

EEM-STF

理論説明書

株式会社EEM

目次

1. 概要.....	1
2. 基本式の離散化.....	2
3. 共役勾配法.....	5
3. 1 行列表示.....	5
3. 2 行列の対称化.....	6
3. 3 共役勾配法.....	7
3. 4 ICCG 法.....	8
3. 5 MICCG 法.....	10
3. 6 SOR 法.....	11
3. 7 共役勾配法の並列計算.....	12
3. 8 SOR 法の並列計算.....	12
4. 特性の計算.....	14
4. 1 電界.....	14
4. 2 電荷.....	14
4. 3 静電エネルギー.....	14
参考文献.....	15

1. 概要

(目的)

静電界シミュレータEEM-STFは、3次元任意形状の誘電体、電極、点電荷からなる系の電圧分布を差分法を用いて解析するものである。

誘電体を磁性体に、電界を磁界に置き換えれば静磁界の解析に用いることもできる。

(解析手法)

電界に関するMAXWELL方程式のポテンシャル表示であるポアソン方程式を空間的に離散化し(7点差分)、電圧に関する連立一次方程式を解く。

連立一次方程式の解法としては、共役勾配法(CG法/ICCG法)またはSOR法を用いる。

(座標系とメッシュ)

座標系は3次元のXYZ座標系とし、メッシュは各方向に均一または不均一とする。

(解析対象)

任意個数の誘電体、電極、点電荷を任意位置に置くことができる。

誘電体と電極の形状は、直方体、平板、円柱、球、角柱その他の集合とする。

各誘電体には独立に比誘電率を設定することができる。ただし、無損失・等方的・線形とする。

各電極には独立に電圧を設定することができる。

各点電荷には独立に電荷量を設定することができる。

(出力機能)

解析領域内の電圧と電界の分布、電極の電荷量、全静電エネルギーを出力する。

2. 基本式の離散化

MAXWELL 方程式の電界と電荷に関する式

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.1)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \quad (2.2)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0 \quad (2.3)$$

と電界のポテンシャル表示

$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (2.4)$$

から次式の Poisson 方程式が得られる。

$$\nabla \cdot (\varepsilon_r \nabla V) = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (2.5)$$

ここで、D：電束密度、E：電界、V：電圧(電位)、 ε ：誘電率、 ε_r ：比誘電率、 ε_0 ：真空の誘電率、 ρ ：電荷密度である。

式(2.5)が基本方程式となる。V、 ε_r 、 ρ は場所の関数である。Vは未知数、 ε_r 、 ρ は既知数である。

3次元空間をメッシュ (x_i, y_j, z_k) ($i=0 \dots N_x$, $j=0 \dots N_y$, $k=0 \dots N_z$) で分割する。

式(2.5)を点(i, j, k)で離散化すると次式のようになる[2]。以下では比誘電率 ε_r を ε と表示する。

$$\begin{aligned} -\frac{\rho_{i,j,k}}{\varepsilon_0} &= \frac{1}{\Delta x_i} \left\{ (\varepsilon \nabla V)_{i+\frac{1}{2},j,k} - (\varepsilon \nabla V)_{i-\frac{1}{2},j,k} \right\} \\ &+ \frac{1}{\Delta y_j} \left\{ (\varepsilon \nabla V)_{i,j+\frac{1}{2},k} - (\varepsilon \nabla V)_{i,j-\frac{1}{2},k} \right\} \\ &+ \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ (\varepsilon \nabla V)_{i,j,k+\frac{1}{2}} - (\varepsilon \nabla V)_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right\} \\ &= \frac{1}{\Delta x_i} \left\{ \frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} (V_{i+1,j,k} - V_{i,j,k}) - \frac{\varepsilon_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} (V_{i,j,k} - V_{i-1,j,k}) \right\} \\ &+ \frac{1}{\Delta y_j} \left\{ \frac{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_{j+\frac{1}{2}}} (V_{i,j+1,k} - V_{i,j,k}) - \frac{\varepsilon_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}} (V_{i,j,k} - V_{i,j-1,k}) \right\} \\ &+ \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ \frac{\varepsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_{k+\frac{1}{2}}} (V_{i,j,k+1} - V_{i,j,k}) - \frac{\varepsilon_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_{k-\frac{1}{2}}} (V_{i,j,k} - V_{i,j,k-1}) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} V_{i+1,j,k} + \frac{\varepsilon_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} V_{i-1,j,k} \\
&+ \frac{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \Delta y_{j+\frac{1}{2}}} V_{i,j+1,k} + \frac{\varepsilon_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \Delta y_{j-\frac{1}{2}}} V_{i,j-1,k} \\
&+ \frac{\varepsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k+\frac{1}{2}}} V_{i,j,k+1} + \frac{\varepsilon_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k-\frac{1}{2}}} V_{i,j,k-1} \\
&- \left(\frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{\varepsilon_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x_i \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} + \frac{\varepsilon_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \Delta y_{j+\frac{1}{2}}} + \frac{\varepsilon_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y_j \Delta y_{j-\frac{1}{2}}} + \frac{\varepsilon_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k+\frac{1}{2}}} + \frac{\varepsilon_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k-\frac{1}{2}}} \right) V_{i,j,k} \\
&\quad (0 < i < N_x, \quad 0 < j < N_y, \quad 0 < k < N_z) \tag{2.6}
\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\Delta x_i &= \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}, \quad \Delta x_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i, \quad \Delta x_{i-\frac{1}{2}} = x_i - x_{i-1} \\
\Delta y_j &= \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2}, \quad \Delta y_{j+\frac{1}{2}} = y_{j+1} - y_j, \quad \Delta y_{j-\frac{1}{2}} = y_j - y_{j-1} \\
\Delta z_k &= \frac{z_{k+1} - z_{k-1}}{2}, \quad \Delta z_{k+\frac{1}{2}} = z_{k+1} - z_k, \quad \Delta z_{k-\frac{1}{2}} = z_k - z_{k-1}
\end{aligned} \tag{2.7}$$

である。

式(2.6)は未知数Vに関する連立一次方程式である。

解析領域の境界における境界条件はNeumann条件(電圧の法線微分=電界の法線成分=0)とする。

$$\frac{\partial V}{\partial n} = 0 \quad (\text{Neumann条件、n: 法線方向}) \tag{2.8}$$

ただし、解析領域に電極が一つもないときは電圧は不定となるのでDirichlet条件(電圧=0)を用いる。

$$V = 0 \quad (\text{Dirichlet条件}) \tag{2.9}$$

式(2.8)(2.9)を離散化すると次式になる。

$$\begin{aligned}
V_{0,j,k} &= V_{1,j,k}, \quad V_{N_x,j,k} = V_{N_x-1,j,k} \quad (j=0 \dots N_y, \quad k=0 \dots N_z) \\
V_{i,0,k} &= V_{i,1,k}, \quad V_{i,N_y,k} = V_{i,N_y-1,k} \quad (k=0 \dots N_z, \quad i=0 \dots N_x) \\
V_{i,j,0} &= V_{i,j,1}, \quad V_{i,j,N_z} = V_{i,j,N_z-1} \quad (i=0 \dots N_x, \quad j=0 \dots N_y)
\end{aligned} \quad (\text{Neumann条件}) \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned}
V_{0,j,k} &= V_{N_x,j,k} = 0 \quad (j=0 \dots N_y, \quad k=0 \dots N_z) \\
V_{i,0,k} &= V_{i,N_y,k} = 0 \quad (k=0 \dots N_z, \quad i=0 \dots N_x) \\
V_{i,j,0} &= V_{i,j,N_z} = 0 \quad (i=0 \dots N_x, \quad j=0 \dots N_y)
\end{aligned} \quad (\text{Dirichlet条件}) \tag{2.11}$$

さらに、電極上では電圧は一定(入力値)である。

$$V_{i,j,k} = \bar{V} \quad (\text{点}(i, j, k) \in \text{電極}) \tag{2.12}$$

式(2.4)(2.5)は電界と磁界の双対性から静磁界については以下のようになる。

$$\mathbf{H} = -\nabla V_m \quad (2.13)$$

$$\nabla \cdot (\mu_r \nabla V_m) = -\frac{\rho_m}{\mu_0} \quad (2.14)$$

ここでH：磁界、 V_m ：磁位、 μ_r ：比透磁率、 μ_0 ：真空の透磁率、 ρ_m ：磁荷密度である。

3. 共役勾配法

3. 1 行列表示

以下では3次元のメッシュを1次元的に並べる。

$$[i, j, k] \equiv i * (N_y + 1) * (N_z + 1) + j * (N_z + 1) + k \quad (3.1)$$

$$0 \leq [i, j, k] \leq N - 1 \quad (3.2)$$

$$N = (N_x + 1) * (N_y + 1) * (N_z + 1) \quad (3.3)$$

連立一次方程式(2.6)は次式のように表される。

$$\begin{aligned} & A([i, j, k], [i+1, j, k])V([i+1, j, k]) + A([i, j, k], [i-1, j, k])V([i-1, j, k]) \\ & + A([i, j, k], [i, j+1, k])V([i, j+1, k]) + A([i, j, k], [i, j-1, k])V([i, j-1, k]) \\ & + A([i, j, k], [i, j, k+1])V([i, j, k+1]) + A([i, j, k], [i, j, k-1])V([i, j, k-1]) \\ & + A([i, j, k], [i, j, k])V([i, j, k]) = B([i, j, k]) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$(0 < i < N_x, \quad 0 < j < N_y, \quad 0 < k < N_z)$$

ここでAは2次元の配列(=行列)、VとBは1次元の配列(=ベクトル)である。

行列Aの要素の計算式は次節で述べる。

境界条件(2.10)は

$$\begin{aligned} V([0, j, k]) &= V([1, j, k]), \quad V([N_x, j, k]) = V([N_x - 1, j, k]) \quad (j = 0 \dots N_y, \quad k = 0 \dots N_z) \\ V([i, 0, k]) &= V([i, 1, k]), \quad V([i, N_y, k]) = V([i, N_y - 1, k]) \quad (k = 0 \dots N_z, \quad i = 0 \dots N_x) \\ V([i, j, 0]) &= V([i, j, 1]), \quad V([i, j, N_z]) = V([i, j, N_z - 1]) \quad (i = 0 \dots N_x, \quad j = 0 \dots N_y) \end{aligned} \quad (3.5)$$

となり、境界条件(2.11)は

$$\begin{aligned} V([0, j, k]) &= V([N_x, j, k]) = 0 \quad (j = 0 \dots N_y, \quad k = 0 \dots N_z) \\ V([i, 0, k]) &= V([i, N_y, k]) = 0 \quad (k = 0 \dots N_z, \quad i = 0 \dots N_x) \\ V([i, j, 0]) &= V([i, j, N_z]) = 0 \quad (i = 0 \dots N_x, \quad j = 0 \dots N_y) \end{aligned} \quad (3.6)$$

となる。

電極条件(2.12)は

$$V([i, j, k]) = \bar{V} \quad ([i, j, k] \in \text{電極}) \quad (3.7)$$

となる。

3. 2 行列の対称化

共役勾配法を用いるには行列は対称でなければならないので、以下のような操作を行う。[2]

式(2.6)の両辺に $\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k$ をかける (Control Volume 法)。このとき行列要素は次式になる。

$$\begin{aligned} A([i, j, k], [i \pm 1, j, k]) &= \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{i \pm \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i \pm \frac{1}{2}, j, k} \\ A([i, j, k], [i, j \pm 1, k]) &= \frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{j \pm \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j \pm \frac{1}{2}, k} \\ A([i, j, k], [i, j, k \pm 1]) &= \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{k \pm \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, k \pm \frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} A([i, j, k], [i, j, k]) &= - \left\{ \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i+\frac{1}{2}, j, k} + \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i-\frac{1}{2}, j, k} + \frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{j+\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j+\frac{1}{2}, k} + \frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{j-\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j-\frac{1}{2}, k} + \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{k+\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, k+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{k-\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, k-\frac{1}{2}} \right\} \\ B([i, j, k]) &= - \frac{Q_{i, j, k}}{\varepsilon_0} \quad (Q_{i, j, k} \equiv \rho_{i, j, k} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k: \text{電荷}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

行列要素(3.8)が対称であることは次式から確認できる。

$$\begin{aligned} A([i, j, k], [i \pm 1, j, k]) &= A([i \pm 1, j, k], [i, j, k]) = \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{i \pm \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i \pm \frac{1}{2}, j, k} \\ A([i, j, k], [i, j \pm 1, k]) &= A([i, j \pm 1, k], [i, j, k]) = \frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{j \pm \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j \pm \frac{1}{2}, k} \\ A([i, j, k], [i, j, k \pm 1]) &= A([i, j, k \pm 1], [i, j, k]) = \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{k \pm \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, k \pm \frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

境界条件(3.5)の最初の式については、両辺に式(3.8)の最初の式($i=0$)をかけると

$$- \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{\frac{1}{2}, j, k} V([0, j, k]) + \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{\frac{1}{2}, j, k} V([1, j, k]) = 0 \quad (3.11)$$

となり、これより行列要素は

$$\begin{aligned} A([0, j, k], [0, j, k]) &= - \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{\frac{1}{2}, j, k} \\ A([0, j, k], [1, j, k]) &= \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{\frac{1}{2}, j, k} \end{aligned} \quad (3.12)$$

となる。式(3.12)の第2式は式(3.10)に含まれ($i=0$)、従って対称行列になる。その他の境界についても同様に行い次式を得る。

$$\begin{aligned} A([N_x, j, k], [N_x, j, k]) &= - \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{N_x - \frac{1}{2}}} \varepsilon_{N_x - \frac{1}{2}, j, k} \\ A([N_x, j, k], [N_x - 1, j, k]) &= \frac{\Delta y_j \Delta z_k}{\Delta x_{N_x - \frac{1}{2}}} \varepsilon_{N_x - \frac{1}{2}, j, k} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$A([i, 0, k], [i, 0, k]) = -\frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, \frac{1}{2}, k} \quad (3.14)$$

$$A([i, 0, k], [i, 1, k]) = \frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, \frac{1}{2}, k}$$

$$A([i, N_y, k], [i, N_y, k]) = -\frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{N_y - \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, N_y - \frac{1}{2}, k} \quad (3.15)$$

$$A([i, N_y, k], [i, N_y - 1, k]) = \frac{\Delta z_k \Delta x_i}{\Delta y_{N_y - \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, N_y - \frac{1}{2}, k}$$

$$A([i, j, 0], [i, j, 0]) = -\frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, \frac{1}{2}} \quad (3.16)$$

$$A([i, j, 0], [i, j, 1]) = \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{\frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, \frac{1}{2}}$$

$$A([i, j, N_z], [i, j, N_z]) = -\frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{N_z - \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, N_z - \frac{1}{2}} \quad (3.17)$$

$$A([i, j, N_z], [i, j, N_z - 1]) = \frac{\Delta x_i \Delta y_j}{\Delta z_{N_z - \frac{1}{2}}} \varepsilon_{i, j, N_z - \frac{1}{2}}$$

以上で境界条件(3.5)は対称になる。

境界条件(3.6)は以下で述べる電極条件と同じ扱いになる。(電圧=0)

次に電極条件については以下の操作を行う。ここで節点[i, j, k]が電極でその電圧を \bar{V} とする。

まず、

$$B([i, j, k]) = A([i, j, k], [i, j, k]) \bar{V} \quad (3.18)$$

となり、次に電圧 \bar{V} にかける項をすべて右辺に移す。

$$\begin{aligned} B([i \pm 1, j, k]) &\leftarrow B([i \pm 1, j, k]) - A([i \pm 1, j, k], [i, j, k]) \bar{V} \\ B([i, j \pm 1, k]) &\leftarrow B([i, j \pm 1, k]) - A([i, j \pm 1, k], [i, j, k]) \bar{V} \\ B([i, j, k \pm 1]) &\leftarrow B([i, j, k \pm 1]) - A([i, j, k \pm 1], [i, j, k]) \bar{V} \end{aligned} \quad (3.19)$$

最後に行または列が[i, j, k]である非対角要素をすべて0にする。

$$\begin{aligned} A([i, j, k], [i \pm 1, j, k]) &= 0 \\ A([i, j, k], [i, j \pm 1, k]) &= 0 \\ A([i, j, k], [i, j, k \pm 1]) &= 0 \\ A([i \pm 1, j, k], [i, j, k]) &= 0 \\ A([i, j \pm 1, k], [i, j, k]) &= 0 \\ A([i, j, k \pm 1], [i, j, k]) &= 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

式(3.20)から行列は対称であることがわかる。

以上の操作によって行列は完全に対称になる。

3.3 共役勾配法

対称な連立一次方程式

$$A\mathbf{x}=\mathbf{B} \quad (3.21)$$

に対する共役勾配法 (CG 法: Conjugate Gradient method) のアルゴリズムは以下の通りである。[1]-[3]

(1) 適当な初期ベクトル \mathbf{x}_0 を選んで次の計算を行う。

$$\mathbf{r}_0=\mathbf{B}-A\mathbf{x}_0 \quad (3.22)$$

$$\mathbf{p}_0=\mathbf{r}_0 \quad (3.23)$$

(2) $n=0, 1, 2, \dots$ について次の手順を繰り返す。 (ε : 適当な微小量)

$$\mathbf{u}_n=A\mathbf{p}_n \quad (3.24)$$

$$\alpha_n=\frac{(\mathbf{r}_n, \mathbf{p}_n)}{(\mathbf{p}_n, \mathbf{u}_n)} \quad (3.25)$$

$$\mathbf{x}_{n+1}=\mathbf{x}_n+\alpha_n\mathbf{p}_n \quad (3.26)$$

$$\mathbf{r}_{n+1}=\mathbf{r}_n-\alpha_n\mathbf{u}_n \quad (3.27)$$

$$\frac{\|\mathbf{r}_{n+1}\|}{\|\mathbf{B}\|}<\varepsilon \quad \text{ならば終了する} \quad (3.28)$$

$$\beta_n=\frac{(\mathbf{r}_{n+1}, \mathbf{r}_{n+1})}{(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_n)} \quad (3.29)$$

$$\mathbf{p}_{n+1}=\mathbf{r}_{n+1}+\beta_n\mathbf{p}_n \quad (3.30)$$

ここで $\|\mathbf{x}\|$ はベクトルのノルム、 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) はベクトルの内積である。

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}\| &\equiv \left\{ \sum_i x_i^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \\ (\mathbf{x}, \mathbf{y}) &\equiv \sum_i x_i y_i \end{aligned} \quad (3.31)$$

式(3.28)の $\|\mathbf{B}\|$ の計算では電極条件の点は除外する。

共役勾配法は次節のように前処理を行うと収束を速くすることができる。

3.4 ICCG 法

前処理を行う共役勾配法として ICCG 法 (Incomplete Cholesky decomposition Conjugate Gradient method: 不完全コレスキー分解共役勾配法) を使用する。

これは行列の固有値を集中させて収束を速くする手法である。

ICCG 法のアルゴリズムは以下の通りである。[2]-[5]

(1) 適当な初期ベクトル \mathbf{x}_0 を選んで次の計算を行う。

$$\mathbf{r}_0=\mathbf{B}-A\mathbf{x}_0 \quad (3.32)$$

$$\mathbf{p}_0=(LDL^T)^{-1}\mathbf{r}_0 \quad (3.33)$$

(2) $n=0, 1, 2, \dots$ について次の手順を繰り返す。

$$\mathbf{u}_n = A \mathbf{p}_n \quad (3.34)$$

$$\alpha_n = \frac{(\mathbf{r}_n, (LDL^T)^{-1} \mathbf{r}_n)}{(\mathbf{p}_n, \mathbf{u}_n)} \quad (3.35)$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{p}_n \quad (3.36)$$

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n - \alpha_n \mathbf{u}_n \quad (3.37)$$

$$\frac{\|\mathbf{r}_{n+1}\|}{\|\mathbf{B}\|} < \varepsilon \quad \text{ならば終了する} \quad (3.38)$$

$$\beta_n = \frac{(\mathbf{r}_{n+1}, (LDL^T)^{-1} \mathbf{r}_{n+1})}{(\mathbf{r}_n, (LDL^T)^{-1} \mathbf{r}_n)} \quad (3.39)$$

$$\mathbf{p}_{n+1} = (LDL^T)^{-1} \mathbf{r}_{n+1} + \beta_n \mathbf{p}_n \quad (3.40)$$

これをプログラムに即して記述すると以下のようにになる。

(1) 適当な初期ベクトル \mathbf{x} を選んで次の計算を行う。

$$\mathbf{u} \leftarrow A \mathbf{x} \quad (3.41)$$

$$\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{B} - \mathbf{u} \quad (3.42)$$

$$\mathbf{p} \leftarrow (LDL^T)^{-1} \mathbf{r} \quad (3.43)$$

$$\gamma \leftarrow (\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (3.44)$$

(2) 以下の手順を繰り返す。

$$\mathbf{u} \leftarrow A \mathbf{p} \quad (3.45)$$

$$\alpha \leftarrow \frac{\gamma}{(\mathbf{p}, \mathbf{u})} \quad (3.46)$$

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \alpha \mathbf{p} \quad (3.47)$$

$$\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \alpha \mathbf{u} \quad (3.48)$$

$$\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{B}\|} < \varepsilon \quad \text{ならば終了する} \quad (3.49)$$

$$\tilde{\gamma} \leftarrow \gamma \quad (3.50)$$

$$\mathbf{v} \leftarrow (LDL^T)^{-1} \mathbf{r} \quad (3.51)$$

$$\gamma \leftarrow (\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (3.52)$$

$$\beta \leftarrow \frac{\gamma}{\tilde{\gamma}} \quad (3.53)$$

$$\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{v} + \beta \mathbf{p} \quad (3.54)$$

式(3.43) (3.51)における計算 $\mathbf{v} \leftarrow (LDL^T)^{-1} \mathbf{r}$ については、次の2つの三角行列の方程式を解く。

$$L \mathbf{y} = \mathbf{r} \quad (3.55)$$

$$DL^T \mathbf{v} = \mathbf{y} \quad (3.56)$$

7点差分のときの式(3.55) (3.56)の具体的な計算式は以下の通りである。[2][4]
まず反復計算を行う前に対角成分Dを次式で計算する。

$$D([i, j, k]) = \left\{ A([i, j, k], [i, j, k]) - A([i, j, k], [i-1, j, k])^2 D([i-1, j, k]) - A([i, j, k], [i, j-1, k])^2 D([i, j-1, k]) - A([i, j, k], [i, j, k-1])^2 D([i, j, k-1]) \right\}^{-1} \quad (3.57)$$

次に次式で前進代入と後退代入を行う。

$$y([i, j, k]) = D([i, j, k]) \left\{ r([i, j, k]) - A([i, j, k], [i-1, j, k]) y([i-1, j, k]) - A([i, j, k], [i, j-1, k]) y([i, j-1, k]) - A([i, j, k], [i, j, k-1]) y([i, j, k-1]) \right\} \quad (3.58)$$

$(i=0 \dots N_x, j=0 \dots N_y, k=0 \dots N_z)$

$$v([i, j, k]) = y([i, j, k]) - D([i, j, k]) \left\{ A([i+1, j, k], [i, j, k]) y([i+1, j, k]) + A([i, j+1, k], [i, j, k]) y([i, j+1, k]) + A([i, j, k+1], [i, j, k]) y([i, j, k+1]) \right\} \quad (3.59)$$

$(i=N_x \dots 0, j=N_y \dots 0, k=N_z \dots 0)$

各点での誘電率と電極電圧条件には間接的に整数のインデックスを割り当てる。インデックスを1バイト(=8ビット=256)とすると256種類の誘電率と電極電圧が指定でき、必要メモリーは節点あたり2バイトですむ。

予め $\|B\|$ を計算しておくとし式(3.42)後 B が不要になるので式(3.51)の v と共用できる。

また、式(3.58)(3.59)の y と v は共用することができる。

結局必要メモリーは単精度で $64N$ バイトになる。

また、計算時間はメッシュ数 N と反復回数に比例する。

図3.1に前処理の有無と収束状況の関係の一例を示す。これから前処理(ICCG法)によって反復回数がほぼ1/3になることがわかる。ただし、ICCG法では反復計算あたりの計算量が約1.5倍になるので、結局前処理によって計算時間が約1/2になる。

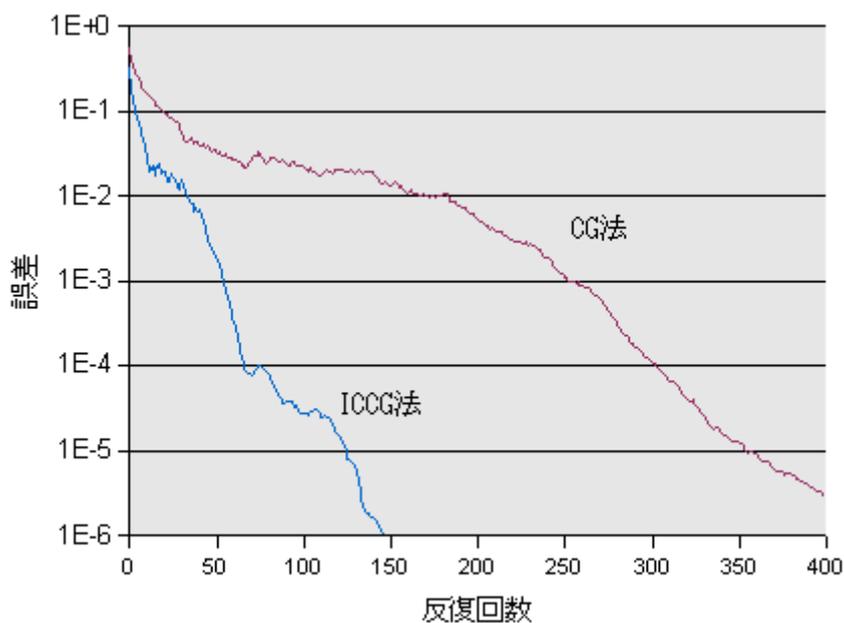


図3.1 共役勾配法の前処理と収束状況の関係(セル数=100*100*100)

3.5 MICCG法

前節のICCG法において、対角成分 D を計算する式(3.57)を以下のように変えると、反復回数がさらに小

さくなる。[2][4]

$$\begin{aligned}
D([i, j, k]) &= [A([i, j, k], [i, j, k]) \\
&- A([i, j, k], [i-1, j, k]) \{A([i, j, k], [i-1, j, k]) + g \times c_i\} D([i-1, j, k]) \\
&- A([i, j, k], [i, j-1, k]) \{A([i, j, k], [i, j-1, k]) + g \times c_j\} D([i, j-1, k]) \\
&- A([i, j, k], [i, j, k-1]) \{A([i, j, k], [i, j, k-1]) + g \times c_k\} D([i, j, k-1)]^{-1} \\
c_i &= A([i-1, j+1, k], [i-1, j, k]) + A([i-1, j, k+1], [i-1, j, k]) \\
c_j &= A([i, j-1, k+1], [i, j-1, k]) + A([i+1, j-1, k], [i, j-1, k]) \\
c_k &= A([i+1, j, k-1], [i, j, k-1]) + A([i, j+1, k-1], [i, j, k-1])
\end{aligned} \tag{3.60}$$

これを MICCG 法 (Modified ICCG 法、Gustafsson 法) と呼ぶ。ここで、 g は加速因子である。

$$0 \leq g < 1 \tag{3.61}$$

$g=0$ のとき ICCG 法と一致する。

数値実験によると $g=0.8-0.9$ のとき反復回数が最小になり約 20% 短縮される。

本方法は ICCG 法の反復計算を行う前の処理だけを変更するものである。必要メモリーは ICCG 法と同じである。

3.6 SOR 法

SOR 法 (successive overrelaxation, 逐次過緩和法) は連立一次方程式の反復解法である [2][5]-[7]。行列は対称でなくてもよい。

そのアルゴリズムは以下の通りである。

連立一次方程式 (3.21) において、適当な初期値 \mathbf{x} を与え次式で反復計算する。

$$x([i, j, k]) \leftarrow x([i, j, k]) - \omega \frac{r[i, j, k]}{A([i, j, k], [i, j, k])} \tag{3.62}$$

$$\begin{aligned}
r[i, j, k] &= A([i, j, k], [i, j, k])x([i, j, k]) \\
&+ A([i, j, k], [i+1, j, k])x([i+1, j, k]) + A([i, j, k], [i-1, j, k])x([i-1, j, k]) \\
&+ A([i, j, k], [i, j+1, k])x([i, j+1, k]) + A([i, j, k], [i, j-1, k])x([i, j-1, k]) \\
&+ A([i, j, k], [i, j, k+1])x([i, j, k+1]) + A([i, j, k], [i, j, k-1])x([i, j, k-1]) \\
&- B([i, j, k])
\end{aligned} \tag{3.63}$$

式 (3.62) において x は毎回上書き更新し、式 (3.63) において右辺の x には最新の値を使用する (Gauss-Seidel 法)。 ω は過緩和パラメーターと呼ばれる。

収束判定条件は次式とする。

$$\frac{\|r\|}{\|B\|} < \epsilon \tag{3.64}$$

必要メモリーは単精度で 53N バイトになる。

計算時間はセル数 N と収束反復回数の積に比例する。

図 3.2 は過緩和パラメーター ω を変えたときの収束状況である。縦軸は残差 (式 (3.64) の左辺) である。

ω を変えると収束反復回数が変わり最適値が存在することがわかる。[6]

また、図から収束状況が ω によって変わることがわかる。これは ω を動的に変化させたほうが計算時間が短縮できることを示唆しているが [6]、ここでは一定とする。

また、残差は $1e-5$ 程度以下に下がらないが、これは単精度で計算したためである。

図 3.3 は二つのケースで ω を変えたときの収束反復回数である。

図から、セル数が大きいほど ω の最適値が大きくなることと最適範囲が狭くなることがわかる。 ω の最適値はセル数以外にも、解析対象の形状にも依存するが、以下の式で近似的に評価することができる。

$$\omega = 2 - \frac{5}{\text{MAX}(N_x, N_y, N_z)} \quad (3.65)$$

3.7 共役勾配法の並列計算

ICCG法の式(3.58)(3.59)の前進代入と後退代入は逐次計算であり完全な並列計算はできないので、並列計算の手法として「局所前処理法」を用いる。すなわち、ベクトルの長さ N をスレッド数で領域分割し、各スレッドは右辺のベクトル y に関する部分については添え字が自分の処理する範囲内にあるときだけ計算を行う。これにより不完全コレスキー分解がより不完全になり反復回数が少し増えるが、並列計算の高速化で相殺することができる。

その他のベクトル演算は容易に並列化することができる。

GPUではスレッド数が多く、上記の「局所前処理法」のペナルティが大きいのでICCG法は使用できない。従ってCG法を用いる。

3.8 SOR法の並列計算

SOR法の式(3.62)は x を毎回更新する逐次計算であるから、そのまま並列計算を行うとスレッド間で参照が競合する。そこで、並列計算のためのアルゴリズムであるred-black法[5]-[7]を用いる。

式(3.62)(3.63)からわかるようにベクトル x を更新するには自分以外は i, j, k のいずれかが1異なる項を参照する。従って、 $i+j+k$ が偶数のときは自分以外の $i+j+k$ は奇数であり、 $i+j+k$ が奇数のときは自分以外の $i+j+k$ は偶数である。以上から、 $i+j+k$ が偶数と奇数である2回のループを実行する。

この方法はスレッド数によらず使用できるので、CPUとGPUの両方でこの方法を用いる。

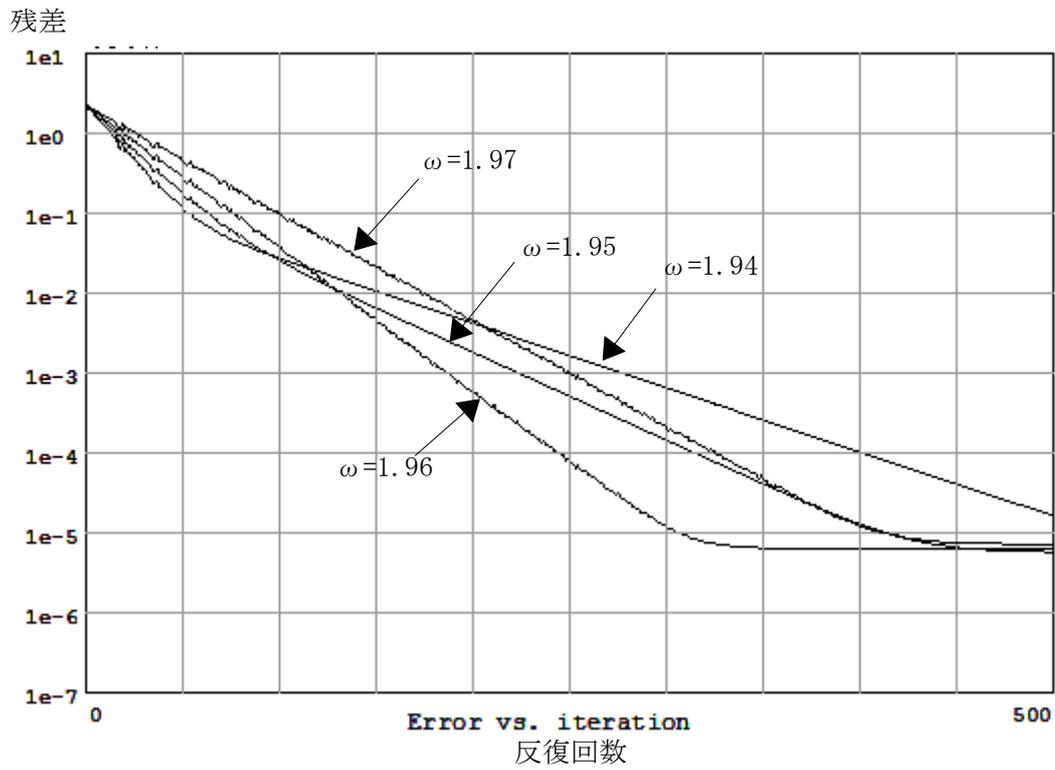


図3.2 SOR法の収束状況と過緩和パラメーター ω の関係(セル数=100*100*100)

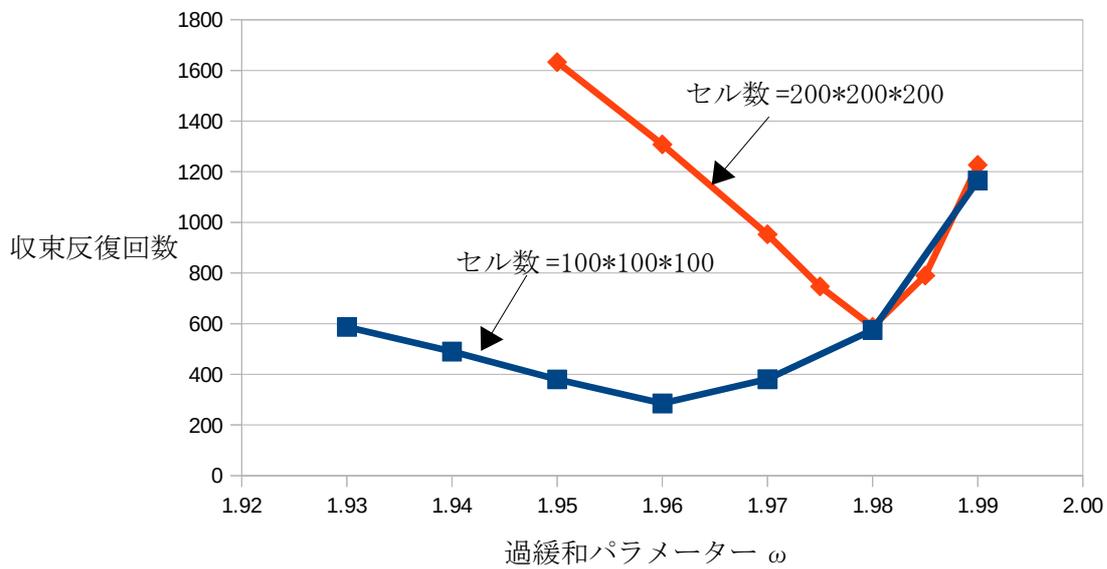


図3.3 SOR法の過緩和パラメーター ω と収束反復回数の関係(収束判定条件 $\epsilon = 2e-5$)

4. 特性の計算

以上で求めた電圧分布から各種の特性を計算することができる。

4. 1 電界

電界は式(2.4)より次式で計算される。

$$\begin{aligned}
 E_x(i, j, k) &= -\frac{V_{i+1, j, k} - V_{i-1, j, k}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \\
 E_y(i, j, k) &= -\frac{V_{i, j+1, k} - V_{i, j-1, k}}{y_{j+1} - y_{j-1}} \\
 E_z(i, j, k) &= -\frac{V_{i, j, k+1} - V_{i, j, k-1}}{z_{k+1} - z_{k-1}}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

境界では片側差分を用いる。

4. 2 電荷

電荷密度は式(2.5)より次式で計算される。

$$\begin{aligned}
 \rho_{i, j, k} &= -\epsilon_0 \nabla \cdot (\epsilon_r \nabla V) \Big|_{i, j, k} \\
 &= \epsilon_0 \left\{ \frac{\epsilon_{i+\frac{1}{2}, j, k}}{\Delta x_i \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} (V_{i, j, k} - V_{i+1, j, k}) + \frac{\epsilon_{i-\frac{1}{2}, j, k}}{\Delta x_i \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} (V_{i, j, k} - V_{i-1, j, k}) \right. \\
 &\quad + \frac{\epsilon_{i, j+\frac{1}{2}, k}}{\Delta y_j \Delta y_{j+\frac{1}{2}}} (V_{i, j, k} - V_{i, j+1, k}) + \frac{\epsilon_{i, j-\frac{1}{2}, k}}{\Delta y_j \Delta y_{j-\frac{1}{2}}} (V_{i, j, k} - V_{i, j-1, k}) \\
 &\quad \left. + \frac{\epsilon_{i, j, k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k+\frac{1}{2}}} (V_{i, j, k} - V_{i, j, k+1}) + \frac{\epsilon_{i, j, k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k \Delta z_{k-\frac{1}{2}}} (V_{i, j, k} - V_{i, j, k-1}) \right\}
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

各電極の総電荷は次式で計算される。

$$Q_n = \int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{i, j, k} \rho_{i, j, k} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \quad (\mathbf{r} = (x_i, y_j, z_k) \in \text{電極 } n) \tag{4.3}$$

4. 3 静電エネルギー

全領域での静電エネルギーの和は次式で計算される。

$$\begin{aligned}
 W &= \frac{1}{2} \epsilon_0 \int \epsilon_r(\mathbf{r}) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{2} \epsilon_0 \sum_{i, j, k} \epsilon_{i, j, k} \left\{ E_x(i, j, k)^2 + E_y(i, j, k)^2 + E_z(i, j, k)^2 \right\} \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

参考文献

- [1] 戸川隼人「共役勾配法」教育出版、1977
- [2] 森正武「FORTRAN77 数値計算プログラミング(増補版)」岩波書店、1988
- [3] 森正武「数値解析、第2版」共立出版、2002
- [4] 小国力「行列計算ソフトウェア WS, スーパーコン, 並列計算機」丸善、1991
- [5] J. J. Dongarra (小国力訳)「コンピュータによる連立一次方程式の解法 ベクトル計算機と並列計算機」丸善、1993
- [6] W. H. Press 他 (丹慶勝市他訳) "Numerical Recipes in C (日本語版)", 技術評論社、1993
- [7] 金田康正「並列数値処理-高速化と性能向上のために-」コロナ社、2010