

構造メッシュ差分法における任意渦度の流れ場の生成

¹⁾ 名古屋靖一郎, ²⁾ 高橋匡康, ²⁾ 相曾秀昭, ²⁾ 岸恭子

1) (株) アーク情報システム, 2) 宇宙航空研究開発機構

Generation of Flow Field with Arbitrarily Given Vorticity for Finite Difference Method on Structured Mesh

by

¹⁾Seiichiro Naoyga, ²⁾Tadayasu Takahashi, ²⁾Hideaki Aiso, and ²⁾Kyoko Kishi

1) Ark Information Systems, Inc. 2) Japan Aerospace Exploration Agency

ABSTRACT

We propose a technique to generate flow field with arbitrarily given vorticity for finite difference method on the staggered structured mesh, and it is based on the conjugate gradient method defined on the structured mesh naturally. Since the linear system of rotation operator is degenerate, the matrix is ill-condition. For the pre-condition of conjugate gradient method, the Balancing Domain Decomposition method is employed. Since the subspace of the kernel of rotation, i.e. balancing space, is known as the scalar potential velocity field, we solve the discretized Poisson-like equation with the Shur complement to eliminate the degenerate components.

1. はじめに

構造メッシュ上において、スタガード流速場の差分法を用い、任意の渦度場を与えた場合の流れ場を生成する手法について述べる。つまり、ベクトルポテンシャルを求めることに想定するが、構造メッシュ上の共役勾配法を定義し、自然な計算アルゴリズムを提案する。共役勾配法は行列ソルバーとして知られているが、ここでは、その概念を抽象化した有限次元 Hilbert 空間上の手法へと拡張し、構造メッシュ差分法に沿った有限次元 Hilbert 空間を定義することにより、任意渦度場を持つ流れ場を計算する。

本講演で提案する回転作用素を近似する差分法は、FDTD 法 (cf. [1, 2]) と同様のもので、スタガードメッシュ差分法であり、双対メッシュ上に離散化される。有限体積法から自然に決まる内積を定義し、双対メッシュに沿って、2つの有限次元 Hilbert 空間を導入し、その Hilbert 空間上での共役勾配法を適用することで、任意渦度流れ場再現問題を解く。

回転作用素から導かれる連立一次方程式の係数行列には退化があり、大規模問題においては、悪条件になり、前処理が必要である。領域分割法を適用し、小規模の問題に帰着させ、Neumann-Neumann 前処理における不能問題を不定問題に帰着させる BDD 法 (cf. [4]) を適用する。BDD 法においては、退化モードが既知であることが必要であるが、部分空間の性質により、スカラーポテンシャルである。

2. 有限次元 Hilbert 空間上の共役勾配法

有限次元 Hilbert 空間 H を考え、内積を $(\cdot, \cdot)_H$ と書くことにする。その上での線形作用素 $A: H \rightarrow H$ を考える。ただし、定義域 $D(A) = H$ とし、対称性：

$$(Au, v)_H = (u, Av)_H, \quad \forall u, v \in H \quad (1)$$

と、半正定値性：

$$(Av, v)_H \geq 0, \quad \forall v \in H \quad (2)$$

を満足するものとする。 A の値域の集合を $\text{Im}(A)$ と書き、核を $\text{Ker}(A) \equiv \{u \in H : Au = 0\}$ と書くことにする。このとき、 H が有限次元なので、(1), (2) が成立するとき、

$b \in \text{Im}(A)$ ととり、未知変数 $x \in H$ についての問題に共役勾配法 (CG=Conjugate Gradient 法) が適用できる。

$$Ax = b \quad (3)$$

ここで、(1), (2) が成立するような枠組ができれば、その抽象化された有限次元 Hilbert 空間上での CG 法が適用できることが、本論文の基本的なアイデアである。

特に、2つの Hilbert 空間 H, V があり、線形作用素 $R: H \rightarrow V$ が定義されていて、次式を満足する共役作用素 $R^*: V \rightarrow H$ が存在するときを考える。

$$(Ru, v)_V = (u, R^*v)_H, \quad \forall u \in H, \forall v \in V. \quad (4)$$

このとき、作用素 $R^*R: H \rightarrow H$ を考えると、自然に、(1), (2) 式が成立する。そこで、(4) 式が成立するような枠組みを構成することを考える。

3. 無計量差分法

Bossavit (cf. [1, 3]) は、チェーンと微分形式を用いて、勾配作用素、回転作用素、発散作用素の離散化式として、無計量差分法を定式化している。ここで、無計量の意味は、メッシュ幅による割り算のない形の差分法である。

基本的な原理は、次の Stokes の定理である。

$$\int_{\Omega} d\omega = \int_{\partial\Omega} \omega \quad (5)$$

と書ける。 d は外微分であり、 ∂ は境界作用素である。積分量を考え、空間をチェーンと呼ばれる幾何学的対象に分解することで、微分作用素を近似する。その際、重ならない複数の積分領域上の積分値は、各積分領域上の積分値の和で書けるといえるが基本定理である。具体例を示そう。

(5) 式は、積分領域 Ω の次元によって、表現が変わる。 Ω が 1 次元チェーン l ならば、 ∂l は向き付けされたその端点である 0 次元チェーン $l_{\text{終点}}, l_{\text{始点}}$ であり、

$$\int_l \tau \cdot \text{grad} p = \int_{\partial l} p = p(l_{\text{終点}}) - p(l_{\text{始点}}) \quad (6)$$

となる。ここで、 τ は l の単位接線ベクトルである。次に、 Ω が 2 次元チェーン S ならば、 ∂S は 1 次元チェーンで

あり,

$$\int_S \mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{u} = \int_{\partial S} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} \quad (7)$$

となる. ここで, \mathbf{n} は S の単位法線ベクトルである. 最後に, Ω が3次元チェーン V ならば, ∂V は2次元チェーンであり,

$$\int_V \text{div } \mathbf{v} = \int_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \quad (8)$$

となる. ここで, \mathbf{n} は ∂V の単位法線ベクトルである. (5) 式は, 積分領域の次元によって, (6), (7), (8) のように, 勾配作用素, 回転作用素, 発散作用素を, それぞれの次元のチェーンの特性的な積分をした量として表現している. 特性的な積分とは, 1次元チェーン上の積分は, その単位接線方向ベクトルとの内積の積分, 2次元チェーンでは, その単位法線方向ベクトルとの内積の積分, 3次元チェーンではスカラー関数の積分となっている. そして, それぞれの右辺は, 1次元下がったチェーン上の特性的な積分となっている. そして, (7), (8) 式のそれぞれの右辺は, 流れ場 \mathbf{u} の循環と, 流れ場 \mathbf{v} の流量を表す.

(6) 式の左辺と (7) 式の右辺は, $l = \partial S$, $\text{grad } p = \mathbf{u}$ と見れば同じ形をしていて, 流速場 $\mathbf{u} = \text{grad } p$ の循環である. つまり, 2つのスカラー関数の始点終点での差は, grad という微分作用素の循環という積分量になることを意味する. そして, (6) 式の右辺は, 計量情報のない, つまり, 2点間距離による割り算のない, 符号付きの和である. 同様に, (7) 式の左辺と (8) 式の右辺は, $S = \partial V$, $\text{rot } \mathbf{u} = \mathbf{v}$ と見れば同じ形をしていて, 流速場 $\mathbf{v} = \text{rot } \mathbf{u}$ の流量である. そして, もし, ∂S が, $l_i \cap l_j = \emptyset, i \neq j$ となる1次元チェーンの集合 l_1, \dots, l_m によって, $\partial S = \cup_{j=1}^m \bar{l}_j$ と書けるなら, 積分の加法性から,

$$\int_{\partial S} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} = \sum_{j=1}^m (-1)^{s_j} \int_{l_j} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} \quad (9)$$

ここで, $s_j = 0, 1$ は, 1次元チェーン l_j と ∂S の積分の向きが一致するとき, $s_j = 0$ とし, 異なるとき, $s_j = 1$ とする. (7), (9) 式より, ベクトル場 \mathbf{u} の1次元の境界での循環の和をとると, \mathbf{u} に回転作用素を施したベクトル場の流量になることが分かる. 以上より, 境界チェーンの分割により, 回転作用素を近似する離散化式が得られることになる. ただし, その量は, \mathbf{u} に回転作用素を施した関数の流量となっている. (8) 式も同様であり, 境界 ∂V を重ならない領域分割することで, 各面の流量の和として, 発散作用素の積分量の離散式を作ることができる.

流量と循環という物理量を導入し, 相互の変換として, Hodge 作用素 (スター作用素とも呼ばれる) を導入することで, grad , rot , div を近似する無計量な差分法を構築できる. 例えば, Poisson 方程式

$$-\text{div grad } p = f$$

を構造メッシュの差分法で離散化する場合,

$$\begin{pmatrix} U_{i-\frac{1}{2},j,k} \\ V_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ W_{i,j,k-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{i,j,k} - p_{i-1,j,k} \\ p_{i,j,k} - p_{i,j-1,k} \\ p_{i,j,k} - p_{i,j,k-1} \end{pmatrix} \quad (10)$$

は循環の次元を持っているので, 流量に Hodge 作用素を施し,

$$\begin{pmatrix} \bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k} \\ \bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ \bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = * \begin{pmatrix} U_{i-\frac{1}{2},j,k} \\ V_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ W_{i,j,k-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} U_{i-\frac{1}{2},j,k} \Delta y_j \Delta z_k / \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \\ V_{i,j-\frac{1}{2},k} \Delta z_k \Delta x_i / \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \\ W_{i,j,k-\frac{1}{2}} \Delta x_i \Delta y_j / \Delta z_{k-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

とすればよい. ここで, Hodge 作用素は $*$ で表す. 発散の積分量は,

$$\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k} + \bar{V}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k} + \bar{W}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \quad (11)$$

と計算すればよい. これは, Poisson 方程式に, 通常の2次中心差分公式を適用した離散化に一致する. 計量つまりメッシュ幅等の情報の管理は, すべて, Hodge 作用素に負わせて, 差分式 (10), (11) は, 無計量であることに注意しよう. 次節では, 回転作用素について, 具体的な定式化をする.

4. 回転作用素と双対スタガードメッシュ差分法

3節での原理を使って, 回転作用素の離散化を考える. そのために, 双対スタガードメッシュを導入する. 次の流速の線形空間として, 各流速成分の自由度分の実数の直積空間を考える.

$$V \equiv \left\{ \mathbf{u} = \begin{pmatrix} (u_{i-\frac{1}{2},j,k})_{\substack{0 \leq i \leq L+1 \\ 0 \leq j \leq M \\ 0 \leq k \leq N}} \\ (v_{i,j-\frac{1}{2},k})_{\substack{0 \leq i \leq L \\ 0 \leq j \leq M+1 \\ 0 \leq k \leq N}} \\ (w_{i,j,k-\frac{1}{2}})_{\substack{0 \leq i \leq L \\ 0 \leq j \leq M \\ 0 \leq k \leq N+1}} \end{pmatrix} \right\},$$

$$V^* \equiv \left\{ \mathbf{u}^* = \begin{pmatrix} (u_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^*)_{\substack{0 \leq i \leq L \\ 0 \leq j \leq M+1 \\ 0 \leq k \leq N+1}} \\ (v_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^*)_{\substack{0 \leq i \leq L+1 \\ 0 \leq j \leq M \\ 0 \leq k \leq N+1}} \\ (w_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^*)_{\substack{0 \leq i \leq L+1 \\ 0 \leq j \leq M+1 \\ 0 \leq k \leq N}} \end{pmatrix} \right\}$$

流量を大文字に上線で書き, 循環を大文字で書くことにする. 例えば, 流量

$$\begin{aligned} \bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k} &= \Delta y_j \Delta z_k u_{i-\frac{1}{2},j,k} \\ \bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k} &= \Delta z_k \Delta x_i v_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ \bar{W}_{i-\frac{1}{2},j,k} &= \Delta x_i \Delta y_j w_{i,j,k-\frac{1}{2}} \\ \bar{U}_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* &= \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \Delta z_{k-\frac{1}{2}} u_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ \bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* &= \Delta z_{k-\frac{1}{2}} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} v_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* \\ \bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* &= \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} w_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* \end{aligned}$$

と循環

$$\begin{aligned} U_{i-\frac{1}{2},j,k} &= \Delta x_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j,k} \\ V_{i,j-\frac{1}{2},k} &= \Delta y_{j-\frac{1}{2}} v_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ W_{i,j,k-\frac{1}{2}} &= \Delta z_{k-\frac{1}{2}} w_{i,j,k-\frac{1}{2}} \\ U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* &= \Delta x_i u_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* &= \Delta y_j v_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* \\ W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* &= \Delta z_k w_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* \end{aligned}$$

である。回転作用素 $R:V \rightarrow V^*$, $R_*:V^* \rightarrow V$ であり、次のように定義する。 $\mathbf{u}^* = R\mathbf{u}$ ならば、 \mathbf{u}^* の流量 $\bar{\mathbf{U}}^*$ と \mathbf{u} の循環 \mathbf{U} は、次の関係式を満たす。

$$\begin{aligned}\bar{U}_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* &= W_{i,j,k-\frac{1}{2}} - W_{i,j-1,k-\frac{1}{2}} \\ &\quad - V_{i,j-\frac{1}{2},k} + V_{i,j-\frac{1}{2},k-1} \\ \bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* &= U_{i-\frac{1}{2},j,k} - U_{i-\frac{1}{2},j,k-1} \\ &\quad - W_{i,j,k-\frac{1}{2}} + W_{i-1,j,k-\frac{1}{2}} \\ \bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* &= V_{i,j-\frac{1}{2},k} - V_{i-1,j-\frac{1}{2},k} \\ &\quad - U_{i-\frac{1}{2},j,k} + U_{i-\frac{1}{2},j-1,k}\end{aligned}$$

この式を 次の量を使って、 $\bar{\mathbf{U}}^* = R\mathbf{U}$ と簡略化して書くことにする。

$$\bar{\mathbf{U}}^* = \begin{pmatrix} (\bar{U}_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^*) \\ (\bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^*) \\ (\bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^*) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} (U_{i-\frac{1}{2},j,k}) \\ (V_{i,j-\frac{1}{2},k}) \\ (W_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{u} = R_*\mathbf{u}^*$ ならば、 \mathbf{u} の流量 $\bar{\mathbf{U}}$ と \mathbf{u}^* の循環 \mathbf{U}^* は、次の関係式を満たす。

$$\begin{aligned}\bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k} &= W_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}^* - W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* \\ &\quad - V_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}^* + V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* \\ \bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k} &= U_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^* - U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ &\quad - W_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* + W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* \\ \bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}} &= V_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* - V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* \\ &\quad - U_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* + U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^*\end{aligned}$$

この式を $\bar{\mathbf{U}} = R_*\mathbf{U}^*$ と簡略化して書くことにする。

$$\bar{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} (\bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k}) \\ (\bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k}) \\ (\bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}^* = \begin{pmatrix} (U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^*) \\ (V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^*) \\ (W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^*) \end{pmatrix}.$$

ただし、これらの量を計算するとき、未定義の値が出るが、それらはすべて0として定義する。このとき、 $\mathbf{u} \in V$ については、

$$\mathbf{n} \times \mathbf{u} = 0$$

という境界条件を課していることになり、 $\mathbf{u}^* \in V^*$ については、

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^* = 0$$

という境界条件が対応する。

V , V^* に有限体積法から自然に決まる L^2 内積を定義

する。 V 内積のみを書くと、 $\forall \mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2 \in V$

$$\begin{aligned}(\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2)_V &= \sum_{i=0}^{L+1} \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N u_{i-\frac{1}{2},j,k}^1 u_{i-\frac{1}{2},j,k}^2 \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \Delta y_j \Delta z_k \\ &\quad + \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^{M+1} \sum_{k=0}^N v_{i,j-\frac{1}{2},k}^1 v_{i,j-\frac{1}{2},k}^2 \Delta x_i \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \Delta z_k \\ &\quad + \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^1 w_{i,j,k-\frac{1}{2}}^2 \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_{k-\frac{1}{2}} \\ &= \sum_{i=0}^{L+1} \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N \bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k}^1 U_{i-\frac{1}{2},j,k}^2 \\ &\quad + \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N \bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k}^1 V_{i,j-\frac{1}{2},k}^2 \\ &\quad + \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N \bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^1 W_{i,j,k-\frac{1}{2}}^2 \\ &= (\bar{\mathbf{U}}^1, \mathbf{U}^2), \\ (\mathbf{u}^{1*}, \mathbf{u}^{2*})_{V^*} &= \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^{M+1} \sum_{k=0}^N u_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{1*} u_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{2*} \Delta x_i \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \Delta z_{k-\frac{1}{2}} \\ &\quad + \sum_{i=0}^{L+1} \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N v_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{1*} v_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{2*} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \Delta y_j \Delta z_{k-\frac{1}{2}} \\ &\quad + \sum_{i=0}^{L+1} \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N w_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{1*} w_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{2*} \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \Delta z_k \\ &= \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N \bar{U}_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{1*} U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{2*} \\ &\quad + \sum_{i=0}^{L+1} \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N \bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{1*} V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{2*} \\ &\quad + \sum_{i=0}^{L+1} \sum_{j=0}^M \sum_{k=0}^N \bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{1*} W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{2*} \\ &= (\bar{\mathbf{U}}^{1*}, \mathbf{U}^{2*}).\end{aligned}$$

循環と流量を組み合わせると、内積も無計量になる。ここで、 $p=1,2$ として、

$$\mathbf{U}^p = \begin{pmatrix} (U_{i-\frac{1}{2},j,k}^p) \\ (V_{i,j-\frac{1}{2},k}^p) \\ (W_{i,j,k-\frac{1}{2}}^p) \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{U}}^p = \begin{pmatrix} (\bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k}^p) \\ (\bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k}^p) \\ (\bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^p) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{U}^{p*} = \begin{pmatrix} (U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{p*}) \\ (V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{p*}) \\ (W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{p*}) \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{U}}^{p*} = \begin{pmatrix} (\bar{U}_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^{p*}) \\ (\bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^{p*}) \\ (\bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^{p*}) \end{pmatrix}$$

と書き、無計量の内積を (\cdot, \cdot) で書いた。

定理 1 次の部分積分公式が成り立つ。

$$(R\mathbf{u}, \mathbf{u}^*)_{V^*} = (\mathbf{u}, R_*\mathbf{u}^*)_V, \quad \forall \mathbf{u} \in V, \quad \forall \mathbf{u}^* \in V^*.$$

定理 2 任意に与えられた $\mathbf{j}_0 \in V^*$ について、線形方程式

$$R_*R\mathbf{u} = R_*\mathbf{j}_0 \quad (12)$$

の解 $\mathbf{u} \in \text{Im}(R_*)$ を求める問題と

$$\min_{\mathbf{u} \in \text{Im}(R_*)} \|\mathbf{R}\mathbf{u} - \mathbf{j}_0\|_{V^*}$$

は同値である。また、この問題は一意可解である。ここで、 $\text{Im}(R_*)$ は作用素 R_* の値域を表す。

問題 (12) の線形作用素 $R_*R : V \rightarrow V$ は、定理 1 より条件 (4) を満足するので、2 節での CG 法を適用できる。

5. 部分空間の性質

スカラー量を近似する線形空間として、

$$Q = \left\{ \mathbf{q} = (q_{i,j,k}) \begin{array}{l} 0 \leq i \leq L \\ 0 \leq j \leq M \\ 0 \leq k \leq N \end{array} \right\}$$

を考え、発散作用素として、 $D : V \rightarrow Q$ として、 $\mathbf{p} = D\mathbf{u}$ となる時、 \mathbf{p} の体積積分量 $P_{i,j,k} = \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k p_{i,j,k}$ をとれば、

$$P_{i,j,k} = \bar{U}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \bar{U}_{i-\frac{1}{2},j,k} + \bar{V}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \bar{V}_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ + \bar{W}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \bar{W}_{i,j,k-\frac{1}{2}}$$

また、勾配作用素 $G : Q \rightarrow V$ は、 $\mathbf{u} = G\mathbf{p}$ は、循環 U を用いて、(10) 式を満たす。

双対メッシュについても同様に、

$$Q^* = \left\{ \mathbf{q}^* = (q_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^*) \begin{array}{l} 0 \leq i \leq L+1 \\ 0 \leq j \leq M+1 \\ 0 \leq k \leq N+1 \end{array} \right\}$$

を定義し、 $D_* : V^* \rightarrow Q^*$ として、 $\mathbf{p}^* = D_*\mathbf{u}^*$ なら、 $P_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* = \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \Delta y_{j-\frac{1}{2}} \Delta z_{k-\frac{1}{2}} p_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^*$ として、

$$P_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* = \bar{U}_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* - \bar{U}_{i-1,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ + \bar{V}_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* - \bar{V}_{i-\frac{1}{2},j-1,k-\frac{1}{2}}^* \\ + \bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* - \bar{W}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-1}^*$$

となり、勾配作用素 $G_* : Q^* \rightarrow V^*$ は、 $\mathbf{u}^* = G_*\mathbf{p}^*$ ならば、循環 U^* を用いて、

$$\begin{pmatrix} U_{i,j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ V_{i-\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}^* \\ W_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}^* \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} P_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* - P_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ P_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* - P_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \\ P_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^* - P_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}^* \end{pmatrix}$$

以上のような線形作用素を定義すると、次のような直交直和分解が成り立つ。

$$\begin{aligned} Q &= \text{Ker}(G) \oplus \text{Im}(D), \\ V &= \text{Ker}(D) \oplus \text{Im}(G) \\ &= \text{Ker}(R) \oplus \text{Im}(R_*), \\ Q^* &= \text{Ker}(G_*) \oplus \text{Im}(D_*), \\ V^* &= \text{Ker}(D_*) \oplus \text{Im}(G_*) \\ &= \text{Ker}(R_*) \oplus \text{Im}(R). \end{aligned}$$

作用素の性質として、

$$\begin{aligned} DR_* &= 0 \\ RG &= 0 \\ D_*R &= 0 \\ R_*G_* &= 0 \end{aligned}$$

が自然に成り立つので、

$$\begin{aligned} \text{Ker}(D) &\supset \text{Im}(R_*) \\ \text{Im}(G) &\subset \text{Ker}(R) \\ \text{Ker}(D_*) &\supset \text{Im}(R) \\ \text{Im}(G_*) &\subset \text{Ker}(R_*) \end{aligned}$$

が成立する。そして、特に、Betti 数 (cf. [3]) が 0 であるとき、

$$\begin{aligned} \text{Ker}(D) &= \text{Im}(R_*) \\ \text{Im}(G) &= \text{Ker}(R) \\ \text{Ker}(D_*) &= \text{Im}(R) \\ \text{Im}(G_*) &= \text{Ker}(R_*) \end{aligned}$$

となる。今は、穴のない直方体領域を考えているので、Betti 数は 0 である。ソレノイダル空間 $\text{Ker}(D)$ は、ベクトルポテンシャル $\text{Im}(R_*)$ に一致する。渦無し $\text{Ker}(R)$ は、スカラーポテンシャル $\text{Im}(G)$ に一致する。

以上のような部分空間の性質より、与えられたベクトル場 $\mathbf{j}_0 \in V^*$ に対して、 $\mathbf{u} \in V$ を未知ベクトルにする方程式

$$\mathbf{R}\mathbf{u} = \mathbf{j}_0 \quad (13)$$

が可解であるためには、 $\mathbf{j}_0 \in \text{Im}(R) = \text{Ker}(D_*)$ でなければならないことが分かる。 $\mathbf{j}_0 \notin \text{Im}(R)$ であるとき、(13) は可解ではないが、定理 2 の問題のように、残差 $\mathbf{j}_0 - \mathbf{R}\mathbf{u}$ のノルムを最小にする解は、方程式 (12) を満足することが分かり、前述のように、構造メッシュに自然に導入した V 内積の意味での CG 法を適用できる。

6. 正則化

(13) 式の方程式に対して、定理 2 より、 $\mathbf{u} \in \text{Im}(R_*)$ のとき、一意可解になる。そこで、 $\mathbf{u} = R_*\mathbf{v}$ を満足する \mathbf{v} を求める問題を考える。つまり、

$$RR_*\mathbf{v} = \mathbf{j}_0 \quad (14)$$

の形の連立一次方程式を解く。作用素 RR_* は退化している。そこで、正則化を考える。

有限要素法の分野では、補木による正則化が知られている (cf. [1, 3])。本論文でのスタガードメッシュ差分法においても、同様のことができる。それを説明するために、有向ネットワークの概念を導入する。 Q^*, V^* の空間格子系に図 1 に示す有向ネットワークを定義する。空間 Q^* の元をネットワークの節点とし、辺上に V^* の元を配置する。

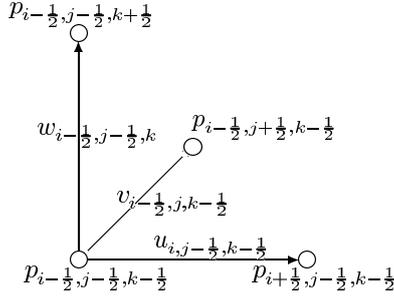
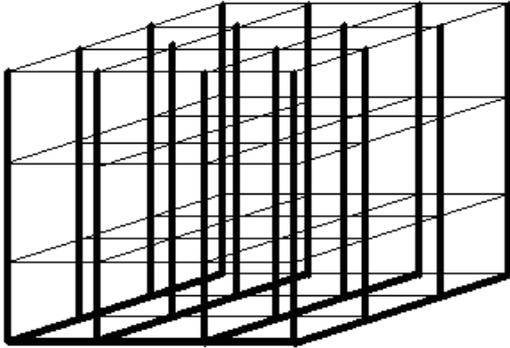


図1 スタガード格子の有向ネットワーク

このようなネットワークに、木の概念を導入する。木とは、閉路を持たないネットワークと定義する。閉路とは、ある節点から始まり、辺をたどるとその節点に戻るようなネットワークと定義する。ネットワークの部分ネットワークとは、そのネットワークの部分集合であると定義する。ネットワークの極大部分木とは、1つでも辺を追加すると、閉路ができてしまうような部分ネットワークであり、節点の集合は元のネットワークと一致するようなものと定義する。連結なネットワークにおいては、木の性質から極大部分木の辺の数は、節点数から1引いたものになる。補木とは、極大部分木を除いた残りのネットワークと定義する。自由度を補木に限定すると、連立一次方程式 (14) は正則になる。図2に極大部分木の例を示す。



このような自由度を制限するような処理を行うために、計算フラッグを導入する。作用素 R を施すとき、その結果に対して、次の計算フラッグを乗じることで正則化の処理ができる。

$$f_{i,j-1/2,k-1/2} = \begin{cases} 1, & u_{i,j-1/2,k-1/2} \text{ に対応する辺が補木,} \\ 0, & \text{その他.} \end{cases}$$

$$f_{i-1/2,j,k-1/2} = \begin{cases} 1, & v_{i-1/2,j,k-1/2} \text{ に対応する辺が補木,} \\ 0, & \text{その他.} \end{cases}$$

$$f_{i-1/2,j-1/2,k} = \begin{cases} 1, & w_{i-1/2,j-1/2,k} \text{ に対応する辺が補木,} \\ 0, & \text{その他.} \end{cases}$$

7. 静磁場問題に対する構造メッシュCG法

(13) 式を解く問題は、ベクトルポテンシャルを求める問

題であり、

$$\text{rot rot } \mathbf{u} = \text{grad div } \mathbf{u} - \text{div grad } \mathbf{u}$$

の公式と $\text{div } \mathbf{u} = 0$ の制約条件を課せば、Poisson 方程式を解く問題に帰着される。次の静磁場問題 (cf. [1, 3]) においては、透磁率 $\mu(\mathbf{x})$ が空間分布をもつ場合には、そのような簡単な定式化はできない。 $\text{div } \mathbf{j}_0 = 0$ を満足する強制電流 \mathbf{j}_0 について、次を満足する磁場 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ と、磁束密度 $\mathbf{b}(\mathbf{x})$ を求める問題が静磁場問題である。

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{u} = \mathbf{j}_0, & \text{in } \Omega, \\ \text{div } \mathbf{b} = 0, & \text{in } \Omega, \\ \mathbf{b} = \mu \mathbf{u}, & \text{in } \Omega, \\ \mathbf{n} \times \mathbf{u} = 0, & \text{on } \partial\Omega. \end{cases}$$

本論文の提案する構造メッシュに沿ったCG法においては、透磁率 $\mu(\mathbf{x})$ が空間分布を持つ場合においても、作用素の対称性 (1) を崩さない。

この問題は、4節の離散化により、 $\mathbf{j}_0^* \in \text{Ker}(D_*) \subset V^*$ に対して、

$$R\nu R_* \mathbf{a}^* = \mathbf{j}_0^*, \quad \nu = \mu^{-1}$$

を満足する $\mathbf{a}^* \in V^*$ を求める問題に帰着される。 \mathbf{A}_k^* を、CG法の k 回反復後の解 \mathbf{a}_k^* の循環、 \mathbf{P}_k^* , \mathbf{R}_k^* をそれぞれCG法の探索方向ベクトルの循環、残差ベクトルの流量とし、Hodge作用素 $*$ は流量を循環に変換するとし、CG法の1回の反復計算を書けば以下ようになる。

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}}_k &:= R_* \mathbf{P}_k^* \\ \mathbf{U}_k &:= * \nu \bar{\mathbf{U}}_k \\ \bar{\mathbf{U}}_k^* &:= R \mathbf{U}_k \\ \gamma_k &:= (\bar{\mathbf{U}}_k^*, \mathbf{P}_k^*) \\ \alpha_k &:= \sigma_k / \gamma_k \\ \mathbf{A}_{k+1}^* &:= \mathbf{A}_k^* + \alpha_k \mathbf{P}_k^* \\ \bar{\mathbf{R}}_{k+1}^* &:= \bar{\mathbf{R}}_k^* - \alpha_k \bar{\mathbf{U}}_k^* \\ \mathbf{R}_{k+1} &:= * \bar{\mathbf{R}}_{k+1}^* \\ \sigma_{k+1} &:= (\bar{\mathbf{R}}_{k+1}^*, \mathbf{R}_{k+1}^*) \\ \beta_k &:= \sigma_{k+1} / \sigma_k \\ \mathbf{P}_{k+1}^* &:= \mathbf{R}_{k+1}^* + \beta_k \mathbf{P}_k^* \end{aligned}$$

R, R_* を施す部分は、4節での構造メッシュに沿った代入計算として書けるので、この算法を構造メッシュCG法と呼ぶことにする。 R, R_* を施す部分や内積は、すべて無計量になっていることに注意しよう。計量処理はHodge作用素が行う。

8. BDD法

(14) 式の方程式には、前述の通り退化があり、悪条件の問題であり、大規模になるとCG法が収束しない可能性がある。そこで、論文 [4] のBDD法の適用を行った。BDD法は、領域分割法の一つで、大規模な問題を分割し、小さな問題に帰着させ、並列計算させる手法であり、並列計算機の登場とともに注目されている。

BDD法では、全領域 Ω を小領域 $\Omega_i, i = 1, \dots, m$ に分割し、内部自由度と、隣接する領域を繋ぐ接続境界自由度に分け、内部自由度を消去したShur補元に対するCG法に帰着させる。そして、前処理として、Neumann-Neumann前処理を行うが、Neumann-Neumann前処理の作用素には退化があるので、バランシングと呼ばれる係数ベクトル

の可解化を行う。変位を自由度とする構造解析の分野では、剛体運動モードであり (cf. [5])、Poisson 方程式においては定数モードを除去して、可解化をする。(14)式についてのバランシングを行うためには、(14)式の各領域 i 毎の Shur 補元 S_i についての核を求めなければならないが、(14)は回転作用素 $R_{*,i}$ が施されるため、それは境界自由度における $G_{*,i}$ の値域になり、Shur 補元をはさんだ形の Poisson 方程式を解くことになる。ここで、 $R_{*,i}$ 、 $G_{*,i}$ は分割領域 i の作用素を表す。

[5] 塩谷隆二, 金山寛, 田上大助, 荻野正雄, バランシング領域分割法による3次元大規模構造解析, 計算工学会論文集 2, , pp. 139-144, 2000, Paper No. 20060004.

9. 数値実験

(1) 正則化の検証

$L = M = N = 7$ として、7節での構造メッシュCG法の数値実験を試みた。適合条件とは、 $D_*j_0^* = 0$ を満足することと定義する。また、正則化とは6節での補木による正則化を行うこととする。適合条件を満足するかしないか、正則化をするかしないかによって、4通りの場合の数値実験を試みた。CG法の収束判定は残差の最大値ノルムが 10^{-10} 以下になることとし、完全収束とは、流量残差を体積で割った最大値ノルムが倍精度計算で 10^{-15} になることとする。

表 1 CG法の収束

ケース	適合条件	正則化	反復回数	完全収束
①	×	×	—	×
②	○	×	73	×
③	○	○	478	○
④	×	○	494	○

①のケースでは、CG法は収束しなかった。①、②のように正則化をしないと完全収束はしなかった。ただ、最も速い収束は、②のケースであった。これは、有限要素法においても起こることが知られている (cf. [1])。図 3, 4, 5 にそれぞれケース②, ③, ④のベクトル図を示す。④は適合条件を満足しないので、物理的に無意味な解になっている。

(2) 領域分割法

$L = M = N = 19$ として、立方体の x, y, z 方向にそれぞれを2等分ずつ8等分に分割して、領域分割法を試みた。Shur 補元についてのCG法の反復回数を表2に示す。BDD法の前処理効果が認められる。

表 2 領域分割法の反復回数

手法	反復回数
退化CG法	68回
BDD法	20回

参考文献

- [1] 五十嵐一, 亀有昭久, 加川幸雄, 西口磯春, A. ボサビ, 新しい計算電磁気学 [基礎と数値], 培風館, 2003.
- [2] Yee, K.S., "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media," IEEE Trans., AP-14, 3(1966), 302-307.
- [3] Bossavit, A., Computational Electromagnetism, Academic Press(Boston), 1998.
- [4] Mandel, J., Balancing Domain Decomposition, Communications on Numerical Methods in Engineering 9, 1993, 233-241.

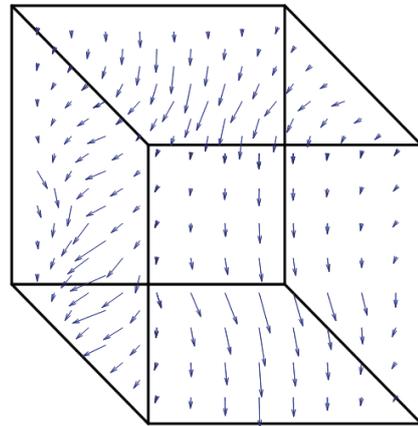


図 3 ケース②の解

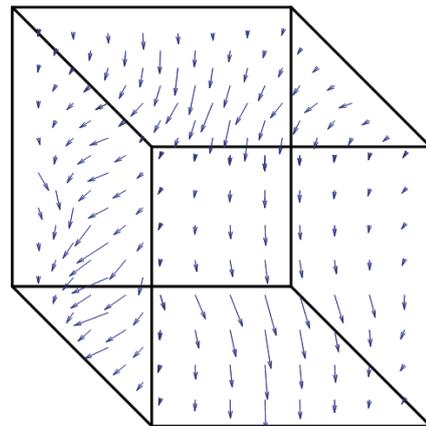


図 4 ケース③の解

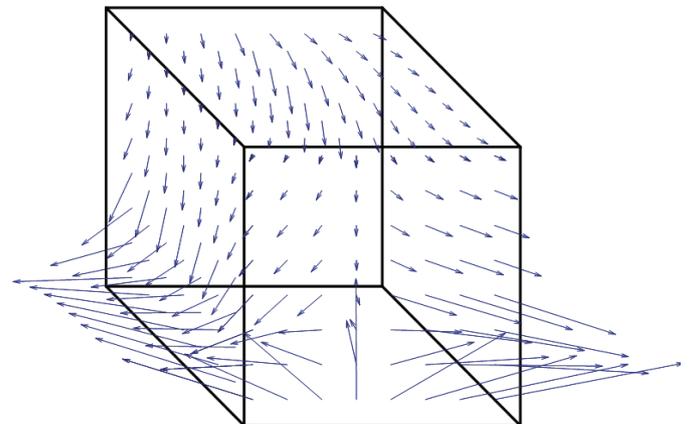


図 5 ケース④の解