

三维爆炸与冲击问题的大规模 高性能计算研究*

费广磊¹, 马天宝¹, 郝莉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. 北京建筑工程学院 理学院,北京 100044)

摘要: 爆炸与冲击问题常常涉及到材料的大变形、多种物质交界面处理及各种强间断的处理,对此类问题采用 Euler 方法具有显著的优势. 对于 Euler 方法的并行计算,由于在扰动未到达之前某些网格的物理量是不发生变化的,采用固定分区方法并行策略容易出现负载不均衡,且计算效率不高. 为解决这一问题,采用动态并行策略,即计算域随着扰动传播而扩充,并采用国际上通用的 MPI 并行模式设计出相应的动态并行程序. 从程序测试结果来看,动态并行程序结果与原有并行程序结果一致,且与实际情况也是一致的.

关键词: 爆炸与冲击; 动态并行; MPI; 空中爆炸

中图分类号: O383.1;O246 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2011.03.011

引 言

爆炸与冲击问题是高速、高温、高压等极端条件下的瞬态动力学问题,常常涉及到材料的大变形、多种物质交界面处理及各种强间断的处理,对爆炸与冲击问题的数值模拟比通常的流体力学问题、空气动力学问题及结构动力学问题要复杂得多^[1]. 爆炸与冲击问题的数值模拟按其采用的坐标可分为拉格朗日方法(Lagrange法)和欧拉方法(Euler法). Euler法网格固定,不存在因物质界面大变形产生网格扭曲. 因此对于爆炸与冲击这类涉及多物质的大变形流场问题,采用 Euler法具有显著的优势. 对三维问题进行数值模拟一个突出问题是计算规模大,网格数多达千万以上,远远超出了单个计算机所能承受的范围,因此开展三维问题的并行计算研究尤为重要.

爆炸与冲击问题包括诸如空中爆炸、聚能射流形成及侵彻等一些列复杂问题. 当采用 Euler法的数值模拟计算时,如果对整个计算域计算,在扰动到来之前,空气介质或者靶板等区域的物理量不会发生变化. 采用固定的区域分解的并行办法,容易出现负载不均衡的情况. 为

* 收稿日期: 2010-12-24; 修订日期: 2011-01-14

基金项目: 国家重点基础研究发展计划资助项目(2010CB832706); 爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)自主课题资助项目(ZDKT10-03b)

作者简介: 费广磊(1983—),男,河南人,博士生(Tel: +86-10-68912762;E-mail: glf630@yahoo.cn); 马天宝(1981—),男,黑龙江人,副教授(联系人.Tel: +86-10-68918315;E-mail: madabal@bit.edu.cn).

了提高计算效率,各个进程尽量负载均衡,采用目前国际上主流的 MPI(message passing interface)并行设计模式^[2],设计出爆炸与冲击问题的动态并程序。其具体实现方法是:初始计算域限定在一个能描述计算初始状态的最小区域内,随着扰动的传播扩大计算区域;同时考虑到负载均衡,根据计算区域动态的调整各个进程的计算范围以达到较好的负载均衡。

1 数学模型及数值方法

1.1 基本方程组

不考虑外力、外源和热传导,控制方程组为非守恒形式的 Euler 流体弹塑性动力学偏微分方程组如下^[3]:

质量守恒方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad (1)$$

动量守恒方程:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}; \quad (2)$$

能量守恒方程:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla e = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}). \quad (3)$$

1.2 数值方法

假定空间的计算域是一个长方体,分别在直角坐标系下的 3 个坐标维度上,将空间计算域离散成六面体网格。为了处理计算域周围的边界,保持程序编码的统一性,在其上、下、左、右各增加一排虚网格,所谓差分方法的边值条件,就是要给出虚网格上有关物理量。边界条件可按其边界类型给出,包括:连续性边界条件、固壁边界条件和自由面网格边界条件。时间的离散方法是满足 CFL(courant-friedrichs-lewy)稳定性条件。对于双曲型方程组而言,即使给定的初始条件非常光滑,它的解也可能发展成间断或激波。因此在对流体运动进行数值计算时,必须要考虑处理间断解的问题。本文使用人工粘性捕捉激波的间断解捕捉法。

1.3 算子分裂算法

计算采用算子分裂算法,按照物理效应进行分裂,将控制方程中的 3 个守恒方程以对流相和扩散相分成两步^[4]。守恒方程(1)~(3)按照各项的属性,可以统一的表示成如下的形式:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \mathbf{H}, \quad (4)$$

式中, ϕ 代表 ρ (密度), e (能量)和 \mathbf{u} (速度)等物理量;左边第 2 项,即 $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$,就是对流项, ϕ 也就是在空间上的通量; \mathbf{H} 为源项。物理效应意义上的算子分裂是指将每个形如式(4)的方程分裂成如下两个方程,在数值计算时也分成相应的两步完成:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mathbf{H}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (6)$$

在式(5)中,不考虑对流相的影响,只考虑源项的作用,得到网格各屋里来的中间值这一步称为 Lagrange 步;式(6)中考虑对流相的影响,通过计算网格间的输运量,对质量、动量及能量在

网格上重新分配,这一步称之为 Euler 步或输运步。

1.4 Euler 输运

Euler 输运步是按照质量、动量及能量守恒的原则,在 Lagrange 步基础上进行质量、动量及能量的重新分配。前人在界面跟踪算法方面提出了很多方法,应用的比较广泛的方法主要分为如下的 4 大类:格子类方法、波前追踪法、VOF 方法和用函数描述分界面的方法。这些方法虽然在理论上都可以向三维扩展,但是真正操作起来并不简单,而且处理多物质介质时过于复杂。模糊界面处理方法^[5]的主要思想是: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;根据输运质量和输运体积计算介质的密度;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 α 计算输运量;按模糊输运表进行输运。其主要过程有:介质分类、确定输运次序及输运量。

设计算域内含有 N 种介质,其编号为 $1, 2, 3, \dots, N$, 网格种类有按组合数计算共有 $C_N^0 + C_N^1 + \dots + C_N^N = 2^N$ 种情况,分为如下情况:

第 0 类, 空网格: $0(0)$;

第 1 类, 1 种介质的网格: $1(1), 1(2), \dots, 1(N)$;

第 2 类, 2 种介质的网格: $2(1, 2), 2(1, 3), \dots, 2(1, N),$
 $2(2, 3), 2(2, 4), \dots, 2(2, N),$
 \vdots
 $2(N - 1, N)$;

第 3 类, 3 种介质的网格: $3(1, 2, 3), 3(1, 2, 4), \dots, 3(1, 2, N),$
 $3(2, 3, 4), 3(2, 3, 5), \dots, 3(2, 3, N),$
 \vdots
 $3(N - 2, N - 1, N)$;

第 N 类, N 种介质的网格: $N(1, 2, 3, \dots, N)$ 。

这样就得到了 N 种介质的所有网格的分类。

在确定输运方案之前,根据模糊综合评判方法对介质输运优先权进行排序,采用的基本原则是:主动介质优先于被动介质(所谓主动介质是指介质本身含有极高的能量或极高的运动速度,如爆炸场中的炸药,侵彻中的动能杆及射流等);密度小者优先于密度大者,气体优先于固体;对于具体情况应该根据具体的模糊专家系统规定排序规则。优先权的判断是一个模糊综合评判,其值“大”者优先。对于 N 种介质只要介质种类有限,总以可以制定出响应的模糊输运表。不失一般性,设 3 种介质的介质标志为 m_1, m_2 和 m_3 , 其输运优先权为: $m_1 > m_2 > m_3$, 则沿着 x 方向的模糊输运表可制定如表 1。

$$\beta = \begin{cases} \frac{1}{2}(\theta_{id} + \theta_{ic}), & \theta_{ic} \neq 0, \\ \theta_{id}, & \theta_{ic} = 0, \\ 1, & \theta_{ic} = 1, \end{cases} \quad (7)$$

式中, θ_{ic}, θ_{id} 分别为接受网格和贡献网格中同种介质所占的体积比。

表 1 中

表 1 x 方向模糊输运表

Table 1 Fuzzy transport table along x direction

Contribution mesh	Acceptation mesh	Transport priority	Transport factor α
m1	arbitrary	m1	1
mix m1 with m2	have m2	$m2 > m1$	β
	no m1	$m2 > m1$	
	others	$m1 > m2$	
mix m1 with m2 and m3	no m1 or m2	$m3 > m1 > m2$	β
	no m1	$m2 > m1 > m3$	
	others	$m1 > m2 > m3$	

模糊界面方法的特点是逻辑简单、计算量小,特别适合于处理三维、3 种以上介质的计算问题,其缺点是计算过程中会使得物质界面变的模糊,但可以通过增加网格数、缩小网格步长的方法来解决,采用大规模高性能计算可以有效解决这一问题。

2 动态并行程序实现方法

域分解是指把计算域分成若干重叠或非重叠的子区域,一个处理器处理一个或多个子区域。分解成非重叠的子区域的方法主要用于隐式或半隐式差分格式,这种格式所要求解的大型稀疏矩阵将会随着子区域分裂成若干子矩阵,并行实现起来比较复杂^[6]。MMIC3D 程序中采用显示的差分格式,因此并行实现采用把计算域分解成若干重叠的子区域的方法。为说明情况以二维为例,如图 1 所示,将一个二维的计算域分解成 4 个子区域,其中灰色的重叠的网格称为“子区域边界虚网格”。

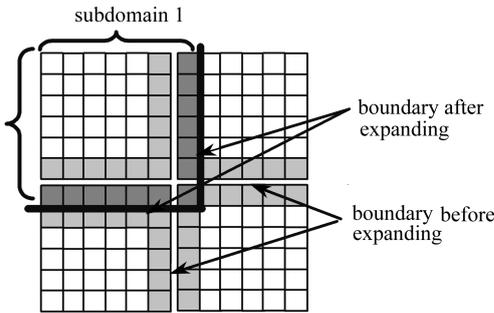


图 1 重叠子区域

Fig.1 Subdomains and overlapping

在采用固定分区方式的静态并行程序的基础上,MMIC3D 动态并行程序增加了初始计算域分割、计算域扩充及数据定位等模块,修改了数据通信、二维三维结果输出等模块。

2.1 初始计算域分割

初始计算域的确定与所模拟的问题的有关,一般为能描述清楚模型的基本状态的最小立方体。比如对于空中爆炸问题,初始计算域为能描述清楚炸药形状的最小立方体;对于射流问题,初始计算域为能描述清楚药型罩形状的最小立方体。

计算域随着扰动传播而扩大,程序中判定扰动到达计算域边界的标准为:待扩充计算域边界的压力或速度变化的绝对值是否大于特定的阈值。程序中压力阈值为大气压的 10^{-4} 倍,速度阈值为炸药 CJ 爆速的 10^{-6} 倍。计算域扩充可以在 3 个方向沿着两端进行,但大部分的问题可简化为一个方向沿着一端扩充。下面以 z 方向为例说明计算域扩充及子区域计算起始位置的确定。

设模型在 z 方向的总网格数为 $kmax$,初始计算域 z 方向的参与计算的网格数为 $icoutz$,采用域分界策略, z 方向分了 npz 个子区域, z 向的子区域坐标 $mepz$ 分别为 $0, 1, \dots, npz-1$ 。由于 $icoutz$ 随着计算域的扩大而增大, $icoutz$ 可能不是 npz 的整数倍,则每个子区域 z 向分配的网格数 $dmaxz$ 有两种情况,如图 2 所示,其中灰色为网格数较多的子区域。为了方便动态并行扩充

数据时数据移动,初始时每个子区域在其一端预留一段空闲网格,其个数 $kidl = kmax/npz - dmaxz$,如图 3 所示。

$$dmaxz = \begin{cases} \left\lceil \frac{icoutz}{npz} \right\rceil + 1, & mepz < remz, \\ \left\lfloor \frac{icoutz}{npz} \right\rfloor, & mepz \geq remz, \end{cases}$$

其中, $remz = \text{mod}(icoutz, npz)$, $\lceil \quad \rceil$ 为舍掉小数的取整数方法。

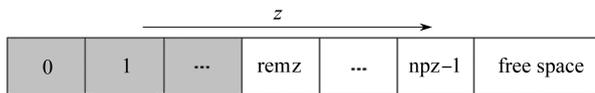


图 2 各子区域网格数的分布图

Fig. 2 Meshes in every subdomain distribution



图 3 空闲网格分布图

Fig. 3 Free mesh distribution

2.2 计算域扩充与数据定位

当扰动到达计算域边界时,要进行计算域扩充,以保证计算可以正确的完成.假设子区域内部网格(不含用来存储临近子区域信息的子区域边界网格)的范围为 $[dkeb, dkee]$,计算域向 z 方向正方向扩充步骤如下:

- 1) 子区域 $npz-1$ 向扩充方向增加一层网格量;并把 $dkeb$ 层网格信息传递个子区域 $npz-2$;更新 $dkeb, dkee$,即 $dkeb, dkee$ 都向前推进一层网格,内部网格数不变;
- 2) 子区域 $npz-2$ 接受从子区域 $npz-1$ 传递来的网格信息;并把 $dkeb$ 层网格信息传递给子区域 $npz-3$; $dkeb, dkee$ 都向前推进一层网格,内部网格数不变;
- 3) 子区域坐标 $mepz > remz$ 的子区域进行步骤 1) 和 2) 操作;
- 4) 子区域 $remz$ 接受从子区域 $remz+1$ 传递来的网格信息; $dkeb$ 不变, $dkee$ 向前推进一层网格,内部网格数在 z 向上增加一层;
- 5) 扩充过程中,若子区域 $npz-1$ 的 $dkee = kmax/npz$,则扩充无法继续进行,则必须调整所有子区域内部网格的位置,使得空闲网格如图 3 所示分布。

3 MMIC3D 动态并程序测试

空中爆炸算例用来研究爆轰气体、冲击波在空气中的传播及其相互作用,涉及到炸药、空气等介质.为测试程序,设计了无限空气介质中爆炸场的模型.初始数据定位见图 4,浅灰色为未反应区,沿着 z 方向分 4 个区.为了和经验公式比较,该模型采用球状装药,具体模型参数见表 2。

表 2 TNT 装药模型

Table 2 The model of TNT charge

m / T	r / m	$\Delta s / m$	L / m
9.28	1.10	0.20×0.20×0.20	40.0×40.0×80.0

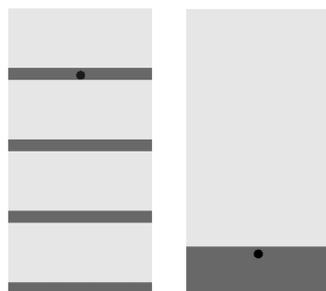


图 4 初始数据定位

Fig. 4 Initial data location

爆轰产物主要参数见表 3 和表 4. 其中 k_0 为爆轰产物的多方指数, k_1 是爆轰产物充分膨胀下的多方指数, b 是调节系数。

表3 TNT炸药爆炸性能参数

Table 3 The performance parameter of TNT explosive detonation

$\rho/(g/cm^3)$	P/GPa	$D/(m/s)$	$e_0/(kJ/g)$
1.60	18.5	6 700	7.0

表4 TNT炸药可变指数多方气体状态方程参数

Table 4 The parameter of TNT explosive's state equation

k_0	k_1	b
3.0	3.16	1.0

3.1 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(或形状相近的装药)在无限空气介质中爆炸时的空气冲击波峰值超压计算公式为^[7]

$$\Delta P_m = \begin{cases} 20.06 \frac{\sqrt[3]{w}}{r} + 1.94 \left(\frac{\sqrt[3]{w}}{r}\right)^2 - 0.04 \left(\frac{\sqrt[3]{w}}{r}\right)^3, & 0.05 \leq \bar{r} \leq 0.5, \\ 0.67 \frac{\sqrt[3]{w}}{r} + 3.01 \left(\frac{\sqrt[3]{w}}{r}\right)^2 + 4.31 \left(\frac{\sqrt[3]{w}}{r}\right)^3, & 0.5 \leq \bar{r} \leq 70.9, \end{cases}$$

以上各式中的 ΔP_m 为空气冲击波峰值超压(0.1 MPa), w 为有效装药量(kg), r 为到爆炸中心的距离(m), $\bar{r} = r/\sqrt[3]{w}$ 为对比距离。

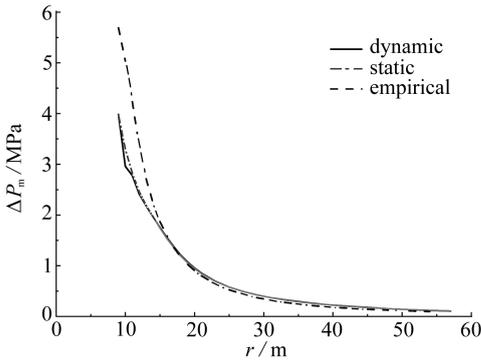


图5 冲击波峰值随距离变化曲线

Fig. 5 The overpressure versus distance from the centre of explosion

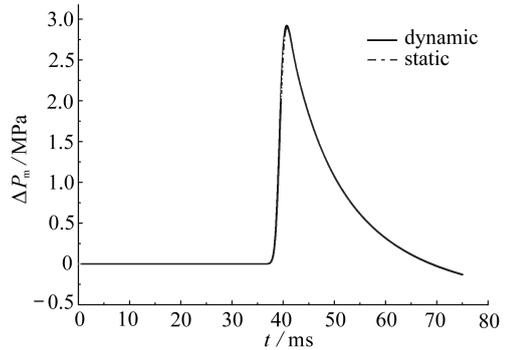


图6 距爆心 35 m 处超压随时间变化曲线

Fig. 6 The overpressure at 35 m versus time

图5为冲击波峰值随距离的变化曲线,从曲线可以看出两种并行方法所得到的结果基本一致,存在差异是由速度阈值、压力阈值所造成的数值误差所引起的。从图中还可以看出爆炸场冲击波峰值超压数值解与经验公式的计算结果在中远场上基本是吻合的,在距离较小时差异较大。

图6为距离爆心 35 m 处超压随着时间的变化曲线,二者吻合得相当好。从图中可以看出:在 $t = 38$ ms 时距爆心 35 m 处的区域超压迅速增大,在很短的时间内达到峰值,并迅速衰减。进一步观察还可以看到负压区的存在,这些计算结果与实际情况是一致的。

3.2 加速比及并行效率

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,这也称为“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,这样称为“相对加速”(relative speed-up). 本文采用相对加速的概念,加速比除以处理机个数,称为并行效率. 加速比及并行效率在八节点机群下进行了测试,每个节点有两颗 Intel 的 E5620 CPU,每颗 CPU 包含 4 个核,主节点 24G 内存,其余节点 12G 内存.

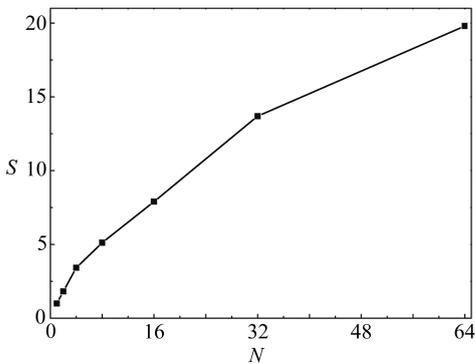


图7 不同进程数下的加速比

Fig.7 The speedup versus the number of processors

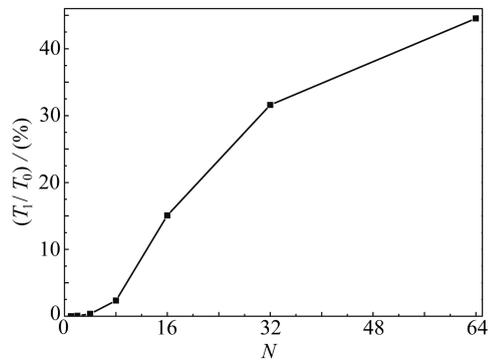


图8 通信时间在总时间的百分比

Fig.8 The percentage of communication time to the total time

图7为不同进程下的加速比,从图中可以看出,随着进程数的增多,加速比相应的增大;利用八节点64进程时加速比为20左右,其并行效率为31%. 并行效率不高的一个重要原因是通信开销所占的比重过大,如图8所示,随着进程数增多,通信时间在总计算时间的百分比逐渐上升,64进程所占的比重为44%. 这是由于MMIC3D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,通信频繁造成进程数较多时通信开销过大.

相对于采用固定分区的静态并行程序,动态并行程序虽然增加一些额外的开销,但计算时间比静态并行程序小得多,单进程下计算2000个时间步,动态并行计算时间为5236s,而静态并行程序计算时间为16817s.

4 结 论

1) 对于混合网格中物质界面的处理采用模糊界面处理方法,虽然该方法会使得混合网格中的物质界面变得模糊,采用并行计算,通过增大网格数,减小网格步长,可以有效解决这一问题. 从空中爆炸算例可以看出,数值模拟结果与实验结果基本吻合.

2) 对于Euler方法的数值模拟,采用动态并行方法,计算域随扰动传播而扩充,动态的调整子计算区域以达到负载均衡,相对于采用固定分区方法的静态并行程序,计算时间大大缩短. 从空中爆炸的数值算例来看,动态并行结果与静态并行结果基本一致,所采用的动态并行方法是可靠的.

参考文献:

- [1] 恽寿榕,涂侯杰,梁德寿. 爆炸力学计算方法[M]. 北京:北京理工大学出版社,1995. (YUN Shou-rong, TU Hou-jie, LIANG De-shou. *Computational Method of Explosion Mechanics*[M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1995. (in Chinese))
- [2] Jack Dongarra. 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.

- (Jack Dongorra. *Sourcebook of Parallel Computing*[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005. (in Chinese))
- [3] 宁建国,王成,马天宝. 爆炸与冲击动力学[M]. 北京:国防工业出版社,2010. (NING Jian-guo, WANG Cheng, MA Tian-bao. *Explosion and Shock Dynamics*[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2010. (in Chinese))
- [4] MA Tian-bao, WANG Cheng, NING Jian-guo. Multi-material Eulerian formulations and hydrocode for the simulation of explosions[J]. *CMES-Comp Model Eng*, 2008, **33**(2): 155-178.
- [5] NING Jian-guo, CHEN Long-wei. Fuzzy interface treatment in Eulerian method[J]. *Sci China Ser E*, 2004, **47**(5): 550-568.
- [6] Oleksandr Nesterov. A simple parallelization technique with MPI for ocean circulation models [J]. *J Parallel Distrib Comput*, 2010, **70**(1): 35-44.
- [7] 北京工业学院八系. 爆炸及其作用(下)[M]. 北京:国防工业出版社,1979. (The Eighth Department of Beijing Institute of Technology. *Explosions and Its Action*[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1979. (in Chinese))

Large Scall High Performance Computation on 3D Explosion and Shock Problems

FEI Guang-lei¹, MA Tian-bao¹, HAO Li²

(1. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, P. R. China;*

2. Science School, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing 100044, P. R. China)

Abstract: Explosion and shock often involve large deformation, interface treatment between multi-material and strong discontinuity. The Eulerian method has advantages for solving these problems. In parallel computation of the Eulerian method, the physical quantities of the computational cells do not change before the disturbance reaches to these cells. Computational efficiency is low when using fixed partition because of load imbalance. To solve this problem, a dynamic parallel method in which the computation domain expands with disturbance was used. The dynamic parallel program was designed based on the generally used MPI model. The numerical test of dynamic parallel program agrees well with that of the original parallel program, also agrees with actual situation.

Key words: explosion and shock; dynamic parallel; MPI; air explosion