

いくつかの自由境界問題とその数値解析

筑波大学電子情報工学系 今井 仁司(Hitoshi IMAI)
千葉大学工学部 ソー ウィン マウン(Saw Win Maung)
千葉大学工学部 河原田 秀夫(Hideo KAWARADA)

1 序

近年、数値解法の発展と計算機の性能向上により、さまざまな物理現象の数値シミュレーションが可能になってきた。しかしながら、そこで扱われている物理現象のほとんどは固定境界問題であり、自由境界を有する現象即ち自由境界問題の数値シミュレーションはまだそれほど一般的ではない。というのは、自由境界問題の本質的な難しさが、支配方程式の形よりもむしろ解くべき領域が未知であるというところにあるからである。今までの固定境界問題で開発された数値解法はそのまま応用できない。また、例え方程式が線形であっても問題全体としては非線形になるため、非定常問題では領域形状の位相変化といった現象がしばしば起こり[12, 13, 19-20, 23]、定常問題では領域形状(解)の分岐といった現象をしばしば伴う[7, 8]。それらの現象は、自由境界問題独特の現象であるので、その解析には固定境界問題の解法とは別の方法を考えなければならない。

自由境界問題の基本的な解法には二つのものが考えられる。(1) 固定領域上の問題に帰着する方法と(2) 自由境界を直接追跡する方法である。これらの方法を具体的に適用する際には、つぎのこととに注意する必要がある。一つは原理上のことで、もう一つは数値計算のことである。(1) の方法には自由境界問題を固定領域上の問題に帰着するという原理的な難しさがあるが、それができれば数値計算は比較的容易である。(2) の方法には原理的な難しさはさほどないものの、自由境界の移動による計算格子の再構成といったような、数値計算上の難しさがある。即ち、(1) は数学で苦労して数値計算で楽をするという方法であり、(2) は数学で楽をして数値計算で苦労するという方法であるといえる。どちらの方法を選ぶかはユーザの好み次第である。

ところで、自由境界問題の数値解法を考えるときに、定常問題と非定常問題に対する難しさが、数学と数値計算では違うということにも注意する必要がある。

自由境界問題に限ったことではないが、数学では定常問題よりも非定常問題の方が難しいとされている。しかしながら数値計算では、非定常問題よりも定常問題の方が難しい。この違いの由来は、数値計算では解を構成しなければならないということにある。非線形性のために、定常問題といえども数値解の構成は逐次的にしか行えない。したがって、逐次計算の方針が発展方程式の形で陽に入っている非定常問題に較べて、陽に入っていない定常問題は数値的に難しいことになる。ただし、凸な汎関数を容易につくることができる定常問題の場合には、汎関数の最小化が逐次計算の方針になるので、数値計算は容易である。しかしながら、一般的の定常問題ではそのようなことは望めない。そこで、定常自由境界問題に対する一般的で有効な数値解法を確立することは興味ある問題となる。

2 自由境界問題の数値解法と数値計算例

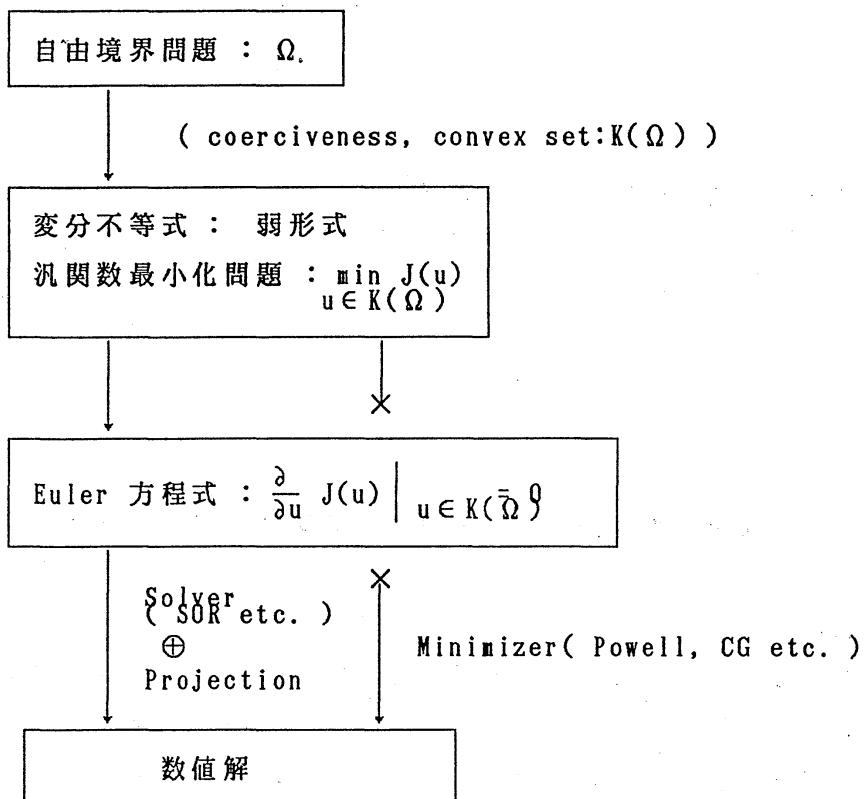
この章では、我々および我々の周辺で行なったいくつかの数値解析例をもとに、自由境界問題の数値解法を細分し、それぞれの方法における作業をフローチャートにまとめてみる。また、領域形状の位相変化や領域形状の分岐といったような、自由境界問題に現われる興味ある現象の解析に役立ちそうな解法と、その数値計算例も紹介する。

2.1 固定領域法（固定領域上の問題に帰着する方法）

自由境界問題の基本的な解法は、固定領域上の問題に帰着して既存の方法で解くというものである。これはなにも数値計算に限らないで、数学的にもいえることである。固定領域法とその数値計算例を以下に示す。

(i) 変分法

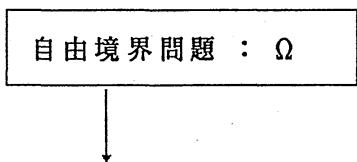
これは、固定領域（境界も含めて）のなかに自由境界があるような場合に、問題を、ある関数集合上で定義される汎関数の最小化問題に帰着して解く方法である。ここで、関数集合を構成する関数はすべて固定領域で定義されていることに注意する。この方法では、関数集合と汎関数を問題に応じて見つける必要がある[5]。

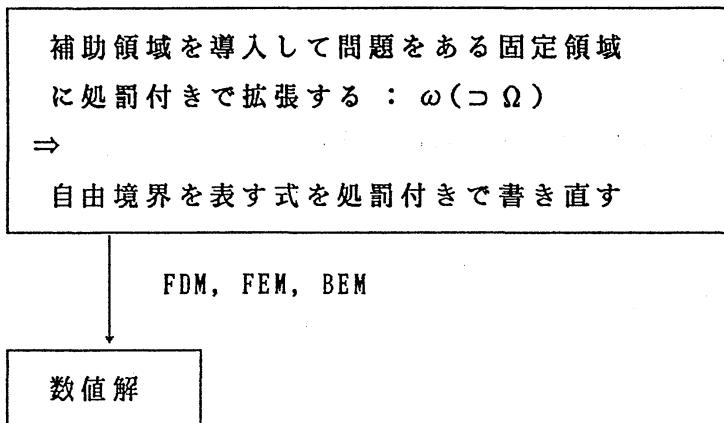


摩擦問題を変分法を用いて解いた数値計算例を図1に示す[22]。

(ii) ベナルティ法（補助領域法）

これは、未知領域の外側に補助領域を考えて、ペナルティ付きの近似問題を補助領域を含めた固定領域全体で解く方法である[15]。この方法の最大の特徴は、境界条件をディリクレ条件等の簡単なものに置き換えることができる。したがって、安定な数値計算が簡単にかつ高速にできる。ただし、この方法では、近似問題における自由境界の定義が問題になることに注意する。例えば、解が非負関数で、自由境界は解が正である領域とゼロである領域の境界であるような問題を考える。それに対するペナルティ法による解が正関数で得られた場合、自由境界の定義がたちまち問題となる。





一相ステファン問題をペナルティー法で解いた数値計算例を図2に示す[10, 21]。

(iii) 写像関数法

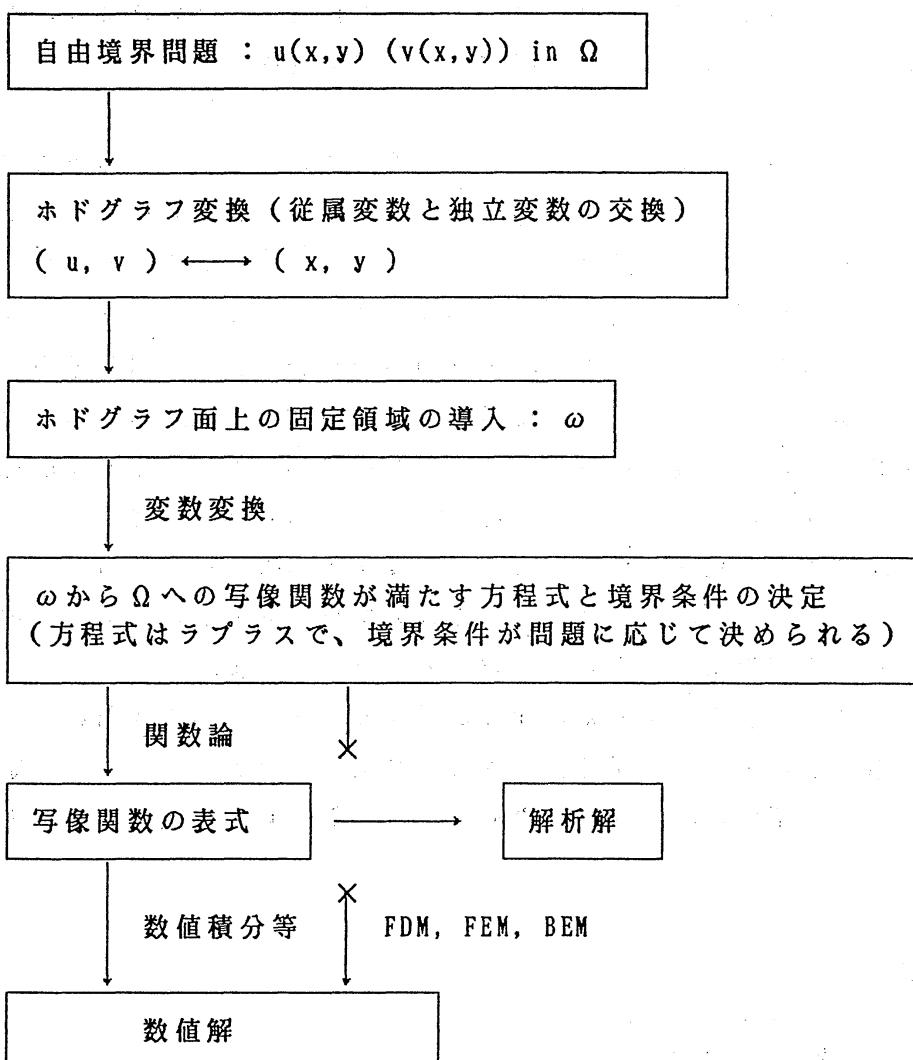
これは、計算面というものを導入し、問題を計算面から物理面への写像関数を求める問題に帰着して解く方法である。即ち、計算面上のある固定された領域と物理面上の未知領域との間の、対応を与える関数を、計算面上で求めるのである。ここで、物理面というのは問題が定義されている平面のことである。いま、便宜上“面”という言葉を使うが、2次元に限る必要はない。

写像関数法というのは、後で述べる一般座標系法のことであると思ってよいのだが、歴史的な背景を考えて、まずホドグラフ変換法を取り上げることにする。一般座標系法というのは、差分法における格子生成のテクニック[24]を自由境界問題に応用したもので、比較的新しい数値解法であるといえる。自由境界問題の数値解法としての導入経緯はホドグラフ変換法と異なるものの、どちらも写像関数を求めているという意味で本質的に同じものである。しかも、一般座標系法はホドグラフ変換法の拡張とみなすことができる。

(iii.1) ホドグラフ変換法

これは、従属変数（未知関数）と独立変数（座標系）の交換即ちホドグラフ変換を用いて、問題をホドグラフ面から物理面への写像関数を求める問題に帰着して解く方法である[1]。即ち、ホドグラフ面上のある固定された領域から物理面上の未知領域への、対応を与える関数を、ホドグラフ面上で求めるのである。この写像関数を決定するためには、ホドグラフ面上の固定領域とそこで満たすべき方程式と境界条件を与える必要がある。この方法は、2次元のラプラス方程式に支配される自由境界問題によく応用される[1, 7, 8]。というのは、そのような問

題では、ホドグラフ面上の固定領域と方程式を容易に与えることができるからである。



あるプラズマ平衡の問題を、ホドグラフ変換法を用いて解いた数値計算例を図3に示す[7]。

(iii.2) 一般座標系法

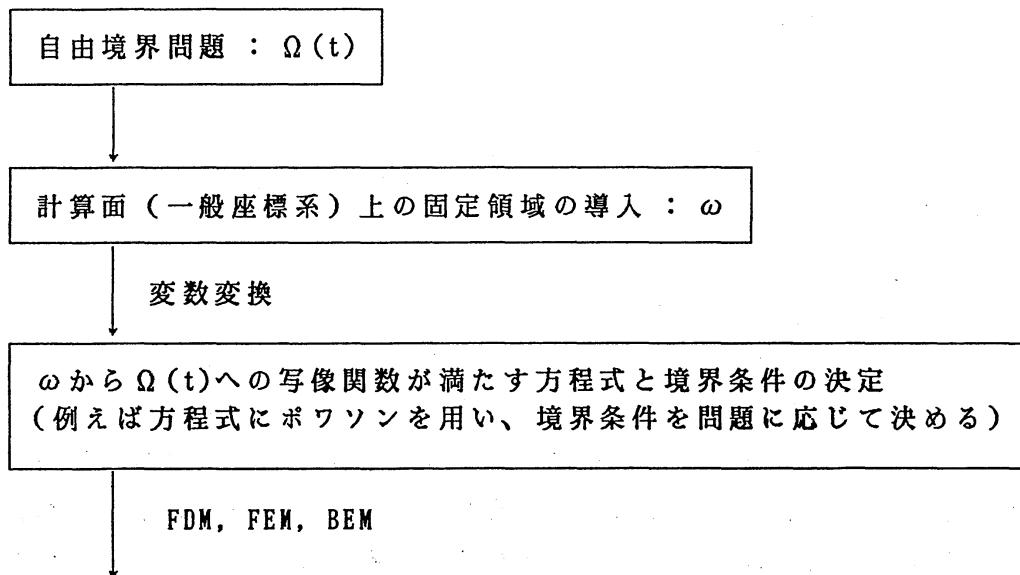
これは、適当な計算面（一般座標系）を用意して、計算面上のある固定領域を考え、この固定領域から物理面上の未知領域への写像関数を、ステップ毎に求める方法である。ここでいうステップとは、非定常問題ならば時間を離散化したものであり、定常問題ならば汎関数最小化のステップのことである。計算面をホドグラフ面にとった場合はホドグラフ変換法と一致する。したがってこの方法は、

ホドグラフ変換法の一般化であるといえる。(逆に、定常問題で考えると、ホドグラフ変換法は、一般座標系法の中で、汎関数最小化を最短に行う方法であるといえる。というのは、計算面のとり方によってさまざまな一般座標系法を考えることができる。そのなかで、計算面にホドグラフ面をとった場合には等価な問題を一度解くだけでよくなるので、汎関数の最小化を逐次的に行う必要はなくなるからである。)

一般座標系法の場合には、ホドグラフ変換法と異なって、計算面上の固定領域は任意に与えてよい。したがって、写像関数を決定するためには、それが満たすべき方程式と境界条件(初期条件)を与えるべき。方程式に関しては、各ステップを通して、例えば楕円型方程式等に固定しておけばよい。一方、境界条件は問題に応じて定められねばならない。定常問題の場合には、汎関数最小化子(Minimizer)が各ステップにおける境界条件を決定する[14]。非定常問題の場合には、計算面上における問題の解が各ステップの境界条件を決定する[12]。そこで、あるステップにおける問題の解を計算面上で求める必要が出てくる。それには、変数変換によって問題に含まれている写像関数の部分に、前のステップで計算されたものを用いた後、時間ステップを進めて解を求めればよい。写像関数の初期条件はもとの初期条件から容易に求めることができる。

以上のように、一般座標系法は次元に関係なく、また定常の問題にも非定常の問題にも適用できるので、応用範囲はきわめて広いといえる。ただし、定常問題における一般座標系法は、後述の境界変数法の計算の補助手段とみなせる場合があることに注意する[14]。

非定常問題



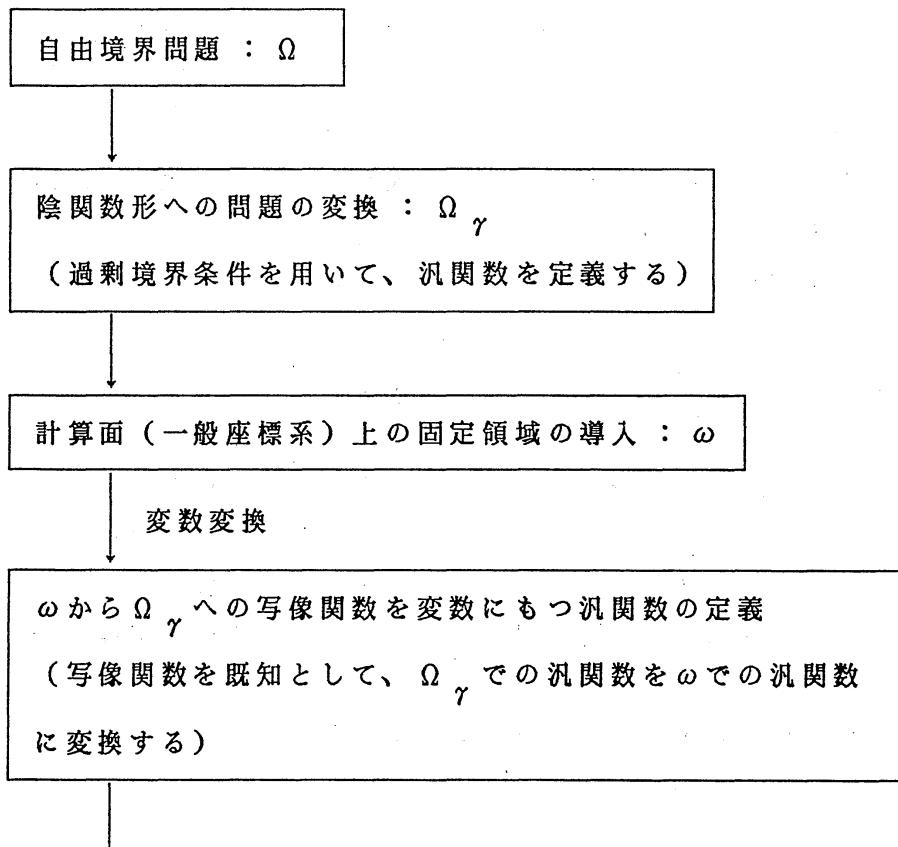
数値解

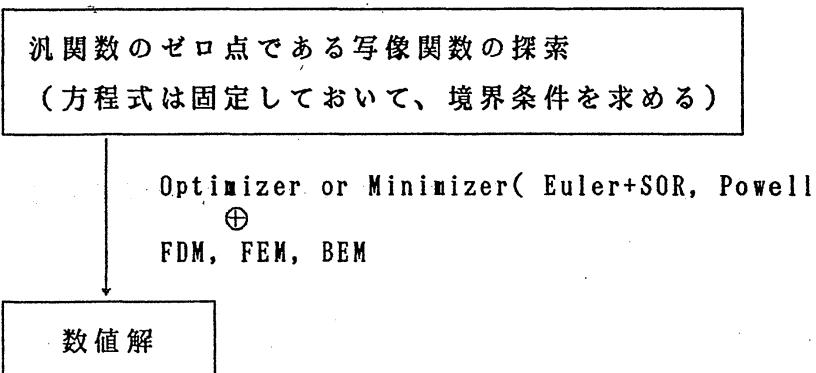
インクジェットの問題を、写像関数法を用いて解いた数値計算例を図4に示す。

定常問題

領域 Ω は、固定境界 Γ と自由境界 γ をもつものとする。つぎに領域 Ω_γ を、 γ を与えたときに固定境界 Γ とで定まる領域とする。過剰境界条件を用いて、問題を、 γ を変数にもつ汎関数のゼロ点を求める問題（陰関数形）に変換するのは容易である。この変換は、分岐を調べるときなどにしばしば用いられる。汎関数をつくるときに、過剰境界条件を平方すれば正の汎関数をつくることができ、問題を汎関数最小化の問題に帰着することができる[14]。

ここで、写像関数を用いないで物理面で汎関数のゼロ点を求めるのは、後述の境界変数法になることを注意しておく。





あるプラズマ平衡の問題を、写像関数法を用いて解いた数値計算例を図5に示す[14]。

2.2 直接法（自由境界を直接追跡する方法）

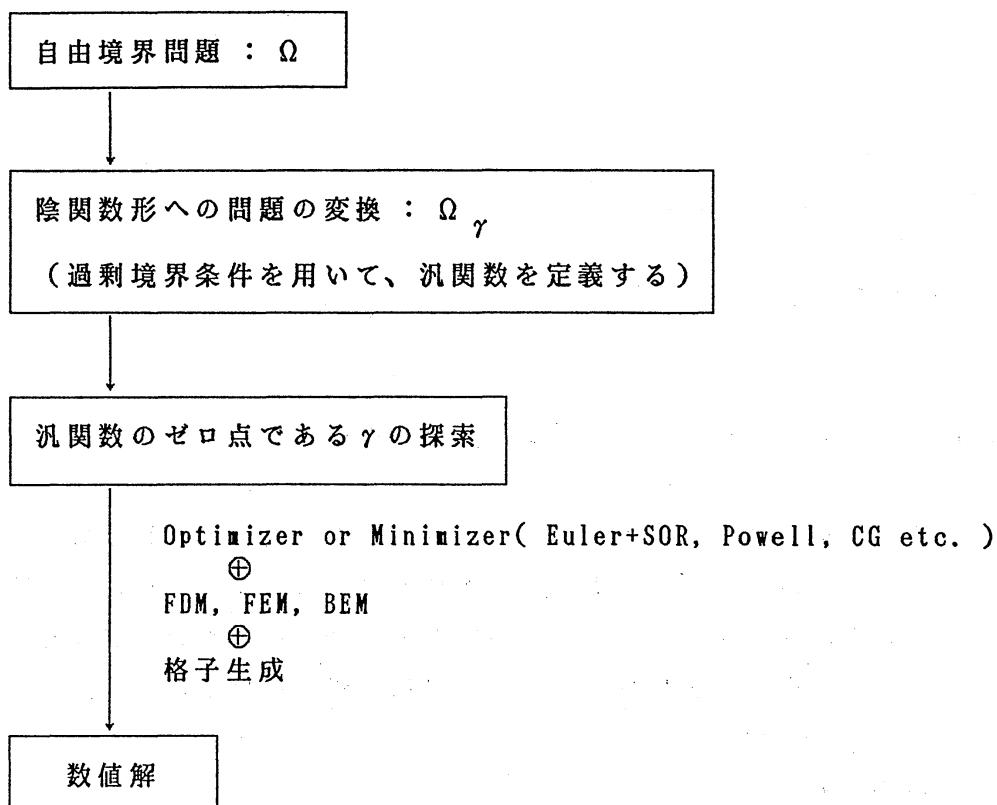
計算格子を物理面で作るテクニックをもっているならば、なにも固定領域上の問題に変換して解かなくても、物理面で直接解く方が簡単である。物理面で直接解く方法を、ここでは直接法と呼ぶことにする。直接法を以下に示す。

(iv) 境界変数法

これは、問題を、自由境界を変数にもつ汎関数のゼロ点を求める問題（陰関数形）に帰着して解く方法である。この汎関数の作り方は、(iii.2)の写像関数法の定常問題への応用のところで述べた。ここで、自由境界をパラメetrizeしておき、汎関数を、そのうちの有限個の関数とみなすことで、数値計算が可能になる。この方法では、汎関数の計算と、ゼロ点を推定する計算の二つが必要である。汎関数の計算自体は、自由境界を与えて定まる一般形状をもつ固定領域での計算ができればよいので、それは現在のテクニックを用いれば問題はない。汎関数のゼロ点の推定には、それを正に取っておくと、パウエル法などの最小化子が使える。以上のことから、この方法は簡単で、きわめて応用範囲が広いといえる。

計算のときに、一般座標系を補助手段に用いれば計算面の固定領域で計算できる((iii.2)写像関数法参照)。

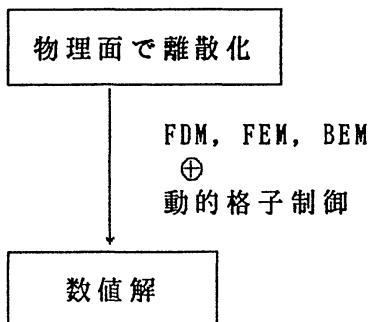
非定常自由境界問題においても、自由境界を時間も含めてパラメetrizeすることによってこの方法が適用できる。



(v) 格子制御法

これは、動的に格子を制御することによって、自由境界を直接求めてゆく方法である。格子を物理面で制御するか計算面で制御するかによって、直接法と固定領域法のどちらにも解釈できる。ただし、計算面で制御するのは写像関数法の特別な場合と見なせるので、なにもことわらなければここでは直接法に解釈する。格子制御法は、動的に格子を生成する方法と、一度生成された格子の格子点を動的に管理する方法の二つがある。前者の典型的なものは適合格子法[1]であり、後者の典型的なものはMAC法(marker and cell method)[6,23]である。前者の方法では、格子の正則性を保つために格子の再構成とそれに伴うデータの補間が必要である。一方、後者の方法では、格子点の管理（格子点が属する領域の判定等）が大変である。このように、数値的な難しさは伴うものの、原理としては単純な方法であるので、将来有望な方法であると思われる。また、領域の位相が変化するような問題にはいちばん適した方法であると思われる。





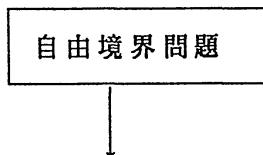
2.3 自由境界問題のもつ興味ある現象と数値解析例

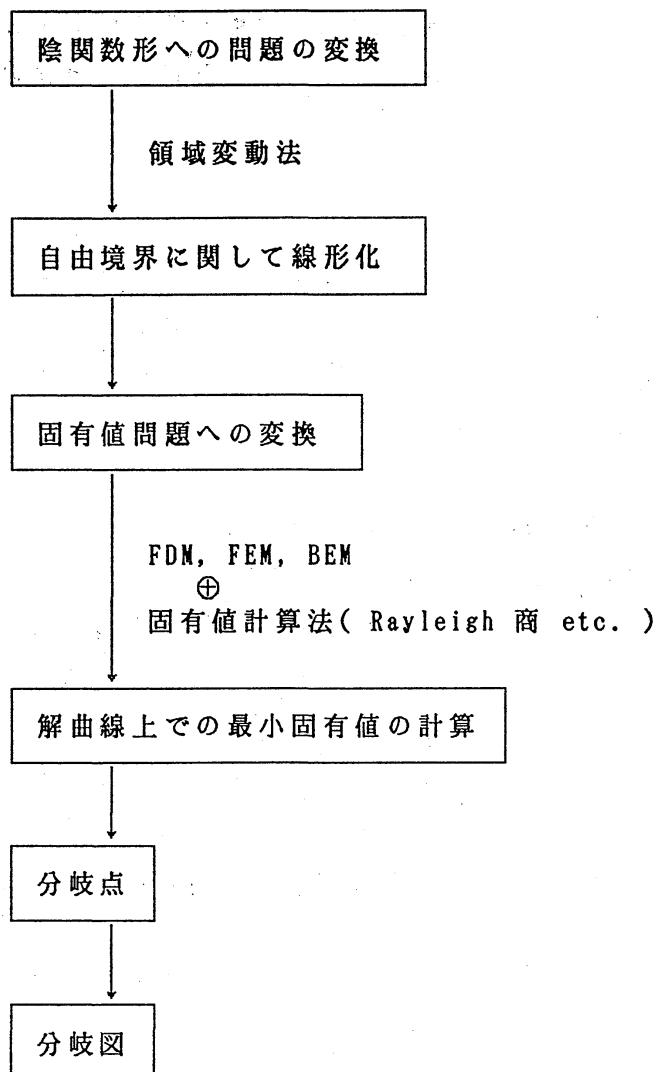
自由境界問題はさまざまな興味ある現象を伴う。例えば、領域形状の分岐、領域の位相変化、解の爆発（領域形状の爆発現象もあるかもしれない）等がある。また、自由境界問題の中には、解くのがきわめて難しい不適切な問題もある。そのような現象や問題の解析に役に立ちそうな数値解法を以下に示す。

(a) 分岐現象の解析

自由境界の形状に関する分岐現象を伴う問題を考える。分岐図を求めるための方法の一つに分岐点探索法がある[9]。この方法では、まず、ある解曲線を求める。これは数値的には比較的容易であり、解析的にも自明解がわかる場合には容易である。つぎに、解曲線上にある分岐点を見つける。それが見つかれば、その付近を注意深く調べることにより、そこからでている別の解曲線を見つけることができる。これを繰り返すことによって分岐図が得られる。ここで問題なのは、分岐点を見つけることである。そのためには、自由境界問題を自由境界に関して線形化し、それによって得られる線形化作用素の正則性を、解曲線上の各点で調べればよい。それは、線形化作用素を離散化して得られる行列が、ゼロ固有値をもつかどうかを調べることで可能である。自由境界に関する線形化は、領域変動法(Domain Dependence Technique)[2-4]を用いれば、比較的容易にできる。

ただし、この分岐点探索法は、解曲線がつながっているような分岐の場合にしか有効でない。それから、領域変動法はまだ2次元でしか確立されていないようなので、現時点では2次元問題にしか適用できない。





この方法の有効性を示す数値計算例が図6である[9]。ここでは、ある自由境界問題で得られている解曲線に対して、最小固有値のゼロ点と分岐点が一致することを調べている。

(b) 領域が位相変化する問題の解析

ノズルから噴出する液体の液滴形成[12, 13] や、ステファン問題におけるマッシュ(mushy)領域の生成消滅問題[19, 20] 等のように、領域の位相が変化する現象は物理的に興味あると同時に、その数値シミュレーションは工学的にも重要である。その場合の数値解法としては、格子制御法が適当であると思われる。しかしながら、領域の生成消滅の時期の同定と格子再構成が難しいので、まだその数値シミュレーションは確立しているとはいひ難い。

液滴分離のシミュレーション例を図7に示す[12]。分離の時期の同定に物理面のMAC法のセルを用い、計算面で格子制御を行っている。ただし、流体の速度は人工的に与えている。

(c) 不適切な最適形状設計問題の解析

自由境界問題の中には、橢円型作用素の初期値問題になるような不適切な問題[18, 25]がある。このような問題に対する数値計算は非常に難しい。その理由は二つある。一つは、数値計算が不安定で、すぐに解の振動が起きることであり、もう一つは、たとえ数値解が求まったとしても、その解の評価をどうするかという問題である。

解の評価に対しては、二つの方法がある。問題を簡単に

$$T\Gamma = \gamma \quad (T \text{ は例えば非線形コンパクト作用素})$$

とおくと、 T^+ を T の一般化逆作用素として、誤差 $\|\Gamma - T^+ \gamma\|$ に対応する汎関数(コスト)で解の評価を行う方法と、残差 $\|T\Gamma - \gamma\|$ に対応する汎関数で行う方法がある。前者はとても難しいので、工学的には後者がよく使われる。

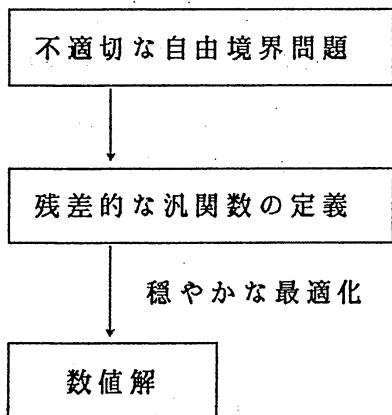
そこで、問題を、残差に対応する正の汎関数をパラメータ空間で最小にする最適問題に帰着する。ここで、問題によっては、汎関数の計算に(適切な)自由境界問題を解かなくてはならない。このことは汎関数最小化に制限を与える。つまり、最小化における各ステップで、パラメータをあまり変えないような穏やかな最小化というものが必要になるのである。というのは、自由境界問題は非線形問題であるので、一般的には反復法で解かれる。その場合に出発値が必要となるが、前のステップの結果が出発値に使えないとき、自由境界問題が精度よく解けない。その結果、汎関数の計算精度が悪くなり、間違った最小化をしてしまうことになる。

不適切な最適問題における解の振動という現象を、汎関数の立場で考えてみることにする。振動が起こるのは、汎関数最小化の解法が不安定になり易いということであり、その一つの理由としては汎関数の底が広いことが想像される。底が広いとどうなるかというと、解が少々変化しても汎関数の値が変わらない。したがって、最小化の方向が定まらず、解の振動が起きたことになる。事実、この予想を示す計算結果が得られている。ここで、最小化に穏やかな最小化を用いた場合を考えてみる。最小化の効率は悪くなるものの、パラメータをあまり変えないために、振動を抑えながら最小化を行える可能性がある。

つぎに、安定な解法として認められている正則化[16, 17, 25]を、汎関数の立場で考えてみる。これは、正則項を加えた汎関数の最小化を行なうことで、近似解を安定に求めようとする方法である。正則化は、汎関数を変形して凸性を鋭くす

る効果がある。ただし同時に、最小点もずらしてしまう。したがって、正則化が適切であるかどうかは、凸性の回復と最小点のズレのバランスがとれているかどうかということになる。つまり、正則化項が大きいと、汎関数が鋭く立ってくるので、最小解は容易にまた安定に求まる。ところが、最小点のズレも大きいので近似は悪い。そこで、近似をよくしようと正則化項を小さくすると、こんどは汎関数の底が広くなつて解の振動が起きる。そのようなことにならない適切な正則化を、問題に応じて行う必要があるが、それは容易なことではない。ただし、穏やかな最小化を併用することで、あまり適切でない正則化に対しても、計算の安定性に改善がみられる可能性がある。

以上のことから、不適切な最適問題の数値解法には穏やかな最小化が有用であると思われる。そもそもそれを用いるならば、正則化は行わず、汎関数を直接最小にすることを考えてもよいと思われる。その場合の最小化は、解をパラメトリーズして得られるパラメータ空間の有限次元部分空間で行う。ここで、いきなり大きな次元で計算するのは現実的でないので、小さな次元から計算する。得られた近似解が十分でない場合にのみ、部分空間の次元数をあげる。このように、解をパラメトリーズして得られるパラメータ空間の有限次元部分空間で、汎関数を穏やかな最小化を用いて直接最小化することを、穏やかな最適化と呼ぶことにする[11,22]。これはかなり実用的であると思われる。というのは、適切な正則項を求める必要はないし、また、パラメータを少し工夫して選ぶことで少ないパラメータで十分よい近似解が安定に得られるからである。



あるプラズマ平衡に関する不適切な最適形状設計問題を、穏やかな最適化を用いて解いた数値計算例を図8に示す[11]。ここで、穏やかな最小化にラインサーチ的な三次曲線当てはめを用い、解のパラメトリーズを形状のモードに関して行

った。

3 結論

自由境界問題は、解くべき領域が未知でありまた非線形問題であるので、その解の存在や解の性質の解析を解析的に行うのは容易ではない。その場合に有効な解析手段が、計算機を用いた数値解析である。大域的な解析や解の性質を具体的に調べるのはどうしても数値計算が必要になる。

ここでは、我々及び我々の周辺で行った数値計算例をもとに、自由境界問題の数値解法をおおまかに分類してみた。現時点での経験からすると、それらの解法の中で簡単で使いやすいものは、定常問題の場合には境界変数法（あるいは一般座標系法）に minimizerとしてパウエル法を用いた組み合わせである。また、非定常問題の場合には、一般座標系法や格子制御法の適合格子法であるといえる。とりわけ、定常問題に対する境界変数法とパウエル法の組み合わせは有効である。というのは、数値計算の場合、非定常問題を解くより定常問題を解く方が難しいが、この方法を用いると比較的容易に定常問題が解けるからである。汎関数は前述のように容易につくることができるし、パウエル法は計算機センター等でライブラリとして用意されている。ただし、パウエル法で得られるのは極小解であって最小解ではないので、極小値が十分小さくなっていることを確認する必要がある。また、たまに極小解の探索をパウエル法が失敗することがあるので、そういうときは計算に使う出発値やパウエル法が持っているパラメータを変えてみて計算する。一方、非定常問題の数値計算では、一般座標系法にしても適合格子法にしても原理的な問題はあまりない。しかしながら、領域が大変形を起こすような問題の場合には、動的格子制御などの技術的な問題が残っている。

参考文献

- [1] CRANK, Free and Moving Boundary Problems, OXFORD, 1984.
- [2] DERVIEUX, INRIA-LABORIA, Rapport de Recherche, 16, 1980.
- [3] DERVIEUX, INRIA-LABORIA, Rapport de Recherche, 18, 1980.
- [4] DERVIEUX, INRIA-LABORIA, Rapport de Recherche, 21, 1980.
- [5] FRIEDMAN, Variational Principles and Free-Boundary Problems, WILEY, 1982.

- [6] HARLOW and WELCH, The Physics of Fluids, 8(12), 1965, 109-116.
- [7] IMAI and KAWARADA, Japan J. Appl. Math., 5(2), 1988, 173-186.
- [8] IMAI and KAWARADA, Proc. 5th Int. Symp. Num. Meth. Eng., Computational Mechanics Publications, Springer-Verlag, Vol. 2, 1989, 519-524.
- [9] IMAI and KAWARADA, Control Cyb., submitted.
- [10] 今井、河原田、応用数学合同シンポジウム研究報告集、1987、277-279.
- [11] IMAI, SASAMOTO and KAWARADA, Technical Reports of Math. Sci., Chiba Univ., 5(7), 1989.
- [12] IMAI, KAWARADA and TAKAHASHI, Proc. 5th Int. Symp. Num. Meth. Eng., Computational Mechanics Publications, Springer-Verlag, Vol. 2, 1989, 515-518.
- [13] KATANO, KAWAMURA and TAKAMI, Theoretical and Applied Mechanics, Univ. of Tokyo Press, Vol. 34, 1986, 3-14.
- [14] KAWARADA, SAWAGURI and IMAI, Japan J. Appl. Math., 6(3), 1989, 331-340.
- [15] 河原田、自由境界問題、東大出版会、1989.
- [16] KITAGAWA, Japan J. Appl. Math., 4(3), 1987, 371-391.
- [17] KITAGAWA, J. Information Processing, 11(4), 1988, 263-270.
- [18] 溝畠、偏微分方程式論、岩波書店、1981.
- [19] NOCHETTO and VERDI, SIAM J. Numer. Anal., 25(4), 1988, 784-814.
- [20] NOCHETTO and VERDI, Math. Comput., 51(183), 1988, 27-53.
- [21] 大里、岡本、卒業論文、千葉大学、1987.
- [22] SAW、河原田、応用数学合同シンポジウム研究報告集、1989、63-68.
- [23] TAKAHASHI, TAKEDA and TAKAMI, Theoretical and Applied Mechanics, Univ. of Tokyo Press, Vol. 36, 1988, 3-15.
- [24] THOMPSON, WARSI and MASTINE, Numerical Grid Generation, North-Holland, 1985.
- [25] TIKHONOV and ARSENIN, Solution of Ill-Posed Problems, John Wiley & Sons, 1977.

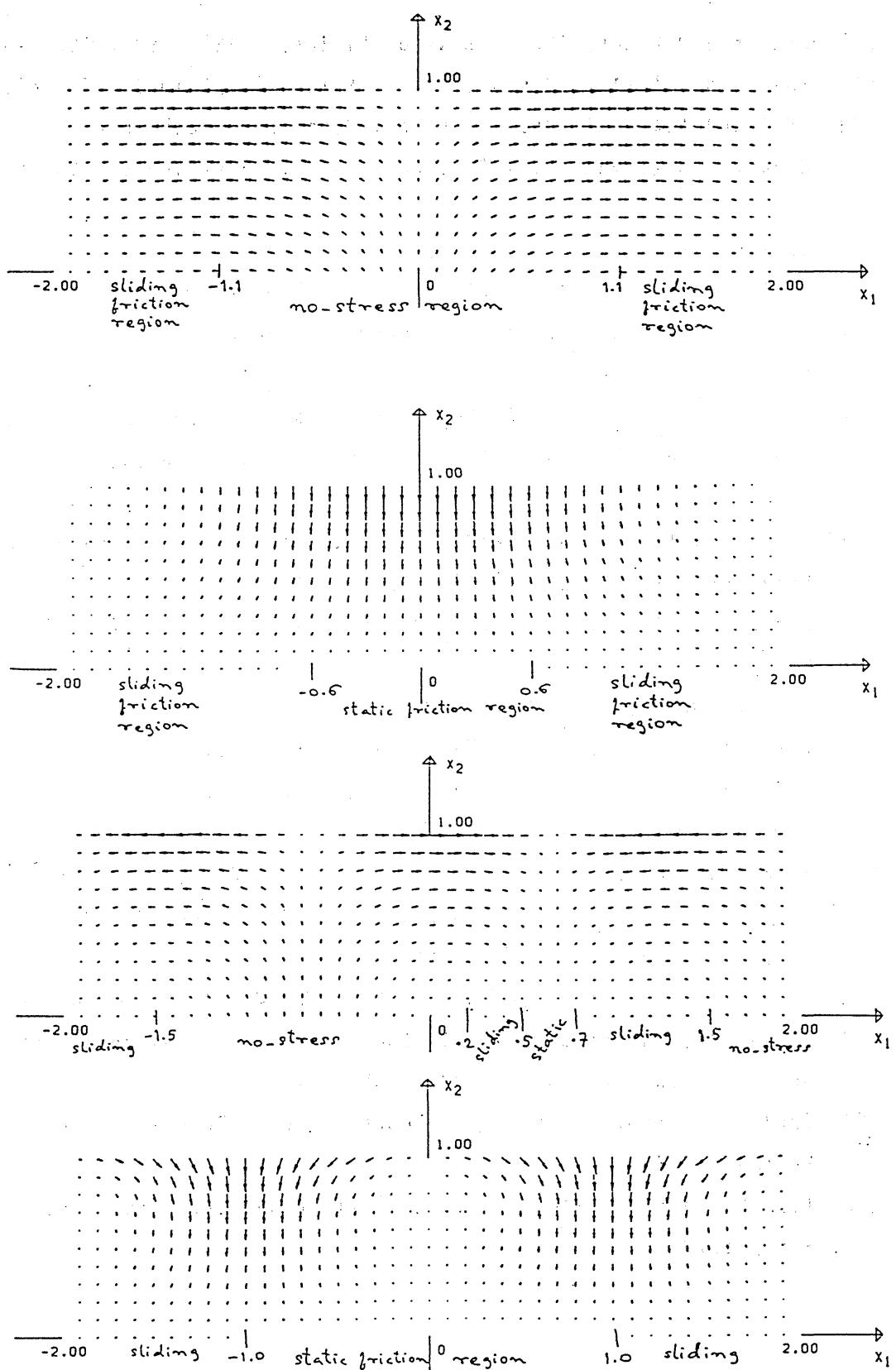


図1. 摩擦問題の数値計算例（変分法）

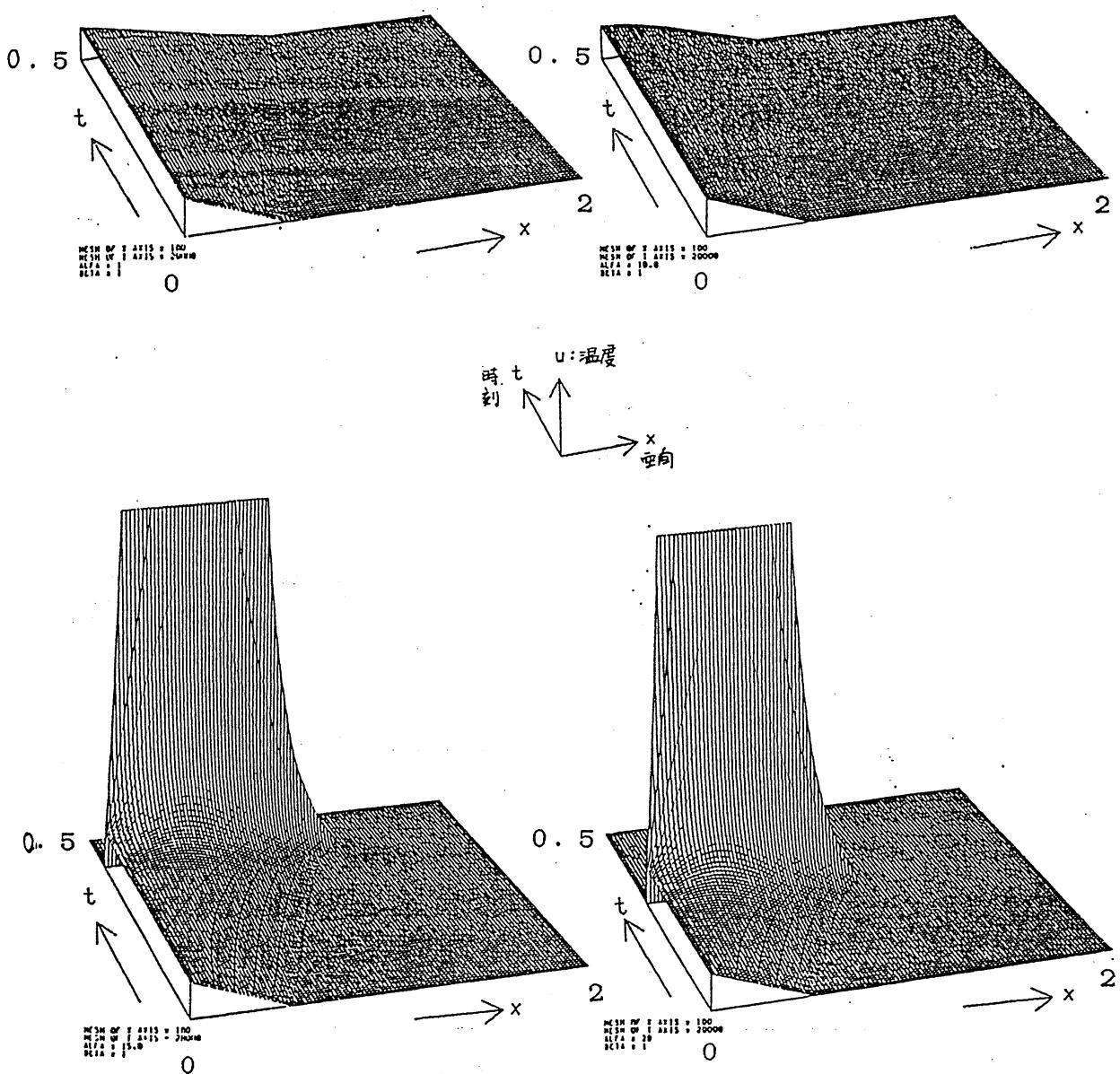


図2. ステファン問題の数値計算例（パナルティ法）

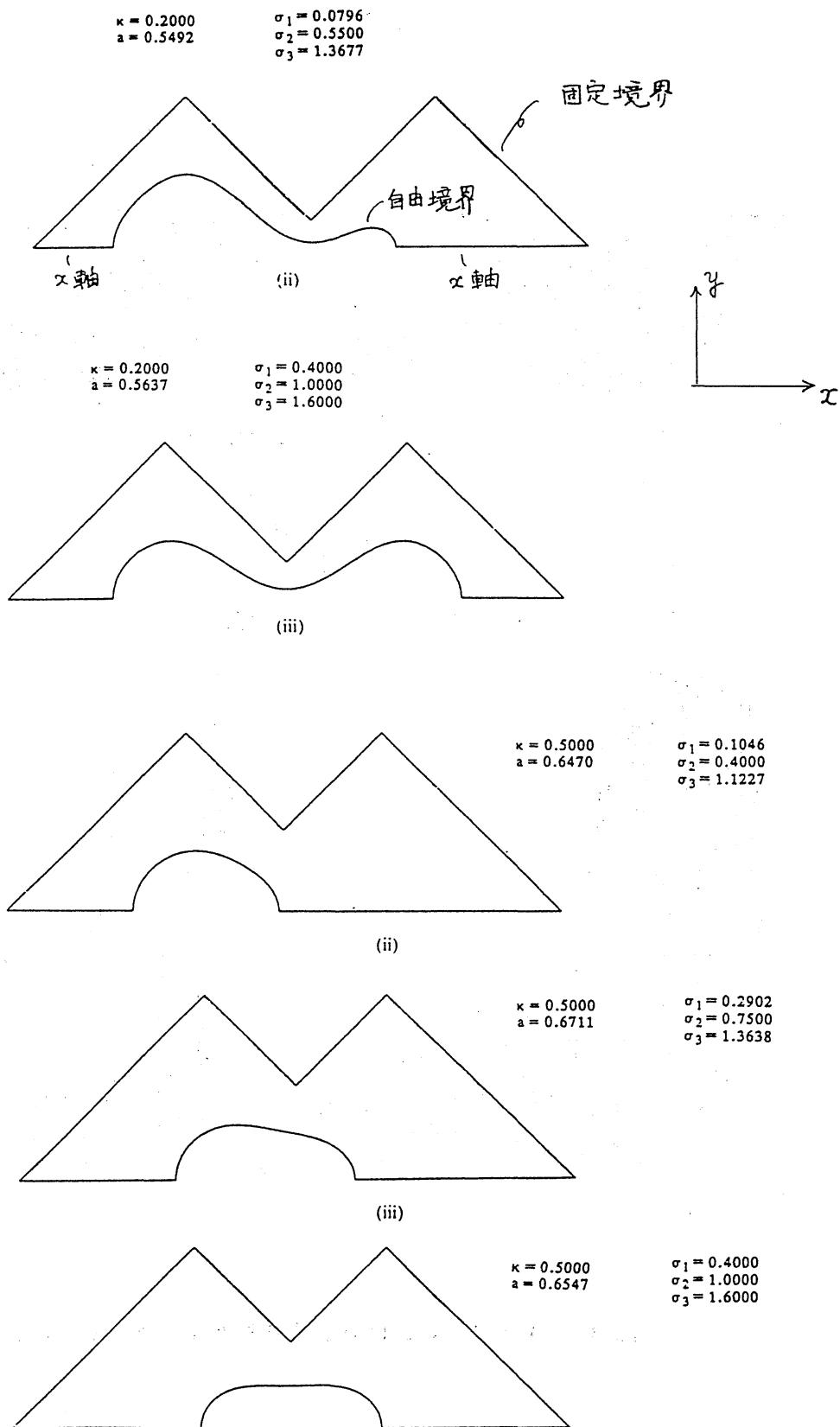


図3. プラズマ平衡問題の数値計算例（ホドグラフ変換法）

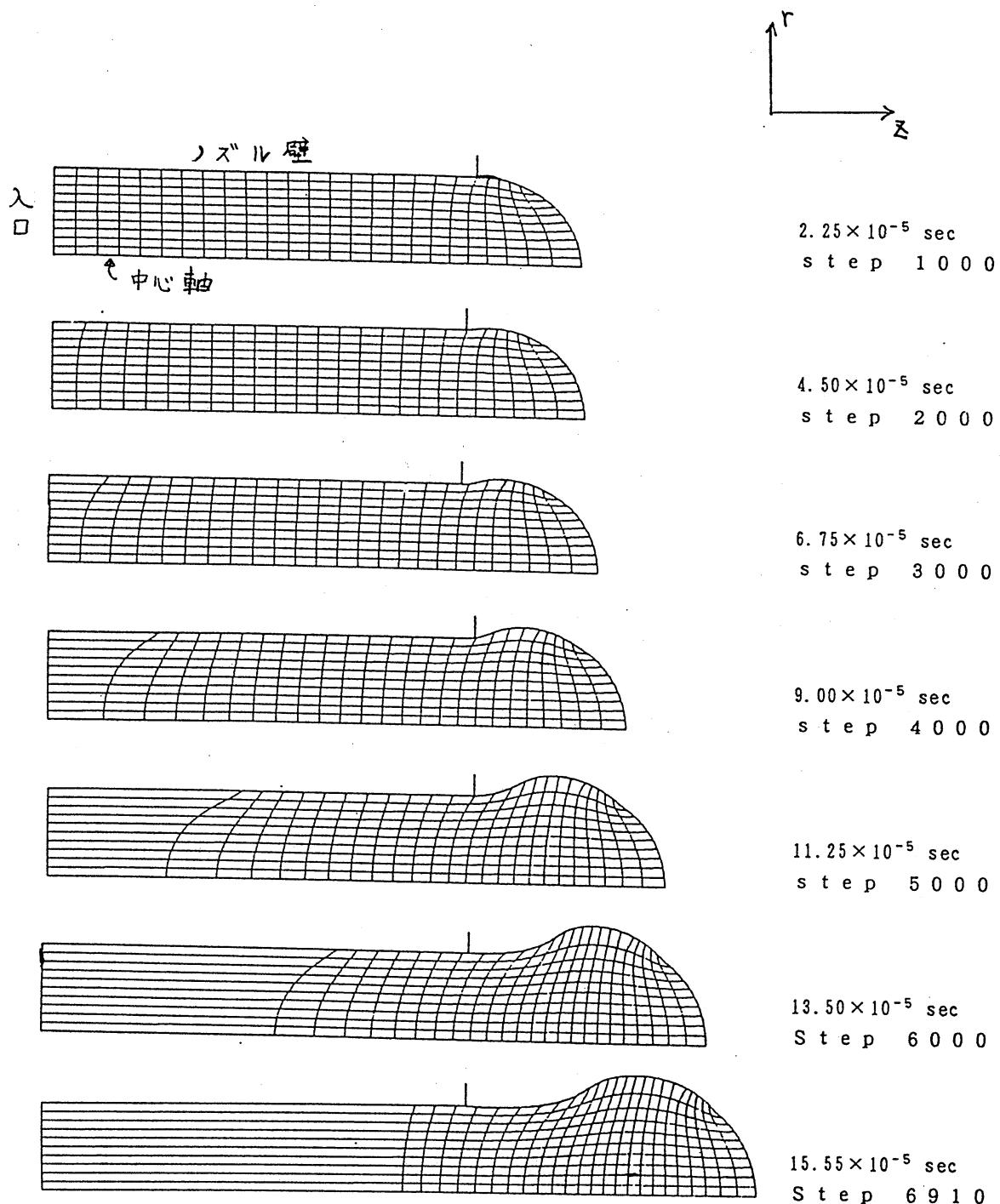


図4. インクジェットの数値計算例（一般座標系法）

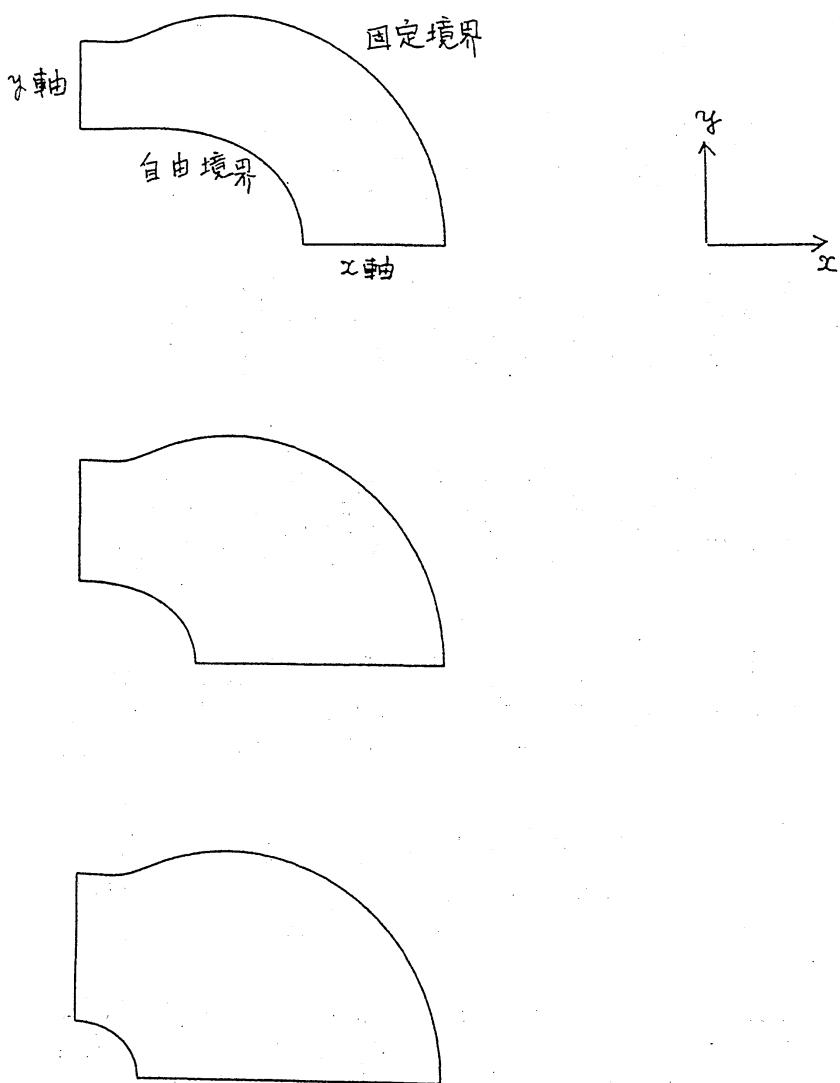


図5. プラズマ平衡問題の数値計算例（一般座標系法）

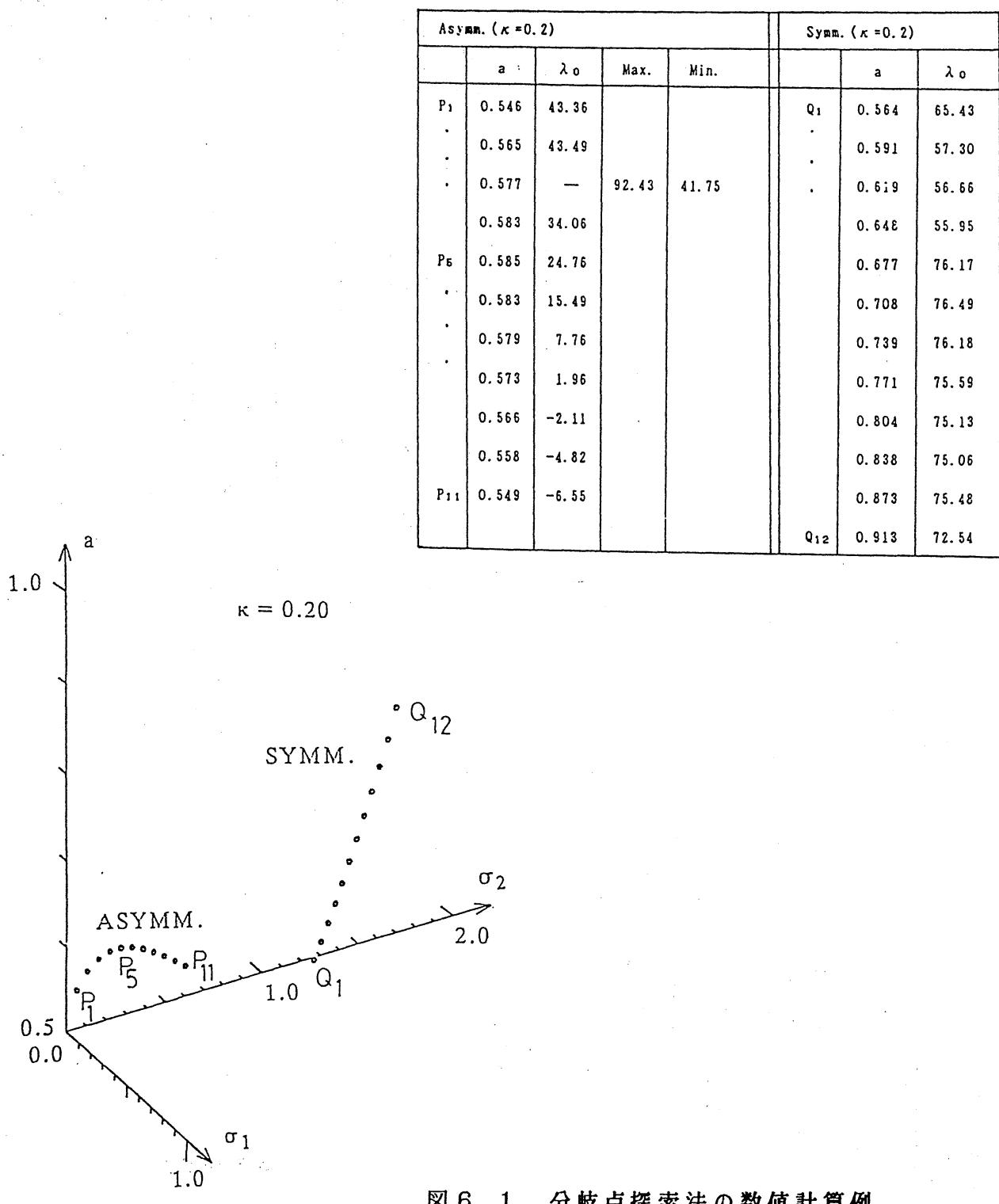


図 6.1 分岐点探索法の数値計算例

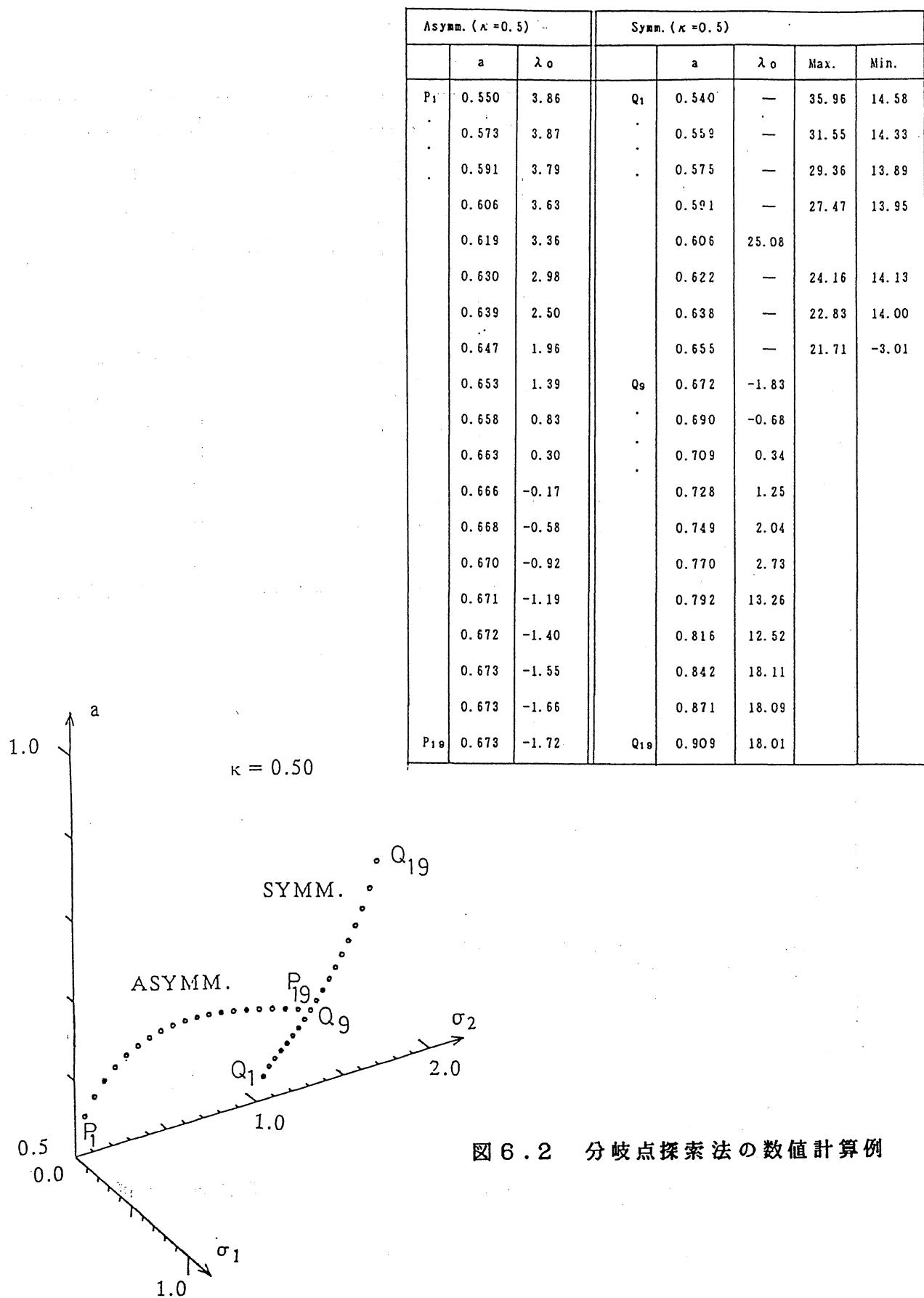


図 6.2 分岐点探索法の数値計算例

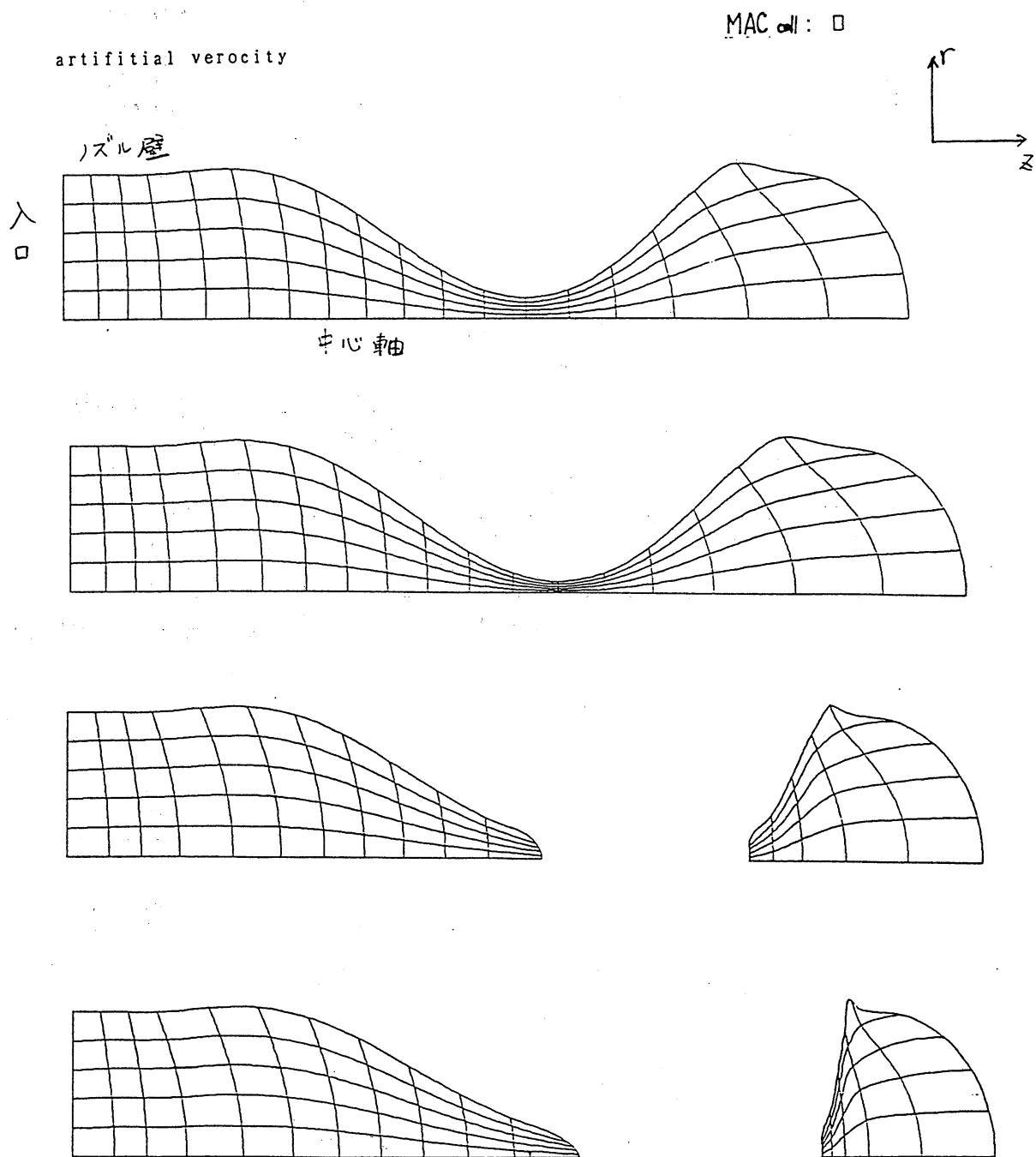


図7. インクジェットの数値計算例（格子制御法）

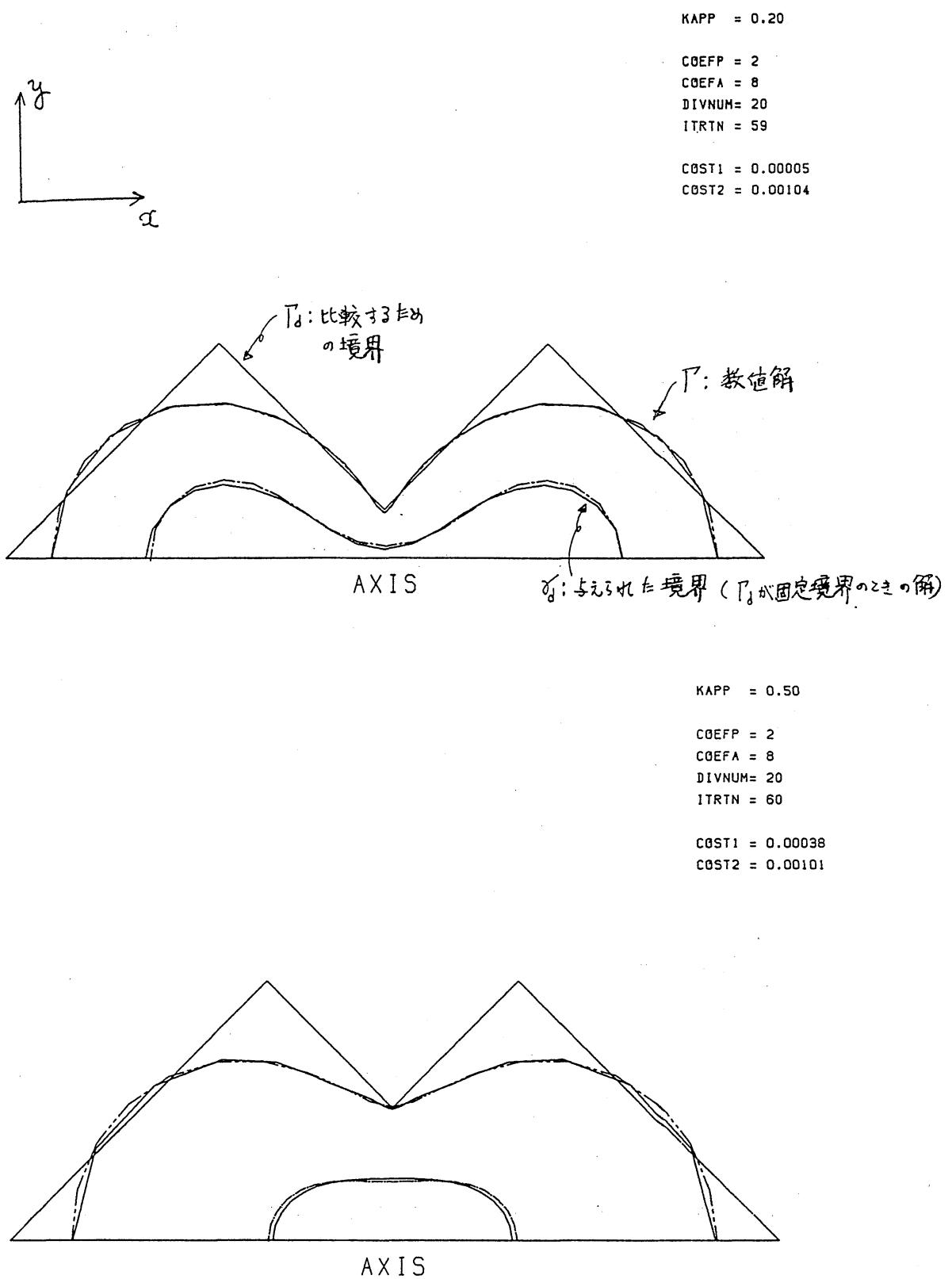


図 8 . 最適形状設計問題の数値計算例（穏やかな最適化）