

УДК 519.612

ИТЕРАЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В РАСЧЕТАХ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

О. А. Русанов

В статье рассмотрены методы итерационного решения систем линейных алгебраических уравнений в задачах расчета напряженно-деформированного состояния сложных конструкций с помощью метода конечных элементов. Предложенные модификации метода сопряженных градиентов и алгоритма Ланцоша показали эффективность при решении систем уравнений высокого порядка.

Ключевые слова: метод конечных элементов, система уравнений, итерационный метод, алгоритм Ланцоша, метод сопряженных градиентов.

Введение

В исследованиях методом конечных элементов (МКЭ) напряженно-деформированного состояния (НДС) сложных машиностроительных конструкций возникает необходимость решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) высокого порядка. Нередко наиболее эффективными для определения неизвестных в подобных задачах оказываются итерационные алгоритмы, позволяющие быстрее в сравнении с прямыми методами получить результаты и требующие меньше компьютерной памяти. Быстрая сходимость итерационных алгоритмов наблюдается при использовании в моделях объемных и плоских конечных элементов. Однако, если расчетные модели составлены из элементов оболочек и балок, для решения СЛАУ в основном выбирают прямые методы из-за неопределенного характера сходимости итерационных процедур.

В данной работе представлены итерационные методы, с помощью которых решен ряд прикладных задач МКЭ высокой размерности исследования НДС конструкций из оболочек. Итерационные алгоритмы применены в линейных задачах МКЭ и использованы, как составная часть алгоритмов нелинейного анализа, учитывающего упругопластические свойства материалов и контактное взаимодействие в системе.

Система разрешающих уравнений

Запишем систему разрешающих уравнений, получающуюся при статическом анализе НДС конструкций с помощью МКЭ по методу перемещений, в форме

$$\bar{\mathbf{K}} \cdot \bar{\mathbf{U}} = \bar{\mathbf{R}}, \quad (1)$$

где $\bar{\mathbf{K}}$ – матрица жесткости конечно-элементной модели (симметричная, разреженная, положительно определенная); $\bar{\mathbf{U}}$ – вектор неизвестных узловых перемещений; $\bar{\mathbf{R}}$ – вектор узловых нагрузок.

Для улучшения спектральных характеристик матрицы системы уравнений перед началом итераций целесообразно выполнить процедуру переобуславливания [1], которая позволяет уменьшить отношение собственных чисел матрицы (максимального к минимальному), способствует ускорению сходимости. Она заключается в преобразовании системы уравнений (1) к эквивалентной системе

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{R} \quad (2)$$

с помощью следующих операций масштабирования:

$$\mathbf{K} = \mathbf{L}^{-1} \cdot \bar{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{L}^{-T}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{L}^{-1} \cdot \bar{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{L}^T \cdot \bar{\mathbf{U}} = \mathbf{U}, \quad (3)$$

где $\mathbf{L}$ и $\mathbf{L}^T$ – множители Холецкого в разложении блочно-диагональной матрицы, составленной только из диагональных блоков исходной матрицы жесткости $\bar{\mathbf{K}}$; «-1» и «Т» – соответственно символы обращения и транспонирования матрицы.

Для решения системы уравнений в форме (1) или в преобразованной форме (2) предложены модификации методов сопряженных градиентов [1] и алгоритма Ланцоша [2–4].

Метод сопряженных градиентов

При описании процедуры метода сопряженных градиентов будем использовать обозначение текущего приближения перемещений $\mathbf{U}_i$ на итерации с номером i к точному решению $\mathbf{U}$. Это приближение в общем случае не обеспечивает полностью равновесие в системе, оставляя неуравновешенной некоторую часть внешней нагрузки $\mathbf{r}_i$, вычисляемую по формуле:

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_i. \quad (4)$$

Для практической реализации подходит вариант метода сопряженных градиентов, основанный на следующей трехчленной рекурсии [1]:

$$\mathbf{r}_{i+1} = \rho_{i+1} (-\gamma_{i+1} \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_i) + (1 - \rho_i) \mathbf{r}_{i-1}, \quad (5)$$

где $\mathbf{r}_{i+1}$, $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_{i-1}$ – доли внешней нагрузки, неуравновешенные на итерациях с номерами $i+1$, i , $i-1$, соответственно; ρ_{i+1} , γ_{i+1} – числовые коэффициенты, расчет которых выполняется по рекурсивным формулам:

$$\gamma_{i+1} = (\mathbf{r}_i^T \cdot \mathbf{r}_i) / (\mathbf{r}_i^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i),$$

$$\rho_{i+1} = \left\{ 1 - (\gamma_{i+1} / \gamma_i \rho_i) \mathbf{r}_i^T \cdot \mathbf{r}_i / (\mathbf{r}_{i-1}^T \cdot \mathbf{r}_{i-1}) \right\}^{-1},$$

$$\rho_1 = 1. \quad (6)$$

Одновременно с $\mathbf{r}_i$ по аналогичной трехчленной формуле (в которую не входит операция умножения матрицы на вектор) пересчитывается приближение перемещений:

$$\mathbf{U}_{i+1}, \mathbf{K}_B \mathbf{U}_{i+1} = \rho_{i+1} (\gamma_{i+1} \mathbf{r}_i + \mathbf{U}_i) + (1 - \rho_i) \mathbf{U}_{i-1}, \quad (7)$$

где $\mathbf{U}_i$, $\mathbf{U}_{i-1}$ – приближения перемещений на итерациях с номерами $i+1$, i , $i-1$ соответственно.

Наиболее трудоемкая часть алгоритма – операция умножения матрицы на вектор в данной схеме выполняется на каждой итерации только один раз. На нее тратится основное компьютерное время. Это время может быть сокращено, а сходимость метода ускорена при использовании специальной блочной структуры матриц, позволяющей уменьшить число необходимых арифметических операций в процессе умножения матрицы на вектор.

Использование специальной структуры матрицы коэффициентов системы уравнений является основой для ускоренного варианта метода сопряженных градиентов.

Исходные матрицы МКЭ являются в значительной степени разреженными. Большинство их коэффициентов содержат нули. За счет выбора определенного порядка нумерации неизвестных в задаче (степеней свободы) отличные от нуля коэффициенты можно сгруппировать в заданных позициях матрицы, сформировав таким образом ту или иную ее структуру.

В ускоренном варианте метода сопряженных градиентов с помощью алгоритмов нумерации матрица жесткости системы (до переобуславливания) формируется в следующей форме из четырех основных блоков:

$$\bar{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} * & & & * & * & * \\ & * & & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ * & * & * & * & & \\ * & * & * & & * & \\ * & * & * & & & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_R & \mathbf{K}_R \\ \mathbf{K}_B & \mathbf{D}_B \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где символ (*) означает область матрицы, в которой группируются все отличные от нуля коэффициенты.

Непомеченные символом (*) зоны должны содержать только нулевые коэффициенты, т.е. в диагональных блоках $\mathbf{D}_R$, $\mathbf{D}_B$ ненулевые коэффициенты должны содержаться как можно ближе к главной диагонали. Во внедиагональных блоках $\mathbf{K}_R$, ненулевые коэффициенты могут содержаться в произвольных позициях.

В результате выполнения процедуры переобуславливания (3) матрицу системы в форме (8) преобразуют к виду:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_R & \mathbf{L}_R^{-1} \cdot \mathbf{K}_R \cdot \mathbf{L}_B^{-T} \\ \mathbf{L}_B^{-1} \cdot \mathbf{K}_B \cdot \mathbf{L}_R^T & \mathbf{I}_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_R & \mathbf{C}_R \\ \mathbf{C}_B & \mathbf{I}_B \end{bmatrix}, \quad (9)$$

где $\mathbf{I}_R$, $\mathbf{I}_B$ – единичные матрицы с размерами соответствующих диагональных блоков; $\mathbf{C}_R$ и $\mathbf{C}_B$ – внедиагональные блоки; $\mathbf{L}_R$, $\mathbf{L}_B$ – множители Холецкого.

Множители Холецкого получаются при разложении диагональных блоков $\mathbf{D}_R$ и $\mathbf{D}_B$:

$$\mathbf{D}_R = \mathbf{L}_R \cdot \mathbf{L}_R^T, \quad \mathbf{D}_B = \mathbf{L}_B \cdot \mathbf{L}_B^T. \quad (10)$$

Согласно данному разбиению векторы перемещений, нагрузок и другие могут быть представлены состоящими из подвекторов $\mathbf{U} = \{\mathbf{U}_R \quad \mathbf{U}_B\}^T$, $\mathbf{r} = \{\mathbf{r}_R \quad \mathbf{r}_B\}^T$.

Ускоренный итерационный метод основан на тех же трехчленных рекурсивных формулах (5), (7), что и базовый алгоритм, но благодаря учету специального вида матриц коэффициентов и определенному выбору структуры стартовых векторов (векторов начальных приближений) упрощается наиболее трудоемкая часть каждой итерации, связанная с умножением матрицы на вектор.

Если на старте итерационного процесса выбрать вектор невязки $\mathbf{r}_i$ с полностью нулевым подвектором – $\mathbf{r}_R$ (или $\mathbf{r}_B$), то согласно (6) коэффициент $\gamma_2 = 1$. Шаги алгоритма с использованием трехчленных соотношений (5), (7) генерируют последовательность $\mathbf{r}_i$, у которых по очереди обращаются в нуль составляющие $\mathbf{r}_R$, $\mathbf{r}_B$, а все коэффициенты $\gamma_i = 1$. Две последовательные итерации (5) могут быть описаны упрощенными уравнениями

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{Bi+1} &= \rho_{i+1} \mathbf{C}_B \mathbf{r}_{Ri} + (1 - \rho_{i+1}) \mathbf{r}_{Bi-1}, \\ \mathbf{r}_{Ri+2} &= \rho_{i+2} \mathbf{C}_R \mathbf{r}_{Bi+1} + (1 - \rho_{i+2}) \mathbf{r}_{Ri} \end{aligned} \quad (11)$$

с исключением матричных операций с тождественно нулевым результатом.

Обеспечить равенство нулю одной из составляющих (например, $\mathbf{r}_B$) на старте алгоритма можно за счет выбора начальных перемещений согласно уравнению (4):

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_R \\ \mathbf{R}_B \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{I}_R & \mathbf{C}_R \\ \mathbf{C}_B & \mathbf{I}_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_R \\ \mathbf{U}_B \end{bmatrix}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_R \\ 0 \end{bmatrix}_i,$$

откуда

$$\mathbf{C}_B \cdot \mathbf{U}_R + \mathbf{I}_B \cdot \mathbf{U}_B = \mathbf{R}_B \quad \text{или} \quad \mathbf{U}_B = -\mathbf{C}_B \cdot \mathbf{U}_R + \mathbf{R}_B.$$

Данные алгоритмы эффективны, если схема размещения коэффициентов матриц МКЭ в памяти компьютера и все выполняемые алгебраические операции учитывают высокую разреженность этих матриц.

Модификация алгоритма Ланцоша для решения систем уравнений

Алгоритм Ланцоша представляет собой метод построения ортогонального базиса в подпространстве Крылова, которое образовано произвольным начальным вектором $\mathbf{q}_1$ и векторами, которые получают многократным умножением $\mathbf{q}_1$ на матрицу $\mathbf{K}$ рассматриваемой системы уравнений:

$$\{\mathbf{q}_1, \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_1, \mathbf{K}^2 \cdot \mathbf{q}_1, \mathbf{K}^3 \cdot \mathbf{q}_1, \mathbf{K}^4 \cdot \mathbf{q}_1, \dots\}. \quad (12)$$

Полезные свойства алгоритма определяются свойствами подпространства Крылова, которое даже при малом числе членов близко аппроксимирует собственное подпространство матрицы $\mathbf{K}$ (образованное группой собственных векторов этой матрицы).

Процесс построения базиса заключается в последовательном выделении ортогональных компонент – ортогональной к вектору $\mathbf{q}_1$ компоненты $\mathbf{q}_2$ из произведения $\mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_1$, затем ортогональной к $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ компоненты $\mathbf{q}_3$ из произведения $\mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_2$ и так далее. Векторы $\mathbf{q}_1$, $\mathbf{q}_2$, $\mathbf{q}_3$, ... называются векторами Ланцоша. Выполняются условия нормирования и ортогональности:

$$\mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{q}_i = 1; \quad \mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{q}_j = 0, \quad i \neq j; \quad (13)$$

$$\mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_j = 0, \quad j \leq i-2 \quad \text{или} \quad j \geq i+2. \quad (14)$$

После объединения всех n векторов $\mathbf{q}_i$ в качестве столбцов в квадратной матрице $\mathbf{Q}$ условия (13), (14) можно переписать в матричном виде:

$$\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{I}; \quad \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{T}, \quad (15)$$

где $\mathbf{I}$ – единичная матрица; $\mathbf{T}$ – симметричная трехдиагональная матрица.

Трехдиагональная матрица имеет вид

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \\ & & \beta_3 & \alpha_4 & \ddots \\ 0 & & & \ddots & \ddots \end{bmatrix},$$

коэффициенты которой определяются уравнениями:

$$\alpha_i = \mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_i, \quad \beta_i = \mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_{i+1}. \quad (16)$$

Алгоритм Ланцоша основан на использовании трехчленной формулы

$$\beta_i \mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_i - \alpha_i \mathbf{q}_i - \beta_{i-1} \mathbf{q}_{i-1} \quad (17)$$

для вычисления $\mathbf{q}_{i+1}$ по известным $\mathbf{q}_i$ и $\mathbf{q}_{i-1}$.

На i -м шаге алгоритма перемещения $\mathbf{U}$ разложим по $\mathbf{q}_i$ и объединим все проекции пере-

мещений в векторе $\mathbf{X}_i = \mathbf{Q}_i^T \cdot \mathbf{U}$, где $\mathbf{Q}_i$ – прямоугольная матрица, имеющая i столбцов, содержащих $\mathbf{q}_i$. Система уравнений (2) может быть переписана в базисе $\mathbf{q}_i$

$$\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{X}_i = \mathbf{Q}_i^T \cdot \mathbf{R}, \quad (18)$$

где $\mathbf{T}_i$ – трехдиагональная матрица размерностью $(i \times i)$, являющаяся блоком матрицы $\mathbf{T}$.

Из (18) определяются $\mathbf{X}_i$ и далее $\mathbf{U}_i = \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{X}_i$. Сходимость оценивают по норме вектора неуравновешенной нагрузки $\mathbf{r}_i = \mathbf{R} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{U}_i$.

Предложенная модификация алгоритма (не требующая сохранения всех векторов Ланцоша, вычисленных на предыдущих итерациях) заключается в выполнении решения (18) (используя для этого метод Холецкого) с одновременным вычислением $\mathbf{U}_i$. Умножителя Холецкого $\mathbf{L}_i$ в разложении $\mathbf{T}_i = \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{L}_i^T$ отличными от нуля являются коэффициенты на главной диагонали (a_j) и рядом с главной диагональю (b_j), вычисляемые по формулам:

$$a_1 = (\alpha_1)^{1/2}, \quad b_j = \beta_j / a_j, \quad a_{j+1} = (\alpha_{j+1} - b_j^2)^{1/2}, \\ j = 1, \dots, i-1.$$

Приближения перемещений вычисляются по формуле

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{L}_i^{-T} \cdot \mathbf{L}_i^{-1} \cdot \mathbf{Q}_i^T \cdot \mathbf{R}. \quad (19)$$

Параллельно с вычислением векторов $\mathbf{q}_i$ и коэффициентов α_i, β_i определяются коэффициенты a_j, b_j и векторы направлений $\mathbf{p}_j$, группируемые в столбцах вспомогательной матрицы $\mathbf{P}_i$:

$$\mathbf{L}_i^{-1} \cdot \mathbf{Q}_i^T = \mathbf{P}_i^T \quad \text{или} \quad \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{P}_i^T = \mathbf{Q}_i^T. \quad (20)$$

Уравнение (20) можно пояснить следующей схемой:

$$\begin{aligned} & \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{P}_i^T = \\ & \begin{bmatrix} a_1 & & & & \\ b_1 & a_2 & & & \\ & b_2 & a_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{i-1} & a_i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{p}_1^T \\ \mathbf{p}_2^T \\ \mathbf{p}_3^T \\ \dots \\ \mathbf{p}_i^T \end{bmatrix} = \\ & = \mathbf{Q}_i^T \\ & = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_2^T \\ \mathbf{q}_3^T \\ \dots \\ \mathbf{q}_i^T \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (21)$$

Система (21) имеет следующее решение:

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{q}_1 a_1^{-1},$$

$$\mathbf{p}_j = (\mathbf{q}_j - \mathbf{p}_{j-1} b_{j-1}) a_j^{-1}, \quad j = 2, \dots, i. \quad (22)$$

На i -м шаге алгоритма для вычисления $\mathbf{p}_j$ из векторов направлений требуется только $\mathbf{p}_{j-1}$, сохранять остальные нет необходимости. Приближения перемещений определяют как

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_i^T \cdot \mathbf{R}. \quad (23)$$

Рассмотрим подробнее шаги алгоритма.

1. С использованием формулы

$$\beta_i \mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_i - \alpha_i \mathbf{q}_i - \beta_{i-1} \mathbf{q}_{i-1} \quad (24)$$

вычисляют коэффициент β_i и вектор Ланцоша $\mathbf{q}_{i+1}$.

2. Определяют диагональный коэффициент α_{i+1} матрицы $\mathbf{T}_i$:

$$\alpha_{i+1} = \mathbf{q}_{i+1}^T \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_{i+1}. \quad (25)$$

3. Определяют коэффициенты множителя Холецкого:

$$b_i = \beta_i / a_i, \quad a_{i+1} = (\alpha_{i+1} - b_i^2)^{1/2}. \quad (26)$$

4. Рассчитывают вектор направления:

$$\mathbf{p}_{i+1} = (\mathbf{q}_{i+1} - \mathbf{p}_i b_i) a_{i+1}^{-1}. \quad (27)$$

5. Определяют проекцию вектора неуравновешенной нагрузки на направление:

$$\lambda_{i+1} = \mathbf{p}_{i+1}^T \cdot \mathbf{r}_i. \quad (28)$$

6. Вычисляют шаг по перемещениям в направлении $\mathbf{p}_{i+1}$:

$$\mathbf{U}_{i+1} = \mathbf{U}_i + \lambda_{i+1} \mathbf{p}_{i+1}. \quad (29)$$

7. Оценивают вектор неуравновешенной внешней нагрузки:

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \mathbf{q}_i (\mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{r}_i). \quad (30)$$

Ускоренный алгоритм Ланцоша

Разработан ускоренный вариант алгоритма, в котором сокращается число арифметических операций за счет использования специальной структуры матрицы в блочной форме (8), преобразованной в результате выполнения операции переобуславливания к виду (9). В соответствии с данным разбиением векторы перемещений и нагрузок могут быть представлены состоящими из подвекторов

$$\mathbf{U} = \{\mathbf{U}_R \quad \mathbf{U}_B\}^T, \quad \mathbf{r} = \{\mathbf{r}_R \quad \mathbf{r}_B\}^T.$$

Если стартовый вектор Ланцоша $\mathbf{q}_1 = \{\mathbf{q}_R \quad \mathbf{q}_B\}^T$ содержит один из подвекторов $\mathbf{q}_R$ или $\mathbf{q}_B$ со всеми нулевыми компонентами, то первый

диагональный коэффициент α_i матрицы T_i , а затем и все последующие диагональные коэффициенты α_i оказываются равными 1, а у всех генерируемых на основе трехчленных формул векторов Ланцоша подвекторы q_R , q_B по очереди будут иметь все нулевые компоненты. Трехчленные формулы с учетом специальной структуры матриц для двух последовательных итераций преобразуют к виду

$$\begin{aligned}\beta_i q_{B_{i+1}} &= C_B \cdot q_{R_i} - \beta_{i-1} q_{B_{i-1}}, \\ \beta_{i+1} q_{R_{i+2}} &= C_R \cdot q_{B_{i+1}} - \beta_i q_{R_i}.\end{aligned}\quad (31)$$

Сходимость метода оценивают по норме вектора неуравновешенной внешней нагрузки $r_i = R - K \cdot U_i$. При точных вычислениях векторы Ланцоша в матрице Q_i являются взаимно ортогональными

$$Q_i^T \cdot Q_i = I, \quad (32)$$

где I – единичная матрица.

Неуравновешенную часть внешней нагрузки на i -м шаге можно оценить, последовательно вычитая из полного вектора нагрузки R его проекции на направления текущих векторов Ланцоша:

$$r_i = r_{i-1} - q_i (q_i^T \cdot r_{i-1}). \quad (33)$$

Вычисления выполняются компьютером с ограниченной точностью, что приводит к потере ортогональности между векторами Ланцоша. В задачах на собственные значения алгоритм Ланцоша должен предусматривать процедуру поддержки ортогональности между векторами. В противном случае будут определены дубликаты собственных чисел и собственных векторов матрицы, искажающие картину спектра. При решении систем линейных уравнений потеря ортогональности не приводит к нарушениям в алгоритме. Он продолжает сходиться с уменьшением нормы неуравновешенной нагрузки.

Изложенные варианты метода сопряженных градиентов и алгоритма Ланцоша являются эффективными, если матрица решаемой системы уравнений целиком размещается в оперативной памяти с учетом разреженности, что необходимо для быстрого вычисления на каждом шаге произведения матрицы на вектор. При размещении матрицы во внешней памяти на жестком диске возрастают затраты на выполнение операций обмена при считывании матрицы.

Блочный вариант алгоритма Ланцоша

Для задач, в которых матрица системы не может быть размещена в оперативной памяти, использован блочный вариант алгоритма Ланцоша, позволяющий сократить общее количество операций обмена. На каждом шаге алгоритма при уточнении перемещений участвуют одновременно несколько образующих подпространство векторов направлений.

Основой рассмотренных в предыдущих разделах вариантов алгоритма являлась трехчленная рекурсия (17) с единственным стартовым вектором q_1 и последовательностью векторов Ланцоша q_i , определяемых по одному на каждом шаге. В блочном варианте алгоритма процесс построения векторов Ланцоша начинается не с одного, а с группы из m векторов. Их будем объединять в столбцах стартовой матрицы (размером $n \times m$), для которой примем то же обозначение q_1 , использованное ранее для отдельных векторов Ланцоша. Блочный алгоритм позволяет получить за один шаг одновременно группу m векторов Ланцоша, которые будем размещать в столбцах матрицы q_i .

Основная трехчленная формула блочного алгоритма имеет вид:

$$K \cdot q_i = q_{i+1} \cdot \beta_i + q_i \cdot \alpha_i + q_{i-1} \cdot \beta_{i-1}^T, \quad (34)$$

где q_{i-1} , q_i , q_{i+1} – матрицы для трех последовательных шагов алгоритма, каждая из которых содержит своими столбцами m векторов Ланцоша, определяющих подпространство для поиска приращений перемещений; α_i , β_i – диагональный и наддиагональный блоки размерами $(m \times m)$ блочной трехдиагональной матрицы T .

Объединив все q_i в общей ортогональной матрице Q , с помощью которой можно выполнить ортогональное преобразование матрицы K

$$Q^T \cdot K \cdot Q = T, \quad (35)$$

в результате которого получается блочная трехдиагональная матрица T со следующей структурой:

$$T = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & 0 \\ \beta_1^T & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \beta_2^T & \alpha_3 & \beta_3 & \\ & & \beta_3^T & \alpha_4 & \dots \\ 0 & & & \dots & \dots \end{bmatrix}. \quad (36)$$

Решение системы уравнений (2) может быть записано в виде:

$$U = Q \cdot T^{-1} \cdot Q^T \cdot R \quad (37)$$

с использованием матрицы Q , содержащей

полный набор векторов Ланцоша и матрицы $\mathbf{T}$ в блочной трехдиагональной форме.

Как и в случае алгоритма, использующего один вектор направлений, в блочном варианте параллельно с вычислением коэффициентов матрицы $\mathbf{T}$ выполняют разложение этой матрицы на множители Холецкого $\mathbf{T} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}^T$. Разложение на множители может быть представлено в блочном виде, как показано на схеме (с обозначением блоков):

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & 0 \\ \beta_1^T & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & \beta_2^T & \alpha_3 & \beta_3 \\ & & \beta_3^T & \alpha_4 & \dots \\ 0 & & & \dots & \dots \end{pmatrix} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & & & 0 \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_2 & & \\ & \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_3 & \\ & & \mathbf{B}_3 & \mathbf{A}_4 & \dots \\ 0 & & & \dots & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^T & \mathbf{B}_1^T & & 0 \\ & \mathbf{A}_2^T & \mathbf{B}_2^T & \\ & & \mathbf{A}_3^T & \mathbf{B}_3^T \\ & & & \mathbf{A}_4^T & \dots \\ 0 & & & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (38)$$

где $\mathbf{A}_i$, $\mathbf{B}_i$ – диагональный и поддиагональный блоки множителя Холецкого соответственно.

Для неполного набора векторов Ланцоша на i -м шаге приближение перемещений определяется по формуле:

$$\mathbf{U}_i = \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{T}_i^{-1} \cdot \mathbf{Q}_i^T \cdot \mathbf{R} = \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{L}_i^{-T} \cdot \mathbf{L}_i^{-1} \cdot \mathbf{Q}_i^T \cdot \mathbf{R} = \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_i^T \cdot \mathbf{R}. \quad (39)$$

Матрицы $\mathbf{P}_i$ содержат векторы подпространства, на котором согласно принципу минимума потенциальной энергии определяются приближения перемещений на текущем шаге. Матрица $\mathbf{L}_i$ является множителем Холецкого в разложении матрицы $\mathbf{T}_i$:

$$\mathbf{T}_i = \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{L}_i^T. \quad (40)$$

Матрицу $\mathbf{P}_i$ получают в результате решения уравнения:

$$\mathbf{L}_i \mathbf{P}_i^T = \mathbf{Q}_i^T, \quad (41)$$

которое можно представить в виде схемы

$$\mathbf{L}_i \cdot \mathbf{P}_i^T = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & & & \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_2 & & \\ & \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_3 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \mathbf{B}_{i-1} & \mathbf{A}_i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{p}_1^T \\ \mathbf{p}_2^T \\ \mathbf{p}_3^T \\ \dots \\ \mathbf{p}_i^T \end{bmatrix} =$$

$$= \mathbf{Q}_i^T = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_2^T \\ \mathbf{q}_3^T \\ \dots \\ \mathbf{q}_i^T \end{bmatrix}. \quad (42)$$

Построенный на основе формулы (34) блочный алгоритм Ланцоша последовательно генерирует набор векторов $\mathbf{q}_i$. Каждый шаг алгоритма предусматривает следующие операции:

1) выполнение одновременного умножения набора векторов $\mathbf{q}_i$ на матрицу $\mathbf{K}$

$$\mathbf{s} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}_i; \quad (43)$$

2) вычисление диагонального блока α_i матрицы $\mathbf{T}$

$$\alpha_i = \mathbf{q}_i^T \cdot \mathbf{s}; \quad (44)$$

3) ортогонализация (для всех шагов, кроме первого) невязки $\mathbf{s}$ к векторам $\mathbf{q}_{i-1}$ согласно (34)

$$\mathbf{s} = \mathbf{s} - \mathbf{q}_{i-1} \cdot \beta_{i-1}^T; \quad (45)$$

4) ортогонализация векторов в $\mathbf{s}$ по отношению друг к другу и их нормирование

$$\mathbf{s}^T \cdot \mathbf{s} = \beta_i^T \cdot \beta_i; \quad \mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{s} \cdot \beta_i^{-1}. \quad (46)$$

Для вычисления боков $\mathbf{A}_i$, $\mathbf{B}_i$ множителей Холецкого использованы следующие матричные операции. Первый диагональный блок $\mathbf{A}_1$ получается в результате разложения по Холецкому первого диагонального блока α_1 . Для всех внедиагональных блоков $\mathbf{B}_i$ имеет место равенство

$$\mathbf{B}_i = \mathbf{A}_i^{-T} \beta_i^T. \quad (47)$$

Вычисление поддиагонального блока $\mathbf{B}_i$ осуществляется в результате решения системы уравнений:

$$\mathbf{A}_i^T \cdot \mathbf{B}_i = \beta_i^T. \quad (48)$$

Диагональные блоки $\mathbf{A}_i$, начиная со второго, получают в результате разложения по Холецкому матричного выражения $(\alpha_i - \mathbf{B}_{i-1} \cdot \mathbf{B}_{i-1}^T)$:

$$\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_i^T = (\alpha_i - \mathbf{B}_{i-1} \cdot \mathbf{B}_{i-1}^T). \quad (49)$$

Затем вычисляется группа векторов направлений $\mathbf{P}_i$, определяющих подпространство, на котором будет выбираться вектор перемещений на текущем шаге алгоритма. Очередная группа векторов $\mathbf{P}_i$ получается в процессе решения уравнения (40), предусматривающего выполнение матричной операции

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{A}_i^{-1} (\mathbf{q}_i - \mathbf{B}_{i-1} \cdot \mathbf{q}_{i-1}^T). \quad (50)$$

Далее i -й шаг по перемещениям осуществляют с использованием формулы

$$\mathbf{U}_{i+1} = \mathbf{U}_i + \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_i^T \cdot \mathbf{R}. \quad (51)$$

Преимущество блочного варианта алгоритма Ланцоша для систем линейных уравнений с матрицами коэффициентов во внешней памяти заключается в выполнении операции умножения матрицы одновременно на группу векторов. За один цикл считывания матрицы в память определяется несколько векторов Ланцоша, пересчитываемых в такое же количество векторов направлений для уточнения перемещений. Число шагов блочного алгоритма до появления сходимости меньше количества шагов стандартного алгоритма с единственным вектором направления. Соответственно уменьшается время на операции обмена с внешней памятью.

Блочный алгоритм Ланцоша может быть ускорен (по ранее рассмотренной схеме) за счет использования структуры матрицы (8) в сочетании с процедурой переобуславливания (9). В блочном методе стартовую матрицу векторов

Ланцоша $\mathbf{q}_i = \begin{Bmatrix} \mathbf{q}_R \\ \mathbf{q}_B \end{Bmatrix}$ разбивают на две подматрицы, одна из которых должна быть выбрана нулевой. В этом случае первый диагональный блок $\mathbf{A}_1$ блочной трехдиагональной матрицы $\mathbf{T}$, а затем и все последующие блоки $\mathbf{A}_i$ оказываются единичными матрицами. Все матрицы $\mathbf{q}_i$ имеют нулевой одну из подматриц $\mathbf{q}_R$ или $\mathbf{q}_B$. Трехчленные формулы блочного алгоритма Ланцоша, аналогичные (31), для двух последовательных итераций в данном случае принимают вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{B\ i+1} \cdot \beta_i &= \mathbf{C}_B \cdot \mathbf{q}_{R\ i} - \mathbf{q}_{B\ i-1} \cdot \beta_{i-1}^T, \\ \mathbf{q}_{R\ i+2} \cdot \beta_{i+1} &= \mathbf{C}_R \cdot \mathbf{q}_{B\ i+1} - \mathbf{q}_{R\ i} \cdot \beta_i^T. \end{aligned} \quad (52)$$

Как и ранее, при умножении $\mathbf{q}_i$ на матрицу системы специальной структуры, выполняется меньшее количество арифметических операций (в сравнении со случаем умножения на матрицу такого же порядка общей структуры), что позволяет быстрее достичь сходимости и получить решение задачи.

Примеры применения итерационных алгоритмов

Пример 1. Расчет пересекающихся цилиндрических оболочек. Тестирование разработанных итерационных алгоритмов решения СЛАУ в МКЭ выполнено с использованием моделей локально укрепленного тонкостенного

сосуда с патрубком. Составленные модели (рис. 1) соответствуют различным расчетным случаям, связанным с геометрическими параметрами и условиями нагружения сосуда. Поэтому рассматривались модели половины и полной конструкции, которые различаются количеством степеней свободы. При создании моделей МКЭ использованы восьмиузловые объемные изопараметрические конечные элементы (см. рис. 1).

Для рассматриваемой тематики интерес представляют соотношения между размерностью СЛАУ и количественными характеристиками сходимости итерационных процессов при использовании различных алгоритмов решения. Поэтому результаты расчета НДС сосуда здесь не представлены и не анализируются.

Численные эксперименты проведены на персональном компьютере с процессором *Intel Pentium Quad 9300* с тактовой частотой 2500 МГц и оперативной памятью 8 ГБ. В расчетах применялся программный комплекс [5], разработанный автором.

Решение системы линейных уравнений МКЭ выполнялось тремя методами: прямым блочным методом $\mathbf{LDL}^T$; итерационным методом Ланцоша в ускоренном варианте; методом Ланцоша без циклического ускорения. Для итерационных процедур выбран параметр сходимости 10^{-10} , определяющий неуравновешенную долю от нормы вектора внешней нагрузки. Тестируемые итерационные методы предполагают размещение матриц системы целиком в памяти компьютера.

Данные о сходимости алгоритмов и затраченных ресурсах приведены в таблице. Указанные временные затраты учитывают только время решения системы уравнений и не учитывают время на вспомогательные операции (формирование указателей разреженной структуры матриц, пе-

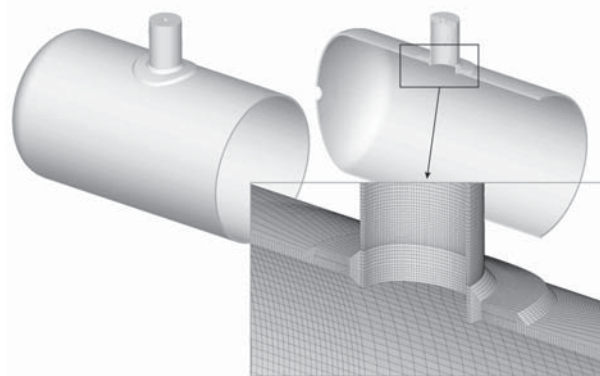


Рис. 1. Модели МКЭ для тестирования итерационных методов

Таблица

Ресурсы, необходимые для исследования моделей сосуда

Модель	Ресурсы	Алгоритм Ланцоша		Прямой метод LDL^T
		ускоренный	неускоренный	
Половина сосуда, $n = 493428$	память для размещения матрицы, МБ	212	148	~12000
	время решения, мин	12	67	757
	число итераций	2176	21854	-
Целый сосуд, $n = 975213$	память для размещения матрицы, МБ	506	296	~ 50000
	время решения, мин	38	147	-
	число итераций	3284	25943	-

ренумерацию степеней свободы, формирование коэффициентов матрицы жесткости, вычисление напряжений). Для ускоренного метода в качестве числа итераций в таблице указано число двойных итераций, предусмотренных схемой алгоритма.

Следует отметить, что соотношение характеристик скорости решения использованных методов решения СЛАУ свойственно данным конкретным задачам. В других задачах, как показывает практика, оно может быть другим.

Пример 2. Расчет несущей системы трактора. Изложенные итерационные методы продемонстрировали работоспособность в исследованиях с помощью МКЭ напряженно-деформированного состояния сложных несущих конструкций ряда мобильных машин. В моделях несущих систем применены конечные элементы тонкой оболочки и балочные элементы. Размерность моделей достигает 2 млн степеней свободы. В качестве примера на рис. 2 представлена модель несущей системы трактора ВТ-150Д (Волгоградский тракторный завод).

В данной задаче не удалось воспользоваться имеющимися в распоряжении программами, реализующими прямые алгоритмы, из-за неприемлемо больших затрат компьютерной памяти и значительного времени счета. Итерационные методы смогли обеспечить получение решения. Сходимость итерационных процессов оценена по норме неуравновешенной части внешней нагрузки (длине вектора), которая, как было принято в расчетах, при окончании итераций не должна превышать долю в 10^{-10} от нормы полного вектора нагрузки. Для достижения заданной сходимости в подобных задачах может потребоваться большое количество итераций (до 10% от числа степеней свободы). Однако вы-

числительная схема позволяла контролировать промежуточные результаты на ранних стадиях расчета задолго до достижения указанного предельного значения по норме неуравновешенной нагрузки, что особенно важно на этапе отладки моделей, когда целесообразно как можно раньше выявить явные ошибки в способах закреплений или приложения нагрузок.

Организация вычислительных алгоритмов обеспечила выполнение длительных расчетов, накапливая порциями нужное количество итераций, останавливая их в необходимый момент и возобновляя через некоторое время с точки остановки.

На практике при выполнении подобных расчетов, как правило, выбирается один из алгоритмических вариантов, который затем применяется для серии однотипных вычислений, как

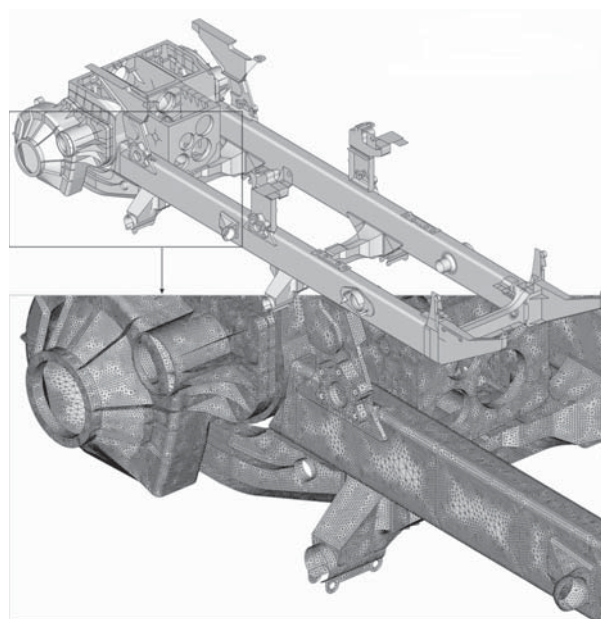


Рис. 2. Модель МКЭ несущей системы трактора ВТ-150Д

проверенный и предсказуемый по затратам компьютерной памяти и времени счета.

В большинстве случаев для решения таких задач использовались циклически ускоренные методы при размещении матрицы в памяти компьютера. Если объем используемой оперативной памяти компьютера являлся критическим параметром, применялись методы без циклического ускорения.

Заключение

Разработанные алгоритмы итерационного решения систем линейных алгебраических уравнений в МКЭ являются развитием известных методов сопряженных градиентов и Ланцоша, имеют преимущество перед прямыми методами для решения двумерных или трехмерных задач механики с помощью МКЭ. Они подтвердили свою работоспособность при конечно-элементном анализе сложных оболочечных конструкций.

Список литературы

1. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные итерационные методы. – М.: Мир, 1986. – 448 с.
2. Парлетт Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. – М.: Мир, 1983. – 384 с.
3. Alvaro L.G.A., Coutinho J.L.D., Alves L.L., Edison C.P.L., Nelson F.F.E. On the application of an element-on-element Lanczos solver no large offshore structural engineering problem // Computers & Structures, Vol. 27, No. 1, 1987. P. 27 – 37.
4. Bahram Nour-Amid, Ray W.C. Dynamic analysis of structures using Lanczos co-ordinates // Earthquake engineering and structural dynamic. v.12, No. 4, 1984. P. 565 – 577.
5. Дмитриченко С.С., Русанов О.А. Опыт расчетов на прочность, проектирования и доводки сварных металлоконструкций мобильных машин // Тракторы и сельскохозяйственные машины. 2006. № 1. С. 8–13.

Материал поступил в редакцию 3.03.2010

РУСАНОВ

Олег

Александрович

E-mail:

newmalina@rambler.ru

Тел. 8 (495) 620-39-89

Доктор технических наук, ведущий научный сотрудник НИО, доцент кафедры сопротивления материалов МГИУ. Область научных интересов – численные методы статического и динамического анализа машиностроительных конструкций, расчеты на прочность несущих систем машин. Автор более 60 научных работ.