33

ポアソン方程式の離散ノイマン問題に対する反復解法について

藤田直行、高橋匡康、田村敦宏（航技研）

On Iterative Solutions of the Discrete Neumann Problem for Poisson's Equation

Naoyuki Fujita, Tadayasu Takahashi, Atsuhiro Tamura
National Aerospace Laboratory

This paper is concerned with iterative solutions and iteration invariants of the discrete Neumann probelm for Poisson's equation. In order to ensure convergence of iterative solutions theoretically, the so-called discrete divergence theorem is required for difference equations. Using the fact that iteration invariants exist, it is shown that the sequence of iterates converge to the unique solution which is determined by a given initial value. Numerical results on iteration invariants suggest that the choice of unknowns and the pinning down procedure may influence convergence.

1 はじめに

電子計算機ハードウェアの急速な発達により、様々な分野で数値計算が行われるようになった。流体力学の分野も例外ではない。そのひとつとして、偏微分方程式で表された支配方程式を差分方程式で近似し、その解を反復解法により求めるという方法がある。

非圧縮性流れや格子生成の計算に現れるポアソン方程式は、ノイマン問題の場合、ディレクレ問題等と異なり、差分近似によって得られる係数行列が正則でなくなるため、反復計算上、収束性が悪く計算時間がかかる、収束の精度が悪い、等の問題点を抱えている。そこで、本稿では、ポアソン方程式のノイマン問題を対象に、まず、連続系の方程式(偏微分方程式)と離散系の方程式(差分方程式)の適合性を再確認する中で、どの様な差分近似を採用するかを決める。つづいて、その結果出来た差分方程式を反復計算により解く時に、(1)未知数の選択　(2)反復計算を成功させるための工夫(基準値の設定による値の引き戻し)[2]が、収束性にどの様な影響を及ぼすかを、Jacobi法等各反復法に固有な反復不変量に着目し考察する。

2 ポアソン方程式のノイマン問題

まず、ノイマン問題の性質について見ておく。一般に、ポアソン方程式のノイマン問題は、次の形で表わされる。

$$\Delta u=f \tag{1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}=g \tag{2}$$

これらの式とは別に、一般に領域Dとそれを囲む境界Sについて、次の式が成立する。

$$\int_D \Delta u \, dD=\int_S \frac{\partial u}{\partial n} dS \tag{3}$$

ここで、式(1)、(2)をそれぞれの定義域D、Sで積分すると

$$\int_D \Delta u \, dD=\int_D f \, dD \tag{4}$$

$$\int_S \frac{\partial u}{\partial n} dS=\int_S g \, dS \tag{5}$$

となる。すると、式(3)～(5)には、次の拘束条件が成立していることがわかる。

$$\int_D f \, dD=\int_S g \, dS \tag{6}$$

この拘束条件式(6)が存在することが、ノイマン問題に特有な性質を与えている。

3 差分近似

式(1)、(2)を差分近似により離散化することを考える。正方形領域の2次元問題を、間隔hの等間隔メッシュを切って解く場合を例に考える。

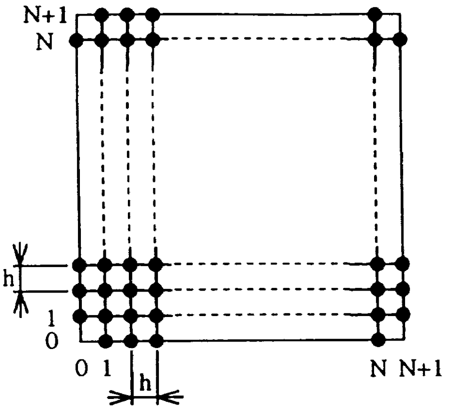


図1　2次元ノイマン問題

差分近似により得られる離散系の方程式は、多元連立一次方程式

$$A\,u = f \tag{7}$$

の形に表わすことが出来る。

連続系の方程式(1)にある作用素Δの性質に対応する性質を、離散系方程式にも持たせる様な差分近似を採用する。式(7)の行列Aが、対称・半正定値行列になるように差分を作る。これには例えば、式(1)を2次の中心差分で、式(2)を1次の片側差分で近似すればよい(式(8)、(9))。

$$\begin{aligned} & a_{i+1/2,j}(u_{i+1,j}-u_{i,j}) - a_{i-1/2,j}(u_{i,j}-u_{i-1,j}) \\ & + b_{i,j+1/2}(u_{i,j+1}-u_{i,j}) - b_{i,j-1/2}(u_{i,j}-u_{i,j-1}) = f_{i,j} \\ & \qquad (i,j=1,\cdots,N) \end{aligned} \tag{8}$$

$$\left(\text{ただし、} \; a_{i+1/2,j} = \frac{1}{h^2} \quad b_{i,j+1/2} = \frac{1}{h^2} \right)$$

$$\begin{cases} c_{0,j}(u_{0,j}-u_{1,j}) = g_{0,j} \\ c_{N+1,j}(u_{N+1,j}-u_{N,j}) = g_{N+1,j} \\ \qquad (j=1,\cdots,N) \\ c_{i,0}(u_{i,0}-u_{i,1}) = g_{i,0} \\ c_{i,N+1}(u_{i,N+1}-u_{i,N}) = g_{i,N+1} \\ \qquad (i=1,\cdots,N) \end{cases} \tag{9}$$

$$\left(\text{ただし、} \; c_{0,j} = c_{N+1,j} = c_{i,0} = c_{i,N+1} = \frac{1}{h} \right)$$

ここで、式を行列形式で表わすため、図1の点を次のようにグループ化しておく(図2)。

u_I:　内点

u_B:　境界点

u_C:　内点の最外部の点とu_B

また、各グループの点の総数n_I,n_B,n_Cをそれぞれ

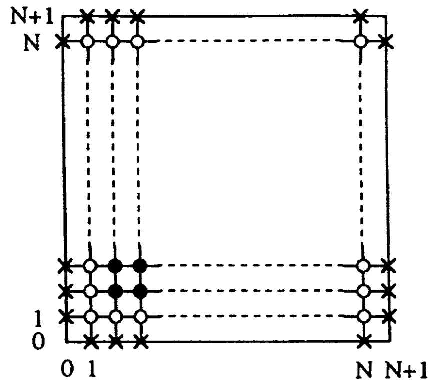
$n_I = N^2$

$n_B = 4N$

$n_C = 8N-4$

$(n = n_I + n_B = N^2 + 4N)$

とする。



u_I: ●+○　　$(n_I = N^2)$

u_B: ×　　$(n_B = 4N)$

u_C: ○+×　　$(n_C = 8N-4)$

u: ●+○+×　　$(n = N^2+4N)$

図2　点のグループ化

これらを用い、式(8)、(9)を行列形式で表わしておく。

$$A\,u = f_I \tag{8'}$$

$$\left(\text{ただし、} \; A: n_I \times n \quad u = \begin{bmatrix} u_I \\ — \\ u_B \end{bmatrix} \right)$$

$$B\,u_C = g_C \tag{9'}$$

$$(\text{ただし、} B: n_B \times n_C)$$

ここで、式(8)、(9)をi, j = 1, …, Nについて、計量を掛けて、辺々足し合わせると、

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j=1}^{N} \{a_{i+1/2,j}(u_{i+1,j}-u_{i,j}) - a_{i-1/2,j}(u_{i,j}-u_{i-1,j}) \\ & \quad + b_{i,j+1/2}(u_{i,j+1}-u_{i,j}) - b_{i,j-1/2}(u_{i,j}-u_{i,j-1})\}h^2 \\ & = \sum_{i,j=1}^{N} f_{i,j}h^2 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N} c_{0,j}(u_{0,j}-u_{1,j})h + \sum_{j=1}^{N} c_{N+1,j}(u_{N+1,j}-u_{N,j})h \\ & + \sum_{i=1}^{N} c_{i,0}(u_{i,0}-u_{i,1})h + \sum_{i=1}^{N} c_{i,N+1}(u_{i,N+1}-u_{i,N})h \\ & = \sum_{j=1}^{N} g_{0,j}h + \sum_{j=1}^{N} g_{N+1,j}h \\ & + \sum_{i=1}^{N} g_{i,0}h + \sum_{i=1}^{N} g_{i,N+1}h \end{aligned} \tag{11}$$

となる。式(10)、(11)を整理すると、

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N} \{-a_{1-1/2,j}(u_{1,j}-u_{0,j}) + a_{N+1/2,j}(u_{N+1,j}-u_{N,j})\}h^2 \\ & + \sum_{i=1}^{N} \{-b_{i,1-1/2}(u_{i,1}-u_{i,0}) + b_{i,N+1/2}(u_{i,N+1}-u_{i,N})\}h^2 \\ & = \sum_{i,j=1}^{N} f_{i,j}h^2 \end{aligned} \tag{10'}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N} \{-c_{0,j}(u_{1,j}-u_{0,j}) + c_{N+1,j}(u_{N+1,j}-u_{N,j})\}h \\ & + \sum_{i=1}^{N} \{-c_{i,0}(u_{i,1}-u_{i,0}) + c_{i,N+1}(u_{i,N+1}-u_{i,N})\}h \\ & = \sum_{j=1}^{N} (g_{0,j}+g_{N+1,j})h + \sum_{i=1}^{N} (g_{i,0}+g_{i,N+1})h \end{aligned} \tag{11'}$$

となる。ここで、

$$a_{1-1/2,j} = a_{N+1/2,j} = \frac{1}{h^2}$$
$$b_{i,1-1/2} = b_{i,N+1/2} = \frac{1}{h^2}$$
$$c_{0,j} = c_{N+1,j} = \frac{1}{h}$$
$$c_{i,0} = c_{i,N+1} = \frac{1}{h}$$

であるから、式(10)、(11)、(10)'、(11)'から

$$\sum_{i,j=1}^{N} \{a_{i+1/2,j}(u_{i+1,j} - u_{i,j}) - a_{i-1/2,j}(u_{i,j} - u_{i-1,j}) + b_{i,j+1/2}(u_{i,j+1} - u_{i,j}) - b_{i,j-1/2}(u_{i,j} - u_{i,j-1})\}h^2$$
$$= \sum_{j=1}^{N} \{c_{0,j}(u_{0,j} - u_{1,j}) + c_{N+1,j}(u_{N+1,j} - u_{N,j})\}h + \sum_{i=1}^{N} \{c_{i,0}(u_{i,0} - u_{i,1}) + c_{i,N+1}(u_{i,N+1} - u_{i,N})\}h \quad (12)$$

が、成立していることがわかる。これは、離散系における、連続系の式(3)に対応する式である。すると、式(10)、(11)、(12)の間に

$$\sum_{i,j=1}^{N} f_{i,j}h^2 = \sum_{j=1}^{N} g_{0,j}h + \sum_{j=1}^{N} g_{N+1,j}h + \sum_{i=1}^{N} g_{i,0}h + \sum_{i=1}^{N} g_{i,N+1}h \quad (13)$$

なる拘束条件式が存在することがわかる。これは、連続系の式(6)に対応する。

上記の方法とは異なり、非対称な差分を作る方法も見られるが、ここでは、対称な差分を作り、連続系の式(3)に対応する離散系の式(12)が成立することを優先する。また、4で述べるが、この様な差分を作ると、反復法の収束に関する数学的結果を用いることができるので、ここでは、対称な差分を扱う。

表1　連続系と離散系の対応

連続系	離散系
$\Delta u = f$ (ポアソン方程式)	$A u = f_I$
$\frac{\partial u}{\partial n} = g$ (ノイマン境界条件)	$B u_C = g_C$
$\int_D \Delta u \, dD = \int_S \frac{\partial u}{\partial u} dS$ (発散定理)	$(A u h^2, \mathbf{1}) = (B u_C h, \mathbf{1})$
$\int_D f \, dD = \int_S g \, dS$ (拘束条件)	$(f_I h^2, \mathbf{1}) = (g h, \mathbf{1})$

(ただし、$\mathbf{1}$は成分が全て1のベクトル)

差分近似により計算を行う場合、式(13)を反復計算の途中で満足させるため、ソース項$f_{i,j}$を、適宜調節しながら計算を進めることが行われる[1]。

しかし、式(13)は、式(10)～(12)より導き出される拘束式であり、式(10)～(12)、特に式(12)が成立しているか確認せずに式(13)を単体で成立させても意味が無い。

4　反復手続きの定式化

扱う差分方程式が決まったので、次に、反復計算を行う際に、(1)未知数の選択　(2)反復計算を成功させるための工夫(基準値の設定による値の引き戻し)が、収束性にどの様な影響を及ぼすか考える。そこで、まず始めにJacobi法等代表的な反復手順の定式化を行っておく。

先にも述べたが、差分方程式(8)、(9)は、多元連立1次方程式

$$A u = f$$

の形に書き表すことができる。ここで、行列Aを

$A = D - L - U$　　D：対角行列
　　　　　　　　　L：下三角行列
　　　　　　　　　U：上三角行列

の様に分ける。すると、Jacobi法は、次のように表わすことができる。

$$D u^{m+1} = (L + U) u^m + f \quad (14)$$

(ただし、u^mはm回反復後のuの値)

同様にして、Gauss-Seidel法は、

$$(D - L) u^{m+1} = U u^m + f \quad (15)$$

となる。表2に代表的な反復法の手順をまとめておく。

表2　代表的な反復法の反復手順

反　復　法	反　復　手　順
Jacobi	$D u^{m+1} = (L + U) u^m + f$
Relaxed Jacobi	$D u^{m+1} = [(1-\omega) D + \omega (L + U)] u^m + \omega f$
Gauss-Seidel	$(D - L) u^{m+1} = U u^m + f$
SOR	$(D - \omega L) u^{m+1} = [(1-\omega) D + \omega U] u^m + \omega f$

ここで示した反復法はJacobi法以外、3で述べた行列Aに対する条件(対称・半正定値行列)を満たすとき、収束が数学的に証明されている[2),3),4)]。

表3 代表的反復法の収束

	singular (Neumann)	non-singular (Dirichlet)
Jacobi	×	○
Relaxed Jacobi	○	○
Gauss-Seidel	○	○
SOR	○	○

(○:収束する、×:収束しない)

5 反復不変量

Jacobi法を例に考える。表2より、

$$Du^{m+1}=(L+U)u^m+f$$

$A=D-L-U$であるので、

$$Du^{m+1}=(D-A)u^m+f$$
$$Du^{m+1}=Du^m-Au^m+f$$

ここで、方程式を辺々足し合わせるために、成分が全て1のベクトル$\mathbf{1}$との内積をとる。

$$(Du^{m+1},\mathbf{1})=(Du^m,\mathbf{1})-(Au^m,\mathbf{1})+(f,\mathbf{1}) \quad (16)$$

ここで、式(10)より、

$$(Au^{m+1},h^2\mathbf{1})=(f_I,h^2\mathbf{1})$$
$$\therefore(Au^{m+1},\mathbf{1})=(f_I,\mathbf{1})$$

よって、式(16)は、

$$(Du^{m+1},\mathbf{1})=(Du^m,\mathbf{1}) \quad (17)$$

となり、$(Du^m,\mathbf{1})$という量が、反復計算中で不変であることが分かる。この量を反復不変量(Iteration Invariants)と呼ぶことにする。ここで、式(10)を満たすような初期値u^0を設定しておく必要がある。

表4に、代表的な反復法の反復不変量を示す。

表4 代表的な反復法の反復不変量

反 復 法	反復不変量
Jacobi	$(Du,\mathbb{1})$
Relaxed Jacobi	$(Du,\mathbb{1})$
Gauss-Seidel	$((D-L)u,\mathbb{1})$
SOR	$((D-\omega L)u,\mathbb{1})$

ノイマン問題の場合、u^∞が解の時、$u^\infty+C$(C:任意定数)も解である。ここで求めた反復不変量を用いると、初期値u^0によりこの任意定数Cが決定され、反復計算での収束解が一意に決定されることが導出される。

反復の初期値をu^0とした時、解u^∞が求められたとする。この時、

$$(Du^\infty,\mathbf{1})=(Du^0,\mathbf{1}) \quad (18)$$

が、成立する。ここで、同じ初期値で$u^\infty+C$にも収束すると仮定すると、

$$(D(u^\infty+C),\mathbf{1})=(Du^0,\mathbf{1})$$
$$\therefore(Du^\infty,\mathbf{1})+(DC,\mathbf{1})=(Du^0,\mathbf{1}) \quad (19)$$

が成立することになる。式(18)、(19)より、

$$(DC,\mathbf{1})=0 \quad (20)$$

となる。Dは0ではないので、

$$C=0 \quad (21)$$

となる。よって、初期値u^0から求められる解はu^∞唯一つである。

ここで、未知数の選択が、反復計算の収束性に与える影響を、反復不変量の観点から見てみる。

式(8)'、(9)'

$$Au=f_I \qquad ただし、u=\begin{bmatrix} u_I \\ u_B \end{bmatrix}$$

$$Bu_C=g_C$$

を数値計算するときに、この2式から境界点u_Bを消去した式、

$$A_I u_I=f_I \quad (22)$$

を計算した時と、u_Bを残したままの式

$$A_A\begin{bmatrix} u_I \\ \text{—} \\ u_B \end{bmatrix}=f \quad (23)$$

を計算した時に、収束性にどの様な影響が出るのか反復不変量を計算し、確かめた。計算結果は、7に他の計算結果とともに示す。式(22)のA_Iと、式(23)のA_Aとは違う行列であるので、数値的に式(17)を満たし易い方を選ぶべきである。

6 基準値の設定

反復計算を行う時、反復値が発散してしまわないため、または、収束解をある一定の値の近傍に得たい等の理由で、計算領域中のある点を基準点として設定し、反復計算の度に、基準点がある一定値になるように計算領域の値全体を引き戻すという手法がとられることがある。この手順を表わすと次の様になる。

反復手順を

$$u^{m+1}=T\hat{u}^m+g \quad (24)$$

と表わす。ここで、Tは反復行列、u^{m+1}はm+1回目の反復値、$\hat{u}$はuに引き戻しを行った値である。これを、

$$u_{1,1}=0 \tag{25}$$

となるように、

$$\delta^{m+1}=-u_{1,1}^{m+1} \tag{26}$$

だけ引き戻す。ここで、δ^{m+1}はm+1回目の反復における引き戻し量である。

$$\hat{u}^{m+1}=u^{m+1}+\delta^{m+1} \quad (\hat{u}^{0}=u^{0}) \tag{27}$$

これを、$\hat{u}$のみで表わすと、

$$\hat{u}^{m+1}=T\hat{u}^{m}+\delta^{m+1}+g \tag{28}$$

となる。

式(28)は、値の引き戻しを行わない反復手順、

$$u^{m+1}=Tu^{m}+g \tag{29}$$

と比較すると、δ^{m+1}という項が加わった手順になっている。この時、$\hat{u}^{m}$が方程式Au=fの解u^{∞}に収束するための必要十分条件は、

$$\left|\sum_{m=1}^{\infty}\delta^{m}\right|<\infty \tag{30}$$

である。したがって、値の引き戻しを行うと無条件には収束しないことがわかる。この引き戻し操作が、反復計算の収束性にどう影響するか、反復不変量を計算して確かめた結果を7に示す。

7 計算例

前述した(1)未知数の選択 (2)反復計算を成功させるための工夫(基準値の設定による値の引き戻し)が、収束性にどの様な影響を及ぼすかを図1の例について、計算した結果を示す。正方形の領域を32×32に等間隔分割した格子を用い離散化した。

7・1 未知数の選択

5の式(22)、(23)の係数行列A_IとA_Aは、それぞれ次の様な形をしている。

$$A_I=\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} D_1 & -I & & & 0 \\ -I & D_2 & -I & & \\ & -I & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & D_2 & -I \\ 0 & & & -I & D_1 \end{bmatrix}$$

ただし、

$$D_1=\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 3 & -1 & & \\ & -1 & 3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{bmatrix},\quad D_2=\begin{bmatrix} 3 & -1 & & & 0 \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

$$I=\begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

$$A_A=\frac{1}{h^2}\left[\begin{array}{ccccc|c} D_3 & -I & & & 0 & \\ -I & D_3 & -I & & & \\ & -I & \ddots & \ddots & & E \\ & & \ddots & D_3 & -I & \\ 0 & & & -I & D_3 & \\ \hline & & E^T & & & I \end{array}\right]$$

ただし、

$$D_3=\begin{bmatrix} 4 & -1 & & & 0 \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 4 & -1 \\ 0 & & & -1 & 4 \end{bmatrix},\quad I=\begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

E：成分が0、-1からなる行列

すると、A_IとA_Aの対角成分は次の様になる。

$$\mathrm{diag}A_I=\frac{1}{h^2}(2,3,\cdots,3,2,3,4,\cdots,4,3,\cdots\cdots,2,3,\cdots,3,2)$$

$$\mathrm{diag}A\ =\frac{1}{h^2}(4,\cdots\cdots,4)$$

この違いが、反復計算にどの様に影響するのか、図3に示す。(a)は、残差$\|A_I u_I - f_I\|$(または、$\|A_A[u_I \mid u_B]^T - f\|$)、(b)は反復不変量である。

これらを見ると、この例題の場合、境界点を未知数にするかどうかは、反復計算の収束性に大きくは影響しないことがわかる。しかし、一般的には、未知数の選択が収束性に影響を及ぼすものと思われる。

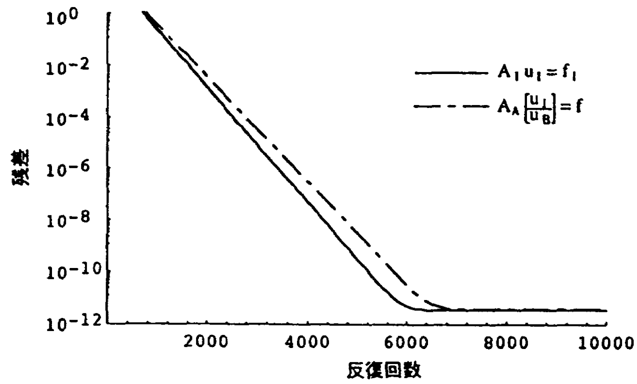


図3(a) 変数の選択による収束性への影響(残差)

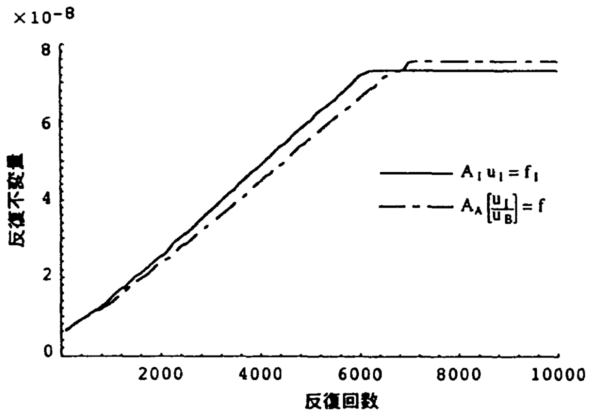


図3(b)　変数の選択による収束性へ(反復不変量)

7・2　基準値の設定

6で述べた、反復手順(28)を行うと、収束性にどの様な影響を及ぼすか計算した結果を、図4に示す。格子点(1,1)の値を常に0になるように、反復計算の度に、計算空間の値全体を引き戻した。

これより、図4(b)から、引き戻しを行った場合、反復不変量が保存しないことがわかり、図4(a)から行わなかった場合と比較して、残差で1桁程度収束精度が悪いことがわかる。

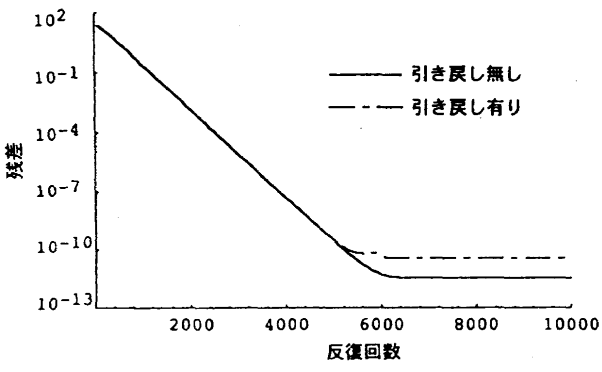


図4(a)　値の引き戻しによる収束性への影響(残差)

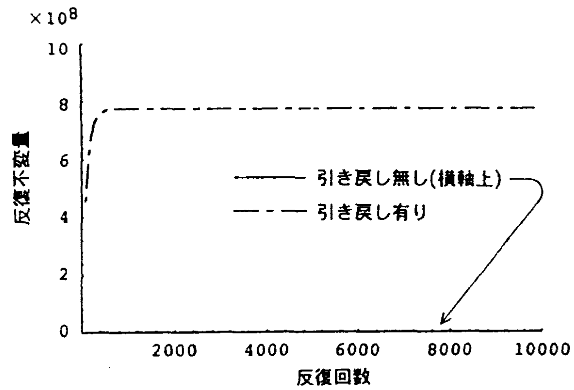


図4(b)　値の引き戻しによる収束性への影響(反復不変量)

8　まとめ

ポアソン方程式のノイマン問題について、連続系と離散系の方程式の適合性を確認し、反復計算の収束性に関する数学的結果を適用できる差分法について考えた。その後、反復不変量という概念を導き、反復計算の収束解は初期値を定めると、唯一つであることを示した。また、(1)未知数の選択　(2)反復計算を成功させるための工夫(基準値の設定による値の引き戻し)という反復計算における操作が、収束性にどの様に影響しているかを、2次元の問題を例に確かめた。その結果、この例においては、未知数の選択は収束性に大きく影響を与えないが、基準値の設定に関しては、残差で1桁程度の収束精度の悪化が確認された。

今後の課題として、不等間隔格子・一般座標系等の場合についてこの議論を適用した場合の考察を行いたいと考えている。また、反復不変量について、本来、増減なく一定でなければならないものであるにもかかわらず、計算例では、一定方向に値が増加している。この原因は何であるのか、これから考察して行きたいと思う。

参考文献

(1)W.R.Briley,"Numerical Method for Predicting Three-Dimensional Steady Viscous Flow in Ducts", J.Comp.Phy.14,8-28(1974)

(2)G.E.Forsythe,W.R.Wasow,"Finite Difference Methods for Partial Differencial Equations",1960

(3)J.Douglas,Jr.,C.M.Pearcy, "On Convergence of Alternating Direction Procedures in the Presence of Singular Operators", Numerische Mathematik 5, 175-184,1963

(4)H.B.Keller,"On the Solution of Singular and Semidefinite Linear Systems by Iteration",J.SIAM Numer.Anal.Ser.B,Vol.2,No.2, 1965