・有限要素法（FEM: finite element method）とは？

大雑把に言えば、PDEの数値解法の一種で、

$$\begin{cases} 1.\ \text{方程式を弱形式に緩めて、微分階数を下げる。} \\ 2.\ \text{解} \cong \sum_i \underbrace{c_i}_{\text{係数}} \underbrace{\phi_i(x)}_{\text{既知の函数}} \text{として、}\{c_i\}\text{を計算する。} \end{cases}$$

重要

というモノだ。以下、説明しよう。

1. 方程式を弱形式に変形

例として KdV eq. $\overbrace{u_t + u u_x + \varepsilon^2 u_{xxx} = 0}^{\text{この「元の問題」は、後述の弱形式と比べて「強形式」とも言う。}}$ in $\Omega = [0, L]$, (1)

ただし、B.C.は周期的B.C.とする。

を用いて説明しよう。

まず、このPDEに対し適当な函数 $w(x)$ との積をとって積分すると、当然、

$$\int_0^L \left(u_t + u u_x + \varepsilon^2 u_{xxx} \right) \cdot w \, dx = 0 \qquad (2)$$

となる。

そして、3項目が部分積分できるのでそうしてみると、

$$= \int_0^L \left\{ (u_t + u u_x) \cdot w - \varepsilon^2 u_{xx} \cdot w_x \right\} dx + \varepsilon^2 \overbrace{\left[u_{xx} w \right]_0^L}^{0 \text{ by BC}} \qquad (2')$$

となる。この(1)と(2')を比べると、(1)には ∂_x^3 が登場するが(2')には ∂_x^2 までしか登場しない。

重要

しかも、さらに

$$v(x,t) := u_{xx}(x,t) \qquad (3)$$

として新しい函数を導入すると、

$$(2') = \int_0^L \left\{ (u_t + u u_x) \cdot w - \varepsilon^2 v \cdot w_x \right\} dx \qquad (4)$$

となり、(4)の中には ∂_x^1 までしか登場しなくなる。

(3)についても、同様に適当な $\xi(x)$ に対して

$$\int_0^L \overbrace{(v - u_{xx})}^{(3)\text{より}0\text{となる}} \cdot \xi \, dx = 0$$

$$\overset{\text{部分積分}}{=} \int_0^L \left(v \cdot \xi + u_x \cdot \xi_x \right) dx - \overbrace{\left[u_x \cdot \xi \right]_0^L}^{0 \text{ by B.C.}} \qquad (5)$$

という式を導出でき、そしてこの式中には ∂_x^1 までしか登場しない。

少し長くなったのでまとめると、(1)の解 u に対し、適当な w, ξ は次の2つの式(4), (5)を満たすことが分かる、というコトだ。

$$\begin{cases} 0 = \int_0^L \left\{ (u_t + u u_x) \cdot w - \varepsilon^2 v \cdot w_x \right\} dx & (4) \\ 0 = \int_0^L \left(v \cdot \xi + u_x \cdot \xi_x \right) dx & (5) \end{cases}$$

注. 重要 (4), (5)の中には ∂_x^1 しか登場しない。

この(4), (5)を(1)の弱形式と言う。

⇩ そこで発想を変えて

［(1)を解いて u を求める代わりに、
充分多数の w, ξ に対し (4), (5)を満たす u, v を求める］

というアイディアが出てくる。

注. (4)(5)には ∂_x^1 しか登場しないため、∂_x^3 が登場する(1)よりも解き易いというもくろみがある。

2. 解 $\simeq \sum_i c_i\phi_i(x)$ として…

(4)(5)を解くために、解に仮定を加えよう。色々バリエーションは考え得るが
ここでは u, v, w, ξ 全ての基底函数を共通と仮定して

$$\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{N} \tag{6}$$

とするコトにする(具体形は後述)
そして、

$$\begin{cases} u(x,t) \simeq \displaystyle\sum_{i=1}^{N} U^i(t)\,\phi_i(x), \\ v(x,t) \simeq \displaystyle\sum_{i=1}^{N} V^i(t)\,\phi_i(x), \\ w(x) \simeq \displaystyle\sum_{i=1}^{N} W^i\,\phi_i(x), & \text{ただし } W^i \text{ は任意.} \\ \xi(x) \simeq \displaystyle\sum_{i=1}^{N} X^i\,\phi_i(x), & \text{ただし } X^i \text{ は任意.} \end{cases} \tag{7}$$

wとξを充分多くとる、ということをこれで表わす。

と仮定する。

以降、面倒なので Σ を省略して $\sum_{i=1}^{N} U^i\phi_i$ の代わりに $U^i\phi_i$ と書く。(Einstein notation. 上下の添字が同じなら和をとる。)

さて、これらの仮定を(4),(5)に代入しよう。すると

$$\begin{cases} 0 = \displaystyle\int_0^L \left\{ \left(U^j_t\phi_j + U^j\phi_j \cdot U^k\phi'_k\right) W^i\phi_i - \varepsilon^2 V^j\phi_j \cdot W^i\phi'_i \right\} dx, & (8) \\ 0 = \displaystyle\int_0^L \left(V^j\phi_j\, X^i\phi_i + U^j\phi'_j \cdot X^i\phi'_i \right) dx. & (9) \end{cases}$$

さらに、$(a,b) := \int_0^L ab\,dx$ として表記を楽にすると、

$$(8) \Leftrightarrow 0 = \left\{ (\phi_i,\phi_j)U^j_t + (\phi_i\phi'_k,\phi_j)U^kU^j - \varepsilon^2(\phi'_i,\phi_j)V^j \right\} W^i \tag{10}$$

$$(9) \Leftrightarrow 0 = \left\{ (\phi_i,\phi_j)V^j + (\phi'_i,\phi'_j)U^j \right\} X^i \tag{11}$$

しかし、W^j, X^j は任意の為、(10)(11)が成り立つためには次の2式が成り立っていないといけない。

$$\begin{cases} 0 = (\phi_i,\phi_j)U^j_t + (\phi_i\phi'_k,\phi_j)U^kU^j - \varepsilon^2(\phi'_i,\phi_j)V^j \quad \text{for } i = 1, 2, \cdots, N. & (12) \\ 0 = (\phi_i,\phi_j)V^j + (\phi'_i,\phi'_j)U^j \quad \text{for } i = 1, 2, \cdots, N & (13) \end{cases}$$

分かり易くするために、

$$\left(\begin{array}{lll} \text{行列 } \Phi: & (i,j)\text{成分が} & (\phi_i,\phi_j) \\ \text{行列 } \varphi(\mathbb{U}): & \text{〃} & (\phi_i\phi'_k,\phi_j)U^k \\ \text{行列 } D_1: & \text{〃} & (\phi'_i,\phi_j) \\ \text{行列 } D_2: & \text{〃} & (\phi'_i,\phi'_j) \\ \text{ベクトル } \mathbb{U}: & i\text{成分が} & U^i(t) \\ \text{ベクトル } \mathbb{V}: & \text{〃} & V^i(t) \end{array}\right) \tag{14}$$

を導入すると、(12)(13)は次の2式になる。

$$\begin{cases} \Phi \dfrac{d}{dt}\mathbb{U} + \varphi(\mathbb{U})\mathbb{U} - \varepsilon^2 D_1\mathbb{V} = \mathbb{O}, & (15a) \\ \Phi\mathbb{V} + D_2\mathbb{U} = \mathbb{O} & (15b) \end{cases}$$

A^{-1}と書いても良いが、A^{-1}は実際は不要なので。

よって、$A\mathbb{x} = \mathbb{b}$ を解いて $\mathbb{x}$ を求めることを $A\backslash\mathbb{b}$ と書いて、

$\mathbb{p}(\mathbb{u}) = \varphi(\mathbb{u})\cdot\mathbb{u}$ のコト。

$$(15) \Leftrightarrow \frac{d}{dt}\mathbb{U} = -\Phi\backslash\left[\mathbb{p}(\mathbb{u}) + \widetilde{D}_1\left\{\Phi\backslash(D_2\mathbb{U})\right\}\right] \tag{16}$$

というODEに帰着する。あとはRunge-Kuttaでもなんでもお好みで。

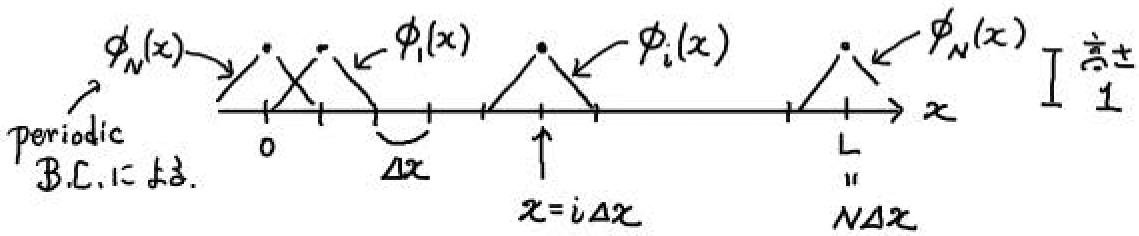
$\widetilde{D}_1 := \varepsilon^2 D_1$ のコト。

$\{\phi_i(x)\}_{i=1}^N$ の具体形

$\phi_i(x)$ の具体形であるが、(ϕ_i, ϕ_j) がなるべく疎(= スカスカ)であると扱いが楽だし計算も速い。そこで、たとえば次のようにとると良い。
(注: 周期的B.C.も考慮している)

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \left(\dfrac{x - i\Delta x}{\Delta x}\right) + 1 & : (i-1)\Delta x \le x \le i\Delta x, \\ -\left(\quad " \quad \right) + 1 & : i\Delta x \le x \le (i+1)\Delta x, \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases} \quad (17a)$$

$(i = 1, 2, \cdots, N-1)$



ただし、$L = N\Delta x$, 即ち, $\Delta x = L/N$ としている。

上の図で分かると思うが、periodic B.C. により、$\phi_N(x)$ のみ特殊で、

$$\phi_N(x) := \begin{cases} \left(\dfrac{x - L}{\Delta x}\right) + 1 & : (N-1)\Delta x \le x \le N\Delta x = L, \\ -\dfrac{x}{\Delta x} + 1 & : 0 \le x \le \Delta x \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases} \quad (17b)$$

となる。

注: ここでは話を簡単にする為に Δx を一定にしているが、FEMでは Δx が一定である必要は全く無い。
つまり、空間の離散化の方法の自由度が高いのだ。
このことは空間の次元数が上がると大変重要になってくる。

この具体形の下での行列etc.は、

$$(\phi_i, \phi_j) = \begin{cases} 2\displaystyle\int_0^{\Delta x} \left(\frac{x}{\Delta x}\right)^2 dx = (2/3)\Delta x, & : i = j \\ \displaystyle\int_0^{\Delta x} \frac{x}{\Delta x}\left(1 - \frac{x}{\Delta x}\right) dx = \frac{1}{6}\Delta x, & : |i-j| = 1 \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases} \quad (18)$$

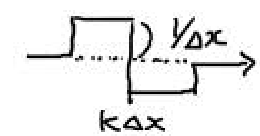
ただし periodic. つまり $N = 0$.

なので

$$\Phi = \Delta x \begin{pmatrix} 2/3 & 1/6 & 0 & \cdots & 0 & 1/6 \\ 1/6 & 2/3 & 1/6 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & & & 0 \\ 0 & \cdots & & 1/6 & 2/3 & 1/6 \\ 1/6 & 0 & \cdots & 0 & 1/6 & 2/3 \end{pmatrix} \quad (19)$$

← 周期的三重対角行列, 対称.

他も似たようなもので、



が $\phi'_k(x)$ であるので、

$$(\phi_i \phi'_k, \phi_j) U^k = (\phi_i \phi_j, \phi'_k U^k)$$

$$= \begin{cases} \dfrac{\cancel{\Delta x}}{3} \cdot \dfrac{U^{i+1} - U^{i-1}}{\cancel{\Delta x}} = \dfrac{U^{i+1} - U^{i-1}}{3} & : i = j \\ \dfrac{\cancel{\Delta x}}{6} \cdot \dfrac{U^{\max(i,j)} - U^{\min(i,j)}}{\cancel{\Delta x}} = \dfrac{U^{i \vee j} - U^{i \wedge j}}{6} & : |i-j| = 1 \\ 0 \end{cases} \quad (20)$$

periodicに.

となるので、

$$\varphi(U) = \begin{pmatrix} \frac{U^2 - U^N}{3} & \frac{U^2 - U^1}{6} & 0 & \cdots & 0 & \frac{U^1 - U^N}{6} \\ \frac{U^2 - U^1}{6} & \frac{U^3 - U^1}{3} & \frac{U^3 - U^2}{6} & & \ddots & 0 \\ 0 & & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & & \\ 0 & & & & & \frac{U^N - U^{N-1}}{6} \\ \frac{U^1 - U^N}{6} & 0 & \cdots & 0 & \frac{U^N - U^{N-1}}{6} & \frac{U^1 - U^{N-1}}{3} \end{pmatrix} \quad (21)$$

より,

$$\mathbb{P}(U) = \varphi(U) U = \left\{ \frac{1}{6} (U^{i+1} + U^i + U^{i-1})(U^{i+1} - U^{i-1}) \right\}_{i=1}^N \quad (21')$$

添字は cyclic.

$$
(\phi_i', \phi_j) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}\cancel{\Delta x} \cdot \dfrac{1}{\cancel{\Delta x}} = \dfrac{1}{2} & : i = j+1, \\ -\dfrac{1}{2} & : i = j-1, \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases} \tag{22}
$$

より、

$$
D_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 0 & & \boxed{1/2} \\ 1/2 & 0 & -1/2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & -1/2 \\ \boxed{-1/2} & & & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \tag{23}
$$

← 歪対称.

また、

$$
(\phi_i', \phi_j') = \begin{cases} 2\left(\dfrac{1}{\Delta x}\right)^2 \cdot \Delta x = \dfrac{2}{\Delta x} & : i = j, \\ -\left(\dfrac{1}{\Delta x}\right)^2 \Delta x = -\dfrac{1}{\Delta x} & : |i-j| = 1, \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases} \tag{24}
$$

より、

$$
D_2 = \left(\frac{1}{\Delta x}\right) \cdot \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \boxed{-1} \\ -1 & 2 & -1 & 0 \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 \cdots 0 & -1 & 2 & & -1 \\ \boxed{-1} & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \tag{25}
$$

← 対称、
周期的三重対角.

これで(16)が具体的になったので、後は計算するだけである。