偏微分境界値問題向けオブジェクト指向言語 FreeFEM+

3D－11

大塚 厚二 (広島電機大学・工学部・情報工学科)
O. Pironneau (University of Pierre and Marie Curie, Paris, France)
F. Hecht (The French Research Institute for Computer Science and Control, France)

1. はじめに

FreeFEM+[1)] は，1995年から O.Pironneau が中心となって開発してきた有限要素解析計算プログラム FreeFEM[2)]の新しいバージョンである。しかし，全てのコードを C++で完全に書きなおし，数学的構造をより反映させた新しいプログラムであるとも言える。FreeFEM+の実質的開発メンバーは今のところ，２人の応用数学専門家 Pironneau(主として流体が専門)と大塚(固体)，自動メッシュ生成専門家 Hecht の３名である。

コンピュータが普及するに従い，数学理論だけでなく，数値シミュレーションも応用数学の重要な研究対象となってきた。このことは，逆に理論研究の一時的な軽視を招いているように思われる。そして，応用数学での研究時間におけるプログラミング時間の増大を招いている。最近の数式処理システム Mathematica，Maple などは，代数，離散数学，微分積分学など多くの数学研究を支援し，数学教育にも大きな影響を与えている。しかし，偏微分方程式を数式処理システムで差分法的に解くことは出来ても，複雑な形状領域や部分的に計算精度を高める数値計算は不可能か非常に困難である。FreeFEM+は，数式による記述と操作による有限要素計算を実現することを目的にしている。ほとんどの場合，偏微分境界値問題の解は既知の関数で記述できないので，近似解で代用せざる得ない。つまり，FreeFEM+では近似解に対しても数学操作を可能にしている。この点が数式処理システムと決定的に異なる点である。

2. オブジェクト指向構造

オブジェクト指向は，「ものとその操作」に注目して対象を分析し，プログラムを設計しようとするパラダイムである。他方現代数学も，「操作の与えられた数学記号や言葉」を用いて研究している。現代数学は，オブジェクト指向ソフトウェア工学の方法論と表記法を与えていると考えられる。このことは，**定義をクラス，数学記号をインスタンス，定義による定義が継承を与える**，などと読み替えると分かる。また，多くの定理は証明を無視し，定理を満たす条件(public な特性)だけで使用される点はカプセル化の概念と同じである。たとえば「領域Ω」という言葉は，「クラス“位相集合”を親にもつクラス“連結開集合”によるインスタンスΩ」となる。したがって，Ω は“位相集合”の性質や操作を継承している。また，“位相集合”は“次元”を親クラスとして持つ。複雑になるので，オブジェクト指向の用語でなく数学用語を用いるが，実際には上記のようにオブジェクト指向用語に置き換え可能であることを了解されたい。

有限要素解析は，ソボレフ空間上の変分法と密接に関係している。FreeFEM+が対象としているのは，２次元平面上の２階の偏微分方程式またはシステムである。

2.1. 偏微分境界値問題の数理構造

偏微分境界値問題の定式化は次のように行われる[2)]。

(a) 定義する領域Ωを与える。領域は，曲線 $\Gamma_k, k=1,\cdots,M$ の直和を境界として持ち，各曲線はパラメータ t をもつ１変数関数により，
$$\Gamma_k=\{(x,y)|x=\phi_{k,1}(t), y=\phi_{k,2}(t), t_{k,\min}\le t\le t_{k,\max}\}$$
の形で定義される。

(b) 領域Ωで定義された境界条件を満たす１階のソボレフ空間の部分閉空間 $V(\Omega)$ を設ける。

(c) 偏微分境界値問題の解 u がエネルギー最小原理を満たすなら，解 u は $V(\Omega)$ 上でエネルギーを最小にする要素となる。これは，

「解 u は任意の $v\in V(\Omega)$ に対して
$a(u,v)=\langle F,v\rangle$ を満たす」

と定式化できる。ここで，$a(u,v)$はエネルギーの表現から得られる２次形式で，ラプラス方程式の場合は，

$$a(u,v)=\sum_{i=1}^{2}\int_{\Omega}(\partial u/\partial x_i)(\partial v/\partial x_i)dx$$

となる。また$\langle F,v\rangle$におけるFは既知関数から導かれる。

3. FreeFEM+での有限要素計算

この部分の詳細はマニュアル[1),3)]を参照されたい。領域が2.1の(a)のように与えられたとき，三角形分割は命令

mesh TO=buildmesh$(\Gamma_1(d_1)+\cdots+\Gamma_M(d_M))$

によって自動生成され，識別子 TO に結び付けられる。ここで，$d_k, k=1,\cdots,d_M$ は境界Γ_kの分割点の数であり，境界は分割点を結ぶ折れ線で近似される。三角形分割 TO の三角形節点数をn_vとし，１次要素基底関数を$\varphi_{h,j}, j=1,\cdots,n_v$で表す。

3.1. 数式関数，三角形分割上配列

FreeFEM+は，$\sin^{-1}x$, $\cos^{-1}x$を除く基本初等関数と，関数の合成および四則演算をサポートしている。新しい１変数関数$f(x)$は，たとえば

function f(x) = sin(x^2+x+1+cos(x));

と定義する。２変数関数$f(x,y)$は１変数関数で

function f(x,y) = sin(cos(x+y)*exp(x^2+y^2));

と定義できる。FreeFEM+では，三角形分割 TO が与えられたとき，

array(TO)　ff = f(x,y);

によって配列

$$\mathrm{ff}[n_v]=\left\{f\left(q_x^1,q_y^1\right)\cdots,f\left(q_x^{n_v},q_y^{n_v}\right)\right\}$$

が生成される((q_x^j,q_y^j)は節点の座標)。ff を三角形分割 TO 上配列と呼び，２変数関数

$$f_h(x,y)=\sum_{j=1}^{n_v}f\left(q_x^j,q_y^j\right)\varphi_{h,j}(x,y)$$

が定義される。また偏微分境界値問題(1)の解は，配列$u[n_v]=\{u_1,\cdots,u_{n_v}\}$として与えられる。

FreeFEM+では，数式関数と配列の定義する関数に対して次の演算が定義される。

(a) 関数の四則演算。演算中に配列があると，結果は配列となる。異なる三角形分割での補完により，形式的には計算は三角形分割に依存しない。

(b) 関数の微分。演算中に配列があると，数値微分を使い，結果は配列となる。

(c) 関数の定積分。三角形分割を与えることで，面積分と線積分を計算する。

3.2. 偏微分境界値問題の記述

既知関数は，数式関数または三角形分割上配列として与えられたと仮定。Dirichlet 条件を除いて，2の(c)で与えられた問題は次のように記述する。

varsolve　aa(u,v) with {　aa = $a(u,v)-\langle F,v\rangle$　};

この偏微分境界値問題の解は三角形分割上配列で，識別子 u により参照できる。

3.3. 結果の出力と外部データ参照

計算の途中結果は，コンソールとグラフィック・ウインドウに出力される。計算結果の保存等には，save, savemesh, readmesh が用意されている。

3.4. その他の特徴的機能

移動三角形分割。Adaptive Mesh 法。

4. 最後に

FreeFEM+は応用数学の専門家の使用に耐えるものとして設計され，応用数学の教育を支援するソフトウェアとしても使える。ソースコードは公開され[4)]，商用に使用しない限りは自由に変更でき，不足する機能を容易に追加できる。本研究は，文部省科学研究補助金 基盤研究(B)(1) #10440035(研究代表者 大塚 厚二)の援助を受けている。

---

1) D.Bernardi, F.Hecht, K.Ohtsuka, O.Pironneau: FREEFEM+ for Macs, PCs, Linux, 1998 Dec.25

2) B.Lucquim and O.Pironneau: Introduction to Scientific Computering, 1999, John Wiley & Suns

3) F.Hecht and O.Pironneau: Multiple Unstructured Meshes and the design of freefem+, 1998 Dec. 27

4) ftp://ftp.ann.jussieu.fr/pub/soft/pironneau

“Object-Oriented-Language FreeFEM+ for Partial Differential Boundary Value Problems”　Kohji Ohtsuka (Hiroshima-Denki Insitute of Technology), O.Pironneau (Univ. Paris), F.Hecht (INRIA)