Sturm-Liouville 型の固有値問題の数値解法

伝熱学において現れる円管内の層流熱伝達（Graetz 問題）を例に考える．流れ場が完全発達し，温度場が発達過程にある場合，以下の常微分方程式と境界条件からなる固有値問題を形成する．本稿では，シューティング法にニュートン法的な考えを援用した計算方法を紹介する．

＜微分方程式＞

$$\frac{d^2\Psi}{dR^2}+\frac{1}{R}\frac{d\Psi}{dR}+\lambda\left(1-R^2\right)\Psi=0 \tag{1}$$

＜境界条件＞

$$\begin{cases} R=1: & \Psi=0 \\ R=0: & d\Psi/dR=0 \end{cases} \tag{2}$$

ここで，R は無次元半径を表す．

この Sturm-Liouville 型の固有値問題には，無限個の固有値 $\lambda^{(n)}\left(n=1,2,\cdots\right)$ とそれに対応する固有関数 $\Psi^{(n)}$ が存在する．図 1 のように，計算領域を N-1 分割し，中心軸上から順に格子点番号を 1, 2, 3, ・・・N とする．

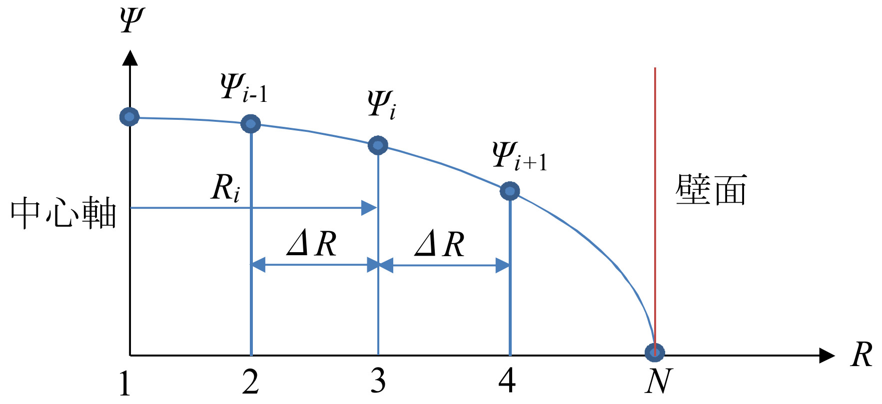

図 1　格子点の配置（領域を 4 分割の場合．$N=5$）

この微分方程式を 2 次精度の中心差分法で近似し，

$$\frac{\Psi_{i+1}-2\Psi_i+\Psi_{i-1}}{\left(\Delta R\right)^2}+\frac{1}{R_i}\frac{\Psi_{i+1}-\Psi_{i-1}}{2\left(\Delta R\right)}+\lambda\left(1-R_i^2\right)\Psi_i=0 \tag{3}$$

これを以下のように変形する．ここで，ΔR は格子点間隔であり，$R_i=\left(i-1\right)\Delta R$ である．

$$\underbrace{\left[1-\frac{\Delta R}{2R_i}\right]}_{A_i}\Psi_{i-1}+\underbrace{\left[\left(\Delta R\right)^2\lambda\left(1-R_i^2\right)-2\right]}_{B_i}\Psi_i+\underbrace{\left[1+\frac{\Delta R}{2R_i}\right]}_{C_i}\Psi_{i+1}=0 \tag{4}$$

壁面から中心軸に向かって，順に値を求めるものとする．つまり，推定固有値 λ を適当に与えて，格

子点 N-1 での適当な推定値を与えれば，式(5)により中心軸上の点の値まで順次求めることができる．

$$\Psi_{i-1} = -\frac{B_i \Psi_i + C_i \Psi_{i+1}}{A_i}, \quad (i = N-1,\ N-2,\ \cdots,\ 2) \tag{5}$$

一方で，境界条件は，中心軸上でテイラー展開を考慮し，以下のように近似されるとする．

$$\begin{cases} R = 1: \quad \Psi_N = 0 \\ R = 0: \quad \Psi_1 = \dfrac{4\Psi_2 - \Psi_3}{3} \end{cases} \tag{6}$$

式(5)で，$i = 2$ を代入すると，

$$\Psi_1 = -\frac{B_2 \Psi_2 + C_2 \Psi_3}{A_2} \tag{7}$$

となるが，この値が式(6)の下式

$$\Psi_{1b} = \left(4\Psi_2 - \Psi_3\right)/3 \tag{8}$$

から得られる値に合致すれば，そのときの推定固有値 λ は適切なものであると判断されるが，値が正確に合致する偶然はありえない．そこで，式(8)から得られる Ψ_{1b} の値と式(7)から得られる Ψ_1 の値との差 $\Delta\Psi\left(= \Psi_{1b} - \Psi_1(\lambda)\right)$ がゼロに近づいていくように，ニュートン法的な考えを適用する．言い換えれば，$\Delta\Psi$ の値が固有値 λ の値に依存すると考えれば，

$$\Delta\Psi = f(\lambda) = 0$$

が成り立つ．これより，左上付き m を反復回数として，次のように与える．

$$^{m+1}\lambda = {}^{m}\lambda - \frac{\Delta\Psi}{df/d\lambda} = {}^{m}\lambda - c\left({}^{m}\Psi_{1b} - {}^{m}\Psi_1\right) \tag{9}$$

ここで，c は収束の速さを調整するための定数であり，$df/d\lambda$ が明確に定まらないことの反映でもある．この反復計算中に固有値 λ の値が変われば，式(5)中の係数 B_i も変わるので，式(7)から得られる Ψ_1 の値も修正されていく．このとき，式(9)の右辺第二項の値 $\Delta\Psi$ は小さくなっていく．この反復操作中に，固有関数を一意に定めるために，規格化しておくとより確実に収束する．例えば，式(10)のように与えれば，中心軸上での関数値 Ψ_1 を 1.0 に固定することができる．式(10)の 2 つ目の式は，右辺の古い関数値を全ての点に渡って定数倍して，関数値を更新することを意味する．

$$C_{nor} = 1.0/\Psi_1, \qquad \Psi_i^{new} = C_{nor}\Psi_i^{old} \quad \left(1 \le i \le N\right) \tag{10}$$

こうして，ある固有値とそれに対応する固有関数がそれぞれ収束していく．無数に存在する固有値と固有関数のペアのうち，どれが求まるかについては，計算の入力パラメータとして与える初期の推定固有値に依存する．図２と表１にそれぞれ固有関数分布と数値解を示す．n =1, 2, 3, 4, 5, 6 の固有値はそれぞれ，7.3136,　44.610,　113.92,　215.24,　348.56,　513.89 となる．

計算アルゴリズムは，以下のようになる．

1．初期の推定固有値${}^{0}\lambda$および関数値${}^{0}\Psi_{N-1}$を与え，壁面から中心軸に向かって，順に関数の値を求める．
2．式(9)により，固有値を修正し，再度壁面から順に中心軸までの関数の値を求める．
3．反復計算中に，固有関数の規格化を実行する．
4．固有値と固有関数が収束すれば計算を終了する．

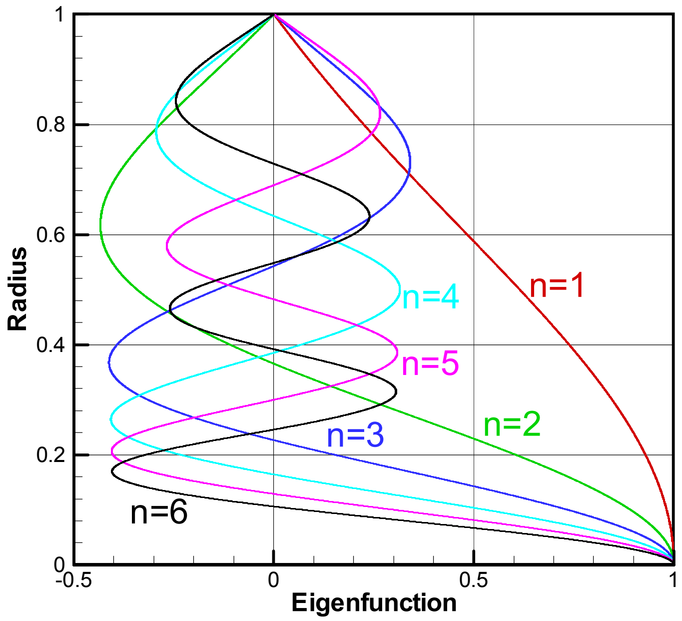

図２　$\Psi^{(1)}$から$\Psi^{(6)}$までの固有関数分布（$R=0$ での値を 1 とする）

表１　円管内層流熱伝達の固有関数の数値解（伝熱面温度一定）

（固有関数を$\Psi|_{R=0}=1$と規格化した場合）

R	$\Psi^{(1)}$	$\Psi^{(2)}$	$\Psi^{(3)}$
0.0	1	1	1
0.1	0.9818	0.8918	0.7355
0.2	0.9289	0.6047	0.1525
0.3	0.8455	0.2339	-0.3152
0.4	0.7381	-0.1096	-0.3921
0.5	0.6146	-0.3421	-0.1423
0.6	0.4831	-0.4322	0.1697
0.7	0.3510	-0.3976	0.3315
0.8	0.2243	-0.2845	0.3027
0.9	0.1067	-0.1411	0.1626
1.0	0	0	0