

超声速多相流数值模拟并行计算研究^{*}

吴海燕, 孙明波, 邵 艳, 汪洪波, 周 进

(国防科学技术大学航天与材料工程学院, 长沙 410073)

摘 要: 为实现超声速多相流动的高效数值仿真, 搭建了多机集群分布式 MIMD 并行计算平台, 并基于 MPI 通信平台开发了计算多相流流场的并行计算程序。对并行计算中网格分区方法、区域网格交界处通信方法及 Euler 与 Lagrange 坐标系间数据传递技术进行了研究。并进行了超声速燃烧多相流动算例的数值验证, 比较了并行计算效率, 证明了该多相流并行计算方法是高效可行的。

关键词: 超声速多相流; MPI; 并行计算; 数值模拟

中图分类号: TJ760.33 文献标志码: A

Parallel Numerical Simulation of Supersonic Multi-phase Flow

WU Haiyan, SUN Mingbo, SHAO Yan, WANG Hongbo, ZHOU Jin

(College of Aerospace and Material Engineering, NUDT, Changsha 410073, China)

Abstract: For effective numerical simulation of supersonic multi-phase flow, the parallel calculation program of multi-phase flow numerical simulation was developed by the MPI transfer function database, and the PC cluster distribution type system was established for MIMD parallel computation architecture. The method of grid partition, the course of grid sub-zone interface communication, and the data transfer between Euler and Lagrange coordinate system were studied. Then a case of multi-phase supersonic combustion flow was conducted to numerical validate, and the efficiency of parallel computation was compared. Which indicate the parallel numerical simulation method for multi-phase flow is viable and effectively.

Keywords: supersonic multi-phase flow; MPI; parallel calculation; numerical simulation

0 引言

计算流体力学的发展依赖于计算机技术的发展与数值方法的改进, 计算机技术的飞速发展加速了计算流体力学在工程应用方面的进程^[1]。随着航空、航天、水利、能源等研究领域的发展, 流体力学工程问题的日趋复杂, 计算流体力学的仿真任务量成级数增加, 传统的串行计算方法已无法满足实际需要, 因此数值方法的重点从优化提高串行算法计算效率和效果转为并行计算效率和方法的研究^[2]。

超声速多相流是吸气式超燃冲压发动机内流动的主要特征, 数值模拟是研究该流动特征的重要手段。由于超声速两相流动的可压缩性及高湍流度, 其数值模拟对计算网格和差分格式的精度要求较高。特别是采用 Euler-Lagrange 方

法求解两相流场时, 两相间复杂的数据交换成为开发并行计算程序的主要难点。目前国内外对超声速多相流动并行计算程序的研究都还不成熟, 鉴于此文中以超声速两相流动为研究对象, 开展了基于 MPI 的多相流动并行计算方法的研究。

1 并行计算平台

随着计算机性能的提高和网络技术的完善, 多机集群分布式 MIMD (multiple-instruction multiple-data 多指令多数据流) 计算系统的优点逐渐显露出来, 其最大的优点就是可扩展性: 其计算能力、内存容量和带宽会随着处理器节点的增加而增加。这种并行环境具有良好的可移植性, 每个处理器节点都可以快速有效地对它的内存进行处理而不需要外界的干预, 因此用户在设

^{*} 收稿日期: 2008-05-20

作者简介: 吴海燕(1980-), 女, 湖北人, 博士研究生, 研究方向: 高超声速推进。

计并程序时只需要设计好各个节点之间的通信同步就可以实现并行计算^[3]。

文中的多机集群分布式 MIMD 并行计算平台由 96 个微机节点、5 台千兆交换机和 6 台高性能终端组成,单机 CPU3.0GHz、内存 1.0GB。经过性能评估,总计算能力在 2000 亿次到 2500 亿次之间。并行计算 32 个 CPU 加速比超过 27,64 个 CPU 加速比为 48。

好的网络通信方法要求完备性好、效率高并且通信开销小。消息传递方式是广泛应用于分布式并行机的一种通信模式。常用的消息传递系统有 MPI、PVM、P4 等,其中 MPI 是完全的可移植并且扩展性良好的并行消息传递平台,它能有效地管理消息缓存区实现完全的异步通信,并且可以灵活地绑定多种编程语言和开发工具,因此是目前应用最广泛的并行计算通信方式。MPI 是消息传递界面(message passing interface)的简称,是目前消息传递并程序设计的标准之一。MPI 的实现包括 MPICH、LAM、IBM MPL 等多个版本,目前最常用最稳定的是 MPICH。

2 网格分区方法及通信处理技术

2.1 网格分区方向的不同处理

对于流场结构简单、对称的流动,如管道流动,火箭发动机燃烧室,超燃冲压发动机等直段,通常采用单向网格分区方法,如图 1(a)。该方法易于实现各区网格数量相等的目标,从而使计算的各节点有均衡的计算量,在通信上易于保持同步,减少为保持通信同步而等待的机时。对于单向网格分区,易于看到奇数区域仅与偶数区域相邻,易于采用 MPI 中最基本的点对点通信。为避免通信锁死,在计算中计算节点判断自己进程的秩(Process ID),如为奇数则先发送消息后接收消息,如为偶数则先接收消息后发送消息。为确保计算资源的安全和重复使用效率,对于这种网格分区方式采用阻塞式标准型 MPI 通信方式,即 MPI_Send 函数与 MPI_Recv 函数。这种标准的 MPI 通信模式发送方可能需要与接收方联络,因此是非局部的。通信时由系统判断是否将消息复制到一个缓冲区然后返回,还是等待将

数据完全送出后再返回。大部分 MPI 系统预留了一定大小的缓冲区,当发送的消息长度小于缓冲区长度时会将消息缓冲后立即返回,此时消息的发送由 MPI 系统在后台进行;当消息长度过长时则系统要等到部分或全部消息发送完成后才返回。

对于流场结构复杂、非对称的流动,如超燃冲压发动机中的凹腔、斜坡、后向台阶等结构,通常采用多向网格分区方法,如图 1(b)。该方法易于处理流场中不对称区域,易于对流场中变量梯度较大的区域进行网格加密。由于区域界面数量较多,各计算机节点不易判断其邻节点的进程秩的特征,为避免通信锁死,在计算中采用缓冲型 MPI 通信方式,即调用 MPI_Bsend 函数。在这种通信模式下发送方无需与接收方联络,因此是局部的。通信时 MPI 系统将消息复制到一个用户提供的缓冲区中立即返回,重新开始计算,消息的发送完全由 MPI 系统在后台进行,但用户必须保证提供的缓冲区大小足以容下发送消息的长度。缓冲型通信模式免除了判断先发送还是先接收信息的过程,能提高整体通信量,但有一次额外的将信息复制到缓冲区的过程,当发送大尺寸的消息时通信效率会明显下降。

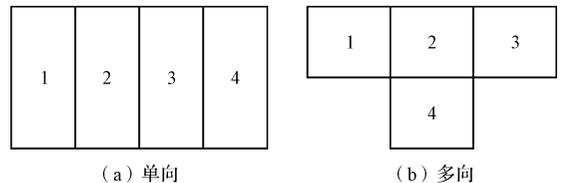


图 1 网格分区方法

2.2 区域交界网格处理技术

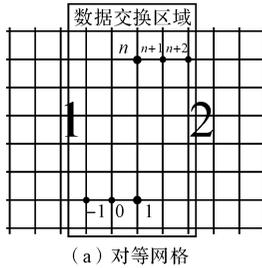
区域交界面上网格节点坐标对应相等的情况是并行计算中用得最多的也是最简单的,通常为保持差分格式的精度要将网格节点向相邻区域进行拓展。如三阶精度的 WENO 格式需要 5 个点进行插值才能保证精度要求。如图 2(a)中,对于 1 区中的 n 点取 2 区中 1、2、3 点的值分别赋给 1 区中 n 、 $n+1$ 、 $n+2$ 点,而对 2 区中的 1 点则取 1 区中的 $n-2$ 、 $n-1$ 、 n 的值分别赋给 2 区中的 -1 、 0 、 1 点。也就是说在区域间通信时要传递本区域 3 层网格的数据给相邻区域。

当一侧网格进行了加密,交界网格节点数是邻一侧的 k 倍时,如图 2(b)。则加密侧的部分节

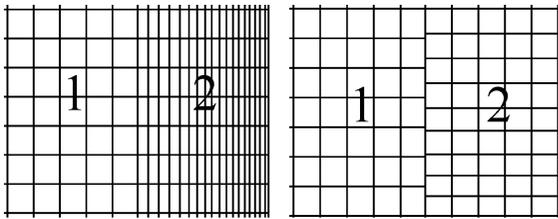
点值需要插值求得,通常认为一阶线性插值的精度就可以满足要求。值得注意的是,为保证计算格式的精度,不仅要交界面上的节点进行插值还要对区域扩展的 2 层(对于三阶精度 WENO 格式) 网格进行插值计算。一阶线性插值方法:

$$F_2(x) = \frac{1}{x_j - x_{j+1}} \left\{ \begin{array}{l} F_1(x_j) \quad x - x_j \\ F_1(x_{j+1}) \quad x - x_{j+1} \end{array} \right\} \quad (1)$$

对于区域交界面上网格节点交错的情况,不仅要区域两侧的节点都进行插值,还要求插值精度高。因此这种情况在实际应用中应尽量避免。



(a) 对等网格



(b) 单侧对等网格

(c) 非对等网格

图 2 区域交界面网络情况

3 多相流不同坐标系坐标变换及通信

3.1 三线形插值方法

在多相流动系统中,对连续相流场的仿真通常采用 Euler 坐标系,而对离散相,如液滴、固粒等的仿真通常采用 Lagrange 坐标系,在计算流动中各相之间的相互作用时不可避免的要对流场中各相进行坐标变换与数据交换。由于离散粒子位置并不一定与连续相空间网格节点重合,如图 3,故在连续相和离散相之间采用三线形插值^[1] 交换数据,即首先判断粒子位于哪个网格内,定位后再根据此网格 8 个顶点上的已知流体参数和粒子的位置坐标插值出该粒子位置上的流体参数值。具体插值方法如下^[4]:

令:

$$F(\xi, \eta, \zeta) = a_1 + a_2\xi + a_3\eta + a_4\zeta + a_5\xi\eta + a_6\eta\zeta + a_7\zeta\eta + a_8\xi\eta\zeta \quad (2)$$

其中: $a_1 \sim a_8$ 是取决于网格 8 个顶点流动参数的系数, F 为离散颗粒所处位置气体的物理量:

$$a_1 = F_{i,j,k}$$

$$a_2 = F_{i+1,j,k} - F_{i,j,k}$$

$$a_3 = F_{i,j+1,k} - F_{i,j,k}$$

$$a_4 = F_{i,j,k+1} - F_{i,j,k}$$

$$a_5 = F_{i,j,k} + F_{i+1,j+1,k} - F_{i+1,j,k} - F_{i,j+1,k}$$

$$a_6 = F_{i,j,k} + F_{i,j+1,k+1} - F_{i,j+1,k} - F_{i,j,k+1}$$

$$a_7 = F_{i,j,k} + F_{i+1,j,k+1} - F_{i+1,j,k} - F_{i,j,k+1}$$

$$a_8 = F_{i+1,j+1,k+1} + F_{i+1,j,k} + F_{i,j+1,k} + F_{i,j,k+1} -$$

$$F_{i+1,j+1,k} - F_{i,j+1,k+1} - F_{i+1,j,k+1} - F_{i,j,k}$$

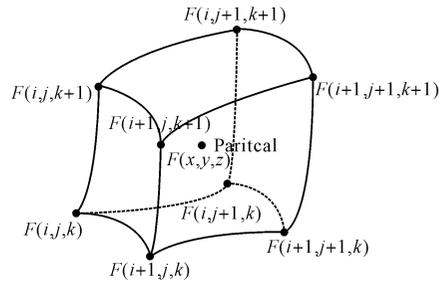


图 3 三线形插值方法

$F_{i,j,k}$ 表示网格点 (i, j, k) 上的流动参数值,而 $0 < \xi < 1, 0 < \eta < 1, 0 < \zeta < 1$, 代表了离散颗粒在网格中的相对位置。为求 ξ, η, ζ , 可利用 xyz 坐标作为函数反解如下关系式求得:

$$X_0 = a_1 + a_2\xi + a_3\eta + a_4\zeta + a_5\xi\eta + a_6\eta\zeta + a_7\zeta\eta + a_8\xi\eta\zeta \quad (3)$$

$$Y_0 = b_1 + b_2\xi + b_3\eta + b_4\zeta + b_5\xi\eta + b_6\eta\zeta + b_7\zeta\eta + b_8\xi\eta\zeta \quad (4)$$

$$Z_0 = c_1 + c_2\xi + c_3\eta + c_4\zeta + c_5\xi\eta + c_6\eta\zeta + c_7\zeta\eta + c_8\xi\eta\zeta \quad (5)$$

其中: (X_0, Y_0, Z_0) 是离散颗粒所处的位置坐标, $a_i, b_i, c_i (i = 1 \sim 8)$ 是取决于网格 8 个顶点坐标的系数,文中用牛顿迭代法求解 ξ, η, ζ , 其初值取 0.5。

3.2 三线形插值方法的替代

三线形插值方法不是 X, Y, Z 方向三次线性插值的叠加,它耦合求解 X, Y, Z 的插值,考虑了网格单元 8 个节点数值的相关性,具有三阶精度,同时三线形插值对处理边界不规则的网格单元非常有效。但三线形插值方法需要迭代求解一个三阶矩阵,计算量相对较大,对于流场中离散颗粒数目较多、计算网格较密的情况,由于总计算量过大导致流场步进速度低。因此采用三线形插值替代方法:四次线性插值加一次双线性插值方法。即先利用线性插值方法求得颗粒所在平面

4 个顶点的物理量,如图 4,然后在该平面上进行双线性插值^[5]。双线性插值方法与三线性插值方法一致,只是维数减一,计算量可明显降低。

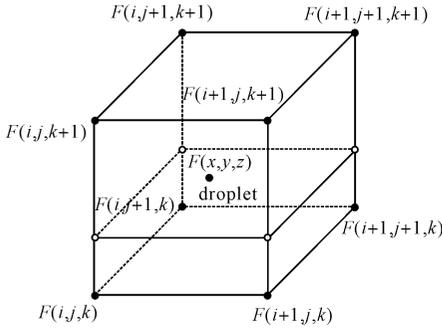
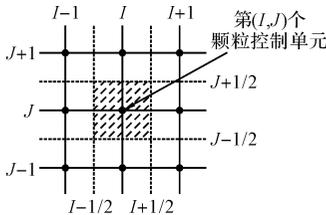


图 4 三线性插值替代方法

由于大部分流动过程其扰动的发展都有方向性,如混合层的发展就是先发展展向涡结构再发展流向涡结构。所以可在流向结构不明显时采用沿展向三线性插值替代方法,当流向结构发展起来以后改用三线性插值方法。对于采用结构网格的有限差分方法,该替代方法与三线性插值方法有基本相同的计算结果。

3.3 离散颗粒在流场中的统计方法

在计算颗粒对流场的反作用时,要将 Lagrange 坐标中离散颗粒的物理量统计归并到 Euler 坐标的网格节点中,图 5 离散相颗粒的统计方法



具体做法如图 5,取两节点间距 1/2 处定义液滴控制单元,在该单元体内统计颗粒物理量,然后归并到该单元中心的网格节点上,实现了 Lagrange 坐标中离散相物理量到连续相 Euler 坐标系的传递。

3.4 区域间数据的通信

对于 Euler 坐标系其边界处网格数是确定的,因此进程间通信时的数据量也是确定的,可以很方便的定义 MPI 系统缓存大小和消息尺寸。对于采用 Lagrange 坐标的离散相,由于每一时刻运动到边界上的颗粒数是不确定的,因此对于发送方必须先定义一个足够大的数组,并用数组的最后一个变量记录统计出交界面上颗粒的数目,然后进行计算机节点间通信。对于接受方,只有获得了颗粒的数目才能确定赋值循环的次数。

4 仿真结果分析

针对以上方法文中采用大涡模拟方法,仿真了非定常情况下超声速流场中凹腔前横向喷注当量比 0.09 液态乙醇的燃烧流场。凹腔长深比 $L/D=7$,仿真结果如图 6。

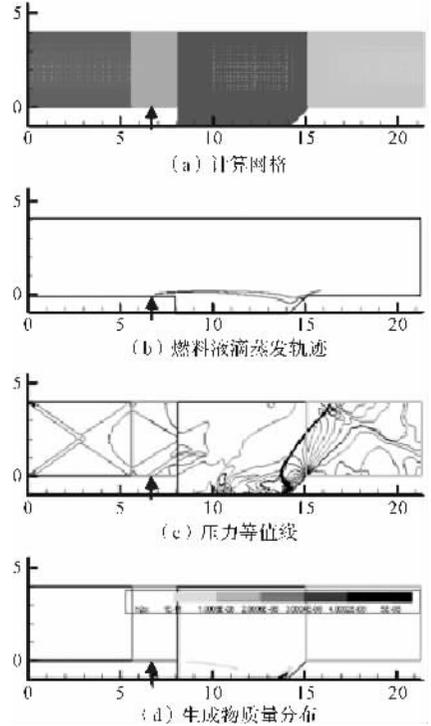


图 6 凹腔前横向喷注仿真结果

并行计算网格采用单向分区方法分为 4 个区,在边界层、喷注、凹腔前、后缘均进行了网格加密,各区的网格数量在 20000~30000 之间,网格数量基本平衡。

从图 6(b)、图 6(c)可以看出在区域交界面上连续相和离散相两种模型的物理量保持了很好的连续性,没有因为分进程的计算而出现间断点。说明在两种坐标系下,采用文中提出的流场通信方法,能使各计算机节点间通信稳定可靠。

图 6(b)表明当液滴横向喷入超声速流场时,速度方向迅速改变,液滴轨迹基本沿流线,并在凹腔后缘处完全蒸发。由于液滴蒸发向气相流场加入质量源项,在图 6(c)中喷流的位置产生了一道斜激波。但由于当量比较低液滴蒸发速度也较慢,所以激波强度较弱。从图 6(c)燃烧产物 H_2O 的分布可以看出,燃烧反应基本在凹腔内的低速回流区中完成。

该数值仿真在 4 台机器上完成,加速比为 3.1,并行效率为 77.5%,并行效率比计算平台平均效率偏低的原因是:1)网格划分时第 3 区网格量较多;2)在计算离散相粒子时第 3 区(第 2 个进程)中粒子数目最多。因此进程 0、1、3 在计算完后要等待与进程 2 的通信,使得并行效率降低。

5 结 论

文中提出的基于 MPI 多相流动并行计算方法在 Euler 及 Lagrange 坐标系中均能很好保持并行计算通信同步,并真实地模拟多相流动。该方法能获得很高的并行效率,同时只要合理地配比各节点的计算量,并行效率还可以进一步提高。

(上接第 185 页)

的振动影响比左右向要明显。

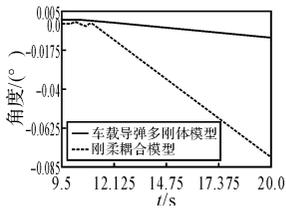


图 6 左侧弹绕 X 轴的扰动角变化曲线

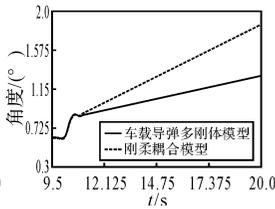


图 7 左侧弹绕 Y 轴的扰动角变化曲线

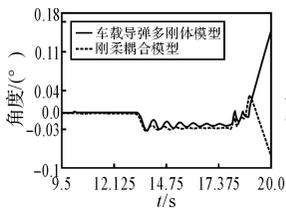


图 8 右侧弹绕 X 轴的扰动角变化曲线

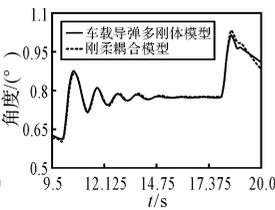


图 9 右侧弹绕 Y 轴的扰动角变化曲线

5 结 论

文中依据多柔体系统刚柔耦合动力学基本理论,完成了对某车载导弹发射系统的动力学仿

参考文献:

[1] Bui T T. A parallel, finite-volume algorithm for large eddy simulation of turbulent flows [R]. AIAA 99-0789, 1999.

[2] Dongarra J. 并行计算综述[M]. 莫则尧,译. 北京:电子工业出版社,2005.

[3] Grama A. 并行计算导论[M]. 张武,毛国勇,程海英,译. 北京:机械工业出版社,2005.

[4] Leonor Camila Q Y. Three dimensional chimera grid flow simulation over aerospace configurations [R]. AIAA 99-3132, 1999.

[5] Reza Ghias R M. A non-body conformal grid method for simulation of compressible flows with complex immersed boundaries[R]. AIAA 04-0080, 2004.

真分析。对比多刚体模型仿真结果和多柔体的刚柔耦合模型仿真结果可以看出,柔性构件的变形对导弹出筒姿态有重要影响,即对导弹绕 Y 轴的扰动角的影响比绕 X 轴的要大。刚柔耦合模型中由于柔性构件的弹性振动的影响,使得系统的振动响应略比多刚体模型的情况要滞后。结合弹性半空间理论和有限元分析方法,弹-架系统以及与之接触的地面土体被看作一个整体来考虑,地面的振动响应不再被忽略。文中的计算结果对发射装置的研制具有一定的参考价值。

参考文献:

[1] 郑建荣. ADAMS—虚拟样机技术入门与提高[M]. 北京:机械工业出版社,2002.

[2] 李军,邢俊文,覃文洁. MSC. ADAMS 实例教程[M]. 北京:北京理工大学出版社,2002.

[3] 冯勇,马大为,薛畅,等. 多管火箭炮刚柔耦合多体发射动力学仿真研究[J]. 兵工学报,2006,27(3): 545-548.

[4] 廖振鹏. 工程波动理论导论[M]. 北京:科学出版社,2002.