4D-6　有限要素法DEQSOLの流体ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ向き機能における自動離散化方式

平山裕之　太田忠　武石美以子　佐川暢俊*　荒木憲司*
（日立超ＬＳＩエンジニアリング、＊ 日立製作所）

１．緒　言

現在、筆者らはＤＥＱＳＯＬの流体シミュレーションへの適用を可能とするため、連立陰解法、要素次数の混在などの拡張機能を実現するＤＥＱＳＯＬ有限要素法翻訳プログラムの開発をすすめている。ＤＥＱＳＯＬでは、今回の拡張機能も含め、各種機能を組み合わせた様々な記述が可能であることから、そのすべてを包含したＦＯＲＴＲＡＮコードの自動生成を実現し、高ベクトル化率を達成するには、偏微分方程式の離散化に、通常の人手によるプログラム作成とは異なる種々の工夫が必要となる。

本報告では、今回採用した離散化方式の概要及び性能評価結果について述べる。

２．自動離散化方式の概要

ＤＥＱＳＯＬ有限要素法流体バージョンでは、図１に示す離散化の手順を採用している。ＤＥＱＳＯＬによる各種解法の記述からのＦＯＲＴＲＡＮコード生成を実現するために離散化上工夫した点を各機能対応に以下に示す。

（１）連立陰解法：要素係数マトリクスの分割作成

連立偏微分方程式において、要素係数マトリクス全体を一度に作成せず、特定の式、未知数に着目した部分的な要素係数マトリクスを逐次作成し、全体係数マトリクスに足し込んでいく。（例えば、図２に示すように三角形６節点２次要素で、未知数ｕ，ｖ（２次）、ｐ（１次）を含む式が連立している場合、要素係数マトリクスは１５＊１５になる。２次の重み関数のかかった式Ｆのｕのみに着目した場合には、６＊６の部分要素係数マトリクスになる。）

これにより、ＦＯＲＴＲＡＮコードの最内側ループ中で計算すべき離散式を着目している式、変数によって振り分ける処理が不要になり、コードのベクトル化も容易になる。

$$\mathbf{U}\cdot \mathrm{grad}D \qquad D：未知量，\mathbf{U}=(U,V)：既知量 \qquad ①$$

↓

$$\int_{\Omega}\mathbf{U}\cdot \mathrm{grad}D\,\phi_i\,d\Omega \qquad \phi_i：重み関数 \qquad ②$$

↓

$$\sum_e \int_{\Omega_e}\left(\sum_k \phi_k U_k,\ \sum_k \phi_k V_k\right)\cdot\left(\sum_j \frac{\partial \phi_j}{\partial x}D_j,\ \sum_j \frac{\partial \phi_j}{\partial y}D_j\right)^T \phi_i\,d\Omega \qquad ③$$

↓　　$D=\Sigma\,\phi_j D_j$

$$\sum_e \sum_j \int_{\Omega_e}\left\{\left(\sum_k \phi_k U_k\right)\frac{\partial \phi_j}{\partial x}D_j+\left(\sum_k \phi_k V_k\right)\frac{\partial \phi_j}{\partial y}D_j\right\}\phi_i\,d\Omega \qquad ④$$

↓

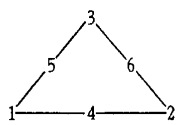
$$\sum_e \sum_j \left[\int_{\Omega_e}\left\{\left(\sum_k \phi_k U_k\right)\frac{\partial \phi_j}{\partial x}\phi_i\,d\Omega\right\}D_j+\int_{\Omega_e}\left(\sum_k \phi_k V_k\right)\frac{\partial \phi_j}{\partial y}\phi_i\,d\Omega\right\}D_j\right] \qquad ⑤$$

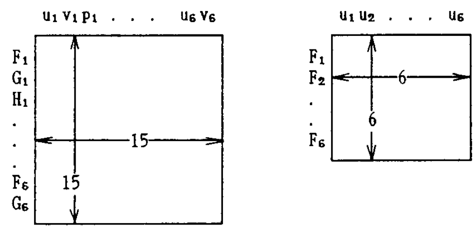
↓

⑤式を評価するＦＯＲＴＲＡＮコードを生成

図１．離散化の手順

$$F(u,v,p)=-\frac{\partial p}{\partial x}+\mu\nabla^2 u=0 \qquad u,\ v：２次$$
$$G(u,v,p)=-\frac{\partial p}{\partial y}+\mu\nabla^2 v=0 \qquad p\quad：１次$$
$$H(u,v)\ =\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0$$





要素係数マトリクス　　部分要素係数マトリクス

図２．要素係数マトリクスの構成

（２）高次要素、次数混在：基底関数による展開のＤＯループによる実現

基底関数による未知量、既知量の展開（Σ_j，Σ_kの展開）は、ＤＥＱＳＯＬトランスレータにおける数式処理のレベルでは行わず、生成ＦＯＲＴＲＡＮコードのＤＯループ及びそれに相当するインライン展開で行う。

数式処理における③式の時点で補間関数による展開を行ってしまうと⑤式に到達するまでに要素の形状、変数の次数などにより多種多様なマトリクス演算が必要になり、また生成するＦＯＲＴＲＡＮコードレベルの離散式も非常に冗長になってしまうが、本方式では、数式処理時に煩雑なマトリクス演算は不要で離散式も単純化できる。

Automatic Discretizing Methods in DEQSOL FEM Fluid Mechanics Version

Hiroyuki HIRAYAMA, Tadasi OHTA, Miiko TAKEISHI, Nobutoshi SAGAWA & Kenji ARAKI
HITACHI VLSI ENGINEERING Ltd.　　*HITACHI Ltd.

（３）ランピング・風上有限要素法：各種手法の数式処理時取り込み

式処理部で、ランピングの場合 $\int \phi i \phi j \, d\Omega$ の ϕj を１に置き換え、風上有限要素法の場合②式において ϕi の代わりに風上用に別の重み付けをした $\phi' i$ を掛ける、という処理を行なう。

このように各手法を数式処理時に取り込んでおくことにより、コード出力部ではどのような手法あるいはその組合せが用いられているかを意識せずにコードを生成できる。

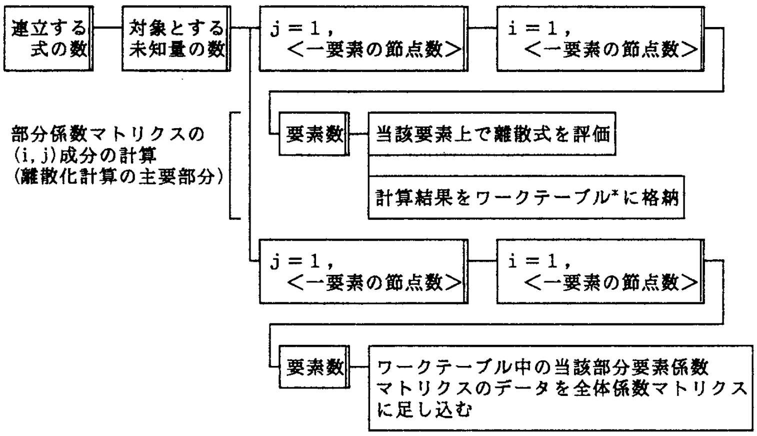
（４）その他：数式処理による内積演算の評価

③式から④式への変換と言ったベクトル・テンソル間の演算を数式処理で積和の形に展開する。

数式処理で内積演算を行う場合、ベクトル・テンソルを含む一般式を扱えるため、任意のベクトル・テンソルを含む形の偏微分方程式の離散化コードの出力が可能になる。また、ループ長の短い内積演算ループが不要なことから、ベクトル化率の高いコードの生成に適している。

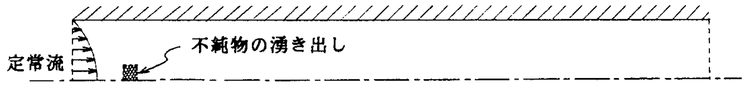
以上述べたように、（１）～（４）を用いることにより、任意の形で記述された偏微分方程式（系）の、各種解法を用いた離散化コードの自動生成が実現できる。また、（２），（４）を用いることによりベクトル化率の高いコードの生成が可能になる。

図３に本離散化方式を用いた生成ＦＯＲＴＲＡＮにおける全体係数マトリクス計算部の処理の流れを示す。ベクトル化率を高めるために、ループ長の長い要素数分のループを最内側に持ってきている。



＊　ワークテーブル：全要素数分の部分係数マトリクスのデータを一時的に保持するテーブル

図３．係数マトリクス計算部処理フロー



$$\partial D/\partial t = (\mathrm{div}(K\ \mathrm{grad}(D)+Q)/\rho - V.\mathrm{grad}(D)$$

ρ：定常流の密度；　V：定常流の速度ベクトル
D：不純物濃度比；　K：拡散係数＊密度
Q：不純物の湧き出し；

図４．非定常移流拡散問題

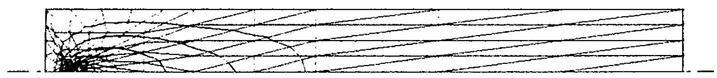


図５．解析結果（不純物濃度の分布）

３．適用・評価結果

性能面の評価を目的として、テストした非定常の移流拡散問題を図４に示す。図５が解析結果の濃度分布を等高線で示したもの、表１が性能評価結果である。要素数２１０と比較的規模の小さい問題であるが、離散化計算部のみで９３．４％のベクトル化率を達成している。

表１．性能評価

項　目	問題規模（要素数）	DEQSOL 記述行数	FORTRAN 生成行数	DEQSOL 翻訳時間	ﾍﾞｸﾄﾙ化率*
非定常移流拡散問題	210	75行	711行	(M680H) 8.25sec	(S810) 93.4%

＊ 離散化計算部のみのベクトル化率

４．結　言

以上、ＤＥＱＳＯＬ有限要素法の流体シミュレーションへの適用を可能とするための離散化方式の概要について述べた。今後は広範囲な分野の実問題への適用を通じて性能評価を進め、生成コードの最適化を図っていきたい。

＜参考文献＞

［１］O.C.ｼﾞｪﾝｷｪｳﾞｯﾁ他：”有限要素と近似”、ﾜｲﾘｰ・ｼﾞｬﾊﾟﾝ、1984
［２］矢川元基：”流れと熱伝導の有限要素法入門”、培風館、1983
［３］平山 他：”有限要素法ＤＥＱＳＯＬの３次元解析機能及び評価”、
情報処理学会第３２回（昭和６１年前期）全国大会、PP.2067-2068(1986)