УДК 539.3 DOI: 10.20535/2409-7160.2023.XXIII.278255

Зменшення похибок наближення у схемах із факторизованими операторами

К.М. Рудаков
КПІ ім. Ігоря Сікорського, Київ, Україна

Анотація. *Проблематика. Для прискорення процесів розв'язування крайових задач нестаціонарної теплопровідності та динамічного навантаження можна застосувати факторизовані оператори, що призведе до появи додаткових похибок наближення.*
Мета дослідження: отримати формули, які дозволяють керувати величинами цих похибок.
Методика реалізації: математичний аналіз, програмування, чисельний експеримент.
Результати дослідження. Запропоновано проводити зменшення цих додаткових похибок шляхом накладання обмежень на часовий крок: отримані відповідні формули.
Висновки. Запропоновані ефективні формули та алгоритми їхньої реалізації, які дозволяють керувати точністю розв'язку крайових задач нестаціонарної теплопровідності та динамічного навантаження у схемах із факторизованими операторами за рахунок обмеження часового кроку. Практична реалізація показала їхню дієвість та доцільність.
Ключові слова: *похибки наближення; крайова задача; теплопровідність; динамічне навантаження*

Вступ

Формалізація крайових задач нестаціонарної теплопровідності та динамічного навантаження призводить до систем алгебраїчних рівнянь, які можна записати у канонічному операторному вигляді [1]:

$$B\vec{u}^{\,n+1} = \vec{F}^{\,n}, \tag{1}$$

де права частина відома, оператор $B = I + \omega\Delta t R$ або $B = I + 0.5\Delta t^2 R$ породжує квадратну матрицю розмірністю $N \cdot N$; верхній індекс вказує номер часового кроку (шару), а $0 < \omega \le 1$. Проблема полягає у великій кількості арифметичних дій щодо знаходження оберненої матриці: пропорційне N^3. Вона вирішується шляхом застосування факторизованих операторів B_m, які наближують B за формулою $B = B_1 \cdot \ldots \cdot B_S$; $s \ge 2$. Ці оператори для всіх неявних схем повинні мати кількість дій, пропорційну N^2 (явні схеми мають цю кількість, пропорційну N, але дуже жорстке обмеження на часовий крок Δt). Зазвичай, щоб обернення B_m потребувало кількість дій, пропорційну N^2, оператори B_m обирають такими, що породжують трикутні матриці. Відомі факторизовані оператори, відповідно до типів крайових задач, що розглядаються:

$$B_m = I + \omega\Delta t R_m; \tag{2-а}$$

$$B_m = I + 0.5\Delta t^2 R_m, \tag{2-б}$$

де $\sum_{m=1}^{S} R_m = R$ є обов'язковою умовою. Тоді, наприклад, при $s = 2$, маємо наближення

$$B = I + \omega\Delta t R \approx (I + \omega\Delta t R_1)(I + \omega\Delta t R_2) = I + \omega\Delta t (R_1 + R_2) + \underline{(\omega\Delta t)^2 R_1 R_2} = (I + \omega\Delta t R) + O(\Delta t^2); \tag{3-а}$$

$$\begin{aligned} B = I + 0.5\Delta t^2 R &\approx (I + 0.5\Delta t^2 R_1)(I + 0.5\Delta t^2 R_2) = \\ &= I + 0.5\Delta t^2 (R_1 + R_2) + \underline{0.25\Delta t^4 R_1 R_2} = (I + 0.5\Delta t^2 R) + O(\Delta t^4). \end{aligned} \tag{3-б}$$

Формально така заміна має достатню точність: $O(\Delta t^2)$ та $O(\Delta t^4)$ відповідно. Але підкреслені відкинуті складові мають при Δt результати перемноження матриць, а це можуть бути великі значення. Така похибка наближення нерівномірно розподіляється по ступеням свободи СЛАР, порушуючи однорідність розв'язку там, де цього не повинне бути. Цілком очевидно, що це явище можна згладити, лише зменшуючи Δt.

Мета: отримати відповідні вирази, що обмежують Δt, виходячи з необхідної точності розв'язку крайових задач нестаціонарної теплопровідності та динамічного навантаження із застосуванням факторизованих операторів.

Формули обмеження часового кроку

Оскільки оператор R є позитивно визначеним, то $\det R > 0$ й $\det B > 0$, як і будь-яка інша їхня норма. Тепер можна застосувати нерівність Міньковського щодо норм, і записати, що

$$\| I + \omega \Delta t R \| \le \| I \| + \omega \Delta t \| R \|; \tag{4-а}$$

$$\| I + 0.5 \Delta t^2 R \| \le \| I \| + 0.5 \Delta t^2 \| R \|. \tag{4-б}$$

Призначимо $\delta > 0$ – мале число, яке визначає відносну похибку на кожному часовому кроці, викликану застосуванням факторизованих операторів. Наприклад, $\delta = 0.001$, тобто 0.1%. Тоді умова порівняної малості підкреслених частин виразів, якими нехтуємо:

$$\omega^2 \Delta t^2 \| R_1 R_2 \| \le \delta \| I + \omega \Delta t R \|; \tag{5-а}$$

$$0.25 \Delta t^4 \| R_1 R_2 \| \le \delta \| I + 0.5 \Delta t^2 R \|. \tag{5-б}$$

З урахуванням $\| I \| = 1$ й (4), із (5) маємо

$$\omega^2 \Delta t^2 \| R_1 R_2 \| \le \delta + \delta \omega \Delta t \| R \|; \tag{6-а}$$

$$0.25 \Delta t^4 \| R_1 R_2 \| \le \delta + \delta 0.5 \Delta t^2 \| R \|. \tag{6-б}$$

Коли є рівність, маємо два відомих квадратичних алгебраїчних рівняння відносно приросту часового кроку Δt чи Δt^2. Позначимо коефіцієнти:

$$a = \omega^2 \| R_1 R_2 \|; \quad b = -\delta \omega \| R \|; \quad c = -\delta; \tag{7-а}$$

$$\beta = 0.25 \| R_1 R_2 \|; \quad \gamma = -\delta 0.5 \| R \|; \quad c = -\delta. \tag*{(7-а)}$$

Тоді із умови відносної малості відкинутої з (3) частини для застосування виразів (2) маємо обмеження на часовий крок (за виключенням $\omega = 0$):

$$\Delta t \le \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}; \tag{8-а}$$

$$\Delta t \le \sqrt{\frac{-\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\beta c}}{2\beta}}. \tag{8-б}$$

Ці обмеження є додатковими, оскільки на часовий крок є основні обмеженні, отримані за умов абсолютної чи асимптотичної стійкості та відсутності осциляцій розв'язку [1]. Відомі формула Куранта [1], а саме

$$\Delta t \le 1/[\mu_{\max}(1-\omega)] \tag{9}$$

для крайової задачі нестаціонарної теплопровідності (визначає умову відсутності осциляцій розв'язку), а також формула $\Delta t \le T_{\min}/\pi$ для крайової динамічної задачі [1]. Тут позначені $\mu_{\max}$ – максимальне власне значення матриці R; $T_{\min}$ – мінімальний період коливань (із всіх ступенів свободи об'єкта розрахунків).

Практична реалізація

Виникає питання, яку норму застосувати. Для обчислення детермінанта матриці потрібна кількість "довгих" операцій (типу помножити / поділити) порядку N^3. Але детермінант – лише одна із можливих норм матриці. Для нерівності Міньковського можна застосовувати будь-яку норму, але тут тільки ту, що якимсь чином пов'язана з $\mu_{\max}$. Відома оцінка $\mu_{\max}$ через її l-норму (октаедричну) [1]:

$$\mu_{\max} \le \max_j \sum_i |a_{ij}| = \|A\|_l , \tag{10}$$

яка зовсім не потребує для обчислення "довгих" операцій. Визначення цієї норми можна легко робити одночасно з операцією збирання глобальної матриці із компонент матриць скінченних елементів. Це повністю скасовує операції із вибирання необхідних компонент глобальної матриці із пам'яті комп'ютера.

Крім того, відома така властивість будь-яких норм: $\|YZ\| = \|Y\| \cdot \|\mathrm{Z}\|$. Тому й $\|R_1R_2\| = \|R_1\| \cdot \|R_2\|$. Оскільки оператор R в задачах, що розглядаються, є симетричним, то зазвичай приймають, що $R_2 = R_1^T$ (при цьому, як зазначено вище, обов'язково $\sum_{m=1}^{S} R_m = R$). Тоді $\|R_1R_2\| = \|R_1\|^2 = \|R_2\|^2$, що значно прискорює обчислення $\|R_1R_2\|$, оскільки не потрібно попередньо перемножувати дві матриці.

Відомо, що для крайових задач нестаціонарної теплопровідності зазвичай у програмних комплексах, наприклад [2], замість умови Куранта застосовують формулу

$$\Delta t \le \frac{C_p\rho}{\lambda}\frac{h^2}{10}, \tag{11}$$

де C_p, ρ – питомі теплоємність та густина матеріалу; λ – його коефіцієнт теплопровідності; h – мінімальний діаметр скінченного елемента в моделі об'єкта. Ця формула гарантує наявність абсолютної стійкості явної схеми, тобто і всіх неявних схем. Але вона не має відношення до умови відсутності осциляцій розв'язку, тому дає значення Δt, інше, ніж за формулою Куранта. Отже, для задачі нестаціонарної теплопровідності можна отримати три оцінки Δt, потім з них призначити найменшу.

Тестовим об'єктом був обраний довгий стрижень з незмінним перерізом, навантажений в повздовжньому напрямку. При цьому застосування факторизованих операторів призводить до порушень однорідності розв'язку у перерізах, що дуже легко контролювати шляхом аналізу результатів.

В чисельних експериментах отримали, що при умові відносної похибки $\delta = 0.001$ формула (8-а) дає значення Δt, близьке до значення, отриманого за формулою (11), а при $\delta = 0.0001$ – дещо менше. Формула Куранта теж дає близькі значення. Схожа ситуація спостерігалася і для тестової динамічної задачі.

Висновки

1. Запропоновані формули, які дозволяють керувати точністю результатів розв’язку крайових задач нестаціонарної теплопровідності та динамічного навантаження у схемах із факторизованими операторами за рахунок обмеження часового кроку;
2. Запропоновано ефективний алгоритм, який для застосування цих формул потрібує відносно невелику кількість математичних операцій при обчисленнях;
3. Практична реалізація цього алгоритму показала його дієвість та доцільність, оскільки може вплинути на величину часового кроку, що призначається з умов стійкості, відсутності осциляцій та точності розв’язку;
4. Оскільки подібні формульні оцінки прямо залежать від геометрії об’єкта, параметрів скінченно-елементної сітки та властивостей матеріалу, то загальних висновків про надання пріоритету будь-якої з цих формул зробити неможливо. Але в програмній реалізації алгоритмів бажано проводити всі варіанти обчислень часового кроку, а призначати – найменший з отриманих.

Список літератури

1. Рудаков К.Н. Чисельні методи аналізу в динаміці та міцності конструкцій: навч. посібник [для студ. вищ. навч. закл.] – К.: НТУУ "КПІ", 2007. – 379 с.
2. Siemens. Simcenter Nastran Thermal Analysis User’s Guide. Simcenter Nastran 2021.1 Series.

Control of approximation errors in schemes with factorized operators

K. Rudakov

Abstract. *Problems. Factorized operators can be applied to speed up the processes of solving boundary value problems of non-stationary thermal conductivity and dynamic load, which will lead to the appearance of additional approximation errors.*
The aim of the study: to obtain formulas that allow controlling the values of these errors.
Methodology of implementation: mathematical analysis, programming, numerical experiment.
Research results. It is proposed to reduce these additional errors by imposing restrictions on the time step: the corresponding formulas are obtained.
Conclusions. Effective formulas and algorithms for their implementation are proposed, which allow you to control the accuracy of the solution of boundary value problems of non-stationary thermal conductivity and dynamic load in schemes with factorized operators due to the limitation of the time step. Practical implementation has shown their effectiveness and expediency.
Keywords: *approximation errors; boundary-value problem; thermal conductivity; dynamic load*