

研究论文

## 两相体系宏观拟颗粒模拟并行算法

王小伟 郭力 唐德翔 葛蔚 杨章远 李静海

(中国科学院过程工程研究所多相反应实验室, 北京 100080)

**摘要** 将流体处理为离散粒子的宏观拟颗粒模型, 具有与分子动力学模拟类似的算法, 是进行两相流直接模拟的一种有效方法. 但其计算量非常大. 为此, 本文工作改进了针对该模型的区域分解算法, 并在可扩展的集群系统上得以实现, 取得了较高的并行计算效率.

**关键词** 两相流 拟颗粒模型 区域分解 并行计算

中图分类号 TQ 021

文献标识码 A

文章编号 0438-1157 (2004) 05-0716-05

## PARALLEL ALGORITHM OF MACRO-SCALE PSEUDO-PARTICLE SIMULATION FOR TWO-PHASE FLOW

WANG Xiaowei, GUO Li, TANG Dexiang, GE Wei, YANG Zhangyuan and LI Jinghai

(Multi-phase Reaction Laboratory, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract** The macro-scale pseudo-particle model (MaPPM) is an effective method used in high resolution simulation of particle-fluid systems, which can be implemented with an algorithm similar to molecular dynamics (MD) simulation. However, the wide application of MaPPM is only possible with the advent of high-performance parallel computers. The great size gap between solid particle and pseudo-particle makes MaPPM different from MD simulations during the parallelization process, which is the specialty and difficulty in this paper. The domain decomposition method is used in the parallel algorithm because of the great number of pseudo-particles in particle-fluid systems. The algorithm is also improved according to the specialty in MaPPM to reduce computation cost. The computation is conducted on COW (cluster of workstations) with different system sizes and various numbers of processors to test its performance. Computation results indicate that the new algorithm has high parallel efficiency and good scalability. The parallel implementation will help to make use of MaPPM in large-scale simulations of two-phase flow.

**Keywords** two-phase flow, pseudo-particle modeling, domain decomposition, parallel computation

### 引 言

两相流是一种在自然界和工业生产过程中广泛存在的复杂系统, 如自然界中的云雾、含尘空气以及化工和能源领域中的流态化系统等. 目前对两相

流的研究虽然已经有许多的成果, 但总的说来还是经验多于理论, 原因是其机理太复杂, 难以深入研究. 因此, 从本质上对两相流体的流动规律进行研究具有重要的意义.

直接模拟是进行两相流动本构机理研究的一种

2003-02-15 收到初稿, 2003-11-25 收到修改稿.

联系人: 郭力. 第一作者: 王小伟, 男, 26岁, 博士研究生.

基金项目: 国家自然科学基金 (No. 20336040, 20221603) 和中国科学院知识创新工程项目 (No. INF105-SCE-2-07, KG CX-2-207).

Received date: 2003-02-15.

Corresponding author: Guo Li. E-mail: lguo@home.ipe.ac.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 20336040, 20221603) and Chinese Academy of Sciences (No. INF105-SCE-2-07, KG CX-2-207).

有效方法。在各种直接模拟方法中，将流体离散为经典力学下的离散粒子的拟颗粒模拟<sup>[1~9]</sup>直接描述了流体的底层物理结构和过程，能深入而可靠地反映系统的机理，已在两相体系得到初步应用<sup>[1~9]</sup>。

但是对流体系统进行直接模拟需要巨大的计算量，一般的微机或工作站是不能胜任的，即使能够进行小规模的计算，也会耗费相当长的时间。因此直接模拟迫切需要并行计算。针对某一具体问题，可以利用它内部的并行性，将其分解为相互独立、但彼此又有一定联系的若干个子问题，分别交给各处理器，由各处理器采用并行算法完成初始问题的求解。基于并行算法，就可以利用高性能的并行机来求解大规模的应用问题，满足研究工作的需要。

## 1 拟颗粒计算模型简介

从直观上说，拟颗粒模型是将宏观上连续的流体处理成离散的流体粒子，流体内各部分之间的力用拟颗粒之间的作用力来代替。作为原始模型<sup>[1~4]</sup>的扩展，近年来提出的宏观拟颗粒模型<sup>[5~7]</sup>可以更直观地看成是由若干分子组成的分子集团，它的大小在每一特定问题中有一合适尺度。此时颗粒和拟颗粒组成的两相系统如图 1 所示，而拟颗粒间的作用模型类似于 MD 模拟中的软球模型，可采用的时间驱动算法具有很好的并行性<sup>[5~7]</sup>，粒子间的作用属于近程作用，即当粒子间的距离大到一定程度后，可以认为彼此间没有作用，这样就使得总的计算规模和系统中的粒子数呈线性关系。

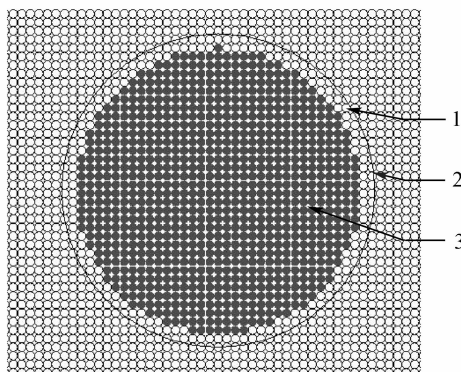


Fig. 1 System of solid particles and pseudo particles

1—pseudo particles; 2—solid particles;

3—fixed pseudo particles that compose solid particles

在固体颗粒和拟颗粒的两相体系中，粒子间的作用可以分为三类：颗粒间的相互作用、拟颗粒间的相互作用以及颗粒和拟颗粒间的相互作用。前两

种作用由于粒子的尺度和质量都相同，因而计算比较简单。为了方便地处理不规则颗粒，模型中把固体颗粒也看成是由与拟颗粒相同大小的粒子组成，这样颗粒和拟颗粒间的作用就可以通过拟颗粒间的作用叠加起来。由于固体颗粒是刚性的，这些拟颗粒的速度和位移的变化应和颗粒是一致的，可由固体颗粒的运动导出。

目前已应用拟颗粒模型对平面槽流、单圆柱绕流以及圆柱阵列绕流等经典流场进行了计算，并实现了小规模流态化现象模拟，如模拟了气-固流化床中不同空隙率下团聚体和气泡周围的流场特征，流化床的节涌和鼓泡现象等<sup>[1~9]</sup>。这些工作得到的结论与实验结果和理论分析进行了比较，结果表明拟颗粒模型是合理的，在对两相体系的模拟中有其独特的优势。但是传统的串行算法限制了拟颗粒模型在更大规模上的应用，为了解决拟颗粒模拟中的巨大计算量，考虑对拟颗粒计算模型进行并行化，将计算任务分解到高性能的可扩展集群系统上进行，来满足大规模计算的要求。在这方面已进行了一些初步的工作<sup>[6~10]</sup>：实现了单相流拟颗粒模拟的并行化，提出了粒子模拟通用并行平台的设计思想，并实现了多相系统模拟并行化的一个方案。目前的实现方式仅限于一维方向的区域划分，限制了并行粒度的减小和效率的提高。本文将在分析已有算法的基础上，采用更为灵活的多维方向的区域分解方法，并对算法进行优化。

## 2 拟颗粒模型的并行算法

考虑将一个问题进行并行化，首先要确定问题本身是否存在并行的特点。在拟颗粒模型计算中，每个颗粒或拟颗粒的受力和位移计算可以分别进行，问题具有并发性的特征，适宜并行计算。考虑到在拟颗粒模型中粒子间的作用属于近程作用，近程作用的粒子的并行计算方法主要有粒子分解法、区域分解法和力分解法三种。

粒子分解法<sup>[11]</sup>是将所有粒子平均分配给各处理器，各处理器只负责计算属于它的粒子。处理器需要存储所有粒子的信息，并且之间要进行全局通信。处理器间的全局通信和很大的内存消耗使得粒子分解法不适合大规模的计算问题。力分解法<sup>[11]</sup>和粒子分解法有些类似，它是将计算粒子受力的矩阵进行按块分割，而不是像粒子分解法那样简单地按行分割，从而相对减少了内存的消耗和相互间通

信的处理器数目, 但该方法同样也不适宜处理大规模的计算. 区域分解法<sup>[11]</sup>是将物理区域划分成和处理器数目相同的子区域, 各处理器负责计算自己区域内的所有粒子的受力并更新它们的速度和位移, 当粒子运动到新的子区域时, 就把它分配给相应的处理器. 为了计算粒子的受力, 处理器仅需要和相邻的处理器通信. 由于处理器的计算和通信只是限定在局部的区域, 因此区域分解法适合处理规模比较大的计算问题.

由于在两相体系中存在着两种尺度的粒子, 并且二者之间存在相互作用, 这是拟颗粒模型计算不同于一般的分子动力学计算的地方, 也是本文研究的特点和难点所在. 通常情况下, 颗粒和拟颗粒的数量在系统中相差几个数量级, 模型中主要的计算负荷还是拟颗粒计算部分. 结合以上三种并行算法的特点, 在对颗粒和拟颗粒两相体系的并行计算中, 本文选用了区域分解法<sup>[6~10]</sup>.

并行程序的设计采用了消息传递的编程模型. 所谓消息传递模型<sup>[12]</sup>, 是指处理器间必须通过显式发送和接受消息来实现数据交换. 消息传递模型的并行粒度大, 特别适合于大规模可扩展并行算法. 当处理器数量较多时, 只有消息传递方式才能充分发挥并行机的潜在性能. 消息传递模型已成为可扩展集群系统上主要的并行编程模型. 本文的并行算法采用的是基于消息传递的通用 MPI 平台作为并行计算的支撑环境.

拟颗粒模型并行计算的流程如图 2 所示. 首先是计算任务的分解, 将粒子按空间中的位置分配给各个处理器, 为了保证各处理器间的计算负载平衡, 划分区域时, 应使每个处理器的粒子数大致相同. 处理器内的所有粒子组成一个链表结构, 对粒子的受力计算和位移更新都是根据粒子在链表中的位置进行的. 对于固体颗粒则分配了一个全局的 ID 号, 并把它作为粒子结构的属性之一. 当进行固体颗粒受力计算和组成固体颗粒的拟颗粒的速度、位移更新时, 通过该 ID 号建立了拟颗粒和固体颗粒间的对应关系<sup>[1~9]</sup>.

为了提高寻找邻近的作用粒子的效率, 算法中采用了元胞列表方法<sup>[1~9, 13]</sup>. 在计算区域内, 以粒子间的最大作用距离为单位建立网格, 所有的粒子都会落在这些格子内. 这样在二维空间中, 粒子寻找邻近的作用粒子时, 就可以限定在九个单元格: 粒子本身所在的格子和它周围的八个格子 (实际上

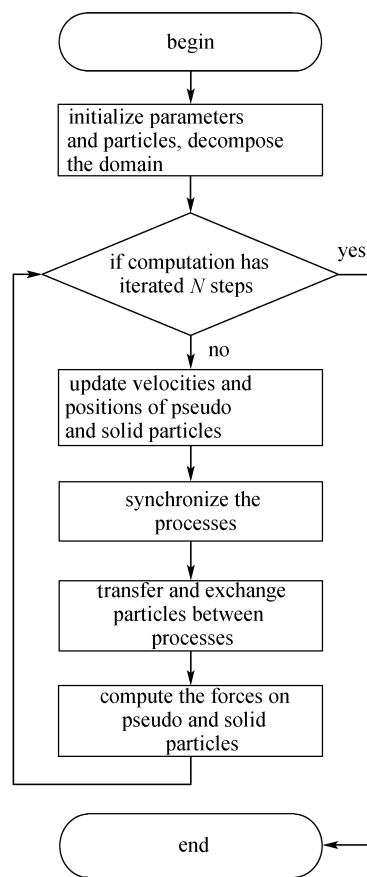


Fig. 2 Flow graph of parallel algorithm

由于作用的对称性, 对每个单元格只需寻找半空间内的四个相邻格), 同时每个格子中的所有粒子也组成链表, 以链表为序查找邻近的粒子. 这样就极大地减少了搜寻时间. 考虑到网格之间粒子运动的相关性, 每计算一个时间步, 就需要在两个相邻的处理器间交换其相邻格子中的粒子信息, 以计算边界粒子的受力. 因此各处理器间存在信息交换和同步的关系. 典型的计算区域如图 3 所示. 内层的区域是各个处理器的实际计算区域, 外层则包含了和邻近处理器交换得到的粒子信息. 这里为了表示方便, 处理器的计算区域和单元格的边界是一致的, 实际上二者可以不重合.

处理器间消息传递方式的好坏直接影响并行程序的效率. 因为对于并行计算机来说, 由于网络延迟和传输速度的影响, 通信系统的性能始终是一个瓶颈. 高效的并行算法应尽量地减少处理器间的通信次数和通信量. 在拟颗粒模型的计算中, 主要的通信是粒子在处理器间的迁移和交换边界粒子. 考虑到拟颗粒模型中粒子的运动是连续的, 每个时间步内粒子的运动不会超过一个网格单元, 将迁移粒

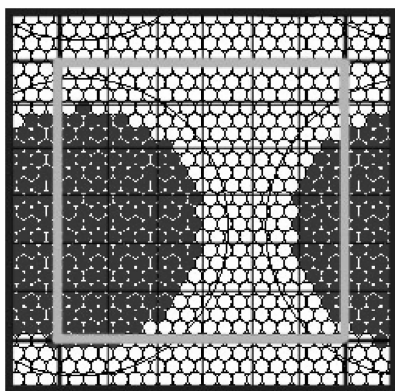


Fig. 3 Processor domain

子的信息和边界粒子的信息合并到一起进行通信。各处理器将边界网格单元粒子链中粒子和迁移到邻近处理器的所有粒子的信息整理成数据包，分别发送给相邻处理器，同时接受来自相邻处理器的同样信息。传递的过程如图 4 所示。以处理器 P2 为例说明，首先是沿左右方向，处理器 P2 把它的左边界和移出左边界的粒子信息发送给 P1，同时接收 P3 传递的同样信息，接着把右边界和移出右边界的粒子信息发送给 P3，同时接收 P1 传递的同样信息。然后再沿上下方向，具体传递过程和左右方向是一致的。这样经过四次传递，处理器 P2 就得到了与它邻近的粒子信息。

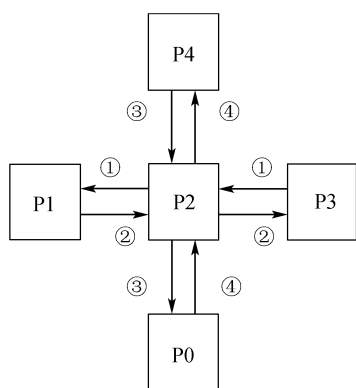


Fig. 4 Transfer mode among processors

粒子受力的计算在每个时间步中是最耗时的，对这一部分进行优化，可以明显地提高程序的效率。在计算受力时，以网格为单位，按照网格中的粒子链的顺序计算粒子的受力，而不是以整个处理器的粒子链为序<sup>[1~9]</sup>。在后面的结果讨论中可以看到，这样对计算性能有很大改善，因为同一网格中粒子的邻近粒子许多是一样的，提高了处理器 Cache 的命中率。

当固体颗粒位于处理器的边界时，组成它的拟

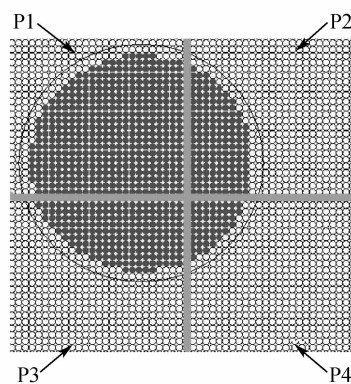


Fig. 5 Solid particle lies in several processor domains

颗粒可能位于几个处理器上，计算情况要复杂些。如图 5 所示，固体颗粒位于处理器 P1、P2、P3 和 P4 的交界处，它的质心落在 P1 内，它的受力计算及速度、位移更新由 P1 负责。但是为了计算固体颗粒总的受力，P2、P3 和 P4 需要将分别属于它们的组成该固体颗粒的拟颗粒的受力传递给 P1。然后 P1 要把固体颗粒更新后的速度和位移传递给 P2、P3 和 P4，以更新它们处理器内组成固体颗粒的拟颗粒的速度和位移。如果这样，各处理器间就需要进行两次传递，并且传递方式和前面介绍的也不一样。为了减少通信次数和保持传递方式的一致性，在 P2、P3 和 P4 中也保存该固体颗粒的信息，这一步是在进行粒子迁移传递时完成的。各处理器间只需按照同样的传递方式传递一次该固体颗粒的信息，固体颗粒总的受力叠加由各处理器分别完成，并由此更新各自的组成该固体颗粒的拟颗粒的速度、位移。这样就通过计算的重叠有效地减少了通信负荷。

### 3 并行计算数据

计算是在基于分布式存储的可扩展集群上进行的。集群系统的节点配置是：双 P III 1.13G CPU，512M SDRAM PC133 内存，节点间通过 100M 以太网联接。

如前所述，首先对比了在计算受力时以网格单元中的粒子链为序和以整个处理器的粒子链为序两种方式下的单步的受力计算时间，如图 6 所示。从图中可以看出，前一种方式计算受力的速度比后一种方式可以快约 20%。

为了检验算法的可扩展性能，计算中对几种规模的粒子数采用了不同数目的计算节点，进行了对

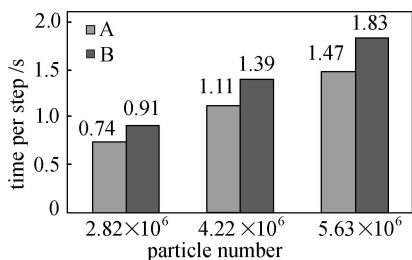


Fig. 6 Time for force computing by two methods  
A—along the particle chains in cell unit;  
B—along the particle chains in processor

比, 结果如图 7、图 8 所示. 图 7 是在 CPU 数目一定的情况下, 单步迭代平均耗费的时间随系统中粒子规模变化的情况. 从图中可以看出, 每一步的时间随着系统中粒子数的增大而呈线性增长, 并且当 CPU 数目多时, 时间变化缓慢.

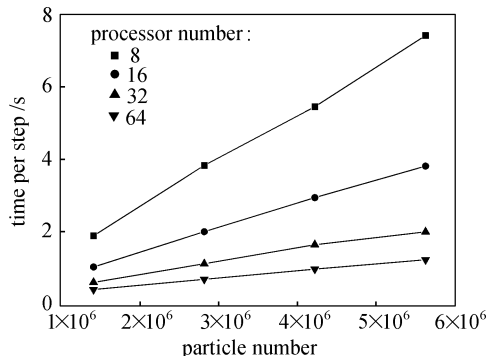


Fig. 7 Variation of time per step with particle number in system

图 8 是在固定的粒子规模下, 单步迭代的平均时间随处理器数目变化的情况. 从图中可以看出, 随着处理器数目的增多, 计算时间减少, 并行加速比也随之下降, 这主要是由通信和同步的开销增大引起的. 当粒子规模大时, 加速比要高, 这主要是由于处理器内的计算时间和通信时间比率大, 并行效率高.

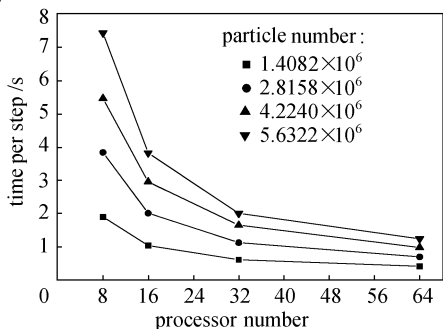


Fig. 8 Variation of time per step with CPU number

## 4 结 论

通过应用区域分解的方法, 在可扩展集群系统上实现了拟颗粒计算模型的并行化, 并根据模型的特点, 对其并行算法进行了优化. 数值实验结果表明, 对拟颗粒模型的并行计算在集群系统上是成功的, 算法具有并行加速比高、可扩展性好等特点. 并行算法的实现, 有助于利用拟颗粒模型进行大规模的科学计算, 对两相流动的规律进行深入研究.

## References

- 1 Ge Wei, Li Jinghai. Pseudo-particle Approach to Hydrodynamics of Particle-fluid Systems. In: Proceeding of the Fifth International Conference on Circulating Fluidized Beds. Beijing: Science Press, 1996. 260—265
- 2 Ge Wei (葛蔚), Li Jinghai (李静海). Discrete Particle Simulation of Aggregative to Particulate Fluidization. *Chinese Science Bulletin* (科学通报), 1997, **42** (19): 2081—2083
- 3 Ge Wei (葛蔚). Multi-scale Simulation on Fluidization System; [dissertation] (学位论文). Harbin: Harbin Institute of Technology, 1998
- 4 Ge Wei (葛蔚). Micro-scale Simulation and Multi-scale Analysis of Particle-fluid System; [post-doctor report] (博士后研究报告). Beijing: Institute of Chemical Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, 2001
- 5 Ge Wei (葛蔚), Li Jinghai (李静海). Macro-scale Pseudo-particle Modeling for Particle-fluid Systems. *Chinese Science Bulletin* (科学通报), 2001, **46** (10): 802—805
- 6 Ge Wei (葛蔚), Li Jinghai (李静海). General Approach for Discrete Simulation of Complex Systems. *Chinese Science Bulletin* (科学通报), 2002, **47** (5): 353—356
- 7 Ge Wei, Li Jinghai. Particle-fluid System Is All But Flowing Particles-macro-scale Pseudo-particle Modeling. *Powder Technology*, 2003, **137** (1-2): 99—108
- 8 Ge Wei (葛蔚), Zhang Jiayuan (张家元), Li Tinghua (李廷华), Li Jinghai (李静海). Pseudo-particle Simulation of Multi-scale Heterogeneity in Fluidization. *Chinese Science Bulletin* (科学通报), 2003, **48** (7): 634—636
- 9 Ge Wei, Li Jinghai. Macro-scale Phenomena Reproduced in Microscopic Systems—Pseudo-particle Modeling of Fluidization. *Chemical Engineering Science*, 2003, **58**: 1565—1585
- 10 Ge Wei (葛蔚), Li Jinghai (李静海). Simulation of Discrete Systems with Local Interactions: a Conceptual Model for Massive Parallel Processing. *Computers and Applied Chemistry* (计算机与应用化学), 2000, **17** (5): 385—388
- 11 Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, **117**: 1—19
- 12 Chen Guoliang (陈国良). Parallel Computing (并行计算). Beijing: Higher Education Press, 1999
- 13 Hockney R W, Goel S P, Eastwood J W. Quiet High-resolution Computer Models of a Plasma. *Journal of Computational Physics*, 1974, **14**: 148—158