

球殻内 Stokes 問題の並列計算

Parallel computation of a Stokes problem in a spherical shell

九州大学 大学院数理学研究科 鈴木 厚 (Atsushi Suzuki)

1. はじめに

遅い流れの非圧縮流体を記述する Stokes 方程式について考える. Stokes 方程式は, 例えば, 地球マントル対流の数学モデルである無限 Prandtl 数流体の Rayleigh-Bénard 方程式の流速と圧力に関する支配方程式をなす. 3 次元領域の問題に対し効率よく数値解を求めるアルゴリズムを開発することが必要である.

偏微分方程式に対し, 有限要素法による離散化を行い CG 法に代表される Krylov 部分空間反復法などを用いて, 連立方程式を解く場合, 剛性行列の記憶に多くのメモリーが必要である.

取り扱う領域が球殻であることに着目し, 領域の対称性を利用する. ある部分領域の剛性行列のみを記憶することにより, メモリー使用量の削減を図る. 反復法の前処理に部分領域毎の不完全 Cholesky 分解を用いることで, 並列化が容易に実現できる.

2. 支配方程式

3 次元球殻領域で, 滑り境界条件を課す Stokes 方程式について考える. 3 次元球殻領域 $\Omega = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3; R_1 < \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} < R_2\}$ で定義された流速 $u = (u_1, u_2, u_3)$, 圧力 p に関する次の Stokes 方程式を考える.

$$(P) \begin{cases} -\Delta u + \nabla p = f, \\ \nabla \cdot u = 0, \end{cases} \quad x \in \Omega.$$

境界条件に滑り境界条件を課す:

$$\begin{cases} u \cdot n = 0, \\ t^{(k)} \cdot D(u)n = 0 \quad (k = 1, 2), \end{cases} \quad x \in \partial\Omega.$$

n は境界での外向き単位法線ベクトル, $t^{(1)}, t^{(2)}$ は境界での独立な単位接ベクトル, $D(u)$ は変形速度テンソルである: $D_{ij}(u) := \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j)$ ($1 \leq i, j \leq 3$). 粘性係数は, 定数 1 の場合を考える.

3. P1/P1 安定化有限要素法と離散化行列

Stokes 方程式を 3 次元領域で解くことを考慮し, 有限要素近似において最低次最小自由度の四面体要素, P1/P1 要素を用いる. しかし, P1/P1 要素は Stokes 方程式の混合型有限要素近似において必要となる下限・上限条件を満たさない. この条件の克服のため, 最小 2 乗型 Galerkin 安定化有限要素法 [1] を用い離散化を行う.

$\mathcal{T}_h$ を $\bar{\Omega}_h$ の四面体要素による分割とする: $\bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} \bar{K}$. Ω_h は Ω の多角形近似とする. h_K を各要素 K の直径, h を最大要素直径とする. 煩雑さを避けるため, 領域に関する h は省略して

表記する. $S_h (\subset H^1(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega}))$ を一次多項式の関数からなる空間とする. 流速, 圧力に対し次の有限要素空間を用いる:

$$\begin{aligned} W_h &:= \{v_h \in S_h^3; (v_h \cdot n_\Omega)(P) = 0 \ (\forall P)\}, \\ V_h &:= \{v_h \in W_h; (v_h, v^{(k)}) = 0 \ (k = 1, 2, 3)\}, \\ M_h &:= S_h, \\ Q_h &:= \{q_h \in S_h; (q_h, 1) = 0\}. \end{aligned}$$

ここで, $v^{(k)} = e^{(k)} \times x$ ($k = 1, 2, 3$) は剛体回転の自由度を表すベクトルである. x_k 軸方向の単位ベクトルを $e^{(k)}$ とした. P は $\partial\Omega$ 上の節点, n_Ω は $\partial\Omega$ の外向き単位法線ベクトルを表す. $(\cdot, \cdot)$ を $L^2(\Omega)$ または $L^2(\Omega)^3$ での内積とする. $V_h \times Q_h$ は球殻領域で滑り境界条件を課す Stokes 方程式の一意可解性のために必要な空間である. $u, v \in S_h^3, q \in S_h$ に対して, 双一次形式を次のように定義する.

$$\begin{aligned} a(u, v) &:= 2 \int_\Omega \sum_{1 \leq i, j \leq 3} D_{ij}(u) D_{ij}(v) dx, \\ b(v, q) &:= - \int_\Omega \nabla \cdot v q dx. \end{aligned}$$

安定化有限要素法によるスキームは (P_h) を満たす $(u_h, p_h) \in V_h \times Q_h$ を求めることである.

$$(P_h) \begin{cases} a(u_h, v_h) + b(v_h, p_h) = (f, v_h), & v_h \in V_h \\ b_h(u_h, q_h) - \delta \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 (\nabla p_h, \nabla q_h)_K = -\delta \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 (f, \nabla q_h)_K, & q_h \in Q_h. \end{cases}$$

ここで $(\cdot, \cdot)_K$ は要素 K での内積を表す. 正定数 δ は安定化パラメータである.

行列成分計算に $V_h \times Q_h$ の有限要素基底を用いることは煩雑である. このため, $W_h \times M_h$ の有限要素基底を用いるが, この場合係数行列は正則でない. そこで, 剛体回転の自由度と圧力の定数の任意性を取り除くための正射影を付加する.

$N_W = \dim W_h, N_M = \dim M_h$, とし, 流速, 圧力に対する有限要素基底をそれぞれ,

$$\begin{aligned} W_h &= \text{span}[\varphi_1, \dots, \varphi_{N_W}], \\ M_h &= \text{span}[\psi_1, \dots, \psi_{N_M}] \end{aligned}$$

とし, 有限要素解の節点での値を $\{U_j\}_{j=1}^{N_W}, \{P_j\}_{j=1}^{N_M}$ とする: $u_h \in W_h, u_h = \sum_{j=1}^{N_W} U_j \varphi_j, p_h \in M_h, p_h = \sum_{j=1}^{N_M} P_j \psi_j$.

$V^{(k)} \in \mathbb{R}^{N_W}$ を $v^{(k)}$ の節点での値からつくられるベクトル: $v^{(k)} = \sum_{j=1}^{N_W} V_j^{(k)} \varphi_j$, また $C = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{N_M}$ とする.

$$\begin{aligned} N_V &:= \text{span}[V^{(1)}, V^{(2)}, V^{(3)}], \\ N_Q &:= \text{span}[C], \\ N &:= \text{span}[(V^{(1)}, 0), (V^{(2)}, 0), (V^{(3)}, 0), (0, C)] \end{aligned}$$

に対し, 流速, 圧力に対する正射影 P_V, P_C と $P_{N^\perp}$ を次のように定義する:

$$\begin{aligned} P_V : \mathbb{R}^{N_W} &\rightarrow N_V^\perp, & P_V U &= U - \sum_{k=1}^3 \frac{(U, V^{(k)})}{\|V^{(k)}\|^2} V^{(k)}, \quad U \in \mathbb{R}^{N_W}, \\ P_Q : \mathbb{R}^{N_M} &\rightarrow N_Q^\perp, & P_Q P &= P - \frac{(P, C)}{\|C\|^2} C, \quad P \in \mathbb{R}^{N_M}, \\ P_{N^\perp} : \mathbb{R}^{N_M+N_W} &\rightarrow N^\perp, & P_{N^\perp} &:= \begin{pmatrix} P_V & 0 \\ 0 & P_Q \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

(P_h) に対応する連立一次方程式は

$$(M) \quad \mathcal{A} \begin{pmatrix} U \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -\delta D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_V F \\ -\delta G \end{pmatrix}.$$

となる. 行列 A, B および D はそれぞれ双一次形式 $a(\cdot, \cdot), b(\cdot, \cdot)$ および安定化項に対応する行列である. この行列は対称であるが正定値ではないため, CG 法は破綻する可能性があるが, 反復解法として用いる. また $\mathcal{A}$ の核は N である. CG 法の反復の各ステップにおいて, 行列とベクトルの乗算, ベクトルの加減算を行う際, 数値誤差の混入により, N の成分が現れることを防ぐため, 正射影 $P_{N^\perp}$ を用いる.

4. 領域の対称性を利用したアルゴリズム

全体領域を, 8 個の部分領域に分ける. $\bar{\Omega} = \bigcup_{0 \leq d \leq 7} \bar{\Omega}^{(d)}$:

$$\begin{aligned} \Omega^{(0)} &:= \{(x_1, x_2, x_3) \in \Omega; x_1 > 0, x_2 > 0, x_3 > 0\}, \\ \Omega^{(1)} &:= \{(x_1, x_2, x_3) \in \Omega; x_1 < 0, x_2 > 0, x_3 > 0\}, \\ \Omega^{(2)} &:= \{(x_1, x_2, x_3) \in \Omega; x_1 < 0, x_2 < 0, x_3 > 0\}, \\ \Omega^{(3)} &:= \{(x_1, x_2, x_3) \in \Omega; x_1 > 0, x_2 < 0, x_3 > 0\}. \end{aligned}$$

また $\Omega^{(4)}, \dots, \Omega^{(7)}$ は $x_3 < 0$ である部分領域とする. この分割に対し, 直交変換 $R^{(d)}$ が存在し, $\Omega^{(d)} = R^{(d)} \Omega^{(0)}$ ($0 \leq d \leq 7$) が成り立つ.

次に行列の分割を定義する. 説明の簡単化のため, スカラー変数の圧力に対する行列 D の分割を扱うが, 流速に対する剛性行列に関しても同様に考えることができる.

添字の集合を次のように定義する:

$$\Lambda := \{1, 2, \dots, N_M\}, \quad \Lambda_I := \{1, 2, \dots, N_{M,I}\}, \quad \Lambda_B := \{N_{M,I} + 1, \dots, N_M\}.$$

ここで $N_{M,I} < N_M$ であり, 添字に対応する節点に対して次が成り立つ:

$$\begin{aligned} i \in \Lambda_I : P_i, \quad \exists e, P_i \in \Omega^{(e)}, \\ j \in \Lambda_B : P_j, \quad P_j \in \bigcup_{0 \leq e < f \leq 7} (\partial \Omega^{(e)} \cap \partial \Omega^{(f)}). \end{aligned}$$

Λ_B は部分領域間の境界上の節点に対応する添字の集合である. 部分領域 $\bar{\Omega}^{(0)}$ の添字の集合を次のように定義する:

$$\Lambda^{(0)} := \{1, 2, \dots, N_M^{(0)}\}, \quad \Lambda_I^{(0)} := \{1, 2, \dots, N_{M,I}^{(0)}\}, \quad \Lambda_B^{(0)} := \{N_{M,I}^{(0)} + 1, \dots, N_M^{(0)}\}.$$

$\Lambda^{(d)} = \Lambda_I^{(d)} \cup \Lambda_B^{(d)}$, $\Lambda_I^{(d)} \cap \Lambda_B^{(d)} = \emptyset$ ($1 \leq d \leq 7$) はそれぞれ 部分領域 $\bar{\Omega}^{(d)}$ の添字の集合であり, 次が成り立つものとする:

$$\Lambda_I = \bigcup_{0 \leq d \leq 7} \Lambda_I^{(d)}, \quad \Lambda_I^{(e)} \cap \Lambda_I^{(f)} = \emptyset \quad (0 \leq e < f \leq 7), \quad \Lambda_B = \bigcup_{0 \leq d \leq 7} \Lambda_B^{(d)},$$

$$\exists \mathcal{T}_I^{(d)}, \mathcal{T}_B^{(d)} : \Lambda^{(0)} \rightarrow \Lambda, \quad \mathcal{T}_I^{(d)} \Lambda_I^{(0)} = \Lambda_I^{(d)}, \quad \mathcal{T}_B^{(d)} \Lambda_B^{(0)} = \Lambda_B^{(d)}.$$

行列 D の $\bar{\Omega}^{(d)}$ での自由度に対する行列 $D^{(d)}$ を次のように表す:

$$D^{(d)} = \begin{pmatrix} D_{II}^{(d)} & D_{IB}^{(d)} \\ D_{BI}^{(d)} & D_{BB}^{(d)} \end{pmatrix}.$$

全体の行列 D は部分領域での行列 $D^{(d)}$ の重ね合わせによりに表現できる.

$$D = \begin{pmatrix} D_{II}^{(0)} & & & D_{IB}^0 \mathcal{T}_B^{(0)T} \\ & D_{II}^{(1)} & & D_{IB}^0 \mathcal{T}_B^{(0)T} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & D_{II}^{(7)} & D_{IB}^{(7)} \mathcal{T}_B^{(7)T} \\ \mathcal{T}_B^{(0)} D_{BI}^{(0)} & \mathcal{T}_B^{(1)} D_{BI}^{(1)} & \dots & \mathcal{T}_B^{(7)} D_{BI}^{(7)} & D_{BB} \end{pmatrix}.$$

ここに,

$$D_{BB} = \sum_{0 \leq d \leq 7} \mathcal{T}_B^{(d)} D_{BB}^{(d)} \mathcal{T}_B^{(d)T}$$

である.

剛性行列 A と発散に対応する 行列 B に対しては, 成分が 1, -1, 0 からなる行列 $M_A^{(d)}$, $M_B^{(d)}$ を用いて $A^{(d)} = M_A^{(d)} A^{(0)}$, $B^{(d)} = M_B^{(d)} B^{(0)}$, ($0 \leq d \leq 7$) となることに注意する必要がある.

これらの考察より, 領域全体の行列を作成する必要は無く, 部分領域 $\Omega^{(0)}$ で行列を作成するのみで良いことが分かる.

アルゴリズム (a) 前処理行列に不完全 Cholesky 分解による行列を採用する.

$$C = P_{N^\perp} \begin{pmatrix} \tilde{A}^{-1} & 0 \\ 0 & -\delta^{-1} \tilde{D}^{-1} \end{pmatrix}.$$

アルゴリズム (b) 前処理行列に部分領域毎の不完全 Cholesky 分解による行列を採用する.

$$C = P_{N^\perp} \begin{pmatrix} \hat{A}^{-1} & 0 \\ 0 & -\delta^{-1} \hat{D}^{-1} \end{pmatrix}.$$

ここに,

$$\hat{D}^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{D}_{II}^{(0)-1} & & & \\ & \tilde{D}_{II}^{(1)-1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{D}_{II}^{(7)-1} \\ & & & & ((D_{BB})_{ii}^{-1}) \end{pmatrix}$$

であり, $\Omega^{(d)}$ 内の節点に対しては Cholesky 分解による行列, 部分領域間境界上の節点に対しては対角スケーリングを採用する. $\hat{A}^{-1}$ も同様に定義される.

5. 数値実験

$R_1 = 11/9$, $R_2 = 22/9$ の球殻領域において, f を次のように与えた. (r, θ, φ) , $(R_1 \leq r \leq R_2, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi)$ を極座標とすると

$$f(r, \theta, \varphi) = e^{(r)} \left(\frac{1}{r} \frac{R_2 R_1}{R_2 - R_1} - \frac{R_1}{R_2 - R_1} + \epsilon \sin \pi \left(\frac{R_2 - r}{R_2 - R_1} \right) Y_3^2(\theta, \varphi) \right), \quad \epsilon = 0.1.$$

ここで, $e^{(r)}$ は半径方向の単位ベクトル $e^{(r)}(x) = \frac{x}{|x|}$, Y_3^2 は正規化された 3 次 2 階球面調和関数である. 図 1 に球殻領域の四面体による要素分割 (メッシュ B) を示す.

表 1 に離散化条件を示す. メッシュ A での計算コストを表 2, より大規模なメッシュ B での計算コストを表 3 に示す. 残差収束判定は $\epsilon = 10^{-10}$ とした. メッシュ B での残差収束状況を図 2 に示す. 横軸は経過時間 (秒) である. 表 2, 表 3 と異なり, 前処理行列の作成時間を含んでいる.

共有メモリー型の並列計算機 Origin 2000(MIPS R10000@250MHz, 4M バイトキャッシュ) を用い, POSIX Threads[5] により並列処理を記述した. CG 法のアルゴリズム中, 内積計算を行うが, 処理を複数プロセッサ (スレッド) に分割して行う場合, 同期処理が必要となる. 同期処理のため, `barrier_wait` 関数 [5] を用いたが, スレッドの同期の際のオーバーヘッドが大きい. このため, 並列化が容易なアルゴリズムにも関わらず, 小規模な問題 (メッシュ A) では高い並列効率は得られなかった. プログラムのチューニングが必要である.

アルゴリズム b は領域の対称性を利用し, メモリーの節約を図っているため a と比較しメモリー使用量が約 1/2 になっていることが分かる.

謝辞: 科学技術庁高度計算科学技術共同推進制度「地球深部ダイナミクスの数値シミュレーション」の援助により, 防災科学技術研究所所有の並列計算機を使用した. ここに, 謝意を表す.

参考文献

- [1] L. P. Franca, S. L. Frey, and T. J. R. Hughes. Stabilized finite element methods: I. Application to the advective-diffusive model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 95:253–276, 1992.

- [2] E. F. Kassechieter. Preconditioned conjugate gradients for solving singular systems. *J. Comput. Appl. Math.*, 24:265–275, 1988
- [3] M. Tabata. Finite element approximation to infinite Prandtl number Boussinesq equations with slip boundary condition. *Computational Fluid Dynamics '98*, 22–27, John Wiley & Sons, Chichester, 1998.
- [4] 鈴木 厚. 有限要素離散化 Stokes 方程式に対する反復解法. 京都大学数理解析研究所講究録 1084 (数値計算における前処理の研究): 103–110, 1999 年 2 月.
- [5] D. R. Butenhof. *Programming with POSIX Threads*. Addison-Wesley, Massachusetts, 1997.

表 1. 離散化パラメータ

メッシュ	節点数	要素数	h	δ	N_W	N_M
A	25,538	141,168	0.30681	0.5	72,842	25,538
B	225,838	1,293,312	0.15466	0.5	657,542	205,866

表 2. メッシュ A での計算効率

アルゴリズム	PE 数	計算時間 (秒)	速度倍率	反復回数	残差 ($\log_{10}$)	使用メモリ (K バイト)
a	1	395.886	—	250	-10.2952	178,144
b	1	460.810	1	282	-10.1539	82,944
b	2	310.800	1.483	282	-10.1090	84,064
b	4	215.757	2.136	282	-10.1081	86,336
b	8	249.143	1.850	281	-10.1105	90,976

表 3. メッシュ B での計算効率

アルゴリズム	PE 数	計算時間 (秒)	速度倍率	反復回数	残差 ($\log_{10}$)	使用メモリ (K バイト)
a	1	3,602.274	—	451	-10.1490	896,704
b	1	4,462.921	1	458	-10.6498	444,304
b	2	2,676.887	1.667	449	-10.0143	446,736
b	4	2,044.857	2.183	457	-10.2025	457,424
b	8	1,932.546	2.309	457	-10.2207	478,512

SGI Origin2000, MIPS R10000@250MHz

MIPSpro Compilers: C Version 7.2.1

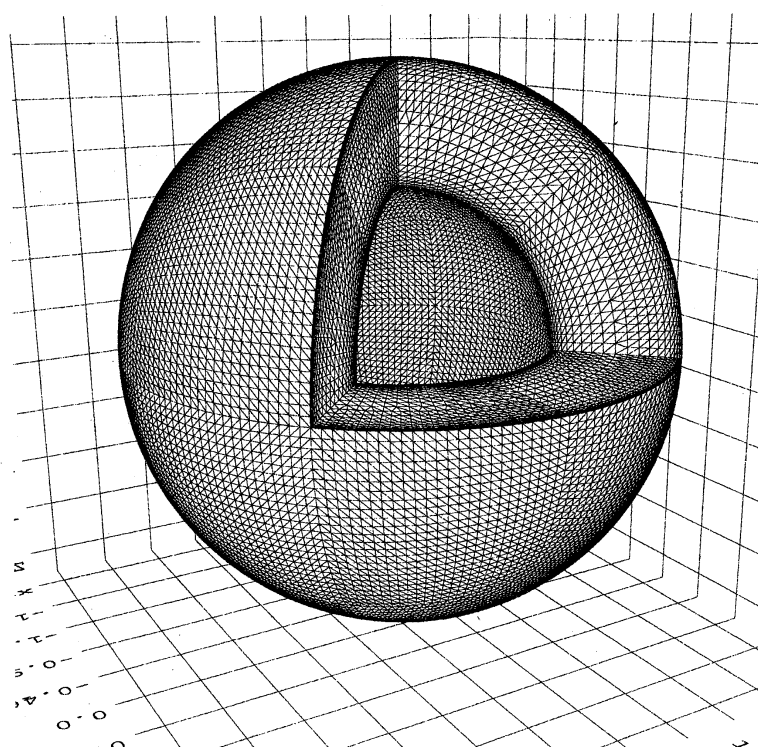


図 1. 球殻領域の四面体要素分割 (メッシュ B)

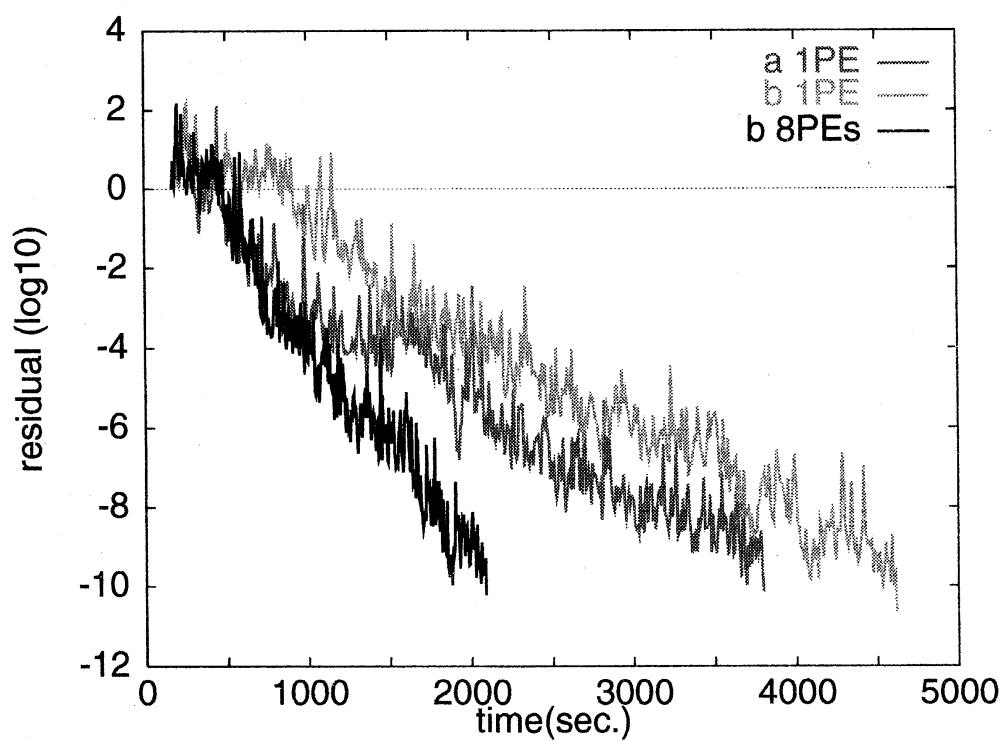


図 2. 残差収束履歴