非線型常微分方程式境界値問題の一解法*

高　田　　勝**

1. まえおき

工学問題を数式化した際，非線型の常微分方程式の境界値問題となることが多い．線型ならば重ね合せ可能の性質を利用して，初期値問題として2回数値解法を実行すればよいが[1]，非線型ではそれができない．適当な初期条件を補って試行錯誤的に初期値問題として解く方法もあるが，よほどおとなしい性質のものでないかぎり容易ではない．ダイナミックプログラミングの手法を用いれば解けるという話ではあるが，計算機の記憶容量の点からみると，これも‘お告げ’のようなもので，実用的ではないようだ．もっとも，得られる表を函数近似して（多分，数値積分の結果はおとなしい曲線や曲面であろうから有効と思われる）やれば実用の可能性は出てくる．

ここに述べようとする方法は，差分近似を行ない，かつ線型化して連立方程式の形で解こうとするものである．このように微分を差分で近似すると，一般に微分方程式は，

$$A\underline{x}=\underline{b} \tag{1・1}$$

の形になるが，行列 A は対角要素と，その両側に，ある幅をもった所の要素のみが零でない形をした行列となる．したがって消去法で解 $\underline{x}$ を出すに際しても，そのように必要な部分だけ記憶するような消去法のプログラムを組んでおけばよい．特に化学工学や，熱伝達の問題では 2～3 階の常微分方程式の形がよく現われるが，そのような場合には，A の要素は対角上とその両側に一列のみ要素をもち，他は零となる幅の大きさ3の幅行列(band matrix)となる．つまり(1・1)は3項方程式となるので，消去法が漸化式の形で解ける(Thomas の方法と呼ばれている）ため解法が簡単になる．ここではこのような形のものについて三つの例をあげて説明したい．

* A Numerical Method for Boundary Value Problems of Nonlinear Ordinary Differential Equations, by Masaru Takada (Kyushu University)
昭和39年1月10日第5回プログラミングシンポジウムで講演したものをもとにした．

** 九州大学工学部生産機械工学教室．

2. 化学反応塔の問題

これは，ある数値計算法の本の例題[2]としてあげられたものであって，後述のような適切でないと思われる解法を採用したために，収束がきわめて遅く，実用的な解が得られていないものである．それは次のような2階の非線型常微分方程式であらわされる境界値問題である：

$$\frac{1}{Pe}\frac{d^2f}{dz^2}-\frac{df}{dz}-Rf^m=0,\ 0<z<1.0 \tag{2・1}$$

$$\left.\begin{aligned} z=0:&\ 1.0=f-\frac{1}{Pe}\frac{df}{dz},\\ z=1.0:&\ \frac{df}{dz}=0,\end{aligned}\right\} \tag{2・2}$$

ここで

Pe: Peclect 数（(流体速度)×(反応塔長さ)/(有効軸方向拡散係数)），

R: 反応定数より定まる定数，

z: 無次元軸方向長さ，

f: 残留反応物質の割合．

$m=1$ ならば線型となり問題ないが，ここでは $m=2$ の場合を扱う．z の区間〔0, 1〕を等間隔 h の格子点で分割し，(2・1)，(2・2) 式を差分近似すると

$$\left.\begin{aligned}&\frac{1}{Pe}\frac{f_{n+1}-2f_n+f_{n-1}}{h^2}-\frac{f_{n+1}-f_{n-1}}{2h}\\ &-Rf_n^2=0,\quad (n=0,\ 1,\ \cdots\cdots,\ N)\end{aligned}\right\} \tag{2・3}$$

$$\left.\begin{aligned}&1.0=f_0-\frac{1}{2Peh}(f_1-f_{-1})\\ &f_{N+1}=f_{N-1},\end{aligned}\right\} \tag{2・4}$$

ここに f_n は第 n 番目の格子点での f の値とする．(2・3) 式を先に述べた教科書の著者 Lapidus は二次の代数方程式

$$f_n^2+\frac{2}{RPeh^2}f_n-\frac{(1-Peh/2)f_{n+1}+(1-Peh/2)f_{n-1}}{h^2}=0 \tag{2・5}$$

として解いているが，h を小さくすればするほどこの第 2，3 項の分母は小さくなり，誤差も拡大され収束も悪くなることが予想される．事実，彼の結果を同書

第1表

z	$h=0.04$	$h=0.02$	$h=0.02^*$	$h=0.01^{**}$
0.1	………	0.605 174	-0.7049×10^{-4}	0.604 097
0.2	0.577 406	0.574 974	-0.7444×10^{-4}	0.573 970
0.3	………	0.548 566	-0.8246×10^{-4}	0.547 612
0.4	0.528 072	0.525 723	-0.9341×10^{-4}	0.524 795
0.5	………	0.506 300	-0.9869×10^{-4}	0.505 373
0.6	0.492 705	0.490 236	-0.9677×10^{-4}	0.489 281
0.7	………	0.477 544	-0.9718×10^{-4}	0.476 529
0.8	0.471 155	0.468 320	-1.0078×10^{-4}	0.467 209
0.9	………	0.462 745	-0.9791×10^{-4}	0.461 495
Number of iterations	701	3,488	…………	5,734**

* Values substituted back into left side of (2.5)
** The computation was stopped before complete convergence.

より転載すれば (P 321, Table 6.6) **第1表**のようになり $h=0.04$ で 701 回, $h=0.02$ で 3,448 回, $h=0.01$ では 6,000 回近い反復でも収束しているとはいえず, かつ正しいと思われる値から次第に遠ざかっている.

これは工学をやるものにとって最も大切な order estimation の感覚がないため, 誤った解き方をしたものといえる. われわれは (2・3) 式を, (2・5) 式の形にせず, 小さい値である h^2 をかけて分母を払い, 次の連立方程式とする:

$$\left.\begin{array}{l} f_0+b_0f_1=d_0, \\ f_0+a_1f_1+b_1f_2=d_1, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ f_{n-1}+a_nf_n+b_nf_{n+1}=d_n, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ f_{N-1}+a_Nf_N=d_N, \end{array}\right\} \quad (2\cdot6)$$

ただし,

$$\left.\begin{array}{l} a_0=1, \\ a_n=-(2+RPeh^2f_n)/(1+Peh/2), \\ \quad (n=1,\ 2,\ \cdots\cdots,\ N-1) \\ a_N=-(2+RPeh^2f_N)/2, \\ b_0=-2/(2+(1+Peh/2)\cdot 2\,Peh+RPeh^2f_0), \\ b_n=(1-Peh/2)/(1+Peh/2)\equiv b, \\ \quad (n=1,\ 2,\ \cdots\cdots,\ N-1) \\ d_0=(1+Peh/2)\cdot 2\,Peh/(2+(1+Peh/2)\cdot \\ \quad 2\,Peh+RPeh^2f_0), \\ d_n=0,\ (n=1,\ 2,\ \cdots\cdots,\ N) \end{array}\right\} \quad (2\cdot7)$$

これらの係数中には変数 f を含むものがあるから, 実際には線型ではない. しかし物理的考察よりすれば f, R, Pe などすべて 1～2 の程度の値であることが予想されるので, それに h^2 を乗じたものは他の 1 や 2 に比し十分小さいと考えてよい. したがってまずこれら係数中の f には試みの値を入れて (2・6) 式を線型連立方程式 (今の場合は三項方程式) として解き, 試みた値と比べる. もし対応する新旧の解が十分のケタ数一致していれば計算は終りであるとし, 収束しておらねば新しい解, またはもとの値と新しい値との平均値を係数中の f に代入して, 再びこれを解く. これを相続く反復値が所望のケタ数だけ一致するまで行なう. この反復演算の収束性の理論的証明はないが*, h さえ適当に小さくとれば $RPeh^2f$ の変動にもとづく影響は二次的であるから, 十分収束するものと考えてよかろう.

実際にこの考えで計算した所, **第2表**のような結果を得た. いずれも推定値をすべて $f=0.5$ としてはじめた. **第1表**と比べてわかるように比較にならぬほど収束もよく, 式の残差も小さい. また $h=0.0025$ のような小さな h でも, もちろん収束し, この計算法が十分実用になることがわかった.

なお, この解法を行なうに際しての今一つの利点は, 先に述べたように (2・6) 式が3項方程式であるから消去法の演算が漸化式の形になることである. すなわち

$$\left.\begin{array}{l} q_0=b_0,\ g_0=d_0, \\ w=a_n-q_{n-1},\ g_n=(d_n-g_{n-1})\text{-}w, \\ q_n=b_n/w,\ (n=1,\ 2,\ \cdots\cdots,\ N) \end{array}\right\} \quad (2\cdot8)$$

$$\left.\begin{array}{l} f_N=g_N, \\ f_n=g_n-q_nf_{n+1},\ (n=N-1,\ N-2, \\ \quad \cdots\cdots,\ 1,\ 0) \end{array}\right\} \quad (2\cdot9)$$

で解ける. (2・8) 式は消去法での前進部分, (2・9) 式は逆行 (代入) 部分に相当する.

この計算はまず OKTAC-5090 用の SIP によってプログラムして求めたが, それを ALGOLIP で書いたものが**付録**である. ここに記号の対応は次のとおり:

N(N), I(n), PE(Pe), R(R), H(h), B 0(b_0), A(a), F 1(f), G(g) Q(q).

なお EPS は収束判定用の定数, Kは反復回数を数えるためのものである. ただし ALGOLIP のプログラムでは残差を出す計算を省いている.

3. 熱伝達による自由対流 (線熱源) の問題

水平線熱源による自由対流 (層流定常流れ) の問題

(注) $y''=f(x,\ y)$ の型のものについての収束性の議論が文献[3]にあることを後で知った. 今の場合 $f=F\exp(Pez)$ とおけばこの形になる. このような場合には今少し精度のよい差分近似ができる.

第 2 表

h \ z	0.1 f	0.05 f	0.02 f	0.02 残差	0.01 f	0.01 残差	0.005 f	0.005 残差	0.0025 f	0.0025 残差
0	.636 536 021 7	.636 726 149 4	.636 774 587 0	$.147\times10^{-8}$	.636 781 017 0	$.218\times10^{-8}$	.636 779 613 5	$.460\times10^{-10}$	.636 763 606 0	$.203\times10^{-9}$
0.1	.602 424 327 7	.602 580 576 1	.602 618 980 5	.0	.602 623 914 0	$-.100\times10^{-9}$	.602 621 871 0	$-.800\times10^{-9}$	.602 604 174 5	$-.130\times10^{-8}$
0.2	.572 362 777 5	.572 496 517 1	.572 528 124 0	$-.100\times10^{-8}$	.572 532 035 5	$-.700\times10^{-9}$	.572 529 505 0	$.100\times10^{-9}$	.572 510 446 0	$-.600\times10^{-9}$
0.3	.546 034 225 4	.546 155 216 2	.546 182 811 5	$-.190\times10^{-8}$	.546 186 076 0	$-.190\times10^{-8}$	.546 183 187 5	$-.300\times10^{-9}$	.546 162 847 0	$-.700\times10^{-9}$
0.4	.523 211 720 1	.523 328 642 2	.523 354 703 0	$-.900\times10^{-9}$	.523 357 679 5	$-.300\times10^{-9}$	.523 354 569 5	$.200\times10^{-9}$	.523 333 231 0	$-.900\times10^{-9}$
0.5	.503 750 583 1	.503 871 462 9	.503 898 291 0	$.100\times10^{-9}$	.503 901 321 0	.0	.503 898 109 0	$-.160\times10^{-8}$	.503 875 989 5	$.300\times10^{-9}$
0.6	.487 583 894 7	.487 716 477 2	.487 746 301 9	$-.300\times10^{-9}$	.487 749 712 0	.0	.487 746 514 6	$.100\times10^{-9}$	.487 723 480 1	$.200\times10^{-9}$
0.7	.474 721 041 7	.474 873 125 1	.474 908 191 4	$-.200\times10^{-9}$	.474 912 306 6	$-.100\times10^{-8}$	.474 909 204 9	$.600\times10^{-9}$	.474 885 333 5	$.900\times10^{-9}$
0.8	.465 249 210 7	.465 428 976 6	.465 471 641 9	$.100\times10^{-9}$	.465 476 672 6	$-.320\times10^{-8}$	.465 473 897 2	$.400\times10^{-9}$	.465 449 634 3	$.800\times10^{-9}$
0.9	.459 337 916 6	.459 554 273 0	.459 607 099 7	$-.490\times10^{-8}$	.459 613 178 5	$.710\times10^{-8}$	.459 611 034 9	$-.160\times10^{-8}$	.459 586 766 1	$.700\times10^{-9}$
1.0	.457 246 890 4	.457 509 862 9	.457 575 422 9	$.170\times10^{-8}$	.457 583 657 3	$-.700\times10^{-9}$	.457 579 731 6	$.338\times10^{-7}$	.457 557 530 5	$.343\times10^{-7}$
反復回数	10	13	16		32		23		19	
判定回数	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}		10^{-7}		10^{-7}		10^{-7}	

はもともと，流体の連続の式，ナビアストークスの式およびエネルギーの式から成立つ流体速度に関する非線型の連立偏微分方程式であるが，これに流れ函数ψを代入し，層内の速度場と温度場について相似解の存在を仮定して常微分方程式の境界値問題に帰することができる．その詳細は文献[4]にゆずり，結果のみを記すと

$$f'''+(3/5)ff''-(f')^2/5+h=0, \qquad (3\cdot1)$$

$$h''+(3/5)Pr(fh)'=0, \qquad (3\cdot2)$$

境界条件

$$\left.\begin{array}{l}\xi=0:f=0,\ f''=0,\ h'=0,\\ \xi=\infty:f'=0,\ h=0\end{array}\right\} \qquad (3\cdot3\mathrm{a,b})$$

なる形の常微分方程式の境界値問題となる．ここで式の独立変数ξはもとの連立偏微分方程式の座標 x, y の分数べきの積に比例し，f, h はそれぞれ流れ函数，温度から導かれる量であり，Pr はプラントル数である．これらの式および境界条件はすべて斉次であって，このほかに，熱源の負荷条件より

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}hf'\,d\xi$$

が定められるが，導入した変数ξがいろいろの Pr の値に対して共通であるようにするためにつぎの条件を付加する：

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}hf'd\xi=1 \qquad (3\cdot4)$$

なお運動量保存則から導出される次式は計算結果の精度を見るうえに役立つ：

$$\frac{4}{5}\int_{-\infty}^{\infty}(f')d\xi=\int_{-\infty}^{\infty}hd\xi \qquad (3\cdot5)$$

今

$$f=(5/3)F,\ h=(5/3)H \qquad (3\cdot6)$$

とおき (3.1)〜(3.3) に代入すると

$$F'''+FF''-(F')^2/3+H=0, \qquad (3\cdot1')$$

$$H'+Pr(FH)'=0, \qquad (3\cdot2')$$

$$\left.\begin{array}{l}\xi=0:F=0,\ F''=0,\ H'=0,\\ \xi=\infty:F'=0,\ H=0.\end{array}\right\} \qquad (3.3'\mathrm{a,b})$$

また (3・4) 式は

$$\int_{-\infty}^{\infty}F'Hd\xi=\left(\frac{3}{5}\right)^2. \qquad (3\cdot4')$$

この ξ, F, H を

$$\xi=aX,\ F=bY,\ H=cZ \qquad (3\cdot7)$$

とおく．ここに a, b, c は定数．これを (3.1′), (3.2′) 式に代入して

$$\frac{b}{a^3}Y'''+\frac{b^2}{a^2}YY''-\frac{1}{3}\ \frac{b^2}{a^2}(Y')^2+cZ=0, \qquad (3\cdot1'')$$

$$\frac{c}{a^2}Z''+Pr\cdot\frac{bc}{a}(YZ)'=0. \qquad (3\cdot 2'')$$

ここに (′) はXに関する微分をあらわす．もし

$$ab=1,\quad b^2=a^2c \qquad (3\cdot 8)$$

であれば(3・1″)，(3・2″) 式は(3・1′)，(3・2′) 式とそれぞれ一致する．つまり

$$Y'''+YY''-(Y')^2/3+Z=0, \qquad (3\cdot 9)$$

$$Z''+Pr(YZ)'=0, \qquad (3\cdot 10)$$

$$\left.\begin{array}{l} X=0: Y=0,\ Y''=0,\ Z=0, \\ X=\infty: Y'=0,\ Z=0 \end{array}\right\} \qquad (3\cdot 11\,\mathrm{a,b})$$

となる．しかし (3・8) を満足する a, b, c には任意の組み合わせが可能であるから，(3・1″)，(3・2″) の解は一義的に定まらない．そこで $X=0$ における $Y'(0)$ あるいは $Z(0)$ のどちらか一つを適当に定めて，境界条件 (3・11) 式を満足する Y, Z が得られれば，それは一つの解である．その Y および Z について

$$\int_{-\infty}^{\infty}Y'ZdX=J \qquad (3\cdot 12)$$

を求め (3・4′) 式の条件を用いて a, b, c を求めることができる．一方 (3・7) 式を (3・4′) 式に代入して

$$\int_{-\infty}^{\infty}F'Hd\xi=bc\int_{-\infty}^{\infty}Y'ZdX=\frac{1}{2}\left(\frac{3}{5}\right)^2$$

$$\therefore\ bcJ=9/50 \qquad (3\cdot 13)$$

これと (3・8) 式から a, b, c を解くと

$$a=(9/50J)^{-1/5},\ b=(9/50J)^{1/5},\ c=(9/50J)^{4/5}$$

すなわち(3・4′) の条件を満足する (3・1′)〜(3・3′) 式の解は

$$\left.\begin{array}{l} \xi=\left(\frac{9}{50J}\right)^{-\frac{1}{5}}X,\quad F=\left(\frac{9}{50J}\right)^{\frac{1}{5}}Y, \\ H=\left(\frac{9}{50J}\right)^{\frac{4}{5}}Z,\quad F'=\left(\frac{9}{50J}\right)^{\frac{2}{5}}Y' \end{array}\right\} \qquad (3\cdot 14)$$

となる．

けっきょく，(3・9)，(3・10) 式を条件 (3・11) 式の下に解くことが問題となる．

まず(3・10) 式を1回Xについて積分して (3・11) 式の条件の一つを用いると

$$Z'+PrYZ=0,\ \text{あるいは}\ (Z'/Z)=-PrY.$$

さらに今一度積分して

$$Z=Z_0\exp\left\{-Pr\int_0^X YdX\right\} \qquad (3\cdot 15)$$

を得る．今 $Y'=P$ あるいは

$$Y=\int_0^X PdX \qquad (3\cdot 16)$$

とおき (3・9) 式に代入して

$$P''+YP'-(P)^2/3+Z_0\exp(-YL)=0, \qquad (3\cdot 17)$$

ここに

$$YL=Pr\int_0^X YdX. \qquad (3\cdot 18)$$

これらを数値積分するために(3・17) 式を前節の例にならって差分近似する．まず $X=0$ での式は，(3・11 a) 式の $Y''=0$ ($P'=0$) から，Xの格子間隔を h として

$$(P(h)-P(-h))/2h=0 \quad \therefore\ P_{-1}=P_1$$

を用いて

$$(2+(h^2/3)P_0)P_0-2P_1=Z_0h^2. \qquad (3\cdot 19)$$

一般に $X=nh$ では

$$-(1-(h/2)Y_n)P_{n-1}+(2+(h^2/3)P_n)P_n -(1+(h/2)Y_n)P_{n+1}=Z_0h^2\exp(-YL_n) \qquad (3\cdot 20)$$

となる．また $X=\infty$ での条件から，十分大きな $X=Nh$ で

$$P_N=0 \qquad (3\cdot 21)$$

であることが必要となる．

このように差分近似して，もし (3・19)，(3・20) 式の ( ) 内にある h または h^2 のかかった項の Y_n, P_n に推定値あるいは前回の反復値を用いるとすれば，これらの式は線型連立一次方程式しかも三項方程式となり，前節同様の解法を適用することができる．計算の手順はあらましつぎのとおり：

1) (3・21) 式が満足されるように，適当なきざみ幅 h に対して十分大きな N を想定する．

2) Pの第0近似 P° を推定する．たとえば $P^\circ=(1-\tanh^2(X/2))/2$ とする*．また Z_0 を適当に仮定 (たとえば $Z_0=1/3$) とする．

3) これを (反復計算のときはその前の反復時に得られた値を) (3・16)，(3・18) に代入して $\overline{Y_n}, \overline{YL_n}$ を求める．

4) これらを (3・19)，(3・20) 式の ( ) 内 h のかかった項に代入して，これらを線型連立方程式として Thomas の方法を用いて解く．

5) 得られた P から，Y, YL を求め，はじめ仮定して得た Y (あるいは前回の反復値) と比べて，所望のケタ数一致したか否かを調べる．収束が悪ければ，新しく得た値を用いて 4) 以下の手順を繰り返す．

6) もし収束したならば，$|P_N|<\varepsilon$ (ε は小さな正数) であるかどうかをみる．もし満足していなければさらに N を大にして 4) 以下を繰り返す．

---

* 幸い $Pr=2$ に対して (3・1′)，(3・2′) 式の解析解が見出だされているので[4]，その値を推定値とする．

7)　満足していたら $J=\int_{-\infty}^{\infty}Y'ZdX$ を求め，(3・14) で規格化する．そして ξ, f, h, f' を求める．

この計算はまず日本科学技術研修所計算センターの HIPAC-101 B により，SIP でプログラムして行なわれた*．またその後，いろいろのパラメータ Pr の値で計算する必要が生じ，OKITAC-5090 用 ALGOLIP でプログラムし直して計算を行なった．そのプログラムは付録IIのとおりである．

計算をはじめるに当たっては，$Pr=2$ についての解析解がわかっていたので，まずそれを数値計算結果と比較してみた．きざみ幅 $\Delta X=h=2^{-3}$, $N=80$ の場合 $\xi=0$ で

解析解　$F'(0)=0.502$, $H(0)=0.336$,

数値解　$F'(0)=0.503$, $H(0)=0.337$

の程度で一致しており，また運動量保存則から出てくる条件 $(4/3)(F')^2=H$ が，あらゆる ξ の値に対して 0.001 以下の程度の誤差で成立っていた．したがって計算に要求された精度の上からはまず十分なものと考えた．また，他の Pr の値に対しては (3・5) 式の関係がどの程度の精度で成立っているかで見当つけられるが，これは Pr の大きな値に対して精度が悪くなる．理由は H が δ-函数のようになってくるためであって，これらの模様は**第3表**に見られる．

第3表　線 熱 源

P_r	Δx	N	収束判定定数	反復回数	計算時間〔分〕	I_f	I_h
1.0	2^{-4}	200	10^{-5}	21	22	0.4695	0.4720
2.0	(2^{-3} 2^{-4}	80 200	2^{-18} 10^{-5}	8 20	26+34) 23		
3.0	2^{-4}	200	10^{-5}	19	22	0.4401	0.4376
5.0	2^{-4}	200	10^{-5}	17	19	0.4377	0.4317
10.0	(2^{-6} 2^{-4}	160 200	2^{-18} 10^{-5}	12 14	45+65) 15	0.4442	0.4313
30.0	2^{-4}	200	10^{-5}	16	15	0.4729	0.4423
100.0	2^{-4}	200	10^{-5}	14	15	0.5251	0.4591
300.0	2^{-4}	200	10^{-5}	17	13	0.5899	0.4650
1000.0	2^{-4}	200	10^{-5}	17	13	0.7060	0.4215
0.01	(1 2^{-1}	190 200	2^{-18} 10^{-5}	12 26	52+76) 26	0.7702	0.7850
0.03	2^{-1}	200	10^{-5}	25	25	0.6768	0.6957
0.1	2^{-4}	200	10^{-5}	29	25	0.6100	0.6157
0.3	2^{-4}	200	10^{-5}	24	25	0.5353	0.5404
0.7	(2^{-3} 2^{-4}	80 200	2^{-18} 10^{-5}	9 23	36+36) 26	0.4860	0.4896

(　) は HIPAC 101 B による場合，このときの計算時間は計算時間＋印刷時間を分で示す．
I_f, I_h は運動量保存則の成立を見るための値で，値が近いほどよい．

この計算を実行するに際しての一つの困難は，得られた結果の Y そのものを次の推定値として反復すると次第に発散する傾向を示したことである．これはきざみ幅が十分小さくないため，三項方程式の係数行列中の対角要素が，非対角要素に比べてあまり大きくなく，また1に比べて $h\bar{Y}_n/2$ がさほど小さくないためとも考えられるが，きざみ幅 h を小さくすると分点の数が大となり，計算機の容量から制限をうけるし，計算時間もきわめて大となるので，格子点数を増すこともできない．そこで，前回の推定値と，得られた新しい値との平均値を用いるようにした所，うまく収束させることができた．（手順3）の（　）内をそのように修正）．このようなやり方はかなり荒っぽいもので，理論的でないが，平均という操作はこのような場合有効のようである．このプログラムに要した命令は HIPAC (SIP) の場合約 700，記憶装置はほとんど使いきっていた．

* このプログラミングに関しては，立教大学藤川洋一郎教授，および同センター石川照子さんにたいへんお世話になった．

4.　熱伝達による自由対流（点熱源）の問題

前節の場合で熱源が点熱源となった場合，(3・1)〜(3・3) 式に相当する式はつぎのようになる：

$$\frac{f'''}{\xi}+\frac{f-1}{\xi}\left(\frac{f'}{\xi}\right)'+h=0, \qquad (4\cdot1)$$

$$(\xi h')'+Pr(fh)'=0, \qquad (4\cdot2)$$

$$\left.\begin{aligned}&\xi=0:\frac{f}{\xi}-\frac{f'}{2}=0,\left(\frac{f'}{\xi}\right)'=0,\ h'=0,\\&\xi=\infty:\frac{f'}{\xi}=0,\ h=0.\end{aligned}\right\} \qquad (4\cdot3\,\mathrm{a,\,b})$$

ここで $\xi=0$ において速度が有限でなければならぬから，f'/ξ も有限でなければならない．したがって $f'(0)=0$ であり，さらに (4・3 a) の第一条件より $f(0)=0$ となる．また，この場合の規格化の条件は

$$\int_0^{\infty}hf'd\xi=1 \qquad (4\cdot4)$$

前節同様，任意の一つの解から規格化する積分は

$$\int_0^{\infty}Y'ZdX=J \qquad (4\cdot5)$$

これより

$$\left.\begin{aligned}&\xi=J^{1/4}X,\ f=Y,\ h=J^{-1}Z\\&f'/\xi=J^{-1/2}Y/X,\end{aligned}\right\} \qquad (4\cdot6)$$

として解が得られる．けっきょく (4・1)，(4・2) 式と同形となり

$$\frac{Y'''}{Y}+\frac{Y-1}{X}\left(\frac{Y'}{X}\right)'+Z=0, \qquad (4\cdot7)$$

$$(XZ')'+Pr(YZ)'=0, \qquad (4\cdot8)$$

$$X=0:\frac{Y}{X}-\frac{Y'}{2}=0,\left(\frac{Y'}{X}\right)'=0,\ Z'=0,$$

$$X=\infty:\ \frac{Y'}{X}=0,\ Z=0. \qquad (4\cdot 9\,\mathrm{a,b})$$

やはり $X=0$ で任意の適当な値 Z_0 を与えて解を求める．また差分近似は次のようにした．(4・8) 式を2回積分して (4・9) 式の条件を考慮し，

$$XZ'+PrYZ=0,\ \text{または}\ Z'/Z=-PrY/X,$$

$$\therefore\ Z=Z_0\exp\left\{-Pr\int_0^X(Y/X)dX\right\} \qquad (4\cdot 10)$$

つぎに

$$Y'/X=P \qquad (4\cdot 11)$$

とおき，これと (4・10) 式を (4・7) 式に入れて

$$P''+(Y+1)P'/X=-Z_0e,^{-YL} \qquad (4\cdot 12)$$

ここに

$$YL=Pr\int_0^X(Y/X)dX. \qquad (4\cdot 13)$$

(4・7) 式をつぎのように差分近似する．$X=0$ で P'/X は不定であるが，(4・9) 式より $\lim\limits_{X\to 0}(P'/X)=P_0''$ ゆえ (4・12) 式より $2P_0''=-Z_0$．したがって $\lim\limits_{X\to 0}(P'/X)=-Z_0/2$．また $P_0'=0$ より $P_{-1}=P_1$ ゆえ，$X=0$ での (4・12) 式の差分近似はきざみ幅を h として

$$-2P_0+2P_1-h^2Z/2=-Z_0h^2$$

または

$$P_0-P_1=h^2Z_0/4, \qquad (4\cdot 14)$$

一般の格子点 $X=nh$ では

$$-\left(1-\frac{Y_n+1}{2n}\right)P_{n-1}+2P_n-\left(1+\frac{Y_n+1}{2n}\right)P_{n+1}$$
$$=Z_0h^2e^{-YL_n} \qquad (4\cdot 15)$$

この場合の計算法も前例同様なので，詳細は略するが，結果は**第4表**のようになる．やはり $Pr=1$ と2の場合について解析解が得られていたので，それについてテストし，他の Pr の値の場合はそれを最初の推定値として用いた．なお $Pr=2$ の場合の解析解と数値解との比較は**第5表**に示した．これによるとかなりよい一致を示している．

第4表 点 熱 源

P_r	Δx	N	収束判定定数	反復回数	計算時間 分	I_f	I_h
1.0	(2^{-8} 2^{-4}	160 400	2^{-18} 10^{-4}	22 21	78+42) 25	1.9970	1.9999
2.0	(2^{-8} 2^{-4}	160 320	2^{-18} 10^{-4}	18 15	65+41) 23	1.4865	1.4918
3.0	2^{-4}	320	10^{-4}	9	24	1.2817	1.2892
5.0	2^{-4}	320	10^{-4}	11	21	1.0896	1.1019
10.0	(2^{-8} 2^{-4}	160 320	2^{-18} 10^{-4}	14 11	60+40)	0.9046	0.9269
30.0	2^{-4}	320	10^{-4}	15		0.7065	0.7546
100.0	2^{-4}	320	10^{-4}	11		0.5478	0.6418
300.0	2^{-5}	384	10^{-4}	14	19	0.2877	0.5916
1000.0	10^{-5}	384	10^{-4}	9	19	0.1754	0.5449
0.01	(1 2^{-8}	190 560	 10^{-4}	195 35	1090+80) 41	18.4739	18.4924
0.03	2^{-8}	560	10^{-4}	57	40	11.3270	11.3349
0.1	10^{-8}	400	10^{-4}	53	35	6.2348	6.2410
0.3	2^{-8}	320	10^{-4}	45	35	3.5934	3.5964
0.7	(2^{-8} 2^{-8}	160 320	 10^{-4}	28 29	116+44) 35	2.3654	2.3655

5. 結 び

非線型常微分方程式の境界値問題を差分法によって解く方法を実例で示した．ここにあげたものはすべて三項方程式に帰着できるものばかりであったが，これはもとの方程式が2～3階程度の場合につごうがよい．もっと高階のものも2階のものの連立形にするか，あるいはそのまま差分近似して連立一次方程式として解けばよい．たいていの場合は一つの差分式の項数は少なく，係数行列の要素は対角線の両側に幅をもったものと考えられるから，その部分のみ記憶するようなくふうをこらせばよい．なお柱の曲げ問題など4階の微分方程式では5項方程式となるであろうが，このような5項方程式の場合も消去法を漸化式の形にすることができる．

第5表 $P_r=2$ の解析解との比較

ξ	f			h/P_r			f'/ξ		
	解析解	数値解	誤差 %	解析解	数値解	誤差 %	解析解	数値解	誤差 %
0	0	0		0.625000	0.625032	0.005	1.118034	1.118072	0.003
0.174 980	0.017086	0.017039	−0.275	0.614392	0.614451	0.010	1.108475	1.108559	0.008
0.349 959	0.067310	0.067295	−0.222	0.583981	0.584025	0.008	1.080693	1.080734	0.004
0.524 939	0.148331	0.148295	−0.024	0.537325	0.537381	0.010	1.036628	1.036638	0.001
1.049 877	0.533925	0.533775	−0.028	0.352364	0.352457	0.026	0.839452	0.839343	−0.013
1.574 816	1.029571	1.029183	−0.038	0.190077	0.190174	0.051	0.616549	0.616288	−0.042
2.099 755	1.525016	1.524279	−0.048	0.091607	0.091686	0.086	0.428022	0.427629	0.092
2.974 652	2.211589	2.209722	−0.084	0.024975	0.025019	0.176	0.223489	0.222908	−0.260
4.024 530	2.774351	2.769979	−0.158	0.055056	0.055290	0.425	0.104968	0.104205	−0.727

以上，理論的な裏づけはないが，実用的に有用と思われる非線型常微分方程式の差分近似による解法例を示した．計算に当たり注意すべきことを繰り返していうと，それは問題の物理的な意義の把握，および order estimation であると思う．

終りに計算資料の取りまとめをしてくださった九州大学生産技術研究所の上原春男君，日本科学技術研修所計算センターの石川照子さんに深謝する．

参考文献

1) 森口，高田：数値計算法II（岩波講座現代応用数学，1958），§ 24.
2) Lapidus, L.: Digital Computation for Chemical Engineers (McGraw-Hill, 1962), 318, Example 6.3.
3) Henrici, P.: Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations (John Wiley, 1962), Chapt. 7.
4) 藤井：水平線熱源および点熱源による自然流，九州大学生産科学研究所報告第 33 号，1962.

〔付録 I〕 化学反応塔の問題

```
begin integer N, I, K, CTEST, S 1;
      real PE, R, H, D, DD, B 0, B, EPS;
      array A, F 1, G, Q[0: 400];
START: PE:=READREAL; R:=READREAL;
      H:=READREAL; EPS:=READREAL;
  N:=FIX(1.0/H):
  PRINTSTRING('  PE= '); PRINTREAL(PE);
  PRINTSTRING('   R= '); PRINTREAL(R);
  PRINTSTRING('   H= '); PRINTREAL(H);
  PRINTSTRING(' EPS= '); PRINTREAL
                              (EPS);
  PRINTSTRING('   N= '); PRINTINTEGER
                              (N);
   CRLF(2);
  PH:=1.0+PE*H/2.0;  RPH:=R*PE*H*H;
  B:=(2.0-PH)/PH;  DD:=PH*2.0*PE*H;
   for I:=0 step 1  until N do F 1[I]:=0.5;
  A[0]:=1.0; K:=S 1:=0;
KINC: K:=K+1;
   for I:=1 step 1 until N-1 do
  A[I]:=-(F 1[I]*RPH+2.0)/PH;
  A[N]:=-(F 1[N]*RPH/2.0+1.0);
  D:=2.0+DD+RPH*F 1[0];
  Q[0]:=B 0:=-2.0/D;
 G[0]:=D:=DD/D;
   for I:=1 step 1 until N do
     begin real W;
      W:=A[I]-Q[I-1]; G[I]:=-G[I-1]/W;
      Q[I]:=B/W
     end;
 CTEST:=0; if ABS(G[N]-F 1[N])>EPS then
          CTEST:=1;
     if S 1≠0 then go to AVE 1;
NEXT: F 1[N]:=G[N]; go to REV;
AVE 1: F 1[N]:=(F 1[N]+G[N])/2.0;
REV: for I:=N-1 step -1 until 0 do begin
     real DELT, F;
   F:=G[I]-Q[I]*F 1[I+1]; DELT:=ABS
       (F-F 1[I]);
     if S 1≠0 then go to P 2;
P 1: F 1[I]:=F; go to TEST;
P 2: F 1[I]:=(F+F[I])/2.0;
TEST: if EPS<DELT then CTEST:=1
     end;
       if CTEST=0 then go to END;
       if S 1≠0 then go to P 4;
P 3: ifK≧15 then begin S 1:=1; go to KINC
     end;
P 4: if K≦50 then go to KINC;
NOSOL: PRINTSTRING (' NOT CO ');
         PRINTSTRING(' NVERGE ');
         PRINTSTRING(' D        ');
        CRLF(2);
END: for I:=0 step 1 until N do PRINTREAL
       (F 1[I]);
       CRLF(2); PRINTINTECER(K);
       CRLF(5);
       go to START
 end
1.0, 2.0, 0.02, ₁₀-6,    1.0, 2.0, 0.01, 2.0₁₀-7,
```

〔付録II〕 熱伝達による自然対流（線熱源）の問題

```
begin integer N, NN, M, I;
    real   PR, Z0, EPS, H, HH, X, YL, AL, A, IF, IH, P0, DELT, EI, CI, JI, KI, GSAE, V, C, W;
    array  Y, P, Z, Q, G[0:200];
  START: PR:=READREAL: Z0:=READREAL; P0:=READREAL; EPS:=READREAL;
        AL:=READREAL; NN:=READINTEGER; M:=READINTEGER; PRINTREAL(PR);
        PRINTREAL(Z0); PRINTREAL(P0); PRINTREAL(EPS); PRINTREAL(AL);
        PRINTINTEGER(NN); PRINTINTEGER(M); CRLF(2);
    N:=NN*M; H:=1.0/FLOAT(M); HH:=H*H; Y[0]:=0; halt;
  for I:=1 step 1 until N do
    begin   real ALX; X:=FLOAT(I)*H; ALX:=2.0*AL*X; W:=EXP(-ALX);
          W:=(1.0-W)/(1.0+W);    Y[I]:=(10.0/3.0)*AL*W;
          P[I]:=(10.0/3.0)*(AL↑2)-(3.0/10.0)*(Y[I]↑2)
    end;
     Z[0]:=Z0; P[0]:=P0;
 L1: YL:=Y[1]*H/2.0; Z[1]:=Z0*EXP(-PR*YL);
    for I:=2 step 1 until N do
    begin  YL:=YL+(Y[I-1]+Y[I])*H/2.0; Z[I]:=Z0*EXP(-PR*YL); if Z[I]<₁₀-20 then
          Z[I]:=0
    end;
W:=-(2.0+HH*P[0]/3.0); G[0]:=-Z0*HH/W; Q[0]:=2.0/W;
  for I:=1 step 1 until N do
    begin   if G[I-1]<₁₀-20 then G[I-1]:=0; A:=-(2.0+HH*P[I]/3.0); C:=1.0-H*Y[I]/2.0;
        W:=A-Q[I-1]*C; G[I]:=-(Z[I]*HH+C*G[I-1])/W; Q[I]:=(2.0-C)/W
    end;
    P[N]:=G[N];
  for I:=N-1 step-1 until 0 do    P[I]:=G[I]-Q[I]*P[I+1];
    DELT:=0; Q[0]:=0;
for I:=1 step 1 until N do
    begin real DEF;  W:=Q[I-1]+(P[I-1]+P[I])*H/2.0;  DEF:=ABS(W-Y[I]);  Q[I]:=W;
        if DEF<DELT then DELT:=DEF
    end;
    for I:=1 step 1  until N do    Y[I]:=(Y[I]+Q[I])/2.0;
  if EPS≧DELT then go to L2;    PRINTREAL(DELT);    CRLF(1); go to L1;
 L2:  W:=ABS(P[N]);    if W>0.0001 then go to L4; halt
 L3:  W:=V:=0;
  for I:=1 step 2 until N-1 do
    begin W:=W+Z[I]*P[I]; V:=V+Z[I+1]*P[I+1]  end;
       W:=W*4.0; V:=2.0*V-Z[N]*P[N]; W:=0.54/H/(W+V+P[0]*Z[0]);
       EI:=EXP(LN(W)/5.0); CI:=1.0/EI; JI:=EI↑2;
       KI:=JI↑2; GSAE:=CI*H; V:=KI/SQRT(PR);
  for I:=0 step 1 until N do
    begin  real S, T;
```

```
        W:=GSAE*FLOAT(I);  S:=Y[I]*EI;  T:=2.0/3.0*W*P[I]*JI;
        PRINTREAL(W);  PRINTREAL(5.0/3.0*Y[I]*EI);
        PRINTREAL((5.0/3.0)*P[I]*JI);  PRINTREAL((5.0/3.0)*V*Z[I]);
        PRINTREAL(S);  PRINTREAL(T);
        PRINTREAL(S-T);  CRLF(2)
    end;  halt
    W:=V:=0;
  for  I:=1 step 2 until N-1 do
    begin    W:=W+(P[I]↑2)*2.0+(P[I+1]↑2);    V:=V+Z[I]*2.0+Z[I+1]    end;
        IF:=(4.0/3.0)*(W*2.0-P[N]↑2)*H/3.0*KI;
        IH:=(V*2.0-Z[N])*H/3.0*KI;
            PRINTREAL(IF);    PRINTREAL(IH);    CRLF(5);
 L4:  go to START;
end
```

1.0,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
3.0,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
5.0,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
10.0,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
30.0,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
100.0,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
0.01,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
0.03,	0.3,	0.5,	0,00001,	0.50124,	25,	8,
0.1,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
0.3,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,
0.7,	0.3,	0.5,	0.00001,	0.50124,	25,	8,