応用数値解析特論メモ No.1, 2

桂田 祐史

2015 年 9 月 29 日
511 にて

この授業用の WWW ページは http://www.math.meiji.ac.jp/~mk/ouyousuchi/

1 ガイダンス

1.0 自己紹介

連絡は katurada@meiji.ac.jp

1.1 授業の目標

有限要素法 (finite element method, FEM) の原理を理解する。
いくつか代表的な微分方程式のプログラムを作成し、
数値シミュレーションを体験する。
(プログラミング言語としては FreeFem++, C などを考えている)

受講者が解析学に詳しい場合は、収束証明など理論的な説明も行う。
シラバスは参考まで。最後は流体、固有値問題、色々ありうる。

1.2 有限要素法とは？

(以下に出て来る言葉の多くは、今後説明していくので、現時点で分からなくても構わない。)

差分法 (**finite difference method**, **FDM**) と「双璧をなす」微分方程式の数値解法。微分方程式に現れる導関数を差分商で置き換えた差分方程式を作り、その解を近似解に採用する。

有限要素法とは、

ある種の Ritz-Galerkin 法により、偏微分方程式の近似解を求める数値計算法の一種

である。古典的な Ritz-Galerkin 法では、近似関数の基底関数として、微分方程式に現れる微分作用素の固有関数等を用いるが、有限要素法では、

区分的多項式などを使うのが特徴

である。

1.3 受講者アンケート

- プログラミング、特に数値計算の経験は？(プログラミング言語、OS 等)
  自分で使えるパソコンはあるか。ノートパソコンでない場合、こちらで用意するが、Windows, Mac どちらが良い？
- 有限要素法について知っていることは？差分法は？
- 偏微分方程式について、授業等で学んだことがあるか？Poisson 方程式、熱方程式、波動方程式が書ける？なじみの微分方程式はありますか？
- 変分法を知っている？何か具体例があげられる？Euler-Lagrange 方程式とは？
- Dirichlet の原理とは何か知っている？
- 関数解析を勉強したことはありますか？例えば Hilbert 空間とは？
- $\mathbf{R}^n$ の有界領域 Ω における Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題の弱形式を書けますか?

1.4 参考書

後から必要に応じて追加する。

- 菊地文雄, 有限要素法概説 新訂版, サイエンス社 (1999).
  理工系一般向けに書かれている (関数解析的な知識は仮定されていない)。大変明解。関数解析的な成分を抜いても、たくさん数学があることが分かる。
- 菊地文雄, 有限要素法の数理, 培風館 (1994).
  有限要素法の数学について、日本語で書かれた数少ない貴重な書籍。
- 寺沢 寛一, 自然科学者のための数学概論 — 応用編 —, 岩波書店 (1960), の中の「変分法」 (by 加藤敏夫)

1.5 講義ノート

大体 1 週遅れくらいで

`http://www.math.meiji.ac.jp/~mk/ouyousuchi/`

に掲載するつもり。

2 変分法メモ

近代的な解析学の重要なルーツとも言える変分法は講義されることが少ない！

変分法とは、関数を変数とする (言い換えると関数空間の部分集合を定義域とする) 実数値関数 (**汎関数**(はんかんすう), **functional**) の最小問題 (or 極値問題) である。

等周問題 (周の長さが与えられた領域のうちで面積が最大となるものは何か？ — 円であることが予想されるが、証明は？) という古い問題もあるが[1]、**最短降下線** (**Brachistochrone**) がスタートと考えられる。

[1]調べてみることを勧める。レポート歓迎。

2.1 Johann Bernoulli (1667–1748) の最短降下線の問題

例 2.1 一様な重力場内の二定点 P, Q (P は Q よりも高いところにある) が与えられた時、P から Q に至る曲線に拘束されて、重力に従って移動する質点の運動 (重力以外の摩擦力、空気抵抗は無視する) を考える。P が原点になるように座標軸を取り、$Q=(a_1,b_1)$ とし、経路 (曲線) を $u=u(x)$ とすると、所要時間は、

$$I[u]:=\int_0^{a_1}\frac{\sqrt{1+u'(x)^2}}{\sqrt{-2gu(x)}}dx \quad (g \text{ は重力加速度})$$

のような経路 u の関数であるが、それを最小とするのは、どのような経路か？

ベルヌーイ兄弟、Newton, Euler, ... 色々な解き方をした。これについては、S. P. ネルセット, G. ヴァンナー, E. ハイラー,「常微分方程式の数値解法 I 基礎編」, シュプリンガー・ジャパン (2007) に少し詳しい紹介がある。

現代の観点からは、変分法の定跡である **Euler-Lagrange 方程式**に帰着させる (Lagrange による) 解法が重要である。

曲線 $y=u(x)$ 上の任意の点 (x,y) における速さを v とすると、

$$v^2=\left(\frac{dx}{dt}\right)^2+\left(\frac{dy}{dt}\right)^2=\left(\frac{dx}{dt}\right)^2+\left(\frac{dy}{dx}\cdot\frac{dx}{dt}\right)^2=\left[1+u'(x)^2\right]\left(\frac{dx}{dt}\right)^2. \tag{1}$$

一方、エネルギー保存則から

$$\frac{1}{2}mv^2+mgu(x)=\frac{1}{2}m\cdot 0^2+mg\cdot 0$$

が成り立つから

$$v=\sqrt{-2gu(x)}. \tag{2}$$

ゆえに (1), (2) から

$$\frac{dx}{dt}=\frac{v}{\sqrt{1+u'(x)^2}}=\frac{\sqrt{-2gu(x)}}{\sqrt{1+u'(x)^2}}$$

所要時間は

$$I[u]:=\int_0^{a_1}\frac{dt}{dx}dx=\int_0^{a_1}\frac{\sqrt{1+u'(x)^2}}{\sqrt{-2gu(x)}}\,dx.$$

少し一般化して考える。ここで

$$f(x,y,z):=\frac{\sqrt{1+z^2}}{\sqrt{-2gy}},\quad a:=0,\quad b:=a_1$$

とおくと、

$$I[u]=\int_a^b f(x,u(x),u'(x))\,dx.$$

Euler-Lagrange 方程式

3 変数関数 $f=f(x,y,z)$ と、$u(a)=A$, $u(b)=B$ が与えられているとき、C^1 級の $u\colon [a,b]\to\mathbf{R}$ で、

(3) $$I[u]:=\int_a^b f(x,u(x),u'(x))dx$$

を最小にするものを求めよ。
(解) u が I を最小にする関数とする。

$$\varphi(a)=\varphi(b)=0$$

を満たす任意の関数 φ を取って、

$$F(t):=I[u+t\varphi]\quad (t\in\mathbf{R})$$

とおく。F は $t=0$ で最小になるので $F'(0)=0$ となるであろう。

$$F(t)=\int_a^b f(x,u(x)+t\varphi(x),u'(x)+t\varphi'(x))dx$$

であるから、積分記号下の微分によって

$$\begin{aligned}F'(t)=\int_a^b\Big[&\frac{\partial f}{\partial y}\big(x,u(x)+t\varphi(x),u'(x)+t\varphi'(x)\big)\varphi(x)\\&+\frac{\partial f}{\partial z}(x,u(x)+t\varphi(x),u'(x)+t\varphi'(x))\varphi'(x)\Big]dx.\end{aligned}$$

ゆえに

$$F'(0)=\int_a^b\left[\frac{\partial f}{\partial y}\big(x,u(x),u'(x)\big)\varphi(x)+\frac{\partial f}{\partial z}(x,u(x),u'(x))\varphi'(x)\right]dx.$$

第 2 項について部分積分を実行して

$$\begin{aligned}F'(0)&=\int_a^b\left[\frac{\partial f}{\partial y}(x,u(x),u'(x))-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial z}(x,u(x),u'(x))\right)\right]\varphi(x)dx+\left[\frac{\partial f}{\partial z}(x,u(x),u'(x))\varphi(x)\right]_a^b\\&=\int_a^b\left[\frac{\partial f}{\partial y}(x,u(x),u'(x))-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial z}(x,u(x),u'(x))\right)\right]\varphi(x)dx.\end{aligned}$$

これが任意の φ について 0 となることから、変分法の基本補題によって

(4) $$\frac{\partial f}{\partial y}(x,u(x),u'(x))-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial f}{\partial z}(x,u(x),u'(x))\right)=0.$$

これは u についての微分方程式である。これを汎関数 I (あるいは変分問題 $\min\limits_u I[u]$) に対する **Euler 方程式**あるいは **Euler-Lagrange 方程式**と呼ぶ。

上の $I[u]$ については、Euler-Lagrange 方程式は

(5) $$\frac{\sqrt{1+u'(x)^2}}{2\sqrt{2g}\sqrt{-u(x)}^3}-\frac{d}{dx}\left(\frac{u'(x)}{\sqrt{1+u'(x)^2}\sqrt{-2gu(x)}}\right)=0$$

である。実際

$$\frac{\partial f}{\partial y}=\frac{\sqrt{1+z^2}}{2\sqrt{2g}\left(\sqrt{-y}\right)^3},\quad \frac{\partial f}{\partial z}=\frac{z}{\sqrt{1+z^2}\sqrt{-2gy}}$$

であるから。

(5) を整理すると

$$\frac{2u''(x)}{1+u'(x)^2}+\frac{1}{u(x)}=0.$$

u' をかけて積分すると、

$$\log\left(1+u'(x)^2\right)+\log|u(x)|=\log C \quad (C \text{ は正の任意定数}).$$

$u(x)\le 0$ に注意して整理すると

$$\left(1+(u')^2\right)u=-C.$$

u について解くと、変数分離型の微分方程式

$$u'=-\sqrt{\frac{u+C}{-u}}. \tag{6}$$

が得られる。後はこれを解くだけである (実はちょっと難しい [2])。

$$u=\frac{C}{2}\left(\cos\theta-1\right)$$

という変数変換を行うと、

$$u+C=\frac{C}{2}\left(1+\cos\theta\right),\quad \frac{u+C}{-u}=\frac{1+\cos\theta}{1-\cos\theta}=\tan^2\frac{\theta}{2},\quad \frac{du}{dx}=\frac{du}{d\theta}\cdot\frac{d\theta}{dx}=-\frac{C}{2}\sin\theta\frac{d\theta}{dx}$$

であるから、微分方程式に代入して、

$$-\frac{C}{2}\sin\theta\frac{d\theta}{dx}=-\sqrt{\tan^2\frac{\theta}{2}}.$$

ゆえに

$$\frac{dx}{d\theta}=C\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{C}{2}(1+\cos\theta).$$

積分して

$$x=\frac{C}{2}\left(\theta+\sin\theta\right)+D \quad (D \text{ は積分定数}).$$

(はてね) 結果のみ示すと、

$$x=\frac{C}{2}\left(\theta+\sin\theta\right)+D,\quad u=\frac{C}{2}\left(\cos\theta-1\right) \qquad (C,\,D \text{ は積分定数}).$$

$(x,u)=(0,0)$ を通ることから、$\exists\theta$ s.t.

$$0=\frac{C}{2}\left(\theta+\sin\theta\right)+D,\quad 0=\frac{C}{2}\left(\cos\theta-1\right).$$

これから $D=0$. ゆえに

$$x=\frac{C}{2}\left(\theta+\sin\theta\right),\quad u=\frac{C}{2}\left(\cos\theta-1\right). \tag{7}$$

これは軌跡が**サイクロイド**となることを表している。

レポート課題 1a　以上の計算の細部を遂行し、($Q(a_1,b_1)$ を色々変えながら) 軌跡の具体形をコンピューターを利用して描け。

[2] 普通に変数分離型微分方程式のパターンで計算を進めても、(u の複雑な式) $=x$ となり、それがサイクロイドであることは分り辛い。

2.2 最小作用の原理

(これは講義ではカットする可能性が高い。昔だったら[3]、理系の学生にとって「常識的」事項であったし、現在でも学ぶことになる可能性は低くないので、ちら見するだけでも価値があると考え、ここに書いておく。)

質点の運動を考える (デカルト座標を $x_1, \ldots, x_n$ とする)。力は保存力で、位置エネルギー U は時刻 t によらず $x_1, \ldots, x_n$ のみによると仮定する: $U = U(x_1, \ldots, x_n)$. 運動量 $p_j = m\dot{x}_j$ を用いると、**Newton の運動方程式**は

$$\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x_j} \quad (j = 1, \ldots, n). \tag{8}$$

運動エネルギー

$$K(\dot{x}_1, \ldots, \dot{x}_n) := \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2} m \dot{x}_j^2$$

を用いると

$$p_j = \frac{\partial K}{\partial \dot{x}_j}$$

となることに注意する。

一般座標 $q = (q_1, \ldots, q_n)$ を導入する。

$$\begin{cases} x_1 = x_1(q;t) = x_1(q_1, \ldots, q_n; t) \\ \vdots \\ x_n = x_n(q;t) = x_1(q_1, \ldots, q_n; t). \end{cases}$$

運動方程式 (8) は、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial K}{\partial \dot{q}_k}\right) = -\frac{\partial U}{\partial q_k} + \frac{\partial K}{\partial q_k} \quad (k = 1, \ldots, n) \tag{9}$$

と書き直される (途中経過略)。

ここで **Lagrange 関数** (**Lagrangian function**) と呼ばれる

$$L(q, \dot{q}, t) = L(q_1, \ldots, q_n, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t) := K(q, \dot{q}, t) - U(q, t)$$

を導入すると、(9) は、

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k} \quad (k = 1, \ldots, n)$$

に書き直される (この確認は簡単である)。これを **Lagrange の運動方程式**と呼ぶ。これは**作用** (action) あるいは**作用積分** (action integral) と呼ばれる

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t)\, dt$$

の Euler-Lagrange 方程式に他ならない。つまり、運動は作用積分を最小にするような軌道に沿う、ということになる。これを**最小作用の原理** (**action principle**) という。

L には直観的な物理的意味はない ($K - U$ でなく $K + U$ ならばエネルギーだが、そうではない)。

---

[3]現代の数学を構成する成分のルーツの多くは物理学にある。もちろん一度数学になってしまえば、数学の中で定義出来て議論はすべて数学的に行うことが出来る。物理を学ぶことは数学を理解するための必要条件ではない。また物理から生まれた数学の応用は物理に限定される、ということもない (例えば Fourier 解析は、熱方程式や波動方程式など、物理学に現れる微分方程式を解くために生まれたが、現代では音声、画像処理への応用が盛んで、微分方程式をほとんど使わない (学ばない) 分野の学生が Fourier 解析を学んでいる)。要するに、義務的に物理学を学ぶ必要はない。**しかし、**興味が生じたら、あるいは必要が生じたら、ちゅうちょなく物理学を学ぶ気持ちを持っていて欲しい。

2.3 Dirichlet 原理

Laplace 方程式に対する **Dirichlet の原理**「Dirichlet 境界条件 $u = \psi$ (on $\partial\Omega$) を満たす u のうちで、Dirichlet 積分

$$I[u] := \iint_\Omega (u_x(x,y)^2 + u_y(x,y)^2)\,dx\,dy$$

を最小にするものは、Laplace 方程式 $u_{xx} + u_{yy} = 0$ を満たす」も、以下で見るように、上と同じ原理 (2.1, 2.2 では関数の独立変数が t だけ、1 変数であったが、今度は独立変数が x, y の 2 つなので、様子がかなり異なるが) によると考えられる。

汎関数 I を最小にする関数は、Laplace 方程式を満すことの確認

$u = u_0$ が I を最小にすると仮定する。任意の $v \in C_0^\infty(\Omega)$, $t \in \mathbf{R}$ に対して、$u_0 + tv$ は

$$u_0 + tv = \psi \quad (\text{on } \partial\Omega)$$

を満たすので、I の定義域に属している。u_0 が最小値を与えるという仮定から、

$$I[u_0 + tv] \ge I[u_0].$$

これは $f(t) := I[u_0 + tv]$ とおくとき、f が $t = 0$ で最小値を取る、と言い替えられる。ところが f は

$$\begin{aligned} f(t) &= \iint_\Omega \nabla(u_0 + tv)\cdot\nabla(u_0 + tv)dx\,dy \\ &= \iint_\Omega \left(|\nabla u_0|^2 + 2t\nabla u_0\cdot\nabla v + t^2|\nabla v|\right)dx\,dy \\ &= I[u_0] + 2t\int_\Omega \nabla u_0\cdot\nabla v\,dx + t^2 I[v] \end{aligned}$$

のような 2 次関数であるから、これが 0 で最小になるには、1 次の係数が 0 である[a] 必要がある:

$$\iint_\Omega \nabla u_0\cdot\nabla v\,dx\,dy = 0.$$

これを部分積分して (あるいは Green の定理を使って)

$$\iint_\Omega \triangle\, u_0\, v\,dx\,dy = 0.$$

v が任意であることから、(**変分法の基本補題**[b] というのが使えて)

$$\triangle\, u_0 = 0 \quad (\text{in } \Omega). \quad \blacksquare$$

[a] あるいは、$f'(0) = 0$ と言っても同じこと。

[b]「$f \in L^1_{\text{loc}}(\Omega)$ が任意の $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$ に対して、$\int_\Omega f(x)\varphi(x)\,dx = 0$ を満たすならば、実は $f = 0$ (a.e.)」。これを**変分法の基本補題** (fundamental lemma of calculs of variations) と呼ぶ。

2.4 変分法の “直接法”

最小問題が目的とは限らない

Dirichlet の原理は、G. F. B. Riemann (1826–1866) による (関数論で有名な) **写像定理** (1851年) の証明に使われたが、Riemann は I の最小値の存在を厳密に示すことができず (下限の存在は明らかだが、下限が最小値であることは明らかでない — Weierstrass の指摘)、D. Hilbert (1862–1943) によって 1900 年 に解決されるまで、ほぼ 50 年近い年月がかかった。

最短降下線の場合には、最短降下線という変分問題を解くために微分方程式の問題に変形し、その微分方程式を解くことによって解を得たが、Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題の場合には、偏微分方程式の問題を解くために変分問題に変形し、その変分問題を "直接[4]" 解く (解の存在を示す) ことによって解を得た。この論法を変分法の**直接法**と呼ぶ。

議論の方向が最短降下線のような "従来の" 変分法とは逆であることに注意しよう。こういうことは、数学のあちこちで現われる。一つの問題が一見違う形の問題と同等であるということが比較的一般的に分かっていて、どちらの問題が解きやすいかは、個々の問題による、という状況がある。

2.5 おまけ: 極小曲面

空間内に与えられた閉曲線 Γ に石鹸膜を張ったとき、膜の形はどうなるか？ — 表面張力が働くので、面積を最小にするような曲面 (**極小曲面**, minimal surface) になる。

局所的には、適当な座標系を取ると微分方程式

$$\left(1+u_x^2\right) u_{yy} - 2u_x u_y u_{xy} + \left(1+u_y^2\right) u_{xx} = 0 \tag{10}$$

の解 u のグラフとなる。この微分方程式は非線形の偏微分方程式で簡単には解けない。

レポート課題 1b 対応する汎関数と、その Euler-Lagrange 方程式として (10) が導出される過程を書け。代表的な極小曲面 (これについては文献を探して調べよ) を二三選び、(10) を満たすことを確認せよ。さらにコンピューターで図示せよ。

参考文献

[1] E. ハイラー, S. P. ネルセット, G. ヴァンナー, 常微分方程式の数値解法I 基礎編, シュプリンガー・ジャパン (2007).

[2] 加藤敏夫, 変分法, (寺沢 寛一, 自然科学者のための数学概論 — 応用編 —, 岩波書店 (1960) の C 編).

[3] 高桑 昇一郎, 微分方程式と変分法, 共立出版 (2003).

[4]変分法の問題なので、Euler-Lagrange 方程式を作ると、最初の問題が出て来て、堂々巡りになってしまう。