

文章编号: 0258-1825(2013)02-0225-06

适用于混合网格的并行 GMRES+LU-SGS 方法

康忠良, 阎超

(北京航空航天大学 国家计算流体力学实验室, 北京 100191)

摘要:给出了一种适用于混合网格的并行无矩阵 GMRES+LU-SGS 隐式时间格式。首先采用 LU-SGS 方法迭代若干步以获得一个合适的初场,然后切换到 GMRES 方法在每一时间步内近似求解,并将 LU-SGS 方法作为其预处理器。为加速收敛,将 CFL 数随着残差的降低逐步放大;为减少存储量和计算量,通量 Jacobian 采用无矩阵处理。在保证与串行执行一致的前提下,采用基于共享内存的 OpenMP 方法实现了并行计算,并通过对网格的分组避免了内存争夺。算例验证表明,方法极大地提高了计算收敛效率,并行结果与串行结果完全一致,计算结果与实验结果吻合较好。

关键词:混合网格;并行计算;GMRES;隐式格式;OpenMP

中图分类号:V211.3 **文献标识码:**A

0 引言

在计算流体力学(CFD)的应用中,采用混合网格可以充分利用非结构网格的网格生成优势和类结构网格的计算优势,因此是一种先进有效的方法。但是,由于混合网格单元类型的任意性及拓扑的随机性,因此必须采用无序的非结构方式来存储,从而极大地增加了计算机存储量并降低了计算效率^[1]。为提高计算收敛效率,采用 LU-SGS 和 GMRES 隐式格式及其并行方法一直是一个研究热点^[2-4]。

在并行计算方面,目前大多数 CFD 并行方法都采用基于消息传递的单程序多数据流(SPMD)分布式并行模式,最具代表性的是 MPI 方法。但是采用该模式的问题在于:必须把网格切分为若干个子区并分别存储在不同的处理器节点上,一方面造成了大量的消息数据和分区边界数据需要频繁传递及负载不平衡等问题;另一方面也给不同计算格式的应用带来了很大困难,迫使串行程序必须做大量调整,并且最终还会导致并行结果与串行结果不一致。

Luo^[3]等人采用一种基于共享内存体系结构的 OpenMP 并行计算模式研究了 GMRES+LU-SGS 隐式格式。该研究通过某种方法对网格进行重排序

并将网格在处理器线程间进行划分,计算过程不需要大量信息传递并具有良好的负载平衡性。但是,该方法改变了串行执行顺序,同样造成了并行结果与串行结果的不一致性,实际应用也较为复杂。

因此本文基于混合网格,旨在充分利用 OpenMP 并行方法的优势对 GMRES+LU-SGS 格式进行研究,在不影响串行执行结果的前提下对网格进行分组,从而实现了非关联计算过程的并行执行(非关联计算过程即是改变计算顺序不影响计算结果且并行执行更新相关数据时不会发生内存争夺的计算操作,如两个没有公共单元的控制面的通量计算即为非关联过程)。本文方法实现简单,极大地提高了计算收敛效率,且保证了并行结果与串行结果完全一致。

1 格心有限体积法

本文所有算法构造均基于任意多面体混合网格单元。空间离散采用格心有限体积法,控制体取为网格单元,控制面取为单元表面,流场变量存储在单元中心。

三维非定常可压 NS 方程组的守恒积分形式为

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega} \mathbf{Q} d\Omega + \oint_{\partial\Omega} (\mathbf{F}_c - \mathbf{F}_v) dS = 0 \quad (1)$$

* 收稿日期:2011-11-30; 修订日期:2012-03-12

基金项目:国家重点基础研究发展计划资助项目(2009CB724104)

作者简介:康忠良(1981-),男,山东曹县人,博士研究生,主要研究领域:计算流体力学。E-mail:KZL929@163.com

其中, Ω 为控制体, $\partial\Omega$ 为控制体表面。 \mathbf{Q} 为守恒变矢量, \mathbf{F}_c 为对流通量, \mathbf{F}_v 为粘性通量, 各项的具体描述详见文献[5]。

对流通量采用 Roe^[6]格式离散, 控制面的左右状态采用 Barth^[7]提出的分段线性重构方法求取, 控制体中心梯度采用最小二乘法^[5]计算, 限制器函数采用收敛特性非常好的 Venkatakrisnan^[8]限制器。粘性通量采用中心格式离散, 控制面上的值和梯度根据左右控制体求取。湍流模型采用 Spalart-Allmaras^[9]一方程模型, 湍流方程与平均方程解耦求解。

2 GMRES 隐式时间格式

2.1 隐式格式构造

方程(1)通量项经空间离散后得到

$$\frac{d(V\mathbf{Q})_i}{dt} = -\mathbf{R}_i \quad (2)$$

其中, V 表示体积, \mathbf{R} 表示残差。为构造隐式格式, 对方程(2)采用后向欧拉格式, 可得

$$V \frac{\Delta\mathbf{Q}_i^n}{\Delta t} = -\mathbf{R}_i^{n+1} \quad (3)$$

其中, $\Delta\mathbf{Q}_i^n = \mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n$, \mathbf{R}_i^{n+1} 表示 $n+1$ 时间步的残差, 将其相对 n 时间步残差进行线性化, 方程(3)最终可化为

$$\left[\frac{(V\mathbf{I})_i}{\Delta t_i} + \left[\frac{\partial\mathbf{R}}{\partial\mathbf{Q}} \right]_i \right] \Delta\mathbf{Q}_i^n = -\mathbf{R}_i^n \quad (4)$$

方程(4)左端的中括号内称为隐式算子, 该项是一个不对称大型稀疏分块矩阵, 存储量需求很大, 尤其是通量 Jacobian 矩阵的计算处理极其复杂, 隐式格式的难点也主要在于此。

2.2 GMRES 方法

为便于表示, 方程(4)可简写为

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (5)$$

对于线性系统(5), 设 \mathbf{x}_0 是方程解的初始估计, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ 为初始残差, 称

$$K_m(\mathbf{A}, \mathbf{r}_0) = \text{span}\{\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{m-1}\mathbf{r}_0\}$$

为由 \mathbf{A} 和 \mathbf{r}_0 产生的 Krylov 子空间, m 表示子空间的维数和寻找方向个数。

GMRES 方法就是寻求方程(5)如下形式的近似解

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{z} \quad (6)$$

其中, $\mathbf{z} \in K_m$, 并且满足残差的二范数 $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{z})\|$ 达到最小化。

因此, GMRES 方法主要涉及两方面问题: 一是 Krylov 子空间构造, 可通过类似 Gram-Schmidt 正交

化过程得到; 二是残差最小化, 可对其简化后通过 Given 旋转矩阵方法求解^[5]。

理论上, 对于 n 元线性系统, GMRES 方法可以通过建立 n 个寻找方向得到精确解, 但是由于存储量和计算量会随寻找方向个数的增加呈线性增长, 实际应用中 m 一般取值为 10 到 40 之间, 这样就导致一次 GMRES 计算并不能得到足够的收敛精度, 因此需要将上一次的计算结果作为下一次计算的初始估计, 重启 GMRES 计算。

2.3 通量 Jacobian 的无矩阵处理

前已述及, 通量 Jacobian 矩阵的计算处理复杂且存储量极大, 是隐式方法实施的主要困难。由于 GMRES 方法中该矩阵仅以与 $\Delta\mathbf{Q}^n$ 的乘积形式出现, 不需要显性存在, 因此可以通过简单的有限差分方法对其作一阶近似, 从而实现无矩阵存储, 表示为

$$\frac{\partial\mathbf{R}}{\partial\mathbf{Q}}\Delta\mathbf{Q}^n \approx \frac{\mathbf{R}(\mathbf{Q} + h\Delta\mathbf{Q}^n) - \mathbf{R}(\mathbf{Q})}{h} \quad (7)$$

其中, h 是一个很小的扰动参数, 它的选取与该近似方法的误差有较大关系, 如果 h 取得过大, 近似方法的误差会较大, 如果 h 取得过小, 近似的结果又容易被计算机的舍入误差所污染。本文采用 Nielsen^[10] 提出的确定方法

$$h = \frac{\sqrt{\epsilon}}{\|\Delta\mathbf{Q}^n\|_2}$$

其中, ϵ 为近似机器精度, 取为 1.0×10^{-15} 。

上述无矩阵处理是通过增加通量的计算过程来实现的, 在每次子空间构造迭代和每次 GMRES 重启迭代中都需要执行一次通量计算, 因此一次 GMRES 计算中共需要执行 $m+1$ 次通量计算。

2.4 预处理技术和启动过程

由于方程(4)中隐式算子的谱分布对 GMRES 方法的收敛性具有重要影响, 所以 GMRES 计算之前需要首先对方程(4)进行预处理, 尽可能将隐式算子的特征值处理到趋于 1。考虑 LU-SGS 方法计算效率较高且存储量较小, 本文选用其作为预处理器来改善隐式算子的谱分布。

另外, 虽然理论上 GMRES 方法对时间步长没有限制, 但是由于残差呈高非线性, 并且迭代初场也可能会远远偏离定常状态, 并不能保证取在牛顿迭代的收敛区内, 所以 GMRES 方法执行之前还需要一个启动过程。本文首先采用鲁棒性非常好的 LU-SGS 隐式格式迭代若干步以获得一个合适的初场, 然后将 CFL 数随着残差的降低逐渐增大, 在每一时

间步内采用上述 GMRES 方法近似求解, 如此可大大增强收敛的鲁棒性, 避免在初始阶段计算容易发散的情况。其中, CFL 数根据式(8)来确定。

$$CFL^{n+1} = CFL^n \frac{\|R^{n+1}\|_2}{\|R^n\|_2} \quad (8)$$

3 并行计算方法

OpenMP 方法是一种基于共享内存体系结构的并行计算模式, 所有计算数据统一存储并可被不同处理器线程共享, 因此它不需要对网格进行再切分, 在各种 CFD 计算方法上实现起来非常容易。

3.1 网格分组

前已述及, LU-SGS 方法在本文隐式格式中同时作为启动过程的求解器和 GMRES 计算过程的预处理器, 其实现的主要困难在于混合网格的无序性, 因此计算之前需要对网格进行分组。与文献[11]针对格点格式的分组方法类似, 本文针对格点格式对网格单元进行了分组。如图 1 所示(括号外数字为单元编号, 括号内数字为超平面分组号, 控制面分组用不同符号区分), 网格单元被分为 5 组, 每一组即是一个超平面, 超平面内单元互不邻接, 从而保证 LU-SGS 方法的前后扫描过程可以沿超平面依次进行。

另外, 本文还对控制面进行了分组, 保证同一组内的控制面不存在公共的节点和公共的单元。如图 1 所示, 不同分组用不同符号区分。

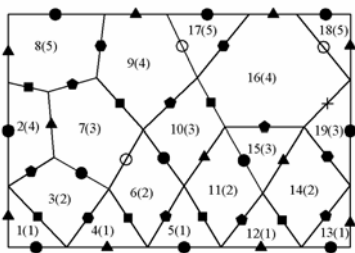


图 1 网格分组举例

Fig. 1 Cell and edge renumbering illustration

3.2 并行方法

由于本文的 CFD 计算过程主要是沿控制体和控制面循环, 并且通过以上对控制体和控制面的分组保证了循环之间不存在数据关联, 因此可以通过 OpenMP 方法把一个循环过程分配给多个线程并行处理, 一方面能够保证与串行结果完全一致, 另一方面也避免了并行处理时的内存争夺。

比如上述的 LU-SGS 方法, 通过分组后网格单元被化分成了若干个超平面, 由于超平面内单元互不邻接, 循环处理某个超平面更新单元数据时便不会出

现内存争夺, 因此可以把超平面内的单元平均分配给多个线程并行处理。再如对于通量计算, 由于同一组内的控制面不存在公共的单元, 因此, 循环处理某个控制面分组更新相关单元通量数据时不会出现内存争夺, 从而可实现多线程并行处理。类似地, 本文 CFD 计算中所有非关联计算过程都采用 OpenMP 方法实现了并行处理。

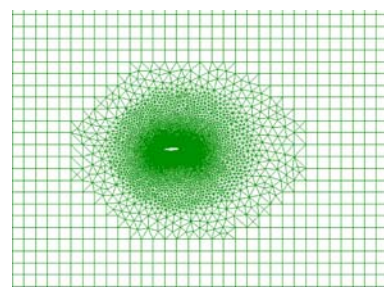
由于本文 OpenMP 方法是对所有非关联计算过程的并行, 这些计算过程改变计算顺序不会影响计算结果, 因此该方法必定能够保证并行结果与串行结果完全一致。

4 算例验证

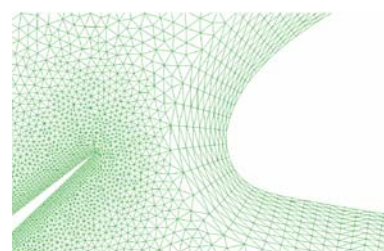
4.1 计算效率验证

为验证上述方法的计算收敛效率, 选用三段翼绕流算例, 实验模型详见文献[12]。

图 2 是对称面网格及壁面附近网格放大图, 外围流场采用笛卡尔网格可提高填充率, 壁面附近采用各向异性网格可有利于边界层粘性计算, 其它中间区域采用各向同性网格过度。由于程序是三维算法, 在展向拉伸出一层网格, 因此实际计算网格包括六面体(共 1673 个)和三棱柱(共 75530 个)。来流马赫数为 0.2, 攻角为 10° , 取前缘缝翼和主翼的综合弦长 c 为特征长度, 雷诺数取为 3×10^6 , 壁面为绝热壁, 远场取到 15 倍综合弦长。



(a) 对称面网格



(b) 壁面附近网格放大图

图 2 三段翼计算网格

Fig. 2 Grid of 3-element airfoil

网格的超平面分布见图 3(每 5 个相邻超平面显示 1 等值线),本文从壁面开始选取第一超平面,直至远场取为最后一个超平面。从图中可见,所选超平面较为平滑,有利于满足隐式算子对角占优。

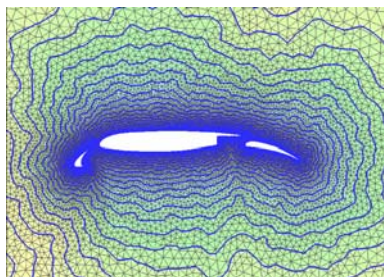


图 3 三段翼超平面分布

Fig. 3 Super face distribution of 3-element airfoil

首先,基于前述 CFD 方法测试 OpenMP 方法的加速效率,在 12 处理器配置计算机上分别采用 1 到 12 个线程计算。定义加速比为串行单步计算时间与多线程并行单步计算时间的比值。加速比结果见图 4,可见加速比与所采用线程数接近于线性关系,12 线程计算相比单线程计算可加速 8 倍左右,说明 OpenMP 方法应用于 CFD 计算的加速效果十分显著。

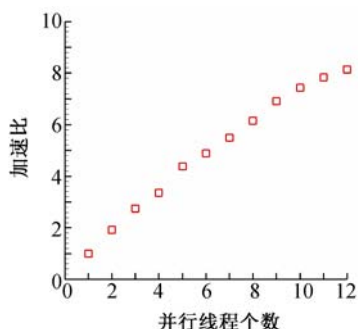


图 4 三段翼计算多线程并行加速比

Fig. 4 Speedups for computation of 3-element airfoil using different processors

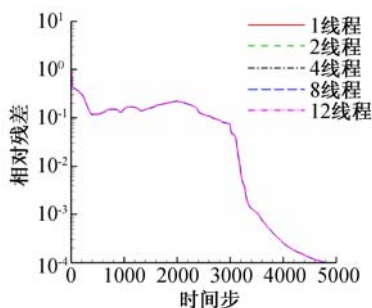


图 5 三段翼不同线程数并行的收敛过程对比

Fig. 5 Residual convergence history for computation of 3-element airfoil using different processors

GMRES+LU-SGS 格式计算中,首先采用 LU-SGS 方法推进 3000 步,然后再切换到 GMRES 方法

继续计算。图 5 对比了不同线程数并行计算的收敛过程,可见本文并行方法对计算结果没有影响,并行结果与串行结果完全一致。

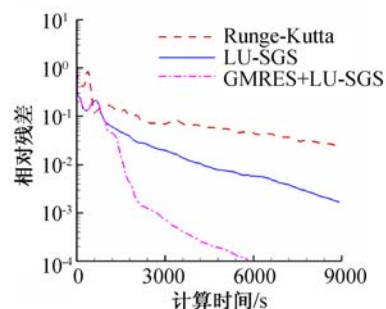


图 6 三段翼不同时间格式收敛对比

Fig. 6 Residual convergence history for computation of 3-element airfoil using different temporal methods

然后,分别采用四步 Runge-Kutta 显式格式、LU-SGS 隐式格式和 GMRES+LU-SGS 隐式格式进行 12 线程并行计算。三种方法收敛过程的对比见图 6(图中 LU-SGS 与 GMRES+LU-SGS 收敛曲线的分叉位置即表示 LU-SGS 方法向 GMRES 方法的切换),可见本文给出的 GMRES+LU-SGS 格式加速收敛效果十分明显。采用 GMRES+LU-SGS 方法计算的等马赫线和壁面压力分布分别见图 7 和图 8。可见亚声速气流在翼型前缘处形成驻点,整个流场结构光滑,符合翼型低速绕流的基本规律。前缘缝翼、主翼和襟翼表面压力均与实验结果吻合较好。

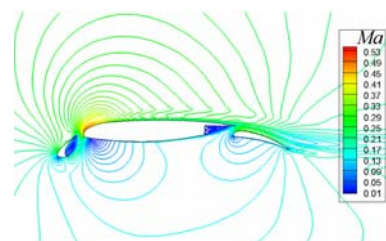


图 7 三段翼对称面等马赫线

Fig. 7 Mach contours of 3-element airfoil

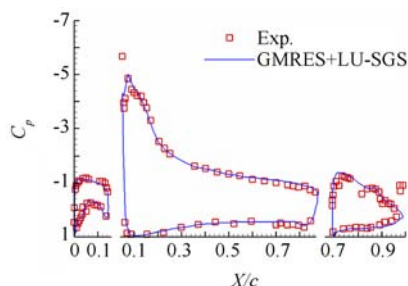


图 8 三段翼壁面压力分布

Fig. 8 Pressure coefficient distribution of 3-element airfoil

4.2 复杂混合网格应用

ONERA-M6 机翼是一个经典的 CFD 验证算

例。图 9 给出了其计算网格，机翼前后缘采用六面体以方便于法向和流向加密，机翼表面其它部分采用三棱柱以方便于法向加密，外围采用四面体填充，四面体与六面体之间用金字塔连接，网格总数为 251 万。来流 Ma 数为 0.8395，攻角为 3.06° ，相对于平均气动弦长 Re 数取为 1.172×10^7 。

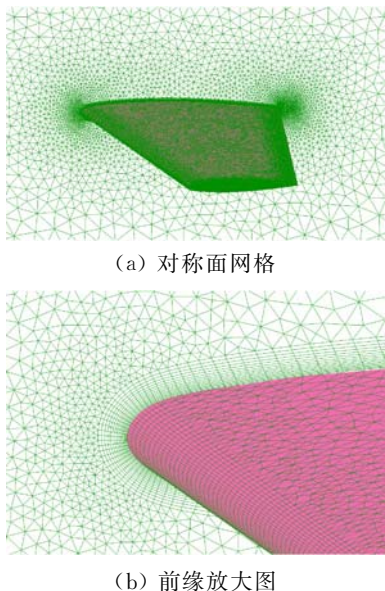


图 9 ONERA-M6 计算网格
Fig. 9 Grid of ONERA-M6

分别采用 LU-SGS 隐式格式和 GMRES+LU-SGS 隐式格式进行 12 线程并行计算，收敛过程对比见图 10，可见单独采用 LU-SGS 格式残差在下降 4 个量级后已经很难再收敛，而采用本文给出的 GMRES+LU-SGS 格式能够较快的收敛到 5 个量级。

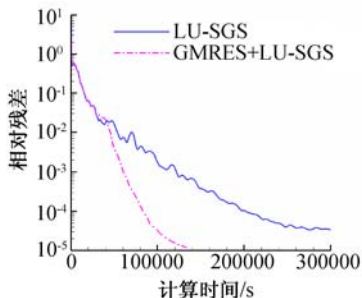


图 10 ONERA-M6 不同时间格式收敛对比
Fig. 10 Residual convergence history for computation of ONERA-M6 using different temporal methods

图 11 是对称面和机翼表面的等密度线分布，可以清晰地看到陡峭的 λ 激波结构。从图 12 可见，壁面压力分布的计算结果与实验吻合较好，前缘吸力峰值和激波位置的捕捉十分准确。

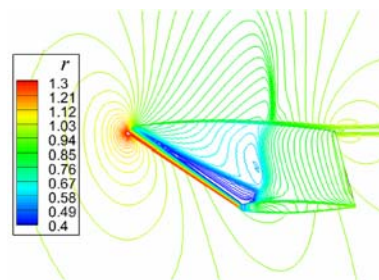
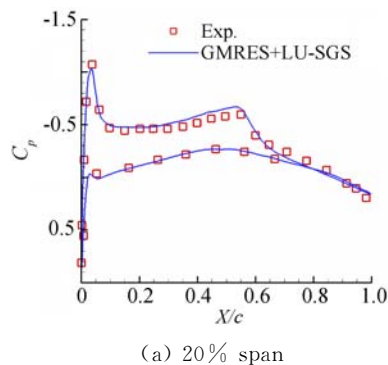
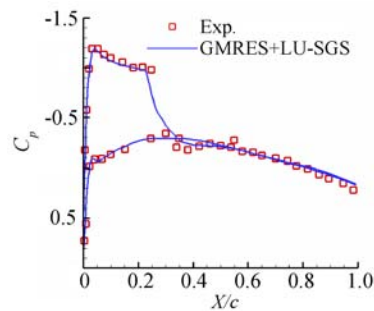


图 11 ONERA-M6 等密度线
Fig. 11 Density contours of ONERA-M6



(a) 20% span



(b) 90% span

图 12 ONERA-M6 壁面压力分布

Fig. 12 Pressure coefficient distribution of ONERA-M6

5 结 论

(1) 对 GMRES 隐式方法采用无矩阵处理，减少了存储量和计算量，并将 LU-SGS 方法用于启动过程和预处理过程，提高了鲁棒性和收敛效率。

(2) 在保证与串行执行一致的前提下，采用基于共享内存的 OpenMP 方法实现了并行计算，该方法使用方便，不需要对网格进行再切分，且能够极大提高计算效率，12 线程并行可加速 8 倍左右。

(3) 通过对控制体和控制面的分组避免了内存争夺，方便了 OpenMP 方法的实施。对控制体分组的超平面较为平滑，有利于满足隐式算子对角占优。

(4) 基于三维混合网格的三段翼绕流计算表明，本文方法加速收敛效果十分明显，并行结果与串行结

果完全一致,计算结果与实验吻合较好,且在 ONERA-M6 机翼复杂混合网格中的应用效果显著。

参 考 文 献:

- [1] DIMITRI J MAVRIPLIS. Unstructured-mesh discretizations and solvers for computational aerodynamics[J]. *AIAA Journal*, 2008, 46(6): 1280-1296.
- [2] CHEN R F, WANG Z J. Fast, block lower-upper symmetric gauss-seidel scheme for arbitrary grids [J]. *AIAA Journal*, 2000, 38(12): 2238-2244.
- [3] HONG LUO, DMITRI SHAROV, JOSEPH D. BAUM. Parallel unstructured grid GMRES+LU-SGS method for turbulent flows[R]. AIAA 2003-273, 2003.
- [4] KRZYSZTOF MICHALAK, CARL F. OLLIVIER-GOOCH. Matrix-explicit GMRES for a higher-order accurate inviscid compressible flow solver[R]. AIAA 2007-3943, 2007.
- [5] BLAZEK J. Computational fluid dynamics principles and application[M]. Elsevier, 2001: 5-430.
- [6] ROE P L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes[J]. *Journal of Computational Physics*, 1981, 43: 357-372.
- [7] BARTH T J, JESPERSEN D C. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes[R]. AIAA 1989-0366, 1989.
- [8] VENKATAKRISHNAN V. Convergence to steady-state solutions of the Euler equations on unstructured grids with limiters[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 118: 120-130.
- [9] SPALART P R, ALLMARAS S R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows [R]. AIAA 1992-0439, 1992.
- [10] NIELSEN E J, W K ANDERSON, R W WALTERS, D E Keyes. Application of Newton-Krylov methodology to a three-dimensional unstructured Euler codes[R]. AIAA 1995-1733, 1995.
- [11] DMITRI SHAROV, KAZUHIRO NAKAHASHI. Re-ordering of 3-D hybrid unstructured grids for vectorized LU-SGS Navier-Stokes computations[R]. AIAA 1997-2102, 1997.
- [12] NAKAYAMA A, KREPLIN H P, MORGAN H L. Experimental investigation of flowfield about a multielement airfoil[J]. *AIAA Journal*, 1990, 28(1): 14-21.

Parallel GMRES+LU-SGS method for mixed grids

KANG Zhong-liang, YAN Chao

(National Laboratory for CFD, Beihang Univ., Beijing 100191, China)

Abstract: A parallel matrix-free GMRES+LU-SGS implicit scheme is presented based on mixed grids. LU-SGS method is employed at the beginning process to obtain a better initial solution, and then switched to GMRES method with LU-SGS as preconditioner. To improve convergence efficiency, the CFL number is increased correspondingly to the reduction of the residual. A matrix-free approach is applied to reduce computational and memory cost. OpenMP method based on shared-memory system is used to achieve parallelization, and a special grids grouping method is applied to avoid memory contention. The numerical results demonstrated that the present methods can improve convergence efficiency greatly, produce exactly the same result as single processor case and show good agreement with experiments.

Key words: mixed grids; parallelization; GMRES; implicit scheme; OpenMP