

ステファン問題の有限要素解析に現れる 非対称行列に対する PCR 法†

須賀伸介†† 南知行†††* 森正武††††

ステファン問題を有限要素近似したときに現れるような疎な非対称行列を係数に持つ連立一次方程式を解くために PCR(1)法(ILUCR(1)法)を効率的に適用することを考察する。この問題では、時間によって変化する係数行列を持つ連立一次方程式を多数回解くことが必要になるが、各時刻ごとの係数行列の変化は小さい。また、PCR(1)法は、不完全 LU 分解の計算に多くの時間を要する。以上のことを考慮して、前処理のため、PCR(1)法は、不完全 LU 分解は初期時刻においてのみ行い、この L と U の積の逆 $(LU)^{-1}$ を以後すべての時刻における前処理に用いる方法を採用する。数値実験の結果、PCR(1)法の初期値を1段階前の時間ステップの解に選ぶと、収束に必要な反復回数は各時刻でほぼ一定で、われわれの方法は非常に効率的であることがわかった。この理由を調べるために、各時刻ごとに係数行列の固有値分布の変化と PCR(1)法の残差ノルムの減少の様子を調べた。その結果、前半の時間ステップでは前処理の効果によって固有値の縮重度が高く、残差ノルムの減少が速くなること、後半の時間ステップでは固有値の縮重度は低く、残差ノルムの減少は遅くなるが、初期残差ノルム自体が小さくなっていくために残差ノルムの減少の遅さをカバーしていることがわかった。

1. はじめに

本研究は、有限要素法を用いた2次元1相ステファン問題の数値解法に関するものである。特に、各時刻ごとの解析において現れる連立一次方程式の反復解法の解の収束について、主として数値実験と固有値解析の立場から詳しく考察する。

われわれの問題は、1: 時間に依存する自由境界問題であることから、各時刻において少しずつ変化する係数行列を持つ連立一次方程式を解くこと、2: 各時刻において現れる連立一次方程式の係数行列が疎な非対称行列であること、の二点に特徴がある。

上記2の性質により、連立一次方程式の反復解法に ILUCR(1)法 (Incomplete LU decomposition Conjugate Residual method の略) を採用する。疎な対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の反復解法に対しては、元の方程式に、係数行列の不完全 Cholesky 分解による前処理を施した後に、CG 法を適用する ICCG 法¹⁾ (Incomplete Cholesky decomposition

Conjugate Gradient method の略) が種々の問題に対して非常に有効な手段であることが確認されている²⁾。これに対して、疎な非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の反復解法に対しては、元の方程式に、不完全 LU 分解 (以後 ILU 分解と書く) による前処理を施した後、CR(k)法³⁾、あるいは BCG 法⁴⁾ (Bi-Conjugate Gradient method の略) を適用する ILUCR(k)法、あるいは ILUBCG 法が実用的であることが知られている⁵⁾。ILUCR(1)法 (以後 PCR(1)法 (Preconditioned Conjugate Residual method の略) と書く) はその中でアルゴリズムが比較的簡単で計算量が少なく済む方法である。

上記1の性質より、各時刻において新しい係数行列を計算する必要が生ずるため、固定領域の問題に比べて計算量は多くなる。しかし、各時刻における連立一次方程式の解法を工夫すれば、初期時刻から目的の時刻までの解析を効率的に行うことができる。すなわち、性質1で述べたように、各時刻ごとの係数行列の変化は小さいので、一度ある時刻における係数行列に対して ILU 分解を計算しておけば、以後当分の間この左下三角行列 L と右上三角行列 U の積の逆 $(LU)^{-1}$ が十分な preconditioner としての役割を果たすことが期待できる。PCR(1)法の計算量の中で、ILU 分解の計算量がかなりの部分を占める。したがって、このような方法をとれば計算時間を短縮できることになる。実際、ステファン問題に対して、各時刻ごとに ILU 分解を計算する必要がないことは確認されている⁶⁾。

† An Application of the PCR Method to Sparse Non-symmetric Systems of Linear Equations Appearing in the Finite Element Approximation of the Stefan Problem by SHINSUKE SUGA (Doctoral Program in Engineering, University of Tsukuba), TOMOYUKI MINAMI (Master's Program in Scientific Technology, University of Tsukuba) and MASATAKE MORI (Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba).

†† 筑波大学工学研究科

††† 筑波大学理工学研究科

†††† 筑波大学電子・情報工学系

* 現在 富士写真フイルム(株)勤務

そこで本論文では、時間刻み幅を Δt としたとき、時刻 $t = \Delta t$ のときの係数行列に対する ILU 分解による $(LU)^{-1}$ を以後すべての時刻において preconditioner として用いる方法を採用する。そして第一に、各時刻において得られる係数行列にわれわれの選んだ preconditioner で前処理を施した行列の固有値分布の変化を求め、時間ステップの後半でこの preconditioner の効果がどのくらい持続するかを調べる。第二に、連立一次方程式の反復解法における初期ベクトルの選び方が反復回数に及ぼす影響について調べる。

2. モデル問題

モデル問題としては、図1に示すような中心に熱源、そのまわりに水の領域 Ω 、 Ω の外側を氷が覆う状況における問題を考える。 Ω の熱源側の境界 Γ_1 は固定境界で、 $s_1(x, y) = 0$ で表されるものとする。水と氷の境界 Γ_2 は自由境界で、 Γ_2 を表す関数 $s(x, y, t)$ は未知関数である。問題は $u(x, y, t)$ を領域内の温度を表す関数として、次の(2-1)~(2-6)の形に定式化することができる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad \text{in } \Omega \quad (2-1)$$

$$u(x, y, t) = g(x, y, t) \quad \text{on } \Gamma_1 \quad (2-2)$$

$$u(x, y, t) = 0 \quad \text{on } \Gamma_2 \quad (2-3)$$

$$u(x, y, 0) = u^0(x, y) \quad \text{in } \Omega \quad (2-4)$$

$$s(x, y, t) = s^0(x, y) \quad (2-5)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\kappa \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial s}{\partial y} \right) \quad \text{on } \Gamma_2 \quad (2-6)$$

ここで、 g, u^0, s^0 はそれぞれ熱源の温度、初期温度分布、初期自由境界を表す関数である。また κ は正定数である。式(2-6)はステファン条件⁷⁾と呼ばれている。そして、 s_1, g, u^0, s^0 を与えて $u(x, y, t)$ と $s(x, y, t)$ を求めることがここでの問題である。なお、環状領域であることを考慮して、実際には(2-1)~(2-6)を熱源の中央に中心を置いた極座標によって表示した

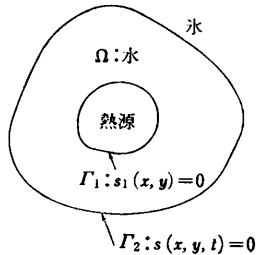


図1 モデル問題の領域
Fig. 1 The domain of the model problem.

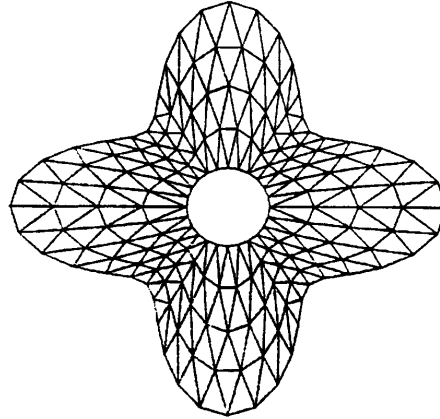


図2 モデル問題に用いる領域 Ω の三角形分割
Fig. 2 Triangulation of the domain Ω for the model problem.

問題を解くこととする。

3. 有限要素法による離散化

有限要素法を適用するために、極座標表示において分割された三角形がなるべく正三角形に近くなるように工夫した方法⁸⁾によって領域 Ω を三角形分割する。

図2に、この方法に基づく分割の一例として、後に実際に使用するものを示す。次に基底関数 φ_i としては、節点 i において値が1、その他の節点で値が0になるような区分的一次の関数を採用する。領域が時間とともに変動するので、分割した三角形要素もまた時間とともに変動する。したがって、基底関数 φ_i は空間 x, y のみでなく時間 t の関数でもある⁹⁾。しかし、各時刻における節点数は一定で等しく、またその結果として導かれる連立一次方程式の次元数および係数行列の非零要素の分布パターンは時刻によらず一定である。

この基底関数 φ_i によって近似解 \hat{u} を

$$\hat{u} = \sum_{i=1}^n a_i(t) \varphi_i(x, y, t) \quad (3-1)$$

とおく。そして、有限要素法の標準的な手法に従って、方程式(2-1)の弱形式を作り、それに(3-1)を代入すると次の方程式が導かれる。

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{da_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_i \varphi_j dx dy \right\} \\ & + \sum_{j=1}^n a_j \left\{ \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right) dx dy \right\} \\ & + \sum_{j=1}^n a_j \left\{ \iint_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial t} dx dy \right\} = 0, \quad i=1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (3-2)$$

φ_i が t の関数であるために (3-2) の左辺第三項が現れるところが通常の有限要素法と異なる点である。方程式 (3-2) の時間微分を後退差分で近似すれば最終的に次の連立一次方程式が導かれる。

$$\{M + \Delta t(K + N)\} \mathbf{a}(t + \Delta t) = M\mathbf{a}(t) \quad (3-3)$$

ここで、 Δt は時間刻み幅、 M は質量行列、 K は剛性行列である。 M についてはここでは集中質量行列を用いる。 M と K の第 ij 要素は次式で与えられる。

$$M_{ij} = \left[\iint_{\Omega} \varphi_i \varphi_j \, dx \, dy \right] \quad (3-4)$$

$$K_{ij} = \left[\iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right) dx \, dy \right] \quad (3-5)$$

また、 N は速度行列と呼ぶ行列⁹⁾で

$$N_{ij} = \left[\iint_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial t} \, dx \, dy \right] \quad (3-6)$$

で与えられる。この項の影響で (3-3) の係数行列は非対称行列になる。図 3 に係数行列の非零要素の分布パターンの一例として、図 2 の分割の場合のものを示す。

各行列要素の積分のうち、節点 (x_i, y_i) , (x_j, y_j) , (x_k, y_k) によって正の向きに囲まれた三角形要素 e 上 (図 4) の積分、すなわちいわゆる要素行列の具体形はいまの場合それぞれ次のようになる。

要素質量行列

$$M_{ij}^{(e)} = \begin{cases} \frac{S}{3} & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (3-7)$$

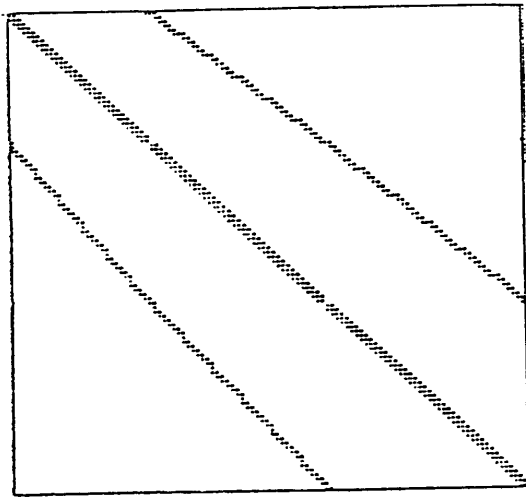


図 3 図 2 の三角形分割より得られる係数行列の非零要素の分布

Fig. 3 Distribution of nonzero elements of the coefficient matrix obtained by triangulation shown in Fig. 2.

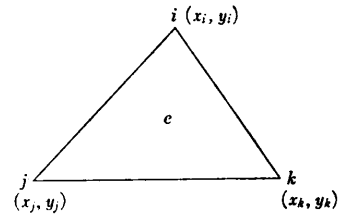


図 4 三角形要素 e

Fig. 4 A typical triangular element.

要素剛性行列

$$K_{ij}^{(e)} = \begin{cases} \frac{1}{4S} \{(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2\} & (i=j) \\ \frac{1}{4S} \{(x_j - x_k)(x_k - x_i) + (y_j - y_k)(y_k - y_i)\} & (i \neq j) \end{cases} \quad (3-8)$$

要素速度行列

$$N_{ij}^{(e)} = \frac{1}{24} \{(x_j - x_k)(2\dot{y}_i + \dot{y}_j + \dot{y}_k) - (y_j - y_k)(2\dot{x}_i + \dot{x}_j + \dot{x}_k)\} \quad (3-9)$$

$$N_{ij}^{(e)} = \frac{1}{24} \{(x_k - x_i)(2\dot{y}_i + \dot{y}_j + \dot{y}_k) - (y_k - y_i)(2\dot{x}_i + \dot{x}_j + \dot{x}_k)\} \quad (3-10)$$

$$N_{ik}^{(e)} = \frac{1}{24} \{(x_i - x_j)(2\dot{y}_i + \dot{y}_j + \dot{y}_k) - (y_i - y_j)(2\dot{x}_i + \dot{x}_j + \dot{x}_k)\} \quad (3-11)$$

ここで、 S は三角形 e の面積で $\dot{}$ は時間微分 d/dt を表す。

4. ステファン条件の差分近似

ステファン条件の式 (2-6) の (r, θ) による極座標表示は、自由境界 Γ_2 が $r = s(\theta, t)$ と表されているものとすると、次のようになる⁹⁾。

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\kappa \frac{\partial u}{\partial r} \left\{ 1 + \left(\frac{1}{s} \frac{\partial s}{\partial \theta} \right)^2 \right\} \quad (4-1)$$

自由境界の増分は (4-1) の近似式から計算することになる。そこで、図 5 に示すような自由境界上の点 P に

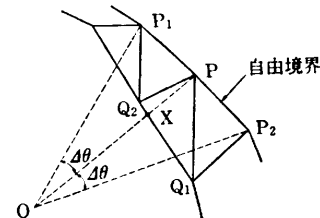


図 5 節点 P における自由境界の増分の近似

Fig. 5 Approximation of increment of the free boundary at the nodal point P .

着目して(4-1)の微分を次のように差分で近似する。

$$\frac{\partial s}{\partial t} \approx \frac{\Delta s}{\Delta t} \quad (4-2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r} \approx \frac{-u(X)}{r(P)-r(X)} \quad (4-3)$$

$$\frac{\partial s}{\partial \theta} \approx \frac{s(P_1)-s(P_2)}{2\Delta\theta} \quad (4-4)$$

ここで点 X における u, r の値は点 Q_1, Q_2 における値を一次補間して求める。(4-2)~(4-4)を(4-1)に代入して Δs について解くと次の式を得る。

$$\Delta s = \kappa \frac{u(X)}{r(P)-r(X)} \left\{ 1 + \frac{1}{s^2} \left(\frac{s(P_1)-s(P_2)}{2\Delta\theta} \right)^2 \right\} \quad (4-5)$$

すなわち、点 P の r 方向への増分が(4-5)で計算できることになる。

5. 数値解法

5.1 解法手順

以下に上に述べたステファン問題の解法手順を示す。

時刻 $t=0$ における初期設定

0. $g(x, y, 0), s^0(x, y)$ を与える。 $u^0(x, y)$ は次式で与える。

$$u^0(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{in } \Omega \\ g(x, y, 0) & \text{on } \Gamma_1 \end{cases}$$

次の 1~4 を目標の時間まで繰り返す。

時刻 $t=t_n (=n\Delta t, n=1, 2, \dots)$ における計算

1. $t_n \leftarrow t_{n-1} + \Delta t$
2. 近似式(4-5)より自由境界の増分 $\Delta s(t_n)$ を求める。
 $s(t_n) \leftarrow s(t_{n-1}) + \Delta s(t_n)$
3. 2で求めた新しい領域において行列 M, K, N を計算する。
4. 連立一次方程式(3-3)を解き、近似解を求める。

5.2 CR(1)法とPCR(1)法

解法手順4における各時刻 t_n の連立一次方程式の解法には、最初に述べたようにPCR(1)法を採用する。一般に、PCR(k)法の基本となるのはCR(k)法³⁾である。ここで用いるCR(k)法は $k=1$ に相当する方法、すなわち反復過程における方向ベクトル p_k が一つ前の段階の方向ベクトル p_{k-1} だけと直交関係 $(Ap_k, Ap_{k-1})=0$ を満たすように選ぶCR(1)法である。ここで、 A は連立一次方程式の係数行列である。

以下に $Ax=b$ をCR(1)法で解く計算手順を示す。

初期設定 x_0 を定める。

$$r_0 = b - Ax_0, \quad p_0 = r_0$$

反復計算 次の反復を $k=1, 2, \dots$ について相対残差が十分小さくなるまで繰り返す。

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$\alpha_k = \frac{(r_k, Ap_k)}{(Ap_k, Ap_k)}$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k Ap_k$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} - \beta_k p_k$$

$$\beta_k = \frac{(Ar_{k+1}, Ap_k)}{(Ap_k, Ap_k)}$$

CR(1)法に前処理を行うPCR(1)法では、まず前処理として左下三角行列 L と右上三角行列 U の積の形に近似的に行列 A をILU分解する。ここで採用したILU分解は、元の行列 A の非零成分が存在していた部分だけについてLU分解を実行するものである。このLUは、 A の厳密なLU分解ではないので、 A とLUの間には、

$$R = A - LU \quad (5-1)$$

だけの差があることになる。

そして $Ax=b$ の代わりに、これと同値な次の連立一次方程式

$$(LU)^{-1}Ax = (LU)^{-1}b \quad (5-2)$$

をCR(1)法で解くわけである。

6. ステファン問題の数値実験結果

数値実験は、図2に示したような三角形分割された領域における問題に対して行った。この分割より得られる連立一次方程式の次元数は108となる。また、熱源側の境界 Γ_1 は $r=1.0$ 、初期自由境界は $r=4.0+1.25 \cos 4\theta$ 、熱源 g は $g=10.0$ で与えた。また、式(2-6)における κ は $\kappa=1.0$ とした。使用計算機はデータゼネラル社 MV 4000 (浮動小数点演算装置付き)である。連立一次方程式の解法に要する計算時間は、ILU分解に約0.58秒、CR(1)法の初期設定に約0.28秒、一回反復当たり約0.1秒である。時間刻み幅は $\Delta t=0.1$ として、 $t=30\Delta t$ まで計算した。計算はすべて単精度で行い、CR(1)法の収束判定は相対残差 10^{-6} 以下とした。図6に、自由境界の変化を $3\Delta t$ ごとに表した図を示す。

最初にも述べたように、ILU分解は $t=\Delta t$ における係数行列に対してのみ実行し、以後 $30\Delta t$ までは、このILU分解による左下三角行列 L と右上三角行列

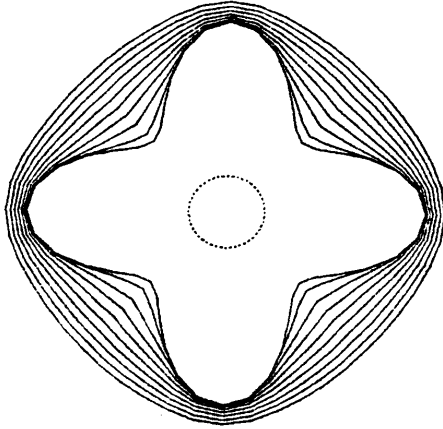


図 6 初期時刻から時刻 $30\Delta t$ までの $3\Delta t$ ごとの自由境界の変化
 Fig. 6 Change of the free boundary every three time steps from $t=0$ to $t=30\Delta t$.

U の積の逆 $(LU)^{-1}$ を preconditioner に用いた。連立一次方程式の反復解法の初期ベクトルと反復回数との関係を調べるために、各時刻ごとの反復解法の初期ベクトルとして、初期値 A : 1 段階前の時間ステップの解、初期値 B : 奇数番目の成分が -1 で偶数番目の成分が $+1$ であるようなベクトルを選んで比較した。初期値 A はこの問題に適した良い初期値、初期値 B はひどく悪い初期値の例である。

表 1 に計算の結果を示す。また、表 2 には、最初の

表 1 初期ベクトルと反復回数の関係
 ($t=\Delta t$ のときのみ ILU 分解を実行)

Table 1 The relation between the initial vector and the number of iterations. (ILU decomposition is carried out only at the initial time step.)

初期ベクトル	時間ステップ														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	25	30	
初期値 A	5	4	4	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	
初期値 B	5	5	5	6	6	7	7	7	7	8	9	9	10	10	

表 2 初期ベクトルと反復回数の関係
 (各時間ステップごとに ILU 分解を実行)

Table 2 The relation between the initial vector and the number of iterations. (ILU decomposition is carried out at each time step.)

初期ベクトル	時間ステップ														
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20	25	30	
初期値 A	5	4	4	4	4	4	4	4	4	3	3	3	3	2	
初期値 B	5	5	5	5	5	5	4	4	4	4	4	4	4	4	

$t=\Delta t$ だけでなく、すべての時間ステップにおいて ILU 分解を実行する場合の結果を示す。両者を比較すると、各時間ステップにおける反復回数は、表 2 の結果の方が表 1 の結果より当然少ない。しかし、時刻 $t=30\Delta t$ まで連立一次方程式を解くために要する合計の計算時間で比較すると、初期値 A の場合、各時間ステップごとに ILU 分解を行う表 2 の場合には、ILU 分解の計算時間の影響で約 38.7 秒要するのに対して、一回だけ ILU 分解を行う表 1 の結果の場合は約 23.8 秒である。初期値 B の場合も、表 2 では約 42.7 秒かかるのに対して、表 1 では約 33.7 秒で済んでいる。以上から結論として、われわれが採用した一回だけ ILU 分解を行う方法が効率的で、しかも初期値は 1 段階前の時間ステップの解を用いるのが良いことがわかる。

7. 考察

7.1 反復回数と固有値分布

表 1 の結果からわかるように、初期ベクトルの選び方で時間ステップが進むにつれて反復回数が異なってくる。初期値 A については、われわれの用いた preconditioner が時刻 $t=30\Delta t$ のときにも十分に前処理としての役割を果たしているようにみえるが、初期値 B では時刻 $t=30\Delta t$ のときの反復回数は時刻 $t=\Delta t$ のときの 2 倍になりこの時点では十分な前処理が行われていないと考えられる。実際、図 6 を見るとわかるように、時刻 $t=\Delta t$ のときの領域は花びらのような形をしているのに対して、時刻 $t=30\Delta t$ のときの領域は円に近い形をしており、これらの領域から得られる係数行列の性質も異なっていると考えられる。

そこで、preconditioner の効率の持続性を調べるために、各時刻に現れる連立一次方程式の元の係数行列と前処理を施された係数行列の固有値分布を求めた。それぞれの結果を図 7、図 8 に示す。なお、固有値番号は絶対値の小さい方から順に付けてある。二つの図を比較すると、われわれの選んだ preconditioner は、第一に、固有値の最小絶対値を 1 に近づけ、第二に、固有値の絶対値、特に最大絶対値を大きくする働きがあることがわかる。次に、図 8 を見ると、前半の時間ステップではすべての固有値の絶対値は 1 に近い値に集中しており前処理の効果が良く現れている。しかし、後半の時間ステップでは固有値の絶対値の範囲が広がって行き preconditioner の効力が弱まって行くことがわかる。

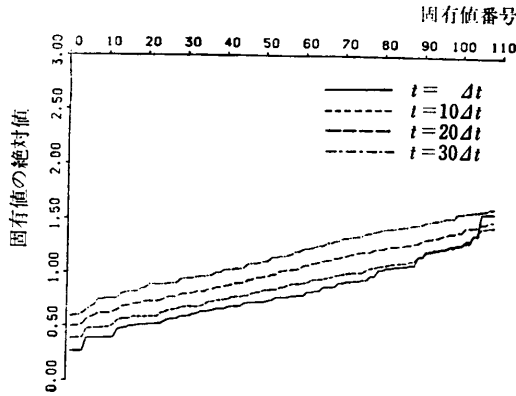


図7 各時間ステップにおける前処理を施さない係数行列の固有値分布

Fig. 7 Distribution of the eigenvalues of the coefficient matrix at several time steps.

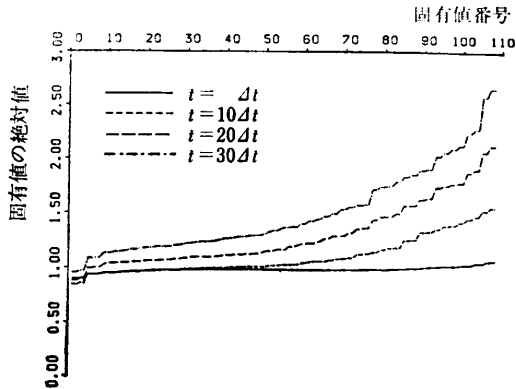


図8 各時間ステップにおける前処理を施された係数行列の固有値分布

Fig. 8 Distribution of the eigenvalues of the preconditioned coefficient matrix at several time steps.

一方、表1の初期値Bでは、固有値の縮重度が低下していると考えられる後半の時間ステップで反復回数が増えている。CG法に関しては、固有値の縮重度が高いと解の収束に要する反復回数は少なくて済むことが知られているが¹⁰⁾、上記の結果からここで採用したCR(1)法もCG法の収束と良く似た性質を持っていることがわかる。

CR(k)法の収束に関する定理として以下のことが知られている¹¹⁾。連立一次方程式 $Ax=b$ の係数行列Aを対称部分Mと反対称部分Rとに $A=M-R$ の形に分解すると、Mが正定値ならば、CR(k)法の第i反復目の残差ノルム $\|r_i\|_2$ の上限が次のように評価できることがわかっている。

$$\|r_i\|_2 \leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(M)^2}{\lambda_{\max}(A^T A)} \right]^{i/2} \|r_0\|_2 \quad (7-1)$$

$$\|r_i\|_2 \leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(M)^2}{\lambda_{\min}(M)\lambda_{\max}(M) + \rho(R)} \right]^{i/2} \|r_0\|_2 \quad (7-2)$$

不等式(7-2)の方が(7-1)よりも精密な評価になっている。ここで、 $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ はそれぞれ行列Mの絶対値最小、最大の固有値を表す。また、 $\rho(R)$ は、行列Rのスペクトル半径を表す。なお、ここでのMとRは(3-1)、(5-1)のMとRとは、無関係であることに注意されたい。ここで、われわれの問題に対してこれらの評価式を具体的に計算してみよう。表3、表4には各時刻における係数行列をAとしたとき、元の係数行列と前処理を施された係数行列のM、R、 $A^T A$ の固有値のうち(7-1)、(7-2)の評価に必要な値を示す。これらの値はそれ自身としても興味ある情報を与えるものである。これらの値を用いて(7-1)、(7-2)の右辺の大括弧で定義される減衰係数の値を求めてみる。表5、表6はそれぞれ(7-1)、(7-2)についてのものである。計算結果を見ると、表3、表4における行列Mの固有値は、実はすべて正の値になっていることがわかる。したがって元の係数行列、前処理された係数行列

表3 各時間ステップにおける前処理を施さない係数行列Aに関する $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $\rho(R)$ 、 $\lambda_{\max}(A^T A)$
Table 3 $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $\rho(R)$ and $\lambda_{\max}(A^T A)$ of original coefficient matrix A at several time steps.

時間ステップ	$\lambda_{\min}(M)$	$\lambda_{\max}(M)$	$\rho(R)$	$\lambda_{\max}(A^T A)$
1	0.27	1.59	0.01	2.52
5	0.32	1.51	0.02	2.27
10	0.39	1.47	0.02	2.15
15	0.44	1.47	0.02	2.17
20	0.49	1.51	0.02	2.29
25	0.54	1.57	0.02	2.47
30	0.59	1.63	0.02	2.67

表4 各時間ステップにおける前処理を施された係数行列Aに関する $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $\rho(R)$ 、 $\lambda_{\max}(A^T A)$
Table 4 $\lambda_{\min}(M)$ 、 $\lambda_{\max}(M)$ 、 $\rho(R)$ and $\lambda_{\max}(A^T A)$ of the preconditioned coefficient matrix A at several time steps.

時間ステップ	$\lambda_{\min}(M)$	$\lambda_{\max}(M)$	$\rho(R)$	$\lambda_{\max}(A^T A)$
1	0.90	1.08	0.02	1.18
5	0.86	1.26	0.05	1.58
10	0.84	1.57	0.07	2.46
15	0.85	1.86	0.07	3.47
20	0.88	2.14	0.08	4.58
25	0.91	2.41	0.09	5.81
30	0.95	2.67	0.10	7.14

表 5 各時間ステップにおける不等式 (7-1) に関する減衰係数

Table 5 The attenuation coefficients in the inequality (7-1) at several time steps.

時間ステップ	行列 A	行列 $(LU)^{-1}A$
1	0.97	0.52
5	0.95	0.53
10	0.93	0.71
15	0.91	0.79
20	0.89	0.83
25	0.88	0.86
30	0.87	0.87

表 6 各時間ステップにおける不等式 (7-2) に関する減衰係数

Table 6 The attenuation coefficients in the inequality (7-2) at several time steps.

時間ステップ	行列 A	行列 $(LU)^{-1}A$
1	0.83	0.17
5	0.79	0.31
10	0.74	0.47
15	0.70	0.54
20	0.67	0.59
25	0.65	0.62
30	0.64	0.64

とも対称部分が正定値であり、われわれの問題では (7-1), (7-2) の評価が使えることがわかる。表 5, 表 6 を見ると、時間ステップが進むにつれて行列 $(LU)^{-1}A$ に関する減衰係数の値は 1 に近づき、表 1 の初期値 B の反復回数の増加に対応していることがわかる。

不等式 (7-1), (7-2) は荒い評価ではあるが、このように後半の時間ステップで減衰係数が増加して 1 に近づくとこの事実からも preconditioner の効力が弱まっていくことがみてとれる。

7.2 初期ベクトルと反復回数との関係

連立一次方程式の反復解法の初期ベクトルを初期値 A のように選ぶと、時間ステップが進むにつれて preconditioner の効果が弱まるにもかかわらず、表 1 に見るように、解の収束に要する反復回数はほぼ一定である。1 段階前の時間ステップの時刻の解をとるという初期値 A の初期ベクトルの選び方は、物理的に考えても最も適した方法になっていると言える。

そこで、このことをさらに明確にするために、初期値 A と初期値 B の場合の残差ノルムの減少の様子を調べた。図 9 にその結果を示す。(a), (b) はそれぞれ初期値 A, 初期値 B の結果である。両者とも時間ステップが進むにつれて反復一回当りの残差ノルムの減少

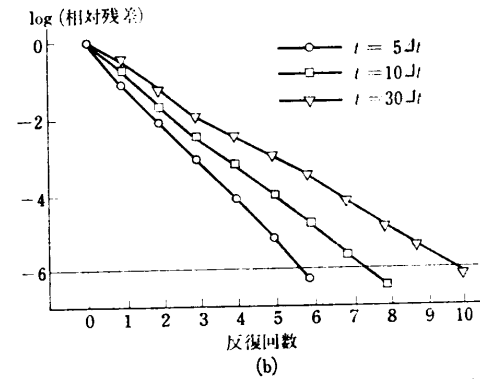
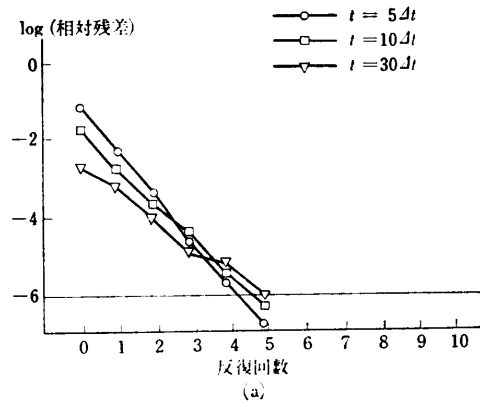


図 9 各時間ステップにおける残差ノルムの減少
(a): 初期値は 1 段階前の時間ステップの解
(b): 初期値は $(-1, +1, -1, +1, \dots)^T$

Fig. 9 Change of the residual norm at several time steps.

(a): Initial vector is the solution at previous time step.

(b): Initial vector is $(-1, +1, -1, +1, \dots)^T$.

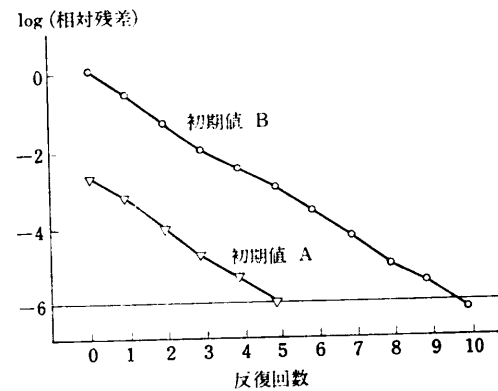


図 10 時刻 $t=30\Delta t$ における残差ノルムの減少
Fig. 10 The rate of decrease of the residual norm at $t=30\Delta t$.

が遅くなって行くことがわかる。また、両者の残差ノルムの減り方を比較するために、例えば時刻 $t=30\Delta t$ における結果のみを取り出すと、図 10 に示したよう

に残差ノルムの減少の速さ自体は両者ともほとんど同じである。このことは他の時刻についても言えることである。残差ノルムの減少が遅くなることは、初期値の選び方でなく、preconditionerの効力が弱まっていることに対応していると考えられる。

さて、初期値Bの場合は、初期ベクトルの選び方によって、当然のことながら各時刻における初期残差ノルムの値はほぼ一定である。したがって前半の時間ステップでは反復一回当りの残差ノルムの減少が速いために収束までに必要な反復回数が少なく済んでいるが、後半では残差ノルムの減少が遅くなるために反復回数が増えていくことがわかる。これに対して、初期値Aでは時間ステップが進むにつれて各時間ステップでの初期残差ノルムが減って行くことがわかる。したがって、後半の時間ステップでは反復一回当りの残差ノルムの減少は遅くなるが、初期残差ノルムが小さくなるために収束までに必要な反復回数は前半の時間ステップと同じになるのである。すなわち、初期値Aの初期ベクトルは後半の時間ステップで初期残差ノルムを小さくするという意味では良い初期ベクトルであるが、とくにCR(1)法の残差ノルムの減少を速める性質を持っているわけではないことがわかる。

以上のことから、初期値Aの場合、各時間ステップにおいて解の収束に要する反復回数がほぼ一定である理由は、前半の時間ステップでは前処理の効果、後半の時間ステップでは初期残差ノルムが小さいことにあると言える。

8. む す び

2次元1相ステファン問題の有限要素近似によって現れる連立一次方程式の反復解法にPCR(1)法(ILUCR(1)法)を適用し、各時刻における前処理は、時刻 $t = \Delta t$ のときに得られる連立一次方程式の係数行列に対するILU分解による左下三角行列 L と右上三角行列 U の積の逆 $(LU)^{-1}$ をpreconditionerとして行った。

その結果、われわれの問題に対しては、1段階前の時間ステップの解をとるという初期値Aのような初期ベクトルの選び方をすれば、上記のような方法が非常に効率的であることがわかった。その理由としては、

- 1: 前半の時間ステップにおいては前処理が良い効果をもたらして、解の収束を速めること、
- 2: 後半の時間ステップにおいては、われわれの選んだpreconditionerの効力は弱まって反復解

の残差ノルムの減少は遅くなるが、初期残差ノルムが小さくなっているために解の収束に要する反復回数は、前半の時間ステップのときとほぼ同じで済むこと、

の二点が挙げられる。

参 考 文 献

- 1) Meijerink, J. A. and Van der Vorst, H. A.: Iterative Solution Method for Systems of Which the Coefficient Matrix Is a Symmetric M-Matrix, *Math. Comp.*, Vol. 31, pp. 148-162 (1977).
- 2) 後 保範: ベクトル計算機向きICCG法, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 514, pp. 110-134 (1984).
- 3) Saad, Y.: The Lanczos Biorthogonalization Algorithm and Other Oblique Projection Methods for Solving Large Unsymmetric Systems, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 19, pp. 485-506 (1982).
- 4) Fletcher, R.: Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems, in Watson, G. A. (ed.) *Proc. of the Dundee Conf. on Numer. Anal.*, Lecture Notes in Math., 506, pp. 73-89, Springer-Verlag, New York (1975).
- 5) 村田健郎: CR(k)法の加速について, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 514, pp. 92-109 (1984).
- 6) 須賀伸介, 南知行, 森 正武: ステファン問題の有限要素解析に現れる非対称行列に対するPCR法, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 548, pp. 71-89 (1985).
- 7) 山口昌哉, 野木達夫: ステファン問題, pp. 99-101, 産業図書, 東京 (1977).
- 8) Santos, V. R. B.: A Direct Method for Solving Two-Dimensional One Phase Stefan Problems, *Mem. Numer. Math.*, No. 6, pp. 29-63 (1979).
- 9) Mori, M.: Stability and Convergence of a Finite Element Method for Solving the Stefan Problem, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.*, Vol. 12, No. 2, pp. 539-563 (1976).
- 10) 野寺 隆: 大型疎行列に対するPCG法, *Seminar on Math. Science, Keio Univ.*, No. 7, pp. 10-14 (1983).
- 11) Eisenstat, S. C., Elman, H. C. and Schulth, M. H.: Variational Iterative Method for Non-symmetric Systems of Linear Equations, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 20, No. 2, pp. 345-357 (1983).

(昭和60年2月27日受付)

(昭和60年4月25日採録)