

基于 RBF 的多学科耦合数据传递并行方法研究

王乐琪¹ 周 磊¹ 李 典¹ 李中武¹
WANG Leqi ZHOU Lei LI Dian LI Zhongwu

摘 要

径向基函数 (radial basis function, RBF) 插值方法因具有诸多优点而被广泛应用于多学科耦合界面数据传递中。然而, 对于实际工程问题中的大规模网格或复杂构型场景, 传统的 RBF 方法存在计算量过高、求解效率低的问题。为了解决这一问题, 发展了一种基于 RBF 插值的耦合界面数据传递的并行方法, 利用 MPI 分别完成了 RBF 基系数矩阵的并行装配、插值系数的并行求解以及数据并行插值的过程。数值实验结果表明, 所提出的并行方法对耦合界面数据传递过程具有明显的加速效果, 同时兼具较高的精度和可扩展性, 具有良好的工程应用前景。

关键词

径向基函数插值; 多学科耦合; 数据传递; 并行计算; MPI

doi: 10.3969/j.issn.1672-9528.2024.06.006

0 引言

多学科耦合分析已经广泛应用于航空航天、生命医学、土木工程各个领域。在航空领域, 飞行器的系统仿真通常涉及流体、结构、噪声等多个学科和专业领域的相互作用与高度耦合, 需要开展多学科耦合过程的分析, 以验证各物理场耦合关系下更接近于真实情况的飞行性能。分区耦合方法是目前多学科耦合模拟的主流方法, 即每个学科首先在各自的求解器内完成求解, 然后在耦合界面上完成耦合。耦合的过程需要在耦合界面上频繁地进行数据传递^[1], 这会对问题的分析速度产生影响, 因而高效快速的耦合界面数据传递方法具有重要的工程实际意义。

耦合界面信息传递方法从总体上可以分为局部数据传递方法和整体数据传递方法两大类^[2]。局部数据传递方法指在进行信息传递时, 流体或固体界面网格点的未知物理量可根据固体或流体界面上的部分单元或网格点的已知物理量求得。常见的局部数据传递方法如线性插值法、常体积转换法 (constant volume tetrahedron, CVT), 实现较为简单, 数据传递效率高, 不足之处是不能保证通量守恒, 并且可能会导致插值不连续, CVT 方法仅限于流固耦合界面的位移传递。整体数据传递方法需要根据所有单元或网格点上的已知物理参数求得。通常采用整体数据传递方法, 如边界有限元法 (boundary element method, BEM)、虚拟表面法 (visual surface, VS)、径向基函数方法 (radial basis function, RBF) 等。需要构造从流场网格到结构网格的映射矩阵, 能够保证界面上总功守恒, 但构造映射矩阵比较复杂, 计算相对比较耗时。其中, 径向基函数插值方法是可实现耦合界

面上位移、速度、温度等传递矩阵一次性解决各种信息传递的统一方法, 并且在求解时无需知道网格节点间的连接关系, 因而被广泛用于耦合界面的信息传递中^[3-5]。

然而随着插值基点数目的增多, RBF 插值的计算量呈非线性增长趋势^[6]。在实际的工程应用中, 耦合界面网格的规模往往是十分庞大的。如果采用传统的 RBF 方法进行数据传递, 会不可避免地导致过高的计算量和较低的插值效率。而与之相对的, 计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD)、计算结构力学 (computational structure dynamics, CSD) 等单一学科的并行求解已较为成熟, 其求解效率已经可以维持在较高的水平。这就使得耦合界面数据传递的效率无法与各学科求解的效率相匹配, 从而使得多学科耦合模拟的效率出现瓶颈^[7-8]。

为了加快耦合界面数据传递的速度, 使耦合界面数据传递的效率和各学科并行求解的效率相匹配, 必须采用并行的策略来加快数据传递的过程^[9-10], 使其能够更好地应用在大规模的多学科耦合分区模拟问题中。

为此, 本文针对耦合界面数据传递问题, 在传统的 RBF 插值方法的基础上发展了一种并行加速策略。该方法可以在保持数据传递精度的前提下提高数据传递的效率, 旨在解决实际工程中面临的耦合界面大规模数据传递问题, 这对多学科问题的仿真模拟具有实际意义。

1 基本原理

1.1 径向基函数插值

径向基函数泛指一类取值仅依赖于距离的实值函数, 主要包含全局径向基函数、局部径向基函数和正定紧支径向基函数三大类。常用的径向基函数如表 1 所示。正定紧支径向

1. 航空工业西安航空计算技术研究所 陕西西安 710000

基函数可以使系数矩阵变得更加稀疏,可以有效地解决大规模问题,因此被广泛应用于工程应用中。

表 1 常用的径向基函数

分类	名称	表达式
全局	薄板样条	$x^2 \ln x$
	体积样条	x
	Hardy 多重二次曲面	$(C_0^2 + x^2)^2$
局部	Gauss	$\exp(-x^2)$
	Hardy 反多重二次曲面	$(C_0^2 + x^2)^{-1/2}$
紧支	Wendland C0	$\begin{cases} (1 - \frac{x}{r})^3, x \leq r \\ 0, x > r \end{cases}$
	Wendland C2	$\begin{cases} (1 - \frac{x}{r})^4 (4 \frac{x}{r} + 1), x \leq r \\ 0, x > r \end{cases}$

下面来详细介绍径向基函数插值的过程。假设在 d 维欧几里得空间已知的一组空间离散点, $X = x_1, x_2, \dots, x_n \subseteq R^d$ 称为中心点。可以根据已知的离散点确定一个连续函数,使函数通过这些中心点。当连续函数采用如下方程表示的形式时,称为 RBF 插值函数:

$$S(x) = \sum_{i=1}^{N_s} \alpha_i \phi(\|x - X_i\|) + p(x) \quad (1)$$

式中: $S(x)$ 表示在位置处的评估函数,它给出网格变形后该处网格节点所需要传递的变量; x 为未知点坐标; X_i 为已知第 i 个点坐标; ϕ 为选用的径向基函数。 α_i 为相应于第 i 个点的待求系数; $\|\cdot\|$ 为欧几里得空间距离。 $p(x)$ 为一个低阶 d 维多项式,一阶线性多项式一般即可满足要求,表示为:

$$p(x) = \gamma_0 + \gamma_x x + \gamma_y y + \gamma_z z \quad (2)$$

由式(1)中系数和多项式系数,根据以下定解条件求得:

$$\begin{aligned} S(X_i) &= g_i, i = 1, 2, \dots, N \\ \sum_{i=1}^N \alpha_i q(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

式中: X_i 为已知数据中心点; g_i 为已知函数值; $q(x)$ 为多项式函数。 $q(x)$ 的阶数需满足 $\deg[q(x)] \leq \deg[p(x)]$, 保证插值系数 α_i 解的唯一性。

1.2 基于 RBF 插值流固耦合界面的数据传递

假设在流固耦合界面上,固体域和流体域分别存在 N_s 和 N_f 个插值点,这些插值点可以表示为:

$$\begin{aligned} X_{si} &= (x_{si}, y_{si}, z_{si}) \in R^3 \quad i = 1, 2, \dots, N_s \\ X_{fi} &= (x_{fi}, y_{fi}, z_{fi}) \in R^3 \quad i = 1, 2, \dots, N_f \end{aligned} \quad (4)$$

假设 d_{si} 、 d_{fi} 分别代表固体、流体插值点的位移矢量,根据插值初始条件将上述方程统一写成矩阵的表达式为:

$$\begin{aligned} D_{sx} &= C_{ss} \alpha_x \\ D_{sy} &= C_{ss} \alpha_y \\ D_{sz} &= C_{ss} \alpha_z \end{aligned} \quad (5)$$

其中, D_{sx} 和 α_x 定义为:

$$D_{sx} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ d_{sx} \end{bmatrix}, d_{sx} = \begin{bmatrix} d_{s1} \\ \vdots \\ d_{sN_s} \end{bmatrix}, \alpha_x = \begin{bmatrix} \gamma_0^x \\ \gamma_x^x \\ \gamma_y^x \\ \gamma_z^x \\ \alpha_{s1}^x \\ \vdots \\ \alpha_{sN_s}^x \end{bmatrix} \quad (6)$$

同理,可以定义 D_{sy} 、 D_{sz} 及它们对应的 α_y 、 α_z 向量。 C_{ss} 表达式为:

$$C_{ss} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x_{s1} & \dots & x_{sN_s} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & y_{s1} & \dots & y_{sN_s} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z_{s1} & \dots & z_{sN_s} \\ 1 & x_{s1} & y_{s1} & z_{s1} & \phi_{s11} & \dots & \phi_{s1N_s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{sN_s} & y_{sN_s} & z_{sN_s} & \phi_{sN_s1} & \dots & \phi_{sN_sN_s} \end{bmatrix} \quad (7)$$

式中: $\phi_{sij} = \phi(\|x_{si} - x_{sj}\|)$ 为径向基函数,代表节点 i 和 j 间的距离函数,其他的表达式意义类似。根据方程(6),即可求出各个方向上的插值系数向量:

$$\begin{aligned} \alpha_x &= C_{ss}^{-1} D_{sx} \\ \alpha_y &= C_{ss}^{-1} D_{sy} \\ \alpha_z &= C_{ss}^{-1} D_{sz} \end{aligned} \quad (8)$$

同理,如果要插值得到 CFD 网格节点的信息,将 CFD 物面节点的坐标代入方程(6)中,得到:

$$\begin{aligned} d_{fx} &= A_{fs} \alpha_x \\ d_{fy} &= A_{fs} \alpha_y \\ d_{fz} &= A_{fs} \alpha_z \end{aligned} \quad (9)$$

其中, A_{fs} 矩阵为:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_{f1} & y_{f1} & z_{f1} & \phi_{f1s1} & \dots & \phi_{f1sN_s} \\ 1 & x_{fs} & y_{fs} & z_{fs} & \phi_{f2s1} & \dots & \phi_{f2sN_s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{fN_f} & y_{fN_f} & z_{fN_f} & \phi_{fN_f s1} & \dots & \phi_{fN_f sN_s} \end{bmatrix} \quad (10)$$

定义矩阵 H 为:

$$H = A_{fs} C_{ss}^{-1} \quad (11)$$

则方程(11)写成矩阵运算形式为:

$$\begin{bmatrix} d_{fx} \\ d_{fy} \\ d_{fz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H & & \\ & H & \\ & & H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{sx} \\ d_{sy} \\ d_{sz} \end{bmatrix} \quad (12)$$

2 耦合界面数据传递的并行方案

下面以流固耦合场景下 CSD 向 CFD 的数据传递为例来说明所提出的基于 RBF 的耦合界面数据传递并行方案,具体流程如图 1 所示。

Stage1: 并行初始化阶段

(1) CSD 求解器主进程收集各个从进程上其他局部网

格的坐标信息 Γ_S^i ，并将其打包形成 Γ_S ，然后在主进程内对 Γ_S 进行点的筛选，形成插值基点集 $\hat{\Gamma}_S$ 。

(2) CSD 的主进程将筛选后的插值基点集 $\hat{\Gamma}_S$ 发送给 CFD 求解器的主进程。

(3) CFD 求解器的主进程将接收到的插值基点 $\hat{\Gamma}_S$ 的坐标信息播撒到其余含 CFD 耦合界面网格的进程 j 上。

这样，CFD 的每个含表面网格的进程内都含有局部的 CFD 网格 Γ_F^j 信息和接收到的插值基点 $\hat{\Gamma}_S$ 的坐标信息。

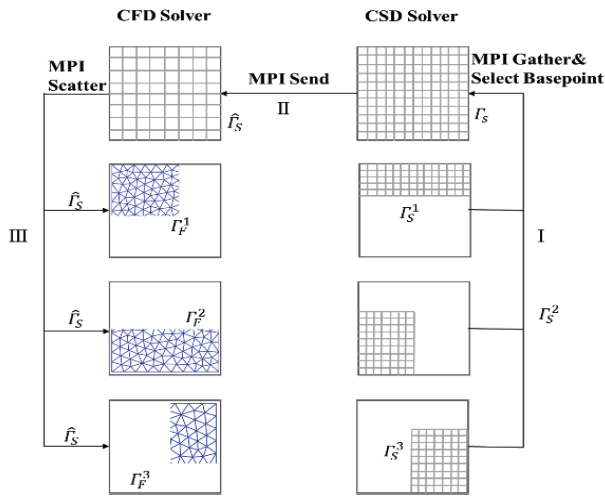


图1 并行初始化阶段工作示意图

Stage2: 并行插值阶段

(1) 在 CFD 求解器含耦合界面网格的进程中根据插值建立一个分布式存储的空矩阵，使其阶数等于插值基点的个数，且每个进程都存储该矩阵的部分连续行。各进程利用收到的基点坐标值来计算矩阵中每项元素的值，并将其插入到本进程存储的各个矩阵行中，在对零元素进行压缩处理后进行聚集，这就完成了 C_{ss} 矩阵的并行装配过程。通过相同的方法创建右端向量 D_{si} 。矩阵和向量的分布式存储方式如图2所示。

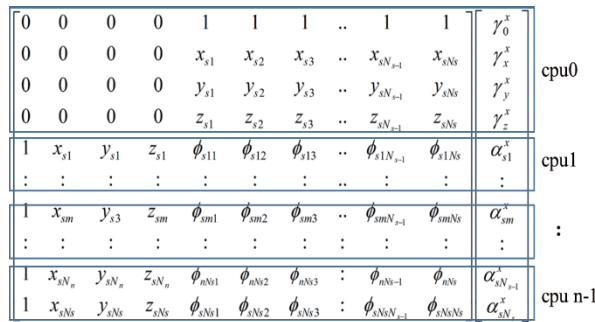


图2 矩阵 C_{ss} 和向量 α_i 的分布式存储结构示意图

(2) 在步骤(1)中完成了 C_{ss} 矩阵和右端向量 D_{si} 的装配后，各个 CFD 进程并行地求解式(6)中的线性方程组，得到插值系数 α_i ，并将 α_i 播撒到 CFD 含表面网格 Γ_F^j 的各个进程上。

(3) 在 CFD 求解器含耦合界面网格的各个进程上，利

用插值基点 $\hat{\Gamma}_S$ 的坐标信息和当地局部 CFD 网格 Γ_F^j 的坐标，分别构造本进程内的 A_{fs} 矩阵，并根据接收到的插值系数 α_i 完成式(10)中的计算，实现并行的耦合界面数据的传递。

3 方案测试

为了探究所提出的耦合界面数据传递并行方案的效果，基于 HIRENASD 机翼构造疏密程度不同的两套网格进行验证。HIRENASD 的 CFD 的机翼表面计算网格有 154 062 个节点和 285 272 个三角形单元；模拟生成的 CSD 的机翼表面共有 103 356 个节点和 102 264 个四边形单元，如图3所示。

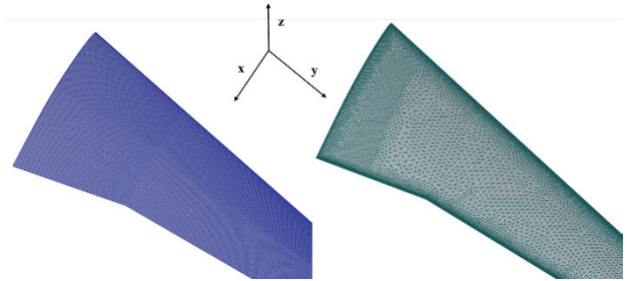


图3 HIRENASD 机翼的模拟 CSD (左) 网格和 CFD (右) 网格

以 CSD 向 CFD 传递数据为例：将 CSD 向 CFD 传递的物理量设置为 $V_{sf} = 0.01y^{1.5} + 0.1$ ，使用式(15)中构造的平均相对误差 MRE 为指标来衡量数据传递的精度。其中， n 为待插值基点的个数， v_{true}^i 为第 i 个待插值点处的理论值， v_{tip}^i 为在第 i 个待插值点处通过插值得到的估计值，即通过式(9)得到的计算值。

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\|v_{true}^i - v_{tip}^i\|}{\|v_{true}^i\|} \quad (13)$$

分别使用 PETSc 库迭代算法中一般最小残差法 (GMRES)、LQ 解法 (SYMMLQ)、稳定双共轭梯度法 (BiCGstab) 来计算插值系数，迭代法的收敛标准采用 PETSc 的默认值，即相对收敛容限 $r_{tol}=1e-5$ ，绝对收敛容限 $a_{tol}=1e-50$ ，发散容限 $d_{tol}=1e5$ ，最大迭代步数 $M_{maxits}=1e4$ 。以求解 $Ax=b$ 为例，PETSc 根据如下准则来判断求解是收敛还是发散，收敛准则为：

$$\|b - Ax_k\| < \max(r_{tol} \|b\|_2, a_{tol}) \quad (14)$$

发散准则为：

$$\|b - Ax_k\| > d_{tol} \|b\|_2 \quad (15)$$

选取 CSD 机翼表面 58 221 个网格点作为插值基点，所传递的物理量为 V_{sf} 。在进行插值系数求解时，分别选用前述中提到的 GMRES、SYMMLQ 和 BiCGstab 方法。

在增加并行核数至 64 核的过程中，记录 CSD 界面向 CFD 界面进行数据传递的平均相对误差，所得的结果如图4所示。

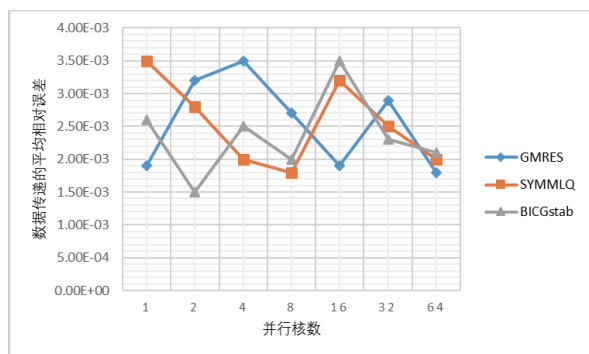


图4 耦合界面数据传递的平均相对误差图

由图4可以看出,数据传递的平均相对误差均维持在 $1\text{E-}03$ 这一量级且最大均不超过0.004,表明该数据传递的并行方法具有较高的精度。

为了进一步探究所提出方法的加速效果和使用不同迭代法求解插值系数时的表现情况,在增加并行核数至64核的过程中记录数据传递所用的总时间和并行效率,所得结果如图5和图6所示。

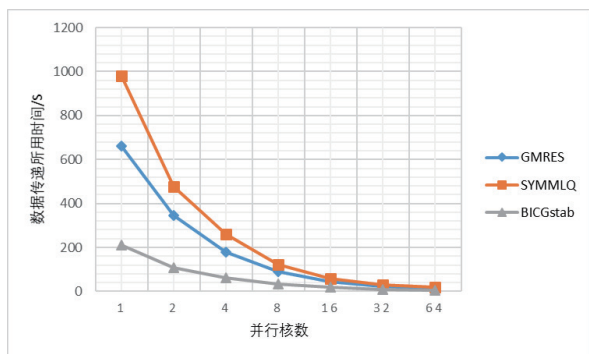


图5 耦合界面数据传递的总时间随并行核数变化图

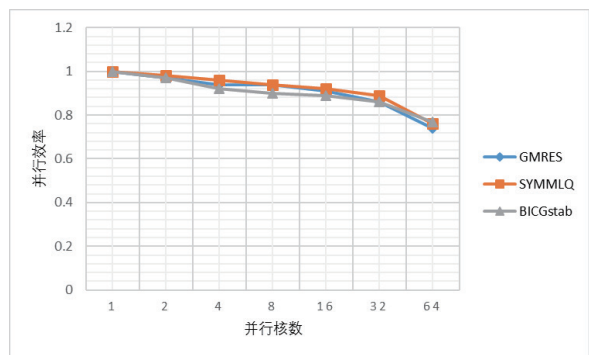


图6 耦合界面数据传递的并行效率随并行核数变化图

由图5可以看出,不管采用哪种迭代法求解插值系数,耦合界面数据传递总时间均随并行核数的增加而显著减小,加速效果显著。稳定双共轭梯度法最适合用于耦合界面数据传递过程中插值系数的求解中。

由图6可以看出,在增加并行核数达到64核时均可以维持在70%以上,这表明所发展的并行方法具有很好的可扩展性。

4 结语

本文针对多学科分区耦合场景下的耦合界面数据传递问题,提出了一种基于分布式数据的并行RBF插值方法,实现了矩阵的并行装配、插值系数的并行求解和并行的RBF插值。根据HIRENASD机翼构造测试算例并对所提出的并行方法进行测试数值实验,结果表明,所提出的耦合界面数据传递的并行方法具有明显的加速效果和较好的可扩展性,具有良好的工程应用前景。

参考文献:

- [1] 陈刚,吕计男,龚春林,等.计算流固耦合力学[M].北京:科学出版社,2021.
- [2] 苏波,钱若军,袁行飞.流固耦合界面信息传递理论和方法研究进展[J].空间结构,2010,16(1):3-10.
- [3] 孙岩,Ronch A D,王运涛,等.基于非线性涡格法的快速静气动弹性数值模拟技术[J].气体物理,2020,5(6):26-38.
- [4] 周强,李东风,陈刚,等.基于CFD和CSM耦合的通用静气弹分析方法[J].航空动力学报,2018,33(2):355-363.
- [5] 郭中州,何志强,赵文文,等.高效非结构网格变形与流场插值方法[J].航空学报,2018,39(12):133-144.
- [6] 路宽,宋文萍,郭恒博,等.基于空间嵌套径向基函数的高效并行网格变形方法[J/OL].航空学报:1-12[2024-03-16].<http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.1929.V.20231016.1003.008.html>.
- [7] 高一地,张桂江.基于径向基函数的载荷重分配算法[J].飞机设计,2021,41(6):29-32+51.
- [8] ZHAO Z, MA R, HE L, et al. An efficient large-scale mesh deformation method based on MPI/Open MP hybrid parallel-radial basis function interpolation[J]. Chinese journal of aeronautics, 2020,33(5):1392-1404.
- [9] 孙学功.多物理场耦合界面数据传递的仿真研究[J].计算机仿真,2015,32(1):23-28.
- [10] 王海波,刘韬,刘圣军,等.使用局部支撑径向基函数的隐式曲线曲面几何迭代算法[J].计算机辅助设计与图形学学报,2021,33(11):1755-1764.

【作者简介】

王乐琪(1999—),男,陕西宝鸡人,硕士研究生,研究方向:多学科耦合数据映射。

(收稿日期:2024-04-11)