

Bessel 関数の境界条件への適合に関する精度保証付き計算

山本 野人 (Yamamoto, Nobito)

電気通信大学・情報工学科

Department of Computer Science, The University of Electro-Communications

1 はじめに

スペクトル法に基づいて偏微分方程式、特に楕円型偏微分作用素の固有値問題を精度保証付きで解くことを考える。スペクトル法に基づく精度保証付き計算の特徴は

- 有限要素法に基づく精度保証法に比べて射影誤差評価を容易に行うことができる
- 固有値問題については、離散化後に得られる行列の一般固有値問題が比較的簡単な形になる

という利点がある一方、領域が制限されるという欠点も併せ持っていて、領域ごとに基底となる固有関数を与えなおさなくてはならない。

ここでは円環領域における楕円型偏微分方程式に対するスペクトル法を基にした精度保証付き計算の準備として、円環の内側と外側の境界で Dirichlet 条件をみたすような Fourier-Bessel 展開の基底を構成することを考える。特に第 1 種 Bessel 関数 $J_n(r)$ 、第 2 種 Bessel 関数 $Y_n(r)$ の一次結合の係数を精度保証付きで決定するための方法を提案する。

2 問題設定

二次元円環領域 Ω を内径 a 、外径 b ($a < r < b$) のものにとる。この円環領域を扱うために、極座標を導入する。動径方向を r 、偏角方向を θ とする。

関数空間を次のように設定する。

$$L^2(\Omega) = \{u \text{ は } \Omega \text{ 上の実数値関数} \mid \int_0^{2\pi} \int_a^b ru^2 dr d\theta < +\infty\}$$

$$H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) \mid u \text{ の弱導関数 } \partial_r u, \frac{1}{r} \partial_\theta u \in L^2(\Omega)\}$$

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

$$H^2(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) \mid u \text{ の弱導関数 } \partial_r^2 u, \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 u \in L^2(\Omega)\}$$

とする。 L^2 上の内積、 H_0^1 上の内積について以下のように定義する。

$$L^2 \text{内積: } (u, v) = \int_{\Omega} r u v \, dr d\theta$$

$$H_0^1 \text{内積: } \langle u | v \rangle = \int_{\Omega} (r \partial_r u \partial_r v + \frac{1}{r} \partial_\theta u \partial_\theta v) \, dr d\theta$$

ここで、 L^2 内積は通常の L^2 内積とは異なることに注意する。

$L^2(\Omega)$ 上の連続線形作用素 Q が正定値で自己随伴であるとして、次の固有値問題を考える。

$$(1) \quad \begin{cases} -\Delta u + Qu = \lambda u & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

このとき、 Q の正定値性・自己随伴性から(1)の固有値は正の実数となる。固有関数 u としては、

$$u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$$

となるものを、 λ に関しては $\lambda > 0$ となるものを探す。

以下ではこのような問題を精度保証付きで解くことを念頭において、そのためのスペクトル法の構成方法について述べよう。

3 Fourier-Bessel 展開と近似解法

3.1 Fourier-Bessel 展開

二次元円環領域 Ω においては、任意の $u(r, \theta) \in L^2(\Omega)$ を次のように Fourier-Bessel 展開することが出来る。

$$(2) \quad u(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} (S_{nk} \cos n\theta + T_{nk} \sin n\theta) \phi_n(\omega_{nk} r)$$

(S_{nk}, T_{nk} : 定数)

ここで関数 $\phi_n(\omega_{nk} r)$ は

$$(3) \quad \frac{d^2 \phi_n(\omega_{nk} r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\phi_n(\omega_{nk} r)}{d(r)} + (\omega_{nk}^2 - \frac{n^2}{r^2}) \phi_n(\omega_{nk} r) = 0$$

$$\phi_n(\omega_{nk}a) = \phi_n(\omega_{nk}b) = 0$$

を満たすものとして取る。

Fourier-Bessel 展開を

$$u(r, \theta) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} u_i \psi_i$$

とおき、基底関数 ψ_i として、 $m = 1, 2, \dots$ と (n, k) の対応づけを 1 対 1 にとって

$$\begin{cases} \psi_{2m-1} = \cos n\theta \phi_n(\omega_{nk}r) \\ \psi_{2m} = \sin n\theta \phi_n(\omega_{nk}r) \end{cases}$$

とする。

4 基底関数の構成法

第 1 種 Bessel 関数 $J_n(r)$ 、第 2 種 Bessel 関数 $Y_n(r)$ は Bessel の微分方程式

$$(4) \quad f''(r) + \frac{1}{r}f'(r) + \left(1 - \frac{n^2}{r^2}\right)f(r) = 0$$

の一次独立な解であるので、この 2 つの関数を用いて

$$(5) \quad \phi(\omega r) = AJ_n(\omega r) + BY_n(\omega r)$$

とおく。境界 ($r = a, r = b$) で $\phi(\omega r) = 0$ であるためには次の式が成り立たなければならない。

$$\begin{cases} AJ_n(\omega a) + BY_n(\omega a) = 0 \\ AJ_n(\omega b) + BY_n(\omega b) = 0 \end{cases} \quad (A, B) \neq (0, 0)$$

この 2 式を A, B についての連立一次方程式として考えると、左辺の係数行列の行列式は

$$(6) \quad J_n(\omega a)Y_n(\omega b) - J_n(\omega b)Y_n(\omega a) = 0$$

となる。(6) が成立するような正の数 ω は可算無限個存在することが知られている [6]。このような ω を小さい順に

$$0 < \omega_{n1} < \omega_{n2} < \dots < \omega_{nk} < \dots$$

とする。 $\phi(\omega r)$ を $\phi_n(\omega_{nk}r)$ と書いて、

$$(7) \quad \phi_n(\omega_{nk}r) = J_n(\omega_{nk}a)Y_n(\omega_{nk}r) - Y_n(\omega_{nk}a)J_n(\omega_{nk}r)$$

とおけば、 $\phi_n(\omega_{nk}r)$ は

$$(8) \quad \frac{d^2 f(\omega_{nk}ar)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df(\omega_{nk}r)}{d(r)} + \left(\omega_{nk}^2 - \frac{n^2}{r^2}\right) f(\omega_{nk}r) = 0$$

を満たし、かつ境界条件

$$\phi_n(\omega_{nk}a) = \phi_n(\omega_{nk}b) = 0$$

を満足する直交関数系を与える。

$$\int_a^b r \phi(\omega_{nk}r) \phi(\omega_{nl}r) dr = 0, \quad k \neq l.$$

$\cos \theta, \sin \theta$ に関しても同様の直交関係が成り立つことから、

$$\int_0^{2\pi} \int_a^b r \psi_i \psi_j dr d\theta = 0, \quad k \neq l$$

となることがわかる。すなわち、

$$(\psi_i, \psi_j) = 0, \quad i \neq j$$

また

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = 0, \quad i \neq j$$

も示すことができる。

ω_{nk} の近似計算方法は次の通りである。

1. $f(\rho) = J_n(\rho a) Y_n(\rho b) - Y_n(\rho a) J_n(\rho b)$ とする。
2. ω_{nk} を含む範囲の候補を $[\rho_1, \rho_2]$ とする。
3. $f(\rho_1), f(\rho_2)$ の値を計算し、もし $f(\rho_1) f(\rho_2) < 0$ ならば二分法を用いて ρ_1, ρ_2 の幅を狭めて ω_{nk} を求める。
4. もしそうでないならば、 $[\rho_1, \rho_2]$ の範囲を変えて 3. にもどり、再度計算する。

5 ω_{nk} の精度保証

ここでは、基底を構成する上で必要な ω_{nk} の値の精度保証付き計算法について述

5.1 弱形式化

まず ω_{nk} および $\phi(\omega_{nk}r)$ は以下を固有値問題とみなしたときの固有値・固有関数に関係することに注意する。

$$(9) \quad \begin{cases} f''(r) + \frac{1}{r}f'(r) - \frac{n^2}{r^2}f(r) = -\omega_{nk}^2 f(r), & a < r < b, \\ f(a) = 0, \\ f(b) = 0 \end{cases}$$

次のように $L[f]$ を定義する。

$$L[f] = r f''(r) + f'(r) - \frac{n^2}{r} f(r)$$

すると (9) は次のように表すことができる。

$$\begin{cases} L[f] = -r \omega_{nk}^2 f(r), \\ f(a) = 0, \\ f(b) = 0 \end{cases}$$

また、

$$X_0 = L_2[a, b]$$

とおき、内積を

$$(u, v) = \int_a^b r u(r) v(r) dr, \quad u, v \in X_0$$

とする。さらに

$$X_1 = H_0^1[a, b]$$

とおき、内積を

$$(u|v) = \int_a^b (r u'(r) v'(r) + \frac{n^2}{r} u v) dr, \quad u, v \in X_1$$

とする。このとき、グリーンの公式より $L[v]$ を用いると以下の式を得る。

$$(10) \quad (u, \frac{1}{r} L[v]) = -(u|v) \quad \forall u, v \in X_1$$

これを用いて、(9) の弱形式を得る。

$$(11) \quad (f, v) = \omega_{nk}^2 (f|v) \quad \forall u, v \in X_1$$

以下、これを精度保証付きで解くことを考えよう。

5.2 有限要素法の部分空間と誤差評価

はじめに、

$$t = \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{1}{K}}$$

$$r_i = at^i, \quad r_0 = a, \quad r_K = b$$

$$e_i = [r_{i-1}, r_i] \quad (i = 1, \dots, K)$$

として、小さい区間 e_i で区間 $[a, b]$ を分割する (K は分割数)。 r_i は等比級数となる。

さて、以下の基底関数を用いて $K - 1$ 次元有限要素部分空間 $S_h \subset X_1$ を定義する。

$n = 0$ の時、

$$V_i(r) = \begin{cases} \frac{\log \frac{r}{r_{i-1}}}{\log \frac{r_i}{r_{i-1}}} & r \in e_i, \\ \frac{\log \frac{r}{r_{i+1}}}{\log \frac{r_i}{r_{i+1}}} & r \in e_{i+1}, \\ 0 & r \notin e_i \cup e_{i+1} \end{cases}$$

$n \geq 1$ の時、

$$V_i(r) = \begin{cases} \frac{\left(\frac{r}{r_{i-1}}\right)^n - \left(\frac{r_{i-1}}{r}\right)^n}{\left(\frac{r_i}{r_{i-1}}\right)^n - \left(\frac{r_{i-1}}{r_i}\right)^n} & r \in e_i, \\ \frac{\left(\frac{r}{r_{i+1}}\right)^n - \left(\frac{r_{i+1}}{r}\right)^n}{\left(\frac{r_i}{r_{i+1}}\right)^n - \left(\frac{r_{i+1}}{r_i}\right)^n} & r \in e_{i+1}, \\ 0 & r \notin e_i \cup e_{i+1} \end{cases}$$

ここで、 $r \neq r_i$ のとき

$$(12) \quad L[V_i] = 0$$

となることに注意する。

次に、以下の式で X_1 から S_h への直交射影 P_h を定義する。

$$\langle P_h v | v_h \rangle = \langle v | v_h \rangle \quad \forall v_h \in S_h$$

(12) の性質を使うと、 P_h の誤差評価

$$\|v - P_h v\|_{X_1} \leq C_h \left\| \frac{1}{r} L[v] \right\|_{X_0} \quad \forall v \in X_1 \quad L[v] \in X_0$$

を導くことが出来る。ここで C_h は以下の値となる。

$$C_h = \frac{2}{\sqrt{4\pi^2 - (t-1)^2}} \frac{t-1}{t} b, \quad \text{for } n = 0,$$

$$C_h = \frac{1}{\pi} \frac{t-1}{t} b, \quad \text{for } n \geq 1.$$

5.3 ω_{nk} の精度保証付き計算

固有値問題 (11) を近似するために

$$A_{ij} = \langle V_i | V_j \rangle,$$

$$B_{ij} = (V_i, V_j)$$

として $(K-1) \times (K-1)$ 行列 A と B を定義する。 ω_{nk} の近似固有値は次のような形の一般固有値問題を解くことによっても得ることができる。

$$(13) \quad A\mathbf{x} = \lambda B\mathbf{x}$$

k 番目の固有値 λ_k に対して、近似固有値 $\omega_{nk} \approx \sqrt{\lambda_k}$ を得る。

さて (13) の近似固有対を $(\tilde{\lambda}, \tilde{\mathbf{x}})$ とする。(11) の固有値が 1 つだけ存在する区間を得るために、次の定理が利用できる ([1] にこれに関する方法が与えられている)。

[定理 1]

$K \times K$ 行列 P を以下のものとする。

$$P = \begin{bmatrix} A - \tilde{\lambda}B & -B\tilde{\mathbf{x}} \\ -\tilde{\mathbf{x}}^T B & 0 \end{bmatrix}$$

また、ある正数 ρ に対して、以下のように定義する。

$$M_1 = \frac{\|B\|_\infty}{1 - C_h^2(\tilde{\lambda} + 2\rho)},$$

$$M_2 = \frac{C_h^2(\tilde{\lambda} + \rho)}{1 - C_h^2(\tilde{\lambda} + 2\rho)} \sqrt{\tilde{\mathbf{x}}^T B \tilde{\mathbf{x}}},$$

$$M_3 = \frac{1}{2\|P^{-1}\|_2} - (M_2 + \rho)M_1$$

$$M_4 = M_2^2 + 2\rho M_2 + \|(A - \tilde{\lambda}B)\tilde{\mathbf{x}}\|_2 + \frac{1}{2}|\tilde{\mathbf{x}}^T B \tilde{\mathbf{x}} - 1| - \frac{\rho}{\|P^{-1}\|_2}.$$

$$M_3 > 0$$

かつ

$$M_3^2 - M_1^2 M_4 \geq 0$$

ならば、

$$[\tilde{\lambda} - \rho, \tilde{\lambda} + \rho]$$

に (11) の固有値が 1 つだけ存在する。

次に、与えられた区間に固有値が存在しないことを証明する方法を述べる。これは ω_{nk} の指数 k による順序付けを確定するために必要となる。

[定理 2]

λ_k を一般固有値問題 (13) の k 番目の固有値とする。また、

$$\eta_k = 1 + \lambda_k C_h^2$$

と定める。

$k = 1$ のとき、次の区間には固有値が存在しない。

$$\left[0, \frac{\lambda_1}{\eta_1}\right]$$

$k > 1$ のとき、 $\eta_{k+1} \leq \sqrt{2}$ であれば、以下の区間には固有値が存在しない。

$$\left[\frac{1}{4C_h^2} \left\{ \eta_k - \sqrt{\eta_k^2 - 8\lambda_k C_h^2} \right\}, \frac{\lambda_{k+1}}{\eta_{k+1}}\right]$$

証明については [4] に述べる。これら 2 つの定理は、演算子が自己随伴行列かつ正定値であれば一般に適用される。

以上の定理を用いて、 ω_{nk} の精度保証付き計算は次のように行なわれる。

1. $n = 0$ から $n = N$ まで以下を行なう。
2. $k = 1$ から $k = M$ までについて、 ω_{nk} の近似解の近傍で真の ω_{nk} を含む区間 W_k を定理 1 によって確定する。
3. W_k および W_{k+1} との交わりが空でない連続したある区間 R_k に対して、定理 2 によって R_k が ω_{ml} (m, l は任意) を含まないことを示す。

上の手順によって、特に ω_{nk} の順序が確定することに注意してほしい。行列の一般固有値を順序もこめて精度保証付きで求める方法については [3] を参照のこと。

以上をもって与えられた円環の境界で Dirichlet 条件をみたすような Fourier-Bessel 展開の基底を構成することが出来る。

5.4 数値例

以下に $a = 1, b = 2$ の場合の数値例を示す。表中で中央の値が ω_{nk} の近似値、左端が精度保証された下限、右端が上限を示す。

3.12295542804858	3.12303091959569	3.12315400250131
6.27328304880776	6.27343571399218	6.27368589975258
9.41797573967120	9.41820754225158	9.41859057057541
12.56110913424329	12.56142318552536	12.56194794525929
⋮	⋮	⋮
59.68657791798924	59.68921359545443	59.69496109511972
62.82794815163752	62.83085856711654	62.83729580393245
65.96929243163511	65.97249855916444	65.97968516731613

$$n = 0, \quad k = 1, \dots, 21$$

3.19648094382804	3.19657838081064	3.19672477083304
6.31215608868709	6.31234951037326	6.31264151473558
9.44417292066030	9.44446492548227	9.44490926214332
12.58080893755817	12.58120281010411	12.58180862558894
15.71935428515863	15.71985426942974	15.72063356604653
⋮	⋮	⋮
59.69038853040234	59.69340079450846	59.69952940740168
62.83152960271639	62.83483650700567	62.84167503558977
65.97266477074211	65.97628715596171	65.98389504290610

$$n = 1, \quad k = 1, \dots, 21$$

3.40676189075924	3.40692142656753	3.40716070297503
6.42746389312837	6.42776592259606	6.42822034485573
9.52240217463783	9.52285226995334	9.52353301150422
12.63977881535640	12.64038116949378	12.64129874375474
15.76658248563319	15.76734172576594	15.76850870607972
⋮	⋮	⋮
59.70197202278212	59.70596092084001	59.71355020646493
62.84243421673846	62.84676906573878	62.85514502640250
65.98295016413408	65.98765185719971	65.99687404276534

$$n = 2, \quad k = 1, \dots, 21$$

以下 $n = 3, \dots, 19$ を省略して $n = 20$ の結果を示す。

12.70857239164912	12.70858577558492	12.70862875961209
14.98222373745461	14.98224689028010	14.98231056656234
17.02073176143999	17.02076643868730	17.02085440386985
19.05565000007658	19.05569808411006	19.05581755122279
21.25081469520028	21.25087921733351	21.25104220862051
⋮	⋮	⋮
58.29201443368631	58.29315521052931	58.29635424462074
61.34376063888394	61.34508718705683	61.34881246444432
64.40416372039705	64.40569576800841	64.41000371636935
67.47203215136943	67.47379073162993	67.47874108528745

$$n = 20, \quad k = 1, \dots, 21$$

以上のように有効桁数が5桁程度の精度で ω_{nk} の厳密な包み込みを得ることが出来た。

参考文献

- [1] Nagatou, K., *A numerical method to verify the elliptic eigenvalue problems including a uniqueness property*, Springer-Verlag, (1999) 109-130,
- [2] Nagatou, K., Yamamoto, N. & Nakao, M. T., *An approach to the numerical verification of solutions for nonlinear elliptic problems with local uniqueness*, Numerical Functional Analysis and Optimization 20 (1999) 543-565
- [3] Yamamoto, N., *A simple method for error bounds of eigenvalues of symmetric matrices*, Linear Algebra and its Applications, Vol. 324, No.3 (2001) 227-234
- [4] Yamamoto N., *On verified computation of PDE using Spectral methods with Bessel functions*, (preprint)
- [5] Y. Watanabe, N. Yamamoto, M. T. Nakao and T. Nishida, *A numerical verification of nontrivial solutions for the heat convection problem*, to appear in Journal of Mathematical Fluid Mechanics
- [6] アグモン 著・村松寿延 訳「楕円型境界値問題」吉岡出版 (1968)
- [7] 大石進一 著「精度保証付き数値計算」コロナ社 (2000)
- [8] 中尾充宏・山本野人 共著「精度保証付き数値計算」日本評論社 (1998)