

Zonal 法に対する領域分割法を用いた並列計算

A Parallel Computation for the Zonal Method Using Domain Decomposition Method

渡辺丈展, 北陸先端大院, 〒923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, E-mail: take-w@jaist.ac.jp
古山彰一, 富山商船高専, 〒933-0293 富山県新湊市海老江練合 1-2, E-mail: shoichi@toyama-cmt.ac.jp
松澤照男, 北陸先端大, 〒923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, E-mail: matuzawa@jaist.ac.jp
Takenobu WATANABE, School of I.S., JAIST, Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN
Shoichi FURUYAMA, Dept. of C.E., Toyama NCMT, Shinminato, Toyama 933-0293, JAPAN
Teruo MATSUZAWA, Center for I.S., JAIST, Tatsunokuchi, Ishikawa 923-1292, JAPAN

The Zonal Method, which is one of Overlaid Grid Methods with use of FSA(Fortified Solution Algorithm) for the exchange of data in each domains, is effective in generating the mesh for complex shaped bodies. In the case of parallel computing, however, it is difficult to decompose the domain efficiently, because it is needed to exchange the data between over-grid domains. In this study, we develop and implement a proper parallel algorithm for the calculation of 3-dimensional flow field based on Domain Decomposition Method, as we notice the translation between the domains.

1. はじめに

藤井によって提案された Zonal 法⁽¹⁾は, 複雑な形状の計算領域を複数の単純形状領域にわけて計算を行う手法であり, 格子生成の点から優れている点が多い. これは, 領域間の物理量の接続に解の強制置換を用いた重合格子法であり, それぞれの領域間を独立に計算し, 境界値や重なり合う部分でのデータは, 必要に応じて交換, または内挿を行う. しかし Zonal 法に対して領域分割法を用いて並列計算を行う際には, 重なり合う計算領域間で物理量のやりとり(交換・内挿)が伴うために効率的な領域分割を行うことが困難になる. そこで本報では Zonal 法を用いて 3次元モデルで流れ場を解く場合, 領域間でのデータの受け渡しに注目し, それに適した領域分割法を基にした並列化アルゴリズムを開発し実装を行なう. Zonal 法の適用例としては 3次元分岐管モデルを用いた. また実装は Cray T3E 上で通信ライブラリ Message Passing Interface (MPI)を用いて行った.

2. 数値計算法

2.1 基礎方程式

基礎方程式は連続の式と 3次元ナビエ・ストークス(NS)方程式である.

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + \nabla p - \frac{1}{\text{Re}} \Delta \vec{u} = 0 \quad (2)$$

ただし,

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{u} = [u, v, w]: \text{速度}, p: \text{圧力}, \text{Re}: \text{レイノルズ数}$$

2.2 MAC 法

計算スキームには MAC 法を用いた. MAC 法は圧力と速度を分離して計算を行う分離解法である. ある時間ステップ n での速度から圧力を求め, その圧力と速度から次の時間ステップ n+1 での速度を求める. 離散化においては, 速度は前進差分, 圧力は中心差分によって求める. 圧力を求めるために, 連続の式と NS 方程式から, 次の圧力に関する Poisson 方程式を得る.

$$\nabla^2 p^n = -\left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right) + 2 \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) \right\} + \frac{D^n}{\Delta t} \quad (3)$$

ただし,

$$D = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$$

この Poisson 方程式を解く事で時刻 n における速度から, 次の時間ステップ n+1 で連続の式を満足するような圧力 p^n が求まる.

Poisson 方程式の解法としては, 反復解法の SOR 法を用いた. SOR 法は一般的に以下のように表す事ができる.

$$p|_{m+1} = p|_m + \omega(p^* - p|_m) \quad (4)$$

ここで $p|_{m+1}, p|_m$ は, 反復ステップ m+1, m での圧力値であり p^* は, $p|_{m+1}$ の見積もり値である. また ω は緩和係数である. 収束判定には, 計算空間全体の残差の総和があらかじめ定めた残差閾値以下になった時点で収束したとする.

NS 方程式は速度についての陽解法であるので, ある時刻 n での u^n, p^n が求まれば, 次の時刻 n+1 での速度 u^{n+1} が求まる. オイラーの陽解法では以下のように書くことができる.

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left\{ -u^n \frac{\partial u^n}{\partial x} - v^n \frac{\partial u^n}{\partial y} - w^n \frac{\partial u^n}{\partial z} - \frac{\partial p^n}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u^n}{\partial z^2} \right) \right\} \quad (5)$$

v, w についても同様である.

2.3 Zonal 法

複雑形状の内部流れを解析するために, Zonal 法を用いた. Zonal 法は, 複雑形状物体に構造格子を張ることができるようにするための手法である. 計算領域を複数にわけ, 複雑形状の解析領域を, 複数の単純な形状の領域の集まりとして表現する. それぞれの領域間を独立に計算し, 境界値や, 重なり

り合う部分でのデータは、解強制置換法(FSA)により交換、または内挿を行う。この手法を用いる事で、分岐形状管に対しても容易に構造格子を用いる事ができる。今回 Zonal 法の適用例として 3 次元分岐管モデルを用いた。

Zonal 法を MAC 法に適用した場合、領域間でデータを交換するタイミングが速度を解く場合と圧力を解く場合で 2 回ある。圧力を解く場合には、以下の式に基づきデータの交換を行う。また圧力の解法として反復解法(SOR 法)を用いているため、圧力値については反復回数毎に交換を行う。

$$(1 + \chi)P_A \Big|_{m+1} = \{(1 - \omega)P_A \Big|_m + \omega P_A^*\} + \chi P_B \Big|_m \quad (6)$$

$$(1 + \chi)P_B \Big|_{m+1} = \{(1 - \omega)P_B \Big|_m + \omega P_B^*\} + \chi P_A \Big|_m \quad (7)$$

ここで、 P_A は Zone A での値で、 P_B は Zone B での値である。また χ は $[0, 1]$ の値をとるパラメータである。値の交換を行わない領域、つまり領域の重なっていない部分では $\chi = 0$ と置く。そうした場合 P_A の値は保存される。値の交換を行う領域、つまり領域の重なっている部分では $\chi = 1$ と置く。その場合 P_A の値は P_B に置き換えられる。 ω は SOR 法の緩和係数である。

速度の場合は以下のように交換する。

$$(1 + \Delta t \cdot \chi)(u_A^{n+1} - u_A^n) = \Delta t \cdot R.H.S._u + \Delta t \cdot \chi(u_B - u_A) \quad (8)$$

ただし、

$$R.H.S._u = -u_A^n \frac{\partial u_A^n}{\partial x} - v_A^n \frac{\partial u_A^n}{\partial y} - w_A^n \frac{\partial u_A^n}{\partial z} - \frac{\partial p_A^n}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u_A^n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_A^n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_A^n}{\partial z^2} \right)$$

v, w についても同様である。

2.4 格子点不一致の場合

Zonal 法において、重複する計算領域の格子点が一致している場合は、そのまま同じ座標の格子点の値を交換すればよいが、領域間の格子点が一致していない場合は内挿により値の交換を行わなければならない。

今回は定常問題を解くため、格子同士の位置関係を示すテーブルを計算の前に作成した。格子関係が分かっているの内挿法には線形内挿を用いた。以下に具体的な内挿の手順を示す。

1. 内挿に用いる格子を定める
2. 6 面体格子を三角錐格子に分割する
3. 三角錐格子内の局所座標を以下のように定義する

$$\vec{x} = \vec{x}_1 + \xi(\vec{x}_4 - \vec{x}_1) + \eta(\vec{x}_2 - \vec{x}_1) + \zeta(\vec{x}_3 - \vec{x}_1) \quad (9)$$

$\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_4$: 三角錐格子の頂点座標

局所座標値 ξ, η, ζ は次の条件式で表される。

$$0 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1, \quad \xi + \eta + \zeta \leq 1 \quad (10)$$

(10)式は局所座標(ξ, η, ζ)を求めた時に被内挿点が内挿セルに含まれているかどうかを判断する条件でもある。

4. 得られた ξ, η, ζ を利用して次式を用いて求める点での物理量 p を決定する

$$p = p_1 + \xi(p_4 - p_1) + \eta(p_2 - p_1) + \zeta(p_3 - p_1) \quad (11)$$

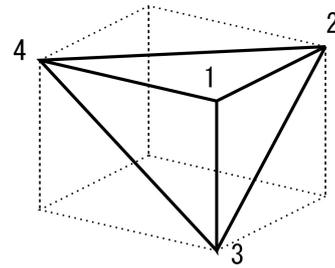


Fig.1 division of the hexahedron

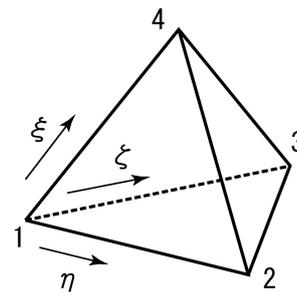


Fig.2 local coordinates of trigonal pyramid

2.5 Zonal 法の計算手順

Fig.3 に MAC 法に Zonal 法を組み込んだ場合の計算手順を示す。計算の流れは以下の通りである。

1. Zone 間で、全物理量の交換
2. Zone 間で圧力の交換
3. SOR 法を用いて、時間ステップ n での圧力解を求める。この際、収束判定値、最大反復回数をあらかじめ決めておく。この条件を満たさない場合は 2. に戻り再び圧力値の交換を行う。
4. 時間ステップ n の圧力解、速度解を用いて、時間ステップ $n+1$ での速度解を求める。
5. 1. に戻る

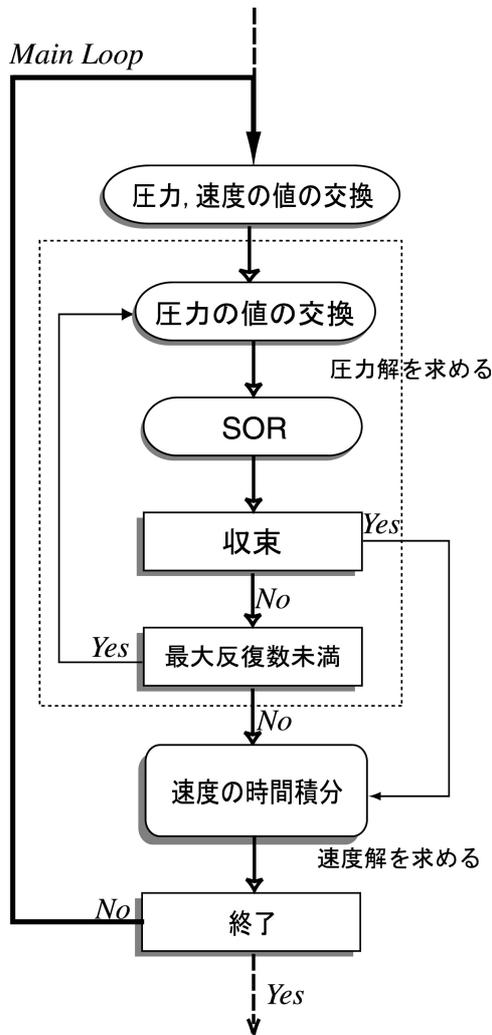


Fig.3 MAC Method including Zonal Method

3. 並列計算

本報では圧力の解法としてSOR法を用いた。SOR法での反復計算は多大な計算時間を要する。また3次元モデルでは計算対象である格子数が2次元モデルに比べて飛躍的に増大する。そこで並列化による計算時間の短縮を検討した。SOR法を用いた流体解析では、計算時間のほとんどが圧力の反復解法に費やされる。そこでSOR法の計算負荷を均等に分割できるように領域分割法を用いた。実装はCray T3E上で通信ライブラリMessage Passing Interface (MPI)を用いた。

3.1 領域分割法

静的領域分割法を用いて計算の並列化を考える場合に重要なのは効率的な領域分割を行うことである。この場合の効率的な領域分割とは、各PEの計算量負荷が均等な事とPE間のデータ通信量、通信回数が共に少ないことである。しかし、Zonal法に対して領域分割法を用いる場合、重なり合う計算領域間で物理量のやりとり(交換・内挿)が伴うために効率的な領域分割を行うことが困難になる。通信量についても通常の領域分割法の通信量に比べて増加する。具体的な通信量の増加の例としては、内挿計算を行う際、内挿に用いる格子点のデータを他のPEから得なければならない場合に発生する通信、Zone間の接続のための通信といったものがあげられる。

3.2 並列化手法

並列化手法として領域分割法に基づき静的に負荷分散を行った。またできるだけ通信量の増加を少なくする分割を行った。具体的にはFig.4のような分岐管を考えた場合、主管(Zone A)と枝管(Zone B)は順番に計算が行われる。ここで各Zoneに対して領域分割を行うが、重なりのある領域の分割については同じPEが計算を行えるように領域分割を行う。これによりZone間で物理量の内挿・交換を行う際に発生する分割領域間のメッセージ通信を無視する事ができるため、高い並列効果が期待できる。

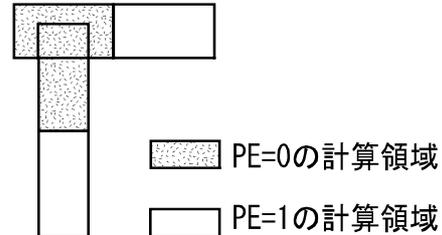


Fig. 4 Domain Decomposition Method

4. 計算結果

4.1 正方キャビティ流れ

3次元モデルでの計算スキームと本シミュレーションプログラムの正確さを検証するため、予備実験として、Zonal法を用いた正方キャビティ流れの解析を逐次計算機上で行った。この計算対象では、現在シミュレーション結果として最も正しいとされているGhiaらによるシミュレーション結果との比較検討が行えるためコードの正確さの確認ができる。Fig.5に今回の計算で用いた正方キャビティモデルのグリッド図を示す。Fig.6,7に正方キャビティ流れの計算結果として速度ベクトル図を示す。グリッド数はZone A(左側), Zone B(右側)ともに $32 \times 32 \times 18$ で等間隔の正方格子である。また、Zone AとZone Bでは4グリッド重なりのある格子があり、格子点は一致している。Fig.6,7から異なる計算領域である2つのZone間でベクトルの連続性が見られる。また、中心渦の発生も確認できる。Fig.8にはZ軸中心断面での中心速度分布図を示す。図にはGhiaらのシミュレーション結果も同時にプロットし比較を行った。2つの値を比較すると概ね一致している事から今回実装したコードの正確さが確認できる。

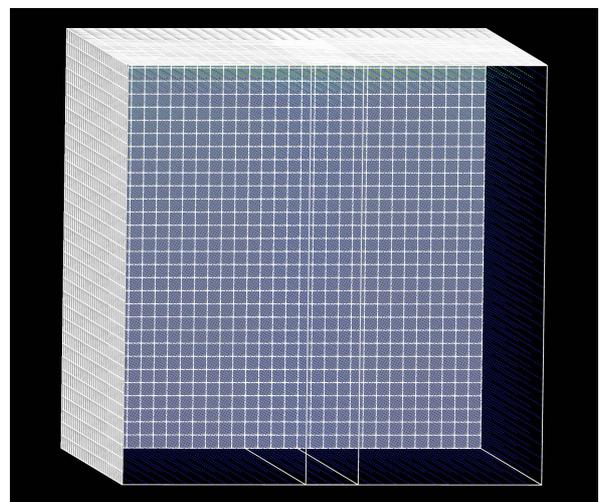


Fig.5 Grid of Cavity flow

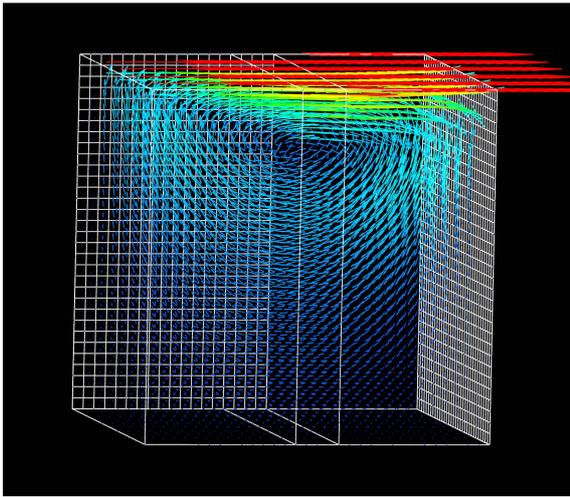


Fig. 6 Velocity Vector of Cavity flow

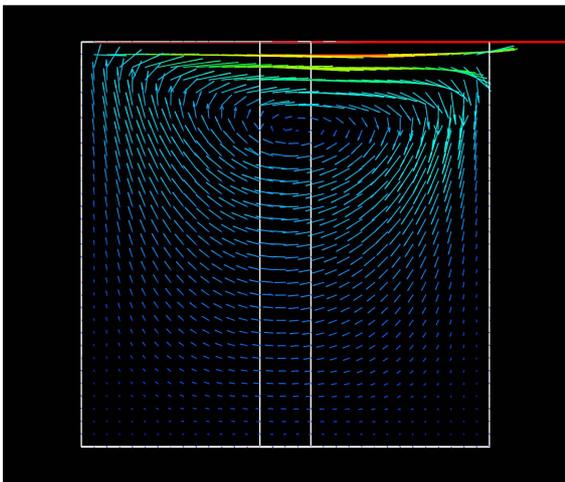


Fig. 7 Velocity Vector of Cavity flow (Center)

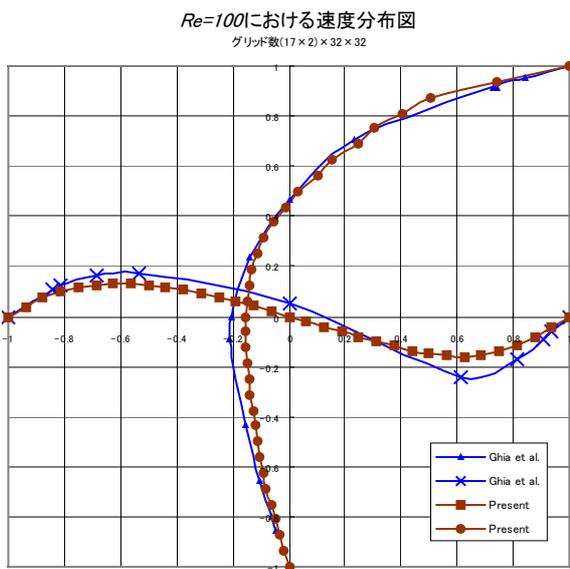


Fig. 8 Velocity distribution (Re = 100)

4.2 分岐管モデル

3次元分岐管モデルについて数値解析を行った。分岐管については水平方向を向いた管を主管(Zone A), 垂直方向を向いた管を枝管(Zone B)とし, 2つの管の結合角度は90度である。格子は等間隔の正方格子で, 格子数は主管, 枝管ともに $10 \times 10 \times 100$ となっている。主管と枝管は主管の流入口から30.5の位置で結合している。ふたつの計算領域の格子点は一致していない。初期条件として一様流を主管の左側から流した。レイノルズ数については, 代表長さを管の流入口の大きさとし, 代表速さを流入の速度とした。

Fig.9 に分岐管モデルの全体のグリッド図を示す。

Fig.10 に分岐管モデルの接合部のグリッド図を示す。

Fig.11 に Zonal 法を用いた 3次元非圧縮性流れの分岐管モデル全体の中心断面の速度ベクトル図を示す。

Fig.12 に Zonal 法を用いた 3次元非圧縮性流れの分岐管モデル結合部の中心断面の速度ベクトル図を示す。

Fig.13 に Zonal 法を用いた 3次元非圧縮性流れの分岐管モデル結合部の中心断面の圧力コンタ図を示す。

ベクトル図, 圧力コンタ図は全てレイノルズ数が100の場合である。

ベクトル図において, 主管から枝管への流入が確認できる。圧力コンタ図においても, 分岐部位付近で本来異なる計算領域である2つのZoneの間で等圧線の連続性が見られる。主管と枝管の流出口では, 滑りなし条件の作用により中心付近の流速が速くなっている事が確認できる。これらは物理的に妥当な結果であるといえる。

4.3 並列化効果と課題

分岐管モデルでは並列計算を行った。以下に並列効果による加速率を示す。

Number of PE	Speedup ratio
1	1.0
2	1.71

SOR法の反復計算時間が全体の計算時間のほとんどを占めているため, 現在のところ領域分割による通信量の増加があるものの比較的良好な加速率を得ることができている。PE数を増加させた場合については現在検討中である。また今回通信量の観点から重合部位は同じPEで計算を行うようにするために領域分割を行わなかった。しかし, より複雑な形状の物体を扱う場合には, 重合部位を領域分割した場合でも通信量を少なくできるような, 自由度の高い手法が必要となる。これらについても今後検討していく。

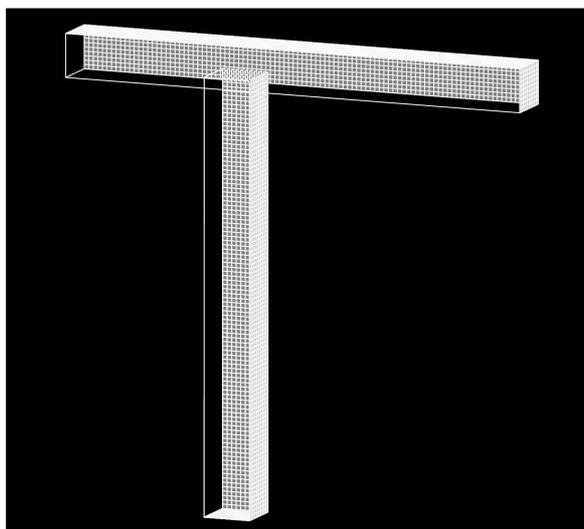


Fig.9 Grid of 3D Bifurcation

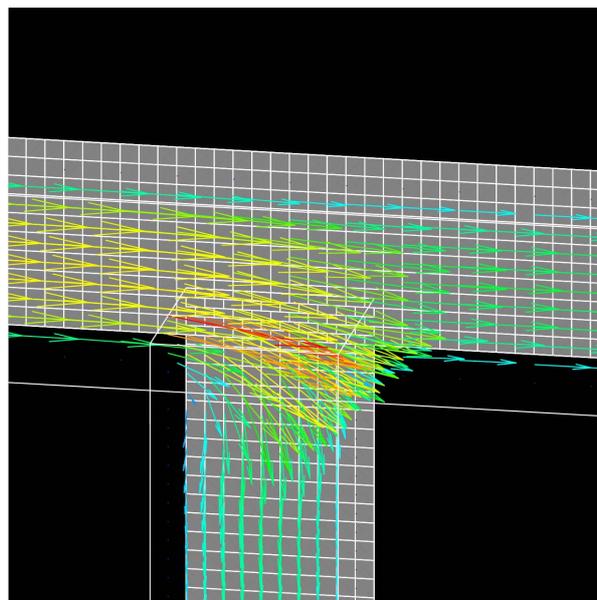


Fig.12 Velocity Vector of 3D Bifurcation

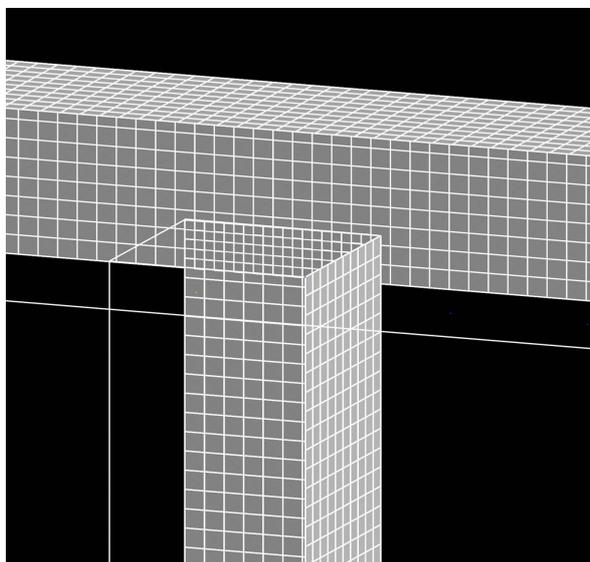


Fig.10 Overlaid Grid of 3D Bifurcation

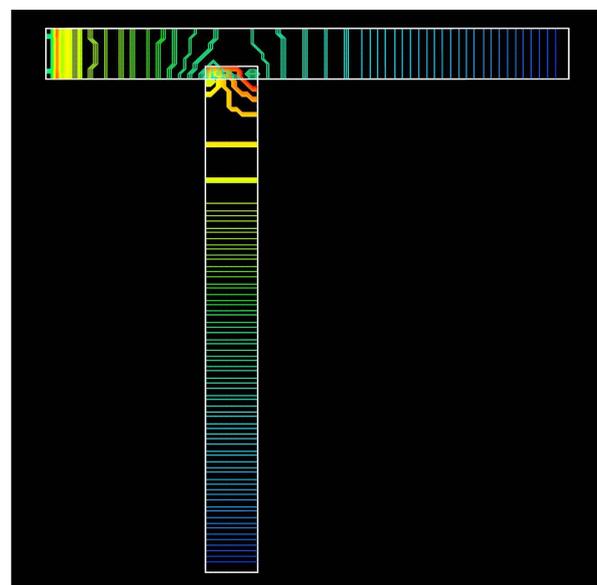


Fig.13 Pressure Profile of 3D Bifurcation

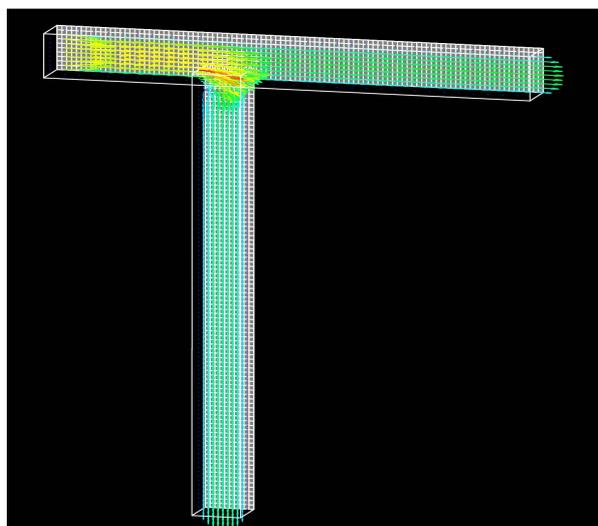


Fig. 11 Velocity Vector of 3D Bifurcation

参考文献

- (1) KozoFujii, "Unified Zonal Method Based on the Fortified Solution Algorithm", Proc. J. of Comp.Phys., Vol.118.,(1995)
- (2) 古山彰一,松澤照男,藤井孝蔵,國藤進, "Zonal 法を用いた分岐部位流れの解析" 第 11 回数值流体力学シンポジウム講演論文集, pp. 433-434.1998
- (3) 中橋和博・藤井孝蔵, "格子形成法とコンピュータグラフィックス", 東京大学出版会,1995