

応用数値解析特論 第1回

～ガイダンス, 変分法～

かつらだ まさし
桂田 祐史

<http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/ana2021/>

2021年9月20日

目次

1 ガイダンス

- 自己紹介
- 授業の内容・成績評価
- 有限要素法とは？
- 受講者アンケート

2 変分法入門

- はじめに
- 最短降下線の問題
- Euler-Lagrange 方程式
- 最小作用の原理
- Dirichlet の原理
- おまけ: 極小曲面

3 参考書案内

- 有限要素法のテキスト
- 参考文献

自己紹介

- かつらだ まさし 桂田 祐史
- 専門は数値解析 (数値計算法の数理の関数解析的研究)
- 研究室は高層棟 910 号室 (今学期は対面指導はしない?)
- 質問・相談はメールで
(メールアドレスは katurada あっと meiji ずっと ac ドット jp)
オフィスアワー (Zoom 対応) が決まったら連絡します。

授業内容

- **有限要素法** (finite element method, FEM) の原理を理解する。
- 微分方程式の問題を有限要素法で解くプログラムの典型例を理解して、実際に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主に FreeFem++ を用いるが、アルゴリズムの説明用に C 言語も用いる。)
- 近似解の厳密解への収束定理など理論的な説明もある程度行う (?)。

参考まで [▶ シラバス](#) (特に後半は内容を差し替える可能性がある。)

資料は次のサイトにおきます (スライド PDF からリンクを張りますが…)

<http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/ana/>

(パスワード付き、パスワードは「シラバスの補足」に書いてあります。)

成績評価 各自興味のある問題について、(a) 数理モデル (偏微分方程式) の説明, (b) 弱定式化, (c) プログラム, (d) シミュレーション結果, (e) シミュレーション結果の分析 以上をまとめたレポートにより成績評価する。

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。)

有限要素法 (FEM) は、

- Ⓐ (偏) 微分方程式の数値解法 (近似解を求める数値計算法) の一種 **差分法 (finite difference method, FDM)**¹ と双璧
- Ⓑ (広い意味での) **Galerkin 法, Ritz 法** …… **変分法** と近縁
- Ⓒ **近似関数** として、領域を三角形・四面体などに分割して区分的多項式を用いる
- Ⓓ “プログラムの自動化” がしやすい
→ FreeFem++ などを使えば、自分が書くプログラムはわずかで済む

Cf. 古典的な Galerkin 法, Ritz 法では、近似関数として、微分方程式に現れる微分作用素の固有関数の線形結合を用いることが多い。

¹ 差分法では、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。

受講者アンケート

必要なことは講義内で説明するつもりですが、予備知識の状況は知っておきたいので、簡単に構わないので回答して下さい。

- プログラミング、特に数値計算の経験は(どの程度)ありますか？
- 偏微分方程式について、授業等で学んだことがありますか？なじみのある(何か覚えている)偏微分方程式がありますか？
- 偏微分方程式の数値解法として有名な差分法を勉強したことはありますか？プログラムを動かした経験はありますか？
- 変分法について勉強したことがありますか？もし出来ればどういうことを学んだか、簡単に構わないので説明して下さい。
- 関数解析を勉強したことはありますか？勉強する予定はあるでしょうか？
- 有限要素法について何か勉強したことはありますか？Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題の弱形式を書けますか？

1 変分法入門

1.1 はじめに

汎関数の最小問題 (あるいはより一般に極値問題) を**変分問題** (variational problem) と呼び、変分問題を扱うのが**変分法** (calculus of variations) である。

汎関数 (functional) とは、関数を変数とする実数値関数のことをいう。言い換えると、汎関数とは、関数空間の部分集合から \mathbb{R} への写像である。

有限要素法は、**変分法**と近縁で、変分法の解説が参考になることが多い。現代の解析学の重要なルーツの1つと言えるが、まとまった形で講義されることが少ない (多分適用範囲が広すぎるから)。高桑 [?], 井田 [?], 加藤 [?] をあげておく。

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?) という古典的な問題もあるが、以下では3つ紹介する。

- ① **最短降下線** 歴史上最初の例と考えられる。
- ② **最小作用の原理** 物理学で常識的
- ③ **Dirichlet 原理** 解析学で有名な弱解の方法の典型例で、有限要素法とも関係が深い

1.2 最短降下線の問題

例 1.1 (Johann Bernoulli (1667–1748) の最短降下線 (Brachistochrone) の問題)

一様な重力場内の2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 $y = u(x)$ とすると、所要時間は

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

これは変数 u の関数であるから、 I はいわゆる汎関数である。条件

$$(2) \quad u(0) = 0, \quad u(a_1) = b_1$$

の下で、 $I[u]$ を最小とする u は何か (どのような経路か)?

Bernoulli 兄弟、Newton, Euler, ... 色々な解き方をした (ハイラー・ネルセット・ヴァンナー [?])。

今では、**Euler-Lagrange 方程式** に帰着させる解法 (後述) が標準的である。

1.2 最短降下線の問題 (1) の導出

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、

$$(3) \quad v^2 = \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 = \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dx} \cdot \frac{dx}{dt}\right)^2 = [1 + u'(x)^2] \left(\frac{dx}{dt}\right)^2.$$

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

$$(4) \quad v = \sqrt{-2gu(x)}.$$

(3), (4) から

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

ゆえに所要時間は

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

1.2 最短降下線の問題 続き

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

(再掲 2)
$$u(0) = 0, \quad u(a_1) = b_1.$$

少し一般化して考える。ここで

$$f(x, y, z) := \frac{\sqrt{1 + z^2}}{\sqrt{-2gy}}, \quad a := 0, \quad b := a_1, \quad A := 0, \quad B := b_1$$

とおくと、(1), (2) はそれぞれ次のように書き換えられる。

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

1.3 Euler-Lagrange 方程式

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

$$(5) \quad I[u] := \int_a^b f(x, u(x), u'(x)) dx$$

を最小にするための条件を求めよ。

(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、

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

とおく。 F は $t = 0$ で最小になる。ゆえに $F'(0) = 0$ が成り立つ。

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

であるから、積分記号下の微分によって

$$F'(t) = \int_a^b \left[\frac{\partial f}{\partial y}(x, u(x) + t\varphi(x), u'(x) + t\varphi'(x)) \varphi(x) + \frac{\partial f}{\partial z}(x, u(x) + t\varphi(x), u'(x) + t\varphi'(x)) \varphi'(x) \right] dx.$$

1.3 Euler-Lagrange 方程式

ゆえに

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

第2項について部分積分を実行して

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

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](#) (後述) によって

$$(6) \quad \frac{\partial f}{\partial y}(x, u(x), u'(x)) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial z}(x, u(x), u'(x)) \right) = 0.$$

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 $\min_u I[u]$) に対する [Euler-Lagrange 方程式](#) と呼ぶ。

1.2 最短降下線 (再び)

最短降下線の問題では、

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

であるから、その Euler-Lagrange 方程式は

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

整理して

$$(7) \quad \frac{2u''(x)}{1+u'(x)^2} + \frac{1}{u(x)} = 0.$$

u' をかけて積分すると (左辺の 2 項がどちらも対数微分の形)

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

$u(x) \leq 0$ に注意して整理すると $(1+(u')^2)u = -C$. u' について解くと

$$(8) \quad u' = -\sqrt{\frac{u+C}{-u}}.$$

が得られる。これは変数分離型の微分方程式である。これを解くと、最短降下線がサイクロイドとなることが分かる。(有名だが結構難しい。省略する。)

1.4 最小作用の原理 (解析力学の入口)

(詳しく説明する時間はないが、情報へのリンクを張る意味で書いておく。種本は加藤 [?], 他に教科書から例えば井田 [?], 古典としてアーノルド [?] をあげておく。)

質点系の運動を考える (デカルト座標を x_1, \dots, 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, \dots, x_n のみによると仮定する: $U = U(x_1, \dots, x_n)$. 運動量 $p_j = m\dot{x}_j$ を用いると、**Newton の運動方程式**は

$$(9) \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x_j} \quad (j = 1, \dots, n).$$

運動エネルギー

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

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 $q = (q_1, \dots, q_n)$ を導入する。

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

1.4 最小作用の原理 (解析力学の入口)

運動方程式 (9) は、

$$(10) \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial K}{\partial \dot{q}_k} \right) = -\frac{\partial U}{\partial q_k} + \frac{\partial K}{\partial q_k} \quad (k = 1, \dots, n)$$

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

$$(11) \quad L(q, \dot{q}, t) = L(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t) := K(q, \dot{q}, t) - U(q, t)$$

を導入すると、(10) は、

$$(12) \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k} \quad (k = 1, \dots, n)$$

に書き直される。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

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

の Euler-Lagrange 方程式に他ならない。つまり、質点の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)。

1.5 Dirichlet の原理

Riemann は、Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題

$$\Delta u(x, y) = 0 \quad (\text{in } \Omega), \quad u(x, y) = \psi(x, y) \quad (\text{on } \partial\Omega)$$

の解の存在を証明するために “Dirichlet の原理” を用いた。

Laplace 方程式に対する Dirichlet の原理

Ω を \mathbb{R}^2 の有界領域、 $\psi: \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ とする。Dirichlet 境界条件 $u = \psi$ (on $\partial\Omega$) を満たす u のうちで、Dirichlet 積分

$$(13) \quad I[u] := \iint_{\Omega} (u_x(x, y)^2 + u_y(x, y)^2) dx dy$$

を最小にするものは、Laplace 方程式

$$(14) \quad \Delta u = 0 \quad (\text{つまり } u_{xx} + u_{yy} = 0)$$

を満たす。

(13) の最小性から、(14) を導く議論は次のスライドで説明するが、前の 2 つの例と本質的に同じ原理 $\left. \frac{d}{dt} I[u + t\varphi] \right|_{t=0} = 0$ である。つまり、(14) は (13) の Euler-Lagrange 方程式である、と言える。

1.5 Dirichlet の原理

I を最小にする u は、(14) を満すことの確認

u で I が最小と仮定する。任意の $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$, $t \in \mathbb{R}$ に対して、 $u + t\varphi$ は

$$u + t\varphi = \psi \quad (\text{on } \partial\Omega)$$

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

$$I[u + t\varphi] \geq I[u].$$

ゆえに、 $F(t) := I[u + t\varphi]$ とおくと、 F は $t = 0$ で最小値を取る。ところが

$$\begin{aligned} F(t) &= \iint_{\Omega} \nabla(u + t\varphi) \cdot \nabla(u + t\varphi) dx dy = \iint_{\Omega} (|\nabla u|^2 + 2t \nabla u \cdot \nabla \varphi + t^2 |\nabla \varphi|^2) dx dy \\ &= I[u] + 2t \iint_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi dx dy + t^2 I[\varphi] \end{aligned}$$

であるから、 F が 0 で最小になるには、1 次の係数が 0 (あるいは $F'(0) = 0$ と言える):

$$\iint_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi dx dy = 0.$$

これを部分積分 (Green の定理) して

$$\iint_{\Omega} \Delta u \varphi dx dy = 0.$$

φ が任意であることから、(変分法の基本補題² というのが使えて)

$$\Delta u = 0 \quad (\text{in } \Omega). \quad \square$$

1.5 Dirichlet の原理 反省, 変分法の “直接法”

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 — K. T. W. Weierstrass (1815–1897) の指摘)、D. Hilbert (1862–1943) によって解決されるまで (1900 年頃)、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³” 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 (the direct methods in the calculus of variations) 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。

変分法は最小問題が目的とは限らない

特に、解きたい微分方程式を Euler-Lagrange 方程式とする変分問題を数値的に解くことにより微分方程式の近似解を求めることも良く行われる。有限要素法による数値計算の多くについてそういう解釈が出来る。

³Euler-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。

1.6 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。膜が $z = u(x, y)$ ($(x, y) \in \Omega$) とグラフで表せるならば (局所的には、適当な座標系を取ればこの仮定は満たされるとして良いだろう)、

$$S[u] := \int_{\Omega} \sqrt{1 + u_x^2 + u_y^2} \, dx \, dy$$

を最小にする、ということである。

これから

$$(15) \quad (1 + u_x^2) u_{yy} - 2u_x u_y u_{xy} + (1 + u_y^2) u_{xx} = 0.$$

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。

課題 汎関数 $S[u]$ の Euler-Lagrange 方程式として、(15) 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、(15) 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。

参考書案内 有限要素法のテキスト

菊地 [?] は、理工系一般読者を対象とした有限要素法の入門書 (関数解析の知識は必要ない) である。Poisson 方程式に限られているが、大変明解。原理がはっきり分かるという意味では数学的。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。この科目の前半部分の種本と言っても良い。

菊地 [?] は、有限要素法の数学 (関数解析的な事項をふくむ) についての貴重な和書。鞍点型変分原理にも詳しい。ただしページ数が限られているので、これ一冊で足りる訳ではない。

洋書にチャレンジする元気があれば、定評ある Brenner-Scott [?] を勧める。

実際に数値計算する場合は、まず [FreeFem++](#) を使うことになると思われる。FreeFem++ のマニュアル Hecht [?] と、日本語によるテキスト大塚・高石 [?] が頼りとなるが、有限要素法それ自身のテキストにはならない。

[?] には、非常に豊富な事例が載っているが、解説には率直に言って (理解しやすいかどうかの観点から) 当たり外れがある。ネット上にあるチュートリアルを探すのが良いかもしれない (今後いくつか紹介する予定)。

参考文献