DOI:10.16265/j.cnki.issn1003-3033.2002.03.011
第12卷第3期 中国安全科学学报 Vol.12 No.3
2002年6月 China Safety Science Journal Jun. 2002

计算流体力学(CFD)中的迭代法及其并行计算方法

何有世 副教授 袁寿其 王大承 丛小青
(江苏大学) (五邑大学) (江苏大学)

学科分类与代码:620.5020
基金项目:江苏省应用基础基金项目(基金号:BJ2000006)。

【摘 要】 应用计算流体力学(CFD)方法分析事故原因已被广泛采用,笔者针对事故理论分析和流体计算过程中,运用CFD方法所存在计算量大的问题,分析和讨论了几种古典迭代法及其并行计算方法。

【关键词】 计算流体力学(CFD) 迭代法 并行计算

Iteration and Its Parallel Computation in Computational Fluid Dynamics

He Youshi, Assoc. Prof. Yuan Shouqi Wang Dachen Cong Xiaoqing
(Jiangsu University) (Wuyi University) (Jiangsu University)

Abstract: Computational fluid dynamics (CFD) has been widely applied to analyze the causation of accidents. In view of the large amount of computation in accident theoretical analysis and in the process of fluid computation by CFD, some classic iterations and their parallel computations are analyzed and discussed.

Key words: Computational fluid dynamics (CFD) Iteration Parallel computation

1 引 言

在安全科学的众多领域,例如,爆炸压力场的分布计算中,都广泛地使用CFD(Computational Fluid Dynamics,计算流体力学)技术。CFD需要速度快、容量大的计算机,即使在目前所提供的运算速度最快、容量最大的超级计算机上进行计算,一个三维定常问题的数值模拟,也要花费几十个机时。因此,并行计算方法的研究越来越被人们重视。

在研究CFD的计算方法时,人们常用直接法和迭代法。但在对大型稀疏线性方程组求解时,直接法不能充分利用方程组系数矩阵的稀疏特性,因其所占用的存储空间和计算费用高,且不易并行。迭代法却能利用方程组系数矩阵的稀疏特性,将问题转化为构造一个无穷迭代序列来逐步逼近方程组的解,因此,具有方法简单、所需计算空间小、易并行等优点。

在事故理论分析中,能简单、快速、无需大容量的计算机系统就足以完成。由于古典迭代法例如,Jacobi迭代、Gauss-Seidel迭代、SOR迭代,稍加变形就可以适用于稀疏带状线性方程组,所以,笔者主要讨论古典迭代法。

2 迭代法的一般数学表达式及收敛性

2.1 一般数学表达式

n阶线性方程组 $Ax=b$,用迭代法解的一般表达式为

$$x^{(k)} = F_k(A, b, x^{(0)}, x^{(1)}, \cdots, x^{(k-1)})$$
$$k = 1, 2, \cdots \tag{1}$$

对任意给定的初始向量 $x^{(0)}$,要求 $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k)} = x$。

各种不同的迭代公式,可以从选择不同的 F_k 得到。如果 F_k 只依赖于 $x^{(k-1)}, x^{(k-2)}, \cdots x^{(k-p)}$,则称 F_k 为 p 阶迭代公式。通常情况下,p 取较小的值。当 $p=1$ 时,称其为一阶迭代公式

$$x^{(k)} = F_k(A, b, x^{(k-1)}) \qquad k = 1, 2, \cdots \quad (2)$$

当 F_k 与迭代次数无关时, 称为定常迭代。最简单的一阶迭代是 $x^{(k-1)}$ 的线性函数

$$x^{(k)} = H_k x^{(k-1)} + g_k \qquad k = 1, 2, \cdots \quad (3)$$

迭代法与直接法不同, 迭代法的本质是将系数矩阵分解为两个矩阵的和, 不同的分解方式和原则构成不同的迭代方法, 而直接法是将系数矩阵分解为矩阵的乘积。

2.2 收敛性

将 $Ax = b$ 的解 X_T 代入式(3)

$$x^{(k)} = H_k x^{(k-1)} + g_k$$

得到

$$X_T = H_k X_T + g_k \quad (4)$$

由(3 ~ 4), 并令 $e^{(k)} = x^{(k)} - x_T$, 得

$$e^{(k)} = H_k e^{(k-1)} \quad (5)$$

式(5) 说明, 误差向量 $e^{(k)}$ 满足式(3) 的齐次式, 这是线性迭代的基本特征。于是

$$e^{(k)} = H_k H_{k-1} \cdots H_1 e^{(0)} \quad (6)$$

令 $M_k = H_k H_{k-1} \cdots H_1$, 对任意初值 $x^{(0)}$, 误差 $\lim\limits_{k\to\infty} e^{(k)} = 0$ 的充分必要条件是 $\lim\limits_{k\to\infty} M_k = 0$。在定常迭代(包括循环迭代) 的情况下, 对任意初始向量 $x^{(0)}$, 迭代收敛的充分必要条件的矩阵 H 的谱半径 $\rho(H) < 1$。

3 古典迭代法及其并行计算

3.1 Jacobi 迭代

对线性方程组 $Ax = b$, 将系数矩阵 A 分解为下列形式

$$A = D + L + U \quad (7)$$

式中, D—— 对角线矩阵;

L 和 U—— 分别是对角线元素为零的下三角矩阵和上三角矩阵。

用 $D + L + U$ 代替矩阵 A, 式(7) 可以改写成

$$Dx = -(L + U)x + b \quad (8)$$

当矩阵 A 的对角元素非零时, 可建立迭代公式

$$x_i^{(k)} = -\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{(k-1)} + \frac{b_i}{a_{ii}}$$

$$i = 1, 2, \cdots, n; \quad k = 1, 2, \cdots \quad (9)$$

写成矩阵形式, 得 Jacobi 迭代公式:

$$X^{(k)} = D^{-1}(L + U) X^{(K-1)} + D^{-1} b$$

$$k = 1, 2 \cdots \quad (10)$$

其迭代矩阵为

$$H_j = -D^{-1}(L + U) \quad (11)$$

当矩阵 A 非奇异且对角线上存在零元素时, 通过矩阵的行列互换, 总可以保证 D 非奇异。

当 $\rho(H_j) < 1$ 时, 迭代收敛。一个实用的判定 Jacobi迭代收敛的充分条件是矩阵 A 的对角元素占优。

由式(10)可以看出, Jacobi 迭代的每一步的值只依赖于上一迭代步的值, 因此, 具有很高的并行度。对稀疏线性方程组, 更有交换数据量小的特点。以稀疏带状五对角线性方程组的并行 Jacobi 迭代法为例, 对方程组 $Ax = b$, A 为如下矩阵:

$$\begin{bmatrix}
d_1 & g_1 & & & & h_1 & & & \\
e_2 & d_2 & g_2 & & & & h_2 & & \\
 & e_3 & d_3 & g_3 & & & \ddots & & \\
 & & & & & & & h_{im\times jm-jm-1} & \\
f_{im+1} & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & h_{im\times jm-jm} \\
 & f_{im+2} & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & \ddots & & & & & & \\
 & & & f_{im\times jm-1} & & e_{im\times jm-1} & & d_{im\times jm-1} & g_{im\times jm-1} \\
 & & & & f_{im\times jm} & & & e_{im\times jm} & d_{im\times jm}
\end{bmatrix}$$

迭代公式为

$$x_i^{(k)} = \frac{b_i}{d_i} - \frac{f_i}{d_i} x_{i-jm}^{(k-1)} - \frac{e_i}{d_i} x_{i-1}^{(k-1)} - \frac{g_i}{d_i} x_{i+1}^{(k-1)} - \frac{h_i}{d_i} x_{i+jm}^{(k-1)}$$

$$i = jm+1,\ jm+2,\ \cdots,\ im\times jm-1;\ k=1,\ 2,\ \cdots \quad (12)$$

对 $x_i^{(k)}$, $1 \leqslant i \leqslant jm$ 或 $im\times jm - jm \leqslant i \leqslant im\times jm$, 迭代计算公式稍有差异。

设现使用 n 台处理机并行处理, 按行平均分配存储 5 条对角线上的元素和右端项, $x^{(k)}$ 和 $x^{(k-1)}$ 需要同

时存储,各处理机上不仅要存储本机的各 $im \times jm / n$ 个 $x^{(k)}$和 $x^{(k-1)}$,还要存储邻机上的各 jm 个(对首尾两台处理机)或各 $2 \times jm$ 个 $x^{(k)}$和 $x^{(k-1)}$(对中间的处理机)。并行求解过程算法如下图 1, 可见, Jacobi 迭代容易并行且平均并行度高。

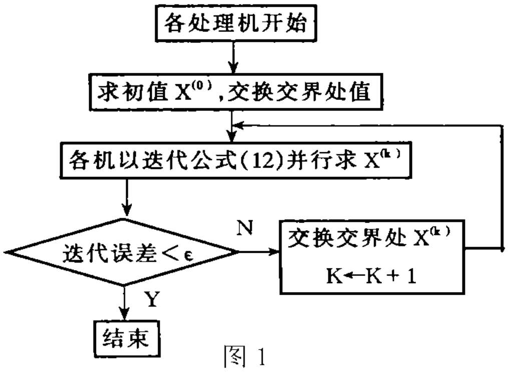

图 1

3.2　Gauss—Seidel 迭代

计算公式:

$$x_i^{(k)} = -\frac{1}{a_{ii}}\left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k-1)} - b_i\right) \tag{13}$$

$i = 1, 2, \cdots, n$; $k = 1, 2, \cdots$

写成矩阵形式

$$x^{(k)} = -D^{-1}(Lx^{(k)} + Ux^{(k-1)}) + D^{-1}b \tag{14}$$

于是

$$x^{(k)} = -(D+L)^{-1}Ux^{(k-1)} + (D+L)^{-1}b \tag{15}$$

因此, Gauss—Seidel 迭代相当于矩阵分解

$$A = (D+L) + U \tag{16}$$

迭代矩阵

$$H = -(D+L)^{-1}U \tag{17}$$

$$g = (D+L)^{-1}b \tag{18}$$

Gauss—Seidel 迭代从第 i 个方程计算 $x_i^{(k)}$ 时, 立即用前 $i-1$ 个方程计算出来的 $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_{i-1}^{(k)}$ 代替 $x_1^{(k-1)}, x_2^{(k-1)}, \cdots, x_{i-1}^{(k-1)}$, 不仅可以节省一组存储单元, 而且还能加快迭代收敛速度。

两个判定 Gauss-Seidel 迭代收敛的充分条件是矩阵 A 有对角优势或矩阵 A 正定。

对 Gauss—Seidel 迭代, 直接按式(13)并行计算需要大量的通信与同步操作, 开销极大。

可通过采用对节点进行红、黑排序的方法来实现 Gauss-Seidel 迭代的并行计算。如 Poisson 方程:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -f(x, y) \tag{19}$$

用五点差分近似, 得:

$$\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j}}{h_1^2} + \frac{u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 2u_{i,j}}{h_2^2} = -f_{i,j} \tag{20}$$

对上述差分方程进行数值离散后, 可得稀疏带状五对角线性方程组。这里考虑单个节点的迭代修正。

对于单位正方形网格($h_1 = h_2 = 1$), 上式化简为

$$u_{i,j} = \frac{1}{4}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} + f_{i,j}) \tag{21}$$

使用 Gauss—Seidel 迭代公式, 得

$$u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i,j-1}^{(k+1)} + u_{i-1,j}^{(k+1)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + f_{i,j}) \tag{22}$$

采用奇—偶排序策略, 当 $i+j$ 为偶数时, 节点(i, j)记为偶节点; 当 $i+j$ 为奇数时, 节点(i, j)记为奇节点, 这样偶节点的邻接点仅为奇节点。奇、偶节点的迭代公式分别为:

偶节点

$$u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i,j-1}^{(k)} + u_{i-1,j}^{(k)} + u_{i,j+1}^{(k)} u_{i+1,j}^{(k)} + f_{i,j}) \tag{23}$$

奇节点

$$u_{i,j}^{(k+1)} = \frac{1}{4}(u_{i,j-1}^{(k+1)} + u_{i-1,j}^{(k+1)} + u_{i,j+1}^{(k+1)} + u_{i+1,j}^{(k+1)} + f_{i,j}) \tag{24}$$

可以证明使用式(23)、式(24)组成的迭代过程, 其收敛速度跟使用式(22)相同。Gauss-Seidel 迭代的并行算法如上图 2 所示。

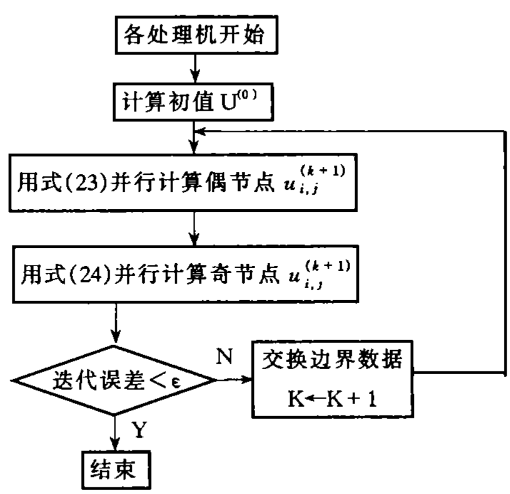

图 2 Gauss-Seidel 迭代的并行算法

3.3　逐次超松弛(SOR)迭代法

SOR 迭代是一种进一步提高收敛速度的方法。记 $u_G^{(k)}$ 是 Gauss-Seidel 迭代法的第 k 次迭代值, SOR 算法的迭代公式为

$$u_{i,j}^{(k+1)} = u_{i,j}^{(k)} + \omega[u_{i,j(G)}^{(k+1)} - u_{i,j}^{(k)}] \tag{25}$$

式中, ω—— 松弛因子。

可以证明当 ω< 2,式(25)是收敛的。ω> 1 称为超松弛, ω< 1 称为低松弛, ω= 1 即为 Gauss-Seidel 迭代法。选择不同的 ω,式(25)的收敛速度不同。

将式(22)代入式(25), 得

$$u_{i,j}^{(k+1)} = (1-\omega)u_{i,j}^{(k)} + \frac{1}{4}\omega(u_{i,j-1}^{(k+1)} + u_{i-1,j}^{(k+1)} + u_{i,j+1}^{(k)} + u_{i+1,j}^{(k)} + f_{i,j}) \tag{26}$$

使用奇—偶排序, 同样可以方便地对式(26)进行并行计算。

4　结　论

笔者对 CFD 中常用的几种古典迭代方法的并行计算进行了分析讨论,并对并行计算的可行性、收敛性、收敛速度等问题展开论述,给出了并行计算的算法。该算法对于开发研制基于网络环境的具有分布式并行处理能力的 CFD 大型软件系统,实现CFD 软件的集成化和智能化,具有较好的参考价值和借鉴作用。

(收稿:2002 年 1 月;作者地址:江苏省镇江市;江苏大学工商学院;邮编:212013)

参 考 文 献

1　Dirk Roose. 并行计算机和计算流体力学并行算法. 力学进展, 1998(2)
2　邹　辉. N—S 方程隐式分区并行计算. 计算物理, 2001(5)
3　刘　钢. 一类块隐式单步并行计算方法. 武汉工业大学学报, 1997(3)
4　王承尧, 王正华. 计算流体力学及并行计算. 长沙: 国防科技大学出版社, 2000

安全科学技术人才交流园地

本期论文作者简介

许兆义　教授、博士生导师，工学博士，享受政府津贴，北方交大土木建筑工程学院常务副院长，中国环境科学学会评价委分会常务理事，中国地质学会环境地质专业委员会委员。1950 年生于吉林省梨树县。长期从事水文地质、工程地质、岩土工程和环境工程领域的研究工作。指导博士生的专业和研究方向包括：岩土工程专业、环境岩土工程、道路与铁道工程专业、交通环境理论与方法；指导环境工程专业硕士生的研究方向包括：放射性废物地质处置理论与方法、交通环境影响与控制。著有《包气带水文地质土专论》和《放射性废物地质处置》，发表论文二十余篇。“低水平放射性废浅地层处置安全评价方法研究（第一期）”1996 年获国家科技进步三等奖，1994 年获核工业总公司部级科技进步一等奖；“包气带水文地质土专论”1995 年获国家教委科技进步三等奖。

何有世　江苏大学工商管理学院信息计算中心副教授。1964 年3 月生，1985 年本科毕业并参加工作。工作以来，主持、参加完成省部级课题3 项，其中获省部级二等奖两项，市级二等奖两项，出版著作 3 部。发表论文近二十篇。现从事信息管理与信息系统、计算方法等方面的教学和研究工作。

聂　磊　现任北方交通大学交通运输学院副教授。1970 年生，湖南省长沙市人。从事交通运输规划与管理研究 10 年。近年来，在《铁道学报》、《中国铁道科学》等学术刊物及国际、国内学术会议上发表论文 20 篇，参加过近十项科研项目的研究工作。目前主要研究方向为：铁路运输组织、高速铁路安全监控及计算机在交通运输管理中的运用。

孙安弟　高级工程师，上海市安全生产领导小组办公室常务副主任，中国劳动保护科学技术学会第一、二、三届常务理事，上海劳动保护科学技术学会名誉理事长。1940 年3 月生，1963 年毕业于上海机械学院仪器系。曾在军工企业从事技术工作。1981 年调入上海市劳动保护科学研究所工作。获劳动部科技成果三等奖、四等奖各一项，1983 年起任局级领导，参加编辑《导弹科技词典》、《安全知识大全》、《1988 年～1991 年中国职业安全卫生年鉴》等，在境内外发表论文10 篇：《上海市劳动保护概况及重大工程安全监察经验》、《企业负责与国家监察的关系探讨》等。

任福民　1987 年 7 月于郑州大学获理学学士学位，1991 年 7 月于中国科技大学获理学硕士学位，并获 1991 年中国科学院院长奖学金。主编《建筑工程材料》（中国铁道出版社出版，1999 年），主编《新型建筑材料》（海洋出版社出版，1998 年），主持“稀土复合型重油燃烧促进剂”项目，通过北京市科委组织的鉴定。研究、开发水泥矿化剂和发电厂燃煤固硫除灰剂。参加铁道部“客车废弃物发生源控制及车站处理设施规划研究”项目，参加国家自然基金“特大城市固体废物发生量及其种类的建模研究”项目。

奚成刚　1973 年生，山东聊城人，北方交通大学土建学院博士研究生。1994 年毕业于北京师范大学数学系，1996 年考入北京师范大学环境科学研究所学习，并于 1999 年获环境科学专业硕士学位。现主要从事环境评价与规划、交通环境理论与方法等方面的研究工作。主要参加了“龙南油田开发建设项目环境影响评价”、“铁路工程中土壤侵蚀评价方法的研究”（国家自然科学基金项目）等多项科研项目。