

PYSEMTOOLS: 用于六面体谱元数据后处理的库

Adalberto Perez¹, Siavash Toosi², Tim Felle Olsen⁴, Stefano Markidis³, and Philipp Schlatter^{1,2}

¹FLOW Dept. Engineering Mechanics, KTH Royal Institute of Technology

²Institute of Fluid Mechanics (LSTM), Friedrich–Alexander–Universität (FAU)

³Division of Computational Science and Technology (CST), KTH Royal Institute of Technology

⁴Department of Civil and Mechanical Engineering Solid Mechanics, Technical University of Denmark

2025 年 4 月 20 日

1 总结

PySEMTools 是一个基于 Python 的库，用于处理使用谱元法在计算流体动力学中生成的高阶六面体单元模拟数据。它的目标是减少分析大型文件时通常需要的中间步骤。具体而言，不再需要使用单独的代码库（如求解器本身）来进行后处理。为此，我们利用消息传递接口 (MPI) 进行分布式计算来执行典型的谱元网格上的数据处理任务，例如谱精度微分、积分、插值和降阶建模等。所有功能都以自包含的 Python 代码形式提供，并且不依赖于特定求解器的使用。我们相信 PySEMTools 可以为研究人员加速科学发现并降低使用计算流体动力学中高级方法的门槛。

2 需求说明

流体在物体周围的流动对许多工业和自然系统至关重要，从空气动力学和冷却到天气系统的运行。特别相关的一些应用通常存在于湍流流态中，在这种状态下，流体受到不规则运动的影响，这些运动特征是多尺度涡旋相互作用的结果，并且存在更高水平的波动和混合。

研究这些现象的一种流行方法是使用计算机模拟其支配物理。湍流的多尺度特性以及通常感兴趣的高雷诺数（惯性力与粘性力之比）要求数值网格足够精细以捕捉最小涡旋的运动。虽然这表明仿真计算成本很高，但图形处理单元 (GPU) 的到来开启了执行过去不可能进行的仿真的大门。这种能力的提高使得管理典型仿真活动产生的数据更具挑战性。我们在 PySEMTools 中的工作旨在简化从一种常用数值方法获得的数据管理和结果后期处理，同时保持高阶精度。

PySEMTools 旨在帮助处理使用光谱元方法 (SEM) 的求解器的数据，该方法最初由 Patera (1984) 提出，是有限元法 (FEM) 的一种高阶变体。在 SEM 中，计算域被划分为一组有限的单元，在其中嵌入了给定次数 N 的 Gauss-Lobatto-Legendre (GLL) 网格。在每个单元内部，解决方案使用 $P = N - 1$ 阶多项式进行展开，从而导致较低的耗散和色散误差。

Nek5000 (Fischer et al., 2008)，用 Fortran 77 编写，是 SEM 的一个成功实现，在该领域中已被用于多个研究，例如由 Fischer et al. (2006) 进行的血管流模拟、由 El Khoury et al. (2013) 进行的湍流管道流动、由 Mallor et al. (2024) 进行的绕翼流动以及如 Merzari et al. (2020) 概述所示的核应用。一般来说，后处理流程相对复杂，因为当需要将数据以 SEM 格式用于例如计算速度场的导数时，求解器本身被用作“后处理”模式。此模式使用求

解器和额外的 Fortran 代码，这些代码需要编译以生成可以在 Matlab 或 Python 中使用的较小文件，例如通过 PyMech(Mohan et al., 2022) 执行信号处理、创建图表等。NekRS(Fischer et al., 2021)，即 Nek5000 的 GPU 版本，以及 Neko(Jansson et al., 2024, 2023)，一个现代 Fortran 实现的 SEM，都采用了相同的方法，这促使了未来对我们的 PySEMTTools 的需求。

使用原始格式的数据本身与求解器结合的动机是可以理解的，因为这些大型文件需要并行处理以应对它们的巨大体积。然而，我们认为这一过程已经变得非常繁琐，因为需要维护多个代码库来进行数据的后处理。通过 PySEMTTools，我们为这个问题提供了一个解决方案，因为我们包含了通常从求解器中所需的全部功能，同时确保代码在并行执行时也能高效运行，并充分利用 Python 中存在的丰富库生态系统。

3 特征

PySEMTTools 严重依赖于 Dalcín et al. (2005) 的 MPI for Python，因为它从一开始就被设计为在分布式设置下工作。对于计算，我们依赖于 NumPy(Harris et al., 2020)。它已在由 Nek5000 和 Neko 生成的数据上进行了广泛测试，但如前所述，所实现的方法和例行程序与任何具有六面体元素的类似 SEM 的数据结构一致。其最相关的特点包括以下几点：

- **并行输入输出** 一组用于在 Nek5000/Neko 场文件上执行分布式 IO 的例程，并直接将数据保留在 NumPy 数组或 PyMech 数据对象中的内存中。
- **并行数据接口** 一组旨在促进处理器之间消息传输的对象。为了便于不那么有经验的用户使用 MPI 函数。
- **微积分**：根据几何形状计算导数和积分矩阵的对象，这允许在谱元网格上执行微积分运算。
- **网络连接性和划分**：根据几何和网格重分区工具确定连通性的对象，用于诸如全局求和等任务。
- **插值** 执行从 SEM 网格到任意查询点的高阶插值的例行程序。在进行后处理时的一个关键功能。
- **降阶建模** 执行并行和流正交分解 (POD) 的对象。
- **数据压缩/流媒体** 通过使用 ADIOS2(Godoy et al., 2020)，可以提供一组接口来执行数据压缩或将 Python 脚本连接到运行中的模拟以进行原位数据处理。
- **可视化** 给定数据在 Python 中可用，可以从现成的软件包进行可视化。

我们注意到所有这些功能都由软件仓库中的示例支持，位置在 <https://github.com/ExtremeFLOW/pySEMTTools>。

4 致谢

本工作部分由“面向 exascale 的自适应多级智能数据管理器 (ADMIRE)”项目资助，该项目获得欧盟地平线 2020 JTI-EuroHPC 研究与创新计划的支持，资助协议号为：956748。测试计算得以进行得益于瑞典国家超级计算学术基础设施 (NAISS) 提供的资源，该设施部分由瑞典研究理事会通过资助协议编号 2018-05973 提供资金支持。

参考文献

- Lisandro Dalcín, Rodrigo Paz, and Mario Storti. Mpi for python. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 65(9): 1108–1115, 2005. ISSN 0743-7315. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jpdc.2005.03.010>.
- George K. El Khoury, Philipp Schlatter, Azad Noorani, Paul F. Fischer, Geert Brethouwer, and Arne V. Johansson. Direct numerical simulation of turbulent pipe flow at moderately high reynolds numbers. *Flow, Turbulence and*

- Combustion*, 91(3):475–495, Oct 2013. ISSN 1573-1987. doi: 10.1007/s10494-013-9482-8. URL <https://doi.org/10.1007/s10494-013-9482-8>.
- Paul Fischer, Francis Loth, Sang-Wook Lee, David Smith, Henry Tufo, and Hisham Bassiouny. - parallel simulation of high reynolds number vascular flows. In Anil Deane, Akin Ecer, James McDonough, Nobuyuki Satofuka, Gunther Brenner, David R. Emerson, Jacques Periaux, and Damien Tromeur-Dervout, editors, *Parallel Computational Fluid Dynamics 2005*, pages 219–226. Elsevier, Amsterdam, 2006. ISBN 978-0-444-52206-1. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-044452206-1/50026-4>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444522061500264>.
- Paul Fischer, James W. Lottes, and Stefan G. Kerkemeier. Nek5000 web page, 2008. <http://nek5000.mcs.anl.gov>.
- Paul Fischer, Stefan Kerkemeier, Misun Min, Yu-Hsiang Lan, Malachi Phillips, Thilina Rathnayake, Elia Merzari, Ananias Tomboulides, Ali Karakus, Noel Chalmers, et al. Nekrs, a gpu-accelerated spectral element navier-stokes solver. *arXiv preprint arXiv:2104.05829*, 2021.
- William F Godoy, Norbert Podhorszki, Ruonan Wang, Chuck Atkins, Greg Eisenhauer, Junmin Gu, Philip Davis, Jong Choi, Kai Germaschewski, Kevin Huck, et al. Adios 2: The adaptable input output system. a framework for high-performance data management. *SoftwareX*, 12:100561, 2020.
- Charles R. Harris, K. Jarrod Millman, Stéfan J. van der Walt, Ralf Gommers, Pauli Virtanen, David Cournapeau, Eric Wieser, Julian Taylor, Sebastian Berg, Nathaniel J. Smith, Robert Kern, Matti Picus, Stephan Hoyer, Marten H. van Kerkwijk, Matthew Brett, Allan Haldane, Jaime Fernández del Río, Mark Wiebe, Pearu Peterson, Pierre Gérard-Marchant, Kevin Sheppard, Tyler Reddy, Warren Weckesser, Hameer Abbasi, Christoph Gohlke, and Travis E. Oliphant. Array programming with NumPy. *Nature*, 585(7825):357–362, September 2020. doi: 10.1038/s41586-020-2649-2. URL <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>.
- Niclas Jansson, Martin Karp, Adalberto Perez, Timofey Mukha, Yi Ju, Jiahui Liu, Szilárd Páll, Erwin Laure, Tino Weinkauff, Jörg Schumacher, Philipp Schlatter, and Stefano Markidis. Exploring the ultimate regime of turbulent rayleigh – Bénard convection through unprecedented spectral-element simulations. In *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC '23*, New York, NY, USA, 2023. Association for Computing Machinery. ISBN 9798400701092. doi: 10.1145/3581784.3627039. URL <https://doi.org/10.1145/3581784.3627039>.
- Niclas Jansson, Martin Karp, Artur Podobas, Stefano Markidis, and Philipp Schlatter. Neko: A modern, portable, and scalable framework for high-fidelity computational fluid dynamics. *Computers & Fluids*, 275:106243, 2024. ISSN 0045-7930. doi: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2024.106243>.
- Fermin Mallor, Ricardo Vinuesa, Ramis Örlü, and Philipp Schlatter. High-fidelity simulations of the flow around a naca 4412 wing section at high angles of attack. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 110:109590, 2024. ISSN 0142-727X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2024.109590>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0142727X24003151>.
- Elia Merzari, Paul Fischer, Misun Min, Stefan Kerkemeier, Aleksandr Obabko, Dillon Shaver, Haomin Yuan, Yiqi Yu, Javier Martinez, Landon Brockmeyer, Lambert Fick, Giacomo Busco, Alper Yildiz, and Yassin Hassan. Toward exascale: Overview of large eddy simulations and direct numerical simulations of nuclear reactor flows with the spectral element method in nek5000. *Nuclear Technology*, 206(9):1308–1324, 2020. doi: 10.1080/00295450.2020.1748557. URL <https://doi.org/10.1080/00295450.2020.1748557>.
- Ashwin Vishnu Mohanan, Guillaume Chauvat, Vitor Gabriel Kleine, Nicolò Fabbiane, and Jacopo Canton. Pymech: A python software suite for nek5000 and simson, 2022.
- Anthony T Patera. A spectral element method for fluid dynamics: Laminar flow in a channel expansion. *Journal of Computational Physics*, 54(3):468–488, 1984. ISSN 0021-9991. doi: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(84\)90128-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(84)90128-1).