

3次元一般座標系における非圧縮性流れの 圧力場の並列計算法の提案

PARALLEL COMPUTATION METHOD FOR PRESSURE FIELD
IN INCOMPRESSIBLE FLOWS ON 3D CURVILINEAR COORDINATES

牛島 省¹・奥山 洋平²・竹村 雅樹²・櫛津 家久³

Satoru USHIJIMA, Yohei OKUYAMA, Masaki TAKEMURA and Iehisa NEZU

¹ 正会員 工博 京都大学大学院助教授 環境地球工学専攻(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)

² 学生員 京都大学大学院 環境地球工学専攻 修士課程

³ フェロー 工博 京都大学大学院教授 環境地球工学専攻

A parallel computational method has been proposed to calculate the pressure field in the three-dimensional incompressible flows. The detailed numerical procedures are presented to solve the pressure Poisson equations which are derived with the CBP (Cell-Boundary Pressure) scheme on the collocated grid system. The C-HSMAC method, which is effective to reduce the numerical error related to the continuity of the fluid mass, is improved with the Bi-CGSTAB method and the reasonable treatment on the convergence. Then this method is parallelized with a domain decomposition method using overlapping grid points. As a result of the computations, the validity of the improved C-HSMAC method is confirmed. In addition, it is shown that the speed up of the parallel C-HSMAC method is sufficiently high in the large scale computations.

KeyWords : collocated grid, 3D BFC, pressure Poisson equations, parallel computation, domain decomposition, C-HSMAC method

1. はじめに

近年の計算機の発展に伴い、水工学における2次元あるいは3次元の流体計算では、非圧縮性流体の数値解法が広く利用されるようになった。有限差分法を用いる場合、非圧縮性流体の数値解法では、陽的あるいは陰的なアルゴリズムのどちらにおいても、圧力の連立1次方程式の計算が必要となる。このため計算格子点数が大規模となる場合には、通常この圧力計算に多大な計算時間を要する。特に、MAC系の解法では、この圧力計算は1ステップの計算処理の中でも計算負荷が非常に大きいものとなっている。

本報では、3次元一般座標系を用いて表現された基礎方程式をコロケート格子上で離散化する流体計算法を対象として、その圧力計算を並列化し、高速計算を可能とする手法について考察する。最初に、3次元一般座標系を用いる場合の領域分割に関して、計算空間中で重合格子点を設定する手法を示す。次に、コロケート格子に基づくMAC系解法の予測段階で有効なCBPスキーム¹⁾から導かれる圧力に関する基礎式を示す。数値計算により得られた流速場と圧力場は、流速ベク

トルの発散値が十分0に近い値となるよう整合が取られている必要がある。このために、コロケート格子上の流体計算ではC-HSMAC法²⁾が有効であることが示されているが、本報ではこれを改良し、圧力の時間変化量に関する連立1次方程式を安定化双共役勾配法(Bi-CGSTAB法)で解くとともに、収束判定基準をより合理的なものとする。

改良されたC-HSMAC法を領域分割法に基づいて並列化するため、Bi-CGSTAB法におけるnode間通信とC-HSMAC法の計算フローにおけるnode間通信について考察を行い、これらはベクトル成分の通信と実数値の通信という2種類の領域間通信に分類されることを示す。このうち、ベクトル成分の通信には、重合格子点上のnode間通信³⁾を利用することができる。

上記のようにして得られた並列C-HSMAC法を用いて3次元の流体計算を行い、主として計算時間に関する検討を加える。最初に、逐次計算により、改良型のC-HSMAC法の有効性を確認する。そして、1次元領域分割を行った場合のスピードアップとnode数の関係を求め、計算格子点数が大規模となるにつれ、良好なスピードアップが得られることを示す。

2. 数値解析手法

(1) 一般座標系における領域分割

一般座標系を用いて物理空間中の境界形状を表現する場合、計算格子点配置は次式より定められる⁴⁾。

$$\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} + P_m \frac{\partial x_i}{\partial \xi_m} = 0 \quad (1)$$

ここに、 x_i と ξ_m は直交座標系および一般座標系の座標成分、 P_m は指数関数などの任意の関数で、格子点間隔の粗密を制御するために用いられる。図 1 (a), (b) に生成した格子分布とこれに対して 1 次元領域分割を行った場合の例を示す。

一方、非圧縮性流体の基礎式の離散化が行われる写像空間中では、図 1 (c) に示すように、格子点分布は等間隔の規則的な配置となる。このため、物理空間中で複雑な形状を有する計算領域に対しても、写像空間中では領域分割を容易に行うことができる。また、写像空間中では、図 2 に示すように、分割された小領域（以下 subdomain）間の境界面における格子点の対応が明確であるので、領域分割による並列計算で利用される重合格子点³⁾の設定は直交座標系の場合と同様に行える。

(2) 圧力に関する基礎式

3 次元 Navier-Stokes 方程式を一般座標系を用いて表示し、これをコロケート格子上で離散化して、非圧縮性流体の解法を適用する。MAC 系の解法を適用する場合、計算手順は、1) 流速の予測段階、2) 圧力計算段階、3) 流速の修正段階、の 3 つの段階から構成される。本報では、2) の段階に対して並列計算を利用する計算法を扱う。

コロケート格子を用いる場合、流速の予測段階においては、セル中心で圧力を含まない仮の流速成分を求め、これをセル境界上へ空間内挿した後、この位置における圧力勾配を加えて予測値とするスキーム（以下 CBP スキーム）が適切であることが示されている¹⁾。時間方向の離散化に Euler 陽解法を用いると、CBP スキームでは、セル境界における流速の予測値 $u_{b,i}^*$ は次式で与えられる。

$$u_{b,i}^* = \hat{u}_{c,i} - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^n}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial \xi_i} \quad (2)$$

ここに、 u_i は物理空間における x_i 方向の流速成分で、下添字 b, c はそれぞれセル境界とセル中心における変数を表す。また、 Δt は 1 ステップの時間刻み、 ρ は密度、 p は圧力である。式 (2) の $\hat{u}_{c,i}$ は、セル中心の流速成分 $u_{c,i}$ をセル境界に空間内挿した値である。

図 3 に、写像空間中の 3 次元計算セルにおける変数の定義位置を示す。セル中心位置（■記号位置）におい

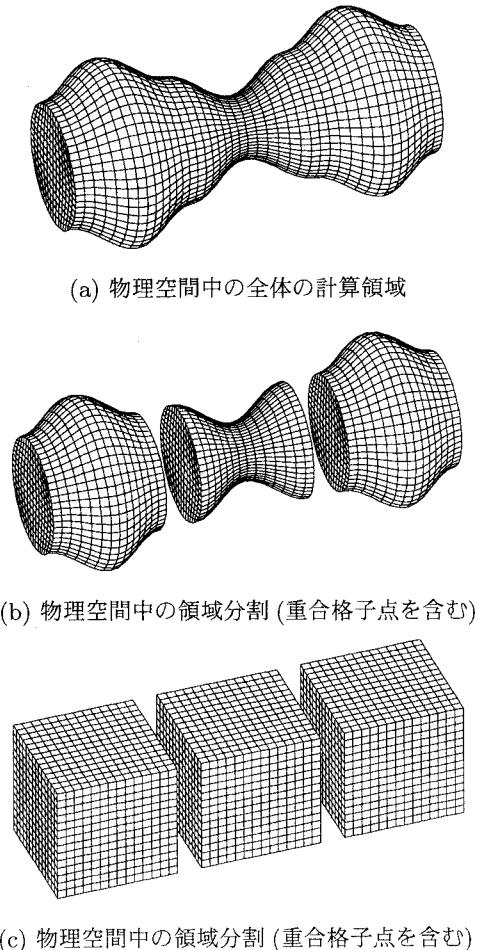


図- 1 3 次元一般座標系における領域分割の例

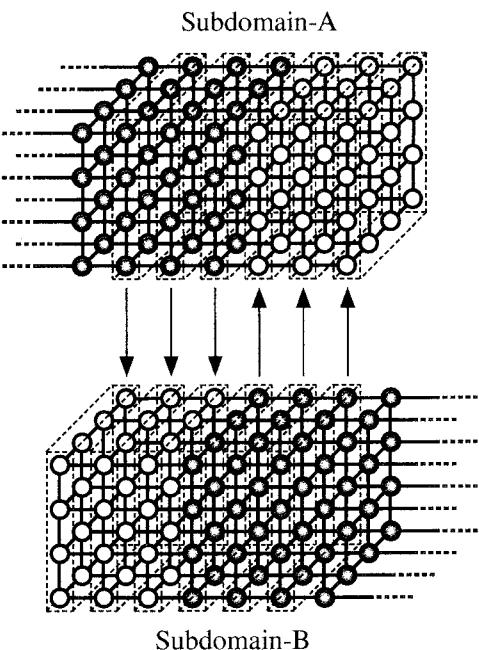


図- 2 写像空間中における重合格子点を有する領域分割 (重合格子点数 3 の場合)

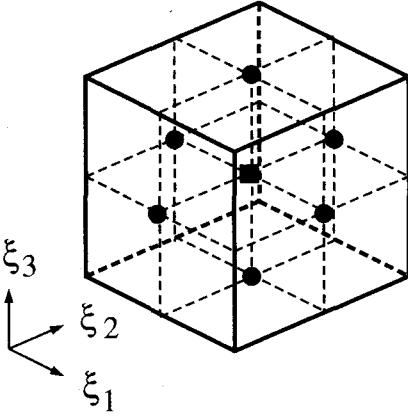


図-3 写像空間中の計算セルにおける変数の定義位置

て、圧力と物理空間中の3次元流速成分が定義される。また、流速の反変成分 U_m が定義されるセル境界位置は図3中の●記号位置に相当する。

セル中心の流速成分 $u_{c,i}$ は次式から計算される。

$$u_{c,i} = u_i^n + F_i \Delta t - U_m \frac{\partial u_i^n}{\partial \xi_m} \Delta t + \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\nu \frac{\partial u_i^n}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial \xi_j} \right) \frac{\partial \xi_m}{\partial \xi_j} \quad (3)$$

ここに、 F_i は x_i 方向の外力、 ν は動粘性係数、 U_m は流速の反変成分である。式(2)と式(3)に示されるように、CBPスキームでは $u_{c,i}$ の計算には p^n を用いず、 $u_{b,i}^*$ の評価に圧力を利用する。 $u_{c,i}$ の計算に p^n を用いるスキームと比較すると、CBPスキームでは圧力勾配が精度良く評価されるため、自由水面計算が適切に行えることが示されている²⁾。

式(2)に対して、 $n+1$ ステップで成り立つ関係式は次式で与えられる。

$$u_{b,i}^{n+1} = \hat{u}_{c,i} - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial \xi_i} \quad (4)$$

式(2)と式(4)の差を取り、写像空間中の変数を基本変数とする表示を行うと次式が導かれる。

$$U_{b,m}^{n+1} = U_{b,m}^* - \frac{\Delta t}{\rho} g^{mj} \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \quad (5)$$

ここに、 $U_{b,m}^{n+1}$ と $U_{b,m}^*$ は、それぞれ $u_{b,i}^{n+1}$ および $u_{b,i}^*$ の反変成分、 g^{mj} は基本テンソルの反変成分である。また、 ϕ は圧力の時間変化分 $p^{n+1} - p^n$ に相当する。

写像空間中における連続式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial (JU_{b,m}^{n+1})}{\partial \xi_m} = 0 \quad (6)$$

ここに、 J は変換のヤコビアンである。式(5)を式(6)の連続式に代入すると ϕ に関する次式が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(J g^{mj} \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \right) = \frac{\rho}{\Delta t} \frac{\partial (JU_{b,m}^*)}{\partial \xi_m} \equiv \frac{\rho}{\Delta t} D \quad (7)$$

式(7)を中心差分により空間的に離散化すると、次式のような ϕ の連立1次方程式となる。

$$\begin{aligned} & a_{000} \phi_{i,j,k} \\ & + a_{\pm 100} \phi_{i\pm 1,j,k} + a_{0\pm 10} \phi_{i,j\pm 1,k} + a_{00\pm 1} \phi_{i,j,k\pm 1} \\ & + a_{\pm 1\pm 10} \phi_{i\pm 1,j\pm 1,k} + a_{0\pm 1\pm 1} \phi_{i,j\pm 1,k\pm 1} \\ & + a_{\pm 10\pm 1} \phi_{i\pm 1,j,k\pm 1} \\ & = \frac{\rho}{\Delta t} D_{i,j,k} \equiv b_{ijk} \end{aligned} \quad (8)$$

ここに、 a はヤコビアンや基本テンソルの反変成分などから構成される係数で、計算対象が移動境界問題でない場合は、 a は計算過程で変化しない定数となる。 a の下添字は ϕ の格子点位置に対応する。なお、式(8)左辺の第5～7項の ϕ の格子点位置の指標は複号同順でない。このように、3次元写像空間中においては、 $\phi_{i,j,k}$ は周囲の18個の ϕ を含んだ関係式として表され、計算領域全体では適当な境界条件のもとに連立1次方程式となる。式(8)の係数 a から構成される係数行列を A 、 ϕ および b から構成されるベクトルをそれぞれ x および b とすると、式(8)は次式のように表される。

$$Ax = b \quad (9)$$

(3) C-HSMAC 法の改良

コロケート格子を用いて自由水面流れ等の計算を行う場合には、圧力と流速の同時緩和を行うC-HSMAC法が有効であることが示されている²⁾。C-HSMAC法では、反復計算の k ステップにおける $U_{b,m}^k$ を用いて、式(7)の D^k を次式より求める。

$$D^k = \frac{\partial (JU_{b,m}^k)}{\partial \xi_m} \equiv G(U_b^k) \quad (10)$$

上添字 k はC-HSMAC法のステップ数を表す。 D^k を用いて式(8)右辺の b を定め、式(9)を解く。得られた x は ϕ^{k+1} に相当する。この ϕ^{k+1} を用いて、 $U_{b,m}^{k+1}$ を次のように修正する。

$$U_{b,m}^{k+1} = U_{b,m}^k - \frac{\Delta t}{\rho} g^{mj} \frac{\partial \phi^{k+1}}{\partial \xi_j} \equiv F(\phi^{k+1}) \quad (11)$$

次の計算ステップでは、 $U_{b,m}^{k+1}$ を $U_{b,m}^k$ として式(10)より再び D^k を求め、この値がしきい値 D_0 より小さくなるまで同様の計算を繰り返し行う。

前報²⁾では、式(9)をSOR法で解き、SOR法における反復計算のステップ間の変化量 $\Delta x = x^{m+1} - x^m$

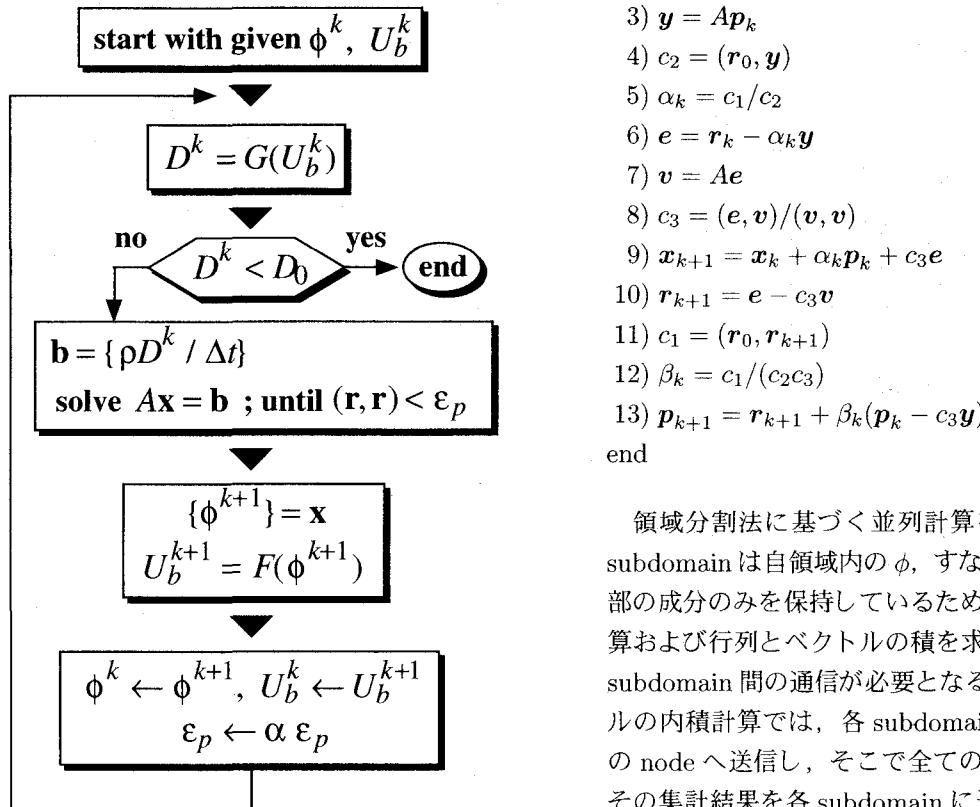


図-4 残差ベクトルの内積を判定基準とする
C-HSMAC 法の計算手順

の絶対値の最大値を x の収束判定の基準とした。しかし、本報ではより合理的な判定基準として、残差ベクトル $r = b - Ax$ の内積 (r, r) を用いる。すなわち、図 4 に示すように、 $(r, r) < \epsilon_p$ となった時点で収束解 x が得られたと判断し、この x を用いて計算された D^k がしきい値 D_0 を満足しない場合には、次のステップで $(r, r) < \alpha \epsilon_p$ が満たされるように再び式 (9) が解かれる。ここに、 $\alpha < 1$ であり、より厳しい収束判定基準のもとで、右辺に新たに D^k から求められた b を用いて式 (9) の解が求めされることになる。

(4) C-HSMAC 法の並列化

式 (9) の係数行列は一般に大規模なものとなるため、この解法としては反復法が適している。本報では、行列解法として有効であり⁵⁾、理論的に有限回の反復回数で解が得られる非定常的な反復法の一つである安定化双共役勾配法 (Bi-CGSTAB 法) を用いて、領域分割法に基づく並列 C-HSMAC 法を以下で考察する。

式 (9) に対して、Bi-CGSTAB 法を用いる場合には以下の手順を取る⁵⁾。

- 1) 初期値 x_0
- 2) $r_0 = b - Ax_0$, $p_0 = r_0$, $c_1 = (r_0, r_0)$
for $k = 0, 1, 2, \dots$, until $\|r_{k+1}\| < \epsilon$, do

- 3) $y = Ap_k$
 - 4) $c_2 = (r_0, y)$
 - 5) $\alpha_k = c_1/c_2$
 - 6) $e = r_k - \alpha_k y$
 - 7) $v = Ae$
 - 8) $c_3 = (e, v)/(v, v)$
 - 9) $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k + c_3 e$
 - 10) $r_{k+1} = e - c_3 v$
 - 11) $c_1 = (r_0, r_{k+1})$
 - 12) $\beta_k = c_1/(c_2 c_3)$
 - 13) $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k (p_k - c_3 y)$
- end

領域分割法に基づく並列計算を行う場合には、各 subdomain は自領域内の ϕ 、すなわちベクトル x の一部の成分のみを保持しているため、ベクトルの内積計算および行列とベクトルの積を求める計算の 2箇所で subdomain 間の通信が必要となる。このうち、ベクトルの内積計算では、各 subdomain 内の内積値を特定の node へ送信し、そこで全ての値の和を取り、次にその集計結果を各 subdomain に送信する操作を取る。残差ベクトルの内積値に関しても、同様に subdomain 間で通信が行われ、全計算領域における最大値が ϵ_p と比較されて収束判定がなされることになる。

これに対して、行列とベクトルの積を求める場合には、演算を行う前に一部のベクトル成分を他の subdomain と交換する必要がある。この変数交換には、重合格子点上の通信³⁾ が利用できる。式 (8) のような離散化式に対しては、重合格子点数は 1 でよい。以上より、上記で示された Bi-CGSTAB 法では、初期値設定のための演算を除くと、手順 3) と 7) で合計 2 回のベクトル成分の交換が行われ、手順 4), 8), 11) で合計 4 回内積値が交換されることになる。

また、図 4 に示した C-HSMAC 法では、式 (10) および式 (11) の計算においても、隣接する subdomain と、それぞれ変数 U_b^k および ϕ^{k+1} の通信が必要となる。この通信は前出のベクトル成分の交換と同様である。さらに、C-HSMAC 法の終了判定基準となる D^k と D_0 の比較を行う場合には、各 subdomain 内の D^k の最大値を特定の node へ送信し、その node で最大値 D_m を求める。得られた D_m は各 node へ送信され、全 node で D_m と D_0 が比較されて、終了判定がなされる。したがって、 $D_m < D_0$ となるときには、全ての subdomain で同時に並列 C-HSMAC 法の計算が終了することになる。この数値処理においては、上記のベクトルの内積計算と同様の通信が行われる。

以上のように、並列 C-HSMAC 法では、ベクトル成分の通信と実数値の通信という、2つの型のメッセー

ジパッキングが行われる。実数値の通信では、全 sub-domain 数を p とするとき、倍精度実数 1 個を $2(p-1)$ 回通信すればよいので、ベクトル成分の通信と比較すれば通信量は一般に小さい。しかし、全 subdomain 間の同期を取る必要がある。一方、ベクトル成分の通信では、通信量は比較的大きいが、隣接する subdomain 間の同期のみが必要であり、同期のための待ち時間は少ないと考えられる。

3. 並列 C-HSMAC 法の適用性

(1) 計算条件

並列 C-HSMAC 法を用いて 3 次元場における非圧縮性流体の計算を行い、その適用性について検討を加える。計算対象は、Ghia⁶⁾による 2 次元キャビティ流れを 3 次元としたものであり、各辺の長さが 1.0 の立方体領域において、上部の壁面が 1.0 の速度で移動し、流体の粘性により内部流動が発生する。前後の側面でのみ摩擦が作用しないものとする。このような条件により、鉛直断面内の定常解は、Ghia⁶⁾の 2 次元計算の結果と同様の流況を示す。レイノルズ数 $Re (= 1/\nu)$ は 100 とした。

前報³⁾と同様に、並列計算プログラムには MPI⁷⁾ 準拠の通信コマンド等を含んだライブラリを提供する LAM (<http://www.mpi.nd.edu/lam/>) を利用した。使用した計算機は、CPU が PentiumIII 850MHz、OS が Linux 2.2.13 である複数台の PC で、スイッチングハブを介して 100BaseTX で接続されたものである。計算の際には、図 4 に示した圧力計算部分のみを並列 C-HSMAC 法としたサブプログラムを用意し、逐次計算に基づくメインプログラムとの間で必要な変数を送受信することにより、通常の計算と同様に与えられた初期値から非定常計算を行うものとした。計算時間を計測する際には、MPI の時間関数を用いて、上記の圧力計算部分のみに要する値を測定した。

(2) 逐次計算における解法の比較

改良を施した C-HSMAC 法の有効性を確認するため、逐次計算において流速ベクトルの発散値 D の挙動を調べた。図 5 は、非定常計算開始後のある 1 時間ステップの計算において、C-HSMAC 法の反復計算過程における D と ϵ_p の変化を示したものである。 k_c は C-HSMAC 法の反復計算ステップ数を表し、 α は 0.1、また ϵ_p の初期値 ϵ_{p0} は 1.0 とし、C-HSMAC 法の終了判定のしきい値 D_0 は 1.0×10^{-10} とした。なお、定常状態に近い流速場では圧力計算の反復回数が低減するため、初期条件に近い流速場を対象とした。

図 5 に示されるように、SOR あるいは Bi-CGSTAB 法のどちらの解法を用いた場合でも、 D は反復計算の

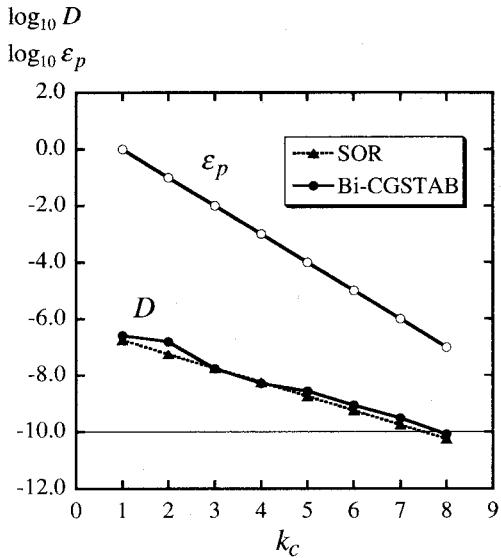


図 5 C-HSMAC 法の反復計算における D と ϵ_p の変化

進行とともに低減し、8 ステップで $D < D_0$ を満足する。なお、 $\alpha = 1.0$ という条件では、 D はこのように低減しない。したがって、本報で提案するように、 $\alpha < 1.0$ として行列計算の収束判定基準を C-HSMAC 法の反復計算過程で厳しくすることが重要である。

次に、逐次計算において Bi-CGSTAB 法を用いた場合に、 ϵ_{p0} を変えたときの反復計算回数と計算時間の値を表 1 に示す。表中の k_n および m_n は、それぞれ 1 時間ステップあたりの C-HSMAC 法の反復計算回数と行列計算の反復計算回数であり、10 時間ステップ分の平均値である。また、 T^* は $\epsilon_{p0} = 1.0$ のときの計算時間を基準とする各条件での計算時間を表す。表 1 より、Bi-CGSTAB 法を用いる場合には、 k_n が 1 をわずかに上回る程度に ϵ_{p0} を設定することが、計算時間を少なくするために有効であると考えられる。

表 1 ϵ_{p0} に対する反復計算回数と計算時間
(逐次計算、Bi-CGSTAB 法、 $\alpha = 0.1$)

ϵ_{p0}	k_n	m_n	T^*
1.0	8.1	190.1	1.0
1.0×10^{-4}	4.3	162.5	0.77
1.0×10^{-6}	1.8	127.9	0.65
1.0×10^{-8}	1.0	132.9	0.67
1.0×10^{-9}	1.0	137.8	0.71

なお、SOR 法を用いた場合には、 $\epsilon_{p0} = 1.0$ の条件下、 $k_n = 8.0$ および $m_n = 2,017$ であり、同条件下 Bi-CGSTAB 法を用いたときの約 5.8 倍の計算時間を要した。また、 ϵ_{p0} をさらに小さくすると、 $\epsilon_{p0} = 1.0$ の場合よりも計算時間は増加した。したがって、計算

時間を短縮化するためには、行列計算に Bi-CGSTAB 法を利用するのが有効である。

(3) 並列計算の結果と考察

逐次計算で有効性が示された Bi-CGSTAB 法を用いて、並列 C-HSMAC 法による流体計算を行い、計算速度と得られる解について検討を加える。

領域の分割方法は、前報³⁾と同様に、写像空間中で分割面を互いに平行に取る 1 次元領域分割とした。圧力の計算が行われる格子点数は、4 つの node に対して均等に配分されるように、 $24 \times 24 \times 24$, $36 \times 36 \times 36$, $48 \times 48 \times 48$ の 3 種類とした。

3 種類の格子におけるスピードアップと node 数の関係を図 6 に示す。ここで、スピードアップは、逐次計算の計算時間を、並列計算に要する計算時間で除した値として定義される。図 6 に示すように、格子点数が多くなるにつれてスピードアップは向上する。この結果から、並列 C-HSMAC 法は大規模な非圧縮性流体の圧力計算に適していると考えられる。

並列 C-HSMAC 法により得られる圧力場が妥当なものであることを確認するため、格子点数を $15 \times 15 \times 15$, node 数を 3 として定常な流速場を求めた。計算領域の中央の断面における、水平方向流速 u の鉛直方向 (x_3 方向) の分布を図 7 に示す。計算結果は、Ghia⁶⁾による 2 次元計算の結果とよく一致する。

4. おわりに

本報では、3 次元一般座標系上でコロケート格子を用いる流体計算法を対象として、その圧力計算を高速に行うための手法に関する考察を加えた。すなわち、MAC 系解法の予測段階に CBP スキームを用いる場合の圧力に関する基礎式を示すとともに、C-HSMAC 法の改良を行い、さらにこれを高速計算するための並列 C-HSMAC 法について検討を加えた。

3 次元流れ場を対象とした逐次計算により、改良された C-HSMAC 法の有効性が示され、行列計算には Bi-CGSTAB 法が適していることが確認された。さらに、領域分割による並列計算を行った結果、格子点数の多い大規模計算では、並列 C-HSMAC 法により高いスピードアップが得られることが示された。

参考文献

- 1) 牛島省、竹村雅樹、櫛津家久。コロケート格子配置を用いた MAC 系解法の計算スキームに関する考察。土木学会論文集、No. 719/II-61, pp. 11-19, 2002.
- 2) 牛島省、櫛津家久。移動一般座標系を用いたコロケート格子による自由水面流れの数値解析手法。土木学会論文集、No. 698/II-58, pp. 11-19, 2002.

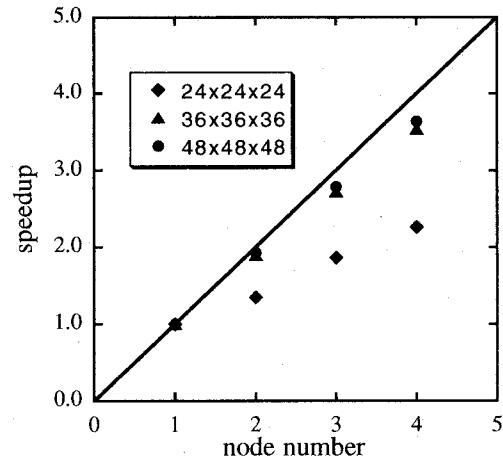


図- 6 並列 C-HSMAC 法における node 数とスピードアップの関係

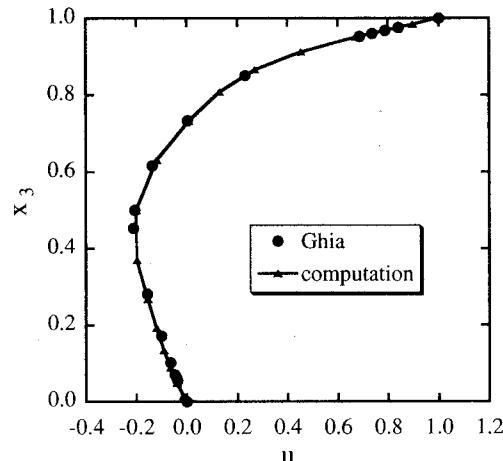


図- 7 鉛直中央断面における水平方向の流速分布

- 3) 牛島省、櫛津家久、奥山洋平。領域分割法を用いた QSI スキームによる移流拡散方程式の並列計算法。水工学論文集, Vol. 46, pp. 415-420, 2002.
- 4) J. F. Thompson, F. C. Thames, and C. W. Mastin. Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies. *J. Comput. Phys.*, Vol. 15, No. 1, pp. 299-319, 1974.
- 5) 藤野清次、張紹良。反復法の数理。朝倉書店, 1996.
- 6) U. Ghia, K. N. Ghia, and C. T. Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *J. Comput. Phys.*, Vol. 48, pp. 387-411, 1982.
- 7) W. Gropp, E. Lusk and A. Skjellum. *Using MPI*. The MIT Press, 1994.

(2002. 9. 30受付)