

第9章 数値スキームの基礎

9.1 格子形成

9.2 座標変換

9.3 有限要素法の基礎

有限要素法 (FEM, finite element method) の特徴を差分法との比較において述べれば次のようになる。第一の最大の特徴は計算領域を自由に要素分割できることで、計算領域が複雑な形状を呈していても無理なく扱える。必要に応じ要素を細分化すれば局所精度を上げることできる。第二は、変分原理、ガレルキン法、最小 2 乗法などにより弱定式化されることで、支配方程式が平均的に満足されることである。誤差の評価は簡単ではないが、ゆがみの少ない 1 次要素を用いれば、2 次の差分式よりも高精度の結果が容易に得られる。しかし一方では対流項の 4 次精度の結果を得ることは容易でない。その他に、第 2 種境界条件の法線微分値ゼロの場合は自然境界条件といわれ、何もしなくてもよいこと、既存のプログラムを有効活用できることがある。

9.3.1 要素分割

有限要素法では計算領域は三角形、四辺形、四面体、六面体、三角柱などの要素 (element) に分割される。このことを要素分割またはメッシュ分割 (mesh discretization) という。要素分割は自由に行えるが、精度上は正三角形、正方形などに近いものが望ましく、大きさが徐々に変化し、必要なところが細かく分割されていなければならない。要素番号と節点番号の関係を、配列を用意し DATA 文で入力する。大きいデータは必要に応じ BLOCK DATA 文で入力する。M([要素節点番号],[要素番号])=[節点番号]。下図参照。

```
DIMENSION M(3,NF)
DATA M/1,4,5, 1,5,2, 2,5,6, 2,6,3, 3,6,7, 4,8,9, 4,9,5, ...../
```

あるいは要素が格子状に並び、縦横に番号をふることができれば、プログラム中で入力することも可能である。

```
DIMENSION M(4,NF)
DO 10 I=1,IF-1; DO 10 J=1,JF
K=(I-1)*JF+J           !nodal pt number
N=(I-1)*(JF-1)+J      !element number
M(1,N)=K           ; M(2,N)=K+JF
M(3,N)=K+JF+1     ; M(4,N)=K+1
10 CONTINUE
```

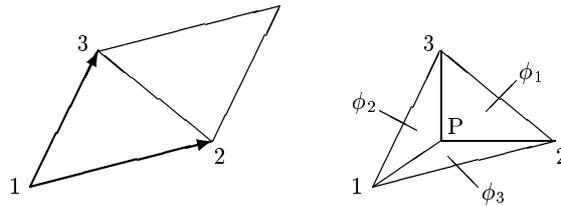
図 9.1: 要素分割

要素節点番号はすべての要素に対し同一基準でふられなければならない。3 次元要素の場合も同様である (下図参照)。また要素分割に際しては、連立 1 次方程式の係数行列のバンド幅を考慮しなければならない。例えば図 9.3 の場合に、メッシュ(a) はメッシュ(b) よりも節点数が 27%少ないが、バンド幅は (b) で

ただし

$$\Delta = |\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix} = |(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \times (\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1)|$$

Δ は三角形要素の面積の 2 倍である．同様に式 (9.5) の行列式を解釈すれば，形状関数 ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 は Δ_{123} の面積に対する $\Delta_{P23}, \Delta_{P31}, \Delta_{P12}$ の面積の割合であることが分かる．三角形 1 次要素の形状関数は面積座標 (area coordinates) とも呼ばれることがある．



三角形 1 次要素の形状関数は 1 次式で，その 1 階微分は定数，2 階微分は 0 になる．

$$\begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

また形状関数の積分に関しては次の公式が知られている．

$$\int_{\Omega^e} \phi_1^l \phi_2^m \phi_3^n d\Omega = \frac{l! m! n!}{(l+m+n+2)!} \Delta \quad (9.7)$$

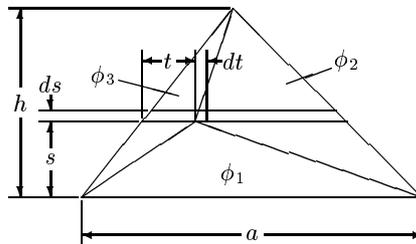


図 9.4: 三角形 1 次要素における形状関数の積分

次に三角形 1 次要素の積分公式 (9.7) を上図を参照しながら証明する．形状関数すなわち面積座標は

$$\begin{aligned} \phi_1 &= as/\Delta, \\ \phi_2 &= \{a(h-s) - ht\}/\Delta, \\ \phi_3 &= ht/\Delta \end{aligned}$$

となる．したがって式 (9.7) の積分は

$$I = \int_{\Omega^e} \phi_1^l \phi_2^m \phi_3^n d\Omega = \frac{a^l h^{m+n}}{\Delta^{l+m+n}} \int_0^h s^l ds \int_0^{a(1-s/h)} \{a(1-s/h) - t\}^m t^n dt$$

ここで部分積分を繰り返すことによって得られる関係

$$\int_0^b (b-t)^m t^n dt = \frac{n}{m+1} \int_0^b (b-t)^{m+1} t^{n-1} dt = \dots = \frac{m! n!}{(m+n)!} \int_0^b (b-t)^{m+n} dt = \frac{m! n! b^{m+n+1}}{(m+n+1)!}$$

を上式の t に関する積分, 続いて s に関する積分に適用すれば

$$I = \frac{m! n! a^{l+m+n+1} h^{-1}}{(m+n+1)! \Delta^{l+m+n}} \int_0^h (h-s)^{m+n+1} s^l ds = \frac{l! m! n!}{(l+m+n+2)!} \Delta$$

となる [証明終り] .

一般に形状関数の i 番目の要素 ϕ_i の行列式は $\Delta = |A|$ の i 行目を b で置換えたものになる . 三角形 2 次要素その他の形状関数の式も A と b が与えられれば容易に書けるであろう .

三角形 3 次要素の推奨できるものは, 節点値として関数 u のほかに節点における関数の微分 u_x, u_y を用いるものである . このような要素は Hermite 要素と呼ばれる . 3 次要素では多項式 (9.2) の 10 項めまで取られるので節点条件は 10 個必要になり, 三角形の 3 頂点の u, u_x, u_y と例えば重心点の u が用いられる . この 3 次要素の節点値のベクトルは

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_{x1} \\ u_{y1} \\ u_2 \\ u_{x2} \\ u_{y2} \\ u_3 \\ u_{x3} \\ u_{y3} \\ u_4 \end{pmatrix}, \quad \Delta = |A|$$

また A と b は次のようになる .

	A	b
三角形 3 次 Hermite 要素	$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1 y_1 & y_1^2 & x_1^3 & x_1^2 y_1 & x_1 y_1^2 & y_1^3 \\ 0 & 1 & 0 & 2x_1 & y_1 & 0 & 3x_1^2 & 2x_1 y_1 & y_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_1 & 2y_1 & 0 & x_1^2 & 2x_1 y_1 & 3y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2 y_2 & y_2^2 & x_2^3 & x_2^2 y_2 & x_2 y_2^2 & y_2^3 \\ 0 & 1 & 0 & 2x_2 & y_2 & 0 & 3x_2^2 & 2x_2 y_2 & y_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_2 & 2y_2 & 0 & x_2^2 & 2x_2 y_2 & 3y_2^2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3^2 & x_3 y_3 & y_3^2 & x_3^3 & x_3^2 y_3 & x_3 y_3^2 & y_3^3 \\ 0 & 1 & 0 & 2x_3 & y_3 & 0 & 3x_3^2 & 2x_3 y_3 & y_3^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & x_3 & 2y_3 & 0 & x_3^2 & 2x_3 y_3 & 3y_3^2 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4^2 & x_4 y_4 & y_4^2 & x_4^3 & x_4^2 y_4 & x_4 y_4^2 & y_4^3 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & x & y & x^2 & xy & y^2 \\ x^3 & x^2 y & xy^2 & y^3 \end{pmatrix}$

頭の中で, xy 面に垂直に u 軸を取り, 面 $u = u(x, y)$ を描く . この面は三角形 1 次, 2 次, 3 次要素内では平面, 2 次曲面, または 3 次曲面であるが, 要素境界ではどうなっているのだろうか . 答えは変数 u は連続, 法線微分値 u_n は不連続である . すなわち繋がってはいるが折れ曲っている . このことは三角形 1 次要素では

明らかであろう。2次要素では、境界に沿って座標 s を取り、その両側の要素に関して $u(s) = d_0 + d_1s + d_2s^2$ と置けば、3つの未定係数 d_0, d_1, d_2 は3節点の u の値から一意的に決定でき u は連続になる。しかし u_n については、1次式 $u_n(s) = d_0 + d_1s$ の未定係数が節点条件から確定できず不連続である。また上記の3次 Hermite 要素では、 u については $u(s) = d_0 + d_1s + d_2s^2 + d_3s^3$ の4つの未定係数が辺の両端の節点の u と u_s の値から一意的に決定でき連続であるが、 u_n については $u_n(s) = e_0 + e_1s + e_2s^2$ の未定係数が、両端の節点の u_n の値のみでは条件不足で確定できず、節点上では連続になるが境界上では一般に不連続である。しかし不連続の程度は他と較べ小さいと言える。法線微分値も境界上で連続になることは望ましいが、これは5次要素にしてはじめて可能なことで、三角形の頂点の $u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}$ と辺の中間点の u_n を用いる三角形5次 Hermite 要素が提案されている。しかしながらこの要素は、提唱者の見解とは異なり、プログラムが長大、計算量多く、精度も期待ほどでなく推奨できない。これとは別に、三角形2次要素で u_n の不連続性に配慮する方法も提案されている。

四辺形要素：補間関数の多項式展開

$$\begin{aligned}
 u(x, y) = & c_1 + c_2x + c_5x^2 \\
 & + c_3y + c_4xy + c_7x^2y \\
 & + c_6y^2 + c_8xy^2 + c_9x^2y^2
 \end{aligned} \tag{9.8}$$

において項の数は要素の節点数に合わせなければならない。四辺形双1次要素の場合には、第4項までの双1次式が用いられる。 xy の項は数合わせのために含まれたもので、これで2次式に近づくことはない。四辺形2次 Lagrange 要素は双2次式すなわち上式のすべての項をとるものである。第8項めまでをとり要素中心の節点を省略する2次要素もあるが、問題にもよるが2次 Lagrange 要素に較べて精度がかなり低下するという報告もある。

四辺形双1次要素と2次 Lagrange 要素の式 (9.4) の A, b は次のようになる。

	A	b
四辺形双1次要素	$ \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3y_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4y_4 \end{pmatrix} $	$ (1 \quad x \quad y \quad xy) $
四辺形2次 Lagrange 要素	$ \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1y_1 & y_1^2 & x_1^2y_1 & x_1y_1^2 & x_1^2y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2y_2 & y_2^2 & x_2^2y_2 & x_2y_2^2 & x_2^2y_2^2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_9 & y_9 & x_9^2 & x_9y_9 & y_9^2 & x_9^2y_9 & x_9y_9^2 & x_9^2y_9^2 \end{pmatrix} $	$ \begin{pmatrix} 1 & x & y & x^2 & xy & y^2 \\ & x^2y & xy^2 & x^2y^2 & & \end{pmatrix} $

形状関数の微分積分を物理空間で直接行うのは必ずしも容易でない。そのために物理空間内の要素を局所的に正方形、直角二等辺三角形、立方体などに写像し、写像空間内で微分積分を行う方法が広く用いられている。双1次要素を $\xi\eta$ 空間内の正方形要素 $-1 \leq \xi, \eta \leq 1$ に写像する。この正方形要素の補間関数は、 ξ または η に関して1次で、また形状関数の性質上 $\phi_1(\xi_i)$ は $i = 1$ で1、 $i = 2, 3, 4$ で0でなければならない。

いから次のように与えられる .

$$u^*(\xi) = \phi(\xi) \cdot \mathbf{u} = \phi_1 u_1 + \phi_2 u_2 + \phi_3 u_3 + \phi_4 u_4$$

$$\phi_i = \frac{1}{4}(1 + \xi_i \xi)(1 + \eta_i \eta) \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (9.9)$$

ただし ξ_i, η_i の値は次の通りである .

i	1	2	3	4
ξ_i	-1	1	1	-1
η_i	-1	-1	1	1

式 (9.9) は変数 u の代わりに座標 x または y を入れてももちろん成立し , これにより u と x, y がパラメータ ξ を介して関係付けられることになる .

次に形状関数の微分についてのべる . 自明の関係

$$x = x(\xi(x, y), \eta(x, y)), \quad y = y(\xi(x, y), \eta(x, y)) \quad (9.10)$$

を x, y で微分すれば

$$1 = \xi_x x_\xi + \eta_x x_\eta, \quad 0 = \xi_x y_\xi + \eta_x y_\eta,$$

$$0 = \xi_y x_\xi + \eta_y x_\eta, \quad 1 = \xi_y y_\xi + \eta_y y_\eta$$

これらの式から次の変換の測度 (metrics) の関係が導かれる .

$$\xi_x = y_\eta / J, \quad \eta_x = -y_\xi / J, \quad \xi_y = -x_\eta / J, \quad \eta_y = x_\xi / J \quad (9.11)$$

ただし J は次式で定義される変換の Jacobian である .

$$J = \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \eta)} = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi \quad (9.12)$$

式 (9.11) を用いれば

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_x & \eta_x \\ \xi_y & \eta_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} y_\eta & -y_\xi \\ -x_\eta & x_\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (9.13)$$

となるから , ϕ の微分は次のようになる .

$$\begin{pmatrix} \phi_x \\ \phi_y \end{pmatrix} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} y_\eta & -y_\xi \\ -x_\eta & x_\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_\xi \\ \phi_\eta \end{pmatrix} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \phi_\eta \cdot \mathbf{y} & -\phi_\xi \cdot \mathbf{y} \\ -\phi_\eta \cdot \mathbf{x} & \phi_\xi \cdot \mathbf{x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_\xi \\ \phi_\eta \end{pmatrix} \quad (9.14)$$

ただし形状関数の微分と節点の座標は次のようになる .

$$\begin{pmatrix} \phi_\xi \\ \phi_\eta \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -1 + \eta & 1 - \eta & 1 + \eta & -1 - \eta \\ -1 + \xi & -1 - \xi & 1 + \xi & 1 - \xi \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{x} \ \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \\ x_3 & y_3 \\ x_4 & y_4 \end{pmatrix} \quad (9.15)$$

なお上式の導出について多少補えば，式 (9.9) は x に対しては $x(\xi) = \phi(\xi) \cdot x$ となり，これを ξ で微分すれば $x_\xi = \phi_\xi \cdot x$ となる．他も同様である．またこの式の形状関数の微分は $(\phi_i)_\xi = \xi_i(1+\eta_i\eta)/4$ ， $(\phi_i)_\eta = \eta_i(1+\xi_i\xi)/4$ である．

形状関数の積分に関しては，例えば

$$\int_{\Omega^e} \phi_k(\mathbf{x})\phi_j(\mathbf{x})d\Omega = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \phi_k(\xi)\phi_j(\xi)J(\xi)d\xi d\eta \quad (9.16)$$

となる．この積分値は，通常 6.1.3 項に述べた Gauss 積分 (Gauss-Legendre 求積法) によって求められる．

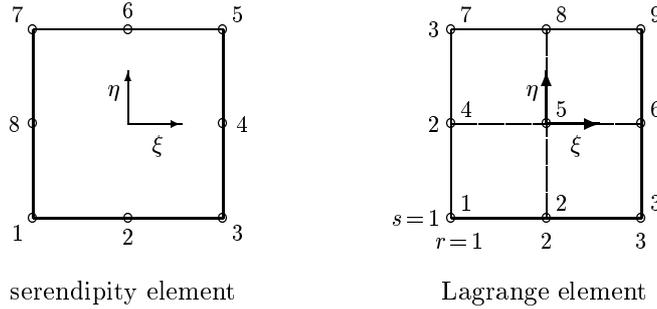


図 9.5: 四辺形 2 次要素

8 節点 2 次セレンディピティ²要素 (8-node quadratic serendipity element) の形状関数は次のようになる³．

$$\phi_i = \begin{cases} \frac{1}{4}(1+\xi_i\xi)(1+\eta_i\eta)(\xi_i\xi+\eta_i\eta-1) & (\xi_i = \pm 1, \eta_i = \pm 1, \text{四隅}) \\ \frac{1}{2}(1-\xi^2)(1+\eta_i\eta) & (\xi_i = 0, \eta_i = \pm 1, \text{辺の中点}) \\ \frac{1}{2}(1+\xi_i\xi)(1-\eta^2) & (\xi_i = \pm 1, \eta_i = 0, \text{辺の中点}) \end{cases} \quad (9.17)$$

また 9 節点 2 次ラグランジュ要素 (quadratic Lagrangian element) の補間関数は次のようになる．

$$u(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^9 \phi_i(\xi, \eta)u_i = \sum_{r=1}^3 \sum_{s=1}^3 L_r^2(\xi)L_s^2(\eta)u_i \quad (i = r+3(s-1)) \quad (9.18)$$

ただし L_r^2 は 2 次 Lagrange 補間多項式の係数で

$$L_1^2(\xi) = -\frac{1}{2}\xi(1-\xi), \quad L_2^2(\xi) = 1-\xi^2, \quad L_3^2(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1+\xi)$$

形状関数は例えば $\phi_2(\xi, \eta) = L_2^2(\xi)L_1^2(\eta) = -(1-\xi^2)\eta(1-\eta)/2$ である．

形状関数の微分は serendipity 要素では

$$\begin{pmatrix} \phi_\xi \\ \phi_\eta \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (1-\eta)(2\xi+\eta) & -4\xi(1-\eta) & \cdots & -2(1-\eta^2) \\ (1-\xi)(\xi+2\eta) & -2(1-\xi^2) & \cdots & -4(1-\xi)\eta \end{pmatrix}$$

² Horace Walpole のおとぎばな “The Three Princes of Serendip” (ものがたりの主人公が偶然に珍宝を発見) の題名からの造語で，当てにしないいいものを偶然発見する才能．

³ セレンディピティとは言い理窟はある． $\phi(\xi)$ は節点 ξ_i で 1，他の節点上で 0 でなければならない． $\phi_i(\xi, \eta)$ ， $\xi_i = \pm a$ が $\phi_i(\mp a, \eta) = 0$ になるための因子は $a^2 + \xi_i\xi$ である．また $\phi(\pm a, \pm b) = 0$ であるための因子は $\alpha(\xi^2 - a^2) + \beta(\eta^2 - b^2)$ ， α, β は任意定数であるが， ξ, η に関し対称であるためには $\alpha = \beta$ でなければならない．

また Lagrange 要素では

$$\begin{pmatrix} \phi_\xi \\ \phi_\eta \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (1-2\xi)\eta(1-\eta) & 4\xi\eta(1-\eta) & \dots\dots\dots & (1+2\xi)\eta(1+\eta) \\ \xi(1-\xi)(1-2\eta) & -2(1-\xi^2)(1-2\eta) & \dots\dots\dots & \xi(1+\xi)(1+2\eta) \end{pmatrix}$$

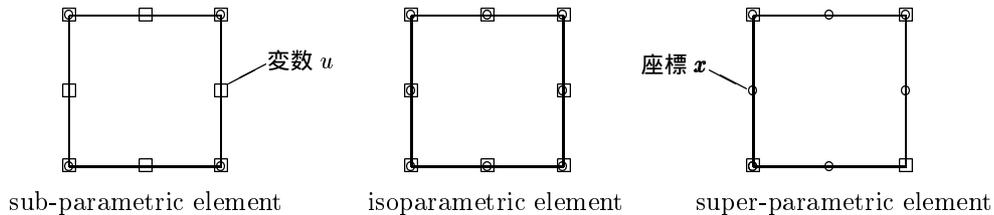
のようになる .

四辺形双 1 次要素では座標 x と変数 u に対し同じ補間関数を用いたが , 高次要素では必ずしも同じものを用いる必要はない .

$$\mathbf{x}(\xi) = \bar{\phi}_i(\xi) \mathbf{x}_i$$

$$u(\xi) = \phi_i(\xi) u_i$$

ただし $\bar{\phi}_i(\xi), \phi_i(\xi)$ は要素ごとの局所座標 ξ で表された形状関数である . $\bar{\phi}_i(\xi)$ の節点数が $\phi_i(\xi)$ の節点数よりも少ない要素をサブパラメトリック要素, 同じものをアイソパラメトリック要素, 多いものをスーパーパラメトリック要素という .



serendipity 要素と Lagrange 要素を比較すれば , 1 次要素は同じになり , 2 次要素は Lagrange 要素の方が解の精度が良く , 更に高次では serendipity 要素の方が計算量少なくかつ安定であると言われている .

3 次元要素 : 四面体要素 , 六面体要素 , 三角柱要素が用いられている . 四面体要素への分割は , 直接は困難なので , 計算領域を一たん六面体要素に分割しそれから各六面体要素を 5 個の四面体要素に分割することによって実現できる . 三角柱要素への分割は , 六面体要素を 2 分割するか , 計算領域をまず層状に分割し , 各境界面上に同じトポロジーの三角形メッシュを作りこれを繋ぐことによって達成できる . 要素の歪が小さくなるように注意しなければならない . 四面体 1 次要素と三角柱要素の形状関数の式 (9.4) の A, b は次のようになる .

	A	b
四面体 1 次要素	$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & x & y & z \end{pmatrix}$
六面体三重 1 次要素	$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 & y_1 z_1 & z_1 x_1 & x_1 y_1 & x_1 y_1 z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 & y_2 z_2 & z_2 x_2 & x_2 y_2 & x_2 y_2 z_2 \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ 1 & x_8 & y_8 & z_8 & y_8 z_8 & z_8 x_8 & x_8 y_8 & x_8 y_8 z_8 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & x & y & z & yz & zx & xy & xyz \end{pmatrix}$

9.3.3 変分法

変分法 (calculus of variations) は理系学部の前記課程で習得されると思うが、されなかった人のために、そもそも変分とは何か、変分に関する基礎用語、変分 FEM に関連するところを簡単に説明する。物理現象は変分原理にしたがうもので、例えば光の屈折反射に関する最小時間の Fermat の原理、弾性体の平衡問題における最小ポテンシャルエネルギー、Castigliano の原理など良く知られるものである。変分原理を基にひとつの物理現象を支配する汎関数の変分問題が立てられ、それから微分方程式の境界値問題が出てくる。しかし昨今の変分 FEM では、境界値問題が先にあり、変分問題が後になることも多い。微分方程式は汎関数から一意的に得られる。逆にある微分方程式の汎関数はいくつでも作ることができるが、通常使われるものは 1 つである。

まずはじめに最も簡単な変分問題、 $x_0, x_1, u(x_0), u(x_1)$ が与えられるときに汎関数 (functional)

$$J[u] = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx = \min \quad (9.19)$$

の最小値を決定する問題を考える⁴。F は $x, u, u' (= du/dx)$ に関し 2 階微分まで連続、また u は x に関し 2 階微分まで連続とする。J[u] が極小になる関数 $u(x)$ に対しては、 u の値が少し変化しても J の値がほとんど変わらないと考えられる。このことは、汎関数は関数の関数であるが、通常関数 $u(x)$ の最大値または最小値のところでは、変数 x の値が少し変化しても u の値がほとんど変化しないことから類推できよう。関数 u の微小変化したものをパラメータ ϵ を用い $u + \delta u \equiv u + \epsilon \eta(x)$ と置き、式 (9.19) に代入すれば、

$$J[u + \epsilon \eta] = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u + \epsilon \eta, u' + \epsilon \eta') dx$$

となる。最小値と求めるために、これを ϵ で微分しゼロと置けば

$$\frac{d}{d\epsilon} J[u + \epsilon \eta] = \int_{x_0}^{x_1} (F_u \eta + F_{u'} \eta') dx = 0$$

更にこの式を部分積分すれば、 $\eta(x_0) = \eta(x_1) = 0$ であるから

$$\int_{x_0}^{x_1} \eta \left(F_u - \frac{d}{dx} F_{u'} \right) dx = 0$$

となる。この式は任意の η に対して成立しなければならないから次式が得られる。

$$\frac{d}{dx} F_{u'} - F_u = 0 \quad (9.20)$$

あるいは誤解の生じないように詳しく書けば次のようになる。

$$u'' F_{u'u'} + u' F_{u'u} + F_{u'x} - F_u = 0 \quad (9.21)$$

この式は Euler の微分方程式と呼ばれるものである。この方程式の解は上記の停留関数 (extremal) である。 $dF_{u'}/dx - F_u$ を F の u に関する変分導関数 (variational derivative) という。停留関数は Legendre の条件

$$F_{u'u'} \neq 0 \quad (9.22)$$

⁴R. Courant and D. Hilbert, Methods of Mathematical Physics, Vol.I, 1953, Interscience Publishers.

が満足されるときに，極値関数 (extremum) になる．このことは，関数 $u(x)$ の場合に， $u' = 0$ の点が極値であるためには，定数値関数や変曲点を除くために条件 $u'' \neq 0$ が必要であることから類推できよう．なお通常の言い方では， $\delta u = \epsilon \eta$ は u の変分 (variation)，また

$$\delta J = \int_{x_0}^{x_1} (F_u \delta u + F_{u'} \delta u') dx = \int_{x_0}^{x_1} \left(F_u - \frac{d}{dx} F_{u'} \right) \delta u dx + (F_{u'} \delta u)_{x=x_1} - (F_{u'} \delta u)_{x=x_0}$$

は J の第 1 変分 (first derivative) または単に変分と呼ばれる． J が最小になるための必要条件は，与えられた境界条件を満足するすべての $u + \delta u$ に対して第 1 変分がゼロになることである．

次にいくつかの変分問題について，汎関数，第 1 変分，Euler 方程式などを示す．

関数 $u(x), v(x), \dots$ の変分問題：この問題は一般に次のように書かれる．

$$J = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, v, \dots, u', v', \dots) dx = \min$$

$u + \delta u, v + \delta v, \dots$ と置いて第 1 変分を取れば

$$\delta J = \int_{x_0}^{x_1} (F_u \delta u + F_{u'} \delta u' + F_v \delta v + F_{v'} \delta v' + \dots) dx = 0$$

部分積分すれば

$$\delta J = F_{u'} \delta u \Big|_{x_0}^{x_1} + F_{v'} \delta v \Big|_{x_0}^{x_1} + \int_{x_0}^{x_1} \left(F_u - \frac{d}{dx} F_{u'} \right) \delta u dx + \int_{x_0}^{x_1} \left(F_v - \frac{d}{dx} F_{v'} \right) \delta v dx + \dots = 0$$

これより Euler 方程式は

$$\frac{d}{dx} F_{u'} - F_u = 0, \quad \frac{d}{dx} F_{v'} - F_v = 0$$

あるいは詳しく書けば

$$\begin{aligned} u'' F_{u'u'} + u' F_{u'u} + F_{u'x} - F_u &= 0, \\ v'' F_{v'v'} + v' F_{v'v} + F_{v'x} - F_v &= 0 \end{aligned}$$

となる．

高次微分 $u'', \dots, u^{(n)}$ を含む変分問題：この問題は一般に

$$J = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u', u'', \dots, u^{(n)}) dx = \min$$

境界条件 $u(x_0), u'(x_0), \dots, u^{(n)}(x_0), u(x_1), u'(x_1), \dots, u^{(n)}(x_1)$ が与えられるものとする．上式の第 1 変分を取れば

$$\delta J = \int_{x_0}^{x_1} (F_u \delta u + F_{u'} \delta u' + \dots + F_{u^{(n)}} \delta u^{(n)}) dx = 0$$

部分積分すれば

$$\delta J = \int_{x_0}^{x_1} \left(F_u - \frac{d}{dx} F_{u'} + \frac{d^2}{dx^2} F_{u''} - \dots + (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} F_{u^{(n)}} \right) \delta u dx = 0$$

これより Euler 方程式は

$$F_u - \frac{d}{dx}F_{u'} + \frac{d^2}{dx^2}F_{u''} - \dots + (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}F_{u^{(n)}} = 0$$

この式は詳しく書けば膨大なものになる．例えば $n = 2$ の場合には次のようになる．

$$\begin{aligned} & F_u - (u'''F_{u'u''} + u''F_{u'u'} + u'F_{u'u} + F_{u'x}) \\ & + u^{(4)}F_{u''u''} + u'''(u''''F_{u''u''u''} + u''F_{u''u'u''} + u'F_{u''u'u'} + F_{u''xu''}) \\ & + u''''F_{u''u''} + u''(u''''F_{u''u''u''} + u''F_{u''u'u''} + u'F_{u''u'u'} + F_{u''xu''}) \\ & + u''F_{u''u} + u'(u''''F_{u''u''u} + u''F_{u''u'u} + u'F_{u''uu} + F_{u''xu}) \\ & + (u''''F_{u''u''x} + u''F_{u''u'x} + u'F_{u''ux} + F_{u''xx}) = 0 \end{aligned}$$

2次元の変分問題：この問題では次の汎関数の極値関数 $u(x, y)$ を求める．

$$J = \iint_G F(x, y, u, u_x, u_y) dx dy = \min$$

第1変分を取れば

$$\delta J = \iint_G (F_u \delta u + F_{u_x} \delta u_x + F_{u_y} \delta u_y) dx dy = 0$$

部分積分すれば⁵

$$\delta J = \oint_G (F_{u_x} dy - F_{u_y} dx) \delta u + \iint_G (F_u - \frac{\partial}{\partial x}F_{u_x} - \frac{\partial}{\partial y}F_{u_y}) \delta u dx dy = 0$$

境界値 u が与えられる場合には

$$\delta J = \iint_G (F_u - \frac{\partial}{\partial x}F_{u_x} - \frac{\partial}{\partial y}F_{u_y}) \delta u dx dy = 0$$

Euler 方程式は

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

あるいは詳しく書けば

$$u_{xx}F_{u_x u_x} + 2u_{xy}F_{u_x u_y} + u_{yy}F_{u_y u_y} + u_x F_{u_x u} + u_y F_{u_y u} + F_{u_x x} + F_{u_y y} - F_u = 0$$

となる．

次に汎関数の例をいくつか挙げ、それらの Euler 方程式を示す． $2F = \nabla u \cdot \nabla u = u_x^2 + u_y^2$ の変分問題とその第1変分は

$$\begin{aligned} J &= \iint_G \frac{1}{2}(u_x^2 + u_y^2) dx dy = \min \\ \delta J &= \iint_G \frac{1}{2}(u_x \delta u_x + u_y \delta u_y) dx dy = 0 \end{aligned}$$

⁵被積分関数の第1項を除外すれば、上式の積分は $\iint \mathbf{a} \cdot \delta \nabla u dx dy$ のように書ける．この被積分関数は $\mathbf{a} \cdot \delta \nabla u = \nabla \cdot (\mathbf{a} \delta u) - \nabla \cdot \mathbf{a} \delta u$ のように書換えることができる．この右辺第1項の積分は Gauss の定理を用いれば、 $\iint \nabla \cdot (\mathbf{a} \delta u) dx dy = \oint \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} \delta u ds$ となる．ただし \mathbf{n} は境界の部分 ds における外向き単位法線ベクトルで、 $\mathbf{n} ds = (dy \ -dx)$ となる．

この変分の式を部分積分する． $u_x \delta u_x + u_y \delta u_y = \nabla u \cdot \nabla \delta u = \nabla \cdot (\delta u \nabla u) - \delta u \nabla^2 u$ であるから，Gauss の定理を用い，法線微分を $\mathbf{n} \cdot \nabla u = u_n$ と置けば

$$\delta J = \oint_{\Gamma} u_n \delta u \, ds - \iint_G (u_{xx} + u_{yy}) \delta u \, dx dy = 0$$

これよりこの変分問題の Euler 方程式が Laplace 方程式 $\nabla^2 u \equiv u_{xx} + u_{yy} = 0$ であることが分かる．

またこれより Poisson 方程式 $u_{xx} + u_{yy} = g$ の汎関数が

$$J = \iint_G \left\{ \frac{1}{2} (u_x^2 + u_y^2) + gu \right\} dx dy$$

のようになることは容易に分かるであろう．

次に $2F = (\nabla^2 u)^2 = u_{xx}^2 + 2u_{xx}u_{yy} + u_{yy}^2$ の変分問題とその第 1 変分は

$$J = \iint_G \frac{1}{2} (u_{xx}^2 + 2u_{xx}u_{yy} + u_{yy}^2) dx dy = \min$$

$$\delta J = \iint_G (u_{xx} \delta u_{xx} + u_{yy} \delta u_{yy} + u_{xx} \delta u_{yy} + u_{yy} \delta u_{xx}) dx dy = \iint_G \nabla^2 u \delta \nabla^2 u \, dx dy = 0$$

この変分の式を部分積分する． $\nabla^2 u \delta \nabla^2 u = \nabla \cdot (\nabla^2 u \delta \nabla u) - \nabla \nabla^2 u \cdot \delta \nabla u = \nabla \cdot (\nabla^2 u \delta \nabla u) - \nabla \cdot (\nabla \nabla^2 u \delta u) + \nabla^2 \nabla^2 u \delta u$ であるから，Gauss の定理を用いれば，

$$\delta J = \oint_{\Gamma} (\nabla^2 u \delta u_n - \nabla^2 u_n \delta u) ds + \iint_G \nabla^2 \nabla^2 u \delta u \, dx dy = 0$$

これよりこの変分問題の Euler 方程式は重調和方程式 (biharmonic equation) $\nabla^2 \nabla^2 u \equiv u_{xxxx} + 2u_{xxyy} + u_{yyyy} = 0$ であることが分かる．

この項の終りに境界条件について簡単に述べる．変分問題には上記のように境界値 u の課されるものの他に，境界条件のないもの，より一般的な境界条件の課されるものがある．最も簡単な変分問題

$$J = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx = \min$$

で境界条件のない場合には，第 1 変分を取れば

$$\delta J = (F_{u'} \delta u)_{x=x_1} - (F_{u'} \delta u)_{x=x_0} + \int_{x_0}^{x_1} \left(F_u - \frac{d}{dx} F_{u'} \right) \delta u \, dx = 0$$

したがって， $\delta J = 0$ にするためには，Euler 方程式と共に境界条件

$$F_{u'} = 0 \quad (x = x_0, x = x_1)$$

が満足されなければならない．この条件は自然境界条件 (natural boundary condition) と呼ばれる．

次により一般的な境界条件の与えられる場合について説明する．一つの例として次の変分問題を取上げる．

$$J = \int_{x_0}^{x_1} F(x, u, u') dx + \varphi_1(u_1) - \varphi_0(u_0) = \min$$

第 1 変分を取れば

$$\delta J = (F_{u'} + \varphi_1') \delta u \Big|_{x=x_1} - (F_{u'} + \varphi_0') \delta u \Big|_{x=x_0} + \int_{x_0}^{x_1} \left(F_u - \frac{d}{dx} F_{u'} \right) \delta u \, dx = 0$$

自然境界条件は

$$F_{u'} + \varphi'_0 = 0 \quad (x = x_0); \quad F_{u'} + \varphi'_1 = 0 \quad (x = x_1)$$

となる . Poisson 方程式に相当の変分問題は

$$J = \iint_G \left\{ \frac{1}{2}(u_x^2 + u_y^2) + gu \right\} dx dy + \oint_\Gamma \left(\frac{1}{2}\sigma u^2 - \tau u \right) ds = \min$$

第 1 変分を取れば

$$\delta J = - \iint_G (u_{xx} + u_{yy} - g) \delta u dx dy + \oint_\Gamma (u_n + \sigma u - \tau) \delta u ds = 0$$

この場合の自然境界条件は次の一般的な混合境界条件になる .

$$u_n + \sigma u = \tau \quad \text{on } \Gamma$$

9.3.4 FEM の精度の評価と改善

三角形 1 次要素の精度は , 1 つの要素内に限定すれば , 関数値は 1 次補間 , 1 階微分値は定数 , 2 階微分値は 0 になる . しかしながら隣接要素も含めれば , その精度は差分法の 3 点差分式にほぼ匹敵し場合によってはそれを凌駕する . 例えば Laplace 方程式 $\nabla^2 u = 0$ の境界値問題を正三角形 1 次要素を用い変分 FEM または Galerkin 法で解く場合には , 離散方程式は領域内部の節点では次のように簡単になる .

$$\sum_{k=1}^6 (u_k - u_0) = 0$$

ただし $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ は六角形の中心の節点 , $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k$ はその周囲の節点である . この離散方程式は驚く勿れ 4 次精度である . このことを xy に関する Taylor 展開を用いて証明する .

$$u_k = u_0 + h \mathbf{a}_k \cdot \nabla u_0 + \frac{1}{2!} a^2 (\mathbf{a}_k \cdot \nabla)^2 u_0 + \frac{1}{3!} a^3 (\mathbf{a}_k \cdot \nabla)^3 u_0 + \frac{1}{4!} a^4 (\mathbf{a}_k \cdot \nabla)^4 u_0 + \frac{1}{5!} a^5 (\mathbf{a}_k \cdot \nabla)^5 u_0 + \dots$$

ただし a は正三角形要素の 1 辺の長さ , $\mathbf{a}_1 = (1 \ 0)$, $\mathbf{a}_2 = (1/2 \ \sqrt{3}/2)$, $\mathbf{a}_3 = (-1/2 \ \sqrt{3}/2)$, $\mathbf{a}_4 = (-1 \ 0)$, $\mathbf{a}_5 = (-1/2 \ -\sqrt{3}/2)$, $\mathbf{a}_6 = (1/2 \ -\sqrt{3}/2)$ である . u_k の Taylor 展開を次表に示す .

	u	u_x	u_y	u_{xx}	u_{xy}	u_{yy}	u_{xxx}	u_{xxy}	u_{xyy}	u_{yyy}
	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{\sqrt{3}}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3\sqrt{3}}{8}$
u_1	1	2	0	4	0	0	8	0	0	0
u_2	1	1	1	1	2	1	1	3	3	1
u_3	1	-1	1	1	-2	1	-1	3	-3	1
u_4	1	2	0	4	0	0	-8	0	0	0
u_5	1	-1	-1	1	2	1	-1	-3	-3	-1
u_6	1	1	-1	1	-2	1	1	-3	3	-1
sum	6	0	0	3	0	3	0	0	0	0

u_{xxxx}	u_{xxyy}	u_{xyyy}	u_{yyyy}		u_{xxxx}	u_{xxyy}	u_{xyyy}	u_{yyyy}	u_{yyyyy}	
$\frac{1}{16}$	$\frac{\sqrt{3}}{16}$	$\frac{3}{16}$	$\frac{3\sqrt{3}}{16}$	$\frac{9}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{\sqrt{3}}{32}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{3\sqrt{3}}{32}$	$\frac{9}{32}$	$\frac{9\sqrt{3}}{32}$
16	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0
1	4	6	4	1	1	5	10	10	5	1
1	-4	6	-4	1	-1	5	-10	10	-5	1
16	0	0	0	0	-32	0	0	0	0	0
1	4	6	4	1	-1	-5	-10	-10	-5	-1
1	-4	6	-4	1	1	-5	10	-10	5	-1
9/4	0	18/4	0	9/4	0	0	0	0	0	0

sum はその上の欄の数の和に第 2 欄の数を乗じたものである。この表を参照すれば上式から

$$\sum_{k=1}^6 (u_k - u_0) = 3 \frac{1}{2!} a^2 \nabla^2 u + \frac{9}{4} \frac{1}{4!} a^4 \nabla^2 \nabla^2 u + O(a^6)$$

Laplace 方程式では $\nabla^2 \nabla^2 u = 0$ であるから次式が導かれる。

$$\nabla^2 u = \frac{2}{3a^2} \sum_{k=1}^6 (u_k - u_0) + O(a^4) \quad (9.23)$$

この Laplace 演算子の離散近似式の精度は、Poisson 方程式 $\nabla^2 u = -\rho$ で右辺が 1 次式 $\rho = c_0 + c_1 x + c_2 y$, c_0, c_1, c_2 定数の場合にも保たれる。離散近似式の実質精度はメッシュのゆがみと共に徐々に低下するから、Laplace 演算子は正三角形に近い 1 次要素のメッシュで高精度の計算を行うことができる。

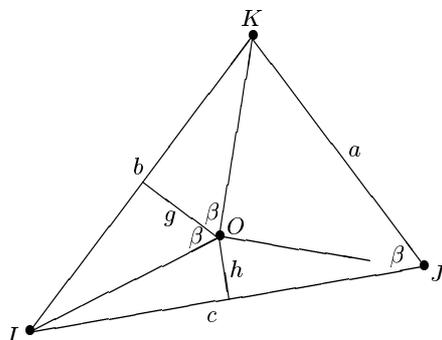


図 9.6: 三角形 1 次要素の解釈

9.4 非構造格子法の基礎