文章编号：1000-5773(2010)01-0026-05

基于消息传递接口的空中爆炸问题的并行计算*

费广磊，马天宝，宁建国

（北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室，北京 100081）

摘要：研究了用于处理三维多物质欧拉网格的模糊界面技术以及算法存在的数据相关性问题，提出了解决数据相关性的方法。采用基于消息传递接口（MPI）模式，设计出了相应的 MMIC-3D 并行程序，得到了无限空气介质中爆炸的三维数值模拟结果，计算结果与实际的实验现象及规律基本吻合。在共享存储的全对称多处理机（SMP）上进行了测试，得到了理想的加速比。

关键词：并行计算；数据相关性；界面处理；爆炸场；加速比

中图分类号：O382.1；O246 **文献标识码**：A

1 引 言

并行计算对于大规模科学与工程计算具有十分重要的意义。目前，并行计算机的基本存储方式主要有共享存储与分布式存储两种[1]。在共享存储的并行机上，一般采用基于 OpenMP 的编程方式，这种方式相对简单，但却限制了并行计算的扩展性。而分布式存储的并行机避免了共享内存所带来的这一瓶颈，具有很好的扩展性，极大地提高了并行计算的性能。消息传递接口（Message Passing Interface，MPI）为分布式存储的并行计算提供了强有力的编程环境。消息传递是指在各个并行执行的进程之间通过消息传递来交换信息、协调步伐、控制执行，它需要程序员显式地将负载和数据分配给进程，因此程序员必须解决所有的交互问题[2]。

在三维多物质流体弹塑性欧拉方法的数值模拟中，对混合网格的界面处理是欧拉方法的关键问题，也是当前计算流体力学研究中具有相当难度的研究课题之一。在众多界面处理方法中，大多采用了“方向分裂”输运算法[3-4]。这种算法避免了对角输运问题，但数据间有很强的依赖关系，而且这种依赖关系在整个计算域中都存在，从而导致了基于计算域分区方式的并行思想无法实现。

目前，对空中爆炸问题的理论研究主要是通过二维数值模拟进行[5]。由于它把实际问题简化为二维问题，不能满足需要，因此对三维空中爆炸问题的研究就显得尤为重要。本工作利用三维多介质模糊界面处理方法，研究消除数据依赖关系、同时降低由此所带来的对计算精度影响的一些可行方法。采用 MPI 编程模式，编写了相应的三维流体弹塑性程序——MMIC-3D。通过对无限空气介质中的爆炸场进行三维数值模拟，验证了所采用方法的可行性，考察了其在共享存储的全对称多处理机（Symmetrical Multi-Processing，SMP）上的并行效率。

2 基本理论及程序并行的实现

从控制方程组出发，采用“和”分裂差分格式，把总体方程组按空间 x、y、z 3 个方向进行分裂。对于

* **收稿日期**：2009-05-06；**修回日期**：2009-08-27

基金项目：国家自然科学基金（10625208，10872034）；北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室自主研究课题（ZDKT08-02）

作者简介：费广磊（1983—），男，博士研究生，主要从事多物质流体弹塑性程序研究. E-mail：fgl630@bit.edu.cn

时间用前差分,对于空间用中心差分,从而得到一阶精度显式格式。在 3 个方向进行离散,将计算区域分成固定的 Euler 长方体网格,网格以(i,j,k)编号。各网格在 x、y 和 z 方向的长度分别为 Δx、Δy 和 Δz。对于每个方向,计算分为两个阶段:Lagrange 阶段和 Euler 阶段(输运阶段)。

欲对原有的串行程序进行并行化,则必须分析计算程序中所有语句间的依赖关系,即相关分析(Dependency Analysis)。在一个时间步内,在同一个三重循环下若满足更新后的变量值影响周围网格相关变量的更新,则数据间具有相关性(依赖关系)。

MMIC-3D 并行程序采用高维分解策略,将三维计算区域分割成若干个子区域,实现了沿着 3 个方向的任意分割,但在具体分区时应考虑各个进程的负载均衡因素。每个子区域指定一个处理机,外部增加虚网格(4 层),如图 1(a)所示的白色区域,在扩充的子区域上计算网格量;各个进程的数据通信如图 1(b)所示,其中最外层为虚网格,即接受数据网格层,临近的是要发送数据的网格层。

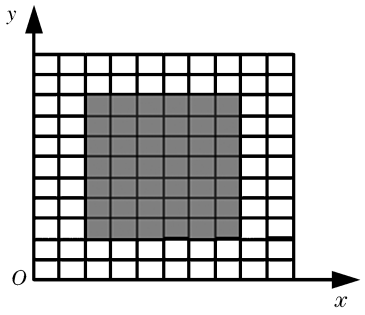


图 1(a)　计算域分区网格图

Fig. 1(a)　The grid graph of computational domain partition

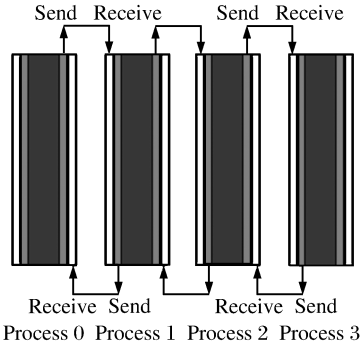


图 1(b)　数据通信示意图

Fig. 1(b)　The schematic diagram of data communication

2.1　Lagrange 阶段

网格随流体运动,即考虑压力梯度对速度和内能的影响,计算出速度、比内能、动量和能量。差分步是纯算术计算,因此在区域分割的情况下,差分步算法适合并行计算。并行程序设计的重点是协调各子区域虚网格的相关变量的更新。

2.2　Euler 阶段

在 Euler 步中,采用模糊界面方法。该方法是指在一个混合网格中,不区分物质界面,根据模糊方法计算体积比,把体积比作为模糊权重系数,由输运质量和输运体积计算出介质的密度;然后对网格进行分类,不同类网格之间视为物质界面;接着对介质进行模糊排序,决定输运优先权和模糊输运表;最后根据模糊权重计算输运量,按模糊输运表进行输运[5]。

模糊界面方法采用了“方向分裂”输运,3 个方向的输运在一个三重循环下进行,并且更新后的网格体积量影响周围网格相关量的更新,因此有很强的数据依赖性,如图 2 所示,网格 n 的更新将依赖于网格 1。为了消除数据依赖性并截断依赖性的传播,程序将三重循环下 3 个方向的输运转变为在 3 个三重循环内进行,并且 3 个方向的输运顺序轮流交替进行。为保持计算精度,每完成 1 个方向的输运,更新所有网格(包括虚网格)的相关变量。

2.3　关键点信息的输出

MMIC-3D 的前处理程序——Mesh3D 可以在计算域内任意设置关键点,所生成的关键点是没有次序的。为确认各进程中的关键点数量和序号,建立进程间的拓扑关系,在拓扑关系中各进程都有相应的坐标,最后由主进程进行搜集和输出相关数据。

2.4　其它阶段

人工粘性和计算更新后相关变量的修正也是纯算术计算,因此也适合并行计算。数据的前后处理及继续计算、数据的收集和散播、减少通信时间是此步的重点。

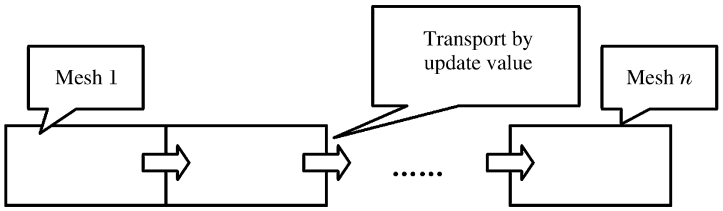


图 2 欧拉步数据相关性分析

Fig. 2 The analysis of data dependence in Euler step

3 空中爆炸数值模拟

3.1 计算模型

TNT 装药模型参数见表 1。

表 1 TNT 装药模型

Table 1 The model of TNT charge

Charge weight/(t)	Charge radius/(m)	Mesh step/(m)	Computational domain size/(m)	Step number
9.29	1.15	0.4×0.4×0.4	24.0×40.0×80.0	54 000

爆轰产物的主要参数见表 2 和表 3,其中:k_0 为爆轰产物的多方指数,k_1 为爆轰产物充分膨胀下的多方指数,b 为调节系数。

表 2 TNT 炸药爆炸性能参数

Table 2 The detonation parameters of TNT explosive

ρ /(g/cm^3)	Detonation pressure /(GPa)	Detonation velocity /(m/s)	Initial specific internal energy/(kJ/g)
1.60	18.5	6 700	7.0

表 3 TNT 炸药状态方程参数

Table 3 Parameters of equation of state for TNT explosive

k_0	k_1	b
3.0	3.16	1.0

3.2 数值模拟结果分析

根据炸药在空气中爆炸的爆炸相似定律以及大量的实验结果,TNT 球状装药(或形状近似球状的装药)在无限空气介质中爆炸时的空气冲击波峰值超压的计算公式为[6]

$$\Delta p_{\mathrm{m}} = 0.84\frac{w^{1/3}}{r} + 2.7\left(\frac{w^{1/3}}{r}\right)^2 + 7.0\left(\frac{w^{1/3}}{r}\right)^3 \qquad 1 \leqslant \bar{r} \leqslant 10 \sim 15 \tag{1}$$

$$\Delta p_{\mathrm{m}} = \begin{cases} 20.06\dfrac{w^{1/3}}{r} + 1.94\left(\dfrac{w^{1/3}}{r}\right)^2 - 0.04\left(\dfrac{w^{1/3}}{r}\right)^3 & 0.05 \leqslant \bar{r} \leqslant 0.5 \\ 0.67\dfrac{w^{1/3}}{r} + 3.01\left(\dfrac{w^{1/3}}{r}\right)^2 + 4.31\left(\dfrac{w^{1/3}}{r}\right)^3 & 0.5 \leqslant \bar{r} \leqslant 70.9 \end{cases} \tag{2}$$

式中:Δp_{m} 为空气冲击波峰值超压(10^5 Pa),w 为有效装药量(kg),r 为距爆炸中心的距离(m),$\bar{r} = r/w^{1/3}$ 为对比距离。

表 4 给出了无限空气介质中爆炸场超压的数值解和经验公式计算结果。从表中可以看出,爆炸场冲击波峰值超压的数值解与经验公式的计算结果在中远场上是基本吻合的,但在近场上误差较大。

图 3 为数值计算得到的距爆心 35 m 和 50 m 处的压力-时间曲线。从图中可以看出激波的存在及激波的传播情况:随着传播距离的增大,激波的强度越来越弱,压力峰值越来越低,进一步观察还可以发现负压区的存在,这些与实际情况一致。

图 4 为爆炸场在不同时刻的三维数值模拟结果。从图中可以直观地看出爆轰产物和空气介质在计算域中的运动变化,这与实验现象和物理规律是符合的。

表 4　冲击波峰值超压数值解和经验公式计算结果

Table 4　Peak overpressure of shock waves calculated by numerical solution and empirical formula

Distance /(m)	$\Delta p_{m,eq(1)}$ /(MPa)	$\Delta p_{m,eq(2)}$ /(MPa)	$\Delta p_{m,Num}$ /(MPa)	Distance /(m)	$\Delta p_{m,eq(1)}$ /(MPa)	$\Delta p_{m,eq(2)}$ /(MPa)	$\Delta p_{m,Num}$ /(MPa)
10		5.037	1.153	35	0.242	0.299	0.205
12		3.359	0.771	40	0.181	0.220	0.158
14		2.239	0.551	45	0.141	0.170	0.127
15		1.872	0.466	50	0.113	0.135	0.108
16		1.586	0.421	55	0.094	0.111	0.098
20		0.904	0.329	60	0.080	0.093	0.079
22	0.715	0.934	0.391	65	0.068	0.079	0.069
24	0.579	0.751	0.486	70	0.059	0.069	0.061
30	0.343	0.432	0.303				

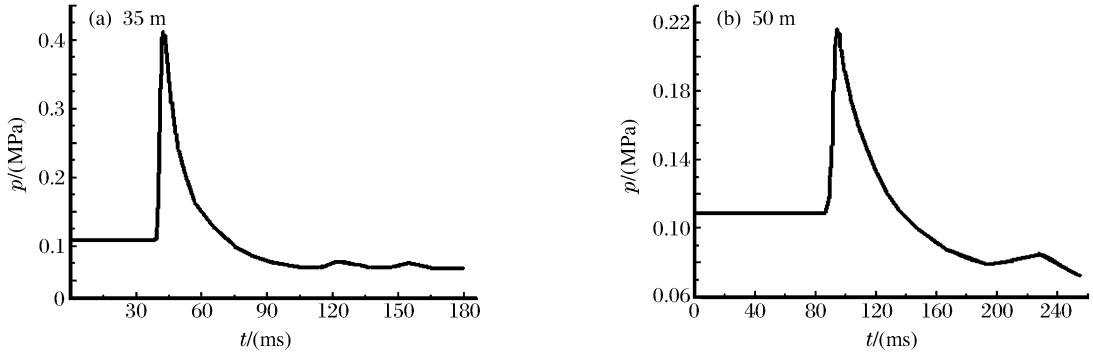
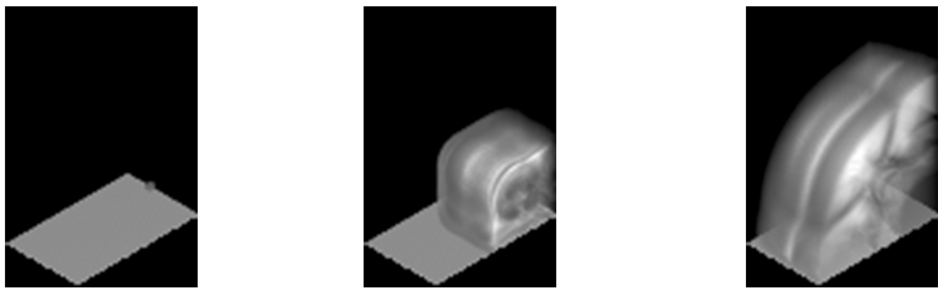


图 3　数值模拟得到的距爆心不同距离处的压力-时间曲线

Fig. 3　Pressure-time curves at different distance from the center of explosion by numerical simulation



(a) t=0 ms　(b) t=9.75 ms　(c) t=42.34 ms

图 4　爆炸场三维数值模拟结果

Fig. 4　3D numerical simulation results of the explosion field

3.3　并行效率和加速比

简单地讲,并行系统的加速比分为绝对加速比和相对加速比。对于一个给定的应用,并行程序的执行速度相对于串行程序的执行速度加快了多少倍,称为“绝对加速”;对于给定问题,同一程序在单个中央处理器(CPU)的运行时间除以多个中央处理器的运行时间,即为“相对加速”。本研究采用相对加速的概念。将加速比除以处理器个数,即为并行效率。

网格数为 60×100×200,在 SMP 机(双 CPU 双核)上测试 MMIC-3D 并行程序在不同分区方式下的加速比。表 5 列出了不同分区方式下采用堵塞方式的加速比和并行效率。可以看出,不同的分区方式有着不同的并行效率,这是由于 Fortran 语言程序的存储为列优先,沿 x 方向分区时需要通信的数据量为非连续数据,因此沿 x 方向分区并行效率较低。

表 5 采用堵塞方式得到的不同分区方式下系统的加速比和并行效率

Table 5 Speedup and parallel efficiency of system with different area-dividing method by blocking model

Area-dividing method	Total time/(s)	Speedup	Parallel efficiency/(%)
1×1×1	7 153		
4×1×1	2 392	2.99	74.7
1×2×2	2 056	3.48	87.0
1×1×4	2 100	3.41	85.1

4 结 论

采用欧拉型的有限差分格式,对爆炸问题进行了数值模拟,其中对输运步计算采用方向分裂算法,解决了并行化三维弹塑性流体动力学程序的关键问题——解除欧拉步数据间的依赖性。根据空中爆炸的模拟结果,所采用的并行算法是合理的,保留了原有算法的精度,达到了加快计算速度的目的。但从近场模拟结果来看,原有算法的精度以及物质界面的分辨率还有待进一步提高。基于 MPI 的 MMIC-3D 并行程序,为未来移植到大规模集群、进行超级运算提供了有力的技术支持。

References:

[1] Chen G L. Parallel Algorithm Practice [M]. Beijing: China Higher Education Press, 1999. (in Chinese)
陈国良. 并行算法实践 [M]. 北京:高等教育出版社,1999.

[2] Du Z H. High Performance Computing and Parallel Programming Technology [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2001. (in Chinese)
都志辉. 高性能计算并行编程技术 [M]. 北京:清华大学出版社,2001.

[3] Ning J G, Wang Z Q, Zhao H Y, et al. Study on the Flow of the Explosive Shock Wave around the Wall Numerical Simulation [J]. Journal of Beijing Institute of Technology, 1999, 19(5): 543-547. (in Chinese)
宁建国,王仲琦,赵衡阳,等. 爆炸冲击波绕流的数值模拟研究 [J]. 北京理工大学学报,1999,19(5):543-547.

[4] Ma T B. Computation on High Velocity Multi-Material Dynamics and Development and Application of EXPLOSION-2D Software [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2007. (in Chinese)
马天宝. 高速多物质动力学计算、软件 EXPLOSION-2D 的开发及应用 [D]. 北京:北京理工大学,2007.

[5] Chen L W. Three-Dimensional Plastic-Elastic Hydrokinetics Multi-Material Interface Method and Numerical Simulation [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2003. (in Chinese)
陈龙伟. 三维弹塑性流体动力学多介质界面处理及数值模拟 [D]. 北京:北京理工大学,2003.

[6] The Eighth Department of Beijing Institute of Technology. Explosion and Its Action [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1979. (in Chinese)
北京工业学院八系. 爆炸及其作用 [M]. 北京:国防工业出版社,1979.

The Parallel Computation Based on MPI for Explosion in Air

FEI Guang-Lei, MA Tian-Bao, NING Jian-Guo

(*State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

Abstract: Euler algorithm, fuzzy interface method for three-dimensional multi-material and the data dependence of this algorithm were studied, and a method for settling the data dependence was presented. The parallel program of MMIC-3D based on message passing interface (MPI) was designed. The three-dimensional numerical simulation results of explosion field in an infinite air medium, which were obtained in this study, are in agreement with the experimental phenomena and the principle of physics. Test on the symmetrical multi-processing (SMP) shows a better speedup.

Key words: parallel computing; data dependence; interface treatment; explosion field; speedup