文章编号：1000-5773(2011)06-0508-06

三维多物质弹塑性流体动力学 Euler 方法的并行算法研究及程序测试*

马天宝[1]，费广磊[1]，张文耀[2]

(1.北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室，北京 100081；
2.北京理工大学计算机学院智能信息技术北京市重点实验室，北京 100081)

摘要：并行计算是解决爆炸与冲击问题大规模数值模拟最有效的手段之一。针对 Euler 方法并行程序设计的复杂性，阐述了三维多物质弹塑性流体动力学程序 MMIC-3D 并行设计的总体策略，基于消息传递接口(MPI)设计出相应的 PMMIC-3D 并行程序，并提出了一套实用的程序测试方案。结合聚能射流形成过程的数值模拟算例，在八节点的集群上测试了加速比、并行效率及可扩放性，分析了影响并行性能的因素。

关键词：爆炸与冲击；Euler 方法；并行计算；消息传递接口；程序测试
中图分类号：O347；O358　　**文献标识码**：A

1 引　言

近年来，随着大规模科学与工程计算的需求，许多计算问题已经超出单机所能承受的能力范围，并行计算对于大规模科学与工程计算越来越重要[1]。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。MPI(Message Passing Interface)——消息传递接口是消息传递函数库的标准规范，是目前广泛使用的并行编程工具[2]，MPI 基于分布式存储，但同样适应于共享存储，具有移植性好、功能强大、效率高等多种优点。

MMIC-3D(Multi-Material in Cell for 3D)[3]是基于 Euler 型有限差分方法的用于爆炸与冲击问题仿真计算的三维多物质弹塑性流体动力学程序，能处理 3 种及 3 种以上物质混合格的界面计算问题，解决了三维 Euler 方法中多物质计算的难题，实现了对空中爆炸、密实介质中爆炸及聚能射流形成等典型的爆炸与冲击问题的数值模拟。在单机 32 位操作系统下，受限于计算机内存和计算速度，原有 MMIC-3D 串行程序最多只能计算 200 万网格的问题，远远达不到工程和科研的需求，迫切需要将原有的串行程序改造为并行程序，以扩大计算规模，加快求解速度。

并行程序设计不但包含了串行程序设计，而且还包含了更多富有挑战性的问题[4]，由于并行程序需要通信、同步等操作，使得并行程序设计远比串行程序设计复杂得多。Lagrange 方法，无论采用显式或隐式差分格式，最后都会归结为代数或矩阵运算，对于这类运算都有现成的并行算法可用。采用Euler 方法，由于需要处理物质在网格间的输运问题，隐含在输运算法中的数据相关性及子区域间的关联性不易发现。本文针对 Euler 方法并行设计的复杂性，阐述了处理 Euler 输运算法中处理数据相关性的一种方法，以及挖掘子区域间关联性的过程。程序测试是程序开发的一个重要环节，考虑到并行程序的测试复杂性，将测试分为两个阶段，提出了一些实用的测试策略，缩短了整个程序的开发周期，并在八节点集群上测试了程序的并行性能。

---

* **收稿日期**：2010-08-20；**修回日期**：2010-11-26
基金项目：国家重点基础研究发展计划(2010CB832706)；爆炸科学与技术国家重点实验室自主课题(ZDKT10-03b)；国家自然科学基金(10972041)
作者简介：马天宝(1981—)，男，博士，副教授，主要从事计算爆炸力学研究. E-mail：madabal@bit.edu.cn

2　MMIC-3D 数学模型及数值方法介绍

MMIC-3D 串行程序采用不考虑外力、外源和热传导，非守恒形式的 Euler 流体弹塑性动力学偏微分方程组[5]。数值计算采用算子分裂格式，将上述非守恒形式的方程组分为 Lagrange 步和 Euler 步进行计算，并在计算中按空间 x、y、z 3 个方向进行分裂。

MMIC-3D 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；对网格进行分类，不同类网格之间视为物质界面；对介质进行模糊排序，决定输运优先权和模糊输运表；根据模糊权重计算输运量；按模糊输运表进行输运；在建模和计算中应用模糊方法，故称为“模糊界面方法”[6]。

3　PMMIC-3D 并行算法实现的关键性问题

PMMIC-3D (Parallelization for Multi-Material in Cell-3D)采用域分解并行策略，域分解是指把计算域分成若干子区域，一个处理器处理一个或多个子区域。采用域分解并行策略，PMMIC-3D 的并行算法设计主要应考虑如下问题：(1) 如果原有串行算法有数据相关性，如何解除相关性；(2) 采用计算域分区的并行方式，各子区域间关联性如何，即需要多少额外的网格储存临近子区域的信息。

3.1　数据相关性分析

MMIC-3D 程序采用欧拉型有限差分算法，分 Lagrange 步和 Euler 输运步分别进行计算，使得当前计算网格最多受到周围 26 个网格的影响，这是能采用计算域分区方式对 MMIC-3D 并行的有利条件，同时必须分析计算程序所有语句间的依赖关系，称之为相关分析(Dependency Analysis)。对于采用域分解策略的三维多物质流体弹塑性并行程序来说，在 1 个时间步内，在同 1 个空间三重循环下若满足：当前网格物理量的更新依赖于周围网格相关变量更新后的值，则该算法会存在数据相关性。用表达式表示为

$$a'_{i,j,k} = f(a_{i,j,k}, a'_{i\pm1,j\pm1,k\pm1}) \tag{1}$$

其中 a 的更新直接或间接依赖于周边网格 a 更新后的值。

采用 Euler 方法的数值模拟，数据相关性一般出现在 Euler 输运步上。模糊界面方法采用“方向分裂”输运，3 个方向的输运在 1 个空间三重循环下进行，当前网格的物理量的更新依赖于周边相关物理量更新后的值，更新后网格物理量影响周围网格相关量的更新，因此存在数据依赖性，且这种依赖关系影响到整个计算域。如何解除数据相关性，且保持原有的计算精度，要与具体算法结合起来。为消除 PMMIC-3D 中 Euler 输运步的数据相关性，当前网格输运采用相邻网格更新前的值，同时为了消除因此而带来过量输运的问题，将原有在 1 个空间三重循环下完成的 3 个方向的输运改为在 3 个空间三重循环下完成，即每个空间三重循环只进行 1 个方向的输运，3 个方向的输运顺序随时间步交替变换。

为考核因解除数据相关性而带来的精度影响，采用 Harive 和 Fletche[7-8] 设计的测试精度的方法。该方法定义了 L_1 误差，其公式如下

$$E = \sum_{i,j,k} A_{\Omega}^{(i,j,k)} \left| F_{t=T}^{(i,j,k)} - F_{\mathrm{e}}^{(i,j,k)} \right| \tag{2}$$

式中：$A_{\Omega}^{(i,j,k)}$ 为网格的体积，$F_{t=T}^{(i,j,k)}$ 为数值计算的网格介质体积分数，$F_{\mathrm{e}}^{(i,j,k)}$ 为准确的网格介质体积分数。数值算例计算参数见表 1，其结果为计算到 400 步的结果。由表 1 可以看出，并行算法的精度和原有串行算法的精度基本一致，说明所采用的解除数据相关性的策略是可行的。

表 1　计算参数和结果

Table 1　Calculation parameters and results

Cell number	Spatial step	Time step	Fluid velocity	E	
				Parallel algorithm	Serial algorithm
50×50×50	0.1	0.1	$u_x=0.5$；$u_y=0.5$	0.164	0.162

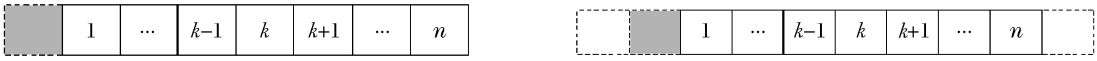
3.2 子区域边界网格(层)数量的确定

子区域边界网格是用来储存临近子区域相关变量的额外网格。采用 Euler 数值方法,子区域间的关联性,即子区域边界网格的数量取决于两个因素:(1) 因算法本身所固有的因素,当前网格物理量依赖于周边网格物理量的更新;(2) 当前网格物理量的更新需要周边网格的物理量。考虑到通信所占用的开销,子区域边界网格(层)的数量应该考虑以上两个因素所增加的网格(层)数的最小值。以一维 Euler 输运步为例,说明子区域边界网格数量的确定过程。

如图 1(a)所示,其中 u 为当前 k 网格的速度值。k 网格的更新(输运)影响 $k+1$ 网格的物理量,也就是说 $k+1$ 网格的物理量依赖于 k 网格和 $k+1$ 网格物理量的更新(输运),即 k 网格为 $k+1$ 网格的依赖网格,$k+1$ 网格为 k 网格的影响网格。因此若想保证图 1(a)左端 1 网格更新正确,需要在计算域左侧增加 1 层网格,并参与计算更新(输运),如图 1(a)的灰色虚网格。由于在实际的更新运算中,往往需要周边网格物理量的信息,因此考虑如下的差分格式

$$u_k^{n+1} = (1-2r)u_k^n + r(u_{k+1}^n + u_{k-1}^n) \tag{3}$$

则 k 网格更新需要 k、$k+1$、$k-1$ 网格的物理量。综合以上两种因素,对于一维 Euler 输运步的运算来说,需要在计算域增加 3 层子区域边界网格,左边增加 2 层,右边增加 1 层,如图 1(b)所示,其中左边灰色虚网格参与运算,两端的虚网格不参与运算更新。



(a) Extra cell added considering the first factor (b) Extra cells added considering two factors

图 1 一维 Euler 输运步子区域边界虚网格确定过程

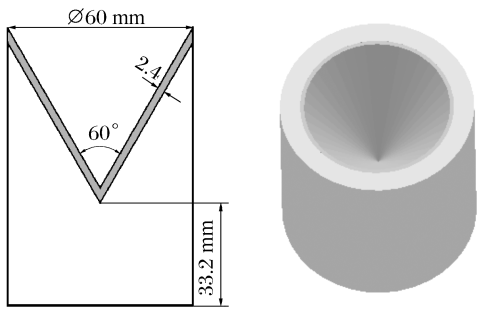
Fig. 1 The process of extra cells added in Euler model

4 PMMIC-3D 并行程序测试

G. J. Myers 在他的名著《软件的测试技巧》一书中给出测试的定义:“程序测试是为了发现错误而执行程序的过程”[9]。基于 MPI 并行程序的测试与调试的主要困难在于:除了串行程序的所有问题之外,并行程序还会有一些其它的问题存在。具体体现在:(1) 并行算法设计的复杂性,对于一个串行程序很容易实现的问题,并行实现起来可能就困难重重,潜在的算法逻辑错误不易发现;(2) 多进程之间协同作业(任务的映射与分发),导致并行程序比串行程序难于驾驭;(3) 基于 MPI 的并行程序增加了通信、进程同步等操作,增加了程序潜在的风险,一些不当的操作可能会导致程序异常中断或死锁。

考虑到基于 MPI 并行程序的测试与调试的困难,把对 PMMIC-3D 并行程序的测试分为 2 个阶段:阶段 1,不依赖于实际的物理模型、测试分区对计算结果的影响;阶段 2,设计合理的物理模型,测试计算结果是否符合物理规律。阶段 1 是阶段 2 的基础,只有在阶段 1 测试正确的基础上才能进行阶段 2 的测试。

聚能射流算例的计算几何模型如图 2 所示,其中图 2(a)为二维尺寸结构图,图 2(b)为三维模型图。药柱直径为 60 mm,高为 90 mm。依据网格步长设计了 4 个算例,见表 2。聚能射流的数值模拟涉及到的材料包括炸药、金属药型罩及空气 3 种介质。炸药采用 B 炸药,金属罩采用 45 钢。爆轰产物采用 JWL 状态方程;空气采用理想气体状态方程;对于金属材料,考虑其在高温、高压、高应变率下表现的动态行为,采用 Mie-Grüneisen 状态方程描述。起爆方式采用点起爆,并采用简单的燃烧模型模拟爆轰波在炸药中的传播过程。



(a) 2D geometric model (b) 3D model

图 2 聚能装药二维几何模型及三维模型图

Fig. 2 2D geometric model and 3D model of shaped charge

表 2　射流算例模型

Table 2　Model of shaped charge jet

Model	Charge mass /(g)	Spatial step /(mm×mm×mm)	Cell number	Model	Charge mass /(g)	Spatial step /(mm×mm×mm)	Cell number
Example 1	340	1.00×1.00×1.00	80×80×180	Example 3	342	0.04×0.04×0.04	227×227×480
Example 2	344	0.06×0.06×0.06	151×151×300	Example 4	342	0.03×0.03×0.03	301×301×600

对于射流算例,阶段 1 的测试采用射流头部速度作为监测变量,监测精度为 10^{-11} m/s,算例 1 的分区方式为:3×1×1,1×3×1,1×1×3;算例 2 的分区方式为:1×4×1,1×1×4;算例 3 的分区方式为:2×2×2,1×2×4;算例 4 的分区方式为:2×2×8,2×2×6。测试表明,不同分区方式下的计算结果保持一致,表明 PMMIC-3D 并行程序在网格数较多的情况下,分区方式不影响计算结果(算例 4 网格数为5 436 万)。

图 3 展示了 4 种算例的三维射流图,从图 3 中可以看出,算例 2、算例 3 及算例 4 的射流形状明显优于算例 1,算例 3 和算例 4 射流形状差别不大。图 4 为 4 种算例的射流头部速度随时间的变化曲线,从图 4 中可以看出,随着网格数的增多,射流最大头部速度略有增加,算例 2、算例 3 及算例 4 比较接近,三者最大头部速度分别为 4.4、4.5 和 4.7 km/s,比实验结果略小,而算例 1 最大头部速度仅为 4.0 km/s。

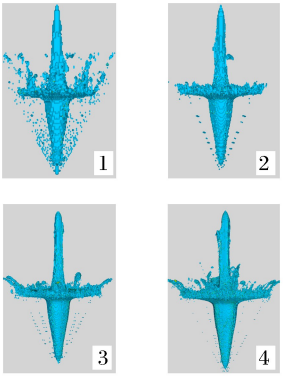


图 3　32.51 μs 时 4 种算例的三维数值模拟图

Fig. 3　Three-dimensional simulation graphs at 32.51 μs of four examples

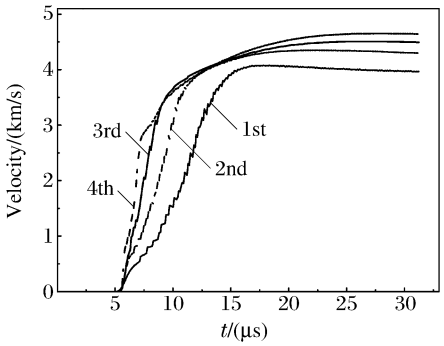


图 4　4 种算例的射流头部速度随时间变化曲线

Fig. 4　The jet tip velocity changes with time

5　PMMIC-3D 并行性能测试

并行程序除了满足分区方式不影响计算结果的最基本要求外,加速比、并行效率及可扩放性也是衡量并行程序质量的主要性能指标。PMMIC-3D 程序并行性能测试在自主定制的八节点集群上进行,每个节点包含两颗 Intel 四核 E5620CPU,主节点 24 G 内存,其余节点 12 G 内存。

5.1　加速比及并行效率测试

并行系统的加速比(Speedup)是指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,也称为"绝对加速"(Absolute Speedup);对于给定问题,同一程序在单 CPU 的运行时间除以在多个 CPU 运行的时间,称为"相对加速"(Relative Speedup)。加速比除以处理机个数,称为并行效率。加速比及并行效率测试采用第 4 节中的射流测试算例中的算例 2、算例 3 作为测试算例,二者的网格数分别为 684 万和 2 473 万。

射流测试中的算例 2、算例 3 的加速比及并行效率如图 5 所示。从图 5 中可以看出:加速比随着进程数的增加而增加,用 64 进程时算例 2 和算例 3 的加速比可达到 16 倍和 20 倍;并行效率随着进程数的增多而降低,用 64 进程时算例 2 和算例 3 的并行效率只有 25%和 30%,这是由于进程数增多,通信开销所占的比重也会增加;一样的进程数下,加速比及并行效率随着网格数的增多而增大。

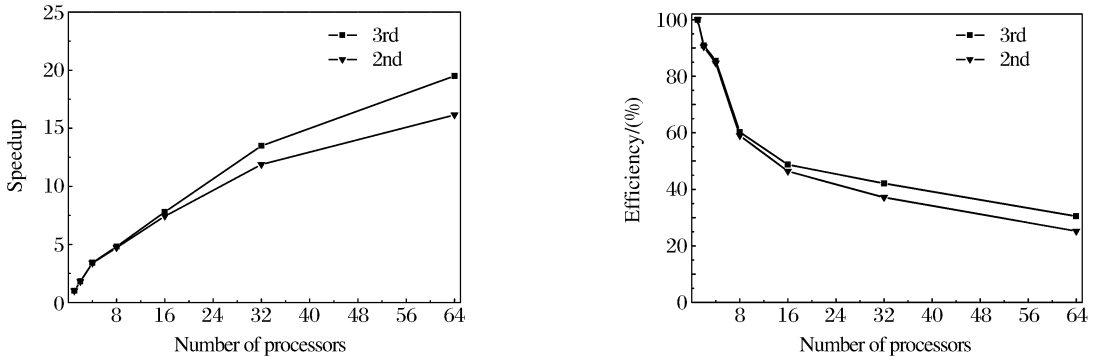


图 5 加速比及并行效率

Fig. 5 The speedup and efficiency versus the number of processors

5.2 可扩放性测试

可扩放性是指在确定的应用背景下,计算机系统(或算法或编程等)的性能随处理器的增加而按比例提高的能力。可扩放性是和并行算法以及并行计算机体系结构放在一起讨论的,某个算法在某个机器上的可扩放性反映了该算法是否能有效利用不断增加的 CPU 的能力。

采用射流算例作为测试算例,其结果如图 6 所示,计算域为 10 cm×10 cm×20 cm。对于不同的进程数,每个进程分配的网格数固定为 100 万。测试的进程数如图 6 横轴所示,纵轴为计算 1000 个时间步的总时间。理想的可扩放性折线应该是一条平行于横轴的直线。由图 6 可知:随着进程数的增多,平均每个进程处理固定网格数的时间逐渐增加,64 进程下处理时间是单进程下处理时间的 2.8 倍。

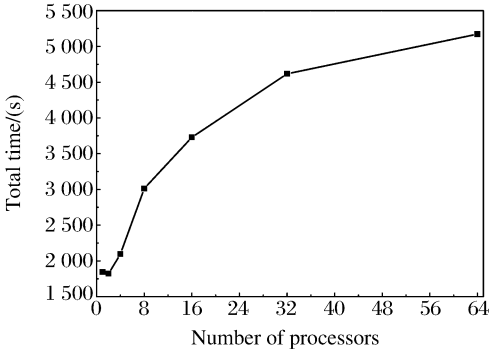


图 6 可扩放性折线

Fig. 6 Scalability

5.3 影响并行性能的因素

影响并行性能的因素主要包括通信所占用的开销以及负载不均衡所造成的同步等待时间等。图 7 为射流测试算例 3 在不同进程数下通信时间占总时间的百分比曲线。从图 7 中可以看出,通信时间在计算总时间的百分比随着进程数的增多而快速增大,64 进程时达到 48%。这是由于:(1) PMMIC-3D 中每一个子模块中都有诸如密度、质量、速度、能量及动量等变量更新,而这些变量的变化会影响下一个子模块的计算,因此需要数据通信;(2) 每个节点采用千兆网络及千兆交换机连接,实测数据通信速度为 35～45 M,网络通信延迟及带宽也影响通信。通信开销比重过大是影响并行性能的最重要因素。

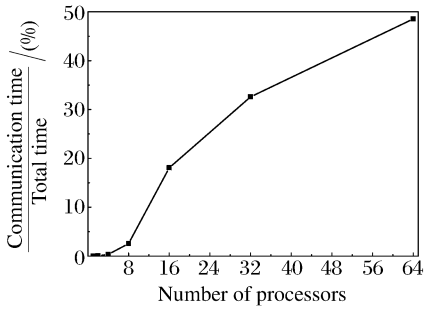


图 7 通信时间在总时间的百分比

Fig. 7 The percentage of communication time to the total time

6 结 论

(1) Euler 数值方法由于需要处理物质在网格间的输运问题,隐含在输运算法中的数据相关性及子区域间的关联性不易发现,因此并行算法设计中潜在的逻辑性错误不易发觉。

（2）由于 PMMIC-3D 中通信过多及自主定制的集群通信延迟及带宽的限制，通信开销比重过大，影响了 PMMIC-3D 的并行性能。优化程序结构、减少通信量是改善 PMMIC-3D 并行性能的重要手段。

（3）从射流算例的模拟结果看，随着网格数的增多计算精度越来越高，数值模拟三维图片的分辨率越来越高，表明所采用的并行算法是合理的；PMMIC-3D 并行程序增大了计算规模，加快了计算速度，达到了并行程序设计的目的。

References：

[1] Dongarra J，Foster I，Fox G，et al. Sourcebook of Parallel Computing [M]. Translated by Mo Z Y，Chen J，Cao X L. Beijing：Publishing House of Electronics Industry，2005.（in Chinese）
Dongarra J，Foster I，Fox G，等. 并行计算综论 [M]. 莫则尧，陈　军，曹小林，译. 北京：电子工业出版社，2005.

[2] Malard J. MPI：A Message-Passing Interface Standard [R]. UK：The University of Edinburgh，1994.

[3] Xue M Y，Ning J G. Research on 3D Eulerian Numerical Simulation for Explosion [J]. Acta Armamentarii，2006，27(6A)：129-132.（in Chinese）
薛妙轶，宁建国. 三维爆炸问题的 Euler 数值方法研究 [J]. 兵工学报，2006，27(6A)：129-132.

[4] Chen G L，An H，Chen L. The Architecture of Parallel Compute [M]. Beijing：Higher Education Press，2004.（in Chinese）
陈国良，安　虹，陈　崚，等. 并行算法实践 [M]. 北京：高等教育出版社，2004.

[5] Ma T B，Wang C，Ning J G. Multi-Material Eulerian Formulations and Hydrocode for the Simulation of Explosions [J]. CMES：Computer Modeling in Engineering & Sciences，2008，33(2)：155-178.

[6] Ning J G，Chen L W. Fuzzy Interface Treatment in Eulerian Method [J]. Sci China Ser E－Eng Mater Sci，2004，47(5)：550-568.

[7] Harvie D J E，Flectcher D F. A New Volume of Fluid Advection Algorithm：The Stream Scheme [J]. J Comput Phys，2000，162：1-32.

[8] Harvie D J E，Flectcher D F. A New Volume of Fluid Advection Algorithm：The Difined Donating Region Scheme [J]. Int J Numer Meth Fl，2001，35：151-172.

[9] Shi J M. Software Engineering－Principle，Method and Apply [M]. Beijing：Higher Education Press，2002.（in Chinese）
史济民. 软件工程——原理、方法与应用 [M]. 北京：高等教育出版社，2002.

Study on Parallel Algorithm of Eulerian Method for Three-Dimensional Multi-Material Plastic-Elastic Hydrokinetics

MA Tian-Bao[1]，FEI Guang-Lei[1]，ZHANG Wen-Yao[2]

（1. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology，Beijing Institute of Technology，Beijing* 100081，*China*；
2. *Beijing Laboratory of Intelligent Information Technology，School of Computer Science and Technology，Beijing Institute of Technology，Beijing* 100081，*China*）

Abstract：Parallel computing of 3D explosion and shock processes on the parallel computer is effective means for the large-scale numerical study of explosion and shock process. Considering the complexity of the parallel programming，the overall strategy for parallel programming of 3D mutil-material hydro-elastoplastic hydrocode MMIC-3D was discussed，and the PMMIC-3D parallel hydrocode was designed based on MPI（Message Passing Interface）. In addition，a practical plan of program testing was presented. The speedup，efficiency and scalability of the PMMIC-3D parallel hydrocode were tested on the cluster consisting of 8 nodes based on the numerical example of shaped charge jet，and the effect of the bottlenecks of PMMIC-3D parallel hydrocode was discussed.

Key words：explosion and shock；parallel computing；Message Passing Interface(MPI)；program test