

第5章 補間と関数近似—続き

本章には、4章に続いて補間と関数近似について、まず多項式では良く近似できない離散データによく適用できる安定な補間公式について述べる。次に多次元の補間と関数近似について述べる。デカルト座標系や一般曲線座標系の構造格子に対しては、1次元の補間公式がそのまま利用できる。しかしながら有限体積法の非構造格子、有限要素法のメッシュに対しては、多次元の補間公式を始めから作る必要がある。ここでは1次元の補間における考えのみがいかされることになる。

5.1 安定な補間公式

解くべき問題または与えられたデータが不連続性のある関数で近似される場合、また不連続性はないものの例えば物体の遠方で一様で境界近傍で急激に増加する関数の場合には、上述の補間法では2次以上のものは不安定になり、1次のは安定であるが精度不足ということになる。また初期値問題でも、繰返し計算の過程でわずかな誤差が集積し、それがもとで不安定性が生じることもある。このような場合には、特に安定性に優れた補間公式を用いることが必要である。

5.1.1 単調関数を用いた補間

安定化対策のひとつは、指数関数、対数関数、双曲線関数などの単調関数を用いることである。ここには指数関数に1次式を重ねる方法について述べる。関数 $u(x)$ を次のように置く。

$$u(x) \doteq C_1 \exp(C_2 x) + C_3 x + C_4 = u_i + b(a^\alpha - 1) + c\alpha \quad (5.1)$$

ただし $\alpha = (x - x_i)/\Delta x$ 、計算点の間隔 Δx は一定とする。また a, b, c は未定係数で、与えられた4点 u_{-1}, u_0, u_1, u_2 を通る条件

$$u_{i+j} = u_i + b(a^j - 1) + jc \quad (j = -1, 0, 1, 2)$$

を満足するように決定される。中心差分を

$$\begin{aligned} \Delta u_{i+1/2} &= u_{i+1} - u_i, \\ \Delta^2 u_i &= \Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i-1/2}, \\ \Delta^3 u_{i+1/2} &= \Delta^2 u_{i+1} - \Delta^2 u_i \end{aligned}$$

のように定義すれば、

$$\begin{aligned} \Delta u_{i+j+1/2} &= b(a-1)a^j + c, & (j = -1, 0, 1) \\ \Delta^2 u_{i+j} &= b(a-1)^2 a^{j-1} & (j = 0, 1) \end{aligned}$$

となる．これらの関係を用いれば未定係数は容易に決定することができ，次の指数関数を用いた補間公式が導かれる．

$$u(x) \doteq u_i + \frac{(\Delta^2 u_i)^2 \Delta^2 u_{i+1}}{(\Delta^3 u_{i+1/2})^2} \left[\left(\frac{\Delta^2 u_{i+1}}{\Delta^2 u_i} \right)^\alpha - 1 \right] + \alpha \left(\Delta u_{i+1/2} - \frac{\Delta^2 u_i \Delta^2 u_{i+1}}{\Delta^3 u_{i+1/2}} \right) \quad (5.2)$$

式 (5.2) は 1 次補間とそれを高次にする補正項の和で表せば次のようになる．

$$u(x) \doteq u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \frac{\Delta^2 u_i \Delta^2 u_{i+1}}{(\Delta^3 u_{i+1/2})^2} \{ (\Delta^2 u_i)^{1-\alpha} (\Delta^2 u_{i+1})^\alpha - (1-\alpha) \Delta^2 u_i - \alpha \Delta^2 u_{i+1} \} \quad (5.3)$$

この式は点 $x_{i+1/2}$ に関し対称である．更にこの式は次のように書き換えることもできる．

$$u(x) \doteq (1-\alpha)u_i + \alpha u_{i+1} + \frac{1}{R-1} \left(\frac{R^\alpha - 1}{R-1} - \alpha \right) \Delta^2 u_{i+1} \quad (5.4)$$

ただし $R = \Delta^2 u_{i+1} / \Delta^2 u_i$ は曲率比である．この式は $R < 0$, $R \approx 0$, 1 , $R \rightarrow \infty$, すなわち変曲点, 曲率一定, 曲率ゼロ, またその近辺には使えない．ここでは, 変曲点のある区間では補正項ゼロとし 1 次式で補間し, 曲率ほぼ一定の区間では補正項を次式で近似する．

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} \Delta^2 u_i + \frac{(\alpha+1)\alpha(\alpha-1)}{3!} \Delta^3 u_{i+1/2} + \cdots, \\ \text{または} & \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} \Delta^2 u_{i+1} + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} \Delta^3 u_{i+1/2} + \cdots \end{aligned} \quad (1-\varepsilon < R < 1+\varepsilon) \quad (5.5)$$

ただし ε は十分小さい正数とする．この近似では, 補間式は $R = 1$ で u_{i-1} , u_i , u_{i+1} または u_i , u_{i+1} , u_{i+2} を通る 2 次式になる．また曲率 R がほぼ 0 または ∞ になる直線部または直線と曲線が滑らかに接続するところでは, 補正項を次式で近似する．

$$\begin{aligned} & \{ R^\alpha - R - (1+R)(1-\alpha) \} \Delta^2 u_{i+1}, & (R < \varepsilon) \\ & \left\{ \left(\frac{1}{R} \right)^{1-\alpha} - \frac{1}{R} - \left(1 + \frac{1}{R} \right) \alpha \right\} \Delta^2 u_i & (R > 1/\varepsilon) \end{aligned} \quad (5.6)$$

これらの補正項の値は一般に小さく $R \rightarrow 0$ または ∞ でゼロに近づく．

式 (5.4) は, 曲率比 R を

$$\tilde{R} = \begin{cases} \varepsilon & (R < \varepsilon) \\ R & (\varepsilon \leq R \leq 1-\varepsilon) \\ 1-\varepsilon & (1-\varepsilon < R \leq 1) \\ 1+\varepsilon & (1 < R < 1+\varepsilon) \\ R & (1+\varepsilon \leq R \leq 1/\varepsilon) \\ 1/\varepsilon & (R > 1/\varepsilon) \end{cases} \quad (5.7)$$

で定義される修正曲率比に代えれば, 曲率一定またはゼロとその近辺にも, すなわち変曲点のある区間を除いたすべての区間に適用することができる．

以上述べた指数関数を用いる補間公式は通常 区間 $0 \leq \alpha \leq 1$ の補間に用いられるが, 境界のところでは $\alpha \geq -1$ または $\alpha \leq 2$ にも延長して用いられる．

5.1.2 制限関数を用いた補間

始めに簡単な等間隔計算点の場合について説明する．2次補間多項式は

$$u(\alpha) = u_i + \frac{1}{2}\alpha(1-\alpha)\Delta u_{i-1/2} + \frac{1}{2}\alpha(1+\alpha)\Delta u_{i+1/2} \quad (5.8)$$

ただし, $\alpha = (x-x_i)/\Delta x$, $\Delta u_{i+1/2} = u_{i+1} - u_i$ である．この2次補間公式を1次補間公式とそれを2次にする補正項の和で表せば

$$\begin{aligned} u(\alpha) &= u_i + \alpha^- \Delta u_{i-1/2} + \alpha^+ \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2}(\alpha^2 - |\alpha|)(\Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i-1/2}) \\ &= \underbrace{u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2}}_{1 \text{ 次補間}} + \underbrace{\pm \frac{1}{2}\alpha(|\alpha|-1)\Delta^2 u_i}_{2 \text{ 次補正項}} \quad (\alpha = \alpha^\pm) \end{aligned} \quad (5.9)$$

ただし $\alpha^\pm = (\alpha \pm |\alpha|)/2$, $\alpha = \alpha^+ + \alpha^-$, $|\alpha| = \alpha^+ - \alpha^-$, $\Delta^2 u = \Delta u_{i+1/2} - \Delta u_{i-1/2}$ である．補間公式を用いる数値計算において, 補間値がその両側の与えられたデータ値の間にあるときには一般に補間によって不安定性を招くことはないが, 補間値がデータ値からはみ出し極値になるとときには補間によって不安定性を招く虞がある．上式は, 1次補間の部分は安定であるから, 補正項の大きさを極値が発生しないように制限すれば, 常に安定なものに作り変えることができる．

$\alpha = \alpha^+$ の場合には, 上式は

$$u(\alpha) = u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2}\alpha(\alpha-1)(1-r^-)\Delta u_{i+1/2} \quad (5.10)$$

ただし $r^- = \Delta u_{i-1/2}/\Delta u_{i+1/2}$ は勾配比である．補間値 $u(\alpha)$ が極値になる α は次式から求められる．

$$\frac{\partial u(\alpha)}{\partial \alpha} = \left\{ \left(\frac{1}{2} + \alpha \right) + \left(\frac{1}{2} - \alpha \right) r^- \right\} \Delta u_{i+1/2} = 0 \quad (5.11)$$

補間公式 (5.10) は通常 $0 < \alpha < 1$ の範囲で用いられるが, $\alpha = 0$ に極値が来るのは式 (5.11) から $r^- = -1$ のとき, また $\alpha = 1$ に極値が来るのは $r^- = 3$ のときである．勾配比が $-1 < r^- < 3$ の範囲では $u(\alpha)$, ($0 < \alpha < 1$) に極値は生じない (次図参照)．しかしながら $r^- < -1$ または $r^- > 3$ では極値が生じるので, 通常使われている minmod 制限関数を導入し, $r^- \rightarrow \min\text{mod}(r^-+1, 4)-1$ のように置き, 補正項の大きさを制限することにする．このとき補間公式 (5.10) は次のようになる．

$$u(\alpha) = u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \left\{ 1 - \min\text{mod}\left(\frac{r^-+1}{2}, 2\right) \right\} \Delta u_{i+1/2} \quad (5.12)$$

ただし minmod 制限関数は次のように定義される．

$$\min\text{mod}(x, y) \equiv \text{sign}(x) \max[0, \min\{|x|, \text{sign}(x)y\}] = \begin{cases} x & (xy > 0 \text{ and } |x| \leq |y|) \\ y & (xy > 0 \text{ and } |x| > |y|) \\ 0 & (xy \leq 0) \end{cases} \quad (5.13)$$

下図は勾配比 $r^- = -3, -1, 1, 3, 5$ に対し式 (5.12) による補間曲線を示したものである． $r^- = -3$ の場合には, 式 (5.10) では点線のようになり, 補間値が極小値になる可能性があるが, minmod 制限関数を用いる式 (5.12) では $r^- = -1$ の場合と同じになり, 極小値になることはない． $r^- < -1$, $r^- > 3$ の場合にも同様のことが言える．

同様に $\alpha = \alpha^-$ の場合には, 式 (5.9) は

$$u(\alpha) = u_i + \alpha \Delta u_{i-1/2} + \frac{1}{2}\alpha(\alpha+1)(r^+-1)\Delta u_{i-1/2} \quad (5.14)$$

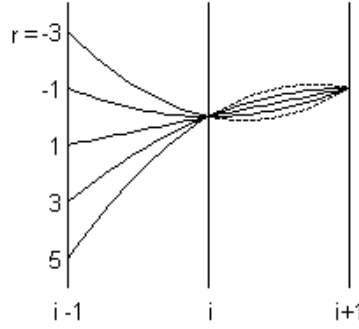


図 5.1: 制限関数を用いた 2 次補間公式

ただし $r^+ = \Delta u_{i+1/2}/\Delta u_{i-1/2}$ は勾配比で, $-1 < r^+ < 3$ の範囲にあれば式 (5.14) の $u(\alpha)$, ($-1 < \alpha < 0$) に極値は生じない. また $r^+ < -1$ または $r^+ > 3$ の範囲にあるときにも, $r^+ \rightarrow \min\text{mod}(r^++1, 4)-1$ のように置き, 補正項の大きさを制限すれば極値の発生を抑えることができる. このとき補間公式は次のようになる.

$$u(\alpha) = u_i + \alpha \Delta u_{i-1/2} - \alpha(\alpha+1) \left\{ 1 - \min\text{mod}\left(\frac{r^++1}{2}, 2\right) \right\} \Delta u_{i-1/2}$$

これら 2 つの場合をまとめれば次式が得られる.

$$u(\alpha) \doteq u_i + \alpha \Delta u_{i\pm 1/2} + \alpha(|\alpha|-1) \left\{ 1 - \min\text{mod}\left(\frac{r^\mp+1}{2}, 2\right) \right\} \Delta u_{i\pm 1/2} \quad (\alpha = \alpha^\pm) \quad (5.15)$$

不等間隔計算点の場合について述べる. 1 次補間の式は次のように表される.

$$\begin{aligned} u(x) &\doteq \begin{cases} -\alpha u_{i-1} + (\alpha+1)u_i & (\alpha \leq 0) \\ (1-\alpha)u_i + \alpha u_{i+1} & (\alpha \geq 0) \end{cases} \\ &= -\alpha^- u_{i-1} + (1-|\alpha|)u_i + \alpha^+ u_{i+1} \\ &= u_i + \alpha \Delta u_{i\pm 1/2} \quad (\alpha = \alpha^\pm) \end{aligned} \quad (5.16)$$

ただし $\alpha^+ = (x-x_i)/\Delta x_{i+1/2}$ ($0 \leq \alpha^+ \leq 1$), $\alpha^- = (x-x_i)/\Delta x_{i-1/2}$ ($-1 \leq \alpha^- \leq 0$), また $\alpha = \alpha^+ + \alpha^-$, $|\alpha| = \alpha^+ - \alpha^-$, である. 1 次補間では補間値 $u(x)$ は必ず両端の関数値 u_i と $u_{i\pm 1}$ の間に入り, 補間によって不安定性の生じることはない.

次に 2 次補間について, 前記の等間隔計算点の補間公式を不等間隔計算点のものに拡張する. $\alpha = \alpha^+$ の場合には 4.1 節の Lagrange 補間多項式から

$$\begin{aligned} u(\alpha) &= \frac{\alpha(\alpha-1)}{m^-(m^-+1)} u_{i-1} - \frac{(\alpha+m^-)(\alpha-1)}{m^-} u_i + \frac{(\alpha+m^-)\alpha}{m^-+1} u_{i+1} \\ &= u_i - \frac{\alpha(\alpha-1)}{m^-(m^-+1)} \tilde{\Delta} u_{i-1/2} + \frac{(\alpha+m^-)\alpha}{m^-+1} \tilde{\Delta} u_{i+1/2} \\ &= u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \frac{1-r^-}{m^-+1} \tilde{\Delta} u_{i+1/2} \end{aligned} \quad (5.17a)$$

$$= \underbrace{u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2}}_{1 \text{ 次補間}} + \underbrace{\frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \tilde{\Delta}^2 u_i}_{2 \text{ 次補正項}} \quad (5.17b)$$

ただし $m^- = \Delta x_{i-1/2}/\Delta x_{i+1/2}$, $\tilde{\Delta}u_{i-1/2} = \Delta u_{i-1/2}/m^-$, $\tilde{\Delta}u_{i+1/2} = \Delta u_{i+1/2}$, $r^- = \tilde{\Delta}u_{i-1/2}/\tilde{\Delta}u_{i+1/2}$, $\tilde{\Delta}^2 u_i = (\tilde{\Delta}u_{i+1/2} - \tilde{\Delta}u_{i-1/2})/\{(m^-+1)/2\}$ である. $u(\alpha)$ の極値は, 式 (5.17a) を α で微分し 0 と置いた式

$$1 - (1-2|\alpha|)\frac{1-r^-}{m^-+1} = 0$$

から求められ, 勾配比 r^- が $-m^- \leq r^- \leq 2+m^-$ の範囲にあれば当該区間 $0 < \alpha < 1$ に極値を持たないことになる. 次の 2 次補間公式は, 制限関数を導入し, 勾配比がこの範囲の外にあるときにも当該区間に極値を持たないように作り変えたものである.

$$u(\alpha) \doteq u_i + \alpha \tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r^-+m^-}{1+m^-}, 2 \right) \right\} \tilde{\Delta}u_{i+1/2} \quad (5.18)$$

この minmod 制限関数は, 当該区間 $0 < \alpha < 1$ の勾配 $\tilde{\Delta}u_{i+1/2}$ に対し隣接区間の勾配 $\tilde{\Delta}u_{i-1/2}$ の大きさを $-m^- \tilde{\Delta}u_{i+1/2} \leq \tilde{\Delta}u_{i-1/2} \leq (2+m^-) \tilde{\Delta}u_{i+1/2}$ の範囲に制限するものである. これによって, $u(\alpha)$ は当該区間に極値を持たないようにその 2 次補正項の大きさが制限され, 補間に伴う不安定性の発生が抑えられるのである.

同様に $\alpha = \alpha^-$ の場合には

$$\begin{aligned} u(\alpha) &= \frac{\alpha(\alpha-m^+)}{1+m^+} u_{i-1} - \frac{(\alpha+1)(\alpha-m^+)}{m^+} u_i + \frac{(\alpha+1)\alpha}{(1+m^+)m^+} u_{i+1} \\ &= u_i + \alpha \hat{\Delta}u_{i-1/2} + \alpha(\alpha+1) \frac{r^+-1}{1+m^+} \hat{\Delta}u_{i-1/2} \end{aligned} \quad (5.19a)$$

$$= u_i + \alpha \hat{\Delta}u_{i-1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha+1) \hat{\Delta}^2 u_i \quad (5.19b)$$

ただし $m^+ = \Delta x_{i+1/2}/\Delta x_{i-1/2}$, $\hat{\Delta}u_{i-1/2} = \Delta u_{i-1/2}$, $\hat{\Delta}u_{i+1/2} = \Delta u_{i+1/2}/m^+$, $r^+ = \hat{\Delta}u_{i+1/2}/\hat{\Delta}u_{i-1/2}$, $\hat{\Delta}^2 u_i = (\hat{\Delta}u_{i+1/2} - \hat{\Delta}u_{i-1/2})/\{(1+m^+)/2\} = \tilde{\Delta}^2 u_i (m^-)^2$ である. 当該区間 $-1 < \alpha < 0$ に極値を持たない安定な 2 次補間公式は次のようになる.

$$u(\alpha) \doteq u_i + \alpha \hat{\Delta}u_{i-1/2} - \alpha(\alpha+1) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r^++m^+}{1+m^+}, 2 \right) \right\} \hat{\Delta}u_{i-1/2} \quad (5.20)$$

次に一般の 3 次補間多項式の安定化について述べる. 4.1 節の 3 次 Lagrange 補間多項式は次のように書き換えることができる.

$$\begin{aligned} u(\alpha) &= -\frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-1-m^+)}{m^-(m^-+1)(m^-+1+m^+)} u_{i-1} + \frac{(\alpha+m^-)(\alpha-1)(\alpha-1-m^+)}{m^-(1+m^+)} u_i \\ &\quad - \frac{(\alpha+m^-)\alpha(\alpha-1-m^+)}{(m^-+1)m^+} u_{i+1} + \frac{(\alpha+m^-)\alpha(\alpha-1)}{(m^-+1+m^+)(1+m^+)m^+} u_{i+2} \\ &= u_i + \alpha \tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \left\{ \tilde{\Delta}^2 u_i + \frac{1}{3} (\alpha+m^-) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2} \right\} \end{aligned} \quad (5.21a)$$

$$= \underbrace{u_i + \alpha \tilde{\Delta}u_{i+1/2}}_{1 \text{ 次補間}} + \underbrace{\frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \tilde{\Delta}^2 u_i}_{2 \text{ 次補正項}} + \underbrace{\frac{1}{3} (\alpha-1-m^+) \tilde{\Delta}^3 u_{i+1/2}}_{3 \text{ 次補正項}}$$

$$= \phi_1 \left\{ u_i + \alpha \tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \tilde{\Delta}^2 u_i \right\} + \phi_2 \left\{ u_i + \alpha \tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} \right\} \quad (5.21b)$$

ただし $\alpha = (x - x_i)/\Delta x_{i+1/2}$, またここでは区間 $0 \leq \alpha \leq 1$ をベースに定義されたものが用いられた.

$m^- = \Delta x_{i-1/2} / \Delta x_{i+1/2}$, $m^+ = \Delta x_{i+3/2} / \Delta x_{i+1/2}$, また 1 階から 3 階の差分は

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}u_{i-1/2} &= \frac{u_i - u_{i-1}}{m^-}, & \tilde{\Delta}u_{i+1/2} &= \frac{u_{i+1} - u_i}{1}, & \tilde{\Delta}u_{i+3/2} &= \frac{u_{i+2} - u_{i+1}}{m^+} \\ \tilde{\Delta}^2u_i &= \frac{\tilde{\Delta}u_{i+1/2} - \tilde{\Delta}u_{i-1/2}}{(m^-+1)/2}, & \tilde{\Delta}^2u_{i+1} &= \frac{\tilde{\Delta}u_{i+3/2} - \tilde{\Delta}u_{i+1/2}}{(1+m^+)/2}, \\ \tilde{\Delta}^3u_{i+1/2} &= \frac{\tilde{\Delta}^2u_{i+1} - \tilde{\Delta}^2u_i}{(m^-+1+m^+)/3} \\ \phi_1(\alpha) &= -\frac{\alpha-1-m^+}{m^-+1+m^+}, & \phi_2(\alpha) &= \frac{\alpha+m^-}{m^-+1+m^+}\end{aligned}$$

式 (5.21) の第 2 式は 2 次補間式と 3 次補正項の和で表したものである．第 3 式は点 u_i, u_{i+1}, u_{i+2} を通る別の 2 次補間式と 3 次補正項の和で表したもので、また最後の式はこれらの式から 3 階差分の項を消去し 2 つの 2 次補間公式の 1 次結合で表したものである．結合のパラメータ ϕ_1, ϕ_2 は α の関数で、下図に示すように、それらの和は 1 で、区間 $x_{i-1} \leq x \leq x_{i+2}$ では共に正である．また 2 次式の補間区間で大きく、外挿区間で小さいことが分かる．これより 3 次補間公式の補間値はこれら 2 つの 2 次補間公式による補間値の間にあることが分かる．

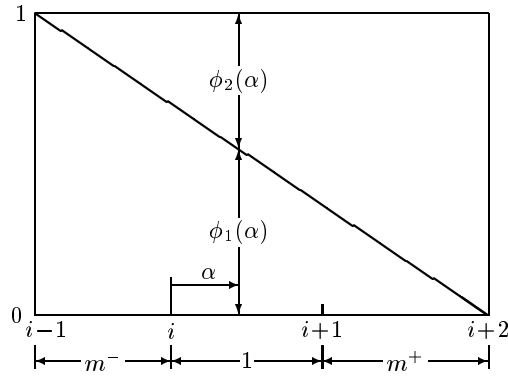


図 5.2: 3 次補間公式における ϕ_1, ϕ_2

3 次補間公式 (5.21b) はその中の 2 つの 2 次補間式を上記の安定化した公式 (5.18) または (5.20) で置き換えれば安定化することができる．

$$\begin{aligned}u(\alpha) &\doteq u_i + \alpha \tilde{\Delta}u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \\ &\quad \times \left[\phi_1 \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r^- + m^-}{1 + m^-}, 2 \right) \right\} - \phi_2 \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r^+ + m^+}{1 + m^+}, 2 \right) \right\} \right] \tilde{\Delta}u_{i+1/2}\end{aligned}\quad (5.22)$$

式 (5.22) による補間値は、常用の区間 $[x_i, x_{i+1}]$ ではもちろんその両端の値 u_i, u_{i+1} の間にあり、かつ 2 つの安定な 2 次補間公式による補間値の間にある．

等間隔の場合には $m^- = m^+ = 1$, $\tilde{\Delta} = \hat{\Delta} = \Delta$ であるから、上記の 3 次補間公式 (5.21) は次のようになる．

$$\begin{aligned}u(\alpha) &= u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \left(\Delta^2 u_i + \phi_2 \Delta^3 u_{i+1/2} \right) \\ &= u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \left(\Delta^2 u_{i+1} - \phi_1 \Delta^3 u_{i+1/2} \right)\end{aligned}\quad (5.23a)$$

$$= \phi_1 \left\{ u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \Delta^2 u_i \right\} + \phi_2 \left\{ u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \Delta^2 u_{i+1} \right\}\quad (5.23b)$$

ただしこの場合の結合のパラメータは $\phi_1 = -(\alpha-2)/3$, $\phi_2 = (1+\alpha)/3$ である。また制限関数を導入し安定化した式 (5.22) は次のようになる。

$$u(\alpha) \doteq u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \times \left[\phi_1 \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r^-+1}{2}, 2 \right) \right\} - \phi_2 \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r^++1}{2}, 2 \right) \right\} \right] \Delta u_{i+1/2} \quad (5.24)$$

ただし $r^- = \Delta u_{i-1/2} / \Delta u_{i+1/2}$, $r^+ = \Delta u_{i+3/2} / \Delta u_{i+1/2}$ である。

5.1.3 例題と補間公式の限界

与えられた離散データが滑らかに変化する場合には、補間値は補間公式によらずほとんど同じになる。しかしながら指数関数的に変化するデータ、極大値または極小値、更には折れ曲りのあるものでは、補間値は補間公式によって大きく異なり、適切に補間が行われないうときは、補間を含む計算全体が不安定になることもある。はじめに、上述の Lagrange 補間公式、指数関数を用いた補間公式、minmod 関数を導入した Lagrange 補間公式を用いいくつかの例題を解く。

CASE 1 $u_0 = 5, u_{i+1} = u_i/10$

CASE 2 $u(x) = 3 \sin \pi(x/4+1/6)$

CASE 3 $u_0 = u_1 = 1, u(x) = 2+0.2x \ (x \geq 2)$

CASE 4 $u_0 = 5, u_1 = u_2 = 2, u(x) = 4-x \ (x \geq 2)$

以下にはメインプログラムは省略し、上記の3つの補間法のサブルーチンのみ示すことにする。

```
! ***** Lagrangian interpolation polynomial
SUBROUTINE LAGINT(u,if,un,nf)
DIMENSION u(0:if),un(0:nf)
DO i=1,if-2
  kb=0; IF(i== 1)kb=-8
  ke=7; IF(i==if-2)ke=16
  DO k=kb,ke; n=8*i+k; al=FLOAT(k)/8.
    c0=-al*(al-1.)*(al-2.)/6.
    c1=(al+1.)*(al-1.)*(al-2.)/2.
    c2=-(al+1.)*al*(al-2.)/2.
    c3=(al+1.)*al*(al-1.)/6.
    un(n)=c0*u(i-1)+c1*u(i)+c2*u(i+1)+c3*u(i+2)
  ENDDO
ENDDO
END

! ***** Interpolation by linear+exponential function
SUBROUTINE EXPINT(u,if,un,nf)
DIMENSION u(0:if),un(0:nf)
rm0(x,e)=SIGN(MAX(ABS(x),e),x)
rang(x,a,b)=MIN(MAX(x,a),b)
e=.01
DO i=1,if-2
  kb=0; IF(i== 1)Kb=-8
  ke=7; IF(i==if-2)ke=16
  dum=u(i)-u(i-1); du=u(i+1)-u(i); dup=u(i+2)-u(i+1)
  ddu=du-dum; ddup=dup-du; dddu=ddup-ddu
  ddu0=rm0(ddd, e); R=ddup/ddu0
  cycle_1: DO k=kb,ke; n=8*i+k; al=FLOAT(k)/8.; al1=1.-al
```

```

un(n)=u(i)+al*du
IF(R<=0.) THEN                                !inflection point
  IF(k<0) THEN; au=2.*ABS(dum)
  un(n)=u(i)+al*dum-.5*al*(1.+al)*rang(dum-du,-au,au)
ENDIF
IF(k>=8) THEN; al=al-1.; au=2.*ABS(dup)
  un(n)=u(i+1)+al*dup-.5*al*(1.-al)*rang(dup-du,-au,au)
ENDIF; CYCLE cycle_1
ELSEIF(R>1.-e.AND.R<1.+e) THEN                !nearly const curvature
  c=-al*al1/2.*ddu-(al+1.)*al*al1/6.*dddu
ELSEIF(R<e) THEN; c=(r**al-R-(1.+R)*al1)*R*ddu !very small R
ELSEIF(R>1./e) THEN                            !very large R
  ddup0=rm0(ddup,e); R1=ddu/ddup0
  c=(R1**al1-R1-(1.+R1)*al)*R1*ddup
ELSE
  c=ddu*ddup/dddu/dddu*(ddu*R**al-al1*ddu-al*ddup)
ENDIF
un(n)=un(n)+c
ENDDO cycle_1
ENDDO
END

! ***** Lagrangian interpolation with limiter
SUBROUTINE LAGINTL(u,if,un,nf)
DIMENSION u(0:if),un(0:nf)
AMINMOD(x,y)=SIGN(1.,x)*MAX(0.,MIN(ABS(x),SIGN(1.,x)*y)) !minmod limiter
DO i=1,if-2
  dum=u(i)-u(i-1); du=u(i+1)-u(i); dup=u(i+2)-u(i+1)
  DO k=0,7; n=8*i+k; al=FLOAT(k)/8.
    phi1=(2.-al)/3.; phi2=(1.+al)/3.
    x1=(dum/du+1.)/2.; x2=(dup/du+1.)/2.
    un(n)=u(i)+al*du+.5*al*(al-1.) &
      *(phi1*(1.-AMINMOD(x1,2))-phi2*(1.-AMINMOD(x2,2)))*du
  ENDDO
ENDDO
i=0; du=u(1)-u(0); dup=u(2)-u(1)                !near left bound
DO k=0,7; n=k; al=FLOAT(k)/8.-1.
  x1=(dup/du+1.)/2.
  un(n)=u(1)+al*du-al*(al+1.)*(1.-AMINMOD(x1,2.))*du
ENDDO
i=if-1; du=u(i+1)-u(i); dum=u(i)-u(i-1)        !near right bound
DO k=0,8; n=8*i+k; al=FLOAT(k)/8.
  x1=(dum/du+1.)/2.
  un(n)=u(i)+al*du+al*(al-1.)*(1.-AMINMOD(x1,2.))*du
ENDDO
END

```

これらのサブルーチンは、配列 u にデータ u_i を入れて引用すれば、配列 un に補間値 u_n が入って戻るように作られている。 $i_f = 5$, $n_f = 40$ 。計算の結果を図 5.3 に示す。CASE 1 は関数値 $u(x)$ が境界 $x = 0$ の近傍で急激に増加する場合である。この場合には指数関数を用いた補間公式が最適で、Lagrange 補間公式ないし 2 次以上の多項式による補間は極値を持つので要注意である。CASE 2 は正弦曲線で、Lagrangian の赤線は exponential の緑線に消されているが両者はほとんど同じである。極値の発生を嫌う場合には minmod 関数を含む Lagrange 補間公式が推奨される。CASE 3 と CASE 4 は折れ曲りのある場合で、Lagrange 補間公式は折れ曲りの前後で極値の発生する虞があるが、ほかの 2 つはその虞のないことが分かる。どの補

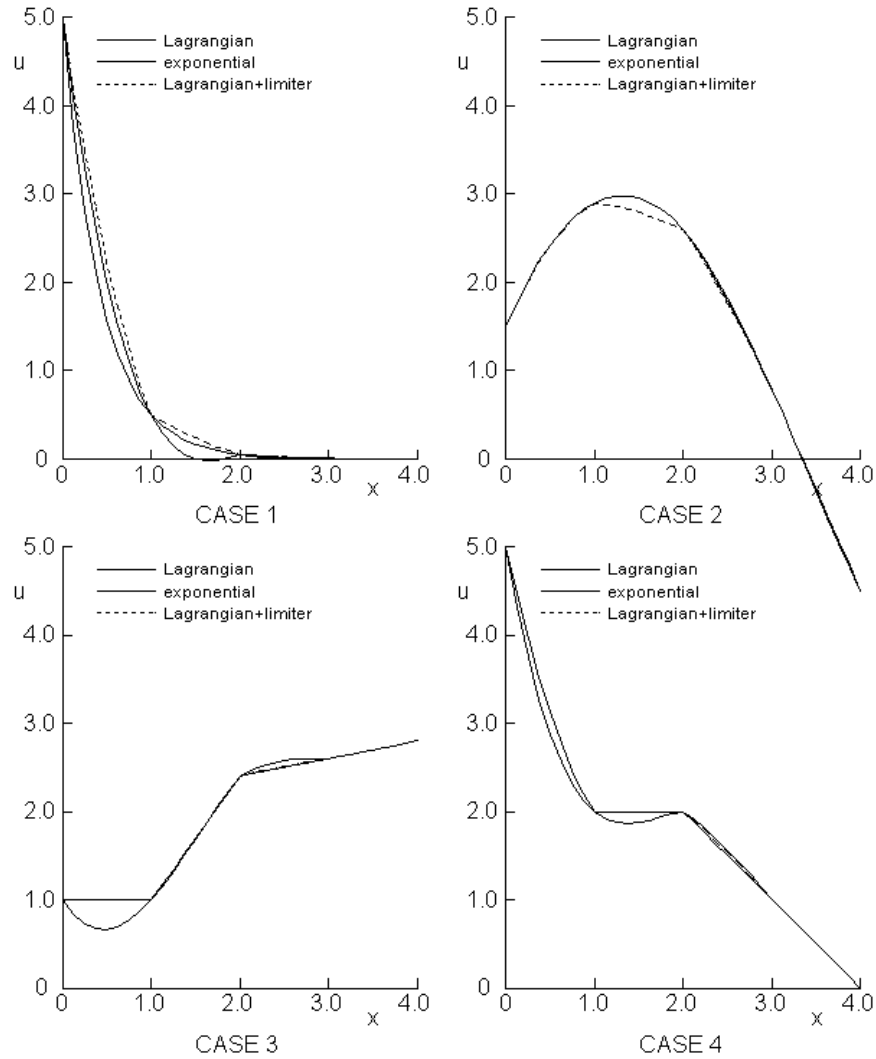


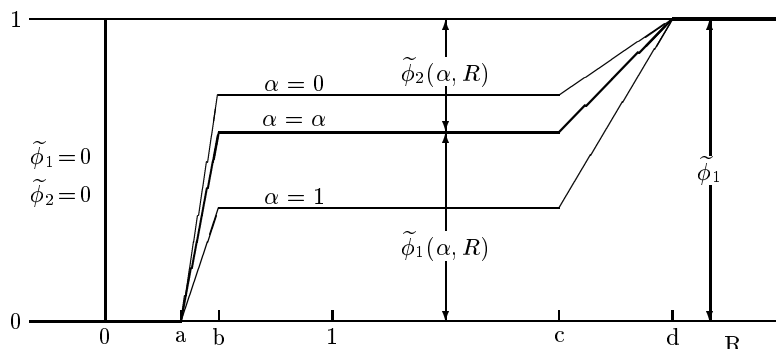
図 5.3: 補間公式の比較

間公式を用いるべきかは場合による。

式 (5.22) または (5.24) において, 2つの2次式の曲率の比 $R \equiv \tilde{\Delta}^2 u_{i+1} / \tilde{\Delta}^2 u_i$ が1から大きくそれる場合, すなわち与えられた離散データが大きい折れ曲りまたはピーク値を持つ場合には, それを意識して補間することが望ましい. ここでは曲率比 R が1から大きくそれる場合には小さい方の曲率を取り, R が負の場合には1次補間に切り替え, また3次補間から2次補間への移行は緩やかに行われるようにする. このような考えを盛り込んだ3次補間式を次に示す. 図5.4はこれらの要求を満足する結合のパラメータ $\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2$ を示したもので, 式で示せば次のようになる.

$$\tilde{\phi}_1 = \min\text{mod}\left(\frac{R-a}{b-a}, 1\right)\phi_1 + \min\text{mod}\left(\frac{R-c}{d-c}, 1\right)\phi_2 \quad (5.25a)$$

$$\tilde{\phi}_2 = \mathbf{1}(R) - \tilde{\phi}_1 \quad (5.25b)$$

図 5.4: 修正 3 次補間公式における $\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2$

ただし $\mathbf{1}$ は Heaviside 演算子である．修正 3 次補間公式は次のようになる．

$$u(x) \doteq u_i + \alpha \tilde{\Delta} u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \times \left[\tilde{\phi}_1 \left\{ 1 - \min \text{mod} \left(\frac{r^- + 1}{2}, 2 \right) \right\} - \tilde{\phi}_2 \left\{ 1 - \min \text{mod} \left(\frac{r^+ + 1}{2}, 2 \right) \right\} \right] \tilde{\Delta} u_{i+1/2} \quad (5.26)$$

$b \leq R \leq c$ では 3 次補間， $0 < R \leq a$ と $R \geq d$ では 2 次補間， $R \leq 0$ では 1 次補間が行われ，また区間 $[a, b]$ と $[c, d]$ では 3 次補間から 2 次補間へ緩やかに移行する．ただしこれらの 3 次補間と 2 次補間の式は制限関数を含むもので，制限関数が働けば精度は落ちることになる． a, b, c, d の値は，対称性により $a = 1/d, b = 1/c$ に取るべきで，ここには $c = 2, d = 3 \sim$ を一応の目安としてあげておく．等間隔の場合の修正 3 次補間公式は次のようになる．

$$u(x) \doteq u_i + \alpha \Delta u_{i+1/2} + \alpha(\alpha-1) \times \left[\tilde{\phi}_1 \left\{ 1 - \min \text{mod} \left(\frac{r^- + 1}{2}, 2 \right) \right\} - \tilde{\phi}_2 \left\{ 1 - \min \text{mod} \left(\frac{r^+ + 1}{2}, 2 \right) \right\} \right] \Delta u_{i+1/2} \quad (5.27)$$

次に 3 次 Lagrangian 補間公式， $\min \text{mod}$ 関数を導入した Lagrangian 補間公式 (5.24)，修正 Lagrangian 補間公式 (5.27) を用い 1 つの例題を解く．

CASE 5 $u(x) = -x^2/3 + 2x + 1$ ($x \leq 2$), $= x^2/6 - 3x + 9$ ($x \geq 2$)
等間隔の場合の修正 3 次 Lagrangian 補間公式のサブルーチンは次のようになる．

```
! ***** modified Lagrangian interpolation
SUBROUTINE LAGINTM(u,if,un,nf)
DIMENSION u(0:if),un(0:nf)
AMINMOD(x,y)=SIGN(1.,x)*MAX(0.,MIN(ABS(x),SIGN(1.,x)*y))
RMO(x,e)=SIGN(MAX(ABS(x),e),x)
RMI(x,f)=SIGN(MIN(ABS(x),f),x)
e=.01
DO i=1,if-2
  dum=u(i)-u(i-1); du=u(i+1)-u(i); dup=u(i+2)-u(i+1)
  ddu=du-dum; ddu0=rmo(du,e)
  ddup=dup-du; r=ddup/ddu0; r=rmi(r,1./E)
  x=(r-.25)/(.333-.25); am1=AMINMOD(x,1.)
  x=(r-3.)/(4.-3.); am2=AMINMOD(x,1.)
  kb=0; IF(i== 1)kb=-8
  ke=7; IF(i==if-2)ke=16
```

```

DO k=kb,ke; n=8*i+k; a1=FLOAT(k)/8.
  phi1=(2.-a1)/3.; phi2=(1.+a1)/3.
  Tphi1=am1*phi1+am2*phi2
  Tphi2=1.-Tphi1; IF(r<0.)Tphi2=0.
  x1=(dum/du+1.)/2.; x2=(dup/du+1.)/2.
  un(n)=u(i)+a1*du+.5*a1*(a1-1.) &
    *(Tphi1*(1.-AMINMOD(x1,2))-Tphi2*(1.-AMINMOD(x2,2)))*du
ENDDO
ENDDO
i=0; du=u(1)-u(0); dup=u(2)-u(1)          !near left bound
:
```

このサブルーチンの最後の部分は前記のサブルーチン LAGINTL と同じになるので省略した。計算の結果を図 5.5 に示す。もとの離散データが勾配の不連続を含む場合には、修正 Lagrangian 補間公式が折れ曲りのところでより自然な結果を与えることが分かる。

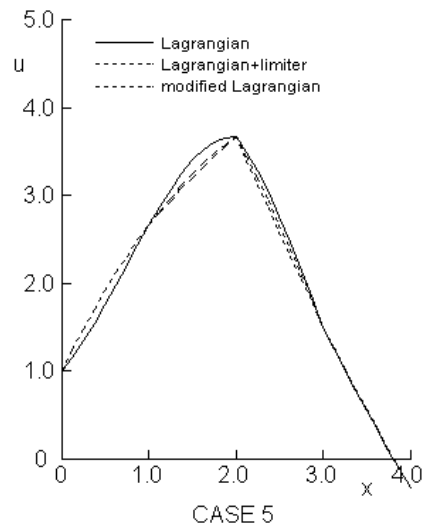


図 5.5: 補間公式の比較 2

5.2 構造格子における補間法

滑らかな構造格子の場合には上述の補間公式がそのまま利用できる．ここにはデカルト座標系の長方形格子 (rectangle grid) と一般曲線座標系の曲線座標格子 (curvilinear coordinate grid) における補間に関していくつかの例を示すにとどめる．不等間隔直方体格子の格子点 x_i, y_j, z_k 上の関数 u_{ijk} の値が既知のときに，任意の点 x, y, z の関数 $u(x, y, z)$ の値を補間することを考える．4.1 節に述べた 3 次 Lagrange 補間公式を用いれば，

$$u(\alpha, \beta, \gamma) \doteq \sum_{l=-1}^2 C_l^3(\alpha) \sum_{m=-1}^2 C_m^3(\beta) \sum_{n=-1}^2 C_n^3(\gamma) u_{i+l, j+m, k+n} \quad (5.28)$$

ただし $C_l^3(\alpha)$ ($l = -1, 0, 1, 2$) は 3 次の補間係数で，

$$C_{-1}^3(\alpha) = -\frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-1-m_i^+)}{m_i^-(m_i^-+1)(m_i^-+1+m_i^+)}, \quad C_0^3(\alpha) = \frac{(\alpha+m_i^-)(\alpha-1)(\alpha-1-m_i^+)}{m_i^-(1+m_i^+)},$$

$$C_1^3(\alpha) = -\frac{(\alpha+m_i^-)\alpha(\alpha-1-m_i^+)}{(m_i^-+1)m_i^+}, \quad C_2^3(\alpha) = \frac{(\alpha+m_i^-)\alpha(\alpha-1)}{(m_i^-+1+m_i^+)(1+m_i^+)m_i^+}$$

ただし $\alpha = (x-x_i)/\Delta x_{i+1/2}$, $\Delta x_{i+1/2} = x_{i+1}-x_i$, $m_i^- = \Delta x_{i-1/2}/\Delta x_{i+1/2}$, $m_i^+ = \Delta x_{i+3/2}/\Delta x_{i+1/2}$ である．また $\beta = (y-y_j)/\Delta y_{j+1/2}$, $\gamma = (z-z_k)/\Delta z_{k+1/2}$ ．なお補間の結果は l, m, n に関する総和の順番には無関係である．

上の Lagrange 補間公式は次のように書くこともできる．

$$u_{ij}(\gamma) \doteq u_{ijk} + \gamma \tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+1/2} + \frac{1}{2} \gamma(\gamma-1) \{ \phi_1(\gamma) \tilde{\Delta}_z^2 u_{ijk} + \phi_2(\gamma) \tilde{\Delta}_z^2 u_{i,j,k+1} \}, \quad (5.29a)$$

$$u_i(\beta, \gamma) \doteq u_{ij}(\gamma) + \beta \tilde{\Delta}_y u_{i,j+1/2}(\gamma) + \frac{1}{2} \beta(\beta-1) \{ \phi_1(\beta) \tilde{\Delta}_y^2 u_{ij}(\gamma) + \phi_2(\beta) \tilde{\Delta}_y^2 u_{i,j+1}(\gamma) \}, \quad (5.29b)$$

$$u(\alpha, \beta, \gamma) \doteq u_i(\beta, \gamma) + \alpha \tilde{\Delta}_x u_{i+1/2}(\beta, \gamma) + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \{ \phi_1(\alpha) \tilde{\Delta}_x^2 u_i(\beta, \gamma) + \phi_2(\alpha) \tilde{\Delta}_x^2 u_{i+1}(\beta, \gamma) \} \quad (5.29c)$$

ただし $\phi_1(\alpha) = -(\alpha-1-m_i^+)/(m_i^-+1+m_i^+)$, $\phi_2(\alpha) = (\alpha+m_i^-)/(m_i^-+1+m_i^+)$, $\tilde{\Delta}_z u_{i,j,k-1/2} = (u_{ijk} - u_{i,j,k-1})/m_k^-$, $\tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+1/2} = u_{i,j,k+1} - u_{ijk}$, $\tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+3/2} = (u_{i,j,k+2} - u_{i,j,k+1})/m_k^+$, $\tilde{\Delta}_z^2 u_{ijk} = (\tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+1/2} - \tilde{\Delta}_z u_{i,j,k-1/2})/\{(m_k^-+1)/2\}$, $\tilde{\Delta}_z^2 u_{i,j,k+1} = (\tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+3/2} - \tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+1/2})/\{(1+m_k^+)/2\}$, また例えば $\tilde{\Delta}_y^2 u_{ij}(\gamma) = (\tilde{\Delta}_y u_{i,j+1/2}(\gamma) - \tilde{\Delta}_y u_{i,j-1/2}(\gamma))/\{(m_j^-+1)/2\}$ である．3 次元空間の補間は式で表せばやや分かり難いものになるが，3 次 Lagrange 補間の場合には，要するに下図に示すように，まず z 方

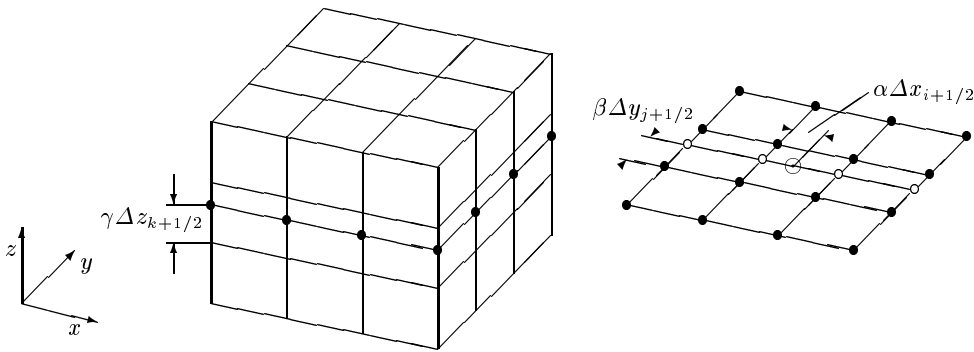


図 5.6: 3 次元空間における 3 次 Lagrange 補間

向に 16 の補間を行い，次にその結果をもとに y 方向に 4 つの補間を行い，最後に x 方向に 1 つの補間を行うことになる．

また minmod 関数を導入し安定化した 3 次 Lagrange 補間公式 (5.22) の場合には次のようになる．

$$u_{ij}(\gamma) \doteq u_{ijk} + \gamma \tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+1/2} + \gamma(\gamma-1) \left[\phi_1(\gamma) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_k^- + m_k^-}{1 + m_k^-}, 2 \right) \right\} - \phi_2(\gamma) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_k^+ + m_k^+}{1 + m_k^+}, 2 \right) \right\} \right] \tilde{\Delta}_z u_{i,j,k+1/2}, \quad (5.30a)$$

$$u_i(\beta, \gamma) \doteq u_{ij}(\gamma) + \beta \tilde{\Delta}_y u_{i,j+1/2}(\gamma) + \beta(\beta-1) \left[\phi_1(\beta) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_j^- + m_j^-}{1 + m_j^-}, 2 \right) \right\} - \phi_2(\beta) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_j^+ + m_j^+}{1 + m_j^+}, 2 \right) \right\} \right] \tilde{\Delta}_y u_{i,j+1/2}(\gamma), \quad (5.30b)$$

$$u(\alpha, \beta, \gamma) \doteq u_i(\beta, \gamma) + \alpha \tilde{\Delta}_x u_{i+1/2}(\beta, \gamma) + \alpha(\alpha-1) \left[\phi_1(\alpha) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_i^- + m_i^-}{1 + m_i^-}, 2 \right) \right\} - \phi_2(\alpha) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_i^+ + m_i^+}{1 + m_i^+}, 2 \right) \right\} \right] \tilde{\Delta}_x u_{i+1/2}(\beta, \gamma) \quad (5.30c)$$

次に曲線座標格子における補間の例について述べる．物理空間のデカルト座標系を \boldsymbol{x} とする．曲線座標格子は，一般曲線座標系 (general curvilinear coordinates) $\boldsymbol{\xi}$ に沿って形成され，この格子は写像空間 $\boldsymbol{\xi}$ では通常 一辺の長さ 1 の立方体格子 (2 次元の場合には正方形格子) になる¹．補間は通常 写像空間の格子に対して行われ，上記の 3 次元の補間法を使うことができる．一辺の長さ 1 の立方体格子の場合には上記の式 (5.29) は次のようになる．

$$\begin{aligned} u_{ij}(\gamma) &\doteq u_{ijk} + \gamma \Delta_z u_{i,j,k+1/2} + \frac{1}{2} \gamma(\gamma-1) \{ \phi_1(\gamma) \Delta_z^2 u_{ijk} + \phi_2(\gamma) \Delta_z^2 u_{i,j,k+1} \}, \\ u_i(\beta, \gamma) &\doteq u_{ij}(\gamma) + \beta \Delta_y u_{i,j+1/2}(\gamma) + \frac{1}{2} \beta(\beta-1) \{ \phi_1(\beta) \Delta_y^2 u_{ij}(\gamma) + \phi_2(\beta) \Delta_y^2 u_{i,j+1}(\gamma) \}, \\ u(\alpha, \beta, \gamma) &\doteq u_i(\beta, \gamma) + \alpha \Delta_x u_{i+1/2}(\beta, \gamma) + \frac{1}{2} \alpha(\alpha-1) \{ \phi_1(\alpha) \Delta_x^2 u_i(\beta, \gamma) + \phi_2(\alpha) \Delta_x^2 u_{i+1}(\beta, \gamma) \} \end{aligned}$$

ただし $\alpha = x - x_i$ ， $\beta = y - y_j$ ， $\gamma = z - z_k$ ， $\phi_1(\alpha) = -(\alpha-2)/3$ ， $\phi_2(\alpha) = (\alpha+1)/3$ ， $\Delta_z u_{i,j,k-1/2} = u_{ijk} - u_{i,j,k-1}$ ， $\Delta_z^2 u_{ijk} = \Delta_z u_{i,j,k+1/2} - \Delta_z u_{i,j,k-1/2}$ ，また $\Delta_y^2 u_{ij}(\gamma) = \Delta_y u_{i,j+1/2}(\gamma) - \Delta_y u_{i,j-1/2}(\gamma)$ ， \dots である．また式 (5.30) は次のようになる．

$$\begin{aligned} u_{ij}(\gamma) &\doteq u_{ijk} + \gamma \Delta_z u_{i,j,k+1/2} + \gamma(\gamma-1) \\ &\quad \left[\phi_1(\gamma) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_k^- + 1}{2}, 2 \right) \right\} - \phi_2(\gamma) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_k^+ + 1}{2}, 2 \right) \right\} \right] \Delta_z u_{i,j,k+1/2}, \\ u_i(\beta, \gamma) &\doteq u_{ij}(\gamma) + \beta \Delta_y u_{i,j+1/2}(\gamma) + \beta(\beta-1) \\ &\quad \left[\phi_1(\beta) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_j^- + 1}{2}, 2 \right) \right\} - \phi_2(\beta) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_j^+ + 1}{2}, 2 \right) \right\} \right] \Delta_y u_{i,j+1/2}(\gamma), \\ u(\alpha, \beta, \gamma) &\doteq u_i(\beta, \gamma) + \alpha \Delta_x u_{i+1/2}(\beta, \gamma) + \alpha(\alpha-1) \\ &\quad \left[\phi_1(\alpha) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_i^- + 1}{2}, 2 \right) \right\} - \phi_2(\alpha) \left\{ 1 - \min\text{mod} \left(\frac{r_i^+ + 1}{2}, 2 \right) \right\} \right] \Delta_x u_{i+1/2}(\beta, \gamma) \end{aligned}$$

写像空間の立方体 (正方形) 格子上ですべての計算を行う場合にはこれで十分であるが，物理空間の補間値 $u(\boldsymbol{x})$ が必要な場合には， $u(\alpha)$ の補間と同時に $\boldsymbol{x}(\alpha)$ の補間を同じ式を使って行う必要がある．

¹ ここで的一般は直交に対する語がかつては非直交 (non-orthogonal) とも言われたが直交を含むものである．

5.3 有限要素法の補間関数

有限要素法 (finite element method, FEM) では, 計算領域が三角形, 四辺形, 四面体, 六面体などの要素 (elements) に分割され (mesh discretization), 変数値は要素の節点上に与えられ, 要素内の任意の点における変数値はその要素の節点値 (nodal values) をもとに補間によって求められる. その補間関数 (interpolation function) は通常 多項式で, その次数により要素は 1 次要素, 2 次要素などと呼ばれる.

5.3.1 三角形要素, 四面体要素

ここではまず簡単な三角形 1 次要素 (linear triangular element) を例にとり, 補間関数について説明する. 図 5.7 に三角形 1 次要素を示す. 要素節点番号は通常 左回り (反時計回り) に付けられる. この要素の補間関数 $u^*(x, y)$ は x, y, u 空間内の平面で, 次の 1 次式で表される.

$$u^*(\mathbf{x}) = c_1 + c_2x + c_3y \quad (5.31)$$

ただし c_1, c_2, c_3 は未定係数で, 節点値 $x_i, y_i, u_i (i = 1, 2, 3)$ の関数である. 式 (5.31) は節点上でも成り立つから次の 3 節点条件が得られる.

$$u_i = c_1 + c_2x_i + c_3y_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.32)$$

3 個の未定係数はこれらの節点条件から一意的に決定することができ, それらを式 (5.31) に代入すれば補間関数の式が導かれる. 補間関数は三角形 1 次要素ではこのようにして容易に決定できるが, 高次要素ではむずかしく, 通常次の方法が採られている.

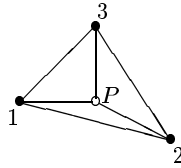


図 5.7: 三角形 1 次要素

式 (5.31) は u^* が c_1, c_2, c_3 の 1 次式であること, 式 (5.32) は c_1, c_2, c_3 が u_1, u_2, u_3 の 1 次式であることを示している. したがって $u^*(\mathbf{x})$ は u_1, u_2, u_3 の 1 次式で次のように置くことができる.

$$u^*(\mathbf{x}) = \phi_1(\mathbf{x})u_1 + \phi_2(\mathbf{x})u_2 + \phi_3(\mathbf{x})u_3 = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u} \quad (5.33a)$$

ただし

$$\boldsymbol{\phi} = (\phi_1 \ \phi_2 \ \phi_3), \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \quad (5.33b)$$

式 (5.33) に式 (5.31) と (5.32) を代入すれば

$$c_1 + c_2x + c_3y = (c_1 + c_2x_1 + c_3y_1)\phi_1 + (c_1 + c_2x_2 + c_3y_2)\phi_2 + (c_1 + c_2x_3 + c_3y_3)\phi_3$$

この式は c_1, c_2, c_3 の値によらず成立するから, 両辺のそれらの係数を等値すれば次式が得られる.

$$\begin{aligned} \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 &= 1, \\ x_1\phi_1 + x_2\phi_2 + x_3\phi_3 &= x, \\ y_1\phi_1 + y_2\phi_2 + y_3\phi_3 &= y \end{aligned} \quad (5.34a)$$

あるいは

$$\mathbf{A}^T \boldsymbol{\phi}^T = \mathbf{b}^T, \quad (\boldsymbol{\phi} \mathbf{A} = \mathbf{b}) \quad (5.34b)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & x & y \end{pmatrix} \quad (5.34c)$$

式 (5.34) は $\boldsymbol{\phi}$ の連立 1 次方程式で、その解 $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$ は Cramer の公式から次のようになる。

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x & y \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x & y \end{vmatrix} \end{pmatrix} \quad (5.35a)$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} \quad (5.35b)$$

結局 三角形 1 次要素の補間関数は、 $\boldsymbol{\phi}$ を式 (5.34) を消去法で解いて、あるいは式 (5.35) から直接計算し、これらを式 (5.33) に入れれば決定できる。式 (5.35b) の Δ は、

$$\Delta = (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1) = |(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1)|$$

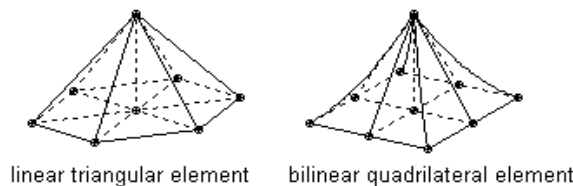
となるから、三角形要素の面積の 2 倍であることが分かる。式 (5.35a) の行列式も同様に幾何学的に解釈できるから、 ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 はそれぞれ $\triangle 123$ の面積に対する $\triangle P23, \triangle P31, \triangle P12$ の面積の割合を表している。それゆえ ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 は面積座標と呼ばれることがある。

補間関数 $u^*(\mathbf{x})$ は、一般に節点値 u_j の 1 次式で次のように表される。

$$u^*(\mathbf{x}) = \phi_j(\mathbf{x})u_j = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u} \quad (5.36)$$

$$\mathbf{A}^T \boldsymbol{\phi}^T(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^T(\mathbf{x}) \quad (5.37)$$

ただし $\boldsymbol{\phi}$ は節点と補間点の座標 \mathbf{x}_i, \mathbf{x} のみの関数で、形状関数 (shape function, あるいは基底関数 base function) と呼ばれる。また \mathbf{u} は節点値 u_j の列ベクトルである。なお 同じ添字が 2 回繰り返し用いられる場合には、Einstein の総和規約に従うものとする。 $\phi_j u_j = \phi_1 u_1 + \phi_2 u_2 + \phi_3 u_3 + \dots$ 。点 \mathbf{x} の補間値 $u^*(\mathbf{x})$ は $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$ の連立 1 次方程式 (5.37) を解いて $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$ を求め、これを式 (5.36) に代入すれば求めることができる。形状関数は補間関数の係数で各節点に対して定義され、補間係数の性質としてその節点上で値 1、他の節点上で値 0 を取る。なお、逆にこのような性質を持つ多項式は形状関数になる。補間関数は各要素ごとに定義され形状関数もそうであるが、1 つの節点に対する形状関数は、その節点を共有するすべての要素の形状関数になり、下図に示すように、三角形 1 次要素の形状関数 $\phi_j(x, y)$ は xyu 空間内の高さ 1 の六角錐、また四辺形双 1 次要素のものはピラミッド状になる。形状関数は当該節点を共有する要素内でのみ値をもち、その外部領域では 0 である。



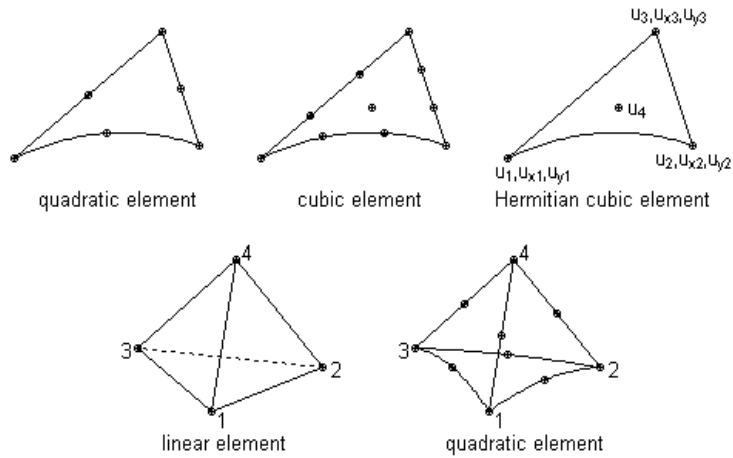


図 5.8: 三角形, 四面体要素

2次元の場合の x, y の多項式は一般に

$$\begin{aligned}
 u^*(\mathbf{x}) &= \sum_{\nu=1}^n c_{\nu} \psi_{\nu}(\mathbf{x}) \\
 &= c_1 + c_2 x + c_4 x^2 + c_7 x^3 + \cdots \\
 &\quad + c_3 y + c_5 xy + c_8 x^2 y + \cdots \\
 &\quad + c_6 y^2 + c_9 xy^2 + \cdots \\
 &\quad + c_{10} y^3 + \cdots
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

のようになり, 1次, 2次, 3次, 4次, 5次式の未定係数 c_{ν} の数はそれぞれ3個, 6個, 10個, 15個, 21個になる. これらの未定係数を決定するためには同数の節点条件が必要で, 三角形要素の節点条件は図5.8に示すようになる. すなわち3頂点の u の他に2次要素の場合には3辺の中点の u , また3次要素の場合には3辺上の各2点と重心の u が取られる. また3次要素では, 3頂点の u, u_x, u_y と重心の u を取るものもあり, このような要素はエルミート要素 (Hermitian element) と呼ばれる. なお中点や重心は一応のめやすにすぎない. 2次以上の要素は湾曲している境界に合わせて取ることができ, このような境界を含む問題に適している.

2次の三角形要素の式 (5.36) の \mathbf{u} と式 (5.37) の \mathbf{A}, \mathbf{b} は次のようになる.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1 y_1 & y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2 y_2 & y_2^2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3^2 & x_3 y_3 & y_3^2 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4^2 & x_4 y_4 & y_4^2 \\ 1 & x_5 & y_5 & x_5^2 & x_5 y_5 & y_5^2 \\ 1 & x_6 & y_6 & x_6^2 & x_6 y_6 & y_6^2 \end{pmatrix}, \\
 \mathbf{b} &= \begin{pmatrix} 1 & x & y & x^2 & xy & y^2 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

この要素の形状関数 ϕ は, 式 (5.37) に \mathbf{A}^T と \mathbf{b}^T を代入することによって得られる連立1次方程式をガウス消去法で解くことによって求められる.

3 次の Hermite 要素の場合には

$$\begin{aligned} u_x^*(\mathbf{x}) &= c_2 + 2c_4x + c_5y + 3c_7x^2 + 2c_8xy + c_9y^2, \\ u_y^*(\mathbf{x}) &= c_3 + c_5x + 2c_6y + c_8x^2 + 2c_9xy + 3c_{10}y^2 \end{aligned}$$

であるから, \mathbf{u} , \mathbf{A} , \mathbf{b} は次のようになる.

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_{x1} \\ u_{y1} \\ u_2 \\ u_{x2} \\ u_{y2} \\ u_3 \\ u_{x3} \\ u_{y3} \\ u_4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1y_1 & y_1^2 & x_1^3 & x_1^2y_1 & x_1y_1^2 & y_1^3 \\ 0 & 1 & 0 & 2x_1 & y_1 & 0 & 3x_1^2 & 2x_1y_1 & y_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_1 & 2y_1 & 0 & x_1^2 & 2x_1y_1 & 3y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2y_2 & y_2^2 & x_2^3 & x_2^2y_2 & x_2y_2^2 & y_2^3 \\ 0 & 1 & 0 & 2x_2 & y_2 & 0 & 3x_2^2 & 2x_2y_2 & y_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_2 & 2y_2 & 0 & x_2^2 & 2x_2y_2 & 3y_2^2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3^2 & x_3y_3 & y_3^2 & x_3^3 & x_3^2y_3 & x_3y_3^2 & y_3^3 \\ 0 & 1 & 0 & 2x_3 & y_3 & 0 & 3x_3^2 & 2x_3y_3 & y_3^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_3 & 2y_3 & 0 & x_3^2 & 2x_3y_3 & 3y_3^2 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4^2 & x_4y_4 & y_4^2 & x_4^3 & x_4^2y_4 & x_4y_4^2 & y_4^3 \end{pmatrix}, \quad (5.40)$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & x & y & x^2 & xy & y^2 & x^3 & x^2y & xy^2 & y^3 \end{pmatrix}$$

この要素の形状関数 ϕ は 10 元の連立 1 次方程式を解くことによって求められる. なおこの Hermite 要素の場合には, \mathbf{u} は節点値 u_j, u_{xj}, u_{yj} のベクトルで, 例えば

$$u_{x1} = \phi_x(\mathbf{x}_1) \cdot \mathbf{u} = \phi_{1x}(\mathbf{x}_1)u_1 + \phi_{2x}(\mathbf{x}_1)u_{x1} + \phi_{3x}(\mathbf{x}_1)u_{y1} + \phi_{4x}(\mathbf{x}_1)u_2 + \dots$$

であるから, 形状関数 ϕ_2 は, それ自身ではなく, x で微分した $\phi_{2x}(\mathbf{x}_1)$ が当該節点で 1, $\phi_{1x}(\mathbf{x}_1), \phi_{3x}(\mathbf{x}_1), \dots, \phi_{10x}(\mathbf{x}_1)$ が 0 になる.

ところで FEM で用いられる近似関数は, 各要素内で多項式で近似され解析的に滑らかであるが, 要素の境界では関数自身は連続であるがその法線方向微分は一般に連続でなく, この近似関数を xyu 空間内の面で表せばこの面は要素境界でごくわずかに折れ曲っていることになる. 上記の 3 次要素の補間関数は 3 次式であるから, ひとつの要素境界に沿って次のように置くことができる.

$$u^*(s) = d_1 + d_2s + d_3s^2 + d_4s^3$$

ただし s は境界に沿っての距離, d_1, d_2, d_3, d_4 は未定係数である. 両端の条件, 関数値 u とこの境界に沿う内微分 u_s を用いれば, これらの未定係数は確定できる. したがってこの境界上で $u(x)$ は連続になる. 一方この境界上で補間関数の法線微分値 u_n は次数が 1 つ下がり 2 次式になり, 要素境界に沿って

$$u_n^*(s) = e_1 + e_2s + e_3s^2$$

ただし e_1, e_2, e_3 は未定係数. これらの未定係数は両端の条件 u_n からは条件不足で確定できないので, 法線微分値 u_n は一般に要素境界を横切って連続にはならない. u_n は 5 次の三角形要素ではじめて連続にすることができる². 一般に高次要素を用いれば同精度の結果を得るのに計算時間を節減できるとも言われて

² 4 次の三角形要素で, 節点値として 3 頂点の u, u_x, u_y と各辺中点の u, u_n を取るものも候補の 1 つであるが, 要素境界に沿って関数 u の 4 次式の 5 個の未定係数は両端の u, u_s と中点の u から一意的に決まるが, 法線微分 u_n の 3 次式の 4 個の未定係数は両端と中点の u_n からは条件不足で決まらない.

5 次の三角形要素で, 節点値として 3 頂点の $u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}$ と各辺中点の u_n を取るものは, 要素境界に沿って関数 u の 5 次式の 6 個の未定係数は両端の u, u_s, u_{ss} から一意的に決まり, また法線微分 u_n の 4 次式の 5 個の未定係数も両端の u_n, u_{ns} と中点の u_n から一意的に決まる.

いるが、原著論文の見解とは異なることになるが、このような高次要素の使用は推奨できない。また三角形 2 次要素で要素間の不連続性を考慮する計算法も提案されているが普及している様子はない。

1 次の四面体要素 (linear tetrahedral element) は三角形 1 次要素を 3 次元に直接拡張したもので、要素節点番号は普通 図 5.8 に示す順番に付けられる。すなわち節点 1 を規準に節点 2,3,4 を右手の親指、人差し指、中指の方向に取る。この四面体 1 次要素の場合には \mathbf{u} , \mathbf{A} , \mathbf{b} は次のようになる。

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & x & y & z \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

3 次元の場合の x, y, z の多項式は

$$u^*(\mathbf{x}) = c_1 + c_2x + c_3y + c_4z + c_5x^2 + c_6y^2 + c_7z^2 + c_8yz + c_9zx + c_{10}xy + \dots$$

のようになり、1 次、2 次、3 次、4 次式の未定係数の数は 4 個、10 個、20 個、35 個になる³。節点条件は 2 次要素の場合には 4 頂点と各稜の中点の u 、3 次要素の場合には 4 頂点と各稜上の 2 点と各面の中心の u 、3 次 Hermite 要素の場合には 4 頂点の u, u_x, u_y, u_z と各面の中心の u が取られる。詳細は省略する。

5.3.2 四辺形要素，六面体要素

まず Lagrange 要素 (Lagrangian elements) について述べる。2 次元の長方形要素の補間関数は

$$u^*(x, y) = \sum_{j=1}^n \phi_j(x, y)u_j = \sum_{k=0}^K C_k^K(x) \sum_{l=0}^L C_l^L(y)u_{kl} \quad (5.42a)$$

$$C_k^K(x) = \frac{(x-x_0) \cdots (x-x_{k-1})(x-x_{k+1}) \cdots (x-x_K)}{(x_k-x_0) \cdots (x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1}) \cdots (x_k-x_K)} \quad (5.42b)$$

ただし C_k^K は Lagrange 補間係数で、 $n = (K+1)(L+1)$ 、 $j = l(K+1)+k+1$ である。 K と L は通常等しく取られ、 $K = L = 1$ の要素を双 1 次要素 (bilinear element)、 $K = L = 2$ の要素を双 2 次要素 (biquadratic element) という (図 5.9)。双 1 次式は x または y に関して 1 次以下のすべての項を取った式、双 2 次式は x または y に関して 2 次以下のすべての項を取った式である。3 次元の直方体要素の補間関数は

$$u(x, y, z) = \sum_{j=1}^n \phi_j(x, y, z)u_j = \sum_{k=0}^K C_k^K(x) \sum_{l=0}^L C_l^L(y) \sum_{m=0}^M C_m^M(z)u_{klm} \quad (5.43)$$

ただし $n = (K+1)(L+1)(M+1)$ 、 $j = m(K+1)(L+1)+l(K+1)+k+1$ である。 $K = L = M = 1$ の要素を 3 重 1 次要素 (trilinear element)、 $K = L = M = 2$ の要素を 3 重 2 次要素 (triquadratic element) という。

次にセレンディピティ要素 (serendipity elements) について述べる。セレンディピティはおとぎ話の題名に由来する語で、その意味は偶然珍宝を発見することである。1 つの要素の中で定義される関数 $\phi_j(x, y)$ が、節点 j で $\phi_j(x_j, y_j) = 1$ 、その要素の他のすべての節点で $\phi_j(x_i, y_i) = 0$ 、($i \neq j$) という条件を満足するものとする。またその要素の他の節点に対しても同様の関数を定義することができ、その要素内の任意の点でこのように定義された関数の合計 $\sum \phi_j(x, y)$ が 1 という条件を満足するならば、このような関数系は形状関数として使うことができる。

³ $1 + (1+2) + (1+2+3) + \dots$

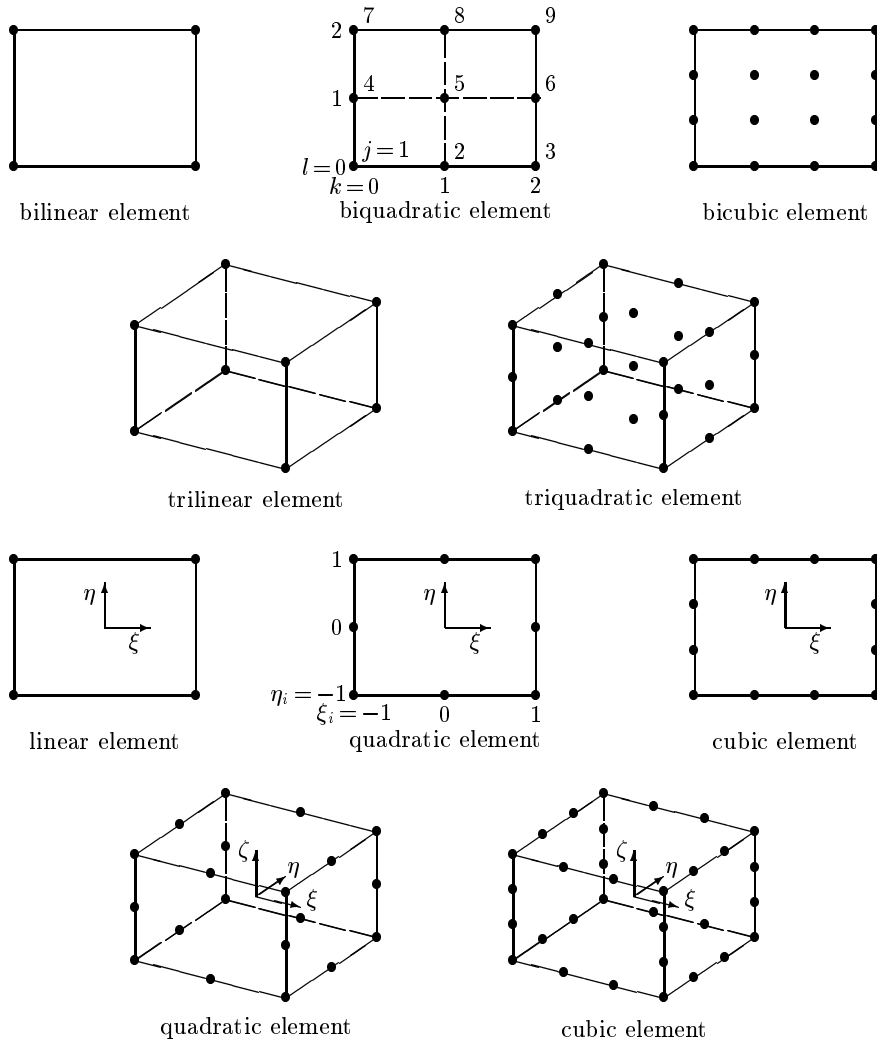


図 5.9: 四辺形，六面体要素

まず 2 次元の長方形 1 次要素を考える．図 5.9 に示すように要素の中心に局所座標系 $\xi\eta$ の原点を取り，節点番号 $j = 1, 2, 3, 4$ を左下から左回りに付けることにする． $\xi_j = \pm 1, \eta_j = \pm 1$ ．上記の第 1 の条件を満足するように関数 $\phi_1(\xi, \eta)$ を

$$\phi_1(\xi, \eta) = \frac{1-\xi}{2} \frac{1-\eta}{2}$$

のように置く．この式の右辺の第 1 因子は $\xi = -1$ で 1, $\xi = 1$ で 0, 第 2 因子は $\eta = -1$ で 1, $\eta = 1$ で 0 となるので，この式は確かに上記の第 1 の条件を満足する． $\phi_2(\xi, \eta), \phi_3(\xi, \eta), \phi_4(\xi, \eta)$ も同様に置くことにすれば，これらの関数は上記の第 2 の条件も満足し，形状関数であることが分かる．これら 4 つの形状関数はまとめて次のように表すことができる．

$$\phi_j(\xi, \eta) = \frac{1+\xi_j\xi}{2} \frac{1+\eta_j\eta}{2} \quad (j = 1, 2, 3, 4; \xi_j = \pm 1, \eta_j = \pm 1) \quad (5.44)$$

これらの関数は ξ, η に関して双 1 次で，このセレンディピティ 1 次要素は四辺形双 1 次要素に他ならない．

長方形 2 次要素は Lagrange 双 2 次要素の中心の節点を省略し境界上の節点のみを取るものである．このとき 1 つの要素では節点が 9 から 8 に減るに過ぎないが，全体の節点数は約 3/4 に減る．また節点条件が

1つ少ないので，Lagrange 要素の双 2 次式の 4 次項 $\xi^2\eta^2$ を落とし 3 次式にできる．その形状関数は次式で与えられる．

$$\phi_j(\xi, \eta) = \frac{1+\xi_j\xi}{2} \frac{1+\eta_j\eta}{2} (\xi_j\xi + \eta_j\eta - 1), \quad (j = 1, 3, 5, 7; \xi_j = \pm 1, \eta_j = \pm 1) \quad (5.45a)$$

$$\phi_j(\xi, \eta) = \begin{cases} (1-\xi^2) \frac{1+\eta_j\eta}{2}, & (j = 2, 6; \xi_j = 0, \eta_j = \pm 1) \\ (1-\eta^2) \frac{1+\xi_j\xi}{2}, & (j = 4, 8; \xi_j = \pm 1, \eta_j = 0) \end{cases} \quad (5.45b)$$

これらの形状関数 ϕ_j は当該節点 ξ_j, η_j で 1，その他の節点で 0 になるように作られている．要素節点番号は左下から左回りに振られている．式 (5.45a) の $\phi_1 = \{(1-\xi)/2\}\{(1-\eta)/2\}\{-(\xi+\eta+1)\}$ は，各因子が点 $\xi = \eta = -1$ で 1，またそれぞれ線 $\xi = 1, \eta = 1$ または $\xi + \eta = -1$ 上で 0 で，第 1 の条件を満足する．また式 (5.45b) の $\phi_2 = (1+\xi)(1-\xi)\{(1-\eta)/2\}$ も各因子が点 $\xi = 0, \eta = -1$ で 1，また線 $\xi = \pm 1, \eta = 1$ 上で 0 で第 1 の条件を満足する．また第 2 の条件を満足することも容易に確かめられる．

この要素の形状関数は，8 節点の条件に対し， ξ, η に関して対称な 8 個の未定係数を持つ 3 次式 $u^*(\xi, \eta) = c_1 + c_2\xi + c_3\eta + c_4\xi^2 + c_5\xi\eta + c_6\eta^2 + c_7\xi^2\eta + c_8\xi\eta^2$ を補間関数に採り，通常の方法で決定することもできる．このように考えれば，セレンディピティとはいえなくなる？ 形状関数を求める連立 1 次方程式 (5.37) は

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \\ \eta \\ \xi^2 \\ \xi\eta \\ \eta^2 \\ \xi^2\eta \\ \xi\eta^2 \end{pmatrix}$$

となり，逆行列は容易に？ 計算でき，形状関数は次式で表される．

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \\ \phi_7 \\ \phi_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/4 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & -1/4 & -1/4 \\ 1/2 & 0 & -1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ -1/4 & 0 & 0 & 1/4 & -1/4 & 1/4 & -1/4 & 1/4 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & 0 & -1/2 \\ -1/4 & 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & -1/2 & 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ -1/4 & 0 & 0 & 1/4 & -1/4 & 1/4 & 1/4 & -1/4 \\ 1/2 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \xi \\ \eta \\ \xi^2 \\ \xi\eta \\ \eta^2 \\ \xi^2\eta \\ \xi\eta^2 \end{pmatrix}$$

このようにして求めた形状関数はもちろん式 (5.45) と同じものである．

長方形 3 次要素は，Lagrange 双 3 次要素の境界上の節点のみを残し内部の節点をすべて取除いたもので，全体の節点数は Lagrange 要素の約 5/9 になる．その形状関数は次式で与えられる．

$$\phi_j(\xi, \eta) = \frac{1+\xi_j\xi}{2} \frac{1+\eta_j\eta}{2} \frac{9(\xi^2 + \eta^2) - 10}{8}, \quad (j = 1, 4, 7, 10; \xi_j = \pm 1, \eta_j = \pm 1) \quad (5.46a)$$

$$\phi_j(\xi, \eta) = \begin{cases} \frac{9(1-\xi^2)}{8} \frac{1+9\xi_j\xi}{2} \frac{1+\eta_j\eta}{2}, & (j = 2, 3, 8, 9; \xi_j = \pm 1/3, \eta_j = \pm 1) \\ \frac{9(1-\eta^2)}{8} \frac{1+9\eta_j\eta}{2} \frac{1+\xi_j\xi}{2}, & (j = 5, 6, 11, 12; \xi_j = \pm 1, \eta_j = \pm 1/3) \end{cases} \quad (5.46b)$$

これらの $\phi_j(\xi, \eta)$ が形状関数になっていることは容易に確かめられるであろう。セレンディピティ要素の形状関数 ϕ_j は、当該節点 ξ_j, η_j で 1、他の節点で 0 になる因子からなり、他のすべての節点で 0 になるようにこれらの因子が掛け合わされる。 $\xi_j = \pm a$ の ϕ_j の、 $\xi = \mp a$ で 0 になる因子は、容易に $(a^2 + \xi_j \xi)/2a^2$ であることが分かるであろう。特に $\xi_j = \pm 1$ の因子は $(1 + \xi_j \xi)/2$ である。また $\xi = a, \eta = b$ で ϕ_j を 0 にする因子は、 $\alpha(\xi - a) + \beta(\eta - b)$ である。 α, β は任意パラメータで、 ξ, η に関して対称であるためには $\alpha = \beta$ である。例えば $a = \pm 1/3, b = \pm 1$ ならばこの因子は $\alpha(\xi^2 + \eta^2 - 10/9)$ となる。更に $\xi_j, \eta_j = \pm 1$ ならばこの因子は $\{9(\xi^2 + \eta^2) - 10\}/8$ となる。この要素の形状関数は、12 節点条件に対し、 ξ, η に関し対称な 12 の未定係数を持つ 4 次式 $u^*(\xi, \eta) = c_1 + c_2 \xi + c_3 \eta + c_4 \xi^2 + c_5 \xi \eta + c_6 \eta^2 + c_7 \xi^3 + c_8 \xi^2 \eta + c_9 \xi \eta^2 + c_{10} \eta^3 + c_{11} \xi^3 \eta + c_{12} \xi \eta^3$ を補間関数に採り、通常の方法で決定することもできる。

3次元の直方体要素の場合には、その中心に $\xi\eta\zeta$ 座標系の原点を取れば、1次要素の形状関数は次のようになる。

$$\phi_j(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1 + \xi_j \xi}{2} \frac{1 + \eta_j \eta}{2} \frac{1 + \zeta_j \zeta}{2} \quad (\xi_j, \eta_j, \zeta_j = \pm 1) \quad (5.47)$$

また 2 次要素は Lagrange 要素の中心と側面中心の節点を省略し頂点と稜の中心の 20 節点のみを取るもので、全体の節点数は同じ大きさの Lagrange 要素のもの約 1/2 になる。その形状関数は次式で与えられる。

$$\phi_j(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1 + \xi_j \xi}{2} \frac{1 + \eta_j \eta}{2} \frac{1 + \zeta_j \zeta}{2} (\xi_j \xi + \eta_j \eta + \zeta_j \zeta - 2), \quad (\xi_j, \eta_j, \zeta_j = \pm 1) \quad (5.48a)$$

$$\phi_i(\xi, \eta, \zeta) = (1 - \xi^2) \frac{1 + \eta_j \eta}{2} \frac{1 + \zeta_j \zeta}{2} \quad (\xi_j = 0, \eta_j, \zeta_j = \pm 1) \quad (5.48b)$$

節点 $(\eta_j = 0, \xi_j, \zeta_j = \pm 1)$ と $(\zeta_j = 0, \xi_j, \eta_j = \pm 1)$ に対する形状関数は省略したが対称性から容易に分かるであろう。3 次要素も Lagrange 要素の内部と側面上の節点をすべて省略し頂点と稜上の 32 の節点を取るもので、全体の節点数は Lagrange 要素に比べ 7/27、約 1/4 に減る。その形状関数は次式で与えられる。

$$\phi_i(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1 + \xi_j \xi}{2} \frac{1 + \eta_j \eta}{2} \frac{1 + \zeta_j \zeta}{2} \frac{9(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - 19}{8}, \quad (\xi_j, \eta_j, \zeta_j = \pm 1) \quad (5.49a)$$

$$\phi_j(\xi, \eta, \zeta) = \frac{9(1 - \xi^2)}{8} \frac{1 + 9\xi_j \xi}{2} \frac{1 + \eta_j \eta}{2} \frac{1 + \zeta_j \zeta}{2} \quad (\xi_j = \pm 1/3, \eta_j, \zeta_j = \pm 1) \quad (5.49b)$$

Lagrange 要素と serendipity 要素を比較すれば、1 次のは同等であるが、2 次のものでは Lagrange 要素の方が当然 解の精度が良く、総合的にみても優れているといわれている。しかしながら 更に高次のものでは serendipity 要素の方が計算量少なく、また形状関数の変動も少なく優れているともいわれている。

次に上記の長方形要素の補間関数を任意形状の四辺形要素に、また 3 次元の場合には直方体要素の補間関数を任意形状の六面体要素に適用可能にすることについて述べる。最も簡単な双 1 次要素の場合には、形状関数は式 (5.37) に次の \mathbf{A} と \mathbf{b} を用いることによって容易に求めることができる。

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1 y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2 y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3 y_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4 y_4 \end{pmatrix}, \quad (5.50)$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & x & y & xy \end{pmatrix}$$

ほかの Lagrange 型の要素も、節点の位置が十分滑らかに配置されていれば、このような方法で形状関数を求めることができる。しかしながら例えば双 2 次の四辺形要素では 9 元の連立 1 次方程式、3 重 2 次の六面体要素では 27 元の連立 1 次方程式を解かなければならないことになる。

補間関数を求める別の方法は、 x 空間内に与えられた要素を ξ 空間内の単純な形状の要素に写像して計算するものである。四辺形双 1 次要素の場合には、通常 $\xi\eta$ 面上の一辺の長さ 1 の正方形要素に写像される⁴。写像面上の正方形要素の補間関数は次のように簡潔に与えることができる。

$$u(\xi, \eta) = (1-\xi)(1-\eta)u_1 + \xi(1-\eta)u_2 + (1-\xi)\eta u_3 + \xi\eta u_4 \quad (5.51)$$

この補間式は座標 x, y に対しても成立し次のようになる。

$$x(\xi, \eta) = (1-\xi)(1-\eta)x_1 + \xi(1-\eta)x_2 + (1-\xi)\eta x_3 + \xi\eta x_4 \quad (5.52a)$$

$$y(\xi, \eta) = (1-\xi)(1-\eta)y_1 + \xi(1-\eta)y_2 + (1-\xi)\eta y_3 + \xi\eta y_4 \quad (5.52b)$$

補間関数 $u^*(x, y)$ はこれらの 3 つの式でパラメータ ξ, η を介して与えられる。

このように物理空間 x 内の任意形状の要素を局所的に単純な形状の要素に写像する方法では、物理空間内の特定の点の補間値 $u(x)$ を求めるのではなく、写像空間 ξ 内の特定の点の u, x の値を求めこれを物理空間内に与えることになる。この方法では計算はすべて写像空間内で行われる。座標 x と関数 u は一般に次のように表すことができる。

$$\mathbf{x}(\xi) = \bar{\phi}_j(\xi)\mathbf{x}_j \quad (5.53a)$$

$$u(\xi) = \phi_j(\xi)u_j \quad (5.53b)$$

ただし $\bar{\phi}_j(\xi)$ と $\phi_j(\xi)$ は局所座標 ξ で表された形状関数である。 $\bar{\phi}_j(\xi) = \phi_j(\xi)$ の要素を等パラメータ要素 (isoparametric element) という。また $\bar{\phi}_j$ の数が ϕ_j の数よりも少ない要素をサブパラメータ要素 (sub-parametric element)、 $\bar{\phi}_j$ の数が ϕ_j の数よりも多い要素をスーパーパラメータ要素 (super-parametric element) という。これらの要素の例を図 5.10 に示す。図中の \bullet は座標、 \square は関数の定義される節点である。

1 例として等パラメータ Lagrange 2 次要素を考え形状関数の微分を計算する。

$$u(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^9 \phi_j(\xi, \eta)u_j = \sum_{r=0}^2 \sum_{s=0}^2 C_r^2(\xi)C_s^2(\eta)u_{rs}$$

$$u_{,\xi}(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^9 \phi_{j,\xi}(\xi, \eta)u_j = \sum_{r=0}^2 \sum_{s=0}^2 C_r^{2'}(\xi)C_s^2(\eta)u_{rs}$$

$$u_{,\eta}(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^9 \phi_{j,\eta}(\xi, \eta)u_j = \sum_{r=0}^2 \sum_{s=0}^2 C_r^2(\xi)C_s^{2'}(\eta)u_{rs}$$

ただし $C_0^2(\xi) = -\xi(1-\xi)/2$, $C_1^2(\xi) = 1-\xi^2$, $C_2^2(\xi) = \xi(1+\xi)/2$, $C_0^{2'}(\xi) = -1/2+\xi$, $C_1^{2'}(\xi) = -2\xi$, $C_2^{2'}(\xi) = 1/2+\xi$, また添字 $,x$ は x に関する微分を意味するものとする。 x, y に対しても同様の式が使われる。形状関数 ϕ の x, y に関する微分は

$$\phi_{,x} = \xi_{,x}\phi_{,\xi} + \eta_{,x}\phi_{,\eta} \frac{1}{J}(y_{,\eta}\phi_{,\xi} - y_{,\xi}\phi_{,\eta})$$

$$\phi_{,y} = \xi_{,y}\phi_{,\xi} + \eta_{,y}\phi_{,\eta} \frac{1}{J}(-x_{,\eta}\phi_{,\xi} - x_{,\xi}\phi_{,\eta})$$

ただし $J = x_{,\xi}y_{,\eta} - x_{,\eta}y_{,\xi}$ 。

⁴ $-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1$ の正方形要素に写像する方法も一般的である。

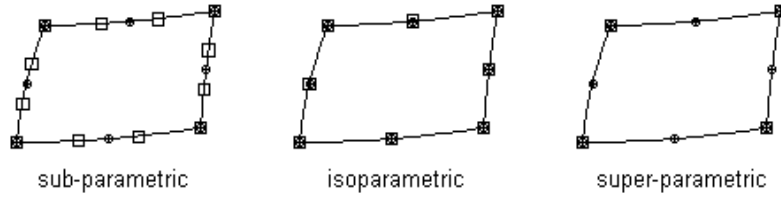


図 5.10: サブ, 等, スーパーパラメータ四辺形要素

5.4 任意形状メッシュにおける関数近似

ここには筆者らが 1980 年代はじめに提案した, 任意形状メッシュの節点上に離散的に与えられた関数 u_k に対し近似多項式 $u(\mathbf{x})$ を求め, 差分演算子を導出するひとつの方法とその 3 次元への拡張について述べる.

はじめに 2 次元空間の任意形状メッシュを考える. 1 つの節点 \mathbf{x}_0 近傍の節点条件 $u(\mathbf{x}_0) = u_0$ を満足する 2 次多項式は一般に次のように書くことができる.

$$u(\mathbf{x}) = u_0 + \sum_{l=1}^5 c_l \phi_l(\mathbf{r}) \quad (5.54)$$

ただし $\phi_1 = x - x_0 = \mathfrak{r}$, $\phi_2 = y - y_0 = \eta$, $\phi_3 = \mathfrak{r}\mathfrak{r}$, $\phi_4 = \eta\mathfrak{r}$, $\phi_5 = \eta\eta$ である. 式 (5.54) の 5 つの未定係数 c_l は, それよりも多い例えば 8 節点の条件

$$u_k - u_0 = \mathbf{u}_k = \sum_{l=1}^5 c_l \phi_{lk} \quad (k = 1, 2, \dots, 8) \quad (5.55)$$

を平均的に満足するように, 最小 2 乗法によって決定される. すなわち c_l の値は次の連立 1 次方程式から求められる.

$$\sum_{l=1}^5 a_{nl} c_l = f_n \quad (n = 1, 2, \dots, 5) \quad (5.56a)$$

ただし

$$a_{nl} = \sum_{k=1}^8 W_k^2 \phi_{nk} \phi_{lk}, \quad f_n = \sum_{k=1}^8 W_k^2 \phi_{nk} \mathbf{u}_k \quad (5.56b)$$

ここに W_k は点 \mathbf{x}_0 に近い節点条件を遠いものよりも重視するために導入された重み関数で

$$W_k = |\mathbf{r}|^{-\alpha} \quad (5.57)$$

のように置かれる. 式 (5.54) から x, y に関する微分と Laplace 演算子は次のように求められる.

$$u_x(\mathbf{x}) = \frac{1}{h}(c_1 + 2c_3\mathfrak{r} + c_4\eta), \quad u_y(\mathbf{x}) = \frac{1}{h}(c_2 + c_4\mathfrak{r} + 2c_5\eta) \quad (5.58)$$

$$u_{xx}(\mathbf{x}) = \frac{2}{h^2}c_3, \quad u_{xy}(\mathbf{x}) = \frac{1}{h^2}c_4, \quad u_{yy}(\mathbf{x}) = \frac{2}{h^2}c_5 \quad (5.59)$$

$$\nabla^2 u(\mathbf{x}) = \Delta u(\mathbf{x}) = \frac{2}{h^2}(c_3 + c_5) \quad (5.60)$$

ただし h はメッシュの代表長さで通常 1 に取られる.

筆者らの見解では、式 (5.55) の節点条件を与える近傍節点の取り方と、重み関数の選び方は重要である。近傍節点は点 x_0 に近いものから順に選ぶのではなく、2 次式を近似するためには必ずしも 1 列に並ぶ必要はないが最低 3 点必要で、 x_0 から見てすべての方向に均等に選ぶべきである。図 5.11 は、2 次元の規則的三角形メッシュと四辺形メッシュに対し、近傍節点の取り方の例を示したものである (図は簡単のため同形のメッシュに描かれているが、不等間隔で歪んでいても良い)。三角形メッシュの近傍節点の数は 6、四辺形メッシュの近傍節点の数は 8 が適当である。境界のところでは領域の外にある仮想節点の分を領域の内部に取る必要がある。

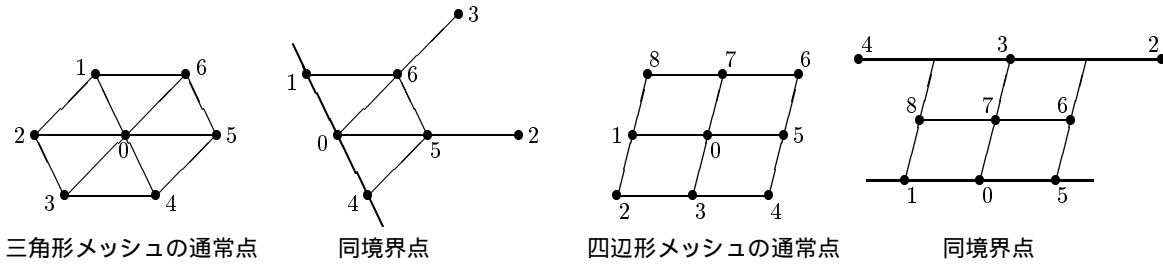


図 5.11: 近傍節点の選び方

また重み関数の指数 α は次のような考えで選ぶことにした。正方形格子の場合に 1 階の導関数 $u_x(x_0)$ と Laplace 演算子 $\Delta u(x_0)$ の差分近似式の係数は、重み関数の指数 α により次の表ようになる。

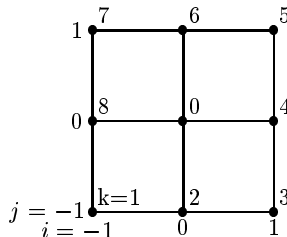
α	0	1	2	3	4
u_x	$\frac{1}{6h} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{8h} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -2 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{12h} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -4 & 0 & 4 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{20h} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -8 & 0 & 8 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{36h} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -16 & 0 & 16 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Δu	$\frac{1}{5h^2} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & -12 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{3h^2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{4h^2} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & -12 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{6h^2} \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 4 & -20 & 4 \\ 1 & 4 & 1 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{10h^2} \begin{bmatrix} 1 & 8 & 1 \\ 8 & -36 & 8 \\ 1 & 8 & 1 \end{bmatrix}$

例えば $\alpha = 2$ の場合には上表から

$$(u_x)_{00} = \frac{1}{12h} \{4(u_{10} - u_{-1,0}) + (u_{1,-1} - u_{-1,-1}) + (u_{11} - u_{-1,1})\}$$

$$\Delta u_{00} = \frac{1}{4h^2} \{2(u_{-1,0} + u_{10} + u_{0,-1} + u_{01}) + u_{-1,-1} + u_{1,-1} + u_{-1,1} + u_{11} - 12u_{00}\}$$

ただし h は格子間隔である⁵。



⁵ これらの係数は次のように導出される。 $u_x(x_0) = c_1/h$, $\Delta u(x_0) = 2(c_3 + c_5)/h^2$ 。式 (5.56) から $c_l = \sum_{n=1}^5 a_{ln}^{-1} f_n$ 。いま $c_l = \sum_{k=1}^8 c_{lk} u_k$ と置けば $c_{lk} = W_k^2 \sum_{n=1}^5 a_{ln}^{-1} \phi_{nk} \cdot c_{1k}$ から u_x の係数, $2(c_{3k} + c_{5k})$ から Δu の係数が求められる。

正方形格子の5点差分法または直角二等辺三角形1次要素を用いるFEMの離散近似式は $\alpha \rightarrow \infty$ のものに対応し、また正方形双1次要素の式は u_x に対しては $\alpha = 2$ 、 Δu に対しては $\alpha = 1$ のものになる。 $\alpha = 0$ は重み関数を導入しない場合で、最小2乗法では重み関数を導入しないと点 x_0 から遠い節点条件を重視する傾向にあることが分かる。 $\alpha = 3$ の場合の Δu は、高精度の差分演算子として知られるもので、次の段落で詳しく説明する。図の u_x の離散近似式は

$$u_{x00} = (u_x)_{00}^h + \frac{1}{2\alpha+2} \{ (u_x)_{0,-1}^h - 2(u_x)_{00}^h + (u_x)_{01}^h \} - \frac{h^2}{3!} \left(u_{xxx} + \frac{2}{2\alpha+2} 3u_{xyy} \right)$$

$$(u_x)_{0j}^h = (u_{1j} - u_{-1j})/2h$$

のように書くことができる。右辺の第1項は通常の2次中心差分の式、第2項は $j = -1$ と $j = 1$ の差分式が付加されたことによる修正項、最後の項は打ち切り誤差である。修正項は解の安定性を増す働きをするが、誤差も増えるので適当の大きさにとどめるべきである。 $\alpha = 3$ の場合の u_x はCowell公式の $(f_{-1} + 10f_0 + f_1)/12$ に近いものになっている。これらの考察といくつかの数値計算の結果より、重み関数の指数 α は3に取るのが最適と言える。また任意形状メッシュに対しても $\alpha = 3$ に取ることが推奨される。

ここでLaplace方程式 $\Delta u = 0$ の境界値問題の解すなわち調和関数についてひとこと述べる。領域内の任意の点 x_0 を中心とする2次元の場合には円、3次元の場合には球を考える。円または球は領域内に取るものとする。このとき円または球上の u の平均値は点 x_0 の u の値に等しくなる。半径は任意であるから、円または球の内部の u の平均値も点 x_0 の u の値になる。これを調和関数の平均値の定理と言う。またこれより調和関数の最大値と最小値は領域内部ではなく境界上にあるという、最大値の定理が出てくる。平均値の定理の証明はPoissonの積分からなされるが詳細は省略する。この平均値の定理から上の表の下段のものがLaplace差分演算子であること、またその優劣もある程度予測できるであろう。ラプラス差分演算子の精度をテイラー展開を基に見積もれば

$$\diamond u_{00} \equiv u_{-1,0} + u_{1,0} + u_{0,-1} + u_{0,1} - 4u_{00}$$

$$= 2 \left[\frac{h^2}{2!} \Delta + \frac{h^4}{4!} \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} \right) + \frac{h^6}{6!} \left(\frac{\partial^6}{\partial x^6} + \frac{\partial^6}{\partial y^6} \right) \right] u_{00} + O(h^8)$$

$$\square u_{00} \equiv u_{-1,-1} + u_{1,-1} + u_{-1,1} + u_{1,1} - 4u_{00}$$

$$= 4 \left[\frac{h^2}{2!} \Delta + \frac{h^4}{4!} \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} + 6 \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} \right) + \frac{h^6}{6!} \left(\frac{\partial^6}{\partial x^6} + 15 \frac{\partial^6}{\partial x^4 \partial y^2} + 15 \frac{\partial^6}{\partial x^2 \partial y^4} + \frac{\partial^6}{\partial y^6} \right) \right] u_{00} + O(h^8)$$

これらの式から

$$\Delta u_{00} = \frac{1}{h^2} \diamond u_{00} + O(h^2)$$

$$\Delta u_{00} = \frac{1}{2h^2} \square u_{00} + O(h^2)$$

また2つの差分演算子の線形結合を取ることによって次の高次精度の差分式を導くことができる。

$$\Delta u_{00} = \frac{1}{6h^2} (4\diamond + \square) u_{00} - \left[\frac{2}{4!} h^2 \Delta^2 + \frac{2}{6!} h^4 \left(\Delta^2 + 2 \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} \right) \Delta \right] u_{00} + O(h^6)$$

この差分式は、Laplace方程式に対しては6次精度、Poisson方程式の場合にも右辺が x, y の1次式ならば6次精度あり、高精度の差分式として使われているものである。

以上のべた任意形状メッシュにおける近似関数と差分演算子を求める方法は3次元に容易に拡張できる。3次元空間内の任意形状メッシュにおいて、1つの節点 x_0 近傍の節点条件 $u(x_0) = u_0$ を満足する2次多

項式は一般に次のように書くことができる．

$$u(\mathbf{x}) = u_0 + \sum_{l=1}^9 c_l \phi_l(\mathbf{x}) \quad (5.61)$$

ただし $\phi_1 = x - x_0 = \xi$, $\phi_2 = y - y_0 = \eta$, $\phi_3 = z - z_0 = \zeta$, $\phi_4 = \xi\xi$, $\phi_5 = \eta\eta$, $\phi_6 = \zeta\zeta$, $\phi_7 = \eta\zeta$, $\phi_8 = \zeta\xi$, $\phi_9 = \xi\eta$ である．式 (5.61) の 9 個の未定係数 c_l をそれよりも多い 14 の節点条件

$$u_k - u_0 = u_k = \sum_{l=1}^9 c_l \phi_{lk} \quad (k = 1, 2, \dots, 14) \quad (5.62)$$

を平均的に満足するように最小 2 乗法によって決定することにすれば, c_l の値は次の連立 1 次方程式から求められる．

$$\sum_{l=1}^9 a_{nl} c_l = f_n \quad (n = 1, 2, \dots, 9) \quad (5.63a)$$

ただし

$$a_{nl} = \sum_{k=1}^{14} W_k^2 \phi_{nk} \phi_{lk}, \quad f_n = \sum_{k=1}^{14} W_k^2 \phi_{nk} u_k \quad (5.63b)$$

ここに W_k は重み関数で次のように定義される．

$$W_k = |\mathbf{x}|^{-\beta} \quad (5.64)$$

式 (5.61) から x, y, z に関する微分と Laplace 演算子は次のように求められる．

$$\begin{aligned} u_x(\mathbf{x}) &= \frac{1}{h} (c_1 + 2c_4\xi + c_9\eta + c_8\zeta), \\ u_y(\mathbf{x}) &= \frac{1}{h} (c_2 + 2c_5\eta + c_7\zeta + c_9\xi), \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$\begin{aligned} u_z(\mathbf{x}) &= \frac{1}{h} (c_3 + 2c_6\zeta + c_8\xi + c_7\eta) \\ \Delta u(\mathbf{x}) &= \frac{2}{h^2} (c_4 + c_5 + c_6) \end{aligned} \quad (5.66)$$

ただし h はメッシュの代表長さである．

図 5.12 は, 3 次元の規則的な六面体メッシュと三角柱メッシュに対し, 近傍節点の取り方の例を示したものである (図は簡単のため同形のメッシュに描かれているが, 不等間隔で歪んでいても良い)．六面体メッシュ, 三角柱メッシュ共に対称性を考えれば近傍節点は 14 個取るのが適当と思われる．2 次元の場合同様, これらの点はすべての方向に均等に 3 節点ずつ並ぶように取られている．なお隅の点の 14 節点番号は, それらの左に示す境界面上の点の 14 節点番号および下方の境界面上の点の 14 節点番号と両立するように付けるべきである．

次に 3 次元の場合の, 重み関数の指数 β について検討する．立方体格子の場合に 1 階の導関数 $u_x(\mathbf{x}_0)$ と Laplace 演算子 $\Delta u(\mathbf{x}_0)$ の差分近似式の係数は重み関数の指数 β により下表のようになる．

β	0	1	2	3	4	5
u_x	$\frac{1}{10h}, 1, 1$	$\frac{1}{14h}, 3, 1$	$\frac{1}{26h}, 9, 1$	$\frac{1}{62h}, 27, 1$	$\frac{1}{170h}, 81, 1$	$\frac{1}{494h}, 243, 1$
Δu	$\frac{1}{13h^2}, 1, 3$	$\frac{1}{5h^2}, 1, 1$	$\frac{1}{7h^2}, 3, 1$	$\frac{1}{13h^2}, 9, 1$	$\frac{1}{31h^2}, 27, 1$	$\frac{1}{85h^2}, 81, 1$

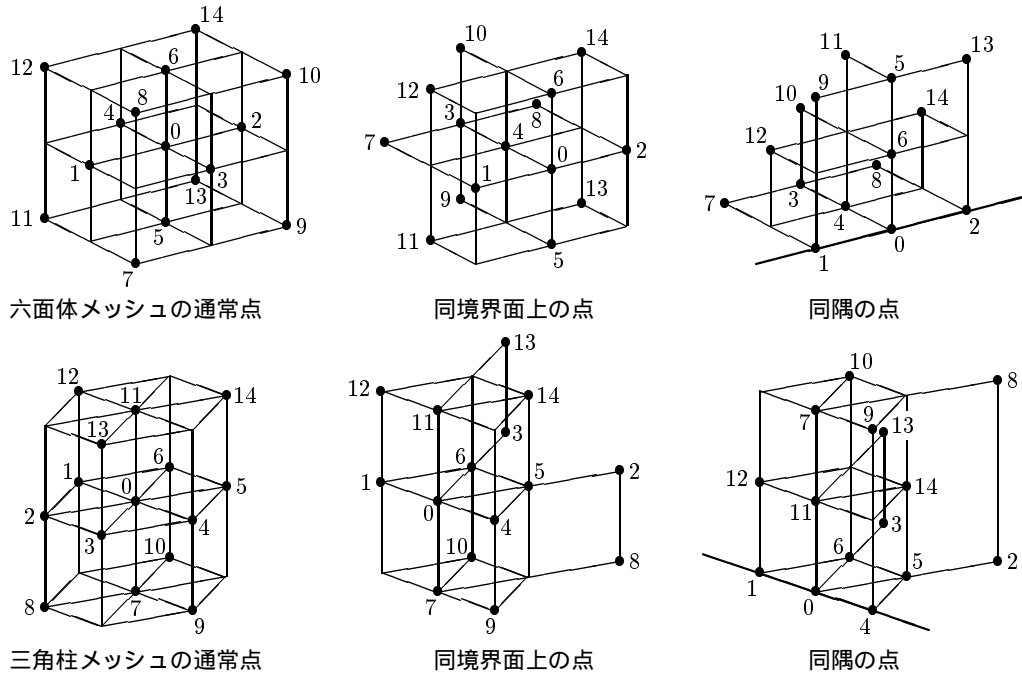


図 5.12: 14 近傍節点の選び方

例えば $\beta = 2$ の場合には上表から次のようになる .

$$\begin{aligned}
 (u_x)_0 &= \frac{1}{26h} \{ 9(u_{100} - u_{-1,0,0}) + (u_{1,-1,-1} - u_{-1,-1,-1}) + (u_{1,1,-1} - u_{-1,1,-1}) \\
 &\quad + (u_{1,-1,1} - u_{-1,-1,1}) + (u_{111} - u_{-1,1,1}) \} \\
 \Delta u_0 &= \frac{1}{7h^2} \{ 3(u_{-1,0,0} + u_{100} + u_{0,-1,0} + u_{010} + u_{0,0,-1} + u_{001}) + u_{-1,-1,-1} + u_{1,-1,-1} \\
 &\quad + u_{-1,1,-1} + u_{-1,-1,1} + u_{-1,1,1} + u_{1,-1,1} + u_{1,1,-1} + u_{111} - 26u_{000} \}
 \end{aligned}$$

立方体メッシュの一般的な Laplace 差分演算子は , 立方体の 6 側面の中心の u_k の和から立方体中心の u_0 を 6 倍したものを引算するもので次式で表される .

$$\begin{aligned}
 \diamond^3 u_{000} &\equiv u_{-1,00} + u_{100} + u_{0,-10} + u_{010} + u_{00,-1} + u_{001} - 6u_{000} \\
 &= 2 \left[\frac{h^2}{2!} \Delta + \frac{h^4}{4!} \left(\frac{\partial^4}{\partial x^4} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} + \frac{\partial^4}{\partial z^4} \right) \right] u_{000} + O(h^6)
 \end{aligned} \tag{5.67}$$

この式は指数 $\beta \rightarrow \infty$ に相当する . 一方 Laplace 差分演算子は立方体の 8 頂点の u_k の和から u_0 を 8 倍したものを引算することによって , また立方体の 12 の稜の中心点の u_k の和から u_0 を 12 倍したものを引算することによっても作ることもできる . このことは上記の調和関数の平均値の定理からも明らかである . ここでは高次の Laplace 差分演算子を上式と 8 頂点のものとの線形結合を取ることによって導く . 頂点の u_{111} の Taylor 展開は

$$\begin{aligned}
 u_{111} &= u_{000} + h \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) u_{000} + \frac{1}{2!} h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} + 2 \frac{\partial^2}{\partial z \partial z} + 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) u_{000} \\
 &\quad + \frac{1}{3!} h^3 \left(\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \dots \right)
 \end{aligned}$$

となる．これより 8 頂点の u の Taylor 展開の和は h, h^3, h^5, \dots の項は 0 になることが分かる．また h^4 の項の項数は $3^4 = 81$ あり，その内訳は $\partial^4/\partial x^4, \partial^4/\partial x^3\partial y, \partial^4/\partial x^2\partial y^2, \partial^4/\partial x^2\partial y\partial z$ 型のものがそれぞれ 3, 24, 18, 36 項ある．この内第 2, 第 4 の型ものは 8 頂点のものを加えれば 0 になることは容易に分かる．したがって 8 頂点の u を用いる Laplace 差分演算子は次のようになる．

$$\begin{aligned} \square^3 u_{000} &\equiv u_{-1,-1,-1} + u_{1,-1,-1} + u_{-1,1,-1} + u_{-1,-1,1} + u_{-1,1,1} + u_{1,-1,1} + u_{1,1,-1} + u_{111} - 8u_{000} \\ &= 8 \left[\frac{h^2}{2!} \Delta + \frac{h^4}{4!} \left\{ \Delta^2 + 4 \left(\frac{\partial^4}{\partial y^2 \partial z^2} + \frac{\partial^4}{\partial z^2 \partial x^2} + \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} \right) \right\} + \dots \right] u_{000} \end{aligned} \quad (5.68)$$

h^4 の項が $\Delta^2 u$ の形になるように式 (5.67) と (5.68) の線形結合を取れば次式が得られる．

$$\Delta u_{000} = \frac{1}{12h^2} (8\diamond^3 + \square^3) u_{000} - \frac{1}{18} h^2 \Delta^2 u_{000} + O(h^4) \quad (5.69)$$

この 3 次元の Laplace 差分演算子は，Laplace 方程式または Poisson 方程式の右辺が x, y の 1 次式の場合には 4 次精度で，また一般に 2 次精度の式 (5.67) に較べて高次のものである．上表に同じものはないが， $\beta = 3$ のものは十分に近く，これより 3 次元の場合にも重み関数の指数は 2 次元の場合と同じで良いことが分かる．

ここで参考までに，上表の係数を決定するためのプログラムを示す．このプログラム中の MATINV は行列 a の逆行列 a^{-1} を求めるサブルーチンで，配列 a に a の値を入れて呼べば配列 a に a^{-1} の値が入って戻るようになっているものである．記号の意味はだいたい分かると思うが， $wt = W$ ，また $coef$ は表中の係数の分母の配列である．このプログラムは，はじめ $coef$ の値を 1 と置いて差分式の係数 $ux, uLap$ を計算し，次にその結果から分母の値を決めこれを $coef$ に入れて再計算し係数の分子 $ux, uLap$ を決定するように作られている．

```

SUBROUTINE SELECTBT()
DIMENSION phi(9,14),a(9,9),wt(14),wa(9),iw(9),ux(14),uLap(14),bt(7),coef(2,7)
DATA phi/-1., 0., 0., 1., 0., 0., 0., 0., 0., &
      1., 0., 0., 1., 0., 0., 0., 0., 0., &
      0.,-1., 0., 0., 1., 0., 0., 0., 0., &
      0., 1., 0., 0., 1., 0., 0., 0., 0., &
      0., 0.,-1., 0., 0., 1., 0., 0., 0., &
      0., 0., 1., 0., 0., 1., 0., 0., 0., &
      -1.,-1.,-1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., &
      1.,-1.,-1., 1., 1., 1., 1.,-1.,-1., &
      -1., 1.,-1., 1., 1., 1.,-1., 1.,-1., &
      -1.,-1., 1., 1., 1., 1.,-1.,-1., 1., &
      -1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,-1.,-1., &
      1.,-1., 1., 1., 1., 1.,-1., 1.,-1., &
      1., 1.,-1., 1., 1., 1.,-1.,-1., 1., &
      1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1. /
! put m=1,2,3,4,5,6 or 7   m=1 then beta=0
DATA bt/0.,1.,2.,3.,4.,5.,6./; m=1
DATA coef/10.,13., 14.,5., 26.,7., 62.,13., 170.,31., 494.,85., 1466.,247./
FORALL(k=1:14)wt(k)=sqrt(phi(1,k)*phi(1,k)+phi(2,k)*phi(2,k)+phi(3,k)*phi(3,k))**(-bt(m))
DO n=1,9; DO l=1,9
  DO k=1,14
    a(n,l) = a(n,l)+wt(k)*wt(k)*phi(n,k)*phi(l,k)
  ENDDO
ENDDO; ENDDO
det=1.; e=0.
CALL MATINV(a,wa,iw,9,det,e)
DO k=1,14

```

```
DO n=1,9
  ux(k) = ux(k)+coef(1,m)*a(1,n)*wt(k)*wt(k)*phi(n,k)
  uLap(k) = uLap(k)+coef(2,m)*2.*(a(4,n)+a(5,n)+a(6,n))*wt(k)*wt(k)*phi(n,k)
ENDDO
ENDDO
OPEN(20,FILE='OUTPUT.dat')
WRITE(20,'(//14F12.6 /14F12.6)')ux,uLap
CLOSE(20)
ENDSUBROUTINE
```

最後に以上述べたことを纏めれば、ここには2次元または3次元空間内に u_k のデータが離散的に与えられているときに、これを局所的に近似するの2次多項式 $u(\mathbf{x})$ を最小2乗法によって決定する方法について述べた。最小2乗法の一般的性質として、中心の点 \mathbf{x}_0 に近い節点条件よりもむしろ遠い節点条件を重視する傾向があり、ここではそれを是正し更に高精度の差分式を得るために、点 \mathbf{x}_0 からの距離のべき乗に反比例する重み関数を導入することを提案した。その指数の値は2次元と3次元の場合に基本的に同じものになることを述べた。しかしながら筆者は、本来は計算に取り込む近傍節点の数や配置によるものであり、また上流化の必要のあるときには上流側の節点条件を重視するように重み関数に異方性を持たせることも必要であろうと考えている。三角形1次要素や四辺形双1次要素を用いるFEM解析において、Laplace方程式やPoisson方程式の境界値問題に関しては、これらの要素が正三角形または長方形またはこれらに近い場合には、2次精度の5点差分式を用いる計算を凌ぐ精度で関数値を求めることができる。しかしその微分値は、差分法では通常2次精度で得られるのに対し、FEMで単に各要素内で補間関数を微分したのでは2次精度は難しい。8節点六面体要素や6節点三角柱要素を用いたFEM解析においても同様のことが言える。上記の方法は、このような境界値問題のFEM解析において、各節点上の微分値を2次精度相当で求める際にも有効であろう。