

文章编号: 1004-3918(2010)12-1513-04

# 数值计算软件 Overture 的结构和应用

刘深泉<sup>1</sup>, 王彦博<sup>2</sup>, 蒋祺<sup>1</sup>

(1. 华南理工大学 理学院 应用数学系, 广州 510640; 2. 中原工学院 广播影视学院, 郑州 450002)

**摘要:** 论述了基于面向对象的偏微分方程数值计算软件 Overture 的计算方法、体系结构和实现技术及安装使用等方面的优点, 并利用 Overture 数值模拟了圆柱绕流和一类激发介质的反应扩散方程, 得到了卡门涡街和螺旋波。

**关键词:** Overture 软件; 模块; 框图; 接口

**中图分类号:** O 29; O 245; O 35 **文献标识码:** A

## 1 系统简介

### 1.1 主要功能

Overture 是一套基于面向对象技术设计的求解偏微分方程的数值计算软件, 它为用户完成数值求解各种类型偏微分方程问题(特别是流体力学问题)提供了一套可移植的、灵活的开发平台。Overture 内建支持有限差分法和有限体积法等常用的数值计算方法, 同时 Overture 的网格生成系统能够为复杂的几何体生成结构网格, 并且支持多重网格法, 具有使用组合在一起的多个结构网格的能力。Overture 还能够利用多重网格法求解复杂的运动几何体问题。Overture 是一套融合了网格生成、差分计算、边界条件设定<sup>[1]</sup>、数据存取和图形显示等功能的综合型数值计算软件。

### 1.2 系统结构

Overture 是基于分层原则设计的(图 1), 系统自上而下包括应用层、数值方法层、串/并程序接口层和数据分布与通讯 I/O 线程库层。分层设计方法最主要的优点是能够将复杂的问题分解成易于理解和解决的简单问题, 并且能够增强软件的通用性和适应性。例如传统的数值计算程序往往是一个程序对应一个问题, 网格的改动或者边界条件的变化都要对程序做重大的修改, 甚至需要重新编写。Overture 将网格和数值计算方法分别放在了数值方法层和串/并程序接口层, 由于在程序接口层中对不同的网格有统一的抽象接口描述, 因此有可能在数值方法层中做到对不同网格和边界条件通用的数值方法。这样修改网格或边界条件对程序的影响将减到最小。又如 Overture 在数据分布与通讯 I/O 层中内建对大型集群计算环境中数据传输接口 MPI/PVM, 配合在串/并程序接口层中的 A++/P++ 数组程序库的使用, 使得 Overture 程序能够在极少修改原代码的情况下从单机环境移植到大型计算机集群环境上, 而通常这种移植是不能作到或者需要程序员针对计算机集群环境修改大量代码。

### 1.3 系统优点

1.3.1 降低开发复杂度 随着计算机性能的不提高, 人们对数值结果的精度也在不断提高, 更多更精密的计算格式, 更大更复杂的网格使数值模拟问题的复杂度不断提高。Overture 成功地利用面向对象设计的原则, 尽可能地将编写数值计算程序的复杂度降到较低的程度, 通过分层结构设计, 将复杂度分散不同层中,

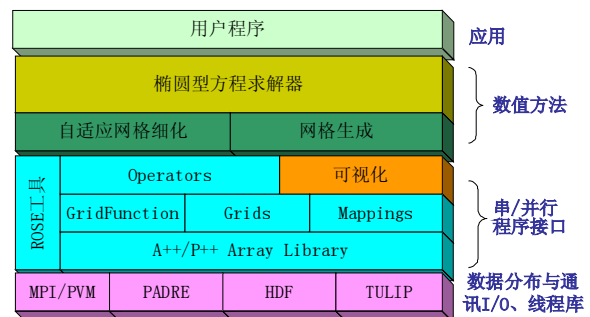


图 1 Overture 系统框架

Fig.1 System framework of overture

收稿日期: 2010-05-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10872069)

作者简介: 刘深泉(1964-)男, 河南洛阳人, 教授, 博士, 博士生导师, 主要研究非线性动力学、神经动力学、应用数学、力学等教学与研究。

对用户来说,主要精力是投入到问题的解决上,而不是计算环境的搭建上。

1.3.2 更先进的网格系统 数值计算离不开网格,Overture系统避免了单纯使用结构网格系统,克服单纯非结构网格系统的弊端,同时融合各种方法的优势,见表1。

表1 网络系统

Tab.1 Network system

	Overture	Embedded	Unstructured	Multi-Block
Efficient solver storage	★★★	★★★	★	★★
Efficient Moving Component	★★★	★	★	★
Body-fitted coordinates	★★★	★	★★★	★★★
Boundary Layer control	★★★	★	★	★★★
Component based grid generation	★★★	★★	★	★
Volume partitioning Not required	★★★	★★★	★★★	★
Expectation for automatic grid generation	★★	★★★	★★★	★
Full re-grid not required for add components	★★★	★	★★	★

1.3.3 提供更好的性能 Overture是可以用于编写大型计算程序的科学软件,在设计的时候,它就考虑到了性能问题,这体现在Overture系统各个设计环节上。例如,其基类较少使用虚函数,大量利用C++模板技术等。另外,通过使用ROSE预处理优化程序来提高程序性能。ROSE能够对已经写好的程序在编译之前做性能上的优化,例如,将矩阵语法转换成效率更高的C语言循环,调节MPI通讯使通讯延时降低,消除不必要的程序开销等。

## 2 算例

### 2.1 激发介质的反应扩散方程计算

Overture可以计算很多模型,这里利用Overture计算激发介质的反应扩散方程。该模型描述心肌组织、BZ化学反应等现象,其方程描述如下<sup>[2-4]</sup>:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + \varepsilon^{-1} u(1-u)(u - \frac{v+b}{a}), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u - v, \end{cases} \quad (1)$$

式中,计算域40 cm×40 cm的方型区域,分辨率为121×121,计算参数a=0.5 b=0.01 ε=1/50。采用Neumann边界,初始值:对u,以水平中线为分界线,下半边值为1.0,对v,以垂直中线为分界线,左半边值为a/2。在不同参数下,可以看到螺旋波和破碎螺旋波的斑图变化,计算结果如图2。

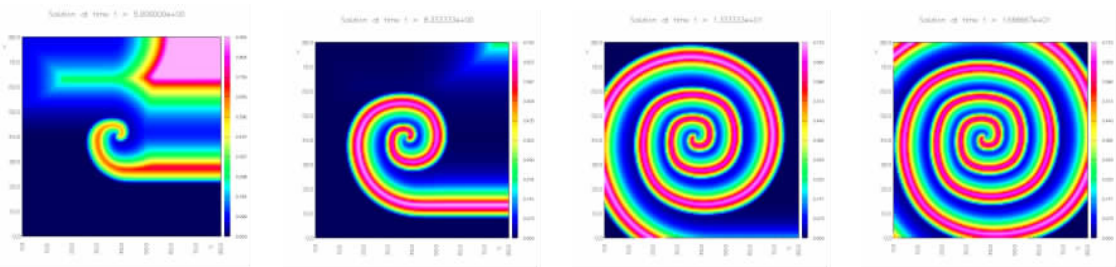


图2 Overture计算得到的螺旋波

Fig.2 The spiral of Overture simulation

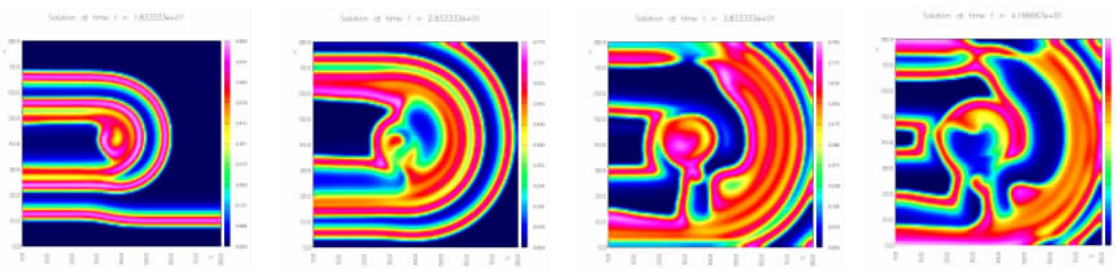


图3 Overture计算得到的破碎螺旋波

Fig.3 The spiral breakup of Overture simulation

对于上面的反应扩散模型,文献[5]采用差分格式的计算比这里的程序复杂.这体现了 Overture 计算软件的优越性<sup>[6]</sup>.

### 2.2 圆柱绕流算例

圆柱绕流是工程中常见的问题,对圆柱绕流的数值模拟由来已久,并且获得了相当丰富的计算结果. Overture 在设计初期就考虑到流体力学计算的需求<sup>[7]</sup>,包含了一套运行在 Overture 基础设施之上的 Navier-Stokes 方程求解器 OverBlown,OverBlown 是一个通用型 N-S 方程求解程序,能够计算可压、不可压、低马赫、高马赫等一系列不同情况下的流动,下面是一个在 Overture 上计算圆柱绕流的算例.控制方程为不可压 N-S 方程,描述如下:

$$\begin{cases} u_t + (u \cdot \Delta)u + \Delta p = \nu \Delta u, \\ \Delta u = 0. \end{cases} \quad (2)$$

作者计算了  $Re$  为 400 的情况,采用了 Overture 平台内建支持的多重网格技术,整个网格由一个纵横 101×51 的长方型网格和一个周向及径向网格数为 30×100 的圆形网格组合而成<sup>[8]</sup>,网格形状如图 6.

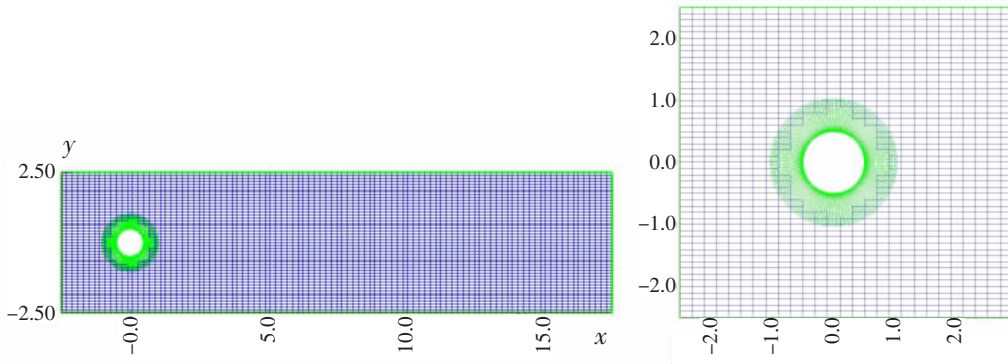


图 4 计算网格

Fig.4 The simulation network

计算域最大远场位置为圆柱半径的 35 倍,计算得出了压力,速度分布以及流场流线随时间变化情况,这些流动特征与已有实验相符.数值模拟了旋涡脱落后很长时间的演化过程,即典型的卡门涡街结构.

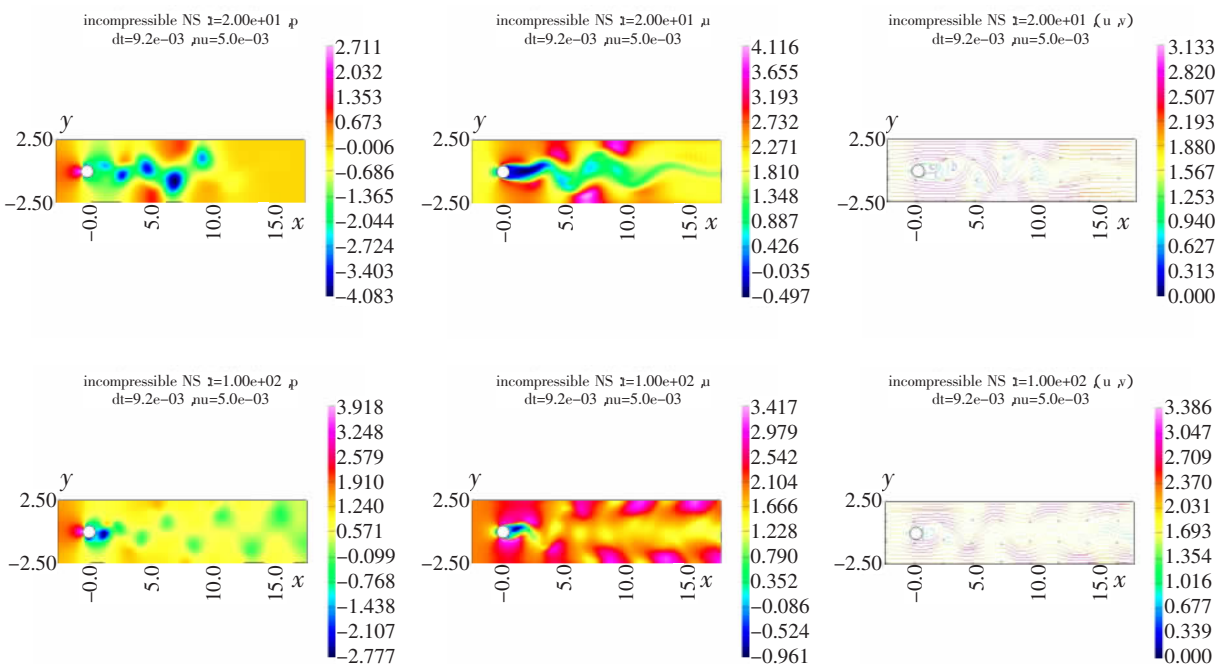


图 5 卡门涡街(等压面,等速面,流线表示)

Fig.5 Karman vortex street (isobaric surface, isovelocity surface and stream filament)

### 3 结论

由前面分析可知,Overture 这套计算软件功能完善,结构合理,能够大大提高数值计算程序的开发效率,降低开发成本.同时 Overture 出色运用了 C++ 语言的特性和 OOP 的设计思想,有效地将高性能数值计算程序开发过程中所要面对的多种多样的复杂技术问题和大量的背景知识封装在它的层次结构中,降低了对程序员的要求,增强了软件的通用性和易用性.但该软件平台仍然在不断发展与完善的过程中,笔者相信在大规模微分方程数值计算领域,大力推广使用 Overture 这样的成熟软件平台,可在数值计算问题中起到更大作用.

#### 参考文献:

- [1] 胡建伟,汤怀民.微分方程数值方法[M].北京:科学出版社,1999.
- [2] 刘深泉,蒋 祺.心肌组织螺旋波与回卷波的数值分析[J].华南理工大学学报,2002,30(12):74-76.
- [3] Dowle M,Mantel R M. Fast simulations of waves in three-dimensional excitable media[J]. Chaos,1999,7(11):2529-2546.
- [4] Duckett G,Barkley D. Modeling the dynamics of cardiac action potentials[J]. Physical Review Letters,2000,85(4):884-887.
- [5] Mantel R M,Barkley D. Parametric forcing of scroll wave patterns in three dimensional excitable media[J]. Physical D,2001,149.
- [6] Henshaw W D. A fourth-order accurate method for the incompressible Navier-Stokes equations on overlapping grids[J]. Journal of Computational Physics,1994,113(1):13-25.
- [7] Bassetti F,Brown D,Davis K. Overture:an object-oriented framework for high performance scientific computing[C]//Conference on High Performance Networking and Computing. San Jose,CA,1999:1-9.
- [8] 刘超群.多重网格法及其在计算流体力学中的应用[M].北京:清华大学出版社,1995.

## The Structure and Application of Numerical Simulation Software Overture

Liu Shenquan<sup>1</sup>, Wang Yanbo<sup>2</sup>, Jiang Qi<sup>1</sup>

(1. Department of Mathematics, School of Science, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China;

2. Broadcasting Movie and Television College, Zhengzhou 450002, China)

**Abstract**: An object-oriented software Overture was introduced for solving partial differential equations. Both computation method, system architecture and implement techniques in Overture were discussed. Flow pass circle in channel and a reaction-diffusion system were simulated for example and got Kamen vortex-street and spiral waves.

**Key words**: Overture software; modular; block diagram; interface