リーマン多様体上の有限要素法

東北大学大学院情報科学研究科　　浦川　肇

微分幾何学では, 一般の n 次元コンパクト・リーマン多様体が登場する. その上でのラプラシアンの固有値問題を扱いたいが, その固有値と固有関数を具体的に求めることはほとんど不可能である. 本論文は一般的な n 次元リーマン多様体上の有限要素法の定式化を行なうものである. これは, 小生の著書

朝倉数学大系 第3巻

「ラプラシアンの幾何と有限要素法」

朝倉書店, ２７２頁, ISBN978-4-254-11823-0, ２００９年１０月

で言い足りなかったことを補足するものである. 同書では, (M, g) は $\mathbb{R}^{n+1}$ に等長的に埋め込まれていることを仮定していたが, その仮定を取り去ることができることを示す. すなわち, 本論文では, (M, g) が一般の n 次元リーマン多様体の状況の下で, 有限要素法の定式化を行ないたい.

この場合, J. Nash の定理によって, (M, g) は十分大きい次元, K とする, のユークリッド空間 $\mathbb{R}^K$ に等長的に埋め込まれているとしてよい:

$$(M, g) \hookrightarrow (\mathbb{R}^K, g_0)$$

ここで g_0 は $\mathbb{R}^K$ の標準計量を表す. 以下では, 上記の埋め込み写像と $\mathbb{R}^K$ の標準計量 g_0 は必要がない限り表記しないものとする.

目　次

1

問 題 設 定

1.1 ラプラシアンの固有値問題

(M,g) のラプラシアンを Δ と表記する．すなわち，

$$\Delta = -\frac{1}{\sqrt{|g|}}\sum_{i,j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sqrt{|g|}\,g^{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}\right) \tag{1.1}$$

とする．ここで (M,g) の局所座標 $(x_1,\cdots,x_n)$ に関する リーマン計量 g の成分を $g_{ij}=g(\frac{\partial}{\partial x_i},\frac{\partial}{\partial x_j})$ とし，$(g^{k\ell})$ で n 次正定値対称行列 (g_{ij}) の逆行列を表し，$|g|$ を，(g_{ij}) の行列式とする．

また，(M,g) の体積要素を

$$v_g = \sqrt{|g|}\,dx_1\cdots dx_n \tag{1.2}$$

と表す．

そこで次の固有値問題を考える．

(1) M がコンパクトの時，**境界条件のない固有値問題**:

$$\text{(F)} \qquad \Delta u = \lambda u \qquad (M\ \ \text{上}). \tag{1.3}$$

(2) 境界 $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ となる M 内の有界領域 $\Omega\subset M$ のときには，**ディリクレ境界値固有値問題**:

$$
\text{(D)} \qquad \begin{cases} \Delta v = \mu v & (\Omega \quad 上) \\ v = 0 & (\partial\Omega \quad 上) \end{cases} \tag{1.4}
$$

または**ノイマン境界値固有値問題**:

$$
\text{(D)} \qquad \begin{cases} \Delta w = \mu w & (\Omega \quad 上) \\ \dfrac{\partial w}{\partial \mathbf{n}} = 0 & (\partial\Omega \quad 上) \end{cases} \tag{1.5}
$$

ここで $\mathbf{n}$ は境界 $\partial\Omega$ の滑らかな点における内向きの単位法線ベクトルを表し，それに関する方向微分を $\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}$ で表す．$\frac{\partial w}{\partial \mathbf{n}}(x) = g_x(\nabla w(x), \mathbf{n}(x))$ $(x \in \partial\Omega)$ である．∇w は関数 w の勾配ベクトル場とし，g のレビ・チビタ接続を ∇ で表す．

3 つの固有値問題 F), (D), (N) の固有値と $L^2(M)$ または $L^2(\Omega)$ の正規直交基底を与える固有関数系を，それぞれ，

$$
\begin{array}{lll}
\text{(F)} & \lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_k \le \cdots; & u_1, u_2, \cdots, u_k, \cdots \\
\text{(D)} & \mu_1 \le \mu_2 \le \cdots \le \mu_k \le \cdots; & v_1, v_2, \cdots, v_k, \cdots \\
\text{(N)} & \nu_1 \le \nu_2 \le \cdots \le \nu_k \le \cdots; & w_1, w_2, \cdots, w_k, \cdots
\end{array}
$$

とする．ここで固有値は重複度を込めて数えるものとする．

例 1.1. (F) のときは，$\lambda_1 = 0$，かつ $u_1 = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{Vol}(M,g)}}$ である． ここで $\mathrm{Vol}(M,g) = \int_M 1\, v_g$ は (M,g) の体積である．また，$\lambda_2 > 0$ である．

(D) のときは，$\mu_1 > 0$ である．

(N) のときは，$\nu_1 = 0$，かつ $w_1 = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{Vol}(\Omega)}}$ である．ここで $\mathrm{Vol}(\Omega) = \int_\Omega 1\, v_g$ は Ω の (M,g) における体積である．また，$\nu_2 > 0$ である．

1.2 ソボレフ内積，L^2 内積，レーリー商

コンパクト・リーマン多様体 (M,g) 上の**ソボレフ空間**を

$$H_1^2(M) := \{\psi \in L^2(M) |\, (\psi, \psi)_1 < \infty\} \tag{1.6}$$

とし, 完備リーマン多様体 (M, g) 内の有界領域 Ω 上の**ソボレフ空間**を

$$H_1^2(\Omega) := \{\psi \in L^2(\Omega) |\, (\psi, \psi)_1 < \infty\} \tag{1.7}$$

とし, その閉部分空間

$$\overset{\circ}{H}{}_1^2(\Omega) := \{\psi \in H_1^2(\Omega) |\ \psi = 0 \quad (\partial\Omega\ 上)\} \tag{1.8}$$

を定義する. これも**ソボレフ空間**とよばれる. ここで

$$(\psi, \varphi)_1 := \int_M \psi\, \varphi\, v_g + \int_M g(\nabla\psi, \nabla\varphi)\, v_g, \qquad \|\psi\|_1 := \sqrt{(\psi . \psi)_1},$$
$$(\psi, \varphi) := \int_M \psi\, \varphi\, v_g, \qquad \|\psi\| := \sqrt{(\psi, \psi)}$$

とする. それぞれ, **ソボレフ内積**, **ソボレフ・ノルム**, L^2 **内積**, L^2 **ノルム**とよばれる. また, Ω 上のソボレフ内積等についても同様に定義するものとする.

また, **レーリー商**を次のように定義する. 問題 (F) のときには,

$$R(\psi) := \frac{\int_M g(\nabla\psi, \nabla\psi)\, v_g}{\int_M \psi^2\, v_g} \qquad (\psi \in H_1^2(M)) \tag{1.9}$$

とし, 問題 (D), (N) のときには,

$$R(\psi) := \frac{\int_\Omega g(\nabla\psi, \nabla\psi)\, v_g}{\int_\Omega \psi^2\, v_g} \qquad (\psi \in H_1^2(\Omega)) \tag{1.10}$$

と定義する.

2

有　限　要　素

2.1　単　体　分　割

さて有限要素法による定式化を進めよう．

境界なしの固有値問題 (F) の場合には, $\mathbb{R}^K$ 内の n 次元 C^∞ コンパクト・リーマン多様体 (M,g) 内の m 個の点 (**節点**という)

$$\{\mathrm{P}_1, \mathrm{P}_2, \cdots, \mathrm{P}_m\}$$

を取る．

(M,g) が完備リーマン多様体で, Ω が境界 $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ である M 内の有界領域で, 問題 (D) または (N) を考えるときは, $\ell < m$ として, $\overline{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ 上の節点 $\{\mathrm{P}_1, \mathrm{P}_2, \cdots, \mathrm{P}_m\}$ として,

$$\{\mathrm{P}_1, \mathrm{P}_2, \cdots, \mathrm{P}_\ell\} \text{ は } \Omega \text{ の節点に取り,}$$
$$\{\mathrm{P}_{\ell+1}, \mathrm{P}_{\ell+2}, \cdots, \mathrm{P}_m\} \text{ は } \partial\Omega \text{ 上の節点に取る,}$$

ものとする．この節点の集合から M または $\overline{\Omega}$ の**単体分割** $\Xi = \{e_\mu\}_{\mu=1}^s$ を次のように作る:

各 e_μ $(\mu = 1, \cdots, s)$ は n-単体とよばれるもので, $\{\mathrm{P}_1, \mathrm{P}_2, \cdots, \mathrm{P}_m\}$ の中から, $n+1$ 個の節点 $\{\mathrm{P}_{i_0}, \mathrm{P}_{i_1}, \cdots, \mathrm{P}_{i_n}\}$ を選び, $\mathbb{R}^K$ の点と考え, $\mathbb{R}^K$ 内の部分集合

$$e_\mu := \{a_0\mathrm{P}_{i_0} + a_1\mathrm{P}_{i_1} + \cdots + a_n\mathrm{P}_{i_n} \mid \sum_{i=0}^n a_i = 1,\ a_i \geq 0\,(i = 0, \cdots, n)\}$$

として与えられるものとする．各 e_μ は，$n=2$ のときは，$\mathbb{R}^K$ 内の三角形を表し，$n=3$ のときは，$\mathbb{R}^K$ 内の四面体を表す．ここで我々は，つぎのことを仮定する．

「2つの n-単体 e_μ と e_ν が共通点を持つのは，e_μ と e_ν が，どれかの $k=0,1,\cdots,n-1$ について，k-単体を共有する場合に限るものとする」

そこで，

$$G(\Xi) := \overline{\cup_{\mu=1}^{s} e_\mu} \text{ の内部}$$

とし，有界領域 Ω の場合には，さらに，

$$\Gamma(\Xi) := G(\Xi) \text{ の境界}$$

とおく．

以下では，単体分割 Ξ を十分細かく取り，

(1) (M,g) が $\mathbb{R}^K$ 内の n 次元 C^∞ コンパクト・リーマン多様体のときは，$M=G(\Xi)$ と見なせ，

(2) $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ である有界領域のときは，$\Omega=G(\Xi)$ かつ $\partial\Omega=\Gamma(\Xi)$ と見なせ，さらに，$\partial\Omega$ の滑らかでない集合は Ξ の節点か $(n-2)$-単体に含まれているように選ばれているものとする．

Ξ の n-単体 e_μ $(\mu=1,\cdots,s)$ は**要素**と呼ばれている．

2.2 基底関数と折れ線関数

このような単体分割 Ξ に対して，基底関数と折れ線関数を定義する．

定義 2.1. 各節点 P_i $(i=1,\cdots,m)$ に対して，関数 ψ_i を次の性質により定める：

(1) 各節点における値は，

$$\psi_i(\mathrm{P}_j)=\delta_{ij} \tag{2.1}$$

を満たす.

(2) 関数 ψ_i は各要素 e_μ 上においては, $\mathbb{R}^K$ の標準座標 $(x_1, \cdots, x_K)$ に関して, 高々 1 次式である. すなわち,

$$\psi_i(x_1, \cdots, x_K) = \sum_{k=1}^{K} a_{ik}^{\mu} x_k + a_{i0}^{\mu} \qquad ((x_1, \cdots, x_K) \in e_\mu) \tag{2.2}$$

が成り立つとする. a_{ik}^{μ} $(i = 1, \cdots, m;\ k = 0, 1, \cdots, K)$ は要素 e_μ に依存する定数である. ψ_i を (P_i に関する) **基底関数**という.

基底関数 ψ_i は M が $\mathbb{R}^K$ 内の n 次元コンパクト多様体のときは, $\overline{G(\Xi)} = G(\Xi)$ 上の連続関数であり, $\mathbb{R}^K$ 内の境界 $\partial\Omega$ が区分的な C^∞ である有界領域 Ω の場合には, $\overline{G(\Xi)} = G(\Xi) \cup \Gamma(\Xi)$ 上の連続関数である.

定義 2.2. $\mathbf{u} = {}^t(u_1, \cdots, u_m) \in \mathbb{R}^m$, すなわち, m 個の実数 $u_1, \cdots, u_m$ に対して, ψ_i の 1 次結合

$$\widehat{\mathbf{u}}(x) := \widehat{\mathbf{u}}(x_1, \cdots, x_K) = \sum_{i=1}^{m} u_i \psi_i(x_1, \cdots, x_K) \tag{2.3}$$

$$(x := (x_1, \cdots, x_K) \in \overline{G(\Xi)})$$

により定義される $\overline{G(\Xi)}$ 上の関数 $\widehat{\mathbf{u}}$ を $\overline{G(\Xi)}$ 上の **折れ線関数** という.

補題 2.1. (1) (M, g) が n 次元コンパクト・リーマン多様体のとき, 任意の $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ に対して, $\widehat{\mathbf{u}} \in H_1^2(M)$ である.

(2) 境界 $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ である有界領域 Ω に対して, 任意の $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ に対して, $\widehat{\mathbf{u}} \in H_1^2(\Omega)$ が成り立つ. さらに $\widehat{\mathbf{u}} \in \mathring{H}_1^2(\Omega)$ となる必要十分条件は

$$u_{\ell+1} = \cdots = u_m = 0 \tag{2.4}$$

が成り立つことである. 以下では, (2.4) を満たす $\mathbf{u}$ 全体を $\mathbb{R}^\ell = \{\mathbf{u} = {}^t(u_1, \cdots, u_\ell) \in \mathbb{R}^\ell\}$ で表すものとする.

(証明)　　(2) のみ示す. 定義より, $\widehat{\mathrm{u}} = 0$ ($\Gamma(\Xi)$ 上) が成り立つことと $\widehat{\mathrm{u}}(\mathrm{P}_j) = 0$ ($j = \ell+1, \cdots, m$) が成り立つこととは必要十分である. さらに, 定義 2.1 (1) より,

$$\widehat{\mathrm{u}}(\mathrm{P}_j) = \sum_{i=1}^{m} u_i\,\psi_i(\mathrm{P}_j) = u_j$$

となるからである.　　　//

2.3　有限要素固有値問題

以上のような状況の下で, 問題を線形代数の問題に帰着するため, 次のような行列を考える. 単体分割 Ξ を十分細かく取っておく. そこで次の定義をする.

定義 2.3. $i, j = 1, 2, \cdots, m$ に対して,

$$K_{ij}(\Xi) := \int_{G(\Xi)} g(\nabla\psi_i, \nabla\psi_j)\,v_g \tag{2.5}$$

$$M_{ij}(\Xi) := \int_{G(\Xi)} \psi_i\,\psi_j\,v_g \tag{2.6}$$

とおき, これらを (i, j) 成分に持つ 2 つの m 次対称行列を,

$$K(\Xi) := (K_{ij}(\Xi))_{i,j=1,\cdots,m},\, M(\Xi) := (M_{ij}(\Xi))_{i,j=1,\cdots,m} \tag{2.7}$$

とし, 2 つの ℓ 次対称行列を,

$$K_0(\Xi) := (K_{ij}(\Xi))_{i,j=1,\cdots,\ell},\, M_0(\Xi) := (M_{ij}(\Xi))_{i,j=1,\cdots,\ell} \tag{2.8}$$

と定義する. $K(\Xi)$, $K_0(\Xi)$ をどちらも**剛性行列**といい, $M(\Xi)$, $M_0(\Xi)$ をどちらも**質量行列**という.

そこで, 次の 3 つの固有値問題を考える. いずれも**有限要素固有値問題**という.

定義 2.4. (1) (M, g) が $\mathbb{R}^K$ 内のコンパクト・リーマン多様体のとき,

$$(\mathrm{FEM-F}) \qquad K(\Xi)\,\mathbf{u} = \lambda\, M(\Xi)\,\mathbf{u}, \qquad \mathbf{u} \in \mathbb{R}^m \tag{2.9}$$

を考える. ここで $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ は零ベクトルではない m 次列ベクトルとし, λ は定数としている.

(2) (M, g) を $\mathbb{R}^K$ 内の完備リーマン多様体とし, M 内の境界 $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ である有界領域を Ω とする. このとき,

$$(\mathrm{FEM-D}) \qquad K_0(\Xi)\,\mathbf{v} = \mu\, M_0(\Xi)\,\mathbf{v}, \qquad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^\ell \tag{2.10}$$

$$(\mathrm{FEM-N}) \qquad K(\Xi)\,\mathbf{w} = \nu\, M(\Xi)\,\mathbf{w}, \qquad \mathbf{w} \in \mathbb{R}^m \tag{2.11}$$

を考える. ここで $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^\ell$ は零ベクトルではない ℓ 次列ベクトルとし, μ は定数としている. また, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^m$ は零ベクトルではない m 次列ベクトルとし, ν は定数としている.

このとき, 定数 λ, μ, ν を有限要素固有値問題の**固有値**, $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$, $\mathbf{w}$ を**固有ベクトル**という.

このとき, 次の定理が成り立つ.

定理 2.1. (1) のとき, (FEM − F) の固有値はすべて非負の実数であり, 重複度を込めてちょうど m 個ある. それらを大きさの順に並べて,

$$(0 \leq)\, \lambda_1(\Xi) \leq \lambda_2(\Xi) \leq \cdots \leq \lambda_m(\Xi) \tag{2.12}$$

と表す. また, 対応する 1 次独立な m 個の固有ベクトルが存在する. それらを $\mathbf{u}_i(\Xi)$ $(i = 1, \cdots, m)$ と書く.

(2) のとき, (FEM − D) の固有値はすべて正の実数であり, 重複度を込めてちょうど ℓ 個ある. それらを大きさの順に並べて,

$$(0 <)\, \mu_1(\Xi) \leq \mu_2(\Xi) \leq \cdots \leq \mu_\ell(\Xi) \tag{2.13}$$

と表す．また，対応する1次独立な ℓ 個の固有ベクトルが存在する．それらを $\mathbf{v}_i(\Xi)$ $(i=1,\cdots,\ell)$ と書く．

さらに，(FEM − N) の固有値はすべて非負の実数であり，重複度を込めてちょうど m 個ある．それらを大きさの順に並べて，

$$(0\leq)\,\nu_1(\Xi)\leq\nu_2(\Xi)\leq\cdots\leq\nu_m(\Xi) \tag{2.14}$$

と表す．また，対応する1次独立な m 個の固有ベクトルが存在する．それらを $\mathbf{w}_i(\Xi)$ $(i=1,\cdots,m)$ と書く．

このとき，次の基本定理が成り立つ．

定理 2.2.（基本定理）

(I) $k=1,2,\cdots$ とする．

(I − 1) (M,g) が $\mathbb{R}^K$ 内の n 次元 C^∞ コンパクト・リーマン多様体とする．このとき，

$$\lim_{\delta(\Xi)\to 0}\lambda_k(\Xi)=\lambda_k \tag{2.15}$$

が成り立つ．

(I − 2) (M,g) を $\mathbb{R}^K$ 内の完備リーマン多様体とし，M 内の境界 $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ である有界領域 Ω 上において，

$$\begin{cases}\displaystyle\lim_{\delta(\Xi)\to 0}\mu_k(\Xi)=\mu_k\\ \displaystyle\lim_{\delta(\Xi)\to 0}\nu_k(\Xi)=\nu_k\end{cases} \tag{2.16}$$

が成り立つ．

ここで，$\delta(\Xi)\to 0$ は単体分割 Ξ を十分細かくすることを意味する．

(II) M または $\overline{\Omega}$ の単体分割の列 $\{\Xi_p\}_{p=1}^{\infty}$ で，以下が成り立つものが存在する：

$k=1,2,\cdots$ に対して，

(II − 1) (M,g) が $\mathbb{R}^K$ 内の n 次元 C^∞ コンパクト・リーマン多様体とす

る. このとき,

$$\|\widehat{\mathbf{u}_k(\Xi_p)} - u_k\|_1 \longrightarrow 0 \qquad (p \to \infty). \tag{2.17}$$

(II − 2) (M, g) を $\mathbb{R}^K$ 内の完備リーマン多様体とし, M 内の境界 $\partial\Omega$ が区分的に C^∞ である有界領域 Ω 上において,

$$\begin{cases} \|\widehat{\mathbf{v}_k(\Xi_p)} - v_k\|_1 \longrightarrow 0 & (p \to \infty) \\ \|\widehat{\mathbf{w}_k(\Xi_p)} - w_k\|_1 \longrightarrow 0 & (p \to \infty) \end{cases} \tag{2.18}$$

が成り立つ.

ここで $\|\ \|_1$ は (M, g) または Ω 上のソボレフ・ノルムを表す.

基本定理 2.2 により, コンピュータを用いて, ラプラシアン Δ の 3 つの固有値問題 (F), (D), (N) の固有値と固有関数の数値計算を実行するには, 次の手順をふまえればよい:

(I) M または Ω の単体分割分割を十分細かく取る.

(II) 剛性行列と質量行列 $K(\Xi)$, $M(\Xi)$ または $K_0(\Xi)$, $M_0(\Xi)$ を決定する.

(III) 3 つの有限要素固有値問題 (FEM − F), (FEM − D), または (FEM − N) の固有値 $\lambda_k(\Xi)$, $\mu_k(\Xi)$, $\nu_k(\Xi)$ および 固有ベクトル $\mathbf{u}_k(\Xi)$, $\mathbf{v}_k(\Xi)$, $\mathbf{w}_k(\Xi)$ を計算する.

(IV) 基底関数 ψ_i を用いて, 固有ベクトル $\mathbf{u}_k(\Xi)$, $\mathbf{v}_k(\Xi)$, $\mathbf{w}_k(\Xi)$ に対する折れ線関数 $\widehat{\mathbf{u}_k(\Xi)}$, $\widehat{\mathbf{v}_k(\Xi)}$, $\widehat{\mathbf{w}_k(\Xi)}$ を, 補間法等を用いて, 画面に表示する.

以上の定理の証明などの詳細と実際のコンピュータ・アルゴリズムについては, 小生の「ラプラシアンの幾何と有限要素法」を見て頂きたい. なお, そのアルゴリズムは, 2 次元リーマン多様体 (M, g) が $\mathbb{R}^K$ **に等長的に埋め込まれている状況の下でも有効である**ことに注意されたい.