第6卷 第2期
1985年12月

岩 土 力 学
Rock and Soil Mechanics

Vol.6 No.2
Dec. 1985

双列块法—大型、稀疏、对称线代数方程组的一种有效解法

葛修润 杨家岭

提 要

双列块法用于有限元分析计算中求解大型线代数方程组。

目前在有限元计算中最通常使用的求解大型线代数方程组的方法是分块的三角分解法。由于这种方法对方程组系数矩阵的分块受带宽的限制'以至目前一般计算机的内存贮量限制了大带宽问题的求解，使一些大型的有限元课题，特别是三维问题的解算难以实现。双列块法解决了这个困难。双列块法对方程组系数矩阵实行按计算机许可的容量划分列块，按列分解，可以完全不受带宽的限制。方法是成功的、有效的。用双列块法在PE－3220小型机上仅用685K字节的内存解算了最大半带宽为1746，系数矩阵存贮量为5000K以上字节的三维(124个20节点等参元，8个16节点等参节理元、831个节点)有限元课题，这种方法使小型和高档微机用于大型有限元的解算成为可能。

一、概 述

用有限单元法分析结构物的应力、应变和变位时通过物理近似和离散化过程，最后可将问题归结为求解一个线代数方程组

$$KX=R \tag{1}$$

其中系数矩阵K具有对称、正定、稀疏性。但它又往往是一个高阶的矩阵。对于大型问题的有限元分析来说，求解上述方程组的计算时间几乎占全部计算时间的80％以上。在解方程时，所需占用的计算机内存往往最大。当按通常采用的直接解法来求解时，虽然充分利用了其系数矩阵的稀疏对称性，采取一维变带宽紧缩存贮的方式，一般计算机内存的容量也仍旧难以满足其庞大的系数矩阵的存贮要求。随着有限元方法的日益发展，特别在对于大型结构物的空间问题的有限元分析计算时，计算机容量不够用这个问题就更为突出，以致成为影响有限元求解能力的一个关键问题，'迫使从事有限元分析的人来改进大型代数方程组的求解技术。多年来，围绕着如何有效地求解有限元线代数方程组这个问题，国内外都采用了一些新技术。

这些新技术的一个共同点就是改进算法技巧，充分利用计算机丰富的外部存贮器来弥补内存的不足，从而扩大了计算机的容纳能力。根据它们使用不同的矩阵分解方法、不同的处理矩阵非零元素的方法、数据在计算机内外存贮器不同组织形式以及不同的内外交换技术，构成了各种不同特点的解法。例如波前法[1]、超元矩阵法[2]、带式分解法[3]、分块三角分解法[4]等等。目前大部分大型有限元分析通用程序用得较多的解法是分块三角分解法和波前法。应用特别普遍的是按列分块的三角分解法。

上述一些解法虽然在不同程度上都扩大了计算机的解题能力，但是它们也都存在一些极大的限制。对于波前法，受到最大波前区的限制，如果最大波前区的容量超过了计算机内存贮器的许可范围，计算仍旧无法实现。波前区的大小与所求解的结构物的形状及网格有着密切的关系，即使是平面问题，也可能达到很大的量级，空间问题就更难控制了。对于按变带宽紧缩存贮的分块的三角分解法，则受到最大半带宽的限制，如果由最大半带宽所决定的子块的容量超过了计算机内存贮器的容量，计算也将无法实现。而有限元空间问题的最大半带宽，即使在采取了优化带宽技术之后也难于期望有大幅度的减小。总之，我们所期望求解的一些较复杂较大型的有限元课题仍旧无法在中小型计算机上实现。一些更大型的题目就是在带有虚拟内存贮器的大型计算机上也常常遇到存贮上的一些麻烦。

突破带宽的限制，最大限度地解除对计算机内存贮容量的苛求，研究一种更为有效的求解大型、对称、正定，稀疏线代数方程组（集）的方法，对于解决日趋复杂、大型的有限元分析计算，对于广泛应用中小型计算机和微机都具有重要的意义。

本文探讨的双列块法是一种新的分块的三角分解解法。它的主要特点是在按列分块的基础上分块可以是任意的，块的大小不受半带宽的限制，而是根据计算机的内存量来确定。从理论上讲，块的大小可以小到一块只包含系数矩阵K的一列元素。同时，它不受系数矩阵中非零元素分布方式的限制，可适应非零元素任意分布的情况。实践证明，双列块法在求解大型有限元线代数方程组中，已经突破了带宽的限制。这不仅使得以前因为计算机容量不够用而不能求解的大型课题现在可以求解了，而且可以利用比较普及的小计算机解算大型课题。同时也减轻了以往计算人员在编制有限元网格时为缩小带宽或优化带宽所付出的繁重的工作。

二、双列块法

（一）三角分解的求解方式

利用方程组（1）式中系数矩阵K的对称正定性，对K采用按列分解的三角分解方式如下

$$K = U^T D U \tag{2}$$

式中 U——对角线元素为1的上三角阵；

K——对角阵。

则（1）式可写为

$$U^{T}DUX=R \tag{3}$$

$$UX=Y \tag{4}$$

$$DY=Z \tag{5}$$

$$U^{T}Z=R \tag{6}$$

（5）、（6）式称为前向回代过程，也可称之为右端行约化过程，（4）式称为后向回代过程，两者合在一起称之谓回代过程。

（2）式系数矩阵的分解是方程组解算的主要部分。矩阵U和D中的元素在一般满阵分解的情况下可按下式求出

$$u_{ij}=\left(k_{ij}-\sum_{r=1}^{i-1}u_{ri}u_{rj}d_{rr}\right)\Big/d_{ii} \tag{7}$$

$$(i=1,\ 2,\ \cdots\cdots n-1)$$

$$(j=i+1,\ i+2,\ \cdots\cdots n)$$

$$d_{jj}=k_{jj}-\sum_{r=1}^{j-1}u_{rj}^{2}d_{rr} \tag{8}$$

$$(j=1,\ 2,\ \cdots\cdots n)$$

由于系数矩阵K是按一维变带宽紧缩存贮方式存放，半带宽以外的零元素一律不存，这样不但减少了存贮量而且省略了结果为零的无效运算。所以实际计算时，（7）、（8）两式可改写成如下形式

$$u_{ij}=\left(k_{ij}-\sum_{r=\max(m_i,m_j)}^{i-1}u_{ri}u_{rj}d_{rr}\right)\Big/d_{ii} \tag{9}$$

$$(i<j)$$

$$d_{jj}=k_{jj}-\sum_{r=m_j}^{j-1}u_{rj}^{2}d_{rr} \tag{10}$$

其中m_i，m_j分别为第i列和第j列的非零元素的最小行号。

当分解完后，求得U和D矩阵，则按（6）式可以求得向量Z，再按（5）式求得向量Y，最后按（4）式即得最终解向量X。

（二）双列块算法

图1所示为一个大带宽的系数矩阵。

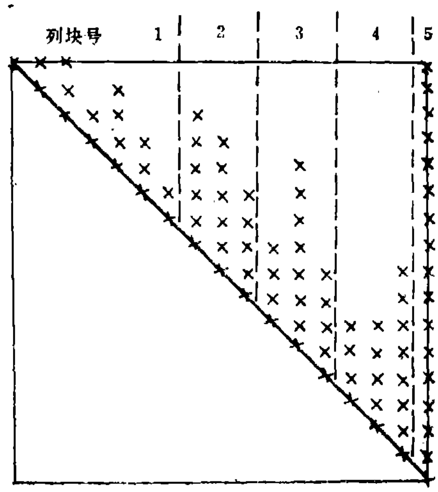

图 1

如果按照通常的分块分解解法，这样的矩阵形式由于受一个大带宽的限制，实际上只能当着一块来处理。其中的所有非零系数及带宽内零元素必须同时存入计算机内存，方可求解。这显然就会遇到内存贮量不够用的困难。

双列块法对上述矩阵的分块完全不受带宽的限制。它只是根据计算机许可的内存贮量来任意分割，譬如图1上所示的5块，仅仅要求任意两块的半带宽内元素之和不超过计算机许可的容量，便可进行求解。

具体的做法是：设置两个相等长度的一维数组（它们既是系数矩阵生成的工作数组又是系数矩阵分解的工作数组），分别称之为主列块数组和相关列块数组。系数矩阵的分块就按照这个数组的大小来进行。各列块可以包含不同的列数，但各列块带宽内的元素数目都不能超过一个列块数组的长度。列块按自然顺序编号。

另外，最好再设置一个一维数组存放系数矩阵分解的对角元素d_{ii}，称为对角元数组D。后面的分析将会看到这样做的目的只是为了减少内外存交换的次数。

预先按各列块逐块地生成系数矩阵，并立即转存到计算机的外存贮器贮存，同时要记录该列块的下列特征信息：始列号JB、末列号JE、所有列第一个非零元素行号中的最小行号M_j。

分解系数矩阵的步骤概述如下：

1．将第1列块的数据从外存调入内存的主列块数组。

2．将第1列块中的各列按（9），（10）两式逐列进行分解计算，不过此时，$j=1$，2，……JEM。JEM是该列块的末列号，计算所得的u_{ij}存放在原k_{ij}的位置上。并将该列块各列的d_{ii}记入对角元数组D的相应位置上。完成分解的第1列块暂时占据主列块数组不动，称之为主列块。

3．从第2列块开始，顺序向后逐块处理各列块如下：

（1）根据主列块的末列号JEM判断与其相关的列块号。凡某列块内非零元素的最小行号M_i小于或者等于JEM，则表示该列块与主列块相关，称之为相关列块。否则，表示与主列块不相关，于是该列块轮空，不必进入内存。

（2）将相关列块的数据从外存调入内存的相关列块数组。

（3）此时主列块与相关列块并存，按（9）式对相关列块内与主列块相关的元素进行分解计算，不过，此时（9）式中

$$i=1,\ 2,\ \cdots\cdots JEM \tag{11}$$

$$JBR\leqslant j\leqslant JER \tag{12}$$

其中　JEM是主列块的末列号；

JBR是相关列块的始列号；

JER是相关列块的末列号。

计算得到的u_{ij}仍旧存放在原k_{ij}的位置上。

（4）全部完成相关元素的分解后，立即将该相关列块调出内存，存入外存贮器原先存放该列块的地址上。

（5）逐列块重复（1）～（4），直到最后一个相关列块完成相关部分的分解并转出为止。

4．第一轮循环到此结束。主列块，即第1列块可以调出内存，存入外存贮器原先存放该列块的地址上，留待后向回代过程再调入使用。

此时，系数矩阵的分解形势如图2中划斜线部分，它表示第一轮循环完成分解的范围。

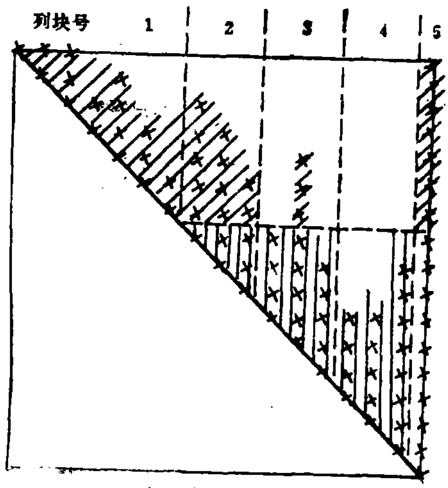

图　2

5．第二轮循环开始，第2列块成为主列块。

（1）将第2列块的数据从外存调入内存的主列块数组。

（2）该主列块除了与前面的列块相关的元素完成了分解计算外，从（11）式可知 $i>JEM$ 的部分包括对角项元素还没有进行分解。如图2中画竖线的部分所示。首先对这部分元素进行分解，这些分解计算只与本块内元素有关。至此，第2列块全部元素分解完毕。同样，u_{ij} 存放在 k_{ij} 原来的位置上，块内的 d_{ii} 记入对角元数组 D 中。

（3）重复上述第3、第4两步，对第3块以后的各列块中相关的元素进行分解计算。这里需着重补充说明的是：当主列块与相关列块并存时，设 m_i、m_j 分别为第 i 列和第 j 列的非零元素的最小行号；JBM、JEM 分别为主列块的起始和终止列号；JBR，JER 分别为参加运算的相关列块的起始和终止列号。则参加运算的相关列块中各列诸元素凡其行号脚标小于 JBM 的，都已在这一轮循环以前分解完毕，无需再进行计算。而各列诸元素凡是其行号脚标大于 JEM 的，在这一轮循环中暂不作分解，因而也不需要运算。所以，分解公式（9）、（10）中

$$JBM \leqslant i \leqslant JEM \tag{13}$$

$$JBR \leqslant j \leqslant JER \tag{14}$$

6．由此类推，直到全部完成系数矩阵的分解为止。

（三）关于前向回代过程

一般表达式如下

$$Z_i = R_i - \sum_{r=m_i}^{i-1} u_{ri} Z_r \tag{15}$$

$$y_i = z_i / d_{ii} \tag{16}$$

$$(i = 1,\ 2,\ \cdots\cdots n)$$

上述（15）式的计算是在各列块的系数分解过程中同时完成的，Z_i 就存放在原先存放 R_i 的位置中。（16）式是在分解过程全部完成后进行的，由于对角元素 d_{ii} 预先存放在专设的对角元数组 D 中，所以在计算 y_i 时就不必逐个列块从外存中调入数据了，从而省略了许多内外交换的次数。

（四）关于后向回代过程

一般表达式如下

$$x_i = y_i - \sum_{r=i+1}^{n} u_{ir} x_r \tag{17}$$

$$(i = n,\ n-1,\ \cdots\cdots 1)$$

当采用按列分解的双列法时，不能直接套用上式按行运算的格式。后向回代过程也是按列进行的，从调入最后一个列块、从最后一列开始，逆序进行。

对于最后一列，y_n即是x_n

$$x_n = y_n \tag{18}$$

并由此得到x_i（$i<n$）的第一次近似值

$$x_i^{(1)} = y_i - u_{in} \cdot x_n \tag{19}$$

当进行到第j列时

$$x \;= x' \tag{20}$$

$$x_i^{(n-j+1)} = x_i^{(n-j)} - u_{ij} x_j \tag{21}$$

$$(i = 1,\ 2,\ \cdots\cdots j-1)$$
$$(\text{当} i < m_j \text{时}，u_{ij} = 0)$$

当调入最后一个列块，进行到$j=1$时，方程组的全部解即已获得。

三、算例与讨论

应用上述双列块法对某三维问题进行了有限元分析计算。这个问题的有限元网格由124个20节点的等参元、8个16节点的等参节理元、共831个节点组成。其最大半带宽为1746，刚度矩阵K在上三角带宽内的元素总长为1,246,536，该矩阵按一维变带宽紧缩存贮方式需要计算机的内存贮容量为5兆字节以上方可求解。而我们应用双列块法在中国科学院武汉分院计算站的小型计算机PE-3220上仅用0.685兆字节的内存容量就求解成功。

1．上述算例说明双列块法可以在较小的内存情况下进行大型有限元线代数方程组的分块求解。摆脱了最大带宽的限制，从而适应非零元素任意分布的情况，因而具有较大的优越性和通用性。总之，突破带宽的限制是一个很重要的问题，在这里得到了解决。

2．在双列块法运行中，可以灵活地判别相关列块与不相关列块，以及每一相关列块内的相关列与不相关列，每一相关列内的相关元素与不相关元素，有效运算与无效运算等等。这样做减少了许多不必要的内外交换和一些不必要的运算，从而提高了运行的效率。

3．在双列块法的程序设计中，设置了对角元数组D和存放各列块一些特征信息的存贮单元。这些单元占内存很少，而且有些信息可以随列块数据同时贮存在外存贮器内。这样做对提高运行效率是必要的。

4．双列块法由于它是按列分解计算，按列分块，分块不受计算机内存贮容量的限制，所以它可以适应各种类型的计算机。但是，内存的节省是靠外存贮器来弥补的，故计算机需带有较丰富的外存贮设备并具备一定的内外交换速度。根据目前计算机的发展情况，这方面完全可以满足算题的需要。

5．双列块法对系数矩阵的分块是根据计算机所许可的内存贮量来决定的。块的大小从理论上讲可以小到每个子块只包含系数矩阵的一列元素。不过这样就会有大量的内外交换的次数。所以一般情况下，应该尽量利用计算机所许可的容量，使分块数尽量少一些，把 I/O 次数降到最低限度。

6．一般具有带状对称系数矩阵的线代数方程组，按三角分解方法求解，所需的运算次数是按$nm^2/2$来估算的。这一点也适用于双列块法。其中n代表矩阵的阶数，m代表矩阵的平均半带宽。

参 考 文 献

〔1〕Hinton,E.and Owen,D.R.J.,Finit Element Programming.Academic Press.1977.

〔2〕Schrem,E., Computer Implementation of the Finite Element Procedure, Numericai and Computer Methods in Structural Mechanics,1971.

〔3〕Wilson,E.L.,Bathe,K.J.,Doherty,W.P., Direct Solution of Large Systems of Linear Equations,Inter.J.Computer and Structures,Vol.4,1974.

〔4〕李大潜等，有限元素法续讲，科学出版社，1977年。

〔5〕袁建新、王可钧、杨家岭，GJP-1—含节理的三维弹性静力程序，岩土力学，1983年第1期。

〔6〕IAINS.Duff,A Survey of Sparse Matrix Research.Proc.of the IEEE,Vol.65, No.4,1977.

〔7〕冯康，数值计算方法，国防工业出版社，1978年。

The Double Column Block Method, an Effective Solution for Large sparse symmetric System of Linear Equations

Ge Xiurun　Yang Jialing

Abstract

The double Column block method applies to solute of large sparse linear simultaneous equations in finite element analysis.

At present the partitioned triangular decomposition method is generally used for solving large systems of linear equations in FE. With the partition of the coefficient matrix dependent on its bandwidth, the solution of problems with a large bandwidth is restricted owing to the computer core storage and hence it is difficult for this method to solve some large-scal FE problems, especially the three-dimensional problems.

This difficulty has been overcome by the doulbe column block method, completely independent of the bandwidth, by means of our method the coefficient matrix is partitioned according to the computer core storage capacity. It is proved that this approach is successful and effective. Based on this method, the solution has been completed of the three-dimensional FE problem with 124 twenty-node and 8 sixteen-node isoparametric elements, and 831 nodes, having a maximum half-bandwidth of 1746 and global stiffness matrix storage of more than 5000 K bytes. The computation was performed on PE-3220 minicomputer and only a core storage of 685 K bytes was used. The double column block method makes it possible for minicomputer and high-level microcomputer to be applied to calculations in large-scale FE problems.