

楕円型方程式の解の 数値的検証における簡易法について

指導教官 中尾 充宏 教授

提出日 平成7年 1月 31日

提出者 原 雅文

序文

微分方程式の解を数値的に捉える試みは多々行なわれてきたが、偏微分方程式に至ってはまだ発展途上の段階である。しかしながら、最近では計算機の発達と共に数値計算技術も飛躍的に進歩し、それと同時に非線形偏微分方程式の解を捉える手法も次第に確立されつつある。

現在、真の解を包み込む集合を計算機内で求める精度保証付き計算法と呼ばれる手法が提唱されていて、2 階の非線形楕円型方程式に応用されている。[8, 10]

本論文は [8] に述べられた数値的検証法の定式化を改良し（第 1 章）、更に楕円型方程式の右辺が、一般の多項式にも拡張できることを述べ、その手法を提案する。（第 2 章） また、従来の検証法では反復法を用いて解を包み込んだが、解の検証条件を 2 元連立不等式化することにより、反復回数 1 回で検証を成功させる手法を第 3 章で述べる。そして、第 4 章では第 2・3 章で構成されたプログラムに基づく数値例を挙げる。

本論文を完成するにあたって、御指導、御協力いただいた中尾充宏教授、山本野人講師、並びに大型計算機センターの渡部善隆助手、そしてプログラミングにあたって援助をしてくれた西村喜信君に感謝いたします。

目 次

1	楕円型方程式の解の数値的検証法の概要	1
1.1	不動点形式化	1
1.2	検証条件	4
1.3	計算機による検証法	5
2	適用方式の一般化技法	7
2.1	基底分解と評価式	7
2.2	基底分解の応用	15
3	簡易化の手法	17
3.1	検証法の連立不等式化	17
3.2	List Vector	22
4	適用例	22
5	結論	27
A	Best Constant in Sobolev Inequality	28

1 楕円型方程式の解の数値的検証法の概要

1.1 不動点形式化

次の非線形楕円型方程式を考える.

$$\begin{cases} -\Delta u &= f(u) & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad (1.1)$$

$\Omega : \mathbf{R}^2$ の有界凸閉集合
 $\partial\Omega$: 区分的に滑らかな境界

$$f(u) = \sum_{m=0}^{\mathcal{M}} a_m u^m \quad a_m \in \mathbf{R}^1$$

まずはじめに次の記号を定義しておく.

$H^m(\Omega)$ を Ω 上の m 次の L^2 -Sobolev 空間としたとき

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

このとき $H_0^1(\Omega)$ の内積を

$$(u, v)_{H_0^1(\Omega)} \equiv (\nabla u, \nabla v) \quad u, v \in H_0^1(\Omega)$$

として定義する. ただし $(\cdot, \cdot)$ は $L^2(\Omega)$ - 内積で

$$\nabla u \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2} \right)$$

とする. また $S_h, S_h^\perp, P_h$ を次のように定義する.

S_h : パラメータ h ($0 < h < 1$) に依存する $H_0^1(\Omega)$ の有限次元部分空間.

通常添字 h は領域の分割幅を表す.

$S_h^\perp$: S_h の直交補空間.

P_h : H_0^1 から S_h への H_0^1 -projection

すなわち

$$(\nabla u - \nabla P_h u, \nabla \phi_h) = 0 \quad \forall \phi_h \in S_h$$

この P_h に対して次の仮定をしておく.

Assumption 1.1

$$\|\phi - P_h \phi\|_{H_0^1} \leq C_1 h |\phi|_{H^2} \quad (1.2)$$

となるような h に依らない, 数値的に算定可能な定数 C_1 が存在する.

ただし

$$|\phi|_{H^2}^2 = \sum_{i,j=1}^2 \left\| \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j} \right\|_{L^2}^2$$

まず有限要素法を用いて, 次式を満たす (1.1) の有限要素近似解 $u_h \in S_h$ を見つけておく.

すなわち

$$(\nabla u_h, \nabla \phi_h) = (f(u_h), \phi_h) \quad \forall \phi_h \in S_h$$

を満たす u_h を見つける.

このとき, u_h は

$$\begin{cases} -\Delta \hat{u} &= f(u_h) & \text{in } \Omega \\ \hat{u} &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

の解 $\hat{u}$ の S_h への H_0^1 -projection となっている.

i.e.

$$\begin{aligned} u_h &= P_h \hat{u} \\ (\nabla \hat{u} - \nabla u_h, \nabla \phi_h) &= 0 \quad \forall \phi_h \in S_h \end{aligned} \tag{1.3}$$

よって

$$\begin{cases} -\Delta(u - \hat{u}) &= f(u) - f(u_h) & \text{in } \Omega \\ u - \hat{u} &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

ここで

$$\begin{aligned} w &= u - \hat{u} \\ v_0 &= \hat{u} - u_h \end{aligned} \tag{1.4}$$

とおくと

$$\begin{cases} -\Delta w &= f(u_h + v_0 + w) - f(u_h) & \text{in } \Omega \\ w &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{1.5}$$

と書ける. つまり (1.1) を解く代わりに (1.5) を解くことを考える. ここで 1 つ Lemma をあげておく.

Lemma 1.1

任意の $\psi \in L^2(\Omega)$ に対して,

$$\begin{cases} -\Delta \phi &= \psi & \text{in } \Omega \\ \phi &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

を満たすような $\phi \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ が一意に存在し

$$|\phi|_{H^2} \leq C_2 \|\psi\| \tag{1.6}$$

となるような, 数値的に算定可能な定数 C_2 が存在する.[3] 特に Ω が凸多角形領域のときは $C_2 = 1$ となる.[6]

このときの $\psi \in L^2(\Omega)$ に対して, $\phi \equiv A\psi$ と定義する.

$$A: L^2(\Omega) \rightarrow H_0^1(\Omega) \cap H^2(\Omega)$$

であるが, 埋め込み $H^2(\Omega) \hookrightarrow H_0^1(\Omega)$ は compact なので,

$$A: L^2(\Omega) \rightarrow H_0^1(\Omega) \quad compact$$

いま, 非線形作用素 F を

$$F(w) \equiv A(f(u_h + v_0 + w) - f(u_h))$$

として, 定義すれば F は $H_0^1(\Omega)$ から $H_0^1(\Omega)$ への compact 作用素となる.

これにより

$$w = F(w) \tag{1.7}$$

と不動点形式に書ける.

• v_0 の評価

(1.2)(1.4)(1.6) より

$$\begin{aligned} \|v_0\|_{H_0^1} &= \|\hat{u} - P_h \hat{u}\|_{H_0^1} \\ &\leq C_1 h |\hat{u}|_{H^2} \\ &\leq C_1 C_2 h \|f(u_h)\|_{L^2} \\ &= C_0 h \|f(u_h)\|_{L^2} \quad (C_0 \equiv C_1 C_2) \end{aligned} \tag{1.8}$$

次に, Aubin Nitsche Trick (例えば [5]) を用いて v_0 の L^2 ノルムを評価する.
まず, 次の方程式を考える.

$$\begin{cases} -\Delta \eta &= v_0 & in \ \Omega \\ \eta &= 0 & on \ \partial\Omega \end{cases}$$

η_h を η の有限要素近似解とすると

$$\begin{aligned} \|v_0\|^2 &= (v_0, v_0) \\ &= (v_0, -\Delta \eta) \\ &= (\nabla v_0, \nabla \eta) \\ &= (\nabla v_0, \nabla(\eta - \eta_h)) + (\nabla v_0, \nabla \eta_h) \end{aligned}$$

また, (1.3) より, 次の式が成り立つ.

$$(\nabla v_0, \nabla \eta_h) = (\nabla(\hat{u} - u_h), \nabla \eta_h) = 0$$

$$\begin{aligned} \therefore \|v_0\|^2 &\leq \|\nabla v_0\| \cdot \|\nabla(\eta - \eta_h)\| \\ &\leq \|\nabla v_0\| \cdot C_0 h \|v_0\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \|v_0\| &\leq C_0 h \|\nabla v_0\| \\ &= C_0 h \|v_0\|_{H_0^1} \\ &\leq C_0^2 h^2 \|f(u_h)\| \end{aligned} \tag{1.9}$$

1.2 検証条件

不動点形式化した (1.7) をさらに次のように変形する.

$$\begin{cases} P_h w &= P_h F(w) \\ (I - P_h)w &= (I - P_h)F(w) \end{cases} \quad (1.10)$$

(1.10) の上の式に Newton-like Method を用い, それを $P_h N(w)$ とおく. 即ち

$$P_h N(w) \equiv P_h w - [P_h - P_h F'(u_h)]^{-1} (P_h w - P_h F(w))$$

と定義する.

ここで $P_h N(w)$ に現れる作用素の仮定をしておく.

Assumption 1.2

$F'(u_h)$ を F の u_h での Fréchet 微分とするとき写像 $(P_h - P_h F'(u_h)) : H_0^1(\Omega) \rightarrow S_h$ を S_h に制限したものは, 逆作用素 $[P_h - P_h F'(u_h)]^{-1} : S_h \rightarrow S_h$ を持つ.

Assumption 1.2 は行列 $\{(\nabla(P_h - P_h F'(u_h))\phi_i, \nabla\phi_j)\}$ が可逆となることが必要十分条件であることを意味している.

いま作用素 T を

$$T(w) \equiv P_h N(w) + (I - P_h)F(w)$$

と定義すると, 次の proposition が成り立つ.

Proposition 1.1

$$w = T(w) \iff w = F(w) \quad (1.11)$$

(proof)

$w = T(w)$ より

$$\begin{cases} w_h &= P_h N(w) \\ w_h^\perp &= (I - P_h)F(w) \end{cases} \quad (1.12)$$

となる $w_h \in S_h, w_h^\perp \in S_h^\perp$ が一意に存在し $w = w_h + w_h^\perp$ と書ける. すると (1.12) より

$$\begin{aligned} w_h &= P_h w - [P_h - P_h F'(u_h)]^{-1} (P_h w - P_h F(w)) \\ \therefore P_h w &= P_h F(w) \end{aligned}$$

従って

$$\begin{aligned} w &= w_h + w_h^\perp \\ &= P_h w + w_h^\perp \\ &= P_h F(w) + (I - P_h)F(w) \\ &= F(w) \end{aligned}$$

□

すると Schauder の不動点定理 [11, 14] より

$$T(W) \equiv \{T(w) \mid w \in W\} \subset W$$

となる $H_0^1(\Omega)$ の有界凸閉部分集合 W が見つければ

$$\exists w \in T(W) \quad s.t. \quad w = T(w)$$

と言える.

そこで, $T(W) \subset W$ なる $W \subset H_0^1(\Omega)$ をどのようにして計算機内で表現するのだが, 作用素 $T(w)$ の構成に着目して無限次元空間である W を有限次元の部分と無限次元の部分に分ける.

i.e.

$$W = W_h \oplus W_h^\perp$$

$$\left(\begin{array}{cc} W_h & \subset S_h \\ W_h^\perp & \subset S_h^\perp \end{array} \right)$$

このとき検証条件は

$$P_h N(W) \subset W_h$$

$$(I - P_h)F(W) \subset W_h^\perp$$

となる.

$$\begin{aligned} (\because) \quad T(W) &= P_h N(W) \oplus (I - P_h)F(W) \\ &\subset W_h \oplus W_h^\perp \\ &= W \end{aligned}$$

1.3 計算機による検証法

$\{\phi_j\}_{j=1,\dots,M}$ を S_h の基底関数 ($M = \dim S_h$) とし, Φ_h を区間係数をもった $\{\phi_j\}$ の一次結合全体の集合とする.

i.e.

$$\Phi_h \equiv \{W_h \subset S_h \mid W_h = \sum_{j=1}^M [\underline{a}_j, \overline{a}_j] \phi_j \quad \underline{a}_j, \overline{a}_j \in \mathbf{R}^1\} \quad (1.13)$$

また $\alpha \in \mathbf{R}^+$ に対して

$$[\alpha] \equiv \{v \in S_h^\perp \mid \|v\|_{H_0^1} \leq \alpha, \|v\|_{L^2} \leq C_0 h \alpha\}$$

とおく. この Φ_h と $[\alpha]$ の元に対して反復列 $\{(w_h^{(n)}, \alpha_n)\}_{n=0,1,\dots}$ を考える.

$$(W^{(n)} \equiv w_h^{(n)} \oplus [\alpha_n])$$

Algorithm

$n = 0$ のとき

$$w_h^{(0)} = \{0\} \in \Phi_h$$

$$\alpha_0 = 0 \in \mathbf{R}^+$$

i.e.

$$W^{(0)} = w_h^{(0)}$$

$n \geq 1$ のとき $0 < \delta \ll 1$ となる δ を与え δ -inflation を次式で定義する.

$$\begin{cases} \tilde{w}_h^{(n-1)} & \equiv w_h^{(n-1)} + \sum_{j=1}^M [-1, 1] \delta \phi_j \\ \tilde{\alpha}_{n-1} & \equiv \alpha_{n-1} + \delta \end{cases} \quad (1.14)$$

次に $\widetilde{W}^{(n-1)} \equiv \tilde{w}_h^{(n-1)} \oplus [\tilde{\alpha}_{n-1}]$ について $w_h^{(n)}, \alpha_n$ を次式で定義する.

$$\begin{cases} w_h^{(n)} & \equiv \bigcup_{w \in \widetilde{W}^{(n-1)}} P_h N(\widetilde{W}^{(n-1)}) \\ \alpha_n & \equiv C_0 h \sup_{w \in \widetilde{W}^{(n-1)}} \|f(u_h + v_0 + w) - f(u_h)\| \end{cases} \quad (1.15)$$

Theorem 1.1

ある定数 N について

$$\begin{cases} w_h^N & \overset{\circ}{\subset} \tilde{w}_h^{(N-1)} \\ \alpha_N & < \tilde{\alpha}_{N-1} \end{cases}$$

が成り立てば

$$w = F(w)$$

となるような解 $w \in w_h^{(N)} \oplus [\alpha_N]$ が存在する. ここで

$$A \overset{\circ}{\subset} B \xLeftrightarrow{def} \overline{A} \subset \overset{\circ}{B}$$

とする.

(proof)

前半は検証条件のとおり. 後半は (1.2)(1.6) より

$$\begin{aligned} \|F(w) - P_h F(w)\|_{H_0^1} & \leq C_1 h |F(w)|_{H^2} \\ & = C_1 C_2 h \|f(u_h + v_0 + w) - f(u_h)\| \\ & = C_0 h \|f(u_h + v_0 + w) - f(u_h)\| \\ & \leq \alpha_N \end{aligned} \quad \square$$

$\widetilde{W}^{(n-1)} = \tilde{w}_h^{(n-1)} \oplus [\tilde{\alpha}_{n-1}]$ に対して

$$\begin{aligned} \bigcup P_h N(W) & = \bigcup \left(P_h W - [P_h - P_h F'(u_h)]^{-1} (P_h W - P_h F(W)) \right) \\ & \subset w_h^{(n)} \equiv \sum_{i=1}^M B_i^n \phi_i \end{aligned} \quad (1.16)$$

となるような区間ベクトル $(B_i^n)_{i=1}^M$ を見つける.

$w_h \equiv \sum_{i=1}^M B_i^{n-1} \phi_i \in \tilde{w}_h^{(n-1)}$, $\hat{\alpha} \in [\tilde{\alpha}_{n-1}]$ をとると

$$\begin{aligned}
(\nabla F(w_h + \hat{\alpha}), \nabla \phi_i) &= (\nabla A(f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h)), \nabla \phi_i) \\
&= (-\Delta A(f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h)), \phi_i) \\
&= (f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h), \phi_i) \\
&= \left(\frac{\partial f}{\partial u}(u_h) \cdot w_h + \kappa_{n-1}, \phi_i \right)
\end{aligned} \tag{1.17}$$

($\kappa_{n-1} : w_h$ の高次項)

(1.16) の両辺に $(P_h - P_h F'(u_h))$ を作用させると

$$(P_h - P_h F'(u_h))P_h w - (P_h w - P_h F(w)) \subset (P_h - P_h F'(u_h)) \sum_{i=1}^M B_i^n \phi_i$$

$w = w_h + \hat{\alpha}$ として両辺 H_0^1 内積をとると

$$\begin{aligned}
&(\nabla P_h F(w_h + \hat{\alpha}), \nabla \phi_j) - (\nabla P_h F'(u_h)w_h, \nabla \phi_j) \\
&\subset \sum_{i=1}^M B_i^n \cdot (\nabla(P_h - P_h F'(u_h))\phi_i, \nabla \phi_j)
\end{aligned} \tag{1.18}$$

ここで $M \times M$ 行列 $G \equiv (g_{ij})$ を

$$g_{ij} \equiv (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j) - \left(\frac{\partial f}{\partial u}(u_h) \phi_i, \phi_j \right)$$

で定義すると (1.17)(1.18) より

$$B_i^n = G^{-1}(K_j^{(n-1)})$$

と決定できる. ただし

$$\begin{aligned}
K_j^{(n-1)} &\equiv (\kappa_{n-1}, \phi_j) \\
(\kappa_{n-1}, \phi_j) &= \left(f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h) - \frac{\partial f}{\partial u}(u_h)w_h, \phi_j \right)
\end{aligned}$$

あと α_n の計算は $\|f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h)\|$ を三角不等式等で分けてやればよい.

2 適用方式の一般化技法

2.1 基底分解と評価式

第 1 章の検証手順の中に現われる G , K , α 等に現れる内積, ノルムの計算は $f(u)$ が u の 2 次式, 3 次式ぐらいでは Mathematica などでも計算も可能だが, 高次式となるとプログラミングに無理が生じる.

そこで第 2 章では $f(u)$ が一般の多項式のときの打開法と計算機内でのその実現法を提案する. ここで今後の精度のことも考えて 2 次要素で行う.

即ち

$$\begin{aligned}\Omega &\equiv [0, 1] \times [0, 1] \\ \Omega_i &\equiv \left[\frac{i-1}{N}, \frac{i}{N} \right] \quad (N : \text{分割数}) \\ V_2(x) &\equiv \{ v \in C((0, 1)) \mid v|_{\Omega_i} \in P_2(\Omega_i) \quad 1 \leq i \leq N, \quad v(0) = v(1) = 0 \}\end{aligned}$$

としたとき

$$S_h \equiv V_2(x) \otimes V_2(y) \quad (2.1)$$

と定義する.

さらに x 方向 y 方向はそれぞれともに等分割とする.

とりあえず $f(u) = u^m$ についての計算法を述べる. これができれば後は定数倍して Σ を施せば一般の多項式に拡張できるので十分である.

では, 次の 3 つの計算を順にみていく.

- 1 行列 G
- 2 内積 (κ_{n-1}, ϕ_j)
- 3 α_n

• まずは $w_h^{(n)}$ の計算に現われる行列 G の計算だが

$$\begin{aligned}g_{ij} &= (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j) - \left(\frac{\partial f}{\partial u}(u_h) \phi_i, \phi_j \right) \\ &= (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j) - m(u_h^{m-1} \phi_i, \phi_j)\end{aligned} \quad (2.2)$$

$k = m - 1$ とおき内積の部分に着目すると

$$\int_K u_h^k \phi_i \phi_j \, dK$$

の計算をしていることになる.

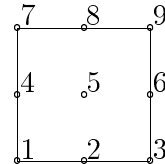
ただし $K \equiv [0, h] \times [0, h]$

$$dK \equiv dx dy$$

他の Element も変数変換等をすればこの形に帰着する事が明らかである.

いま Element K に右図のような node number をつけると

$$u_h|_K = \sum_{i=1}^9 c_i \phi_i \quad (2.3)$$



c_i : node i 上の u_h の値

ϕ_i : node i 上の基底関数

となる. すると

$$\begin{aligned}
\int_K u_h^k \phi_i \phi_j \, dK &= \int_K \left(\sum_{i=1}^9 c_i \phi_i \right)^k \phi_i \phi_j \, dK \\
&= \int_K \sum_{p_8=0}^k \binom{k}{p_8} \left(\sum_{i=1}^8 c_i \phi_i \right)^{p_8} (c_9 \phi_9)^{k-p_8} \phi_i \phi_j \, dK \\
&= \dots \\
&= \int_K \sum_{p_8=0}^k \sum_{p_7=0}^{p_8} \dots \sum_{p_1=0}^{p_2} \binom{k}{p_8} \binom{p_8}{p_7} \dots \binom{p_2}{p_1} \\
&\quad \times (c_1 \phi_1)^{p_1} \dots (c_8 \phi_8)^{p_8-p_7} (c_9 \phi_9)^{k-p_8} \phi_i \phi_j \, dK \\
&= \sum_{p_8=0}^k \dots \sum_{p_1=0}^{p_2} \binom{k}{p_8} \dots \binom{p_2}{p_1} c_1^{p_1} \dots c_8^{p_8-p_7} c_9^{k-p_8} \\
&\quad \times \int_K \phi_1^{p_1} \dots \phi_8^{p_8-p_7} \phi_9^{k-p_8} \phi_i \phi_j \, dK \tag{2.4}
\end{aligned}$$

ここで改めて積分内の計算に着目すると, i, j はともに $1 \sim 9$ の数字なので基底関数の積の計算をしている. そこで次のような計算をしよう.

($a_i \in \mathbb{Z}^+$, $\sum_{i=1}^9 a_i = k$ とする. ただし (2.4) にあらわれる k とは違うことに注意.)

$$\begin{aligned}
&\int_K \phi_1^{a_1} \phi_2^{a_2} \dots \phi_9^{a_9} \, dK \\
&= \int_0^h \int_0^h \frac{1}{h^{4k}} ((2x-h)(x-h))^{a_1+a_4+a_7} ((4x)(h-x))^{a_2+a_5+a_8} (x(2x-h))^{a_3+a_6+a_9} \\
&\quad \times ((2y-h)(y-h))^{a_1+a_2+a_3} ((4y)(h-y))^{a_4+a_5+a_6} (y(2y-h))^{a_7+a_8+a_9} \, dx dy \\
&= \frac{1}{h^{4k}} \int_0^h \int_0^h 4^q x^{q+r} (2x-h)^{p+r} (x-h)^p (h-x)^q \\
&\quad \times 4^t y^{t+u} (2y-h)^{s+u} (y-h)^s (h-y)^t \, dx dy \\
&= \frac{1}{h^{4k}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \int_0^h \int_0^h x^{q+r} (2x-h)^{r+p} (h-x)^{p+q} y^{t+u} (2y-h)^{u+s} (h-y)^{s+t} \, dx dy \\
&= \frac{1}{h^{4k}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \int_0^h \Phi(x; q+r, r+p, p+q) \, dx \int_0^h \Phi(y, t+u, u+s, s+t) \, dy \tag{2.5}
\end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}
\Phi(x; q+r, r+p, p+q) &\equiv x^{q+r} (2x-h)^{r+p} (h-x)^{p+q} \tag{2.6} \\
&\begin{pmatrix} p = a_1 + a_4 + a_7 & s = a_1 + a_2 + a_3 \\ q = a_2 + a_5 + a_8 & t = a_4 + a_5 + a_6 \\ r = a_3 + a_6 + a_9 & u = a_7 + a_8 + a_9 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

としている.(2.5) より次の計算をすれば十分.

$$\begin{aligned}
&\int_0^h \Phi(x; q+r, r+p, p+q) \, dx \\
&= \int_0^h x^{q+r} (h-x)^{p+q} \sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (2x)^l (-h)^{p+r-l} \, dx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-h)^{p+r-l} 2^l \int_0^h x^{q+r+l} (h-x)^{p+q} dx \\
&= \sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-h)^{p+r-l} 2^l \int_0^1 x^{q+r+l} (1-x)^{p+q} h^{(q+r+l)+(p+q)+1} dx \\
&= \sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-h)^{p+r-l} 2^l \cdot B(q+r+l+1, p+q+1) h^{(q+r+l)+(p+q)+1} \\
&\quad (B : \text{ベータ関数}) \\
&= \sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-1)^{p+r-l} 2^l \frac{(q+r+l)!(p+q)!}{(p+2q+r+l+1)!} h^{2k+1} \tag{2.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\therefore (2.5) &= \frac{1}{h^{4k}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \left(\sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-1)^{p+r-l} 2^l \frac{(q+r+l)!(p+q)!}{(p+2q+r+l+1)!} h^{2k+1} \right) \\
&\quad \times \left(\sum_{n=0}^{s+u} \binom{s+u}{n} (-1)^{s+u-n} 2^n \frac{(t+u+l)!(s+t)!}{(s+2t+t+n+1)!} h^{2k+1} \right) \\
&= (-1)^{r+u} 4^{q+t} h^2 \left(\sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-1)^l 2^l \frac{(q+r+l)!(p+q)!}{(p+2q+r+l+1)!} \right) \\
&\quad \times \left(\sum_{n=0}^{s+u} \binom{s+u}{n} (-1)^n 2^n \frac{(t+u+l)!(s+t)!}{(s+2t+t+n+1)!} \right)
\end{aligned}$$

よって

$$H(q+r, r+p, p+q) \equiv \sum_{l=0}^{p+r} \binom{p+r}{l} (-2)^l \frac{(q+r+l)!(p+q)!}{(p+2q+r+l+1)!} \tag{2.8}$$

とおくと

$$\int_K \phi_1^{a_1} \phi_2^{a_2} \cdots \phi_9^{a_9} dK = (-1)^{r+u} 4^{q+t} h^2 H(q+r, r+p, p+q) H(t+u, u+s, s+t) \tag{2.9}$$

と書ける.

今後, 上記のような計算を **基底分解** と呼ぶ.

• 次に 2 番目の (κ_{n-1}, ϕ_j) の計算をする.

第 1 章同様, $w_h \in \tilde{w}_h^{(n-1)}$, $\hat{\alpha} \in [\tilde{\alpha}_{n-1}]$ をとると

$$\begin{aligned}\kappa_{n-1} &= (u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha})^m - u_h^m - m u_h^{m-1} w_h \\ &= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (u_h + w_h)^{m-k} (v_0 + \hat{\alpha})^k - u_h^m - m u_h^{m-1} w_h \\ &= \sum_{k=2}^m \binom{m}{k} u_h^{m-k} w_h^k + \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} (u_h + w_h)^{m-k} (v_0 + \hat{\alpha})^k\end{aligned}\quad (2.10)$$

ここで, 最初の $m-1$ 項は

$$(u_h^{m-k} w_h^k, \phi_j)$$

なので u_h 同様 $w_h = \sum_{i=1}^9 B_i \phi_i$, $B_i = [\underline{B}_i, \overline{B}_i]$ において基底分解の要領で計算すると次のようになる.

$$\begin{aligned}(u_h^{m-k} w_h^k, \phi_j) &\subset [-1, 1] \left\{ \int_K \left(\sum_{i=1}^9 c_i \phi_i \right)^{m-k} \left(\sum_{i=1}^9 B_i \phi_i \right)^k \phi_j \, dK \right\} \\ &\subset [-1, 1] \left\{ \sum_{p_8=0}^{m-k} \cdots \sum_{p_1=0}^{p_2} \sum_{q_8=0}^k \cdots \sum_{q_1=0}^{q_2} \binom{m-k}{p_8} \cdots \binom{p_2}{p_1} \binom{k}{q_8} \cdots \binom{q_2}{q_1} \right. \\ &\quad \times c_1^{p_1} \cdots c_9^{m-k-p_8} \overline{B}_1^{q_1} \cdots \overline{B}_9^{k-q_8} \\ &\quad \times \left. \left| \int_K \phi_1^{p_1+q_1} \phi_2^{(p_2-p_1)+(q_2-q_1)} \cdots \phi_9^{m-p_8-q_8} \phi_j \, dx dy \right| \right\}\end{aligned}\quad (2.11)$$

積分に絶対値を施したのは w_h が区間係数をもつ関数だからである.

残りの m 項は

$$\begin{aligned}\left| ((u_h + w_h)^{m-k} (v_0 + \hat{\alpha})^k, \phi_j) \right| &\leq \| (u_h + w_h)^{m-1} \phi_j \| \cdot \| v_0 + \hat{\alpha} \| \quad (k=1) \\ &\leq \| (u_h + w_h)^{m-k} \phi_j \|_{L^\infty} \cdot \left| \int (v_0 + \hat{\alpha})^k \right| \\ &\leq \| (u_h + w_h)^{m-k} \phi_j \|_{L^\infty} \cdot \| v_0 + \hat{\alpha} \| \| (v_0 + \hat{\alpha})^{k-1} \| \quad (k \geq 2)\end{aligned}\quad (2.12)$$

として計算する. いま, 一般性を保つため $k-1$ を改めて k とおき, ここに現われる $\| (v_0 + \hat{\alpha})^k \|$ の計算を説明する. まず, 次の Sobolev の埋め込み定理を用いて得られる不等式を紹介しておく.

Lemma 2.1

$\forall v \in H_0^1(\Omega)$, $p > 1$ に対して

$$\| v \|_{L^p} \leq \frac{p\sqrt{2}}{8} |\Omega|^{1/p} \| v \|_{H_0^1} \quad (2.13)$$

ただし $|\Omega|$ は Ω の測度を表わす.

(本論では $|\Omega| = 1$)

証明は [4, 8]

では, 上の不等式を用いて先の $\| (v_0 + \hat{\alpha})^k \|$ の計算をすると

$$\begin{aligned}
\| (v_0 + \hat{\alpha})^k \|_{L^2} &= \| v_0 + \hat{\alpha} \|_{L^{2k}}^k \\
&\leq \left(\frac{2k}{8} \sqrt{2} \| v_0 + \hat{\alpha} \|_{H_0^1} \right)^k \\
&\leq \left(\frac{k}{4} \sqrt{2} \right)^k (\gamma_0 + \alpha)^k \quad (\gamma_0 \equiv \| v_0 \|_{H_0^1})
\end{aligned} \tag{2.14}$$

となるが, 次のようにも計算できる.

$$\begin{aligned}
\| (v_0 + \hat{\alpha})^k \|_{L^2}^2 &= \left| \int (v_0 + \hat{\alpha})^{2k} \right| \\
&\leq \| v_0 + \hat{\alpha} \| \cdot \| (v_0 + \hat{\alpha})^{2k-1} \| \\
&\leq C_0 h (\gamma_0 + \alpha) \cdot \left(\frac{4k-2}{8} \sqrt{2} (\gamma_0 + \alpha) \right)^{2k-1} \\
\therefore \| (v_0 + \hat{\alpha})^k \|_{L^2} &\leq \left(C_0 h \left(\frac{2k-1}{4} \sqrt{2} \right)^{2k-1} \right)^{1/2} \cdot (\gamma_0 + \alpha)^k
\end{aligned} \tag{2.15}$$

上と同様の計算を l 回繰り返すと

$$\| (v_0 + \hat{\alpha})^k \|_{L^2} \leq (C_0 h)^{1-\frac{1}{2^l}} \left(\frac{2^l(k-1)+1}{4} \sqrt{2} \right)^{k-1+\frac{1}{2^l}} (\gamma_0 + \alpha)^k \tag{2.16}$$

となる.(証明は帰納法による) ここで $C_{(N,k,l)}$ を

$$C_{(N,k,l)} \equiv (C_0 h)^{1-\frac{1}{2^l}} \left(\frac{2^l(k-1)+1}{4} \sqrt{2} \right)^{k-1+\frac{1}{2^l}}$$

とおく. $C_{(N,k,l)}$ はより小さい値が望ましいので

$$C_{(N,k,l)} < C_{(N,k,l-1)}$$

となる N, k, l を求めると次の表のようになる.

$k = 2$	$l = 3$	$N \geq 18$
$k = 3$	$l = 2$	$N \geq 18$
$k = 4$	$l = 1$	$N \geq 6$
$k = 5$	$l = 1$	$N \geq 18$
$k = 6$	$l = 1$	$N \geq 60$
$k = 7$	$l = 0$	$N \leq 201$
$\vdots$		

ただし k, l を与え, それを満たす N を解いている. また $C_0 = \frac{1}{2\pi}$ としている. (例えば [6, 7])
 これより, 例えば $k = 2$, 分割数 $N = 20$ では, $l = 3$ が最良評価を与えることが分かる.
 これで (κ_{n-1}, ϕ_j) は計算できる.

• 最後に, α_n の計算だが

$$\begin{aligned}
 & \|f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h)\| \\
 &= \| (u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha})^m - u_h^m \| \\
 &= \left\| \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (u_h + w_h)^{m-k} (v_0 + \hat{\alpha})^k - u_h^m \right\| \\
 &= \left\| \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} u_h^{m-k} w_h^k + \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} (u_h + w_h)^{m-k} (v_0 + \hat{\alpha})^k \right\| \\
 &\leq \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} \|u_h^{m-k} w_h^k\| + \sum_{k=1}^m \|(u_h + w_h)^{m-k} (v_0 + \hat{\alpha})^k\| \\
 &\leq \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} \|u_h^{m-k} w_h^k\| + \sum_{k=1}^m \|(u_h + w_h)^{m-k}\|_{L^\infty} \|(v_0 + \hat{\alpha})^k\| \\
 &\leq \sum_{k=1}^m \binom{m}{k} \|u_h^{m-k} w_h^k\| + \sum_{k=1}^m (\|u_h\|_{L^\infty} + \|w_h\|_{L^\infty})^{m-k} \|(v_0 + \hat{\alpha})^k\| \quad (2.17)
 \end{aligned}$$

最初の m 項は基底分解の要領で計算可能. ((2.11) 参照)

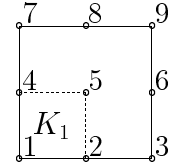
残りの項に現われる $\|u_h\|_{L^\infty}$, $\|w_h\|_{L^\infty}$ は, 分割 Element が 1 次要素であれば $\max |u_h|$, $\max |w_h|$ と一致するが, 2 次要素ではそうはならない. そこでその計算法を述べる.

• $\|u_h\|_{L^\infty(\Omega)}$ について

Element K を 4 等分しその左下の Element を K_1 とおく.

まず, K_1 上では

$$\begin{aligned}
 \phi_1, \phi_2, \phi_4, \phi_5, \phi_9 &\geq 0 \\
 \phi_3, \phi_6, \phi_7, \phi_8 &\leq 0
 \end{aligned}$$



そこで,

$$\begin{aligned}
 \bar{u}_{max} &\equiv \max\{c_1, c_2, c_4, c_5, c_9\} \\
 \bar{u}_{min} &\equiv \min\{c_3, c_6, c_7, c_8\} \\
 p_1(x, y) &\equiv \phi_1 + \phi_2 + \phi_4 + \phi_5 + \phi_9 \\
 p_2(x, y) &\equiv \phi_3 + \phi_6 + \phi_7 + \phi_8
 \end{aligned}$$

とおくと

$$u_h \leq \bar{u}_{max} \cdot p_1(x, y) + \bar{u}_{min} \cdot p_2(x, y)$$

となる. すると右辺の式は

$$\begin{aligned}
 \bar{u}_{max} &\geq \bar{u}_{min} \text{ のとき 点 } (h/4, h/4) \text{ で最大値 } \bar{u}_{max} + \frac{9}{32}(\bar{u}_{max} - \bar{u}_{min}) \\
 \bar{u}_{max} &\leq \bar{u}_{min} \text{ のとき node } 1, 2, 4, 5, 9 \text{ で最大値 } \bar{u}_{max}
 \end{aligned}$$

をとることが分かる. つまり

$$u_h \leq \max\{ \bar{u}_{max} + \frac{9}{32}(\bar{u}_{max} - \bar{u}_{min}) , \bar{u}_{max} \} (\equiv u_h^{max}) \quad (2.18)$$

同様にして

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{max} &\equiv \max\{c_3, c_6, c_7, c_8\} \\ \tilde{u}_{min} &\equiv \min\{c_1, c_2, c_4, c_5, c_9\} \end{aligned}$$

とおけば

$$\min\{ \tilde{u}_{min} + \frac{9}{32}(\tilde{u}_{min} - \tilde{u}_{max}) , \tilde{u}_{min} \} (\equiv u_h^{min}) \leq u_h \quad (2.19)$$

となる.

(2.18)(2.19) から

$$\| u_h \|_{L^\infty(K_1)} \leq \max\{ |u_h^{min}| , |u_h^{max}| \} \quad (2.20)$$

となり, 以上の評価を他の 3 つの小 Element についても行えば

$$\| u_h \|_{L^\infty(\Omega)} \leq \max_K \max_i \{ \| u_h \|_{L^\infty(K_i)} \} \quad (2.21)$$

が言える.

• $\| w_h \|_{L^\infty(\Omega)}$ について

w_h は 0 中心の区間係数を持つ関数なので

$$\bar{w} \equiv \max_{1 \leq i \leq 9} \{ \bar{B}_i \}$$

とおけば (2.18) ~ (2.20) より

$$\| w_h \|_{L^\infty(K)} \leq \bar{w} + \frac{9}{32}(\bar{w} + \bar{w}) = \frac{25}{16}\bar{w}$$

よって

$$\| w_h \|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{25}{16} \max_{i \in node} \{ \bar{B}_i \} \quad (2.22)$$

以上より $f(u) = \sum_{m=0}^{\mathcal{M}} a_m u^m$ のときの $(\kappa_{n-1}, \phi_j), \alpha_n$ の計算は次のようにする.

$$\begin{aligned}
(\kappa_{n-1}, \phi_j) &\subset [-1, 1] \times \left\{ \sum_{k=2}^{\mathcal{M}} \left| \left(\sum_{m=k}^{\mathcal{M}} a_m \binom{m}{k} u_h^{m-k} w_h^k, \phi_j \right) \right| \right. \\
&\quad + \sum_{k=1}^{\mathcal{M}} \left\| \sum_{m=k}^{\mathcal{M}} a_m \binom{m}{1} \binom{m-1}{k-1} u_h^{m-k} w_h^{k-1} \phi_j \right\| \|v_0 + \hat{\alpha}\| \\
&\quad + \sum_{l=2}^{\mathcal{M}} \sum_{k=l}^{\mathcal{M}} \left\| \sum_{m=k}^{\mathcal{M}} a_m \binom{m}{l} \binom{m-l}{k-l} u_h^{m-k} w_h^{k-l} \phi_j \right\|_{L^\infty} \|v_0 + \hat{\alpha}\| \| (v_0 + \hat{\alpha})^{l-1} \| \left. \right\} \\
\alpha_n &\leq C_0 h \left\{ \sum_{k=1}^{\mathcal{M}} \left\| \sum_{m=k}^{\mathcal{M}} a_m \binom{m}{k} u_h^{m-k} w_h^k \right\| \right. \\
&\quad + \sum_{l=1}^{\mathcal{M}} \sum_{k=l}^{\mathcal{M}} \left\| \sum_{m=k}^{\mathcal{M}} a_m \binom{m}{l} \binom{m-l}{k-l} u_h^{m-k} w_h^{k-l} \right\|_{L^\infty} \| (v_0 + \hat{\alpha})^l \| \left. \right\} \quad (2.23)
\end{aligned}$$

Remark

(2.23) に現れる w_h を含む計算は区間演算を用いるので, なるべく overestimate が少なくなるように工夫する必要がある.

区間演算は分配律が成立しないため, すなわち

$$A(B + C) \subseteq AB + AC$$

となるので (2.23) では同じ区間 w_h をできるだけくり, 計算するようにしている.

2.2 基底分解の応用

検証法の中で γ_0 すなわち v_0 の H_0^1 ノルムが出てきたがそこでの計算は a-priori 評価であった. ((1.8)) しかし, 実際の検証では a-priori 評価では検証が困難となる場合が多い. そこで, 次のような a-posteriori 評価を用いる.

$$\|v_0\|_{H_0^1} \equiv \|\nabla u_h - \bar{\nabla} u_h\| + C_0 h \|\bar{\Delta} u_h + f(u_h)\| \quad (2.24)$$

ここでは簡単に説明し, 詳しくは [13]

まず, $\bar{\nabla}, \bar{\Delta}$ を次のようにして定義する.

$$\bar{\nabla} : (L^2)^2 \rightarrow (S_h^*)^2 \quad L^2\text{-projection}$$

$$\bar{\nabla} u_h = \begin{pmatrix} \sum_i^{M^*} a_i \hat{\phi}_i \\ \sum_i^{M^*} b_i \hat{\phi}_i \end{pmatrix}$$

$$\bar{\Delta} = \nabla \bar{\nabla} u_h$$

ここで, M^* は S_h^* の次元で S_h^* は S_h に端点上の基底関数を付加した空間である. また $\hat{\phi}_i$ は S_h^* 上の基底関数である. そして

$$\begin{aligned} L_{ij} &\equiv (\hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j) & M^* \times M^* \text{ 行列} \\ K_{ij}^x &\equiv (\hat{\phi}_i, \partial_x \phi_j) & M^* \times M \text{ 行列} \\ K_{ij}^y &\equiv (\hat{\phi}_i, \partial_y \phi_j) & M^* \times M \text{ 行列} \\ \mathbf{a} &\equiv (a_1, \dots, a_{M^*})^T \\ \mathbf{b} &\equiv (b_1, \dots, b_{M^*})^T \\ \mathbf{c} &\equiv (c_1, \dots, c_M)^T \end{aligned}$$

とおいたとき

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= L^{-1} K^x \mathbf{c} \\ \mathbf{b} &= L^{-1} K^y \mathbf{c} \end{aligned}$$

として計算する.

あとは

$$\| \nabla u_h - \bar{\nabla} u_h \|^2 = \| \nabla u_h \|^2 - \| \bar{\nabla} u_h \|^2$$

となることから

$$\begin{aligned} \| \nabla u_h - \bar{\nabla} u_h \|^2 &= \mathbf{c}^T E \mathbf{c} - \mathbf{a}^T L \mathbf{a} - \mathbf{b}^T L \mathbf{b} \\ (E_{ij} &\equiv (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j)) \end{aligned}$$

これで, 第 1 項は計算できる. 第 2 項は以下のようにして計算する.

$$\| \bar{\Delta} u_h + f(u_h) \|^2 = \| \bar{\Delta} u_h \|^2 + 2(\bar{\Delta} u_h, f(u_h)) + \| f(u_h) \|^2 \quad (2.25)$$

(2.25) の第 1 項は

$$\bar{\Delta} u_h = \sum_{i=1}^{M^*} a_i \partial_x \hat{\phi}_i + \sum_{i=1}^{M^*} b_i \partial_y \hat{\phi}_i$$

より

$$\begin{aligned} \| \bar{\Delta} u_h \|^2 &= \mathbf{a}^T D^{xx} \mathbf{a} + 2 \mathbf{a}^T D^{xy} \mathbf{b} + \mathbf{b}^T D^{yy} \mathbf{b} \\ (D_{ij}^{xx} &\equiv (\partial_x \hat{\phi}_i, \partial_x \hat{\phi}_j)) \\ (D_{ij}^{xy} &\equiv (\partial_x \hat{\phi}_i, \partial_y \hat{\phi}_j)) \\ (D_{ij}^{yy} &\equiv (\partial_y \hat{\phi}_i, \partial_y \hat{\phi}_j)) \end{aligned}$$

となる.(2.25) の第 2 項は

$$(\bar{\Delta} u_h, f(u_h)) = \sum_{m=0}^{\mathcal{M}} \left(\sum_{i=1}^{M^*} a_i \partial_x \hat{\phi}_i + \sum_{i=1}^{M^*} b_i \partial_y \hat{\phi}_i, u_h^m \right)$$

となり, ここに基底分解の計算を利用する. 前と同様に Element K の中で考えて例えば

$$(\partial_x \phi_1, u_h^m)_K \quad (\text{内点では } \hat{\phi} = \phi)$$

の計算をみていこう.

$$\begin{aligned} \int_K \partial_x \phi_1 \left(\sum_{i=1}^9 c_i \phi_i \right)^m dK &= \sum_{p_8=0}^m \cdots \sum_{p_1=0}^{p_2} \binom{m}{p_8} \cdots \binom{p_2}{p_1} c_1^{p_1} \cdots c_8^{p_8-p_7} c_9^{m-p_8} \\ &\quad \times \int_K \partial_x \phi_1 \cdot \phi_1^{p_1} \cdots \phi_8^{p_8-p_7} \phi_9^{m-p_8} dK \end{aligned}$$

再び, 積分の中に着目して前と同様

$$\int_K \partial_x \phi_1 \cdot \phi_1^{a_1} \cdots \phi_9^{a_9} dK$$

の計算をする.

$$\begin{aligned} &\int_K \partial_x \phi_1 \cdot \phi_1^{a_1} \cdots \phi_9^{a_9} dK \\ &= \int_K \frac{1}{h^2} (4x - 3h) \frac{1}{h^2} (2y - h)(y - h) \times \frac{1}{h^{4k}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \Phi(x; q+r, r+p, p+q) \\ &\quad \times \Phi(y; t+u, u+s, s+t) dK \\ &= \frac{1}{h^{4m+4}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \int_K (3h - 4x)(2y - h)(h - y) \Phi(x; q+r, r+p, p+q) \\ &\quad \times \Phi(y; t+u, u+s, s+t) dK \\ &= \frac{1}{h^{4m+4}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \int_0^h (3h - 4x) \Phi(x; q+r, r+p, p+q) dx \\ &\quad \times \int_0^h (2y - h)(h - y) \Phi(y; t+u, u+s, s+t) dy \\ &= \frac{1}{h^{4m+4}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \times \int_0^h \Phi(y; t+u, u+s+1, s+t+1) dy \\ &\quad \times \left(3h \int_0^h \Phi(x; q+r, r+p, p+q) dx - 4 \int_0^h \Phi(x; q+r+1, r+p, p+q) dx \right) \\ &= \frac{1}{h^{4m+4}} (-1)^{p+s} 4^{q+t} \times (-1)^{u+s+1} H(t+u, u+s+1, s+t+1) h^{2m+3} \\ &\quad \times \left(3(-1)^{r+p} H(q+r, r+p, p+q) h^{2m+2} - 4(-1)^{r+p} H(q+r+1, r+p, p+q) h^{2m+2} \right) \\ &= (-1)^{r+u} 4^{q+t} h (4H(q+r+1, r+p, p+q) - 3H(q+r, r+p, p+q)) \\ &\quad \times H(t+u, u+s+1, s+t+1) \end{aligned}$$

後は, 同様にして $\partial_x \phi_2 \cdots \partial_x \phi_9$, $\partial_y \phi_1 \cdots \partial_y \phi_9$ の場合も計算できる.

3 簡易化の手法

3.1 検証法の連立不等式化

検証の方法は第 1 章で分かったが, それにおける反復の初期値は

$$w_h^{(0)} = \{0\}, \quad \alpha_0 = 0 \quad (3.1)$$

としている.

しかし, 実際にこの初期値から検証を始めると最低でも通常 10 数回の反復回数が必要となる場合が多い. そこで, 分割数を増やし (h を小さくし) 反復回数を減らすことを試みると, 同時に S_h の次元が大きくなることになる. すると行列 G 自体は sparse なので memory の節約は可能だが (後述), 逆行列 G^{-1} は full matrix なのでその大きさだけの memory が必要となる. 確かに memory 不足を補う G^{-1} の計算法はあるが, その方法では検証の反復計算をする度に, 毎回同じ計算をしなければならない.

これでは, 本来 1 回計算をしておけばよい G^{-1} の計算に時間を要し, 検証効率の低下を来す. しかも, それで検証が成功すれば良いが, 収束しないとまた h を変えて殆ど同じ計算を試みなければならない, 一層の計算コストを高くしてしまう.

そこで検証条件を 2 元連立不等式に変え, 検証完了条件の成立する w_h と α の大きさを予め判定し, 検証の反復計算を 1 回で済ませようというのがこの章の狙いである. そうすれば, 検証の計算だけでなく G^{-1} の計算の回避にもつながり, (1.14) の Delta Inflation をする必要がなくなる. さらに, この方法の特徴として h をどのくらい小さくすれば, 検証が成功するかの予測がたてられることがある.

以下にその手順を説明する.

$\alpha, \beta \in \mathbf{R}^1$, $w_0 \in S_h$ として次の空間 $W_h, W_h^\perp$ を考える.

$$\begin{aligned} W_h &= \{w_h \in \Phi_h \mid w_h \subset [-1, 1]\beta w_0\} \\ W_h^\perp &= \{v \in S_h^\perp \mid \|v\|_{H_0^1} \leq \alpha\} \end{aligned}$$

すると $T(w)$ は α, β に依って決定される. そこで

$$\begin{aligned} P_h N(W) &\subset \{w_h \in \Phi_h \mid w_h \subset [-1, 1]F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta)w_0\} \\ (I - P_h)F(W) &\subset \{v \in S_h^\perp \mid \|v\|_{H_0^1} \leq F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta)\} \end{aligned}$$

となる関数 $F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta)$, $F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta)$ ($\gamma_0 = \|v_0\|_{H_0^1}$) を求めると検証条件は

$$\begin{aligned} F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta) &< \beta \\ F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta) &< \alpha \end{aligned}$$

となる. 右辺の α, β を左辺に移項し, その式を改めて $F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta)$, $F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta)$ とおく.

Proposition 3.1

曲線 $F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta)$ と $F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta)$ が交点をもつとき

$$D_F \equiv \{(\gamma_0 + \alpha, \beta) \mid F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta) < 0\} \cap \{(\gamma_0 + \alpha, \beta) \mid F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta) < 0\} \quad (3.2)$$

の領域内の点 $(\gamma_0 + \alpha^*, \beta^*)$ をとる. $w_h^{(0)}, \alpha_0$ の初期値 0 の代わりに

$$w_h^{(0)} = \beta^* w_0, \quad \alpha_0 = \alpha^*$$

から検証を始めると 1 回で成功する.

では, 実際に例として $f(u) = u^2$ (Emden Equation) の場合において F_1, F_2 を求めてみる.
ベクトル w_0 を次のようにする.

$$w_0 \equiv \frac{|G^{-1}|}{\|G^{-1}\|_\infty} \mathbf{1} \quad (3.3)$$

ただし $|G^{-1}|$: G^{-1} の i, j 成分の絶対値をとった行列 (i.e. $|G^{-1}| \equiv (|g_{ij}^{-1}|)$)

$$\|G^{-1}\|_\infty \equiv \max_i \sum_j |g_{ij}^{-1}|$$

$$\mathbf{1} \equiv (1, \dots, 1)^T$$

(注: $w_0 > 0, \max w_0 = 1$)

$w_h \in \tilde{w}_h^{(n-1)}, \hat{\alpha} \in [\tilde{\alpha}_{n-1}]$ をとると

$$\begin{aligned} |(\kappa_{n-1}, \phi_j)| &= \left| \left(f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h) - \frac{\partial f}{\partial u}(u_h) w_h, \phi_j \right) \right| \\ &= \left| \left((u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha})^2 - u_h^2 - 2u_h w_h, \phi_j \right) \right| \\ &= \left| \left(w_h^2 + 2(u_h + w_h)(v_0 + \hat{\alpha}) + (v_0 + \hat{\alpha})^2, \phi_j \right) \right| \\ &\leq \left| (w_h^2, \phi) \right| + 2 \|(u_h + w_h) \phi_j\| \cdot \|v_0 + \hat{\alpha}\| + \|\phi_j\|_{L^\infty} \|v_0 + \hat{\alpha}\|^2 \\ &\leq \beta^2 (w_0^2, \phi_j) + 2(\|u_h \phi_j\| + \beta \|w_0 \phi_j\|) \|v_0 + \hat{\alpha}\| + \|v_0 + \hat{\alpha}\|^2 \end{aligned}$$

いま右辺を r_j とおくと

$$\begin{aligned} K_j^{(n-1)} &= (\kappa_{n-1}, \phi_j) \subset [-1, 1] r_j \\ \therefore G^{-1} K_j^{(n-1)} &\subset G^{-1} [-1, 1] r_j \\ &= [-1, 1] |G^{-1}| r_j \end{aligned}$$

となるが, 検証条件より

$$[-1, 1] |G^{-1}| r_j \subset [-1, 1] \beta w_0 \quad (3.4)$$

であればよい. すなわち

$$\max_i \left(\frac{1}{(w_0)_i} (|G^{-1}| r_j)_i \right) < \beta$$

であればよいことになる.

$$\begin{aligned} c_1 &\equiv \max_i \left(\frac{1}{(w_0)_i} \left(|G^{-1}| \cdot (w_0^2, \phi_j) \right)_i \right) \\ c_2 &\equiv \max_i \left(\frac{1}{(w_0)_i} \left(|G^{-1}| \cdot \|u_h \phi_j\| \right)_i \right) \\ c_3 &\equiv \max_i \left(\frac{1}{(w_0)_i} \left(|G^{-1}| \cdot \|w_0 \phi_j\| \right)_i \right) \end{aligned}$$

とおけば, c_1, c_2, c_3 はそれぞれ定数なので左辺の式は $\gamma_0 + \alpha$ と β についての2次式となる. それを $F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta)$ とおく.

i.e.

$$F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta) \equiv c_1 \beta^2 + 2(c_2 + c_3 \beta) C_0 h(\gamma_0 + \alpha) + \|G^{-1}\|_\infty \cdot (C_0 h(\gamma_0 + \alpha))^2 - \beta$$

するとこの F_1 に対して

$$\lceil F_1(\gamma_0 + \alpha, \beta) < 0 \rceil \implies (3.4)$$

が成立する.

次に α_n についてみると

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_n}{C_0 h} &\equiv \|f(u_h + v_0 + w_h + \hat{\alpha}) - f(u_h)\| \\ &= \|2u_h w_h + w_h^2 + 2(u_h + w_h)(v_0 + \hat{\alpha}) + (v_0 + \hat{\alpha})^2\| \\ &\leq 2\|u_h w_h\| + \|w_h^2\| + 2\|u_h + w_h\|_{L^\infty} \|v_0 + \hat{\alpha}\| + \|(v_0 + \hat{\alpha})^2\| \\ &\leq 2\beta\|u_h w_0\| + \beta^2\|w_0\|^2 \\ &\quad + 2(\|u_h\|_{L^\infty} + \beta\|w_0\|_{L^\infty})(C_0 h(\gamma_0 + \alpha)) + C_{(N,2,l)}(\gamma_0 + \alpha)^2 \end{aligned} \quad (3.5)$$

検証条件より

$$((3.5)\text{右辺}) < \frac{\alpha}{C_0 h}$$

であればよいので, 先ほどと同様にして

$$\begin{aligned} F_2(\gamma_0 + \alpha, \beta) &\equiv 2\beta\|u_h w_0\| + \beta^2\|w_0\|^2 + 2(\|u_h\|_{L^\infty} + \beta\|w_0\|_{L^\infty})C_0 h(\gamma_0 + \alpha) \\ &\quad + C_{(N,2,l)}(\gamma_0 + \alpha)^2 - \frac{(\gamma_0 + \alpha)}{C_0 h} + \frac{\gamma_0}{C_0 h} \end{aligned}$$

とおく. いま曲線 F_1, F_2 の交点の $\gamma_0 + \alpha$ の値を $(\gamma_0 + \alpha)^*$ とし,

$$\alpha^* \equiv (\gamma_0 + \alpha)^* - \gamma_0 + \varepsilon \quad (0 < \varepsilon \ll 1)$$

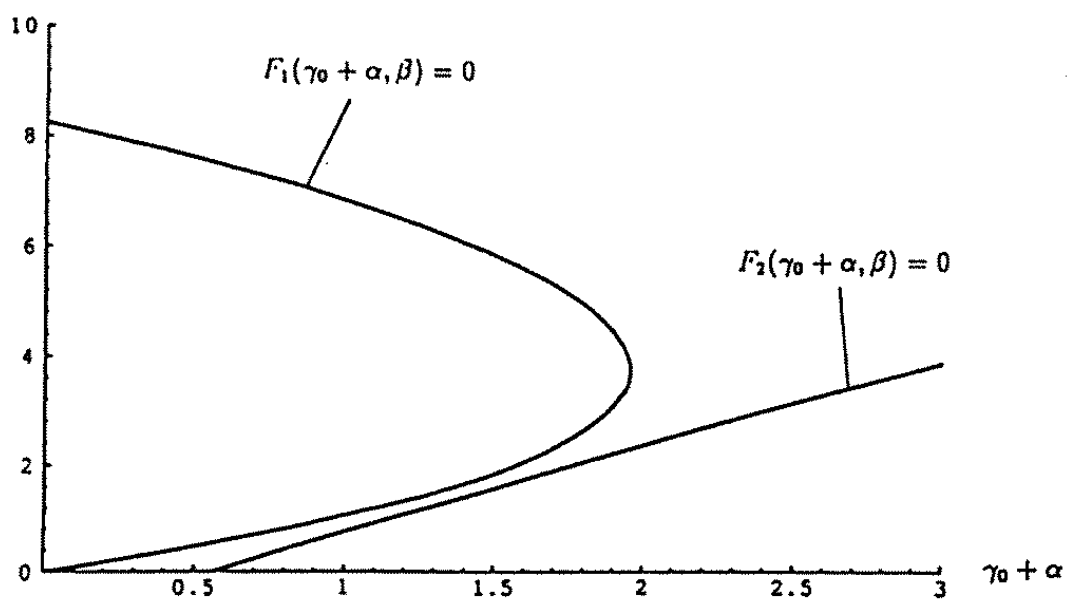
とおく. さらに

$$B \equiv \{\beta \mid F_1(\gamma_0 + \alpha^*, \beta) < 0\} \cap \{\beta \mid F_2(\gamma_0 + \alpha^*, \beta) < 0\}$$

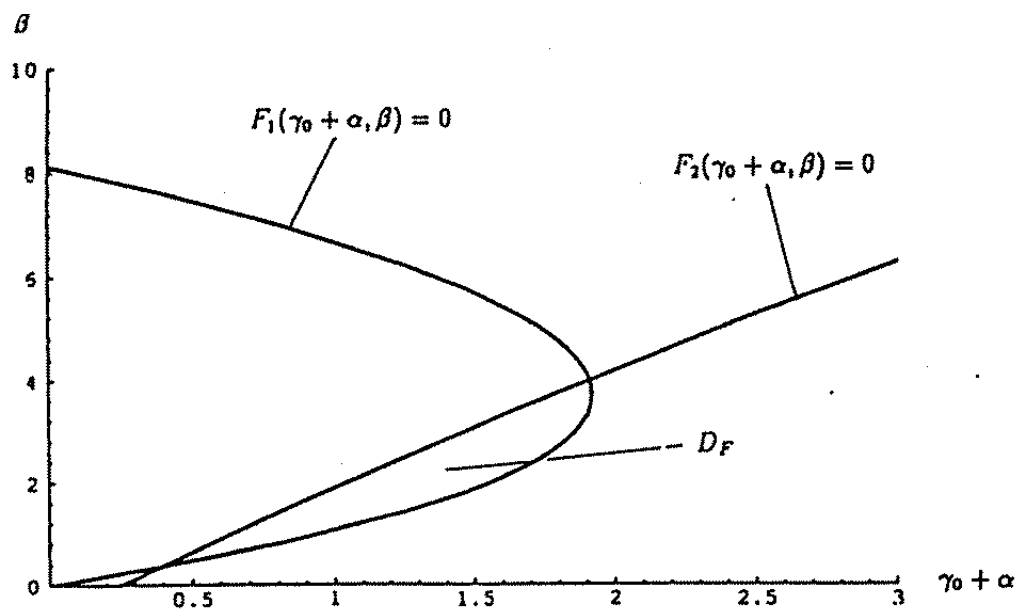
とおき, $\beta^* \in B$ となる β^* をとる. その作り方からこの α^*, β^* に対して Proposition 3.1 が適用できる.

では, 適用例をいくつか挙げておく. 今の例の場合, 曲線 F_1, F_2 は楕円となる. それを分割数が $N = 10, 15$ に対してそれぞれ描くと次のようになる.

$N=10$



$N=15$



つまり $N=10$ では無理だが $N=15$ では検証が成功することが分かる。

3.2 List Vector

最後に, 冒頭で話した G の memory の節約法を述べる.

行列 G はその性質上, 次のような形をしている.(有限要素法の特徴の 1 つ)
(プログラミングの便宜上, 添字を 0 からにしている.)

$$G = \begin{pmatrix} a_{00} & & & & & \\ a_{10} & a_{11} & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ a_{w-1,0} & a_{w-1,1} & \cdots & a_{w-1,w-1} & & \\ & \ddots & & & \ddots & \\ & & \ddots & & & \ddots \\ 0 & & & a_{M-1,M-w} & \cdots & \cdots & a_{M-1,M-1} \end{pmatrix} \quad (w : half\ band幅)$$

G は対称行列なので $M \times w$ の band matrix を用いれば memory は $O(Mw)$ で済む. しかし, それでもまだ 0 の要素を含んでいるのでその部分の memory の削減を計る (つまり, 真に非零成分だけを memory に取り込む) List Vector というのを提案する. これだと $O(Mw - \frac{w^2}{2} + \frac{w}{2})$ の memory で済む.

ここに matrix G と list vector v との添字の対応関係を書いておく.

$$G = (g_{ij})$$

$$v = (v_k)$$

としたとき

$$k = \begin{cases} j + \frac{1}{2}i(i+1) & i \leq w-1 \\ j + (w-1)i - \frac{1}{2}w(w-3) - 1 & i \geq w \end{cases}$$

4 適用例

本章では第 2, 3 章で構成されたプログラムに基づき得られた数値結果を示す.

検証例の図は, 曲線 F_1, F_2 を描いた図 (上図) と矩形領域 Ω の $y = 0.5$ に沿ったの断面図 (下図) を表わす. 解は下図の 2 つの曲線に v_0 の L^2 誤差を加えた集合の中に存在する.

検証例 1:

Emden Equation

$$f(u) = u^2$$

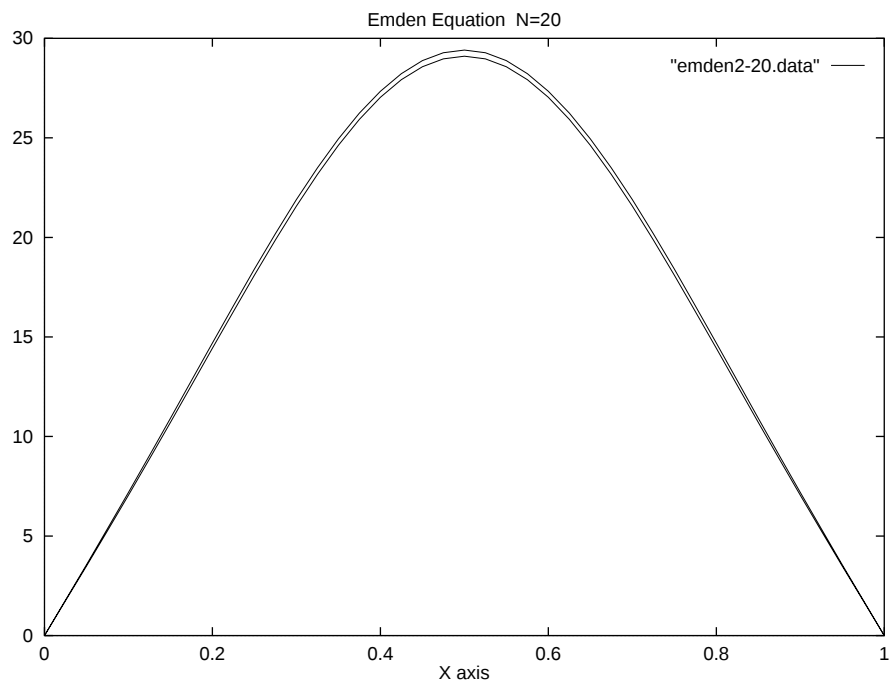
分割数 $N = 20$

S_h の次元 $M = 1521$

$$\|v_0\| \leq 0.00107016$$

$$\max |w_h| = 0.167207$$

$$C_0 h \alpha \leq 0.000406396$$



検証例 2 :

Allen-Cahn Equation

$$f(u) = \lambda u(u - a)(1 - u)$$

$$\lambda = 150, a = 0.01$$

分割数 $N = 20$

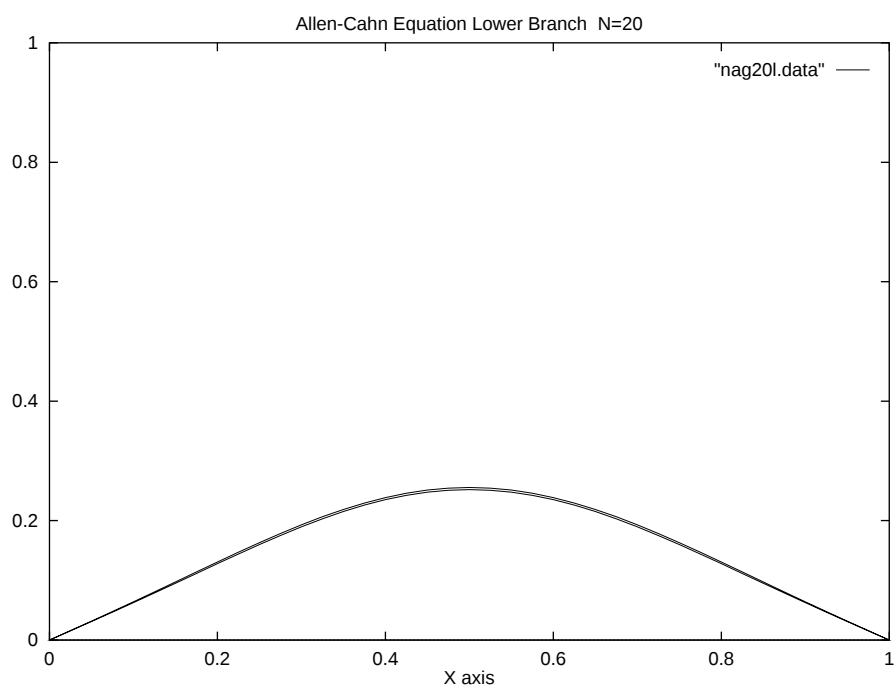
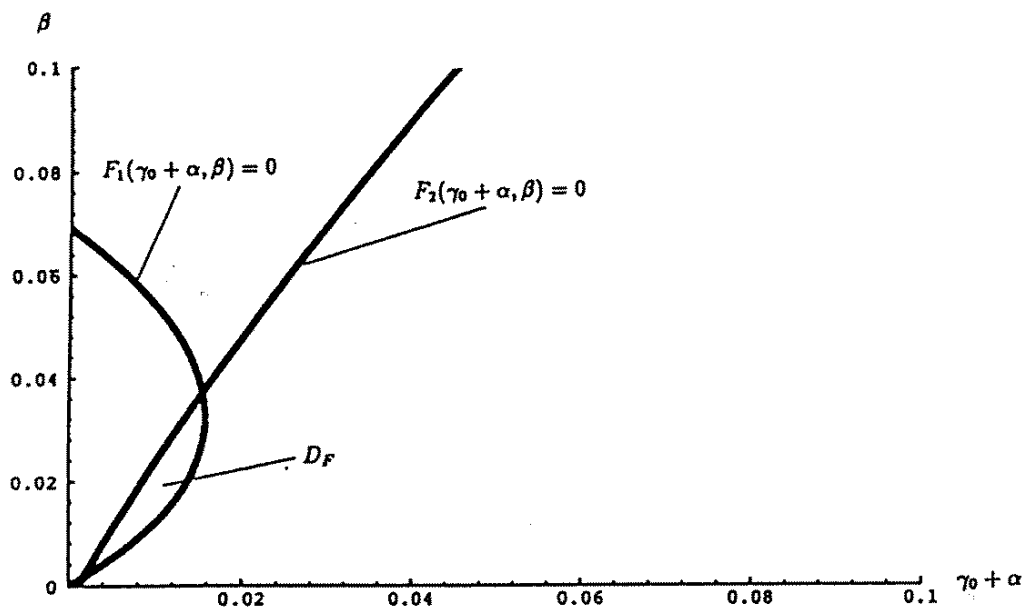
S_h の次元 $M = 1521$

Lower Branch

$$\|v_0\| \leq 0.00000880963$$

$$\max |w_h| = 0.00183790$$

$$C_0 h \alpha \leq 0.00000629209$$



検証例 3 :

Allen-Cahn Equation

$$f(u) = \lambda u(u - a)(1 - u)$$

$$\lambda = 150, a = 0.01$$

分割数 $N = 20$

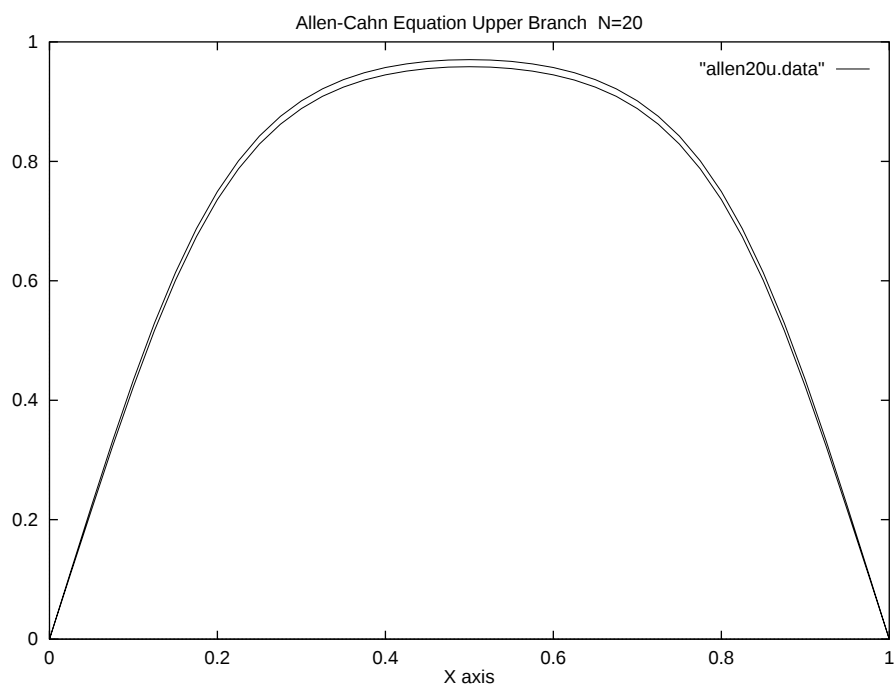
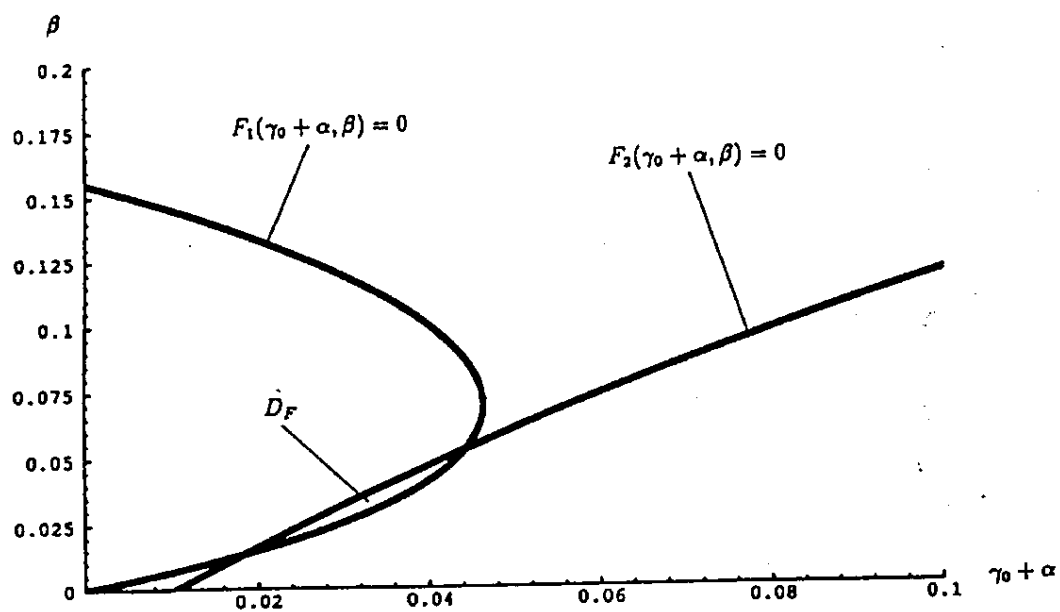
S_h の次元 $M = 1521$

Upper Branch

$$\|v_0\| \leq 0.0000822748$$

$$\max |w_h| = 0.00788475$$

$$C_0 h \alpha \leq 0.0000737832$$



検証例 4 :

$$f(u) = 1 + u + \frac{u^2}{2!} + \frac{u^3}{3!}$$

分割数 $N = 30$

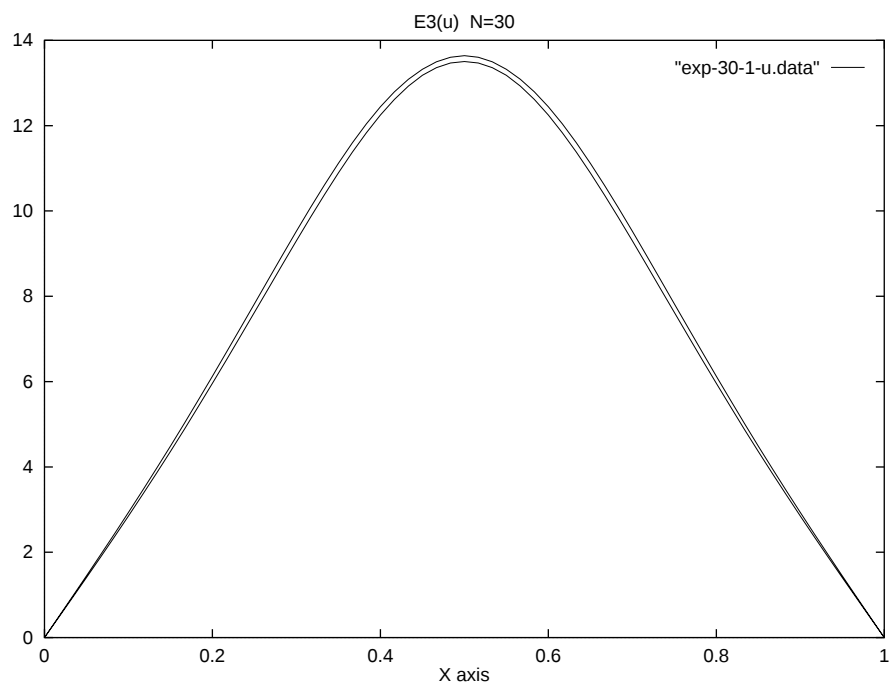
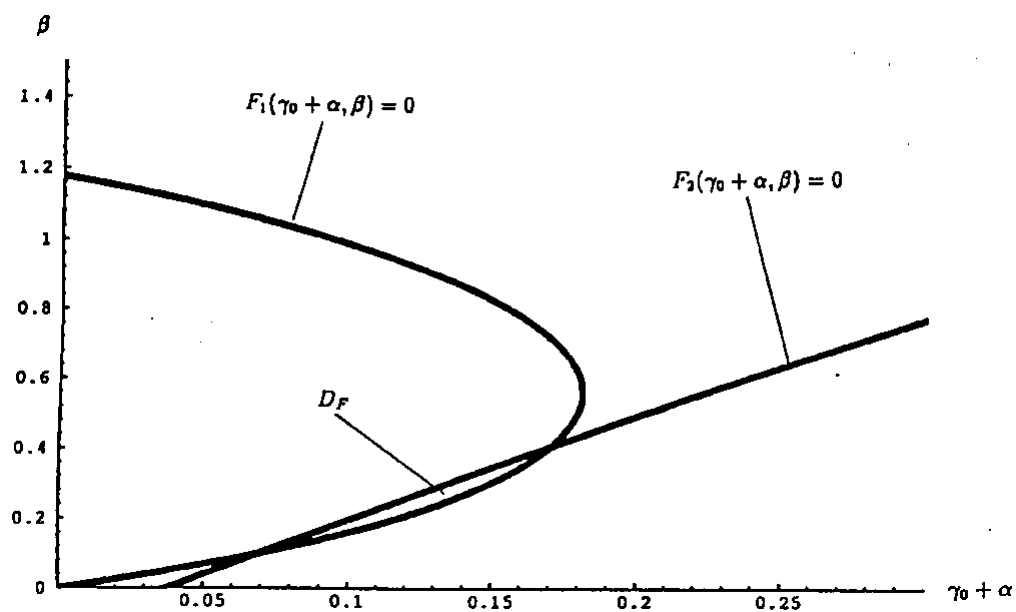
S_h の次元 $M = 3481$

Upper Branch

$$\|v_0\| \leq 0.000199953$$

$$\max |w_h| = 0.115210$$

$$C_0 h \alpha \leq 0.0002124$$



5 結論

従来の検証法では, 検証例 1 は反復回数 8 回を要したのに対して, 本論文の手法を用いると, 関数 F_1, F_2 の係数を求める計算とその後の検証の計算とを合わせた, 2 回の計算回数で済むことになった. この点で, 検証に要する時間が大いに削減できたと言えよう.

また, 本論文では 2 次要素を用いて検証を試みたが, 基底分解の手法を用いれば, より高次要素での検証が可能であるところに, その大きな利点がある.

しかしながら, 以下のような問題が残っている.

区間 w_h の入った内積の計算 (2.11) は, 現段階では積分に絶対値をつけて評価し overestimate の計算をしている. 1 次要素では, そのようなことは起こらないのだが 2 次要素に精度を上げたための demerit (区間拡大) が生じている. 今後, より効率的な評価式を検討する必要があるだろう.

また $f(u) = u^3$ の場合, 分割数 $N = 40$ で検証の予測が立てられたが, 計算機能力の点で問題がありプログラミングの改良が要求される.

そのほか, 検証例 4 では非線形性の強い $f(u) = e^u$ のことを想定して検証を試みたわけだが $f(u) = e^u$ のときにも基底分解が応用できないかが今後の課題である.

A Best Constant in Sobolev Inequality

付録として Sobolev の不等式の Best Constant を紹介する. そして, 従来の評価式 (2.13) と比べ, 効率良い評価が得られたことを示す.

Theorem A.1

u を m 次元ユークリッド空間 $\mathbf{R}^m$ 上で定義された, 実数値 (複素数値) 関数で, さらに, 無限遠点で急減少するものとする.

このとき $1 < p < m$ なる p に対して

$$\left\{ \int_{\mathbf{R}^m} |u|^q \right\}^{1/q} \leq C \left\{ \int_{\mathbf{R}^m} |Du|^p \right\}^{1/p} \quad (\text{A.1})$$

が, 成り立つ. ただし $q = mp/(m-p)$ で $|Du|$ は u の gradient Du の長さを表し

$$C = \pi^{-\frac{1}{2}} m^{-\frac{1}{p}} \left(\frac{p-1}{m-p} \right)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{\Gamma(1+m/2)\Gamma(m)}{\Gamma(m/p)\Gamma(1+m-m/p)} \right\}^{1/m} \quad (\text{A.2})$$

である. 証明は [12]

いま $m = 2$ のとき, 任意の $u \in H_0^1(\Omega)$ に対して

$$\left\{ \int_{\mathbf{R}^2} |u|^q \right\}^{1/q} \leq C \left\{ \int_{\mathbf{R}^2} |Du|^p \right\}^{1/p}$$

なので

$$v = \begin{cases} u & \text{in } \Omega \\ 0 & \text{in } \mathbf{R}^2 - \Omega \end{cases}$$

なる v をとると

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^q(\Omega)} &\leq C \left\{ \int_{\Omega} |Dv|^p \right\}^{1/p} \\ &\leq C \left\{ \left(\int_{\Omega} (|Dv|^p)^{2/p} \right)^{p/2} \cdot \left(\int_{\Omega} 1^{\frac{2}{2-p}} \right)^{\frac{2-p}{2}} \right\}^{1/p} \\ &= C \left\{ \left(\int_{\Omega} |Dv|^2 \right)^{1/2} \cdot |\Omega|^{\frac{2-p}{2p}} \right\} \\ &= C |\Omega|^{\frac{2-p}{2p}} \|v\|_{H_0^1(\Omega)} \\ \therefore \|v\|_{L^q(\Omega)} &\leq C \|v\|_{H_0^1(\Omega)} \end{aligned}$$

となる. $q = 2$ における C を求めようとする $p = 1$ となり, 不適.

そこで

$$\|v^k\|_{L^2} = \|v\|_{L^{2k}}^k$$

より $\|v\|_{L^{2k}}$ における C を求める. ($k = 2, 3, \dots$)

$m = 2$ $q = 2k$ $p = \frac{2k}{k+1}$ を (A.2) に代入すると

$$\begin{aligned}
C &= \pi^{-\frac{1}{2}} 2^{-\frac{1}{p}} \left(\frac{p-1}{2-p} \right)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{2}{p}\right) \Gamma\left(3-\frac{2}{p}\right)} \right\}^{1/2} \\
&= \pi^{-\frac{1}{2}} 2^{-\frac{1}{p}} \left(\frac{k-1}{2} \right)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{k+1}{k}\right) \Gamma\left(3-\frac{k+1}{k}\right)} \right\}^{1/2} \\
&= \pi^{-\frac{1}{2}} 2^{-\frac{1}{p}} 2^{-(1-\frac{1}{p})} (k-1)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{1}{\Gamma\left(1+\frac{1}{k}\right) \Gamma\left(2-\frac{1}{k}\right)} \right\}^{1/2} \\
&= \pi^{-\frac{1}{2}} 2^{-1} (k-1)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{1}{\frac{1}{k} \Gamma\left(\frac{1}{k}\right) \cdot \left(1-\frac{1}{k}\right) \Gamma\left(1-\frac{1}{k}\right)} \right\}^{1/2} \\
&= \pi^{-\frac{1}{2}} 2^{-1} (k-1)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{1}{\frac{1}{k} \left(1-\frac{1}{k}\right) \frac{\pi}{\sin \frac{1}{k} \pi}} \right\}^{1/2} \\
&= \pi^{-\frac{1}{2}} 2^{-1} (k-1)^{1-\frac{1}{p}} \left\{ \frac{k^2}{k-1} \frac{\sin \frac{1}{k} \pi}{\pi} \right\}^{1/2} \\
&= \frac{k}{2\pi} (k-1)^{\frac{1}{2}-\frac{1}{p}} \left(\sin \frac{1}{k} \pi \right)^{1/2} \\
&= \frac{k}{2\pi} (k-1)^{-\frac{1}{2k}} \left(\sin \frac{1}{k} \pi \right)^{1/2}
\end{aligned} \tag{A.3}$$

となる. C を改めて $C_{BC(k)}$ と書く.

これにより

$$\|v^k\|_{L^2} \leq \left(C_{BC(k)}\right)^k \gamma^k \quad (\gamma \equiv \|v\|_{H_0^1}) \tag{A.4}$$

が言えるので, 第2章と同様の操作をすると, 次式が成り立つ.

$$\|v^k\| \leq (C_0 h)^{1-\frac{1}{2^l}} \left(C_{BC(2^l(k-1)+1)}\right)^{k-1+\frac{1}{2^l}} \gamma^k \tag{A.5}$$

前と同様, 最良評価を与える l を求めると, 次の表のようになる. 第2章の表と比べられたい.

$k = 2$	$l = 3$	$N \geq 7$
$k = 3$	$l = 2$	$N \geq 7$
$k = 4$	$l = 1$	$N \geq 6$
	$l = 2$	$N \geq 25$
$k = 5$	$l = 1$	$N \geq 7$
$k = 6$	$l = 1$	$N \geq 13$
$k = 7$	$l = 1$	$N \geq 25$
$\vdots$		

最後に数値的比較をしておく.

$C_{PC(k)}$ を

$$C_{PC(k)} \equiv \frac{k}{4}\sqrt{2} \quad (\text{A.6})$$

とおくと, 上の表における $C_{PC(k)}$, $C_{BC(k)}$ をそれぞれ求めた値が次の表である.

$$p \equiv 2^l(k-1) + 1$$

k	l	$C_{PC(p)}$	$C_{BC(p)}$
$k = 2$	$l = 3$	3.1820	0.7464
$k = 3$	$l = 2$	3.1820	0.7464
$k = 4$	$l = 1$	2.4749	0.6457
	$l = 2$	4.5962	0.9200
$k = 5$	$l = 1$	3.1820	0.7464
$k = 6$	$l = 1$	3.8891	0.8370
$k = 7$	$l = 1$	4.5962	0.9200
$\vdots$			

尚, 検証例には $C_{PC(k)}$ を用いているため, 付録とした.

$C_{BC(k)}$ を用いると, より良い数値結果が得られるのは言うまでもない.

参考文献

- [1] R.A.Adams: Sobolev Space, *Academic Press, NewYork (1975)*
- [2] P.G.Cialret: The Finite Element Methods for Elliptic Problems, *North-Holland, Amsterdam (1978)*
- [3] P.Grisvard: Elliptic problems in nonsmooth domains, *Pitman Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics 24, London (1985)*
- [4] C.Johnson, A.H.Schatz, L.B.Wahlbin: Crosswind Smear and Pointwise Errors in Streamline Diffusion Finite Element Methods, *Math.Comp.*49, 25-38 (1987)
- [5] M.Křížek, P.Neittaanmäki: Finite Element Approximation of Variational Problems and Applications, *Longman Scientific and Technical, Harlow (1990)*
- [6] M.T.Nakao: A Numerical Approach to the Proof of Existence of Solutions for Elliptic Problems, *Japan Journal of Applied Mathematics* 7, 477-488 (1990)
- [7] M.T.Nakao: A Numerical Verification Method for the Existence of Weak Solutions for Nonlinear Boundary Value Problems, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 164, 489-507 (1992)
- [8] M.T.Nakao: Solving Nonlinear Elliptic Problem with Result Verification Using an H^{-1} Type Residual Iteration, *Computing, Suppl.*9, 161-173 (1993)
- [9] A.Neumaier: Interval methods for systems of equations, *Cambridge University Press (1990)*
- [10] M.Plum: Explicit H_2 -estimates and pointwise bounds for solutions of second-order elliptic boundary value problems, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 165, 36-61 (1992)
- [11] D.R.Smart: Fixed point theorems, *Cambridge University Press (1974)*
- [12] G.Talenti: Best Constant in Sobolev Inequality, *Annali di Matematica Pura ed Applicata, Serie Quarta. Tom.109-110, 353-372 (1976)*
- [13] N.Yamamoto, M.T.Nakao: Numerical verification of solutions for elliptic equations in nonconvex polygonal domains, *Numerische Mathematik* 65, 503-521 (1993)
- [14] E.Zeidler: Nonlinear Functional Analysis and its Applications I, *Springer, NewYork (1986)*