

高超声速热化学非平衡绕流分布式并行计算

王江峰, 余奇华, 伍贻兆

(南京航空航天大学航空宇航学院, 江苏南京 210016)

摘要: 讨论了非结构网格高超声速热化学非平衡绕流流场的分布式并行数值模拟方法. 流动控制方程为多组分 Navier-Stokes 方程, 化学反应模型为考虑了弱电离效应的七组元空气反应模型及双温模型. 控制方程的空间离散采用 Jameson 有限体积法, 时间推进为显式 5 步 Runge-Kutta 法. 采用基于区域分裂的分布式并行计算方法, 对整体计算区域进行了以各子区单元数为负载均衡条件的划分. 使用 PVM 并行机制在 PCs-Cluster 机群上对二维钝头体高超声速热化学非平衡绕流进行了分布式并行计算, 得到了与串行计算及文献相符合的计算结果.

关键词: 高超声速; 热化学非平衡; 有限体积法; 区域分裂; 并行算法

中图分类号: V211.3 **文献标识码:** A

Distributed parallel algorithms for hypersonic thermo-chemical non-equilibrium flows

WANG Jiang-feng, YU Qi-hua, WU Yi-zhao

(College of Aerospace Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: A distributed parallel algorithm for hypersonic thermochemical non-equilibrium flow was presented. The control equations were Navier-Stokes equations with multi-components. The chemical kinetic model was, which was popularly used with the consideration of the weak ionization effects, that of seven species and six chemical reactions with a two-temperature model. The spatial discretization for the control equations was Jameson's finite volume scheme, with an explicit 5-stage time step method. The decomposition of the global computational domain was realized by means of a software named METIS, in view of cell number of sub-domains load-balanced. Test cases, obtained on a PCs-Cluster system with PVM protocol, were shown for a hypersonic blunt cone body. Satisfactory numerical results were obtained and compared with those of sequential results and references.

Key words: hypersonic; thermochemical non-equilibrium; finite volume method; domain decomposition; parallelization

0 引言

气体的非平衡效应对高超声速飞行器再入大气

层时的流场将产生不可忽略的影响. 高温空气个组元会发生平动激发、转动激发、振动激发、组元束缚电子激发和化学反应等. 对于正激波后的离解电离

收稿日期: 2006-09-08; 修回日期: 2007-03-10

基金项目: 国家自然科学基金(10402013)资助.

作者简介: 王江峰, 男, 1970年生, 博士/副教授. 研究方向: CFD, 高超声速, 并行计算技术等. E-mail: wangjf@nuaa.edu.cn

通讯作者: 伍贻兆, 教授. E-mail: wuzao@nuaa.edu.cn

非平衡流动,一般存在着 4 个与气体热力学有关的温度:平动温度、转动温度、振动温度和电子激发温度. 本文采用 Park 提出的双温度模型,即由一个单一的温度 T 来描述重粒子的平动能和转动能的分布,由另一个单一的温度 T_v 来描述振动能、电子激发能和电子平动能的分布.

目前,国内外在粘性高超声速非平衡数值模拟方面做了大量的研究,取得了显著的研究成果^[1,2],发展了一系列高效、高精度的基于结构网格的数值求解方法,如 TVD、NND 等格式^[3,4]. 对于热化学非平衡问题,控制方程为带化学反应源项的 N-S (Navier-Stokes) 方程加上振动能量方程,总的连续方程由组元连续方程组代替,计算量相当巨大;考虑到复杂流场及复杂外形等情况,有必要发展基于非结构网格的高效数值求解方法.

本文采用七组元、六化学反应和双温度模型,数值模拟了 71 km 高度条件下 RAM-C II 飞行试验. 在完成串行程序的基础上,发展了基于 PVM (parallel virtual machine) 的分布式并行算法. 并行计算结果与串行结果、文献的比较可知,本文的并行算法可以应用于高超声速热化学非平衡绕流流场的数值模拟,且具有较高的效率.

1 控制方程及热化学模型

1.1 控制方程

考虑粘性效应及热化学非平衡效应,二维 N-S 方程的守恒形式为^[4]

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{W} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{E}_v + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{F}_v + \mathbf{S}. \quad (1)$$

式中,

$$\mathbf{W} = [\rho_1, \dots, \rho_{NS}, \rho u, \rho v, e_t, e_v]^T,$$

$$\mathbf{S} = [\dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_{NS}, 0, 0, 0, \dot{\omega}_v]^T,$$

$$\mathbf{E} = [\rho_1 u, \dots, \rho_{NS} u, \rho u^2 + p, \rho u v, (e_t + p) u, e_v u]^T,$$

$$\mathbf{F} = [\rho_1 v, \dots, \rho_{NS} v, \rho v u, \rho v^2 + p, (e_t + p) v, e_v v]^T,$$

$$\mathbf{E}_v = \left[\rho D_1 \frac{\partial c_1}{\partial x}, \dots, \rho D_{NS} \frac{\partial c_{NS}}{\partial x}, \tau_{xx}, \tau_{xy}, \right.$$

$$\left. u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + q_x, q_x \right]^T,$$

$$\mathbf{F}_v = \left[\rho D_1 \frac{\partial c_1}{\partial y}, \dots, \rho D_{NS} \frac{\partial c_{NS}}{\partial y}, \tau_{yx}, \tau_{yy}, \right.$$

$$\left. u \tau_{yx} + v \tau_{yy} + q_y, q_y \right]^T.$$

热化学非平衡气体的组元粘性系数 μ_i , 热传导系数 k_i, k_{vi} , 混合气体的粘性系数 μ , 热传导系数 k

的计算采用经验公式拟合. 具体参见文献^[2,4,5].

1.2 化学反应模型

本文考虑的是七组元有限速率化学反应,化学组分为 $O_2, N_2, NO, O, N, NO^+, e^-,$ 其反应式及相关公式参见文献^[5,6].

在热化学非平衡状态时,空气的化学反应特征时间和振动松弛时间是可比拟的,因此需要考虑振动和化学过程之间的耦合. 不同的化学反应采用不同的控制温度,对于离解反应其正向反应由平动、振动温度共同决定,本文取为 $(TT_v)^{1/2}$; 逆向反应由平动温度控制;置换反应由平动温度控制;电离反应的正向反应由平动温度控制,逆向反应依赖于振动温度.

1.3 振动松弛模型

对于温度为 300~8 000 K 的空气, Millikan 和 White 给出了 Millikan-White 松弛时间 τ_s^{MW} 的拟合

$$\rho \tau_s^{MW} = \frac{\sum_{j \neq e} N_j \exp[A_j (T^{-1/3} - 0.015 \mu_j^{1/4}) - 18.42]}{\sum_{j \neq e} N_j}. \quad (2)$$

对于 8 000 K 以上的温度, Park 给出振动松弛时间修正的表达式为

$$\tau_s^p = (\sigma c_s N_s)^{-1}, \quad (3)$$

振动松弛时间 τ_s 为^[7]

$$\tau_s = \tau_s^{MW} + \tau_s^p. \quad (4)$$

2 数值求解方法及边界条件

本文采用非结构网格有限体积方法 Jameson 格式求解控制方程,时间推进采用了当地时间步长 Δt , 其表达式为

$$\Delta t = \min(\Delta t_f, \Delta t_{chem}, \Delta t_{therm}). \quad (5)$$

式中, Δt_f 为加入粘性修正的流场时间步长; Δt_{chem} 为化学反应特征时间,其表达式为

$$\Delta t_{chem} = \min \left[\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial \rho_i} \right]^{-1} \quad (i = 1, \dots, ns); \quad (6)$$

Δt_{therm} 为振动松弛特征时间,其表达式为

$$\Delta t_{therm} = \min(\tau_s). \quad (7)$$

边界条件的处理:对远场边界,采用基于黎曼不变量的无反射边界处理;对物面边界,采用无滑移条件,并认为物面为等温壁及非催化壁. 详细处理过程请参阅文献^[2,4,10],这里不再重复.

3 并行计算

本文针对高超声速热化学非平衡绕流场计算

量大的特点,基于分布式存储环境 PVM,在 Linux PCs-Cluster(PIV 1.6 GHz/512 MB)机群上开展了分布式并行算法研究,通过调用 METIS 库函数,对整体计算网格进行基于网格单元个数负载均衡的区域分解,使每一处理器对应一个子区,解决了程序数据的合理划分,保证了各处理器的负载平衡及较高的并行效率。

3.1 区域分裂方法及子区定义

本文采用区域分裂技术将总体计算域划分为 N 个子域,这部分工作通过调用软件 METIS 库函数来自动完成.然后根据 METIS 返回信息,对各子域网格的单元和节点进行重排序,并确定交界面单元拓扑关系,以备信息传递之需^[7].图 1 为四分区域示意图,四分区边数分别为 6 988, 6 988, 6 989, 6 984, 交接面单元个数分别为 80, 150, 70, 140. 可以发现, METIS 分成的子区具有相近的网格维数,可以基本保证多 CPU 计算的负载平衡,这是提高并行计算效率的一个重要参数。

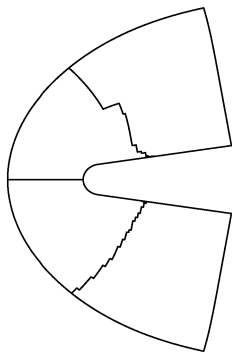


图 1 区域分裂示意图(四分区)

Fig. 1 Sketch map of sub-domains (4-domains)

3.2 区域边界处理

目前 CFD 分区并行计算基本上是以对接分区为主^[8,10],主要是因为对接分区的区域划分比较简单,另外相对于具有相同分区的重叠分区,一般对接分区并行计算具有传递信息少、单步计算耗时少等优点.各子区交界面按对接分区处理,即将交接面离散点作为子域内点计算,对其控制单元积分时,如果控制体周边上的离散点在相邻子域内,其值从相邻子域取得.这样处理减少了误差,防止内边点引起区域扰动,同时也保证了内边界交界面通量守恒。

根据上述思想,将整体网格区域分解后,对子区网格信息重新排序,搜索各子区网格,在相应的分区上建立一一对应的映射关系.各子区分区计算时交接面上的信息传递按工作组进行,避免了常用的点

对点传递方式的信息阻塞效应,节省了信息传递时间,提高了并行计算效率。

3.3 并行计算方法

本文采用基于 PVM 平台的 Master-Slaver 并行拓扑结构,主要由网格区域分解、交界面单元关系确定、Master/Slaver 启动方式、信息交换等几部分组成.并行计算主要运行过程如下(以四分区为例):

(I) 启动 PVM,在主节点机上加入 4 个子节点机,主节点上 Master 完成:(a)总体网格读入及子区划分,(b)分配任务到其他 4 个节点,(c)接收子节点计算结果,(d)结果汇总,(e)结果后处理等任务.其中,除接收子节点计算结果环节外,其他步骤不受子节点进程影响,并且计算结果直接显示到总体网格上,增强了可视性。

(II) 子进程 Slaver 为多组分 N-S 方程有限体积格式求解器。

(III) 计算残值 RES,在 4 个子区上判断 RES 是否满足要求,如果满足就输出计算结果,否则进行下一步迭代.残值 RES 的计算也需要各子区的残值,它们通过 PVM 信息传递语句在节点机上传送到主节点机上,计算得到残值 RES,然后分发到各节点机上,即各节点机上的残值是一样的。

本文并行结构具有以下特点:子进程所有流场条件控制参数、网格数据由主进程控制及发送,不需要任何人工干涉,且有较强的鲁棒性。

4 计算结果及分析

用本文发展的串行及并行算法,数值模拟了 71 km 高度条件下 RAM-C II 飞行试验.飞行器的外形为具有头部半径 $R_n = 0.1524$ m、半锥角为 9° 、总长度为 1.295 m 的球锥体.来流速度为 7 650 m/s,马赫数为 25.9,攻角为 0.0° .来流空气组成为 N_2 (79%)与 O_2 (21%).物面温度固定为 1 500 K,并认为是非催化壁.图 2 分别给出了串行与并行计算(二分区)的温度分布对比,可以看出本文的并行算法得到了与串行计算相同的结果,并且与文献[9]相符,图 3 为并行计算流场特征参数分布.表 1 给出了不同分区个数并行计算的加速比对比.图 4 给出了单温和双温模型沿驻点线温度分布的比较(图中 n 为从驻点算起的物面法向距离),单温模型的温度位于双温模型的平动温度 T 和振动温度 T_v 之间,变化规律和趋势与文献[9]的计算结果相吻合,但温度峰值位置有偏差,这可能是由于数值格式精度及二维

表 1 加速比对比

Tab. 1 Comparison of speed-up ratio

分区个数	CPU 个数	墙上时间/s	加速比
1	1	125 250	1.0
2	2	83 350	1.503
4	4	42 500	2.947

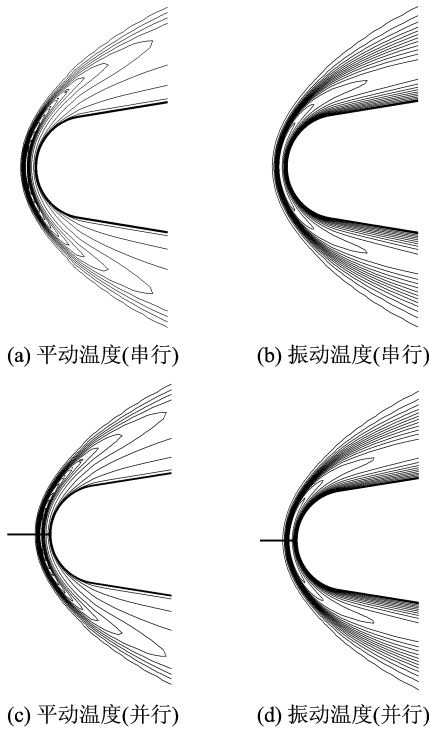


图 2 温度等值线分布对比

Fig. 2 Comparison of temperature distribution

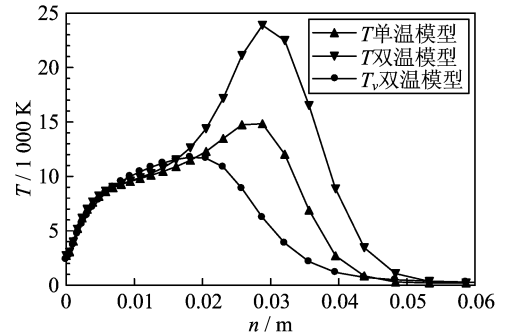


图 4 单温和双温模型沿驻点线温度分布

Fig. 4 Temperature distribution along stagnation line

和三维数值模拟之间的差别引起的. 图 5 给出了沿驻点线组元质量浓度分布, N_2 的浓度由来流的 79% 降到 43%, N 原子浓度升高到 35%, 与文献[5]中 N_2 的浓度由来流的 79% 降到 47%, N 原子浓度升高到 30% 相比, 本文计算的氮气分子离解加剧, 浓度偏低, 导致氮原子浓度偏高, 造成这种偏差的原因可能是采用的化学反应系数及其控制温度的计算方法不同, 其余各组元的质量浓度分布曲线与文献[5]符合较好.

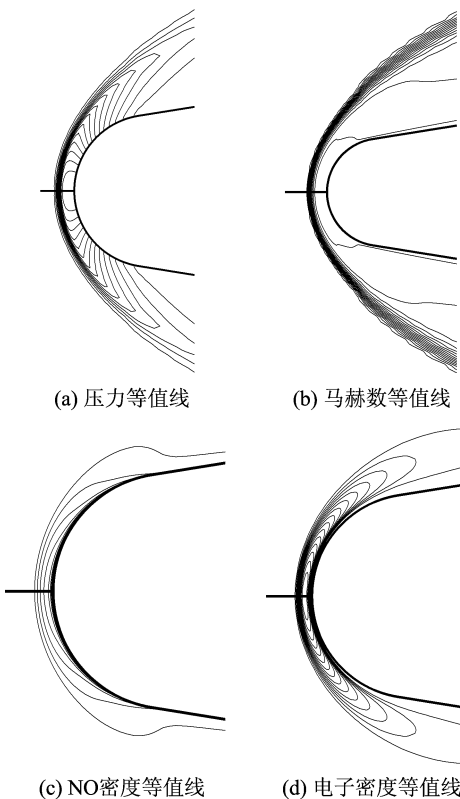


图 3 并行计算结果(二分区)

Fig. 3 Results of parallel computation (2-domains)

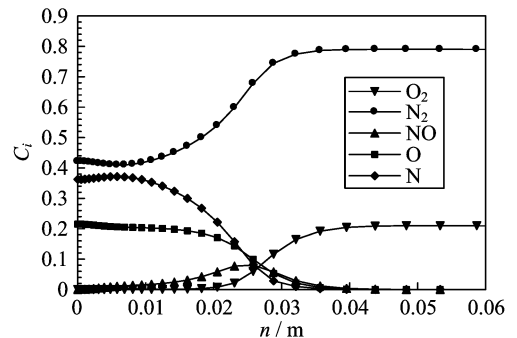


图 5 沿驻点线组元质量浓度分布

Fig. 5 Mass fraction distribution of species along stagnation line

5 结论

本文应用 Jameson 有限体积格式在非结构网格上对高超声速热化学非平衡粘性绕流进行了基于 PCs-Cluster 的并行数值求解, 得到了计算结果. 针

对本文的数值算例,可以得到以下结论:

(I) 本文的数值格式在非结构网格上可以用于热化学非平衡绕流的计算.

(II) 采用区域分裂并行计算方法,可以明显提高数值模拟效率,缩短数值模拟周期.

(III) 热化学非平衡模型和化学非平衡模型相比,温度分布和组元密度分布有较大的变化,而压力分布影响不大.

影响并行效率的主要因素有:信息传递时间及交接面边界处理,子区负载平衡,硬件设备性能.考虑到本文并行效率并不是很高,除了硬件设施等的影响外,还有待于寻找更加高效的交接面信息交换方法,如点对点通信与组内信息发布的联合应用等.我们将对此作进一步研究.

参考文献(References)

- [1] 周军,徐文. 美国高超声速研制的最新进展[J]. 飞航导弹, 2003, (1):31-35.
- [2] Wang Jiang-feng, Wu Yi-zhao. Numerical simulation for hypersonic flow on unstructured grid and analysis of drag induction effects on channel-configuration [J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2004, 36(6):671-676.
王江峰,伍贻兆. 非结构网格高超声速化学非平衡绕流数值模拟及涵道构型减阻特性分析[J]. 南京航空航天大学学报, 2004, 36(6):671-676.
- [3] Wang Hao, Wu Song-ping, Lu Ye. Iterative method for hypersonic non-equilibrium flows[J]. Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2002, 28(1):94-97.
- 王浩,吴颂平,陆烨. 高超音速化学非平衡流的隐式格式迭代解法[J]. 北京航空航天大学学报, 2002, 28(1):94-97.
- [4] 欧阳水吾,谢中强. 高温非平衡空气绕流[M]. 北京:国防工业出版社, 2001.
- [5] Candler G V, MacCormack R W. The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium[R]. Reston, VA: AIAA Paper 88-0511, 1988.
- [6] Gupta R N, Yos J M, Thompson R A. A preview of reaction rates and thermodynamics and transport properties for the 11-species air model for chemical and thermal non-equilibrium calculations to 30 000 K[R]. Washington D C: NASA, NASA-TM-101528 (N89-21193), 1989.
- [7] Gnoffo P A, Gupta R N, Shinn J L. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium [R]. Washington D C: NASA, NASA-TP-2867, 1989.
- [8] 于战华. 跨声速欧拉方程并行算法研究及应用[D]. 南京:南京航空航天大学, 2004.
- [9] Imlay S T, Eberhardt S. Nonequilibrium thermochemical calculations using a diagonal implicit scheme [R]. Reston, VA: AIAA, AIAA Paper 91-0648, 1991.
- [10] Yu Qi-hua, Wang Jiang-feng, Wu Yi-zhao. Distributed parallel algorithm for hypersonic flow with non-equilibrium chemical reactions[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2005, 37(4):431-435.
余奇华,王江峰,伍贻兆. 高超声速化学非平衡绕流分布式并行算法[J]. 南京航空航天大学学报, 2005, 37(4):431-435.