Bubnov-Galarkin の有限要素法による拡散方程式の計算

拡散方程式が与えられていた時にそれを有限要素法で解く方法を以下に示す。なめらかな空間を $\Omega = \sum_e \Omega_e$ と分割することを考える。また解はなめらか (C^1 級で十分) とみなせる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D\Delta\phi \tag{1}$$

の解 $\phi(x,t)$ を

$$\phi(x,t) = \sum_e \sum_\alpha \phi_e^\alpha(t) N_e^\alpha(x,y) \tag{2}$$

のように e で添数付けられた分割領域の第 α 接点における値とその頂点で 1, その分割領域内の他の頂点で 0 をとるように定義した形状関数 $N(x,y)$ を用いて近似する（以降は見やすさのため Einstein の記法を用いる)。さらにこれを変分法に基づく変形を加える。任意関数 $\delta\lambda$ を用いて変分は

$$\int_\Omega \delta\lambda(\frac{\partial \phi}{\partial t} - D\Delta\phi)dV = 0 \tag{3}$$

と書くことができる。ここで第二項に関するガウスの発散定理と部分積分により

$$\int_\Omega \delta\lambda\frac{\partial \phi}{\partial t} + D(\nabla\delta\lambda)(\nabla\phi)dV = \int_{\delta\Omega} \delta\lambda\nabla\phi n dS \tag{4}$$

ここでノイマン型境界条件は上式右辺によって与えられる。とくに流入が 0 ならば (右辺)= 0 として良いことがわかる。次に（要検証）ディリクレ型境界条件を与える場合は右辺は 0 として良いように任意関数を $\delta\lambda = \delta\lambda_e^\alpha N_e^\alpha$ の形であたえるものとする。具体的な形の例はのちに与える。代入して、

$$\sum_e \int_{\Omega_e} \delta\lambda_e^\alpha (N_e^\alpha N_e^\beta)\frac{\partial \phi_e^\beta}{\partial t} + D\delta\lambda_e^\alpha \phi_e^\beta(\nabla N_e^\alpha \nabla N_e^\beta)dV = \sum_e \int_{\delta\Omega_e} \delta\lambda_e^\alpha \phi_e^\beta N_e^\alpha \nabla N_e^\beta n dS \tag{5}$$

を得る。これが任意の $(\delta\lambda)_{e,\alpha}$ で成立するのだから

$$\sum_e \int_{\Omega_e} (N_e^\alpha N_e^\beta)\frac{\partial \phi_e^\beta}{\partial t} + D\phi_e^\beta(\nabla N_e^\alpha \nabla N_e^\beta)dV = D\sum_e \int_{\delta\Omega_e} \phi_e^\beta N_e^\alpha \nabla N_e^\beta n dS \tag{6}$$

が成立する。これは直感的に考えるため複数の分割要素でのかぶりを単純化して書くと

$$(\int N_i N_j dV)_{i,j}(\partial\phi_j/\partial t)_j = -D(\int(\nabla N_i)(\nabla N_j)dV)_{i,j}(\phi_j)_j + D(\int N_i(\nabla N_j)dS)_{i,j})(\phi_j)_j \tag{7}$$

と書ける。

次に積分を計算する必要がある。有界領域の数値計算はガウス=ルジャンドル法を使うことが多い。これは閉区間 B[-1,1] における積分だから $f : \mathbb{R}^3 \to B^3$ を使えば変数変換を用いる必要がある。一見面倒であるが、形状関数 N を変換先の立方体空間で定義することで標本点を格子のような周期的で単純な形としなくても統一的に定義できるという利点がある。ここで仮に分割メッシュが n 次元空間 2^n 頂点で定義されているとすれば例えば空間 B^n において $N(\xi_{1,2,3}{}_*^\alpha) = \sum_\alpha (1\pm\xi_1)(1\pm\xi_2)(1\pm\xi_3)/8$ とすれば $N(f(x,y,z))$ は形状関数の要請を満たすことがわかる。以上をアイソパラメトリック変換と呼ぶ。あとは LU 分解など適当な線形ソルバーで $\phi(x,t_n)$ から $\frac{\partial\phi}{\partial t}{}_n$ を求めれば良い。