数理解析研究所講究録
1084 巻 1999 年 103-110

有限要素離散化 Stokes 方程式に対する反復解法

九州大学 大学院数理学研究科　　鈴木 厚 (Atsushi Suzuki)

1. はじめに

遅い流れの非圧縮流体を記述する Stokes 方程式について考える. Stokes 方程式は地球マントル対流や, 溶融ガラスの数学モデルである無限 Prandtl 数流体の Boussinesq 方程式の流速と圧力に関する支配方程式をなす. Stokes 方程式の数値解を求めることを目的とするが, 3 次元計算を考慮し, 未知数自由度の少ない $P1/P1$ 安定化有限要素法により離散化を行う. Stokes 方程式の弱形式は鞍点型問題であるため, 離散化後の連立方程式を CG 法で加速された Uzawa 法で解くものが提案されている [1]. しかし反復が入籠になっているため計算時間がかかる. 離散化後の行列に直接反復法を適用することを考える. 行列は対称であるが正負固有値が混在すること, 非対称ではあるが, 強圧的な行列に変換することができることに着目する. それぞれの行列表現の反復解法に CG 法, GCR(k) 法を用いた場合の収束性と計算効率を数値実験により比較する.

2. 支配方程式

3 次元球殻領域で, 滑り境界条件を課す Stokes 方程式について考える. Ω を 3 次元球殻領域とする.

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^3;\ R_1 < |x| < R_2\}$$

ここで $|x|$ は $x = (x_1, x_2, x_3)$ のユークリッドノルムである. R_1 は内径, R_2 は外径である. 境界 $\Gamma = \partial\Omega$ は内側と外側の境界 Γ_1, Γ_2 からなる $\Gamma_i = \{x \in \mathbb{R}^3;\ |x| = R_1\}, (i = 1, 2)$. Ω で定義された流速 $u = (u_1, u_2, u_3)$, 圧力 p に関する次の Stokes 方程式を考える.

$$(E)\left\{\begin{array}{c} -\nabla \otimes \sigma(u,p) = f\ , \\ \nabla \cdot u = 0\ , \end{array}\right. \quad x \in \Omega.$$

境界条件に滑り境界条件を課す:

$$\left\{\begin{array}{c} u \cdot n = 0, \\ t^{(k)} \cdot \sigma(u,p)\, n = 0 \quad (k = 1, 2), \end{array}\right. \quad x \in \Gamma.$$

σ は応力テンソルであり, 変形速度テンソルを $D_{ij}(u) := \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j)$ $(1 \le i, j \le 3)$, 3×3 単位行列を I として,

$$\sigma(u,p) := 2D(u) - p\,I$$

と定義される. $(\nabla \otimes \sigma(u,p))_i := \sum_{j=1}^{3} \partial_j \sigma_{ij}(u,p)$ $(1 \le i \le 3)$ である. n は境界での外向き単位法線ベクトル, $t^{(1)}, t^{(2)}$ は境界での独立な単位接ベクトルである. 応力テンソルは粘性係数を含むが, ここでは定数 1 の場合を考える.

3. P1/P1 安定化有限要素法

3 次元問題において Stokes 方程式の流速, 圧力に $P2/P1$ 要素を用いると剛性行列の非零要素が非常に多くなり, 膨大な記憶容量と計算時間を必要とするため, 現実的でない. そこで, 流速, 圧力に最低次最小自由度の四面体要素, $P1/P1$ 要素を用いる. しかし, $P1/P1$ 要素は Stokes 方程式の混合型有限要素近似において必要となる下限・上限条件を満たさない. この条件の克服のため, 最小 2 乗型 Galerkin 安定化有限要素法 [3] を用い離散化を行う.

$\mathcal{T}_h$ を $\bar{\Omega}_h$ の四面体要素による分割とする: $\bar{\Omega} = \bigcup_{K\in\mathcal{T}_h} \bar{K}$. Ω_h は Ω の多角形近似, h_K を各要素 K の直径, h を最大要素直径とする. S_h $(\subset H^1(\Omega_h)\cap C^0(\bar{\Omega}_h))$ を四面体 $P1$ 要素による区分的一次多項式の関数からなる空間とする. 流速, 圧力に対する有限要素空間を各々, 次のように設定する.

$$
\begin{aligned}
W_h &:= \left\{v_h \in S_h^3 \ ; \ (v_h\cdot n_\Omega)(P) = 0\ (\forall P)\right\},\\
V_h &:= \left\{v_h \in W_h \ ; \ (v_h, v^{(k)})_h = 0\ (k=1,2,3)\right\},\\
M_h &:= S_h,\ Q_h := \{q_h \in S_h \ ; \ (q_h, 1)_h = 0\}.
\end{aligned}
$$

ここで, $v^{(k)}(k=1,2,3)$ は剛体回転の自由度を表すベクトルである. これらは x_k 軸方向の単位ベクトル $e^{(k)}$ を用いると, $v^{(k)}(x) = e^{(k)}\times x$ である. $V_h\times Q_h$ は球殻領域で滑り境界条件を課す Stokes 方程式の一意可解性のために必要な空間である. P は $\partial\Omega_h$ 上の節点, n_Ω は $\partial\Omega$ の外向き単位法線ベクトルを表す. $(\cdot,\cdot)_h$ を $L^2(\Omega_h)$ または $L^2(\Omega_h)^3$ での内積とする. $u, v\in S_h^3$, $q\in S_h$ に対して, 双一次形式を次のように定義する.

$$
\begin{aligned}
a_h(u,v) &:= 2\int_{\Omega_h}\sum_{1\le i,j\le 3} D_{ij}(u)D_{ij}(v)\,dx,\\
b_h(v,q) &:= -\int_{\Omega_h}\nabla\cdot v\, q\,dx.
\end{aligned}
$$

安定化有限要素法によるスキームは (P_h) を満たす $(u_h,\, p_h)\in V_h\times Q_h$ を求めることである.

$$
(P_h)\left\{
\begin{array}{lr}
a_h(u_h,\, v_h) + b_h(v_h,\, p_h) = (f,\, v_h)_h, & v_h\in V_h\\
b_h(u_h,\, q_h) - \delta\displaystyle\sum_{K\in\mathcal{T}_h} h_K^2(\nabla p_h,\, \nabla q_h)_K = -\,\delta\displaystyle\sum_{K\in\mathcal{T}_h} h_K^2(f,\, \nabla q_h)_K, & q_h\in Q_h.
\end{array}
\right.
$$

ここで $(\cdot,\cdot)_K$ は 要素 K での内積を表す. 正定数 δ は安定化パラメータである.
(P_h) は $f\in L^2(\Omega)^3$ が

$$
(f, v^{(k)})_h = 0, \qquad (1\le\forall k\le 3)
$$

を満たすとき一意可解であり, 有限要素解は 1 次の近似精度である [7].

4. 行列表現と反復解法

行列成分計算に $V_h\times Q_h$ の有限要素基底を用いることは煩雑である. このため, $W_h\times M_h$ の有限要素基底を用いるが, この場合係数行列は正則でない. そこで, 剛体回転の自由度と圧力の定数

の任意性を取り除くための正射影を付加する. Dirchlet 境界条件の場合, 剛体回転の自由度は無く, 流速に関する正射影は必要ない.

$N_W = \mathrm{dim} W_h$, $N_M = \mathrm{dim} M_h$, とし, 流速, 圧力に対する有限要素基底をそれぞれ,

$$W_h = \mathrm{span}[\varphi_1, \cdots \varphi_{N_W}],$$
$$M_h = \mathrm{span}[\psi_1, \cdots \psi_{N_M}]$$

とし, 有限要素解の節点での値を $\{U_j\}_{j=1}^{N_W}$, $\{P_j\}_{j=1}^{N_M}$ とする: $u_h \in W_h$, $u_h = \sum_{j=1}^{N_W} U_j \varphi_j$, $p_h \in M_h$, $p_h = \sum_{j=1}^{N_M} P_j \psi_j$.

双一次形式から行列, 内積からベクトルを次のように定義する.

$$\begin{aligned}
(A)_{ij} &:= a_h(\varphi_j, \varphi_i), && 1 \le i, j \le N_W, \\
(B)_{ij} &:= b_h(\varphi_j, \psi_i), && 1 \le i \le N_M, 1 \le j \le N_W, \\
(D)_{ij} &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 (\nabla \psi_j,\, \nabla \psi_i)_K, && 1 \le i, j \le N_M, \\
(F)_i &:= (f_h,\, \varphi_i)_h, && 1 \le i \le N_W, \\
(G)_i &:= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 (f_h,\, \nabla \varphi_i)_K, && 1 \le i \le N_M.
\end{aligned}$$

f_h は f の W_h への補間とする.

$V^{(k)} \in \mathbb{R}^{N_W}$ を $v^{(k)}$ の節点での値からつくられるベクトル: $v^{(k)} = \sum_{j=1}^{N_W} V_j^{(k)} \varphi_j$, また $C = (1, 1, \cdots, 1)^T \in \mathbb{R}^{N_M}$ とする.

$$N_V := \mathrm{span}[V^{(1)}, V^{(2)}, V^{(3)}],$$
$$N_Q := \mathrm{span}[C]$$

に対し, 流速, 圧力に対する正射影 P_V, P_C を次のように定義する:

$$P_V : \mathbb{R}^{N_W} \to N_V^{\perp}, \qquad P_V U = U - \sum_{k=1}^{3} \frac{(U, V^{(k)})}{||V^{(k)}||^2} V^{(k)},\ U \in \mathbb{R}^{N_W},$$

$$P_Q : \mathbb{R}^{N_M} \to N_Q^{\perp}, \qquad P_Q P = P - \frac{(P, C)}{||C||^2} C,\ P \in \mathbb{R}^{N_M}.$$

補題 1. A は対称行列で $N_V^{\perp}$ で正定値である.

補題 2. D は対称行列で $N_Q^{\perp}$ で正定値である.

(P_h) に対応する連立一次方程式は

$$(M_1) \quad \mathcal{A}_1 \begin{pmatrix} U \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -\delta D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_V F \\ -\delta P_Q G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_V F \\ -\delta G \end{pmatrix}.$$

となる. ここで G は定義から $(G, C)_{\mathbb{R}^{N_M}} = 0$ となることがわかるため,$P_Q G = G$ である.

補題 3. 対称行列 $\mathcal{A}_1$ の核は

$$N := \mathrm{span}[(V^{(1)}, 0), (V^{(2)}, 0), (V^{(3)}, 0), (0, C)]$$

である.

補題 4. ある直交変換 Q と $(N_W-3)\times(N_W-3)$ 対称正定値行列 $\bar{A}$ が存在し,

$$A = Q^T\begin{pmatrix}\bar{A} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}Q, \qquad P_V = Q^T\begin{pmatrix}I_{N_W-3} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}Q$$

が成り立つ. ここで I_{N_W-3} は $(N_W-3)\times(N_W-3)$ 単位行列である.

$A^\dagger = Q^T\begin{pmatrix}\bar{A}^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}Q$, $\hat{A} = Q^T\begin{pmatrix}\bar{A} & 0\\ 0 & I_3\end{pmatrix}Q$ とするとき, $A^\dagger A = A^\dagger\hat{A} = P_V$ である.

補題 5. $B\,P_V = B$ が成り立つ.

これは $BV^{(k)} = 0,\ (k=1,2,3)$ より $\mathrm{Ker}P_V \subset \mathrm{Ker}B$ であることからわかる.

補題 6. $\mathcal{A}_1$ は $N^\perp$ で正則であるが, 正負固有値が混在するため不定値である.

$$\begin{pmatrix}\hat{A} & 0\\ B & I_{N_M}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A^\dagger & 0\\ 0 & -BA^\dagger B^T - \delta D\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{A} & B^T\\ 0 & I_{N_M}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\hat{A}A^\dagger\hat{A} & \hat{A}A^\dagger B^T\\ BA^\dagger\hat{A} & BA^\dagger B^T - BA^\dagger B^T - \delta D\end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix}\hat{A}P_V & P_V^T B^T\\ BP_V & -\delta D\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}A & B^T\\ B & -\delta D\end{pmatrix}$$

したがって, Sylvester の慣性則より, $\mathcal{A}_1$ は N_W-3 個の正の固有値と, 4 個の 0 固有値, N_M-1 個の負の固有値を持つ [6].

CG 法は破綻する可能性があるが, 反復解法として用いる.

(M_1) の符号を変えることで別の連立一次方程式が得られる.

$$(M_2)\quad \mathcal{A}_2\begin{pmatrix}U\\ P\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}A & B^T\\ -B & \delta D\end{pmatrix}\begin{pmatrix}U\\ P\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}P_V F\\ \delta G\end{pmatrix}.$$

補題 7. $\mathcal{A}_2$, $\mathcal{A}_2^T$ の核は N である. また $\mathcal{A}_2$ は $N^\perp$ で強圧的である. すなわち,

$$\exists\alpha > 0, \qquad (\mathcal{A}_2(V,Q),(V,Q))_{\mathbb{R}^{N_W+N_M}} \geq \alpha||(V,Q)||^2_{\mathbb{R}^{N_W+N_M}}, \qquad \forall(V,Q)\in N^\perp.$$

したがって反復解法に GCR(k) 法を用いることができる.

正射影 $P_{N^\perp}$ を次のように定義する:

$$P_{N^\perp} := \begin{pmatrix}P_V & 0\\ 0 & P_Q\end{pmatrix}.$$

以下では $\tilde{A}^{-1}$, $\tilde{D}^{-1}$ をそれぞれ A, D の不完全 Cholesky 分解による逆行列とする.

(M_1) に対する 正射影付の CG 法と, (M_2) に対する 正射影付の GCR(k) 法を示す. アルゴリズムの中で, 右辺ベクトルは b, 解の近似ベクトルは x_n と記述した. $\mathcal{C}$ を前処理行列とする.

アルゴリズム 1-a. (M_1) を CG 法で解く.

CG 法の反復の各ステップにおいて, 行列とベクトルの乗算, ベクトルの加減算を行う際, 数値誤差の混入により, N の成分が現れることを防ぐため正射影 $P_{N^\perp}$ を用いる. 前処理は行わない.

$$\mathcal{C} = I_{N_W+N_M}.$$

アルゴリズム 1-b. (M_1) を SCG 法で解く.
正射影付きの CG 法の前処理行列に, 対角項の逆数からなるスケーリングを採用する.

$$\mathcal{C} = P_{N^\perp} \begin{pmatrix} ((A)_{ii}^{-1}) & 0 \\ 0 & -\delta^{-1}((D)_{ii}^{-1}) \end{pmatrix}.$$

アルゴリズム 1-c. (M_1) を PCG 法で解く.
正射影付きの CG 法の前処理行列に不完全 Cholesky 分解による行列を採用する.

$$\mathcal{C} = P_{N^\perp} \begin{pmatrix} \tilde{A}^{-1} & 0 \\ 0 & -\delta^{-1}\tilde{D}^{-1} \end{pmatrix}.$$

アルゴリズム 2-a. (M_2) を GCR(k) 法 [2] で解く.
GCR(k) 法の反復の各ステップにおいて, 行列とベクトルの乗算, ベクトルの加減算を行う際, 数値誤差の混入により, N の成分が現れることを防ぐため正射影 $P_{N^\perp}$ を用いる. 前処理は行わない.

$$\mathcal{C} = I_{N_W+N_M}.$$

アルゴリズム 2-b. (M_2) を SGCR(k) 法で解く.
正射影付きの GCR(k) 法の前処理行列に, 対角項の逆数からなるスケーリングを採用する.

$$\mathcal{C} = P_{N^\perp} \begin{pmatrix} ((A)_{ii}^{-1}) & 0 \\ 0 & \delta^{-1}((D)_{ii}^{-1}) \end{pmatrix}.$$

アルゴリズム 2-c. (M_2) を PGCR(k) 法で解く.
正射影付きの GGR(k) 法の前処理行列に不完全 Cholesky 分解による行列を採用する.

$$\mathcal{C} = P_{N^\perp} \begin{pmatrix} \tilde{A}^{-1} & 0 \\ 0 & \delta^{-1}\tilde{D}^{-1} \end{pmatrix}.$$

5. 数値実験

2 種のアルゴリズムについて, $R_1 = 0.55$, $R_2 = 1$ の球殻領域において, f を次のように与えた. (r, θ, φ), $(R_1 \le r \le R_2, \quad 0 \le \theta \le \pi, \quad 0 \le \varphi < 2\pi)$ を極座標とするとき

$$f(r,\theta,\varphi) = e^{(r)} \left(\frac{1}{r}\frac{R_2 R_1}{R_2 - R_1} - \frac{R_1}{R_2 - R_1} + \epsilon \sin\pi\left(\frac{R_2 - r}{R_2 - R_1}\right) Y_3^2(\theta,\varphi) \right), \quad \epsilon = 0.1.$$

ここで, $e^{(r)}$ は半径方向の単位ベクトル $e^{(r)}(x) = \dfrac{x}{|x|}$, Y_3^2 は正規化された 3 次 2 階球面調和関数である. 図 1. に球殻領域の四面体による要素分割を示す.
表 1. の離散化条件のもとでの計算コストを表 2., 残差収束状況を図 1., 図 2. に示す. 残差収束判定は $\varepsilon = 10^{-11}$, 反復回数の上限は $5,000$ に設定した. GCR(k) 法のリスタートは $k = 20$ とした. 2-b は残差減少が停滞し, 収束判定残差に到達しなかった.

CG 法によるアルゴリズム 1-c は振動しながら収束するが, 6 種の中でもっとも高速であることがわかる.

参考文献

[1] J. Cahouet and J. -P. Chabard, Some Fast 3D Finite Element Solvers for the Generalized Stokes Problem, *Int. J. Numer. Methods in Fluids*, 8:869–895, 1988.

[2] S. C. Eisenstat, H. C. Elman, M. H. Schultz. Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 2-20:345–357, 1983.

[3] L. P. Franca, S. L. Frey, and T. J. R. Hughes. Stabilized finite element methods: I. Application to the advective-diffusive model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 95:253–276, 1992.

[4] 藤野 清次, 張 紹良. 反復法の数理, 朝倉書店, 1996

[5] E. F. Kassechieter. Preconditioned conjugate gradients for solving singular systems. *J. Comput. Appl. Math.*, 24:265–275, 1988

[6] A. Quarteroni and A.Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations* Springer, Berlin, 1997, SCM vol. 23.

[7] M. Tabata. Finite element approximation to infinite Prandtl number Boussinesq equations with slip boundary condition. *Computational Fluid Dynamics '98*, 2:22–27, John Wiley & Sons, Chichester, 1998.

表 1. 離散化パラメータ

節点数	要素数	h	δ	N_W	N_M
25,538	141,168	0.1384	0.1	72,842	25,538

表 2. 計算コスト

アルゴリズム	反復回数	残差 ($\log_{10}$)	計算時間 (秒)	使用メモリ
1-a. CG	(5000)	−7.861	2641.15	121,368K
1-b. SCG	799	−11.015	449.15	121,368K
1-c. PCG	319	−11.088	332.44	171,112K
2-a. GCR(20)	(5000)	−5.085	4194.29	136,744 K
2-b. SGCR(20)	(1500)	−6.757	1265.20	136,744 K
	(5000)	−6.758	4218.06	136,744 K
2-c. PGCR(20)	1100	−11.004	1423.57	200,776 K

SUN UltraSPARC II@300MHz, 2 M バイトキャシュ付,
SUN WorkShop C Compiler 4.2

アルゴリズム 1. 正射影付き CG 法

$$
\begin{aligned}
&x_0 : \text{ initial data}\\
&r_0 = P_{N^\perp}(b - \mathcal{A}_1 x_0)\\
&q_0 = p_0 = \mathcal{C} r_0\\
&\text{for } n = 0, 1, \cdots\\
&\quad \tilde{p}_n = P_{N^\perp}\mathcal{A}_1 p_n\\
&\quad \alpha_n = \frac{(q_n, r_n)}{(p_n, \tilde{p}_n)}\\
&\quad x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n\\
&\quad r_{n+1} = P_{N^\perp}(r_n - \alpha_n \tilde{p}_n)\\
&\quad \text{if } ||r_{n+1}|| < \varepsilon ||b|| \text{ stop.}\\
&\quad q_{n+1} = \mathcal{C} r_{n+1}\\
&\quad \beta_n = \frac{(q_{n+1}, r_{n+1})}{(q_n, r_n)}\\
&\quad p_{n+1} = P_{N^\perp}(q_{n+1} + \beta_n p_n)\\
&\text{end.}
\end{aligned}
$$

アルゴリズム 2. 正射影付き GCR(k) 法

$$
\begin{aligned}
&x_0 : \text{ initial data}\\
&r_0 = P_{N^\perp}(b - \mathcal{A}_2 x_0)\\
&p_0 = \mathcal{C} r_0\\
&q_0 = P_{N^\perp}\mathcal{A}_2 p_0\\
&\text{for } n = 0, 1, \cdots k-1\\
&\quad \alpha_n = \frac{(q_n, r_n)}{(q_n, q_n)}\\
&\quad x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n\\
&\quad r_{n+1} = P_{N^\perp}(r_n - \alpha_n q_n)\\
&\quad \text{if } ||r_{n+1}|| < \varepsilon ||b|| \text{ stop.}\\
&\quad \tilde{r}_{n+1} = \mathcal{C} r_{n+1}\\
&\quad \bar{r}_{n+1} = P_{N^\perp}\mathcal{A}_2 \tilde{r}_{n+1}\\
&\quad \beta_{n,i} = -\frac{(q_i, \bar{r}_{n+1})}{(q_i, q_i)}, \ (0 \le i \le n)\\
&\quad p_{n+1} = P_{N^\perp}(\tilde{r}_n + \textstyle\sum_{i=0}^{n} \beta_{n,i} p_i)\\
&\quad q_{n+1} = P_{N^\perp}(\bar{r}_n + \textstyle\sum_{i=0}^{n} \beta_{n,i} q_i)\\
&\text{end}\\
&x_0 = x_k, \text{ repeat.}
\end{aligned}
$$

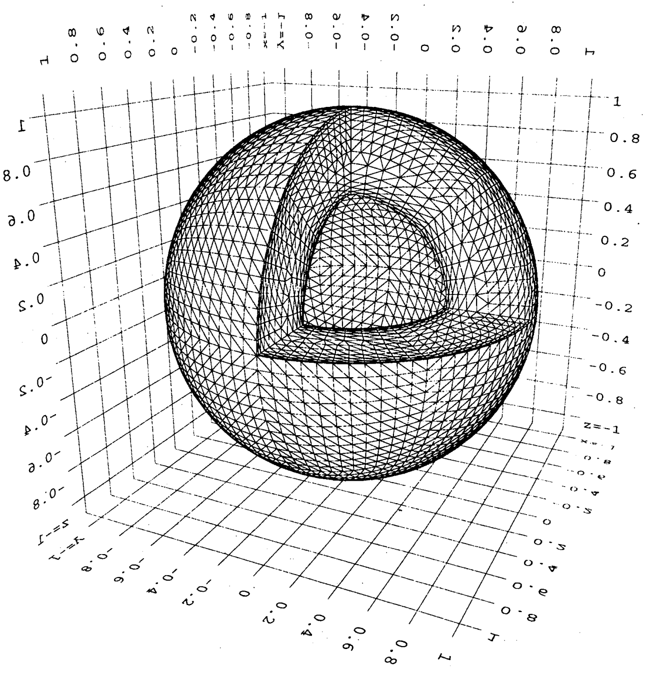

図 1. 球殻領域の四面体要素分割

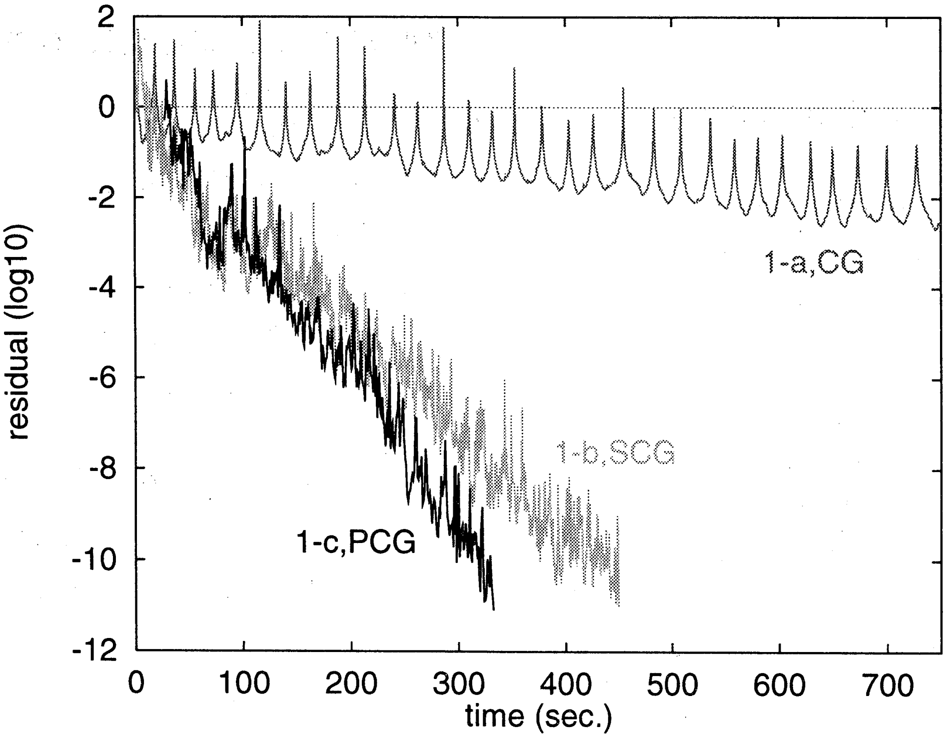

図 2. CG 法残差収束履歴

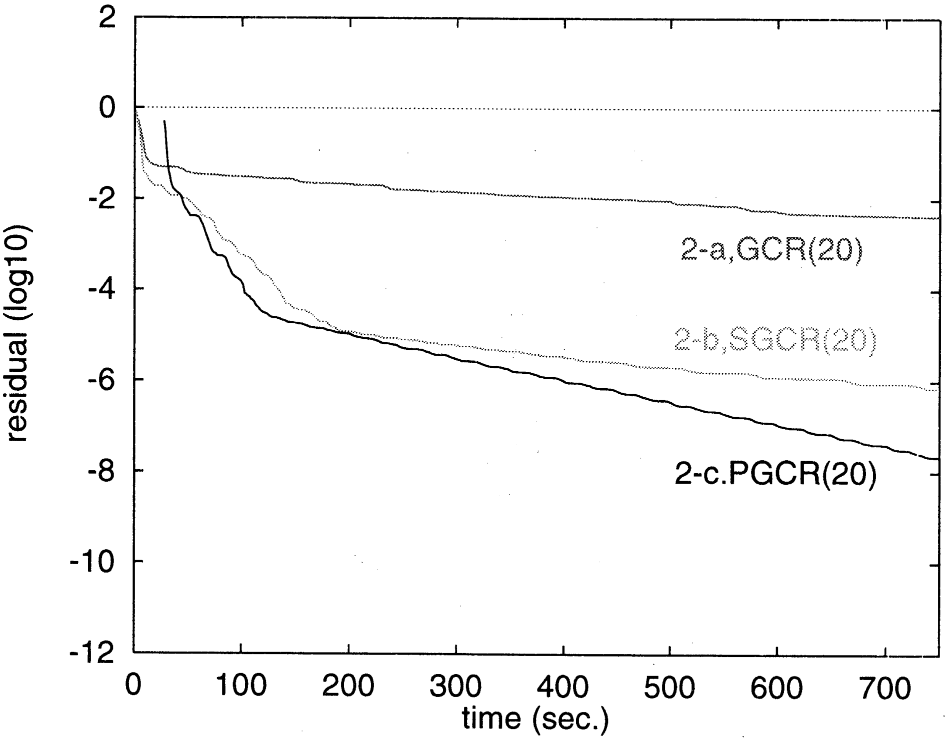

図 3. GCR(k) 法残差収束履歴