# 電磁流体力学シミュレーションの高速数値解法

曽谷勝義
NEC

# A Fast Numerical Solution of Electromagnetic－Hydrodynamics Simulation

Katsuyoshi　Sotani
NEC

Abstract.　Numerical solution by magneto-fluid － 2 fluid hybrid type simulation represented electromagnetic-hydrodynamics is used the ADI method , which is considered for fast computation due to indicate the characteristic of matrix.

Recently , in the BCGSTAB method proposed for Krylov subspace solution, the improved version used to the TF-BCGSTAB method put on TF preconditioned by new idea , we report on having achieved numerical simulations which are 9.6 times faster than the conventional method.

***Key Words*　:**　Electromagnetic-hydrodynamics , Computational Physics , ADI Method ,
TF-BCGSTAB Method , Fast Numerical Computation , Supercomputer Simulation

## １．はじめに

計算を紹介する研究では、理工学問題に関しては差分系を変更し、理論解との比較評価であったり、数値計算の新規研究として取り扱ったものでは、Toeplitz 行列など数学上のモデルを大規模問題として作り、その研究報告があげられている。当論文に今回採り上げた事例は、計算物理への具体的研究として、行列サイズそのものは決して大きい物ではない。日頃研究対象としての現実的な物理モデルであり、数値解の打ち切りも数学的厳密性に近づけたものではなく$10^{-6}$程度の現実的許容範囲にしている。また当ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝｺｰﾄﾞは次世代ｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀ性能予測(単一 CPU)の為に用いられているｱﾌﾟﾘｹｰｼｮﾝの１つでもある。この電磁流体力学ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝの高速数値解法を目指し、次の３つの点から研究を行った。①連立一次方程式が対称行列の問題に対して、対称に適する解法だけではなく、非対称行列の解法まで拡大して適する解法を調査した点、②行列の前処理として、多く研究されて来た従来の不完全ｺﾚｽｷｰ分解や不完全 LU 分解だけではなく、最近型の三項対角近似因子分解(TF)に対して実用化を評価した点、③高速解法を目指した上記①＋②の組み合わせによる解法がｵﾘｼﾞﾅﾙ版と改良版とを比較して、計算精度上問題がないかとした現実面からの可能性を検討した点である。

以下電磁流体力学における磁気流体二流体混合型ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝｺｰﾄﾞに関して、簡単な概要紹介[5]を含めながら、新規の数値解法改良の比較研究結果を報告する。

## ２．磁気流体二流体混合型シミュレーションコード解説

電磁流体力学(MHD)に関するﾃｰﾏを数値解法の点から取り上げる。ﾌﾟﾗｽﾞﾏ物理における複雑な非線形現象を２次元問題とした数式ﾓﾃﾞﾙで近似し、数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝを実施したい。この分野では時間ｽﾃｯﾌﾟに関わる問題となり、大規模計算になることが多い。ここでは主ﾌﾟﾗｽﾞﾏ(完全電離ﾌﾟﾗｽﾞﾏ)と周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏ(中性子を含む低い温度のﾌﾟﾗｽﾞﾏ)という異なったﾌﾟﾗｽﾞﾏの結合系における相互作用、及びその物理的解明の実施と、磁気流体二流体混合型ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝｺｰﾄﾞの数値解法改良を目指したい。

主ﾌﾟﾗｽﾞﾏが作る物理量(電流等)に対しては、周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏがその厚みの方向(主ﾌﾟﾗｽﾞﾏと周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏを結ぶ磁力線の方向)に積分された物理量で応答するﾓﾃﾞﾙとなっている。この時の周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏは主ﾌﾟﾗｽﾞﾏで占められたｼﾐｭﾚｰｼｮﾝﾎﾞｯｸｽに対して応答する境界条件としての役割を果たす。この境界条件は主ﾌﾟﾗｽﾞﾏからの入力量に応じて周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏの厚みと垂直な方向(磁力線に対して垂直な方向)の平面内の変形されたﾃﾞｨﾘｸﾚ問題を解くことで決定される。即ち主ﾌﾟﾗｽﾞﾏで起きた変動は、周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏからなる境界に入力量の変動と言う形で影響を与え、この入力量の変動に応じて周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏの振る舞いが変形ﾃﾞｨﾘｸﾚ問題を解くことによって決定され、この結果得られた周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏの変動が、電場等の物理量として再び主ﾌﾟﾗｽﾞﾏに影響を与えるといった、いわゆるﾌｨｰﾄﾞﾊﾞｯｸ現象が行われている。(Fig.1.参照) このﾌｨｰﾄﾞﾊﾞｯｸ効果が主ﾌﾟﾗｽﾞﾏと周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏの結合系で最も重要な課題であり、これを正確に計算させる必要がある。しかし多量のﾒｯｼｭ数を持つ変形ﾃﾞｨﾘｸﾚ問題を計算精度良く解く問題は、困難な場合が多い。そこで具体的な数値解法の特徴として、時間発展の計算方法は2 Step Lax-Wendroff 法により、空間微分に関しては中心差分法を用いており、また時間積分に関しては４次の Runge-Kutta-Gill 法に基づいた数式ﾓﾃﾞﾙから構成されており、これらから数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝを実施したい。(Fig.2.参照)

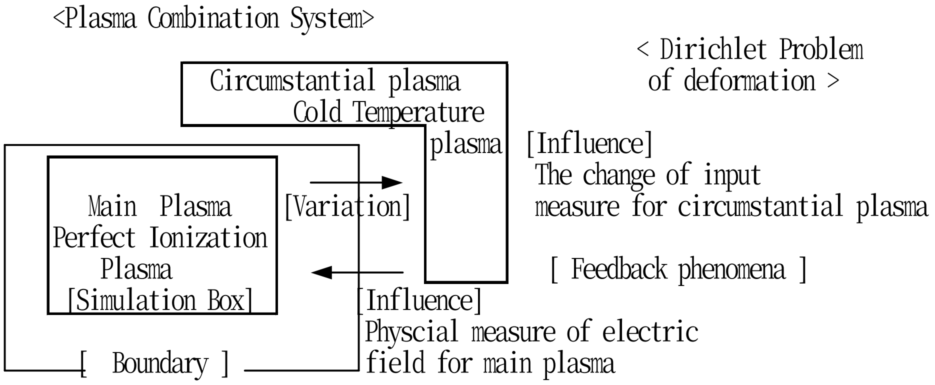
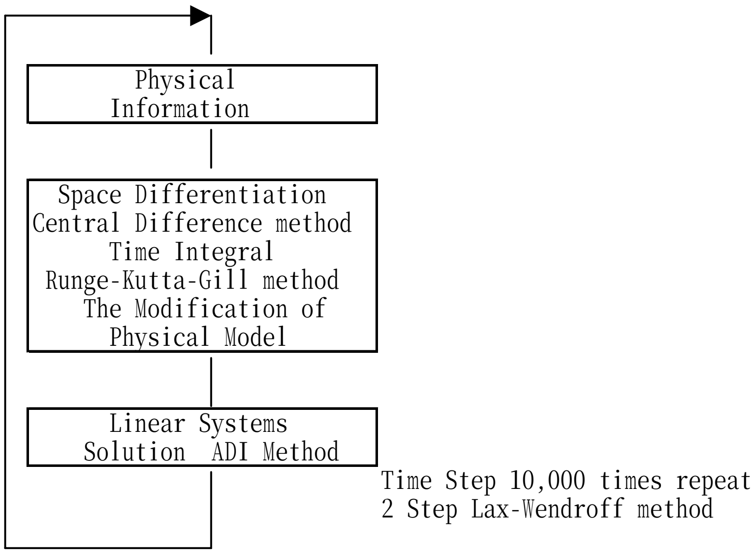


Fig.1. Relation between Main Plasma and Circumstantial Plasma



[ FORTRAN about 16,000 steps ]

[ Practical matrix size n=2,500×2,500 ]

Fig.2. Program Structure. (The Flow of PLASMA2WAY)

## ３．対象モデル

磁気流体二流体方程式の数式モデルを示す。

主ﾌﾟﾗｽﾞﾏに対する磁気流体方程式系

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\,\mathbf{v}) = 0 \quad , \quad \rho\,\dfrac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{j}\times\mathbf{B} - \nabla p \\ \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla\times\mathbf{E} \quad , \quad \mathbf{j} = \dfrac{1}{4\pi\mu_0}\nabla\times\mathbf{B} \\ \mathbf{E} = \mathbf{v}\times\mathbf{B} + \eta\,\mathbf{j} \quad , \quad \dfrac{\partial p}{\partial t} + \nabla\cdot(p\mathbf{v}) = (\gamma-1)(-p\nabla\cdot\mathbf{v} + \eta\,\mathbf{j}^2) \end{array} \right. \tag{3.1}$$

を適用する。ここで $\mathbf{v}, \mathbf{j}, \mathbf{B}, \mathbf{E}, \rho, p, \eta, \gamma$ は速度、電流、磁場、電場、質量密度、圧力、電気抵抗、断熱定数を表す。

周辺ﾌﾟﾗｽﾞﾏに対する二流体方程式系

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla\cdot(n\,v_j) = S_j - \alpha\,(n^2 - n_0^2) \quad , \quad j = i\ (\mathrm{ion})\ \text{ or }\ e\ (\mathrm{electron}) \tag{3.2}$$

$$m_j n \frac{d v_j}{d t} = q_j n\left(\mathbf{E} + \mathbf{v}_j\times\mathbf{B}\right) - \nabla p_j + R_j \quad , \quad j = i\ (\mathrm{ion})\ \text{ or }\ e\ (\mathrm{electron}) \tag{3.3}$$

式(3.3)の粒子の運動方程式を置換表現すると、次の式(3.4)で表現される。

$$n\,v_j = \frac{j}{q_j} + n\mu_{Hj}\frac{\mathbf{E}\times\mathbf{B}}{\mathbf{B}} + n\mu_{pj}\mathbf{E} + \frac{nv_n}{1+(\mu_\parallel\,\mathbf{B})^2} + \mu_\parallel\,\mathbf{B}\frac{q_j}{e}\frac{nv_n\times\mathbf{B}}{\mathbf{B}} \tag{3.4}$$

j = i ( ion ) or e (electron)

磁場、電場に対して $\kappa$ を二流体の境界面の単位法線ベクトルとすれば、磁力線は表面に沿っており、磁界の法線成分は０となるため、

$$\kappa\,\mathbf{B} = 0 \tag{3.5}$$

となる。ここで $v_j, R_j, S_j, m_j q_j, p_j$ はj種の粒子の速度、衝突などによる摩擦力、電流が流れ込んだり電離する事などによる密度増加の源泉項、質量、電荷、圧力を表す。 $n, n_0, \alpha$ は数密度、背景にあるﾌﾟﾗｽﾞﾏの数密度、再結合率を表す。 $v_n, \mu_{Hj}, \mu_{pj}, \mu_\parallel$ は中性粒子の速度、ﾎｰﾙ移動度、ﾍﾟﾀｰｾﾞﾝ結合度、及び磁場と平行な方向の移動度を表す。磁気流体二流体のこれら２つの異なった方程式系で表されるそれぞれのｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ領域が磁力線によって結ばれ、物理場の情報を交換するものが、このｼｽﾃﾑの基本的数値ﾓﾃﾞﾙとなっている。

## ４．離散化された差分系の方程式　（連立一次方程式）

式(3.1)、(3.2)、(3.3)は展開されて次の連立一次方程式

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \tag{4.1}$$

となる。当ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝｺｰﾄﾞはモデル上、計算の多くはこの連立一次方程式で占められている。

### 4.1　プログラミング言語による表現

これをﾌﾟﾛｸﾞﾗﾐﾝｸﾞ言語で表現すると次の形になる。

```
D(I,J)*U(I,J) + AXLYL(I,J)*U(I-1,J-1) + AYL(I,J)*U(I,J-1)
              + AXUYL(I,J)*U(I+J,J-1) + AXL(I,J)*U(I-1,J)
              + AXU(I,J)*U(I+1,J) + AXLYU(I,J)*U(I-1,J+1)
              + AYU(I,J)*U(I,J+1) + AXUYU(I,J)*U(I+1,J+1)
                          =  F(I,J) 、 (I=1,………,NX;J=1,………,NY)
```

### 4.2　行列の形式

磁気流体二流体方程式数式モデルで、計算の主要部分を占める式(4.1)の連立一次方程式の表現として、ﾉﾝｾﾞﾛ要素の位置を図式化する。(Fig.3. 参照)

NX=50　NY=50ｺ　matrixSIZE = NX*NY　２次元５点差分　時間ｽﾃｯﾌﾟ 10,000step

各行列 $\mathbf{A}_i\ (i = 1,2,\cdots, NY)$ 、 小行列 $\mathbf{A}_1 = 50 \times 50$ 、 $\mathbf{A} =$ 2,500 × 2,500

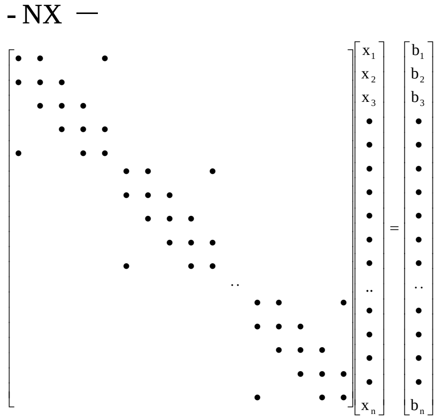


Fig.3.　The Form of Magnetic Flow - 2Flow Simulation Matrix

### 4.3　磁気流体二流体方程式当数式モデルの所見

当数式モデルにおいては実対称正定値、対角非負、非対角非正の優対角行列で、行列 $\mathbf{A}$ においては $\mathbf{A}^{-1} > \mathbf{0}$ である。この行列 $\mathbf{A}$ はスティルチエス( Stieltjes )条件を満足する。行列 $\mathbf{A}$ は空間格子点上に対応する３つの行列に分離する事が出来る。この時、それぞれの要素は空間上の水平、及び垂直方向の格子点に沿った形の方程式を中心差分近似する事が容易になる。これに適切な加速パラメータを用いて収束計算を高速化させる事が出来る。つまり当数式モデルに ADI 法を適用させる事は合理的な考え方である。 ここで行列 $\mathbf{A}$ がスティルチエス行列であれば、$\mathbf{A}$ は $\mathbf{M}$ 行列でもある[20]。 従って $\mathbf{A}$ が $\mathbf{M}$ 行列の性質を有する時、次の３点が言える。

1 ）安定的な数値解が得られる。

2 ） 正則分離が可能な行列であれば、絶対値最大固有値のスペクトル半径が１未満となり、行列 $\mathbf{A}$ の正則分離に対応する反復解法は収束する。

3 ）前処理法の考えが容易となり、大規模行列における計算の高速化が得られると共に、この時の反復解法は効率的と考えられる。従って当モデル解法に適した勾配法系に、適切な前処理をする事で、より高速計算の実現が期待出来る。

## ５．オリジナルコードの解法

連立一次方程式の解法では、MHD ﾓﾃﾞﾙにおける行列の性質の特徴から、ｵﾘｼﾞﾅﾙｺｰﾄﾞは ADI 法に基づいて解法されている。この解法は条件に適したある種の行列では高速で安定した解法として、いろいろ評価されている。そして優れた解法であることが知られている。

### 5.1　ADI 法(Alternating-Direction Implicit Iterative Method)要旨

Peaceman と Rachford は反復法の長所である高速解法の中に、直接法の長所である厳密解法の組み込み研究を行い、行方向求解、列方向求解による交互方向の解法を提案した(1955)[20]。ある種の疎な対称行列である場合 ﾊｳｽﾎﾙﾀﾞｰ変換により三重対角行列に導く事が出来る。特に大型な三重対角行列では、計算の高速性への著しい効果が見られる。行列 $\mathbf{A}$ がスティルチエス行列で有れば $\mathbf{A}$ を次の３つの行列に分ける事が出来る陰反復解法である。

$\mathbf{A}_{\mathrm{D}}$ (非負対角行列)、$\mathbf{H}$ ，$\mathbf{V}$ (正の対角要素と非正の非対角要素を持つ優対角行列)とすると

$$\mathbf{A} = \mathbf{H} + \mathbf{V} + \mathbf{A}_{\mathrm{D}} \tag{5.1}$$

の形になりここで 式(4.1)に対して、次の２つの式を導く。　( $\omega$ ：加速ﾊﾟﾗﾒｰﾀ)

$$(\mathbf{H} + {}^{1}\!/_{2}\mathbf{A}_{\mathrm{D}} + \omega\mathbf{I})\mathbf{x}^{\mathrm{i+1}} = (\omega\mathbf{I} - \mathbf{V} - {}^{1}\!/_{2}\mathbf{A}_{\mathrm{D}})\mathbf{x}^{\mathrm{i}} + \mathbf{b} \tag{5.2}$$

$$(\mathbf{V} + {}^{1}\!/_{2}\mathbf{A}_{\mathrm{D}} + \omega\mathbf{I})\mathbf{x}^{\mathrm{i+1}} = (\omega\mathbf{I} - \mathbf{H} - {}^{1}\!/_{2}\mathbf{A}_{\mathrm{D}})\mathbf{x}^{\mathrm{i}} + \mathbf{b} \tag{5.3}$$

$$\mathbf{H}_{1} = \mathbf{H} + {}^{1}\!/_{2}\mathbf{A}_{\mathrm{D}} \quad , \quad \mathbf{V}_{1} = \mathbf{V} + {}^{1}\!/_{2}\mathbf{A}_{\mathrm{D}} \tag{5.4}$$

$$(\mathbf{H}_{1} + \omega_{\mathrm{i+1}}\mathbf{I})\mathbf{x}^{\mathrm{i}+{}^{1}\!/_{2}} = (\omega_{\mathrm{i+1}}\mathbf{I} - \mathbf{V}_{1})\mathbf{x}^{\mathrm{i}} + \mathbf{b} \;, \quad (\mathbf{V}_{1} + \omega_{\mathrm{i+1}}\mathbf{I})\mathbf{x}^{\mathrm{i+1}} = (\omega_{\mathrm{i+1}}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{1})\mathbf{x}^{\mathrm{i}+{}^{1}\!/_{2}} + \mathbf{b} \tag{5.5}$$

第一の方程式つまり式(5.2)は水平格子線に沿って解き、第二の方程式 式(5.3)は垂直格子線に沿って解く事から交互方向陰反復解法と呼ばれる。行列の性質にもよるが、特に５線対角のﾌﾞﾛｯｸ行列である場合、この解法が大変適しており、一般的な直接法(ｶﾞｳｽｼﾞｮﾙﾀﾞﾝ法等)で解かす場合に比べて、相当高速に解ける事が良く知られている。

### ６．新数値解法への探求

今回対象とした磁気流体二流体方程式は、主ﾌﾟﾗｽﾞﾏと周辺の関係における変形ﾃﾞｨﾘｸﾚ問題を高精度に求解することを目指して、これを出来る限り正確に反映させる為には時間ｽﾃｯﾌﾟ毎に数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝを行うことにした。この磁気流体二流体混合型ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝの電磁流体力学では、数式ﾓﾃﾞﾙが連立一次方程式に展開され、その時のﾉﾝｾﾞﾛ要素が対角線にまとまる５点差分形式となる特徴があり、計算物理におけるこの分野では、ある条件を満たせば、従来から対角行列の数値解法に高速性をもたらす ADI 法が重要視され、効果的であると考えられてきた[24]。これに対して当論文では、最近ｸﾘﾛﾌ部分空間解法として提案されてきた BCGSTAB 法[9]に TF 前処理を施した TF-BCGSTAB 法を用いる事により安定した高速数値解法を目指した点にある。電磁流体力学変形ﾃﾞｨﾙｸﾚ問題の事例研究に於いて、対称非対称にも適用出来るｸﾘﾛﾌ部分空間解法を前処理することによる提案である。今回の研究では、更に ILUBCG 法、及び ICCG 法に対しても参考として比較検討をした。

### ７．シミュレーションコード改良への考え方

Hestenes と Stiefel は一次独立なﾍﾞｸﾄﾙを定義し、空間内を直交性を保って探索する考え方として共役勾配法(CG 法)を提唱した(1952)[13]。この解法は従来の反復解法(ﾔｺﾋﾞ法、ｶﾞｳｽ･ｻﾞｲﾃﾞｨﾙ法)に比べて高速求解が期待出来るが、対称行列の解法を主としており、行列が限定されてきた。その後、非対称行列への求解方法への探索研究も行われ、一方で各種の前処理(Preconditioning)を施す事で計算の効率化を目指した形式があり、これらは CG 法系として発展し、現在は幾つもの種類が存在している[16]。

当数式モデルは対称行列であるが、最適解法を考えるに於いて、非対称行列に迄拡大検討したい。CG法系を用いての非対称行列への展開は次の形が考えられる。

１）双対な方程式を定義してもとの行列と合わせて(拡大した)対称形に導き求解する方法、
２）もとの行列の自乗形式で対称形に導き求解する方法、
３）もとの行列の転値行列を(左から)掛けて対称形に導き求解する方法等、が考えられる。

このうちｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑとして一般に普及しているものが１）と２）であり、３）の方法によると、著者の研究では、条件数が比較的少ない行列(概ね$10^2$以内)に於いては安定解が求められるが、数式モデルにより時間が多くかかる点がある。１）と２）で、その解法をクリロフ部分空間の点から高速安定解法を目指したものが、今回採り上げたBCGSTAB法 [補足1] である。非対称問題への高速解法ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑは対称問題へも容易に適用可能である。この解法へ導く迄に、前処理を行う事は計算の効率を高めることになる。前処理を含めた解法は与えられたﾏﾄﾘｯｸｽに対して、適切な処理により少しでも密集固有値形に導き、条件数を改良するｱﾌﾟﾛｰﾁ方法である。幾何学的には、n次元固有値空間における超楕円体が球体により近づく事を意味し、これにより数値解法が容易になってくる。この前処理の後、共役勾配法系を適用することは、与えられた空間の中で、最短距離で解に収束させる事を意味している。前処理には不完全LUや不完全なｺﾚｽｷｰなどの分解が一般的である[15]。

今回は近年DOI-HARADAが提案した三項対角を用いたTF前処理に着目した。これはｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀの高速計算を目指し、並列的にｸﾞﾘｯﾄﾞﾎﾟｲﾝﾄを連続計算させる考えであり、ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを含めて詳細は文献[4]等で見あたる。この方法は行列の形式、特徴にもよるが疎な規則行列に対して効率が良い事が判明した。前処理として用いたTF法は、計算のための格子点を並列計算させる形をとり、そのときの基礎反復法としてBCGSTAB法は条件数が比較的大きくても、縮退傾向が見られない行列に対しても、安定な解を求める事が期待できる。つまりTF-BCGSTAB法は対称非対称に関係なく疎な規則大規模行列の解法に効果を発揮させる事が期待できる。(Fig.4.参照)

参考に比較対象として選定したBCG法は、１）を代表する解法であり、非対称行列に対する安定した解法である。多くの非対称行列にｽﾑｰｽﾞに求解することが知られている。これは対称行列に対しても安定して効果を発揮すると予想出来る。このBCG法には前処理として著名なILUを用いている。更に改良版として対称行列に効果を発揮してきたICCG法の場合とも合わせて検討したい。

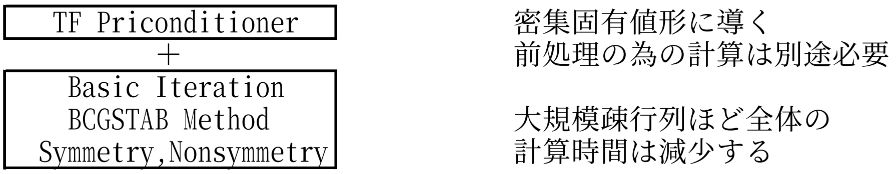


Fig.4. The Image for TF Preconditioner.

[補足1]

過去の幾つかの研究によれば、数学的疑似モデルでの計算を含めて、前処理として効果をもたらすCG法に近接した領域に残差論に基づいたCR法系があり、このCR法に比べて

① BCG法は安定した性能をもたらす事が分かっている[16]。
② このBCG法を改良し、残差ベクトルを速く０にすることで高速求解を目指したCGS法はある面では高い評価を得ている[15]。しかしこのCGS法は大規模行列または繰り返しのある計算に於いて、内積計算を特徴とするベクトル計算機では丸め誤差を伴う時のCGS法の自乗性による非収束の拡散性を指摘している研究もある[26]。

以上より①②の特徴を考え、今回の磁気流体二流体モデルには第三の解法

③ BCGSTAB 法に見る残差ベクトルの考えが実モデルに有効であり、残差多項式の理論と数値安定性の点から、適していると判断し、ｵﾘｼﾞﾅﾙｺｰﾄﾞと比較すべき代表的解法として TF 前処理の基礎反復に選定した。

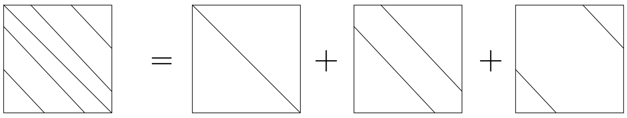
## ８．改良版シミュレーションコードとして用いた解法

計算物理に広く使われている ADI 法を用いたｵﾘｼﾞﾅﾙｺｰﾄﾞに対して、三項対角近似因子分解としての TF 前処理を採り上げ、その実用性を評価したい。そしてその時の基礎反復として最近研究されているｸﾘﾛﾌ部分空間解法としての高速数値解法BCGSTAB 法を用いる。これは対称非対称問題に可能であり、汎用性に富み安定性かつ収束性もあり、高速反復解法を導く事が期待出来る。以下概要を簡単に説明する。

### 8.1 前処理法 〔TF 法 三項対角近似因子分解法〕

大規模行列に対する前処理として、三項対角近似因子分解の計算における考え方について、他の論文[4]に詳細が記載されており、前処理としての ILU と TF の有効性の比較も報告されている。 ここでは前処理行列の考えのみ簡単に紹介したい。

計算ﾓﾃﾞﾙが 2 次元 5 点差分係数行列の形で構成される時、行列 $\mathbf{A}$ に対してその対角行列を $\mathbf{A}_D$ 、ｘ方向の微分に関する副対角要素から構成される行列を $\mathbf{A}_x$ 、同じくｙ方向の行列を $\mathbf{A}_y$ として分離する。2 次元 5 点差分係数行列の構造としては以下に示される。(Fig.5.参照)



$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_D + \mathbf{A}_x + \mathbf{A}_y$$

Fig.5. Tridiagonal Approximate Factorization

この時の前処理行列は次の式(8.1)で定義される。

$$\mathbf{M}_{TF} = (\mathbf{A}_D + \mathbf{A}_x)\mathbf{A}_D^{-1}(\mathbf{A}_D + \mathbf{A}_y) \quad (8.1)$$

### 8.2 基礎反復 〔BCGSTAB 法〕

BCG 法の残差多項式は BCGSTAB 法の基にもなり、$R_k(\lambda)$ で表現され Lanczos 多項式と呼ばれる。この方法の概略は、行列の次数が大きくなると、本質的には特性方程式が複雑になり、数値計算が困難になる事が知られている。そこで高次方程式に対して、より効率的な収束条件を追求する必要性から考え出された。これにはｸﾘﾛﾌ部分空間 $\mathrm{Span}\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \cdots\cdots, \mathbf{A}^{n-1}\mathbf{r}_0\}$ を定義し、その中で Hermite 行列に対して、ｶﾞﾚﾙｷﾝ条件 $\mathbf{r}_{n+1} \perp K_{n+1}(\mathbf{A} : \mathbf{r}_0)$ を満たす残差を導く。この残差にｸﾞﾗﾑｼｭﾐｯﾄの直交化法を施すことで式を導き出す事が出来る。これにﾗﾝﾁｮｽ･ﾌﾟﾛｾｽにみる３項漸化式により２つのﾊﾟﾗﾒｰﾀ $\alpha_k$ , $\beta_k$ が導かれる。

$$R_0(\lambda) = 1 \quad , \quad (8.2)$$

$$R_1(\lambda) = 1 - \alpha_0 \lambda \quad , \quad (8.3)$$

(8.4) $$\mathrm{R}_{\mathrm{k}+1}(\lambda) = \left(1+\alpha_{\mathrm{k}}\frac{\beta_{\mathrm{k}-1}}{\alpha_{\mathrm{k}-1}} - \alpha_{\mathrm{k}}\lambda\right)\mathrm{R}_{\mathrm{k}}(\lambda) - \alpha_{\mathrm{k}}\frac{\beta_{\mathrm{k}-1}}{\alpha_{\mathrm{k}-1}}\mathrm{R}_{\mathrm{k}-1}(\lambda) \quad , \quad \mathrm{k}=1,2,\ldots\ldots$$

ここでパラメータ $\omega_{\mathrm{k}}$ を用いて

(8.5) $$\mathrm{Q}_{\mathrm{k}}(\ \mathbf{A}\ ) = (1-\omega_1\mathbf{A})(1-\omega_2\mathbf{A})\cdots\cdots(1-\omega_{\mathrm{k}}\mathbf{A})$$

とおく。 式(8.5)より BCG 法、及び BCGSTAB 法の残差ﾍﾞｸﾄﾙは次の形で表現できる。

BCG 法 ： $\mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}} = \mathrm{R}_{\mathrm{k}}(\mathbf{A})\mathbf{r}_0$

BCGSTAB 法 ： $\mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}} = \mathrm{Q}_{\mathrm{k}}(\mathbf{A})\mathrm{R}_{\mathrm{k}}(\mathbf{A})\mathbf{r}_0$

反復の為の２つのパラメータ $\alpha_{\mathrm{k}}$ ， $\beta_{\mathrm{k}}$ の計算方法

BCG 法 ： $\alpha_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}} = \dfrac{(\mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}*}\ \mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}})}{(\mathbf{p}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}*}, \mathbf{A}\mathbf{p}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}})}$ ， $\beta_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}} = \dfrac{(\mathbf{r}_{\mathrm{k}+1}^{\mathrm{B}*}, \mathbf{r}_{\mathrm{k}+1}^{\mathrm{B}})}{(\mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}*}, \mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{B}})}$

BCGSTAB 法 ： $\alpha_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}} = \dfrac{(\mathbf{r}_0^{*}, \mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}})}{(\mathbf{r}_0^{*}, \mathbf{A}\mathbf{p}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}})}$ ， $\beta_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}} = \dfrac{\alpha_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}}}{\omega_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}}}\dfrac{(\mathbf{r}_0^{*}, \mathbf{r}_{\mathrm{k}+1}^{\mathrm{S}})}{(\mathbf{r}_0^{*}, \mathbf{r}_{\mathrm{k}}^{\mathrm{S}})}$

BCGSTAB 法の場合

初期値 $\mathbf{x}_0$ を与え、残差 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ を計算し、$\mathbf{r}_0^{*} = \mathbf{p}_0^{\mathrm{S}} = \mathbf{r}_0^{\mathrm{S}} = \mathbf{r}_0$

( $\mathbf{r}_0^{*}$ ：適当なﾍﾞｸﾄﾙ、$\mathbf{p}_0^{\mathrm{S}}$ ：補助ﾍﾞｸﾄﾙ、$\varepsilon$ ：収束判定定数 )

```
k = 0,1,......., $\|\mathbf{r}_k^S\| \le \varepsilon\|\mathbf{b}\|$ まで繰り返す。
    $\alpha_k^S$ ,  $\mathbf{s}_k^S = \mathbf{r}_k^S - \alpha_k^S\mathbf{A}\mathbf{p}_k^S$
    $\omega_k^S = \frac{(\mathbf{s}_k^S, \mathbf{A}\mathbf{s}_k^S)}{(\mathbf{A}\mathbf{s}_k^S, \mathbf{A}\mathbf{s}_k^S)}$ ,  $\mathbf{x}_{k+1}^S = \mathbf{x}_k^S + \alpha_k^S\mathbf{p}_k^S + \omega_k^S\mathbf{s}_k^S$
    $\mathbf{r}_{k+1}^S = \mathbf{s}_k^S - \omega_k^S\mathbf{A}\mathbf{s}_k^S$
    $\beta_k^S$ ,  $\mathbf{p}_{k+1}^S = \mathbf{r}_{k+1}^S + \beta_k^S(\mathbf{p}_k^S - \omega_k^S\mathbf{A}\mathbf{p}_k^S)$
```

## ９．数値シミュレーション結果

オリジナル版の ADI 法、改良版 1, TF-BCGSTAB 法、改良版 2, ILUBCG 法、改良版 3, ICCG 法による数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ結果を表示する。

### 9.1 計算機環境

計算機環境 ｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀ SX5/1CPU ﾒﾓﾘ 32GB 倍精度 打ち切り $10^{-6}$ 時点での比較値

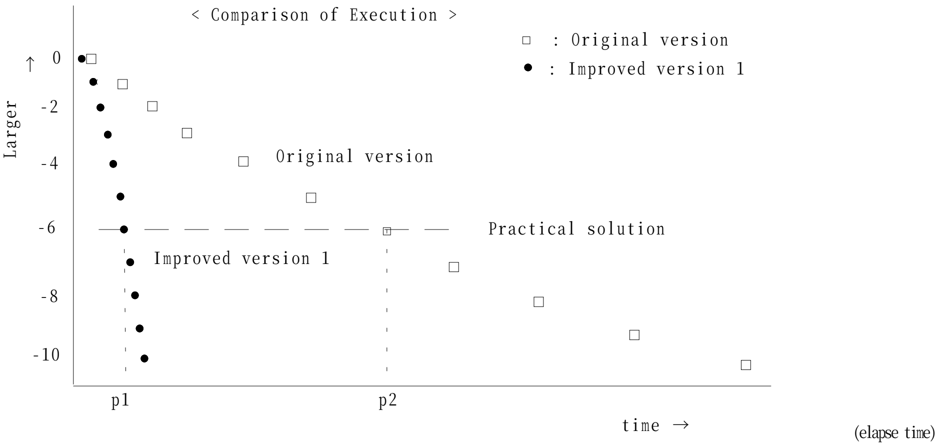
### 9.2 収束時間の比較

解法時に境界条件が変化すれば、CG 法系の反復法は収束性が変化する事が分かってきた。従って比較時は同じ条件としている。(Table 1.、Fig.6.、Fig.7. 参照)

Table 1. Comparative Table of Executive Time. (Elapse Time)

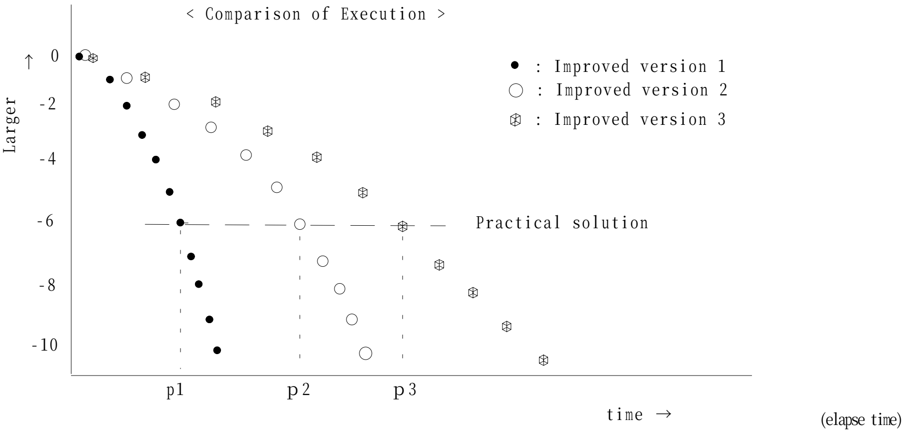
| Residual Norm | Original version ADI Method | Improved version 1 TF-BCGSTAB Method | Improved version 2 ILUBCG Method | Improved version 3 ICCG Method |
|---|---|---|---|---|
| $10^{0}$ | 134770 | 14487 | 15732 | 16957 |
| $10^{-1}$ | 334122 | 35663 | 38749 | 41612 |
| $10^{-2}$ | 510839 | 53508 | 58238 | 62524 |
| $10^{-3}$ | 851606 | 89208 | 97094 | 104018 |
| $10^{-4}$ | 1153057 | 120375 | 131022 | 140345 |
| $10^{-5}$ | 1455161 | 151582 | 164992 | 176485 |
| $10^{-6}$ | 1819740 | 189295 | 205969 | 220109 |
| $10^{-7}$ | 2170499 | 221789 | 241463 | 257206 |
| $10^{-8}$ | 2548635 | 257760 | 280638 | 299234 |
| $10^{-9}$ | 2953301 | 295720 | 321311 | 343078 |
| $10^{-10}$ | 3495908 | 342743 | 372386 | 395499 |

(msec)



p1: TF-BCGSTAB . 189,295msec p2: ADI . 1,819,740msec

Fig.6. Comparative Illustration 1.



p1: TF-BCGSTAB. 189,295msec p2: ILUBCG . 205,969msec p3: ICCG. 220,109msec

Fig.7. Comparative Illustration 2.

### 9.2　解法の計算精度検討

オリジナル版(ADI 法)と改良版(TF-BCGSTAB 法、ICCG 法)との各計算値の最大誤差は１％以内であった。(Table 2.参照)　　電場値の出力値一例　時間ｽﾃｯﾌﾟ 1,500 回値～ による。

Table 2. Computational Value for the Electric Field.

| SAMPLE | ADI Method | TF-BCGSTAB Method | ILUBCG Method | ICCG Method |
|---|---|---|---|---|
| No1 | 3.8582E+03 | 3.8567E+03 | 3.8562E+03 | 3.8576E+03 |
| No2 | 3.8603E+03 | 3.8570E+03 | 3.8568E+03 | 3.8588E+03 |
| No3 | 3.8620E+03 | 3.8598E+03 | 3.8593E+03 | 3.8604E+03 |
| No4 | 3.8746E+03 | 3.8699E+03 | 3.8698E+03 | 3.8715E+03 |
| No5 | 3.8791E+03 | 3.8738E+03 | 3.8737E+03 | 3.8780E+03 |
| No6 | 3.8860E+03 | 3.8895E+03 | 3.8894E+03 | 3.8901E+03 |
| No7 | 3.8927E+03 | 3.8932E+03 | 3.8931E+03 | 3.8928E+03 |
| No8 | 3.8969E+03 | 3.8951E+03 | 3.8950E+03 | 3.8991E+03 |
| No9 | 3.8987E+03 | 3.8977E+03 | 3.8979E+03 | 3.8986E+03 |
| No10 | 3.8998E+03 | 3.8996E+03 | 3.8992E+03 | 3.8997E+03 |

### 9.3　TF 前処理法の効率検討

改良版 TF-BCGSTAB 法の前処理となる TF 法の効率は残差ノルムにより、比率は少し変化しているが、全体的に優れていることが分かる。TF-BCGSTAB 法 と BCGSTAB 法との比較表を示す。(Table 3.参照)

Table 3. Comparative Table of Executive Time. (Elapse Time)

| Residual Norm | Improved version 1 TF-BCGSTAB Method | Improved version 4 BCGSTAB Method |
|---|---|---|
| $10^{0}$ | 14487 | 16251 |
| $10^{-1}$ | 35663 | 40185 |
| $10^{-2}$ | 53508 | 60391 |
| $10^{-3}$ | 89208 | 101024 |
| $10^{-4}$ | 120375 | 136854 |
| $10^{-5}$ | 151582 | 172788 |
| $10^{-6}$ | 189295 | 218452 |
| $10^{-7}$ | 221789 | 261373 |
| $10^{-8}$ | 257760 | 304646 |
| $10^{-9}$ | 295720 | 350428 |
| $10^{-10}$ | 342743 | 408964 |

(msec)

## １０．磁気流体二流体混合型シミュレーション２次元５点差分形の数値計算結果比較

数値計算結果は以下の形となった。(Table 4.参照)

Table 4. Comparative Table of Computational Results.

|  | Original version ADI Method | Improved version 1 TF-BCGSTAB Method | Improved version 2 ILUBCG Method | Improved version 3 ICCG Method |
|---|---|---|---|---|
| Total elapse time(msec) | 1,819,740 | 189,295 | 205,969 | 220,109 |
| Total Vectorized ratio(%) | 78.53 | 86.65 | 86.13 | 86.04 |
| Total practical time for applicable routine(msec) | 1,329,243 | 6,907 | 7,517 | 8,054 |
| The ratio of CPUtime for applicable routine(%) | 73.04 | 3.64 | 3.74 | 3.87 |
| Total practical number of times for applicable routine(round) | 5,420 | 5,827 | 5,849 | 5,865 |

### 10.1　考察

ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝｺｰﾄﾞ全体の実行時間において、ｵﾘｼﾞﾅﾙ版に対して改良版 1 では約 9.6 倍の高速結果が得られた。改良版 2 では約 8.2 倍の高速結果であった。連立一次方程式の解法部分だけを比較すれば、改良版

1 では約 192 倍の高速結果となっている。ｵﾘｼﾞﾅﾙ版で連立一次方程式の解法が７割を占める今回のｺｰﾄﾞでは、この部分の高速数値解法が全体のｼﾐｭﾚｰｼｮﾝに大きな影響力を及ぼしている。

　このコードの構成上、全体の実行時間(Elapse time)のうち 68%程度が CPU time となっている。ｵﾘｼﾞﾅﾙ版では十分に手の付けられていない箇所に対して、改良版では各ﾙｰﾁﾝに対してベクトル化率向上の為のﾁｭｰﾆﾝｸﾞを施した。ｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀ上での高速計算比較はベクトル化率により実行時間が大きく影響される事もあって、異なる数値計算ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑを同一条件で評価していない問題点はあるが、行列のサイズが大きくなる場合は前処理後の CG 法系は高速計算が可能である点は明言出来る。前処理法としては、不完全 LU 分解、不完全ｺﾚｽｷｰ分解等の研究が多く行われてきたが、Fig.6,Fig.7 に見る如く単一 CPU におけるｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀの高速計算を実現するには TF 法が優れており、これに付随する基礎反復も **[補足 1]** に記述している様に、実用的な物理モデルでは、計算精度においても、安定性においても BCGSTAB 法が優れている感じを受ける。TF 前処理を行う事によって今回のモデルでは単体の BCGSTAB 法に比べて、概ね 13%程度の効率アップが見込まれた。そして ILUBCG 法、ICCG 法より効果が有ることが判明した。磁気流体二流体混合型における解法には、前処理後の CG 法系では、TF-BCGSTAB 法が優れた数値解法と言える。

### 10.2　付記　条件数の検討

　著者によるこれまでの研究では、現実的な物理問題等において、反復法の中でも CG 法系の多くは条件数が十分に大きくなると、解が得られなくなる場合があり得る。今回のｹｰｽでも数値計算上、時間積分を１次のｵｲﾗｰ法にすると行列も若干変化し、条件数も変化する。この件に関する議論は別途の研究としたい。磁気流体二流体混合型ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝﾓﾃﾞﾙの条件数; $8.53608 \times 10^{2}$

## １１．まとめ

　本事例研究では、MHD の分野に於いて、計算物理の分野でその行列の性質から従来高速性をもたらすと考えられてきた ADI 法に対して、最近注目されている新しい数値解法に変更して評価した。物理モデルを離散化した後、対称モデルとなる場合、幾つもの数値解法の研究が行われている。疎な規則大規模対称行列の反復解法では、前処理付き CG 法系の ILUBCG 法、ICCG 法があり、高速計算と言われており、この検証も合わせて行った。

　今回の研究では、大規模行列に高速性をもたらす解法として最近提案されているクリコフ部分空間解法として Van der Vorst が提案した BCGSTAB 法に着目した。この考えの発展として大規模行列に対して DOI-HARADA 流にみる最適な前処理法である TF 前処理を行い、その時の基礎反復には対称非対称に関わらず行列に高速で良好な効果をもたらすこの BCGSTAB 法を用いる事による。これにより安定して高速計算を実現させる事が出来た。改良した数値解法は、ある種の計算物理に代表される規則大規模疎行列に適しており、これまで高速解法と考えられてきた ADI 法に比べて、９倍程度速く計算させる事が出来た。この解法は幾つかのモデルに対して条件数や収束性、安定性の面から、今後継続研究を行うべき検討の余地がある。

## 参考文献

[1] Axelsson,O.,Solution of Linear Systems of Equations,Lecture Notes in Mathematics, 572, Springer-Verlag,(1977).

[2] C.K. Birdsall and A.B. Langdon: Plasma Physics via Computer Simulation, McGraw-Hill , New York,(1985).

[3] C.W.Hirt,B.D.Nichols,N.C.Romero,SOLA : A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows,LA-5852(1975).

[4] Doi,S. and Harada,N., Tridiagonal Approximate Factorization Method : A Preconditioning Technique for Solving Nonsymmetric Liner Systems Suitable to Supercomputers, National Aero Space Laboratory , Special Paper 7,(1987).

[5] Dwight R.Nicholson,小笠原正忠他訳,プラズマ物理学の基礎,丸善㈱,1986.

[6] 藤野清次,竹内敏己,差分ｽｷｰﾑの再考によるﾍﾞｸﾄﾙ計算機向き不完全 LU 分解について, 日本応用数理学会論文誌,VOL.4,No.2,1994,pp.117-126.

[7] Golub, Jennings, A. :Matrix Computation for Engineers and Scientists,John Wiley,(1977).

[8] H. A. Van der Vorst, A vectorizable variant of some ICCG, SIAM, J.Sci.Stat.Comp., Vol.3(1982) pp.350-356.

[9] H. A. Van der Vorst Bi-CGSTAB,A fast and smoothly converging variant of Bi-CG For the solution of nonsymmetric linear systems,UNIVERSITY of UTRECHT,NR, 633, December1990.

[10] I. Gustafsson : BIT,18,(1978). PP.142-156.

[11] J. A. Mejerink and van der Vorst, Math. Comp.31,(1977), pp.148-162.

[12] N.Nakajima and H.Okuda, Parallel Iterative Solvers with Localized ILU Preconditioning for Unstructured Girds on Workstation Cluster ,4-rh Japan-US Symposium on FEM in Large -Scale Computational Fluid Dynamics Proceedings , pp.25-30,1998.

[13] M. R. Hestenes , E .Stiefel , Methods of conjugate gradients for solving linear systems , J. Res. Nat. Bur. Standard vol. 49,33-53,(1952).

[14] M.Tanaka, S.Murakami, H.Takamaru and T.Sato Macroscale Implicit, Electro-magnetic Particle Simulation of Inhomogeneous and Magnetized Plasmas In Multi-Dimensions , NATIONAL INSTITUTE FOR FUSION SCIENCE ,NIFS-91,Jun.1991.

[15] 村田健郎,小国力,三好俊郎,小柳義夫,工学における数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ,丸善,(1988).

[16] 村田健郎,名取亮,唐木幸比古,大型数値ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ,岩波書店,(1990).

[17] 日本物理学会,ｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀ,倍風館,(1985).

[18] P.C.Liewer and V.K.Decyk. J. Comput. Phys.85.302,(1989).

[19] Richard Barrett /Michael Berry 著,長谷川里美,長谷川秀彦,藤野清次訳,反復法,Templates, 朝倉書店,(1996).

[20] R.S.Varga 著,渋谷政昭他訳,計算機による大型行列の反復解法,ｻｲｴﾝｽ社,(1972), pp.52-117.

[21] T.Tajima, Computational Plasma Physics :With Application to Fusion and Astrophysics, Addison-Wesley Publishing Company ,Inc.(1989).

[22] 後保範,ﾍﾞｸﾄﾙ計算機向き ICCG 法、京都大学数理解析研究所講究録,No.514,(1988).

[23] V.C.A. Ferraro , C. Plumpton,桜井明訳,電磁流体力学・ﾌﾟﾗｽﾞﾏ入門,東京電機大学出版部,1963.

[24] 山内二郎,森口繁一,一松信,電子計算機のための数値計算法Ⅱ,培風館,(1968), pp.175-199.

[25] 張紹良,藤野清次,丸め誤差の分離に基づく共役勾配法の解法の収束特性の考察,日本応用数理学会論文誌,VOL.3,No.3,1993,pp.135-146.

[26] 張紹良,藤野清次,ランチョス･プロセスに基づく積型反復解法,日本応用数理学会論文誌, VOL.5, No.4,1995,pp.343-360.

曽谷勝義　E-mail : k_sotani@knes.nec.co.jp
〒540-8551 大阪市中央区城見一丁目 4-24 ( NEC 関西ﾋﾞﾙ ).