

グリーン関数の重ね合せ法によるステファン問題の解法†

野中善政†† 村島定行†††

代用電荷法（グリーン関数法）を拡散方程式に応用した結果をさらに発展させ、ステファン問題に応用した。代用電荷法の解と一重層ポテンシャルの関係について解析し、この結果をもとにステファン問題に応用している。代用電荷法では境界上でのポテンシャルの導関数値の不連続値を調整できるので、通常の積分方程式法よりも融通性がある。計算解と解析解との比較を行い、また一次元および二次元のステファン問題ならびに過冷却問題についての数値例を与えている。この方法は連続的微小変化を表現するのに適しているので移動境界の漸近的挙動などをうまく表せる。

1. まえがき

代用電荷法はこれまで静電場¹⁾、線形弾性論、散乱場²⁾、熱伝導³⁾等の境界値問題に応用された。またラプラス方程式の自由境界問題に関しては、高電圧電極の電極形状決定問題などで用いられ、効率や精度の点で有限要素法や境界要素法より優れていることが認められている⁴⁾。ここでは拡散方程式の自由境界問題—ステファン問題への応用を試みる。この問題に関しては、空間次元の問題においてこれまで多数の解法が提案された^{5)~8)}。多次元問題では、変分法^{6), 10)}や、問題の弱形式化によってステファン条件を直接取り扱わないエンタルピー法^{6), 10)}などが有力とされているが、自由境界の形が複雑な場合にも適用しうる実際の数値解法について研究されている。ここで述べる代用電荷法は問題への直接的アプローチであり、積分方程式法¹¹⁾と似ている。代用電荷法をステファン問題に応用する場合、利点として考えられるのは次のとおりである。

- (1) 領域の変形に応じて、熱源点や境界点の移動だけを考慮すればよく、境界の処理が簡単である。
- (2) 積分方程式法と比較して、境界上での積分が不要であり、境界が滑らかな場合、計算解の精度が高い。
- (3) 解の導関数を基本解の導関数の和によって求められるので境界付近での導関数値を有限差分

近似するなどの困難がない（ただし、境界上の導関数値は若干補正する必要がある）。

- (4) 二次元問題では、ステファン条件を特性微分方程式系で表し、積分できる。
- (5) 未知数は領域法（差分法・有限要素法）に比べて次元分だけ少ない。また開領域の問題に適している。

代用電荷法の難点は、積分方程式法と同様に、非線形スキームを反復法で解くなどの場合に、グリーン関数を繰り返し計算しなければならないので、二次元以上の問題ではかなりの計算時間を要する点であるが、陽解法によって線形計算で代用する（incremental method）か、予測子-修正子法のように反復を最小限に止めれば実用的となる。また時間の経過にともなって熱源点の総数が増加し、1ステップに要する計算時間が増大するが、時間増分を大きくするか、あるいはある時刻での解をそれ以降の解についての初期値として計算を再スタートさせるなどの処置によって緩和することができる。

2. 代用電荷法の拡散方程式への応用³⁾

拡散方程式（無次元形）の初期値・境界値問題

$$u_t = u_{xx} \quad (0 < x < l, \quad 0 < t \leq T) \quad (1)$$

$$u(0, t) = f_1(t), \quad u(l, t) = f_2(t) \quad (0 < t \leq T) \quad (2)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x) \quad (0 < x < l) \quad (3)$$

の近似解 $\tilde{u}(x, t)$ を次式で表す。

$$\tilde{u}^*(x, t) = h(x, t)$$

$$+ \sum_{i=1}^2 \sum_{k=1}^n q_i^* G_0(x - \xi_i, t - (k-1)\Delta t)$$

$$(0 < x < l, \quad (n-1)\Delta t < t \leq n\Delta t) \quad (4)$$

ここで $h(x, t)$ は次のポアソン積分

$$h(x, t) = \int_0^t \varphi(\xi) G_0(x - \xi, t) d\xi \quad (5)$$

† A Method for Solving the Stefan Problem by Means of Superposition of Green's Functions by YOSHIMASA NONAKA (Department of Earth Science, Faculty of Education, Miyazaki University) and SADAYUKI MURASHIMA (Department of Electronics, Faculty of Engineering, Kagoshima University).

†† 宮崎大学教育学部地学科

††† 鹿児島大学工学部電子工学科

* ベナルティ法⁹⁾などを含む。

か、あるいは初期分布 $\varphi(x)$ を近似する基本解 G_0 の重ね合せであり³⁾、これらの熱源点の位置 ξ_i はすべて領域 $(0, l) \times (0, T]$ の外部にある。基本解 G_0 は

$$G_0(x-\xi, t-\tau) = \begin{cases} \frac{\exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{4(t-\tau)}\right)}{2\sqrt{\pi(t-\tau)}} & t > \tau \\ 0 & t \leq \tau \end{cases} \quad (6)$$

で与えられる。二次元空間での基本解は(6)の直積である。近似解(4)は境界上の拘束点 x_i で境界条件を満たすとして重み係数 q_i^* を決めることができる。一般に次の代数方程式を解かねばならない。

$$h_i^* + \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^2 G_{ij}^* q_j^* = f_i^* \quad (i=1, 2) \quad (7)$$

ここで h_i^*, f_i^*, G_{ij}^* は次のように定義される。

$$\begin{aligned} h_i^* &= h(x_i, (n-1/2)\Delta t) \quad (i=1, 2) \\ f_i^* &= f_i((n-1/2)\Delta t) \quad (i=1, 2) \\ G_{ij}^* &= G_0(x_i - \xi_j, (n-k+1/2)\Delta t) \quad (i, j=1, 2) \end{aligned}$$

ここで、 $x_1=0, x_2=l$ である。(7)が安定に解けるためには $a \leq 1.9$ でなければならない³⁾。ただし

$$a = \alpha^2 / 2\Delta t \quad (8)$$

ここで α は拘束点と熱源点の空間距離で、 $\alpha = |0 - \xi_1| = |l - \xi_2|$ 、また Δt は時間増分である。二次元問題では(7)は一般に

$$h_i^* + \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^N G_{ij}^* q_j^* = f_i^* \quad (i=1 \sim M) \quad (9)$$

と書ける。ここで N は熱源点数、 M は拘束点数で、 $N=M$ のとき、安定必要条件は $a < 2.5$ ³⁾ である。

2.1 二次元問題についての注意

代用電荷法は境界法に属するが、境界上の(特異)積分を含まない簡単な方法である。しかし、二次元以上の問題では熱源点数や配置によって係数行列(G_{ij}^*)が悪条件(ill condition)になりやすい欠点がある。これを避けるために、熱源点数 N 、熱源点と拘束点の

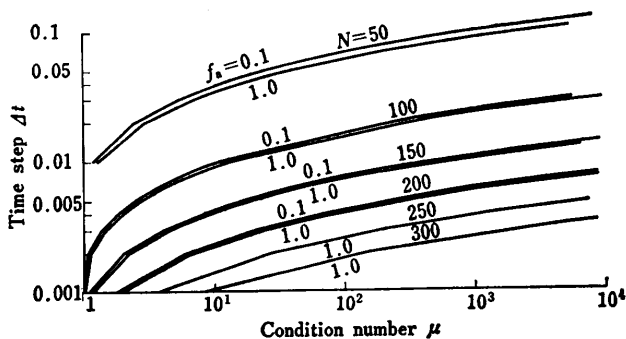


図1 円形境界 ($r=2$) についての係数行列 G^* の条件数
Fig. 1 Condition numbers of the coefficient matrix G^* for the circular boundary ($r=2$).

距離 α 、時間増分 Δt 等と係数行列の条件数の関係を知る必要がある。とくに境界が円形の場合には係数行列の固有値を解析的に求められる(付録1参照)ので、この関係を正確に調べることができ、この結果から一般の場合についてもある程度の見通しが得られる。図1は(A.3)、(A.4)によって求めた $\Delta t, f_s, N$ と条件数 μ の関係を示している。 f_s は代用電荷法ではアサインメント・ファクタと呼ばれ $f_s = \alpha / \Delta l$ で定義される。ただし Δl は拘束点の間隔で、ここでは $\Delta l = 2\pi r / N$ である。条件数が大きい場合、とくに計算機イプシロンの逆数 ϵ^{-1} と同程度もしくはそれ以上である場合にその連立方程式は悪条件である。図1 ($r=2$ の場合) からわかるように、条件数 μ は $N, \Delta t$ に大きく依存し、 f_s にはあまり影響されずラプラス方程式の場合と事情が異なる¹²⁾。図1が示すとおり、 N の増加は急速に係数行列の条件数を大きくするので、一般には $N < M$ として連立方程式の最小自乗解を得ることが考えられる²⁾。すなわち(9)を

$$\sum_{j=1}^N G_{ij}^* q_j^* = f_i^* - h_i^* - \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=1}^N G_{ij}^* q_j^* \equiv b_i^* \quad (i=1 \sim M) \quad (9)'$$

と未知数について陽に書き改め、(9)'の最小自乗解 $q_i^*(i=1 \sim N)$ を

$$\sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^M G_{ij}^* q_i^* \right) q_j^* = \sum_{i=1}^M G_{ij}^* b_i^* \quad (i=1 \sim N) \quad (10)$$

によって得る。この論文では、二次元のステファン問題でこの方法を用いた。

2.2 代用電荷法における一重層ポテンシャル

近似解(4)はもし関数 $f_1(t), f_2(t)$ が滑らかであれば、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限で内部領域において一重層ポテンシャルで表される厳密解に収束すると期待される*。しかし一重層ポテンシャルのソース面では法線方向導関数 $\partial u / \partial n$ が不連続であるので^{6), 13)}、ステファン問題に应用するにあたって、このことについて考察しておく必要がある。

一次元の一重層ポテンシャルは無次元形で

$$v(x, t) = \frac{-1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{t-\tau}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4(t-\tau)}\right) d\tau \quad (11)$$

と表される。ただし、ソースの密度を便宜的に $q(t)$

* 二次元ラプラス方程式で円形境界(内部領域、境界値一定)の場合、 f_s を一定として N を増しても明らかに収束しないことが確かめられる。しかし f_s を大きくすると著しく精度が改良される。

= -1 としている。 $v(x, t)$ の導関数 $v_x(x, t)$ は二重層ポテンシャルであり、これを $w(x, t)$ で表し、次式を得る。

$$w(x, t) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{x-x_0}{(t-\tau)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4(t-\tau)}\right) d\tau \quad (12)$$

$w(x, t)$ の $x=x_0$ での値は $w(x_0, t)=0$ であるが、一方、 $\lim_{x \rightarrow x_0+0} w(x, t) = 1/2$ となって $x=x_0$ において不連続である。ところで代用電荷法において(12)の積分に対応するものは次の和である。

$$\tilde{w}_n(a) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{2\pi}} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{(n-k)^{3/2}} \exp\left(-\frac{a}{2(n-k)}\right) \quad (13)$$

$$\left(a = \frac{(x-x_0)^2}{2\Delta t}, \quad n = \frac{t}{\Delta t}\right)$$

ここで a = 一定として、 $\Delta t \rightarrow 0$ とすれば同時に $x \rightarrow x_0$ であることを意味し、このときの $\tilde{w}_n(a)$ の極限值 $\tilde{w}_\infty(a)$ は次の級数で表される。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{w}_n(a) = \tilde{w}_\infty(a) = \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{2\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}} \exp\left(-\frac{a}{2n}\right) \quad (14)$$

したがって、 \tilde{w}_∞ は a に依存するが、 $a \rightarrow 0$ のとき $\tilde{w}_\infty \rightarrow 0$ 、および $a \rightarrow \infty$ のとき $\tilde{w}_\infty \rightarrow 1/2$ である。すなわち積分(12)は極限のとり方によって $1/2$ のジャンプが生ずるのに対して、級数(14)で求まるのは $0 \sim 1/2$ の連続値であり、 a に依存したジャンプが生ずる。

空間二次元で直線上に分布する単位密度の一重層ポテンシャルの導関数についても同様に不連続値は $1/2$ であるが、この場合代用電荷法でこれに対応するものは導関数値を求める点の位置によって2通りの級数で表される。対向配置型¹²⁾(熱源点と向かい合う)では

$$\tilde{w}_\infty(a, b) = \frac{\sqrt{ab}}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(-\frac{a}{2n} - \frac{m^2 b}{2n}\right) \quad (15)$$

$$\left(a = \frac{(x-x_0)^2}{2\Delta t}, \quad b = \frac{(\Delta y)^2}{2\Delta t}\right)$$

となり、千鳥配置型¹²⁾(熱源点と交互になる)では、

$$\tilde{w}_\infty(a, b) = \frac{\sqrt{ab}}{2\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \times \exp\left(-\frac{a}{2n} - \frac{\left(m - \frac{1}{2}\right)^2 b}{2n}\right) \quad (16)$$

となる。ここで Δy は熱源点の間隔である。 $\tilde{w}_\infty(a, b)$ を $\sqrt{a/2}, \sqrt{b/2}$ の関数として表すと図2のようにな

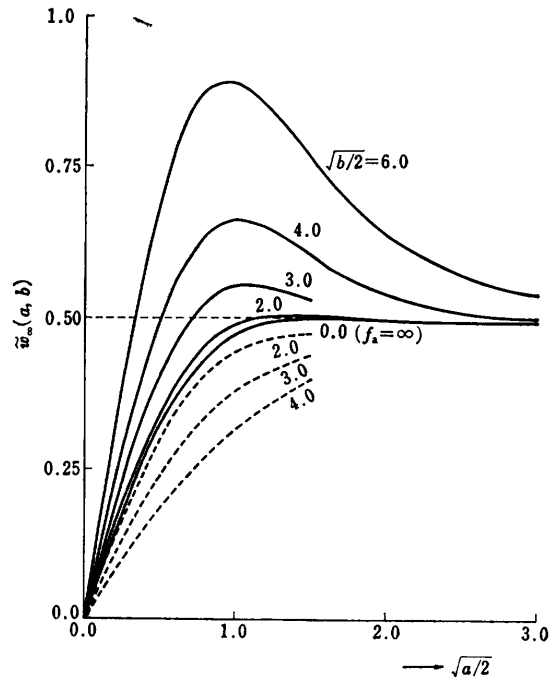


図2 $\Delta t \rightarrow 0$ に対するポテンシャルの導関数値の極限とパラメータ \sqrt{a}, \sqrt{b} の関係

Fig. 2 Dependence of limit values of the derivative of the potential for $\Delta t \rightarrow 0$ on the parameters, \sqrt{a} and \sqrt{b} .

る。対向配置型では、小さな a に対しては \tilde{w}_∞ は $1/2$ より小さく、中間の a に対しては b の値によっては $1/2$ より大きくなる。千鳥配置型では \tilde{w}_∞ はつねに $1/2$ より小さい(図2の点線)。しかし、 b を小さくすれば、両者は一致するようになり ($b=1$ のとき(15), (16)は項数 n を 2,000 として4桁まで一致する)、 $a \rightarrow \infty$ とすれば、いずれの場合も $\tilde{w}_\infty \rightarrow 1/2$ となる。以上の議論は一般に各点で接平面を有する滑らかな時空曲面 S_t についても成立する。ただし一般に $w(p_0, t_0) \neq 0$ ($(p_0, t_0) \in S_t$) である。対数ポテンシャルの場合については付録2で述べる。

さて、拡散方程式(一次元)の場合、 $x=x_0$ での導関数値は代用電荷法的に計算したとき、 $\Delta t \rightarrow 0$ に対して $1/2$ に収束せず、 $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \tilde{w}^*(\sqrt{2a\Delta t} + x_0, t) < 1/2$ であることがわかった。 $a \rightarrow \infty$ とすれば $1/2$ に収束するが安定性の問題から $a \leq 1.9$ でなければならぬ。したがって差を補正するため、境界上の導関数値 \tilde{u}_x を一般に $q(t) = -\sigma$ として次のようにおく。

$$\begin{aligned} \tilde{u}_x^*(\sqrt{2a\Delta t} + x_0, n\Delta t) \\ = \sigma \tilde{w}_n(a) + \sigma \left(\frac{1}{2} - \tilde{w}_\infty(a)\right) \end{aligned} \quad (17)$$

この操作は境界上の積分方程式を導くときに、二重層ポテンシャルの境界でのジャンプを考慮する⁶⁾ことに対応する。しかし、この方法では a を安定の限界まで大きくすることで補正分を調整することが可能である。

3. ステファン問題への応用

3.1 一次元一相問題

3.1.1 方法

一次元のステファン問題とは、物理的には水柱と氷柱が接しているとき、水柱面の熱源によって氷柱が融解する振舞を問題とする。未知関数は水柱の温度 $u(x, t)$ と水柱・氷柱の界面(自由境界)の位置 $y(t)$ である(一相問題では氷柱の温度を0とする)。支配方程式系は水の熱拡散係数、密度、体積比熱、氷の潜熱などの物理量を陽に含まない次の無次元形の方程式系⁶⁾に帰着できる。

$$u_{xx} - u_t = 0 \quad (0 < x < y(t), 0 < t \leq T) \quad (18)$$

$$u(0, t) = f(t) \geq 0 \quad (0 < t \leq T) \quad (19)$$

$$u(y(t), t) = 0 \quad (0 < t \leq T) \quad (20)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x) \geq 0 \quad (0 < x < l) \quad (21)$$

$$\dot{y}(t) = -u_x(y(t), t) \quad (0 < t \leq T, y(0) = l) \quad (22)$$

(ステファン条件)

以下、方程式(18)~(22)の代用電荷法による解法について述べる。水柱の温度 $u(x, t)$ および自由境界 $y(t)$ を近似的に次のように表す。

$$\tilde{u}^n(x, t) = g(x, t) + h(x, t) + \sum_{k=1}^n q^k G(x - \xi^{k-1}, t - (k-1)\Delta t) \quad (23)$$

$$\tilde{y}^n(t) = y^{n-1} + \frac{t - (n-1)\Delta t}{\Delta t} (y^n - y^{n-1}) \quad (24)$$

$$((n-1)\Delta t < t \leq n\Delta t, 0 < x < \tilde{y}^n(t))$$

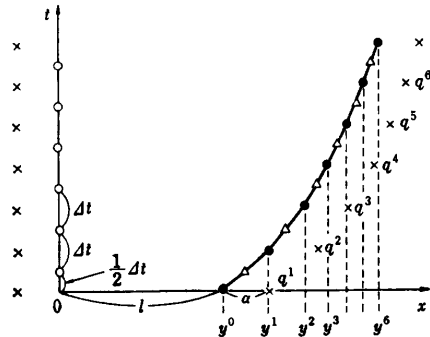


図3 一次元一相問題における拘束点(●), 境界点(Δ), 熱源点(x)の配置

Fig. 3 Arrangement of contour points, boundary points and source points for a one phase Stefan problem in one dimension.

ここで y^n, ξ^{k-1} はそれぞれ境界点 y^n , 熱源点の位置であり、各時刻において異なる。熱源点, 拘束点, 境界点の関係を図3に示す。また G は $x=0$ で第一種境界条件を満たす半無限空間のグリーン関数である。 $g(x, t), h(x, t)$ はそれぞれ一重層ポテンシャルおよびポアソン積分であり、 $q(x, t)$ は次のように書ける。

$$g(x, t) = \int_0^t G_0(x, t-\tau) f(\tau) d\tau \quad (25)$$

また $h(x, t)$ は(5)で表される。積分を解析的に行うことが困難なときは

$$g(x, t) = \sum_{k=1}^n q^k G_0(x - \xi^{k-1}, t - (k-1)\Delta t)$$

と表す^{**}。ここで q^k は次式を解いて決定する。

$$f\left(\left(n - \frac{1}{2}\right)\Delta t\right) = \sum_{k=1}^n q^k G_0\left(0 - \xi^{k-1}, \left(n - k + \frac{1}{2}\right)\Delta t\right) \quad (26)$$

図3の t 軸左側に熱源の位置 ξ^{k-1} を示す。

(23)の未知数 q^n は拘束点において

$$\tilde{u}^n\left(\frac{y^n + y^{n-1}}{2}, \left(n - \frac{1}{2}\right)\Delta t\right) = 0 \quad (27)$$

となるように決める。またステファン条件を台形公式によって次のように近似する。

$$\begin{cases} y^n = y^{n-1} - \frac{\Delta t}{2} \{ \tilde{u}_x^n(y^n, n\Delta t) + \tilde{u}_x^{n-1}(y^{n-1}, (n-1)\Delta t) \} \\ \tilde{u}_x^n(y^n, n\Delta t) = g_x(y^n, n\Delta t) + h_x(y^n, n\Delta t) + \sum_{k=1}^n q^k G_x(y^n - \xi^{k-1}, (n-k+1)\Delta t) + \gamma q^n \end{cases} \quad (28)$$

ここで γq^n は2.2節の議論を考慮した境界上での導関数値のジャンプ分の補正である。 γ は

$$\gamma = \frac{\frac{1}{2} - \tilde{w}_w(a)}{\Delta t} \quad (29)$$

で与えられる。結局、問題は q^n, y^n についての非線形連立方程式(27), (28)を解くことに帰着した。

この連立方程式を反復法によって解くにあたっては、 q^n をある値に固定しておいて(28)の解 y^n を反復法によって決め、それから新しい q^n を計算するという手順を繰り返して q^n, y^n の収束値を求める方法を採用

* 拘束点と区別して境界点と呼ぶ。拘束点は $\{(y^n + y^{n-1})/2, (n-1/2)\Delta t\}$ にある。

** この論文の一次元問題の数値例はこの方法を探る。

った。(28)を単純な反復法で解くためには、時間増分 Δt をきわめて小さくとらなければならない場合が多い。しかし、ステフエンセン法¹⁴⁾(付録3参照)を用いると相対的に大きな Δt に対しても収束する。以上まとめると次のようになる。

時間 $(n-1)\Delta t < t \leq n\Delta t$ において

(i) $r=0$ とおき、 $y^{n(0)}=y^{n-1}$ (あるいは $q^{n(0)}=q^{n-1}$) とおく。

(ii) (27)から $q^{n(r)}$ を求める。

(iii) $r \rightarrow r+1$ として(28)からステフエンセン法¹⁴⁾によって $y^{n(r)}$ を得る。

(iv) $y^{n(r)}$ と $y^{n(r-1)}$ を比較して収束が不十分であれば(ii)に戻る。

(v) $n \rightarrow n+1$ として(i)に戻り次のステップに進む。

(i)において、 $q^{n(0)}=q^{n-1}$ とおいた場合は(ii)と(iii)の順序が入れ替わり、(iv)の判定は $q^{n(r)}$ の収束について行う。

3.1.2 非線形系の収束性

(23)を漸化式の形で次のように表す。

$$\begin{cases} \tilde{u}^0(x, t) = h(x, t) + g(x, t), \lim_{t \rightarrow 0} \tilde{u}^0(x, t) = \varphi(x) \\ \tilde{u}^n(x, t) = q^n G(x - \xi^{n-1}, t - (n-1)\Delta t) + \tilde{u}^{n-1}(x, t) \end{cases} \quad (30)$$

y^n, q^n についての非線形連立方程式は結局、次式の非線形方程式にまとめられる。

$$\Delta y = F(\Delta y; \Delta t) \quad (31)$$

ただし、 $F(\Delta y; \Delta t)$ は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} F(\Delta y; \Delta t) = & \frac{\Delta t}{2} \{G_x(\Delta y - \alpha, \Delta t) + \gamma\} \\ & \times \frac{\tilde{u}^{n-1} \left(\frac{\Delta y}{2} + y^{n-1}, \left(n - \frac{1}{2} \right) \Delta t \right)}{G \left(\frac{\Delta y}{2} - \alpha, \frac{\Delta t}{2} \right)} \\ & - \frac{\Delta t}{2} \tilde{u}_x^{n-1}(\Delta y + y^{n-1}, n\Delta t) \\ & - \frac{\Delta t}{2} \tilde{u}_x^{n-1}(y^{n-1}, (n-1)\Delta t) \end{aligned}$$

ここで、 $\xi^{n-1} = y^{n-1} + \alpha$ ($\alpha > 0$) とおき、 $\Delta y = y^n - y^{n-1}$ とおいた。(31)の解 Δy_0 が反復法によって得られるには $F(X; \Delta t)$ が不動点の近傍で縮小写像であり、 $|F_x| < 1$ となることが条件である。とくに $n=1$ の場合について考える。初期分布 $\varphi(x)$ は $x=l$ において $\varphi(l)=0, \varphi_x(l-0) \leq 0$ とする。したがって十分小さな $\Delta t, |\Delta y|$ に対して $F(\Delta y; \Delta t) \geq 0$ となるので、このとき解 Δy_0 は $\Delta y_0 \geq 0$ である。 $\alpha^2/\Delta t = \text{一定}$ として

表1 解析解 $y = \beta\sqrt{t}$ と計算解の比較

Table 1 Comparison of the computed solutions with the solution $y = \beta\sqrt{t}$.

$t \backslash \Delta t$	0.01	0.001	0.0001	0.0001*	$y = \beta\sqrt{t}$
0.01	0.1452	0.2046	0.2062	0.2079	0.2119
0.02	0.2842	0.2928	0.2929	0.2970	0.2997
0.03	0.3380	0.3599	0.3599	0.3650	0.3670
0.04	0.4018	0.4163	0.4162	0.4222	0.4238
0.05	0.4451	0.4659	0.4658	0.4725	0.4739
0.06	0.4939	0.5107	0.5106	0.5180	0.5191
0.07	0.5353	0.5519	0.5518	0.5598	0.5607
0.08	0.5774	0.5902	0.5901	0.5987	0.5994
0.09	0.6135	0.6261	0.6261	0.6352	0.6358
0.10	0.6490	0.6601	0.6601	0.6697	0.6702

$\Delta t \rightarrow 0$ としたとき、たとえば $\Delta y = 4\alpha$ での $F(\Delta y; \Delta t)$ の各項は $\Delta t^{1/2}$ よりも速く0に近づくので $0 \leq \Delta y \leq 4\alpha$ において不動点があるように Δt を選べる。同時に、 $0 \leq X \leq 4\alpha$ において $|F_x| < 1$ となることが示される。一般に、 $n > 1$ のとき計算解は点 $(y^{n-1}, (n-1)\Delta t)$ において $\varepsilon > \tilde{u}^{n-1} > 0, \tilde{u}_x^{n-1} < 0$ という条件を満たしている。 $\Delta t \rightarrow 0$ のとき $\varepsilon \rightarrow 0$ であると期待される。

3.1.3 数値例

初期条件・境界条件は次のとおりである。

$$\begin{cases} y(0) = 0.02 \\ u(x, 0) = 0 \quad (0 < x < 0.02) \\ u(0, t) = 5 \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{t}{0.0004}\right) \right\} \quad (0 < t \leq T) \end{cases} \quad (32)$$

$\Delta t = 0.01 \sim 0.0001, \alpha = \sqrt{3\Delta t}$ とする。ただし、一重層ポテンシャルはすべて $\Delta t = 0.0001$ を用いて求めている。 $f(t) \sim \mu (t \rightarrow \infty)$ ならば初期値 $y(0)$ に関係なく、自由境界は $y = \beta\sqrt{t}$ に漸近する⁶⁾。ただし β は次式の根である。

$$\mu = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n!}{(2n)!} \beta^{2n} \quad (33)$$

この例では $\mu = 5, \beta = 2.1194$ である。表1は理論解 $y = \beta\sqrt{t}$ と計算解の比較である(収束の判定は $\varepsilon = |y^{n(r+1)} - y^{n(r)}|/y^{n(r)}, \varepsilon < 0.001$)。表1の*印の欄以外の数値はジャンプ分の補正なしで計算した結果である。単純に Δt を小さくしても一定の限度以上精度が上らないことが示される。2.2節で述べた γ を考慮して補正すると解析解との一致はよくなる。

3.2 一次元二相問題

3.2.1 方法

二相問題では氷柱の温度分布を考慮する。以下の方

程式系⁶⁾を満たす関数の組 $(y(t), u(x, t))$ を求める問題を考える。

$$0 < y(t) < 1 \quad (0 < t \leq T), y(0) = l \quad (34)$$

$$u_t = \sigma_1 u_{xx} \quad (0 < x < y(t), 0 < t \leq T) \quad (35)$$

$$u_t = \sigma_2 u_{xx} \quad (y(t) < x < 1, 0 < t \leq T) \quad (36)$$

$$u(0, t) = f_1(t) > 0 \quad (0 < t \leq T) \quad (37)$$

$$u(1, t) = f_2(t) < 0 \quad (0 < t \leq T) \quad (38)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x) \quad (0 < x < 1) \quad (39)$$

$$u(y(t), t) = 0 \quad (0 < t \leq T) \quad (40)$$

$$\dot{y}(t) = -k_1 u_x(y(t) - 0, t) + k_2 u_x(y(t) + 0, t) \quad (41)$$

(0 < t \leq T) (ステファン条件)

ただし σ_1, σ_2 は熱拡散係数である。この問題に代用電荷法を適用する場合、氷柱・氷柱のそれぞれの領域について一相問題と同様な考え方をし、時間 $(n-1)\Delta t < t \leq n\Delta t$ において二つの関数 $\tilde{u}_1^n(x, t)$ ($0 < x < y^n(t)$), $\tilde{u}_2^n(x, t)$ ($y^n < x < 1$) を定義する。ステファン条件を次のように近似する。

$$\left\{ \begin{aligned} y^n &= y^{n+1} - \frac{k_1 \Delta t}{2} \{ \tilde{u}_{1x}^n(y^n, n\Delta t) \\ &\quad + \tilde{u}_{1x}^{n-1}(y^{n-1}, (n-1)\Delta t) \\ &\quad + \frac{k_2 \Delta t}{2} \{ \tilde{u}_{2x}^n(y^n, n\Delta t) + \tilde{u}_{2x}^{n-1}(y^{n-1}, (n-1)\Delta t) \} \\ \tilde{u}_{i,x}^n(y^n, n\Delta t) &= q_{i,x}(y^n, n\Delta t) + h_{i,x}(y^n, n\Delta t) \\ &\quad + \sum_{k=1}^n q_k^\dagger G_{i,x}(y^n - \xi_k^{i-1}, (n-k+1)\Delta t) + \gamma_i q_i^\dagger \end{aligned} \right. \quad (i=1, 2) \quad (42)$$

ここで G_1, G_2 はそれぞれ $x=0$ および $x=1$ において第一種境界条件を満たすそれぞれ $x > 0, x < 1$ の半無限空間のグリーン関数であり、それぞれの領域において(35), (36)を満たす。 $\gamma_i q_i^\dagger$ ($i=1, 2$) は各導関数値についての補正項であり、

$$\gamma_i = \left(\frac{1}{2} - \frac{\tilde{w}_i(a)}{\sigma_i \Delta t} \right) \quad (i=1, 2) \quad (43)$$

となる。

3.2.2 数値例

$\sigma_1 = k_1 = 1, \sigma_2 = k_2 = 2$ とする。

初期条件・境界条件は次のとおりである。

$$\left\{ \begin{aligned} y(0) &= 0.5 \\ u(x, 0) &= \begin{cases} Ax^2 + Bx + 1 & (0 < x \leq 0.5) \\ 1 - 2x & (0.5 \leq x < 1) \end{cases} \\ u(0, t) &= 1, \quad u(1, t) = -1 \end{aligned} \right. \quad (44)$$

ただし、

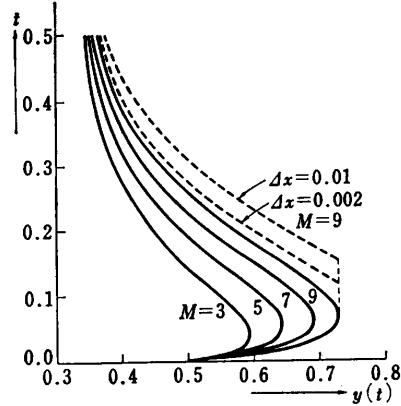


図4 二相問題における自由境界の変化
Fig. 4 Movements of the free boundary in the two phase Stefan problem.

$$A = -4(\sqrt{M-1} + \sqrt{M}),$$

$$B = 4\sqrt{M-1}(\sqrt{M-1} + \sqrt{M}),$$

$$M = 3, 5, 7, 9$$

とする。 $\Delta t = 0.005$ として各領域についての境界一熱源点の距離 $\alpha_i = \sqrt{3\sigma_i \Delta t}$ ($i=1, 2$) を用いた。また初期分布を表す熱源点を $\Delta x = 0.05$ の間隔で $t = -0.002$ ($0 \leq x \leq 0.5$)、および $t = -0.001$ ($0.5 \leq x \leq 1$) に置いた。この結果を図4に示す。ただし点線は $M=9$ について、インプリシット差分スキーム⁶⁾で計算した結果を示す。差分の空間メッシュを $\Delta x = 0.01$ および 0.002 とし、 $\beta^* = 1.0$ を用いた。曲線の折り返し点の部分で両者は異なった特徴を示す。この方法ではインプリシット差分スキームのように境界の変化が小さいときに Δt が大きくなって計算が粗くなることはない(差分法でも Δx を小さくすれば不連続的变化は小さくなる)。しかし境界の変化が急な場合はインプリシット差分スキームでは自動的に Δt の大きさが調整されるので都合がよい。

3.3 二次元一相問題

3.3.1 方法

空間一次元問題では自由境界が時空間で曲線で表された。それに対して空間二次元問題では自由境界は曲面で表される。一次元の場合と同様に $u=0$ で相変化が起こるものとして、 $u=0$ の点からなる曲面を $S_i: \Phi(x, y, t) = 0$ とする。問題は次のように定式化される。時間の経過に従って変化する二次元空間の開領域 $\Omega(t)$ とその境界 $\Gamma(t)$ を考える。時刻 $t=0$ において $\Omega(0)$ は有界領域であるとし、その境界が二つの滑ら

* この β はインプリシット差分スキーム⁶⁾で時間増分 Δt が大きくならないように調整するパラメータ。

かな閉曲線 F と $\Gamma(0)$ からなり, F は $\Gamma(0)$ の囲む領域の内部にあるとする. そこで次の無次元形の方程式系⁶⁾を満たす関数の対 $(u(x, t), \Phi(x, y, t))$ を求める問題を考える ($\Gamma(t)$ は $t=\text{const}$ と曲面 $\Phi=0$ との交線).

$$u_t = u_{xx} + u_{yy} \quad ((x, y) \in Q(t), 0 < t \leq T) \quad (45)$$

$$u = \psi \quad ((x, y) \in F, 0 < t \leq T) \quad (46)$$

$$u = \varphi \quad ((x, y) \in Q(0), t \leq 0) \quad (47)$$

$$u = 0 \quad ((x, y) \in \Gamma(t), 0 < t \leq T) \quad (48)$$

$$\Phi_t = u_x \Phi_x + u_y \Phi_y \quad ((x, y) \in \Gamma(t), 0 < t \leq T) \quad (49)$$

(ステファン条件)

ステファン条件は一階偏微分方程式で表されるが, 代用電荷法を二次元問題に応用する場合は, これと同様な次の特性微分方程式系を解くことにする.

$$\dot{x} = -u_x, \quad \dot{y} = -u_y \quad (50)$$

ただし, 非線形系を反復法で解く方法は計算時間を要するので, 陽解法により線形計算で代用する (incremental method). ステファン条件は次のように近似する.

$$\begin{cases} x_i^n = x_i^{n-1} - \Delta t \tilde{u}_{x_i}^{n-1} \\ y_i^n = y_i^{n-1} - \Delta t \tilde{u}_{y_i}^{n-1} \\ \tilde{u}_{x_i}^{n-1} = g_{x_i}^{n-1} + h_{x_i}^{n-1} \\ \quad + \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=1}^N G_{x_{ij}}^{n-k-1} q_j^k + \gamma \lambda_i^{n-1} \sigma_i^{n-1} \\ \tilde{u}_{y_i}^{n-1} = g_{y_i}^{n-1} + h_{y_i}^{n-1} \\ \quad + \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=1}^N G_{y_{ij}}^{n-k-1} q_j^k + \gamma \nu_i^{n-1} \sigma_i^{n-1} \\ \gamma = \frac{\frac{1}{2} - \tilde{w}_-(a, b=0)}{\Delta t \cdot \Delta l^{n-1}} \\ (i=1 \sim M, j=1 \sim N) \end{cases} \quad (51)$$

ここで $\tilde{u}_{x_i}^n, \tilde{u}_{y_i}^n$ ($i=1 \sim M$) は

$$\tilde{u}_{x_i}^n = \tilde{u}_x^n(x_i^n, y_i^n, n \Delta t), \quad \tilde{u}_{y_i}^n = \tilde{u}_y^n(x_i^n, y_i^n, n \Delta t)^*$$

と定義する ($g_{x_i}^n, g_{y_i}^n, h_{x_i}^n, h_{y_i}^n$ についても同様).

また, $G_{x_{ij}}^{n-k}, G_{y_{ij}}^{n-k}$ ($i=1 \sim M, j=1 \sim N$) は

$$G_{x_{ij}}^{n-k} = G_x(x_i^n - \xi_j^{k-1}, y_i^n - \eta_j^{k-1}, (n-k+1)\Delta t)$$

$$G_{y_{ij}}^{n-k} = G_y(x_i^n - \xi_j^{k-1}, y_i^n - \eta_j^{k-1}, (n-k+1)\Delta t)$$

と定義する. また λ_i^n, ν_i^n 自由境界上の境界点 (x_i^n, y_i^n) における近似単位法ベクトルのそれぞれ x 成分, y 成分である. σ_j^n ($j=1 \sim M$) は

$$\sigma_j^n = \frac{1}{s+1} \sum_{r=0}^s \sum_{i \in j} w_i q_i^{n-r} \quad (52)$$

* 境界点の中間 $((x_i^n + x_{i-1}^n)/2, (y_i^n + y_{i-1}^n)/2)$ の導関数値の平均を用いる方法もある.

と定義する. ただし s は時間平均をとるステップ数, j は境界点およびその点における平均の熱源の強さを表す熱源点群の番号で, $i \in j$ は強さ q_i^{n-r} の熱源が j 群にあることを意味する. ここで w_i は平均の重みで $\sum_{i \in j} w_i = 1$ とする (具体的には数値例参照). さらに, $G(x-\xi, y-\eta, t-\tau)$ は特定の境界条件を満たすグリーン関数である. また N は熱源点数, M は拘束点数 (=境界点数) で $N \leq M$ である. 補正項 $\tilde{w}_-(a, b)$ は導関数を求める境界上の位置で異なるが, b を適切にとればその差は小さいので (2.3節参照), $b=0$ として共通の補正項をとる.

自由境界は点 (x_i^n, y_i^n) を結ぶ長さ L^n の折線で近似されるが, これによる $\Gamma(t), Q(t)$ の近似をそれぞれ $\tilde{\Gamma}^n, \tilde{Q}^n$ とし, また $\tilde{\Gamma}^n$ を閉曲線とした場合, $\Delta l^n = L^n/N, a = \alpha^2/2\Delta t$ (α は境界点と熱源点の空間距離), $\tilde{w}_-(a, b=0)$ は(14)で与える. (λ_i, ν_i) の決め方は図5に示す.

実際に計算を実行するためには, 次元問題と異なった配慮が必要である. まず時間ステップを追って, 境界点 (x_i^n, y_i^n) の間隔が不均一になり, これを放置すれば (i) 自由境界についての細かい情報が失われる, (ii) 係数行列が悪条件になる原因となる, ので修正しなければならない. 最も簡単に次の方法を採用.

境界点と点間の距離をそれぞれ $P_i, |P_{i+1} - P_i|$ と表すと, $L^n = \sum_{i=1}^M |P_{i+1} - P_i|$ ($P_{M+1} = P_1$), $\Delta L^n = L^n/M$ となる. これから (i) $\max_i |P_{i+1} - P_i| > (1+\mu) \times \Delta L^n$ または $\min_i |P_{i+1} - P_i| < (1-\mu) \Delta L^n$ のとき境界点の位置を修正する. (ii) 関数 $S(P) = |P - P_k| + \sum_{i=1}^k |P_{i+1} - P_i|$ ($P \in \tilde{\Gamma}^n, |P_{k+1} - P_k| = |P_{k+1} - P| + |P - P_k|, k < M$) を定義し, $S(Q_{k+1}) - S(Q_k) = \Delta L^n$ となる点 Q_i ($i=1 \sim M$) $\in \tilde{\Gamma}^n$ を決め, これを結ぶ $\tilde{\Gamma}^{n'}$ を定める. 最後に (iii) $\max_i |Q_{i+1} - Q_i| < (1+\mu) \Delta L^n$,

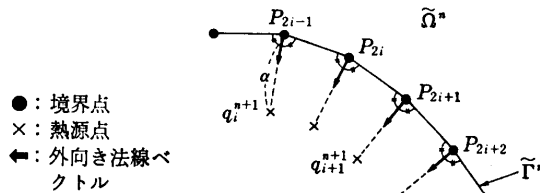


図5 境界点をもとにした熱源点の位置の決め方 $\alpha = \sqrt{2a\Delta t}$

Fig. 5 Determination of the positions of the source points from those of the boundary points. $\alpha = \sqrt{2a\Delta t}$

および $\min_i |Q_{i+1} - Q_i| > (1-\mu)\Delta L^*$ を確認する。場合によっては(iii)が成立しないので、そのときは $\mu, \Delta t$ を小さくするか、 M を大きくする(修正分が小さくなり、落ち着く)。後述の数値例では $\mu=0.05$ としたが、これより大きい μ についてはとくに過冷却問題で不安定を生じた。境界点の移動に従って熱源点も移動するが、その決め方は図5に示す。 $\tilde{\Gamma}^n$ が尖っている場合は熱源点が $\tilde{\Omega}^n$ 内に入ることもありうるので、 $\tilde{\Omega}^n$ 外にあることを確認しなければならない。境界点と同様に、熱源点の近づきすぎは係数行列が悪条件になる原因となるので場合によっては上述の方法に従ってこの間隔も修正する必要が生ずる(数値例では修正していない)。

3.3.2 数値例

問題 1: 二次元ステファン問題

初期条件・境界条件は次のとおりである。

$$\begin{cases} F_1 = \{(r, \theta); r=1, 0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ\} \\ F_2 = \{(r, \theta); 0 < r < \infty, \theta=0^\circ \text{ or } 45^\circ\} \\ \Gamma(0) = \{(r, \theta); r=f(\theta), 0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ\} \end{cases} \quad (53)$$

ただし (r, θ) は極座標、関数 $f^{-1}(r)$ は次の4点:

$$\begin{aligned} r_1=1.2, r_2=1.4, r_3=1.6, r_4=1.8 \\ \theta_1=0^\circ, \theta_2=25^\circ, \theta_3=20^\circ, \theta_4=45^\circ \end{aligned}$$

を通る3次のラグランジュ補間多項式*である。

$\Omega(0)$ は $F, F_2, \Gamma(0)$ で囲まれる領域である。

$$\begin{cases} u(x, y, 0) = 0 & ((x, y) \in \Omega(0)) \\ \frac{\partial u}{\partial n}(x, y, t) = 0 & ((x, y) \in F_2, 0 < t \leq T) \\ u(x, y, t) = 10 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{0.002}\right) \right) & ((x, y) \in F_1, 0 < t \leq T) \end{cases} \quad (54)$$

ここで $\Gamma(0)$ は星形**ではない。

F_2 上で第二種境界条件を満たすグリーン関数を鏡像法によって構成した。用いたパラメータは $\Delta t=0.001, \alpha=\sqrt{2}\Delta t, \tilde{\Gamma}^n$ についての熱源点数 $N=26$, 拘束点数 $M=51, F_1$ については $N=M=11$, また $a=1$ に対し、 $\gamma=0.1/(\Delta t \cdot \Delta L^*)$ とした。 $N < M$ であるので連立方程式を最小自乗法的に解き、グリーン関数の重み q_j^* を求めている。熱源点数は $\tilde{\Gamma}^n$ 上の境界点数の1/2であり、導関数の補正のため、 σ_j^* ($j=1 \sim 51$) を次式で計算した。

* 直線 $\theta=0^\circ$ と $\theta=45^\circ$ に直交するように端で適当に修正されているとする。
** 曲線を極形式で $r=r(\theta)$ と表したとき、 r が θ の一価関数である。

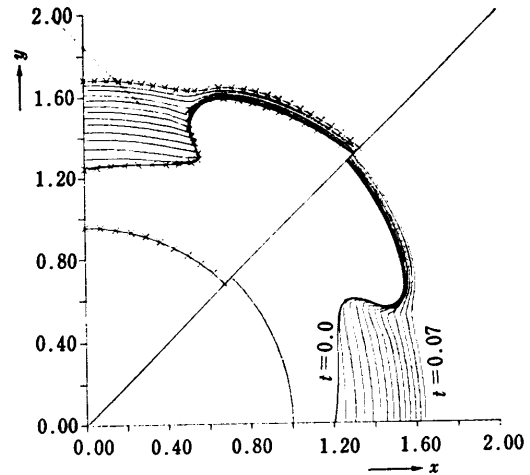


図6 二次元問題における自由境界の変化
Fig. 6 Movement of the free boundary in the two dimension Stefan problem.

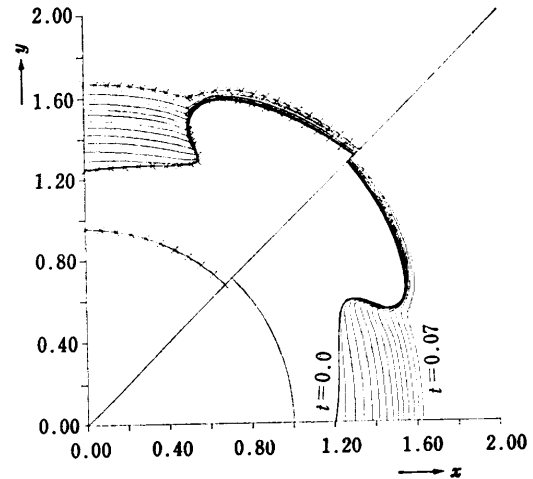


図7 導関数値の補正がない場合の自由境界の変化(問題とは図6と同じ)
Fig. 7 Movement of the free boundary computed with the no corrected derivative for the same problem as shown in Fig. 6.

$$\sigma_j^* = \begin{cases} (q_j^* + q_{j+1}^* + q_{j-1}^* + q_{j+1}^*)/4 & (j=2i) \\ (q_j^* + q_{j-1}^*)/3 + (q_{j-1}^* + q_{j+1}^* + q_{j+1}^*)/12 & (j=2i-1) \end{cases} \quad (55)$$

この結果を図6に示す。ここで上半分は熱源点の位置を表す ($b \leq 1.25$)。参考のため導関数値を補正しないで求めた結果を図7に示す。境界の曲率の小さい部分については、導関数値の補正は境界の移動をわずかに速めるだけであまり影響がない。

問題 2: 過冷却問題*

* 初期条件のわずかな差異が増幅されるため適切 (well posed) な問題ではない。

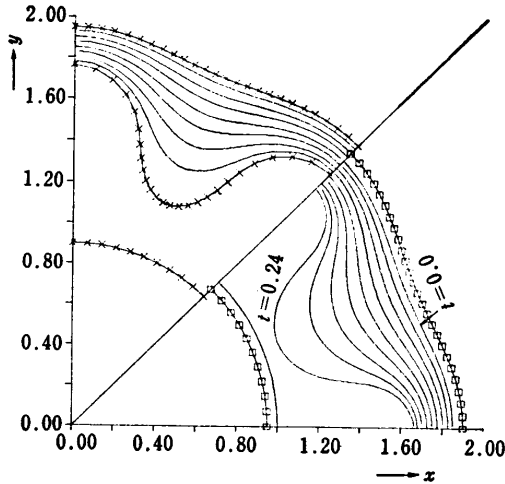


図8 過冷却問題における自由境界の変化
Fig. 8 Movement of the free boundary in the super cooling problem.

初期条件・境界条件は次のとおりである。

$$\begin{cases} \Gamma(0) = \{(r, \theta); \\ r = 1.8 + 0.05 \cos 8\theta, 0^\circ \leq \theta \leq 45^\circ\} \\ u(x, y, 0) = \varphi(x, y) \quad ((x, y) \in \Omega(0)) \\ u(x, y, t) = -1 \quad ((x, y) \in F_1, 0 < t \leq T) \end{cases} \quad (56)$$

(他の条件は(53), (54)と同じ)

ただし $\varphi(x, y)$ は次の方程式系の解である。

$$\begin{cases} \nabla^2 \varphi = 0 \quad ((x, y) \in \Omega(0)), \varphi = -1 \quad ((x, y) \in F_1) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0 \quad ((x, y) \in F_2), \varphi = 0 \quad ((x, y) \in \Gamma(0)) \end{cases} \quad (57)$$

また, $\Delta t = 0.005$, $\alpha = \sqrt{2\Delta t}$, $N = 26$, $M = 51$ (Γ^* について) である。関数 $\varphi(x, y)$ は近似的にラプラス方程式の基本解の重ね合せ(鏡像も考える)で

$$\varphi(x, y) = \sum_i Q_i \log \sqrt{(x - \xi_i)^2 + (y - \eta_i)^2} \quad (58)$$

と表す。図8の×印は熱源点の位置 ($b \leq 0.25$)、□印は対数関数の極 (ξ_i, η_i) を示す。自由境界上の導関数値の補正をしないで計算している。その理由はこの程度の時間増分 ($\Delta t = 0.005$) については補正は重要でなく、また補正によってかえってノイズが生じ、初期条件と無関係な解になることを避けるためである。この結果、与えられた $\Gamma(0)$ の波数に応じたパターンが増幅される様子がみられ、スキームが安定であることを示す。結晶成長における形状安定性は Sekerka¹⁵⁾ などによって扱われ、線形理論では波数の大きい凹凸ほど成長速度が大きい。

4. むすび

代用電荷法のステファン問題への応用を試みた結果、有用であることがわかった。連続関数によって領域の温度が表現され、初期分布が一様に0であるときの境界の熱源による自由境界の初期の変化、定常状態に収束する解の挙動などの離散量で扱いにくい問題で強みがあり、差分法・有限要素法などの離散法を補うものである。通常の積分方程式法と比較して、境界上のジャンプ分を調整できるため、より融通性がある。二次元問題ではジャンプ分が求める点によって異なるがアサインメント・ファクター ($f_a = \sqrt{a/b}$) を適切にとることで一致するようにでき、実用的に問題がない。

参考文献

- 1) 村島, 久原: リーマン面上のグリーン関数の重ね合わせによる二次元ラプラス方程式の近似解法, 情報処理, Vol. 21, No. 5, pp. 455-467 (1980).
- 2) Sánchez-Sesma, F. J. and Esquivel, A.: Ground Motion at Canyons of Arbitrary Shape under Incident SH Waves, *Earthquake Eng. Struct. Dyn.*, Vol. 7, pp. 441-450 (1979).
- 3) 野中, 村島: グリーン関数の重ね合わせ法による拡散方程式の近似解法, 情報処理学会論文誌, Vol. 23, No. 3, pp. 288-295 (1981).
- 4) 大久保他: 反復自動計算による電界強度分布の一樣化と Borda 形状—電極形状最適化へのアプローチ, 電気学会論文誌 A, Vol. 100-A, No. 8, p. 441 (1980).
- 5) Gladwell, I. and Wait, R. (ed.): *A Survey of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, pp. 332-356, Oxford University Press, Oxford (1979).
- 6) 山口, 野木: ステファン問題, pp. 6, 13, 34, 48, 53, 産業図書, 東京 (1977).
- 7) Mori, M.: A Finite Element Method for Solving the Two Phase Stefan Problem in One Space Dimension, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.*, Vol. 13, pp. 723-753 (1977).
- 8) Kawarada, H. and Natori, M.: On Numerical Solutions of Stefan Problem I, *Mem. Numer. Math.*, Vol. 1, pp. 43-54 (1974).
- 9) Natori, M. and Kawarada, H.: An Application of the integrated Penalty Method to Free Boundary Problems of Laplace Equation, *Numer. Funct. Anal. Optimiz.*, Vol. 3, No. 1, pp. 1-17 (1981).
- 10) Elliott, C. M. and Ockendon, J. R.: *Weak and Variational Methods for Moving Boundary Problems*, pp. 61-91, Pitman Advanced Pub.

Prog., Boston (1982).

- 11) Rubinstein, L.: Application of the Integral Equation Technique to the Solution of Several Stefan Problems, Proc. of the Seminar on Free Boundary Problems, Held in Pavia in September-October, Vol. 1, pp. 417-436 (1979).
- 12) 村島, 近藤他: 代用電荷の配置法と誤差との関係, 電気学会論文誌 A, Vol. 102-A, No. 1, pp. 1-8 (1982).
- 13) 宇野, 洪: ポテンシャル, p. 73, 培風館, 東京 (1961).
- 14) Henrici, P. (一松他訳): 数値解析の基礎, p. 115, 培風館, 東京 (1973).
- 15) Sekerka, R. F.: Morphological Stability, *J. Cryst. Growth*, Vol. 3-4, pp. 71-81 (1968).
- 16) Zurmühl, R. (瀬川他訳): マトリクスの理論と応用, p. 223, ブレイン図書, 東京 (1972).
- 17) 数学ハンドブック編集委員会編: 理工学のための数学ハンドブック, p. 92, 丸善, 東京 (1960).

付録 1 円形境界の係数行列の条件数

拘束点と熱源点がそれぞれ半径 $r, r-\alpha$ ($\alpha > 0$) の円周上に向かい合って配置されている場合の係数行列の条件数を求める。ただし個数を N とする。このとき(8)の係数行列 (G_{ij}^0) は対称かつ巡回的構成¹⁶⁾であり,

$$(G_{ij}^0) = \begin{pmatrix} g_0 & g_1 & g_2 & \dots & g_{N-1} \\ g_{N-1} & g_0 & g_1 & \dots & g_{N-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_1 & g_2 & g_3 & \dots & g_0 \end{pmatrix} \quad (A.1)$$

と書ける。ここで $g_i = G_0(x_0 - \xi_i, y_0 - \eta_i, \Delta t/2)$, ただし $G_0(x - \xi, y - \eta, t - \tau)$ は二次元の拡散方程式の基本解であり, $\sqrt{(x_i - \xi_i)^2 + (y_i - \eta_i)^2} = \alpha$ ($i = 0 \sim N-1$) である。この行列の固有値 λ_k は次式で与えられる。

$$\lambda_k = g_0 + g_1 \varepsilon_k + g_2 \varepsilon_k^2 + \dots + g_{N-1} \varepsilon_k^{N-1} \quad (k = 0 \sim N-1) \quad (A.2)$$

ただし, ε_k は1の N 乗根で, $\varepsilon_k = e^{ik2\pi/N}$ である。 N を偶数とすると行列の対称性から次のようになる。

$$\lambda_k = g_0 + 2(g_1 + g_{N-1}) \cos \frac{2\pi k}{N} + 2(g_2 + g_{N-2}) \cos \frac{4\pi k}{N} + \dots + 2(g_{N/2-1} + g_{N/2+1}) \cos \frac{(N-2)\pi k}{N}$$

$$+ g_{N/2} \cos k\pi \quad (A.3)$$

したがって条件数 μ は固有値の最大値と最小値の比であり, 次式で与えられる。

$$\mu = \lambda_0 / \lambda_{N/2-1} \quad (A.4)$$

付録 2 対数二重層ポテンシャルの不連続

直線上に分布する二重層のポテンシャル

$$w(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x-x_0}{(x-x_0)^2 + y^2} dy \quad (A.5)$$

についても同様に $\lim_{x \rightarrow x_0+0} w(x) = 1/2$ であるが, これ

に対する代用電荷法の級数は対向配置型の場合

$$\tilde{w}_-(f_*) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{f_*}{n^2 + f_*^2} = \frac{1}{2} \coth \pi f_*^{17)} \quad (A.6)$$

$$\left(f_* = \frac{x-x_0}{\Delta y} \right)$$

となり, 千鳥配置型の場合は次式となる。

$$\begin{aligned} \tilde{w}_-(f_*) &= \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_*}{(n-1/2)^2 + f_*^2} \\ &= \frac{1}{2} \tanh \pi f_*^{17)} \end{aligned} \quad (A.7)$$

したがって $f_* \rightarrow 0$ に対して(A.6)の場合 $\tilde{w}_-(f_*) \rightarrow \infty$, (A.7)の場合 $\tilde{w}_-(f_*) \rightarrow 0$, また $f_* \rightarrow \infty$ に対してはいずれも $\tilde{w}_-(f_*) \rightarrow 1/2$ となる。

付録 3 ステフェンセン反復法¹⁴⁾

解くべき方程式が次の形式

$$x = f(x) \quad (A.8)$$

で与えられているとする。ここで関数 $F(x)$ を

$$F(x) = \begin{cases} N(x) = f(f(x)) - 2f(x) + x \\ x - \frac{[f(x) - x]^2}{N(x)} & (N(x) \neq 0) \\ x & (N(x) = 0) \end{cases} \quad (A.9)$$

として, 適当な $x^{(0)}$ を選んで数列 $\{x^{(k)}\}$ を帰納的に $x^{(k+1)} = F(x^{(k)})$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) (A.10)

によって定義する。 $\{x^{(k)}\}$ が(A.8)の解に収束する条件については「非局所収束定理」¹⁴⁾ などがある。

(昭和 57 年 11 月 2 日受付)
(昭和 58 年 9 月 13 日採録)