線形燃焼チェーンに基づく燃焼方程式の解析解 [1]

核種数 n からなる線形燃焼チェーンで記述される燃焼方程式を以下のように考える。

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1, \tag{1}$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \lambda_{i-1}N_{i-1} - \lambda_i N_i, \qquad (i = 2, \cdots, n) \tag{2}$$

ここで N_i、λ_i は核種 i の数密度と崩壊定数を示す。なお、核種 1 がチェーンの最上流に位置し、核種 $i-1$ の崩壊により核種 i が生成されるものとする。

初期条件を、$N_1(0) \neq 0$、$N_i(0) = 0$（$i >$1）とした場合、$N_n(t)$ の解析解は以下のように与えられる。

$$N_n(t) = \frac{N_1(0)}{\lambda_n}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\alpha_i\exp(-\lambda_i t), \tag{3}$$

$$\alpha_i = \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}\frac{\lambda_j}{\lambda_j-\lambda_i} \tag{4}$$

燃焼計算に関する論文ではこの解析解の導出は省略されているので、本稿でまとめることとする。

燃焼方程式 (1)(2) を行列形式で書くと以下のようになる。

$$\frac{\mathbf{N}(t)}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{N}(t) \tag{5}$$

ここで、

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_{n-1} & -\lambda_n \end{pmatrix} \tag{6}$$

である。

さて、行列 $\mathbf{A}$ の固有値 ω であるが、行列 $(\mathbf{A}-\omega\mathbf{I})$ の特性方程式は

$$\det(\mathbf{A}-\omega\mathbf{I}) = \prod_{i=1}^{n}(-\lambda_i-\omega) = 0 \tag{7}$$

と書けるので、i 番目の固有値 ω_i は $-\lambda_i$ となる。λ_i が全て異なる値であるとするならば、行列 $\mathbf{A}$ の固有値は n 個存在することになるので、行列 $\mathbf{A}$ は以下のように対角化できる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{PDP}^{-1} = \mathbf{P}diag(-\lambda_1, -\lambda_2, \cdots, -\lambda_n)\mathbf{P}^{-1} \tag{8}$$

式 (5) の解は行列指数 $\exp(\mathbf{A}t)$ を用いて $\mathbf{N}(t) = \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{N}(0)$ と書ける。また、行列指数はその定義により以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \exp(\mathbf{A}t) &= \sum_{k=0}\frac{1}{k!}(\mathbf{A}t)^k = \sum_{k=0}\frac{1}{k!}\left(\mathbf{PDP}^{-1}\right)^k t^k = \sum_{k=0}\frac{1}{k!}\mathbf{PD}^k\mathbf{P}^{-1}t^k = \mathbf{P}\left(\sum_{k=0}\frac{1}{k!}\mathbf{D}^k t^k\right)\mathbf{P}^{-1} \\ &= \mathbf{P}diag\left(\sum_{k=0}\frac{(-\lambda_1 t)^k}{k!}, \sum_{k=0}\frac{(-\lambda_2 t)^k}{k!}, \cdots, \sum_{k=0}\frac{(-\lambda_n t)^k}{k!}\right)\mathbf{P}^{-1} \\ &= \mathbf{P}diag\left(\exp(-\lambda_1 t), \exp(-\lambda_2 t), \cdots, \exp(-\lambda_n t)\right)\mathbf{P}^{-1} \\ &= \sum_{i=1}^{n}\exp(-\lambda_i t)\mathbf{G}_i \end{aligned} \tag{9}$$

[1] /Document/Fundamental/SolLinearChain/

ここで、$\mathbf{G}_i$ は $R(\mathbf{A}+\lambda_i\mathbf{I})$ に沿った $N(\mathbf{A}+\lambda_i\mathbf{I})$ への spectral projector である（文献 [1]、p.529）。これを用いると、$\mathbf{N}(t)$ として以下が得られる。

$$\mathbf{N}(t)=\sum_{i=1}^{n}\exp(-\lambda_i t)\mathbf{G}_i\mathbf{N}(0)=N_1(0)\sum_{i=1}^{n}\exp(-\lambda_i t)\mathbf{G}_i\mathbf{e}_1 \tag{10}$$

ここで、$\mathbf{e}_1$ は $(1\ \ 0\ \ \ldots\ \ 0)^T$ である。Spectral projector $\mathbf{G}_i$ は以下のように書ける（文献 [1]、p.529）。

$$\mathbf{G}_i=\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(\mathbf{A}+\lambda_j\mathbf{I})\,/\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(-\lambda_i+\lambda_j) \tag{11}$$

従って、式 (10) は以下となる。

$$\mathbf{N}(t)=N_1(0)\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\exp(-\lambda_i t)}{\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(-\lambda_i+\lambda_j)}\left(\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(\mathbf{A}+\lambda_j\mathbf{I})\,\mathbf{e}_1\right)\right] \tag{12}$$

ここで、式 (12) に現れるベクトル $\left(\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(\mathbf{A}+\lambda_j\mathbf{I})\right)\mathbf{e}_1$ について考えよう。我々は $N_n(t)$ についてのみ関心があるので、このベクトルの n 番目の要素のみを考えればよい。この項について、以下のように書く。

$$\begin{aligned}&\left(\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(\mathbf{A}+\lambda_j\mathbf{I})\right)\mathbf{e}_1=\\ &\qquad(\mathbf{A}+\lambda_{i-1}\mathbf{I})(\mathbf{A}+\lambda_{i-2}\mathbf{I})\cdots(\mathbf{A}+\lambda_1\mathbf{I})(\mathbf{A}+\lambda_n\mathbf{I})\cdots(\mathbf{A}+\lambda_{i+2}\mathbf{I})(\mathbf{A}+\lambda_{i+1}\mathbf{I})\mathbf{e}_1\end{aligned} \tag{13}$$

まずは $(\mathbf{A}+\lambda_{i+1}\mathbf{I})\mathbf{e}_1$ を計算すると、$(-\lambda_1+\lambda_{i+1}\quad\lambda_1\quad 0\quad\cdots)^T$ となることは容易に分かるであろう。さらにこれに対して $(\mathbf{A}+\lambda_{i+2}\mathbf{I})$ を左から乗じると、得られるベクトルの 3 番目の要素は $\lambda_1\lambda_2$ となることが分かる。これを繰り返すことにより、最終的には式 (13) で定義されるベクトルの n 番目の要素は $\prod_{k=1}^{n-1}\lambda_k$ となる。

以上より、$N_n(t)$ の解析解が以下のように得られることが分かる。

$$\begin{aligned}N_n(t)&=N_1(0)\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\exp(-\lambda_i t)}{\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(-\lambda_i+\lambda_j)}\left(\prod_{k=1}^{n-1}\lambda_k\right)\right]=N_1(0)\sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\exp(-\lambda_i t)}{\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}(-\lambda_i+\lambda_j)}\left(\prod_{\substack{k=1\\ k\neq i}}^{n}\lambda_k\right)\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right]\\ &=\frac{N_1(0)}{\lambda_n}\sum_{i=1}^{n}\left[\lambda_i\left(\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}\frac{\lambda_j}{\lambda_j-\lambda_i}\right)\exp(-\lambda_i t)\right]\end{aligned} \tag{14}$$

参考文献

[1] C. Meyer, *Matrix analysis and applied linear algebra,* Society for industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (2000).