

通用计算流体力学软件框架架构设计

丁海昕², 陆林生¹, 吴庆波², 赵慧勇¹, 王 兰¹

(1. 中国空气动力研究与发展中心, 四川 绵阳 621000;

2. 国防科技大学, 湖南 长沙 410000)

摘 要: 计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)软件是专门用来进行流场分析、计算以及预测的软件。CFD 软件应用于飞行器设计, 可以有效提高飞行器设计质量、缩短研制周期及降低研制成本等。目前虽有大量 CFD 计算软件, 但这些软件是针对不同需求的, 它们的接口没有统一的标准, 且处理流程也大致相似。因此, 文中从能满足通用 CFD 软件集成的软件框架研制出发, 着重研究了软件框架的架构设计。首先, 在对国内外优秀 CFD 软件进行调研的基础上, 文中通过挖掘 CFD 软件的共性, 采用分而治之的设计方法将系统分割成多个组件, 使得整个软件结构清晰明确, 软件模块化规范。然后, 通过设计标准化的数据接口和功能子系统接口来保证数据的完整性, 以提高数据的利用率。最后, 利用典型算例对框架进行验证以确保架构设计的正确性, 从而为将来大规模软件平台的实现奠定坚实的基础。

关键词: 软件框架; 架构设计; 接口设计

中图分类号: TP39

文献标识码: A

文章编号: 1673-629X(2012)12-0223-05

Architecture Design of General Computational Fluid Dynamics Software Framework

DING Hai-xin², LU Lin-sheng¹, WU Qing-bo², ZHAO Hui-yong¹, WANG Lan¹

(1. China Aerodynamics Research & Development Center, Mianyang 621000, China;

2. National University of Defense Technology, Changsha 410000, China)

Abstract: Computational fluid dynamics (CFD) software is used for flow field analysis, computation and prediction. CFD software, applying to the design of aircraft, can improve the design quality, shorten the development cycle, reduce the development cost and so on. Though there existing lots of CFD software, these software are designed for different requirements. There are no uniform standard between these software, and the procedure of these software is similar. From the above consideration, starting from the developing of the software framework which can satisfy the integration of the general CFD software, it emphasizes on the architecture design of the software framework. First, based on the analysis of existing excellent CFD software, through extracting the general character of CFD software, divide the system into multiple components. This makes the structure of the software clear and the modularization standard. Then, through design of the standard data interface and functional sub-system interface, the integrity of data can be guaranteed, and this increases the utilization ratio of data. Finally, by testing on typical example, validity of the designed framework is guaranteed for foundation of the large-scale software platform in future.

Key words: software architecture; framework design; interface design

0 引言

当今, 计算流体力学(CFD)技术^[1]已成为气动工程型号研制的主要手段和关键技术, CFD 技术的广泛应用也为 CFD 软件的开发和应用带来了诸多机遇和挑战。CFD 软件应用于飞行器设计, 可以有效提高飞行器设计质量、缩短研制周期、降低研制成本、减小应用风险, 还可解决许多无法通过风洞试验开展研究的

技术难题。

在 CFD 软件研制方面, 国外开展较早。从 90 年代开始, 国外的 CFD 软件开发机构相继推出了 Fluent、CFX 等知名商业软件, 同时开发了众多知名的专业软件, 如 CFL3D、FUN3D、TAU 等。但在实际应用中也发现了不少问题:

1) 兼容性问题: CFD 软件的求解流程被划分为多个步骤, 各步骤需要使用不同的软件, 而不同软件之间, 信息的抽取、传递, 兼容性、性能匹配困难。如 ANSYS 的流固耦合方案, 就需要调用流体模拟 CFX、固体模拟 FEA、耦合求解 MultiField 这三个软件进行松

收稿日期: 2012-03-21; 修回日期: 2012-06-27

基金项目: 国家重点科技工程专项项目(GFZX0101060102)

作者简介: 丁海昕(1985-), 男, 硕士生, 主要研究方向为软件工程;
陆林生, 教授级高级工程师, 主要研究方向为并行算法、并行识别。

耦合求解;

2) 可重用性问题: 1969 年, NASA 推出了第一个 NASTRAN 版本, 迄今, 虽然经过若干次重大修改, 但是由于其庞大的代码量、长久的生命周期, 其代码的可读性、可重用性都存在严重问题;

3) 可扩展性问题: ANSYS 2003 年收购了 CFX, 2006 年收购了 Fluent, 2008 年收购了 AN-SOFT, 但是由于软件结构上的差异, 需要花费很长时间来完成新模块的整合。

国内的 CFD 软件研制由于起步较晚, 和国外优秀 CFD 软件相比还有较大的差距, 其主要体现为:

1) 缺乏较为先进的软件工程思想的应用^[2]。所开发的 CFD 软件在需求分析、系统分析、软件架构设计、数据结构设计等方面先天不足, 难以保证软件质量, 其可维护性、可扩展性、易移植性及可持续发展能力普遍不强, 升级、维护和二次开发往往困难重重;

2) 缺乏统一的顶层规划。为应对不同 CFD 应用需求而研制出不同类型的 CFD 计算软件, 因而必然导致一系列后续问题, 众多计算软件间的内在共性技术没有得到充分挖掘, 低水平重复开发非常严重, 徒耗人工和时间; 大量重复的计算功能使软件的测试、验证及工程确认工作繁重; 众多分散、使用方法各异的计算软件难以学习掌握, 软件的维护、升级开销也非常大^[3]。

为促进我国大型 CFD 技术的发展, 研制具有多功能、多学科的 CFD 软件计算平台。文中调研和分析国内外 CFD 软件研制情况, 采用软件工程设计方法, 构建一个多层次、多工作流程软件框架的设计思路^[4]。针对通用 CFD 软件的封装性、重用性和可扩展性进行开发, 通过统一的顶层架构, 采用合理的架构设计最大限度提高软件的可扩展性和易维护性, 实现核心算法的快速工程化^[5], 缩短软件研制周期; 通过设计规范化、标准化的数据接口和功能子系统接口来保证数据的完整性, 提高数据的利用效率^[6]。

1 框架需求分析

CFD 技术发展的趋势是针对多学科多目标优化设计。目前虽有大量针对不同需求的 CFD 计算软件, 但这些软件接口没有统一标准, 限制了不同 CFD 软件之间的数据共享和交流。而且它们的处理流程大致相似, 区别仅在于计算功能。因此文中研究了大型通用 CFD 框架设计, 该框架不仅可以指导和支撑 CFD 软件的研制, 也可作为一个开放、共用的 CFD 软件二次开发平台, 利用其扩展性好的特点实现先进功能的快速集成及工程化。

CFD 软件框架研制是为了更好地应用于工程中, 应该满足以下功能:

1) 可维护和扩展性, 在开发中注重程序结构的封装和独立性, 便于程序调试、修改以及后续开发和维护;

2) 具有良好的外部程序接口, 开发出的软件与外部 CFD 应用程序具备良好的交互通信的能力;

3) 程序使用方便、快捷, 具有较强的操作灵活性;

4) CFD 应用集成功能, 提供友好的用户界面, 封装集成底层求解器的具体实现细节, 实现软件功能调用。

2 架构设计

2.1 基本设计概念

由于 CFD 软件框架是一个复杂的系统, 文中采用按分而治之的方法进行设计, 先不深入研究每个子系统, 而是确定子系统的外部契约, 再解决问题的内部实现。根据通用 CFD 软件的特点, 文中将整个软件系统按广度分割成集成架构、求解器架构和后处理架构三个子系统, 如图 1 所示, 再把一个子系统分割成多个组件。这样划分使得整个软件结构清晰明确, 软件模块化规范, 易于软件的维护和扩展^[7]。

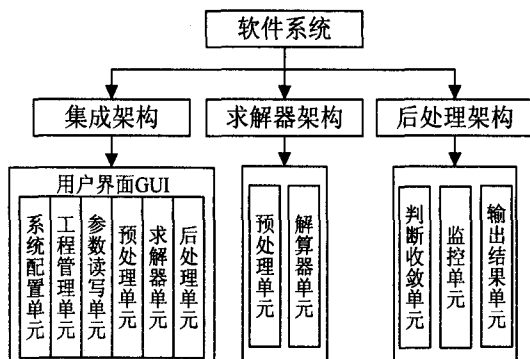


图 1 软件系统层次结构图

三个子系统的架构是相互独立的, 集成子系统是以动态库形式调用后处理子系统, 以可执行文件(.EXE)或动态库形式调用求解器子系统。不管求解器子系统内部如何设计, 只要求解器子系统提供的是统一规范性的接口, 集成子系统就一定可以完成求解器封装集成的。这样就具体的应用, 动态配置求解器框架的功能, 就能满足软件框架共用性强、易移植、可扩展、二次开发易实现等要求^[8]。

2.2 集成架构设计

考虑到框架设计目的是为了满足不同需求 CFD 软件的集成, 其关键问题在于集成架构能够方便进行工程管理, 调用不同的求解器, 执行计算任务^[9]。结合通用 CFD 软件的计算流程, 设计了如图 2 所示的集成架构执行方案图, 该图显示的是用户启动软件进行求解器运算的一个完整过程。整个集成系统由 SC、PM、PP、CRW、CI 和 VIS 对象组成。首先, 用户启动软件

GUI, 创建 SC 对象并加载系统配置信息; 其次, 通过 PM 对象创建工程; 之后导入网格文件, 创建预处理对象并进行预处理, 在预处理过程中创建 VIS 对象并实现网格显示以及边界条件定义修改; 然后, 创建 case, 创建 CRW 对象进行控制参数设置, CASEFILE 文件读写; 然后, 创建 CI 对象并进行求解器运算, 同时创建 VIS 对象实现实时曲线显示; 运算完以后创建 VIS 对象进行后处理相关操作; 最后, 析构所有对象关闭软件。这种设计理念与“结构化”软件的设计思想有着本质的差别。

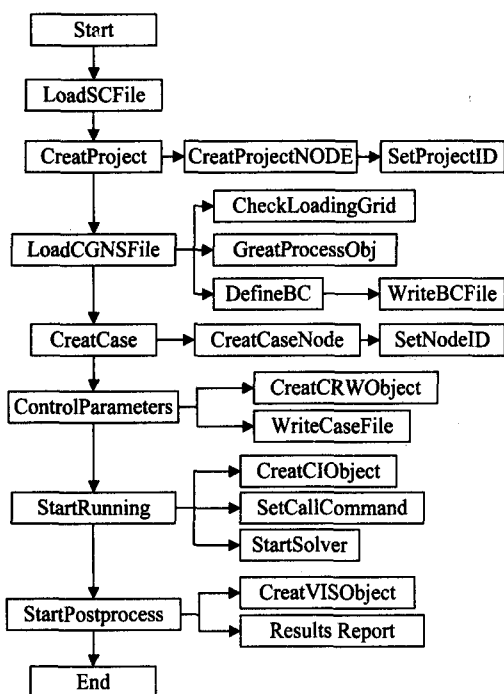


图 2 软件集成执行方案图

2.3 求解器架构设计

软件求解器系统的功能是根据用户要求给出所需要的流场。首先求解器接收网格、流动参数和控制参数, 完成方程求解所需网格特性的计算; 然后根据用户设置的流动特性、流动介质模型等, 采用一系列的 CFD 方法求解相应的物理方程, 得到流场计算结果, 最后对计算结果做进一步的处理。为了使求解器系统对于计算模块的封装做到使用简单、调用方便和多个语言接口等特点, 将求解器系统分成三个子系统, 预处理子系统、流场解算子系统和后处理子系统。求解器架构执行方案如图 3 所示。

1) 预处理子系统主要负责读取软件集成预处理单元所生成解算器需要的数据。在并行计算时, 它还负责实现不同进程之间的负载均衡^[10]。只要建立标准的数据接口, 预处理系统就是通用的。

2) 流场解算子系统由多个功能模块及子功能模块组成, 如图 3 所示, 每个模块都包含多种算法, 用户可以根据不同应用来选择算法。流场解算子系统的构

成复杂, 为了有效集成各种计算模型和计算方法, 根据 CFD 计算方法特点, 流场解算子系统被划分为五个层次结构, 它们分别是底层库支持、计算区域离散、物理问题描述、空间离散和时间推进。每层可根据计算任务需求, 进行必要扩展。下面详细介绍各层次结构。

第一层是底层库支持层, 其主要为 CFD 软件提供数据通信和基本的线性代数功能支持, 包括用于并行的 MPI 库、OpenMP 库、基本数学算法库 (Lapack、Blas 等) 以及 CFD 专用的算法库和其它自定义的工具包。

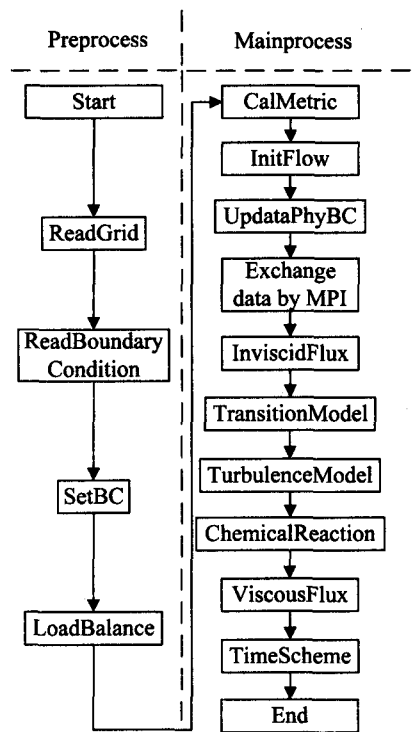


图 3 求解器架构执行方案图

第二层是计算区域离散层, 其主要为软件提供流场计算所需模型几何特性, 网格特性及拓扑关系支持, 主要包含计算区域拓扑划分, 为子区域生成网格, 建立网格间的连接关系等功能模块。对于并行计算, 还要针对各进程建立私有的计算子区域及进程间的通信拓扑关系。

第三层是物理问题描述层, 它包含了 CFD 计算需要求解的物理问题的多种数学描述形式。主要负责根据用户设置, 确定描述物理问题的数学方程, 为高速流动模拟软件提供流动特性、流动介质特性及流动运动状态描述等方面的支持。

第四层是空间离散层, 它是根据物理问题的数学描述, 负责在离散后的计算区域上完成方程的空间项离散, 包含了多种计算对空间导数项、源项的方法。

第五层是时间推进层, 其主要负责方程的时间离散, 形成并完成代数方程组的求解, 该层为高速流动模拟软件提供比较全面的方程求解策略。它包含了多种不同精度的时间离散格式, 以及多种代数方程组求解

方法和加速收敛方法^[11]。

这种分层结构在集成不同的求解器时,可以很好地提供公共算法模块的调用,提高了代码的可重用性。而对于一些特殊的 CFD 计算功能,可以对上面定义的层次结构进行扩展。比如,对于发动机模拟需增加燃烧模拟和两相流计算的功能^[12],燃烧模拟需要在物理问题描述层中增加燃烧模型子系统,在空间离散层中增加有限速率和快速反应燃烧模型处理子系统;而两相流的计算,需在物理问题描述层中,增加两相流处理的子系统。

2.4 后处理架构设计

后处理是指在流场解算器求得收敛的流场后,针对不同的计算目的对流场进行处理,求取需要的结果并输出,实现输出计算结果流场可视化的过程。而在可视化方面,考虑到目前大部分 CFD 软件的情况,不要求提供直接进行流场可视化的功能,而只需要提供标准数据转换接口(3.2 节将详细介绍),使用 Tecplot 等常用商业可视化软件输出典型流场变量(如物面压力、物面热流等)或完成云图、等值线、流线等常用流场可视化分析任务。

3 接口设计

3.1 用户界面设计

本软件设计采用统一风格的图形用户界面提供各项操作。用户通过进行各项图形化显示的窗体界面操作,以完成相应的 CFD 计算任务的人机交互方式。图形用户界面通过接口实现对内部求解器子系统的封装和调用,完成求解器框架中各具体功能子系统的有机集成,实现一个方便的用户参数管理和计算作业加载的图形化界面工具,可用于目标网格的导入和转换、计算参数的设置和管理、计算作业的加载运行和实时监控、计算结果的后处理等既定目标。

3.2 外部接口设计

和软件配套的外部接口主要包括前置软件数据接口和后置软件数据接口。前置软件主要包括网格生成软件的接口,比如 Gridgen、ICEM-CFD 等,后置软件的数据接口主要包括 Tecplot、FieldView 等。因此,在设计时要充分考虑和这些前后置处理软件的接口需求。为了设计规范化、标准化的核心数据结构,采用了目前被广泛推广的 CGNS 数据格式。CGNS 数据格式几乎涵盖了所有 CFD 数据类型,能很好的作为输入输出标准。

3.3 内部接口设计

在软件运行过程中,系统内部需要进行大量数据和信息传递。比如,用户需要利用图形用户界面将一系列计算控制参数传递给具体的求解器框架,进而将

相关参数传递到所需核心计算模块,以完成各类计算控制参数的设置和内存初始化等操作。根据软件架构设计,进一步明确以满足各层次之间、各模块之间内部信息传递需要,将内部接口划分如表 1~表 3。

表 1 预处理接口

接口标识符	接口类型
ImportMeshGridInterface	导入网格文件
BCInterface	边界条件
LoadBalanceInterface	负载平衡

表 2 求解器接口

接口标识符	接口类型
InviscidFluxInterface	无粘通量
ViscousFluxInterface	粘性通量
ExplicitTimeAdvanceInterface	显式时间积分
ImplicitTimeAdvanceSchemeInterface	隐式时间积分
TurbulenceModelInterface	湍流模型
TransitionModelInterface	转捩模拟
ChemicalReactionInterface	化学反应
TransportCoeffInterface	输运系数
ThermoCoeffInterface	热力学系数
MetricInterface	网格面面积、体积和法向
QyGradInterface	计算网格梯度
TurbAndCombustionInterface	湍流与化学反应相互作用
InitiFlowInterface	流场初始化
TimeStepInterface	时间步

表 3 后处理接口

接口标识符	接口类型
MonitorInterface	监控
Write_outputInterface	输出结果文件

每个接口都应定义其数据元素特征:

- 1) 元素名称:进程号 idproc、守恒变量值 Qcnv 等;
- 2) 数据类型:整型变量、整型数组、实型变量、实型数组;
- 3) 数据来源:输入、输出;
- 4) 通讯方式:虚实对应、公用数据块等;
- 5) 调用关系:上下层函数。

通过对所有接口的数据应依照数据完备性的原则建立统一的底层数据结构,就能提供标准的求解器框架接口,以满足面向不同应用的求解器框架在统一界面下调用的设计需求。

4 软件框架初步测试

基于以上设计,研制了集成发动机燃烧模拟技术的软件框架。并通过典型算例对其进行了测试。

文中采用两个算例来验证软件框架的正确性。首先,采用超声速平板算例,来流条件取为 $\text{Mach} = 2.244$, $\rho = 1.0 \text{ kg/m}^3$, 平板长 1 m , $T = 288.0 \text{ K}$ 。图4给出了摩擦分布。可以看到集成后的结果与原程序的基本一致,达到了预期的效果。

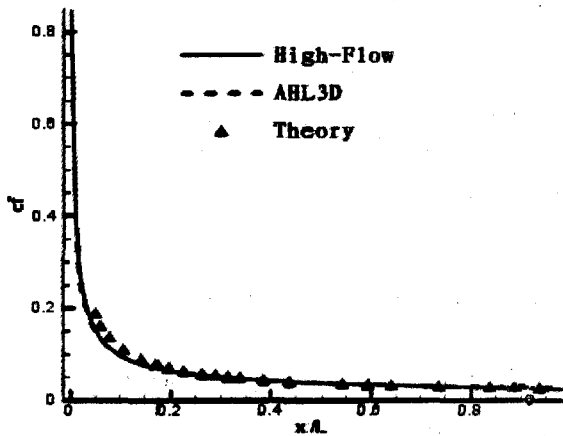


图4 平板壁面摩擦分布

然后,文中模拟了lehr的高超声速球头激波诱导燃烧,马赫数云图计算结果如图5所示,由结果可见,两者基本一致,再次证明了软件框架的正确性。

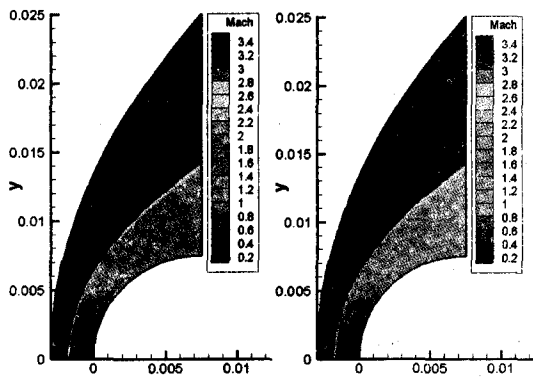


图5 马赫数云图(左图为AHL3D,右图为High-Flow)

5 结束语

文中针对未来大型CFD软件发展的趋势,在分析

和调研国外优秀CFD软件的基础上,架构设计了适用于大型通用的CFD软件框架。通过软件工程化开发使得软件框架实现完全的平台化、模块化,软件结构具有极强的扩展性和广泛的兼容性,很容易集成不同的解算器。通过简单算例的计算结果进行比较,验证了软件框架的正确性,为将来大规模软件平台的实现奠定坚实的基础。

参考文献:

- [1] 霍建华. 计算流体力学(CFD)的通用软件[J]. 河北科技大学学报, 2005, 26(2): 161-165.
- [2] 蒋平. 形式概念分析在软件工程中的应用[J]. 计算机技术与发展, 2008, 18(4): 127-129.
- [3] 赫新. 大型通用CFD软件体系结构与数据结构研究[C]. 出版地不详: 中国空气动力学会, 2011.
- [4] Shaw M. Toward higher-level abstractions for software systems[J]. Data & Knowledge Engineering, 1990(5): 119-128.
- [5] 吴家菊, 席传裕, 姜龙. 基于RUP的迭代式软件开发研究及应用[J]. 现代电子技术, 2009, 32(16): 95-96.
- [6] Barrett D J, Clarke L A, Tarr P L, et al. A framework for event-based software integration[J]. ACM Transactions on Software Engineering and Methodology, 1996, 5(4): 378-421.
- [7] 张志杰. 基于分层结构的管理信息系统架构设计[J]. 计算机技术与发展, 2010, 20(10): 146-149.
- [8] Fielding R T. Architectural Styles and the Design of Network-based Software Architectures[D]. California: University of California, 2000.
- [9] 刘云楚. CFD软件系统集成技术研究[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2001.
- [10] 赵慧勇. 超燃冲压整体发动机并行数值模拟[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2005.
- [11] Zhang L P, Wang Z J. A block LU-SGS implicit dual time-stepping algorithm for hybrid dynamic meshes[J]. Computers & Fluids, 2004(33): 891-916.
- [12] 杨顺华. 碳氢燃料超燃冲压发动机数值研究[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2006.

(上接第222页)

影音技术, 2010(11): 61-65.

- [10] Felice C, Calogero P, Paolo M. Full Model and Characterization of Noise in Operational Amplifier[J]. IEEE Circuits and Systems Society, 2009, 56(1): 97-102.
- [11] Urs A M, Steve T, Pierre-André F. Fully differential low-noise amplifier with offset reduction for high-resolution neural signal recording[C]//2010 Conference on Research in Microelectronics and Electronics (PRIME). [s. l.]: [s. n.], 2010: 1-4.
- [12] 彭灿明, 曾德胜, 潘日明. 模数及数模转换中的精度问题分

析[J]. 电脑知识与技术, 2010, 6(15): 4001-4004.

- [13] Carter B, Mancini R. 运算放大器权威指南[M]. 姚剑清译. 第3版. 北京: 人民邮电出版社, 2010.
- [14] Bae S, Lee S W, Hirukawa A, et al. AC Magnetic-field-induced Heating and Physical Properties of Ferrite Nanoparticles for a Hyperthermia Agent in Medicine[J]. IEEE Transactions on Nanotechnology, 2009, 8(1): 86-94.
- [15] 熊奇欢. 中频磁感应热疗机空间磁场分析与建模[D]. 广州: 广东工业大学, 2010.