

ホモロジー、コホモロジーと有限要素法

袁 熙*

Homology, Cohomology, and Its Application on Finite Element Method

Xi Yuan*

「外微分学」は、数学的電磁気学に対する標準的なアプローチである。数値解析において外微分学を利用することは、自然な選択肢の1つとされている。有限要素外微分学(FEEC)は、外微分学の言葉でいくつかのよく知られた有限要素法を形式化している。有限要素外微分学の研究は、古典的なベクトル値有限要素空間の基底、自由度、幾何学的分解のための統一された枠組みを提供している。本文は FEECを理解するのに必要なトポロジー知識を整理した上、有限要素法解析への応用を紹介する。

Keywords: 外微分学, 有限要素法, 有限要素外微分学

1. はじめに

領域 $\Omega \in R^3$ の静磁場 $\mathbf{u}$ を求めるため、式 $\text{curl } \mathbf{u} = 0$ から、よくスカラーポテンシャル ϕ を用いて磁場を表す $\mathbf{u} = \text{grad}(\phi)$ 。しかし、このアプローチは図 1 の物理問題を解くと正しい結果が得られない。磁場 $\mathbf{u}$ が閉ループ C 上で積分されることがわかっているため、結果はコイル上の電流 nl になるはずだが。ポテンシャル関数を使用される場合、値はゼロになる。

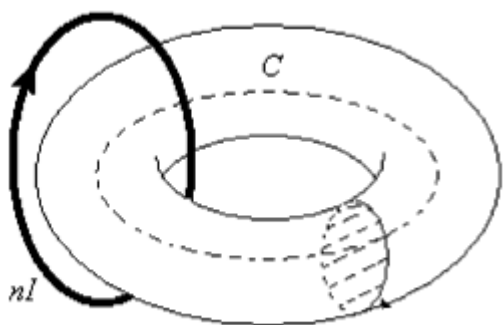


図 1 コイルで囲まれた閉磁路

$$\oint_C \mathbf{u} \cdot d\mathbf{l} = \oint_C \text{grad}(\mathbf{u}) d\mathbf{l} = 0$$

実際、式 $\mathbf{u} = \text{grad}(\phi)$ は単連結体上のみ成り立つ。このような問題は解析領域のトポロジーを特定する必要があり、適切な代数位相演算が必要となる ([2]、[3])。

2. ホモロジーとコホモロジー

2.1. 単体、複体、鎖複体とホモロジー

単体とは3角形を一般化した概念で、多面体等の図形を構成する際、基本となる形状を指し言葉である。単体から構成される図形について複体を作り、複体からホモロジー群と呼ばれる群計算を構築することができる。

多様体の位相空間は、単体(simplex)でカバーできる。 r 次元単体は $\sigma_k = \langle p_0 p_1 \dots p_r \rangle$ は R^m 空間上の $r+1$ 個の独立点 $p_0, p_1, \dots, p_r$ から構築する。

$$\sigma_r = \left\{ x \in R^m \mid x = \sum_{i=0}^r c_i p_i, c_i \geq 0, \sum_{i=0}^r c_i = 1 \right\} \quad (1)$$

3次元空間上の単体は図 2 に示している。

*アドバンスソフト株式会社 第2事業部

2nd Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

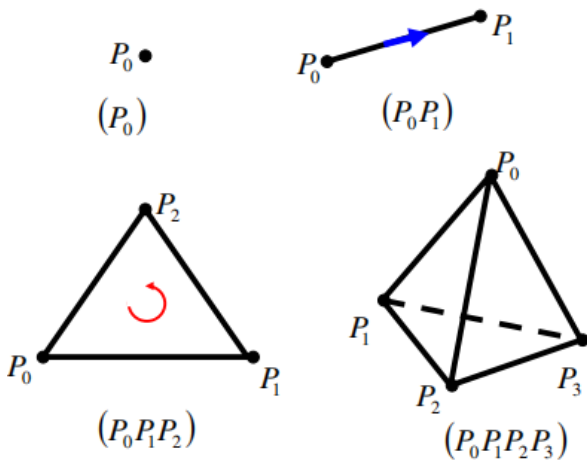


図 2 3次元空間上の単体

単体は方向持つ。例えば単体 $(p_0p_1) = -(p_1p_0)$ 。単体の境界は境界演算子 ∂ で表す。例え上図に示した三角形単体の境界

$$\begin{aligned}\partial(p_0p_1p_2) &= (p_0p_1) - (p_0p_2) + (p_1p_2) \\ &= (p_0p_1) + (p_1p_2) + (p_2p_0)\end{aligned}$$

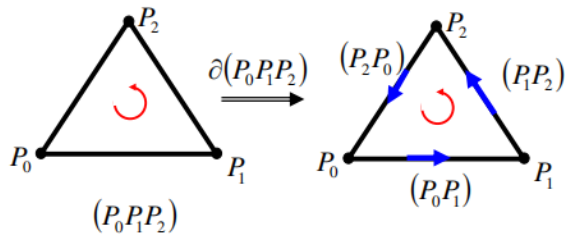


図 3 三角形単体の境界演算

明らかに $\partial\partial = 0$ 。例え上記三角形単体の場合では $\partial\partial(p_0p_1p_2) = \partial(p_0p_1) - \partial(p_0p_2) + \partial(p_1p_2)$

$$= p_0 - p_1 + p_1 - p_2 + p_2 - p_0 = 0$$

私たちが研究したい幾何学図形は有限個の単体から構成されており、このような幾何学図形を単体複体、あるいは複体 K と呼ぶ。下図では、いくつかの複体を示している。

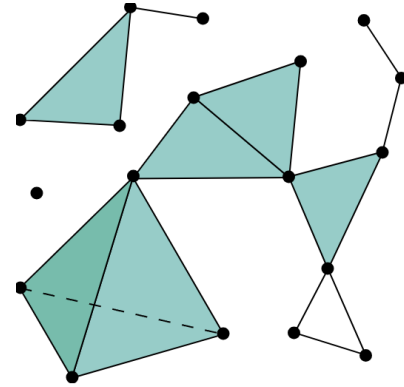


図 4 複体の例[4]

複体は、FEM、FVM、および FDM 計算で使用されるメッシュやグリッドの概念に対応しており、離散化された多様体を表すために使用される。

複体 K に含まれる r 次元単体 $\sigma_{r,i}$ とし、これらの有向単体の間の整数係数による線形結合は以下になる。

$$c = \sum_{i=1}^{I_r} \{c_i \sigma_{r,i}\}, c_i \in \mathbb{Z} \quad (2)$$

この c を r 次元鎖と呼び、 r 次元鎖全体が成す集合を $C_r(K)$ と表す。 $C_r(K)$ は加法についてアーベル群を成すため、これを r 次元鎖群と呼ぶ。

境界演算子 ∂_r 上式に作用すると、次の結果を得ることができる。 $\partial_r c = \sum_{i=1}^{I_r} c_i \partial_r \sigma_{r,i}$ 、ここでは、境界演算子 ∂_r は以下のマッピングを定義する。

$$\partial_r: C_r(K) \rightarrow C_{r-1}(K) \quad (3)$$

この演算子は n 次元空間上の複体 K に対して使用すると、次のマッピングシーケンスを取得できる。

$$0 \xrightarrow{i} C_n(K) \xrightarrow{\partial_n} C_{n-1}(K) \xrightarrow{\partial_{n-1}} \dots \xrightarrow{\partial_1} C_0(K) \xrightarrow{\partial_0} 0 \quad (4)$$

このアーベル群の列は鎖複体、あるいはチェイン複体(chain complex)と呼ばれる。

$c \in C_r(K)$ が条件 $\partial_r c = 0$ を満たす時、 c は r -cycle と呼ぶ。 r -cycle の集合 $Z_r(K) \in C_r(K)$; $Z_r(K) = \ker \partial_r$ r -cycle group と呼ぶ。

$c \in C_r(K)$ に対して、もし存在 $d \in C_{r+1}(K)$ 満足 $c = \partial_{r+1} d$ の時、 c は r -boundary と呼ぶ。 r -boundary の集合 $B_r(K) \in C_r(K)$; $B_r(K) = \text{im } \partial_{r+1}$ r -boundary group と呼ぶ。通常は $Z_r(K) \supset B_r(K)$ 、つまり、他の集合の境界でない非有界集合が常に存在する。例え、図 1 に示したドーナツ形状は境界

がないの同時に、どの3次元図形の境界でもない。
この状況は多くの場合、穴の存在を示す。

2つの r -cycle の場合 c_1, c_2 以下の同値関係が存在する時、homologous (ホモロガス) であると言い、同じ輪っかであるとみなす。

$$c_1 \sim c_2 \Leftrightarrow c_1 - c_2 \in B_r(K) \quad (5)$$

下図では c_1 と $-c_2$ はホモロガスである。 $c_1 - (-c_2) = \partial f \in B_r(K)$

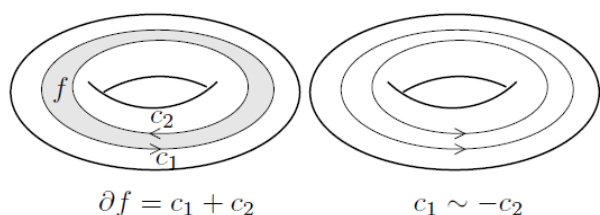


図 5 2つの1 chain は2 chain f の境界である

上記の等価関係の定義と群の準同型定理に基づいて、次の商群を定義でき

$$H_r(K) := Z_r(K)/B_r(K) = \{z + B_r(K) \mid z \in Z_r(K)\} \quad (6)$$

ホモロジー群と呼ぶ。

ホモロジー群を理解するコツは、サイクルとバウンダリーの違いを調べることである。どの領域の境界は閉曲線 (サイクル) でなければならないが、曲面上のどのサイクルもある領域の境界 (バウンダリー) である必要はない。それらの間の違いはホモロジーである。ある曲面上のすべてのサイクルがバウンダリーである場合、その曲面は必然的に球面である。この考えの厳密な代数化は、ホモロジー群である。

2.2. ド・ラームコホモロジー

多様体 M 上ホモロジー群と共役する群はコホモロジー群と呼ぶ。コホモロジー群は、鎖群上に定義された関数として理解できる。以下では、ある特別なコホモロジー群、微分形式のド・ラームコホモロジー群を紹介する。

多様体 M 上 p -form の外微分

$$d_p: \Omega^p(M) \rightarrow \Omega^{p+1}(M) \quad (7)$$

は下記コチェイン複体(cochain complex)を構築することができる。

$$0 \xrightarrow{i} \Omega^0(M) \xrightarrow{d_0} \dots \xrightarrow{d_{p-1}} \Omega^p(M) \dots \xrightarrow{d_{n-1}} \Omega^n(K) \xrightarrow{d_n} 0 \quad (8)$$

閉微分形式の集合は $Z^r(M)$ と表し、cocycle group と呼ぶ。完全微分形式の集合は $B^r(M)$ と表し、coboundary group と呼ぶ。 $dd=0$ なので、 $Z^r(M) \subset B^r(M)$ 。 r 次元ド・ラームコホモロジー群が以下のように定義される。

$$H^r(M, R) = Z^r(M)/B^r(M) = \ker d_{r+1} / \operatorname{im} d_r \quad (9)$$

ド・ラームコホモロジー群とホモロジー群の間に、以下の双対関係が存在する。

・ ド・ラームの定理([1]Theorem 6.2)

M がコンパクトであり、有限次元の $H^r(M)$, $H_r(M)$ 間の写像

$$\Lambda: H_r(M) \times H^r(M) \rightarrow R \quad (10)$$

非縮退双線形の場合、 $H^r(M)$, $H_r(M)$ は双対ベクトル空間である。

この双対性を強調するために、下記内積を定義する。

$$(c, \omega) = \int_c \omega \quad (11)$$

この記号を利用すると、ストークスの定理 $\int_c d\omega = \int_{\partial c} \omega$ を以下のように書き換えることができる。

$$(c, d\omega) = (d c, \omega) \quad (12)$$

この式は d と δ は互いに随伴演算子であることが示している。

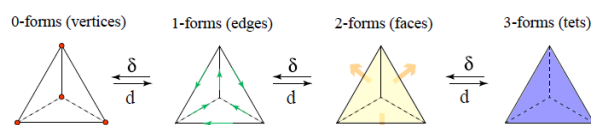


図 6 d と δ は随伴演算子である

デ・ラムのコホモロジー群を理解するコツは、非回転場と勾配場の違いを調べることである。ド・ラームコホモロジー群は微分形式で定義されているが、曲面がリーマン計量であれば、微分形式は接線ベクトル場として等価的に理解できる。多様体上勾配場の回転はどこでもゼロであるが、どの非回転場が勾配場である必要がない。例え、二つの非回転場は1つの勾配場によって異なる場

合、相互にコホモロジーである。

本文冒頭で提起された問題に戻るが、静磁場 $\mathbf{u}$ の一般式は以下である。

$$\mathbf{u} = \text{grad}(\varphi) + \mathbf{h} ; \mathbf{h} \in H^2(\Omega) \quad (13)$$

$\mathbf{u}$ のコホモロジーがゼロ、すなわち $H^2(\Omega) = 0$ である場合、上記で提示した解決策に問題はないが、そうでない場合もあるので、静磁場のホモロジーの次数を計算する必要がある。

2.3. Whitney 形式

Whitney マッピングはコチェイン複体から微分形式までマッピングする方法である。

$$W: C^r(K) \rightarrow L^2\Omega^r(X) \quad (14)$$

ここで、 X は、 C^∞ コンパクト有向リーマン多様体であり、 $L^2\Omega^r(X)$ は平方積分可能な微分 r 形式である。ここで得られる微分形式は Whitney 形式と呼ばれる。Whitney 形式は、適切な有限要素メッシュ上で定義された自由度から有限要素上の微分形式を再構築する補間関数として見るができる。例として、下図では一次三角形要素上の Whitney 形式を列挙している。ここでは、0-form はハット内挿関数、1-form はベクトル場、2-form は区分的定数関数である。

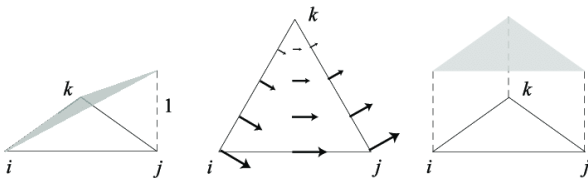


図 7 線形三角形要素上の Whitney 0-form、1-form、2-form[5]

2.4. 離散外積代数と有限要素法

離散外積代数は外積代数を離散空間への拡張である。その典型的な離散空間は FEM, FVM, FDM などが使われたメッシュ構造である。

離散外積代数では、メッシュとメッシュ上に定義した物理量はそれぞれチェーンとコチェインと解釈する。例え、三次元空間では、節点(0-cell)、辺(1-cell)、面(2-cell)、体積(3-cell)からチェーン複体を構築される。一方、解析 Domain 上の物理量(微分形式 Λ^k)下記リダクション演算子

$$R: \Lambda^k(d, \Omega) \rightarrow C^k \quad (15)$$

を経由し、コチェイン C^k を構築できる。また、ド・ラームマッピング(式(11))は偏微分方程式のラグランジアン形式と対応している。

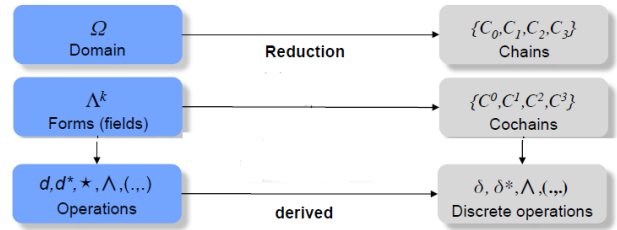


図 8 解析領域、物理量はチェーンとコチェインとの対応関係

3. 応用

PDE の解析ツールとして、ド・ラームコホモロジーは PDE のローカルおよびグローバル不変量を表し、PDE 解の存在、解の安定性、および収束性解析に適用されている。一方で、ホモロジー計算および外微分の計算ツールとしての代数トポロジーもますます注目を集めている。特に、数値解析及びプログラム設計の観点から、以下の応用が考えられる。

3.1. 要素設計と有限要素周期表

チェーンは有限要素の格子構造を表し、コチェインはチェーン上に定義された物理量を表す。前述では、チェーンとコチェインには良好な対称性があることがわかり、要素計算アルゴリズム設計ではこの制約を厳密に遵守する必要がある。そうしないと、不可解な計算結果が得られる場合がある。これらの理論的な議論は有限要素外微分学(FEEC)と名付けられ、参考文献 [8] でまとめてされている。

この方向の研究成果の一部は、有限要素周期表に反映されている[9]。この周期表は、拡張した Whitney コホモロジー構造の満足できる要素設計をまとめたものである。

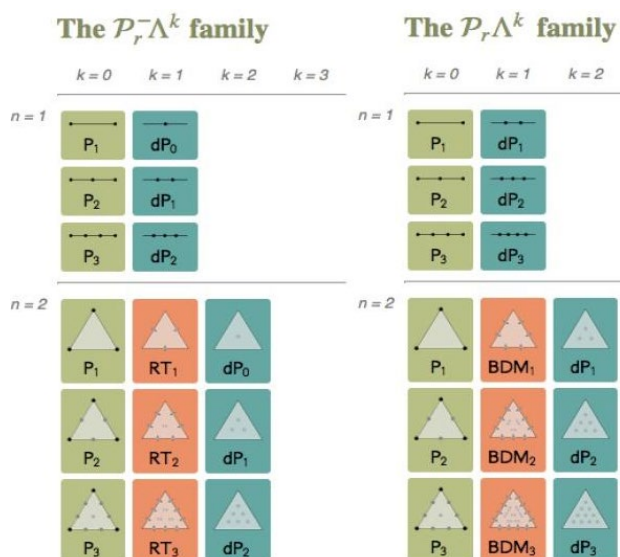


図 9 有限要素周期表の一部[9]

この表にリストされている実装は、オープンソース有限要素ソフトウェア FEniCS[10]および Intrepid2[11]上に実装されている。

3.2. ホモロジー群計算

本文冒頭の例は、電磁気計算ではポテンシャル関数の不連続位置を見つけるためにホモロジー群計算が必要であることを示している。計算量は少ないため、この計算に関する研究も [12]、[13] など数多く行われている。この計算機能は、メッシュ作成オープンソースソフトウェア Gmsh [14,15] に実装されており、オープンソース有限要素ソフトウェア GetDP [3]による電磁気計算で使用されている。

3.3. メッシュデータの構造と管理

上記提示した鎖群の計算は、複体(FEM,FVM などの解析ではメッシュ)のトポロジー計算に有力の計算ツールである。例え、ホモロジー群の計算しなくても、要素界面の存在や隣接関係の判定にもさまざまなケースに応用できる。そのため、メッシュデータの構造と管理にはこの技術の導入は強く勧められる[16]。

4. まとめ

本文は有限要素外微分学の基本概念を紹介

し、その技術は数値解析及びプログラム設計への応用を議論した。

参考文献

- [1] M. Nakahara: Geometry, Topology and Physics, 2nd edition, IOP, 2003.
- [2] Anh Tuan Phung et al: IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, VOL. 41, NO. 5, MAY 2005.
- [3] M. Pellikka et al: SIAM J. Sci. Comput.,35(5), B1195–B1214.
- [4] <https://ja.wikipedia.org/wiki/複体>
- [5] K. Wang et al: ACM Transactions on Graphics 25(3):1041-1048
- [6] Alain Bossavit: IEEE Proceedings A, December 1988, p.493 – 500.
- [7] Whitney, H: Geometric integration theory, Princeton Univ. Press, 1957.
- [8] Douglas N. Arnold Finite Element Exterior Calculus, Siam, 2018
- [9] Douglas N. Arnold and Anders Logg, SIAM News 47 (2014), No. 9
- [10] <https://salsa.debian.org/science-team/fenics>
- [11] <https://trilinos.github.io/intrepid2.html>
- [12] S Suuriniemi : Homological computations in electromagnetic modeling, Tampere Univ. Tech., 2004.
- [13] M. Pellikka: Homology and Cohomology Solver in Gmsh and its Applications, 2013.
- [14] <https://gitlab.onelab.info/gmsh/gmsh/-/wikis/SecondGmshWorkshop/pellikka.pdf>
- [15] <http://transit.iut2.upmf-grenoble.fr/doc/gmsh-doc/gmsh.html>
- [16] Paul W. Gross, P. Robert Kotiuga : Electromagnetic Theory and Computation: A Topological Approach, Cambridge University Press, 2004
- [17] P. Bochev, J. M. Hymen: Proceedings of IMA Hot Topics Workshop on Compatible Discretizations, D. N. Arnold, P. Bochev, R. Lehoucq, R. Nicolaides, and M. Shashkov, eds.,

vol. IMA 142, Springer Verlag, 2006, pp. 89–120.

- [18] P. Bochev, H.C. Edwards, R.C. Kirby, K. Peterson, D. Ridzal: Scientific Programming, Volume 20, Issue 2, April 2012, pp 151–180.

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）