

岩石流/热固耦合下损伤演化 并行分析系统及初步应用

李根^{*1,2}, 李连崇¹, 唐春安¹, 唐世斌¹

(1. 大连理工大学 土木工程学院 岩石破裂与失稳研究所, 大连 116024;
2. 长江科学院 水利部岩土力学与工程重点实验室, 武汉 430010)

摘要:实现了可用于计算岩体在渗流场(H)、温度场(T)及应力场(M)等多场耦合作用下损伤(D)演化并行分析系统。详细论述了整体实现方案、线性方程组求解器、并行通信优化策略及针对不同场问题的高效处理方法。对测试模型 HM 和 TM 计算表明,在启动合理数目处理器时程序具有最佳性能,近线性加速比,效率在 82% 以上,默认精度下一次耦合计算千万自由度模型稳定在 200 s。对三维水压致裂过程和温度载荷引起的材料表面裂纹现象进行了数值计算,结果很好地反映客观规律,展示出该系统的广阔应用前景。

关键词: HM/TM-D 耦合; 并行计算; 区域分解; 岩石破裂

中图分类号: O346.5 **文献标志码:** A

1 引言

岩石作为固体工程材料,其在多物理场作用下的损伤演化直至破坏的过程是岩石力学与工程领域持续关注研究的重点;作为研究手段,数值计算一直是最常用的一种^[1-3]。

自上世纪 90 年代以来,计算机模拟正在成为科学和工程许多领域内解决问题的主流方法,和理论分析与实验研究一起成为科学研究的三大支柱之一。基于模拟的工程与科学已经成为国家的核心竞争力^[4]。目前,我国高性能计算机发展取得巨大成就,已研制出峰值性能为每秒 2.57 千万亿次的“天河一号”超级计算机,目前世界排名位居 Top 1,我国成为继美国之后世界上第二个能够研制千万亿次超级计算机的国家^[5]。但应用软件发展水平却与其极不相称;另外,并行计算主要应用于航空、航天、气象预报以及结构分析等方面。应用于岩土工程领域的高性能并行计算软件的开发及发展相对滞后,可供三维岩体在多场耦合作用下破裂过程分析的程序鲜有报道。

本文以 RFPA3D 主程序为基本框架,集群 Linux

操作系统为平台开发了耦合计算模块,组成岩石多场耦合破裂过程并行分析系统,实现了对三维岩体在流固与热固耦合过程中的变形及损伤演化直至破坏全过程的并行计算,并达到千万自由度以上的解题规模。同时,本文力图将对具有相似数学模型的一类问题的有限元并行计算处理中所积累下来的成功方法、经验及心得分享给致力于岩土工程数值并行计算领域的同仁,重点阐述应用程序设计思想以及在提高代码共享率、线性方程组求解及提升执行效率减少时空开销等方面所做的一系列工作,最后通过三个算例加以测评和初步应用。

2 并行有限元计算策略

岩石破裂过程分析系统 RFPA3D 主程序由前处理、有限元计算分析、破坏分析和后处理四部分组成。有限元计算分析是整个分析过程中最为耗时的,通过此模块并行化,能够有效提高系统计算规模和提升计算速度,其实施策略是整个程序算法的核心。

2.1 基本思想

整个计算过程可以概括分为以下三部分。

(1) 采用基于粗力度并行的区域分解算法将总体求解区域分解为若干子求解分区。

(2) 对每个子区域独立进行有限元分析,包括生成单刚、组装总刚、形成载荷向量、求解和导出结果。

收稿日期: 2010-12-02; 修改稿收到日期: 2011-10-23.

基金项目: 国家自然科学基金(50909013, 50820125405, 50804006); 国家重点基础研究发展计划(973)(2011CB710603)资助项目.

作者简介: 李根*(1982-), 男, 博士
(E-mail: badboy955@163.com).

(3) 将各个子区域计算结果收集汇总得到整体信息。

2.2 区域分解

采用基于图论的算法^[6], 首先将有限元网格结构转化为图结构, 然后采用多级图形分裂方法对图进行连续粗化, 对粗化后的图进行分割, 逐步还原图的规模, 并在还原过程中不断细化图形, 最终得到保证区域负载平衡的原图划分, 其过程如图 1 所示。

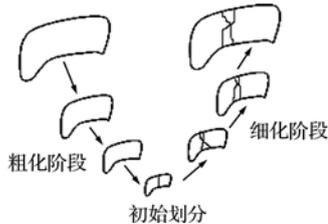


图 1 多级图形分裂算法
Fig. 1 Multilevel partitioning algorithms

2.3 线性方程组求解

有限元分析最终要归结为满足一定边界条件的线性方程组, 求解方法可以分为迭代法和直接法两类。

(1) 迭代法求解器

Krylov 子空间迭代是数值代数届前沿的代数方程求解方法, 是目前求解稀疏线性方程组最有效的方法之一。通过作者大量的数值试验表明 BiCGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Stabilized) 在结构和非结构网格以及模型破坏后期均表现出良好的收敛性和稳定性; 另外, 结合采用预条件技术可以加速迭代法的收敛和提高算法的稳定性, 预条件矩阵的构造见文献^[7], 本系统默认为无填充不完全分解预条件子 ILU(0)。

(2) 直接法求解器

直接法是求解线性方程组的另一类方法, 有较高的稳定性 (优于迭代法)。当迭代法不收敛时或在可接受的时空开销情况下可以选择直接法求解, 程序采用静态主元高斯消去法^[8]。

2.4 热与流分析中的异同处理

M、T 和 H 三场各物理量与边界条件对应关系见表 1。三场控制方程、基元损伤本构方程、耦合方式及系统计算流程见文献^[1, 9, 10]。

饱和渗流场与传热场总控制微分方程的形式相似, 差别在于第三类边界 (见表 1) 条件的处理, 在传热或热固耦合并行分析中遇到第三类边界需要进程通信确定各子域内所含第三类边界条件的单元及对应的节点。本文采用一次通信, 各自查找,

表 1 分析问题的相似性

Tab. 1 Analogies in analysis of field problems

问题类型	未知场	导出结果	第一类边界条件	第二类边界条件	第三类边界条件
应力分析	位移	应力	定位移	给定应力	—
传热分析	温度	热流密度	定温度	给定热流密度	对流换热
渗流分析	总水头	流速	定水头	给定流速	—

快速定位的办法, 即首先将所含第三类边界条件的单元号及对应的面号一次广播到各个进程, 各个进程查找各自域内带第三类边界条件的单元, 这其中利用了高效二分法查找算法, 可快速定位到相关节点。整个过程并行运算, 提高了并行度, 减少了进程空闲等待。若是采用由主进程将所有对应区域内的边界节点找出后再发送给各个进程则效率将很低。

在不含第三类边界条件的相关计算中, 分布式总刚的组装与载荷列向量的集成处理方法完全一致。高度并行无需通信, 程序走行共用一段代码, 有效减少代码冗余开销。同时, 这种泛型化处理对于具有多场耦合性质的一类问题也提供了一个很好的程序设计思路。

3 基于 MPI 的并行程序开发及工作流程

采用 MPI (Message Passing Interface) 消息传递并行编程环境, 提供了可供执行并行任务的库函数, 几乎所有的并行计算机厂商都提供对其支持^[11]。

3.1 软件环境与硬件平台

RFP3D 前后处理以图形方式进行人机交互过程, 其基于 Windows 操作平台。破坏分析模块采用 Windows 下的串程序。计算模块程序采用 Fortran 语言在 Linux 平台下开发, 程序源码级具有很好的可移植性适用于各类硬件平台和操作系统。

硬件平台采用大连理工大学高性能计算中心联想深腾 1800 集群系统, 双精度浮点运算理论峰值 4085 GFlops, 10 Gbps 48 端口 Infiniband 计算网络。每个计算节点配置 2 颗 Intel Xeon E5430 (四核, 主频 2.66GHz, 二级缓存 6 MB×2), 16GB 内存, 146G SAS 硬盘和 Red Hat Linux AS5 (kernel 2.6) 操作系统。

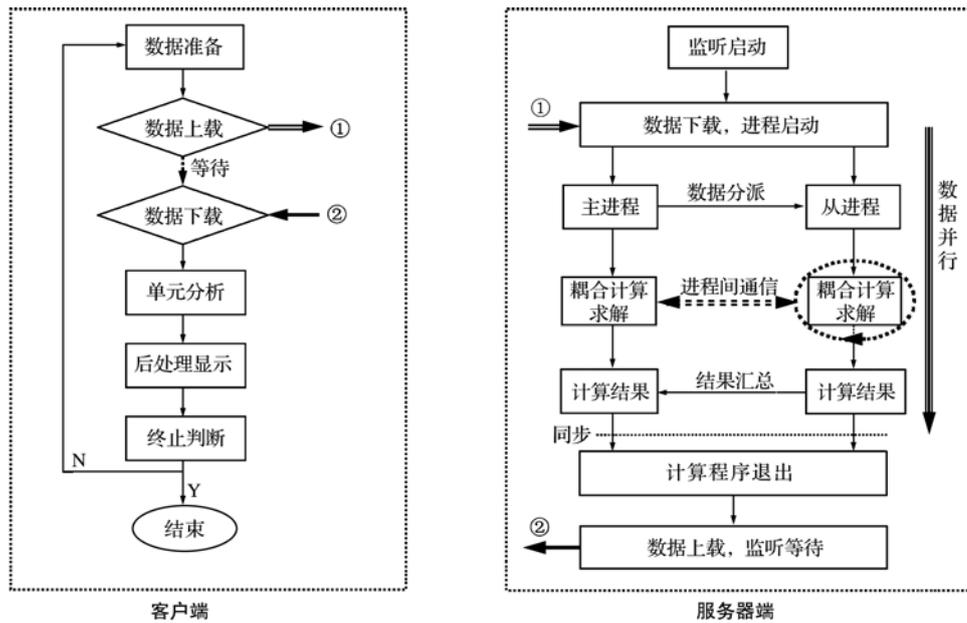


图2 系统分析计算流程图
Fig. 2 The flowchart of computaiona model

3.2 分析计算流程

分析系统采用服务器-客户端的工作模式,并行有限元求解器结构采用了 master/slave 工作模式,其流程如图 2 所示。

3.3 并行有限元计算过程中通信优化策略

并行计算的性能优化相对于串行而言更加复杂,其中最主要的是选择好的并行算法及通信模式。当算法确定之后,影响并行程序效率的主要因素是通信开销^[11],可以采用如下通信优化策略。

(1) 减少通信量,提高通信粒度。对全局的数据发送,如单元个数、节点个数及迭代精度等数据时尽可能合并起来一起一次传递,在收发不同类型数据时,定义适当的 MPI 数据类型来避免内存中的数据复制。

(2) 全局通信时尽量利用高效聚合通信算法。如对单元或节点所在分区标示数组等全局信息,可以采用广播的操作。

(3) 挖掘算法的并行度,减少 CPU 空闲等待,如程序对传热计算中第三类边界条件的处理等。

(4) 通信与计算的重叠。

(5) 通过引入重复计算来减少通信。

4 算例

4.1 并行计算程序性能评估模型

并行加速比和效率是衡量一个并行程序性能最基本的两个指标^[11]。程序评估测试计算的有限元模型如图 3 所示,模型尺寸为 $1 \times 1 \times 2$,单元网

格划分为 $50 \times 50 \times 100 = 250,000$ 。为了测试程序性能,分别进行 HM 与 TM 两种耦合情况下的弹性稳态一步求解,各情况下的模型均取为均质,模型力学参数采用系统默认值,求解器默认迭代法,精度 $\epsilon = 1.0e-5$,荷载及边界情况如下。

HM 耦合求解:上下表面水头差 100,四周水平向约束,底部竖向约束。

TM 耦合求解:上下表面温差 100,初始温度 20,四周对流边界,环境温度 0,四周水平向约束,底部竖向约束。

每计算步开始至计算结束(不包括前后处理及数据传输时间)的墙上时间为一次计算时间。以计算程序启动两个 CUP 时作为基准(这里每个 CUP 仅代表运行一个进程,即一个 CUP 只对应一个进程),并定义此时加速度比为 2。图 4 给出了一次计算启动 CPU 数与墙上时间的关系曲线,图 5 为一次计算启动 CPU 数与加速比的关系,图 6 为启动 CPU 数与计算效率的关系。

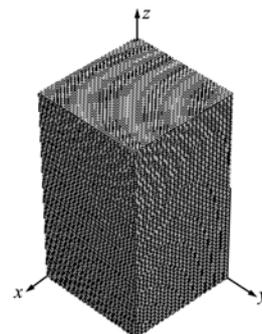


图3 计算网格图
Fig. 3 The model of finite elements mesh

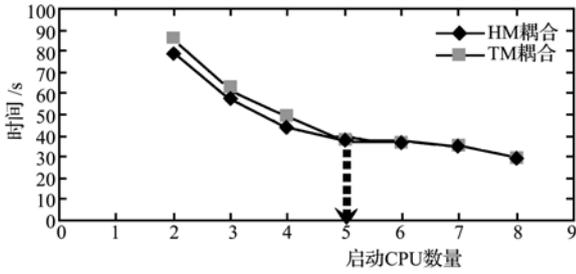


图4 一次计算时间
Fig. 4 The cost time for one step

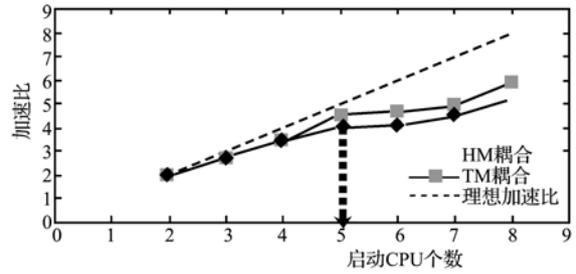


图5 并行计算加速比
Fig. 5 Speedup of parallel computation

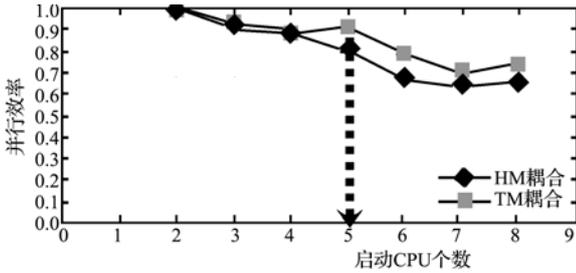


图6 并行计算效率
Fig. 6 Efficiency of parallel computation

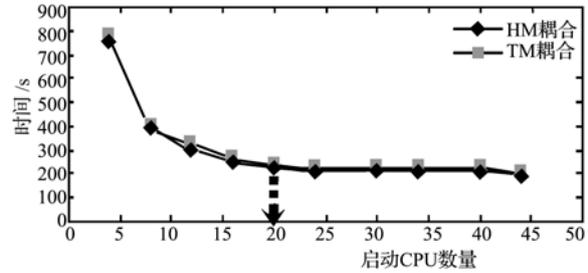


图7 单次计算时间(300万单元)
Fig. 7 The cost time for one step (three million elements)

从计算时间和并行加速比曲线可以看到,随着启动进程数量的增加单步计算时间明显缩短,加速比有提高的趋势;但并行计算效率随之下降,这是因为增加处理器的数量使得单步计算时间缩短,但各个进程在求解过程中产生的同步开销和通信开销的增加降低了求解效率。该算例同时也说明,采用并行计算时要同步考虑求解效率及启动进程数量,使之产生最优结果。从HM计算结果可知,启动5个处理器来计算时会取得接近线性的加速比和82%以上的计算效率,达到最佳效果,超过5个之后无论是计算时间的减幅还是加速比的增幅均趋缓,并行效率降低。

TM计算由于第三类边界条件的处理,用时略高于HM计算,启动大于5个处理器以后二者用时基本相当,表明进程间通信开销比例上升;说明了本文提出的处理第三类边界条件的方法是高效的,所占据的通信比例并不大。启动5个处理器之前的加速比更接近线性化,并且计算效率在90%左右,进一步说明了处理的高效性。

在其他条件不变的情况下,将本模型剖分成300万单元后(千万自由度),启动CPU数量及一次计算时间关系曲线如图7所示。可以看出,本程序在处理千万自由度规模的耦合计算具有较高的求解速率,启动处理器超过20个之后单步求解时间便稳定在200s左右,但当启动超过20个处理器之后由于通信开销明显增加,几乎屏蔽了有限元求解加速了的时间,因此从整个计算求解速率来看提升不多。

如图4和图7所示,存在一个“用时稳定期”,在此阶段内虽然增加了处理器(即计算进程)数量,但是由于同步及通信开销的增加却不会明显降低墙上求解用时,并且模型越大的情况下这个稳定期可能越“持久”。但是加速比及效率却是下降的。当然,这还与具体的分析问题类型以及其他具体条件有关,这些都是在计算时须要考虑的,力求获得事半功倍的效果。

4.2 HM耦合算例

水压致裂是岩体渗流-应力耦合研究的一个重要方向,在石油、岩盐和煤层开采及地应力测量等领域有着广泛应用^[12]。

本算例应用该分析系统计算了当最大主应力方向为水平情况下,裸眼水压致裂过程中裂纹的萌生、发展和贯通,最后导致失稳的过程。如图8所示,模型单元数为120万六面体,计算分区12个,计算结果如图9所示。

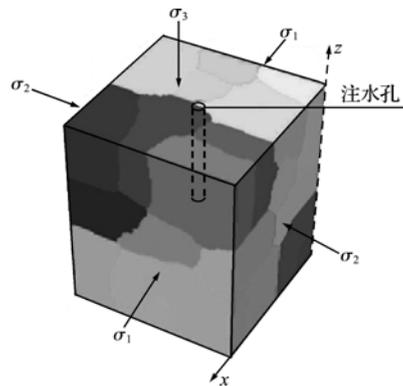


图8 并行计算模型分区图
Fig. 8 Parallel computational areas

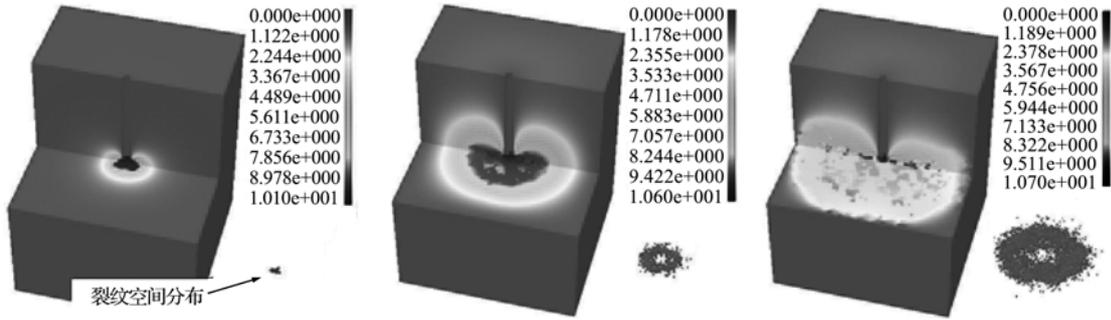


图9 水压致裂过程中的水压力截面图及裂纹空间分布
Fig. 9 Section of pore pressure and crack during hydraulic fracturing process

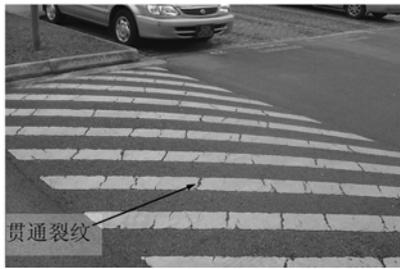


图10 马路上斑马线裂纹
Fig. 10 Crack in zebra crossing of road

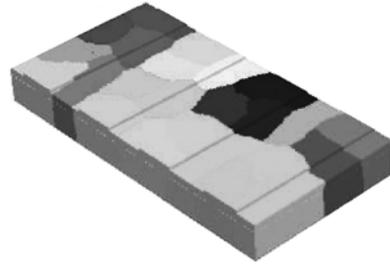


图11 并行计算模型分区图
Fig. 11 Parallel computational areas

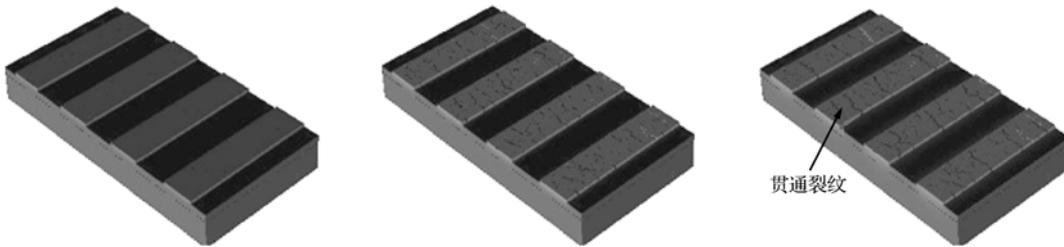


图12 斑马线上裂纹演化过程图
Fig. 12 Development process of crack in zebra crossing

从模拟结果可知,应力状态对裂纹扩展及分布方向的影响是,破裂面垂直于最小主应力(在最小主应力面内),与最大主应力方向一致。

4.3 TM耦合算例

该算例为城市较为普遍的现象,马路上人行斑马线上的裂纹形成,如图10所示。由于斑马线油漆材料与沥青热力学材料属性的不匹配导致马路油漆带的表面裂纹现象,这里仅考虑温度对形成裂纹的影响(假设材料在一定条件下符合RFPA内部的本构模型),在温差的作用下导致裂纹形成。模型共计有六面体单元1,536,000个,计算分成24个区域如图11所示。计算结果见图12。从计算结果可知,贯通性裂纹平行分布于斑马线宽度方向,与长度方向垂直,并且呈现出类似于等间距分布的形态,这与实际观察(图10)到的现象相吻合。

5 结 语

目前,国内专用于岩石在多场耦合作用下损伤演化直至破坏的并行计算分析工具较少。本文详

细阐述了程序实现的原理,并行策略及方案等,并计算了如下三个算例。

(1) 基于粗粒度的区域分解法使得有限元分析过程高度并行。线性方程组求解器包括:并行BICGSTAB预处理子空间迭代法和主元三角分解直接法。根据传热场与饱和渗流场控制微分方程形式相似性,提出了一整套高效的处理方案。

(2) 基于消息传递的并行开发环境,根据有限元计算特点,提出了具体通信优化策略。

(3) 对测试模型HM和TM计算结果表明:在启动合理进程情况下计算可达最佳效果,加速比接近线性,且效率较高,默认精度下千万自由度耦合计算一步稳定在200s左右。对水压致裂和热开裂算例计算表明:结果反映客观规律,揭示问题本质,是相关领域研究的有力工具,具有广阔的应用前景。

参考文献(References):

[1] 李连崇,唐春安,王大国. 岩石破裂过程THM-D耦合数值模型研究[J]. 计算力学学报, 2008, 25(6):

- 764-769. (LI Lian-chong, Tang Chun-an, WANG Da-guo, et al. Investigation on the damage coupled THM-D model for rock failure process and associated application[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2008, **25**(6):764-769. (in Chinese))
- [2] Tsang C F, Stephansson O, Hudson J A. A discussion of thermo-hydro-mechanical (THM) processes associated with nuclear waste repositories[J]. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 2000, **37**:397-402.
- [3] J L Yow, J R Hunt, Coupled processes in rock mass performance with emphasis on nuclear waste isolation [J]. *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 2002, **39**:1-7.
- [4] Hunan Institute of Mechanics Site [OB]. <http://www.hnlxue.com/POPArticle/9/45.html>.
- [5] <http://video.sina.com.cn/p/news/c/v/>[OB]. 2010-11-17/132361185735.html.
- [6] G Karypis, V Kumar. Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs[J]. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 1998, **48**(1):96-129.
- [7] O Axelsson, P S Vassilevski. A black box generalized conjugate gradient solver with inner iterations and variable-step preconditioning[J]. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 1991, **12**:625-644.
- [8] Laura Grigori, James W Demmel, Xiaoye S Li. Parallel symbolic factorization for sparse LU with static pivoting[J]. *SIAM J. Scientific Computing*, 2007, **29**(3):1289-1314.
- [9] 李根, 唐春安, 李连崇, 等. 水压致裂过程的三维数值模拟研究[J]. *岩土工程学报*, 2010, **12**(32):1875-1881. (LI Gen, TANG Chun-an, LI Lian-chong, et al. Numerical simulation and research of 3D hydraulic fracturing process[J]. *Journal of Geotechnical Engineering*, 2010, **12**(32):1875-1881. (in Chinese)).
- [10] 唐世斌, 唐春安, 朱万成, 等. 热应力作用下的岩石破裂过程分析[J]. *岩石力学与工程学报*, 2006, **25**(10):2071-2078. (TANG Shi-bin, TANG Chun-an, ZHU Wan-cheng, et al. Numerical investigation on rock failure process induced by thermal stress[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2006, **25**(10):2071-2078. (in Chinese))
- [11] 张林波, 迟学斌, 莫则尧, 等. 并行计算导论[M]. 北京:清华大学出版社, 2006. (ZHANG Lin-bo, CHI Xue-bin, MO Ze-rao, et al. *Introduction to Parallel Computing*[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2006. (in Chinese))
- [12] 杨天鸿, 唐春安, 芮勇勤, 等. 不同围压作用下非均匀岩石水压致裂过程的数值模拟[J]. *计算力学学报*, 2004, **21**(4):419-424. (YANG Tian-hong, TANG Chun-an, RUI Yong-qin, et al. Numerical simulation of hydraulic fracturing process in heterogeneous rocks under different confining pressures[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2004, **21**(4):419-424. (in Chinese))

Parallel analysis system for computing damage evolution of rocks subjected to H/TM coupling processes and its primary application

LI Gen^{*1,2}, LI Lian-chong¹, TANG Chun-an¹, TANG Shi-bin¹

(1. Institute for Rock Instability and Seismicity Research, School of Civil Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China;

2. Key Laboratory of Geotechnical Mechanics and Engineering of Ministry of Water Resources, Yangtze River Scientific Research Institute, Wuhan 430010, China)

Abstract: The 3D parallel analysis system which is used to analyze damage (D) evolution of rocks subjected to the hydraulic (H), temperature (T) and mechanical (M) coupling processes has been developed. Some details about its implementation, linear equations solver, methodologies of parallel communication optimization, and efficient approaches for dealing with different physical fields are discussed. The results of the test models for the HM and TM computing indicate that it is the best performance, nearly linear speedup, and more than 82% efficiency to start a reasonable number of processors in the system, moreover, the one step time-consuming for computing the coupled model of 10 million DOFs with default precision is about 200 s. The numerical simulation results of 3D hydraulic fracturing process and surface cracks of material caused by temperature load have been well reflected the objective laws. The broad application prospects of this system have been shown.

Key words: HM/TM-D coupling; parallel computation; domain decomposition; rock failure