

DOI: 10.3876/j.issn.1000-1980.2010.03.008

应用改进算法的对称逐步超松弛预处理共轭梯度法 进行大体积混凝土仿真计算

韩 林, 张子明, 倪志强

(河海大学力学与材料学院, 江苏 南京 210098)

摘要:针对大体积混凝土有限元仿真计算中存在计算规模大、计算时间长的问题,为克服使用直接解法导致占用内存多、耗时长和精度得不到保证的缺点,充分考虑大体积混凝土结构有限元仿真分析中温度场和位移场求解的特点,用改进算法的对称逐步超松弛预处理共轭梯度法取代直接解法,进行温度场和位移场计算中大型稀疏对称正定线性方程组的求解.采用算例计算对比了使用 2 种方法计算的内存占用、耗时和计算精度等情况,结果表明,该方法可完全消除整体劲度矩阵带宽对存储空间需求的影响,减少内存占用和计算耗时,且使得计算精度可灵活控制.

关键词:大体积混凝土 对称逐步超松弛 预处理共轭梯度法 有限元方法 仿真计算

中图分类号: TU311.4 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-1980(2010)03-0278-06

当前,采用有限元方法进行仿真计算是大体积混凝土结构温控分析方法的主流.大体积混凝土结构的施工期和运行期历时较长,在仿真计算中数据存储量及计算量都很大,计算耗时很长.为解决此问题,可以从两方面考虑:一是从改进计算模型入手,即在理论指导下,减少网格和计算时段的划分数,在一定程度上减少计算规模,从而减少计算时间.如朱伯芳等提出的并层算法^[1]、弹性徐变体分区异步长算法^[2]等.但无论计算模型如何改进,对于大体积混凝土结构仿真而言,计算规模依然很大.二是通过改进计算方法,针对计算过程中的主要耗时环节,使用高效率算法,在不减少问题规模并保证计算精度的情况下,减少计算时间.本文即通过改进计算方法来提高计算效率.

有限元计算可归结为大型稀疏对称正定线性方程组的求解,而此求解过程在整个计算中最为耗时.通常使用的基于系数矩阵分解的直接解法(以下简称直接法)虽然在理论上可精确解决任何非奇异问题,但由于该算法计算中操作元素过多,导致计算量和内存需求较大,在大型问题求解时多要进行分块求解.再者,在该算法的计算机实现时,大量舍入误差的积累也使得计算精度得不到保证.因此,可以采用其他算法代替直接法,以减少计算时间,提高计算精度.针对有限元方法导出的整体劲度矩阵的特点,采用某种预处理形式的共轭梯度法(conjugate gradient method, CGM)^[3]进行迭代求解,既可充分利用系数矩阵的稀疏性,减少内存占用,又可快速收敛至期望精度的解. Jacobi 预处理共轭梯度法和多搜索方向预处理共轭梯度法已在混凝土温控仿真中得到应用^[4].应用对称逐步超松弛预处理共轭梯度法(symmetric successive over relaxation-preconditioned conjugate gradient method, SSOR-PCGM)进行有限元计算也证实是可行的^[5-7].本文给出了 SSOR-PCGM 的改进算法,并将其应用于大体积混凝土结构的仿真计算过程中.该方法可以较大程度地提高大体积混凝土结构有限元仿真计算效率,且计算精度控制简便灵活.

1 对 SSOR-PCGM 算法的改进

预处理共轭梯度法(preconditioned conjugate gradient method, PCGM)可以充分利用系数矩阵的稀疏性,适用于系数矩阵对称正定情况,具有短迭代公式,可以保证计算的高效性,且通过良好的预处理,使得迭代矩阵的

条件数降低,这在一定程度上克服了 CGM 收敛性与系数矩阵特征值分布密切相关的缺点^[8],加速了收敛过程. 这些特点正是大体积混凝土仿真计算过程中所需要的.

设有 n 阶对称正定线性方程组^[3]

$$Ax = f \tag{1}$$

PCGM 的一般算法可参见文献^[3]. 令 $A = L + D + L^T$, 其中 L 为 A 之严格下三角阵, D 为 A 之对角阵, 则应用于 A 的对称逐步超松弛 (symmetric successive over relaxation, SSOR) 法预处理矩阵^[5-6] 为

$$Q = \frac{\omega \left(\frac{D}{\omega} + L \right) D^{-1} \left(\frac{D}{\omega} + L \right)^T}{2 - \omega} \tag{2}$$

式中 ω 为松弛因子.

为充分利用系数矩阵对称的特点, 可将 Q 进行某种拆分, 以得到更为简短的迭代格式, 在一定程度上减少计算量. 为使预处理发挥主要作用的主要部分 $Hr = Q^{-1}r$ 易于变换, 摆脱矩阵求逆带来的繁琐运算, 直接按 Q 中明显的三部分进行拆分, 得到两个不同部分, 分别令为

$$S_1 = \frac{D}{\omega} + L \qquad S_2 = (2 - \omega) \frac{D}{\omega} \tag{3}$$

经过推导, 改进算法的 SSOR-PCGM (以下简称本文方法) 可表述如下:

给定迭代初值 $x^{(0)}$, 计算 $r^{(0)} = f - Ax^{(0)}$, $y^{(0)} = S_1^{-1} r^{(0)}$, $z^{(0)} = S_2 y^{(0)}$, $p^{(0)} = S_1^{-T} z^{(0)}$, 对 $k = 0, 1, 2, \cdots$, 有

$$\left. \begin{aligned} \alpha_k &= \frac{(S_2 y^{(k)}, y^{(k)})}{(2z - S_2 p^{(k)}, p^{(k)})} \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)} \\ y^{(k+1)} &= y^{(k)} - \alpha_k [p^{(k)} + S_1^{-1}(z^{(k)} - S_2 p^{(k)})] \\ \beta_k &= \frac{(S_2 y^{(k+1)}, y^{(k+1)})}{(S_2 y^{(k)}, y^{(k)})} \\ z^{(k+1)} &= S_2 y^{(k+1)} + \beta_k z^{(k)} \\ p^{(k+1)} &= S_1^{-T} z^{(k+1)} \end{aligned} \right\} \tag{4}$$

迭代格式中类似 $y^{(0)} = S_1^{-1} r^{(0)}$ 的计算, 均转化为 $S_1 y^{(0)} = r^{(0)}$ 使用 SSOR 法迭代一次, 无需求逆运算, 且可以共用一个子程序. 另外, 松弛因子的选取仍然存在问题. 针对复杂工程问题导出的大型矩阵, 还没有计算最佳松弛因子的方法, 而往往需要按经验取值. 一般可取略大于 1 的数作为松弛因子.

文献^[5]使用 $(S_2 y^{(k)}, y^{(k)})$ 作为收敛控制条件是可取的. 同时可以使用收敛后残差的无穷范数为事后评价收敛情况提供佐证. 而为了快速有效地比较直接法和 SSOR-PCGM 的计算效率, 可以使用残差的无穷范数作为收敛控制条件. 具体地, 可先计算出直接法所得残差无穷范数的范围, 进而也使用与之相似数量级的残差无穷范数作为 SSOR-PCGM 的收敛控制条件进行计算.

2 用本文方法进行大体积混凝土仿真的程序实现

在已有大体积混凝土仿真程序^[9-11]基础上, 使用本文方法改进其计算过程, 用 Fortran 语言编写了三维大体积混凝土仿真程序, 其流程如图 1 所示, 其中也参考了文献^[12]的编程方法. 本文程序与普通大体积混凝土仿真程序有较大差异的地方在于温度场和位移场求解中方程组的求解部分.

迭代求解之前, 需要估计存储空间大小, 形成新的索引列阵以标记整体劲度矩阵中的全部非零元素, 并在形成整体劲度矩阵时将其中非零元素按索引列阵的指示累加至各自位置.

形成索引列阵是关键步骤之一, 因为后续的几乎所有操作都通过在其指示下寻找到整体劲度矩阵中的特定元素而进行. 形成索引列阵时, 应寻找计算域内每个节点需计入的自由度 (除去无任何位移发生的自由度) 整体编号, 其中的编号两两组合即表现出整体劲度矩阵中非零元素的分布. 由于是存储对称阵, 只需标记对角元素及严格下三角元素的位置即可. 这样, 按自由度编号顺序, 逐单元寻找不大于其值的相关自由度编号, 即可标记出某元素在整体劲度矩阵中的行号和列号. 其中, 前一个自由度编号为行号, 后一个相关自由度

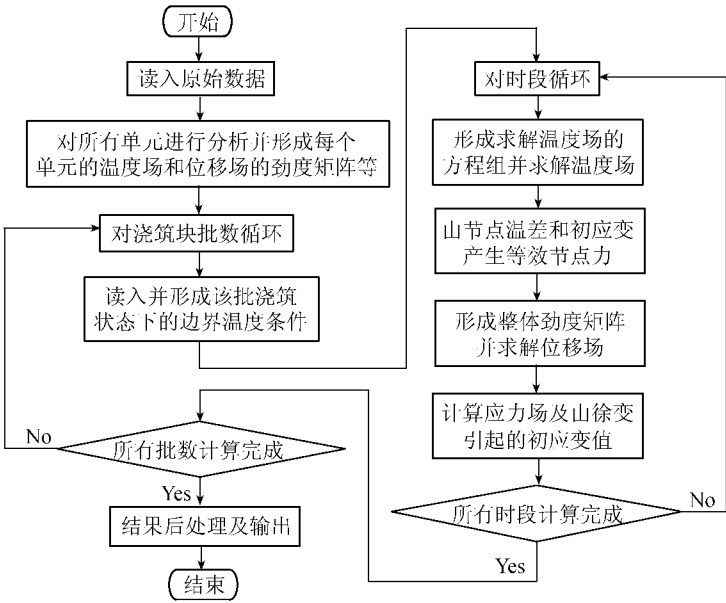


图 1 三维大体积混凝土结构有限元仿真程序流程

Fig. 1 Flow chart of FEM simulation program of 3D massive concrete structure

编号为列号.由于同时按行号与列号的索引进行标记,元素的存储顺序要求并不严格.为了方便后续运算,特别将对角元素的列索引排列至每一行的末尾.

按照式(4)给出的迭代格式,可编制采用本文方法进行计算的子程序,其中运算大部分为内积及矩阵向量乘.对其中较复杂的矩阵向量运算部分分别编制了应用于迭代初始化、求解逆矩阵与列阵乘积、新梯度的生成及精度计算的子程序.

为了进一步减少计算时间,根据大体积混凝土仿真计算中同一批次混凝土相邻时段的温度场变化连续且规律相似的特点,可将上一时段温度场作为下一时段温度场计算的迭代初值,以减少迭代次数.位移场计算亦采用此法,但应注意突加结构荷载的情形.因为差异较大的受力情况会引起计算结果变化规律的突变,不能保证减少迭代次数.

使用直接法进行运行期仿真计算时,一般假设施工完成一段时间后混凝土弹性模量不再变化.这避免了运行期内大部分计算时段中整体刚度矩阵的重新生成和分解,可节省较多的计算时间.使用 SSOR-PCGM 计算时也可以借鉴这一点.

由于直接法占用内存较多,使用直接法的仿真程序一般将所有计算中间数据,如单元信息、约束信息、单元刚度矩阵等均存储于硬盘中,待使用时将其读出.而大体积混凝土仿真计算中上千次有限元计算使得硬盘读取数据的动作反复进行,这在一定程度上增加了耗时,降低了计算效率.相关测试也说明,应用直接法仿真程序计算时,并不能保持 CPU 高占用率下的平稳使用,而硬盘使用率较高.采用本文方法可较大程度地降低内存占用,故可将所有原存储于硬盘的数据全部移入内存.使用本文方法的仿真程序可保证 CPU 高占用率下的平稳使用,且除读原始输入数据和写输出文件外没有过多硬盘读写操作.

3 数值算例与分析

使用微型计算机(主要配置为 Intel Pentium M 处理器,1.86 GHz,1 G 内存)进行程序编制和测试.编译器为 Compaq Visual Fortran 6.5.

算例:官地水电站碾压混凝土重力坝位于四川凉山彝族自治州西昌和盐源县交界的雅砻江上.正常蓄水位 1 330 m,坝顶高程 1 334 m,最大坝高 168 m,最大底宽 152.8 m.选取其中某溢流坝段进行施工期和运行期仿真分析.该坝段坝区使用了 1 种常态混凝土和 3 种碾压混凝土,地基为岩石,材料分区情况见图 2.结构剖分为 13 088 个 8 节点六面体单元,最大计算自由度为 47 813,分 64 批进行仿真.随着浇筑进行,单元数逐步增加,问题规模逐步变大.

分别将直接法和本文方法应用于仿真程序进行计算,比较二者内存占用、结果精度及计算耗时.为较客

观地进行比较,直接法计算中不会出现分块情况.

主要数据类型取编译器默认的单精度浮点数和长整型数.从整体劲度矩阵存储要求的比较即可见二者内存占用量的巨大差异(表 1).本文方法可完全消除带宽对存储空间需求的影响,仅需直接法需求量的 20% 即可完成对整体劲度矩阵元素的定位和存储.程序运行中间结果的存储空间需求也相应减少.内存的节约表明本文方法数据利用率高,这也使得原有计算设备上进行更大规模计算成为可能.

对于一个确定的问题而言,直接法只可能得到一组结果,故其计算精度是确定的.用每批次各时段计算结果中最大和最小的残差无穷范数($\|r\|_\infty$)表示的直接法计算精度如图 3 所示.由图 3 曲线可见,本文算例的直接法仿真计算精度基本为 $10^{-5} \sim 10^{-4}$ 数量级,个别偏大,且极不稳定.而本文方法仿真程序可以在编译器允许的范围内随意指定精度控制因子,易于达到更高而且稳定的计算精度.

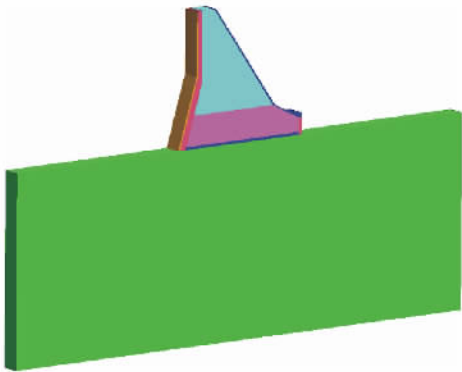


图 2 溢流坝段材料分区示意图

Fig. 2 Zoning of materials at overflow dam section

表 1 整体劲度矩阵存储空间需求比较

Table 1 Comparison of requirements for storage space of integral stiffness matrix B

计算方法	整体劲度矩阵元素	索引列阵元素	总计
直接法	$17\,795\,243 \times 4$	$47\,813 \times 4$	71 372 224
本文方法	$1\,912\,520 \times 4$	$1\,960\,333 \times 4$	15 491 412

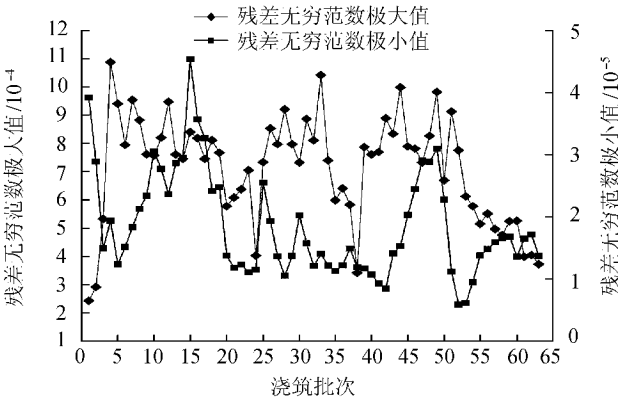


图 3 直接法仿真程序的计算精度

Fig. 3 Accuracy of program using straightforward methods

使用本文方法不仅可以达到很高的计算精度,且耗时较少.从表 2 数据可以看出,在相似的计算精度下,本文方法比直接法减少了约 70% 的计算时间.表 2 还给出了不同精度控制和不同松弛因子选择下的计算耗时比较.首先,提高计算精度自然会使计算时间增加,但耗时增加的幅度较小,故本文方法可以保证精确而高效的计算.再者,选择较好的松弛因子可以减少迭代次数从而减少耗时,根据计算经验,可取 $\omega \in [1, 1.1]$.

为进一步说明本文方法相对于直接法的计算优势,适当增大计算规模,分别用二者进行一次三维有限元计算.取一种弹性材料构成的立方块,将其划分为 $30 \times 30 \times 30$ 个 8 节点六面体单元(图 4),仅约束其刚体平动和转动,使其在均匀升温 10°C 下自由膨胀.该问题计算规模为 88 409 个自由度.为较客观地进行比较,使采用直接法计算时无需进行分块求解,另取微型计算机(主要配置为 Intel Pentium Dual E2160 处理器,1.80 GHz,2 G 内存)进行测试.用本文方法计算时,选用 $\omega = 1.0$.两种方法的计算耗时比较见表 3.显然,计算规模越大,本文方法较直接法的优势越明显.而这种优势恰可以应用于大体积混凝土仿真计算,在一定程度上解决了计算规模大、计算时间长的突出困难.

表 2 仿真程序计算耗时比较

Table 2 Comparison of simulation run time

计算方法	耗时/s
直接法	5 741
本文方法($\ r\ _\infty = 1.0 \times 10^{-5}, \omega = 1.0$)	1 807
本文方法($\ r\ _\infty = 1.0 \times 10^{-5}, \omega = 1.1$)	1 872
本文方法($\ r\ _\infty = 1.0 \times 10^{-5}, \omega = 1.2$)	1 982
本文方法($\ r\ _\infty = 1.0 \times 10^{-6}, \omega = 1.0$)	2 035
本文方法($\ r\ _\infty = 1.0 \times 10^{-7}, \omega = 1.0$)	2 189
本文方法($\ r\ _\infty = 1.0 \times 10^{-8}, \omega = 1.0$)	2 355

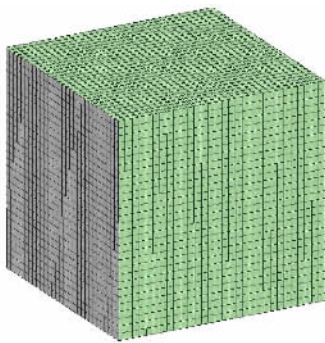


图4 立方块网格剖分
Fig. 4 Meshes for a cube

表3 有限元程序计算耗时比较	
Table 3 Comparison of FEM run time	
计算方法	耗时/s
直接法	931
本文方法($\ r\ _{\infty} = 1.0 \times 10^{-10}$)	13
本文方法($\ r\ _{\infty} = 1.0 \times 10^{-12}$)	19
本文方法($\ r\ _{\infty} = 1.0 \times 10^{-14}$)	21
本文方法($\ r\ _{\infty} = 1.0 \times 10^{-20}$)	34
本文方法($\ r\ _{\infty} = 1.0 \times 10^{-21}$)	38

4 结 论

- a. 一般认为,用直接法进行有限元计算可得到精度很高的解,这对小型问题的计算而言是正确的.但随着计算规模增大,由于舍入误差累积,其计算精度难以保证,加之占用内存多和计算时间长,该方法已不再适用于有限元计算过程中大型稀疏对称正定线性方程组的精确求解.
- b. 选用适合于温度场及位移场计算的本文方法改进大体积混凝土仿真计算过程,可充分发挥该方法计算效率高、计算精度好的特点,使大体积混凝土仿真中计算规模大、计算时间长的突出问题得到较好的解决.
- c. 本文方法可完全消除整体劲度矩阵带宽对存储空间需求的影响,对同一问题,任意方式的节点号排列具有相同的内存使用率和计算量,故在网格剖分时,节点编号更加自由.在无法避免巨大带宽的拱坝仿真计算中,本文方法的优势更为显著.
- d. 若综合应用各种方法提高计算效率(如 SSOR-PCGM 等)以及减少自由度和计算时段(如并层算法、弹性徐变体分区异步长算法等),可以进一步提高大体积混凝土仿真问题的计算效率、精度和规模.

参考文献:

[1] 朱伯芳. 多层混凝土结构仿真应力分析的并层算法[J]. 水力发电学报,1994(3) :21-30. (ZHU Bo-fang. Mixed-layer method for analysis of stresses by simulating the construction process of multilayered high concrete structures [J]. Journal of Hydroelectric Engineering,1994(3) :21-30. (in Chinese))

[2] 朱伯芳,许平. 混凝土坝仿真计算的并层算法和分区异步长算法[J]. 水力发电,1996(1) :38-43. (ZHU Bo-fang,XU Ping. Zone-merged algorithm and zoned different-step-length algorithm in the concrete simulation calculation [J]. Water Power,1996(1) :38-43. (in Chinese))

[3] 曹志浩. 变分迭代法[M]. 北京:科学出版社,2005 :84-126.

[4] 林志祥. 混凝土大坝温度应力数值仿真分析关键技术研究[D]. 南京:河海大学,2005.

[5] 林绍忠. 对称逐步超松弛预处理共轭梯度法的改进迭代格式[J]. 数值计算与计算机应用,1997(4) :266-270. (LIN Shao-zhong. Improved iterative format of symmetric successive over relaxation-preconditioned conjugated gradient mthod [J]. Journal of Numerical Methods and Computer Applications,1997(4) :266-270. (in Chinese))

[6] 林绍忠. 用预处理共轭梯度法求解有限元方程组及程序设计[J]. 河海大学学报,1998,26(3) :112-115. (LIN Shao-zhong. Application of preconditioned conjugated gradient method to finite element equations and program design [J]. Journal of Hohai University, 1998,26(3) :112-115. (in Chinese))

[7] 林绍忠,苏海东. 大体积混凝土结构仿真应力分析快速算法及应用[J]. 长江科学院院报,2003,20(6) :19-22. (LIN Shao-zhong,SU Hai-dong. Fast algorithms for stress analysis simulating construction process of massive concrete structures and applications [J]. Journal of Yangtze River Scientific Research Institute,2003,20(6) :19-22. (in Chinese))

[8] 张磊. 水工结构高性能计算方法及其应用[D]. 南京:河海大学,2008.

[9] 张子明,宋智通,黄海燕. 混凝土绝热温升和热传导方程的新理论[J]. 河海大学学报:自然科学版,2002,30(3) :1-6. (ZHANG Zi-ming,SONG Zhi-tong,HUANG Hai-yan. New theory on adiabatic temperature rise and heat conduction equation of concrete [J]. Journal of Hohai University :Natural Sciences,2002,30(3) :1-6. (in Chinese))

[10] 张子明,张研,宋智通. 水化热引起的大体积混凝土墙温度分析[J]. 河海大学学报:自然科学版,2002,30(4) :22-27.

(ZHANG Zi-ming,ZHANG Yan,SONG Zhi-tong. Analysis of hydration heat induced temperature rise in massive concrete walls[J]. Journal of Hohai University Natural Sciences,2002,30(4) 22-27. (in Chinese))

[11] 宋智通. 基于有效时间的碾压混凝土重力坝温度场和温度徐变应力场有限元分析[D]. 南京 河海大学,2002.

[12] WU Yong,LUNA R.Numerical implementation of temperature and creep in mass concrete[J]. Finite Elements in Analysis and Design, 2001,37(2) 97-106.

Application of symmetric successive over relaxation-preconditioned conjugate gradient method with improved algorithm in numerical simulation of massive concrete

HAN Lin, ZHANG Zi-ming, NI Zhi-qiang
(College of Mechanics and Materials, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract :With regard to problems of large scale computation and excessive run time in the numerical simulation of massive concrete using the FEM, and in order to overcome the disadvantages of high memory occupancy rate, excessive run time, and low accuracy using straightforward methods, the symmetric successive over relaxation-preconditioned conjugate gradient method with an improved algorithm can be employed to replace the straightforward methods with full consideration of the characteristics of solving temperature and displacement fields of massive concrete structures with finite element simulations. The large-sized sparse symmetric positive definite linear equations for the temperature and displacement fields were solved. The memory occupancies, run time, and accuracies of the two methods were compared through computation examples. The results show that the proposed method can completely eliminate the influence of the bandwidth of the integral stiffness matrix on the storage space requirement, reduce the physical memory occupancy and run time, and flexibly controlling the accuracy.

Key words :massive concrete ; symmetric successive over relaxation ; preconditioned conjugate gradient method ; FEM ; numerical simulation

.....

·简讯·

河海大学参建的苏通长江公路大桥获美国土木工程协会大奖

2010 年 3 月 26 日举行的美国土木工程师协会 2010 年度颁奖大会上,苏通长江公路大桥(简称苏通大桥)从入围的 5 项重大工程中脱颖而出,获得 2010 年度土木工程杰出成就奖.这是苏通大桥继荣获国际桥梁大会乔治理查德森奖、江苏省科技进步一等奖后获得的又一大奖,也是中国工程项目首次获此殊荣.颁奖委员会认为,苏通大桥是全球首座超千米跨径斜拉桥,在线性优美和技术领先的同时,在施工和环保方面保持了完美的平衡,是对现代桥梁建设理念很好的诠释,对今后桥梁建设和管理都有极大的促进.

河海大学参与了苏通大桥的建设,并在江苏省、交通部于 2005 年 10 月召开的“苏通大桥科技创新工作会议”上,成为唯一囊括 4 种奖项的单位.学校被授予“苏通大桥科技创新工作先进单位”,索塔地基基础稳定与安全监测专题组被评为“苏通大桥科技创新工作先进班组”,陈志坚教授被评为“苏通大桥科技创新工作先进个人”,朱俊高教授等撰写的论文《苏通大桥主桥墩超长桩群桩基础的工作性能》被评为“优秀论文”.

美国土木工程协会成立于 1852 年,所服务的会员有来自 159 个国家超过 13 万的专业人员,是目前世界上最大、最有影响力的土木工程协会.该协会的土木工程杰出成就奖设立于 1960 年,用于表彰近期完成的在世界范围内对社会发展有重大贡献的土木工程项目及其团队领导人.

(本刊编辑部供稿)