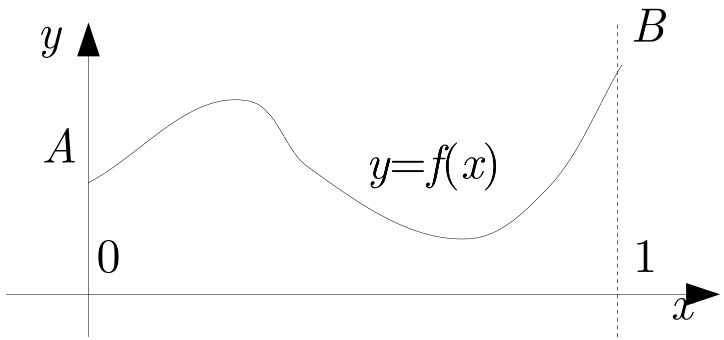
# 計算科学特論

スペクトル法と代用電荷法1

# 復習：汎関数と停留関数

- 汎関数：関数→数、（関数：数→数）
  例：2点$A,B$を結ぶ曲線長：$J$




$$J(f) = \int_0^1 \sqrt{1 + [\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)]^2}\mathrm{d}x$$

- $J(f)$ を最小化する $f$ を探す問題を考える
  ただし、$f \in \{(0,1)$で連続かつ1回微分可能$\} = \mathrm{C}^1$

関数の最小化なら停留値を考える

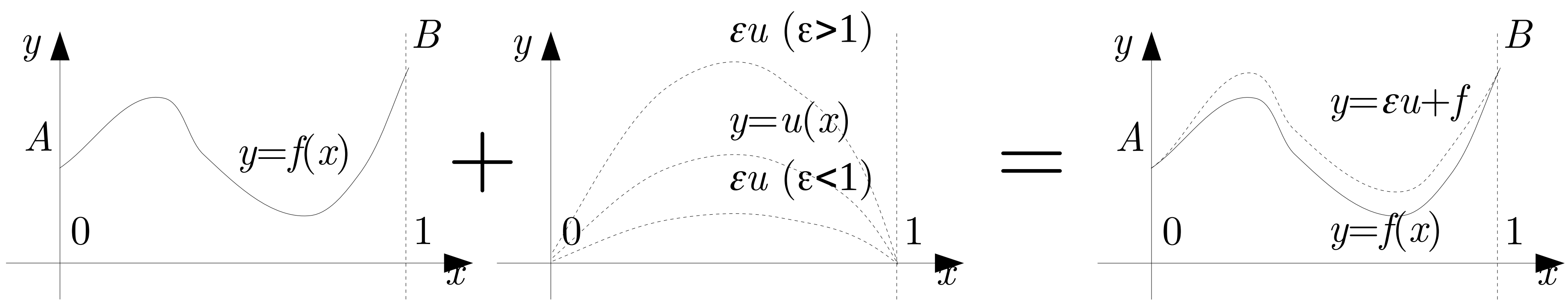
- 停留関数 $f^*(x)$ を探す　$\frac{\partial J}{\partial f}(f^*) = 0?$

# 復習:汎関数と停留関数

- 曲線長$J$を最小にする関数を $f^*$ とする。

$$J(f^*) = \min_{f\in C^1} J(f)$$

- このとき $u(0)=u(1)=0$ を満たす $u\in C^1$を考えれば関数 $\varepsilon u+f^*$は要件を満たしABを結ぶ曲線を与え $J(\varepsilon u+f^*)\geq J(f^*)$　ただし $\varepsilon\in\mathrm{R}$ (∵ $J(f^*)$は最小)が成立する。



# 復習：汎関数と停留関数

- $\varepsilon \to 0$ の極限で曲線長 $J(\varepsilon u + f^*)$ は極値をとり、汎関数 $J$ が極値を取る関数を$f^*$停留関数と呼ぶ

| $\varepsilon < 0$ | $\longrightarrow$ | $\varepsilon = 0$ | $\longrightarrow$ | $\varepsilon > 0$ |
|---|---|---|---|---|
| $J(\varepsilon u + f^*)$ | $\searrow$ | $J(f^*)$ | $\nearrow$ | $J(\varepsilon u + f^*)$ |

- 逆に 任意の$u$ で次式が成立⇒$f$は停留関数

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\partial J}{\partial \varepsilon}(f + \varepsilon u) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int_0^1 \{1 + [f' + \varepsilon u']^2\}^{\frac{1}{2}} \mathrm{d}x = 0$$

- そこで、式を成立させる条件を考える。

# 復習：汎関数と停留関数

- $f$=$f^*$:停留関数を求める
  任意関数 $u$ に対して停留条件を満たす$f$を探す

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\partial J}{\partial\varepsilon}(f+\varepsilon u)=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\int_0^1\{1+[f'+\varepsilon u']^2\}^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}x=0$$

- 被積分関数を微分して極限（$\varepsilon\to 0$）をとる

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\int_0^1\{1+[f'+\varepsilon u']^2\}^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}x=\int_0^1\{1+[f'+\varepsilon u']^2\}^{-\frac{1}{2}}[f'+\varepsilon u']u'\mathrm{d}x$$

$$\overset{\epsilon\to 0}{\to}\int_0^1\frac{f'u'\mathrm{d}x}{\sqrt{1+f'^2}}=\left[\frac{f'}{\sqrt{1+f'^2}}u\right]_0^1-\int_0^1\left[\frac{f'}{\sqrt{1+f'^2}}\right]'u\mathrm{d}x=0$$

- 任意の$u$に成立する必要があるので次式が言える

$$\therefore\ \left[\frac{f'}{\sqrt{1+f'^2}}\right]'=\frac{f''}{[1+f'^2]^{\frac{3}{2}}}=0\Rightarrow f''=0$$

# 復習:オイラー方程式

- 曲線長に関する議論を汎関数に一般化する
- $1$変数の場合($v$:境界で$0$の任意関数)

$$J(u) = \int F(x, u, u')\mathrm{d}x$$

$$\frac{\partial J}{\partial \varepsilon}(u + \varepsilon v) = \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\int F(x, u+\varepsilon v, u'+\varepsilon v')\mathrm{d}x = \int F_u v + F_{u'} v' \mathrm{d}x$$

$$\left[\frac{\partial J}{\partial \varepsilon}\right]_{\varepsilon=0} = \int F_u v \mathrm{d}x + \int F_{u'} v' \mathrm{d}x = \int F_u v \mathrm{d}x + [F_{u'} v] - \int [F_{u'}]_x v \mathrm{d}x$$

$$= \int [F_u - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} F_{u'}] v \mathrm{d}x = 0 \Rightarrow F_u - \frac{\mathrm{d}F_{u'}}{\mathrm{d}x} = 0$$

- 停留関数を探す=オイラー方程式を解く

# 復習:オイラー方程式

- 2変数の場合のオイラー方程式

$$J(u)=\iint F(x,y,u,u_x,u_y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$J(u+\varepsilon v)=\iint F(x,y,u+\varepsilon v,u_x+\varepsilon v_x,u_y+\varepsilon v_y)\mathrm{d}x$$

$$\left[\frac{\partial J}{\partial \varepsilon}\right]_{\varepsilon=0}=\iint F_u v+F_{u_x}v_x+F_{u_y}v_y\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$=\iint F_u v+[F_{u_x}v]_x-[F_{u_x}]_x v+[F_{u_y}v]_y-[F_{u_y}]_y v\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$=\iint [F_u-[F_{u_x}]_x-[F_{u_y}]_y]v+[F_{u_x}v]_x+[F_{u_y}v]_y\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$=\iint [F_u-[F_{u_x}]_x-[F_{u_y}]_y]v+\oint[F_{u_x}v]\mathrm{d}x-[F_{u_y}v]\mathrm{d}y=0$$

$$\Rightarrow F_u-\frac{\partial}{\partial x}F_{u_x}-\frac{\partial}{\partial y}F_{u_y}=0$$

# 復習:オイラー方程式

- 汎関数 $J(u)$ が

$$J(u) = \iint F(x, y, u, u_x, u_y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \iint \frac{1}{2}[u_x^2 + u_y^2]\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

のとき、オイラー方程式は $F_u - \dfrac{\partial}{\partial x}F_{u_x} - \dfrac{\partial}{\partial y}F_{u_y} = 0$

$$\Rightarrow 0 - \frac{\partial}{\partial x}u_x - \frac{\partial}{\partial y}u_y = 0 \ \Rightarrow \underbrace{u_{xx} + u_{yy} = 0}_{\text{ラプラス方程式}}$$

- ラプラス方程式の解を求める
＝汎関数 $J(u)$ の停留関数 $u^*$ を求める

# 復習:リッツ法

- ラプラス方程式を解く⇔$J(u)$ の停留関数を探す

$$J(u)=\iint_D \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial y}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

- $u$ の範囲を限定して考える
  任意の関数→基底関数列 $u_1,\ldots,u_N$ の線形結合

$$u \sim \sum_{j=1}^{N} c_j u_j \rightarrow J(u)=\iint_D \left(\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial x}\right)^2 + \left(\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial y}\right)^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$J(u) = f(c_1,\ldots,c_N)$$

- 停留関数を探す＝連立方程式

$$\frac{\partial f}{\partial c_j} = 0 \quad j = 1,\ldots,N$$

  を解く

# 復習:リッツ法

- $u_1,\ldots,u_N$ の線形結合の範囲で停留関数を探す

$$J(u)=\iint_D \frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial u}{\partial y}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$u \sim \sum_{j=1}^{N} c_j u_j \rightarrow J(u)=\iint_D (\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial x})^2+(\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial y})^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$J(u)=f(c_1,\ldots,c_N)$$

$$\frac{\partial f}{\partial c_k}=\frac{\partial}{\partial c_k}\iint_D (\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial x})^2+(\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial y})^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$=\iint_D 2\frac{\partial u_k}{\partial x}(\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial x})+2\frac{\partial u_k}{\partial y}(\sum_j c_j \frac{\partial u_j}{\partial y})\mathrm{d}x\mathrm{d}y=0$$

$$\therefore \sum_j c_j \iint_D \frac{\partial u_k}{\partial x}\frac{\partial u_j}{\partial x}+\frac{\partial u_k}{\partial y}\frac{\partial u_j}{\partial y}\mathrm{d}x\mathrm{d}y=0$$

ガレルキン法と同じ連立方程式が得られた

# 有限要素法のまとめ

方程式 $\mathcal{L}f(x_1,\ldots)=g(x_1,\ldots)$を満たす$f$を求める方法

- 重み付き残差法

近似解$F:=\Sigma_j c_j u_j(x_1,\ldots)$に対し、原方程式から得た残差$R(F,x_1,\ldots)=(\mathcal{L}F-g)(x_1,\ldots)$を定め、$R(f,x_1,\ldots)\equiv 0$であり、任意の重み$w$に対して$\langle w,R(f)\rangle=0$であることから、$F$に条件$\langle w_k,R(F)\rangle=0$を課して次の条件式を導く。

$$\langle w_k,R(F)\rangle=\langle w_k,\mathcal{L}F-g\rangle=\langle w_k,\Sigma_j c_j \mathcal{L}u_j-g\rangle=0$$

これを$c_j(j=1,\ldots,n)$を求める連立方程式に置き換えて

$$\Sigma_j c_j\langle w_k,\mathcal{L}u_j\rangle=\langle w_k,g\rangle \quad k=1,\ldots,n$$

近似解$F$の決定を係数$c_j(j=1,\ldots,n)$の決定に帰着する。

# 有限要素法のまとめ

方程式 $\mathcal{L}f(x_1,\ldots)=g(x_1,\ldots)$を満たす$f$を求める方法

- ガレルキン法

重み付き残差法の重み関数$w_k\ (k=1,\ldots,n)$を近似解の基底関数$u_j\ (j=1,\ldots,n)$に一致$(w_k=u_k)$させたもの。

係数$c_j(j=1,\ldots,n)$を求める連立方程式は

$$\Sigma_j c_j \langle u_k, \mathcal{L}u_j\rangle = \langle u_k, g\rangle \quad k=1,\ldots,n$$

となる。

# 有限要素法のまとめ

方程式 $\mathcal{L}f(x_1,\ldots)=g(x_1,\ldots)$を満たす$f$を求める方法

- 有限要素法

有限要素を組合せたコンパクトな台（サポート）を持つ基底関数を用いたガレルキン法（とも言える。）

低次の基底関数（例えば$1$次関数）を用いる場合は、残差方程式を弱形式に置き換える必要がある。

係数$c_j(j=1,\ldots,n)$を求める連立方程式は

$$\Sigma_j c_j \langle u_k,\mathcal{L}'u_j\rangle = \langle u_k,g\rangle \quad k=1,\ldots,n$$

となる。$\mathcal{L}'$は弱形式を与える線形作用素。

# スペクトル法

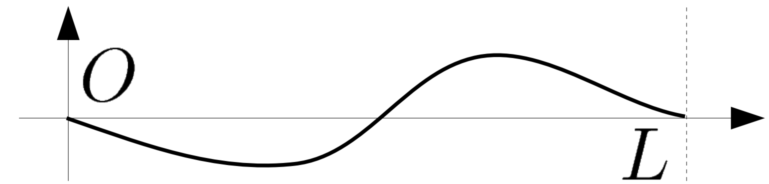
- 一番広い定義
  関数の重ね合せによる離散化法
  - 例えばLaplace方程式の境界値問題

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x,y)=0 \qquad 0<x,y<1,$$

$$u(x,0)=x(1-x),\ u(x,1)\equiv u(0,y)\equiv(1,y)=0.$$

  - 近似解 $$u(x,y)\sim U(x,y)=\sum_{\mathrm{j}} c_{\mathrm{j}}u_{\mathrm{j}}(x,y)$$
  - 重みを決める方法
    - 選点法　条件を選点的に満すよう決める
    - 重み付き残差法　重み付き残差を利用して決める（重み付き残差をどのように定めるかが重要）

# スペクトル法




弦の振動を考える。
端点$x$=$0,L$ で振幅 $0$ として、
境界条件に合う三角関数列で、
$u \sim U = \Sigma_j c_j u_j(t,x)$ ただし、$u_j(t,x) = u_j(t)\sin(\pi jx/L)$
として、残差 $U_{tt} - U_{xx} = 0$ を考える。
$U$ 全体を代入してガレルキン法で;

$$(U_{tt} - U_{xx}, u_k) = 0 \Rightarrow c_k(u_{ktt} - \lambda_j^2 u_k)u_k = 0 \,\mathrm{for}\, k = 1, \ldots.$$

$\Rightarrow [u_{ktt} - \lambda_j^2 u_k] u_k = 0$ for $k = 1,\ldots$ ただし $\lambda_j = \pi j/L$

$\therefore U = \Sigma_j [a_j \sin(\lambda_j t) + b_j \cos(\lambda_j t)] \sin(\lambda_j x)$

$a_j$ ,$b_j$ は初期条件から定める。

# スペクトル法の特徴

- 滑らかな関数で展開すれば差分近似のような誤差は無い
- うまく関数を選んで展開すれば展開の次数が低くても精度は高い
- 微分方程式に適合した関数で展開すれば簡単になる
- 展開に用いる関数の準備が難しい場合がある
- 展開に用いる関数によっては重みを定めるのに手間がかかる
- 非線形の問題を扱う場合には、問題に応じて工夫が必要

# 代用電荷法⊂広義の重み付き残差法

- 代用電荷法：<br>試行関数が厳密に微分方程式を満す<br>（満すような関数を使って近似解を構成する）

  試験関数（重み）にはデルタ関数を用いる<br>（選点法を用いることと同等）
- 微分方程式の残差は厳密にゼロ
- 境界条件によって近似解の重みを決める

# 代用電荷法によるLaplace方程式の解法

- 試行関数には電荷を模した基本解を用いる:
厳密に調和関数になる

2次元 $$u \sim U(z) = \sum_{\mathrm{j}} c_{\mathrm{j}} \log |z - x_{\mathrm{j}}|$$

3次元 $$u \sim U(z) = \sum_{\mathrm{j}} c_{\mathrm{j}} / |z - x_{\mathrm{j}}|$$

- 試験関数（重み）にはデルタ関数を用いる
（選点法を用いることと同等）

$$\int \dots \int \delta(z - y_{\mathrm{k}})(u(z) - \sum_{\mathrm{j}} c_{\mathrm{j}} u_{\mathrm{j}}(z)) = u(y_{\mathrm{k}}) - U(y_{\mathrm{k}}) = 0$$

- 残差の計算に積分等は不要になる

# 代用電荷法の特徴

- Laplace方程式に適合したスペクトル法の一種で、Laplace方程式を厳密に満たす
- 境界条件だけで重みを定めるため数値積分が不要
- 展開に用いる関数をうまく選べば高精度
- 展開に用いる関数の準備＝電荷点の撰択が難しい
- 境界条件が滑らかでない問題の近似精度が下がる
- 非線形の問題を扱うことが難しい

# レポート(9)

学籍番号･氏名を記し提出してください。

- 2次元と3次元の電荷ポテンシャルがラプラス方程式を満たすことを確認せよ(次の式の成立を示せ)

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\log\sqrt{x^2+y^2}=0$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}=0$$

# 授業レポート用紙：氏名（　　　　　　　　）学籍番号(　　　　　　　)

2019年12月16日（月）

できれば授業の感想も書いてください。