

## 変分不等式によるステファン問題

STEFAN PROBLEMS BY VARIATIONAL INEQUALITIES

菊 池 昇\*・市 川 康 明\*\*

By Noboru KIKUCHI and Yasuaki ICHIKAWA

### 1. 緒 言—ステファン問題について—

本論文では、ステファン問題に対する従来の解法について概観したあと、結氷率 (freezing index) という新しい未知変数によって書かれる変分不等式にステファン問題を変換して解く方法を紹介する。

ステファン問題とは、たとえば、地盤の凍結現象などにみられるように、液体相と固体相が共存し、その境界面が移動する場合の熱伝導、拡散の問題である。一相ステファン問題は、液体相か固体相のいずれか一方の温度が一定であると仮定したステファン問題の特殊ケースで、その取り扱いが一層簡略化される。両方の相が熱伝導・拡散の式に従う場合を、一相ステファン問題と区別するために、二相ステファン問題と名付ける<sup>1)</sup>。

ステファン問題は 1889 年に Stefan<sup>2)</sup> によって提案され、以来多くの数学者によってその解の存在、一意性、正則性などが議論されてきた<sup>3)</sup>。この種の数学的な議論は簡潔な形で、たとえば、山口・野木<sup>4)</sup>によって紹介されている。ステファン問題の困難な点は液体相と固体相の境界をアブリオリに書くことができないことがある。このため、実際に解析的な解を求めるには一次元問題などの数少ない例外を除いてほとんど不可能で、数值解法がもっぱら現実的なものになっている。

ステファン問題の解法には大きく分けて三つの方法があり、それぞれの場合についての数学的基礎付けがほぼ完了している。第一の方法は、直接温度  $\theta(x, t)$  を未知関数として液体相・固体相の境界をステファン条件とよばれる境界上の熱の保存則から求められる条件を使って近似的に追っていく方法である。境界層の位置をあらかじめ予測できれば、残された問題は単純な二つの境界値

問題を解くことだけであることに注意しよう。第二の方法は温度を熱流ポテンシャルという新しい変数に変換し、支配方程式を液体相・固体相とともに含む領域全体について成立する非線形方程式に書き直す方法である。この場合、直接境界層を追っていく方法とは違い、熱流ポテンシャルの正負で液体相・固体相を判定するので境界層がどこで発生するかという心配は無用である。すなわち、相の区別は熱流ポテンシャルが自動的に進行する。第三の方法は、この論文で詳しく議論する変分不等式によるもので、第二方法の基本的な考え方を踏まえている。温度を結氷率という領域全体で定義され空間方向の微分が連続である新しい変数に変換する。相の区別は結氷率の時間微分の正負によってなされ、第二方法と同様に境界層を特別に追求する必要がない。

このような三つの方法についてもう少し詳しく議論を行い、それぞれの特長を述べ数値解析の際の問題点を明らかにしてみよう。

温度  $\theta(x, t)$  を直接未知関数とする 数値解法は大きく 2 つの系統に分類される。簡単な議論するために一次元問題を仮定すると、ステファン問題は、たとえば、

$$c_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \text{ in } (0, a)$$

$$c_2 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \text{ in } (a, 1)$$

$$\theta=0, \lambda \frac{da}{dt} = k_2 \frac{\partial \theta}{\partial x} - k_1 \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad \text{at } x=a$$

(ステファン条件)

$$\theta(0, t) = g_0(t), \theta(1, t) = g_1(t) \quad (\text{境界条件})$$

$$\theta(x, 0) = \theta_0(x) \quad (\text{初期条件})$$

..... (1)

のように表現される。ここでは、移動境界層が  $x=a$  と書かれている。第一系統の解法は、領域  $(0, 1)$  を適当な差分法か有限要素法で分割し、 $n$  回目の時間積分における時間方向の離散化の時間幅  $4t$  を、離散化されたステファン条件

\* 正会員 Ph.D. Science Associate II, The Univ. of Texas at Austin

\*\* M.S. 名古屋大学助手 工学部附属土圧研究施設

$$\left. \begin{array}{l} q^{n-1} = (k_w \delta \theta^{n-1} - k_i \delta \theta^{n-1}) / (\alpha^{n-1}) \\ \text{if } q^{n-1} > 0, \quad \lambda \frac{dx}{dt} = q^{n-1} \\ \text{if } q^{n-1} < 0, \quad \lambda \frac{-dx}{dt} = q^{n-1} \end{array} \right\} \dots\dots\dots (2)$$

から決定する方法である。ここで、 $a^{n-1}$  は  $(n-1)$  回目のステップにおける移動境界層の位置、 $\theta^{n-1}$  は  $(n-1)$  回目のステップにおける温度、 $\delta$  は離散化された  $x$ -方向の微分、 $\Delta x$  は分割幅である。上記の方法で  $n$  回目時間積分の移動層の位置を定めてしまうと、あとは単純な 2 つの境界値問題となるので、問題は解決したことになる<sup>4)</sup>。第二系統の解法は、 $n$  回目の境界層の位置  $a^n$  を、時間幅  $\Delta t$  を与えて、やはりステファン条件から、

$$\lambda \frac{a^n - a^{n-1}}{4t} = q^{n-1} \dots \dots \dots \quad (3)$$

となるように、 $(n-1)$  回目のデータを使って求め、領域  $(0, a^n)$  と  $(a^n, 1)$  を適当に分割して、単純な 2 つの境界値問題に還元する方法である<sup>5)</sup>。第一系統の方法は明らかに一次元問題の場合にのみ適用でき、また、固体相が分離しつつ複数個存在するときは一次元問題でなく解けない。第二系統の方法は、固体相が複数個多次元的に存在しても、境界層の移動が単純であれば、要素分割を自動的にできるので、有限要素解析も可能である<sup>6)</sup>が、移動が複雑になれば適用困難となる。たとえば、境界層が交わったりすると、ほとんど適用不可能である。任意の境界層を追求するためには、液体相・固体相ともに含む領域をあらかじめ要素分割した離散系を使って解く努力が必要である。この一つの試みは、未知変数を温度  $\theta(x, t)$  から熱流ポテンシャル

$$v(x, t) = \int_0^{\theta(x, t)} k(s) ds \quad \dots \dots \dots (4)$$

に変換し、 $\theta(x, t)$  における場の方程式を

という、領域  $(0, 1)$  で定義される非線形方程式に変換する方法である。関数  $a(v)$  は単位体積当たりのエンタルピーに相当し、

$$a(v) = \left\{ \begin{array}{ll} \int_0^\theta c(\theta) d\theta + \lambda & \text{if } \theta > 0, \\ \int_0^\theta c(\theta) d\theta & \text{if } \theta < 0 \end{array} \right\} \dots \dots \dots (6)$$

で定義される。明らかに  $a(v)$  は  $\theta=0$  (境界層を特徴付ける温度値) で不連続となる。正確に述べると,  $v$  は  $a$  の一価関数であるが,  $a$  は  $v$  の一価関数でないので, 式 (5) で,  $\partial a(v)/\partial t = (\partial a/\partial v)(\partial v/\partial t)$  とするとき,  $\partial a/\partial v$  はある  $v$  で無限大となるため, 実際の数値計算には使えない。このため,  $a(v)$  を連続な  $a_e(v)$  で近似して解くことになる。この種の正則化した非線形方程式でステファン問題を解く方法はおもにソ連邦を中心とし

て開発され数学的<sup>7)</sup>にも、数値解析的<sup>8)</sup>にも1960年代の前半に完成している。非線形方程式(5)の $a(v)$ を $a_c(v)$ に置き直し、両相を含む領域(0, 1)を適当に要素分割し(5)を離散化して非線形代数方程式を導き $v$ を求めるとき、その正負の符号で液体相であるか固体相であるかを自動的に決定できるわけである。

非線形方程式に還元する方法の一つの変形として、次の方法がある。さきに述べたように、関数  $a$  は  $v$  に対して一値ではないが、 $v$  は  $a$  に対して一値関数である。したがって、式 (5) を解釈する場合、 $v$  を  $a$  の関数とすると、(5) は、 $a$  についての非線形方程式になる<sup>9)</sup>。すなわち、

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} v(a) \quad \dots \dots \dots \quad (7)$$

適当な離散化ののち、この式を  $a$  について解き  $v(a)$  を求めると、その符号により液体相・固体相を分離できる。この種の解法の数学的な解析<sup>10)</sup>、および有限要素法による数学的な解析<sup>11)</sup>は、フランスを中心として行われているが、ソ連邦でも早くから数値解法の一つとして提案されていた<sup>9)</sup>。

第三の方法として、この論文で詳しく議論する変分不等式による解法がある。変分不等式の理論は、1963年に弾性論における接触問題に対する解として Fichera<sup>12)</sup>が、膜の障害物問題（obstacle problem）の解法として 1964 年に Stampacchia<sup>13)</sup> が独立的に導き、Lions-Stampacchia<sup>14)</sup> によって体系づけられ、従来の変分法の拡張として位置づけられた。理論の発生そのものが、力学上の問題、特に境界が明示されない自由表面問題からであったために、その後の発展も力学問題とともになされ、これらの成果が Duvaut-Lions<sup>15)</sup> にまとめられている。変分不等式のステファン問題への応用は、Duvaut<sup>16)</sup> によって一相問題に、また、Duvaut<sup>17)</sup>、Fremond<sup>18)</sup> らによって二相問題になされているが、数値解法および応用について多くは語られていない。

変分不等式による定式化では、温度  $\theta(x, t)$  を結氷率 (Freezing Index) とよばれるものに変換し、 $\theta(x, t)$  による支配方程式系を結氷率によるものに書き直す。このとき、興味深いことは、結氷率の空間方向の勾配が液体相・固体相の中のみならず、境界層上でも連続になるため両相を含んだ全体領域で問題を定式化できることである。一相ステファン問題の場合、温度は非負値もしくは非正値の一方であるために、結氷率は非負値もしくは非正値である拘束を受けるが、この拘束条件が液体相と固体相とを自動的に分離する役目を果たす。二相ステファン問題では支配方程式そのものが結氷率の時間微分の正負に従属する非線形方程式になるので、一相問題よりはその取り扱いが複雑になる。いずれにせよ、相の分離は

変分不等式を解く際に自動的に行われる。この特長は、前述した第二の方法、熱流ポテンシャルを使って解く場合と同種のもので、これら二つの方法の相似性を示している。結氷率によって変分不等式を導く方法と、熱流ポテンシャルによって非線形方程式を導く方法の本質的な相違についてまだ十分には明らかにされていないが、一相問題に限って二つの方法は同値であることが証明されている。数値解析の観点から経験的にいえることは、一相問題に関して結氷率による方法がより扱いやすいことである。というのは、熱流ポテンシャルの方法で解く場合、一相問題は二相問題の極限として扱われるため、結氷率による方法では、物性定数が場所による関数であれ式の形そのものは線形になっているので数値解の安定・収束性などの議論が単純になる。二相問題に関しては結氷率による定式化の際、物性定数が場所によらないものという仮定を使うので応用上制限が加えられる。さらに非線形性が結氷率の時間微分によるので、熱流ポテンシャルの値そのものが非線形性を決定する第二の方法よりも数値解析のスキームの反応が鈍い。このことは計算過程で時間微分を計算する手間とそこに入ってくる誤差を意味する。とはいっても、結氷率による方法はまだ発展途上にあるのでこれから展開に期待がもてるこども確かである。

## 2. 一相ステファン問題

ここでは、単純化のために2次元領域における土の凍結問題を考え、凍結前の領域は常に $0^{\circ}\text{C}$ の水と土で構成されているとする。したがって、熱伝導・拡散の式は水と土の混合領域にのみ適用すればよい。温度を $\theta(x, t)$ 、比熱を $c(x)$ 、熱伝導率を $k(x)$ 、潜熱を $\lambda$ 、境界層の式を $t=S(x)$ 、とすると、この種の一相問題は、

$$\left. \begin{array}{l} c \frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla \theta) \text{ in } \Omega, \quad \theta = 0 \text{ in } D - \bar{\Omega} \\ \theta(x, t) = g(t) \text{ on } \Gamma_G, \\ \frac{\partial \theta}{\partial n} + \alpha(\theta - r) = 0 \text{ on } \Gamma_F \cap \bar{\Omega} \\ \theta(x, t) = 0 \text{ and } k \nabla \theta \cdot \nabla S(x, t) = \lambda \text{ on } t = S(x) \\ \theta(x, 0) = \theta_0(x) \text{ in } D \end{array} \right\} \quad (8)$$

と表わされる。関数 $\alpha(x)$ と $r(x)$ は適当に与えられ、 $g(t)$ は温度による境界条件で $g(t) < 0$ が仮定されている。領域 $D$ は凍結部分および不凍結部分両方を包含する全体領域で、 $\Omega$ は凍結部分を示す。初期値 $\theta_0(x)$ は非正の関数で、 $\theta_0(x) < 0$ の部分を $\Omega_0$ と置く。

さて上記の問題を変分不等式で表現するために、結氷率<sup>19)</sup>(Freezing Index<sup>18)</sup>) $u(x, t)$ を次のように定義し

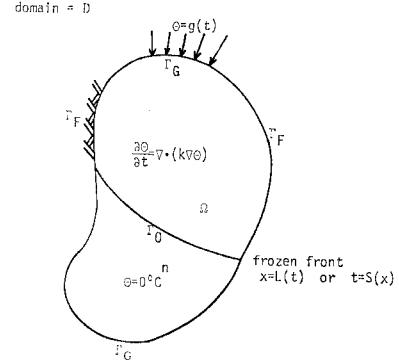


Fig. 1 One-phase Stefan model

よう。

$$u(x, t) = \int_{S(x)}^t \theta(x, \tau) d\tau, \quad x \in D \quad \dots \dots \dots (9)$$

領域 $\Omega_0$ では $S(x)$ は、画一的に零であると定めると、

$$\nabla u(x, t) = \int_{S(x)}^t \nabla \theta(x, \tau) d\tau, \quad x \in D \quad \dots \dots \dots (10)$$

もし領域 $D$ 上で $\theta$ が連続かつ $\nabla \theta$ がほとんど至るところで(a.e.と略記する)有界であれば、 $u$ および $\nabla u$ は領域全体 $D$ 上で連続になる。したがって、 $\nabla \theta$ が不連続となる境界層 $t = S(x)$ 上でも $\nabla u$ は連続になる。式(10)の両辺に $k(x)$ を乗じて、勾配をとると、

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (k \nabla u) &= \nabla \cdot \int_{S(x)}^t k(x) \nabla \theta(x, \tau) d\tau \\ &= \int_{S(x)}^t \nabla \cdot (k \nabla \theta) d\tau \\ &\quad - k(x) \nabla \theta(x, t) \cdot \nabla S(x)|_{t=S(x)} \\ &= \int_{S(x)}^t \nabla \cdot (k \nabla \theta) d\tau - \begin{cases} 0 & \text{if } x \in \Omega_0 \\ \lambda & \text{if } x \in \Omega - \Omega_0 \end{cases} \end{aligned} \quad (11)$$

支配方程式(8)から、領域 $\Omega$ 上では、

$$\begin{aligned} \int_{S(x)}^t \nabla \cdot (k \nabla \theta) d\tau &= \int_{S(x)}^t c(x) \frac{\partial \theta}{\partial \tau}(x, \tau) d\tau \\ &= c(x) \theta(x, t) - c(x) \theta(x, S(x)) \\ &= c \frac{\partial u}{\partial t} - \begin{cases} c \theta_0 & \text{in } \Omega_0 \\ 0 & \text{in } \Omega - \Omega_0 \end{cases} \end{aligned}$$

したがって、

$$\left. \begin{array}{l} c \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla u) + c \theta_0 \text{ in } \Omega_0 \\ c \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla u) + \lambda \text{ in } \Omega - \Omega_0 \end{array} \right\} \quad (12)$$

領域 $D - \Omega$ では、画一的に $\theta = 0$ であるから、

$$u = 0 \text{ in } D - \Omega \quad \dots \dots \dots (13)$$

が満たされている。一方、凍結した部分では、温度が零度以下になるので、結氷率の定義(9)から、領域 $\Omega$ 上で、

$$u(x) < 0 \text{ in } \Omega \quad \dots \dots \dots (13)'$$

の不等式が満たさなければならぬ。以上の議論

をまとめると,

$$\left. \begin{array}{l} u\left(c(x)\frac{\partial u}{\partial t}-\nabla \cdot (k(x)\nabla u)-f(x)\right)=0 \\ c(x)\frac{\partial u}{\partial t}-\nabla \cdot (k(x)\nabla u)-f(x) \leq 0 \text{ in } x \in D \\ u \leq 0 \end{array} \right\} \quad (14)$$

となる. ここで関数  $f(x)$  は,

$$f(x)=\begin{cases} c\theta_0 & \text{in } \Omega_0 \\ \lambda & \text{in } D-\Omega_0 \end{cases} \quad (15)$$

と定義される.

次に境界条件の変換を行う. 一相問題を取り扱っているので,  $g(t) < 0$  をアприオリに仮定した. このことから境界  $\Gamma_G$  は常に領域  $\Omega$  の境界の一部分になるため,  $\Gamma_G$  上の結氷率は,

$$u(x, t)=\int_0^t g(\tau) d\tau=G(t) \text{ on } \Gamma_G \quad (16)$$

となる. 境界  $\Gamma_F$  上での第三種境界条件は  $\Gamma_F \cap \bar{\Omega}$  で, 両辺を  $S(x)$  から  $t$  までの時間について積分すると,

$$\begin{aligned} & \int_{S(x)}^t k(x) \frac{\partial \theta}{\partial n}(\tau) d\tau \\ & + \int_{S(x)}^t \alpha(\theta(x, \tau)-\gamma) d\tau=0 \end{aligned}$$

関数  $k, \alpha, \gamma$  は時間に関して独立であるから,

$$k(x) \frac{\partial u}{\partial n}(x, t)+\alpha u(x, t)-\alpha \gamma(t-S(x))=0$$

一般に,  $S(x)$  は未知関数であるため, 項  $\alpha \gamma(t-S(x))$  は, すべての境界層に関する直接的な情報を消し去るという変分不等式の定式化の目的には不適合である. この問題を解消するため, 次の仮定を設ける.

$$\alpha(x) \gamma(x)=0 \text{ on } \Gamma_F \cap (\bar{D}-\bar{\Omega}_0) \quad (17)$$

したがって,  $\Gamma_F \cap \bar{\Omega}$  上の境界条件は,

$$k(x) \frac{\partial u}{\partial n}+\alpha(x)(u-\gamma(x)t)=0$$

となる. 領域  $D-\Omega$  で結氷率は零であるので, その境界でも零である. 上の議論をまとめると, 系 (14) と同じように境界  $\Gamma_F$  上でも, 条件

$$\alpha(x) \gamma(x) \geq 0 \text{ on } \Gamma_F \quad (18)$$

を満たしていると仮定すると,

$$\left. \begin{array}{l} u\left(k(x)\frac{\partial u}{\partial n}+\alpha(x)(u-\gamma(x)t)\right)=0 \\ k(x) \frac{\partial u}{\partial n}+\alpha(x)(u-\gamma(x)t) \leq 0 \text{ on } \Gamma_F \\ u \leq 0 \end{array} \right\} \quad (19)$$

初期条件は, 結氷率の定義から明らかに,

$$u(x, 0)=0 \text{ in } D \quad (20)$$

である.

### 3. 変分不等式による定式化

前節では, 温度で表現されている一相ステファン問題を, 結氷率  $u(x, t)$  を使って書き改めた. ここでは, その変分法による定式化を考えよう. 関数  $u(x, t)$  を (14), (16), (19), (20) の解とし,  $v(x, t)$  を (16) および  $v(x, t) \leq 0$  を満たす任意関数とする. このとき,

$$\begin{aligned} & \int_D \left\{ c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) - f \right\} dx \\ & = \int_D \left\{ c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) \right\} (v-u) dx \\ & + \int_{\Gamma} k \nabla u \cdot n (v-u) ds \\ & \geq \int_D f(v-u) dx - \int_{\Gamma_F} \alpha(u-\gamma t)(v-u) ds \end{aligned}$$

が成立する. ここで,

$$\begin{aligned} & \left( c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) - f \right) v \geq 0, \\ & \left( c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) - f \right) u=0 \end{aligned}$$

などの関係を使つた.

$$\left. \begin{array}{l} (u, v)=\int_D u v dx \\ a(u, v)=\int_D k \nabla u \cdot \nabla v dx+\int_{\Gamma_F} \alpha u v ds \\ L(v)=\int_D f v dx+\int_{\Gamma_F} \alpha \gamma t v ds \end{array} \right\} \quad (21)$$

と定義すると, 上の不等式は,

$$\begin{aligned} u \leq 0 : & \left( c \frac{\partial u}{\partial t}, v-u \right) + a(u, v-u) \\ & \geq L(v-u), \quad v-u \leq 0 \end{aligned} \quad (22)$$

と書かれる. これを, 一相ステファン問題 ((14), (16), (19), (20)) の変分不等式といふ. 一般に不等式 (22) を満たす解を一相ステファン問題の弱解とよぶ. 弱解が一般化された意味でもともとのステファン問題の解になることを数学的に正確に記述するためには, トレース (Trace) 定理などの微分方程式論の概念を必要とする. このため, ここでは直感的に説明するにとどめる. 不等式 (22) で  $v=u+\phi$ ,  $\phi \in C_0^\infty(D)$ ,  $\phi \leq 0$ , とおくと,

$$\left( c \frac{\partial u}{\partial t}, \phi \right) + a(u, \phi) - L(\phi) \geq 0$$

が成り立つ.  $\phi=0$  on  $\Gamma$  に注意して部分積分し,  $\phi \leq 0$  が任意である条件を使うと,

$$c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) - f \leq 0 \text{ in } D$$

が求まる. さらに (22) で  $v=u+\phi$ ,  $\phi=0$  in  $D$ ,  $\phi \in C_0^\infty(\Gamma_F)$ ,  $\phi \leq 0$  on  $\Gamma_F$ ,  $\phi=0$  on  $\Gamma_G$ , とすると, 部分積分より,



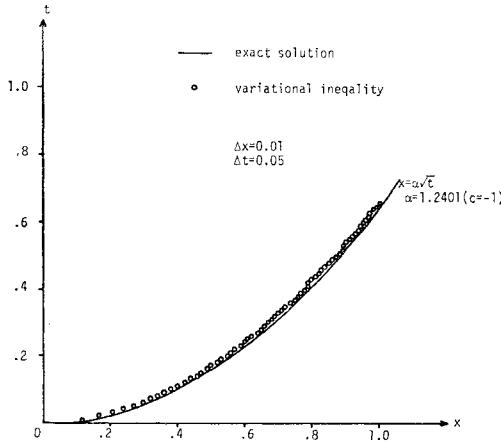


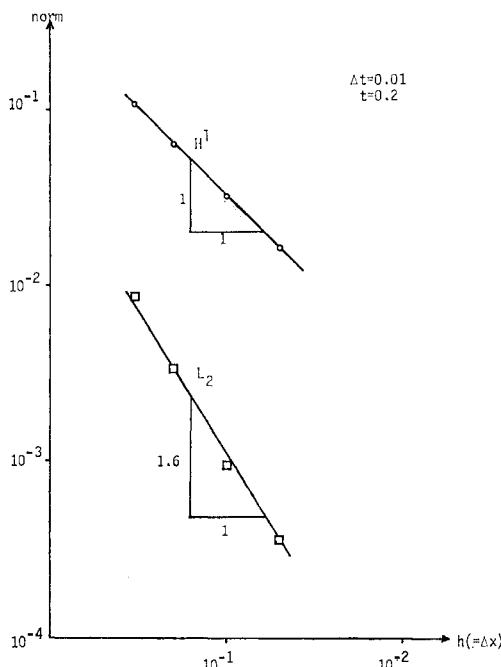
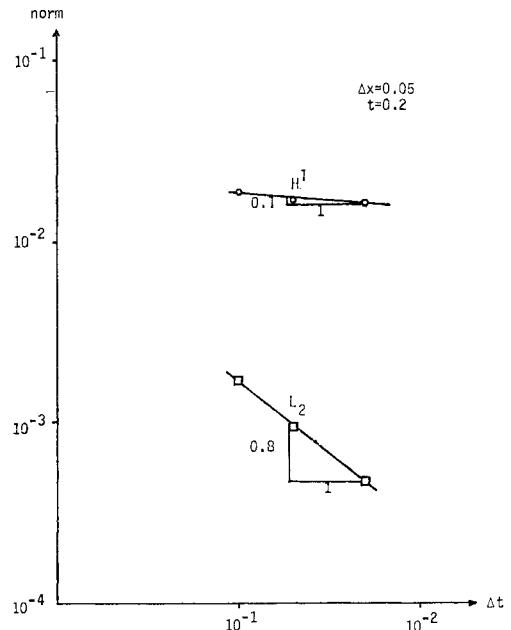
Fig. 2 Front propagation in one dimensional case

を区間  $(0, 1)$  に取り、100 個の等分割要素に分割し、各要素では線形の座標関数を使用する。質量マトリックスは適合のものとして、時間幅  $\Delta t=0.05$  で計算すると Fig. 2 に示す結果を得る。図から明らかのように、数值解と解析解はよく合致している。

(例題 1) で解いた問題に対して、有限要素法の誤差解析を線形の要素の場合について実行した。理論的には Johnson<sup>23)</sup> および Ichikawa<sup>20)</sup> などにみられるように、

$$\max_n \|e^n\|_0^2 + c_1 \|e^{n+1}\|_1^2 \Delta t \leq c_2 (h^2 + \Delta t^2) \dots \dots (31)$$

と求められる。 $c_1$  と  $c_2$  は適当な正定数、 $n$  は時間積分のステップ数、 $h$  は要素幅、 $\Delta t$  は時間幅、 $\|\cdot\|_0$  は  $L^2$ -

Fig. 3 Estimates for  $h(=\Delta x)$  (linear elements)Fig. 4 Estimates for  $\Delta t$  (linear elements)

ノルム、 $\|\cdot\|_0$  は  $H^1$ -ノルム、 $e^n = u_{\text{exact}}^n - u_{\text{numerical}}^n$  である。評価式 (31) は、要素に対しては  $H^1$ -ノルムで  $O(h)$ 、時間に対しては  $L^2$ -ノルムでほぼ  $O(\Delta t)$  の誤差をもつことを示す。数値解析の実際例を Fig. 3, 4 に示す。図から、解析理論 (31) の正確さを読むことができる。

一次元問題を解くことによって、変分不等式による定式化が意味をもつことを理解したので、次は二次元問題を考えよう。ここで注意したいことは、変分不等式の定式化で、まったく一次元という有利点を使っていないので、多次元問題に対しても一次元問題の解法そのものが適用されることである。

(例題 2) 二次元の領域  $D=(0, 1) \times (0, 1)$  を考え、 $c=k=1.0$ 、 $\lambda=0.1$  の物性定数を考える。領域が正方形である長所を使って 5 点差分法で離散化する。Fig. 5 に示す結果は、 $\Delta x=\Delta y=0.02$ 、 $\Delta t=0.0025$ 、の離散パラメーターを使い、境界条件

$$\begin{aligned} \theta(x, 0) &= -x^3 - 0.1 \\ \theta(x, 1) &= -(x-0.5)^2 - 0.1 \\ \theta(0, y) &= -0.25 y - 0.1 \\ \theta(1, y) &= 0.75 x - 1.1 \end{aligned}$$

初期条件

$$\theta(x, y) = 0$$

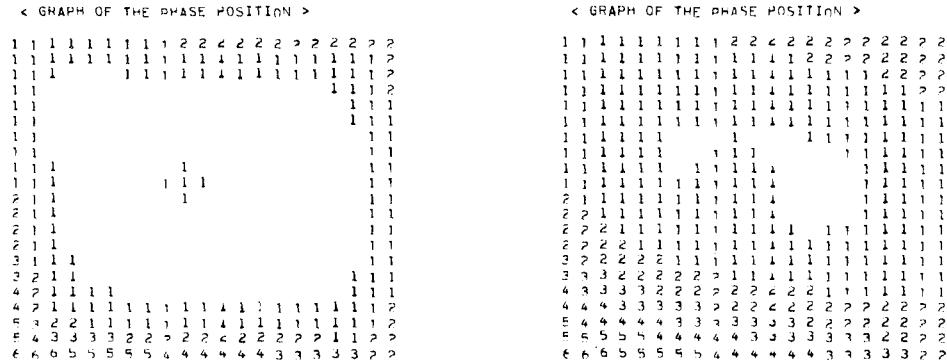
および内部条件

$$\theta(0.5, 0.5) = -0.1$$

の場合である。射影付き S.O.R. 法の収束の判定は反復における相対誤差が  $10^{-4}$  以下になったか否かで行われ

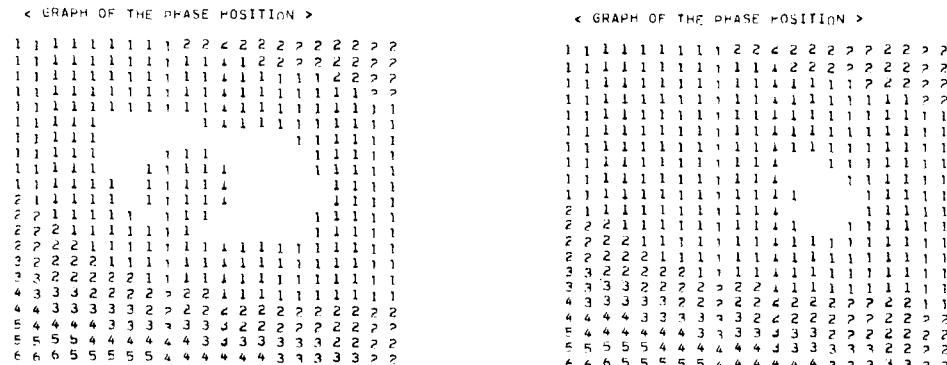
..... RESULT AT TIME= 5.000E-03.....

..... RESULT AT TIME= 3.000E-02.....



..... RESULT AT TIME= 2.500E-02 .....

..... RESULT AT TIME= 3.500E-02.....



**Fig. 5** Results for the One-Phase Stefan Problem by V.I.

た. Fig. 5 (a), (b) に打ち出した数字  $n$  は氷の温度を示すもので、

の関係がある。図の空白は水の部分を示す。

(例題 3) 有限要素法を用いて(例題 2)と同様な問題を解くが、興味点は、質量マトリックスをランピング(lumping)するか否かの場合の違いについてである。領域は  $D=(0, 10) \times (0, 10)$  の正方形で  $k = c = 4x = 4y = l = 1.0$ ,  $4t = 0.5$  を取り時間差分は陰

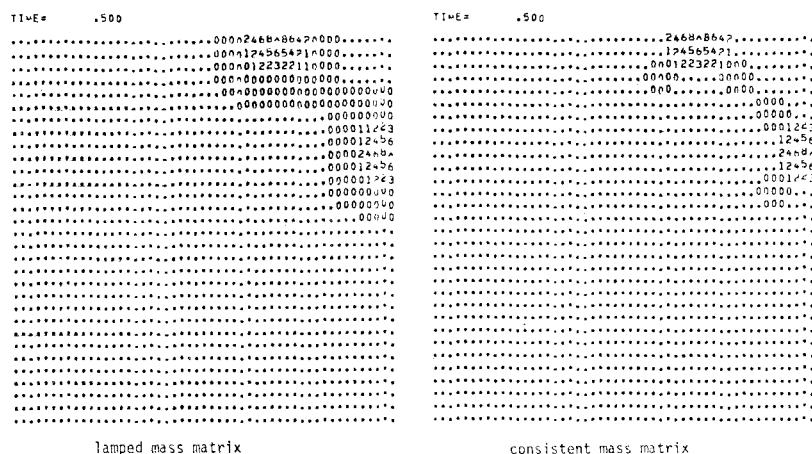
公式を使って計算する。境界条件は、

$$\theta(0.75, 10) = \theta(10, 0.75) = -1.0$$

で他の部分は  $\partial\theta/\partial n=0$  と置いた。Fig. 6 の打ち出しの数字は温度の 10 倍に相当し、卓の部分は水である。

結果からわかるように、有限要素法の場合質量マトリック

クスはランプ化した方が妥当である。



**Fig. 6** Comparison of the Lumped and Consistent Mass Matrix for V.I. by Finite Element Methods

## 6 二相フローファン問題

これまでの一相問題に対する議論を二相ステファンに



であるから、

$$\left. \begin{aligned} & \frac{c_i}{k_i} \frac{\partial u}{\partial t} \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) \leq f(v) - f\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right), \quad \forall \epsilon D \\ & f(v) = \frac{1}{2} \frac{c_1}{k_1} (v^-)^2 + \frac{1}{2} \frac{c_2}{k_2} (v^+)^2 \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

が成り立つ。同様に、 $-\epsilon_{ij}\lambda$  は、

$$-\epsilon_{ij}\lambda = H\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)\lambda, \quad -\epsilon_{ij}\lambda = -H\left(-\frac{\partial u}{\partial t}\right)\lambda$$

と書けるので、

$$\left. \begin{aligned} & -\epsilon_{ii}\lambda \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) = H\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)\lambda \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) \\ & \leq \lambda \left( v^+ - \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^+ \right) \\ & -\epsilon_{iz}\lambda \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) = -H\left(-\frac{\partial u}{\partial t}\right)\lambda \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) \\ & \leq \lambda \left( -v^- + \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^- \right) \end{aligned} \right\} \quad (47)$$

が導かれる。次に境界  $\Gamma_F$  上の条件について考えよう。関係式 (44) を適用するために次の仮定を  $\Gamma_F$  上の境界条件を付加する。

境界  $\Gamma_F$  は 3 つの部分  $\Gamma_{F1}$ ,  $\Gamma_{F2}$ ,  $\Gamma_{F3}$  に分けることができ、 $\Gamma_{F1}$  は常に固体相の境界、 $\Gamma_{F2}$  は常に液体相の境界、 $\Gamma_{F3}$  は固体相・液体相の区別をあらかじめできない境界で、境界条件は

$$\left. \begin{aligned} & k_1 \frac{\partial \theta}{\partial n} + \alpha_1(\theta - r_1) = 0 \quad \text{on } \Gamma_{F1} \\ & k_2 \frac{\partial \theta}{\partial n} + \alpha_2(\theta - r_2) = 0 \quad \text{on } \Gamma_{F2} \\ & \frac{\partial \theta}{\partial n} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{F3} \end{aligned} \right\}$$

と表現される。

$$(48)$$

このとき、(48) は、

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial u}{\partial n} + \frac{\alpha_1}{k_1} u - \alpha_1 r_1 t = 0 \quad \text{on } \Gamma_{F1} \\ & \frac{\partial u}{\partial n} + \frac{\alpha_2}{k_2} u - \alpha_2 r_2 t = 0 \quad \text{on } \Gamma_{F2} \\ & \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{on } \Gamma_{F3} \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

と書かれる。

さて以上の議論を踏まえて二相ステファン問題の変分式を求めよう。 $v$  を境界  $\Gamma_G$  上で  $v = \partial g / \partial t$  を満たす任意の関数とすると、部分積分と式 (38) から、

$$\begin{aligned} & \int_D \left\{ \frac{c_i}{k_i} \frac{\partial u}{\partial t} \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) + \nabla u \cdot \nabla \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) \right\} dx \\ & = \int_D \left\{ \epsilon_{ij}\lambda \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) + c_j \theta_0 \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) \right\} dx \end{aligned}$$

$$+ \int_{\Gamma_F} \frac{\partial u}{\partial n} \left( v - \frac{\partial u}{\partial t} \right) ds \quad (50)$$

が得られる。

$$\begin{aligned} a(u, v) &= \int_D \nabla u \cdot \nabla v dx + \int_{\Gamma_{F1}} \frac{\alpha_1}{k_1} uv ds \\ & + \int_{\Gamma_{F2}} \frac{\alpha_2}{k_2} uv ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L(v) &= \int_{D_i(0)} c_1 \theta_0 v dx + \int_{D_i(0)} c_2 \theta_0 v dx \\ & + \int_{\Gamma_{F1}} \alpha_1 r_1 t v ds + \int_{\Gamma_{F2}} \alpha_2 r_2 t v ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F(v) &= \int_D f(v) dx + \int_{D_i(0)} \lambda v^+ dx \\ & - \int_{D_i(0)} \lambda v^- dx \end{aligned}$$

と置き、積分式 (50) に、(46), (47), (49) を代入すると変分不等式

$$\begin{aligned} F(v) - F\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) + a\left(u, v - \frac{\partial u}{\partial t}\right) \\ \geq L\left(v - \frac{\partial u}{\partial t}\right) \end{aligned} \quad (51)$$

が得られる。ここで、 $u = \hat{g}$  on  $\Gamma_G$  はあらかじめ仮定され、初期条件 (42) とともに、(51) は二相ステファン問題の変分式を形成する。

## 8. 正則化した二相ステファン問題

前節では、6. で導いた結氷率による式に対する変分式を求めたが、一般に、直接不等式 (51) を解くことは適当でない。これは、汎関数  $F(\cdot)$  が普通の意味で微分できない項、 $\phi^+$ ,  $\phi^-$  などで形成されているためで、変分不等式 (51) を解くには、 $F(\cdot)$  を微分可能な近似汎関数に置き換える必要がある。正数  $\epsilon$  を任意のパラメーターとし、「 $F_\epsilon(v) \rightarrow F(v)$  as  $\epsilon \rightarrow 0$ 」が期待できるように、 $v^+$  と  $v^-$  を近似する。すなわち、

$$v_\epsilon^+ = \begin{cases} v - \frac{\epsilon}{2} & \text{if } v \geq \epsilon \\ \frac{1}{2\epsilon} v^2 & \text{if } 0 \leq v \leq \epsilon \\ 0 & \text{if } v \leq 0 \end{cases} \quad (52)$$

$$v_\epsilon^- = \begin{cases} 0 & \text{if } v \geq 0 \\ -\frac{1}{2\epsilon} v^2 & \text{if } -\epsilon \leq v \leq 0 \\ -v + \frac{\epsilon}{2} & \text{if } v \leq -\epsilon \end{cases} \quad (53)$$

とすると、汎関数

$$\begin{aligned} F_\epsilon(v) &= \int_D f(v) dx + \int_{D_i(0)} \lambda v_\epsilon^+ dx \\ & - \int_{D_i(0)} \lambda v_\epsilon^- dx \end{aligned}$$

は  $F(v)$  に収束する 微分可能な ものになる. したがって, 変分不等式

$$F_\epsilon(v) - F_\epsilon\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) + a\left(u, v - \frac{\partial u}{\partial t}\right) \geq L\left(v - \frac{\partial u}{\partial t}\right) \dots \dots \dots \quad (54)$$

が (51) の変わりに実際は解かれることになる.

一方、上記の正則化によって、支配方程式 (38) は、

$$\begin{aligned} & \left( \frac{c_1}{k_1} + \frac{\lambda}{\varepsilon} \right) \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \nabla u = c_2 \theta_0 \quad \text{if } x \in D_2(0) \\ & \quad \text{and } -\varepsilon \leq \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \leq 0 \\ & \left( \frac{c_2}{k_2} + \frac{\lambda}{\varepsilon} \right) \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \nabla u = c_1 \theta_0 \quad \text{if } x \in D_1(0) \\ & \quad \text{and } 0 \leq \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \leq \varepsilon \\ & \frac{c_i}{k_i} \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \nabla u - \epsilon_{ij} \lambda = c_j \theta_0 \quad \text{if otherwise} \end{aligned}$$

のように近似されることになる.

変分不等式 (54) の離散化は一相ステファンの場合に準じて行い、解法は再び S.O.R. 法を用いればよい。不等式 (54) における  $v$  は任意であるので、この場合一相問題とは異なり射影を取る必要はないが、 $F_v$  の近似が  $\partial u / \partial t$  の値によるので、その判断を各反復段階で行う必要がある。

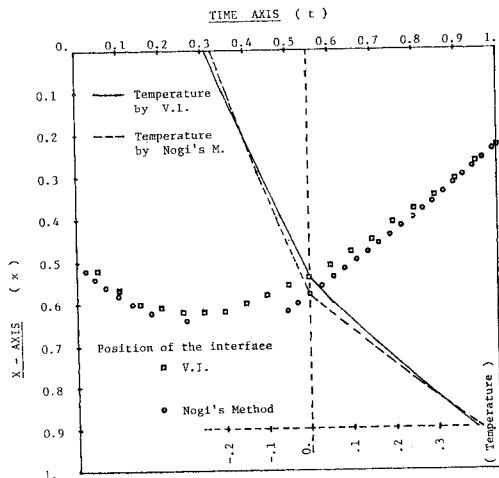
## 9. 二相問題の数値解析例

一相ステファン問題の変分不等式は、潜熱  $\lambda$  がどのように大きな値であれ、反復計算は常に収束するが、二相問題の場合には、 $\lambda$  をまったく任意にとることはできない。これは式 (55) からも理解できるように、方程式そのものが非線形になり、 $\lambda$  が含まれる項も  $\partial u / \partial t$  の値に従属することによっている。このため、離散化の際、そのモデルが適合するか否かを、要素サイズ  $\Delta x$  と時間幅  $4t$  の中に、

の関係が成立しているか否かで決める。ここで、「 $\langle \rangle$ 」の意味は「十分に大きい」ということで、 $0(\cdot)$ は、 $\cdot$ のオーダーを示す。判断基準(56)は、変分不等式(54)を S.O.R. 法で解く場合の反復計算で、 $\lambda e_{ij}$  の項が他の項に比べて十分小さくなるために要求される条件である。

(例題 4) 領域  $D = (0, 1)$  を 50 等分し、線形の有限要素法を考える。時間幅  $\Delta t = 0.05$  とし、陰公式で時間方向を離散化し、 $c_1 = 0.5$ 、 $k_1 = c_2 = k_2 = \lambda = 1$  を仮定する。境界条件を、

$$\theta(0, t) = 0.5(t-1), \quad \theta(1, t) = t$$



**Fig. 7** Propagation of the interface

初期条件を、

$$\theta(x, 0) = -0.5 + x \text{ if } x \leq 0.5,$$

と与えて、変分不等式 (54) を解くと、氷と水の境界層は Fig. 7 に示す軌跡をたどる。

図で Nogi の方法と述べてあるのは、1. で解説した直接法の第一系統の方法のことである。この方法の特長は要素幅によって境界層発展の turning point 付近で  $\Delta t$  はかなり大きくなるとともに、値そのものも大きく変わることである。一方、変分不等式による解法では、氷の最大深さが Nogi の方法によるものと比べて小さく計算されている。

(例題 5) 二次元領域  $D=(0, 1) \times (0, 1)$  を考えよう. 領域が正方形である長所を生かして 5 点差分法で離散化を行い, 時間積分は陰公式による. メッシュ幅を  $\Delta x = \Delta y = 0.05$ , 時間幅を  $\Delta t = 0.0025$  として, 境界条件を,

$$\begin{aligned}\theta(x, 0) &= -x^3 - 0.1, \\ \theta(x, 1) &= -(x - 0.5)^2 - 0.1 \\ \theta(0, y) &= -0.25y - 0.1, \\ \theta(1, y) &= 0.75y - 1.1\end{aligned}$$

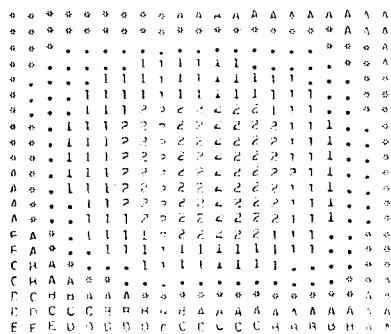
初期条件を、

$$\theta_0(x, y) \equiv 10 x(x-1) y(y-1)$$

と定める。物性定数を  $c_1=0.5$ ,  $c_2=k_1=k_2=1.0$ ,  $\lambda=0.1$  とて  $t=0.0075$  の状態を Fig. 8(a) に示す。図の数字は正の温度値を示すもので、数字  $N$  は温度が  $0.2 < \theta < 0.2(N+1)$  の範囲にあることを示し、アルファベットは負の温度値を正の温度値と同様に示している。図の「\*」は  $-0.2^\circ\text{C}$  以上の氷を、「・」は  $0.2^\circ\text{C}$  以下の水を意味する。

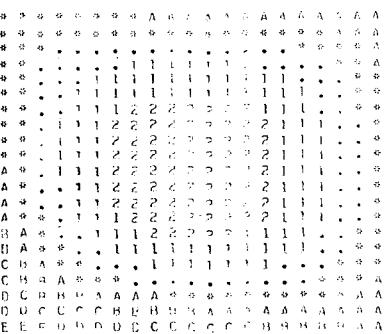
**Fig. 8 (b)** の温度分布図は、1. で議論した熱流ポンシャルを使う第二方法による数値計算の結果である。

&lt; GRAPH OF THE PHASE POSITION &gt;



(a) Result by the Freezing Index

&lt; GRAPH OF THE PHASE POSITION &gt;



(b) Result by the Heat Potential

Fig. 8 Results at  $t=0.0075$  of the Two-Phase Stefan Problem by the Methods of the Freezing Index and Heat Potential

すなわち非線形方程式(5)の二次元についての場合を解いた結果で、結氷率によるもの(Fig. 8(a))とほとんど同じである。結氷率による方の氷の進展具合がわずかに熱流ポテンシャルによるものよりも遅いことを除けば、温度分布状況はまったく同じであるといってよい。

(例題 6) 二次元領域  $D=(0, 0.4) \times (0, 0.4)$  を(例題 5)と同じ物性定数で計算してみよう。この場合、メッシュ幅を  $\Delta x = \Delta y = 0.02$ , 時間幅を  $\Delta t = 0.05$  に取って境界条件を、

$$\theta(x, 0) = 0.5\sqrt{x}(1 - 3t)$$

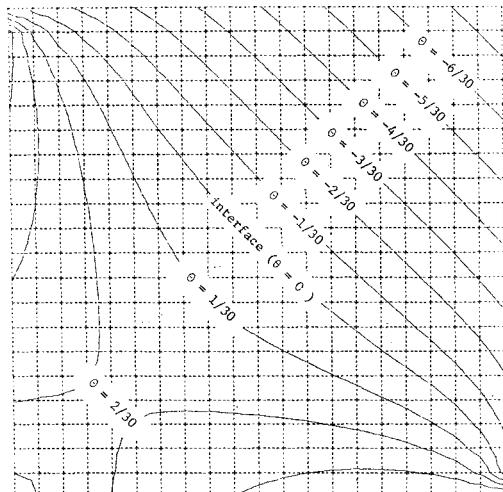
$$\theta(x, 0.4) = (0.8 - x)(2t - 1)$$

$$\theta(0, y) = (0.8 - x)(2t - 1)$$

$$\theta(0.4, y) = 0.5\sqrt{y}(1 - 3t)$$

初期条件を  $\theta_0(x, y) = 0$  として計算する。Fig. 9 (a)には 4 ステップめ ( $t=0.2$ ) の結果、Fig. 9 (b) には 8 ステップめ ( $t=0.4$ ) の結果を示す。等高線は温度分布

STEFAN STEP 4

Fig. 9 (a) Result of Example 6 at  $t=0.2$ 

についてである。領域中で温度の最大値と最小値の差が比較的大きい場合 ( $t=0.2$ ) については境界層は滑らかになるが、差がほとんどない場合 ( $t=0.4$ ) では層の分布があたかも long horn のように不規則になる。

上に述べた二次モデルは領域の長所を使って差分法で解いたが、有限要素法によつても解けることは明らかである。最後の例題として、4点の isoparametric 要素を使った有限要素法による数値解を示そう。

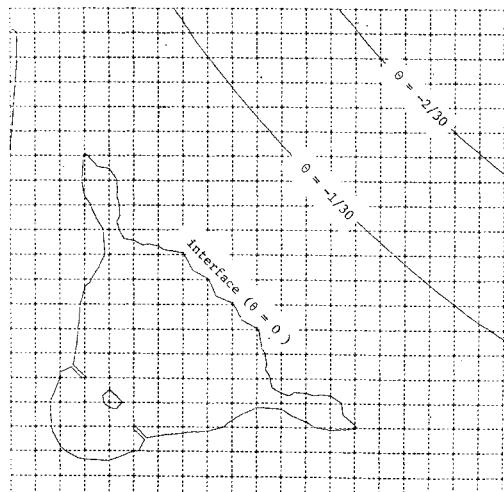
(例題 7) 領域  $D=(0, 0.4) \times (0, 0.4)$  の中で要素幅を 0.025 として  $16 \times 16$  の要素分割を行う。物性定数を  $c_2=0.5$ ,  $c_1=k_1=k_2=1.0$ ,  $\lambda=1.0$  として、時間幅  $\Delta t=0.1$ , 境界条件として  $0 \leq x \leq 0.025$  の部分に、

$$\theta(x, 0) = -1.0 \text{ if } 0 < t < 0.4$$

$$= 0.5 \text{ if } 0.4 \leq t \leq 0.5$$

という温度を与え、他の部分は  $\partial\theta/\partial n=0$  という熱流入の条件を与え、初期条件として  $\theta_0(x, y)=0$  を考えた。Fig. 10 (a) に時間  $t=0.3$  の、Fig. 10 (b) に時間  $t=0.4$  の温度分布図を示した。図中で氷の部分はアルファベットで、水の部分は数字であり、またそれぞれの値は、温度値の 10 倍の整数部分に相当する。「\*」は  $-0.02^{\circ}\text{C}$  以上の氷、「・」は  $0.02^{\circ}\text{C}$  以下の水を特別に表わしている。氷の相が一方向のみに進展していく場合、

STEFAN STEP 8

Fig. 9 (b) Result of Example 6 at  $t=0.4$

**Fig. 10 (a)** Result of Example 7 at  $t=0.3$

**Fig. 10 (b)** Result of Example 7 at  $t=0.4$

境界層は滑らかであるが、Fig. 10 (b) のような氷の相が両側からはさまれてしまい、氷の温度そのものが零度に近い場合では不規則な境界層となり、氷の島が領域中に残ってしまう結果になる。

## 10. 結 語

以上、数値解析例をあげつつ一相・二相ステファン問題の変分不等式による解法の理論および計算方法について議論した。液体相と固体相の境界を追求しながら温度分布を求めていく直接法に比べて、境界層が解の符号に

よって自動的に求められる変分不等式（結氷率を未知数とする）による方法の簡便さが、数学的な議論の複雑さにもかかわらず明らかになったと思われる。前にも述べたように、境界層を逐次追求する方法では二つの相が入り乱れたり、領域の幾何形状が複雑であったりする場合には応用できない。しかしながら、ここで紹介した結氷率による変分不等式にステファン問題を変換する方法は、直接法のような制限がない。何よりも数値解析の際便利な点は、すべての計算ステップで同一の離散モデル（メッシュ分割、要素分割）を使えることである。

結氷率による方法の制限は二相問題について物性定数  $c_1, c_2, k_1, k_2$  を場所に依存する関数として取り扱うこと ができないことである。一相ステファンの場合には、こ の種の制限はまったくない。

残されている課題は、1. 緒言で述べた熱流ポテンシャルを使う第二方法との関連性、相違点を明らかにすること、二相問題に対する変分不等式の収束・安定性などの数値解析的な研究などであろう。

謝 辞：この研究を続けるにあたって数学的な議論の相手となり、また同時に経済的援助を与えてくださった Texas 大学, Engineering Mechanics 教授 J. Tinsley Oden に深く感謝いたします。また、筆者らは、この研究の間、U.S. National Science Foundation ENG 76-15105 および U.S. Army Research Office DAAG 29-77-G 0087 から Grant を受けていました。

## 参 考 文 献

- 1) Lions, J.L. : Sur Quelques Questions d'Analyse, de Mécanique et de Contrôle Optimal, Les Presses de l'Université de Montréal, Montréal, 1976.
  - 2) Stefan, J. : Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere, Sitzber. Wien. Akad. Mat. naturw., Bd 98, 11 a, 1889, p. 965~983.
  - 3) 野木達夫：ステファン問題, 数学, 30 卷 1 号, p. 1~11, 1978.
  - 4) 山口昌哉・野木達夫：ステファン問題, 産業図書, 東京, 1977.
  - 5) Bonnerot, R. and P. Jamet : A Second Order Finite Element Method for the One-Dimensional Stefan Problem, Int. J. Numer. Meth. Eng., 8, pp. 811~820, 1974.
  - 6) Jamet, P. and R. Bonnerot : Numerical Computation of the Free Boundary for the Two-Dimensional Stefan Problem by Finite Elements, J. Compt. Phys.
  - 7) Oleinik, O.A. : A Method of Solution of the General Stefan Problem, Soviet Math. Dokl., 1, pp. 1350~1354, 1961.
  - 8) Samarskii, A.A. and B.D. Moiseyenko : An Economic Continuous Calculation Scheme for the Stefan Multidimensional Problem, U.S.S.R. Comput. Math. and Math. Phys., 5, pp. 43~58, 1965.
  - 9) Fedorenko, R.P. : A Difference Scheme for Stefan's Problem, Zh. vychisl. Mat. Fiz., 15, pp. 1339~1344, 1975.

- 10) Lions, J.L. : Quelques Méthodes de Resolution des Problèmes aux Limites Non Linéaires, Dunod, Paris, 1969.
- 11) Ciavaldini, J.F. : Analyse Numérique d'un Problème de Stefan à Deux Phases par une Méthode d'Éléments Finis, SIAM J. Numer. Anal., 12, pp. 464~487, 1975.
- 12) Fichera, G. : Problemi Elastostatici con Vincoli Unilaterali, Mem. Accad. Naz. dei Lincei, 8(7), pp. 91~140, 1964.
- 13) Stampacchia, G. : Formes Biliéaires Coercitives sur les Ensembles Convexes, C.R. Acad. Sci. Paris, t. 258, pp. 4413~4416, 1964.
- 14) Lions, J.L. and G. Stampacchia : Variational Inequalities, Comm. Pure Appl. Math. 20, pp. 493~519, 1967.
- 15) Duvaut, G. and J.L. Lions : Les Inéquations en Mécanique que et en Physique, Dunod, Paris, 1972.
- 16) Duvaut, G. : Resolution d'un Problème de Stefan (Fusion d'un Bloc de Glace à Zero Degre), C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. A, 276, pp. 1461~1463, 1973.
- 17) Duvaut, G. : The Solution of a Two-Phase Stefan Problem by a Variational Inequality, in Moving Boundary Problem in Heat Flow and Diffusion, ed. J.R. Ockendon and W.R. Hodgkins, Clarendon Press, Oxford, pp. 171~181, 1975.
- 18) Fremond, M. : Variational Formulation of the Stefan Problem-Coupled Stefan Problem-Frost Propagation in Porous Media, Computational Methods in Nonlinear Mechanics, J.T. Oden et. al., Eds., The Texas Institute for Computational Mechanics, 1974.
- 19) 高村幸男・小西芳夫 : 非線形発展方程式, 基礎数学, 岩波書店, 東京, 1977.
- 20) Ichikawa, Y. : A Numerical Analysis of a One Phase Stefan Problem by Variational Inequalities, M.S. Thesis, University of Texas at Austin, 1978.
- 21) Falk : Error Estimates for the Approximation of a Class of Variational Inequalities, Math. Comp. 28, pp. 963~971, 1974.
- 22) Tikhonov, A.N. : Equations of Mathematical Physics, Pergamon Press, Oxford, 1963.
- 23) Johnson, C. : A Convergence Estimate for an Approximation of a Parabolic Variational Inequality, SIAM J. Numer. Anal., Vol. B, No. 4, pp. 599~603, 1976.

(1978.3.18・受付)