

辐射流体力学 RH2D 程序的重构与改进^{*}

Reconstruction and Improvement of the Radiation Hydrodynamics Code RH2D

任 健^{1,2}, 申卫东¹

REN Jian^{1,2}, SHEN Wei-dong¹

(1. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094; 2. 中国工程物理研究院研究生部, 北京 100088)

(1. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094;

2. Graduate School, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China)

摘 要:在科学与工程实际应用研究领域,经过长期的积累与发展形成了一批应用程序,它们集成了丰富的物理建模与计算方法,而且通过理论模型与实验数据的反复校正,具有较高的数值模拟置信度。但是,随着物理模型的精密化研究,这些程序的算法精度与计算规模难以满足实际问题的研究需求。本文基于 JASMIN 框架重构辐射流体力学 RH2D 程序,优化数据结构与程序结构,并且将辐射分裂计算改进为整体计算。实际算例表明, RH2D 程序辐射整体计算的能量守恒性明显好于分裂计算,而且具有较高的并行效率。

Abstract: In scientific computing and industrial applications, some programs integrated with physical models and numerical methods and verified by theories and the experiment in the past long time, have much more confidence in numerical simulation. But these programs are not suitable for the research requirements in numerical accuracy and computing scales at present. In this paper, the code RH2D have been reconstructed based on JASMIN, and the radiation heat conduction numerical method has been improved from the splitting method to the non-splitting method. The numerical results for practical problems are presented to show that the non-splitting method has smaller energy conservation errors and much higher parallel efficiency than the splitting method.

关键词: 辐射流体力学; RH2D 程序; JASMIN 框架; 重构; 并行计算

Key words: radiation hydrodynamics; code RH2D; JASMIN; reconstruction; parallel computing

doi: 10.3969/j.issn.1007-130X.2012.02.018

中图分类号: TP301

文献标识码: A

1 引言

RH2D 程序是北京应用物理与计算数学研究所自主研发的二维辐射流体力学数值模拟应用程序,经过了几十年的应用与发展,集成了丰富的物理建模与计算方法,并且通过理论模型与实验数据的反复校正,在实际应用问题研究中具有较高的数

值模拟置信度^[1]。由于以前实际问题的几何构型简单、变形程度小,所以 RH2D 程序计算模型的网格规模较小,辐射计算可以采用速度快、存储小的分裂方法。但是,随着实际问题的物理模型更加精密化, RH2D 程序在算法精度与计算规模等方面难以满足需求,而且程序结构复杂、扩展性差,也制约了 RH2D 程序的发展。

JASMIN 框架^[2](J Adaptive Structured Mesh

^{*} 收稿日期:2011-02-14; 修订日期:2011-05-13

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11171037); 国防基础科研计划(B1520110011); 重点实验室基金(9140C690201110C6904)

通讯地址:100094 北京市海淀区丰豪东路2号

Address: 2 Fenghao Rd East, Haidian District, Beijing 100094, P. R. China

applications INfrastructure, 简称 JASMIN) 的全称为并行自适应结构网格应用支撑软件框架, 其中 J 代表研制单位北京应用物理与计算数学研究所。JASMIN 框架围绕科学与工程计算中普遍采用的结构网格或非结构拼接的结构网格, 提供丰富的数据结构、算法构件与解法器, 屏蔽高性能并行计算(数据通信、负载平衡)和网格自适应(细化、粗化)的实现, 支撑多物理模型的耦合计算方法研究与高效并行应用程序研制。

本文基于 JASMIN 框架重构辐射流体力学 RH2D 程序, 优化了 RH2D 程序的数据结构与程序结构, 并且将辐射热传导分裂计算改进为适于大规模并行的整体计算, 达到 RH2D 程序算法改进与程序并行的同步实现。JASMIN 框架下 RH2D 程序数值模拟实际应用问题, 计算结果表明辐射整体计算的能量守恒明显好于分裂计算, 而且在大规模并行计算条件下可以取得较高的并行效率。

2 RH2D 程序的重构

2.1 数据结构设计

RH2D 程序原有数据结构采用一维数组与首地址相结合的方式, 依次连续存储所有计算变量, 并且通过逻辑转化关系将其对应于计算区域的二维结构网格。这种数据结构可以确保数据存储空间的连续性, 但在区域分解并行计算条件下的扩展性与移植性较差。

RH2D 程序数据结构重构时, 设计实际计算区域的虚网格, 并且将计算区域与虚网格直接对应于二维数组存储。如图 1a 所示, 实线网格为实际计算区域, 虚线网格为计算区域的虚网格。单个区域串行计算时, 虚网格不仅可以避免数组越界问题, 而且还可以填充物理边界条件。如图 1b 所示, 两个相邻计算区域的虚网格分别为虚线和点线。多个区域并行计算时, RH2D 程序的虚网格可以作为区域间消息传递的空间。

JASMIN 框架的数据结构中将计算区域的网格划分为互不重叠的数据片 Patch, 其中每个数据片 Patch 都设置有影像区 GhostBox。以图 2 为例, 计算区域网格规模为 20×20 (图 2a), 在 JASMIN 框架中将其划分为 7 个数据片 (图 2b), 其中 6 号数据片的影像区数据由其相邻数据片与物理边界来填充 (图 2c)。同时, JASMIN 框架可以根据负载平衡, 自动将多个数据片分配到不同处理器上, 例如图 2 中的 7 个数据片 Patch 分配到 2 个处

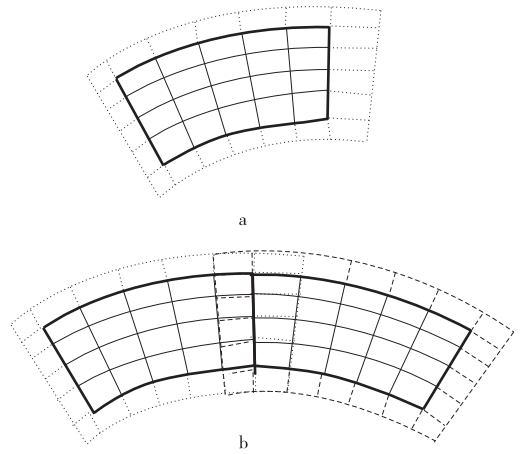


图 1 RH2D 程序的数据结构示例图
理器上, 分别用黑色与浅灰色以示区别^[2]。

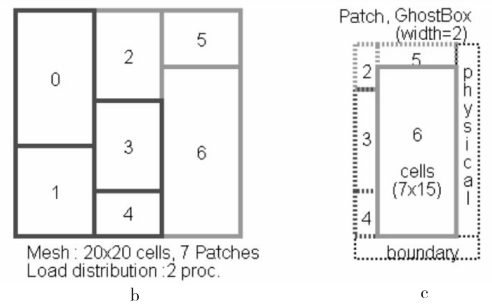
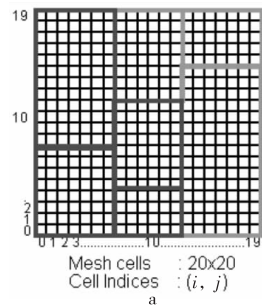


图 2 JASMIN 框架的数据结构示例图

如上所述, RH2D 程序虚网格在设计原理和使用方式上, 与 JASMIN 框架数据片 Patch 的影像网格 GhostBox 是完全一致的。从并行计算的角度上讲, RH2D 程序串行计算相当于 JASMIN 框架下 RH2D 程序单个 CPU 计算单个数据片 Patch 的情况。

2.2 程序结构优化

RH2D 程序代码最初是由机器语言设计、编写的指令代码, 直到上世纪 80 年代改写为 Fortran77 的高级语言代码, 而非直接由 F77 语言设计生成的程序代码, 因而程序结构比较复杂。例如, RH2D 程序中大量使用单个变量频繁传递数据, 计算过程中形成了较强的数据依赖关系, 而且 goto 语句的大范围强制跳转使得程序的计算流程非常复杂^[3]。

辐射流体力学 RH2D 程序的重构,首先定义二维数组传递数据,降低计算过程中的数据依赖关系,并且重新设计程序结构,将不同计算过程进行解耦,简化计算流程。

以 RH2D 程序辐射计算的程序结构优化为例说明。如图 3 所示,旧版辐射程序将计算格式(及其对应的系数矩阵装配)、代数解法器以及非线性迭代过程完全耦合在一起,程序结构复杂、数据依赖关系强。在新版辐射程序中,计算过程分解为外层的非线性迭代与内层的线性求解两个过程,而且进一步将内层的线性求解过程分解为更新边界温度、计算节点温度、非线性项、辐射计算格式、矩阵装配与代数解法器等多个独立的程序模块,使得新版辐射程序的数据依赖关系简单,程序结构清晰。

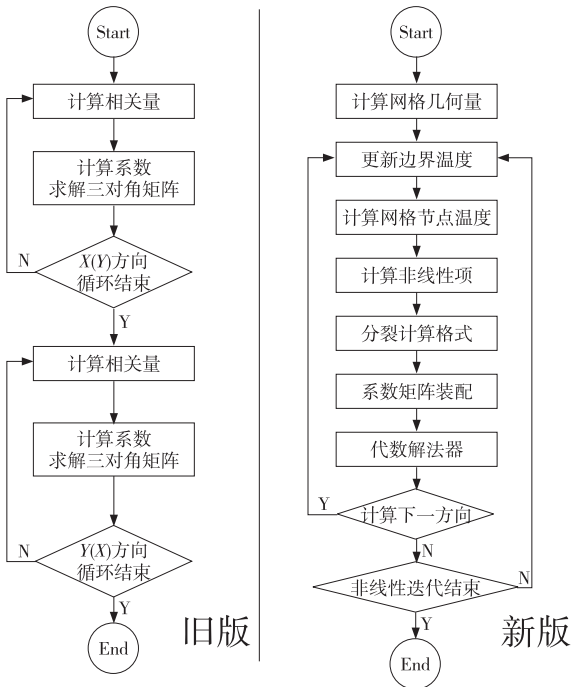


图 3 RH2D 程序辐射计算程序结构优化

RH2D 程序流体力学部分的重构与辐射计算程序的重构类似,这里不再重复说明。

3 RH2D 程序的改进

3.1 辐射计算方法简介

首先介绍辐射流体力学程序 RH2D 的辐射热传导计算方法。文献[4]中基于积分插值方法,在任意多边形网格上建立了求解二维辐射热传导方程的差分格式,对于结构四边形网格(图 4),该格式的模板由相邻的九个网格组成,故称其为九点格式(Nine Point Scheme)。

考虑如下二维辐射热传导问题:

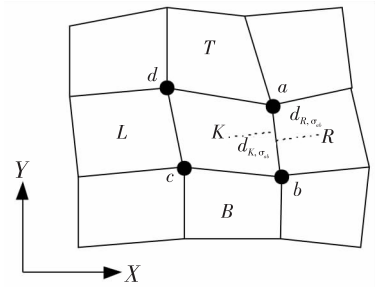


图 4 九点格式计算模板的示意图

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\kappa(u) \nabla u) = 0, \text{ in } \Omega \times (0, T] \quad (1)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y), \text{ on } \Omega,$$

$$u(x, y, t) = \varphi(x, y, t), \text{ on } \partial\Omega \times (0, T] \quad (2)$$

其中, $u(x, y, t)$ 是物质温度, x, y 表示空间变量, t 表示时间变量, $\kappa(u)$ 是热传导系数,它是一个给定的关于温度、空间和时间的恒为正值的函数, φ 为给定函数。 Ω 为 R^2 中的有界区域,其边界记为 $\partial\Omega$, \vec{n} 为边界 $\partial\Omega$ 上的外法线方向单位向量。

将有界区域 Ω 进行四边形网格剖分,网格由大写英文符号 K, L, \dots 等表示,同时也表示网格中心,网格节点由小写英文字母 a, b, \dots 等表示,网格边用 σ_{ab} 来表示。时间区间剖分为:

$$0 = t^0 < t^1 < \dots < t^{N+1} = T$$

$$t^n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N+1)$$

结构四线形网格 K 的右网格边上辐射流的离散逼近为:

$$F_{K,R}^{n+1} = -\tau_{\sigma_{ab}}^{n+1} [u_R^{n+1} - u_K^{n+1} - D_{\sigma_{ab}} (u_a^{n+1} - u_b^{n+1})] \quad (3)$$

其中,

$$\tau_{\sigma_{ab}}^{n+1} = \frac{m(\sigma_{ab}) \kappa_{\sigma_{ab}}^{n+1}}{d_{R, \sigma_{ab}} + d_{K, \sigma_{ab}}}, D_{\sigma} = \frac{(R - K, a - b)}{|a - b|}$$

$$d_{K, \sigma_{ab}} = \text{dist}(K, \sigma_{ab})$$

$$\kappa_{\sigma_{ab}}^{n+1} = \frac{1}{m(\sigma_{ab})} \int_{\sigma} \kappa(x, y, u, t) d\sigma$$

$$m(\sigma_{ab}) = |a - b|$$

辐射流离散公式(3)中的网格节点由其相邻的四个网格中心温度插值计算得到,例如流连续加权、自适应加权等,或者采用计算格式来计算节点温度^[5~7]。

在计算区域的边界上 $\partial\Omega$, 可以给出两种边界条件:

(1) 已知边界 $\partial\Omega$ 上的温度分布 $u|_{\partial\Omega} = g(x, y, t)$, 则网格边上 σ_{ab} 离散的辐射流可以分为以下三种情况:

① 如果 $a \in \partial\Omega$ and $b \in \partial\Omega$, 则 $F_{K,R}^{n+1} = -$

$$\frac{m(\sigma_{ab})\kappa_{\sigma_{ab}}^{n+1}}{d_{K,\sigma_{ab}}}[g_{(a+b)/2}^{n+1} - u_K^{n+1}];$$

② 如果 $a \in \partial\Omega$ and $b \notin \partial\Omega$, 则 $F_{K,R}^{n+1} = -\tau_{\sigma_{ab}}^{n+1}[u_R^{n+1} - u_K^{n+1} - D_{\sigma_{ab}}(g_a^{n+1} - u_b^{n+1})];$

③ 如果 $a \notin \partial\Omega$ and $b \in \partial\Omega$, 则 $F_{K,L}^{n+1} = -\tau_{\sigma_{ab}}^{n+1}[u_R^{n+1} - u_K^{n+1} - D_{\sigma_{ab}}(u_a^{n+1} - g_b^{n+1})].$

(2) 已知通过边界 $\partial\Omega$ 上的辐射流 $\kappa \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega} = f(x, y, t)$, 则网格边 σ_{ab} 上离散的辐射流给定 $F_{K,R}^{n+1} = f_{(a+b)/2}^{n+1}$ 即可。

网格 K 的其它网格边上的辐射流离散公式可以类似给出。

在结构四边形网格 K 上, 求解二维辐射热传导问题(1-2)的九点格式分裂计算为:

$$\frac{1}{\Delta t}(u^* - u^n) = -[F_{K,R}^* + F_{K,L}^*] \quad (4)$$

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^*) = -[F_{K,T}^{n+1} + F_{K,B}^{n+1}] \quad (5)$$

其中, u^* 为分裂计算中间步骤得到的网格中心温度值。采用维数分裂方式计算九点格式, 在时间推进过程中需要交替方向计算, 即在第 n 时间步先沿 X 方向求解式(4), 后沿 Y 方向求解式(5); 则在第 $n+1$ 时间步先沿 Y 方向求解式(5), 后沿 X 方向求解式(4), 依次轮流计算直至到达所需计算时刻。

九点格式分裂计算形成的系数矩阵为三对角矩阵, 可以采用追赶法直接求解。因为热传导系数 $\kappa(u)$ 是物质温度、密度的非线性函数, 所以必须进行非线性迭代。九点格式分裂计算的具体流程如算法 1 所示。

算法 1 分裂计算

Step 1 计算网格的几何量;

Step 2 填充或者更新计算区域边界(对称轴、反射边界)的温度值;

Step 3 计算节点温度与非线性项 $\kappa(u)$;

Step 4 沿 X (或者 Y) 方向辐射分裂计算, 形成系数矩阵(三对角阵);

Step 5 追赶法求解三对角矩阵;

Step 6 判断是否计算下一个分裂方向的辐射热传导, 如需计算, 则返回 Step 2;

Step 7 判断非线性迭代是否收敛, 如迭代误差收敛, 返回 Step 2。

3.2 算法分析与改进

以前由于计算条件所限, RH2D 程序难以直接应用九点格式整体计算二维辐射热传导问题, 所以采用维数分裂方法^[8,9], 将二维问题转化为两个方

向上的一维问题交替方向求解, 从而避免求解大型稀疏矩阵的困难, 发挥三对角矩阵计算快速高效、节省存储的特点。

但是, 当前实际问题构型复杂、网格扭曲变形严重(如图 5 所示), 使得 RH2D 程序中辐射热传导分裂计算的局限性凸显, 计算精度有所降低。这是因为分裂计算过程依赖网格划分, 具有明显的方向性, 而且网格温度无法同步更新。辐射整体计算可以有效避免分裂计算的弊端, 充分体现出辐射热传导问题的全局效应与同步效应。文献[7]中的理论分析与数值算例证明, 扭曲网格上九点格式的整体计算的精度比分裂计算好, 而且在相同计算精度的前提下, 整体计算可以适当放大时间步长。

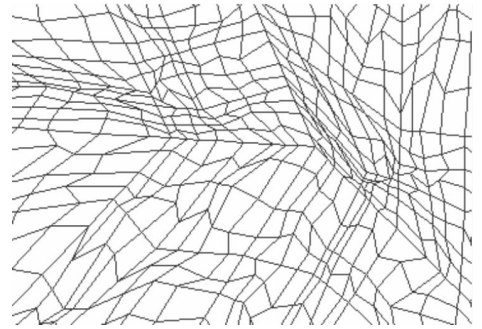


图 5 局部网格扭曲变形的示意图

求解二维辐射热传导问题(1-2)的九点格式整体计算如下:

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = -[F_{K,R}^{n+1} + F_{K,L}^{n+1} + F_{K,T}^{n+1} + F_{K,B}^{n+1}] \quad (6)$$

由式(4)~式(6)可以看到, 无论九点格式分裂计算还是整体计算, 两者对网格边上辐射流的离散表达式是相同的, 但是具体的求解方式不同。九点格式整体计算形成的系数矩阵为带状稀疏矩阵, 需要调用相应的代数解法器及预条件加速方法^[10,11]求解。

九点格式整体计算的具体流程如算法 2 所示。

算法 2 整体计算

Step 1 计算网格的几何量;

Step 2 填充或者更新计算区域边界(对称轴、反射边界)的温度值;

Step 3 计算节点温度与非线性项 $\kappa(u)$;

Step 4 辐射整体计算, 形成系数矩阵(带状稀疏矩阵);

Step 5 调用代数解法器求解;

Step 6 判断非线性迭代是否收敛, 如迭代误差收敛, 返回 Step 2。

对比算法 1 与算法 2, 分析 RH2D 程序辐射热

传导分裂与整体算法的计算时间。在串行计算条件下,辐射整体计算(算法 2)中求解大型稀疏矩阵比较费时,所以整体计算的计算时间明显大于分裂计算。

在区域分解的并行计算条件下,辐射计算需要在不同计算区域间进行消息传递,用于更新区域边界温度与节点温度。由于分裂算法本质上是求解两个方向上的辐射热传导问题,计算过程中需要进行两次消息传递,而整体计算仅需要进行一次消息传递,理论上分裂算法的通信量是整体算法通信量的两倍,这也成为影响分裂算法大规模并行计算速度和效率的重要因素。所以,相对于分裂计算,辐射整体计算更适于当前的大规模并行计算条件。

4 数值算例

对于网格扭曲变形严重的实际问题,能量守恒误差成为检验 RH2D 程序算法精度与数值模拟置信度的重要指标。在计算区域上,定义能量守恒误差如下:

$$\epsilon_{error} = \left| 1 - \frac{E^0 + Q}{E + F_R + W} \right| \times 100\%$$

其中, E^0 为初始时刻计算区域的物质总能, Q 为加入该区域的外源能量, E 为终态时刻计算区域的物质总能, F_R 为计算区域界面的辐射流, W 为计算区域界面的做功。

选取实际问题中网格扭曲变形较大的多介质模型 A, RH2D 程序的辐射热传导九点格式分别采用分裂计算与整体计算,考察模型 A 的多个介质分区与全区域的能量守恒误差,如表 1 所示。

表 1 RH2D 程序计算模型 A 的能量守恒误差

物质区	辐射分裂计算	辐射整体计算
分区 1	1.860%	0.027%
分区 2	0.136%	0.035%
分区 3	0.445%	0.009%
分区 4	0.695%	0.018%
分区 5	0.569%	0.020%
全区域	0.438%	0.043%

表 2 RH2D 程序计算模型 A 的计算时间(单位:秒)与加速比

CPU	RH2D 程序计算时间(辐射分裂计算)				RH2D 程序计算时间(辐射整体计算)			
	力学	辐射	总时间	加速比	力学	辐射	总时间	加速比
4	28.89	60.81	89.72	1.00	40.19	43.84	84.04	1.00
16	7.94	17.77	25.76	3.48	8.76	10.09	18.87	4.45
64	2.29	5.94	8.24	10.88	2.36	2.85	5.30	15.84
256	0.63	1.95	2.59	34.58	0.71	0.84	1.58	53.19

由表 1 可以看到,二维辐射流体力学程序 RH2D 计算模型问题,采用九点格式整体计算的能量守恒性明显好于分裂计算的守恒性,不仅各个物质分区,而且整个系统的能量守恒性均有明显改善。

模型 A 的网格总数达到 102 400(320×320),计算 100 步,测试 JASMIN 框架下 RH2D 程序辐射流体力学计算的并行加速比。辐射计算采用 JASMIN 框架提供的代数解法器,其中分裂计算采用并行的追赶法解法器,而整体计算采用并行 BiCGSTAB 解法器与代数多重网格(AMG)预条件相结合的方法求解系数矩阵。

如表 2 所示,在大规模并行计算条件下, RH2D 程序的辐射计算采用分裂方法,无论辐射计算时间,还是辐射与流体的总计算时间,均比辐射采用整体方法的计算时间多。而且,相对于 4 个处理器,在 256 个处理器上, RH2D 程序辐射采用整体计算时,流体与辐射的总体计算时间可以达到 83% 的并行效率,远高于辐射采用分裂计算时 54% 的总体并行效率。

5 结束语

基于 JASMIN 框架的辐射流体力学 RH2D 程序重构,优化设计数据结构与程序结构,改进辐射计算方法,实际算例表明新版 RH2D 程序的能量守恒性有所改善,而且并行效率较高。在下一步的研究中,将采用 JASMIN 框架提供的多物理耦合方法、结构网格的非结构拼接等支撑技术,提高 RH2D 程序的数值模拟研究能力。

参考文献:

- [1] 李德元,徐国荣,水鸿寿,等. 二维非定常流体力学数值方法[M]. 北京: 科学出版社, 1998.
- [2] MO Zeyao, ZHANG Aiqing, CAO Xiaolin, et al. JASMIN: A Parallel Software Infrastructure for Scientific Computing [J]. Frontiers of Computer Science in China, 2010, 4(4): 480-488.
- [3] McConnell S. Code Complete《代码大全》[M]. 第 2 版. 金戈等,译. 北京: 电子工业初版社, 2006.

- [4] 李德元,水鸿寿,汤敏君. 关于非矩形网格上的二维抛物型方程的差分格式[J]. 数值计算与计算机应用, 1980, 1(4): 217-224.
- [5] 袁光伟, 杭旭登. 九点格式中网格边上切向流的计算——节点自适应加权格式[J]. 计算物理, 2008, 25(1): 7-14.
- [6] SHENG Zhiqiang, YUAN Guangwei. A Nine Point Scheme for the Approximation of Diffusion Operators on Distorted Quadrilateral Meshes[J]. SIAM Journal Scientific on Computing, 2008, 30(3): 1341-1361.
- [7] 任健. 辐射热传导九点格式的研究与应用:[硕士学位论文][D]. 北京:中国工程物理研究院研究生部, 2010.
- [8] Ciarlet P G, Lions J L. Handbook of Numerical Analysis. Volume I. Finite Difference Methods (Part 1)[M]// Marchuk G I. Splitting and Alternating Direction Methods. North-Holland, 1990.
- [9] 李德元,陈光南. 抛物型方程差分方法引论[M]. 北京: 科学出版社, 1998.
- [10] Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems[M]. 2nd Edition. Philadelphia:SIAM, 2003.
- [11] Mousseau V A, Knoll D A, Rider W J. Physics-Based Pre-

conditioning and the Newton-Krylov Method for Non-linear-equilibrium Radiation Diffusion[J]. J Comput Phys, 2000, 160(2):743-765.



任健(1978 -),男,山西太原人,助理研究员,研究方向为辐射流体力学计算方法与数值模拟。**E-mail:** ren_jian@iapcm.ac.cn

REN Jian, born in 1978, research assistant, his research interests include the numerical scheme and simulation of radiation hydrodynamics.



申卫东(1964 -),男,湖北天门人,硕士,研究员,研究方向为辐射流体力学计算方法与数值模拟。**E-mail:** shen_weidong@iapcm.ac.cn

SHEN Wei-dong, born in 1964, MS, research fellow, his research interests include the numerical scheme and simulation of radiation hydrodynamics.