マルチスケール変分法と気泡関数要素の関係性について

総合情報基盤センター　准教授　奥村 弘

本報は移流拡散方程式に対するマルチスケール変分法と気泡関数要素を用いた有限要素近似との関係性を説明し，安定化法の観点から気泡関数の安定化作用を最適に制御する方法を解説する．

キーワード：マルチスケール変分法，気泡関数要素，移流拡散方程式，安定化法

１．はじめに

波動方程式の解が移流方程式に深いつながりがあることから，移流拡散方程式は弾性体や波動現象を解析するうえで基本となる微分方程式である．さらに，流体力学の分野において常に眼目されている Navier-Stokes 方程式が連立の移流拡散方程式系とみなせることからも，移流拡散方程式の求解は，自然現象に顕在する諸問題の解明に欠くことができない．このところずっと，どこもかしこも，計算機による数値解析が盛んにおこなわれており，移流拡散方程式に対するそれも例外ではない．近年では弾性体解析や流体解析等において微視微小現象を捕えんとするマルチスケール法(1)が闊達であるが，先にも述べたようにそれらマルチスケール解析発展の礎となるべき移流拡散方程式の数値解析において直面する諸問題は解決していない(2, 3, 4)．この行き詰まりに対し，主に有限要素法で定番となっている安定化法(5)が，マルチスケール変分法（VMS: Variational multiscale method）(6, 7, 8)と密接な関連性があることが分かってきた．つい先日，著者は有限要素近似に用いられる気泡関数要素(1, 8, 9, 10)とマルチスケール変分法の関係を明らかにし，気泡関数要素によるマルチスケール有限要素解析によってその有効性を定量的に示した(11)．しかしながら，この論文(11)の英文が極めて拙劣にて読み難いため，著者のせっかくの努力も成果も読者に理解され難い．著者は親切であるので極々少数の読者に留まるであろう賢明な読者諸君により一層のご理解をいただくため，拙著英語論文(11)の和訳プラスアルファの説明付加という形で本報を書いた．

２．気泡関数要素とマルチスケール変分法の関係，そして有限要素近似について

有界なd次元$(d = 2, 3)$空間領域を$\Omega \subset \mathbb{R}^d$ とし，その境界を $\Gamma = \partial\Omega$ とする．このとき，次の定常な移流拡散方程式を考える：Find the scalar function $u: \Omega \to \mathbb{R}$ such that

$$\begin{cases} \boldsymbol{a} \cdot \nabla u - \nu \Delta u = f & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{on } \Gamma \end{cases} \quad (1)$$

ここで， $\boldsymbol{a} \in (L^\infty(\Omega))^d, \nu$ および $f \in L^\infty(\Omega)$ はそれぞれ移流速度ベクトル，拡散係数（あるいは粘性係数），ソース（外力）である．移流速度には divergence-free 条件$\nabla \cdot \boldsymbol{a} = 0$の制約は課していない．なお，議論を明確にするため，式(1)の境界条件には Dirichlet 境界条件のみを与える．

従来，移流拡散方程式(1)に対するマルチスケール変分法の関数空間には， $\mathcal{V} = H_0^1(\Omega), \mathbb{L} = (L^2(\Omega))^d$を選び，次のカップリングさせた変分問題 (2, 3, 7) を考える：Find $u \in V, \boldsymbol{g} \in \mathbb{L}$ such that

$$\begin{cases} B(u, v) + (\nu_{\text{add}} \nabla u, \nabla v) - (\nu_{\text{add}} \boldsymbol{g}, \nabla v) \\ \qquad\qquad = (f, v) \qquad \forall v \in V \\ (\nabla u - \boldsymbol{g}, \boldsymbol{\ell}) = 0 \qquad\qquad \forall \boldsymbol{\ell} \in \mathbb{L} \end{cases} \quad (2)$$

ここで，双一次形式 B は，

$$B(u, v) = (\boldsymbol{a} \cdot \nabla u, v) + (\nu \nabla u, \nabla v) \ \forall v \in V \quad (3)$$

である．式(2)で出現する任意の関数 ν_{add} は後述するが，マルチスケール関数と呼んでおこう．

変分問題(2)に対する有限要素近似には，空間領域 Ω に三角形$(d = 2)$または四面体$(d = 3)$による正則な有限要素分割 $\mathcal{T}_h$ を与える．ここで，メッシュパラメータを$h = \max(\text{diam}(K)), \forall K \in \mathcal{T}_h$ で表すこととする．

このとき，本報ではマルチスケール法から導出される有限要素近似に，気泡関数要素の空間 V_h を選ぶ．この関数空間V_hは，区分一次要素の所謂P_1有限要素空間V_1と気泡関数の空間$\mathcal{B}(K)$により次を以って構成される．

$$\begin{aligned} V_1 &= \{u_1 \mid u_1 \in P_1(K),\ \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \\ V_b &= \{u_b \mid u_b|_K = u_b^K \phi_K \in \mathcal{B}(K),\ \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \\ V_h &= \{u_h \mid u_h|_K = P_1(K) \oplus \mathcal{B}(K),\ \forall K \in \mathcal{T}_h\} \end{aligned} \tag{4}$$

ここで，$\phi_K \in \mathcal{B}(K)$ は要素$K \in \mathcal{T}_h$をコンパクトな台とする気泡関数である．適合型（confirming）の気泡関数は要素境界∂K上でその値がゼロとなり，要素$K \in \mathcal{T}_h$において区分高次多項式が用いられる[9]．なお，気泡関数が定義される自由度上での値をu_b^Kとする．そして，カップリングされた変分問題(2)におけるベクトル・サブスペース$\mathbb{L}$の近似に対しては，区分定数のベクトル空間$\mathbb{R}_0^d$を選ぶ．

$$\mathbb{R}_0^d = \{\mathbb{G}_h \mid \mathbb{G}_h \in \left(L^2(K)\right)^d, \forall \in \mathcal{T}_h\} \tag{5}$$

マルチスケール変分問題(2)に対して，気泡関数要素空間(4)と区分定数ベクトル空間(5)を用いて近似する．このとき，フルに離散化された近似問題が次のように得られる[2, 3, 7, 8]: Find $u_h \in V_h, \mathbb{G}_h \in \mathbb{R}_0^d$ such that

$$\begin{cases} B(u_h, v_h) + (\nu_{\mathrm{add}} \nabla u_h, \nabla v_h) - (\nu_{add} \mathbb{G}_h, \nabla v_h) \\ \qquad\qquad = (f, v_h) \quad \forall v_h \in V_h \\ (\nabla u_h - \mathbb{G}_h, \boldsymbol{\ell}_h) = 0 \qquad \forall \boldsymbol{\ell}_h \in \mathbb{R}_0^d \end{cases} \tag{6}$$

ここで，近似問題(6)の第 2 方程式では，$\mathbb{G}_h = \mathbb{P}_h \nabla u_h$とし，$\mathbb{P}_h$を空間$\nabla V_h$から$\mathbb{R}_0^d$への$L^2$直交射影とする．さらに，$\mathbb{P}_h : \nabla V_h \to \mathbb{R}_0^d$ としてガウス一点求積法に基づいたものを選ぶ．つまり，

$$\mathbb{P}_h u_h|_K = \nabla u_h(q_b^K) \tag{7}$$

ここで，q_b^Kは要素$K \in \mathcal{T}_h$の重心点である．このとき，$\mathbb{P}_h \nabla v_h \in \mathbb{R}_0^d$であることから次が得られる．

$$\left((\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla u_{h,} \boldsymbol{\ell}_h\right) = \left((\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla u_{h,} \mathbb{P}_h \nabla v_h\right) \tag{8}$$

ここで，$\mathbb{I}$は恒等作用素である．

式(8)より，区分一次要素では，$\mathbb{P}_h \nabla u_1 = \nabla u_1$と$\mathbb{P}_h \nabla v_1 = \nabla v_1$の関係が得られる．さらに，区分一次関数と気泡関数における直交性[10, 12, 13]により以下の関係が成り立つ．

$$\begin{aligned} (\nabla u_1, \nabla v_b)_K &= -(\Delta u_1, v_b)_K = 0, \\ (\nabla u_b, \nabla v_1)_K &= -(u_b, \Delta v_1)_K = 0 \end{aligned} \tag{9}$$

ここで，$(\cdot, \cdot)_K$は要素Kでの積分である．

最終的に，移流拡散方程式(1)に対するカップリングされたマルチスケール変分問題(2)の近似問題(6)は次の近似問題と等価である: Find $u_h \in V_h$ such that

$$\begin{aligned} B(u_h, v_h) + (\nu_{\mathrm{add}}(\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla u_h, (\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla v_h) \\ = (f, v_h)\ \forall v_h \in V_h \end{aligned} \tag{10}$$

注釈 1. 式(10)において，明らかに$(\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla u_h$の項は，$\nabla u_h$に対して微小な変動量である．式(10)の左辺第 2 項はラプラシアンであり，これはメッシュ分割hでは解像できないスケールへの安定化作用を振る舞うものと予測して差し支えない．

さて，近似問題(10)の左辺第 2 項に焦点を当てよう．変分問題(2)にて出現したマルチスケール関数ν_{add}とやらを要素Kにおいてコンスタントな値をとるものと仮定しよう．さすれば，次の関係が得られる．

$$\begin{aligned} &(\nu_{\mathrm{add}}(\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla u_h, \nabla v_h) \\ &= \left(\nu_{\mathrm{add}}(\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla(u_1 + u_b), (\mathbb{I} - \mathbb{P}_h)\nabla(v_1 + v_b)\right) \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \nu_{\mathrm{add}}((\nabla u_b, \nabla v_b)_K - (\mathbb{P}_h \nabla u_b,\ \mathbb{P}_h \nabla v_b)) \end{aligned} \tag{11}$$

つまり，近似問題(10)は次のように書き換えることができる．

$$\begin{aligned} B(u_h, v_h) &+ \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\nu_{\mathrm{add}} \nabla u_b, \nabla v_b)_K \\ &- \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\nu_{\mathrm{add}} \mathbb{P}_h \nabla u_b, \mathbb{P}_h \nabla v_b)_K \\ &= (f, v_h) \quad \forall v_h \in V_h \end{aligned} \tag{12}$$

ここで，一般的に用いられる気泡関数[9, 10, 13, 14]を選ぶ．この古典的な気泡関数は，面積座標あるいは体積座標λ_i $(i = 1, \cdots, d+1)$ を用いることで次式のように表現することができる．

$$\phi_K = \frac{1}{(d+1)^{d+1}} \prod_{i=1}^{d+1} \lambda_i \tag{13}$$

ここで，iは要素Kの頂点（ノード）である．さらに進めれば，近似問題(12)は次式のように VMS 有限要素近似問題へ帰着する．

$$B(u_h,v_h)+\sum_{K\in\mathcal{T}_h} v_{\mathrm{add}}(\nabla u_b,\nabla v_b)_K \ \ \forall v_h\in V_h \quad (14)$$

なぜならば，気泡関数のL^2直交射影により

$$\mathbb{P}_h\nabla\phi_K=0 \ \ \forall\phi_K\in\mathcal{B}(K)$$

が成り立つからである．

本報で提案したマルチスケール変分法の定式化により導出された VMS 有限要素近似方程式(14)は，Guermond (1999) [5]が提唱した所謂古典的 Bubnov-Galerkin 法の近似方程式に，経験に依存したパラメータ（本報ではこのパラメータをマルチスケール関数と名付け，この関数の最適解を算出する方法論を述べている）を係数とする気泡関数の自由度におけるラプラシアン，つまり人工拡散（人工粘性）項$v_{\mathrm{add}}(\nabla u_b,\nabla v_b)_K$だけを付加した近似式と一見するところ同じである[5]．しかしながら, Guermond をはじめとするいくつかの研究[5, 7, 8]においても，マルチスケール関数の十分な理解と評価には至っていない．

注釈 2. 気泡関数と一括りに謂っても幾つかの関数がこれまでに提案されている．気泡関数選びの候補としては，residual-free bubbles (RFB) [13]や P-scaled bubble function [14, 15] 等が挙げられる．しかしながら，本研究で提案した VMS 有限要素近似方程式(10)-(12)にはこれらの気泡関数を適用することができない．なぜなら，これら気泡関数[13, 14, 15]は三角形要素または四面体要素の重心点に特異点が存在するからである．

ここで一旦，VMS の定式化により導出された近似方程式(10)に戻り，マルチスケール関数v_{add}の評価を試みよう．まず，気泡関数の静的縮約（static condensation）を行う．近似方程式(10)における近似解u_hは次式のように線形和として表現することができる．

$$u_h=u_1+\sum_{K\in\mathcal{T}_h} u_b^K\phi_K \quad (15)$$

ここで，$u_1\in V_1$は線形一次要素の近似解, u_b^Kは気泡関数の自由度における近似解（気泡関数にかかる係数），そして，$\phi_K\in\mathcal{B}(K)$ は気泡関数(13)である．

このとき, 近似方程式(10)において, 重み関数v_hの任意性により，$v_h=\phi_K$を選ぶ．さらに，ソースfと移流速度$\boldsymbol{a}$を要素K内で区分一定と仮定すれば（ゼロ次補間を与えると謂っていいだろう），気泡関数の自由度における近似解u_b^Kが得られる．

$$u_b^K=\frac{(1,\phi_K)_K}{|K|}\frac{(f,1)_K-(a\cdot\nabla u_1)_K}{\nu\|\nabla\phi_K\|_K^2+\nu_{\mathrm{add}}\|(\mathbb{I}-\mathbb{P}_h)\nabla\phi_K\|_K^2} \quad (16)$$

ここで，$\|\cdot\|_K$は$L^2(K)$ノルムを示す．式(16)の示すところ，気泡関数の近似解u_b^Kは陽的に取り出すことができる，ということが重要である．

次に，近似方程式(10)において，はたまた重み関数v_hの任意性により，$v_h=v_1$を選べば，静的縮約により気泡関数の自由度を取り除いた線形一次要素のP_1有限要素近似方程式が得られる：Find $u_1\in V_1$ such that

$$(\boldsymbol{a}\cdot\nabla u_1,v_1)+(\nu\nabla u_1,\nabla v_1)+\sum_{K\in\mathcal{T}_h}\tau_K(\boldsymbol{a}\cdot\nabla u_1,\boldsymbol{a}\cdot\nabla v_1)_K$$
$$=(f,v_1)+\sum_{K\in\mathcal{T}_h}\tau_K(f,a\cdot\nabla v_1)_K \ \ \forall v_1\in V_1 \quad (17)$$

ここで，τ_Kは VMS 有限要素近似における安定化パラメータである．

$$\tau_K=\frac{|K|^{-1}(1,\phi_K)^2}{\nu\|\nabla\phi_K\|_K^2+\nu_{\mathrm{add}}\|(\mathbb{I}-\mathbb{P}_h)\nabla\phi_K\|_K^2} \quad (18)$$

ここで，h_K は要素Kのメッシュサイズである．

注釈 3. かの SUPG（streamline-upwind / Petrov-Galerkin ）法[16]に代表される安定化法のアナロジーを沿うことにより，つまり有限要素分割$\mathcal{T}_h$が正則で一様に$h\to 0$となる線形一次要素の空間V_1の範疇では，マルチスケール変分法の定式化により得られた有限要素近似方程式(17)は空間V_1において強圧的（coercive）であることを証明することができる[16]．

注釈 4. 移流拡散方程式(1)に対し, 本研究で提案した気泡関数要素を用いた VMS 有限要素近似は，安定化法の観点から線形一次要素を用いた SUPG 法[16]と等価である．つまり，安定化作用の効果は移流速度場における上流（風上）型テンソルのラプラシアンにより作用する. よって, 式(18)の安定化パラメータτ_Kの大きさは, 気泡関数ϕ_Kの形状とマルチスケール関数ν_{add}により決定される．

一方，SUPG 法の安定化パラメータ[16]には，次

のものが一般的に用いられる．

$$\tau_{\mathrm{SUPG}}=\left\{\left(\frac{2\|\boldsymbol{a}\|_K}{h_K}\right)^2+\left(\frac{4\nu}{h_K^2}\right)^2\right\}^{-\frac{1}{2}}. \tag{19}$$

なお, 近年ではSUPG法の安定化パラメータにはより精緻な安定化作用を与える算出法が提唱されているが，ここでの論点から少々逸れるので本報では割愛する．

よって，式(18)と(19)をリンクさせれば，マルチスケール関数の値を決定するためのクライテリアが次の様に得られる．

$$\nu_{\mathrm{add}}=\frac{\tau_{\mathrm{SUPG}}^{-1}|K|^{-1}(1,\phi_K)^2-\nu\|\nabla\phi_K\|_K^2}{\|(\mathbb{I}-\mathbb{P}_h)\nabla\phi_K\|_K^2} \tag{20}$$

注釈 5. 古典的な気泡関数(13)を選ぶことにより，有限要素近似方程式(12)における気泡関数の自由度に関する拡散項は，$\mathbb{P}_h\nabla\phi_K=0$が自明である故，次のシンプルなものとなる．

$$(\nu+\nu_{\mathrm{add}})\|\nabla\phi_K\|_K^2=\frac{(1,\phi_K)^2}{\tau_{\mathrm{SUPG}}|K|} \tag{21}$$

４．おわりに

本報では，安定化法の観点から，マルチスケール変分法と気泡関数要素を用いた有限要素近似の関係性を明らかにし，新たにマルチスケール関数を導入することによって Guermond (1999) (5)が提唱した Bubnov-Galerkin 法の近似方程式に気泡関数の自由度上での人工粘性項を付加するだけで安定な数値計算結果が得られる理由がようやく判明した．つまり，Guermond (1999) (5)が使った人工粘性係数つまり本報で提案したマルチスケール関数が SUPG 法の安定化パラメータとリンクさせることによって，試行錯誤のパラメータではなく，最適な風上（上流）型の人工粘性の値を安定化法の観点から整合性を保持したままこのマルチスケール関数に反映させることができる．気泡関数要素を用いた VMS 有限要素近似により得られる定量的な計算精度および安定化効果については拙著(11)をご参考いただきたい．

今後は，本報のアイデアを基軸に，非定常の移流拡散方程式，波動方程式，浅水長波問題，そして弾性体問題等へ適用したい．

謝辞

本研究内容は JSPS 科研費 JP16K13734 の助成を受けた研究成果である．

参考文献

[1] T. J. R. Hughes: Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles, and the origin of the stabilizaed formulation，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，Vol.127, pp.387-401, 1995.

[2] R. Codina: On stabilized finite element methods for linear systems of convection-diffusion-reaction equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.188, pp.61-82, 2000.

[3] R. Codina: Stabilization of incompressibility and convection through orthogonal sub-scales in finite element methods, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.190, pp.1579-1599, 2000.

[4] L. P. Franca and T. J. R. Hughes: Convergence analysis of Galerkin least-squares methods for advective-diffusive forms of the Stokes and incompressible Navier-Stokes equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.105, pp.285-298, 1993.

[5] J. L. Guermond: Stabilization of Galerkin approximations of transport equations by subgrid modeling, M2AN Mathematical Modelling and Numerical Analysis, Vol.33, pp.1293-1316, 1999.

[6] T. J. R. Hughes, G. R. Feijóo, L. Mazzei and J. B. Quincy: The variational multiscale method - a paradigm for computational mechanics, Vol.166, pp.3-24, 1998.

[7] V. John, S. Kaya and W. Layton: A two-level variational multiscale method for convection-dominated convection-diffusion equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.195, pp.4594-4603, 2006.

[8] L. Song, Y. Hou and H. Zheng: A variational multiscale method based on bubble functions for convection-dominated convection-diffusion

equations, Applied Mathematics and Computation, Vol.217, pp.2226-2237, 2010.
[9] D. Boffi, F. Brezzi and M. Fortin: Mixed finite element methods and applications, Springer, Berlin Heidelberg, 2013.
[10] H. Okumura and M. Kawahara: A new stable bubble element for incompressible fluid flow based on a mixed Petrov-Galerkin finite element formulation, IJCFD, Vol.17 (4), pp.275-282, 2003.
[11] H. Okumura: Variational Multiscale Finite Element Method Based on Bubble Element for Steady Advection-Diffusion Equations, Memoirs of the Faculty of Human Development; University of Toyama, Vol.13 (2), pp.297-304, 2019.
[12] H. Okumura and M. Kawahara: A new stable bubble element for incompressible fluid flow based on a mixed Petrov-Galerkin finite element formulation, IJCFD, Vol.17 (4), pp.275-282, 2003.
[13] F. Brezzi, L. P. Franca, T J. R. Hughes and A. Russo: $b = \int g$, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering , Vol.145, 329-339, 1997.
[14] J. C. Simo, F. Armero and C. Taylor: Galerkin finite element methods with bubble for advection dominated incompressible Navier-Stokes, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.38, pp. 1475-1509, 1995.
[15] T. Yamada: A bubble element for the compressible Euler equations, IJCFD, Vol.9, pp.273-283, 1998.
[16] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes: Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulation for convection dominated flows with Navier-Stokes equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.32, pp.199-259, 1994.