

串并行显式拉格朗日有限差分法研究及实现

戴 荣, 李仲奎, 刘 辉

(清华大学 水利水电工程系, 北京 100084)

摘要: 显式拉格朗日有限差分法作为一种新的数值分析方法, 近年来在岩土和水利工程中得到普遍的认同和广泛的应用, 然而关于该算法的具体实现及进一步研究的文献较为鲜见。虽然计算机硬件发展速度很快, 但当前超大规模岩土及水利工程的高仿真度计算和实时快速反馈分析的要求, 对常规串行数值分析技术提出挑战。因而, 基于网络信息传输技术的并行算法研究得到人们的广泛关注。迄今为止, 对于并行有限元或并行边界元的研究已经取得一些成果, 但关于并行显式拉格朗日有限差分法的研究则鲜见报导。首先, 在对该算法进行深入研究的基础上, 编写串行程序。然后, 进一步对该算法的可并行性、数据分配、通信模式和计算次序进行研究, 采用区域分解法、主从模式和非阻塞通信设计并行显式拉格朗日有限差分法, 并用 C 语言和 MPI(消息传递接口)在机群上予以实现。圆形隧洞和条形基础的算例证明, 串并行算法的实现是正确的。对并行程序在深超-21C 机群上的进一步测试表明, 在单元数为 921 600, 计算节点数为 32 的情况下, 仍能获得 0.8 以上的并行效率, 算法的可扩展性较好, 对串并行显式拉格朗日有限差分法的研究使之可应用于岩土和水利工程的大规模数值计算。

关键词: 数值分析; 串并行; 显式拉格朗日有限差分法; 区域分解法

中图分类号: O 241

文献标识码: A

文章编号: 1000-6915(2006)08-1591-07

RESEARCH AND IMPLEMENTATION OF SERIAL-PARALLEL EXPLICIT LAGRANGIAN FINITE DIFFERENCE METHOD

DAI Rong, LI Zhongkui, LIU Hui

(Department of Hydraulic and Hydropower Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: As a new numerical method, explicit Lagrangian finite difference method(FDM) is accepted abroad and applied widely in geotechnical and hydraulic engineering in recent years. However, code implementation and careful investigation on the method are rarely reported. Despite the fast development of computer hardware, it is still a great challenge for regular serial numerical analytical technology to perform either highly simulated numerical analysis or real-time fast back analysis on super-scale geotechnical and hydraulic engineering. Hence, the research on parallel algorithm based on network information transfer is received great attention. Up to now, studies on parallel finite element method or parallel boundary element method have gained great success, but on parallel explicit Lagrangian FDM, there are still many things to do. Thus the method is investigated and serial code is developed. The method's parallel ability, data assignment, communication mode and calculation order are examined. Parallel explicit Lagrangian FDM is designed in domain decomposition method, master-slave mode and non-block communication. The parallel code is also implemented in C language and MPI(message passing interface) on parallel cluster. Two numerical examples, i.e. circular tunnel and strip footing, are presented to demonstrate that the serial and parallel methods are implemented correctly. More tests with parallel code are undertaken on DeepSuper-21C supercomputer and parallel efficiency above 0.8 can be obtained under condition that number of elements is 912 000 and the number of computing nodes is 32, which shows that the parallel

收稿日期: 2005-04-12; **修回日期:** 2005-07-11

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50379020); 清华大学基础研究基金项目(JC2003008)

作者简介: 戴 荣(1979-), 男, 2000年毕业于清华大学水利水电工程系水工结构专业, 现为博士研究生, 主要从事岩土和地下工程的数值模拟方面的研究工作。E-mail: dairong00@mails.tsinghua.edu.cn

method has good scalability. Research on the serial and parallel explicit Lagrangian FDM can be used in large-scale numerical simulation in geotechnical and hydraulic engineering practices.

Key words: numerical analysis; serial-parallel; explicit Lagrangian finite difference method; domain decomposition method

1 引言

近年来，显式拉格朗日有限差分法以及基于此算法的软件——FLAC 和 FLAC^{3D} 以其原理清晰、适应性强的特点，在岩土和水利工程的数值模拟中得到广泛的应用^[1, 2]。在显式拉格朗日有限差分法的进一步研究的基础上，陈文胜等^[3]提出静态松弛快速拉格朗日分析方法 S-FLAC；A. N. B. Poliakov^[4]根据显式拉格朗日有限差分法的原理，开发 PAROVOZ 程序，研究地层的断裂和屈曲问题；赵崇斌等^[5]结合 FIDAP 和 FLAC，研究饱和和多孔介质中孔隙流体的双扩散对流问题；J. Rutqvist 等^[6]结合 TOUGH2 和 FLAC^{3D}，研究二氧化碳和核废料的地下处置问题。

随着岩土和水利工程计算规模的不断扩大，要进行高仿真度计算和实时快速反馈分析，对并行计算需求已经越来越迫切。刘耀儒^[7]、张友良等^[8]对并行有限元法进行研究；张健飞^[9]对并行边界元法进行研究；L. Te Kamp 等^[10]对并行显式拉格朗日有限差分法进行研究，但其程序的单元数为 512 000，计算 CPU 数为 6 时，并行效率仅为 0.61，算法的可扩充性有待于进一步提高。

本文在对显式拉格朗日有限差分法原理进行深入研究的基础上，开发相应的串并程序，并用数值算例进行验证。

2 串行算法

显式拉格朗日有限差分法的串行算法^[11]将在下文加以描述。

2.1 空间离散化

和有限元一样，显式拉格朗日有限差分法首先需要计算域进行离散化。其基本单元为常应变率四面体，单元划分如图 1 所示。编号为节点 1~4，第 *n* 面表示与节点 *n* 相对的面。对于六面体单元(见图 1(b)，为表示方便，省略“节点”字样)，计算时也进一步划分为四面体。

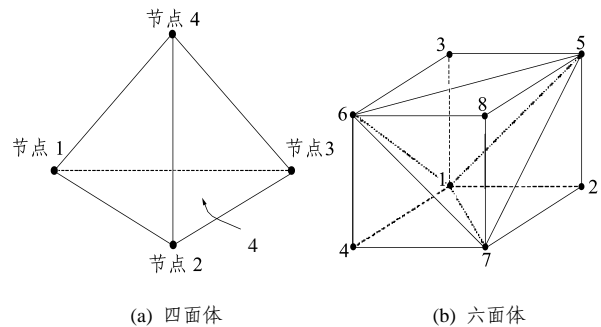


图 1 单元划分

Fig.1 Element partition

2.2 单元应变增量计算

对于一个给定的初始速度场 v_i ，假定四面体单元内 v_i 为线性分布，则 v_i 在 *j* 方向的导数 $v_{i,j}$ 是一个常量，外表面的单位法向量 n_j 在每个面上为常量，应用高斯公式可得到：

$$v_{i,j} = -\frac{1}{3V} \sum_{l=1}^4 v_l^i n_j^{(l)} S^{(l)} \tag{1}$$

式中：*V* 为四面体的体积，*S* 为四面体的外表面，上标“*l*”为节点 *l* 的变量，上标“(*l*)”为面 *l* 的变量。

对每个四面体单元，应变率 ξ_{ij} 可以写成：

$$\xi_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i}) \tag{2}$$

由式(1)，(2)可得到某一时步 Δt 中，单元应变增量 $\Delta \epsilon_{ij}$ 为

$$\Delta \epsilon_{ij} = -\frac{\Delta t}{6V} \sum_{l=1}^4 (v_l^i n_j^{(l)} + v_l^j n_i^{(l)}) S^{(l)} \tag{3}$$

2.3 单元应力计算

材料的增量型本构方程可表述为

$$\Delta \sigma_{ij} = H_{ij}(\sigma_{ij}, \Delta \epsilon_{ij}, k) \tag{4}$$

式中： $\Delta \sigma_{ij}$ 为应力增量， H_{ij} 为表示应力 - 应变关系的函数， σ_{ij} 为单元当前的应力，*k* 为考虑加载过程的参数。

算出 $\Delta \sigma_{ij}$ 之后，可得到新的单元应力。

2.4 节点力计算

节点在 *i* 方向上受到的合力 F_i 为

$$F_i = \left[\left[\frac{1}{3} \sigma_{ij} n_j^{(l)} S^{(l)} + \frac{1}{4} \rho b V \right] \right] + P_i \tag{5}$$

式中： ρ 为材料的密度， b_i 为单位质量受到的体力， P_i 为节点上受到的外力， $[[\cdot]]$ 表示对所有相关单元求和。

阻尼是连续体系在运动过程中能量耗散的主要原因，节点阻尼力 f_i 为

$$f_i = -\alpha |F_i| \operatorname{sgn} v_i \quad (6)$$

式中： α 为阻尼系数，默认值为 0.8； $\operatorname{sgn} v_i$ 为速度 v_i 的符号。

2.5 节点集中质量计算

在显式拉格朗日有限差分法中，采用节点集中质量，使得在求解运动方程的时候，不必进行矩阵求逆的运算，节点质量 M 可表示为

$$M = [[m]] \quad (7)$$

式中： m 为相关单元分配到节点上的质量。

在分析静力问题时，采用虚拟质量以保证数值稳定性， m 计算表达式为

$$m = \frac{K + 4G/3}{9V} \max[(n_i^{(l)} S_i^{(l)})^2] \quad (i = 1, 2, 3) \quad (8)$$

式中： K 为材料的体积模量， G 为材料的剪切模量。

2.6 节点速度更新

在每个节点上，牛顿第二定律成立，即

$$F_i + f_i = M \frac{dv_i}{dt} \quad (9)$$

式中： dv_i/dt 为节点在 i 方向的加速度。

将式(9)用中心差分近似表示，则可得

$$v_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = v_i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \frac{F_i + f_i}{M} \Delta t \quad (10)$$

计算出新的速度场之后，即可进行下一个时步的计算。

3 并行算法

对显式拉格朗日有限差分法的串行算法进行分析可以发现，在每一个时步的计算中，无需像有限元那样形成整体刚度矩阵，计算应变增量和应力是逐个单元进行的，节点力和节点速度也是逐个进行计算的，而且只需用到相邻单元或节点的信息。因此，显式拉格朗日有限差分法并行化的基本策略是区域分解法，即把整个计算区域划分为几个子区域，分配给不同的进程进行计算。算法中必须考虑的问题有网格划分、通信模式和计算次序等。

3.1 网格划分

网格划分和数据通信密切相关。进行网格划分有 2 种选择^[12]：单元划分和节点划分，网格划分如图 2 所示。前者沿着节点对网格进行分割，每个单元只划分到一个进程中；后者对单元进行分割，每个节点只划分到一个进程中。

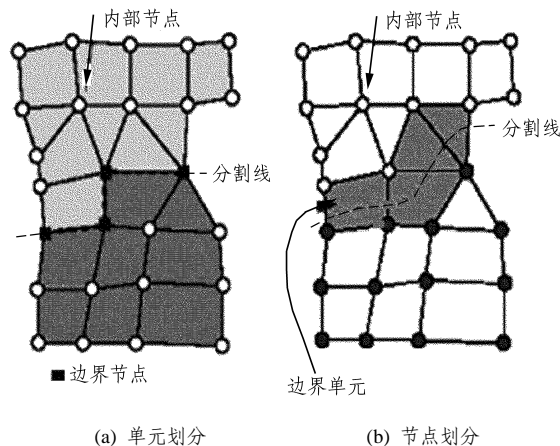


图 2 网格划分

Fig.2 Mesh partition

如果采用单元划分，在计算节点力时，因为边界节点为几个进程共享，需要收集各进程中边界单元对边界节点的作用力，才能得到总的节点力；如果采用节点划分，在计算单元应变增量时，因为边界单元的节点同时处于几个进程中，需要收集各进程中边界单元的节点速度，才能进行计算。

考虑到单元应力计算最为耗时，而且边界单元数通常多于边界节点数，为减少通信量，采用节点划分。网格划分采用 METIS^[13]来实现。

3.2 通信模式

为交换数据，也可采用两种通信模式：主从模式和对等模式，通信模式如图 3 所示。主从模式中，有一个主进程，各从进程都与之进行通信，而不直接和其他从进程进行通信；对等模式中，各个进程

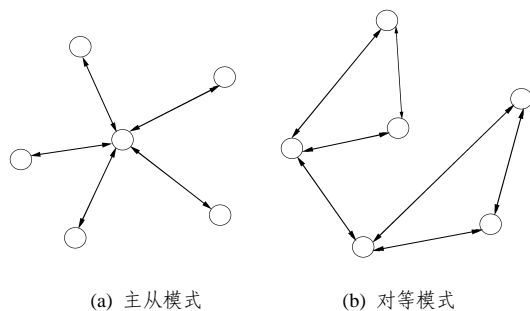


图 3 通信模式

Fig.3 Communication modes

都是平等的，没有主从之分，相互之间可以直接通信。

主从模式实现比较简单，但是当进程数较多的时候，主进程可能会成为通信的瓶颈；对等模式实现起来更为复杂，但是扩展性好，进程数较多时没有明显的通信瓶颈。

考虑到在一般硬件条件下，进程数不会太多，此时主从模式的性能要优于对等模式，因此采用主从模式。

3.3 计算次序

对每个从进程，为减少通信等待时间，提高计算效率，将单元分为 2 部分：边界单元和内部单元；节点也分为 2 部分：边界节点和内部节点。首先计算边界单元对边界节点的作用力，然后发送给主进程；在等待接收边界节点合力的同时，对内部单元完成本时步计算。数据接收完成之后，继续完成边界节点本时步的计算，这样就实现计算和通信的重叠，可采用 MPI 的非阻塞通信来实现。

3.4 算法说明

显式拉格朗日有限差分法的并行算法可描述如下：

```
main (){
    if (是主进程){
        读入数据文件；
        发送子区域数据给从进程；
        while (未达到平衡){
            接收从进程边界节点力；
            对节点力求和；
            发送边界节点合力给从进程；
        }
        接收从进程计算结果；
        输出结果文件；
    }
    else{
        从主进程接收子区域数据；
        while (未达到平衡){
            计算边界单元对节点的作用力；
            发送边界节点力给主进程；
            完成内部单元本时步计算；
            从主进程接收边界节点合力；
            完成边界节点本时步计算；
        }
    }
}
```

发送计算结果给主进程；

}

}

4 并行计算环境

并行计算环境包括硬件和软件环境，本文采用的是机群和 MPI。

4.1 机群

机群计算被认为是未来解决大型科学或商业计算的主流方案^[14]。本文采用的机群环境是清华大学计算机系高性能计算研究所研制的深超 - 21C。该机群有 128 个计算节点，256 个 Xeon 处理器，节点总内存为 128 GBit，峰值速度达到 1.5 Tflop/s(即 15×10^{12} 次/s)，计算节点间采用高速千兆网络 Myrinet2000 实现互联。

4.2 MPI

MPI 是目前最流行的基于消息传递机制的并行编程模型之一^[15]。它提供一种与语言和平台无关、可被广泛使用的编写消息传递程序的标准，所编写的程序具有实用、可移植、高效和灵活的特点。MPICH 是一种最重要的 MPI 实现。本文采用的是 MPICH 1.2.5.2。

5 算例

根据上述算法，用 C 语言和 MPI 编制用于求解静力问题的串并行拉格朗日元程序。其中实现 2 种单元——四面体和六面体；2 种本构关系——各向同性弹性模型和莫尔 - 库仑模型，可以考虑初始应力和开挖。对编制的程序用如下算例进行验证。因串并行程序的计算结果完全一致，文中不另做比较。

5.1 圆形隧洞

黏性无重土体中圆形隧洞的开挖，其计算模型如图 4 所示。洞径 a 为 1 m，模型尺寸 $10.0 \text{ m} \times 0.2 \text{ m} \times 10.0 \text{ m}$ (长 \times 宽 \times 高)，材料的体变模量 K 为 3.9 GPa，剪切模量 G 为 2.8 GPa，黏聚力 c 为 3.45 MPa，摩擦角 φ 和剪胀角 ψ 均为 30° ，初始应力 P_0 为 30.0 MPa。

洞周应力和位移如图 5, 6 所示。洞周单元的计算结果如表 1 所示。从图表中可看出，编制的程序和 FLAC^{3D} 的计算结果基本一致，且与解析解相符。

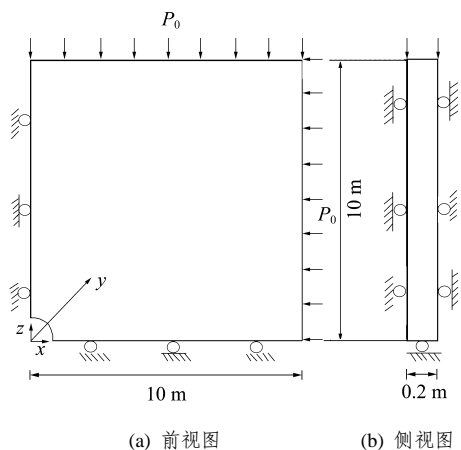


图 4 圆形隧洞计算模型

Fig.4 Calculation model for circular tunnel

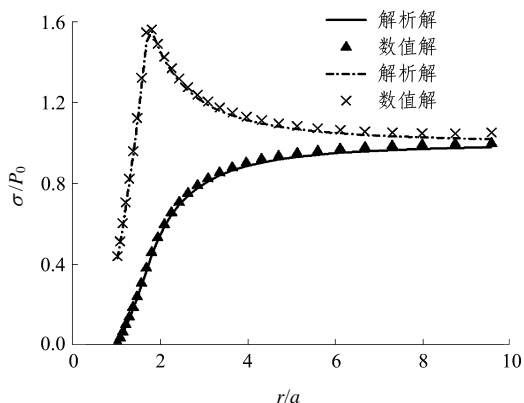


图 5 洞周应力

Fig.5 Stresses around tunnel

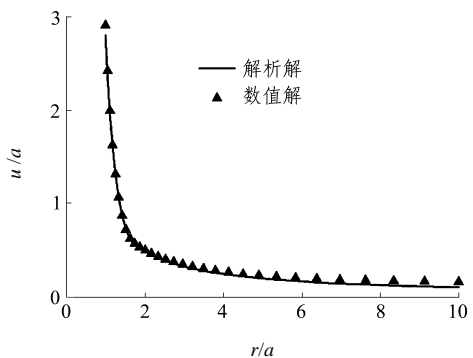


图 6 洞周位移

Fig.6 Displacements around tunnel

表 1 洞周单元计算结果

Table 1 Results of zones around tunnel with different methods

方法	σ_r/P_0	σ_θ/P_0	u_r/a
解析解	0.010 9	0.431 1	2.810 3
FLAC ^{3D}	0.013 9	0.439 8	2.923 9
本文程序	0.014 0	0.440 2	2.919 6
误差	28.400 0	2.100 0	3.900 0

注: 误差是指本文程序与解析解的相对误差(%), 下同。

5.2 条形基础

纯黏性无重地基上粗糙条形基础的极限承载力, 其计算模型如图 7 所示。条形基础半宽 a 为 3.0 m, 模型尺寸 20 m×1 m×10 m(长×宽×高), 材料的体变模量 K 为 0.2 GPa, 剪切模量 G 为 0.1 GPa, 黏聚力 c 为 0.1 MPa, 摩擦角 φ 和剪胀角 ψ 均为 0° , 条形基础在每个时步中向下运动 5.0×10^{-6} m。

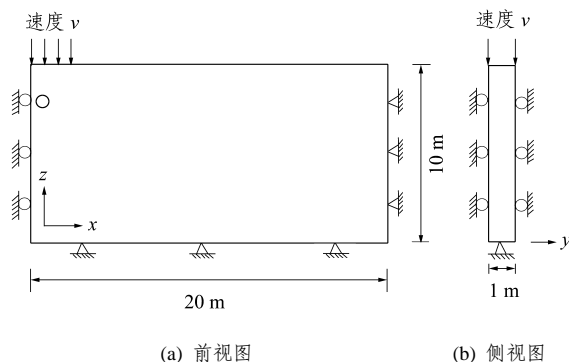


图 7 条形基础计算模型

Fig.7 Calculation model for strip footing

地基的承载力随条形基础的位移 d 变化如图 8 所示。极限承载力 p 如表 2 所示。从图表中可以看出, 所编制程序的计算结果和解析解及 FLAC^{3D} 都符合得很好。

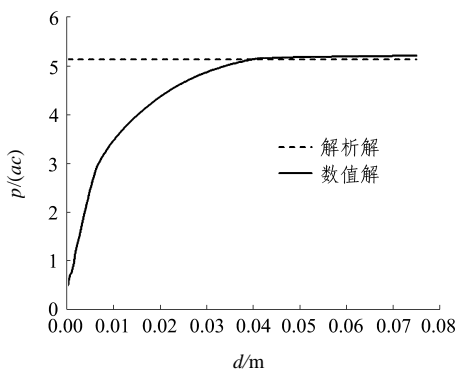


图 8 地基承载力

Fig.8 Bearing capacity

表 2 极限承载力计算结果

Table 2 Results of limit bearing capacity

方法	$p/(ac)$
解析解	5.141 6
FLAC ^{3D}	5.212 3
本文程序	5.216 7
误差	1.500 0

5.3 并行效率

为测试并行算法的性能，在圆形隧洞算例网格的基础上，在 y 方向上逐步增加单元。材料取为弹性模型，其他参数不变。所有模型都运行 100 个时步，比较其运行时间。测试网格单元及节点数如表 3 所示。网格 1 在 8 个计算节点上的划分如图 9 所示。

表 3 测试网格单元及节点数

Table 3 Meshes for test of elements and nodes

参数	网格				
	1	2	3	4	5
单元数	57 600	115 200	230 400	460 800	921 600
节点数	62 465	123 969	246 977	492 993	985 025

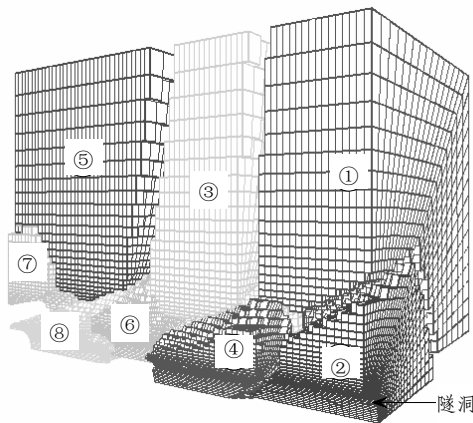


图 9 网格 1 的划分

Fig.9 Partition of mesh 1

程序进行 100 个时步的计算所需的时间如表 4 所示，其并行效率 η 如图 10 所示。可见，计算节点数较少时 η 接近于 1.0，计算节点数增加到 32

表 4 运行时间

Table 4 Runtime

网格	运行时间/s					
	1	2	4	8	16	32
1	106.51	53.66	27.27	13.94	7.25	4.13
2	212.35	108.35	54.99	27.76	14.50	8.11
3	412.59	215.25	107.76	54.63	28.65	15.81
4	810.61	425.73	217.07	110.00	56.72	30.99
5	1 576.26	842.15	425.62	217.91	112.68	59.64

注：1, 2, 4, 8, 16, 32 指计算节点数。

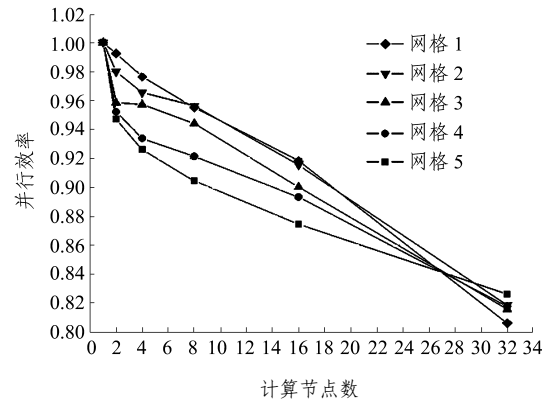


图 10 并行效率 η

Fig.10 Parallel efficiency η

时， η 也在 0.8 以上。

6 结 论

本文算例表明，对串并行显式拉格朗日有限差分法的实现是成功的，且并行程序能获得较高的并行效率。目前已实现基本的静力计算功能，进一步可对支护措施和结构面等进行处理，以增强其实用性。对串并行显式拉格朗日有限差分法的研究和实现将推动其在大规模岩土和水利工程计算中的应用。

致谢 衷心感谢清华大学计算机系都志辉副教授为本文计算提供机群硬件和技术指导！

参考文献(References):

- [1] 王泳嘉, 邢纪波. 离散单元法同拉格朗日元法及其在岩土力学中的应用[J]. 岩土力学, 1995, 16(2): 1 - 14.(Wang Yongjia, Xin Jibo. Discrete element method and Lagrangian element method and their applications to geomechanics[J]. Rock and Soil Mechanics, 1995, 16(2): 1 - 14.(in Chinese))
- [2] 梁海波, 李仲奎, 谷兆祺. FLAC 程序及其在我国水电工程中的应用[J]. 岩石力学与工程学报, 1996, 15(3): 225 - 230.(Liang Haibo, Li Zhongkui, Gu Zhaoqi. FLAC program and its application to hydropower projects in China[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 1996, 15(3): 225 - 230.(in Chinese))
- [3] 陈文胜, 冯夏庭, 葛修润, 等. 静态松弛快速拉格朗日分析方法原理[J]. 岩石力学与工程学报, 1999, 18(6): 680 - 684.(Chen Wensheng, Feng Xiating, Ge Xiurun, et al. Theory of static relaxation fast Lagrangian analysis of continua[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 1999, 18(6): 680 - 684.(in Chinese))

- [4] Poliakov A N B. Modeling of tectonic problem with PAROVOZ: examples of lithospheric rifting and bulking[A]. In: Detournay C, Hart R ed. Proc. of the 1st Int. FLAC Symposium on Numerical Modeling in Geomechanics[C]. Rotterdam: A. A. Balkema, 1999. 165 - 172.
- [5] Zhao C B, Hobbs B E, Muhlhaus H B, et al. Numerical modeling of double diffusion driven reactive flow transport in deformable fluid-saturated porous media with particular consideration of temperature-dependent chemical reaction rates[J]. Engineering Computations, 2000, 17(4): 367 - 385.
- [6] Rutqvist J, Wu Y S, Tsang C F, et al. A modeling approach for analysis of coupled multiphase fluid flow, heat transfer, and deformation in fractured porous rock[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2002, 39: 429 - 442.
- [7] 刘耀儒. 三维有限元并行计算及其在水利工程中的应用[博士学位论文][D]. 北京: 清华大学, 2003.(Liu Yaoru. Parallel 3D finite element analysis and its application to hydraulic engineering[Ph. D. Thesis][D]. Beijing: Tsinghua University, 2003.(in Chinese))
- [8] 张友良, 冯夏庭, 茹忠亮. 基于区域分解算法的岩土大规模高性能并行有限元系统研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2004, 23(21): 3 636 - 3 641.(Zhang Youliang, Feng Xiating, Ru Zhongliang. Large-scale high performance parallel finite element system based on domain decomposition method in geomechanics[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2004, 23(21): 3 636 - 3 641.(in Chinese))
- [9] 张健飞. 机群环境下的并行边界元法研究及其在水工结构分析中的应用[博士学位论文][D]. 南京: 河海大学, 2004.(Zhang Jianfei. Parallel boundary element method on cluster and its application to hydraulic structure engineering[Ph. D. Thesis][D]. Nanjing: Hohai University, 2004.(in Chinese))
- [10] Te Kamp L, Konietzky H, Muller-Hoppe N, et al. Modeling huge coupled systems with parallel FLAC^{3D}[A]. In: Proc. of the EUROCK 2000 Symposium[C]. Aachen, Germany: Verlag Gluck-Auf GmbH, 2000. 675 - 679.
- [11] Itasca Consulting Group, Inc.. FLAC^{3D} version 2.0 user's manual[R]. Minnesota USA: Itasca Consulting Group, Inc., 1997.
- [12] Krysl P, Bittnar Z. Parallel explicit finite element solid dynamics with domain decomposition and message passing: dual partitioning scalability[J]. Computers and Structures, 2001, 79: 345 - 360.
- [13] Karypis G, Kumar V. Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs(Technical Report TR 96 - 036)[R]. Minnesota: Department of Computer Science, University of Minnesota, 1996.
- [14] Rajkumar B. 高性能集群计算: 编程与应用(第二卷)[M]. 郑炜民, 汪东升, 石 威, 等译. 北京: 电子工业出版社, 2001.(Rajkumar B. High Performance Cluster Computing: Programming and application(Volume II)[M]. Translated by Zheng Weimin, Wang Dongsheng, Shi Wei, et al. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2001.(in Chinese))
- [15] 都志辉. 高性能计算并行编程技术——MPI 并行程序设计[M]. 北京: 清华大学出版社, 2001.(Du Zhihui. MPI Parallel Programming: High Performance Computation and Parallel Program Technique[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2001.(in Chinese))