離散点で与えられた1階偏導関数値に対する数値積分法* (FEM形状関数または差分近似式を用いた最小二乗解法)

内山 知実^{*1}, 峯村 吉泰^{*1}

Numerical Quadratures of First-Order Partial Derivatives Given on Discrete Points (Least Squares Method Utilizing FEM Shape Function or Finite Difference Approximation)

Tomomi UCHIYAMA and Kiyoshi MINEMURA

With regard to inverse design problems, numerical integration of the first-order partial derivatives given on discrete points in n -dimensional spaces is demanded occasionally, for example, to obtain a velocity field satisfying the velocity gradients given in the field. In this paper, such numerical quadratures are proposed by the use of the shape function for finite element methods or the finite difference approximation, based on a least squares method. Applicability of these methods is confirmed by applying them to a two-dimensional problem, and the characteristics of computational accuracy and the CPU time necessitated are discussed.

Key Words: Numerical Analysis, Finite-Element Method, Computational Mechanics, Inverse Problem, Numerical Integration, Shape Function, Least Squares Method

1. ま え が き

数値解析や計測により得られた物理量に対する偏導関数値を求める場合、差分近似⁽¹⁾や区分的多項式近似⁽²⁾などに基づく精度の高い数値微分法が利用できる。

一方、多くの設計問題に見られるような逆問題解析では、 n 次元空間($n \geq 1$)における離散点で与えられた1階偏導関数値に対する数値積分法が必要となる場合がある。例えば、与えられた速度こう配を満たす速度場、所望の圧力こう配を実現する圧力場、あるいは与えられた熱流束分布を実現する温度場などを求めたい場合である。しかし、数値解析的に有用な手法は、一次元問題に対する解法を除き、これまで与えられていないのが実状のようである。

本論では、上述の例のように、離散点で与えられた1階偏導関数値に対してその解析領域でこれを数値積分するために、差分近似式あるいは有限要素法の形状関数に基づいて偏導関数近似式を導出し、優決定系に属するこの式を最小二乗法により数値解析する方法を提案する。また、一例として、本方法を二次元問題に適

用した結果についても述べ、その有用性や誤差特性なども示す。

2. 記 号

- a : 定数
 - C : 領域 D の境界
 - D : ユークリッド空間内の領域
 - f : 既知1階偏導関数値
 - g : 既知関数値
 - h : 離散点間距離
 - m : 方程式の数
 - M : 領域 D の一つの境界線上の離散点数
 - n : 次元
 - N : 形状関数
 - x : 位置ベクトル
 - α : 一つの要素における節点数
 - β : 領域 D における要素数
 - γ : 領域 D における離散点数
 - ε : 相対誤差 $= |\phi_{nu} - \phi_{ex}|/a$
 - ϕ : 未知関数
- 添 字
- e : 要素
 - ex : 厳密解

* 原稿受付 平成3年12月3日。

^{*1} 正員, 名古屋大学教養部 (〒464-01 名古屋市千種区不老町)。

max : 最大値
 nu : 数値解

3. 基礎式

3.1 問題の定式化 n 次元ユークリッド空間 ($1 \leq n < \infty$) の領域 D において, 連続かつ2階微分可能な関数 ϕ が定義されるものとする。すなわち,

$$\phi = \phi(\mathbf{x}) \quad [\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n); \mathbf{x} \in D] \quad \dots (1)$$

いま, 図1に示すように, 領域 D に属する離散点 $\mathbf{x}$ において関数 ϕ の1階偏導関数値 $\mathbf{f}$ が与えられ, かつ D の境界 C の一部分 C_1 上の離散点において ϕ の関数値 g が既知であるものとする。すなわち,

$$\nabla \phi = \mathbf{f} \quad [\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in D] \quad \dots (2)$$

$$\phi = g \quad [g = g(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in C_1] \quad \dots (3)$$

ただし,

$$\nabla = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \dots, \partial/\partial x_n)$$

$$\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n) \quad \dots (4)$$

本論では, 式(2), (3)に対し, これを満足する関数 ϕ を求めるための方法, つまり領域 D の離散点で与えられた $\nabla \phi$ に対する数値積分法を述べる。

3.2 差分近似式による方法 領域 D 内に γ 個の離散点が格子状に等間隔 (間隔 h) に配置されているものとする。任意の格子点 k (位置ベクトル $\mathbf{x}_k$) における ϕ の偏導関数値は近似的に差分商で与えられるから, 点 k に関して, ϕ をテイラー級数に展開し, 1階偏導関数に対する前進差分近似式を導けば次式を得る。

$$\begin{aligned} \partial \phi(\mathbf{x}_k) / \partial x_j &= [\phi(\mathbf{x}_k + \mathbf{h}_j) - \phi(\mathbf{x}_k)] / h \\ (j=1, 2, \dots, n, \mathbf{x}_k \in D) &\dots (5) \end{aligned}$$

ここで, $\mathbf{h}_j$ は第 j 成分のみが h で他の成分が零である, n 次元のベクトルである。

また, 中心差分近似式は次式のようになる。

$$\begin{aligned} \partial \phi(\mathbf{x}_k) / \partial x_j &= [\phi(\mathbf{x}_k + \mathbf{h}_j) - \phi(\mathbf{x}_k - \mathbf{h}_j)] / 2h \\ (j=1, 2, \dots, n, \mathbf{x}_k \in D) &\dots (6) \end{aligned}$$

ただし, 式(5)および式(6)の打ち切り誤差は, $O(h)$ および $O(h^2)$ である。

図1 問題の定式化

各離散点において, n 個の1階偏導関数値を式(5)あるいは式(6)により近似し, これらを式(2)で与えられる既知偏導関数値 $\mathbf{f}$ と等置した式を求め, 全離散点に対して併記した行列式をつくれば, つぎの偏導関数近似式が得られる。

$$K\phi = \mathbf{f} \quad \dots (7)$$

ただし,

K : 離散点間距離 h を成分とする $n\gamma$ 行 γ 列の行列

ϕ : 離散点の ϕ を成分とする γ 次元のベクトル

$\mathbf{f}$: 離散点の $\mathbf{f}$ を成分とする $n\gamma$ 次元のベクトル

3.3 FEM 形状関数による方法 有限要素法では, 解析領域を任意形状の要素に分割し, 離散点として節点を要素辺上 (必要な場合にはさらに要素内) にとり, 節点関数値をもとに要素内の任意の点における未知関数値を近似する。この有限要素近似の手法を用いた場合について述べる。

3.3.1 ϕ および $\nabla \phi$ の区分的多項式近似 領域 D を任意形状からなる β 個の有限要素 D^e に分割し, 各 D^e に α 個の異なる節点を配置し, D には γ 個の節点がある場合を考える。

各要素において, 節点における関数値 ϕ_i ($i=1 \sim \alpha$) と, α 個の一次独立な形状関数 N_i ($i=1 \sim \alpha$) の一次結合により, 任意の点の ϕ は次式のように近似される。

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{\alpha} N_i(\mathbf{x}) \phi_i \quad (\mathbf{x} \in D^e) \quad \dots (8)$$

ただし, N_i は各要素において定義される節点座標値の関数であるが, つぎの補間条件を満たさねばならない。

$$\begin{aligned} N_i(\mathbf{x}_j) &= \delta_{ij} \quad (i=1, 2, \dots, \alpha, j=1, 2, \dots, \alpha, \\ \mathbf{x}_j \in D^e) &\dots (9) \end{aligned}$$

ここで, $\mathbf{x}_j$ は D^e 内の節点 j の位置ベクトル, δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。

式(8)は, 節点関数値 ϕ を用いた近似式であり, ラグランジュの補間多項式⁽³⁾に相当する。この補間法は, 節点における偏導関数値を考慮していないことから, 隣接要素間の境界上では ϕ の連続性のみを要求することになる。

D^e 内の任意の点における1階偏導関数 $\nabla \phi$ の近似式は, 式(8)を偏微分することにより得られる。すなわち,

$$\begin{aligned} \nabla \phi(\mathbf{x}) &= \nabla \left[\sum_{i=1}^{\alpha} N_i(\mathbf{x}) \phi_i \right] \\ &= \sum_{i=1}^{\alpha} [\nabla N_i(\mathbf{x})] \phi_i \quad (\mathbf{x} \in D^e) \quad \dots (10) \end{aligned}$$

3.3.2 偏導関数近似式の導出 ある要素において, 一つの節点 k (位置ベクトル $\mathbf{x}_k$) に対する1階偏

導関数の値は n 次元空間に対応して n 個あるが、これらを式(10)により近似し、式(2)で与えられる既知偏導関数 f と等しくおけば、この要素の α 個の節点における関数値 ϕ を未知数とする、 n 個の方程式が得られる。すなわち、

$$\sum_{i=1}^{\alpha} [\partial N_i(\mathbf{x}_k) / \partial x_j] \phi_i = f_j(\mathbf{x}_k) \quad (j=1, 2, \dots, n) \quad \dots\dots\dots (11)$$

この要素の全節点(位置ベクトル $\mathbf{x}_k$, $k=1 \sim \alpha$)に対して式(11)の連立方程式を求めれば、 α 個の未知関数値 ϕ からなる $n\alpha$ 個の方程式が得られる。すなわち、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\alpha} [\partial N_i(\mathbf{x}_1) / \partial x_j] \phi_i &= f_j(\mathbf{x}_1) \quad (j=1, 2, \dots, n) \\ \sum_{i=1}^{\alpha} [\partial N_i(\mathbf{x}_2) / \partial x_j] \phi_i &= f_j(\mathbf{x}_2) \quad (j=1, 2, \dots, n) \\ &\vdots \\ \sum_{i=1}^{\alpha} [\partial N_i(\mathbf{x}_\alpha) / \partial x_j] \phi_i &= f_j(\mathbf{x}_\alpha) \quad (j=1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (12)$$

式(12)は、次式のように行列形式で表すことができる。

$$K^e \phi^e = f^e \quad \dots\dots\dots (13)$$

ただし、 K^e は形状関数 N_i の1階偏導関数を成分とする $n\alpha$ 行 α 列の行列、 ϕ^e は節点の未知関数値 ϕ を成分とする α 次元のベクトル、 f^e は節点の既知偏導関数値 f を成分とする $n\alpha$ 次元のベクトルである。

領域 D における β 個の全要素に対して式(12)の関係を求め、併記すると、偏導関数近似式が得られる。すなわち、

$$K\phi = f \quad \dots\dots\dots (14)$$

ただし、

K : 行列 K^e を全要素に対して組み立てることにより得られる $n\alpha\beta$ 行 γ 列の行列
 ϕ : 全節点の ϕ を成分とする γ 次元のベクトル
 f : 全節点の f を成分とする $n\alpha\beta$ 次元のベクトル

なお、要素間の境界上に節点が存在し、複数の要素に共有される節点がある場合にも、各要素ごとに偏導関数を式(11)により近似するため、 $\alpha\beta \geq \gamma$ なる関係が成り立つ。

3.4 偏導関数近似式の解法 未知関数値 ϕ は、偏導関数近似式〔式(7)あるいは式(14)〕を解くことにより求められる。しかし、これらの式は、方程式の数 m 〔式(7)の場合 $m=n\gamma$ 、式(14)の場合 $m=n\alpha\beta$ 〕が未知数の数 γ に等しいか大きい優決定系に属する。このため、解 ϕ は一般的には存在しない⁽⁴⁾ ので、最小二乗法⁽⁵⁾ により近似解 ϕ を求める。

偏導関数近似式に対するユークリッド・ノルムをとると、次式のようになる。

$$R = \|K\phi - f\|^2 = \sum_{j=1}^m \left(\sum_{i=1}^{\gamma} K_{ji} \phi_i - f_j \right)^2 \quad \dots\dots\dots (15)$$

ただし、 K_{ji} は行列 K の第 j 行 i 列成分、 ϕ_i はベクトル ϕ の第 i 次元成分、 f_j はベクトル f の第 j 次元成分を表すものとする。

最小二乗法によれば、 R を最小化する ϕ が偏導関数近似式の最良近似を与える。この最小化の条件は次式により表される。

$$\partial R / \partial \phi_k = 0 \quad (k=1 \sim \gamma) \quad \dots\dots\dots (16)$$

式(16)に式(15)を代入して整理すれば、最小二乗法の正規方程式である、 γ 元一次連立方程式が得られる。すなわち、

$$\sum_{i=1}^{\gamma} \left(\sum_{j=1}^m K_{jk} K_{ji} \right) \phi_i = \sum_{j=1}^m K_{jk} f_j \quad (k=1 \sim \gamma) \quad \dots\dots\dots (17)$$

境界条件〔式(3)〕を式(17)に代入し、得られた式を解くことにより、式(2)、(3)で与えられる関数 ϕ が求められる。ここで、式(17)を行列表現すれば左辺行列が対称帯行列となることから、Bunch-Kaufmanの方法⁽⁶⁾ などにより、少ない記憶容量で高精度に数値解析できる。

4. 計算結果と考察

4.1 数値解析例 ここでは、本解法の適用性を示すため、二次元領域における既知の二変数関数を例にとり、前述の解法により数値積分した結果を厳密解と比較し、誤差特性や計算に要した時間などについて述べることにする。

平面領域 D の関数 ϕ に対して、 D において1階偏導関数値、境界 C の一部 C_1 において関数値が次式のように与えられているものとする。

$$\begin{aligned} \partial \phi(x, y) / \partial x &= a\pi \cdot \cos(\pi x) \cdot \sin(\pi y) \\ \partial \phi(x, y) / \partial y &= a\pi \cdot \sin(\pi x) \cdot \cos(\pi y) \\ [(x, y) \in D] &\quad \dots\dots\dots (18) \end{aligned}$$

$$\phi(x, y) = 0 \quad [(x, y) \in C_1] \quad \dots\dots\dots (19)$$

ただし、

$$\begin{aligned} D &= \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\} \\ C_1 &= \{x=0, y=0\} \quad \dots\dots\dots (20) \end{aligned}$$

求める ϕ の厳密解 ϕ_{ex} は、図2に示すように、次式で表される。

$$\phi_{ex} = a \cdot \sin(\pi x) \cdot \sin(\pi y) \quad [(x, y) \in D] \quad \dots\dots (21)$$

4.2 差分近似式を用いた場合 領域 D は正方形であるから、この各辺を $(M-1)$ 等分して、 $(M-1)^2$

表 1 差分近似と形状関数を用いたときの離散点配置
(二次元領域の均一分割の場合)

	Finite difference approximation		Shape function approximation	
	Forward difference	Central difference	Linear element	Quadratic element
Arrangement of discrete points				
h	$1/(M-1)$	$1/(M-1)$	$1/(M-1)$	$1/(M-1)$
α	—	—	3	6
β	—	—	$2(M-1)^2$	$(M-1)^2/2$
γ	M^2	M^2	M^2	M^2
$\epsilon_{\max} (M=25)$	0.1358	0.0029	0.0171	0.0028
CPU time ($M=25$) [ms]	235	298	135	305

$$\phi = a \cdot \sin(\pi x) \sin(\pi y)$$

図 2 二変数関数 $\phi(x, y)$

個の正方形格子からなる格子点を離散点とする。前進および中心差分近似に対する格子点配置、格子点数 γ を表 1 に示す。偏導関数近似式〔式(7)〕を差分近似式〔式(5)あるいは式(6)〕から構成し、この式から導かれる式(17)を数値解析して格子点における数値解 ϕ_{nu} を求め、厳密解 ϕ_{ex} 〔式(21)〕に対する相対誤差 ϵ ($=|\phi_{nu} - \phi_{ex}|/a$) をとれば、 ϵ の分布は図 3 のようになる。ただし、 $M=25$ に対する ϵ の値が等しい等値線を示してある。

前進差分近似式〔式(5)〕による結果は図 3 (a) である。 ϵ は、積分の始点〔座標値 (0, 0)〕から終点 (1, 1) に向けて単調増加し、終点において最大値 $\epsilon_{\max}$ ($=0.1358$) をとる。中央差分近似式〔式(6)〕による結果は図 3 (b) であり、 ϵ は領域中央〔座標値 (0.5, 0.5)〕で最大値 $\epsilon_{\max}$ ($=0.0029$) をとる。

図 3 相対誤差分布 ($M=25$)

一つの境界線上の離散点数 M を増したとき、すなわち格子点間距離 h を減じたときの、 h と最大誤差 $\epsilon_{\max}$ の関係を両対数表示すると、図 4 のようになる。式(5)による結果は細い破線で、式(6)による結果は

太い破線で示してあり、 ε_{max} は h の減少に対し線形、すなわち h のべき乗に比例して減ることがわかる。式(5)に対する ε_{max} は傾き 1 の直線で表され、式(5)の近似精度 $O(h)$ に対応していることが知れる。また、式(6)に対する ε_{max} は、式(6)の近似誤差 $O(h^2)$ に対応して、傾き 2 の直線で表される。式(6)を用いたほうが ε_{max} はかなり小さく、 $h \leq 0.071$ では $\varepsilon_{max} < 0.01$ が得られる。

4.3 形状関数を用いた場合 ここでは、領域 D を一様な三角形要素に分割し、一次要素および二次要素に対する形状関数を式(8)に用いた場合の結果について述べる。比較のため、4.2節で用いた $(M-1)^2$ 個の正方形格子を二分割した直角二等辺三角形を要素とする(図2)。この場合の節点配置、一つの要素の節点数 α 、要素数 β 、全節点数 γ を表1に示してある。

4.3.1 三角形一次要素の場合 一次要素に対する形状関数⁷⁾を用いて偏導関数近似式〔式(14)〕を組み立て、この式から導かれる式(17)を数値解析して各節点における相対誤差 ε を求め、 $M=25$ に対する ε の分布を示すと図3(c)のようになる。分布は $x=0.5$ および $y=0.5$ に関して対称となる。領域境界線に直角方向の ϕ の変化が、とくに、各境界線の中央部で大きいので、ここに最大誤差 ε_{max} ($=0.0171$) が存在する。領域中央部の誤差も大きい、 ε_{max} の約6割である。

節点間距離 h に対する ε_{max} の変化を図4に細い実線で併記してある。 h が同一の場合、 ε_{max} の値は中央差分近似式による結果よりも大きい、前進差分近似式による結果よりもかなり小さく、 $h \leq 0.029$ の条件に対して $\varepsilon_{max} < 0.01$ が得られる。また、一つの一次要素において1階偏導関数を近似する場合の近似精度は $O(h)$ である⁸⁾ が、得られた直線の傾きは 1.75 であ

り、かなり精度がよい。これは、各節点の偏導関数値を、その節点を共有する全要素の形状関数から近似していることによるものであろう。

4.3.2 三角形二次要素の場合 二次要素に対する形状関数⁷⁾を用いて偏導関数近似式〔式(14)〕を組み立て数値解析し、得られた ε の分布を示すと図3(d)のようになる。分布は、図3(c)と同様、 $x=0.5$ および $y=0.5$ に関して対称となる。領域中央部で最大値 ε_{max} ($=0.0028$) を生ずるが、各境界の中点近傍における値もこれとほぼ同じである。

節点間距離 h に対する ε_{max} の変化を図4に太い実線で示してあるが、 ε_{max} の値は、 $h < 0.04$ では中央差分近似の場合とほぼ同一結果が得られ、 $h \geq 0.04$ では上述のいずれの結果よりも小さい値が得られる。また、得られた直線の傾きは、二次要素による1階偏導関数の近似精度 $O(h^2)$ ⁸⁾ に対応して、ほぼ2である。

差分近似式を用いる場合に比べ、形状関数を用いる方法の利点は、離散点が正方形格子状に並んでいなくともよいという、自由度の高さにある。すなわち、有限要素解析の場合、解析領域を任意形状の要素に分割し、関数値の急峻な変化が予測される領域の要素分割を細分化するが、このような離散点配置に対しても等しく適用できる点が長所である。前述の解析例の場合も、適切に細分割した要素節点上で与えられた偏導関数値に対しては、より高い精度で結果が得られることは言うまでもない。

表1には、同一の離散点数 ($M=25$) に対する計算時間 (CPU 時間) を比較してある。精度が高い三角形二次要素による計算時間は中央差分による場合とほぼ同じであるが、三角形一次要素の計算時間は精度のわりにかかなり短いことが知れる。なお、計算は倍精度、使用計算機は名古屋大学大型計算機センターの FACOM M-780/20 である。

5. 結 論

離散点で1階偏導関数値が与えられた解析領域に対し、差分近似式あるいは有限要素法の形状関数を用いてその関数値を求める数値積分法を提案した。すなわち、等間隔格子状の格子点で1階偏導関数値が与えられ、これに差分近似を適用する場合は式(7)により、また領域を有限要素状に分割した節点で偏導関数値が与えられ、これを形状関数により近似する場合は式(14)により、偏導関数近似式が表される。これら偏導関数近似式は優決定系に属するので、最小二乗法を適用して正規方程式〔式(17)〕を求め、これを数値解析することにより関数値を求める。計算精度については、

図4 離散点間距離に対する相対誤差の変化

中央差分近似式および三角形二次要素の形状関数を用いる方法では離散点間距離の二乗, 三角形一次要素による方法では1.75乗, 前進差分近似式による方法では1乗に比例して, 誤差が減ずる。

なお, 本文に引用した三角形要素の形状関数や差分近似に基づく計算ルーチンは, n 次元空間におけるアイソパラメトリック要素などに対するルーチンも含めて, 名古屋大学大型計算機センターにライブラリープログラムとして登録する予定である。

文 献

(1) 一松, 数値解析, (1990), 90, 朝倉書店.

- (2) 佐藤・二宮, 不規則分布二変数関数データに対する C^k 級補間法, 情報処理学会論文誌, **22**-6(1981), 581.
- (3) 森, 数値解析法, (1989), 19, 朝倉書店.
- (4) 小柳, 最小二乗法の新しいアルゴリズム, 情報処理, **23**-2(1982), 99.
- (5) 文献(3)の181ページ.
- (6) Bunch, J. R. and Kaufman, L., Some Stable Methods for Calculating Inertia and Solving Symmetric Linear Systems, *Math. Comput.*, **31**-137(1977), 163.
- (7) 川原, 有限要素法流体解析, (1985), 80, 日科技連.
- (8) 菊地・岡部, 有限要素システム入門, (1986), 167, 日科技連.