

文章编号: 1001-2486(2011)06-0120-04

激光辐照下树脂基复合材料温度场 MSPH 算法的并行化*

陈敏孙, 江厚满, 刘泽金

(国防科技大学 光电科学与工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘要:改进的光滑粒子方法在模拟激光对树脂基复合材料的辐照效应时具有明显优势,但串行计算通常难以满足需求。为了提高程序的运行效率,基于消息传递界面并行编程环境实现了串行程序的并行化。将个人电脑完成的串行计算结果与峰值5万亿次的计算机集群完成的并行计算结果进行了比较,并对并行程序的加速比和并行效率进行了测试。数值计算表明,并行计算结果与串行计算结果一致,且并行效果显著,说明基于消息传递界面的并行化是成功的。

关键词:激光辐照;树脂基复合材料;改进的光滑粒子方法;消息传递界面;并行化

中图分类号: O433.5⁺4 **文献标识码:** A

Parallelization of MSPH Simulating the Temperature Field of Resin Composite Irradiated by Laser

CHEN Min-sun, JIANG Hou-man, LIU Ze-jin

(College of Opto-Electronic Science and Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The modified smoothed particle hydrodynamics method (MSPH) has obvious advantages on simulating the radiation effects of resin composite irradiated by laser, but the serial computation is difficult to meet the demand. In order to improve the computational efficiency of the serial MSPH program, the parallelization of the serial program was carried out by using the message passing interface (MPI) standard. The parallel computing results were compared with the serial computing results given by a personal computer, and the performances of the parallel program involving speed-up and efficiency are tested on a 5 teraflop computer cluster. Numerical calculations show that the parallel computing results are consistent with the serial computing results, thus obtaining a very good parallel performance. Therefore, the parallelization based on MPI is successful.

Key words: laser irradiation; resin composite; Modified Smoothed Particle Hydrodynamics(MSPH); the Message Passing Interface(MPI); parallelization

树脂基复合材料在激光辐照下通常会发生复杂的物理化学变化,可能涉及材料热分解、烧蚀、气化和比较复杂的界面问题。如果采用网格法进行模拟,可能由于网格畸变而得到错误的结果。考虑到改进的光滑粒子(Modified Smoothed Particle Hydrodynamics, MSPH)方法适用于处理大变形、网格“畸变”和材料烧蚀等问题,且算法实现比常规方法要容易得多^[1-3]。在模拟激光辐照下复合材料树脂基热解时的温度场时,选择MSPH为数值计算方法。

尽管MSPH方法在许多应用领域中很受欢迎,但却需要较高的运算速度。以粒子数为64000,时间步长为0.001s,计算12000步的计算规模为例,对于CPU主频2.66GHz、内存2.0G的

个人电脑而言,串行程序需要运行260h左右,为我们的数值研究带来了很大不便。因此,为了减少MSPH程序的运行时间,并行化操作非常必要。

在SPH方法提出后,已有许多并行计算技术被用于提高SPH程序的计算性能。Lia^[4]等开发了模拟X射线星系簇群形成的并行树形SPH程序。Thacker^[5]等基于OpenMP/ Fortran77应用程序平台,开发了模拟宇宙流体动力学的共享存储并行SPH程序。Ferrari^[6]等基于消息传递界面(Message Passing Interface, MPI),使用非阻塞通信操作,开发了模拟自由表面流问题的3维并行SPH程序。

鉴于MPI具有移植性好、可扩展性好和效率高等优点^[7-8],选择MPI作为并行编程环境。考

* 收稿日期:2011-03-04

基金项目:国家部委基金资助项目

作者简介:陈敏孙(1981—),男,博士生。

虑到非阻塞通信操作对于我们所考虑的问题不太适用,采用集合通信操作,实现了串行 MSPH 程序的并行化。在峰值 5 万亿次的计算机集群上对并行 MSPH 程序的性能进行测试,结果表明并行编程非常成功。

1 并行化实现

1.1 温度场控制方程

描述激光辐照下树脂基复合材料内部温度场 T 的 3 维偏微分方程为

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + (h_g - \bar{h}) \frac{\partial \rho}{\partial t} + (f_g \rho_g v_{gz}) \frac{\partial h_g}{\partial z} + q_{laser} \quad (1)$$

式中: ρ 为部分分解材料的密度; c_p 为比定压热容; k 为热导率; h_g 为热分解气体热函; f_g 为热分解气体体积分数; ρ_g 为热分解气体密度; v_{gz} 为热分解气体沿激光加载方向的速度; q_{laser} 为激光热源项; $\bar{h} = \frac{\rho_v h_v - (\rho_c h_c + \eta \rho_g h_g)/(1 + \eta)}{\rho_v - (\rho_c + \eta \rho_g)/(1 + \eta)}$, 其中, ρ_v 为初始材料密度, ρ_c 为炭化物密度, h_v 为初始材料热函, h_c 为炭化物热函, η 为表征炭化物疏松度的常数。

在热分解气体的运动是 1 维(沿激光辐照方向, z 方向)和热分解气体与它们所流过的炭化物达到热平衡的假设下^[9-10] $f_g \rho_g v_{gz}$ 满足

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial (f_g \rho_g v_{gz})}{\partial z} \quad (2)$$

$$f_g \rho_g v_{gz} = - \int_z^{z_b} \frac{\partial \rho}{\partial t} dz' \quad (3)$$

式中: z_b 为后表面坐标。

1.2 MSPH 算法简介

在传统的 SPH 方法中,函数 $f(x)$ 在 x 点范围 Ω 内的近似值为

$$\tilde{f}(x) = \int_{\Omega} f(\xi) W(x - \xi, h) d\xi \quad (4)$$

式中: $W(x - \xi, h)$ 为核函数;函数 $f(x)$ 的近似值 $\tilde{f}(x)$ 依赖于两个参数,核函数 $W(x - \xi, h)$ 和影响核函数 $W(x - \xi, h)$ 支持域的扩张量 h 。

为了数值求解式(4),假设 Ω 范围内的质量分解成 N 个粒子的质量 m_1, m_2, \dots, m_N 和密度 $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N$, 得到第 i 个粒子的近似值为

$$f_i = \sum_{j=1}^N f_j W_{ij} m_j / \rho_j; W_{ij} = W(x^{(i)} - \xi^{(j)}) \quad (5)$$

在 $x = x^{(i)}$ 点将函数 $f(x)$ 泰勒展开,并只保留前 3 项得

$$f(\xi) = f(x^{(i)}) + \frac{\partial f}{\partial x_{\alpha}} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) (\xi_{\beta} - x_{\beta}^{(i)}) \quad (6)$$

式(6)中:求和包含在重复下标 α 和 β 中。

在上式两边同时乘以核函数 $W(x - \xi, h)$, 并在 Ω 范围内积分得

$$\int_{\Omega} f(\xi) W d\xi = f_i \int_{\Omega} W d\xi + f_{\alpha i} \int_{\Omega} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) W d\xi + \frac{1}{2} f_{\alpha \beta i} \int_{\Omega} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) (\xi_{\beta} - x_{\beta}^{(i)}) W d\xi \quad (7)$$

用 $W_{\gamma} = \partial W / \partial \xi_{\gamma}$ 和 $W_{\gamma \delta} = \partial^2 W / \partial \xi_{\gamma} \partial \xi_{\delta}$ 代替 W , 并在 Ω 范围内积分得

$$\int_{\Omega} f(\xi) W_{\gamma} d\xi = f_i \int_{\Omega} W_{\gamma} d\xi + f_{\alpha i} \int_{\Omega} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) W_{\gamma} d\xi + \frac{1}{2} f_{\alpha \beta i} \int_{\Omega} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) (\xi_{\beta} - x_{\beta}^{(i)}) W_{\gamma} d\xi \quad (8)$$

$$\int_{\Omega} f(\xi) W_{\gamma \delta} d\xi = f_i \int_{\Omega} W_{\gamma \delta} d\xi + f_{\alpha i} \int_{\Omega} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) W_{\gamma \delta} d\xi + \frac{1}{2} f_{\alpha \beta i} \int_{\Omega} (\xi_{\alpha} - x_{\alpha}^{(i)}) (\xi_{\beta} - x_{\beta}^{(i)}) W_{\gamma \delta} d\xi \quad (9)$$

对于 3 维情况 ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$), 式(7) ~ (9) 在 $x = x^{(i)}$ 点组成了包含 10 个未知变量 ($f_i, f_{\alpha i}$ 和 $f_{\alpha \beta i}$) 的 10 维方程组。

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi(1) = W_{ij} \\ \Phi(2) = W_{ij,x} \\ \Phi(3) = W_{ij,y} \\ \Phi(4) = W_{ij,z} \\ \Phi(5) = W_{ij,xx} \\ \Phi(6) = W_{ij,yy} \\ \Phi(7) = W_{ij,zz} \\ \Phi(8) = W_{ij,xy} \\ \Phi(9) = W_{ij,yz} \\ \Phi(10) = W_{ij,xz} \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} \Theta(1) = 1 \\ \Theta(2) = x_j - x_i \\ \Theta(3) = y_j - y_i \\ \Theta(4) = z_j - z_i \\ \Theta(5) = (x_j - x_i)^2 / 2 \\ \Theta(6) = (y_j - y_i)^2 / 2 \\ \Theta(7) = (z_j - z_i)^2 / 2 \\ \Theta(8) = (x_j - x_i)(y_j - y_i) \\ \Theta(9) = (y_j - y_i)(z_j - z_i) \\ \Theta(10) = (x_j - x_i)(z_j - z_i) \end{array} \right. \quad (10)$$

$$B_{IJ} = \int_{\Omega} \Phi(I) \Theta(J) d\xi = \sum_{j=1}^N \Phi(I) \Theta(J) m_j / \rho_j \quad (11)$$

$$F = \{f_i, f_{xi}, f_{yi}, f_{zi}, f_{xxi}, f_{yyi}, f_{zxi}, f_{xyi}, f_{yzi}, f_{xzi}\}^T \quad (12)$$

$$T_i = \sum_{j=1}^N f_j \Phi(I) m_j / \rho_j \quad (13)$$

可以将式(7)~(9)表示为

$$T = BF \text{ 或 } B_{ij}F_j = T_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (14)$$

通过求解式(14)便可以得到 F_1, F_2, \dots, F_{10} , 为了使式(14)定义的矩阵 B 非奇异,对于 1 维、2 维和 3 维情况, N 的取值至少为 3, 6 和 10。

1.3 串行 MSPH 程序并行化

在串行 MSPH 模拟程序中,以粒子编码为循环迭代变量的循环计算发生得相当频繁,并且测试表明,此类循环计算是典型 MSPH 模拟中最耗时的部分。为此,本文的并行化操作主要针对此类循环计算,即用多个处理器完成该循环计算。

将 NP 个处理器引入到循环计算中,并假定粒子数为 NUM ,且满足 $NUM = q \times NP$,其中 q 为商数,那么有如图 1 所示的循环计算并行处理过程。此时,每个处理器所消耗的时间可以得到相当好的平衡,可提供近似线性的加速。图 2 给出的是并行处理时,每个处理器缓冲区的数据内容。

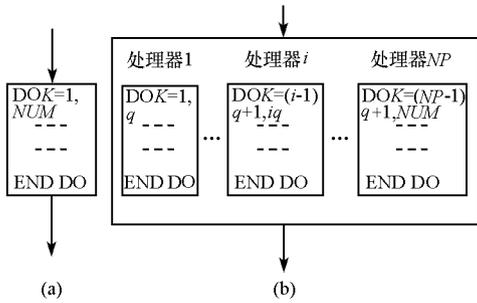


图 1 循环计算的并行化

Fig. 1 Parallelization of loop computing

进程1	进程2	进程 <i>i</i>	进程 <i>NP</i>
1	0		0
0	2		0
⋮	⋮	⋯⋯⋯	⋮
0	0		<i>NP</i>

图 2 各处理器缓冲区数据内容

Fig. 2 Data in the buffer of every processor

值得指出的是,基于 MSPH 算法模拟激光对树脂基复合材料的破坏效应时, MSPH 程序中的循环计算并不是独立的,往往需要将组中所有进程输出缓冲区的数据连接在一起,作为所有进程的输入缓冲区内容。理论上讲, $MPI_Allgather$ 函数^[7]正好具有此功能,图 3(a)给出的是图 2 所示的缓冲区数据经 $MPI_Allgather$ 函数收集操作后的效果图。不难发现,对于图 2 所示的缓冲区数据, $MPI_Allgather$ 函数并不能直接对其进行有效

收集。

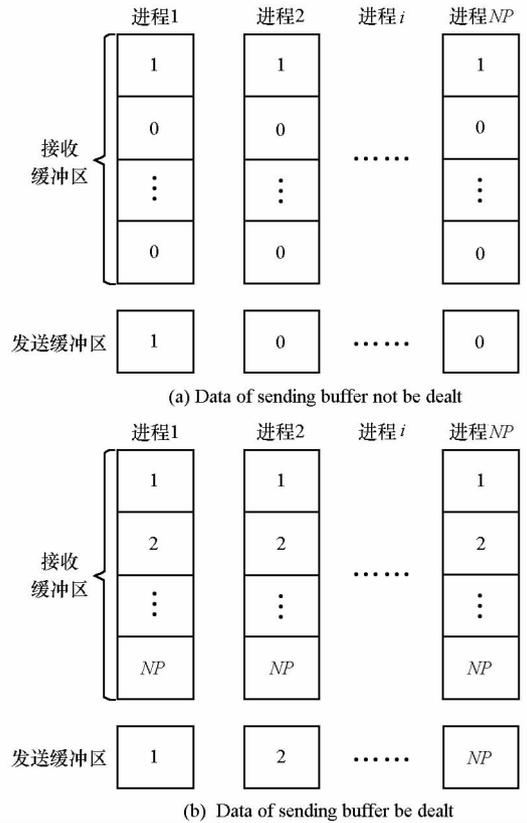


图 3 $MPI_Allgather$ 函数的执行效果

Fig. 3 Execution effect of $MPI_Allgather$ function

分析认为,有 2 种方法可以对图 2 所示的数据进行有效收集,方法 1 是对图 2 所示的数据进行处理,使得 $MPI_Allgather$ 函数能对其有效收集;方法 2 是开发其他 MPI 收集函数,直接对图 2 所示的数据进行有效收集。

方法 1 需要定义过渡矩阵,不仅对并行计算平台的内存提出了更高的要求,而且增加了 CPU 的计算量。如果开发出直接对图 2 所示的数据进行有效收集的 MPI 收集函数,不仅可以降低对并行计算平台内存的要求,还可以提高计算效率。然而,就目前而言,只能采取方法 1。图 3(b)给出的是图 2 所示的数据经处理后,再由 $MPI_Allgather$ 函数收集时的效果图。

基于 MPI 并行编程环境,实现了模拟激光照射下树脂基复合材料温度场的串行 MSPH 程序的并行化。并行操作主要针对循环计算,除了预处理、各粒子对激光的吸收和后处理分析中的循环采用串行计算实现外,程序中的其他循环都采用并行计算。并行 MSPH 程序执行过程的主要步骤如下:

- (1) 串行输入初始粒子信息和计算所需的其他数据;
- (2) 并行搜索每个粒子的支持域粒子;

(3) 串行计算每个粒子对激光的吸收(各粒子对激光的吸收不独立,具有强联结特性,并行计算并不能提高效率);

(4) 并行计算每个粒子的密度及其变化率;

(5) 并行计算每个粒子的导热系数、气体热函数和温度及其各阶导数;

(6) 并行更新计算每个粒子的温度并判断是否烧蚀;

(7) 串行后处理分析,输出粒子的信息,如果计算时间小于初始设定的计算时间,返回步骤(2)。

2 并行 MSPH 程序性能测试

2.1 并行计算平台

并行计算在峰值 5 万亿次的机群上进行,每个计算节点有 8 个主频为 2.33GHz 的 CPU 核,每个节点内存为 8G,每个节点上的操作系统均为 RedHat Linux AS4.0,并行计算环境采用 MPICH2,通过 Infiniband 高速互连组成,采用全局共享并行文件系统,存储容量达到 8TB。

2.2 并行程序测试

选取激光辐照玻璃钢复合材料为算例测试并行 MSPH 程序的正确性及性能,串行 MSPH 程序在个人电脑(主频 2.66GHz、内存 2.0G)上进行,并行 MSPH 程序在峰值 5 万亿次的计算机集群上进行。计算表明,并行计算结果与串行计算结果一致,说明并行 MSPH 程序是正确的(本文侧重的是串行 MSPH 程序的并行化,不给出温度场分布)。表 1 给出的是并行 MSPH 程序在不同并行规模下,完成相同任务(粒子数 64000、计算步数 12000)所消耗的时间。

表 1 并行程序性能测试纪录

Tab.1 Performance testing records of the parallel program

数据规模	64000 粒子/12000steps			
	并行规模	计算时间(s)	加速比	并行效率
个人电脑 1 CPU	947837.0	-	-	-
集群 1 CPU	117159.4	1.00	100%	
集群 2 CPU	58874.1	1.99	99.5%	
集群 4 CPU	29775.6	3.93	98.3%	
集群 8 CPU	15277.2	7.67	95.9%	
集群 16 CPU	8077.8	14.50	90.6%	
集群 32 CPU	4544.0	25.78	80.6%	
集群 64 CPU	2902.4	40.37	63.1%	
集群 128 CPU	1653.2	70.87	55.4%	

从表 1 可以看出:随着进程数的增加,加速比呈增大趋势,进程数为 128 时的加速比接近 71,如果与个人 P4 电脑相比,加速比超过 570,说明

并行 MSPH 程序的并行效果明显;随着进程数的增加,并行效率呈下降趋势,当进程数为 128 时,并行效率降至 55.4%,说明想通过进一步增加进程数来提高加速比可能会比较困难,初步认为是因为每个时间步长内都要串行循环计算各粒子对激光的吸收。

3 结论

基于 MPI 并行编程环境,实现了模拟激光辐照下树脂基复合材料温度场的串行 MSPH 程序的并行化。在峰值 5 万亿次的计算机集群上对并行 MSPH 程序的性能进行了测试,并将并行计算结果与个人电脑(串行)计算结果进行了比较。计算表明,并行计算结果与串行计算结果一致,且并行效果显著,说明文中对串行 MSPH 程序的并行化是成功的。

此外,虽然本文完成的是模拟激光辐照下树脂基复合材料温度场的串行 MSPH 程序的并行化,但文中的并行化思路并不仅限于此,对于其他串行 MSPH 程序的并行化同样适用。另外,如果开发出能够直接对图 2 所示的数据进行有效收集的 MPI 收集函数,不仅可以降低对并行计算平台内存的要求,还可以提高计算效率。

致谢:感谢国防科技大学计算机学院高性能计算应用研究中心的吴建平、赵娟和龚慧等老师提供的帮助!

参考文献:

- [1] 刘更,刘天祥,谢琴.无网格法及其应用[M].西安:西北工业大学出版社,2005.
- [2] Zhang G M, Batra R C. Modified Smoothed Particle Hydrodynamics Method and Its Application to Transient Problems [J]. Computational Mechanics, 2004 (34): 137-146.
- [3] Liu G R, Liu M B. 光滑粒子流体动力学——一种无网格粒子法[M].韩旭,杨刚,强洪夫,译.长沙:湖南大学出版社,2005.
- [4] Lia C, Carraro G. Parallel Tree-SPH: A Tool for Galaxy Formation [J]. Astrophysics and Space Science, 2001 (276): 1049-1056.
- [5] Thacker R J, Couchman H M P. A Parallel Adaptive P³M Code with Hierarchical Particle Reordering [J]. Computer Physics Communications, 2006(174): 540-554.
- [6] Ferrari A, Dumbser M, Toro E F, et al. A New 3D Parallel SPH Scheme for Free Surface Flows [J]. Computers & Fluids, 2009 (38): 1203-1217.
- [7] 陈国良.并行计算——结构·算法·编程[M].北京:高等教育出版社,2003.
- [8] 张武生,薛巍,李建江,等. MPI 并行程序设计实例教程[M].北京:清华大学出版社,2009.
- [9] Henderson J B, Wiebelt J A, Tant M R. A Model for the Thermal Response of Polymer Composite Materials with Experimental Verification [J]. Journal of Composite Materials, 1985(19): 579-595.
- [10] Torre L, Kenny J M, Maffezzoli A M. Degradation Behaviour of a Composite Material for Thermal Protection Systems Part 2: Process Simulation [J]. Journal of Materials Science, 1998 (33): 3145-3149.