

# 基于非结构化网格的高可扩展并行有限体积格子 Boltzmann 方法

徐 磊<sup>1</sup> 陈荣亮<sup>1</sup> 蔡小川<sup>2</sup>

(中国科学院深圳先进技术研究院 广东 深圳 518055)<sup>1</sup>

(美国科罗拉多大学博尔德分校计算机系 博尔德 80309)<sup>2</sup>

**摘 要** 均匀网格格子 Boltzmann 方法虽然有其优势,但是在模拟大规模流场信息以及复杂几何边界时仍然存在困难。为此,文中给出了非结构化网格下的有限体积格子 Boltzmann 方法。该方法采用 cell-centered 方案,使用 low-diffusion Roe 方案计算对流通量密度,通过最小二乘方法计算粒子分布函数的梯度。为了能够模拟大规模复杂流场情况,文中给出了非结构化网格有限体积格子 Boltzmann 方法的并行方法。该法通过 ParMETIS 划分流场的非结构化网格,将网格近似平均地发送给 MPI 进程,比较了两种不同规模的网格单元的并行性能。文中通过以下两点验证了并行算法的正确性:1)顶盖方腔驱动流, $Re=400,1000,3200,5000$ ;2)圆柱绕流, $Re=10,20,40$ 。并行数值实验的结果表明所提并行算法在 1920 核上仍然拥有良好的可扩展性,在 1920 个核上的并行效率可以达到在 240 核上效率的 78.42%。

**关键词** 有限体积格子 Boltzmann 方法,非结构化网格,并行计算,ParMETIS

中图分类号 TP391 文献标识码 A DOI 10.11896/j.issn.1002-137X.2019.08.013

## Scalable Parallel Finite Volume Lattice Boltzmann Method Based on Unstructured Grid

XU Lei<sup>1</sup> CHEN Rong-liang<sup>1</sup> CAI Xiao-chuan<sup>2</sup>

(Shenzhen Institutes of Advanced Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenzhen, Guangdong 518055, China)<sup>1</sup>

(Department of Computer Science, University of Colorado Boulder, Boulder 80309, USA)<sup>2</sup>

**Abstract** Although the lattice Boltzmann method (LBM) has become an effective and promising approach in computational fluid dynamics (CFD), it is still difficult to simulate large-scale flow field with complex geometric boundaries. In this paper, the finite volume lattice Boltzmann method with cell-centered scheme on unstructured grids was given. The convective fluxes are evaluated by low-diffusion Roe scheme, and the gradients of the particle distribution function are computed with Green-Gauss approach. In order to simulate large-scale complex flow field, a parallel algorithm for the finite volume lattice Boltzmann method on unstructured grids was presented. In this method, ParMETIS is applied to partition the unstructured mesh, and then the partitioned meshes are sent to the MPI processes. The parallel performance of two kinds of meshes are compared. The correctness of the parallel algorithm was verified by two benchmark flows: 1) the lid-driven flow with  $Re=400,1000,3200,5000$ ; 2) the steady viscous flow past a circular cylinder with  $Re=10,20,40$ . The results of parallel numerical experiments show that the parallel algorithm still has good scalability on 1920 cores, which achieves 78.42% efficiency on 1920 cores compared with 240 cores.

**Keywords** Finite volume lattice Boltzmann method, Unstructured grid, Parallel computing, ParMETIS

## 1 引言

格子 Boltzmann 方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)诞生至今已有 30 年,其已经能够解决部分工程应用中的实际问题,并成为相关领域研究的一个热点。LBM 是介于流体的微观分子动力学模型和宏观连续模型之间的介观模型,在多

孔介质、晶体生长以及磁流体等诸多领域都有成功的应用。Chen 等<sup>[1]</sup>和 Qian 等<sup>[2]</sup>首先分别提出了单松弛时间格子 Boltzmann 模型(Single-Relaxation-Time LBM, SRT-LBM)和格子 BGK 模型(Lattice Bhatnagar-Gross-Krook, LBGK)。它们都采用单一松弛时间系数,计算效率高。但是当无量纲松弛时间非常趋近 0.5 时,该模型会产生数值不稳定从而导致发

到稿日期:2018-09-21 返修日期:2018-12-15 本文受国家重点研发计划高性能计算重点专项(2016YFB0200601),深圳市 E 级工程与科学计算重点实验室(ZDSYS201703031711426),深圳市基础研究项目(JCYJ20160331193229720, JCYJ20170307165328836),国家自然科学基金(61531166003)资助。

徐 磊(1987—),男,博士,助理研究员,CCF 会员,主要研究方向为并行计算;陈荣亮(1984—),男,博士,副研究员,主要研究方向为并行计算和计算流体力学, E-mail: rl.chen@siat.ac.cn(通信作者);蔡小川(1962—),男,博士,教授,主要研究方向为计算数学、并行计算和计算流体力学。

散的情况。D'Humières<sup>[3]</sup>提出了广义格子 Boltzmann 模型 (Generalized Lattice Boltzmann Equation, GLBE), 该模型又被称为多松弛格子 Boltzmann 模型 (Multiple-Relaxation-Time LBM, MRT-LBM)。该模型的稳定性和精确性都优于 SRT-LBM<sup>[4]</sup>。因此本文采用了 MRT 模型。

由于在均匀笛卡尔网格下, 格子 Boltzmann 方法难以处理具有复杂几何图形或者局部梯度大的流体计算, 因此许多研究者进行了非结构化网格下的格子 Boltzmann 方法研究。与其他方向相比, 非结构化网格能更好地处理复杂边界上流场的流动。Patil 等<sup>[5]</sup>通过 cell-centered 有限体积方法离散格子 Boltzmann 方程, 详细分析了 Chapman-Enskog 展开恢复 Navier-Stokes 方程组的过程<sup>[6]</sup>。Misztal 等<sup>[7]</sup>分析了前向 Euler 和 operator splitting 两种有限体积 LBM 方法在非结构化网格上的实现, 并且通过 Chapman-Enskog 展开恢复了宏观方程; 此外, 他们还给出了一个改进的边界反弹格式处理边界条件。Li 等<sup>[8]</sup>提出了基于 MRT 碰撞模型并且适用于任何网格的有限体积 LBM 方法; 接着他们提出了一种全隐格式的有限体积 LBM 方法, 每次在求解线性方程组时都使用了块下上三角矩阵对称高斯赛德尔 (lower-upper symmetric-Gauss-Seidel) 算法<sup>[9]</sup>。Chen 等<sup>[10]</sup>提出了一种新的边界条件处理方法, 该方法通过相邻格子点间的距离关系近似得到非平衡态 PDFs。

为了模拟大规模流场并尽快得到模拟结果, 已经有许多关于均匀网格下格子 Boltzmann 方法的同构和异构环境的并行算法<sup>[11-12]</sup>。但是, 基于非结构化网格的有限体积格子 Boltzmann 方法的大规模并行算法还未有研究。本文详细讨论了非结构化网格下有限体积格子 Boltzmann 方法的并行策略和性能。

本文第 1 节主要介绍有限体积格子 Boltzmann 方法及边界条件的处理方法; 第 2 节主要介绍 LBM 的并行策略; 第 3 节对并行数值方法进行验证; 第 4 节给出算法的可扩展性和并行效率; 最后总结全文。

## 2 有限体积格子 Boltzmann 方法

在本工作中, 我们选择了 Cell-Centered (CC) 方案进行控制方程的离散。在 CC 方案中, 粒子分布函数 (Particle Distribution Functions, PDFs) 和宏观量与单元质心相关, 控制容积即为每个单元自身。

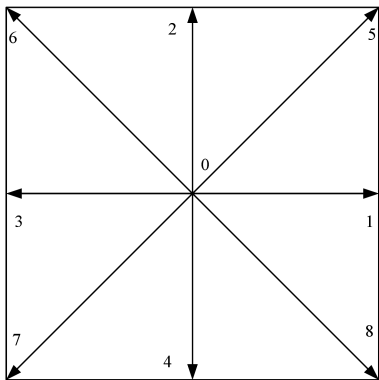


图 1 D2Q9 格子模型

Fig. 1 D2Q9 lattice model

速度离散的 Boltzmann 方程可以由式(1)表示:

$$\partial_t f_a(x, t) + \mathbf{e}_a \cdot \nabla f_a(x, t) = \Omega_a \quad (1)$$

其中,  $f_a$  为 PDFs,  $\mathbf{e}_a$  为格子第  $a$  个方向的离散速度 ( $a=0, 1, \dots, 8$ ),  $\mathbf{e}$  的具体取值如式(2)所示。本文采用 D2Q9 格子模型 (见图 1)。

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$\Omega = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [\mathbf{m}(x, t) - \mathbf{M}^{eq}(x, t)]$  为碰撞项。其中,  $\mathbf{M}$  为变换矩阵, 通过  $\mathbf{m}(x, t) = \mathbf{M} \mathbf{f}(x, t)$  将速度空间的粒子分布函数  $f(x, t)$  变换为矩空间的粒子分布函数  $\mathbf{m}(x, t)$ 。 $\mathbf{m}^{eq}(x, t)$  是矩空间的平衡态分布函数,  $\mathbf{S}$  是松弛对角阵且对角线满足  $0 \leq S_a \leq 1.0$ 。矩空间的平衡态分布函数为:

$$\mathbf{m}^{eq} = \rho (1, -2 + 3u^2, \alpha + \beta u^2, u_x, -u_x, u_y, -u_y, u_x^2 - u_y^2, u_x u_y) \quad (3)$$

其中,  $\alpha$  和  $\beta$  为自由参数,  $\rho$  为密度,  $\mathbf{u}$  为速度, 松弛矩阵为  $\mathbf{diag}(0, s_e, s_e, 0, s_q, 0, s_q, s_v, s_v)$ 。剪切粘性和体粘性系数分别为:

$$\nu = c_s^2 \left( \frac{1}{s_v} - \frac{1}{2} \right) \delta_i, \quad \xi = c_s^2 \left( \frac{1}{s_e} - \frac{1}{2} \right) \delta_i \quad (4)$$

宏观量为:

$$\rho = \sum f_i, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum f_i \mathbf{e}_i \quad (5)$$

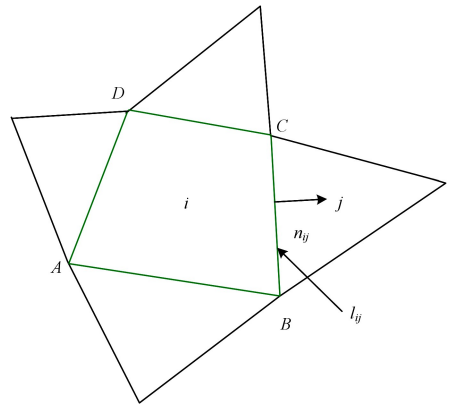


图 2 Cell-Centered 方案

Fig. 2 Cell-Centered Scheme

如图 2 所示, 单元  $i$  和单元  $j$  共同拥有边  $ij$ , 边的长度为  $l_{ij}$ , 其外法向为  $\mathbf{n}_{ij}$ 。记单元  $i$  的 CV 为  $V_i$ , 它的边界为  $\partial V_i$ 。

对式(1)在  $V_i$  上积分, 并使用高斯定理将对流项中的积分转换为面积分可得:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_i} f_a(x, t) dV + \oint_{\partial V_i} (\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{n}) f_a(x, t) ds = \int_{V_i} \Omega_a dV \quad (6)$$

其中,  $s \in \partial V_i$ 。  $\mathbf{n}$  为单位外法向。记单元  $i$  质心处的粒子分布函数定义为单元内的平均值。

$$f_{ai}(t) = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} f_a(x, t) dV \quad (7)$$

$$\text{式(6)的半离散形式可以写成: } \frac{d}{dt} f_{ai}(t) = A_{ai} + C_{ai} \quad (8)$$

其中:

$$C_{ai} = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \Omega_a dV \quad (9)$$

$$A_{ai} = \frac{1}{V_i} \oint_{\partial V_i} F(f_a) ds \quad (10)$$

其中,  $C_{ai}$  和  $A_{ai}$  分别代表粒子的碰撞和对流项。  $F(f_a) = (\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{n})f_a$  为  $f_a$  通过交界面处的通量密度。因为格子点的  $f_a$  及其对应的  $m_a^{eq}$  假定在单元内取平均值。式(10)可以写成:

$$C_{ai} = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \boldsymbol{\Omega}_a dV = \boldsymbol{\Omega}_{ai} \quad (11)$$

根据 CV 边界  $\partial V_i$  所包含的边可以将式(10)离散为:

$$A_{ai} = -\frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{N_s} F(f_{aij}) l_{ij} \quad (12)$$

其中,  $f_{aij}$  是边  $ij$  中心处的粒子分布函数,  $N_s$  为单元  $i$  边的个数。在本工作中, 我们采用 low-diffusion Roe 方案近似  $F(f_{aij})$ 。

$$F(f_{aij}) = \frac{1}{2} [F(f_a^R) + F(f_a^L) - U | \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{n}_{ij} |_{\max} (f_a^R - f_a^L)] \quad (13)$$

其中,  $U = \max[\min(k \| \mathbf{u} \|, 1.0), \frac{v}{\Delta x}, \epsilon]$ 。从式(13)右端可以看出, 边  $ij$  中心处的粒子分布函数需要重构。  $f_{\infty}^L$  和  $f_{\infty}^R$  由式(14)得到:

$$\begin{cases} f_{\infty}^L = f_{\infty_i} + \Psi_{ai} (\nabla f_{\infty_i} \cdot \mathbf{r}_L) \\ f_{\infty}^R = f_{\infty_j} + \Psi_{aj} (\nabla f_{\infty_j} \cdot \mathbf{r}_R) \end{cases} \quad (14)$$

其中,  $f_{\infty_i}$  为  $f_{\infty}$  在单元  $i$  质心处的梯度,  $\Psi_{ai}$  为限制器。向量  $\mathbf{r}_L$  和  $\mathbf{r}_R$  从单元的质心指向边的中心。梯度可以通过最小二乘法 (Least-squares approach) 得到。本工作所采用的限制器为 Superbee 限制器<sup>[13-14]</sup>。

$$\Psi_{ai} = \max(0, 4\min(r, 1-r)) \quad (15)$$

其中,  $r = \frac{f_{aj} - f_{ai}}{2(\nabla f_{ai}, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)}$ 。

在式(8)中, 我们采用前向欧拉差分可以得到:

$$f_a^{n+1} = f_a^n + (A_{ai}^n + C_{ai}^n) \Delta t \quad (16)$$

其中,  $\Delta t$  可以通过 CFL 数得到, 如式(17)所示:

$$\Delta t = CFL \frac{V_{\min}}{|e| + c(l_{\min}^x + l_{\min}^y)} \quad (17)$$

其中,  $V_{\min}$  为体积最小单元,  $l_{\min}^x$  和  $l_{\min}^y$  分别为最小体积单元在  $x$  方向和  $y$  方向上的投影长度。

在有限体积格子 Boltzmann 方法中, 我们使用了 ghost 单元实现边界条件。将边界上的 PDFs 分为平衡态部分和非平衡态部分<sup>[8]</sup>, 平衡态部分由已知宏观量得到, 非平衡态部分通过边界单元近似得到。通过中心差分方法可以得到 ghost 单元上的 PDFs。

### 3 并行算法

#### 3.1 网格划分

在并行算法的设计中, 首先需要将网格分配给各个进程, 每个进程在得到的流场子区域网格边界处设置缓冲区, 用来与相邻进程进行数据传递。针对流场对应的非结构化网格, 尤其是单元数量大的非结构网格。在单节点上进行计算需要耗费大量时间。ParMETIS 是一个并行库<sup>[15]</sup>, 内置了并行非结构图和网格划分算法, 适合在大规模集群上进行非结构化网格的并行划分。如图 3 和图 4 所示, 分别通过 6 个进程和 8 个进程将二维方腔和圆柱绕流非结构化网格并行划分给每个子进程。每种颜色代表每个进程划分后得到的网格。



图 3 二维方腔非结构化网格划分

Fig. 3 Partition of unstructured grid of 2D cavity

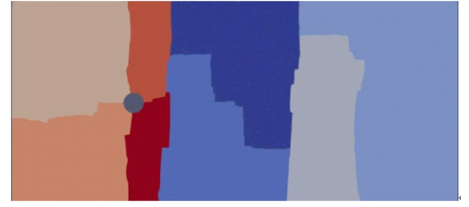


图 4 二维圆柱非结构化网格划分

Fig. 4 Partition of unstructured grid of 2D cylinder

#### 3.2 并行算法的设计

PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) 是一套可扩展科学计算工具箱<sup>[16]</sup>, 它为大规模应用代码在并行集群上的实现提供了构造模块。在非结构化网格有限体积格子 Boltzmann 方法的并行实现中, 我们通过 ParMETIS 进行非结构化网格的划分, 将划分得到的子网格分配给每个进程, 然后每个进程通过索引集存储需要进行通信的部分网格。在每次循环迭代的过程中每个进程只需要通信一次。并行算法的主要框架如算法 1 所示。

##### 算法 1 非结构化网格有限体积格子 Boltzmann 方法

1. 读取非结构化网格文件, 通过 ParMETIS 将网格划分给各个进程
2. 每个进程处理得到的子网格, 计算每个网格单元的信息 (包括单元、单元包含的面、面所在单元等)
3. 初始化流场中单元的宏观量和粒子分布函数
4. while(true) // 执行循环迭代
5. 处理边界条件
6. 依据式(12)执行对流项计算
7. 进程间进行通信, 将子网格边界单元处的粒子分布函数传递给相邻进程
8. 根据式(5)计算宏观量
9. 根据式(11)执行 collision 计算
10. 判断是否满足收敛条件
11. 输出模拟结果

### 4 数值实验

#### 4.1 数值模拟

##### 4.1.1 顶盖方腔驱动流

顶盖方腔驱动流是计算流体力学中的经典问题。方腔的上边界以恒定的速度  $U_0 = 0.1$  向右水平移动, 其他 3 个边界保持静止。Reynolds 与顶盖速度  $U_0$ , 方腔宽度  $L$  以及粘性系

数  $\nu$  有关,定义为  $Re=U_0 L/\nu$ 。

实验中采用的网格包含了 28400 个单元。图 5 给出了 4 个不同的  $Re$  下顶盖方腔驱动流的流线图。当  $Re<1000$  时,在流线图中有 3 个涡:一个涡位于方腔中央,一个位于左下角,一个位于右下角。当  $Re=3200$  时,在左上角出现了 1 个新的涡。当  $Re$  达到 5000 时,在右下角出现了第 5 个涡。随着  $Re$  的增加,中央的涡会逐渐向方腔的中心靠近。这与文献 [17]报道的结果一致。

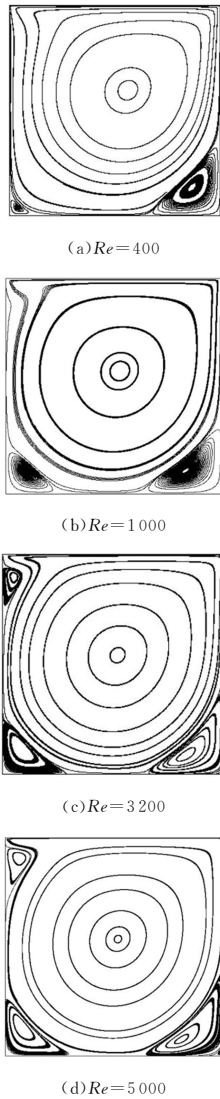


图 5 不同  $Re$  下顶盖方腔驱动流的流线图

Fig. 5 Streamlines of lid-driven flow at different  $Re$

#### 4.1.2 圆柱绕流

圆柱绕流的数值和物理实验已经得到了广泛的研究。我们测试了 3 种不同雷诺数下流场的情况。圆柱绕流的雷诺数  $Re=U_0 D/\nu$ 。其中,  $U_0=0.1155$  为初始速度,  $D$  为圆柱直径。实验中,我们采用的网格包含了 31840 个单元。

图 6 给出了  $Re=10, Re=20$  和  $Re=40$  时的流线图。从图 6 可以看出,在圆柱后产生了一对对称的涡,随着雷诺数的增大,涡也在逐渐变大。我们对比研究了文献 [18]报道的涡的长度、分离角度  $\theta$  和阻力系数等细节,所得与本文得到的结果相吻合。

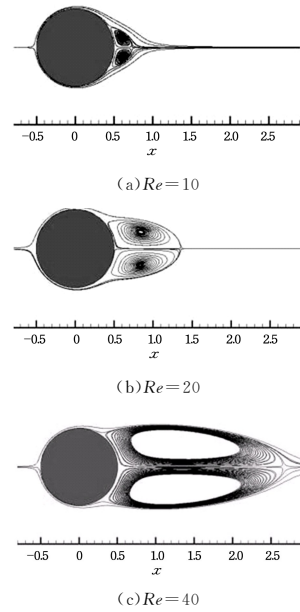


图 6 不同  $Re$  下圆柱绕流的流线图

Fig. 6 Streamlines of flow past a circular cylinder at different  $Re$

#### 4.2 并行性能

“天河二号”超级计算机是国防科学技术大学研制的超级计算机系统,其峰值计算速度为每秒 5.49 亿亿次,持续计算速度为每秒 3.39 亿亿次双精度浮点运算。“天河二号”由 16000 个节点组成,每个节点有 2 个 Intel Xeon E5 2692 处理器和 3 个 Intel Xeon Phi,共有 312 万个计算核心。

我们在“天河二号”超级计算机上以顶盖方腔驱动流作为测试案例进行了并行性能测试。在测试中,我们使用了两种不同规模的网格单元(规模 1:  $3.42 \times 10^5$ ; 规模 2:  $1.42 \times 10^6$ )的流场分析并行性能。

图 7 给出了两种不同网格规模下算法有限体积格子 Boltzmann 方法的并行加速比和效率。从图 7 可以看出,规模越大,算法的加速比和效率越好。当规模 2 的网格在 1920 个核上运行时,效率可以达到 78.42%。

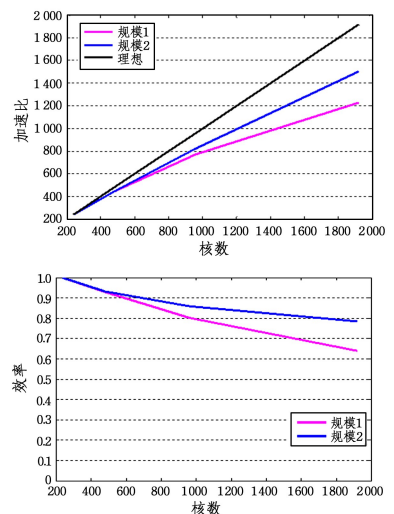


图 7 两种不同规模下算法的加速比和效率比较

Fig. 7 Speedup and efficiency of algorithm under two kinds of mesh scale

**结束语** 本文给出了非结构化网格下的有限体积格子 Boltzmann 方法。为了模拟大规模复杂流场情况,本文给出了非结构化网格有限体积格子 Boltzmann 方法的并行方法。该法通过 ParMETIS 划分流场的非结构化网格,将网格近似平均地发送给 MPI 进程。通过顶盖驱动流和圆柱绕流两个案例验证了并行算法的正确性。并行数值实验的结果表明本文并行算法在 1920 核上仍然具有良好的可扩展性。从并行算法中可以看出,该算法可以很方便地推广到三维有限体积格子 Boltzmann 方法,进行实际计算流体问题的模拟。

### 参 考 文 献

- [1] CHEN S, CHEN H, MARTINEZ D. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics [J]. *Physical Review Letters*, 1991, 67(27): 3776-3780.
- [2] QIAN Y H, D'HUMIÈRES D, LALLEMAND P. Lattice BGK model for Navier-Stokes equation [J]. *Europhysics Letters*, 1992, 17(6): 479-484.
- [3] D'HUMIÈRES D. Generalized lattice Boltzmann equations [C]// *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations, Progress in Astronautics and Aeronautics*. Reston: AIAA, 1992: 450-458.
- [4] D'HUMIÈRES D, GINZBURG I, KRAFCZYK M. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions [J]. *Philosophical Transactions Mathematical Physical & Engineering Sciences*, 2002, 360(1792): 437-451.
- [5] PATIL D V, LAKSHMISHA K N. Finite volume TVD formulation of lattice Boltzmann simulation on unstructured mesh [J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228(14): 5262-5279.
- [6] PATIL D V. Chapman-Enskog analysis for finite-volume formulation of lattice Boltzmann equation [J]. *Physica A*, 2013, 392(12): 2701-2712.
- [7] MISZTAL M K, HERNANDEZ-GARCIA A, MATIN R, et al. Detailed analysis of the lattice Boltzmann method on unstructured grids [J]. *Journal of Computational Physics*, 2015, 297: 316-339.
- [8] LI W, LUO L S. Finite Volume Lattice Boltzmann Method for Nearly Incompressible Flows on Arbitrary Unstructured Meshes [J]. *Communications in Computational Physics*, 2016, 20(2): 301-324.
- [9] LI W, LUO L S. An implicit block LU-SGS finite-volume lattice-Boltzmann scheme for steady flows on arbitrary unstructured meshes [J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 327: 503-518.
- [10] CHEN L, SCHAEFER L A. A unified and preserved Dirichlet boundary treatment for the cell-centered finite volume discrete Boltzmann method [J]. *Physics of Fluids*, 2015, 27(2): 027104.
- [11] SCHEPKE C, MAILLARD N, NAVAUX P. Parallel Lattice Boltzmann Method with Blocked Partitioning [J]. *International Journal of Parallel Programming*, 2009, 37(6): 593-611.
- [12] HONG P, HUANG L, LIN L, et al. Scalable multi-relaxation-time lattice Boltzmann simulations on multi-GPU cluster [J]. *Computer & Fluids*, 2015, 110: 1-8.
- [13] BLAZEK J. *Computational Fluid Dynamics Principles and Applications* [M]. Berlin, Germany: Elsevier, 2015.
- [14] BERGER M, AFTOSMIS M J, MURMAN S M. Analysis of slope limiters on Irregular Grids [C]// *43 AIAA Aerospace Sciences Meeting*. Reno: AIAA, 2005: 10-13.
- [15] KARYPIS G, SCHLOEGE K. ParMETIS: parallel graph partitioning and sparsematrix ordering library [D]. Minneapolis: University of Minnesota, 2013.
- [16] BALAY S, ABHYANKAR S, ADAMS M, et al. *PETSc users manual*. Argonne, Argonne National Laboratory [OL]. <https://www.mcs.anl.gov/petsc/documentation/referencing.html>.
- [17] GHIA U, GHIA K, SHIN C. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method [J]. *Journal of Computational Physics*, 1982, 48(3): 387-411.
- [18] VANKAS. Block-implicit multigrid solution of Navier-Stokes equations in primitive variables [J]. *Journal of Computational Physics*, 1986, 65(1): 138-158.