計算天文学II 第4回 変分法と有限要素法

牧野淳一郎

2000 年 11 月 1 日

1 適応型格子

ここまでは、差分法、つまり、もとの偏微分方程式に現れる時間・空間微分自体を差分近似する方法を紹介してきた。この方法はもちろん一般に広く用いられている。しかし、現実の応用では差分法ではあまりに不便であるとか面倒であるという場面も多い。

一つの理由は、差分法の普通の実装では、空間分割が規則的である、例えば前回扱ったような、長方形領域を規則正しく並んだ正方形に分割する必要があるからである。丸い領域なら極座標を使うという方法もあるが、例えば、四角い領域に丸い穴をあけた領域をどう扱うかとなるともうそんなにうまい方法があるわけではない。

もっとも、特に2次元での応用、例えば飛行機の翼断面の回りの空気の流れの計算といった場合には、「一般化座標」というものでこういった問題に対応するということが普通に行なわれている。これはどういうものかというと、要するにまず長方形を正方形分割した格子を準備しておいて、これを翼断面に張りつくようにねじ曲げるわけである。そうすると、そういった曲がった座標系上でのものにもとの微分方程式を書き換えてやることで、ある程度一般的な形状にたいして規則的な格子で対応できるということになる。

もっとも、これは極めて面倒な方法であり、方程式を書き換える際にはリーマン幾何学を駆使して曲がった空間(というか座標系)上の方程式を書き下すということになり、一般相対論の本でもないのに計量テンソルがどうこうということを扱うことになる。

また、仮に境界形状が単純であっても、規則的な格子ではうまくいかない場合もある。例えば、非常に簡単な例としては、途中で太さが急に変わるような棒に力をかけた時にどのように曲がるかを数値的に解こうとする場合を考える。ここでは、「応力集中」という現象が起こって、急に太さが変わるところだけに力が集中して大きく変形し、それ以外のところの変形はずっと小さい。

少し古い話になるが、高速増殖炉「もんじゅ」の事故では、配管の中に出ていた温度計(だったかな)?のサヤがまさにそのような応力集中が起きるような構造になっていた上に、さらに「対称渦」という原子炉設計時には考慮されていなかった流体不安定が重なってそこで折れるにいたったものらしい。カルマン渦についてはさすがに考慮されていたが、対称渦は少なくとも設計者は知らなかったようである。

と、そんなことはともかく、こういった形状をちゃんと計算しようと思ったら、応力集中が起きる部分を他よりも正確に計算する必要がある。もちろん、全部を細かい格子で正確に計算すればそれでもいいわけであるが、それでは計算が有限時間でおわらなかったりするからである。

しかし、差分法ではそういうものに対応するのは非常に難しい。

対応しようとする方法はないわけではなく、その一つは nested grid といわれる、大きさが違う格子を重ねる方法である。これは最近は天文でも特に星形成のシミュレーションなどでよく使われるようになってきている。これはかなりうまくいくようになってきてはいるが、格子が変わるところで面倒な処理が必要になり、プログラミングも複雑になる。

もうちょっと一般的に、格子が規則的でない、適当な 3 角形分割（ポリゴン分割）とか 4 面体分割に対して数値解を求める方法を考えようというのが有限要素法の考え方である。今日は、その基本的な原理を前回と同じラプラス / ポアソン方程式を例にして考える。

2　弱定式化

ポアソン方程式

$$-\nabla^2 u = f \tag{1}$$

のディリクレ問題（境界で関数値を与えるもの。面倒なので関数値は 0 とする）を考える。記号を簡単にするため、方程式を解くべき領域を Ω、境界を Γ と書くことにしよう。領域 Ω は一般には N 次元ユークリッド空間 R^N の有界で連結な開部分集合ということにする。開集合なのは、単に境界上では微分が定義できないので微分方程式もなりたたないからである。

ここで、天下りではあるが、任意の関数 v (ただし、境界 Γ 上では 0) を考えて、これを元のポアソン方程式の両側に掛けて積分すると、もちろん

$$-\int_\Omega (\nabla^2 u) v dx = \int_\Omega f v dx \tag{2}$$

である。ここで Green の公式

$$\int_\Omega (\nabla^2 u) v dx = -\int_\Omega (\nabla u)\cdot(\nabla v) dx + \int_\Gamma \frac{\partial u}{\partial n} v d\gamma \tag{3}$$

（ここで n は境界での外向き単位法線である）と、境界で $v = 0$ という仮定から、

$$\int_\Omega (\nabla u)\cdot(\nabla v) dx = \int_\Omega f v dx \tag{4}$$

というふうに書き直せる。

この形式のことを弱形式という。ここで弱というのは、元のポアソン方程式の解は、もちろん任意の v に対してこの方程式を満たしているのに対し、任意の v に対して弱定式化をみたす関数 u がもとの方程式の解かどうかというのはそんなに自明ではない、例えば、2 階微分が存在しなくても弱形式の解ではありえるかもしれないというようなことがあるからである。

ここではポアソン方程式のディリクレ問題だけを考えるが、もっと一般に波動方程式や流体の方程式でもこのような弱形式を導くことが、いろいろ工夫するとできる。

3　変分問題

さて、さらに記述を手抜きするために、以下、弱形式の左辺を

$$a(u,v) = \int_\Omega (\nabla u)\cdot(\nabla v) dx \tag{5}$$

右辺を

$$F(v) = \int_\Omega fv dx \tag{6}$$

というふうに書く（a と F をこう定義する）ことにすると、弱形式は、単に

$$a(u, v) = F(v) \tag{7}$$

である。

ここで、どうも天下りが多くてよくないが、

$$J(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - F(v) \tag{8}$$

というものを定義する。これは、関数を実数に対応させる写像（汎関数 functional）である。これに対し、

「境界Γ で $v = 0$ を満たす範囲で $J(v)$ を最小にする v を見い出せ」

という問題を考えることができる。このような、汎関数の最小化問題は、一般に変分問題 variational problem と呼ばれるものの一つである。

で、ここで大事なことは、上の変分問題と、そのまえの弱形式が、実際には同等である、つまり、一方の解は他方の解であるというのが双方向になりたつということである。この辺の証明とかは参考書を見て欲しい。

4 Ritz-Galerkin 法

弱形式や変分問題にしても、それだけでは元の方程式以上にどうやって解けばいいかわからない。しかし、近似的（数値的）に解こうというときには、これらの形式から具体的な解を構成できる。

もとの弱形式では、u や v の範囲は実ヒルベルト空間（境界 Γ で 0 とか微分可能性がどうとかややこしい条件はつくが）である。ヒルベルト空間というのは何だったか忘れたとか知らないとかいう人がいるかもしれないが、要するに内積が定義できるベクトル空間のことである。元が関数だと、次元は無限ということになるが、まあ、そういうものである。

ここで、近似解を求めようという作業は、無限次元ヒルベルト空間を適当な有限次元に制限して、その範囲で解こうということであると思いなさいというのが、基本的な Ritz-Galerkin 法の精神である。この有限次元部分空間を以下 U^h と書くことにする。有限次元に制限する方法はいろいろありえるが、もちろんそのとり方によってどれくらいまともな答がでるかというのは変わってくる。ここで、弱形式の時に u だけでなく v も同じ部分空間に制限してしまうのがミソで、これで自由度の数と方程式の数を合わせることができる。

もっとも、それで方程式を解いたとして、求まった解がもともとのポアソン方程式の近似解に本当になっているかどうかというのは全然自明ではない。が、これをやってるとそれだけでこの講義半年分が終るので、その議論は省略することにしたい。

以下、まず、形式的にどうやって解が求められるかということを考える。U^h は有限次元線形空間なので、基底 $\{\psi_i\}_{i=1}^m$ がとれて、U^h の任意の元は $v_h = \sum_{i=1}^m \alpha_i\psi_i$ と書ける。但し、ここで α_i は実数係数である。

もとの弱形式は

$$a(u, v) = F(v) \tag{9}$$

であった。 ここで考える a, F はどちらも線形汎関数 (作用素、演算子、、、この辺の言葉の使い方は業界によって違うような気がする) なので、これが制限された部分空間で可能な任意の v_h についてなり立つということは、各基底 ψ_i について、

$$a(u_h, \psi_i) = F(\psi_i) \tag{10}$$

がなり立つというのと同じことである。で、さらに $u_h = \sum \alpha_i \psi_i$ と書けることから、これは結局α_i についての連立 1 次方程式

$$\sum_{j=1}^{m} a(\psi_i, \psi_j)\alpha_j = F(\psi_i) \quad (i = 1, 2, \cdots, m) \tag{11}$$

あるいは、例によって行列を使って

$$A\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{f} \tag{12}$$

と書けることになる。A や $\boldsymbol{f}$ の要素 $a(\psi_i, \psi_j)$ と $F(\psi_i)$ を計算して具体的に A と $\boldsymbol{f}$ を決めれば、上の方程式を解くことで $\boldsymbol{\alpha}$ が求まり、近似解 u_h が求まるわけである。

5 近似関数の空間

さて、近似関数としてはどんなものがあり得るかの例をちょっとだけあげる。

5.1 空間 1 次元の場合

空間 1 次元だと、領域 Ω は有界開区間なので、適当な変数変換をして単位開区間 $(0, 1)$ であると思っていい。ここでの近似関数空間としては、例えばフーリエ級数 (sin 級数) を有限項で打ち切ったものが考えられる。この時は、基底が直交基底で、結局 a_{ij} が対角要素以外は 0 になるので右辺の積分ができれば答が求まる。

が、まあ、2 次元以上の話というか、有限要素法の話につなげるために、まず折れ線関数というものを考える。これは、区間のなかに適当な分点 $x_0 = 0, x_1, x_2, \cdots, x_m = 1$ を考えて、各分点の間で 1 次関数、各分点では連続になるような関数である。これは、基底関数として、図に示すような、各 x_i のところで 1、その両側の分点で 0 になるような区分的 1 次関数を考えるということに相当する。

この場合には、フーリエ級数の場合と違って基底が直交していないので、左辺は対角行列にはならない。しかし、一つ向こうの基底とは直交しているので、A は 3 重対角行列になる。左辺の評価には一階微分が必要だが、これはもちろん定数関数で簡単に計算できる。右辺の$\boldsymbol{f}$ のほうは 1 次のままだが、これも簡単に評価できる。

例えば、分点が等間隔の場合を考えてみると、折れ線基底から出てくる方程式は結局 2 次の差分近似と同じになる。それではなにも変わらないではないかと思うかもしれないが、実はそうではない。というのは、今使っている折れ線基底は、分割が等分割である必要が全くないからである。どのように分点をとってきても、A や $\boldsymbol{f}$ は機械的に計算できる。

まあ、1 次元であれば差分式を中心差分を拡張して定義できるので、それほどありがたみが見えないのは確かであろう。

5.2 多次元の場合

この場合は、まず分割をどうするかが問題である。とりあえず、2次元として広く使われている3角形分割を考える。ここで、どの3角形の頂点も、他の3角形の辺の途中に来たりすることはないように分割することにする。すると、折れ線関数を自然に拡張したものとして、各3角形の中では平面（1次関数）であるような関数を考えることができる。ちなみに3次元でも話は同じで4面体にすればいい。この時は、結局基底関数として、ある節点（三角形の頂点）で1、それにつながった他のすべての頂点で0になるような多角錐を考えることになる。

有限要素法の強力さは、多次元の場合により明らかである。つまり、空間を3角形分割しただけでは、2階の導関数なんてものがいったいどうやって構成できるかは良くわからないので、差分式自体のたてようがない。しかし、有限要素法では、元の微分方程式を積分型の方程式に書き直すことで、空間が分割されていれば必ず近似解を構成できるわけである。

6 参考書

今日の内容は、基本的に菊地文雄「有限要素法の数理」(計算力学とCAEシリーズ13、培風館、1994)に基づいている。よりきちんと学びたいひとにはこの本を勧めたい。菊地さんの本なら他のでもいいかもしれない。

7 レポート課題

本当は2次元のをつくってもらうといいんだが、これはちょっとプログラムが大がかりになり過ぎる。といって、1次元ではプログラムといっても結局3重対角行列を解くだけになってあまり楽しいことはない。というわけで、今回はプログラミングの課題はなし。

1は必須。後はオプション。

1. 単位開区間での1次元のポアソン方程式で、右辺 f が δ 関数 $f(x) = \delta(x - x_0)$ である時の、Ritz-Galarkin 法による解を求めよ。ただし、近似関数空間としては sin 級数の最初の m 項を考えよ。
2. 上の近似解が $m \to \infty$ で収束する先を求め、それが解であることを確認せよ。

8 次週予告

来週、再来週は、牧野が外国出張となる。課題を出してもいいが、たまる一方でもしょうがないような気もするので、この間は自習ということにする。11/23までにはいままでの分のレポートをなるべく提出しておいて欲しい。

次回から、常微分方程式の初期値問題を扱う。これはすでにIでやっているわけだが、もうちょっといろいろなことを考える。