

Green 関数による Helmholtz の方程式の 固有値問題の数値解法*

扇 谷 紳 一** 石 桁 正 士**

Eigenvalue problems expressed by Helmholtz's differential equation can be solved for case that the shape of boundary is easy to treat analytically. Monte Carlo method utilizing discrete random walk process is effective for case that the boundary is of arbitrary shape, but Monte Carlo solution has statistical fluctuation.

In this paper, to improve the weak point mentioned above, the normal derivatives of Green function are calculated by using mass deviation method, and then Green function is obtained. Eigenvalues are calculated from integral equation, that is to calculate the eigenvalues of matrix of Green function. The matrix is symmetric, since the reciprocity of Green function.

This method is useful to calculate higher order of eigenvalues more precisely than Monte Carlo method utilizing discrete random walk process. The authors show the several results of two dimensional eigenvalue problems using this method.

1. まえがき

単一連結領域 M において関数 φ (恒等的に 0 でない) は Helmholtz の方程式 $\Delta\varphi + \lambda\varphi = 0$ を満足し, M の境界 Γ 上で $\varphi = 0$ を満足する場合の λ を求めるいわゆる固有値問題は, M が解析的に取り扱い易い形については厳密に解かれている. Γ の形に任意性がある場合は主として摂動法や緩和法などによるが, またモンテカルロ法による方法も試みられている. このモンテカルロ法はランダム・ウォーク・プロセスを利用するきわめて巧妙なものであるが^{1)~6)}, 統計的変動のため推定した固有値の有効桁数が小さく, また高次の固有値まで推定できないという欠点を有している. 本論文はモンテカルロ法から出発し, この欠点を改良することを目的として Green 関数を利用する方法を述べ, さらに行列の固有値との関係より任意の形の境界の固有値問題の解を求める方法についても述べる.

2. ランダム・ウォーク・プロセスと固有値問題との関連

Fig. 1 のような境界 Γ で囲まれた単一連結領域 M は一様な熱拡散率 D をもつ物質からなっていると考える. M の内部 Ω の点 $P(x_0, y_0)$ に, $t=0$ に単位熱源

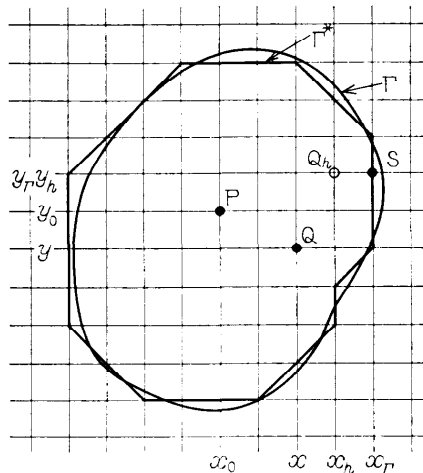


Fig. 1 Continuous boundary Γ of a simply connected domain M and discrete boundary Γ^* .

を置き, Γ を常に 0 に保つとき, 時刻 t での Ω 内の点 $Q(x, y)$ における温度 $u(x, y, t)$ は次式を満足する.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u \tag{1}$$

$$u(x, y, t) = \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(t) \tag{2}$$

$$(u)_{\Gamma} = 0 \tag{3}$$

これらの式を満足する関数 u は λ_j, φ_j を j 番目の固有値および規格化 (M の面積を 1 にした場合) 固有関数とすると次式で表わされる⁷⁾.

* Numerical approach of eigenvalue problem of Helmholtz's differential equation by utilizing Green function, by Shinichi Sengoku and Tadashi Ishiketa (Faculty of Engineering Science, Osaka University.)

** 大阪大学基礎工学部

$$u(x, y, t) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-\lambda_j D t} \varphi_j(x_0, y_0) \varphi_j(x, y) \quad (4)$$

次にランダム・ウォーク・プロセスと関連づけるために空間に間隔 h の平行線を引いて格子状にとり、 Ω を格子点で構成し、これを Ω^* とする。 Ω^* 内の一点 P に置いたランダム・ウォーク・ポイント (以下 r.w.p. と略する) がその動作を続け $n\tau$ のちに Ω^* 内の点 Q ($P \neq Q$ とする) に到達する確率を表わす関数 $U(Q/P, n\tau)$ はよく知られているように近似的に拡散方程式を満足する⁷⁾。

この関数 U は上記の関数 u と次式で結ばれている。

$$\lim_{\tau, h \rightarrow 0} \frac{U(Q/P, n\tau)}{h^2} = u(x, y, t) \quad (5)$$

$t=0$ のとき点 $P(x_0, y_0)$ を出発した r.w.p. が $t=n\tau$ に Ω^* 内のいずれかでランダム・ウォークを続けている確率 $P(n\tau)$ は次式で与えられる⁷⁾。

$$P(n\tau) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-D\lambda_j n\tau} \varphi_j(x_0, y_0) \iint \varphi_j(x, y) dx dy \quad (6)$$

$\varphi_j(x_0, y_0) \iint \varphi_j(x, y) dx dy$ は j を固定すると定数となるから固有値 λ_j は実験的に $P(n\tau)$ を求め (6) 式の展開から得られるが、統計的変動のため 10^3 オーダーの試行回数ではたかだか 2~3 次までしか求められていない。そこで Green 関数 $G(x, y; \xi, \eta)$ を導入する。関数 G は次式を満足する。

$$D_{xy} G(x, y; \xi, \eta) = -\delta(x-\xi)\delta(y-\eta) \quad (7)$$

$$(G)_r = 0 \quad (8)$$

$x_0 = \xi, y_0 = \eta$ で表わしてある。

規格化固有関数 φ_j と Green 関数 G との関係は次式で与えられる⁸⁾。

$$G(x, y; \xi, \eta) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j(x, y) \quad (9)$$

$$c_j = \iint \varphi_j(x, y) G(x, y; \xi, \eta) dx dy \quad (10)$$

以上の関数 G および関数 φ を用いて次式を作る。

$$\begin{aligned} \iint (G \Delta \varphi - \varphi \Delta G) dx dy &= \iint (-\lambda \varphi G + \varphi \delta) dx dy \\ &= -\lambda \iint \varphi G dx dy + \varphi(\xi, \eta) \end{aligned}$$

上式の左辺は Green の定理により 0 となる。したがって次式を得る。

$$\varphi(\xi, \eta) = \lambda \iint \varphi(x, y) G(x, y; \xi, \eta) dx dy \quad (11)$$

Ω に含まれる格子点に番号をつけて点 (x, y) を i , 点 (ξ, η) を j , $\varphi(x, y) = \phi_i$, $\varphi(\xi, \eta) = \phi_j$, $G(x, y; \xi, \eta) = G_{ij}$ とし (11) 式を差分 ($dx = dy = h$) 式に直すと、Green 関数の相反性 ($G_{ij} = G_{ji}$) を用いて、

$$\phi_j = \lambda \sum_i \phi_i G_{ij} h^2 = \lambda \sum_i G_{ji} \phi_i h^2$$

行列の形で書くと $[I - \lambda G h^2] \Phi = 0$ となり、 $\Phi \neq 0$ ゆえ

$$|I - \lambda G h^2| = 0 \quad (12)$$

を解けば λ が求まり、固有値 λ を求めるには Φ は計算しなくてよいことに着目しよう。

3. Green 関数の求め方

ランダム・ウォーク・プロセスと Green 関数とは既に関連づけられており⁷⁾, Ω^* 内にある点 P から同じ Ω^* 内の点 Q へ時間に関係なく r.w.p. が到達する確率 $p(P \rightarrow Q)$ および r.w.p. が点 Q から点 Q へ時間に関係なく再帰する確率 $q(Q \rightarrow Q)$ を用いて G は次式で与えられる⁹⁾。

$$G(Q, P) = \frac{p(P \rightarrow Q)}{4[1 - q(Q \rightarrow Q)]}$$

したがって Green 関数は上式を用いて求められるが、本論文では以下に述べる方法をとる。

r.w.p. が Γ^* へ到達すると、そこで消滅させるのであるから、熱拡散に対応させるとこれは Γ より外へ流出する熱に相当する。したがって単位時間 dt に Γ の単位長さ ds から Γ の外へ流出する熱量 dE は次式で与えられる¹⁰⁾。ただし n は法線方向を示す。

$$dE = -ds D \frac{\partial u}{\partial n} dt \quad (13)$$

ds より流出する全熱量 E は (4) 式を用いて

$$\begin{aligned} E &= -ds D \frac{\partial}{\partial n} \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(x_0, y_0) \varphi_j(x, y) \int_0^{\infty} e^{-D\lambda_j t} dt \\ &= -ds \frac{\partial}{\partial n} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j(x_0, y_0) \varphi_j(x, y)}{\lambda_j} \end{aligned} \quad (14)$$

と表わされる。一方 r.w.p. が Ω^* 内の点 $P(x_0, y_0)$ から Γ^* 上の点 $S(x_r, y_r)$ へ時間に関係なく到達する確率を $\omega(P \rightarrow S)$ で表わすと ω は関数 U を用いて次式のように表わされる。

$$\omega(P \rightarrow S) = \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{\infty} U(Q_h/P, n\tau) \quad (15)$$

ただし Q_h は Γ^* より h だけ内部の点で、その座標を (x_h, y_h) と表わすことにする。(15) 式は (4) 式、(10) 式、(5) 式を用いて次のように表わすことができる。

$$\begin{aligned} \omega(P \rightarrow S) &= \frac{1}{4\tau} \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(x_0, y_0) \varphi_j(x_h, y_h) h^2 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-D\lambda_j n\tau} \tau \rightarrow \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j(x_0, y_0) \varphi_j(x_h, y_h)}{\lambda_j} \\ &\quad (\tau, h \rightarrow 0) \end{aligned} \quad (16)$$

ただし

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-D\lambda_n \tau} \rightarrow \int_0^{\infty} e^{-D\lambda_j t} dt \quad (\tau, h \rightarrow 0)$$

一方 (14) 式を差分の形で表わすと,

$$E = -h \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j(x_0, y_0)}{\lambda_j} \frac{[\varphi_j(x_{r^*}, y_{r^*}) - \varphi_j(x_h, y_h)]}{h} \\ = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j(x_0, y_0) \varphi_j(x_h, y_h)}{\lambda_j} \quad (17)$$

(16) 式と (17) 式が一致することから $\omega(P \rightarrow S) = E$ が成り立つことは明らかである。

さて Helmholtz の式と (11) 式とは同値であり, Green 関数は対称核であることから (11) 式において x を ξ , y を η と交換しても同式は成り立ち, (9) 式 (10) 式の関係を用い, 関数 G は次のように表わされる。

$$G(x, y; \xi, \eta) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j(x, y) \varphi_j(\xi, \eta)}{\lambda_j} \quad (18)$$

$\xi = x_0, \eta = y_0$ をとり (18) 式を (14) 式に代入すると ω は G と次のように結ばれる。

$$\omega(P \rightarrow S) = -ds \frac{\partial G}{\partial n} = G(Q_h, P) \quad (19)$$

ただし ω は確率ゆえ非負となるよう $\partial/\partial n$ をとる。

ランダム・ウォークにおいて上記の $\omega(P \rightarrow S)$ を求めると直ちに $G(Q_h, P)$ が求まり, さらに (7) 式を差分式にとり (8) 式の関係を用いると, Ω^* 内のすべての点における G の値が求められる。

$$G(Q, P) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 G(Q_i, P) \quad (P \neq Q) \quad (20)$$

$$G(P, P) = \frac{1}{4} \left[\sum_{i=1}^4 G(P_i, P) + 1 \right] \quad (21)$$

ただし Q_i, P_i は点 Q , 点 P のそれぞれの 4 隣点を示す。 G が求まれば (12) 式より λ が求められる。以上の論法より ω を求めなければならないが, $\omega(P \rightarrow S)$ の求め方には次の方法がある。

(1) ランダム・ウォーク・シミュレーション^{7,11)}

実際に乱数を用いて無作為に r.w.p. を動作させて, 点 P から点 S へ到達する確率を求める¹²⁾。この方法は統計的変動をもつ。

(2) 質量分割法⁷⁾ (爆発法⁹⁾)

点 P に質量 1 の質点を置き, これを 1/4 の質量の点 4 個に分ち点 P の 4 隣接点に置く。さらにこれらをそれぞれ 1/4 ずつに分つ。こうして境界上の点 (点 S を含めて) に到達した質量はそこで吸収させ, 点 S に吸収された全質量を求める。この方法は決定的でかつ無限に続く過程であるから途中で打ち切るときは未分割の質量が Ω^* 内に残るため誤差が生じる。しかし

m 回目の分割によって到達する質量を $M(P \rightarrow S, m)$ とすれば, (14) 式を差分に直し変形して,

$$M(P \rightarrow S, m) = D \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j(P) \varphi_j(Q_h) e^{-D\lambda_j m \tau} \\ = \sum_{j=1}^{\infty} k_j e^{-D\lambda_j m \tau} \quad (22)$$

(k_j は定数) と表わせる。固有値の性質より $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots$ であるから, m が十分大きくなると $M(P \rightarrow S, m)$ はほぼ $\exp(-D\lambda_1 m \tau)$ に比例して減少する。このことから十分大きい m 回目で打ち切ってそれ以後の到達質量がある程度推定できるので, これらを m について加えれば $\omega(P \rightarrow S)$ の近似値が求まる。Fig. 2 に示

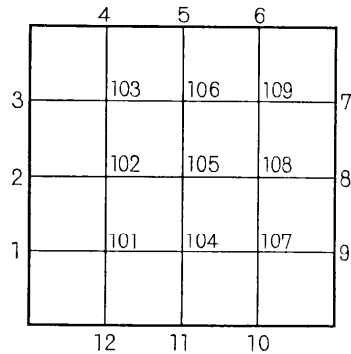


Fig. 2 An example of square boundary.

すような非常に簡単な例についてであるが推定手順を説明する。点 P を点 103 に, 点 S を点 3 にとる。このときの $M(P \rightarrow S, m)$ を Fig. 3 に示す。図のように $m \geq 17$ ではほぼ直線とみなしうるので $m=21$ の結果を用いてこれ以後の $\sum_{m=22}^{\infty} M(P \rightarrow S, m)$ を求める。簡単な計算から $\sum_{m=22}^{\infty} M(P \rightarrow S, m) = 0.305169 \times 10^{-4}$ が得られ一方 21 までのは $\sum_{m=1}^{21} M(P \rightarrow S, m) = 0.2990766252$ であるから,

$$\omega(P \rightarrow S) = \sum_{m=1}^{21} M(P \rightarrow S, m) \\ + \sum_{m=22}^{\infty} M(P \rightarrow S, m) \\ = 0.2991071421$$

この簡単な図形では ω だけはその真値が知られていて次のとおりである*。

$$\omega(P \rightarrow S) = \frac{67}{224} = 0.2991071429$$

したがって, この場合は 8 桁~9 桁の有効桁数がある (20 桁計算)。このように真値が得られている図形では ω の誤差の評価は可能であるが, 一般的には Γ の

* 分割質量が等比級数となって極限値が求まる。

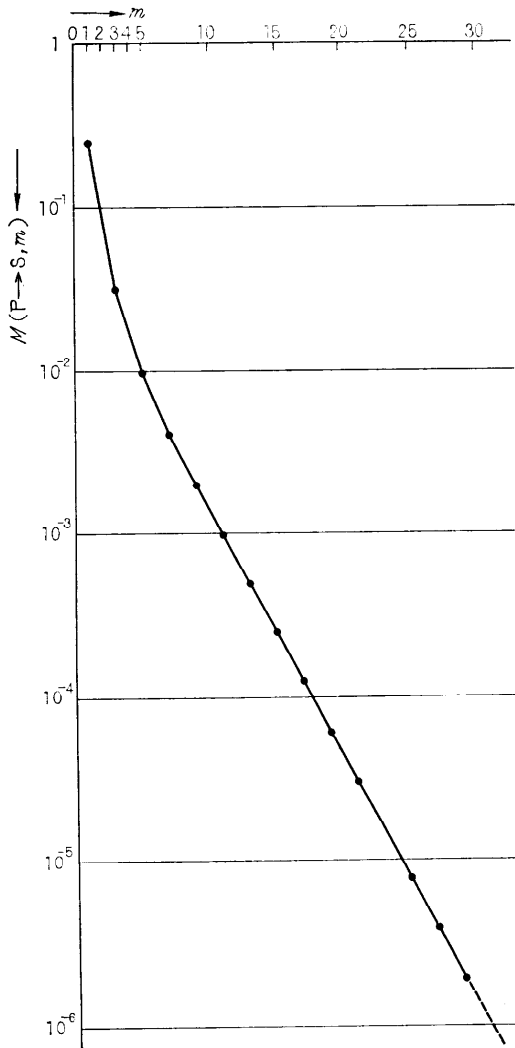


Fig. 3 Curve of $M(P \rightarrow S, m)$.

(The starting point P is set at a lattice point 103, and the arrival point set at a lattice point 3 shown in Fig. 2.)

任意性のため評価は困難である。

4. 計算例

Fig. 2 に示す非常に簡単な例について本方法を実施する。r.w.p. が点 P から点 S へ時間に関係なく到達する確率 $\omega(P \rightarrow S)$ は Table 1. の確率行列で与えられる。

前述の方法すなわち (19) 式, (20) 式, (21) 式に基づいて求めた Green 関数 G は Table 2. の確率行列で示される。

Table 1. $\omega(P \rightarrow S)$ of square boundary shown in Fig. 1.

P	S	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
	$\omega =$		67	22	7	7	6	3	3	6	7	7	22
	101	22	74	22	22	14	6	6	10	6	6	14	22
	102	7	22	67	67	22	7	7	6	3	3	6	7
	103	22	14	6	6	10	6	6	14	22	22	74	22
	104	14	28	14	14	28	14	14	28	14	14	28	14
	105	6	14	22	22	74	22	22	14	6	6	10	6
	106	7	6	3	3	6	7	7	22	67	67	22	7
	107	6	10	6	6	14	22	22	74	22	22	14	6
	108	3	6	7	7	22	67	67	22	7	7	6	3
	109	$\times \frac{1}{224}$											

Table 2. $G(P \rightarrow Q)$ of square boundary shown in Fig. 1.

P	Q	101	102	103	104	105	106	107	108	109	
	$G =$		67	22	7	22	14	6	7	6	3
	101	22	74	22	14	28	14	6	10	6	
	102	7	22	67	6	14	22	3	6	7	
	103	22	14	6	74	18	10	22	14	6	
	104	14	28	14	28	84	28	14	28	14	
	105	6	14	22	10	28	74	6	14	22	
	106	7	6	3	22	14	6	67	22	7	
	107	6	10	6	14	28	14	22	74	22	
	108	3	6	7	6	14	22	7	22	67	
	109	$\times \frac{1}{224}$									

Table 3. Eigenvalues of square by this method.

理論値	Green 関数による値		
	一辺4分割	一辺5分割	一辺6分割
λ_1	19.74	17.87	19.10
λ_2	49.35	41.37	44.10
λ_3	49.35	41.37	44.10
λ_4	78.96	64.00	69.10
λ_5	98.70	64.00	75.00
λ_6	98.70	86.63	75.00
λ_7	128.3	86.63	100.0
λ_8	128.3	110.1	100.0
λ_9	167.8		100.0
λ_{10}	167.8		100.0
λ_{11}	177.7		125.0
λ_{12}	197.4		125.0
λ_{13}	197.4		130.9
λ_{14}	246.7		155.9
λ_{15}	246.7		155.9
λ_{16}	256.6		180.9
λ_{17}	256.6		170.4
λ_{18}	286.2		180.0
λ_{19}	286.2		180.0
λ_{20}	315.8		206.4
λ_{21}	335.6		206.4
λ_{22}	335.6		216.0
λ_{23}	365.2		242.4
λ_{24}	365.2		242.4
λ_{25}	394.8		268.7

Monte Carlo estimate λ_1 is 22.2 (division number is 4).

Table 4. A part of 69 eigenvalues of circle dividing the radius into 10 equal parts by this method.

	理論値	実験値		理論値	実験値
λ_1	18.17	18.02	λ_9	154.6	137.9
λ_2	46.12	44.74	λ_{10}	154.6	137.9
λ_3	46.12	44.74	λ_{11}	180.9	152.9
λ_4	82.86	76.81	λ_{12}	180.9	160.9
λ_5	82.86	79.27	λ_{13}	222.6	179.2
λ_6	95.73	89.29	λ_{14}	222.6	194.5
λ_7	127.9	115.7	λ_{15}	235.3	197.5
λ_8	127.9	115.7			

Monte Carlo estimate λ_1 is 18.5 (the starting point P is the center).

Table 5. A part of 36 eigenvalues of figure shown in Fig. 4 by this method.

	実験値		実験値
λ_1	41.92	λ_6	117.6
λ_2	44.07	λ_7	122.2
λ_3	64.96	λ_8	125.5
λ_4	77.55	λ_9	141.7
λ_5	95.94	λ_{10}	154.9

In this case the rank of matrix is 36.

行列 G の対称性から Green 関数の相反性 $G(Q, P) = G(P, Q)$ が成り立っていることがわかる。(12) 式を用いて求めた λ の値を Table 3. に示す。なお同表には解析的に求めた正方形の固有値も示してある。また同表には従来から用いられている $P(n\tau)$ の分解による値も示す。この場合出発点 P を点 101, 点102, 点105 にとった (対称性のため3点でよい) が, 最小の固有値 λ_1 が得られたにすぎなかった。

Table 3. には一辺を5分割, 6分割した正方形において Green 関数より求めた固有値も示す。

Table 4. は円の場合で, 直径を10分割した場合の値を示す。

さらに任意の図形について計算を行なった。Fig. 4 にその形を示す。この場合固有値は 36 個求まるが, Table 5. にその一部を示す。この図形を中央の欠けた部分がないいわゆる長方形と比較した場合, 図形の面積を1として長方形の固有値 λ_1 は 36.02909 で, Fig. 4 の固有値の下界となっている。Table 6. には計算した Green 関数の一例を示す。

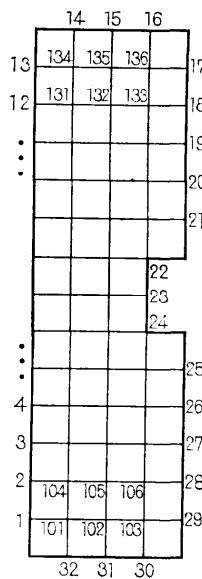


Fig. 4 An example of arbitrary shaped boundary.

Table 6. A row of matrix of Green function shown in Fig. 4 (the starting point P is a lattice point 101).

Q	G(Q, P)	Q	G(Q, P)	Q	G(Q, P)
101	0.300171 E+0	113	0.635621 E-2	125	0.658027 E-4
102	0.996455 E-1	114	0.761916 E-2	126	0.780399 E-4
103	0.322190 E-1	115	0.439412 E-2	127	0.379254 E-4
104	0.101038 E+0	116	0.253796 E-2	128	0.285319 E-4
105	0.661921 E-1	117	0.280167 E-2	129	0.359686 E-4
106	0.292304 E-1	118	0.993949 E-3	130	0.210647 E-4
107	0.377901 E-1	119	0.104955 E-2	131	0.123561 E-4
108	0.348544 E-1	120	0.388291 E-3	132	0.162380 E-4
109	0.185105 E-1	121	0.402575 E-3	133	0.103649 E-4
110	0.152677 E-1	122	0.156639 E-3	134	0.465462 E-5
111	0.169246 E-1	123	0.172463 E-3	135	0.626236 E-5
112	0.995732 E-2	124	0.525971 E-4	136	0.415681 E-5

In this case the rank of matrix is 36.

6. むすび

ランダム・ウォークによる固有値問題の解法の欠点は本方法によってかなり改善することができ, 将来任意の形の境界の固有値が従来より精度よく求められることが可能になった。それは前述のように Green 関数 $G(Q_h, P)$ が確率 $\omega(P \rightarrow S)$ と(19) 式のような関係を有していることが明らかとなり(20) 式, (21) 式から容易に G の値を求めることができるようになった

からであるが、なお ω を求める方法として質量分割法を用いるのでその計算は面倒でもあり、誤差も存在する。

最後に研究を可能にくださった本学藤沢俊男教授に、また種々の助言を賜わった大阪府立大学宮武修教授に感謝の意を表する。

参 考 文 献

- 1) W. Wasow: Random walks and the eigenvalues of elliptic differential equation, Journal of Research of the National Bureau Standards, 46 (1951), pp. 65~73
- 2) M.D. Donsker and M. Kac: A sampling method for determining the lowest eigenvalue and the principal eigenfunction of Schrödinger's equation, Journal of Research of the National Bureau Standards, 44 (1950), pp. 551~557
- 3) R. Fortet: On the estimation of an eigenvalue by an additive functional of a stochastic process, with special reference to the Kac-Donsker method, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 48 (1952), pp. 68~75
- 4) H. Sugiyama and O. Miyatake: Design of random walker for Monte-Carlo method, Journal of the Institute of Polytechnics, Osaka City University, Series D, 9 (1958), pp. 35~41
- 5) O. Miyatake et al.: A computer for stochastic process and its contribution to physical science, Preprint of the international statistical institute (Tokyo), (1960), 32 session.
- 6) H. Sugiyama and K. Joh: Some probabilistic methods for numerical analysis in case of boundary value problems of partial differential equations (1), Technology Reports of the Osaka University, 12, (1962), pp. 199~255
- 7) 宮武, 中山: モンテカルロ法, 日刊工業新聞社, (昭 35), 第 7 章
- 8) 日高: 積分方程式論, 河出書房, (昭 16)
- 9) M. Toyama, T. Ishiketa and O. Miyatake: An application of Monte-Carlo method to the calculation of stress function, Mathematica Japonicae, 10 (1965), pp. 107~113
- 10) 川下: 熱伝導論, 河出書房, (昭 16), 第 1 章
- 11) 石桁: 規格化したランダム・ウォーク・シミュレーション, 情報処理, 8 (1967), pp. 16~22
- 12) T. Ishiketa and H. Hirai: Three-dimensional random walk simulator and its applications, The Journal of the Institute of Electrical Engineers in Japan, 86 (1966), No. 3
(昭和 42 年 12 月 20 日受付)