I-348　有限要素流れ解析に対する前処理付き共役勾配法の適用

東京大学　学生員　佐藤　豪
東京大学　正員　野村　卓史

1. はじめに

近年、非線形問題や、非定常問題の計算が更に大型化するにつれ、使用メモリの少ない共役勾配法が見直されてきている。また、反復解法での解の収束性を良くするための様々な前処理が考案され[1]、その有効性が検討されている。構造解析の分野では、不完全コレスキー分解を利用した前処理により収束性は大きく改善されるが、計算時間に関してはそれほどの改善につながらないことが報告されている[2]。一方有限要素法による流れ解析で解く連立一次方程式は、混合補間の場合には、係数行列が非対称行列と対角行列の積であるため、同じことが言えるかどうか分からない。本研究はこうした点をふまえ、実際に有限要素流れ解析の連立一次方程式を前処理付き共役勾配法で解き、検討した結果を報告するものである。また、非構造メッシュの性質を活かしたアルゴリズムも検討の対象とした。

2. 流れの問題の連立一次方程式と前処理

ナビエ・ストークスの式と連続の式に流速双線形、圧力一定の混合補間を行って有限要素方程式を誘導すると、それぞれ式(1)、式(2)のようなマトリクスを用いた式になる。

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{a}+\boldsymbol{N}\boldsymbol{u}-\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}=\boldsymbol{f} \quad , \quad \boldsymbol{G}^t\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0} \qquad (1),(2)$$

$\boldsymbol{a}$	：	節点加速度ベクトル	$\boldsymbol{M}$	：	質量マトリクス
$\boldsymbol{u}$	：	節点流速ベクトル　（一部未知量）	$\boldsymbol{N}$	：	対流項、粘性項及び人工粘性に関するマトリクス
$\boldsymbol{p}$	：	要素圧力ベクトル　（全部未知量）	$\boldsymbol{G}$	：	空間の勾配に関するマトリクス　（非対称）
$\boldsymbol{f}$	：	流体力ベクトル　（一部未知量）			

ここで、圧力変数と流速変数の数が違うため、$\boldsymbol{G}$ は非対称である。式(1)は $\boldsymbol{u}$ に注目すると時間に関する一階の常微分方程式であるので、predictor-corrector 法などの時間積分公式が適用できる。$\boldsymbol{p}$ に関しては、時間発展的に扱えないので、連続条件を $\boldsymbol{u}$ に課し、次式(3)のような $\boldsymbol{G}^t$、$\boldsymbol{M}^{-1}$、$\boldsymbol{G}$ の三重積を係数行列とする連立一次方程式を得る。これが今回検討した方程式である。

$$\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{p}=\boldsymbol{b} \qquad (3)$$

本研究では、まず式(3)中の $\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{G}$を計算し、全体係数行列 $\boldsymbol{A}$ を作った後それを次の各方法で解き、使用メモリ、解の収束の仕方や時間を比較した。

1. スカイライン法(SK 法)
2. 前処理をしない共役勾配法(Conjugate Gradient 法：CG 法)
3. 前処理として、スケーリング(係数行列の対角成分を 1 にする)を行う Scaled CG 法(SCG 法)
4. 前処理に不完全コレスキー分解を利用した Incomplete Cholesky CG 法(ICCG 法)
5. 3 と 4 を併用した方法(SICG 法)

また、スケーリングを行うだけであるなら、$\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{G}$ から $\boldsymbol{A}$ を組み上げないでも前処理の行列 $\boldsymbol{D}^{-\frac{1}{2}}$ を求めることができ、計算の際、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}$ を $\boldsymbol{D}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{G}^t\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{D}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{p}$ と置き換えることで解を求めることが可能である。この方法では、非構造メッシュの性質を活かすことができ、様々な index を作成する手間が省ける。よって6番目の方法として、

6. 全体係数行列を計算しないでスケーリングを行う方法(S'CG 法)

も併せて比べた。

3. 計算の概要と結果

実際に計算した問題は、角柱周りの流れの問題で、(図1)のようなメッシュ（節点数 5090、要素数 5000）を用い、左側の境界に流速を与えた。

上記 1 ～ 6 の方法で計算を行い、使用メモリ(図2a)、解の収束にかかった反復回数や時間(図2b)を比較した。なお、使用メモリは、全体係数行列 $\boldsymbol{A}$とその作成に必要な index、そして前処理の行列を記憶するのに必要な領域を合計

したもので、マトリクス G と M^{-1} の分(約 8 Mbyte) は除いている。また、計算は Hewlett Packard 社のワークステーション HP Apollo 9000 model 730 (76 MIPS) で行った。

また、それぞれの方法での解の収束の仕方を (図 3)、(図 4) に示した。ここで、S'CG 法は、解の収束の仕方自体は SCG 法と変わらないので示していない。縦軸の norm は、$\|p_{k+1} - p_k\| / \|p_k\|$ (k は反復回数) であり、今回の計算ではこの値が 1.0E－12 以下になったとき反復計算を終了した。

メモリに関しては共役勾配法のメリットが良く現れている。特に S'CG 法では、全体係数行列 A とその作成に必要な index が不要になるので、この計算では SCG 法に比べて約 1MByte の節約になる。

反復回数は SICG 法がいちばん少ないが、一回の反復にかかる時間が増えてしまうため、トータルな時間では SCG 法の方が速くなっている。また S'CG 法をみてみると、SCG 法の 2.2 倍、ICCG 法の 1.8 倍時間がかかっている。

特徴的であるのは、解の収束の仕方で、CG 法や SCG 法ではなめらかに収束しているのに対し、ICCG 法や SICG 法ではノルムが 2 桁ほど振動しながら収束している点である。そのため ICCG 法や SICG 法では反復計算を打ち切る際に注意が必要であると考えられる。

4. まとめ

今回の問題では、ICCG 法より SCG 法の方が収束にかかる計算時間が短く、特に ICCG 法では解が振動しながら収束する傾向がみられた。よって、アルゴリズムの複雑な不完全コレスキー分解を行わなくても、スケーリングだけで充分な効果を発揮することが分かった。

また、S'CG 法は SCG 法よりは計算時間がかかるが、プログラミングの際一番面倒な全体係数行列を組み上げる箇所がなくなるため、アルゴリズムが非常に簡単になる。しかも有限要素法本来の特長である非構造メッシュが更に扱い易くなるため、比較的有力な方法といえる。

なお、計算に使用したメッシュは三井造船（株）平野廣和氏に提供していただいた。記して謝意を表する次第である。

[参考文献] [1] 村田健郎, 小国力, 唐木幸比呂：" スーパーコンピューター" 丸善 (1985)
[2] 吉田裕, 中川昌弥, 田中知足：" 共役勾配法を基礎とする連立一次方程式解法の効率化に関する考察" 土木学会論文集 No.437(1991.10)

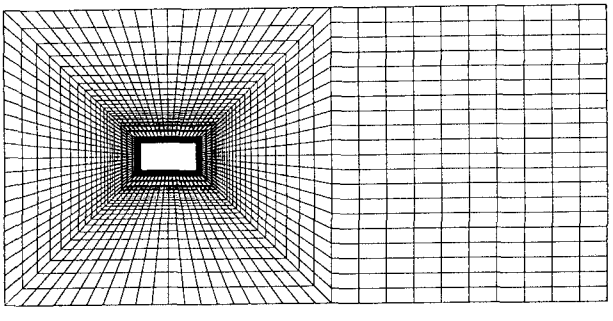

図 1 メッシュ図

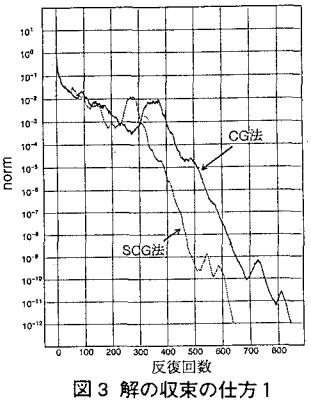

図 3 解の収束の仕方 1

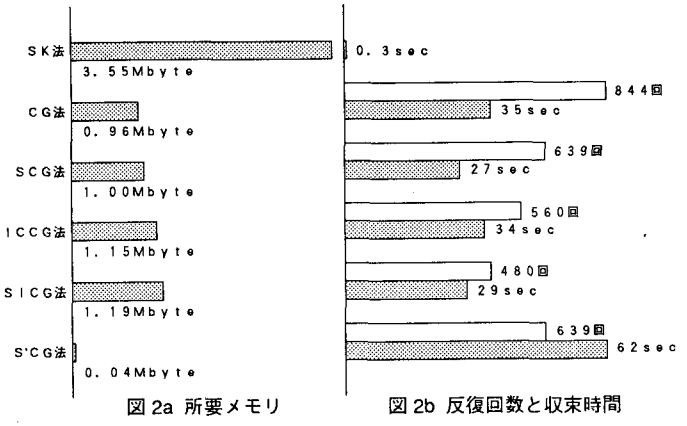

図 2a 所要メモリ　　図 2b 反復回数と収束時間

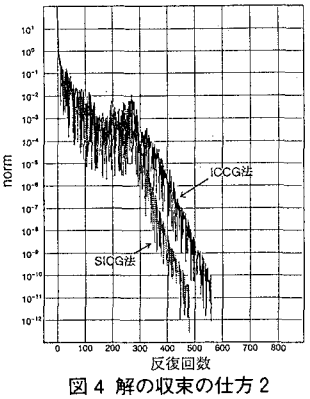

図 4 解の収束の仕方 2