快速多极边界元法中的优化数值技术应用

张拥萍[1]，陈一鸣[1]，苏卫卫[1]，刘建平[2]

（1．燕山大学理学院；2．河北科技师范学院，河北秦皇岛　066004）

摘　要：快速多极边界元法是近几年发展起来的边界元新型数值算法，利用多极边界元法解题的关键和难点是求解大规模稀疏矩阵方程组．引入最优化数值技术很好地解决了这一问题，并通过数值实验验证，该方法可节约求解时间，从而为求解大规模问题奠定了理论基础．

关键词：边界元法；Taylor 级数；数值技术；多极展开；共轭方向法

中图分类号：O224; O242.2　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：1006-0375(2008)01-0020-06

近年来，国际上发展起来的快速多极边界元法为边界元研究者展示了广阔的应用前景．这种算法用节点集群的多极展开式来近似表示核函数与远场边界变量乘积的边界积分，从而将边界元法的满秩方程组化为具有稀疏矩阵的方程组（形如 $Ax=b$），特别是对于大规模问题，能大大降低形成矩阵的时间．为了进一步降低存储空间和求解时间，需要开发高效且需较小存储量的算法．本文利用最优化数值技术处理，把求解线性方程组问题转化为求解一个等价的严格凸二次函数的极小化问题，该方法被称为共轭方向法．对于大型稀疏线性方程组，用该方法通常只需经过比方程组阶数 n 小的多的迭代次数，就能获得所要求精度的近似解．而且共轭方向法不需要存储迭代矩阵，具有较快的收敛速度和二次终止性的优点，这大大降低了求解时间．

1 多极边界元法中的稀疏方程组的形成

在不记体积力的情况下，以三维弹性静力学为例，首先给出其边界积分方程为

$$c_{ij}(x)\mu_j(x)+\int_\Gamma T_{ij}(x,y)\,\mu_j(y)\,d\Gamma(y)=\int_\Gamma U_{ij}(x,y)t_j(y)\,d\Gamma(y) \tag{1}$$

其中，Γ 为边界，x，y 分别为边界上核函数的源点和边界场点，$c_{ij}(x)$ 是与 x 处边界几何特征有关的系数，$\mu_j(y)$ 和 $t_j(y)$ 分别为边界位移分量和面力分量．$U_{ij}(x,y)$，$T_{ij}(x,y)$ 分别为 *kelvin* 基本解的位移和面力核函数，可以用双调和函数 Ψ 表示

$$U_{ij}(x,y)=\frac{(1+\nu)[2(1-\nu)\psi_{,ss}\delta_{ij}-\psi_{,ij}]}{8\pi(1-\nu)E} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}T_{ij}(x,y)&=\frac{-n_k}{8\pi(1-\nu)}[-\psi_{,ijk}+\nu\delta_{kj}\psi_{,ssl}+(1-\nu)(\delta_{ij}\psi_{,ssk}+\delta_{ik}\psi_{,ssj})]\\&=T_{ij}^k(x,y)\,n_k\end{aligned} \tag{3}$$

收稿日期：2007-06-04

基金项目：河北省自然科学基金资助项目（E2007000381）

作者简介：张拥萍（1979-），女，河北张家口人，硕士研究生，研究方向：边界元数值方法及其应用

对于三维弹性问题，$\psi = r$，$r=\sqrt{r_i r_i}$，$r_i = x_i - y_i$，$r_{,i} = \dfrac{\partial r}{\partial x_i} = \dfrac{r_i}{r}$，$\dfrac{\partial r}{\partial n} = r_{,i} n_{,i}$.

从（2）和（3）式可以看出，边界积分方程的积分核函数仅用r的微分形式就可以描述了. 边界离散后，式（1）可以表示为

$$\begin{aligned} & c_{ij}(x)\mu_j(x) + \sum_{n=1}^{N}\left\{\sum_{\alpha=1}^{m}\mu_j^{n,\alpha}\iint T_{ij}(x, y(\xi,\eta))\varphi\, d\xi\, d\eta\right\} \\ & = \sum_{n=1}^{N}\left\{\sum_{\alpha=1}^{m} t_j^{n,\alpha}\iint U_{ij}(x, y(\xi,\eta))\varphi\, d\xi\, d\eta\right\} \end{aligned} \tag{4}$$

其中，N为边界单元个数，m为每个边界单元的节点数，$\varphi = N^{\alpha}(\xi,\eta)J(\xi,\eta)$，$N^{\alpha}(\xi,\eta)$为单元节点的形函数，$J(\xi,\eta)$为$Jacobian$矩阵.

取$\psi(x,y) = x - y$，$\psi_{,i} = \dfrac{\partial\psi}{\partial x_i}$，有$\dfrac{\partial}{\partial x_j} = -\dfrac{\partial}{\partial y_j}$，在$y$附近$y_0$点对$\psi(x, y)$进行$Taylor$级数展开，有

$$\psi(x-y) = \psi(x-y_0) + \sum_{\beta=1}^{\infty}\frac{1}{\beta!}(y_0-y)_{k_1}\cdots(y_0-y)_{k_\beta}\psi_{,k_1\cdots k_\beta}(x-y_0) \tag{5}$$

其中，$(y_0-y)_k$表示向量(y_0-y)的第k个分量. 可以根据下式计算ψ的高阶导数：

$$\begin{aligned} & r(x-y_0) = |x-y_0|;\quad r_{,i} = \frac{r_i}{r}; \\ & r_{,ij} = \frac{\delta_{ij} - r_{,i}r_{,j}}{r}; \\ & r_{,ijk} = -\frac{1}{r}(r_{,i}r_{,jk} + r_{,j}r_{,ik} + r_{,k}r_{,ij}); \\ & r_{,ijkl} = -\frac{1}{r}(r_{,i}r_{,jkl} + r_{,j}r_{,ikl} + r_{,k}r_{,ijl}r_{,l}r_{,ijk} + r_{,ij}r_{,kl} + r_{,ik}r_{,jl} + r_{,il}r_{,jk}). \end{aligned} \tag{6}$$

有了ψ的高阶导数项，就可根据（2）和（3）式计算$U_{ij}(x, y)$和$T_{ij}(x, y)$的$Taylor$级数展开式.

根据快速算法的思想，将边界单元进一步形成边界叶子和边界簇结构，将边界积分方程分为近场和远场两部分计算，则（1）式可以表示为

$$\begin{aligned} & c_{ij}(x)\mu_j(x) + \int_{\Gamma_{nf}} T_{ij}(x, y)\mu_j(y)\, d\Gamma(y) \\ & = \int_{\Gamma_{nf}} U_{ij}(x, y)t_j(y)\, d\Gamma(y) + \sum_{\beta=0}^{N_s-1} c_{ik_1\cdots k_\beta}\prod_{m=1}^{\beta}(x-x_0)_{k_m} \end{aligned} \tag{7}$$

其中，$c_{ik_1\cdots k_\beta} = \sum_{n=0}^{N_s}(\bar{M}^{n}_{ik_1\cdots k_\beta} - \sum_{l=1}^{3}\bar{M}^{nl}_{ik_1\cdots k_\beta})$，$\bar{M}^{n}_{ik_1\cdots k_\beta}$和$\bar{M}^{nl}_{ik_1\cdots k_\beta}$称为多极矩系数[1-2]. Γ_{nf}表示近场边界，N_s为$Taylor$级数展开项项数，一般取4-5项. 对近场边界对源点的影响按（4）式计算. 整理（7）式，可得到形如$Ax=b$的稀疏矩阵线性方程组.

2 求解线性方程组与求解凸二次函数极小点的等价性

引理 1 基于$Taylor$级数展开的多极边界元法形成的矩阵A是非奇异的.

证明：对于方程组$Ax=b$，假设A是奇异矩阵，则$|A|=0$，从而$Ax=b$有无穷多个解或无解，这与多极边界元法解的存在唯一性相矛盾（参见文献[3]之 4.3.3），故A是非奇异的.

性质 1 如果$A\in R^{n\times n}$，那么A^TA是一个对称矩阵[4].

性质 2 如果$A\in R^{n\times n}$，且A非奇异，那么A^TA是正定的.

因为，对方程组$Ax=b$的求解等价于对方程组$A^TAx=A^Tb$的求解，令$A^TA=F$，$A^Tb=h$，下面的定理给出了求解$Fx=h$的解与求二次函数$f(x)=\dfrac{1}{2}x^TFx-h^Tx$的极小点的等价性.

定理 1 设$f(x)=\dfrac{1}{2}x^TFx-h^Tx$，其中$F$是$n$阶对称正定矩阵，则$x^*$是线性方程组$Fx=h$的解的充要条件是$x^*$是$f(x)$的极小点，即$Fx^*=h\Leftrightarrow f(x^*)=\min\limits_{x\in R^n}f(x)$.

证明：充分性 设x^*是$\min\limits_{x\in R^n}f(x)$的极小点，则有无约束问题最优解的一阶必要条件可知$\Delta f(x^*)=Fx^*-h=0$，即$x^*$是$Fx=h$的解.

必要性 若x^*是$Fx=h$的解，即$Fx^*=h$. 注意到，F是对称正定的，故对任意的$x\in R^n$，有

$$
\begin{aligned}
&f(x^*)-f(x)=\frac{1}{2}x^TFx-h^Tx-\frac{1}{2}x^*Fx^*+h^Tx^*\\
&=\frac{1}{2}(x^TFx-2h^Tx+x^{*T}Fx^*)-x^{*T}Fx^*+h^Tx^*\\
&=\frac{1}{2}(x^TFx-2(Fx^*)^Tx+x^{*T}Fx^*)-(Fx^*-h)^Tx^*\\
&=\frac{1}{2}(x-x^*)^TF(x-x^*)\geq 0
\end{aligned}
$$

即x^*是$f(x)$的极小点.

通过上面的性质及定理 1 我们就可以将求解$Ax=b$的问题转化为求解一个凸二次函数极小化的问题.

3 线性方程组$Fx=h$的共轭方向法计算步骤及收敛性分析

定义 1 设$d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(m-1)}$是$m$个非零向量，$F$是$n$阶对称正定矩阵，如果对于任意的$i\neq j$，有$(d^{(i)},\mathrm{F}d^{(j)})=0$，$i=0,1,\cdots,m-1$，$j=0,1,\cdots,m-1$，则称$d^{(0)},d^{(1)},\cdots,d^{(m-1)}$是关于$F$共轭的向量组，简称$d^{(i)}(i=0,1,\cdots,m-1)$是关于$F$共轭的向量.

定理 2 关于F共轭的向量组中的向量是线性无关的.

定理 3 设$p^{(0)},p^{(1)},\cdots,p^{(m-1)}$线性无关，则由这组向量可以构造$m$个关于$F$共轭的向量

$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m-1)}$（证明参见文献[5]）.

3.1 线性方程 $Fx = h$ 的共轭方向法计算步骤

（I）给定初始点 $x^{(0)}$ 及精度 $\varepsilon > 0$；

（II）$d^{(0)} = r^{(0)} = h - Fx^{(0)}$；

（III）对 $k = 0, 1\cdots, n-1$，作

（i）$\alpha_k = \dfrac{\left\| r^{(k)} \right\|_2^2}{(d^{(k)}, Fd^{(k)})}$ ，

（ii）$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$ ，

（iii）$r^{(k+1)} = h - Fx^{(k+1)}$ ，

（iv）若 $\dfrac{\left\| r^{(k+1)} \right\|}{\left\| h \right\|} \le \varepsilon$，或 $k+1 = n$，则输出 $x^{(k+1)}, r^{(k+1)}$，取 $x^{(k+1)}$ 作为 $Fx = h$ 的解，停机，否则：

（v）$\beta_{k+1,k} = \dfrac{\left\| r^{(k+1)} \right\|_2^2}{\left\| r^{(k)} \right\|_2^2}$ ，

（vi）$d^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_{k+1,k} d^{(k)}$.

这样就可以得到 $Fx = h$ 的解，进而就得到了 $Ax = b$ 的解.

3.2 共轭方向法的收敛性分析

共轭方向法，从任意给定的初始点出发，沿一组关于 F 共轭的方向进行线性搜索，在不考虑舍入误差的情况下，最多迭代 n 步（n 为方程组的阶数）便可求得二次函数的极小点.

定理 4　设 F 是 n 阶对称正定矩阵，$d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m-1)}$ 是一组关于 F 共轭的向量，求解以下极小化问题：

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T F x - h^T x \tag{8}$$

若从任意给定的初始点 $x^{(0)}$ 出发，依次沿 $d^{(0)}, d^{(1)}, \cdots, d^{(m-1)}$ 进行精确线性搜索，则最多经过 n 次迭代，可达到问题（8）的极小点（证明参见文献[5]定理 2.1.5）.

事实上，对于大型稀疏线性方程组，通常该方法只经过比方程组阶数 n 小的多的迭代次数就可获得所要求精度的近似解.

4 算例分析

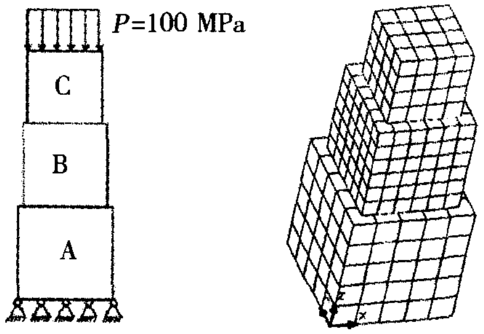
文献[6]中的例子考虑的是两个立方体接触，在此基础上，我们考虑A、B、C 3个立方体摩擦接触，边长分别为5 mm、4 mm、3 mm．物体A、B、C均为弹性体．物体A下表面固定约束．计算模型及离散网格如图1所示，离散数据见表1．三个物体的弹性模量E = 210 Gpa，泊松比 μ = 0.3，物体C的上表面受均布载荷P = 100 MPa，摩擦系数f = 0.2，接触容限为0.001 mm.

利用图1计算模型及离散网格用本文所提算法加以计算．对于 A 物体的部分计算结果示于图2和图3，CPU时间为2分8秒，计算效率大大提高了.

表 1　离散数据

Tab. 1　Discrete data

物体	节点数	单元数	接触节点数	接触单元数	自由度数
A 物体	152	150	36	25	648
B 物体	218	216	49	36	801
C 物体	98	96	25	16	369
合计	468	462	110	77	1 818



a　　b

a.计算模型；　b.离散网格

图1　计算模型及离散网格

Fig. 1　Calculation model and discrete meshes

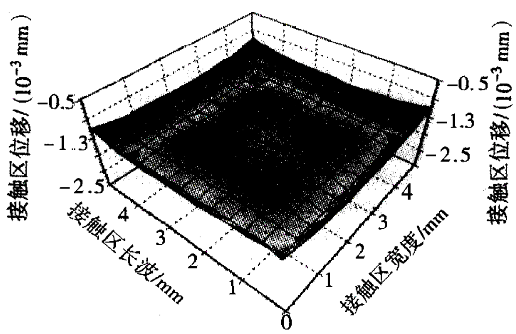


图2　物体A接触面位移(*z*=5 mm)

Fig. 2　Displacements on the contact surface for bodyA (*z*=5 mm)

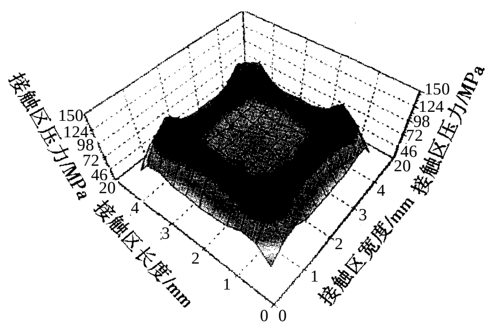


图3　接触区压力分布(*z*=5 mm)

Fig. 3　Pressure distribution in the contact zone(*z*=5 mm)

5 结束语

本文将多极边界元法与最优化数值技术相结合，这不但大大降低了存储量，而且使得运算量与 n 成正比，且比例系数不大于 1．通过数值实验验证，该方法使计算时间大大减少，从而为大规模问题的求解奠定了理论基础，有进一步研究的价值．

参考文献

[1] ZHAO L B, YAO Z H. Fast Multipole BEM for 3-D Elastostatic Problem with Applications for Thin Structures [J]. Tsinghua Science and Technology, 2005, 10(1): 67-75.

[2] 赵丽滨，姚振汉．快速多极边界元法在薄板结构中的应用[J]．燕山大学学报, 2004, 28(2): 103-107.

[3] 王玮玮．三维位势和弹性问题的多极边界元法研究[D]．秦皇岛：燕山大学, 2006: 36-38.

[4] 王萼芳，石生明．高等代数[M]．北京：高等教育出版社, 2003: 359-390.

[5] 徐成贤，陈志平，李乃成．近代优化算法[M]．北京：科学出版社, 2002: 50-58.

[6] Yu C X, Shen G X, Liu D Y. Mathematical programming solution for the frictional contact multipole-BEM [J]. Tsinghua Science and Technology, 2005, 10(1): 51-56.

Application of the Optimized Numerical Technology in the Fast Fast Multipole Boundary Element Method

ZHANG Yongping[1], CHEN Yiming[1], SU Weiwei[1], LIU Jianping[2]

(1. College of Science, Yanshan University; 2. Hebei Normal University of Science and Technology, Qinhuangdao, China 066004)

Abstract: Fast multipole boundary element method is the new numerical algorithm of boundary element method that develops in recent years. The key and difficulty of the multipole boundary element method is to find the solutions of the large-scale sparse matrix system of equations. This paper introduces the optimized numerical technology to solve the problem perfectly, tests the method through numerical experiments and finds out that this method can save time of finding solutions, which sets foundations for the solving of large-scale questions.

Key words: Boundary element method; Taylor series; Numerical technology; Multipole expansion; Conjugate direction method

（编辑：王一芳）