4

高速連立一次方程式解法を用いた 2，3次元流体解析システム

秋 葉 幸 範* 土 肥 俊*
速 水 謙* 石 原 誠 治**

A Two- and Three-Dimensional Fluid Flow Analysis System Using a Fast Linear System Solver

by

Yukinori AKIBA, Shun DOI and Ken HAYAMI
C&C Information Technology Research Laboratories, NEC Corporation
Seiji ISHIHARA
NEC Scientific Information System Development, Ltd.

ABSTRACT

We propose a preconditioned conjugate gradient type method suited to supercomputers for solving large sparse nonsymmetric linear systems arising in finite difference fluid flow analysis which employ boundary-fitted coordinates. In two-dimensional analysis, by using only the 5-point finite difference matrix as the preconditioner, the linear systems can be solved efficiently by the Tridiagonal Factorization CGS algorithm, which can be easily vectorized. The method is also applicable to three-dimensional problems by using the 7-point finite difference matrix as the preconditioner. These techniques are employed to realize a fast 3-D fluid flow simulation system.

Numerical experiments were done on the NEC SX-2 supercomputer. Results show that the TFCGS algorithm is 1.3 times faster than the conventional ILUCGS method. By using the 7-point TFCGS method, a very high vector ratio of 99.9% is achieved, and the computation speed of the vector mode is 53 times as fast as that of the scalar mode.

1. はじめに

現在筆者らは，流体とガス（化学物質）の拡散現象を解析するための2次元及び3次元のシミュレーションシステムをスーパーコンピュータ NEC SX－2上で開発中である。ベクトル演算型スーパーコンピュータに代表される高速・高性能な計算機を効果的に利用するためには，ハードウェア性能を充分に引き出すための数値計算アルゴリズムの開発が必要である。また問題の大規模化にともない，膨大なデータを容易に取り扱うための入出力技術の開発も重要となって来ている。

* 日本電気㈱
** 日本電気技術情報システム開発㈱

計算流体力学では，スーパーコンピュータによる高精度なシミュレーションにより，実験では得られない微細な現象をとらえることが可能になってきた。その計算時間の大部分は連立一次方程式の求解に費やされている。例えば２次元圧力ポアソン方程式を古典的な差分法で離散化すると，規則スパースで対称正定値な５点差分行列を係数とする連立一次方程式が得られる。このような対称正定値行列の解法としてはICCG法やベクトル化に適したSCG法[1]などの前処理共役勾配法が提案され成果をあげている。一方，境界適合法により２次元ポアソン問題を離散化すると非対称な９点差分行列を生じるが，従来この行列はSOR法やSLOR法などの緩和反復法で解かれていた。これらの緩和反復法は収束性やベクトル化の点で効率的とは言えない。そこで筆者らは，境界適合法で生じる非対称差分行列のスーパーコンピュータ向き求解法として，主要５点差分行列のみを前処理に用いるTFCGS法を提案した[2]。本手法は３次元一般座標系の問題へも容易に適用できる。すなわち，３次元境界適合法ではポアソン方程式は非対称19点差分行列に離散化されるが，このうち主要７点差分要素を前処理に用いればよい。

本報告では開発した流体解析システムの概要を紹介するとともに，流体解析における連立一次方程式求解計算の高速化の重要性と，筆者らの提案する前処理反復法の有効性を数値実験例により示す。

2. 流体解析システムの概要

2.1 システム構成

流体解析システムは当社のスーパーコンピュータSXシリーズ上で開発され，次の三つのモジュールから構成されている（図１）。

(1) メッシュジェネレータ

領域や物体形状を表わす図形データより格子を自動的に生成する。格子生成アルゴリズムにThompsonらによる楕円型生成法[3]を使用しており，ソース項による格子の粗密制御が可能である。

(2) 解析モジュール

与えられた初期条件・境界条件等より，流れ・物質拡散・熱拡散の計算を行う。指定した時刻毎に計算結果をファイルに出力することができる。スーパーコンピュータ向きの数値計算アルゴリズムにより高速計算が可能である。

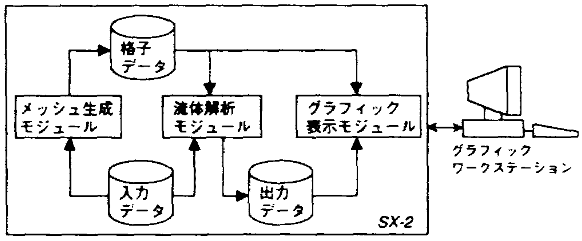

図１　システム概略

(3) グラフィック表示モジュール

対話処理によりシミュレーション結果をグラフィックディスプレイに表示する。このモジュールはワークステーション上にも移植されており，データファイルを転送することによりローカルな処理が可能となる。主な表示図種としては，流速ベクトル図，流線図，圧力・濃度・温度の断面等値線図及び等値面図，格子図などがある。

2.2 支配方程式と離散化

本システムでは無次元化された物理変数表示の非圧縮粘性流体の方程式を一般曲線座標系で解く。

Navier-Stokes方程式

$$\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial t}+\boldsymbol{V}\cdot\nabla\boldsymbol{V}=-\nabla P+\frac{1}{Re}\nabla^2\boldsymbol{V}+\alpha\boldsymbol{g} \qquad (1)$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{V}=0 \qquad (2)$$

物質（ガス）の輸送方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\boldsymbol{V}\cdot\nabla C=D\nabla^2C+S \qquad (3)$$

熱の輸送方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\boldsymbol{V}\cdot\nabla T=K\nabla^2T+Q \qquad (4)$$

ここで，流速$\boldsymbol{V}$ (u, v, w)，圧力p，重力加速度$\boldsymbol{g}$ (g_x, g_y, g_z)，レイノルズ数Re，濃度C，物質の発生源S，物質の拡散係数D，温度T，熱源Q，温度伝導度Kとする。

温度差および物質濃度による浮力の効果はBussinesque近似により考慮される。流体の元の密度をρ_0，温度差ΔTおよび濃度Cの影響を受けた場

合の密度をρ，温度膨張率をβ，流体に対する物質の比重をγとすると式(1)の係数αは次のように表される。

$$\rho=\rho_0\{1-C(1-\gamma)-\beta\Delta T\} \tag{5}$$

$$\alpha=(\rho-\rho_0)/\rho_0 = -C(1-\gamma)-\beta\Delta T \tag{6}$$

実際には一般座標系に変換された方程式を差分法で離散化して解く。時間積分には無条件安定なオイラーの陰解法を用い，移流項の差分には数値拡散の小さな 3 次精度風上差分法($K-K$スキーム)[4]を使用した。また，全ての変数が格子点上で定義される non-staggered 格子を採用した。計算アルゴリズムは次のとおりで，陰解法により各時刻又は各時間ステップで連立一次方程式を解くことになる。

$$\nabla^2 P=\frac{\nabla\cdot\boldsymbol{V}}{\Delta t} \tag{7}$$

$$\frac{\boldsymbol{V}^{n+1}-\boldsymbol{V}^n}{\Delta t}+\boldsymbol{V}^n\cdot\nabla\boldsymbol{V}^{n+1}=-\nabla P^{n+1}+\frac{1}{Re}\nabla^2\boldsymbol{V}^{n+1}+d\boldsymbol{g} \tag{8}$$

$$\frac{C^{n+1}-C^n}{\Delta t}+\boldsymbol{V}^{n+1}\cdot\nabla C^{n+1}=D\nabla^2 C^{n+1}+S \tag{9}$$

$$\frac{T^{n+1}-T^n}{\Delta t}+\boldsymbol{V}^{n+1}\cdot\nabla T^{n+1}=K\nabla^2 T^{n+1}+Q \tag{10}$$

3. 連立一次方程式の高速求解法

3.1 従来法の問題点と 5 点前処理法の提案

ここでは簡単のために 2 次元問題について述べるが，3 次元への適用は容易である。2 次元境界適合法による離散化では，Navier-Stokes 方程式は13点，圧力ポアソン方程式は 9 点の規則スパースな非対称連立一次方程式に帰する。従来これらの方程式の求解法に使用されていた SOR 法やSLOR 法などの緩和反復法には次のような問題点がある。

(1) SOR 法は収束性がわるく，SLOR 法はベクトル化が難しい。

(2) 問題により最適な緩和係数が異なる。

(3) 境界条件やスイープの方向により収束性が異なる。

特に圧力ポアソン方程式の境界条件の大部分はノイマン条件であるので，スイープの出発点や方向に注意を必要とする。解析計算に要するCPU時間の大部分が連立一次方程式の求解に費やされることを考えると，より高速な求解法が必要である。そこで筆者らはスーパーコンピュータ向きの前処理付き共役勾配法を提案し，本システムに応用した。

いま連立一次方程式を$A\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}$で表すと，前処理付き共役勾配法とは，$A$の近似行列（前処理行列）$M$の逆行列を両辺にかけ，係数行列を単位行列に近い方程式に変換し，この方程式に反復法を適用し解を求める手法である。

$$A\boldsymbol{u}=\boldsymbol{b}\rightarrow M^{-1}A\boldsymbol{u}=M^{-1}\boldsymbol{b},\ M^{-1}A\sim I \tag{11}$$

非対称系の前処理法には，不完全LU分解 (ILU) 法，筆者らの開発した三重対角分解 (TF) 法[5]などが，基礎反復法には，双対共役勾配 (BCG) 法，共役勾配 2 乗 (CGS) 法，共役残差 (CR) 法などがある。

前処理行列Mの性質としては，係数行列Aに対する近似度が高く，逆行列計算が容易で演算の並列性があることが望ましい。

いま$n_x * n_y$元の 9 点差分連立一次方程式について考えよう。係数行列Aの第i行の非零要素を並べて次のように表記する。

$$A[i]=[b_i^-, b_i, b_i^+, c_i, d_i, e_i, f_i^-, f_i, f_i^+] \tag{12}$$

$$列=i-n_x-1\quad i-n_x\quad i-n_x+1\quad i-1\quad i\quad i+1\quad i+n_x-1\quad i+n_x\quad i+n_x+1$$

Aの非零要素すべてを反復法の前処理に使用すると，近似度は良いがベクトル長やメモリ容量の点で効率が良くない。そこで行列Aの非零要素が

(1) 直交性のよい格子では斜め方向の要素が対角項に比べて小さい($d\gg b^-, b^+, f^-, f^+$),

(2) なめらかな解では前記係数が相殺し合う($b^-=f^+, b^+=f^-, b^-=-b^+, f^-=-f^+$),

ことに着目し，筆者らは前処理行列として 5 点差分行列のみを用いる方法を提案する。

$$A_5\sim M[i]=[b_i, c_i, d_i, e_i, f_i] \tag{13}$$

$$列=i-n_x\quad i-1\quad i\quad i+1\quad i+n_x$$

前処理行列Mに関する計算には主要 5 点差分行列を使用し，係数行列に関する計算（例えば行列

ベクトル積）にはもとの９点差分要素全てを使用すると，ベクトル化に適したアルゴリズムを使用できるとともに，前処理の作業領域は９点全てを前処理に用いた場合の約半分で済むので効率がよい。３次元境界適合法ではポアソン方程式は19点の非対称行列に離散化されるが，２次元と同様に主要７点差分行列のみを前処理に用いればよい。

3. 2 不完全 LU 分解前処理法（ILU 法）

９点差分行列のうち５点差分行列 A_5 の非零要素に対してのみ LU 分解を行い，他の非零要素及び fill-in を無視すると，A_5 の不完全 LU 分解行列 M_{ILU} が得られる。fill-in を無視した分，前処理行列 M_{ILU} には誤差 R_{ILU} が含まれている。

$$M_{ILU}=LDU=A_5+R_{ILU} \tag{14}$$

L, U はそれぞれ A_5 の下三角，上三角と同じ構造を持つ下三角行列，上三角行列である。ILU 法では，各々座標軸方向に付けた格子番号の和が一定になるようなハイパープレーンに対して計算の並列性がある。

3. 3 三重対角分解前処理法（TF 法）

筆者らの開発した三重対角分解法[5] はベクトル化に適した前処理法である。５点差分の係数行列 A_5 を，対角行列 D, x 方向の微分に対応する非対角要素行列 A_x, y 方向の微分に対応する非対角要素行列 A_y に分割すると，

$$A_5=D+A_x+A_y \tag{15}$$

三重対角分解による前処理行列 M_{TF} を次式で定義する。

$$M_{TF}=(D+A_x)D^{-1}(D+A_y)=A_5+R_{TF} \tag{16}$$

この前処理行列 M_{TF} は各座標軸方向に並列性を持つためベクトル化に適している。いま２次元格子サイズを $n*n$ とすると，ILU 法のベクトル長は１から n まで変化し，平均ベクトル長は約 $n/2$ となる。これに対して TF 法のベクトル長は n で一定である。また９点前処理ILU法及びSOR法のメモリアクセス間隔は $n-2$ となり，平均ベクトル長はさらに短くなる。３次元では ILU 法はリストベクトルを用いなければならないので，ベクトル化の点で TF 法はさらに有利になる（図２）。

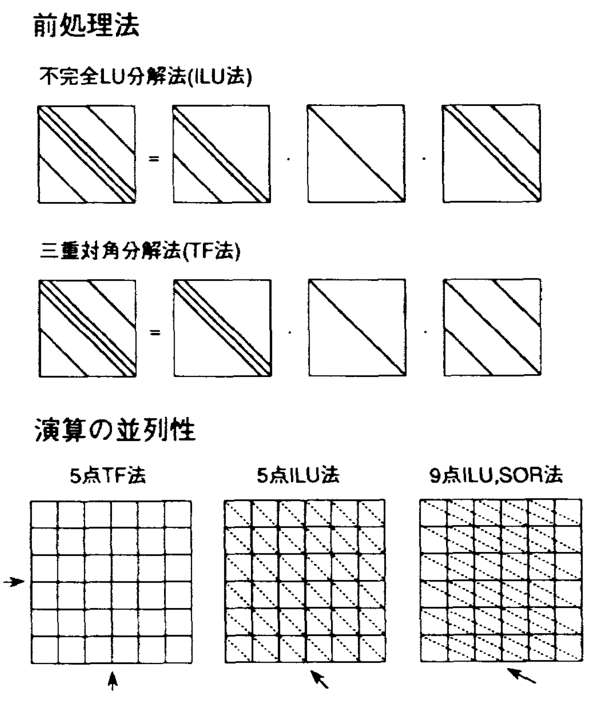

図２　前処理法と並列性

4. 数値実験による解法の比較

4. 1 ２次元の流れ

当社のスーパーコンピュータ NEC SX−2 を使用して，２次元自動車まわりの流れのシミュレーション（図５～図６）により，従来法と各種前処理反復法の収束性の比較計算を行う。計算条件を次に示す。

メッシュ数 $=303*101=30603$,

レイノルズ数 $=1.85\times10^6$,　$\Delta t=0.05$

600 ステップ後の１ステップにおける圧力のポアソン方程式と Navier-Stokes 方程式について，各種前処理反復法の反復数と CPU 時間の関係を表１に，CPU 時間に対する相対残差の L_2 ノルム r の収束の様子を図３，図４に示す。ここで MILU 法，MTF 法の M は Gustafsson の修正[6]（係数：MILU＝0.95, MTF＝0.8）を表す。数値実験の結果より以下のことが言える。

SOR 法は反復数が千回でも収束条件に達しなかった。BCG 法は CGS 法に比べて 20～35％程度反復数・CPU 時間が多い。TF 法は ILU 法に比べ 30～45％反復数が多いが CPU 時間は短い。Gustafsson 修正の効果は殆どなく，かえって収束

表 1　各前処理反復法の比較

圧力ポアソン方程式　(r=1.0E-8)

解法	BCG反復数 (回)	CPU時間 (SEC)	解法	CGS反復数 (回)	CPU時間 (SEC)
ILUBCG	379	1.93	ILUCGS	294	1.55
MILUBCG	366	2.20	MILUCGS	307	1.70
TFBCG	501	1.96	TFCGS	372	1.44
MTFBCG	534	2.04	MTFCGS	427	1.65
SOR	1000	3.26	(ω=1.8) 収束せず r=5.79E-3		

Navier-Stokes方程式　(r=1.0E-12)

解法	BCG反復数 (回)	CPU時間 (SEC)	解法	CGS反復数 (回)	CPU時間 (SEC)
ILUBCG	19	1.13E-1	ILUCGS	10	6.47E-2
MILUBCG	20	1.88E-1	MILUCGS	11	1.41E-1
TFBCG	19	8.57E-2	TFCGS	10	5.33E-2
MTFBCG	21	9.74E-2	MTFCGS	11	6.16E-2
SOR	52	2.16E-1	(ω=1.2)		

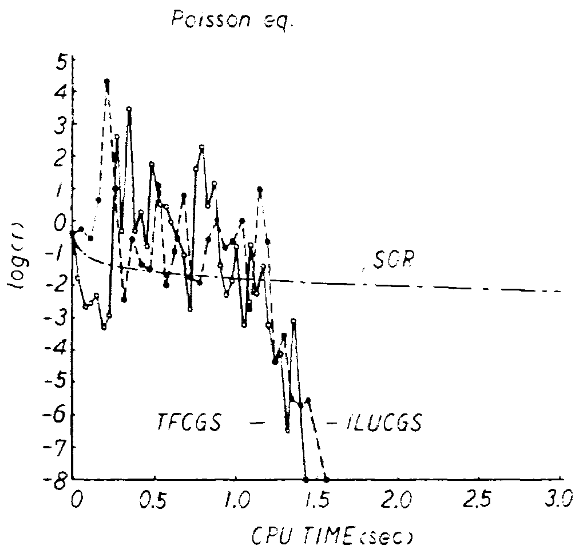

図 3　各解法の収束の様子
(圧力ポアソン方程式)

性が悪化している。

圧力ポアソン方程式の境界条件の大部分がノイマン条件であるため，係数行列は ill conditioned となる。そのためSOR法は収束性が非常に悪い。ILU法に比べTF法の反復数が多いのは，前処理行列の近似度が低いためと思われる。しかしベクトル化の効果でCPU時間は短くなっている。

Navier-Stokes 方程式に関する係数行列は，非対角要素に Δt ($\ll$ 1) がかかっているので対角優位性が強く条件がよい。そのためポアソン方程式

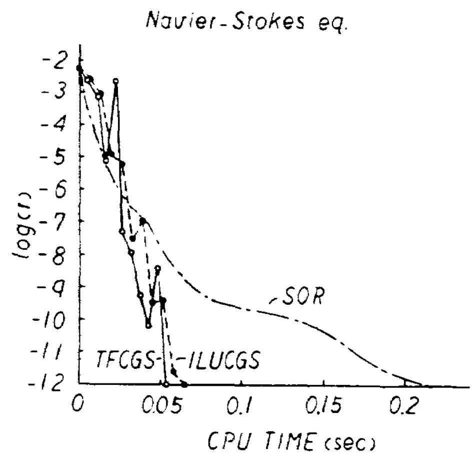

図 4　各解法の収束の様子 (N−S 方程式)

に比べ反復数が非常に少い。ここでもTFCGS法はILUCGS法に比べ約1.2倍，SOR法に比べ約4倍高速であった。以上，5点前処理によるベクトル化に適したTFCGS法により，連立一次方程式求解の高速化が可能となった。

4. 2　3次元の流れ

3次元直角座標系での建物周りの流れの解析(図5～図8)の例を用いて，TFCGS法とILUCGS法の比較及びベクトル化の効果の解析を行う。計算機にはNEX　SX−2を使用した。計算条件は以下のとおりである。

メッシュ数＝61×55×25＝83875

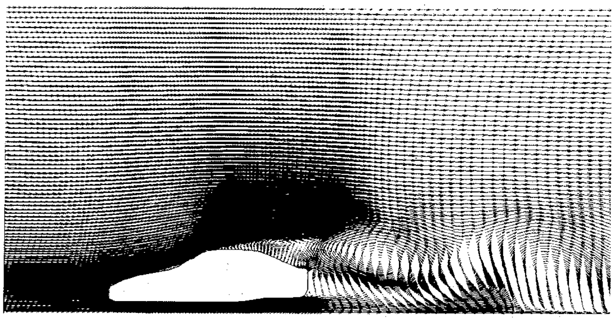

図５　自動車まわりの流れ（流速ベクトル図）

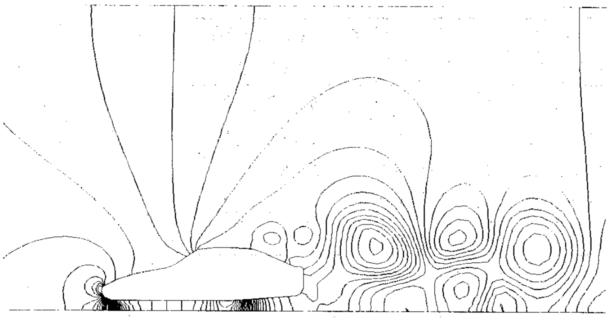

図６　自動車まわりの流れ（等圧力線図）

レイノルズ数 $=6.7\times10^4$，$\Delta t=0.2$

収束条件：残差ノルム $r\leqq1.0\times10^{-10}$

一時間ステップに要するCPU時間はTF法が3.66秒，ILU法が4.77秒で，ILU法に比べTF法が約1.3倍高速であった。またTF法を使用した場合のスカラ計算に対するベクトル計算の加速率は約53倍であり，ベクトル計算機の性能を充分引き出している。SX－2のFORTRAN用解析ツールANALYZER/SXを用いコードの動的解析をした結果，ベクトル化率は99.9％で，各処理部分にかかるCPU時間の割合は下記のとおりであった。

圧力ポアソン方程式：91.86％

N－S・拡散方程式：7.18％

その他の処理　：0.96％

以上より３次元流体計算の約99％は連立一次方程式の求解のための時間であり，これを効率よく計算する手法として，筆者らの提案した主要７点前処理によるTFCGS法が非常に有効であることがわかった。

5. むすび

現在開発中の2，3次元流体解析システムの紹介をするとともに，流体解析で生じる連立一次方程式の求解法としてベクトル計算機向きの主要5(7)点前処理共役勾配法を提案し，その有効性をスーパーコンピュータNEC SX－2による数値実験例で示した。今後は３次元一般曲線座標への対応と，操作性の良いメッシュジェネレータの開発が重要な課題と考える。

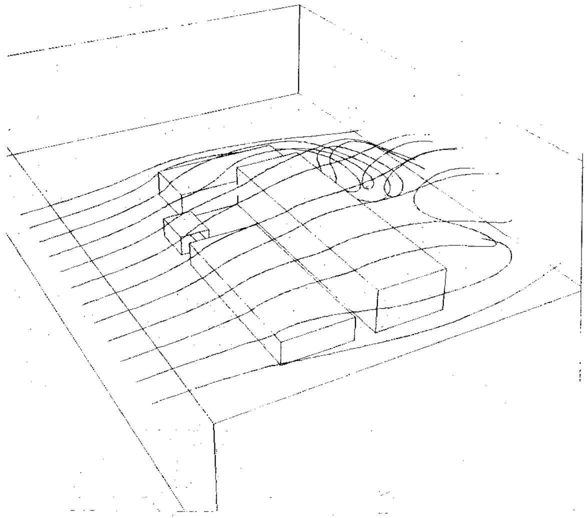

図７　建物まわりの流れ（流線図）

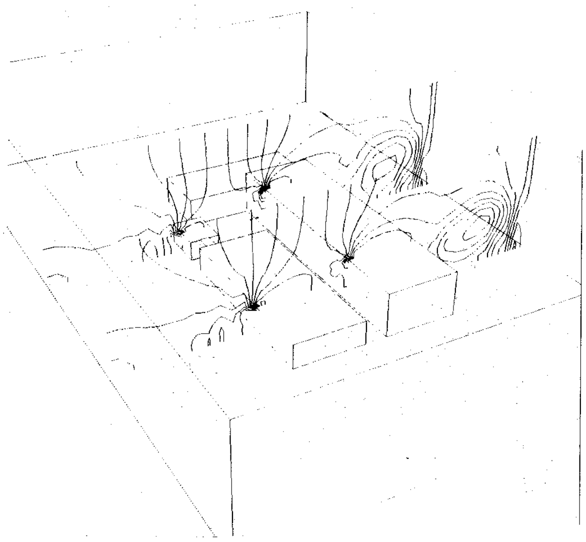

図８　建物まわりの流れ（断面等圧力線図）

参考文献

1) K. Hayami and N. Harada: The Scaled Conjugate Gradient Method and Vector Processors, Proc. 1st Int. Conf. on Supercomputing Systems, IEEE Computer Society, pp. 213-221, Florida (1985).

2) 秋葉，土肥：境界適合法による流体解析への非対称系 PCG 法の応用，情報処理学会研究報告 88-NA-27-3, Vol.88, No.91 (1988).

3) J.F. Thompson, F.C. Thames and C.W. Mastin: TOMCAT-A Code for Numerical Generation of Boundary-Fitted Curvilinear Coordinate Systems on Fields Containing Any Number of Aebitrary Two-Dimensional Bodies, J. Compt. Phys. Vol. 2, pp. 245-273 (1977).

4) T. Kawamura and K. Kuwahara: Computation of High Reynolds Number Flow around a Circuler Cylinder with Surface Roughness, AIAA paper, 84-0340 (1984).

5) S. Doi and N. Harada: Tridiagonal Factorization Algorithm; A Preconditioner for Nonsymmetric System Solving on Vector-computers, J. Info. Processing, Vol. 11, No. 1, pp. 38-46 (1988).

6) I. Gustafsson: A class of first order factorization methods, BIT18, pp. 142-156 (1987).