УДК 519.6

ОБЗОР ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ СТРОИТЕЛЬНОЙ МЕХАНИКИ И ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ СХЕМЫ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ ЗАДАЧ БОЛЬШОЙ РАЗМЕРНОСТИ

д-р техн. наук, проф. С.П. КУНДАС
(Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова, Минск);
канд. техн. наук, доц. Д.О. ГЛУХОВ, Т.М. ГЛУХОВА
(Полоцкий государственный университет)

В статье приводится классификация и анализ численных методов решения систем линейных уравнений, полученных в результате применения метода конечных элементов для расчета напряженно-деформированного состояния строительных конструкций. Проиллюстрирован алгоритм метода сопряженных градиентов. Рассмотрены особенности применения прямых и итерационных численных методов решения систем линейных алгебраических уравнений, способы повышения числа обусловленности матриц. Проведено исследование методов хранения разреженных матриц большой размерности. По результатам исследований сделан вывод о необходимости реализации нескольких методов (прямого и итерационного) для расчета конструкций, применения методов предобуславливания и использования ассоциативных контейнеров при хранении разреженных матриц в оперативной памяти компьютера.

Метод конечных элементов в настоящий момент является наиболее популярным инструментом численного исследования напряженно-деформированного состояния строительных конструкций [1]. Основное уравнение метода конечных элементов для вычисления перемещений имеет вид:

$$F = \boldsymbol{K}\Delta, \tag{1}$$

где F – вектор внешней нагрузки; $\boldsymbol{K}$ – матрица жесткости системы; Δ – вектор перемещений.

В общем случае система уравнений (1) является нелинейной, так как существует нелинейная зависимость между жесткостью и внутренними усилиями (а следовательно и перемещениями). Большинство же современных программных комплексов производят расчет в упрощенной форме. В этом случае матрица жесткости не изменяется, а система уравнений, полученная методом конечных элементов, является системой линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). При этом матрица жесткости $\boldsymbol{K}$ является симметричной положительно определенной матрицей высокого порядка. Размерность матрицы $\boldsymbol{K}$ зависит от расчетной схемы конструкции: геометрических параметров и способа разбиения на конечные элементы.

Согласно требованиям, которые выдвигаются к программному обеспечению для расчета напряженно-деформированного состояния строительных конструкций, для построения расчетных схем необходимо до 1 млн. конечных элементов. При этом система уравнений (1) метода конечных элементов содержит до 6 млн. неизвестных. Расчет подобных систем даже в линейной форме требует применения специальных методов. Кроме того, матрицы жесткости системы могут оказаться плохо обусловленными, что может значительно повлиять на точность полученных в результате расчета данных. В этом случае прибегают к методам предобуславливливания матриц.

Методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Методы решения СЛАУ делятся на прямые и итерационные. К прямым методам относят: решение систем линейных алгебраических уравнений при помощи правила Крамера, метод Гаусса и метод Гаусса с выбором главного элемента и др.

Прямые методы решения СЛАУ дают возможность вычислять неизвестные величины за заранее известное количество операций. При этом решение выражается в виде точных формул, благодаря чему прямые методы также называют точными. Недостаток прямых методов – необходимость хранения всей матрицы системы в оперативной памяти, накопление погрешности в ходе расчетов и неэффективное использование особенностей самой матрицы, таких как симметричность и разреженность.

Итерационные методы – методы, которые на каждом шаге итерации последовательно приближают решение к более точному по сравнению с предыдущим шагом, начиная с некоторого начального приближения. Количество операций заранее неизвестно, итерационный процесс заканчивается по достижении некоторой заданной точности.

Итерационный процесс в таких методах организован следующим образом:

$$\Delta_{i+1} = \Delta_i - \boldsymbol{H_i}(\boldsymbol{K}\Delta_i - \mathrm{F}), \quad \text{или} \quad \Delta_{i+1} = T_i\Delta_i + \boldsymbol{H_i}\mathrm{F}), \tag{2}$$

где $\boldsymbol{H_i}$ – невырожденная матрица; $T_i = \boldsymbol{E} - \boldsymbol{H_i}\,\boldsymbol{K}$ – оператор i-того шага итерационного процесса; $\boldsymbol{E}$ – единичная матрица.

Среди итерационных методов можно выделить:

- метод последовательных приближений;
- метод простой итерации (метод Якоби);
- одношаговый циклический процесс (метод Зейделя);
- метод Гаусса – Зейделя;
- метод последовательной релаксации;
- метод минимальных невязок;
- метод сопряженных градиентов и др.

Многочисленные исследования алгоритмов показывают, что для итерационных методов продолжительность решения задачи возрастает с увеличением размерности значительно медленнее, чем для прямых методов. Отсюда следует, что, начиная с некоторой размерности задачи, итерационный метод становится более быстрым, чем прямой. Указанная закономерность носит общий характер [2]. Однако надо отметить, что возможны случаи, когда итерационные методы не могут дать удовлетворительное решение в связи с плохой обусловленностью матрицы жесткости [2, с. 565], а прямые методы при этом могут выполнить расчет за вполне приемлемое время. Из этого следует, что при реализации метода конечных элементов рекомендуется применение как прямых, так и итерационных методов решения СЛАУ. При этом вероятность того, что итерационные методы окажутся более эффективными, возрастает с ростом размерности задачи (особенно при размерности более 200 000 уравнений).

Метод сопряженных градиентов

Среди итерационных методов широкое распространение имеет метод сопряженных градиентов, которые позволяют находить решение за число шагов, не превосходящее порядка СЛАУ. Итерационный процесс метода сопряженных градиентов организован следующим образом [3]:

$$\Delta_{i+1} = \Delta_i + \alpha_i \mathrm{p}_i \quad i = 0,1,\ldots,N-1,$$

где i – номер итерации; N – порядок системы; p_i – вектор сопряженного направления; α_i – коэффициент, значение которого на данной итерации выбирается из условия

$$f(\Delta_i + \alpha_i p_i) = \min_{\alpha} f(\Delta_i + \alpha_i p_i)$$

и в случае минимизации квадратичной функции имеет вид:

$$\alpha_i = (r_i, p_i)/(\boldsymbol{K}p_i, p_i).$$

В этом соотношении r_i – вектор невязок системы, т.е.

$$\mathrm{r}_i = \mathrm{F} - \boldsymbol{K}\Delta_i.$$

Методы предобуславливания матриц

Важной составляющей расчета являются также и методы предобуславливания. Исследования показывают, что один и тот же итерационный метод может достичь требуемой точности в несколько раз быстрее только благодаря эффективным методам предобуславливания [2, с. 564].

Предобуславливание состоит в построении положительно определенной матрицы $\boldsymbol{M}$, на которую умножается система линейных алгебраических уравнений (1). При этом число обусловленности матрицы коэффициентов системы повышается по сравнению с исходной. Для предобуславливания выбирается такая матрица, которая бы хорошо аппроксимировала матрицу $\boldsymbol{K}^{-1}$[4].

Некоторые формы предобуславливания:

- симметричный предобуславливатель Гаусса – Зейделя: $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$, где $\boldsymbol{L}$ – нижняя треугольная часть матрицы жесткости $\boldsymbol{K}$;
- семейство методов незавершенной факторизации Холецкого: $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$, где $\boldsymbol{L}$ – нижняя треугольная матрица, возникающая как результат неполной факторизации Холецкого матрицы жесткости $\boldsymbol{K}$;
- предобуславливание типа элемент за элементом, где предобуславливатель представляется как произведение специфических матриц;
- многоуровневые агрегатные методы.

Наиболее эффективными из перечисленных методов по результатам исследований является метод сопряженных градиентов с агрегатным многоуровневым предобуславливанием [2].

Хранение разреженных матриц

Для реализации расчетов напряженно-деформированного состояния строительных конструкций на вычислительной технике немаловажной задачей является также подбор оптимального способа хранения данных и способа доступа к ним.

Система уравнений (1), полученная методом конечных элементов, имеет большую размерность (до 6 млн. неизвестных). Следовательно, вопрос экономного расходования ресурсов стоит перед разработчиком программного обеспечения достаточно остро.

Матрица жесткости ***K*** является симметричной положительно определенной разреженной матрицей. Для хранения подобных матриц не рационально использовать хранилища данных (массивы, контейнеры) в оперативной памяти с полным набором нулевых и ненулевых элементов.

Существует множество схем хранения разреженных матриц, которые обеспечивают наиболее оптимальное размещение данных, обеспечивая хранение лишь ненулевых элементов матрицы.

Схема Кнута. Ненулевые элементы хранятся в компактной форме и в произвольном порядке в одномерном массиве AN. Информация о положении ненулевых элементов может храниться двумя дополнительными параллельными одномерными массивами I и J, где для каждого ненулевого элемента содержатся его строковые и столбцовый индексы. Массив NR содержит указатели следующего ненулевого элемента той же строки, а массив NC – следующего ненулевого элемента того же столбца. Пять массивов AN, I, J, NR и NC имеют одинаковую длину, и их одноименные позиции соответствуют друг другу; JR и JC – массивы, содержащие указатели входа для строк и столбцов. Схема Кнута требует пяти ячеек памяти для каждого ненулевого элемента A плюс к этому указатели входа для строк и столбцов. Подобная схема весьма неэкономна.

Схема Ларкума для хранения симметричных положительно определенных матриц называется «вперед по строке – назад по столбцу». Хранятся только диагональ и верхний треугольник матрицы; нужен лишь один массив указателей входа, которые отсылают к диагональным элементам. От каждого диагонального элемента начинаются два списка:

- один описывает часть соответствующей строки вправо от диагонали и проходится в прямом направлении;
- другой описывает часть соответствующего столбца над диагональю и проходится в обратном направлении, т.е. снизу вверх.

Разреженный строчный формат – это одна из наиболее широко используемых схем хранения разреженных матриц. Эта схема предъявляет минимальные требования к памяти. Значения ненулевых элементов матрицы и соответствующие столбцовые индексы хранятся в этой схеме по строкам в двух массивах: соответственно в AN и JA. Используется также массив указателей IA, отмечающих позиции массивов AN и JA, с которых начинается описание очередной строки. Дополнительная компонента в IA содержит указатель первой свободной позиции в JA и AN (графики с префиксом K на рисунках 1, 2).

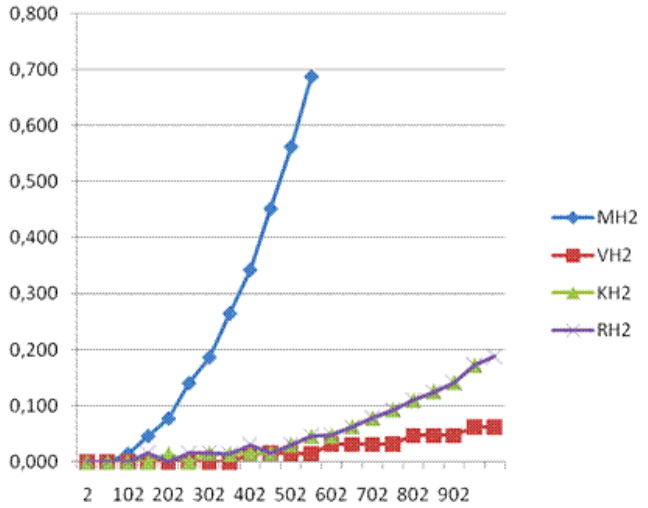
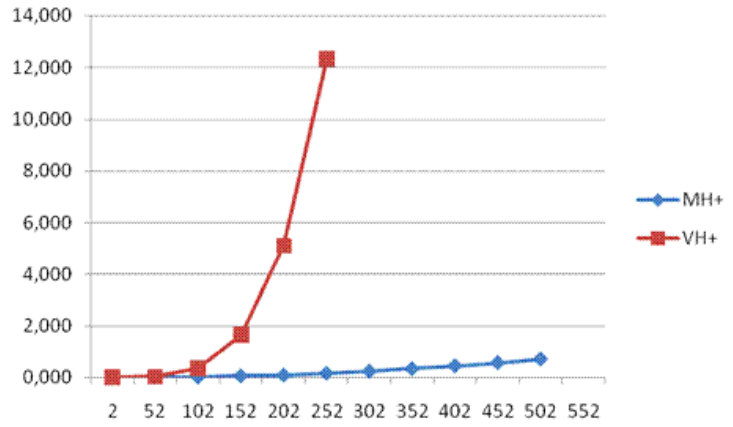


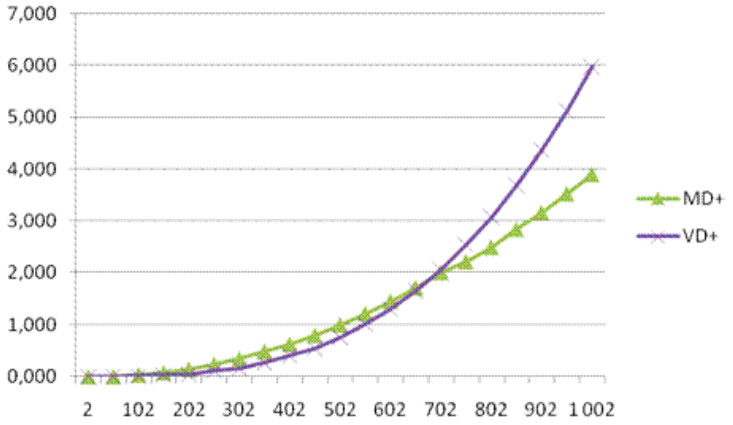
Рис 1. Зависимость времени выполнения простейшей операции над неразреженными матрицами от размерности

Существует множество **других модификаций схемы Кнута**. Так, значения ненулевых элементов матрицы и соответствующие им строковые и столбцовые индексы могут храниться последовательно в трех массивах: AN, IA, JA соответственно (графики с префиксом R на рисунках 1, 2). Либо модификация схемы кнута, когда матрица AN хранит ненулевые элементы, IA – соответствующие строковые индексы, а JA – количество элементов в каждой строке матрицы (графики с префиксом V на рисунках 1, 2).

Кроме того, когда существует возможность использовать **ассоциативные массивы**, позволяющие хранить пары (ключ, значение). Наиболее популярны реализации, основанные на различных деревьях поиска. Ключом в данном случае могут выступать индексы ненулевых элементов матрицы. Достоинство такого подхода в том, что для доступа к определенному элементу в дереве выполняется гораздо меньше операций (графики с префиксом M на рисунках 1, 2).



а)



б)

Рис. 2. Зависимость времени выполнения сложения нескольких неразреженных (а) и разреженных (б) матриц от размерности

Было протестировано несколько вариантов схем хранения данных. По результатам экспериментов получены следующие:

1) простейшие операции (умножение элементов матрицы на число) над неразреженными матрицами наиболее эффективно выполняются с помощью модифицированной схемы Кнута (график VH2 на рисунке 1). Наиболее неудачной схемой хранения данных является древовидное представление данных (график MH2 на рисунке 1);

2) однако на более сложных операциях (сложение двух матриц) древовидная схема дает значительное преимущество на неразреженных матрицах (график MH+ на рисунке 2, а) и начиная с определенного момента на разреженных матрицах (график MD+ на рисунке 2, б).

Заключение

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о целесообразности применения метода сопряженных градиентов совместно с методами предобуславливания для решения систем линейных уравнений высокого порядка, полученных при моделировании строительных конструкций методом конечных элементов. При этом для хранения матриц в оперативной памяти рациональнее использовать древовидные структуры. Такую структуру реализует, например, ассоциативный контейнер map стандартной библиотеки шаблонов STL на языке программирования C++. Кроме того, контейнер предоставляет готовый набор функций для взаимодействия с контейнером и его содержимым.

ЛИТЕРАТУРА

1. Игнатюк, В.И. Метод конечных элементов в расчетах стержневых систем: учеб. пособие / В.И. Игнатюк. – Брест: БГТУ, 2004. – 172 с.
2. Перельмутер, А.В. Расчетные модели сооружений и возможность их анализа / А.В. Перельмутер, В.И. Сливкер. – Киев, Изд-во «Сталь», 2002. – 600 с.
3. Турчак, Л.И. Основы численных методов: учеб пособие / Л.И. Турчак, П.В. Плотников. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 304 с.
4. Шкурко, А.А. Разработка и реализация эффективных технологий параллельного решения систем линейных алгебраических уравнений в стандарте MPI / А.А. Шкурко. – Минск: БГУ, 2003. – 61 с.

Поступила 04.06.2010

REVIEW OF NUMERICAL METHOD FOR CALCULATING EQUATIONS OF STRUCTURAL MECHANICS AND CHOICE OF THE OPTIMAL STORAGE SOLUTIONS FOR SYSTEMS OF LARGE DIMENSIONALITY

S. KUNDAS, D. GLUKHOV, T. GLUKHOVA

The article provides a classification and analysis of numerical methods for solving systems of linear equations derived from the finite element method for calculating the stress-strain state of building constructions. The use of nonlinear conjugate gradient method was shown. Were considered features of direct and iterative numerical methods for solving systems of linear equations, examined ways to improve the condition numbers of matrices. We study methods of storing sparse matrices of large dimension. As a result of studies concluded the need to implement multiple methods (direct and iterative) to calculate the structures, the use of preconditioned methods and the use of associative containers for storage of sparse matrices in computer memory.