

偏微分方程式の解の精度保証

渡部 善隆*

Self-validating numerical computations of solutions for partial differential equations

Yoshitaka Watanabe*

Key words: Self-validating numerical computations, Computer-assisted proof, Partial differential equations, Fixed-point theorem, Newton method

1. はじめに

ご存じのように、非線形偏微分方程式の解に対する統一的な理論は現在のところ存在しません。そのため、偏微分方程式の精度保証についても、最終的には個々の問題の特性に応じた様々な工夫を施す必要があります。ここでは、楕円型境界値問題の解の存在検証を目的として開発された精度保証法^[1,3]を例に取り上げ、その原理を一般化して紹介します。なお、この原理は、常微分方程式の境界値問題にもそのまま適用可能です。また、関数解析学の用語については、参考文献[4]を参照してください。

2. 問題設定と不動点定式化

\hat{X} を Banach 空間, X, Y を Hilbert 空間とし、埋め込みを含めた包含関係: $\hat{X} \hookrightarrow X \hookrightarrow Y$ が成り立つとします。また、埋め込み $\hat{X} \hookrightarrow X$ のコンパクト性を仮定します。以降、 X, Y の内積を $(u, v)_X, (u, v)_Y$ 内積から導かれるノルムを $\|u\|_X = \sqrt{(u, u)_X}, \|u\|_Y = \sqrt{(u, u)_Y}$ で表記します。次に、線形作用素 $A: \hat{X} \rightarrow Y$ と(一般に非線形)作用素 $f: X \rightarrow Y$ を定めます。作用素 $f: X \rightarrow Y$ は連続であり、 X の有界集合を Y の有界集合に移すとします。 f の微分可能性は必ずしも仮定しません。

以上の準備のもと、方程式:

$$Au = f(u) \quad (1)$$

の解 u を求める問題を考えます。非線形微分方程式の場合、式(1)の A は最高階数の微分を含む線形作用素、 f はそれ以外の非線形項に対応します。

2.1 不動点定式化

任意の $\phi \in Y$ に対し、 $A\psi = \phi$ は一意の解 $\psi \in \hat{X}$ を持つと仮定し、この対応関係を $A^{-1}: Y \rightarrow \hat{X}$ で表記します。また、作用素 A^{-1} に連続性を仮定します。次に、埋め込み作用素 $I_{\hat{X} \rightarrow X}$ と A^{-1} との合成写像: $I_{\hat{X} \rightarrow X} \circ A^{-1}: Y \rightarrow X$ を改めて $A^{-1}: Y \rightarrow X$ と置き直します。この時、 A^{-1} と f の合成写像を

$$F := A^{-1} \circ f: X \rightarrow X \quad (2)$$

と定義すると、方程式(1)は X 上の不動点問題:

$$u = F(u) \quad (3)$$

に書き直すことができます。その作り方より、 F はコンパクト作用素となります。対応関係は次の通りです。

$$F: \begin{cases} X & \xrightarrow[\text{連続・有界}]{f} & Y & \xrightarrow[\text{コンパクト}]{A^{-1}} & X \\ u & \mapsto & f(u) & \mapsto & A^{-1} \circ f(u) \end{cases}$$

したがって、Schauder の不動点定理[8, Theorem 2.A]より、空でない有界凸閉集合 $U \subset X$ に対する包含関係:

$$F(U) \subset U \quad (4)$$

を確認することができれば、 U の中に F の不動点の存在を保証することができます。上記の U のように、解を包み込むことが期待される集合を“候補者集合”と呼ぶことにします。

2.2 有限次元部分空間と直交射影

作用素 A に対し、

$$(u, v)_X = (Au, v)_Y, \quad \forall u \in \hat{X}, \quad \forall v \in X \quad (5)$$

* 九州大学情報基盤研究開発センター
Research Institute for Information Technology, Kyushu University

の成立を仮定します。次に、 X の有限次元部分空間を X_h 、 X の内積に対する直交射影 $P_h : X \rightarrow X_h$ を

$$(u - P_h u, v_h)_X = 0, \quad \forall v_h \in X_h \quad (6)$$

で定義します。さらに、直交射影 P_h に対し、 h に依存する具体的な数値が算定可能な $C(h) > 0$ が存在し

$$\|(I - P_h)v\|_X \leq C(h)\|Av\|_Y, \quad \forall v \in \hat{X} \quad (7)$$

を満たすことを仮定します。なお、“ $C(h)$ ” は、オーダーが h という意味ではないことに注意してください。ここで、 $v \in \hat{X}$ に対して $\phi = Av$ とすれば、直交射影 P_h の定義(6)と式(5)より

$$(P_h v, v_h)_X = (\phi, v_h)_Y, \quad \forall v_h \in X_h \quad (8)$$

となります。したがって式(7)は、 $\phi \in Y$ が与えられたとき、方程式 $Av = \phi$ の解 $v \in \hat{X}$ の X_h における近似解が、射影を用いた式(8)により計算可能であり、かつ、 v と $P_h v$ の誤差評価が

$$\|v - P_h v\|_X \leq C(h)\|\phi\|_Y$$

で与えられることを意味します。また、 $C(h)$ は、存在を示すだけでは不十分で、具体的な値を算定することが必要となります。この $C(h)$ の見積もりを“構成的誤差評価”と呼びます。詳しくは本小特集『7. 有限要素法に現れる誤差評価定数の厳密な評価』を参照してください。

3. 射影と射影誤差に基づく解の検証

式(6)で定義される直交射影 P_h を用いることで、 X の不動点方程式 $u = F(u)$ を有限次元 X_h 部分と無限次元の誤差に対応する X_h^+ 部分に

$$\begin{cases} P_h u = P_h F(u), \\ (I - P_h)u = (I - P_h)F(u) \end{cases} \quad (9)$$

と一意に分解することができます。 X_h^+ は内積 $(\cdot, \cdot)_X$ に対する X_h の直交補空間です。分解された有限次元および無限次元部分それぞれについて候補者集合を設定し、 F を作用させた後の包含関係を調べます。

3.1 候補者集合と検証条件

問題(1)の近似解を $u_h \in X_h$ とします。解を X で探すため、必ずしも $u_h \in \hat{X}$ である必要はありません。

具体的には、 A に対する条件(5)を用いて

$$(u_h, v_h)_X = (f(u_h, v_h))_Y, \quad \forall v_h \in X_h \quad (10)$$

を満たす u_h を(ここでは)近似的に計算します。次に、解を包含することが期待される候補者集合(有界凸閉集合) $U \subset X$ を

$$U = u_h + U_h + U, \quad U_h \subset X_h, \quad U \subset X_h^+ \quad (11)$$

と選びます。 U_h, U は近似解 u_h と真の解の差を包含することが期待される集合です。この時、式(11)で定めた候補者集合 U に対し、 $F(U) \subset U$ が成立するための

十分条件は

$$\begin{cases} P_h F(U) - u_h \subset U_h, \\ (I - P_h)F(U) \subset U. \end{cases} \quad (12)$$

であることがわかります。よって問題は、直交射影 P_h によって分けられた有限次元部分と無限次元部分それぞれに対する包含関係の確認に帰着されます。式(12)の第1式の左辺は近似解 u_h の残差に、第2式の左辺は $F(U)$ に対する射影 P_h の誤差にそれぞれ対応します。

3.2 無限次元部分の包含関係

次の定理は、候補者集合の無限次元部分の構成と包含関係成立のための条件を与えます。

定理 3.1 式(11)の候補者集合 U の無限次元部分 U を、半径 $\alpha > 0$ の X の球として

$$U = \{u \in X_h^+ \mid \|u\|_X \leq \alpha\} \quad (13)$$

で定める時

$$C(h) \sup_{u \in U} \|f(u)\|_Y \leq \alpha \quad (14)$$

が成立すれば、式(12)の後半： $(I - P_h)F(U) \subset U$ が満たされる。

式(13)の U は中心 0 、半径 α の球であり、空でない有界凸閉集合です。また、条件(14)の不等式は、構成的誤差評価定数 $C(h)$ を十分小さく取ることができるならば、その成立が期待できます。

3.3 有限次元部分の包含関係

次に、候補者集合の有限次元部分の構成と包含関係成立のための条件を導きます。 X_h の次元を N で表記し、 $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq N}$ を X_h の基底とします。また、 $N \times N$ 複素行列 D を、 $1 \leq i, j \leq N$ に対し

$$[D]_{ij} := (\phi_j \phi_i)_X, \quad (15)$$

で定義します。候補者集合の有限次元部分 $U_h \subset X_h$ は、複素凸閉集合 $\{B_i\}_{1 \leq i \leq N}$ と基底との一次結合で

$$U_h = \sum_{i=1}^N B_i \phi_i \quad (16)$$

と設定します。 X が実空間の場合には、 B_i を上端と下端を持つ閉区間に設定します。複素空間の場合には、実部・虚部が閉区間となるように B_i を定義するか、中心と半径で表現される閉円板に設定します。この時、 U_h は、各 $1 \leq i \leq N$ に対し B_i に属するすべての複素数と基底 ϕ_i との一次結合全体の関数集合として、すなわち

$$U_h = \left\{ \sum_{i=1}^N v_i \phi_i \in X_h \mid v_i \in B_i \subset \mathbb{C}, 1 \leq i \leq N \right\} \quad (17)$$

と表現することができます。その作り方から U_h は有

界凸閉集合となり、次が成り立ちます。

定理 3.2 式(13), (16), (11)より構成される候補

者集合 $U \subset X$ に対し, $\mathbf{d} = [d_i] \subset \mathbb{C}^N$ を, $1 \leq i \leq N$ で

$$d_i = \{(f(u)\phi_i)_Y - (u_h, \phi_i)_X \in \mathbb{C} \mid u \in U\} \quad (18)$$

と定める. この時

$$\mathbf{x} = \{\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{C}^N \mid \hat{\mathbf{x}} = D^{-1}\hat{\mathbf{d}}, \forall \hat{\mathbf{d}} \in \mathbf{d}\} \quad (19)$$

となる $\mathbf{x} = [x_i] \subset \mathbb{C}^N$ に対し

$$x_i \in B_i, \quad 1 \leq i \leq N \quad (20)$$

が成り立てば, 式(12)の前半: $P_h F(U) - u_h \subset U_h$ が満たされる.

定理 3.2 における式(18)は, U が無限次元の項を含むため, 正確な値を求めることはできません. そのため実際の計算では, \mathbf{d} を包含する複素閉集合で代用します. また, 式(19)を満たす \mathbf{x} も集合として正確に算定することは困難です. こちらも実際の計算では, \mathbf{x} を包含する複素閉集合で代用します. それぞれ大きめの評価となるものの, 最終的な包含関係(20)が得られれば検証には問題ありません. また, 式(19)(に対応する包含集合)は, 行列 D に対する連立 1 次方程式を精度保証付きで解くことにより定まります. 詳しくは本特集『3. 連立方程式の解に対する精度保証付き数値計算』を参照してください.

4. Newton 型作用素の導入

前章で紹介した検証手法が成功するためには, 作用素 F が不動点の近傍で引き込み的であることが前提となります. そこで, より一般的な問題に対応するため, 有限次元部分に Newton 法を適用します.

4.1 Newton 型作用素

線形作用素 $q: X \rightarrow Y$ を導入します. f が Fréchet 微分可能な場合, q は近似解 $u_h \in X_h$ における微分 $f'[u_h]$ に取るのが一般的です. 次に, 線形作用素 Q を

$$Q := A^{-1} \circ q: X \rightarrow X \quad (21)$$

で, さらに, Newton 型作用素 $N_h: X \rightarrow X_h$ を

$$N_h(u) := P_h u - [I - Q]_h^{-1} P_h (u - F(u)) \quad (22)$$

で定義します. N_h の定義式(22) $[I - Q]_h^{-1}: X_h \rightarrow X_h$ は,

$$P_h(I - Q): X \rightarrow X_h \quad (23)$$

の定義域 X を X_h に制限した作用素 $P_h(I - Q)|_{X_h}: X_h \rightarrow X_h$ の逆作用素とし, その存在を仮定します. N_h は, $\mathcal{F}(u) := u - F(u)$ に形式的に Newton 法を適用し, P_h を施すことにより得られる非線形作用素です.

次に, X_h の基底 $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq N}$, および q により構成される $N \times N$ 行列 G を, $1 \leq i, j \leq N$ に対し

$$[G]_{ij} := (\phi_j, \phi_i)_X - (q\phi_j, \phi_i)_Y \quad (24)$$

で定義します. この時, $[I - Q]_h^{-1}$ と式(24)の行列 G との関係と, 具体的な $[I - Q]_h^{-1}$ の行列・ベクトル表現が以下で与えられます.

補題 4.1 $[I - Q]_h^{-1}: X_h \rightarrow X_h$ の存在と G の可逆性は同値である. また, $[I - Q]_h^{-1}$ が存在するとき

$$w_h = \sum_{i=1}^N w_i \phi_i \in X_h, \quad \mathbf{w} = [w_i] \in \mathbb{C}^N$$

に対し

$$v_h = [I - Q]_h^{-1} w_h = \sum_{i=1}^N v_i \phi_i, \quad \mathbf{v} = [v_i] \in \mathbb{C}^N$$

の係数ベクトル \mathbf{v} は

$$\mathbf{v} = G^{-1} D \mathbf{w} \quad (25)$$

で決定される.

4.2 Newton 型作用素による不動点定式化

有限次元部分に対する Newton 型作用素 N_h を用い, X 上の無限次元作用素 T を

$$T(u) := N_h(u) + (I - P_h)F(u) \quad (26)$$

で定義します. この時, T はコンパクトであり, $[I - Q]_h^{-1}$ の存在を仮定すれば, 不動点問題 $u = F(u)$ と $u = T(u)$ との同値性を確認できます. 作用素 T に対しても, F と同様 Schauder の不動点定理から, 空でない有界凸閉な候補者集合 $U \subset X$ に対して

$$\begin{cases} N_h(U) - u_h \subset U_h, \\ (I - P_h)F(U) \subset U, \end{cases} \quad (27)$$

が確認できれば, $T(U) \subset U$ となり, T の不動点が U 内に存在します. N_h は Newton 型作用素のため, U がもし真の解を包含していれば, 縮小傾向にあること, つまり式(27)の前半の包含関係の成立が期待できます. また, 無限次元部分 $(I - P_h)F(U)$ は, Newton 法的な変換は施していないものの, 前章と同じく, $C(h) \rightarrow 0$ ($h \rightarrow 0$)に基づく縮小性が期待できます.

4.3 有限次元部分の縮小性

有限次元・無限次元部分ともに, 候補者集合の設定は 3 章と同じです. 無限次元部分に対する確認は定理 3.1 で行います. 有限次元部分の縮小性は次で確認します.

定理 4.1 式(13), (16), (11)で構成される候補者集合 $U \subset X$ に対し, $u \in U$ のそれぞれの要素を

$$u = u_h + \hat{u}_h + u_s, \quad \hat{u}_h \in U_h, \quad u_s \in U_s$$

で表現する. $\mathbf{d} = [d_i] \subset \mathbb{C}^N$ を $1 \leq i \leq N$ に対し

$$d_i = \{(f(u) - q\hat{u}_h\phi_i)_Y - (u_h\phi_i)_X \in \mathbb{C} \mid u \in U\} \quad (28)$$

で定める。この時

$$\mathbf{x} = \{ \hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{C}^N \mid \hat{\mathbf{x}} = G^{-1} \hat{\mathbf{d}}, \forall \hat{\mathbf{d}} \in \mathbf{d} \} \quad (29)$$

となる $\mathbf{x} = [x_i] \in \mathbb{C}^N$ に対し

$$x_i \in B_i, \quad 1 \leq i \leq N \quad (30)$$

が成り立てば、条件(27)の前半: $N_h(U) - u_h \subset U_h$ が満たされる。

前章と同様、定理 4.1 におけるベクトル \mathbf{d}, \mathbf{x} を実際に計算する場合には、それぞれを包含する(一般に複素)閉集合を用いて評価します。

ここまで紹介したコンパクト作用素を用いた不動点定式化と Schauder の不動点定理の成立条件を確認する検証手法は、Banach の不動点定理[8, Theorem 1.A]に基づく局所一意性付き存在検証、および有限次元部分をノルムで評価する検証手法に拡張可能です^[1,3,6]。

4.4 検証例: Kolmogorov 問題

Newton 型作用素を用いた検証例として、Navier-Stokes 方程式の流れ関数表示から導かれる以下の 2 次元 Kolmogorov 問題[7, 5 章]を考えます。

$$\Delta^2 \phi = -R J(\phi, \Delta \phi) - \cos(y) \text{ in } \Omega. \quad (31)$$

ここで、領域はアスペクト比 $0 < \alpha < 1$ に対して $\Omega = (-\pi/\alpha, \pi/\alpha) \times (-\pi, \pi)$ は x, y に対し周期的であり、対称条件 $\phi(x, y) = \phi(-x, -y)$ および正規条件 $\int_{\Omega} \phi dx dy = 0$ を満たすとしてします。また、 $J(u, v) := u_x v_y - u_y v_x$ です。4 階楕円型方程式(31)は、任意の $R > 0$ に対し自明解 $\phi = -\cos(y)$ を持ちます。課せられた条件より、関数空間 $X^k (k \geq 0)$ を $m \in \mathbb{N}_0, n \in \mathbb{Z}, (m, n) \neq (0, 0)$ に対しすべての関数 $\cos(m\alpha x + ny)$ が張る空間の $H^k(\Omega)$ での閉包として設定します。ただし $H^0(\Omega) := L^2(\Omega)$ です。このとき、作用素と関数空間を

$$A = \Delta^2, \quad \hat{X} = X^4, \quad X = X^3, \quad Y = X^0,$$

内積を

$$\begin{aligned} (u, v)_X &= (u_{xxx}, v_{xxx})_{L^2(\Omega)} + 3(u_{xxy}, v_{xxy})_{L^2(\Omega)} + 3(u_{xyy}, v_{xyy})_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + (u_{yyy}, v_{yyy})_{L^2(\Omega)}, \\ (u, v)_Y &= (u, v)_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

で定義することにより定式化の枠組みにあてはまります。ただし式(5)は $(\Delta_u, \Delta_v)_{L^2(\Omega)} = (Au, v)_{L^2(\Omega)}$ で成立するため、 G の定義を含め若干の式の修正が必要です。式(7)を満たす射影誤差定数は、無限次元空間の打ち切りを $K = n = m$ にしたとき、 $C(h) = 1/(\alpha(K+1))$ に取ることができます。

図 1 は $R = 5, \alpha = 0.35$ に対する近似解の形状です。文献[7, 図 5.7]のモード 1(上)およびモード 2(下)の解に対応します。この近似解に対し検証定理を適用した結果、 $K = 60$ に対し、 X^3 ノルムの意味でモード 1 が 7.4159×10^{-10} 、モード 2 が 5.8337×10^{-10} の誤差で解を包み込むことに成功しました。

5. 無限次元 Newton 法に基づく解の検証

ここでは、3 章・4 章の手法とは異なる、無限次元 Newton 法に基づく解の精度保証法を紹介します。

5.1 残差引き戻し

まず、近似解を用いて問題を残差形に同値変換します。二通りの方法があります。

5.1.1 直接的引き戻し

問題(1)の近似解 $u_h \in X$ が $Au_h \in Y$ を満たすとしてします。この時

$$g(w) := f(w + u_h) - Au_h \quad (32)$$

とおくことで、方程式(1)は $Aw = g(w)$ を満たす残差:

$$w = u - u_h$$

を求める問題に書き直すことができます。

5.1.2 X^* 型引き戻し

二つ目の引き戻しは、“ X^* 型”手法^[3]です。まず、近似解 $u_h \in X_h$ が式(10)を、近似の意味ではなく、厳密に満たすと仮定します。 u_h は有限次元問題の真の解で

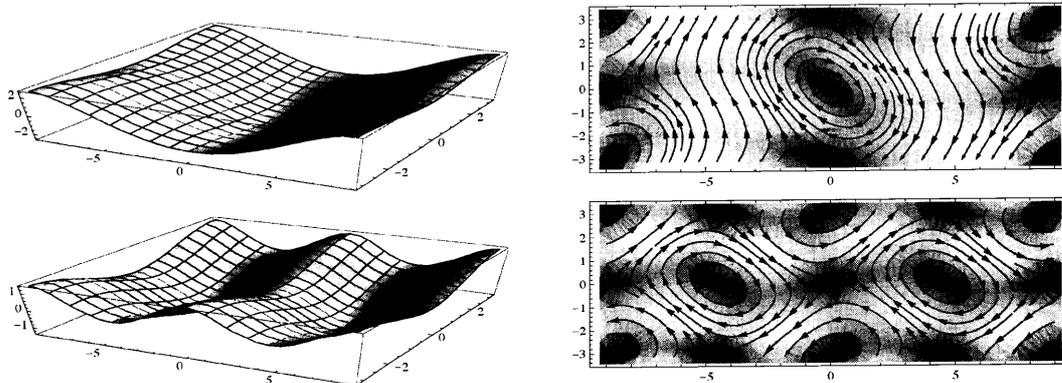


図 1 $\alpha = 0.35, R = 5$ で得られる Kolmogorov 問題(31)の 2 つの近似解 ϕ_N と流線 $([\phi_N]_y, -[\phi_N]_x)^T$ 。

あるという点が重要です. 実際には, 有限次元問題に対する精度保証^[5]によって u_h の係数を真に包含する区間係数ベクトルを求めます. ここで, $f(u_h) \in Y$ ですので

$$A\bar{u} = f(u_h) \quad (33)$$

を満たす $\bar{u} \in X$ が存在します. この \bar{u} の周りで式(1)の解 u を探します. 式(5)より

$$(\bar{u}, v)_X = (f(u_h), v)_Y, \quad \forall v \in X \quad (34)$$

ですので, 式(34)の $v \in X$ を特に X_h の要素に制限し式(10)を引くと

$$(\bar{u} - u_h, v_h)_X = 0, \quad \forall v_h \in X_h \quad (35)$$

となり, 式(35)は $P_h \bar{u}$ が u_h に一致することを示しています. そこで, \bar{u} と u_h の差を

$$v_0 := \bar{u} - u_h \quad (36)$$

とおけば $v_0 \in X_h^+$ となります. v_0 の具体的な形は不明です. しかし, 式(7)を用いるとノルム評価

$$\|v_0\|_X \leq C(h)\|f(u_h)\|_Y \quad (37)$$

を得ることができます. 最後に $w = u - \bar{u}$ とおけば, 式(1)の引き戻し形式

$$Aw = f(w + u_h + v_0) - f(u_h) \quad (38)$$

が完成します. この式(38)の右辺を $g(w)$ と置き, 定式化を進めます. 式(38)の解 $w \in X$ が求まれば, 式(1)の解 u を

$$u = u_h + v_0 + w$$

で構成することができます. この引き戻しは, $Au_h \in Y$ である必要がありません. また, 具体的な A については, X_h の高次要素を用いた v_0 の a posteriori 評価による高精度化も可能です^[1].

5.2 無限次元 Newton 法の適用

次に, 線形作用素 $q: X \rightarrow Y$ を与え, その連続性を仮定します. g がFréchet微分可能であれば, ある $\hat{w} \in X$ に対し

$$qw = g'[\hat{w}]w \quad (39)$$

と取るのが一般的です. 例えば, 式(32)で $\hat{w} = 0$ ととれば $g'[\hat{w}]w = f'[u_h]w$ となります. q を用いた式 $Aw = g(w)$ に対するNewton型残差方程式:

$$Aw - qw = g(w) - qw \quad (40)$$

を考えます. そして, 式(40)の左辺の対応を

$$\mathcal{L} := A - q: \hat{X} \rightarrow Y \quad (41)$$

で定義します. \mathcal{L} は線形作用素であり, 式(39)で q を定義した場合には, 問題 $Aw = g(w)$ の \hat{w} における線形化作用素に対応します.

ここで, \mathcal{L} は連続な逆作用素: $\mathcal{L}^{-1}: Y \rightarrow \hat{X}$ を持つことと, 具体的な値が算定可能な $M > 0$ が存在して

$$\|\mathcal{L}^{-1}\phi\|_X \leq M\|\phi\|_Y, \quad \forall \phi \in Y \quad (42)$$

を満たすことを仮定します. 次に, 非線形作用素 $\hat{T}: X \rightarrow X$ を

$$\hat{T}(w) := \mathcal{L}^{-1} \circ (g(w) - qw) \quad (43)$$

で定めます. この時, g が X の有界集合を Y の有界集合に移すこと, \mathcal{L}^{-1} , q の連続性, および $\hat{X} \hookrightarrow X$ コンパクト性を用いて, \hat{T} は X 上のコンパクト作用素として定義され, 問題(40)は X 上の不動点方程式:

$$w = \hat{T}(w) \quad (44)$$

に書き直されます.

作用素 \hat{T} は, 残差形式 $Aw = g(w)$ に対するNewton型作用素であることから, 0の近傍で引き込み的であることが期待されます. この時, Schauderの不動点定理に基づく以下の検証条件が導かれます.

定理 5.1 無限次元候補者集合 W を, 半径 $\alpha > 0$ に対し

$$W := \{w \in X \mid \|w\|_X \leq \alpha\} \quad (45)$$

と取る. この時

$$M \sup_{w \in W} \|g(w) - qw\|_Y \leq \alpha \quad (46)$$

が成立すれば, \hat{T} は W 内に不動点を持つ.

また, 候補者集合 W 内の解の局所一意性は, Banachの不動点定理に基づく以下の条件で確認することができます.

定理 5.2 式(45)で定義した候補者集合 $W \subset X$ に対し, $C_g > 0$ が存在して

$$\|g(w_1) - g(w_2) - q(w_1 - w_2)\|_Y \leq C_g \|w_1 - w_2\|_X, \quad \forall w_1, w_2 \in W \quad (47)$$

を満たすとする. この時, 定理 5.1 の条件(46)に加え

$$MC_g < 1 \quad (48)$$

が成立すれば, \hat{T} の不動点は W 内で唯一である.

特に, g が $W \subset X$ でFréchet微分可能ならば, 式(47)の $C_g > 0$ は

$$\sup_{\hat{w} \in W} \|(g'[\hat{w}] - q)w\|_Y \leq C_g \|w\|_X, \quad \forall w \in X \quad (49)$$

を満たすように取ればよいことがわかります. さらに, 定理 5.1 と定理 5.2 を組み合わせることで局所一意性の範囲を拡大することも可能です. また, \mathcal{L}^{-1} に対するノルム評価式(42)を用いてSchauder, Banach以外の不動点定理の適用を考えることもできます.

5.3 \mathcal{L} の可逆性と M の評価

式(15)定義した行列 D , および

$$[L]_{ij} := (\phi_j, \phi_i)_Y, \quad 1 \leq i, j \leq N \quad (50)$$

に対し, $D = D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}}$, $L = L^{\frac{1}{2}} L^{\frac{1}{2}}$ となる分解行列 $D = D^{\frac{1}{2}}$, $L^{\frac{1}{2}}$ を定めます. 通常 $D^{\frac{1}{2}}$ および $L^{\frac{1}{2}}$ は, Hermite 正定値行列 D, L の Cholesky 分解により計算可能です. 次に, 式(24)で定義した行列 G と $D^{\frac{1}{2}}, L^{\frac{1}{2}}$ を用いた行列のスペクトルノルムを, G の可逆性を前提に

$$\rho := \|D^{\frac{1}{2}} G^{-1} L^{\frac{1}{2}}\|_2 \quad (51)$$

で定めます. この時, 次の評価が成り立ちます.

定理 5.3

$$\|q w\|_Y \leq \tau_1 \|P_h w\|_X + \tau_2 \|(I - P_h) w\|_X, \quad \forall w \in X \quad (52)$$

を満たす $\tau_1, \tau_2 \geq 0$ が存在し, かつ, 具体的な値が算定可能とする. この時

$$\kappa := C(h) \tau_2 (1 + \tau_1 \rho) < 1 \quad (53)$$

が成立すれば, \mathcal{L} は可逆であり, 式(42)を満たす $M > 0$ は

$$M = \frac{\sqrt{\rho^2 + C(h)^2 (1 + \tau_1 \rho)^2}}{1 - \kappa} \quad (54)$$

で定まる.

線形作用素 \mathcal{L} の逆作用素 \mathcal{L}^{-1} の存在証明と式(42)を満たす $M > 0$ の具体的な値のその他の算定方法としては, リッツ・プロジェクトンに基づく Oishi の方法^[5], ホモトピー法に基づく Plum の方法^[2], 4章の手法を線形化作用素に適用した Nakao の方法^[3,6] などがあります.

5.4 検証例：2階楕円型問題

2次元正方領域 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ と与えられたパラメータ $\lambda, a > 0$ に対し, 次の問題を考えます.

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda(1 + u + u^2 - au^3) & \text{in } \Omega, \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (55)$$

$$H_0^1(\Omega) := \{u \in H^1(\Omega) \mid u = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$$

に対し,

$$A = -\Delta, \quad \hat{X} = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega), \quad X = H_0^1(\Omega), \quad Y = L^2(\Omega)$$

と設定します. X と Y の内積は, それぞれ

$$(u, v)_X = (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)}, \quad (u, v)_Y = (u, v)_{L^2(\Omega)}$$

です. 領域 Ω を三角形一様分割し(分割幅 h), 各三角形領域上での区分一次関数を基底とする関数空間 X_h を与えるとき, 式(7)を満たす射影誤差定数は $C(h) = 0.493h$ に取ることができます(本小特集 7. 参照). 図 2 は $\lambda = 6, a = 0.001$ で得られる 2 つの近似解の形状です.

近似解の左は最大値ノルムの意味で $\|u_h\|_\infty \approx 2.143$, 右は $\|u_h\|_\infty \approx 0.995$ です. 定理 5.1, 5.3 による検証の結果, $H_0^1(\Omega)$ -ノルムの意味で左の解が $1.10273 \times 10^{-1} (h = 1/30)$, 右の解が $2.19176 \times 10^{-2} (h = 1/100)$ の範囲の候補者集合の中に解を包み込むことに成功しました. また, 定理 5.2 による一意性の範囲は $H_0^1(\Omega)$ -ノルムの意味で左の解が $0.19535 (h = 1/30)$, 右の解が $0.21588 (h = 1/100)$ でした.

6. はじめに

本稿では, 楕円型境界値問題の解の存在検証を目的として開発された精度保証法を例に取り上げ, その原理を一般化して紹介しました. 非線形偏微分方程式に対する精度保証付き数値計算の技術は未だ確立・完成されているとはいえませんし, 今後も発展を続けると思います. 興味を持たれた方のために, 精度保証付き数値計算に関する比較的最近の成果をまとめた論文集^[2,6] も参考になるかと思います.

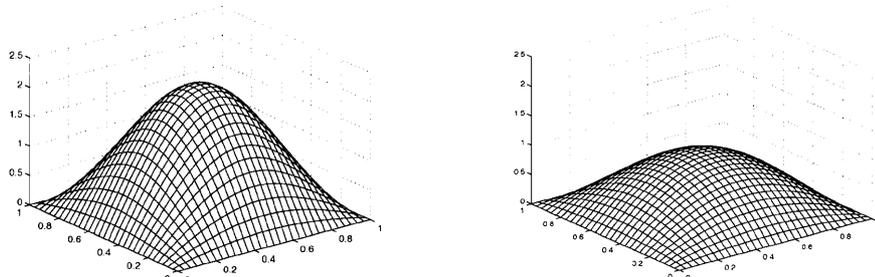


図 2 $\lambda = 6, a = 0.001$ における問題(55)の 2 つの近似解の概形

参 考 文 献

- [1] 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)
- [2] M.T. Nakao and S. Oishi (ed.): Special Issue on State of the Art in Self-Validating Numerical Computations, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, **26-2, 3**, 123/530(2009)
- [3] 中尾 充宏, 渡部 善隆: 実例で学ぶ精度保証付き数値計算—理論と実践—, 196, サイエンス社(2011)
- [4] 日本シミュレーション学会編: シミュレーション辞典, 452, コロナ社(2012)
- [5] 大石 進一: 精度保証付き数値計算, 185, コロナ社(2000)
- [6] S. Oishi, M. Plum, and S.M. Rump (ed.): Special Section on Recent Progress in Verified Numerical Computations, *Nonlinear Theory and Its Applications*, **IEICE**, **2-1**, 1/127 (2011)
- [7] 岡本 久: ナヴィエーストークス方程式の数値, 365, 東京大学出版会(2009)
- [8] E. Zeidler (Translated by P.R. Wadsack): *Nonlinear Functional Analysis and its Applications, Part I: Fixed-Point Theorems*, Springer-Verlag (1986)
-