

等效裂隙岩体 THM 耦合并行有限元程序开发

张强林¹, 王媛², 曹国利¹

(1. 黄河勘测规划设计有限公司, 郑州 450003; 2. 河海大学岩土所, 南京 210098)

摘要:为了解决计算精度与计算时间之间的矛盾, 针对三场耦合问题, 根据区域分解策略, 采用预处理共轭梯度法进行方程组的并行求解, 利用 mpi + f77 编制主从式并行有限元计算程序, 并在河海大学高性能计算机群上进行调试及计算, 通过算例计算, 显示并行计算可大幅节省计算时间, 未来必会得到更广泛的应用。

关键词:并行有限元; THM 耦合; 区域分解; 预条件共轭梯度法

中图分类号:TV641; TB115

文献标识码:A

有限元数值计算是研究岩土工程问题的一种重要方法, 由于岩土工程领域研究对象所处的环境越来越复杂, 模型考虑越来越多, 再加上原本的岩土介质材料非线性, 各向异性等计算需要, 使得数值计算工作量越来越大, 而计算时间也越来越长, 如果采用简化模型或粗网格等手段来减少计算量则计算精度会受到影响。计算精度与计算时间之间的矛盾, 对于现有的有限元模拟来说是很大的挑战, 因此有限元并行计算模拟即成为人们解决此问题的首选方案, 如张友良等^[1]、茹忠亮等^[2]针对水布垭地下厂房的研究, 刘耀儒等^[3,4]针对二滩、锦屏等工程研究都是针对单场进行并行计算, Wang 等^[5]、江春波等^[6]也对渗流问题的并行计算进行了研究。

在考虑多场耦合情况下, 由于研究问题更复杂, 考虑因素更多, 多场耦合并行计算尚处于起步阶段, 耦合问题的并行计算并不多见, 而对于目前研究的热点之一——三场耦合(温度-渗流-应力耦合)问题更是如此, 纵观国内外针对三场问题的研究, 仅仅有 Yu-Shu Wu 等^[7-9]利用 TOUGH2 并行版, 对 Yucca 山中的三场试验进行了研究, 并取得了不错的效果, 但其他的研究成果目前尚未发现。由此本文即针对三场耦合问题, 根据区域分解策略, 开发三场耦合并行程序进行数值模拟, 并在河海大学高性能计算机群上利用算例验证了程序的可靠性。

1 有限元并行策略

有限元并行策略主要有 2 种形式, 一种是将大的研究域剖分为小区域, 降低形成的方程组维数, 即

区域分解策略, 另一种则是方程组解法并行策略。目前应用较多的则是 2 种策略方法相结合, 即先进行区域分解, 而后以各种预条件子的共轭梯度为解法求解。本文开发的三场耦合并行求解程序也是如此。

1.1 区域分解算法

区域分解算法^[10]的基本思想是通过将一个区域划分为若干个独立的、规模较小的子区域, 对一个或若干个子问题用一个处理机来处理, 使原问题的求解转化为各子区域上子问题的求解, 通过并行求解子问题而获得整个区域上大问题的解。区域分解算法通过对子问题的同步并行求解来缩小问题规模, 降低求解复杂度, 提高计算效率, 体现的是“分而治之”的思想。相对于传统算法, 区域分解算法的优越性体现在以下几个方面:

- (1) 它把大问题化为若干个小问题, 缩小了计算规模;
- (2) 子区域形状如果规则, 可以使用熟知的快速算法, 如快速 Fourier 交换、谱方法等;
- (3) 允许使用局部拟一致网格, 无需使用整体拟一致网格;
- (4) 允许不同子区域选用不同的数学模型, 以便更适合于工程物理实际情况;
- (5) 算法高度并行, 计算的主要步骤在各自子区域内独立进行。

1.2 方程组并行求解策略

方程组求解并行方面, 主要是直接求解与迭代求解 2 种, 而目前迭代法是并行求解的主流, 尤其是以共轭梯度法应用为最多。本文所采用的预条件共

扼梯度法^[10] (BICGSTAB) 主要思想是基于双边 Lanczos 算法, 收敛速度较快且平稳, 许多求解器中采用的也是它。BICGSTAB 算法主要计算流程如下:

(1) 给定系数矩阵 \mathbf{A} , 向量 $\vec{\mathbf{b}}$ 、初始值 \vec{x}_0 最大迭代次数 k_{\max} , 最大容许误差 ε_{\max} 以及预优矩阵 \mathbf{M} , 计算 $\vec{r}_0 = \vec{\mathbf{b}} - \vec{\mathbf{A}}x_0$, 并令 $k = 1, \vec{r}_0 = \vec{r}_0$;

(2) 如果 $k \leq k_{\max}$ 且 $\varepsilon \leq \varepsilon_{\max}$ 转(3), 否则终止, 输出 \vec{x}_k ;

(3) $\rho_{k-1} = \vec{r}_{k-1}^T \vec{r}_{k-1}$, 如果 $\rho_{k-1} = 0$ 或者 $\omega_{k-1} = 0$, 算法终止, 输出失败信息, 否则转(4);

(4) 如果 $k = 1$, 则 $\vec{p}_1 = \vec{r}_0$, 否则计算 $\beta_{k-1} = \frac{\rho_{k-1} \alpha_{k-1}}{\rho_{k-2} \alpha_{k-1}}, \vec{p}_k = \vec{r}_{k-1} + \beta_{k-1} (\vec{p}_{k-1} - \omega_{k-1} \vec{V}_{k-1})$;

(5) 求解方程 $\mathbf{M}\hat{\vec{p}} = \vec{p}$, 计算 $\vec{V}_k = \mathbf{A}\hat{\vec{p}}, \alpha_k = \frac{\rho_{k-1}}{\vec{r}_{k-1}^T \vec{V}_k}$, $\vec{s}_k = \vec{r}_{k-1} - \alpha_k \vec{V}_k$;

(6) $\varepsilon = \|\vec{s}_k\|$, 如果 $\varepsilon > \varepsilon_{\max}$, $\vec{x}_k = \vec{x}_{k-1} + \alpha_k \hat{\vec{p}}$ 否则停止输出 \vec{x}_k ;

(7) 求解 $\mathbf{M}\vec{s} = \vec{s}, \vec{t} = \mathbf{A}\vec{s}, \omega_k = \frac{\vec{t}^T \vec{s}}{\vec{t}^T \vec{t}}, \vec{x}_k = \vec{x}_{k-1} + \alpha_k \hat{\vec{p}} + \omega_k \vec{s}, \vec{r}_k = \vec{s} - \varepsilon_k \vec{t}, \varepsilon = \|\vec{r}_k\|$, 令 $k = k + 1$ 转(2)。

2 并行计算程序开发

2.1 编程语言

目前并行程序开发, 所采用的编程语言^[11] 主要有 MPI, OPENMP 等几种, 各有优略, 而实际应用中 MPI 较多。本并程序是利用消息传递并行编程环境 MPI, 结合 f77 实现了并行程序的开发。MPI 是目前国际上最流行、可移植性和可扩展性都很好的并行程序设计环境。它是一个库, 不是一门语言, 可以被 F77/C/F90/C++ 等编程语言调用, 和一般的函数调用过程没什么区别, 且可移植性好。

2.2 并行计算结构模式

编程模式采用主/从式 (Master/Slave) 结构, 即并行处理由一个主进程和若干从进程组成。主进程维持全局数据结构并负责任务划分, 包括接受任务, 启动计算, 各子进程计算任务划分及分发, 回收从进程的求解结果等。而每个从进程则负责完成子任务的计算, 包括局部初始化, 接收主进程发来的消息; 并行进行各自计算; 向主进程发回各自的计算结果。它们都是操作系统的进程, 在本程序中将主进程作为 0 号进程, 而其他编号则根据主进程的任务划分

确定。也就是说在整个程序中, 除了求解过程各从进程之间需要进行通信外, 其他的信息交换只发生在主进程和从进程之间。同时为了避免由于各进程并行读取磁盘文件所带来的复杂性, 程序中所有磁盘文件的读写操作均由主进程来完成, 而从进程不参与磁盘文件的读写。主从式计算的流程如图 1 所示。

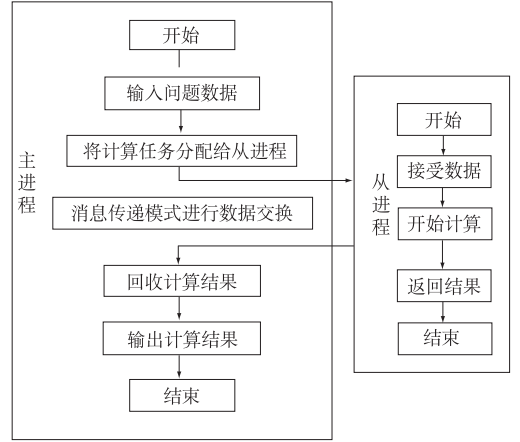


图 1 主从式模型并行计算流程图

Fig. 1 Parallel computation flow chart in M/s model

2.3 并行计算环境

目前的并行计算环境以造价低廉的集群系统为主, 许多高校、研究所等都组建了自己的集群系统进行高性能计算, 所谓集群即是指通过高性能网络将一组普通微机、工作站或服务器等紧密联系在一起形成的计算机系统, 每个节点都可以单独完成工作。本文所编制的计算程序即是在河海大学所组建的高性能 linux 计算机群上进行的调试及完成计算, 该集群系统节点机配置为 IBM 刀片机, 处理器 3.2 G, 内存 2 G。

3 THM 耦合算例验证

3.1 多孔饱和介质 THM 耦合方程

不考虑流体、固相密度随温度压力的变化, 均质各向同性饱和情况下岩体的 THM 耦合方程如下:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \alpha \frac{\partial p}{\partial x_i} - \beta \frac{\partial T}{\partial x_i} + f_i = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} = -\nabla \left(\frac{k}{\mu \gamma_f} \nabla p \right) \quad (2)$$

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q \quad (3)$$

式中: σ_{ij} 为应力张量分量 ($i, j = 1, 2, 3$); f_i 为岩体介质的体积力分量, 当只考虑重力时, 有 $f_i = (0, 0, -\rho g)^T$, 其中 ρ 为岩体密度, g 为重力加速度, 一般取 9.81 m/s^2 ; α 为 biot 耦合系数; β 为岩体骨架的热膨

胀系数; γ_f 为水的重度; k 为渗透系数; $\varepsilon_{ii} = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ 为体积变形; C 为比热; λ 为热传导系数; Q 为热源。

对于此方程解法,串行求解一般有全耦合解法及迭代解法 2 种,而在并行求解过程中,考虑到计算时间,主要是采用迭代解法进行计算。本文所开发的并行程序,先计算温度场,然后计算渗流应力场,并相互迭代进行计算,而所需的参数更新可以在迭代稳定之后进行,每个时间步的迭代过程中假定参数不变。

3.2 算例验证

为对并行 THM 耦合计算程序的验证,构建如下算例模拟中间填埋热源、底部存在热流、上表面受均布力作用的情况,并验证并行计算效率。取研究域为 $110\text{ m} \times 50\text{ m} \times 90\text{ m}$,域中存在两组正交裂隙,中间热源为 $10\text{ m} \times 40\text{ m} \times 10\text{ m}$ 。本算例不考虑流体、固体密度随温度和压力而变的情况来进行计算,并假定代表单元体存在,根据文献[12]所提出的等效方法,将裂隙影响等效利用饱和多孔介质模型进行计算处理,即裂隙的影响可以根据应变等效、渗流量等效及热流量等效将裂隙岩体等效为饱和多孔介质进行计算。

以六面体划分单元,共划分 14 560 个单元,16 443 个节点进行计算,自由度近 8 万个,研究域及网格剖分如图 2 所示。计算时间 0 ~ 1 000 d,计算 50 步。边界条件与初始条件:上表面受均布力 100.0 kN/m^2 作用,侧面法向约束,底部固定;上表面为排水边界,其他无水流量交换;上表面定温 10°C ,下底面有热流 10.0 W/m^2 ,中间研究区域热源 20.0 W/m^3 。假定初始孔压为 0,初温热源部分为 20°C ,其他为 10°C 。

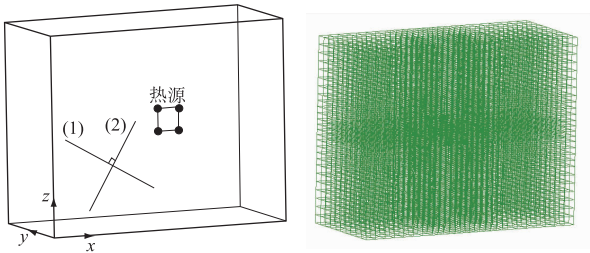


图 2 THM 耦合研究域及网格剖分示意图
Fig. 2 THM coupling research model and FEM grids

算例所用的部分材料参数如下:岩体弹模 $E = 60\text{ GPa}$ 、泊松比 $\nu = 0.23$ 、热传导系数 $\lambda_r = 3.0\text{ W/(m} \cdot ^\circ\text{C)}$ 、热容 $\rho C = 2.25 \times 10^3\text{ kJ/(m}^3 \cdot ^\circ\text{C)}$ 、线性热膨胀系数 $\beta_r = 3.0 \times 10^{-7}\text{ (1/}^\circ\text{C)}$ 、Biot 系数 $\alpha = 1.0$ 、流体的热传导系数为 $\lambda_f = 0.7\text{ W/(m} \cdot ^\circ\text{C)}$;裂

隙法向刚度、切向刚度分别为 100 GPa 、 10 GPa ,第一组裂隙隙宽 $30 \times 10^{-6}\text{ m}$,间距 40 m ,法向与 z 轴夹角 30° ,第二组隙宽 $20 \times 10^{-6}\text{ m}$,间距 25 m ,法向与 z 轴夹角 60° ,而裂隙面则都垂直于 xz 面。

针对本文的计算模型,先在本机上进行串行计算,然后将前处理模型及并行计算程序通过网页形式提交到学校 IBM 刀片集群系统上,分别采用 4,6,8,10 个节点机进行计算,具体的串并行计算时间如图 3 示,计算加速比及计算效率比较如图 4 所示。

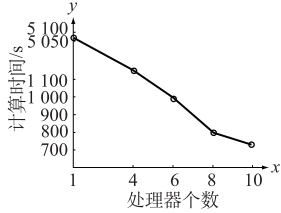


图 3 THM 耦合并行计算时间比较
Fig. 3 The comparison of computing time by different CPUs

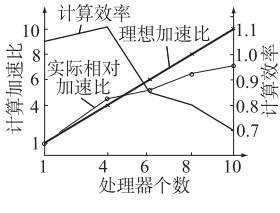


图 4 THM 耦合并行计算加速比及计算效率比较
Fig. 4 Comparison of the speedup ratio and computing efficiency by different CPUs

从图 3 和图 4 可以分析对本并程序的计算性能:

(1) 计算时间上,节点数越多所用的计算时间越少,如单机计算时间需 5 069 s,并行 4 节点为 1 146 s,6 节点为 997 s,而 10 节点则减少为 724 s,另外每增加 2 个计算节点时,计算时间减小量越来越小,正如图 3 中的斜率所示;

(2) 加速比上,节点数越多加速比越大,如图 4 中所示,4 节点、6 节点、10 节点计算的加速比分别为 4.46、5.09 与 7.01,相应斜率也在降低;

(3) 计算效率上,如图 4 所反映,随节点增多计算效率越来越低,如 4 节点、6 节点及 10 节点的计算效率分别为 110.8%,84.9% 和 70.1%,参与计算的节点数越多,计算效率越低。一般情况下并行计算的加速效率都不会达到 100%,对于 4 节点超过 100% 的情况,主要是由于个人 PC 与集群系统节点机的配置不同所造成的,计算个人 PC 配置为赛扬 2.4 d,768 M 内存,而集群节点机则为 IBM 刀片机,处理器 3.2 G,内存 2 G,配置相差较大也引起了较大的误差。

从加速比及计算效率上可以看出,虽然采用并行计算可以大大减少计算时间,但也并不是采用的计算节点越多越好,根据自己的计算规模采用合适的计算节点参与计算即可,以避免计算资源浪费,针对本文算例根据计算效率变化可知,采用 4 节点参

与计算即可满足计算需求。

参考文献：

[1] 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.

[2] 茹忠亮,冯夏庭,张友良,等. 地下工程锚固岩体有限元分析的并行计算[J]. 岩石力学与工程学报,2005,24 (1):13 – 17.

[3] 刘耀儒,杨 强,黄岩松,等. 基于双重孔隙介质模型的渗流 – 应力耦合并行数值分析[J]. 岩石力学与工程学报,2007,26(4):705 – 711.

[4] 刘耀儒,周维垣,杨 强. 有限元并行 EBE 方法及应用[J]. 岩石力学与工程学报, 2005,24 (17):3023 – 3028.

[5] WANG K P, BRUCH J C. A SOR Iterative Algorithm for the Difference and the Finite Element methods That is Efficient and Parallelizable[J]. Advances in Engineering Software,1994,21(1):37 – 48.

[6] 江春波,安晓谥. 二维非恒定渗流的有限元并行计算[J]. 水科学进展,2004,15(4):454 – 458.

[7] WU Yu-shu, KARSTEN P. Numerical Simulation of Non – isothermal Multiphase Tracer Transport in Heterogeneous Fractured Porous Media[J]. Advances in Water Resources, 2000,23(7):699 – 723.

[8] WU Yu-shu, ZHANG Keni, CHRIS D, *et al.* An Efficient Parallel-computing Method for Modeling Nonisothermal Multiphase Flow and Multicomponent Transport in Porous and Fractured Media[J]. Advances in Water Resources, 2002,25(3):243 – 261.

[9] ZHANG Ke-ni, WU Yu-shu, BODVARSSON G S. Parallel Computing Simulation of Fluid Flow in the Unsaturated Zone of Yucca Mountain, Nevada[J]. Journal of Contaminant Hydrology,2003,62 – 63:381 – 399.

[10] 胡家赣. 线性代数方程组的迭代解法[M]. 北京:科学出版社,1997.

[11] 都志辉. 高性能计算并行编程技术[M]. 北京:清华大学出版社,2001.

[12] 张强林. 裂隙岩体温度渗流应力耦合数学模型研究[D]. 南京:河海大学,2008.

(编辑:聂 文)

Development of THM Coupling Parallel Computing Program in Equivalent Rock Masses

ZHANG Qiang-lin¹, WANG Yuan², CAO Guo-li¹

(1. Yellow River Engineering Consulting Co. Ltd. ; Zhengzhou 450003, China;
2. Geotechnical Research Institute, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: In order to solve the contradiction between the computing precision and computing time, according to the THM(themo-hydro-mechanical) coupling mechanism and the domain decomposed method, the paper selects preconditioning conjugate gradient to solve paralleled solution of system equation, in which using mpi + 177 establishes a master slave model and the calculation of the governing equations is performed on the Hohai University high function computer, and this question is verified by one example . The conclusion showed that this method can obviously save the computing time and will be applied extensively in the future .

Key words: parallel finite element; THM(themo-hydro-mechanical); domain decomposed method; preconditioning conjugate gradient

(上接第 57 页)

How to Find Empirical Formulas of Usual Relation Curves in Mechanics

MAO Ning

(Nanjing Hydraulic Research Institute, Nanjing 210024, China)

Abstract: In this paper, the simple method to find empirical formula using the experimented and researched data to be plotted on the coordinate paper of related function not to form a straight line is introduced. As examples, the relation curves plotted on log-paper, semi-log paper and ordinary coordinate paper in hydraulics and soil mechanics were selected. With these three typical curves the procedure of simple method to find empirical formula is stated . Consequently the formulas of drag coefficient for an immersed sphere body moving through water, settling velocity for silt and sand , settlement consolidation degree for soft foundation and storativity are obtained.

Key words: empirical formula; relativity curve; drag coefficient; degree of consolidation; storativity