楕円型方程式の解に対する数値的検証方式の効率化

中尾充宏*(九州大学数理学研究院)，渡部善隆 (九州大学情報基盤センター)
mtnakao@math.kyushu-u.ac.jp

1　はじめに

2 階楕円型境界値問題の解の数値的検証では，これまで，問題を有限次元への projection とその誤差部分の二つに分け，前者には区間 Newton 型反復の直接計算を行い，後者には projection の a priori 評価による逐次型反復を用いてきた．この方法においては，前者と後者が互いに関わりながら反復が実行され，検証対象方程式が 1 階微分の項を含まない場合には，実用上十分効率的であることが既に多数の検証例から実証されている．これは，前者は Newton 法の局所縮小性が働き，後者には近似空間の近似度を上げれば必ず縮小化が起こるという検証原理が基盤になっている．

一方，1 階微分項をともなう場合には，後者で評価した誤差が適切に有限次元反復に反映されず，その結果，近似空間の近似度を上げても検証達成が困難な場合が起こりうることが判明した．

本稿では，そのような難点を克服する一つの方法を提案し, その実例を挙げる．

2　問題と不動点定式化

以下本稿では，多少冗長ではあるが問題の設定も含めて従来の検証法について今一度なるべく self-contained な形で述べることにする．

2.1　関数空間の設定

Ω を $\mathbb{R}^n (n = 1, 2, 3)$ の有界凸領域で，境界 $\partial\Omega$ は区分的に滑らかとする．$L^2(\Omega)$ の内積を $(u, v) := \int_\Omega u(x)v(x)\ dx$ と表記する．また，自然数 m に対する Ω 上の L^2-Sobolev 空間 $H^m(\Omega)$ の内積は

$$\sum_{|k|=0}^{m} (D^{(k)}u, D^{(k)}v)$$

で定めるが,

$$H_0^1(\Omega) := \{u \in H^1(\Omega) \mid tr(u) = 0,\ x \in \partial\Omega\}$$

に対しては, その内積を $(\nabla u, \nabla v)$ で定める．このとき，Poincaré の不等式より,

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)} := \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} = \left(\sum_{i=1}^{n} \|\partial u/\partial x_i\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}$$

は Ω 上 $H^1(\Omega)$ ノルムと同値な $H_0^1(\Omega)$ ノルムとなる．

2.2 不動点定式化

次の非線形楕円型境界値問題を考える.

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x,u,\nabla u), & x \in \Omega, \\ u = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases} \tag{1}$$

ここで，$\Delta u = \partial^2 u/\partial x_1^2 + \cdots + \partial^2 u/\partial x_n^2$ とする．f は次の仮定を満たすとする.

1. f は $H^1(\Omega)$ から $L^2(\Omega)$ への連続写像.
2. 有界集合 $U \subset H^1(\Omega)$ に対し,

$$f(\cdot,U,\nabla U) := \{f(\cdot,u,\nabla u) \mid u \in U\} \subset L^2(\Omega)$$

も有界.

有限要素法でよく知られた弱形式化手法を用いて，(1) を次を満たす弱解 $u \in H_0^1(\Omega)$ を求める問題に書き直す.

$$(\nabla u, \nabla v) = (f(x,u,\nabla u), v), \quad \forall v \in H_0^1(\Omega). \tag{2}$$

次に，(1) の線形化問題である Poisson 方程式に対する補題 [2, 3] を用いる.

Lemma 1 任意の $g \in L^2(\Omega)$ に対し,

$$\begin{cases} -\Delta \phi = g, & x \in \Omega, \\ \phi = 0, & x \in \partial\Omega, \end{cases} \tag{3}$$

は唯一の解 $\phi \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ を持ち,

$$|\phi|_{H^2(\Omega)} \le \|g\|_{L^2(\Omega)} \tag{4}$$

が成立する．ただし，$|\cdot|_{H^2(\Omega)}$ は $H^2(\Omega)$ 上のセミノルム:

$$|v|_{H^2(\Omega)}^2 = \sum_{i,j=1}^n \|\partial^2 v/\partial x_i \partial x_j\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

$L^2(\Omega)$ の元 g から (3) の解 $\phi \in H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$ の対応関係を $\phi = Ag$ と定義すると，A は $L^2(\Omega)$ から $H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ への全単射写像になる．また，$H^2(\Omega)$ から $H^1(\Omega)$ への恒等写像を $\hat{I}$ とおくと，$\hat{I}$ はコンパクト作用素であることが示せる [1, 5]．したがって f の仮定より，コンパクトな合成写像:

$$F := \hat{I}Af : \quad H_0^1(\Omega) \longrightarrow H_0^1(\Omega)$$

を定義することができ，(2) は $H_0^1(\Omega)$ 内の不動点方程式:

$$u = F(\cdot,u,\nabla u) \tag{5}$$

と同値になる．以降，簡単のため,

$$f(u) := f(\cdot,u,\nabla u), \qquad Fu := F(\cdot,u,\nabla u)$$

と表記する．不動点方程式の対応は以下の通り.

$$\begin{array}{ccccccc} H_0^1(\Omega) & \xrightarrow{f} & L^2(\Omega) & \xrightarrow{A} & H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega) & \xhookrightarrow{\hat{I}} & H_0^1(\Omega) \\ u & \mapsto & f(u) & \mapsto & Af(u) & \mapsto & Fu \end{array}$$

3　解の存在検証

3.1　近似空間と疑似 Newton 法

不動点方程式 (5) を近似空間内の不動点方程式とその誤差空間にあたる空間の不動点方程式に分解し，有限次元部分を Newton 型方程式に書き直す．

$H_0^1(\Omega)$ の近似空間として，パラメータ $h > 0$ に依存する有限次元部分空間 S_h を用意する．$H_0^1(\Omega)$ から S_h への射影として，$\phi \in H_0^1(\Omega)$ に対する H_0^1 内積の意味での直交射影 (H_0^1-projection) $P_h\phi \in S_h$ を次のように定義する．

$$(\nabla(\phi - P_h\phi), \nabla v) = 0, \quad \forall v \in S_h. \tag{6}$$

また，P_h の近似性として

$$\|v - P_hv\|_{H_0^1(\Omega)} \le Ch|v|_{H^2(\Omega)}, \qquad \forall v \in H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$$

が成り立つことを仮定する．ここに $C > 0$ は有限要素空間の近似性から定まる定数で，具体的な上界値が算定可能であるとする．C の値は，例えば，2 次元矩形領域において S_h の基底を区分的双 1 次多項式にした場合には $1/\pi$，区分的双 2 次多項式にした場合は $1/(2\pi)$，また 2 次元多角形領域を一様に三角形分割し各分割領域上で 1 次多項式となる有限要素空間 S_h を設定した場合には $C = 0.81$ とできることが知られている [4].

S_h は $H_0^1(\Omega)$ の閉部分空間のため，$H_0^1(\Omega)$ の任意の元は S_h の元と直交補空間 $S_h^\perp$ の元で一意に書き表すことができる．よって，$H_0^1(\Omega)$ の不動点方程式 $u = Fu$ も P_h を用いて次のように S_h の部分と $S_h^\perp$ の部分に (一意に) 分解することができる．

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_hu &=& P_hFu, \\ (I - P_h)u &=& (I - P_h)Fu. \end{array} \right. \tag{7}$$

(7) の第 1 式は H_0^1-projection を介しているため，S_h における有限次元の問題となる．(7) の第 2 式は無限次元の不動点方程式ではあるものの，S_h の近似度がよければ縮小写像的な働きをすることが期待される．よって，分解された不動点問題の有限次元部分に Newton 法を適用する．

$u_h \in S_h$ を問題 (2) の近似解とする．$P_h(I - F'(u_h))$ の定義域を S_h に制限した逆写像を $[I - P_hF'(u_h)]_h^{-1}$ と書き，存在を仮定する．実際の数値計算では，計算機内に対応する行列を構成して逆写像の存在を数学的に厳密な意味で確認する．

$$N_hu := P_hu - [I - P_hF'(u_h)]_h^{-1}P_h(u - Fu)$$

とおくと，S_h 内における不動点方程式 $P_hu = P_hFu$ と $P_hu = N_hu$ は同値になる．以上より，縮小的であることが期待される $H_0^1(\Omega)$ 上の作用素 T を

$$Tu := N_hu + (I - P_h)Fu \tag{8}$$

で定義すると， T は $H_0^1(\Omega)$ 上のコンパクト作用素，かつ，不動点方程式 $u = Tu$ は $u = Fu$ すなわち (2) と同値となる．

3.2 解の存在検証条件

$$U := u_h + U_h + U_*, \qquad U_h \subset S_h, \quad U_* \subset S_h^{\perp}$$

とする，このとき Schauder の不動点定理を用いて以下の検証条件が成立する．

Theorem 1 $U = u_h + U_h + U_* \subset H_0^1(\Omega)$ が有界凸閉集合かつ

$$\begin{cases} P_h TU - u_h & \subset & U_h, \\ (I - P_h)FU & \subset & U_* \end{cases} \tag{9}$$

が成り立つならば，T の不動点すなわち *(2)* の解が U 内に存在する．

Theorem 1 の条件を満たす集合は，しばしば「候補者集合 (candidate set)」と呼ばれる．(9) の第 1 式，第 2 式の左辺は無限次元の項が含まれるため正確に計算することはできない．しかし，ノルム評価などを用いた大きめの評価は可能である．

4 候補者集合の構成

従来は，候補者集合の中の U_h は S_h の基底関数に関する区間係数の一次結合の形で表現し，(9) の第 1 式の左辺を右辺が区間ベクトルであるような連立 1 次方程式の解を直接計算する形で定めていた．ところが，この方式では作用素が 1 階微分の項を含む場合に，計算効率が落ちる場合のあることがわかり，その場合には以下に述べるようなノルム評価を行う方が所期の計算効率を確実に達成できることが明らかとなった．

いま，小さな正数 $\gamma > 0, \alpha > 0$ を用いて候補者集合 U_h, U_* を

$$U_h := \left\{ \hat{u}_h \in S_h \mid \|\hat{u}_h\|_{H_0^1(\Omega)} \le \gamma \right\},$$
$$U_* := \left\{ u_* \in S_h^{\perp} \mid \|u_*\|_{H_0^1(\Omega)} \le \alpha, \quad \|u_*\|_{L^2(\Omega)} \le C\alpha \right\}$$

で構成する．

$K \times K$ 行列 A，G を

$$A_{ij} = (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i),$$
$$G_{ij} = (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i) - (f'(u_h), \phi_i),$$

$K \times K$ 下三角行列 L を

$$A = LL^T$$

で定義する．また，行列ノルムを

$$\rho = \|L^T G^{-1} L\| \tag{10}$$

と定める．このとき，以下の検証条件が導かれる．

Theorem 2 候補者集合 $U = u_h + U_h + U_*$ に対して

$$\begin{aligned} \rho \sup_{u \in U} \|Fu - F'(u_h)\hat{u}_h - u_h\|_{H_0^1(\Omega)} &< \gamma \\ Ch \sup_{u \in U} \|f(u)\|_{L^2(\Omega)} &< \alpha \end{aligned} \tag{11}$$

が成立するとき，U 内に F の不動点が存在する．ただし $\hat{u}_h$ は $u \in U$ を

$$u = u_h + \hat{u}_h + u_*, \qquad \hat{u}_h \in U_h, \quad u_* \in U_*$$

と分解表記したときの U_h の要素とする．

(10) の行列ノルムは一般に非対称行列の特異値評価になる．実際の計算では，例えば絶対値最大固有値の上界を精度保証付きで求めるアルゴリズム [6] を用いて ρ を上から評価する．

具体的な検証アルゴリズム，従来の手法との比較となる検証例については講演時に述べる．

参考文献

[1] R. A. Adams: Sobolev Spaces, Academic Press (1975) ISBN 0-120-44150-0

[2] P. Grisvard: Elliptic Problems in Nonsmooth Domains, Pitman, (1985) ISBN 0-273-08647-2

[3] O. A. Ladyzenskaya(ラジゼンスカヤ; 藤田宏, 竹下彬訳): 非圧縮粘性流の数学的理論, 産業図書 (1979) ISBN 4-782-80625-6

[4] 中尾 充宏, 山本 野人: 精度保証付き数値計算—コンピュータによる無限への挑戦—, 149, 日本評論社 (1998) ISBN 4-535-78258-X

[5] 田端 正久: 微分方程式の数値解法 II, 岩波講座・応用数学 13, 岩波書店 (1994) ISBN 4-00-010803-4

[6] 渡部 善隆, 山本 野人, 中尾 充宏: 一般化固有値問題の精度保証付き計算とその応用, 日本応用数理学会論文誌, Vol.9, No.3 (1999) pp.137-150.