

大形科学計算技法と仮想メモリ方式*

村田 健 郎**

1. はじめに

熱と流れのカップルした偏微分方程式系とか、荷電粒子の拡散、およびドリフトを扱う偏微分方程式系などの数値的シミュレーションが、研究レベルでは既に成果を挙げてきたが、最近設計レベルにおいても、経済的に引合う程度の現実性を帯びてきた。

これらの系は、差分法によって問題を離散化し、大次元行列問題に帰着させることができる。そのあと、主メモリ容量の制限から、いわゆる“陽的 (explicit)”な解法が好んで用いられてきた。ところが、これら非線形の、しかも移流項カップルのある問題を陽的反復法でやるのは無理を伴い易い。また、離散化を簡単にするために、離散化する以前の方程式の段階で、スケール・アナリシス等によって方程式そのものを簡単化することが行われるが、方程式の簡単化は、実は細心の注意を要するものであって、小さなオーダーの項を落すことが、時には重大な結果をひきおこすこともしばしばであった。

主メモリ容量の増加と、さらには仮想メモリ方式の導入によって、比較的安心して計算の可能な“陰的 (implicit)”な解法が現実味を帯びてきた。また、境界形状の扱いなどにおいても差分法よりも柔軟性のある有限要素法が、この分野にも採用された。このようにして、“大型科学計算の大衆化”が始まった。

ところが、大衆化を支援するもののひとつとなっている仮想メモリ方式ではあるけれども、そのカラクリを何も知らないで使ってもうまく行く、というほどには全能でない。今日は、“偏微分方程式系の有限要素解析”に登場する主要計算技法が、仮想メモリ方式の計算機にどのような負荷を与えるかについてお話ししたい。それは聞いてみれば比較的単純なことだから、その大筋さえ心得てしまえば、主たる知的エネルギーは、「場の物理特性をうまく捉えて、それをオーソド

ックスな数値計算技法の中にとりこむ」ことに集中することができる。

2. 念頭に置く具体例——自然対流問題——

話にいくらかでも具体性を持たせ、申し上げたいことを鮮明にするために、今日は比較的身近かでもありまた産業界に応用の機会の多い表記の問題を念頭に置こう。この種の問題の例としては、たとえば、

1. 浴槽の湯
2. 暖房器のある室内気流
3. 盆地に発生する局地気流
4. 油漬トランスの熱拡散

これらの問題は、身近かであるにもかかわらず、シミュレーションは必ずしも容易とは言えない。相手か気体の場合特にめんどうで、すくなくとも原理的には下記の程度の偏微分方程式系を出発点とせねばならない：気体は、理想気体の状態方程式に従い、定圧比熱 c_p は定数、粘性係数 μ は温度の関数、熱拡散係数 k は温度の関数であるとして、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho = -\rho \operatorname{div} v \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + v \cdot \nabla v_i \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ik} \operatorname{div} v \right] + \rho K_i \quad (2)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \Phi + \left(\frac{\partial p}{\partial t} + v \cdot \nabla p \right) \\ \Phi = 2 \sum_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right)^2 + \sum_{l \neq m} \left(\frac{\partial v_l}{\partial x_m} + \frac{\partial v_m}{\partial x_l} \right)^2 - \frac{2}{3} (\operatorname{div} v)^2 \quad (3)$$

(1)式は質量輸送の式、(2)式は運動量輸送の式で、 $\operatorname{div} v = 0$ すなわちじまぬ流体のときには、周知のナビア・ストークス方程式と呼ばれるもの、(3)式はエネルギー輸送の式である。

実際には、この方程式系をまともに解くのでは辛過

* 情報処理学会第17回全国大会招待講演 (昭和51年11月20日)

** (株)日立製作所神奈川工場

ぎるので、スケール・アナリシスその他の手法を用いて、方程式の簡単化が更に行われる。その際、コンピュータの主メモリ容量（と速度の）制限のために、従来は物理的にも数学的にも問題のある簡単化を強いられることがしばしばであった。仮想メモリ方式は、その不都合を本当にやわらげるものでなければならない。

これから先の話においては、話を簡単にするために、空間二次元の自然対流場を問題にしよう。また、いわゆる Boussinesq 近似が成り立つとして、次の方程式系を考えることにする。

$$T = T_0 + \theta, \quad p = -\rho_0 g z + p_1(x, z) + \text{const}$$

と書くとき、 $\nabla \rho = -\rho_0 \beta \nabla \theta$, $\partial p / \partial x = -\rho_0 g + \partial p_1 / \partial x$, $\partial p / \partial z = \partial p_1 / \partial z$ などを得て、 $v = (u, w)^T$ とするとき、

$$\text{div } v = -\beta v \cdot \nabla \theta \quad (4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \cdot \nabla u = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_1}{\partial x} + \nabla \cdot (\nu(\theta) \nabla u) \quad (5)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + v \cdot \nabla w = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_1}{\partial z} + \nabla \cdot (\nu(\theta) \nabla w) + \beta g \theta \quad (6)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + v \cdot \nabla \theta = \nabla \cdot (x \nabla \theta) + \eta (\nabla u \cdot \nabla u + \nabla w \cdot \nabla w) - \rho_0 g \quad (7)$$

(注) この方程式系では、スケール・アナリシスの結果、(4)式を $\text{div } v = 0$ としてない。これは、強い上昇気流に伴う密度の変化を記述するためである。一方、(5)、(6)、(7)では、 $\text{div } v$ の項はすべて落ちてある。

もし、流体を全面的にちぢまぬ: $\text{div } v = 0$ としてよく、かつ、動粘性係数 $\nu = \mu / \rho$ の温度依存性が無視できると仮定することが、物理的に妥当であるならば、この問題は、うず度 ζ と流れ関数 ϕ に関する非常に扱い易い系に直すことができる。すなわち、

$$\zeta = \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial z}, \quad u = \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad w = -\frac{\partial \phi}{\partial x}$$

とするとき、

$$\nabla^2 \phi = -\zeta \quad (8)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial \zeta}{\partial z} = \nu \nabla^2 \zeta + \beta g \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (9)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial \theta}{\partial z} = x \Delta^2 \theta + \eta (\nabla u \cdot \nabla u + \nabla w \cdot \nabla w) - \rho_0 g \quad (10)$$

先程、物理的に問題のある簡単化と言ったのは、たとえばこのようなときに起り勝ちである。また仮に、スケール・アナリシスの結果この簡単化が物理的には正当に見える場合においても、数学的に正当であるとは必ずしも言えない。方程式のレベルにおける近さが解の近さの保証にはならないからである。特にある項

を落したとき、解の安定性をこわすとき問題が大きい。たとえば粘性項。上の文中にその例を求めよう。

(2)式の粘性項は、

$$= \nabla \cdot (\mu \nabla v_i) + \mu \frac{\partial}{\partial x_i} (\text{div } v) + \sum_k \frac{\partial \mu}{\partial x_k} \frac{\partial u_k}{\partial x_i}$$

である。従ってちぢまぬ: $\text{div } v = 0$ としたとき、最後の項はまだ残っている。強い温度変化のある場において、この項を落してよいかどうか？

さて、(8)、(9)、(10)を数値的に解くことを考える。大分易しそうになったがまだまだ問題がある。それは、移流項が、未知関数 ϕ によって表現されていることと関係がある。移流項の差分に関する有名な“荒川スキーム”，あるいは時間差分に関する“松野スキーム”など、先人の苦心がそこにある。

以下、実践の詳細は省略して、今日の話に筋を与えるために、次の順序で問題を解くことができるとしよう。時刻 t_n の θ を $\theta^{(n)}$, ζ を $\zeta^{(n)}$ などと書いて；

1) $-\nabla^2 \phi^* = \frac{3}{2} \zeta^{(n)} - \frac{1}{2} \zeta^{(n-1)}$ を満す ϕ^* を求める。

2) $u^* = \frac{\partial \phi^*}{\partial z}$, $w^* = -\frac{\partial \phi^*}{\partial x}$, ∇u^* , ∇w^* を求める。

3) $\frac{\partial \theta}{\partial t} + u^* \frac{\partial \theta}{\partial x} + w^* \frac{\partial \theta}{\partial z} = x \nabla^2 \theta + \eta (\nabla u^* \cdot \nabla u^* + \nabla w^* \cdot \nabla w^*) - \rho_0 g$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + u^* \frac{\partial \zeta}{\partial x} + w^* \frac{\partial \zeta}{\partial z} = \nu \nabla^2 \zeta + \beta g \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

を空間がレルキン式 F. E. M*, 時間クランク・ニコルソン式 F. D. M** によって離散化したものによって $\theta^{(n)}$, $\zeta^{(n)}$ から $\theta^{(n+1)}$, $\zeta^{(n+1)}$ を求め、 $\nu = \nu + 1$ として 1) に戻る。

加熱壁からの熱伝達が自然対流の原動力となっているわけであるが、それは、第三種境界条件という形で数値計算に参加する。

さて、移流項のある方程式 3) を解くところが主要部である。数値解法上は、 θ についても ζ についても同じであるから、うず度 ζ についてだけ示そう (このとき、 $\theta^{(n+1)}$ はすでに求まっているから、 $\beta g (\partial \theta / \partial x)$ は既知項として扱える)。

$\zeta = \sum_{i=1}^N \zeta_i(t) \varphi_i(x, z)$, $\varphi_i(x, z)$ は“基底角錐関数”とおいて、これを 3) の ζ に入れた式の両辺に、 $\varphi_i(x, z)$ を掛けて領域で積分する (このとき、ガウスの発散定理を使う)。結果として、 $\zeta_i(t) = (\zeta_1(t), \dots, \zeta_N(t))^T$

* 有限要素法 (Finite Element Method)
** 差分法 (Finite Difference Method)

というベクトル値関数に関する一階の常微分方程式:

$$M\dot{\xi}(t) + C\xi(t) = -A\xi(t) + f$$

を得る。ここに、 M, A は対称正定値、 C は移流項から生じた非対称の、帯行列である。次いでこれを時間差分式:

$$M\left(\frac{\xi^{(v+1)} - \xi^{(v)}}{\tau}\right) + C\left(\frac{\xi^{(v+1)} + \xi^{(v)}}{2}\right) = -A\left(\frac{\xi^{(v+1)} + \xi^{(v)}}{2}\right) + f$$

に直して、 $\xi^{(v+1)}$ について解く。 $\xi^{(v+1)}$ についての式は $(2M + \tau A + \tau C)\xi^{(v+1)} = (2M - \tau A - \tau C)\xi^{(v)} + 2\tau f$ (11)

これを解くのにいくつかの方法がある。たとえば、
i) ガウス、あるいはハウスホルダ三角化法によって直接解く。

ii) 反復スキーム:

(ただし、 $\bar{g}^{(v)} = (2M - \tau A - \tau C)\xi^{(v)} + 2\tau f$ と略し、)
 $(2M + \tau A)\xi^{(v+\mu/m)} = -\tau C\xi^{(v+\mu-1/m)} + \bar{g}^{(v)}$ (12)

が収束するに十分なだけ、すなわち、

$$\rho((2M + \tau A)^{-1}(\tau C)) \leq r < 1 \quad (12)$$

が成り立つよう τ を小さくとして、対称正定値行列のコレスキー分解と、前進・後退代入のくりかえしによって $\xi^{(v+1)}$ に到達する。

以上の考察によって、帯行列に関するガウス、あるいはハウスホルダ三角分解、あるいはコレスキー分解の計算の手間と、仮想メモリー方式に与える負荷如何が主要な話題となることが判った。

3. 帯行列の三角分解 (コレスキー、ガウス、ハウスホルダ) の主要ループとその "Working Set"

今日は、FORTRAN にとって "局所性の良い" すなわち、DO 文の最内側ループ; 例えば、

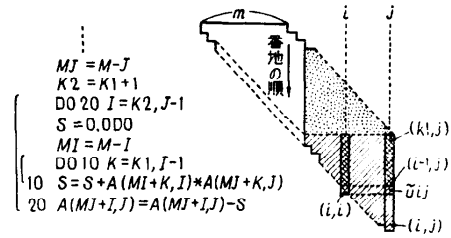
$$SUM = SUM + A(I, J) * B(I, K)$$

において、左側の添字 (今の例では I) だけが動くプログラムについてだけ考える。局所性の悪いプログラムは論外とするのである。

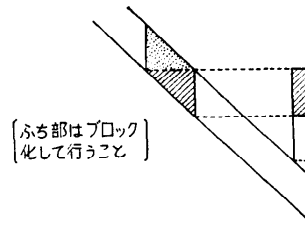
3.1 LDL^T コレスキー

DO 20 のループ (図-1(a) 参照) が、LDL^T 分解の主要部となる。これを実行するとき、真に参照するのは斜格子線部の約 $m^2/2$ 語であるが、仮想メモリー方式のコンピュータの場合、4kB 程度のページ単位にブロック転送を行う関係上、実質的には、 m^2 語が主メモリーに入り得るかどうか問題になる。この m^2 語のこ

$$A = L\tilde{U} : a_{ij} = \sum_{k=ki}^{j-1} l_{ik} \tilde{u}_{kj} + l_{ii} \tilde{u}_{ij}$$



(a) LDL^T 分解の主要部



(b) ふちつき帯 LDL^T 分解

図-1

とを、DO 20 のループの Working Set と呼ぶ。Working Set さえ主メモリーに入り切らなければ、帯行列のアレイ全体が主メモリー容量を大巾に超えていても、差し支えない (図-2 参照)。図-2 は、DO 10 のループを 1.2 μ s で行う計算機に主メモリー 640kB を

(横軸、元数 n , パラメータ m : 帯半幅)

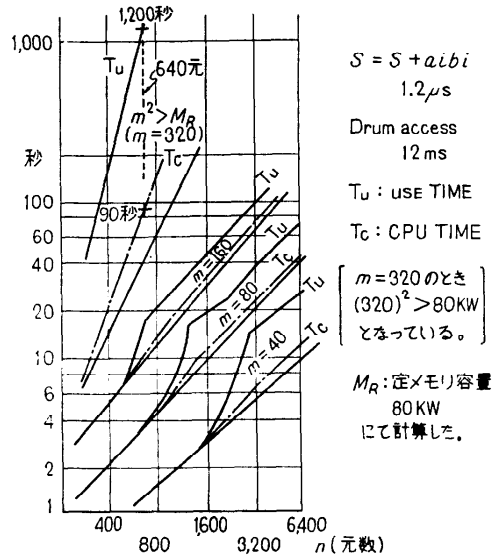


図-2 帯 LDL^T 所要時間の一例

与え、ドラムアクセスタイム実質 12 ms の場合の実測データである。帯半巾 $m=160$ の場合、元数 3,200 において、内部演算時間約 75 秒に対し、ドラム待ち時間は約 25 秒に過ぎない。 $m=320$ のときは、 m^2 語が 640 kB を超えるため、許すべからざるドラム待ち時間を発生している。Working Set が主メモリに入っている場合の内部演算時間対ドラムの回転待ち時間の概算法は容易である。

ふちつき帯のふち部については注意が要る (図-1 (b)).

3.2 非対称帯行列の三角分解

結論を先に言うと、帯行列の三角分解においては、比較的条件的の良い行列に関しては、部分軸選択のガウスが良く、条件の悪い行列を何とか解こうという場合には、ハウスホルダーの三角分解が良い。ガウスの変形で、すべてを内積形の計算で行うクラウト法は、密行列のときに推奨されたような著しいメリットは無い。理由は、Working Set がガウス、ハウスホルダーの $3m^2$ に対し、 $10m^2$ と不当に大きく、また、内部演算回数が、ハウスホルダーの $4m^2n$ 回積和に比べそれに近い $3.5m^2n$ 積和になるからである。それならいっそのこと、より高安定、高精度のハウスホルダーでということになるわけである。各種の三角分解の内部演算の手間と、主要ループの Working Set の比較を表-1 に示す。帯半巾を m 、行列の元数を n とし、ガウスにおける基本演算 Add+Multi+Store は、他のものの基本演算 Add+Multi の 1.25 倍と仮定したものを、() の中に示して置いた。

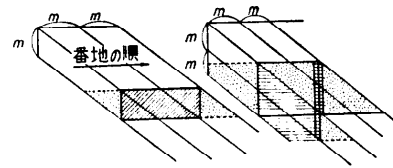
表-1 各種三角分解の比較表 (帯半巾 m)

プログラム名	コレスキー	ガウス	ハウスホルダー	クラウト
主要ループの Working Set	m^2	$3m^2$	$3m^2$	$10m^2$
同上演算の手間 (積・和換算)	$1/2m^2$	$2m^2$ ($2.5m^2$)	$4m^2$ ($4.5m^2$)	$3.5m^2$
全演算の手間 (積・和換算)	$1/2m^2n$	$2uw^2n$ ($2.5m^2n$)	$4uw^2n$ ($4.5m^2n$)	$3.5m^2n$

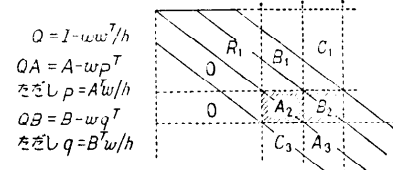
アルゴリズムを手で覚えていれば、上表を検算することや、ドラムの待ち時間の概算は容易であろう (図-3)。

4. 種々の応用動作

前章までで、偏微分方程式系の有限要素解析に登場する主要アルゴリズムと、それが仮想メモリ方式計算機に与える負荷のポイントについての粗描を行った。この章では、若干の応用動作について述べる。主たる



(a) 帯ガウスと帯クラウト



$$\begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & Q & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 & B_1 & C_1 \\ 0 & A_2 & B_2 \\ 0 & C_3 & A_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1 & B_1 & C_1 \\ 0 & QA_2 & QB_2 \\ 0 & C_3 & A_3 \end{pmatrix}$$

変るのはここだけ。

(b) ハウスホルダー

図-3

関心事は、

- 1) 主要ループの Working Set が、空間の要素分割と、節点番号のつけ方とどのように関係しているか?
- 2) Working Set の大きさを主メモリ容量の大きさの中に収めるための処方如何? その処方が、安定な、かつ効率的な計算を遂行するうえでの他の要請と、本質的に矛盾しないか。

などである。何れにせよ“移流項”から発生する非対称帯行列が、Working Set も大きく、また数値計算実行上の問題も多いから、注目を要するわけである。また、連立の方程式系のカップルを切ってそれぞれを解くという通常の操作が許されないような問題は、どうということになるかが、折角仮想メモリ方式を導入したわけであるから、当然関心が高いであろう。

4.1 定常問題

$$-\nabla^2 \phi^* = \zeta, \quad v^* = \left(\frac{\partial \phi^*}{\partial x}, -\frac{\partial \phi^*}{\partial y} \right) \quad (0)$$

$$v^* \cdot \nabla \theta = x \nabla^2 \theta + \eta \phi^* - \beta \theta \quad (1)$$

$$v^* \cdot \nabla \zeta = \nu \nabla^2 \zeta + \beta \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2)$$

を考える。これは 2. で扱った、自然対流の定常問題である。グラスコフ数 $Gr = g\beta l^3 \theta / \nu^2$ が十分小さいとき、反復法:

$$-\nabla^2 \phi^* = \zeta^{(i)}, \quad v^* = \left(\frac{\partial \phi^*}{\partial x}, -\frac{\partial \phi^*}{\partial y} \right) \quad (0')$$

$$v^* \cdot \nabla \theta^{(\nu+1)} = \chi \nabla^2 \theta^{(\nu+1)} + \eta \Phi^* - \beta g \quad (1')$$

$$v^* \cdot \nabla \zeta^{(\nu+1)} = \nu \nabla^2 \zeta^{(\nu+1)} + \beta g \frac{\partial \theta^{(\nu+1)}}{\partial x} \quad (2')$$

$$\nu = \nu + 1 \text{ として } (0') \text{ へ戻る.} \quad (3')$$

によって収束解を得ることができるであろう。今はそのような場合を問題にする。

ポアソン方程式 (0') を離散化したとき生ずる左辺の行列は、対称正定値の帯だから問題としては易しい。(1'), (2') は同形の方程式:

$$(A_1 + C_1) \theta = f_1 \quad (4)$$

$$(A_2 + C_2) \zeta = f_2 \quad (5)$$

を解くことになる。ここに、 A_i は、それぞれの拡散項から得られた対称正定値の帯、 C_i は、それぞれの移流項から得られた非対称の帯行列である。 ζ の式について考える*。主メモリの容量を M 語とすると、

$$M < m^2, m^2 \leq M < 3m^2, 3m^2 < M$$

の三つの場合に分けて考えねばならない。このうち、 $3m^2 < M$ の場合は、 $A+C$ を直接ガウスなり、ハウスホルダーなりによって三角分解できるから問題ない。 $m^2 \leq M < 3m^2$ の場合には、反復法:

$$A \zeta^{(\mu+1)} = -C \zeta^{(\mu)} + f$$

が収束する場合、すなわち、 $A^{-1}C$ のノルムが1より小さい場合には、 A をコレスキー分解してこの反復を実行できる。この反復法が収束しない(あるいは極度に遅い)場合には、部分構造法による離散化手順をふんで方程式を、

$$\begin{bmatrix} A_i + C_i & A_{ib} + C_{ib} \\ A_{ib} + C_{ib} & A_b + C_b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \zeta_i \\ \zeta_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_i \\ f_b \end{bmatrix}$$

の形にしたのち、上のアンダーラインの部分だけを右に移して反復式を組み立てる。 $A_{ib} = A_{bi}^T$ だから、

$$\begin{bmatrix} A_i + C_i & A_{bi} \\ A_{ib} & A_b + C_b \end{bmatrix}$$

は、ブロック対称となっている。ここに、 ζ_i は、部分構造内部節点に関するベクトルであり、 ζ_b は、部分構造間境界上節点に関するベクトルである。この方法は $M < m^2$ の場合にも適用できる。

さて、この方法の反復式をきちんと書いて見る。

$$\begin{bmatrix} A_i + C_i & A_{bi} \\ A_{ib} & A_b + C_b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \zeta_i^{(\mu+1)} \\ \zeta_b^{(\mu+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -C_{bi} \\ -C_{ib} & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \zeta_i^{(\mu)} \\ \zeta_b^{(\mu)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_i \\ f_b \end{bmatrix}$$

この反復式は、行列:

* 以下、行列 A_i, C_i の添字 i を省略する。そして、行列 $C_i = C_{i0} + C_{i1}$ と書くべきところを、 $C = C_0 + C_1$ などで済ます。

$$\begin{bmatrix} A_i + C_i & A_{bi} \\ A_{ib} & A_b + C_b \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 & C_{bi} \\ -C_{ib} & 0 \end{bmatrix}$$

のハルムが < 1 なら収束する。右辺に移した行列は、内部境界上の節点と、内部節点のカップルに関する移流項分だけだから、もとの方程式が解を持ち、それが、安定に解ける(条件指数がひどく大きくない)なら、この反復式も大抵の場合収束するであろうことは定性的には理解できる。これで収束しないようなものは、定常解を求めるために次にのべる非定常解の極限を求めるという手法によるべきである。

4.2 非定常問題

$$\nabla^2 \phi = -\zeta, v = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, -\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (0)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + v \cdot \nabla \theta = \chi \nabla^2 \theta + \eta \Phi - \beta g \quad (1)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + v \cdot \nabla \zeta = \nu \nabla^2 \zeta + \beta g \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (2)$$

を、2. で述べた方法で解くときのことを考える。

2. の (11) 式:

$$(2M + \tau A + \tau C) \zeta^{(\mu+1)} = (2M - \tau A - \tau C) \zeta^{(\mu)} + 2\tau f$$

の左辺の帯行列の帯半巾 m に注目する。主メモリ容量を M とするとき、三つの場合:

$$M < m^2, m^2 < M < 3m^2, 3m^2 < M$$

に場合を分けて考える。 $3m^2 < M$ の場合は、2. で示した i) の方法 ii) の方法何れも採用できる。 $m^2 < M < 3m^2$ の場合には、ii) の方法が採用できる。 $M < m^2$ の場合が問題である。まず部分構造法による離散化手順によって、各部分構造ごとの帯半巾 m' を $(m')^2 < M$ 、あるいは思い切って $3(m')^2 < M$ にして置く必要がある。以下 $3(m')^2 < M$ にした場合について述べる。簡単のために領域を二つの部分に分けた場合について解説する(図-4)。

ζ を、部分構造内節点に関する ζ_1, ζ_2 と、部分構造

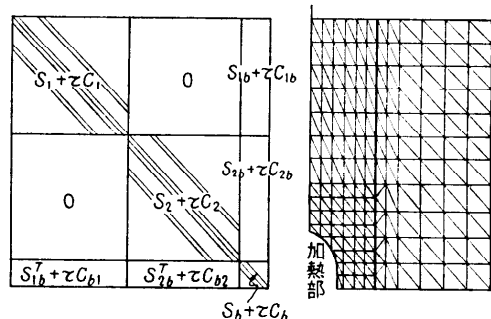


図-4 部分構造法

内境界上節点に関する ζ_s とに分けて記述する。いま、(11)式の $\zeta^{(r+1)}$ を ζ と書き、右辺は既知ベクトル \tilde{h} であらわし、また左辺の行列を対称正定値部 $S=2M+\tau A$ とそうでない部分にわけて書き直すと、

$$(S+\tau C)\zeta = \tilde{h} \quad (11')$$

これを、上述の部分構造による離散化式の形に書くと、

$$\begin{pmatrix} S_1+\tau C_1 & 0 & S_{1b}+\tau C_{1b} \\ 0 & S_2+\tau C_2 & S_{2b}+\tau C_{2b} \\ S_{1b}^T+\tau C_{b1} & S_{2b}^T+\tau C_{b2} & S_b+\tau C_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{h}_1 \\ \tilde{h}_2 \\ \tilde{h}_3 \end{pmatrix}$$

この式で、 τC の表式の項を全部右辺に移して、反復式 $S\zeta^{(r)} = -\tau C\zeta^{(r-1)} + \tilde{h}$ によるというのが ii) の方法であった。このとき、行列 $S^{-1}(\tau C)$ のノルムを1よりも十分小さくせねばならなかった。それに対して、上の式で、アンダーラインをほどこしたものを右辺に移して反復式を作れば、より大きな τ によって収束を保証できる。しかもそのとき左辺に残された行列は、ブロックの意味で対称であり、またブロック間のカップルはふち部をのぞいては切れているから、その三角化は τC 形の項をすべて右に移したのとくらべて極度に手間がかかるというわけではない。実は、対角上に残された τC_i のうち、特に強いものだけを左辺に残して、他の τC_i は右辺に移すという方法が、実用上最有力となる。強い τC_i はレイノルズ数 R_i の高い部分構造において起こるから、それを見越して部分構造化を行う。また、その R_i が大きくなった時刻においてだけ τC_i を左辺に残せばよい。

4.3 τ と ϕ による定式化ができない場合

この方が現実にははるかに多いはずである。そのような場合の一例として、自然対流系(4)、(5)、(6)、(7)をとりあげる。これを完全に連立させて t_n から t_{n+1} へ進めるというのではあまりにも負担が大きい。そこで、境界からの加熱が現象を引き起こす原動力になっているという点に注目して、まず(7)式によって新しい $\theta^{(r+1)}$ を決めたのち、(4)、(5)、(6)を連立させて新しい $\tilde{u}^{(r+1)}$ 、 $\tilde{w}^{(r+1)}$ 、 $\tilde{p}^{(r+1)}$ を決めるという方法をとる。

(4)式は、元来は $\rho_i + \rho \operatorname{div} v = -v \cdot \nabla \rho$ であったものであることを考慮して、(5)、(6)式と同列に扱う。

さて、 $\theta^* = (\theta^{(r+1)} + \theta^{(r)})/2$ と考え、 $\nu^* = \nu(\theta^*)$ としよう。(4)、(5)、(6)式を、(4)式を一下に移して、

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + \nabla \cdot (\nu^* \nabla u) \quad (5')$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_1}{\partial z} + \nabla \cdot (\nu^* \nabla w) + \beta g \theta^* \quad (6')$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = -\beta \left(u \frac{\partial \theta^*}{\partial x} + w \frac{\partial \theta^*}{\partial z} \right) \quad (4')$$

として $t_r \rightarrow t_{r+1}$ を行うことにする。これを、ガレルキン・クランクニコルソン式離散化手順によって離散化を行うと、 $\tilde{u}^{(r+1)}$ 、 $\tilde{w}^{(r+1)}$ 、 $\tilde{p}^{(r+1)}$ に関する非線形連立系を得る：(以後、添字 $(r+1)$ と、 p_1 の添字1を省く)。

$$\begin{pmatrix} S_1+\tau C_1(\tilde{u}) & \tau E_1(\tilde{w}) & \tau P_1 \\ \tau E_2(\tilde{u}) & S_2+\tau C_2(\tilde{w}) & \tau P_2 \\ \tau A & \tau B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{w} \\ \tilde{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f} \\ \tilde{g} \\ \tilde{h} \end{pmatrix} \quad (1)$$

ここに、 S_i は、 $M+\tau A$ 形の対称正定値帯であり $C_i(\tilde{u})$ は、その要素が、ベクトル \tilde{u} の要素 u_j の一次結合となっている：

$$C_{1i} = \sum_j \alpha_{ij} u_j$$

$C_2(\tilde{w})$ 、 $E_1(\tilde{w})$ 、 $E_2(\tilde{u})$ も同様である。これらの行列は、非対称の帯となっている。

原理的には、時間きざみ τ を十分小さくすることによって、非線形項を全部右辺に移して作った反復法によって、かなりの高レイノルズ数領域まで計算が可能のはずである。この反復スキームは、

$$\begin{pmatrix} S_1 & 0 & \tau P_1 \\ 0 & S_2 & \tau P_2 \\ \tau A_1 & \tau A_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^{\mu+1} \\ \tilde{w}^{\mu+1} \\ \tilde{p}^{\mu+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f} \\ \tilde{g} \\ \tilde{h} \end{pmatrix} \\ - \begin{pmatrix} \tau C_1(\tilde{u}^\mu) & \tau E_1(\tilde{w}^\mu) & 0 \\ \tau E_2(\tilde{u}^\mu) & \tau C_2(\tilde{w}^\mu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^\mu \\ \tilde{w}^\mu \\ \tilde{p}^\mu \end{pmatrix} \quad (2)$$

である。この反復式よりも、粗い τ によって収束可能なものに、次のものがある。

$$\begin{pmatrix} S_1+\tau C_1(\tilde{u}^\mu) & \tau E_1(\tilde{w}^\mu) & \tau P_1 \\ \tau E_2(\tilde{u}^\mu) & S_2+\tau C_2(\tilde{w}^\mu) & \tau P_2 \\ \tau A_1 & \tau A_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^{\mu+1} \\ \tilde{w}^{\mu+1} \\ \tilde{p}^{\mu+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f} \\ \tilde{g} \\ \tilde{h} \end{pmatrix} \quad (3)$$

しかしこの LU 分解は μ ごとにやらねばならぬから大変辛い。 τE_2 、 τE_1 の項だけでも左辺に移して、

$$\begin{pmatrix} S_1+\tau C_1(\tilde{u}^\mu) & 0 & \tau P_1 \\ 0 & S_2+\tau C_2(\tilde{w}^\mu) & \tau P_2 \\ \tau A_1 & \tau A_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^{\mu+1} \\ \tilde{w}^{\mu+1} \\ \tilde{p}^{\mu+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{f} - \tau E_1(\tilde{w}^\mu) \tilde{w}^\mu \\ \tilde{g} - \tau E_1(\tilde{u}^\mu) \tilde{u}^\mu \\ \tilde{h} \end{pmatrix} \quad (4)$$

とすれば、LU 分解の手間は目覚ましく軽減される。

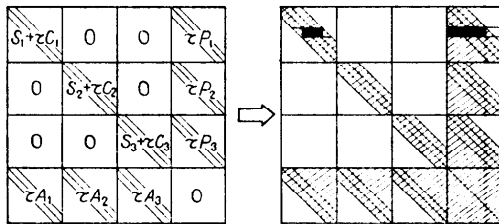
何れにせよ、ここでは、**ブロック帯行列の LU 分解**が主題になる。ブロックの一員となっている行列が帯であっても、この場合のガウス法の Working Set は $3m^2$ では一般に済まない。小行列の元数を n とするとき、 nm のオーダーである。内部演算の手間も大きいことと併せて注意を要するところである。ここでも、部分構造法を、場の物理的特性をにらんでうまく設定することによって、計算効率を飛躍的に向上させるであろう。ブロック LU 分解：

$$\begin{pmatrix} S_1 & 0 & P_1 \\ 0 & S_2 & P_2 \\ A_1 & A_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix} \quad (5)$$

の分解公式を作って見ると判ることであるが、それは

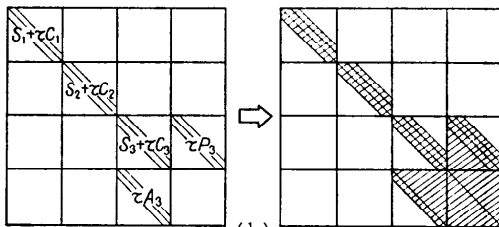
$$= \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ 0 & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & 0 & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix}$$

の形になるばかりでなく、 $S_1=L_{11}U_{11}$ 、 $S_2=L_{22}U_{22}$ であり、これらは帯のままである。ふちにならんだ L_{31} 、 L_{32} 、 U_{13} 、 U_{23} は半分以上の部分が密化する。 L_{33} と R_{33} はその半部分が密化する。このようにふちの部分の計算が辛い。圧力場を、質量連続の方程式を満すように決めようという主旨から、 τA_1 、 τA_2 、 τP_1 、 τP_2 の項を右辺に持って行くわけに行かないのであるが、主旨さえ保有できる限りにおいては、例えば、特に重要な鉛直方向圧力分布だけその主旨に沿えばよろ



(a)

($\tau A_3, \tau P_3, S_i + \tau C_i (i=1-3)$ が左辺に残ったとき)



(b)

図-5

しいというのであれば、 τA と τP_1 の項は右に移して反復の仲間に入れることが許されよう。今は水平方向として x 方向だけ考えているが、もし、水平方向が x_1, x_2 の二次元そろってる場合には、この顧慮は大変重要になるであろう。そのときのようすを図-5(a)、図-5(b)に示す。

〔コメント〕ひとつの節点ごとに u_1, w, p をまとめて並べるという方程式の構成法が考えられる。そのようにすれば、圧力 p を決めようとするときの上述の特別な困難はなくなる替りに、帯半巾は4倍に増える。帯半巾を決めるもととなっている網目の一面上の概数を m_0 とするとき、帯半巾が $4m_0$ となる。そのときガウス LU 法の Working set は $3(4m_0)^2=48m_0^2$ となる。 $m_0=100$ で、480k 語、約 4 MB であるから、しばらく現実のものとなり難い。その他、この方法は、場の特性をにらんでの自在性に欠ける。

4.4 ブロック帯、ふちつき帯の三角分解における Working Set について

図-4 にあらわれた行列、あるいは部分構造法においてあらわれる行列 LU の分解は、下記のアルゴリズムに従って解ける。

$$\begin{pmatrix} S_1 & 0 & 0 & P_1 \\ 0 & S_2 & 0 & P_2 \\ 0 & 0 & S_3 & P_3 \\ A_1 & A_2 & A_3 & S_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 & & & \\ 0 & L_2 & & \\ 0 & 0 & L_3 & \\ B_1 & B_2 & B_3 & L_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 & 0 & 0 & Q_1 \\ U_2 & 0 & Q_2 & \\ 0 & U_3 & Q_3 & \\ 0 & & U_N & \end{pmatrix}$$

$j < N$ のとき、 $S_j=L_jU_j$ 、 $P_j=L_jQ_j$ 、 $A_j=B_jQ_j$

$j=N$ のとき、 $S_N=\sum_{k=1}^{N-1} B_kQ_k+L_NU_N$

これから判るように、 L_N, U_N を求めるのに一番手数がかかる。このことから、図-4(a)を図-4(b)に直して処理できれば、大変楽になるのであった。さて、 L_NU_N を求めるときは、上の式そのままではなくて、

$$S_N=S_N-B_jQ_j \quad (j=1, N-1)$$

を各 j 段において他のものと一緒にやったのち、最後に $S_N=L_NU_N$ を行うのが局所性がよい。しかしそれでも S_N は密行列化しているから、その Working Set は n^2 である。 $n=500$ のときすでに 250 kW (2 MB) であるから、多くの場合部分構造化が必須となるであろう。

上の場合、 $S_j=L_jU_j$ は帯のままで行われるから、これらは、帯行列専用の DIMENSION によって行うの

がていねいであるが、ここでもし、 $n \times n$ の正方形の中に帯半巾 m の帯を入れて、アルゴリズムだけを帯専用で行うとすると、LU 分解の Working Set は $m^2 \sim 3m^2$ でなく nm のオーダーにはね上がる。それにもかかわらず、部分構造化を行うときには、プログラムが楽だということと、部分構造内の nm が $< M$ なら問題ないという理由で、このようなプログラムで実行することがしばしばである。

4.5 場の物理特性に対する配慮

スケール・アナリシスによって方程式を簡単化することが今まで大に行われてきた。今日とり上げた Boussinesq 系や、流れあるいは温度の境界層方程式などは特に有名である。これらの結果をうのみにすることは戒められるが、その根底にある物理的精神は、数値解析上大いに参考になる。たとえば、スケール・アナリシスによって、項を落すのではなく、それを右辺に移すことに利用するのである。それならば、自然対流のような、明瞭な境界層が必ずしも生成されない場に対しても、その考え方は大いに活用できる。

また、レイノルズ数、ペクレ数、グラシヨフ数などの諸量を、数値解析においてあらわれる行列、特に“縮小行列”のノルムとの関係においてとらえておくことが望まれる。 R_r , P_r については、明らかな対応が見つかるが、 G_r についても意味のある対応をつけ得るのではあるまいか。

5. 結 語 (申したかったことの要約)

(1) 熱と流れのカップルした偏微分方程式系の数値的シミュレーションにおいて、物理的・数学的に疑問のある方程式の簡単化をできるだけ避けて数値計算を実行しようとするとき、仮想メモリ方式は大変有用のはずである。

(2) 実際、帯コレスキーや帯ガウスなど、主役となる数値計算アルゴリズムの“主要ループの Working Set”についての知見と、それが仮想メモリ方式に与える負荷に関する認識があれば、その有用性を現実のものとする事ができる。Working Set さえ主メモリに入るならば、アレイの全容量は大巾に主メモリ容量を超えても構わない。

(3) スケール・アナリシスの精神や、レイノルズ数などに関する知識を、数値解析に結びつけることが、大変に有用である。

〈あとがきと文献〉

(i) 今日述べたことは、多くはすでにどこかに示されていることを、仮想メモリ方式の、偏微分方程式係数値解法への有効利用という観点からひとつのストーリーの形にまとめてみたというもので、とり立てて新規なことはない。強いて言うならば、

“主要ループの Working Set” の物指しは、通常言われている“Working Set”の概念の特別な場合に対する応用であるが、実用上便利なのでここに提示した。この物指しによって、密行列において特に有用であったところの“内積に執着したクラウド法”が、帯においては他のものにくらべて、異常に負担が大きく、そのため、帯において高精度、高安定を狙うためにはハウスホルダーを推奨するという結果となったことは筆者自身意外という程のものであった。

(ii) なお、本文であまり明瞭になし得なかったことで、 R_r や P_r を、移流項行列 C を反復式の右辺に移したときの“縮小行列 (増巾行列)” $A^{-1}C$ のノルムと結びつけて理解するという話は、その道のプロの人においては周知と思われるが、それを Working Set との関連、あるいは、部分構造法との関連において、右辺に移すか移さぬかの判断に資し得るような実用的な知見を今後開発し、PR する必要がある。実は、自然対流においては、 R_r や P_r よりも、グラシヨフ数 G_r が本質的のはずであるから、それを数値解析と結びつけたいものである。なお、 R_r , P_r は、線形ながら非自己随伴の方程式

$$-\nabla \cdot (k(x) \nabla \theta) + v(x) \cdot \nabla \theta = f(x) \quad x \in \Omega$$

の広義解の存在条件を証明するとき出てくる、“ラックス・ミルグラムの定理”の成立のための条件と直接結びつく、 $(vd/\lambda_0 \sqrt{m} < 1$ という形*)。 G_r についても同様の関数解析学的解釈がつけば更によい。

参 考 文 献

- 1) Varga: **Matrix Iterative Analysis** (1962)
- 2) Schlichting: **Boundary Layer Theory** (1968)
- 3) A. J. EDE: **Advances in Free Convection, in Advances in Heat Transfer, Vol. 4** (1967) [AP]
- 4) Strang & Fix: **An Analysis of the Finite Element Method** (1973)

* ここに $v = \max_{x \in \Omega} \sqrt{v_i(x)}$, d は Ω の“直径”, $\lambda_0 = \min_{x \in \Omega} k(x)$