

[共同研究成果]

スタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用した場合の
SIMPLE の並列化特性の比較

松下洋介, 小山敦暢, 齋藤泰洋, 青木秀之, 三浦隆利
東北大学大学院工学研究科化学工学専攻

1. 緒言

マッハ数が十分小さい流れ場では, 流体を非圧縮性流体として取り扱うことが可能であり, 様々な対象がこの仮定の下計算されている. 非圧縮性流体を対象として流動解析を行う場合, 速度場および圧力場の解法には MAC(Marker And Cell)系[1]あるいは SIMPLE(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation)系[2]のスキームが用いられる. これらのスキームは, 速度成分をセル界面に, その他の物理量をセル中心に定義するスタaggerド格子(Staggered grid)[1]上で開発されてきた. しかしながら, これらのスキームを境界適合格子(Boundary Fitted Coordinate, BFC)や非構造格子に適用する場合, 全物理量をセル中心に定義するコロケート格子(Colocated grid)を用いる必要があり, これらのスキームには数々の改良が施されてきた[3].

本研究では, 計算格子にスタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用した場合の SIMPLE の分散メモリ型並列計算機による並列化特性の比較を行う.

2. SIMPLE の定式化

計算格子の概念図を図 1 に示す. 以後, 図 1 に示す表記を用いるものとする.

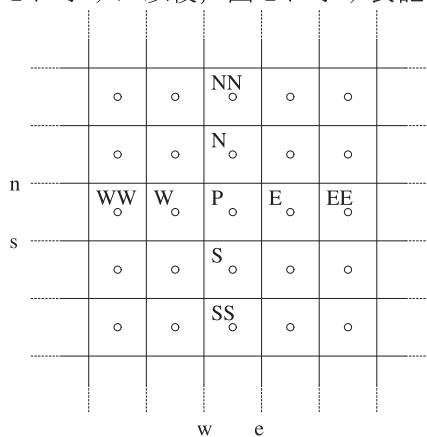


図 1 計算格子の概念図

式(1), (2)および(3)に 2 次元定常状態における連続の式および運動量保存式をそれぞれ示す.

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S'_u \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v v) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S'_v \quad (3)$$

有限体積法に基づき連続の式(1)を離散化すると離散化された連続の式(4)を得る.

$$\left(\overline{\rho_e u_e} - \overline{\rho_w u_w} \right) \Delta y \Delta z + \left(\overline{\rho_n v_n} - \overline{\rho_s v_s} \right) \Delta z \Delta x = 0 \quad (4)$$

以下, 計算格子にスタッガード格子あるいはコロケート格子を用いた場合の定式化を示す.

2.1. スタッガード格子を用いた場合

運動量保存式(2)および(3)を離散化し u および v について整理すると式(5)および(6)を得る. 式(5)および(6)を適当な線形システムの解法を用いて解く. ただし, 圧力 p は一定とする. そのため, 繰り返し計算中における速度場および圧力場は運動量保存式を満たさないため, *により示すものとする.

$$u_w^* = \frac{\sum_{nb} a_{nb} u_{nb}^* + S'_u \Delta V}{a_w} - d_{u,w} (p_P^* - p_W^*) \quad (5a)$$

$$u_e^* = \frac{\sum_{nb} a_{nb} u_{nb}^* + S'_u \Delta V}{a_e} - d_{u,e} (p_E^* - p_P^*) \quad (5b)$$

$$v_s^* = \frac{\sum_{nb} a_{nb} v_{nb}^* + S'_v \Delta V}{a_s} - d_{v,s} (p_P^* - p_S^*) \quad (6a)$$

$$v_n^* = \frac{\sum_{nb} a_{nb} v_{nb}^* + S'_v \Delta V}{a_n} - d_{v,n} (p_N^* - p_P^*) \quad (6b)$$

ここで, $d_{u,w}$ などは d term と呼ばれ[2], 式(7)および(8)に示すとおりである.

$$d_{u,w} = \frac{\Delta y \Delta z}{a_w} \quad (7a)$$

$$d_{u,e} = \frac{\Delta y \Delta z}{a_e} \quad (7b)$$

$$d_{v,s} = \frac{\Delta z \Delta x}{a_s} \quad (8a)$$

$$d_{v,n} = \frac{\Delta z \Delta x}{a_n} \quad (8b)$$

速度場および圧力場が運動量保存式を満たした場合の離散化された運動量保存式を式(9)および(10)に示す.

$$u_w = \frac{\sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + S'_u \Delta V}{a_w} - d_{u,w} (p_P - p_W) \quad (9a)$$

$$u_e = \frac{\sum_{nb} a_{nb} u_{nb} + S'_u \Delta V}{a_e} - d_{u,e} (p_E - p_P) \quad (9b)$$

$$v_s = \frac{\sum_{nb} a_{nb} v_{nb} + S'_v \Delta V}{a_s} - d_{v,s}(p_P - p_S) \quad (10a)$$

$$v_n = \frac{\sum_{nb} a_{nb} v_{nb} + S'_v \Delta V}{a_n} - d_{v,n}(p_N - p_P) \quad (10b)$$

ここで、式(9)および(10)と式(5)および(6)の差をとり、右辺第 1 項がそれぞれ等しいと仮定すると、式(11)および(12)を得る。この仮定は運動量保存式が満たされた場合厳密に成り立つため、解析精度に影響を及ぼさない。

$$u_w = u_w^* - d_{u,w}(p'_P - p'_W) \quad (11a)$$

$$u_e = u_e^* - d_{u,e}(p'_E - p'_P) \quad (11b)$$

$$v_s = v_s^* - d_{v,s}(p'_P - p'_S) \quad (12a)$$

$$v_n = v_n^* - d_{v,n}(p'_N - p'_P) \quad (12b)$$

ただし、 p' は圧力補正值と呼ばれ、式(13)に示す関係を満たす。

$$p = p^* + p' \quad (13)$$

式(11)および(12)を離散化された連続の式(4)に代入し、圧力補正值 p' について整理すると、式(14)を得る。

$$a_P p'_P = \sum_{NB} a_{NB} p'_{NB} + S_{p'} \quad (14)$$

ただし、離散化係数および生成項は式(15)に示すとおりである。

$$a_W = \overline{\rho_w} d_{u,w} \Delta y \Delta z \quad (15a)$$

$$a_E = \overline{\rho_e} d_{u,e} \Delta y \Delta z \quad (15b)$$

$$a_S = \overline{\rho_s} d_{v,s} \Delta z \Delta x \quad (15c)$$

$$a_N = \overline{\rho_n} d_{v,n} \Delta z \Delta x \quad (15d)$$

$$a_P = \sum_{NB} a_{NB} \quad (15e)$$

$$S_{p'} = (\overline{\rho_w} u_w^* - \overline{\rho_e} u_e^*) \Delta y \Delta z + (\overline{\rho_s} v_s^* - \overline{\rho_n} v_n^*) \Delta z \Delta x \quad (15f)$$

式(14)を適当な線形システムの解法を用いて解くことで、圧力補正值 p' を求め、求めた圧力補正值 p' を式(11)、(12)および(13)に代入し、速度場および圧力場を改善する。連続の式および運動量保存式が満たされるまで以上の計算を繰り返す。

2.2. コロケート格子を用いた場合

運動量保存式(2)および(3)を離散化し、 u および v について整理すると式(16)および(17)を得る。式(16)および(17)を適当な線形システムの解法を用いて解く。ただし、圧力 p は一定とする。そのため、繰り返し計算中における速度場および圧力場は運動量保存式を満たさないため、*により示すものとする。

$$u_P^* = \frac{\sum_{NB} a_{NB} u_{NB}^* + S'_u \Delta V}{a_P} - d_{u,P} \frac{p_E^* - p_W^*}{2} \quad (16)$$

$$v_p^* = \frac{\sum_{NB} a_{NB} v_{NB}^* + S'_v \Delta V}{a_p} - d_{v,p} \frac{p_N^* - p_S^*}{2} \quad (17)$$

ここで、 $d_{u,p}$ などは *d-term* と呼ばれ、式(18)および(19)に示すとおりである。

$$d_{u,p} = \frac{\Delta y \Delta z}{a_p} \quad (18)$$

$$d_{v,p} = \frac{\Delta z \Delta x}{a_p} \quad (19)$$

式(16)および(17)はセル中心に定義された速度成分であるため、式(20)および(21)を用いてセル界面の速度を求める。

$$u_w^* = \frac{1}{2}(u_w^* + u_p^*) \quad (20a)$$

$$u_e^* = \frac{1}{2}(u_p^* + u_E^*) \quad (20b)$$

$$v_s^* = \frac{1}{2}(v_s^* + v_p^*) \quad (21a)$$

$$v_n^* = \frac{1}{2}(v_p^* + v_N^*) \quad (21b)$$

速度場および圧力場が運動量保存式を満たした場合の離散化された運動量保存式を式(22)および(23)に示す。

$$u_w = \frac{\sum_{NB} a_{NB} u_{NB} + S'_u \Delta V}{a_p} \Big|_w - \overline{d_{u,w}} (p_p - p_w) \quad (22a)$$

$$u_e = \frac{\sum_{NB} a_{NB} u_{NB} + S'_u \Delta V}{a_p} \Big|_e - \overline{d_{u,e}} (p_E - p_p) \quad (22b)$$

$$v_s = \frac{\sum_{NB} a_{NB} v_{NB} + S'_v \Delta V}{a_p} \Big|_s - \overline{d_{v,s}} (p_p - p_s) \quad (23a)$$

$$v_n = \frac{\sum_{NB} a_{NB} v_{NB} + S'_v \Delta V}{a_p} \Big|_n - \overline{d_{v,n}} (p_N - p_p) \quad (23b)$$

ここで、式(22)および(23)と式(20)および(21)の差をとり、右辺第1項がそれぞれ等しいと仮定すると、式(24)および(25)を得る。この仮定は運動量保存式が満たされた場合厳密に成り立つため、解析精度に影響を及ぼさない。

$$u_w = u_w^* - \overline{d_{u,w}} (p'_p - p'_w) - \overline{d_{u,w}} (p_p^* - p_w^*) + \frac{1}{2} \left(d_{u,w} \frac{p_p^* - p_{wW}^*}{2} + d_{u,p} \frac{p_E^* - p_W^*}{2} \right) \quad (24a)$$

$$u_e = u_e^* - \overline{d_{u,c}}(p'_E - p'_P) - \overline{d_{u,c}}(p_E^* - p_P^*) + \frac{1}{2} \left(d_{u,P} \frac{p_E^* - p_W^*}{2} + d_{u,E} \frac{p_{EE}^* - p_P^*}{2} \right) \quad (24b)$$

$$v_s = v_s^* - \overline{d_{v,s}}(p'_P - p'_S) - \overline{d_{v,s}}(p_P^* - p_S^*) + \frac{1}{2} \left(d_{v,S} \frac{p_P^* - p_{SS}^*}{2} + d_{v,P} \frac{p_N^* - p_S^*}{2} \right) \quad (25a)$$

$$v_n = v_n^* - d_{v,n}(p'_N - p'_P) - \overline{d_{v,n}}(p_N^* - p_P^*) + \frac{1}{2} \left(d_{v,P} \frac{p_N^* - p_S^*}{2} + d_{v,N} \frac{p_{NN}^* - p_P^*}{2} \right) \quad (25b)$$

式(24)および(25)を離散化された連続の式(4)に代入し、圧力補正值 p' について整理すると、式(26)を得る。

$$a_P p'_P = \sum_{NB} a_{NB} p'_{NB} + S_{p'} \quad (26)$$

ただし、離散化係数および生成項は式(27)に示すとおりである。

$$a_W = \overline{\rho_w d_{u,w}} \Delta y \Delta z \quad (27a)$$

$$a_E = \overline{\rho_e d_{u,c}} \Delta y \Delta z \quad (27b)$$

$$a_S = \overline{\rho_s d_{v,s}} \Delta z \Delta x \quad (27c)$$

$$a_N = \overline{\rho_n d_{v,n}} \Delta z \Delta x \quad (27d)$$

$$a_P = \sum_{NB} a_{NB} \quad (27e)$$

$$\begin{aligned} S_{p'} = & \left(\overline{\rho_w u_w^*} - \overline{\rho_e u_e^*} \right) \Delta y \Delta z + \left(\overline{\rho_s v_s^*} - \overline{\rho_n v_n^*} \right) \Delta z \Delta x \\ & + \overline{\rho_e} \left[\overline{d_{u,c}}(p_E^* - p_P^*) - \frac{1}{2} \left(d_{u,P} \frac{p_E^* - p_W^*}{2} + d_{u,E} \frac{p_{EE}^* - p_P^*}{2} \right) \right] \Delta y \Delta z \\ & - \overline{\rho_w} \left[\overline{d_{u,w}}(p_P^* - p_W^*) - \frac{1}{2} \left(d_{u,W} \frac{p_P^* - p_{WW}^*}{2} + d_{u,P} \frac{p_E^* - p_W^*}{2} \right) \right] \Delta y \Delta z \\ & + \overline{\rho_n} \left[\overline{d_{v,n}}(p_N^* - p_P^*) - \frac{1}{2} \left(d_{v,P} \frac{p_N^* - p_S^*}{2} + d_{v,N} \frac{p_{NN}^* - p_P^*}{2} \right) \right] \Delta z \Delta x \\ & - \overline{\rho_s} \left[\overline{d_{v,s}}(p_P^* - p_S^*) - \frac{1}{2} \left(d_{v,S} \frac{p_P^* - p_{SS}^*}{2} + d_{v,P} \frac{p_N^* - p_S^*}{2} \right) \right] \Delta z \Delta x \end{aligned} \quad (27f)$$

式(26)を適当な線形システムの解法を用いて解くことで、圧力補正值 p' を求め、求めた圧力補正值 p' を式(24)、(26)および(13)に代入し、速度場および圧力場を改善する。この際、式(24)および(25)の右辺第2項と第3項の和はゼロと仮定する。連続の式および運動量保存式が満たされるまで以上の計算を繰り返す。

2.3. フローチャート

図 2 に計算格子にスタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用した場合の SIMPLE のフローチャートを示す. さらに, 分散メモリ型並列計算機を用いた並列計算における通信についても併記する. 計算格子にスタaggerド格子とコロケート格子を適用する場合を比較すると, 計算格子にスタaggerド格子を適用する場合と比較して, 計算格子にコロケート格子を適用する場合, d -term の通信を必要とするため, 通信量が多いことがわかる. ここで通信とは, 領域分割により生成する界面間の物理量を各ノード間で交換することを意味する. なお, 計算機には並列コンピュータ TX7/i9610 を用いた.

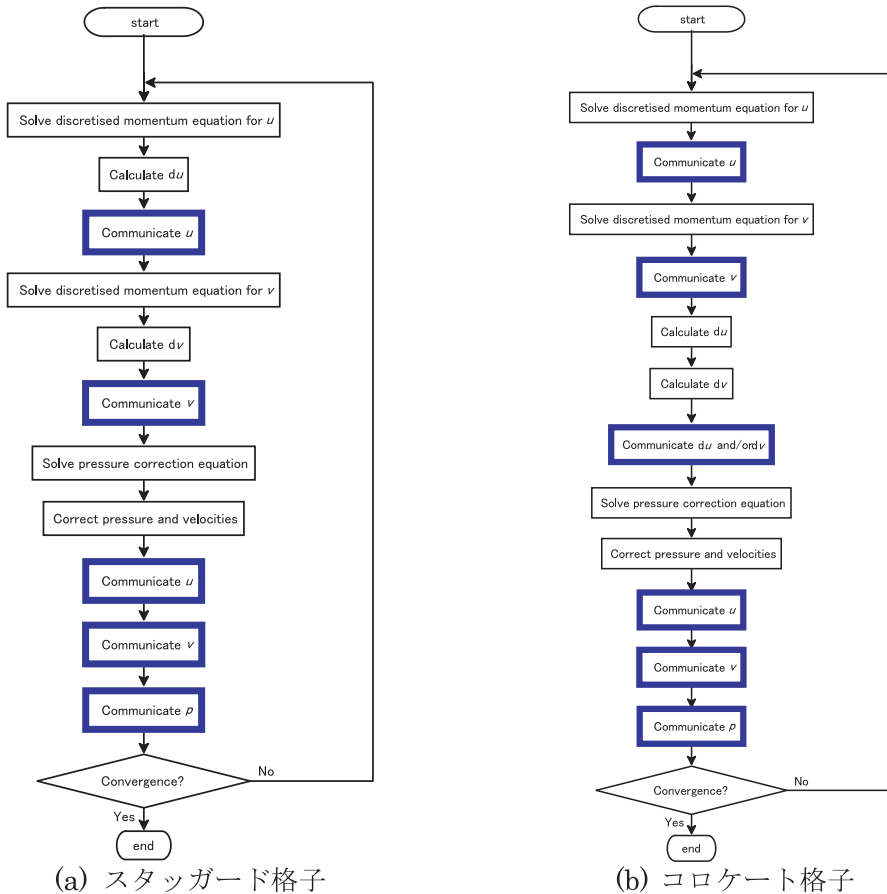


図 2 SIMPLE のフローチャート

3. 解析方法

3.1. 解析対象, 境界条件および解析条件

本研究では, 検証問題としてしばしば用いられる Ghia *et al.* [4]の 2次元正方キャビティ流を対象とする. 図 3 に解析対象の概念図を示す. 上部の壁のみ移動壁($u = u_w$), その他の壁を固定壁とする. 代表長さを L とし, $Re = u_w L / \nu = 1,000$ を解析条件とした.

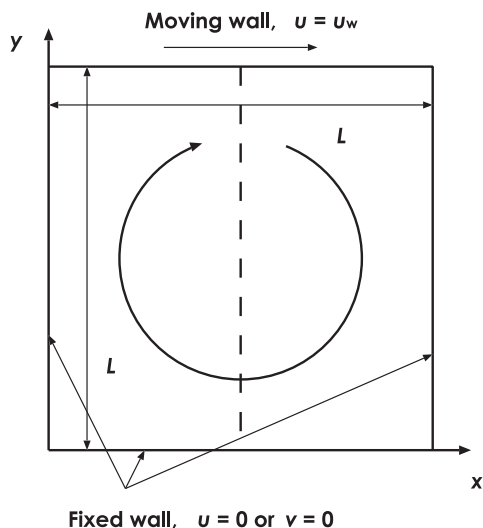


図3 2次元キャビティ流の概略図と境界条件

3.2. 基礎式

直交座標系を用いた場合の定常状態における2次元正方キャビティ流の基礎式は、式(1)に示す連続の式および式(2)および(3)に示す運動量保存式である。

3.3. 数値スキームおよび解法

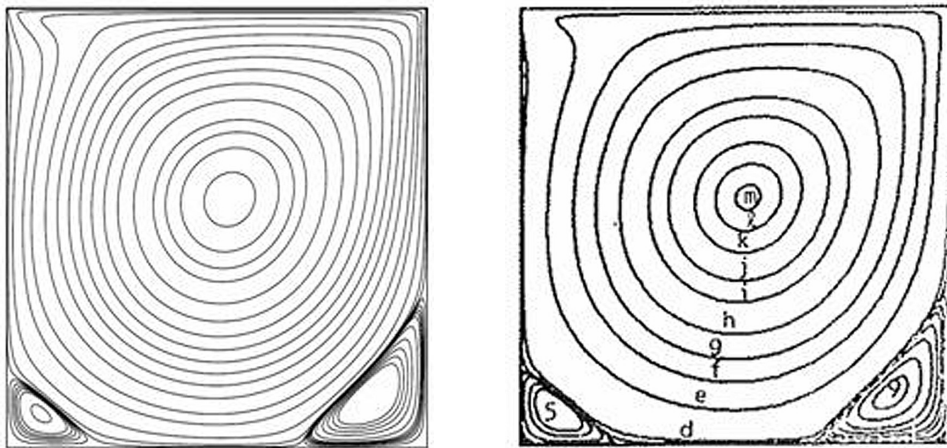
計算格子にはスタaggerド格子(Staggered grid)あるいはコロケート格子(Colocated grid)を適用し、式(1)から(3)に示した基礎式を有限体積法(Finite Volume Method)に基づき、対流項については Pe により2次中心差分法あるいは1次風上法相当の精度を、拡散項については Pe によらず2次中心差分法相当の精度を有するべき乗法(Power law scheme)[5]を用いて対流項および拡散項をそれぞれ離散化した。速度場と圧力場の解法にはSIMPLE(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation)[2]あるいはコロケート格子に適用できるように拡張されたSIMPLE[4]を用いた。収束解が得られるまでTDMA[5]を用いて繰り返し計算を行った。

4. 結果および考察

4.1. 解析精度

4.1.1. 定性的な比較(流線の比較)

図4に結果の一例として、格子分割数を 320×320 とし、計算格子にスタaggerド格子を適用し、8ノード用いた場合に得られる流線をGhia *et al.*の解析結果とともに示す。解析結果は解析対象の中心に大きな渦を、下部左右のそれぞれに小さな渦を形成している。また、定性的な比較ではあるが、解析結果はGhia *et al.*の結果を再現している。

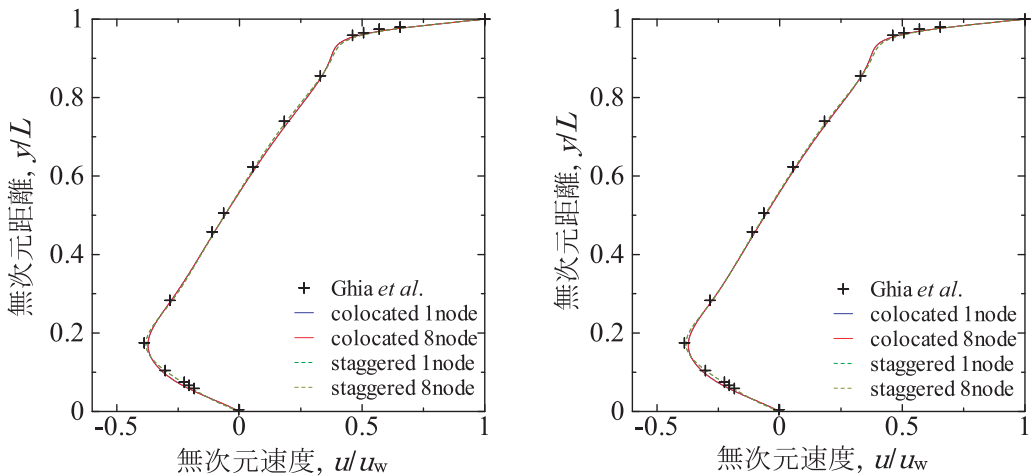


(a) 本研究 (b)Ghia *et al.*

図4 2次元正方キャビティ流の流線

4.1.2. 定量的な比較(速度成分の比較)

図5に格子分割数を 320×320 あるいは 480×480 とし、計算格子にスタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用し、1ノードあるいは8ノード用いた場合に得られる $x/L = 0.5$ における y 方向における無次元距離に対する x 方向無次元速度成分を Ghia *et al.*の解析結果とともに示す。格子分割数を 320×320 とした場合、対流項の離散化には2次中心差分あるいは1次風上法を用いているにもかかわらず、すべての解析結果は Ghia *et al.*の解析結果をほぼ完璧に再現している。これは、 $Re = 1,000$ であるため、数値粘性の影響が顕著にならないことに加えて、格子分割数が十分であることを示している。



(a) 320×320

(b) 480×480

図5 y 方向における無次元距離に対する x 方向無次元速度成分

また、計算格子にスタaggerド格子およびコロケート格子を適用した場合の解析結果が一致していることから、全物理量をセル中心に定義するコロケート格子を用いても計算格子にスタaggerド格子を適用した場合の解析精度を確保することが可能で

あることが示されている. さらに, 計算格子にスタaggerド格子を適用した場合およびコロケート格子を適用した場合, それぞれ1ノードおよび8ノード用いた場合に得られる解析結果に差異がないことから, 並列化を行っても解析精度が低下していないことがわかる. なお, 格子分割数を 480×480 とした場合も格子分割数を 320×320 とした場合と全く同様の結果が得られていることから, 本解析結果は計算格子数に依存しない知見である.

4.2. 収束性

図6に格子分割数を 320×320 あるいは 480×480 とし, 計算格子にスタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用した場合に得られる収束性を示す. なお, ここで収束性とは, n ノード用いた場合に収束解が得られるまでに要する繰り返し計算回数を, 1ノードを用いた場合に収束解が得られるまでに要する繰り返し計算回数で除した値である. 格子分割数を 320×320 とした場合, 収束性の低下はせいぜい1.025程度であり, 並列化が収束性に及ぼす影響は小さい. また, 計算格子にスタaggerド格子を適用した場合と比較して, 計算格子にコロケート格子を適用した場合, 収束性の低下は同程度あるいは若干大きい. 格子分割数を 480×480 とした場合, 格子分割数を 320×320 とした場合と比較して全体的に収束性の低下は小さく, 1.010程度である. また, 格子分割数を 320×320 とした場合と同様に, 計算格子にスタaggerド格子を適用した場合と比較して, 計算格子にコロケート格子を適用した場合, 収束性の低下は若干大きい.

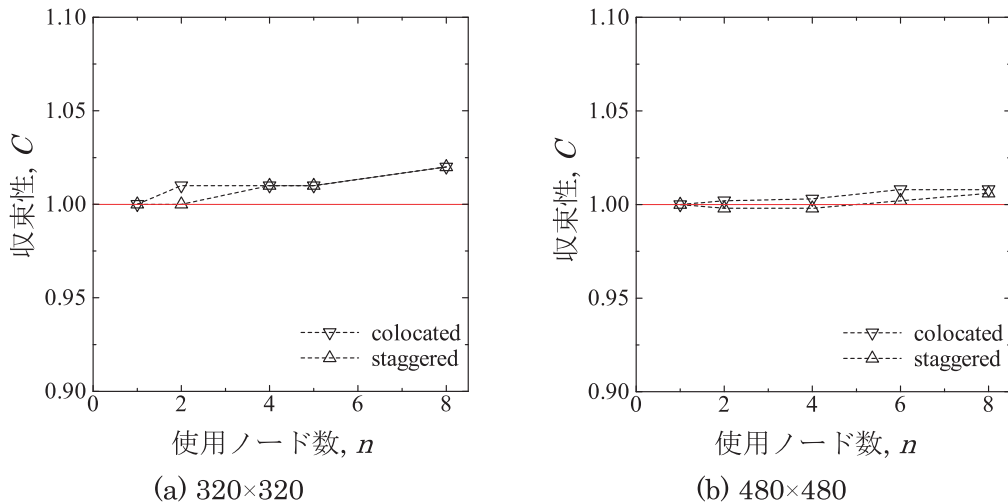


図6 ノード数に対する収束性

4.3. 速度向上度

図7に格子分割数を 320×320 あるいは 480×480 とし, 計算格子にスタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用した場合に得られる速度向上度を示す. 格子分割数を 320×320 とした場合, 計算格子の種類によらず, ノード数の増加に伴い, 速度向上度が低下している. また, 計算格子にスタaggerド格子を適用した場合と比較して, 計算格子にコロケート格子を適用した場合, 速度向上度は若干小さい. 一方, 格子分割数を 480×480 とした場合, 格子分割数を 320×320 とした場合とは異なり, 理論的

な速度向上度を上回る Superlinear Speed と呼ばれる並列化効率を得ることができた。これは、1 ノード用いた計算では、ベクトル化されない、あるいはベクトル化効率の悪いループが、 n ノード用いた計算では、領域分割によりループが小さくなり、ベクトル化効率が向上したためであると考えられる。また、格子分割数を 320×320 とした場合と同様に計算格子にスタaggerド格子を適用した場合と比較して、計算格子にコロケート格子を適用した場合、速度向上度は若干小さい。

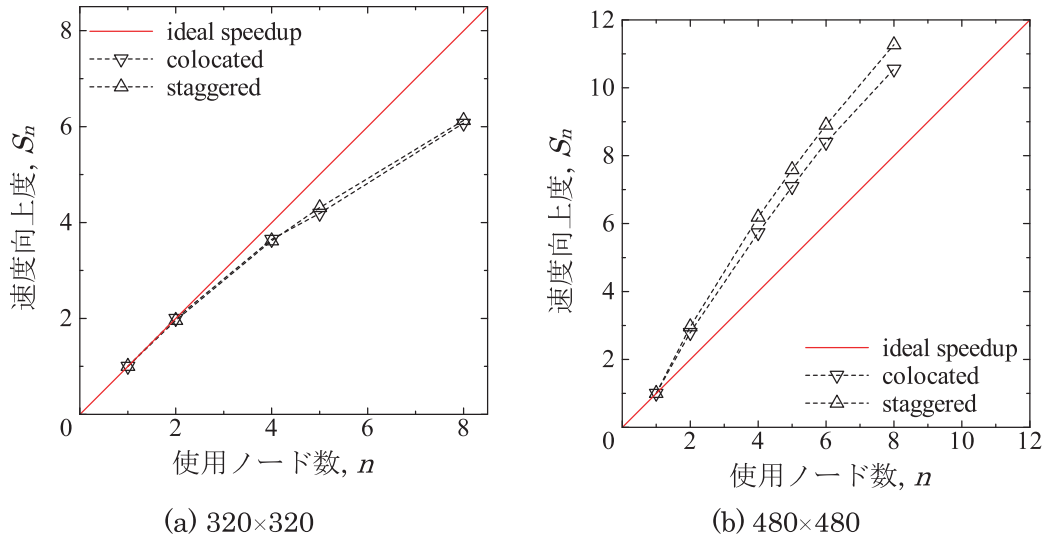


図 7 ノード数に対する速度向上度

5. 結言

本研究では、計算格子にスタaggerド格子あるいはコロケート格子を適用した場合の SIMPLE の分散メモリ型並列計算機による並列化特性の比較を行った。適用する計算格子によらず、8 ノード用いた並列計算における解析結果は 1 ノード用いた解析結果および Ghia *et al.* の解析結果と一致したことから、並列計算においても解析精度を維持していることを確認した。適用する計算格子によらず収束性の低下は小さく、せいぜい 1.025 程度であった。コロケート格子を適用した場合と比較して、スタaggerド格子を適用した場合、速度向上度は大きく、並列計算にはスタaggerド格子を適用する方が優位であることを示した。

記号

a	discretized coefficient	
C	convergence performance	
d	d-term	
L	length	[m]
n	the number of nodes	
p	pressure	[Pa]
Re	Reynolds number	[-]
S	source term or speedup parameter	
u	velocity component for x -direction	[m/s]
V	cell volume	[m ³]

v	velocity component for y -direction	[m/s]
w	velocity component for z -direction	[m/s]
x	coordinate	[m]
y	coordinate	[m]
z	coordinate	[m]

Greek symbols

ϕ	Dependent variable	
μ	fluid viscosity	[Pa·s]
ν	fluid dynamic viscosity	[m ² /s]
ρ	fluid density	[kg/m ³]

Subscripts

E	east (cell center)
e	east (cell face)
N	north (cell center)
NB	near boundary (cell center)
n	north (cell face)
P	present (cell center)
S	south (cell center)
s	south (cell face)
W	west (cell center)
w	west (cell face) or wall

謝辞

本研究は、東北大学情報シナジーセンター(現東北大学サイバーサイエンスセンター)との共同研究として、また、並列計算機 TX-7/i9610 を用いることで実現することができました。同センター関係者に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] F. H. Harlow and J. E. Welch, Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, *Physics of Fluids*, **8(12)**, pp. 2182-2289 (1965)
- [2] S. V. Patankar and D. B. Spalding, A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **15**, pp. 1787-1806 (1972)
- [3] C. M. Rhie and W. L. Chow, Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation, *AIAA Journal*, **21**, pp. 1525-1532 (1983)
- [4] U. Ghia, K. N. Ghia and C. T. Shin, High-Re Solution for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, *Journal of Computational Physics*, **48**, pp. 387-411 (1982)
- [5] S. V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow (Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences), Hemisphere Publishing Corporation, New York (1980)