

コロケート格子配置に基づく3次元非圧縮性流体の 陰的計算アルゴリズムの構築とその並列化

Implicit Computational Algorithm for 3D Incompressible Flows
with Collocated Grid System and its Parallelization

牛島 省*・奥山 洋平**・瀬津 家久***

Satoru USHIJIMA, Yohei OKUYAMA and Iehisa NEZU

*正会員 工博 京都大学大学院助教授 社会基盤工学専攻 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町)

**学生員 京都大学大学院 環境地球工学専攻 修士課程 (同上)

***フェロー会員 工博 京都大学大学院教授 社会基盤工学専攻 (同上)

A new computational method for incompressible fluid has been developed on the collocated grid system. This method consists of an implicit algorithm (C-ISMAL) for the prediction stage in a MAC method, a fifth-order QSI scheme for non-linear terms and an improved pressure computation method (C-HSMAC). The developed method, including the grid generation, was completely parallelized on the basis of a 3D domain decomposition method. As a result of the computation of cubic cavity flows, the improvements of the computational efficiency due to the C-HSMAC and 3D domain decomposition methods were clearly confirmed. In addition, the velocity profiles in the 3D cavity were reasonably predicted with the present method.

Key Words : *collocated grid, incompressible flow, parallel computation, QSI scheme, C-ISMAL method, C-HSMAC method*

1. はじめに

MAC系の計算アルゴリズムは、有限差分法あるいは有限体積法に基づく非圧縮性流体の数値計算において有効であり、広く利用されている。著者らは、近年有用性が示されているコロケート格子配置に着目し、同格子上でMAC系の解法を用いる流体計算法について考察を加えてきた。その結果、解法の各段階における有効ないくつかの手法が新たに提案されている。特に、コロケート格子上の予測段階の計算において、圧力勾配項を適切に扱うことが可能な陰的解法(C-ISMAL法)¹⁾は、計算時間が短縮化されると同時に、空間的に精度が高いスキームを陽解法と同様に利用できる有効な手法である。C-ISMAL法の有効性は、2次元の移動境界座標系¹⁾や3次元場²⁾で確認されている。また、非圧縮性流体の数値計算で重要となる流体の連続性に関する条件に対して、これを精度良く満足する数値解が得られ、しかも収束性能の高い手法としてC-HSMAC法が提案されている³⁾。C-HSMACの有用性、あるいは収束特性は既報^{4), 5)}に示されている。

本報では、これまで個別に提案され、検証が進められてきた各手法に基づいて、非圧縮性流体計算に対する一連の解法を構成した。この計算アルゴリズムは、

1) 流体計算に必要な高次精度を保持する、2) 高速計算を可能とする、3) プログラムを簡素化する(コロケート格子の利用)、という条件を考慮したものとなっている。本報では、これまでの手法を単に統合するだけでなく、格子生成を含めて、流体計算全体に多次元領域分割法に基づく並列計算法を適用する。さらに、C-HSMAC法とこれに類似のSOLA法の収束特性を離散化式に基づいて比較するとともに、C-HSMAC法の収束判定条件、また多次元領域分割法の有効性に関して理論的な考察を加える。構築された計算アルゴリズムを用いて3次元流体計算を行い、その結果に基づいて圧力計算の収束特性や多次元領域分割の有効性に関する考察結果を検証する。また、既往の計算結果との比較を行い、妥当な流速場が計算されることを示す。

2. 数値解析手法

本報で扱う流体計算法は、3次元一般座標系で表示された非圧縮性流体の基礎式をコロケート格子上で有限差分法により離散化する手法に基づいている。本手法は、定常あるいは流速変動の時間スケールが計算時間ステップと比較して十分大きい非定常流を対象とする。このような流れ場に対して、非線形項に空間的な離散

化精度が高いスキームが利用でき、しかも高速計算が可能な陰的計算法 (C-ISMAC 法) は有効である。非線形項に対しては、コロケート格子上で利用可能な 5 次精度相当の QSI スキームが提案されている⁶⁾。また、圧力解法には流体の連続性に対する誤差をその判定基準とする C-HSMAC 法が利用可能である。これらの各解法により、非圧縮性流体の計算アルゴリズムとして、予測段階に QSI スキームを用いた C-ISMAC 法、圧力計算段階に C-HSMAC 法、そして修正段階に PG スキーム⁴⁾を用いるという、一連の計算アルゴリズムが構成される。

本報では、この一連の解法をさらに高速化し、大規模計算を行えるものへと発展させることを目的として、格子生成を含めたすべての流体計算を領域分割法に基づいて並列化する。本章では、領域分割法に基づく格子生成法と C-ISMAC 法による予測段階の並列計算法を示す。さらに、圧力計算段階に関しては、C-HSMAC 法の解法を SOLA 法と比較するとともに、並列 C-HSMAC 法の収束判定基準の合理性を示す。

2.1 3 次元格子生成のための基礎式と並列解法

3 次元場における格子生成には、Thompson ら⁷⁾が提案した手法を用いる。本報で扱う立方体キャピティのように境界形状が単純な条件でも、領域内部の計算点を境界層が発達する壁面付近に密に分布させ、流体計算を写像空間中で行う場合などには、この格子生成法が有効である。このため、境界形状が単純に見える場合であっても、一般座標系に基づく流体計算法が極めて効果的であることに留意すべきである。

この格子生成法では、物理空間中の境界形状が与えられた場合、内部の格子点分布は次式を利用して定められる。

$$\frac{\partial^2 \xi_m}{\partial x_i^2} = P_m(\xi_m) \quad (1)$$

ここに、 x_i と ξ_m は、それぞれ物理空間および写像空間中の座標成分である。また、右辺の $P_m(\xi_m)$ は、物理空間中の格子間隔の粗密を制御するための関数である⁸⁾。式 (1) により格子分布を定めるためには、独立変数と従属変数を交換した次式を用いる。

$$F(x_i) = \alpha_m \frac{\partial^2 x_i}{\partial \xi_m^2} + 2\beta_{pq} \frac{\partial^2 x_i}{\partial \xi_p \partial \xi_q} + P_m \frac{\partial x_i}{\partial \xi_m} = 0 \quad (2)$$

ただし、式 (2) では、添字 m に関しては通常の表記に従い縮約を行うが、 (p, q) は、 $(1, 2), (2, 3), (3, 1)$ の組合わせを取る。式 (2) の α_m と β_{pq} は、それぞれ次式で

与えられる。

$$\alpha_m = \sum_{k=1}^3 c_{mk}^2, \quad \beta_{pq} = \sum_{k=1}^3 c_{kp} c_{kq} \quad (3)$$

ここで、 c_{ij} は次式で定義される。

$$c_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \quad (4)$$

式 (2) は非線形方程式であるため、格子生成の際には、 n ステップの既知の座標成分 x_i^n を用いて α_m と β_{pq} を固定して、これを楕円型の 2 階線形偏微分方程式とする。その差分式を反復計算して x_i^{n+1} が求められる⁷⁾。しかし、この方法では、各ステップで α_m と β_{pq} の計算が必要になること、また x_i^n の収束解が得られるまで計算を継続することなどにより、特に 3 次元で格子点数が大きい場合には、多くの計算時間を要する。

本報では、この格子生成の計算を領域分割による並列計算を利用して高速化した。 x_i^{n+1} を次のように表す。

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \phi_i \quad (5)$$

x_i のステップ間の変化量に相当する ϕ_i は、 x_i^n が収束解となるときの 0 へ漸近する。 x_i^{n+1} が式 (2) を満足するとすれば、 ϕ_i と x_i^n は次の関係にある。

$$F(\phi_i) = -F(x_i^n) \quad (6)$$

式 (6) を中央差分で離散化すると、 ϕ_i の連立 1 次方程式となり、これより ϕ_i を求めて、式 (5) に代入して x_i^{n+1} を得る。結果が未収束であれば、 $F(x_i^{n+1})$ を計算して再び ϕ を計算するという手順を取る。

領域分割法を用いる場合には、オーバーラップ格子点を有する subdomain に境界形状を含む座標成分の初期値を割り当てる。各 subdomain では、オーバーラップ格子点上的変数値を交換して、反復法により ϕ_i の連立 1 次方程式の解を求める。この場合に、収束判定基準を必要以上に厳しくしても、最終的に x_i^n の収束解が得られるまでの計算時間の点から有効ではないことが判明した。このため、反復法としては、初期の残差の低減傾向が比較的安定している SOR 法を用いて、反復回数を指定する方法を取ることとした。得られた ϕ_i を用いて、式 (5) より x_i^{n+1} を計算し、オーバーラップ格子点上の x_i^{n+1} を subdomain 間で交換する。 x_i^n の収束判定は、各格子点上の $F(x_i^{n+1})$ の二乗和を求め、これをしきい値と比較する。この収束判定基準に対しては、十分小さいしきい値を設定することで、適切な座標生成が行える。未収束の場合には、 $F(x_i^{n+1})$ を右辺に用いた式 (6) の計算を再び行い、同様の手順を取る。

2.2 予測段階における陰的解法の並列化

基本変数として、直交座標系の流速成分を用いると、3次元一般座標系における Navier-Stokes 式は次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + U_m \frac{\partial u_i}{\partial \xi_m} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \\ & + \nu \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (7)$$

ここに、 u_i は x_i 方向の流速成分、 p は圧力、 U_m は流速の反変成分である。なお、本報では、流体の密度 ρ と動粘性係数 ν は時間的および空間的に一定とし、外力が作用しない場を対象としている。3次元コロケート格子上で基礎式を離散化する場合、セルの中心の格子点で圧力と3方向の流速成分が定義される。セルの各頂点に相当する格子点と、セル中心の格子点位置を座標生成時に定めるため、合計27個の格子点が1つの計算セルに対して用いられる。各格子点における c_{ij} 等のテンソル量は、近接する格子点の座標値を利用して定める。

コロケート格子配置において MAC 系の解法を適用する場合には、最初にセル中心位置で流速の推定値 u_i^* を求める。陽解法を用いるときには、セル中心で圧力勾配を用いない CBP スキームを利用する必要があることを著者等は示している⁴⁾。一方、C-ISMAC 法を用いて u_i^* を計算する場合には、セル中心で圧力勾配を考慮して推定値の数値解を求め、その結果から圧力を差し引いてセル境界へ空間内挿した後、再び圧力勾配を考慮する方法が有効である⁴⁾。

この計算法を並列化するにあたり、C-ISMAC 法で用いられる主な関係式を示す。C-ISMAC 法では、まず次式より u_i^* を求める。

$$\begin{aligned} u_i^* = & u_i^n - \alpha U_m^n \frac{\partial u_i^*}{\partial \xi_m} \Delta t - (1 - \alpha) U_m^n \frac{\partial u_i^n}{\partial \xi_m} \Delta t \\ & + \beta \nu \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \Delta t \\ & + (1 - \beta) \nu \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial u_i^n}{\partial \xi_n} \frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} \right) \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \Delta t \\ & - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^n}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、 $0 \leq \alpha, \beta \leq 1$ である。 u_i^* を次式のように表す。

$$u_i^* = u_i^n + \tilde{u}_i \quad (9)$$

式(8)に式(9)を用いて次式を得る。

$$\begin{aligned} [1 + D(\alpha, \beta)] \tilde{u}_i \\ = -D(1, 1) u_i^n - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^n}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (10)$$

ここに、 $D(\alpha, \beta)$ は次式で定義される微分演算子である。

$$\begin{aligned} D(\alpha, \beta) = & \alpha \Delta t U_m^n \frac{\partial}{\partial \xi_m} \\ & - \beta \Delta t \nu \frac{\partial \xi_m}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(\frac{\partial \xi_n}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_n} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

式(10)を空間的に離散化すると、 $\tilde{u}_i$ の連立1次方程式となる。定常解あるいは時間的な変化が十分小さい解においては、 $\tilde{u}_i$ は0に近い値となり、式(10)左辺の影響は無視できる。このため、式(10)左辺には低次精度の簡単な離散化スキームを用い、右辺に高精度のスキームを適用することができる。式(10)を離散化して得られる $\tilde{u}_i$ の連立1次方程式を解いて得られた数値解を式(9)に用いて、流速の推定値 u_i^* を求める。次に、次式のように u_i^* から圧力項を取り除く。

$$\hat{u}_i^* = u_i^* + \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^n}{\partial \xi_m} \frac{\partial \xi_m}{\partial x_i} \quad (12)$$

得られた $\hat{u}_i^*$ は CBP スキーム⁴⁾におけるセル中心上の流速の推定値と同様に扱える。このため、 $\hat{u}_i^*$ をセル境界上へ空間内挿し、そこで圧力勾配を考慮することで、次式のように、圧力計算に用いられるセル境界上の流速の推定値の反変成分 $\hat{U}_{b,m}^*$ を得ることができる。

$$\hat{U}_{b,m}^* = U_{b,m}^* - \frac{\Delta t}{\rho} g^{mj} \frac{\partial p^n}{\partial \xi_j} \quad (13)$$

ここに、 g^{mj} は基本テンソルの反変成分である。C-ISMAC 法による推定値の計算では、陽的解法の安定性基準となる CFL 条件や拡散数に関する条件が緩くなるため、時間刻み Δt を大きく取れる。その結果、 $\tilde{u}_i$ の連立1次方程式の求解という手続きが付加されるにもかかわらず、高精度スキームの計算精度を保持した状態で計算時間を短縮できることが確認されている^{1), 2)}。

上記で示した予測段階の計算に、本報では領域分割による並列計算法を用いる。陽的な解法を用いる場合には、移流項および拡散項を離散化するスキームで使用する格子点数に応じたオーバーラップ格子点を利用される⁹⁾。移流項に5次精度の QSI スキーム⁶⁾を用いる場合には、オーバーラップ格子点数は3となる⁹⁾。

一方、ここで扱う陰的な解法では、式(10)を離散化して得られる連立1次方程式を分割された領域間で解くことが必要となる。式(10)右辺には高精度スキームが用いられるが、これを並列的に計算する方法は、上記の陽解法の場合と同様である。また、 $\tilde{u}_i$ に対しては、1次精度の最も簡単なスキームを用いることができるので、オーバーラップ格子点数は1となる。並列計算を行う場合には、重合格子点数が小さいと、node間通信量が少なくなる。したがって、C-ISMAC 法は高精度スキームを直接陰的に扱う方法よりも有利である。

連立 1 次方程式の求解法には Bi-CGSTAB 法¹⁰⁾を用いて、反復計算の過程で必要なオーバーラップ格子点上の変数の交換を行い、収束解を得る。Bi-CGSTAB 法の並列計算法の詳細は、既報¹¹⁾に示す通りで、オーバーラップ格子点上の数値群と、ベクトルの内積値などの単一の実数値が、subdomain 間で交換されて反復計算が進められる。

2.3 C-HSMAC 法と SOLA 法の比較

圧力計算段階では、セル境界上の流速の推定値の反変成分 $\hat{U}_{b,m}^*$ を用いて、連続性を満足する 3 次元流速成分と圧力分布を求める。

セル境界流速の反変成分 $U_{b,m}^{n+1}$ に対して、次式が成り立つとして、 $n+1$ ステップの流速成分と圧力を以下で求める。

$$U_{b,m}^{n+1} = U_{b,m}^* - \frac{\Delta t}{\rho} g^{mj} \frac{\partial p^{n+1}}{\partial \xi_j} \quad (14)$$

式 (13) と式 (14) より次式を得る。

$$U_{b,m}^{n+1} = \hat{U}_{b,m}^* - \frac{\Delta t}{\rho} g^{mj} \frac{\partial \phi^{n+1}}{\partial \xi_j} \quad (15)$$

ここに、 $\phi = p^{n+1} - p^n$ である。また、連続式は次式となる。

$$\frac{\partial(JU_{b,m}^{n+1})}{\partial \xi_m} = 0 \quad (16)$$

ここに J はヤコビアンである。式 (15) と式 (16) より、次式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(J g^{mj} \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \right) = \frac{\rho}{\Delta t} \frac{\partial}{\partial \xi_m} (J \hat{U}_{b,m}^*) \quad (17)$$

上記の関係式を用いて、連続性を精度良く満足する解を得るために、C-HSMAC 法を利用する。C-HSMAC 法は、HSMAC 法あるいはこれと同等とされる SOLA 法¹²⁾を一般座標系におけるコロケート格子上の流体計算へ拡張したものであるが、両者には解法上の相違があり、収束特性は大きく異なる。直交座標系で等間隔格子を用いる場合の両者の比較は既報⁵⁾で検討しているので、ここでは一般座標系上で不等間隔格子を用いる、より一般的な条件での比較を行う。

SOLA 法はこれまで主として直交座標系で用いられており、一般座標系でコロケート格子を用いるときの解法は示されていないようである。このため、本報の圧力計算の関係式に SOLA 法を適用する方法を示す。最初に、次式から流速ベクトルの発散 D^k を求める。

$$D^k = \frac{\partial(JU_{b,m}^k)}{\partial \xi_m} \quad (18)$$

$U_{b,m}^k$ の初期値 $U_{b,m}^0$ としては、 $\hat{U}_{b,m}^*$ を用いる。次に、式 (17) の左辺の対角成分のみを考慮した次の近似式を利用して、圧力の修正値 $\delta\phi$ を求める。

$$\delta\phi = -\frac{\rho}{2J\Delta t} \left[\frac{\beta_0 D^k}{g^{mn} \Delta \xi_m^{-1} \xi_n^{-1} \delta_{mn}} \right] \quad (19)$$

ここに、 $\Delta \xi_m$ は一般座標系における格子間隔、 δ_{mn} はクロネッカーのデルタである。なお、本来の SOLA 法では、 ϕ ではなく圧力 p に対する連立 1 次方程式に対して上記の方法が取られている。式 (19) の β_0 は加速係数といわれ、1.7 前後の値が用いられる¹²⁾。 $\delta\phi$ により、圧力は次のように更新される。

$$p^{k+1} = p^k + \delta\phi \quad (20)$$

流速は $\delta\phi$ を用いて次のように更新される。

$$U_{b,m}^{k+1} = U_{b,m}^k \pm \frac{\rho}{\Delta t} g^{mj} \frac{\delta\phi}{\Delta \xi_j} \quad (21)$$

式 (21) 右辺の符号は、セル中心に対して ξ_m 方向のセル境界で正、その反対側の面で負とする¹²⁾。得られた $U_{b,m}^{k+1}$ に対し、 $k+1$ を k として、式 (18) により D^k を求める。これをしきい値 D_0 と比較して、収束判定を行い、すべてのセルで $|D^k| < D_0$ であれば終了、未収束であれば同様の反復計算を繰り返す。

一方、C-HSMAC 法では、SOLA 法と同様に、式 (18) から D^k を求める。これを用いて、式 (17) から得られる次式より ϕ^k を計算する。

$$\frac{\partial}{\partial \xi_m} \left(J g^{mj} \frac{\partial \phi^k}{\partial \xi_j} \right) = \frac{\rho}{\Delta t} D^k \quad (22)$$

得られた ϕ^k を用いて圧力を次のように更新する。

$$p^{k+1} = p^k + \phi^k \quad (23)$$

次に、 $U_{b,m}^k$ を次式により更新する。

$$U_{b,m}^{k+1} = U_{b,m}^k - \frac{\Delta t}{\rho} g^{mj} \frac{\partial \phi^k}{\partial \xi_j} \quad (24)$$

得られた $U_{b,m}^{k+1}$ に対し、 $k+1$ を k として、式 (18) により D^k を求める。収束判定は、SOLA 法と同様であり、圧力計算終了後には、どちらの解法でもすべての計算セルに対して $|D^k| < D_0$ が満足されている。以上の C-HSMAC 法のアルゴリズムの概要を図 1 に示す。

上記のように、C-HSMAC 法は、単にコロケート格子上で用いられる SOLA 法という位置づけではなく、解法の相違がある。特に、C-HSMAC 法では式 (22) を離散化して得られる ϕ^k の連立 1 次方程式の求解が流速を更新する毎に行われる点が SOLA 法と異なる。この

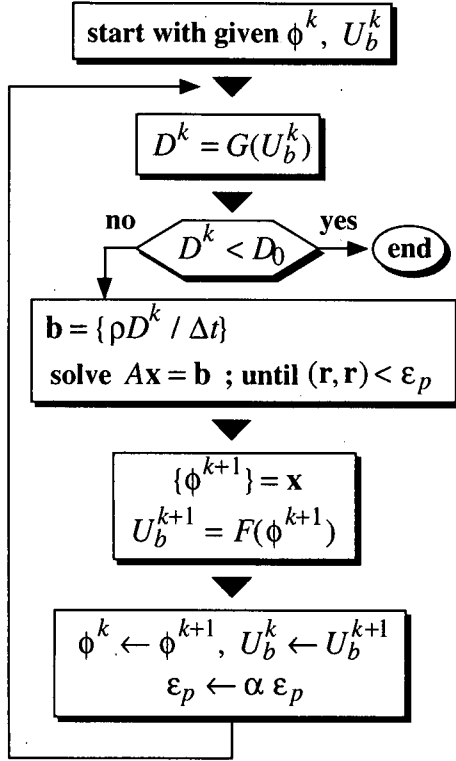


図-1 C-HSMAC 法のアルゴリズムの概要

相違により、両者の収束特性は異なるものとなることを以下で示す。

離散化された式 (18) と式 (19) を式 (21) に用いると、次式の関係が導かれる。

$$U_{b,m}^{k+1} = U_{b,m}^k + f(U_{b,m}^k) \quad (25)$$

ここに、 $f(U_{b,m}^k)$ は計算対象となる $U_{b,m}^{k+1}$ が定義される格子点の周辺の $U_{b,m}^k$ の線形な関数である。つまり、SOLA 法では古典的なヤコビ法に相当する反復計算法により、連続性を満足しない流速成分が補正される。一方、C-HSMAC 法の反復計算の主要な部分は、(22) 式の求解であり、その離散化式は次のように表される。

$$g(\phi^k) = d \quad (26)$$

ここに、 d は格子点ごとに定められる定数、 $g(\phi^k)$ は計算対象の格子点の周囲の ϕ^k から構成される線形な関数である。SOLA 法と異なり、 ϕ^k の連立 1 次方程式に相当する式 (26) の求解には、より高速な反復解法を利用できる。このため、適切な解法を選択すれば、C-HSMAC 法の収束特性は SOLA 法より優れたものとなると考えられる。実際の流体計算における両者の比較は後述部分で行う。

2.4 並列 C-HSMAC 法における収束判定方法

C-HSMAC 法の並列化は既報¹¹⁾で報告されているので、ここでは、既報で用いられた収束判定条件に関する理論的な考察を行い、その合理性を明らかにする。

並列 C-HSMAC 法では、領域分割法を利用しており、領域間通信を行いながら前節の計算手順を並列的に進める。 ϕ^k の連立 1 次方程式の計算には、Bi-CGSTAB 法を用いる。領域間通信としては、 ϕ^k および $U_{b,m}^k$ などのベクトル量の通信と、Bi-CGSTAB 法における内積や $|D^k|$ の最大値などの実数値の通信が行われる。前者に関しては、離散化に中央差分を用いるので、重合格子点数を 1 とした通信を利用する。

Bi-CGSTAB 法の収束判定を行う際には、残差ベクトルの内積をしきい値と比較するが、ここで k ステップのしきい値を $\epsilon^k = \alpha_\phi^{k-1} \epsilon_0$ とする。ここに、 $\alpha_\phi < 1$ であり、 ϵ_0 は適当な初期値である。すなわち、収束判定条件 ϵ^k を k ステップごとに厳しくする¹¹⁾。この収束判定条件の合理性について以下で考察する。簡単のため、図 2 に示す 1 次元場を対象とする。多次元場でも同様の考察が行える。ここでは、変数の下添字 j は格子点位置を表し、 $j+1/2$ および $j-1/2$ に相当するセル境界面上の変数にはそれぞれ上添字 $+$ と $-$ を付す。また、格子間隔 $\Delta\xi$ は 1 とする。 D と ϕ はセル中心、流速 U はセル境界で定義される。

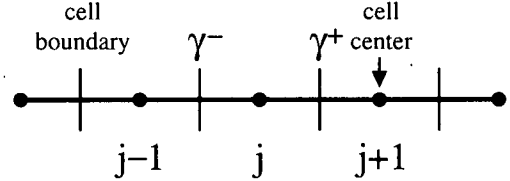


図-2 1次元コロケート格子

これらの条件のもとで、 D_j^k は次式から計算される。

$$D_j^k = J^+ U_j^k - J^- U_{j-1}^k \quad (27)$$

ここで、 U_j は、セル中心点が j および $j+1$ の間にあるセル境界上で定義される。次に、 ϕ_j^k は次式から計算される。

$$\begin{aligned} & \gamma^+ \phi_{j+1} - (\gamma^+ + \gamma^-) \phi_j + \gamma^- \phi_{j-1} \\ & = \frac{\rho}{\Delta t} D_j^k \end{aligned} \quad (28)$$

ここに、 $\gamma = Jg$ である。反復計算を行い、式 (28) の収束解 ϕ_j^k が得られたとする。このときの残差を e_j^k とすれば、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} & \gamma^+ \phi_{j+1}^k - (\gamma^+ + \gamma^-) \phi_j^k + \gamma^- \phi_{j-1}^k \\ & = \frac{\rho}{\Delta t} (D_j^k + e_j^k) \end{aligned} \quad (29)$$

この ϕ_j^k を用いて流速を更新する.

$$U_j^{k+1} = U_j^k - \frac{\Delta t}{\rho} g^+ (\phi_{j+1}^k - \phi_j^k) \quad (30)$$

$$U_{j-1}^{k+1} = U_{j-1}^k - \frac{\Delta t}{\rho} g^- (\phi_j^k - \phi_{j-1}^k) \quad (31)$$

これらの結果を用いると, 式 (29) を考慮すれば, D_j^{k+1} に対して次の関係が導かれる.

$$\begin{aligned} D_j^{k+1} &= D_j^k \\ &- \frac{\Delta t}{\rho} [\gamma^+ \phi_{j+1}^k - (\gamma^+ + \gamma^-) \phi_j^k + \gamma^- \phi_{j-1}^k] \\ &= -e_j^k \end{aligned} \quad (32)$$

C-HSMAC 法の反復計算では, D_j^k を 0 へ収束させることが必要である. 上記の結果から, このためには下記の条件が必要である.

$$\left| \frac{D_j^{k+1}}{D_j^k} \right| = \left| \frac{e_j^k}{D_j^k} \right| < 1 \quad (33)$$

換言すれば, $|e_j^k|$ が一定のとき, 反復計算を継続しても $|D_j^k|$ はある値以下にはならず, 0 へ収束しない. このため, 流速が更新される毎に ϕ^k の連立 1 次方程式の数値解の残差を減少させるという方法には, 上記のような理論的な背景があることが示された.

3. 計算結果と考察

3.1 立方体キャビティ流れの計算条件

計算対象は, これまでに数値計算例が示されており, 結果の検証がある程度正確に行える 3 次元キャビティ流れ¹³⁾とする. この計算では, 図 3 に示されるように, 一辺が 1.0 の立方体の計算領域に非圧縮性の粘性流体が満たされ, 上部の壁面が 1.0 の速度で移動する. 流速の境界条件は, 移動する壁面以外では, 壁面上の流速値を 0 とし, 圧力境界条件はすべての壁面の法線方向の勾配が 0 であるとする. この計算では側壁面の影響がある 3 次元流れとなるため, Ghia¹⁴⁾ が行った 2 次元キャビティ流れとは異なる流速分布が生ずる. レイノルズ数 (Re) は, 一辺の長さ and 壁面の移動速度に基づき, $Re = 1/\nu$ で定義される.

計算では, 境界層が発達する壁面の近傍で計算格子点が密に分布するように, 一般座標系を用いた格子生成を利用している. 外部の境界形状がこのように単純な場合でも, すでに記したように一般座標系が有効である. 移流項に対しては, 5 次精度相当の QSI スキーム⁶⁾を用いた. 計算対象となる流れの条件は, $Re=1,000$ とした. この条件では, 定常解が得られることが既往の計算例で示されている.

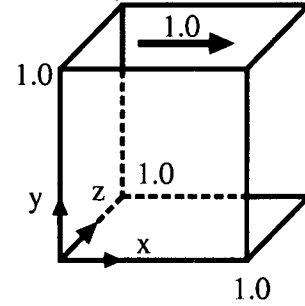


図-3 3次元キャビティと座標系

3.2 C-HSMAC 法の収束特性

C-HSMAC 法と SOLA 法の収束特性を比較するため, 圧力計算以外はすべて同一の解法を用いて, 逐次計算により, 静止流体の初期条件から同ステップ数までの非定常計算を行った. SOLA 法および C-HSMAC 法の収束条件は, いずれも $D_0 = 1.0 \times 10^{-10}$ とした. 連続性誤差は, 非定常計算の過程で蓄積されるため, このように D_0 は可能な限り小さくすることが重要である³⁾. 計算時間を測定する際には, MPI¹⁵⁾ の時間計測関数 (MPI_wtime) を利用して, C-HSMAC 法と SOLA 法の計算処理のみに要する時間の累積値を求めた. なお, C-HSMAC 法における ϕ の連立 1 次方程式の反復解法には Bi-CGSTAB 法を用いた. ϕ の連立 1 次方程式の収束判定条件 ϵ は $\epsilon = \alpha^{k-1} \epsilon_0$ とし, $\alpha = 0.1$ および $\epsilon_0 = 1.0 \times 10^{-2}$ とした. SOLA 法では加速係数 β_0 を 1.7 とした¹²⁾. 前述の格子生成法を用いて, 壁面に接する計算セルの間隔は, 中央部のセル間隔の 0.5 倍の大きさとなる不等間隔格子とした.

C-HSMAC 法の収束特性を SOLA 法と比較するため, 全計算セル数 N を変化した場合の計算時間を求めた. それぞれの解法に要する計算時間を $T_{c-hsmac}$ および T_{sola} とするとき, それらの比と N の関係を図 4 に示す. 図中の破線は等間隔格子を用いた既報⁵⁾の結果である. N の増加とともに計算時間の比は増大しており, 特に不等間隔格子を用いた本報の結果ではその傾向が顕著である. 前章で考察したように, C-HSMAC 法の収束特性が SOLA 法よりも良好であることが, 実際の流体計算を通じて明確に示された. また, この結果から, SOLA 法ではなく C-HSMAC 法を並列化することで, より効率の良い計算が行えると考えられる.

3.3 多次元領域分割の有効性

3 次元の写像空間中では, 領域分割を行う場合に, 分割面の法線を ξ_m 軸方向に取るものとすれば, 3 方向の分割面の設定方法が考えられる. 既報^{9), 11)}では, 分割面の法線が 1 方向に向かう場合のみを扱ったが, 本報では 3 方向の領域分割, すなわち 3 次元領域分割が

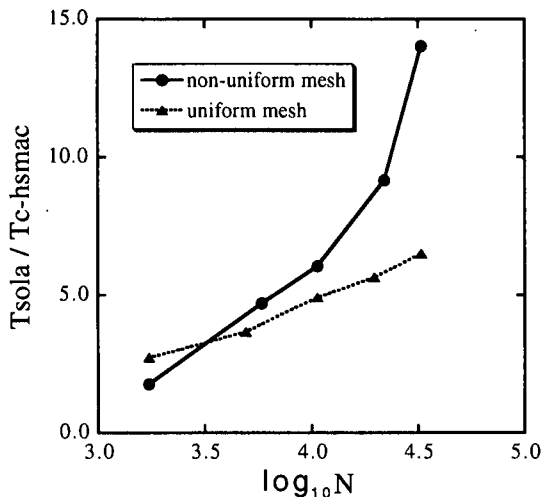


図-4 SOLA 法と C-HSMAC 法の計算時間の比と格子点数の関係 (逐次計算)

可能な計算手法を構築した。この多次元領域分割方法と計算時間について以下で理論的に考察するとともに、計算結果を用いて考察結果を検証する。

重合格子点を有する領域分割法を利用する場合には、逐次計算と並列計算に要する計算時間の比として定義される speedup¹⁶⁾ S は、全計算格子点数 N と全重合格子点数 N_m の比 (γ_{cm}) をパラメータとして次式のように近似的に表現されることが示されている⁹⁾。

$$S = \frac{k_1 \gamma_{cm} p}{k_1 \gamma_{cm} + k_2} \quad (34)$$

ここで、 p は node 数であり、 k_1 と k_2 は、それぞれ 1 格子点あたりの計算の負荷とシステムの通信性能に依存する係数である。なお、式 (34) は実測結果をほぼ良好に再現することが確認されている⁹⁾。

式 (34) より、 γ_{cm} が十分大きくなると speedup は p へ漸近する。したがって、同一の計算条件で高い speedup を得るためには、 γ_{cm} が大きい値となる領域分割の方法を選択することが望ましい。計算格子点数が各方向に十分大きい N_1 個である場合、分割面における重合格子点数を求め、これを全体の格子点数で除することにより、領域分割の方法を変えた場合の γ_{cm} の理論値が得られる。その結果は、1 次元領域分割では $N_1/2n_0(p-1)$ 、また 2 次元および 3 次元領域分割では、それぞれ $N_1/4n_0(p^{\frac{1}{2}}-1)$ および $N_1/6n_0(p^{\frac{1}{3}}-1)$ となる。ここに n_0 は重合格子点数である。つまり、node 数などの条件が同一で、格子点数が十分大きいときには、多次元の領域分割を行うと γ_{cm} を大きく取ることができ、有利である。

このような考察によって示された多次元領域分割の有効性を、実際の流体計算によって確認する。解析対

象は、上述した立方体キャビティ内の $Re=100$ における流れである。図 5 に speedup を比較した結果を示す。ここでは node 数を変えると同時に、領域分割の方法を 1 次元から 3 次元領域分割まで変化させている。node 数と領域分割の方法以外の計算条件はすべて同一である。この結果には、多次元領域分割の有効性が明確に示されており、上記の考察結果を並列計算によって確認することができた。

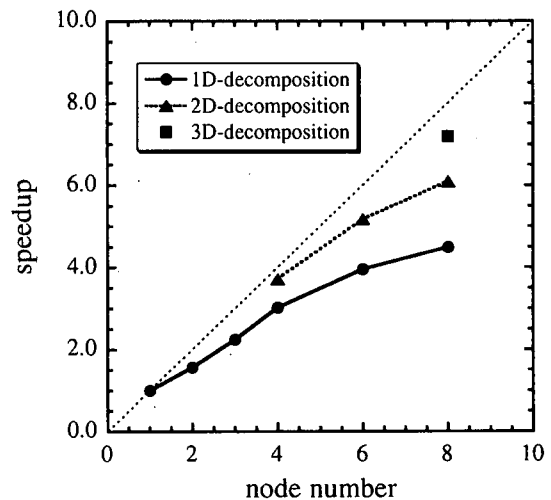


図-5 speedup と node 数の関係

3.4 立方体キャビティ内の流れの計算結果

並列計算により得られたキャビティ内の流速分布を図 7 に示す。流速は、図 3 に示した座標系に対して、 x および y 方向の成分をそれぞれ u 、 v としている。図中には、Ku ら¹³⁾により、疑似スペクトル法を利用して計算された結果を合わせて示している。本報の計算結果は、Ku らの結果とほぼ一致しており、妥当な計算結果が得られたと考えられる。また、図中には、Ghia¹⁴⁾による 2 次元計算の結果を参考として示した。3 次元流れでは、 Re が高くなると、2 次元の場合と異なるフローパターンが形成されていることが示されている。

4. おわりに

3 次元場における定常あるいは時間的な変化が十分小さい非圧縮性流れを対象として、数値解を精度良くしかも高速に求めるための計算法を示し、その有効性に関して考察を加えた。この計算法は、3 次元一般座標系上で表示された非圧縮性流体の基礎式をコロケート格子上で有限差分法により離散化する手法に基づくもので、これまでに提案された MAC 系解法の各段階における解法を統合し、これに並列計算法を適用したものである。

最初に格子生成法の並列化と、C-ISMALC 法を並列

的に行う手順を示した。C-ISMALC 法の利点は、高速計算が可能な陰的解法において、空間的に精度の高いスキームを陽解法と同様に容易に扱える点である。これを並列計算という観点から見た場合、陰的に扱われる流速の残差成分に対して低次スキームが利用できるため、重合格子点数が 1 となり、node 間通信量を少なくできるという長所もあることが示された。本報では、これらの解法を示すと同時に、C-HSMAC 法と SOLA 法の収束特性を離散化式に基づいて比較し、C-HSMAC 法の収束判定条件、また多次元領域分割法の有効性に関して理論的な考察を加えた。3 次元キャビティ流れの計算を行った結果、圧力計算法の収束特性や多次元領域分割の有効性に関する考察結果の妥当性が確認された。また、既往の 3 次元キャビティ流れの計算結果との比較を行い、妥当な流速場が得られることが示された。

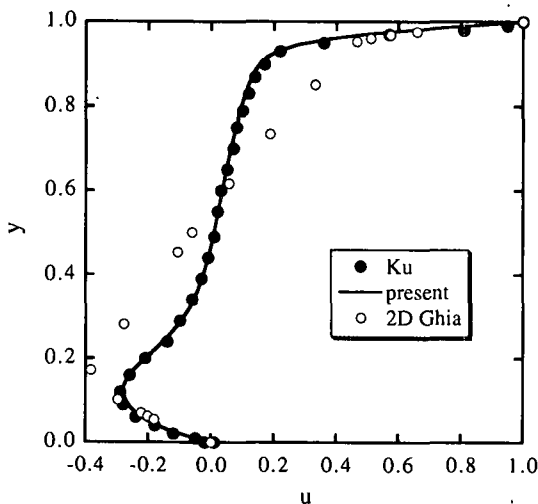


図-6 u の分布 ($Re=1,000, x=z=0$)

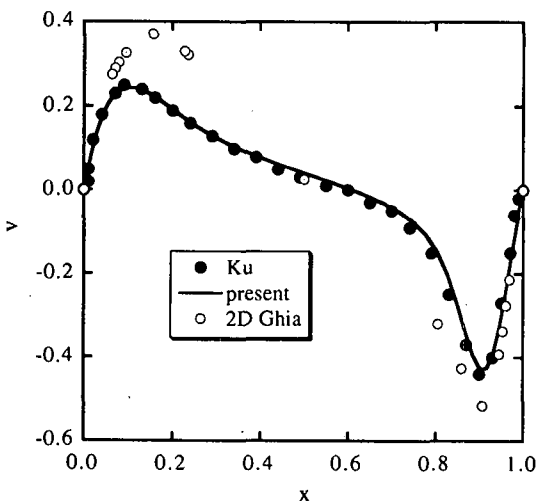


図-7 v の分布 ($Re=1,000, y=z=0$)

参考文献

- 1) 牛島省, 棚津家久. 陰解法を用いたコロケート格子による高次精度の流体解析手法の提案. 土木学会論文集, No. 719/II-61, pp. 21-30, 2002.
- 2) 牛島省, 竹村雅樹, 棚津家久. 3 次元定常流れ場に対するコロケート格子を用いた高次精度陰的計算法. 水工学論文集, Vol. 47, pp. 391-396, 2003.
- 3) 牛島省, 棚津家久. 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.
- 4) 牛島省, 竹村雅樹, 棚津家久. 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.
- 5) 牛島省, 奥山洋平. 非圧縮性流体計算における C-HSMAC 法と SOLA 法の収束特性. 土木学会論文集, (投稿中).
- 6) 牛島省, 棚津家久, 山上路生, 坂根由季子. 局所 5 次スプライン内挿法 (QSI 法) を利用したコロケート格子による流体解析手法. 土木学会論文集, No. 691/II-57, pp. 73-83, 2001.
- 7) J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, and C. W. Mastin. *Numerical Grid Generation*. Elsevier Science, New York, 1985.
- 8) 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.
- 9) 牛島省, 棚津家久, 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.
- 10) 藤野清次, 張紹良. 反復法の数理. 朝倉書店, 1996.
- 11) 牛島省, 奥山洋平, 竹村雅樹, 棚津家久. 3 次元一般座標系における圧力場の並列計算法の提案. 水工学論文集, Vol. 47, pp. 385-390, 2003.
- 12) C. W. Hirt and J. L. Cook. Calculating three-dimensional flows around structures and over rough terrain. *J. Comp. Phys.*, Vol. 10, pp. 324-340, 1972.
- 13) H. C. Ku, R. S. Hirsh, and T. D. Taylor. A pseudospectral methods for solution of the three-dimensional incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 70, pp. 439-462, 1987.
- 14) 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.
- 15) W. Gropp, E. Lusk and A. Skjellum. *Using MPI*. The MIT Press, 1994.
- 16) P. パチエコ (秋葉 博訳). MPI 並列プログラミング. 培風館, 2001.

(2003 年 4 月 18 日 受付)