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，以下に示す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．

＜常微分方程式＞

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

＜境界条件＞

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

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 $\boldsymbol{\Psi}^{(n)}$ 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．

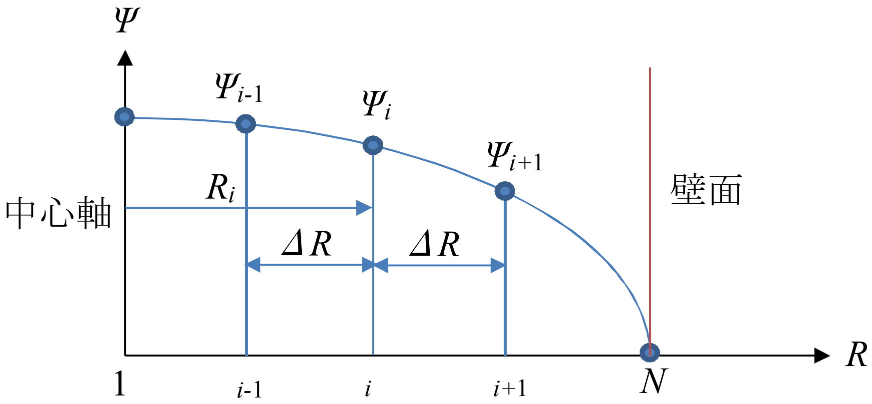

図 1　格子点の配置

この常微分方程式を 2 次精度の中心差分法で近似し，

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

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

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

A_i, B_i, C_i は係数である．式(4)の 3 項間漸化式に対して，壁面から中心軸に向かって，順に関数値 $\boldsymbol{\Psi}_i$

を求めるものとする．すなわち，推定固有値 λ を適当に与えて，さらに格子点 N-1 での適当な推定関数値を与えれば，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，式(6)のように近似的に与えられるとする．

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

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，左上付き添え字 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．

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

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．

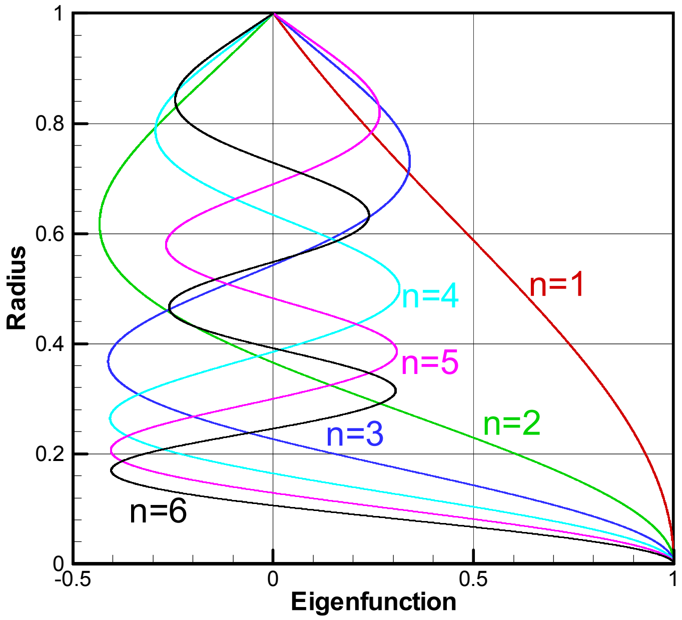

図２　$\Psi^{(1)}$ から $\Psi^{(6)}$ までの固有関数分布（$R=0$ での値を 1 とする）

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