研究紹介: 有限要素法に関する研究

劉　雪峰 (リュウ　シュウフォン)

2014 年 10 月 22 日

目次

1　有限要素法とは

有限要素法は様々な分野に現れる微分方程式を解くための強力な道具である。有限要素法は数学の変分法等豊かな数学の理論があって，数学的な理論研究と工学への応用，両側で発展している。有限要素法の高い汎用性によって，差分法等他の計算手法と比べて，多くの商用ソフトが開発されていて，電子商品の熱伝導や，電磁場, 車の衝撃, 洪水･津波のシミュレーションのような幅広い分野に使用されている。

一般的に，偏微分方程式の厳密解は明らかな式で表現できないが，それの近似解は有限要素法によって計算できる。近似解の計算効率を高めて，信頼性を確保するために，近似解と厳密解との誤差評価は不可欠である。従来，近似解の厳密解への収束性等に関する定性的な誤差評価の研究が多かった。最近，アダプティブ計算と精度保証付き数値計算法等のニーズに応じて，補間関数の誤差評価や微分方程式の近似解の具体的な誤差評価など定量的な誤差評価が要求されている。

本研究室は以下のテーマをメインにして，有限要素法の定量的な誤差評価理論と応用を検討している。

1. 特異性のある偏微分方程式の事前誤差評価
2. 微分作用素の高精度な固有値計算法と誤差評価方法
3. 非線形偏微分方程式の解の検証
4. 半導体の抵抗率の測定や 3D プリント分野への応用

本研究室では，数学理論の研究の以外に，有限要素法に関する科学数値計算とプログラミングの勉強も行っている。有限要素法の研究に関する計算の一部はオンラインで利用できる。（URL: `http://www.xfliu.org/onlinelab/`）

以下は Poisson 方程式の例を初めとして，有限要素法に関する研究課題を説明する。

2　Poisson 方程式の近似解と誤差解析

Poisson 方程式は様々の現象から導出される。例えば，図1の中のシャボン玉の膜を三角フレームに張って，膜の変形が小さいの時，それの形状は以下の Poisson 方程式の解で表現できる。

$$-\Delta u = f \text{ in } \Omega, \quad u = 0 \text{ on } \partial\Omega$$

ただし，Ω は三角フレームに対応する領域，$\partial\Omega$ は Ω の境界である。f は既知の関数とする。シャボン玉の膜の形状を検討する時，f は膜における荷重（風，重力等）に対応する。

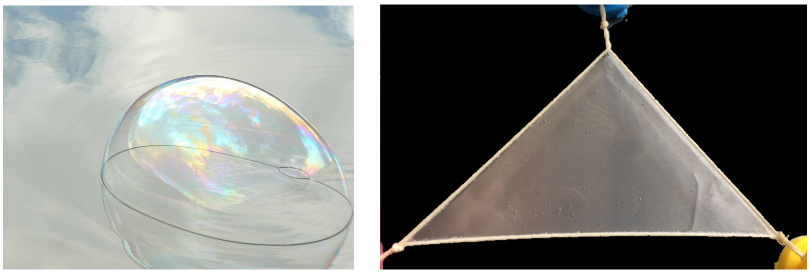

図 1:　シャボン玉の膜 (左の図：「シャボン玉」『ウィキペディア日本語版』)

微分方程式の変分式　上記の微分方程式の両辺にテスト関数 $v \in H_0^1(\Omega)$ をかけて，Ω の上で積分すると，次の式が得られる。

$$\int_\Omega -\Delta u v \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_\Omega f v \mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

ここで，$H_0^1(\Omega)$ は Sobolev 関数空間の一種であって，$H_0^1(\Omega)$ のメンバー関数は境界での値が 0 かつ一定の連続性を持っている。次に，左辺の式に部分積分を用いることで，上記の式を次の変分式に変形できる。

$$\int_\Omega \nabla u \nabla v \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_\Omega f v \mathrm{d}x\mathrm{d}y, \quad v \in H_0^1(\Omega)$$

解の特異性　領域 Ω の非凸な角の近くで，極座標系を角の頂点において，解の特異性 (関数の微分の積分が発散すること) が現れる可能性がある。解の特異性がある場合，近似解の誤差評価は極めて困難になる。

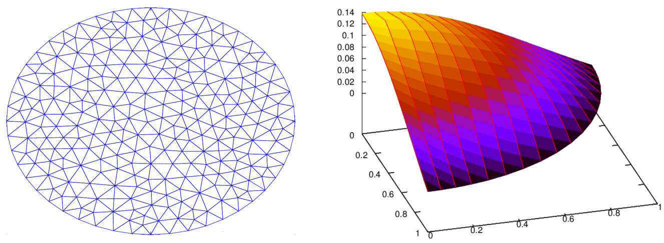

図 2: 円盤領域のメッシュ分割と有限要素空間 V^h 中のサンプル関数

有限要素空間と近似解　有限要素法は領域の三角分割を利用し，一定の連続性を持つ区分的な多項式によって有限次元の関数空間 $V^h(\Omega)$ を作る。図2では V^h のサンプル関数を表示している。有限次元の関数空間 V^h で上記の変分式の近似解 u_h を求めることができる。

$$\text{Find } u_h \in V^h(\Omega), \text{ s.t.,} \int_\Omega \nabla u_h \nabla v_h \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_\Omega f v_h \mathrm{d}x\mathrm{d}y \quad v_h \in V^h(\Omega)$$

近似解 u_h と厳密解 u の誤差は以下のように評価できる。

$$\|\nabla u - \nabla u_h\|_{L^2(\Omega)} \le Ch^{\alpha}\|f\|_{L_2(\Omega)} \tag{1}$$

関連研究課題　有限要素法の研究では以下の課題が検討されている。

a) 近似解の収束性。即ち，式（1）の中の C の有界性や収束オーダー（式 (1) の中の α）等に関する解析。

b) 特異性のある時，近似解の高精度な計算方法の開発。

c) 具体的な誤差評価，即ち，Ch^{α} の具体的な値を求めること。これは精度保証付き数値計算の分野に重要な役割を果たしている。

d) もっと一般的な偏微分方程式，例えば，Navier-Stokes 方程式，Maxwell 方程式，発展方程式に関する近似解への検討。

最近の進展 式 (1) の誤差評価について，厳密解に特異性が含まれる場合に，私は Hypercircle equation を利用して，厳密解と近似解の明らかな誤差評価を得ました。従来の有限要素法の定量な誤差評価に関する研究は特別な領域に限っていたが，該当研究で提案した手法は一般的な多角形領域に自然に対応できて，有限要素法の研究分野に重要な成果である。現在，我々は Hypercircle equation の手法を拡張して，他の微分方程式への拡張を検討している。

3　微分作用素の固有値問題

様々な数学の問題は固有値問題に繋がっている。以下ではドラムの音の話から，ラプラス微分作用素の固有値問題を紹介する。

ドラムの音　ドラムのヘッド（膜）を弾性膜として，それの振動の数学モデルを考える。ドラムのヘッドを領域 Ω とする。ヘッドの各点の位置 $u(x,y,t)$ は時間 t と場所 (x,y) に依存する。理想なドラムの場合，u は以下の方程式を満たす。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) \text{ for } (x,y)\in\Omega, \quad u(x,y)=0 \text{ on } \partial\Omega.$$

ただし，c は膜の振動が横方向に伝える速度である。数学の変数分離法によって，ヘッドの振動は以下の基本振動モードに分解できる。

$$u = T_n(t)\phi_n(x,y), \quad T_n(t) = a_n\cos(c\lambda_n t) + b_n \sin(c\lambda_n t).$$

上記の分解で，ϕ_n, λ_n それぞれはラプラス作用素の固有関数と固有値に対応する。

$$\text{固有値問題：} \quad -\Delta\phi_n = \lambda_n\phi_n \text{ in } \Omega, \quad \phi_n = 0 \text{ on } \partial\Omega \tag{2}$$

ドラムの音を解析するために，上記の固有値問題の固有値と固有関数の計算は不可欠である。図3は円盤領域の場合 λ_i $(i=1,2,\cdots,9)$ に対応する固有関数を挙げる。

Can you hear the shape of a drum?　固有値の分布は領域の形に依存する。1966 年，研究者 Marc Kac が「Can you hear the shape of a drum?」という問題を提示した。即ち，固有値の分布（音）によって，領域の形が一意に決められるかとうかという問題である。図4の中の領域 A, B, C について，領域の形が全然違うが，それぞれの固有値の近似計算結果が互いに近いことがある。実は，理論解析の手法によって, 領域 A と B に対応するすべての固有値が完全に一致することが証明されている。ですので，「You cannot hear the shape.」という解答がある。

数学の言葉で，領域 A と B におけるラプラス作用作用素の固有値が一致する場合，A と B が isospectral と呼ぶ。理論解析の手法によって，「２つ領域が isospectral である」ということは証明しやすいですが，その否定命題「２つ領域が isospectral ではない」は証明しにくい。代わりに，固有値の数値計算と厳密な誤差評価に行っ

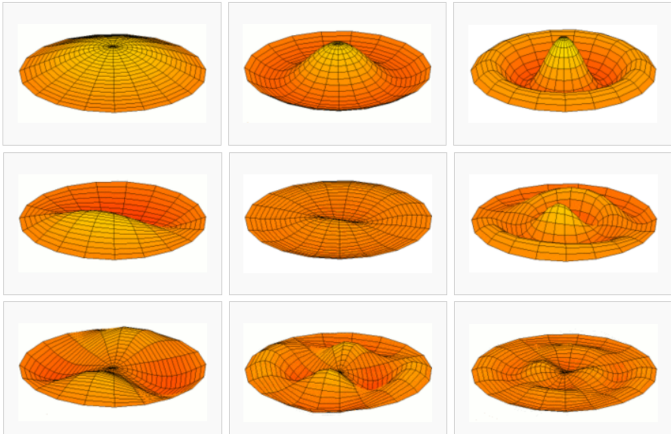

図 3: 円盤領域の固有モード (Vibrations of a circular membrane, In *Wikipedia, The Free Encyclopedia.*)

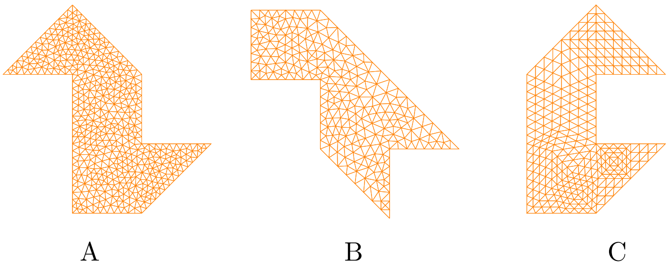

図 4:　領域と有限要素法計算でのメッシュ分割

て，B と C の固有値が違って，故に「B と C が isospectral ではない」は簡単に証明できる。この例によって,理論解析の強みと「数値計算＋誤差評価」の重要性が分かる。

<u>固有値問題に関する研究課題</u>

有限要素法などの数値計算手法によって，固有値の近似計算ができる。ラプラス作用素の場合，固有値の上界評価は昔からよく分かっているが，固有値の下界の評価は難しい問題として残されている。よって，精度のいい固有値評価は数値解析の分野における重要な課題である。以下では固有値問題に関する研究を列挙する。

a) 固有値の上界下界評価

b) 固有値の高精度な計算方法と誤差評価の理論

c) 補間関数の誤差評価に現れる固有値問題への検討

d) 非線形微分方程式の解の検証に不可欠な微分作用素の固有値への検討

e) 他の問題に現れる固有値問題

<u>最近の進展</u>　私はラプラス作用素の固有値問題を検討し，有限要素法の誤差評価を利用して，任意多角形領域におけるラプラス作用素の固有値の下界の評価式を提案した。最近，有限要素法と Lehmann-Goerisch の定理と合わせて，一般的な固有値の問題に対して固有値の高精度な評価方法を検討している。また，有限要素法の一種である非適合有限要素法によって，固有値の下界評価について，新しい研究成果が出されている。固有値問題に帰着する補間関数の誤差評価について，劉・菊地が提案した定数の評価式を初め，小林・土屋などのいい研究が展開されている。

表 1: 有限要素法による A,B,C におけるラプラス作用素の固有値計算

領域	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5
A	29.6530	26.5940	21.1007	14.8272	10.2913
B	30.2243	27.1428	21.4834	14.9708	10.4013
C	30.0662	26.9505	21.5866	15.0297	10.3975

4　他分野への応用と連携研究

有限要素法はたくさんの分野に応用されている。以下では本研究室で行っている共同・連携研究を紹介する。

4.1　非線形微分方程式の解への検証

アメリカのクレイ数学研究所の「ミレニアム賞 7 問」の一つである「ナヴィエ・ストークス方程式の解の存在と滑らかさ」の問題は，多くの研究者に知られている。ナヴィエ・ストークス方程式は非線形偏微分方程式の一種であり，解決するためには従来の解析手法だけではない，何か新しい概念や発見が必要と予想される。

一方，近年，注目されている「精度保証付き数値計算」は，計算機を利用して計算中に生じる近似誤差 (離散化誤差，打ち切り誤差，丸め誤差など) をすべて評価し，数学的に正しい結果が得られる有用な新しい方法である。これまでの過去 20 年間で，モデル問題であるポアソン方程式から様々な偏微分方程式まで，たくさんの問題が計算機援用証明方法で解けることが示されている。

本研究室では非線形楕円型偏微分方程式に対する解の精度保証付き数値検証方法の研究が行われている。従来の研究では，中尾充宏氏, M.Plum 氏, 大石進一氏などは解の検証方法を提案した。しかし，非凸領域における特異性の処理は大がかりな仕掛けが必要であったため，一般的な領域での解の検証は難しい問題であった。我々は，Hypercircle equation の方法により，非線形楕円型偏微分方程式の一種を検討し，任意領域におけるその方程式の解の検証が可能となった。

$$\begin{cases} -\Delta u = u^2 + 10 & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

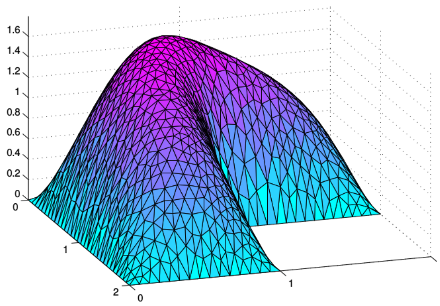

図 5: L-shape 領域における非線形微分方程式の解の検証例

図5では L-shape 領域における非線形微分方程式の近似解を示す。当該近似解の近傍で厳密解の存在性などを計算機援用して検討できる。現在，高精度な固有値計算によって，効率よく検証方法の開発が検討さてている。

<u>共同研究者</u>　早稲田大学大石進一教授，早稲田大学高安亮紀助教。

4.2　抵抗率測定に関する数値解析

4 探針法は、半導体材料の抵抗率測定法として半導体材料の製造工程および半導体デバイスの製造工程において最も広く用いられている。

抵抗率の測定原理の数学モデルを簡単に説明する。抵抗率 ρ が均一である半導体材料を考える。図6のように、針 4 本を半導体材料の表面に接触し、針 A と針 D の間に

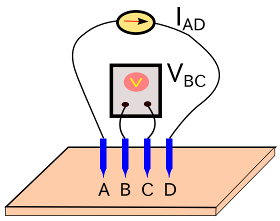

図 6: 4 探針法による抵抗率の測定

電流 I_{AD} を流し、針 B と針 C の間の電圧 V_{BC} を測定する。抵抗率 ρ を測定するために，次の Poisson 方程式の解の計算が必要である。

$$-\Delta u(x) = 2\rho I_{AD}(\delta(x-A) - \delta(x-D)) \text{ for } x \text{ in } \Omega; \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ on } \partial\Omega\,.$$

ただし、Ω は材料全体の領域，δ が Dirac のデルタ関数である。上記の方程式の解を計算する際、以下の課題を検討している。

a) レギュラーではない領域（材料）の場合、方程式の厳密解を得ることができないので、抵抗率の算出は難しい。

b) Dirac のデルタ関数を含むので、微分方程式の解に特異性が現れ、解の近似計算も極めて難しい。

現在，本研究室は株式会社ナプソンとの連携研究で，様々な半導体材料の抵抗率測定における高精度、高信頼度の補正係数の計算と検証方法を開発している。

連携研究　株式会社ナプソン (http://www.napson.co.jp)

4.3　3D プリント分野の固有値解析

本研究室は中国科学技術大学の研究グループとの連携研究で、３Ｄプリントのモデルの最適な構成や材料節約等の課題に関する研究を行っている。

３Ｄプリンターによってモデルを作成する時、モデルの強度を保持して、使用する材料を少なくすることが大切である。特に、プリントされるモデルは弾性体として、固有値モード・固有値の解析によってモデルの強度を計算することは不可欠である。本研究では有限要素法を用い、弾性体の固有値モード解析して、ビームによって支えられるモデル内部の構成を最適化し、モデルの変形を抑える新しい手法を提案した。その手法によって、モデルのボリュームの約３０％の材料のみ使って、丈夫なモデルをプリントすることができる。

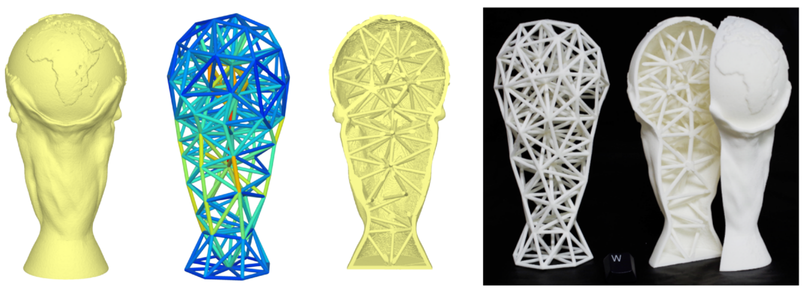

図２：最適化されたモデルの内部構成とプリントされた実物

連携研究　Prof. Yang Zhouwang, University of Science & Technology of China

5　有限要素法のプログラミング

最近，DOLFIN 等様々な有限要素計算ライブラリの発展によって，有限要素法の計算は簡単になっている。以下は Poisson 方程式の解を計算に用意される DOLFIN のサンプルコードである。図7では，DOLFIN の 3D グラフ描画の機能を利用して計算結果を表示している。従来のプログラミングでは，数百行の計算コードが必要であるが，DOLFIN を使う場合，プログラミングの作業は大幅に楽になる。

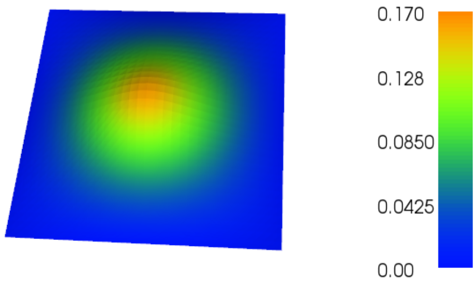

図 7: DOLFIN による Poisson 方程式の近似解

Listing 1: DOLFIN による有限要素法の実装

```
#Load DOLFIN package
from dolfin import *

# Create mesh and define function space
mesh = UnitSquareMesh(32, 32)
V = FunctionSpace(mesh, "Lagrange", 1)

# Define Dirichlet boundary (x = 0 or x = 1 or y = 0 or y = 1)
def boundary(x):
    return near(0,x[0]) or near(1,x[0]) or near(0,x[1]) or near(1,x[1]) ;

# Define boundary condition
bc = DirichletBC(V, Constant(0.0), boundary)

# Define variational problem
u = TrialFunction(V)
v = TestFunction(V)
f = Expression("10*exp(-(pow(x[0] - 0.5, 2) + pow(x[1] - 0.5, 2)) / 0.02)")
a = inner(grad(u), grad(v))*dx
L = f*v*dx

# Compute solution
u = Function(V)
solve(a == L, u, bc)

# Plot solution
plot(u, interactive=True)
```

オンライン計算　数値解析の分野における研究では、数学理論の検討以外に、実際の計算システムの構築も非常に重要である。本研究室では，計算機サーバーと Web システムの開発に関する知識を活用して，これまでの研究成果の一部である「誤差定数の高精度な評価」と「ラプラス作用素の精度保証付き固有値計算」のオンライン計算を公開している。

オンライン計算サイト：`http://www.xfliu.org/onlinelab/`