УДК 519.61

doi.org/10.15407/fmmit2023.37.093

Достовірність комп'ютерних розв'язків при дослідженні власних коливань

Олександр Попов[1], Олексій Чистяков[2]

[1] д. ф.-м. н., с. н. с., Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, пр-т Академіка Глушкова, 40, 03187, Київ, e-mail: alex50popov@gmail.com
[2] к. ф.-м. н., с. н. с., Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, пр-т Академіка Глушкова, 40, 03187, Київ, e-mail: alexej.chystyakov@gmail.com

В роботі розглядаються питання достовірності результатів чисельного моделювання власних коливань конструкцій та споруд на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень. На основі аналізу методу скінченних елементів для дискретизації задач про власні коливання, методів комп'ютерного дослідження математичних властивостей, розв'язування та дослідження достовірності розв'язків часткової узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень (АПВЗ), яка виникає в результаті дискретизації, отримано апостеріорні оцінки похибок власних значень і власних векторів узагальненої проблеми з симетричними матрицями, одна з яких додатно визначена. Запропоновано та обґрунтовано алгоритми (які використовують змінну розрядність) розв'язування методом ітерацій на підпросторі часткової узагальненої АПВЗ та апостеріорного комп'ютерного дослідження її розв'язків.

Ключові слова: *алгебраїчна проблема власних значень, аналіз міцності, багаторозрядна арифметика, власні коливання, достовірність результатів, змінна розрядність, паралельні обчислення.*

Вступ. При комп'ютерному аналізі міцності різноманітних конструкцій та споруд важливе місце займають дослідження власних коливань цих об'єктів. Отримані в результаті розв'язання розрахункової задачі частоти та форми власних коливань використовуються безпосередньо для аналізу міцності або, наприклад, для розв'язування методом Фур'є задач, які виникають при моделюванні динаміки складних об'єктів. Тому особливої ваги набувають проблеми достовірності отриманих комп'ютерних розв'язків. Відповідна розрахункова (дискретна) задача про власні коливання – це алгебраїчна проблема власних значень (АПВЗ), як правило, узагальнена. При цьому дискретні моделі, особливо тривимірні, використовують надвелику кількість (може перевищувати 10^7) степенів свободи, а матриці таких АПВЗ мають розріджену структуру, наприклад, блочно-тридіагональну. Очевидно, що розгляд проблем в такій постановці потребує використання нових ефективних адаптивних високопродуктивних алгоритмів для розв'язування з оцінками достовірності дискретних задач. Одним із засобів як забезпечення достовірності результатів, так і підвищення ефективності використання обчислювального ресурсу є застосування багаторівневої моделі паралельних обчислень [1] та змінної (мішаної) розрядності [2]. В цій роботі розглядаються питання достовірності результатів чисельного моделювання власних коливань конструкцій та споруд на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень.

1. Постановки задач

Математично задача про власні коливання конструкції з використанням принципу можливих зміщень може бути поставлена у вигляді варіаційної задачі (див., напр., [2]): знайти вектор-функцію $u\in U_0$, яка для будь-якої вектор-функції $v\in U_0$ задовольняє інтегральній тотожності $\boldsymbol{a}(u,v) = \lambda\boldsymbol{b}(u,v)$, де U_0 – нескінченновимірний функціональний простір можливих переміщень, симетричні білінійні функціонали $\boldsymbol{a}(u,v)$, $\boldsymbol{b}(u,v)$ пропорційні відповідно потенційній і кінетичній енергіям деформації.

Теоретичною основою більшості програмних засобів для розрахунку міцності конструкцій є метод скінченних елементів (МСЕ) [3]. Дискретизація варіаційної задачі МСЕ, полягає в заміні нескінченновимірного простору допустимих функцій U_0 його скінченновимірним підпростором U_0^{h}. Вектор-функції з підпростору U_0^{h} можуть бути представлені у вигляді лінійної комбінації $u^h(\chi)=\sum_{i=1}^{n} x_i\varphi_i(\chi)$ базисних вектор-функцій φ_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$, звичайно кусково-поліноміальних, які задовольняють головним граничним умовам.

Тоді білінійні функціонали у скінченновимірному просторі U_0^{h} є відповідно білінійними формами коефіцієнтів (вузлових параметрів) x_i $\boldsymbol{a}(u^h,v^h) \equiv y^TAx$, $\boldsymbol{b}(u^h,v^h) \equiv y^TBx$, де x і y – вектори вузлових параметрів відповідно функцій u^h і v^h, а елементи матриць жорсткості (A) та мас (B) обчислюються за формулами $(i, j = 1, 2, \ldots, n)$ $a_{ij} = \boldsymbol{a}(\varphi_i, \varphi_j)$, $b_{ij} = \boldsymbol{b}(\varphi_i, \varphi_j)$.

Таким чином, враховуючи довільність вектора y, отримуємо відповідну дискретну задачу [3, 4] – узагальнену АПВЗ

$$Ax = \lambda\mathrm{h}Bx. \tag{1}$$

Враховуючи, що базисні функції підпростору МСЕ U_0^h вибирають так, щоб вони були відмінними від нуля лише на декількох скінченних елементах, структура матриць з (1) є в загальному випадку розрідженою і визначається нумерацією вузлових параметрів. Крім того, матриці дискретних задач є симетричними, додатно визначеними або додатно напіввизначеними.

2. Розв'язування узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень.

В задачі на власні коливання, як правило, необхідно знайти лише невелику кількість власних форм (порівняно з порядком задачі), які відповідають мінімальним власним значенням. Тому відповідна часткова проблема власних значень (1) може розв'язуватися методом ітерацій на підпросторі [4]. Цей метод полягає в побудові послідовності підпросторів E_t (t = 1, 2, ...), яка збігається до підпростору E_∞, що містить шукані власні вектори.

Алгоритми розв'язування узагальненої часткової АПВЗ (1) з розрідженими симетричними матрицями (додатно визначеної A) та (додатно напіввизначеної B) методом ітерацій на підпросторі для паралельних комп'ютерів різної архітектури представлено в [4, 5]. В алгоритмах виділяються по чотири підзадачі.

1. Розвинення розрідженої симетричної додатно визначеної матриці A, використовуючи, наприклад, паралельні алгоритми LDL^T-розвинення [4], а також арифметику змінної розрядності [2] для підвищення ефективності при збереженні точності.
2. Формування розподіленої між паралельними процесами матриці Y_0 початкових векторів. Виконується процесами вищого рівня паралелізму, використовуючи, наприклад, алгоритм запропонований в [4].
3. Ітераційний процес в якому для кожного $t = 1, 2, \ldots$ виконуються розподілені між процесорними пристроями операції: знаходження розв'язку СЛАР $AX_t = Y_{t-1}$ (використовуючи розвинення матриці A); обчислення прямокутної матриці $W_t = BX_t$; обчислення додатно визначених проекцій матриць A та B на підпростір E_t – $A_t = X_t^T Y_{t-1} \equiv X_t^T AX_t$, $B_t = X_t^T W_t \equiv X_t^T BX_t$; розв'язування повної АПВЗ $A_t Z_t = B_t Z_t \Lambda_t$, де $\Lambda_t = diag(\lambda_i)$; перевірка умов закінчення ітераційного процесу (наприклад, $|(\lambda_i^{(t)} - \lambda_i^{(t-1)})/\lambda_i^{(t)}| \le \varepsilon$,); обчислення нового наближення $Y_t = W_t Z_t$ (або матриці наближених власних векторів $X^* = X_{t+1} Z_{t+1}$).
4. Дослідження достовірності комп'ютерних результатів (див., напр., [6]). Комп'ютерні методи та паралельні алгоритми дослідження властивостей дискретних задач та їх розв'язків представлено в [4, 6].

Ітераційний процес збігається лінійно, причому швидкість збіжності визначається відношенням λ_q/λ_1, де q − розмірність підпростору. Використання багаторівневої моделі обчислень дозволяє підвищити ефективність алгоритму за рахунок ущільнення обчислень, збільшуючи розмір підпростору за наявності вільного обчислювального ресурсу.

3. Достовірність результатів

При визначенні власних коливань конструкції важливо гарантувати достовірність отримуваних розв'язків. Коли йдеться про достовірність розв'язку, то мається на увазі достовірність наближених розв'язків вихідної задачі. Повна похибка наближеного розв'язку враховує вплив похибок вихідних даних, похибок дискретизації і формування даних дискретної задачі (1) та похибок комп'ютерного розв'язку цієї узагальненої АПВЗ.

Достовірність розв'язку прикладних задач з наближеними вихідними даними гарантується використанням стійких до збурення вихідних даних математичних моделей конструкцій, що розраховуються, використанням при дискретизації МСЕ теоретично обґрунтованих скінченних елементів, які задовольняють умовам збіжності і для яких отримано оцінки похибок розв'язку.

Похибка комп'ютерного розв'язку $\tilde{x}$ відносно точного розв'язку x відповідної дискретної задачі (1) залежить від точності завдання вихідних даних, методу і алгоритму розв'язування цієї дискретної задачі, а також похибок заокруглення. В [6] отримано оцінки ($r = A\tilde{x} - \tilde{\lambda}B\tilde{x}$, $\|v\|_B^2 = v^T Bv$)

$$\min_j \left|\frac{\tilde{\lambda}-\lambda_j}{\lambda_j}\right| = \left|\frac{\tilde{\lambda}-\lambda_i}{\lambda_i}\right| \le \frac{\|A^{-1}r\|_B}{\|\tilde{x}\|_B}, \quad \|\tilde{x} - f\| \le \frac{\|A^{-1}r\|_B}{\|\sigma_i\tilde{x}\|_B} . \tag{2}$$

обчислювальних похибок наближеного власного значення $\tilde{\lambda}$ та відповідного власного вектора $\tilde{x}$ комп'ютерної задачі $A^*x^* = \lambda^*B^*x^*$ за умов, що $\tilde{\lambda}$ наближає, в загальному випадку, кратне власне значення λ_i ($i = p, p+1, \ldots, q$), $|(\tilde{\lambda} - \lambda_j)\lambda_j^{-1}| \ge \sigma_i$ для $j \ne p, p+1, \ldots, q$ та існує вектор $f = \alpha_p x_p + \cdots + \alpha_q x_q$.

Окремого дослідження вимагають розв'язки методу ітерацій на підпросторі часткової АПВЗ. Так при обчисленні m мінімальних власних значень може виникнути ситуація, коли замість одного з них обчислено (m+1)-е власне значення. Виявити таку ситуацію можна, використавши властивість послідовності Штурма [6] для задачі $(A - \sigma B)x = \nu Bx$ (якщо B додатно визначена матриця) або для задачі $(A - \sigma B)x = \nu Ax$ (якщо додатно визначена лише матриця A). Зсув σ вибирається більшим за максимальне з власних значень (λ_r), які випробовуються. Якщо вибрати σ достатньо віддаленим (наприклад, рівновіддаленим) від λ_r і λ_{r+1}, LDL^{T}-розвинення можна виконати, використовуючи одинарну розрядність, і значно скоротити час.

Отже, останнє дослідження, а також обчислення оцінок (2) повинно включати процедуру виявлення некратних власних значень. Очевидно, що для некратності власного значення λ_i в умовах наближених даних достатньо, щоб сусідні інтервали, які обмежують відповідні точні власні значення задачі (1), не перетинались, тобто щоб виконувались умови $\lambda_{i-1} + 2\delta < \lambda_i < \lambda_{i+1} - 2\delta$, де $\delta = \max\{\|\Delta A\|, \|\Delta B\|\}$, а власні значення нумеруються за зростанням. При комп'ютерному дослідженні, щоб розрізнити близькі та кратні власні значення доцільно використати розв'язування АПВЗ для проєкцій зі змінною розрядністю, слідкуючи за поведінкою близьких власних значень при збільшенні довжини мантиси машинного слова: якщо різниця між цими власними значеннями зменшується, то це кратні власні значення, а в протилежному випадку – близькі.

Висновки. В роботі розглянуто питання достовірності результатів чисельного моделювання власних коливань конструкцій та споруд на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень. На основі аналізу методу скінченних елементів для дискретизації задач про власні коливання, методів комп'ютерного дослідження математичних властивостей, розв'язування та дослідження достовірності розв'язків часткової узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень, яка виникає в результаті дискретизації, отримано апостеріорні оцінки похибок власних значень і власних векторів узагальненої проблеми з симетричними матрицями, одна з яких додатно визначена. Запропоновано обґрунтовані алгоритми (які використовують змінну розрядність) розв'язування методом ітерацій на підпросторі часткової узагальненої АПВЗ та апостеріорного комп'ютерного дослідження її розв'язків.

Література

[1] *Попов О.В., Рудич О.В., Чистяков О.В.* Багаторівнева модель паралельних обчислень для задач лінійної алгебри. *Проблеми програмування*, 2018, № 2–3, С. 83–92.
[2] *Хіміч О.М., Сидорук В.А.* Використання мішаної розрядності у математичному моделюванні. *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки.* Зб. наук. праць. – 2019, вип. 19. – С. 180–187.
[3] *Городецкий А.С., Евзеров И.Д.* Компьютерные модели конструкций, К.: ФАКТ. – 2007. – 394 с.
[4] *Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф.* Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. – Київ: Наук. думка, – 2008. – 248 с.
[5] *Khimich A.N., Popov A.V., Chistyakov O.V.* Hybrid Algorithms for Solving the Algebraic Eigenvalue Problem with Sparse Matrices. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2017. V. 53, N. 6. P. 937–949. https://doi.org/10.1007/s10559-017-9996-5.
[6] *Попов О.В.* Комп'ютерне дослідження достовірності розв'язків узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень. *Компьютерная математика*. Сб. науч. трудов. – 2012, вып. 1. – С. 52–59.

Reliability of Computer Solutions in the Study of natural oscillations

Alexandr Popov, Alexey Chystiakov

The paper examines the reliability of the results of numerical modeling of natural oscillations of structures and buildings on computers with parallel organization of calculations. Based on the analysis of the finite element method for the discretization of problems about natural oscillations, methods of computer research of mathematical properties, solving and reliability research of the solutions of the partial generalized algebraic eigenvalue problem (AEP), which arises as a result of discretization, a posteriori estimates of errors of eigenvalues and eigenvectors of a generalized problem with symmetric matrices, one of which is positive definite, were obtained. Reasoned algorithms (which use a variable bit rate) for solving by subspace iteration method of a partial generalized AEP and a posteriori computer research of its solutions are proposed.

Отримано 28.03.23