

LU-SGS 右前処理付き GMRES 法の高速度流体ソルバ FaSTAR への適用

坂下雅秀 (大興電子通信株式会社), 松尾裕一, 橋本敦, 青山剛史 (宇宙航空研究開発機構)

Applying the GMRES method with LU-SGS right preconditioning to fast flow solver FaSTAR

by

Masahide Sakashita (DAIKO DENSHI TSUSHIN, LTD.), Yuichi Matsuo, Atsushi Hashimoto,
and Takashi Aoyama (Japan Aerospace Exploration Agency)

Abstract

We apply the GMRES method with LU-SGS right preconditioning, faster and more stable than the LU-SGS method, to the three-dimensional hybrid-unstructured-grid finite-volume method flow solver FaSTAR (FaST Aerodynamic Routines), and compare the execution time with LU-SGS method by ONERA M6 wing simulation. As a result, we confirm the GMRES method is about 2 times faster than LU-SGS method.

1. はじめに

現在, 宇宙開発研究機構 (JAXA) において, 数値流体シミュレーション (CFD: Computational Fluid Dynamic) 技術およびコンピュータの計算能力の飛躍的向上を受けて, 風洞を用いた空力実験 (EFD: Experimental Fluid Dynamics) との連携, 融合による新たな高精度かつ高効率の空力特性予測技術を創出すべく, EFD/CFD 融合システム (ハイブリッド風洞) の構築が行われている [1]. そのような状況において, CFD に要求される課題のひとつとして, CFD 計算時間の短縮があげられる. このため複雑形状を精度良く解像できる非構造格子の下, 高速に Euler/Navier Stokes (NS) 方程式を解くことの出来る CFD ソルバ FaSTAR (Fast Aerodynamic Routines) の開発が行われている [2][3]. 本研究では, FaSTAR のさらなる高速化を目的に GMRES (Generalized Minimal RESidual) 法 [4] の適用を試みた. その結果について報告する.

2. 基礎方程式

解析対象となる流れ場は近似的に定常であるという仮定の下に, NS 方程式の定常解を求めることを考える. 三次元非定常圧縮性 NS 方程式の積分形表示は,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV + \int_{\partial\Omega} [\mathbf{F}(\mathbf{Q}) - \mathbf{G}(\mathbf{Q})] dS = 0 \quad (2.1)$$

で与えられる. ここに, $\mathbf{Q} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e]^T$ は保存量 (Conservative variables) ベクトルであり, ρ は密度, $\mathbf{u} = [u, v, w]^T$ は流速, e はエネルギーである. また, $\mathbf{F}(\mathbf{Q})$ 及び $\mathbf{G}(\mathbf{Q})$ はそれぞれ非粘性流束ベクトル及び粘性流束ベクトルである. この (2.1) 式を時間発展させて行き, 十

分な時間経過の後に漸近的に

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{Q} dV = 0 \quad (2.2)$$

が成立した時の解を定常解とみなすこととする. (2.1) 式は, 適切な無次元化のもと, セル中心有限体積法による空間方向の離散化及び Euler 陰解法による時間方向の離散化を行うことにより,

$$V_i \frac{\Delta \mathbf{Q}_i^{n+1}}{\Delta t} = \mathbf{R}_i^{n+1} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{R}_i^{n+1} = - \sum_{j(i)} [\mathbf{f}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})_{ij}^{n+1} - \mathbf{g}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})_{ij}^{n+1}] \Delta S_{ij}$$

となる. ただし, $\Delta \mathbf{Q}_i^{n+1} \equiv \mathbf{Q}_i^{n+1} - \mathbf{Q}_i^n$, $\mathbf{f}(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \equiv \mathbf{F}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$ 及び $\mathbf{g}(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \equiv (1/\text{Re})\mathbf{G}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$ とおいた. また, Δt は時間刻み幅を, 上付き添え字 n は時間ステップを表す. V_i はセル i の体積であり, ΔS_{ij} と \mathbf{n}_{ij} はそれぞれセル i とそれに隣接するセル j との間の検査体積表面の面積及びその単位法線ベクトルである. $\sum_{j(i)}$ はセル i の周りの多面体検査体積において, それを構成する全ての面についての総和を取ることを意味する. Re はレイノルズ数である.

(2.3) 式は

$$\mathbf{R}_i^{n+1} = \mathbf{R}_i^n + \frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{Q}_i} \Delta \mathbf{Q}_i^{n+1} \quad (2.4)$$

とおくことにより線形化することができる. 全ての節点についての方程式をまとめて書けば,

$$\mathbf{A} \Delta \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{R}^n \quad (2.5)$$

を得る。ただし、

$$\mathbf{A} = \frac{\Delta V}{\Delta t} \mathbf{I} - \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{Q}} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{R}^n = \left[- \sum_{j(i)} \left[\mathbf{f}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})_{ij}^n - \mathbf{g}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})_{ij}^n \right] \Delta S_{ij} \right]$$

であり、 $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{Q}$ はヤコビ行列である。

3. 数値解法

与えられた連立方程式(2.5)式を解く方法として、ここではGMRES法[4]を用いる。GMRES法はKrylov部分空間法の一つであり、当該部分空間において残差が最小となるような近似解を与える解法である。

GMRES法は前処理を行うことにより収束が加速されることが知られている。前処理行列を \mathbf{M} とした場合、左前処理では連立方程式

$$\mathbf{M}^{-1} \mathbf{A} \Delta \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{R}^n \quad (3.1)$$

に対してGMRES法を適用することとなる。Luoら[5]は前処理行列 \mathbf{M} として、LU-SGS法により係数行列 \mathbf{A} を近似因数分解した行列を用いLU-SGS左前処理付きGMRES法による計算を行った。いま、係数行列 \mathbf{A} を対角行列 \mathbf{D} 、下三角行列 \mathbf{L} および上三角行列 \mathbf{U} の和により

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U} \quad (3.2)$$

と表した場合、LU-SGS左前処理における前処理行列 \mathbf{M} は、LU-SGS法によって直接Euler/NS方程式を解く場合(以下、単にLU-SGS法という)の近似因数分解と同じ

$$\mathbf{M} = (\mathbf{D} + \mathbf{L}) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \mathbf{U}) \quad (3.3)$$

で与えられる。(3.2)式は、部分因数分解すれば

$$\mathbf{A} = (\mathbf{D} + \mathbf{L}) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \mathbf{U}) + \mathbf{L} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U} \quad (3.4)$$

であり、(3.4)式右辺第二項は、右辺第一項に対する比が Δ^2 のオーダーであるのでこれを無視することとすれば(3.3)式が得られる。

しかし、左前処理付きGMRES法では、前処理空間における直交基底を生成するため、近似解の残差は前処理空間において最小になるものの、解が存在するKrylov部分空間では必ずしも最小になるとは限らないこと、収束判定方法に問題のあることが知られている[6]。そこで、本研究ではLU-SGS右前処理付きGMRES法の適用を試みた。右前処理付きGMRES法では、

$$\mathbf{A} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{u} = \mathbf{R}^n \quad (3.5)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{M} \Delta \mathbf{Q}^{n+1}$$

を解くこととなる。このとき前処理行列 \mathbf{M} は、左前処理の場合と同じ(3.3)式で与えられる。

左前処理付きGMRES法の計算方法をアルゴリズム3.1に、右前処理付きGMRES法をアルゴリズム3.2に示す。

アルゴリズム3.1 左前処理付きGMRES法

1. Choose \mathbf{x}_0 and compute $\mathbf{r}_0 = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0)$,
 $\beta = \|\mathbf{r}_0\|$ and $\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_0 / \|\mathbf{r}_0\|$
2. For $j = 1, 2, \dots, m$ Do: (GMRES iteration loop)
3. $\tilde{\mathbf{v}}_j = \mathbf{A}\mathbf{v}_j$
4. solve $\mathbf{M}\mathbf{w}_j = \tilde{\mathbf{v}}_j (= \mathbf{A}\mathbf{v}_j)$ by LU - SGS method
5. $h_{i,j} = (\mathbf{w}_j, \mathbf{v}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, j$
6. $\mathbf{w}_j = \mathbf{w}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j} \mathbf{v}_i$
7. $h_{j+1,j} = \|\mathbf{w}_j\|$
8. $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{w}_j / h_{j+1,j}$
9. End Do
10. Compute \mathbf{y}_m the minimizer of $\|\beta \mathbf{e}_1 - \tilde{\mathbf{H}}_m \mathbf{y}\|$
and $\mathbf{x}_m = \mathbf{x}_0 + \mathbf{V}_m \mathbf{y}_m$
11. If converged stop, else set $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_m$ and Go To 1

- | | |
|----------|---------------------------------------|
| step 1 | : 初期ベクトル生成 |
| step 2~9 | : Arnoldi法による直交基底ベクトル \mathbf{v} 生成 |
| step 3 | : 前処理 |
| step 10 | : 残差を最小にする近似解ベクトル \mathbf{x}_m 生成 |

アルゴリズム3.2 右前処理付きGMRES法

1. Choose \mathbf{x}_0 and compute $\mathbf{r}_0 = (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0)$,
 $\beta = \|\mathbf{r}_0\|$ and $\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_0 / \|\mathbf{r}_0\|$
2. For $j = 1, 2, \dots, m$ Do: (GMRES iteration loop)
3. Solve $\mathbf{M}\tilde{\mathbf{w}}_j = \mathbf{v}_j$ by LU - SGS method
4. $\mathbf{w}_j = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{w}}_j$
5. $h_{i,j} = (\mathbf{w}_j, \mathbf{v}_i)$ for $i = 1, 2, \dots, j$
6. $\mathbf{w}_j = \mathbf{w}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j} \mathbf{v}_i$
7. $h_{j+1,j} = \|\mathbf{w}_j\|$
8. $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{w}_j / h_{j+1,j}$
9. End Do
10. Compute \mathbf{y}_m the minimizer of $\|\beta \mathbf{e}_1 - \tilde{\mathbf{H}}_m \mathbf{y}\|$
and $\mathbf{x}_m = \mathbf{x}_0 + \mathbf{M}^{-1} \mathbf{V}_m \mathbf{y}_m$
11. If converged stop, else set $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_m$ and Go To 1

- | | |
|----------|---------------------------------------|
| step 1 | : 初期ベクトル生成 |
| step 2~9 | : Arnoldi法による直交基底ベクトル \mathbf{v} 生成 |
| step 3 | : 前処理 |
| step 10 | : 残差を最小にする近似解ベクトル \mathbf{x}_m 生成 |

ここに、ベクトル \mathbf{w}_j は規格直交化前の基底ベクトルであり、 \mathbf{v}_j は正規直交基底ベクトルである。左前処理付きGMRES法と右前処理付きGMRES法の違いは、step 1,3,4,10の部分にある。

Euler/NS方程式の解法として、LU-SGS右前処理付きGMRES法を適用するにはひとつ問題点がある。いまLU-SGS法により解くべき方程式は(2.5)式において係数行列 \mathbf{A} を近似因数分解した、

$$\mathbf{M}\Delta\mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{R}^n \tag{3.6}$$

であり、右前処理としてのLU-SGS法によって解くべき方程式は、

$$\mathbf{M}\Delta\mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{v}_j \tag{3.7}$$

である(アルゴリズム3.2 step 3)。このとき、(3.6)式と(3.7)式の残差(右辺)に対して

$$|\mathbf{v}_j| > |\mathbf{R}^n| \tag{3.8}$$

となる場合が存在する。すなわち、LU-SGS右前処理ではLU-SGS法により直接Euler/NS方程式を解く場合に比べて、右辺残差の大きい状態の方程式を解かなければならない場合が存在し、このような場合にはCFL (Courant Friedrichs Lewy Condition) を現実的な大きさに取れないことがある。

この問題は、直交基底 \mathbf{v}_j の規格化定数を適切な大きさにとることにより解決することが可能である。いま、規格化定数を α ($\alpha < 1$) とすれば、アルゴリズム3.2における右前処理step 3において解くべき方程式は

$$\mathbf{M}\tilde{\mathbf{w}}_j = -\alpha\mathbf{v}_j \tag{3.9}$$

となる。実際の計算では、アルゴリズム3.2のstep5以降に規格化定数 α が表れるのを避けるため、(3.9)式より得られた $\tilde{\mathbf{w}}_j$ に対して $\alpha\tilde{\mathbf{w}}_j$ を改めて $\tilde{\mathbf{w}}_j$ とおくことにすれば、それ以外にアルゴリズム3.2を変更する必要はない。

4. 計算条件

(3.9)式によって正規直交基底を修正したLU-SGS右前処理付きGMRES法の検証を行うために設定した各種計算条件の一覧を表4.1に示す。

表4.1 計算条件

基礎方程式	Euler
時間離散化	Euler陰解法
空間離散化	セル中心有限体積法
Jacobianの評価方法	matrix free form
格子形状	ハイブリッド非構造格子
形状	ONERA M6
セル数	1,920,585
面数	4,247,333
境界面数	103,899
マッハ数	0.8395
迎角	3.06

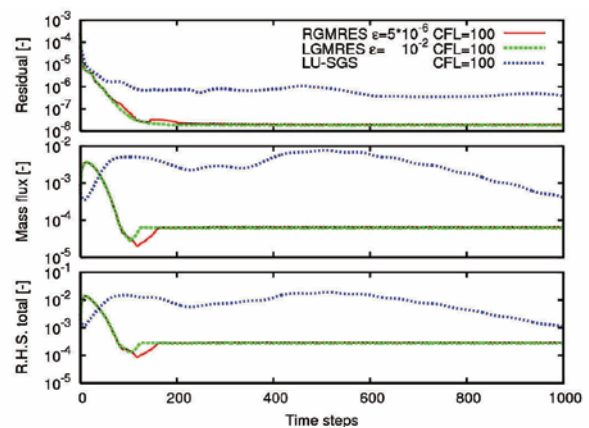
また、正規直交化規定の規格化定数は $\alpha=10^{-4}$ とした。GMRES法としてはリスタートGMRES法を用い、基底ベクトルの探索方向は最大10方向、リスタートは最大10回とした。

5. 計算結果

以下に、LU-SGS右前処理付きGMRES法の検証のために行った計算結果を示す。各図において"RGMRES"はLU-SGS右前処理付きGMRES法を示す。また、比較のためLU-SGS左前処理付きGMRES法による計算結果を"LGMRES"として、LU-SGS法により直接解いた結果を"LU-SGS"としてそれぞれ示す。また、 ϵ はGMRES法の収束判定値である。

残差ノルム

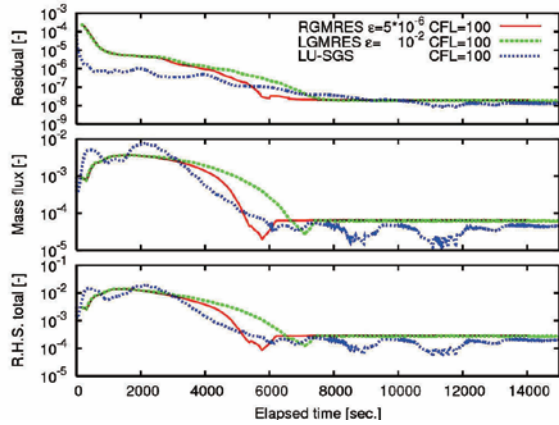
図5.1に、LU-SGS右前処理付きGMRES法、LU-SGS左前処理付きGMRES法およびLU-SGS法による計算結果について、タイムステップに対する残差ノルムの変化を示す。LU-SGS右前処理付きGMRES法においては $\epsilon=5 \times 10^{-5}$ 、LU-SGS左前処理付きGMRES法においては $\epsilon=10^{-2}$ とした。収束判定値の違いは、右前処理では解の存在する部分空間で収束判定を行うのに対して、左前処理では前処理空間で行うことによる。また、全てのケースにおいて、CFL=100で一定とした。タイムステップで見た場合、LU-SGS法に比べ右前処理、左前処理に関わらず、GMRES法は極めて早い速度で収束している。



Residual : 左辺密度時間変化 $\Delta\rho$ 規格化ノルム
 Mass flux : 右辺質量fluxのノルム
 R.H.S total : 右辺 \mathbf{R}^n のノルム

図5.1 残差ノルムのタイムステップ変化

図5.2に経過時間に対する残差ノルムの変化を示す。経過時間で見た場合、密度の時間変化 $\Delta\rho$ (左辺)を見る限りLU-SGS法とGMRES法の収束性に顕著な違いは見られない。しかし、右辺のノルムを見るとLU-SGS法のノルムはまだ安定しておらず、収束していないことが判る。



Residual : 左辺密度時間変化 $\Delta\rho$ 規格化ノルム
 Mass flux : 右辺質量fluxのノルム
 R.H.S total : 右辺 R^d のノルム

図5.2 残差ノルムの経過時間変化

空力係数

図5.3にタイムステップに対する空力係数の変化を、図5.4に経過時間に対する空力係数の変化をそれぞれ示す。残差ノルムの場合同様、タイムステップで見ると十分早く、およそ10倍ほどの速さで収束している。経過時間で見ても、約2倍程度早く収束していることがわかる。

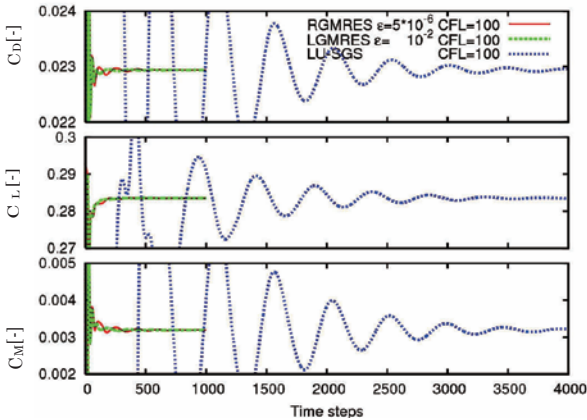


図5.3 空力係数のタイムステップ変化

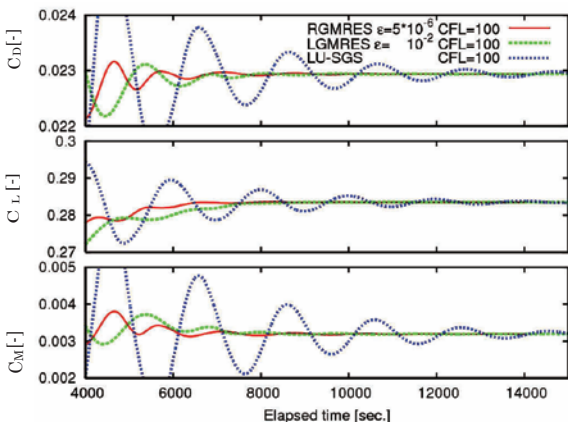


図5.4 空力係数の経過時間変化

抵抗係数 C_D の振幅の変化

以下、収束性に関する定量的な評価を行うことを考える。航空機設計では、空力係数の1カウントが問題となることから、必要な計算精度が得られる程度に時間発展が収束するには、空力係数の変動が0.5カウント以下になれば十分である。よって、ここでは抵抗係数 C_D の経過時間に対する極大・極小値の差から振幅 ΔC_D を求め、振幅が0.5カウント (5×10^{-5}) 以下になったときを収束判定の指標として採用する。図5.5に、経過時間に対する抵抗係数の振幅の変化を示す。図では下限を0.5カウントに設定してある。この指標において、LU-SGS法では、収束するまでに約16,000秒かかっているのに対して、GMRES法では約8,000秒と1/2の経過時間で収束することが確認された。

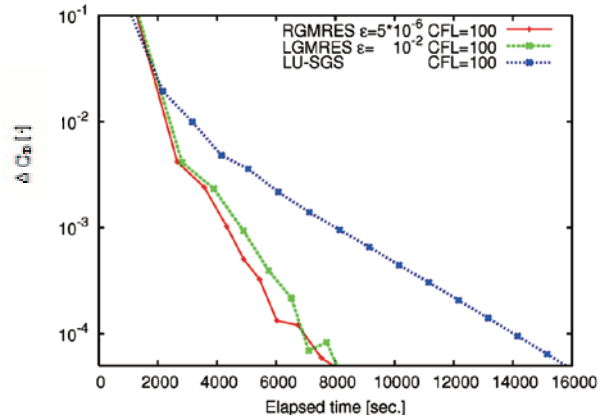


図5.5 抵抗係数の振幅の経過時間変化

収束の収束判定値依存性

GMRES法の収束判定値 ϵ と収束性の関係を探るため、 ϵ を 10^{-4} 、 5×10^{-5} 、 10^{-5} 、 5×10^{-6} と変化させ場合に、収束性がどのように変化するかを調べた。図5.6にタイムステップごとのGMRES法の反復回数を、図5.7に経過時間に対する抵抗係数の振幅 ΔC_D の変化を示す。GMRES法の反復回数は、リスタートに対して通算した基底ベクトル探索方向の数である。図5.6より収束判定を厳しくすると、GMRES法の反復回数が増加するという予想された結果が得られた。1反復あたりの演算量は一定であるから、この結果から1タイムステップあたりの計算時間は長くなることがわかる。にもかかわらず、図5.7より収束判定を厳しくした方がより早く収束するという結果が得られた。したがって、タイムステップあたりの計算時間が多くかかっても、各タイムステップでの計算をなるべく厳密に行った方が短時間に収束することがわかった。

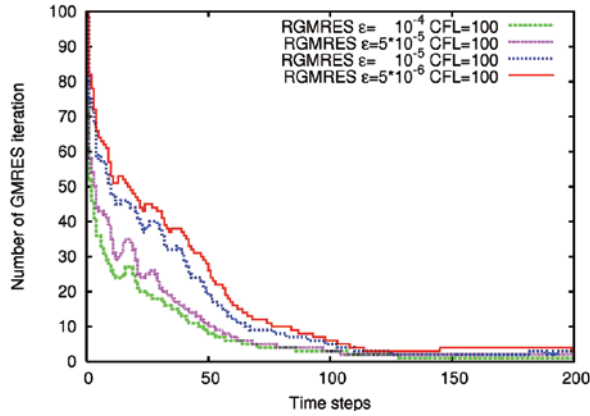


図5.6 反復回数と収束判定値の関係

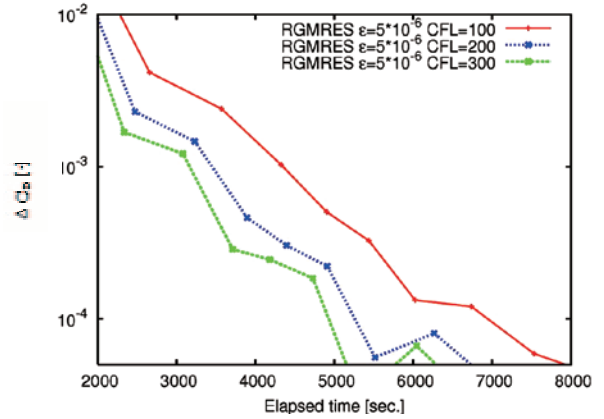


図5.9 収束性とCFLの関係

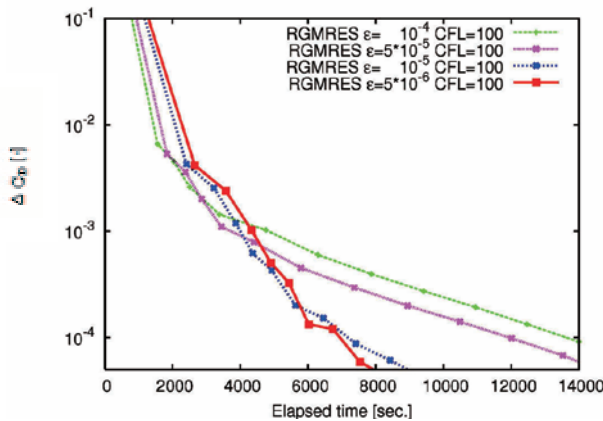


図5.7 収束性と収束判定値の関係

収束のCFL依存性

CFLがGMRES法の収束性にどのような影響を与えるかを調べるために、CFLを100, 200, 300と変化させた。図5.8にタイムステップあたりのGMRES法の反復回数を、図5.9に経過時間に対する抵抗係数の振幅 ΔC_D の変化を示す。25ステップ前後からCFLが大きい方が反復回数が少なくなり(図5.8), 結果として早く収束した(図5.9)。この点ではLU-SGS法などと変わらない傾向をもつことがわかる。

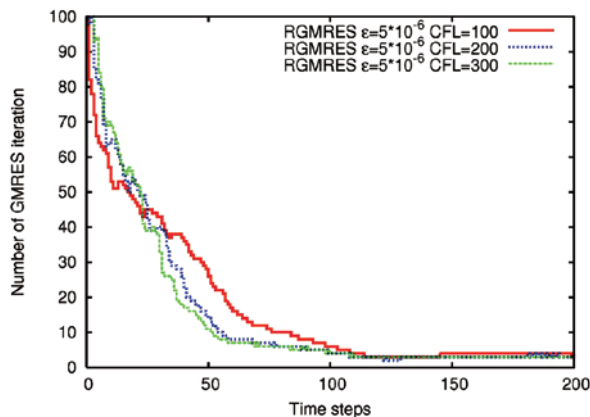


図5.8 反復回数とCFLの関係

6. まとめ

基底ベクトルの規格化定数 α を適切に選ぶことで、現実的なCFL条件の下で、Euler方程式をLU-SGS右前処理付きGMRES法で解くことが可能となった。

LU-SGS右前処理とLU-SGS左前処理は、収束判定値 ϵ を適切に選ぶことで、同等の収束性を示した。

LU-SGS前処理付きGMRES法は、LU-SGS法に比べて、タイムステップで約10倍、計算に要する経過時間で比較しても約2倍早く収束することが明らかとなった。

参考文献

- [1] 渡辺他, “JAXAにおけるEFD/CFD融合に向けた試み～デジタル/アナログ・ハイブリッド風洞構想～”, 第40回流体力学講演会／航空宇宙数値シミュレーションシンポジウム2008 講演集, 1C12, 2008.
- [2] 橋本他, “高速流体ソルバFaSTARの開発”, 第42回流体力学講演会／航空宇宙数値シミュレーションシンポジウム2010 講演集, 1C9, 2010.
- [3] 菱田他, “非構造高速流体ソルバFaSTARにおける勾配制限関数”, 第42回流体力学講演会／航空宇宙数値シミュレーションシンポジウム2010 講演集, 1C10, 2010.
- [4] Saad, Y. and Schultz M. H., "Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems", SIAM J. SCI STAT. COMPUT., Vol. 7, No.3, pp 856-869, 1986.
- [5] Luo, H., Baum J. D. and Löhner R, "A Fast, Matrix-free Implicit Method for Compressible Flows on Unstructured Grids" AIAA Paper 99-0936, 1999.
- [6] Saad, Y., "Iterative Methods for Space Linear Systems", 2nd edition, SIAM, 2000.