有界領域上の2階微分作用素に対する固有値問題のペナルティー法による近似解法

笠井　博則 (福島大学共生システム理工学類)
e-mail：kasai@sss.fukushima-u.ac.jp

1　概要

数値計算において，一般の有界領域上での偏微分方程式の解を求める際に，考える領域を含む大きな計算領域をとり，考える領域の外に大きなパラメータを置いて計算することが行われている。この方法はペナルティー法の１つと見なすことができ，パラメータの値を十分大きく取った時に計算領域の外側では関数の値がゼロとみなせることになり、結果的に零 Dirichlet 境界条件を満たすことになる。

一方，我々は一般の行列で，与えられた固有値に対する固有ベクトルを形式的に表す（固有値に対する固有空間への射影行列を構成する）公式を見つけた（定理１）。

本講演では，これを用いて Dirichlet 境界条件の下での２次元有界領域のラプラシアン，または１次元区間上の２階微分作用素 $\dfrac{d^2}{dx^2}$ に関する固有値・固有関数を有限差分とペナルティー法によって陽的に構成する。

2　問題設定

簡単のため，１次元の問題を扱う。2 次元の場合は講演の際に紹介する。

有界区間 $[a,b]\subset[0,1]$ における Dirichlet 境界条件の下での２階微分作用素 $\dfrac{d^2}{dx^2}$ に関する固有値問題を考える。

$$\left\{\begin{array}{l} -\frac{d^2}{dx^2}u=\lambda u \quad \text{in } [a,b] \\ u(a)=u(b)=0 \end{array}\right. \tag{1}$$

これに対し，区間 $[a,b]$ を含む区間 $[0,1]$ と微小パラメータ μ を考え，以下のように近似問題を考える。

$$\left\{\begin{array}{l} -\frac{d^2}{dx^2}u+\frac{1}{\mu}\chi_{[a,b]}u=\lambda u \quad \text{in } [0,1] \\ u(0)=u(1)=0 \end{array}\right. \tag{2}$$

$$\text{但し,}\chi_{[a,b]}(\mathbf{x})=\left\{\begin{array}{l} 0\ (\mathbf{x}\in[a,b]) \\ 1\ (\mathbf{x}\in[0,1]\backslash[a,b]) \end{array}\right.$$

これらの問題を差分化して，μ を十分小さくしたとき，近似方程式 (2) の解が方程式 (1) の解に収束するかを確認する。

空間刻み幅を h とするとき，２階微分作用素 $\dfrac{d^2}{dx^2}$ に対応する N 次正方行列を，次の三重対角行列で表す。

$$L_N=\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

区間 $[0,a],[a,b],[b,1]$ での関数を差分化してできる n_1 次，n_0 次，n_2 次ベクトルをそれぞれ $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_0,\mathbf{u}_2$，それぞれの区間に対応する２階微分作用素を差分化してできる行列を L_{n_1},L_{n_0},L_{n_2} と表すことにすると方程式 (2) に対応する差分方程式は次のように表される。

$$\begin{pmatrix} A_1 & C_1 & 0 \\ D_1 & B_0 & C_2 \\ 0 & D_2 & A_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_0 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \mathbf{0}_1 \\ \mathbf{0}_0 \\ \mathbf{0}_2 \end{pmatrix}$$

ただし，I_j は n_j 次単位行列，A_j は n_j 次正方行列で，$A_j=L_{n_j}+(\lambda-\frac{1}{\mu})I_j\ (j=1,2)$。$B_0$ は n_0 次正方行列で，$B_0=L_{n_0}+\lambda I_0$。C_1 は $n_1\times n_0$ 行列で $(n_1,1)$ 成分のみ 1，それ以外の成分は 0 の行列。C_2 は $n_0\times n_2$ 行列で $(n_0,1)$ 成分のみ 1，それ以外の成分は 0 の行列。D_j は C_j の転置行列 $(j=1,2)$。

3　逆行列による固有ベクトルの導出公式

固有ベクトルの計算に，以下の定理を用いる。

定理 1 A を n 次正方行列とし，A の固有値 λ であるとき，

(i) $\mathbf{u}$ が固有値 λ に対する固有ベクトル成分を含むベクトルであるとき，

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\left((\lambda+\varepsilon)I-A\right)^{-1}\mathbf{u}$$

は，固有値 λ に対する固有ベクトルになる。

(ii) $\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\left((\lambda+\varepsilon)I-A\right)^{-1}$ は，固有値 λ の固有空間に対する射影ベクトルになる。

Remark 2 *(1)* 定理の *(i)* で、どんなベクトルを選んでも固有ベクトルになる（$A\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$ を満たす）が、$\mathbf{u}$ に固有値 λ に対する固有ベクトル成分を含まないベクトルを用いると常に零ベクトルになる。（実際には適当な摂動で固有ベクトルが得られる）

(2) この定理により得られる固有ベクトルは，正規化されていない。左辺に ε をかけて極限をとっているが、これは $(\varepsilon/|(\lambda+\varepsilon)I - A|)$ の部分が有界であるための工夫なので、別の言い方をすれば $(\lambda+\varepsilon)I - A$ の転置余因子行列について、$\varepsilon \to 0$ としたものが射影ベクトルになっている、と言ってもよい。

4 定理と証明の方針

この問題に関して、次のことが言える。

定理 3 方程式 *(2)* の解は、$\mu \to 0+$ のとき、方程式 *(1)* の解に収束する。

証明には、(修正) チェビシェフ多項式の理論と、ブロック対角行列の行列式・逆行列の公式を用いる。(修正) チェビシェフ多項式については、[1] が詳しい。

4.1 ブロック行列の行列式・逆行列

定理 4

$$\begin{vmatrix} A_1 & C_1 & 0 \\ D_1 & B & C_2 \\ 0 & D_2 & A_2 \end{vmatrix} = |A_1||A_2||\tilde{B}|$$

$$\begin{pmatrix} A_1 & C_1 & 0 \\ D_1 & B & C_2 \\ 0 & D_2 & A_2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -A_1^{-1}C_1\tilde{B}^{-1}\mathbf{u} \\ \tilde{B}^{-1}\mathbf{u} \\ -A_2^{-1}D_2\tilde{B}^{-1}\mathbf{u} \end{pmatrix}$$

ただし、$\tilde{B} = B - D_1A_1^{-1}C_1 - C_2A_2^{-1}D_2$

4.2 三重対角行列とチェビシェフ多項式

(修正) チェビシェフ多項式は漸化式

$$S_{j+1}(a) = aS_j(a) - S_{j-1}(a),\ S_0(a) = 1,\ S_1(a) = a$$

によって定義される a に関する多項式であり、三角関数との関連について次がが知られている。

$$a = 2\cos\theta \text{のとき},\ S_n(a) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta}$$

また，次の n_j 次三重対角行列 A_{n_j}

$$A_{n_j} = \begin{pmatrix} a & 1 & 0 & & & \\ 1 & a & 1 & & & \\ 0 & 1 & a & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & a & 1 \\ & & & & 1 & a \end{pmatrix}_{n_j \times n_j}$$

とチェビシェフ多項式の関係として，行列 A_{n_j} の行列式，逆行列について，以下のことが知られている。

定理 5

$$|A_{n_j}| = S_{n_j}(a)$$

$$(A_{n_j}^{-1})_{k,l} = \begin{cases} \frac{(-1)^{k+l}}{S_{n_j}(a)} S_{n_j-k}(a)S_{l-1}(a) & (l \leq k) \\ \frac{(-1)^{k+l}}{S_{n_j}(a)} S_{n_j-l}(a)S_{k-1}(a) & (l \geq k) \end{cases}$$

ただし、$(A_{n_j}^{-1})_{k,l}$ は行列 $A_{n_j}^{-1}$ の (k,l) 成分。

さらに、

定理 6 n 次正方行列 A, n 次単位行列 I による以下の三重対角ブロック行列

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} A & I & 0 & & & \\ I & A & I & & & \\ 0 & I & A & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & A & I \\ & & & & I & A \end{pmatrix}_{N \times N}$$

について，$|S_k(A)| \neq 0$ $(k = 1, 2, \cdots, N-1)$ であるとき，$|\tilde{A}| = |S_N(A)|$ が成り立つ。

5 まとめ

逆行列を用いた固有ベクトルの表現公式によって、有界領域での微分作用素の固有値問題をペナルティー法を用いて計算する正当性が得られる。この結果は、時間発展問題の数値計算にペナルティー法を使うことの正当化、誤差評価などにも有用と考える。

(このアブストラクトは、2017 年度日本応用数理学会における筆者の講演予稿に加筆・修正したものである)

参考文献

[1] 山本哲朗， 行列解析ノート，サイエンス社, 2013.