

三维位错动力学并行算法与程序研制*

刘旭⁺, 曹小林, 张广财, 沈卫超, 吴国清

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

Parallel Algorithm and Software of Three-Dimensional Dislocation Dynamics

LIU Xu⁺, CAO Xiao-Lin, ZHANG Guang-Cai, SHEN Wei-Chao, WU Guo-Qing

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

+ Corresponding author: E-mail:liu_xu@iapcm.ac.cn

Liu X, Cao XL, Zhang GC, Shen WC, Wu GQ. Parallel algorithm and software of three-dimensional dislocation dynamics. *Journal of Software*, 2010,21(Suppl.):263–269. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/10027.htm>

Abstract: To study the properties of metal under extreme conditions, a parallel program for 3-dimensional dislocation dynamics (PDD3D) is developed based on JASMIN. By integrating effective distributed data structures, a scalable fast multi-pole method solver and a novel communication scheme based on ghost, PDD3D achieves good parallel scalability. In a simulation of a model containing 30 million dislocation segments, the parallel efficiency of PDD3D of 1024 CPUs relative to 128 CPUs is 81%.

Key words: parallel computing; dislocation dynamics; particle simulation; fast multi-pole method; JASMIN

摘要: 为研究极端条件下金属材料的性质,在 JASMIN 框架上研制了三维并行位错动力学程序 PDD3D. 它集成了离散位错动力学模拟的物理方案和数值算法.通过设计实现高效的分布式数据结构、可扩展的快速多极子解法器以及基于影像区的拓扑操作通信方式,该程序具有较高的性能和较好的可扩展性.1024 个处理器上,对包含 3 千万条位错线的物理模型的模拟结果显示,PDD3D 程序获得了 81% 的并行效率.

关键词: 并行计算;位错动力学;粒子模拟;快速多极子;JASMIN 框架

随着材料科学发展和应用需求的提高,需要研究金属材料在辐照损伤、高应变律和大变形等极端情况下的弹塑性性质及动态断裂性质;另外,纳米结构的新材料不断出现,它们与原来大晶粒金属具有完全不同的力学性质.原来建立在简单经验模型上的弹塑性本构关系不能够满足要求.对于这些材料力学性质的把握需要从金属微观和介观层次上认识.

位错是金属材料塑性变形的承载个体.位错动力学从介观层次上研究上述内容.位错动力学数值模拟以其能够完全控制模拟条件并且全程观察位错演化,成为研究硬化效应、损伤积累与疲劳、塑性不稳定性、断裂早期孕育过程等问题的一条重要途径.

位错动力学数值模拟通常采用离散位错动力学方法^[1-5].该方法的核心部分包括:(1) 位错线离散为位错线段.在模拟微米尺度的问题时,整个位错网络可能包含几千万条位错线段.(2) 位错线段间 Peach-Koehler 力的快

* Supported by the National High-Tech Research and Development Plan of China under Grant No.2010AA012300 (国家高技术研究发展计划(863)); the National Basic Research Program of China under Grant No.2011CB309702 (国家重点基础研究发展规划(973)); the National Natural Science Foundation of China under Grant No.61033009 (国家自然科学基金)

Received 2010-06-15; Accepted 2010-12-10

速计算.该计算属于 N 体问题,其大规模计算需采用快速多极子方法将计算复杂度从直接方法的 $O(N^2)$ 降到 $O(N)$.然而,即使使用快速多极子方法,在模拟中,该部分的计算时间一般仍占总计算时间超过 80%.(3) 位错反应.由于位错受力运动,造成位错线生长、交错.这些过程要求增加新的位错线段、删除已有的位错线段、改变位错线段的连接关系,从而带来复杂的拓扑变化.

位错动力学数值模拟计算量巨大,并行计算是必要的支撑手段.并行程序设计主要面临的难点包括:(1) 数据结构.数据结构需要存储位错线段的互连关系,动态改变互连关系,并能适应分布式存储环境.(2) 并行快速多极子方法.快速多极子方法需要使用多网格层,这涉及到比单网格层更复杂的数据结构、数据通信和负载平衡,因此实现并行快速多极子方法难度较大.(3) 并行处理位错反应.由于数据分布式存储,因此位错线段的增删、连接关系的改变都可能涉及到多个处理器.所以必须设计有效的通信机制以协调相关处理器,保证位错线段之间的正确连接关系.

通过几十年的发展,位错动力学有了较大进展,国际上也已经开发出一系列位错动力学模拟程序,文献[4,5]对此进行了详细地论述.但是由于上述种种困难,大规模可扩展的并行位错动力学模拟程序很少^[2,3].美国 LLNL 实验室研制的并行位错模拟程序 ParaDiS,通过采用并行 FMM 算法、高并行度的位错反应算法等核心技术,在 Blue Gene/L 的 16384 个处理器上成功模拟了包含 1 亿多条位错线段的模型.该程序是目前性能最好的并行位错模拟程序.

在我国,自主研发的位错动力学程序较少,尤其是并程序,目前还未见报道.为了研究极端条件下金属材料的性能,我们基于物理学家设计的数学物理方案,在 JASMIN 框架上研制了 PDD3D 程序.PDD3D 移植了部分 ParaDiS 的数值程序,但是采用了更有效的并行算法和更先进的软件工程设计思想. PDD3D 的核心技术包括:(1) 键粒子数据片,管理位错结点及其相连信息;(2) 基于影像区的通信机制以传输拓扑变化信息;(3) 基于网格片的 FMM 并行解法器.

1 基本数值算法

如图 1 所示,算法将空间划分成均匀的单元,并用离散的位错线段描述位错线.每条位错线段的端点称为位错结点.其中,连接两条以上位错线段的结点是物理结点(图中圆圈标出点),其他为离散结点.柏氏矢量、力、速度等物理量定义在位错结点或位错线段上.为了保证相连的位错结点分布在相邻的空间单元中,规定一条位错线段不能跨越两个单元.整个模拟过程通过空间单元组织,围绕位错结点和位错线段展开.为了保证位错线离散精度的同时减少计算量,在模拟过程中自适应地增减离散结点.

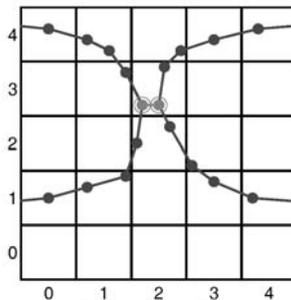


Fig.1 Discretizing dislocation lines into dislocation segments

图 1 位错线离散成多条位错线段

具体的,位错动力学模拟按照如下算法进行:

算法 1. 离散位错动力学模拟.

- (1) 初始化系统.初始分布位错.
- (2) while(模拟时间不满足要求){

- ```

(3) do{ // Euler 梯形迭代方法积分一个时间步
(4) 计算位错线段受到的三种力:Peach-Koehler 力、线张力和逾渗力.
 // 其中 Peach-Koehler 力需要使用快速多极子方法计算.
(5) 根据受力计算位错结点的速度.
 // 由材料的迁移率,分别计算攀移速度与滑移速度的刃型分量与螺型分量.
(6) 更新位错结点位置.
(7) }while(迭代法未收敛)
(8) 自适应更新时间步长.
(9) 位错反应,模拟时间增加一个步长.
 // 按顺序处理物理结点分裂、位错线相交、位错线段自适应粗化、细化等.
(10) 统计系统总塑性变形张量、弹性张量. 根据系统应变改变加载应力.
}

```

## 2 并行算法核心技术

我们基于网格片<sup>[6]</sup>实现了算法 1.网格片是计算区域管理的基本单位.每个网格片由多个内部单元及其影像区组成,包含内部单元计算所需要的全部数据,是一个独立的规则计算子区域.例如,图 2(左)所示的局部计算区域包含两个网格片,其中深色网格片需要图 2(中)所示粗框中单元的数据,因此在填充影像区时将这部分单元复制到深色网格片的影像区形成影像,计算时该网格片就能够独立完成计算.

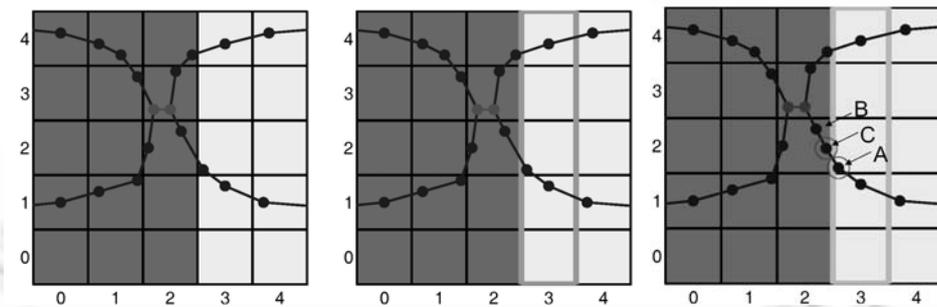


Fig.2 Dislocation patches: inner cells (left), ghosts (middle), communication of topological changes (right)

图 2 网格片:内部区域(左)影像区(中)拓扑操作通信(右)

由于填充影像区后,各网格片可以独立计算,因此该方式可以很好地支持并行计算.在并行计算时,首先由负载均衡算法将网格片平衡地分配到各个处理器,然后通信算法负责填充影像区,最后各网格片独立地进行计算.这样就实现了并行位错动力学模拟.

将并行算法中的核心技术总结为如下 3 点:(1) 键粒子数据片,管理位错结点及其相连信息;(2) 基于影像区的通信机制以传输拓扑变化信息;(3) 基于网格片的 FMM 并行解法器.

### 2.1 键粒子数据片

为了管理网格片上的位错结点,构造了键粒子数据片.

键粒子数据片用两个数组存储位错结点,一个数组存储内部区域的位错结点(称为内部数组),一个数组存储影像区的位错结点(称为影像数组).依据单元的顺序,结点在数组中顺序存储,既同一单元内的结点相邻存储.在一个计算阶段结束后,进行结点迁移、填充影像区,然后重建这些数组(与位错模拟的数值计算开销相比,该重建开销可以忽略).

另一方面,为了表示位错线段,在每个端点中各存储一份线段信息,包括另一端点的索引、柏氏矢量、滑移

面等.

我们用网格片编号、内部数组索引号、影像数组索引号三部分组成位错结点的索引.前两者一起唯一对应一个结点,后者表示是该结点的哪个影像.从而避免全局统一编号可能引入的高开销和超出整型数索引范围的问题.另外,还有效支持周期边界条件引入的多重镜像.

综合这些手段,保证了位错线段两端点的相互索引、单元中全部结点的索引、网格片中全部结点的索引三个层次位错结点索引的高效性.

在内部数组、影像数组重建之后,位错结点的索引会发生改变,这时需要更新位错结点的连结索引.为了保证算法的效率,我们使用了排序和二分查找的方式,具体步骤在算法 2 中描述.

**算法 2.** 更新位错结点连接索引.

- (1) 遍历网格片 P 及其影像区中的位错结点 A {
- (2) 以 A 的原索引作为关键字,新索引作为数据域,构造记录 R
- }
- (3) 排序所有的记录 R
- (4) 遍历网格片 P 及其影像区中的位错结点 B {
- (5) 遍历 B 连接的位错线段 BC {
- (6) 二分查找 C 的新索引 C\*
- (7) 更新 BC 索引为 BC\*
- }
- }

## 2.2 拓扑变化通信

位错反应描述了位错线段相距小于位错核半径时的相互作用和演化情况.这里借鉴了 ParaDiS 中具有较好扩展性的位错反应算法.但是由于位错反应引起的拓扑变化可能影响多个处理器间位错结点的互连关系,因此必须解决拓扑变化的通信问题.

通过分析,我们将拓扑变化分为两种:

- (1) 增、删结点;
- (2) 增、删线段,改变连接关系,改变结点属性,改变边的属性.

第一种拓扑变化可以与结点迁移相统一,从而使用相应的通信方式.

第二种拓扑变化除了使用结点迁移外,还需要专门通信.具体分如下 4 步进行:

- (1) 将拓扑操作归结为几种核心操作.其所需信息被规范为统一的形式——操作类型、涉及的位错结点、操作参数.
- (2) 将执行这些操作所需的信息存储到被修改结点在影像区内影像的拓扑操作部分.
- (3) 将影像区信息发送出去,另一端点收到信息后就可以执行拓扑操作.
- (4) 结点迁移,并根据新的结点索引更新位错结点之间的连接关系.

例如,在图 2(右)中,深色网格片中增加了一个位错结点 C,浅色网格片中的位错结点 A 必须相应改变连接关系.首先,在深色网格片中 A 的影像上存储该拓扑操作信息,然后深色网格片传输影像区到浅色网格片.接着,浅色网格片中 A 结点得到了该拓扑操作信息  $AB \rightarrow AC$ ,结点 A 改变连接到 C.如果 C 的索引改变,使用算法 2 更新连接索引.这样就保证了位错线段之间的正确连接关系.

## 2.3 FMM 解法器

FMM 计算部分,包括多极转移(multipole to multipole)、多极到局部转移(multipole to local)和局部转移(local to local).其并行算法设计的主要难点在于高效地管理 FMM 的多层结构.一方面,由于 FMM 独特的计算结构与负载平衡特征(FMM 计算部分负载均匀,而其他部分与位错结点分布相关),另一方面,FMM 与其他部分的通信

量不大,因此单独设计了 FMM 解法器,自己管理这部分的数据并组织计算.

与 ParaDiS 的专用 FMM 程序不同,我们基于 FMM 方法的共性和个性分离,设计实现了通用 FMM 解法器.该解法器不仅可以支撑这里的位错动力学计算,还可以支持其他应用的 FMM 计算.它屏蔽了多网格层分布存储,层间数据通信和负载平衡等并行计算细节.基于该解法器提供的抽象接口,应用程序只需按串行方式实现网格片上单元之间的转移操作.

FMM 解法器使用基于网格层和网格片的并行计算模式,基于影像区实现通信.根据用户要求可以采用空间坐标对分或空间填充曲线的负载平衡方法.

FMM 解法器的详细介绍可以参见文献[7].

### 3 并行程序设计

程序设计的一个指导思想是共性与个性的分离.将位错动力学模拟中与其他科学计算问题具有共性的部分提炼出来,抽象化,以类的形式集成到 JASMIN 框架,包括键粒子数据片、键粒子通信模块和 FMM 解法器.然后,基于已有的类,通过派生的方法,加入位错动力学算法中的个性部分,就得到了位错动力学的应用类,包括位错结点类、位错网格片、位错网络、材料性质类、拓扑操作类和 FMM 算子类等.这样,随着 JASMIN 框架的发展,PDD3D 程序可以自动地获得改善.同时,物理学家也无需关注并行计算方面的内容,只需调整程序中物理相关的个性部分.

另一方面,为了提升代码的执行性能,将核心数值计算算法等代码编成工具函数,使用 C 语言编写.这部分主要移植 ParaDiS 软件的代码.

这样,PDD3D 程序被分解为 3 个层次,JASMIN 框架层、位错应用层和工具函数层,如图 3 所示.

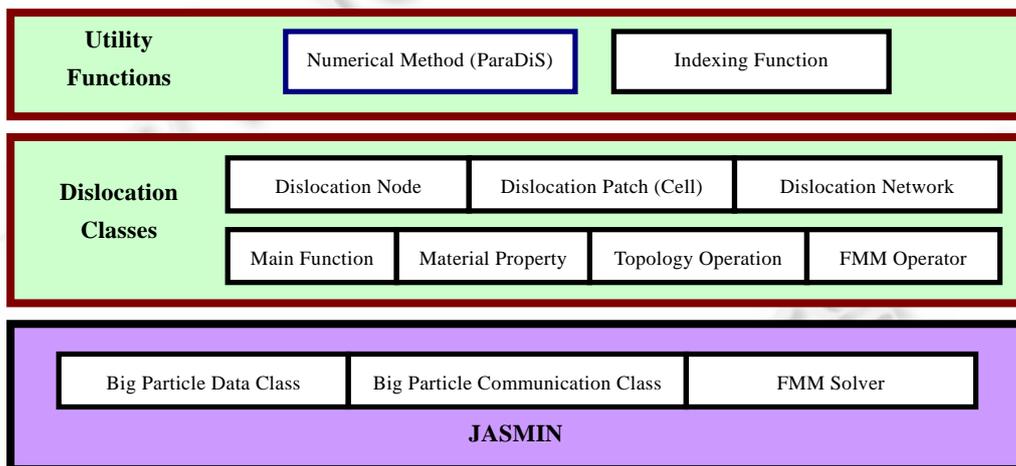


Fig.3 Program structure chart of PDD3D

图 3 PDD3D 程序结构图

程序设计注重了数据等的封装,尽量减少类之间传递的数据和相互调用的接口.一方面,代码的健壮性得到了提高,另一方面,编写代码所需面对的接口也大大精简.

此外,对部分类实现了自测试功能.只需执行这些类的测试构造函数,就能够对该类重要功能进行测试.从而使得编程错误易于查找.

## 4 数值模拟

### 4.1 初步模拟实例

我们对 Frank-Read 位错源模型进行了模拟.模拟结果通过 JADLib 接口输出,使用并行可视化软件 JaVis 显示,并且通过模拟结果分析程序,辅助物理学家找到物理信息丰富的区域.模拟结果引起了物理学家的兴趣.

图 4 显示了 Frank-Read 位错源模型模拟中,位错线的演化状况.其中最外层的立方体显示了模拟的整个物理区域,立方体内的彩色线段显示的是位错线段,不同颜色代表位错线段具有不同的柏氏矢量.从图 4 中可以看出,在外应力作用下,位错线逐步演化,形成了有规律的非均匀结构.这些现象的物理规律和机制仍然有待分析.

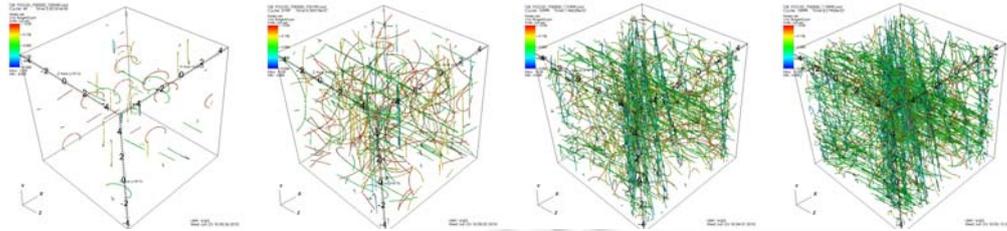


Fig.4 The evolution of dislocation lines in Frank-Read model

图 4 Frank-Read 位错源模型中位错线的演化

### 4.2 并行性能测试

为检测程序的可扩展性能,设计了一个在初始时刻包含 3 千万条位错线段的模型.在该模型中,空间离散为  $128 \times 128 \times 128$  个网格.针对该模型,进行了固定问题规模的可扩展性能测试.测试共模拟 100 个时间步,处理器个数从 128~1024 变化.从表 1 可看出,相对于 128 个处理器,在 1 024 个处理器上,获得了 81%的并行效率.测试结果说明了 PDD3D 程序在上千处理器上仍有较好的并行性能.

Table 1 Fix problem, scalability of PDD3D

表 1 固定问题规模,PDD3D 程序的可扩展性能测试结果

| Number of CPU cores | Time (s) | Parallel efficiency (%) |
|---------------------|----------|-------------------------|
| 128                 | 3 945    | 100                     |
| 256                 | 2 076    | 95                      |
| 512                 | 1 146    | 86                      |
| 1 024               | 608      | 81                      |

## 5 结论

根据位错动力学的物理和数学方法,设计了键粒子数据结构、通信模块以及 FMM 解法器.将其集成到 JASMIN 框架上,并在此基础上研制了三维位错动力学程序 PDD3D.通过该程序进行了 Frank-Read 源模型的模拟,得到了物理学家感兴趣的结果.同时,1024 处理器上,包含 3 千万条位错线的模型的模拟结果显示,该程序获得了 81%的并行效率.

致谢 感谢美国 Stanford 大学机械工程系的 Cai W 教授等人.他们在网上提供的 ParaDiS 程序和相关的资料对我们帮助非常大.

### References:

- [1] Bulatov VV, Hsiung L, Tang M, Arsenlis A, Bartelt M, Cai W, Florando J, Hiratani M, Rhee M, Hommes G, Pierce T, Rubia T. Dislocation multi-junctions and strain hardening. Nature, 2006,440(7088):1174-1178.

- [2] Arsenlis A, Cai W, Tang M. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2007,15(6):553–595.
- [3] Wang Z, Ghoniem N, Swaminarayan S, LeSar R. A parallel algorithm for 3D dislocation dynamics. *Journal of Computational Physics*, 2006,219(2):608–621.
- [4] Vasily B, Wei C. *Computer Simulations of Dislocations*. New York: Oxford University Press, Inc., 2006.
- [5] Ghoniem NM. *Computational Dislocation Dynamics: A Practitioner's Manual*. Los Angeles: UCLA Publication, 2004.
- [6] 莫则尧,张爱清,刘清凯,曹小林,安恒斌,肖丽,胡晓燕,曹立强,徐小文,陈军,张宝印.并行自适应结构网格应用支撑软件框架用户指南.T09-JMJL-01.北京:北京应用物理与计算数学研究所,2008.
- [7] 曹小林,莫则尧,刘旭,徐小文,张爱清.基于 JASMIN 框架的快速多极子并行解法器.中国科学:信息科学,2010,40(9):1187–1196.



刘旭(1981—),男,北京人,博士,助研,CCF 会员,主要研究领域为并行算法研究,并行应用软件研制.



沈卫超(1971—),男,硕士,副研究员,CCF 会员,主要研究领域为大规模科学数据存储与管理.



曹小林(1974—),男,博士,研究员,CCF 会员,主要研究领域为大规模科学与工程计算中并行算法的研究与并行应用软件的研制.



吴国清(1980—),男,博士,助研,CCF 会员,主要研究领域为科学数据挖掘,科学数据压缩.



张广财(1965—),男,博士,研究员,主要研究领域为材料状态方程,爆轰物理,材料微观和介观模拟研究.