

Franciszek A. DUL
Instytut Techniki Lotniczej i Mechaniki Stosowanej
Politechnika Warszawska

NOWA METODA WYZNACZANIA CZĘSTOŚCI I POSTACI DRGAŃ WŁASNYCH UKŁADÓW FIZYCZNYCH O WIELKIEJ LICZBIE STOPNI SWOBODY

Streszczenie. Przedstawiono nową metodę wyznaczania dużej liczby postaci własnych, szczególnie przydatną dla układów symetrycznych o wielkiej liczbie stopni swobody, $N \sim 10^3 \div 10^6$. Pokazano, iż jest ona znacznie efektywniejsza od standardowych metod: Iteracji Podprzestrzennych i Lanczosa. Obliczenia praktyczne potwierdzają przewagę nowej metody, rosnącą ze wzrostem liczby stopni swobody N . Proponowana metoda może istotnie zmniejszyć koszt analizy modalnej przy projektowaniu konstrukcji.

THE NEW METHOD FOR COMPUTING OF FREQUENCIES AND MODE SHAPES OF PHYSICAL SYSTEMS WITH VERY LARGE NUMBER OF DEGREES OF FREEDOM

Summary. The new computational method, especially suited to the partial solution of very large, $N \sim 10^3 \div 10^6$ generalized symmetric eigenproblems has been presented. Its effectiveness is much larger than of the standard methods: Subspace Iterations and Lanczos. The results of tests for various problems confirm this advantage, which grows quickly with the number of degrees of freedom N . It may then be used for considerable reducing of cost of modal analysis in course of the design process.

НОВЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ЧАСТОТ И ФОРМ КОЛЕБАНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ОЧЕНЬ БОЛЬШИМ ЧИСЛОМ СТЕПЕНИ СВОБОДЫ

Резюме. Описан новый метод решения очень больших $N \sim 10^3 \div 10^6$ симметрических обобщенных задач на собственные значения и векторы. Его эффективность значительно больше чем стандартных методов: Итерации Подпространств и Ланчоса. Практические вычисления совсем утверждают это преимущество, которое растет быстро с увеличением N . Поэтому метод может быть приложен к уменьшению стоимости модального анализа при проектировании сложных конструкций.

1. WSTĘP

Projektowanie konstrukcji lotniczych, kosmicznych, morskich czy budowlanych, jak również inne problemy, np. zagadnienia akustyki, fizyki kwantowej wymagają często wyznaczenia pewnej liczby najniższych wartości własnych λ_i i wektorów własnych x_i , $i=1,\dots,M$, $M=1\div 100$, spełniających wielkie, uogólnione, symetryczne równanie własne

$$Kx = \lambda Mx, \quad (1)$$

gdzie K , M są symetrycznymi macierzami sztywności i bezwładności o wymiarze N (równym liczbie stopni swobody układu fizycznego), M jest nieujemnie określona.

W typowych zadaniach mechaniki konstrukcji lub teorii pola macierze K i M są rzadkie (liczba niezerowych elementów w wierszach jest mała, $m_0 \sim 5\div 50$) oraz mają strukturę pasmową¹⁾, $M_{ij}, K_{ij} = 0$ dla $|i-j| > m_b$, m_b - szerokość pasma.

Standardowe metody obliczeniowe, używane zwykle do rozwiązywania takich zadań: Metoda Iteracji Podprzestrzennych (włączona do wielu pakietów CAD-MES, np. ADINA, FEAP) oraz Metoda Lanczosa, są efektywne dla $N < 10^3$. Jednakże dokładna dyskretyzacja obiektów o skomplikowanych kształtach przy użyciu MES-u prowadzi do zadań o znacznie większych wymiarach, osiągających często $N \sim 10^4 \div 10^5$ [1]. Metody standardowe są w takich przypadkach mało efektywne ze względu na konieczność wykonywania bardzo kosztownego rozkładu trójkątnej macierzy

$$K - \sigma M = LDL^T, \quad (2)$$

gdzie: L - macierz trójkątna dolna, D - macierz diagonalna, σ - liczba.

W pracy przedstawiono nową metodę, która nie korzysta z rozkładu macierzy i w związku z tym jest bardzo efektywna przy rozwiązywaniu wielkich zagadnień własnych [2]. Analiza teoretyczna i testy wykazały jej przewagę zarówno nad metodami standardowymi (w tym - nad metodą Lanczosa, uważaną powszechnie za najlepszą [1,3]), jak również innymi, nie korzystającymi z rozkładu macierzy. W celu zilustrowania uniwersalności i efektywności metody przedstawiono różne zagadnienia rozwiązane za jej pomocą.

2. OPIS METODY

Metoda polega na wyznaczaniu kolejnych par własnych poprzez iterowanie zbioru wektorów w dwu fazach: wstępnej, w której wyznacza się przybliżenia par własnych z małą dokładnością, lecz małym kosztem, i właściwej, w której kolejne wektory własne

¹⁾ Dalsze rozważania i wnioski są słuszne również dla innych postaci macierzy.

wyznacza się z żadaną, wysoką dokładnością.

Jądrem algorytmu są iteracje odwrotne, w których kolejne przybliżenia wektorów własnych wyznacza się iteracyjnie z układu równań

$$(K - \sigma^{(n)} M) y^{(n+1)} = M y^{(n)}, \quad n=0,1,\dots \quad (3)$$

gdzie $\sigma^{(n)}$ jest tzw. przesunięciem, a n - numerem iteracji.

Metoda składa się z dwu faz. W fazie pierwszej zbiór wektorów (podprzestrzeń) $S_K^{(n)} = [y_1^{(n)}, y_2^{(n)}, \dots, y_K^{(n)}]$ jest poprawiany iteracyjnie za pomocą procedur: iteracji odwrotnych (3) z przesunięciem $\sigma^{(n)} = \lambda_i$, Rayleigha-Ritza oraz Grama-Schmidta. Jeżeli wskaźnik stabilizacji pewnego wektora $y_k^{(n)}$, zdefiniowany jako

$$\theta(y_k^{(n)}) = |\mu(y_k^{(n)}) - \mu(y_k^{(n-1)})| / |\mu(y_k^{(n-1)})|, \quad (4)$$

gdzie: n - numer iteracji, $\mu(y_k^{(n)})$ - iloraz Rayleigha dany wzorem

$$\mu(y) = y^T K y / y^T M y, \quad (5)$$

spełni warunek $\theta(y_k^{(n)}) < \tau$ (τ - próg przełączania), to przechodzi się do fazy drugiej, w której za pomocą iteracji odwrotnych (3) z przesunięciami $\sigma^{(n)} = \mu(y_k^{(n)})$ oblicza się przybliżenie wektora własnego z żadaną dokładnością ϵ

$$\|e(y_k^{(n)})\| = \|K y_k^{(n)} - \mu(y_k^{(n)}) M y_k^{(n)}\| < \epsilon. \quad (6)$$

Obliczony wektor własny zastępowany jest w zbiorze $S_K^{(n)}$ nowym wektorem startowym i cały proces jest powtarzany aż wyznaczone zostaną wszystkie poszukiwane pary własne.

Iteracje odwrotne wymagają rozwiązania układu (3) z macierzą nieokreśloną i prawie osobliwą dla $\sigma^{(n)} \rightarrow \lambda_i$. Aby uniknąć rozkładu trójkątnego (2) do jego rozwiązania używa się specjalnych procedur iteracyjnych [4]. Istotną poprawę efektywności uzyskuje się stosując tzw. skalowanie (preconditioning). Szczegóły przedstawione są w artykule [2].

Metoda zrealizowana jest w postaci autonomicznego pakietu, do którego należy dołączyć trzy procedury, obliczające wektory $a := Kx$, $b := My$, $c := P^{-1}z$ (P jest macierzą skalującą), dla wektorów x , y i z przekazywanych przez program wywołujący. Na wejściu należy podać: liczbę poszukiwanych postaci własnych M i dokładność ϵ .

Metoda jest bardzo dobrze dostosowana do obliczeń równoległych, gdyż w obu jej fazach wykonywanych jest szereg niezależnych procesów obliczeniowych.

3. ZASTOSOWANIE PRAKTYCZNE METODY

Metoda umożliwia rozwiązywanie dowolnych, symetrycznych zagadnień własnych. Jednak jej przewaga nad innymi metodami uwidacznia się dla zadań, w których $N > 1000$ i $m_b \sim N^{0.5} \pm N^{0.66}$. Warunki te są zazwyczaj spełnione w zagadnieniach teorii pola (np. akustycznego) oraz mechaniki konstrukcji, zwłaszcza trójwymiarowych.

Metoda umożliwia wyznaczenie sztywnych stopni swobody (np. samolotów lub wielkich konstrukcji orbitalnych), jak również postaci drgań maszyn wirnikowych (wirniki śmigłowców, siłowni wiatrowych, turbin gazowych, silników odrzutowych, etc.). Model obiektu może uwzględniać tzw. tłumienie proporcjonalne,

$$F_D(\dot{q}) = C \dot{q}(t), \quad C = \alpha K + \beta M, \quad \alpha, \beta - \text{współczynniki.} \quad (7)$$

Rozwiązywane mogą być też zadania z osobliwą macierzą M , powstającą przy pomijaniu w modelu fizycznym niektórych efektów bezwładnościowych. Innymi obszarami zastosowań metody są: zadania pełne, tzn. wyznaczenie wszystkich $M=N$ wektorów własnych oraz zagadnienia słabo niesymetryczne [2]. Za pomocą opisanej metody rozwiązano wiele zadań, dotyczących głównie układów mechanicznych; wyznaczono m.in.:

- Postacie akustyczne wewnątrz trójwymiarowych kabin samochodów, modelowanych liniowymi i kwadratowymi elementami skończonymi; $N=956 \div 20186$; $M=20 \div 100$;
- Postacie drgań płyt modelowanych elementami hermitowskimi; $N=100 \div 6000$, $M \sim 80$.
- Postacie drgań trójwymiarowych konstrukcji belkowych; $N=720 \div 10368$, $M \sim 50$.
- Postacie drgań służące do analizy dynamicznej konstrukcji złożonych z wielkich układów liniowych połączonych małymi układami o nieliniowych charakterystykach sprężystych i tłumiących; $N=1120, 2460, 3847$; $M=10 \div 35$.

Rozwiązowano także inne problemy, na przykład:

- Zagadnienia chemii kwantowej: wielkoskalowe oddziaływania funkcji falowych atomów i molekuł; $N=1000 \div 40000$, $M=10 \div 350$.
- Pełne zagadnienia własne, np. $N=M=729$;
- Ekstremalnie wielkie zagadnienia własne: $N=103823$, $M=3$; $N=216000$, $M=2$.

4. PORÓWNANIE Z INNYMI METODAMI

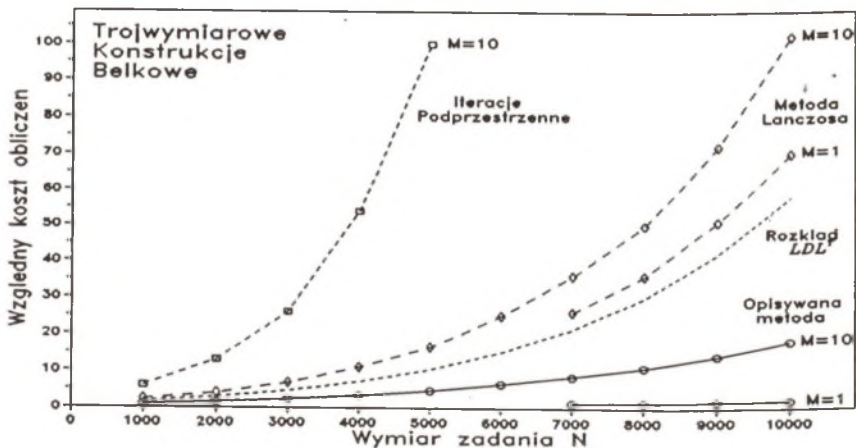
Przydatność praktyczna każdej metody zależy zarówno od jej efektywności, jak też własności użytkowych: uniwersalności oraz niezawodności. Metody wykorzystujące rozkład trójkątny (2) (zwłaszcza metoda Lanczosa) są bardzo efektywne, gdy $N < 1000$ lub

szerokość pasma m_b jest mała. Nie są jednak efektywne dla dużych N i m_b , gdyż ich koszt (mierzony liczbą operacji), rzędu $\sim N^{2.2} \div N^3$, rośnie dużo szybciej niż w przedstawionej metodzie, gdzie jest on rzędu $\sim N^{1.1} \div N^{1.6}$. Ponadto macierz L zajmuje Nm_b jednostek pamięci, podczas gdy K i M zajmują ich łącznie $2Nm_0$. Dla typowych wartości: $m_0=10$ i $m_b=200$ macierz L zajmuje 10 razy więcej pamięci niż K i M . Stosunek ten rośnie ze wzrostem wymiaru N , gdyż $m_b \sim N^{0.5} \div N^{0.66}$, podczas gdy $m_0 \sim \text{const}$. Metoda Lanczosa wymaga dodatkowo pamięci $\sim 50N \div 300N$ dla wektorów roboczych.

Przewagę przedstawionej metody dla zadań o dużej liczbie stopni swobody całkowicie potwierdzają obliczenia praktyczne (Rys.1): już dla $N=4000$, $M=10$ jest ona około dziesięć razy szybsza niż Iteracje Podprzestrzenne i trzy razy szybsza niż metoda Lanczosa. Pierwsze postacie wyznaczane są w czasie stanowiącym ułamek czasu niezbędnego do rozkładu macierzy (np. 1/100 dla $N=10000$).

Niezawodność metody, podobnie jak Iteracji Podprzestrzennych, jest wysoka, w przeciwieństwie do metody Lanczosa, która narażona jest na kłopoty związanych z wielokrotnymi wartościami własnymi, często spotykanymi przy analizie konstrukcji symetrycznych [2,3].

Wyniki testów pokazały, że inne metody, nie wykorzystujące rozkładu (2), np. TRACMN, SIRQIT, SRQMG, nie są tak efektywne, poza tym są często wrażliwe na rodzaj zadania (metoda Davidsona) lub przybliżenia początkowe (TLIME) [2].



Rys.1 . Porównanie kosztów względnych wyznaczania postaci własnych trójwymiarowych konstrukcji belkowych. Pokazano też koszt rozkładu macierzy

Fig.1 . Comparison of relative costs of finding of mode shapes for 3-D building-type problems. The cost of factorization is also shown

5. PODSUMOWANIE

Ze względu na fakt, iż projektowanie wielu obiektów technicznych wymaga rozwiązywania coraz większych zagadnień własnych, można spodziewać się, że przedstawiona metoda znajdzie zastosowanie w systemach CAD, zważywszy jej zalety: dużo niższy (często 10-krotny) koszt obliczeń w porównaniu z metodami standardowymi, uniwersalność, niezawodność oraz łatwość użycia.

LITERATURA

- [1] Matthies H.G.: A Subspace Lanczos Method for the Generalized Symmetric Eigenproblem, Computers & Structures, vol.21, no.1/2, 1984, ss.319-325.
- [2] Dul F.A., Arczewski K.: The Two-Phase Method for Finding a Great Number of Eigenpairs of the Symmetric or Weakly Non-Symmetric Large Eigenvalue problems, Journal of Computational Physics (w druku, 1993).
- [3] Parlett B.N.: The Software Scene in the Extraction of Eigenvalues from Sparse Matrices, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computations, vol.5, no.3, 1984, ss.590-604.
- [4] Paige C.C., Saunders M.A.: Solution of Sparse Indefinite Systems of Linear Equations, SIAM Journal on Numerical Analysis, vol.12, no.4, 1975, s.617-629.

Recenzent: Dr hab. inż. Jerzy Świder

Wpłynęło do Redakcji w grudniu 1993 r.

Abstract

The designing of space structures, aircraft, ships, buildings, oil pipes, etc., as well as other problems of physics, require often computing a few eigenpairs $\lambda_i, x_i, i=1, \dots, M$, $M=1 \div 100$, of large ($N \sim 10^3 \div 10^6$), generalized symmetric eigenproblem (1). The standard computational methods: Subspace Iterations and Lanczos, perform factorization (2), thus are not efficient for large problems because of huge memory requirements ($\sim N^{1.5} \div N^{1.66}$) and unacceptable cost of computations ($\sim N^{2.2} \div N^3$).

The new method presented here, being factorization-free, is especially suited for solving very large eigenproblems, due to moderate cost ($\sim N^{1.1} \div N^{1.6}$), small memory requirements ($\sim N$) and high level of reliability [2].

The method consists of two phases: in the first phase the set $S_K^{(n)} = [y_1^{(n)}, y_2^{(n)}, \dots, y_K^{(n)}]$, is iterated using: Inverse Iterations (3) with constant shift

$\sigma^{(n)} \neq \lambda_i$, Rayleigh Quotient and Gram-Schmidt. After k -th vector is stabilized, $\theta(y_k^{(n)}) < \tau$ (4), the second phase is performed using Inverse Iterations with $\sigma^{(n)} = \mu(y_k^{(n)})$ (5) to obtain the final accuracy $\|y_k^{(n)}\| < \epsilon$ (6). The process is then repeated with new starting vector until all M required eigenpairs are computed. The indefinite, almost singular systems (3) are solved iteratively [4] with preconditioning [2]. The method is well suited to the parallel computations.

The method is general purpose, but it is especially suited to problems with $N > 1000$ and large bandwidth m_b ($\sim N^{0.5} \div N^{0.66}$). It is able to compute rigid modes of free constructions as well as these of rotating machinery. The proportional damping (7) or singular mass matrices may be taken into account. Some weakly non-symmetric eigenproblems can be solved [2]. Here is the collection of problems solved by the proposed method:

- Acoustics modes of the 3-D interiors discretized by FE, $N=956 \div 20186$, $M=20 \div 100$;
- Mode shapes of plates discretized by hermitian FE; $N=100 \div 6000$, $M \sim 80$.
- Vibration modes of 3-D buildings composed of beams: $N=720 \div 10368$, $M \sim 50$.
- Mode shapes for dynamic analysis of mixed structures (large-linear joint by small non-linear); $N=1120, 2460, 3847$; $M=10 \div 35$;
- Problems of quantum chemistry: the large scale configuration interactions of electronic wavefunctions of atoms and molecules; $N=1000 \div 40000$, $M=10 \div 350$;
- Full (e.g., $N=M=729$) and extremely large (e.g., $N=216000$, $M=2$) eigenproblems.

The effectiveness of the method is very high, its superiority grows quickly with the dimension N (Fig.1), e.g., for $N=4000$, $M=10$ it is about ten times faster than the Subspace Iterations and three times faster than Lanczos. The first eigenmode is computed with the cost being a small fraction of that of factorization. Therefore, it can be used for significant reduction of the cost of modal analysis, an important part of the design process.