

ステファン問題とその逆問題の差分解法

京大工 野木達夫

§1 ステファンによる岩塩の融解実験 (1889)

ステファンは2気体混合気体及び2成分混合液体の拡散理論を展開し、それを岩塩の融解実験に応用し、拡散係数を決定した。

一端だけ開いた中空のガラス箱の中に岩塩を詰めたとものと水の入った大きな容器の中につける。岩塩は次第にとけていくが、その融解面の変化を時間を追って観測する。(図-1)

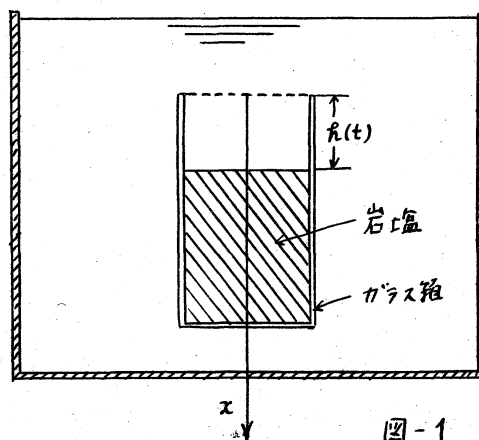


図-1

記号を導入する：

$n = n(x, t)$ = 水溶液単位体積中の NaCl 分子数

N = 岩塩単位体積中の NaCl 分子数

N_1 = 飽和水溶液単位体積中の NaCl 分子数

v = 水溶液中で 1 々の NaCl 分子が占有する空間体積

x = ガラス箱の開端から岩塩の融解する方向に測, る距離

t = 岩塩の融解開始から計, る時間

$h(t)$ = 時刻 t までは融けた岩塩の深さ

このとき溶液中の濃度及び融解面の位置 $h(t)$ を決定する方程式系は

$$(1.1) \quad \begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} = k \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + (Nv-1) \frac{\partial n}{\partial x} \dot{h} & (k: \text{正定数}) \\ 0 < x < h(t), & t > 0 \\ n(0, t) = 0, & n(h(t), t) = N, \\ k \frac{\partial n}{\partial x}(h(t), t) = N \cdot (1 - Nv) \dot{h} & , h(0) = 0 \end{cases}$$

となる。拡散係数 k が与えられているとき、問題 (1.1) の特徴は、境界の位置 $h(t)$ が時間とともに変化し、それ自身未知関数という点にある。したがって (n, h) に関する非線形問題になる。

ステファンは問題 (1.1) の解を、第 1 式を満たす関数

$$(1.2) \quad n = A \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{kt}}} e^{-z^2 - 2\alpha\beta z} dz, \quad h = 2\alpha\sqrt{kt}, \quad \beta = Nv - 1$$

(A, α : 定数)

の形で求めた。すなわち、(1.1) の境界条件より、 α, A の決

定方程式

$$(1.3) \quad \alpha e^{\alpha^2 + 2\alpha^2\beta} \int_0^\alpha e^{-z^2 - 2\alpha\beta z} dz = \frac{N_1}{2N(1-N_1\nu)}$$

$$A = \left(\int_0^\alpha e^{-z^2 - 2\alpha\beta z} dz \right)^{-1} N_1$$

と置き、これを解けばよいとすることがある。

ステファンは上の結果を用いて、逆に拡散係数 k を求めようとした。彼の観測によれば $h^2(t)/t = 0.3902 \text{ cm}^2/\text{day}$ となる。したがって (1.2) 式より $4\alpha^2 k = 0.3902$ となる。一方、NaCl 飽和水溶液の比重 1.205 より $N_1\nu = 0.114$ 、また $N/N_1 = 2.143/0.319$ を用いれば $N\nu = 0.766$ 、 $\beta = -0.234$ となる。このとき (1.3) 式の右辺 = 0.084 であり、求めるべき α の値も決まる。そこで (1.3) の近似式

$$(1.4) \quad \alpha^2 \left[1 + \alpha^2 \left(\frac{2}{3} + \beta \right) \right] = \frac{N_1}{2N(1-N_1\nu)}$$

を解いて $\alpha^2 = 0.081$ を得る。これより $k = 1.204 \text{ cm}^2/\text{day}$ となる。

§2 代表的ステファン問題

次の方程式系をみたす関数 $u(x, t)$, $h(t)$ を決定することとを考へる：

$$(2.1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < h(t), \quad t > 0 \\ u(0, t) = f(t), \quad u(h(t), t) = 0 \\ \dot{h}(t) = k v(t), \quad v(t) \equiv \frac{\partial u}{\partial x}(h(t), t), \quad h(0) = l \\ u(x, 0) = g(x), \quad 0 \leq x \leq l \end{array} \right.$$

この系において $l=0$, $u = (n-N_1)/N(1-N_1v)$, $t = -N_1/N(1-N_1v)$ とおけば系 (1.1) (ただし第1式右辺の第2項は高次の微少量として無視する) となる。

問題 (2.1) の解の存在と一意性等については次の様な結果が得られている [1]。それを述べるため $l > 0$, $l = 0$ の場合に応じて仮定 A, 仮定 B をおく:

(仮定 A) $f \leq 0$, $g \leq 0$ で, f と g をつないだ関数は有限個の第1種不連続点を許しても, 他では連続であり, しかも正数 M が存在して

$$0 \geq g(x) \geq -M(l-x) \quad (0 \leq x \leq l).$$

(仮定 B) 関数 f は有限個の第1種不連続点を許しても他では連続であり, しかも正数 d, D が存在して

$$-dt \geq f(t) \geq -Dt \quad (0 \leq t \leq T).$$

定理 1 $l > 0$ の場合には仮定 A, $l = 0$ の場合には仮定 B の下で (2.1) の解 (u, h) は一意的に存在する。自由境界 $h(t)$ は $t > 0$ で連続的に微分可能でしかも単調非減少である。

注意：仮定Bの中で $f(t)$ は $t=0$ 近傍で t の1次のオーダーで減少するよう制限がついてゐるが、この条件は $t^{1+\delta}$ ($\delta > 0$) オーダーも許すよう一般化されてゐる。しかし問題(1.1)の場合この条件は満たされてゐないので一意性については尚未解決である。

§3 差分解法

$l > 0$ のときの問題(2.1)の近似解を構成するための差分法を提案する。いま空間格子間隔 Δx , 時間ステップ $\{ \tau_n \}$ の網目をとる。ただし $J\Delta x = l$ (J : 整数) で, τ_n ($n=1, 2, \dots$) は自由境界が格子点 (x, t_n) ($x_n = x_{J+n} = (J+n)\Delta x$, $t_n = \sum_{p=1}^n \tau_p$) を通過するように決められるべきものとする。その他記号

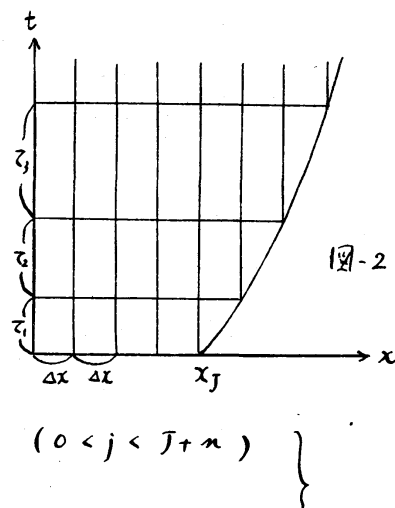
$$u_{j,n} = u(x_j, t_n) \quad (x_j = j\Delta x), \quad f_n = f(t_n), \quad \varphi_j = \varphi(x_j)$$

$$v_n = v(t_n)$$

を導入する。

次のような差分法を考える。

$$(3.1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{u_{j,n}^{(s)} - u_{j,n-1}^{(s)}}{\tau_n^{(s-1)}} \\ = k \frac{u_{j+1,n}^{(s)} - 2u_{j,n}^{(s)} + u_{j-1,n}^{(s)}}{\Delta x^2} \end{array} \right.$$



$$(3.1)^{(s)} \left\{ \begin{array}{l} u_{0,n}^{(s)} = f_n, \quad u_{j+n,n}^{(s)} = 0 \\ \tau_n^{(s)} = \frac{2\Delta x}{k v_n^{(s)} + \sqrt{(k v_n^{(s)})^2 + 4\beta\sqrt{\Delta x}}} \\ u_{j,0} = \varphi_j \end{array} \right\} \begin{array}{l} s=1,2,\dots \\ n=1,2,\dots \\ (\beta: \text{正定数}) \end{array}$$

添数 (s) は各時刻 t_n で実行する逐次計算の繰り返し回数
を示すものである。添数 (s) を有した系を (3.1) で表わす。 (3.1)
が (2.1) に対応したものであり、未知数が $\{u_{j,n}, \tau_n\}$ になっ
てゐる。 (3.1) の第 4 式は

$$\frac{\Delta x}{\tau_n} = k v_n + \beta \frac{\tau_n}{\sqrt{\Delta x}}$$

とも表わせ、 β は計算のために導入した付加項の入り方とを示す
ものである。

定理 2 i) 適当に与えられた β ($0 < t < T$ に関して一様にとれ
る) に対して、 $s \rightarrow \infty$ のとき逐次計算は収束し、その極限は
系 (3.1) の解になる。しかもその解は一意的である。

ii) $f(t)$ が 1 回連続的に微分可能で、 $\varphi(t)$ が 2 回連続的に微分
可能な関数 $\{u_{j,n}, h_n\}$ (適当につなげたもの) は $\Delta x \rightarrow 0$ のとき
収束し、その極限関数 $\{u(r,t), h(t)\}$ は (2.1) の解である。

証明は [2] をみよ。

$l=0$ の場合は未解決である。

§4 逆問題とその差分解法

§1 で述べた拡散係数決定問題をもう少し一般的に考える。

次の系をみたす関数 $u(x, t)$, $k(t)$ を決定する問題を扱う：

$$(4.1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = k(t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < h(t) \\ u(0, t) = f(t) \leq 0, \quad u(h(t), t) = 0 \\ \dot{h}(t) = k(t) v, \quad v = \frac{\partial u}{\partial x}(h(t), t), \quad h(0) = l > 0 \\ u(x, 0) = \varphi(x) \leq 0, \quad 0 < x < l \end{array} \right.$$

ただし $h(t)$, $f(t)$, $\varphi(x)$ は与えられた関数とする。しかも正数 m, M が存在して

$$0 < m < \dot{h}(t) < M$$

がなりたつものと仮定する。†は1回, φ は2回連続的に微分可能。

(4.1)の解を構成するための差分法を提案する。記号は§3のものに踏襲するが, $\{t_n\}$ は未知でなく, $h(t_n) = (J+n)\Delta x$ となるように予め決まっているものとする。 $\{u_{j,n}, k_n\}$ を決定する差分法は

$$(4.1)^{(s)} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{u_{j,n}^{(s)} - u_{j,n-1}^{(s)}}{\tau_n} = k_n^{(s-1)} \frac{u_{j+1,n}^{(s)} - 2u_{j,n}^{(s)} + u_{j-1,n}^{(s)}}{\Delta x^2} \\ u_{0,n}^{(s)} = f_n, \quad u_{J+n,n}^{(s)} = 0 \end{array} \right. \quad (0 < j < J+n)$$

$$(4.1)^{(s)} \left\{ \begin{array}{l} k_n^{(s)} = \frac{2 \dot{h}_n}{v_n^{(s)} + \sqrt{(v_n^{(s)})^2 + 4\beta \dot{h}_n \sqrt{\Delta x}}} \\ u_{j,0} = \varphi_j \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} s=1,2,3,\dots \\ n=1,2,3,\dots \end{array}$$

ここで $\dot{h}_n = \Delta x / \tau_n$ (s) の意味, 系 (4.1) の定義も前と同様である。 β も適当に大きく選ばれりる正定数である。(4.1) の第4式を別の形にかけば

$$\dot{h}_n = k_n v_n + \beta \sqrt{\Delta x} k_n^2$$

となり, β は人工的な項の大きさを示す。

定理3 i) 適当に大きな β ($\Delta x, n$ に関して一様にとれる) に対して $s \rightarrow \infty$ のとき逐近計算は収束しその極限は系 (4.1) の解になる。しかも一意に決まる。

ii) $\Delta x \rightarrow 0$ のとき各 t に対して $\{u_{j,n}\}$ は x に関して 1 回連続的微分可能な関数 $u(x, t)$ に一様収束し

$$\lim_{x \rightarrow h(t)} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = v(t) \quad (\geq 0)$$

が存在する。もし $v(t)$ が常に正であれば (このようになる $\tau - \varphi$ (h.f. φ) は well set な $\tau - \varphi$ という), $\{k_n\}$ も連続関数 $k(t)$ に一様収束し, (u, k) が問題 (4.1) の解となる。しかも有界な解として一意である。

注意: Well set でないとき $a(t) = \infty$ なる t が存在する

ことになり不合理な問題設定となる。どんなテ-マ-も well set にするのについて検討中である。

定理の証明は [3] を参照。

§5 数値計算例

i) まず '逆' となる問題を解いた例をあげる。テ-マ-は

$$k = 1.0, \quad l = 1.0, \quad \Delta x = 0.01, \quad \beta = 0.05$$

$$f(t) = \begin{cases} -\cos \frac{\pi}{4} t & (0 < t \leq 2) \\ 0 & (t > 2) \end{cases}, \quad g(t) = x - 1.$$

計算結果を図-3 の i) の曲線 ($x = h(t)$) で示す。毎回の逐次計算回数は約 3~4 回 (判定規準 0.0001) である。

ii) 次に逆問題の計算例をあげる。 $l, f, g, \Delta x, \beta$ と (2 は i) と同じものを用い、 $h(t)$ と (2 は i) で得た結果を用いる。従って期待される解は $k(t) = 1.0$ である。 $k(t)$ 曲線を図-3 の ii) で示した。このときの収束回数は 2~6 回 (判定規準 0.0001) である。

iii) とは 3 か ii) の結果で例えれば

$$k_1 = 1.0005, \quad k_{50} = 1.0095, \quad k_{90} = 1.1511, \quad k_{100} = 3.7569$$

となり、80 ステップ以降では急速に値が大きくなる。これは

i) の計算で 80 ステップ以降で h が小さくなり、人工的に付加した項による誤差が大きくなるからであり、(10 は ii) の

計算での人工項の誤差も加, 2.3 からである。

(c) h が小さくなる範囲では $k_n \approx 1.0$ の良好な結果を得ている。

iv) i) ii) の計算をそれぞれ 100 ステップ, $70 \pm$ で実行したとき
に両者あわせての CPU 時間は, 京大大型セクターの FACOM
230-75 で 4.6 秒である。

参考文献

- [1] J.R. Cannon & C.D. Hill, Existence, uniqueness, stability, and monotone dependence in a Stefan problem for the heat equation, J. Math. Mech. 17 (1967)
- [2] T. Nogi, A Difference Scheme for solving the Stefan problem, Pub. R.I.M.S. 9 (1974)
- [3] T. Nogi, 逆ステファン問題の差分解法, Comp. & Anal. Sim. Japan 6 (1974)

