

С. А. Соловьев^{1}, В. В. Лисица², М. А. Новиков¹*

Метод разделения полей для численного решения уравнений Био в квазистатической постановке

¹ Институт математики им. С. Л. Соболева, г. Новосибирск,
Российская Федерация

² Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука, г. Новосибирск,
Российская Федерация

* e-mail: solovevsa@ipgg.sbras.ru

Аннотация. В работе система уравнений Био используется для численного моделирования нагружения образцов пороупругих флюидонасыщенных сред и для определения их эффективных частотно-зависимых соотношений деформации и напряжения в частотной области в квазистатической постановке. Целью моделирования является восстановление частотно-зависимого тензора жесткости, соответствующего ортотропным вязкоупругим средам, таким образом, чтобы решение задачи пороупругости совпадало с решением задачи упругости. Для решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), получаемой из конечно-разностной аппроксимации уравнений Био, мы разработали алгоритм итеративного решателя BICGStab предобусловленного способом разделения полей. В этой работе исследуются вычислительная сложность как предложенного алгоритма, так и прямого подхода. Численные результаты показывают, что итерационный процесс быстро сходится, и предлагаемый метод превосходит прямой метод с точки зрения потребления памяти и производительности.

Ключевые слова: пороупругость, уравнение Био, конечные разности, прямые методы решения СЛАУ, итерационные методы, предобуславливатель с разделением полей

S. A. Solovyev^{1}, V. V. Lisitsa¹, M. A. Novikov²*

Field-split method for numerical solution of Biot equations in quasistatic state

¹ Sobolev Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russian Federation

² Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, Novosibirsk, Russian Federation

* e-mail: solovevsa@ipgg.sbras.ru

Abstract. The Biot equation can be used to simulate low-frequency loading of fluid-filled poroelastic materials and to determine their effective frequency-dependent strain-stress relations in the frequency domain under quasi-static conditions. The aim of the simulation is to recover the frequency-dependent stiffness tensor, corresponding to orthotropic viscoelastic media so that the solution of the Biot problem coincides with the solution of the upscaled elastic problem. To do this, we propose an algorithm for solving the system of linear algebraic equations (SLAE) resulting finite-difference approximation of Biot equations. It use the BICGStab iterative solver and field-split preconditioner technique. This research investigates the computational requirements of both the proposed algorithm and a direct approach. Numerical experiments show that the iterative process converges rapidly, and the proposed method outperforms the direct method in terms of memory consumption and performance.

Keywords: poroelasticity, Biot equation, finite differences, direct methods for SLAE, iterative methods, field-split preconditioner

Введение

Численное решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), является ресурсоемкой проблемой и требует, как знаний в области математических алгоритмов решения таких систем, так и программной реализации под высокопроизводительные вычислительные системы. Уравнения Био в квазистатической постановке в частотной области аппроксимируются методом конечных разностей [1,2] на разнесенных сетках с частичным разделением переменных и уравнений [3]. Полученная СЛАУ может быть решена либо путем оптимизированной реализацией прямых методов, в основном использующих LU-декомпозиции [4, 5, 6], либо с помощью итерационных алгоритмов с применением предобуславливателей [7]. Существуют различные подходы к построению предобуславливателей, такие как ILU0, многосеточный [8], разделения полей (field-split) [9] и т. д. В работе используется предобуславливатель с разделением уравнений и переменных на две группы по процессам (деформации твердого тела и переноса флюида) для раздельного решения. На численном решении СЛАУ основан алгоритм численного апскейлинга для оценки эффективных свойств трещинно-пористых изотропных сред в низкочастотном диапазоне на основе конечно-разностной аппроксимации уравнений Био. Для решения результирующей СЛАУ сравниваются два подхода: прямой на основе оптимизированной декомпозиции матрицы LU и итерационный предобусловленный решатель. Разработан собственный матричный предобуславливатель, основанный на идее разделении полей (от английского field-split). Оценки операций с плавающей запятой Флоп (акроним от англ. Floating point Operation) для обоих подходов в сочетании с численными экспериментами по оценке Флоп и количеству используемой памяти показывают преимущества прямого подхода для небольших задач и итерационного подхода для больших моделей.

Постановка задачи

Для описания пороупругой среды рассматривается система уравнений Био в квазистатической постановке [10, 11]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[C_{11} \frac{\partial u_x}{\partial x} + C_{13} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[C_{55} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\alpha M \left(\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \right] = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[C_{55} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[C_{13} \frac{\partial u_x}{\partial x} + C_{33} \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha M \left(\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \right] = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\alpha M \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[M \left(\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \right] - i\omega \frac{\eta}{k} w_x = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha M \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[M \left(\frac{\partial w_x}{\partial x} + \frac{\partial w_z}{\partial z} \right) \right] - i\omega \frac{\eta}{k} w_z = 0. \quad (4)$$

В этом уравнении $\vec{u} = (u_x, u_z)^T$ – вектор смещения твердых частиц, $\vec{w} = (w_x, w_z)^T$ – вектор относительного смещения флюида, ω – временная частота, $C_{11}, C_{13}, C_{33}, C_{55}$ – компоненты тензора жесткости матрицы, M – коэффициент накопления жидкости, α – коэффициент Био-Уиллиса.

Тензор напряжений связан с деформациями законом Гука в виде

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{13} & 0 \\ C_{13} & C_{33} & 0 \\ 0 & 0 & C_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xz} \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right). \quad (5)$$

Для системы уравнений (1)–(4) используются граничные условия Неймана:

$$\begin{aligned} \sigma \cdot \vec{n} |_{\partial D} &= \vec{\sigma}_0 \\ \vec{w} \cdot \vec{n} |_{\partial D} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Алгоритм численного апскейлинга для оценки эффективных свойств трещиновато-пористых изотропных сред заключается в восстановлении такого частотно-зависимого эффективного тензора жесткости такой эквивалентной вязкоупругой среды, осредненные напряжения в которой совпадают с напряжениями в пороупругой среде при одинаковых нагрузках. Детали алгоритма восстановления поля описаны в работах [12, 13].

Для численного решения система (1)–(4) аппроксимируется конечно-разностной схемой на разнесенных сетках [12]. В результате матрица A полученной СЛАУ относительно компонент векторов смещений является разреженной квадратной матрицей, неэрмитовой и несимметричной. Кроме того, граничные условия типа Неймана в уравнении (6) делают матрицу плохо обусловленной или вырожденной. Кроме того, количество ненулевых элементов в матрице $NNZ(A)$, зависит от выбора разностных операторов. В частности, используемая аппроксимация уравнений (1) и (2) задействует 16 точек сетки, а уравнения (3) и (4) – 14, что приводит к приблизительно $60N_xN_z$ ненулевым элементам в A [12].

Численное решение СЛАУ

Для решения СЛАУ, используются как прямой (далее ПР), так и итерационный методы (далее ИТ).

При разработке методов необходимо учитывать ряд аспектов, а именно: точность численного решения СЛАУ, число арифметических операций, машинное время счета (зависящее как от Флоп так и от реализации алгоритмов), а также минимизацию использования памяти (далее Пам). Последняя необходима в большей степени для возможности проведения масштабных вычислений.

Прямой решатель

Прямые решатели зачастую основаны на алгоритмах LU-факторизации. Они имеют достаточно большое потребление памяти несмотря на то, что в коммерческих прямых решателях (MUMPS [5], PARDISO [6], SuperLU [4]) применяются различные модификации (переупорядочивание столбцов и строк матрицы СЛАУ, мультифронтальная факторизация и др.). В тоже время они обеспечивают высокую точность решения что также является существенным критерием выбора способа решения задачи.

В качестве прямого решателя используется решатель PARDISO из библиотеки Intel MKL [12]. Здесь мы исследуем этот решатель как «черный ящик» в контексте масштабируемости и производительности по сравнению с предложенным итерационным решателем. Оценим количество операций с плавающей запятой $\Phi_{\text{лон}}(\text{ПП})$ и потребление памяти $\text{Пам}(\text{ПП})$ для Intel MKL PARDISO.

Любой разреженный прямой решатель выполняет три шага для решения SLAE:

1. Переупорядочивание (предварительный шаг для уменьшения количества ненулевых множителей LU)
2. Факторизация (Фкт, получение LU)
3. Решение (Реш, $Ly=b$ и $Ux=y$)

Этап переупорядочивания обычно выполняется с использованием целых чисел быстрее, чем этап факторизации. Более того, он выполняется один раз для всего набора центральных частот ($N_{\text{част}}$). Последние свойства могут быть реализованы по одной и той же схеме для различных частот, и мы не будем учитывать этот шаг для оценки $\Phi_{\text{лон}}$ для прямого решателя: $\Phi_{\text{лон}}(\text{ПП}) = \Phi_{\text{лон}}(\text{Фкт}) + \Phi_{\text{лон}}(\text{Реш})$. Здесь оценка $\Phi_{\text{лон}}(\text{Реш})$ основана на подсчете ненулевых элементов (NNZ от англ Number of Non Zero) в факторах L и U : при обращении этих факторов каждый ненулевой элемент используется один раз в двух операциях: умножение "*" и сложение "+". Учитывая одинаковую структуру L и U , а также кол-во правых частей (три нагрузки – три правые части) получаем

$$\Phi_{\text{лон}}(\text{Реш}) = (3 \text{ нагрузки}) * (2 \text{ операции на один элемент}) * (2 * \text{NNZ}(L)),$$

а общее количество операций с плавающей запятой равно $\Phi_{\text{лон}}(\text{ПП}) = N_{\text{част}} [\Phi_{\text{лон}}(\text{Фкт}) + 12 * \text{NNZ}(L)]$. Здесь параметры $\Phi_{\text{лон}}(\text{Фкт})$ и $\text{NNZ}(L)$ получены экспериментально.

Итерационный решатель

Итерационные алгоритмы используют значительно меньше памяти по сравнению с прямыми, но как правило обладают меньшей точностью, а медленная сходимости итераций может приводить к большому времени решения и накоплению ошибки вычислений.

В качестве итерационного алгоритма используется BCSGStab [7] для ускорения сходимости которого применяется предобуславливатель B , преобразующий исходную СЛАУ к форме $\hat{A}x = \hat{b}$, где $\hat{A} = B^{-1}A$, $\hat{b} = B^{-1}b$ с комплексной неэрмитовой матрицей \hat{A} .

Для вычисления количества операций с плавающей запятой метода BCSGStab учитываются обе операции «константа, умноженная на вектор плюс вектор» (**axpy**), скалярное произведение (**dot**) и операция $\hat{A}x$ (наиболее трудоемкая часть алгоритма). Произведение $\hat{A}x$ состоит из матрично-векторного произведения исходной матрицы A (**mv**) и обращения предобуславливателя B (**inv**) (Таблица 1). Здесь **axpy**, **dot**, **mv**, **inv** – названия функций в мат. библиотеках.

Таблица 1

Оценка операции с плавающей запятой для основной операции в BICGStab.

Здесь $N = 4 * n^2$ и $NNZ(A) = (2 * 16 + 2 * 14) * n^2 = 15N$.

| Название операции | Флоп | Число операций на один шаг итерационного процесса |
|-------------------|--------------------------|---|
| axpy | $2N$ | 6 |
| dot | $2N - 1$ | 4 |
| mv | $2NNZ(A)$ | 2 |
| inv | (далее из экспериментов) | 2 |

Если принять во внимание число операций, указанные в таблице 1, то общее количество операций для итерационного процесса составляет:

$$\text{Флоп}(ИТ) = N_{\text{част}} N_{\text{ит}} [80N + 2 \text{Флоп}(\text{inv}B)].$$

Построение предобуславливателя СЛАУ

Для построения предобуславливателя используется метод разделения полей. Основная идея подхода состоит в исключении дифференциальных операторов, связанных с неизвестной переменной W , из уравнений (1) и (2). Используя конечно-разностную аппроксимацию в полученных уравнениях, можно вывести блочный нижнетреугольный преобуславливатель B (10).

$$A = \begin{pmatrix} A_0 & A_1 \\ A_2 & A_3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} A_0 & 0 \\ A_2 & A_3 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_3 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Алгоритм решения СЛАУ $Bx = y$ выглядит следующим образом:

1. Решение системы $A_0 x_0 = y_0$
2. Вычисление $y_3 = y_3 - A_2 x_0$

3. Решение системы $A_3x_3 = y_3$

Здесь матрица A_0 соответствует оператору уравнений (1), (2) для переменной u ; A_2 – матрица оператора уравнений (3), (4) для u ; A_3 – матрица оператора уравнений (3), (4) для w . При этом матрицы A_0 и A_2 вещественны и не зависят от частот ω , а матрица A_3 имеет комплексные элементы лишь на главной диагонали. Число ненулевых элементов в матрице A_0 равно $2 \times 9 \times n^2$, в A_2 и A_3 равно $2 \times 7 \times n^2$.

Основное преимущество обращения A_0 и A_3 по сравнению с обращением полной матрицы A состоит в том, что первые меньше последней, при этом A_0 не зависит от частоты и в случае обращения прямым решателем можно разложить единожды для всех частот, в то время как A_3 следует факторизовать для каждой частоты один раз за все итерации (N_{um}). После проведения ряда арифметических преобразований общее количество операций с плавающей запятой для итерационного решателя равно:

$$\begin{aligned} \text{Флоп}(ИТ) &= \text{Флоп}(\text{Фкт}A_0) + \\ &+ N_{\text{част}}[\text{Флоп}(\text{Фкт}A_3) + N_{um}[80N + 2 * 12Nnz(L_0) + 14n^2 + 2 * 12Nnz(L_3)]] \end{aligned}$$

Численные эксперименты для оценки сложности прямого и итерационного алгоритмов

Численные эксперименты по нагружению образца трещиноватой среды подтверждают, что время решения уравнений Био в большей степени зависит от числа операций с плавающей запятой при решении СЛАУ. Также эксперименты помогают оценить параметры подсчета Флоп как для прямого, так и для итерационного подходов.

Геометрическая структура трещиноватой модели среды изображена на рисунке 1, коэффициенты уравнений Био во вмещающей породе и в трещинах представлены в таблице 2.

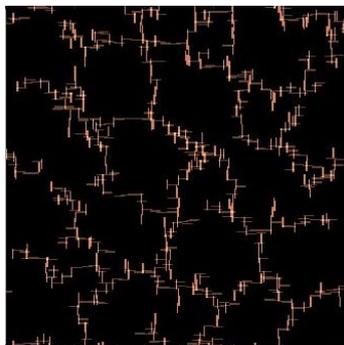


Рисунок 1. Изображение модели трещиноватой среды. Жёлтым обозначены трещины, черным – вмещающая порода

Таблица 2

Геометрия и коэффициенты уравнений Био для численных экспериментов.

| Кэфф. | Твердая фаза | Трещина |
|------------|-----------------|----------------|
| C_{11} | $69,10 * 10^9$ | $38,96 * 10^9$ |
| C_{12} | $7,16 * 10^9$ | $32,67 * 10^9$ |
| C_{22} | $69,10 * 10^9$ | $38,96 * 10^9$ |
| C_{33} | $30,97 * 10^9$ | $22,62 * 10^9$ |
| M | $20,10 * 10^9$ | $9,33 * 10^9$ |
| αM | $5,95 * 10^9$ | $6,85 * 10^9$ |
| η/k | $1000.0 * 10^9$ | $0,007 * 10^9$ |

Количество Флоп для факторизации и количество ненулевых элементов для различных размеров N СЛАУ (различных размеров n сетки Био) приведены в таблице 3. Критерием остановки итерационного процесса является значение относительной невязки $\|\hat{b} - \hat{A}x_0\| / \|\hat{b}\| < 10^{-10}$. Такой точности хватает для вычисления эффективного тензора C .

Таблица 3

Результаты численных экспериментов: количество Флоп, количество ненулевых элементов в L-факторах и количество итераций

| Размер сетки | Размер A | ГФлоп ($10^6 * \text{Флоп}$) | | | Число ненулевых элементов ($\times 10^9$) | | | Число итераций |
|-----------------|---------------|--------------------------------|----------------|----------------|---|-------|-------|----------------|
| | | Φ_{kTA} | Φ_{kTA_0} | Φ_{kTA_3} | L | L_0 | L_3 | |
| $n = n_x = n_z$ | N | | | | L | L_0 | L_3 | N_{um} |
| 250 | $0,25 * 10^6$ | 67 | 13 | 3 | 0,02 | 0,01 | 0,01 | 4 |
| 500 | $1 * 10^6$ | 655 | 137 | 36 | 0,11 | 0,03 | 0,01 | 4 |
| 1000 | $4 * 10^6$ | 5312 | 1241 | 304 | 0,53 | 0,17 | 0,09 | 4 |
| 2000 | $16 * 10^6$ | 45119 | 11178 | 3445 | 2,47 | 0,77 | 0,43 | 4 |
| 4000 | $64 * 10^6$ | Н/Д | 93872 | 28881 | Н/Д | 3,71 | 1,96 | 4 |

Число арифметических операций для факторизации увеличивается как $\times 8 \dots \times 11$; коэффициент для увеличения числа ненулевых элементов составляет около $\times 4 \dots \times 5$. Самая большая задача 4000×4000 не решена прямым методом, т.к.

LU-факторы с другими промежуточными данными не вмещаются в 512G RAM. Количество операций с плавающей запятой для 30 частот представлено в таблице 4.

Таблица 4

Общее число Флоп для решения задачи Био на 30 частотах.

| Размер сетки | Гфлоп (Флоп $\times 10^9$) | |
|-----------------|-----------------------------|--------------------|
| | Прямой метод | Итерационный метод |
| $n = n_x = n_z$ | | |
| 250 | 2029 | 149 |
| 500 | 19690 | 1372 |
| 1000 | 159554 | 11159 |
| 2000 | 1354471 | 118158 |
| 4000 | Н/Д | 977291 |

Заключение

Основные выводы по результатам проведенного исследования заключаются в том, что итерационный решатель с предобуславливателем разделения полей сходится и скорость сходимости не зависит от размера задачи и временной частоты. По сравнению с прямым решателем итерационный может решать большие задачи. Результаты вычислений количества арифметических операций показывают, что итерационный решатель может достигать ускорения более чем в 10 раз по сравнению с прямым.

Благодарности

Лисица В.В. сформулировал математическую постановку задачи в рамках проекта ФНИ FWZZ-2022-0022. Соловьев С.А. и Новиков В.А. разрабатывали алгоритмы численного решения и проводили численное моделирование при поддержке гранта РФФ № 19-77-20004

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Masson Y.J., Pride S.R., Nihei K.T. Finite difference modeling of biot's poroelastic equations at seismic frequencies // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. – 2006. – Vol. 111 – №. B10305 – P. 1-13.
2. Quintal B., Steeb H., Frehner M., Schmalholz S. M. Quasi-static finite-element modeling of seismic attenuation and dispersion due to wave-induced fluid flow in poroelastic media // Journal of Geophysical Research – 2011. – Vol. 116 – №. B01201 – P. 1-17.
3. Alekseev A. S. and Mikhailenko B. G. Solution of dynamic problems of elastic wave propagation in inhomogeneous media by a combination of partial separation of variables and finite difference methods // Geophysics. – 1980. – Vol. 48 – P. 161-172.
4. Li X. S. An overview of SuperLU: Algorithms, implementation, and user interface. ACM // Transactions on Mathematical Software. – 2005. – Vol. 31 – № 3 – P. 302-325.
5. Amestoy P.R., Duff I.S., Koster J., L'Excellent J.-Y. A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. – 2001. – Vol. 23 – № 1 – P. 15-41.
6. Bollhofer M., Schenk O., Janalik R., Hamm S., Gullapalli K. Parallel Algorithms in Computational Science and Engineering – Birkhäuser Cham. – 2020. – 417 p.
7. Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. – New York: PWS Publishing, 1996.

8. Stuben K. A review of algebraic multigrid // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. – 2001. – Vol. 128 – № 1-2 – P. 281-309.
9. Ke G, Calandrini S, Aulisa E. A field-split preconditioning technique for fluid-structure interaction problems with applications in biomechanics // *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*. – 2020 – Vol. 36 – № 3 – P. 3301.
10. Biot M.A. Theory of propagation of elastic waves in fluid-saturated porous solid. i. low-frequency range // *Journal of the Acoustical Society of America*. – 1956 – Vol. 28 – P. 168-178.
11. Biot M.A. Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. ii. higher frequency range // *Journal of the Acoustical Society of America*. – 1956. – Vol. 28 – P. 179-191.
12. Solovyev S., Novikov V, Lisitsa V. Numerical solution of anisotropic biot equations in quasi-static state. *Computational Science and Its Applications – ICCSA 2022 Workshops. ICCSA 2022. Lecture Notes in Computer Science*. Osvaldo Gervasi, Beniamino Murgante, Sanjay Misra, Ana Maria A. C. Rocha, and Chiara Garau (editors). – Springer Cham, 2022.
13. Соловьев С.А., Новиков М.А., Лисица В.В. Численное решение уравнений Био анизотропной пороупругой флюидонасыщенной среды в квазистатической постановке для численного решения задачи апскейлинга // *Вычислительные методы и программирование*. – 2023 – Т. 24. – № 1 – С. 67-88.

© С. А. Соловьев, В. В. Лисица, М. А. Новиков, 2023