

常微分方程式の初期値問題に対する数値解の意外な挙動について

佐世保工業高等専門学校 木村拓馬 (Takuma Kimura) *

佐世保工業高等専門学校 中尾充宏 (Mitsuhiro T. Nakao) †

* † Sasebo National College of Technology

* E-mail: tkimura@post.cc.sasebo.ac.jp

概要

放物型方程式の初期境界値問題に対する有限要素解の意外な挙動に端を発した検討結果について報告する。本稿では、極めて簡単な問題に対して自然な近似スキームを用いた場合でも、近似解の評価定数が発散することを例証する。これは、ある種の無限次元問題に関する性質が有限次元に移行しないことを示す例として大変興味深いものといえよう。

1 はじめに

放物型方程式の初期境界値問題に対する有限要素解の意外な挙動に端を発した検討結果について報告する。いま固定された $T > 0$ と、与えられた $f \in L^2(T)$, パラメータ $\kappa \in \mathbb{R}^1$ に対し、簡単な常微分方程式の初期値問題,

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}u(t) + \kappa u(t) = f(t), & t \in J = (0, T], \\ u(0) = 0, \end{cases} \quad \begin{matrix} (1a) \\ (1b) \end{matrix}$$

の有限要素近似解 u_h を考える。 h は離散近似におけるステップサイズを表すパラメータである。このとき一般的な a priori 評価として次の形を期待するのは自然であろう。

$$\|u'_h\|_{L^2(J)} \leq C \|f\|_{L^2(J)}. \quad (2)$$

ここに、 C は f, h に無関係な正定数 (ただし、 κ と T には依存してよい) を意味する。本稿では、自然な近似スキームを用いた場合でも、このような C が存在しないことを示す。これは、ある種の無限次元問題に関する性質が有限次元に移行しないことを示す例として大変興味深いものといえよう。

1.1 研究の背景

論文 [1, 3] において, 線形放物型初期値境界値問題,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} w - \nu \Delta w + (b \cdot \nabla) w + cw = g, & \text{in } \Omega \times J, \\ w(x, t) = 0, & \text{on } \partial\Omega \times J, \\ w(x, 0) = 0, & \text{on } \Omega, \end{cases}$$

の解について,

$$\|w\| \leq C_{\mathcal{L}_t^{-1}} \|g\|,$$

なる評価定数 $C_{\mathcal{L}_t^{-1}}$ を計算する手法が提案されている. ここに, $t \in J = (0, T) \subset \mathbb{R}$, $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$, $\nu \in \mathbb{R}$ は正定数, $b \in L^\infty(J; L^\infty(\Omega))^d$, $c \in L^\infty(J; L^\infty(\Omega))$, $g \in L^2(J; L^2(\Omega))$ である. [1] は $\Omega \times J$ での全離散近似, [3] は Ω のみ離散化する半離散近似を用いて評価定数を導出している.

[1] の提案手法は, 熱方程式 $\frac{\partial}{\partial t} u - \nu \Delta u = g$ の全離散近似解の評価, すなわち, S_h^k を $\{u \in L^2(J; H_0^1(\Omega)) \cap H^1(J; L^2(\Omega)), u(x, 0) = 0 \text{ in } \Omega\}$ の有限次元部分空間 (h と k はそれぞれ Ω と J の分割におけるメッシュサイズを表す) とし,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} u_h^k, v_h^k \right)_{L^2(J; L^2(\Omega))} + \nu \left(u_h^k, v_h^k \right)_{L^2(J; H_0^1(\Omega))} = \left(g, v_h^k \right)_{L^2(J; L^2(\Omega))}, \quad \forall v_h^k \in S_h^k,$$

なる $u_h^k \in S_h^k$ について,

$$\left\| \frac{\partial}{\partial t} u_h^k \right\| \leq \sigma \|g\|,$$

なる評価を必要とする. しかし, 上記の評価に関し, $k \rightarrow 0$ で $\sigma \rightarrow \infty$ となる意外な傾向が確認され, $C_{\mathcal{L}_t^{-1}}$ の評価に不利に働くようであった.

この全離散近似解 u_h^k は, 熱方程式の適当な半離散近似により導出される,

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} + Bu = g, & \text{in } J, \\ u(0) = 0, \end{cases}$$

のような形式の常微分方程式系の近似解を用いて表現できることに注意する. $B \in L^\infty(J)^{n \times n}$, $g \in L^2(J)^n$ である. このような常微分方程式系における近似解の評価においても同様な傾向が見られたため, 極めて簡単化された問題 (1) に対し解析を行うこととした.

2 解の評価

本節では, (1) の厳密解および近似解の評価について述べる.

2.1 定義等

J 上の k 次 L^2 -Sobolev 空間を $H^k(J)$ とする. 初期条件を考慮した空間 $V^1(J)$ を以下で定義する.

$$V^1(J) := \{u \in H^1(J), u(0) = 0\}.$$

h を離散近似におけるステップサイズ, S_h を $V^1(J)$ の有限次元部分空間, S_h の基底関数を $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq n}$ とする.

$P_h^0 : L^2(J) \rightarrow S_h(J)$ を,

$$(u - P_h^0 u, v_h)_{L^2(J)} = 0, \quad \forall v_h \in S_h(J), \quad (3)$$

なる L^2 -projection と定義する.

$u_h \in S_h$ を (1) の近似解, $f_h \in S_h$ を f の近似とする. 任意の u_h, f_h は基底関数の線形結合で表現できる. 即ち, $a, b \in \mathbb{R}^n$ を用いて

$$u_h = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i, \quad f_h = \sum_{i=1}^n b_i \phi_i, \quad (4)$$

と表現できる.

2.2 厳密解の評価

$V^1(J)$ (無限次元) では, (2) のような評価は妥当である.

(1) の厳密解は,

$$u(t) = \int_0^t e^{\kappa(s-t)} f(s) ds,$$

と書ける. これを用いて,

$$\begin{aligned} \|u'\|_{L^2(J)} &= \|-\kappa u + f\|_{L^2(J)} \\ &\leq |\kappa| \|u\|_{L^2(J)} + \|f\|_{L^2(J)} \\ &= |\kappa| \left\| \int_0^t e^{\kappa(s-t)} f(s) ds \right\|_{L^2(J)} + \|f\|_{L^2(J)} \\ &\leq \left(\frac{1}{2} (e^{-2\kappa T} + 2\kappa T + 1)^{1/2} + 1 \right) \|f\|_{L^2(J)}, \end{aligned}$$

と評価できる.

また, (1) の厳密解は, 次のように変分定式化できることに注意する.

$$\begin{aligned} f &\in L^2(J), \exists u \in V^1(J) \text{ s.t.} \\ (u' + \kappa u, v)_{L^2(J)} &= (f, v)_{L^2(J)}, \quad \forall v \in V^1(J), \end{aligned} \quad (5)$$

$\kappa \geq 0$ ならば,

$$\begin{aligned} \kappa \|u\|_{L^2(J)}^2 &\leq \frac{1}{2}u(T)^2 + \kappa \|u\|_{L^2(J)}^2 \\ &= (u, u')_{L^2(J)} + (u, \kappa u)_{L^2(J)} \\ &= (u' + \kappa u, u)_{L^2(J)} \\ &= (f, u)_{L^2(J)} \\ &\leq \|f\|_{L^2(J)} \|u\|_{L^2(J)}, \end{aligned}$$

より,

$$\begin{aligned} \|u'\|_{L^2(J)} &\leq |\kappa| \|u\|_{L^2(J)} + \|f\|_{L^2(J)} \\ &\leq 2 \|f\|_{L^2(J)}, \end{aligned}$$

と評価できる.

2.3 近似スキーム 1

近似解 $u_h \in S_h$ を,

$$(u'_h + \kappa u_h, v'_h)_{L^2(J)} = (f, v'_h)_{L^2(J)}, \quad \forall v_h \in S_h,$$

で定義する.

$\kappa \geq 0$ ならば,

$$\begin{aligned} \|u'_h\|_{L^2(J)}^2 &\leq \|u'_h\|_{L^2(J)}^2 + \frac{\kappa}{2}u_h(T)^2 \\ &= (u'_h, u'_h)_{L^2(J)} + \kappa (u_h, u'_h)_{L^2(J)} \\ &= (f, u'_h)_{L^2(J)} \\ &\leq \|f\|_{L^2(J)} \|u'_h\|_{L^2(J)}, \end{aligned}$$

より,

$$\|u'_h\|_{L^2(J)} \leq \|f\|_{L^2(J)},$$

と評価できる. 従って, この場合は確かに (2) が成り立っている.

2.4 近似スキーム 2

近似解 $u_h \in S_h$ と f の近似 $f_h \in S_h$ を,

$$(u'_h + \kappa u_h, v_h)_{L^2(J)} = (f, v_h)_{L^2(J)}, \quad \forall v_h \in S_h, \quad (6)$$

$$(f_h, v_h)_{L^2(J)} = (f, v_h)_{L^2(J)}, \quad \forall v_h \in S_h, \quad (7)$$

で定義する。ここで、近似スキーム (6) は (1) の変分定式化 (5) から、その有限次元近似として自然に導かれるものであることに注意しよう。

行列 $L, R, D, G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ とベクトル $g \in \mathbb{R}^n$ をそれぞれ,

$$L_{ij} := (\phi_i, \phi_j)_{L^2(J)}, \quad R_{ij} := (\phi_i, \phi'_j)_{L^2(J)}, \quad D_{ij} := (\phi'_i, \phi'_j)_{L^2(J)},$$

$$G := R + \kappa L, \quad g_i := (\phi_i, f)_{L^2(J)},$$

と定義する。 G は正則と仮定する。このとき、(4) より,

$$\|u'_h\|_{L^2(J)}^2 = a^T D a, \quad \|f_h\|_{L^2(J)}^2 = g^T L g,$$

(4), (6), (7) より,

$$Ga = g, \quad Lb = g, \quad (8)$$

が成立する。

(7) より,

$$\|f_h\|_{L^2(J)} \leq \|f\|_{L^2(J)},$$

がいえる。さらに (8) より,

$$\frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}^2}{\|f\|_{L^2(J)}^2} \leq \frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}^2}{\|f_h\|_{L^2(J)}^2} = \frac{g^T G^{-T} D G^{-1} g}{g^T L^{-1} g}, \quad (9)$$

と評価できる。よって,

$$\frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}^2}{\|f\|_{L^2(J)}^2} \leq \sup_{g \neq 0} \frac{g^T G^{-T} D G^{-1} g}{g^T L^{-1} g}, \quad (10)$$

が成立する。(10) の右辺は行列ノルムの評価に帰着する。 L と D が対称正定値行列となることは良く知られている。 $L^{1/2}$ を Cholesky 分解などにより得られる $L = L^{1/2} L^{1/2}$ なる行列とすると,

$$\sup_{g \neq 0} \frac{g^T G^{-T} D G^{-1} g}{g^T L^{-1} g} = \left\| L^{1/2} G^{-T} D G^{-1} L^{1/2} \right\|_2, \quad (11)$$

がいえる。

数値実験

h に依存しないような (11) の評価の上限を求めることにより (2) の評価定数が得られると考え、この上限の値の見当をつけるため数値実験を行った。

計算は MATLAB R2010a 上で行った。得られた計算結果は INTLAB 6.0 及び VERSOFT 10 の使用により精度保証されたものである。行列ノルムの評価には [5] で提案された手法を用いた。

$\kappa \approx 0$ の場合、 $h \rightarrow 0$ で $u'_h \approx f_h$ となり、(9) の評価値が 1 程度の値に収束することを期待した。しかし、数値実験の結果は、 $\kappa = 0$ であっても、 $h \rightarrow 0$ で (11) の右辺が $+\infty$ に発散する傾向を示した。

図 1 は、 h, κ と (11) の右辺による評価値との関係を示している。基底には区分一次関数を用いた。 κ にかかわらず評価値は h の逆オーダーとなり、 h が小さくなるほどに $\|u'_h\|_{L^2(J)}$ と $\|f_h\|_{L^2(J)}$ の比は大きくなる。

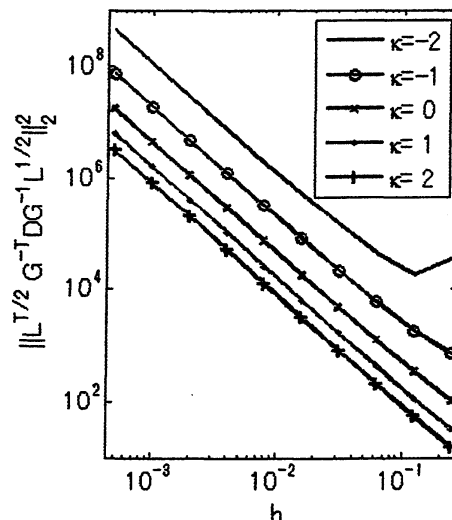


図 1: (10) の評価値 ($T = 1$) .

3 逆オーダーになる例

(10) の右辺が $h \rightarrow 0$ で発散することを例証する。

いま、分点 $0 = t_0, \dots, t_n = T$ は等間隔、 $h = t_i - t_{i-1}$ ($i = 1, \dots, n$) とする。 n は奇数とし¹,

$$u = \phi_1 + \phi_3 + \phi_5 + \dots + \phi_{n-2} + \phi_n, \quad f = u' + \kappa u,$$

¹ n が偶数の場合も同様に議論できる。

を考える。基底関数 $\{\phi_i\}_{1 \leq i \leq n}$ は,

$$\phi_i(t_j) = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases}$$

なる区分一次関数とする。

u_h は (6) で定義される S_h の元とする。 $u \in S_h$ より, $u = P_h^0 u = u_h$ がいえる。 f_h は (7) で定義される S_h の元とする。

$$\begin{aligned} f_h &= P_h^0 f \\ &= P_h^0 (u' + \kappa u) \\ &= P_h^0 (u') + \kappa u_h, \end{aligned}$$

がいえる。

3.1 $\kappa = 0$ の場合

$u = u_h$, $f = u'_h$ は図 2, 図 3 のようになる。 $f_h = P_h^0 (u')$ である。

$\|u'_h\|_{L^2(J)}$ と g は簡単に計算でき,

$$\|u'_h\|_{L^2(J)}^2 = h^{-2}T, \quad g_i = \begin{cases} 0, & i = 1, \dots, n-1, \\ 1/2, & i = n, \end{cases}$$

が得られる。また, $\|f_h\|_{L^2(J)}$ は,

$$\|f_h\|_{L^2(J)}^2 = (f_h, f_h)_{L^2(J)} = (f, f_h)_{L^2(J)} = g^T b = b_n/2,$$

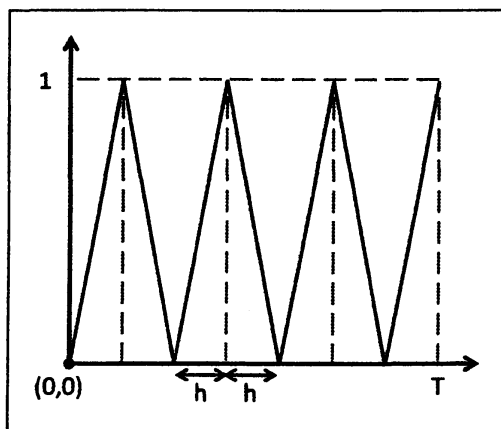


図 2: $u(t)$ ($n = 7$) .

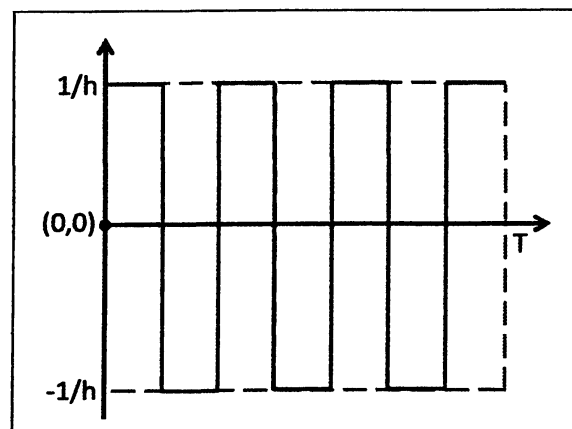


図 3: $f(t)$ ($n = 7$) .

である。ここで b_n は、 $Lb = g$ を解くことで得られる。

L^{-1} は厳密に計算でき、数列 $\{p_i\}$, $\{q_i\}$ を、

$$p_0 = 1, \quad p_1 = 2, \quad p_{i+1} = 4p_i - p_{i-1}, \quad (i = 1, 2, \dots),$$

$$q_0 = 1, \quad q_1 = 4, \quad q_{i+1} = 4q_i - q_{i-1}, \quad (i = 1, 2, \dots),$$

とおいたとき、

$$L^{-1}_{ij} = \frac{6}{p_n h} (-1)^{i+j} \times \begin{cases} p_{n-j} q_{i-1}, & i \leq j, \\ p_{n-i} q_{j-1}, & i \geq j, \end{cases} \quad (13)$$

となる。(13) は、 $\{p_i\}$, $\{q_i\}$ が、

$$p_{i+1} = 2q_i - q_{i-1}, \quad (i \geq 1),$$

$$p_{j-i} q_i - p_{j-i-1} q_{i-1} = p_{j-i+1} q_{i-1} - p_{j-i} q_{i-2}, \quad (i \geq 2, j \geq i+1),$$

をみたすことを用いて証明できる。

(13) より、

$$\|f_h\|_{L^2(J)}^2 = \frac{b_n}{2} = \frac{1}{2} (L^{-1}g)_n = \frac{1}{4} \frac{6}{h} \frac{q_{n-1}}{p_n},$$

であり、これは $p_{i+1} = 2q_i - q_{i-1}$ より、

$$\|f_h\|_{L^2(J)}^2 = \frac{3}{2h} \frac{q_{n-1}}{2q_{n-1} - q_{n-2}},$$

と書ける。よって、

$$\begin{aligned} \frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}^2}{\|f_h\|_{L^2(J)}^2} &= h^{-2} T \left(\frac{3}{2h} \frac{q_{n-1}}{2q_{n-1} - q_{n-2}} \right)^{-1} \\ &= \frac{2T}{3h} \left(\frac{q_{n-1}}{2q_{n-1} - q_{n-2}} \right)^{-1}, \end{aligned}$$

が得られる。ここで、3項間線形漸化式の一般項の公式より、

$$q_n = \frac{(2 + \sqrt{3})^{n+1} - (2 - \sqrt{3})^{n+1}}{2\sqrt{3}},$$

が得られる。よって、

$$\frac{q_{n-1}}{2q_{n-1} - q_{n-2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{(2 + \sqrt{3})^n - (2 - \sqrt{3})^n}{(2 + \sqrt{3})^n + (2 - \sqrt{3})^n} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \text{as } n \rightarrow \infty,$$

であるため、 $\|u'_h\|_{L^2(J)} / \|f_h\|_{L^2(J)} = \mathcal{O}(h^{-1/2})$ がいえる。

3.2 $\kappa \neq 0$ の場合

$u_h = u$ より,

$$\|u'_h\|_{L^2(J)}^2 = h^{-2}T, \quad \|u_h\|_{L^2(J)}^2 = T/3,$$

である. $\|f_h\|_{L^2(J)}$ については,

$$\|f_h\|_{L^2(J)} \leq \|P_h^0(u')\|_{L^2(J)} + \|\kappa u_h\|_{L^2(J)},$$

がいえる. ここで, $\|P_h^0(u')\|_{L^2(J)}$ は前節で得られた $\kappa = 0$ での $\|f_h\|_{L^2(J)}$ の値と等しい. よって,

$$\begin{aligned} \frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}}{\|f_h\|_{L^2(J)}} &\geq \frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}}{\|P_h^0(u')\|_{L^2(J)} + \|\kappa u_h\|_{L^2(J)}} \\ &= \frac{\|u'_h\|_{L^2(J)}}{\|P_h^0(u')\|_{L^2(J)} + |\kappa|T/3}, \end{aligned}$$

が得られる.

前節の結果から, $\kappa \neq 0$ でも $\|u'_h\|_{L^2(J)}/\|f_h\|_{L^2(J)}$ が $\mathcal{O}(h^{-1/2})$ 以上であることがいえる.

4 おわりに

第3節で紹介した例により, (10) の右辺による f に依存しない評価は $h \rightarrow 0$ で無限大に発散することがわかる. このことは, 近似スキーム (6) による近似解に対しては, (2) の評価定数 C は f, h に無関係な正定数としては求められないことを意味する.

第2.2節で示したとおり, 無限次元 ($V^1(J)$) では (2) のような評価は妥当であるため, これは, 無限次元における性質が, その自然な近似スキームによっても失われることを示す例といえる.

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金 (基盤研究 (S), 課題番号 20224001) の助成を受けたものである.

参考文献

- [1] M.T. Nakao, K. Hashimoto: A numerical verification method for solutions of nonlinear parabolic problems, *Journal of Math-for-industry*, 1, pp. 69-72, 2009.
- [2] T. Kinoshita, T. Kimura and M.T. Nakao: A posteriori estimates of inverse operators for initial value problems in linear ordinary differential equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 236(6), pp. 1622-1636, 2011.
- [3] M.T. Nakao, T. Kinoshita and T. Kimura: On a posteriori estimates of inverse operators for linear parabolic initial-boundary value problems, to appear in *Computing*.
- [4] N. Yamamoto and M.T. Nakao: Numerical verifications of solutions for elliptic equations in nonconvex polygonal domains, *Numerische Mathematik*, 65, pp. 503-521, 1993.
- [5] S.M. Rump: Verified bounds for singular values, in particular for the spectral norm of a matrix and its inverse, *BIT Numerical Mathematics*, 51(2), pp. 367-384, 2011.