

基于时域多分辨率的非球形气溶胶散射并行 计算模型设计及验证

胡 帅¹, 高太长^{1,2}, 李 浩¹, 杨 波², 陈 鸣¹, 刘 磊¹, 李 刚³

¹解放军理工大学气象海洋学院, 江苏 南京 211101;

²解放军理工大学电磁环境效应与光电工程国家级重点实验室, 江苏 南京 210007;

³中国洛阳电子装备实验中心, 河南 洛阳 471000

摘要 为解决串行时域多分辨率(MRTD)散射模型运行时间长和内存消耗大的问题,基于消息传递接口(MPI)技术设计了一种非球形气溶胶散射并行计算模型。介绍了 MRTD 散射模型的基本框架和 2 种并行数据通信方案,并基于 MPI 重复非阻塞通信技术实现了 MRTD 散射模型的并行化设计;搭建了网络并行计算平台,实现了模型的并行化计算。将 MRTD 散射模型与 Mie 散射模型、T 矩阵法进行了对比,验证了并行 MRTD 散射模型的计算准确性。结果表明,MRTD 模型可较准确地模拟非球形粒子散射特性,并行计算技术可显著提高计算效率;电磁场分量同时交换的并行设计方案的计算效率略高于仅交换磁场分量的方案;通过增加中央处理器核数,程序的并行加速比随之增大,但单核运行效率却略有降低。随着粒子尺度参数的增大,单核计算效率随之增加,复折射率的改变并不会显著影响并行计算效率。

关键词 大气光学;非球形气溶胶;散射;时域多分辨率;并行计算

中图分类号 P426.3+1 文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201737.0601001

Design and Validation of Parallelized Computational Model for Nonspherical Aerosol Scattering Based on Multi-Resolution Time-Domain

Hu Shuai¹, Gao Taichang^{1,2}, Li Hao¹, Yang Bo², Chen Ming¹, Liu Lei¹, Li Gang³

¹ College of Meteorology and Oceanography, PLA University of Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 211101, China;

² National Key Laboratory on Electromagnetic Environment and Optical-Electro Engineering,

PLA University of Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210007, China;

³ Luoyang Electronic Equipment Testing Centre, Luoyang, Henan 471000, China

Abstract In order to decrease computational time and computer memory consumed by the serial multi-resolution time-domain (MRTD) scattering model, a parallel calculation model for nonspherical aerosol scattering is proposed based on message passing interface (MPI) technique. A basic frame of the MRTD scattering model and two parallelization data communication schemes are introduced, and the parallel design for MRTD scattering model is achieved by MPI repeated non-blocking communication technique. A network parallel computation platform is established for the parallel calculation. To validate the computational accuracy of the MRTD scattering model, the simulation results of parallelized MRTD scattering model are compared with that of Mie scattering model and T Matrix method. The results show that the MRTD model can calculate the scattering parameters of nonspherical particles accurately. Parallel computational technique can improve computation efficiency notably. The computation

收稿日期: 2017-01-17; 收到修改稿日期: 2017-01-22

基金项目: 国家自然科学基金(41575025,41575024)

作者简介: 胡 帅(1990—),男,博士研究生,主要从事军事大气探测理论与技术等方面的研究。

E-mail: hushuai2012@hotmail.com

导师简介: 高太长(1958—),男,博士,教授,博士生导师,主要从事军事大气探测理论与技术等方面的研究。

E-mail: 2009gaotc@gmail.com(通信联系人)

efficiency of the parallelization design scheme that exchanges electric field and magnetic field simultaneously is higher than that of the scheme that exchanges magnetic field simply. With increasing the number of central processing unit cores, the parallel acceleration ratio of program is increasing, while the computational efficiency of single processor is slightly decreasing. With the increasing of particle size parameter, the computational efficiency of single processor is increasing as well. It also can be found that the change of complex refractive index has no notable influence on parallel computational efficiency.

Key words atmospheric optics; nonspherical aerosol; scattering; multi-resolution time-domain; parallel computation

OCIS codes 010.1290; 140.3510; 140.3550; 140.3570

1 引 言

气溶胶散射特性是影响气溶胶光学遥感的重要因素^[1-2]。气溶胶光学遥感以辐射传输模式为基础^[3-4],在辐射传输模式中,气溶胶散射参数(如穆勒矩阵和散射相函数等)是模式不可或缺的输入参数^[5]。目前气溶胶散射参数主要通过 Mie 散射计算得到,并未充分考虑气溶胶及冰晶的非球形效应,实际非球形粒子与等效球形粒子的散射特性存在较大差异^[6-7],影响遥感反演精度^[2],因此非球形气溶胶散射特性的准确获取已成为气溶胶光学遥感技术的关键环节之一^[8-9]。

为模拟非球形气溶胶的散射特性,目前已建立了许多气溶胶散射模型,主要包括两类:1)近似计算模型,该类模型主要针对入射光波长远大于或远小于粒子半径的情形,主要的模型包括 Rayleigh 近似、Rayleigh-Gans-Stevenson 近似(RGA)、异常衍射近似和几何光学近似(GOA)等^[10];2)精确求解模型,该类模型需要通过求解 Maxwell 方程组或 Helmholtz 方程来模拟粒子电磁散射特性^[10],该类模型包括基于场展开方式的散射模型、基于体积积分方程的散射模型及基于微元法的散射模型。基于场展开方式的散射模型,如 T 矩阵法^[11]、扩展边界条件法^[12]、分离变量法^[13]和点匹配法^[14]等,虽然利用精确求解模型进行计算的计算精度高、速度快以及内存消耗小,但当粒子复折射率和尺度参数(k)较大或形状较为特殊时,易出现数值求解的不稳定;此外,受求解边界条件的限制,这类模型主要用于简单形状的散射过程模拟,如椭球和圆柱粒子等,但实际气溶胶形状并不规则,同时还存在多物质的复杂混合,因此该类模型无法完全满足实际应用需求。体积积分方程法,如矩量法(MoM)^[15]和离散偶极近似法(DDA)^[16]等,虽然适用于任意形状、非均匀质的粒子,但计算过程涉及大型矩阵的求解,存在不稳定性,同时计算精度取决于偶极子的数目,存在内存消耗大、收敛速度慢的问题,因此该类模型目前只能用于计算尺度参数较小的粒子。在可见光和近红外波段,气溶胶或冰晶粒子的尺度参数较大。随着计算电磁学的发展,基于微元法思想的时域有限差分法(FDTD)^[10,17]和有限元法(FEM)^[18]等被引入气溶胶散射特性的计算中,其中 FDTD 已广泛应用于复杂形状气溶胶粒子散射特性的模拟^[17],该方法可避免积分方程法常见的奇异核问题,适用于复杂形状、非均匀质气溶胶粒子的光散射过程的模拟,但计算精度与计算量的矛盾较为突出;为解决该问题,时域伪谱法(PSTD)被引入气溶胶散射特性的计算中,该方法可显著减小程序的内存消耗和缩短运行时间^[19],目前 Liu 等^[20]已采用该方法实现了尺度参数达 200 的粒子散射特性模拟。

与 PSTD 类似,解放军理工大学军事大气探测理论与技术研究团队将时域多分辨(MRTD)技术引入气溶胶散射过程模拟中,并自主研发了一套新的非球形气溶胶散射模型,该方法在较少的空间取样点条件下便可取得较高的模拟精度^[21]。MRTD 技术虽然可有效模拟大目标的散射特性^[22],但对于尺度参数较大的气象目标,如 PM_{2.5}、PM₁₀ 和大冰晶等,其运行时间较长且内存消耗很大,特别对于形状极不规则的粒子,为保证模拟精度,相应网格还得加密,串行计算模式很难满足工程应用的要求。因此,基于并行计算技术,设计高效的 MRTD 并行计算模型无疑具有重要的现实意义。基于此,本文在原有串行散射模型基础上,结合 MPI 重复非阻塞通信技术,设计了 MRTD 的并行散射计算模型。

2 模型简介及基本原理

2.1 模型的基本框架

MRTD 非球形气溶胶散射模型如图 1 所示,该模型主要包括三个模块:电磁场近场计算模块、近远场外

推模块及气溶胶散射特性计算模块。电磁场近场计算模块主要实现包含散射体空间的电磁场模拟,其中关键技术包括 Maxwell 方程离散迭代格式、吸收边界的设计以及基于总场-散射场技术的人射波引入;模型中采用的吸收边界为基于辅助微分方程的完全匹配层(ADE-PML)。近远场外推模块的功能是将近场电磁场变换至频域,以实现远场散射场外推。气溶胶散射特性计算模块主要实现粒子吸收、消光和散射截面及穆勒矩阵等参数的模拟。

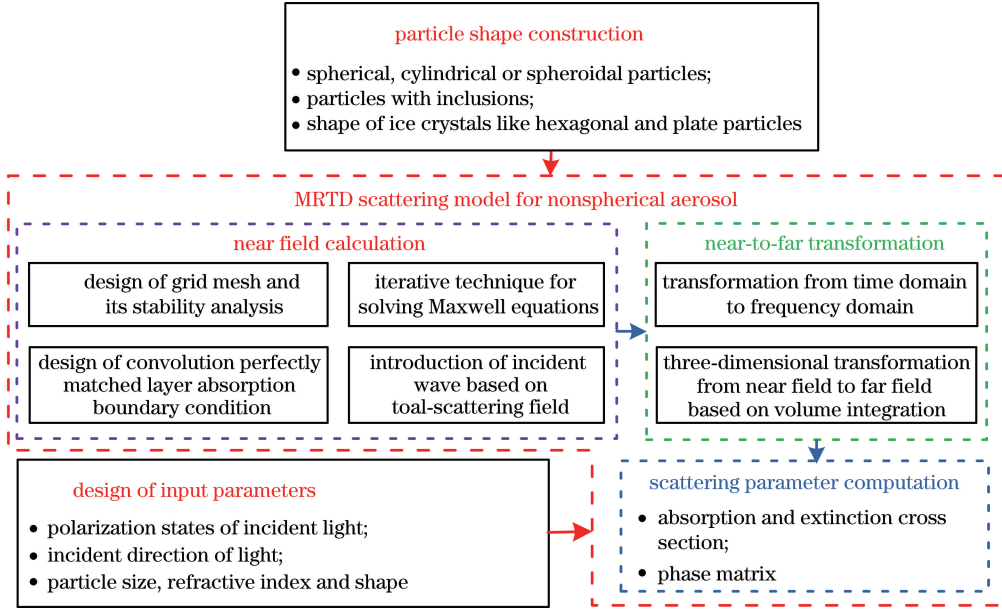


图 1 非球形气溶胶 MRTD 散射模型基本框架

Fig. 1 Basic frame of MRTD scattering model for nonspherical aerosol

2.2 MRTD 的基本原理

在均匀介质条件下, Maxwell 方程组的矢量形式为

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma \mathbf{E}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \sigma_m \mathbf{H}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho / \epsilon, \quad (2)$$

式中 \mathbf{E} 为电场强度矢量,单位为 V/m; \mathbf{H} 为磁场强度矢量,单位为 A/m; ϵ 为介质的介电常数,单位为 F/m; μ 为磁导系数,单位为 H/m; σ 为电导率,单位为 S/m; σ_m 为磁导率,单位为 Ω /m; ρ 为电荷密度。在大气科学领域,粒子的光学属性通常采用复折射率 m 表示,其实部和虚部分别表征了粒子散射效应和吸收效应的强弱。粒子复折射率 m 与复介电常数 ϵ_c 的关系为

$$\epsilon_c = \epsilon_0 \epsilon_r = \epsilon_0 m^2 = \epsilon - \frac{j\sigma}{\omega}, \quad (3)$$

式中 ϵ_r 为介质的相对介电常数, ϵ_0 为真空介电常数, ω 为电磁波角频率。若假设复折射率 $m = m_r - jm_i$ (m_r 为负折射率的实部, m_i 为负折射率的虚部), 则 $\epsilon = \epsilon_0 (m_r^2 - m_i^2)$ 和 $\sigma = 2\omega m_r m_i \epsilon_0$ 成立。利用(3)式, 便可将粒子的复折射率转化为电磁散射模拟所需的电磁参数。

MRTD 是 Maxwell 方程的高阶差分格式,是矩量法 MoM 和 FDTD 的结合体,在对气溶胶散射过程模拟中具有独特优势。以电场分量 E_x 为例,对 Maxwell 方程的 MRTD 离散迭代格式进行说明。在直角坐标系下,分别采用 Daubechies 尺度函数 $\phi_i(x)$ 与时间矩形脉冲函数 $h_n(t)$ 在时间和空间上将电磁场分量展开^[23]:

$$E_x(\mathbf{r}, t) = \sum_{i,j,k,n=-\infty}^{+\infty} E_{i+1/2,j,k}^{x,n} \phi_{i+1/2}(x) \phi_j(y) \phi_k(z) h_n(t), \quad (4)$$

式中 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 为场分量的位置向量, $E_{i+1/2,j,k}^{x,n}$ 为电场分量的展开系数, (i, j, k) 为场分量的空间离散坐

标, n 为时间迭代步数。 $h_n(t)$ 满足正交性, 可表示为

$$h_n(t) = h(t/\Delta t - n), \quad (5)$$

式中 Δt 为时间变化量。 Daubechies 尺度函数 $\phi_i(x)$ 可定义为

$$\phi_i(x) = \phi(x/\Delta x - k + M_1), \quad (6)$$

式中 $M_1 = \int_{-\infty}^{\infty} x\phi(x)dx$ 为 Daubechies 函数 $\phi(x)$ 的一阶矩, Δx 为空间离散网格尺寸, k 为平移因子。 尺度函数 $\phi_k(x)$ 不仅满足正交性, 同时还近似满足位移内插特性, 即 $\phi_i(x) \approx \delta_{i,0}$, 其中 $\delta_{i,i'}$ 为狄拉克函数。

将(4)式代入 Maxwell 旋度方程, 并采用 Galerkin 法则化简可得

$$E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n+1} = CA(m)E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n} + CB(m) \sum_{l=-L_s}^{L_s-1} a(l)(H_{i+0.5,j+l+0.5,k}^{\phi z,n+1/2}/\Delta y - H_{i+0.5,j,k+l+0.5}^{\phi y,n+1/2}/\Delta z), \quad (7)$$

式中 m 为场分量的网格离散坐标, $m = i + 1/2, j, k$; $a(l)$ 为连接系数, l 的变化范围仅为 $-L_s \sim L_s-1$, 其中 $L_s = 2N-1$ 为基函数的有效支撑尺寸, N 为小波函数消失矩, 这里取 $N = 2$ 。 $CA(m)$ 和 $CB(m)$ 的计算式为

$$CA(m) = \frac{2\epsilon - \sigma\Delta t}{2\epsilon + \sigma\Delta t}, \quad CB(m) = \frac{2\Delta t}{2\epsilon + \sigma\Delta t}. \quad (8)$$

$a(l)$ 可由尺度函数在傅里叶频域的内积计算得到, 即

$$a(l) \equiv \left\langle \frac{d\phi_{j+1/2}(x)}{dx}, \phi_{j-l}(x) \right\rangle = \int_0^{\infty} \omega |\hat{\phi}(\omega)|^2 \sin[\omega(l + 1/2)]d\omega, \quad (9)$$

式中 $|\hat{\phi}(\omega)|$ 为尺度函数的傅里叶变换。 由于函数 $\phi_i(x)$ 具有位移内插特性, 空间 \mathbf{r}_0 的电磁场值等于该处的场展开系数, 即 $E_x(\mathbf{r}_0, t_0) = E_{i+1/2,j,k}^{\phi x,n}$ 成立, 从而可避免对场分量的重构, 这是采用 Daubechies 尺度函数作为基函数展开的优势所在。

3 并行计算模型设计

MRTD 并行计算的基本思路是: 根据处理器的个数, 将计算区域均衡地分割为若干子区域, 并将各个子区域分配给各子进程, 各进程之间通过连接面的数据交换来实现电磁散射过程的协同仿真。 这里计算区域的划分采用一维区域划分的方式(沿 z 轴), 如图 2 所示。

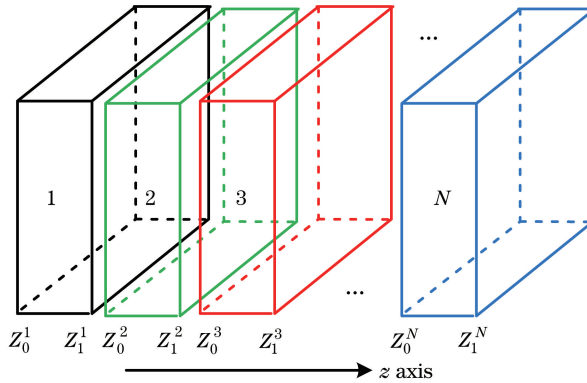


图 2 MRTD 并行计算区域的划分

Fig. 2 Division of MRTD parallel computational region

图 3 为 MRTD 并行计算的基本流程, 包括任务分配与初始化、电磁场分量的 MRTD 迭代求解以及粒子散射特性的计算三个环节。 任务分配由主进程实施, 任务确定后, 主进程将计算任务发送给其他进程。 粒子散射特性计算的主要功能是实现近远场变换以及粒子散射截面、吸收截面、消光截面和散射矩阵等参数的计算, 该过程由各进程分别实现, 除此之外, 主进程还负责各进程数据的收集、整理与输出。 电磁场分量的 MRTD 迭代求解是主要的并行设计部分, 主要功能是实现近场电磁场分量的迭代计算, 该部分由各进程分工协同实施, 采用 MPI 重复非阻塞通信技术实现进程间的数据通信。

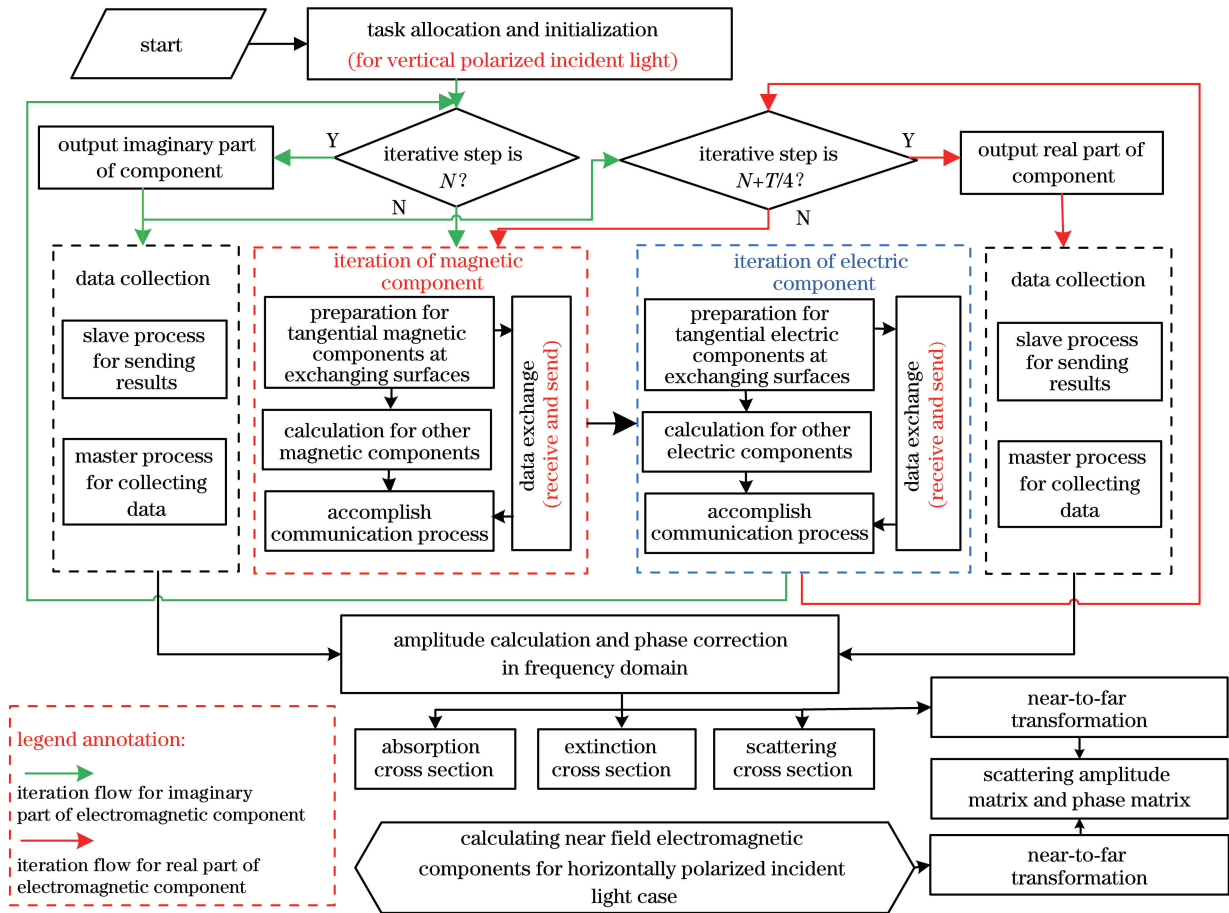


图 3 MRTD 并行计算模型的流程图

Fig. 3 Flowchart of MRTD parallel computational model

3.1 MPI 重复非阻塞通信模式介绍

在阻塞通信模式下,数据通信的同时各进程只能处于等待状态,浪费了大量计算机资源。为了解决此问题,MPI 开发了非阻塞通信模式,该通信模式实现了计算和通信的重叠,可有效提高程序运行效率。

在实际并行计算过程中,需要重复执行某些通信过程(如在 MRTD 迭代过程中,每次迭代均需要交换固定节点的场分量),因此,在非阻塞通信基础上,进一步优化得到了重复非阻塞通信模式,在该模式中,通信参数和 MPI 内部对象得到固化,通信过程也得以优化,降低了不必要的通信开销。重复非阻塞通信分为 4 步,即通信初始化、启动通信、完成通信和释放通信对象。

3.2 连接面的数据交换模式设计

在 MRTD 并行计算模型中,任何一个场分量的迭代计算均需要周围 2~3 个连接面的切向场分量,因此需要交换各进程计算区域连接面的电磁场分量。基于此,给出了两套电磁场分量并行交换方案,下面以第 k 个进程为例,对其进行简单说明。

图 4 为第一种数据交换方案。首先计算左边界的数据,计算 $Z=Z_0$ 和 $Z=Z_0+1$ 两个连接面的切向磁场分量 H_x 和 H_y ,并计算 $Z=Z_0, Z_0+1$ 和 Z_0+2 三个连接面的切向电场分量 E_x 和 E_y ;然后将这些场分量数据发送至进程 $k-1$,用于计算第 $k-1$ 个计算区域 $Z=Z_1$ 和 Z_1-1 两个面上切向电场和 $Z=Z_1, Z_1-1$ 和 Z_1-2 三个面上切向磁场。接着计算并交换右侧的场分量数据,计算 $Z=Z_1, Z_1-1$ 和 Z_1-2 三个连接面切向磁场分量和 $Z=Z_1$ 和 Z_1-1 两个连接面内的切向电场分量,这部分数据主要用于第 $k+1$ 个子区域 $Z=Z_0, Z_0+1$ 和 Z_0+2 三个连接面内 E_x 和 E_y 的计算,以及 $Z=Z_0$ 和 $Z=Z_0+1$ 两个连接面内 H_x 和 H_y 的计算。与此同时,该进程同时接收两侧进程发送的切向电磁场分量数据,实现了自身的电磁场分量迭代。

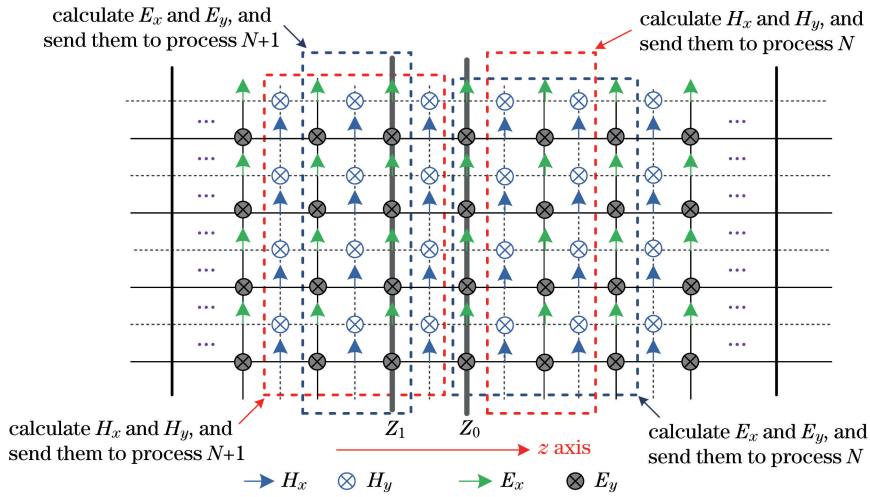


图 4 第一种数据交换方案

Fig. 4 First kind of data exchange scheme

第一种数据交换方案共需要进行 8 次通信用过程,其实现过程相对复杂。为减小通信的复杂度,采用第二种数据交换方案,如图 5 所示。与第一种数据交换方案不同,第二种数据交换方案只需对切向磁场分量进行交换,交换数量为子区域两侧的 10 个连接面,切向电场分量可在磁场数据的基础上由各进程迭代计算获得。以第 k 个子区域为例,该方案需要分别计算左侧 $Z=Z_0, Z_0+1, Z_0+2, Z_0+3$ 和 Z_0+4 5 个连接面的 H_x 和 H_y 以及右侧 $Z=Z_1, Z_1-1, Z_1-2, Z_1-3$ 和 Z_1-4 5 个连接面的 H_x 和 H_y ,并将左、右切向磁场分量分别发送至第 $k-1, k+1$ 个子进程,且该进程同时接收这两个进程发送的数据。与第一种数据交换方案相比,第二种数据交换方案的通信次数减少一半(仅为 4 次,但通信数据量不变,即图 3 中电场的通信过程不存在了),但在各进程内,部分电场分量的计算需要重复一次。

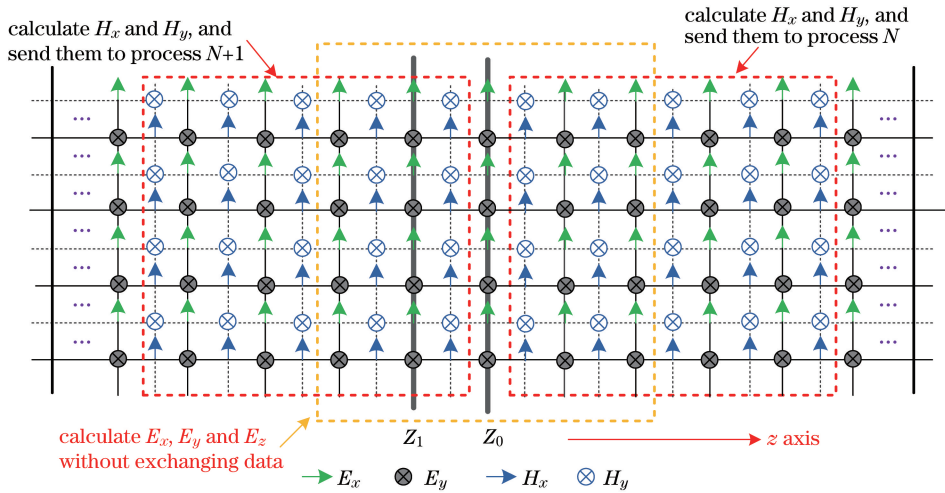


图 5 第二种数据交换方案

Fig. 5 Second kind of data exchange scheme

4 模拟结果验证及性能分析

基于 Fortran 和 MPI 软件包可实现模型编码。下面分别对模型的计算精度和计算性能进行分析和验证,其中模拟的形状包括球形和圆柱形粒子。如图 6 所示, r 为球形粒子的半径, D 和 L 分别为圆柱粒子的直径和高度,圆柱粒子的空间取向用旋转轴的天顶角 α 和方位角 β 表示。

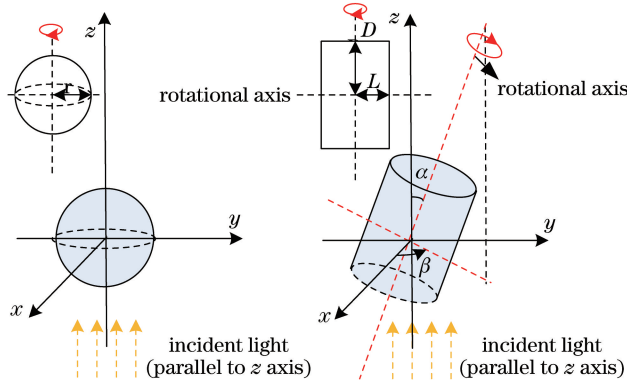


图 6 球形、椭球及圆柱粒子的参数说明

Fig. 6 Parameter illustrations of sphere, ellipsoid and cylinder particles

4.1 球形粒子情形的对比验证

4.1.1 穆勒矩阵的对比验证

设入射光波长 $\lambda=0.633 \mu\text{m}$, 球形粒子半径为 $0.8 \mu\text{m}$, 复折射率为 $1.4142-0.00i$, 网格间距为 $\lambda/40$ (参照前期的研究结果设置^[21]), 采用 MRTD 散射模型模拟粒子的穆勒矩阵, 并将其与 Mie 散射模型的模拟值进行对比, 结果如图 7 所示。

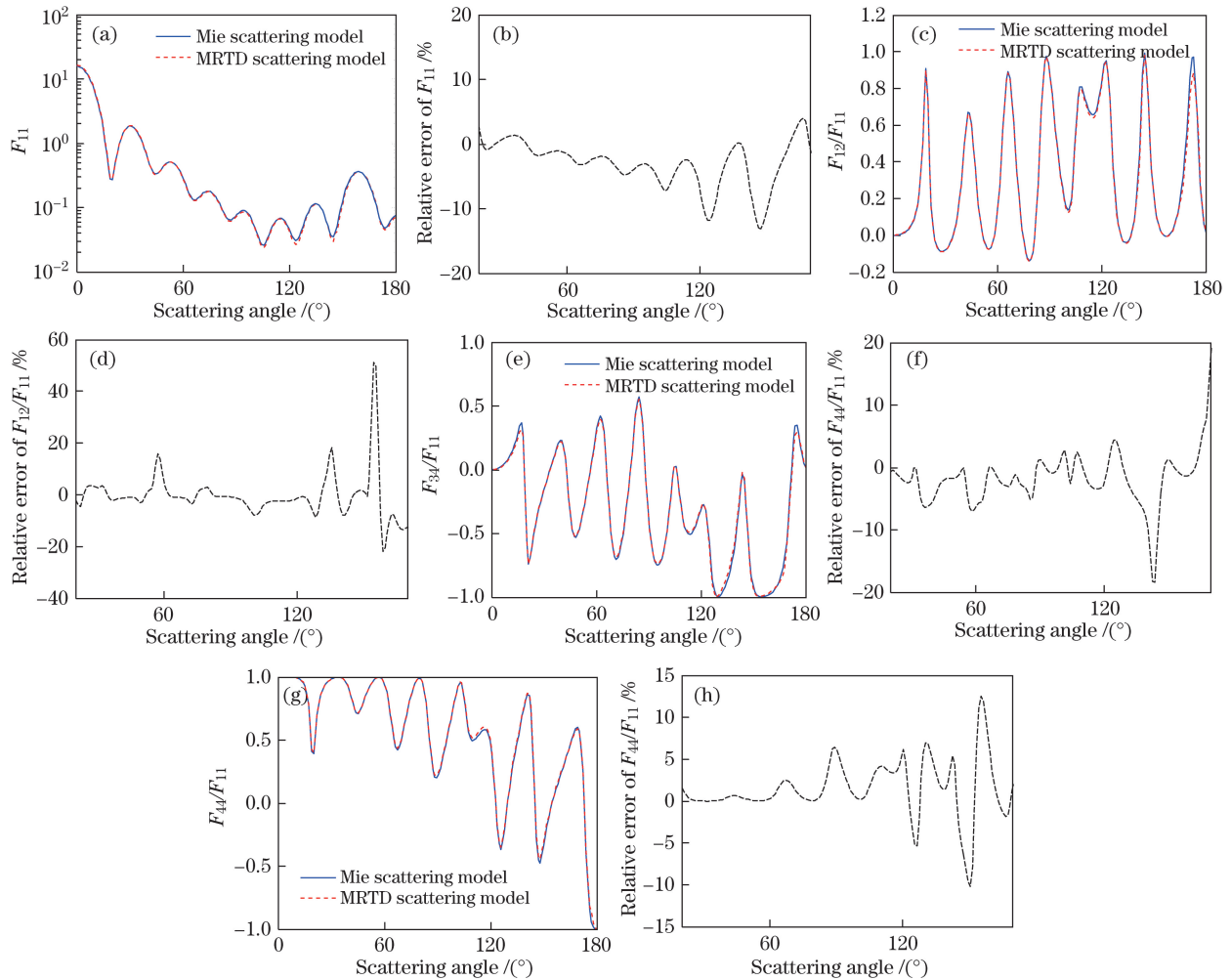


图 7 基于 MRTD 和 Mie 散射模型模拟的 (a)(c)(e)(g) 穆勒矩阵元素和 (b)(d)(f)(h) 相对误差 ($r=0.8 \mu\text{m}$)

Fig. 7 (a)(c)(e)(g) Müller matrix elements and (b)(d)(f)(h) relative error simulated with MRTD and Mie scattering models ($r=0.8 \mu\text{m}$)

由图 7 可知,在小球形粒子情形下,基于 MRTD 和 Mie 散射模型模拟结果的一致性较好。在全散射角区间($0^\circ\sim 180^\circ$)内,穆勒矩阵元素 F_{11} 和 F_{44} 的相对误差大部分在 10% 以内;对于穆勒矩阵元素 F_{12} 和 F_{34} ,当散射角小于 130° 时,相对误差均小于 10%,在后向散射方向,个别散射角对应的相对误差虽然略大,但两曲线基本重合,验证了并行 MRTD 散射模型的准确性。

4.1.2 积分散射特性的对比验证

当入射光波长为 $0.8\ \mu\text{m}$ 、粒子复折射率为 $1.33-0.005i$ 时,分别取粒子尺度参数 X 为 5, 10, 20, 40, 80, 采用 MRTD 和 Mie 散射模型模拟粒子的积分散射特性(消光效率因子 Q_{ex} 、吸收效率因子 Q_{ab} 和单散射反照率 $\bar{\omega}$), 并求取两者的相对模拟误差 E_R , 结果如表 1 所示, 表 1 中 N_{grid} 为每个波长内的网格数量。

由表 1 可知,并行 MRTD 散射模型模拟的粒子积分散射特性的准确度较高,当粒子尺度参数 X 为 10 时,消光和吸收效率因子的相对误差为 -0.4891% 和 -1.6933% ,单散射反照率相对误差仅为 0.1168% ,验证了模型的准确性。从整体上看,单散射反照率的模拟精度要明显高于消光和吸收效率因子。

表 1 基于 Mie 散射模型与并行 MRTD 散射模型模拟的积分散射参数的对比

Table 1 Comparison of integral scattering parameters simulated with Mie scattering model and parallelized MRTD scattering model

No.	Size parameter	N_{grid}	Q_{ex}			Q_{ab}			$\bar{\omega}$		
			Mie scattering model	Parallelized MRTD scattering model	$E_R/\%$	Mie scattering model	Parallelized MRTD scattering model	$E_R/\%$	Mie scattering model	Parallelized MRTD scattering model	$E_R/\%$
1	5	50	3.5362	3.4964	-1.1255	0.1018	0.0995	-2.2298	0.9712	0.9715	0.0350
2	10	40	2.2284	2.2175	-0.4891	0.2067	0.2032	-1.6933	0.9073	0.9084	0.1168
3	20	40	2.1296	2.0948	-1.6341	0.3701	0.3585	-3.1343	0.8262	0.8289	0.3219
4	40	30	2.0478	1.9997	-2.3488	0.5372	0.5227	-2.6992	0.7377	0.7386	0.1234
5	80	20	2.0815	2.0265	-2.6423	0.7526	0.7283	-3.2289	0.6384	0.6406	0.3462

4.2 非球形粒子散射特性模拟与对比

当粒子为圆柱形粒子,取入射光波长 λ 为 $0.86\ \mu\text{m}$,离散网格间距为 $\lambda/40$,直径 $D = 2.0\ \mu\text{m}$, $L = 1.0\ \mu\text{m}$,粒子取向 $(\alpha, \beta) = (0, 0)$,粒子复折射率为 $1.414-0.00i$,采用 MRTD 散射模型与 T 矩阵法分别计算粒子的穆勒矩阵,如图 8 所示。

由图 8 可知,采用 MRTD 散射模型与 T 矩阵法得到模拟结果的一致性较好,验证了模型的准确性。与球形粒子的模拟结果类似,采用 MRTD 散射模型模拟得到的后向散射方向的相对误差大于前向散射方向的相对误差,特别是在曲线剧烈变化的散射角区间。在前向散射方向, F_{11} 的模拟结果相对误差均小于 5%,对于 F_{12}/F_{11} , F_{13}/F_{11} 和 F_{14}/F_{11} , 对应模拟结果的绝对误差均小于 0.1;在后向散射方向, F_{11} 的最大相对误差可达到 15.3%, F_{12}/F_{11} 、 F_{13}/F_{11} 和 F_{14}/F_{11} 对应的最大绝对误差分别为 0.121, 0.15, 0.13。

4.3 并行计算模型的效能评估

并行计算模型的效能通常采用并行加速比和效率两个指标进行评价。并行加速比 S_p 是指采用多个处理器时计算速度提高的倍数,可表示为

$$S_p = T_1/T_n, \quad (10)$$

式中 T_1 为串行计算花费的时间, T_n 为 n 个核并行计算花费的时间。

效率 η 描述一个处理器计算能力被有效利用的比率,可表示为

$$\eta = S_p/n, \quad (11)$$

式中 n 为总进程数。下面分别在不同粒径和复折射率情形下讨论散射模型的并行计算效率。

4.3.1 不同粒径情形的并行效能分析

取入射光波长 λ 为 $0.633\ \mu\text{m}$,粒子形状设为球形,尺度参数 X 为 10, 30, 80,复折射率为 $1.4142-0.00i$,网格间距取 $\lambda/50, \lambda/30, \lambda/20$ (所有情形下,粒子消光效率因子的相对误差小于 4%),分别采用不同中央处理器(CPU)核数和并行数据交换方案对该个例进行模拟,统计相应的程序运行时间、并行加速比及运行效率,如

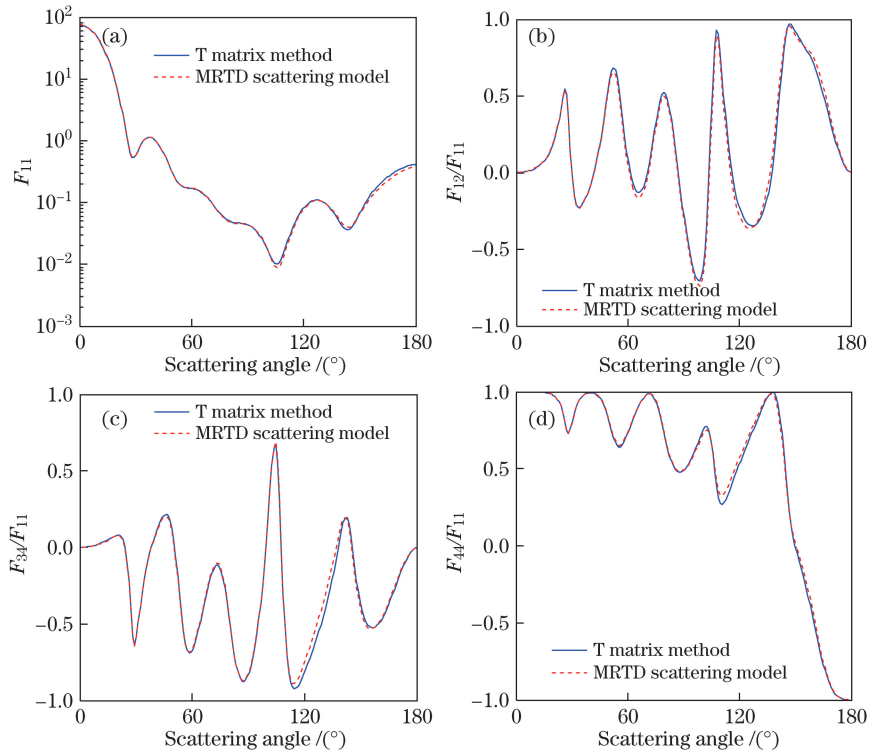


图 8 基于 MRTD 散射模型与 T 矩阵法模拟得到的圆柱形粒子的穆勒矩阵元素。(a) F_{11} ; (b) F_{12}/F_{11} ; (c) F_{34}/F_{11} ; (d) F_{44}/F_{11}

Fig. 8 Müller matrix elements of cylinder particles simulated with MRTD scattering model and T matrix method.

(a) F_{11} ; (b) F_{12}/F_{11} ; (c) F_{34}/F_{11} ; (d) F_{44}/F_{11}

表 2~4 所示。模拟过程中,采用的计算平台为自主搭建的网络并行计算平台,该平台共包含 3 台同型号计算机,采用千兆级交换机进行连接,计算机配置为 CPU 3.1 GHz,内存为 4 GB,系统为 Win7 64 bit,并行计算软件为 mpich2-1.2.1p1。

表 2 并行 MRTD 散射模型的计算性能分析表($X=10$)

Table 2 Calculation performance analysis of parallelized MRTD scattering model ($X=10$)

No.	CPU core number	Data exchange method 1			Data exchange method 2		
		Time /(10^3 s)	S_p	η /%	Time /(10^3 s)	S_p	η /%
1	1	6.9421	1,000	100.0	—	—	—
2	2	4.5792	1,516	75.8	4.6717	1,486	74.3
3	3	3.3666	2,062	68.7	3.5185	1,973	65.7
4	4	2.7537	2,521	63.0	2.8604	2,427	61.2
5	8	2.0286	3,422	42.7	2,1640	3,208	40.1

表 3 并行 MRTD 散射模型的计算性能分析表($X=30$)

Table 3 Calculation performance analysis of parallelized MRTD scattering model ($X=30$)

No.	CPU core number	Data exchange method 1			Data exchange method 2		
		Time /(10^4 s)	S_p	η /%	Time /(10^4 s)	S_p	η /%
1	1	4.9553	1,000	100.0	—	—	—
2	2	3,1303	1,583	79.1	3,2073	1,545	77.3
3	3	2,3801	2,082	69.4	2,4863	1,993	66.4
4	4	1,8339	2,702	67.5	1,9088	2,596	64.9
5	8	0,9847	5,032	62.9	1,0057	4,927	61.6

表 4 并行 MRTD 散射模型的计算性能分析表($X=80$)Table 4 Calculation performance analysis of parallelized MRTD scattering model ($X=80$)

No.	CPU core number	Data exchange method 1			Data exchange method 2		
		Time /(10^5 s)	S_p	$\eta / \%$	Time /(10^5 s)	S_p	$\eta / \%$
1	1	3.3521	1.000	100.0	—	—	—
2	2	2.0782	1.613	80.6	2.1337	1.571	78.5
3	3	1.5251	2.198	73.2	1.5947	2.102	70.1
4	4	1.2075	2.776	69.4	1.2663	2.647	66.2
5	8	0.6203	5.404	67.6	0.6406	5.232	65.4

由表 2~4 可知,随着 CPU 核数的增加,程序所需的运行时间迅速减少,其中当粒子尺度参数为 30 时,若使用的 CPU 核数从 1 增加至 8,相应的模拟时间则缩短为原来的 1/5。随着 CPU 核数的增加,单核程序运行效率有所降低,其原因是数据交换的次数和数据量增加;数据交换方案一的总体效率要略高于数据交换方案二,其原因是两个方案的数据通信量是相同的,但数据交换方案二同时还涉及电场的重复计算环节。随着粒子尺度参数的增加,并行计算的效率随之提高,其原因是粒子越大,单个进程分配的计算量越大。因此,计算所用时间相对于通信时间的比例有所增加,其中当 CPU 核数为 4 时, $X=10,30,80$ 对应的单核计算效率依次为 63.0%、67.5%、69.4%(数据交换方案一)。

4.3.2 不同复折射率情形的并行效能分析

取入射光波长 λ 为 $0.633 \mu\text{m}$,粒子形状为球形,尺度参数为 30,复折射率 $m_1 = 1.33 - 0.00i$ 和 $m_2 = 1.33 - 0.75i$,采用不同并行计算方案分析粒子的散射特性,并统计相应的并行计算效率,如表 5、6 所示。

表 5 并行 MRTD 散射模型的计算性能分析表($m_1 = 1.33 - 0.00i$)Table 5 Calculation performance analysis of parallelized MRTD scattering model ($m_1 = 1.33 - 0.00i$)

No.	CPU core number	Data exchange method 1			Data exchange method 2		
		Time /(10^4 s)	S_p	$\eta / \%$	Time /(10^4 s)	S_p	$\eta / \%$
1	1	4.9993	1.000	100.0	—	—	—
2	2	3.1442	1.590	79.5	3.2868	1.521	76.1
3	3	2.4128	2.072	69.0	2.5796	1.938	64.6
4	4	1.8557	2.694	67.3	1.9460	2.569	64.2
5	8	0.9777	5.113	63.9	1.0117	4.941	61.7

表 6 并行 MRTD 散射模型的计算性能分析表($m_2 = 1.33 - 0.75i$)Table 6 Calculation performance analysis of parallelized MRTD scattering model ($m_2 = 1.33 - 0.75i$)

No.	CPU core number	Data exchange method 1			Data exchange method 2		
		Time /(10^4 s)	S_p	$\eta / \%$	Time /(10^4 s)	S_p	$\eta / \%$
1	1	5.0113	1.000	100.0	—	—	—
2	2	3.0687	1.633	80.1	3.2144	1.559	77.9
3	3	2.3286	2.152	70.4	2.5018	2.003	66.7
4	4	1.7814	2.813	67.5	1.9706	2.543	63.5
5	8	0.9611	5.214	62.9	1.0237	4.895	61.2

由表 5、6 可知,复折射率的改变对并行效率并无显著影响,其中当 CPU 核数为 3 时,两种复折射率 m_1 和 m_2 对应的单核计算效率分别为 69.0%和 70.4%。与不同尺度参数的讨论结果相似,计算加速比随 CPU 核数的增加而增加。

5 结 论

MRTD 散射并行计算模型是解放军理工大学军事大气探测技术研究团队自主开发的一新型非球形气

溶胶散射特性计算模式,可实现任意形状、非均质气溶胶的散射特性模拟。为解决该模型计算时间长和内存消耗大的问题,设计了2套并行数据通信方案,基于MPI重复非阻塞通信技术实现了MRTD散射模型的并行化设计,然后分别从模拟精度和计算性能两方面对模型的模拟结果进行了分析,主要结论如下。

1) 经对比分析,发现基于并行MRTD散射模型与Mie散射模型、T矩阵法得到的模拟结果的一致性较好,验证了模型的准确性和可靠性。

2) 并行计算可显著缩短程序运行时间,提高模型的运行效率,其中电磁场分量同时交换的并行设计方案的效率略高于仅交换磁场的并行设计方案;随着粒子尺度参数的增加,单核计算效率随之增加;复折射率的改变并不会显著影响并行计算效率。

3) 积分散射参数(如吸收效率因子和消光效率因子等)比穆勒散射矩阵的模拟精度高;从模拟误差分布上看,前向散射方向穆勒矩阵的模拟精度优于后向散射方向;在穆勒矩阵元素随散射角剧烈变化的角度区间,并行MRTD散射模型的模拟结果相对较差,原因可能是粒子形状构造存在阶梯近似,下一步将采用共形网格技术来进一步提高模拟精度。

目前该模型已获得国家软件著作权,下一步将基于该模型开展非球形气溶胶和冰晶粒子散射特性的模拟研究,并建立相应的散射特性数据库。

致谢

感谢解放军理工大学野战工程学院电磁环境效应与电光工程国家级重点实验室陈彬教授、杨波和刘亚文博士以及海军航空工程学院江志东博士在电磁场理论及并行计算方面提供的指导。

参 考 文 献

- [1] Liou K N, Takano Y. Light scattering by nonspherical particles: Remote sensing and climatic implications[J]. *Atmospheric Research*, 1994, 31: 271-298.
- [2] Hu Shuai, Gao Taichang, Liu Lei, *et al.* Simulation of radiation transfer properties of polarized light in non-spherical aerosol using Monte Carlo method[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(9): 094201.
胡 帅, 高太长, 刘 磊, 等. 偏振光在非球形气溶胶中传输特性的 Monte Carlo 仿真[J]. *物理学报*, 2015, 64(9): 094201.
- [3] Rao R Z. *Modern atmospheric optics*[M]. Beijing: Scientific Express, 2012: 166-181.
- [4] Liou K N. *An introduction to atmospheric radiation*[M]. San Diego: Academic Press, 2003.
- [5] Han Yong, Wang Tijian, Rao Ruizhong, *et al.* Progress in the study of physical-optics characteristics of atmospheric aerosol[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(11): 7396-7407.
韩 永, 王体健, 饶瑞中, 等. 大气气溶胶物理光学特性研究进展[J]. *物理学报*, 2008, 57(11): 7396-7407.
- [6] Hu Shuai, Gao Taichang, Liu Lei. Analysis on scattering characteristics and equivalent Mie scattering errors of nonspherical aerosol[J]. *Journal of the Meteorological Sciences*, 2014, 34(6): 612-619.
胡 帅, 高太长, 刘 磊. 非球形气溶胶粒子散射特性及其等效 Mie 散射误差分析[J]. *气象科学*, 2014, 34(6): 612-619.
- [7] Shao Shiyong, Huang Yinbo, Wei Heli, *et al.* Phase function of prolate spheroidal mono-disperse aerosol particles[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, 29(1): 108-113.
邵士勇, 黄印博, 魏合理, 等. 单分散长椭球形气溶胶粒子的散射相函数研究[J]. *光学学报*, 2009, 29(1): 108-113.
- [8] Herman M, Deuzé J L, Marchand A, *et al.* Aerosol remote sensing from POLDER/ADEOS over the ocean: Improved retrieval using a nonspherical particle model[J]. *Journal of Geophysical Research*, 2005, 110: D10S02.
- [9] Yang P, Liou K N, Bi L, *et al.* On the radiative properties of ice clouds: Light scattering, remote sensing, and radiation parameterization[J]. *Advances in Atmospheric Sciences*, 2015, 32: 32-63.
- [10] Mishchenko M I, Hovenier J W, Travis L D. *Light scattering by nonspherical particles, theory, measurements, and application*[M]. New York: Academic Press, 2000.
- [11] Mishchenko M I, Travis L D. Capabilities and limitations of a current fortran implementation of the T-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 1998, 60(3): 309-324.
- [12] Bi L, Yang P. Tunneling effects in electromagnetic wave scattering by nonspherical particles: A comparison of the Debye series and physical-geometric optics approximations[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative*

- Transfer, 2016, 178: 93-107.
- [13] Voshchinnikov N V, Farafonov V G. Optical properties of spheroidal particles[J]. *Astrophysics & Space Science*, 1993, 204(1): 19-86.
- [14] Al-Rizzo H M, Tranquilla J M. Electromagnetic scattering from dielectrically coated axisymmetric objects using the generalized point-matching technique[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 119(2): 356-373.
- [15] Harrington R F. *Field computation by moment methods*[M]. New York: Macmillan, 1968.
- [16] Draine B T. Discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains[J]. *Astrophysical Journal*, 1988, 333(2): 848-872.
- [17] Yang P, Liou K N. Light scattering by hexagonal ice crystals: Comparison of finite-difference time domain and geometric optics models[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1995, 12(1): 162-176.
- [18] Morgan M A, Mei K K. Finite-element computation of scattering by inhomogeneous penetrable bodies of revolution[J]. *IEEE Transactions on Antennas & Propagation*, 1979, 27(2): 202-214.
- [19] Liu C, Panetta R L, Yang P. The effects of surface roughness on the scattering properties of hexagonal columns with sizes from the Rayleigh to the geometric optics regimes[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2013, 129: 169-185.
- [20] Liu C, Panetta R L, Yang P. Application of the pseudo-spectral time domain method to compute particle single-scattering properties for size parameters up to 200[J]. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 2012, 113: 1728-1740.
- [21] Hu Shuai, Gao Taichang, Li Hao, *et al.* Simulating scattering properties of nonspherical aerosol particles using multi-resolution time-domain method[J]. *Acta Physica Sinica*, 2017, 66(4): 044207.
胡 帅, 高太长, 李 浩, 等. 基于时域多分辨算法的非球形气溶胶散射特性仿真模拟[J]. *物理学报*, 2017, 66(4): 044207.
- [22] Dai Shaoyu, Wu Zhensen. Application of wavelet-Galerkin time domain method in the composite scattering of target and lossy ground[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(12): 7636-7640.
代少玉, 吴振森. 时域小波 Galerkin 法在有耗地面与任意目标复合散射中的应用[J]. *物理学报*, 2008, 57(12): 7636-7640.
- [23] Tentzeris E M, Cangellaris A, Katehi L P B, *et al.* Multiresolution time-domain (MRTD) adaptive schemes using arbitrary resolutions of wavelets[J]. *IEEE Transactions on Microwave and Techniques*, 2003, 50(2): 501-516.