

文章编号: 0258-1825(2019)01-0121-12

基于雅可比矩阵精确计算的 GMRES 隐式方法 在间断 Galerkin 有限元中的应用

龚小权, 贾洪印*, 陈江涛, 赵 辉, 周桂宇
(中国空气动力研究与发展中心, 四川 绵阳 621000)

摘 要:为改善高阶间断 Galerkin 有限元方法(DG)时间推进效率,在三维非结构网格下针对该方法建立了并行广义最小残差(Generalized Minimal Residual, GMRES)隐式时间迭代方法, GMRES 方法基于科学计算工具包 PETSc 中的 Krylov 子空间求解器实现。为进一步提高 GMRES 的计算效率,发展了方程组右端项残值雅可比精确计算方法,针对无黏通量 Roe 格式和黏性通量 BR2(Bassi Rebay 2)黏性计算方法,分别解析给出其对守恒变量多项式自由度的雅可比矩阵。基于建立的方法首先采用 NACA0012 翼型研究了 GMRES 的重启次数及收敛参数对方法收敛性影响,然后采用无黏及黏性算例对比研究了基于雅可比矩阵不同计算方法的 GMRES 计算效率,同时对比研究了雅可比矩阵完全近似求解下 GMRES 和 LU-SGS(Lower Upper-Symmetric Gauss-Seidel)的计算效率。结果表明,建立的基于右端项残值雅可比矩阵精确求解的 GMRES 方法能够大幅提高不同精度 DG 方法的 CFL (Courant-Friedrichs-Lewy)数,相比前面提到的其它方法具有更高的计算效率,其收敛速度实现量级以上的提高。

关键词:隐式迭代;间断 Galerkin 有限元方法;GMRES;精确雅可比矩阵;计算效率

中图分类号:V211.3;V211.78

文献标识码:A

doi: 10.7638/kqdlxxb-2018.0189

Applications of GMRES based on exact calculations of Jacobian matrix in discontinuous Galerkin methods

GONG Xiaoquan, JIA Hongyin*, CHENG Jiangtao, ZHAO Hui, ZHOU Guiyu
(China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China)

Abstract: To improve iteration efficiency of high-order discontinuous Galerkin finite element (DG) method, an efficient implicit generalized minimal residual (GMRES) method has been applied to DG method based on unstructured grids. The method is implemented by the ksp solver of portable, extensible toolkit for scientific computation (PETSc) library. In order to further improve computational efficiency of GMRES, the exact calculation method of Jacobian matrix is developed. The Jacobian matrix of Roe scheme and bassi rebay 2 (BR2) scheme are exactly obtained for the freedom of conservation variables. The developed method is applied to compute a variety of steady inviscid and viscous flow problems. First, a NACA0012 airfoil is used to study the effect of restarted iteration and convergence parameters on the GMRES convergence. The computational efficiencies of the GMRES based on different calculation methods of Jacobian matrix are compared by the inviscid and viscous examples. The computational efficiencies are also compared for the GMRES and LU-SGS iterative method. The results show that the exact calculation method of Jacobian matrix can greatly increase the CFL number of the GMRES for different DG methods. Compared with other methods, the GMRES based on the exact calculation

收稿日期:2018-09-28; 修订日期:2018-10-22

作者简介:龚小权(1984-),男,重庆潼南人,助理研究员,硕士研究生,研究方向:高阶精度 DG 方法及亚跨超声速计算空气动力学, E-mail: xiaoquan19492002@163.com

通信作者:贾洪印*,男, E-mail: hongyinjia@foxmail.com

引用格式:龚小权,贾洪印,陈江涛,等. 基于雅可比矩阵精确计算的 GMRES 隐式方法在间断 Galerkin 有限元中的应用[J]. 空气动力学学报, 2019, 37(1): 121-132.

doi: 10.7638/kqdlxxb-2018.0189 GONG X Q, JIA H Y, CHENG J T, et al. Applications of GMRES based on exact calculations of Jacobian matrix in discontinuous Galerkin methods[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2019, 37(1): 121-132.

method of Jacobian matrix has higher computational efficiency, and its convergence speed is improved by more than one order of magnitude.

Keywords: implicit iteration; discontinuous Galerkin method; GMRES; exact Jacobian matrix; computation efficiency

0 引言

间断 Galerkin 有限元方法 (Discontinuous Galerkin finite element method, DG)^[1] 是一种适合于非结构网格的高精度格式。Reed & Hill^[2] 在 1973 年将其用于求解中子输运方程问题。DG 方法具有计算精度高, 计算模板紧致, 并行能力强, 自适应方便等优点, 适用于非结构网格, 适合处理复杂外形及复杂边界。作为一种内自由度方法, DG 方法通过提高单元内变量多项式的阶数实现高阶精度, 其内存需求高、计算量大, 随着空间精度的提高, 其内存需求量和计算量非线性增加, 因此发展高阶精度 DG 方法的高效隐式时间迭代方法有重要的学术研究和工程应用价值。

隐式迭代方法需要计算大型的非线性系统, 如何高效求解是其重要研究内容。目前多种隐式迭代方法已成功应用于间断 Galerkin 有限元方法等高阶精度方法, 如 Lower Upper-Symmetric Gauss-Seidel (LU-SGS)^[3-6], GMRES (Generalized Minimal Residual)^[7-9], Implicit Integration Factor (IIF)^[10] 等。非线性系统的计算方法和近似处理方法直接影响高阶 DG 的计算稳定性以及计算效率。

Landmann^[11]、杨小权^[12-13]、程剑^[14] 等在二维非结构网格上通过精确求解右端项残值对变量自由度的雅可比矩阵来提高计算的 CFL, 从而提高 DG 方法在黏性计算的计算效率。

DG 方法是一种内自由度方法, 具有计算模板紧致特点, 这两大特性带来了如下优点:

(1) 单元高斯积分点的变量值来自单元内变量分布多项式, 通过多项式求导能够获取变量值对变量自由度的偏导数, 这使得精确计算无黏通量对变量自由度的雅可比矩阵较为容易。

(2) 单元边界面上变量梯度只与当前单元及其面相邻单元有关, 无需重构, 故能较为简单地精确给出变量梯度对边界面左右变量自由度的偏导数。

基于以上优点, 本文在三维非结构网格基础上, 发展了求解右端项残值雅可比矩阵 (简称残值雅可比) 的精确计算方法, 同时建立了简化计算、部分精确计算方法, 实现雅可比矩阵元素的简化和精确计算, 并在此基础上结合 PETSC (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) 库^[15] 建立了 GMRES

隐式迭代方法。采用 NACA0012 翼型首先研究了每步重启步数及残差收敛参数对基于残值雅可比矩阵精确计算的 GMRES 计算效率影响; 然后采用 NACA0012 翼型、ONERA-M6 机翼比较了基于残值雅可比矩阵精确计算的 GMRES 相比基于矩阵近似计算的 GMRES 以及 LU-SGS/TVD-RK 的计算效率; 最后采用方腔流动以及平板层流边界层验证了本文方法在黏性流数值模拟中的计算效率。

1 数值方法

1.1 控制方程

在直角坐标系下, 三维非定常可压缩 Euler/Navier-Stokes 方程组的守恒形式为:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = i\mathbf{vis}(\nabla \cdot \mathbf{F}_v(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U})) \quad (1)$$

当 $i\mathbf{vis} = 0$ 时为 Euler 方程, $i\mathbf{vis} = 1$ 时为 N-S 方程。式中 $\mathbf{U}$ 为守恒变量, $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = (F^x, F^y, F^z)$ 为无黏通量张量, $\mathbf{F}_v(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}) = (F_v^x, F_v^y, F_v^z)$ 为黏性通量张量, 其具体形式如下:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix}, \mathbf{F}^x = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F}^y = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix}, \mathbf{F}^z = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ (\rho E + p)w \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\mathbf{F}_v^x = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \Theta_x \end{bmatrix}, \mathbf{F}_v^y = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{yz} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ \Theta_y \end{bmatrix}, \mathbf{F}_v^z = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ \Theta_z \end{bmatrix} \quad (3)$$

式中, ρ, p 分别为密度和压力; x, y, z 分别为笛卡尔坐标系下的坐标分量; u, v, w 分别为笛卡尔坐标系下的速度分量; E 为总能; $\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{zz}, \Theta_x, \Theta_y, \Theta_z$ 具体形式见参考文献[16]。

1.2 DG 空间离散

空间离散前首先将整个求解区域划分为互不重叠的非结构单元, 对于三维问题, 包括三棱柱、四面体、六面体和金字塔单元。

令 $ivis=1$, 将方程(1) 两端乘以测试函数 $\phi_i(x, y, z)$, 然后在单元内积分, 并使用分部积分方法可得 DG 的弱形式:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial t} \phi_i d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F} \phi_i d\Omega &= \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F}_v \phi_i d\Omega \\ \int_{\Omega} \frac{\partial U}{\partial t} \phi_i d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \phi_i d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{F} \cdot \nabla \phi_i d\Omega &= \\ \int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_v \cdot \mathbf{n} \phi_i d\Gamma - \int_{\Omega} \mathbf{F}_v \cdot \nabla \phi_i d\Omega \end{aligned} \quad (4)$$

其中, $\mathbf{n}$ 为单元边界面的外法向, $\partial\Omega$ 为单元 Ω 的边界。假设变量在单元内具有分段的多项式分布:

$$U_e = \sum_{j=1}^N u_j^e(t) \phi_j(x, y, z) \quad (5)$$

其中, $u_j^e(t)$ (简称为 u_j) 为单元的自由度, $\phi_j(x, y, z)$ (简称为 ϕ_j) 为单元基函数。将方程(5) 代入方程(4) 的第二个式子, 并令:

$$\begin{aligned} RHS &= RHS_v + RHS_f \\ RHS_v &= RHS_{i-v} + RHS_{v-v} \\ RHS_{i-v} &= \int_{\Omega} \mathbf{F} \cdot \nabla \phi_i d\Omega \\ RHS_{v-v} &= - \int_{\Omega} \mathbf{F}_v \cdot \nabla \phi_i d\Omega \\ RHS_f &= RHS_{i-f} + RHS_{v-f} \\ RHS_{i-f} &= - \int_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \phi_i d\Gamma \\ RHS_{v-f} &= \int_{\partial\Omega} \mathbf{F}_v \cdot \mathbf{n} \phi_i d\Gamma \end{aligned} \quad (6)$$

最后化简得:

$$\mathbf{M} \frac{du_j}{dt} = RHS \quad (7)$$

其中:

$$\begin{aligned} RHS_{i-v} &= \sum_{l=1}^{vp} \omega(l) (\mathbf{F} \cdot \nabla \phi_i) |J_l| \\ RHS_{v-v} &= - \sum_{l=1}^{vp} \omega(l) (\mathbf{F}_v \cdot \nabla \phi_i) |J_l| \\ RHS_{i-f} &= - \sum_{f=1}^{nface} \sum_{k=1}^{fp} \omega_f(k) \mathbf{H}_c \phi_i |J_{fk}| \\ RHS_{v-f} &= \sum_{f=1}^{nface} \sum_{k=1}^{fp} \omega_f(k) \mathbf{H}_v \phi_i |J_{fk}| \end{aligned} \quad (8)$$

$\mathbf{M}$ 为质量矩阵, 其元素为 m_{ij} , RHS_v 、 RHS_f 分别为体积分项残值和面积分项残值, RHS_{i-v} 、 RHS_{v-v} 分别为体积分项残值中的无黏残值和黏性残值, RHS_{i-f} 、 RHS_{v-f} 分别为面积分项残值中的无黏残值

和黏性残值, 四项采用高斯数值积分计算, 如公式(8)。 $\omega(l)$ 、 $\omega_f(k)$ 分别为高斯面积分和体积分加权系数, $|J_l|$ 、 $|J_{fk}|$ 为坐标变化雅可比矩阵行列式。无黏通量和黏性通量面积分项中的 $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$ 、 $\mathbf{F}_v \cdot \mathbf{n}$ 采用数值通量代替, 无黏数值通量 $\mathbf{H}_c$ 采用通量差分分裂 FDS 方法 (Flux Difference Splitting) 和矢通量分裂 FVS 方法 (Flux Vector Splitting) 计算, 黏性数值通量 $\mathbf{H}_v$ 计算方法与选取的黏性计算方法有关。

1.3 DG 时间离散

隐式迭代方法具有较高的效率, 尤其是在高精度计算时, 目前隐式方法主要有直接求解法、近似因子分解法和迭代法三种。直接求解法在求解网格规模较大问题时相当困难, 后两种方法在近四十年间得到了大量的研究, 并在 CFD 中广泛应用。

对方程(7) 采用一阶欧拉后差得到:

$$\begin{aligned} \frac{M}{\Delta t} \Delta u_j^{n+1} &= RHS^{n+1} \approx RHS^n + \frac{\partial(RHS^n)}{\partial u_j^n} \Delta u_j^{n+1} \\ \frac{M}{\Delta t} \Delta u_j^{n+1} - \frac{\partial(RHS^n)}{\partial u_j^n} \Delta u_j^{n+1} &= RHS^n \\ \mathbf{A} \Delta u_j^{n+1} &= RHS^n \end{aligned} \quad (9)$$

方程(9) 的第三项为一大型线性系统 $\mathbf{A}x = \mathbf{B}$, 以三维 DG(P3) 为例, 矩阵 $\mathbf{A}$ 的维数为 $n_{\text{cell}} \times (5 \times 20)$, 其中 n_{cell} 为单元总数, 5 为方程组个数, 20 为 P3 次多项式的自由度, 直接存储该矩阵并且求逆, 其存储量和计算量太大, 一般采用迭代法求解该线性系统。

将残值的面积分项和体积分项带入方程(9) 中第二式的左端 RHS 得:

$$\frac{M}{\Delta t} \Delta u_j^{n+1} - \frac{\partial(RHS_v^n + RHS_f^n)}{\partial u_j^n} \Delta u_j^{n+1} = RHS^n \quad (10)$$

将残值项带入方程(10), 对其采用链式法则得:

$$\begin{aligned} \left[\frac{M}{\Delta t} - \frac{\partial(RHS_{i-f} + RHS_{i-v} + RHS_{v-f} + RHS_{v-v})}{\partial u_j^n} \right] \Delta u_j^{n+1} &= RHS^n \\ \frac{\partial(RHS_{i-f})}{\partial u_j^n} &= \frac{\partial(RHS_{i-f})}{\partial U^n} \frac{\partial U^n}{\partial u_j^n} = \frac{\partial(RHS_{i-f})}{\partial U^n} \phi_j \\ \frac{\partial(RHS_{i-v})}{\partial u_j^n} &= \frac{\partial(RHS_{i-v})}{\partial U^n} \frac{\partial U^n}{\partial u_j^n} = \frac{\partial(RHS_{i-v})}{\partial U^n} \phi_j \\ \frac{\partial(RHS_{v-f})}{\partial u_j^n} &= \frac{\partial(RHS_{v-f})}{\partial U^n} \frac{\partial U^n}{\partial u_j^n} = \frac{\partial(RHS_{v-f})}{\partial U^n} \phi_j \\ \frac{\partial(RHS_{v-v})}{\partial u_j^n} &= \frac{\partial(RHS_{v-v})}{\partial U^n} \frac{\partial U^n}{\partial u_j^n} = \frac{\partial(RHS_{v-v})}{\partial U^n} \phi_j \end{aligned} \quad (11)$$

求解 $\frac{\partial(RHS^n)}{\partial u_j^n}$ 、 RHS_f^n 、 RHS_v^n 的方法影响残差收敛速度, 目前常用的雅可比矩阵求解方法包括解析

方法、无矩阵处理技术等。无矩阵处理技术能够简单统一处理复杂的离散算子,但是由于 DG 方法残差计算复杂且计算量巨大,无矩阵处理过程包含自由参数 ϵ , 处理过程计算量较大,且其为一阶差分近似,对收敛性有一定影响。

在迭代求解 $\mathbf{A}x = \mathbf{B}$ 过程中如果精确给出矩阵 $\mathbf{A}$ 中的矩阵元素,方程两端的匹配性和相容性更好,这将提高求解过程的 CFL 数,增强求解过程稳定性,提高计算效率。

1.3.1 右端项残差雅可比矩阵精确求解方法

在精确求解右端项残差雅可比矩阵时,需确保残值雅可比的无黏通量和黏性通量完全与右端项残值中的通量一致,因此本文针对 Roe^[17] 格式以及 BR2^[18] 黏性计算格式建立对应的雅可比矩阵精确求解方法。

文献[19]给出了 Roe 格式的具体表达形式,由方程(8)的第三式及方程(11)的第二式,通过链式法则求导,

$$\frac{\partial(RHS_{i-f})}{\partial u_j^n} = - \sum_{s=1}^{nface} \sum_{k=1}^{fp} \omega_s(k) \frac{\partial \mathbf{H}_{Roe}}{\partial U} \phi_i |J_{sk}| \phi_j \quad (12)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}_{Roe}(U_L, U_R, \mathbf{n})}{\partial U} = \frac{\partial \left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{F}_c(U_L) + \mathbf{F}_c(U_R) - |\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)] \right\}}{\partial U} \quad (13)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}_{Roe}(U_L, U_R, \mathbf{n})}{\partial U_L} = \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{A}_c(U_L) - \frac{\partial[|\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)]}{\partial U_L} \right\} \quad (14)$$

$$\frac{\partial \mathbf{H}_{Roe}(U_L, U_R, \mathbf{n})}{\partial U_R} = \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{A}_c(U_R) - \frac{\partial[|\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)]}{\partial U_R} \right\} \quad (15)$$

公式(16)中各符号及具体表达式可参看文献[19]。

由上式可知, $\frac{\partial[|\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)]}{\partial U_L}$ 、 $\frac{\partial[|\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)]}{\partial U_R}$

计算是 Roe 格式对应的雅可比矩阵的核心计算工作,按照链式法则,

(1) 首先计算出 Roe 格式中边界面左右的原始变量 ρ, u, v, w, p 以及 V, c, H 对边界面左右守恒变量偏导数;

(2) 然后再计算出 Roe 平均量 $\tilde{\rho}, \tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}, \tilde{H}, \tilde{c}$, $\tilde{V}$ 对边界面左右守恒变量偏导数;

(3) 其次再计算出 $a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, a_8$ 对边界面左右守恒变量的偏导数;

(4) 最后给出 $\frac{\partial[|\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)]}{\partial U_L}$ 、 $\frac{\partial[|\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L)]}{\partial U_R}$,

并依据式(14)、(15)给出对应的最后的无黏通量的雅可比矩阵。

黏性通量的雅可比矩阵由于包含了 u, v, w, T 的一阶导数,求解过程相对更复杂。BR2 格式的黏性通量计算表达式如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_v(U_L, U_R, \nabla U_L, \nabla U_R, \mathbf{n}) = \\ \frac{1}{2} (\mathbf{F}_v(U_L, \nabla U_L + \eta_e r_{Lf}) + \\ \mathbf{F}_v(U_R, \nabla U_R + \eta_e r_{Rf})) \cdot \mathbf{n} \end{aligned} \quad (17)$$

对于当前单元 L , 进一步写为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{F}_v(U_L, \nabla U_L + \eta_e r_{Lf}, \mathbf{n})}{\partial u_j^L} = \\ \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial U_L} \frac{\partial U_L}{\partial u_j^L} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial (\nabla U_L)} \frac{\partial (\nabla U_L)}{\partial u_j^L} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial r_{Lf}} \frac{\partial r_{Lf}}{\partial u_j^L} \\ \frac{\partial \mathbf{F}_v(U_R, \nabla U_R + \eta_e r_{Rf}, \mathbf{n})}{\partial u_j^L} = \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial r_{Rf}} \frac{\partial r_{Rf}}{\partial u_j^L} \end{aligned} \quad (18)$$

公式(18)看到, 计算 $\frac{\partial \mathbf{H}_v}{\partial u_j^L}$ 需求出 $\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial U_L}$ 、 $\frac{\partial U_L}{\partial u_j^L}$ 、

$\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial (\nabla U_L)}$ 、 $\frac{\partial (\nabla U_L)}{\partial u_j^L}$ 、 $\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial r_{Lf}}$ 、 $\frac{\partial r_{Lf}}{\partial u_j^L}$ 、 $\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial r_{Rf}}$ 、 $\frac{\partial r_{Rf}}{\partial u_j^L}$ 。按以下过程逐步求解:

(1) 由局部提升算子 r_{Lf} 公式求出所有守恒变量的局部提升算子对各自对应的守恒变量自由度的 $\frac{\partial r_{Lf}}{\partial u_j^L}$ 、 $\frac{\partial r_{Rf}}{\partial u_j^L}$ 。

$$\begin{aligned} \frac{\partial r_{Lf}}{\partial u_j^L} = M^{-1} \sum_{k=1}^{fp} - \frac{1}{2} \mathbf{n}_f \phi_{jk}^L \phi_{ik}^L \omega_k |J_k| \\ \frac{\partial r_{Rf}}{\partial u_j^L} = M^{-1} \sum_{k=1}^{fp} \frac{1}{2} \mathbf{n}_f \phi_{jk}^L \phi_{ik}^R \omega_k |J_k| \end{aligned} \quad (19)$$

(2) 计算守恒变量及其方向导数对其守恒变量自由度的偏导数。

$$\begin{aligned} |\mathbf{A}_{Roe}|(U_R - U_L) = \begin{bmatrix} a_4 \\ \tilde{u}a_4 + n_x a_5 + a_6 \\ \tilde{v}a_4 + n_y a_5 + a_7 \\ \tilde{w}a_4 + n_z a_5 + a_8 \\ f' \end{bmatrix} \\ f' = \tilde{H}a_4 + \tilde{V}a_5 + \tilde{u}a_6 + \tilde{v}a_7 + \tilde{w}a_8 - a_1 \frac{\tilde{c}^2}{\gamma - 1} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_L}{\partial u_j^L} &= \phi_j^L, \quad \frac{\partial U_R}{\partial u_j^L} = 0 \\ \frac{\partial U_\xi^L}{\partial u_j^L} &= \frac{\partial \phi_j^L}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial U_\xi^R}{\partial u_j^L} = 0, \quad \xi = x, y, z \end{aligned} \quad (20)$$

(3) 计算 u, v, w, T 对守恒变量的偏导数。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_L}{\partial U_L} &= \left[\frac{\partial (\rho u)_L}{\partial U_L} - u_L \frac{\partial \rho_L}{\partial U_L} \right] / \rho_L \\ \frac{\partial v_L}{\partial U_L} &= \left[\frac{\partial (\rho v)_L}{\partial U_L} - v_L \frac{\partial \rho_L}{\partial U_L} \right] / \rho_L \\ \frac{\partial w_L}{\partial U_L} &= \left[\frac{\partial (\rho w)_L}{\partial U_L} - w_L \frac{\partial \rho_L}{\partial U_L} \right] / \rho_L \\ \frac{\partial T_L}{\partial U_L} &= \frac{\gamma - 1}{R} \left[\frac{\partial (\rho E)_L}{\partial U_L} \frac{1}{\rho_L} - f'' \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{u_L^2 + v_L^2 + w_L^2}{\rho_L^2} - \frac{(\rho E)_L}{\rho_L^2} \right) \frac{\partial \rho_L}{\partial U_L} \right] \\ f'' &= \frac{u_L}{\rho_L} \frac{\partial (\rho u)_L}{\partial U_L} + \frac{v_L}{\rho_L} \frac{\partial (\rho v)_L}{\partial U_L} + \frac{w_L}{\rho_L} \frac{\partial (\rho w)_L}{\partial U_L} \end{aligned} \quad (21)$$

(4) 结合(19)、(20)、(21), 计算 u, v, w, T 的一阶导数对守恒变量自由度的偏导数。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_\xi^L}{\partial u_j^L} &= \left[\frac{\partial (\rho u)_\xi^L}{\partial u_j^L} - \frac{\partial u_L}{\partial u_j^L} \rho_\xi^L - \frac{\partial \rho_\xi^L}{\partial u_j^L} u_L \right] / \rho_L - u_\xi^L \frac{\partial \rho_L}{\partial u_j^L} / \rho_L \\ \frac{\partial v_\xi^L}{\partial u_j^L} &= \left[\frac{\partial (\rho v)_\xi^L}{\partial u_j^L} - \frac{\partial v_L}{\partial u_j^L} \rho_\xi^L - \frac{\partial \rho_\xi^L}{\partial u_j^L} v_L \right] / \rho_L - v_\xi^L \frac{\partial \rho_L}{\partial u_j^L} / \rho_L \\ \frac{\partial w_\xi^L}{\partial u_j^L} &= \left[\frac{\partial (\rho w)_\xi^L}{\partial u_j^L} - \frac{\partial w_L}{\partial u_j^L} \rho_\xi^L - \frac{\partial \rho_\xi^L}{\partial u_j^L} w_L \right] / \rho_L - w_\xi^L \frac{\partial \rho_L}{\partial u_j^L} / \rho_L \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_\xi^L}{\partial u_j^L} &= \frac{1}{\rho_L} \frac{r - 1}{R} \left\{ \frac{\partial (\rho E)_\xi^L}{\partial u_j^L} - f_1 - f_2 \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{(\rho E)_\xi^L}{\rho_L} - (u_L u_\xi^L + v_L v_\xi^L + w_L w_\xi^L) \right) \frac{\partial \rho_L}{\partial u_j^L} \right\} \\ f_1 &= \frac{\partial (\rho E)_L}{\partial u_j^L} \frac{\rho_\xi^L}{\rho_L} + \frac{(\rho E)_L}{\rho_L} \frac{\partial \rho_\xi^L}{\partial u_j^L} - 2 \frac{(\rho E)_L}{\rho_L^2} \rho_\xi^L \frac{\partial \rho_L}{\partial u_j^L} \\ f_2 &= \frac{\partial (\rho u)_L}{\partial u_j^L} u_\xi^L + (\rho u)_L \frac{\partial u_\xi^L}{\partial u_j^L} + \frac{\partial (\rho v)_L}{\partial u_j^L} v_\xi^L \\ &\quad + (\rho v)_L \frac{\partial v_\xi^L}{\partial u_j^L} + \frac{\partial (\rho w)_L}{\partial u_j^L} w_\xi^L + (\rho w)_L \frac{\partial w_\xi^L}{\partial u_j^L} \end{aligned} \quad (23)$$

(5) 结合(23)计算出层流黏性系数 μ_L 对守恒变量自由度的偏导数。

$$\frac{\partial \mu_L}{\partial u_j^L} = \mu_\infty \frac{T_\infty + S_1}{T_\infty^{1.5}} \left(\frac{1.5 T_L^{0.5}}{T_L + S_1} - \frac{T_L^{1.5}}{(T_L + S_1)^2} \right) \frac{\partial T_L}{\partial u_j^L} \quad (24)$$

(6) 结合(23)计算应力张量对守恒变量自由度的偏导数 $\frac{\partial \tau_{\xi\eta}^L}{\partial u_j^L}$ $\xi, \eta = x, y, z$ 。

(7) 按照黏性通量表达式给出 $\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial U_L}, \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial (\nabla U_L)},$

$$\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial r_{Lf}}, \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial r_{Rf}}。$$

(8) 最后按照公式(18)求出黏性通量的雅可比矩阵。

同理求出当前单元相邻一侧单元的黏性通量的面积分项的雅可比矩阵。对于边界单元的边界面, 将其按内部边界来获得无黏通量雅可比矩阵, 并由边界黏性通量获得黏性雅可比矩阵。

采用类似方式计算黏性通量体积分项的雅可比矩阵。 $\frac{\partial (\mathbf{F}_v \cdot \nabla \phi_i)}{\partial u_j^L}$ 计算如下:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{F}_v \cdot \nabla \phi_i)}{\partial u_j^L} &= \frac{\partial (\mathbf{F}_v)}{\partial U_L} \frac{\partial U_L}{\partial u_j^L} + \frac{\partial (\mathbf{F}_v)}{\partial \nabla U_L} \frac{\partial \nabla U_L}{\partial u_j^L} \\ &\quad + \frac{\partial (\mathbf{F}_v)}{\partial R_L} \frac{\partial R_L}{\partial u_j^L} \end{aligned} \quad (25)$$

由方程总体提升算子的计算公式求出 $\frac{\partial R_L}{\partial u_j^L}$ 。

1.3.2 右端项残差雅可比矩阵近似求解方法

为提高计算效率, 方程(11)左端项中的 RHS_{i-f} 采用简单的 LF 数值通量格式。

$$\begin{aligned} RHS_{i-f} &= - \sum_{s=1}^{nface} \sum_{k=1}^{fp} \omega_s(k) \mathbf{H}_{LLF} \phi_i | J_{sk} | \\ \frac{\partial (RHS_{i-f})}{\partial u_j^n} &= - \sum_{s=1}^{nface} \sum_{k=1}^{fp} \omega_s(k) \frac{\partial \mathbf{H}_{LLF}}{\partial U} \phi_i | J_{sk} | \phi_j \end{aligned} \quad (26)$$

在有限体积方法中, 残差中黏性通量的雅可比矩阵采用黏性谱半径简化代替, 本文同样采用类似的方法来处理。

$$\frac{\partial (RHS_{v-f} + RHS_{v-v})}{\partial u_j^n} \approx \Lambda_v \phi_i \phi_j \quad (27)$$

$$\Lambda_v = \frac{1}{\Omega} \sum_{s=1}^{nface} \left[\max \left(\frac{4}{3\rho}, \frac{\gamma}{\rho} \right)_s \left(\frac{\mu_L}{Pr_L} + \frac{\mu_T}{Pr_T} \right)_s S_s \right] \quad (28)$$

其中 Ω 为当前单元的体积, S_s 为当前单元边界面 S 的面积, $nface$ 为当前单元体总的面数, γ 为比热比, Pr 为普朗特数。

将基函数梯度类比为面的法向量, 得到与对流通量雅可比矩阵 $\bar{A}_c$ 类似的矩阵。

$$\frac{\partial (RHS_{i-v})}{\partial u_j^n} = \sum_{l=1}^{vp} \omega(l) \frac{\partial (\mathbf{F}(U_l) \cdot \nabla \phi_i)}{\partial U^n} | J_l | \phi_j \quad (29)$$

1.3.3 GMRES 方法

GMRES 算法是以 Galerkin 原理为基础的 Krylov 子空间投影法, 通过 Arnoldi 过程构造 Krylov 子空间

的正交基,同时求解一个最小二乘法问题在 Krykov 子空间上选择最优解,使得每一步子迭代时的残值模最小。理想状态下 GMRES 具有平方收敛速度,计算效率高。该方法在基于结构网格和非结构网格的有限体积和有限差分方法中得到大量应用。线性系统的收敛速度与左端项系数矩阵的条件数有关,其矩阵条件数越小,收敛速度越快,一般采用预处理方法来改善系数矩阵条件数。本文采用 PETSc 科学计算可移植扩展工具包调用 GMRES 以及预处理技术。

```
For  $l = 1, m$  Do            $m$  次重启迭代
 $v_0 = R - \bar{A}DU_0$        初始残差
 $r_0 = P^{-1}v_0$          预处理
 $b = \|r_0\|_2$ 
 $v_1 = r_0/b$ 
For  $j = 1, k$  Do           内迭代
 $y_{j+1} = \bar{A}v_j$          矩阵向量乘
 $w_{j+1} = P^{-1}y_{j+1}$      预处理
For  $i = 1, j$  Do           Gram-Schmidt
 $h_{i,j} = w_{j+1} \times v_i$ 
 $w_{j+1} = w_{j+1} - h_{i,j}v_i$ 
End Do
 $h_{j+1,j} = w_{j+1}$          Hessenberg 矩阵元素
 $v_{j+1} = w_{j+1}/h_{j+1,j}$    Krylov 向量
End Do
 $z = \min_z \|be_1 - H\hat{z}\|_2$  最小二乘问题
 $DU = DU_0 + \sum_{i=1}^m z_i v_i$  更新逼近解
 $DU_0 = DU$                重启
End Do
```

(30)

对于大型问题,为减小内存开销,一般采用带预处理的重启型 GMRES 算法。本文采用的预处理方法为 ILU0 (incomplete LU factorizations with zero fill-in),预处理矩阵为左端项系数矩阵,算法的具体过程如上所示。

2 数值算例分析

为验证本文发展的基于残值雅可比矩阵精确求解方法的 GMRES 的计算效率,本节采用二维、三维算例,通过比较残差雅可比精确求解方法、残值雅可比近似求解方法以及 LU-SGS 的收敛速度来验证残值无黏项雅可比矩阵精确求解方法和黏性项雅可比矩阵精确求解方法的计算效率。验证算例包括: NACA0012 亚声速无黏绕流、ONERA-M6 机翼亚声速无黏绕流、方腔流动以及平板层流流动。整个测试在中国空气动力研究与发展中心的计算集群上开展,

计算节点为 Intel(R) Xeon(R) E5-2660 V3,主频 2.60 GHz。为方便描述,以 GMRES-Ex、GMRES-Ap、GMRES-Ap1 表示迭代方法为 GMRES 且残值雅可比分别为完全精确求解、完全近似求解以及雅可比中无黏项精确求解和黏性项近似求解;LU-SGS 表示迭代方法为 LU-SGS 且残值雅可比都近似处理; RK 表示显式时间迭代。

2.1 NACA0012 亚声速无黏绕流

本小节以 NACA0012 翼型为例,首先考察本文的 GMRES 方法的重启次数及每步收敛判定系数对计算效率的影响,在此基础上针对本算例选择最佳的重启次数和每步收敛判定系数;然后对比分析不同隐式迭代方法、残值雅可比不同计算方法及显式时间迭代的计算效率。计算网格如图 1,物面共有 398 个单元,对称面共 7020 个三角形单元,通过展向拉伸对称面单元得到三棱柱单元。计算的来流马赫数 $Ma = 0.4$,来流迎角 0° ,计算采用 12 核。分析 GMRES 参数影响时 DG 方法的计算精度为二阶。

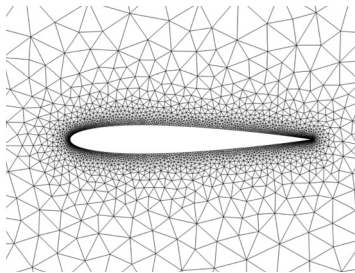


图 1 NACA0012 物面附近计算网格
Fig.1 Mesh near NACA0012 surface

图 2 给出了 GMRES 每步不同重启次数 (Restarted iteration)对密度残值收敛速度影响,此时每步收敛判定系数 $\epsilon_{max}=0.1$ 。从残值随 CPU 计算时间收敛曲线看到,Restarted iteration=5 的收敛速度最慢,当 Restarted iteration ≥ 10 后不同 Restarted iteration 对收敛速度基本没影响。

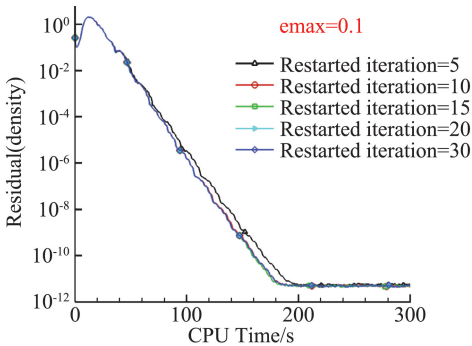


图 2 GMRES 不同重启次数的残值收敛曲线
Fig.2 Residual convergence history for different restarted iterations of GMRES

图 3 给出了 Restarted iteration = 5、15 时 GMRES 每步收敛判定系数对密度残差收敛速度影响。可以看到,不同判定系数对收敛速度有较大影响,随着系数增大,收敛速度明显增大, $\epsilon_{\max}=0.1$ 收敛的总时间约为 $\epsilon_{\max}=0.001$ 的 1/2。同时看到在相同 $\epsilon_{\max}$ 时,Restarted iteration=15 的收敛速度都快于 Restarted iteration=5。故在后面的 GMRES 隐式迭代中,取 Restarted iteration=15, $\epsilon_{\max}=0.1$ 。

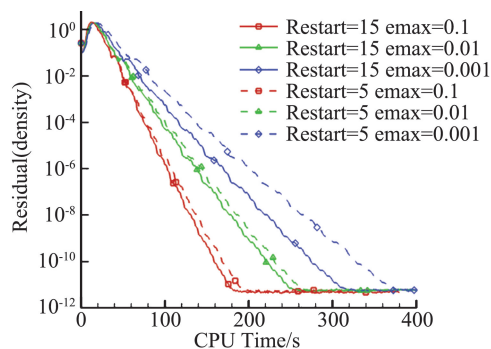


图 3 GMRES 不同收敛判定系数的残值收敛曲线
Fig.3 Residual convergence history for different convergence coefficients of GMRES

图 4 给出了 DG(P1)在 $CFL=1000$ 时不同迭代方法的收敛曲线, CFL 在 1000 步以内从 1 逐渐增大到 1000。GMRES_Ex、GMRES_Ap 和 LU-SGS 三种方法的残值收敛所需的迭代步数远小于显式迭代,GMRES_Ex 隐式迭代所需的迭代步数最小。相同 CFL 下 GMRES_Ex 残值收敛的迭代步数约只有 GMRES_Ap 的 1/5,GMRES_Ap 残值收敛的迭代步数只有 LU-SGS 的 1/3。三种隐式时间迭代的单步计算时间 $GMRES_Ex > GMRES_Ap > LU-SGS$,从残值随计算时间曲线图 5 看,GMRES_Ex 隐式迭代所需的计算时间最小。GMRES_Ex 残值收敛的计算时间约为 GMRES_Ap 的 1/4,GMRES_Ap 残值收敛的计算时间只有 LU-SGS 的 1/2。相比 LU-SGS,

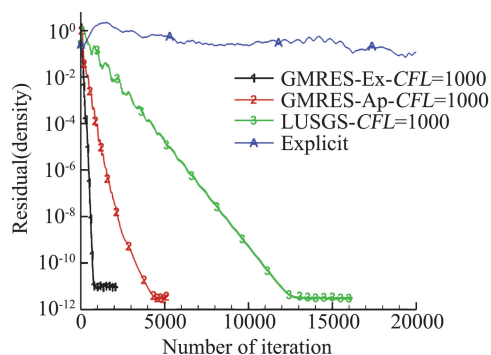


图 4 $CFL=1000$,不同迭代方法残值收敛曲线
(残差与迭代步)

Fig.4 Residual convergence history for different iteration methods (Res. vs. step)

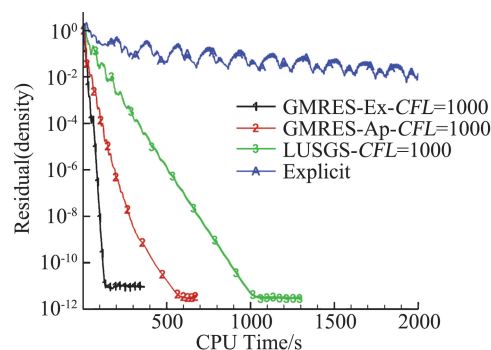


图 5 $CFL=1000$,不同时间迭代方法残值收敛曲线
(残差与时间)

Fig.5 Residual convergence history for different iteration methods (Res. vs. time)

基于残值雅可比精确求解方法的 GMRES 计算效率提高了约 8 倍。

图 6 给出了不同隐式时间迭代方法得到的升力系数随计算时间变化曲线。由图看到,三种隐式方法得到的升力系数相同,GMRES 计算得到的升力系数经过前期短时间的震荡后几乎单调收敛,其气动力收敛速度远高于 LU-SGS。

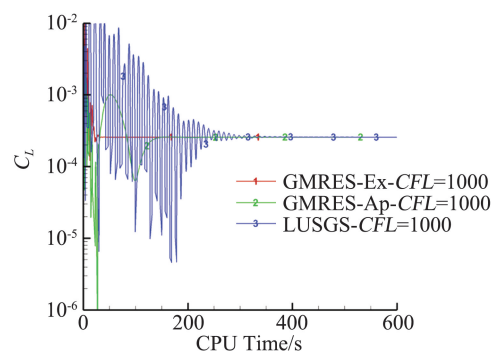


图 6 二阶精度下不同方法的升力系数收敛曲线

Fig.6 Lift coefficient convergence history for different iteration methods for DG(P1)

图 7 给出了不同精度下,不同隐式离散方法的密度残值的收敛曲线。计算的最大 CFL 数取 100, CFL 在 1000 步内从 1 逐渐增大到 100。从图看到,随着

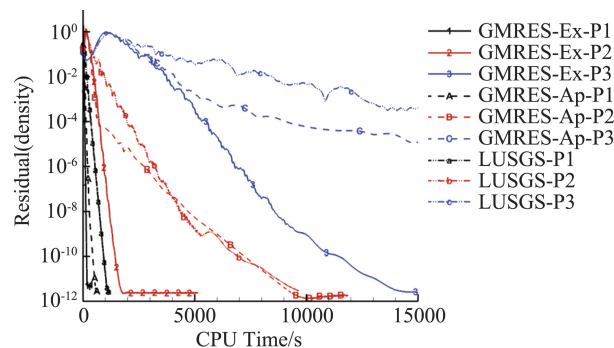


图 7 不同计算精度下,不同迭代方法残值收敛曲线
Fig.7 Residual convergence history for different iteration method for different orders of accuracy (Res. vs. time)

计算精度的提高,收敛所需的时间急剧增大,不同计算精度下,GMRES_Ex 的计算效率都最高。

表 1 给出了不同计算精度下,不同隐式时间离散方法的计算时间,其中耗时比以 GMRES_Ex 计算时间为基准。首先分析相同雅可比矩阵计算方法下不同计算精度的收敛时间,从表看到随着 DG 计算精度的提高,收敛所需计算时间非线性增加,以 GMRES_Ex 为例,DG(P2)和 DG(P3)的计算时间分别约为 DG(P1)的 8.9 倍和 74.3 倍。其次分析相同计算精度下,不同隐式时间迭代方法的计算时间,对于 DG(P1)、DG(P2)、DG(P3),GMRES_Ap 的计算时间分别约为 GMRES_Ex 的 3.0 倍、5.4 倍、6.3 倍,LU-SGS 的计算时间分别约为 GMRES_Ex 的 5.8 倍、5.6 倍、7.0 倍。从以上分析看到,相比残值雅可比近似求解方法,本文发展的残值雅可比精确求解技术能够显著提高 GMRES 的计算效率,这对计算量巨大的 DG 方法来说具有重要意义。

表 1 不同精度以及不同隐式迭代方法下 NACA0012 的计算时间

Table 1 Computation time of different iteration methods with different orders of accuracy for NACA0012 airfoil				
	迭代方法	收敛判据	计算时间/s	耗时比
DG(P1)	GMRES_Ex	6.0×10^{-12}	181	1
	GMRES_Ap	6.0×10^{-12}	539	3.0
	LU-SGS	6.0×10^{-12}	1041	5.8
DG(P2)	GMRES_Ex	6.0×10^{-12}	1623	1
	GMRES_Ap	6.0×10^{-12}	8782	5.4
	LU-SGS	6.0×10^{-12}	9028	5.6
DG(P3)	GMRES_Ex	6.0×10^{-12}	13449	1
	GMRES_Ap	6.0×10^{-12}	84733	6.3
	LU-SGS	6.0×10^{-12}	94142	7.0

2.2 ONERA-M6 机翼亚声速绕流

为进一步验证本文发展的基于残值雅可比矩阵精确求解方法的 GMRES 方法在三维外形的计算效率,本节开展了 ONERA-M6 机翼^[20]的亚声速无黏绕流流场的数值模拟。计算条件为 $Ma=0.4, \alpha=0^\circ$ 。网格如图 8,网格共约 14.8 万个四面体单元,为较好模拟机翼前后缘,机翼前后缘及空间分别采用各向异性和各向同性四面体网格,采用 64 核并行计算。

图 9~图 12 分别给出了 DG(P1)、DG(P3)下密度残值的收敛曲线,同时给出了 RKDG 显式收敛曲线。不同计算精度下 GMRES_Ex 隐式计算的 CFL=1000,GMRES_Ap 和 LU-SGS 的 CFL 数采用能够稳定计算的最大值,P1 阶时 CFL=100,P3 阶时 CFL=20,RK 的 CFL=0.3。以残差下降到 10^{-12} 量级为标准,对于 DG(P1)、DG(P3),GMRES_Ap 所需要的计算时间约为 GMRES_Ex 的 5 倍和 10 倍,LU-SGS

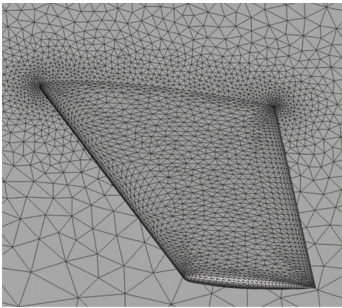


图 8 ONERA-M6 机翼计算网格
Fig.8 Tetrahedral mesh for ONERA-M6

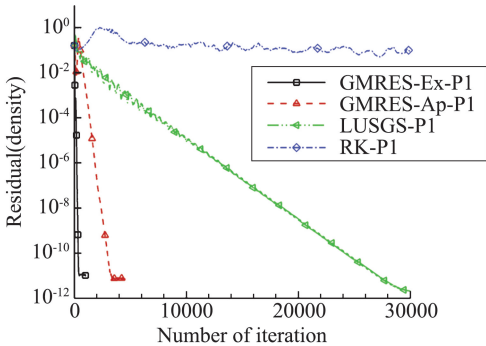


图 9 M6 机翼 DG(P1)的密度残值收敛曲线(残差与迭代步)
Fig.9 Residual convergence history of DG(P1) for M6 wing(Res. vs. step)

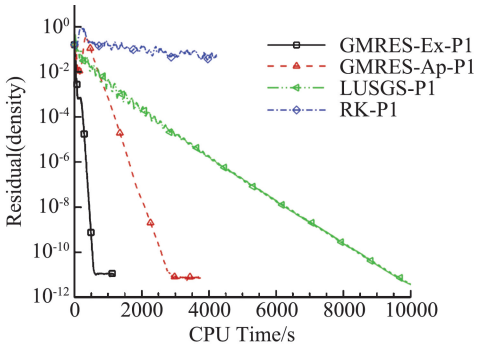


图 10 M6 机翼 DG(P1)的密度残值收敛曲线(残差与时间)
Fig.10 Residual convergence history of DG(P1) for M6 wing(Res. vs. time)

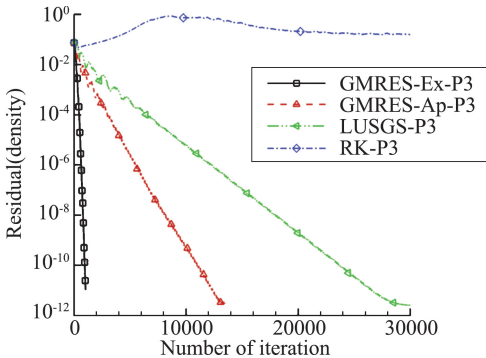


图 11 M6 机翼 DG(P3)的密度残值收敛曲线(残差与迭代步)
Fig.11 Residual convergence history of DG(P3) for M6 wing (Res. vs. step)

所需要的计算时间约为 GMRES_Ex 的 16 倍和 14 倍。

图 13 给出了不同精度 DG 方法采用 GMRES_Ex 获得的升力系数随迭代步数变化曲线。从图看到,不同精度下的升力系数都能 500~1000 迭代步内收敛,显示了本文的基于残值雅可比精确求解的 GMRES 方法在计算效率方面的优势。

表 2 给出了不同计算精度下,不同隐式方法模拟 ONERA-M6 机翼无黏绕流的时间,其中耗时比以 GMRES_Ex 计算时间为基准。从表可知基于残值雅可比精确求解的 GMRES 计算效率远高于雅可比矩阵近似求解的 GMRES 和 LU-SGS,在 DG(P3)时,

GMRES_Ex 的计算效率相比另外两种方法提高了一个数量级以上。

2.3 方腔流动

方腔流动是一个经典层流标准算例。它描述的是一类顶盖驱动流动,顶盖以给定速度 $u=1\text{ m/s}$ 驱动方腔内流动,不同雷诺数下方腔内有不同的流态。本节采用该算例验证建立的残值雅可比精确求解方法,分析精确计算残值中无黏项和黏性项的雅可比矩阵对计算效率影响。

图 14、图 15 给出了不同隐式迭代方法及残值雅可比不同求解方法下 DG(P1)的密度残值收敛曲线,GMRES_Ex 的 CFL 数在 200 步内从 1 增加到 1000。LU-SGS、GMRES_Ap、GMRES_Ap1 的 CFL 数均采用能够稳定计算的最大值,CFL 数在 1000 步内从 1 增加到 100。数值模拟发现,对于 LU-SGS、GMRES_Ap、GMRES_Ap1 这三种方法,当 CFL 数大于 100 后 CFL 数对收敛速度影响很小,因此采用 CFL 数=100 来比较计算效率是合适的。由于 LU-SGS 及 GMRES_Ap 收敛需要较长时间,本文并未给出其完全收敛的收敛曲线。从图看到 GMRES_Ex 及 GMRES_Ap1 的密度残值很快下降到 10^{-17} 次方量级,GMRES_Ex 的收敛时间最短,GMRES_Ap1 的收

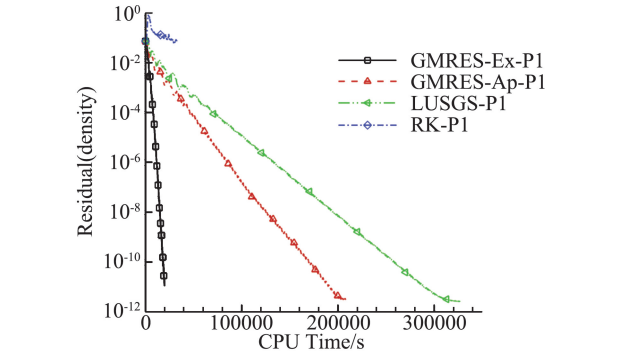


图 12 M6 机翼 DG(P3)的密度残值收敛曲线(残差与时间)
Fig.12 Residual convergence history of DG(P3) for M6 wing(Res. vs. time)

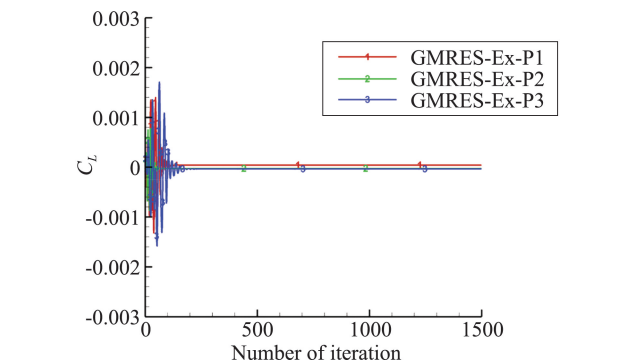


图 13 DG 不同精度的 M6 机翼升力系数收敛曲线
Fig.13 Lift coefficient convergence history of DG with different orders of accuracy for ONERA-M6

表 2 不同精度以及不同隐式时间离散方法下 M6 机翼的计算时间

Table 2 Computation time of iteration methods with different orders of accuracy for ONERA-M6				
计算精度	迭代方法	收敛判据	计算时间(s)	耗时比
DG(P1)	GMRES_Ex	1.0×10^{-11}	637	1
	GMRES_Ap	1.0×10^{-11}	2852	4.5
	LU-SGS	1.0×10^{-11}	9473	14.9
DG(P3)	GMRES_Ex	1.1×10^{-11}	19886	1
	GMRES_Ap	1.1×10^{-11}	189593	9.5
	LU-SGS	1.1×10^{-11}	288662	14.5

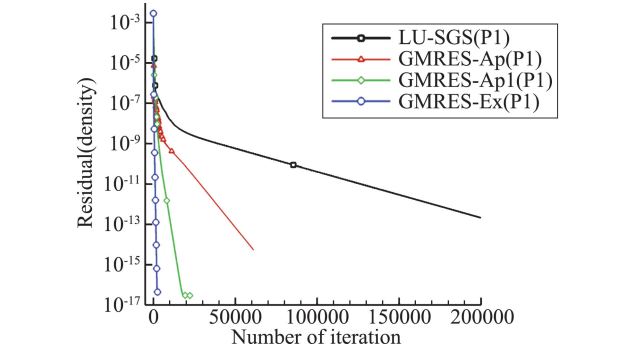


图 14 方腔 DG(P1)的密度残值收敛曲线(残差与迭代步)
Fig.14 Residual convergence history of DG(P1) for square cavity(Res. vs. step)

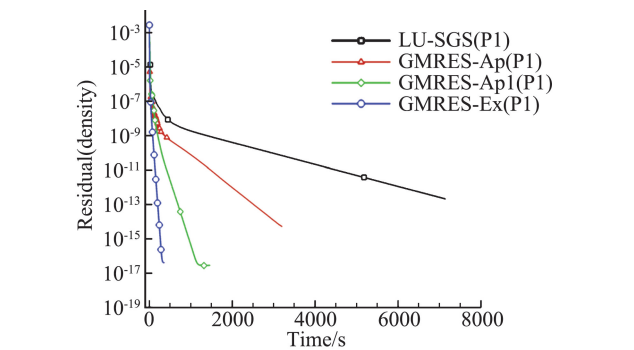


图 15 方腔 DG(P1)的密度残值收敛曲线(残差与时间)
Fig.15 Residual convergence history of DG(P1) for square cavity(Res. vs. time)

敛时间次之,LU-SGS 的收敛时间最长。

表 3 统计了二阶计算精度下,不同隐式迭代方法及残值雅可比不同求解方法的模拟时间。以 GMRES-Ex 模拟时间为基准,当密度残值都下降到 2.12×10^{-13} 时,GMRES-Ap1、GMRES-Ap、LU-SGS 的计算时间分别是 GMRES-Ex 的 3.4 倍、12.3 倍、37.4 倍。从表可知 GMRES-Ex 的计算效率远高于 LU-SGS,体现了本文发展的残值雅可比精确求解方法的计算优势,同时看到即使只对残值中无黏项的雅可比矩阵精确求解同样能够提高计算效率,精确求解黏性项雅可比矩阵能够带来计算效率提升。

表 3 DG(P1)不同隐式时间离散方法的方腔计算时间				
Table 3 Computation time of DG(P1) with different iteration methods for square cavity				
计算精度	迭代方法	收敛判据	计算时间(s)	耗时比
DG(P1)	GMRES_Ex	2.12×10^{-13}	191	1
	GMRES_Ap1	2.12×10^{-13}	645	3.4
	GMRES_Ap	2.12×10^{-13}	2348	12.3
	LU-SGS	2.12×10^{-13}	7143	37.4

图 16、图 17 给出了不同隐式迭代方法及残值雅可比不同求解方法下 DG(P2)的密度残值收敛曲线,GMRES-Ex 的 CFL 数在 200 步内从 1 增加到 1000,GMRES-Ap、GMRES-Ap1、LU-SGS 的 CFL 数在 5000 步内从 1 增加到 100。由于 GMRES-Ex 残值雅可比精确求解,保证迭代求解过程中能取较大的 CFL 数,且基本不受计算精度影响,而基于雅可比近似求解的 GMRES-Ap、GMRES-Ap1 的 CFL 数受计算精度影响较大。

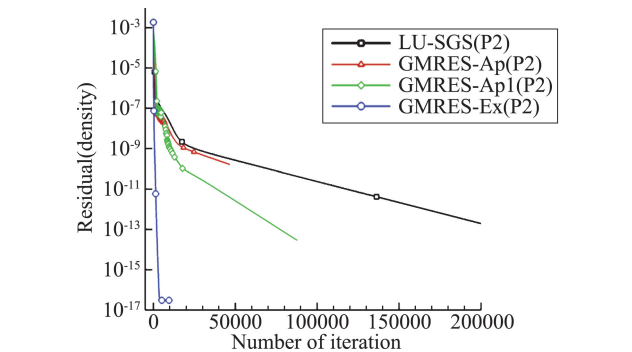


图 16 方腔 DG(P2)的密度残值收敛曲线(残差与迭代步)
Fig.16 Residual convergence history of DG(P2) for square cavity(Res. vs. step)

2.4 二维平直平板层流边界层

最后本文将残值雅可比精确求解方法用于二维平板层流边界层的数值模拟。平板为厚度为 0 的绝热壁,来流马赫数为 0.2,来流雷诺数为 10^5 ,来流温度为 288.15 K。计算区域为 $x = (-0.5, 1)$, $y = (0, 1)$,平板前缘点位于(0,0),后缘点位于(1,0)。网格

点为 61×17 ,平板前方分布 20 个单元,平板表面分布 40 个单元,y 方向共布置 16 个单元,展向一个网格单元。平板前后缘 X 方向的尺寸为 0.001,0.11。第一层网格高度为 0.0005。计算包括两套网格,分别为六面体网格以及由六面体剖分而得的四面体网格。图 18、图 19 展示了计算网格。

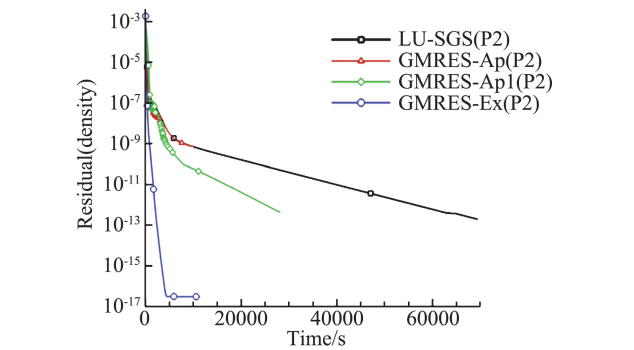


图 17 方腔 DG(P2)的密度残值收敛曲线(残差与时间)
Fig.17 Residual convergence history of DG(P2) for square cavity(Res. vs. time)

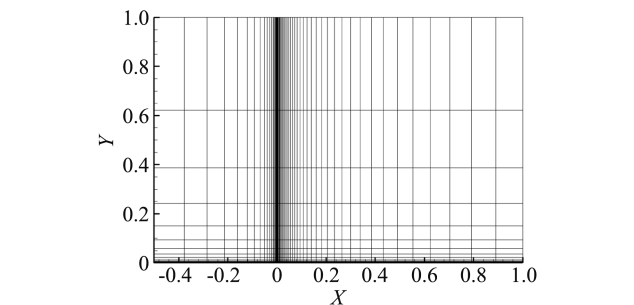


图 18 平板层流边界层计算网格(六面体)
Fig.18 Hexahedron mesh for laminar flow over flat plate

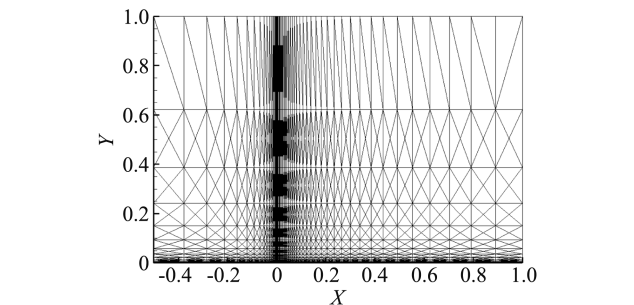


图 19 平板层流边界层计算网格(四面体)
Fig.19 Tetrahedral mesh for flat laminar flow over flat plate

表 4 给出了两种网格在不同计算精度下得到的总摩阻系数,同时给出了 Blasius 解。从表可知,随着计算精度增大,总的摩阻系数增大。对于六面体和四面体网格,随着计算精度增加,摩阻系数逐步向 Blasius 解靠近。

图 20、图 21 给出了采用不同精度 DG 方法的密度残值收敛历程,计算网格为六面体网格。不同计算精度都采用 GMRES 迭代,精确求解方程残值雅可

比, CFL 数从 1 增加到 10^4 。从图看到本文的数值方法在 200 步以内将残值降到 10^{-15} 量级, 进一步验证了本文的残差雅可比精确求解方法的准确性以及隐式迭代方法的计算效率。

图 22 给出了不同精度 DG 方法得到的平板的摩阻分布, 同时也给出了 Blasius 摩阻分布, X 、 Y 坐标

表 4 不同网格和精度下平板的摩擦阻力系数

Table 4 Skin drag coefficient of flat with different grids and orders of accuracy of DG					
精度	网格	Blasius 解	P1	P2	P3
摩阻系数	六面体	4.199×10^{-3}	3.987×10^{-3}	4.172×10^{-3}	4.199×10^{-3}
	四面体	4.199×10^{-3}	3.958×10^{-3}	4.195×10^{-3}	4.197×10^{-3}

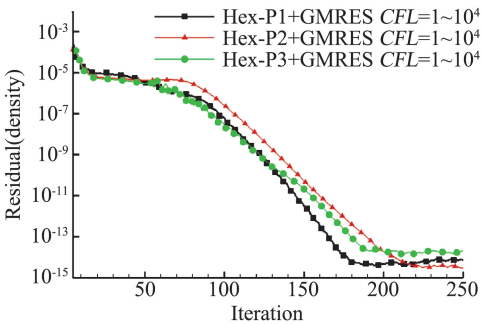


图 20 平板边界层六面体网格收敛历程(残差与迭代步)
Fig.20 Residual convergence history of DG with different orders of accuracy for flat plate(Res. vs. time)

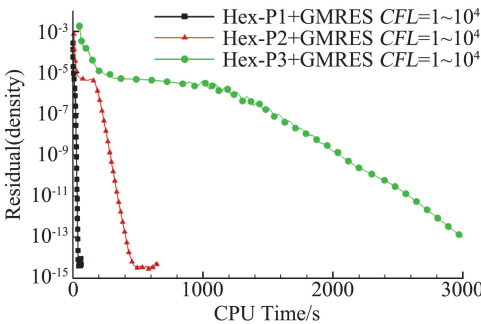


图 21 平板边界层六面体网格收敛历程(残差与时间)
Fig.21 Residual convergence history of DG with different orders of accuracy for flat plate(Res. vs. time)

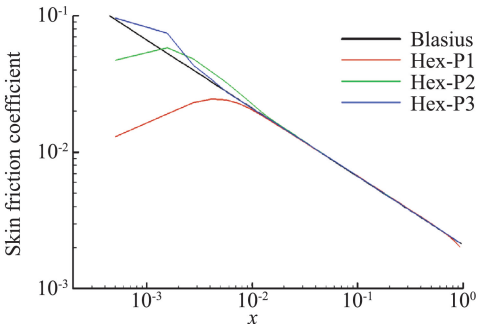


图 22 六面体网格下不同计算精度的平板摩阻系数分布
Fig.22 Comparison of the skin friction calculated from DG with different orders of accuracy for flat plate on hexahedral mesh

都为对数坐标。总的来看, 除去平板前缘, 不同精度的摩阻分布与 Blasius 解分布基本重合, 计算精度越高, 重合度越高。高精度的优势主要体现在平板前缘附近的摩阻系数。从图看到, DG(P1)在 $x < 10^{-2}$ 范围内与 Blasius 解有较大差别, 且 x 越小, 差别越大, DG(P2)、DG(P3)在 $x < 10^{-3}$ 范围内才与 Blasius 解出现明显区别。

3 结 论

本文在三维非结构网格上建立了高阶精度 DG 方法, 针对高阶精度 DG 方法计算量大这一难题, 发展了一种基于右端项残值雅可比矩阵精确计算的高效 GMRES 隐式迭代方法。采用 NACA0012、ONERA-M6、方腔流动、平板层流边界层算例, 通过对比基于残值雅可比矩阵不同计算方法的 GMRES、LU-SGS 隐式时间迭代以及显式 TVD-RK 的计算效率, 体现了不同残值雅可比矩阵计算方法对计算效率的影响以及 GMRES 和 LU-SGS 的计算效率。从对比结果看到: 右端项残值雅可比矩阵精确求解方法更好保证方程组左右两端的匹配性和相容性, 基于矩阵精确求解方法的 GMRES 能够显著提高不同精度下 DG 方法数值模拟的 CFL 数, 大幅提高计算效率。

致谢: 感谢上海大学杨小权对本文雅可比矩阵精确求解部分提供的帮助!

参 考 文 献:

[1] COCKBURN B, SHU C W. The runge-kutta discontinuous galerkin method for conservation laws V: multidimensional systems[J]. Journal of Computational Physics, 1998, 141: 99-224.

[2] REED W H, HILL T R. Triangular mesh methods for the neutron transport equation [R]. Los Alamos Scientific Laboratory Report, LAUR-73-479, 1973.

[3] 马明生, 龚小权, 邓有奇, 等. 一种适用于非结构网格的间断 Galerkin 有限元 LU-SGS 隐式方法[J]. 西北工业大学学报, 2016, 34(4): 754-760.

MAM S, GONG X Q, DENG Y Q, et al. An implicit LU-SGS scheme for the discontinuous galerkin method on unstructured grids[J]. Journal of Northwestern Polytechnical University, 2016, 34(4): 754-760. (in Chinese)

[4] 郭永恒, 杨永, 张强. 一种高效的隐式间断 Galerkin 方法研究[J]. 空气动力学学报, 2012, 30(2): 230-233.

GUO Y H, YANG Y, ZHANG Q. A high efficient implicit discontinuous galerkin method[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2012, 30(2): 230-233. (in Chinese)

[5] TAKANORI H, KEISUKE S, WANG Z J. An implicit LU-SGS scheme for the spectral volume method on unstructured tetrahedral grids [J]. Communications in Computational Physics, 2009, 6(5): 978-996.

[6] 刘伟, 张来平, 赫新等. 基于 Newton/Gauss-Seidel 迭代的 DGM 隐式方法[J]. 力学学报, 2012, 44(4): 792-796.

- LIU W, ZHANG L P, HE X, et al. An implicit algorithm for discontinuous galerkin method based on newton/gauss-seidel iterations[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2012, 44(4): 792-796. (in Chinese)
- [7] PERSSON P O, PERAIRE J. Newton-GMRES preconditioning for discontinuous galerkin discretizations of the navier-stokes equations[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2008, 30(6): 2709-2733.
- [8] CRIVELLINI A, BASSI F. An implicit matrix-free discontinuous galerkin solver for viscous and turbulent aerodynamic simulations[J]. Computers & Fluids, 2011, 50: 81-93.
- [9] LASLO T D, DAVID L D. Discontinuous galerkin solutions of the navier-stokes equations using linear multigrid preconditioning [R]. AIAA 2007-3942.
- [10] CHEN S Q, ZHANG T T. Krylov implicit integration factor methods for spatial discretization on high dimensional unstructured meshes: application to discontinuous galerkin methods[J]. Journal of Computational Physics, 2011, 230: 4336-4352.
- [11] LANDMANN B. A parallel discontinuous galerkin code for the navier-stokes and reynolds-averaged navier-stokes equations [D]. Stuttgart, university of Stuttgart, 2008.
- [12] 党亚斌, 刘凯礼, 孙一峰, 等. 用隐式高精度间断伽辽金方法模拟可压层流和湍流[J]. 空气动力学学报, 2018, 36(3): 535-541.
- DANG Y B, LIU K L, SUN Y F, et al. Implicit high order discontinuous galerkin method for compressible laminar and turbulent flow simulation[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2018, 36(3): 535-541. (in Chinese)
- [13] YANG X Q, CHENG J, WANG C J, et al. A fast, implicit discontinuous galerkin method based on analytical jacobians for the compressible navier-stokes equations[R]. AIAA 2016-1326.
- [14] CHENG J, LIU X D, YANG X Q, et al. A direct discontinuous galerkin method for the compressible navier-stokes equations on arbitrary grids[R]. AIAA 2016-3334.
- [15] BALAY S, ABHYANKAR S, ADAMS M, et al. PETSc users manual[OL]. <http://www.mcs.anl.gov/petsc/documentation/index.html>.
- [16] BLAZEK J. Computational fluid dynamics: principles and applications[M]. LondonElsevier Science, 2001.
- [17] ROE P L. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes[J]. Journal of Computational Physics, 1981, 43: 357-372.
- [18] BASSI F, REBAY S, MARIOTTI G, et al. A high-order accurate discontinuous finite element method for inviscid and viscous turbomachinery flows[C]//In Proceedings of the 2nd European Conference on Turbomachinery Fluid Dynamics and Thermodynamics, March 5-7 1997, 99-108.
- [19] KRIST S L, BIEDRON R T, RUMSEY C L. CFL3D User's Manual (Version 5.0)[EB]. NASA/TM-1998-208444.
- [20] SCHMITT V, CHARPIN F. Pressure distributions on the ONERA-M6 wing at transonic mach numbers [R]. Experimental Data Base for Computer Program Assessment, AGARD AR138, 1979.