

第5章 非圧縮拘束条件付定常 Navier-Stokes 問題

5.1 緒言

本章では流体の式として定常の Navier-Stokes 方程式について扱う。前章で扱った定常 Stokes 方程式との大きな違いは「移流項の有無」である。移流項は離散化した場合、行列としては一般的に非対称となり、ソルバーの収束性を妨げる原因になる。また、Reynolds 数が高い問題になると移流項の効果が強くなり、定常 Navier-Stokes 方程式の解は不安定になりやすく、解を求めるのは困難になる。これを解決するための安定化手法としては、ここまで定常 Stokes 問題で利用してきた圧力部にラプラシアンを足しこむ方法では不十分である。そこで、SUPG 安定化手法及び PSPG 安定化手法と呼ばれる安定化手法を用いる^{[24][31][7]}。

本章において詳しく述べるが、Multigrid 法は Reynolds 数が高い（およそ 1000 程度）問題に対しては収束性が著しく悪化する。これは移流項が存在し、異方性が強くなるからであると考えられる。そこで本章では、異方性に強い ILU-smoother とここまで述べてきた EBEMP-smoother の 2 つの smoother を組み合わせることにより安定なソルバーを開発した。

5.2 非圧縮拘束条件付定常 Navier-Stokes 方程式

5.2.1 非圧縮拘束条件付定常 Navier-Stokes 方程式の離散化

定常 Navier-Stokes 方程式は 2.2 節で導かれた

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_x + \rho (\mathbf{v} \otimes \nabla_x) \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{g} + -\nabla_x p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (5.2.1)$$

の左辺第一項（慣性項）を無視したもので与えられる。また重力も無視すれば、定常 Navier-Stokes 方程式は以下の形で与えられる。

$$\rho(\mathbf{v} \otimes \nabla_x) \cdot \mathbf{v} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla_x p = \mathbf{0} \quad (5.2.2)$$

また、非圧縮拘束条件の連続の式は以下のように与えられる。

$$\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (5.2.3)$$

本章では式 (5.2.2) 及び式 (5.2.3) を連立して解いていく。まず、この方程式を 4.2 節と同様にして弱形式化し離散化を行うと、以下のような行列を係数行列とする連立一次方程式を導くことができる。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & -\mathbf{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} \quad (5.2.4)$$

各ブロックにおける行列の性質は 4.2 節で述べたように以下のように与えられる。B は divergence オペレータに対応する項で $\ker(\mathbf{B}^T)=0$ を満たす。C は安定化項などが付与されれば対称正定値行列、付与されない場合は零行列とする。本章においては安定化手法として PSPG 法を用いているため、C は零行列ではなくラプラシアンに対応するような行列が対応する。また、A は Stokes 方程式の場合は正定値対称行列であったが、定常 Navier-Stokes 方程式の場合は移流項のマトリクス、粘性項のマトリクスなどから構成されている。そのため移流項のあり、Navier-Stokes 方程式においては A は対称にはならない。この部分が Navier-Stokes 問題の最大の難しさといえよう。

5.3 問題設定

5.3.1 計算条件

本章でも引き続き 2次元キャピティーフロー問題を用いて検証を行っていく。特に断りが無い限り、本章においては以下に述べる条件を適用する。上部境界には一定の流速を与え、それ以外の流速境界条件は 0 とする。また境界条件のすべての点において圧力の値は与えない。収束判定条件は相対残差が 1.0×10^{-8} を下回った時とする。メッシュは特に断りが無い限り正方形領域を x 軸、y 軸方向に 64 等分したものとする。Multigrid の層数は 5 階層とする。要素は $4/4c$ を用いた。

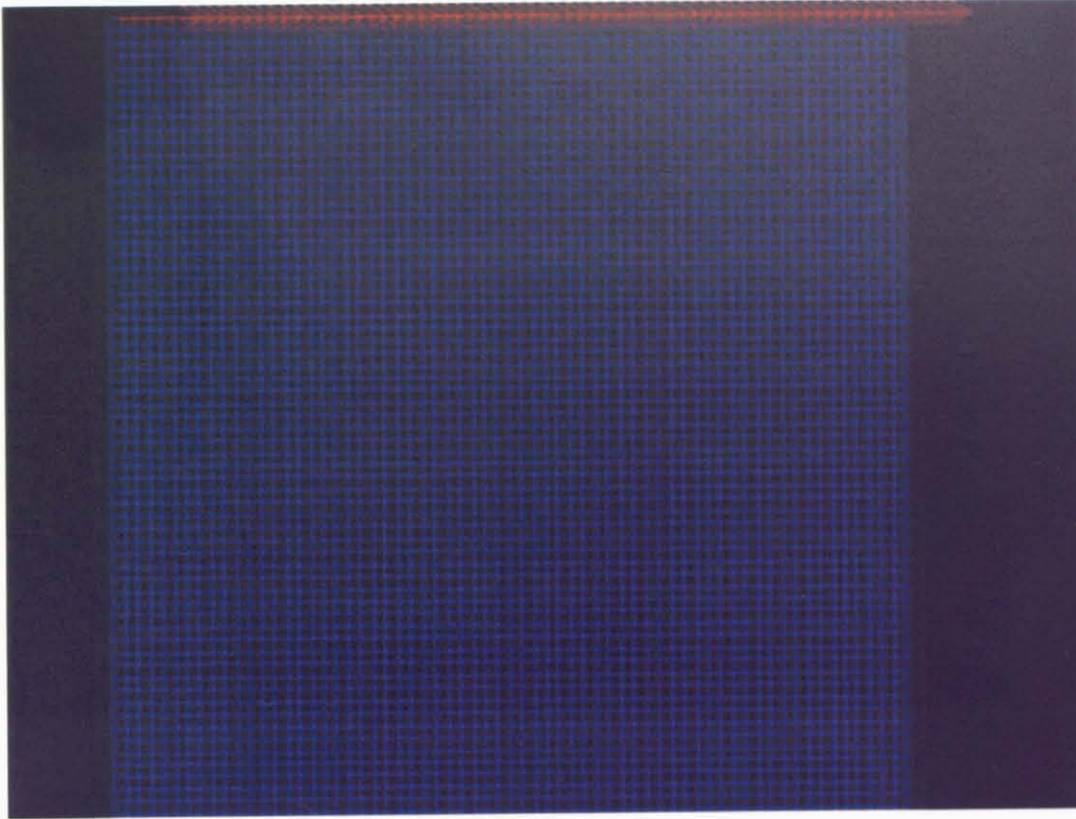


図 5.1: 本章（定常 Navier-Stokes 方程式）における問題設定

5.3.2 結果の表示法について

本章においては表・図中の反復回数の中に > 1000 という表示があるものは、反復回数 1000 回以上を意味する（すなわち発散はせずに収束していることを意味する）。また、表・図中の反復回数の中に発散という表示があるものは、計算が発散してしまったことを意味する。いずれの場合もそれに対応する計算時間は \times とあらず。GMRES 法のリスタートは 200 回。ILU は鷺尾らが開発したフィルインを制御した混合型 FEM 用の ILU 分解・前処理^[4]を用いている。GMRES 法のリスタート回数は大きくとった方が反復回数は少なくなるが、メモリの観点から 500 程度が限界である。また、本問題においてはリスタート 200 回と 500 回では反復回数に大きな差が無いことや、リスタートを大きく取ると計算に時間がかかることなどから 200 回で固定とした。以下の章でも同様とする。また、非線形の反復計算は割線法を使用した。この収束判定条件は残差が 1.0×10^{-6} を下回った時とする。

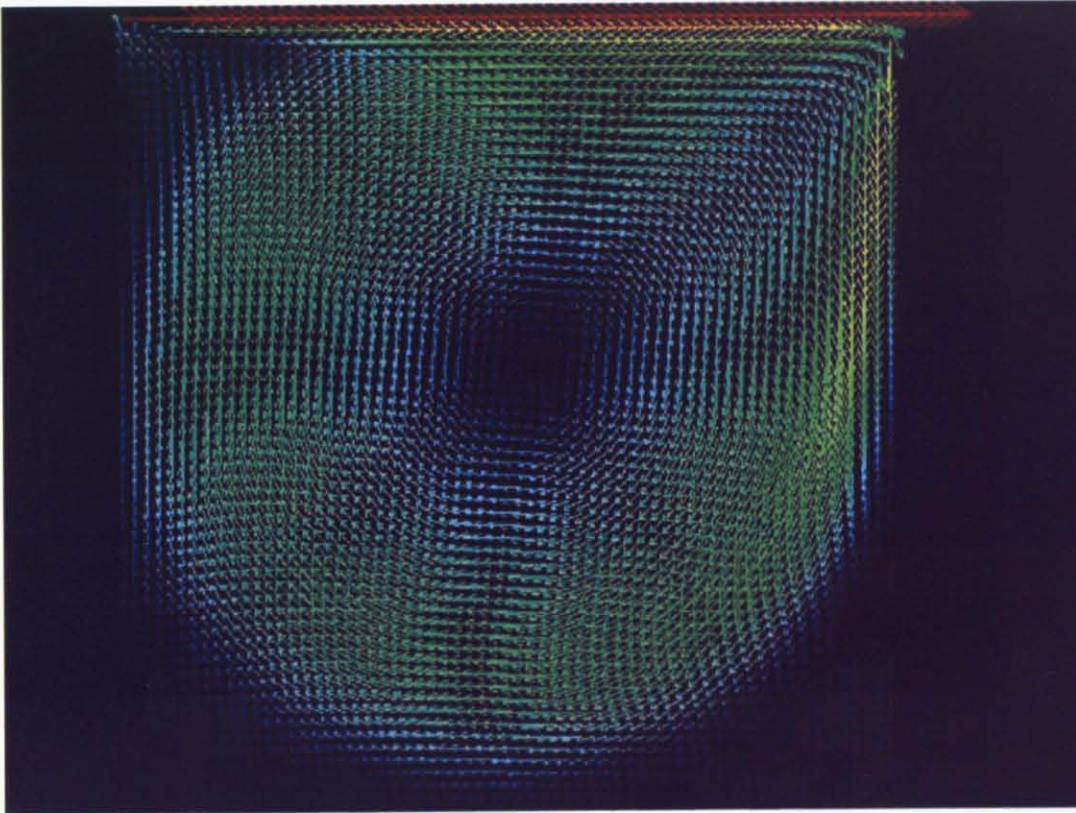


図 5.2: キャビティーフロー（定常 Navier-Stokes）問題の流速分布の様子 ($n=64$)

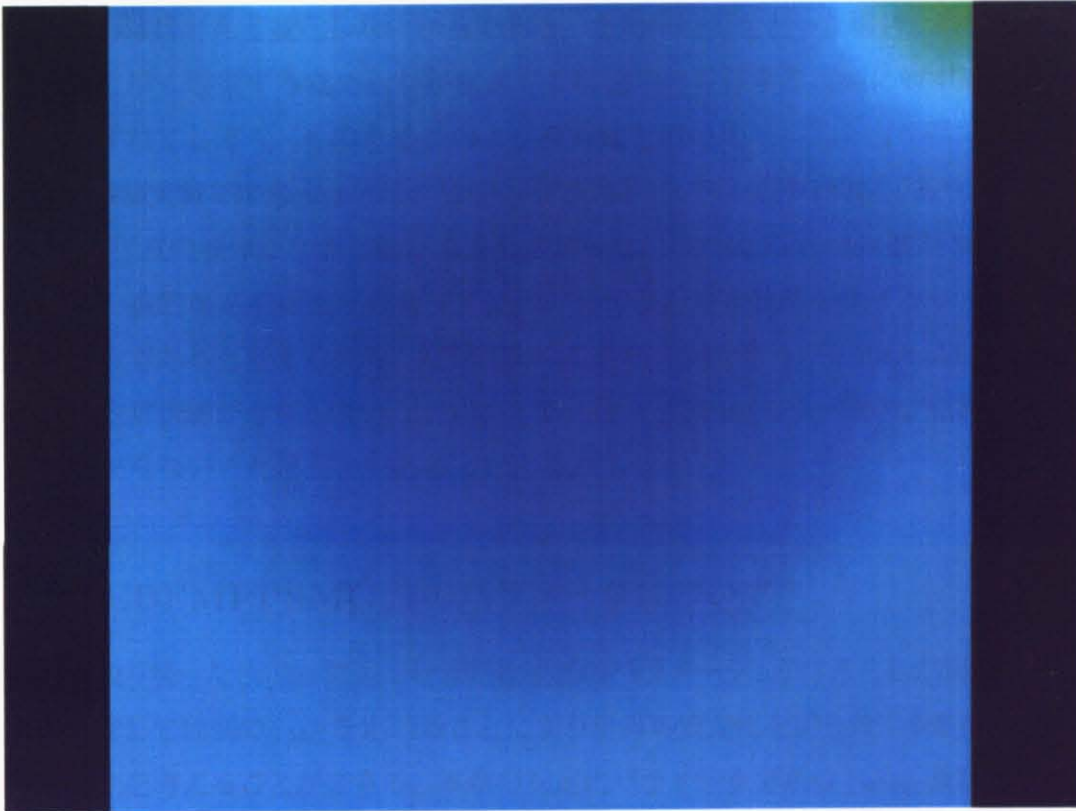


図 5.3: キャビティーフロー（定常 Navier-Stokes）問題の圧力分布の様子 ($n=64$)

流速分布をあらわす図においては矢印の長さ及び色が流速をあらわす。早い流速は赤及び長いベクトルであらわされ、遅い流速は青色の短いベクトルであらわされる。また、圧力分布においては、色が圧力を現す。圧力の最大値は赤、圧力の最小値は青であらわされる。また、線形化の手法としては割線法を用いた^[24]。また、本章における表中の（反復ソルバー）の反復数は、割線法の最終反復における反復数を表記してある。このように割線法の最終反復における反復数をデータとして採用したのは、割線法の各ステップにおける反復回数は移流項が存在しない（流速が0である）最初のステップ以外はほとんど変化しないからである。また平均値をとった場合、最初のステップは非常に早く収束するため我々が意図する移流項の存在する行列に対する反復数からはややずれてしまう。そのためこのような方法を用いた。

本章の数値実験では Reynolds 数が 2000 程度の流体までは可解な問題であり、Reynolds 数が 3000 程度の流体になると解が求まらなかった。これは Reynolds 数が 3000 程度になると、一意的な定常状態が存在せずに、いくつかの定常状態をサイクリックに移り変わるからであると考えられる。次章において数値実験を行うが、Reynolds 数が 5000 になると定常状態が存在しないことがわかる。従って高 Reynolds 数の定常問題において解が求まらないことは妥当であるといえる。

5.3.3 EBEMPPSMG 法のパラメータについて

前章で取り扱った Stokes 問題では安定化手法のパラメータ ε が与えられた場合、Multigrid 法に対しては別の ε_{MG} を用いることにより計算の安定化を図った。本章においても同様の手法を考えることができる。本章の安定化パラメータである τ_{SUPG} 及び τ_{PSPG} は式(4.3.5)のような形で与えられる。Multigrid サイクルに与える τ_{PSPG} の値を $\tau_{PSPG-MG}$ とあらわすことにし、以下のような実定数 $\alpha > 1$ を与えることにより、前章と同様に計算の安定化を図ることもできる。

$$\tau_{PSPG-MG} = \alpha \tau_{PSPG} \quad (5.3.1)$$

なお、 $\alpha = 1$ の場合 EBEMPPSMG 法は EBEMPPSMG 法に帰着する。本章では、実験的に最も効果があった $\alpha = 3$ を用いている。

5.4 計算結果（各々の Reynolds 数に対する収束性の比較）

本節では各々の Reynolds 数に対する収束性の変化を検証する。Reynolds 数を 100 から 1000 まで変化させた場合の数値実験結果は以下のようになる。但し $n=64$ とし、Multigrid 階層は 5 層とした。

表 5.1: ILU-GMRES 法及び EBEMPPSMG-GMRES 法の収束性の比較

Reynolds 数	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
10	ILU-GMRES	139	9	6
10	EBEMPPSMG-GMRES	23	6	6
100	ILU-GMRES	135	19	12
100	EBEMPPSMG-GMRES	33	19	12
300	ILU-GMRES	122	31	20
300	EBEMPPSMG-GMRES	62	62	20
500	ILU-GMRES	118	50	26
500	EBEMPPSMG-GMRES	118	161	26
700	ILU-GMRES	119	36	29
700	EBEMPPSMG-GMRES	366	571	29
1000	ILU-GMRES	124	44	31
1000	EBEMPPSMG-GMRES	> 1000	×	×

Reynolds 数が 100 程度までであれば EBEMPPSMG-GMRES 法の収束性が ILU-GMRES 法の収束性を上回る。しかしながら、ILU-GMRES 法は収束性が Reynolds 数に左右されない。一方、EBEMPPSMG-GMRES 法の収束性は Reynolds 数に大きく左右され、Reynolds 数が高くなると反復回数が大幅に上昇してしまう。これが MG 系統の解法である EBEMPPSMG-GMRES 法を定常 Navier-Stokes 問題に適用した場合の最大の問題点といえる。

以降は、高 Reynolds 数において EBEMPPSMG-GMRES 法の収束性を考察し、その対処法を検討していく。

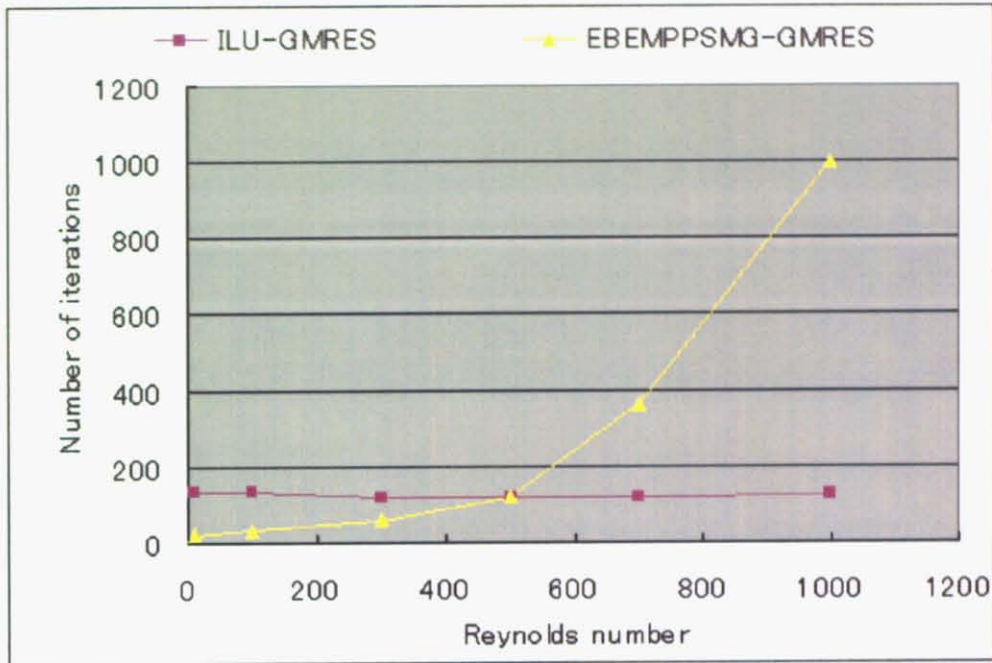


図 5.4: 各 Reynolds 数に対する反復数の比較

5.5 計算結果（高 Reynolds 数に対する収束性の比較）

5.5.1 本節の概要

本節では Reynolds 数が 500 以上の高 Reynolds 数に対して自由度数を変化させた場合の検証を行う。一般には Reynolds 数が 500 程度では高 Reynolds 数とは言わないが、本研究においては Reynolds 数が 500 付近で Multigrid 法の収束性の悪化が始まるため、Reynolds 数 500 以上の場合を高 Reynolds 数と呼んでいる。Reynolds 数が 100 程度の問題であれば、移流項の効果は非常に弱く、定常 Stokes 問題と同様 EBEMPPSMG-GMRES 法を用いても十分な収束性を示す。しかしながら Reynolds 数が 500, 1000 と上昇するにつれ移流項の効果が強まり、既存の EBEMPPSMG-GMRES 法では理想的な収束性を達成できない。しかしながら、本節の結果から EBEMPPSMG-GMRES 法は自由度数には依存しないソルバーであることがわかる。

5.5.2 計算結果 (Reynolds 数=500)

ここでは Reynolds 数が 500 の場合において、メッシュの分割幅 n を変化させた場合の計算結果を示す。

表 5.2: ILU-GMRES 法及び EBEMPPSMG-GMRES 法の収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
32	ILU-GMRES	53	4	28
32	EBEMPPSMG-GMRES	106	53	28
64	ILU-GMRES	118	32	26
64	EBEMPPSMG-GMRES	118	187	26
128	ILU-GMRES	306	754	24
128	EBEMPPSMG-GMRES	104	627	24
256	ILU-GMRES	> 1000	×	×
256	EBEMPPSMG-GMRES	118	3013	23

Reynolds 数が 500 の時は自由度数が高い場合は EBEMP-GMRES 法が ILU-GMRES 法に比べて優位であることがわかる。また注目すべきは EBEMP-GMRES 法の反復数である。自由度に応じてほとんど変化していない。すなわち、EBEMP-GMRES 法はその反復数が Reynolds 数に大きく依存するものの、自由度に関してはほとんど依存しない。一方、ILU-GMRES 法はその反復数が自由度には大きく依存するものの、Reynolds 数に関してはほとんど依存しない。以降ではこの 2 つを組み合わせた手法を紹介していく。

5.5.3 計算結果 (Reynolds 数=1000)

続いて、Reynolds 数が 1000 の場合について、自由度等を変化させてより詳しい数値実験を行う。既存の EBEMPPSMG-GMRES 法をそのまま用いると以下のような計算結果になる。

$n=256$ の時は一応収束はしているものの、実用的な計算時間に収まっていない。また α などのパラメータ調節を行っても収束性が向上しないことを確認している。次節

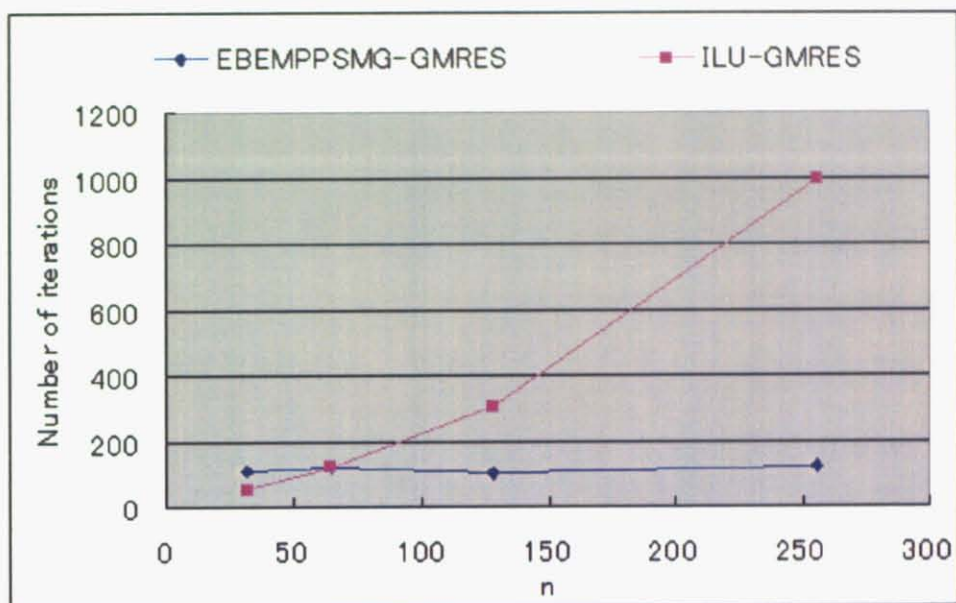


図 5.5: 各 n に対する反復数の比較

表 5.3: 各 n に対する EBEMPPSMG-GMRES 法の収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
64	EBEMPPSMG-GMRES	> 1000	×	×
128	EBEMPPSMG-GMRES	> 1000	×	×
256	EBEMPPSMG-GMRES	557	10397	27

から、このような問題点を解決するために数種類のソルバーを同様の問題に適用していく。

5.6 収束性悪化原因の考察

定常 Navier-Stokes 問題における項 Reynolds 数に対する収束性の悪化の原因は移流項であるところまで述べてきた。本節では、その数値的な裏づけを行う。

Navier-Stokes 方程式を離散化した後に、係数行列及び smoother に用いる行列の移流項を無視して計算を行った (PSPG 及び SUPG 法の項はすべてそのままにした)。その結果は以下ようになる。

表 5.4: 係数行列から移流項のみを取り除いた場合の収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
64	EBEMPPSMG-GMRES	87	58	13
64	ILU-GMRES	110	17	13
128	EBEMPPSMG-GMRES	59	178	12
128	ILU-GMRES	248	225	12
256	EBEMPPSMG-GMRES	41	364	9
256	ILU-GMRES	722	4821	9

表 5.5: 係数行列から移流項を取り除かない場合 (通常の Navier-Stokes) の収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
64	EBEMPPSMG-GMRES	> 1000	×	×
64	ILU-GMRES	124	49	31
128	EBEMPPSMG-GMRES	> 1000	×	×
128	ILU-GMRES	294	667	29
192	EBEMPPSMG-GMRES	557	10397	27
192	ILU-GMRES	667	6850	27

ILU-GMRES 法を用いた場合は、移流項の有無により収束性にほとんど変化は見られない。しかしながら、EBEMPPSMG-GMRES 法を用いた場合、移流項の有無により収束性が大きく異なることがわかる。以上から、高 Reynolds 数においては移流項が Multigrid 法の収束の妨げをしていることが実験的に示せた。

5.7 ILU-smoohter の改良

5.7.1 Multigrid 法の特性及び ILU-smoohter の特性

ここまで述べてきたように、Multigrid 法は異方性に対して弱い。これは smoother をかけた際に、異方性が強い（値が大きい）方向に対しては誤差がスムーズになるものの、異方性が弱い方向に対しては誤差がスムーズにならないからである。この問題を解消するための方法としては例えば異方性に応じてメッシュの粗さを変えていく方法や、係数行列からメッシュを作成するような代数的 Multigrid 法を用いればよいと考えられるが、このためにはアルゴリズムの大幅な改良が必要となる。そこで既存の ILU-smoohter を改良する方法を考える。

ILU-smoohter は異方性に強いと考えられる。これは、例えば次元・差分問題を考えた場合、係数行列は 3 重対角行列になるため、ILU 分解は完全 LU 分解となるからであると考えられる。すなわち、異方性が強い方向にはほぼ完全に解くことが可能であり、良い収束性を期待することができる。しかしながら、ILU-smoohter をそのまま用いると、固有値分布が悪く smoother としては大きな不安定性を有する。

そこで、本節では ILU-smoohter をかける際に、圧力部に入る fill-in の値を 2 倍する方法を用いる。このような smoother を ILUPS-smoohter と呼ぶことにする。PS は Pressure Stabilized の略である。これにより、収束性は落ちるものの安定度が増した smoother を構築することができた。倍率に関しては 2 倍以外の値も考えられるが、小さすぎると不安定性が増し、大きすぎると元の行列との乖離が発生する。数値実験においては数種類の値で試し、2 倍程度が最も収束性が高かったため、本論文ではこの値を採用している。

5.7.2 ILU-smoother の改良及び計算結果

ILU-smoother 及び ILUPS-smoother を用い、PSMG 法を前処理とした GMRES 法 (以下それぞれ ILUPSMG-GMRES 法及び ILUPSMG-GMRES 法とする) の計算結果は以下のようなになる。

表 5.6: ILUMG-GMRES 法及び ILUPSMG-GMRES 法の収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
64	ILUMG-GMRES	> 1000	×	×
64	ILUPSMG-GMRES	785	973	31
128	ILUMG-GMRES	> 1000	×	×
128	ILUPSMG-GMRES	> 1000	×	×
192	ILUMG-GMRES	> 1000	×	×
192	ILUPSMG-GMRES	261	3364	27

ILUPSMG-GMRES を用いると、 $n = 64$ 及び $n = 192$ の場合は収束させることができている。しかしながら $n = 128$ の場合に収束しないなど、まだまだ不安定性を有している。続いてフィルインレベルを調節して ILU 分解の安定化を図る。

- (1,2) および (2,1) ブロックに関しては、もとの行列の非ゼロパターンの組み合わせから生成されるフィルインのみを許す (通常これをレベル 1 のフィルインと呼ぶ。レベルゼロはもとの行列の非ゼロパターンに相当する)。
- (2,2) ブロック上に (2,1),(1,2) ブロックの組み合わせから生成されるフィルインをいつでも許す。
- 上記以外のフィルインを許さない。

以前との違いは、(1,2) および (2,1) ブロックのフィルインレベルを 0 から 1 に上げたことである。この場合の計算結果は以下のようなになる。

従って、フィルインレベルを調節し、行列の近似度を上げることにより、安定な smoother を構築することができた。しかも、ILUPSMG-GMRES 法は自由度にほぼ依存しておらず、高 Reynolds 数・定常 Navier-Stokes 問題に対する自由度に依存しないソルバーは一応完成したことになる。

表 5.7: ILUMG-GMRES 法及び ILUPSMG-GMRES 法の収束性の比較 (フィルインレベル調節後)

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
64	ILUMG-GMRES	138	237	31
64	ILUPSMG-GMRES	133	22	31
128	ILUMG-GMRES	968	4912	29
128	ILUPSMG-GMRES	103	692	29
192	ILUMG-GMRES	> 1000	×	×
192	ILUPSMG-GMRES	92	1470	27

しかしながら、 $4/4c$ 要素など、圧力の補間次数が1次の要素においてこのようなフィルインレベルを設定すると、計算に膨大な時間がかかる。特に、3次元問題においては縦方向への圧力方向のつながりも考慮されることになり、更なる計算量の負担を強いることになる。次節では、ここまでに開発してきた EBEMP-smoother 及び ILUPS-smoother を組み合わせることにより、フィルインレベルを上げることなく、理想的な収束性を実現できるソルバーを提案する。

5.8 (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法

5.8.1 本節の概要

本節では EBEMP-smoother 及び ILUPS-smoother の2つの smoother を用いた方法を提案する。この方法用いた MG 法を (ILUPS+EBEMP)PSMG 法と呼ぶことにする。現在は pre-smoother 及び post-smoother 共に ILUPS-smoother を先に作用させ、その後 EBEMP-smoother を作用させている。また、(ILUPS+EBEMP)PSMG 法を前処理とする GMRES 法を (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法と呼ぶことにする。

5.8.2 計算結果

(ILUPS+EBEMP)PSMG 法を定常 Navier-Stokes 問題に適用した結果は以下のようになる。

表 5.8: (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法を用いた場合の収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
64	(ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法	112	286	31
128	(ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法	157	1503	29
192	(ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法	147	3325	27

表からわかるとおり、(ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法は自由度にほぼ依存しておらず、高 Reynolds 数・定常 Navier-Stokes 問題に対する自由度に依存しないソルバーは完成したと言えよう。現時点では ILUPSMG-GMRES 法に比べて時間がかかっている部分もあるが（表 5.7 を参照）、先に述べたとおり 3 次元問題に拡張した場合には (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法の方が計算量の観点から優れていると考えられる。

また、適当な初期誤差に対して各 smoother を適用した様子を以下に示す。例えば ILU-smoother を適用すると圧力部の不安定性から一部の誤差が増幅されていることがわかる。

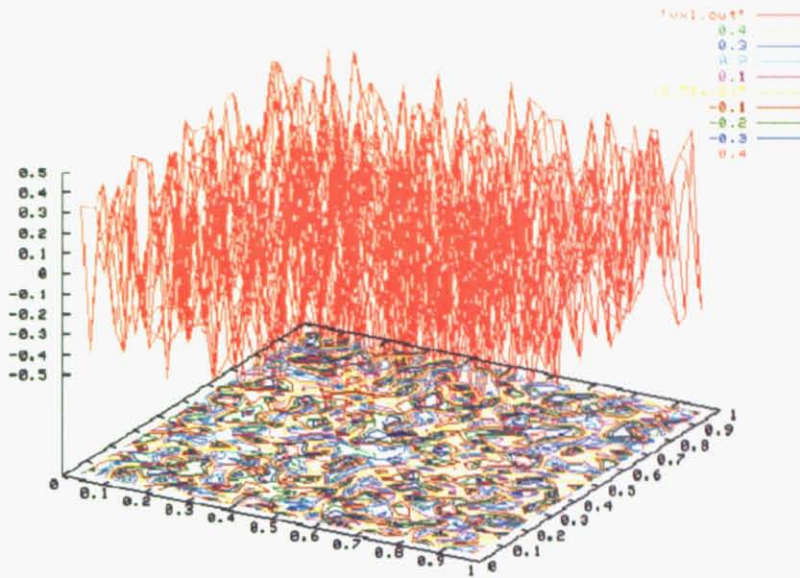


図 5.6: 初期誤差の分布

5.9 計算結果（アスペクト比の変化による収束性の比較）

5.9.1 本節の概要

先に述べた心臓問題などでは心筋付近などにおいてメッシュが歪むことが多い。一般にメッシュが歪むとヤコビアンが負になることや数値積分の精度が落ちてしまうため計算の精度も低下する。ここまでは正方メッシュに対して計算を行ってきたが、本節ではメッシュのアスペクト比（メッシュの縦と横の長さの比）を変化させ、ソルバーの収束性を検討する。具体的には y 方向の領域を広げ、アスペクト比を変化させた。次小節ではアスペクト比の変化が反復数などについて与える影響をより詳しく考察していく。

5.9.2 計算結果

領域の y 方向の長さを一定倍していった際の反復数及び計算時間の関係は以下のようになる。この際の倍率を β とおく。なお、ソルバーは ILU-GMRES 法及び (ILUPS + EBEMP)PSMG-

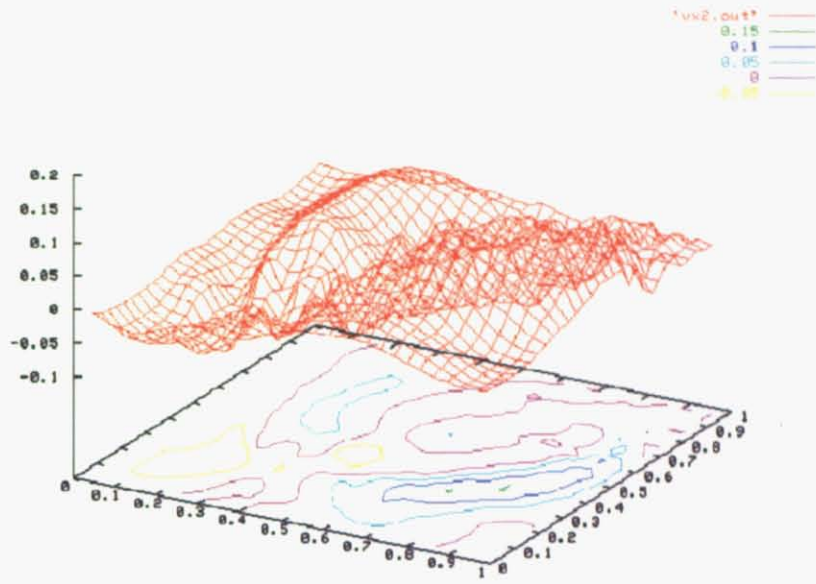


図 5.7: ILUPS-smoother を 2 回適用した後の誤差の分布

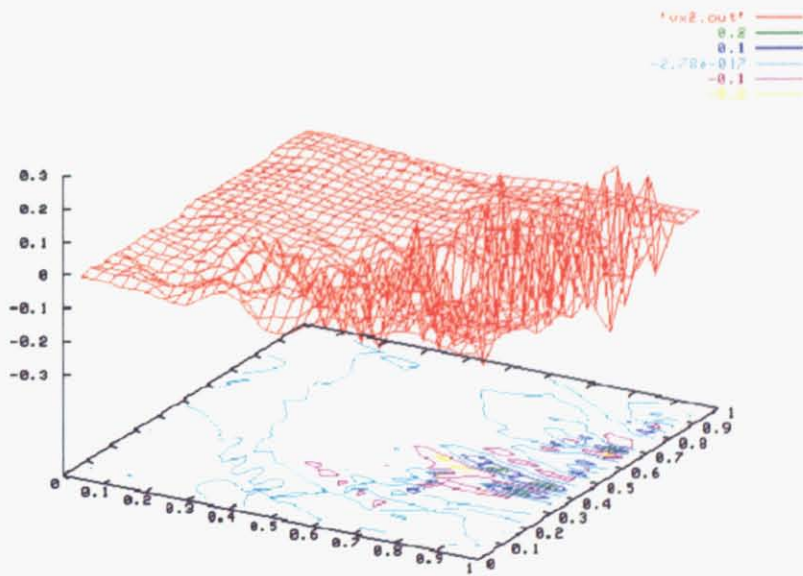


図 5.8: EBEMP-smoother を 2 回適用した後の誤差の分布

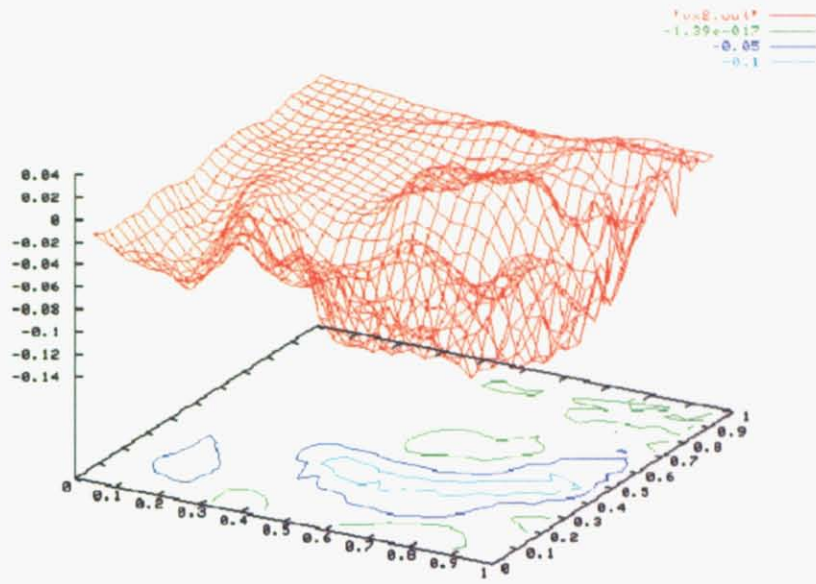


図 5.9: (ILUPS+EBEMP)-smoother を 1 回適用した後の誤差の分布

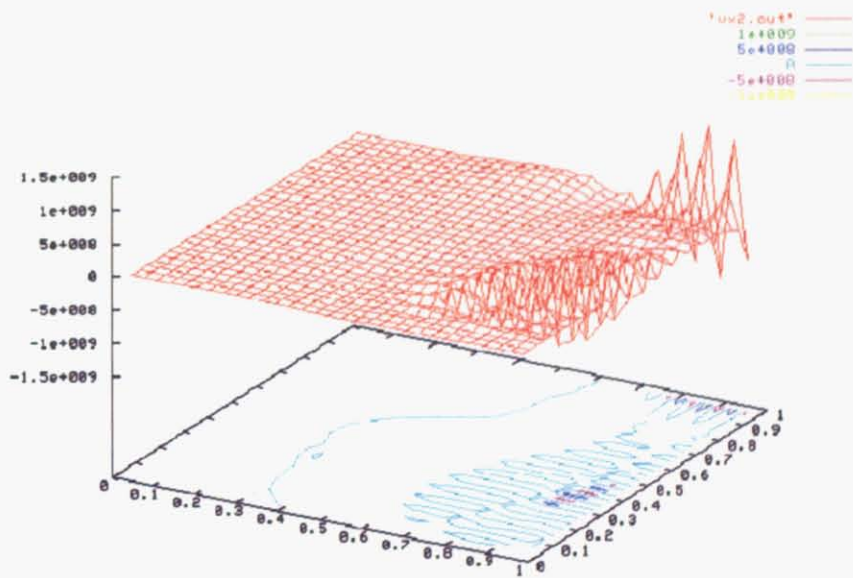


図 5.10: ILU-smoother を 2 回適用した後の誤差の分布

GMRES法を用い、定常 Navier-Stokes 問題に適用した。また、メッシュサイズは x 軸方向、y 軸方向共に 64 分割とした。

表 5.9: (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法を用いた場合のアスペクト比による収束性の比較

β	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
1	139	301	31
2	111	282	36
4	159	417	38

なお、 β の値を 8 とした場合は割線法そのものが収束しない。これはメッシュの分割幅を h とした場合、粘性項に対応する行列成分のオーダーは $\frac{1}{h^2}$ であるのに対し、移流項に対応する行列成分のオーダーは $\frac{1}{h}$ である。従って、メッシュが粗くなる (h の値が大きくなる) と移流項が相対的に強くなるため、割線法が収束しないと考えられる。表から、アスペクト比の変化はソルバーの収束性そのものには影響を与えないと言って良い。従って今回提案したソルバーを扱う際には、ソルバーに対してアスペクト比を特別に考慮する必要はないと言える。

5.10 問題依存性の検証

本節ではここまで議論してきた収束性がキャビティフロー問題に依存するものではないことを示すために U 字流れ問題に対する計算結果を検証する。細かい問題設定はキャビティフロー問題と同様とする。U 字流れ問題の流れの様子は図 5.11 のようになる。なお本実験では Reynolds 数は 500 とした。また、割線法の収束判定は 10^{-4} とした。メッシュは図 5.1 のような正方形メッシュを用いている。U 字管問題のような U 字の流れに沿ったメッシュではないことに注意する。以下が結果である。

表 5.10~5.12 から、問題による収束性は多少の差あるもののオーダーが変わる程のものではないと言える。またキャビティフロー問題と同様に、U 字流れ問題も本論文にて提案している ILUPSMG-GMRES 法及び (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法を用いた場合の反復回数は自由度に依存しないとうことがわかる。

U 字流れ問題はキャビティフロー問題に比べてやや解きづらいという性質はすべ

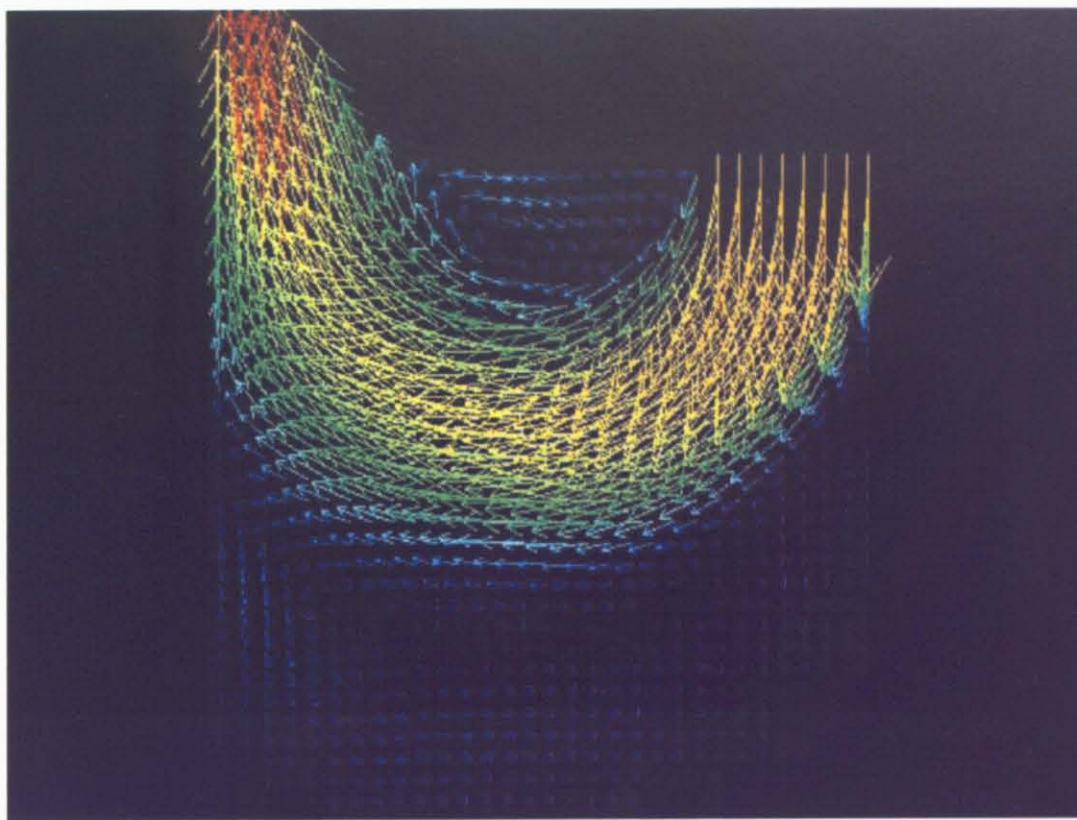


図 5.11: U 字流れ問題の流れの様子

表 5.10: ILU-GMRES 法を用いた場合における問題別・自由度別の収束性の比較

適用問題	n	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
キャビティーフロー	64	80	39	15
U 字流れ	64	145	164	34
キャビティーフロー	128	162	163	15
U 字流れ	128	293	345	31

表 5.11: ILUPSMG-GMRES 法を用いた場合における問題別・自由度別の収束性の比較

適用問題	n	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
キャビティーフロー	64	119	19	15
U 字流れ	64	150	57	34
キャビティーフロー	128	70	132	15
U 字流れ	128	125	547	31

表 5.12: (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法を用いた場合における問題別・自由度別の収束性の比較

適用問題	n	反復回数	計算時間 (秒)	割線法反復回数
キャビティーフロー	64	53	59	15
U 字流れ	64	71	178	34
キャビティーフロー	128	49	222	15
U 字流れ	128	106	945	31

でのソルバーに共通する特徴がある。今回の実験でだけで一般論を述べることはできないが、特定のソルバーが特定の問題に対してのみ効果があり、それ以外の問題に対しては効果がないという現象は考えづらいと言えよう。

5.11 本章の結言

本章においては、まずは定常 Stokes 問題で効果のあった EBEMPPSMG-GMRES 法を低 Reynolds 数問題に対して適用した場合、定常 Stokes 問題と同様に効果が高いことを示した。続いて高 Reynolds 数に対して用いた場合に、移流項の効果により収束が妨げられることを述べた。そしてその問題を解決するために、圧力部に関する不安定性はあるが移流項に対して収束性を向上させることができると考えられる ILU-smoother を改良し、ILUPS-smoother を開発し、フィルレベルを高く調節することにより高 Reynolds 数・定常 Navier-Stokes 問題に対する自由度に依存しないソルバーを完成させた。また、3次元問題への拡張性を持たせるために、フィルレベルを上げずに、ILUPS-smoother 及び EBEMP-smoother を組み合わせる (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法を提案し

た. これにより 3次元問題にも拡張できる, 高 Reynolds 数・定常 Navier-Stokes 問題に対する自由度に依存しないソルバーを開発することができたといえる. また, これらの結果が要素のアスペクト比や問題に依存しないことも実験的に確かめた.

第6章 非圧縮拘束条件付非定常 Navier-Stokes 問題

6.1 緒言

本章では流体の式として前章の定常の Navier-Stokes 方程式を時間発展問題として考える。非定常の Navier-Stokes 方程式について扱う。前章で扱った非定常の Navier-Stokes 方程式との大きな違いは「慣性項の有無」である。慣性項は離散化した場合、行列としては流速-流速ブロックの対角ブロックに大きな正の値が入ることになり、一般的に反復ソルバーの収束性を上げると考えられる。従って前章と比べてより大きな Reynolds 数に対して収束をさせることができると考える。

6.2 非圧縮拘束条件付非定常 Navier-Stokes 方程式

6.2.1 非圧縮拘束条件付非定常 Navier-Stokes 方程式の離散化

非定常 Navier-Stokes 方程式は 2.2 節で導かれた

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \Big|_x + \rho (\mathbf{v} \otimes \nabla_x) \cdot \mathbf{v} = \rho \mathbf{g} + -\nabla_x p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (6.2.1)$$

で与えられる。更に重力を無視すれば、非定常 Navier-Stokes 方程式は以下の形で与えられる。

$$\rho (\mathbf{v} \otimes \nabla_x) \cdot \mathbf{v} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla_x p = \mathbf{0} \quad (6.2.2)$$

また、非圧縮拘束条件の連続の式は以下のように与えられる。

$$\nabla_x \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (6.2.3)$$

本章では式 (4.2.2) 及び式 (4.2.3) を連立して解いていく。まず、この方程式を 4.2 節と同様にして弱形式化し離散化を行うと、以下のような行列を係数行列とする連立一次

方程式を導くことができる。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & -\mathbf{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} \quad (6.2.4)$$

各ブロックにおける行列の性質は 4.2 節で述べたように以下のように与えられる。B は divergence オペレータに対応する項で $\ker(\mathbf{B}^T)=0$ を満たす。C は安定化項などが付与されれば対称正定値行列、付与されない場合は零行列とする。また、A は Stokes 方程式の場合は正定値対称行列であったが、定常 Navier-Stokes 方程式の場合は移流項のマトリクス、粘性項のマトリクスなどから構成されている。そのため移流項のあり、Navier-Stokes 方程式においては A は対称にはならない。この部分が Navier-Stokes 問題の最大の難しさといえよう。非定常問題の場合は、この部分に更に慣性項が加わる。これは対角ブロックに比較的大きい正の値が入るため、反復ソルバーにとっては一般的に解きやすくなる。従って、非定常問題は定常問題に比べて収束性が良い（反復回数が少ない・大きな Reynolds 数に対して解ける）といえる。

6.3 問題設定

6.3.1 計算条件

本章でも引き続き 2 次元キャビティーフロー問題を用いて検証を行っていく。特に断りが無い限り、本章においては以下に述べる条件を適用する。上部境界には一定の流速を与え、それ以外の流速境界条件は 0 とする。また境界条件のすべての点において圧力の値は与えない。収束判定条件は相対残差が 1.0×10^{-8} を下回った時とする。メッシュは特に断りが無い限り正方形領域を x 軸、y 軸方向に 64 等分したものとする。Multigrid の層数は 5 階層とする。要素は 4/4c を用いた。

6.3.2 結果の表示法について

本章においては表・図中の反復回数の中に > 1000 という表示があるものは、反復回数 1000 回以上を意味する（すなわち発散はせずに収束していることを意味する）。また、表・図中の反復回数の中に発散という表示があるものは、計算が発散してしまったことを意味する。いずれの場合もそれに対応する計算時間は \times とあらわす。GMRES

法のリスタートは200回。ILUは鷺尾らが開発したフィルインを制御した混合型FEM用のILU分解・前処理^[4]を用いている。GMRES法のリスタート回数は大きくとった方が反復回数は少なくなるが、メモリの観点から500程度が限界である。また、本問題においてはリスタート200回と500回では反復回数に大きな差が無いことや、リスタートを大きく取ると計算に時間がかかることなどから200回で固定とした。以下の章でも同様とする。また、非線形の反復計算は割線法を使用した。この収束判定条件は残差が 1.0×10^{-2} を下回った時とする。

また、上部境界に流速を与える際には徐々に流速を増加させていく方法を取る。今回は全解析時間の半分の時間が経過した時点で目的の流速が与えられるように、時間に比例させて流速を増加させていった。例えば上部境界条件として速さ10を与え、1秒間の解析を行う場合、0.1秒の時点では速さ2、0.2秒の時点では速さ4、0.3秒の時点では速さ6、0.4秒の時点では速さ8、0.5秒の時点では速さ10というように増加させていく。但し、次ページ以降のキャビティフローの図のみ、全解析時間の10分の1の時間が経過した時点で目的の流速を与えるようにした。

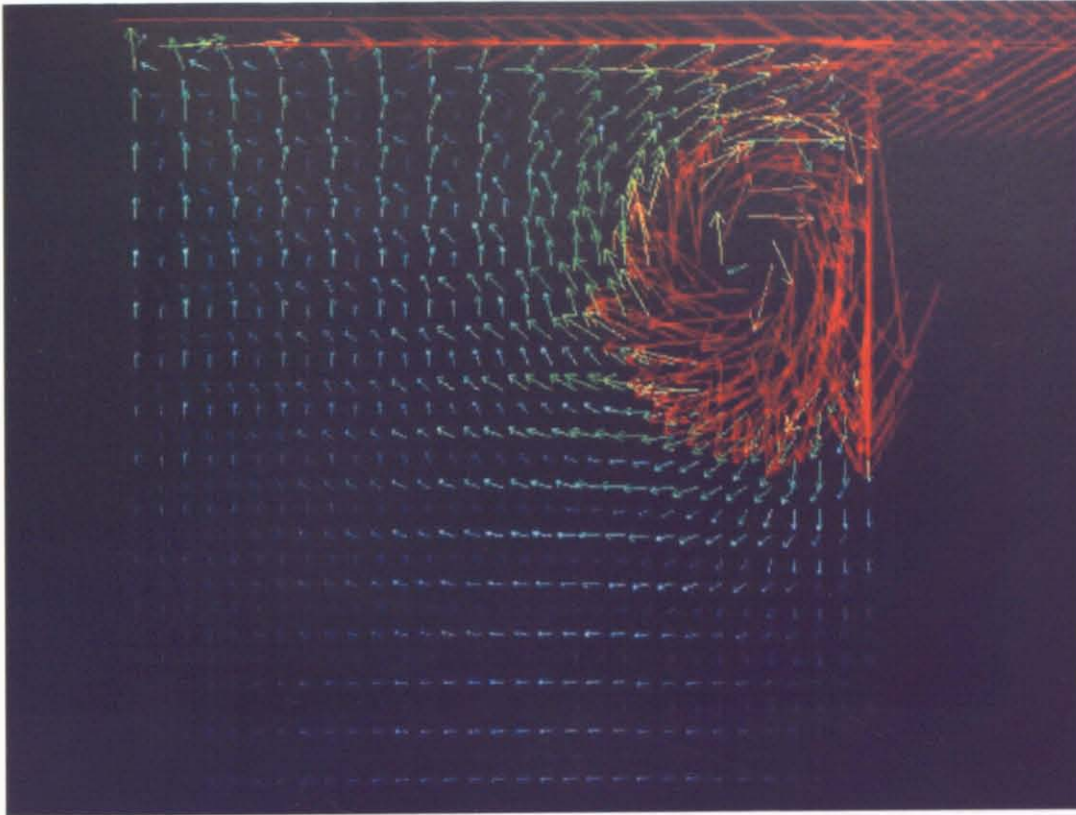


図 6.1: キャビティーフロー（非定常 Navier-Stokes）問題の流速分布の様子 (n=32,t=1.0,Reynolds 数 5000)

流速分布をあらわす図においては矢印の長さ及び色が流速をあらわす。早い流速は赤及び長いベクトルであらわされ、遅い流速は青色の短いベクトルであらわされる。また、圧力分布においては、色が圧力を現す。圧力の最大値は赤、圧力の最小値は青であらわされる。また、線形化の手法としては割線法を用いた^[24]。また、本章における表中の（反復ソルバー）の反復数は、時刻が 0.2 秒までの全てのステップ（割線法及び時間発展）における反復数の平均値を表記している。また、計算時間は初期時刻から 0.2 秒までの解析にかかった時間を表記している。Δt は 0.01 とし Reynolds 数は 5000 とした。

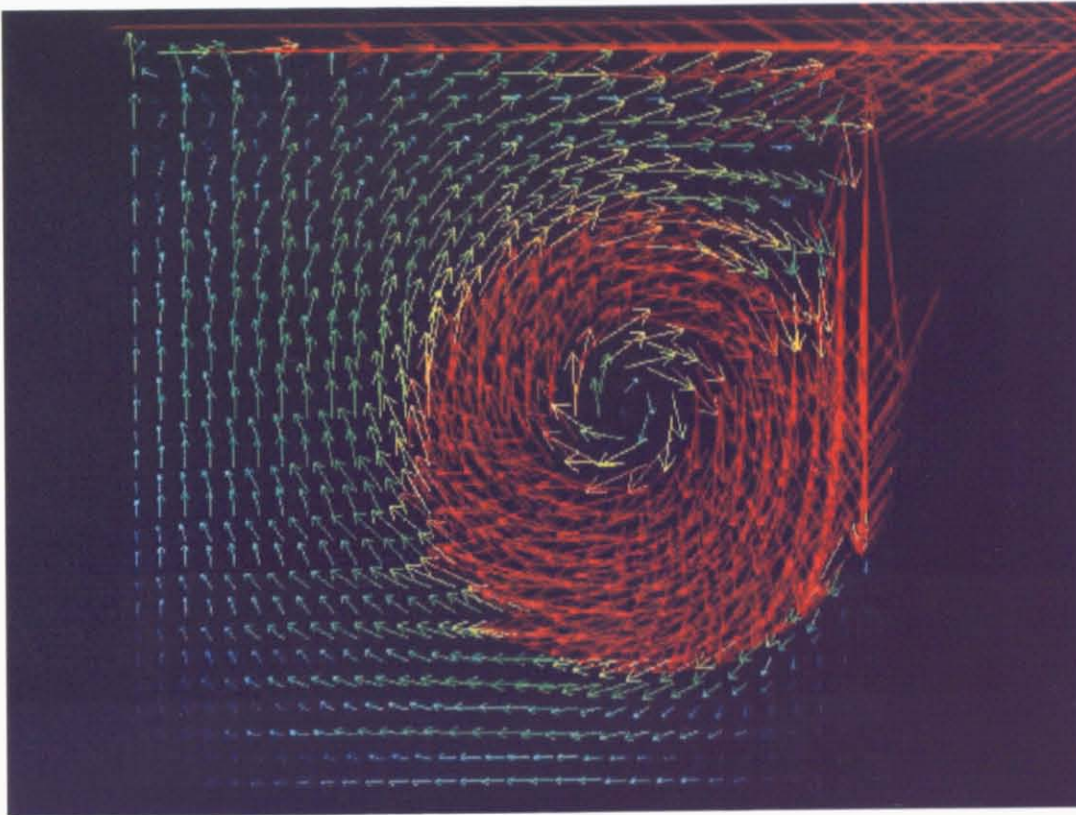


図 6.2: キャビティーフロー (非定常 Navier-Stokes) 問題の流速分布の様子
($n=32, t=2.0, \text{Reynolds 数 } 5000$)

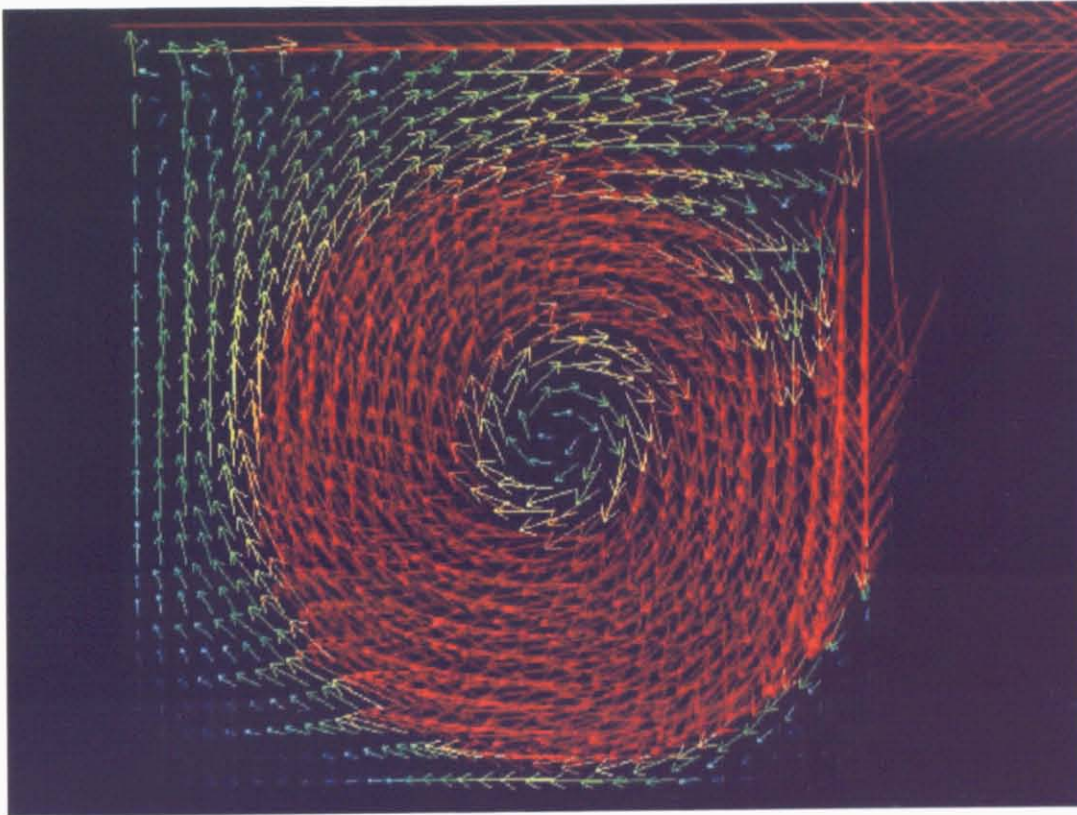


図 6.3: キャビティーフロー（非定常 Navier-Stokes）問題の流速分布の様子
($n=32, t=3.0, \text{Reynolds 数 } 5000$)

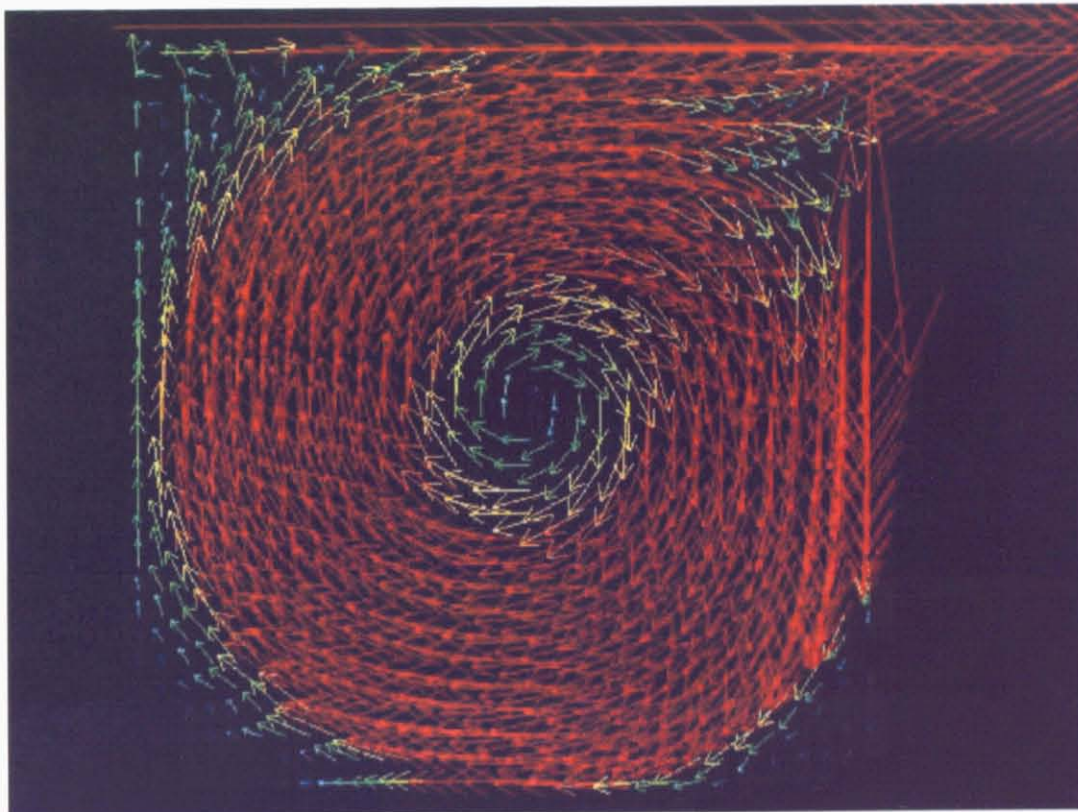


図 6.4: キャビティーフロー（非定常 Navier-Stokes）問題の流速分布の様子
($n=32, t=4.0$, Reynolds 数 5000)

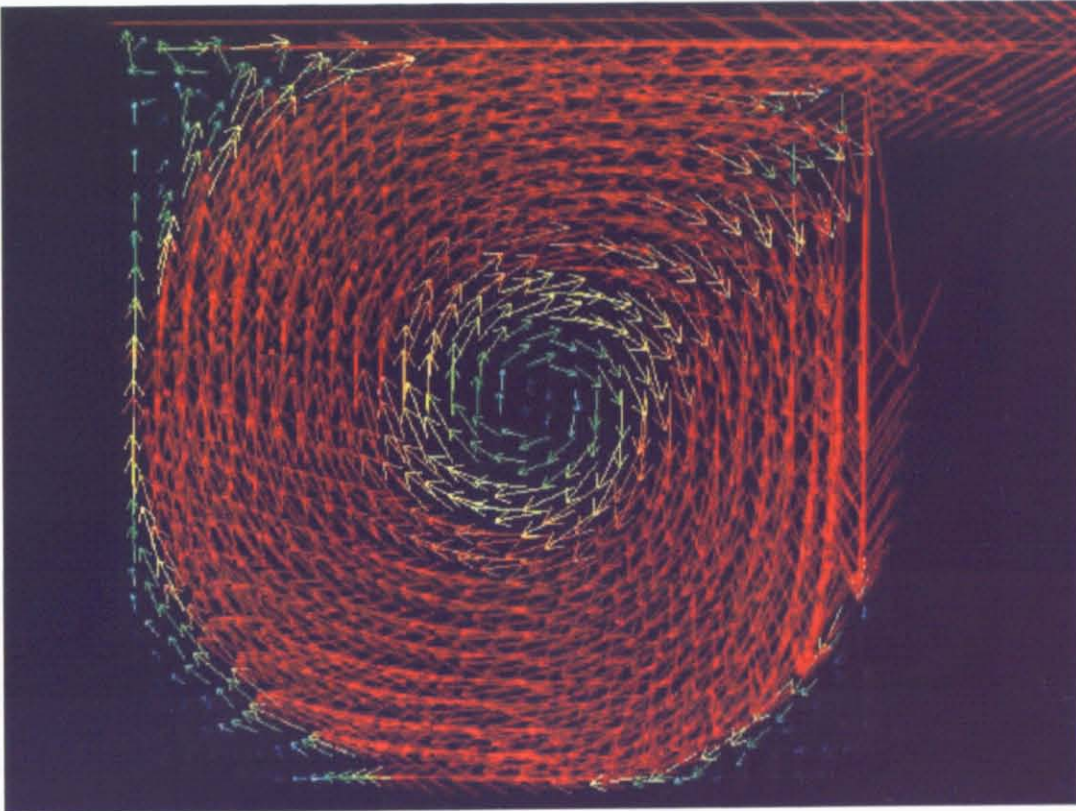


図 6.5: キャビティーフロー（非定常 Navier-Stokes）問題の流速分布の様子
($n=32, t=5.0, \text{Reynolds 数 } 5000$)

6.4 移流項の定量的な測定

具体的な計算結果に入る前に、本節では移流項の定量的な値についての測定結果を示す。以下は粘性項に対する移流項の比及び慣性項に対する移流項の行列値の比である。粘性項に対する移流項の比を積分点ごとに計算し、その最大値及び最小値を示した。同様に慣性項に対する移流項の比を積分点ごとに計算し、その最大値及び最小値を示した。全解析時間を0.2秒とした。またメッシュサイズは 64×64 とする。要素番号は左下の要素を1とし右に進むに連れて番号を増加させ、右端に辿りついたら一段上に上がり左端から同様に数えることとする。このメッシュでは右上の要素番号は4096となる。

表 6.1: 粘性項に対する移流項の比

時刻	最大値	最大値を与える要素番号	最小値	最小値を与える要素番号
0.02	1.33×10^1	4033	2.35×10^{-9}	64
0.2	6.67×10^1	4034	3.41×10^{-9}	88

表 6.2: 慣性項に対する移流項の比

時刻	最大値	最大値を与える要素番号	最小値	最小値を与える要素番号
0.02	2.39×10^{-1}	4096	1.15×10^{-10}	64
0.2	1.20	4035	1.67×10^{-10}	88

どちらの結果においても、時刻が進み流速が発達した状態 ($t = 0.2$ の時)における移流項の比が大きくなっている。従って、速度が高くなった状態 (Reynolds 数が高い・時刻が進んだ状態)においては定量的にも移流項の割合が大きくなり、これが行列の性質を悪化させ収束性を妨げていることがわかる。また、最大値を与える要素は最上部の要素であることがわかり、最小値を与える要素は最下部に近い要素であることもわかる。

6.5 計算結果 (慣性項の有無による収束性の比較)

本節では前章で扱った定常 Navier-Stokes 問題と本章で扱う非定常 Navier-Stokes 問題の収束性の比較を行う。係数行列の観点から見ると、定常 Navier-Stokes 問題で取り扱う係数行列に慣性項に対応する行列を加えたものが非定常 Navier-Stokes 問題で取り扱う係数行列といえる。結果は以下のようなになる。なお、 Δt は 0.01 とし 0.2 秒時におけるデータを掲載する。reynolds 数は 1000 とした。また、定常問題の計算時間と非定常問題の計算時間を比較するために定常問題の計算時間にステップ数 20 をかけた値を表記する。

表 6.3: 慣性項の有無による収束性の比較 (ILU-GMRES 法を用いた場合)

問題	n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)
定常問題	64	ILU-GMRES	124	980
非定常問題	64	ILU-GMRES	54.5	162

表 6.4: 慣性項の有無による収束性の比較 (ILUPSMG-GMRES 法を用いた場合)

問題	n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)
定常問題	64	ILUPSMG-GMRES	785	19460
非定常問題	64	ILUPSMG-GMRES	11.1	147

表 6.5: 慣性項の有無による収束性の比較 [(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES 法を用いた場合]

問題	n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)
定常問題	64	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	112	5720
非定常問題	64	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	8.3	208

本論文にて提案している ILUPSMG-GMRES 法及び (ILUPS+EBEMP)MG-GMRES 法を用いた場合は慣性項の有無により収束性に大きな変化が現れている。非定常問題 (慣性項がある場合) の収束性は、定常問題 (慣性項がない場合) のそれに比べて劇的に向上している。

一方、ILU-GMRES 法についても非定常問題（慣性項がある場合）の収束性は、定常問題（慣性項がない場合）のそれに比べて向上しているもののそれほど大きな変化ではない。

ここまでの章において述べてきたが、Multigrid 法は移流項が存在する問題に対して弱い。しかしながら慣性項が加わることにより (1,1) ブロックの対角部分に値が入り、相対的に移流項が弱まることにより収束性が向上すると考えられる。

6.6 計算結果（自由度の変化による収束性の比較）

本節では 3 種類のソルバーを非定常 Navier-Stokes 問題に適用する。その際、自由度を変化させ、各々のソルバーに対する自由度と反復数（計算時間）の関係を調べる。結果は以下ようになる。なお、 Δt は 0.01 とし 0.2 秒間解析を行ったデータを掲載する。reynolds 数は 5000 とした。

表 6.6: 各自由度に対する収束性の比較

n	手法名	反復回数	計算時間 (秒)
32	ILU-GMRES	42.4	24
64	ILU-GMRES	69	187
128	ILU-GMRES	114.8	2287
192	ILU-GMRES	154.1	7481
32	ILUPSMG-GMRES	24.6	41
64	ILUPSMG-GMRES	23.9	130
128	ILUPSMG-GMRES	19.2	807
192	ILUPSMG-GMRES	21.7	2219
32	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	21.8	64
64	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	62.6	292
128	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	59.6	1175
192	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	63.8	4162

ILU-GMRES 法を用いた場合、自由度の増加により反復数も増加しているが、今回提案した ILUPSMG-GMRES 法や (ILUPS+EBEMP)MG-GMRES 法を用いた場合、反

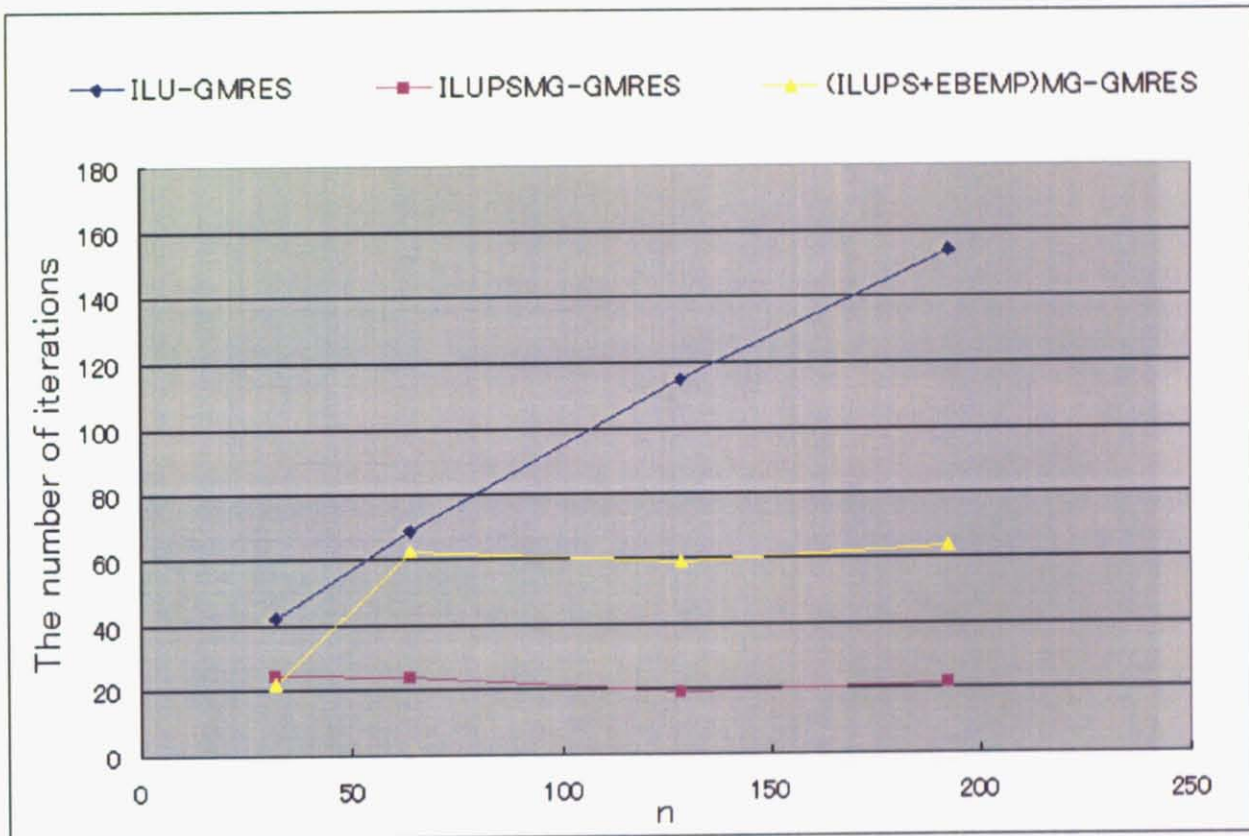


図 6.6: 各 n 数に対する反復数の比較

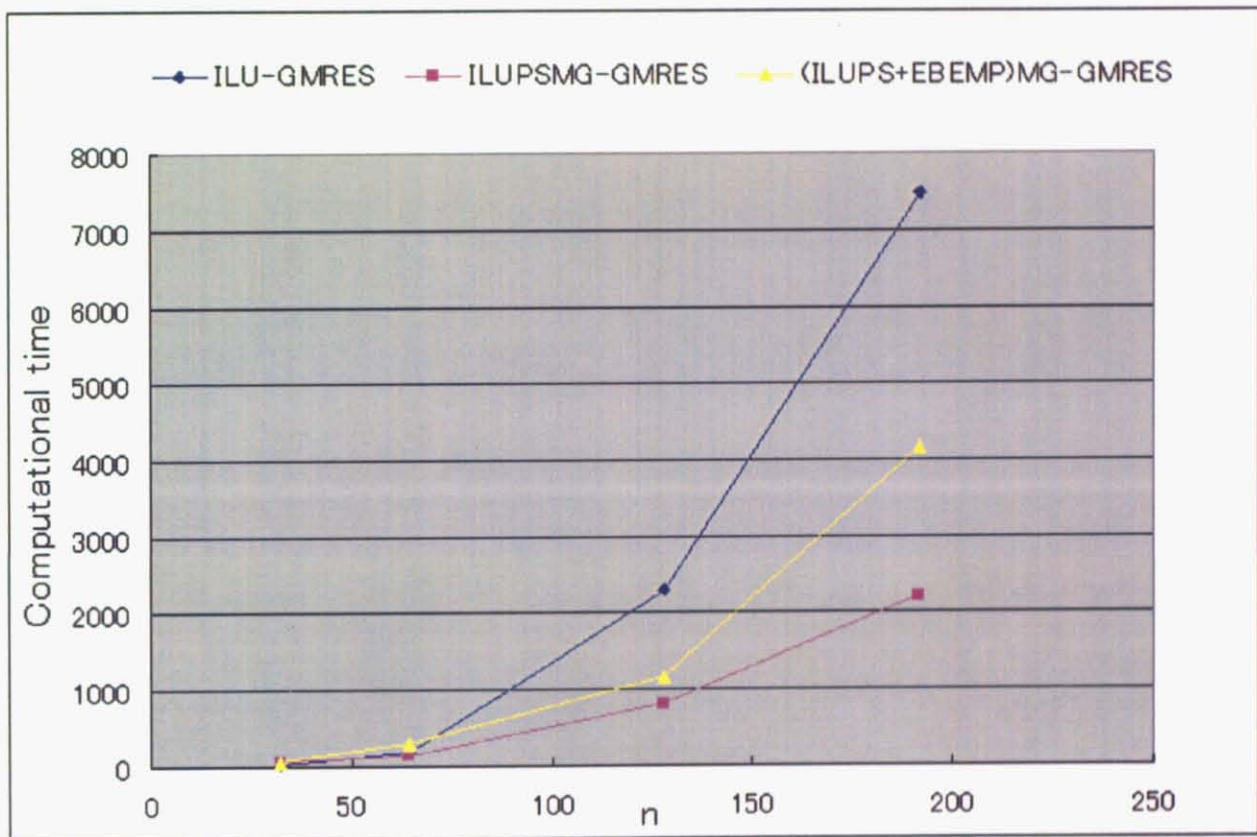


図 6.7: 各 n 数に対する計算時間の比較

復数は自由度にほぼ依存しないといえる。従って今回提案した手法を用いることにより自由度の増加による計算時間の急増を抑えることに成功しているといえよう。

6.7 計算結果 (Reynolds 数の変化による収束性の比較)

本節では3種類のソルバーを非定常 Navier-Stokes 問題に適用する。その際、Reynolds 数を変化させ、各々のソルバーに対する自由度と反復数 (計算時間) の関係を調べる。結果は以下ようになる。なお、 Δt は 0.01 とし 0.2 秒間解析を行ったデータを掲載する。

表 6.7: 各 Reynolds 数に対する収束性の比較

Reynolds 数	手法名	反復回数	計算時間 (秒)
1000	ILU-GMRES	54.5	162
5000	ILU-GMRES	69	187
10000	ILU-GMRES	77.9	214
1000	ILUPSMG-GMRES	11.1	147
5000	ILUPSMG-GMRES	23.9	130
10000	ILUPSMG-GMRES	31.3	192
1000	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	8.3	208
5000	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	62.6	292
10000	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	47.3	227

ILU-GMRES 法に関しては、反復数は Reynolds 数に関して大きく依存はしないことがわかる。ILUPSMG-GMRES 法に関してはある程度増加はしているものの、(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES の増加に比べるとその増加率は抑えられている。

Reynold 数が増加するにつれて、移流項の効果が大きく現れるようになる。よって、これらの結果は先に述べたように ILU 前処理 (ILU-smoohter) が移流項によってもたらされる異方性に対して強いからであると考えられる。

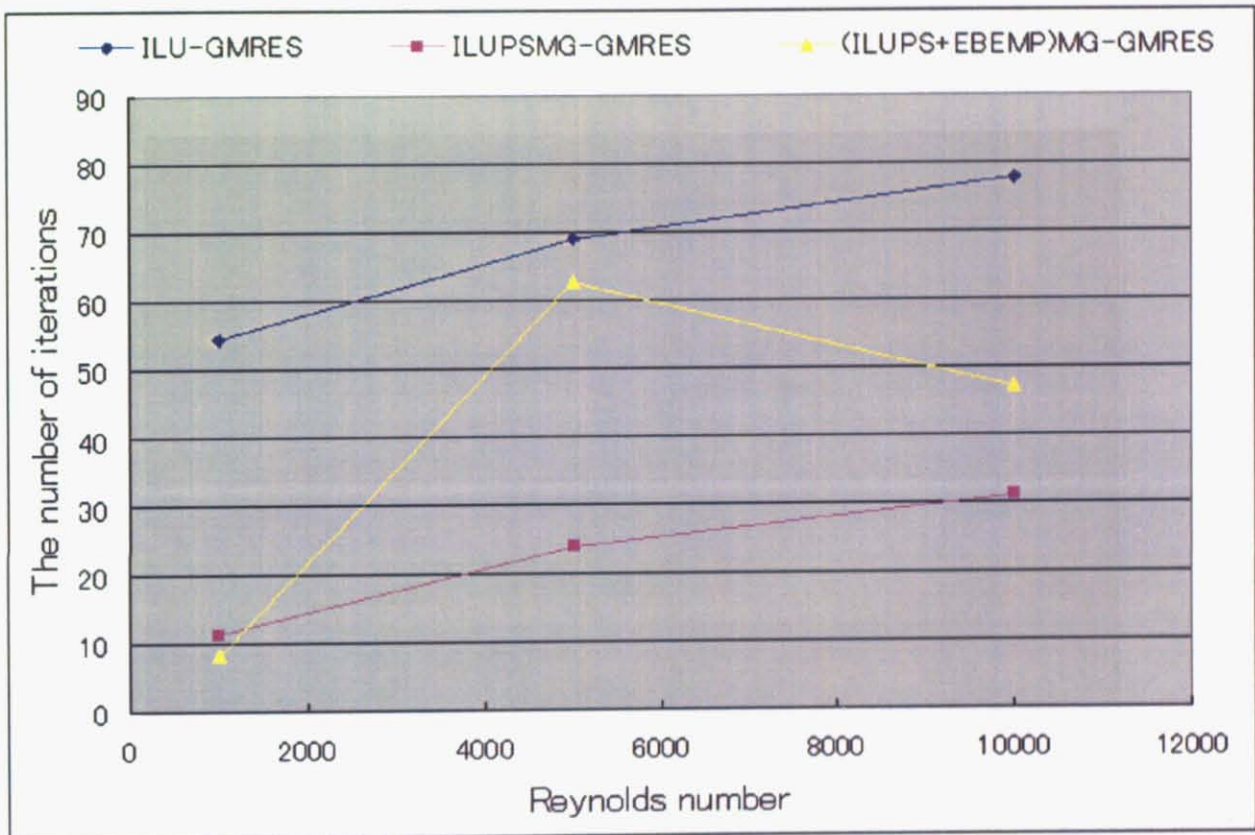


図 6.8: 各 Reynolds 数に対する反復数の比較

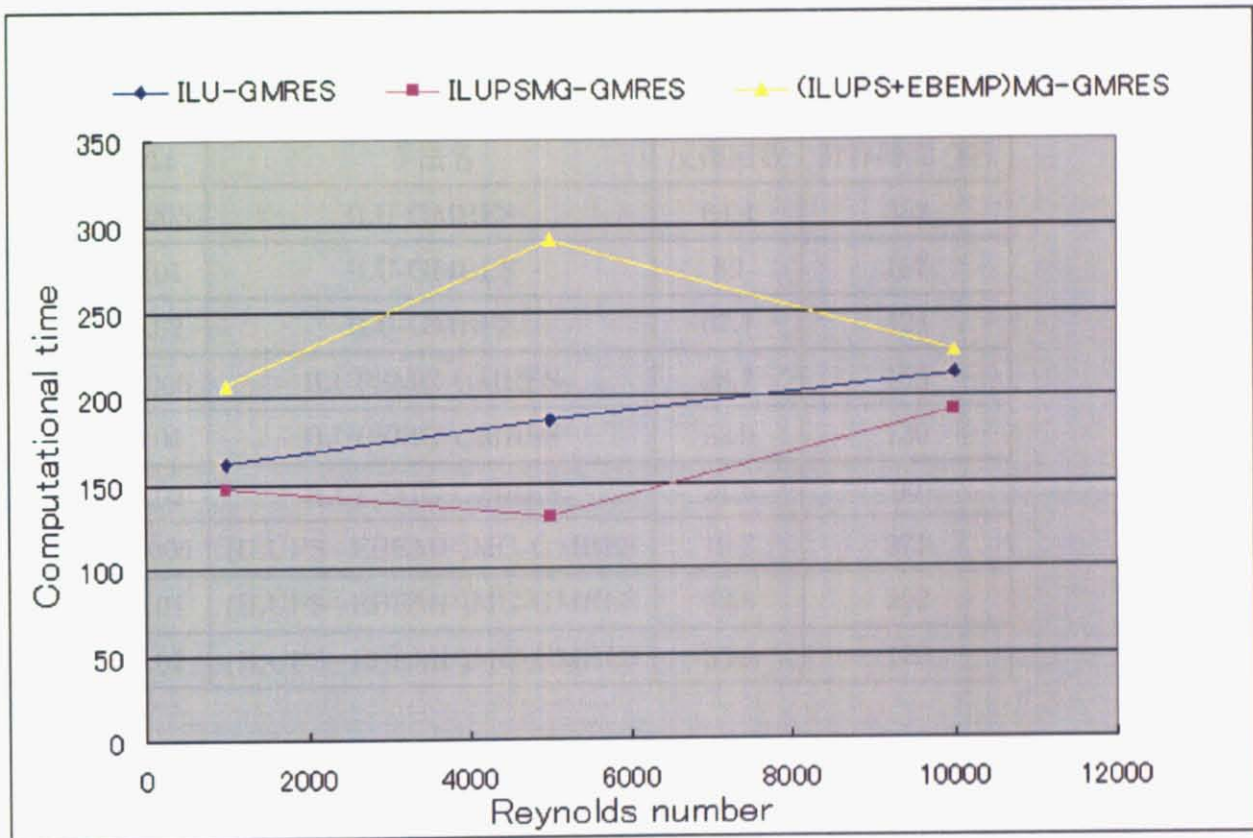


図 6.9: 各 Reynolds 数に対する計算時間の比較

6.8 計算結果 (Δt の変化による収束性の比較)

本節では 3 種類のソルバーを非定常 Navier-Stokes 問題に適用する。その際、 Δt を変化させ、各々のソルバーに対する自由度と反復数 (計算時間) の関係を調べる。結果は以下のようなになる。なお、 Δt は 0.01 とし 0.2 秒間解析を行ったデータを掲載する。式 (2.3.68) から、 Δt が小さくなることによりその他の行列に対する慣性項の比率が大きくなるためソルバーの収束性は上がる。本節では、各ソルバーの収束性の上昇を比べることにより慣性項の影響が各ソルバーに与える影響を調べるのが目的である。

表 6.8: 各 Δt に対する収束性の比較

Δt	手法名	反復回数	計算時間 (秒)
0.005	ILU-GMRES	64.4	352
0.01	ILU-GMRES	69	187
0.02	ILU-GMRES	67.1	124
0.005	ILUPSMG-GMRES	28.7	163
0.01	ILUPSMG-GMRES	23.9	130
0.02	ILUPSMG-GMRES	21.5	90
0.005	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	19.7	371
0.01	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	62.6	292
0.02	(ILUPS+EBEMP)MG-GMRES	33.9	170

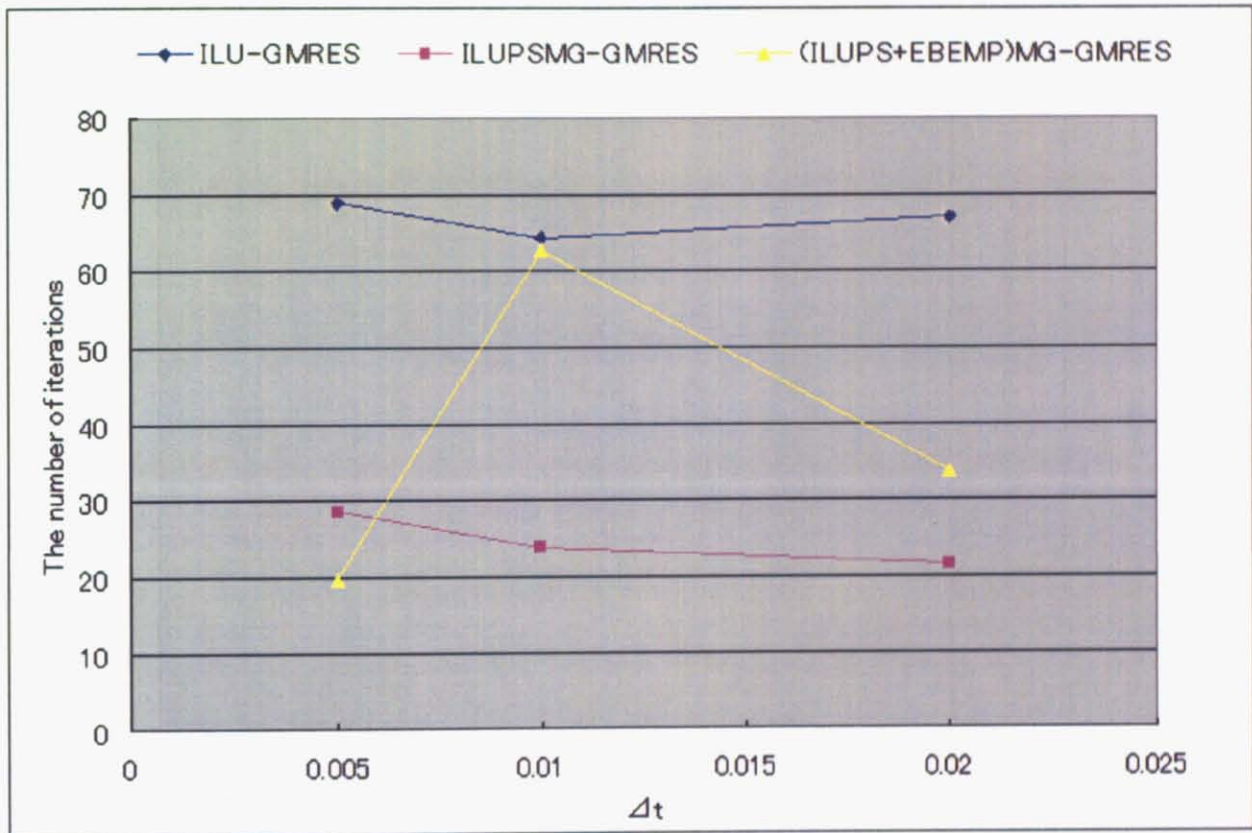


図 6.10: 各 Δt に対する反復数の比較

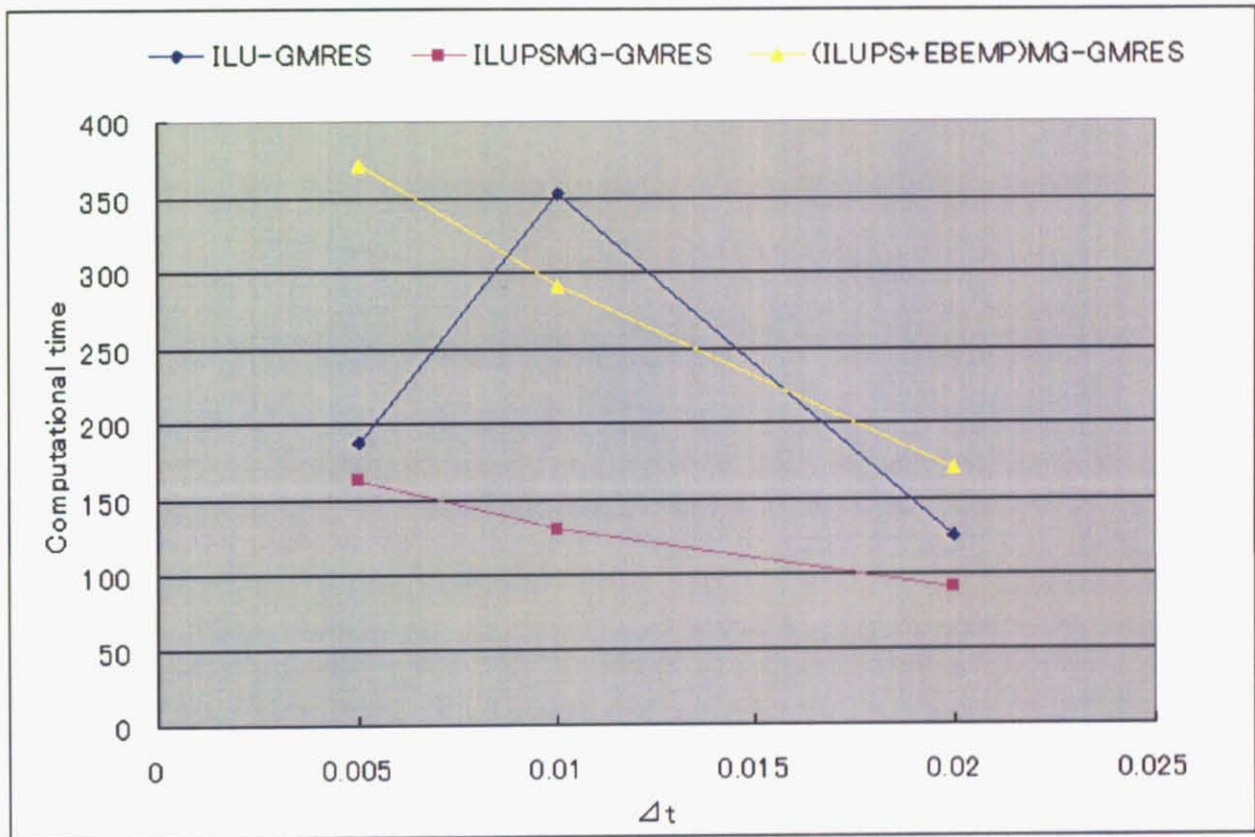


図 6.11: 各 Δt に対する計算時間の比較

6.9 本章の結言

本章においてはまず、粘性項、移流項及び慣性項を離散化した際の行列のオーダーを比較し、非定常問題において導入される慣性項が移流項を打ち消すのに十分なオーダーであることを確認した。続いて、第5章で提案した数種類の解法を非定常問題に適用した。まずは慣性項の有無による収束性の比較を行い、非定常問題（慣性項有り）は定常問題（慣性無し）に比べてはるかに収束性が良く、定常問題では収束しなかった高 Reynolds 数問題（Reynolds 数 5000 程度）に対しても十分収束することを実験的に示した。そして、本論文で提案している ILUPSMG-GMRES 法や (ILUPS+EBEMP)MG-GMRES 法などを用いれば非定常問題においても反復数が自由度によらないことを実験的に示した。また、これらの手法を Reynolds 数 10000 の問題にも適用し、十分な収束性を持つことを実験的に示した。最後に、 Δt による収束性の変化について考察を行い、総合的な計算時間の観点から考え発散しない範囲で出来る限り大きな Δt の値を取るべきであるということを提案した。

本章では特に新しい smoother などは提案していない。これは非定常問題は慣性項があるため定常問題に比べて反復法ソルバーにとって解きやすい問題といえるため、前章までの方法で十分収束させることができるからである。

第7章 全体結言

7.1 本研究の成果

本研究では、定常 Stokes 問題及び定常 Navier-Stokes 問題などの不定値問題に対して有効な smoother を提案した。具体的には

1. EBEMP-smoother
2. ILUPS-smoother

の2種類の smoother を開発した。また、EBEMP-smoother を用いる際に、Multigrid サイクルの中で用いる ε の値を調節し安定化を図った方法 (EBEMPPSMG 法) を提案し、その有用性を検証した。そして smoother を用いた Multigrid 法及び Multigrid 法を前処理とした GMRES 法の有用性を検証した。その結果特に自由度が 10 万を超えるような大規模問題に対して以下のような成果を示した。

1. 定常 Stokes 問題において ILU-GMRES 法では反復が 1000 回以上かかってしまう自由度に対して、EBEMPPSMG-GMRES 法を用いることにより 40 回程度という現実的な反復回数で収束させることに成功した
2. Reynolds 数が 500 の定常 Navier-Stokes 問題において ILU-GMRES 法では収束させることができない自由度に対して、EBEMPPSMG-GMRES 法を用いることにより 100 回程度という現実的な反復回数で収束させることに成功した
3. Reynolds 数が 1000 の定常 Navier-Stokes 問題において ILU-GMRES 法では収束させることができない自由度に対して、(ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法を用いることにより 100 回程度という現実的な反復回数で収束させることに成功した

4. Reynolds 数が 5000~10000 の非定常 Navier-Stokes 問題において ILUPSPSMG-GMRES 法を用いることにより、反復回数が自由度に依存せず常に 20 回程度という理想的なソルバーの開発に成功した

すなわち、定常・非定常 Navier-Stokes 問題において自由度に依存しないソルバーの開発に成功したといえる。これは非常に画期的であると考えられる。

7.2 今後の課題

今後の課題としては以下のようなものが挙げられる。

まず現時点では全てのグリッドにて離散化を行い要素剛性行列を作成している。今後は細かいグリッドのみで離散化を行い粗いグリッドにおいては細かいグリッドから代数的に作成する方法を用いる。これにより、グリッド間における安定化パラメータ調節などがなくなるため、有益であると考えられる。

続いて、非定常 Navier-Stokes 問題においては ILUPSPSMG-GMRES 法は有効であったものの (ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法はそれほどの有用性はなかった。今後パラメータ調節などを行い、(ILUPS+EBEMP)PSMG-GMRES 法の有用性をより詳しく検証する必要がある。

また、心臓シミュレータに対応するソルバーを開発するためには 3 次元への拡張、代数的 Multigrid 法への拡張、使用する要素の変更などが挙げられる。

3 次元への拡張は自由度の急激な増加を生み出し、問題の大規模化は避けられない。大規模問題に対応させるために、並列化を行う。32 ビットマシンで 1 CPU を用いた場合、メモリ容量から数十万自由度が限界である。実際には数千万自由度の計算を扱うことが期待されているため、並列化が必須となる。その際粗いグリッドを考慮して、オーバーラップを深めに取るなどの工夫が必要と考えられる [2][3]。

また、本論文では幾何学的 Multigrid 法を用いているが、心臓問題のような複雑なメッシュを有する問題では幾何学的な階層構造を定義することが困難である。そのため代数的マルチグリッド法への拡張が望まれる。この際の問題点は、本論文で提案した EBEMP-smoother は要素毎の更新を必要とするが、代数的 Multigrid 法では粗いメッシュ上において要素という概念は存在しない。従って粗いメッシュ上においても節点の集合から要素を構築していく必要がある。但し、心臓問題のように制約条件がある

問題の場合、圧力のつながりが分からないなどの点から代数的Multigrid法の構築は難しい。そこで、幾何学的なメッシュを数個与え（各々のメッシュ上の節点は、他のメッシュ上の節点と重なる必要は無い）、メッシュ間の補間関係を定義し現在の方法を用いることもできる。

最後に、現時点では正方形の二次元4/4c要素（3次元の場合は8/8c要素に対応）を計算に用いているが、実際の心臓問題では三角形でバブル節点が存在する4/3c要素（3次元の場合は5/4c要素に対応）で計算が行われている。現在の心臓問題のコードにおいては、5/4c要素を扱う際にはソルバー内でバブル節点を消去し、行列的には4/4c要素として扱っている。このような行列は4/4c要素をPSPG法を用いて離散化したものと同様の行列（従って本論文で扱ったような行列）になるため、本論文で提案したソルバーはバブル節点が存在する問題でも同様の効果を発揮すると考える。

付録 A

A.1 線形代数の基礎

本節では、本論文の中で用いる線形代数に関する基礎的な知識について述べておく。また、本論文では係数行列 A はすべて実行列（実ベクトル空間から実ベクトル空間への線形写像）であり、更に正則である（ A^{-1} が存在する）として扱うことにする。

ベクトルに対するノルムが定義されていれば、行列に対するノルムの1つを次のように定義することができる。

定義 A.1.1 (行列に対するノルム) V を n 次元実ベクトル空間とする。更に、内積が定義されているとする（計量実ベクトル空間）。 A を $V \rightarrow V$ への線形写像とする。この時、 A のノルムは

$$\|A\| = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \quad (\text{A.1.1})$$

で定義される。

線形写像 A が対称であるというのを以下のように定義する。

定義 A.1.2 (対称線形写像) V を n 次元実ベクトル空間とする。更に、内積が定義されているとする。 A を $V \rightarrow V$ への線形写像とする。この時、 A が対称であるということを以下のように定義する。

$$A \text{ が対称} \Leftrightarrow (A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (A\mathbf{y}, \mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in V \quad (\text{A.1.2})$$

で定義される。

定理 A.1.3 ($\|A\|$) 定義 A.1.1 で定められた $\|A\|$ は以下の式を満たす。

$$\|A\| = \sup_{\|\mathbf{x}\|=1} \|A\mathbf{x}\| \quad (\text{A.1.3})$$



証明は省略する.

A が対称行列である場合, 以下のような性質が成り立つ.

補題 A.1.4 (対称行列の性質 1) A を対称行列とする. また, A の固有値, 固有ベクトルをそれぞれ λ_i, \mathbf{v}_i とする. このとき, λ_i はすべて実数となる. また $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \delta_{ij}$ を満たす. すなわち固有ベクトル同士は直交する.



[証明] まず, 固有値が実数であることを示す. 固有値が複素数であるとすれば固有ベクトルも複素ベクトルとなるので, それぞれの複素共役を $\bar{\lambda}_i, \bar{\mathbf{v}}_i$ と定義すれば, A が実行列であることに注意すれば

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i$$

となるので, これを利用すれば

$$\begin{aligned} \lambda_i(\mathbf{v}_i, \bar{\mathbf{v}}_i) &= (\lambda_i\mathbf{v}_i, \bar{\mathbf{v}}_i) = (A\mathbf{v}_i, \bar{\mathbf{v}}_i) \\ &= (\mathbf{v}_i, A\bar{\mathbf{v}}_i) = (\mathbf{v}_i, \bar{\lambda}_i\bar{\mathbf{v}}_i) = \bar{\lambda}_i(\mathbf{v}_i, \bar{\mathbf{v}}_i) \end{aligned}$$

よって

$$(\lambda_i - \bar{\lambda}_i)(\mathbf{v}_i, \bar{\mathbf{v}}_i) = 0$$

となる. あとは $(\mathbf{v}_i, \bar{\mathbf{v}}_i) > 0$ に注意すれば $\lambda_i = \bar{\lambda}_i$ が示せる. すなわち λ_i は実数となる.

続いて, 固有ベクトル同士が直交することを示す.

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i$$

に左から \mathbf{v}_j^T を作用させれば

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_j^T A\mathbf{v}_i &= \lambda_j\mathbf{v}_j^T\mathbf{v}_i \\ \mathbf{v}_i^T A\mathbf{v}_j &= \lambda_i\mathbf{v}_i^T\mathbf{v}_j \end{aligned}$$

などが導ける. この2式を引き算すれば

$$(\lambda_i - \lambda_j)\mathbf{v}_i^T\mathbf{v}_j = \mathbf{v}_i^T A\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_j^T A\mathbf{v}_i$$

となる. あとは A が対称であることを考慮すれば右辺は0になるので $\lambda_i - \lambda_j \neq 0$ から固有ベクトル同士は直交することが示せた.

□

補題 A.1.5 (対称行列の性質 2) A を正則な対称行列とする. 更に A の固有値を λ_i とする. このとき A^{-1} の固有値は $\frac{1}{\lambda_i}$ で与えられる.

■

[証明] A は対称行列なので対角化可能で以下を満たす直交行列 T が存在する.

$$T^{-1}AT = \text{diag}(\lambda_i)$$

よって

$$(T^{-1}AT)^{-1} = T^{-1}A^{-1}T = \text{diag}\left(\frac{1}{\lambda_i}\right)$$

となる. このような T の一意性から, $\frac{1}{\lambda_i}$ は A^{-1} の固有値となる.

□

次にスペクトル半径というものを定義する.

定義 A.1.6 (スペクトル半径) 行列 A の固有値の中で, その絶対値が最大であるものを A のスペクトル半径と呼び, $\rho(A)$ と表す.

定理 A.1.7 ($\|A\|$ の値) A を対称行列とする. このとき式 (A.1.1) で与えられる $\|A\|$ は次の等式を満たす

$$\|A\| = \rho(A) \tag{A.1.4}$$

■

[証明] 絶対値が最大の固有値とその固有ベクトルをそれぞれ $\lambda_{max}, \mathbf{v}_{max}$ と置く. $\|A\| = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$ であることに注意すれば, \mathbf{x} として特に \mathbf{v}_{max} を採用すれば

$$\begin{aligned} \|A\| &= \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \\ &\geq \frac{\|A\mathbf{v}_{max}\|}{\|\mathbf{v}_{max}\|} \\ &= |\lambda_{max}| = \rho(A) \end{aligned}$$

A の固有ベクトルを $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ とする. このとき任意の \mathbf{x} に対し, 適当な実数 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ を用いて $\mathbf{x} = \sum_i \alpha_i \mathbf{v}_i$ と基底分解ができる. この式に A を作用させれば

$$A\mathbf{x} = \sum_i \lambda_i \alpha_i \mathbf{v}_i$$

となる. ここで A が対称だとその固有ベクトルは直交することに注意すれば

$$\begin{aligned} \|A\mathbf{x}\|^2 &= (\sum_i \lambda_i \alpha_i \mathbf{v}_i) \cdot (\sum_j \lambda_j \alpha_j \mathbf{v}_j) \\ &= \sum_{i,j} \delta_{ij} (\lambda_i \alpha_i \mathbf{v}_i) \cdot (\lambda_j \alpha_j \mathbf{v}_j) \\ &= \sum_i (\lambda_i \alpha_i)^2 \\ &\leq \rho(A)^2 \sum_i (\alpha_i)^2 \\ &= \rho(A)^2 \|\mathbf{x}\|^2 \end{aligned} \tag{A.1.5}$$

よって $\|\mathbf{x}\|$ が任意だったので

$$\|A\| = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \rho(A) \tag{A.1.6}$$

が示せる.

□

補題 A.1.8 A を対称行列とする. このとき

$$\|A\| = \sup_{\|\mathbf{v}\|=1} (\mathbf{v}, A\mathbf{v})$$

が成り立つ.

■

この定理の証明は省略する. 続いて行列 B が正方行列ではなく, 一般の行列であるときのベクトルのノルムを以下のように定義する.

定義 A.1.9 (一般の行列に対するベクトルのノルム) 行列 B を $m \times n$ の行列 (特に正方行列とは限らない) とする. このときベクトルのノルムを以下のように定義する,

$$\|B\mathbf{x}\| = \sup_{\|\mathbf{y}\|=1} (\mathbf{y}, B\mathbf{x})$$

但し \mathbf{x} は m 次, \mathbf{y} は n 次のベクトルとする.



これを利用して B が一般の行列である場合の行列のノルムが定義できる。

定義 A.1.10 (一般の行列に対する行列のノルム) 行列 B を $m \times n$ の行列 (特に正方形行列とは限らない) とする. このとき行列のノルムを以下のように定義する,

$$\|B\| = \sup_{\|x\|=1} \|Bx\|$$

但し x は m 次のベクトルとする.



尚, y は n 次のベクトルとすれば

$$\|B\| = \sup_{\|x\|=1} \sup_{\|y\|=1} (y, Bx)$$

と書けることにも注意しておく.

続いて対称行列について成り立つ性質を述べる.

補題 A.1.11 ($\|XX^T\|$) X を $n \times m$ の対称行列とする. このとき

$$\|XX^T\| = \|X^T X\|$$

が成り立つ.



[証明] まず

$$(x, x) = \sup_{\|y\|=1} (x, y)(x, y)$$

が成り立つことに注意する ($y = \frac{x}{\|x\|}$ をとってくればよい). これと補題 A.1.8 を合わせれば,

$$\begin{aligned} \|XX^T\| &= \sup_{\|v\|=1} (v, XX^T v) \\ &= \sup_{\|v\|=1} (X^T v, X^T v) \\ &= \sup_{\|v\|=1} \sup_{\|u\|=1} (X^T v, u)(X^T v, u) \\ &= \sup_{\|v\|=1} \sup_{\|u\|=1} (v, Xu)(v, Xu) \\ &= \sup_{\|u\|=1} (Xu, Xu) \\ &= \|X^T X\| \end{aligned}$$

□

更に以下の補題も簡単ではあるが非常に良く使われるので紹介しておく。

補題 A.1.12 (対称行列の性質 3) A を対称行列とする。更に A の固有値の中で、絶対値が最大と最小の固有値をそれぞれ $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ とする。このとき、 $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ は以下の式で与えられる。

$$|\lambda_{\max}| = \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}, \quad |\lambda_{\min}| = \min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$$

■

[証明] A は対称行列なので固有値はすべて実数である。さて、 A の任意の固有値、固有ベクトルを λ, \mathbf{v} とすれば

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$$

が成り立つので、両辺と \mathbf{v} の内積を取って計算をしていけば

$$\frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} = \lambda \tag{A.1.7}$$

が導ける。つまり A の任意の固有値 λ は必ず式 (A.1.7) の形で表されるので、

$$\lambda_{\max} \leq \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}, \quad \lambda_{\min} \geq \min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$$

が示せた。

次に逆を示す。式 (A.1.5) を導いたのと同様にして

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) &= \sum_i \lambda_i (\alpha_i)^2 \\ &\leq |\lambda_{\max}| (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \\ (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) &\geq |\lambda_{\min}| (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

となるので、

$$\lambda_{\max} \geq \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}, \quad \lambda_{\min} \leq \min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{(\mathbf{x}, A\mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$$

が示せた。

□

続いて、対称行列 A の正定値性、負定値性という性質を以下のように定義する。

定義 A.1.13 (正定値行列) A を対称行列とする。このとき、 A が正定値、負定値であるということを以下のように定義する。

$$A \text{ が正定値} \Leftrightarrow (\mathbf{v}, A\mathbf{v}) > 0 \quad \forall \mathbf{v} \neq \mathbf{0}$$

$$A \text{ が負定値} \Leftrightarrow (\mathbf{v}, A\mathbf{v}) < 0 \quad \forall \mathbf{v} \neq \mathbf{0}$$

■

A が負定値行列でも A を $-A$ などに置き換えれば正定値になるため正定値と負定値は実質同じものになる。以降では正定値のみに集約して議論する。

A が正定値対称行列である場合、以下のような性質が成り立つ。

補題 A.1.14 (対称正定値行列) A を正定値対称行列とする。このとき A の固有値はすべて正の実数になる。

■

[証明] A が対称なのでその固有値 λ_i が実数であることは既に補題 A.1.8 で示してある。ここでは正になることを示す。 λ_i に対応する固有ベクトルを \mathbf{v}_i とする。すると

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$

が成り立つ。この両辺と \mathbf{v}_i の内積を取れば

$$(\mathbf{v}_i, A\mathbf{v}_i) = \lambda_i (\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i)$$

となり、 A が正定値であることに注意すれば $(\mathbf{v}_i, A\mathbf{v}_i) > 0$ なので $\lambda_i > 0$ となるので題意は示せた。

□

ちなみに A 自体は対称ではなくても、 A の対称部 $A_s = \frac{1}{2}(A + A^T)$ は勿論対称になるので、 A は非対称行列でも A_s が正定値であることさえ示せば A_s の固有値、固有ベクトルには上の補題が成り立つことに注意しておく。

正定値対称行列 A に対して A で定義されるノルムを以下のように定義出来る。

定義 A.1.15 (A-ノルム) 正定値対称行列 A に対してベクトルの行列のノルム $\|\cdot\|_A$ を以下のように定める.

$$\begin{aligned}\|\mathbf{x}\|_A &= (\mathbf{x}, A\mathbf{x})^{\frac{1}{2}} \\ \|B\|_A &= \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|B\mathbf{x}\|_A}{\|\mathbf{x}\|_A}\end{aligned}$$

このように定めたノルムを A -ノルムと呼ぶ.

このように与えられたノルム $\|\cdot\|_A$ がノルムの公理を満たすのは明らかである.

続いて, 不定値行列という概念を定義する.

定義 A.1.16 (不定値行列) A の固有値に 0 が存在せず, 且つ正定値又は負定値ではない行列 (すなわち固有値に正と負のものが混じっているもの) を不定値行列と呼ぶ.



後に述べるが, 係数行列 A が不定値であると, 連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ に対する反復法や並列化に関する理論が非常に難しくなり, 実際にわかっていないことが数多く存在する. 本論文では特殊な不定値行列に対していくつかの定理を示す.

係数行列 A が不定値であると理論的な側面が難しくなるという一つの理由が以下の補題からわかる.

補題 A.1.17 ($\|A\|$) 実数 \underline{a} を以下のように定める.

$$\underline{a} = \inf_{\mathbf{v} \neq 0} \frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} \tag{A.1.8}$$

このとき行列 A の固有値 λ に対して以下の不等式が成り立つ.

$$\operatorname{Re}(\lambda) \geq \underline{a} \tag{A.1.9}$$



[証明] A は対称ではないので複素数で表現する事に注意する. λ に対する固有ベクトルを φ とし

$$\lambda = \alpha + \beta i, \quad (\alpha, \beta \text{ は実数})$$

$$\varphi = \mathbf{u} + i\mathbf{v}$$

とあらかず事にすれば

$$A(\mathbf{u} + i\mathbf{v}) = (\alpha + \beta i)(\mathbf{u} + i\mathbf{v}) \quad (\text{A.1.10})$$

が成り立つ. 式 (A.1.10) の左辺と $\mathbf{u} - i\mathbf{v}$ の内積を計算していくと以下のようになる.

$$(\mathbf{u} - i\mathbf{v}, A(\mathbf{u} + i\mathbf{v})) = (\mathbf{u}, A\mathbf{u}) + (\mathbf{v}, A\mathbf{v}) + i\{(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - (\mathbf{v}, A\mathbf{u})\}$$

同様に, 式 (A.1.10) の右辺と $\mathbf{u} - i\mathbf{v}$ の内積を計算していくと以下のようになる.

$$(\mathbf{u} - i\mathbf{v}, (\alpha + \beta i)(\mathbf{u} + i\mathbf{v})) = \alpha\{(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + (\mathbf{v}, \mathbf{v})\} + i\beta\{(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + (\mathbf{v}, \mathbf{v})\}$$

よって

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{(\mathbf{u}, A\mathbf{u}) + (\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + (\mathbf{v}, \mathbf{v})} \\ &= \frac{(\mathbf{u}, \mathbf{u})}{(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + (\mathbf{v}, \mathbf{v})} \frac{(\mathbf{u}, A\mathbf{u})}{(\mathbf{u}, \mathbf{u})} + \frac{(\mathbf{v}, \mathbf{v})}{(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + (\mathbf{v}, \mathbf{v})} \frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} \\ &\geq \underline{\alpha} \end{aligned}$$

となるので題意が示せた.

□

A が対称正定値行列であれば補題 A.1.12 と A.1.14 から $\underline{\alpha} > 0$ となり, A の固有値が Gauss 平面において右半面に入る事がわかり, 非常に都合がよい (第 3.1 節参照). だが, A が不定値であると当然のことながら $\underline{\alpha}$ が負になり, 固有値分布が悪くなるので非常に議論が難しくなるというわけである.

さて, 次に行列に対する不等式 (大小関係) を以下のように定義する.

定義 A.1.18 (行列の大小) 任意の n 次対称正方行列 A, B に対し, 行列の大小関係を以下のように定義する.

$$A \geq B \Leftrightarrow (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) \geq (\mathbf{x}, B\mathbf{x}) \text{ for } \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

■

最後に Schur Complement というものについて説明をする. 連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の係数行列 A を以下のように 2×2 ブロックの行列に分割する.

$$A = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.11})$$

Schur Complement とは、目的となる未知数以外を消去した際の残りの係数行列を表す。例えば A_{22} ブロックに対する Schur Complement を求めると以下ようになる。

まず、 A の分割に対応して \mathbf{b} , \mathbf{x} も以下のように同様に分割をする。

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix}$$

すると $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ は以下のように表示できる。

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}$$

この式から \mathbf{x}_1 を下段から消去すれば

$$(A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})\mathbf{x}_2 = \mathbf{b}_2 - A_{21}A_{11}^{-1}\mathbf{b}_1 \quad (\text{A.1.12})$$

となるので、 A_{22} ブロックに対する Schur Complement は $A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ であるということがわかる。本論文では分割として

1. 流速部（変位部）と圧力部
2. 領域分割法における自分の担当領域とそれ以外の領域

という 2 種類の分割を用いる。

後に述べるが、例えば 1 の分割を考えた場合 Schur Complement といえば普通圧力部 A_{22} ブロックに対する Schur Complement を表すことなどにも注意しておく。

A.1.1 係数行列 A と A' の特徴

ここまでの導出でわかるとおり、流体構造連成有限要素解析で現れる連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ は以下のような形になる。ここで一行目は N-S 方程式、二行目は連続の式に対応する。

$$A = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.13})$$

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_v \\ \mathbf{b}_p \end{pmatrix}$$

但し、 \mathbf{A} は対称正定値行列であり、 \mathbf{C} は対称正定値行列または零行列とする。また、 \mathbf{B} は $\ker(\mathbf{B}^T)=0$ を満たす。 \mathbf{v} は未知数の流速部に対応し、 \mathbf{v} は未知数の圧力部に対応する。また、 \mathbf{b}_v は右辺の流速部に対応し、 \mathbf{b}_p は右辺の圧力部に対応する。

\mathbf{A} は N-S 方程式の質量マトリクスや移流項のマトリクスなどから構成されているため、移流項の無い超弾性体の構成式や Stokes 方程式においては対称になるが、N-S 方程式においては対称にはならない。但し、タイムステップが十分小さいと質量マトリクス \mathbf{M} が支配的となり対称行列に近くなる。そのためここでは \mathbf{A} を対称と仮定している。また、 \mathbf{C} は非圧縮なら零行列、微圧縮なら非常に小さな対称正定値行列となる。

後に示すが、この形で表わされる連立一次方程式の係数行列は対称ではあるのだが、不定値であるというのが最大の特徴である。すなわち係数行列 \mathbf{A} の固有値の中に正のものと負のものが混在するため正定値で成り立つような収束性の議論などが適用できない。そのためこのような方程式に対するソルバーの開発並びに並列化手法の開発は理論的な扱いが非常に難しくなる。第 3.2 節でこの難しさ・解決法などについて詳しく議論する。

また、方程式の圧力部全体にマイナスをかければ $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ は以下のような係数行列 \mathbf{A}' を用いた $\mathbf{A}'\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$ に変換することができる。

$$\mathbf{A}' = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}^T \\ -\mathbf{B} & \mathbf{C} \end{pmatrix}$$

このようにすると対称性は崩れてしまうが、 \mathbf{A} より議論がしやすい点も出てくる。以降では \mathbf{A} と \mathbf{A}' の 2 つの行列の特徴、並びに固有値分布の特徴などについて述べていく。

固有値分布の重要性

$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ に反復法を適用した際の収束性を議論する際に、多くの場合「係数行列 \mathbf{A} の固有値分布」を調べることとなる。何故固有値分布を調べるのが重要であるかを以下に述べる。

まず、Richardson 反復法及び前処理付き Richardson 反復法 (Jacobi 法, Gauss-Seidel 法など) と呼ばれる解法 (第 A.2 節参照) は図 A.1 のように係数行列 \mathbf{A} 又は前処理さ

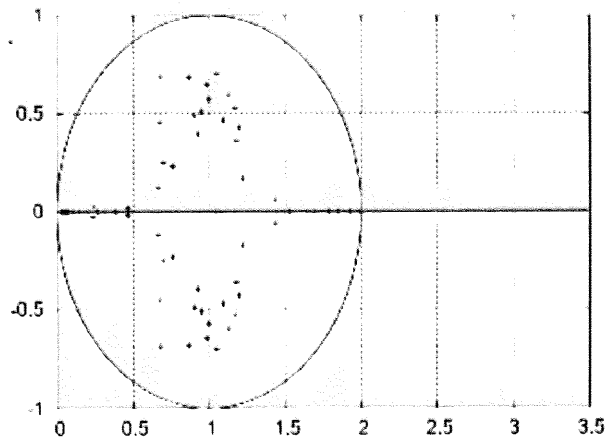


図 A.1: 全ての固有値が Gauss 平面上で実軸上の点 1 を中心として半径 1 に収まる様子

れた係数行列 $M^{-1}A$ の固有値が Gauss 平面上で実軸上の点 1 を中心として半径 1 の円に入っていれば収束するということが知られている。

更に GMRES 法と呼ばれる解法 (第 A.2 節参照) では係数行列 A の対称部 $\frac{1}{2}(A + A^T)$ の固有値がすべて正であれば収束することが知られている。

更に固有値分布を用いることにより, 収束に関してだけ無くその収束のスピードも評価することができる。まずは条件数と呼ばれるものを定義する。

定義 A.1.19 (条件数) 行列 A の条件数 $\text{cond}(A)$ を以下の式で定義する。

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \quad (\text{A.1.14})$$

ここで, 絶対値が最大・最小の固有値をそれぞれ $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ と置く。 A が対称行列であれば

$$\|A\| = \lambda_{\max}, \quad \|A^{-1}\| = \frac{1}{\lambda_{\min}}$$

となり

$$\text{cond}(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \quad (\text{A.1.15})$$

と書くことができる。

実際に A の次元が大きくなると $\|A\|$ 並びに $\|A^{-1}\|$ を用いるのは非常に困難である。そこで A が完全に対称ではない場合も, $\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ を条件数のようなものとして考えることも多い。

反復法においては一般的に条件数が小さいほど収束のスピードが向上する（解が早く求まる）ということが知られている。実際、条件数と GMRES 法の収束性に関する議論は第 A.2.4 小節で述べた。

以上のことから、行列 A の固有値分布を調べ、その分散具合（上下左右への散らばり方）の評価をすることが反復法の収束性を語る上で非常に重要であるということがわかる。

A の性質 1 (不定値性)

ここでは、以下の形で表される行列 A が実際に不定値行列であるということを証明していく。

$$A = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix}$$

まず A を圧力部 $-C$ に対する Schur complement S を用いて LU 分解していくと

$$A = \begin{pmatrix} A & 0 \\ B & -C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & -S^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B^T \\ 0 & -S \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.16})$$

となる。但し A に対する Schur complement S は式 (A.1.12) から

$$S = C + BA^{-1}B^T$$

である。

次に、行列に対する符号数というものを定義する。

定義 A.1.20 (符号数) 行列 A の負の固有値の個数が a 、零の固有値の個数が b 、正の固有値の個数が c であるとき、行列 A の符号数を (a, b, c) と定める。

例えば、 A の符号数が $(3, 1, 5)$ であれば、 A の負の固有値の個数が 3、零の固有値の個数が 1、正の固有値の個数が 5 であるということが分かる。

次に、シルベスターの慣性則という定理を紹介する。証明は省略する。

定理 A.1.21 (シルベスターの慣性則) A を対称行列、 C を正則行列とする。このとき A と $C^T A C$ の符号数は一致する。

この定理はすなわち A が正定値ならば $C^T A C$ も正定値になるということを表していることになる。

この定理を繰り返し用いれば目的であった以下の定理が示せる。

定理 A.1.22 (不定値)

$$A = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{pmatrix}$$

で表される行列 A は不定値である。但し、 A は対称正定値行列であり、 C は対称正定値行列または零行列とする。また、 B は $\ker(B^T) = 0$ を満たす。

[証明] A は正定値であるのでシルベスターの慣性則を用いれば、 BAB^T も正定値であることがわかる。更に C も正定値であるので

$$S = C + BA^{-1}B^T$$

も正定値となることがわかる。すなわち $-S^{-1}$ は負定値になるので

$$\begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & -S^{-1} \end{pmatrix}$$

は不定値になることがわかる。よって式 (A.1.16) に再びシルベスターの慣性則を用いれば A が不定値になることが示せた。

□

なお、この定理から A を n 次、 C を m 次の行列とすれば A の符号数は $(m, 0, n)$ となることがわかる。

係数行列 A' の性質 2 (固有値分布)

この小節では係数行列 A の 2 行目のブロックにマイナスをかけた

$$A' = \begin{pmatrix} A & B^T \\ -B & C \end{pmatrix} \tag{A.1.17}$$

の固有値分布について考える.

A' の固有値, 固有ベクトルをそれぞれ λ, φ とすれば $A'\varphi = \lambda\varphi$ が成り立つ. これを流速部 (変位部) と圧力部に以下のように分割して表現する.

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ -B & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$$

この式の第1行目と \mathbf{v} との内積を取り, (\mathbf{v}, \mathbf{v}) で割る. また, 第2行目と \mathbf{p} との内積を取り, (\mathbf{p}, \mathbf{p}) で割ると

$$\begin{pmatrix} \frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} - \lambda & \frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} \\ -\frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} & \frac{(\mathbf{p}, C\mathbf{p})}{(\mathbf{p}, \mathbf{p})} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

が導ける. この係数行列には明らかに逆行列が存在しない (したら矛盾) ので

$$\det \begin{pmatrix} \frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} - \lambda & \frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} \\ -\frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} & \frac{(\mathbf{p}, C\mathbf{p})}{(\mathbf{p}, \mathbf{p})} - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

が成り立つ. よって

$$\lambda = \frac{1}{2}(a + c) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(a - c)^2 - 4b} \quad (\text{A.1.18})$$

が導ける. 但し

$$\frac{(\mathbf{v}, A\mathbf{v})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} = a, \quad \frac{(\mathbf{p}, B\mathbf{v})^2}{(\mathbf{p}, \mathbf{p})(\mathbf{v}, \mathbf{v})} = b, \quad \frac{(\mathbf{p}, C\mathbf{p})}{(\mathbf{p}, \mathbf{p})} = c$$

と置いた. ここで, A, C の固有値は正の実数であるので, A, C の最大固有値, 最小固有値をそれぞれ $\bar{a}, \underline{a}, \bar{c}, \underline{c}$ と置けば, 明らかに以下の式が成り立つことに注意しておく.

$$\underline{a} \leq a \leq \bar{a}, \quad \underline{c} \leq c \leq \bar{c} \quad (\text{A.1.19})$$

式 (A.1.18) から明らかにいくつか重要な性質が示せる.

補題 A.1.23 (実固有値の評価) 式 (A.1.17) で表される係数行列 A' の固有値を λ とする. このとき $\text{Im}(\lambda) = 0$ をみたす λ に対して以下の式が成り立つ.

$$\lambda = \text{Re}(\lambda) = \frac{1}{2}(a + c)$$

■

[証明] 式 (A.1.18) から明らか.

□

補題 A.1.24 ($\text{Im}(\lambda) \neq 0$ を満たす固有値の評価) 式 (A.1.17) で表される係数行列 A' の固有値を λ とする. このとき $\text{Im}(\lambda) \neq 0$ をみたす λ の実部に対して以下の評価ができる.

$$\min(a, c) \leq |\text{Re}(\lambda)| \leq \max(a, c)$$

■

[証明] $a > 0, c > 0$ に注意すれば式 (A.1.18) から明らかに $b = 0$ のとき $\text{Re}(\lambda)(= \lambda)$ は最大値及び最小値をとる. よって

$$\text{Re}(\lambda) = \frac{1}{2}(a + c) \pm \frac{1}{2}|(a - c)| \quad (\text{A.1.20})$$

が最大値及び最小値を取る λ に対して成り立つ. この式から $a > c$ のときは

$$c < \text{Re}(\lambda) < a$$

が成り立つ. 一方, $a < c$ のときは

$$a < \text{Re}(\lambda) < c$$

となるので, これらを合わせれば題意が示せた.

□

この定理は, 全体行列 A の固有値の実部がその一部分である対角ブロック行列 A と C のみで評価ができるという非常に重要な定理である. すなわち行列 A と C の性質がそれほど悪くない (固有値の絶対値が大きすぎたり小さすぎたりしない) ならば, A の固有値の実部の絶対値が大きすぎたり小さすぎたりしないということがわかるのである.

ちなみに, 流体に非圧縮性を仮定すると $c = 0$ となり, 微圧縮性を仮定すると c は限りなく 0 に近いので固有値の実部の絶対値が下から抑えられずに固有値分布が悪くなるといえる.

更に固有値の虚部についても以下の補題が成り立つ.

補題 A.1.25 (固有値の虚部の評価) 式 (A.1.17) で表される係数行列 A' の固有値を λ とする. $\text{Im}(\lambda)$ に対して以下の評価式が成り立つ.

$$2\text{Im}(\lambda) \leq \|B\| \tag{A.1.21}$$

■

[証明]

$$\lambda = \frac{1}{2}(a + c) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(a - c)^2 - 4b} \tag{A.1.22}$$

で表されたので, その虚部が最大になるのは明らかに $a - c = 0$ の時でそのときの最大値は $2b$ になる.

ここで

$$b = \frac{(\mathbf{p}, B\mathbf{v})^2}{(\mathbf{p}, \mathbf{p})(\mathbf{v}, \mathbf{v})}, \quad \|B\| = \sup_{\|\mathbf{p}\|=1} \sup_{\|\mathbf{v}\|=1} \frac{(\mathbf{p}, B\mathbf{v})^2}{(\mathbf{p}, \mathbf{p})(\mathbf{v}, \mathbf{v})}$$

であることに注意すれば

$$b \leq \|B\|$$

が成り立つ. よって題意は示せた.

□

ちなみに現時点では $\|B\|$ そのものの評価については行えていないことに注意する.

A.2 Richardson 反復法と Krylov 部分空間法

A.2.1 緒言

本節では連立一次方程式の解法として直接法と反復法の特徴を紹介し、その後に混合型 FEM 問題に有効なソルバーとしても用いられている反復法に関して説明していく。更に、現在反復法の主流となっている Krylov 部分空間法と呼ばれる方法が、実は一見関係のなさそうな Richardson 反復法（古典的反復法）と深い関係があるということの説明していく。最後に Richardson 反復法では実際に計算を収束させるのは難しく、Krylov 部分空間法が現在の反復法の主流になっているということの説明する。

A.2.2 連立一次方程式の解法

直接法と反復法の特徴

連立一次方程式 $Ax = b$ を解く方法としては、直接法と反復法の 2 種類がある。直接法は Gauss の消去法に代表されるように同値変形により A を上三角行列のような解き易い行列に変形をして、後退代入などを行なっていく手法である。反復法はその名の通り、 x_0 から定められた手順に従って x_1, x_2, \dots, x_n を求めていき x_n が十分に x に近づいたところで計算を打ち切り、 x_n を x とする近似解法である。

以下に直接法（skyline 法と multi-frontal 法）及び反復法における計算量とメモリ使用量のオーダーを表す。なお、これはポアソン方程式を直方体（長方形）の領域にメッシュを張って計算を行ったと仮定したものになる。また、 k は反復回数を表している。例えば ICCG 法を用いると k は n に比例することが知られている。Multigrid 法を用いれば、 k は定数になることが知られている。

表 A.1: 代表的な直接法及び反復法の計算量とメモリ使用量のオーダーの比較

名称	3次元		2次元	
	計算量	メモリ使用量	計算量	メモリ使用量
skyline 法	n^7	n^5	n^4	n^3
multi-frontal 法	n^6	n^4	n^3	$\log 2n^2$
反復法	$k \times n^3$	n^3	$k \times n^2$	n^2

直接法と反復法のメリット、デメリットをまとめると以下のようなになる。

- 直接法のメリット
 - 基本的にどのような連立一次方程式に対しても理論的には解が求まる
 - 求めた解は丸めや打ち切り誤差などが無ければ正確に求まる
- 直接法のデメリット
 - 問題の規模が大きくなるとメモリの使用量が大幅に増える
 - 問題の規模が大きくなると計算に多くの時間がかかる
 - 係数行列 A の rank (階数) がフルランクでないと計算ができない
- 反復法のメリット
 - 問題によっては計算のスピードが大幅に向上する
 - fill-in を取り込んでもその量が未知数の個数 n に比例するためメモリの使用量が少ない
 - 大規模問題にも適用が可能
 - rank がフルランクで無くても右辺のベクトル b が well-defined なら解くことができる
- 反復法のデメリット
 - 使用できる問題が 2 階の楕円型方程式に限られることが多い
 - 問題ごとに係数行列の特性を把握し、チューニングすることが必要

本研究では大規模な自由度の問題を扱うことのできるソルバーの作成を目指しているため、以降では、大規模問題に適用可能な反復法についてのみ話を進めていく。

A.2.3 Richardson 反復法

まずは Richardson 反復法 (古典的反復法) について定義し、成り立つ性質などを調べていく。また、Richardson 反復法は実際には収束させるのが難しいことを最後に述べる。

連立一次方程式 $Ax = b$ に対する Richardson 反復法とは以下のように残差を単純に加えて解を更新してゆく反復法である.

定義 A.2.1 (Richardson 反復法) Richardson 反復法とは以下のアルゴリズムで与えられる反復法である.

$$1. \textit{ Guess } \mathbf{x}_0, \tag{A.2.1}$$

$$2. \textit{ For } k = 0, 1, \dots \textit{ Do:} \tag{A.2.2}$$

$$3. \quad \mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \tag{A.2.3}$$

$$4. \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{r}_k \tag{A.2.4}$$

$$\quad \textit{ If the convergence condition is satisfied, then goto 6} \tag{A.2.5}$$

$$5. \textit{ EndDo} \tag{A.2.6}$$

$$6. \mathbf{x} = \mathbf{x}_{k+1} \tag{A.2.7}$$

但し, m は与えられた任意の自然数で反復回数を表す.

上の式から

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \tag{A.2.8}$$

$$I\mathbf{x}_{k+1} + (A - I)\mathbf{x}_k = \mathbf{b} \tag{A.2.9}$$

が導かれるので, 式 (A.2.9) から Richardson 反復法は収束すればその解は厳密解に一致することがわかる. つまり式 (A.2.1) ~ (A.2.9) で定義される方法 (Richardson 反復法) は確かに反復法の一つであるといえる. また, 式 (A.2.9) から Richardson 反復法とは連立一次方程式 $Ax = b$ の係数行列 A に対して

$$A = I + (A - I)$$

という分離に基づく反復法といえる.

A.2.4 Krylov 部分空間法

この小節では, Krylov 部分空間法を定義し, 前小節で定義した Richardson 反復法と Krylov 部分空間法の関係について述べていく.

定義 A.2.2 (Krylov 部分空間) m を任意の自然数とする. このとき Krylov 部分空間 $K_m(A, \mathbf{r}_0)$ とは以下のように定義される空間のことである.

$$K_m(A, \mathbf{r}_0) = \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0)$$

ただし $\mathbf{r}_0 \cdots$ 初期の残差ベクトル, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$

■

Krylov 部分空間法とは Krylov 部分空間 $K_m(A, \mathbf{r}_0)$ の原点を \mathbf{x}_0 にとった空間 $\mathbf{x}_0 + K_m(A, \mathbf{r}_0)$ から (何らかの意味で) 最適な解を探す方法である.

実はこのように定義した Krylov 部分空間法というものは, 一見全く関係ない Richardson 反復法と大きな関係があることが分かる. それが次の定理である.

定理 A.2.3 (同値な空間) (前処理無し) Richardson 反復法で得られる近似解の列を $\{\mathbf{x}_k\}$, $k = 1, m$ とする. この時, $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_0$ で張られる空間

$$\text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_0)$$

は Krylov 部分空間 $K_m(A, \mathbf{r}_0)$ と等しい.

■

[証明] ● step1

$$\text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1}) \subset \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0)$$

を示す.

まず明らかに, $\forall m \in \mathbb{N}$ に対して

$$\text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_0, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_0) = \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1})$$

が成り立つ. また,

$$I\mathbf{x}_{m+1} + (A - I)\mathbf{x}_m = \mathbf{b}$$

$$I\mathbf{x}_m + (A - I)\mathbf{x}_{m-1} = \mathbf{b}$$

から

$$\mathbf{r}_m = (A - I)\mathbf{r}_{m-1} = (A - I)^2\mathbf{r}_{m-2} = \cdots = (A - I)^m\mathbf{r}_0 \quad (\text{A.2.10})$$

となる. あとは $\mathbf{x}_{m+1} - I\mathbf{x}_m = \mathbf{r}_m$ に注意すれば任意の $\mathbf{x} \in \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1})$ に対して

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \alpha_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) + \alpha_2(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) + \cdots + \alpha_m(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1}) \\ &= \alpha_1(A - I)\mathbf{r}_0 + \alpha_2(A - I)^2\mathbf{r}_0 + \cdots + \alpha_m(A - I)^m\mathbf{r}_0 \\ &\in \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0) \end{aligned}$$

が成り立つ. よって示せた.

● step2

$$\text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1}) \supset \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0)$$

を数学的帰納法によって示す.

(1) $m=1$ のときを示す.

$\forall \mathbf{x} \in K_1(A, \mathbf{r}_0)$ に対して

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \alpha_0\mathbf{r}_0 \\ &= -\alpha_0\mathbf{x}_0 + \alpha_0\mathbf{x}_0 + \alpha_0\mathbf{r}_0 \\ &= -\alpha_0\mathbf{x}_0 + \alpha_0\mathbf{x}_1 \\ &= \alpha_0(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) \end{aligned}$$

よって,

$$\mathbf{x} \in \mathbf{x}_0 + \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)$$

が成立つので

$$K_1(A, \mathbf{r}_0) \subset \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)$$

が示せた. 但し途中で $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}_0$ を用いた.

(2) $m=n$ のときが成り立ったと仮定する. このとき $m=n+1$ のときを示す.
 仮定から

$$\forall \mathbf{x} \in \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{n-1}\mathbf{r}_0) \Rightarrow \mathbf{x} \in \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1})$$

が成り立つと言える. これは言い換えれば

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= (\text{n-一次の } A \text{ の多項式})\mathbf{r}_0 \Rightarrow \\ \mathbf{x} &\in \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1}) \end{aligned} \quad (\text{A.2.11})$$

となるということと同等である.

さて $\forall \mathbf{x} \in \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^n\mathbf{r}_0)$ を取ってくれば, scalar の列 $\{\beta_i\}$ を用いて

$$\mathbf{x} = \beta_0\mathbf{r}_0 + \beta_1A\mathbf{r}_0 + \dots + \beta_{n-1}A^{n-1}\mathbf{r}_0 + \beta_nA^n\mathbf{r}_0$$

と書ける. ここで, $\mathbf{r}_n = (A - I)^n\mathbf{r}_0$ に注意すれば

$$\begin{aligned} A^n\mathbf{r}_0 &= \mathbf{r}_n + (A \text{ の } n\text{-一次の多項式})\mathbf{r}_0 \\ &= \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n + (A \text{ の } n\text{-一次の多項式})\mathbf{r}_0 \end{aligned}$$

と書ける. よって (A.2.11) に注意すれば

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \beta_0\mathbf{r}_0 + \beta_1A\mathbf{r}_0 + \dots + \beta_{n-1}A^{n-1}\mathbf{r}_0 + \beta_n(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) + \beta_n(A \text{ の } n\text{-一次の多項式})\mathbf{r}_0 \\ &= (A \text{ の } n\text{-一次の多項式})\mathbf{r}_0 + \beta_n(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) \\ &\in \text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) \end{aligned}$$

よって

$$\text{span}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m-1}) \supset \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, A^2\mathbf{r}_0, \dots, A^{m-1}\mathbf{r}_0)$$

も示せた.

□

以上から, 実は Richardson 反復法で得られる近似解の列 $\{\mathbf{x}_i\}$ が Krylov 部分空間を形成していることが分かる. また, 以下のようなことも言える.

定理 A.2.4 (同値な集合) 集合 B と C をそれぞれ

$$B = \{ \mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbf{x}_0 + \text{span}(\mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, \dots, A^{n-1}\mathbf{r}_0) \} \quad (\text{A.2.12})$$

$$C = \{ \mathbf{r} = P_k(A)\mathbf{r}_0 \mid P_k(0) = 1, P_k \text{ は } k \text{ 次の多項式} \} \quad (\text{A.2.13})$$

と定める. 但し, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ とする. このとき集合 B と C は一致する.

■

[証明] 集合 B の中の任意の \mathbf{r} を取ってくると

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{b} - A\mathbf{x} \\ &= \mathbf{b} - A(\mathbf{x}_0 + \alpha_0\mathbf{r}_0 + \alpha_1A\mathbf{r}_0 + \dots + \alpha_{n-1}A^{n-1}\mathbf{r}_0) \\ &= \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0 + \alpha_0A\mathbf{r}_0 + \alpha_1A^2\mathbf{r}_0 + \dots + \alpha_{n-1}A^n\mathbf{r}_0 \\ &= (\mathbf{I} + \alpha_0A + \alpha_1A^2 + \dots + \alpha_{n-1}A^n)\mathbf{r}_0 \\ &= P_k(A)\mathbf{r}_0 \end{aligned}$$

となる. この $P_k(A)$ は $P_k(I) = I$ を満たすので $B \subset C$ は示せた. $C \subset B$ も計算を逆にたどっていけば示せるので題意は示せた.

□

定理 A.2.5 (Richardson 反復の多項式) 連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の Richardson 反復法における近似解の列を $\{\mathbf{x}_k\}$ とする. このとき残差 $\mathbf{r}_k = \mathbf{b}_k - A\mathbf{x}_k$ は以下の式を満たす.

$$\mathbf{r}_k = (I - A)^k \mathbf{r}_0$$

■

[証明] 定理 A.2.3 の中の式 A.2.10 で示されている.

□

この小節では, Krylov 部分空間法を定義し, Richardson 反復法と Krylov 部分空間法の関係について述べてきた.

A.2.5 Richardson 反復法の収束性

この小節では Richardson 反復法は実際には収束させるのが難しいことを述べる。

反復法の収束性を考える際に良く使われるのが固有値分布である。

実際、 A を n 次の正則行列とする。このとき、行列 $A - I$ のスペクトル半径 $\rho(A - I)$ が

$$\rho(A - I) < 1 \quad (\text{A.2.14})$$

を満たせば、連立一次方程式 $Ax = b$ に対する Richardson 反復法は収束するということが知られている。

例えば固有値分布が図 A.1 ように与えられていれば Richardson 反復法は収束する。

A.2.6 Richardson 反復法の問題点

Richardson 反復法はアルゴリズムは非常に簡単であり、実装も容易であるが大きな欠点がある。それは係数行列 A が $\rho(I - A) < 1$ という非常に厳しい条件を満たさなければ収束しないという点である。実際、 A に何も操作を行わずにこのような条件を満たすことはほとんどの場合ないと言っても良い。そこでこれほどきつい条件ではない Krylov 部分空間法が必要、もしくは前処理によって固有値分布を改善し、条件を満たすようにすることが必要という流れになる。

例えば Krylov 部分空間法の1つである GMRES 法では A の対称部が正定値（固有値が全て正）であれば収束することが知られている。これは第 3.1 節で示す。

また、係数行列 A に近似行列 Q を用いて前処理というものを施し、 $I - AQ^{-1}A$ のすべての固有値の絶対値が 1 より小さくなるように調節し、係数行列を $Q^{-1}A$ として Richardson 反復法を適用するという方法もある。このような前処理付き Richardson 反復法の代表例として Jacobi 法や Gauss-Seidel 法などが挙げられるが、実際にそれらで用いられる近似行列 Q^{-1} を用いて $\rho(I - Q^{-1}A) < 1$ を満たすのは、係数行列 A がポアソン方程式など簡単な方程式から生じた場合に限られる。

そこで現在の主流の反復法は、前処理を用いて固有値をできるだけ改善しすべての固有値が単位円の中に入っていないなくても、条件数が比較的良ければ良い収束性を示す Krylov 部分空間法を用いるといういわゆる「前処理付き Krylov 部分空間法」といえる。

A.2.7 前処理付き Richardson 反復法

本節では Richardson 反復法に前処理を施した前処理付き Richardson 反復法について説明しその後前処理付き GMRES 法の収束性、更には前処理の具体例として ILU 前処理について説明していく。前処理付き Richardson 反復法とは $Ax = b$ の代わりに適当な前処理行列 M を用いて $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ と変形して (すなわち A を $M^{-1}A$ として) Richardson 反復法を行なうものである。

定義 A.2.6 (前処理付き Richardson 反復法) 前処理付き Richardson 反復法とは以下のアルゴリズムで与えられる反復法である。

1. *Guess* x_0 , (A.2.15)

2. *For* $k = 0, 1, \dots$ *Do*: (A.2.16)

3. $r_k = b - Ax_k$ (A.2.17)

4. $\Delta x_k = M^{-1}r_k$ (A.2.18)

5. $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$ (A.2.19)

If the convergence condition is satisfied, then goto 7 (A.2.20)

6. *EndDo* (A.2.21)

7. $x = x_{k+1}$ (A.2.22)

上の式から

$$x_{k+1} = x_k + M^{-1}b - M^{-1}Ax_k \quad (\text{A.2.23})$$

$$Mx_{k+1} + (A - M)x_k = b \quad (\text{A.2.24})$$

$$(\text{A.2.25})$$

が導かれるので、前処理付き Richardson 反復法も収束すればその解は厳密解に一致することがわかる。このことから、前処理付き Richardson 反復法とは Richardson 反復法で分離に用いた I の代わりに前処理行列 M を用いる方法と言える。

$$A = M + (A - M)$$

M の選び方によって名称や収束性などが大きく異なる。

例えば行列 A を，以下のように対角成分 D ，狭義下三角行列 E ，狭義上三角行列 F に分離して表現したとする。

$$A = D + E + F$$

このとき，前処理行列 M として A の対角成分 D を用いるものを Jacobi 法と呼ぶ。また，前処理行列 M として $D + E$ を用いるものを Gauss-Seidel 法と呼ぶ。すなわち，代表的な反復法である Jacobi 法や Gauss-Seidel 法などは系統としては「前処理付き Richardson 反復法」の一分類と考えることができるのである。

謝辞

本論文を書くにあたり、多くの方々に大変お世話になった。

指導教員である久田俊明先生（東大）には、内容に関してはもちろん、論文の書き方、などあらゆる面でお世話になった。数学を使って社会に貢献したいという筆者に声をかけてくださり、このような素晴らしい分野に足を踏み入れるきっかけを作ってくださいました。在学中5年間の間に本当に多くことを勉強をさせていただいた。長時間に渡る議論に何度も付き合ってくださいました。この場をお借りして深く御礼を申し上げたい。

鷺尾巧様（東大）にはソルバー全般に関する知識を筆者に丁寧に分かりやすく、そして根気強く説明をしていただいた。筆者の知識不足で何度も同じ内容を質問することもあったが、笑顔で説明してくださった。また、本論文の方針、内容、証明などありとあらゆる点において数多くのご指導を頂いた。筆者の修士時代におけるドイツ滞在中から、研究面をはじめとして、生活面、健康面などありとあらゆる面においてお世話になった。この場をお借りして深く御礼を申し上げたい。

渡邊浩志先生（東大）には流体構造連成の基礎式に関するご指導をいただき、コンピュータ関係の知識も数多く教えていただいた。研究室での色々な相談もさせていただいた。この場をお借りして深く御礼を申し上げたい。

陳献先生（九州大）には筆者が修士課程に入学した頃から長期に渡り数多くの知識を教えていただいた。研究室での色々な相談もさせていただいた。この場をお借りして深く御礼を申し上げたい。

また、学位審査をしていただいた渡邊先生、酒井信介先生（東大）、鈴木克幸先生（東大）、中島研吾先生（東大）には、非常にご多忙の中長時間に渡り時間を割いていただいた。また、多くの有益なアドバイスをさせていただいた。この場をお借りして深く御礼を申し上げたい。

澤田有弘様（産業技術総合研究所）には安定化手法などについて数多くの助言を頂いた。また、筆者が修士1年の頃から、研究面において数多くのご指導を頂いた。岡田純一様には研究面において数多くのご助言を頂いた。お二人とも、筆者が修士1年に入学した時から研究室にいらっしゃり、あらゆる面においてお世話になった。この場をお借りして深く御礼を申し上げたい。

梅谷信行様（東大）には Newmark β 法など、時間発展問題の解法について数多くの助言を頂いた。また安定化や離散化など、筆者が専門としない分野の助言も数多く頂

いた。忙しい申色々と議論に付き合ってもらった。この場をお借りして深く御礼を申し上げますたい。

久田研の秘書である喜田徳代様（東大）には事務的な面で長期に渡り非常にお世話になった。この場をお借りして深く御礼を申し上げますたい。久田研究室の院生の方々にも、様々な面でお世話になった。この場をお借りして深く御礼を申し上げますたい。

また、長期にわたる学生生活を支えてくれた母と家族には本当に感謝している。深く御礼を申し上げますたい。

最後に、本論文の執筆や就職活動などで筆者がくじけそうになった時に、いつも笑顔で励まし勇気付けてくれた末高麻美さんには言葉では言い表せないほど感謝をしている。何度も相談にのってもらい、的確なアドバイスをくれた。深く深く御礼を申し上げますたい。

文献

- [1] T. Washio, et.al., Robust and Efficient Preconditioners based on incomplete LU factorization for Fluid-Structure Interaction Problems, Computer Methods in Applied Mechanics Engineering, 2004
- [2] K. Suzuki, Study of parallel solution method of linear systems generated by strongly coupled FSI analysis, Master thesis in Japanese, Graduate School of Frontier Science, University of Tokyo, 2004
- [3] K. Suzuki, T. Washio and T. Hisada, An Optimization of Overlapped Preconditioners for Mixed Finite Element Problems, 日本計算工学会計算工学講演会論文集, Vol.10, pp.227-230, 2005
- [4] H. Watanabe, S. Sugiura, H. Kafuku and T. Hisada , Multi-physics Simulation of left ventricular filling dynamics using fluid-structure interaction finite element method, Biophysical Journal, Vol. 87, pp.2074-2085, 2004
- [5] 久田俊明, 非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎, 丸善, 1992
- [6] 久田俊明, 野口裕久, 非線形有限要素法の基礎と応用, 丸善, 1995
- [7] 澤田有弘, 流体・構造連成問題における有限要素と安定化手法の相互作用に関する研究, 修士論文, 東京大学, 2003
- [8] O. tatebe, The Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method Sixth, Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, volume CP 3224, NASA, pp.621-634, 1993

- [9] S. Zeng and P. Wesseling, Multigrid Solution Of The Incompressible Navier-Stokes Equations in General Coordinates, SIAM Journal on Numerical Analysis, 1994.
- [10] S. Zeng and P. Wesseling, Numerical solution of the incompressible Navier-Stokes equations by Krylov subspace and multigrid methods Adv. Comp. Math. 4, pp27-49, 1995
- [11] S. Zeng and P. Wesseling, An ILU smoother for the incompressible Navier-Stokes equations in general coordinates Report 92-91, Faculty of Technical Mathematics and Informatics, Delft University of Technology, 1992
- [12] P. Wesseling, A. Segal, J.J.I.M. van Kan, C.W. Oosterlee and C.G.M. Kassels Finite volume discretization of the incompressible Navier-Stokes equations in general coordinates on staggered grids Comp. Fluid Dyn. Journal 1, pp.27-33, 1992
- [13] C.W Oosterlee and P. Wesseling, Multigrid schemes for time-dependent incompressible Navier-Stokes equations Impact of Comp. in Sc. and Eng. 5, pp.153-175 1993
- [14] Howard C. Elman, Multigrid and Krylov Subspace Methods for the Discrete Stokes Equations Published in International Journal for Numerical Methods in Fluids 22, pp.755-770, 1996.
- [15] G. Wittum, Multi-Grid Methods for Stokes and Navier-Stokes Equations, Numer. Math. 54, pp.543-563, 1989
- [16] M. Griebel, T. Neunhoeffler and H. Regler, Algebraic multigrid methods for the solution of the Navier-Stokes equations in complicated geometries, International journal for numerical methods in fluids, vol. 26, no3, pp.281-301, 1998
- [17] D. Braess and R. Sarazin, An efficient smoother for the Stokes problem, Applied Numerical Mathematics 23, pp.3-19, 1997

- [18] A. Janka, Smoothed aggregation multigrid for a Stokes problem, accepted for Computing and Visualization in Science, Springer, 2006
- [19] Brooks, A. N. and Hughes, T. J. R., Streamline upwind/Petrov Galerkin formulation for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 32, pp.199-259, 1982
- [20] Tezduyar, T. E., Stabilized finite element formulation for incompressible flow computations, Advance in Applied Mechanics, Vol. 28, pp. 1-44, 1991
- [21] B. Li, C. A. Fleming, Three-dimensional hydrodynamic model for free surface flow, Journal, Hydraulic, Research Vol.41, No.4, pp.367-377, 2003
- [22] A. Sameh and V. Sarin, An Efficient Iterative Method for the Generalized Stokes Problem, Proceedings of the fourth copper mountain conference on iterative methods, 1996
- [23] U. Trottenberg, C. W. Oosterlee, A. Schuller, Multigrid, academic press, 2001
- [24] T. Sawada, Study of the Overlaying ALE Mesh Computations of Fluid-Structure Interaction Problems, Ph.D. Thesis in Japanese, Graduate School of Frontier Science, The University of Tokyo, 2006
- [25] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, PWS Publishing Company, 1996
- [26] H. Kuroda, T. Katagiri and Y. Kanada, Performance of Automatically Tuned Parallel GMRES(m) Method on Distributed Memory Machines, Proceedings of VecPar2000, pp.251-264, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Portugal, 2000
- [27] S. O. Wille , O. Staff and A. F. D. Loula, Parallel ILU preconditioning, a priori pivoting and segregation of variables for iterative solution of the mixed finite element formulation of the Navier-Stokes equations, International Journal for Numerical Methods in Fluids. 47, pp.977-996, 2003

- [28] A. Klawonn and L. F. Pavarino, Overlapping Schwarz methods for mixed linear elasticity and Stokes problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 165, pp.233-245, 1998
- [29] Peter S. P., 秋葉博訳, MPI 並列プログラミング, 倍風館, 2001
- [30] 高橋大輔, 数値計算 (理工系の基礎数学), 岩波書店, 1996
- [31] Tezduyar TE, Mittal S, Ray SE and Shih R., Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, vol 95, pp221-242, 1992
- [32] 川上 浩樹, ALE 有限要素法におけるメッシュ制御に関する研究, 博士論文, 東京大学, 1999
- [33] Huerta, A. and Liu, W. K., Viscous flow with large free surface motion, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 69, pp.277-324, 1988
- [34] Huerta, A. and Liu, W. K., ALE formulation for large boundary motion, *10th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology*, Vol. B, pp.335-346, 1989
- [35] Ray, S. E., Wren, G. P. and Tezduyar, T. E., Parallel implementations of a finite element formulation for fluid-structure interactions in interior flows" *Parallel Computing*, Vol, 23 pp.1279-1292, Japan, 1997
- [36] Ray, S. E., Wren, G. P. and Tezduyar, T. E., Parallel three-dimensional implementation of fluid-structure interaction in a thin-walled container *Fourth Japan-US Symposium on the Finite Element Methods in Large-Scale Computational Fluid Dynamics Proceedings*, pp.101-104, Japan, 1998
- [37] 張 群, 構造座屈と領域大変動を伴う構造・流体連成問題の ALE 有限要素解析, 博士論文, 東京大学, 1999
- [38] P. Wesseling and C.W. Oosterlee, Geometric multigrid with applications to computational fluid dynamics, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 128, pp.311-334, 2001

- [39] E. Brakkee, P. Wesseling and C.G.M. Kassels, Schwarz domain decomposition for the incompressible Navier-Stokes equations in general coordinates, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 32, pp.141-174, 2000
- [40] C. Moulinec and P. Wesseling, Discretization of the Navier-Stokes equations on non-smooth grids using auxiliary points, *Computation and Visualization in Science* 2, pp.69-73, 1999
- [41] D.R. van der Heul, C. Vuik and P. Wesseling, A staggered scheme for hyperbolic conservation laws applied to unsteady sheet cavitation, *Computation and Visualization in Science* 2, pp.63-68, 1999
- [42] E. Brakkee, C. Vuik and P. Wesseling, Domain decomposition for the incompressible Navier-Stokes equations: solving subdomain problems accurately and inaccurately, *Int. J. for Numer. Meth. in Fluids* 26, pp.1217-1238, 1998
- [43] C. Vuik, R.R.P. van Nooyen and P. Wesseling, Parallelism in ILU-preconditioned GMRES, *Parallel Computing* 24, pp.1927-1946, 1998