学術俯瞰講義『図形から拡がる数理科学』

第 9 回：シミュレーションと多角形・多面体 ミニッツレポートへの回答

齊藤 宣一
数理科学研究科
http://www.infsup.jp/saito/

2016 年 6 月 27 日

この文書では，6 月 16 日の講義の後で皆さんが提出してくれたミニッツレポートに書かれていた質問に，可能な範囲で答えます．ただし，講義では専門的な言葉や記号をできるだけ使わないように努めましたが，この文書の中では，遠慮なく使わせて頂きます．この文書の最新版は，

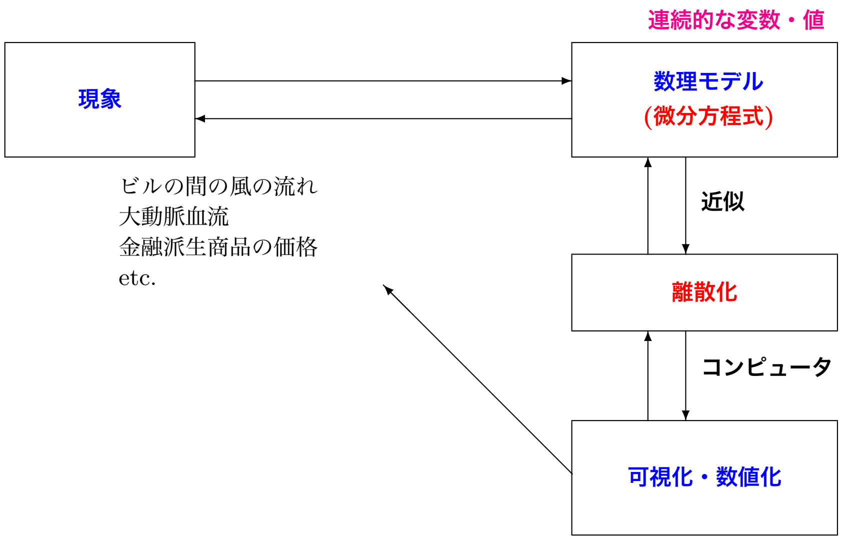
http://www.infsup.jp/saito/materials/160616ans.pdf

にあります．

現象の数理モデルが正しいかどうかは実際に計算して間違いを見つけるほかに何かあるのでしょうか？

“だいたい同じ” を再現することを目指すとのことでしたが，真解との誤差，ひいてはシミュレーションの精度はどのように考えられているのでしょうか．

→ 講義で下記の図式を紹介しました．



数理モデル（方程式）の真の解と数値化された近似値との間の誤差 (discretization error) については膨大な研究があります．

- H. Fujita, N. Saito and T. Suzuki: Operator Theory and Numerical Methods, Elsevier, 2001

その他に，実数をコンピュータ上で表現できる数（浮動小数点数）で近似する際に生じる誤差 (rounding error) やデータの測定誤差などいろいろと考慮しなければならないことがあります．大雑把に言うと，上図の縦の系列（数理

モデル—可視化・数値化）に関係する問題は，数学的な考察でその正当性を検証すること (verification) ができます．一方で，現象と数理モデルの関係は，様々な研究の歴史を通じてその妥当性を確保すること (validation) になります．この 2 つの立場を，科学史からの視点も織り交ぜて論じた論文を 2 つ紹介します．

- J. T. Oden, I. Babuška, F. Nobile, Y. Feng and R. Tempone: *Theory and methodology for estimation and control of errors due to modeling, approximation, and uncertainty*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. **194** (2005), no. 2-5, 195–204.
- I. Babuška and J. T. Oden: *Verification and validation in computational engineering and science: basic concepts*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. **193** (2004), no. 36-38, 4057–4066.

曲面の三角形分割が収束性を持つことと，曲面の面積を計算できることは同値であるといえる可能性はあるのでしょうか？

曲面の面積は極限で定義されるのでしょうか．実際に，実在するのでしょうか．

→ 鋭い質問です．曲面には “滑らかさ” という概念が定義されます．曲面が “ある程度滑らか”（具体的には，C^1 級，あるいは，Lipschitz 連続）であれば，三角形分割の極限として面積を定義することが可能です．あまり滑らかでない場合どうか？という問題は，まさに，現代的な研究課題です．

Runge–Kutta 法がどれくらい複雑なのか，知りたいです．

→ 惑星運動の方程式

$$-\frac{d^2}{dt^2}x(t) = GM\frac{x(t)}{r(t)^3}, \qquad -\frac{d^2}{dt^2}y(t) = GM\frac{y(t)}{r(t)^3} \qquad r(t) = \sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}$$

で説明します．G は万有引力定数，M は太陽の質量，$(x(t), y(t))$ は時刻 t での（xy 平面における）惑星の位置を表します．このとき，

$$\boldsymbol{u}(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ x'(t) \\ y'(t) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{y}) = \begin{pmatrix} y_3 \\ y_4 \\ -GMy_1(y_1^2 + y_2^2)^{-3/2} \\ -GMy_2(y_1^2 + y_2^2)^{-3/2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}$$

とおくと，方程式は，

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{f}(t, \boldsymbol{u}(u))$$

となります．そして，$t_n = nh$ $(n = 0, 1, \ldots, N)$，$T = Nh$ と定めて，$\boldsymbol{U}_n = (U_{n,1}, \ldots, U_{n,4}) \approx \boldsymbol{u}(t_n)$ を次で求めるのが Runge–Kutta 法です：

$$\boldsymbol{U}_{n+1} = \boldsymbol{U}_n + \frac{h}{6}\left(\boldsymbol{k}_1 + 2\boldsymbol{k}_2 + 2\boldsymbol{k}_3 + \boldsymbol{k}_4\right), \quad \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{f}(t_n, \boldsymbol{U}_n),$$

$$\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{f}\left(t_n + \frac{1}{2}h, \boldsymbol{U}_n + \frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_1\right), \quad \boldsymbol{k}_3 = \boldsymbol{f}\left(t_n + \frac{1}{2}h, \boldsymbol{U}_n + \frac{1}{2}h\boldsymbol{k}_2\right), \quad \boldsymbol{k}_4 = \boldsymbol{F}\left(t_n + h, \boldsymbol{U}_n + h\boldsymbol{k}_3\right).$$

単体や複体の概念もこのような分野で活用されるのだろうか．

→ 活用されます．単体分割は，まさに，三角形分割・四面体分割です．複体も，有限要素法の数学理論で活躍します．

- D. N. Arnold, R. S. Falk and R. Winther: *Finite element exterior calculus: from Hodge theory to numerical stability*, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.) **47** (2010) 281–354.
- D. N. Arnold, R. S. Falk and R. Winther: *Finite element exterior calculus, homological techniques, and applications*, Acta Numerica **15** (2006) 1–155

初歩かと思いますが，“無次元化” がつかめませんでした．5 次元化もできるということですか？

→ すみません．うっかりこのような言葉を使ってしまいました．ここで言う，“次元 (dimension)” は，空間 1 次元，2 次元，という意味での次元でなく，むしろ，“単位 (unit)” のことです．例えば，2 つの変数 x, y を扱う事を考えます．そして，x が 0 cm から 10 cm，y が 0 cm から 20 cm という範囲を動くとします．このとき，長さの規格化定数 $L = 10$ を導入して，$x = Lx'$，$y = Ly'$ とおくと，これらは $0 \le x' \le 1$，$0 \le y' \le 2$ の範囲を動く，単位を持たない量（これを無次元化量と言います）となります．数学的には，単位を気にするよりも，無次元化量を扱った方が楽です．なので，Poisson 方程式を書いた際に，すでにこのような処理をしている，ということを断ったわけです．

三角形分割の方法についてもっと詳しく知りたいと思いました．

今回，さらっと流してしまった部分に関して参考となるような本があれば教えて欲しい．（例えば，ボロノイ分割について）

ボロノイ図の母点というのは，実際のシミュレーションにおいて何を元に決定されるのでしょうか．

→ 参考書のみ示します．

- 杉原厚吉：なわばりの数理モデル—ボロノイ図からの数理工学入門，共立出版，2009 年
- M. ドバーグ他，浅野哲夫（訳）：コンピュータ・ジオメトリ—計算幾何学:アルゴリズムと応用，近代科学社，2010 年
- 浅野哲夫：計算幾何—理論の基礎から実装まで，共立出版，2007 年

ラーデマッヘルの条件とヤングの条件に出てくる “適当な正定数”α, β には条件がありますか？それとも任意ですか？

→ 私の表現が曖昧でした．適当な $\alpha > 0$ や $\beta < \pi/2$ が，「一つ」取れれば大丈夫です．

良い分割の「良い」とはどういう所を指しているのかもう少し詳しく教えて頂きたいです．

→ 良いか悪いかは，目的に応じて異なります．

1. 構造保存の観点：Poisson 方程式や熱伝導方程式には，正値性の保存や最大値原理という性質があります．近似によってこれを壊さない三角形分分割は良い三角形分割です．ドロネー三角形分割はその例です．
2. 収束性の観点：Poisson 方程式に対する有限要素法の問題設定で説明します．Ω を方程式が定義されている（空間 2 次元の）多角形領域として，V_h を Ω の三角形分割 $\mathcal{T}_h$ 上で定義された連続区分一次有限要素空間とします．h は分割のパラメータ（現れる三角形の最大辺長）です．このとき，適当な正定数 C が存在して，任意の $u \in H^2(\Omega)$ に対して，
$$\inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_{H^1(\Omega)} \le Ch\|u\|_{H^2(\Omega)}$$
が成り立つか否かが問題となります．講義で説明した，最小角条件，最大角条件，外接半径条件の下では，この不等式が成り立ちます．例えば，Zlámal 1968 と書いたのは，Zlámal さんが，1968 年に発表した論文でその証明が報告された，と言う意味です．なお，$H^1(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) \mid \partial_y v, \partial_y v \in L^2(\Omega)\}$ はソボレフ空間の一つです．$L^2(\Omega)$ は 2 乗可積分な可測関数全体の集合，∂_x, ∂_y は超関数 (distribution) の意味での微分を表します．$\|\cdot\|_{H^1(\Omega)}$ は，$H^1(\Omega)$ のノルム (norm) と呼ばれるもので，
$$\|w\|_{H^1(\Omega)} = \left(\iint_\Omega \left(|w|^2 + |\partial_x w|^2 + |\partial_y w|^2 \right) \, dxdy \right)^{1/2}$$
で定義されます．$H^2(\Omega)$ と $\|\cdot\|_{H^2(\Omega)}$ の意味も同様です．
3. 他にも “条件数の観点” などがありますが専門的になりすぎるので省略します．

次の論文（“プレプリント” ですが）も参考になります．

J. R. Shewchuk: *What is a good linear finite element? Interpolation, conditioning, anisotropy, and quality measures*, 2012, http://people.eecs.berkeley.edu/~jrs/papers/elemj.pdf

有限要素法では，立体は四面体で分割するが，必ずしも分割できないと仰っていたと思うのですが，どのような場合に分割できないのでしょうか？

→ おそらく，「立体は普通は四面体で分割するが，六面体を使っても良い．しかし，六面体の場合は，必ずしも与えられた立体を分割できるわけではない」という趣旨の事を指していると思います．なお，この場合，立体は多面体を意図しています．三角錐を想像してみてください．

円周上に（母）点を配置すると，ドロネー図が，n 角形になる気がします．

→ その通りです．まったく任意に配置すると，そのようになる可能性は 0 ではありません．応用上は，同一円周上に多くの点が配置されないようにします．一方で，理論上は，そのような特殊な場合について考察することが（特殊な場合を排除するために）重要になります．

有限要素法と曲面の面積を三角形分割で求めることで，条件が同じということは，証明の論理構造が同じということでしょうか？

→ 良い指摘です．全く同じではないのですが，有限要素法の解析の中には，曲面の面積の話と似た部分が含まれます．

うまい三角形分割を得る問題は理想的には鋭角三角形分割の問題に見えます．実用上で後者のテクニックは使われているのでしょうか．

→ どうしてそう思ったのでしょう？鋭角三角形だけからなる三角形分割を，鋭角三角形分割（非鈍角三角形分割）と言います．実は，鋭角三角形分割は自動的にドロネー三角形分割になります（逆は，反例があり一般には成り立ちません）．実は，鋭角三角形分割は（ドロネーよりも）に良い性質を持っていることが知られています．また，四面体分割の場合も，隣り合う面のなす角が，すべて $\pi/2$ 以下のとき，非常に良い性質があることが知られています．次の論文に詳しいことが書いてあります．なお，obtuse は鈍角という意味で，nonobtuse triangle は非鈍角三角形のことです．また，simplicial partitions は単体分割を意味します．

J. Brandts, S. Korotov, M. Křížek, J. Šolc, *On nonobtuse simplicial partitions*, SIAM Review, **51** (2), 2009, 317–335. http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/060669073

— 以上 —