

## 共享内存式并行离散元程序的设计与测试

李长圣,尹宏伟\*,刘 春,蔡申阳

(南京大学地球科学与工程学院,南京,210023)

**摘 要:**构建了适用于并行计算的离散元数据结构,改进了基于网格法的邻居搜索算法,进而完成无锁的离散元程序的并行设计.计算测试实例采用固体晶格模型,模拟了一个岩石试样在单轴压缩情况下的整个剪切破坏过程.测试结果表明:颗粒数量达到数万以后,加速比变化不大,体现了并行具有与问题规模无关的特点;四个线程并行计算时,并行效率可达到 0.85 左右,程序耗时随颗粒数量增加呈现良好的线性增长趋势.新的邻居搜索算法适用于离散元的并行计算,可以大大提高计算速度,有助于复杂岩土体或复杂地质模型等颗粒要求较多的问题研究.

**关键词:**DEM, OpenMP, 数据结构, 邻居搜索, 固体晶格模型, 单轴试验

**中图分类号:** TP319

**文献标识码:** A

## Design and test of parallel discrete element method program of shared memory type

Li Changsheng, Yin Hongwei\*, Liu Chun, Cai Shenyang

(School of Earth Sciences and Engineering, Nanjing University, Nanjing, 210023, China)

**Abstract:** With the help of such data structure and changing the neighbor search algorithm based on grid, the lock-free parallel computing of discrete element method was achieved, and an efficient program of discrete element method was written in the C language. As a test case, a rock specimen was simulated under uniaxial compression by using the solid lattice model, and the entire process of shear failure was observed. The parallel test results showed that the speedup ratio basically remained unchanged when the number of particles reached tens of thousands or more. It reflected the phenomenon that the speedup of parallel has nothing to do with the scale of the problems. The parallel efficiency was about 0.85 and the time costs linear increases with the increase of number of particles, when we used four threads. The parallel computing of discrete element method was realized based on procedure-oriented language, which could make full use of existing multi-core resources and improve computing speed greatly and be useful to simulate the complex geotechnical engineering and geological model required more particles.

**Key words:** DEM, OpenMP, data structure, neighbor search, solid lattice model, uniaxial tests

基金项目:国家重点基础研究发展计划(973)项目(2012CB214703),国家自然科学基金(41272227, 41572187)

收稿日期:2017-09-28

\* 通讯联系人, E-mail: hwyin@nju.edu.cn

20 世纪 70 年代, Cundall and Strack<sup>[1]</sup> 首先提出用于研究颗粒物质力学行为的离散元法 (Discrete Element Method, DEM), 最初主要用于研究岩土体等非连续介质<sup>[2]</sup>. 经过近半个世纪的探索与发展, DEM 在许多工程和科学领域都有了广泛的应用<sup>[3-7]</sup>. 借助 DEM 研究颗粒材料及其他非连续介质的变形规律及力学性质, 对散粒物料运输与混合<sup>[8]</sup>、地质防灾减灾研究、矿产开采与运输<sup>[9]</sup>、构造解译与油气勘探<sup>[4,10-14]</sup>、探月计划<sup>[5]</sup> 等都具有重要的实际意义.

发展之初, DEM 程序多采用面向过程的语言编写, 如 Cundall and Strack<sup>[1,15]</sup> 用 FORTRAN 编写的二维圆盘程序 BALL 及三维圆球程序 TRUBALL, 王永嘉和刘连峰<sup>[16]</sup> 用 C 语言研制的三维离散元软件 TRUDEC. 随着 DEM 的蓬勃发展, 程序的规模与复杂度越来越大, 开发与维护费剧增. 新的离散元程序多采取面向对象的语言编写, 以便于扩展. 王泳嘉等<sup>[17]</sup> 和焦红光等<sup>[8]</sup> 都采用 C++ 编写了相应的二维离散元程序. 近些年的开源离散元程序也多采用面向对象的方法编写的, 如 YADE, Esys-Particle 及 LIGGGHTS 等. 随着 DEM 与 FEM (Finite Element Method), SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 等其他计算方法耦合, 数值计算软件的代码规模越来越大, 采用面向对象的编程语言是很有必要的<sup>[18]</sup>. 但设计往往更为复杂, 有时候需要甚至牺牲部分计算速度为代价. 离散元法需要很大颗粒体系和相对较小的时间步, 和连续介质力学方法 (如有限元、有限差分等方法) 相比, 需要更快的计算速度. 为了提高计算速度, 一些学者开发了基于 GPU 的离散元软件, 可显著提高离散元的计算速度<sup>[19-21]</sup>. 但是, 目前 GPU 硬件多是专为单精度浮点运算设计的, 执行双精度运算性能有可能会降低一个数量级<sup>[22]</sup>, 而单精度无法保证得到准确的计算结果. NVIDIA 公司也推出了专门用于科学计算的 Tesla 系列 GPU, 双精度性能较 GeForce 系列可以提升一倍, 但是价格相对也更为昂贵<sup>[22]</sup>. 现在的计算机基本上都是采用共享存储的多核架构,

实现离散元的并行, 可以充分利用现有的多核计算资源, YADE 等在离散元的并行计算上都进行了相应的尝试<sup>[23-25]</sup>.

Balevičius *et al*<sup>[26]</sup> 研究表明, 采用同样算法 (即邻居搜索算法、接触力学模型和时间积分方法) 的前提下, 使用面向过程编程语言实现离散元程序时, 其计算速度优于面向对象的编程语言. 而近些年的离散元软件为了与其它数值方法耦合、易于扩展等目的, 多采用面向对象设计, 牺牲了离散元亟待提升的计算效率. 我们选用面向过程的 C 语言编写了一个离散元程序 VOBX (virtual sandbox), 将颗粒信息存储在结构体数组中, 使得串行程序在框架基本不变的前提下, 可以很容易的用 OpenMP 实现无锁并行. 计算实例采用固体晶格模型<sup>[27]</sup>, 模拟了一个岩石试样在单轴压缩情况下的整个剪切破坏过程.

## 1 数据结构与邻居搜索

Cundall and Strack<sup>[1]</sup> 基于分子动力学原理首先提出了对颗粒物质进行离散模拟的思路, 用于研究岩土体的各种力学行为, 其基本思想是将颗粒材料内部细观尺度的单个离散颗粒视为一个离散单元, 通过一系列离散的单元来模拟颗粒材料的力学行为. 离散元的迭代计算可以概括为两部分, 如图 1 所示. 第一步, 找到相互接触的颗粒, 应用接触力学模型 (即力一位移法则) 计算颗粒间的接触力, 进而得到所有颗粒受到的合力与合力矩; 第二步, 已知的颗粒所受合力和合力矩, 由牛顿第二定律更新每个颗粒的位置. 反复执行这两个步骤, 直到计算结束.

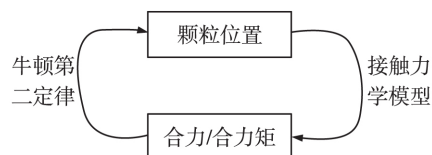


图 1 离散元的计算循环

Fig.1 The calculation cycle of DEM

1.1 数据结构 离散元程序一般采用链表来构建所有颗粒和接触数据, 便于动态增加删除

颗粒及接触,但不利于程序的并行设计<sup>[28-31]</sup>.而通过构建颗粒的结构体数组(见图2)和网格的链表数组(见图3)可以清晰地描述离散元的数据结构,实现程序的并行设计.但是构建数组前,需要事先确定颗粒及网格的数量,不太灵活.在前处理阶段可以采用链表存储颗粒属性,迭代计算开始前,转换成结构体数组.这样,既能在前处理阶段动态生成或者删除颗粒,迭代计算时又可以采用并行算法.

如图2所示,结构体数组中的每个结构体保存一个颗粒的所有信息,包括质量  $m$ , 半径  $r$ , 速度  $v$ , 合力  $F$ , 颜色  $color$ , 接触链表  $contact$  等.

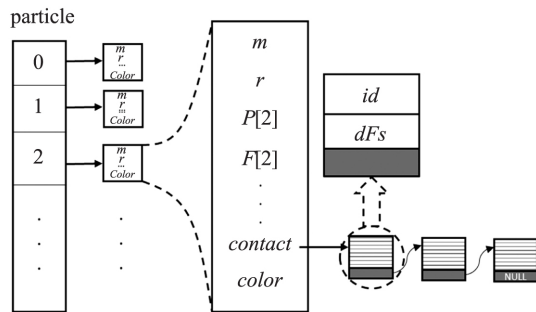


图2 颗粒的结构体数组

Fig.2 The structural array of particles

每个网格保存一个链表,其中保存落入这个网格中的所有颗粒,如图3所示.

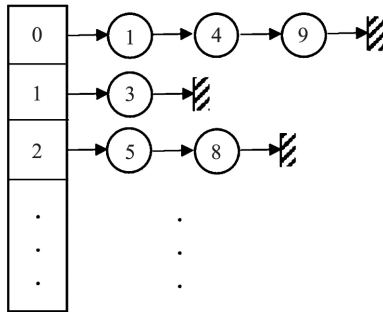


图3 网格的链表数组

Fig.3 The array of meshes consisting of linked list of particle

**1.2 邻居搜索与接触判断** 要计算接触颗粒间的接触力,需要找到相互接触的颗粒,这就需要进行接触检测.离散元的接触检测通常分两步进行.

第一步将颗粒邻居确定.一般采用划分网格法<sup>[16,32-33]</sup>,将研究区域划分成大小相等的网格,将所有颗粒映射到相对应的网格中,这样每个网格都保存了一个记录了颗粒编号的链表(见图3),记录了当前网格的所有颗粒编号.当前颗粒所在的网格为当前网格,当前网格周围的网格为邻居网格,当前网格和邻居网格中的颗粒即为当前颗粒的邻居(见图4).

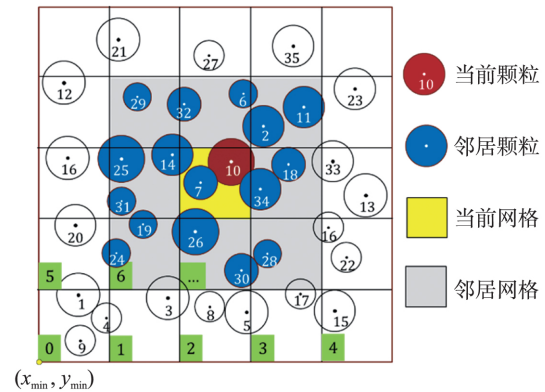


图4 邻居搜索

Fig.4 Neighbor search

对研究区域划分网格时,左下角的起始网格编号为0,遵循由左到右、由下到上的原则,依次编号,如图4所示.将某个颗粒映射到相应的网格中,可用如下公式:

$$MeshIndex = \left\lfloor \frac{y - y_{min}}{L} \right\rfloor \times MeshRow + \left\lfloor \frac{x - x_{min}}{L} \right\rfloor \quad (1)$$

其中,  $MeshIndex$  为网格编号,  $MeshRow$  为划分的网格总行数,  $(x, y)$  为颗粒的圆心坐标,  $(x_{min}, y_{min})$  为研究区域左下角的坐标(见图4),  $L$  为单个正方形网格的边长.

为了保证颗粒圆心落在网格边界上时,有唯一的网格归属,采用了负无穷取整的方法.如图5所示,颗粒圆心落在网格左边界和下边界

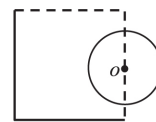


图5 颗粒归属规定

Fig.5 The attribution rules of particles

及网格内部时,才属于该网格.图 5 中所示颗粒  $o$  的圆心恰好落在右边界上,不属于该网格.

第二步做精确的接触判断.把邻居颗粒与当前颗粒的圆心距离与两颗粒半径之和作比较,对于图 4 所示的情况,只有颗粒 7 和 34 与当前颗粒 10 接触.由于颗粒间的接触是相互的,它们间的接触力是作用力与反作用力的关系,在更新颗粒 7 的合力时,已经计算过颗粒 10 对颗粒 7 的作用力计算并存储到颗粒 7 的结构体数组(见图 2)中.在更新颗粒 10 的合力时,没有必要再计算颗粒 7 对颗粒 10 的作用力,这样接触力计算量就可以减少一半. VBOX 中,颗粒间相互作用力的计算存储,遵循“舍大取小”原则,即把颗粒间的接触力存储在编号较小的颗粒的结构体数组中<sup>[16]</sup>.所以,只需要将颗粒 34 和当前颗粒 10 进行接触力计算就可以了.

邻居搜索时,每步都把所有颗粒映射进网格,是非常耗时的.这里给出一种针对划分网格法的优化方法.假设最大的颗粒半径为  $r$ ,网格的边长设置为  $3r$ ,如图 6 所示.初始化所有颗粒所在网格之后,左网格中的颗粒  $o$  要和右网格中的颗粒  $a$  接触,颗粒  $o$  和颗粒  $a$  最少需要分别向右、向左移动  $r/2$ ,也就是说,颗粒  $o$  最少需要沿着水平或者竖直方向移动  $r/2$  才可能与其邻居网格之外的颗粒接触,我们把该距离( $r/2$ )定义为安全距离.程序应时刻监测所有颗粒的累计位移(水平方向累计位移及竖直方向累计位移),如果颗粒  $o$  的水平方向累计位移或者竖直方向累计位移大于或者等于安全距离,则颗粒  $o$  的累积位移清零并按照式(1)更新颗粒  $o$  所属网格.

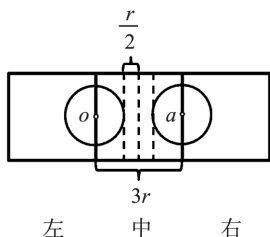


图 6 颗粒所属网格的更新

Fig.6 The update of particles in the meshes

一般的,当网格边长为  $L$  时(需满足  $2r < L < 4r$ ,  $r$  为研究体系中最大颗粒的半径),半径为  $r$  的颗粒安全距离  $O_{safe}$  为:

$$O_{safe} = \frac{L}{2} - r \quad (2)$$

## 2 计算实例

自然界中,颗粒间的相互作用力一般是非线性的,真实的再现自然界中的颗粒行为,需要构建复杂的接触力学模型,相应的求解接触力也需要更大的计算量.这里,选用固体晶格模型<sup>[27]</sup>作为计算测试实例.固体晶格模型不考虑颗粒旋转,在模拟断层传播时的脉冲滑动行为<sup>[34]</sup>、高孔隙度砂岩中不同形态压密带的形成机制<sup>[6,35]</sup>、地质构造模拟<sup>[4,10-13,36]</sup>中应用较多.

固体晶格模型中,颗粒间的法向接触力用下式计算:

$$F_n = K_n U_n \quad (3)$$

式中,  $K_n$  为颗粒间的法向接触刚度,  $U_n$  为颗粒间的法向叠合量.

同理,颗粒间的切向接触力为:

$$F_s = K_s U_s \quad (4)$$

式中,  $K_s$  为颗粒间的法向接触刚度,  $U_s$  为颗粒间的切向叠合量.

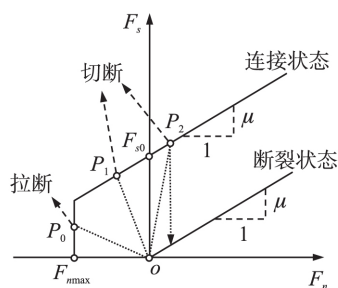


图 7 固体晶格模型中颗粒间的断裂准则

Fig.7 The fracture criterion of solid lattice model between particles

固体晶格模型采用如图 7 所示的断裂准则限制切向力的大小,规定颗粒间压力为正,拉力为负,则断裂准则可以表示为<sup>[27]</sup>:

$$|F_s| \leq \begin{cases} F_{s0} + \mu F_n & \text{连接状态} \\ \mu F_n & \text{断裂状态} \end{cases} \quad (5)$$

其中,  $F_{s0}$  定义为接触的剪切强度,  $\mu$  为颗粒间

的摩擦系数.一般情况下,假如两个颗粒的圆心距离小于两颗粒半径之和,则说这两个颗粒是接触的.而接触的颗粒又分两种状态,即“连接状态”和“断裂状态”.程序开始,所有相互接触的颗粒设置为“连接状态”,并定义“连接”的抗拉强度  $F_{n\max}$  与剪切强度  $F_{s0}$ .随着试验进行,颗粒间“连接”可能发生剪切断裂(图7中点  $P_1$  和  $P_2$ )或者拉伸断裂(图7中点  $P_0$ ).如果切断后的颗粒仍然接触(图7中点  $P_2$ ),则“连接”转为“断裂”,按照式(5)的“断裂状态”公式调整颗粒间切向接触力的大小.如果两个处于“连接状态”的颗粒发生切断(图7中点  $P_1$ )或者拉断(图7中点  $P_0$ )后,不再接触,删除该“连接”,颗粒间的法向接触力与切向接触力都不复存在.也就是说“连接”拥有抗拉强度与剪切强度,“断裂”的抗拉强度与剪切强度为零.

计算完颗粒间的接触力,累加颗粒受到的所有接触力,即可得到颗粒所受的合力.之后,采用跳蛙法<sup>[23]</sup>求解牛顿第二定律,更新颗粒位置.另外,固体晶格模型中引入了人工阻尼(Artificial viscosity)耗散体系能量,在构造变形模拟中取得了很好的效果.并且,颗粒的质量  $m$  定义为<sup>[27]</sup>:

$$m = \rho(\sqrt{3}d^2/2) \quad (6)$$

式中,  $\rho$  为颗粒密度,  $d$  为颗粒直径.

这里的实例为 Liu *et al*<sup>[27]</sup> 给出的一个岩石试样单轴压缩试验,人工阻尼为  $1.16 \times 10^3 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1}$ ,时步为  $2 \times 10^{-8} \text{ s}$ ,模型长和高均为  $0.3 \text{ m}$ ,共 1033 个颗粒.颗粒直径  $d$  均为  $0.001 \text{ m}$ ,六方晶格紧密堆积,如图8所示.颗粒间的法向接触刚度  $K_n$  为  $6.587 \times 10^{10} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ ,切向接触刚度  $K_s$  为  $2.371 \times 10^{10} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ ,摩擦系数  $\mu$  为  $0.239$ ,密度  $\rho$  为  $2.65 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2}$ ,初始“连接”的抗拉强度  $F_{n\max}$   $1.252 \times 10^4 \text{ N}$ ,剪切强度  $F_{s0}$  为  $3.690 \times 10^4 \text{ N}$ .顶底面施加位移边界条件每计算 400 时间步压缩一次,每次压缩量  $1.9 \times 10^{-9} \text{ m}$ ,共计算  $3.2 \times 10^7$  时步.计算结果见图8,在应变约为  $7 \times 10^{-4}$  时,试样拉张断裂,轴向应力发生波动.之后,试样强度仅由颗粒间的剪切强度提供,使得轴向应力继续增加,在应变  $2.8 \times 10^{-3}$  左右,达到峰值强度发生破坏,产生两个“X”状剪切带,前人数值计算已经观察到这种现象<sup>[37]</sup>,同时与室内岩石压缩试验中观察到的现象相似<sup>[38-39]</sup>.数值模拟结果与前人采用石英岩试样的试验结果相符<sup>[40]</sup>,首先观察到平行于最大压应力方向的拉张微裂缝,随着试验进行,裂缝数量增加,最终贯穿试样,形成宏观的剪切面.

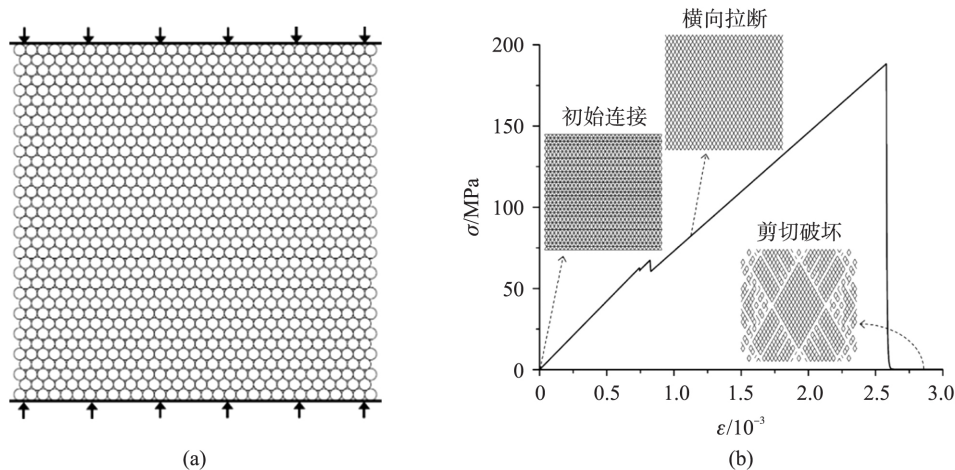


图8 (a)单轴试验离散元模型,(b)应力应变曲线

Fig.8 (a) The DEM model of uniaxial test, (b) the stress-strain curve



### 3 并行设计

并行计算领域, OpenMP<sup>[41]</sup> 作为共享存储模型中最为重要的并行编程标准, 以分离、聚合的共享内存的方式实现并行, 可获得较高的加速比. 由于程序内存是共享的, 主要数据都存储在一个内存空间中, 每个线程独立占用内存空间的数据较少, 程序总共占用的内存大小和串行程序相比没有较大变化. VBOX 并行和串行计算占用内存基本一样, 百万颗粒约占用 700 M, 千万颗粒约占用 7.5 G. 基于 OpenMP 的并行计算流程, 如图 9 所示.

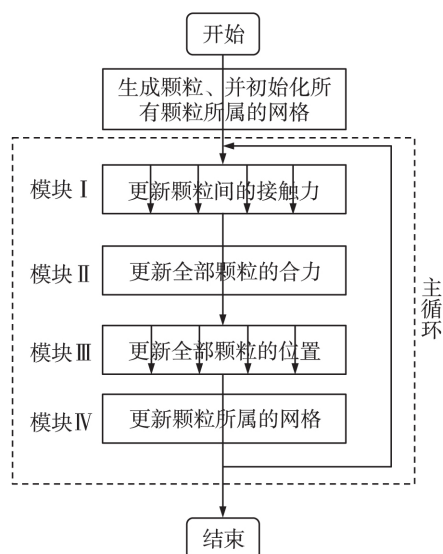


图 9 VBOX 的计算流程

Fig.9 The calculation process of VBOX

首先将采用划分网格法<sup>[33]</sup>初始化所有颗粒所属的网格, 更新网格的链表数组(见图 3). 之后, 进入主循环计算, 主循环分为四个模块. 在模块 I 中, 进行邻居搜索和接触判断, 并完成颗粒间的接触力的计算, 串行计算时模块 I 耗时可以达到整个程序的近 90%, 是进行并行计算的主要模块. 颗粒间接触力计算存储, 遵循“舍大取小”原则, 即把颗粒间的接触力存储在编号较小的颗粒的结构体数组中<sup>[16]</sup>.

假设模块 I 开辟了  $a$  和  $b$  两个线程, 如图 10 所示, 线程  $b$  正在更新颗粒 100 的合力, 如果此时线程  $a$  也试图更新线程  $b$  中颗粒 100

的合力, 可能导致数据写入错误导致程序崩溃<sup>[42]</sup>. 为了避免这种两个线程同时写内存数据使得程序出错, 线程  $a$  计算完颗粒 0 和 100 的接触力之后, 将其存储在接触链表中, 在模块 II 中采用串行的方式累加到颗粒 100 所受的合力上, 这样可以对最耗时的模块 I 完成了并行无锁编程. 当然, 线程  $a$  和  $b$  还是可能同时读取颗粒 100 的坐标和速度等信息进行相应的接触力计算. 共享内存模型是允许多个线程同时读某个变量的, 可能会造成读操作并发延迟, 影响并行效率<sup>[43]</sup>. 但是四线程并行时, 模块 I 仍可获得约 0.90 的并行效率(约 3.6 倍的加速比). 模块 III 更新颗粒的位置, 此时并行计算不存在并发写内存数据的错误, 模块 IV 中更新颗粒所属的网格. 在拥有四核四线程 CPU 的微型计算机上, 程序开始时只有一个主线程, 在模块 I 和 III 中使用 OpenMP 创建四个线程(一个主线程和三个派生线程)完成并行计算, 效果如图 9 所示.

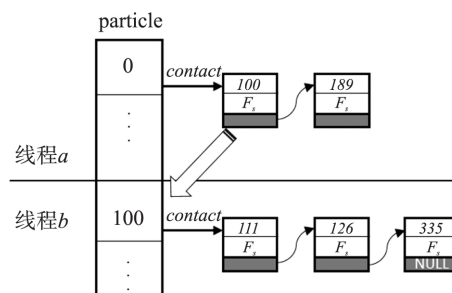


图 10 多线程并行计算时可能的并发错误

Fig.10 Possible concurrent error of multithreaded parallel computing

这里并行测试是采用第 2 节的实例, 颗粒数量增加时, 保证试样长宽比恒定. 在 Dell XPS 8700 微型计算机上进行, 该微型计算机采用的是 Intel(R)Core(TM)i5-4460 CPU, 其主频 3.20 GHz, 为四核四线程处理器, 峰值运算能力约为 47 GFlops. 此时, 采用 OpenMP 开辟四个线程并行时, 四个线程就是分别在 CPU 的四个物理核上进行的计算, 即一个线程占用一个物理核.

图 11 为加速比随颗粒数的变化情况, 颗粒数从千(1033 个)到万(16611 个)数量级别时,

加速比有较为明显的提高,尤其是四线程计算时更为明显(图 11 虚线所示部分).颗粒数为 1033 个时,采用四线程并行效果较差,是因为将串程序的任务分割,并分配到相应线程间,需要花费一些时间.当颗粒数较多时,每个线程的计算时间相对于开辟线程所花费的时间较长,基本可以忽略这种额外的开辟线程所需的时间.而颗粒数较少(1033 个)时,每个线程很快就完成了程序分配给自己的任务,不能忽略程序开辟线程额外花费的时间,导致加速比较低.颗粒数增加到十万(149552 个)、百万(1064086 个)、甚至到千万(10393268 个)级别时,加速比变化不大,可见颗粒数量达到上万级别后,颗粒的数量增加基本对程序的加速比没有影响,体现了程序的并行具有与问题规模(上万颗粒以上)无关的特点.

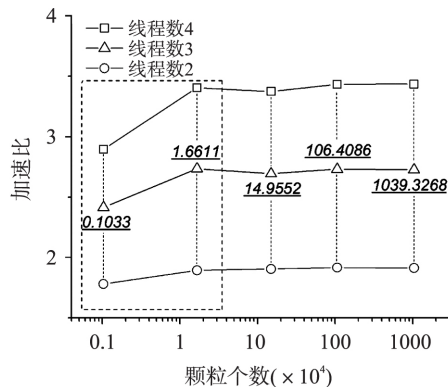


图 11 加速比随颗粒数的变化

Fig. 11 The variation of the speedup ratio with the number of particles

由图 11 已知,颗粒数量达到上万以后,加速比变化不大,所以这里我们选取颗粒数为 16611 个的体系,探究加速比随线程数增加的变化情况,见图 12.

由图 12 可知,加速比随线程数增加逐渐偏离理想的线性加速比.串程序中,模块 I 耗时最多,所以并行效率主要取决于模块 I,由图 13 可知,并行的模块 I 和模块 III 加速情况良好,而串行的模块 II 和模块 IV 计算用时并不会随着线程数的增加而减小,这也就导致了程序

的整体并行效率降低.使用四个线程并行计算时,并行效率仍能达到 0.85,体现了程序良好的并行效果.

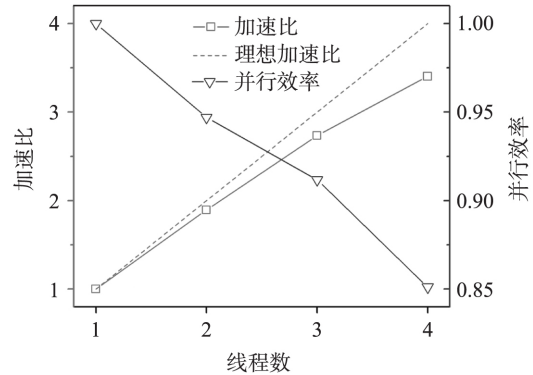


图 12 颗粒数 16611 个时,加速比和并行效率随线程数的变化

Fig. 12 The variations of the speedup ratio and parallel efficiency with the number of threads when the number of particles is 16611

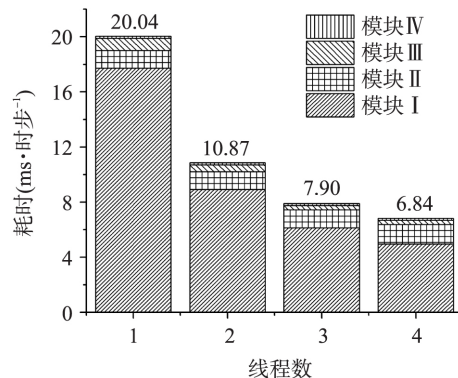


图 13 颗粒数 16611 个时,计算一个时步,各个模块在不同线程数下的耗时情况

Fig. 13 The time costs of each models in one time step with various numbers of threads when the number of particles is 16611

图 14 为采用四个线程并行时,在不同颗粒数下,计算一个时步的耗时情况.可见,程序并行计算时,耗时随颗粒数量增加呈现良好的线性增长趋势.颗粒数为 16611 个时,一个时步耗时约为 6.84 ms,计算  $3.2 \times 10^7$  时步,耗时约 60 h,计算机峰值运算能力(本文约 47 GFlops,文献[27]约 48 GFlops)相似的情况下,比文献[27]快了近 6.8 倍.

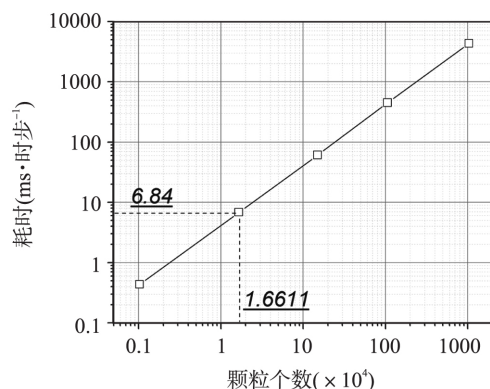


图 14 采用四个线程并行时,在不同颗粒数下,计算一个时步的耗时情况

Fig.14 The time costs of one time step with different number of particles using four threads

## 4 结 论

本文基于离散元方法,用结构体数组和链表数组构建了简明的离散元数据结构,用 C 语言开发一个易于扩展的高效的并行离散元程序 VOBX(virtual sandbox).

程序改进了基于网格法的邻居搜索算法,给出了安全距离的概念,加快了邻居搜索与接触判断的速度.同时,使得程序可以采用 OpenMP 实现无锁并行,并行测试结果表明:算法的并行加速比与模型规模无关,并且具有较好的扩展性;颗粒数量达到数万以上,加速比基本不变,体现了并行具有与问题规模无关的特点;采用四个线程并行计算时,并行效率约为 0.85,程序计算用时随颗粒数量增加呈现良好的线性增长趋势;基于面向过程语言的并行离散元程序可以大大提高计算速度.

实例采用固体晶格模型,模拟了一个岩石试样的单轴压缩,捕获了试样的拉张和剪切破坏过程.程序中的接触力学模型作为独立模块,也可灵活地嵌入其他不同的接触力学模型.

致 谢 感谢南京大学黄倩博士、周会群教授在程序开发过程中给予的建议与帮助,更多计算实例及程序手册见 <http://www.geovbox.com>.

## 参考文献

- [1] Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1979, 29(1): 47—65.
- [2] 刘凯欣, 高凌天. 离散元法研究的评述. *力学进展*, 2003, 33(4): 483—490. (Liu K X, Gao L T. A review on the discrete element method. *Advances in Mechanics*, 2003, 33(4): 483—490.)
- [3] Mishra B K. A review of computer simulation of tumbling mills by the discrete element method: Part I — contact mechanics. *International Journal of Mineral Processing*, 2003, 71(1—4): 73—93.
- [4] Yin H W, Zhang J, Meng L S, *et al.* Discrete element modeling of the faulting in the sedimentary cover above an active salt diapir. *Journal of Structural Geology*, 2009, 31(9): 989—995.
- [5] 蒋明镜, 奚邦禄, 申志福等. 月壤水平开挖推剪阻力影响因素离散元数值分析. *岩土力学*, 2016, 37(1): 229—236. (Jiang M J, Xi B L, Shen Z F, *et al.* Discrete element numerical analysis of factors affecting horizontal pushing resistance in lunar ground excavation. *Rock and Soil Mechanics*, 2016, 37(1): 229—236.)
- [6] Liu C, Pollard D D, Gu K, *et al.* Mechanism of formation of wiggly compaction bands in porous sandstone; 2. Numerical simulation using discrete element method. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2015, 120(12): 8153—8168.
- [7] Liu C, Xu Q, Shi B, *et al.* Mechanical properties and energy conversion of 3D close-packed lattice model for brittle rocks. *Computers & Geosciences*, 2017, 103: 12—20.
- [8] 焦红光, 刘鹏, 马 娇等. 筛分作业离散元模拟程序的开发及应用. *河南理工大学学报(自然科学版)*, 2008, 27(6): 711—715. (Jiao H G, Liu P, Ma J, *et al.* Development and application of screen simulation program by using particle discrete element method. *Journal of Henan Polytechnic University(Natural Science)*, 2008, 27(6): 711—715.)
- [9] 王 涛, 盛 谦, 熊 将. 基于颗粒流方法自然崩落法数值模拟研究. *岩石力学与工程学报*, 2007, 26(S2): 4202—4207. (Wang T, Shen Q, Xiong J. Research on numerical simulation of natural caving method based on particle flow method.



- Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2007, 26(S2): 4202–4207.)
- [10] 张洁, 尹宏伟, 徐士进. 用离散元方法讨论岩石强度对主动底辟盐构造断层分布模式的影响. 南京大学学报(自然科学), 2008, 44(6): 642–652. (Zhang J, Yin H W, Xu S J. Influence of rock strength on fault patterns above active salt domes: Insights from 2D discrete element simulations. Journal of Nanjing University(Natural Sciences), 2008, 44(6): 642–652.)
- [11] Hardy S, McClay K, Muñoz J A. Deformation and fault activity in space and time in high-resolution numerical models of doubly vergent thrust wedges. Marine and Petroleum Geology, 2009, 26(2): 232–248.
- [12] 张洁, 尹宏伟, 孟令森等. 主动底辟盐构造的二维离散元模拟. 地球物理学进展, 2008, 23(6): 1924–1930. (Zhang J, Yin H W, Meng L S, *et al.* Simulation of active salt domes using 2D discrete element method. Progress in Geophysics, 2008, 23(6): 1924–1930.)
- [13] 孟令森, 尹宏伟, 张洁等. 岩石强度和应变速率对水平挤压变形影响的离散元模拟. 岩石学报, 2007, 23(11): 2918–2926. (Meng L S, Yin H W, Zhang J, *et al.* Influence of rock strength and strain rate on horizontally compressive deformation: Insights from discrete element modeling. Acta Petrologica Sinica, 2007, 23(11): 2918–2926.)
- [14] Morgan J K. Effects of cohesion on the structural and mechanical evolution of fold and thrust belts and contractional wedges: Discrete element simulations. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2015, 120(5): 3870–3896.
- [15] Cundall P A. Computer simulations of dense sphere assemblies. Studies in Applied Mechanics, 1988, 20: 113–123.
- [16] 王泳嘉, 刘连峰. 三维离散单元法软件系统 TRUDEC 的研制. 岩石力学与工程学报, 1996, 15(3): 201–210. (Wang Y J, Liu L F. Formulation of a three-dimensional discrete element model-trudec system. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 1996, 15(3): 201–210.)
- [17] 王泳嘉, 宋文洲, 赵艳娟. 离散单元法软件系统 2D-Block 的现代化特点. 岩石力学与工程学报, 2000, 19(S1): 1057–1060. (Wang Y J, Song W Z, Zhao Y J. Modern features of the Dem software system-2D-BLOCK. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2000, 19(S1): 1057–1060.)
- [18] Kozicki J, Donzé F V. A new open-source software developed for numerical simulations using discrete modeling methods. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2008, 197(49–50): 4429–4443.
- [19] 常新正. 基于 GPU 的颗粒离散元计算方法研究. 硕士学位论文. 大连: 大连理工大学, 2013. (Chang X Z. Research of granular discrete element's calculation method based on GPU. Master Dissertation. Dalian: Dalian University of Technology, 2013.)
- [20] 刘春, 施斌, 顾凯等. 岩土体大型三维离散元模拟系统的研发与应用. 工程地质学报, 2014, 22(S1): 551–557. (Liu C, Shi B, Gu K, *et al.* Development and application of large-scale discrete element simulation system for rock and soil. Journal of Engineering Geology, 2014, 22(S1): 551–557.)
- [21] Zhao G F. High Performance computing and the discrete element model: Opportunity and challenge. Oxford: Elsevier, 2015.
- [22] NVIDIA. CUDA C programming guide(version 7.5). 2015.
- [23] Šmilauer V, Catalano E, Chareyre B, *et al.* Yade Documentation. The 2<sup>nd</sup> Edition. The Yade Project, 2015, 145.
- [24] Kloss C, Goniva C. LIGGGHTS-open source discrete element simulations of granular materials based on Lammmps. Supplemental Proceedings: Materials Fabrication, Properties, Characterization, and Modeling. doi: 10.1002/9781118062142.ch94, 2011.
- [25] Weatherley D, Hancock W, Boros V, *et al.* Esys-particle tutorial and user's guide version 2.3. Abe Institute for Geothermal Resource Management, 2014.
- [26] Balevičius R, Dziugys A, Kačianauskas R, *et al.* Investigation of performance of programming approaches and languages used for numerical

- simulation of granular material by the discrete element method, *Computer Physics Communications*, 2006, 175(6): 404–415.
- [27] Liu C, Pollard D D, Shi B. Analytical solutions and numerical tests of elastic and failure behaviors of close-packed lattice for brittle rocks and crystals. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2013, 118(1): 71–82.
- [28] 王泳嘉, 邢纪波. 离散单元法及其在岩土力学中的应用. 沈阳: 东北工学院出版社, 1991, 273. (Wang Y J, Xing J B. Discrete element method and its application in rock and soil mechanics. Shenyang: Northeast Institute of Technology Press, 1991, 273.)
- [29] 魏 群. 散体单元法的基本原理数值方法及程序. 北京: 科学出版社, 1991, 321. (Wei Q. The basic principle, numerical method and program of distinct element method. Beijing: Science Press, 1991, 321.)
- [30] 焦玉勇, 葛修润, 谷先荣. 三维离散元法中的数据结构. 岩土力学, 1998, 19(2): 74–79. (Jiao Y Y, Ge X R, Gu X R. Data structure in three dimensional discrete element method. *Rock and Soil Mechanics*, 1998, 19(2): 74–79.)
- [31] Cundall P A. Formulation of a three-dimensional distinct element model — Part I. A scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 1988, 25(3): 107–116.
- [32] 万 柯. 颗粒材料离散元—有限元多尺度耦合分析的连接尺度方法. 博士学位论文. 大连: 大连理工大学, 2012. (Wan K. Bridging scale method coupling multiscale DEM-FEM analysis for granular materials. Ph D Dissertation. Dalian: Dalian University of Technology, 2012.)
- [33] Asmar B N, Langston P A, Matchett A J, *et al.* Validation tests on a distinct element model of vibrating cohesive particle systems. *Computers & Chemical Engineering*, 2002, 26(6): 785–802.
- [34] Place D, Mora P. The lattice solid model to simulate the physics of rocks and earthquakes; Incorporation of friction. *Journal of Computational Physics*, 1999, 150(2): 332–372.
- [35] Liu C, Pollard D D, Deng S, *et al.* Mechanism of formation of wiggly compaction bands in porous sandstone; 1. Observations and conceptual model. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2015, 120(12): 8138–8152.
- [36] Mora P, Wang Y C, Alonso-Marroquin F. Lattice solid/Boltzmann microscopic model to simulate solid/fluid systems — A tool to study creation of fluid flow networks for viable deep geothermal energy. *Journal of Earth Science*, 2015, 26(1): 11–19.
- [37] 郑文刚, 刘凯欣. 离散元法工程计算软件的前后处理系统. *计算机工程与科学*, 2000, 22(6): 14–15, 23. (Zheng W G, Liu K X. A preprocessing and postprocessing system for an engineering computation software of discrete element methods. *Computer Engineering & Science*, 2000, 22(6): 14–15, 23.)
- [38] Borg I, Handin J. Experimental deformation of crystalline rocks. *Tectonophysics*, 1966, 3(4): 249–367.
- [39] Wong T F, Baud P, Klein E. Localized failure modes in a compactant porous rock. *Geophysical Research Letters*, 2001, 28(13): 2521–2524.
- [40] Hallbauer D K, Wagner H, Cook N G W. Some observations concerning the microscopic and mechanical behaviour of quartzite specimens in stiff, triaxial compression tests. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 1973, 10(6): 713–726.
- [41] OpenMP Architecture Review Board. OpenMP Application Program Interface, version 4. 0. OpenMP Architecture Review Board, 2013.
- [42] 严成增, 郑 宏, 孙冠华等. 基于 OpenMP 的二维有限元—离散元并行分析方法. 岩土力学, 2014, 35(9): 2717–2724. (Yan C Z, Zheng H, Sun G H, *et al.* Parallel analysis of two-dimensional finite-discrete element method based on OpenMP. *Rock and Soil Mechanics*, 2014, 35(9): 2717–2724.)
- [43] Ferrez J A, Liebling T M. Parallel DEM simulations of granular materials. In: Hertzberger B, Hoekstra A, Williams R. High-Performance Computing and Networking. Springer Berlin Heidelberg, 2001: 211–220.

(责任编辑 吴劲薇)