《講　座》

領域分割法入門
第2回　有限要素法と領域分割法

秋　葉　　博*・鈴　木　正　文*・大　山　知　信*

ABSTRACT This is the second article of a serial in four installments of an introduction on domain decomposition method for finite element analysis. We give here a rather theoretical discussion on domain decomposition method. There are two types of domain decomposition: one allows overlap of domain, whereas in the other two domains only have common boundary. The latter is an iterative substructuring method which is predominantly used in parallel structural analysis. From a theoretical point of view, regardless of overlap of domain, domain decomposition method can be viewed as a preconditioning for a large scale linear equation.

1. 前回の復習と今回の内容

前回は「並列処理と有限要素法」という副題で，並列処理の一般論，並列コンピュータ，MPI，領域分割法について述べた．領域分割法については，国内では普通 DDM(Domain Decomposition Method)と呼ばれている，部分領域がオーバラップしない構造問題に関わる方法(本稿3章参照)に基づいており，主として MPI プログラムの観点から述べたもので，領域分割法を概観するものではなかった．

第2回の本稿では，理論的側面から領域分割法について述べる．今回の記述は少しだけ数学的なものになるが，前提としている知識は線形空間の初歩，有限要素法の初歩，数値解析の初歩のみである．有限要素法については簡単な復習からはじめる．また，たとえば2.3節「前処理つきCG法」では，前処理による条件数の低減を述べているが，詳細な解説を行っているわけではなく，大雑把に捉えていただければ十分である．本稿の核心は領域分割法と前処理との関係を述べた3.3節にあるが，ここだけは議論が少し込み入るかもしれない．しかし，やはり大きく捉えれば，領域分割法とは何かが見通しよくお分かりいただけるものと思う．

一般に，領域分割法(Domain Decomposition Method)は，解析的に解くことが困難な偏微分方程式を数値的に解くにあたって，並列コンピュータを利用する方法として研究されてきた．領域分割法は，偏微分方程式を離散化して得られる係数行列がスパースな線形あるいは非線形方程式の解法として，一般的で広範な方法である．領域分割法は，線形問題に関しては共役勾配法(CG 法，Conjugate Gradient Method)などに代表される Krylov 部分空間法(Krylov Subspace Method)の前処理，非線形問題に関しては，ニュートン法などにおいて現れる線形方程式の解法の前処理とみなせる[1]．

領域分割という言葉は，偏微分方程式とその数値計算に関わる分野に限っても，このような文脈とは異なる様々な意味で使われている．しかし，本稿では上に述べた，方程式解法の前処理に関連する意味に限定して使う．すなわち，偏微分方程式を離散化して得られる方程式の前処理を構築することを目的に，大規模な線形問題を小規模な問題に分割することを領域分割と呼ぶこととする．

領域分割法には重要な3つの長所がある．第一は，並列化が簡単で並列効率が良いこと．第二は，複雑な形状に関する問題を簡単化できること．第三は，問題の自由度にあまり依存しない(0次依存に近い)優れた収束特性をもつことである[1]．

本稿では，特に連続体問題を有限要素法によって離散化する場合を取り上げ，その際生ずる正定値対称線形方程式を解くための前処理としての領域分割法に限定する．そこで今回は，連続体問題の有限要素法による離散化の基本的な考え方を概観し，離散化により得られる線形方程式の前処理，代表的な反復法である

Introduction to Domain Decomposition Method — [2] Finite Element Method and Domain Decomposition Method. By *Hiroshi Akiba, Masabumi Suzuki* and *Tomonobu Ohyama* (Allied Engineering Corporation)
*(株)アライドエンジニアリング ソルバ開発チーム

CG法に対する前処理の効果をおさらいしておく．その上で，領域分割法を大別するオーバラップするSchwarz法と反復型部分構造法を紹介し，次に領域分割法と前処理の関係を，Schwarzのフレームワーク(Schwarz framework)と呼ばれる枠組みを通じて述べる．

2. 有限要素法

2.1 有限要素法

有限要素法について簡単に復習する．有限要素法は連続体力学における離散化近似計算手法の一種である．連続体力学において，連続体問題は通常次のように扱われる．まず，解析対象を連続体とその上に定義される場の量として定式化する．例えば，構造問題では構造物とその変位場，流体問題では対象とする流体が占める空間領域とその速度場や圧力場などである．次に，場の量に関する方程式を定める．この方程式は場の方程式と呼ばれ，通常時間，空間変数に関する偏微分方程式の形をとる．構造問題における場の方程式は構造物の運動方程式あるいは静的問題の場合は釣合い方程式であり，流体の速度場の方程式は流体の運動方程式を表わす．また，熱伝導問題では熱伝導方程式が現れる．場の方程式はほとんどの場合厳密に解くことが不可能であり，数値解析的に解かざるを得ない．そのための連続体問題の離散近似的再定式法が必要となる．

有限要素法はその方法の一つである．有限要素法では，まず連続体の占める空間領域を複数の要素(有限要素法の要素)に分割し，非ゼロの値をとる領域が一つの節点を共有して隣接する要素に局在した関数(それを要素ごとにバラバラにしたものが形状関数)を導入して，求めたい場の量をそれらの関数の重ね合わせで表現されるものに限定する近似により，場の量および場の方程式(あるいは釣合い方程式)を空間変数について離散化する．この関数は有限要素基底関数(finite element basis functions)と呼ばれる．この空間的離散化により，方程式は一つ(静的線形問題の場合)あるいは複数(例えば非線形問題の場合増分ステップ毎，動的問題の場合時間ステップ毎)の線形方程式に帰着される．

解析対象領域をΩと記す．u_{exa}をΩ上で定義された求めたい場の量，Kをu_{exa}の方程式を表現する偏微分演算，Fを例えば外力のような，Kをとおしてu_{exa}に影響を及ぼす場の量として，u_{exa}に対する偏微分方程式が次のように表されたとする．

$$K\left(u_{\mathrm{exa}}\right)=F \tag{1}$$

変分法により，これは次の条件を満たす場の量u_{exa}を探し出すという問題に等価に書き換えられる．すなわち，任意の場の量の変分δu_{exa}に対して次が成り立つ．

$$\int_{\Omega}\delta u_{\mathrm{exa}}\,K\left(u_{\mathrm{exa}}\right)d\Omega=\int_{\Omega}\delta u_{\mathrm{exa}}\,F\,d\Omega \tag{2}$$

この積分型の方程式は元の方程式(1)の弱形式と呼ばれる．境界条件は適当に与えられているとし，それについては後で簡単に述べる．

解析領域Ωを有限要素メッシュで離散化し，上に述べた有限要素基底関数をN個(有限要素メッシュに含まれる節点の数×節点の自由度，拘束条件の自由度は後から取除く)構成したとする．それを$\{\varphi_i\}_{i=0,1,\ldots,N-1}$とする．上に述べた有限要素法の原理にしたがって，近似解u_{apx}を$\{\varphi_i\}_{i=0,1,\ldots,N-1}$で張られる空間$V_{\mathrm{apx}}\equiv\mathrm{span}\{\varphi_i\}_{i=0,1,\ldots,N-1}$から探すことになる．探す基準としての変分方程式(2)を次のように書き直す．つまり，次の条件を満たすV_{apx}の場の量u_{apx}を探す．

$$\int_{\Omega}\delta u_{\mathrm{apx}}\,K\left(u_{\mathrm{apx}}\right)d\Omega=\int_{\Omega}\delta u_{\mathrm{apx}}\,F\,d\Omega \tag{3}$$

この積分方程式は更に次のように，空間変数について代数方程式に書き直される．近似解u_{apx}を$\{\varphi_i\}_{i=0,1,\ldots,N-1}$で次のように展開する．

$$u_{\mathrm{apx}}=\varphi_j u^j \tag{4}$$

ここで，u^jは展開係数，展開式ではEinsteinの規約を使っている．以下でも断わりなしに使うことにする．係数マトリクスK，外的作用fを次のように定義する．

$$K_{ij}\equiv\int_{\Omega}\varphi_i\,K\left(\varphi_j\right)d\Omega,\quad f_i\equiv\int_{\Omega}\varphi_i\,F\,d\Omega \tag{5}$$

微分演算Kが線形なら，展開式(4)を(3)に代入し，δu_{apx}をすべてのφ_jで代表させて，u^jを並べた数ベクトルuと上で定義したK, fを使って整理すると次の線形方程式が得られる．

$$Ku=f \tag{6}$$

Kが線形でない場合は，Fを有限増分に分割するなどしてKを線形近似し，同様の線形方程式を導く．

線形方程式(6)からuが求まれば，展開式(4)を使って場の量の近似解u_{apx}が再現される．このように，連続体の場の方程式は有限要素法においては，有限次元ベクトル空間V_{apx}上の線形問題に帰着される．

ここで，後の前処理の話にもかかわる注意すべき事柄は，われわれが解こうとする線形方程式(6)の係数マトリクスは，式(5)からわかるとおり，線形変換というよりは双線形形式(2つのベクトルから1つのスカラ値

を対応させる2重に線形な関数）

$$v, u \rightarrow v^t K u \tag{7}$$

を表したものと考えるべきだという点である．詳しくは第2.2節でのべる．

方程式(2)，(6)では境界条件を省略した．全自由度の内，束縛される自由度を添え字b，残りを添え字0で表現すると，方程式(6)は次のとおりブロック分割される．

$$\begin{pmatrix} K_0 & K_{0b} \\ K_{b0} & K_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^0 \\ u^b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_b \end{pmatrix} \tag{8}$$

これはu^0に関する方程式であり，f_0は外力として，u^bは境界条件として事前に与えられる量，f_bはu^0，u^bから事後に計算される量で，たとえば構造問題の場合は拘束条件の課されている境界上に発生する反力になる．

2.2 前処理

第1章で述べたとおり，領域分割法は反復法の前処理とみなされる．前処理とは対象としているベクトル空間の内積を取り代えて方程式を表現しなおし，解きやすくすることであると解釈できる．

線形方程式(6)を考える．ここで扱われるのはN次元数ベクトルであり，その数ベクトル空間には自然に標準の内積

$$v^t u = v^i u^i \tag{9}$$

が定義されている．

別に一つ正定値対称行列Gを設定して，方程式(6)を次のとおり変形する．

$$GKu = Gf \tag{10}$$

二つの方程式(6)と(10)はuに関する方程式として同等であり，方程式を(6)から(10)に変換することを線形方程式の前処理，前処理に使った行列Gを前処理行列と呼ぶ．前処理を行なう意義は，前処理によって方程式を解き易くすることにある．例えばGを逆行列K^{-1}の近似にとればGKは単位行列の近似になり，解が得やすくなる．

前処理には別にもう一つの方法がある．正則行列Uを用意し，係数行列K，右辺ベクトルfおよび変数ベクトルuを次のように変換する．

$$\tilde{K} = U^t K U、\quad \tilde{u} = U^{-1} u、\quad \tilde{f} = U^t f \tag{11}$$

すると方程式 は次のとおり同等に書き直される．

$$\tilde{K}\tilde{u} = \tilde{f} \tag{12}$$

方程式の(6)から(12)への変換も前処理と呼ばれる．この場合もその目的は変換によって方程式を解き易くすることである．

上の二つの方法は，同じことの2側面であることが次のようにしてわかる．Gは正定値対称行列だから次の関係をもつ正則行列Uが存在する．

$$G = UU^t \tag{13}$$

逆に正則行列Uから式(13)でGを定義するとGは正定値対称になる．式(13)が成り立つとき，上で定義した$\tilde{K}$とGKは次のとおり相似になる．

$$\tilde{K} = U^{-1} GKU \tag{14}$$

したがって，式(11)の第2式の解uと$\tilde{u}$の関係式の下に，方程式(10)と(12)は等価であることがわかる．特に重要なことは，GKと$\tilde{K}$の固有値が同じであるため，GKと$\tilde{K}$の条件数も同じになることである．つまり，どちらの前処理も反復法の収束特性の改善に対して同等の効果をもつ．領域分割法では式(10)の形式の前処理が扱われる．

上の事情を，方程式(3)の観点に戻って幾何学的に解釈してみる．第2.1節で考えた有限要素基底関数$\{\varphi_i\}_{i=0,1,\cdots,N-1}$とそれで張られる近似のベクトル空間$V_{apx} \equiv \mathrm{span}\{\varphi_i\}_{i=0,1,\cdots,N-1}$を再び考える．$V_{apx}$の2つベクトル$v^{fld}$，$u^{fld}$を次のように展開しておく．

$$v^{fld} = \varphi_i v^i, \quad u^{fld} = \varphi_j u^j \tag{15}$$

以下v，uはそれぞれ展開係数v^j，u^jを並べた数ベクトルとする．ベクトル空間V_{apx}に次のとおり標準の内積を定義する．

$$(v^{fld}, u^{fld}) = v^t u \tag{16}$$

この内積は，基底関数$\{\varphi_i\}_{i=0,1,\cdots,N-1}$を正規直交系にする．

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij} \tag{17}$$

第2.1節の偏微分演算Kを線形と仮定する．Kを使ってベクトル空間Vに双線形関数aを次のように定義する．

$$a(v^{fld}, u^{fld}) = \int_\Omega v^{fld} K(u^{fld})\, d\Omega \tag{18}$$

aは標準の内積により係数マトリクスKに次のように対応づけられる．

$$a(v^{fld}, u^{fld}) = v^t K u \tag{19}$$

ここで，V_{apx} にもう一つの双線形関数 c を考える．ただし，c は正定値対称と仮定する．すると，c は標準の内積によりある正定値対称マトリクス C に次のように対応づけられる．

$$c\,(v^{\mathrm{fld}}, u^{\mathrm{fld}}) = v^T C u \tag{20}$$

c，C はそれぞれに正定値対称だから，c は V_{apx} および対応する数ベクトル空間に標準の内積とは異なるもう一つの内積を定義する．C は正定値対称だから逆マトリクスが存在するのでそれを G と記す．G も正定値対称マトリクスである．すると次が成り立つ．

$$a\,(v^{\mathrm{fld}}, u^{\mathrm{fld}}) = v^T C G K u \tag{21}$$

これは，新しい内積に基づくと a は GK に対応づけられることを示している．同じ a が標準の内積に基づくと K に対応し，c で定義される内積に基づくと GK に対応する．このとおり，内積を交換することが前処理の幾何学的意味である．

2つの前処理の方法の違いは，基底の違いによるマトリクスやベクトルの表示の違いと考えられる．実際，マトリクス K，C は基底関数 $\{\varphi_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ に基づく a，c のマトリクス表示であり，G も C の逆マトリクスであるから同じく $\{\varphi_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ に基づくといえる．ところで，$\{\varphi_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ は標準内積に関しては正規直交基底を成したが，

$$c\,(\varphi_i, \varphi_j) = C_{ij} \tag{22}$$

なので，C が単位行列でない限り，$\{\varphi_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ は内積 c の直交系ではない．しかし，内積 c の正規直交基底は次のように導入できる．式(13)の正則マトリクス U を使って基底の変換

$$\tilde{\varphi} = \varphi_j U_i^j \tag{23}$$

を行なう．新しい基底関数 $\{\tilde{\varphi}_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ は内積 c に関して正規直交系をなし

$$c\,(\tilde{\varphi}_i, \tilde{\varphi}_j) = \delta_{ij} \tag{24}$$

となることがわかる．この基底変換によりマトリクス GK は $\tilde{K}$ に変換される．つまり方程式(10)は，方程式(3)を有限要素基底関数 $\{\varphi_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ を使って表示したもの，方程式(12)は同じ方程式(3)を内積 c に関する正規直交基底関数 $\{\tilde{\varphi}_j\}_{j=0,1,\ldots,N-1}$ を使って表示したものである．

変換則(11)で右辺ベクトル f の変換則が u のそれと異なるが，これは f の定義(5)から来ており f が u と同じ種類のベクトルでない（u に双対なベクトルである）ことを示している．この違いは物理的にみても，例えば構造問題の場合，変位場 u は長さの次元，外力 f は力の次元をもち，両者の内積がエネルギーというスカラ量になることからも順当である．

2.3 前処理つきCG法

基本となる前処理付きCG法を例にとり，前処理が反復法の収束率に与える効果についておさらいしておく．係数行列 K が正定値対称のとき，前処理行列 G をもつCG法の収束特性は次で与えられるのであった．

$$\| u_j^{\mathrm{err}} \|_K \le 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1} \right)^j \| u_0^{\mathrm{err}} \|_K \tag{25}$$

ここで u_j^{err} は第 j ステップの反復誤差である．κ は GK の条件数 $\kappa \equiv \lambda_{\max} / \lambda_{\min}$ である．前節で述べたとおり，GK の固有値は正定値対称行列 $U^T K U$ の固有値と同じなので，固有値はすべて正の実数であり，$\lambda_{\max}$ はその最大値を，$\lambda_{\min}$ はその最小値を表わす．$\| u \|_K$ は正定値対称行列 K に基づくベクトル u のノルム（$\| u \|_K \equiv \sqrt{u \cdot K u}$）である．この収束特性は，前処理行列 G 付きCG法では，各反復ステップ j で更新される近似解 u_j が，その初期近似解 u_0 との差を部分空間span $\{G r_k\}_{0 \le k \le j-1}$ 内に含みつつ，誤差ノルム $\| u_j^{\mathrm{err}} \|_K$ が最小になるように選ばれることからくる[3]．誤差ノルムが最小というのは，汎関数

$$I\,(u) \equiv \frac{1}{2}\, u^T K u - u^T f \tag{26}$$

の最小化原理（変分原理）からきており，この原理は積分方程式(3)に表現されている．

式(25)を見ると前処理付きCG法の場合，前処理行列 G を使って GK の条件数を減らせば収束効率が向上することがわかる．領域分割法では，大規模な線形問題を小規模な問題に分割することによって，並列処理を可能とすると同時に，前処理行列による条件数の低減に相当する効果をもたらし，反復処理の効率化が得られる．

3. 領域分割法

3.1 部分領域がオーバラップする領域分割法

領域分割法は部分領域(subdomain)がオーバラップする領域分割法と，オーバラップしない領域分割法の2種類に大別できる．初めに前者について簡単に紹介する．

領域分割法は，最初1870年代に *Schwarz* によって提案された[4]．その方法は交代型Schwarz法(alternating Schwarz method)と呼ばれ，2つの部分領域を合併してできた領域上の楕円型偏微分方程式の境界値問題を解

く手法であったが，元もとは数値計算を意図したものではなかった．そこでは，各部分領域に制限した境界値問題を交互に解くことによって，全体領域の解を求める．2つの部分領域がオーバラップすること(例えば3次元問題の場合ならば，ある体積を共有するようにオーバラップする)がこの方法の要である(**図1**参照)．つまり，一方の部分領域の境界の一部は，他方の部分領域の内部に含まれており，その逆も成り立つという状況である．一方の部分領域においては境界になっており，他方においては内部になっている領域は，一方については境界条件が課され，他方では解が求められるような領域である．したがってその領域では，他方の解が一方の境界条件を与えるという関係にある．各部分領域の境界値問題を交互に解くことにより，解の更新と，境界条件の更新が交互に行なわれ，これを繰り返せば条件がよければやがては平衡状態に収斂するであろう．こうして平衡状態に到達した2つの解は，全体領域の解のそれぞれの担当領域を表すことになる．

このアイデアを数値計算の手法として，一般の複数の部分領域より成る問題に拡張したものが，部分領域がオーバラップするcoarse空間(マルチグリッド法におけるcoarse空間．次回で解説する)のないSchwarz法(one level overlapping Schwarz method)と呼ばれる方法で，領域分割法のうちで最も簡単なものである．この方法はブロックJacobi法，ブロックGauss-Seidel法の一般化とみなせる．

オーバラップするSchwarz法には，加法的Schwarz法(additive Schwarz method)，乗法的Schwarz法(multiplicative Schwarz method)の2種類がある[15]．加法的Schwarz法は次のとおりブロックJacobi法に等価である．いま，解析対象領域全体Ωに幾つかのオーバラップする部分領域Ω^Iを設定したとする．部分領域Ω^I上のDirichlet境界条件をもつ場の方程式を離散化して得られる係数マトリクスをK_{II}とする．全体の係数マトリクスKのうち，$\partial\Omega^I$上の自由度とΩ^I上自由度との相互作用を表す成分だけ取り出したものをK_{IJ}とする．Ω^I上のDirichlet境界条件を満たす場の量の空間をV^Iと記す．全体自由度の空間VのベクトルuのV^I−成分をu^Iと記す．同じく右辺ベクトルfのV^I−成分をf^Iと記す．すると線形方程式(6)は次のように等価に書き直される．

$$K_{II}u^I = f_I \tag{27}$$

加法的Schwarz法は，方程式(27)をブロックJacobi法で解く手法である．乗法的Schwarz法は同じく方程式(27)をブロックGauss-Seidel法で解く手法である．

3.2 反復型部分構造法

部分領域がオーバラップしない領域分割法について簡単に紹介する．この方法は部分構造法(substructuring method)と呼ばれる．本講座1回目でも述べたように，これは元もと直接法に基づいたアルゴリズムであったが，後に直接法のところを反復法に替えた方法が有望視されるようになった．これを反復型部分構造法(iterative substructuring method)あるいはSchur補元法(Schur complement method)と呼ぶ．この方法では，その概念やデータ構造を従来のものとほとんど変えずに，従来のものより効果的な解法が期待できる．

部分領域がオーバラップする領域分割法では，オーバラップする部分が狭まるほど，計算コストは下がるが，その収束率も下がってしまう．オーバラップする部分が無くなる(隣り合って接しているだけの場合など)ともはや反復しても解は全く更新されなくなる．この難点に対処すべく，反復型部分構造法にはオーバラップする領域分割法にはない処理，部分領域が接し合っている内部境界上の自由度について解く処理が追加される(**図2**参照)．

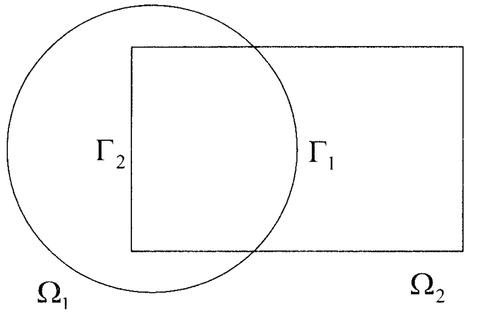

図1　2つの部分領域がオーバラップする領域分割法
Ω_1，Ω_2は2つの部分領域，Γ_1はΩ_2の内部に含まれるΩ_1の境界の一部，Γ_2はΩ_1の内部に含まれるΩ_2の境界の一部である

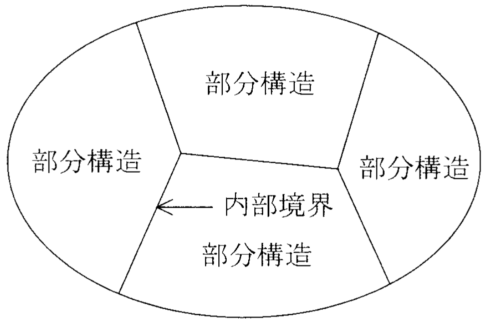

図2　部分構造法

部分構造法の基本的なアイデアは次のとおりである．部分構造はオーバラップせず，内部境界を挟んで隣り合っている．したがって，自由度は各部分構造内と内部境界上のものに分けられる．全自由度の空間をVとし，部分構造内に含まれる自由度の空間をV^I，内部境界上の自由度の空間をV^Sと記す．ベクトルの成分の順序を並べ替えて上のほうに内部自由度の成分u^I，下のほうに内部境界自由度の成分u^Sが来るようにすると，全体のベクトルuおよび係数マトリクスKは次のようにブロック表示される．

$$u=\begin{pmatrix} u^I \\ u^S \end{pmatrix},\quad K=\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ K_{SI} & K_{SS} \end{pmatrix} \tag{28}$$

方程式は

$$\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ K_{SI} & K_{SS} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u^I \\ u^S \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f_I \\ f_S \end{pmatrix} \tag{29}$$

となる．ここから次のような段取りで，部分構造内部自由度が消去できる．K_{II}はV^I上で正則であると仮定して，係数マトリクスを次のようにブロックLU分解する．

$$\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ K_{SI} & K_{SS} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ K_{SI}K_{II}^{-1} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ 0 & S \end{pmatrix} \tag{30}$$

ここで，SはKのSchur補元マトリクス(Schur complement matrix)と呼ばれ次で定義される(あるいは式(30)自体が定義式ともいえる)．

$$S\equiv K_{SS}-K_{SI}K_{II}^{-1}K_{IS} \tag{31}$$

$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -K_{SI}K_{II}^{-1} & 1 \end{pmatrix}$が$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ K_{SI}K_{II}^{-1} & 1 \end{pmatrix}$の逆行列になることから方程式(29)は次のように書き直せる．

$$\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ 0 & S \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u^I \\ u^S \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -K_{SI}K_{II}^{-1} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f^I \\ f^S \end{pmatrix} \tag{32}$$

この方程式は，まず2行目の方程式をu^Sについて解き，これを1行目の方程式に代入してu^Iを解く．ここでは全自由度のうちu^Sが独立な変数であり，u^Iはu^Sの従属変数として扱われる．これは，一般にある領域上の微分方程式の解はその境界条件で決まるが，この境界上の値が境界内部の値を定めるという一般的な関係が，内部境界自由度と部分構造内部自由度の関係に反映しているわけである．

解析領域がn個の部分構造に分かれているときは，ブロックマトリクスK_{II}はn個のブロックからなる対角ブロックマトリクスになる．したがって計算はブロックごとの計算を基本にして行なわれ，これを並列に処理することができる．

直接型部分構造法は，Schur補元マトリクスSを実際に直接法で扱うが，特に大規模問題の場合SにはK_{II}^{-1}が含まれるのでその算出自体に大きな計算コストが掛かり，さらにSは一般にスパースではないのでこれを直接扱うのはメモリ消費の面でも不利である．反復型部分構造法では，Sは陽には扱わずSの作用と同じ効果をもち計算コスト，メモリ使用量を削減できるほかの処理で代用する．この代用処理とは，定義式(31)から容易に確かめられる次の関係式を利用したものである．

$$\begin{pmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ K_{SI} & K_{SS} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u^I \\ u^S \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ Su^S \end{pmatrix} \tag{33}$$

この式で，u^Sは与えられたベクトル，u^Iは未知ベクトルである．つまり，第1行をu^Iに関する方程式と見てこれを解き，その解u^Iを使って第2行左辺を計算すれば，u^Sに直接Sを掛けたものと等しいベクトルが得られる．これは構造解析の場合に当てはめて解釈すれば，外力ゼロで，内部境界上で拘束条件が与えられている場合の内部境界上の反力の計算に相当する．計算量の大半は線形方程式求解一回分，計算にはスパースであることが期待できる元の係数行列データしか使われないのでメモリも節約できる．

3.3 領域分割法と前処理との関係——Schwarzのフレームワーク

既に述べたように，領域分割法は反復法に対する前処理法として位置付けられる．この定式化の枠組みは*Schwarz*のフレームワーク(Schwarz framework)と呼ばれており，以下の解説は*Schwarz*のフレームワークについて述べたものともいえる[1]．逆に，Schwarzのフレームワークで特徴付けられる方法はすべてSchwarz法(Schwarz method)と呼ばれ，反復型部分構造法もSchwarz法の一種である．

これまでどおり問題を正定値対称問題に限る．線形方程式(6)から境界条件により束縛される自由度を取り除いて整理して同じく方程式(6)の形にまとめたとする．Ωは有限要素分割されており，VをΩ上の拘束されない全自由度のベクトル空間とする．Kは正定値対称行列である．

ここで，Ωを領域分割する．この分割は要素を切断するようには取らず，境界面は必ず要素の面(2次元の場合は線分)になるものとする．Iを分割された部分領域のインデクスとして各部分領域をΩ^Iと記す．Ω^Iは互いにオーバラップしてもしなくてもかまわない．しかし，もちろん部分領域は全体でΩを覆い尽くしてい

なければならない．Ωの自由度をΩ^Iとその境界に含まれる節点の自由度に制限した自由度の空間をV^Iとする．V^IはVの部分ベクトル空間になる．

ここで，V^I上の半正定値対称行列K^Iを定義して，V^I上の線形方程式

$$K^I u^I = v^I \tag{34}$$

を設定する．u^I，v^IはV^Iのベクトルである．K^Iは，KをV^Iに制限した行列，あるいはΩ^Iのメッシュから得られる係数行列などにすればよい(この2つの行列は一般に等しくない．なぜならΩ^Iの内部境界上の節点に対応する有限要素基底関数はΩ^Iに制限されるとΩ^Iの外の部分が削り取られて変ってしまうから)が，両行列とも正則になるとは限らない．そこで，K^Iとしてこれらの行列を正則化したものなどを許すためにとりあえずK^IはKとは独立に定義できることにしておく．方程式(6)をグローバルな方程式，(34)をローカルな方程式と呼ぶことにする．

Vには有限要素基底関数に基づく自然な内積が定義されている．V^Iにもその内積を受け継がせる．P^IをV^Iへの直交射影子とする．直交射影子の定義からP^Iは対称行列である．方程式(34)で定義したK^Iは半正定値対称と仮定した．正定値であれば逆行列が存在するが，そうでないときは一般化逆行列を考える．グローバルな自由度とこのローカルな逆行列あるいは一般化逆行列を結びつけるため，グローバルなベクトルをローカルなベクトルに写す行列G^Iを次で定義して，ローカルな前処理行列と呼ぶこととする．

$$G^I \equiv (K^I)^- P^I \tag{35}$$

ここで$(K^I)^-$はK^Iの一般化逆行列(正則の場合は逆行列を表わすとする)である．

部分領域がオーバラップする領域分割法の場合

31節のオーバラップするSchwarz法の場合は，方程式(27)のK_{II}がローカルな方程式のK^Iになり，G^Iは$(K^I)^-$になる．

反復型部分構造法の場合

32節に述べた反復型部分構造法の場合はK^IをまずΩ^Iのメッシュから得られる係数行列にとり，各部分構造Ω^Iをさらにその境界と内部に分けて，式(30)のK_{II}とSを各部分構造に分けたものK^I_{II}とS^I，あるいはS^Iが正則でないときにそれに単位行列を適当にスケール倍したものを加えて正則化したものなどでローカルな方程式を設定する．対応するローカルな前処理行列はそれぞれ$(K^I_{II})^{-1}P^{(i)I}$，$(S^I)^- P^I$あるいは正則化されたS^Iの逆行列×P^Iとなる．ここで$P^{(i)I}$はΩ^Iの内部自由度空間へのK^I直交射影子である(詳しくは次回説明する)．S^Iの代わりにK_{bb}を各部分構造に分けたものK^I_{bb}やいっそのこと単位行列に簡素化して事実上内部境界自由度のローカルな方程式を無くしてしまう方法もある．

前処理行列Gとの関係

領域分割法と前処理行列Gとの関係は次の通りである．部分領域がオーバラップする領域分割法，反復型部分構造法の場合ともに，上記のローカルな前処理行列からグローバルな前処理行列Gを

$$G = \sum_I G^I \tag{36}$$

と定義する．このGにより元のグローバルな方程式を次のように書き直す．

$$GKu = Gf \tag{37}$$

もちろんこの前処理は，方程式(34)のK^Iの定義に依存する．P^IがV^Iへの直交射影子でK^IはV^I上で半正定値対称だから，G^IもV^I上で半正定値対称，したがってGは半正定値対称である．しかし，グローバルな正定値対称行列Kを部分領域に分解すると半正定値になることを逆にたどれば，K^Iを適切に設定して半正定値対称のG^Iが集まってできるGが全空間V上で正定値対称になるようにできる．第22節で述べたことにしたがうと，Vの内積を標準のものからGの逆行列に替えたとみなせる．この新しい内積は，部分領域自由度が相互に独立でないので正確ではないが，おおよそK^Iの重ね合せで構成されているといえる．

この前処理は，数値計算上次のように処理される．残差ベクトルrに前処理Gを施す場合を考える．Grの計算は，まずベクトルrを各部分領域のローカルなベクトルr_Iに分解する．次にローカルな方程式(34)，すなわち

$$\begin{cases} G^I r_I = x \\ K^I x = r_I \end{cases} \tag{38}$$

を各部分領域ごとに独立に解く．最後に得られた各$G^I r^I$を全部分領域に渡って足し合わせる．反復法で解く場合，方程式(37)の求解処理は前処理がその大半を占めるが，ここに示したように，その前処理の中核が各部分領域に分解され部分領域ごとに独立に行なわれる．

以上のグローバルな前処理行列Gの定義(36)は実は一般的でなく，話を簡単にするため第31節で述べた

加法的Schwarz法と第3.2節の反復型部分構造法の定式化に限定したものである．乗法的Schwarz法まで含めるためには，次のようにする．部分領域の数をnとすると，n変数の多項式$Q(x_0, \cdots, x_{n-1})$で定数項ゼロのものを導入する．そこでグローバルな前処理GをG^iによって次のように定義する．

$$GK = Q\left(G^0 K, \cdots, G^{n-1} K\right) \tag{39}$$

ここで，多項式Qを

$$Q\left(x_0, \cdots, x_{n-1}\right) = 1 - \prod_i \left(1 - x_i\right) \tag{40}$$

と選んだものが乗法的Schwarz法である．すでにおわかりの通り，加法的Schwarz法では

$$Q\left(x_0, \cdots, x_{n-1}\right) \sum_i x_i \tag{41}$$

を取ったものである．乗法的，加法的と呼ばれるゆえんもわかる．さらに，他の多項式を採用することによって，加法的，乗法的以外の様々なタイプのSchwarz法が定式化できる．しかし，現在のところ実用面で有望なものは，最もシンプルな加法的Schwarz法のようである．

4．今回のまとめと次回の予定

今回は，有限要素法とその離散化により得られる線形方程式の前処理，反復法に対する前処理の効果について復習し，領域分割法についての概要を述べた．領域分割法は線形方程式の解法における前処理とみなせる．この枠組みを*Schwarz*のフレームワークという．次回は，反復型部分構造法の前処理にマルチグリッド法を採り入れたBDD法(Balancing Domain Decomposition method)を中心に，領域分割法の高速化手法について述べる予定である．

参　考　文　献

1) Barry F. Smith, Petter E. Bjørstad, William D. Gropp: Domain decomposition: parallel multilevel methods for elliptic partial differential equations, Cambridge University Press (1996)

2) 藤野清次，張紹良 反復法の数理，朝倉書店(1996)

3) 森正武，杉原正顕，室田一雄 線形計算「岩波講座，応用数学」，岩波書店(1994)

4) H. A. Schwarz Gesammelte Mathematische Abhandlungen, volume **2**, 133/143 Springer, Berlin (1890) First published in Vierteljahrsschrift Naturforsch. Ges. Zurich, 15, 272/286 (1870)

5) P. Le Tallec Domain Decomposition Methods in Computational Mechanics, Computational Mechanics Advances, **1**, 121/220 (1994)