陰陽格子の開発

The "Yin-Yang Grid": A Chimera Grid for the Spherical Geometry

陰山 聡, 地球シミュレータセンター, 横浜市金沢区昭和町, E-mail: kage@jamstec.go.jp Akira Kageyama, The Earth Simulator Center, Showa-machi 3173-25, Kanazawa-ku, Yokohama

An overset grid or a Chimera grid is proposed for the spherical geometry. It is named "Yin-Yang Grid" since it reminds us the Chinese philosophical symbol (or its three-dimensional version). The Yin-Yang grid is composed of two component grids. They are identical in the shape and the coordinates. The component grid is just the low latitude region of the usual spherical latitude-longitude grid. The grid spacing of the Yin-Yang grid is nearly uniform and it has no coordinate singularity. The Yin-Yang grid is applied to geoscientific three-dimensional simulations including geodynamo, mantle convection, atmosphere and ocean simulations.

1. はじめに:緯度経度格子の問題点

球ジオメトリで偏微分方程式を解く手法は、球面調和関数展開によるスペクトル法、2重 FFT 法、有限要素法、有限体積法、有限差分法など、数多く存在する。その中で空間の全方向に差分をとる有限差分法は、地球シミュレータのように大規模なベクトル・並列計算機の使用を想定すると、計算速度と効率の上で最も魅了的な手法である。

球ジオメトリでの差分格子として最も単純な格子系は、Fig. 1 に示したような緯度経度格子であろう。これは、球座標系の下で緯度と経度の両方向にそれぞれ等間隔に格子を置いた系である。この緯度経度格子系は直交系であり、メトリックが単純という数値計算上好ましい性質を持っている。しかし、極が座標特異点になっているという点と、極近くに格子点が集中しているために経度方向の CFL 条件が非現実的なほど厳しくなるという二つの点に注意を払う必要がある。

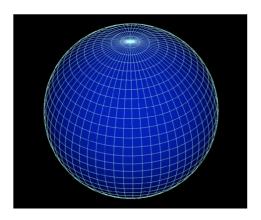


Fig. 1 Spherical (latitude-longitude) Grid

座標特異点は、ロピタルの定理を使えば容易に解消されるので 実は問題ではない。たとえば、

$$\lim_{\theta = 0} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \theta} = \lim_{\theta = 0} \frac{1}{\cos \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \theta}$$
$$= \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \bigg|_{\theta = 0}$$

と変形すれば、最後の項を差分形で表すのは容易である。

一方、極近くでの厳しすぎる CFL 条件の問題は、経度方向にローパスフィルターをかけることで回避できる。物理的な場の量の分布を考えれば、経度方向のフーリエ係数は高緯度付近になるほど低いモードしか持たない。(スカラー場の場合、極上ではモード0だけしか存在しない。)したがって、緯度の関数としてのローパスフィルタをかけることは自然なことである。見方を変えるとこの方法は、実空間での格子はそのままにしておきながら、フーリエ空間での情報量を減らすことにより、経度方向の格子点数を仮想的に減らしていることに相当する。

仮想的にではなく、実際に実空間に置く格子点の数を高緯度になるに従って減らしていくという方法も考えられる。しかし、こうすると緯度方向への差分をとる時に困る。なぜなら、任意の格子点をとったときに、その真北側と真南側に対応する格子点が存在するとは限らないからである。そうなると、何らかの方法で経度方向への補間処理が必要となる。結局それは、もとの格子点の真北隣と真南隣に仮の格子点を置き、そこでの値を補間で設定することと等価になる(Fig. 2)。そのような仮の格子点を必要なだけ、全て用意してみると、それは結局、元の緯度経度格子に戻ってしまう。それならば最初から緯度経度格子にフィルターをかける方が早いであろう。ローパスフィルターをかけるということは、適当な補間計算を自動的にしていることに相当するからである。

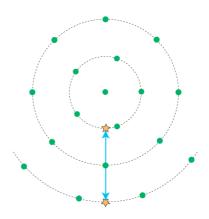


Fig. 2 Reduced Grid. It is theoretically the same, but practically slower than the latitude-longitude grid with an azimuthal low-pass filter.

ローパスフィルター処理は実空間でそのまま行ってもいいが、FFT を使い、フーリエ空間でフィルターをかけてから再び実空間に戻せば高速に処理できる。高速とは言っても全体のシミュレーション時間のかなりの割合をこのフィルター処理に要することも珍しくない。

私はこれまで、地磁気ダイナモのシミュレーションのために緯度経度格子を利用してきた。上述のロピタルの定理とローパスフィルター法を組み合わせた全空間方向での差分法により、球殻ジオメトリにおける電気伝導性流体(MHD流体)の熱対流運動の時間発展を解き、MHDダイナモ機構による双極子磁場の自発的な生成やその逆転現象の再現などの成果を得た。

しかしながら、緯度経度格子を用いたシミュレーションは、たとえ表面的な Flops 値を高くできたとしても、実は数値計算上、大変効率が悪いことに以前から気が付いていた。Fig. 1 を見ながら緯度経度格子での計算をもう一度振り返ると、この方法は非常に無駄の多い計算方法であることが分かる:

- 1. 格子点をわざわざ (無意味に) 極軸近くにたくさん集め、
- 2. その分だけ赤道付近の分解能を (無意味に) 悪くし、
- 3. 全ての格子点上で差分を計算し、
- 4. そうして得た情報の多くを、(苦労して)フィルター処理をして捨ててしまう。

このような無駄と非効率を避けるための適切な差分格子系を提案 することが本論文の目的である。

緯度経度格子における上述の無駄は、結局は、格子間隔の分布が極端に不均一になっていることが原因であり、離散化手法としての有限差分法に由来するものではない。従って、緯度と経度の両方向に差分法を用いた場合に限らず、2重 FFT 法を用いた場合でも(なんらかのローパスフィルターを使う限り)、全く同じ性質の無駄がある。あるいは、緯度方向には差分、経度方向にはフーリエスペクトル法をとったとしても同じことである。この問題を解消するためには、緯度経度格子を捨てる以外にない。

しかしながら、緯度経度格子が悪い性質を持つのは、格子点が無意味に集中している高緯度領域だけに限られている。この部分さえ除けば、この格子系は格子間隔がほぼ一様なので、魅力的な直交格子と言える。そこで、緯度経度格子の低緯度領域だけを取り出し、それを複数個組み合わせて球面全体を覆うことを考える。そのような格子形成手法としてキメラ格子法がある。

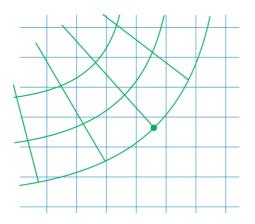


Fig. 3 Overlapped region of a Chimera grid.

2. キメラ格子

キメラ格子 (Chimera grid または overset grid または composite overlaid grid) 法とは、複数の要素格子を組み合わせ、要素格子同士の部分的な重なり合いを許しながら計算領域全体を覆う格子形成法の一種である。キメラ格子は 1980 年代始めから使われてきた(1-8)。その数学的基礎については文献(9)に詳しい。要素格子同士はその境界部分で部分的に重なり合っている (Fig. 3)。一つの要素格子の境界上の値(例えば Fig. 3 の緑色の点)は、その周囲の他の要素格子 (Fig. 3 の水色の格子)から補間により求める。

キメラ格子法の応用範囲は広い。そのほんの一部を挙げると、飛行機 $^{(10-14)}$ 、船 $^{(15)}$ 、スペースシャトル $^{(16)}$ 、ヘリコプター $^{(17)}$ 、室内換気流 $^{(18)}$ 、血流 $^{(19)}$ などの数値流体力学計算などがある。しかし不思議なことに、地球科学の分野ではキメラ格子法はこれまであまり使われてこなかった。本論文では、地球科学シミュレーションへの応用を想定した2次元球面、あるいは3次元球殻ジオメトリにおけるキメラ格子を提案する。

緯度経度格子における極領域での問題を避けるためにキメラ格子を利用するという考えは自然なものである。例えば、古く1957年に Phillips²⁰⁾によって提案された気象シミュレーション用の格子系は一種のキメラ法と見なすことができる。その改良版²¹⁾もある。論文²²⁾では、球座標の極領域にパッチを当てた球面上のキメラ格子の図が見られる。また、2次元球面上のキメラ格子ではなく、箱の中に置かれた球の周囲を覆う3次元キメラ格子を生成した例として²³⁻²⁴⁾がある。そこではキメラ格子自動生成プログラムが用いられている。

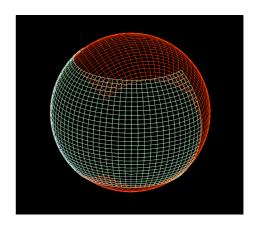


Fig. 4 A Chimera grid on a sphere named "Yin-Yang Grid.".

3. 陰陽格子

地磁気ダイナモシミュレーションや、マントル対流シミュレーション、大気・海洋シミュレーションなどの、地球科学への応用を考えると、この分野で最も重要な3次元ジオメトリは、二つの同心球に挟まれた領域で定義される球殻ジオメトリであろう。球殻の場合、2次元球面上のキメラ格子が構成できれば、それを半径方向に延長するだけで簡単に3次元化できる。そこでこの論文では、最適な2次元球面キメラ格子を構成することを考える。

球面を覆うキメラ格子には当然、無数のバリエーションが考えられる。その中で最適なキメラ格子とは何であろうか?最適かどうかを判断する基準は、

- 1. 地球シミュレータのような大規模ベクトル・並列機で高 速に計算できること。
- 2. 高精度化が容易であること。
- 3. 格子の構造が単純で、シンプルなプログラミングが可能 なこと。

などが考えられる。一般にキメラ格子法では要素格子の数が多い と補間計算の負荷が増えるので、要素格子の数は最小、つまり2 が最も望ましい。2個の要素格子だけで球面を覆うことはもちろ ん簡単であり、その方法もまた無数に存在する。その中で、全く 同じ形の二つの要素格子で球面を覆う方法は存在するであろう か?もしもそれが可能ならば、同じ計算手続きを2度使うことが できるのでプログラムが簡単になり、なによりエレガントであろ う。そして、計算速度を考えると、要素格子上の座標系は当然、 直交系であるべきだ。つまり、我々が求める最適な2次元球面キ メラ格子の持つべき具体的な性質は、

- 二つの要素格子を組み合わせて球面を覆うこと。
- 二つの要素格子は互いに合同であること。
- ・ 要素格子は単純な形状で、その座標は直交系であること。
- 要素格子の格子間隔はほぼ一様であること。
- ・並列化のための領域分割とベクトル化が容易であること。

と、まとめることができる。 本論文で提案するのは、上述の意味で最適と考えられる2次元

球面上の新しいキメラ格子である (Fig. 4)。この格子は、後述す る理由から「陰陽(インヤン)格子」と名付けた。「陰陽」と書 いて「インヤン」と読む。

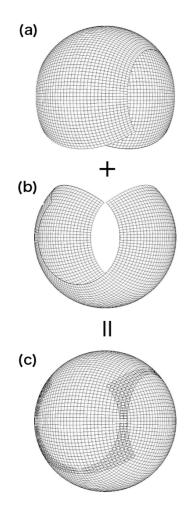


Fig. 5 The component grid of the Yin-Yang is a part of the usual spherical (latitude-longitude) grid.

陰陽格子の要素格子は、通常の球座標の低緯度領域の一部分を 切り抜いたものである。Fig. 5(a)に示したように、緯度方向には 赤道付近の南北 90 度、経度方向には 270 度の領域を抜き出す。 球座標の一部なので当然直交系であり、低緯度領域だけなので格 子間隔の極端な不均一性は持たない。この要素格子を二つ、全く 同じものを用意し (Fig. 5(a)と(b))、それらを互いに角度をずら して組み合わせたもの (Fig. 5(c)) が陰陽 (インヤン) 格子であ る。要素格子の「カド」の部分を少し削れば、重複面積を最小化 させることは可能だが、今はベクトル・並列化の効率を優先させ、 要素格子の計算上の形状が長方形になるようにしている。

我々は、二つある要素格子の一方を「陰(イン)格子」、また は「N系」、もう一方を「陽(ヤン)格子」または「E系」と呼 んでいる。N は北 (north) を、E は東 (east) を意味する。これ は、それぞれの要素格子のもととなる球座標の軸方向が向いてい る方向に由来している。

N 系の座標軸と E 系の座標軸は 90 度回転しており、カーテシ アン座標で書けば、この二つの座標は、以下のような関係がある。

$$(x^e, y^e, z^e) = (-x^n, z^n, y^n)$$

陰陽格子の要素格子は、緯度経度座標の一部なので、解くべき 基礎方程式が球座標表示で書かれていれば、それをそのまま差分 化すればいい。これが陰陽格子の長所の一つである。たとえば、 球殻容器内での流体の時間発展を陰陽格子を使って計算する場合、 球座標系で表現した Navier-Stokes 方程式を差分化し、そのまま プログラムに書くだけである。また、球ジオメトリのシミュレー ションでは一般に、境界条件が球座標表示でのベクトルの各成分 で独立して書かれる場合が多いので、球座標ベクトルがそのまま 扱えるのは大変望ましい性質である。

上述のようにキメラ格子法においては、要素格子の境界条件は 自分以外の要素格子からの補間によって設定される (Fig. 3)。現 在我々が開発している陰陽格子を用いた地磁気ダイナモのシミュ レーションや、マントル対流のシミュレーションの結果をみると、 2次精度の中心差分、または1次精度の風上差分を使ったシミュ レーション場合、境界での補間は線形で十分のようである。もち ろん必要があれば補間精度を上げることは容易である。

陰陽格子のもう一つの特徴は、二つの要素格子が全く同一なの で、プログラムが簡単になるという点である。例えば、Navier-Stokes 方程式を解く Fortran90 プログラムでは、N 系と E 系の流 れベクトル場を保持する構造体変数 flow n system と flow e system を用意しておき、その時間発展を追跡するために は、次のように同一のサブルーチンを2度call すればよい。

> call navier stokes(flow n system) call navier stokes(flow e system)

4. 野球ボールと陰陽シンボル

同じ形をした二つの要素を組み合わせて球面を作っている身近 な例として、野球のボールがある。Fig. 6(a)に示したように、野 球のボールをよく見ると、縫い目は1本しかないことに気が付く。 そして、この縫い目に沿って鋏を入れ、切ってみると、野球ボー ルの表面は、Fig. 6(b)にあるような全く同じ形をした2枚の布で 作られていることが分かる。この2枚を縫い合わせて球面が構成 されているわけである。野球ボールの縫い目は、陰陽 (インヤン) 格子の二つの要素格子の重なり合った境界部分に対応している。 陰陽格子の3次元的な形状と、二つの要素格子の相補的な役割が、 Fig. 6(c)に示した中国の陰陽思想のシンボル(あるいはその3次 元拡張版) を連想させるので、陰陽格子と名付けた。

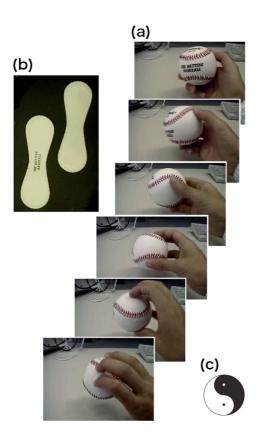


Fig. 6 (a) The stitch of a baseball is a closed curve. (b) The spherical surface of the baseball is composed of two identical cloths. (c) The complemental two elements reminds us the "Yin-Yang" symbol.

5. ベクトル成分の変換

陰陽格子で、流体運動などのベクトル場を扱う場合、球座標 (r, θ, ϕ) でのベクトル成分のうち、 θ, ϕ 成分の補間については多少注意が必要である。なぜなら二つの要素格子 (N 系と E 系)では、座標の軸が 90 度ずれているため、ベクトルの θ, ϕ 成分の値が違うからである。だが、その成分変換公式は、以下のように簡単な形にまとめることができる。

$$\begin{pmatrix} v_r^e \\ v_\theta^e \\ v_\phi^e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin\phi_e \sin\phi_n & -\cos\phi_n/\sin\theta_e \\ 0 & \cos\phi_n/\sin\theta_e & -\sin\phi_e \sin\phi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_r^n \\ v_\theta^n \\ v_\phi^n \end{pmatrix}$$

ここで、 v_r^e は E 系で見たあるベクトルの半径 r 成分、 ϕ_n は、N 系で見たφ座標であり、他の変数も同様な意味である。このように、ベクトル成分の変換が解析的に書けることも陰陽格子の優れた特徴の一つである。もしも、もっと複雑な座標系を要素格子として採用すれば、各要素格子での計算に必要なメトリックが複雑になるだけでなく、ベクトル成分の変換と補間もコストのかかる計算が必要とされることになるであろう。ちなみに上の変換公式は、ベクトルの局所的な回転変換として解釈することができる。

6. 陰陽格子の応用

海洋科学技術センター、地球シミュレータセンターでは、陰陽 格子を使った

- 1. 地磁気ダイナモシミュレーションコード
- 2. マントル対流シミュレーションコード
- 3. 大気・海洋結合シミュレーションコート⁽²⁵⁻²⁷⁾ を現在開発中である。

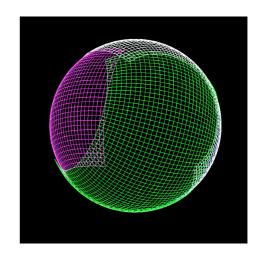


Fig. 7 A variation of the Yin-Yang grid: Another Chimera grid on a sphere that consists of three identical component grids.

7. 陰陽格子のバリエーション

陰陽格子は球座標の一部、その表面積の約半分に相当する領域を切り抜いた形の二つの合同な要素格子を組み合わせたものである。同じように、球座標の一部、その表面積の約1/3に相当する領域を切り抜いた合同な要素格子を3つ組み合わせたキメラ格子も考えられる(Fig. 7)。この場合の要素格子は、緯度経度格子から緯度方向には赤道の南北90度、経度方向には180度の領域を抜き出したものである。この球面キメラ格子は、プロセッサ数が3の倍数である場合の並列計算には有効かもしれない。

同様に、緯度経度格子からもっと細かい部分領域を取り出して、より多くの要素格子を組み合わせたキメラ格子を想像することもできるが、要素格子が多くなるに従い境界での補間の相対的な計算負荷が上がるので、陰陽格子と比べてメリットはあまりないであろう。

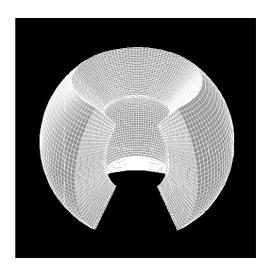


Fig. 8 A component grid of three-dimensional Yin-Yang grid.

8. まとめ

球ジオメトリで偏微分方程式を解くための新たな格子系「陰陽 (インヤン)格子」を考案した。陰陽格子はキメラ格子の一種である。二つの合同な要素格子を組み合わせて球面を覆う。その要素格子は、緯度経度格子の低緯度領域の一部を切り取ったものである。陰陽格子は座標特異点を持たず、要素格子は直交系で、格子間隔はほぼ均一である。2次元球面を覆う陰陽格子を半径方向に拡張したものが3次元陰陽格子である(Fig. 8)。この3次元陰陽格子は、地磁気シミュレーション、マントルシミュレーション、大気・海洋シミュレーションなどに現在応用されている。

参考文献

- J.L. Steger, "Implicit finite difference simulation of inviscid and viscous compressible flow", in Transonic, Shock and Multidimensional Flows, R.E.Meyers, ed., Academic Press, New York, (1982), pp.181-217
- Joseph L. Steger, "On application of body conforming curvilinear grids for finite difference solution of external flow", in "Numerical Grid Generation", J.F. Thomposon, ed., North-Holland, New York, (1982), pp.295-316
- Joseph L. Steger, F. Carroll Dougherty, and John A. Benek, "A chimera grid scheme", Advances in Grid Generation, edited by K.N. Ghia and U. Ghia, (1983), pp.59-69
- J.A. Benek, J.L. Steger, and F.C. Dougherty "A flexible grid embedding technique with application to the Euler equations", AIAA, 83-1944, (1983), pp. 373-382
- Joseph L. Steger and Pieter G. Buning, "Developments in the simulation of compressible inviscid and viscous flow on supercomputers", in Progress in Scientific Computing, Vol.6, Proceedings of U.S.-Israel Workshop, (1984), pp.67-91
- 6. E.Atta. "Component-adaptive grid interfacing" AIAA, 81-0382, (1981).
- E.H. Atta and J. Vadyak, "A grid interfacing zonal algorithm for three dimensional transonic flows about aircraft configurations", AIAA, 82-1017, (1982), pp. 107-114
- Essam H. Atta and Joseph Vadyak, "A grid overlapping scheme for flowfield computations about multicomponent configurations", AIAA J., 21, (1983), pp.1271-1277
- G. Chesshire and W.D. Henshaw, "Composite overlapping meshes for the solution of partial differential equations", J. Comput. Phys., 90, (1990), pp.1-64,
- Robert L. Meakin, "Computations of the unsteady flow about a generic wing/pylon/finned-store configurations", AIAA, 92-4568-CP, (1992), pp.564-580
- Robert L. Meakin, "Moving body overset grid methods for complete aircraft tiltrotor simulations", AIAA 93-3350-CP, (1993), pp.576-588
- Stuart E. Rogers, "Progress in high-lift aerodynamic calculations", J. Aircraft, 31, (1994), pp.1244-1251
- Hoa V. Cao, T.Y. Su, and Stuart E. Rogers, "Navier-stokes analysis of a 747 high lift configuration", AIAA 98-2623, (1998), pp. 402-409
- Stuart E. Rogers, H.V. Cao, and T.Y. Su, "Grid generation for complex high-lift configurations", AIAA, 98-3011, (1998), pp.1-11
- 15. Cheng-Wen Lin, Scott Percival, and Eugene H. Gotimer, "Application

- of chimera composite grid scheme to ship appendages", Proceedings of the 4th International Grid Coference, Pineridge Press Limited: Swansea Wales, (1994), pp. 699-710
- P.G. Buning, I.T. Chiu, S. Obayashi, Y.M. Rizk, and J.L. Steger, "Numerical simulation of the integrated space shuttle vehicle in ascent", AIAA Paper, 88-4359-Cp,(1988), pp. 265-283
- Earl P.N. Duque, Roger C. Strawn, Jasim Ahmad, and Rupak Biswas.
 "An overset grid navier-stokes kirchhoff-surface method for rotorcraft aeroacoustic predictions", AIAA 96-0152, (1996), pp.1-13
- Laszlo Fuchs, "Calculation of flow fields using overlapping grids", Notes on Numerical Fluid Mechanics, P. Wesseling eds, Vol.29, (1990), pp.138-147
- C. Kiris, D. Kwak, S. Rogers, and I-D. Chang, "Computational approach for probing the flow through artificial heart devices", Transactions of the ASME, 119 (1997), pp. 452-460
- N.A. Phillips, "A map projection system suitable for large-scale numerical weather prediction", J. Meteor. Soc. Japan, 75th Anniversary Volume, (1957), pp. 262-267
- 21. G.L. Browning, J.J. Hack, and P.N. Swarztrauber, "Month. weath. rev. A Comparison of Three Numerical Methods for Solving Differential Equations on the Sphere", 117, (1989), pp.1058-1075
- 22. N. Anders Petersson, "Hole-cutting for three-dimensional overlapping grids", SIAM J. Comput., 21, (1999), 646-665
- 23. W.D. Henshaw and G. Chesshire and M.E. Henderson, "On Constructing Three Dimensional Overlapping Grids with CMPGRD", Software Systems for Surface Modeling and Grid Generation, NASA Conference Publication 3143, R.E. Smith Editor, (1992), pp. 415-434
- William D. Henshaw, "A fourth-order accurate method for the incompressible Navier-Stokes equations on overlapping grids", J. Comput. Phys., 113, (1994), 13-25
- 25. 彭、肖、高橋、"球面上の高精度高効率移流計算", 第 17 回数値流体力学講演論文集,(2003), C6-1,
- 26.大平、高橋、陰山、渡邉、"陰陽格子上における浅水波方程式 による力学的検証", 第 17 回数値流体力学講演論文集, (2003), C6-2
- 27.小峯、高橋、陰山、渡邉、"陰陽格子法を用いた全球・非静力 学大気モデルの開発",第17回数値流体力学講演論文集,(2003), C6-3