チュートリアル：計算領域での拡散項の弱形式の FreeFEM での記述方法と非線形問題の解法

Tutorial : FreeFEM description of a weak formulation for the diffusion term in computing domain and solution of a nonlinear problem

鈴木 厚 (Atsushi Suzuki)
理化学研究所 計算科学研究センター, 大阪大学 D3 センター
e-mail : Atsushi.Suzuki.aj@a.riken.jp

1 概要

本チュートリアルでは有限要素法による数値計算において本質的な役割を果す疎行列の生成方法について, 計算領域の有限要素細分での基底関数の積分により拡散項からなる双一次形式がどのように離散化されるか FreeFEM 言語での記述方法とあわせて解説をおこなう.

2 Poisson 方程式の弱形式

2 次元または 3 次元の領域 Ω の境界 $\partial\Omega$ は Dirichlet データ g と Neumann データ h を与える部分に分れているものとする $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. 外力を f として次の Poisson 方程式を考える.

$$-\nabla\cdot\nabla u = f \text{ in } \Omega, \quad u = g \ \text{ on } \Gamma_D, \quad \nabla u\cdot n = h \ \text{ on } \Gamma_N \tag{1}$$

関数とその一階偏導関数が Ω で 2 乗可積分となる Sobolev 空間 $H^1(\Omega)$ の部分集合で Γ_D でのトレースが g となるものを $V(g) = \{u \in H^1(\Omega)\,;\, u = g \text{ on } \Gamma_D\}$ とおく. Poisson 方程式 (1) の両辺にテスト関数 $v \in V(0)$ を掛けて領域 Ω で積分すると $\int_\Omega -\nabla\cdot\nabla u\, v = \int_\Omega f\, v$ となるが, 部分積分により $\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v - \int_{\partial\Omega}\nabla u\cdot n\, v = \int_\Omega f\, v$ が得られる. Γ_N で Neumann データ $\nabla u\cdot n = h$ を課すことに注意すると

$$\int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v = \int_\Omega f\, v + \int_{\Gamma_N} h\, v \tag{2}$$

となる. $H^1(\Omega)$ で双一次形式 $a(u,v) = \int_\Omega \nabla u\cdot\nabla v$, 汎関数 $F(v) = \int_\Omega f\, v + \int_{\Gamma_N} h\, v$ を定義すると混合型境界条件の Poisson 方程式 (1) の弱形式はつぎの様に表される.

$$\text{find } u \in V(g) \quad a(u,v) = F(v) \quad \forall v \in V(0) \tag{3}$$

3 P1 要素による有限要素近似

領域 Ω を多角形で近似したものを Ω_h とし, その内部の単体による要素分割を $\mathcal{T}_h$ とする. 有限要素節点, すなわち $\mathcal{T}_h$ の頂点の上に値を取り, 単体 K(2 次元の場合は三角形, 3 次元の場合は四面体) の内部で一次多項式となる, 区分一次多項式関数のつくる空間を $S_h \subset H^1(\Omega)$ とする. S_h の次元数を N, 添字集合を $\Lambda = \{1,\cdots,N\}$ とする. 区分一次多項式の基底関数 φ_j はその座標を x_i とする節点で $\varphi_j(x_i) = \delta_{i,j}$ を満すものとする. 全自由度で $\mathrm{span}[\{\varphi_i\}_{i\in\Lambda}] = S_h$ となるが, 境界での自由度を考える. Γ_D にある節点の添字集合を Γ_D, Γ_N にある節点の添字集合を Λ_N とする. 有限要素解を有限要素基底関数の線形結合 $u_h(x) = \sum_{i\in\Lambda} u_i\varphi_i(x)$ と表す. テスト関数 $v \in V(0)$ は Γ_D で 0 をとることより Λ_D での自由度を除外して, (3) は

$$a(\textstyle\sum_{j\in\Lambda} u_j\varphi_j, \varphi_i) = F(\varphi_i) \quad i \in \Lambda\setminus\Lambda_D, \quad u_j = g_j \quad j \in \Lambda_D \tag{4}$$

となり, 連立一次方程式が得られる. 係数行列

$$[A]_{ij} = a(\varphi_j, \varphi_i) = \int_\Omega \nabla\varphi_j \cdot \nabla\varphi_i = \sum_K \int_K \nabla\varphi_j \cdot \nabla\varphi_i$$

は基底関数 φ_i のサポートがコンパクトであることより疎行列となる. このため, Krylov 部分空間法による解法が効率的であり, 対称行列の場合は共役勾配 (CG) 法, 非対称行列の場合は一般化最小残差 (GMRES) 法が用いられる.

4 FreeFEM スクリプトによる記述

Neumann データは $\int_{\Gamma_N} h\varphi_i$ $(i \in \Lambda \setminus \Lambda_D)$ を評価するが, FreeFEM では Dirichlet データは浮動小数点の計算機イプシロン ε の $1/\varepsilon^2$ 程度の非常に大きな数 τ (図 1 での tgv) を準備して $\sum_{j\neq i} u_j a(\varphi_j, \varphi_i) + \tau u_i = \tau g_i \quad (i \in \Lambda_D)$ で係数行列の成分を置き換えるペナルティー法を用いる.

FreeFEM は 3 次元問題では 連立一次方程式 (4) を弱形式の数学的な表記に近い専用のスクリプト言語で記述することに特化している. 複雑な形状の有限要素分割の生成は Gmsh などの四面体要素分割ソフトウェアが行ない, 線形ソルバーの解法は並列計算環境での Krylov 部分空間法とのそための前処理のライブラリーの PETSc が, 計算結果の可視化は ParaView が担当する.

```
load "gmsh"; load "iovtk";
mesh3 Th = gmshload3("domain.msh");
func f = sin(pi * x) * y * cos(z);
func g = 2.0; func h = 0.0;
fespace Vh(Th, P1);
Vh u;
varf a(u, v)=int3d(Th)(dx(u)*dx(v)
 + dy(u)*dy(v)+dz(u)*dz(v))+on(1,u=g);
varf rhs(u, v)=int3d(Th)(f * v)
 + int2d(Th, 2)(h * v) +on(1,u=g);
matrix A=a(Vh, Vh, tgv=1.e+30);
real[int] b=rhs(0, Vh, tgv=1.0e+30);
u[] = A^-1*b;
int[int] fforder=[1];
savevtk("sol.vtu", Th, u, order=fforder);
```

図 1. Poisson 方程式の P1 要素による有限要素解を求める FreeFEM スクリプト

5 非線形問題

非線形楕円型方程式の例に Liouville–Bratu–Gelfand 方程式を考える. $\lambda \geq 0$ として,

$$\nabla \cdot \nabla u + \lambda e^u = 0 \ \text{ in } \Omega, \quad u = g \ \text{ on } \Gamma = \partial\Omega$$

を満す u を求める. $\nabla \cdot \nabla$ は負定値の作用素であるため, 解が存在するための λ の範囲が存在する. 解を探す部分集合を $V(g) = \{u \in H^1(\Omega)\,;\, u = g \text{ on } \partial\Omega\}$ とすると弱形式は

$$\text{find } u \in V(g) \quad F(u,v) = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v - \lambda \int_\Omega e^u v = 0 \quad \forall v \in V(0)$$

となる. $F(u,v)$ の変分は $\delta u \in V(0)$ として

$$F(u+\delta u, v) - F(u,v) \simeq \int_\Omega \nabla\delta u \cdot \nabla v - \lambda \int_\Omega e^u \delta u\, v \quad \forall v \in V(0)$$

となるため, Newton 法による非線形反復は $u^0 \in V(g)$ を初期データとして

$$\text{find } \ \delta u \in V(0) \quad \int_\Omega \nabla\delta u \cdot \nabla v - \lambda \int_\Omega e^{u^n} \delta u\, v = \int_\Omega \nabla u^n \cdot \nabla v - \lambda \int_\Omega e^{u^n} u^n\, v \quad \forall v \in V(0)$$

を用いて, $u^{n+1} = u^n - \delta u$ と更新することで得られる.

参考文献

[1] FreeFEM Web Page, https://freefem.org/