

爆轰驱动动力学计算程序的并行计算研究

黄娇凤¹, 钟 敏¹, 李于锋², 李 平¹, 柏劲松¹

(1 中国工程物理研究院 流体物理研究所, 四川 绵阳 621900;

2 中国工程物理研究院 计算机应用研究所, 四川 绵阳 621900)

摘 要: 本文针对自行研制的二维爆轰驱动动力学计算程序 LSFC2D 的结构化网格特点, 采用递归对分的区域剖分技术以及全局重分和局部微调相结合的动态负载平衡技术, 实现了欧拉网格间的物理量传递, 使得程序能够在高性能并行计算机上运行, 解决了计算物理模型的计算规模和计算时间问题. 在计算集群上进行了并行程序的正确性验证和并行性能测试, 结果表明, 150 万网格量时并行计算效率达到了 50% 以上.

关键词: LSFC2D; 并行计算; 结构化网格; level set; 负载平衡

中图分类号: TP301

文献标识码: A

文章编号: 1000-7180(2012)09-0031-04

Research of Parallel Computation on Detonation-driver Kinetics Program

HUANG Jiao-feng¹, ZHONG Min¹, LI Yu-feng², LI Ping¹, BAI Jing-song¹

(1 Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China;

2 Computer Application Institute, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

Abstract: Parallel computation on self-developed 2D detonation-driver kinetics program LSFC2D is investigated. According to the structured mesh feature, iterative-dividing local generation technique, as well as dynamic load balance technique with global regeneration and local fine tune, are adapted. Communication of physical quantities between Euler mesh is realized. Therefore, the program can perform on high-quality parallel computers, solving the problem of calculation scale and time of the physical models. Validation and parallel efficiency tests are carried out on cluster. The results show that for 1.5 million grid points, the parallel efficiency is above 50%.

Key words: LSFC2D; parallel computation; structured mesh; level set; load balance

1 引言

自行研制的二维爆轰驱动动力学计算程序 LSFC2D^[1], 沿用原有 HELP^[2] 程序的思想, 采用欧拉方法, 将空间划分为固定的网格, 网格间通过格边相互作用, 计算这些网格的质量、动量和能力的变化模拟物理过程, 引入 Level Set (LS)^[3-4] 方法描述并处理混合物质的界面推进问题, 取得了良好效果; 为了较好的模拟非理想爆轰过程, 研究了利用贴体坐标系和 DSD 结合计算非理想爆轰波阵面传播的方法^[5], 成功将其应用于二维爆轰驱动问题的数值计

算, 验证了其理论模型和计算方法的有效性, 解决了爆轰实验中出现的问题, 如多介质、大变形和三维结构响应等问题. 国外如洛斯·阿拉莫斯国家实验室 (LANL) 用于计算三维高速流动和材料大变形问题的欧拉并行程序 PAGOSA, 另外还有圣地亚国家实验室 (SNL) 的三维欧拉流体动力学计算程序 CTH, 广泛应用于内爆动力学、常规武器以及细观模拟等方面. 为了进行更精确地数值模拟, 需要增大计算欧拉网格的规模, 而大规模的计算如果只在一个计算结点上串行进行, 则是很耗时的, 或者因为内存等原因是不可行的, 为此, 程序需要进行并行化处理, 才能符

收稿日期: 2012-02-15; 修回日期: 2012-03-11

基金项目: 国家自然科学基金(11072228); 中国工程物理研究院发展基金(2011B0202005)

合计算需求,并充分利用现有高性能并行计算机.

2 LSFC2D 并行化技术及其实现

2.1 递归对分技术

对于基于网格的数值模拟程序,做分布式并行化的一般思路是先做区域剖分,然后每个进程各自完成自己的计算,再进行汇总更新,在每个时间步反复执行此过程以完成整个计算的模拟.因为二维串行程序 LSFC2D 是针对一个矩形区域进行计算,在不改变程序基本结构的前提下,使用矩形分区是自然的选择,对于结构化网格,使用索引省去了大量复杂的表示边界的数据结构.为了将计算区域分割成若干个矩形,使各个矩形区域分别在不同的计算节点上计算,需要使用一定的分区策略.考虑到计算模型的多样性,设计了二维递归坐标对分方法^[6].

设计二维分区方法,而不是一维分区的优点在于能够按照模型自身特性进行自适应划分,达到负载均衡并减少并行通信量的目的.如图 1 所示,假设某计算过程的计算网格如图 1 中(a)所示白色矩形,其中灰色为其中计算量最大的区域,表征某种物理计算过程,并假设其一横一竖的结构宽度均为一个网格的宽度.图 1 中(b)和(c)所示为一维剖分,(d)为二维剖分.可以看出(d)的剖分能保证计算量的负载均衡,又能考虑通信量的最小化,是较好的剖分方法.

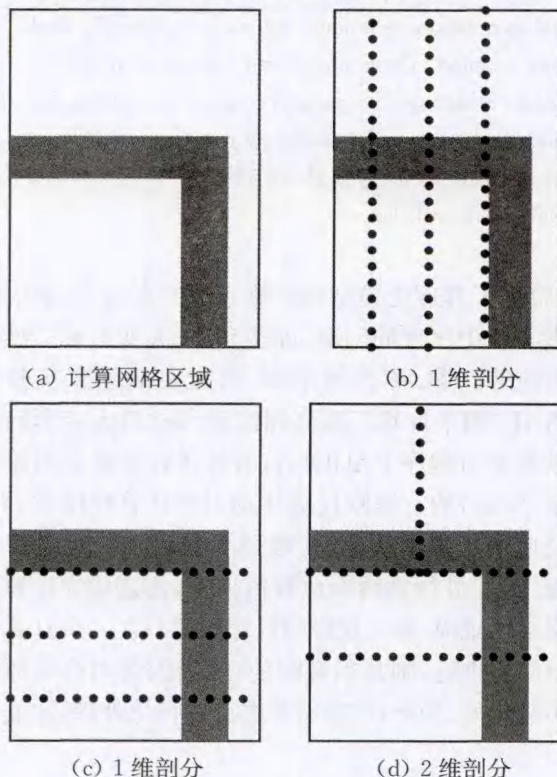


图 1 1 维和 2 维区域剖分方法比较

本程序的并行化选择了二维剖分方法,具体实现为:先将计算区域按照“最长”维按照权重累计进行一分为二,进而在对两个子分区重新选择“最长”维根据权重累计进行一分为二,如此下去,以达到适当的分区数.图 2 为剖分为 16 个子区域的计算分区,很好的适应了物理模型以及计算量的分布.

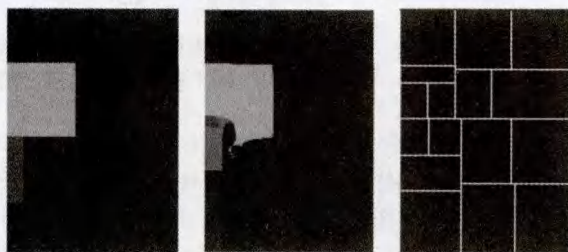
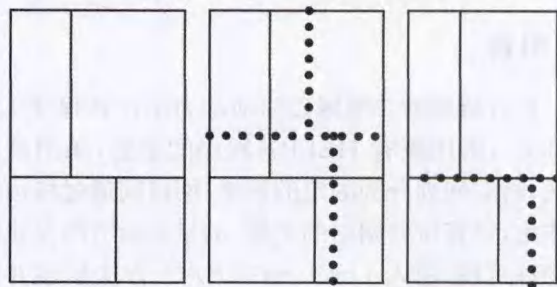


图 2 并行分区示意图(计算区域剖分成 16 个子区域)

2.2 动态负载均衡

由于流体在欧拉网格中的流动,使得单个网格中的计算量是不固定的,如何调整分区适应当前一段时间的计算,达到充分利用并行机资源,减少运行时间等目的是十分重要的.在 LSFC2D 的并行化程序中,通过全局重分和局部微调相结合的方式实现了动态负载均衡.

全局重分的含义是,当程序运行到一定的时间步,收集所有进程的网格计算权重到主进程(如 0 号进程),在主进程进行网格的重划分,将重划分的结果广播给所有进程(在结构化网格的矩形划分方式中,每个分区只需要 4 个整数就可唯一确定),每个进程根据新分区和旧分区的相对位置计算,就可以得到相应的发送和接受数组关系,通过这个关系进行物理量和标志位数组等的传递,以完成重建,进行下一步的时间计算,全局重新剖分如图 3(b)所示.



(a) 原始分区 (b) 全局重新剖分 (c) 局部微调

图 3 动态负载均衡

局部微调的含义是,当程序运行到某一时刻末尾,进行一对一的调整,如 0 号对 1 号;2 号对 3 号,……,这些一对一的调整是局部的,不需要别的进程参入.因为采用了坐标对分,所以这种微调总是可行

的,而且总是单向传递(权重相关数组除外)相关数组.这种微调相对代价较小,可以配合全局重分进行更好的负载平衡,图3(c)展示了局部微调的含义,可见在图中间的一条横向边界并没有改变,改变的仅仅是递归对分过程中最后一次的分区边界的调整,而且并没改变分界线的方向.

全局调整和局部微调的共同点是都能做到一定的动态负载平衡,不同点在于:全局调整能更好的满足计算负载平衡要求,但可能带来调整的较大开销,调整过程中有可能有大量的数据迁移现象;局部微调的特征正好与前者是相反的,在数据迁移量不大的情况下实现了相邻两个分区间的计算负载平衡,但是在全局计算范围内若有较大的计算量随空间变化时,并没有得到整体负载平衡.所以,在实际问题中,建议两者相结合的方式,在时间步循环中,局部微调可以比全局微调更频繁一些,以利用两者优点,取得更高效率.

3 并行程序测试

3.1 测试模型

LSFC2D并行程序主要针对两类模型进行测试,分别是碰撞模型和爆轰模型,如图4所示.测试模型1为模拟铜块撞击铝块的撞击过程,初始时刻铝块静止,铜块有一初始速度.测试模型2为点起爆模型,在一封闭金属罩内充满炸药,通过文件给定炸药的起爆时间.



(a) 测试模型 1

(b) 测试模型 2

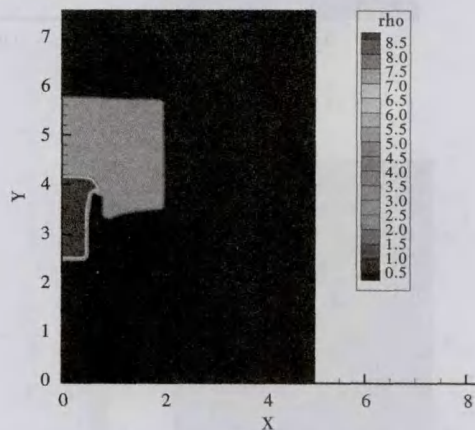
图4 测试模型初始状态

该并行程序的测试环境为计算机应用研究所仿真中心的银河群星集群服务器,该服务器共有64个计算节点,每个节点拥有2个CPU,共有128CPU(2×64),节点间采用千兆以太网互联,浮点运算速度达到8976亿次/秒,各节点内存容量合计272G.

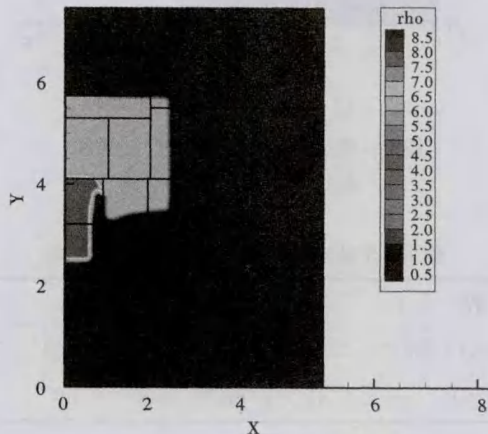
3.2 正确性测试

对于串行程序的运行结果和并行程序的运行结果对比如图5和图6所示.图5中设定模型1的网

格规模为1.5万,图5(a)为该模型在原来串行程序中的密度云图结果,图5(b)为该模型在并行程序的运行结果,其中并行采用了16个进程计算.图6对模型2在串行程序和并行程序运行结果之间进行了对比,模型规模为6万,其中图6(a)是模型2在串行程序上的运行结果,图6(b)是并行程序在四个进程运行时得到的密度云图结果.从两个模型中都可以看出,串行程序和并行程序的结果是一致的,能够保证并行程序的正确性^[7].



(a) 串行密度云图结果



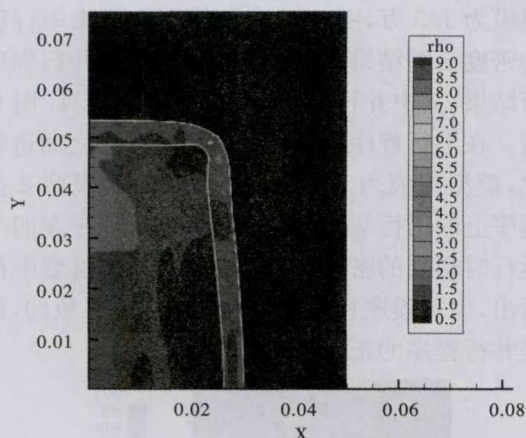
(b) 并行密度云图结果

图5 模型1 串行程序运行结果和并行程序运行结果对比

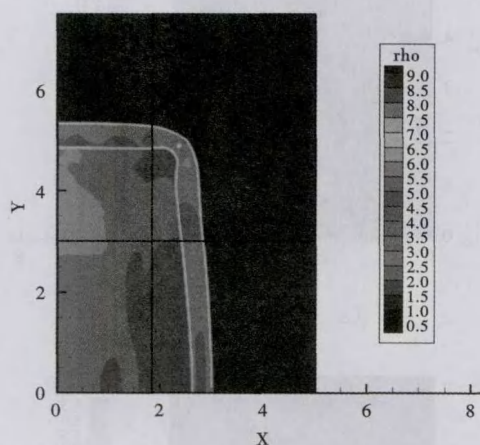
3.3 并行效率测试

在模型1中进行,将测试网格规模设定为150万,测试结果见表1和表2.其中表1是没有动态负载平衡的并行程序测试性能数据,表2是添加动态负载平衡时的性能数据.

表2中负载平衡采用20步做一次全局重分,10步做一次局部调整;可见如果采用了动态负载平衡策略,则效率有较好的改进.



(a) 串行密度云图结果



(b) 并行密度云图结果

图 6 模型 2 串行程序运行结果和并行程序运行结果对比

表 1 无动态负载平衡时程序并行效率

进程数	1	2	4	8	16	32
时间(s)	36020	22106	13690	7765	4363	2259
效率(%)	—	81	66	58	52	50

表 2 增加动态负载平衡后程序并行效率

进程数	1	2	4	8	16	32
时间(s)	36020	20885	13233	7652	4126	2101
效率(%)	—	86	68	59	55	54

4 结束语

根据 LSFC2D 程序的结构化网格特点,采用递归对分的区域剖分技术以及全局重分和局部微调相结合的动态负载平衡技术,实现了欧拉网格间的物理量传递,使得程序能够在高性能并行计算机上运行.解决了计算物理模型的计算规模问题,也能够同等规模下大大缩短计算时间.在计算集群上进行了并行程序的正确性验证和并行性能测试,结果表明,150 万网格量时并行计算效率达到了 50%以上.

参考文献:

- [1] 钟敏,唐蜜,李平. 基于欧拉方法的超高速撞击数值计算程序研发及初步应用[C]//第六届全国空间碎片学术交流会. 中国: 成都, 2011.
- [2] Hageman L J, Walsh J M. HELP: a multi-material eulerian program for compressible fluid and elastic-plastic flows in two dimensions and time [R]. Report 3SR-350, Ballistic Research Laboratories, 1971.
- [3] Brry Merriman, James K. Bence, Stanley J Osher. Motion of multiple junctions; a level set approach[J]. J. Comput Phys, 1994(112):334-363.
- [4] Danping Peng, Barry Merriman, Stanley Osher. A PDE-based fast local level set method[J]. J. Comp. Phys, 1999(155): 410-43.
- [5] 陈森华. 贴体坐标系中多维非理想爆轰波阵面传播计算的位标函数法[J]. 高压物理学报, 2000(14): 280-284.
- [6] Dongarra J. 并行计算综论[M]. 莫则尧,译. 北京:电子工业出版社, 2005(5): 338-339.
- [7] 张林波. 并行计算导论 [M]. 北京:清华大学出版社, 2006.

作者简介:

黄娇凤 女, (1973—), 硕士, 副研究员. 研究方向为并行算法及程序设计.