点緩和型陰的 Discontinuous Galerkin 法の収束加速

保江 かな子，澤田 恵介
東北大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻

Convergence Acceleration for Pointwise Relaxation Implicit Discontinuous Galerkin Method

by
Kanako Yasue and Keisuke Sawada (Tohoku Univ.)

Abstract

Efforts are made to reduce computing time of the pointwise relaxation implicit Discontinuous Galerkin method for reaching convergence by utilizing *p*- multigrid scheme and also by solving a block diagonalized matrix instead of a fully loaded dense matrix to advance a time step. It is shown that computing time to obtain a converged solution for a typical test problem becomes 1/2 of the computing time of the original pointwise implicit relaxation method.

1 はじめに

近年，非構造格子上においても高次精度を達成できる計算手法が多く研究されている．中でも，高次精度化が容易で，あらゆるセル形状において高次精度を厳密に達成することができる手法として，Discontinuous Galerkin 法 [1] が注目されている．この手法では，解を再構築する際に周囲のステンシルを用いるのではなく，セル内部に自由度を与えることでセル内部の物理量分布を近似する．そのため依存域がコンパクトであり，並列化にも高い親和性がある．

しかし高次精度 DG 法の実用化の課題は，計算コストの高さにある．従来の FVM と比べると，例えば 2 次元 2 次精度では約 10 倍，2 次元 3 次精度では約 100 倍の計算コストがかかると言われている．しかし，昨今の CFD では複雑な流れ場の特徴を正確に捕らえることが要求されており，高次精度手法の実用化が望まれる．

この課題を達成するためには，高次精度手法の一番の欠点である計算コストの削減が必要であり，ベクトル，パラレル計算機への移植や，特に定常解を求めるような流れ場には陰解法化による収束加速が必要となる．

我々はこれまでに点緩和型陰解法を用いた陰的 DG 法を構築してきた [2]．点緩和型陰解法は DG 法の特徴と同様，解の更新に隣接するセルの情報が必要ないため，並列化に親和性があるという DG 法の長所を壊す事なく陰解法化が可能である [3]．

しかし，点緩和型陰的 DG 法は大きな CFL 数でも安定に計算が可能であるが，隣のセルの情報を参照しないことから従来の陰解法に比べて必ずしも収束効率が高いとは言えない．そこで，本研究では，より高い収束性を得るために，*p*-multigrid 法 [4, 5] を適用する．また，ブロック対角化を導入することによって陰解法演算の大部分を占める行列演算の簡略化と行列成分の導出を省略して，さらなる計算時間の削減を試みる．

2 計算手法

2.1 Discontinuous Galerkin 法

各セル毎の内部の物理量分布を自由度 Q_j と基底関数 v_j を用いて，

$$Q_h(\boldsymbol{x},t) = \sum_j Q_j(t) v_j(\boldsymbol{x}) \tag{1}$$

と表す．添字 j は精度に応じて決まる自由度の数であり，3 次元 2 次精度の場合は 4 である．基底関数にはヤコビ多項式 [6] を用いており，p 次の多項式で展開すると，空間精度は $p+1$ 次となる．

DG 法では，次式のように支配方程式に基底関数 v_i を乗じて，計算セル Ω_e で積分した弱形式を解くことで解を得る．

$$\sum_j \frac{dQ_j}{dt}\int_{\Omega_e} v_i v_j d\Omega + \int_{\partial\Omega_e} v_i \boldsymbol{F}(Q_h)\cdot\boldsymbol{n}d\sigma_e - \int_{\Omega_e}\boldsymbol{F}(Q_h)\cdot\nabla v_i d\Omega_e = 0 \tag{2}$$

ここで，$\partial\Omega_e$ は各計算セルの境界を表している．

また，式 (2) の左辺第二項の面積分および第三項の体積積分は，ガウスの求積法で評価する．セル境界における流束計算には，近似リーマン解法を用いる．

2.2 点緩和型陰解法

点緩和型の陰解法はセル内の時間発展のみを考えればよい．そこで，次式で表されるような流束関数の線形化を最初に考える．

$$\boldsymbol{F}^{n+1} \cong \boldsymbol{F}^{n} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial Q}\Delta Q \tag{3}$$

式 (3) を用いると，式 (2) における左辺第 2 項の面積積分は以下のように近似される．

$$\int_{\partial\Omega_e} v_i \boldsymbol{F}^{n+1}\cdot \boldsymbol{n} d\sigma_e \cong \int_{\partial\Omega_e} v_i \boldsymbol{F}^{n}\cdot \boldsymbol{n} d\sigma_e + \int_{\partial\Omega_e} v_i \left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial Q}\cdot \boldsymbol{n}\right)^{+} \Delta Q d\sigma_e \tag{4}$$

ここで，$D = (\partial \boldsymbol{F}/\partial Q)\cdot \boldsymbol{n}$ とすると，ヤコビ行列の正射影は $D^{+} = \kappa(D + \lambda_{max} I)/2$ と定義される．λ_{max} は流速 $\boldsymbol{U}$，音速 c を用いて，$\lambda_{max} = (|\boldsymbol{U}\cdot \boldsymbol{n}| + c)$ で表される．また，LU-SGS[7] と同様に，$\kappa = 1.05$ とする．

同様に，式 (2) の左辺第 3 項の体積積分は以下のように近似される．

$$\int_{\Omega_e} \boldsymbol{F}^{n+1}\cdot \nabla v_i d\Omega_e \cong \int_{\Omega_e} \boldsymbol{F}^{n}\cdot \nabla v_i d\Omega_e + \int_{\Omega_e} \left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial Q}\cdot \nabla v_i\right) \Delta Q d\Omega_e \tag{5}$$

式 (4)，(5) における，ΔQ は

$$\Delta Q = \sum_j \Delta Q_j v_j \tag{6}$$

とかける．式 (2) の時間積分項は，

$$\sum_j \frac{dQ_j}{dt}\int_{\Omega_e} v_i v_j d\Omega = \frac{1}{\Delta t}\sum_j I_{ij}\Delta Q_j \tag{7}$$

となる．ここで，$I_{ij} = \int_{\Omega} v_i v_j d\Omega$ は基底関数の積のモーメントであり，基底関数が直交性を持つとき，I_{ij} は対角行列となる．

以上より，最終的に次式で表される ΔQ_j に対する代数方程式を得る．

$$\sum_j \mathcal{M}_{ij}\Delta Q_j = \mathcal{R}_i \tag{8}$$

ここで，

$$\mathcal{M}_{ij} = \frac{1}{\Delta t}\sum_j I_{ij} + \int_{\partial\Omega_e} v_i \left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial Q}\cdot \boldsymbol{n}\right)^{+} v_j d\sigma_e - \int_{\Omega_e}\left(\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial Q}\cdot \nabla v_i\right) v_j d\Omega_e \tag{9}$$

および，

$$\mathcal{R}_i = -\int_{\partial\Omega_e} v_i \boldsymbol{F}^{n}\cdot \boldsymbol{n} d\sigma_e + \int_{\Omega_e} \boldsymbol{F}^{n}\cdot \nabla v_i d\Omega_e \tag{10}$$

である．$\mathcal{M}_{ij}$ の大きさは，保存変数の数と自由度の数の積の二乗で表され，3 次元 2 次精度の場合は，20×20 行列となる．

2.3 行列のブロック対角化

3 次元 2 次精度を例に，式 (8) を書き下すと次のようになる．

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{M}_{11} & \boldsymbol{M}_{12} & \boldsymbol{M}_{13} & \boldsymbol{M}_{14} \\ \boldsymbol{M}_{21} & \boldsymbol{M}_{22} & \boldsymbol{M}_{23} & \boldsymbol{M}_{24} \\ \boldsymbol{M}_{31} & \boldsymbol{M}_{32} & \boldsymbol{M}_{33} & \boldsymbol{M}_{34} \\ \boldsymbol{M}_{41} & \boldsymbol{M}_{42} & \boldsymbol{M}_{43} & \boldsymbol{M}_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta Q_1 \\ \Delta Q_2 \\ \Delta Q_3 \\ \Delta Q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{R}_1 \\ \boldsymbol{R}_2 \\ \boldsymbol{R}_3 \\ \boldsymbol{R}_4 \end{pmatrix} \tag{11}$$

ここで，$\boldsymbol{M}_{ij}$ は 5×5 行列である．

従来の点緩和型陰的 DG 法では，20×20 の逆行列を LU 分解に基づいて求めていた．ここでは，係数行列の 1 列目および対角項のみ考慮し，以下のように式 (11) を近似的に解く．

$$\begin{aligned} \Delta Q_1 &= \boldsymbol{M}_{11}^{-1}\boldsymbol{R}_1 \\ \Delta Q_2 &= \boldsymbol{M}_{22}^{-1}(\boldsymbol{R}_2 - \boldsymbol{M}_{21}\Delta Q_1) \\ \Delta Q_3 &= \boldsymbol{M}_{33}^{-1}(\boldsymbol{R}_3 - \boldsymbol{M}_{31}\Delta Q_1) \\ \Delta Q_4 &= \boldsymbol{M}_{44}^{-1}(\boldsymbol{R}_4 - \boldsymbol{M}_{41}\Delta Q_1) \end{aligned} \tag{12}$$

これにより，(保存変数の数)×(自由度の数) の二乗の大きさの逆行列を求めるのではなく，(保存変数の数) の二乗の大きさの逆行列を (自由度の数) 回求めることになり，計算時間を削減できる．3 次元 2 次精度の場合には，5×5 の逆行列を 4 回求めればよい．

2.4 *p*-multigrid 法の適用

収束加速を図る方法として，*h*-multigrid 法が一般的に用いられている．通常，格子サイズ程度の誤差成分は比較的早く減衰するが，長波長の誤差成分は減衰し難い．*h*-multigrid 法は，粗い格子で得られた解を用いて，細かい格子で得られた解の長波長成分の誤差を選択的に減衰させるという手法である．

一方，*p*-multigrid 法は，*h*-multigrid 法の考えを拡張したものであり，高次の階層的な多項式近似による解で減衰し難い長波長の誤差成分を，低次の多項式近似による解を使って減衰させるという方法である．その際，全ての近似レベルで同じ空間格子を用いる．また，高次の近似解と低次の近似解との変換にはオペレータを用いる．2 次精度を例に具体的な手順を示す．

1. 次ステップの $p = 1$ 次の解 $Q_{P_1}^{n+1}$ を求める．

$$Q_{P_1}^{n+1} = Q_{P_1} + \mathcal{M}^{-1}\mathcal{R}(Q_{P_1}^{n})$$

2. $p = 1$ 次の解 $Q_{P_1}^{n+1}$ と残差ベクトル $\mathcal{R}(Q_{P_1}^{n+1})$ を $p = 0$ 次に補間する．

$$\begin{aligned} Q_{P_0}^{*} &= \boldsymbol{I}_{P_1}^{P_0} Q_{P_1}^{n+1} \\ \mathcal{R}_{P_0} &= \widetilde{\boldsymbol{I}}_{P_1}^{P_0}\mathcal{R}(Q_{P_1}^{n+1}) \end{aligned}$$

3. 次ステップの $p = 0$ 次の解 $Q_{P_0}^{n+1}$ を求める．

$$Q_{P_0}^{n+1} = Q_{P_0}^{*} + \mathcal{M}^{-1}\mathcal{R}_{P_0}$$

4. 修正項 C_{P_0} を求める．

$$C_{P_0} = Q_{P_0}^{n+1} - Q_{P_0}$$

5. $p = 1$ 次の近似解 $Q_{P_1}^{n+1}$ を更新する．

$$\widetilde{Q}_{P_1}^{n+1} = Q_{P_1}^{n+1} + \boldsymbol{J}_{P_0}^{P_1} C_{P_0}$$

ここで，P_i は i 次の多項式近似を示している．また，$\boldsymbol{I}_{P_0}^{P_1}$，$\widetilde{\boldsymbol{I}}_{P_0}^{P_1}$ および $\boldsymbol{J}_{P_0}^{P_1}$ はそれぞれ，状態制限オペレータ，残差制限オペレータ，状態延長オペレータである．

これまでに，h-multigrid 法と p-multigrid 法を組み合わせた hp-multigrid 法は優れた収束性を示すことが報告されているが [5]，h-multigrid 法を適用すると複数の格子が必要となり，並列化の際の手順が煩雑となる．そのため本研究では，高い並列効率を容易に実現できる点緩和型陰的 DG 法の利点を損なう事なく収束加速を図ることが可能な p-multigrid 法単独の検討を行った．

3 結果および考察

本手法を 3 次元 ONERA-M6 翼型周りの非粘性流れ場解析に適用し，収束特性を検証した．計算領域を 393,979 個の四面体で分割した．Fig.1 に翼近傍の計算セルを示す．マッハ数を 0.84，迎角を 3.06[deg] とし，CFL 数は全て 10^6 で計算した．時間積分には，点緩和型陰解法を用い，収束加速のために導入した手法を検証するために，Table 1 のように 4 ケースで計算をおこなった．本計算は，METIS[8] による格子の領域分割および Message Passing Interface (MPI) Library を用いて並列化した．計算は全て東北大学 流体科学研究所のスカラー並列計算機 SGI Altix3700Bx2 を用いて最大 64 並列で実行した．

翼表面およびルート面での圧力等高線図を Fig.2 に示す．典型的なラムダ型の衝撃波が翼上面に捕らえられた．またこのときの圧力係数分布を実験により得られた分布 [9] と共に Fig.3 に示す．非粘性計算であるので，衝撃波位置が後退しているが，概ね解の一致は良好である．得られたステップ数に関する残差履歴および CPU 時間に関する残差履歴を Fig.4 および 5 に示す．Fig.4 より，case 2 では，case 1 の半分の反復回数，また約 3 分の 2 の CPU 時間で収束した．また，case 3 では，case 1 の収束特性を維持したまま，CPU 時間を約 30% 減らすことができた．さらに，case 4 では，case 1 の半分の計算時間で収束解を得られることが示された．

Table 1 Numerical methods.

	p-multigrid	block diagonalization
case 1	×	×
case 2	×	○
case 3	○	×
case 4	○	○

最後に，並列計算における速度向上率を Fig.6 に示す．収束加速法を付加しても高い速度向上率を維持していることを確認した．Case 1 および Case 2 においては 64 並列で計算した際に速度向上率が落ちているが，この原因については現在検討中である．

行列の対角化および p-multigrid 法はどちらも高次精度化するほど効果が出ると考えられ，計算コストの高い高次精度 Discontinuous Galerkin 法の実用化にこれらの収束加速法は有効と期待される．

4 まとめ

点緩和型陰的 Discontinuous Galerkin 法の収束加速を図るために，行列のブロック対角化および p-multigrid 法を適用した．行列のブロック対角化を適用することによって，2 次精度計算では収束特性を変えることなく代数方程式の行列演算にかかる時間を 30% 削減できた．また，p-multigrid 法を併用することで，反復回数ならびに計算時間のいずれもこれまでの点緩和型陰的 DG 法の約半分で収束解を得ることができた．

今後，3 次精度以上への拡張，ならびに粘性流への拡張を検討する予定である．

参考文献

[1] Cockburn, B. and Shu, C-W., Journal of Computational Physics, Vol. 141, 1989, pp. 199-244.

[2] Yasue, K. Ohnishi, N., and Sawada, K., AIAA paper, 2006-3893.

[3] 保江, 大西, 澤田, 第 20 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2006), E7-1.

[4] Luo H., Baum J. D. and Lohner, R., AIAA Journal, Vol. 46, No. 3, 2008, pp. 635-652.

[5] Nastase C. R. and Mavriplis D. J., Journal of Computational Physics, Vol. 213, 2006, pp. 330-357.

[6] Sherwin, S. J. and Karniadakis, G., International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 38, 1995, pp. 3775-3802.

[7] Jameson A. and Turkel E., Methematics of Computation, Vol. 37, No. 156, 1981, pp. 385-397.

[8] Karypis, G. and Kumar, V. TR95-035, University of Minnesota, 1995, http://www-users.cs.umn.edu/karypis/metis/.

[9] Schmitt, V. and Charpin, F. AGARD AR-138-B1, 1979.

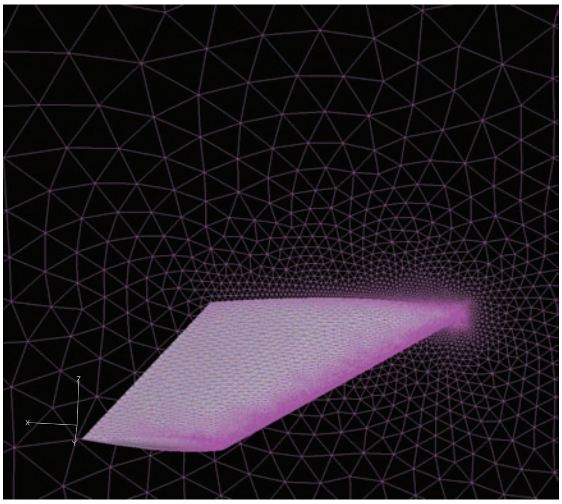

Fig. 1　Computational mesh around ONERA-M6 isolated wing.

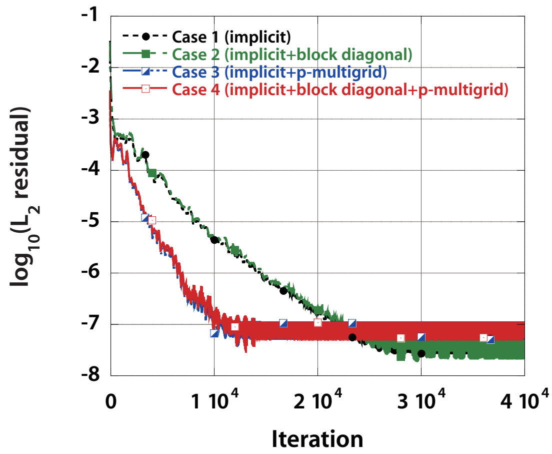

Fig. 4　Convergence histories associated with iteration.

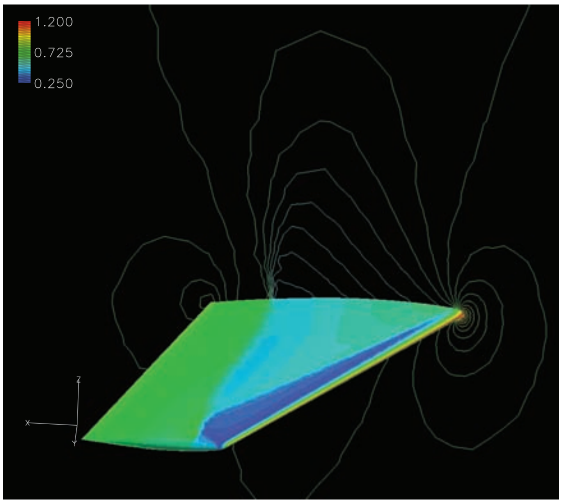

Fig. 2　Obtained pressure contours over ONERA-M6 isolated wing at M=0.84 and AoA=3.06 [deg].

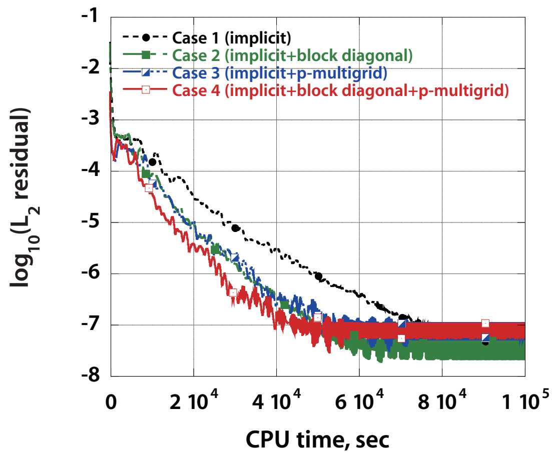

Fig. 5　Convergence histories associated with CPU times.

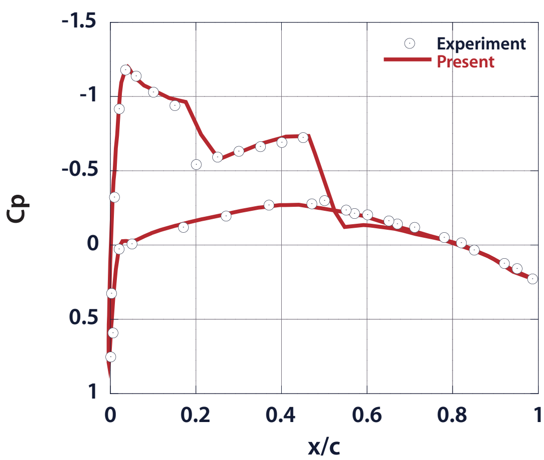

Fig. 3　Pressure coefficient at 65% spanwise location.

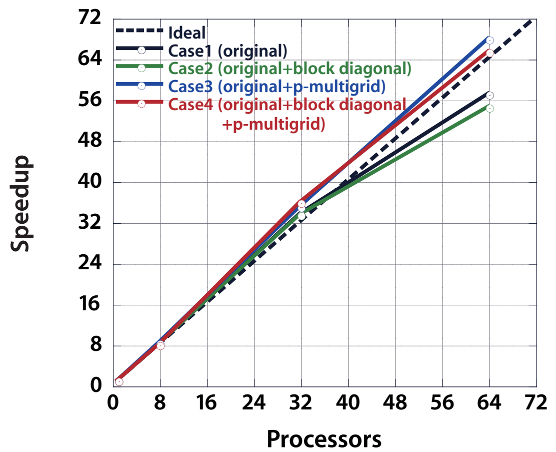

Fig. 6　Sustained speedup ratio.