

Variational and Parallel Boundary Element Method

变分与并行边界单元法

杨爱民 崔玉环 屈静国 武建辉 著

清华大学出版社



Variational and Parallel
Boundary Element Method

变分与并行边界单元法

杨爱民 崔玉环 屈静国

戚建辉 著



清华大学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是作者近年来科研工作的整理和总结,内容包括:基于变分不等式的边界元方法、基于并行 GMRES(m)算法的边界元法、基于多极展开的串并行边界元法、基于自适应技术的多极展开并行边界元法,以及边界元方法在解决调和方程、Poisson 方程、Laplace 方程、矩阵特征值、精密轧制过程模拟等问题中的应用。

本书可作为应用数学、计算数学专业研究生的教学参考书,也可供从事科学与工程计算的科学技术工作者参考。

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签,无标签者不得销售。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

变分与并行边界单元法/杨爱民等著.--北京:清华大学出版社,2015

ISBN 978-7-302-41166-6

I. ①变… II. ①杨… III. ①边界元法 IV. ①O241.82

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 184252 号

责任编辑:付弘宇 柴文强

封面设计:何凤霞

责任校对:焦丽丽

责任印制:宋 林

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座 邮 编:100084

社总机:010-62770175 邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质 量 反 馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

课 件 下 载: <http://www.tup.com.cn>, 010-62795954

印 装 者:三河市少明印务有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:170mm×230mm 印 张:17.75 字 数:307 千字

版 次:2015 年 12 月第 1 版 印 次:2015 年 12 月第 1 次印刷

印 数:1~1000

定 价:69.00 元

产品编号:063851-01

前 言

科学计算是在现代科技环境下,随着信息技术的飞速发展形成的一种科学研究方法,与理论研究、科学实验并列成为进行科学活动的三大基本手段,目前已经成为内容规模庞大、涵盖范围宽广的一门综合性的新学科,而变分法、并行计算、边界单元法均在科学计算领域中扮演着重要的角色。

本书是编者近年来科研工作的整理和总结,内容涉及到:基于变分不等式的边界元方法,基于并行 GMRES(m)算法的边界元法、基于多极展开的串并行边界元法、基于自适应技术的多极展开并行边界元法,以及边界元方法在解决调和方程、Poisson 方程、Laplace 方程、矩阵特征值、精密轧制过程模拟等问题中的应用。撰写时,补充了部分基础知识,以方便读者阅读。每一个方向的成果都为科学计算领域做出了一些贡献,同时也反映出作者紧跟时代步伐,力争在学科前沿做出成绩的愿望。

我们感谢清华大学出版社的帮助,感谢河北省自然科学基金委员会和河北省重点学科(华北理工大学:应用数学重点学科)的资助和支持,使得我们能够坚持相关的研究工作并顺利完成本书的写作。本书作者都是国家精品课程、国家级精品资源共享课程“数值计算方法”的骨干教师,我们要感谢华北理工大学对我们团队的一贯帮助和支持。没有以上支持和帮助,本书是难以面世的。另外华北理工大学科学计算讨论班的研究生为书稿的录入和校对付出了辛勤的劳动,在此向他们表示诚挚的感谢。

由于时间仓促,加之作者水平所限,本书难免会有错误和不妥之处,敬请专家、读者批评指正,我们将不胜感激。

作 者

2015 年 6 月

目 录

第 1 章 引论	1
1.1 边界单元法	1
1.1.1 固体接触边界元法	2
1.1.2 弹塑性接触边界元法	3
1.2 变分不等式	4
1.3 并行计算的发展	5
1.3.1 国内发展	6
1.3.2 国外发展	7
1.4 并行计算在边界元法中的应用	8
参考文献	9
第 2 章 边界变分不等式及其应用	10
2.1 变分不等式的概念	10
2.1.1 变分不等式的例子	10
2.1.2 变分不等式的定义	14
2.2 变分不等式的解	16
2.2.1 解的存在性与唯一性	16
2.2.2 解的正则性	21
2.3 边值问题的变分原理	25
2.3.1 边值问题与最小位能原理	25
2.3.2 边值问题、变分问题、变分不等式的关系	31
2.4 Sobolev 空间与广义解	32

2.4.1	广义函数、导数	33
2.4.2	Sobolev 空间	36
2.4.3	迹定理和 Brezzi 理论	38
2.4.4	等价模定理	40
2.5	弹性摩擦接触问题的二阶边界变分不等式	41
2.5.1	带摩擦的接触问题	43
2.5.2	非线性不可微边界变分不等式的建立	51
2.6	弹性平板的摩擦问题的第二类四阶变分不等式	59
2.6.1	问题的提出及符号	59
2.6.2	摩擦问题与相应的重调和方程边值问题	61
2.6.3	重调和方程边值问题的简化	65
2.6.4	第二类四阶变分不等式中不可微项的正则化方法	66
2.7	本章小结	69
	参考文献	69
第 3 章	求解重调和方程边值问题的边界元法	70
3.1	齐次边值问题解的存在唯一性	70
3.1.1	弱解的存在唯一性	70
3.1.2	解的全平面表达式和常规边界积分方程	74
3.2	边界元法求解齐次边值问题	75
3.3	齐次边值问题的边界元法的收敛性分析	82
3.4	边界元法求解非齐次边值问题	85
3.4.1	边界元法解的建立	85
3.4.2	MRM-边界积分方程的建立	86
3.4.3	MRM-边界变分方程的建立	91
3.4.4	数值算例	93
3.5	非齐次边值问题的边界元法的收敛性分析	94
3.5.1	边界元空间	94

3.5.2	Galerkin 方法及误差估计	97
3.6	边界元法求解屈曲特征值问题	100
3.6.1	问题的提出及弱解的存在唯一性	101
3.6.2	MRM-边界积分方程的建立	104
3.6.3	误差估计	108
3.6.4	MRM-边界变分方程的建立	109
3.6.5	数值算例	111
3.7	本章小结	113
	参考文献	114
第 4 章	机群系统下并行环境的构建	115
4.1	并行计算机	115
4.1.1	并行计算机的分类	115
4.1.2	并行计算机的体系结构	118
4.2	并行算法理论基础	120
4.2.1	并行算法基本知识	120
4.2.2	并行计算模型	122
4.2.3	并行算法的性能度量	123
4.3	机群系统的构建	126
4.4	机群环境下并行算法的设计与分析	127
4.4.1	基本算法	128
4.4.2	并行化过程	130
4.4.3	数值结果	131
4.5	消息传递机制与 MPI	131
4.5.1	MPI 的定义	132
4.5.2	MPI 的特点分析	133
4.5.3	MPI 语言绑定和主要实现	133
4.6	基于 Debian/Linux 和 MPI 的机群系统的构建	134

4.6.1	典型的机群系统结构	134
4.6.2	机群的组建	134
4.6.3	机群系统软件并行平台的搭建	135
4.7	本章小结	139
	参考文献	139
第5章	基于 GMRES 算法的并行边界单元法	140
5.1	GMRES(m)算法及在边界元中的应用	140
5.1.1	线性方程组的 Galerkin 原理	140
5.1.2	Arnoldi 算法	141
5.1.3	GMRES 算法	143
5.1.4	GMRES(m)算法	144
5.2	并行 GMRES(m)算法的设计与分析	150
5.2.1	并行向量内积算法	150
5.2.2	并行矩阵向量乘法	151
5.2.3	并行矩阵乘积	152
5.2.4	并行矩阵 QR 分解	152
5.2.5	并行 GMRES(m)算法	156
5.3	MPI 下的并行 GMRES(m)算法通信开销	159
5.3.1	GMRES(m)串行算法	160
5.3.2	GMRES(m)算法的并行化分析与实现	163
5.3.3	计算实例	167
5.4	网格 MPI 环境的并行 GMRES(m)算法通信开销	169
5.4.1	MPI 的原理与特征	169
5.4.2	基于网格的 G-MPI 库	170
5.4.3	基于网格 G-MPI 环境下并行 GMRES(m)算法 的研究	173
5.4.4	计算实例	176

5.5	并行 PCGMRES 算法的设计与应用	177
5.5.1	PCGMRES 算法	177
5.5.2	并行 PCGMRES 算法	180
5.5.3	并行 PCGMRES 算法在求解大型线性方程组中 的应用	182
5.6	并行边界单元法的设计与实现	184
5.6.1	弹性边界元法	184
5.6.2	并行边界元法计算结构	185
5.7	本章小结	188
	参考文献	189
第 6 章	自适应多极展开与并行计算边界单元法	190
6.1	弹性问题的自适应边界元法及其误差估计	190
6.1.1	自适应边界元法	191
6.1.2	H-R 自适应边界元法	196
6.1.3	误差估计	200
6.1.4	算例及分析	201
6.2	弹性问题的快速多极展开边界元法及应用	204
6.2.1	多级展开法	204
6.2.2	弹性问题基本解分解	211
6.2.3	多级边界元法	215
6.2.4	三维弹性问题多极边界元法与轧辊变形场计算	221
6.3	基于奇异分解和多极边界元法的位势问题	225
6.3.1	引言	226
6.3.2	多极边界元法模型的建立	227
6.3.3	基本解的多极展开系数的平移	231
6.3.4	Poisson 方程的奇异性分解	233
6.3.5	FM-BEM 算法实现	234

6.3.6	数值算例	238
6.4	位势问题的快速多极边界元法	241
6.4.1	引言	241
6.4.2	位势问题的边界积分方程	242
6.4.3	FM-BEM 的基本解	243
6.4.4	FM-BEM 的基本原理和流程	245
6.4.5	数值算例	248
6.5	求解特殊矩阵特征值的并行多极展开算法的研究	250
6.5.1	快速多极展开算法(FMM)	251
6.5.2	多极算法的数据结构	253
6.5.3	并行多极算法的设计	253
6.5.4	数值试验	255
6.6	弹塑性摩擦接触多极边界元法和模拟轧制过程	256
6.6.1	引言	257
6.6.2	弹塑性摩擦接触多极边界元法	258
6.6.3	轧制工程实例	267
6.7	本章小结	270
	参考文献	271

第 1 章 引 论

边界元法是在经典的边界积分方程法的基础上吸收了有限元离散化技术而发展起来的一种偏微分方程的数值解法。其基本思想是将问题的控制方程转换成边界上的积分方程,然后引入位于边界上的有限个单元将积分方程离散化求解。与目前常用的有限元、有限差分这类区域性方法不同,经离散化后的方程组只含有沿边界上的结点未知量,因而降低了问题的维数(如三维有限元对应二维边界元,而二维有限元则在边界元法中只不过是线元),最后求解方程的阶数较低,因而数据准备方便,计算时间缩短。另外,它引用了问题的基本解,具有解析与离散相结合的特点,因而计算精度较高。目前在各领域获得了越来越广泛的应用。

1.1 边界单元法

工程、物理问题的数学模型的解如果可以转化为某个边界积分方程的形式,那么用数值方法求解边界积分方程以达到求解数学模型的方法就是边界元法,所以边界元法又被称为边界积分方程法。它是将区域内的偏微分方程的边值归化为边界上的积分,如果边界归化的途径不同,可以从同一边值问题得到几个不同形式的边界积分方程,也就形成了不同的边界元法。

数学物理问题,如石油、天然气的勘探与开发,大型结构问题,航天航空问题,天气预报等问题的计算,无不归结为求解大型偏微分方程,当区域大而且形态极不规则时,求问题的解析解是根本不可能的,所以数值计算成为求解此类问题的有效方法。而边界元法就是随着有限元法的发展而在 20 世纪 70 年代后期被英国安普敦大学 Brebbia C. A 提出的求解偏微分方程初值、边值问题的数值计算方法,由于它一般只需进行边界剖分,有降低维数

进行数值计算的特性,并且所占计算机内存小,计算时间短,与有限元法相耦合能更好地解决工程实际问题等优点,所以边界元法已在各个工程领域获得广泛的应用。

边界元法的深入研究始于一些苏联学者,如 Mikhlin、Smirnow、Gakhov 和 Ivanov 等,他们研究了标量型、矢量型积分方程及积分区域内奇点和间断的情况,从而为进一步应用边界积分方程方法开辟了道路。20 世纪 70 年代末,Brebbia 系统地总结了有限元法中的离散技术并应用于边界积分问题,使得边界元法成为了一种独立的求解偏微分方程的数值方法,并首次提出了“边界元法”(Boundary Element Method, BEM)这一名称,从而使边界元真正地脱颖而出,成为工程分析和计算的一种新的有效工具。此时边界元法已经应用到了弹性力学、断裂力学、弹塑性力学以及有势场等领域。

在国内,边界元法的研究相对较晚,1978 年杜庆华教授率先独立研究边界元法,并做出了推荐和综述,推动了国内边界元法的研究和发展。紧接着,冯康、胡海昌、何广乾等一大批著名的数学和力学家加入到边界元法的研究行列,使我国的边界元法研究得到了迅速发展。我国大部分边界积分方程——边界元法方面的工作是从固体力学方面的工程应用开始的,后来迅速的转入非线性问题领域。

1.1.1 固体接触边界元法

固体接触问题的经典真实解亦即解析解是对理想模型而言的。可适用于一些具有简单几何形状的理想弹性接触问题,如圆盘或圆柱体接触问题。关于接触问题的研究工作最早见于 H. Hertz 的论文,但对于许多复杂工程实际情况中所遇到的接触问题,很难建立一个完美的数学模型描述真实情况并求得解析解。因此,寻求一种比较精确的满足实际问题的数值方法就显得十分必要。

边界元法是以边界位移和面力为基本参量,接触条件的描述直接和简单,边界上位移和面力具有相同的精度,并在系统方程中直接耦合,这是边界元法明显优于有限元法的一个特征。

弹性接触问题的边界元法,首先由 Anderson、Person 和 Fredriksson 于 1980 年提出。他们最早给出二维弹性无摩擦光滑表面接触问题边界元法,进而又进行了二维弹性摩擦接触问题的研究。他们和其他研究者,做了许多研究工作以提高计算精度和计算效率,并将其应用于裂纹接触问题、滚动接触问题和滚动轴承接触应力分析等各种接触问题。后来 Karami 和 Fene 用于求解热弹性接触问题。Abdull-Mihsein 给出了轴对称问题的边界元法。Becker 等人给出了包括接触区结点对、单元对影响系数的满秩系数阵。另外, Yamazaki 等人也给出了罚数法等一些新解法。

在工程应用中,弹性接触体的形状及加载形式常具有非对称性,事先无法知道接触面的准确位置,因而用近似的接触点对描述很困难,这就迫使人们去寻找一种非协调离散数值技术加以处理上述问题。

对于有摩擦弹性边界元法,由于摩擦在物体接触面间产生能耗,变形过程不可逆。因此,必须用增量方法求解,以便跟踪整个加载过程。计算增量可用迭代方法。迭代方法是在给定一加载步长后反复迭代求解,判断接触条件,计算接触载荷和摩擦状态,认为在一增量加载步中接触条件不变化。加载步长根据经验而定。另外,在求解弹性接触问题边界元法的分离解法方面,也有了最优罚因子和迭代过程快速有限步迭代法等新的进展。

1.1.2 弹塑性接触边界元法

弹塑性问题的边界元法首先由 Swedlow Cruse 和 Mendelson 于 20 世纪 70 年代初分别提出,他们给出了弹塑性问题的边界积分方程。以后 Mukherjee 和 Kumar 对平面问题公式中的错误提出了修正。Tells 和 Brebbia 对二维问题的处理,内部区域采用线性插值单元,并给出了边界应力的计算方法和奇异积分的数值处理方案。

弹塑性摩擦接触问题是多重非线性问题的组合,包括材料、几何(大变形)、接触和考虑摩擦能耗散等多重非线性。将边界元用于分析弹塑性摩擦接触问题,在国内外研究成果报道很少。其中有 A. Gakwaya 和 G. Karami 的二维弹塑性小变形摩擦接触边界元法。用于塑性加工数值解析的三维弹

塑性摩擦接触边界元法由肖宏和黄庆学给出。

Aizawa 等学者改进了弹塑性小变形边界元法,计算了简单算例的大变形问题。陈正清博士等给出弹塑性大变形边界元并完成了圆柱形拉伸试件颈缩的定量数值模拟。

肖宏博士等建立三维弹塑性有限变形边界元法,并给出了轧制过程模拟边界元程序和板带轧制过程变形一面力一应力场,还对奇异问题做了很好的处理。陈一鸣博士等从数学的角度研究了三维弹塑性摩擦接触边界元法,证明了多重非线性问题控制方程解的存在唯一性,给出了三维弹塑性摩擦接触边界元法的快速计算方法。刘德义博士等研究了多级边界元法,给出了三维弹性点一面摩擦接触快速多级边界元法、三维弹塑性摩擦接触快速多级边界元法和三维点一面摩擦接触轧制耦合模型及其 Fortran 源程序。

从边界元方法的发展状况来看,对单一物体的三维弹性静力问题分析,当离散网格结点数超过 1700 时,因计算时间过长而失去可行性。对于工程接触问题,边界条件的非线性使矛盾更加突出,如果再叠加弹塑性和摩擦非线性,将无法实现问题的求解。边界元法计算效率不适应大规模工程运算课题的需求,一直困扰着边界元法的进步,因此提高计算效率和扩大运算规模,对边界元法的发展至关重要。在边界元法求解过程中普遍表现为,整个运算量主要集中在影响系数的计算和方程组的求解两个方面。因此寻求方程组系数积分运算和方程组求解的快速有效方法是扩大边界元法解题规模的关键,随之边界元法的计算结构也将得到更新。

1.2 变分不等式

“变分不等式”的英文为“variational inequality”,它产生于许多不同领域,如物理学、工程学和金融管理科学等。变分不等式是一类重要的非线性问题,早在 1933 年 Signorini 研究一个线性弹性体和刚性体的无摩擦接触问题时,就导出了被称为 Signorini 问题的变分不等式。直到 20 世纪 60 年代,变分不等式方面才逐渐建立了严格的数学理论并形成了专门的数学学科。

从70年代起变分不等式就较多地被用来解决物理、力学和工程科学中的一类自由边界问题。例如,各种类型的障碍问题,土坝渗流问题,弹塑性接触问题,冰块融化问题等。应用有限差分法及有限元法等离散化方法可将连续形式的变分不等式化成离散形式。变分不等式的数学理论及其数值求解方法给解决这类非线性问题提供了有效途径。鉴于这类非线性问题在应用科学中的重要地位,使得变分不等式的理论及其应用越来越引起人们的重视。

在力学中,变分不等式是有限元法的基础,关于这方面的讨论也比较多,但其在边界元法上的应用还不多。边界元法是求解数学物理方程的边界型数值解法,是继有限元法之后的一种别具特色的新的数值方法,它是将弹性力学问题的偏微分方程边值问题化为边界积分方程并吸收有限元法的离散化技术而发展起来的。该方法由于其降维、解析精度高的固有特性,比有限元法更适合于工程中尚待解决的实际问题。它只需对边界进行单元剖分,只要求给出边界结点上的解函数值,就可计算区域内任意点的解函数值。

对于变分不等式的数值解法,现有的方法主要是有限元法,而对边界上的位移和张应力直接使用边界元离散化很适合于只有边界非线性的摩擦问题的求解。因此,使用边界元法比有限元法更具有优越性。要使用边界元法处理摩擦问题中的变分不等式,必须将区域型变分不等式转化成边界型变分不等式,然后再用边界元法进行求解。

1.3 并行计算的发展

计算机技术的出现对现代科技与世界经济的发展以及人类生活都产生了巨大影响,发展之迅猛是其他科学技术所不能及的。由于计算机技术的深入应用,对计算机处理能力的需求呈现指数级别的增长,在人工智能、计算数学、计算力学、能源、气象等大规模科学计算领域和信息处理、高性能数据库等领域出现了需求的增长超出计算机能力增长的情况,导致计算机单CPU的处理速度已远远不能满足需要。正是这种单机技术的有限性和科学与工程计算需求的无限性之间的矛盾决定了高性能计算必然走上多机并行的

道路,并成为推动并行处理技术蓬勃发展的源动力。

高性能计算机的发展以及其应用的日益广泛,对科学技术以至整个人类社会都产生了巨大影响,人们越来越清楚地认识到,计算机已经成为与理论分析和实验并列的第三种科学研究手段,并且充当越来越重要的角色。同时,为了满足大型科学工程计算的需求,除了提高元器件的速度之外,系统结构和算法也必须加以改进,特别是在现有的元器件速度达到极限的时候,就显得更为重要。现阶段,计算机系统结构和算法的改进主要是围绕着并行处理技术和并行算法的设计展开,即增加同一时间间隔内的操作数量。这样,单处理机计算机系统就不能满足高性能计算的需求,此时,研究发展并行计算机显得尤为重要。使用并行处理技术,在并行计算机上设计求解问题的并行算法的方法称之为并行计算,并行计算技术主要应用于大规模、高性能计算领域。

目前,随着并行处理技术在各个行业日益广泛的应用,世界上许多国家已逐步认识到并行处理技术在国防建设和国家科技发展中发挥的重要作用,因此也都在投入巨大的人力和物力,逐步加强这方面的研究工作。同时也有许多非官方组织对并行处理技术的发展起到了很大的作用。

1.3.1 国内发展

早在1978年3月,国内就已经意识到研制自己的巨型机的重要性,并开始着手研制银河-I。目前,高性能计算机是我国在并行处理技术各领域中发展最为显著的一个领域,已研制出神州、银河、曙光系列等高性能计算机,其中涉及的部分并行技术,如机群操作系统、并行优化编译等已达到国际领先水平。并行运算是解决大数据量数值运算耗时过久的重要途径,在PC群上实现并行运算是一种低成本、高效率的解决方案。香港科技大学物理系的Linux PC Cluster计划:2001年80台1.4GHz AMD微机实现了67Gflops的速度(Gflops=Giga Floating-point Operations Per Second),总花费只有120港币。

算法是软件的核心,基于此国内科技工作者已逐渐意识到并行算法的

重要地位,正努力致力于该方面的研究工作,其中包括国防科技大学、中国科学院、哈尔滨工业大学等。他们研究的侧重点各不相同,分别研究了常微分方程、方程组求解等代数领域中的多种并行算法。

除此之外,国内科技工作者在并行检索、并行识别、并行图像处理、并行算法的实际应用等方面也均有涉猎。

尽管我国从20世纪80年代初开始进行并行处理研究,且近20年来得到一定发展,单从并行处理技术设计的三个方面——并行体系结构、并行算法及其应用、并行系统软件的开发来讲,后两者的发展远远落后于前者。目前我国并行计算的发展现状是从事高性能计算机系统研制的单位很多,科研立项也不少,而从事应用系统开发的人员和项目却很少。我国在并行技术方面应重点发展并行编译与编程环境、并行算法与并行应用软件等技术。

1.3.2 国外发展

在国外,并行计算技术的研究以日本和美国为代表。在20世纪80年代,日本由于一直追求发展高性能的传统向量并行机,因此一度徘徊不前。近年来,日本政府将超级计算机技术的研究和产品开发列为国家重要发展项目,在它的推动下,日本的超级计算机取得了很大发展。并且在并行计算的其他领域,日本也逐渐加大了投资强度。如在并行编程方面,日本正在研究开发新一代的并行处理的编程技术,以解决现有的计算机编程思想不能充分挖掘超级计算机的运算性能这一问题,力图缩小超级计算机在其“实际性能”和“理论性能”之间存在的巨大差距。

美国在高性能计算机领域一直处于领先地位,早在1992年,美国就提出了高性能计算和通信计划(High Performance Computing and Communication, HPCC),旨在通过并行技术解决科学与工程计算领域里具有深远影响的一些重大挑战性课题。几年来该项目的研究极大地推动了美国在先进器件、可伸缩超级计算机系统和高速网络、并行计算等方面的革新和发展。高性能计算的其他领域,美国也处于世界领先地位,并行计算在其商业产品中已得到充分体现,如美国的Oracle公司已研制出商品化的并行数据库产品,