

## 6S-2 超並列計算に適合する球対称領域上の偏微分方程式の一差分解法

防災科学技術研究所 矢崎 忍

### 1. はじめに

近年、地球環境問題に関心が高まりつつあるが、地球環境の変化の予測、影響評価のためには大気、海洋、陸地面等における諸過程を総合する計算モデルの確立が必要である。しかるに、これらの現象はきわめて複雑で、したがって計算機のパワーが最も要求される対象であり、今後専用の高並列計算機の開発が期待される分野の1つである。

本稿は、そのための予備的な試みとして球対称領域上で定義される時間発展型の偏微分方程式に対し、その差分解の高並列計算に適合する1つの格子点系とそれに対応する並列計算機を提案し、その上での計算アルゴリズムについて検討したものである。

### 2. 格子系

球対称領域における座標系としては中心からの距離を表わす動径座標と基準方向からの偏角を表わす2つの角座標を用いるのが自然であり、角座標としては通常極座標が用いられる。極座標は解析的な扱いには適しているがその上に差分格子をとるには格子間隔が場所により大きく違うなど必ずしも都合がよくない。そこでここでは格子間隔が全体ではほぼ一定になる次のような格子系を考えた。

まず球対称の中心から見た全立体角を6つの平面  $x = \pm y$ ,  $y = \pm z$ ,  $z = \pm x$  により6つの合同なブロックに分け、各ブロック毎に角座標  $\xi$ ,  $\eta$  を、たとえば  $x$  軸の正方向を含むブロックについては

$$\begin{aligned}\xi &= \tan^{-1}(y/x) \\ \eta &= \tan^{-1}(z/x)\end{aligned}\quad (1)$$

により定義する(他のブロックについても同様)。このとき  $\xi$ ,  $\eta$  の範囲はいずれも  $[-\pi/4, \pi/4]$  となり、各ブロックは  $\xi$ - $\eta$  平面上で正方形領域になる。この領域に  $\xi$ ,  $\eta$  方向にそれぞれ  $n$  個、 $r$  方向に  $m$  個の格子点  $(\xi_i, \eta_j, r_k)$  を次のようにとる。

$$\begin{aligned}\xi_i &= \{ i - (n+1)/2 \} \cdot d \\ \eta_j &= \{ j - (n+1)/2 \} \cdot d \\ r_k &= r_1 + (k-1) \cdot d_r\end{aligned}\quad (2)$$

$$d = \pi / (2n), \quad d_r = (r_2 - r_1) / (m-1)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, n, \quad k = 1, 2, \dots, m$$

ここで  $r_1 < r_2$  は  $r$  の範囲である。  $n = 10$ ,  $m = 1$  の場合の格子点の配置を図1に示す。

### 3. 並列計算機のアーキテクチャ

この格子系に対応する並列計算機として図2を考える。図で■はPU(プロセッシング・ユニット)、線はリンクを表わす。PUはすべて4本のリンクを持ち、局所的には2次元格子、大域的には立方体の表面のトポロジーを持つ。2. の格子系とは2つの角方向にそれぞれ  $n_1$  個 ( $n_1$  は  $n$  の約数)、動径方向に  $m$  個の  $n_1 \times n_1 \times m$  個の格子点と1つのPUが自然に対応する。各PUはそれぞれ独自のプログラムを持ちMIMD方式で動作するものとする。

### 4. 差分

本格子系における微分係数の差分近似にはいくつかの方法が考えられる。ここでは次に述べる2つの方法を検討した。なお、方程式に表われる空間微分は2階までとし、また  $r$  方向の微分に関しては特記すべき点はないのでここでは省略した。

#### 1) $\xi$ , $\eta$ による差分

各ブロック内の格子点は  $\xi$ - $\eta$  平面では正方形格子となるので、方程式の変数を  $\xi$ ,  $\eta$  で書けば各ブロックの最外周を除いた格子点については、通常の差分法が適用できる。しかし最外周の格子点における微分係数を求めるためには、もう1つ外側の  $\xi$ - $\eta$  平面の格子点における関数値が必要であるがこの点は本格子系の格子点ではない。したがってこれらの点における値は隣接ブロックの格子点における値から補間により求める。

#### 2) 局所座標による差分

もう1つのやり方として各格子点毎にその格子点を原点とし原点において直交する固有の座標系  $(r, u, v)$  を導入し、この座標系に対して差分を行なうことが考えられる。この場合は本格子系の格子点は  $u$ - $v$  平面の格子点に一致せず、通常の差分法は適用できない。ここでは次のように求めた。

関数  $\phi$  を原点の近傍で2次までの Taylor 展開し

A finite difference method adaptable for massively parallel calculation of partial differential equation on spherically symmetric domain.

Shinobu YAZAKI  
NIED, STA

た式  $\phi^T$  で原点付近の  $\phi$  の値を近似する.

$$\begin{aligned} \phi^T(u,v) &= \phi(0,0) + \phi_u(0,0) \cdot u + \phi_v(0,0) \cdot v \\ &+ \frac{1}{2} \{ \phi_{uu}(0,0) \cdot u^2 + 2 \cdot \phi_{uv}(0,0) \cdot uv + \phi_{vv}(0,0) \cdot v^2 \} \end{aligned} \quad (3)$$

$u-v$  平面上で原点の付近の数個の格子点における  $\phi$  の値  $\phi^a$  とその点における  $\phi^T$  との差を近似の誤差と考えてこれらの2乗和を最小にするように(3)の係数を決める. この条件から5個の係数  $\phi_u, \phi_v, \phi_{uu}, \phi_{uv}, \phi_{vv}$  に対し5つの1次方程式が得られ、これを解いて  $u-v$  平面の原点すなわち考えている格子点における2階までの微分係数が求まる.

5. シミュレーション

以上に述べた計算方法の有効性を確認し、また計算精度を評価するために通常の逐次型計算機によるシミュレーションを行った. 精度を評価するためには解析解が得られる必要がある. そのような例題として球面上の熱伝導方程式を選んだ. この方程式は、無次元化した形で

$$T_t = \Delta T$$

で表わされ ( $\Delta$  は  $V^2$  の角部分)、その一般解は

$$T(\theta, \varphi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n A_{nm} \cdot P_n^m(\cos \theta) \cdot \exp(im\varphi) \cdot e^{-n(n+1)t} \quad (4)$$

で与えられる. ここで  $P_n^m$  は Legendre の多項式、 $A_{nm}$  は初期条件から決まる定数である. ここでは逆に  $A_{nm}$  に適当な値を与えて1つの特解を構成し、その解の  $t=0$  の値を初期値として数値積分を行い、その結果を解析解と比較した. ここでは  $n=2$  までの項を用い、 $t=0$  における  $T$  の値の最小値および最大値がそれぞれ0および1になるように  $A_{nm}$  を選んだ.

同一の条件の下に4. に述べた2つの方法により解を求め、また比較のために極座標格子による差分解も求めた. 時間積分はいずれの場合もいわゆる陽解法を用いた. 計算の諸元および結果を表1に示す. ここで誤差は計算範囲のすべての空間および時間格子点の上での数値解と解析解との差である.

これらの結果から本格子系による差分解は、いずれの方法によっても精度、安定性、処理速度ともに十分良いことが分かった.

6. まとめ

ここでは具体的な計算例として最も基本的な2次元の熱伝導方程式について検討を行い、それに対しては本方法の有効性が確かめられた. 今後さらにベクトル関数、多変数、非線型、3次元等の一般の場合についての有効性を調べる必要がある.

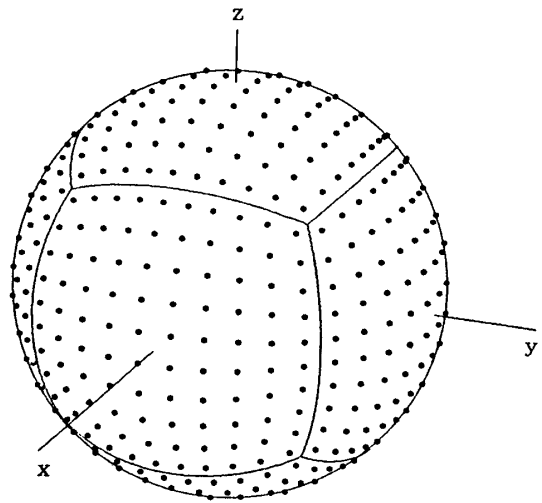


図1 立方体面格子 (n=10, m=1)

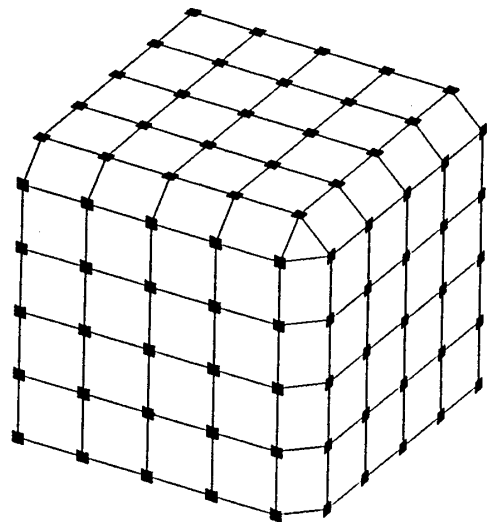


図2 並列計算機のPUネットワーク

表1 計算の諸元および結果

	立方体面格子		極座標格子
空間格子点数	2400		3122
空間格子間隔	$\Delta \xi = \Delta \eta = \pi/40$		$\Delta \theta = \Delta \varphi = \pi/40$
時間格子間隔	$\Delta t = 2 \times 10^{-4}$		$\Delta t = 1 \times 10^{-5}$
積分時間	0.0-0.5		0.0-0.5
差分法	$\xi - \eta$	$u - v$	
最大誤差	$8.54 \times 10^{-5}$	$1.70 \times 10^{-4}$	$4.67 \times 10^{-4}$
2乗平均誤差	$2.72 \times 10^{-5}$	$6.19 \times 10^{-5}$	$1.99 \times 10^{-4}$