数理解析研究所講究録
第 218 巻 1974 年 159-168

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ものを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)

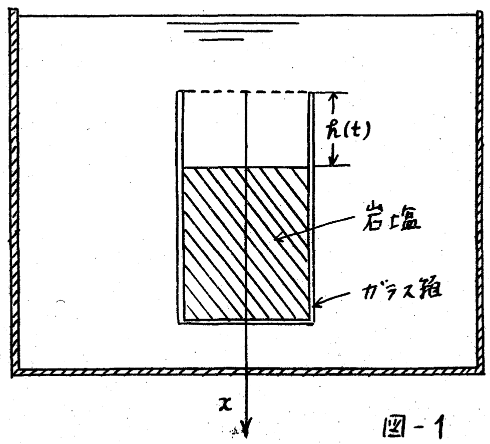

図-1

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ヶの 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った距離

t = 岩塩の融解開始から計った時間

$h(t)$ = 時刻 t までに融けた岩塩の深さ

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

$$
(1.1)\quad
\begin{cases}
\dfrac{\partial n}{\partial t} = k\dfrac{\partial^2 n}{\partial x^2} + (Nv-1)\dfrac{\partial n}{\partial x}\dot{h} \quad (k:\text{正定数}) \\
\qquad\qquad 0 < x < h(t),\quad t>0 \\
n(0,t) = 0,\quad n(h(t),t) = N_1 \\
k\dfrac{\partial n}{\partial x}(h(t),t) = N\cdot(1-N_1 v)\dot{h} \quad ,\ h(0)=0
\end{cases}
$$

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っている。

ステファンは問題 (1.1) の解を，第1式をみたす関数

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

$$(A, \alpha : \text{定数})$$

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

$$(1.3)\qquad \alpha e^{\alpha^2+2\alpha^2\beta}\int_0^\alpha e^{-z^2-2\alpha\beta z}\,dz = \frac{N_1}{2N(1-N_1v)}$$

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

を導き，これを解けばよいとするものである。

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 $h^2(t)/t = 0.3902\ \mathrm{cm^2/day}$ となった。したがって (1.2) 式より $4\alpha^2k = 0.3902$ となる。一方，NaCl 飽和水溶液の比重 1.205 より $N_1v = 0.114$，また $N/N_1 = 2.143/0.319$ を用いれば $Nv = 0.766$，$\beta = -0.234$ となる。このとき (1.3) 式の右辺 $= 0.084$ であり，求まるべき α の値も小さい筈であるから (1.3) の近似式

$$(1.4)\qquad \alpha^2\left[1+\alpha^2\left(\frac{2}{3}+\beta\right)\right] = \frac{N_1}{2N(1-N_1v)}$$

を解いて $\alpha^2 = 0.081$ を得る。これより $k = 1.204\ \mathrm{cm^2/day}$ 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 $u(x,t)$，$h(t)$ を決定することを考える：

$$
(2.1)\quad \begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} = k\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & 0 < x < h(t),\ t > 0 \\
u(0,t) = f(t), & u(y(t), t) = 0 \\
\dot{h}(t) = k v(t), & v(t) \equiv \dfrac{\partial u}{\partial x}(h(t), t),\ h(0) = l \\
u(x, 0) = \varphi(x), & 0 \leq x \leq l
\end{cases}
$$

この系において $l = 0$, $u = (n - N_1)/N(1 - N_1 v)$, $f = -N_1/N(1-N_1 v)$ 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） $f \leq 0$, $\varphi \leq 0$ で, f と φ 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

$$0 \geq \varphi(x) \geq -M(l - x) \qquad (0 \leq x \leq l).$$

（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

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

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いるが，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いる。しかし問題(1.1)の場合この条件はみたされてい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 $(n=1,2,\cdots)$ は自由境界が格子点 (x, t_n) $\left(h_n = x_{J+n} = (J+n)\Delta x,\ t_n = \sum_{p=1}^{n} \tau_n\right)$ 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。

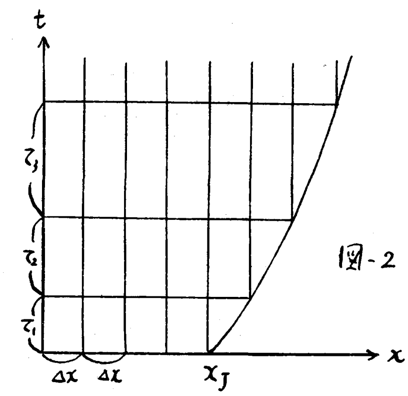

図-2

次のような差分法を考える。

$$(3.1)^{(s)} \begin{cases} \dfrac{u^{(s)}_{j,n} - u_{j,n-1}}{\tau_n^{(s-1)}} \\ = k \dfrac{u^{(s)}_{j+1,n} - 2u^{(s)}_{j,n} + u^{(s)}_{j-1,n}}{\Delta x^2} \end{cases} \quad (0<j<J+n)$$

$$
(3.1)^{(s)}\quad
\begin{cases}
u_{0,n}^{(s)} = f_n, \quad u_{J+n,n}^{(s)} = 0 & s=1,2,\cdots \\
 & n=1,2,\cdots \\
\tau_n^{(s)} = \dfrac{2\Delta x}{k v_n^{(s)} + \sqrt{(k v_n^{(s)})^2 + 4\beta\sqrt{\Delta x}}} & (\beta：正定数) \\
u_{j,0} = \varphi_j &
\end{cases}
$$

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)を省いた系を(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$\{u_{j,n},\ \tau_n\}$に代っている。(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大きさを示すものである。

<u>定理2</u>　i) 適当に大きなβ（$0<t<T$に関して一様にとれる）に対して，$s\to\infty$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回連続的微分可能で，$\varphi(x)$が2回連続的微分可能なら関数$\{u_{j,n},\ h_n\}$（適当につないだもの）は$\Delta x\to 0$のとき一様収束し，その極限関数$\{u(x,t),\ h(t)\}$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：

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

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。 f は1回, φ は2回連続的微分可能.

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

$$
(4.1)^{(s)}\quad \left\{
\begin{array}{l}
\dfrac{u_{j,n}^{(s)} - u_{j,n-1}}{\tau_n} = k_n^{(s-1)}\,\dfrac{u_{j+1,n}^{(s)} - 2u_{j,n}^{(s)} + u_{j-1,n}^{(s)}}{\Delta x^2} \qquad (0 < j < J+n) \\[3ex]
u_{0,n}^{(s)} = f_n, \qquad u_{J+n,n}^{(s)} = 0
\end{array}
\right\}
$$

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

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。

<u>定理3</u> i) 適当に大きなβ（Δx, nに関して一様にとれる）に対して $s\to\infty$ 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) $\Delta x\to 0$ 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

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

が存在する。もし$v(t)$が常に正であれば（このようになるデータ(h, f, φ)を well set なデータという），$\{k_n\}$も連続関数$k(t)$に一様収束し，(u, k)が問題(4.1)の解を与える。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。どんなデーターが well set になるかについては検討中である。

定理の証明は〔3〕をみよ。

§5 数値計算例

i) まず'逆'でない問題を解いた例をあげる。データーは

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

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

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)であった。

ii) 次に逆問題の計算例をあげる。$l, f, \varphi, \Delta x, \beta$ としては i) と同じものを用い、$h(t)$ としては 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)であった。

iii) ところが ii) の結果では例えば

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

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、しかも ii) の

計算での人工項の誤差も加わってくるからである。

しかし h が小さくない範囲では $k_n \fallingdotseq 1.0$ の良好な結果を得ている。

iv) i) ii) の計算をいずれも 100ステップまで実行したときに両者あわせての CPU 時間は、京大大型センターの FACOM 230-75 で 4.6 秒であった。

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. Sem. Japan 6 (1974)