

## ナビエストークス方程式への連立ILUCGS法適用結果

日立ソフトウェア工場 後 保範 (Yasunori Ushiro)

### 1. はじめに

非定常非圧縮性流体はナビエストークス方程式と連続の式で記述される。直交座標系において各軸方向の速度を $U$ ,  $V$ ,  $W$ とし、圧力を $P$ とすると4つの式が連立した偏微分方程式となる。この式に対して $U$ ,  $V$ ,  $W$ ,  $P$ を一つのブロックとして差分法や有限要素法で離散化すると連続の式のため対角ブロックにオールゼロの行が発生する。このため連立して作成した行列をブロックSOR法等の反復解法で解くことはできない。そこで連続の式を大幅に変更し $U$ ,  $V$ ,  $W$ に対する式は陽解法で、圧力 $P$ 又はその補助変数に対してはポアソン方程式を解くSMAC法等の解法が使用されている。

現在、偏微分方程式向き数値シミュレーション言語DEQSOL (Differential Equation Solver Language)の流体解析機能を強化するため、スタガードメッシュや高次風上差分機能を開発している。DEQSOLでは偏微分方程式をほとんどそのままの形で記述し数値シミュレーションを実行することができる。流体解析でSMAC法等のように原式を大幅に変更するより、直接ナビエストークス方程式が記述できて数値シミュレーションができれば、使い勝手が大幅に向上する。このため、ナビエストークス方程式と連続の式を連立して解く方法を試行してみた。適用した方法はブロック不完全分解付きCGS法 (Conjugate Gradient Squared Method)である。この方法を適用するための問題点はブロック不完全三角分解するとき発生する対角ブロックの逆行列の計算であり、この点に最も工夫を要した。また今回使用した離散化方式は、DEQSOLでスタガードメッシュや高次風上差分機能が開発中のため、レギュラーメッシュで中心差分法を使用した。更に連立離散化機能も使用した。

### 2. 対象とした方程式及び離散化方式

対象とした方程式は非圧縮性流体を $Re$ 数 (レイノルズ数) で基準化したナビエストークス方程式と連続の式である。直交座標系において各軸方向の速度を $U$ ,  $V$ ,  $W$ と書くと体力の働かない場合は次の式で表すことができる。ここで、 $P$ は圧力で、 $VW=(U,V,W)$ とする。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial x} + VV \cdot \text{grad}(U) - \frac{1}{Re} \nabla^2 U = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial y} + VV \cdot \text{grad}(V) - \frac{1}{Re} \nabla^2 V = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial z} + VV \cdot \text{grad}(W) - \frac{1}{Re} \nabla^2 W = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

温度変化で体力が働く場合は (3) 式の右辺に温度に依存した体力  $f$  を与える。ただし 2次元の場合は (2) 式にあてえる。

離散化方式としてレギュラーメッシュで中心差分法を使用し  $U, V, W, P$  を一纏めにした連立離散化方式を使用した。連立離散化して連立ILUCGS法を適用した解法の手順を図1に示す。

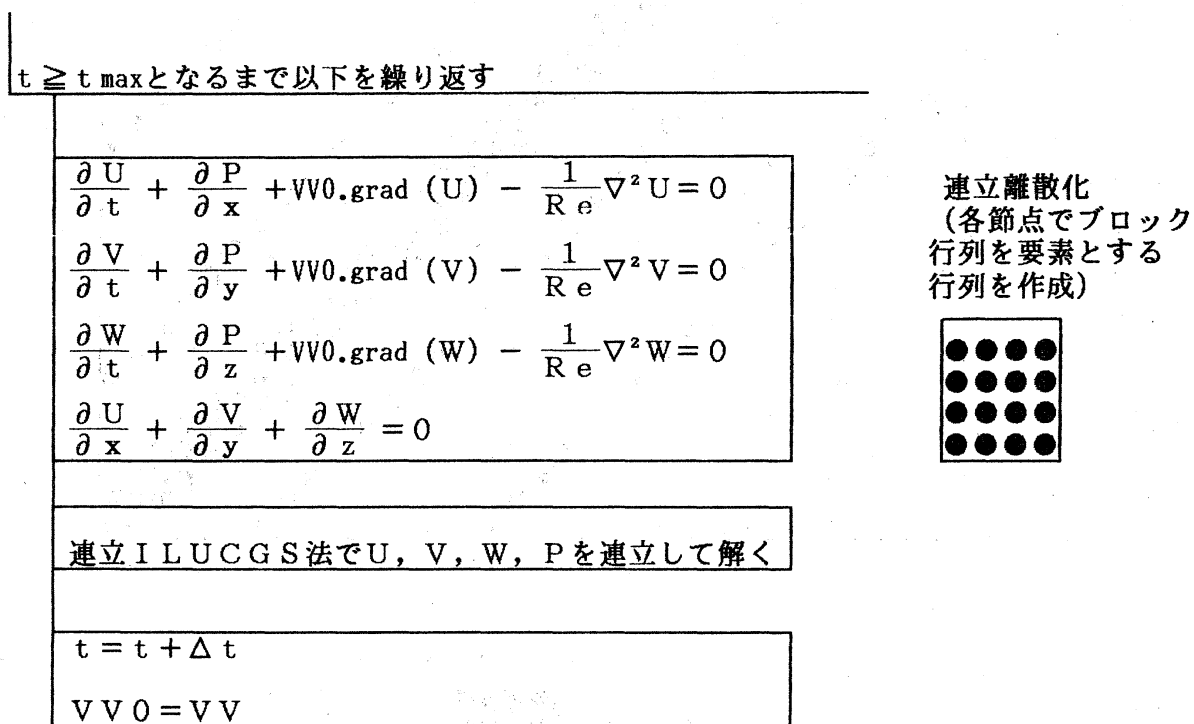


図1. 連立離散化と連立ILUCGS法を適用した解法の手順

( $VV = (U, V, W)$ ,  $VV0 = (U0, V0, W0)$  とする)

図1の方法で3次元の方程式を離散化した連立行列の形を図2に示す。図に示すように行列の各■印は4×4のブロック行列となる。行列中■で示したところ以外はすべてゼロとなる。

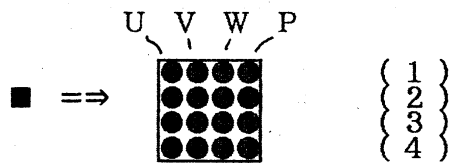
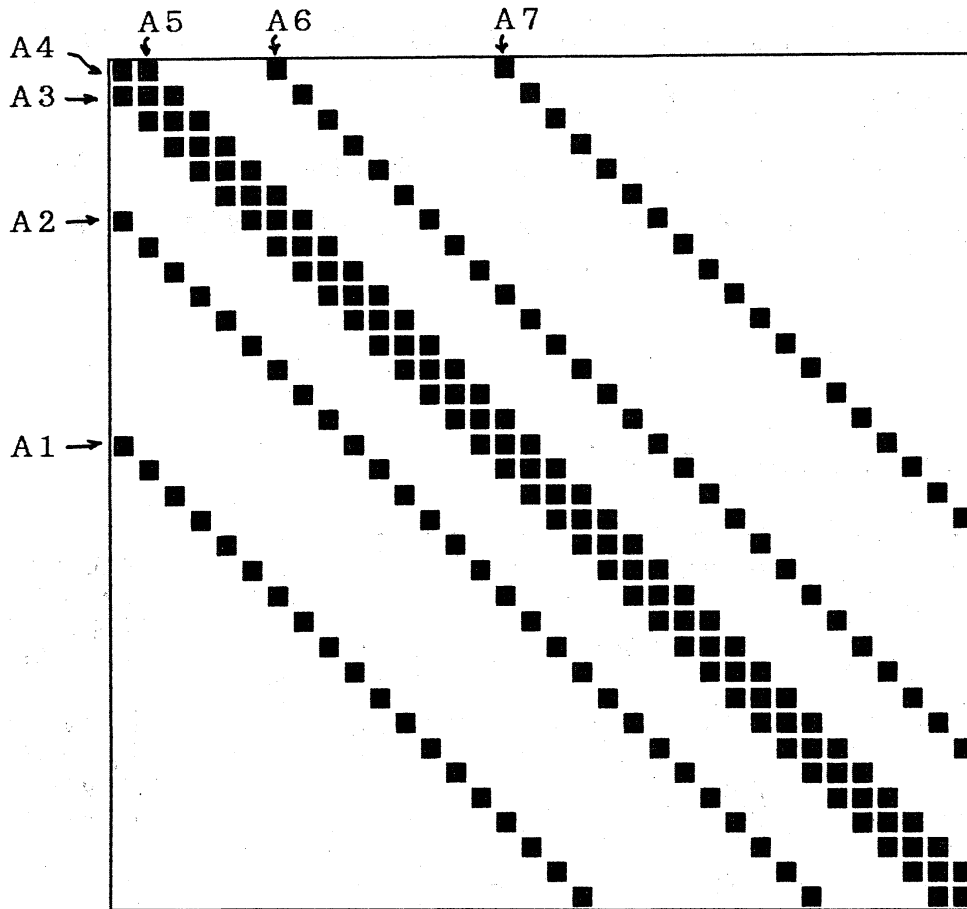
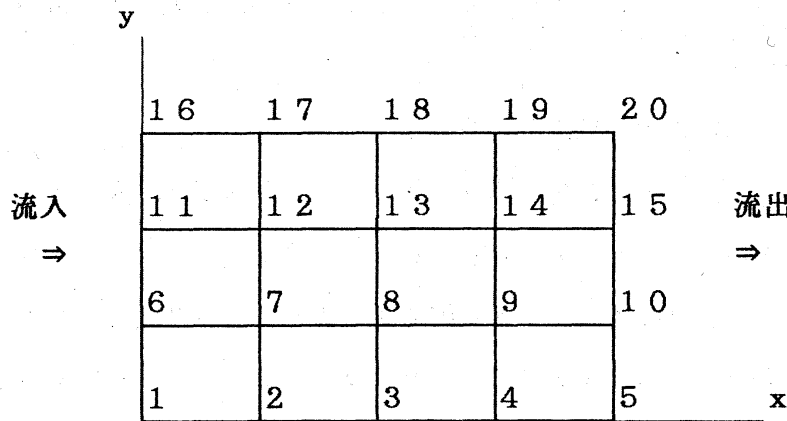


図2. 離散化した連立行列の形 (3次元、全体)

図3に2次元の具体例を示す。x方向(U)に流れる場合の例で上辺と下辺はU, V共にゼロに固定し、左辺は $V=0, U=U_0(y)$ とし、右辺では $P=0, \partial U/\partial x=0, \partial V/\partial x=0$ の境界条件を与える。行列は一部分を示し、行列の上及び左横に示す数字は分割した節点番号に対応する。また\*はゼロ以外の値を、スペースはオールゼロを示す。



	6	7	8	9	10	11	12	13	14
6	1 0 0 0 1 0 * 0 0	0 0 0 0 0 0 * 0 0				0 0 0 0 0 0 0 * 0			
7	* 0 * 0 * 0 * 0 0	* 0 * 0 * 0 0 0 0	* 0 * 0 * 0 * 0 0				* 0 0 0 * * 0 * 0		
8		* 0 * 0 * 0 * 0 0	* 0 0 0 * 0 0 0 0	* 0 * 0 * 0 * 0 0				* 0 0 0 * * 0 * 0	
9			* 0 * 0 * 0 * 0 0	* 0 0 0 * 0 0 0 0	* 0 * 0 * 0 * 0 0				* 0 0 0 * * 0 * 0
10				* 0 * 0 * 0 0 0 0	* 0 * 0 * 0 0 0 1	0 0 0 0 0 0 0 0 0			
11	0 0 0 0 0 0 0 * 0				0 0 0 0 0 0 0 0 0	1 0 0 0 1 0 * 0 0	0 0 0 0 0 0 * 0 0		
12		* 0 0 0 * * 0 * 0				* 0 * 0 * 0 * 0 0	* 0 0 0 * 0 0 0 0	* 0 * 0 * 0 * 0 0	
13			* 0 0 0 * * 0 * 0				* 0 * 0 * 0 * 0 0	* 0 0 0 * 0 0 0 0	* 0 * 0 * 0 * 0 0
14				* 0 0 0 * * 0 * 0				* 0 * 0 * 0 * 0 0	* 0 0 0 * 0 0 0 0

図3. 離散化した連立行列 (2次元、一部分)

2次元の場合は一つのブロックが $3 \times 3$ の行列となる。このためU, Vを固定した節点(6と11)では対角ブロックの1行1列と2行2列に1をセットし、それに対応する行列の行要素はすべてゼロにする。又Pを固定した節点(10)では対角ブロックの3行3列に1をセットし、対応する行要素はすべてゼロにする。ここで問題となるのは内点(7, 8, 9, 12, 13, 14)に対応する対角ブロックである。その対角ブロックでは連続の式を離散化して発生する対角ブロックの3行目がオールゼロになる。このため通常のプロック不完全三角分解が不能となる。

### 3. 連立ILUCGS法適用の問題点と対策方法

図2の形に離散化した行列を係数とする連立一次方程式を反復解法で解くのにSOR系の解法では対角ブロックが特異になるため不可能である。そこで連立ILUCGS法を適用することを考えた。連立一次方程式 $Ax = b$ を解く連立ILUCGS法の計算手順を図4に示す。英大文字は行列を、英小文字はベクトルを、ギリシャ文字はスカラー値を示す。

行列Aをブロック不完全LDU分解する

$$r = [LDU]^{-1}(b - Ax)$$

$$p = e = s = r, \quad \mu_1 = (r, r)$$

収束するまで以下を反復計算する

$$q = [LDU]^{-1}Ap$$

$$\alpha = \mu_1 / (q, s)$$

$$h = e - \alpha q, \quad e = e + h$$

$$q = [LDU]^{-1}Ae$$

$$\mu_2 = \mu_1$$

$$x = x + \alpha e, \quad r = r - \alpha q$$

$$\mu_1 = (r, s), \quad \beta = \mu_1 / \mu_2$$

$$e = r + \beta h$$

$$p = e + \beta (h + \beta p)$$

図4. 連立ILUCGS法の計算手順

ここで問題になるのは行列Aの不完全LDU分解である。下三角行列Lは対角ブロックを除き元の行列Aの下三角部分と同一のものとする。上三角行列Uも同様に行列Aの上三角部分と同一のものとする。またLとUの対角ブロックは対角ブロック行列Dの逆行列 $D^{-1}$ とする。対角ブロック行列Dは図2の行列に対して次のように計算する。A1～A7及びDはブロック行列でm1, m2は対角ブロックからのずれの位置を示す。またnはブロック行列の対角ブロック数を示す。

$$D_i = \{A_{4_i} - A_{3_i} \times D_i \times A_{5_{i-1}} - A_{2_i} \times D_{i-m_1} \times A_{6_{i-m_1}} - A_{1_i} \times D_{i-m_2} \times A_{7_{i-m_2}}\}^{-1} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (5)$$

結局ブロック不完全LDU分解の問題点は(5)式に示した対角ブロック行列Dの計算の問題に帰着する。ブロック不完全LDU分解の問題点と対策を表1に示す。

表1. ブロック不完全LDU分解の問題点と対策

項番	問題点	対策
1	対角ブロックにオールゼロの行が発生	$\sigma$ を対角ブロックの行ノルムとし、 $\sigma = 0$ なら $\sigma$ を非対角を含めた行ノルムに変更
2	不完全LDU分解後の対角ブロック行列が特異又は特異に近い	分解後の対角ブロック逆行列を近似逆行列にする ピポット値をPとすると $P/\sigma < \epsilon$ のとき $P = \sigma \times \epsilon \times (Pの符号)$ に置き換える
4	一般に対角優位性がない	対角ブロック $\times (1 + \alpha)$ で対角優位に近づける $\alpha > 0$ とする

問題点1の対角ブロックにオールゼロの行が発生するのは連続の式の離散化のためである。これは、スタガードメッシュや高次風上差分を使用しても同じである。このため特異行列を解除するのに使用する対角ノルムの代わりに一部非対角を含めたノルムを使用した。本対策で値が定まらないのは、特異性の判定を行う $\epsilon$ と対角ブロックを優位に近ずけるパラメータ $\alpha$ の二つである。そこでパラメータ $\epsilon$ と $\alpha$ は数値実験により定めることにした。

4. 連立ILUCGS法のパラメータ $\epsilon$ と $\alpha$ の選定

連立ILUCGS法のパラメータ $\epsilon$ と $\alpha$ は図5に示す3件のテストモデルに適用して選定した。図5のモデル1とモデル2は3次元の問題で非定常の計算解は定常状態に収束する。一方、モデル3は2次元の問題であるが非定常の計算結果はカルマン渦を発生し定常状態にはならない。

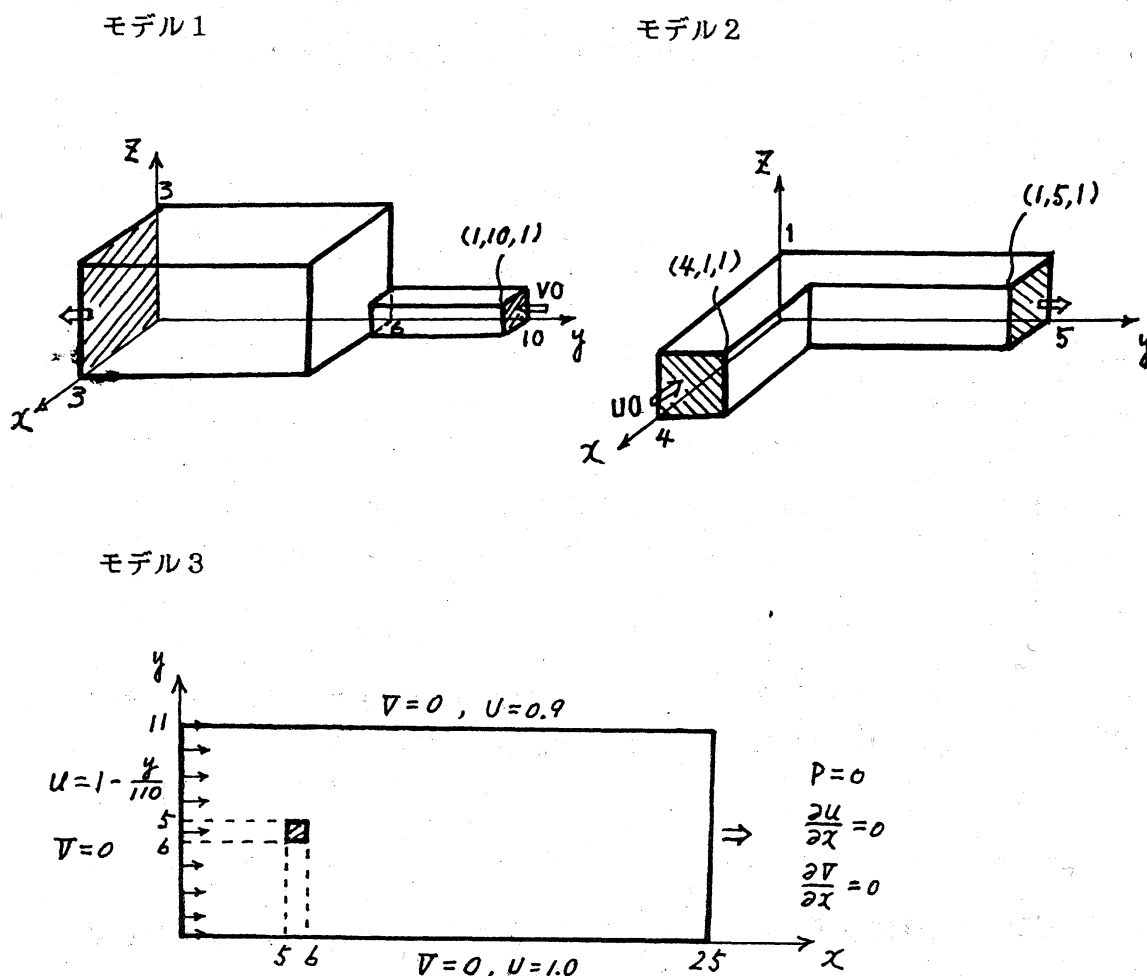
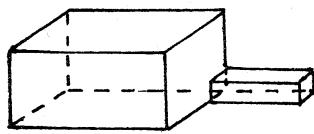
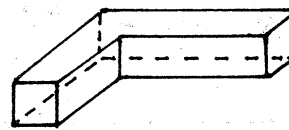


図5. パラメータ $\epsilon$ と $\alpha$ を選定するためのテストモデル

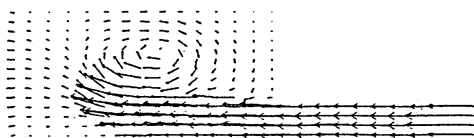
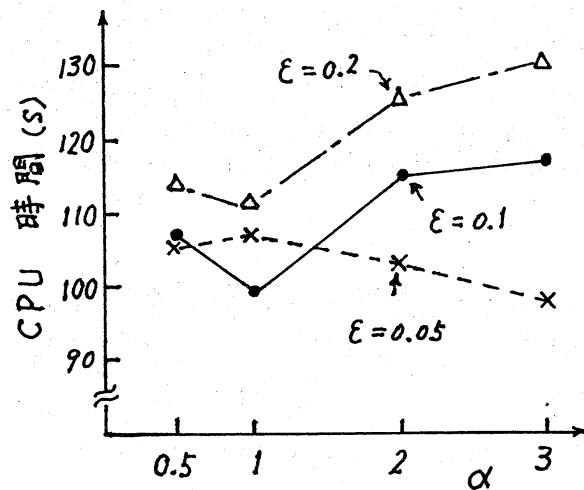
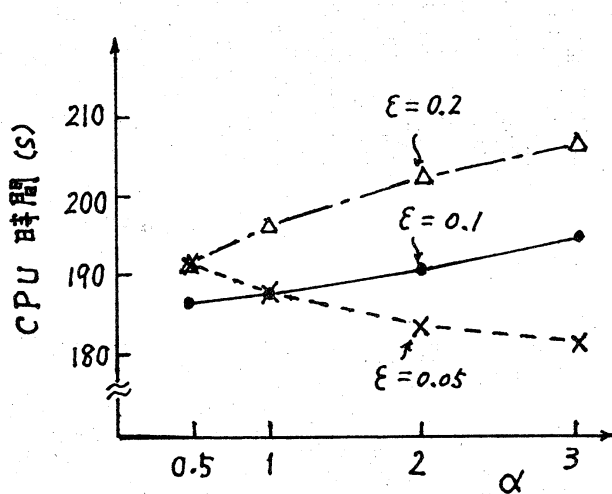
モデル3では、計算誤差でカルマン渦を発生させるのではなく、入口の速度差を主要因としてカルマン渦を発生させるため上、下の速度差を10%とした。パラメータ $\epsilon$ と $\alpha$ を変化させた場合のCPU時間(S-820/80)を、モデル1は図6に、モデル2は図7に、モデル3は図8に示す。またモデル1とモデル2ではすべての計算結果が一致した。モデル3では $\epsilon$ と $\alpha$ の組合せでカルマン渦が発生する場合と、発生しない場合がある。カルマン渦が発生しないものには図8で◇印をつけた。時間きざみ幅 $\Delta t$ はすべて0.1とし、連立ILUCGS法は相対残差ノルムが $10^{-4}$ 以下で打ち切った。図9にモデル3の計算結果の一部を示す。



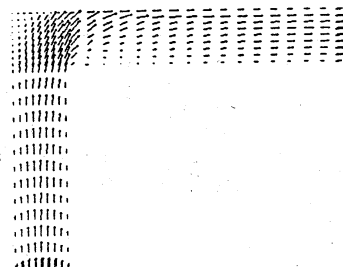
Re = 200  
 $\Delta t = 0.1$ , 200step  
 分割数 =  $15 \times 25 \times 15$



Re = 200  
 $\Delta t = 0.1$ , 100step  
 分割数 =  $22 \times 26 \times 10$



t = 20, x = 0.6の断面ベクトル図



t = 10, z = 0.5の断面ベクトル図

図6. モデル1で $\epsilon$ と $\alpha$ を変化させた結果

図7. モデル2で $\epsilon$ と $\alpha$ を変化させた結果



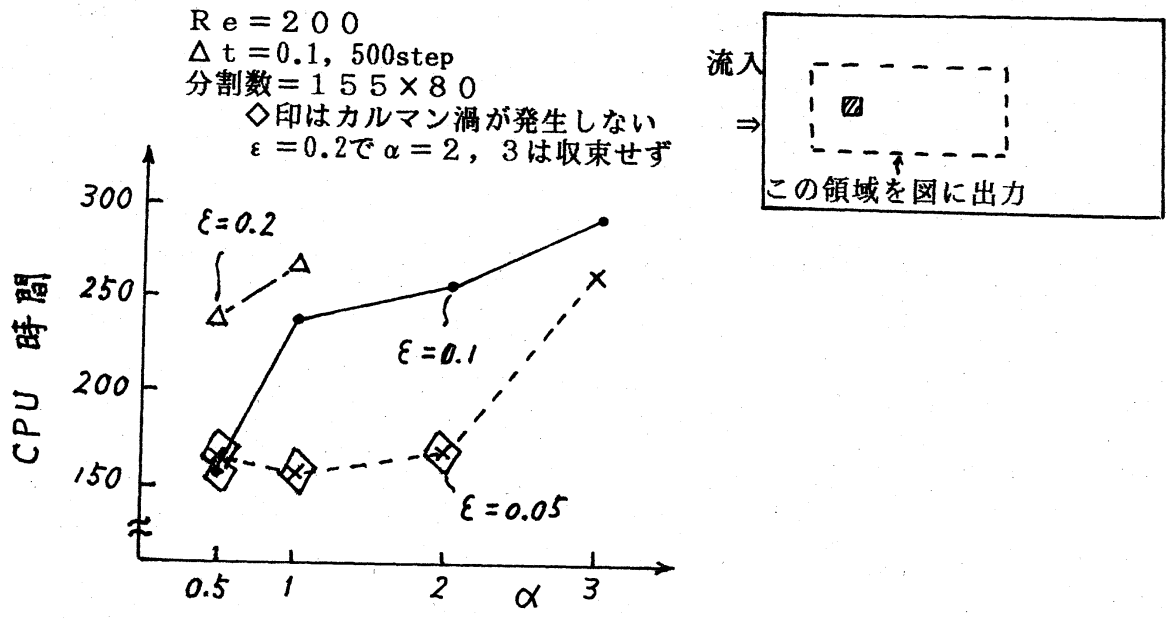


図8. モデル3で $\epsilon$ と $\alpha$ を変化させた場合の計算時間

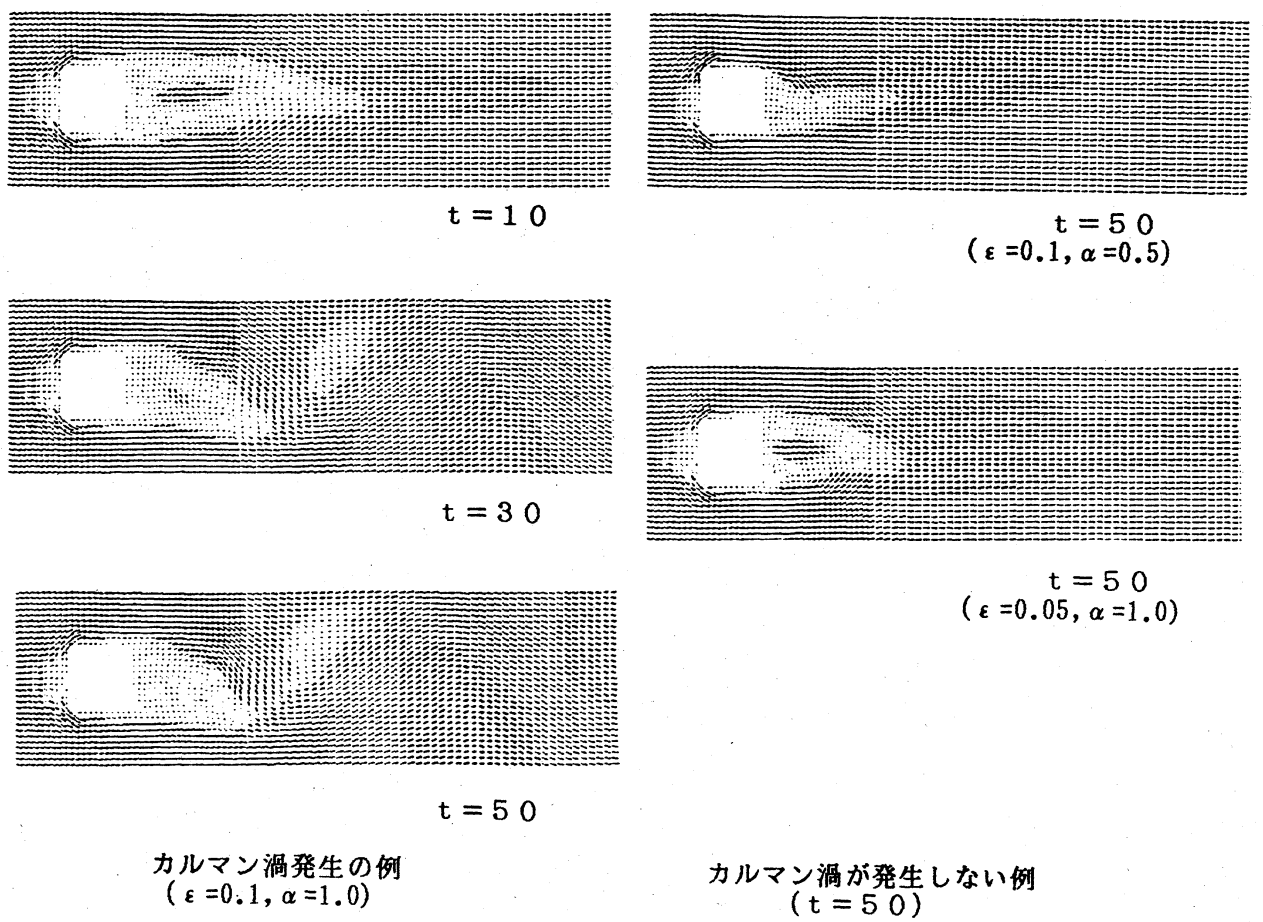


図9. モデル3の計算結果のベクトル図

図6, 図7から  $\epsilon = 0.05$ ,  $\alpha = 3.0$  の組合せが一番高速であり、次いで  $\epsilon = 0.1$ ,  $\alpha = 1.0$  の組合せが高速なことが分かる。図8から定常状態に収束しない場合は計算できる  $\epsilon$  と  $\alpha$  の組合せは少なくなる。このとき  $\epsilon = 0.1$ ,  $\alpha = 1.0$  の組合せがカルマン渦を発生させるうちで一番高速なことが分かる。そこで、今回は  $\epsilon = 0.1$ ,  $\alpha = 1.0$  の組合せを使用することにした。以後の連立ILUCGS法の計算はすべてこの値を使用する。

#### 5. SMAC法との計算時間の比較

今回提案した連立離散化での連立ILUCGS法の性能を評価するため、非圧縮粘性流体でよく使用されるSMAC法と比較した。比較のために使用したSMAC法の計算手順を図10に示す。

$t \geq t_{\max}$  となるまで以下を繰り返す

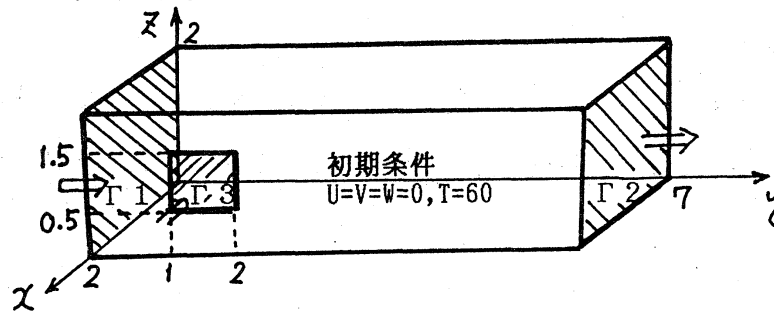
$$\begin{aligned}
 UM &= U0 - \Delta t \left( \frac{\partial P0}{\partial x} + VV0 \cdot \text{grad}(U0) - \frac{1}{Re} \nabla^2 U0 \right) \\
 VM &= V0 - \Delta t \left( \frac{\partial P0}{\partial y} + VV0 \cdot \text{grad}(V0) - \frac{1}{Re} \nabla^2 V0 \right) \\
 WM &= W0 - \Delta t \left( \frac{\partial P0}{\partial z} + VV0 \cdot \text{grad}(W0) - \frac{1}{Re} \nabla^2 W0 \right) \\
 \nabla^2 \phi &= - \left( \frac{\partial UM}{\partial x} + \frac{\partial VM}{\partial y} + \frac{\partial WM}{\partial z} \right) \text{ より } \phi \text{ を PCG 法で計算する} \\
 U &= UM + \frac{\partial \phi}{\partial x} \\
 V &= VM + \frac{\partial \phi}{\partial y} \\
 W &= WM + \frac{\partial \phi}{\partial z} \\
 P &= P0 - \frac{\phi}{\Delta t} \\
 VV0 &= VV \\
 P0 &= P \\
 t &= t + \Delta t
 \end{aligned}$$

図10. SMAC法の計算手順

( $VV=(U,V,W)$ ,  $VV0=(U0,V0,W0)$ とする)

連立 I L U C G S 法と S M A C 法の計算時間を比較するため、図 1 1 に示す 3 件のテストモデルを使用した。モデル A とモデル B は 3 次元のモデルで、モデル A は流れ解析だけで、モデル B はそれに伝熱解析を含めたものである。モデル C は図 5 のモデル 3 と同一である。

モデル A, B の計算領域



モデル A の基礎方程式と境界条件

Re 数で基準化した流れの方程式

境界条件

$$U=0, V=V_0, W=0 \quad \text{on } \Gamma_1$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial y} = \frac{\partial W}{\partial z} = P = 0 \quad \text{on } \Gamma_2$$

$$U=-1, V=0, W=0 \quad \text{on } \Gamma_3$$

$$U = V = W = 0 \quad \text{on 以外}$$

モデル B の基礎方程式と境界条件

Re 数で基準化した流れの方程式の (3) 式に浮力項  $-C(T-60)$  を追加

伝熱の式

$$\partial T / \partial t + \mathbf{V} \cdot \text{grad}(T) - \text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(T)) = 0$$

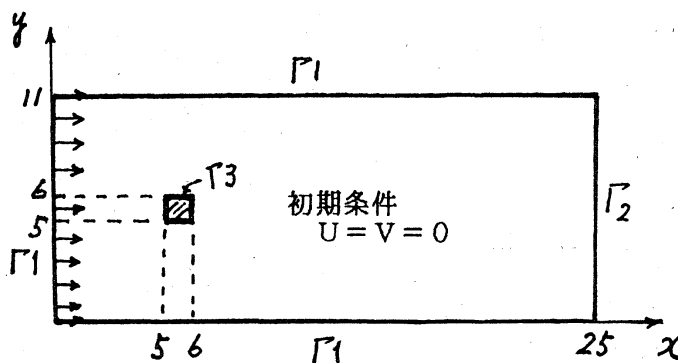
境界条件

流れはモデル A と同じ

$$T=60 \quad \text{on } \Gamma_1, \quad T=100 \quad \text{on } \Gamma_2$$

$$\partial T / \partial n = 0 \quad \text{on 以外}$$

モデル C の計算領域



モデル C の基礎方程式と境界条件

Re 数で標準化した 2 次元の流れの方程式

境界条件

$$U=1-y/110, V=0 \quad \text{on } \Gamma_1$$

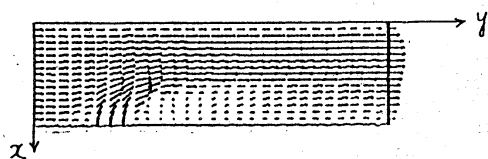
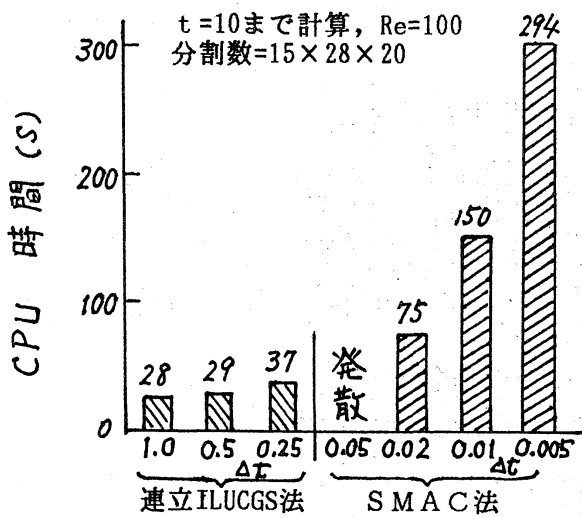
$$\partial U / \partial x = \partial V / \partial x = P = 0 \quad \text{on } \Gamma_2$$

$$U = V = 0 \quad \text{on } \Gamma_3$$

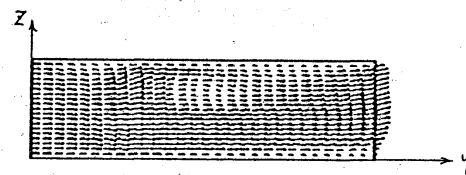
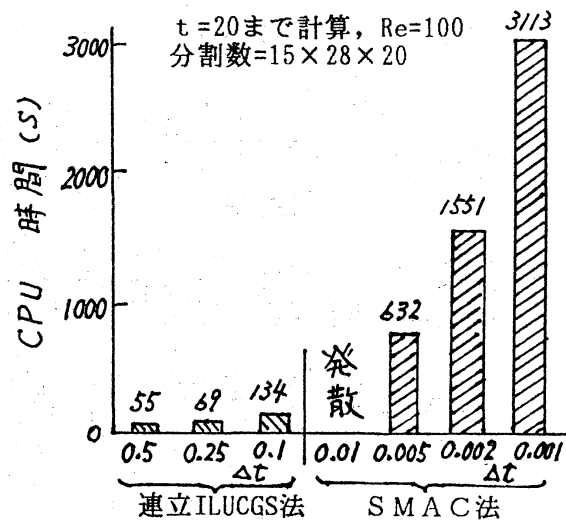
図 1 1. 連立 I L U C G S 法と S M A C 法の比較用モデル

モデルAを使用した連立ILUCGS法とSMAC法のCPU時間 (S-820/80) の比較を図11に示す。モデルBのものを図12に、モデルCのものを図13に示す。

モデルAとモデルBは定常状態に収束するので、結果の断面ベクトル図を同じ図に示す。



t=10でz=1の断面ベクトル図



t=20でx=1.7の断面ベクトル図

図11. 連立ILUCGS法とSMAC法の比較A

図12. 連立ILUCGS法とSMAC法の比較B

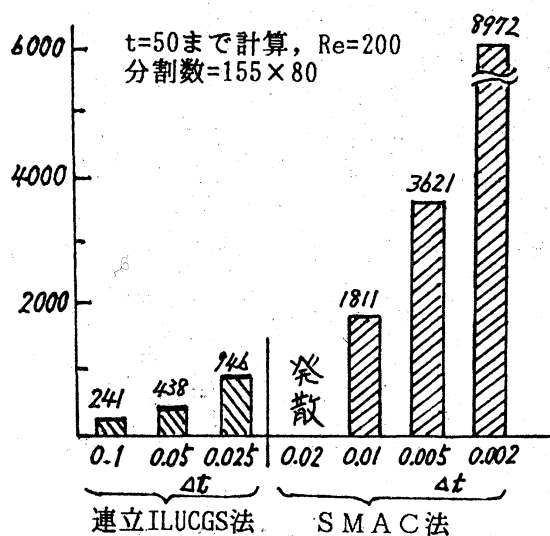


図13. 連立ILUCGS法とSMAC法の比較C

図11, 12, 13から連立ILUCGS法はSMAC法に比較して、きざみ幅で10倍から100倍に、CPU時間で3倍から10倍に短縮できることが分かる。また図11, 12で刻み幅 $\Delta t$ を小さくさせてもCPU時間があまり増加しないのは、連立ILUCGS法の反復回数で調整しているものと考えられる。図14にモデルCで $\Delta t = 0.05$ とし連立ILUCGS法で計算したときの部分ベクトル図を示す。

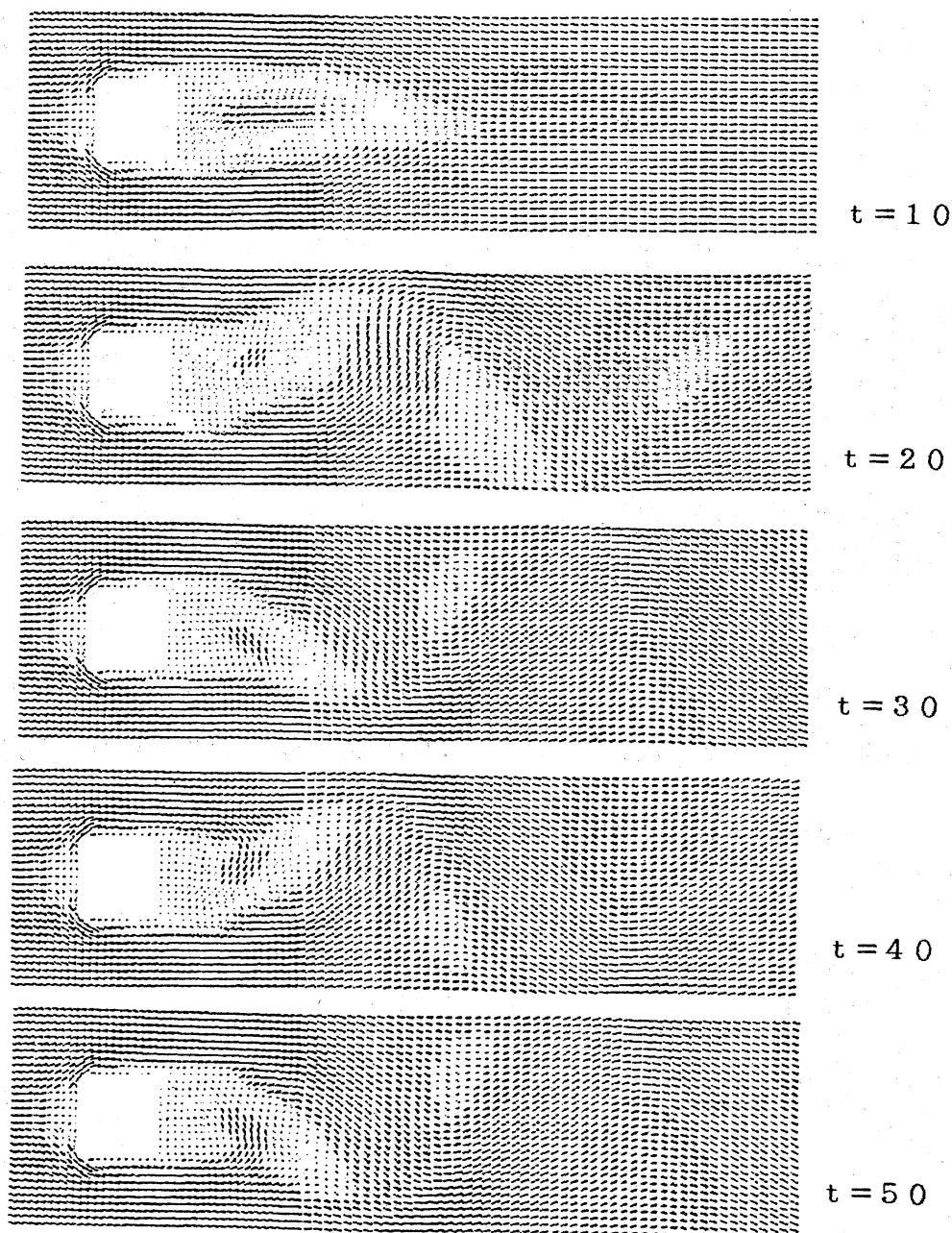


図14. モデルCの連立ILUCGS法による計算結果のベクトル図  
(部分図,  $\Delta t = 0.05$ ,  $Re = 200$ )

モデルCで流入速度を一定とし、レイノルズ数を200から1000に変更してテストした。その結果、連立ILUCGS法では $\Delta t = 0.1$ のきざみ幅でカルマン渦が発生するが、SMAC法では $\Delta t$ をいくら小さくしてもカルマン渦は発生せず、途中計算で発散する。この結果、連立ILUCGS法は自動的に平均操作が入るものと考えられる。

#### 6. おわりに

連立ILUCGS法を使用するとナビエストークス方程式と連続の式をそのまま連立離散化して、低レイノルズ数の流れ解析が可能ながことが判明した。

今回はレギュラーメッシュの差分法を使用した。流体の解析ではスタガードメッシュと3次風上差分法を使用するのが一般的である。このため、今後はスタガードメッシュと3次風上差分法を使用して、高レイノルズ数の問題への適用と評価を行う予定である。また、バウンダリフィット法（一般座標系の差分法）及び有限要素法への適用と評価をする予定である。一方、今回提案した連立ILUCGS法は流れに対して何らかの平均操作が自動的に入るものと考えられる。この平均操作がどのような仕掛けで入り、どのような影響を与えるのか調査する必要がある。

#### 【参考文献】

- 1) 日本機会学会編；数値シミュレーション，コロナ社（1980）
- 2) 後 保範；大型疎行列に対するPCG、PCR法、コンピュータロール，NO. 12，日科技研，PP16～22，（1985）
- 3) 後 保範；移流拡散方程式に対するベクトル計算機向きPCG法，京大数理解析講究録，PP147～160（1985）
- 4) 村田健郎外2；スーパーコンピュータ（科学技術計算への適用），丸善（1985）