

Approximation schemes for two-phase Stefan problems: application to the singular limit of reaction-diffusion systems

九州大学大学院数理学府 村川 秀樹*(Hideki Murakawa)
九州大学大学院数理学研究院 井古田 亮**(Ryo Ikota)
九州大学大学院数理学研究院 中木 達幸**(Tatsuyuki Nakaki)

*Graduate School of Mathematics, Kyushu University, Japan

**Faculty of Mathematics, Kyushu University, Japan

1 はじめに

自由境界を伴う拡散現象は、物理学や工学等の諸分野における重要な問題の一つである。ここでは、その典型的な例であり、氷の融解・凝固の問題を記述する古典的二相 Stefan 問題を取り扱う。古典的 Stefan 問題は古くから研究されており、現在でも多くの研究がなされている（例えば、参考文献 [1, 5, 6, 7]）。また、その数値解法に関しても多くの解法が提案されている。Stefan 問題の数値解法は、界面追跡法とエンタルピー法の二つに大別される。界面追跡法は、界面の動きを決定する Stefan 条件を界面上で陽的に取り扱う方法で、良い界面の近似が得られることが多い。しかしながら、空間多次元の問題では、界面の位相の変化や界面が尖状になる場合があり、界面を追跡するのは困難になる。エンタルピーに着目して定式化された方程式を考えることによって、この問題を解決することができる。エンタルピーに関する方程式には界面で満たされるべき条件が内在しており、界面で特別な操作をすることなしに界面の情報を得ることができる。しかし、界面でエンタルピーが不連続になる等の問題もある。このため、エンタルピーに関する方程式において、温度とエンタルピーの関係式を修正して、解が滑らかなものとなる方程式へと修正し、その方程式の近似を得る方法が現在の数値解法の主流となっている。エンタルピーに関する方程式をそのまま離散化して得られる数値解法においても、上の様に解が滑らかとなる方程式を離散化して得られる数値解法においても、数値解を陰的に求める場合には非線形の連立方程式を解く必要がある。この非線形連立方程式を解くために、SOR 法を応用したものや、Newton 法と CG 法を交互に用いる方法などが提案されており、現在でも様々な研究がなされている（例えば参考文献 [1, 4, 14]）。

本稿の目的は、古典的二相 Stefan 問題の解を近似する近似スキームを提出し、その近似スキームの収束性に関して論じることである。本稿では二つの近似スキームを提出する。一つ目の近似スキームは Stefan 問題のある反応拡散系近似の特異極限解を表現するために導出されたものである。初期値が不連続な場合はこの近似も不連続になり得るため、理論的な解析が困難となる。そこで、もう一つの近似スキームを提出する。二つ目の近似スキームは一つ目の近似スキームに手を加えたものであり、一つ目の近似スキームを滑らかにしたもののみならずとみなすことができる。我々は一つ目の近似スキームに対して空間一次元での収束結果を得 (定理 3.1)、二つ目の近似スキームにおいては任意空間次元での収束結果を得た (定理 3.2)。これらの近似スキームの特徴は、考える領域全体で線形の熱方程式を解くことによって Stefan 問題の解の近似を得るというものである。また、線形の熱方程式の解を数値的に求めることで直ちに Stefan 問題に関する数値スキームを得ることができる。熱方程式の解を数値的に求めることは数値計算法の初歩の問題である。特に、そのときに解くべき連立方程式は線形であるがゆえに、様々な計算法が提案されており、我々はその中から効率的かつ有効な計算法を選べばよいのである。

同様のアプローチとして、村川等による古典的一相 Stefan 問題に対する近似解法 [11, 12] や井古田等によるある生物モデルについての近似解法 (Threshold Competition Dynamics Method) [8], Merriman 等や Ruuth により提案された平均曲率流に関する近似解法 [9, 13] が挙げられる。

本稿の構成は次の通りである。次節では、古典的二相 Stefan 問題とその弱解の定義について述べる。第 3 節では、古典的二相 Stefan 問題の弱解を近似するスキームを提示し、そのスキームの導出、理論的な結果について説明する。第 4 節では、我々の提案した近似スキームを離散化して得られた数値スキームにより数値実験を行いその収束性や有用性について調べる。

2 古典的二相 Stefan 問題

古典的二相 Stefan 問題の古典的な定式化は固相・液相のそれぞれの領域で熱方程式に従って温度分布が変化して行き、それと同時に界面は界面の動きを決定する Stefan 条件に従って変化するというものである。実際に氷の融解・凝固の現象を捉えるためには界面上での熱の流量、表面張力、流体としての水の運動等の効果を考慮する必要があるが、古典的 Stefan 問題では巨視的な挙動を捉えるために、また、問題を簡便化するために、界面は界面上での熱流の収支のみに依存して移動するものとして定式化されている。

エンタルピーの変化に着目すると、古典的二相 Stefan 問題はさらに簡潔に、次のように

定式化される.

$$\begin{cases} z_t = \Delta d(\phi(z)) & Q_T := \Omega \times (0, T] \text{ 上,} \\ \frac{\partial d(\phi(z))}{\partial \nu} = 0 & \partial\Omega \times (0, T] \text{ 上,} \\ z(x, 0) = z_0(x), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (1)$$

ここで, Ω は境界 $\partial\Omega$ が滑らかな \mathbf{R}^N ($N \in \mathbf{N}$) 内の有界領域, T は正の定数, ν は $\partial\Omega$ の外向き単位法線ベクトル, z_0 は与えられた関数, d と ϕ は次で定義される関数である.

$$d(r) = \begin{cases} d_1 r, & r \geq 0, \\ d_2 r, & r < 0, \end{cases} \quad \phi(r) = \begin{cases} r - \lambda, & r > \lambda, \\ 0, & 0 \leq r \leq \lambda, \\ r, & r < 0. \end{cases}$$

定数 d_1 と d_2 はそれぞれ液相, 固相での拡散係数であり, λ は単位体積の氷を融かすのに必要な熱量を表す定数であり, 潜熱係数と呼ばれる. 関数 z と $\phi(z)$ はそれぞれ, エンタルピーと温度分布を表す. このとき, $\phi(z) < 0$ となる領域は固相を表し, $\phi(z) > 0$ となる領域は液相を表す. これらの領域は $\phi(z) = 0$ となる集合によって分断されるが, この集合が固相液相間の界面の位置, 形状を決定する. 一般に, この集合は内点を持ち得る. この様なとき $\phi(z) = 0$ となる集合の開核はマッシーリージョンと呼ばれ, 様々な研究がなされている [2, 3]. 古典的な定式化とエンタルピーによる定式化との詳しい関係は参考文献を参照されたい [4, 5, 10].

初期値 $z_0 \in L^\infty(\Omega)$ に対して, 方程式 (1) の弱解は唯一つ存在することが知られていることに注意しておく [7]. ここで, 方程式 (1) の弱解とは次で定義されるものである.

定義 2.1. 関数 $z \in L^\infty(Q_T)$ が方程式 (1) の弱解であるとは, $d(\phi(z)) \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ であり, $\zeta(\cdot, T) = 0$ なる $\zeta \in C^\infty(\overline{Q_T})$ に対して,

$$\iint_{Q_T} z \zeta_t dx dt + \int_{\Omega} z_0(x) \zeta(x, 0) dx = \iint_{Q_T} \{\nabla d(\phi(z)) \cdot \nabla \zeta\} dx dt$$

を満たすときを言う.

3 近似スキームと結果

方程式 (1) の弱解を近似するスキームを提出する.

近似スキーム 3.1. M_T を正の整数とし, $\tau := T/M_T$, $t_m := m\tau$ ($m = 0, 1, 2, \dots, M_T$) と定義する. 初期値 $z_0 \in L^\infty(\Omega)$ に対し, 方程式 (1) の弱解 z の近似 z_τ を次で定義する.

$$z_\tau(t) = \mathcal{K}(t - t_m) \circ \mathcal{K}(\tau)^m z_0, \\ t_m < t \leq t_{m+1} \quad (m = 0, 1, 2, \dots, M_T - 1).$$

ここで $\mathcal{K}(t)$ は、任意の $a \in L^\infty(\Omega)$ に対して次で定義される作用素である。

$$\mathcal{K}(t)a = e^{td_1\Delta} \phi_1(a) + e^{td_2\Delta} \phi_2(a) + \phi_3(a) \quad (t > 0). \quad (2)$$

ただし、 $a \in L^\infty(\Omega)$ に対して $e^{tD\Delta}a$ は熱方程式

$$\begin{cases} u_t = D\Delta u & \Omega \times \mathbf{R}_+ \text{上}, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 & \partial\Omega \times \mathbf{R}_+ \text{上}, \\ u(x, 0) = a(x), & x \in \Omega \end{cases}$$

の解を表す。また、 ϕ_i ($i = 1, 2, 3$) は

$$\phi_1(a) = \phi(a)^+, \quad \phi_2(a) = -\phi(a)^-, \quad \phi_3(a) = \phi(a) - a, \quad a^\pm = \max\{\pm a, 0\}$$

と定義される関数であり、 a をエンタルピーとすると、 $\phi_1(a)$ は液相の温度分布を、 $\phi_2(a)$ は固相の温度分布を表し、 $\phi_3(a)$ は潜熱を表す。

式 (2) は、時間ステップ毎に線形の熱方程式の解を求めることが近似スキーム 3.1 における計算の大部分を占めていることを示している。

次に近似スキーム 3.1 の導出について説明する。我々は井古田等 [8] の結果と Hilhorst 等 [5, 6] の結果に着目した。Hilhorst 等 [5, 6] は方程式 (1) を近似する次の反応拡散系を与えた。

$$\begin{cases} U_t = d_1\Delta U + kUV - k(\lambda - W)U & Q_T \text{上}, \\ V_t = d_2\Delta V - kUV - kVW & Q_T \text{上}, \\ W_t = k(\lambda - W)U + kVW & Q_T \text{上}, \\ \frac{\partial U}{\partial \nu} = \frac{\partial V}{\partial \nu} = 0 & \partial\Omega \times (0, T] \text{上}, \\ U(x, 0) = U_0(x) := \phi_1(z_0(x)), & x \in \Omega \\ V(x, 0) = V_0(x) := \phi_2(z_0(x)), & x \in \Omega \\ W(x, 0) = W_0(x) := \phi_3(z_0(x)), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 k は正の定数である。

初期値 $z_0 \in L^\infty(\Omega)$ が $\phi(z_0) \in C(\bar{\Omega})$ を満たすとき、方程式 (3) の解を (U_k, V_k, W_k) とすると、 $k \rightarrow +\infty$ のとき $U_k + V_k + W_k$ は z_0 を初期値とする方程式 (1) の弱解に弱収束することが Hilhorst 等により示されている。

方程式 (1) の解を得るために、我々は方程式 (3) の解の $k \rightarrow +\infty$ のときの特異極限を表現することを考えた。このとき、井古田等 [8] に従い、作用素分割法を用いた。

$\{U^m\}_{m=0}^{M_T}$, $\{V^m\}_{m=0}^{M_T}$ および $\{W^m\}_{m=0}^{M_T}$ を次のように定義する。

ステップ 1: $U^0(x) = U_0(x)$, $V^0(x) = V_0(x)$, $W^0(x) = W_0(x)$ と置く。

ステップ 2: $m = 0, 1, \dots, M_T - 1$ に対して、

ステップ 2-1 (拡散項): $\bar{U}^m(\cdot, t_{m+1}) = e^{\tau d_1 \Delta} U^m$, $\bar{V}^m(\cdot, t_{m+1}) = e^{\tau d_2 \Delta} V^m$ と定義する。

ステップ 2-2 (反応項): 次の初期値問題を解く:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{U}_t^m = k \hat{U}^m \hat{V}^m - k(\lambda - \hat{W}^m) \hat{U}^m \quad \Omega \times (t_m, t_{m+1}] \text{ 上,} \\ \hat{V}_t^m = -k \hat{U}^m \hat{V}^m - \hat{V}^m \hat{W}^m \quad \Omega \times (t_m, t_{m+1}] \text{ 上,} \\ \hat{W}_t^m = k(\lambda - \hat{W}^m) \hat{U}^m + \hat{V}^m \hat{W}^m \quad \Omega \times (t_m, t_{m+1}] \text{ 上,} \\ \hat{U}^m(x, t_m) = \bar{U}^m(x, t_{m+1}), \quad x \in \Omega, \\ \hat{V}^m(x, t_m) = \bar{V}^m(x, t_{m+1}), \quad x \in \Omega, \\ \hat{W}^m(x, t_m) = W^m(x), \quad x \in \Omega. \end{array} \right. \quad (4)$$

ステップ 2-3: 次を定義する。

$$\left\{ \begin{array}{l} U^{m+1}(x) = \hat{U}^m(x, t_{m+1}), \\ V^{m+1}(x) = \hat{V}^m(x, t_{m+1}), \\ W^{m+1}(x) = \hat{W}^m(x, t_{m+1}). \end{array} \right.$$

式 (4) において、 $s = (t - t_m)/k$ と置くと、

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{U}_s^m = \hat{U}^m \hat{V}^m - (\lambda - \hat{W}^m) \hat{U}^m \quad \Omega \times (0, k\tau] \text{ 上,} \\ \hat{V}_s^m = -\hat{U}^m \hat{V}^m - \hat{V}^m \hat{W}^m \quad \Omega \times (0, k\tau] \text{ 上,} \\ \hat{W}_s^m = (\lambda - \hat{W}^m) \hat{U}^m + \hat{V}^m \hat{W}^m \quad \Omega \times (0, k\tau] \text{ 上,} \\ \hat{U}^m(x, 0) = \bar{U}^m(x, t_{m+1}), \quad x \in \Omega, \\ \hat{V}^m(x, 0) = \bar{V}^m(x, t_{m+1}), \quad x \in \Omega, \\ \hat{W}^m(x, 0) = W^m(x), \quad x \in \Omega. \end{array} \right.$$

ここで、 $k \rightarrow +\infty$ とすると、方程式 (3) を解くことは $s \rightarrow \infty$ のときの漸近解を求めることに帰着する。 $(\hat{U}^m + \hat{V}^m + \hat{W}^m)_s = 0$ 等に注意すると、ステップ 2-2 と ステップ 2-3

は次のようになる.

$$\begin{cases} U^{m+1}(x) = \phi_1(\bar{U}^m(x, t_{m+1}) + \bar{V}^m(x, t_{m+1}) + W^m(x)), \\ V^{m+1}(x) = \phi_2(\bar{U}^m(x, t_{m+1}) + \bar{V}^m(x, t_{m+1}) + W^m(x)), \\ W^{m+1}(x) = \phi_3(\bar{U}^m(x, t_{m+1}) + \bar{V}^m(x, t_{m+1}) + W^m(x)). \end{cases}$$

このような形式的な計算により, 近似スキーム 3.1 を得た.

次に, 近似スキーム 3.1 に関する我々の結果を述べる.

定理 3.1. 空間の次元を $N = 1$ とする. つまり領域 Ω はある开区間であるとする. 初期値 $z_0 \in L^\infty(\Omega)$ は区分的に連続で単調非増加 (または, 単調非減少) とする. このとき z を Stefan 問題 (1) の弱解とすると, $M_T \rightarrow \infty$ として次が成り立つ.

$$\begin{aligned} \phi_1(z_\tau) &\rightarrow \phi_1(z) && L^2(Q_T) \text{ で強収束,} \\ \phi_2(z_\tau) &\rightarrow \phi_2(z) && \\ \phi_3(z_\tau) &\rightarrow \phi_3(z) && L^2(Q_T) \text{ で弱収束.} \end{aligned}$$

この定理は, 空間一次元の問題を考える限り, z_τ は Stefan 問題 (1) の弱解を近似している, つまり, 領域 Ω 全体で線形の熱方程式を解くことにより Stefan 問題の解を捉えることができることを主張している. しかし, 物理学や工学における重要性や理論的な興味の対象を考えると, 空間一次元での結果では不十分である. そこで我々は, 近似スキーム 3.1 に似たもう一つの近似スキームを与える.

近似スキーム 3.2. 初期値 $z_0 \in L^\infty(\Omega)$ に対し, 方程式 (1) の弱解 z の近似 \tilde{z}_τ を次で定義する.

$$\tilde{z}_\tau(t) = \tilde{\mathcal{K}}(t - t_m) \circ \tilde{\mathcal{K}}(\tau)^m z_0, \\ t_m < t \leq t_{m+1} \quad (m = 0, 1, 2, \dots, M_T - 1).$$

ここで $\tilde{\mathcal{K}}(t)$ は, 任意の $a \in L^\infty(\Omega)$ に対して次で定義される作用素である.

$$\tilde{\mathcal{K}}(t)a = e^{td_1\Delta}\phi_1(a) + e^{td_2\Delta}\phi_2(a) + e^{td_3\Delta}\phi_3(a) \quad (t > 0).$$

また, M_T, τ, t_m ($m = 0, 1, 2, \dots, M_T$) は近似スキーム 3.1 で定義されたものと同様に定義する. 拡散係数 d_3 は与えられた定数 $c > 0$ と $\alpha \in (0, 1)$ を用いて $d_3 = c\tau^\alpha$ と定義する.

近似スキーム 3.1 における作用素 \mathcal{K} では ϕ_3 の部分は何もせずに加えるだけであるのに対して, 近似スキーム 3.2 においては, ϕ_3 の部分を初期値として拡散させている. このときの拡散係数 d_3 は τ に依存しており, 時間の分割数 M_T が大きくなるにつれて d_3 は 0 に近づいていくことに注意すると, 近似スキーム 3.2 の収束性は近似スキーム 3.1 の収

束性を示唆するものだと考えることができる。また、近似スキーム 3.2 においても近似スキーム 3.1 と同様に、領域 Ω 全体で線形の熱方程式を解くことが本質的であることを強調しておく。

近似スキーム 3.2 に関する結果を述べる。

定理 3.2. 関数 z を初期値を $z_0 \in L^\infty(\Omega)$ とする Stefan 問題 (1) の弱解とすると、 $M_T \rightarrow \infty$ として次が成り立つ。

$$\begin{aligned} \phi_1(\tilde{z}_T) &\rightarrow \phi_1(z) & L^2(Q_T) \text{ で強収束, } L^2(0, T; H^1(\Omega)) \text{ で弱収束,} \\ \phi_2(\tilde{z}_T) &\rightarrow \phi_2(z) \\ \phi_3(\tilde{z}_T) &\rightarrow \phi_3(z) & L^2(Q_T) \text{ で弱収束.} \end{aligned}$$

定理 3.2 は任意空間次元の問題に対して成り立つものであり、線形の熱方程式を繰り返し解くことにより Stefan 問題の解を捉えることができることを主張している。

4 数値実験

この節では、近似スキーム 3.1 の収束性を数値実験により確かめることを目的とする。この節は 3 つの小節から成る。初めに、空間一次元の問題に対する数値解法の収束性を見る。次に、近似スキーム 3.1 に関して空間多次元の場合の収束証明は得られていないが、空間二次元の場合の数値実験を行う。最後に、空間三次元の問題を扱い、近似スキーム 3.1 の有用性について述べる。

近似スキーム 3.2 を離散化して得られる数値解法においても、近似スキーム 3.1 の場合と同様の収束性が見て取れるのでここでは割愛する（ただし、拡散係数 d_3 における定数 c 、 α の選び方によっては近似スキーム 3.1 の場合より良く近似できることがある）。

4.1 1次元テスト問題

空間一次元の問題に対する数値実験を行う。考える領域を $\Omega = (0, 1)$ とし、次で定める関数 u, v がそれぞれ真の水の温度分布、氷の温度分布となるような問題を時刻 $T = 1$ まですで考える。

$$\begin{aligned} u(x, t) &= 2(I(t) - x) + (I(t) - x)^2, & (x, t) \in \Omega_u := \cup_{0 \leq t \leq T} (0, I(t)), \\ v(x, t) &= (I(t) - x) - (I(t) - x)^2, & (x, t) \in \Omega_v := \cup_{0 \leq t \leq T} (I(t), 1). \end{aligned}$$

ここで、 $I(t) = 0.25 + 0.5t$ は時刻 $t \in [0, 1]$ における界面の位置を表す。拡散係数は $d_1 = d_2 = 1$ とし、潜熱係数は $\lambda = 2$ としておく。このとき、真のエントルピー z は次で

与えられ,

$$z(x, t) = \begin{cases} u(x, t) + \lambda, & (x, t) \in \Omega_u, \\ v(x, t), & (x, t) \in \Omega_v, \end{cases} \quad (5)$$

潜熱 $w = \phi_3(z)$ は次で与えられる.

$$w(x, t) = \begin{cases} \lambda, & (x, t) \in \Omega_u, \\ 0, & (x, t) \in \Omega_v. \end{cases}$$

上に定義した関数 z が真の解となるように熱源 f を求め, それを方程式 (1) の第 1 式の右辺に加えた方程式を取り扱う. また, 境界上では Dirichlet 境界条件を課し, 境界の値として真の値を与える.

近似スキーム 3.1 において, 熱方程式の数値解を差分法により求めることで, 数値スキームを得る. ここで用いた数値スキームを具体的に説明する. 空間, 時間共に一様な分割をとる. つまり, M_X, M_T を正の定数として, $\delta x = 1/M_X, \delta t = 1/M_T$ ととり, $x_i = i\delta x, t_n = n\delta t, (0 \leq i \leq M_X, 0 \leq n \leq M_T)$ と定義する. $u_i^n, v_i^n, w_i^n (0 < i < M_X, 0 < n \leq M_T)$ をそれぞれ, $u(i\delta x, n\delta t), v(i\delta x, n\delta t), w(i\delta x, n\delta t)$ の近似値とする. 初期値は $u_i^0 = u_0(i\delta x), v_i^0 = v_0(i\delta x), w_i^0 = w_0(i\delta x) (0 \leq i \leq M_X)$ により与える. ここで用いる数値スキームは次を繰り返すものになる.

ステップ 1: u_i^n, v_i^n に対して, 次のステップ 1A, 1B により \bar{u}_i^n, \bar{v}_i^n を定義する.

ステップ 1A: \bar{u}_i^n を次で定義する.

$$\begin{aligned} \bar{u}_0^n &= u(0, t_{n+1}), & \bar{u}_{M_X}^n &= 0, \\ \frac{\bar{u}_i^n - u_i^n}{\delta t} &= d_1 \frac{\bar{u}_{i+1}^n - 2\bar{u}_i^n + \bar{u}_{i-1}^n}{\delta x^2} + f^+(x_i, t_{n+1}), & (0 < i < M_X). \end{aligned}$$

ステップ 1B: \bar{v}_i^n を次で定義する.

$$\begin{aligned} \bar{v}_0^n &= 0, & \bar{v}_{M_X}^n &= v(1, t_{n+1}), \\ \frac{\bar{v}_i^n - v_i^n}{\delta t} &= d_2 \frac{\bar{v}_{i+1}^n - 2\bar{v}_i^n + \bar{v}_{i-1}^n}{\delta x^2} - f^-(x_i, t_{n+1}), & (0 < i < M_X). \end{aligned}$$

ステップ 2: u_i^{n+1} と $v_i^{n+1}, w_i^{n+1} (0 \leq i \leq M_X)$ を次で定義する.

$$u_i^{n+1} = \phi_1(z_i^n), \quad v_i^{n+1} = \phi_2(z_i^n), \quad w_i^{n+1} = \phi_3(z_i^n).$$

ここで, $z_i^n = \bar{u}_i^n + \bar{v}_i^n + w_i^n$ とおいた.

この問題の場合, 固相・液相での拡散係数は等しいので, ステップ 1A とステップ 1B は一つにまとめることができる. 従って, 我々の数値スキームによる数値計算時間は熱方程式の数値計算時間とほぼ同等である. この数値解法により数値実験を行い, 真の解と共に

図 1 に記した. また, 界面の近似を $\{z_i^n\}_{0 \leq i \leq M_X, 0 \leq n \leq M_T}$ の $-\lambda/2$ 等高線により定義し, 真の界面と共に図 2 に示した. 図 3 は図 2 の一部を拡大したものである.

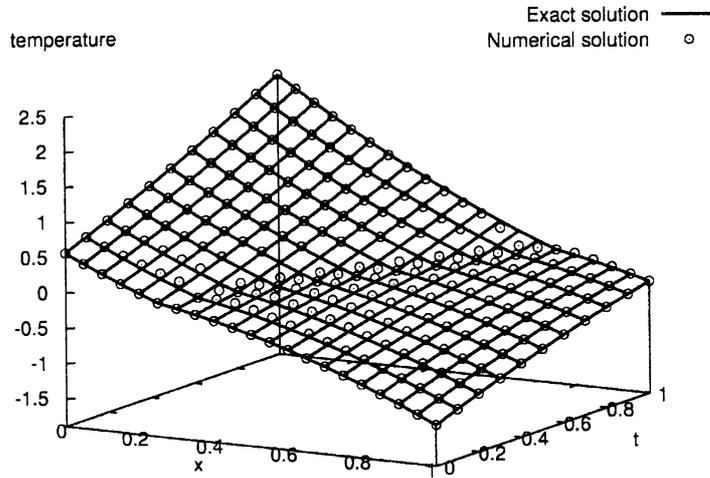


図 1 真の温度分布と数値結果. $M_X = 20, M_T = 40$.

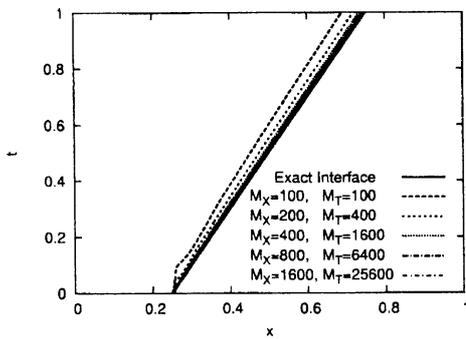


図 2 真の界面の位置と数値結果.

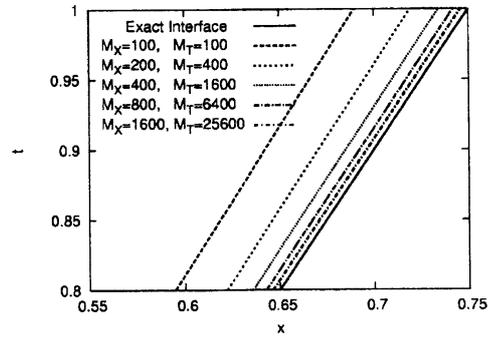


図 3 図 2 の拡大図.

図 4 は, 時間ステップサイズ δt を変えたときの誤差の変化を示している. ここで, E_T, E_I は次で定義される値であり, それぞれ温度分布の誤差と界面の位置の誤差を表している. ただし, I_n は時刻 t_n における数値界面を表す.

$$E_T = \max_{0 \leq i \leq M_X, 0 \leq n \leq M_T} |\phi(z(x_i, t_n)) - \phi(z_i^n)|,$$

$$E_I = \max_{0 \leq n \leq M_T} (\text{dist}(I(t_n), I^n)).$$

数値解は真の解におよそ $1/2$ のオーダーで収束していることが見て取れる.

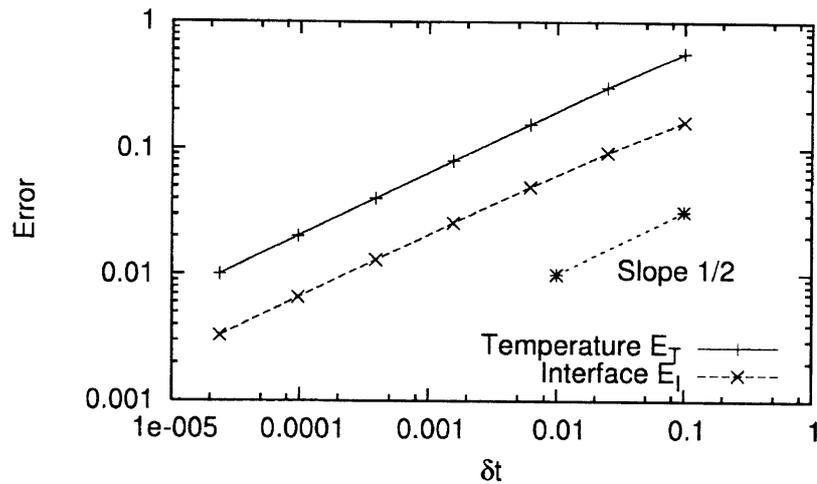


図4 $\delta x = 10^{-3}$ のときの δt と誤差 E_T , E_I との関係.

4.2 二次元数値実験

空間一次元の場合と同様の手法で得られる数値スキームにより、空間二次元の場合に数値実験を行う。領域を $\Omega = (0, 5) \times (-1, 4)$ とし、 $T = \pi/1.25$ と定義する。真の水の温度分布 u と氷の温度分布 v が次で与えられる問題を取り扱う。

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= (1.5 - \alpha(t) \sin \varphi)(r - 1), & (x, t) \in \Omega_u := \{r \geq 1\}, \\ v(x, y, t) &= 0.75(r^2 - 1), & (x, t) \in \Omega_v := \{r < 1\}. \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、 $r = (x^2 + (y - \alpha(t))^2)^{1/2}$ 、 $\alpha(t) = 0.5 + \sin(1.25t)$ 、 $\sin \varphi = (y - \alpha(t))/r$ である。潜熱係数は $\lambda = 1$ とする。このとき、真の界面は中心が $(0, \alpha(t))$ で半径が 1 の半円である。

前の小節と同様に、真のエントルピー z が次で表されるように熱源を求めて、それを加えた問題に対する数値実験を行う。

$$z(x, t) = \begin{cases} u(x, t) + \lambda, & (x, t) \in \Omega_u, \\ v(x, t), & (x, t) \in \Omega_v. \end{cases}$$

ただし、 $y = -1$, $y = 4$, $x = 5$ なる三つの边上では Dirichlet 境界条件を課し、境界の値として真の値 (6) を与え、 $x = 0$ なる边上では Neumann 境界条件を与える。

図 5 は時刻 $t = T$ における真の界面と数値界面を表しており、図 6 は図 5 の一部を拡

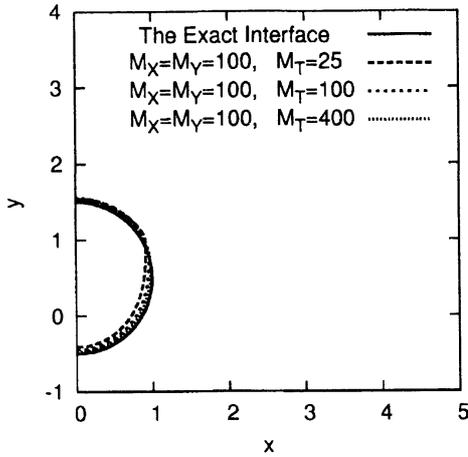


図5 時刻 $t = T$ における真の界面と数値界面.

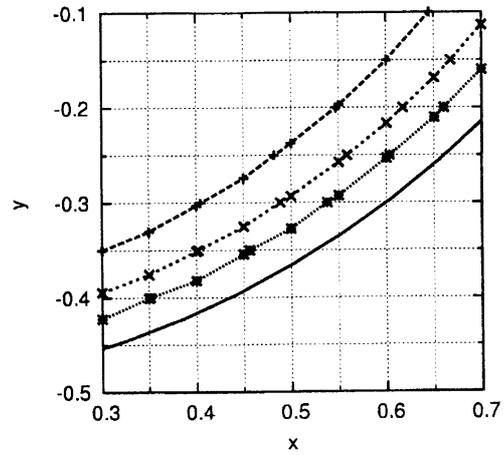


図6 図5の拡大図.

大したものである. 図7は 誤差 E_T, E_I を

$$E_T = \max_{i,j,n} |\phi(z(x_i, y_j, t_n)) - \phi(z_{i,j}^n)|,$$

$$E_I = \max_n (\text{dist}(I(t_n), I^n))$$

と定義して, プロットしたものである. ただし, $z_{i,j}^n$ 等は空間一次元の場合と同様に定義する.

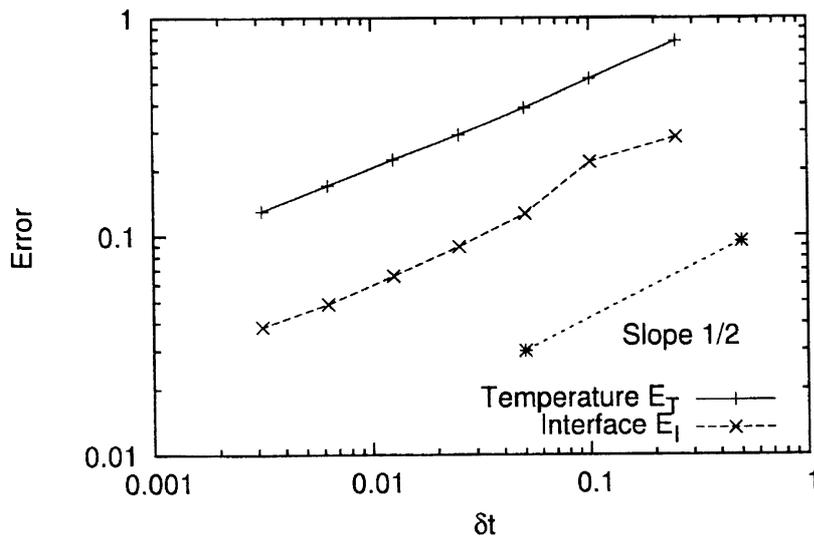


図7 $\delta x = 1/20$ のときの δt と誤差 E_T, E_I との関係.

空間二次元の場合でも空間一次元の場合と同様に収束していることが見て取れる。

4.3 3次元数値シミュレーション

ここでは、 $\Omega = (0, 1)^3$ として、空間三次元での古典的一相 Stefan 問題 ($v \equiv 0$) を取り扱う。数値計算結果は図 8 に示されており、熱流が氷を溶かしている様子が見て取れる。空間の分割は x, y, z 方向共 100 等分割とし、時間ステップは $1/3 \times 10^{-6}$ とし、境界条件は Dirichlet 境界条件 $u|_{\partial\Omega} = 1$ とする。初期状態は図 8 の左上の図に示されている。ここで、水の領域 (物体の外側) では $(u_0(x, y, z), w_0(x, y, z)) = (1, 0)$ を、氷の領域 (物体の内側) では $(u_0(x, y, z), w_0(x, y, z)) = (0, 1)$ を満たしている。

ここで注意しておきたいことは、空間多次元の複雑な形状、振る舞いをするような問題でも簡単に数値計算をすることができることである。空間多次元の問題においても界面の形状を捉えることが可能であり、界面の複雑な形状や位相的な変化も容易に捉えることができる。我々の近似スキームは取り扱いの難しい移動境界問題でも本質的な部分は熱方式が賄っているということを示している。

参考文献

- [1] G. Beckett, J. A. Mackenzie and M. L. Robertson, *A moving mesh finite element method for the solution of two-dimensional Stefan problems*, J. Comp. Phys., 168 (2001), pp. 500–518.
- [2] M. Bertsch, M. H. A. Klaver, *The Stefan problem with mushy regions: continuity of the interface*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh, 112A (1989), pp. 33–52.
- [3] M. Bertsch, P. de Mottoni and L. A. Peletier, *Degenerate diffusion and the Stefan problem*, Nonlinear Analysis TMA, 8, No.11 (1984), pp. 1311–1336.
- [4] J. Crank, *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [5] D. Hilhorst, M. Iida, M. Mimura and H. Ninomiya, *A competition-diffusion system approximation to the classical two-phase Stefan problem*, Japan J. Indust. Appl. Math., 18 (2001), pp. 161–180.
- [6] D. Hilhorst, M. Iida, M. Mimura and H. Ninomiya, *A reaction-diffusion system approximation to the classical two-phase Stefan problem*, Nonlinear

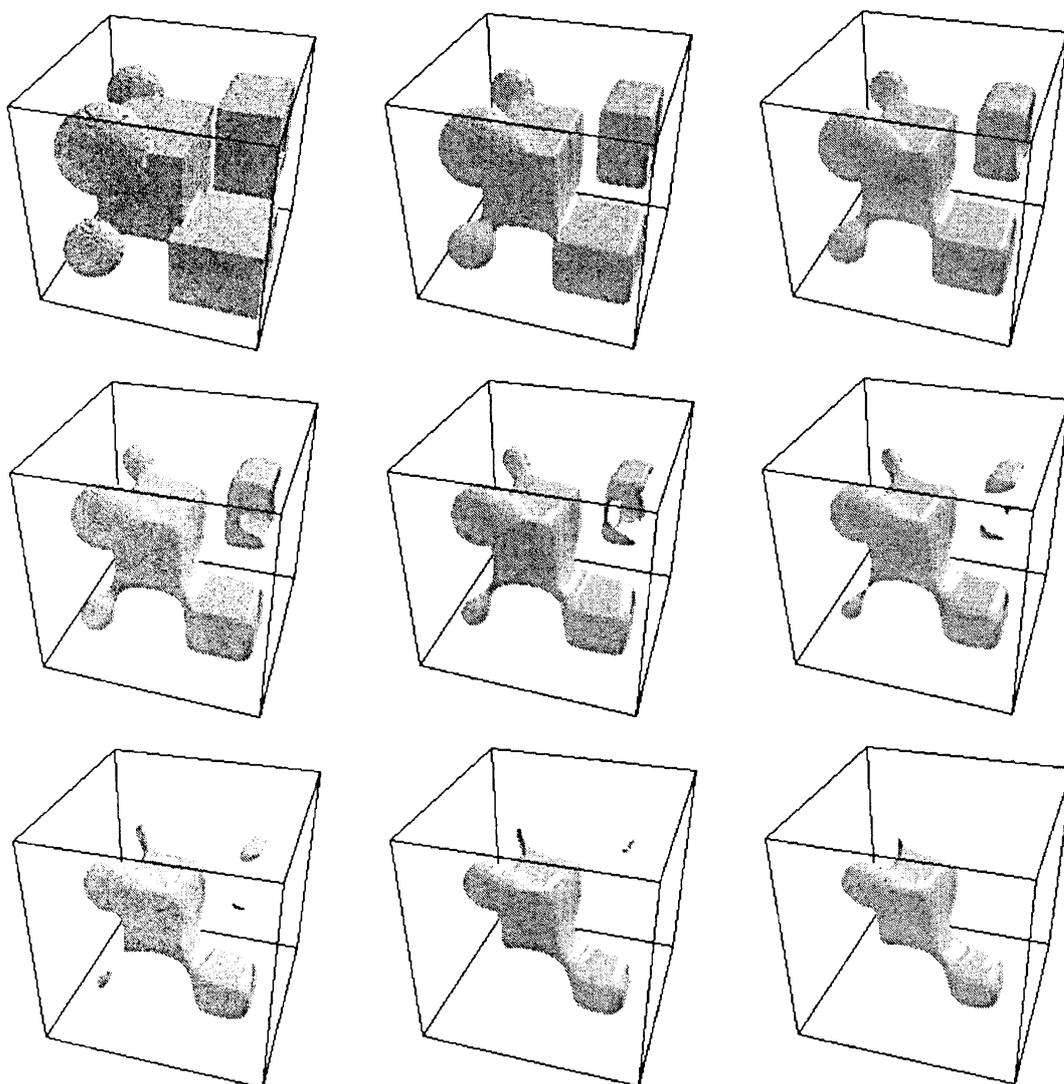


図 8 空間三次元問題における初期状態と数値界面の挙動. 時間は左から右, 上から下へと進んでいる.

Analysis, 47 (2001), pp. 801–812.

- [7] D. Hilhorst, M. Mimura and R. Schätzle, *Vanishing latent heat limit in a Stefan-like problem arising in biology*, *Nonlinear Analysis*, 4 (2003), pp. 261–285.
- [8] R. Ikota, M. Mimura and T. Nakaki, *A methodology for numerical simulations to a singular limit*, preprint.
- [9] B. Merriman, J. K. Bence and S. J. Osher, *Motion of multiple junctions: A*

- level set approach*, J. Comp. Phys., 112 (1994), pp. 334–363.
- [10] A. M. Meirmanov, *The Stefan problem*, Walter de Gruyter, Berlin, 1992.
- [11] H. Murakawa, *A numerical method for Stefan type moving boundary problems (in Japanese)*, MA Thesis, Kyushu University, Japan, (2004).
- [12] H. Murakawa and T. Nakaki, *A singular limit approach to moving boundary problems and its applications*, Theoretical and Applied Mechanics Japan, 52 (2003), pp. 255–260.
- [13] S. J. Ruuth, *A diffusion-generated approach to multiphase motion*, J. Comp. Phys., 145 (1998), pp. 166–192.
- [14] C. Verdi, *Numerical aspects of parabolic free boundary and hysteresis problems*, Lecture Notes in Mathematics, vol. 1584 (1994), pp. 213–284.