

稀薄气体高超声速流动的非结构 DSMC 并行化计算

李学东, 王保国

北京理工大学宇航学院, 北京 100081

摘要 采用非结构化三角网格为基本网格单元, 在可变硬球 (VHS) 分子模型、Borgnakke-Larsen 唯象模型、Bird 的化学反应几率模型及壁面 CLL 反射模型的基础上, 本文用 Fortran 语言编制了能够模拟内能松弛、热力学非平衡和化学非平衡的稀薄气体直接模拟 Monte-Carlo (DSMC) 源程序。针对多核计算机上进行并行计算实现技术, 将并行 OpenMP 的模型应用于 DSMC 方法, 编制了可在多核计算机中进行数值模拟的非结构 DSMC 并行程序。分别对不同稀薄领域的不同工况高超声速气体绕圆柱流动问题进行数值模拟, 得到热非平衡态对飞行器流场的影响。通过数值结果的比较, 验证了编制的 DSMC 并行程序的正确性和合理性, 以双 CPU、双核计算机为例, 并行后的计算效率提高了近一倍。这些数值结果对飞行器流场特性分析和有效地完成飞行器热防护具有重要意义。

关键词 直接模拟 Monte-Carlo 方法; 高超声速绕流; 稀薄气体流动; 非结构网格; 并行算法

中图分类号 V19

文献标识码 A

文章编号 1000-7857(2010)04-0064-04

Parallelization of DSMC Method on Unstructured Grids for Hypersonic Rarefied Gas

LI Xuedong, WANG Baoguo

School of Aerospace, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

Abstract Unstructured triangle grid is used as the basic grid cell. Based on the variable hard sphere (VHS) model, the Borgnakke-Larsen phenomenological model, the chemical reaction model of Bird and the Cercignani-Lampis-Lord (CLL) gas surface interaction model, the rarefied gas Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC) codes in Fortran are developed, which can simulate the relaxation of internal energies, the thermodynamic non-equilibrium and the chemical reaction non-equilibrium. To take advantage of the parallel computation on multi-core computers, the parallel OpenMP model is incorporated into the DSMC method, and the unstructured DSMC parallel program can process numerical simulations on multi-core computers. The hypersonic airflow past cylinder is simulated in different cases of different rarefied regions to see the effect of thermal non-equilibrium. The numerical results have verified the rationality of the DSMC parallel program. For example, the computation efficiency after parallelization is nearly doubled using double-CPU or dual-core computers.

Keywords Direct Simulation Monte-Carlo (DSMC); hypersonic gas flows; rarefied gas flow; unstructured grid; parallel algorithm

0 引言

飞行器的几何外形, 尤其是飞行器头部和机翼前缘是飞行器设计的关键。由于头部驻点处的对流传热与头部曲率半径的平方根呈反比, 将头部钝化可以减轻头部的热载荷^[1]。因此, 大多数的飞行器都采用钝体体和钝化的飞行器前缘, 以

减轻热载荷。高超声速飞行器的设计需要准确预测飞行器表面参数。当飞行轨道经过大气时, 由于大气密度随高度的不同而变化, 高超声速飞行器经历了不同的流场区域。另外, 由于高速度带来的高温使得分子的内能激发和发生化学反应。在地面实验室再现各种流场的工况是很困难的, 技术要求和

收稿日期: 2009-12-29

基金项目: 国家自然科学基金项目 (50376004); 高等学校博士学科点专项科研基金项目 (20030007028)

作者简介: 李学东, 博士研究生, 研究方向为计算流体力学、高速气动热力学, 电子信箱: lxjdbj@bit.edu.cn; 王保国 (通信作者, 中国科协所属全国学会个人会员登记号: E1201700465), 教授, 研究方向为计算流体力学、高速气动热力学, 电子信箱: bguowang@bit.edu.cn

费用都很高。因此,数值模拟对高超声速飞行器的发展是一种非常重要的手段。

直接模拟 Monte-Carlo 方法 (Direct Simulation Monte-Carlo, DSMC) 是通过跟踪大量模拟分子的运动,统计这些模拟分子的运动状态来得到流场参数。计算量主要集中在 3 个方面:分子的运动、分子与物体边界的碰撞以及分子间的相互碰撞。从这一点上可以看出,DSMC 方法很适合并行研究,因此对非结构网格的 DSMC 程序进行并行化处理,对于提高 DSMC 计算效率是非常必要的。国外的计算流体力学家曾针对大规模超级并行计算机系统进行了 DSMC 并行化研究,取得了许多有意义的结果^[2-3]。但由于超级计算机系统造价昂贵而难以得到普及,一定程度上限制了并行 DSMC 方法的发展。

本文中针对多核计算机上进行并行计算的实现技术,将共享存储系统并行 OpenMP 的模型应用于 DSMC 方法,编制了可在多核计算机中进行数值模拟的非结构 DSMC 并行程序^[4-5]。对高超声速绕流进行并行计算,数值模拟的结果验证了非结构 DSMC 并行程序的正确性与合理性,以及并行算法对于计算效率的大幅提高。

1 非结构网格 DSMC 方法并行算法程序设计

OpenMP 是一个为在共享存储的多处理机上编写并行程序而设计的应用编程接口,由一个小型的编制器命令集组成,包括一套编制制导语句和一个用来支持它的函数库。它是通过与标准 Fortran, C 和 C++ 结合进行工作的,对于同步共享变量、合理分配负载等任务都提供了有效的支持,具有简单通用、开发快速的特点。OpenMP 是可移植多线程应用程序开发的行业标准,在细粒度(循环级别)与粗粒度(函数级别)线程技术上具有很高的效率。

下面给出了针对多核微机上并行计算的实现技术,将共享存储系统并行 OpenMP 的模型应用于 DSMC 方法,编制的可在多核计算机中进行数值模拟并行 DSMC 程序设计方法。本文采用主进程/子进程并行模式,主进程用于发送任务、接收计算结果和模拟结果后处理等操作。子进程进行 DSMC 程序中大部分的模拟工作。下面给出非结构网格 DSMC 并行算法。

1) 初始化。在 Microsoft Visual Studio 2005 中启动 OpenMP,计算机将所有闲置处理器(假设是 N 核处理器)自动设置运行进程。将其中一个处理器默认为主进程,其他 $N-1$ 个处理器作为子进程,利用 OpenMP 库函数,将所有子进程定义为新的通信域。

2) 所有主进程与子进程均载入非结构 DSMC 程序中的各数组信息。

3) 对于主进程,进行如下过程:

① 网格划分,根据均匀流场将模拟分子的信息初始化。将数值结果发送给每一个分进程点。

② 启动数据接收操作,准备从子进程接收计算结果。

③ 将接收到的流场信息写盘,作为继续计算的重新开始

文件。

④ 判断计算时间是否达到抽样时间,如果成立,则对各网格内的模拟分子开始进行参数统计。

⑤ 如果计算结果达到计算要求,执行步骤 5),否则回到步骤 2)。

4) 对每一个子进程执行如下过程:

① 初始化子区域流场,启动接收操作,从主进程接收流场数值信息。

② 跟踪分配分子运动,跟踪完成后将分子数据反馈主进程。

③ 接受网格新的分子信息,执行分子碰撞。将数据反馈主程序。

5) 结束。

可以看出,采用 OpenMP 模型编制的非结构网格 DSMC 程序均可很容易地推广到热化学非平衡等复杂流场的并行化计算。因为并行算法只影响程序中的碰撞计算部分,而热化学非平衡态中的分子内能交换和化学反应都是在碰撞过程中完成的。

2 数值模拟结果

本文通过对 Knudsen 数 (Kn) 分别取 0.05、0.1、0.25 和 2 的 4 种不同工况进行数值模拟,研究非平衡态高超声速气体绕流圆柱流动问题。来流速度马赫数为 25,壁面温度取固定值 1500K,模拟分子与壁面碰撞采用 CLL 反射模型。分子自由程的计算采用硬球模型,分别取 Ar 原子作为平衡态流动的计算工质, N_2 分子作为非平衡态流动工质。分子采用变径硬球模型(VHS)和变径软球模型(VSS),这两种模型在平动能、振动能和转动能的能量转换中都被应用。采用 Bird 非时间计数器法(NTC)进行碰撞对的选取;网格大小约为分子自由程的 1/3,每个网格内分布大于 10 个分子。

如图 1 所示,圆柱半径 $R=0.15m$,夹角 ϕ 为圆柱表面上的点到中心的距离与 x 轴的夹角。

图 2 分别为 Ar 原子和 N_2 分子作为工质的沿驻点线的温度分布图,包括平动温度 T_{TRA} 、总温 T 、转动温度 T_{ROT} 和振动温度 T_{VIB} 。从数值模拟结果比较可以看出,气体在激波附近的热

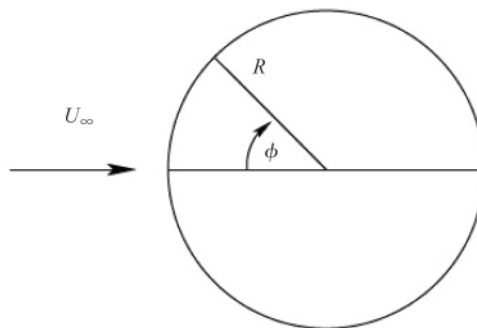


图 1 圆柱绕流结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the flow past a cylinder

力学非平衡态效应非常显著。由于激波附近气体温度增高,激发了 N_2 分子的振动能和转动能,将平动能转换成振动能和转动能,所以非平衡态总温最大值远低于不考虑非平衡态的总温,这与理论分析吻合。对于非平衡态,由于气体分子振

动的松弛时间远大于平动和转动的松弛时间,气体内分子的振动平衡需要更多的分子碰撞时间,激波附近的气体振动温度明显低于气体平动温度和转动温度。

下面以 N_2 为计算工质,对非平衡态高超声速圆柱绕流问

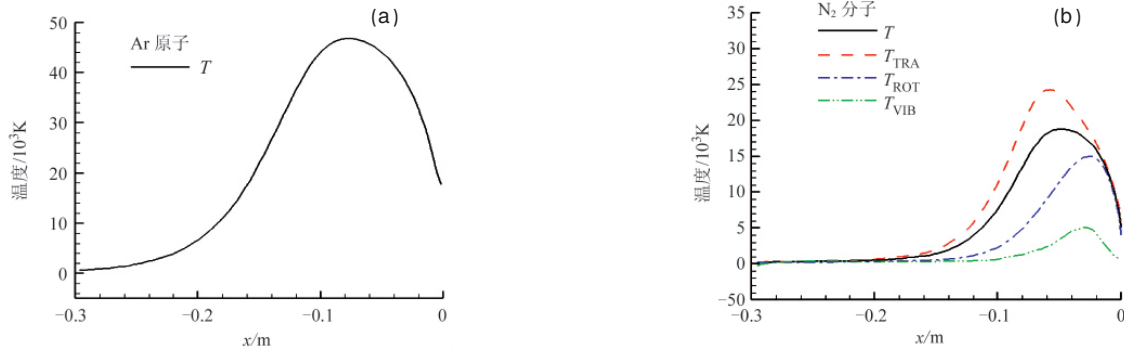


图 2 Ar 原子和 N_2 分子在 $Kn=0.05, M_\infty=25$ 时的沿驻点温度分布

Fig. 2 Translational temperature distribution along the stagnation streamline

题进行数值模拟。通过比较不同稀薄程度高超声速非平衡态气体绕圆柱流动的壁面热流系数,分析非平衡效应对高超声速飞行器壁面参数产生的影响,并将数值模拟结果与文献[6]的结果进行比较,初步验证了所编程序的可行性和有效性。

图 3 给出了沿圆柱壁面的热流系数分布。可以看出,各种工况的壁面热流系数 C_H 的峰值都是出现在壁面驻点处(对应 $\phi=0$ 的点),然后随对应 ϕ 角的增大而单调减小。圆柱壁面参数沿壁面的变化趋势不随 Knudsen 数的变化而改变。

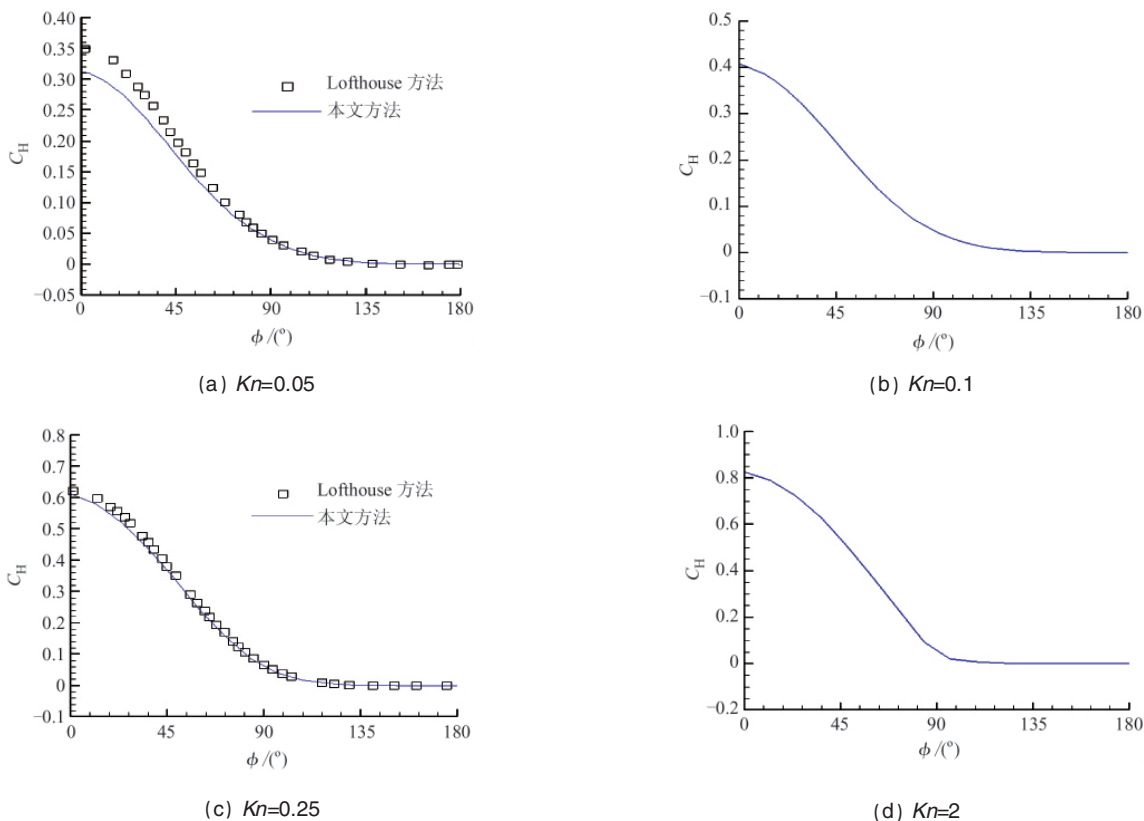


图 3 $M_\infty=25$ 时沿圆柱壁面的热流系数分布

Fig. 3 Wall heat flux distribution when $M_\infty=25$

3 非结构 DSMC 并行算法效率验证

首先通过比较可知,数值模拟结果是一致的,由此得出本文采用并行 OpenMP 模型编制的并行程序是可行的。表 1 给出了非结构网格下二维钝头体绕流 DSMC 数值模拟采用并行 OpenMP 模型与未采用并行算法的模拟时间的比较。数值模拟采用的计算机是双 CPU,Intel(R) Xeon(TM)双核处理

器,主频 2.66Hz,内存 2GB。可以看出,在非结构 DSMC 方法中,数值模拟过程中计算机的运算速度由网格的数目决定。对于双核处理器,采用并行算法消耗机时大约是不采用并行算法的 50%~58.3%,证明了本文编制的并行算法对于 DSMC 方法计算能力的提高。

表 1 不同工况下并行算法与不采用并行算法的模拟机时比较
Table 1 CPU times of computation in different cases

工况	M_∞	Kn	网格数	计算机时/h	
				非并行	并行
1	25	0.05	23080	36	21
2	25	0.1	12763	20	11.5
3	25	0.25	3656	6	3.5
4	25	2	3656	4	2

4 结论

本文采用非结构化三角网格为基本网格单元,针对多核计算机上进行并行计算的实现技术,将共享存储系统并行 OpenMP 的模型应用于 DSMC 方法,编制了可在多核计算机中进行数值模拟的非结构 DSMC 并行程序。分别对不同稀薄领域的不同工况高超声速气体绕圆柱流动问题进行数值模拟,数值模拟结果与文献中的结果吻合,可以得出本文采用并行 OpenMP 的模型编制的并行程序是可行的。

参考文献 (References)

[1] 王保国,刘淑艳,黄伟光. 气体动力学 [M]. 北京:北京理工大学出版社、北京航空航天大学出版社、西北工业大学出版社、哈尔滨工业大学出版社、哈尔滨工程大学出版社,2005: 527-576.
Wang Baoguo, Liu Shuyan, Huang Weiguang. Gas Dynamics[M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, Beijing Aeronautical and Astronautical University Press, Northwestern Polytechnical University Press, Harbin Industry University Press, Harbin Engineering University

Press, 2005: 527-576.
[2] 孙成海,王保国,沈孟育. 完全气体格子 Boltzmann 热模型 [J]. 清华大学学报:自然科学版,2000,40(4): 51-54.
Sun Chenghai, Wang Baoguo, Shen Mengyu. Journal of Tsinghua University: Science and Technology Edition, 2000, 40(4): 51-54.
[3] Bircsak J, Craig P, Crowell R L, et al. Extending OpenMP for NUMA machines[J]. Scientific Programming, 2000, 8(3):163-181.
[4] 王保国,李荣先,马智明,等. 非结构网格下含冷却孔的涡轮转子三维流场计算[J]. 航空动力学报,2001,16(3): 224-231.
Wang Baoguo, Li Rongxian, Ma Zhiming, et al. Journal of Aerospace Power, 2001, 16(3): 224-231.
[5] 王保国,刘淑艳,杨英俊,等. 非结构网格下涡轮级三维非定常 N-S 方程的数值解[J]. 工程热物理学报,2004,25(6): 940-942.
Wang Baoguo, Liu Shuyan, Yang Yingjun, et al. Journal of Engineering Thermophysics, 2004, 25(6): 940-942.
[6] Loftthouse A J, Scalabrin L C, Boyd I D. Hypersonic aerothermodynamics analysis across nonequilibrium regimes using continuum and particle methods[R]. Reston, VA: AIAA Paper 2007-3903, 2007.

(责任编辑 朱宇)

·学术动态·

“2010 年航空器适航与
空中交通管理学术年会”征文



由中国航空学会民用飞行器适航分会、北京航空航天学会和中国民航总局航空安全技术中心共同举办的 2010 年航空器适航与空中交通管理学术年会定于 2010 年 8 月 20 日在北京召开。

会议现面向相关科技工作者征文,范围如下:

适航:初始适航,持续适航;空中交通管理;空域管理、空中交通流量管理、空中交通服务(飞行情报服务、空中交通管制、航空气象服务、告警服务);空管标准与法规;航空器运行;航空人员培训及合格审定;空管通信、导航、监视系统;其他相关内容。

全文截稿日期为 2010 年 5 月 10 日。

联系方式:北京市学院路 37 号北京航空航天大学(100191),文老师,电话:010-82317386,电子信箱:AWATM@buaa.edu.cn。