

3-Dimensional Matrix Expressional Form in an MHD Simulation Trial

Katsuyoshi Sotani
NEC, Japan

Abstract. In this study, we put in practice a new trial matrix expression that uses an MHD simulation. When we repeat a numerical solution of the matrix gradually changing the coefficient case of a general Linear System, it expresses a 3-dimensional matrix. Using the results of the Linear System, a numerical solution search for minimum value problems using algebra, we describe the point of the least minimum value, which is a solution of the 3-dimensional matrix in this 2-dimensional matrix among minimum value groups. We define a numerical solution as a repeating 2-dimensional usual form. This time, selecting a quality initial value's, we search for the fast convergence of a solution.

Here we try a 3-dimensional matrix expressional form of the Linear System and report on the solution's fast numerical results, which includes improvement of the initial value for an MHD simulation by using a numerical solution in a Preconditioning CG method.

Keywords : MHD simulation, computational physics, 3-dimensional matrix,
3-dimensional Linear Systems, improved initial value, fast simulation

電磁流体シミュレーションの3次元行列表現形式の試み

曽谷勝義
NEC

要約

この研究報告では、電磁流体シミュレーションを採り上げて、新しい行列表現の試みを行う。一般の連立一次方程式の場合に見る如く、係数値を少しずつ変化させて、行列を幾度も繰り返して数値解法を行う時、これを3次元で一度に表現することにある。連立一次方程式では、その数値解法は代数学的に最小値問題を求めることに帰結するが、この2次元行列の最小値群の中で、更に最も最小値となる所が、3次元行列の解になる考え方を記載する。数値解法は2次元を繰り返して行う従来の方式とする。この時、初期値を適正に選ぶことにより、解の高収束性を求めている。

ここでは連立一次方程式の3次元行列表現形式を行い、電磁流体シミュレーションに対して前処理系CG法を用いて、初期値の改良を含めた高速数値解法の結果を報告する。

1. はじめに

磁気流体二流体に基づく電磁流体シミュレーション (MHD) は、核融合の基礎研究を行う上で必要とされ、オリジナルの初期バージョンはロスアラモス研究所の核融合研究グループによって研究開発された。核融合の数値解析研究グループは、磁気流体の差分形式が連立一次方程式に展開された時に見る特徴ある形式 (ノンゼロ要素) を活かして、計算物理に効率的と考えられている ADI 法を用いて数値解を求めている。

今回の研究テーマとした電磁流体シミュレーションは、時間ステップにより連立一次方程式の係数値を少しずつ変化させて、同じサイズの連立一次方程式を幾度も計算することに特徴がある。この時、連立一次方程式を繰り返した形を一度に表現する手段として、3次元表現を試みた。連立一次方程式では、その数値解法は代数的に最小値問題を求めることに帰結する。

連立一次方程式に見る反復法の数値解法は、初期値の選び方により解への収束の速さが異なることが分かっている。初期値をゼロに選ぶより、求める連立一次方程式の数値解に少しでも近づいた値を初期値として選ぶ方が、当然ながら反復回数がより少なくて済む。一方でゼロではないが、数値解の離れた値から出発すると、反復の回数が減ることは期待出来ない。つまり初期値をうまく選ぶことで、高速収束させることが出来る。時間ステップによって物理情報が少し変化することにより、行列の値が少しずつ変化をする。しかし時間が経過するに従って、初期の連立一次方程式と終末の頃の連立一次方程式とでは、かなり変化して行くことも予想できる。磁気流体二流体混合型モデルでは、時間ステップが近い範囲では、よく似た係数値であり、時間ステップが過ぎ去って行くと、初期に比べて大きく変化した係数値になっている。Fig.1. はこの時の連立一次方程式の係数が、繰り返しと共に、刻々と新しい形へ変化して行くイメージ図を表現している。

ここでの研究テーマは、電磁流体シミュレーションが時間ステップにより、幾つもの連立一次方程式が構成されるが、行と列からなる本来の連立一次方程式に、これを縦方向に幾つも積み重ねた縦ベクトルの考えを採り入れ、この形を3次元ベクトル型連立一次方程式とした点であり、その時間ステップで、一定区間に入る係数の変化による一定数の連立一次方程式を1つの群と考え、その群に合わせて、数値解に少しでも近い点を初期値として高速求解した点である。その基礎となる数値解法は、規則非対称大規模疎行列に効果をもたらす TF-BCGSTAB 法を適用し、そして数値解法が初期値の選び方によって高速性がもたらすことが期待出来ることで、1つの連立一次方程式を解いたあと、この時の少し解が進んだ時の値を次の連立一次方程式の初期値とすることで、解の進み方をやや速くした点である。但し、繰り返し数が多いため、実際の解法はある一定の期間 (一定の数の連立一次方程式) 一度決めた前の連立一次方程式と同じ初期値としている。

今回の事例の様に、連立一次方程式が少しずつ変化して行き、その計算結果を検討する時、表現として連立一次方程式に3次元化の試みであり、その解法として一番目に大規模疎行列に適した解法の選択と、二番目にその解法に向けて収束の為の効率的な初期値選定方法により、高速収束した点の事例を紹介する。

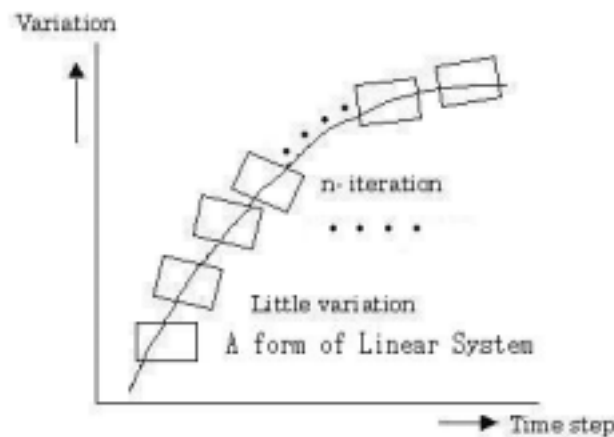


Fig. 1. Conceptual Illustration. (Image figure of Linear System.)

2. 磁気流体二流体混合型シミュレーションコード

磁気流体二流体の混合型シミュレーションコードは、主プラズマが作る物理量（電流等）に対しては、周辺プラズマがその厚みの方向（主プラズマと周辺プラズ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デルとなっている。この時の周辺プラズマは、主プラズマで占められたシミュレーションボ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。この境界条件は主プラズマからの入力量に応じて、周辺プラズ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ディリクレ問題を解くことで決定される。即ち主プラズマで起きた変動は、周辺プラズ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プラズマの振る舞いが、変形デ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プラズマの変動が、電場等の物理量として再び主プラズマに影響を与えるといった、いわゆるフィードバック現象が行われている（Fig.2. 参照）。多量のメッシュ数を持つ変形デ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デ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。

この数値シミュレーションの形式は、物理量の変化に基づき 2 次元の連立一次方程式の係数値を少しずつ変化させて、同じ形式の連立一次方程式を繰り返して解くことを意味している（Fig.3. 参照）。この同じサイズの行列を用いて繰り返し解く数値シミュレーションの形式に対して、3 次元ベクトルを用いて新しい表現を試みて、数値解法の変更と効率的な初期値により、高速に解法した事を説明したい。

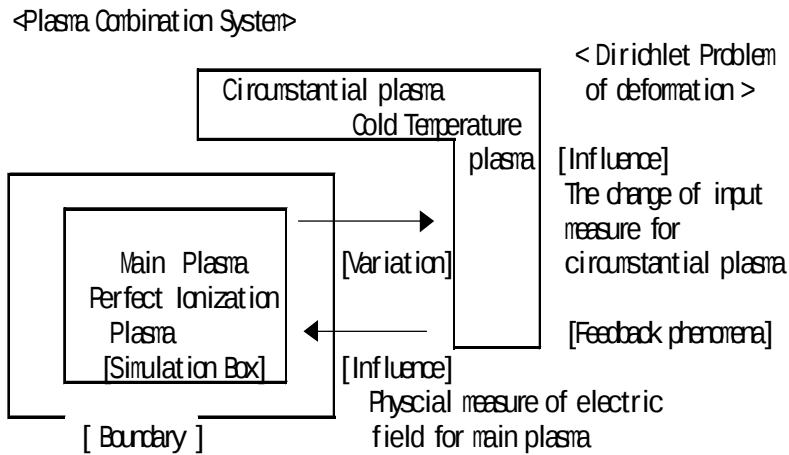


Fig.2. Relation between Main Plasma and Circumstantial Plasma

2．磁気流体二流体混合型シミュレーションの方程式

磁気流体二流体の混合型シミュレーションコードは、主プラズマが作る電磁流体方程式と、周辺プラズマが作る二流体方程式から構成される。

電磁流体シミュレーションの基本方程式

$$(2.1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{j} \times \mathbf{B} - \nabla p \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \mathbf{j} = \frac{1}{4\pi\eta} \nabla \times \mathbf{B} \\ \mathbf{E} = \mathbf{v} \times \mathbf{B} + \eta \mathbf{j}, \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (p\mathbf{v}) = (\gamma - 1)(-p \nabla \cdot \mathbf{v} + \eta \mathbf{j}^2) \end{array} \right.$$

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。

周辺プラズマに対する二流体方程式系

$$(2.2) \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}_j) = S_j - \alpha (n^2 - n_0^2),$$

$j = i \text{ (ion) or } e \text{ (electron)}$

$$(2.3) \quad m_j n \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = q_j n (\mathbf{E} + \mathbf{v}_j \times \mathbf{B}) - \nabla p_j + \mathbf{R}_j,$$

$j = i \text{ (ion) or } e \text{ (electron)}$

ここで $\mathbf{v}_j, \mathbf{R}_j, S_j, m_j, q_j, p_j$ 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。そして n, n_0, α は数密度、背景に存在するプラズマの数密度、再結合率を表す。

(2.3) 式の粒子の運動方程式を置換表現すると、次の(2.4)式で表現される。

$$(2.4) \quad n \mathbf{v}_j = \frac{j}{q_j} + n \mu_{Hj} \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{\mathbf{B}} + n \mu_{pj} \mathbf{E} + \frac{n v_n}{1 + (\mu_{\parallel} \mathbf{B})^2} + \mu_{\parallel} \mathbf{B} \frac{q_j}{e} \frac{n v_n \times \mathbf{B}}{\mathbf{B}}$$

$j = i \text{ (ion) or } e \text{ (electron)}$

ここで $v_n, \mu_{Hj}, \mu_{pj}, \mu_{\parallel}$ は中性粒子の速度、ホール移動度、ベターセン結合度、及び磁場の平行方向の移動度を表す。

磁場、電場に対して κ 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、次の(2.5)式となる。

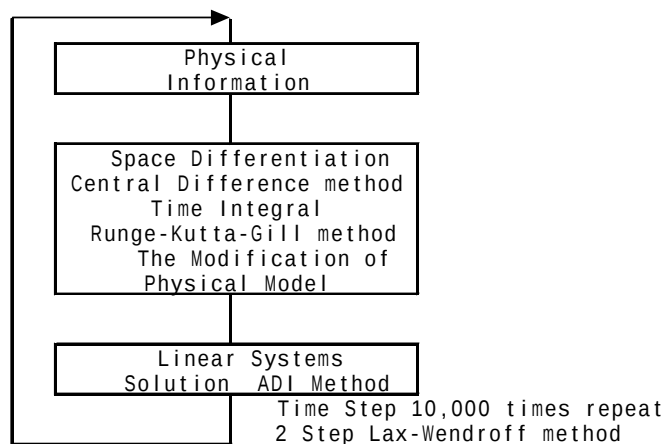
$$(2.5) \quad \kappa \mathbf{B} = 0$$

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式モデルとなっている。(2.1)式、(2.2)式、(2.3)式(及び(2.4)式)は離散化された差分系の方程式として展開され、次の連立一次方程式となる。

$$(2.6) \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

この時の数値シミュレーションは、連立一次方程式をタイムステップとして10,000回の繰り返し計算を行う。これは物理情報を少しずつ変化させて、係数及びそれに関わる右辺情報を少しずつ変化させて、1回の繰り返し毎、連立一次方程式を1回解いて、それを10,000回繰り返して、数値解の変化を見ることになる。それは物理情報を少しずつ変化させて、係数値を少しずつ変化させる。そしてこれ迄の経験上から、その最適な値の情報を検討することにある。

具体的には中性粒子の速度、ホール移動度、ベターセン結合度、及び磁場の平行方向の移動度を検討する。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、物理場の情報を研究することになる。それは連立一次方程式を1回解く毎に、それぞれの物理場の情報が得られるが、最終的には何回目の繰り返しで、経験上最適と考えられる物理情報が得られるかを追求することが重要になる。



[FORTRAN about 16,000 steps], [Practical matrix size $n = 2,500 \times 2,500$]

Fig.3. The Flow of PLASMA2WAY

3. 3次元行列表現形式の試み

今回の研究テーマである行列 A は、 $2,500 \times 2,500$ の行列である。連立一次方程式 $Ax = b$ において、この一般の連立一次方程式を10,000回繰り返し計算することにある。この表現の工夫として次に定義する。

$2,500 \times 2,500$ 行列の10,000回繰り返す連立一次方程式として、次に3次元行列表現を試みる。つまり $2,500 \times 2,500$ による2次元の一般行列に縦ベクトルの行列を考慮し、 $2,500 \times 2,500$ 行列 $\times 10,000$ 回繰り返しの3次元ベクトルとして A^3 の形で表現する。これは行 2,500、列 2,500、縦 10,000 の意味である。この行列に対して、 $2,500 \times 2,500$ 行列の解を x とし、これを10,000回縦に並べた3次元ベクトルを x^3 として表現する。同じくこの10,000回縦に並べた右辺3次元ベクトルを b^3 として表現する。

3次元行列表現の工夫として、 $2,500 \times 2,500$ 行列 $\times 10,000$ 回繰り返して定義された連立一次方程式を

$$(3.1) \quad A^3 x^3 = b^3, \quad (\text{iter} = 10,000)$$

で表現する。これを仮に3次元ベクトル型連立一次方程式と呼称したい。 $\text{iter} = 10,000$ は iteration が10,000回の意味であり、同じサイズの2次元連立一次方程式を係数や右辺行列を少し変えて、10,000回繰り返して数値解法を行う事を表現している。(2.6)式に見る連立一次方程式は、その繰り返しを加味して、3次元を用いて(3.1)式として表現したい。

[反復法 3次元ベクトル行列の概念]

ここで3次元行列表現を、3次元ベクトル行列と呼称したい。(3.1)式に反復法の考えを適用する。(3.1)式において3次元ベクトル行列 A^3 を3次元の縦ベクトルはそのままにして、行又は列において $A^3 = A_1^3 + A_2^3$ と分離して、同値な式を導く。この分離は2次元の場合、一般的に下三角行列と上三角行列の形に分離する場合が多い。

これを3次元の形で分離した式を表現する。

$$(A_1^3 + A_2^3)x^3 = b^3 \quad \text{つまり} \quad A_1^3 x^3 = -A_2^3 x^3 + b^3$$

$$\text{従って} \quad x^3 = -A_1^{3-1} A_2^3 x^3 + A_1^{3-1} b^3$$

$$\text{ここで} \quad M^3 = -A_1^{3-1} A_2^3, \quad c^3 = A_1^{3-1} b^3 \quad \text{と置く事によって}$$

$$x^3 = M^3 x^3 + c^3 \quad \text{と表現することが出来る。}$$

この時の反復式は、2次元の時と同じ形式となり、それを上記に合わせた3次元ベクトル表現を用いて、反復代入のスキームを入れて

$$(3.2) \quad x_{k+1}^3 = M^3 x_k^3 + c^3$$

の形で記述する。ここで $\mathbf{M}^3$ は3次元表現の反復行列であり、 $\mathbf{c}^3$ は3次元表現に見る反復行列の定数である。この時の解は3次元として

$$(3.3) \quad \mathbf{x}^3 = \mathbf{A}^{3^{-1}} \mathbf{b}^3$$

で表現出来る。

この3次元ベクトル型連立一次方程式で求めるべき最適な解を $\mathbf{x}^{3^0}$ として表現する。これはシミュレーションによる繰り返して最適と考えられる、繰り返しの時の数値解である。ここでベクトル型連立一次方程式(3.1)式を、ベクトル型の2次関数として定義する。

$$(3.4) \quad f(\mathbf{x}^3) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}^3, \mathbf{A}^3 \mathbf{x}^3) - (\mathbf{x}^3, \mathbf{b}^3)$$

(3.4)式をn次元空間で最小にすることを導く。n次元空間の最小化、関数 $f(\mathbf{x}^3)$ を個々の普通の2次関数毎に分類して、 $f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x})$ と表現すると、各 $f_h(\mathbf{x})$, $h=1,2,\dots,n$ の成分毎に表現すると $f_1(\mathbf{x})$ では次の形となり

$$(3.5) \quad f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a^1_{ij} x_i x_j - \sum_{j=1}^n x_j b^1_j$$

一般式では

$$(3.6) \quad f_h(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a^h_{ij} x_i x_j - \sum_{j=1}^n x_j b^h_j, \quad h=1,2,\dots,n$$

で表現できる。

最小点の与える点は各 x_k で偏微分することにより求めることが出来る。個々の表現では

$$(3.7) \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_k} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (a^1_{kj} + a^1_{jk}) x_j - b^1_k = 0, \quad k=1,2,\dots,n$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial x_k} = 0, \quad \frac{\partial f_3}{\partial x_k} = 0, \quad \dots, \quad \frac{\partial f_n}{\partial x_k} = 0$$

一般式では

$$(3.8) \quad \frac{\partial f_h}{\partial x_k} = \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (a^h_{kj} + a^h_{jk}) x_j - b^h_k = 0, \quad k=1,2,\dots,n \right), \quad h=1,2,\dots,n$$

で表現出来る。

$\mathbf{A}^3$ が正定値であると、(3.4)式を満たす $\mathbf{x}$ は(3.8)式の最小値0を与える最小点である。つまり(3.1)式の解は(3.8)式の最小点である。

この方式で $f_i(\mathbf{x})$, $i=1,2,\dots,n$ を、各々の x_k で偏微分することにより最小値を求めることが出来る。これを図で解釈する上で、いま3個の係数値 (x_1, x_2, x_3) を採り上げ、幾つからなる次の曲面を考える。

$$(3.9) \quad y = f_i(x_1, x_2, x_3), \quad i=1,2,\dots,n$$

(3.9)式の個々の最小値をそれぞれ $x_{01}, x_{02}, x_{03}, \dots, x_{0n}$ とおくと、それぞれの曲面の最小値は Fig.4. の形になり、これは連立一次方程式を1回解く毎に、 x_{01} から順次 x_{0n} までの最小値を求めている事になる。ここで(3.1)式において $n=10,000$ である。

Fig.4. でこの2次元連立一次方程式の個々の最小値 $x_{01}, x_{02}, x_{03}, \dots, x_{0n}$ が得られており、3次元ベクトル型連立一次方程式は、この個々にそれぞれ求められる2次元最小値の点 $x_{01}, x_{02}, x_{03}, \dots, x_{0n}$ の中で、更にその最小値を求める事に帰結する。各最小値から得られた最小値の集まりを群と考え、その最小値群 $x_{01}, x_{02}, x_{03}, \dots, x_{0n}$ で作る曲面を

$$(3.10) \quad y = f(x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0n})$$

として定義すると、3次元ベクトル型連立一次方程式は、概念的に最小値群で作る曲面の中で、その最小値を求めることになる。

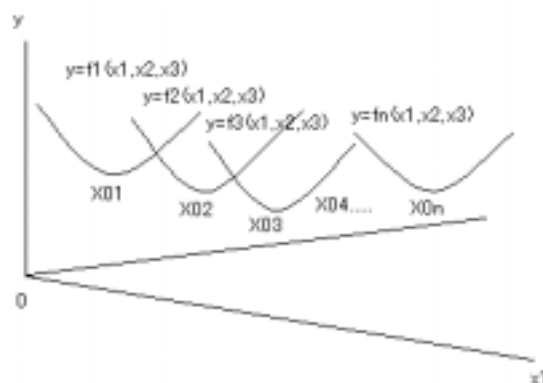


Fig.4. Minimum Value of Each Curved Surface
(Conceptual Illustration.)

考え方として(3.1)式において3次元ベクトル行列 A^3 に対して、3次元の縦方向に2次元行列を幾つも定義して、その連立一次方程式をそれぞれ求めて、それらの中でもっとも最小値を求める事に帰結する。

4. 新しい数式の定義

今3次元ベクトル行列 A^3 を2次元行列の縦方向の積み重ねとして、

$$(4.1) \quad A^3 = A^{(1)} \diamond A^{(2)} \diamond \dots \diamond A^{(n)}$$

の形で定義する。問題の事例では $n=10,000$ である。

ここで $\diamond$ 印は縦方向に、2次元行列を積み重ねる意味として定義する。

つまり $A^{(1)} \diamond A^{(2)}$ は2次元行列 $(2,500 \times 2,500)$ を縦方向に2つ重ねたことを表現している。同じく x^3 と b^3 はそれぞれ3次元の縦方向に2次元行列をそれぞれ並べて、1つのベクトル行列としたものである。 x^3 と b^3 を

$$(4.2) \quad x^3 = x^{(1)} \diamond \dots \diamond x^{(n)}$$

$$(4.3) \quad \mathbf{b}^3 = \mathbf{b}^{(1)} \diamond \dots \diamond \mathbf{b}^{(n)}$$

の形で定義する。つまり(4.1) (4.2) (4.3) 式の $\mathbf{A}^3$, $\mathbf{x}^3$, $\mathbf{b}^3$ は以下の形をしている。

$$(4.4) \quad \mathbf{A}^3 : \quad \mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdot & a_{1n}^{(1)} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n1}^{(1)} & \cdot & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(2)} & \cdot & \alpha_{1n}^{(2)} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \alpha_{n1}^{(2)} & \cdot & \alpha_{nn}^{(2)} \end{pmatrix},$$

$$\dots\dots\dots, \quad \mathbf{A}^{(n)} = \begin{pmatrix} \alpha_{11}^{(n)} & \cdot & \alpha_{1n}^{(n)} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \alpha_{n1}^{(n)} & \cdot & \alpha_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

$$(4.5) \quad \mathbf{x}^3 : \quad \mathbf{x}^{(1)} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ \cdot \\ x_n^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \dots\dots\dots, \quad \mathbf{x}^{(n)} = \begin{pmatrix} x_1^{(n)} \\ \cdot \\ x_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

$$(4.6) \quad \mathbf{b}^3 : \quad \mathbf{b}^{(1)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ \cdot \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \dots\dots\dots, \quad \mathbf{b}^{(n)} = \begin{pmatrix} b_1^{(n)} \\ \cdot \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

ここで $\mathbf{A}^{(i)}$ は、2次元行列を縦方向に積み重ねた、ある i 時点における一般の1つの2次元行列 $\mathbf{A}$ を意味する。 $\mathbf{x}^{(i)}$, $\mathbf{b}^{(i)}$ に関しても同じである。

5 . オリジナルコードに用いられている解法

電磁流体シミュレーションのオリジナルコードは、連立一次方程式の解法に対してピースマンとラチフォード(Peaceman and Rachford, 1955)の提案した ADI法を用いて作られている。この解法は第 i 番目の2次元行列 $\mathbf{A}^{(i)}$ が、ある種の疎な対称行列である場合、これをハウスホルダー変換により、三重対角行列に導く事が出来る。特に2次元行列の第 i 番目である $\mathbf{A}^{(i)}$ が、スティルチェス行列である場合、以下に示す如く、3次元行列表現にして3つの行列に分ける事が出来る陰反復解法が定義できる。これを今回の研究である3次元行列の一部として、第 i 番目にみる2次元行列の形として、新しく定義した方法で表現する。

5.1 シミュレーションコードに用いられたADI法

新しい3次元表現の試みから、オリジナルコードをある i 時点における2次元行列の形で解説したい。

$\mathbf{D}^3$ (2次元非負対角行列を縦方向に積み重ねた3次元表現) 、

$\mathbf{H}^3$, $\mathbf{V}^3$ ($\mathbf{H}^3$ は空間格子に対する水平ベクトル、 $\mathbf{V}^3$ は空間格子に対する垂直ベ

クトルとする、それぞれ 2 次元行列で正の対角要素と非正の非対角要素を持つ優対角行列を縦方向に積み重ねた 3 次元表現)

$$(5.1) \quad \mathbf{A}^3 = \mathbf{H}^3 + \mathbf{V}^3 + \mathbf{D}^3$$

として表現出来る。この $\mathbf{H}^3$, $\mathbf{V}^3$, $\mathbf{D}^3$ に関して

(4.4) (4.5) (4.6) で定義される形と同じ考えである。

(3.1) 式の解法として縦方向に積み重ねた、ある i 時点における形として

$$(5.2) \quad \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)}$$

を定義する。ここで (5.2) 式に対して

$$(5.3) \quad \left(\mathbf{H}^{(i)} + \frac{1}{2} \mathbf{D}^{(i)} + \omega \mathbf{I}^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)} = \left(\omega \mathbf{I}^{(i)} - \mathbf{V}^{(i)} - \frac{1}{2} \mathbf{D}^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}^{(i)}$$

$$(5.4) \quad \left(\mathbf{V}^{(i)} + \frac{1}{2} \mathbf{D}^{(i)} + \omega \mathbf{I}^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)} = \left(\omega \mathbf{I}^{(i)} - \mathbf{H}^{(i)} - \frac{1}{2} \mathbf{D}^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}^{(i)}$$

($\mathbf{I}^{(i)}$ 単位行列、 ω : 加速パラメータ)

(5.3) (5.4) 式より次式を定義し

$$(5.5) \quad \mathbf{H}_1^{(i)} = \mathbf{H}^{(i)} + \frac{1}{2} \mathbf{D}^{(i)}$$

$$(5.6) \quad \mathbf{V}_1^{(i)} = \mathbf{V}^{(i)} + \frac{1}{2} \mathbf{D}^{(i)}$$

反復代入のスキームを入れて

$$(5.7) \quad \left(\mathbf{H}_1^{(i)} + \omega_{k+1} \mathbf{I}^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)(k+1/2)} = \left(\omega_{k+1} \mathbf{I}^{(i)} - \mathbf{V}_1^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)(k)} + \mathbf{b}^{(i)}$$

$$(5.8) \quad \left(\mathbf{V}_1^{(i)} + \omega_{k+1} \mathbf{I}^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)(k+1)} = \left(\omega_{k+1} \mathbf{I}^{(i)} - \mathbf{H}_1^{(i)} \right) \mathbf{x}^{(i)(k+1/2)} + \mathbf{b}^{(i)}$$

$$k \geq 0$$

第一の方程式つまり (5.7) 式は水平格子線に沿って解き、第二の方程式 (5.8) 式は垂直格子線に沿って解くこと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 線対角のブロック行列である場合、この解法が大変適している。それぞれ第 i 番目の 2 次元行列 $\mathbf{A}^{(i)}$ に対して、各方程式を交互方向に陰反復解法で求める。

6 . 新しい数値解法に変更

この章では非対称問題に強く安定した解法である CG 法系の 1 つである BCGSTAB 法に、前処理である TF 法を適用することで高速解法を目指すことにある。

6.1 TF 前処理法及び残差の 3 次元表現

この節においても TF 前処理法における 3 次元表現を試みたい。計算モデルが 5 点差分係数行列の形で構成される時、(3.1) 式に見る 3 次元行列 $\mathbf{A}^3$ に対してその対角行列を $\mathbf{D}^3$ 、

同じく 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 $\mathbf{A}_x^3$, y 方向の微分に関する行列を $\mathbf{A}_y^3$ として分離する。この時の前処理である $\mathbf{M}$ 行列は、3次元として次の式で表現される。

$$(6.1) \quad \mathbf{M}_{TF}^3 = (\mathbf{D}^3 + \mathbf{A}_x^3) \mathbf{D}^{3-1} (\mathbf{D}^3 + \mathbf{A}_y^3)$$

(6.1) 式における $\mathbf{M}_{TF}^3$, $\mathbf{A}_x^3$, $\mathbf{A}_y^3$ も (4.4) (4.5) (4.6) で定義される形と同じ考えである。

(6.1) 式の具体的な計算は、第 i 番目における個々の2次元行列毎に、BCGSTAB法を適用する。

(3.1) 式の残差を次に定義する。3次元残差として $\mathbf{r}^3$ の表現も (4.4) (4.5) (4.6) で定義される形と同じ考えである。

3次元ベクトル連立一次方程式の残差は、次の (6.2) 式として定義される。

$$(6.2) \quad \mathbf{r}^3 = \mathbf{b}^3 - \mathbf{A}^3 \mathbf{x}^3$$

6.2 TF前処理法の計算ステップ

この節も新しい3次元表現の試みから、ある i 時点における2次元行列の形で解説したい。計算モデルが5点差分係数行列の形で構成される時、この時第 i 番目の2次元行列 $\mathbf{A}^{(i)}$ に対してその対角行列を $\mathbf{D}^{(i)}$ 、同じく 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 $\mathbf{A}_x^{(i)}$, y 方向の行列を $\mathbf{A}_y^{(i)}$ として分離する。この時の2次元の前処理である第 i 番目の $\mathbf{M}$ 行列は次の式で表現される。

$$(6.3) \quad \mathbf{M}_{TF}^{(i)} = (\mathbf{D}^{(i)} + \mathbf{A}_x^{(i)}) \mathbf{D}^{(i)-1} (\mathbf{D}^{(i)} + \mathbf{A}_y^{(i)})$$

(6.1) 式の表現形式は3次元であるが、具体的な計算手順は (6.3) 式に見られる2次元で計算して、BCGSTAB法へ渡し、1つの2次元行列が終わると、再びTFの前処理に移り、その後BCGSTAB法へ渡る。繰り返し数 $i=1, \dots, 10000$ である。

つまり前処理としては、(6.3) 式見られる三項対角近似因子分解法 (TF法) を使用し、基礎反復には非対称問題に強いBCGSTAB法を適用する。この解法では、行列 $\mathbf{A}^{(i)}$ が非対称であっても解が得られ、汎用性に富み安定性の高い反復解法である。

BCGSTAB法にTF前処理を適用する。第 i 番目の2次元行列の場合における前処理との関係図を示す (Fig.5. 参照)。

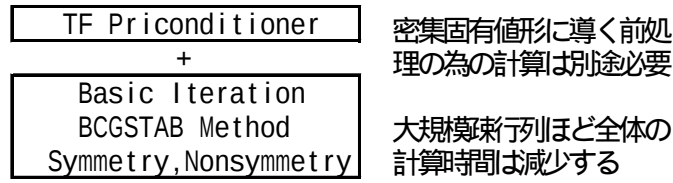


Fig.5. The Image for TF Preconditioner

具体的な計算方法として、第 i 番目の行列を意識し、1つの縦方向列ベクトルの2次元への行列を $\mathbf{A}^{(i)}$, $\mathbf{x}^{(i)}$, $\mathbf{b}^{(i)}$ として表現する。残差 $\mathbf{r}^{(i)}$ 及び $\mathbf{r}^{*(i)}$ 等も同じである。修正量 $\alpha^{(i)}$, $\beta^{(i)}$ 及び $\mathbf{p}^{(i)}$, $\mathbf{s}^{(i)}$, $\omega^{(i)}$ も同じ形式で表現する。

3次元の場合は添え字 (i) , $(i=1, \dots, n)$ に対して、BCGSTAB法にTF前処理をそれぞれ縦ベクトルの回数である n 回繰り返して適用する。 $n=10,000$ 回の繰り返し。

第 i 番目の2次元行列 $\mathbf{A}^{(i)}$, $\mathbf{b}^{(i)}$ それぞれの係数値の変更

3次元に対して、この2次元計算の繰り返しを次の形とする。

$$\mathbf{r}_0^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)} - \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{x}_0^{(i)}$$

BCGSTAB 法：

初期値 $\mathbf{x}_0$ を与え、残差 $\mathbf{r}_0^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)} - \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{x}_0^{(i)}$ を計算し、

$$\mathbf{r}_0^{*(i)} = \mathbf{p}_0^{(i)} = \mathbf{r}_0^{(i)}$$

($\mathbf{r}_0^{*(i)}$: 適当なベクトル、 $\mathbf{p}_0^{(i)}$: 補助ベクトル、 ε : 収束判定数)

$$k = 0, 1, \dots, \quad \|\mathbf{r}_k^{(i)}\| \leq \varepsilon \|\mathbf{b}^{(i)}\|$$

$$\alpha_k^{(i)} = \frac{(\mathbf{r}_0^{*(i)}, \mathbf{r}_k^{(i)})}{(\mathbf{r}_0^{*(i)}, \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{p}_k^{(i)})}$$

$$\mathbf{s}_k^{(i)} = \mathbf{r}_k^{(i)} - \alpha_k^{(i)} \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{p}_k^{(i)}$$

$$\omega_k^{(i)} = \frac{(\mathbf{s}_k^{(i)}, \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{s}_k^{(i)})}{(\mathbf{A}^{(i)} \mathbf{s}_k^{(i)}, \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{s}_k^{(i)})}$$

$$\mathbf{x}_{k+1}^{(i)} = \mathbf{x}_k^{(i)} + \alpha_k^{(i)} \mathbf{p}_k^{(i)} + \omega_k^{(i)} \mathbf{s}_k^{(i)}$$

$$\mathbf{r}_{k+1}^{(i)} = \mathbf{s}_k^{(i)} - \omega_k^{(i)} \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{s}_k^{(i)}$$

$$\beta_k^{(i)} = \frac{\alpha_k^{(i)} (\mathbf{r}_0^{*(i)}, \mathbf{r}_{k+1}^{(i)})}{\omega_k^{(i)} (\mathbf{r}_0^{(i)}, \mathbf{r}_k^{(i)})}$$

$$\mathbf{p}_{k+1}^{(i)} = \mathbf{r}_{k+1}^{(i)} + \beta_k^{(i)} (\mathbf{p}_k^{(i)} - \omega_k^{(i)} \mathbf{A}^{(i)} \mathbf{p}_k^{(i)})$$

6.3 TF-BCGSTAB法の繰り返しと、各連立一次方程式の初期値の選択

この節では前処理系を導入したある1つの反復法を用いて解を求めるにおいて、複数組からなる連立一次方程式に対して、初期値の選び方を検討したい。連立一次方程式に見る反復法の数値解法は、初期値の選び方により、解への収束の速さが異なることが分かっている。実質は僅かに異なるが、繰り返して同じ様な係数に見る連立一次方程式を幾度も解法する上で、その解法毎に初期値を常にゼロに選ぶより、数値解（厳密解）に少しでも近づいた値（1つ前の連立一次方程式の反復途中計算値を選択）を、次の連立一次方程式の初期値として選ぶ方が、当然ながら反復回数がより少なくて済むことが予想できる。一方でゼロではないが、数値解のかけ離れた値から初期値が出発すると、余分な計算があり、反復の回数が減ることは期待出来ない。

ここで一般に言えることは、ある連立一次方程式の途中の反復段階で、ある収束すべき近傍値を選択することが出来れば、反復を少なくして収束することが出来、理想的である。一方でかなり離れた初期値であると、本来収束すべき波にうまく乗らず、この場合は効率の良くない反復収束となる。

今回の電磁流体シミュレーションにおいて、連立一次方程式は時間ステップで10,000回の繰り返し問題となっている。この時間ステップで10,000回の繰り返し問題において、第1回目の連立一次方程式が、繰り返しと共に係数値が少しずつ微々と変化して行き、3,000回目、5,000回目となるとかなり変化して行く。そして9,000回目、最後の10,000回目となると、初期の連立一次方程式に比べて、係数値がかなり大きく変化をして行く特徴がある。

この時間ステップの繰り返し問題において、行列サイズは同じで、良く似た形の複数個の連立一次方程式解法では、常にその1つ前の適当な値（反復n回目）を持ち出し、それを次の初期値とする様にして、その時の連立一次方程式を求解する。この様にしてその繰り返しを行うことが、微々として変化を続けて行く各連立一次方程式の反復法数値計算の初期値選定として理想であるが、個々の反復途中の計算を、毎回選んで次の連立一次方程式の初期値として逐次代入することは、効率上やや精彩に欠ける。

そこで連立一次方程式を時間ステップ10,000回の繰り返し問題を10個の間隔に分ける。1～1,000回迄、1,001～2,000回迄、2,001～3,000回迄、以下同様である。この間隔で分けた集まりを、連立一次方程式の1つの群と考える。これらの間隔で決められた1つの群は、同じ初期値とする。良く似た連立一次方程式の場合、収束も似たステップとなる。つまり常にゼロから反復の開始を行うのではなく、途中状態から反復の開始を実施した方が、効率が良いと判断できる。あまり収束の進み過ぎた時点を、次の連立一次方程式の初期値とすると、収束の波にかけ離れる場合がある。つまりやや類似する連立一次方程式の反復の近傍値でもあり、ある程度の収束が進んだ時点を選択することが求められる。ここでは、少しずつ異なる連立一次方程式の収束に安定して反復が行われ、途中収束点として妥当な点を500回目とした。つまり初期値をうまく選ぶことで、全体として高速収束させることが出来る。

電磁流体シミュレーションの問題では、この時間ステップの繰り返しにおいて、1つ前の連立一次方程式の反復計算において、反復500回目の繰り返し点の値を、次の連立一次方程式の

初期値として設定する形とする。この連立一次方程式の反復500回目繰り返し点とは、次の連立一次方程式の初期値でゼロから出発するより、数値解へ向けて少しでも進んだ値であり、そして1,000回目に变化した連立一次方程式の少し大きな係数変化にあっても、数値解上の収束ラインから大きく離れていないと予想される値である (Table 1. 参照)。つまり第1回目の連立一次方程式の初期値はゼロから出発するが、この1回目の連立一次方程式の反復計算である500回時点の繰り返し点を選び、この値を初期値として、第一の群である2回目から1,000回目迄に適用する。次に1,000回目の連立一次方程式である500回時点の繰り返し点を選び、この値を初期値として、次の群である1,001回目から2,000回目迄に適用する。そして2,000回目の連立一次方程式である500回時点の繰り返し点を選び、この値を初期値として、更に次の群である2,001回目から3,000回目迄に適用する。以下同様とする (Fig.6. 参照)。Table 1. では、繰り返し数を400回、500回、600回それぞれの時点について、打ち切り値 ε の主要点を比較する。それぞれの打ち切り値に対して、第一群に対して連立一次方程式 1,000個収束の平均値である。

Table 1. Comparative Table of Executive Time. (Elapse Time msec)
Iteration point of previous Liner System and
mean time for next 1000 Liner Systems.

Relative Residual ε	Iteration 400point TF-BCGSTAB Method	Iteration 500point TF-BCGSTAB Method	Iteration 600point TF-BCGSTAB Method
10^{-2}	50652	49280	50159
10^{-4}	114192	110865	113094
10^{-6}	179744	174340	178175
10^{-8}	244760	237396	242627
10^{-10}	325535	315666	322884

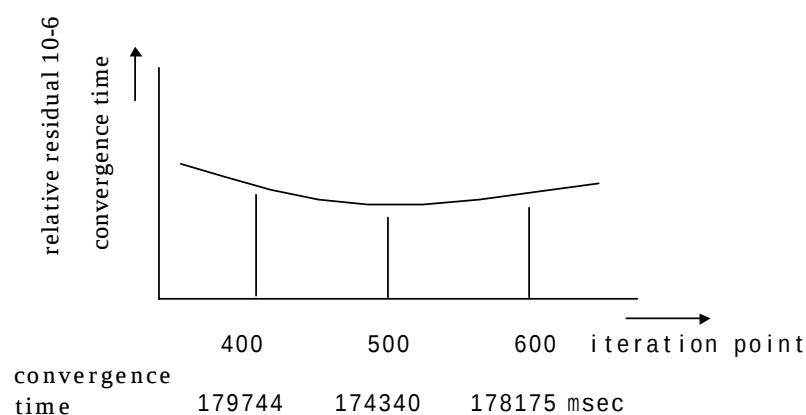


Fig.6. Iteration point of previous Liner Systems and
mean time for next 1000 Liner Systems.

7．数値シミュレーション結果

ADI 法を基礎に持つオリジナル版と、TF-BCGSTAB 法及び初期値効率化変更方法の組み合わせの改良版による数値シミュレーション結果の比較を表示する。

以下、改良版 TF-BCGSTAB 法と表示している計算関係の結果は、同時に初期値効率化変更を合わせて行っている。

7.1 計算機環境

計算機環境はスーパーコンピュータ SX6/1CPU、メモリ 32GB、倍精度である。

打ち切り値 ε を 10^{-0} 時点から 10^{-10} 時点迄におけるオリジナル版と、改良版の比較した値を表示する。

7.2 収束時間の比較

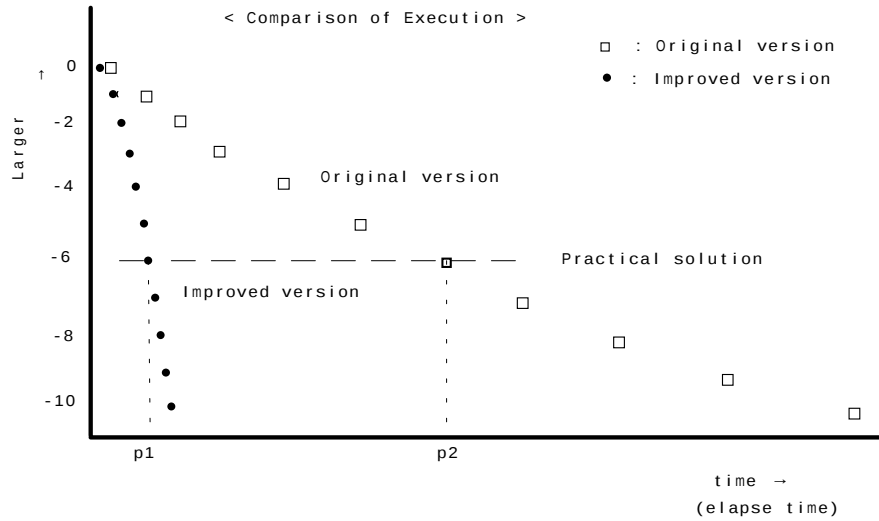
3次元表現のもとでの2次元行列 10,000 回の繰り返し数値計算結果と、そのシミュレーション図を示す。境界条件が変化すれば、解法時に CG 法系の反復法は収束性が変化する事が分かってきた。従って比較時は同じ条件である。

オリジナル版 ADI 法は現状のままの測定値であり、改良版 TF-BCGSTAB 法は、上述した初期値効率化施策を行った測定値である (Table 2.、Fig.7. 参照)。

Table 2. Comparative Table of Executive Time. (Elapse Time msec)

Relative Residual ε	Original version ADI Method	Improved version TF-BCGSTAB Method
10^0	124123	13342
10^{-1}	307726	32845
10^{-2}	470482	49280
10^{-3}	784329	82160
10^{-4}	1061965	110865
10^{-5}	1340203	139607
10^{-6}	1675979	174340
10^{-7}	1999029	204267
10^{-8}	2347292	237396
10^{-9}	2719990	272358
10^{-10}	3219731	315666

7.3 シミュレーション図の表示



p1: TF-BCGSTAB . 174340msec 、 p2: ADI . 1675979msec

Fig.7. Comparative Illustration .

8 . 磁気流体二流体混合型シミュレーションの数値計算結果比較

3次元表現のもとでの2次元行列 10,000 回の繰り返し数値計算結果を示す。

以下の Table 3. に表示する値は、打ち切り値 $\varepsilon = 10^{-6}$ 時点での比較値としている。

オリジナル版 ADI 法と、改良版 TF-BCGSTAB 法は 7.2 と同じ条件である。

Table 3. Comparative Table of Computational Results.

Item	Original version ADI Method	Improved version TF-BCGSTAB Method
Total elapse time(msec)	1675979	174340
Total Vectorized ratio(%)	78.53	86.65
Total practical time for applicable routine(msec)	1224232	6361
The ratio of CPUtime for applicable routine(%)	73.04	3.64
Total practical number of times for applicable routine(round)	5420	5827

9. まとめ

今回の研究では、連立一次方程式において、行列のサイズが同じ形のものを繰り返して数値解法を行うシミュレーションの場合、これを3次元で一度に表現し、合わせて高速計算させることにあった。つまり行列に縦方向の考えを入れて、これを行列の積み重ね形式として、3次元行列表現の試みを新しく提案した。同じ形を繰り返し計算する数値シミュレーションの必要性は多く存在するが、特に(3.1)式に見る表現形式を新しく提案したい。そしてMHDの分野に於いて、従来からの方法では、計算物理の分野で効率的な解法が期待出来ると考えられ、適用されてきたADI法に対して、最近注目されている前処理付きCG法系を適用させることで、新しい解法としての高速解法が期待出来る。

ここでの特徴は、1つの連立一次方程式と、時間ステップにより少しづつ変化する次のグループの連立一次方程式において、新しい表現形式と数値解法の変更に加えて、解法の収束速度を高めるために初期値に着目した点である。同じサイズの良く似た形の連立一次方程式を、反復法で解法する場合、その初期値の選定で収束速度が左右される。今回の磁気流体二流体混合型問題に関する事例では、高速数値解法に変えたことと、各連立一次方程式の初期値を効率よく選定し、それにより更に収束速度を高めることが出来た。つまり、この新しい数値解法に変更した上に、更に効率的な初期値を選定して評価を行った点である。

この改良版においては、高速数値解法に変えた点と、初期値選定の効率化促進による高速化により、オリジナル版に比較して約9.6倍の高速結果が得られた。ここで計算モデルにおいて、行列のサイズが同じものを繰り返し計算する必要がある数値シミュレーション技法に関して、これを3次元表現とする事と、合わせて一定回数の繰り返し表現を添える事で、連立一次方程式を幾度も計算をすることを意味しており、簡素明瞭で一意に表わすことが出来る。そして初期値設定を改良することにより、大規模規則疎行列に適する数値解法に対して、更に高速性が期待出来る。この(3.1)式に見る形式は、数値シミュレーション分野において、今後の表現の工夫として期待出来るものと思われる。

参考文献

- [1] C. W.Hirt,B.D.Nichols,N.C.Romero,SOLA : A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows,LA-5852,(1975).
- [2] Doi,S. and Harada,N., Tridiagonal Approximate Factorization Method : A Preconditioning Technique for Solving Nonsymmetric Linear Systems Suitable to Supercomputers, National Aero Space Laboratory , Special Paper 7,(1987).
- [3] R.S.Varga, 渋谷政昭他訳, 計算機による大型行列の反復解法, サイン社,(1972).
- [4] T.Tajima, Computational Plasma Physics :With Application to Fusion and Astrophysics, Addison-Wesley Publishing Company ,Inc.(1989).

