5E－1

最小自乗法を用いた格子中心データから格子点データへの変換手法

小山田 耕二
日本アイ・ビー・エム株式会社　東京基礎研究所
e-mail koyamada at trl.ibm.co.jp

はじめに

現在使われている可視化手法は，数値データが格子点で定義されていることを仮定していることが多い．一方，数値シミュレーションの中には，格子中心で数値データを計算するものがある．有限体積法では，変数は，格子の中心に定義されている．また，有限要素法では，最初に数値データが格子点で計算されるが，その微分量は，格子の中心で計算されることが多い．このような格子の中心で定義された数値データを以降，格子中心データと呼ぶことにする．

格子中心点を格子点とするような格子を再構築するのは，非現実的である．特に非構造格子データの場合，もとの境界を保持するのが困難である．その代わりに，これまで，格子中心データから次のような２つの手法によって格子点データに変換されてきた．１つは，距離逆数法である．これは，まず，格子中心から格子点までの距離の逆数を重みとして，格子中心データ S^{cell}を各格子点に加算していく．同時に，重みそのものも格子点毎に加算しておき，最後に，加算された重みで加算されたデータを除して，その格子点でのデータ S_i^{point}とする方法である．

$$S_i^{point} = \frac{\sum_{C_i^{cell}} S^{cell} \times W^{cell}}{\sum_{C_i^{cell}} W^{cell}},$$

ここで，W^{cell}は，距離の逆数を，$\sum_{C_i^{cell}}$ は，i番目の格子点について総和をとることを示す．もう１つは，格子中心で評価された勾配ベクタ ∇S^{cell}から格子点データを外挿する方法である．

$$S_i^{point} = S^{cell} + (\vec{D}, \nabla S^{cell}),$$

ここで，$\vec{D}$ は，格子中心から格子点への方向を，$(\vec{A}, \vec{B})$ は，$\vec{A}$ と $\vec{B}$の内積，そして ∇C は，スカラ関数Ｃの勾配を表す．格子中心から格子点データに外挿する場合，一般的に格子点を共有する格子毎に違った値が計算される．格子点毎にユニークな値が必要となる場合，これらの値は，平均化される．

以上のアプローチで得られる格子点データによって張られるデータ空間は，もとの格子中心データによって張られるそれと異なると考えられる．今，紹介した手法では，この違いによる誤差についてなんら考慮がなされていない．しかしながら，我々は，この誤差の定量化を行ない，この定量化された誤差を各格子点毎に極小化するアプローチを提案する．

誤差の定量化

誤差の定量化する前に，格子中心データおよび格子点データによって張られるデータ空間における分布Ｓについて仮定を行なう．前者では，格子内部で一定値 S_k^{cell} をとるものと仮定する:

$$S = S_k^{cell},$$

ここで，k は，格子を識別する番号を表す．後者では，格子内部の１点$\vec{X} = (x, y, z)$ において

$$S = \sum_{i=0}^{n-1} S_i \times N_i(u, v, w) \qquad (1)$$

$$\vec{X} = \sum_{i=0}^{n-1} \vec{X}_i \times N_i(u, v, w) \qquad (2)$$

ここで，n は，格子を構成する格子点の数を，S_i and $\vec{X}_i$ は，i番目の格子点における格子点データ及び格子点座標を，そして，$N_i(u, v, w)$ は，格子内部の局所座標 (u,v,w) で定義された補間関数を表す．補間関数 $N_i(u, v, w)$ は，i番目の格子点において，1.0 となり他の格子点において，0.0 となるような関数である．

ここで，k番目の格子における誤差を残差 $R_k(u, v, w)$ として，以下のように定量化しよう．

$$R_k(u, v, w) = \sum_{i=0}^{n-1} S_i^{point} \times N_i(u, v, w) - S_k^{cell}. \qquad (3)$$

この残差の値は，正負両方の値をとり得る．残差の絶対値を評価するために残差の自乗を領域全体に渡って積分する．

$$\begin{aligned} ||R_k(u, v, w)||^2 &= \int_{V_k} R_k(u, v, w)^2 dV \\ &= \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} R_k(u, v, w)^2 det[J] du dv dw \end{aligned}$$

ここで，Ｊは，座標変換ヤコビアンを，det[J] は，ヤコビアンＪの行列式を，そして，V_kは，k番目の格子が定義されている領域を表す．

A technique to convert from cell-centered data to nodal data by using the Least Square Method
Koji KOYAMADA
Tokyo Research Laboratory, IBM Japan

No.	N_{point}	N_{cell}
1	64	27
2	756	480
3	1872	1260

表 1: 格子データの属性値

最小自乗法に基づく変換手法

本手法では，領域全体に渡って積分した残差を各格子点毎に最小化するストラテジーを採用する．この積分した残差 R は，変分問題 [Fin72] における汎関数に相当し，以下のように表される．

$$\underbrace{R = \sum_{Allcells} ||R_k(u,v,w)||^2}_{minimize} \tag{4}$$

式 4において，各辺を格子点データ S_j^{point}で偏微分して，これを 0 とおくと，

$$\frac{\partial R}{\partial S_j^{point}} = \sum_{C_j^{cell}} \left(\int_{V_k} 2 \times \frac{\partial R_k(u,v,w)}{\partial S_j^{point}} R_k(u,v,w) dV \right) = 0, \tag{5}$$

を得る．ここで，$\sum_{C_j^{cell}}$は，j 番目の格子点につながる格子についての総和を表す．式 3から，

$$\frac{\partial R_k(u,v,w)}{\partial S_j^{point}} = N_j(u,v,w).$$

が成立するので．

$$\sum_{C_j^{cell}} \left(\int_{V_k} N_j(u,v,w) R_k(u,v,w) dV \right) = 0. \tag{6}$$

が得られる．幸いなことに式 6は，ガラーキン法 [Fin72] により得られるものと同じなので，標準的な有限要素法の手法を使って格子点データを計算することができる．

結果

我々は，3 次元非構造格子データを使って，本手法の評価を行なった．評価では，本手法及び距離逆数法を用いて，3 種類の格子中心データを格子点データに変換した．勾配ベクタから格子点データを外挿する方法は，それ自身では，ユニークな格子点データを生成できないので，評価の対象外とした．表 1に，評価に用いた格子データの属性値 (格子数 N_{cell}，格子点数 N_{point}) を示す．

評価で用いるそれぞれの手法において，格子毎に残差の自乗を積分し，それらを格子の体積で正規化した．

$$\frac{\int_{V_k} R_k(u,v,w)^2 dV}{V_k} = \frac{\int_{V_k} (\sum_{i=0}^{7} S_i^{point} \times N_i(u,v,w) - S_k^{cell})^2 dV}{V_k}$$

No.	Max.	Min.	Ave.	Dev.	T
1_{old}	3.3e-1	2.3e-2	8.7e-2	6.4e-2	5.0e-3
1_{new}	1.3e-1	3.5e-2	6.9e-2	2.9e-2	1.0e-2
2_{old}	8.5e-4	1.8e-4	5.5e-4	1.4e-4	3.0e-2
2_{new}	6.9e-4	2.3e-4	4.9e-4	1.2e-4	1.2e+1
3_{old}	2.8e-1	1.1e-5	9.2e-3	1.8e-2	9.0e-1
3_{new}	1.9e-1	6.6e-6	7.8e-3	1.4e-2	1.8e+2

表 2: 格子毎に計算された正規化された積分値の比較

表 2に，格子毎に計算された正規化された積分値の最大値 (Max.)・最小値 (Min.)・平均値 (Ave.)・標準偏差 (Dev.) そして全体の計算時間 (T) を示す．それぞれの行において，上段は，距離逆数法に関する，そして下段は，本手法に関する統計データをそれぞれ表す．

明らかに，積分値の比較からは，本手法は，距離逆数法よりも優れているといえる．特に，本手法は，格子毎の積分値に関する最大値と平均値を減じていることがわかる．ここで，注意すべきことは，本論文が，単に手法の優劣を比較しているだけでなく，残差の積分値という比較可能な尺度を提案していることである．

計算時間については，本手法は，優れているとはいえない．本手法に必要となる計算時間は，主に連立 1 次方程式の求解部分に費やされる．本手法では，連立 1 次方程式の構築に主眼をおいていたため，求解手法については，多くの時間をかけて検討をしていない．連立 1 次方程式の求解については，直接解法であるスカイライン法を採用している．間接解法を用いれば，計算時間の減少につながるかも知れない．この場合，距離逆数法から得られる格子点データを間接解法の初期値とするのが適当であろう．

おわりに

本論文において，格子中心データを格子点データに変換する手法を評価する上で有用となる尺度-残差の自乗-を導入し，この残差自乗の積分値を格子点で極小化する手法を提案した．本手法は，計算時間に関して，距離逆数法に対して不利な点があるものの，本論文で導入した尺度の観点からは，優れていることがわかった．

参考文献

[Fin72] Finlayson, B. A., "The Method of Weighted Residuals and Variational Principles," Academic Press, 1972.