水工学論文集　第35巻　1991年２月

# ２次元および３次元数値流体解析への前処理付き共役勾配法系統の解法の適用

# APPLICATION OF PRECONDITIONED CONJUGATE GRADIENT-LIKE METHODS TO TWO AND THREE DIMENSIONAL FLUID FLOW CALCULATIONS

河原能久*・W. RODI**

By Yoshihisa KAWAHARA and Wolfgang RODI

Performance evaluation of the preconditioned conjugate gradient-like methods is made through the numerical simulation of two and three dimensional turbulent flow fields with the finite volume method. Preconditioned solvers examined include conjugate gradient method (PCG), conjugate residual method (PCR), bi-conjugate gradient method (PBCG) and conjugate gradient squared method (PCGS). Comparisons of the performance of the solvers demonstrate that the combination of PCG for the pressure-correction equation and PCR for the other equations requires the least CPU time against both two and three dimensional flows. PCR, PBCG and PCGS are shown to be superior to the vectorized strongly implicit procedure (SIP) proposed by Stone when they are used together with PCG.

Keywords: PCG method, PCR method, PBCG method, PCGS method, SIP.

## １．はじめに

スーパーコンピュータの利用によって乱流場の３次元数値解析が盛んに行われるようになり，新たな知見や信頼性の高い結果を与えるようになってきている．スーパーコンピュータの計算能力を十分に引き出すためには，解析手法の改良や開発，特に，ベクトル処理向きのアルゴリズムの構築が不可欠である．一方，流体解析では，連立一次方程式の解法に多大なCPUタイムが費やされることが多く，その総CPUタイムに占める割合が９０％を越えることも希ではない．したがって，解析コードを高速化するためには，収束速度の大きい解法の利用とその解法のベクトル化とが第一義的に重要である．

連立一次方程式の反復解法は，1)点反復法，2)ブロック反復法，3)Approximate Factorization 法，4)前処理付きの共役勾配法に大別できよう．従来，1)から3)の解法が使用されることが多く，その順番に大きい収束速度を与えることが知られている．また，スーパーコンピュータの利用とともに前処理付きの共役勾配法系統の手法が注目されてきている．特に，流体解析における輸送方程式を解く場合のように，係数行列が非対称となる問題に適用できる解法の開発が進められている．

前処理付きの共役勾配法系統の解法は数多くの特長を有するが，反面，それらの解法の多くが反復計算ごとに残差を減少させるという性質を持たないという欠点をも持つ．この残差の単調減少性を保証しないこと

*　正会員　工博　東京大学講師　工学部土木工学科
（〒113 東京都文京区本郷 7-3-1）
**　Ph.D.　Professor　University of Karlsruhe
(D-7500 Karlsruhe 1, Kaiserstr. 12, Germany)

は，数値解析スキームの安定性や経済性の観点から，非線形性の強い連立編微分方程式を対象とする流体解析への適用に際して障害になるとも考えられる．実際，それらの解法を流体解析へ適用した例は数少ない．圧力場の計算に前処理付き共役勾配法（PCG）を利用した解析[1),2)]や単純な移流拡散方程式の解析に前処理付き共役残差法（PCR），双共役勾配法（PBCG），2乗共役勾配法（PCGS）を使用した例[3)]が報告されているに過ぎず，複雑な流れ場の解析に適用した例は極めて僅かである[4)]．

本研究の目的は，共役勾配法系統の解法の流体解析への適用性や有効性を明確にし，解析コードの一層の高速化や汎用化をはかることである．本論文では，前処理付きの共役勾配法系統の解法の中からPCG，PCR，PBCG，およびPCGSを取り上げ，各解法を2次元及び3次元の乱流場に適用した結果を報告する．また，従来よく使用されているStoneのSIP[5)]を用いた場合の結果と比較してそれらの解法の有効性を考察する．各解法のアルゴリズムについては紙面の制約上記述できないので，参考文献[3),6)]を参照されたい．なお，使用したスーパーコンピュータはカールスルーエ大学のVP-400EXである．

## 2．数値解析コードの概要

本研究では，定常な2次元及び3次元の乱流場を対象とする．解析コードは，基礎方程式系を有限体積法によって離散化し，ＳＩＭＰＬＥアルゴリズムを用いて収束解を算出するものである．図－1に3次元乱流場をｋ－εモデルを用いて解析する場合のフローチャートを例示する．反復計算は，連続の式を満足させるように速度場と圧力場とを補正しながら，連続の式と運動量式の無次元化した誤差が所定の値（10-3）より小さくなるまで実行される．なお，この大きな反復計算ループの内側に，各未知量に対する連立一次方程式を繰り返し計算により解くループ，すなわち共役勾配法系統の解法ルーチンが存在する．

解析コード内で解く方程式系は，運動量の式と連続の式に相当する圧力補正式，標準ｋ－εモデルを利用するために追加される乱流エネルギー（ｋ）と粘性散逸率（ε）の輸送方程式である．なお，連立一次方程式の係数行列は，圧力補正式については対称で非正則であるが，その他の方程式では非対称かつ正則である．

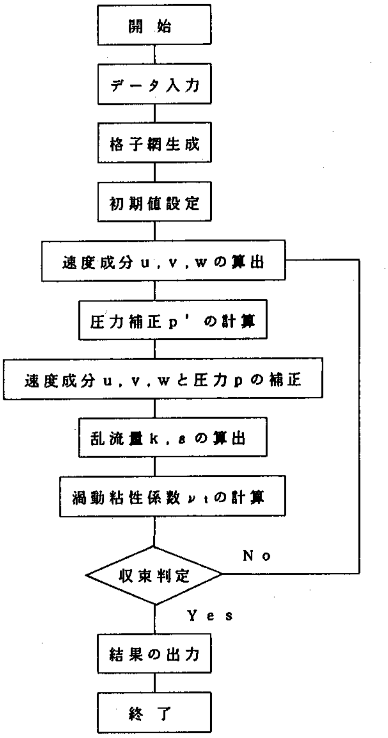


Fig. 1 Flow chart of a numerical code.

## 3．共役勾配法系統の解法の特徴

PCG，PCR，PBCG，PCGSの4種類の反復解法を対象とする．また，前処理の影響をも検討するために，どの解法についても2種類の前処理行列を取り上げる．各解法の特徴と前処理の概略は以下のようである．

（1）PCG ：対称な係数行列に対する最も有力な解法であると見なされている．本研究では圧力補正式の解析にのみ使用する．

（2）PCR ：反復計算ごとに残差を単調に減少させるアルゴリズムから構成されている．圧力補正式のみならず，非対称な係数行列をもつ他の方程式にも適用できる．

（3）PBCG：もとの連立一次方程式とそれに双対な方程式とを組み合わせて計算するものである．この解法では，残差が反復計算の進行につれて必ずしも減少しない．しかし，残差が単調に減少する場合には大きな収束速度を示す．

（4）PCGS：PBCGのアルゴリズムを再構成したものであり，両者は数学的には等価である．しかし，PCGSはPBCGが利用する係数行列の転置を必要とせず，アルゴリズムが簡単となりプロ

グラミングが容易になる．また，高精度で連立一次方程式を解く場合には，PCGSの方がPBCGより収束速度が大きいと期待される．

（5）前処理 ：共役勾配法に対しては不完全コレスキー分解とそのGustafsson流の修正を追加したもの，その他の３つの手法に対しては不完全LU分解とそれにGustafsson流の修正を施した不完全LU分解を前処理として使用する．

前処理と解法との組合せを明示するために，前処理を表すPの代わりに，不完全コレスキー分解に対してIC，不完全LU分解に対してILUを，また，Gustafsson流の補正にはさらにMを付けることとする．

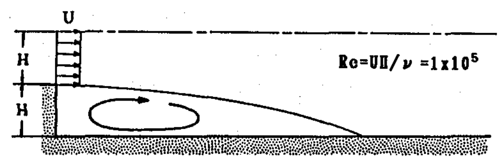
## ４．流体解析への適用結果と考察

上述の反復解法や前処理の適用性を検討するために，それらの収束速度や計算時間に及ぼす影響を比較する．対象とした流れ場は２ケースである．ケース１は図－２（ａ）に示すようなバックステップを通過する乱流場，ケース２は図（ｂ）のような正方形横断面をもつＳ字形ディフューザ内の乱流場である．なお，ケース２の流れ場には剥離域は形成されていない．

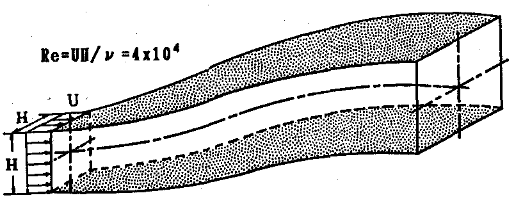
### ４．１　バックステップを通過する乱流場

計算に使用した格子点数は80x30であり，スタガード格子を用いている．また，１回ごとの反復解法の停止条件は誤差の２乗ノルムが反復開始時の0.1未満になることとしている．表－１は，解法や前処理の種類が計算時間や収束速度に与える影響を比較したものである．解法名が２つ記されている場合には，はじめが圧力補正式に適用した解法名を，２番目がその他の方程式に対して使用した手法名を表している．解法名が１つのみ記入されている場合にはその解法をすべての方程式に対して用いることを意味する．また，TCPUと記した欄には計算に要した全CPUタイムを，SCPUという名の欄には連立一次方程式の解析に使用した延べ時間を示している．さらに，TITRと書かれた欄には外側の反復計算ループの実行回数を，変数名の書かれた欄には連立一次方程式の解法ルーチン内でその解を求めるために行われた反復計算回数の総数を記している．表中の横線（－）は計算途中で解が発散したことを表している．

この結果より，解法の性能に関して次のことが言える．1)MILUCR，MILUBCG，MILUCGSを圧力補正式にまで適用することは無理であるか，あるいは妥当ではない．圧力補正式はPCGを用いて解くことが適当である．2)計算時間についてはPCR，特にMICCGとILUCRとの組合せが最も優れている．3)解法の収束速度に関しては




(a) Turbulent flow past a backward facing step.




(b) Turbulent flow in a S-shaped diffuser.

Fig. 2  Test cases.

Table 1  Performance comparison for case-1.

| Solvers | CPU Time(sec) | | Number of Iterations | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | TCPU | SCPU | TITR | p | u | v | k | ε |
| MICCG + MILUCR | 14.1 | 12.1 | 552 | 5919 | 552 | 552 | 552 | 552 |
| MICCG + MILUBCG | 15.3 | 13.2 | 561 | 5795 | 561 | 561 | 561 | 561 |
| MICCG + MILUCGS | 16.1 | 14.1 | 548 | 5693 | 548 | 548 | 548 | 548 |
| MICCG + ILUCR | 13.2 | 11.2 | 553 | 5632 | 553 | 553 | 553 | 553 |
| MICCG + ILUBCG | 14.1 | 12.1 | 553 | 5484 | 553 | 553 | 553 | 553 |
| MICCG + ILUCGS | 15.0 | 13.1 | 547 | 5447 | 547 | 547 | 547 | 547 |
| ICCG + MILUCR | 12.5 | 10.8 | 473 | 5427 | 473 | 473 | 473 | 473 |
| ICCG + MILUBCG | 13.8 | 12.1 | 473 | 5719 | 473 | 473 | 473 | 473 |
| ICCG + MILUCGS | 15.1 | 13.3 | 495 | 5797 | 495 | 495 | 495 | 495 |
| MILUCR | 26.2 | 24.1 | 564 | 11279 | 564 | 564 | 564 | 564 |
| MILUBCG | － | － | － | － | － | － | － | － |
| MILUCGS | － | － | － | － | － | － | － | － |
| SIP | 17.7 | 15.7 | 568 | 4353 | 568 | 568 | 568 | 568 |

MICCGと組み合わせたPCGSが最も大きい. 4)前処理におけるGustafsson流の修正はICCGには有効である. 圧力以外の未知量では隣接格子点間での変動が大きく, 緩やかな変化を仮定するGustafsson流の修正と相容れないためであると考えられる. 5)PCGと組み合わせたPCR, PBCG, PCGSのいずれもがSIPより高速であり, 有効な解法であると判断できる. なお, 連立一次方程式の解法に多くのCPUタイムが費やされていることが理解される.

### 4．2　S字形ディフューザ内の乱流場

計算に使用した格子点数は32x30x14であり, 未知量をすべて同一の位置で定義している. また、1回ごとの反復解法の停止条件は誤差の2乗ノルムが反復開始時の0.2未満になることである. ケース2に対する各解法の適用結果をまとめたものが表－2である. これより, 以下のことが知られる. 1)すべての解法が解を算出している. 2)PCR, PBCG, PCGSを比較すると, 計算時間の観点からはPCRが, 収束速度の面からはPCGSが最も優れている. 3)MILUCR, MILUBCG, MILUCGSを圧力補正式に適用することは, PCGの使用に比較して有効ではない. 4)Gustafsson流の前処理への修正はICCGには有効であるが, その他の解法に対しては必ずしも効果的ではない. 5)PCGと組み合わせたPCR, PBCG, PCGSはいずれもSIPより計算時間が短い. なお, ケース2ほどではないが, 圧力場の算出に多くの計算時間が消費されている.

Table 2　Performance comparison for case-2.

| Solvers | CPU Time (sec) | | Number of Iterations | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | TITR | SCPU | TITR | p | u | v | w | k | ε |
| MICCG + MILUCR | 12.8 | 4.10 | 32 | 369 | 96 | 96 | 97 | 94 | 96 |
| MICCG + MILUBCG | 14.9 | 6.25 | 32 | 369 | 102 | 102 | 107 | 95 | 96 |
| MICCG + MILUCGS | 13.3 | 4.63 | 32 | 369 | 64 | 64 | 64 | 64 | 64 |
| MICCG + ILUCR | 12.7 | 3.98 | 32 | 369 | 96 | 96 | 97 | 94 | 96 |
| MICCG + ILUBCG | 14.7 | 5.98 | 32 | 369 | 97 | 96 | 100 | 94 | 98 |
| MICCG + ILUCGS | 13.3 | 4.65 | 32 | 369 | 64 | 64 | 79 | 68 | 64 |
| ICCG + MILUCR | 12.8 | 4.45 | 30 | 566 | 90 | 90 | 91 | 87 | 90 |
| ICCG + MILUBCG | 14.8 | 6.49 | 30 | 566 | 93 | 99 | 98 | 89 | 90 |
| ICCG + MILUCGS | 13.3 | 4.95 | 30 | 566 | 60 | 60 | 60 | 58 | 60 |
| ICCG + ILUCR | 14.9 | 6.25 | 32 | 369 | 102 | 102 | 107 | 95 | 96 |
| ICCG + ILUBCG | 15.4 | 6.72 | 32 | 552 | 98 | 103 | 115 | 95 | 100 |
| ICCG + ILUCGS | 13.9 | 5.23 | 32 | 552 | 64 | 64 | 84 | 71 | 64 |
| MILUCR | 14.4 | 5.69 | 32 | 640 | 96 | 95 | 97 | 94 | 96 |
| MILUBCG | 19.1 | 10.4 | 32 | 640 | 104 | 100 | 102 | 95 | 96 |
| MILUCGS | 17.1 | 8.44 | 32 | 640 | 64 | 64 | 64 | 62 | 64 |
| SIP | 16.1 | 6.95 | 34 | 637 | 34 | 34 | 34 | 34 | 34 |

以上より, ここで取り上げた解法の適用性, 有効性を総括すると次のようになる. 1)PCGは圧力補正式の解の算出に適用可能であり, しかも最も有効な解法である. 2)PCR, PBCG, PCGSのいずれの解法も非対称な係数行列をもつ方程式に適用可能である. 3)PCGと組み合わせたPCRは計算時間の最も短い解法であり, しかもその特長は解くべき問題に依存しない. この解法はSIPよりも強力であり, 有効である. 4)PCGと組み合わせたPCGSは最も大きな収束速度を与えることが多い. この解法は, 計算時間からみてもSIPより優れている. 5)PCGとPBCGとの組合せもまたSIPより優れている. 6)前処理におけるGustafsson流の修正は, 未知量が空間的に緩やかに変化する場合に有効であり, 乱流場の解析では圧力場がその第一候補となる.

**謝　辞**　　河原はRodi教授のもとに滞在中アレクザンダー・フォン・フンボルト財団から奨学金を頂きました. 同財団に深謝申し上げます.

### 参考文献


1）　藤野清次：京都大学数理解析研究所講究録585, pp.96-112, 1986.

2）　Han,T.: AIAA J., Vol.27, No.9, pp.1213- 1219, 1989.

3）　長谷川秀彦ら：スーパーコンピュータと大型数値解析（名取, 野寺編）, 共立出版, pp.52-60, 1987.

4）　藤野清次：スーパーコンピュータと大型数値解析（名取, 野寺編）, 共立出版, pp.155-164, 1987.

5）　Stone,H.L.: SIAM J. Numer. Anal., Vol.5, pp.　530-558, 1968.

6）　村田健郎, 小国力, 唐木幸比古：スーパーコンピュータ, 丸善, 1985.