

潮流の有限要素解析に現われる

連立一次方程式に対する ICCG 法

筑波大学 理工学研究所

中島裕之

筑波大学 電子・情報工学系

森 正武

国立公害研究所

渡辺正孝

1. はじめに

偏微分方程式の数値解法として、有限要素法 (finite element method) を適用する場合、最終的には、大規模疎行列を係数行列にもつ連立一次方程式 $Ax=b$ を解くことが問題になる。特に、潮流の有限要素解析のように時間に依存する問題の場合、この連立一次方程式を解くルーチンが繰り返して呼ばれることになり、その効率を上げることがきわめて重要になる。

ここでは、潮流の有限要素解析を瀬戸内海に適用した場合に構成される行列問題の解法として、前処理として不完全コレスキー分解を行う ICCG 法を採用した。そして、数通りの異なる前処理について数値実験を行い、Gauss の消去法、Gauss-Seidel 法、CG 法等と比較した。

2. ICCG 法

ICCG 法 (Incomplete Cholesky Decomposition and Conjugate Gra-

dient Method)とは、不完全ユレスキー分解を前処理として用いて、共役傾斜法を適用する方法である。また、不完全ユレスキー分解とは、ユレスキー分解を続けていく途中で、あらかじめ決められた非対角要素は、強制的に零にして分解を続けていく方法である。強制的に零にする要素は、あらかじめ決められている。

Meijerink and van der Vorst [1]によれば、係数行列 A が M 行列であれば強制的に零にする要素の任意の集合に対して、 $l_{ii} = 1$ とする下三角行列 $L = (l_{ij})$ が唯一存在して、 $A = LL^T - R$ のように正則分離できることが保証されている。ところが、係数行列 A が M 行列でない正定値行列であっても、不完全ユレスキー分解で $l_{ii} \leq 0$ とする必要がある。しかし、そのようなことは稀であるし、あったとしても、その l_{ii} を適当な正の値におきかえれば分解を続けていくことができる。[2]

また、強制的に零にする要素を与える集合によって、種々の不完全ユレスキー分解が考えられる。われわれは、次に示す形の不完全ユレスキー分解を行った。ここで、 m は半バンド幅である。すなわち $2m-1$ がバンド幅となる。

不完全ユレスキー分解(A)

diagonal, sub-diagonal, m -th diagonal 以外を強制的に零にする

る分解。

不完全コレスキー分解(B)

diagonal, sub-diagonal, l -th diagonal 以外を強制的に零にする分解。ただし、 l は 3 から m まで任意に選ぶことができる。

不完全コレスキー分解(C)

diagonal から l -th diagonal までの要素以外を強制的に零にする分解。ただし、 l は 1 から m まで任意に選ぶことができる。

不完全コレスキー分解(D)

diagonal から l_1 -th diagonal までと $(m-l_2+1)$ -th diagonal から m -th diagonal までの要素以外を強制的に零にする分解。ただし、 l_1, l_2 は 1 から m まで $l_1+l_2 < m$ を満たす限り任意に選ぶことができる。

不完全コレスキー分解(E)

元の行列の非零要素以外を強制的に零にする分解。

また、各々の不完全コレスキー分解を行ったときの上三角行列の非零要素をプロットすると、以下のような形になる。

分解(E)に示してある形は、後述する次元数 143 の行列を例として挙げている。

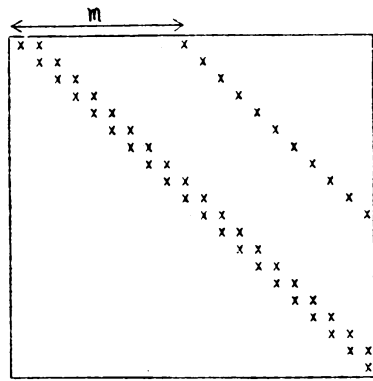


図2.1 不完全コレスキー分解(A) を行った場合の非零要素

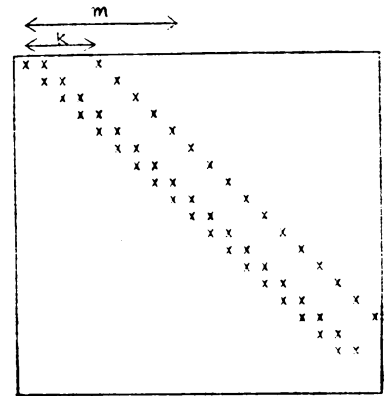


図2.2 不完全コレスキー分解(B) を行った場合の非零要素

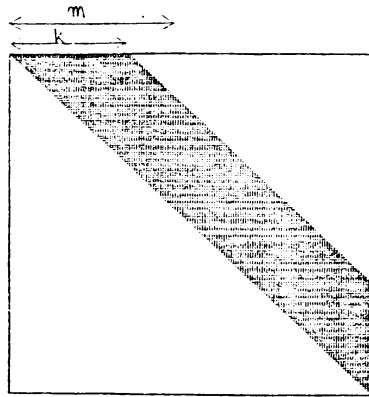


図2.3 不完全コレスキー分解(C) を行った場合の非零要素

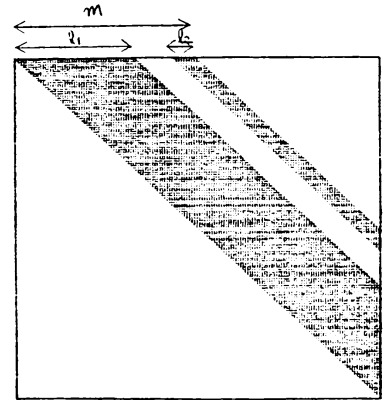


図2.4 不完全コレスキー分解(D) を行った場合の非零要素

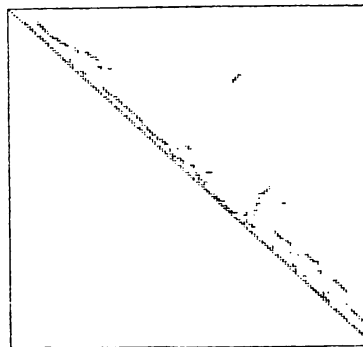


図2.5 不完全コレスキー分解(E) を行った場合の非零要素

次に、連立一次方程式 $Ax=b$, A : 正定値かつ対称行列を解く ICCG法のアプローチ [1] を以下に示す。(行列 A は、 $A = LL^T - R$ のように不完全コレスキー分解されているとする。)

$\alpha^{(0)}$: 初期値, $r_0 = b - A\alpha^{(0)}$, $P_0 = [LL^T]^{-1}r_0$

$$\left\{ \begin{array}{l} d_i = (r_i, [LL^T]^{-1}r_i) / (P_i, AP_i) \\ \alpha^{(i+1)} = \alpha^{(i)} + d_i P_i \\ r_{i+1} = r_i - d_i AP_i \\ \beta_i = (r_{i+1}, [LL^T]^{-1}r_{i+1}) / (r_i, [LL^T]^{-1}r_i) \\ P_{i+1} = [LL^T]^{-1}r_{i+1} + \beta_i P_i \end{array} \right. \quad (2.1)$$

$$i = 0, 1, 2, 3, \dots$$

また、ICCG法は理論的には行列の次元数と同じ反復回数で収束するにわかだが、実際には、丸め誤差のためそうは存らないので、

$$\|r_k\|_2 / \|b\|_2 < \text{EPS}$$

を満たしたならば、反復を終了するようにしてある。ただし、 $\|\cdot\|_2$ はユークリッド・ノルム (以下 2-ノルムと書く)、EPS は 正の小正数である。

前に述べた種々の不完全コレスキー分解と、ICCG法の加算・乗算の演算回数の評価を行う。まず最初に、不完全コレスキー分解とコレスキー分解の演算回数を示す。

表2.1 不完全コレスキー分解とコレスキー分解の演算回数

	加算	乗算
不完全コレスキー分解(A)	$4n - 2$	$4n$
(B)	$4n - 2$	$4n$
(C)	$3n + \frac{1}{2}n(n+1)(7+5l)$	$nl - 3l$
(D)(E)	$n \cdot (7l+5l^2)$	$2nl^2$
コレスキー分解	$\frac{5}{2}m^2n + \frac{9}{2}mn + 3n$	$m^2n - mn$

次に、反復部分及び前進・後退代入部分の演算回数は、次のように存る。

表2.2 反復部分及び前進・後退代入部分の演算回数

		加算	乗算
ICCG法	初期設定	$12nl + 3n - 6l + 2$	$4nl + 5n - 2l$
	1反復	$12nl - 6l + 6n + 2$	$4nl + 9n - 2l + 3$
Gaussの消去法	前進・後退代入	$6mn - 3m^2 + n - \frac{3}{2}m + 2$	$2mn - m^2 + m$

ただし、 n は次元数、 m はバンド幅、 l は行列(片側)の1行にある非零要素の個数である。

例えば、 $n = 143$, $m = 64$, $l = 3$ とすると、反復部分(Gaussの消去法では前進・後退代入部分)の演算回数(乗算)は次のように存る。ただし、反復数は、ICCG法における反復回数に等しい。

表2.3 $M=143, m=64, l=3$ の場合の反復部分の演算回数 (乗算)

反復数	ICCG法	Gaussの消去法
1	2425 + 3000	14272
2	2425 + 6000	
3	2425 + 9000	
4	2425 + 12000	
5	2425 + 15000	
6	2425 + 18000	
7	2425 + 21000	
8	2425 + 24000	
9	2425 + 27000	
10	2425 + 30000	

3. 潮汐流の有限要素解析

潮汐流の有限要素解析で現われる行列は、正定値であるが M 行列には存ら無い。しかし、ICCG法を適用するとき、係数行列が M 行列であることは、収束のための十分条件であり、必要条件ではない。また、瀬戸内海に潮汐流の有限要素解析を適用した場合には、現われる行列は大次元の疎行列であり、バンド幅も大きく存る。ICCG法は、このような行列に対しては、正定値 M 行列でなくとも有効な解法であると考えられる

ので、ここでは、潮汐流の有限要素解析にこれを適用した。

3次元の連続方程式及び運動量方程式を鉛直方向に静水圧近似を仮定し、鉛直方向に積分する。(密度変化は考慮しては行わない) [4]

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (q_x) + \frac{\partial}{\partial y} (q_y) = 0 \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u} q_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\bar{v} q_y) - f q_y \\ = -\frac{\partial}{\partial x} (F_p - F_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} F_{yx} - \frac{1}{\rho_0} (T_x^s - T_x^b) + g\eta \frac{\partial \eta}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\bar{v} q_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\bar{v} q_y) + f q_x \\ = \frac{\partial}{\partial x} F_{xy} - \frac{\partial}{\partial y} (F_p - F_{yy}) - \frac{1}{\rho_0} (T_y^s - T_y^b) + g\eta \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{aligned} \quad (3.3)$$

ここで、 H は潮位変動、 q_x, q_y は x, y 方向の流量、 η は静水位から水表面までの距離、 h は静水位から底面までの距離、 f はコリオリパラメータ、 g は重力加速度、 ρ_0 は平均密度、 T^s は表面シア、 T^b は底面シア、 $\bar{u} = q_x/H$ 、 $\bar{v} = q_y/H$

$$F_p = \frac{1}{2} g \eta^2 + g h \eta$$

$F_{x_i x_j} = E_{ij} \left(\frac{\partial q_j}{\partial x_i} + \frac{\partial q_i}{\partial x_j} \right)$ E_{ij} : eddy viscosity
である。境界条件として、normal flux と潮位を与える。

積分された連続方程式を重み付き残差法によって弱形式に

変換し、有限要素法を適用すると、全体方程式は、以下のよう非線型常微分方程式となる。[4]

$$M_R \frac{\partial H}{\partial t} + G_x Q_x + G_y Q_y - M_R Q_I = 0 \quad (3.4)$$

$$M \frac{\partial Q_x}{\partial t} - G_x^T \eta + E_{xx} Q_x + E_{yx} Q_y - f M Q_y = P_x \quad (3.5)$$

$$M \frac{\partial Q_y}{\partial t} - G_y^T \eta + E_{xy} Q_x + E_{yy} Q_y + f M Q_y = P_y \quad (3.6)$$

ここで、変数は、 H : 潮位変動, Q_x : x 方向の流量, Q_y : y 方向の流量である。

上式に陽的解法を適用し、安定条件として、Courant - Friedrich - Lewy の条件、すなわち

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{\sqrt{2} C} \quad C = \sqrt{gR}$$

が満足されるように、 Δt を選んだ。

紀伊水道、大阪湾、播磨灘を含む海域を、宮ノ浦 - 高松港、備前 - 比井湾を境界線として、以下に示すような2つの三角形分割を行った。一方は、要素数225、次元数143で、鳴門海峡、明石海峡を実際の地形よりかなり広くとり、また、小豆島、家島及び淡路島以外の島を無視した。もう一方は、要素数1806、節点数1036で、ほぼ実際の瀬戸内海の地形と等しくとり、島も淡路島、小豆島、家島等を含めた。各々の三角形分割は以下のようにする。

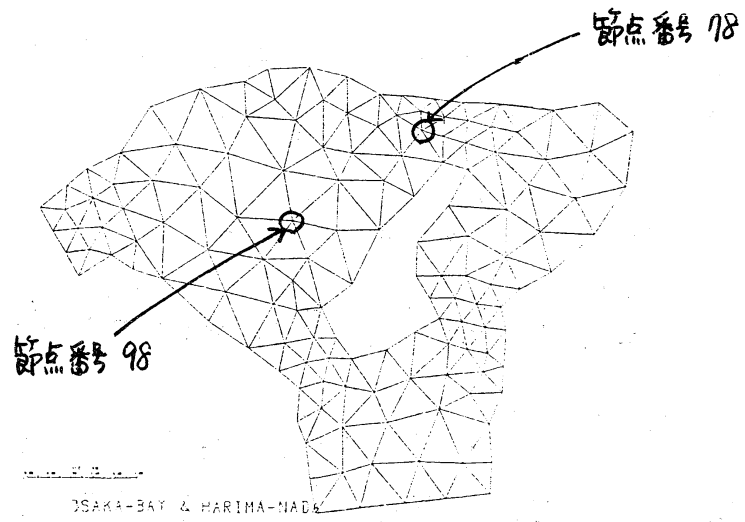


图3.1 要素数 225, 节点数 143 の三角形分割

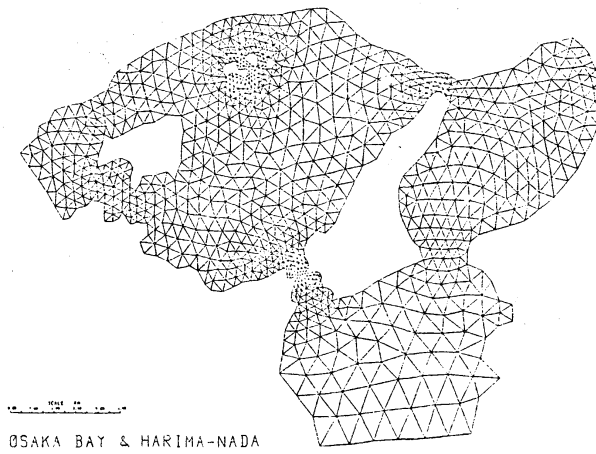


图3.2 要素数 1806, 节点数 1036 の三角形分割

(3.4)式に現われる行列 M の非零要素をプロットすると、それぞれ以下のように存る。なお、(3.5)(3.6)に現われる行列 M も同様の形をした疎行列と存る。

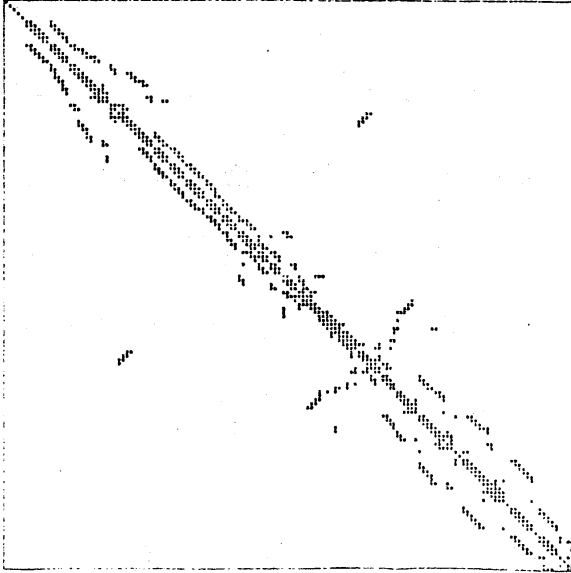


図3.3 次元数 143, 半バンド幅 64 の行列の非零要素プロット

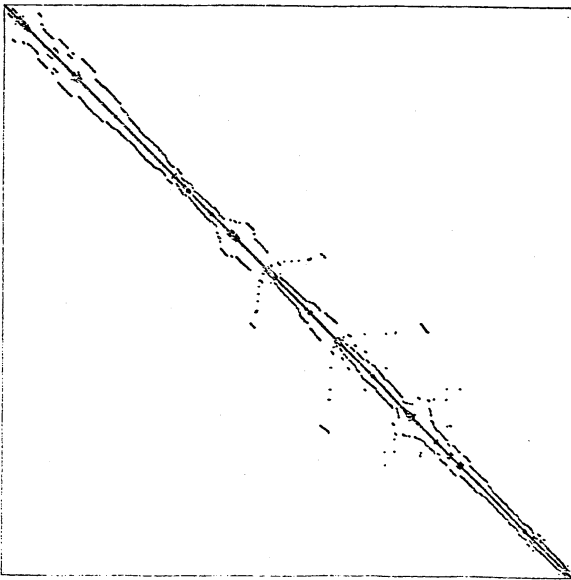


図3.4 次元数 1036, 半バンド幅 187 の行列の非零要素プロット

4. 結果及びその考察

潮流流のような非定常問題においては、任意の時間ステップにおける解は、次の時間ステップにおける解を求めるための初期値として用いることが出来る。したがって、任意時間における1ステップの時間積分に対する各解法の所要時間ならびに精度を比較評価し、その最良の解法を適用することが重要となる。ここでは、潮位変動 H を求める1ステップを取り出して、種々の不完全コレスキー分解を用いたICCG法とGaussの消去法及び他の反復法を用いた場合について、比較検討を行った。

所要時間の比較についての結果を表4.1, 表4.2に示す。(A)~(E)は2.に挙げた不完全コレスキー分解の形である。ここで、反復時間とは、Gaussの消去法においては1回の前進・後退代入に要する時間であり、ICCG法においては共役傾斜法の反復に要する時間である。また、使用機種はHITAC M-170である。また、SOR法については、最適 ω は、143次元の行列の場合0.968~1.031, 1036次元の行列の場合0.963~1.00と有り、各々のGauss-Seidel法と同じ反復数で収束したので、ここには挙げなかった。143次元の行列の場合、SOR行列の最大固有値の絶対値をベキ乗法により求めてみたが、 $\omega=1.2$ において0.42と有り最小と有るが、

$W=1.2$ については、実際に要した反復数は7回であった。

表4.1 次元数143, 半幅幅64の行列の場合 (EPS= 1.0×10^{-3} , 単位: SEC)

方法	分解時間	反復時間	合計時間 (分解時間+反復時間)	反復数	
(A)	0.053	0.317	0.37	6	
(B)	0.051	0.304	0.355	6	$k=27$
(C)	1.31	0.168	1.47	2	$k=27$
(D)	3.44	0.16	3.6	2	$l_1=27$ $l_2=3$
(E)	0.585	0.127	0.712	2	
Gaussの 消去法	4.08	0.227	4.31	—	
Gauss- Seidel法	—	0.12	0.12	5	
共役 傾斜法	—	0.583	0.585	14	

表4.2 次元数1036, 半幅幅187の行列の場合 (EPS= 1.0×10^{-3} , 単位: SEC)

方法	分解時間	反復時間	合計時間 (分解時間+反復時間)	反復数	
(A)	1.12	1.29	2.41	3	
(B)	1.09	1.25	2.35	3	$k=14$
(C)	11.9	1.74	13.6	3	$k=14$
(E)	16.0	0.57	16.6	1	
Gaussの 消去法	296.3	5.57	301.8	—	
Gauss- Seidel法	—	1.12	1.12	6	
共役 傾斜法	—	5.56	5.56	17	

潮流流の有限要素解析のような非定常問題，すなわち時間によつて変化する係数行列をもつ連立一次方程式を何度も解くような問題に適用する場合には，比較表においゝ，反復時間(Gaussの消去法の場合には，前直・後退代入部分に要する時間)のみで，比較するのが適当である。一方，時間によつて係数行列も変化する場合や，一度連立一次方程式を解けば可なり問題に適用する場合には，合計時間で比較すべきであらう。ICCG法を非定常問題に適用する場合，不完全ユレスキー分解(A),(B)よりも(C),(D),(E)の方が，少くも解に時間を要しても，反復時間の方は短くなる。一方，係数行列が時間によつて変化する場合には，反復に少くも時間がかかるとも，分解時間を短くして，その結果として，合計時間が短くなる不完全ユレスキー分解(A),(B)の方が適当であらう。

143次元の行列の場合には，Gaussの消去法以外は何れも差が22%以内だが，1036次元の行列の場合には，反復時間で，不完全ユレスキー分解(E)を用いたICCG法が，Gauss-Seidel法の約2分の1に落ちてゐる。次元数1036次元以上の場合は，数値実験を行つてゐるが，Meijerink and van der Vorst [1]によれば，次元数が大きくなれば圧倒的に速く収束するといわれてゐる。

また，比較のために，Gaussの消去法による解 α_{Gauss} とICCG

法による解 x_{ICCG} とから、 $\|x_{ICCG} - x_{Gauss}\|_2 / \|x_{Gauss}\|_2$, $\|x_{ICCG} - x_{Gauss}\|_\infty / \|x_{Gauss}\|_\infty$ を計算すると、以下のようになる。ただし、2-ノルムはエ-フリップド・ノルム、 ∞ -ノルムは要素の最大絶対値をとるノルムである。

表4.3 次元数143, 半幅幅64の

行列の場合 (EPS = 1.0×10^{-3})

方法	2-norm	∞ -norm
(A)	0.363×10^{-3}	0.176×10^{-3}
(B)	0.363×10^{-3}	0.176×10^{-3}
(C)	0.617×10^{-3}	0.767×10^{-3}
(D)	1.04×10^{-3}	1.3×10^{-3}
(E)	1.0×10^{-3}	0.622×10^{-3}

表4.4 次元数1036, 半幅幅187の

行列の場合 (EPS = 1.0×10^{-3})

方法	2-norm	∞ -norm
(A)	0.596×10^{-2}	0.984×10^{-2}
(B)	0.605×10^{-2}	1.02×10^{-2}
(C)	0.438×10^{-2}	0.767×10^{-2}
(E)	0.954×10^{-2}	2.73×10^{-2}

Gaussの消去法による解と、Gauss-Seidel法、共役傾斜法による解について同様の計算を行うと、以下のようになる。

表4.5 次元数143, 半幅幅64の

行列の場合 (EPS = 1.0×10^{-3})

方法	2-norm	∞ -norm
Gauss-Seidel法	0.295×10^{-3}	0.233×10^{-3}
共役傾斜法	0.562×10^{-2}	0.436×10^{-2}

表4.6 次元数1036, 次元数187の

行列の場合 (EPS = 1.0×10^{-3})

方法	2-norm	∞ -norm
Gauss-Seidel法	0.184×10^{-3}	0.379×10^{-3}
共役傾斜法	0.418×10^{-1}	0.7×10^{-1}

共役傾斜法の場合だけ、EPS = 1.0×10^{-10} とし、以下のようになる。

表4.7 共役傾斜法, $EPS=1.0 \times 10^{-10}$ の場合

	2-norm	∞ -norm	反復数	反復時間(sec)
次元数143の 行列	0.172×10^{-4}	0.937×10^{-5}	81	3.2
次元数1036の 行列	0.519×10^{-4}	0.134×10^{-3}	277	77.6

ICCG法による解の精度を見ると、Gaussの消去法による解と、良く一致していることがわかる。Gauss-Seidel法による解も、ICCG法と同じ程度に良く一致している。共役傾斜法の場合には、 $EPS=1.0 \times 10^{-3}$ とったのでは、良く一致しているとは言えない。 $EPS=1.0 \times 10^{-10}$ とするとICCG法と同程度の精度を得るが、反復数が、 $EPS=1.0 \times 10^{-3}$ の場合に比べて、5~15倍に増える。

次に、種々の不完全ユレスキー分解を用いたICCG法と、共役傾斜法の残差 $\|r\|^2 = \|b - Ax\|^2$ のプロットを図4.1, 図4.2に示す。残差プロットを見ると、共役傾斜法に比べて、ICCG法の収束が速いのがわかる。また、ICCG法では、1反復あたりほぼ同じ比率で残差が減少している。143次元の行列に対する不完全ユレスキー分解(C)の場合には、反復8~10回で急激に減少している。不完全ユレスキー分解(C), (E)において、残差が同程度に減少しているが、演算数・反復時間を考慮に入れると、(E)の方が良い方法であると考えられる。

係数行列の最大固有値と最小固有値の比が1に近いほど、共役傾斜法の部分は速く収束することが理論的にわかっている。

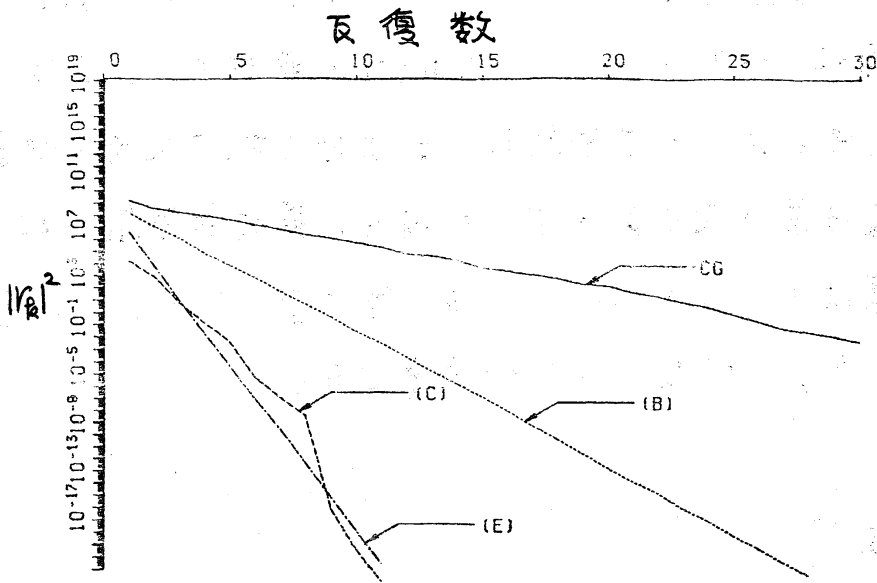


図4.1 次元数 143 の行列の場合の残差プロット
CG は共役傾斜法, (B) (C) (E) は不完全コレスキー分解の形である。

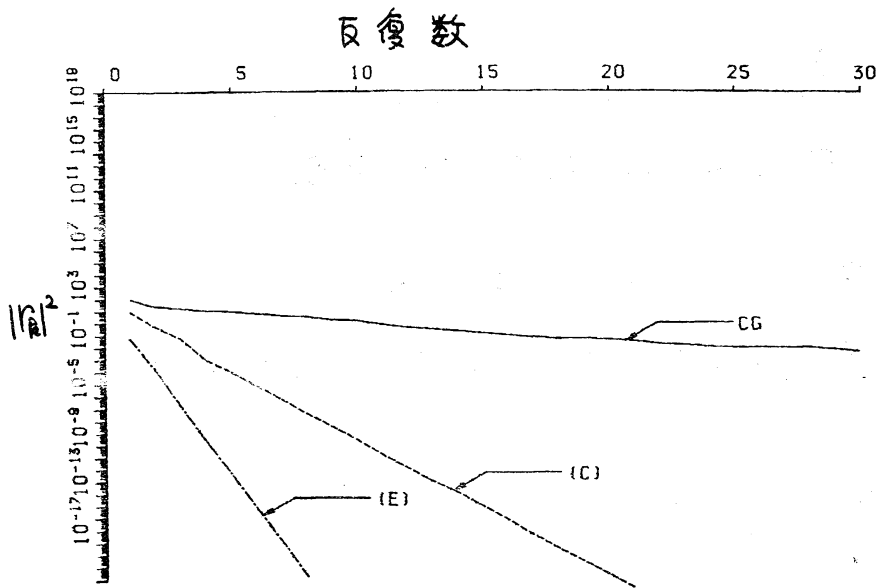


図4.2 次元数 1036 の行列の場合の残差プロット
CG は共役傾斜法, (C) (E) は不完全コレスキー分解の形である。

る。よって、前に示した2つの行列のうちで、次元数143、半バンド幅64の行列について、ICCG法の係数行列 $(LLT)^{-1}A$ の固有値解析を行った。まず最初に、前処理を施す以前の係数行列の固有値分布は図4.3のように存る。最大固有値 0.43×10^9 、最小固有値は1.0である。143個の固有値のうち、1.0の固有値が9個、残り135個は $10^8 \sim 10^9$ 程度である。

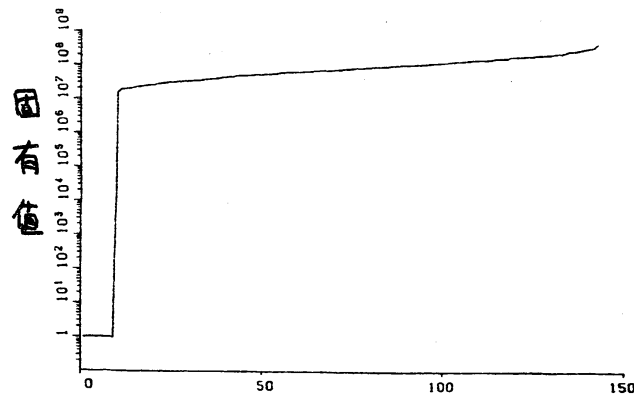


図4.3 前処理を施す以前の固有値分布

次に、不完全コレスキー分解(A),(B),(C),(E)について、 $(LLT)^{-1}A$ の固有値分布を示すと、図4.4~図4.7のように存る。

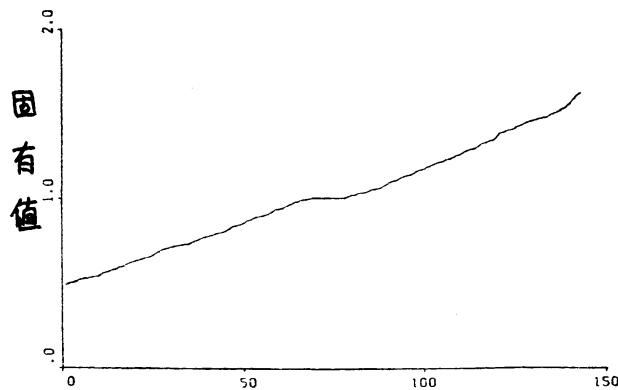


図4.4 不完全コレスキー分解(A)の場合の固有値分布

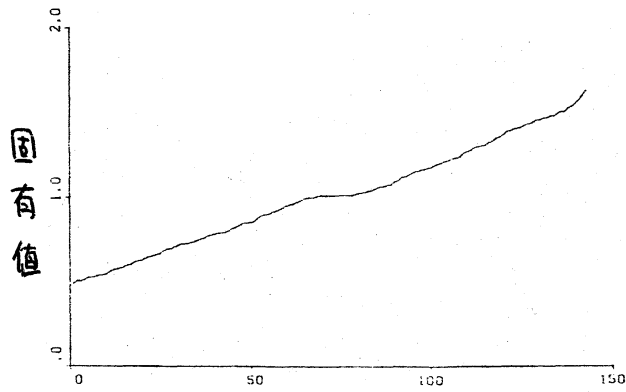


図4.5 不完全コレスキー分解(B)の場合の固有値分布

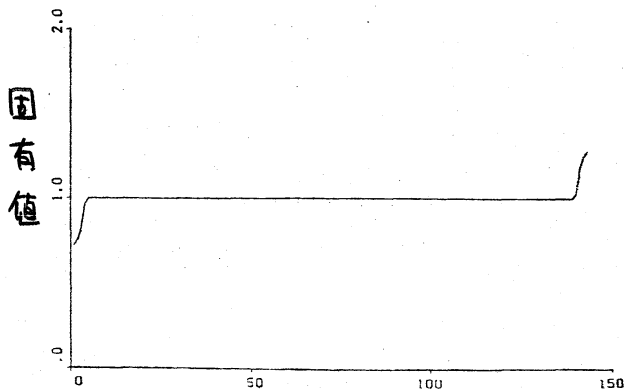


図4.6 不完全コレスキー分解(C)の場合の固有値分布

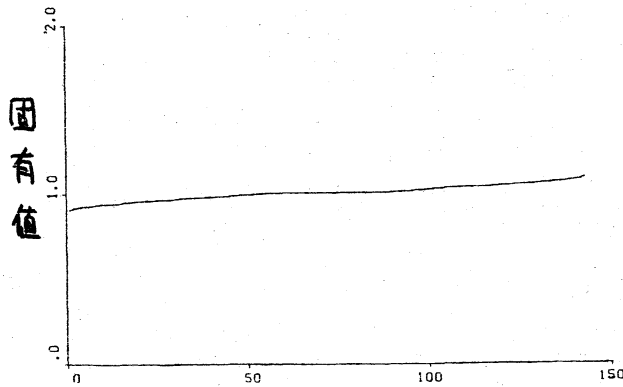


図4.7 不完全コレスキー分解(E)の場合の固有値分布

(A),(B),(C),(E)の最大最小固有値は各々, (A) 1.63, 0.49 (B) 1.62, 0.49
 (C) 1.28, 0.72 (E) 1.09, 0.91 である。最大固有値と最小固有値の
 比が1に近いほど速く収束することは、数値実験からも確か

められた。

前に示した三角形分割(図3.1, 節点数143, 要素数225)の場合
 について, Gaussの消去法と表4.1の結果より他の方法よりも速
 いと考えられる不完全コレスキ分解(D)のICG法を用いた潮
 汐流解析の結果を取り上げ, 両者について, 比較を行った。
 シミュレーションは $\Delta t = 5.0$ 秒として, 342000秒まで約4日間行
 った。使用機種はHITAC M-180である。境界条件としては, 以
 下を示す4つの調和定数を用いている。ICG法の初期値は,
 Δt 秒前の値を用いている。

表4.8 比叻湾における潮汐の調和定数

	M_2	S_2	K_1	O_1
振幅(cm)	46	22	21	17
遅角(度)	180.8	202.8	189.9	171.9

表4.9 宮13湾における潮汐の調和定数

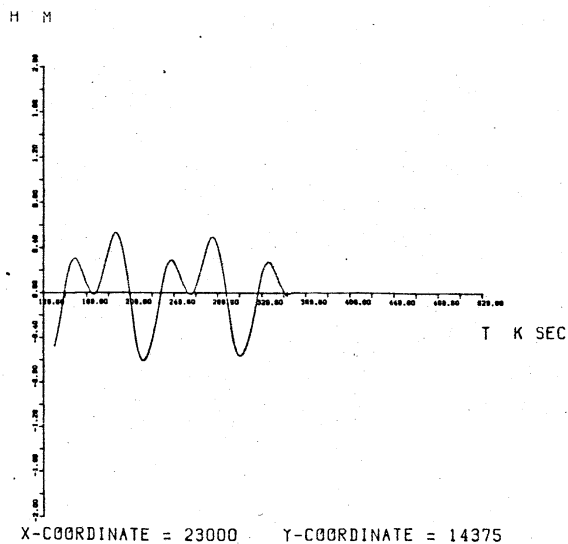
	M_2	S_2	K_1	O_1
振幅(cm)	70.1	22	32.2	22.2
遅角(度)	329.7	353.9	238.9	211.9

Gaussの消去法, ICG法をそれぞれの場合について, 明石海峡
 (節点番号78)の潮位変動の値を比較した。(表4.10) 初期(600秒)の
 頃は, 2桁ぐらいしか一致してはいるが, ある程度定常状態
 になると, 4~5桁が一致してはいる。

また, 播磨灘(節点番号98)の潮位変動を, ICG法を用いた場
 合について図4.8に示す。同様に, 流速分布を194400秒後(約2
 日6時間後)について, 示したものが図4.9である。

表4.10 Gaussの消去法, ICC法を用いた場合について, 潮位変動の比較

時間 (SEC)	Gaussの消去法による解	ICC法による解
600	-0.438778×10^{-9}	-0.432593×10^{-9}
24000	0.405998×10^{-1}	0.405975×10^{-1}
50400	0.241068×10^{-1}	0.239886×10^{-1}
100200	-0.390676	-0.390692
150000	-0.218649	-0.218658
200400	0.229154	0.229169
250200	-0.366080	-0.366058
300000	0.709712	0.709786
342000	-0.361527	-0.361496

図4.8 播磨灘 (節点番号98) の潮位変動
(ICC法を用いた場合)

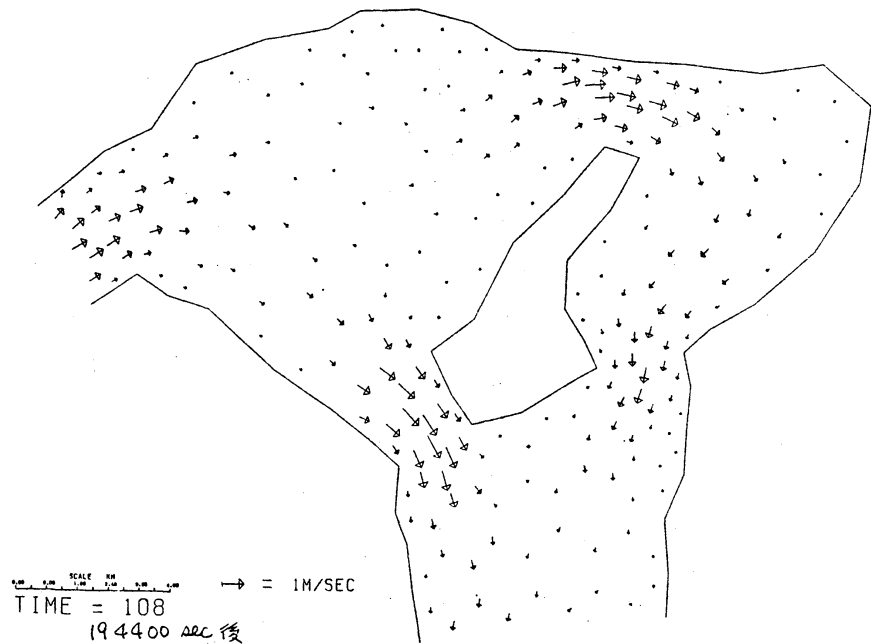


図4.9 19440秒後の流速分布 (ICCG法を用いた場合)

潮位変動, 流速分布の図を比較すると, 潮汐流の有限要素解析に ICCG法が十分使えることがわかる。また, 約4日間 (342000秒) のシミュレーションを行うのに要したCPU時間は, Gaussの消去法を用いた場合には約314分, ICCG法(不完全コレスキー分解法)を用いた場合には約123分である。節点数がもっと大きく存れば, この差は大きく存るし, 他の反復法と比較しても, ICCG法を用いた場合が速く存ることが予想される。

参考文献

1. J.A. Meijerink and H.A. van der Vorst, An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is

a Symmetric M-Matrix, Mathematics of Computation, Vol. 31,
Number 137, January, 1977, 148-162

2. D.S. Kershaw, The Incomplete Cholesky - Conjugate Gradient
Method for the Iterative Solution of Systems of Linear Equations,
Journal of computational physics, 26, 1978, 43-65

3. R.S. Varga, Matrix Iterative Analysis, Prentice-Hall, 1962

(邦訳) 渋谷, 計算機による大型行列の解法, 廿仁二社, 1972

4. 渡辺, 原島, 有限要素法を用いた潮流の数值モデル

国立公害研究所研究報告. 第30号, 1982, 329-362

5. J.J. Connor and C.A. Brebbia, Finite Element Techniques
For Fluid Flow, Butterworth, 1976

(邦訳) 奥村, 流体解析への有限要素法の応用, 廿仁二社, 1978