УДК 539.3

ДЕЯКІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СЛАР ВЕЛИКОГО ПОРЯДКУ, ВИНИКАЮЧИХ ПРИ РОЗВ'ЯЗАННІ ЗАДАЧ ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ МЕТОДОМ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Бувайло Д.П., к.ф.-м.н., ст. викладач, Гоменюк С.І., к. ф.-м. н, доцент

Запорізький державний університет

Однією з істотних важкостей, що виникають при чисельній реалізації розв'язання контактних задач теорії пружності методом скінченних елементів (МСЕ), є розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) великого порядку. Більшість існуючих методів розв'язання таких систем розроблені в припущенні того, що матриця **A** має стрічкову структуру, причому ширина стрічки m<<n, де n – порядок **A.** Однак, при використанні МСЕ для чисельного розв'язання контактних задач можливі випадки, коли ширина стрічки m→n. Більшість існуючих профільних або стрічкових методів [1, 2] для розв'язання СЛАР з такими матрицями коефіцієнтів непридатні. Доводиться або використовувати ітераційні методи, або використовувати більш складні методи стиску трикутного множника матриці **A.**

Розв'язання про застосування ітераційних або прямих методів розв'язання СЛАР необхідно приймати на основі аналізу структури досліджуваної математичної задачі. Прямі методи розв'язання СЛАР більш вигідно використовувати, якщо необхідно розв'язувати багато однакових систем із різними правими частинами, або якщо матриця **A** не є позитивно-визначеної. Крім того, існують завдання з такою структурою матриці, для котрої прямі методи завжди краще, ніж ітераційні.

Для дослідження задач механіки твердого тіла, що деформується, створена інструментальна система FORTU [5]. У цій статті описуються методи, використовуються в інструментальній системі для розв'язання великих розріджених СЛАР.

МЕТОД КОМПАКТНОГО ЗБЕРЕЖЕННЯ МАТРИЦІ ЖОРСТКОСТІ

Матриця жорсткості, що утворюється при застосуванні МСЕ, має симетричну структуру, що дозволяє в загальному випадку берегти тільки верхню трикутну частину матриці. Однак для завдань із великою кількістю невідомих це так само приводить до проблеми недостачі пам'яті. Існують різні схеми збереження логічно ненульових елементів розріджених матриць: координатна схема, скомпресована рядкова (стовпчикова) схема та ін. Для симетричних матриць, що утворюються при моделюванні задач теорії пружності, саму компактну структуру має симетрична компактна стовпчикова схема (CCS) [1]. На основі аналізу структури дискретизації області на кінцеві елементи будується граф зв'язків між невідомими. Додатково введений облік блочності зв'язків. Кожному зв'язку ставиться у відповідність квадратний подблок, розмір якого дорівнює кількості величин, що варіюються, (переміщень) для кожного вузла скінченно-елементної моделі.

ІТЕРАЦІЙНІ МЕТОДИ

Для розв'язання СЛАР високого порядку, матриця коефіцієнтів якої зберігається в компактному вищеописаному виді, найбільш зручним ітераційним методом є метод Ланцоша (варіант методу сполучених градієнтів), розрахункова схема якого має вигляд:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{s}_1 = \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_{i-1} - \mathrm{a}_i \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i, \quad \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_{i-1} - \mathrm{a}_i \boldsymbol{s}_i, \\ &\boldsymbol{s}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i + \mathrm{b}_i \boldsymbol{s}_i, \quad i = 1,2,..., \end{aligned} \tag{1}$$

де

$$\mathrm{a}_i = (\boldsymbol{r}_{i-1}, \boldsymbol{r}_{i-1})/(\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i, \boldsymbol{s}_i), \quad \mathrm{b}_i = (\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i)/(\boldsymbol{r}_{i-1}, \boldsymbol{r}_{i-1}).$$

Перевагою такого методу є його висока швидкість збіжності до точного розв'язання. Крім того, доведено, що він має властивість «квадратичного закінчення», тобто для позитивно визначеної матриці можна гарантовано одержати точне розв'язання при кількості ітерацій k < n. Розмір необхідної пам'яті на кожній ітерації не змінюється, тому що не потрібно перетворення матриці **A**. Як критерій зупинки цього ітераційного процесу звичайно використовують співвідношення

$$\left|(\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i, \boldsymbol{s}_i)\right| \le \varepsilon, \qquad (2)$$

де ε – задана точність. Як інший критерій збіжності іноді зручніше використовувати середньоквадратичну різницю між розв'язаннями, отриманими на сусідніх ітераціях:

$$\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)})^2} \le \varepsilon \ . \qquad (3)$$

Середньоквадратичну різницю необхідно контролювати при виконанні кожних k наперед заданих ітерацій.

Окремо варто розглянути проблему вибору початкового наближення x_0. Доводиться, що при позитивно визначеній матриці **A**, ітераційний процес (1) завжди сходиться при будь-якому виборі початкового наближення. При розв'язанні контактних задач, коли для уточнення граничних умов у зоні передбачуваного контакту потрібна велика кількість розв'язків СЛАР, як початкове наближення для першого розрахунку використовується права частина системи, а для кожного наступного перерахування – розв'язання, отримане на попередньому. Така схема дозволяє значно скоротити кількість ітерацій, необхідних для досягнення заданої точності (2) або (3).

ПРЯМІ МЕТОДИ

Прямі методи засновані на розкладанні матриці A у твір трикутних матриць і вимагають збереження трикутного множника (цілком або частково). Метод Холеського [2] використовується для позитивно визначених матриць:

$$A=L\cdot L^T,$$

метод Мартіна [2] використовується як для позитивно визначених, так і для ермітових матриць:

$$A=L\cdot D\cdot L^T.$$

Тут L – нижня трикутна матриця, D – діагональна матриця.

Відомі такі чотири схеми збереження трикутного множника L [2] (приведені в порядку зростання їхньої ефективності і складності):

- стрічкова
- профільна
- деревоподібна розбивка для асиметричного розкладання
- універсальна компактна схема

Профільну схему збереження можна використовувати тільки для невеликих задач. Для деяких скінченно-елементних завдань середнього розміру ефективно використовувати деревоподібну блокову розбивку для асиметричного розкладання і його варіант – метод рівнобіжних перетинів. Ця схема дозволяє відмовитися від збереження частини трикутного множника L(A) в обмін на збереження відповідних частин вихідної матриці і збільшення об'єму обчислень. Для скінченно-елементних систем високого порядку найбільш підходить універсальна компактна схема Шермана, що цілком використовує ненульові елементи трикутного множника [1].

Нехай A – задана симетрична матриця, а P – матриця перестановки. Хоча структури ненульових елементів A і PAPT різні, їхні розміри однакові: $|\mathrm{Nonz}(A)| = |\mathrm{Nonz}(PAP^T)|$. Однак між кількостями ненульових елементів $|\mathrm{Nonz}(L(A))|$ і $|\mathrm{Nonz}(L(PAP^T))|$ для деякої перестановки P різниця може бути дуже великою.

В ідеалі хотілося б знайти перестановку P^*, яка б мінімізувала розмір структури ненульових елементів матриці заповнення: $|\mathrm{Nonz}(L(P^*AP^{*T}))| = \min |\mathrm{Nonz}(L(PAP^T))|$ [3]. Доведено [6], що для симетричної матриці це завдання має складність NP. Тому доводиться удавати до евристичних алгоритмів, які б давали упорядкування з прийнятно малої, хоча і не обов'язково мінімальним розміром $|\mathrm{Nonz}(L(PAP^T)|$. Дотепер немає ефективного алгоритму для відшукання такої оптимальної перестановки P^* у випадку довільної симетричної матриці. Існуючі алгоритми сильно залежать від їхньої машинної реалізації і звичайно є комерційними розробками. Для розв'язання проблеми мінімізації заповнення і суміжних питань в останні роки розроблені пакети прикладних програм SPARSLIB, METIS, SCOTCH, CHACO, PARTI [9]. Для вітчизняних користувачів вони практично недоступні.

Самою популярною схемою зменшення заповнення серед використовуваних є алгоритм мінімального ступеня (MD) [7,8]. В основі алгоритму – наступне спостереження. Нехай позначені вузли $\{x_1,x_2,...,x_{i-1}\}$. Число ненульових елементів у цих стовпцях надалі не змінюється. Ясно, що для зменшення числа ненульових елементів i-го стовпця в ще не факторизованій матриці на місце i-го стовпця потрібно перевести стовпець із найменшим числом ненульових елементів. Іншими словами, схему можна розглядати як метод зменшення заповнювання матриці шляхом локальної мінімізації $|\mathrm{Nonz}(Lk)|$ для матриці, що розкладається. Початковий успіх MD-заснованих евристик викликав їхній інтенсивний розвиток, поліпшення часу

виконання і якості. Кращими представниками родини MD-заснованих евристик на сьогодні є multiple minimal degree (MMD) алгоритм (George, Liu) [8] і approximate minimal degree (AMD) алгоритм (Davis, Amestoy, Duff) [7]. Авторами запропоновані і реалізовані в інструментальній системі FORTU два алгоритми на основі евристики мінімального ступеня й агресивної абсорбції MMD і AMD. Для представлення послідовності графів виключення використовувалася структура фактор-графа.

Крім алгоритму мінімального ступеня існує інша велика група евристичних алгоритмів для мінімізації універсальної компактної схеми, відома під загальною назвою методу вкладених перетинів (GP). Ці методи спрямовані на пошук ефективних сепараторів у графах і рекурсивний розподіл завдання на вкладені підзадачі. В останні роки інтенсивно розвиваються багаторівневі алгоритми – швидкий і ефективний засіб визначення ефективних роздільників у графі. Типовий багаторівневий алгоритм поділу графа має чотири компоненти: стягування, початкове виділення роздільника в грубому графі, рафінування графа й удосконалення роздільника. Недавні роботи авторів Gupta [9], Ashcraft і Liu [10], Karypis і Kumar [11], показують, що GP-засновані евристики здатні до створення упорядкувань кращої якості, чим MD-засновані евристики для задач скінченого елемента при декілька гірших, але того ж порядку, витратах часу. Для інструментальної системи FORTU авторами запропоновані і реалізовані два евристичних алгоритми вкладених перетинів із визначенням сепараторів по багаторівневій схемі, запропоновані евристичні вирішальні правила для етапів стягування, початкового виділення роздільника, удосконалення роздільника. Ці пропозиції спрямовані на отримання більш збалансованого грубого графа на етапі стягування шляхом модифікації алгоритму HEM [11], що призводить до ліпшого врахування глобальних якостей первісного графа у стягнутому міні-графі. На етапі початкового виділення роздільника використовується евристика, що робить декілька спроб і обирає найкращій роздільник. Для стягнутого грубого графа ці декілька спроб потребують незначний відсоток від загальних витрат на реалізацію алгоритму, але можуть значно удосконалити первісний роздільник.

ЧИСЕЛЬНІ ЕКСПЕРИМЕНТИ

Рисунки 1-6 були створені за допомогою інструментальної системи FORTU. Вони ілюструють особливості різних евристик мінімізації заповнення на прикладі трьох скінченно-елементних моделей. За допомогою градації відтінку (від чорного до білого) показаний порядок виключення вузлів при розкладанні матриці. Добре видно характерні риси, властиві родинам евристик GP і MD. MD-засновані евристики як типові представники алгоритмів локальної мінімізації не враховують глобальну структуру об’єкта і здійснюють хаотичну вибірку кандидатів на виключення. GP-засновані евристики намагаються шляхом процесу стягування зібрати істотну інформацію про весь об'єкт і звичайно одержують досить ефективні роздільники.

Додатково як приклад розглянемо завдання про контактну взаємодію оболонкової конструкції і ложемента [4] у тривимірній постановці (мал. 1). Для дискретизації оболонки і ложемента було використано 2016 КЭ у формі лінійного тетраедра і 880 вузлів. Це завдання розв'язувалося ітераційним методом Ланцоша (обраний критерій збіжності (4), ε=10-4) і прямим методом квадратного кореня з використанням різних евристик мінімізації заповнення. Зіставлення результатів розрахунку наведено в таблиці 1.

Варто помітити, що при використанні критерію збіжності (4) для методу Ланцоша і виборі в якості початкового наближення результати попереднього розрахунку, кількість перерахувань необхідних для досягнення заданої точності різко скоротилося. Так при виборі в якості початкового наближення правої частини, кількість ітерацій для першого розрахунку склало – 450. Для кожного наступного розрахунку при виборі початкового наближення результатів попереднього розрахунку кількість ітерацій не перевищувала 100.

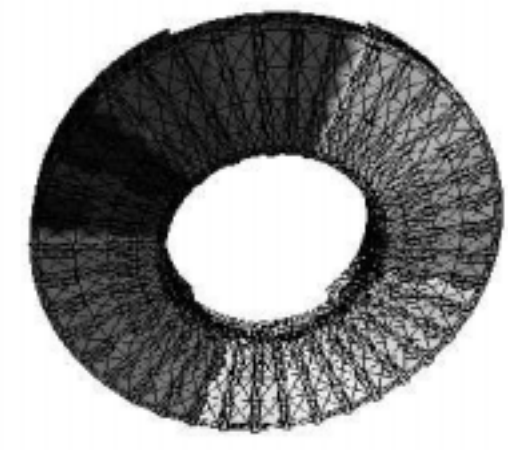

Рис. 1 – Упорядкування GP

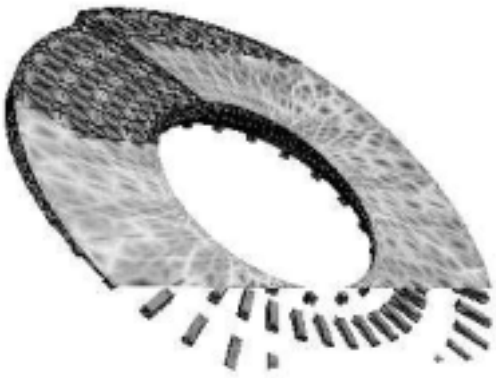

Рис. 2 – Упорядкування MD (частково показані нутрощі об'єкта)

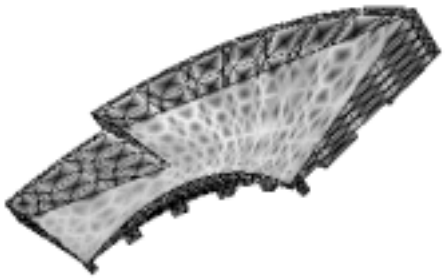

Рис. 3 – Упорядкування MD (частково показані нутрощі об'єкта)



Рис. 4 – Упорядкування GP

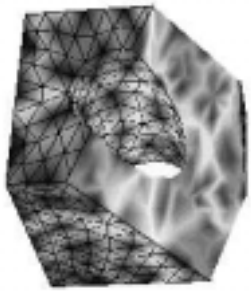

Рис. 5 – Упорядкування MD (частково показані нутрощі об'єкта)

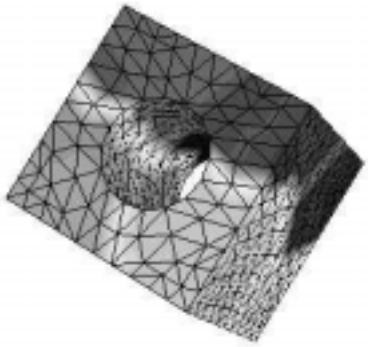

Рис. 6 – Упорядкування GP

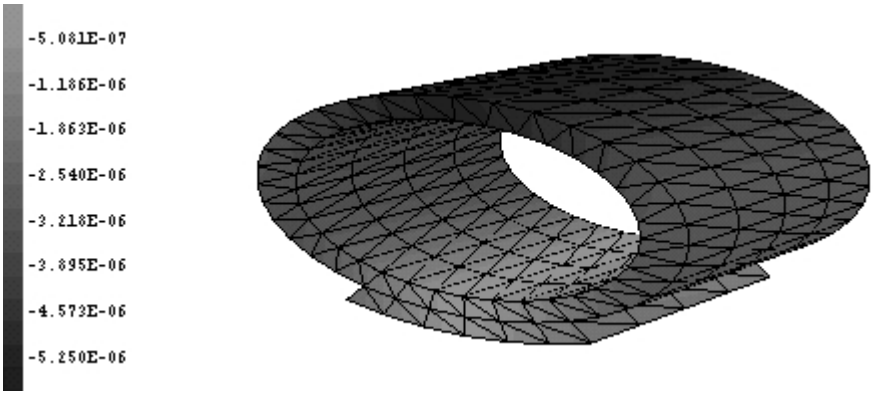

Рис. 7 – контактна взаємодія оболонкової конструкції і ложемента

Таблиця 1 – Зіставлення результатів

Метод розв’язання	Об'єм пам'яті, Mb	Час розв’язання, сек
ітераційний метод Ланцоша	0,417	35,45
алгоритм мінімального ступеня з вузловою абсорбцією в дусі MMD	2,182	25,42
алгоритм мінімального ступеня з елементною абсорбцією в дусі AMD	2,143	24,34
алгоритм вкладених перетинів з удосконаленням реберного роздільника	1,892	16,44
алгоритм вкладених перетинів з удосконаленням вузлового роздільника	1,874	16,05

ВИСНОВКИ

Запропоновано метод компактного збереження великих розріджених СЛАР для ітераційних алгоритмів їхній розв’язання на основі CCS і блочности зв’язків. Запропоновано декілька алгоритмів мінімізації заповнення компактної схеми Шермана на основі евристик MD і GP для прямих методів розв’язання СЛАР великого порядку. Це дозволило скоротити час рахунку і витрати пам'яті при вирішенні практично важливих завдань теорії пружності методом скінченних елементів. Створена бібліотека підпрограм апробувалася в системі FORTU [5] при розв’язанні тривимірних контактних задач із великою кількістю невідомих (до 100000 скінчених елементів) і показала свою високу ефективність.

ЛІТЕРАТУРА

1. F.G. Gustavson, “Some basic techniques for solving sparse matrix algorithms”/ edited by D.J.Rose and R.A.Willoughby.- Plenum Press, New York, 1972
2. Джордж А, Лиу Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений.- М.: Мир, 1984.
3. D. J. Rose, “A graph theoretic study of the numerical solution of sparse positive definite systems of linear equations”, New York, Academic Press, 1972
4. Мосаковский В.И., Гудрамович В.С., Макеев Е.М. Контактные задачи теории оболочек и стержней.- М.: Машиностроение, 1978.
5. Гоменюк С.И., Толок В.А. Инструментальная система анализа задач механики деформированного твердого тела// Придніпровський науковий вісник.- 1997.-№ 4.
6. M. Yannakakis, "Computing the Minimum Fill-In Is NP-Complete," SIAM J. Alg. Discrete Meth. 2, 77-79 (1981)
7. Timothy A. Davis, Patrick Amestoy, and Iain S. Duff, "An Approximate Minimum Degree Ordering Algorithm," Technical Report TR-94-039, Computer and Information Sciences Department, University of Florida, Gainesville, FL, 1994.
8. Alan George and Joseph W.-H. Liu, "The Evolution of the Minimum Degree Ordering Algorithm," SIAM Rev. 31, 1-19 (March 1989).
9. Anshul Gupta, "Graph Partitioning Based Sparse Matrix Ordering Algorithms for Finite-Element and Optimization Problems," Proceedings of the Second SIAM Conference on Sparse Matrices, October 1996.
10. Cleve Ashcraft and Joseph W.-H. Liu, "Robust Ordering of Sparse Matrices Using Multisection," Technical Report CS 96-01, Department of Computer Science, York University, Ontario, Canada, 1996.
11. George Karypis and Vipin Kumar, "METIS: Unstructured Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering System," Technical report, Department of Computer Science, University of Minnesota, Minneapolis, 1995.