

文章编号: 0258-1825(2019)05-0834-10

适用于非定常流模拟的分布式并行 GMRES 方法

陈 龙*, 夏 健, 田书玲

(南京航空航天大学 非定常空气动力学与流动控制工信部重点实验室, 南京 210016)

摘 要:为提高计算流体力学方法的收敛性和对高性能并行计算机的适应性,发展了适用于非定常流模拟的 GMRES 并行全隐式方法,并开展了相应的收敛和并行特性研究。采用变子空间数 GMRES 方法,减小重启过程计算时间;通过分区并行和 Hybrid LU-SGS 预处理算子实现方法的分布式并行化;采用鲁棒的 Negative-SA 湍流模型获得更大 CFL 数,采取计算和存储雅可比矩阵、网格重排序方法提高计算效率。利用这套方法完成了平面流、NACA0012 翼型扰流、翼身组合体扰流、F-16 战斗机非定常气动弹性和旋翼前飞流场的数值模拟。结果表明其计算效率较 LU-SGS 方法提高 20%~200%;适用于当代高性能计算机分布式并行结构,并行效率非常高,在 240 个计算核心上出现了加速比的超线性。

关键词:计算流体力学;全隐式方法;GMRES;并行;非定常流

中图分类号:V211.3

文献标识码:A

doi: 10.7638/kqdlxxb-2017.0185

A GMRES method on distributed parallel computers for unsteady flow simulation

CHEN Long*, XIA Jian, TIAN Shuling

(Key Laboratory of Unsteady Aerodynamics and Flow Control, Ministry of Industry and Information Technology, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: To improve the computational efficiency and applicability for high performance parallel computing of CFD, a parallel full-implicit method based on GMRES + LU-SGS is developed for unsteady flow simulation. The convergence and parallel property of the method have been studied. The restartable GMRES method is improved to save computing time in the process of GMRES restart. The domain decomposition and Hybrid LU-SGS preconditioner have been studied for parallel implementation. A robust Negative-SA turbulence model for large CFL number, computing and storing the Jacobian matrix and grid reorder methods have been studied to improve the computational efficiency. The methods have been used to compute the plane flow, the flow around NACA0012 airfoil, wing-body configuration, F-16 fighter aeroelastics, and rotor unsteady flow simulation. The numerical results indicate that these methods on distributed parallel computers lead to 20%~200% increase in performance over LU-SGS method. Moreover, remarkable super-linear speedup is achieved on 240 processors.

Keywords: CFD; full-implicit method; GMRES; parallel; unsteady flow

0 引 言

随着计算流体力学(CFD)的高速发展,其在航空航天工程中的应用越来越广泛。为了适应航空航天

工程对于精细模拟的更高要求,目前 CFD 已经发展到千万量级的计算网格阶段。非常密的网格给数值计算方法的收敛性带来巨大的挑战,尤其是高雷诺数湍流问题和非定常问题。同时,高性能计算机硬件水

收稿日期:2018-10-11; 修订日期:2019-03-20

基金项目:江苏高校优势学科建设工程资助项目(PAPD)

作者简介:陈龙*(1983-),男,河北赵县人,博士,讲师,研究方向:计算流体力学。E-mail: lchen@nuaa.edu.cn

引用格式:陈龙,夏健,田书玲. 适用于非定常流模拟的分布式并行 GMRES 方法[J]. 空气动力学学报, 2019, 37(5): 834-843.

doi: 10.7638/kqdlxxb-2017.0185 CHEN L, XIA J, TIAN S L. A GMRES method on distributed parallel computers for unsteady flow simulation[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2019, 37(5): 834-843.

平也不断提高,使上万 CPU 核心的并行计算成为可能。这就需要 CFD 高效且鲁棒地处理航空航天工程中的复杂外形、适用于最新的高性能计算机及未来的发展^[1-2]。综上所述,提高 CFD 收敛性和并行计算效率的研究有着重要理论研究和工程应用价值。

全隐式方法是 CFD 提高收敛性和计算效率的重要途径,全隐式方法的并行化是 CFD 研究难点之一。Luo 等^[3]最早将无矩阵 LU-SGS 方法作为 GMRES 的预处理算子,在共享内存系统中采用 OpenMP 实现了算法的并行化。国内阎超等^[4]在混合网格上采用 OpenMP 实现了 GMRES+LU-SGS 的并行化。上述的算法均有非常高的收敛效率,但由于共享内存系统的限制,并行效率并不高。Zingg 等^[5-6]采用近似 Schur 并行预处理算子实现了块结构网格上 GMRES 的分布式并行化,采用无矩阵方法处理矩阵向量积,取得了非常好的收敛效果和并行效果,在一定条件下出现了加速比的超线性,NASA CRM 模型千万量级网格湍流模拟仅需 3000 步收敛。同一算例半隐式的 LU-SGS 方法需要数万步的迭代才能收敛^[7]。燕振国等^[8]将 GMRES 应用于高阶耗散紧致格式,张健等^[9]基于 PETsc 科学计算工具包建立三维混合网格分布式并行 GMRES 算法,龚小权等^[10]将 GMRES 应用于间断 Galerkin 有限元,均取得了不错的效果。综合分析国内外研究的前沿,在混合网格上 GMRES 的分布式并行化是隐式方法研究的难点。需要恰当的处理矩阵运算并行化、预处理算子并行化、通讯模型、网格重排序和负载均衡,才能提高 GMRES 方法并行效率。近年来,计算机硬件高速发展,可用内存越来越大,大规模问题中存储雅可比矩阵成为可能。全隐式方法中计算和存储雅可比矩阵,并采用并行 GMRES 方法求解线性方程组是提高 CFD 收敛性的主要途径。

本文采用变子空间数 GMRES 算法,结合 Hybrid LU-SGS 方法作为并行预处理算子,引入更鲁棒的湍流模型,结合不同网格排序方法,在 MPI 并行环境中,发展出一套计算和存储雅可比矩阵的分布式并行全隐式计算方法。在南京航空航天大学自主开发的 OVERU 软件^[11]中应用该方法,经验证具有非常高的收敛性和并行效率,适用于定常和非定常流问题的数值模拟。

1 控制方程与离散方法

控制方程为任意拉格朗日欧拉(ALE)形式的三维雷诺平均 N-S 方程(RANS),湍流模型为一方程 SA 模型,本文采用的是一种新型的 Negative-SA 模

型^[12],该模型中 $\tilde{\nu}$ 允许为负值,以抑制网格质量较差时的非物理解,可以改善整体隐式方法的鲁棒性,提高迭代中 CFL 数的取值,从而间接达到提高全隐式方法收敛性的目的。Negative-SA 模型方程为:

当 $\tilde{\nu} \geq 0$ 时

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} = c_{b1} (1 - f_{t2}) \tilde{S} \tilde{\nu} - \\ \left[c_{w1} f_w - \frac{c_{b1}}{\kappa^2} f_{t2} \right] \left(\frac{\tilde{\nu}}{d} \right)^2 + \\ \frac{1}{\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right) + c_{b2} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_i} \right] \quad (1) \end{aligned}$$

当 $\tilde{\nu} < 0$ 时

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} = c_{b1} (1 - f_{t2}) \Omega \tilde{\nu} + c_{w1} \left(\frac{\tilde{\nu}}{d} \right)^2 + \\ \frac{1}{\sigma} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left((\nu + \tilde{\nu} f_n) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right) + c_{b2} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_i} \right] \quad (2) \end{aligned}$$

式中各符号与原始 SA 模型一致。其思想是当 $\tilde{\nu} \geq 0$ 求解原始 SA 模型,当出现非物理解 $\tilde{\nu} < 0$ 时求解式(2),式(2)源项中破坏项 $c_{w1} (\tilde{\nu}/d)^2$ 与原 SA 模型符号相反,通过迭代求解使得 $\tilde{\nu}$ 重新更新为正值。

OVERU 软件采用非结构混合网格有限体积方法求解控制方程。空间离散采用格点格式,可处理多种单元类型的混合网格。基于多种常用的通量差分格式 HLLC、ROE、HLEM 和通量分裂格式 AUSMPW+ 等,通过 U-MUSCL 方法进行高阶重构,限制器采用 Venkatakrishna 限制器。非定常计算采用双时间步长方法进行二阶精度的时间离散,内迭代采用本文所发展的全隐式方法。

2 并行全隐式方法

2.1 GMRES 方法

全隐式方法是定常、非定常 CFD 计算中提高收敛性和计算效率有效途径之一。其中的 Krylov 子空间迭代法中的 GMRES 方法^[13]是一种高效的解线性方程组方法,结合不同预处理算子在 CFD 数值计算领域广泛使用。本文的分布式并行 GMRES 方法的架构如图 1 所示,含全隐式方法的并行化实现及优化。

在重启型 GMRES 算法的基础上,本文采用变子空间数 GMRES 算法,其初始化过程为 $\mathbf{v}_0 = \mathbf{R} - \mathbf{A} \Delta \mathbf{W}_0$, $\mathbf{r}_0 := P^{-1} \mathbf{v}_0$, $\beta := \|\mathbf{r}_0\|$, $\mathbf{v}_1 := \mathbf{r}_0/\beta$ 。初始化后,计算流程如下:

```
01: for  $j = 1, m$ 
02:    $\mathbf{w}_j = P^{-1} \mathbf{A} \Delta \mathbf{W}$ 
03: for  $i = 1, j$ 
04:    $h_{ij} = (\mathbf{w}_j, \mathbf{v}_i)$ 
```

```

05:    $w_j = w_j - h_{ij} v_i$ 
06: end
07:  $h_{j+1,j} = \|W_j\|_2$ 
08:    $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$ 
09:    $z_{1,j} := \min_z \|\beta e - H_{1,j} z_{1,j}\|_2$ 
10: if  $\|\beta e - H_{1,j} z_{1,j}\|_2 < \epsilon$  exit restart
11: end
12:  $\Delta W = \Delta W_0 + v_m z_m$ 
13:  $\Delta W_0 = \Delta W$ 
14: restart GMRES (goto 01) (3)

```

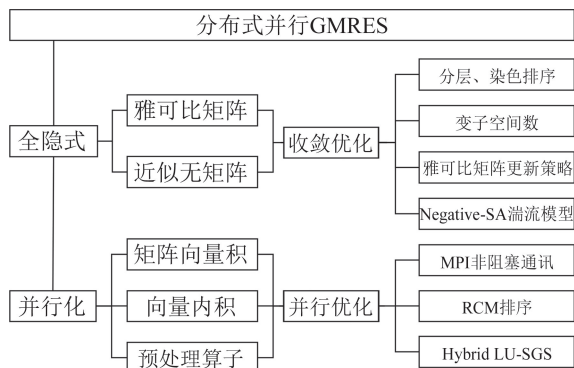


图 1 分布式并行计算架构

Fig.1 Framework of distributed parallel

重启型 GMRES 中通过残差收敛判据确定是否需要 GMRES 重启,每个重启过程的子空间数不变均为 m 。通过增加残差极小值问题的求解次数(式(3)中增加第 10 步),提前判断是否满足残差收敛判据。当满足收敛判据时,即使子空间数小于 m 也退出 GMRES 内循环,从而减少子空间迭代数,提高计算效率。存储空间方面,GMRES 方法需要 $(m+2) \times n_{\text{nodes}} \times n_{\text{eqn}} \times 8$ 字节内存空间。其中 m 为 Krylov 子空间数, n_{nodes} 为网格点数, n_{eqn} 为方程数,如三维 Euler 方程为 5。

变子空间数 GMRES 算法,可以在基本不影响收敛性的前提下,减小了每次迭代计算时间,从而提高整体计算效率。变子空间数 GMRES 算法相比于原重启型 GMRES 算法在迭代启动若干步的鲁棒性上有一定程度的提高,改善了全隐式方法的启动问题。

2.2 雅可比矩阵计算方法

隐式方法在处理雅可比矩阵时可分为无矩阵方法和计算矩阵方法。其中无矩阵方法一般采用数值差分方法直接得到矩阵向量积,不需要计算和存储雅可比矩阵,节约内存空间。有矩阵方法中雅可比矩阵需要提前计算并存储,虽然增加了内存需求和计算量,但是矩阵方法比无矩阵方法具有更好的收敛性。

全隐式方法中雅可比矩阵以双精度实数存储需

要 $(n_{\text{nodes}} + 2n_{\text{edges}}) \times n_{\text{eqn}}^2 \times 8$ 字节内存空间,处理大规模问题时受到内存的限制往往采用无矩阵方法。近几年计算机硬件的发展,内存空间不断增大,价格也不断降低。内存空间已经逐渐不再制约有矩阵方法的应用。雅可比矩阵的计算方法可通过人工编程或自动微分来实现。本文采用人工编程方法实现雅可比矩阵的计算,人工编程方法可以带来较优化的代码和较高的效率。雅可比矩阵由无黏项和黏性项组成,无黏项采用 Van-Leer 通量分裂雅可比矩阵,黏性项则基于薄层 N-S 假设。为提高计算效率,实际计算中雅可比矩阵每隔若干次迭代重新计算一次,在这几次迭代中冻结。采用这个策略在不影响收敛性前提下,减少整体计算时间。

无矩阵方法中的矩阵向量积本文采用 Luo 等^[3]的近似方法,如式(4)所示,简化通量雅可比计算,可节约差分近似中两次残差的计算量:

$$A \Delta W \approx \Delta F = F(W + \Delta W) - F(W) \quad (4)$$

2.3 GMRES 并行化

基于 MPI 非阻塞通讯模型,采用分区并行策略实现 GMRES 的分布式并行化。雅可比矩阵的对角项按点存储,非对角项按边存储,均存储在局部内存中。通过分区边界上的虚拟点进行数据通信,GMRES 中矩阵向量积(式(3)中第 2 步)仅需相邻分区之间的通信,减小通信时间。GMRES 中向量内积(式(3)中第 4、7 步)在各分区计算完成后进行全局归约操作,得到全局 Hessenberg 矩阵,通信量极小。采用 Metis 库进行分区实现并行负载均衡,分区后可以保证各分区的网格点数基本一样,同时分区交界面分割的边数尽量少。可扩展性是并行计算方法的重要指标^[14],非结构网格分区并行实现方法的可扩展性与分区方法的选取有直接关系,问题规模和分区数等比例增大后,如果分区交界面分割的边数基本不变,则并行方法的可扩展性会很好。

Wissink 等^[15]在 DP-LUR 基础上进行改进,发展出并行化的 Hybrid LU-SGS 方法。该方法的本质是在各处理器的网格分区内部使用 LU-SGS 方法,进行 Gauss-Seidel 迭代;在网格分区的边界上,需要数据通信的网格点上使用 DP-LUR 方法,进行 Jacobi 迭代。Hybrid LU-SGS 方法具有较高的并行效率,且计算时间比 DP-LUR 方法的计算时间减少约 45%。相比其它预处理算子 Hybrid LU-SGS 效率更高,因此本文选择 Hybrid LU-SGS 作为 GMRES 方法中的预处理算子 P(式(3)中第 2 步),计算流程如下:

交换分区边界数据,然后边界点上有:

$$w_j = P^{-1} A \Delta W = D^{-1} A \Delta W \quad (5)$$

分区内部进行 LU-SGS 向前扫和向后扫：

$(D + L)\Delta W^* = A\Delta W$ (6)

$(D + U)w_j = D\Delta W^*$ (7)

2.4 网格重排序

本文所发展的数值方法中的网格重排序包含两个方面：

(1) 非结构网格 LU-SGS 算法中的网格重排序^[3-4]。经过分层和染色两个步骤将网格重排之后，保证每一层中的点与本层其它点不相连、与任一点相连的上下对角点的个数相当，目的是改善上三角矩阵 U 和下三角矩阵 L 的平衡性，构造非结构网格超平面，提高 LU-SGS 方法的效率。本文采用全局排序方法将分层信息发送到各计算分区。

(2) 网格节点序号的重排序^[16]。对网格节点序号进行重排序，其目的是减小稀疏矩阵的带宽，使矩阵中非零项靠近主对角项，减小矩阵存储空间，提高解线性方程组的效率。CFD 计算中网格节点序号的重排序还可以减小计算过程中缓存未命中几率，提高计算效率。本文采用 RCM(Reverse-Cuthill-McKee)方法进行网格节点序号的重排序。数值试验表明经过 RCM 排序后可提高约 10% 的计算效率。

3 收敛特性验证

3.1 二维定常流动

本节将对比不同时间离散方法在二维平面无黏流和 NACA0012 翼型黏性绕流算例中的收敛性。二维平面无黏流计算网格为三角形网格，如图 2，共 1426 个网格点。图 3 给出了残差收敛到机器精度时显式方法(RK)、LU-SGS 方法、无矩阵 GMRES 方法和矩阵 GMRES 方法(MGMRES)的对比。算例中最大子空间数 $m=10$ ，GMRES 重启次数为 2，GMRES 内残差收敛判据 $\epsilon<0.1$ ，本文后续算例均采用此设置。三种隐式方法均在 1000 步内收敛到机器精度，收敛性大大优于显示方法，收敛性最好的是 MGMRES 方法。

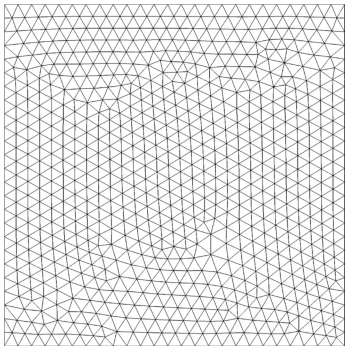


图 2 平面流计算网格

Fig.2 Computational grid for plane flow

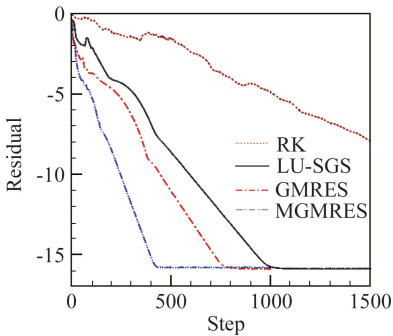


图 3 平面流残差收敛曲线

Fig.3 Convergence history for plane flow

NACA0012 翼型黏性扰流计算网格采用四边形单元，共 23 万网格点，如图 4。计算条件为：来流马赫数 $Ma_\infty=0.15$ ，迎角 $\alpha=10^\circ$ ，雷诺数为 $Re=6\times10^6$ 。该算例中数值方法的收敛性受到密网格和高雷诺数严苛的考验。LU-SGS 方法 CFL 数取 1×10^6 ，GMRES 和 MGMRES 方法均没有启动问题，CFL 数可直接取 300。图 5 分别给出迭代收敛曲线和 CPU 时间收敛曲线。可见残差收敛 6 个量级，LU-SGS 方法需要约 80 000 步，GMRES 方法约 10 000 步，MGMRES 方法仅需 2500 步。计算时间上由于 MGMRES 每迭代步的计算时间较长，迭代初期其计算效率接近或低于 GMRES 方法。迭代后期 MGMRES 的收敛速度优势明显，仅需 GMRES 方法不到二分之一的计算时间。无矩阵 GMRES 方法在计算效率较 LU-SGS 方法提高约 20%。需要特别说明的是收敛 6 个量级主要是为了对比不同方法的收敛性，实际计算中并不需要如此大量的迭代。表 1 给出了本文计算得到的升阻力系数与文献[17]中不同程序计算结果的对比，符合得很好。

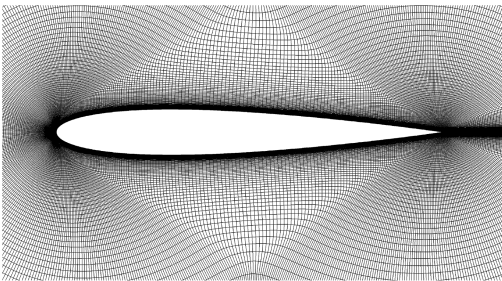


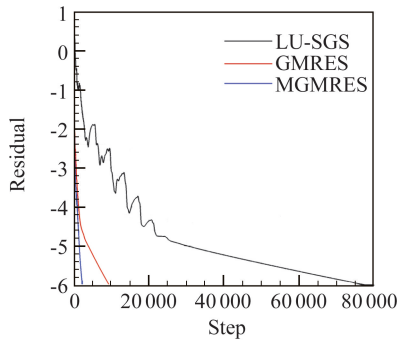
图 4 NACA0012 计算网格

Fig.4 Computational grid for NACA0012 case

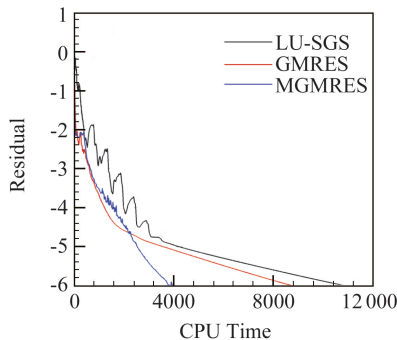
表 1 NACA0012 结果与其他代码比较

Table 1 Present NACA0012 results compared with those of other codes

	Present	CFL3D	FUN3D	JOE
C_L	1.098	1.091	1.098	1.092
C_D	0.012 43	0.012 31	0.012 42	0.012 45



(a) Convergence history versus steps



(b) Convergence history versus CPU time

图 5 NACA0012 扰流收敛曲线

Fig.5 Convergence history for NACA0012 case

3.2 翼身组合体扰流

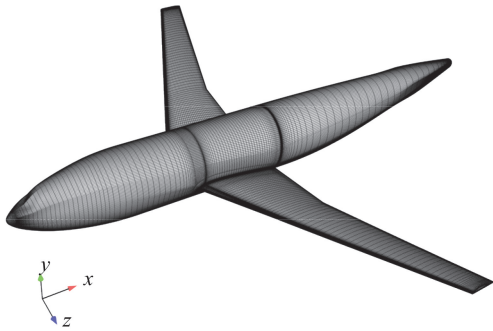
对 DLR-F6 翼身组合体^[18-19]有黏和无黏绕流进行计算分析,其中无黏计算网格采用四面体单元约 90 万网格点 503 万单元,黏性网格采用六面体单元,约 580 万网格点,如图 6。计算条件为:来流马赫数 $M_\infty=0.75$,迎角 $\alpha=0.52^\circ$ 。黏性计算中雷诺数 $Re=3\times10^6$ 。LU-SGS 方法 CFL 数取 1×10^6 ,GMRES 方法 CFL 数取 300,MGMRES 方法无黏算例 CFL 数取 300。MGMRES 方法在黏性算例遇到了启动问题,本文种采用变 CFL 数取值的策略解决启动问题,如下式所示:

$$\text{CFL} = \begin{cases} 10 & , \quad n = 1 \\ 10 \times 1.2n - 1 & , \quad 1 < n < 19 \\ 300 & , \quad n \geq 19 \end{cases} \quad (8)$$

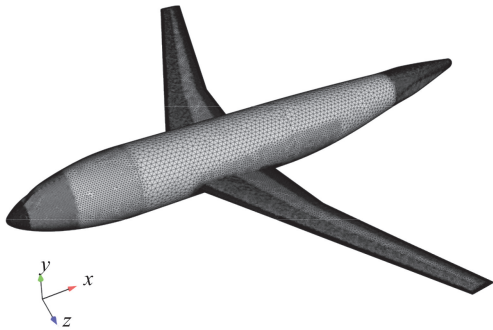
首先进行网格节点序号重排序方法的验证,图 7 给出了采用网格节点序号的重排序方法(RCM)和不采用网格节点序号的重排序方法(NO-RCM)的对比,其中 TET 表示无黏扰流算例,HEX 为黏性扰流算例。可见 RCM 方法减小了计算过程中缓存未命中几率,经过 RCM 排序后可提高约 10%的计算效率。

图 8 给出了黏性扰流算例中重启型 GMRES 方法和本文改进的变子空间数 GMRES 方法残差收敛

曲线的对比,两者收敛效率一致。为达到 GMRES 内残差收敛判据,当重启型 GMRES 方法中一般需



(a) Hexahedron grid



(b) Tetrahedron grid

图 6 DLR-F6 计算网格

Fig.6 Computational grid for DLR-F6 case

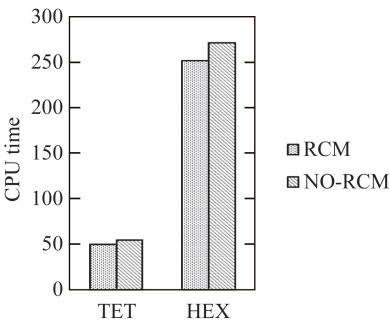


图 7 RCM 排序对计算时间的影响

Fig.7 Effect of RCM reorder on CPU time

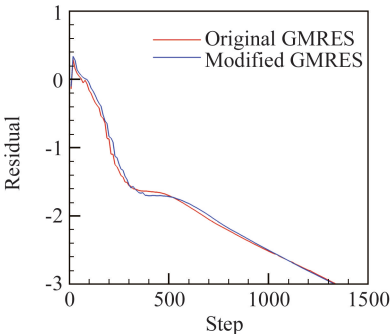
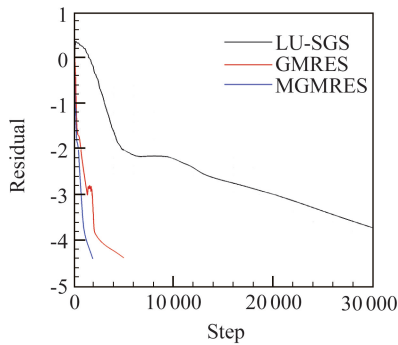


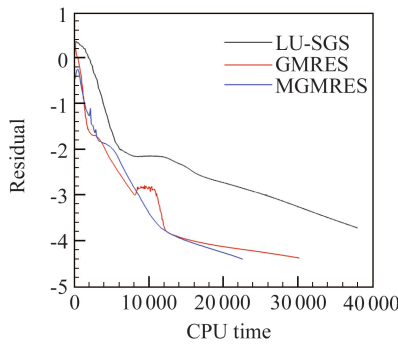
图 8 重启型和改进 GMRES 方法收敛曲线对比
Fig.8 Comparison of convergence history between original and modified GMRES

要 1 次重启,共 10+10 次子空间运算,而变子空间数 GMRES 方法在重启后子空间数会减少,共 10+n 次子空间运算($n \leq 10$)。变子空间数 GMRES 方法较重启型 GMRES 方法,计算时间减少约 15%。

图 9 给出了三种隐式方法在进行黏性扰流计算时的迭代收敛曲线和 CPU 时间收敛曲线。其中 MGMRES 方法的收敛性最好,仅需 800 步左右残差下降 3 个量级。残差下降 3 个量级 MGMRES 方法较 GMRES 方法计算时间减少约 37%,整体计算时间是 LU-SGS 方法的四分之一不到。并且 MGMRES 方法在残差下降 3 个量级后收敛性依然较好,而 GMRES 方法收敛曲线出现一定程度波动。图 10 给出了升力系数的迭代和 CPU 时间收敛曲线。从升力系数上判断 MGMRES 方法收敛效率也是最高,略高于 GMRES 方法,计算效率约为 LU-SGS 方法的 4 倍多。



(a) Convergence history versus steps



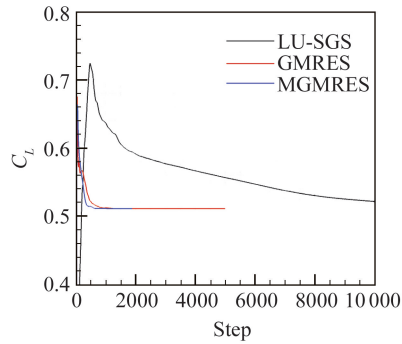
(b) Convergence history versus CPU time

图 9 DLR-F6 扰流收敛曲线

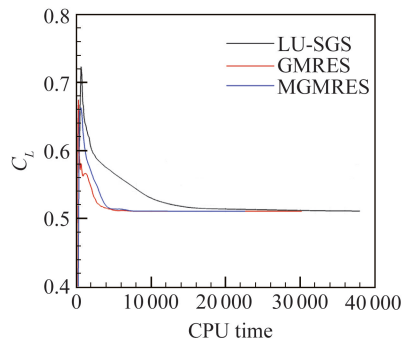
Fig.9 Convergence history for DLR-F6 case

针对第六届 AIAA 阻力测试会议中的 NASA CRM 翼身组合体构型,采用 NASA 提供的混合网格约 3000 万网格点 1.2 亿网格单元,验证本文的方法在数千万量级网格上的收敛性。计算条件为:来流马赫数 $Ma_\infty = 0.85$,迎角 $\alpha = 2.75^\circ$,雷诺数 $Re = 5 \times 10^6$ 。图 11 给出了三种隐式方法在进行黏性扰流计算时的升力系数收敛曲线。其中 MGMRES 方法升力系数收敛仅需 1000 步左右,而 GMRES 方法需要约 1600

步。相同计算状态及网格条件下,文献[20]中 NASA 的 FUN3D 软件采用全隐式方法需要约 3000 步收敛。本文的方法在千万量级网格上的也具有很好的收敛性。



(a) Convergence history versus steps



(b) Convergence history versus CPU time

图 10 DLR-F6 扰流升力系数收敛曲线

Fig.10 Lift coefficient convergence history for DLR-F6 case

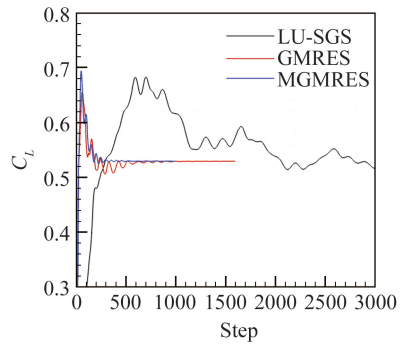


图 11 NASA CRM 扰流升力系数收敛曲线

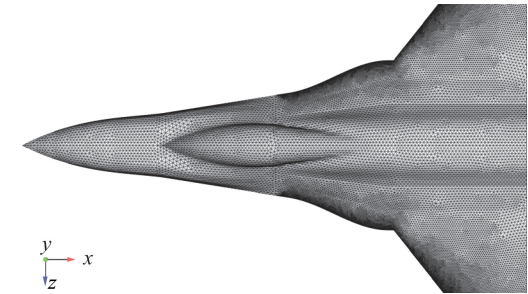
Fig.11 Lift coefficient convergence history for NASA CRM case

3.3 战斗机非定常气动弹性模拟

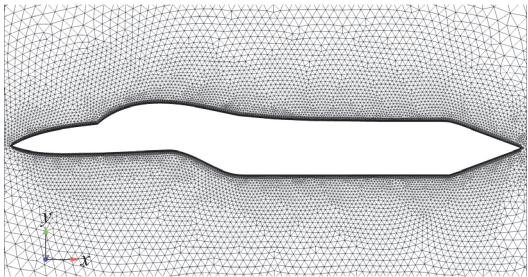
本节采用 F16 战斗机外形的非定常气动弹性数值模拟算例,考察所发展的隐式方法在三维非定常黏性扰流计算中的效果。计算网格采用混和网格,图 12 为机身物面网格和对称面网格,约 214 万网格点。计算条件为:来流马赫数 $Ma_\infty = 0.8$,迎角 $\alpha = 4.0^\circ$,CFL 数取值与 3.2 节一致。结构有限元模型基于 ECERTA 项目^[21]提供的结构模态数据。在时域内耦合求解非定常 N-S 方程和结构模态方程,实现飞

机气动弹性的数值模拟。其中流固界面插值方法为薄平板样条法 (TPS), 动网格方法采用高效的 Delaunay 图映射方法。双时间步长方法中内迭代残差下降 3 个量级为判断其收敛的依据。

图13给出了三组双时间步长内迭代残差曲线,



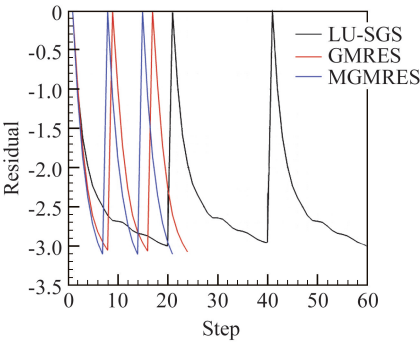
(a) Surface grid



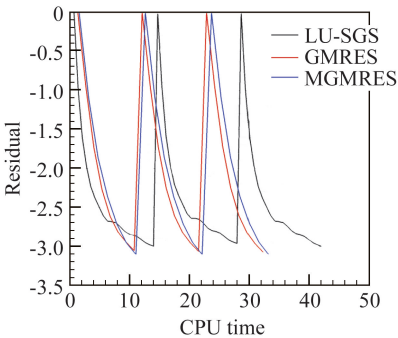
(b) Symmetry grid

图 12 F16 计算网格

Fig.12 Computational grid for F16 case



(a) Convergence history versus steps



(b) Convergence history versus CPU time

图 13 F16 非定常残差收敛曲线

Fig.13 Convergence history for F16 aeroelastics flow

MGMRES 方法仅需约 7 步迭代残差下降 3 个量级, GMRES 方法需要约 8 步, LU-SGS 方法则需要约 20 步。收敛性仍然是 MGMRES 方法最好。计算时间上 GMRES 方法略快于 MGMRES 方法, 较 LU-SGS 方法减少约 23%。需要注意的是, 此时间仅统计了流场计算的时间, 未考虑气动弹性计算中网格变形、流固界面插值等时间。

图 14 给出了采用 MGMRES 方法计算得到的涡量等值面及压强云图, 符合扰流基本规律。图 15 给出了前四阶模态广义位移随时间的变化曲线, 各阶广义位移振幅逐渐减小, 在此状态飞机未发生颤振。

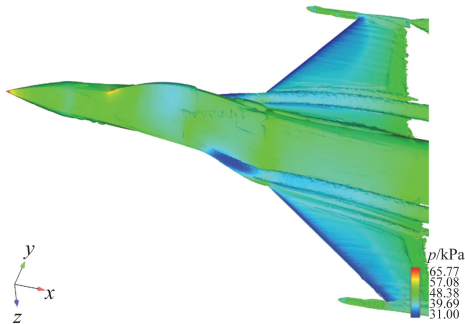


图 14 F16 压强分布和涡量等值面

Fig.14 F16 surface pressure and vorticity iso-surface

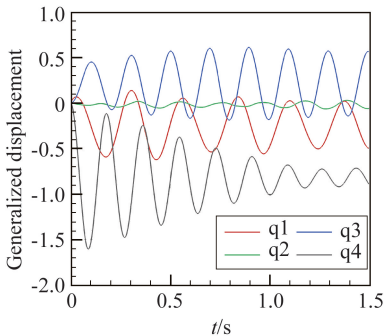


图 15 广义位移时间历程

Fig.15 Generalized displacement history

3.4 旋翼前飞流场

将本文方法发展到非结构重叠网格上, 通过旋翼非定常流模拟研究方法的收敛特性。采用 2.5m 级单旋翼模型, 包括 4 片桨叶。旋翼实度 0.077, 翼型采用 NACA0012, 弦长 0.072 m, 几何扭转 0°, 前飞马赫数 0.127。计算网格方面, 如图 16 所示采用的非结构重叠网格系统, 共包含 6 个子网格, 其中两块为背景网格点数分别为 601 万和 139 万, 每片旋翼叶片的网格随旋翼运动, 网格点数为 107 万, 总网格数约 1200 万。

双时间步长方法中内迭代残差下降 4 个量级为判断其收敛的依据。在内迭代中 MGMRES 方法遇到了鲁棒性问题, 非定常 CFL 最大仅可取到 80, 而 LU-SGS

方法可取 1×10^6 。图 17 给出了采用 MGMRES 方法计算得到的 Q 等值面,其中桨涡干扰现象明显。图 18 给出了两组内迭代残差曲线,MGMRES 方法仅需约 35 步迭代残差下降 4 个量级,LU-SGS 方法则需要约 107 步。收敛性仍然是 MGMRES 方法最优。计算时间上 MGMRES 方法 LU-SGS 方法减少约 40%。

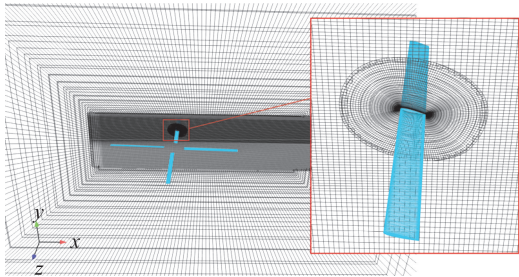


图 16 旋翼重叠网格系统
Fig.16 Overset grids system for rotors

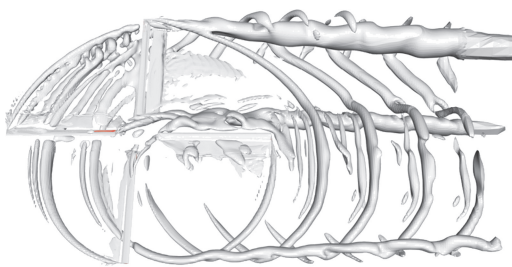
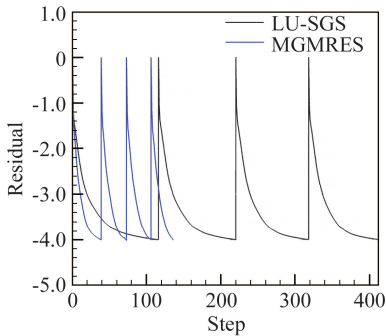
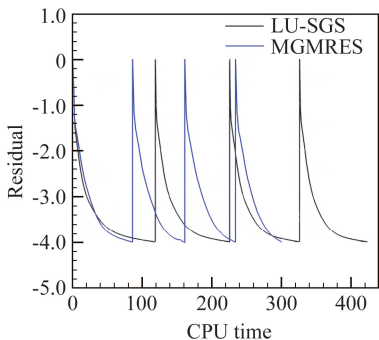


图 17 Q 等值面
Fig.17 Q criterion iso-surface



(a) Convergence history versus steps



(b) Convergence history versus CPU time

图 18 旋翼非定常残差收敛曲线

Fig.18 Convergence history for unsteady rotor flow

但是,内迭代残差下降 3 个量级可满足一般的非定常计算需要,此时 LU-SGS 方法在计算时间上还要少于 MGMRES 方法。主要原因是此算例中 MGMRES 方法的 CFL 数较小,当达到 GMRES 内残差收敛判据 $\epsilon < 0.1$ 时,子空间数仅有 1~3 个,降低了 GMRES 方法的收敛速度。因此提高 GMRES 方法的鲁棒性的研究在未来仍然是很有必要的。

4 并行特性验证

本节采用 3.2 节的翼身组合体绕流算例进行本文发展方法的并行特性验证。图 19 为各隐式方法内存空间需求,无矩阵 GMRES 方法比 LU-SGS 方法内存需求增加有限。MGMRES 方法需要的内存最多,黏性算例在 580 万网格上需要约 13GB 内存。MGMRES 方法平均每千万网格需要约 22GB 内存空间。在目前硬件条件下,采用 MGMRES 方法单台工作站就能够满足千万量级网格的内存需求,高性能分布式集群则可进行更大规模网格的计算。

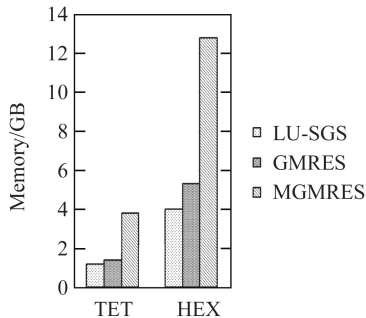


图 19 内存需求
Fig.19 Memory requirements

在国家超级计算天津中心的天河 1A 高性能计算机上,对所发展方法的并行特性展开研究。图 20 为采用 MGMRES 方法、1 和 240 个计算核心(NP)计算得到的机翼上四个站位(η)压强系数分布与实验值的对比,两者符合得较好,验证了并行方法的正确性。

图 21 给出了 Hybrid LU-SGS 方法和 LU-SGS 方法残差收敛曲线。Hybrid LU-SGS 方法在分区边界网格点上使用 DP-LUR 方法而 LU-SGS 方法对分区边界不做处理(图中 w/o 表示)。可见在分区较少时两种方法残差收敛曲线非常接近。当 240 个分区时,分区边界网格点不做处理的并行方法在 4000 步左右计算发散。因此,在进行较多分区并行计算时,采用 Hybrid LU-SGS 方法是必要的。图 22 给出了 Hybrid LU-SGS 预处理算子和 MGMRES 方法并行加速比。两种方法的加速比非常接近理想值,加速效率非常高,MGMRES 方法的加速比略低于 Hybrid LU-SGS 方法。特别的,在 240 个计算核心的并行计

算中均出现了加速比超线性(并行效率超过 100%)。一般认为,在负载均衡和极端通信时间条件下,加速比超线性主要是因为计算机 CPU 缓存在更多分区时利用率更高。

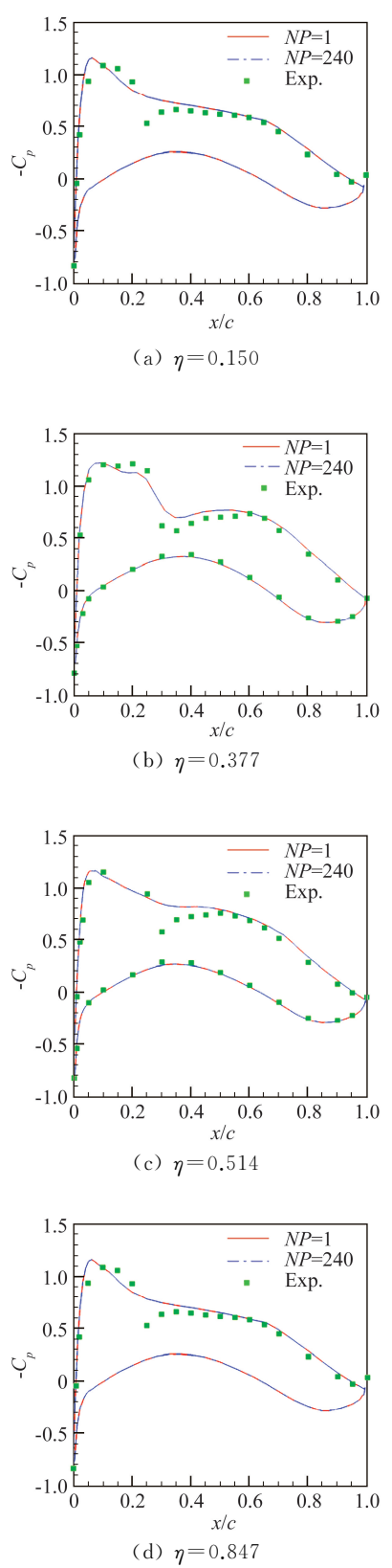


图 20 压强系数分布计算值与实验值对比
Fig.20 Comparison between experimental and computed pressure coefficient distributions

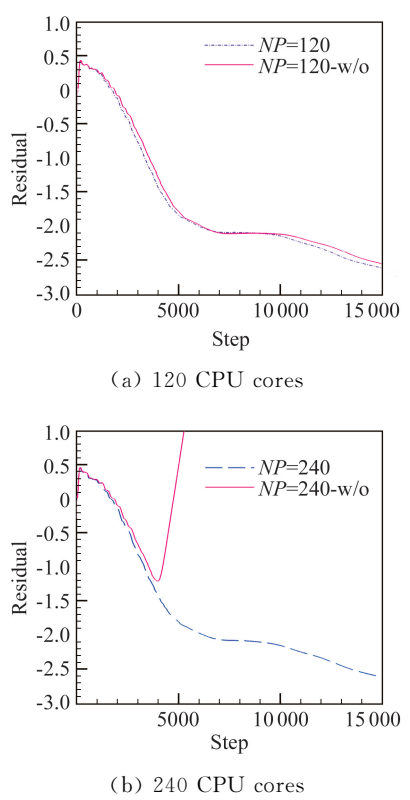


图 21 Hybrid LU-SGS 方法收敛曲线
Fig.21 Convergence history using hybrid LU-SGS

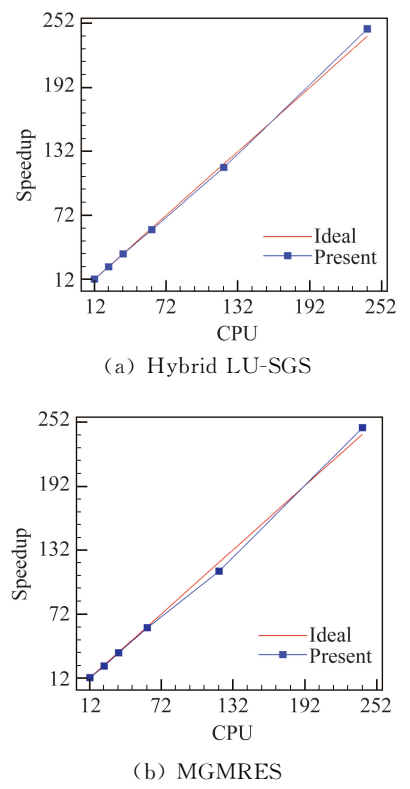


图 22 并行加速比
Fig.22 Parallel speedup

5 结 论

本文基于变子空间数 GMRES 算法, 结合 Hybrid LU-SGS 方法作为并行预处理算子, 引入更鲁棒的湍流模型, 结合不同网格排序方法, 发展出一套计算和存储雅可比矩阵的分布式并行全隐式计算方法。利用南京航空航天大学自主开发的 OVERU 软件, 在天河 1A 高性能计算机上对若干二维和三维扰流问题进行了数值模拟, 经验证具有非常高的收敛性和并行效率, 结论如下:

(1) 变子空间 GMRES 方法与重启 GMRES 方法具有相同的收敛特性, 计算时间可较原方法减少约 15%。计算和存储雅可比矩阵的全隐式方法收敛性优于无矩阵方法, 较 LU-SGS 方法提高 20%~200% 计算效率。采用 RCM 网格重排序方法优化缓存命中可将计算效率再提高 10%。

(2) 矩阵 GMRES 方法每千万网格约需要 22GB 的内存空间, 当前硬件水平下可以满足大规模网格计算的内存需求。

(3) 分布式并行 GMRES 方法结合 Hybrid LU-SGS 预处理算子, 所发展的全隐式方法并行效率非常高。特别的, 在 240 个计算核心出现了加速比的超线性。

本文研究仅限于 CPU 并行计算, 后续研究应向未来 E 级超算的 CPU+GPU(或加速卡)的异构架构, 开展异构架构下全隐式并行算法研究。

参 考 文 献:

- [1] SLOTNICK J, KHODADOUST A, ALONSO J, et al. CFD vision 2030 study: A path to revolutionary computational aerosciences; NASA-2014-218178[R]. Hampton: NASA, 2014.
- [2] 张来平, 邓小刚, 何磊, 等. E 级计算给 CFD 带来的机遇与挑战[J]. 空气动力学学报, 2016, 34(4): 405-417.
ZHANG L P, DENG X G, HE L, et al. The opportunity and grand challenges in computational fluid dynamics by exascale computing[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2016, 34(4): 405-417. (in Chinese)
- [3] SHAROV D, LUO H, BAUM J. Implementation of unstructured grid GMRES + LU-SGS method on shared-memory, cache-based parallel computers; AIAA-2000-0927 [R]. Reno: AIAA, 2000.
- [4] 康忠良, 阎超. 适用于混合网格的并行 GMRES+LU-SGS 方法[J]. 空气动力学学报, 2013, 31(2): 225-230.
KANG Z L, YAN C. Parallel GMRES+LU-SGS method for mixed grids[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2013, 31(2): 225-230. (in Chinese)
- [5] BROWN D A, ZINGG D W. Performance of a Newton-Krylov-Schur algorithm for solving steady turbulent flows[J]. AIAA Journal, 2016, 54(9): 2645-2658.
- [6] OSUSKY L, BUCKLEY H, REIST T, et al. Drag minimization based on the Navier-Stokes equations using a Newton-Krylov approach[J]. AIAA Journal, 2015, 53(6): 1555-1577.
- [7] ITO Y, MURAYAMA M, HASHIMOTO A, et al. TAS Code, FaSTAR and Cflow results for the sixth drag prediction workshop[C]. 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2017.
- [8] 燕振国, 刘化勇, 毛枚良, 等. 基于高阶耗散紧致的 GMRES 方法收敛特性研究[J]. 航空学报, 2014, 35(2): 1181-1192.
YAN Z G, LIU H Y, MAO M L, et al. Convergence property investigation of GMRES method based on high-order dissipative compact scheme[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2014, 35(2): 1181-1192. (in Chinese)
- [9] 张健, 邓有奇, 李彬, 等. 一种适用于三维混合网格的 GMRES 加速收敛新方法[J]. 航空学报, 2016, 37(11): 3226-3235.
ZHANG J, DENG Y Q, LI B, et al. A new method to accelerate GMRES's convergence applying to three-dimensional hybrid grid[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2016, 37(11): 3226-3235. (in Chinese)
- [10] 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.
GONG X Q, JIA H Y, CHEN 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. (in Chinese)
- [11] 夏健, 田书玲, 王江峰, 等. 三维动态非结构重叠网格 Navier-Stokes 方程并行算法[J]. 航空学报, 2008, 29(5): 1118-1124.
XIA J, TIAN S L, WANG J F, et al. Parallel computing strategy for 3d dynamic overset unstructured Navier-Stokes solver[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2008, 29(5): 1118-1124. (in Chinese)
- [12] ALLMARAS S R, JOHNSON F T, SPALART P R. Modifications and clarifications for the implementation of the Spalart-Allmaras turbulence model; ICCFD7-1902 [C]//Big Island; ICCFD, 2012.
- [13] Saad Y. GMRES: Iterative methods for sparse linear systems [M]. 2nd ed. Philadelphia: SIAM, 2003.
- [14] 陈军, 王正华. CFD 并行应用程序的可扩展性分析[J]. 空气动力学学报, 2002, 20(3): 22-26.
CHEN J, WANG Z H. Scalability analysis of CFD parallel applications[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2002, 20(3): 22-26. (in Chinese)
- [15] WISSINK A M. Parallelization of a three-dimensional flow solver for Euler rotorcraft aerodynamics predictions[J]. AIAA Journal, 1996, 34(11): 2276-2282.
- [16] GIBBS N E, POOLE W G, STOCKMEYER P K. An algorithm for reducing the bandwidth and profile of a sparse matrix[J]. SIAM J Numer Anal, 1976, 13: 236-250.
- [17] DAVID H, FORSYTHE J, HALLISSY B P, et al. Fundamental physics validation using CREATE-AV kestrel part I; AIAA 2014-0920[R]. Maryland: AIAA, 2014.
- [18] MURAYAMA M, YAMAMOTO K. Comparison study of drag prediction by structured and unstructured mesh method[J]. Journal of Aircraft, 2008, 45(3): 799-822.
- [19] RUMSEY C L, RIVERS S M, MORRISON J H. Study of CFD variation on transport configurations from the second drag-prediction workshop[J]. Computers & Fluids, 2004, 34(7): 785-816.
- [20] ABDOL-HAMID K S, CARLSON J, RUMSEY C L, et al. DPW-VI results using FUN3D with focus on k-kL-MEAH 2015 turbulence mode; NF1676L-25300[R]. Hampton: NASA, 2017.
- [21] PARKER G. Dynamic aeroelastic analysis of wing/store configurations; AD-445218[R]. Ohio: AFIT, 2005.