

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

筑波大・電情 須賀 伸介 (Shinsuke Suga)
富士写真フィルム 南 知行 (Tomoyuki Minami)
筑波大・電情 森 正武 (Masatake Mori)

1. はじめに

疎な非対称行列を係数に持つ連立一次方程式の反復解法として、元の方程式に対して不完全 LU 分解 (以後 I.L.U. 分解と書く) による前処理を施した方程式に CR (k) 法を適用する PCR (k) 法が注目されてきている。例えば、移流拡散問題の差分近似によつて得られる連立一次方程式の解法に PCR (k) 法が有効であることが確認され、さらに研究が進められている¹⁾。

本稿では、2次元一相ステファン問題の有限要素近似によつて得られる連立一次方程式に PCR (k) 法を適用した結果について報告する。ステファン問題を時間に依存する基底関数²⁾を用いる有限要素法で離散化すると、最終的に非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式が現れる。ステファン問題では、問題を解く領域が時間と共に変化するために各時刻毎に係数

行列を計算して新しい連立一次方程式を解く必要がある。従って固定領域の問題よりも計算時間が多くなる。また、時刻 $t=0$ から目的の時刻までの各時刻毎に現れる連立一次方程式に対して毎回 I.L.U. 分解を実行していたのではさらに計算時間が増し、大規模問題に対しては実用的でなくなる。しかし、^{性質の} 係数行列の変化は少ないと考えられるので、一度ある時刻で係数行列を I.L.U. 分解しておけば、それ以後当分の間古い I.L.U. 分解をそのまま使うことで前処理を十分に代用することが期待できる。

今回の報告では、まず、PCR(※)法、CR(※)法、SOR法についての反復回数、計算時間の比較を行う。次に、各時刻毎に計算を行う場合に前処理を施す間隔と各時刻における反復回数、目的の時間までに要する総計算時間との関係についての数値実験結果を示す。

2. モデル問題

モデル問題は、Fig.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。氷側の境界 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、次の (2-1) ~ (2-6) で与えられる。

$$(2-1) \quad u_t = \Delta u \quad \text{in } \Omega,$$

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

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

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

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

$$(2-6) \quad S_t = -x \nabla u \cdot \nabla S \quad \text{on } \Gamma_2,$$

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 (2-6) は Stefan 条件³⁾と呼ばれている。そして S, g, u^0, S^0 を与えて $u(x, y, t), S(x, y, t)$ を求めることがここでの問題である。

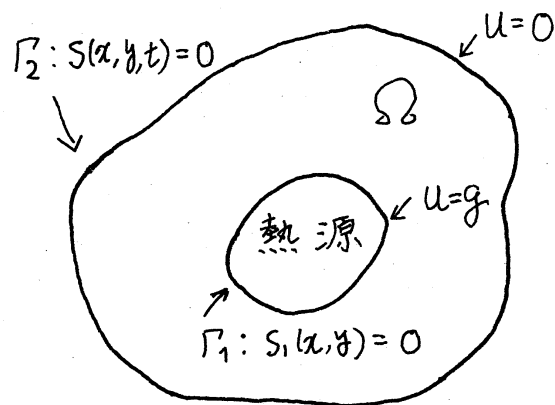


Fig. 1.

尚、環状領域であることを考慮し、実際には (2-1) ~ (2-6) を極座標表示した問題を解くこととする。

3. 有限要素法による離散化

3.1 領域 Ω の三角形分割

領域の三角形分割には Santos の方法⁴⁾を用いる。以下この方法を簡単に述べる。簡単のために Γ_1, Γ_2 は両方とも円の場合

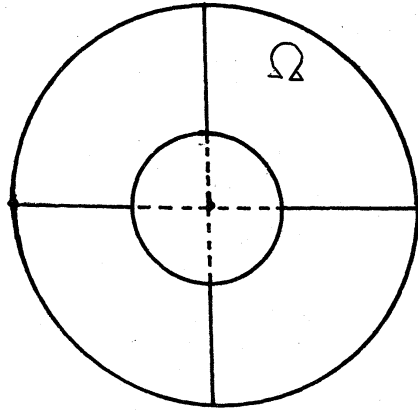


Fig. 2 (a)

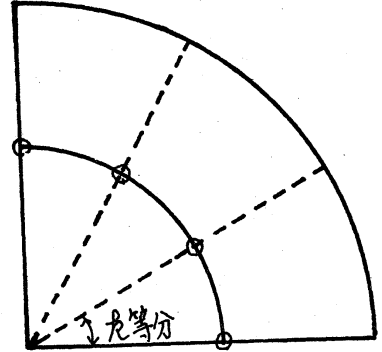


Fig. 2 (b)

合を考える。まず原点を中心に Ω を l 等分する (Fig. 2 (a))。次に l 等分された1つの扇形に着目し、内側の境界を θ 方向に l 等分して節点を求める (Fig. 2 (b))。次に内側と外側の境界間を r 方向に m 等分して、 Γ_1

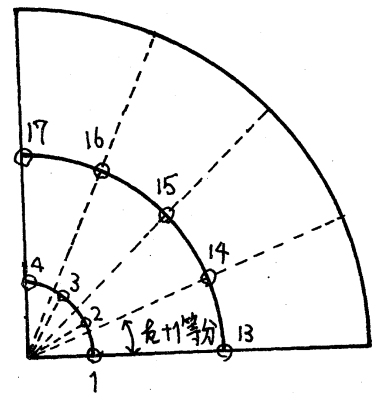


Fig. 2 (c)

の1つ外側の円を θ 方向に $l+1$ 等分して節点を求める。(Fig. 2 (c))。この操作をすべての扇形について行い、節点番号は Fig. 2 (c) に示すように付けに行く。

3.2 方程式の離散化

近似解 \hat{u} を

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

とおく。基底関数 φ_i は時間の関数でもある。例えば1次元問題では φ_i は次のように定める。Fig. 3に示すように時刻 t における1次元線状領域:

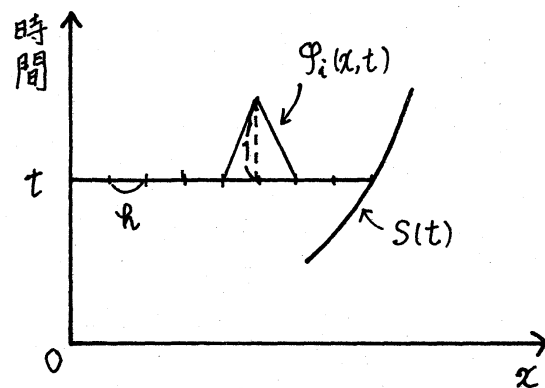


Fig. 3.

$0 \leq x \leq S(t)$ において、この領域

をきざみ幅 Δx で等分して基底関数を構成する。このことから、各時刻における節点数は等しく、連立一次方程式の次元数も領域の変化によらず一定である。

さて、(3-1)で表される \hat{u} を(2-1)に代入すると

$$(3-2) \quad \hat{u}_t = \Delta \hat{u},$$

となる。(3-2)の両辺に φ_i を乗じて積分し、部分積分を実行すれば、

$$(3-3) \quad \sum_{j=1}^n \left[\frac{da_j}{dt} \iint_{\Omega} \varphi_i \varphi_j dx dy + a_j \left\{ \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right) dx dy + \iint_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial t} dx dy \right\} \right] = 0,$$

となる。 φ_j が t の関数であるために、(3-3)の左辺の最後の項が加わる所が通常の有限要素法と異なる点である。(3-3)を行列表現すると、

$$(3-4) \quad M \frac{da}{dt} = -(K+N)a,$$

となる。ここで、

$$(3-5) \quad M = [\iint_{\Omega} \varphi_i \varphi_j dx dy],$$

$$(3-6) \quad K = [\iint_{\Omega} (\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}) dx dy],$$

$$(3-7) \quad N = [\iint_{\Omega} \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial t} dx dy],$$

である。Nは速度行列と呼ばれ、非対称行列である。最後に(3-4)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得られる。

$$(3-8) \quad \{ M + \Delta t (K + N) \} a(t + \Delta t) = M a(t).$$

Nの非対称性からこの連立一次方程式の係数行列は非対称行列になる。尚、実際の計算ではMは集中質量行列を用いる。

Fig. 4 に係数行列の形の一例を示す。

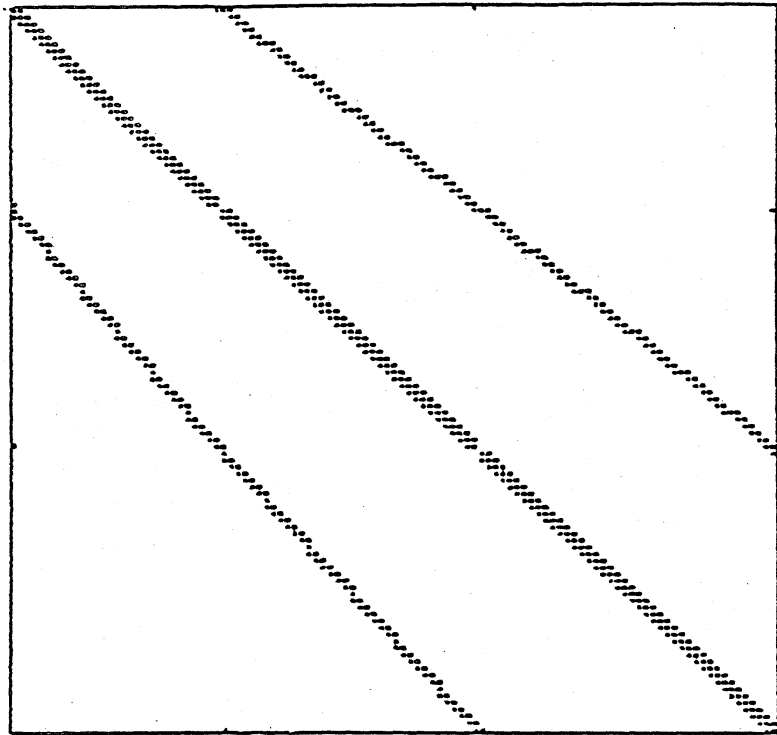


Fig. 4

3.3 ステファン条件の差分近似

ステファン条件の式(2-6)の極座標表示は次のようになる。

$$(3-9) \quad S_t = -\alpha U_r \left(1 + \frac{1}{S^2} (S_0)^2\right)$$

(3-9)の近似方程式から自由境界の増分を計算することになる。ここで Fig. 5 に示すような自由境界上の点Pに着目して(3-9)の微分を(3-10)~(3-12)のように差分で近似する。

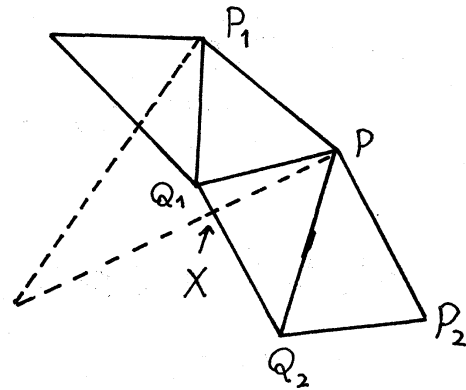


Fig. 5

$$(3-10) \quad S_t \cong \frac{\Delta S}{\Delta t},$$

$$(3-11) \quad U_r \cong \frac{-U(X)}{r(P) - r(X)},$$

$$(3-12) \quad S_0 \cong \frac{S(P_1) - S(P_2)}{2\Delta\theta}.$$

ここで点Xにおける U , r の値は点 Q_1 , Q_2 の値を補間して求める。(3-10)~(3-12)を(3-9)に代入して ΔS について解くと次の式を得る。

$$(3-13) \quad \Delta S = \alpha \frac{U(X)}{r(P) - r(X)} \left\{ 1 + \frac{1}{S^2} \left(\frac{S(P_1) - S(P_2)}{2\Delta\theta} \right)^2 \right\} \Delta t.$$

すなわち、点Pの r 方向への増分が(3-13)で計算できることになる。

4. 数値解法

4.1 解法手順

以下にステファン問題の解法手順を示す。

時刻 $t_0=0$ における状況設定。

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

$$(4-1) \quad u^0(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{in } \Omega \cup \Gamma_2 \\ g(x, y, 0) & \text{on } \Gamma_1 \end{cases}$$

時刻 t_n における計算。

1) $t_n \leftarrow t_{n-1} + \Delta t$

2) (3-13) を用いて $\Delta S(t_n)$ を計算する。

$$S(t_n) \leftarrow S(t_{n-1}) + \Delta S(t_n)$$

3) (3-5) ~ (3-7) を用いて行列 M, K, N を計算する。

4) 連立一次方程式 (3-8) を解き、温度分布を求める。

1) ~ 4) を目的時間 T まで繰り返す。

4.2 CR(l)法とPCR(l)法

解法手順4)における各時刻 t_n での連立一次方程式の解としては、PCR(l)法を採用する。PCR(l)法の基本となる方法はCR(l)法⁵⁾である。今回用いるCR(l)法は、 $l=1$ 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 を一つ前の段階の方向ベクトルとだけ直交するように選ぶCR(1)法である。以下に連立一次方程式 $Ax = b$ 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 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$

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

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

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

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

反復計算は相対残差が十分小さくなるまで繰り返す。

CR(1)法に前処理を行うPCR(1)法では、まず、前処理として行列 A を次式で表すように I.L.U. 分解する。

$$(4-2) \quad A = LU - R$$

I.L.U. 分解は行列 A の非ゼロ成分だけを L.U. 分解したものである。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

$$(4-3) \quad (LU)^{-1} Ax = (LU)^{-1} b,$$

を CR(1)法で解く。

尚、解法手順4)における各時刻での連立一次方程式に対する PCR(1)法の反復手順の出発値としては、1ステップ前の解

を採用する。

5. 数値実験結果

5.1. 反復解法の比較

各時刻毎に温度分布、自由境界を求めて行く前に、時刻 $t=0$ の次のステップ $t=\Delta t$ における連立一次方程式を PCR(1) 法、CR(1)法、SOR法で解き、計算時間と反復回数を比較した。実験は3種類の問題に対して行った。Fig. 6 (a) ~ (c) に各問

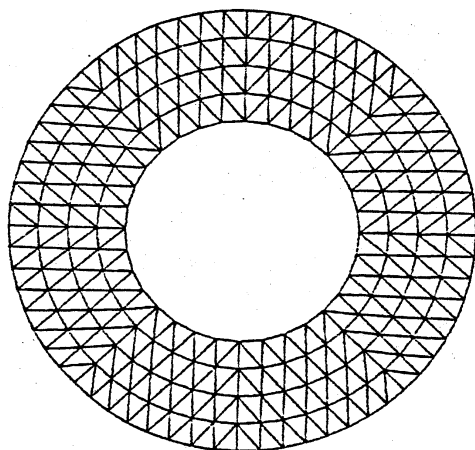


Fig. 6 (a) 問題1

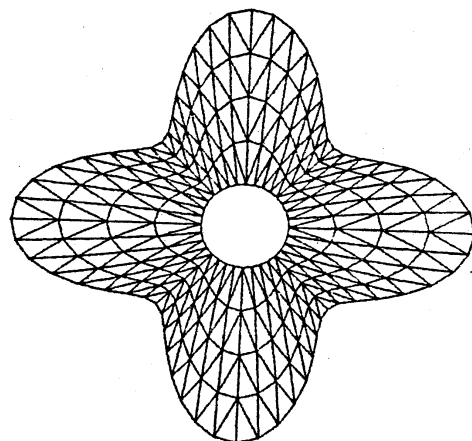


Fig. 6 (b) 問題2

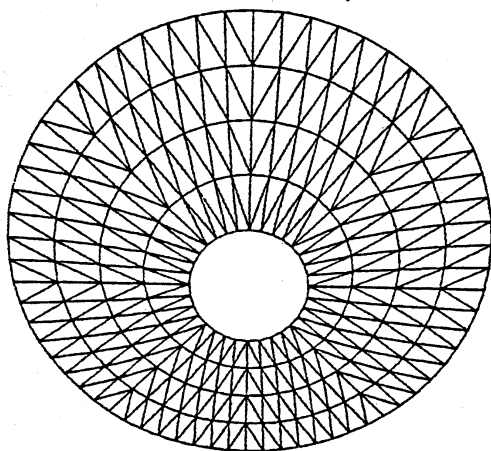


Fig. 6 (c) 問題3

問題1 $\Gamma_1 : r = 0.5$
 $\Gamma_2 : r = 1.0$
 $g = 1.0$

問題2 $\Gamma_1 : r = 1.0$
 $\Gamma_2 : r = 4.0 + 1.25 \cos 4\theta$
 $g = 10.0$

問題3 $\Gamma_1 : r = 0.5$
 $\Gamma_2 : r = 2.0 + 0.5 \sin \theta$
 $g = (1+t) + (0.85+t) \cos 4\theta$

題の時刻 $t=0$ における領域 Ω の三角形分割を示す。尚、これらの図は図を見やすくするために分割のパラメータをそれぞれ $k=4, l=8, m=4$ としたものである。実際の実験では $k=4, l=18, m=13$ とし要素分割した。このとき連立一次方程式の次元数は 2267 次元となる。尚、 $\Delta t=0.1$ とした。

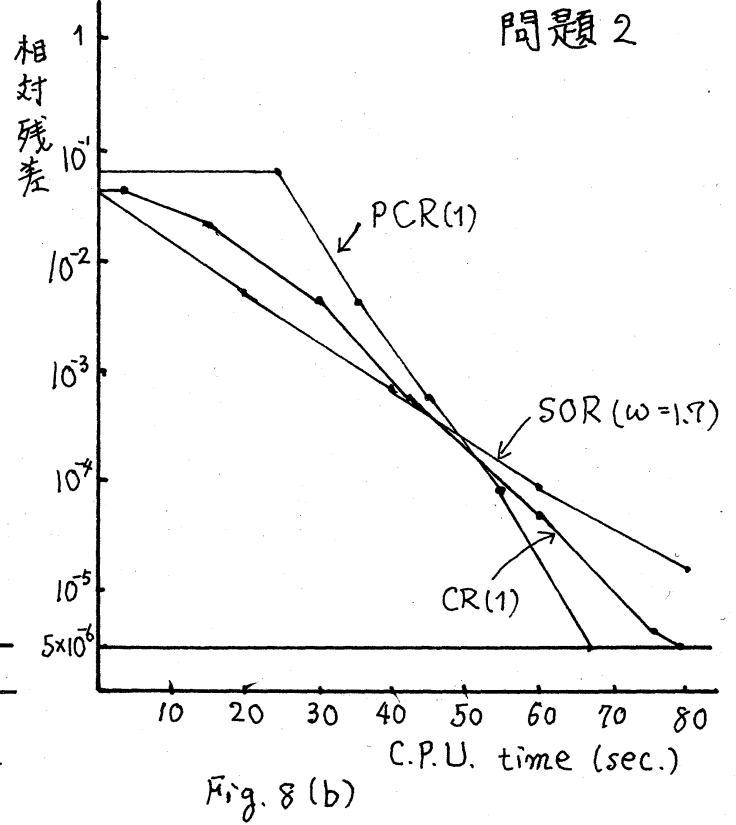
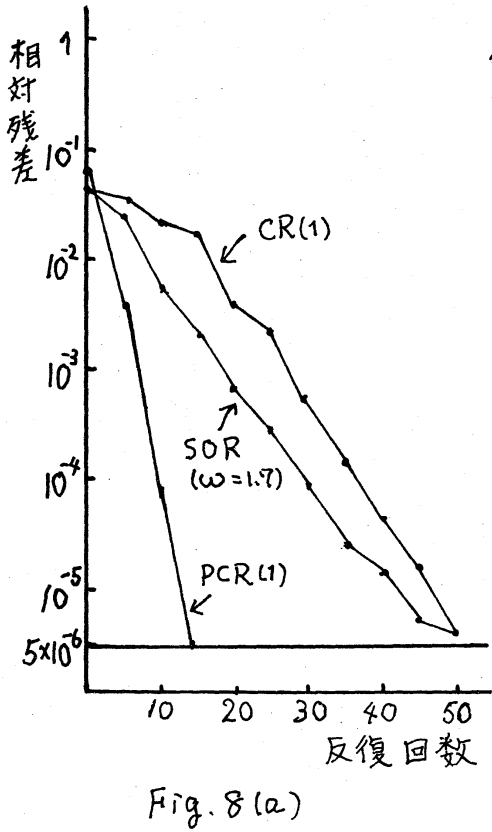
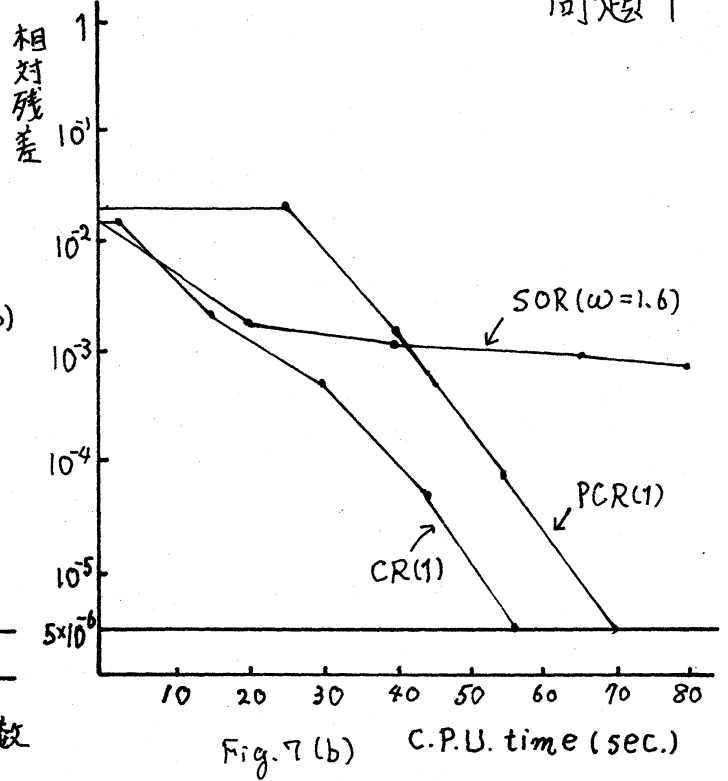
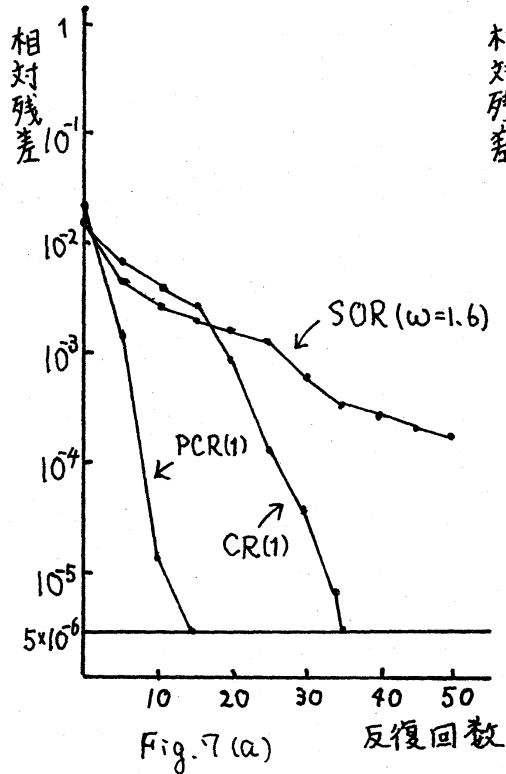
Table 1 に各解法に要する計算時間を示す。尚、計算機はデータゼネラル社 MV 4000 を使用した。SOR法の計算時間

Table 1. 各解法の計算時間の比較

| | | |
|-----------|-----------|--------------|
| PCR (1) 法 | I.L.U. 分解 | 17.77 (sec.) |
| | 初期設定 | 6.86 () |
| | 1回反復 | 3.01 () |
| CR (1) 法 | 初期設定 | 2.08 () |
| | 1回反復 | 1.46 () |
| SOR 法 | 1回反復 | 1.98 () |

には残差計算の時間 1.02 (sec.) が含まれている。問題 1~3 についての結果を Fig. 7 ~ Fig. 9 に示す。各図において (a) は相対残差と反復回数、(b) は C.P.U. time と相対残差との関係を示したグラフである。

問題 1



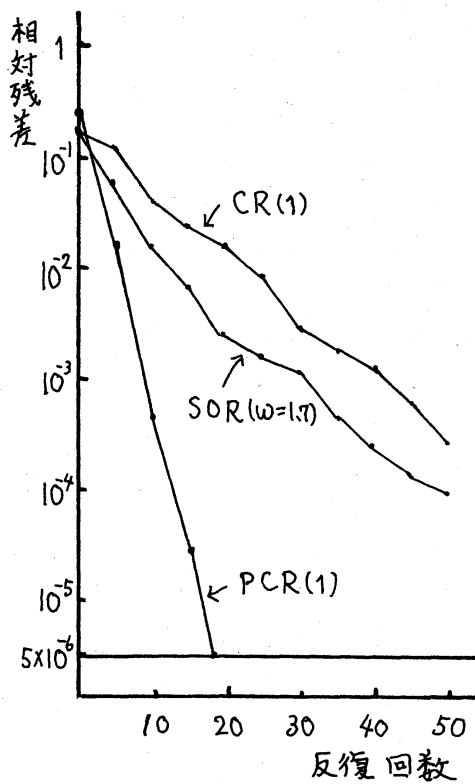


Fig. 9(a)

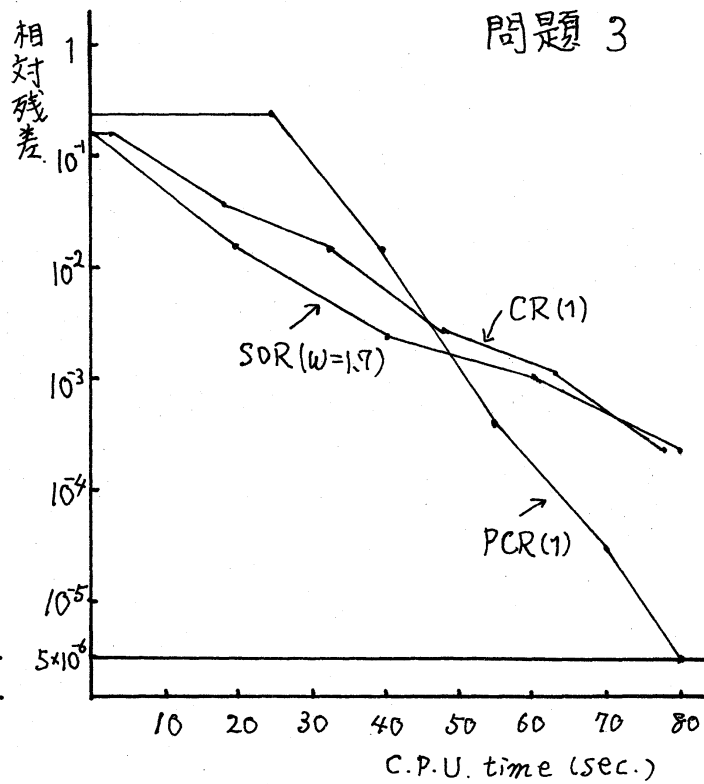


Fig. 9(b)

各問題のグラフの(a)を見ると収束までの反復回数はPCR(1)法が最も少ないことがわかる。また各グラフの(b)において、例えばPCR(1)法のグラフでは、Table 1に示すようにI.L.U.分解と初期設定で約24(sec.)要するので、C.P.U. time 0(sec.) ~ 24(sec.)の相対残差は初期残差と同じ値である。問題1ではI.L.U.分解に要する時間が多いために、収束するまでに要する時間はCR(1)法が最も少ない。しかし、問題2では、I.L.U.分解に要する時間を含めても収束までに要する時間はPCR(1)法が最も少なく、問題3では、PCR(1)法はCR(1)法より1分早く収束する。

5.2 I.L.U.分解を行う間隔の反復回数に及ぼす影響

今度は、問題2と問題3について、 Δt 毎の温度分布と自由境界を、 $t=0$ から $t=50\Delta t$ まで連立一次方程式をPCR(1)法で解くことにより求めた。ここでも $\Delta t=0.1$ とした。その際、I.L.U.分解を行う間隔を変えて、各時刻毎の連立方程式の解の収束に要する反復回数への影響を調べた。尚、これらの計算を行う際の領域 Ω の三角形分割では、分割パラメータをそれぞれ $n=6, l=12, m=8$ とした。このとき連立方程式の次元数は845である。また、計算時間はI.L.U.分解に6.06(sec.)、初期設定に2.45(sec.)、1回反復に1.08(sec.)を要した。

Table 2, Table 3に、それぞれ問題2、問題3におけるI.L.U.分解を行う間隔と各時刻毎に要する反復回数との関係を示す。また、Table 4にはそれぞれのI.L.U.分解の間隔で計算した際に要する総計算時間を示す。さらにFig. 10に問題2,3における自由境界の変化を $5\Delta t$ 毎に表した図を示す。

Table 2 (問題2の結果)

| I.L.U. 分解の間隔 \ time step | time step | | | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------------|-----------|----|---|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 11 | 16 | 21 | 26 | 31 | 36 | 41 | 46 | 50 |
| 毎 回 | 10 | 10 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 回に1回 | 10 | 10 | 9 | 9 | 9 | 8 | 7 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 10 回に1回 | 10 | 10 | 9 | 9 | 9 | 8 | 7 | 6 | 6 | 5 | 5 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 初回のみ | 10 | 10 | 9 | 9 | 9 | 8 | 8 | 8 | 8 | 7 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |

Table 3 (問題3の結果)

| I.L.U. 分解の time step 分解の 間隔 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 11 | 16 | 21 | 26 | 31 | 36 | 41 | 46 | 50 |
|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 毎 回 | 14 | 14 | 14 | 13 | 13 | 13 | 12 | 10 | 10 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 7 |
| 5 回に 1 回 | 14 | 14 | 14 | 13 | 13 | 13 | 12 | 10 | 10 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 7 |
| 10 回に 1 回 | 14 | 14 | 14 | 13 | 13 | 13 | 12 | 10 | 10 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 7 |
| 初 回 の み | 14 | 14 | 14 | 13 | 13 | 13 | 12 | 11 | 10 | 9 | 9 | 8 | 8 | 7 | 7 |

Table 4 総計算時間

| I.L.U. 分解の 問題番号 分解の 間隔 | 2 | 3 |
|------------------------------------|------------|------------|
| 毎 回 | 1773(sec.) | 2019(sec.) |
| 5 回に 1 回 | 1538(%) | 1769(%) |
| 10 回に 1 回 | 1509(%) | 1740(%) |
| 初 回 の み | 1564(%) | 1731(%) |

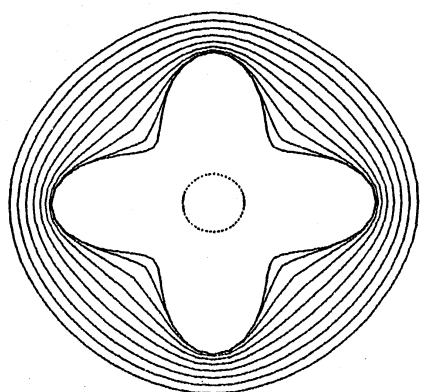


Fig. 10 (a) . 問題 2

注：点線の内側加熱源.

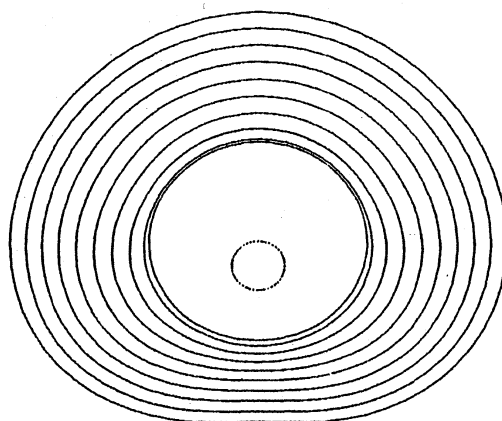


Fig. 10 (b) . 問題 3

Table 2, 3 からわかるように、毎回 I.L.U. 分解を行っても 5 回に 1 回又は 10 回に 1 回 I.L.U. 分解を行った結果と殆ど同じであることがわかる。しかし、最初のステップにおける係数行列に対する I.L.U. 分解を最後まで用いる場合は、特に問題 2 では他の場合より反復回数が多くなることがわかる。Table 4 の計算時間で比較すると、問題 2 では 10 回に 1 回、問題 3 では初回のみ I.L.U. 分解を行う方法が最も計算時間が少いことがわかる。

6. 考察

5.1 の結果から、各時刻毎に解いて行く場合に、問題 2, 3 に対しては毎回 I.L.U. 分解を行ったとしても PCR (1) 法が最も早く収束すると考えられる。また、5.2 の結果から注目すべき点は、最初の係数行列に対する I.L.U. 分解で最後まで十分な前処理としての役目を果たすばかりか、連立一次方程式の解の収束に要する反復回数も減って行くことである。その理由としては、ステファン問題では境界の変化が小さいために各時刻毎の係数行列の変化が少ないことが挙げられるが、もう一つの理由として、時刻 t における連立一次方程式を解く際の反復法の初期値として、1 ステップ前の時刻の解 $Q(t-\Delta t)$ を使うために初期値が非常に良いことが挙げられる。

そこで、初期値として、 a): 1ステップ前の連立一次方程式(3-8)の解 $Q(t-\Delta t)$, b): これに質量行列 M を乗じた(3-8)の右辺ベクトル $MQ(t-\Delta t)$, c): すべての成分が1であるベクトル、の3通りの場合について、最初のI.L.U.分解がそれぞれの場合についての程度有効かを調べた。

Table 5, 6 に、問題

2, 3について、 $\Delta t=0.1$ として $30\Delta t$ まで計算した結果を示す。問題2では、初期値を a から b あるいは c)に変えると、時刻 $20\Delta t$ を過ぎた頃から反復回数が増えることがわかる。Fig.10の問題2の境界の変化を見ると、時刻 $20\Delta t$ の水の領域は菱形に近い

Table 5 (問題 2)

| time step | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 11 | 16 | 21 | 26 | 30 |
|-------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 初期値 | | | | | | | | | | | |
| $Q(t-\Delta t)$ | 10 | 10 | 9 | 9 | 9 | 8 | 8 | 8 | 7 | 7 | |
| $MQ(t-\Delta t)$ | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | 11 | 12 | 12 | 12 |
| $(1, \dots, 1)^T$ | 12 | 12 | 10 | 10 | 10 | 10 | 11 | 11 | 11 | 12 | 12 |

Table 6 (問題 3)

| time step | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 11 | 16 | 21 | 26 | 30 |
|-------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 初期値 | | | | | | | | | | | |
| $Q(t-\Delta t)$ | 14 | 14 | 14 | 13 | 13 | 13 | 12 | 11 | 10 | 9 | 9 |
| $MQ(t-\Delta t)$ | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 15 | 14 | 13 | 13 | 13 |
| $(1, \dots, 1)^T$ | 17 | 17 | 16 | 16 | 15 | 15 | 14 | 14 | 13 | 13 | 13 |

形となり、時刻 $t=0$ のときと比べるとかなり異なった形状とになっている。従って時刻 $20\Delta t$ における係数行列の性質、例えば固有値分布などは、時刻 $t=0$ のときとは異なった分布を持ち、時刻 $t=0$ でのI.L.U.分解は $t=20\Delta t$ ではもはや前処理と

して働いていないと考えられる。問題3に関しては、初期値を(a)から(b)あるいは(c)に変えたことで各時刻毎の反復回数が増えているが、時間が進むにつれて反復回数が減る傾向は前と同じである。Fig. 10の境界の変化を見ると、問題3では時間が進むにつれて、時刻 $t=0$ のときの氷の領域がほぼ同心円状に広がって行っており、従って後の方の時刻における係数行列の性質も時刻 $t=0$ のときと似た性質を持っていると考えられる。

7. まとめ

ステファン問題の有限要素近似によ、 τ 現れる非対称行列を係数行列に持つ連立一次方程式の解法にPCR(1)法が有効であることが確認された。また、ステファン問題に関しては各時刻毎に現れる係数行列を毎回I.L.U.分解する必要はなく、連立一次方程式を解く際の反復法の初期値をうまく選べば、I.L.U.分解の回数はかなり少くすむことがわかった。

今後の課題としては、各時刻毎に現れる係数行列に前処理を施した後の行列の固有値分布を求めて、PCR(1)法の収束性を理論的に考察することである。

参考文献

- 1) 村田 健郎 : CR(後)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.
- 2) M. Mori : Stability and Convergence of a Finite Element Method for Solving the Stefan Problem, Publ. RIMS, Kyoto Univ., Vol 12, No 2, 1976.
- 3) V. R. B. Santos : A Direct Method for Solving Two-dimensional One Phase Stefan Problems, Mem. Numer. Math., Vol 6, pp 39 ~ 63, 1979.
- 4) 山口 昌哉, 野木 達夫 : ステファン問題, 産業図書, 1977.
- 5) Y. Saad : The Lanczos Biorthogonalization Algorithm and Other Oblique Projection Methods for Solving Large Unsymmetric Systems, SIAM J. Num. Anal., Vol 19, pp 485 ~ 506, 1982.