

[文章编号] 1001-246X(2008)01-0065-10

求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论 大规模并行算法

李志辉^{1,2}, 张涵信^{1,2}

(1. 国家计算流体力学实验室, 北京 100083; 2. 中国空气动力研究与发展中心超高速研究所, 四川 绵阳 621000)

[摘 要] 研究各流域三维流动问题的 Boltzmann 模型方程计算方法, 建立直接求解分子速度分布函数的气体运动论耦合迭代数值格式; 基于变量依赖关系、数据通信与并行可扩展性分析, 使用区域分解并行化方法, 建立气体运动论数值算法并行方案, 发展求解各流域三维绕流问题的气体运动论并行算法。拟定高低不同马赫数下来自不同流域的三维球体及返回舱绕流算例, 进行高性能 Fortran (HPF) 大规模并行计算, 将计算结果与有关实验数据、相关理论预测等进行比较分析, 研究揭示不同流区复杂绕流现象及流动机理。研究表明, 所发展的气体运动论并行算法具有很好的并行独立性, 基本达到线性加速的并行效果, 显示出良好的并行可扩展性。

[关键词] Boltzmann 模型方程; 速度分布函数; 离散速度坐标法; 有限差分方法; 并行计算

[中图分类号] O246; O355 **[文献标识码]** A

0 引言

近一个世纪以来, 并行处理技术已成为计算机发展的一个重要特征。以并行体系结构技术为基础、并行程序设计技术为实现手段的并行计算, 由于能够克服单个 CPU 计算内存和速度的瓶颈问题, 大幅度提高计算效率, 已成为当今数值计算的潮流和趋势, 被广泛应用于包括流体力学在内的许多领域。随着大内存、高速度并行计算机突飞猛进的发展, 高性能并行计算已成为复杂科学计算领域的主宰。依托高性能计算机, 发展准确可靠的数值计算技术, 解决航空航天工程、国防经济建设中许多重大空气动力学难题已迫在眉睫。本文从基于 Boltzmann 模型方程各流域三维复杂绕流问题气体运动论统一算法研究需要大规模并行计算资源的角度, 反映国家高性能并行计算环境对航空航天流体力学应用发展的意义和作用。

航天器从外层空间再入大气层先后经历高稀薄自由分子流区、过渡流区、滑移流区和连续流区, 所遇气动环境十分复杂。为研究各流域空气动力学特征, 传统做法是稀薄流有一套算法, 如求解稀薄气体流动问题的直接模拟蒙特卡罗 (DSMC) 方法^[1]; 连续流另有一套研究方法, 如数值求解 Euler, N-S 方程等的宏观流体力学解算器; 上述两类方法相差较大、彼此独立, 获得的气动数值难以随不同流区光滑连接, 尤其是中等 Knudsen 数的近连续滑移流区、稀薄过渡区复杂高超声速气动问题, 无论在数值方法还是实验技术方面均为难于处理的流动。如何准确可靠地求解飞行器跨越飞行各流域复杂绕流问题, 一直是对流体力学研究工作者的挑战。

根据国际上气体运动论模型方程研究现状与发展趋势^[2-5], 结合从事 DSMC 方法与计算流体力学有限差分方法研究基础, 近年来, 作者通过研究确立描述各流域微观分子输运现象的 Boltzmann 模型方程, 发展气体运动论离散速度坐标技术, 将各流域统一的气体分子速度分布函数方程化为在各个离散速度坐标点处基于时间和位置空间具有非线性源项的双曲型守恒方程。研究并发展可用于速度空间宏观取矩的离散速度数值积分方法, 应用拓展非定常时间分裂数值计算方法和 NND 格式, 发展直接求解分子速度分布函数的气体运动论耦合迭代数值格式, 已初步建立起有效模拟各流域一维、二维、三维气体流动问题的统一算法^[6-9], 并开展了一些简单外形绕流数值计算, 取得较好的成果。统一算法用于三维复杂外形绕流计算需要大量机时和内存, 为了从根本上解决这一困难, 同时充分利用当今快速发展的高性能并行计算机资源, 本文依托我

[收稿日期] 2006-09-11; [修回日期] 2007-01-30

[基金项目] 国家自然科学基金(90205009, 10321002)资助项目

[作者简介] 李志辉(1968-), 男, 四川眉山, 研究员, 博士后, 从事稀薄气体动力学与计算流体力学研究。

国自行研制的分布式共享框架结构的“神威”等并行计算机系统,在文[10,11]尝试开展 HPF 并行算法初步研究的基础上,通过分析研究气体运动论统一算法内在并行性,使用区域分解并行化方法研究建立气体运动论数值算法并行方案,以不同流域圆球和返回舱绕流为算例,进行 HPF 大规模并行计算研究,尝试建立基于 Boltzmann 简化速度分布函数方程数值求解,能有效模拟各流域三维复杂流动问题的气体运动论并行算法研究方向。

1 控制方程和数值方法

基于 Boltzmann 方程碰撞间隔理论,利用气体分子速度分布函数在任一时刻由非平衡态向平衡态演化的碰撞松弛特性,及文[4,9,12]的叙述,无量纲的分子速度分布函数简化控制方程形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \nu(f^N - f), \quad (1)$$

$$f^N = f_M [1 + (1 - Pr) \mathbf{c} \cdot \mathbf{q} (2c^2/T - 5)/(5PT/2)], \quad (2)$$

$$f_M = n/(\pi T)^{3/2} \exp(-c^2/T), \quad (3)$$

$$\nu = 8nT^{1/2}/(5\sqrt{\pi}Kn_\infty), \quad Kn_\infty = \lambda_\infty/L, \quad (4)$$

式中 λ_∞ 是来流分子平均自由程; Kn_∞ 表示基于特征长度 L 的来流 Knudsen 数,是划分各流域流动状态的控制参数; \mathbf{c} 为气体分子热运动速度,且 $c = |\mathbf{c}|$; $\chi = (\zeta + 3)/(2\zeta - 1)$ 是关于分子模型的气体常数, ζ 是联系分子间作用力大小 F 与分子间距离 r 的负幂律指数, $F = 1/r^\zeta$; ν 为气体分子碰撞频率。

方程(1)通过描述气体流动过程中分子速度分布函数 f 对位置空间、速度空间和时间的变化率关系,从分子运动论角度给出气体的统计描述.如果得到气体分子速度分布函数,气体动力学中感兴趣的各种宏观量,如气体密度、流动速度、温度、气体压力、应力张量、热流矢量等,均可通过分布函数对速度空间取矩的办法得到^[9,12,13]。

基于气体分子运动论概率统计原理,应用计算数学指数型无穷积分技术^[14],发展气体运动论离散速度坐标法及可用于速度空间宏观取矩的离散速度数值积分方法^[9,12],去掉速度分布函数对速度空间的连续依赖性,将单一的速度分布函数方程化为在各个离散速度坐标点处,基于时、空空间具有非线性源项的双曲型守恒方程组.吸收 Monte Carlo 方法关于分子运动与碰撞去耦技术^[11,13,15],研究拓展计算流体力学有限差分方法,将其应用于基于时间、位置空间和速度空间的七维问题,建立直接求解分子速度分布函数的气体运动论耦合迭代数值格式

$$U^{n+1} = L_s\left(\frac{\Delta t}{2}\right) L_\zeta\left(\frac{\Delta t}{2}\right) L_\eta\left(\frac{\Delta t}{2}\right) L_\xi(\Delta t) L_\gamma\left(\frac{\Delta t}{2}\right) L_\nu\left(\frac{\Delta t}{2}\right) L_s\left(\frac{\Delta t}{2}\right) U^n, \quad (5)$$

其中

$$U^* = L_s(\Delta t) U^n = U^n + \left(1 - \frac{\nu}{2} \Delta t\right) \Delta t S^n,$$

$$U^{**} = L_\zeta(\Delta t) U^* = \left[1 - \bar{W} \Delta t \delta_\zeta + \frac{\bar{W}^2 \Delta t^2}{2} \delta_\zeta^2\right] U^*,$$

$$U^{***} = L_\eta(\Delta t) U^{**} = \left[1 - \bar{V} \Delta t \delta_\eta + \frac{\bar{V}^2 \Delta t^2}{2} \delta_\eta^2\right] U^{**},$$

$$U^{n+1} = L_\xi(\Delta t) U^{***} = \left[1 - \bar{U} \Delta t \delta_\xi + \frac{\bar{U}^2 \Delta t^2}{2} \delta_\xi^2\right] U^{***},$$

式中, $\bar{U} = V_{\infty x} \xi_x + V_{\infty y} \xi_y + V_{\infty z} \xi_z$; $\bar{V} = V_{\infty x} \eta_x + V_{\infty y} \eta_y + V_{\infty z} \eta_z$; $\bar{W} = V_{\infty x} \zeta_x + V_{\infty y} \zeta_y + V_{\infty z} \zeta_z$.

利用气体运动论有限差分数值格式(5),结合文[9,16]的气体运动论边界条件数值处理方法,对所有离散速度坐标点差分求解速度分布函数;使用相应的离散速度数值积分法^[12]确定物理空间各点的宏观流动参数,并进行计算推进和演化更新,重复上述数值算法过程,待表征流动特性的宏观物理量收敛于计算精度而结束该算法过程^[8]。

气体运动论数值算法的精度主要取决于物理模型、离散速度坐标法的精度、求解离散速度分布函数的差分格式误差、网格划分及收敛性.气体分子速度分布函数控制方程,作为一种碰撞模型方程,虽然不如原始

Boltzmann方程那么精确,但由于该方程引入联系于各流域流态控制参数、宏观流动物理量、粘性输运特性、热力学效应及分子相互作用规则等微观分子碰撞松弛参数和当地平衡态分布函数,能可靠描述不同流域的气体流动特性,但必然存在一定的模型系统误差,已在文[16]中进行论述,并检验.离散速度坐标法的精度主要取决于相应的离散速度数值积分方法和离散速度域及离散坐标点的选取,在实际计算中,只要保证其离散截断精度高于全局计算的整体精度一个量级以上即可^[9,14,17].另外,求解离散速度分布函数的数值精度主要依赖于所用的差分格式,本文使用具有二阶精度的 Runge-Kutta 方法数值模拟具有非线性源项的碰撞松弛方程,利用时空空间均为二阶精度的 NND 格式差分离散位置空间各方向的对流运动项;使用与内点格式的迎风属性相一致的特征化基础边界条件进行算法边界处理,由于内点格式的二阶精度,所发展的特征化基础二阶迎风边界格式保证了物理空间求解离散速度分布函数方程的全局二阶精度.通常,网格越密,算法精度越好,但是会占用更多的计算内存与计算时间.计算实践证明,在保证所要求精度的情况下,本文算法结果对物理空间或速度空间的网格间距并不敏感;算法稳定性很高,不受网格尺寸的局限,甚至在网格划分相当粗糙的情况下,计算仍能较快地收敛于所要求的精度.

2 气体运动论并行算法

2.1 数值方法并行性分析

三维绕流气体运动论数值算法的计算空间是由离散速度空间和位置空间组成的六维空间,形成二相空间.算法分成两部分:①在各离散速度坐标点 (V_x, V_y, V_z) 处基于时间和位置空间利用式(5)数值求解速度分布函数 $f_{\sigma,s,\theta}$;②基于已求得分布函数,使用所发展的气体运动论离散速度数值积分法确定位置空间各点 (x, y, z) 的宏观流动参数.该气体运动论算法具有以下特点:①利用离散速度坐标法对气体分子速度分量进行数值离散的过程,对位置空间各点是相互独立的;②数值求解气体分子速度分布函数方程的过程,对各个离散速度坐标点是相互独立的;③利用离散速度数值积分法对速度分布函数进行矩积分确定宏观流动参数的过程,对位置空间各网格点是相互独立的;④判断离散速度分布函数是否满足所需要的计算精度,以及修正速度分布函数方程中各宏观流动参数,对位置空间各网格点也是相互独立的.这些特点与基于 Euler, N-S方程的宏观流体力学数值方法完全不同,避免了传统流体力学并行计算关于复杂流场差分求解、分区网格、边界处理需要大量离散通信的困难.从气体运动论数值算法过程及计算特点可看出,虽然整个求解空间是由 $(i, j, k, \sigma, \delta, \theta)$ 组成的六维空间,然而,只有需要求解的速度分布函数才定义在整个六维空间,其他变量则只定义在位置空间 (i, j, k) 或速度空间 (σ, δ, θ) ;而且算法各模块或基于离散位置空间或基于离散速度空间,彼此存在很好的并行独立性,这是对气体运动论数值算法进行并行化研究的前提和基础.

2.2 气体运动论算法并行方案

从区域分解并行化原理出发,可将算法求解空间分别划分为位置空间 Ω_x 分解策略、速度空间 Ω_v 分解策略或基于位置空间与速度空间的混合分解策略^[11,16].哪种策略最适合气体运动论数值算法,需要从变量依赖关系、数据通信与并行可扩展性3方面进行分析.

变量依赖关系分析是并行识别的基础,也是用于指导区域分解策略的理论依据之一.变量依赖关系分析理论虽然主要针对程序级^[18],但是,其概念和基本理论也适用于算法级.这里,引入变量依赖关系分析原理,对整个算法及各阶段算法模块进行变量依赖关系分析.研究表明,在各个离散速度坐标点 (V_x, V_y, V_z) 处数值求解离散速度分布函数 $f_{\sigma,s,\theta}$ 的差分格式中,位置空间 Ω_x 各维方向都存在数据相关性,在离散速度空间 Ω_v 各维方向毫不相关;使用离散速度数值积分法对气体分子离散速度分布函数进行矩积分确定宏观流动参数的过程中,位置空间 Ω_x 各维方向都不存在数据相关性,而离散速度空间 Ω_v 各维方向则以归约形式体现了问题的相关性.根据变量依赖关系分析结果^[16],可得出结论:如果采用位置空间 Ω_x 分解策略,在利用气体运动论数值格式(5)计算分布函数 $f_{\sigma,s,\theta}$ 时,忽略边界处理,在子空间 Ω_x 并行计算,将存在大量的数据通信;而在计算宏观流动参数时,归约形式的相关性却能被消除,可以实现 Ω_x 空间无数数据通信完全并行.如果采用第2种离散速度 Ω_v 空间分解策略,在计算 $f_{\sigma,s,\theta}$ 阶段,忽略边界处理,在子空间 Ω_v 将出现无数数据通信的完全并行;而在计算宏观流动参数阶段,需要在子空间 Ω_v 内进行并行归约计算,会产生数据通信.所以,这

两种分解策略都是可行的.如果采用第 3 种 Ω_i 与 Ω_v 混合分解策略,在整个计算过程中,无论子空间 Ω_i 还是 Ω_v 中都有数据通信,所以,通常这种分解策略不可取.

通过对 Ω_i 和 Ω_v 的分解策略所需数据通信量分析比较^[16],可以看出:当 Ω_i 空间网格数很多,通常位置空间网格点数 $N_i \times N_j \times N_k$ 在 10^6 量级以上,而 Ω_v 空间离散速度坐标点数目不是很多的情况下,按 Ω_i 分解策略优于 Ω_v 分解策略;当 Ω_i 空间网格数不是足够多,或者离散速度坐标点数很多,并行归约求和运算会引起一定的负载不平衡,使处理器处于短暂闲置状态,但按 Ω_v 分解策略将大大优于 Ω_i 分解策略.在实际计算中,由于处理机资源限制,一般计算条件下,位置空间划分的网格数都不是很多,尤其是在计算高超声速绕流问题,速度分布函数所依赖的离散速度空间很大,要使离散速度坐标法的精度达到计算要求,需要覆盖相应离散速度范围的离散坐标点数目会变得相当大,这种情况就特别适合使用 Ω_v 分解策略.

三维流动问题气体运动论数值算法的计算量很大,需要使用六维数组存放离散速度坐标点和离散位置空间网格点处的速度分布函数,若每维数组的大小取值为 20,则该六维数组将有 64×10^6 个元素必须被计算、存储,属于典型的数据并行化计算,需要利用尽可能多的处理器进行并行计算,这就要求区域分解策略应该适应并行可扩展性需要,以便在条件允许时,能扩大计算规模.在理想情况下并行可扩展性是指求解空间规模和处理器同比增长前提下保持相同的并行效率;实际计算中,常常出现所研究的问题并不要求解空间规模一味地无限膨胀,仅需在满足求解精度前提下使求解空间规模最小,以便在节省处理器数的同时,也能达到较高的并行效率.所以,本文的并行可扩展性分析是在固定求解空间规模前提下,当处理器数增加时,既能得到较高的并行效率,又不会使主存空间溢出.

对于 Ω_i 分解策略,为了达到较高的并行效率,根据变量依赖关系分析, Ω_i 空间各维网格点数 N_i, N_j, N_k 与处理器阵列各维处理器 N_{pi}, N_{pj}, N_{pk} 之间的关系应满足^[11]

$$\frac{N_i}{N_{pi}} \geq 4\beta, \quad \frac{N_j}{N_{pj}} \geq 4\beta, \quad \frac{N_k}{N_{pk}} \geq 4\beta, \quad (6)$$

其中一般需要 $\beta \geq 5$.所以,如果 Ω_i 空间网格点数在 10^6 以下,使用的处理器数最多只能达到 125 个左右,并行可扩展性不高,并行计算规模受到较大的局限性.然而,对于 Ω_v 分解策略,由于仅仅出现归约求和的离散速度数值积分计算步,其运算量只占整个气体运动论算法运算量的 1/5 以下,所以,处理器数最多可达到离散速度坐标点数 $N_v \times N_\theta \times N_\phi$,完全可以实现大于 1 000 并行度的并行计算.

通过对变量依赖关系、数据通信并行可扩展性 3 个方面分析和综合比较,可以看出,当位置空间网格点数并非很大(如百万点以下),应采用离散速度空间 Ω_v 分解策略;只有当位置空间网格点数在千万点以上,使用位置空间 Ω_i 分解策略才合适.在当前数值模拟需求和并行机能力限制下,位置空间划分的网格数一般都在百万量级以下,尤其是计算高马赫数绕流问题,覆盖相应离散速度范围所需要的离散速度坐标点数目会相当大,特别适合使用 Ω_v 分解策略.由此确定本文气体运动论数值算法并行方案宜采用离散速度空间并行分解策略.气体运动论数值算法计算过程具有很好的数据并行特点,使用块(block)布局结构对离散速度空间 (σ, δ, θ) 中的三维进行并行分布,而其它维不分布.通过对气体运动论数值算法并行化改造,每个 CPU 承担的工作量及所需内存空间仅为串行程序的 $1/n$,使得串行条件下受计算机内存限制而无法求解的问题通过并行计算得以解决.计算实践表明,各处理机对自己所分配的计算任务具有相对独立的完整性,程序并行化程度较高,是一种粗粒度并行化计算方法.

3 并行计算与结果分析

3.1 HPF 并行算法测试

使用上述气体运动论数值算法并行方案,通过文[10]发展的 HPF 并行化程序设计方法,研究发展能有效模拟不同流域三维高马赫数绕流问题的气体运动论 HPF 并行算法.为了考验算法并行计算效率,赋予相同计算参数和计算空间规模,在离散速度空间 Ω_v 三个方向进行并行分布,分别在处理机数 $n = 64, 128, 256, 512, 1024$ CPU 上进行并行计算,图 1 直观显示了基于 64 个 CPU 计算得到的并行加速比随处理机数目的变化关系,图中实线为本文计算加速比,虚线所示为理想状态加速比,横坐标表示计算所用的并行处理机数.可以

看出,即使在大规模并行计算机系统中运行,本算法加速比随处理机数目的增加也基本上成拟线性分布,说明算法具有很好的并行加速性能和并行效率,这是基于 Boltzmann 速度分布函数方程的气体运动论并行算法不同于传统 CFD 并行计算的独到之处,说明算法程序在各 CPU 之间的通信效率、负载效率很高,且本文采用的并行计算策略是可行的,良好的并行加速性能足以保证在较高并行效率情况下,通过增加处理机数可以加大计算规模,使依靠传统计算条件难以解决的各流域三维复杂绕流问题计算求解变为现实成为可能,显示出发展大内存高速度并行计算机系统的重要性.为了将本文发展的气体运动论 HPF 并行算法的计算效率与来自文[19]国际同类研究进行比较,表 1 给出宾西尼亚大学在美国 AIAA 国家宇航局支持下,依靠 Connection Machine 大规模并行计算机系统,开展求解 BGK 模型方程不同马赫数下一维激波结构演化问题研究,基于不同位置空间网格划分,分别在 256, 512, 1 024 个并行处理机中进行计算的 CPU 开支情况;表 2 给出基于 256 个 CPU,本算法计算三维绕流问题所获得的并行加速比与宾西尼亚大学利用 BGK 方程计算一维激波结构问题的并行加速比比较情况.可以看出,本文三维绕流并行计算加速比与来自文[18]的一维 BGK 方程并行计算加速比相当,显示出本算法卓越的并行加速性能,不仅率先在国际上创建起求解各流域三维绕流问题的气体运动论 HPF 并行算法,而且所发展的并行算法具有很好的并行可扩展性与并行效率.

3.2 三维复杂绕流并行计算

通过对所发展 HPF 并行算法的测试,本文借助在我国超级并行计算机系统试算机会,开展了不同 Knudsen 数、不同马赫数圆球绕流和“神舟”返回舱外形体高马赫数复杂绕流并行计算研究.

作为气体运动论并行算法对过渡流区高马赫数流动问题研究的算例,取文[20]的圆球绕流状态: $Kn_{\infty} = 0.05$, $M_{\infty} = 6.3$, $Pr = 0.72$, $T_w/T_0 = 1$, $\gamma = 1.4$, 对应的飞行高度 $H = 84.31$ km, 来流雷诺数 $Re_{\infty} = 191.87$. 在有限的并行计算机资源下,利用较为粗略的位置空间网格 $21 \times 13 \times 15$ 和速度空间网格 $66 \times 48 \times 48$, 使用具有 51.94MB/CPU 的 128 个处理机进行 HPF 并行计算.图 2

给出圆球绕流轴对称面内的压力、马赫数等值线计算结果,可看出上述高超声速近连续过渡流,出现较厚的弓形激波、驻点和背风区等流动结构,直观显示了近连续过渡流区绕流面貌.为了揭示因物体扰动引起气体分子碰撞频率随流场不同位置的变化情况,图 3 给出式(4)定义的气体分子碰撞频率 ν 等值线计算结果.由于反映气体分子间相互碰撞频繁程度的碰撞频率直接正比于气体分子的数密度,它还将气体的温度、分子作用模型、划分各流域的流态控制参数 Kn 联系起来.在绕流物体前面的脱体激波层中,由于宏观气体密度、温度突跃变化,导致 ν 也剧烈变化,产生强扰动激波突跃现象.绕流圆球的气体密度降低,圆球背风区后端点附近出现“真空区”,单位体积的气体中所含分子数变得越来越少,表现为 ν 值也不断减小.图 3 说明即使对同

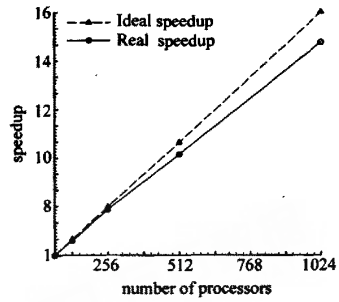


图 1 基于 64 个 CPU 的并行加速比随处理机数变化关系

Fig. 1 Speedup ratio at 64 processors with gas-kinetic HPF parallel algorithm

表 1 宾西尼亚大学基于 BGK 方程在 256, 512, 1 024 并行处理机开展并行计算情况

Table 1 Parallel performance at 256, 512, 1 024 processors with BGK code

Spatial Nodes	Number of Processor Nodes	Machine Type	CPU time/s	GFlops
64K	1 024	CM-2	366	2.9
32K	1 024	CM-2	185	2.9
16K	1 024	CM-2	103	2.6
16K	1 024	CM-2	146	1.8*
8K	1 024	CM-2	64	2.1
32K	512	CM-2	346	1.5
16K	512	CM-2	182	1.5
8K	512	CM-2	101	1.3
16K	256	CM-2	341	0.78
8K	256	CM-2	181	0.74
16K	256	CM-200	320	0.85

* Double precision (64-bit), all other results 32-bit.

表 2 基于 256, 512, 1 024 个 CPU 并行计算加速比比较

Table 2 Speedup ratio at 256, 512, 1 024 processors

并行处理机数	宾西尼亚大学一维计算加速比	统一算法三维计算加速比	理想加速比
256	1	1	1
512	1.87	1.89	2
1 024	3.31	3.30	4

一高度、同一马赫数的绕流状态,在绕流物体的不同部位,气体分子的碰撞频率也是完全不一样的,只有在远前方的均匀来流中 ν 才相同,只要气流受到扰动,就会导致气体分子间碰撞频率发生变化.同时看出,即使上述圆球绕流计算所用的物理空间网格划分相当粗糙,但计算得到的阻力系数 $C_{D,cal} = 1.2887$,与文[20]的实验数据 $C_{D,exp} = 1.2637$ 偏差仅为 2%,显示出本算法具有很强的稳定收敛性.

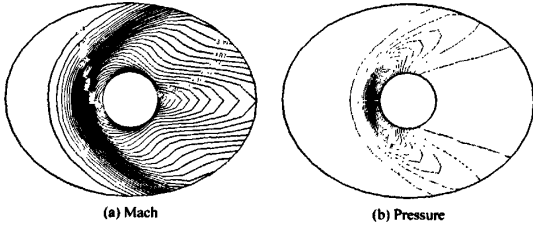


图 2 过渡流区圆球绕流 ($Kn_\infty = 0.05$, $M_\infty = 6.3$) 压力、马赫数等值线

Fig.2 Pressure and Mach number contours of flows around a sphere at $Kn_\infty = 0.05$, $M_\infty = 6.3$

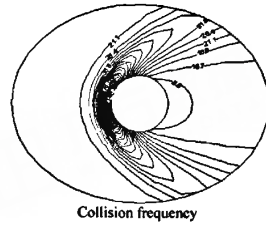


图 3 圆球绕流 ($Kn_\infty = 0.05$, $M_\infty = 6.3$) 气体分子碰撞频率等值线

Fig. 3 Collision frequency of flows around a sphere at $Kn_\infty = 0.05$, $M_\infty = 6.3$

为了检验气体运动论并行算法对近连续滑移流区高超声速绕流问题的研究能力,取文[21]的圆球高马赫数绕流状态: $Kn_\infty = 0.0119$, $M_\infty = 13$, $Pr = 0.72$, $\gamma = 1.4$,对应的飞行高度 $H = 65.44$ km,来流雷诺数 $Re_\infty = 1\ 649.69$,利用位置空间网格 $31 \times 17 \times 21$ 和速度空间网格 $75 \times 65 \times 65$,使用具有 248.5MB/CPU 的 512 个处理机进行并行计算.图 4 给出了该圆球绕流轴对称面内压力、马赫数等值线计算结果,可看出上述高超声速近连续绕流,在物体前面出现相当清楚明晰的脱体弓形激波和驻点域.上述圆球绕流计算得到的阻力系数 $C_{D,cal} = 1.1934$,与文[21]的实验数据 $C_{D,exp} = 1.1227$ 相对偏差为 5.9%.为了比较高稀薄流场结构的变化,图 5 给出了圆球绕流 $Kn_\infty = 0.1$, $M_\infty = 8.68$, $Re_\infty = 131.11$ 轴对称面内的压力、马赫数等值线计算结果,可以看出,对于高稀薄流,只是在物体前面出现厚厚的强扰动,气体绕流基本上是附着物面流动,因物体存在,气流受扰动的区域相当大,这与图 4 形成鲜明的对比,反映出高稀薄流区与近连续流区流动特征的本质差别;同时比较图 2 具有相对较低马赫数和中等克努森数的过渡区高超声速圆球绕流 ($Kn_\infty = 0.05$, $M_\infty = 6.3$) 压力、马赫数等值线,显示出随着克努森数由大 ($Kn_\infty = 0.1$) 变小 ($Kn_\infty = 0.05, 0.0119$),气体流动逐渐由高稀薄流变为近连续流,气体分子变得越来越稠密,气流在物体前面受到的扰动逐渐增强,以致对较小克努森数 ($Kn_\infty = 0.0119$) 的近连续介质绕流,产生强烈的脱体激波;另一方面随着来流马赫数由小 ($M_\infty = 6.3$) 变大 ($M_\infty = 13$),气流因物体存在,在物体前面产生的流动扰动区减小,脱体激波角变小,强扰动弓形激波进一步逼近物面.图 2~5 直观揭示了不同流区的高超声速圆球绕流面貌,其中图 5 的高稀薄圆球绕流,气流受扰动的区域最大,几乎整个流场均存在扰动;图 2 的过渡区圆球绕流,出现厚厚的强扰动区;图 4 的近连续圆球绕流,气流受扰动的区域最小,产生清晰的弓形激波罩在绕流物体前面.

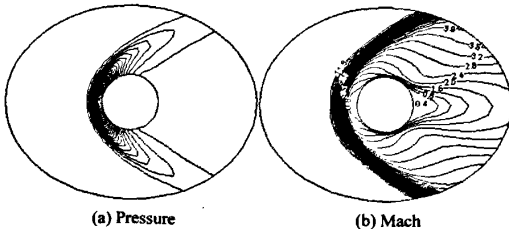


图 4 近连续流区圆球绕流 ($Kn_\infty = 0.0119$, $M_\infty = 13$) 压力、马赫数等值线

Fig.4 Pressure and Mach number contours of flows around a sphere at $Kn_\infty = 0.0119$, $M_\infty = 13$ in near-continuum flow regime

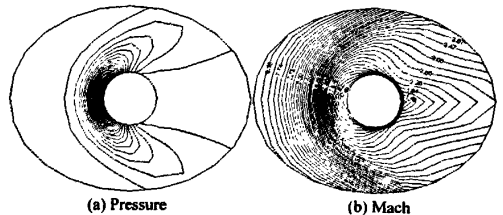


图 5 高稀薄流区圆球绕流 ($Kn_\infty = 0.1$, $M_\infty = 8.68$) 压力、马赫数等值线

Fig.5 Pressure and Mach number contours of flows around a sphere at $Kn_\infty = 0.1$, $M_\infty = 8.68$ in high rarefied flow regime

为了揭示不同流区高超声速绕流流动局部结构,分析其流动规律和现象,图 6(a),(b)分别给出了高稀薄流区高超声速圆球绕流($Kn_{\infty} = 1.6532, M_{\infty} = 8.65$)轴对称面马赫数等值线与矢量流线.图 7(a)将近连续流区高超声速圆球绕流($Kn_{\infty} = 0.0119, M_{\infty} = 13$)轴对称面马赫数等值线与矢量流线绘在一起,以便显示流场等值线与矢量流线的关系,其中不带箭头的实线表示马赫数等值线,而箭头线代表矢量流线.从图中看出,对于 $Kn_{\infty} = 1.6532$ 的高稀薄流,气体绕流完全是附着物面流动.而对于 $Kn_{\infty} = 0.0119, M_{\infty} = 13$ 的近连续高超声速绕流,来流在跨越脱体激波后,流向发生偏折;通过波后矢量流线结构反映出,在迎风对称线驻点附近,流动出现鞍点、在物面驻点出现半结点拓扑结构,远离驻点跨过球面最高点,流动发生膨胀,稍后流动开始脱离物面,出现明显的回流旋涡结构;为了清楚刻划物面绕流及旋涡流动拓扑结构,图 7(b)给出了上述圆球绕流的流线结构放大图,从图中清晰可见,在圆球绕流前驻点附近流场出现鞍点、半结点、背风区上下球面分离点及后驻点出现半鞍点,在回流区上下旋涡结构中出现结点,并且在圆球绕流下游上下流动汇合处再次出现鞍点,奇点总数满足高超声速绕流拓扑规律,如此流动特征恰恰体现了近连续高超声速绕流现象.为了比较近连续过渡流区超声速绕流与上述高超声速气体流动存在的本质区别,图 8 给出在 $M_{\infty} = 3, Pr = 2/3, T_{\infty}/T_0 = 1, \chi = 0.75$ 条件下,两种圆球绕流 $Kn = 0.01, Kn = 0.0001$,使用具有 60.75MB/CPU 分布内存的 64 个并行处理机资源进行 HPF 并行计算的结果,从得到的流场轴对称面内马赫数等值线与矢量流线绕流结构,可看出同样是近连续流区,超声速圆球绕流流动特征与相应的高超声速圆球绕流($Kn_{\infty} = 0.0119, M_{\infty} = 13$)存在明显差别,超声速绕流在圆球后部流场存在强烈的再压缩激波扰动区,而高超声速圆球绕流在跨越物体顶部呈现超声速膨胀,在大部分背风尾迹区仍然呈现超声速流动状态,毫无流动再压缩现象;对于超声速绕流,在物体前部驻点区并不象高超声速绕流存在鞍点、半结点拓扑结构,而是仅在驻点处出现半鞍点流动结构.图 6~8 直观揭示不同流区高超声速与常规超声速绕流流动结构的不同.

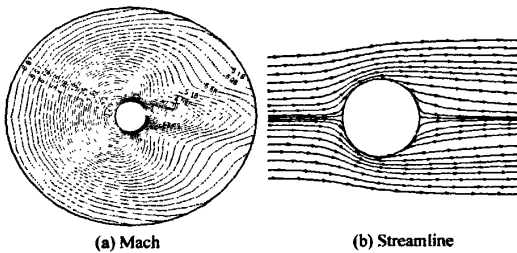


图 6 高稀薄流区高超声速圆球绕流流动结构 ($Kn_{\infty} = 1.6532, M_{\infty} = 8.65$)

Fig. 6 Hypersonic flows around a sphere at

$Kn_{\infty} = 1.6532, M_{\infty} = 8.65$ in high rarefied flow regime

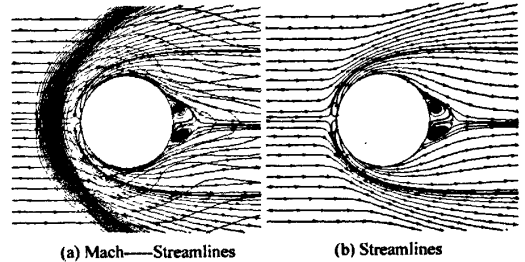


图 7 近连续流区高超声速圆球绕流流动结构 ($Kn_{\infty} = 0.0119, M_{\infty} = 13$)

Fig. 7 Hypersonic flows around sphere at $Kn_{\infty} = 0.0119, M_{\infty} = 13$ in near-continuum flow regime

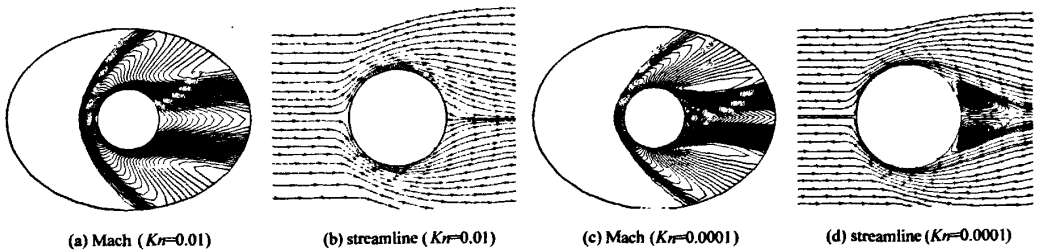


图 8 超声速近连续流区圆球绕流流动结构 ($Kn_{\infty} = 0.01, 0.0001, M_{\infty} = 3$)

Fig. 8 Supersonic flows around a sphere at $Kn_{\infty} = 0.01, 0.0001, M_{\infty} = 3$ in near continuum flow regime

作为复杂外形绕流算例,本文试算了返回舱外形在不同 Knudsen 数、不同马赫数与不同攻角下高马赫数绕流问题.图 9 给出 $Kn_{\infty} = 0.01, M_{\infty} = 5, T_{\infty}/T_0 = 0.25, Pr = 0.72, \alpha = 15^\circ$ 的返回舱绕流轴对称面内马赫数、压力、温度与速度等值线计算结果,显示出明晰的弓形激波、驻点域、背风真空区等近连续绕流面貌.为了

研究“神舟”返回舱外形在稀薄过渡流区的配平攻角,对返回舱绕流状态 $Kn_{\infty} = 0.0063$, $M_{\infty} = 15.587$, 对应飞行高度 $H = 88.34 \text{ km}$, $T_{\infty}/T_0 = 0.5435$, 使用具有 253.12MB/CPU 分布内存的 1024 个并行处理机, 进行计算. 图 10 给出返回舱绕重心的俯仰力矩系数随飞行攻角 α 的变化关系. 图中“O”表示本文计算得到的俯仰力矩系数, “ Δ ”表示文[22]低密度风洞实验数据. 显示出本文计算得到的“神舟”返回舱在高度 $H = 88.34 \text{ km}$ 时, 飞行绕流配平攻角为 $\alpha_{r, \text{cal}} = 25.06^\circ$, 与低密度风洞实验测得的配平攻角 $\alpha_{r, \text{exp}} = 25.39^\circ$ 相一致. 为了剖析复杂高超声速绕流流动结构, 图 11(a) 将来流攻角 $\alpha = 26^\circ$ 的返回舱绕流轴对称面内的马赫数等值线与矢量流线绘在一起, 图 11(b) 展示上述攻角的返回舱绕流流线结构放大图. 可以看出, 对此近连续流区返回舱高超声速绕流, 在返回舱前面出现厚厚的脱体激波层, 跨越脱体激波, 流向发生偏折, 并在脱体激波与物面之间的区域出现鞍点、物面驻点处出现半结点流动拓扑结构, 在背风区后 endpoint 出现半鞍点, 绕流物面出现严重的速度滑移, 该图直观展示了复杂外形体高超声速绕流现象和流动拓扑规律.

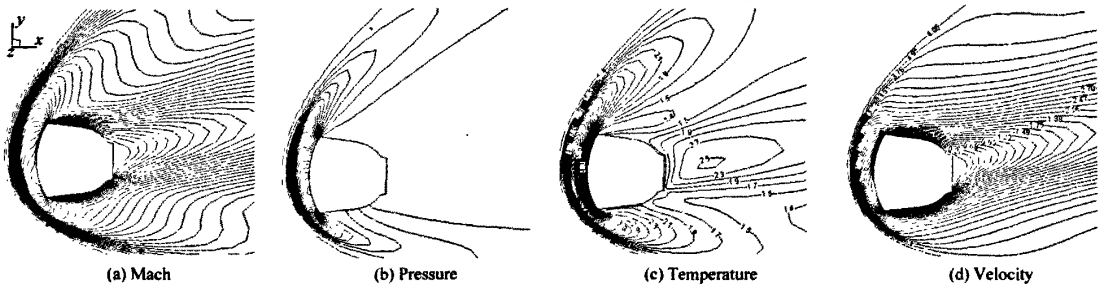


图 9 近连续流区返回舱外形体绕流马赫数、压力、温度、速度等值线结构 ($Kn_{\infty} = 0.01$, $M_{\infty} = 5$, $\alpha = 15^\circ$)

Fig.9 Mach, pressure, temperature, velocity contours around a spacecraft at $Kn_{\infty} = 0.01$, $M_{\infty} = 5$, $\alpha = 15^\circ$ in near-continuum flow regime

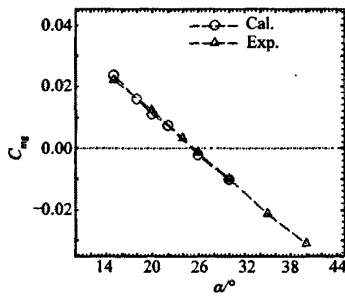


图 10 返回舱高超声速绕流 ($Kn_{\infty} = 0.0063$, $M_{\infty} = 15.587$) 俯仰力矩系数随攻角 α 的变化关系
Fig.10 Pitching moment coefficient vs α for hypersonic flows around a spacecraft at $Kn_{\infty} = 0.0063$, $M_{\infty} = 15.587$

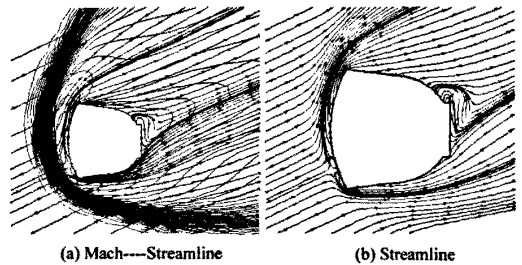


图 11 近连续流区返回舱高超声速绕流流动结构 ($Kn_{\infty} = 0.0063$, $M_{\infty} = 15.587$, $\alpha = 26^\circ$)

Fig.11 Hypersonic flows around a spacecraft at $Kn_{\infty} = 0.0063$, $M_{\infty} = 15.587$, $\alpha = 26^\circ$ in near-continuum flow regime

4 结束语

本文依靠大规模并行计算机系统, 发展气体运动论离散速度坐标法, 将计算流体力学有限差分方法推广拓展到基于时间、位置空间和速度空间的 Boltzmann 模型方程数值求解, 发展直接求解分子速度分布函数的气体运动论耦合迭代数值格式; 通过对气体运动论数值计算方法内在并行性以及算法变量依赖关系、数据通信与并行可扩展性分析, 引入区域分解并行化方法, 研究建立气体运动论数值算法并行方案, 发展从稀薄流到连续流的气体运动论并行算法计算程序. 通过对跨流域不同 Knudsen 数、不同马赫数、不同攻角三维球体及返回舱绕流问题 HPF 并行计算研究, 计算结果与有关实验数据、相关理论分析等吻合较好, 揭示了稀薄流到连续流不同流区、高低不同马赫数复杂绕流现象、规律. 研究表明, 所发展的并行算法不仅负载平衡好, 基

本达到了线性加速的并行效果,而且并行化代价较低,具有良好的并行可扩展性,显示出本文发展的气体运动论数值算法具有相当独特的并行优越性。

由于开展直接求解分子速度分布函数的气体运动论数值计算方法,需要依赖位置空间与速度空间组成的六维相空间,这将占用大量计算机内存.为此,发展三维复杂外形体跨越飞行各流域高超声速绕流问题统一算法,必须依靠现代大规模并行计算机系统.本文曾经短暂使用过的最大并行计算机资源为具有 253.12MB/CPU 分布内存的 1 024 个并行处理机,其总计算内存为 259.2GB.几年来的实践已经证实,基于介观 Boltzmann 模型方程发展起来的各流域飞行器绕流问题统一算法特别适合大规模并行计算.本文研究正是在获得有关并行计算机资源条件下,得以尝试开展从稀薄流到连续流三维气体流动问题统一算法.为了能将该统一算法推广应用于复杂飞行器跨越飞行各流域高超声速绕流问题,特别需要大规模并行计算机.本文后续发展需要海量的大规模并行计算机内存资源,可以说只有当国家高性能计算环境得到解决,加之算法本身进一步研究发展,才有望解决航空航天依靠传统流体力学方法难以解决的各流域复杂空气动力学问题.这说明国家高性能并行计算环境对航空航天流体力学方法研究与应用发展具有重要的推动作用,将使我们开展的大规模并行计算立竿见影,显示其重大的科学意义和实际应用价值.

本文仅是这方面研究的开始和初步应用,将本算法用于复杂飞行器高超声速绕流以及对方法本身的改进与发展,还有相当多的工作要做。

致谢 本文第一作者曾和陆林生研究员、漆锋斌研究员、Macrossan 教授等交流讨论;部分并行计算在国家气象中心“神威”计算机系统、总参三部北方计算中心“神州”计算机系统完成.特此致谢。

[参 考 文 献]

- [1] Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. London: Oxford Univ. Press, 1994.
- [2] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model collision processes in gases: I. small amplitude processes is charged and neutral one-component system [J]. Phys Rev, 1954, 94: 511 - 525.
- [3] Abe T, Oguchi H. A hierarchy kinetic model and its applications[C]// Potter J I, ed. Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, New York, 1977, 51: 781 - 793.
- [4] Shakhov E M. Kinetic model equations and numerical results[C]// Oguchi H, ed. Proceedings of 14th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Tokyo: University of Tokyo Press, 1984: 137 - 148.
- [5] Yang J Y, Huang J C. Rarefied flow computations using nonlinear model Boltzmann equations[J]. Journal of Comput Phys, 1995, 120: 323 - 339.
- [6] Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic algorithm for flows from rarefied transition to continuum[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2000, 18(3): 251 - 259.
- [7] Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic algorithm for flows from rarefied transition to continuum using Boltzmann model equation[J]. Acta Mechanica Sinica, 2002, 34(2): 145 - 155.
- [8] Li Z H, Zhang H X. Numerical investigation from rarefied flow to continuum by solving the Boltzmann model equation[J]. International Journal of Numerical Methods in Fluids, 2003, 42: 361 - 382.
- [9] Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum[J]. Journal of Computational Physics, 2004, 193: 708 - 738.
- [10] Li Z H, Zhang H X, Fu S. Gas kinetic HPF parallel algorithm using Boltzmann model equation[J]. Chinese J Comput Phys, 2003, 20(1): 1 - 8.
- [11] Lu L S, Dong C Q, Li Z H. Research on parallelization of multiphase space numerical simulation[J]. Chinese Journal of Computer Science, 2003, 30(3): 129 - 137.
- [12] Li Z H. Study on the unified algorithm from rarefied flow to continuum [Ph. D. thesis] [D]. China Aerodynamics Research and Development Center, 2001.
- [13] Shen C. Rarefied gas dynamics[M]. Berlin: Springer-Verlag Press, 2005.
- [14] Shizgal B. A Gaussian quadrature procedure for use in the solution of the Boltzmann equation and related problems[J]. J Comput Phys, 1981, 41: 309 - 328.

- [15] Li Z H, Xie Y R. Technique of molecular indexing applied to the direct simulation Monte Carlo method[C]//Shen C, ed. Proc of 20th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Beijing: Peking Univ Press, 1996: 205 - 209.
- [16] Li Z H. Applications of gas kinetic unified algorithm to flows from rarefied to continuum [post-doc. dissertation] [D]. Beijing: Tsinghua University, 2003.
- [17] Yang Z C, Wu W F, Li Y K. An improvement on the discrete ordinate method in simulating radiative heat-transfer[J]. Chinese J Comput Phys, 2005, 22(3): 277 - 282.
- [18] Wolfe M, Banerjee U. Data dependence and its application to parallel processing[J]. International Journal of Parallel Programming, 1987, 16(2).
- [19] Long L N, Kamon M, Myczkowski J. A massively parallel algorithm to solve the Boltzmann (BGK) equation[R]. 30th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, AIAA 92 - 0563, Reno, NV, 1992.
- [20] Vogenitz F W, Bird G A, Broadwell J E, Rungaldier H. Theoretical and experimental study of rarefied supersonic flows about several simple shapes[J]. AIAA J, 1968, 6(12): 2388 - 2394.
- [21] Koppenwallner G, Legge H. Drag of bodies in rarefied hypersonic flow[R]. Progress in Astronautics and Aeronautics: Thermophysical Aspects of Reentry Flows, New York, AIAA Paper 85-0998, 1985, 103: 44 - 59.
- [22] Dai J W, Yang Y G, Li X G. Investigation of rarefied gas aerodynamics of spacecraft shape in low density wind tunnel [R]. Tech Rep No. S423.15, Hypersonic Aerodynamics Institute, China Aerodynamics Research and Development Center, 2003.

Massive Parallelization of Gas-kinetic Algorithm for Boltzmann Model Equation

LI Zhihui^{1,2}, ZHANG Hanxin^{1,2}

(1. National Laboratory for Computational Fluid Dynamics, Beijing 100083, China;

2. China Aerodynamics Research and Development Center, HAI, Mianyang 621000, China)

Abstract: In a numerical study of Boltzmann model equation, a gas-kinetic finite difference scheme with coupling and iteration is constructed to solve molecular velocity distribution function directly. The parallel strategy is established by using parallel technique of domain decomposition based on variable dependency relation, data communication and parallel expansibility. Gas-kinetic HPF (High Performance Fortran) parallel algorithm is developed to solve three-dimensional problems in various flow regimes. Hypersonic gas flows around a sphere and a spacecraft at various Knudsen numbers, Mach numbers and flying angles are computed at a high performance computer with massive scale HPF parallel. The computational results are in good agreement with experimental and theoretical ones. It is shown that the parallel speed-up increases approximately linearly with the numbers of processors. It indicates high parallel efficiency and expansibility with good load balance and data communication. It suggests that a gas-kinetic parallel algorithm on large scale can be used for three-dimensional complex hypersonic flow problems in various flow regimes.

Key words: Boltzmann-model equation; velocity distribution function; discrete velocity ordinate method; finite difference scheme; parallel computing