

Franciszek DUL  
Instytut Techniki Lotniczej i Mechaniki Stosowanej  
Politechnika Warszawska

## WIELKIE LINIOWE SYMETRYCZNE ZAGADNIENIA WŁASNE W MECHANICE KONSTRUKCJI I CHEMII KWANTOWEJ

**Streszczenie.** Omówiono znaczenie liniowych symetrycznych zagadnień własnych pojawiających się w mechanice konstrukcji i w chemii kwantowej. Przedstawiono różne aspekty modelowania rzutuujące na rozwiązywanie wielkich symetrycznych macierzo wych zagadnień własnych. Szczególną uwagę zwrócono na trudności występujące w praktyce, jak również na obserwowane tendencje w rozwoju metod obliczeniowych.

## LARGE LINEAR SYMMETRIC EIGENPROBLEMS IN MECHANICS OF STRUCTURES AND QUANTUM CHEMISTRY

**Summary.** The importance of linear symmetric eigenproblems arising in mechanics of structures and quantum chemistry have been presented. Various aspects of modelling, which influence the solution process of large symmetric matrix eigenproblems are discussed. A special attention has been paid to the difficulties arising in practice, as well as to the trends observed in developing the computational methods for eigenproblems.

## ВЕЛИКИЕ ЛИНЕЙНЫЕ СИММЕТРИЧЕСКИЕ СОБСТВЕННЫЕ ЗАДАЧИ В МЕХАНИКЕ КОНСТРУКЦИЙ И КВАНТОВОЙ ХИМИИ

**Резюме.** В работе представлено значение линейной симметрической собственной задачи в механике конструкций и квантовой химии. Представлены разные аспекты моделирования, которые влияют на процесс решения великих симметрических матрических собственных задач. Специальное внимание обращено к трудностям встречающимся на практике как и тенденциям в развитии численных метод для собственной задачи.

### 1. WSTĘP

Modelowanie wielu zjawisk mechanicznych, takich jak: drgania obiektów, rozchodzenie się fal, utrata stateczności statycznej bądź dynamicznej konstrukcji [1], prowadzi w naturalny sposób do modelu w postaci liniowego zagadnienia własnego

$$Aq = \lambda q, \quad (1)$$

w którym  $A$  jest operatorem (najczęściej jest to operator różniczkowy cząstkowy typu eliptycznego),  $q(x,y,z)$  jest funkcją opisującą stan układu, a  $\lambda$  - pewnym parametrem zwanym krytycznym. W mechanice klasycznej zagadnienie takie otrzymuje się wówczas, gdy stacjonarny model zjawiska (równania równowagi) zawiera obciążenia zależne od przemieszczeń, jak to ma miejsce w przypadku analizy wyboczenia pręta:  $EI q'' = -\lambda q$  lub też gdy niestacjo-

narny model zjawiska oparty na podstawowych prawach zmienności masy, pędu, krętu i energii uzupełni się założeniem harmoniczności ruchu:  $Q(t, x, y, z) = q(x, y, z) \exp(i\sqrt{\lambda} t)$ .

Liniowe zagadnienie własne (1) jest w mechanice klasycznej modelem przybliżonym, co oznacza, że nawet dokładne rozwiązanie równań (1) prowadzi jedynie do przybliżonego opisu zjawisk. Mimo to opisuje ono bardzo dobrze szereg ważnych zjawisk, takich jak na przykład małe drgania konstrukcji wokół położenia równowagi, drgania akustyczne lub utratę stateczności konstrukcji sprężystych [1].

W chemii kwantowej rola liniowego zagadnienia własnego jest dużo większa, gdyż podstawowym modelem opisującym własności atomów i cząsteczek jest stacjonarne równanie Schrödingera [2]

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2)$$

w którym funkcja falowa  $\Psi$  opisuje stan układu cząstek,  $E$  jest nieznaną energią układu, a  $H$  - operatorem Hamiltona [2]. Rozwiązania tego równania w postaci par  $\{E_i, \Psi_i\}$  pozwalają na przewidywanie własności fizycznych nawet bardzo złożonych molekuł. Możliwość ta jest niezwykle cenna, gdyż pozwala znacznie skrócić czas i koszt doświadczeń. Często wyniki obliczeń są dokładniejsze, niż wyniki pomiarów; można też badać takie związki, które są trudno rozpuszczalne lub występują w śladowych ilościach, co uniemożliwia analizę doświadczalną.

Celem pracy jest przedstawienie liniowego zagadnienia własnego jako użytecznego modelu mechaniki i chemii. Opisane zostaną główne problemy związane z formułowaniem i rozwiązywaniem wielkich macierzowych zagadnień własnych, jak również prognozy dotyczące rozwiązywania takich zagadnień w przyszłości.

## 2. LINIOWE MACIERZOWE ZAGADNIENIE WŁASNE

Zagadnienia (1) lub (2) mogą być rozwiązane analitycznie tylko w prostych (choć często bardzo ważnych) przypadkach. Analiza bardziej złożonych, i zazwyczaj bardziej interesujących z praktycznego punktu widzenia zadań, wymaga użycia metod przybliżonych, opartych na dyskretyzacji zagadnienia ciągłego poprzez przybliżenie

$$q(x, y, z) \cong \sum_{i=1}^N \varphi_i B_i(x, y, z), \quad (3)$$

gdzie:  $\varphi_i$  są nieznanymi współczynnikami rozwinięcia funkcji  $q$  lub  $\Psi$  w bazie  $B$ . W mechanice klasycznej bazę  $B$  otrzymuje się za pomocą metody elementów skończonych (MES) [1,3]. W chemii kwantowej baza złożona jest ze ścisłych rozwiązań równania Schrödingera, np. rozwiązań Hartree-Focka [2]. W obu przypadkach ciągłe zadanie (1) lub (2) zostaje sprowadzone do zagadnienia macierzowego postaci

$$\mathbf{K}\varphi = \lambda \mathbf{M}\varphi \quad (4)$$

gdzie macierze  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{M}$  są symetryczne, dodatnio półokreślone, rzadkie i mają na ogół duże wymiary  $N$ . Rozwiązaniem równania (4) są pary wartości i wektorów własnych  $\{\lambda_i, \varphi_i\}_{i=1}^N$ , przy czym wartości własne są rzeczywiste i nieujemne [3-4].

Zasadniczą zaletą liniowych macierzowych zagadnień własnych, decydującą o ich przydatności w praktyce, jest możliwość uzyskiwania coraz dokładniejszych wyników poprzez poprawianie aproksymacji drogą uwzględnienia w przybliżeniu (3) większej liczby funkcji bazowych. Prowadzi to oczywiście do szybkiego wzrostu wymiarów zadań. Ilustruje to poniższa tabela, w której podano wymiary  $N$  typowych i największych zadań rozwiązywanych w ciągu ostatnich szesnastu lat.

	Lata	1978	1982	1988	1994
<i>Mechanika konstrukcji</i>	Typowe	500	2,000	10,000	50,000
	Największe	10,000	15,000	100,000	1,600,000
<i>Chemia kwantowa</i>	Typowe	5,000	50,000	100,000	1,000,000
	Największe	100,000	1,000,000	7,000,000	1,000,000,000

Tematyka publikacji dotyczących zagadnień własnych wskazuje, że tendencja wzrostowa utrzyma się również w przyszłości [1-6]. Dowodzi to zarówno adekwatności liniowych modeli (1)-(2), jak i dużej skuteczności metod obliczeniowych. Należy jednak pamiętać, że rozwiązywanie tak wielkich zadań wiąże się z wieloma trudnościami. Zostaną one omówione poniżej.

### 3. MECHANIKA KONSTRUKCJI

Znaczenie macierzowych zagadnień własnych (4) w mechanice konstrukcji wynika z konieczności wykonywania w przemyśle lotniczym, samochodowym i w niektórych działach budownictwa analizy drgań projektowanych obiektów, tzw. analizy modalnej, polegającej na wyznaczeniu pewnej liczby najniższych częstości drgań swobodnych oraz odpowiadających im postaci drgań. Można to zrobić doświadczalnie, ale metody numeryczne są tańsze i umożliwiają analizę już na etapie projektowania. Stąd wynika bardzo duże zapotrzebowanie na profesjonalne systemy analizy modalnej [3,6].

Liniowe symetryczne zagadnienie własne (4) w wielu przypadkach opisuje bardzo dokładnie modelowane zjawiska. Dokładność uzyskiwanych rezultatów jest bardzo dobra; pierwsze postacie drgań wyznaczone są często z dokładnością lepszą niż 1%. Uwzględnienie tzw. tłumienia proporcjonalnego  $\alpha\mathbf{M} + \beta\mathbf{K}$  pozwala na dalszą poprawę jakości wyników [1,3].

Wyznaczanie częstości i postaci drgań na podstawie modelu (4) jest z pozoru łatwe. Istnieje wiele metod obliczeniowych dla symetrycznych zagadnień własnych, a MES już dawno "zszedł pod strzechy" co wyraża się dużą liczbą systemów typu CAD dostępnych na rynku. Jednak systemy profesjonalne są kosztowne, a nieprofesjonalne (np. shareware'owe, dostępne poprzez sieć Internet) często nie spełniają oczekiwań. Okazuje się bowiem, że wyznaczanie drgań własnych konstrukcji wiąże się z szeregiem kłopotów mających podłoże zarówno w modelowaniu, jak i czymś, co można by nazwać "środowiskiem obliczeniowym".

#### Problemy związane z modelowaniem

Najważniejszym problemem związanym z modelowaniem jest złe uwarunkowanie najniższych wartości własnych,  $|\lambda_2 - \lambda_1| / |\lambda_N - \lambda_1| \sim 10^{-12}$ , a więc tych, które są najważniejsze w praktyce. Powodem jest to, że równanie (4) aproksymuje nieograniczony operator ciągły (1):  $\lambda_N \rightarrow \infty$ , gdy  $N \rightarrow \infty$ . Oznacza to, że zwiększanie dokładności wyników poprzez

dokładniejszy podział konstrukcji na elementy skończone prowadzi do pogorszenia uwarunkowania naj- niższych wartości własnych, a w efekcie - szybki wzrost kosztu obliczeń.

Jeszcze trudniejsza sytuacja występuje wówczas, gdy macierz bezwładności  $\mathbf{M}$  jest *osobliwa*, gdyż niezależnie od wymiaru  $N$  występują wtedy nieskończone wartości własne. Ma to miejsce wtedy, gdy model zawiera tzw. bezmasowe stopnie swobody, np. nieważkie elementy sprężyste. Profesjonalne systemy CAD generują często macierze bezwładności, których rząd jest równy  $2/3N$  [3]. Powoduje to szereg kłopotów, z którymi nie wszystkie metody obliczeniowe są w stanie sobie poradzić [1].

Mniejszym problemem jest osobliwość macierzy sztywności  $\mathbf{K}$ , co ma miejsce wtedy, gdy konstrukcje, np. samolot, statek kosmiczny, są swobodne. Występują wówczas tzw. sztywne stopnie swobody, mające zerowe częstości drgań, w liczbie mniejszej lub równej sześć. Jeżeli nie wiadomo *a priori*, czy macierz  $\mathbf{K}$  jest osobliwa, to mogą pojawić się trudności z wyborem właściwej strategii obliczeń [1].

Jeżeli konstrukcja posiada symetrie, to pojawiają się wielokrotne wartości własne. Niektóre metody rozwiązywania, np. metoda Lanczosa, mogą opuścić niektóre z nich.

Analiza drgań wymuszonych wymaga wyznaczenia postaci drgań z wewnętrznej części spektrum. Wszystkie znane metody numeryczne są wówczas co najmniej o rząd wielkości mniej efektywne [1].

Problemy stateczności statycznej konstrukcji nastręczają również wielu kłopotów, gdyż w zagadnieniach tego rodzaju macierz  $\mathbf{M}$  jest nieokreślona. Wartości własne są wówczas zarówno dodatnie, jak i ujemne, przy czym należy obliczyć najmniejszą dodatnią wartość własną, odpowiadającą podstawowej formie utraty stateczności [1]. Kłopot polega na tym, że przy rozwiązywaniu takiego zadania nie można użyć tzw. transformacji spektralnej w wersji standardowej [1,3]:  $\lambda \rightarrow \mu := 1/(\lambda - \sigma)$ .

### Problemy związane ze środowiskiem obliczeniowym

Bardzo istotnym czynnikiem przy modelowaniu przemysłowych zagadnień własnych jest konieczność uwzględnienia ograniczeń narzucanych przez systemy obliczeniowe CAD. Należy bowiem pamiętać, że są one zazwyczaj bardzo kosztowne, (np. 100,000\$ - UNIGRAPHICS), co zmusza do korzystania z nich nawet w przypadku, gdy należałoby użyć nieco innego modelu lub (zwłaszcza) innej metody numerycznej. Czynnikiem ekonomicznym jest tutaj decydujący.

Trudnością związaną z ograniczeniami systemowymi jest problem złego uwarunkowania macierzy na skutek sztucznego wprowadzania wysokich sztywności lub bardzo dużych mas. Dzieje się tak wówczas, gdy usiłuje się uwzględnić w modelu pewne więzy, które nie mogą być wprowadzone *explicite* ze względu na brak takiej możliwości w systemie obliczeniowym. W taki właśnie sposób modeluje się sztywne elementy konstrukcji lub też uwzględnia więzy nałożone na ruch niektórych punktów konstrukcji [1,6].

Wielkie zagadnienia wymagają zastosowania wyspecjalizowanych metod rozwiązywania. W mechanice dominuje obecnie metoda Lanczosa, która prawie całkowicie wyparła metodę iteracji podprzestrzennych, używaną w latach 1970-1990 [3]. Opisane wyżej problemy powodują jednak, że tylko nieliczne zespoły zdołały opracować oprogramowanie spełniające ostre warunki narzucone przez wymagających użytkowników. Przykładem jest zespół firmy Boeing, który opracował niezwykle starannie metodę Lanczosa [5]. Można przypuszczać, że praca ta ustanowi rodzaj standardu dotyczącego wymagań stawianych oprogramowaniu profesjonalnemu. Za pomocą tego oprogramowania wyznaczono 1000 postaci drgań samolotu, którego model miał wymiar  $N=1,600,000$ . Użyto do tego celu największego superkomputera CRAY [6].

#### 4. CHEMIA KWANTOWA

Jedną z podstawowych metod wyznaczania funkcji falowych złożonych molekuł jest metoda oddziaływania konfiguracji (CI), polegająca na wyborze przybliżenia (3) z funkcjami bazy w postaci rozwiązań Hartree-Focka [2,4]. W efekcie otrzymuje się równanie macierzowe

$$\mathbf{H} \varphi = E \varphi \quad (5)$$

którego najważniejszymi cechami są: bardzo duży wymiar  $N$ , niewielka liczba elementów niezerowych,  $\sim 0.01N^2$  oraz diagonalna dominacja macierzy  $\mathbf{H}$ ,  $H_{ii} \geq \sum_{j \neq i} |H_{ij}|$ ,  $i = 1, \dots, N$  [4]. Zazwyczaj należy wyznaczyć kilka najniższych wartości własnych. Typowe jest także występowanie tzw. stanów zdegenerowanych, którym odpowiadają wielokrotne wartości własne.

Macierze  $\mathbf{H}$  mają zwykle ogromne wymiary,  $N \sim 10^6 - 10^9$  (są to największe zadania własne rozwiązywane obecnie). Wynika to z potrzeby możliwie najdokładniejszego wyznaczenia energii badanej molekuły. Z tego powodu macierz  $\mathbf{H}$  często nie jest dana jawnie, ze względu na olbrzymią, mimo rzadkości, liczbę jej elementów niezerowych ( $10^{11}$  i więcej) [4]; w takich przypadkach elementy  $H_{ij}$  są obliczane na bieżąco, gdy żąda tego metoda rozwiązująca. Zadań tych nie można więc rozwiązywać za pomocą żadnej z metod, która używa macierzy zmodyfikowanych, jak np. metoda Lanczosa; dopuszczalne jest jedynie mnożenie macierzy przez wektor. Do rozwiązywania takich zadań można użyć wyłącznie metod czysto iteracyjnych, takich jak najważniejsza w chemii kwantowej metoda Davidsona [4]. Dla tego typu zadań jest ona przy tym znacznie lepsza niż metoda Lanczosa [3,4]. Metoda Davidsona ma jednak kłopoty, gdy elementy diagonalne różnią się tylko nieznacznie, jak również wówczas, gdy nie są znane wystarczająco dokładne przybliżenia początkowe wektorów własnych  $\varphi$  [7].

Ostatnio pojawiają się problemy, w których należy wyznaczyć bardzo wiele stanów wzbudzonych, np. 10,000 [8]. Rozwiązanie zagadnień tego typu leży na razie poza zasięgiem aktualnie dostępnych superkomputerów, jak również istniejących metod obliczeniowych.

Warto jeszcze wspomnieć, że przydatność metody Davidsona w zadaniach mechaniki konstrukcji jest ograniczona, co wiąże się z tym, że macierze generowane za pomocą MES-u nie są na ogół diagonalnie dominujące [7].

#### 5. PROGNOZY DOTYCZĄCE ROZWIĄZYWANIA ZAGADNIEŃ WŁASNYCH

Obie główne metody rozwiązywania zagadnień własnych, Lanczosa i Davidsona, posiadają nieusuwalne ograniczenia: metoda Lanczosa musi używać rozkładu trójkątnego macierzy, a za pomocą metody Davidsona nie można znaleźć zbyt wielu funkcji falowych. Zachodzi więc pytanie, jakie metody będą używane w przyszłości do rozwiązywania wielkich zagadnień własnych?

Wskazówką może być przykład podany przez jednego z twórców oprogramowania w firmie Boeing, Horsta Simona [9]. Oszacował on, że pod koniec stulecia będzie się rozwiązywać układy równań liniowych o wymiarach  $N \sim 5,000,000,000$ . Najlepsza metoda używająca rozkładu trójkątnego macierzy musiałaby prowadzić obliczenia przez ok. 500,000 lat, podczas gdy

metoda iteracyjna... 600 sekund ! Nawet jeśli przy rozwiązywaniu zagadnień własnych dysproporcje nie byłyby tak gigantyczne, to i tak przewaga metod iteracyjnych jest oczywista.

Wydaje się więc, że może nadejść okres dominacji metod czysto iteracyjnych, takich jak opracowana przez autora niniejszego artykułu *metoda dwufazowa* [7], która pozwoliła m.in. wyznaczyć (przy użyciu superkomputera CRAY Y-MP) dwie postacie własne zadania o wymiarze  $N=8,000,000$  [10], jak również 1000 funkcji falowych pewnego zadania chemii kwantowej o wymiarze  $N=10,000$ . Wydaje się, że metodę dwufazową będzie można zastosować do rozwiązywania takich zadań, które nie mogą być rozwiązywane za pomocą metod Lanczosa lub Davidsona.

## 6. PODSUMOWANIE

Model symetryczny liniowy nie zaspokaja oczywiście wszystkich potrzeb mechaniki. Istnieje wiele zagadnień, które są z natury niesymetryczne bądź nieliniowe. Należy do nich np. zagadnienie sterowania modalnego wielkich konstrukcji przestrzennych [1]. Zadania takie stanowią silny bodziec dla rozwijania efektywnych metod rozwiązywania wielkich niesymetrycznych zagadnień własnych. Bardziej złożone zagadnienia niestateczności statycznej lub dynamicznej konstrukcji wymagają użycia modelu nieliniowego. Jednak nawet wówczas model liniowy symetryczny (4) znajduje zastosowanie jako model pomocniczy [11]. W symulacyjnej analizie aeroelastycznej jako modelu konstrukcji używa się niemal wyłącznie równań modalnych [12].

Liniowe symetryczne zagadnienie własne, chociaż stanowi tylko wąską klasę modeli fizycznych, jest niezwykle ważne w praktyce. Mogłoby się wprawdzie wydawać, że w sytuacji, gdy możliwości obliczeniowe pozwalają na analizę złożonych modeli nieliniowych, liniowe zagadnienie własne straci swoje dawne znaczenie. Tak się jednak nie stało, co więcej, obserwuje się wzrost wysiłków zmierzających do efektywnego rozwiązywania wielkich zagadnień własnych.

## LITERATURA

- [1] Grimes R.G., Lewis J.G., Simon H.D.: Eigenvalue Problems and Algorithms in Structural Engineering, in Large Scale Eigenvalue Problems. J. Cullum and R.A. Willoughby (eds), Elsevier, North-Holland, 1986, pp. 81-93.
- [2] Kołos W.: Chemia kwantowa. Wyd.3. PWN, Warszawa 1978.
- [3] Parlett B.N.: The Software Scene in the Extraction of Eigenvalues from Sparse Matrices. SIAM Journal of Scientific and Statistical Computations, vol.5, 1984, pp. 590-604.
- [4] Davidson E.R.: Super-Matrix Methods. Comput. Phys. Commun., v.53,1989, pp. 49-60.
- [5] Grimes R.G., Lewis J.G., Simon H.D.: A Shifted Block Lanczos Algorithm for Solving Sparse Symmetric Generalized Eigenproblems. SIAM Journal of Matrix Analysis and Applications, vol.15, 1994, pp. 228-272.
- [6] Lewis J.G.: Informacja prywatna, wrzesień 1994.
- [7] Dul F.A., Arczewski K.: The Two-Phase Method for Finding a Great Number of Eigenpairs of the Symmetric and Weakly Non-Symmetric Large Eigenvalue Problems. Journal of Computational Physics, vol.111, 1994, pp.89-109.
- [8] Joslin C.: Informacja prywatna, czerwiec 1994.

- [9] Simon H.: Direct Sparse Matrix Methods, in Modern Numerical Algorithms for Supercomputers, J.C. Almond and D.M. Young, (eds), The University of Texas, Austin 1989, pp.325-344.
- [10] Dul F.: Efficient Preconditioning of the Two-Phase Method in Large Scale Eigenvalue Computations. Polish-German Workshop on Adaptive Techniques for Scientific Modeling, Warszawa: 1994 (w przygotowaniu).
- [11] Wriggers P., Carstensen C.: An Efficient Algorithm for the Computation of Stability Points of Dynamical Systems Under Step Load. Engineering Computations, vol.9, 1992, pp. 669-679.
- [12] Dul F.: Metody symulacyjne badania stateczności aeroelastycznej. V Ogólnopolska Konferencja "Mechanika w Lotnictwie", PTMTiS, Warszawa 1992, s.161-180.

Pracę wykonano w ramach projektu badawczego nr 503/829/4.

Recenzent: prof. dr hab. inż. A. Buchacz

Wpłynęło do Redakcji w grudniu 1994 r.