

数値解析の基礎知識

Fundamentals of Numerical Analysis

田 村 武 (たむら たけし)

京都大学助教授 工学部 交通土木工学科

1. はじめに

数値解析は、

- (I) 行列計算に関するもの
- (II) 数値積分に関するもの
- (III) 微分方程式の解法に関するもの

などに大別することができる。(I)は連立一次方程式の解法や固有値の計算、(II)は定積分の近似法であるが、これらは数値解析よりも数値計算というべきものであって、主としてこれから述べる(III)の基礎となる技術である。ここでは(III)を中心に説明するが、(I)ではガウスの消去法が、また、(II)ではルジャンドル-ガウスの積分法がとくに有名である。

議論を進めるまえに、ここで用いる例題を設定して置く。簡単のため一次元の2階微分方程式：

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + f(x) = 0 \quad (1)$$

をとり上げる。ここで $f(x)$ は与えられた関数である。図-1に示すように、領域の長さは l とし、両端での境界条件は

$$u(0) = 0, \quad u(l) = 0 \quad (2)$$

としておく。これは、両端固定された一様張力のゴムひもに、 $f(x)$ という荷重が作用したときのゴムのたわみ曲線を求める問題ということもできる。

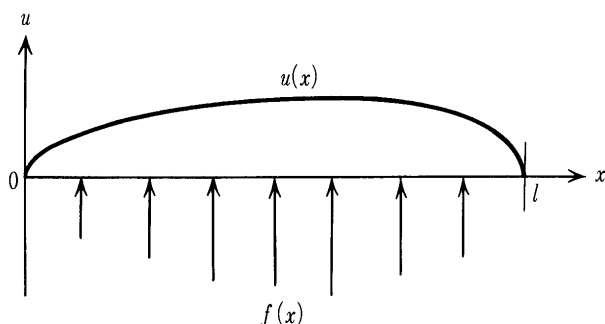


図-1 例題とその境界条件

2. 数値解と数値解法

近似解の「近似」とはどのような意味なのであろうか。じつは、それにはいろいろな答え方がある。さらにいえば、厳密解ですらその定義の仕方によっては、解が存在しなかったり、あるいは存在しても一つでないこともある。例えば、 f が不連続関数であったり、そのほかの特異な関数である場合には、そのような問題が生じる。そ

のような場合、逆に、「どのように解を定義すれば、解がただ一つ存在するか」という問いかけもあり得る。まして数値解や近似解というのは、いろいろな解の定義があっても不思議ではなく、また、それにより求められる解が異なることも当然である。

ところで解析解（厳密解）には種々の属性がある。例えば、

- a. 境界条件(2)を満足する、
- b. 2階微分が可能である、
- c. 支配方程式(1)をいたるところ満足する、

などの性質を有している。これらの一つ一つは、解析解であるための必要条件である。つまり、解析解であるならばこれらすべてを満足するはずである。近似解というのは、これらのうち、いくつかを弱くした条件を満足するものである。その弱くさせる方法はむろん一意的ではない。いうまでもなく、十分弱くすれば解は容易に求められるが、それにどのような意味があるかは個人の価値判断による。より強い条件のもとでは解（うへの条件をなただけ忠実に満足する解）を求めにくい、それだけ多くの価値を有している。

3. 主な数値解析法

3.1 差分法 (Finite Difference Method=FDM)

差分法の基本は、図-2のように接線（微分商）を幅 h の区間において割線の勾配で置き換えることである。つまり、関数 u の1階微分が

$$\frac{du(x)}{dx} \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \quad (3)$$

のように近似される。図-2を参照しながら、この考え方を続いて2回用いれば、

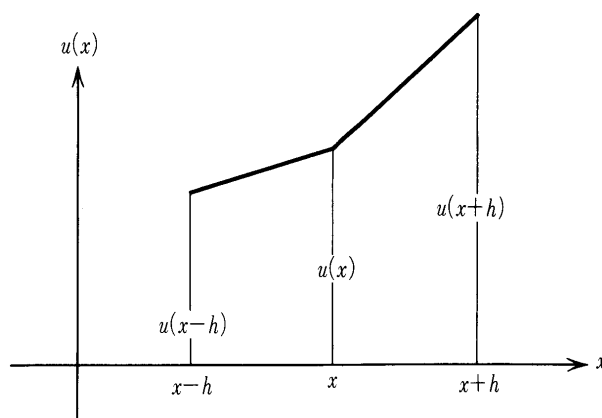


図-2 差分による近似

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} \approx \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} \dots\dots\dots (4)$$

を得る。上記の例題において区間を n 個の部分に等分割し、両端を除く節点で微分方程式を差分で近似すれば、各節点の値を未知数とする連立方程式が得られる。差分法は、与えられた微分方程式に対する直接的な近似式を導く。

ここで求められた解は、節点において値を定義されるが、それ以外の点については何も情報を与えない。したがって、微分可能性や微分方程式の満足度についてはわからない。差分法は歴史が古く、流体力学を中心に、解析領域が格子状に分割できる場合にしばしば用いられる数値解析手法である。

3.2 重み付き残差法 (Weighted Residual Method = WRM)

解 $u(x)$ を以下のように有限個の異なる関数族 $g_i(x)$ (以下、基底関数とよぶ) の線形和で近似する。

$$u(x) \approx \sum_{i=1}^N a_i g_i(x) \dots\dots\dots (5)$$

ここに、基底関数 $g_i(x)$ ($i=1, 2, \dots, N$) は、2 階微分可能であって、かつ、解 $u(x)$ と同じ斉次境界条件：

$$g_i(0) = g_i(l) = 0 \dots\dots\dots (6)$$

を満たす N 個の既知の関数である。個々の $g_i(x)$ が (斉次の) 境界条件を満足することから、いかなる未知係数 a_i に対しても、近似関数 $u(x)$ はやはり斉次境界条件を満たす。この $g_i(x)$ の選び方により解の近似の度合が異なるかもしれないが、基本的には自由に選ぶことができる。

さて $u(x)$ が解であると仮定すると、このとき任意の関数 $v(x)$ に対して、

$$\int_0^l \left\{ \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + f(x) \right\} v(x) dx = 0 \dots\dots\dots (7)$$

すなわち、

$$\int_0^l \left\{ \sum_{i=1}^N a_i \frac{d^2 g_i(x)}{dx^2} + f(x) \right\} v(x) dx = 0 \dots\dots\dots (8)$$

が成立しなければならない。すなわち、解ならば式(1)を満たすことから、当然、上式の積分値は 0 でなければならない。つまり、この式は $u(x)$ が解であるための一つの必要条件である。したがって、なるだけ多くの $v(x)$ について上式を満足すれば、より精度のいい近似解といえるし、わずかの数の $v(x)$ についてのみしか成立しないのであれば精度が悪いといえよう。このような意味で関数 $v(x)$ のことを試験関数とよぶことがある。

さて近似解 $u(x)$ を決定するには、 N 個の未知係数 a_i を決定すればよいのであるから、いろいろな $v(x)$ を N 個 ($v_1(x), v_2(x), \dots, v_N(x)$) 選び、式(8)に代入して N 個の方程式を作成すれば

$$\begin{pmatrix} \int v_1 g_1'' dx & \dots & \int v_1 g_N'' dx \\ \int v_2 g_1'' dx & \dots & \int v_2 g_N'' dx \\ \dots & \dots & \dots \\ \int v_N g_1'' dx & \dots & \int v_N g_N'' dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\int v_1 f dv \\ -\int v_2 f dv \\ \dots \\ -\int v_N f dv \end{pmatrix} \dots\dots\dots (9)$$

のように、未知係数 a_i を決定する連立一次方程式が得られる。ここでは、 $g_i(x)$ として 2 階微分可能な関数を仮定しているから、近似解は境界条件のほかに、微分可能性も満たしている。しかし、支配方程式を厳密には満足していない。以下において、二つの特別な重み付き残差法を紹介する。

○ガラーキン法 (Galerkin Method)

重み付き残差法の基本式(7)あるいは(8)において $v_i(x) = g_i(x)$ とする方法をガラーキン法という。つまり、解 $u(x)$ を近似するのに用いた関数 $g_i(x)$ そのものを試験関数とするような重み付き残差法である。式(9)から明らかなように、解くべき連立方程式は以下のようである。

$$\begin{pmatrix} \int g_1 g_1'' dx & \dots & \int g_1 g_N'' dx \\ \int g_2 g_1'' dx & \dots & \int g_2 g_N'' dx \\ \dots & \dots & \dots \\ \int g_N g_1'' dx & \dots & \int g_N g_N'' dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\int g_1 f dv \\ -\int g_2 f dv \\ \dots \\ -\int g_N f dv \end{pmatrix} \dots\dots\dots (10)$$

○弱形式に基づくガラーキン法

重み付き残差法の基本式(7)を部分積分すれば、

$$\left[\frac{du}{dx} v(x) \right]_0^l - \int_0^l \left(\frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} - f(x) v(x) \right) dx = 0 \dots\dots\dots (11)$$

を得る。式(7)を要求することと、式(11)を要求することと、どのような違いがあるだろうか。一見、式(11)は式(7)と同じ意味をもつように思われるが、一つの大きな違いがある。すなわち、式(7)では関数 $u(x)$ に対し、2 階までの微分可能性が要求されているが、上式では 1 階微分の可能性だけで十分である。その意味で弱い要求になっている。またその分、関数 $v(x)$ のほうは 1 階微分できるものに限られる。つまり、解の近似関数 $u(x)$ の範囲が広がったうえ、さらに試験関数の範囲が狭くなったのだから近似解の定義はずいぶん弱くなったといえる。繰り返すが、式(11)の要求は、式(7)の要求よりも弱いのである。むしろ、もとの微分方程式(1)と比べれば、はるかに弱い式となっている。このような意味で、式(11)を式(1)の弱形式という。また、仮想仕事の式²⁾ともいわれている。近似解 $u(x)$ の範囲はずいぶん広くなり、解が求めやすくなったといえる。逆にいえば、こ

うして求められた解は、本来、解が満たすべき2階の可能性すら有しないので、解といえども「弱い解」にすぎない。

さて、この弱形式の試験関数 $v(x)$ に、やはり $u(x)$ を近似するのに用いた $g_i(x)$ を代入することもできる（これを単にガラーキン法という場合もある）。いまの問題の境界条件から式(11)の第1項は0となるので、

$$\sum_{i=1}^N a_i \int_0^l \frac{dg_i}{dx} \frac{dg_i}{dx} dx = \int_0^l g_i f dx \quad (j=1, 2, \dots, N) \quad (12)$$

なる形の代数方程式を得る。あるいは

$$\begin{pmatrix} \int g_1' g_1' dx & \cdots & \int g_1' g_N' dx \\ \int g_2' g_1' dx & \cdots & \int g_2' g_N' dx \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \int g_N' g_1' dx & \cdots & \int g_N' g_N' dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int g_1 f dx \\ \int g_2 f dx \\ \vdots \\ \int g_N f dx \end{pmatrix} \quad (13)$$

を得る。左辺の係数行列を

$$K = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1N} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{N1} & K_{N2} & \cdots & K_{NN} \end{pmatrix} \quad (14)$$

とすれば、

$$K_{ij} = \int_0^l \frac{dg_i}{dx} \frac{dg_j}{dx} dx \quad (15)$$

であり、あきらかに係数行列 K は対称である。

3.3 有限要素法 (Finite Element Method=FEM)

有限要素法は、重み付き残差法の一つに分類されるが、より詳しく定義すると以下のようにまとめることができる。

- (弱形式に基づく) ガラーキン法である。
- 便宜上、領域を要素という部分領域に分割する。
- 要素の境界節点ごとに $g_i(x)$ を図-3のように選ぶ。

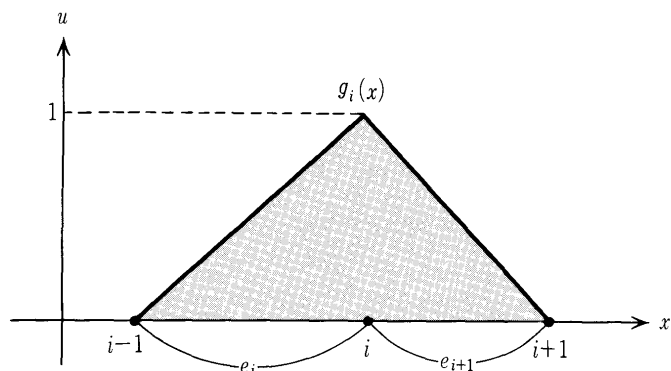


図-3 有限要素法の基底関数

ここで有限要素法で用いる関数 $g_i(x)$ について説明しておく。重み付き残差法において述べたように、本来、

$g_i(x)$ の選び方は境界条件を満たすこと、および微分ができること以外は自由であった。おそらく、領域いっばいに分布する関数の集合を選ぶことが一般的であろう。ところが、有限要素法における関数 $g_i(x)$ は、きわめて特殊なものを選ぶ。すなわち図-4に示すように、全領域を分割して作られた部分領域（要素とよぶ）の境界点（これを節点という）の一つ一つに特定の関数 $g_i(x)$ が結び付けられている。つまり、節点 i に対応して定義される関数 $g_i(x)$ は、節点 i において単位の大きさをとり、隣接の節点で0になり、そのほかにおいては0となるような折れ線として表される。したがって、大半の点において関数値は0である。このように有限要素法において用いられる $g_i(x)$ をとくに形状関数とよぶ。このような形状関数を用いることにより、有限要素法の係数行列は数値計算上、便利な特徴をもつことになる。これについて簡単に説明する。

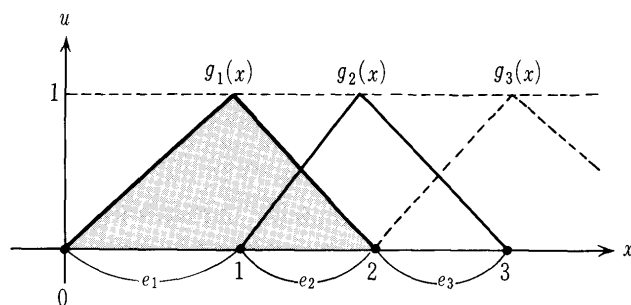


図-4 基底関数と全体剛性行列

上述のような形状関数 $g_i(x)$ を用いた場合、どのようにして式(14)の係数行列が計算されるか図-4を参照しながら考えてみよう（なお、有限要素法において式(14)の係数行列を全体剛性行列という）。例えば、 K_{11} の場合、

$$K_{11} = \int_0^l \frac{dg_1}{dx} \frac{dg_1}{dx} dx \quad (16)$$

であるが、積分範囲は要素 e_1 と要素 e_2 のみである。したがって、

$$K_{11} = \int_{e_1} \frac{dg_1}{dx} \frac{dg_1}{dx} dx + \int_{e_2} \frac{dg_1}{dx} \frac{dg_1}{dx} dx \quad (17)$$

同様に

$$K_{12} = \int_{e_2} \frac{dg_1}{dx} \frac{dg_2}{dx} dx \quad (18)$$

$$K_{21} = \int_{e_2} \frac{dg_2}{dx} \frac{dg_1}{dx} dx = (K_{12}) \quad (19)$$

$$K_{22} = \int_{e_2} \frac{dg_2}{dx} \frac{dg_2}{dx} dx + \int_{e_3} \frac{dg_2}{dx} \frac{dg_2}{dx} dx \quad (20)$$

である。そこで要素 e_i について要素剛性行列 K^{e_i} を以下のように定義する。

$$K^{e_i} = \begin{pmatrix} \int_{e_i} g_{i-1}' g_{i-1}' dx & \int_{e_i} g_{i-1}' g_i' dx \\ \int_{e_i} g_i' g_{i-1}' dx & \int_{e_i} g_i' g_i' dx \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{11}^{e_i} & K_{12}^{e_i} \\ K_{21}^{e_i} & K_{22}^{e_i} \end{pmatrix} \quad (21)$$

この要素剛性行列を用いて全体剛性行列を表現すると、

$$K = \begin{pmatrix} K_{22}^{e1} + K_{11}^{e2} & K_{12}^{e2} & 0 & 0 \\ K_{21}^{e2} & K_{22}^{e2} + K_{11}^{e3} & K_{12}^{e3} & 0 \\ 0 & K_{21}^{e3} & K_{22}^{e3} + K_{11}^{e4} & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \dots\dots (22)$$

のように書ける。すなわち、それぞれの要素ごとの剛性行列（いまの一次元問題の場合、 2×2 の行列）を順次計算しながら、それらの成分を全体剛性行列のなかに埋め込んでいくことができる。これは、実際に全体剛性行列を計算するときに大変役立つ方法である。つまり、要素剛性行列の計算プログラムをいったん作ってしまえば、境界条件を参考にしながら、全体剛性行列を計算することができる。しかも、各要素の大きさは必ずしも同じである必要がないにもかかわらず、要素剛性行列の計算手法はほとんど同じである。しかもその結果、求められる全体剛性行列は対角成分付近を除いて0である。このようなことが言える一つの理由は、先に述べた形状関数を用いていることである。

4. おわりに

差分法と重み付き残差法に分け、これらの手法の概要について述べるとともに、数値解析のなかで最も重要と思われる有限要素法の位置づけを説明した。一言で有限要素法をいえば、「図-4のような基底関数を用いながら、支配方程式の弱形式をガラーキン法で解く方法」といえる。したがって、本来かなり「数学的」な部分を有しているが、実際はきわめて実用的である。有限要素法は、理論よりも計算テクニックが先行しているようにも見える。事実、多少あいまいなテクニックであっても、

それなりに結果を出してくれるのが有限要素法である。したがって、理論は一次元モデルぐらいで理解しておけば十分であり、実際にプログラムを作ることがもっと重要である。

なお、ここで述べた数値解法以外に、境界要素法や個別要素法などの数値解法がかなり用いられている。ここで説明をする余裕はないが、数値解法にはそれぞれの長所、短所があるので、これらを理解しながら賢明な選択をしなければならない。

- 蛇足1.** 有限要素法の導入に「エネルギー」を用いるのは、初心者にとって有害である。誤差評価などには有効であるが、こんな用語なしに理解すべきである。
- 蛇足2.** 「差分法が数学的であることに対し、有限要素法は物理的な方法である」という説明があるが、これは正確ではない。有限要素法は差分法以上に数学的である。
- 蛇足3.** 化学試験では種々の試薬を用いて、その物質の中身を調査する。また、深い地球内部の構造を知りたいとき、波動や電流を用いる。そのような意味で釣合い式に対し用いるのが、試験関数である。だから式(7)や(11)は「式(1)の中身のレントゲン写真」のようなものである。

参 考 文 献

- 1) 土質工学会関西支部：地盤工学における有限要素法入門，1993.
- 2) 田村 武：線形代数，共立出版，1994.

(原稿受理 1995.4.3)