Vol. 23 No. 2　　情　報　処　理　　Feb. 1982

解　説

応用分野の動向†

恒川　純吉††　大阿久　聰††　小山　潤††　佐々木　孝††

1. 応用分野の動向の概観

数値計算は科学技術計算や経営科学計算など広い分野で用いられている．まず本章で一般的な応用分野の動向を概観し，第2章から第4章まででは筆者らが実際に取り扱っている三つのテーマに関しての紹介を行う．

1.1 ハードウェアの進歩と応用計算

わが国で計算機が本格的に実用的に使われ始めた1965年ごろからの十数年の間に，計算機の性能とくに演算速度および内部記憶容量は2桁以上の性能向上があった．このため，大規模な計算の分野での発展がもっとも顕著であり，2次元解析から3次元解析へ，静解析から動解析へというふうに，解ける問題の次元が1つ上がったといって良いであろう．こうした進歩の背景にはモデル化の技術と数値計算の技術の向上が大きな役割を果たしている．たとえば有限要素法の発展と疎な行列（非零要素の割合の小さな行列）に対する取扱い方の進歩が，大次元行列の処理を可能にしたといえる．

計算機が高速になったといっても，大規模な構造計算，流れ解析など3次元の動解析に対しては十分な速さではない．たとえば日常的に計算されている大きな計算として，気象庁の数値予報モデル[1),2)]の運用が挙げられるが，3次元の動解析であるので，メッシュを2倍とし，時刻のきざみ幅を2倍にすればそれだけで16倍となってしまう．数値計算法を陽解法から半陰解法（semi-implicit）に変更したところ，同一精度の計算に対して2～5倍の計算速度の向上となったとのことである．48時間のシミュレーション計算に対して1時間強の計算時間で終了する必要があるので，計算機の性能向上の際には，モデルの精密化や計算範囲の拡張などもっとも効果の上がる項目を取り入れて，定められた時間内に計算が終わるように設計しているそうである．

計算機のハードウェアに関連する話題としては，仮想記憶の利用が多くなっていることと，並列処理用のプロセッサが利用されていることが挙げられる．これらの機能を活用する場合，それらに適したプログラムを作成することが必要になる．ことに並列処理に対しては，数値計算の算法そのものの変革が考えられる．このような面での研究[3)~11)]はなされているが，さらに実用化のための進歩が期待される．

また，最近マイコンなど小型計算機の普及が著しい．小規模な数値計算をマイコンで処理するようにすることは，応用面での底辺を拡げることになる．大型機の場合とは逆に，小さい記憶容量の効率的な使用のための工夫が必要になるであろう．

1.2 数値計算手法別の展望

● 線形計算

連立1次方程式の解法，固有値問題の解法，線形計画法など線形計算の解法は大次元の処理を含めて定着した形で実用化されているといえる．疎な行列の処理の進歩により数万件の連立方程式が実用的に解けるようになっている．連立1次方程式では反復法系統の方法の見直しもあるが実用的には Gauss の消去法系統の方法が主流を占めている．汎用プログラムパッケージがもっとも利用されている分野である．

● 非線形方程式・最適化

非線形方程式の解法，非線形の最適化の手法については多くの研究がなされているが，実用面ではまだ十分定着した方法があるとはいえない．問題の性質にあった解法の選択と初期値の入力といった面で利用者の熟練が必要な分野である．

● 常微分方程式

常微分方程式では高精度の公式が開発されると共にきざみ幅および次数の自動調節の方式が実用化されてきた．また時定数の大きく異なる系の混在する，いわゆる硬い（stiff）方程式の解法（Gear 法など）が発達

† Trends in the Field of Application by Junkichi TSUNEKAWA, Satoshi OAKU, Jun KOYAMA and Takashi SASAKI (Institute of JUSE).

†† (株)日本科学技術研修所

している．連続系シミュレーションプログラムなどでは，このような手法が組み入れられているが，利用者が問題によって手法を選択するようになっている．

● 偏微分方程式

偏微分方程式の解法のうち，線形計算に帰着するものは，そちらの手法が用いられる．一般には陽解法が多く使われており，きざみ幅の自動制御などについては今後の発展が期待される．

● その他

高速フーリエ変換 (FFT) や統計手法における数値計算の最近の進歩の応用はかなり定着してきているように思われる．

1.3 数値計算手法の利用形態

数値計算の算法は精度上も計算効率上も進歩しているが，一方において算法が複雑化している．その算法を十分に理解した上で巧みなコーディングを行わないと効果が上がらないものも多い．また，反復法系統の算法では収束判定定数や加速係数などいくつかのパラメータを含み，それらのパラメータの定め方に知識や経験を要することがある．実用プログラムでは，計算手法はむしろブラックボックスとして，その内容を知らなくても使いこなせることが要求されている．したがって，数値計算の面の深い素養のある人による信頼のおけるプログラムの作成が必要である．そのため，Mathematical Software[12] とか Numerical Mathematics[13] などをいう言葉で数学的手法に対するアルゴリズムとプログラムの整備が提唱されている．

数値計算用のプログラムパッケージは計算機メーカから供給されるものがあるほか，最近はソフトウェア会社や大学などで作成したものが発表されている[14)~16)]．計算機メーカのライブラリは，新しいもので更新されているものもあるが，一般には一昔前の現在では精度や効率の悪いプログラムが残っている．こうした良くない手法を利用した実用プログラムもまだかなり使われているのではないかと思われる．

用途別の汎用プログラムパッケージの流通[17),18)]は年々盛んになっている．構造計算や線型計画法といった分野では，良く整備されており，利用度も高いと思われる．データの入力が容易であるように設計され，また数値計算の手法も目的に応じたものが選択されている．

数値計算を必要とする分野は広い．各分野の専門家は必ずしも数値計算に精通しているとは限らない．逆に意外な分野で興味深い手法を用いていることもある．数値計算の良いプログラムの教育と普及，学際的な研究の交流がますます必要になってくると思われる．

2. 構造解析

現在構造解析で主に使用される数値解析手法は，何といっても有限要素法（以下 FEM という）であろう．本章では FEM における数値解法，特に連立1次方程式の解法，固有値問題の解法，時間積分法，その他のトピックスを解説する．

2.1 連立1次方程式[19),20)]

現在もっとも広範囲に用いられている有限要素法変位法の定式化では連立1次方程式のマトリックスは 1）正定値，2）実対称，3）バンドマトリックスという特徴を有している．もちろん非対称，複素などの場合もあるが解析の主体ではない．FEM の連立1次方程式の解法は上記のマトリックスの特徴を巧みに利用している．まず正定値ということからピボット選択は行わない．さらに対称，バンド性ということを利用して演算量を減らしている．

一昔前の FEM の教科書をひもとくと，連立1次方程式の解法として，ガウス・ザイデル法，SOR 法などの反復解法と，ガウスの消去法による直接解法とがあげられている．反復解法は直接解法に比較して，内部記憶領域が少なくてすむことが主な利点である．これに対して欠点は，繰返しの回数や，SOR 法の過緩和ファクタ ω の最適値がわからないこと，非正定値または非対称問題ではうまくいかないこと，非線形問題や右辺荷重項が多数ある場合に前の繰返し状態が利用できないことなどである．このように，短所が非常に大きいため，これらの反復解法は現在ほとんど利用されていない．

骨組構造解析プログラムの FRAN では，直接解法として内部記憶容量の小ささを補うためユニット分割法が採用されていた．今ではこの方法はさらに融通性のあるサブストラクチャ法へと発展してきている．サブストラクチャ法は同じ構造の繰返しのある場合（たとえば同種の脚が4本ある場合など）に便利である．ただしこのサブストラクチャ法は，以前のように計算機の記憶容量などの制限に対して導入されたものでなく，主に入力データ作成の手間を省くために導入されている．たとえば MSC/NASTRAN には super element とよばれる多レベル・サブストラクチャ法が実装されている．なおサブストラクチャ法によらず直接

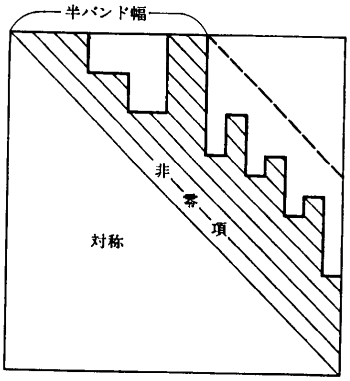

図-1　バンドマトリックス

解きうる自由度数は約6万である．この自由度数は通常の解析には十分で，この値による制限の前にコスト・バウンドになってしまう．

では，NASTRAN[24),25)]などの汎用構造解析プログラムで用いられる手法は何であろうか．これはアクティブ・カラム法もしくはウェーブ・フロント法[23)]のどちらかである．アクティブ・カラム法（またはスカイライン法）はFEMで作られた剛性マトリックスのスパース性を非常にたくみに用いる方法である．剛性マトリックスは，バンド性すなわち非零項が主に対角項周辺にのみ存在する．この特性を生かすために，まずバンド・マトリックス解法が用いられる．これは**図-1**に示すように，最大バンド幅内のみでガウス消去法を実施するものである．しかし，この方法ではある1個所のみにバンド幅が大きい場合でも，その最大バンド幅内のすべてを演算しなくてはならない欠点がある．このため，各列のバンド幅を考慮しながらガウス消去法（実際にはクラウト法）を実施する方法がくふうされた．これがアクティブ・カラム法である．マトリックス全体が内部記憶領域内に格納できない時には，ブロック化したアクティブ・カラム法が用いられる．

ブロック化したアクティブ・カラム法に対して考え出されたのがフロント法またはウェーブ・フロント法である．このフロント法はFEM特有のもので，通常のソルバを用いたFEMのアルゴリズムが全体剛性の組立て，前進解法と2段に大きく分けられているのに対して，フロント法ではこの二つのステップすなわち全体剛性の組立てと前進解法とを同時に行う（ある節点の組立が完了するとただちに分解する）のである．このときのフロント幅はバンド幅よりも小さい．しかしながら連立1次方程式を解くコストは単にバンド幅だけで定まるものではない．アクティブ・カラム法とフロント法の優劣は一概に決められず，使用者の選択にまかされている．

いずれの方法にせよ，現在のFEMコードは自由度数で数万，平均バンド幅数千の3次元問題を大型計算機（並列処理プロセッサを使わなくても）により高々数時間のCPU時間で解くことができる．このような問題はめったに解かれてはいない．アクティブ・カラム法，ウェーブ・フロント法のいずれの方法でも小規模のプログラムは各種文献より入手可能である．

2.2　固有値問題の解法[21),22)]

FEMでは主に一般型固有値問題（MK型実対称行列）が解析の対象となっている．この固有値問題では振動，座屈などの解析に現われる．構造解析では多くの場合すべての固有値を求める必要はない．たとえば座屈問題の場合は最小固有値だけで良いし，振動問題では大体数十個のモードを求めれば十分である．

したがって解析法の主流はハウスホルダ法などの変換型ではなく，インバース・パワー法などの反復解法である．ただしハウスホルダ法などが全く用いられないというわけではなく，動的縮約によりマトリックスを縮約した場合，マトリックスがフルマトリックスとなって，元のバンド性が失われるためハウスホルダ法がよく使用される．

反復型の解法の中では，インバース・パワー法とサブスペース法がよく用いられている．そのどちらの手法でもFEMのマトリックスの特徴であるバンド性を生かしたプログラムが作られている．インバース・パワー法では繰返しの収束を加速するためシフト（原点移動）が用いられるが，シフトには前進消去が付随するため，シフトする手間と根への接近速度を単なる繰返しの演算量と接近速度と比較して，シフトを行うかどうかを定めなければならない．このように，インバース・パワー法は原理は簡単であるが，実際のプログラムでは多くの小道具を必要とする．

インバース・パワー法が一つ一つの固有値を求めていくのに対して，必要な固有値を同時に求めるのがサブスペース法である．サブスペース法は開発者の言によれば「現在もっとも有効な固有値アルゴリズムの一つ」である．

これらの解法により，現在の汎用FEMコードは数千元の固有値問題を解くことができる．

2.3　時間積分法

FEM法で用いる時間積分法は，陰的解法ではニ

ューマークβ法，ウィルソンθ法，フーボルト法が，陽解法では中央差分法，オイラ法，ルンゲクッタ法などが用いられている．通常の線形問題では陽解法による時間節約より陰解法の安定性の利点が大きいため，またマトリックスのバンド性のため計算時間がそれほど膨大にはならないため，陰解法，中でもニューマークβ法が好んで用いられている．最近ヒルバ法も用いられる．

非線形の問題の場合には条件が一変する．微小時間ステップごとに前進消去を必要とする陰解法を用いた場合，現代の計算機の速度ではほんの小さい問題しか解けない．したがって2次元または3次元の非線形プログラムでは必然的に陽解法を用いている．中央差分を用いた3次元非線形コードTRANALは約1万元の運動方程式の10秒間の挙動をCDC 7600を用いて数時間で解きうる．

また，最近では分散性媒質（周波数依存性）の中の挙動を調べるため，FFT（高速フーリエ変換）を用いて時間領域から周波数領域へ移して応答を求める複素応答法もさかんに用いられている．

2.4 最近の話題

通常の設計レベルの計算では，静的な線形解析がもっとも多く使用されるため，現状の汎用コード，アルゴリズムで十分である．研究レベルでは非線形へ，連成系へという傾向がますます強まっている．このため，たとえば非線形問題の積分のきざみ幅と安定性など多くの興味ある問題が解析されている．

3. 流れ解析

流体の問題を扱う分野は気象学，海洋学をはじめ，土木，機械，航空など多岐にわたっている．流体の問題は速度3成分(u, v, w)，温度(T)，圧力(p)および密度(ρ)を未知数とした非線形の偏微分方程式として記述できる．実際にはそれぞれの分野の対象に応じて，支配的な未知数のみを取り出したり，基礎方程式の一部の項を省略するなどのくふうが行われている．数値解法としては従来は差分法が主体であったが，近年は有限要素法が実用化され始めている．ここでは筆者らが日頃接する機会の多い水理学の分野での動向を中心に述べることにする．

3.1 2次元モデル

水理学の扱う流体の問題は河川，水路，海洋などの水の動きが中心である．水の問題では一部の場合を除いて非圧縮性，等温と考えることができるため，未知数は流速と圧力だけとなり，方程式は運動方程式（N-S方程式：Navier Stokesの方程式）と連続方程式だけになる．さらに静水圧分布と鉛直方向の断面平均流速を導入すると，水平2次元あるいは1次元の方程式が導かれる．水平2次元モデルを海の流れに適用したものは浅海長波モデルとよばれ，津波，高潮などをはじめ汚濁，温排水拡散の評価に用いられている．温排水拡散予測の問題に適用するとき，差分法では潮汐流などの場の流れをLax-Wendroffスキーム，温度拡散式を上流差分スキームで解くのが普通である．両方の式をADI法で解くものもある[26)~28)]．有限要素法では三角形や四辺形要素を用い，形状関数は1次または2次の比較的低次のものを多く使う．潮汐流や高潮，津波などの非定常問題では時間方向の離散化は，陽的解法である2段階Lax-Wendroffスキームが計算時間の点で他の陰的解法よりも多用されている．この場合係数行列を対象化する方法についていくつかの検討がなされている[29)~32)]．

浅海長波モデルは差分法，有限要素法により実用化が進んでおり，メッシュ数10^4程度の非定常問題が大型機（記憶容量数MB）で計算時間が数時間で解かれている．

2次元の流れを扱うもう一つの方法に渦度(ξ)と流れ関数(ϕ)を用いる方法（ξ-ϕモデル）がある．2次元の場合のN-S方程式はξとηを導入して，$u=\partial\phi/\partial y$, $v=-\partial\phi/\partial x$, $\xi=\partial v/\partial x-\partial u/\partial y$とおくと，連続式は自動的に満たされて，次の2式に変換できる．(νは粘性係数)

$$\Delta\phi=-\xi \tag{1}$$

$$\partial\xi/\partial t+v\cdot\mathrm{grad}\,\xi=\nu\Delta\xi \tag{2}$$

このモデルは2次元のさまざまな問題に使用されており，計算の規模もそれほど大きくないために多くの計算例が得られている．

差分法では普通(1)式を過緩和法，(2)式を時間前進空間中心型のスキームで解いている．しかしνが小さいときは流れの非線形性が強まり，数値的に不安定となって解が発散するので，より安定な上流差分スキームが多く使われる．しかしこのスキームは数値拡散誤差が大きいので，安定でしかも精度の高いものとして高次上流差分や上流差分と中心差分を併用するハイブリッド法など多くの方法が研究されている[33)~36)]．

有限要素法では(1)式は比較的容易に離散化できるが(2)式はその非線形性のため差分法と同様の問題が生じ，上流差分要素の使用や人工粘性項の付加などの

検討がなされつつある[31),37),38)].

最近では(1)式を有限要素法で(2)式を差分法で解く方法や，三角形格子の差分法なども開発されている[39)~41)].

差分法，有限要素法のいずれの方法においても，問題はもとの式に含まれている非線形項をどう離散化するかということに帰着する．上流差分のスキームに係わる改良も，係数行列の対称化もここから生じてきたものである．流れの数値解法の中の中心課題の一つはこの問題であるといえる．

3.2 3次元モデル

本来3次元的な流れを2次元で近似すると当然実体を十分に表現しえなくなる．水理学上の問題としてはせきを越える流れなど構造物周辺の流れが表わせないし，流体の鉛直分布を求めることもできない．さらに塩水くさび，温排水の水中放流などでは密度の異なった3次元の流れが対象となる．機械工学の分野でも，熱交換器，タービンなどで3次元的な取扱いが必要なものもある．

3次元モデルでは連続式の満たし方，圧力の求め方が問題になる．2次元モデルの場合，浅海長波モデルでは静水圧分布を考え，連続式は水位を求めることにより満たされ，圧力は水位で表されている．ξ, ψ モデルでは連続式は自動的に満たされ，圧力は必要ならば他の変数から求められる．一方3次元モデルでは未知数として流速と圧力を用いる場合，連続式は反復計算の各段階では厳密な意味では満たされていない．流速を反復修正して連続式を満たし，その過程で圧力を求めるなどの方法がとられる．このようにして自由表面の3次元流を解く方法の一つに MAC (Marker & Cell) 法がある[42),43)]．また有限要素法においても類似の方法としてペナルティ関数によるものがある[31),44),45)].

3次元問題では2次元問題に比べて記憶容量，計算時間ともに飛躍的に増大するため，限られた分野を除いて実用的なモデルが十分でき上っているとはいえない．模式的な問題についての研究はいくつか見られる．また部分的に3次元で解いたものを2次元モデルにつなげるといった方法も試みられている．

3.3 乱流モデル

水理学で扱うような流れはほとんど乱流であるため，流体の分子粘性だけを考えた N-S 方程式はその流れの瞬間瞬間では成立しても，平均的な流れを記述することはできない．したがって流速を平均流速と変動流速に分離して N-S 方程式に代入することによって導かれる Raynolds 方程式が用いられる．これまでに述べたモデルでは，この方程式に含まれる変動流速の2次モーメントを分子粘性とのアナロジーから導入された乱流粘性係数 (ν_t) で表現して用いている．ν_t は経験的な定数であり普遍的な法則からは定められないので，計算ごとに試行錯誤的に決めることになる．

このため乱流の状態を表現する方程式を導入して普遍性を持たせようとしたモデルが乱流モデルである[46)~48)]．乱流モデルは Raynolds 方程式のほかに加えられている方程式の数によって，一方程式モデル，二方程式モデル，多方程式モデルに分類される．一方程式モデルの代表的なものは乱れの運動エネルギ (k) の輸送方程式を用いるものである．Prandtl のモデルでは $\nu_t = \beta\sqrt{k}\,l$ (β は定数，l は乱れのスケール)とおかれる．ここでも l を普遍的に求められないという問題が残る．二方程式モデルでは k の方程式に加えて，kl の輸送方程式あるいは乱れの粘性消散率 ε の輸送方程式を用いる．こうすることによりモデルの中に対象ごとに異なる経験式が含まれなくなり，普遍性の高いものとなる．ε を用いるモデルでは，ν_t は $\beta' k^2 \varepsilon^{-1}$ で表わされる．これらのモデルに含まれる β 等の定数は対象に関係しない，普遍性のあるものとされているが，今後さらに多くの実測と計算を積み重ねて確かめていく必要がある[49)]．多方程式モデルは応力方程式モデルとも呼ばれ，Raynolds 応力を乱流粘性仮定を用いずに直接求めるもので，乱流モデルの中ではもっとも進んだモデルといえる．方程式の数は3～5個のものが発表されている．このモデルはかなり複雑であるため数値計算上の取扱いが難しく，安定性，精度など今後研究されるべき課題は多い[50)].

以上に述べた流れの数値解法の問題点を整理すると，(1)非線形項の離散化，(2)連続条件の満たし方，(3)粘性係数，拡散係数のモデル化，などがあげられる．大型問題であるゆえに，さらに大記憶容量，高速な計算機が望まれている．

4. 化工計算

化学工業の分野においては，化学プロセスの計画・設計，および運営・操作の各段階において電子計算機によるシミュレーションが活用されている．化学プロセスは蒸留，抽出，吸収，熱交換，反応などの工程を単位とする単位操作の組み合わせとして表現される．各単位操作ごとのシミュレーション・プログラムおよび

全体のプロセスを対象とするシミュレーションプログラムが多数開発されている[56)~58)]. 単位操作のプログラムについていうと,蒸留,熱交換,反応,配管のプログラムが多い.蒸留操作のプログラムでは,2成分系・多成分系,理想系・非理想系,設計型・操作型,定常・非定常,数値計算法の種類などによりさまざまなプログラムが発表されている.気液平衡に関する物性値がパラメータとして必要であるが,実測ないし推算により与えられなければならない.物性値ファイルとの結合が直接行われるものもある.反応操作については,特定の反応に限定されるものと,一般的に反応を取り扱えるようになっているものとがある.反応の場合は反応速度式の形とそのパラメータが必要であり,前処理として実験値からそれらのパラメータを同定しなければならないことが多い.

全体の系のシミュレーションを行うためのプログラムには,定常解を求めるものと非定常解まで求められるものとがある.1960年代前半から定常解を求めるシミュレーション・プログラムが発表されている.また非定常シミュレーション・プログラムも1970年代になって発表されているが,まだ数は少ない.

日本における化学工業,エンジニアリング会社では,自社開発のプログラムを用いている会社もあるが,販売されている汎用プログラムを用いている会社も多い.プログラム流通が盛んな業種であるといえよう.筆者の属する(株)日本科学技術研修所は1966年に定常シミュレーション・プログラム JUSE-GIFS[59),60)]を,1974年に非定常シミュレーション・プログラム DPS[61)~64)]を発表した.現在前者は25社により,後者は8社により利用されている.定常シミュレーションは連続プロセスにおける定常解を求めるものであり,数学的には連立非線型方程式を解くことに帰着する.変数の個数は数百から数千に達するので,開発当時の大型計算機によれば数分から1時間程度の計算時間を要した.非定常シミュレーションは,プロセスの時間的経過を求めるものであり,バッチ・プロセスの解析,連続プロセスのスタートアップ,シャットダウンの解析,状態変化による安全性の解析や制御系の検討などに使うことができる.数学的には常微分方程式と非線型方程式からなる連立方程式を解くことになる.現在の大型計算機では数百から数千の変数のモデルを数分から1時間程度の計算時間で解くことができる.

このような大型計算であるため,計算量を減少させるための工夫が必要となる.このため,JUSE-GIFS の設計時から,変数間の関数関係をグラフとして表現し,不要な変数の計算を省くとともに,適切な計算順序を自動的に定める方法を用いている.この方法は化学プロセスの計算だけでなく他の分野の問題にも適用可能である.JUSE-GIFS の算法をさらに発展させた DPS における算法について以下に紹介する.

4.1 数式の表現

各単位操作における数学モデルを,DPS では FORTRAN に似た形の数式の表現で記述できる.このとき,それらの数式の計算の順序まで記述する必要はない.プロセス全体を記述した後に,すべての数式をいったん全部集めてから,それらの計算の手順を自動的にシステムが作成することになる.化学プロセスのシミュレータの多くは,単位操作のモデルをサブルーチンの形で記述する.このようなシステムでは,以下に述べるような計算順序の自動作成は不可能である.また CSMP のような汎用アナログシミュレータでは,計算順序の決定の機能を持つが,代数ループは利用者が定義しなければならないという大きな制限がある.

DPS の中では数式を

$$y=f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \qquad (1)$$

の形式で記述する.関数 f は代数関係,積分および時間遅れの関数である.陽に解けない関数,すなわち

$$0=f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

の形の場合には,新しい変数 ξ を追加し

$$\xi=f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

とした上で,変数 ξ の値を0とするように方程式を解けばよい.さらに一つの変数は2回以上左辺に現われないように関数を記述しておくことにする.

4.2 グラフによる関数関係の表現

変数間の関数関係はグラフとして表現できる.変数を点とし,式(1)の形で,右辺にある変数から左辺にある変数を示す点に向けて有向枝を作ることにする.これによって全体の方程式系をグラフで表現することができる.たとえば

$$x_4=f_1(x_1, x_2)$$

$$x_5=\mathrm{integral}\ (x_4)=\int x_4 dt$$

$$x_6=f_2(x_5, x_8)$$

$$\cdots\cdots$$

という方程式群を,**図-2** のように表現する.

一部の変数に対して,その値を設定できる.図-2の中で x_1, x_2, x_{13} の値が定められたとする.x_1 と x_2 はグラフ上矢線が入ってこないので,設定された値は

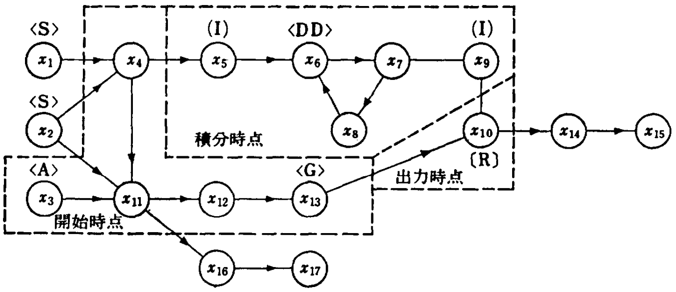

図-2 グラフの例

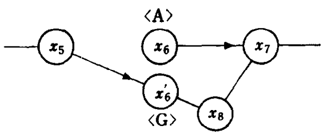

図-3 DD 型変数の分割

以後の点すなわち x_4, x_{11} の計算に使われるだけである．このような変数を S (Set) 型変数とよぶ．一方，x_{13} は x_{12} の関数として計算される．このような場合は，x_{13} の値が設定された値に等しくなるように計算されなければならない．このような変数を G (Given) 型変数とよぶ．図-2 の例では変数 x_3 は値が設定されていない上に，矢印が入ってこないので，計算もされない．この例では未知の x_3 が既知の x_{13} の値を満たすように調整されることになる．この x_3 のような変数を A (Assumed) 型変数とよぶ．

グラフの中で x_6, x_7, x_8 を結ぶ矢線は閉路を形成している．この場合，その閉路を形成する変数の中の一つの値を仮定し，閉路をまわって計算された値とその仮定値とが一致するように解かなければならない．x_6 を仮定する変数としたとき，**図-3** に示すように x_6 を 2つの点に分割して，一方の x_6 を仮定点，他方の x_6' を計算点として解くと考えればよい．このような変数を DD (Divided) 型変数とよぶ．

このように整理すると，大次元の連立方程式であっても真に連立方程式の反復に必要な変数はA型，G型およびDD型変数であり，その他の変数は未知であっても単に代入計算だけで求めることができる．図-2の場合は結局

$$\left.\begin{array}{l} x_{13}=g_1(x_3) \\ x_6=g_2(x_6) \end{array}\right\} \qquad (2)$$

で示される方程式（簡約化された方程式）となる．

4.3 グラフ理論を応用した計算順序の決定

計算機の中でこのように変数をグラフとして表現しておくと，グラフ理論を用いて次のような処理を行うことができる．

（1） 不必要な変数の除去

利用者が出力の指定をすると，出力の指定のあった変数を計算するために必要な変数だけを残して，それ以外の変数を計算から省いてしまう．たとえば，数学モデルには物質収支と熱収支の式が組み込まれていても，熱収支関係の出力の指示がなければ熱収支の計算が省略されることになる．図-2において x_{10} の出力が要求されている ([R] で示されている)．このとき，x_{10} の下位の x_{14}, x_{15} や，x_{10} と無関係な x_{16}, x_{17} は省略される．

（2） 方程式の可解性のチェック[10]

方程式が一般的に解けるための条件は，各A型変数と各G型変数の間に1対1の対応をつけ，その対となるA型変数からG型変数への有向路が，他の対の有向路と相交わることなく作成できることである．ここで一般的に解けるというのは，方程式が構造上解き得るということで，数値的に解けるかどうかまでは保証しない．図-2の例は解けるが，もしこの例でさらに x_2 をA型，x_{14} をG型とすると，(x_1, x_2) と (x_{13}, x_{16}) の対をいかに組み合わせても，同じ x_{11} を通過することになり，解くことができない．このようなチェックを実際に行っている．

（3） 簡約化された方程式のブロック三角化[65]

簡略化された方程式は，行列をブロック三角化することと同じ原理をグラフ的に処理することにより，小さな元数の連立方程式に分割することができる．図-2の場合は，式(2)の二つは独立であり，1元の方程式を2回解けば良いことになる．

（4） 計算時点の最適化

積分の計算はその各時刻のステップごとに行うのであるが，すべての変数をそのステップごとに行う必要はない．計算する時点を次の四つに分けることができる．

● 開 始 時 点

積分ごとに値が変らない変数は最初に1回だけ計算すればよい．

● 積 分 時 点

積分される変数，およびその変数の計算のため直接または間接に必要な変数の値は毎時刻に計算する．

● 出 力 時 点

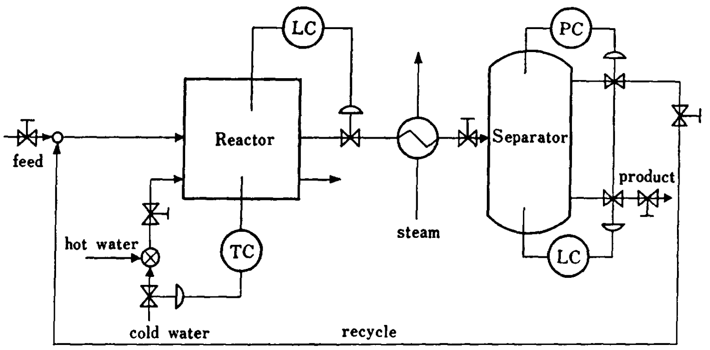

図-4 目的のプロセス

出力のためには必要であるが，積分計算には影響しない変数の値は，出力時点ごとに計算する．

● 最終時点

DPS の場合，一連の計算が終わったあとで，バルブの開閉，制御系のオン・オフなどの条件を与え直して，次の処理に進むことができる．このような後の計算に必要な変数のうち，積分や出力に無関係な変数の値は最終時点で計算を行う．

この計算時点の最適化を行った後に，最終的な関数の計算順序が定められる．図-2 の場合は次のようになる．

開始時点　$x_4, x_7, x_{11}, x_{12}, x_{13}$

x_{11}, x_{12}, x_{13} は反復計算となる．

積分時点　x_5, x_7, x_8, x_6, x_9

x_7, x_6, x_8 は反復計算となる．

出力時点　x_{10}

このようにして計算順序を定めた後に，非線形方程式および常微分方程式の解法を用いて，シミュレーション計算を行う．計算順序決定に手間を掛けても，本計算の方で計算量を大幅に減らすことができて，全体としての処理時間を小さくすることができるのである．

(5) 例　題

図-4 に示すプロセスにおいて反応器へ原料を供給してから定常状態に至るまでのスタートアップの挙動，および定常後に供給量に外乱を与えたときの応答を求める計算を行った．成分数は4であり，1分間隔で5時間のシミュレーションである．途中でバルブの開閉や条件の変更を行っているので，全体のシミュレーションは七つの部分（イベント）に分けている．

表-1 例題におけるイベントごとの変数および方程式の個数

イベント番号	変数の型						変数の合計	連立方程式の	
	A	G	DD	SS	I	X		個数	最大元数
EV 1	0	0	0	46	6	77	129	0	0
EV 2	0	0	0	48	6	75	129	0	0
EV 3	5	5	1	60	13	157	241	3	4
EV 4	6	6	1	61	14	172	260	4	4
EV 5	7	7	1	61	15	194	285	5	4
EV 6	18	18	1	47	0	134	218	6	14
EV 7	6	6	1	53	14	159	239	4	4

全体の変数の個数は 349 個あるが，**表-1** に示すように，実際に計算に関係する変数の個数はイベントによって異なり 129 個から 285 個までになっている．また簡約化された方程式の元数の最大はイベント 6 の 19 元であるが，ブロック三角化により 1 元の方程式を 4 回と，14 元の方程式を 1 回解けばよいことがわかる．この計算は TOSBAC 5600 で約 5 分を要した．

参考文献

1) Kudo, T.: A Semi-Implicit Formulation of Prognostic Equations in a Sigma-Coordinate System, Geophysical Magazine, Vol. 38, No. 2 (1978).

2) 木田秀次，岡村　存，近藤洋輝，菊地幸雄：数値計算上の問題，気象研究ノート，第 134 号，数値予報（下）第 8 章 (1978).

3) 村田健郎：大型科学計算技法と仮想メモリ方式，情報処理，Vol. 18, No. 3 (1977).

4) 小美濃友夫：仮想記憶向きのプログラム作成方法，情報処理，Vol. 21, No. 4 (1980).

5) 村田健郎，二村良彦，門間三尚：仮想記憶方式の下での大形行列計算技法，情報処理，Vol. 21, No. 4 (1980).

6) 三橋鎮雄，生野英二：SSOPTRAN プリコンパイラ，情報処理，Vol. 21, No. 4 (1980).

7) 金田悠紀夫：並列処理システムによる線形計画計算と実対称行列の三重対角化計算，情報処理，Vol. 19, No. 1 (1978).

8) 佐原啓二：石油資源探査における計算機利用，情報処理，Vol. 20, No. 9 (1979).

9) 星野 力：偏微分方程式解析のためのマイクロプロセッサ複合体，情報処理，Vol. 20, No. 11 (1979).

10) 若村 晋，水谷博之，柴山茂樹：並列処理マシン，大型プロジェクトパターン情報処理システム研究成果発表会論文集，日本産業技術振興協会 (1980).

11) 原田裕夫：線形三重対角システムの並列計算，数値解析研究会，瀬戸(1981年5月).

12) Rice, J. R. Fditor: Mathematical Software, Academic Press (1971).

13) Traub, J. F.: Numerical Mathematics and Computer Science, CACM Vol. 15, No. 7 (1972).

14) IMSL: Library Reference Manual, IMSL, Texas, USA.

15) NAG Fortran Library Manual, NAG, Oxford, UK.

16) UMS 利用者マニュアル，情報処理振興事業協会 (1978).

17) ソフトウェア流通，創刊 1979. 10 の雑誌.

18) 小野勝章，三浦大亮，森 敬，矢島敬二 編：アプリケーション・プログラム，bit，臨時増刊7 (1977).

19) Zienkiewicz, O. C.: The Finite Element Method, 第3版, McGraw-Hill Co. (1977).

20) O. C. ツィエンキーヴィッツ：基礎工学における マトリックス有限要素法，培風館 (1975). (19)の旧版の訳本，19)の新版は未訳)

21) Bathe/Wilson：有限要素法の数値計算，科学技術出版社 (1979).

22) 戸川隼人：有限要素法による振動解析，サイエンス社 (1975).

23) Hinton/Owen：有限要素プログラミング，丸善(株) (1979).

24) MSC/NASTRAN User's Manual, Theoretical Manual, MSC 社.

25) Marc User's Manual, Marc 社.

26) 伊藤 剛 編：数値計算の応用と基礎，アテネ出版 (1971).

27) 和田 明他：沿岸海域における温排水拡散予測手法の適合性に関する研究，電力中央研究所報告 (1973).

28) 金子安雄他：ADI 法による潮流と汚染拡散の数値計算，運輸省港湾技術研究所報告，Vol. 14, No. 1 (1975).

29) 川原睦人他：二段階ラックスヴェンドロッフ有限要素法による潮汐流解析，第23回土木学会海岸工学講演会 (1976).

30) 松田安弘：環境汚染問題への有限要素法の応用，情報処理，Vol. 20, No. 7, pp. 590-600 (1979).

31) Hughes, T. J. R. et al.: Finite Element Analysis of Incompressible Viscous Flow by the Penalty Function Formulation, J. Comput. Phys. Vol. 30, pp. 1-60 (1979).

32) Kawahara, M.: Steady and Unsteady Finite Element Analysis of Incompressible Viscous Fluid, Finite Elements in Fluid, Vol. 3, Wiley (1978).

33) Roache, P. J.: Computational Fluid Dynamics, Hermosa publishers (1972)/高橋他訳：コンピュータによる流体力学（上・下），構造計画研究所 (1978).

34) Gupta, M. M. et al.: Boudary Approximations and Accuracy in Viscous Flow Computations, J. Comput. Phys. Vol. 31, pp. 265-288 (1979).

35) Lillington, J. N.: A Vector Upstream Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant Source Terms in Steady-state Linear Systems, Int. J. Num. Meth. Fluids, Vol. 1, pp. 3-16 (1981).

36) Takemitsu, M.: On a Finite-Difference Approximation for the Steady-state Navier-Stokes Equations, J. Comput. Phys., Vol. 36, pp. 236-248 (1980).

37) Zienkiewicz, O. C. et al.: A Note on Upwinding and Anisotropic Balancing Dissipation in Finite Element Approximations to Convective Diffusion Problems, Int. J. Num. Meth. Engng., Vol. 15, pp. 1705-1711 (1980).

38) 池田 勉：移流項を含む拡散方程式の有限要素近似，第2回流れの有限要素法解析シンポジウム報文集，pp. 151-158，日科技連 (1980).

39) 足立武司他：2次元，非圧縮，粘性流の一解法 (VIC 法) について，第1回流れの有限要素法解析シンポジウム報文集，pp. 155-162，日科技連 (1979).

40) Adachi, T. et al.: On the numerical analysis of compressible flow problems by the "Modified FLIC Method", Computers & Fluids, Vol. 8, pp. 251-263 (1980).

41) Ikegana, M.: A New Finite Element Technique for the Analysis of Steady Viscous Flow Problems, Int. J. Num. Meth. Engng., Vol. 14 pp. 103-113 (1979).

42) Hirt, C. W. et al.: Calculating Three-Dimensional Flows around Structures and over Rough Terrain, J. Comput. Phys., Vol. 10, pp. 324-340 (1972).

43) Viecelli, J. A.: A Computing Method for Incompressible Flow Bounded by Moving Walls, J. Comput. Phys., Vol. 8, pp. 119-143 (1971).

44) Heinrich, J. C. et al.: Viscous Incompressible Flow by a Penalty Function Finite Element

Method, Computers & Fluids, Vol. 9, pp. 73-83 (1981).

45) 川原睦人他：構造物周辺の風の流れの有限要素解析，第2回流れの有限要素法解析シンポジウム報文集，pp. 17-24，日科技連 (1980).

46) Launder, B. E. and Spalding, D. B.: Lectures in Mathematical Models of Turbulence, Academic Press (1972).

47) 大路通雄：乱流モデルの展望，日本航空宇宙学会誌，Vol. 28, pp. 48-56 (1980).

48) 広瀬直喜：微分法による乱流境界層計算法の展望，日本航空宇宙学会誌，Vol. 28, pp. 67-82 (1980).

49) Rodi, W.: Turbulence Models and Their Application in Hydraulics, A State of the Art Review, University of Karlsruhe Rep. (1980).

50) 谷 一郎編：流体力学の進歩，丸善 (1980).

51) 第1回流れの有限要素法解析シンポジウム報文集，日本科学技術連盟 (1979).

52) 第2回流れの有限要素法解析シンポジウム報文集，日本科学技術連盟 (1980).

53) 大宮司久明：流体力学の数値解法の現状，日本機械学会誌，Vol. 81, No. 716, pp. 657-662 (1978).

54) 石原智男：流体工学の将来，日本機械学会誌，Vol. 82, No. 722, pp. 24-32 (1979).

55) Connor, J. J. and Brebbia, C. A.: Finite Element Techniques for Fluid Flow, Newnes-Butterworths (1976). /奥村敏恵監訳：流体解析への有限要素法の応用，サイエンス社 (1978).

56) 高松武一郎：プロセス工学の新展開への期待，化学工学，Vol. 45, No. 11 (1981).

57) 大島栄次，正野博視：化工計算，bit，臨時増刊 7 (1977).

58) O'Shima, E.: Static and Dynamic Simulation Programs in Japan, The Proceedings of the July 1980 Engineering Foundation Conference, Henniker.

59) Iri, M., Tsunekawa, J. and Yajima, K.: The Graphical Techniques Used for a Chemical Process Simulator JUSE-GIFS, IFIP 71, North-Holland (1972).

60) JUSE-GIFS プログラム利用の手引き，日科技研 (1970).

61) DPS (V 2) 利用者マニュアル，情報処理振興事業協会 (1980).

62) Yajima, K. and Tsunekawa, J.: Determination of Computing Sequence in Static And Dynamic Chemical Process Simulation, US-JAPAN Joint Seminar, Kyoto, Japan (1975).

63) 恒川純吉：ラージスケールシステムのグラフ論的分割，オペレーションズ・リサーチ，Vol. 25, No. 12 (1980).

64) Yajima, K., Tsunekawa, J. and Kobayashi, S.: On Equation-based Dynamic Simulation, 2nd World Congress of Chemical Engineering, Montreal (Oct. 1981).

65) 伊理正夫，恒川純吉，室田一雄：グラフ論的手法による大規模連立方程式の構造的可解性判定とブロック三角化，情報処理学会論文誌，Vol. 23, No. 1 (1982).

(昭和56年10月15日受付)