842. 反復計算法の気流計算への応用

石川 裕彦*, 横川 三津夫*, 浅井 清*

(1985年 10月7日 受理)

(1986年 3月10日 再受理)

Application of Some Iterative Methods to Wind Field Calculation

By Hirohiko ISHIKAWA,
Mitsuo YOKOKAWA and Kiyoshi ASAI

This paper describes the reduction of computation time of a large sparse linear equations obtained by discretization of a three-dimensional Poisson's equation using the finite difference method. The equation is induced from wind field calculations, which are needed for evaluation of environmental consequences due to radioactive effluents.

Various iterative methods, such as ICCG, MICCG, ILUCR and MILUCR methods, are applied to solving linear equations and are compared with SOR method. The optimum value of the acceleration factor of SOR method can be obtained numerically according to atmospheric stability for each nuclear site, and the iterations are minimized by using this optimum value.

The computation time for MICCG or MILUCR method is a half of that for SOR method. The ILUCR method is better than SOR method, because it does not use acceleration factor and the computation time is shorter. The use of vector computer drastically reduces the computation time, and all the iterative methods are applicable. A scalar computer, however, favors the use of MILUCR or MICCG methods because of a half of the computation time for SOR method.

KEYWORDS: comparative evaluations, computer calculations, ICCG method, ILUCR method, iterative method, MICCG method, MILUCR method, Poisson's equation, radioactive effluent, SOR method, SPEEDI, vector computer, vectors, wind field

I. はじめに

原子力施設から平常時、事故時に大気中に放出される放射性物質の拡散と、それによる公衆の被曝を把握することは、放射線防護の主要課題の1つである。放射性物質の大気中での拡散は、施設周辺の気流に依存する。各原子力施設周辺では環境モニタリングの一環として風向・風速、大気安定度の測定が実施されている。我が国の原子力施設の大部分は地形の複雑な海岸地帯に立地しているので、これらの観測データを入力として地形の起伏や大気鉛直構造を考慮した3次元モデルによる気流計算を行う必要がある。

3次元気流計算モデルには、ポテンシャル流モデル⁽¹⁾、変分モデル⁽²⁾⁽³⁾、気象力学的モデル⁽⁴⁾などがある。変分モデルは観測値を内挿して求めた風速場を、流体

の質量保存則を満たすように変分法を用いて修正するモデルで、ARAC⁽⁵⁾、SPEEDI⁽⁶⁾などの緊急時システムで用いられている。

3次元モデルでは、計算機の記憶領域や計算時間を大量に要する。変分モデルでは50,000元以上の多元連立1次方程式をSOR法(逐次過緩和法)で解く部分に計算時間の多くが費やされる。このため、連立方程式の解法の選択が重要となる。

本報の目的は、気流計算コード⁽³⁾の計算時間を短縮して緊急時におけるコードの応答性を改善すること、および小型計算機でのコードの運用が実用的な計算時間の範囲で可能であることを示す点にある。そのため前処理つき共役勾配法(ICCG法、MICCG法)、前処理つき共役残差法(ILUCR法、MILUCR法)を連立1

* 日本原子力研究所 (Japan At. Energy Res. Inst.)

次方程式に適用し、Odd-even SOR 法と反復回数、計算時間を比較した。また、これら解法のベクトル計算機への適応性も調べた。

II. 計算コードの概要

計算コードの前半では、風向・風速の観測データを内(外)挿して各格子点での風ベクトルの初期推定値(u^0, v^0, w^0)を計算する。座標系は直交系である。初期推定値は一般には質量保存則

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

を満たさない。例えば、山の近傍で風速場の初期推定値から計算される発散は $10^{-2}(\text{s}^{-1})$ 程度である。計算の後半では、変分調節により風速場の発散を $10^{-7}(\text{s}^{-1})$ のオーダーに減らす。これは、本コードの計算結果を用いて放射性物質拡散計算をする際に、質量変化による誤差を1hの拡散計算で0.1%以下に抑えるためである。

変分原理によれば(1)式を満たし、初期推定値からの修正量

$$J = \int_V [\alpha_1^2 (u - u^0)^2 + \alpha_1^2 (v - v^0)^2 + \alpha_2^2 (w - w^0)^2] dv \quad (2)$$

を最小とする風速場(u, v, w)は、汎関数

$$E = J + \int_V \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) dv \quad (3)$$

を最小とする。上式中で λ はラグランジュの未定乗数、 α_1, α_2 は重み係数である。この問題での λ は修正量を与える速度ポテンシャルである。 E を最小とする条件を導くと、境界条件

$$\lambda \delta(u) n_x = 0, \lambda \delta(v) n_y = 0, \lambda \delta(w) n_z = 0 \quad (4)$$

のもとで、 λ に関する楕円型偏微分方程式

$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial y^2} + \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2^2} \cdot \frac{\partial^2 \lambda}{\partial z^2} = -2\alpha_1^2 \left(\frac{\partial u^0}{\partial x} + \frac{\partial v^0}{\partial y} + \frac{\partial w^0}{\partial z} \right) \quad (5)$$

を解くことに、問題は帰着する⁽³⁾。 (n_x, n_y, n_z) は境界面の法線ベクトルである。(5)式は z に関して簡単な変数変換を行えばポアソン方程式となる。

(5)式を7点差分で近似すると、

$$\frac{a_1 \lambda_{i-1,j,k} + b_1 \lambda_{i,j,k} + c_1 \lambda_{i+1,j,k}}{(\Delta x)^2} + \frac{a_m \lambda_{i,j-1,k} + b_m \lambda_{i,j,k} + c_m \lambda_{i,j+1,k}}{(\Delta y)^2} + \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2^2} \cdot \frac{a_n \lambda_{i,j,k-1} + b_n \lambda_{i,j,k} + c_n \lambda_{i,j,k+1}}{(\Delta z)^2}$$

$$= \frac{u_{i+1,j,k}^0 - u_{i,j,k}^0}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1,k}^0 - v_{i,j,k}^0}{\Delta y} + \frac{w_{i,j,k+1}^0 - w_{i,j,k}^0}{\Delta z} \quad (6)$$

ここで、 i, j, k : x 方向, y 方向, z 方向の

インデックス

となる。境界条件は2次多項式で近似し、係数 a_n, b_n, c_n ($s=l, m, n$)により計算に反映される。境界条件と係数の関係を x 微分の項($s=l$)を例にTable 1に示す。

Table 1 Coefficients of finite difference approximation of second derivative $[a_l \lambda_{i-1} + b_l \lambda_i + c_l \lambda_{i+1}] / (\Delta x)^2, j, k$

Boundary condition at $i - \frac{1}{2}$	a_l	b_l	c_l	Boundary condition at $i + \frac{1}{2}$
No boundary	1	-2	1	No boundary
$\partial \lambda / \partial x = 0$	0	-1	1	No boundary
No boundary	1	-1	0	$\partial \lambda / \partial x = 0$
$\partial \lambda / \partial x = 0$	0	0	0	$\partial \lambda / \partial x = 0$
$\lambda = 0$	0	-4	$\frac{4}{3}$	No boundary
No boundary	$\frac{4}{3}$	-4	0	$\lambda = 0$
$\lambda = 0$	0	$-\frac{8}{3}$	0	$\partial \lambda / \partial x = 0$
$\partial \lambda / \partial x = 0$	0	$-\frac{8}{3}$	0	$\lambda = 0$

計算格子の数を x, y, z 方向にそれぞれ51, 51, 21として、すべての格子点で(6)式を作ると54,621元の連立1次方程式

$$Ax = b \quad (7)$$

ここで、 x : $\lambda_{i,j,k}$ を成分とするベクトル変数

A : λ の係数で構成される非対称な
7重対角行列

b : (6)式の右辺を成分とする定数
ベクトル

を得る。 α_1/α_2 の値は大気安定度に依存して時間とともに変化するため、 A, b とも計算対象時刻ごとに異なる。

α_1/α_2 は気流計算で重要なパラメータである。この値が大きいと大気の大気温度成層が不安定な場合に生ずる山越気流が計算され、小さいときは安定な場合の山を迂回する気流が計算される。現在は、野外実験、風洞実験との比較から経験的に定めた値0.01~0.20を用いている。

III. 計算アルゴリズム

本章では、用いられた数値解法について簡単に説明する。WIND 04⁽³⁾のオリジナル版ではOdd-even SOR法を用いている。

1. Odd-even SOR 法

x, y 方向の離散計算格子点数を奇数として、 x, y, z

方向の順に番号付けを行なった計算格子に対して、ポアソン方程式を7点差分近似して得られる行列Aは「性質A」をもつ⁽⁷⁾。この連立1次方程式をSOR法で解く場合、奇数格子の値を先に計算し、その後偶数格子の値を計算するスキームはOdd-even SOR法と呼ばれ、ベクトル計算に適している⁽⁸⁾。また、SOR法の最適加速係数 ω_{opt} は、Aが「性質A」をもつためYoungの理論、 $\omega_{opt} = 2/(1 + \sqrt{1 - \lambda_{max}^2})$ 、によって求められる⁽⁹⁾。ところが、係数行列Aの次数が非常に大きいため、Aのヤコビ行列の最大固有値 λ_{max} を直接求めることは困難である。そこで、

$$\lambda_{max} \doteq \sqrt{\frac{\|r^{(n+1)}\|}{\|r^{(n)}\|}} \quad (8)$$

ここで、 $\|\cdot\|$: ユークリッド・ノルム

$r^{(n)}$: ガウス-ザイデル法で緩和計算を行なった時の第n反復での残差

によって求めた λ_{max} の近似値から ω_{opt} を計算した。

本報の問題に関して、 ω_{opt} は計算領域の地形と大気安定度に依存するパラメータ α_1/α_2 から決まる。このため、 ω_{opt} は各サイトごとに地形および大気安定度の関数として予め求めておくことができる。

2. 前処理つき共役勾配法(ICCG法, MICCG法)⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾

CG法は、対称正定値行列を係数行列にもつ連立1次方程式の解を $f(x) = (A^{-1}r, r)$ を最小にすることによって求める。ここで、 $r = b - Ax$, $(\cdot, \cdot)$ は内積である。この方法は、理論的には次元数以下の反復で真の解に収束し、Aが密集固有値をもてば収束が速い。しかし、収束が不安定で計算誤差のため実際には次元数以下で収束しないなどの点から、あまり用いられていなかった。

ところが、係数行列に前処理(Precondition)を施してからCG法を適用するPCG法は収束が速い。前処理行列として、Aの不完全コレスキー分解を用いるものは、ICCG法(Incomplete Cholesky CG法)⁽¹¹⁾と呼ばれ、移流拡散問題に対しては、SOR法に比べてかなり有利な結果を示している。また、MICCG法(Modified ICCG法)は不完全コレスキー分解因子の対角成分に加速係数 σ_{CG} を用いて修正を加えるものであり、ICCG法よりも速い収束が得られるが、最適な σ_{CG} は試行計算によって求めなければならない。さて、3次元気流計算問題の7点差分によって得られる連立1次方程式の係数行列Aは、境界条件のために非対称となっている。そこで、Aの対称部分に対して不完全コレスキー分解を適用した。

ICCG法, MICCG法は、ハイパープレーン法と呼ば

れるメッシュ走査法を用いたリスト・ベクトルを用いれば、効率的なベクトル化が可能である⁽¹²⁾。

3. 前処理つき共役残差法

(ILUCR法, MILUCR法)⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾

CR法は非対称行列を係数とする連立1次方程式の解を $f(x) = (r, r)$ を最小とすることにより求めるものであり、CG法と比べて一反復あたりの演算量が多い。CR法はAの対称部が正定値であるならば収束し、特に単位行列に近ければ速く収束する。したがって、PCG法と同様に行列Aに前処理を施して収束を速めようとするものがPCR法である⁽¹³⁾。前処理行列として不完全LU分解がよく用いられ、この方法はILUCR法と呼ばれている。また、MICCG法と同様に、不完全LU分解因子の対角項に加速係数 σ_{CR} を用いて修正を施したものをMILUCR法と呼び、最適な加速係数 σ_{CR} を用いればILUCR法よりも速い収束が得られる。しかし、 σ_{CR} も試行計算によって求めなければならない。ILUCR法, MILUCR法ともハイパープレーン法によるベクトル化が可能である。

IV. 計算結果

本章では、Odd-even SOR法, MICCG法, MILUCR法の加速係数と、各解法の反復回数、計算時間の比較結果を示す。計算格子幅は、水平方向が1 km、高さ方向が25 mである。計算はすべて倍精度で実行し、解の収束判定には相対誤差、 $\|Ax - b\|/\|b\| < \varepsilon$ を用いた。本来は修正された風速場の発散の最大値で判定すべきであるが、この条件を用いるとSOR法以外の解法では計算量が大きく増加する。相対誤差を用いると風速場の発散を $10^{-7}(\text{s}^{-1})$ のオーダーにするためには、 ε を 10^{-6} よりも小さくする必要がある。以下の計算では $\varepsilon = 10^{-6}$ を用いた。

1. SOR法の最適加速係数 ω_{opt}

東海サイトを例に、いくつかの α_1/α_2 の値について、 ω と解の収束($\varepsilon = 10^{-6}$)に要する反復回数の関係をFig. 1に示す。 α_1/α_2 の値により反復回数を最小とする ω の値が異なる。 $\omega < \omega_{opt}$ を用いると反復回数は急激に増加し、 $\omega > \omega_{opt}$ の場合は比較的緩やかに反復回数が増加する。図中の矢印は第Ⅲ-1節で述べた方法で求めた ω_{opt} を示す。真の最適値よりも僅かに小さいのは、(8)式による最大固有値の近似値が小さ目に計算されることによる。

係数行列Aは地形により異なるため、 ω_{opt} もまた地形に依存する。Fig. 2に、日本国内のいくつかのサイトについて計算した ω_{opt} を α_1/α_2 の関数として示

す。地形が平坦な場合の ω_{opt} も参考を示す。各サイトとも α_1/α_2 が大きくなると ω_{opt} は小さくなり、一定の値に落ち着く。これは α_1/α_2 がある程度以上大きいと(5)式の z -微分の項が他の微分項に比べ支配的になるためである。逆に、 α_1/α_2 が十分に小さいと z -微分項の寄与は小さくなり、2次元の問題に近くなる。実際平坦地形の ω_{opt} は、2次元ポアソン方程式を 51×51 メッシュの正方領域で解く場合の理論値1.882に近づく。

サイトごとに α_1/α_2 の関数として決まる ω_{opt} を用いて計算を実行すると、例えば上記の2次元問題の ω_{opt} の理論値を用いた場合に比べ、最大で30%程度反復回数を減らすことができる。

Fig. 1 Dependence of iterations on relaxation factor ω_{opt} for various values of α_1/α_2

Fig. 2 Relaxation factor of SOR method computed on basis of Young's theorem

2. MICCG 法, MILUCR 法の最適加速係数

東海サイトにおいて、 $\alpha_1/\alpha_2 = 0.01 \sim 0.2$ の各値に対して、加速係数 σ_{00} を0.0001, 0.0002, 0.0005, 0.001, 0.002, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0

と変化させたときの MICCG 法の収束反復回数をFig. 3に示す。収束判定条件は $\epsilon = 10^{-8}$ とした。いずれの場合も $\sigma_{00} = 10^{-2}$ 付近で最小の反復回数となった。また、MILUCR 法に対して同様の調査を行なったものが

Fig. 3 Dependence of iterations on acceleration parameter σ_{OG} in calculation of MICCG method at Tokai site

Fig. 4 である。 α_1/α_2 の値が大きくなるに従い、 σ_{OR} の低い値で収束が速い。 $10^{-3} \sim 10^{-2}$ に最適加速係数が存在する。

最適な σ_{OG} , σ_{OR} の値についての理論的な根拠はまだ知られておらず、加速係数を変えて数多くの計算を行わなければ最適値が求まらない。本報においては、両解法とも13の異なる値を用いた試行計算によって最適加速係数を求めた。

3. 解法の比較

ここでは、Odd-even SOR 法, ICCG 法, MICCG 法, ILUCR 法, MILUCR 法の5つの解法に対して、東海サイトの地形データ、 $\alpha_1/\alpha_2=0.04$ を用いて収束速度、計算時間について比較した結果を示す。SOR 法, MICCG 法, MILUCR 法の加速係数は、第IV-1, 2節で求めた最適な値を用いた。収束判定に用いる残差はSOR法では真の残差を用い、その他の解法では反復過程の残差を用いた。この問題に対しては真の残差の大きさと反復過程の残差の大きさとの違いが非常に小さいので、計算量を減らすために反復過程の残差を用いた。

まず、各解法と反復回数の関係をFig. 5に示す。ICCG法は収束条件が厳しくなると200回以内では収束しなかった。これは係数行列が非対称であるにもかかわらずICCG法を用いたためと考えられる。MICCG法, MILUCR 法はSOR法の $1/2$ 以下の反復回数で収束し、ILUCR 法もSOR法の約 $1/2$ の反復回数で収束した。

Fig. 4 Dependence of iterations on acceleration parameter σ_{OR} in calculation of MILUCR method at Tokai site

Fig. 5 Comparison of iterations for various methods

各解法をFACOM M-380で実行したときの計算時間をFig. 6に示す。この時間には係数行列の不完全分解に要する時間も含まれている。SOR法とILUCR法, MICCG法, MILUCR 法との差が、反復回数での差ほど大きくないのは、SOR法の1反復当りの計算時間が短いためである。MICCG法, MILUCR 法はほとんど同じ実行時間を示し、SOR法に比べて約2倍の計算速度が得られた。ILUCR 法はSOR法よりも若干速い程度であ

る。また、ベクトル化による速度向上比は FACOM VP-100 で実行した結果、それぞれの解法について約 15 倍となった。

Fig. 6 Comparison of computation times of various methods on scalar computer FACOM M-380

また、PCG, PCR 系の解法を用いたときの主記憶量は、SOR 法を用いる場合の容量 4 MB の 10% 程度の増加になる。

V. まとめ

本報で調査した反復解法を計算時間の短い順に整理すると、①MICCG法, MILUCR法, ②ILUCR法, ③ICCG法(収束判定条件が緩い場合), ④Odd-even SOR法となる。

従来から用いているOdd-even SOR法は、加速係数を計算条件(サイト, 大気安定度)に応じて最適化すれば、最大で 30% 程度反復回数が減少することがわかった。

MICCG法やMILUCR法を用いると、最適加速係数を用いたSOR法の約半分の計算時間で解が収束することがわかった。しかし、これら2つの解法の加速係数を得るには、SOR法の場合と異なり、大量の試行計算を行わねばならない。一方、ILUCR法は計算時間の短縮は僅かだが、加速係数を用いない点でSOR法よりも使いやすい。以上の結果から、ある決まったサイト

の計算をする場合には、加速係数を最適化したMILUCR法またはMICCG法を用い、その他の場合はILUCR法を用いる方法が良いことがわかった。

気流計算コードWIND04は原子炉事故時の運用を第一目的としている。ベクトル計算機や大型汎用計算機などの高性能機で計算を行う場合は1ケース当りの計算時間の短縮は僅かである。特に、ベクトル計算機を用いる場合は、ベクトル化の効果が大きいため、解法の選択はそれほど重要な問題とはならない。しかし、緊急時システムの運用開始時や気象データの追加に伴い再計算を行う場合など、何時間分もの風速場をまとめて計算する時には、この時間短縮によりコード運用上の柔軟性が増す。一方、小型計算機やスーパーミニコンピュータなど演算速度の遅い機種では数10 minの計算時間短縮となる。このクラスの計算機は気象データやモニタリングデータの自動収集に用いられている⁽¹⁴⁾。今回の改良により、これらの計算機上でデータ収集と一体化した風速場計算を実行することが現実的となった。

国土数値情報を利用して頂いた国土庁国土情報整備室、計算コードの一部を作成して頂いた(財)原子力データセンターの中野美貴志氏に感謝する。

—参考文献—

- (1) ICHIKAWA, Y., SHIKATA, H.: *Nucl. Technol.*, **64**, 26 (1984).
- (2) SHERMAN, C.A.: *J. Appl. Meteor.*, **17**, 312 (1978).
- (3) 石川裕彦: *JAERI-M* 83-113, (1983).
- (4) YAMADA, T.: *J. Meteor. Soc. Jpn.*, Ser. 2, **59**, 108 (1983).
- (5) DICKERSON, M.H., ORPHAN, R.C.: *Nucl. Safety*, **17**, 281 (1976).
- (6) IMAI, K., et al.: *JAERI* 1297, (1985).
- (7) 戸川肇人: “マトリクスの数値計算”, (1971), オーム社.
- (8) 石川裕彦(原子力コード研究委員会, 炉物理研究委員会編): *JAERI-M* 85-017, 171 (1985).
- (9) 村田健郎: *Computer Today*, 7[2], 51 (1984).
- (10) 村田健郎, 小国力, 唐木幸比古: “スーパーコンピュータ—科学技術への適用”, (1984), 丸善.
- (11) MEIJERINK, J.A., Van der VORST, H.A.: *Math. Comp.*, **31**, 148 (1977).
- (12) 後保範: 京大数理解析研講究録, **514**, 110 (1984).
- (13) 村田健郎: 同上, **514**, 92.
- (14) 押野昌夫, 他: 保学会第20回研究発表会要旨集, B33, (1985).