

直交基底気泡関数要素安定化法を用いた有限要素流れ解析

Finite Element Flow Analysis
using Orthogonal Basis Bubble Function Element Stabilization Method

独) 産業技術総合研究所 先進製造プロセス研究部門, PRESTO, JST 松本 純一
(Junichi MATSUMOTO)

AMRI, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

1 はじめに

時間方向の離散化として、ルンゲクッタ法や多段階法などを使用した場合には、解析すべき未知量を求めるために質量行列の逆行列が必要になる。有限要素法を用いた質量行列は、一般的に疎な分布行列（整合質量行列）となり、逆行列を求めることは、数値解析上多くの記憶容量、計算時間を要する。この問題を解決するために、通常は質量行列の各行の成分を足し合わせて（集中化させて）対角項のみに成分をもたせた近似行列（集中質量行列）が使用される [1]。集中質量行列を用いた場合には、行列の成分が対角項のみであるので、逆行列は各対角成分を逆数にした行列になり、数値解析上、近似なしの質量行列を使用するのに比べて非常に少ない記憶容量、計算時間で解析を実行することができる。しかしながら、集中質量行列を使用した場合には、集中質量行列が元の質量行列の近似行列であるため、非定常移流方程式などでは計算精度が悪く得られた結果の信頼性に問題がある。本研究では、この問題を解決するため、気泡関数要素を使用した有限要素解析において質量行列の近似を行わずに、質量行列が対角行列となる気泡関数を提案する。すなわち、気泡関数要素の基底（形状関数）が直交する条件を導入して、計算精度の落ちない（近似のない）対角行列となる質量行列を開発し、気泡関数要素を使用した有限要素解析において、記憶容量、計算時間などの計算効率の良い解析手法（直交基底気泡関数要素安定化法）を実現する [2]。検証計算として、非定常移流方程式のベンチマーク問題である Rotating Cone 問題を用いて直交基底気泡関数要素の計算結果を比較する。

2 気泡関数要素 [2]

三角形（四面体）要素を用いた気泡関数要素は、各要素において三角形（四面体）を形成する 3(4) 点と重心点の 4(5) つの節点を用いて図 1 のように、アイソパラメトリック座標系で式 (1) のように表される（表現形式 1）。

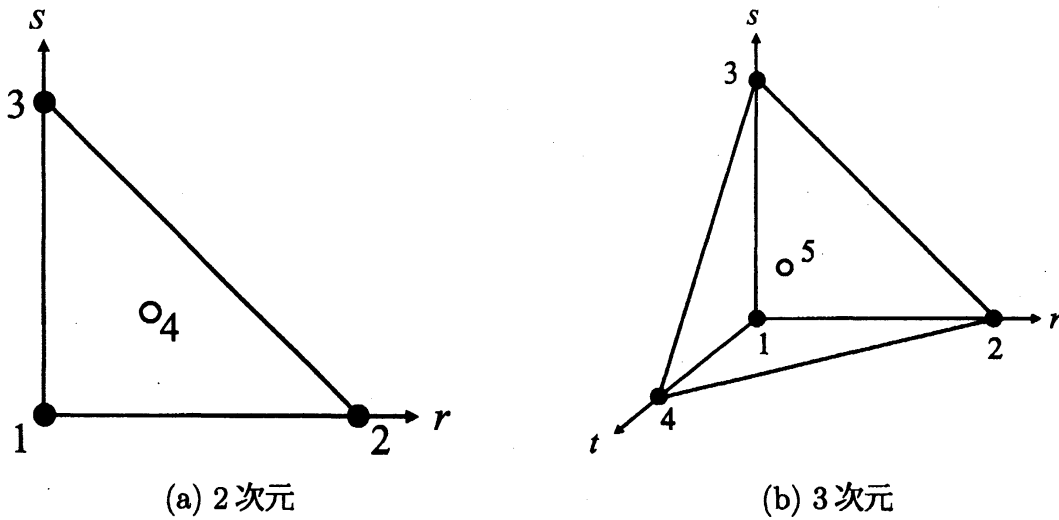


図 1: 気泡関数要素

$$u^h|_{\Omega_e} = \sum_{\alpha=1}^{N+1} \Phi_{\alpha} u_{\alpha} + \phi_B u_B \quad (1)$$

$$\Phi_{\alpha} = \Psi_{\alpha} - \frac{1}{N+1} \phi_B, \quad \alpha = 1 \cdots N+1 \quad (2)$$

式(2)中の Ψ_{α} は、2次元および3次元の一次要素を用いた形状関数、 N は空間次元数であり

$$2D: \Psi_1 = 1 - r - s, \quad \Psi_2 = r, \quad \Psi_3 = s \quad (3)$$

$$3D: \Psi_1 = 1 - r - s - t, \quad \Psi_2 = r, \quad \Psi_3 = s, \quad \Psi_4 = t \quad (4)$$

である。また、 ϕ_B は気泡関数である。気泡関数は要素境界上においてその値が0となり、重心点で値が1となるように要素毎に定義される。気泡関数要素の補間関数は、三角形(四面体)一次要素の補間関数と気泡関数を用いて式(5)のように書き換えることができる(表現形式2)。

$$u^h|_{\Omega_e} = \bar{u}^h|_{\Omega_e} + u^{h'}|_{\Omega_e} \quad (5)$$

$$\bar{u}^h|_{\Omega_e} = \sum_{\alpha=1}^{N+1} \Psi_{\alpha} u_{\alpha}, \quad u^{h'}|_{\Omega_e} = \phi_B u'_B, \quad u'_B = u_B - \frac{1}{N+1} \sum_{\alpha=1}^{N+1} u_{\alpha} \quad (6)$$

3 移流拡散方程式における直交基底気泡関数要素安定化法

3.1 移流拡散方程式

移流拡散方程式は以下のように表される。

$$\dot{u} + a_j u_{,j} - \nu u_{,jj} = f \quad \text{in } \Omega \quad (7)$$

u, a_j, ν, f はある物理量, 流速, 拡散係数, 外力である.

3.2 直交基底気泡関数要素安定化法 [2]

近似空間に 2 レベル [3][4], 重み空間に 3 レベル [4][5] を採用する 2 レベル-3 レベル近似に基づいた気泡関数要素の定式化では, 次の 1 次要素の有限要素空間 $\bar{V}^h$ と気泡関数の空間 $V^{h'}, \hat{V}^{h'}$ を用いる.

$$\bar{V}^h = \{\bar{v}^h \in H_0^1(\Omega); \bar{v}^h|_{\Omega_e} \in P1(\Omega_e)\} \quad (8)$$

$$V^{h'} = \{v^{h'} \in H_0^1(\Omega); v^{h'}|_{\Omega_e} \in \phi_B v'_B, v'_B \in \mathbf{R}\} \quad (9)$$

$$\hat{V}^{h'} = \{\hat{v}^{h'} \in H_0^1(\Omega); \hat{v}^{h'}|_{\Omega_e} \in \varphi_B v'_B, v'_B \in \mathbf{R}\} \quad (10)$$

ϕ_B, φ_B は要素領域 Ω_e を台とする 2 レベル気泡関数 (直交基底となる気泡関数), 3 レベル気泡関数 (安定化作用制御項を導く気泡関数) であり, 下記条件式を満たす気泡関数である.

$$\langle \phi_B, 1 \rangle_{\Omega_e} = \|\phi_B\|_{\Omega_e}^2 = \frac{N+1}{N+2} A_e \quad (11)$$

$$\langle 1, \varphi_B \rangle_{\Omega_e} = \langle \phi_B, \varphi_B \rangle_{\Omega_e} = 0 \quad (12)$$

$\langle u, v \rangle := \sum_{e=1}^{N_e} \langle u, v \rangle_{\Omega_e} = \sum_{e=1}^{N_e} \int_{\Omega_e} uv \, d\Omega$, $\|u\|_{\Omega_e}^2 = \langle u, u \rangle_{\Omega_e}$, $A_e := \int_{\Omega_e} d\Omega$ であり, N_e は要素数である. $V^{h'}, \hat{V}^{h'}$ は気泡関数による近似空間に対応している. 有限要素空間として $V^h = \bar{V}^h \oplus V^{h'}$ を用いて有限要素近似解 $u^h \in V^h$ を見いだす次の近似問題が得られる.

$$\langle \dot{u}^h + a_j^h u_{,j}^h - \nu u_{,jj}^h - f, \hat{v}^h \rangle = 0 \quad \forall \hat{v}^h \in \hat{V}^h \quad (13)$$

V^h に属する近似解 u^h と

$$\bar{V}^h = \bar{V}^h \oplus \{v^{h'} + \hat{v}^{h'}; v^{h'}|_{\Omega_e} + \hat{v}^{h'}|_{\Omega_e} = (\phi_B + \varphi_B)v'_B\},$$

に属する重み関数 $\hat{v}^h$ は次のようになっている.

$$u^h = \bar{u}^h + u^{h'}, \quad \hat{v}^h = \bar{v}^h + v^{h'} + \hat{v}^{h'} = v^h + \hat{v}^{h'} \quad (14)$$

式 (13) は, 以下のように書きかえることができる.

$$\begin{aligned} & \langle \dot{u}^h + a_j^h u_{,j}^h - \nu u_{,jj}^h - f, v^h \rangle \\ & + \sum_{e=1}^{N_e} \nu' \|\phi_{B,j}\|_{\Omega_e}^2 u'_B v'_B = 0 \quad \forall v^h \in V^h \\ & \nu' \|\phi_{B,j}\|_{\Omega_e}^2 u'_B := \langle \dot{u}^h + a_j^h u_{,j}^h - \nu u_{,jj}^h - f, \varphi_B \rangle_{\Omega_e} \end{aligned} \quad (15)$$

式(15)の $\nu' \|\phi_{B,j}\|_{\Omega_e}^2 u_B'$ は直交基底気泡関数要素の安定化作用を制御する項である。安定化作用制御項の安定化制御パラメータ ν' は、次式によって決定する。

$$(\nu + \nu') \|\phi_{B,j}\|_{\Omega_e}^2 = \frac{\langle \phi_B, 1 \rangle_{\Omega_e}^2}{A_e} \tau_{eR}^{-1}. \quad (16)$$

ここで,

$$\tau_{eR} = \left[\left(\frac{2|\bar{u}_h^*|}{h_e} \right)^2 + \left(\frac{4\nu}{h_e^2} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

であり、 h_e は各要素の代表長さである。

4 直交基底気泡関数要素

4.1 気泡関数要素の基底が直交する条件

気泡関数要素の基底（形状関数）が直交するためには、下記式(18), (19)を満たす必要がある。

$$\langle \Phi_\alpha, \phi_B \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{N+1} \langle 1, \phi_B \rangle_{\Omega_e} - \frac{1}{N+1} \|\phi_B\|_{\Omega_e}^2 = 0 \quad (18)$$

$\alpha \neq \beta$ のとき

$$\langle \Phi_\alpha, \Phi_\beta \rangle_{\Omega_e} = \langle \Psi_\alpha, \Psi_\beta \rangle_{\Omega_e} - \frac{1}{(N+1)^2} \langle 1, \phi_B \rangle_{\Omega_e} = 0 \quad (19)$$

$$\langle \Psi_\alpha, \phi_B \rangle_{\Omega_e} = \frac{1}{N+1} \langle 1, \phi_B \rangle_{\Omega_e} \quad (20)$$

$$\alpha = 1 \dots N+1, \beta = 1 \dots N+1$$

式(18), (19)の導出において、式(20)を仮定している。式(18), (19)より以下の関係式(21)を得る。

$$\langle \phi_B, 1 \rangle_{\Omega_e} = \|\phi_B\|_{\Omega_e}^2 = \frac{N+1}{N+2} A_e \quad (21)$$

4.2 直交条件を満たす気泡関数

式(18), (19)を満たすことができる気泡関数として下記式で表される気泡関数を提案する。

$$\phi_B = \frac{\alpha_1 \phi_{B1} + \alpha_2 \phi_{B2} + \phi_{B3}}{\alpha_1 + \alpha_2 + 1} \quad (22)$$

α_1, α_2 は未知量であり、 $\phi_{B1}, \phi_{B2}, \phi_{B3}$ はそれぞれ異なった気泡関数である。式(18)に式(22)を代入することにより下記式(23)を得る。

$$\beta_1 \alpha_1^2 + \beta_2 \alpha_2^2 + \beta_3 + \beta_4 \alpha_1 \alpha_2 + \beta_5 \alpha_1 + \beta_6 \alpha_2 = 0 \quad (23)$$

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= (\langle \phi_{B1}, 1 \rangle_{\Omega_e} - \|\phi_{B1}\|_{\Omega_e}^2) A_e^{-1}, \\
\beta_2 &= (\langle \phi_{B2}, 1 \rangle_{\Omega_e} - \|\phi_{B2}\|_{\Omega_e}^2) A_e^{-1}, \\
\beta_3 &= (\langle \phi_{B3}, 1 \rangle_{\Omega_e} - \|\phi_{B3}\|_{\Omega_e}^2) A_e^{-1}, \\
\beta_4 &= (\langle \phi_{B2}, 1 \rangle_{\Omega_e} + \langle \phi_{B1}, 1 \rangle_{\Omega_e} - 2\langle \phi_{B1}, \phi_{B2} \rangle_{\Omega_e}) A_e^{-1}, \\
\beta_5 &= (\langle \phi_{B3}, 1 \rangle_{\Omega_e} + \langle \phi_{B1}, 1 \rangle_{\Omega_e} - 2\langle \phi_{B1}, \phi_{B3} \rangle_{\Omega_e}) A_e^{-1}, \\
\beta_6 &= (\langle \phi_{B3}, 1 \rangle_{\Omega_e} + \langle \phi_{B2}, 1 \rangle_{\Omega_e} - 2\langle \phi_{B2}, \phi_{B3} \rangle_{\Omega_e}) A_e^{-1}
\end{aligned}$$

式(19)に式(22)を代入することにより下記式(24)を得る.

$$\alpha_2 = \gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \quad (24)$$

$$\gamma_1 = -\frac{\langle \phi_{B1}, 1 \rangle_{\Omega_e} A_e^{-1} - \frac{N+1}{N+2}}{\langle \phi_{B2}, 1 \rangle_{\Omega_e} A_e^{-1} - \frac{N+1}{N+2}}, \quad \gamma_2 = -\frac{\langle \phi_{B3}, 1 \rangle_{\Omega_e} A_e^{-1} - \frac{N+1}{N+2}}{\langle \phi_{B2}, 1 \rangle_{\Omega_e} A_e^{-1} - \frac{N+1}{N+2}}$$

式(23)に式(24)を代入することにより, 最終的に α_1 を未知量とした下記式(25)を得る.

$$a \alpha_1^2 + b \alpha_1 + c = 0 \quad (25)$$

$$a = \beta_1 + \beta_2 \gamma_1^2 + \beta_4 \gamma_1, \quad b = 2\beta_2 \gamma_1 \gamma_2 + \beta_4 \gamma_2 + \beta_5 + \beta_6 \gamma_1, \quad c = \beta_2 \gamma_2^2 + \beta_3 + \beta_6 \gamma_2$$

式(25)は α_1 に関する二次方程式なので, 解の公式より下記式(26)にて未知量 α_1 を求めることができる.

$$\alpha_1 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (26)$$

4.3 直交基底を形成する具体的な気泡関数

式(22)の $\phi_{B1}, \phi_{B2}, \phi_{B3}$ を ξ 乗気泡関数 [2] を用いて下記式(27)のように選ぶと, 二次元(三角形), 三次元(四面体)の気泡関数に対して α_1, α_2 は下記式(28), (29)のようになる.

$$\phi_{B1} = \phi_B^{\xi_1=3}, \quad \phi_{B2} = \phi_B^{\xi_2=2}, \quad \phi_{B3} = \phi_B^{\xi_3=6/5} \quad (27)$$

二次元(三角形):

$$\alpha_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = -0.1393869 \dots, \quad \alpha_2 = -0.6433844 \dots \quad (28)$$

三次元(四面体):

$$\alpha_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = 0.7333511 \dots, \quad \alpha_2 = -1.6387018 \dots \quad (29)$$

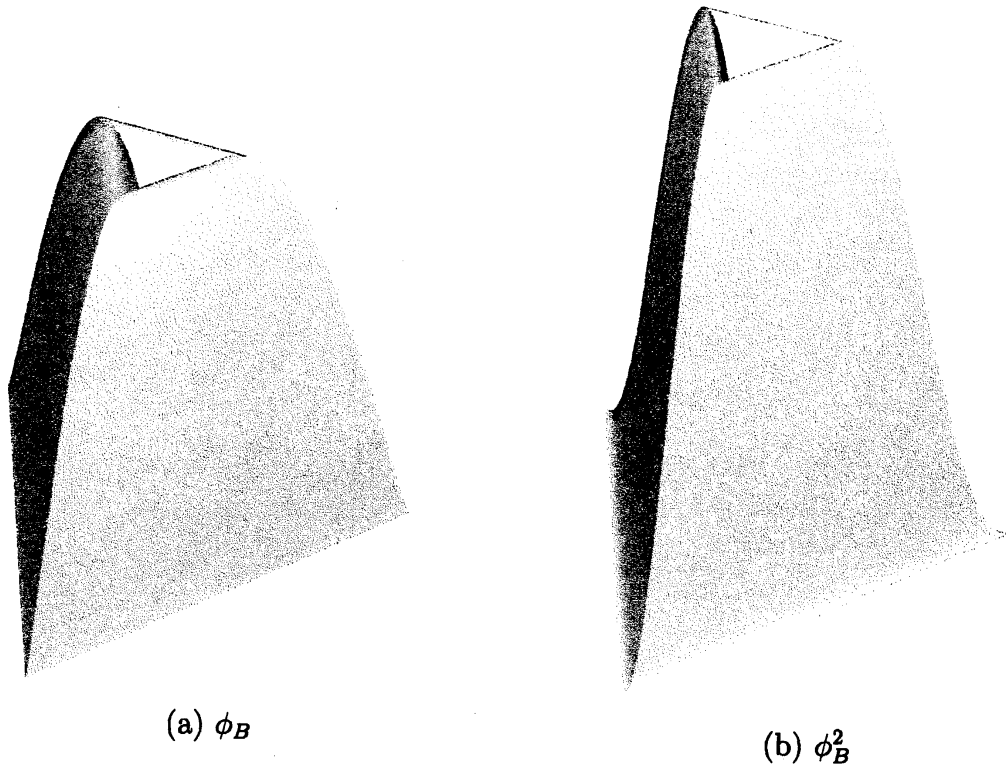


図 2: ϕ_B と ϕ_B^2 の気泡関数形状

図 2 に, 2 次元 (三角形) の気泡関数形状を示す. $\phi_{B1}, \phi_{B2}, \phi_{B3}$ の選び方によって, 式 (21) を満たす気泡関数 (形状) は, 幾つも存在すると考えられる. 従って, 直交基底を形成する具体的な気泡関数やその形状には意味がなく, 直交基底気泡関数要素の本質は気泡関数要素の基底が直交する条件式 (21) を導いた部分にある.

4.4 3 レベル気泡関数と安定化作用制御項

非定常問題においても重心点のみの粘性項を導出できる, 3 レベル気泡関数を考え, 式 (30), 式 (31) の条件を定義する.

$$\langle 1, \varphi_B \rangle_{\Omega_e} = 0 \quad (30)$$

$$\langle \phi_B, \varphi_B \rangle_{\Omega_e} = 0 \quad (31)$$

式 (30), (31) を満足する 3 レベルの気泡関数として, 次式を考える.

$$\varphi_B = \frac{\nu_\varphi}{\nu} \frac{\delta_1 \varphi_{B1} + \delta_2 \varphi_{B2} + \varphi_{B3}}{\delta_1 + \delta_2 + 1}, \quad -\infty < \nu_\varphi < \infty \quad (32)$$

$$\nu' = \frac{\frac{\nu_\varphi}{\delta_1 + \delta_2 + 1} \langle \phi_{B,j}, (\delta_1 \varphi_{B1} + \delta_2 \varphi_{B2} + \varphi_{B3})_{,j} \rangle_{\Omega_e}}{\|\phi_{B,j}\|_{\Omega_e}^2} \quad (33)$$

式(30),(31),(32),(33)より下記式(34)を得る.

$$\langle \dot{u}^h + a_j^h u_{,j}^h - \nu u_{,jj}^h - f, \varphi_B \rangle_{\Omega_e} = \nu' \|\phi_{B,j}\|_{\Omega_e}^2 u_{Bi}' \quad (34)$$

式(32)を式(30),(31)に代入して式(35),(36)を得る.

$$\delta_1 = \frac{\langle 1, \varphi_{B2} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B3} \rangle_{\Omega_e} - \langle 1, \varphi_{B3} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B2} \rangle_{\Omega_e}}{\langle 1, \varphi_{B1} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B2} \rangle_{\Omega_e} - \langle 1, \varphi_{B2} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B1} \rangle_{\Omega_e}} \quad (35)$$

$$\delta_2 = \frac{\langle 1, \varphi_{B3} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B1} \rangle_{\Omega_e} - \langle 1, \varphi_{B1} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B3} \rangle_{\Omega_e}}{\langle 1, \varphi_{B3} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B2} \rangle_{\Omega_e} - \langle 1, \varphi_{B2} \rangle_{\Omega_e} \langle \phi_B, \varphi_{B1} \rangle_{\Omega_e}} \quad (36)$$

式(35),(36),(33)の δ_1, δ_2, ν' は, 式(37)の ξ 乗気泡関数を採用すると, 式(38),(39)の値となる.

$$\varphi_{B1} = \phi_B^3, \varphi_{B2} = \phi_B^2, \varphi_{B3} = \phi_B^1 \quad (37)$$

2次元:

$$\delta_1 = 7.4759881 \dots, \delta_2 = -6.4855929 \dots, \nu' = C \nu_\varphi, C = -0.0935697 \dots \quad (38)$$

3次元:

$$\delta_1 = 70.5090640 \dots, \delta_2 = -37.7545320 \dots, \nu' = C \nu_\varphi, C = -0.0338976 \dots \quad (39)$$

図3に, $(\nu_\varphi = \nu)$ としたときの2次元の $\varphi_B, \phi_B \varphi_B$ の気泡関数形状を示す. 注意すべきこ

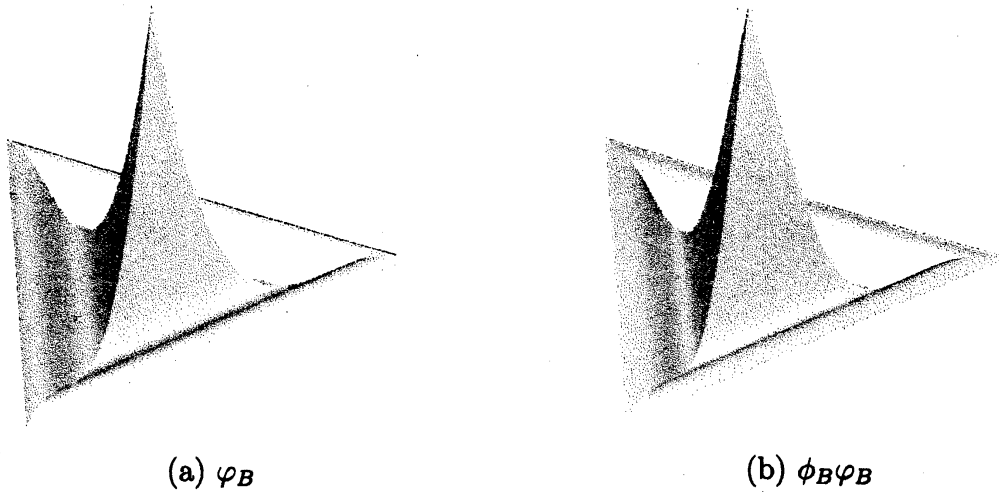


図3: φ_B と $\phi_B \varphi_B$ の気泡関数形状

ととして, 3レベルの気泡関数で重要なのは, 具体的な気泡関数形状ではなく, 安定化作用制御項を導入するために必要な式(30),(31)の条件である.

5 Rotating Cone問題

5.1 2次元解析

検証計算として、Rotating Cone問題の解析を行う。図4に領域モデルとメッシュ（節点数：4921，要素数：9600）を示す。図5が初期条件の鳥瞰図と等高線である。図6～8に計算結果を示す。時間方向の離散化には4段階法を採用した。図6は、線形型（1次）気泡関数での整合質量行列を使用した計算結果である。この計算結果に対して、集中質量行列を使用した計算結果（図7）は、円錐の進行方向の後方に振動が発生しており、円錐の分布状況も崩れている結果となっている。一方、気泡関数（直交基底）での対角質量行列を使用した計算結果（図8）は、円錐の進行方向の後方に振動が発生しておらず、その分布も崩れていなく、線形型気泡関数での整合質量行列を使用した計算結果と同等の計算精度を保っている。

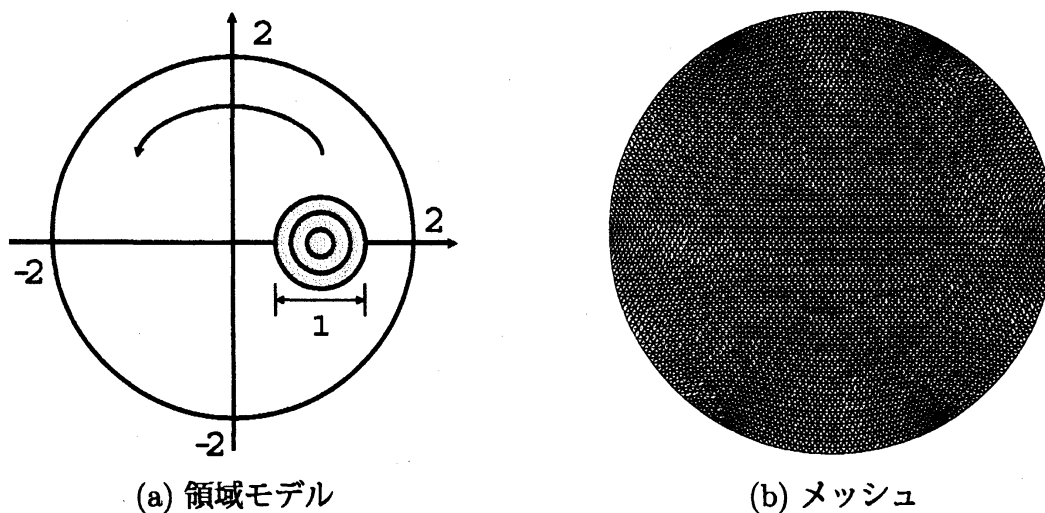


図 4: Rotating Cone 問題

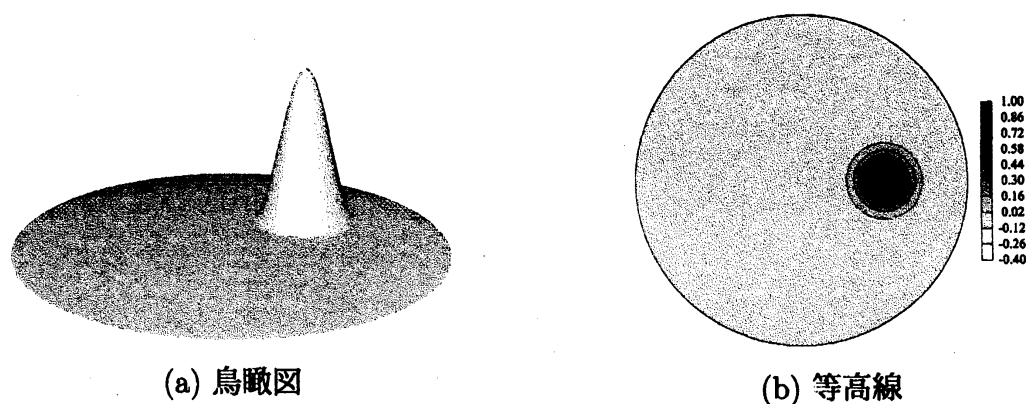
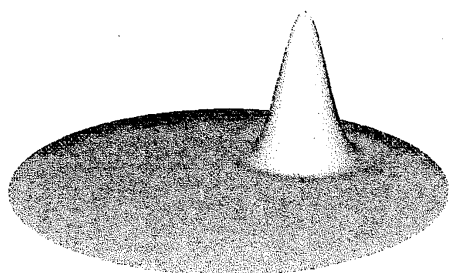
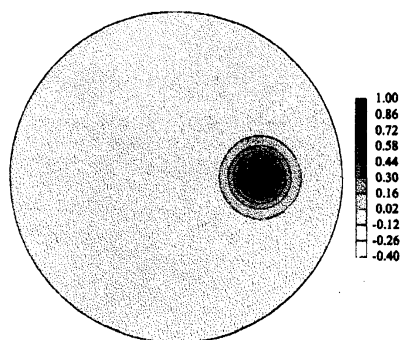


図 5: 初期条件

Maximum cone height = 0.9458



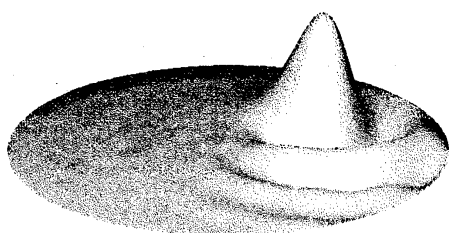
(a) 鳥瞰図



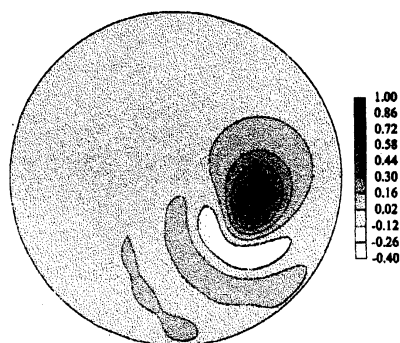
(b) 等高線

図 6: 5 周後：線形型気泡関数（整合質量行列）

Maximum cone height = 0.7039



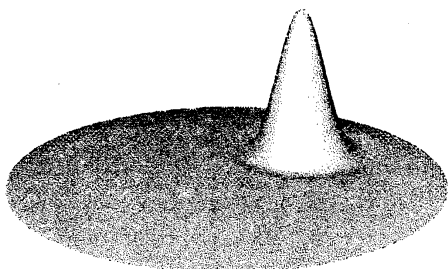
(a) 鳥瞰図



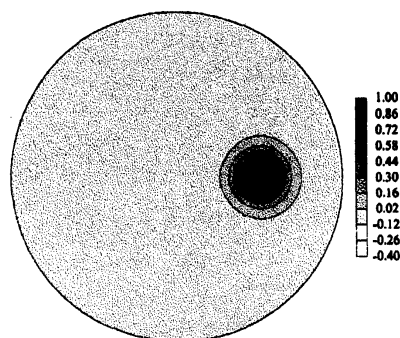
(b) 等高線

図 7: 5 周後：線形型気泡関数（集中質量行列）

Maximum cone height = 0.9453



(a) 鳥瞰図



(b) 等高線

図 8: 5 周後：気泡関数（直交基底：対角質量行列）

5.2 3次元解析

検証計算として、3次元 Rotating Cone 問題の解析を行う。図9に領域モデルとメッシュ（節点数：438413，要素数：2539200）を示す。検証の問題では、2次元的な濃度分布を与え、鉛直方向には一定値とした Cone の分布を採用し、メッシュは四面体要素の任意（不規則的な）分割を用いている。図10が鉛直方向 = 0 部分の初期条件の鳥瞰図と等高線である。図11～13に鉛直方向 = 0 部分の計算結果を示す。時間方向の離散化には4段階法を、時間増分量 Δt は $\pi/600$ を採用した。図11は、線形型（1次）気泡関数での整合質量行列を使用した計算結果である。この計算結果に対して、集中質量行列を使用した計算結果（図12）は、円錐の進行方向の後方に振動が発生しており、円錐の分布状況も崩れている結果となっている。一方、気泡関数（直交基底）での対角質量行列を使用した計算結果（図13）は、円錐の進行方向の後方に振動が発生しておらず、その分布も崩れていなく、線形型気泡関数での整合質量行列を使用した計算結果と同等の計算精度を保っている。

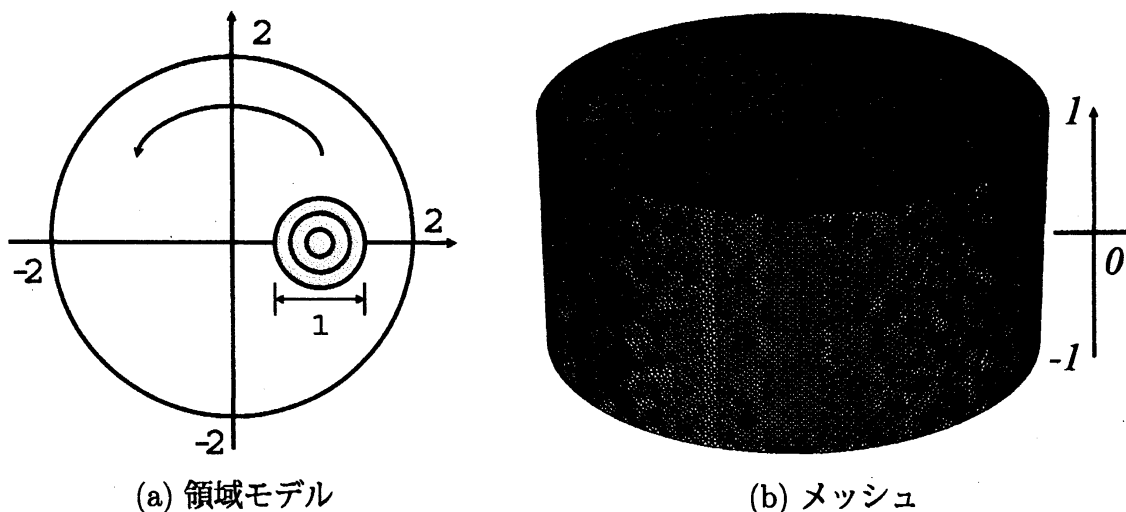


図 9: Rotating Cone 問題

6 おわりに

本研究では、気泡関数要素を使用した有限要素解析において質量行列の近似を行わずに、質量行列が対角行列となる気泡関数を提案した。気泡関数要素の基底（形状関数）が直交する条件を導入して、計算精度の落ちない（近似のない）対角行列となる質量行列を開発し、高精度かつ記憶容量・計算時間などの計算効率の良い解析手法（直交基底気泡関数要素安定化法）を実現した。

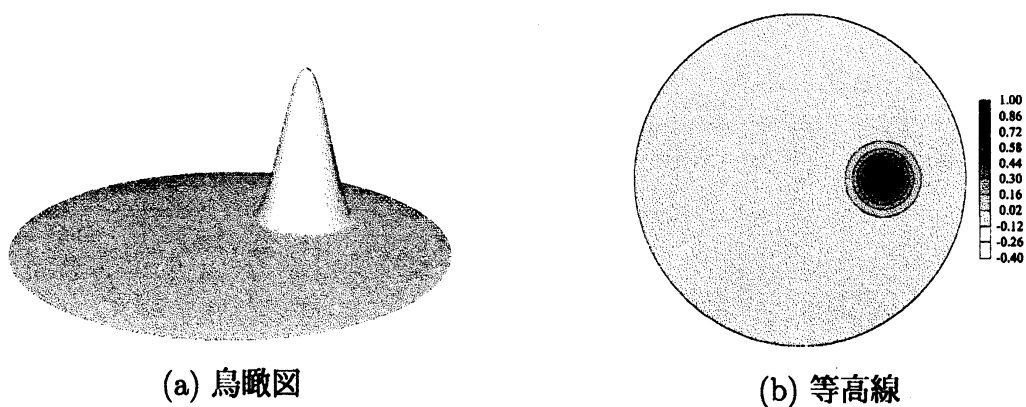


図 10: 初期条件

Maximum cone height = 1.0015

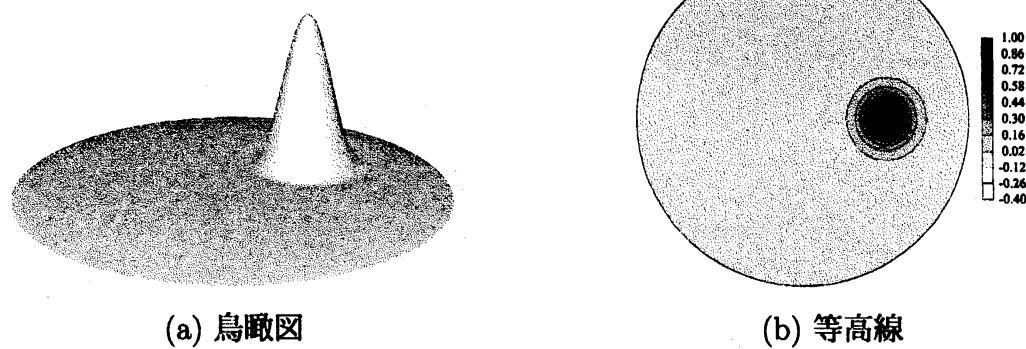


図 11: 5 周後：線形型気泡関数（整合質量行列）

Maximum cone height = 0.8602

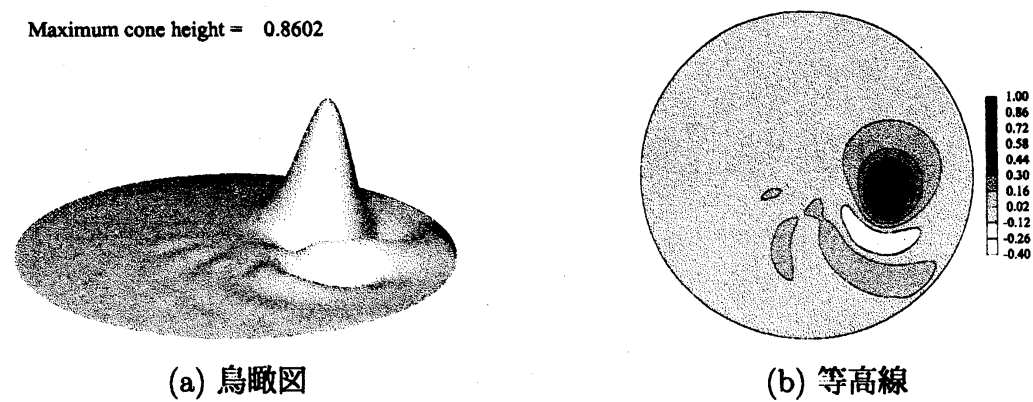


図 12: 5 周後：線形型気泡関数（集中質量行列）

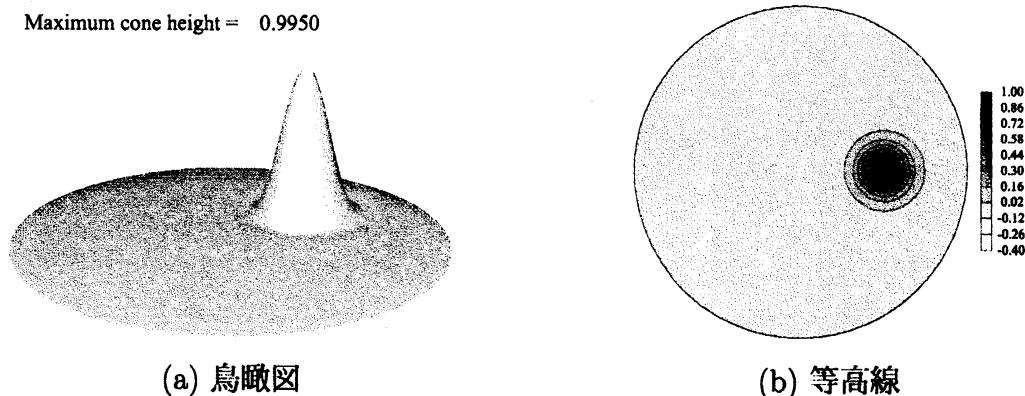


図 13: 5 周後：気泡関数（直交基底：対角質量行列）

参考文献

- [1] 畑中勝守：多段階有限要素法による非圧縮粘性流体の順・逆解析に関する計算力学的研究，中央大学博士論文，1993.
- [2] Matsumoto, J.: A Relationship between Stabilized FEM and Bubble Function Element Stabilization Method with Orthogonal Basis for Incompressible Flows, *Journal of Applied Mechanics*, JSCE, Vol.8, pp.233-242, 2005.
- [3] Hughes, T.J.R., Mazzei, L., Jansen, K.E.: Large Eddy Simulation and the variational multiscale method, *Computing and Visualization in Science*, Vol. 3, pp.47-pp.59, 2000.
- [4] Matsumoto, J. and Kawahara, M.: Shape identification for fluid-structure interaction problem using improved bubble element, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol.15, pp.33-45, 2001.
- [5] Collis, S.S.: Monitoring unresolved scales in multiscale turbulence modeling, *Phys. Fluids*, Vol. 13, pp.1800-1806, 2001.
- [6] Yamada, T.: A bubble element for the compressible Euler equations, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol.9, pp.273-283, 1998.
- [7] Okumura, H. and Kawahara, M.: A new stable bubble element for incompressible fluid flow based on a mixed Petrov-Galerkin finite element formulation, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol.17(4), pp.275-282, 2003.