図10 表面磁荷の分布。
Distribution of surface charge at the center core leg.

図11 鉄心窓外の磁界分布。
Distribution of magnetic field outside the window.

5. む す び

以上、磁界の数値計算法としてよく知られている有限要素法と積分方程式法について、一部の適用例を含め紹介した。有限要素法はその広汎な適用性が、積分方程式法は三次元問題への適用性が多くの計算で確かめられている。今後これらの計算法はさらに高度な磁界計算の分野への適用研究が盛んになるものと予想される。

なお、最近の話題として三次元の非線形問題を計算する有限要素法のプログラムが発表されている⁹⁾。これは、two-scalar potential に基づいて静磁界計算を行なうもので、精度や計算時間の面もかなり改善されているようであり注目されている。

〔参考文献〕

- 1) たとえば、第2回電気・電子工学への有限要素法の応用シンポジウム論文集 (1980)。
- 2) M. J. Newman, C. W. Trowbridge: Proc. 4th Int. Conf. Magnet Tech. (1972)。
- 3) N. Tsuya, Y. Yamazaki: Int. Conf. on Electromagnetic Relays (1963)。
- 4) 野村, 河面: 電気学会回転機研究会資料 RM-78-17 (1978)。
- 5) 中村, 野村, 岩本: 電学誌 **96**, 443 (1976)。
- 6) C. S. Biddlecombe *et al.*: Proc. COMPUMAG (1976)。
- 7) 武智, 黒田: 電気学会回転機・静止器研究会資料 RM-81-19 (1981)。
- 8) M. V. K. Chari *et al.*: IEEE PES Winter Meeting 81, WM 175-9 (1981)。
- 9) J. Simkin *et al.*: IEE Proc., Vol. 127, Pt. B, No. 6 (1980)。
- 10) P. Silvester *et al.*: IEEE Trans. PAS 70, TP-130-PWR (1970)。
- 11) 野村, 中村, 河面: 電気学会情報処理研究会資料 IP-76-25 (1976)。
- 12) 中村, 野村: 電気学会全国大会 No. 869 (1977)。
- 13) たとえば, 古崎, 小倉: 文献1) No. 19 (1980)。
- 14) 野村: 電気学会情報処理研究会資料 IP-80-21 (1980)。

展望

磁界計算 (2)

電子計算機と有限要素法 The Computational Performance in the Finite Element Method

村田健郎 日立中央研究所
Kenro Murata Central Research Lab. Hitachi Ltd.

Computational aspects of the F.E.M Solutions of the convective transport equations:

$\partial_t u + \nabla \cdot (-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f$ or $\nabla \cdot (-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f$ are described. Substructured Iteration Methods

and Preconditioned LU & Conjugate Gradient Methods are feasible to overcome the memory neck of the computers. ICCG by Meijerink and Van der Vorst are applied to the 3 dimensional $\nabla \cdot (-k \nabla u) = f$ with variable diffusion coefficient k and compared to the SOR, SLOR, and Pure CG Methods.

1. はじめに

現在、国産最高水準の計算機の性能は、大体 20 Mips, すなわち $0.05 \mu s/(\text{命令})$ 前後である。FORTRAN の積和ステートメント: $A(I, J) = A(I, J) + T * A(K, J)$ ひとつ当りおよそ $0.3 \sim 0.5 \mu s$ 程度である。この機械で電磁場の解析に現われるポアソン方程式:

$$\operatorname{div}(-k \nabla u) = f \quad (1)$$

を有限要素法で解くのに、 80×100 節点程度の線形問題ならば 10 秒程度の CPU タイムである。 k が異方性テンソルであっても、大差はない。非線形問題でも反復 10 回程度で収束する問題なら 2 分以内である。

こう言う計算機もかなりのものになったとの印象を与えるが、果たしてどうであろうか。時間依存の問題は? あるいは三次元問題は? あるいは動く磁場の解析に現われる

$$\sigma(\partial_t A + \mathbf{v} \cdot \nabla A) = -\operatorname{div}(-k \nabla A) + j \quad (2)$$

には移流項と呼ばれる $\mathbf{v} \cdot \nabla A$ が現われるが、そのときはどうか? といった諸問題について概観したい。問題を“移流拡散方程式”

$$\partial_t u + \operatorname{div}(-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f \quad (\text{非定常}) \quad (3)$$

$$\operatorname{div}(-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f \quad (\text{定常}) \quad (4)$$

にしばり、解法としては“ガレルキン式有限要素法”を採ることとする。

2. 保存則、移流拡散方程式、有限要素法の基礎式

古典物理の保存則: 単位容積当り物理量 u に関する、

$$\partial_t \left[\int_{\Omega} u \, dx \right] = - \int_{\Gamma} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \, ds + \int_{\Omega} f \, dx \quad (5)$$

$\partial_t [\Omega \text{ 内の } u \text{ の総量}]$

= -[表面 Γ からの流出量]

+ [Ω 内でのわき出し]

に、ガウスの発散公式 $\int_{\Gamma} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \, ds = \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{i} \, dx$ を施し、すべてを体積積分の形に書き直して、

$$\int_{\Omega} (\partial_t u + \operatorname{div} \mathbf{i} - f) \, dx = 0$$

とした後、保存則の微分形式:

$$\partial_t u + \operatorname{div} \mathbf{i} = f \quad (6)$$

を得た。ベクトル $\mathbf{i}$ (束) はしばしば、

$$\mathbf{i} = -k \nabla u + \mathbf{b}u \quad (7)$$

拡散束 移流束

と書かれるため、(6) 式は移流拡散方程式:

$$\partial_t u + \operatorname{div}(-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f \quad (8)$$

の形をしていることが多い。対応する定常方程式は

$$\operatorname{div}(-k \nabla u + \mathbf{b}u) = f \quad (9)$$

である。ポアソン方程式は、移流項 $\mathbf{b}u$ が無いという特別のケースである。

(6) 式に関数 $\varphi(x)$ を掛けて積分し、部分積分公式:

$$\int_{\Omega} (\operatorname{div} \mathbf{i}) \varphi = - \int_{\Omega} \mathbf{i} \cdot \nabla \varphi + \int_{\Gamma} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \varphi$$

を使うと、“保存則の変分形式”:

$$\int_{\Omega} \partial_t u \varphi - \int_{\Omega} \mathbf{i} \cdot \nabla \varphi + \int_{\Gamma} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \varphi = \int_{\Omega} f \varphi \quad (10)$$

を得る。これがガレルキン式有限要素法の基礎式となる。以下、移流拡散方程式の例をあげる。

流れ場 $\mathbf{v}$ における、不純物密度 u についての質量保存則は、(5) の形式で考えれば直ぐわかる通り、

$$\partial_t u + \operatorname{div}(-k \nabla u + \mathbf{v}u) = f \quad (11)$$

半導体の中のイオンの濃度 u については、

$$\partial_t u + \operatorname{div}[-k \nabla u \pm (\mu \nabla \psi)u] = f \quad (12)$$

このときの移流項 $\pm (\mu \nabla \psi)u$ は、 u が電場 $\mathbf{E} = -\nabla \psi$ に沿って移動するもので、ときにドリフト項と呼ばれる。

ちぢまぬ、かつ粘性係数 μ が一定のナビエ・ストークス方程式:

$$\partial_t (\rho v_i) = -\operatorname{div}(-\mu \nabla v_i + \rho v_i \mathbf{v}) - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (13)$$

($i = 1, 2, 3$)

は、 i 方向運動量 ρv_i が、速度勾配 ∇v_i に比例する拡散束 (粘性拡散束) $-\mu \nabla v_i$ と、流れ $\mathbf{v}$ によって素直に運ばれる移流束 (慣性束) から成る移流拡散方程式と見ることができる。

3. ガレルキン式有限要素法

初めにわかりやすい一次元問題について解説する。

$$(-ku' + bu)' = -cu + f_0 \quad \text{on } 0 < x < 1 \quad (14)$$

$$u(0) = 0, \quad -ku'(1) + bu(1) = \beta \quad (15)$$

を満たすような $u(x)$ の近似解を求めたい。 $0 < x \leq 1$ に、分割: $0 < x_1 < \dots < x_i < \dots < x_n = 1$ を施し、各 i ごとに局所一次関数 $\varphi_i(x)$ を作る [図 2(a)]。

(14) 式に $\varphi_i(x)$ を掛けて積分した式に部分積分公式を

図 1

図 2

図 3

適用した式：

$$\begin{aligned} & -\int_0^1 (-ku' + bu)\varphi_i' + \left[(-ku' + bu)\varphi_i \right]_0^1 \\ & = -\int_0^1 cu\varphi_i + \int_0^1 f_0\varphi_i \end{aligned} \quad (16)$$

に境界条件(15)を入れると、

$$-\int_0^1 (-ku' + bu)\varphi_i' + \beta\varphi_i(1) + \int_0^1 cu\varphi_i = \int_0^1 f_0\varphi_i$$

この式の u を、折線関数近似 $u = \sum_{j=1}^n u_j \varphi_j(x)$ で代用し
〔図 2 (b)〕 (以下 $\sum_{j=1}^n$ を省略して書く)、

$$\begin{aligned} & -\int_0^1 (-k(u_j\varphi_j)' + b(u_j\varphi_j))\varphi_i' + \int_0^1 c(u_j\varphi_j)\varphi_i \\ & = -\beta\varphi_i(1) + \int_0^1 f_0\varphi_i \end{aligned}$$

これは u_j についての一次方程式で、

$$\begin{aligned} & \left[\int_0^1 (k\varphi_j'\varphi_i' - b\varphi_j\varphi_i' + c\varphi_j\varphi_i) \right] u_j \\ & = -\beta\varphi_i(1) + \int_0^1 f_0\varphi_i \end{aligned}$$

この方程式の係数行列は、図 3 のように、 $j = i-1, i, i+1$ についての (i, j) 要素だけが非ゼロである。

以上をウォーミングアップとして、一般の線形定常問題に移る。 $\mathbf{i} = -k\nabla u + \mathbf{b}u$ とし〔図 4〕、

$$\operatorname{div} \mathbf{i} = -cu + f_0 \quad \text{on } \Omega \quad (17)$$

$$\Gamma_1 \text{ 上で } u = 0 \quad (18)$$

$$\Gamma_2 \text{ 上で } \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} = \alpha u + \beta \quad (19)$$

を満たすような $u = u(x)$, $x \in \Omega$ の近似解を求めたい。
次のようにする：

- 基底関数 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_n(x)$ を用意する。
- (17)式に $\varphi_i(x)$ を掛けて積分した式に部分積分を施した次式 (すなわち変分形式(10)に相当) を基礎式に据える：

$$-\int_{\Omega} \mathbf{i} \cdot \nabla \varphi_i + \int_{\Gamma} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \varphi_i + \int_{\Omega} cu\varphi_i = \int_{\Omega} f_0\varphi_i \quad (20)$$

- 未知関数 $u(x)$ を

$$u(x) = \sum_{j=1}^n u_j \varphi_j(x)$$

とにおいて、(20)式を書き下す (境界条件(18), (19)も入れ、 $\sum_{j=1}^n$ を省略して)：

$$\begin{aligned} & -\int_{\Omega} (-k\nabla(u_j\varphi_j) + \mathbf{b}u_j\varphi_j) \cdot \nabla \varphi_i \\ & + \int_{\Gamma} (\alpha u_j\varphi_j + \beta)\varphi_i + \int_{\Omega} cu_j\varphi_j\varphi_i = \int_{\Omega} f_0\varphi_i \end{aligned}$$

この式は、 u_j についての連立一次方程式である：

$$\begin{aligned} & \left[\int_{\Omega} (k\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i - \mathbf{b} \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i + c \varphi_j \varphi_i) + \int_{\Gamma} \alpha \varphi_j \varphi_i \right] u_j \\ & = -\int_{\Gamma} \beta \varphi_i + \int_{\Omega} f_0 \varphi_i \end{aligned} \quad (21)$$

(17)式を u_j ($j = 1, \dots, n$) について解いて、近似解 $u = \sum_{j=1}^n u_j \varphi_j$ を定めよう、というのが、一般のガレルキン法である。

ガレルキン式有限要素法とは、基底関数 $\varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ を次のようにして作るものである。

- 領域 Ω に三角形の網目を入れ、 Ω 内および Γ_2 上の節点に番号 $i = 1, \dots, n$ を与える (図 5)。
- 各節点 x_i に、それを囲む小角形 Ω_i を対応させ、 Ω_i の外で 0, Ω_i 内では点 x_i 上で関数値が 1 となるような角すい形の関数すなわち局所一次関数 $\varphi_i(x)$ を作る。

この $\varphi_i(x)$ を使って方程式(21)を作って解くわけであるが、そのときの(21)式の特徴をあげよう (図 6)。

- 点 x_j が Ω_i 上にのっているときに限り (i, j) 要素が非ゼロとなる。したがって帯状の行列となる。
- 典型的な $m \times m$ の網目からの帯行列は、帯半幅 m 、元数 m^2 となる。
- 移流項から非対称項 $\int \mathbf{b} \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i$ が作られる。

(17)式を行列形式で書いておく：

$$(A+B)\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (21')$$

図 4

図 5

図 6

ここに、 A は対称項、 B は非対称項とする。

非線形の定常問題：

$$\text{div}[-k(u)\nabla u + \mathbf{b}(u)u] = f(u) \quad (22)$$

に対しては、初めに $v = u^{(0)}$ のときの $k(u^{(0)})$, $\mathbf{b}(u^{(0)})$, $f(u^{(0)})$ を使って $A^{(0)}$, $B^{(0)}$, $\mathbf{f}^{(0)}$ を作り、一般には、第 v 近似 $\mathbf{u}^{(v)}$ を

$$(A^{(v-1)} + B^{(v-1)})\mathbf{u}^{(v)} = \mathbf{f}^{(v-1)} \quad (23)$$

によって求める、という手順を作ることができる。(23) は、やはりガウスの消去法によって解くことができる。

時間依存の線形問題：

$$\partial_t u + \text{div}(-k\nabla u + \mathbf{b}u) = -cu + f$$

を、境界条件(18)、(19)と初期条件： $t = 0$ で $u = u_0(x)$ を与えて解くためには、 $u = \sum u_j(t)\varphi_j(x)$ とおき、変分式(10)の $\varphi(x)$ に $\varphi_i(x)$ を使う。そのとき、 $u_j(t)$ についての常微分方程式：

$$\sum_{j=1}^n m_{ij}u_j'(t) + \sum_{j=1}^n (\alpha_{ij} + \beta_{ij})u_j(t) = f_0(t) \quad (24)$$

を得る。 m_{ij} だけが新規で、 $m_{ij} = \int \Omega \varphi_j \varphi_i$ である。

(24)式は時間差分化 (τ を時間きざみ幅とし)：

$$u_j'(t) \rightarrow (u_j^{(v)} - u_j^{(v-1)})/\tau$$

$$u_j(t) \rightarrow (u_j^{(v)} + u_j^{(v-1)})/2$$

として、 $\mathbf{u}^{(v)} = (u_j^{(v)})$ に関する方程式

$$\begin{aligned} [2M + \tau(A+B)]\mathbf{u}^{(v)} \\ = [2M - \tau(A+B)]\mathbf{u}^{(v-1)} + \mathbf{f} \end{aligned} \quad (25)$$

の形にする。 $\mathbf{u}^{(0)}$ (初期値) から始めて順次 $\mathbf{u}^{(1)}$, $\dots$, $\mathbf{u}^{(v)}$, $\dots$ を解くことができる。

非線形問題でも、解法手順は機械的に構成されて、

$$\begin{aligned} [2M + \tau(A^{(v-1)} + B^{(v-1)})]\mathbf{u}^{(v)} \\ = [2M - \tau(A^{(v-1)} + B^{(v-1)})]\mathbf{u}^{(v-1)} + \mathbf{f} \end{aligned} \quad (26)$$

となる。左辺の係数行列が v ごとに更新されねばならぬ点が(25)との大きな違いであるが、やはりガウス消去法によって解くことができる。

移流項 B , $B^{(v-1)}$ が無い場合、(21'), (23), (24), (25) を解くのにコレスキ法が使用できて、非常に楽になる。

4. 帯ガウス消去法

以上、主役はガウスの消去法であり、特に帯行列に対するものが重要であることがわかった。以下、帯ガウスの所要演算時間や、所要主メモリ容量の見積りの基礎を与えよう。別掲のアルゴリズムがその基礎となる。

線形の時間依存の問題の場合には、この別掲 GUSB を、左辺に対するもの GLUB と右辺に対するもの GSB に分けたものを使う。GLUB を始めに一度だけ使い、各時刻 v に対しては GSB だけを使えばよい。GUSB は $2m^2n + 3mn$ 積和、GLUB は $2m^2n$ 積和、GSB は $3mn$ 積和となる [(*) の仕事が GSB にまわる]。

図 7

GUSB

```

ir=0; m=m1+1
do k=1,n
  amax=abs(a[k,k]); ipk=k
  do i=k+1, min(k+m1,n)
    aik=a[i,k]
    if amax<aik then
      amax=aik; ipk=i
  ip[k]=ipk
  if amax>eps then
    if k≠ipk then
      b[k]=b[ipk]
      do i=k, min(k+2m1,n)
        a[k,i]=a[ipk,i]
      do i=k+1, min(k+m1,n)
        t=-a[i,k]/a[k,k]; a[i,k]=t
        b[i]=b[i]+t*b[k]
        do j=k+1, min(k+2m1,n)
          a[i,j]=a[i,j]+t*a[k,j]
        else ir=ir+1
  if ir=0 then
    do k=n down to 1
      sum=0.0
      do j=k+1, min(k+2m1,n)
        sum=sum+a[k,j]*b[j]
      b[k]=(b[k]-sum)/a[k,k]
  GSBの前半: (*)の仕事を集めたもの
  if ir=0 then
    do k=1,n
      if k≠ip[k] then
        b[k]=b[ip[k]]
      do i=k+1, min(k+m1,n)
        b[i]=b[i]+a[i,k]*b[k]

```

このあと上記(**)をつなぐ

普通の帯ガウスプログラムは、 $ar[m+j-i, i] = a_{ij}$ という規則によって a_{ij} を帯アレイ $ar[\quad, i]$ に収容し、上述のアルゴリズムを書き換えて作る。そのときの主メモリ参照語数は表 1 (A) のようになる。これでは苦しいので、もっと巧妙なプログラムを組んで、表 1 (B) のようにすることができる。今回はこの方を探ることとする¹⁾。

5. 現状で、どの程度の問題が解けるか

使用計算機は 20 Mips, 積和ステートメント一つ当たり

表 1

	(A)	(B)
GUSB	$3mn * 2$	$2mn * 2$
GLUB	$3mn$	$3mn$
GSB	$3mn * 2$	$3mn$

諸々のオーバーヘッド含めて $0.5 \mu s$, 主メモリとディスクの間のページ交換 $20 ms/(\text{ページ})$ とする.

いま, 帯半幅 m , 元数 n の帯行列に対して, それぞれの問題のために如何ほどの CPU タイムとページ交換タイムを要するかをまとめ, $m = 80, n = 8,000$ のときについて概算する (表 2, 要所は実測で確かめてある).

ところで, 現在の大型計算機センターは, どこでもマルチジョブ運転の形をとっているから, 一人一人のユーザにとっての持ち時間は, 深夜を除いて, 表 2 のページ交換時間の 5 倍 ~ 10 倍に及ぶのが普通である.

仮に 10 倍とすると, 表 2 で 2,000 秒以上のページ交換を要するものは, 待ち時間制限にかかる (例: 東大センター C ジョブの待ち時間制限は 18,000 秒, CPU タイム制限は 600 秒である).

実は近頃, 内蔵アレブプロセッサ (IAP と略称) が普及を始めて, それによるときは CPU タイムに関してはかなりのゆとりがとれるようになった. HITAC-M200H の場合, 帯半幅 $m=80$ のあたりだと $0.2 \mu s/(\text{積和ステートメント})$, すなわち 50 Mips 相当の高速処理となる. したがって表 2 の時間依存の非線形問題 5,000 秒が 2,000 秒となる. 問題は待ち時間の方にあるわけである (東大 D ジョブの CPU タイム制限は 3,600 秒, 待ち時間制限は 36,000 秒である).

実用の問題では三次元問題の方がむしろ普通である. 三次元問題となると, 普通にやったのでは $40 \times 40 \times 40$ メッシュ程度でも見込みがないことは計算するまでもなく明らかである. 帯半幅 1,600, 元数 64,000 となるうち, 帯半幅 1,600 の方が大変なのである. したがって連立一次方程式 $Ax = b$ を解くこと自体のために, 反復解法を起用してみようということになる. 反復解法にはそれぞれに弱味があって, うまく収束する問題は限られてくるわけであるが, 止むを得ない. 以下, 反復法の中から比較的汎用性の高い, 部分構造反復法と一般化共役勾配法

表 2

	CPU タイム (秒)	ページ交換 (回, 秒)
定常の線形	$(2m^2n + 3mn) \cdot 10^{-6}$ 約 50 秒	$6mn/500$ 回 160 秒
定常の非線形	$(2m^2n + 3mn) \cdot 10^{-6}$ $v = 10$ のとき 約 500 秒	$6mnv/500$ 回 1,600 秒
時間依存の線形	$(2m^2n + 3mnv) \cdot 10^{-6}$ $v = 100$ のとき 約 150 秒	$(5mn + 3mnv)/500$ 回 8,000 秒
時間依存の非線形	$(2m^2n + 3mn) \cdot 10^{-6}$ $v = 100$ のとき 約 5,000 秒	$6mnv/500$ 回 16,000 秒

図 8

(GCG 法, Generalized Conjugate Gradient 法) をとりあげる.

6. 準陰解法, 特に部分構造反復法

原理: $Ax = b$ の左辺の一部を右辺に移し,

$$A_0x = Bx + b \quad (28)$$

としたとき, A_0 をガウス消去法で三角化するのは容易だとする. このとき反復式

$$A_0x^{(p)} = Bx^{(p-1)} + b \quad (29)$$

によって $x^{(0)}$ から順次 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(p)}$ を求める. これが準陰解法である. (28) - (29) より

$$A_0(x - x^{(p)}) = B(x - x^{(p-1)})$$

$$x - x^{(p)} = A_0^{-1}B(x - x^{(p-1)}), \dots$$

としていけば,

$$x - x^{(p)} = (A_0^{-1}B)^p(x - x^{(0)})$$

したがって

$$\|x - x^{(p)}\| \leq \|A_0^{-1}B\|^p \cdot \|x - x^{(0)}\|$$

となり, $\|A_0^{-1}B\| < 1$ なら収束, 特に $\|A_0^{-1}B\| \ll 1$ なら急速に収束する.

部分構造反復法は準陰解法の一つである (図 8). 元来の方程式 $Ax = b$ に相当するものは次式, それを一印以下の反復式によって解く.

$$\begin{cases} A_k x_k + H_k x_b = f_k & (k = 1, 2) \\ \sum_{k=1}^2 G_k x_k + B x_b = f_b \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} A_k x_k^{(p)} = f_k - H_k x_b^{(p-1)} \\ B x_b^{(p)} = f_b - \sum_{k=1}^2 G_k x_k^{(p)} \end{cases}$$

($p-1$) 扱いされるのは $H_k x_b^{(p-1)}$ だけであるから

$$A_0 = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ & A_2 & 0 \\ G_1 & G_2 & B \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 0 & H_1 \\ & 0 & H_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

である。

この方法によって、普通には解けないような大形の問題が、然るべき精度で解けるようになることが多い。ここに部分構造間境界上の x_b 値の初期値 $x_b^{(0)}$ が必要である。それは、粗いメッシュ系による普通の解き方で解いたものから内挿して作る。ひとつの例を示そう：

P_1 (ペクレ数) $\cong 50$ の移流拡散定常問題を精メッシュ系 100×100 ($m = 100, n = 10,000$) で解きたい。3mn 語が約24メガバイトゆえ今の普通の機械では解けない。

これを10個の部分構造に分けて解いた。各部分構造ごとの行列 A_k の $m \cong 10, n = 1,000$ だから、これなら楽である。粗メッシュ 25×25 , 50×50 の二通りの場合につき、それぞれ等間隔メッシュ (実線) と不等間隔メッシュ (点線) で解いた。使用計算機は 4 Mips (どこにもある機械) である (図9)。

部分構造反復法を威力あらしめるためには、場の物理特性が数値計算にどのように関わりをもつかを知ることが大切である。たとえば、(移流項)/(拡散項)の局所的なスケールの比 (すなわち局所的なペクレ数) がどうであるかを、網目作りと部分構造化に反映させるがよい。

実は、移流項のある問題には、単に行列が非対称になるだけでない厄介な問題がある。線形定常問題：

$$(-ku' + bu)' = f, \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 1$$

図9 $\text{div}(-k\nabla u + \mathbf{v}(x)u) = 0, P_e \cong 50$

を等分点によって離散化すると、 $h = (1/n)$ のとき(両端を除いて)、第 i 番方程式は、

$$\left(-1 - \frac{bh}{2k}\right)u_{i-1} + 2u_i + \left(-1 + \frac{bh}{2k}\right)u_{i+1} = \frac{fh^2}{k}$$

となる。 $|b| \cdot h/k < 2$ のときは、係数の符号は負, 正, 負であるが、 $|b| \cdot h/k > 2$ となると、負, 正, 正となる。

SOR, SLOR, S2LOR などの反復解法の収束の議論は、ほとんどM行列(非対角 $a_{ij} \leq 0, A^{-1} \geq 0$)と呼ばれる行列の枠内で行なわれているが^{*}、上の例で $|b| \cdot h/k > 2$ だとM行列でなくなってしまう。 $|b| \cdot h/k$ は、拡散項に対して移流項がどれだけ強いを示す指標で、セル・ペクレ数と呼ばれる。適列 A がM行列ならば、その非対角項の一部 $-B$ を右辺に移した反復解法 $A_0 x^{(p)} = B x^{(p-1)} + b$ は必ず収束するが、M行列でないときは必ずしも収束するとは限らない。特に B が非負行列でないときに危い^{**}。

実は、先ほどの問題は反復法でなく、直接にガウス消去法で解いても、 $|b| \cdot h/k > 2$ のとき右端近くで振動的な解が得られる。もとの微分方程式の真の解は、

$$u = c(e^{(bx/k)} - 1)$$

という、滑らかな単調増大の関数である。

以上の解説から想像されるように、移流拡散問題においては、セル・ペクレ数 $|b| \cdot h/k$ を2以下に抑えるよう離散化すべきだということになる。また、部分構造反復における B 行列の出所から考えて、部分構造間境界近傍のセル・ペクレ数はできるだけ小さくとるべきだと言える。

7. 共役勾配法 (CG 法) と一般化 CG 法 (GCG 法)

CG 法が発表されたのは1952年 (Hestenes と Stiefel) であるが、最近、三次元の問題を解くのに有力だとして特に注目されている。ただし GCG 法としてである。

CG 法：方程式 $Ax = b$, A は対称正定値を解くのに、

$$\begin{aligned} & x_0 \text{ (初期ベクトル) を用意} \\ & r_0 = b - Ax_0; p_0 = r_0; k = 0 \\ & \text{while } \|r_k\| > \text{eps} * \|b\| \text{ do} \\ & \quad \alpha_k = (r_k, r_k) / (p_k, A p_k) \\ & \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k; r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \\ & \quad \beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}) / (r_k, r_k) \\ & \quad p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k; k = k + 1 \end{aligned}$$

CG 法は (理論的には) 元数 n 回以下の反復で収束する

^{*} たとえば Varga²⁾ を見よ。なお、M行列よりやや広いH行列を基盤に議論することもある³⁾。

^{**} $A = A_0 - B$ が正則分離 ($A_0^{-1} \geq 0, B \geq 0$) なら、 $A^{-1} \geq 0 \Leftrightarrow \rho(A_0^{-1}B) < 1$ (収束)。

が、特に、 A の固有値に重複あるいは密集固有値が多い、あるいは(条件数) $= (A \text{ の最大固有値}) / (A \text{ の最小固有値})$ が小のとき速く収束する。そこで、 A に近い行列 M を起用して $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ に CG 法を適用したのが GCG 法^{*)}である。行列 $M^{-1}A$ の条件数を 1 に近づけようというわけである。途中を省いて結果のアルゴリズムを示そう。

GCG 法: $A = M - N$, A, M とともに対称正定値として、

```

x0(初期ベクトル)を用意
r0 = b - Ax0; p0 = M^-1 r0; k = 0
while ||r_k|| > eps * ||b|| do
    a_k = (r_k, M^-1 r_k) / (p_k, A p_k)
    x_{k+1} = x_k + a_k p_k; r_{k+1} = r_k - a_k A p_k
    beta_k = (r_{k+1}, M^-1 r_{k+1}) / (r_k, M^-1 r_k)
    p_{k+1} = M^-1 r_{k+1} + beta_k p_k; k = k + 1

```

ベクトル $M^{-1}r$ を作るのが容易である必要がある。簡単なのは、 A の三重対角部を M にする、あるいは A のブロック対角部を M とする、などである。近頃特に注目されているのは、 A の不完全コレスキ分解 LDL^T を M とする、ICCG 法^{**)}と SICCG 法^{***)}である。

要素 $(i, j); i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, n$ の集合の部分集合 G を考え、 G 上の不完全コレスキ分解 LDL^T を次式で与える:

```

for i = 1 to n do
    d_i = a_ii - sum_{k=1}^{i-1} l_ik**2 d_k
    (ただし(i,k) ∈ G なる k についてだけ)
    for j = i+1 to n do
        if (j,i) ∈ G
            then l_ji = (a_ji - sum_{k=1}^{i-1} l_jk l_ik d_k) / d_i
            (ただし(i,k) ∈ G なる k についてだけ)
        else l_ji = 0

```

G が全集合なら、これは周知のコレスキ分解である。 A が単に対称であるだけでは $d_i \neq 0$ は保証されない。対称正定値だとコレスキ分解の d_i は > 0 が保証されるが、不完全コレスキ分解の $d_i \neq 0$ は必ずしも保証されない。しかし、 A が M 行列 (非対角項が $\leq 0, A^{-1} \geq 0$) なら、 $d_i > 0$ が保証されることを Meijerink らは示した。

実用上は、 G としては A の非ゼロ集合を含むようにとられる。プログラム上は、 $G = \{(i, j); a_{ij} \neq 0\}$ にとるのが簡単なので多く用いられ、ICCG (0) と呼ばれる。

われわれのところでも、早速これを追試した。特に実用上の興味から、 $k(x)$ の場所的変化の大きな三次元のポ

アッソン方程式:

$$\operatorname{div}(-k(x)\nabla u) = f(x)$$

に応用してみた。その結果の一部を図10~図13に示す。

ICCG 法は、プログラムの作り方の巧拙に依存することが SOR 法や SLOR 法より若干多いので、ここでは反復回数によって SOR 法、SLOR 法、CG 法と比較している。いずれの場合も長方形によって囲まれた柱状の場合ゆえ、ICCG (0) によるプログラムは簡単である。境界条件は背後の三面が $u = 0$ の固定境界、手前の三面が $\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$ の、いわゆるノイマン境界条件で行なった。矢印の方向に沿って節点番号が連続するようにしてある。 $k(x)$ の値は、斜線部が 1、白ぬき部は 0.01 である。

さて、図10の場合に限り、SOR、SLOR、CG法の三者ともにそれなりの収束を示している。図11の場合は、三重対角部が特に優勢ゆえ SLOR にとって有利な場合である。このとき、実時間で測って ICCG と SLOR とがほぼ匹敵した。図12も、SLOR 向きの傾向をもった場であるが、ICCG にはもはや全然太刀打ちできない。実は、図10の SLOR の加速率 1.79 にせよ、図12の 1.84 にせよ、ほぼ最適値に選ばれているゆえ、複雑な場でいつもこううまく行くとはい限らないという意味で、割り引きして見る必要があろう。

図10~図13のすべてについて良好な結果を示したのは ICCG だけである。磁界計算においては、 k は透磁率ゆえ、空気、鉄、銅が入りくんだ場を相手にすることが普通ゆえ、ICCG 法は特に価値がある。加速係数を含んでいないということも、実用上の魅力のひとつである。

非対称行列 A に対しても、 $Ax = b$ の代わりに $A^T Ax = A^T b$ を解くことにすれば、 A が正則のとき $A^T A$ は対称正定値となるから、 $A^T A$ を不完全コレスキ分解して ICCG 法を適用することは原理的には可能である^{*)}。しかし、 $A^T A$ は A と比べて非ゼロ要素が増し、また $A^T A$ の条件数は A のそれと比べて二乗になるので心配である。われわれも二次元長方形の場の図9の問題に対して試みたが、部分構造反復法と比べて、勝ったり負けたりであった。

一般の不整形メッシュの場合、 $A^T A$ の非ゼロ要素がどこにあらわれるかを抑えねばならぬので、プログラムが厄介である。三次元問題となるとますます厄介である。

しかしながら、移流拡散問題に対してこそ ICCG 法のような強力な反復法が強く要望されているわけであるゆえ、ICCG あるいはもっと一般に GCG 法を非対称問題に拡張する試みが各所でなされている^{3,6,7)}。以下、

^{*)} これを NILUCG (Normalized Incomplete LU & CG) と名付けよう。

^{*)} Generalized CG 法, Preconditioned CG 法とも呼ばれる³⁾。

^{**)} Incomplete Cholesky & CG 法: Meijerink ら⁴⁾。

^{***)} Shifted ICCG 法: Manteuffel⁵⁾。

図10

図11

図12

図13

Axelsson ら⁶⁾ の中の一つ：
SMICCG について触れる。

A を不完全 LU 分解する。ただし軸交換しない。 $A = LU - N$, $C = LU$ と置く。 $Ax = b$ の代わりに $C^{-1}Ax = C^{-1}b$ を解くことにし、これを対称正定値問題にするために、 $(C^{-1}A)^T$ を両辺に掛け、

$$\begin{aligned} (C^{-1}A)^T(C^{-1}A)x \\ = (C^{-1}A)^TC^{-1}b \end{aligned}$$

すなわち

$$A^TC^{-1}C^{-1}Ax = A^TC^{-1}C^{-1}b$$

を解くように考え直し、この式を CG 法で解く、長所は NICUCG と違い、 A の非ゼロの要素の位置だけを使って G 集合を構成できることと、 $A^TC^{-1}C^{-1}A$ なる作用をベクトル p_k に施すところの演算がいつも同じ非ゼロ集合をもった行列（およびその転置行列）によるものゆえ、メモリ所要量が NILUCG と比べてはるかに少ないことである。また、 A^TA の非ゼロ集合がどうなるかに頭を悩ます必要がないので、不整メッシュ系のときのプログラムが楽である。

一方、欠点は、 A の不完全 LU 分解が軸選択なしでできることがその条件となっていることである。そのためには A が対角優位ならば十分であるが、この制限はきび

* Modified ILUCG, プログラム名は SMILUCG となっている。S は何の略か不明。

しい。この制限をゆるめるための議論は Manteuffel⁵⁾ に詳しいが割愛する。

不完全 LU 分解のアルゴリズム (LDU タイプ)

```
for i=1 to n do
  d_i = a_ii - sum_{k=1}^{i-1} l_ik u_ki
  for j=i+1 to n do
    if (j,i) in G
      then l_ji = (a_ji - sum_{k=1}^{i-1} l_jk u_ki d_k) / d_i
      else l_ji = 0
    if (i,j) in G
      then u_ij = (a_ij - sum_{k=1}^{i-1} l_ik u_kj d_k) / d_i
      else u_ij = 0
```

ただし $\sum_{k=1}^{i-1}$ と言っても G 上のものだけ加えればよい。

実は Axelsson らは、上述の SMICCG よりもむしろ MICMRCG (Modified Incomplete Minimum Residual CG) なるものを推奨している。それは、 A の不完全 LU 分解を C とし $C^{-1}Ax = C^{-1}b$ を考え、その残差ノルム

表 3

一反復当り所要メモリ語数と積和回数.

	メモリ語数	積和回数
NICCG	22N	38N
SMICCG	19N	33N
MICMRCG	19N	22N
ICCG (0)	13N	20N

$(C^{-1}Ax - C^{-1}b)^T(C^{-1}Ax - C^{-1}b)$ を最小にしよう. という思想である. こう言うと, SMICCG と同じであるが, 工夫がされていて, 所要メモリ容量は同じであるが, 一反復当りの演算負担が小さくなって, テスト問題の範囲では総演算時間もかなり短いという. 理論的な根拠は明らかでないがアルゴリズムはのっている.

私見ながら, 計算機ネックはメモリ容量ゆえ, 理論のよくわかった SMICCG で実用上よいのではないかと思われる. 以上三つの方法のとりまとめ表を, 長方形領域, 二次元 F.E.M のときについて表 3 に示そう. 差分法の場合, 若干減るが傾向は変わらない. また若干の見積り上の相違は, プログラムの技巧にもよることゆえあるに違いないが, 大勢はこのようなものであろう.

8. おわりに (まとめ)

ポアソン方程式 $\text{div}(-k\nabla u) = f$, あるいはそれに対応する非定常問題 $\partial_t u + \text{div}(-k\nabla u) = f$ の系統の問題 (磁石が空間的に静止している場の定常あるいは時間依存の問題) に対しては, 三次元問題まで含めて, 現在的大型計算機によってほぼ満足できる程度の数値シミュレーションができるようになった. ただし三次元問題においては, ICCG 法 (不完全コレスキ法と共役勾配法の組合せ法) を使用するときの話である. 以上, k が異方性のテンソルとなる場合にも大筋は変わらない. k が u 依存性を持つなど, 非線形の問題となると, 非線形の程度如何による.

移流拡散問題: $\text{div}(-k\nabla u + bu) = f$ あるいは対応する

非定常問題 $\partial_t u + \text{div}(-k\nabla u + bu) = f$ の系統の問題においては, 二次元問題においてすでにメモリネックに伴う待ち時間ネックの問題に遭遇することがある. すなわち, 移流項 bu が拡散項 $-k\nabla u$ に比べて強勢の問題に対しては, 必然的に網目を細かくせねばならないがゆえである. そのような問題に対して, 部分構造反復法がかなり有効である. また, ICCG 法を非対称問題向けに拡張する試みが各所で行なわれている. こういふ方法の成熟と, 計算機の進歩の延長線上に, 三次元の移流拡散問題の実用化があると思われる.

磁気記録・再生の分野での移流項 bu の b は, ヘッドの速度ベクトルである. これが純機械的に定まるうちはよいが, ヘッドのまわりを流れる空気の流れと深く関わり合う, たとえば浮動ヘッドの場合, 流れの方程式を解かねばならぬ破目におちいる. ガレルキン式有限要素法は, それに対しても適用可能であるが, 計算機の方が, それを型通りの方法で現実解くにははなはだしく能力不足である. 是非とも乱流モデルによらねばならない.

〔参考文献〕

- 1) 村田 ほか: “仮想記憶方式の下での 大形行列計算技法”, 情報処理 **21**, 4 (1980).
- 2) Varga Matrix Iterative Analysis (1962) の和訳, 渋谷ほか訳「大型行列の反復解法」(サイエンス社).
- 3) 高橋, 野寺: “Preconditioned Conjugate Gradient Algorithm...”, 情報処理56年前期全国大会.
- 4) Meijerink and Van der Vorst: Math. Comp., **31** (1977) 148.
- 5) Manteuffel: Math. Comp., **34** (1980) 473.
- 6) Axelsson and Gustafsson: J. Inst. Maths. Applies. **23** (1979) 321.
- 7) Takahasi and Nodera: ‘Preconditioned Conjugate Gradient Algorithms...’ Keio Math. Sem. Rep. No. 6 (1981) 51.

展望

磁界計算 (3)

電気・電子機器における 磁界計算の最近の動向

Recent Development of Magnetic Field Calculation in Power Apparatus and Electronic Instruments

中田高義, 高橋則雄

岡山大学工学部

Takayoshi Nakata and Norio Takahashi

Department of Electrical Engng., Okayama Univ.