and its Application ; Tadashi Watanabe, Kenichi Honda (Department of Industrial Chemistry Faculty of Engineering, University of Tokyo, Tokyo)

1975年4月17日受理

目を集めている解析法に重みつき残差法⁽⁵⁾⁽⁹⁾があるが、本稿での解説は省略する。

3. FEM の計算手順

まず、極めて簡単な例によって汎関数と微分方程式の関係を復習しておく。初等力学においては、よく知られているように、系を支配する微分方程式(運動方程式)は、次のように定義された汎関数 χ から導かれる。

$$\chi = \int_{t_1}^{t_2} L(q_r, \dot{q}_r, t) dt \quad (1)$$

ここで q_r は r 番目の一般化座標、 $\dot{q}_r$ はその時間微分、 t は時刻、 L はいわゆる Lagrange の関数で $T-V$ (T : 運動エネルギー、 V : ポテンシャルエネルギー) に等しい。いま、 $q_r \rightarrow q_r + \delta q_r$ (ただし $t=t_1, t_2$ で $\delta q_r=0$) という変化を与えたときの χ の変分を $\delta \chi$ とし、

$$\delta \chi = 0 \quad (\chi \text{ の停留条件}) \quad (2)$$

を計算すると、次のようないわゆる Euler の微分方程式

$$\frac{d}{dt} \left(-\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \quad (3)$$

が得られることになる。

易しい例として、ポテンシャル $V(x)$ の中で運動する質点の場合、

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \quad (4)$$

であり、式(2)の操作を行なうと、式(3)に対応するものとしていわゆる Newton の運動方程式

$$m \ddot{x} = F \left(\equiv -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right) \quad (5)$$

が得られる。ここに F は $V(x)$ から導かれる外力である。結局、(3)が微分方程式、(1)がこれに対応する汎関数である。前節で述べたことを繰り返すと、式(3)(あるいは式(5))を種々の境界条件の下で解くのが(a)の微分方程式的手法であり、式(2)をマトリックス方程式に書き直して(そのために予め領域を有限要素の集合に分割する)数値計算を行なうのが FEM を代表とする(b)の変分法的手法であるといえることができる。(b)の場合、例えば固体力学などではエネルギー原理によって式(1)のような汎関数 χ が最初に与えられている場合が多いが、流れ系や以下で例をあげる物質移動系の場合にはそのようなエネルギー原理が明確な形で存在せず、微分方程式のみが与えられているのが普通である。しかしその微分方程式(および境界条件)からこれに対応する汎関数 χ を作り上げるのはさほど困難ではないので、やはり同様な FEM の定式化が可能である。この場合、汎関数 χ の物理的意味が不明瞭になるのは止むを得ない。

以上の事がらに基づいて FEM 計算の手順を図式化すると図 1 のようになる。

図 1 FEM 計算の手順。

4. 例 題

上で述べたことをさらに具体的に理解していただくために、以下でわれわれが FEM の手法を電気化学における拡散問題に適用した例を紹介する。実はこのような系はすでに解析解が得られていたり、解析解が無い場合は差分法などによって検討がかなりの程度まで行なわれていたりする⁽¹⁰⁾ので FEM を適用するのはあまり妙味がないのであるが、はじめての読者にはむしろこのような簡単な系の方が分かり易いのではないかと思われる。

(1) 半無限 1 次元拡散⁽¹¹⁾

(i) 微分方程式および汎関数

つぎのような電気化学系を考える。すなわち電解液中にはある電極活性物質(電極表面上で酸化ないし還元を受けることの物質、たとえば金属イオン) X が溶解しており、その濃度は c^0 である。この電解液に平板電極(たとえば白金板)を浸し、 $t=0$ にその電位を X が反応できるようなものに設定する。液は完全に静止しているものとし、対流は考えない。 $t>0$ では、電極表面上の X が消費され、これによって電極表面と沖合いとの間に濃度勾配が生じ、この濃度勾配によって駆動された X の拡散が進行する。

電極表面に垂直方向に座標 r をとり、 X の濃度を $c(r, t)$ とすると、 c を支配する方程式は Fick の第 2 法則で与えられ、次式となる(拡散係数 D は濃度に依存しない定数であるとする)。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} \quad (6)$$

ただし、初期条件および境界条件として

$$\left. \begin{aligned} c(r, 0) &= c^0 \\ c(0, t) &= 0 \quad (t > 0) \\ \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=\infty} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

ここで $r=0$ は電極表面を表わすとする。

式(6)、(7)を解くことは次式で表わされる汎関数 χ を最小にすることと等価であることが Euler の定理によって導かれる。

$$\chi = \int_0^\infty \left\{ -\frac{1}{2} D \left(\frac{\partial c}{\partial r} \right)^2 + \frac{\partial c}{\partial t} c \right\} dr \quad (8)$$

すなわち、式(8)を濃度 c で変分をとり、部分積分を行なうと

$$\delta \chi = \int_0^\infty \left(D \frac{\partial c}{\partial r} \frac{\partial \delta c}{\partial r} + \frac{\partial c}{\partial t} \delta c \right) dr \\ = D \frac{\partial c}{\partial r} \delta c \Big|_0^\infty + \int_0^\infty \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} \right\} \delta c dr \quad (9)$$

となり、 $\delta \chi = 0$ とすると式(6)、(7)が得られる。

系を支配する微分方程式と境界条件が与えられた際に式(8)のような汎関数を作成する手続きについては、文献(3)で詳細に取扱われているので参照されたい。

(ii) $\delta \chi = 0$ のマトリックス方程式化

$\delta \chi = 0$ をマトリックス方程式に書き直すため、解析すべき領域(この場合は1次元の r 座標軸)をいくつかの有限な大きさを有する要素に分割し(図2参照)、各要素内における X の濃度 c が次式のように座標 r について線形に変化する[†]と仮定する。

図2 1次元領域の要素分割。

$$c^e(r, t) = a_0 + a_1 r \quad (10)$$

ここで上つき文字 e は、その量がある1つの要素(element)に関するものであることを示す。ところで以下の演算の便宜上、行ベクトル $[r(r)] = [1, r]$ と列ベクトル $\{a(t)\} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}$ を導入すると $[1, r] \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = a_0 + a_1 r$ であるから

$$c^e(r, t) = [r(r)] \{a_1(t)\}$$

と書くことができる。列ベクトルをそのまま書き下すのは紙面をとるので、以下では必要があればその転置ベクトル(Transposition)を用い、たとえば $\{a\}^T = [a_0, a_1]$ のように表わすことにする。

$\{a\}$ は未定係数であり、これが決定(そのために $\delta \chi = 0$ の条件を使用)できれば濃度分布が算出できるわけであるが、 $\{a\}$ の代わりに要素両端(節点=node)の濃度を表わすベクトル $\{C^e\} = [c_i, c_j]^T$ を用いることにすると、

[†] 濃度分布をもっと精密に、たとえば r の3次式で表わすことにすると

$$c^e(r, t) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3 = [r(r)] \{a(t)\} \\ \text{ここに } [r(r)] = [1, r, r^2, r^3], \{a\}^T = [a_0, a_1, a_2, a_3]$$

解析精度を上げるには、要素の数を増やすか、あるいは要素内の物理量変化を高次の関数で近似させるかすることになる。計算機の容量を超えなければ、一般に前者のほうが解析は楽である。後者の場合には、定式化がかなり複雑になるが、いったん定式化技術が開発されれば、全体の場の要素分割数が少なくて済むので便利であることが多

$$\begin{pmatrix} c_i \\ c_j \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & r_i \\ 1 & r_j \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = [A] \{a\} \quad (11)$$

より

$$\{a\} = [A^{-1}] \{C^e\} \quad (12)$$

となる。ここに

$$[A^{-1}] = \frac{1}{r_j - r_i} \begin{bmatrix} r_j & -r_i \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (13)$$

である。式(12)を用いると、 c^e の新しい表現として

$$c^e = [r] [A^{-1}] \{C^e\} \quad (14)$$

を得る。

つぎに、1つの要素について式(8)の汎関数(積分範囲は $r_i \leq r \leq r_j$)を時刻 t における要素内濃度 c_i^e で変分をとるのであるが、このとき濃度の時間微分を

$$\frac{\partial c_i^e}{\partial t} = \frac{c_i^e - c_{i-\Delta t}^e}{\Delta t} \quad (15)$$

で近似させると次式を得る。

$$\delta \chi^e = \int_{r_i}^{r_j} \left(D \frac{\partial c_i^e}{\partial r} \frac{\partial \delta c_i^e}{\partial r} + \frac{c_i^e - c_{i-\Delta t}^e}{\Delta t} \delta c_i^e \right) dr \quad (16)$$

式(16)に式(14)を代入し、簡単な計算の結果、

$$\delta \chi^e = \{ \delta C_i^e \} r \int_{r_i}^{r_j} \left\{ D [A^{-1}]^T [r']^T [r'] [A^{-1}] \{C_i^e\} \right. \\ \left. + \frac{1}{\Delta t} [A^{-1}]^T [r]^T [r] [A^{-1}] (\{C_i^e\} - \{C_{i-\Delta t}^e\}) \right\} dr \quad (17)$$

を得る。したがって

$$\frac{\partial \chi^e}{\partial \{ \delta C_i^e \}} = [h] \{C_i^e\} + \frac{1}{\Delta t} [p] (\{C_i^e\} - \{C_{i-\Delta t}^e\}) \quad (18)$$

ただし、式(17)中の $'$ は r による微分を表わす。式(18)の $[h]$, $[p]$ は次に示すようなマトリックスである^{††}。

$$[h] = \int_{r_i}^{r_j} D [A^{-1}]^T [r']^T [r'] [A^{-1}] dr = \frac{D}{r_j - r_i} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$[p] = \int_{r_i}^{r_j} [A^{-1}]^T [r]^T [r] [A^{-1}] dr = \frac{r_j - r_i}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

領域内の全要素について式(18)を計算し、組み合わせてそれをゼロとおくことによって、最終的に次のような

^{††} 要素内濃度分布を r の3次式で仮定すれば、対応する $[h]$, $[p]$ は ($l = r_j - r_i$)

$$[h] = D \begin{pmatrix} \frac{6}{5l} & \text{SYM.} \\ \frac{1}{10} & \frac{2}{15}l \\ -\frac{6}{5l} & -\frac{1}{10} & \frac{6}{5l} \\ \frac{1}{10} & -\frac{1}{30}l - \frac{1}{10} & \frac{2}{15}l \end{pmatrix}, \\ [p] = \begin{pmatrix} \frac{13}{35}l & \text{SYM.} \\ \frac{11}{210}l^2 & \frac{1}{105}l^3 \\ \frac{9}{70}l & \frac{13}{420}l^2 & \frac{13}{35}l \\ -\frac{13}{420}l^2 - \frac{1}{140}l^3 & \frac{11}{210}l^2 & \frac{1}{105}l^3 \end{pmatrix}$$

図3 平面拡散の FEM 解析例.

マトリックス方程式(多元連立 1 次方程式)が得られる.

$$([H] + \frac{1}{\Delta t} [P]) \{C_i\} = \frac{1}{\Delta t} [P] \{C_{i-\Delta t}\} \quad (21)$$

ここに, $[H]$, $[P]$ は各要素について求めた式(19), (20) の $[h]$, $[p]$ を組み合わせて作った領域全体のマトリックスであり, 領域内全節点数に等しい次元を有する ($\{C_i\}$ はこれと同 1 次元を有するベクトル).

式(21)は次の形にあらわすことができる.

$$\{C_i\} = [B] \{C_{i-\Delta t}\} \quad (22)$$

$$\text{ここに } [B] = \frac{1}{\Delta t} ([H] + \frac{1}{\Delta t} [P])^{-1} [P]$$

このようにして, $c(0, 0) = 0$, $c(r, 0) = c^0$ なる初期条件を用い, 式(22)によって時間増分 Δt ごとの $\{C_i\}$ を数値計算することになり, これは簡単なプログラミングによって容易に行ないうる. 式(22)を解くにあたっては, $c(0, t) = 0$ であるので, 電極表面の濃度が関係している行および列を式(22)より削除して計算を行なう.

(iii) 計算結果

図3に半無限平面拡散の場合の c の分布の計算結果を示す. 図中の実線は解析解⁽¹⁰⁾

$$c(r, t) = c^0 \operatorname{erf}\left(\frac{r}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (23)$$

$$\text{ただし } \operatorname{erf}(x) = \int_0^x \exp(-z^2) dz$$

であり, 本 FEM 解との良好な一致がみられる. また点線は Zienkiewicz⁽¹⁾ が「場の問題」に関して提案した次の 2 つの漸化式†

$$-[P] \left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\}_{t-\Delta t} = [H] \{C\}_{t-\Delta t} \quad (24)$$

$$([H] + \frac{2}{\Delta t} [P]) \{C\}_t = [P] \left(\frac{2}{\Delta t} \{C\}_{t-\Delta t} + \left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\}_{t-\Delta t} \right) \quad (25)$$

を交互に用いて FEM 計算を行なったものである. われわれの誘導した式(21)は c の時間微分 $\partial c / \partial t$ を式(15)のように近似して得られたものである.

本問題の場合, 拡散距離 x (c が初期濃度の $1/e$ になる, 電極表面からの距離) と経過時間 t との間には

$$x \sim \sqrt{\pi D t}$$

の関係が成立している, Δr と Δt が $\Delta r \sim \sqrt{\pi D \Delta t}$ になるように選ばないとよい解が得られないが††, Zienkiewicz の(24), (25)による解析の場合には, 濃度勾配 ($\partial c / \partial t$) を直接使用するので, 電極表面での初期の急激な濃度変化 ($c^0 \rightarrow 0$) のために, 表面近傍の解がかなり不安定になる.

この系の電解電流は単位時間あたりに x が電極表面に到達する量に比例するが, 後者は Fick の第 1 法則によって電極表面での x の濃度勾配に比例する. 拡散による電解電流の表式は次式である.

$$i(t) = n F A D \left(\frac{\partial c}{\partial r} \right)_{r=0} \quad (26)$$

図4 平面拡散の電流時間曲線.

- 解析解(式(27)から計算),
- FEM 解(第 1 要素の平均濃度勾配から計算), 初期濃度 10^{-3} mol/l, 拡散定数 10^{-5} cm²/sec, FEM 解析: 時間増分 0.5 sec, 解析領域 0.1 cm, 領域分割 19 要素, 20 節点, 第 2 節点 0.001 cm

† 式(15)の近似を行わず, $\partial c / \partial t$ のままで式(16) ~ (21)の定式化を行なうと, 次式すなわち式(24)が得られる.

$$[H] \{C\}_t + [P] \left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\} = 0 \quad (a)$$

ここで, C を次のように中間差分近似する

$$\{C\}_t = \{C\}_{t-\Delta t} + \left(\left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\}_{t-\Delta t} + \left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\}_t \right) \frac{1}{2} \Delta t \quad (b)$$

(b)を(a)に代入して整理すると式(25)が得られる.

†† Δt , 要素の大きさ, D に関する数値計算上の問題点については, H. Fujii: *Some Remarks on Finite Element Analysis of Time-Dependent Field Problems*, Proceedings of the 1973 Tokyo Seminar on Finite Element Analysis, Univ. of Tokyo Press. 参照.

ここに n は x の 1 分子が電極で授受する電子数, F はファラデー定数, A は電極面積である. c 分布の解析解(22)を代入すると

$$i(t) = nFA D c^0 \pi^{-1/2} t^{-1/2} \quad (27)$$

が得られる. 図 4 には, 平面拡散の場合の電流 - 時間曲線を示す. FEM 解の場合には, $(\partial c / \partial r)_{r=0}$ として, 第 1 要素内の平均濃度勾配を用いた. t の小さい範囲を除けば, 両者は良好な一致をみせている.

(2) 2 次元拡散⁽¹²⁾

1 次元の場合とは異なり, 2 次元場における拡散問題は解析的手法で解くのはかなり困難であるが, FEM に依れば 1 次元の場合と殆ど同形の定式化が可能となる. 1 次元との比較を容易にするため, 対応する式番号を同一として, 2 次元の式には ' を付することになると, この問題では, 濃度 c を変数として解くべき微分方程式は次式で与えられる.

$$\frac{\partial c(x, y, t)}{\partial t} = D \left\{ \frac{\partial^2 c(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c(x, y, t)}{\partial y^2} \right\} \quad (6')$$

ただし, 初期条件: $c(x, y, 0) = c^0$

境界条件:

$$\left. \begin{array}{l} S_1 \text{ 境界 (電極表面) で } c(S_1, t) = 0 \\ S_2 \text{ 境界 (絶縁体表面および無限遠) で} \\ \frac{\partial c(S_2, t)}{\partial n} = 0 \end{array} \right\} \quad (7')$$

ここに n は境界における外向き法線である (図 5 参照).

式(6'), (7')を解くことは, 次の汎関数 χ の停留条件を求めることと等価である.

$$\chi = \iint \left[\frac{D}{2} \left\{ \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial c}{\partial y} \right)^2 \right\} + \frac{\partial c}{\partial t} c \right] dx dy \quad (8')$$

実際, 上式を濃度 c で変分をとり, 部分積分を行なうと

$$\begin{aligned} \delta \chi &= \iint \left\{ D \left(\frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial \delta c}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{\partial \delta c}{\partial y} \right) + \frac{\partial c}{\partial t} \delta c \right\} dx dy \\ &= \oint D \frac{\partial c}{\partial n} \delta c dS + \iint \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} - D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \right\} \delta c dx dy \end{aligned} \quad (9')$$

となり, $\delta \chi = 0$ より式(6') (7')を得る. ただし, 式(9')

の第 1 項は全境界 S に沿っての線積分を表わす.

つぎに, 解析領域を要素に分割するわけであるが, 電

図5 解析領域およびその境界.

極の形状などにより濃度がその領域内で対称的に分布することが予めわかる場合は, その対称軸を S_2 境界に含めて解析領域を縮小することができる (図5参照). この領域内をいくつかの三角形要素に分割し (図6), 各要素内の濃度分が次式のように座標について線形であるとする.

図6 三角形要素.

$$c^e(x, y, t) = a_1 + a_2 x + a_3 y = [S(x, y)] \{a(t)\} \quad (10')$$

ここに $S = [1, x, y]$, $\{a\} = [a_1, a_2, a_3]^T$ である.

以下の取扱い, 要素が 3 節点を有しそのため要素内の物理量を表わす行列が 3 次元になる点を除けば, 1 次元の場合(12)~(20)と並行して行ないうる. 最終的には式(21)に同形な次のマトリックス方程式が得られる.

$$([H] + \frac{1}{\Delta t} [P]) \{C_i\} = \frac{1}{\Delta t} [P] \{C_{i-\Delta t}\} \quad (21')$$

ここに $[H]$, $[P]$ は各要素についての $[h]$, $[p]$ (詳細については文献 12) 参照) を組み合わせて作った領域全体についてのマトリックスで, 全節点数に等しい次元を有する. 式(7')の初期条件と S_2 境界での拘束条件の下で各時間増分ごとの $\{C\}$ 分布を求める手続きも 1 次元拡散の場合と全く同様に行なうことができる.

例として図 7 のような鋸歯状電極を考える. 電極は紙面垂直方向に無限長であると仮定する. これは例えば電極表面の粗さの影響をみるためのモデルと考えることができる. 図 8 が c 分布の計算結果の一例であるが, この

図7 鋸歯状電極の要素分割.

図8 鋸歯状電極の濃度分布 ($t=5 \times 10^{-4}$ sec).

図から、たとえばかなり沖合いの領域では電極表面の凹凸の影響が無くなることとか、電極表面近傍での濃度勾配(したがって拡散による電解電流)が突出部において大きくなることなどの情報を得ることができる。

5. む す び

以上で、微分方程式の変分法的解析法としてのFEMの計算手法について拡散問題を例にあげて説明してきた。この定式化を利用すれば、境界条件や初期濃度分布を変えることによって、種々の拡散問題が解決できる筈である。外力による対流をも考慮に入れた一般的な物質移動方程式は次式のようになる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \text{grad } c = \text{div} (D \text{ grad } c) + R^i \quad (28)$$

ここに $\mathbf{V}$ は対流の流速ベクトル、 R^i は i 次の化学反応による物質の生成消滅を表わす項である。1次反応による物質消費項 R^1 を伴う電極反応についての解析も行なわれ、良好な結果が得られている⁽¹³⁾。式(28)のような方程式を種々の境界条件のもとで解析的に解くことは極めて複雑であり、その点、FEMは有望な手法として期待される。

金属、冶金学の分野でFEM解析が試みられた例として、たとえば山田による解説⁽¹⁴⁾がある。そこでは、主にアルミニウム試験片の引張りによる変形分布の解析が述べられている。また、冶金学でよく知られている水素脆性の研究のために、鋼中における水素の拡散およびト

ラップを考慮した解析例⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾もある。このほかに、応力拡大係数⁽¹⁷⁾、転位の存在する応力場⁽¹⁸⁾の解析も報告されているが、詳細については原論文を参照されたい。

おわりに、本稿作成にあたり懇切なるご指導をいただいた東京大学川井忠彦教授および川井研究室の藤谷義信助手に深甚なる謝意を捧げる。

文 献

- (1) O.C.Zienkiewicz and Y.K.Cheung: *The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics*, McGraw-Hill, London, (1967); 邦訳, 「マトリックス有限要素法」, 培風館, (1970).
- (2) O.C.Zienkiewicz: *The Finite Element Method in Engineering Science*, McGraw-Hill, London, (1971).
- (3) 藤野 勉: 熱伝導と熱応力, コンピューターによる構造工学講座Ⅱ-4-B, 培風館, (1972).
- (4) 川井忠彦: 有限要素法の他の工学問題(非構造分野)への応用, 第8回生研講習会テキスト, (昭和45年6月).
- (5) 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, (昭和48年10月).
- (6) 坪井善勝他: 「数理科学」構造解析特集号, (1970年10月).
- (7) G.Forsythe and C.B.Moler: *Computer Solution of Linear Algebraic Systems*, Prentice-Hall, (1967); (渋谷, 田辺訳: 線形計算の基礎, 培風館, (1969)).
- (8) 岩城 嵩: 機械設計, 16(2) (1972), 49.
- (9) B.A.Finlayson: *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*, Academic Press, New York and London, (1972).
- (10) P.Delahay: *New Instrumental Methods in Electrochemistry*, Interscience, New York, (1954).
- (11) 藤谷義信, 木原哲昭, 本多健一, 川井忠彦: 生産研究, 24(6), (1972), 248.
- (12) 本多健一, 木原哲昭, 渡辺 正, 川井忠彦, 藤谷義信, 椎名章二: 生産研究, 24(9) (1972), 410.
- (13) 川井忠彦, 藤谷義信, 本多健一, 木原哲昭, 渡辺正: 生産研究, 25(3) (1973), 113.
- (14) 山田嘉昭: 金属学会会報, 9(1970), 685.
- (15) 上田幸雄, 福田敬二, 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), p.671~678.
- (16) 岩城 嵩: 同上, (昭和48年6月), p.649~654.
- (17) 宮本 博, 白鳥正樹, 三好俊郎: 日本機械学会誌, 75(1972), 1109.
- (18) D.R.Owen and A.Prakash: *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 6(1973), 117.