固体地球の数値モデリング
– マントル対流シミュレーションのマニアックな技術論 –

亀山 真典 @ 愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター

2016 年 2 月 11 日

そもそも「マントルが流れる」とは?

マントルとは、地球内部を占める「熱い石」なのだが、

対流しているマントル ≠ どろどろに融けたマグマ

マントル対流 = 固体の流動

- **非常にねばねばした「流体」が**
  (水の 10^{20} 倍以上の粘性率)
- **非常に長い時間をかけて起こす**
  (数百万年~ 数億年)
- **非常にゆっくりとした流れ**
  (何千 km の距離を年間数 cm で)

として理論的に扱われる。

磁石にくっつくスライム。写真と動画は http://www.rri.kyoto-u.ac.jp/public/atoms/ASF06/jikken_c.html より。

マントル対流シミュレーションの数理

マントル対流シミュレーションの手順

最も簡単な、非圧縮性流体 + ブシネスク近似 $(Di = 0)$ のもとでの基礎方程式を例に用いる。

do 時間発展ループ

solve 熱輸送方程式 (温度場 T を更新)

$$\frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + q$$

solve 運動方程式+連続の式 (速度場 v と圧力場 p を更新)

$$0 = \nabla \cdot \boldsymbol{v}$$

$$\frac{1}{Pr}\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\,T\boldsymbol{e}_z$$

end do 時間発展ループ

「固体」を「流体」だと思うことによる不都合が. . . (後述)

「流体」としてみたマントルの特異な性質

Prandtl 数

$$Pr \equiv \frac{\text{動粘性率 } \nu}{\text{熱拡散率 } \kappa} = \frac{\text{運動量の拡散の速さ}}{\text{熱の拡散の速さ}}$$

マントルでは $\cdots$	外核では $\cdots$
$\nu = 10^{18}\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$	$\nu = 10^{-6}\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$
$\kappa = 10^{-6}\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$	$\kappa = 10^{-6}\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$
としたら、$Pr \sim 10^{24}$	としたら、$Pr \sim 10^{0}$

マントルの流れの異常さをよく特徴づける量の 1 つ

- 運動量の拡散に比べて熱の拡散が圧倒的に遅い
  (運動量の輸送は瞬時に起こるとみなしてよい)
- 熱境界層に比べて速度境界層が圧倒的に厚い
  (マントル全体が速度境界層)

「固体」を「流体」と思うことによる不都合って?

マントル物質の粘性率が極めて高いが故に、

$$Pr \equiv \frac{\text{運動量の拡散の速さ}}{\text{熱の拡散の速さ}} \simeq O(10^{24}) \simeq \infty$$

各時刻での流れ場を解くのが非常に厄介 (時間がかかる)

do 時間発展ループ

$$0 = \nabla \cdot \boldsymbol{v}$$

$$0 \simeq \frac{1}{Pr}\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\, T \boldsymbol{e}_z$$

end do 時間発展ループ

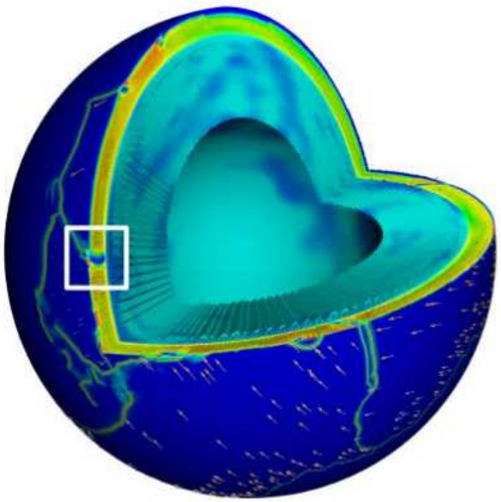
- ❑ **慣性項が無視できるほど小さい**
  熱と比べて、運動量はごく瞬間的に輸送されてしまう
- ❑ **浮力と粘性抵抗の 釣り合い (力学的平衡) が成り立つ流れ場を各時間ステップで求める 必要がある**

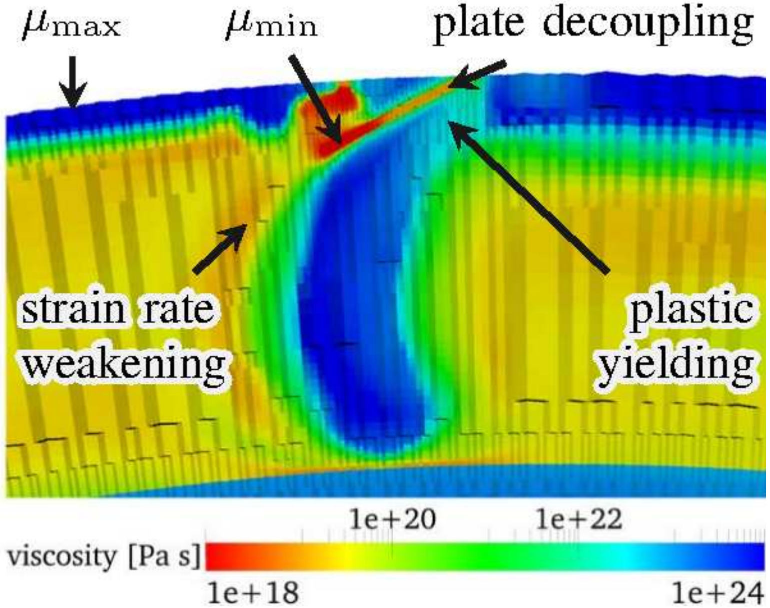
とはいえ、これがプラスになることもある訳で

浮力と粘性抵抗が瞬間的に釣り合って流れ場が決まる

＝ 運動履歴 (加速度) を考慮しなくても流れ場が分かる

そのおかげで、こんな研究もできる。 2015 年の Gordon Bell 賞





浮力の分布と構成関係を与えて、現在の瞬間的なマントル内の流れ場を、とことんまで細かく求めようとしている。

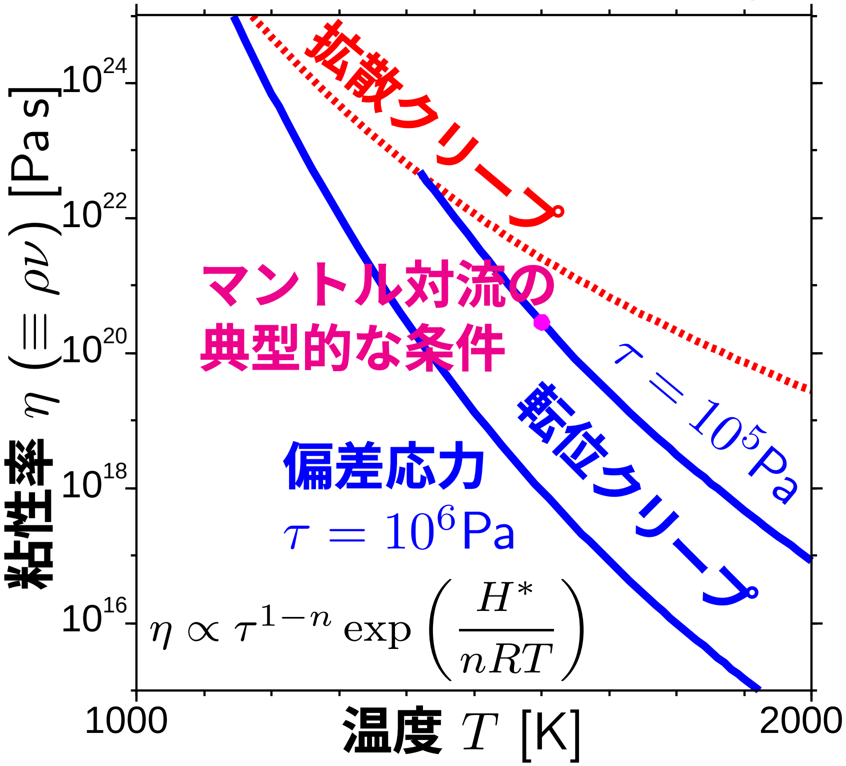
「時間ステップ 1 回分」の計算に数十分ほどかかってそう?

とてもじゃないが、これで「時間発展計算」なんて. . .

マントルの特異な流動特性に起因する難点がもう１つ

- ➢マントルが流れる?
- 数理的構造
- ➢数値解法骨格
- ➢Pr の見積り
- ➢時間スケール乖離
- ➢「今でしょ!!」問題
- ➢粘性の空間変化
- 数値解法技術
- 多重格子法 on HPCI
- 結語
- ACuTE の数理 1
- MG on Yin-Yang
- ACuTE の数理 2

マントル物質の粘性率 η ($\equiv \rho\nu$) の典型値は 10^{21} Pa s 程度であるが、変形させる条件 (温度・圧力・変形速度・変形機構など) によって大きく異なる (η の空間変化が大)。



上部マントル (地表から深さ約 660km まで) 条件での粘性率の推定値。
図は Schubert et al., 2001 より

- ❑ **マントルの定常流れ場 (速度場 v と圧力場 p) を記述する楕円形偏微分方程式の性質が非常に悪くなる。**

マントル対流シミュレーションの技術

原始変数による流れ場の解法: 原理

$$\boxed{\begin{aligned} 0 &= \nabla \cdot \boldsymbol{v} \\ 0 &= -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\,T\boldsymbol{e}_z \end{aligned}}$$

速度 v と圧力 p をしかるべく空間離散化してやると、この式は結局

$$\mathbf{0} = -\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{D}_1 & \boldsymbol{D}_2 & \boldsymbol{D}_3 \\ \boldsymbol{G}_1 & \boldsymbol{C}_{11} & \boldsymbol{C}_{12} & \boldsymbol{C}_{13} \\ \boldsymbol{G}_2 & \boldsymbol{C}_{21} & \boldsymbol{C}_{22} & \boldsymbol{C}_{23} \\ \boldsymbol{G}_3 & \boldsymbol{C}_{31} & \boldsymbol{C}_{32} & \boldsymbol{C}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{v}_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \boldsymbol{RaT} \end{bmatrix}$$

の如き連立一次方程式に書き直せる。
マントル対流の数値シミュレーションではこの連立一次方程式を各時間ステップごとに解く必要がある。
言い換えれば、この (大規模) 連立一次方程式を高速に解けるようにすることが、マントル対流シミュレーションの高速化にとって極めて重要である。

原始変数による流れ場の解法: 難点

$$\mathbf{0} = -\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{D}_1 & \boldsymbol{D}_2 & \boldsymbol{D}_3 \\ \boldsymbol{G}_1 & \boldsymbol{C}_{11} & \boldsymbol{C}_{12} & \boldsymbol{C}_{13} \\ \boldsymbol{G}_2 & \boldsymbol{C}_{21} & \boldsymbol{C}_{22} & \boldsymbol{C}_{23} \\ \boldsymbol{G}_3 & \boldsymbol{C}_{31} & \boldsymbol{C}_{32} & \boldsymbol{C}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{v}_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \boldsymbol{RaT} \end{bmatrix}$$

この連立一次方程式を数値的に解くのも、けっこう大変

- ❑ **ベクトル変数 (速度場の 3 成分) を解く必要がある**
  - ✏ **巷間広く使われている数値計算ライブラリの求解ルーチンが使えない** (スカラー変数の求解が前提)
- ❑ **係数行列の対角成分に 0 がある** (圧力 p の離散化方程式に由来)
  - ✏ **メジャーな連立一次方程式の数値解法をそのまま使うことができない** (対角成分の逆数を使おうとすると転ぶ)
- ❑ **係数行列は悪条件かつ特異** (一意な解が存在しない)

2 次元マントル対流問題でよくある方法

流線関数 Ψ を用いるのが最も簡単

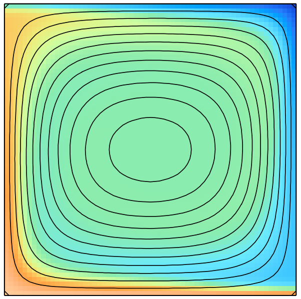
非圧縮 $(\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0)$ の流れ場 $\boldsymbol{v}$ は、あるベクトルポテンシャル $\boldsymbol{\Psi} = (\Psi_x, \Psi_y, \Psi_z)$ を用いて $\boldsymbol{v} = \nabla \times \boldsymbol{\Psi}$ と書ける。特に 2 次元問題 $(\partial/\partial y = 0)$ の場合には、

$$v_x = \frac{\partial \Psi_z}{\partial y} - \frac{\partial \Psi_y}{\partial z} = -\frac{\partial \Psi_y}{\partial z}, \quad v_z = \frac{\partial \Psi_y}{\partial x} - \frac{\partial \Psi_x}{\partial y} = \frac{\partial \Psi_y}{\partial x}$$

となる。さらに圧力 p も消去すれば、結果的に運動方程式は Ψ_y のみを含んだ 4 階の偏微分方程式に変形される。(ただし 3 次元ではそうはいかない)

Ψ_y の等値線分布により流れ場は一目瞭然

- ❑ **接線方向がその点での流速ベクトルの向き**
- ❑ **等値線の間隔が狭いほど流れが速い**



ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005) の数理

連立一次方程式 $Ax = b$ の解は、仮想的な時間発展方程式

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

の定常解とみなすこともできる。ならば、この方程式を定常になるまで時間積分してやることで、求める解が得られるはずである。
例えば、時間方向に陽的なスキームを用いてこの微分方程式を離散化すると、

$$\frac{\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^{k-1}}{\Delta t} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{k-1} \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

のような漸化式を得る。行列 A が正則で、かつ Δt が十分小さい場合には、ベクトル列 $\{x^k\}$ は真の解に収束する ($x^\infty = A^{-1}b$) ことが示せる。

ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005) の数理

ところで、先の式中のスカラー Δt を正則な行列 T に入れ換えて得られる漸化式

$$\boldsymbol{T}^{-1}(\boldsymbol{x}^k - \boldsymbol{x}^{k-1}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{k-1}$$

も同じ極限値に収束する。もし行列 T がうまく選んであれば、このベクトル列の収束が加速できるはずである。

とはいえ最適な T を事前に知ることは不可能だから、それを何らかの形で近似してやる必要がある。**ACuTE 法では T を適当な対角行列にとる**ことによって、収束の加速を試みていることに相当する。要するに「前処理」みたいなもんです

ACuTE 法では実際、T の対角成分を、各行の離散化方程式が代表している**離散化点の粘性率 η のみの関数**として与えている。η の空間変化がスムーズであれば、この T を用いることでベクトル列の収束は十分加速される。

ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005) の数理

先の漸化式より、残差 $\boldsymbol{r}^k \equiv \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^k$ の漸化式を導くと、

$$\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k-1} = -\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^{k-1}$$

を得る。ここで生成されるベクトル列 $\{\boldsymbol{r}^k\}$ が収束するとしたら、その極限値 $\boldsymbol{r}^\infty$ は $\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^\infty = \boldsymbol{0}$ を満たすはずである。行列 $\boldsymbol{A}$ が正則ならば $\boldsymbol{r}^\infty = \boldsymbol{0}$ となり、この反復の繰り返しによって真の解に到達することが保証される。

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^\infty = \boldsymbol{0}$ を利用して、この漸化式をさらに書き直すと

$$\boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^\infty = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{T})(\boldsymbol{r}^{k-1} - \boldsymbol{r}^\infty)$$

即ち、$\boldsymbol{r}^k$ が $\boldsymbol{r}^\infty$ に収束するための必要十分条件は、**行列 $\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{T}$ のベキが $\boldsymbol{0}$ に収束** することである。これは CFL 条件と等価であり、ACuTE 法でも **$\boldsymbol{T}$ の対角成分を無分別に大きくとってはいけない** ことを要請する。

ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005): 大規模計算対策

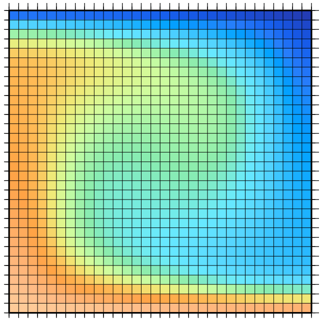
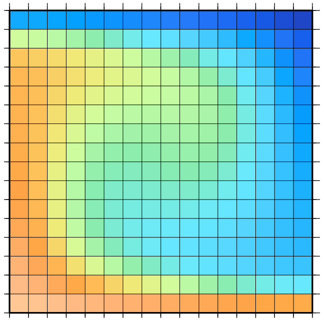
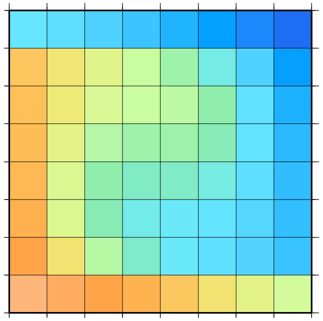
- 多重格子法の「緩和計算」として陽的な擬似時間積分
  - ✏ ベクトル化・並列化はごく自然にできる
  - ✏ どうせ多重格子法で加速するのだし、緩和計算そのものの収束の遅さには目をつぶることにしています
- 全 PE 間で領域分割法+MPI による並列化 (flat MPI)
  - ✏ 粗い格子 (i.e., 計算量小) では粒度が小さくなるので、SMP 並列化は効果的でなさそうなので試してないです
- ループの一重化によりベクトル長を大きくする
  - ✏ 特に粗い格子レベルの計算では超重要
- 集団通信 (i.e., 収束判定の内積計算とか) の頻度を減らす
  - ✏ どうせ収束は遅いのだし、頻繁に判定するのも残念
  - ✏ 各格子レベルでの反復回数を多くとっておく

多重格子法の威力や HPCI との相性

多重格子法 (マルチグリッド法)

(Brandt, 1977; 以降多数の文献あり)

- 楕円型偏微分方程式を数値的に解く最高速の解法
  - ✏ 大規模な問題で威力を発揮する
    計算量 $O(N)$: 他の手法では $O(N \log N)$ や $O(N^2)$ など
- 解像度の異なる格子での計算をうまく組み合わせることにより、細かい格子系での解を高速に求める


⇔

⇔


- マントル対流問題以外にも広く適用可能 (事例多数)
- ただし、大規模並列計算時にはもう一工夫が必要
  (例えば Kameyama, 2005 など)

多重格子法 (マルチグリッド法) とは

計算量でいえば**理論的に最高速**なのは間違いないけれど、計算速度の **対ピーク性能比** でいえばかなり落ちる。

❑ **楕円型偏微分方程式**であることの宿命

✏ 力学的な定常状態を求めるためには、計算領域全体での「つじつま合わせ」(=**通信**) が不可避

❑ **多重格子法**を用いるが故の宿命
解像度の**粗い格子では微々たる計算量で十分正確な解が求まる**はずだから「計算量が $O(N)$ で OK」なのだが、粗すぎる格子系での計算に要する実際のコストは??

✏ そもそも領域分割ができない!!

✏ 不十分な大きさのループ長しかとれない!!

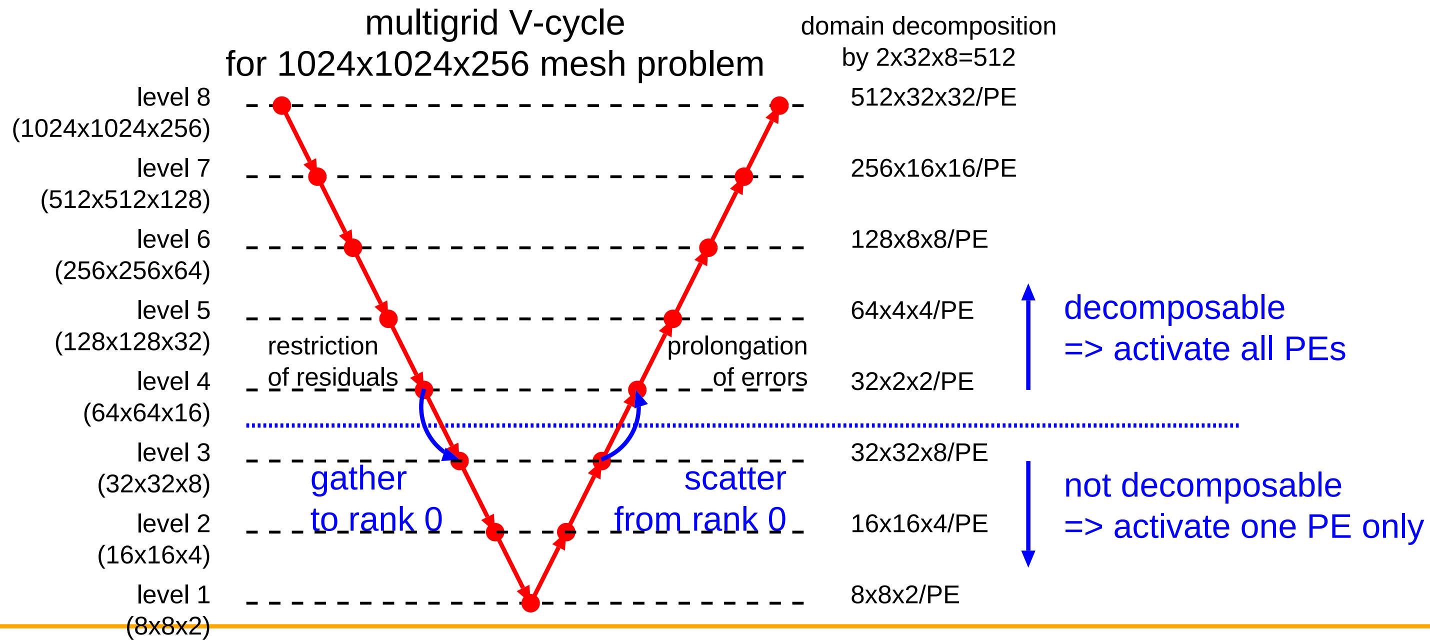
✏ **頻繁に発生する通信のコスト**が無視できなくなる!!

多重格子法計算の並列化

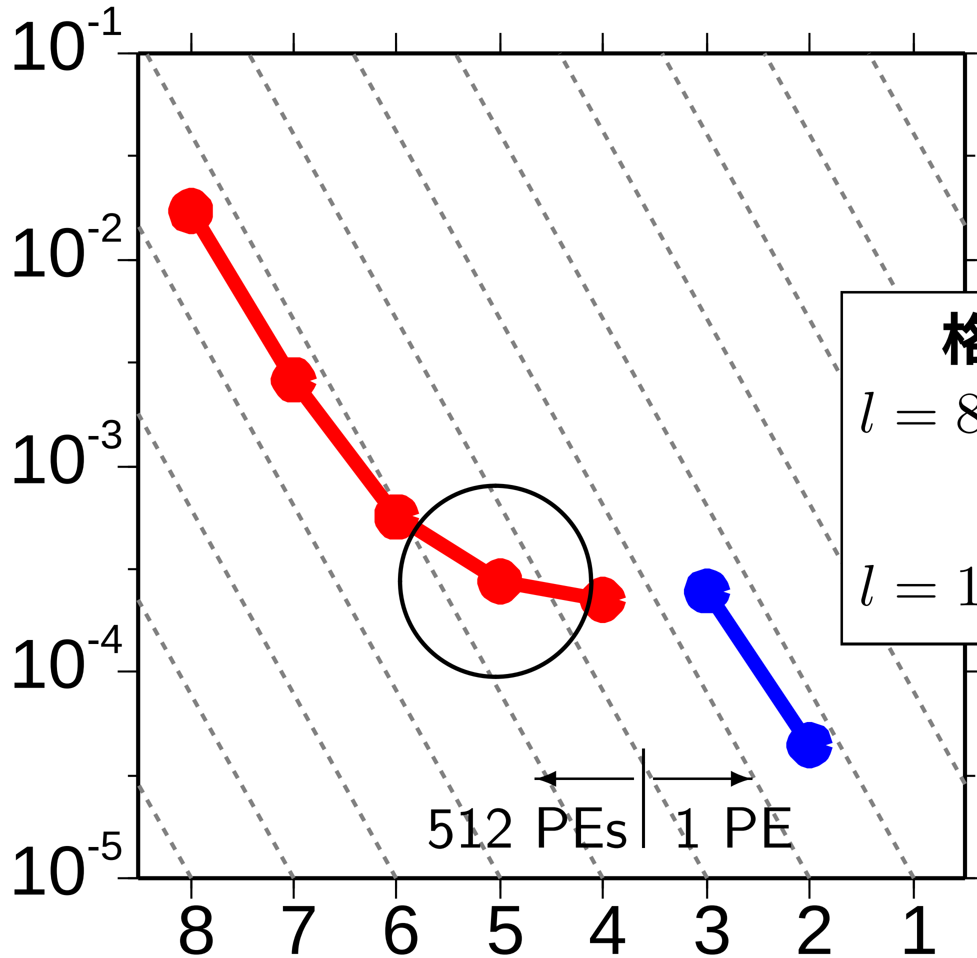
多重格子法の並列実行は agglomeration により効率化

- ❑ 細かい 格子レベル (計算量大) では
  全 PE を使って 並列 で実行
- ❑ 粗い 格子レベル (計算量小) では
  1PE のみ を使って 非並列 で実行

✍ 通信を「少量多数」ではなく「大量少数」にする



各格子レベルでの緩和計算 1 回あたりに要した計算時間



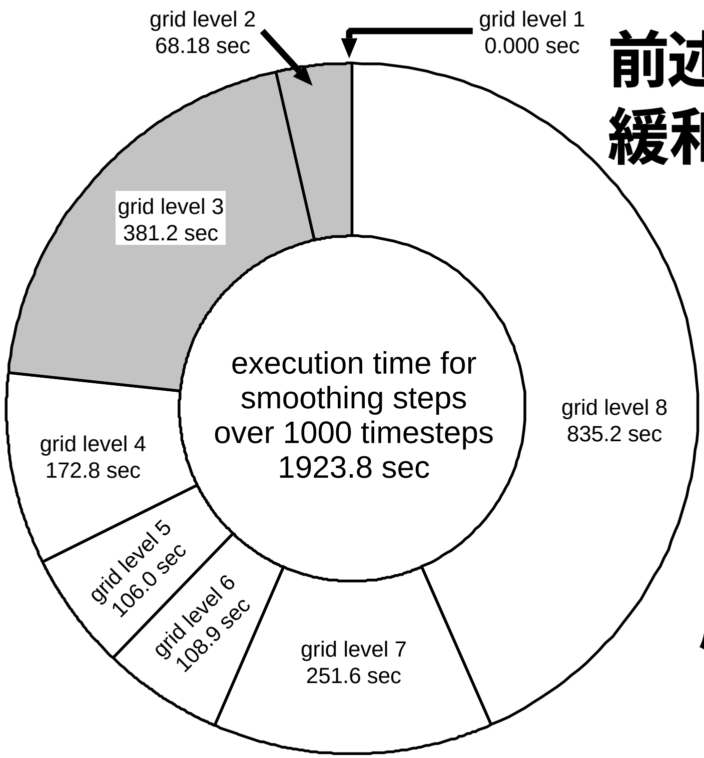
格子レベル l と解像度

$l=8$ (**最密**)	$1024\times$	$1024\times$	256
⋮		⋮	
$l=1$ (**最粗**)	$8\times$	$8\times$	2

解像度が十分でない格子レベルでの並列計算は、パフォーマンスの劣化が深刻 (largely due to **通信コスト**)

(初代) 地球シミュレータでの亀山の経験をば

初代 ES 当時は、通信によるパフォーマンスの劣化を (何とかある程度は) 隠蔽できた。



前述の場合で、各格子レベルでの緩和計算に要した計算時間の比

白: 512PEs **による並列計算**
灰: 1PE **のみによる計算**

粗い格子では「並列化しない」ことにより、通信の負荷が激減し、結果として並列化効率を (そこそこ) 維持できた

こんな「たった 1 **段階の切り替え」でうまくいったのにはやはり、初代** ES **の高い通信性能の恩恵が大きかったのかも** (B/F=4 **だった**?)

まとめ、のつもり

- マントル対流とは、**「岩石が固体状態のままゆっくりと流れる」**という、非常に特殊な流れである。
- かくも特殊なマントルの流れを数値シミュレーションする際には、**悪条件な大規模連立一次方程式を高速かつ高精度で解く** 手法が不可欠な要素である。
- 時間発展するマントルの流れ場を記述する大規模連立一次方程式を解くには、ACuTE **法**+**多重格子法** (マルチグリッド法) が我々の最も有力と考える方法である。
- 多重格子法には **計算量が** $O(N)$ で抑えられるという長所がある一方で、**本質的にベクトル計算・並列計算に不向き** であるという (やや深刻な) 短所がある。
- マントル対流シミュレーション研究の高度化には、PE の演算性能に加えて **低レイテンシ・高速な** PE **間通信** の可能なハードウェアが多分どの分野よりも切実に望まれる。

ACuTE の数理
1: 基本原理

連立一次方程式の反復解法: 基本の「き」

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を、反復回数 k として

$$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{H}\boldsymbol{x}^{k-1} + \boldsymbol{c} \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

なる漸化式を用いて逐次的に求める方法を「定常的反復法」と呼ぶ。

適切な H と c を選ぶ例の一つとして、係数行列 A を $A = M - N$ のように分解する。特に、M が正則かつ N の全非零成分が正であるようにとることを「行列 A の正則分離」という。これにより

$$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{k-1} + \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b} \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

とすればよい。

連立一次方程式の反復解法: 基本の「ほ」

行列 A を $A = M - N$ と正則分離し、これらを用いて以下のような漸化式を考える。

$$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{k-1} + \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b} \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

ベクトル列 $\{x^k\}$ が収束するとしたら、その極限値 x^∞ は当然 $Ax^\infty = b$ を満たす。
さらに実用上は、M^{-1} が簡単に求まることが望ましい。
よく知られた Jacobi 法もその一例であり、M として A の対角部分 D をとった場合に相当する。

Jacobi 法をはじめ多くの反復解法は D^{-1} を用いて近似解を更新する。巷間よくある問題 (スカラー変数のポアソン方程式の求解) にはこれで十分なのだが、A の対角成分に零を含むような場合には、これらの方法を用いることができない。

構成要素その 1: 擬似圧縮性法 (Chorin, 1967)

与えられた温度 T、粘性率 η の分布のもとで、高粘性・非圧縮性流体の定常流れ場を求める方程式

$$0 = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\, T \boldsymbol{e}_z$$
$$0 = \nabla \cdot \boldsymbol{v}$$

を直接解く代わりに、擬似的な時間発展方程式

$$M \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \tau} = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta (\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\, T \boldsymbol{e}_z$$
$$-K \frac{\partial p}{\partial \tau} = \nabla \cdot \boldsymbol{v}$$

を定常になるまで時間積分してやる。

ただし τ : **擬似時間**
M: **擬似密度**
K : **擬似圧縮率** **は「本物」とは無関係。**

擬似圧縮性法とは?

長所

❏ 非圧縮の速度場が必ず得られる (owing to 粘性による散逸)

$$\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}(\nabla\cdot\boldsymbol{v}) = \underbrace{\frac{1}{KM}\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{v})}_{\text{擬似音波の伝播}} + \underbrace{\frac{2\eta}{M}\frac{\partial}{\partial\tau}\left[\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{v})\right]}_{\text{粘性による散逸 (拡散)}} + \cdots$$

❏ 原始変数 (速度場 v と圧力場 p) をそのまま使って解く

✏ 2 次元問題でも 3 次元問題でも OK

✏ プログラムの構造が非常に直感的で簡単

短所

❏ そのまま使うと非常に遅い

✏ 特に**長波長成分の収束が遅い** (拡散方程式の宿命)

$\Rightarrow$ 多重格子法との併用が不可欠

ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005): 粘性変化対策

対策: 「局所時間刻み法」 の援用

- **粘性率 η に応じて「密度」M と「圧縮率」K の大きさを「場所ごと」に変える**
  - ✏ **実効的な時間刻み $\Delta\tau/M$、$\Delta\tau/K$ を空間変化させることに対応**

- **粘性率の空間変化の影響をなるべく打ち消すように、M と K を空間変化させたい**

$$\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}(\nabla\cdot\boldsymbol{v}) = \underbrace{\frac{1}{KM}\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{v})}_{\text{擬似音波の伝播}} + \underbrace{\frac{2\eta}{M}\frac{\partial}{\partial\tau}\left[\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{v})\right]}_{\text{粘性による散逸 (拡散)}} + \cdots$$

  - ✏ **実効的な拡散係数を一様にしたい** $\Rightarrow M \propto \eta$
  - ✏ **擬似的な「音速」を一様にしたい** $\Rightarrow K \propto \eta^{-1}$

(スムーズな変化に対しては) **この方法は非常に効果的**

Gershgorin の定理

中心が a_{ii}、半径が $r_i = \displaystyle\sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$ の円で囲まれた複素平面内の領域を S_i とする。このとき行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ の全ての固有値 λ_k は和集合 $\displaystyle\bigcup_{i=1}^{n} S_i = S_1 \cup S_2 \cup \cdots \cup S_n$ の内部に存在する。

証明: 行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値 λ_k に対応する 固有ベクトルを $\boldsymbol{x}$ とする。$\boldsymbol{x}$ の成分のうちで絶対値が最大のものを x_i とすると、全ての $j \neq i$ に対して当然 $|x_i| \geq |x_j|$ を満たす。このとき、固有方程式 $\boldsymbol{Ax} = \lambda_k \boldsymbol{x}$ の第 i 行に注目すると、

$$a_{i1}x_1 + \cdots + a_{ii}x_i + \cdots + a_{in}x_n = \lambda_k x_i$$

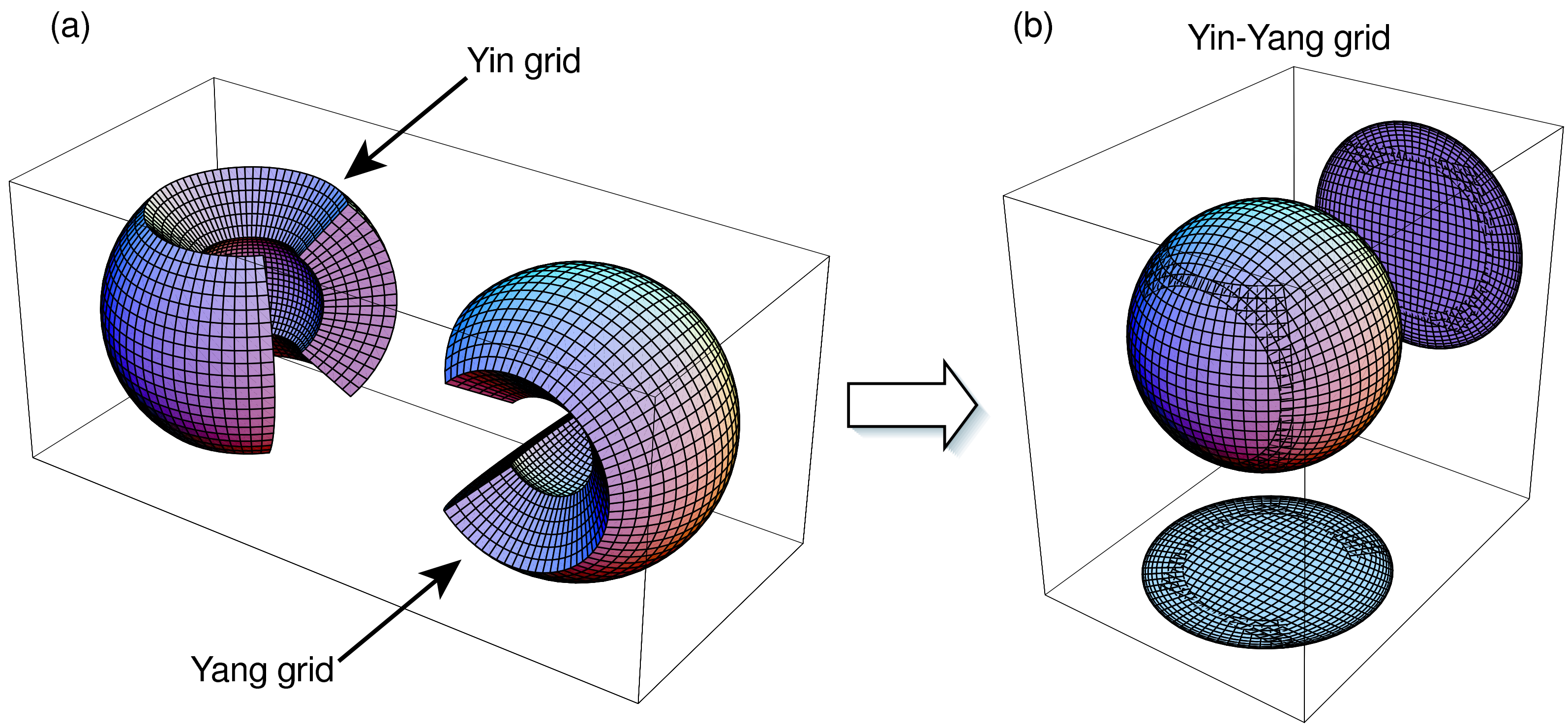
これをさらに書き直すと、

$$|a_{ii} - \lambda_k| = \left| -\sum_{j\neq i} a_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right| \leq \sum_{j\neq i} \left| a_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right| \leq \sum_{j\neq i} |a_{ij}|$$

を得る。即ち、λ_k を含む領域 S_i が必ず存在する。

インヤン格子と多重格子法

インヤン格子 (Kageyama and Sato, 2004)



- 球座標系の「低緯度」部分のみを 2 つ組み合わせる
- 2 つの合同な要素格子の重ね合わせで、球殻を覆う
- 極での特異性なし、極付近での格子間隔の激減なし

インヤン格子を用いたマントル対流

(Kameyama et al., 2008)

3 次元箱型モデルと同じ高速解法を球殻モデルにも適用

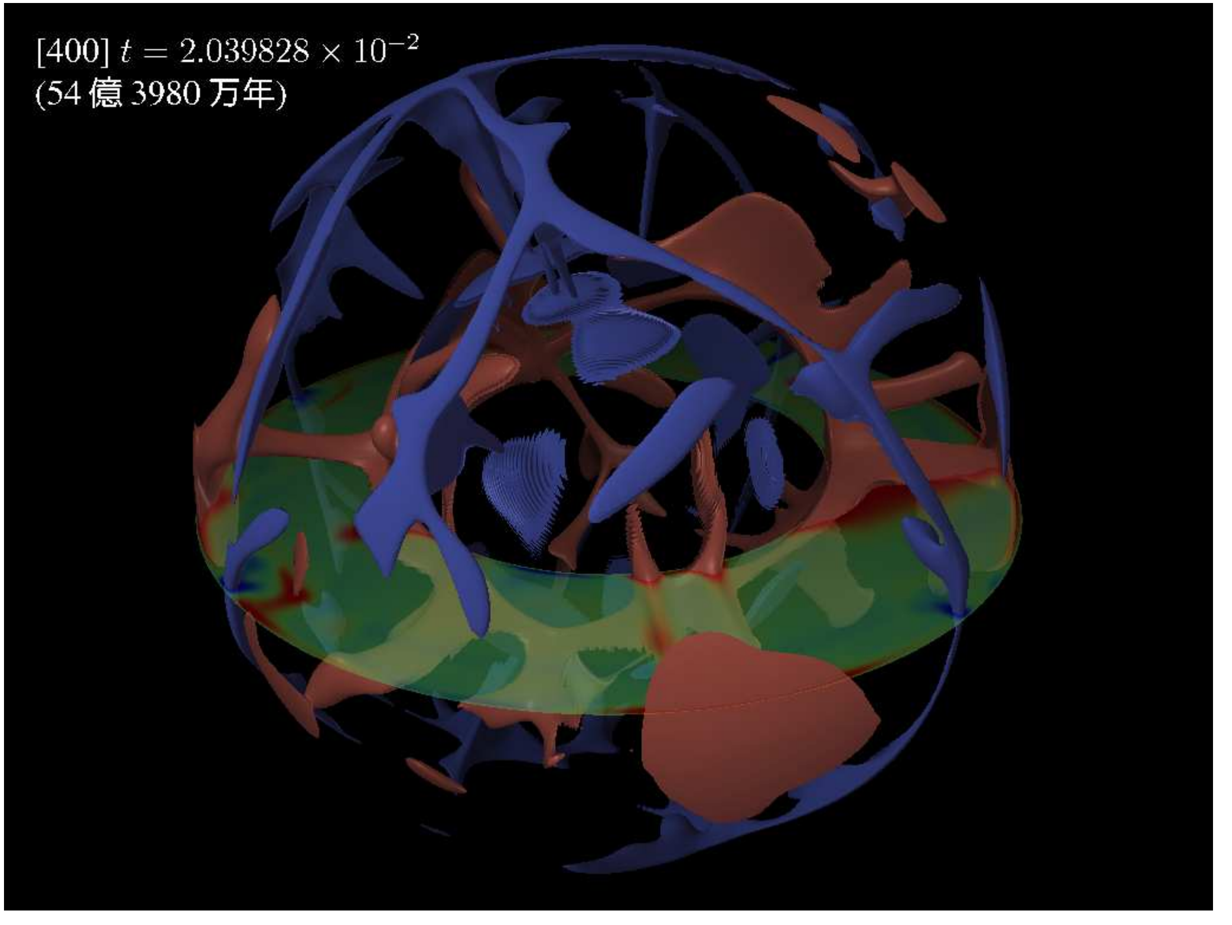


figure and movie by courtesy of Dr. Nobuaki Ohno (**現 兵庫県立大**)

インヤン格子計算の並列化

領域分割法による並列化

❑ 空間 3 方向 (r, θ, ϕ) $\times 2$ (「イン」と「ヤン」) に分割

部分領域間の通信のうち、

❑ 「イン」または「ヤン」内での通信は、ごく普通にやれば OK

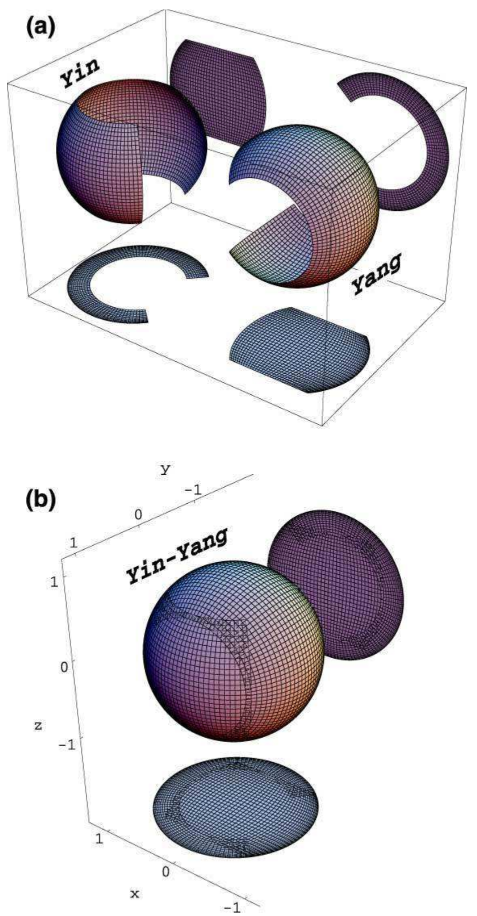
❑ 「イン」と「ヤン」をまたぐ通信には工夫が必要

✏ ある方向へのシフト通信の相手が 1 つだけとは限らない

✏ 多重格子法ではさらに複雑

(通信相手の数が格子レベルにより変化)

ただし、通信テーブルは「イン」と「ヤン」で使い回し OK



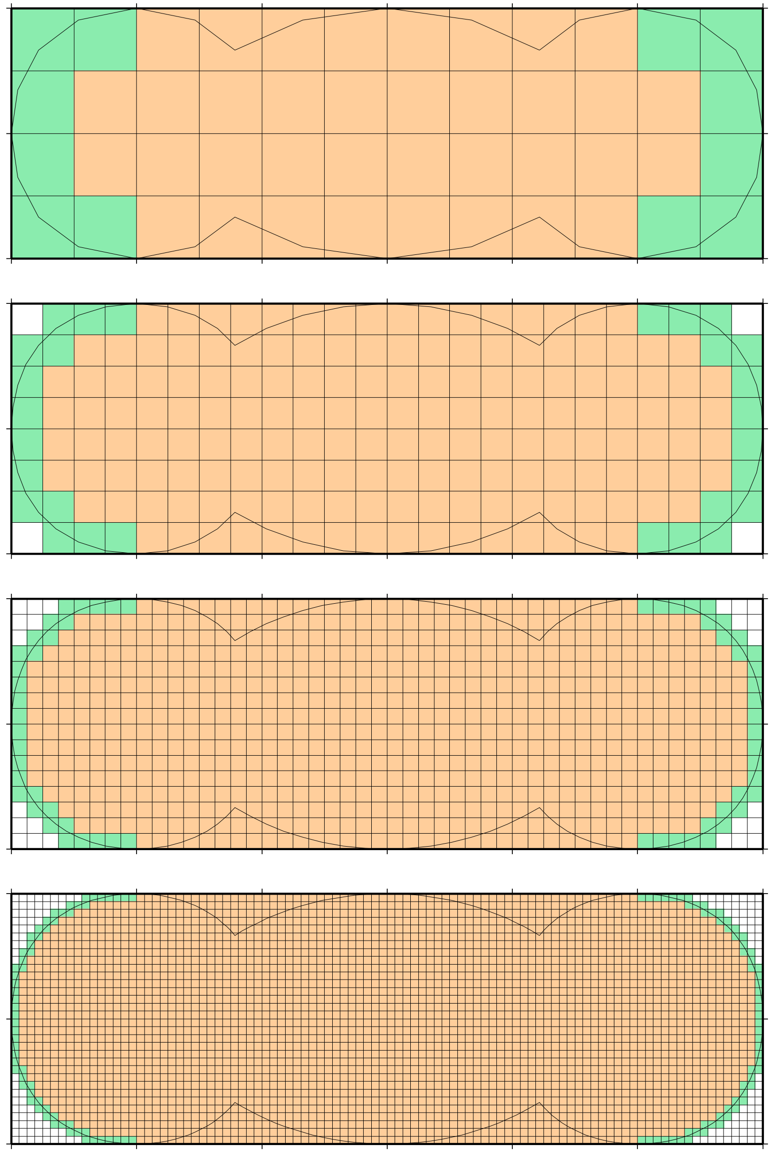
インヤン格子の多重格子計算

$N_\theta = 4$

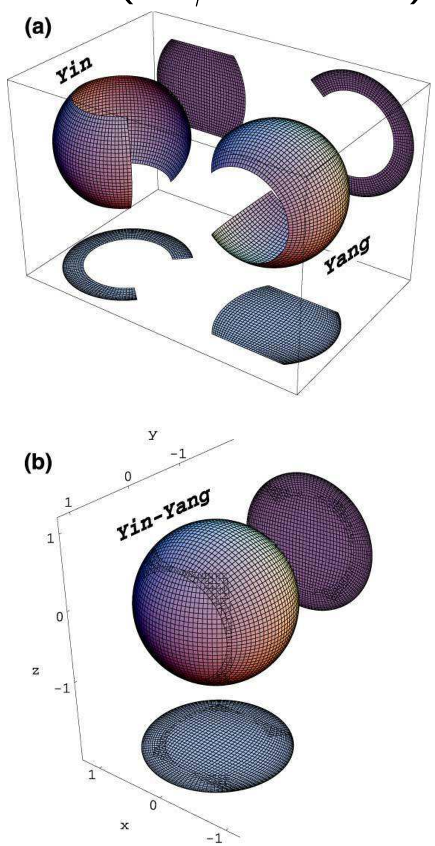
$N_\theta = 8$

$N_\theta = 16$

$N_\theta = 32$



$(N_\phi = 3N_\theta)$



インヤン格子を用いたマントル対流の特殊な事情

流れ場を解く連立一次方程式の特異性を確実に除去すべし

非圧縮性流体の流れ場を解く場合には、

- **圧力 p に定数分の不定性**
  - ✏ **非圧縮性流体では、圧力は「周囲との差」(∇p) の形でしか現れない**
- **速度場 v に剛体運動 (並進・回転) 分の不定性**
  - ✏ **剛体運動は歪を生まないので、粘性的な抵抗力の発生に寄与しない**

. . . 即ち、「一意な解が得られる」保証が (もともと) ない。

箱型モデルの場合にはさほど気にしなくても大丈夫だが、インヤン格子で球殻形状モデルを扱う場合には要注意。

(「補間」=「新たな誤差を混入させる」)

3 次元球殻内マントル対流を解くために

球殻内のマントルの流れ場を記述する連立一次方程式を

$$\underbrace{\begin{bmatrix} C_{rr} & C_{r\theta} & C_{r\phi} & G_r \\ C_{\theta r} & C_{\theta\theta} & C_{\theta\phi} & G_\theta \\ C_{\phi r} & C_{\phi\theta} & C_{\phi\phi} & G_\phi \\ D_r & D_\theta & D_\phi & 0 \end{bmatrix}}_{\equiv \boldsymbol{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} v_r \\ v_\theta \\ v_\phi \\ p \end{bmatrix}}_{\equiv \boldsymbol{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} b_r \\ b_\theta \\ b_\phi \\ b_p \end{bmatrix}}_{\equiv \boldsymbol{b}}$$

のように書いておく。
A の固有値 0 に対する固有ベクトルを与える状態は 剛体回転 3 成分 と 圧力勾配 0 の 4 つが考えられる。これら 4 つの「固有状態」に相当する不定性を取り除けばよい。

なお、剛体的な並進運動は、動径方向速度の境界条件により自然に除去される。

またこれらの拘束条件は、インとヤンの補間の際に混入する誤差の影響を除去する上でも重要。

ACuTE の数理 2: 特異性が効いてくる場合への対策

特異な連立一次方程式の難点

ある正則な行列 T を用いて、連立一次方程式 $Ax = b$ を

$$\boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^{k-1} + \boldsymbol{T}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{k-1}) \quad (k = 1, 2, 3, \cdots)$$

のような反復で解くにあたり、残差 $\boldsymbol{r}^k \equiv \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^k$ の変化に注目してみよう。上式を書き直すと、

$$\boldsymbol{r}^k = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{T})\boldsymbol{r}^{k-1} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{r}^k - \boldsymbol{r}^{k-1} = -\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^{k-1}$$

ベクトル列 $\{\boldsymbol{r}^k\}$ が収束するとしたら、その極限値 $\boldsymbol{r}^\infty$ は $\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^\infty = 0$ を満たすはずである。

- $\boldsymbol{A}$ が正則であれば、$\boldsymbol{r}^\infty = \boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}0 = 0$、即ち $\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^\infty = 0$ を満たす真の解に収束する。
- $\boldsymbol{A}$ が特異であれば、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{c} = 0$ を満たす非零な $\boldsymbol{c}$ が存在する。もし $\boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^\infty = \boldsymbol{c}$ であれば、$\boldsymbol{r}^\infty = \boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{c} \neq 0$ となり、真の解に収束しない。

特異な連立一次方程式を解く：原理

特異な係数行列 A を持つ n 元連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ が解を持つ条件を考える。
A の固有値を λ_i $(i = 1, \cdots, n)$、対応する一次独立な固有ベクトルを $\boldsymbol{e}_i$ と書く。n 個の固有値のうち、$\lambda_1, \cdots, \lambda_m$ の m $(< n)$ 個が零、$\lambda_{m+1}, \cdots, \lambda_n$ の $(n - m)$ 個が非零とする。
$\boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{e}_i$ の一次結合で書いてみよう。

$$\boldsymbol{b} = \sum_{j=1}^{n} c_j \boldsymbol{e}_j, \qquad \boldsymbol{x} = \sum_{k=1}^{n} y_k \boldsymbol{e}_k$$

これをもとの方程式に代入すると、

$$\sum_j c_j \boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{A} \left(\sum_k y_k \boldsymbol{e}_k \right) = \sum_k y_k \boldsymbol{A} \boldsymbol{e}_k = \sum_k y_k \lambda_k \boldsymbol{e}_k$$

特異な連立一次方程式を解く：原理

固有ベクトルの一次独立性より、全ての j について

$$c_j = \lambda_j y_j$$

でなければならない。ここで $\lambda_1 = \cdots = \lambda_m = 0$ であるから、右辺項 b の展開係数は

$$c_1 = \cdots = c_m = 0$$

を満たさなければならない。これが、与式に解が存在するための条件（「適合条件」）である。
また、与式だけから $y_1, \cdots, y_m$ の値を決定できないため、解を一意に定めるためには m 個の付加条件が必要である。

先の表記を使うと、階数 $n-m\ (<n)$ の $n\times n$ 行列 $\boldsymbol{A}$ は

$$\boldsymbol{A}=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\boldsymbol{e}_i\otimes\overline{\boldsymbol{e}}_i+\sum_{j=m+1}^{n}\lambda_j\boldsymbol{e}_j\otimes\overline{\boldsymbol{e}}_j=\sum_{j=m+1}^{n}\lambda_j\boldsymbol{e}_j\otimes\overline{\boldsymbol{e}}_j$$

と表わされる。ただし $\overline{e}_i$ は $\overline{e}_i\cdot e_j=\delta_{ij}$ を満たすとする。ここで、$\boldsymbol{A}$ の代わりに、以下で定義される

$$\tilde{\boldsymbol{A}}\equiv\sum_{i=1}^{m}\nu_i\boldsymbol{e}_i\otimes\overline{\boldsymbol{e}}_i+\sum_{j=m+1}^{n}\lambda_j\boldsymbol{e}_j\otimes\overline{\boldsymbol{e}}_j=\boldsymbol{A}+\sum_{i=1}^{m}\nu_i\boldsymbol{e}_i\otimes\overline{\boldsymbol{e}}_i$$

を考えよう。ただし $\nu_1,\cdots,\nu_m\neq 0$ とする。定義より $\tilde{\boldsymbol{A}}$ は正則であるから、n 元連立一次方程式 $\tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{b}$ は一意な解を持つ。

特異な連立一次方程式を解く: 方法

$\tilde{\boldsymbol{x}} = \sum_{k=1}^{n} \tilde{y}_k \boldsymbol{e}_k$ と展開してもとの方程式に代入し、

$\nu_1, \cdots, \nu_m, \lambda_{m+1}, \cdots, \lambda_n \neq 0$ 及び A の固有ベクトルの一次独立性を用いれば

$$\begin{array}{lll} k = 1 \quad , \cdots, m & \text{について} & \tilde{y}_k = c_k / \nu_k \\ l = m+1, \cdots, n & \text{について} & \tilde{y}_l = c_l / \lambda_l = y_l \end{array}$$

が得られる。
さらに

$$\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{x}} - \sum_{k=1}^{m} \tilde{y}_k \boldsymbol{e}_k = \tilde{\boldsymbol{x}} - \sum_{k=1}^{m} (\tilde{\boldsymbol{x}} \cdot \overline{\boldsymbol{e}}_k) \boldsymbol{e}_k$$

などと付加条件を課すことで、一意な解 x が得られる。

特異な連立一次方程式を解く: 方法

先の表記を使うと、階数 $n-m\ (<n)$ の $n\times n$ 行列 $\boldsymbol{A}$ は

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \boldsymbol{e}_i \otimes \overline{\boldsymbol{e}}_i + \sum_{j=m+1}^{n} \lambda_j \boldsymbol{e}_j \otimes \overline{\boldsymbol{e}}_j = \sum_{j=m+1}^{n} \lambda_j \boldsymbol{e}_j \otimes \overline{\boldsymbol{e}}_j$$

と表わされる。ただし $\overline{\boldsymbol{e}}_i$ は $\overline{\boldsymbol{e}}_i \cdot \boldsymbol{e}_j = \delta_{ij}$ を満たすとする。
ここで、$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く代わりに、

$$\underbrace{\left[\begin{array}{c|ccc} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{e}_1 & \cdots & \boldsymbol{e}_m \\ \hline \overline{\boldsymbol{e}}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{\boldsymbol{e}}_m & 0 & \cdots & 0 \end{array}\right]}_{\equiv\tilde{\boldsymbol{A}}} \underbrace{\left[\begin{array}{c} \boldsymbol{x} \\ \hline \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_m \end{array}\right]}_{\equiv\tilde{\boldsymbol{x}}} = \underbrace{\left[\begin{array}{c} \boldsymbol{b} \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right]}_{\equiv\tilde{\boldsymbol{b}}}$$

という連立一次方程式 $\tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}}$ を考えることにしよう。

$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ の解に注目すると、これは以下の 2 式を満足する。

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{b} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \mu_1 \boldsymbol{e}_1 + \cdots + \mu_m \boldsymbol{e}_m \\
0 &= (\overline{\boldsymbol{e}}_1, \boldsymbol{x}) = \cdots = (\overline{\boldsymbol{e}}_m, \boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

ところで $\boldsymbol{x} = \xi_1 \boldsymbol{e}_1 + \cdots + \xi_n \boldsymbol{e}_n$ とおくと、第 2 式より $\xi_1 = \cdots = \xi_m = 0$ が得られる。即ちこれにより、$\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{A}$ の零空間の成分が除去される。
これをさらに第 1 式に代入すると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{b} &= \boldsymbol{A}(\xi_{m+1} \boldsymbol{e}_{m+1} + \cdots + \xi_n \boldsymbol{e}_n) + \mu_1 \boldsymbol{e}_1 + \cdots + \mu_m \boldsymbol{e}_m \\
&= \mu_1 \boldsymbol{e}_1 + \cdots + \mu_m \boldsymbol{e}_m + \lambda_{m+1} \xi_{m+1} \boldsymbol{e}_{m+1} + \cdots + \lambda_n \xi_n \boldsymbol{e}_n
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{e}_k$ の 1 次独立性より、$1 \le k \le m$ を満たす k について $\mu_k = (\overline{\boldsymbol{e}}_k, \boldsymbol{b})$ がいえる。これより $\mu_1, \cdots, \mu_m$ は、生成項が適合条件を満足することを保証する効果をもつ。

特異な連立一次方程式を解く：方法

先の式で、特に $b = 0$ の場合を考えると、

$$\mu_k = (\overline{\boldsymbol{e}}_k, \boldsymbol{b}) = 0 \quad (\text{ただし} \ 1 \leq k \leq m)$$
$$\lambda_\ell \xi_\ell = (\overline{\boldsymbol{e}}_\ell, \boldsymbol{b}) = 0 \quad (\text{ただし} \ m+1 \leq \ell \leq n)$$

である。このうち第 2 式について考えると、定義より $\lambda_{m+1}, \cdots, \lambda_n \neq 0$ であることから、$\xi_{m+1} = \cdots = \xi_n = 0$ でなければならない。

これに加えて $\xi_1 = \cdots = \xi_m = 0$ であることを考え合わせれば、$\tilde{A}\tilde{x} = 0$ の解は $\tilde{x} = 0$ である。言い換えれば、ここで定義された $(n+m) \times (n+m)$ 行列 $\tilde{A}$ **は正則**である。

以上のことから、ある正則な行列 $\tilde{T}$ を用いた漸化式、

$$\tilde{\boldsymbol{x}}^{k+1} = \tilde{\boldsymbol{x}}^k + \tilde{\boldsymbol{T}}(\tilde{\boldsymbol{b}} - \tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{x}}^k) \quad (k = 0, 1, 2, 3, \cdots)$$

が収束すれば、極限値 $\tilde{x}^\infty$ は $\tilde{A}\tilde{x} = b$ の解になっている。

A から派生して構築された正則な行列 $\tilde{A}$ を持つ連立一次方程式 $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ を考える。定義より、この連立一次方程式は一意な解を持つ。
この連立一次方程式を、ACuTE に倣った反復法で解くことを考える。

$$\tilde{\boldsymbol{T}}^{-1}\left(\tilde{\boldsymbol{x}}^{k+1} - \tilde{\boldsymbol{x}}^{k}\right) = \tilde{\boldsymbol{r}}^{k} = \tilde{\boldsymbol{b}} - \tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{x}}^{k} \quad (k = 0, 1, 2, \cdots)$$

ここで対角行列 $\tilde{T}$ は以下のようにとる。

$$\tilde{\boldsymbol{T}} = \left[\begin{array}{c|ccc} \boldsymbol{T} & \boldsymbol{0} & \cdots & \boldsymbol{0} \\ \hline \boldsymbol{0} & \tau_1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \boldsymbol{0} & & & \tau_m \end{array}\right]$$

なお当然ながら $\tau_1, \cdots, \tau_m \neq 0$ である。

ここで、残差 $\tilde{\boldsymbol{r}}^k$ の表式を考えると、

$$\tilde{\boldsymbol{r}}^k = \left[\begin{array}{c} \boldsymbol{b} \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right] - \left[\begin{array}{c|ccc} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{e}_1 & \cdots & \boldsymbol{e}_m \\ \hline \overline{\boldsymbol{e}}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{\boldsymbol{e}}_m & 0 & \cdots & 0 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \boldsymbol{x}^k \\ \hline \mu_1^k \\ \vdots \\ \mu_m^k \end{array}\right]$$

$$= \left[\begin{array}{c} \boldsymbol{r}^k \\ \hline (\overline{\boldsymbol{e}}_1, \boldsymbol{x}^k) \\ \vdots \\ (\overline{\boldsymbol{e}}_m, \boldsymbol{x}^k) \end{array}\right] - \mu_1^k \left[\begin{array}{c} \boldsymbol{e}_1 \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right] \cdots - \mu_m^k \left[\begin{array}{c} \boldsymbol{e}_m \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right]$$

これらを用いると、1 回の反復での $\tilde{x}$ の更新量は

$$
\tilde{\boldsymbol{x}}^{k+1} - \tilde{\boldsymbol{x}}^{k} = \tilde{\boldsymbol{T}}\tilde{\boldsymbol{r}}^{k}
$$

$$
= \tilde{\boldsymbol{T}} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^k \\ \hline (\overline{\boldsymbol{e}}_1, \boldsymbol{x}^k) \\ \vdots \\ (\overline{\boldsymbol{e}}_m, \boldsymbol{x}^k) \end{bmatrix} - \mu_1^k \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \cdots - \mu_m^k \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_m \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \right)
$$

$$
= \begin{bmatrix} \boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^k \\ \hline \tau_1(\overline{\boldsymbol{e}}_1, \boldsymbol{x}^k) \\ \vdots \\ \tau_m(\overline{\boldsymbol{e}}_m, \boldsymbol{x}^k) \end{bmatrix} - \mu_1^k \begin{bmatrix} \boldsymbol{T}\boldsymbol{e}_1 \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \cdots - \mu_m^k \begin{bmatrix} \boldsymbol{T}\boldsymbol{e}_m \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
$$

あらわに書き下すと

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^{k} &= \boldsymbol{T}\boldsymbol{r}^{k} - \mu_1^k \boldsymbol{T}\boldsymbol{e}_1 \cdots - \mu_m^k \boldsymbol{T}\boldsymbol{e}_m \\
\mu_1^{k+1} - \mu_1^{k} &= \tau_1(\overline{\boldsymbol{e}}_1, \boldsymbol{x}^k) \\
&\vdots \\
\mu_m^{k+1} - \mu_m^{k} &= \tau_m(\overline{\boldsymbol{e}}_m, \boldsymbol{x}^k)
\end{aligned}
$$