

多相空间数值模拟并行化研究^{*}陆林生¹ 董超群¹ 李志辉²(江南计算技术研究所 无锡214083)¹ (国家计算流体力学重点实验室 北京100083)²

Research on Parallelization of Multiphase Space Numerical Simulation

LU Lin-Sheng¹ DONG Chao-Qun¹ LI Zhi-Hui²(Jiangnan Institute of Computing Technology, Wuxi 214083)¹(National Key Laboratory of Computational Fluid Dynamics, Beijing 100083)²

Abstract This paper researches on parallelization of multiphase space numerical simulation with the case of the gas kinetic algorithm for 3-D flows. It focuses on the techniques of domain decomposition methods, vector reduction and boundary processing parallel optimization. The HPF parallel program design has been developed by the Parallel Programming Concept Design (PPCDS). The preferable parallel efficiency has been found by the HPF program in high performance computer with massive scale parallel computing.

Keywords Multiphase space, Data parallel, Domain decomposition, Vector reduction, Boundary processing, Parallel optimization

1 引言

三维绕流气体运动论数值模拟基于从稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法,是由中国空气动力研究与发展中心张涵信院士指导下发展起来的一种新算法,其数学模型和计算方法在文[1]中进行了详细论述。本文以此为例着重讨论多相空间并行化技术。

三维绕流气体运动论数值模拟的计算空间是由离散速度坐标空间和位置空间组成的六维空间,形成二相空间。算法分成两个主要部分,一部分是在各个离散速度点处基于时间和位置空间求解关于气体分子速度分布函数 f 的具有非线性源项的双曲守恒方程;另一部分是基于速度分布函数 f 使用 Gauss-Hermite 无穷积分法求解任一时刻 t ,位置空间 (x, y, z) 中的气体密度 ρ ,温度 T ,流动速度 (U_x, U_y, U_z) ,应力张量 $(\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yx}, \tau_{yy}, \tau_{yz}, \tau_{zy}, \tau_{zx})$ 、热流矢量 (q_x, q_y, q_z) 等宏观流动参数。为便于讨论,下面给出模拟算法的主要计算式。

1.1 离散速度分布函数的控制方程和差分方程

设 (x, y, z) 是直角坐标系的空间位置坐标, (ξ, η, ζ) 是变换坐标, J 是坐标变换的雅可比行列式,则控制方程为:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial G}{\partial \eta} + \frac{\partial H}{\partial \zeta} = S \quad (1)$$

其中, $U = Jf$, $F = \bar{U}U$, $G = \bar{V}U$, $H = \bar{W}U$, $S = \bar{S}J$

$$\bar{U} = V_{\sigma\sigma}\xi_x + V_{\sigma\delta}\xi_y + V_{\sigma\theta}\xi_z,$$

$$\bar{V} = V_{\delta\sigma}\eta_x + V_{\delta\delta}\eta_y + V_{\delta\theta}\eta_z,$$

$$\bar{W} = V_{\theta\sigma}\zeta_x + V_{\theta\delta}\zeta_y + V_{\theta\theta}\zeta_z,$$

$V_{\sigma\sigma}, V_{\sigma\delta}, V_{\sigma\theta}$ 分别是离散速度坐标 σ, δ, θ 处的气体分子速度分量;

$$\bar{S} = \nu(f'' - f), \nu \text{ 是粘性系数};$$

$$f'' = \frac{\rho}{(\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{C^2}{T}\right) [1 + (1 - \text{Pr}) \bar{C} \cdot \bar{q} (2C^2/T - 5) / (5\rho T/2)]$$

$$\bar{C} = (V_{\sigma\sigma} - V_x)\bar{i} + (V_{\sigma\delta} - V_y)\bar{j} + (V_{\sigma\theta} - V_z)\bar{k}$$

$$\bar{q} = q_x\bar{i} + q_y\bar{j} + q_z\bar{k}$$

用差分法求解方程(1),在 ξ, η, ζ 方向的网格点分别是 $i = 1, 2, \dots, N_1; j = 1, 2, \dots, N_2; k = 1, 2, \dots, N_3$ 。在离散速度坐标 σ, δ, θ 方向的网格点分别是 $\sigma = 1, 2, \dots, N_\sigma; \delta = 1, 2, \dots, N_\delta; \theta = 1, 2, \dots, N_\theta$ 。利用非定常时间分裂法, (1)式的差分方程为:

$$U_{i,j,k}^{n+1} = L_\sigma(\Delta t/2) L_\delta(\Delta t/2) L_\eta(\Delta t/2) L_\xi(\Delta t) L_\eta(\Delta t/2) L_\delta(\Delta t/2) L_\sigma(\Delta t/2) U_{i,j,k}^n \quad (2)$$

其中, $L_\sigma, L_\delta, L_\eta, L_\xi$ 分别代表式(3)~(6)的差分算子:

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} = S \quad (3)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial F}{\partial \xi} = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial G}{\partial \eta} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial H}{\partial \zeta} = 0 \quad (6)$$

对于(3)式,采用二阶龙格-库塔法, $L_\xi(\Delta t)$ 算子对应于差分方程(7):

$$\begin{cases} U^* = U^n + \Delta t(1 - \frac{\nu}{2}\Delta t)S(U^n) \\ U^{n+1} = \frac{1}{2}(U^* + U^n + \Delta t(1 - \frac{\nu}{2}\Delta t)S(U^*)) \end{cases} \quad (7)$$

对于(4)~(6)式,采用时间和位置空间均为二阶精度的原始变量(即相对 f)的 NND-4(a) 预测-校正两步差分格式^[2], 则 $L_\delta(\Delta t)$ 算子对应于以下差分方程:

$$\begin{cases} U_i^* = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta \xi}(F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n) & \text{(预测步)} \\ U^{n+1} = \frac{1}{2}(U_i^n + U_i^* - (\frac{\Delta t}{\Delta \xi}F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^*)) & \text{(校正步)} \end{cases} \quad (8)$$

其中, $F_{i+1/2} = J_{i+1/2}(\lambda_{i+1/2}^+ U_{i+1/2}^+ \lambda_{i+1/2}^- U_{i+1/2}^-)$

^{*} 本课题得到国家自然科学基金(批准号:10072077)资助。陆林生 教授,博士生导师,主要研究领域为并行识别与并行计算方法、并行计算环境等。董超群 博士,主要研究领域为并行计算环境、CAD/CASE。李志辉 博士后,副研究员,主要研究领域为稀薄气体力学与计算流体力学。

$\lambda_{i+1/2} = U_{i+1/2}$ 是 F 的雅可比矩阵的特征值。

$$\lambda_{i+1/2}^+ = 1/2(\lambda_{i+1/2} + |\lambda_{i+1/2}|)$$

$$\lambda_{i+1/2}^- = 1/2(\lambda_{i+1/2} - |\lambda_{i+1/2}|)$$

$$U_{i+1/2} = U_i + \frac{1}{2} \min \text{mod}(\Delta U_{i-1/2}, \Delta U_{i+1/2})$$

$$U_{R,i+1/2} = U_{i+1} - \frac{1}{2} \min \text{mod}(\Delta U_{i+3/2}, \Delta U_{i+1/2})$$

$$\Phi_{i+1/2} = \frac{1}{2}(\Phi_i + \Phi_{i+1}) \quad \Delta U_{i+1/2} = U_{i+1} - U_i$$

$L_{q(\Delta x)}, L_{\tau(\Delta x)}$ 算子对应的差分方程与式(8)类似。

1.2 宏观流动参数的计算式

需要计算的宏观流动参数是气体密度、压力、温度、应力张量和热流矢量共15个标量,都需要对离散速度空间进行积分。使用 Gauss-Hermite 无穷积分法简化为在离散速度空间坐标 σ, δ, θ 的三重求和,下面列出其中几个计算公式:

$$\left\{ \begin{aligned} \rho &= \sum_{\sigma=1}^{N_\sigma} \sum_{\delta=1}^{N_\delta} \sum_{\theta=1}^{N_\theta} W_\sigma W_\delta W_\theta (f_{\sigma,\delta,\theta} \cdot e^{v_{\sigma\delta}^2} e^{v_{\delta\theta}^2} e^{v_{\theta\sigma}^2}) \\ \rho U_x &= \sum_{\sigma=1}^{N_\sigma} \sum_{\delta=1}^{N_\delta} \sum_{\theta=1}^{N_\theta} W_\sigma W_\delta W_\theta (V_{x\sigma} \cdot f_{\sigma,\delta,\theta} \cdot e^{v_{\sigma\delta}^2} e^{v_{\delta\theta}^2} e^{v_{\theta\sigma}^2}) - \rho U_x^2 \\ \tau_{xx} &= \sum_{\sigma=1}^{N_\sigma} \sum_{\delta=1}^{N_\delta} \sum_{\theta=1}^{N_\theta} W_\sigma W_\delta W_\theta (V_{x\sigma}^2 f_{\sigma,\delta,\theta} \cdot e^{v_{\sigma\delta}^2} e^{v_{\delta\theta}^2} e^{v_{\theta\sigma}^2}) \\ q_x &= \sum_{\sigma=1}^{N_\sigma} \sum_{\delta=1}^{N_\delta} \sum_{\theta=1}^{N_\theta} W_\sigma W_\delta W_\theta (V_{x\sigma} (V_{x\sigma}^2 + V_{y\sigma}^2 + V_{z\sigma}^2) f_{\sigma,\delta,\theta} \cdot e^{v_{\sigma\delta}^2} e^{v_{\delta\theta}^2} e^{v_{\theta\sigma}^2} \\ &\quad - 2(U_x \tau_{xx} + U_y \tau_{xy} + U_z \tau_{xz}) - \rho U_x (U_x^2 + U_y^2 + U_z^2 + \frac{3}{2} T)) \end{aligned} \right. \quad (9)$$

其中, $w_\sigma, w_\delta, w_\theta$ 分别是离散速度 $v_\sigma, v_\delta, v_\theta$ 相应的权重因子,分别只与 σ, δ, θ 有关。

从上面列举的主要算式中可以看出,虽然问题的整个求解空间是由 $(i, j, k, \sigma, \delta, \theta)$ 组成的六维空间,但涉及的变量有些定义在整个六维空间中,有些则定义在子空间 (i, j, k) 或 (σ, δ, θ) 中,所以,在用数据并行方法研究这一课题的并行方案时,区域分解方法、向量归约技术和边界并行优化策略是研究的重点。下面将就这几个方面展开讨论,并给出实验结果。

2 区域分解方法

区域分解方法是求解偏微分方程问题常用的并行方法^[3],下面着重讨论分解策略。

2.1 区域分解的三种策略

设 Ω 是三维绕流气体运动论数值模拟的求解空间, Ω_r 是位置空间 (x, y, z) , Ω_v 是离散速度坐标空间 (σ, δ, θ) , 则有:

$$\Omega = \Omega_r \times \Omega_v$$

设处理器数为 N_p , 将 Ω 分解为 N_p 个子空间 Ω_i , 满足:

$$\Omega = \sum_{i=1}^{N_p} \Omega_i \text{ 且 } \Omega_i \cap \Omega_j = \Phi \quad (i \neq j)$$

并将子空间 Ω_i 的数据映射到相应的处理器 PE_i 中。显然,这样的分解策略有三种。

第一种是位置空间 Ω_r 的分解策略。按某种方式将 Ω_r 分

解成 N_p 个子空间 Ω_{ri} , 使 $\Omega = \sum_{i=1}^{N_p} \Omega_{ri}$ 且 $\Omega_{ri} \cap \Omega_{rj} = \Phi \quad (i \neq j)$, 取 $\Omega_i = \Omega_{ri} \times \Omega_v$;

第二种是离散速度坐标空间 Ω_v 分解策略。类似于第一种策略,将 Ω_v 分解成 N_p 个子空间 Ω_{vi} , 取 $\Omega_i = \Omega_r \times \Omega_{vi}$;

第三种是混合分解策略,将 Ω_r, Ω_v 分别按类似于上述方式分解成 N_p 个子空间 Ω_{ri}, Ω_{vi} , 取 $\Omega_i = \Omega_{ri} \times \Omega_{vi}$ 。

下面从变量依赖关系分析、数据通信和并行可扩展性三个方面对这三种策略进行讨论。

2.2 变量依赖关系分析

变量依赖关系分析是并行识别的基础,也是用于指导区域分解策略的理论依据之一。变量依赖关系分析理论研究虽然主要针对程序级^[4],但是其概念和基本理论也适用于算法级。

定义1 设 u, v 分别是同一算法的因变量和自变量,且都定义在 n 维整数空间 IR^n 上,当计算变量 u 在空间点 $P(i_1, i_2, \dots, i_n)$ 的值时需引用变量 v 在空间点 $Q(j_1, j_2, \dots, j_n)$ 的值,则称变量 u 依赖于变量 v , 记作 uRv , 依赖的方向向量是 $(j_1 - i_1, j_2 - i_2, \dots, j_n - i_n)$, $k \quad (1 \leq k \leq n)$ 方向的依赖距离为 $j_k - i_k$ 。

定义2 设 uRv , 且至少存在一个方向的依赖距离不等于零,则称变量 u 与变量 v 数据相关,记作 $u\delta v$, 依赖距离不等于零的方向称为相关方向。如果数据沿着相关方向分布于不同处理器中,则必然出现数据通信。

变量依赖关系存在传递性,方向向量符合迭加性。例如,

若 uRV , 且方向向量 $\vec{d}_{u,v}$; vRW , 且方向向量 $\vec{d}_{v,w}$, 则 uRW , 方向向量 $\vec{d}_{u,w} = \vec{d}_{u,v} + \vec{d}_{v,w}$ 。

定义3 算法集 A 的变量依赖关系图可用有向图 $G = \langle V, E \rangle$ 表达。有向图定义为: 顶点集 V 由算法集 A 中的所有变量组成, 当且仅当变量 u_i 与 u_j 属于同一原子算法, 且有 $u_i R u_j$, 则从顶点 u_i 向 u_j 作一有向边, 边权是 u_i 与 u_j 的依赖方向向量。

定义4 若算法集 A 的变量依赖关系图中包含一个或多个回路, 则称该算法集是相关问题。如果数据沿着相关方向分布于不同的处理器中, 需要研究并行算法, 或者采用流水线并行技术消除相关性, 才能进行并行计算。

根据上述给出的基本概念, 对整个算法或各阶段算法画出变量依赖关系图, 然后进行变量依赖关系分析。例如, 算式(8)预测步的变量依赖关系见图1。

图1中没有回路存在, 所以它不是相关问题。显然, $U^* R U^*$, 依赖的路径有4条, 每条路径都有一个依赖方向向量, 这些依赖方向向量的并集构成 U^* 依赖于 U^* 的方向向量集, 它等于 $\{(-2, 0, 0, 0, 0, 0), (2, 0, 0, 0, 0, 0)\}$, 所以, $U^* \delta U^*$, 相关方向是 ξ 坐标方向。利用上述方法研究差分方程(2)中 U^* 的依赖关系, 得到:

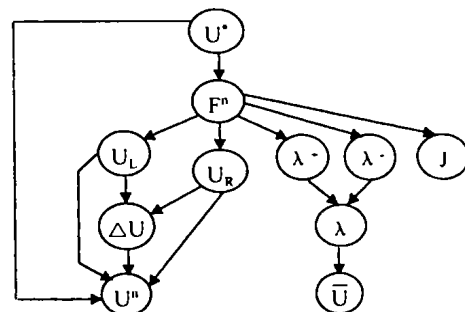


图1 算式(8)预测步变量依赖关系图

对于 L_i 算子, 依赖方向向量是零向量;

对于 L_e 算子, 依赖方向向量集: $\{(-2, 0, 0, 0, 0, 0), (2, 0, 0, 0, 0, 0)\}$;

对于 L_r 算子, 依赖方向向量集: $\{(0, -2, 0, 0, 0, 0), (0, 2, 0, 0, 0, 0)\}$;

对于 L_c 算子, 依赖方向向量集: $\{(0, 0, -2, 0, 0, 0), (0, 0, 2, 0, 0, 0)\}$ 。

所以, 在计算离散速度分布函数 f 的迭代步中, 在位置空间 Ω_r 的各维方向都存在数据相关性, 在离散速度子空间 Ω_v 的各维方向都不存在数据相关性, 而且不是相关问题。

对于宏观流动参数计算式(9), 在位置空间 Ω_r 的各维方向都不存在数据相关性, 在离散速度子空间 Ω_v 的各维方向以归约形式体现了问题的相关性。

根据变量依赖关系分析结果, 可以得到如下结论: 如果采用第一种分解策略, 在计算离散速度分布函数 f 这一阶段, 如果忽略边界处理, 在子空间 Ω_r 并行计算, 有数据通信; 在计算宏观流动参数这一阶段, 归约形式的相关性消除, 实现了 Ω_r 空间的无数据通信的完全并行。如果采用第二种分解策略, 在计算 f 这一阶段, 如果忽略边界处理, 在子空间 Ω_v 内无数据通信的完全并行; 而在计算宏观流动参数这一阶段, 在子空间 Ω_r 内进行并行归约计算, 有数据通信。所以这二种分解策略都是可行的。如果采用第三种分解策略, 在整个计算中, 在子空间 Ω_r 和 Ω_v 中都有数据通信, 所以这种分解策略不可取。

2.3 数据通信分析

2.3.1 位置空间 Ω_r 分解策略的数据通信 假设位置空间 Ω_r 是 $N_r \times N_j \times N_k$ 的网格阵列, 处理器阵列 $N_{pr} \times N_{pj} \times N_{pk}$, Ω_r 按三维方式等分分解:

$$\Omega_r = \sum_{i=1}^{N_{pr}} \sum_{j=1}^{N_{pj}} \sum_{k=1}^{N_{pk}} \Omega_{r,j,k}$$

令 $\Omega_{r,j,k} = \Omega_{r,j,k} \times \Omega_v$, 将 $\Omega_{r,j,k}$ 上的变量映射到处理器 $PE_{r,j,k}$ 中。

根据上节讨论, 数据通信只发生在 L_t, L_η, L_c 算子的计算中, 数据通信的计算首先按各计算步进行, 然后把各步的通信量相加得到整个算法的数据通信量。在各计算步中, 利用变量依赖关系图, 计算每条有向边的通信量, 然后把所有有向边通信量相加。据此, 在忽略边界处理情况下各计算步的数据通信量如表1。

表1 各计算步的数据通信量

计算步	数据通信量(单位: 浮点字节数)
L_t 算子(预测)	$7 \cdot V \cdot (N_{pr} - 1) / N_i$
L_t 算子(校正)	$7 \cdot V \cdot (N_{pr} - 1) / N_i$
L_η 算子(预测)	$7 \cdot V \cdot (N_{pj} - 1) / N_j$
L_η 算子(校正)	$7 \cdot V \cdot (N_{pj} - 1) / N_j$
L_c 算子(预测)	$7 \cdot V \cdot (N_{pk} - 1) / N_k$
L_c 算子(校正)	$7 \cdot V \cdot (N_{pk} - 1) / N_k$

表中, $V = N_i N_j N_k N_v N_s N_\theta$ 。令 C_r 为位置空间 Ω_r 分解策略的整个算法的总数据通信量, 有:

$$C_r = 14 \cdot V \cdot \left(\frac{N_{pr} - 1}{N_i} + 2 \cdot \frac{N_{pj} - 1}{N_j} + 2 \cdot \frac{N_{pk} - 1}{N_k} \right) \quad (10)$$

2.3.2 离散速度空间 Ω_v 分解策略的数据通信 根据前面讨论, 在忽略边界处理情况下 Ω_r 分解策略的数据通信局限在 Ω_v 空间归约求和计算中。经计算式的规范化, 归约求和的变量降至13个, 令 C_v 为这种策略下的数据通信量, 依据二叉树方式并行归约, 可得:

$$C_v = 13 \cdot N_{pr} N_{pj} N_{pk} N_{ps} N_i N_j N_k \quad (11)$$

式中, $N_{pr} \times N_{pj} \times N_{pk}$ 是处理器阵列。

2.3.3 两种分解策略比较 为便于比较, 令 $N_{pr} \times N_{pj} \times N_{pk} = N_{ps} \times N_{ps} \times N_{ps}$, 并将式(11)改写为:

$$C_v = 13 \cdot V \cdot \frac{N_{pr}}{N_i} \cdot \frac{N_{pj}}{N_j} \cdot \frac{N_{pk}}{N_k} \quad (12)$$

比较(10)和(12)式可以看出: 当 $N_i \gg N_{pr}$, $N_j \gg N_{pj}$, $N_k \gg N_{pk}$, $N_i \cap N_{ps}$, $N_j \cap N_{ps}$, $N_k \cap N_{ps}$ 情况下, 也就是 Ω_r 空间网格数很多, Ω_v 空间离散速度点数不是很多的情况, 按 Ω_r 分解策略优于 Ω_v 分解策略; 当 Ω_r 空间网格不是足够多, 或者离散速度点数足够多, 虽然并行归约求和计算会引起负载不平衡, 使处理器处于空闲状态, 但按 Ω_v 分解策略仍将会优于 Ω_r 分解策略。

2.4 并行可扩展性分析

三维绕流气体运动论数值模拟的计算量巨大, 需要利用尽可能多的处理器进行并行计算, 这就要求区域分解策略适应并行可扩展性需要。在理想情况下并行可扩展性是指当问题求解空间规模和处理器同比增长前提下保持相同的并行效率, 然而, 实际问题并不要求求解空间规模无限膨胀, 而是要求在满足求解精度前提下使求解空间规模最小。所以, 本文的并行可扩展性分析是在固定求解空间规模前提下, 当处理器数增加时, 仍能得到较高的并行效率, 又不会使主存空间溢出。

对于 Ω_r 分解策略, 根据变量依赖关系分析, 为了达到较高的并行效率, Ω_r 空间各维网格点数 N_i, N_j, N_k 与处理器阵列各维处理器 N_{pr}, N_{pj}, N_{pk} 关系应满足:

$$\frac{N_i}{N_{pr}} \geq 4 \cdot \beta \quad \frac{N_j}{N_{pj}} \geq 4 \cdot \beta \quad \frac{N_k}{N_{pk}} \geq 4 \cdot \beta$$

其中 β 一般需要 $\beta \geq 5$, 因此如果 Ω_r 空间网格点数在 10^6 以下, 使用的处理器数最多100个左右, 并行可扩展性不高。

对于 Ω_v 分解策略, 由于归约求和计算步的运算量占整个计算的1/5以下, 因此处理器数最多能达到 $N_r \times N_\theta \times N_s$, 能实现大于1000并行度的并行计算。但是, 在这种分解策略中, 有17个物理量、3个坐标 x, y, z 值、4个有关雅可比行列式的变量、9个坐标变换系数等共33个变量定义在 Ω_r 空间, 并且需要复制到各处理器中, 设 N_r 是 Ω_r 空间网格点数, 这些变量在每个处理器中占据的存储空间为: $33 \times 88 \times N_r$ 字节, 当 $N_r > 10^6$ 时, 可能会引起内存溢出。虽然可以进行存储优化, 但潜力不大, 而且要花费更多的计算时间。

根据上述关于变量依赖关系、数据通信、并行可扩展性三个方面分析, 可以得到如下结论: 当 Ω_r 空间网格点数并非很大(例如, 在百万点以下)采用 Ω_r 分解策略, 当 Ω_r 空间网格点数很大(例如在千万点以上), 应采用 Ω_v 分解策略。在当前数值模拟的需求和并行机能力限制下, 一般情况下 Ω_r 空间网格点数至多在百万量级, 所以, 本文的实验采用 Ω_v 空间分解策略, 下面几节的讨论都基于这种分解策略。

3 并行向量归约技术

在 Ω_v 空间分解策略下, 式(9)是在 Ω_v 空间中进行并行归约求和计算, 有大量的数据通信。一般来说, 成组数据捆绑通信是减少通信时间的有效办法之一。所以, 并行向量归约对于提高并行计算效率十分重要。并行向量归约技术涉及到各个标量的归约计算式合并成向量的归约计算式以及循环展开形式两个方面。

在本文研究的数值模拟算法中, 式(9)实际上包含了14

(下转第137页)

大幅提高。由上述结果可以看出,本文对造成 PVFS 吞吐率过低的原因进行的分析是正确的,所做的改进也是有效的。

参考文献

- 1 Carns P H, et al. PVFS: A Parallel File System for Linux Clusters
- 2 Anderson T E, et al. Serverless Network File Systems. ACM Trans. on Computer Systems, 1996, 14(1): 41~79
- 3 王建勇. 可扩展的单一映象的文件系统: [博士学位论文]. 中国科学院计算技术研究所, 1999
- 4 Corbett P F, et al. Parallel file systems for the IBM SP computers. IBM Systems Journal, 1995, 34(2): 222~248
- 5 冯军. 机群文件系统性能优化中的关键问题研究: [硕士学位论文]

- 中国科学院计算技术研究所, 2001
- 6 李善平, 刘文峰, 李程远, 王焕龙, 王伟波. Linux 内核 2.4 版源代码分析大全. 机械工业出版社, 2002
- 7 Sun Microsystems, Inc. NFS Version 4 Protocol. RFC3010
- 8 Shepler S. NFS Version 4 Design Considerations. RFC 2624, June 1999
- 9 Sandberg R, et al. Design and Implementation of the Sun Network Filesystem. In: Proc. USENIX Summer 1985
- 10 Ligon III W B, Ross R B. Implementation and Performance of a Parallel File System for High Performance Distributed Application
- 11 Vahalia U. Unix Internals: The New Frontiers. Prentice-Hall, 1996

(上接第131页)

个归约求和算式,而且相互之间有计算顺序关系,只要将归约求和部分定义为中间变量,这种计算的顺序性就消除了,可以归纳为这些中间变量组成的向量的归约求和,从而提高并行计算效率。

不失一般性,归约计算的数学形式表达为:

$$S_{i_1, i_2, \dots, i_m} = \mathcal{R}_{(i_{m+1}, \dots, i_n) \in \Omega_{red}} f(u_{i_1, i_2, \dots, i_n}, v_{i_1, i_2, \dots, i_n}, \dots) \quad (13)$$

$$(i_1, i_2, \dots, i_m) \in \Omega_{iter}$$

其中, $\mathcal{R}$ 为归约运算符, f 为表达式, $S_{i_1, i_2, \dots, i_m}$ 为归约变量, Ω_{red} 为归约空间, Ω_{iter} 为迭代空间。整个计算空间 $\Omega = \Omega_{iter} \times \Omega_{red}$ 。按数据分布特性将 Ω_{iter} 和 Ω_{red} 进行分解:

$$\Omega_{iter} = \Omega_{iter,1} \times \Omega_{iter,2}$$

$$\Omega_{red} = \Omega_{red,1} \times \Omega_{red,2}$$

其中, $\Omega_{iter,1}$ 是由在 Ω_{iter} 空间中数据分布的维组成, $\Omega_{iter,2}$ 是由在 Ω_{iter} 空间中数据不分布的维组成, $\Omega_{red,1}$, $\Omega_{red,2}$ 的定义是类似的,整个空间 Ω 分解为:

$$\Omega = \Omega_{iter,1} \times \Omega_{red,1} \times \Omega_{iter,2} \times \Omega_{red,2}$$

按各子空间先后次序由外层到内层循环展开,可得到最佳的并行向量归约。

按照上述原理, (9) 式的并行归约循环层次由外层到内层的次序是 $\sigma, \delta, \theta, i, j, k$ 。其中 (σ, δ, θ) 及 (i, j, k) 二组集合内的循环次序根据存储分配从优化 cache 命中率考虑安排。

4 边界条件的并行处理

在前面的讨论中都忽略了边界条件的处理。在许多实际问题中边界条件的处理比较复杂,它的计算公式往往与内点计算公式不同,变量依赖关系也不同,而且往往会更复杂,从而增加了并行计算的复杂性。

在本文列举的数值模拟算法中,物面和流场外边界处理很复杂。在物面,当气体分子撞击物面并发生了反射,则速度分布函数 $f_{\sigma, \delta, \theta}^w$ 是壁面密度 ρ_w 的函数,后者的计算式类似于 (9) 中第一式,且更为复杂,需要在 Ω_w 空间并行归约计算,如果气体分子未撞击物面,则采用原始方程预测、校正两步在位置空间二阶精度的单边差分格式计算。在流场外边界根据分子逆变速度 W 的方向,计算公式也不一样。为了使 L_5 算子在整个求解空间同时进行并行计算,而且不使多重并行现象出现,需要在变量依赖关系分析的基础上,对这一算子的算法步骤作适当调整。下面就是本文采用的 L_5 算子的算法步骤。

步骤1 在 Ω_w 空间并行归约求解壁面反射密度 $\rho_{w,i,j}$ 。

步骤2 在 Ω_w 空间并行,内层是 Ω_w 空间的 j, i 循环。

步骤2.1 k 循环计算通量 H ;

步骤2.2 k 循环内点计算 U^* (预测步);

步骤2.3 利用边界条件计算物面和外流场的 U^* ;

步骤2.4 k 循环计算通量 H ;

步骤2.5 k 循环内点计算 U^{n+1} (校正步);

步骤2.6 计算物面和外流场的中间数据,置于 U^{n+1} 中;

步骤3 在 Ω_w 空间并行归约求解壁面反射密度 $\rho_{w,i,j}$ 。

步骤4 利用边界条件在 Ω_w 空间并行求解物面和外流场的 U^{n+1} 。

5 并行程序设计实验结果

并行程序设计是基于并行程序概念设计系统 (PPCDS)^[5] 进行的,利用 PPCDS 系统的 DPHL 交互编辑器编写 DPHL 源程序,这是一种基于数据并行高层描述语言的形式化建模仿程序^[6,7],经过编译器进行词法、语法和语义分析后,由并行算法分析器进行分析与优化,由并行程序综合器自动生成并行 HPF 源程序,最后在高性能并行计算机上进行大规模并行计算。计算空间规模是,离散速度空间点 $16 \times 16 \times 16$,物理坐标空间点 $51 \times 37 \times 63$,计算对象为圆球绕流,数据在离散速度子空间 Ω_w 三个方向分布,实测加速比如表2。

表2 并行计算加速比

PE 数	128	256	512	1024
迭代1步平均计算时间 t (秒)	33.23	17.06	9.22	5.15
实测加速比	1	1.94	3.60	6.45
理想加速比	1	2	4	8

由上表可以看出,程序获得了很好的加速比,说明本文采用的各种并行计算策略是可行的,PPCDS 系统的并行识别技术与自动生成并行程序的效率较高。

参考文献

- 1 李志辉. 从稀薄到连续流的气体运动论统一数值算法研究: [博士学位论文]. 中国空气动力研究与发展中心, 2001
- 2 张涵信, 等. NND 格式的推广及在年新粘性流计算中的应用. 空气动力学学报, 2000, 12(2): 121~129
- 3 吕涛, 等. 区域分解算法—偏微分方程数值解新技术. 科学出版社, 1997
- 4 Wolfe M, Banerjee U. Data Dependence and its Application to Parallel Processing. Intl. Journal of Parallel Programming, 1987, 16(2)
- 5 并行程序概念设计系统 (PPCDS) 参考手册: [江南计算技术研究所内部技术报告]. 2001. 9
- 6 陆林生, 等. 面向科学计算的数据并行高层建模语言. 计算机研究与发展, 2001, 38(7. 增刊): 153~159
- 7 董超群, 等. 域: 支持并行程序概念设计的一种抽象手段. 计算机科学, 2001(10): 24~28