

移流拡散方程式に対する BCG 法システムの解法の収束特性について†

長谷川 秀彦** 村田 健郎**

3次元移流拡散方程式を差分法で離散化して得られる大型の非対称疎行列を係数とする連立一次方程式に対して、CGS法(自乗共役勾配法)、BCG法(双共役勾配法)、CR法(共役残差法)に前処理として Meijerink の不完全 LU 分解、Gustafsson 流の変更を行った算法を適用する。問題とする場の境界条件(3面固定境界、5面固定境界)や拡散係数、セルの縦横比、差分のとりかた(中心差分、風上差分、部分的風上差分)、セル・ペクレ数などを変化させて収束特性を調べた。その結果、3面固定境界で拡散係数の変化する場が解きにくいこと、セルが立方体の時に速く収束することなどが判明した。BCG法とCGS法は条件の変化に対して安定であるが、CR法はセル・ペクレ数を変えると収束までの反復回数が大きく変化する。Gustafsson 流の前処理は収束までの反復回数を約 2/3 に減少させる。数値計算上の安定性を得るために風上差分を用いると収束がいくぶんか速まる。しかし反復回数は多くかかるが中心差分でも収束するため風上差分の効果は小さい。3次元移流拡散方程式を差分法で離散化して得られる連立一次方程式の反復解法としては、Gustafsson 流の前処理を施した MILUCGS 法が高速で、しかも安定である。

1. はじめに

自然現象をモデル化した偏微分方程式を解くためには、対象とする場を離散化して得られる連立一次方程式の解法が重要となる。本論文では移流拡散方程式

$$\text{div}(-k\nabla u + \mathbf{b}u) = f \quad (1)$$

を離散化して得られる大型の非対称疎行列を係数とする連立一次方程式の反復解法とその収束特性について述べる。(1)式の k を拡散係数、 $-k\nabla u$ を拡散項、 $\mathbf{b}u$ を移流項という。

移流項が0の拡散方程式ならば離散化行列は対称となる。この場合には ICCG 法と ICCG 法に Gustafsson 流の変更を施した MICCG 法を使うのがよいとされている¹⁾。

移流項が0でなければ離散化行列は非対称となる。移流項が拡散項に比べて大きい場合は物理現象を正確に再現するためと、数値計算の安定化のために離散化の網目を小さくする必要がある。網目を小さくすると連立一次方程式の元数は大きくなるので、必要なメモリ容量の少ない反復解法が必要となる。

本論文では、非対称行列に対する反復解法として CR 法 (Conjugate Residual method: 共役残差法)、BCG 法 (Bi-Conjugate Gradient method: 双共役勾配法)、CGS 法 (Conjugate Gradient Squared meth-

od: 自乗共役勾配法) をとりあげ、前処理として Meijerink の不完全 LU 分解や Gustafsson 流の変更を施してから用いる。

これらの算法は、各種の反復解法を実際に試し、問題のある算法を外して残った有望と思われる算法である。SOR 法や SLOR 法は拡散係数に段差があると対称行列の場合でも収束しないことがあるため考察の対象から外した。非対称な係数行列を A として、 $A^T A$ に対する ICCG 法なども本論文でとりあげた算法より劣る。前処理付きのチェビシェフ反復法では最適加速係数を決めるために固有値の分布をみる必要があるが、自作のプログラムではそのための計算時間がばらつくので良い悪いの波がある。

本論文では、境界条件、セルの縦横比、差分のとりかた、セル・ペクレ数、前処理などが異なることでこれらの算法の収束特性がどのように変化するかに注目する。

直接解法では行列の性質によらずほぼ一定の時間で解が求められたが、反復解法では問題によって収束特性が異なるため問題に合わせた解法を用いる必要がある。

対象とする場は図1のような、流れが与えられた3次元の場である。まず各辺の分割数を M_x, M_y, M_z とし、図2のように x 軸に沿って番号が続くよう未知数 u に番号付けを行う。 x 方向の節点数を $m (=M_x)$ 、 y 方向の節点数を $n (=M_y)$ 、全節点数を $N (=M_x \cdot M_y \cdot M_z)$ とする。流れは $\mathbf{b} = (0, 0, b)^T$ 、各辺のきざみ幅が等しく h の場合とする。(1)式の積分形

† On the Convergence of BCGLike Methods for Convective Diffusion Equations by HIDEHIKO HASEGAWA and KENRO MURATA (University of Library and Information Science).

** 図書館情報大学

* 現在 神奈川大学

$$\int_{\Gamma} (-k\nabla u + bu) \cdot n ds = \int_{\Omega} f(x) dx \quad (2)$$

を用いて中心差分で離散化すると

$$hk \left\{ - \left(1 + \frac{bh}{2k} \right) u_{i-mn} - u_{i-m} - u_{i-1} + 6u_i - u_{i+1} - u_{i+m} - \left(1 - \frac{bh}{2k} \right) u_{i+mn} \right\} = f_i h^3 \quad (3)$$

が得られる。(3)は非対称な方程式で u_{i-mn} , u_{i-m} , u_{i-1} , u_i , u_{i+1} , u_{i+m} , u_{i+mn} の係数にだけ非零要素が現れる。それらの係数を左から順に a_i , b_i , c_i , d_i (対角), e_i , f_i , g_i とし、プログラム上では1次元配列に格納する。

なお、本論文に関する素案とプログラミング技法については文献 2) に詳しく書いた。

2. 前処理付き反復法

はじめに非対称行列に対する代表的な反復解法として CR 法, BCG 法, CGS 法の算法を示す。次にこれらの算法に対する2種類の前処理, Meijerink の不完全 LU 分解と Gustafsson 流の変更を示す。

2.1 非対称行列に対する反復解法

CR 法は残差の内積 $(r, r) = (Ax - b, Ax - b)$ を最小にする x を逐次探索する算法で, Orthomin(1)とも呼ばれる^{1), 3), 4)}。アルゴリズムを以下に示すが, 実際には演算量を減らすため Ap_i を q とおいてから用いる。

```

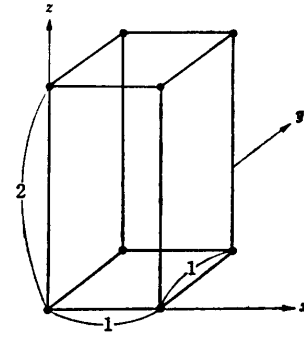
x0 を用意; r0 = b - Ax0; p0* = r0; i = 0
while ||ri|| > ε · ||b|| do
    αi = (ri, Api) / (Api, Api)
    xi+1 = xi + αi pi; ri+1 = ri - αi Api
    βi = -(Ari+1, Api) / (Api, Api)
    pi+1 = ri+1 + βi pi; i = i + 1
    
```

BCG 法は CG 法の拡張で, $Ax = b$ と双対な方程式 $A^T x^* = b^*$ を組み合わせて解を求める算法である^{1), 5), 6)}。アルゴリズムを以下に示す。

```

x0 を用意; r0 = b - Ax0; r0* = p0* = p0 = r0; i = 0
while ||ri|| > ε · ||b|| do
    αi = (ri, ri*) / (Api, pi*)
    xi+1 = xi + αi pi; ri+1 = ri - αi Api
    ri+1* = ri* - αi ATpi*
    βi = (ri+1, ri+1*) / (ri, ri*)
    pi+1 = ri+1 + βi pi; pi+1* = ri+1* + βi pi*
    i = i + 1
    
```

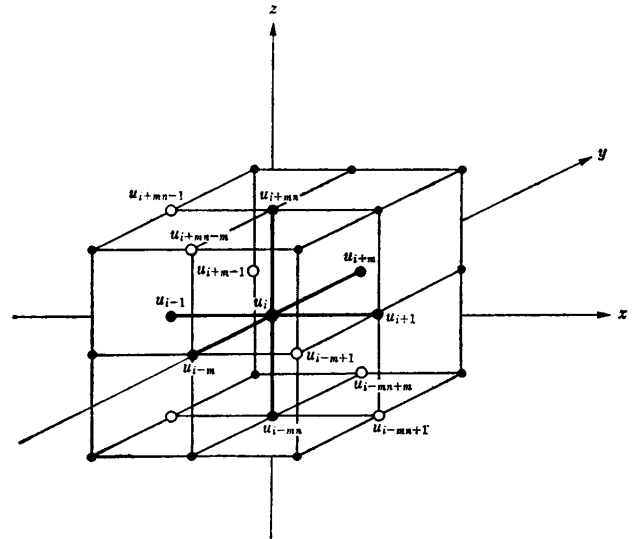
CGS 法はデバイスシミュレーションの分野でよく



境界条件: $x=0, y=0, z=0$ でディリクレ条件 $u|_{\Gamma_1} = 0$
 $x=1, y=1, z=2$ でノイマン条件 $\nabla u \cdot n|_{\Gamma_2} = 0$
 z 軸方向についてのみ流れがあるもの $b = (0, 0, b)^T$ とする。

図 1 3次元移流拡散問題

Fig. 1 3-Dimensional convective diffusion problems.



u_i の周囲にある未知数の位置関係を示す。

図 2 差分法による近似

Fig. 2 The discretization with FDM.

用いられる算法で, BCG 法の r_k, p_k の生成多項式を $R_k(A), P_k(A)$ とし,

$$f_k = R_k^2(A)r_0$$

$$\hat{p}_k = P_k^2(A)r_0$$

を導入して

$$f_k = b - A\hat{x}_k$$

とすることで導出される。ただし $\hat{x}_0 = x_0, f_0 = r_0, r_0^* = r_0$ とする。 k 回の反復で BCG 法の残差ノルムが

$$\|r_k\| = \|R_k(A)r_0\| \ll \|b\|$$

となったとすると, CGS 法の残差ノルム

$$\|f_k\| = \|R_k^2(A)r_0\|$$

は $\|r_k\|$ よりも小さくなる. このため CGS 法は BCG 法よりも速い収束が期待される^{6),7)}. CGS 法のアルゴリズムを以下に示す.

```

 $\hat{x}_0$  を用意;  $f_0 = b - A\hat{x}_0$ ;  $p_0 = e_0 = f_0$ ;  $i = 0$ 
while  $\|f_i\| > \varepsilon \cdot \|b\|$  do

```

```

 $\alpha_i = (f_0, f_i) / (f_0, A p_i)$ 
 $h_{i+1} = e_i - \alpha_i A p_i$ ;  $\hat{x}_{i+1} = \hat{x}_i + \alpha_i (e_i + h_{i+1})$ 
 $f_{i+1} = f_i - \alpha_i A (e_i + h_{i+1})$ 
 $\beta_i = (f_0, f_{i+1}) / (f_0, f_i)$ 
 $e_{i+1} = f_{i+1} + \beta_i h_{i+1}$ 
 $p_{i+1} = e_{i+1} + \beta_i (h_{i+1} + \beta_i p_i)$ ;  $i = i + 1$ 

```

CGS 法は BCG 法とほぼ同じ演算量で, A^T に関する演算が不要になる.

2.2 Meijerink の不完全 LU 分解

方程式 $Ax = b$ を解くために, 適当な行列 M の逆行列を左から作用させ, 問題を

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (4)$$

と変形する. (4) に対する反復法を前処理付き反復法といい, 前処理 (Precondition) の P をそれぞれの解法の前につけて, PCR 法, PBCG 法, PCGS 法と呼ぶ. $M^{-1}A$ が単位行列に近いと収束が速くなる. 前処理としては $M = A$ で, M^{-1} が簡単に作用させられ, $M^{-1}A$ の固有値分布に密集固有値があるのがよい¹⁾.

代表的な前処理は Meijerink の不完全 LU 分解を用いる方法で, A を

$$A = LDU + R$$

(L : 下三角行列, D : 対角行列, U : 上三角行列) と分解して LDU を M とする^{1),9)}. 不完全 LU 分解 (Incomplete LU) を前処理とした算法を ILUCR 法, ILUBCG 法, ILUCGS 法と呼ぶ.

不完全 LU 分解が安定に行われるための十分条件は, A が M -行列であることで, M -行列の必要条件は

$$a_{ii} > 0, a_{ij} \leq 0 \quad (j \neq i), A^{-1} > 0$$

である. M -行列の条件を必ず満足する必要はないが, この程度の条件は満足することが望ましい. 差分法で離散化された (3) の方程式ではセル・ペクレ数

$$Pec = |b|h/k \leq 2$$

であればよい. セル・ペクレ数が 2 以上の場合は場の物理的状況をうまく表していないため問題である.

Meijerink の不完全 LU 分解では

$$G \supseteq \{(i, j); a_{ij} \neq 0\}$$

なる格子集合 G を指定して $(i, j) \in G$ のときだけ l_{ij} と u_{ij} を作る. G を大きくするとメモリが多く必要にな

るため, 普通は一番単純な

$$G = \{(i, j); a_{ij} \neq 0\}$$

とする. L と U は A をそのまま使い, 対角行列 D の要素 \tilde{d}_i を

$$l_{ii} \tilde{d}_i u_{ii} = l_{ii} = u_{ii} \quad (5)$$

となるように決める⁹⁾. 1 章で述べたように A の要素を $a_i, b_i, c_i, d_i, e_i, f_i, g_i, D$ の要素を \tilde{d}_i と書くと, $u_{ii} = \tilde{d}_i^{-1}$ から

$$\begin{aligned} \tilde{d}_i^{-1} = u_{ii} = d_i & \\ & - a_i \tilde{d}_{i-mn} g_{i-mn} \\ & - b_i \tilde{d}_{i-m} f_{i-m} \\ & - c_i \tilde{d}_{i-1} e_{i-1} \end{aligned} \quad (6)$$

となる.

不完全 LU 分解を前処理として用いた反復法では, 最初に 1 回だけ不完全 LU 分解を行い, 反復の過程では $(LDU)^{-1}$, $(LDU)^T$ を作用させる.

2.3 Gustafsson 流の変更

係数行列が対称な場合には, ICCG 法に Gustafsson 流の変更を加えた MICCG 法が安定で速く収束する. 非対称行列の場合にも Gustafsson 流の変更を施した MILUCR 法, MILUBCG 法, MILUCGS 法が考えられる¹⁾.

Gustafsson 流の変更では, 近傍の点では値が等しいとみなして, LDU を作ったときに fill in となる部分のウェイトを対角要素に負わせる. Meijerink の不完全 LU 分解の結果から作った LDU に非零要素が湧き出して fill in となるのは

$$\begin{aligned} u_{i-mn+1}, u_{i-mn+m}, u_{i-m+1}, u_{i+m-1}, \\ u_{i+mn-m}, u_{i+mn-1} \end{aligned}$$

の係数である. これらの関係を図 2 に示す. fill in に対応した量をそのまま対角要素から取り去ると M -行列でなくなる可能性があるので, M -行列性を崩さないように対角要素に移すウェイトを加減する. これから Gustafsson のアイデアは

$$\begin{aligned} \tilde{d}_i^{-1} = (1 + \varepsilon) d_i - a_i \tilde{d}_{i-mn} g_{i-mn} - b_i \tilde{d}_{i-m} f_{i-m} \\ - c_i \tilde{d}_{i-1} e_{i-1} - a_i \tilde{d}_{i-mn} (e_{i-mn} + f_{i-mn}) \\ - b_i \tilde{d}_{i-m} (e_{i-m} + g_{i-m}) - c_i \tilde{d}_{i-1} (f_{i-1} + g_{i-1}) \end{aligned} \quad (7)$$

と書ける⁹⁾. (7) はセル・ペクレ数を小さくしないと有効でない¹⁰⁾. Gustafsson の変更にはいろいろな変種があるが¹⁰⁾⁻¹³⁾, 文献 13) の

$$\begin{aligned} \tilde{d}_i^{-1} = d_i - a_i \tilde{d}_{i-mn} g_{i-mn} - b_i \tilde{d}_{i-m} f_{i-m} \\ - c_i \tilde{d}_{i-1} e_{i-1} \\ - u \{ a_i \tilde{d}_{i-mn} (e_{i-mn} + f_{i-mn}) \} \end{aligned}$$

表 1 非対称行列に対する反復解法
Table 1 Iterative methods for nonsymmetric matrices.

| | | PCGS | PBCG | PCR |
|-------|--------------------------|--------|--------|---------|
| 作業用領域 | | 7N | 7N | 5N |
| 前処理 | LDU 分解 | 1 | 1 | 1 |
| | (LDU) ⁻¹ をかける | 2 | 2 | 3 |
| | A をかける | 1 | 1 | 2 |
| | ループ | 2 | 2 | 2 |
| 反復 | (LDU) ⁻¹ をかける | 2 | 1 | 1 |
| | (LDU) ^{-T} をかける | — | 1 | — |
| | A をかける | 2 | 1 | 1 |
| | A ^T をかける | — | 1 | — |
| | ループ | 4~5 | 4~5 | 4~5 |
| | CPU タイム | 1.7(1) | 1.7(1) | 1(0.58) |

$$+ b_i \tilde{d}_{i-m}(e_{i-m} + g_{i-m}) + c_i \tilde{d}_{i-1}(f_{i-1} + g_{i-1}) \quad (8)$$

を採用する。u の決め方については 3 章で述べるが、非対称性の度合いによって u を変える必要がある。

Gustafsson 流の変更は不完全 LU 分解の対角行列 D を少し変えるだけで、反復の過程は Meijerink の不完全 LU 分解による前処理と同じである。これらの前処理を用いた時の作業用領域、演算の種類と回数を表 1 に示す。作業用領域は PCR 法が一番少なく 5N ワード、PBCG 法と PCGS 法は 7N ワードである。7 点差分で離散化された係数行列をベクトルにかけるためには

$$\text{do } i=1, N \\ (Ax)_i = a_i x_{i-mn} + b_i x_{i-m} + c_i x_{i-1} + d_i x_i + e_i x_{i+1} + f_i x_{i+m} + g_i x_{i+mn}$$

とすればよく、7N 回の乗算と 6N 回の加算が必要になる。その他の演算についても同様に見積もることができる²⁾。汎用計算機上で倍精度演算を行うと、反復 1 回あたり、PBCG 法と PCGS 法は PCR 法の約 1.7 倍の CPU タイムがかかる。PCGS 法の演算の種類は PCR 法と同じである。PCGS 法の演算量は PBCG 法とほぼ同じだが、A^T に関する演算が不要なので PCGS 法のプログラムは PBCG 法のプログラムよりも簡単になる。

ベクトル計算機を使うときには (LDU)⁻¹, (LDU)^{-T} を作用させる部分が問題となるが、リストベクトルを使えばベクトル計算機向きのプログラムを作ることができる¹²⁾。

3. 数値実験

図 1 に示した各辺の長さが 1, 1, 2 の直方体の場で境界条件、セルの縦横比、差分のとりかたなどを変えて係数行列を作り、セル・ペクレ数 0 から 8 の範囲で各算法の有効性を調べた。

境界条件は

$$x=0, y=0, z=0 \text{ のときディリクレ条件: } u|_r=0 \\ x=1, y=1, z=2 \text{ のときノイマン条件: } \nabla u \cdot n|_r=0$$

の 3 面固定境界と

$$z=2 \text{ のときだけがノイマン条件}$$

の 5 面固定境界の 2 通りとした。

分割は (M_x, M_y, M_z) で表し、(20, 20, 40) ならば、x 軸方向と y 軸方向の分割数が 20、z 軸方向の分割数が 40 で、メッシュは一辺が 0.05 の立方体となる。

流れは z 方向にだけ与える。流れは x=1, y=1 の辺上を 1 とし内部では 5 次関数

$$1 - \{(1-x)^5 + (1-y)^5\}$$

で減衰させ、セル・ペクレ数は x=1, y=1 の辺上の値で代表させる。

3 面固定境界では拡散係数 k がすべて 1 の一様な場と、流れによって拡散係数が変化する“乱流場”を扱う。“乱流場”では乱流流れ場における拡散のプロフィールを定性的に表すため、速度勾配の急なところでは拡散係数を大きく、壁際では粘性底層を意識して再び拡散係数を小さくした¹⁴⁾。“乱流場”の拡散係数 k は流れの減衰率から以下のように定める。

$$0.9 \leq \text{減衰率}, \text{減衰率} < 0.1 \quad k=1 \\ 0.7 \leq \text{減衰率} < 0.9, 0.1 \leq \text{減衰率} < 0.3 \quad k=2 \\ 0.3 \leq \text{減衰率} < 0.7 \quad k=8$$

流れの減衰率と“乱流場”の拡散係数を図 3 に示す。

Gustafsson 流の変更を用いる u はセル・ペクレ数 Pec で流れの強さを代表させて

$$u = 0.95 \times \max(0, 1 - Pec/4) \quad (9)$$

とした。

“乱流場”で分割 (20, 20, 40)、セル・ペクレ数 2 のときの相対残差ノルムの減少のしかたを図 4 に示す。PCR 法は各回の反復で残差を最小にするため、相対残差ノルムの減少が直線的になる。PBCG 法、PCGS 法は相対残差ノルムの減少が直線的にならず、特に PCGS 法は減少のしかたに大きな波がある。これは PBCG 法の残差ベクトルが $r_k = R_k(A)r_0$ なのに対して PCGS 法の残差ベクトルは $r_k = R_k^2(A)r_0$ となるの

が原因と考えられる。この傾向は他の場合でも同様である。解の初期値は0とした。

3.1 境界条件依存性

分割 (20, 20, 40) とし、相対差ノルムが 10^{-8} になる

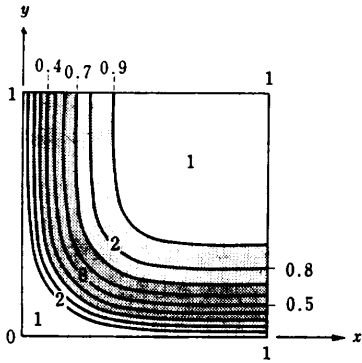


図3 流れの減衰率 (等高線) と「乱流場」の拡散係数 k
 Fig. 3 Damping ratio of flow and diffusion coefficients of "Turbulent" case.

までの反復回数がセル・ペクレ数によってどう変化するかを図5~図8に示す。5面固定境界よりも3面固定境界のほうが、一様な場よりも「乱流場」のほうが収束しにくい。PCR法は場やセル・ペクレ数によって収束までの反復回数にかなりの差があるが、PBCG法とPCGS法は安定している。汎用計算機の場合における1反復あたりのCPUタイムはPCR法がPBCG法やPCGS法の約0.58倍なので、比較のためにPCR法の反復回数を0.58倍に補正したものを図6に示す。

Gustafsson流の変更を用いることで収束までの反復回数が約2/3になる。PCR法ではセル・ペクレ数依存性を弱めて収束を安定化させている。いずれの場合にも(8)と(9)で定めたGustafsson流の変更は有効である。

PCGS法はPBCG法の約2/3の反復回数で収束し、収束までの反復回数とCPUタイムが最も少ない。PBCG法はPCR法よりも収束までの反復回数が少ないが、1反復当たりPCR法の1.7倍のCPUタイム

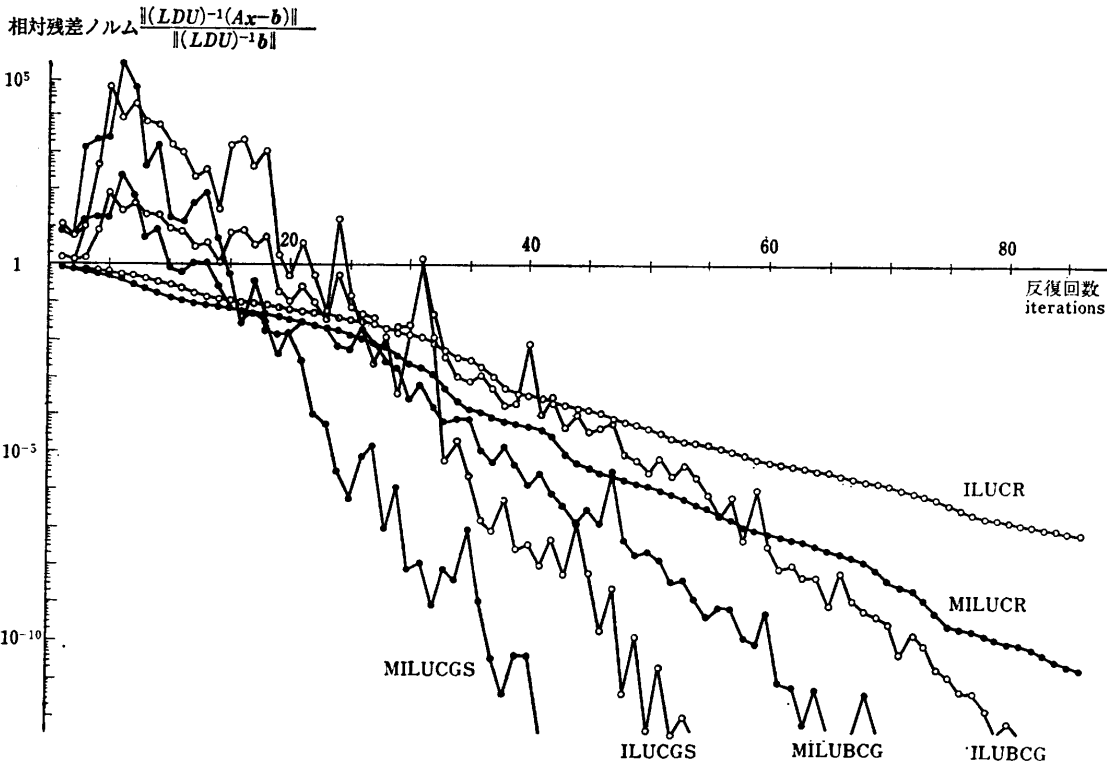


図4 相対残差ノルムの減少のしかた
 (20, 20, 40), $N=16000$, セルペクレ数=2, 「乱流場」
 Fig. 4 Convergence curves.
 (20, 20, 40), $N=16000$, Cell Peclet Number=2, "Turbulent"

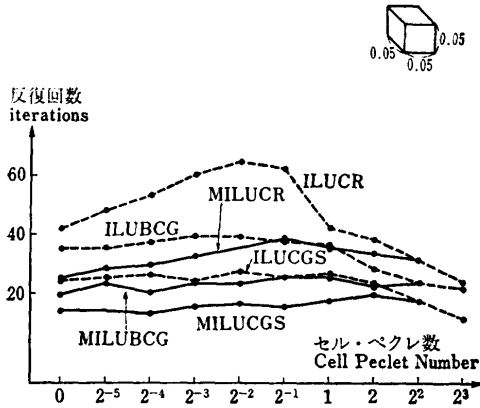


図 5 5面固定, (20, 20, 40), $N=14440$
 Fig. 5 5 Dirichlet surface boundaries, (20, 20, 40), $k=\text{const}$, $N=14440$.

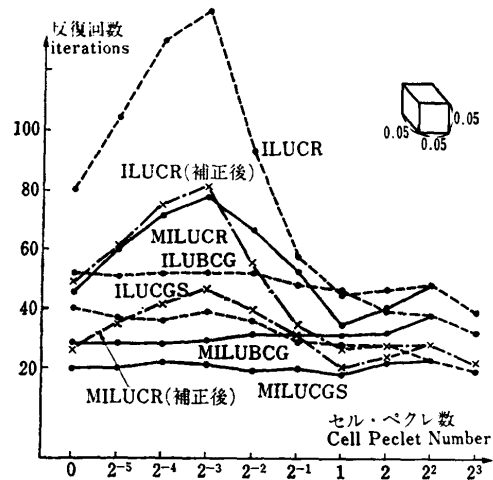


図 6 3面固定 一樣な場, (20, 20, 40), $N=16000$
 Fig. 6 3 Dirichlet surface boundaries, (20, 20, 40), $k=\text{const}$, $N=16000$.

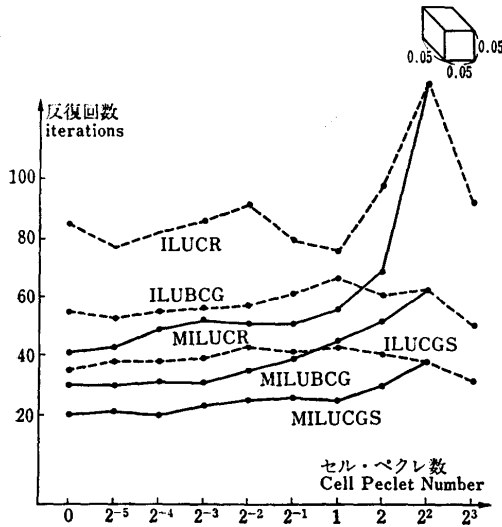


図 7 3面固定 “乱流場”, (20, 20, 40), $N=16000$
 Fig. 7 3 Dirichlet surface boundaries, (20, 20, 40), “Turbulent”, $N=16000$.

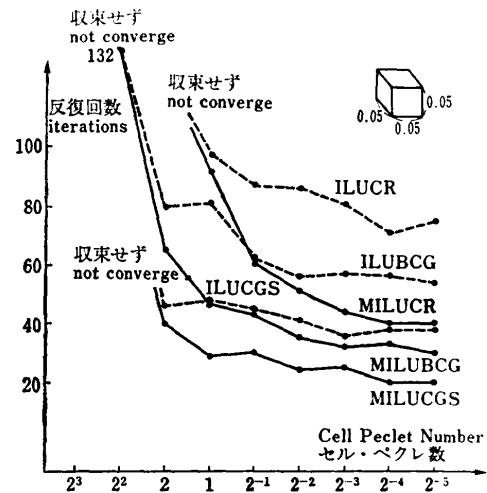


図 8 3面固定 逆流 ($b < 0$), “乱流場”, (20, 20, 40) $N=16000$
 Fig. 8 3 Dirichlet surface boundaries, opposite flow ($b < 0$), “Turbulent” (20, 20, 40), $N=16000$.

を必要とするため、全体の CPU タイムは PCR 法よりも多くなる。

流れを逆 ($b < 0$) にすると、セル・ペクレ数が2より大きい部分で収束までの反復回数が急激に増大し、収束しないこともある¹⁵⁾。

今後は、収束が遅くテスト問題として難しい“乱流場”に話を限定する。

3.2 セルの縦横比依存性

セルの縦横比を変えることで収束までの反復回数がどう変化するかを図9～図11に示す。本論文で用いた算法では元数が2倍になると、1反復当たりの CPU タイムも約2倍になるので、全体の CPU タイムは方

程式の元数と反復回数を合わせて考える必要がある。

立方体のセルを基準にして流れの方向に分割を細かくすると反復回数が増加し(図9参照)、分割を粗くしても反復回数は減少しない²⁾。

流れと垂直な方向(x 軸方向)に分割を細かくすると、流れの方向に分割を細かくしたときよりも反復回数が増加する(図10参照)。分割を粗くしても反復回数は減少しない²⁾。

元数を同じにしたままセルを変形させても反復回数は増加する(図11参照)。

これから、セルが立方体だと収束が速いことと、

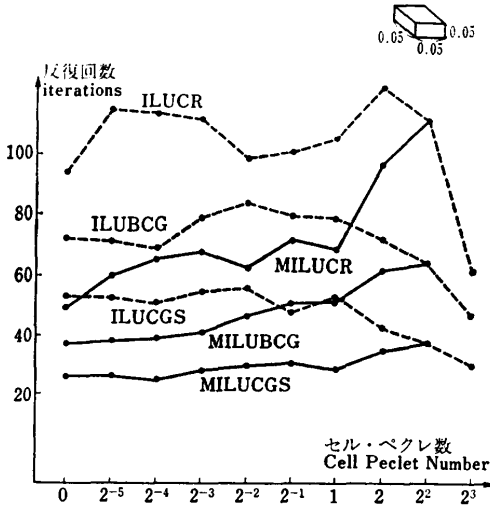


図 9 流れの方向に分割を細かくした“乱流場”, (20, 20, 80), $N=32000$
 Fig. 9 “Turbulent”, (20, 20, 80), $N=32000$

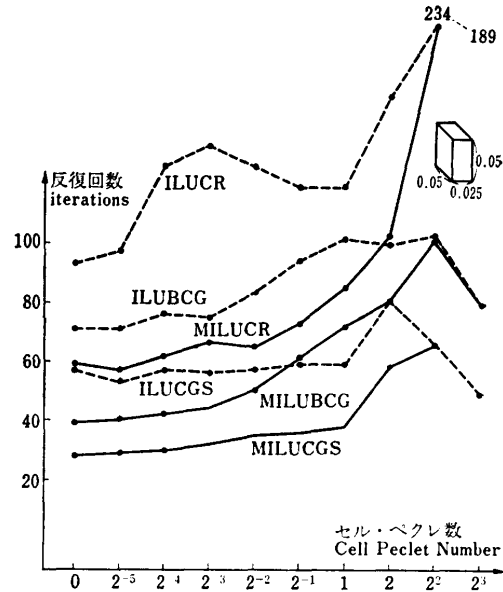


図 10 流れと垂直な方向に分割を細かくした“乱流場”, (40, 20, 40), $N=32000$
 Fig. 10 “Turbulent”, (40, 20, 40), $N=32000$

PCR 法は不安定で収束しないこともあることがわかる。セルが立方体のときには対称性が高く、密集固有値が増えることが収束を速めていると考えられる。これらの場合にも(8)と(9)で定めた Gustafsson 流の変更は有効である。

3.3 差分のとりかた

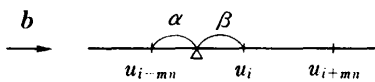
数値計算上の安定性を得るために風上差分(上流差分)を用いて離散化をすることがある。M-行列の条件を満足させるために部分的風上差分を使うこともある。ここでは中心差分, 部分的風上差分を用いて離散化したときの収束特性を調べる。

3次元問題を風上差分で離散化すると

$$-\left(1 + \frac{bh}{k}\right)u_{i-mn} - \dots + \left(6 + \frac{bh}{k}\right)u_i - \dots - u_{i+mn} \quad (10)$$

となり, M-行列の条件を常に満足するため数値計算上は都合がよいが, 物理現象の近似としては問題がある。特に壁面が重要な伝熱問題などでは大きな問題となる。誤差の面でも中心差分が $o(h^2)$ ののに対して, 風上差分では $o(h)$ と精度的に劣る。

そこで部分的風上差分を導入する。流れが次のように与えられているとする。



α, β を以下のように定めて ($\alpha + \beta = 1$)

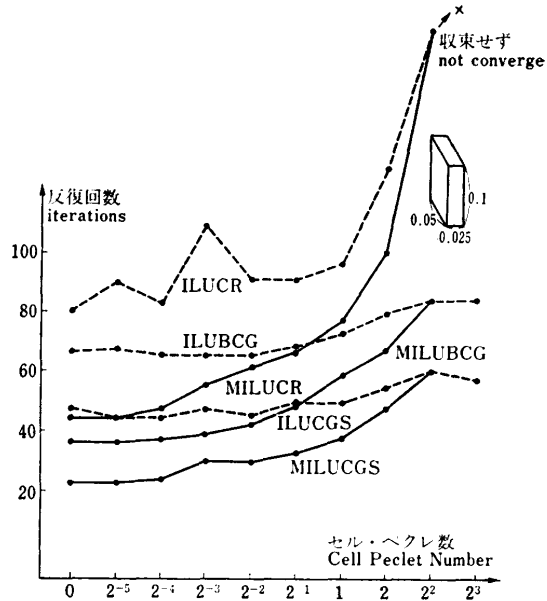


図 11 元数 $N=16000$ のままメッシュを変形, “乱流場”, (40, 20, 20), $N=16000$
 Fig. 11 “Turbulent”, (40, 20, 20), $N=16000$

- $\alpha = \beta$: 中心差分
- $\alpha < \beta$: 部分的風上差分
- $\alpha = 0, \beta = 1$: 風上差分

流速を近似する点を連続的に変化させる。移流項は

$$-\frac{\beta}{\alpha + \beta}u_{i-mn} + \frac{\beta - \alpha}{\alpha + \beta}u_i + \frac{\alpha}{\alpha + \beta}u_{i+mn} \quad (11)$$

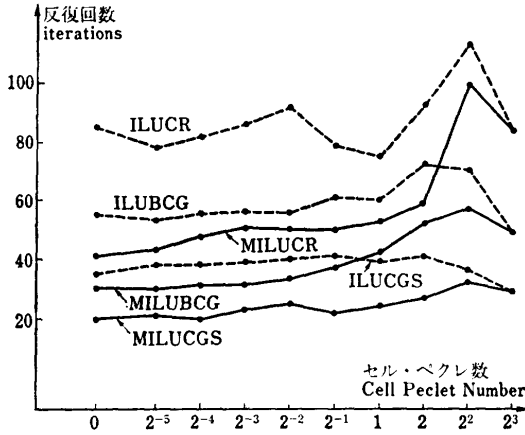


図 12 部分的風上差分 $\omega=0.2$ “乱流場”,
(20, 20, 40), $N=16000$
Fig. 12 Partial upwind difference $\omega=0.2$
“Turbulent”, (20, 20, 40), $N=16000$.

となる。(11)に $\omega=(\beta-\alpha)/(\alpha+\beta)$ を導入して

$$-\frac{1+\omega}{2}u_{i-mn} + \omega u_i + \frac{1-\omega}{2}u_{i+mn} \quad (12)$$

とする。(12)では $\omega=0$ が中心差分, $\omega=1$ が風上差分, その間が部分的風上差分となる。 $\omega=0, 0.2, 1$ の3種類の離散化を行い, 得られた係数行列に前処理付き反復法を適用する¹⁶⁾。

Gustafsson 流の変更の u は ω にも依存させて

$$u=0.95 \times \max(0, 1-Pec/(4+6\omega)) \quad (13)$$

とする。結果を図 12, 図 13 に示す。

全体的に風上差分を用いると速く安定に収束する。PCR 法のセル・ペクレ数依存性は風上差分を導入しても変わらないが, セル・ペクレ数が2以上の場合には風上差分を用いた効果がある。

しかし今回とりあげた問題では, セル・ペクレ数8程度までは中心差分でも収束するため, 数値計算上の安定性を得るために風上差分を用いる必要はない。

4. ま と め

非対称行列に対して PCR 法, PBCG 法, PCGS 法を適用し, 境界条件, セルの縦横比, 差分のとりかたなどを変えて収束特性を調べた。その結果は次のようにまとめられる。

① 場が5面固定境界から3面固定境界, 一様な場から“乱流場”になると, どの解法も収束までの反復回数が増加する。

② PCR 法は収束までの反復回数がセル・ペクレ数に大きく依存するが, PCGS 法と PBCG 法は安定

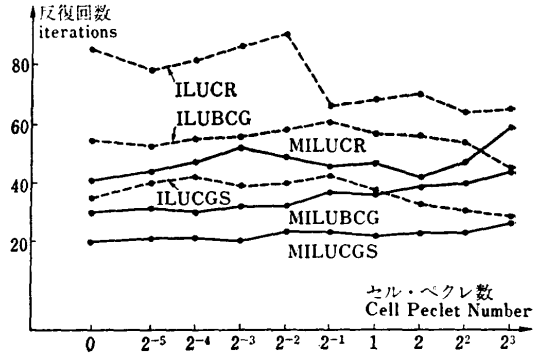


図 13 風上差分 $\omega=1.0$ “乱流場”, (20, 20, 40),
 $N=16000$
Fig. 13 Upwind difference $\omega=1.0$ “Turbulent”,
(20, 20, 40), $N=16000$.

である。PCGS 法は収束までの反復回数, GPU タイムともいちばん少ない。

③ (8)と(13)で定めた Gustafsson 流の変更は非対称行列にも有効であり, 収束までの反復回数を約2/3に減少させる。

④ セルの形状が立方体のときに収束が速い。PCR 法はセルの縦横比によっても収束までの反復回数が大きく変化する。

⑤ M-行列の条件が保証されなくてもセル・ペクレ数が8程度までは収束する。今回試行した問題の範囲では, 精度を落として風上差分を用いるメリットはない。

以上を総括すると「3次元移流拡散方程式を差分法で離散化して得られたセル・ペクレ数が2以下の非対称疎行列について, PCGS 法や PBCG 法はかなり広範囲の問題を安定かつ高速に解くことができる実用的な算法である。特に Gustafsson 流の変更を施した MILUCGS がよい。」といえる。

対象とする場によっては結論が異なるかもしれない。しかし, ここでの実験に限っても PCR 法には問題がある。したがって, 今後は PCR 法を検討の対象から外すことにしたい。

参 考 文 献

- 1) 村田健郎: 前処理付き共役勾配法・共役残差法, 情報処理, Vol. 27, No. 5, pp. 498-507 (1986).
- 2) 長谷川秀彦, 村田健郎: PCR 法, PBCG 法と PCGS 法の性能比較, スーパーコンピュータと大型数値計算 (bit 臨時増刊), pp. 52-60, 共立出版, 東京 (1987).
- 3) Stiefel, E.: Relaxationsmethoden bester Strategie zur Lösung linearer Gleichungssysteme,

- Commentarii Mathematici Helvetici*, Vol. 29, pp. 157-179 (1955).
- 4) Eisenstat, S.C., Elman, H.C. and Shultz, M.H.: Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 20, No. 2, pp. 345-357 (1983).
 - 5) Fletcher, R.: Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, Watson, G. A., ed., *Numerical Analysis (Proc. of the Dundee Conf. on Numerical Analysis, 1975)*, *Lecture Notes in Math.*, 506, pp. 73-89, Springer-Verlag (1976).
 - 6) 名取 亮: BCG 法と CGS 法, 数理解析研究所講究録 613, pp. 135-143 (1987).
 - 7) den Heijer, C.: Preconditioned Iterative Methods for Nonsymmetric Linear Systems, *Proc. Int. Conf. on Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, pp. 267-285 (1984).
 - 8) Meijerink, J. A. and van der Vorst, H. A.: An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix, *Math. Comp.*, Vol. 31, pp. 148-162 (1977).
 - 9) Gustafsson, I.: A Class of First Order Factorization Methods, *BIT*, Vol. 18, pp. 142-156 (1978).
 - 10) 村田健郎: CR(k) 法の加速について, 数理解析研究所講究録 514, pp. 92-109 (1984).
 - 11) 村田健郎: PCR/PBCG 法における Gustafsson 流の改良について, 数理解析研究所講究録 548, pp. 242-255 (1985).
 - 12) 後 保範: ベクトル計算機向き ICCG 法, 数理解析研究所講究録 514, pp. 110-134 (1984).
 - 13) 長谷川秀彦, 前田はるみ, 村田健郎: ILUCR/ILUBCG, MILUCR/MILUBCG の収束特性について, 情報処理学会数値解析研究会, 85-NA-13, pp. 1-10 (1985).
 - 14) 長谷川秀彦, 村田健郎: PBCG 法・PCR 法を用いた部分構造反復法, 「共役勾配法とスーパーコンピュータ」, *Advances in Numerical Methods for Large Sparse Sets of Linear Equations*, No. 2, pp. 69-78 (1986).
 - 15) 長谷川秀彦, 村田健郎: ILUBCG/ILUCR, MILUBCG/MILUCR 法の性能比較, 「共役勾配法とその応用」, *Advances in Numerical Methods for Large Sparse Sets of Linear Equations*, No. 1, pp. 62-71 (1986).
 - 16) 長谷川秀彦, 村田健郎: 非対称行列に対する反復解法の収束特性, 「非対称行列系の反復解法とその応用」, *Advances in Numerical Methods for Large Sparse Sets of Linear Equations*, No. 3, pp. 9-18 (1987).

(昭和 63 年 8 月 29 日受付)
(平成 元年 2 月 14 日採録)



長谷川秀彦 (正会員)

1958 年横浜生. 1980 年筑波大学第 1 学群自然科学類 (数学専攻) 卒業. 1983 年同大学院社会工学研究科 (経営工学専攻) 中退. 同年図書館情報大学助手. 学術修士. 現在, 連立一次方程式の解法, 固有値解析などの線形数値計算法に興味を持つ. ACM 会員.



村田 健郎 (正会員)

1945 年東京帝国大学第二工学部航空原動機学科卒業. 1951 年東京大学理学部数学科卒業. 東京大学工学部助教授, (株) 日立製作所中央研究所技師長, 図書館情報大学図書館情報学部教授を経て 1989 年 4 月より神奈川大学理学部教授. 理学博士. 専門は線形数値計算法. 主要著書「スーパーコンピューター科学技術計算への適用」(共著) 丸善, 「線形代数と線形計算法序説」サイエンス社, 「工学における数値シミュレーション—スーパーコンピュータの応用—」(共著) 丸善. 流体力学会会員.