


UM ESTUDO SOBRE PRECONDICIONADORES
ELEMENTO-POR-ELEMENTO PARA A SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE
EQUAÇÕES DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Rolf Stöller Arruda

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por :



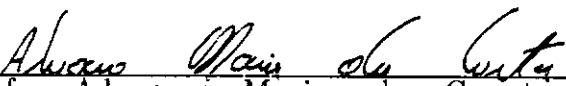
Prof. Luiz Landau, D.Sc.
(Presidente)



Prof. Nelson F.F. Ebecken, D.Sc.



Prof. Alvaro L.G.A. Coutinho, D.Sc.



Prof. Alvaro Maia da Costa, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JULHO DE 1990

ARRUDA, ROLF STÖLLER

Um Estudo sobre Precondicionadores Elemento–por–Elemento para a Solução de Sistemas de Equações do Método dos Elementos Finitos.

[Rio de Janeiro] 1990

XII, 71 p. 29.7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 1990)

Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Método dos Elementos Finitos 2. Gradientes Conjugados

3. Precondicionadores I. COPPE/UFRJ II. Título (série).

AGRADECIMENTOS

Ao Landau, Álvaro Coutinho, José Alves e Nelson Ebecken.

Ao Osni, Carrer, JAFS e Luís Fernando.

À minha Família.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.).

UM ESTUDO SOBRE PRECONDICIONADORES
ELEMENTO-POR-ELEMENTO PARA A SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE
EQUAÇÕES DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Rolf Stöller Arruda

Julho de 1990

Orientador: Luiz Landau

Programa: Engenharia Civil

Este trabalho apresenta uma comparação entre diversos preconditionadores, utilizados no Algoritmo Iterativo dos Gradientes Conjugados Precondicionado, para a solução de problemas estacionários discretizados pelo método dos Elementos Finitos.

Uma nova versão dos preconditionadores Elemento-por-elemento (EPE) Crout e Cholesky é apresentada, além da introdução de um preconditionador EPE Polinomial.

Problemas lineares e não-lineares físicos de condução de calor em regime permanente foram utilizados na análise do desempenho dos algoritmos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.).

A STUDY ON ELEMENT-BY-ELEMENT PRECONDITIONERS
FOR THE SOLUTION OF SYSTEMS OF EQUATIONS
FROM THE FINITE ELEMENT METHOD

Rolf Stöller Arruda

July, 1990

Thesis Supervisor: Luiz Landau

Department: Civil Engineering

This work presents a comparison among some preconditioners used in the Preconditioned Conjugate Gradient Algorithm for the solution of stationary problems discretized by the Finite Element Method.

A new version of the Element-by-Element Crout and Cholesky Preconditioners is presented besides the introduction of an Element-by-Element Polynomial Preconditioner.

Linear and nonlinear material steady-state heat conduction problems are used in the performance analysis of the algorithms.

Í N D I C E

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II – O MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS	3
II.1 – Introdução	3
II.2 – Precondicionamento	4
II.3 – Precondicionador diagonal	9
II.4 – Precondicionador polinomial	10
II.5 – Precondicionadores Elemento–por–Elemento	13
II.5.1 – Precondicionador EPE Crout	14
II.5.2 – Precondicionador EPE Cholesky	19
II.5.3 – Precondicionador EPE Polinomial	20
CAPÍTULO III – ASPECTOS DE IMPLEMENTAÇÃO	21
III.1 – Cálculo do produto matriz–vetor elemento–por–elemento	21
III.2 – Cálculo de $Bz_k = r_k$ elemento–por–elemento	25
III.3 – Critério de convergência	28
CAPÍTULO IV – APLICAÇÕES	29
IV.1 – Introdução	29
IV.2 – Análise Linear	30
IV.2.1 – Geração de Calor em Domínio Quadrado	31
IV.2.2 – Geração de Calor em Domínio Retangular	39
IV.2.3 – O Teste de Isolamento Térmico da NASA	46

IV.3 – Análise não Linear	50
IV.3.1 – Choque Térmico em Domínio Quadrado	52
IV.3.2 – Análise de um Sistema de Proteção Térmica	57
CAPÍTULO V – CONCLUSÕES	62
V.1 – Comentários Gerais	62
V.2 – Futuros Desenvolvimentos	64
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	65

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Atualmente o Método dos Elementos Finitos é amplamente utilizado para solução de problemas de engenharia lineares e não-lineares com variadas geometrias e condições de contôrno, assim como diversos tipos de material. A necessidade de se resolver problemas cada vez mais complexos, envolvendo grandes sistemas de equações, levou a um crescente interesse em relação a solução destes sistemas. Recentemente, com o aparecimento de computadores com capacidade de processamento vetorial e paralelo, atenção particular tem-se dado aos Métodos Iterativos, já que a princípio estes métodos parecem convenientes no sentido de explorar as características da arquitetura destas máquinas. Dentro desta classe de métodos, o Método Iterativo dos Gradientes Conjugados se popularizou como uma das principais técnicas de solução de sistemas de equações lineares provenientes da discretização pelo Método dos Elementos Finitos.

O Método dos Gradientes Conjugados pode ser otimizado preconditionando-se o sistema original (NOUR-OMID e PARLETT, 1985), originando o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado. Diversos preconditionadores podem ser utilizados, cada um com diferentes características, podendo-se citar entre eles os polinomiais, os Elemento-por-Elemento e o Diagonal.

O algoritmo Elemento-por-elemento (EPE), foi inicialmente apresentado por HUGHES, LEVIT e WINGET (1983a), como um método de integração no tempo para resolução de problemas transientes de condução de

calor. Posteriormente o algoritmo foi reformulado e utilizado como uma técnica de solução iterativa de equações lineares provenientes de técnicas comuns de integração no tempo (HUGHES, 1983b,c). Hughes analisou diversas técnicas, sendo a mais favorável a que utilizava o método EPE como um preconditionador para o Algoritmo Iterativo dos Gradientes Conjugados, e dentre estes preconditionadores, os EPE Crout e EPE Cholesky (HUGUES, 1984).

No método EPE, a matriz global não é formada, sendo aproximada por um produto de operadores (no caso as matrizes de cada elemento), onde cada um dos quais é processado individualmente. Este procedimento originou-se de técnicas de fatoração aproximada, mais especificamente do método "fractional step" apresentado por MARCHUK (1974,1975) e YANENKO (1971). A utilização de matrizes de elementos como operadores é encorajada pela arquitetura dos programas de Elementos Finitos, e permite o desenvolvimento de algoritmos paralelos para computadores com multi-processadores, o que parece ser uma tendência para o futuro (Tese D.Sc.WINGET, 1984; FOX, 1968).

Dando continuidade, o presente trabalho apresenta um estudo sobre algumas versões dos Precondicionadores EPE Crout e Cholesky, e um preconditionador EPE polinomial. Uma análise do desempenho destes algoritmos é apresentada, em relação aos exemplos analisados.

CAPÍTULO II

O MÉTODO DOS GRADIENTES CONJUGADOS

II.1 – INTRODUÇÃO

O Método dos Gradientes Conjugados foi inicialmente apresentado por HESTENES e STIEFEL (1952) e explora o fato de que a solução do sistema linear de equações da forma

$$A x = b, \quad (\text{II.1.1})$$

onde A é uma matriz simétrica positiva definida (SPD) de ordem N , x é o vetor de incógnitas e b é o vetor de valores conhecidos, equivale a minimização do funcional quadrático:

$$Q = \frac{1}{2} x^t A x - x^t b \quad (\text{II.1.2})$$

Sucessivas iterações em x são obtidas como aproximações para o mínimo na expressão acima, sobre uma direção de gradiente conjugado. Assim, processos iterativos utilizados para minimizar o funcional Q , conduzem a solução do sistema de equações algébricas associado a este funcional. (VARGA, 1962; YOUNG, 1971; LUENBERGER, 1973; HAGEMAN et alia, 1981; GOLUB et alia, 1985).

Nos algoritmos de solução que empregam o Método Iterativo dos Gradientes Conjugados Precondicionado para resolução do sistema linear, onde a matriz dos coeficientes A atua unicamente como operador linear, o processo de alocar memória para a matriz A pode ser efetuado

elemento-por-elemento utilizando uma estrutura de dados simples e flexível. Extendendo estas conclusões para o caso não-linear, podemos perceber que uma modificação em A , devido a não-linearidade localizada, como condições não-lineares no contorno, não-linearidade do material, etc, ocasionaria uma reformulação seletiva, envolvendo apenas os elementos cujas propriedades se modificassem significativamente.

II.2 – PRECONDICIONAMENTO

A eficiência do método dos Gradientes Conjugados está intrinsecamente relacionada com as características próprias do operador A (AXELSSON e BARKER, 1984), isto é, seus autovalores. Como a matriz A é positiva definida as superfícies representadas pela equação (II.1.2) são elipsóides. Métodos numéricos para minimização de um funcional tendem a ser mais eficientes quando as superfícies se aproximam da forma esférica. Neste caso a razão entre o maior e o menor autovalores do espectro

$$k(A) = \frac{\lambda_n}{\lambda_1}, \quad (\text{II.2.1})$$

onde λ_1 e λ_n são respectivamente o menor e o maior autovalor de A , denominada razão espectral ou número de condicionamento espectral, se aproxima da unidade. Caso contrário, isto é, se as superfícies se apresentarem muito distorcidas da forma esférica, a razão espectral se apresenta muito maior que a unidade, ocasionando um fraco desempenho por parte dos métodos iterativos utilizados para a minimização do funcional.

Torna-se necessário então, a utilização de uma técnica de condicionamento que tem como efeito resultar em um funcional onde as superfícies na vizinhança da solução sejam significativamente menos excêntricas que a original. Pode-se dizer então que para matrizes simétricas positivas definidas a taxa de convergência de um esquema iterativo pode ser avaliada através da razão espectral.

Logo, com o objetivo de atingir uma convergência mais rápida, o Algoritmo dos Gradientes Conjugados pode ser aplicado a um sistema equivalente ao original, mas que tenha sido condicionado. Isto é realizado pré multiplicando-se a equação original do sistema pela matriz não singular B , isto é:

$$B^{-1}A x = B^{-1}b \quad (\text{II.2.2})$$

Além disso, o sistema condicionado pode ser simetrizado, multiplicando-se ambos os lados da equação (II.2.2) pela matriz não singular W e introduzindo-se um novo vetor $\hat{x} = Wx$:

$$W B^{-1}A W^{-1} W x = W B^{-1}b \quad (\text{II.2.3})$$

ou

$$\hat{A} \hat{x} = \hat{b} , \quad (\text{II.2.4})$$

$$\begin{aligned} \text{onde } \hat{A} &= W B^{-1}A W^{-1} \\ \hat{x} &= W x \\ \hat{b} &= W B^{-1}b \end{aligned}$$

Aplicando-se o Método dos Gradientes Conjugados ao sistema condicionado acima, obtém-se o algoritmo dos Gradientes Conjugados

Precondicionado, cujos principais passos são apresentados na tabela a seguir.

Passo 1: Inicializar

$$k = 0$$

$$\mathbf{x}_0 = \text{Dado (usualmente } \mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \text{)}$$

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0 = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_0$$

Passo 2: Atualizar solução e resíduo

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{z}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k$$

Passo 3: Verificar convergência

$$\text{Se } \|\mathbf{r}_{k+1}\| < \delta \|\mathbf{r}_0\| \rightarrow \text{fim}$$

Passo 4: Atualizar direção conjugada

$$\mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_{k+1}$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{z}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{z}_k}$$

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{z}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$$

$$k = k + 1$$

vá para o passo 2

Em geral, uma matriz de condicionamento B para ser eficiente, deve atender alguns requisitos básicos: seus componentes devem ser facilmente determinados além de não necessitar armazenamento excessivo em relação a matriz A ; a solução do sistema $B z_k = r_k$ deve ser mais eficiente que a solução do sistema $A x = b$, já que o mesmo será resolvido a cada iteração do algoritmo, ou seja, escrevendo-se a matriz preconditionadora B na forma mais geral $B = F G^{-1} F^t$, onde F é uma matriz triangular inferior e G é uma matriz diagonal, deve-se resolver a cada iteração:

$$G^{-1} F^t z = r_1 = F^{-1} r_0 \quad (\text{II.2.5})$$

$$F^t z = r_2 = G r_1 \quad (\text{II.2.6})$$

$$z = r_3 = F^{-t} r_2 \quad (\text{II.2.7})$$

Finalmente, deve originar um número de condicionamento espectral $k(\hat{A})$ reduzido em relação a $k(A)$. Pode-se observar que a razão espectral da matriz preconditionada $k(\hat{A})$ é independente da forma escolhida para se fatorar B .

Pode-se mostrar, segundo GOLUB et alii (1985), que a taxa de convergência do método dos Gradientes Conjugados Precondicionado é proporcional ao quociente

$$\frac{\sqrt{k(\hat{A})} - 1}{\sqrt{k(\hat{A})} + 1} \quad (\text{II.2.8})$$

Pode-se notar que se $B = A$, $k(\hat{A}) = 1$, o algoritmo PCG

converge em apenas uma iteração, já que a matriz preconditionada \hat{A} será igual a matriz identidade, sendo a solução do sistema $\hat{A} \hat{x} = \hat{b}$ trivial; entretanto, isto não seria sensato, já que todo esforço seria empregado na fatoração da matriz B , transformando o método num procedimento direto de solução.

Por outro lado, se $B = I$, sendo I a matriz identidade, o Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado transforma-se no Método dos Gradientes Conjugados com $k(\hat{A}) = k(A)$.

Logo, a matriz B é uma aproximação SPD da matriz A , que pode ser escolhida entre a matriz original A e a matriz identidade I . Exprimindo-se B em termos dos seus fatores de Cholesky,

$$B = EE^t \quad (\text{II.2.9})$$

a transformação na equação (II.2.4) será:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= E^{-1} A E^{-t} \\ \hat{x} &= E^t x \\ \hat{b} &= E^{-1} b, \text{ ou seja} \\ E^{-1} A E^{-t} E^t x &= E^{-1} b \end{aligned} \quad (\text{II.2.10})$$

As transformações não precisam ser explicitamente formadas, e pode-se utilizar o algoritmo PCG com $B = EE^t$.

É importante observar que é a matriz de preconditionamento B e não a matriz E que aparece no algoritmo dos Gradientes Conjugados

Precondicionado, como qualquer matriz positiva definida \mathbf{B} tem várias fatorações da forma $\mathbf{B} = \mathbf{E}\mathbf{E}^t$, pode-se procurar por matrizes de condicionamento em toda uma classe de matrizes positivas definidas, sendo que a mesma pode ser determinada, por exemplo, por meio de fatorações incompletas, ou ainda por séries de expansão truncadas.

Diversas técnicas de condicionamento podem ser encontradas na literatura como os trabalhos de MEIJERINK et alia (1977), HAYES e DEVLOO (1984) e KAASSCHISTER (1988). Para um levantamento sobre técnicas de condicionamento ver AXELSSON(1985) e ORTEGA(1988).

II.3 – PRECONDICIONADOR DIAGONAL

Definindo-se como matriz \mathbf{B} a diagonal da matriz dos coeficientes \mathbf{A}

$$\mathbf{B} = \text{Diag}(\mathbf{A}), \quad (\text{II.3.1})$$

temos o Precondicionamento Diagonal, que devido a sua simplicidade de implementação, baixo número de operações envolvidas e efeito favorável de escalonamento de variáveis de grandezas dimensionais diferentes é muito utilizado, embora na maioria dos casos não tenha um efeito muito satisfatório na redução de $k(\hat{\mathbf{A}})$.

III.4 – PRECONDICIONADOR POLINOMIAL

A possibilidade de se empregar um polinômio matricial para a aproximação do inverso de uma matriz simétrica positiva definida como um preconditionador para o Método dos Gradientes Conjugados, foi considerada primeiramente por RUTISHAUSER (1959), e posteriormente por vários autores, dentre eles se destacando DUBOIS (1979); JOHNSON, MICHELLI e PAUL (1983); SAAD (1985) e SCANDRETT (1987).

O polinômio preconditionador escolhido neste trabalho foi o empregado por SAAD (1985), onde uma função peso correspondente ao conjunto ortogonal de polinômios de Chebyshev é utilizada para minimizar por mínimos quadrados o polinômio resíduo no intervalo dos autovalores de A . Como A é simétrica positiva definida os autovalores de A são reais e positivos, logo, pode-se escolher zero como um limite mínimo do intervalo de autovalores e utilizar o teorema de Gershgorin (ISAACSON e KELLER, 1966), para achar o limite máximo (b), sendo o espectro de A aproximado pelo intervalo $[0, b]$,

$$b < \max_i (a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}|) \quad (\text{II.4.1})$$

onde a_{ij} são os termos da matriz A .

Tem-se então que resolver o sistema preconditionado linear:

$$s(A)A \mathbf{x} = s(A)\mathbf{b} , \quad (\text{II.4.2})$$

onde s é o polinômio, usualmente de baixo grau. Polinômios de grau elevado

apesar de reduzirem o número de iterações necessárias a convergência, apresentam em contrapartida um correspondente aumento no número de multiplicações matriciais por iteração (SAAD, 1985). O polinômio s é escolhido de tal forma que a matriz $s(\mathbf{A})\mathbf{A}$ tenha uma distribuição de autovalores favorável ao método dos gradientes conjugados, para que o mesmo atinja rapidamente a convergência.

Neste trabalho, as análises são realizadas variando-se o grau do polinômio de um a cinco. Os cinco primeiros polinômios mínimos quadrados são:

$$s_1(\lambda) = -\frac{5}{4} b + \lambda \quad (\text{II.4.3})$$

$$s_2(\lambda) = \frac{7}{8} b - \frac{7}{4} b\lambda + \lambda^2 \quad (\text{II.4.4})$$

$$s_3(\lambda) = -\frac{15}{32} b^3 + \frac{27}{16} b^2\lambda - \frac{9}{4} b\lambda^2 + \lambda^3 \quad (\text{II.4.5})$$

$$s_4(\lambda) = \frac{55}{256} b^4 - \frac{77}{64} b^3\lambda + \frac{11}{4} b^2\lambda^2 - \frac{11}{4} b\lambda^3 + \lambda^4 \quad (\text{II.4.6})$$

$$s_5(\lambda) = -\frac{91}{1024} b^5 + \frac{91}{128} b^4\lambda - \frac{39}{16} b^3\lambda^2 + \frac{65}{16} b^2\lambda^3 - \frac{13}{4} b\lambda^4 + \lambda^5 \quad (\text{II.4.7})$$

A matriz de condicionamento $s(\mathbf{A})$, para um polinômio genérico de grau k , é dada pela expressão,

$$\mathbf{B}^{-1} = s_k(\mathbf{A}) = c_0 \mathbf{I} + c_1 \mathbf{A} + c_2 \mathbf{A}^2 + \dots + c_{k-1} \mathbf{A}^{k-1} + \mathbf{A}^k \approx \mathbf{A}^{-1} \quad (\text{II.4.8})$$

onde c_0, c_1, \dots, c_{k-1} são expressões que envolvem constantes e o valor

aproximado do autovalor máximo de A .

O algoritmo necessita repetidas multiplicações de B e um vetor de resíduos r , o que pode ser eficientemente realizado pelo processo,

$$w = c_{k-1} r + A r \quad (\text{II.4.9})$$

$$w = c_{k-2} r + A w \quad (\text{II.4.10})$$

$$\dots = \dots + \dots$$

$$B^{-1} r = c_0 r + A w \quad (\text{II.4.11})$$

sendo w um vetor auxiliar de trabalho.

Uma importante vantagem do condicionamento polinomial é que enquanto alguns condicionadores clássicos precisam inicialmente computar e armazenar uma fatoração aproximada, o condicionador polinomial não requer nenhum tipo de pré-processamento. A sua boa performance computacional depende da eficiência da implementação da multiplicação matriz-vetor, o que o torna um método atraente para computadores vetoriais. A vetorização desta operação minimiza as perdas devido ao maior número de multiplicações necessárias do método, melhorando sua performance geral.

II.5 – PRECONDICIONADORES ELEMENTO–POR–ELEMENTO

Os preconditionadores EPE foram apresentados por HUGHES e colaboradores (1984, 1985) baseados no conceito proposto inicialmente por HUGHES (1983a) e posteriormente generalizado e refinado em HUGHES (1983b, 1983c); NOUR–OMID e PARLETT (1983); ORTIZ, PINSKY e TAYLOR (1983) e WINGET (1983).

Por sua vez o conceito EPE foi desenvolvido inspirado nas técnicas de fatoração aproximada para solução de equações de diferenças finitas. Estas técnicas de fatoração aproximadas surgiram com o trabalho de PEACEMAN, RACHFORD e DOUGLAS (1955), e foram resultado do posterior desenvolvimento e aprofundamento por vários autores, dentre eles se destacando DOUGLAS e RACHFORD (1956,1962) e do método mais geral "Fractional Step", apresentado por MARCHUK (1974,1975) e YANENKO (1971).

Ao contrário destas técnicas de diferenças finitas, o método EPE conserva a generalidade do Método dos Elementos Finitos, não impondo restrições geométricas ou topológicas no domínio do problema ou sua discretização espacial. Pode-se acrescentar também o fato de ser facilmente implementado na arquitetura dos programas de Elementos Finitos e em computadores com multi–processadores.

As técnicas de fatoração aproximada consistem numa aproximação soma–para–produto, ou seja, aproxima-se a soma de um número de termos por um produto de termos preconditionados acrescidos da identidade. No caso da fatoração EPE, é simplesmente uma fatoração onde

os componentes da matriz são as matrizes de elementos finitos preconditionadas que contribuem para a formação da matriz global. Maiores esclarecimentos sobre técnicas de fatoração aproximadas EPE podem ser encontradas em HUGHES et alia (1985) e WINGET (1983).

II.5.1 – Precondicionador EPE Crout

O Precondicionador EPE Crout foi considerado por HUGHES et alii (1984) e MULLER (1985) como o mais eficiente na maioria dos casos por eles estudados. Segundo MULLER e HUGHES (1986) os preconditionadores EPE Crout e Cholesky possuem um desempenho superior ao do algoritmo dos Gradientes Conjugados com ou sem condicionamento diagonal em domínios irregulares. A matriz preconditionadora neste caso é dada por:

$$B = D_A^{\frac{1}{2}} \prod_{e=1}^n L_p[\bar{A}_e] \prod_{e=1}^n D_p[\bar{A}_e] \prod_{e=n}^1 L_p^t[\bar{A}_e] D_A^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{II.5.1.1})$$

onde :

$$\bar{A}_e = I + D^{\frac{1}{2}} (A_e - D_e) D^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.5.1.2})$$

$$D_A = \text{Diagonal (A)} \quad (\text{II.5.1.3})$$

$$D_e = \text{Diagonal (A}_e) \quad (\text{II.5.1.4})$$

$$A_e = \text{matriz de elemento } e \quad (\text{II.5.1.5})$$

$$L_p[.] = \text{fator triangular inferior de Crout} \quad (\text{II.5.1.6})$$

$$D_p[.] = \text{fator diagonal de Crout} \quad (\text{II.5.1.7})$$

Deve-se mencionar que embora as matrizes de elemento \bar{A}_e possuam a mesma dimensão da matriz global A , todas as operações estão

restritas ao conjunto de equações acopladas com o elemento considerado. Logo, este tipo de condicionamento pode ser efetuado a nível de elemento. Depois das matrizes de condicionamento de elemento terem sido formadas e fatoradas, o cálculo de $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_k$ é realizado através de tres laços sobre todos os elementos, onde um procedimento de agrupar/espalhar é necessário a cada avante—substituição, condicionamento diagonal e retro—substituição de cada elemento.

A vetorização do algoritmo não é direta mas pode ser realizada satisfatoriamente (HUGHES et alii, 1986 e FERENCZ, 1989). Por outro lado, o algoritmo é facilmente paralelizado, o que pode ser uma característica importante para aqueles com acesso a computadores com multi—processadores (FOX e SEITZ, 1983).

Um procedimento de fatoração direta não é facilmente paralelizado, logo, embora um procedimento iterativo EPE possa necessitar mais tempo de CPU do que um método de fatoração direta em máquinas sequenciais, o reverso pode ser verdade em máquinas paralelas. Deve—se ressaltar também o fato de que com o crescimento do cálculo de elementos finitos em microcomputadores, um procedimento EPE é vantajoso, pois apesar do tempo de computação possivelmente ser maior do que num método direto, o tempo do microcomputador têm um custo reduzido, e como não envolve uma fatoração global, grandes problemas podem facilmente adaptar—se a pouca memória interna disponível. Só um elemento necessita ser armazenado e processado de cada vez. O armazenamento dos elementos fatorados depende da disponibilidade de memória de alta velocidade RAM, e do gasto com operações de I/O entre os discos e a CPU. BROWN e KAMAT(1984) reportaram o uso do algoritmo PCG EPE Crout para solução

de problemas lineares num microcomputador IBM PC. Experiências com problemas não-lineares podem ser encontradas em KAMAT, WATSON e VANDENBRINK (1984), segundo o qual o algoritmo PCG EPE Crout é ideal para uso em microcomputadores se o usuário estiver interessado na resolução de problemas de elevadas dimensões.

Descreve-se a seguir o processo utilizado para obter o preconditionador EPE Crout. Como primeiro passo a matriz A deve ser expressa como:

$$A = D_A + \sum_{e=1}^n (A_e - D_e) \quad (\text{II.5.1.8a})$$

$$= D_A + \sum_{e=1}^n \Delta A_e \quad (\text{II.5.1.8b})$$

Utilizando apenas dois termos, tem-se:

$$\begin{aligned} A &= D_A + (A_1 - D_1) + (A_2 - D_2) \\ &= D_A + \Delta A_1 + \Delta A_2 \end{aligned} \quad (\text{II.5.1.9})$$

onde, D_A contém os termos diagonais, A_1, \dots, A_n são as matrizes de rigidez dos elementos, D_1, \dots, D_n contém os termos diagonais de A_1, \dots, A_n e $\Delta A_1, \dots, \Delta A_n$ contém as contribuições de cada elemento a serem superpostas a D_A .

Aplicando-se um preconditionamento diagonal em A tem-se uma matriz \bar{A} , onde:

$$\bar{A} = D_A^{-\frac{1}{2}} A D_A^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{II.5.1.10})$$

De (II.5.1.8), obtem-se:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= I + \sum_{e=1}^n D_A^{-\frac{1}{2}} (A_e - D_e) D_A^{-\frac{1}{2}} \\ &= I + \sum_{e=1}^n D_A^{-\frac{1}{2}} \Delta A_e D_A^{-\frac{1}{2}} \\ &= I + \sum_{e=1}^n \Delta \tilde{A}_e \end{aligned} \quad (\text{II.5.1.11})$$

a qual, para dois termos, assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= I + D_A^{-\frac{1}{2}} \Delta A_1 D_A^{-\frac{1}{2}} + D_A^{-\frac{1}{2}} \Delta A_2 D_A^{-\frac{1}{2}} \\ &= I + \Delta \tilde{A}_1 + \Delta \tilde{A}_2 \end{aligned} \quad (\text{II.5.1.12})$$

Com a intenção de aproximar (II.5.1.12) utiliza-se o produto:

$$\begin{aligned} (I + \Delta \tilde{A}_1)(I + \Delta \tilde{A}_2) &= I + \Delta \tilde{A}_1 + \Delta \tilde{A}_2 + \Delta \tilde{A}_1 \Delta \tilde{A}_2 \\ &\simeq I + \Delta \tilde{A}_1 + \Delta \tilde{A}_2 = \bar{A} \end{aligned} \quad (\text{II.5.1.13})$$

Fatorando-se as matrizes de elemento modificadas,

$$\bar{A}_{m,1} = I + \Delta \tilde{A}_1 = L_1 D_1 L_1^\dagger \quad (\text{II.5.1.14a})$$

$$\bar{\mathbf{A}}_{m,2} = \mathbf{I} + \Delta \bar{\mathbf{A}}_2 = \mathbf{L}_2 \mathbf{D}_2 \mathbf{L}_2^t \quad (\text{II.5.1.14b})$$

e substituindo em (II.5.1.13), tem-se:

$$\bar{\mathbf{A}} \simeq \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_1^t \\ \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_1^t \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_2 & \mathbf{D}_2 \mathbf{L}_2^t \\ \mathbf{L}_2 & \mathbf{D}_2 \mathbf{L}_2^t \end{array} \right) \simeq \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \\ \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \mathbf{D}_1 & \mathbf{D}_2 \\ \mathbf{D}_1 & \mathbf{D}_2 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_2^t & \mathbf{L}_1^t \\ \mathbf{L}_2^t & \mathbf{L}_1^t \end{array} \right) \quad (\text{II.5.1.15})$$

Pode-se notar na equação (II.5.1.15) que os fatores foram reordenados para preservar a simetria da matriz.

De (II.5.1.10), a matriz original \mathbf{A} , para dois termos, pode ser aproximada para:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \bar{\mathbf{A}} \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \\ &\simeq \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \\ \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \mathbf{D}_1 & \mathbf{D}_2 \\ \mathbf{D}_1 & \mathbf{D}_2 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_2^t & \mathbf{L}_1^t \\ \mathbf{L}_2^t & \mathbf{L}_1^t \end{array} \right) \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} = \mathbf{B} \end{aligned} \quad (\text{II.5.1.16})$$

Generalizando para n matrizes de elemento, obtem-se uma matriz \mathbf{B} simétrica positiva definida dada por:

$$\mathbf{B} = \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \left(\begin{array}{c} \mathbf{L}_e \\ \prod_{e=1}^n \mathbf{L}_e \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \mathbf{D}_e \\ \prod_{e=1}^n \mathbf{D}_e \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \mathbf{L}_e^t \\ \prod_{e=1}^n \mathbf{L}_e^t \end{array} \right) \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.5.1.17})$$

Substituindo \mathbf{L}_e por $\mathbf{L}_p[\mathbf{A}]_e$ chega-se a expressão que foi utilizada anteriormente.

II.5.2 – Precondicionador EPE Cholesky

No preconditionador EPE Cholesky a matriz \mathbf{B} é dada por:

$$\mathbf{B} = \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \prod_{e=1}^n \mathbf{L}_p[\bar{\mathbf{A}}_e] \prod_{e=n}^1 \mathbf{L}_p^t[\bar{\mathbf{A}}_e] \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{II.5.2.1})$$

sendo $\mathbf{L}_p[\cdot]$ o fator triangular inferior proveniente da fatoração por Cholesky. As outras matrizes possuem o mesmo significado do que no caso do preconditionador EPE Crout.

O método segue uma dedução análoga a do caso anterior, cuidando-se para substituir as equações (II.5.1.14) por:

$$\bar{\mathbf{A}}_{m,1} = \mathbf{I} + \Delta\tilde{\mathbf{A}}_1 = \mathbf{L}_1 \mathbf{L}_1^t \quad (\text{II.5.2.2a})$$

$$\bar{\mathbf{A}}_{m,2} = \mathbf{I} + \Delta\tilde{\mathbf{A}}_2 = \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_2^t \quad (\text{II.5.2.2b})$$

e realizando-se as demais transformações necessárias.

Nota-se que novamente a simetria da matriz é preservada através da reordenação dos fatores de Cholesky.

II.5.3 – Precondicionador EPE Polinomial

Neste caso o preconditionador \mathbf{B} é definido como:

$$\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{D}_A^{-\frac{1}{2}} \prod_{e=1}^n s_k[\bar{\mathbf{A}}_e] \prod_{e=n}^1 s_k[\bar{\mathbf{A}}_e] \mathbf{D}_A^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{II.5.3.1})$$

onde,

$$\bar{\mathbf{A}}_e = \mathbf{I} + \mathbf{D}_A^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{2} (\mathbf{A}_e - \mathbf{D}_e) \mathbf{D}_A^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{II.5.3.2})$$

e s_k é o polinômio de grau k .

A obtenção do preconditionador \mathbf{B} baseou-se na teoria sobre fatorações aproximadas (WINGET, 1983), a simetria da matriz pode ser preservada através de dois passos; no primeiro avalia-se as matrizes de elemento de 1 até n ; e no segundo, de n até 1, conforme apresentado na equação (II.5.3.1).

O procedimento é análogo ao do preconditionador polinomial, sendo que o teorema de Gershgorin para se achar um limite máximo que o maior autovalor pode assumir, é aplicado a matriz obtida a partir das contribuições das matrizes de elemento regularizadas, que assim como no caso do preconditionador polinomial, não é explicitamente formada.

CAPÍTULO III

ASPECTOS DE IMPLEMENTAÇÃO

III.1 – CÁLCULO DO PRODUTO MATRIZ-VETOR ELEMENTO-POR-ELEMENTO

A matriz dos coeficientes do sistema linear simétrico positivo definido é geralmente esparsa e é formada a partir das contribuições individuais das matrizes dos elementos finitos, ou seja:

$$\mathbf{A} = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{A}_g^e \quad (\text{III.1.1})$$

onde nel é o número de elementos, e \mathbf{A}_g^e é uma matriz $N \times N$ correspondente a contribuição da matriz de elemento \mathbf{A}^e (densa e de dimensão $ND \times ND$ para um elemento com ND graus de liberdade) expandida para a dimensão total do sistema no referencial global, com seus termos nas linhas e colunas determinadas pela numeração global dos nós, e os outros termos nulos.

O Algoritmo Iterativo dos Gradientes Conjugados necessita para cálculo do resíduo a computação a cada iteração do produto matriz-vetor $\mathbf{A}p$. Logo, deve-se escolher uma forma de armazenamento da matriz \mathbf{A} que atenda favoravelmente os requisitos de área disponível e facilidade de implementação para esta operação.

Num programa de Elementos Finitos, duas formas podem ser consideradas; a primeira forma de calcular o produto $\mathbf{A}p$ envolve um esquema de armazenamento esparsos. Neste caso a matriz global é formada, mas para diminuir a área de armazenamento necessária, só os elementos

diferentes de zero são armazenados (Não confundir com um esquema de armazenamento por banda ou envelope, utilizado para solução de sistemas por métodos diretos, e que ainda contém muitos termos nulos). Este tipo de estrutura envolve a criação de vetores de localização que definem a posição de cada termo em A (Tese D.Sc. MULLER, 1985; Tese D.Sc. WINGET, 1983).

A segunda forma de se calcular o produto Ap é o esquema elemento-por-elemento, onde a matriz A não é formada explicitamente. As matrizes de elemento A^e são armazenadas a nível de elemento e o produto é efetuado de acordo com:

$$A p = \left(\sum_{e=1}^{nel} A_g^e \right) p = \sum_{e=1}^{nel} (A_g^e p) \quad (\text{III.1.2})$$

Entretanto, como só os termos não nulos de cada A^e figuram em cada multiplicação do somatório acima, os produtos individuais matriz-vetor são realizados a nível de elemento ao invés da forma mostrada acima. Deste modo, calcula-se os produtos de matrizes densas com vetores segundo:

$$A p = \sum_{e=1}^{nel} (A^e p^e) \quad (\text{III.1.3})$$

onde p^e é o vetor formado retirando-se do vetor p os termos relacionados com a matriz A^e .

Apesar do esquema de multiplicação esparsa envolver uma redução no número de operações necessárias para avaliação do produto Ap

(neste caso a contribuição de elementos contíguos num mesmo nó é executada uma única vez no cálculo de \mathbf{A}_p , pois suas contribuições já foram somadas anteriormente ao se formar a matriz global \mathbf{A}), e necessitar uma menor área de armazenamento do que o esquema elemento-por-elemento, para problemas de dimensões elevadas sua implementação se torna impraticável, tendo o produto \mathbf{A}_p que ser executado através do esquema EPE, armazenando-se as matrizes em memória secundária ou recalculando-as a cada passo (o que pode ser interessante para problemas não lineares).

Neste trabalho, adota-se o esquema EPE, onde o armazenamento da matriz \mathbf{A} como uma coleção de contribuições de matrizes de elementos atende bem a natureza dos problemas discretizados por elementos finitos, sendo compatível com a estrutura de dados tradicional e a sua arquitetura. A principal característica destes métodos explora o fato de que as contribuições ao sistema são calculadas sequencialmente e independentemente como matrizes densas de elemento. Esta característica parece particularmente apropriada para problemas de grandes dimensões ou cálculos em microcomputadores. Ela também tem mérito quando estratégias de refinamento adaptativo são utilizadas, já que só um subconjunto de elementos pode ser refinado, e em conjunto com estratégias iterativas de solução para problemas não lineares.

Nos métodos diretos, geralmente a numeração dos elementos e nós deve ser feita cuidadosamente para reduzir a largura de banda ou envelope a fim de se ter armazenamento e eficiência otimizados. Em alguns casos esta tarefa é de difícil realização, necessitando de um pré-processador sofisticado. Entretanto se a malha for modificada ou trocada em algum local, como em refinamentos auto-adaptativos, os elementos e nós

devem ser renumerados para preservar por exemplo, uma boa largura de banda. No caso dos algoritmos iterativos EPE, a numeração dos nós e elementos pode ser arbitrária, e as computações realizadas independentemente, tornando-se portanto atraentes em novas arquiteturas de processamento paralelo.

Para implementação do esquema de solução EPE é necessário definir uma estrutura de dados que permita a transferência das informações do nível de elemento para a dimensão global para executar as operações de agrupar/espalhar quando necessário. Sendo assim utiliza-se um vetor apontador $LM(Nel,ND)$, que define o mapeamento do nível local para o nível global através de endereçamento indireto (HUGHES, 1987), cada entrada de $LM(I,J)$ contém o número de uma equação global ativa.

Desta forma, o cálculo do produto Ap é realizado para cada elemento através do seguinte procedimento:

- (i) Agrupar os componentes do vetor global p conectados com os graus de liberdade do elemento.
- (ii) Executar a multiplicação matriz-vetor a nível de elemento, armazenando os resultados num vetor local.
- (iii) Espalhar e acumular o resultado do vetor local para o vetor de dimensão global do problema.

III.2 – CÁLCULO DE $Bz = r_k$ ELEMENTO-POR-ELEMENTO

No Método Iterativo dos Gradientes Conjugados Precondicionado, o preconditionador B precisa ser aplicado em cada iteração para resolver o sistema auxiliar:

$$B z = r \quad (\text{III.2.1})$$

Apresenta-se a seguir as operações envolvidas no processo quando B é uma matriz preconditionadora EPE, através de um exemplo com somente dois elementos finitos. Neste caso, utilizando-se um preconditionador do tipo Crout, a matriz A será dada por:

$$A = D_A^{\frac{1}{2}} \bar{A} D_A^{\frac{1}{2}} \approx D_A^{\frac{1}{2}} (L_1 L_2)(D_1 D_2)(L_2^t L_1^t) D_A^{\frac{1}{2}} = B \quad (\text{III.2.2})$$

Logo, deve-se efetuar a cada iteração o seguinte processo:

$$D_A^{\frac{1}{2}} (L_1 L_2)(D_1 D_2)(L_2^t L_1^t) D_A^{\frac{1}{2}} z = r \quad (\text{III.2.3})$$

$$(L_1 L_2)(D_1 D_2)(L_2^t L_1^t) D_A^{\frac{1}{2}} z = D_A^{-\frac{1}{2}} r = r_1 \quad (\text{III.2.4})$$

$$L_2(D_1 D_2)(L_2^t L_1^t) D_A^{\frac{1}{2}} z = L_1^{-1} r_1 = r_2 \quad (\text{III.2.5})$$

$$(D_1 D_2)(L_2^t L_1^t) D_A^{\frac{1}{2}} z = L_2^{-1} r_2 = r_3 \quad (\text{III.2.6})$$

$$(L_2^t L_1^t) D_A^{\frac{1}{2}} z = (D_1 D_2)^{-1} r_3 = r_4 \quad (\text{III.2.7})$$

$$\mathbf{L}_1^t \mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \mathbf{z} = \mathbf{L}_2^{-t} \mathbf{r}_4 = \mathbf{r}_5 \quad (\text{III.2.8})$$

$$\mathbf{D}_A^{\frac{1}{2}} \mathbf{z} = \mathbf{L}_1^{-t} \mathbf{r}_5 = \mathbf{r}_6 \quad (\text{III.2.9})$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{D}_A^{-\frac{1}{2}} \mathbf{r}_6 \quad (\text{III.2.10})$$

A generalização para mais elementos é imediata. Três tipos de operações são realizadas; condicionamento diagonal e, retro e avante-substituições. Logo, depois das matrizes condicionadoras EPE terem sido formadas e fatoradas (EPE Crout e EPE Cholesky), o cálculo de $\mathbf{B}^{-1} \mathbf{r}_k$ é realizado através de três laços sobre todos os elementos (fatoração por Crout), ou de dois (fatoração por Cholesky e polinomial). Estas operações podem ser efetuadas a nível de elemento, já que para \mathbf{L}_j por exemplo, só temos uma contribuição do elemento j e a unidade nas posições restantes da diagonal principal da matriz. Assim, necessita-se de um procedimento de agrupar/espalhar semelhante ao utilizado no cálculo de $\mathbf{A}p$, antes de cada operação envolvida em $\mathbf{Bz} = \mathbf{r}$.

Duas formas distintas de se efetuar estas operações a nível de elemento foram implementadas para os condicionadores EPE Crout e Cholesky, ambas diferindo na forma utilizada para armazenar as matrizes de elemento antes da regularização e fatoração.

A primeira versão, utilizada por HUGHES et al (1983c) e WINGET (1984), será denominada neste trabalho de "local". Nesta, as matrizes de elemento armazenadas segundo o ítem III.1 são regularizadas e fatoradas no nível local, isto é, onde as matrizes de elemento são formadas.

Uma segunda versão desenvolvida será chamada de "global" para melhor salientar suas diferenças da implementação anterior. Neste caso, as matrizes de elemento após formadas no nível local, são rearranjadas a nível de elemento segundo a numeração dos nós no nível global. O que se deseja é obter uma matriz de elemento de dimensões $ND \times ND$ equivalente a obtida pelo processo de se expandir a matriz de elemento densa do nível local para o global. Isto é, armazena-se a matriz de ordem $ND \times ND$ (no caso NTERM, já que é uma matriz triangular superior) formada pelos elementos não nulos da matriz expandida no nível global, os quais são os termos referentes aos nós originais da matriz do elemento em questão, na nova disposição obtida.

Em ambos os casos, a matriz de identificação ID (ver BATHE, 1982) é a mesma, porém, na segunda implementação (global), tem-se uma nova matriz de localização, já que os nós apresentam uma nova disposição. Esta nova matriz de localização será chamada de GLM, e é formada da mesma forma que a matriz LM utilizada na implementação local.

No caso das matrizes condicionadoras EPE polinomiais, segue-se o mesmo esquema de multiplicação que em A_p , só que utilizando as matrizes de elemento modificadas e executando a multiplicação em dois passos sobre todos os elementos, para assegurar a simetria.

III.3 – CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

O critério de convergência do processo iterativo adotado foi a norma euclideana de resíduos. Denotando-se por $\|\cdot\|_2$ a norma euclideana, tem-se:

$$\|r_k\|_2 = (r_k^t r_k)^{\frac{1}{2}} < \epsilon_r \|r_0\|_2 \quad (\text{III.3.1})$$

Este critério relaciona-se com as equações que governam o problema $r = A x - b$; por exemplo, tomando-se $\epsilon_r = 0,01$ significa que as forças em desequilíbrio representam 1% das cargas aplicadas.

CAPÍTULO IV

APLICAÇÕES

IV.1 – INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta os resultados numéricos obtidos da aplicação do Algoritmo Iterativo dos Gradientes Conjugados Precondicionado a problemas de condução de calor em regime permanente lineares e não-lineares. A equação diferencial que governa o problema, em regime permanente e para domínios bidimensionais, é a seguinte:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K_x \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y \frac{\partial u}{\partial y} \right] + Q = 0 \quad (\text{IV.1.1})$$

onde K_x e K_y são coeficientes de condutividade térmica, u é a temperatura e Q é o calor gerado internamente, definido no domínio $\Omega = \Omega(x,y)$.

Os algoritmos foram analisados quanto a sua performance computacional em 2 itens principais: número de iterações necessárias a convergência e taxa de processamento, definida como a razão entre o tempo de processamento necessário a convergência de cada algoritmo e o tempo obtido pelo Algoritmo dos Gradientes Conjugados. Nestas análises os problemas foram discretizados por meio de elementos finitos isoparamétricos com 4 pontos nodais. O computador utilizado foi o Burroughs (UNISYS) A9P, situado no Núcleo de Computação Eletrônica (NCE) da UFRJ.

IV.2 – ANÁLISE LINEAR

Inicialmente realizou-se um estudo sobre o desempenho dos algoritmos na solução de problemas lineares. A discretização através do Método dos Elementos Finitos de um problema de valor de contorno elíptico simétrico resulta num sistema de equações lineares com uma matriz de coeficientes simétrica positiva definida esparsa. As equações discretas que regem o problema são dadas por:

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (\text{IV.2.1})$$

onde \mathbf{K} é a matriz de condutividade térmica, \mathbf{u} é o vetor de incógnitas nodais e \mathbf{f} é o vetor de termos conhecidos.

IV.2.1 – Geração de Calor em Domínio Quadrado

Analisa-se através deste exemplo, o efeito dos diversos preconditionadores na resolução de um problema de geração de calor em um domínio quadrado $\Omega = [0,10] \times [0,10]$, apresentando condições de contorno de Dirichlet e Neumann (COUTINHO et alii 1987a), conforme a fig. V.2.1, considerando-se $k_x = k_y = 2,0$, $Q = 2,4$ e $u_0 = 0$ em Ω .

Foram realizadas diversas análises empregando malhas regulares e considerando a simetria do problema; estas malhas foram gradualmente refinadas, utilizando um número crescente de graus de liberdade (NGL).

Este problema pode ser considerado bem condicionado, já que a razão entre os valores máximo e mínimo da diagonal principal da matriz de condutividade térmica, que pode ser vista como uma cota superior a razão espectral da matriz, é apenas 4.0 (COUTINHO 1987b).

Os resultados, utilizando uma tolerância para a norma relativa dos resíduos de 10^{-5} , são apresentados a seguir. Na tabela IV.2.1 encontram-se as taxas de processamento para cada malha utilizada e na tabela IV.2.2 o número de iterações necessárias em cada algoritmo para atender a convergência.

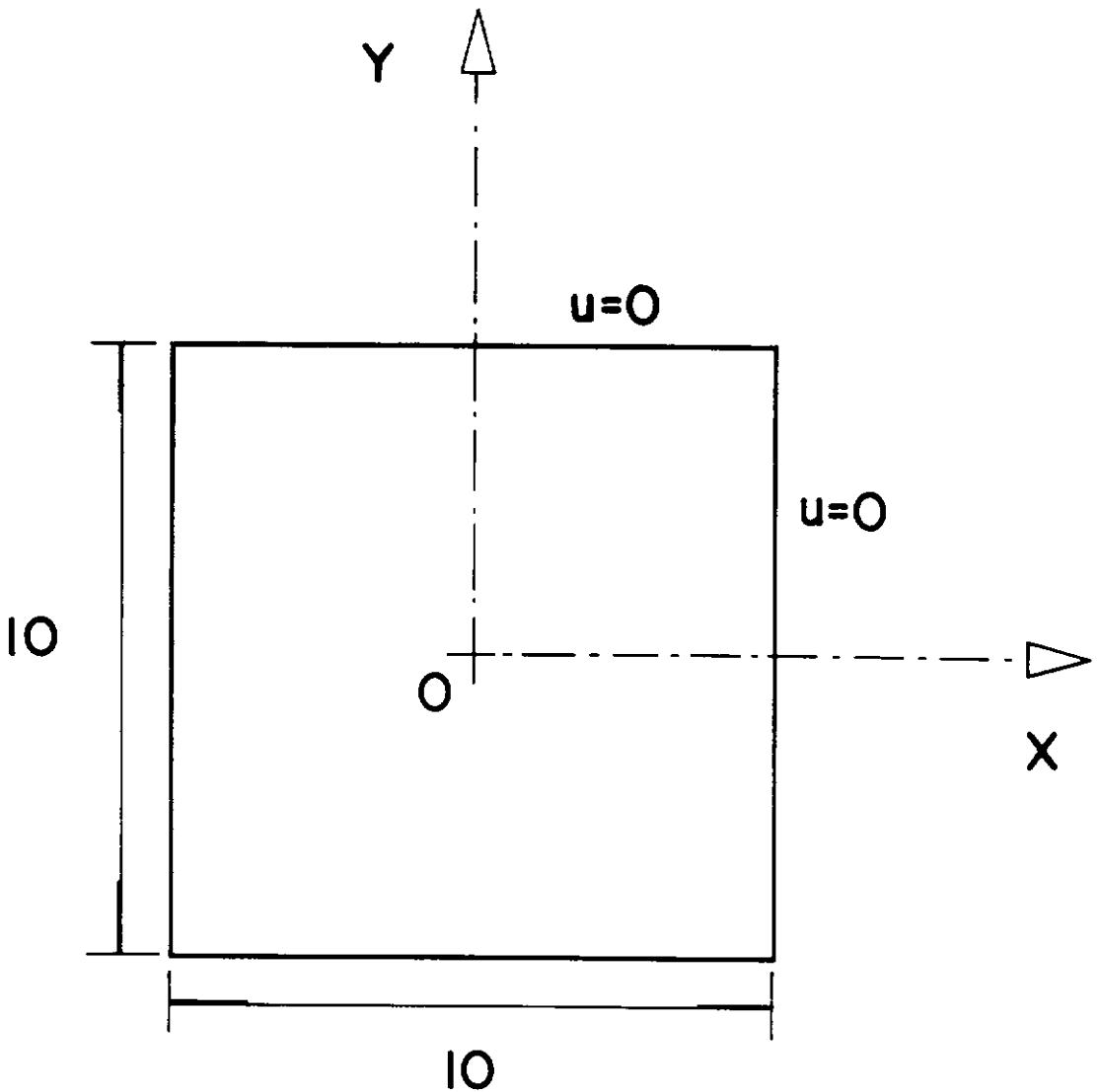


Fig.IV.2.1- Geração de calor em um domínio quadrado.

		MALHA					
		10x10	20x20	40x40	60x60	80x80	100x100
GRAD CONJ		1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
PCG DIAG		1,00	0,98	1,00	1,06	0,98	0,99
PCG EPE CRT	loc	1,11	1,05	1,09	1,09	1,06	1,04
	glb	1,11	1,03	1,04	1,09	0,99	0,97
PCG EPE CHY	loc	1,11	1,08	1,19	1,17	1,07	1,06
	glb	1,11	1,03	1,06	1,09	0,99	0,98
PCG POL	gr1	1,11	1,08	1,12	1,13	1,13	1,14
	gr2	1,67	2,00	2,50	2,75	2,87	2,97
	gr3	1,11	1,08	1,14	1,16	1,13	1,15
	gr4	1,11	1,10	1,16	1,14	1,14	1,14
	gr5	1,22	1,10	1,16	1,17	1,15	1,16
PCG EPE POL	gr1	1,22	1,35	1,62	1,70	1,66	1,71
	gr2	1,67	2,03	2,66	2,93	2,98	3,10
	gr3	1,56	1,83	2,13	2,29	2,30	2,37
	gr4	1,56	1,93	2,28	2,49	2,49	2,59
	gr5	1,67	2,00	2,45	2,63	2,63	2,75

Tabela IV.2.1 – Taxa de processamento

		MALHA					
		10x10	20x20	40x40	60x60	80x80	100x100
GRAD CONJ		23	43	84	125	169	211
PCG DIAG		20	41	82	124	166	208
PCG EPE CRT	loc	12	24	46	68	89	109
	glb	11	21	41	60	79	97
PCG EPE CHY	loc	12	24	46	68	88	108
	glb	11	21	40	59	78	95
PCG POL	gr1	16	28	55	81	109	137
	gr2	28	57	113	170	229	287
	gr3	9	15	30	45	59	74
	gr4	7	13	25	36	48	60
	gr5	7	11	21	31	41	51
PCG EPE POL	gr1	18	36	73	111	148	186
	gr2	26	47	95	144	192	241
	gr3	15	30	54	81	108	135
	gr4	13	26	47	71	95	119
	gr5	12	23	43	63	84	106

Tabela IV.2.2 – Número de iterações para convergência

Pode-se observar que os algoritmos que apresentam melhor desempenho; Gradientes Conjugados, Gradientes Conjugados com Precondicionador Diagonal e PCG EPE Crout global, alternaram entre si a posição de menor tempo de processamento, como pode ser visto no gráfico IV.2.1. Neste gráfico os tempos de processamento apresentam-se normalizados tendo como base o tempo de processamento do Algoritmo dos Gradientes Conjugados para a malha 10x10. Como já enfatizado anteriormente, o problema é considerado bem condicionado e sendo assim não há ganhos significativos na utilização dos precondicionadores em relação ao Método dos Gradientes Conjugados.

O melhor desempenho observado entre os precondicionadores EPE foi o do algoritmo PCG EPE Crout global seguido pelo algoritmo PCG EPE Cholesky global, e suas respectivas implementações do tipo local. Isto demonstra que o pequeno aumento no tempo necessário para realizar cada iteração nas implementações globais em relação as locais foi vantajosamente compensado por um menor número de iterações necessárias para a convergência, resultando num menor tempo de processamento total.

Pode-se notar também o bom desempenho do algoritmo PCG Polinomial neste problema, sendo uma opção a se considerar quando a quantidade de memória disponível no computador for limitada, já que não há necessidade de armazenar as matrizes de elemento fatoradas. O aumento do grau do polinômio precondicionador não favoreceu o desempenho computacional, já que apesar dos precondicionadores polinomiais de grau mais alto apresentarem menor número total de iterações necessárias para a convergência, são acompanhados por um aumento no tempo individual de cada iteração, a ponto do precondicionador polinomial de primeiro grau

obter o menor tempo de processamento dentre os cinco. Comparando-se os preconditionadores polinomiais de primeiro grau, atuando na malha 100x100, notamos que o PCG EPE Polinomial apresentou um tempo computacional superior ao do PCG polinomial.

Do gráfico IV.2.2 pode-se observar que quanto maior o número de graus de liberdade do exemplo analisado, menor porcentualmente o número de iterações necessárias para a convergência, indicando uma tendência de melhora na eficiência dos algoritmos iterativos para resolução de grandes problemas.

Os resultados apresentados pelos algoritmos estão de acordo com a solução encontrada em HINTON e OWEN (1979), onde analisou-se um problema semelhante.

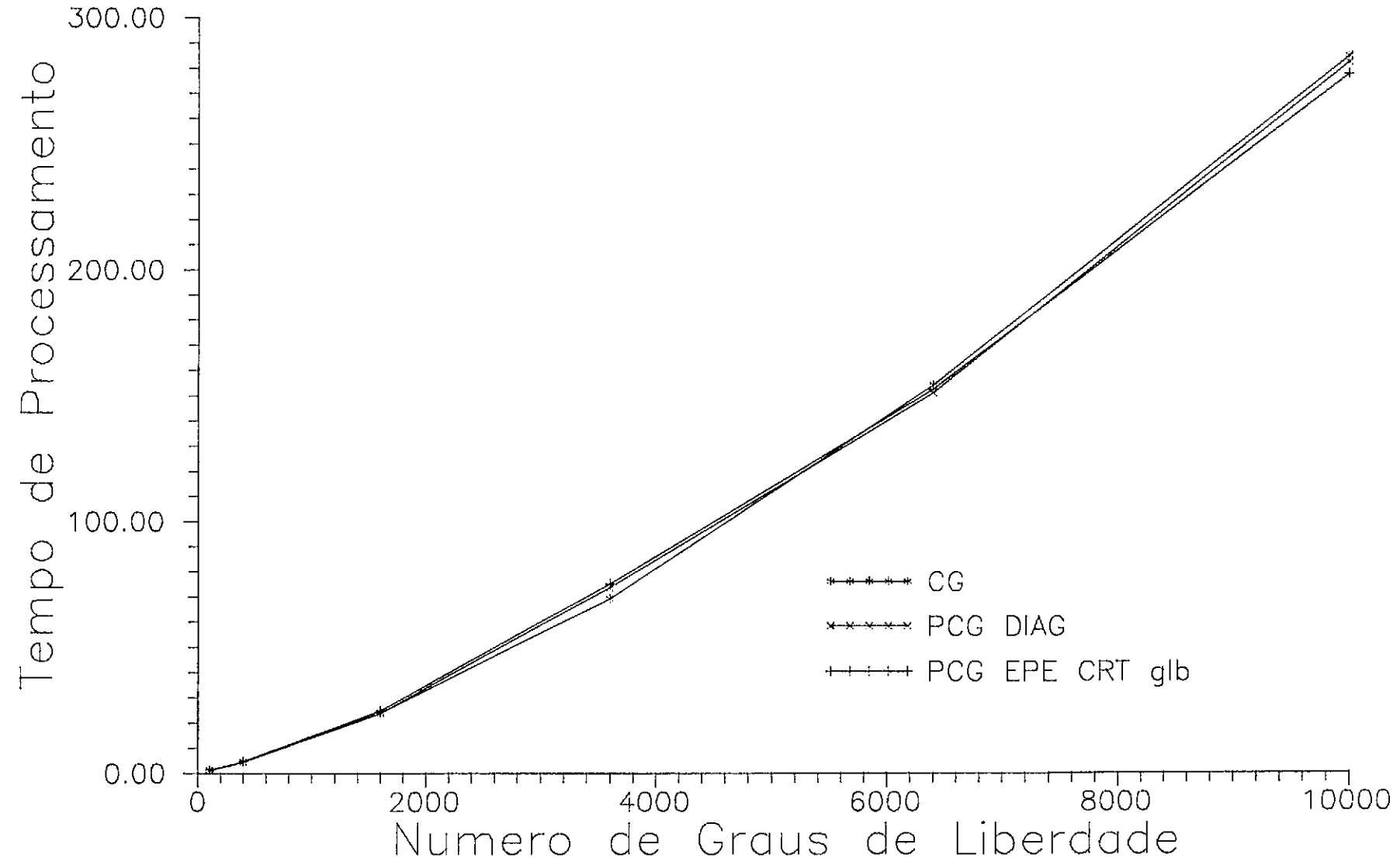


Grafico IV.2.1

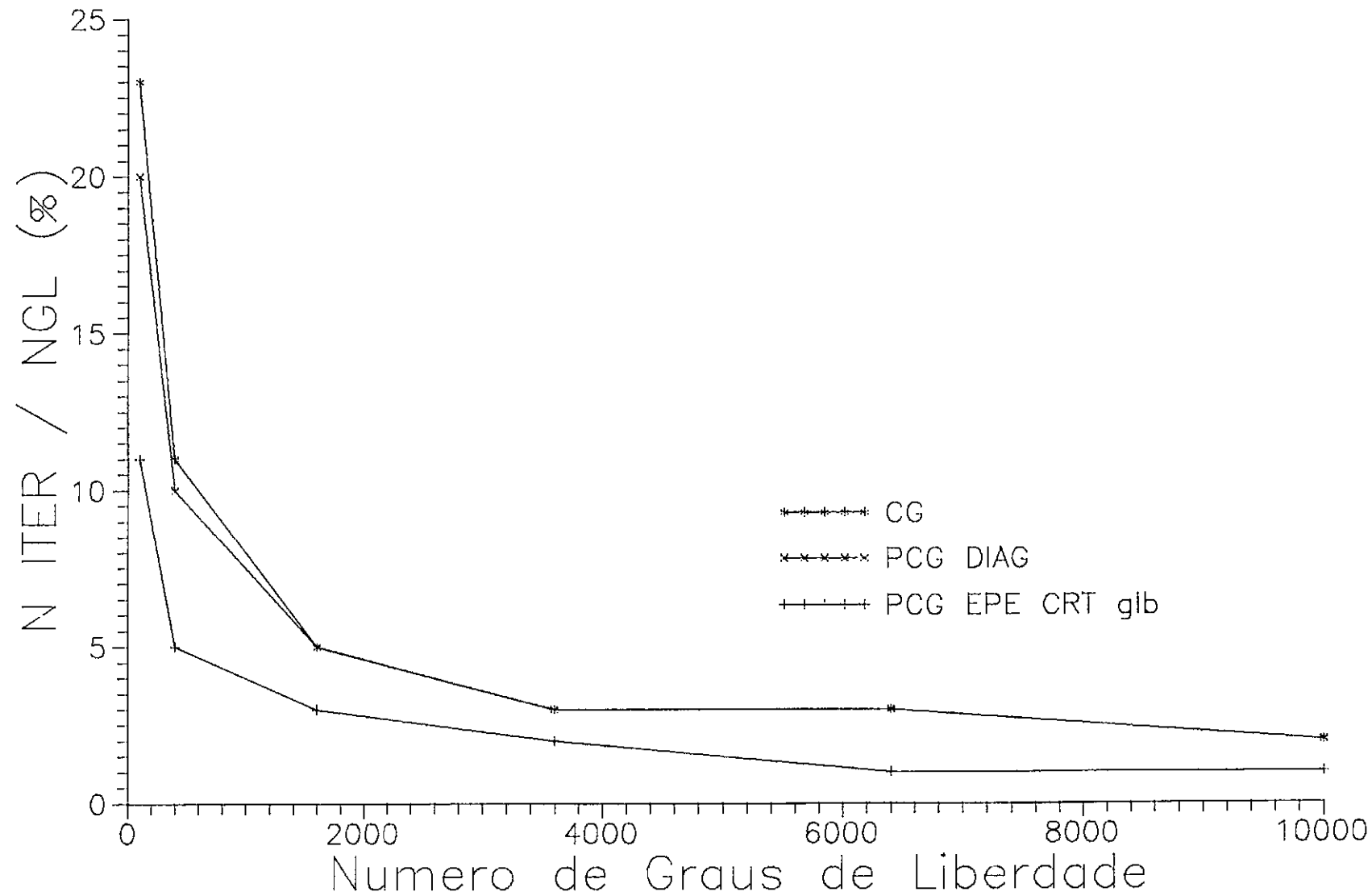


Grafico IV.2.2

IV.2.2 – Geração de Calor em Domínio Retangular

Este exemplo (ver fig.IV.2.2) é semelhante ao exemplo anterior, porém para um domínio retangular $\Omega = [0,10] \times [0,20]$ e possuindo ortotropia sendo $k_x = 2,0$, $k_y = 1000k_x$, $Q = 2,4$ e $u_0 = 0$ em Ω , o que induz um mal condicionamento na matriz de condutividade térmica. As malhas utilizadas possuem o mesmo número de elementos que as do exemplo anterior e os elementos também são igualmente espaçados, apresentando uma razão de aspecto de 1:2 .

Novamente foi utilizada uma tolerância para a norma relativa dos resíduos de 10^{-5} . Os resultados encontram-se nas tabelas IV.2.3, que apresenta as taxas de processamento para cada malha utilizada, e IV.2.4, que apresenta o número de iterações necessárias em cada algoritmo para atender a convergência.

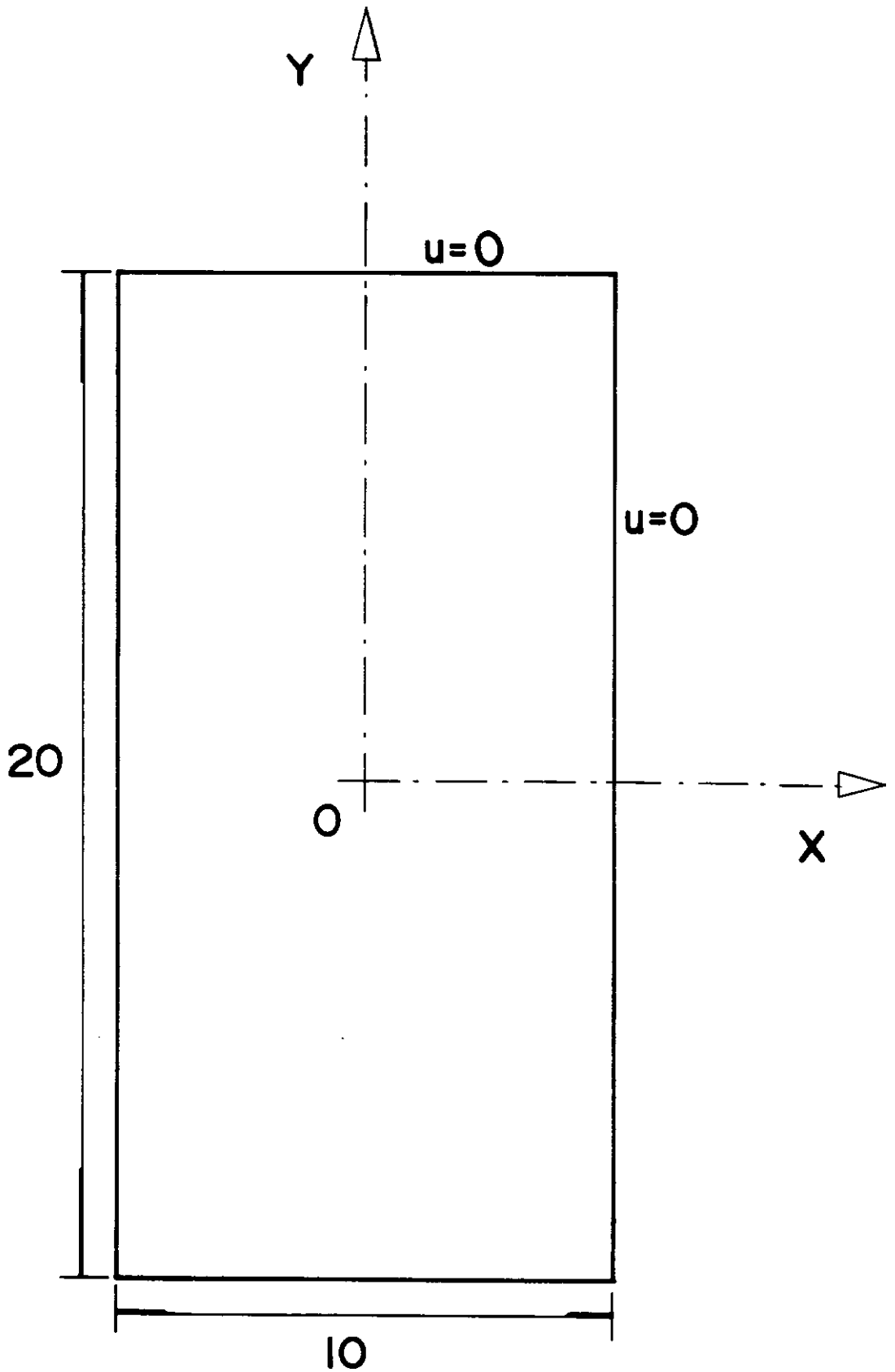


Fig. IV. 2.2 - Geração de calor em um domínio retangular.

		MALHA					
		10x10	20x20	40x40	60x60	80x80	100x100
GRAD CONJ		1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
PCG DIAG		1,07	0,89	0,82	0,84	0,92	0,93
PCG EPE CRT	loc	0,93	0,78	0,76	0,69	0,71	0,73
	glb	0,93	0,71	0,74	0,58	0,60	0,61
PCG EPE CHY	loc	1,00	0,79	0,81	0,69	0,70	0,71
	glb	0,87	0,71	0,69	0,53	0,53	0,55
PCG POL	gr1	1,13	1,05	1,05	1,01	1,02	1,01
	gr2	2,20	2,86	3,09	3,25	3,35	3,40
	gr3	1,13	1,05	1,04	1,01	1,03	1,02
	gr4	1,20	1,07	1,05	1,02	1,02	1,03
	gr5	1,20	1,05	1,04	1,02	1,03	1,03
PCG EPE POL	gr1	1,47	1,26	1,15	1,23	1,36	1,38
	gr2	2,47	2,75	2,75	3,11	3,50	3,60
	gr3	1,87	1,67	2,04	1,72	1,92	2,27
	gr4	2,07	1,90	1,93	1,86	2,08	2,42
	gr5	2,20	2,15	2,64	3,28	4,68	N C

Tabela IV.2.3 – Taxa de processamento

		MALHA					
		10x10	20x20	40x40	60x60	80x80	100x100
GRAD CONJ		82	189	253	478	637	794
PCG DIAG		82	160	190	391	568	719
PCG EPE CRT	loc	34	67	87	156	214	276
	glb	30	57	80	121	171	217
PCG EPE CHY	loc	36	65	91	152	205	261
	glb	28	56	73	108	147	192
PCG POL	gr1	56	112	144	269	358	442
	gr2	103	252	345	647	865	1078
	gr3	31	60	78	143	193	238
	gr4	26	50	64	118	157	195
	gr5	22	41	54	99	133	164
PCG EPE POL	gr1	68	121	138	283	411	519
	gr2	96	201	249	505	734	929
	gr3	50	86	116	204	296	374
	gr4	47	80	102	178	258	325
	gr5	42	77	120	268	497	N C

Tabela IV.2.4 – Número de iterações para convergência

Os algoritmos EPE apresentaram os melhores desempenhos, destacando-se entre eles o algoritmo PCG EPE Cholesky global, com o menor tempo computacional, seguido pelo algoritmo PCG EPE Crout global, e suas respectivas versões locais, como pode ser visto no gráfico IV.2.3. Os tempos de processamento encontram-se normalizados em relação ao tempo obtido pelo algoritmo PCG EPE Cholesky global para a malha 10x10. Novamente observa-se a superioridade das versões globais sobre as locais, justificando assim, o maior esforço computacional das mesmas. No gráfico IV.2.4 temos a evolução da eficiência dos algoritmos iterativos estudados com o aumento do número de graus de liberdade.

O algoritmo PCG Diagonal obteve um desempenho inferior ao obtido pelos Algoritmos PCG EPE, e pouco melhor do que o obtido pelo Algoritmo dos Gradientes Conjugados, indicando que o preconditionador Diagonal não obteve grandes progressos no condicionamento da matriz deste problema.

Os algoritmos com preconditionadores polinomiais apresentaram os resultados mais desfavoráveis, apresentando tempos de processamento um pouco superiores ao do algoritmo dos Gradientes Conjugados sem condicionamento. Novamente o algoritmo polinomial de grau 1 apresentou o melhor desempenho. Comparando os algoritmos PCG Polinomiais, notamos que a aproximação empregada no algoritmo PCG EPE Polinomial comprometeu a sua eficiência, aumentando seu tempo de processamento em relação ao PCG Polinomial de primeiro grau e malha 100x100, sendo que o de grau 5 não convergiu.

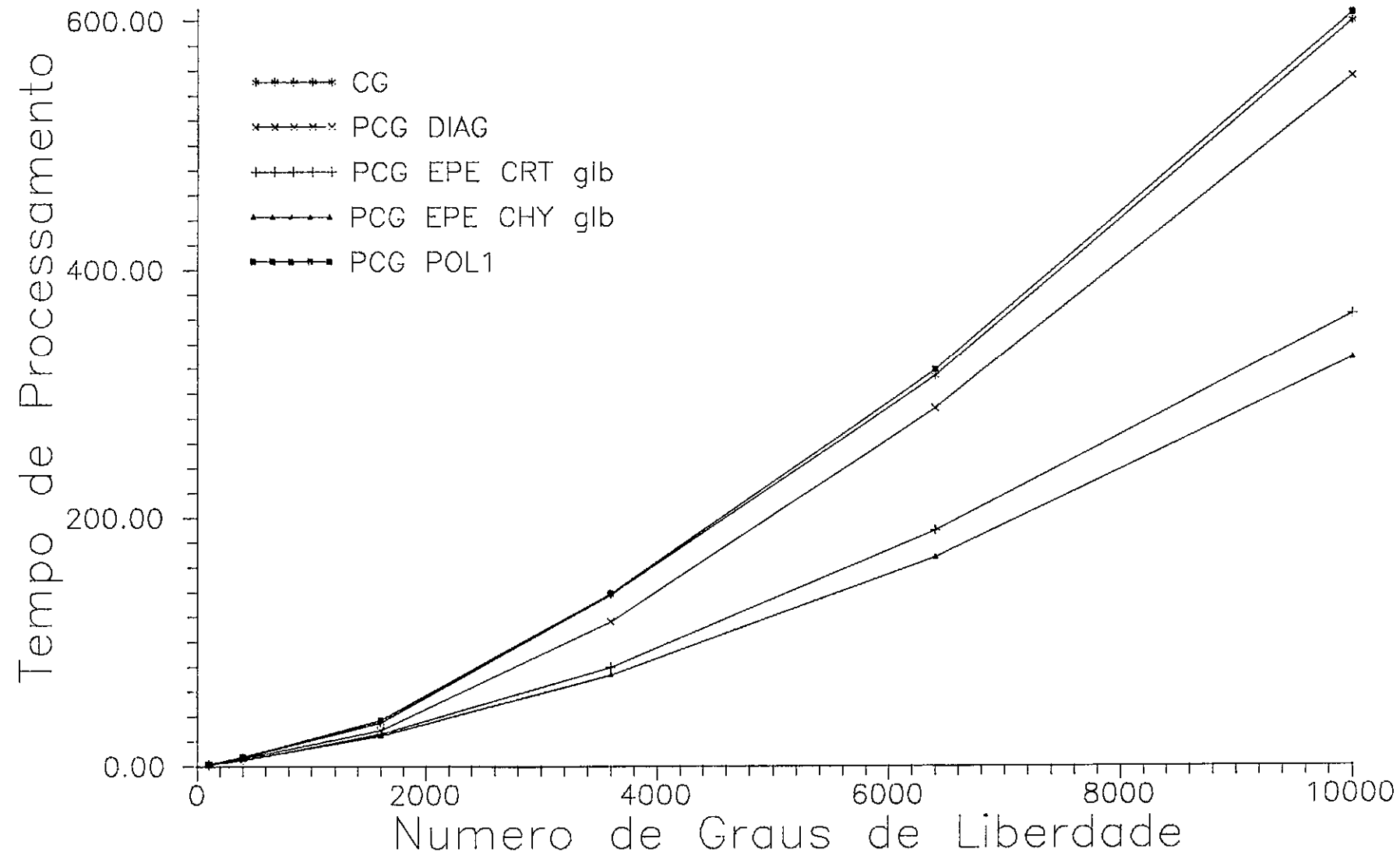
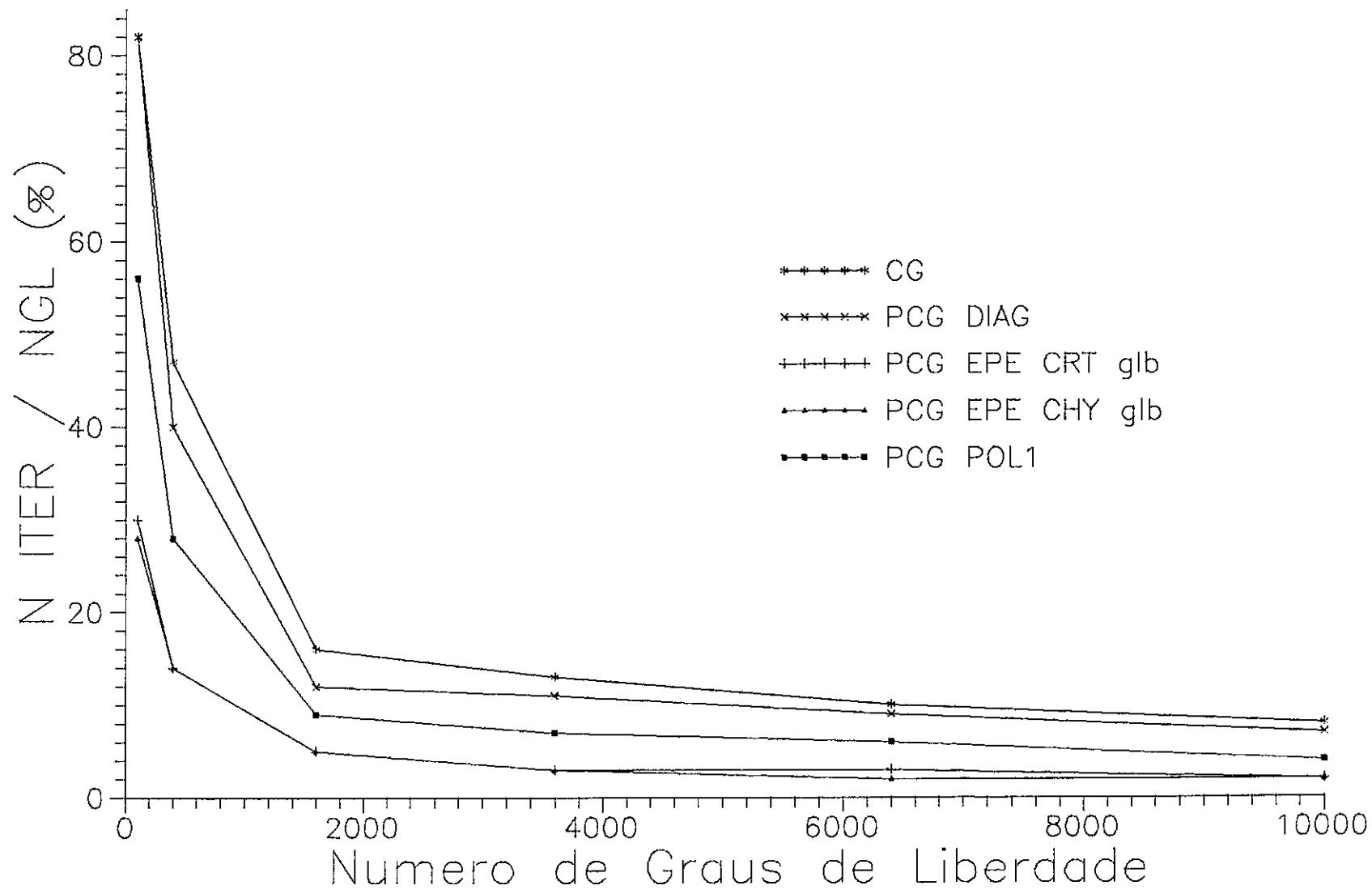


Grafico IV.2.3



Numero de Graus de Liberdade

Grafico IV.2.4

IV.2.3 – O Teste de Isolamento Térmico da NASA

Apresenta-se a seguir a análise de um exemplo encontrado primeiramente em HUGHES e WINGET (1985) e posteriormente utilizado por COUTINHO (1987b), que consiste na junção de uma barra metálica e um isolante formando um domínio em "L", figura IV.2.3, onde dois bordos apresentam temperaturas prescritas, enquanto os outros são isolados. A discretização apresenta 48 elementos finitos isoparamétricos bilineares. Os elementos retangulares apresentam uma razão de aspecto de 1:7 e a condutividade térmica da barra metálica é de 0,002 enquanto a do isolante é $1,57 \times 10^{-6}$.

Este problema pode ser definido como mal condicionado, já que a razão entre as condutividades térmicas dos materiais é aproximadamente $1,3 \times 10^3$, conduzindo a uma razão entre os valores máximos e mínimo da diagonal principal da matriz de condutividade térmica de $2,547 \times 10^3$. A malha apresenta certa irregularidade, e as temperaturas prescritas diferentes de zero foram impostas atribuindo-se um valor muito grande nos graus de liberdade correspondentes da matriz de condutividade térmica.

Na tabela IV.2.5 apresentam-se o número de iterações necessárias para se atender a uma tolerância de 10^{-3} para a norma relativa dos resíduos, assim como a taxa de processamento de cada algoritmo.

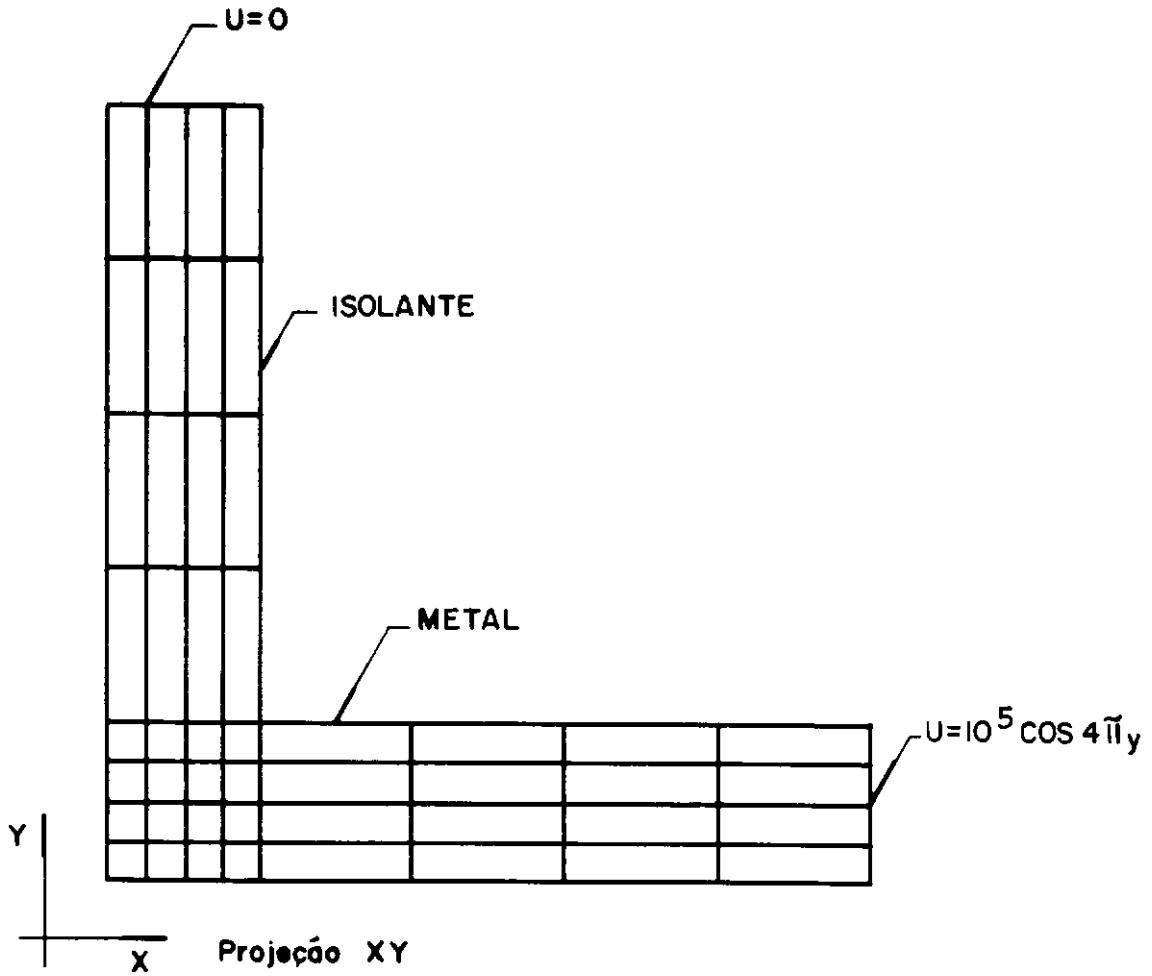


Fig. IV.2.3 - Teste de isolamento térmico da NASA .

		ITER	PROC
GRAD CONJ		136	1,00
PCG DIAG		56	0,60
PCG EPE CRT	loc	28	0,60
	glb	27	0,60
PCG EPE CHY	loc	27	0,60
	glb	25	0,60
PCG POL	gr1	121	1,30
	gr2	150	2,20
	gr3	91	1,80
	gr4	77	1,80
	gr5	69	1,90
PCG EPE POL	gr1	48	0,80
	gr2	65	1,30
	gr3	37	1,00
	gr4	34	1,20
	gr5	31	1,20

Tabela IV.2.5 – Número de iterações e taxa de processamento

Neste exemplo extremamente mal condicionado, algumas observações interessantes podem ser obtidas:

O algoritmo PCG Diagonal mostrou-se, em relação ao tempo computacional, tão efetivo quanto os algoritmos PCG EPE Crout e PCG EPE Cholesky, o que provavelmente se deve a pequena dimensão do problema.

O Algoritmo dos Gradientes Conjugados foi novamente superior ao algoritmo dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento Polinomial. Nota-se que ambos necessitaram de um número de iterações maior que a dimensão do problema devido ao mal condicionamento.

O algoritmo PCG EPE Polinomial mostrou-se superior ao algoritmo PCG Polinomial, embora ambos inferiores, em relação ao tempo computacional, aos demais algoritmos com preconditionadores. Esta superioridade, presente apenas neste exemplo, se deve talvez ao fato dos algoritmos EPE apresentarem maior eficiência em domínios irregulares (MULLER e HUGUES, 1986)

As soluções dos algoritmos estão de acordo com o esperado, segundo HUGHES e WINGET (1985), onde um problema semelhante foi analisado.

IV.3 – ANÁLISE NÃO-LINEAR

O Método dos Elementos Finitos para resolução de problemas de condução de calor em regime permanente com não linearidade física e/ou das condições de contorno origina um sistema de equações algébricas não-lineares. Neste caso, o sistema de equações (IV.2.1) pode ser reescrito na forma

$$\psi(\mathbf{u}) = \mathbf{K}(\mathbf{u})\mathbf{u} - \mathbf{f} = 0 \quad (\text{IV.3.1})$$

onde a matriz \mathbf{K} depende do estado corrente das incógnitas nodais \mathbf{u} . Para solução de (IV.3.1) utiliza-se o método iterativo de Newton-Raphson. Assim, linearizando-se a equação (IV.3.1) no entorno da solução no passo k através de

$$\psi(\mathbf{u}_{k+1}) = \psi(\mathbf{u}_k) + \left. \frac{d\psi}{d\mathbf{u}} \right|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_k} \Delta\mathbf{u}_k = 0 \quad (\text{IV.3.2})$$

onde

$$\left. \frac{d\psi}{d\mathbf{u}} \right|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_k} = \mathbf{J}_k \quad (\text{IV.3.3})$$

é a matriz Jacobiana, esparsa e construída através da contribuição das matrizes de elemento. A nova aproximação da solução é dada por

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k + \Delta\mathbf{u}_k \quad (\text{IV.3.4})$$

onde a correção das incógnitas nodais ou incremento $\Delta\mathbf{u}_k$ é determinado a partir da solução do problema linearizado

$$\mathbf{J}_k \Delta \mathbf{u}_k = - \psi(\mathbf{u}_k) \quad (\text{IV.3.5})$$

A solução do problema descrito pela equação (IV.3.5), linearizado a cada passo é obtida através do Método dos Gradientes Conjugados Precondicionado, onde

$$\psi(\mathbf{u}_k) = \mathbf{f} - \mathbf{J}_k \mathbf{u}_k \quad (\text{IV.3.6})$$

é o vetor de desequilíbrio da iteração para cada nível de carga \mathbf{f} , aplicada de forma incremental. A convergência do processo é verificada através da seguinte expressão,

$$\| \Delta \mathbf{u} \|_2 \leq \epsilon_u \| \mathbf{u}_k \|_2$$

onde ϵ_u é uma tolerância pré-especificada.

Assim, utiliza-se uma estratégia iterativa em dois níveis, o externo com um algoritmo Newton-Raphson, e o interno com um algoritmo dos Gradientes Conjugados Precondicionado.

Para a análise de problemas não-lineares são utilizados os algoritmos que apresentaram o melhor desempenho nas análises lineares anteriores.

IV.3.1 – Choque Térmico em Domínio Quadrado

O problema analisado é definido sobre o domínio quadrado da figura IV.2.1, com condições de contorno de Dirichlet e Neumann. Neste caso considera-se uma geração súbita de calor em todo o domínio (COUTINHO 1987b), e assume-se que a condutividade do material varia com a temperatura através da relação:

$$k = k_0 (1 + 10u),$$

onde k_0 é a condutividade do material para $u = u_0$, e u a temperatura. Considera-se na discretização a simetria do problema, utilizando-se na análise uma malha regular com 1600 elementos finitos isoparamétricos. Assume-se $u_0 = 0$ em todo o domínio e $k_0 = 2,0$. Para um aquecimento súbito de $Q = 2,4$ em todo o domínio, analisa-se o problema em regime permanente.

As tolerâncias empregadas na análise foram $\epsilon_u = 10^{-2}$ para a iteração externa (Newton-Raphson) e $\epsilon_r = 10^{-3}$ para a iteração interna (Gradiente Conjugado Precondicionado). Os resultados para a análise do desempenho dos algoritmos encontram-se na tabela IV.3.1, onde apresentam-se o número de iterações e as taxas de processamento.

		ALGORITMO				
		GRAD CONJ	PCG DIAG	PCG EPE CRT	PCG EPE CHY	PCG POL1
PROC		1,00	0,80	0,79	0,79	1,17
N U M E R O I T E R A C O E S N L	1	70	68	28	28	46
	2	153	90	46	45	106
	3	77	65	28	28	51
	4	108	73	37	36	73
	5	87	64	29	28	58
	6	92	66	29	29	62
	7	85	61	27	26	56
	8	83	58	26	26	55
	9	77	51	24	24	51
	10	70	48	22	22	47
	11	65	41	19	19	43
	TOT	967	685	315	311	648

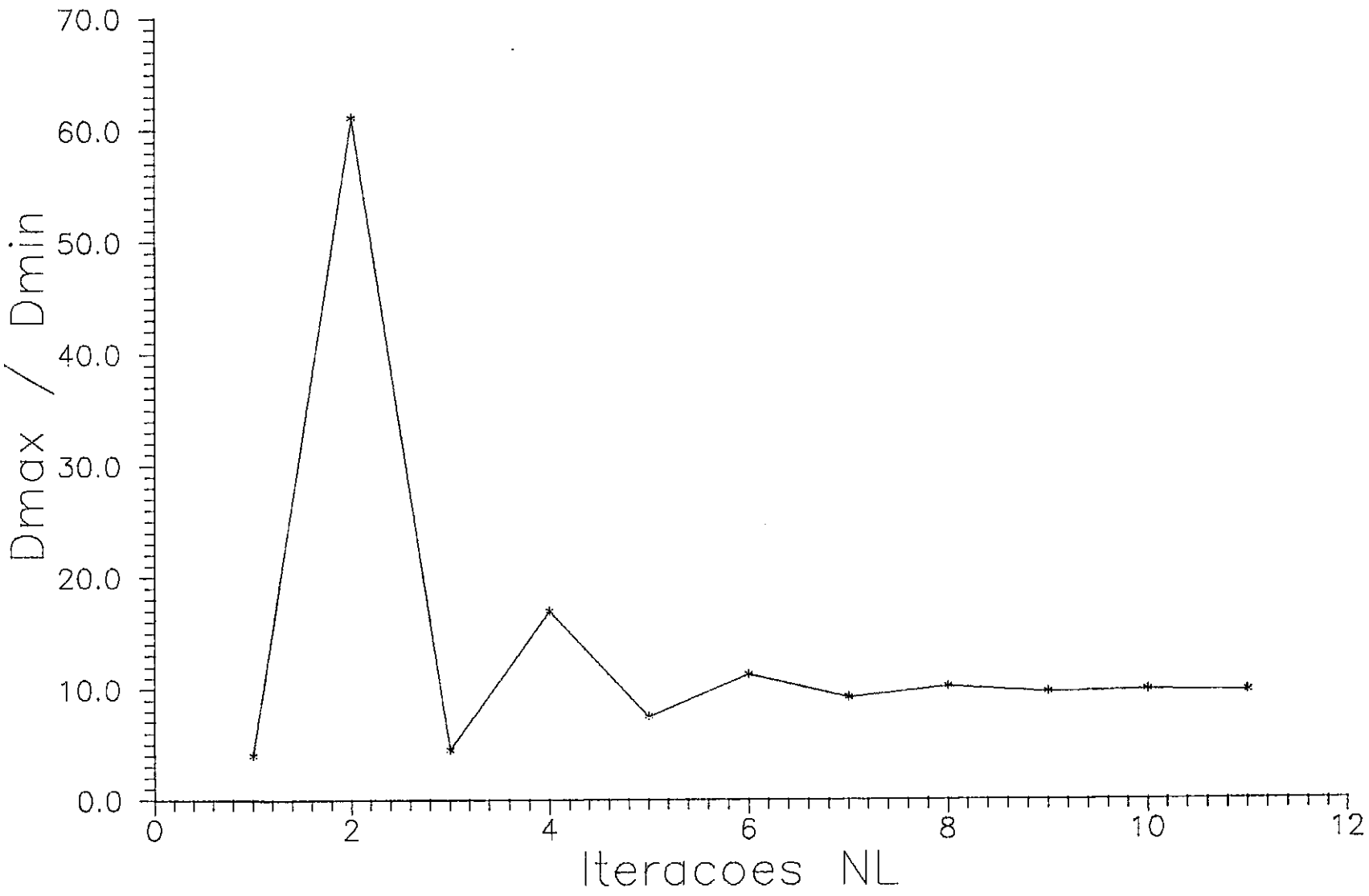
Tabela IV.3.1 – Número de iterações e taxa de processamento

Pode-se observar que o algoritmo mais eficiente foi o PCG EPE Crout global, seguido pelo algoritmo PCG EPE Cholesky global, e PCG Diagonal.

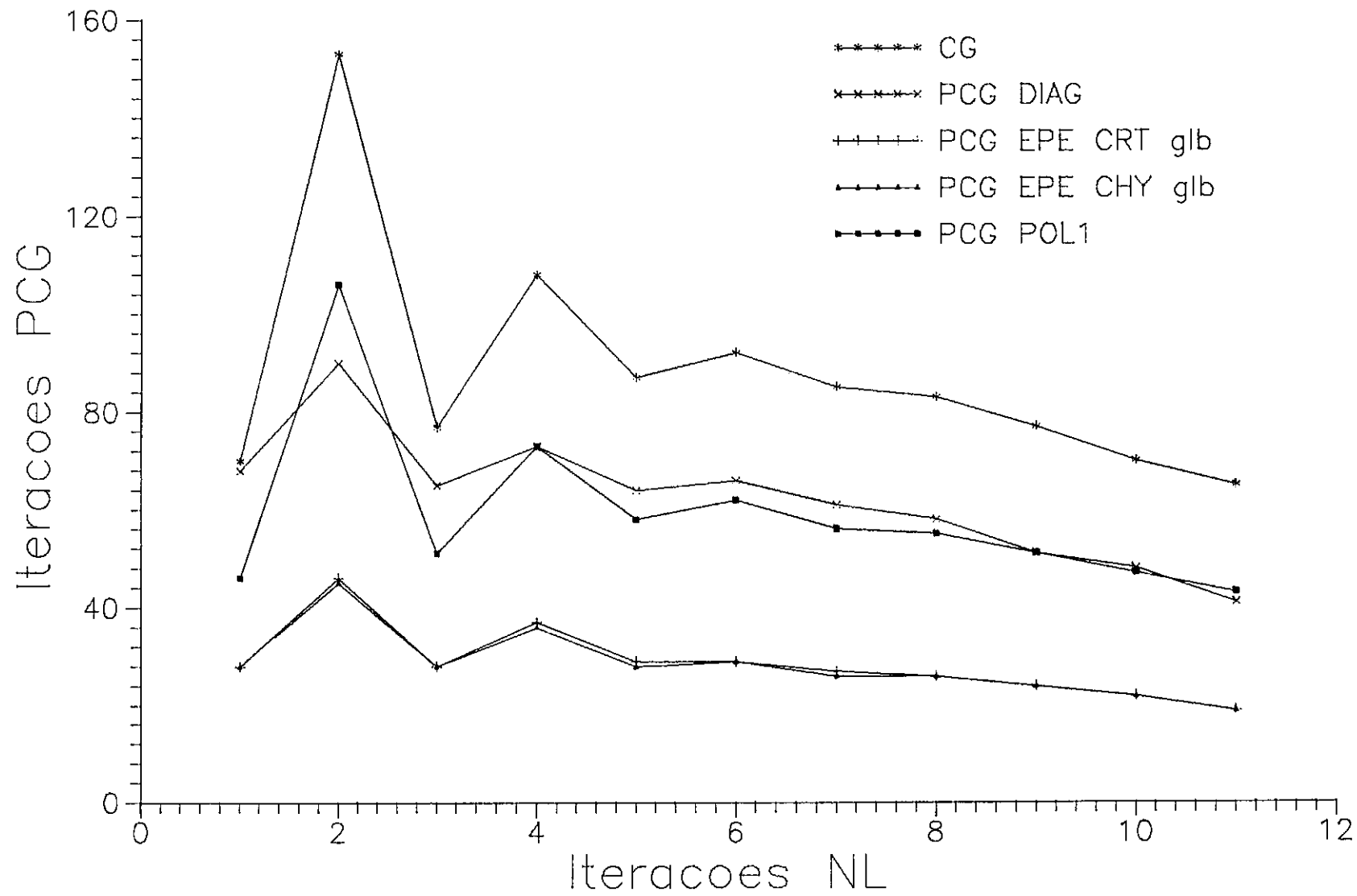
O algoritmo PCG Polinomial obteve fraco desempenho, apresentando um tempo computacional novamente superior ao do Gradientes Conjugados.

Analisando a evolução do número de condicionamento espectral deste problema notamos que inicialmente o mesmo se mostra muito bem condicionado, com a razão de 4,0 entre os valores máximo e mínimo da diagonal principal do jacobiano referênte às condições iniciais. A medida que, devido a não linearidade o número de condicionamento se deteriora, nota-se um correspondente aumento no número de iterações necessárias à convergência dos algoritmos. Finalmente, ao fim do processo iterativo não-linear, o número de condicionamento atinge aproximadamente o dobro do valor inicial (gráficos IV.3.1 e IV.3.2).

Os resultados obtidos pelos algoritmos encontram-se de acordo com os encontrados em COUTINHO (1987b).



Iteracoes NL
Grafico IV.3.1



Iteracoes NL
Grafico IV.3.2

IV.3.2 – Análise de um Sistema de Proteção Térmica

Neste exemplo apresenta-se a análise não-linear em regime permanente de um Sistema de Proteção Térmica (SPT); cujas características geométricas encontram-se na fig.IV.3.1. Neste caso, primeiramente estudado por WILLIAMS e CURRY (1977) e posteriormente por COUTINHO et alii (1987a) a condutividade térmica dos materiais que compõe o SPT varia com a temperatura. As espessuras dos materiais Revestimento 042, RSI, feltro e alumínio são respectivamente 0,0381cm; 7,366cm; 0,01965cm; 0,4191cm e 0,1524 cm. As curvas discretas que regem a variação da condutividade térmica destes materiais são obtidas da Tabela IV.3.2.

Considerando um aquecimento súbito na superfície do SPT de $Q = 6,81 \times 10^5 \text{ W/m}^2$, e uma temperatura inicial $u_0 = 250\text{K}$, procede-se a análise utilizando na discretização 1262 elementos finitos igualmente espaçados, com a malha resultante apresentando 2524 graus de liberdade e semilargura de banda 4. Foi empregada uma tolerância de $\epsilon_u = 10^{-3}$ para a iteração externa (Newton-Raphson) e $\epsilon_r = 10^{-12}$ para a iteração interna (Gradiente Conjugado Precondicionado), estipulada a partir de uma análise preliminar onde se evidenciou a necessidade de uma alta precisão devido as características geométricas e variação dos materiais.

Apresentam-se na tabela IV.3.3 os resultados, na qual a taxa de processamento têm como base o algoritmo dos Gradientes Conjugados com Precondicionamento Diagonal.

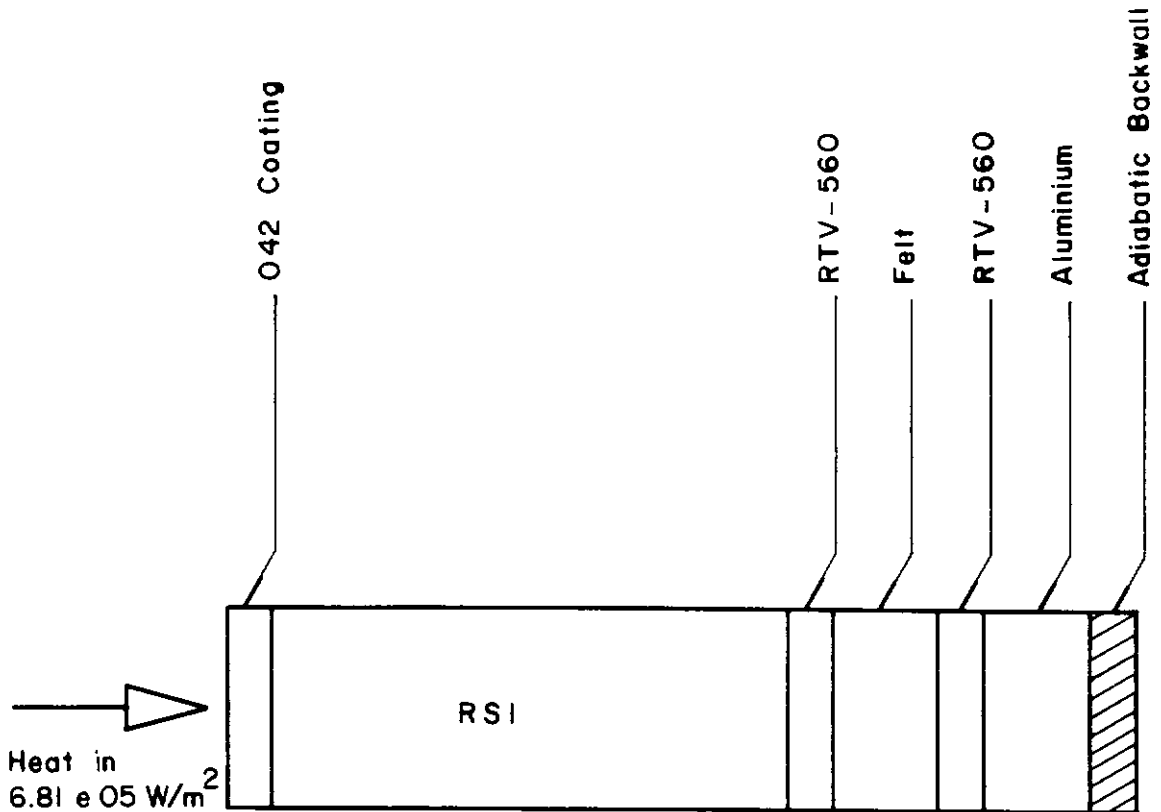


Fig. IV.3.1 - Análise não-linear do sistema de proteção térmica

MATERIAL	TEMPERATURA (K)	CONDUTIVIDADE (W/mK)
RSI	255.56	0.0476
	394.44	0.0592
	533.33	0.0749
	672.22	0.0922
	811.11	0.1138
	950.00	0.1354
	1088.89	0.1629
	1200.00	0.1889
	1227.78	0.1960
	1338.89	0.2262
	1366.67	0.2349
	1422.22	0.2522
	1450.00	0.2608
1533.33	0.2883	
Revestimento 042	255.56	0.8423
	394.44	0.9512
	672.22	1.1311
	950.00	1.2971
	1200.00	1.4338
	1366.67	1.5272
	1533.33	1.6137
Feltro	277.78	0.0294
	477.78	0.0363
	555.56	0.0484
Aluminio	111.11	75.9611
	166.67	95.2627
	222.22	108.9606
	277.78	120.7906
	333.33	131.3753
	388.89	141.9601
	444.44	151.9222

Tabela IV.3.2 – Propriedades físicas dos materiais do SPT

		ALGORITMO		
		PCG DIAG	PCG EPE CRT	PCG EPE CHY
PROC		1,00	0,72	0,68
N I T E R N L	1	1262	501	467
	2	1262	503	468
	3	1262	501	466
	4	1262	500	465
	5	1264	497	463
	6	1264	497	462
	TOT	7576	2999	2791

Tabela IV.3.3 – Número de iterações e taxa de processamento

Dos resultados obtidos pode-se observar que o algoritmo de menor tempo de processamento foi o PCG EPE Cholesky global, seguido pelo PCG EPE Crout global.

Deve-se ressaltar o fato dos algoritmos Gradiente Conjugado e PCG Polinomial não convergirem.

Pode-se verificar da tabela IV.3.3 que o Precondicionador Diagonal não obteve resultados satisfatórios no condicionamento deste problema unidimensional. O número de iterações necessárias a convergência foi aproximadamente igual ao número de elementos finitos da malha. Isto pode ser explicado pela geometria e carregamento do SPT e pela técnica de condicionamento Diagonal, que em um problema unidimensional espalha os resíduos um elemento após o outro, com a norma dos resíduos decaindo abruptamente quando o número de iterações atinge o número total de elementos da malha. Já no caso dos condicionadores EPE, nota-se uma acentuada redução no número de iterações necessárias à convergência, evidenciando sua superioridade no condicionamento da matriz neste problema.

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

V.1 – Comentários Gerais

O algoritmo dos Gradientes Conjugados obteve um bom desempenho para malhas regulares e problemas lineares bem condicionados, sendo que para os problemas mal condicionados e os não-lineares estudados não obteve desempenho satisfatório.

O algoritmo PCG Diagonal também apresentou resultados satisfatórios em malhas regulares e problemas lineares bem condicionados, perdendo um pouco a eficiência em problemas mal condicionados. Levando em conta a facilidade da sua implementação, ainda permanece grande a sua utilidade.

Os algoritmos EPE mostraram-se os mais eficientes no geral, principalmente quando os problemas são mal condicionados ou apresentam domínios irregulares. A implementação global mostrou-se melhor que a local, sob todos os aspectos, sendo que dependendo do tipo de elemento ou malha utilizada ela pode ser mais destacada. A escolha entre a fatoração ser por Crout ou Cholesky não resultou em diferenças significativas

Os algoritmos Polinomiais foram os que apresentaram os piores desempenhos, sempre inferiores ao algoritmo dos Gradientes Conjugados sem Precondicionamento. O preconditionador Polinomial é visto como um algoritmo mais favorável para computadores paralelos/vetoriais, devido as suas características. Num computador escalar, o menor numero de iterações é

compensado desfavoravelmente pelo maior número de operações necessárias de cada iteração. Nota-se também que o polinômio de melhor desempenho foi o de grau 1, o que simplifica significativamente a implementação. Dentre os preconditionadores polinomiais, o EPE Polinomial só apresentou vantagens sobre o Polinomial no problema muito mal condicionado que envolveu topologia irregular (Teste de isolamento térmico da NASA). Para avaliar melhor seu desempenho, seria necessário mais testes envolvendo grandes problemas em domínios irregulares.

V.2 – Futuros Desenvolvimentos

Uma primeira sugestão seria a implementação dos algoritmos que envolvem os preconditionadores Elemento–por–Elemento e os polinomiais em computadores com arquiteturas de processamento paralelas e vetoriais, já que os mesmos são considerados altamente adequados à estas novas arquiteturas, e a aplicação destes algoritmos na solução de problemas de elasticidade de vigas, placas, cascas e tridimensionais.

Em problemas não–lineares, como os pequenos erros na solução iterativa do algoritmo dos Gradientes Conjugados Precondicionado utilizado para aproximar a solução do sistema linear não se acumulam (são corrigidos no algoritmo de solução externo Newton–Raphson pelo uso do resíduo real), pode–se utilizar um critério de convergência para a iteração interna baseado na convergência externa.

Outra importante área de estudo dos algoritmos com esquemas elemento–por–elemento seria sua implementação em conjunto com técnicas de refinamento de malha auto–adaptativos, permitindo facilmente modificações na estrutura e tamanho da matriz dos coeficientes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AXELSSON, O. e BARKER, V.A., (1984), "*Finite Element Solution of Boundary Value Problems*", Academic Press, New York.
- AXELSSON, O. (1985), "A Survey of Preconditioned Iterative Methods for Linear Systems of Algebraic Equations", *BIT*, Vol. 25, pp. 166–187.
- BATHE, K-J. (1982), "*Finite Element Procedures in Engineering Analysis*", Prentice Hall, Englewood Cliffs.
- BROWN, S.A. e KAMAT, M.P., (1984), "Structural Analysis of Large Scale Problems Using a Microcomputer", *Proceedings of the Second National Conference on Microcomputers in Civil Engineering*, October 1984.
- CAREY, G.F. e JIANG, B., (1984), "Element-by-Element Preconditioned Conjugate Gradient Algorithm for Compressible Flow", in *Innovative Methods for Nonlinear Problems*, eds Liu, Belytschko e Park, Pineridge Press, Swansea, U.K.
- CAREY, G.F. e JIANG, B., (1986), "Element-by-Element Linear and Nonlinear Solution Schemes", *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 2, 145–153.
- CONCUS, P., GOLUB, G.H. e O'LEARY, D.P., (1976), "A Generalized Conjugate Gradient Method for the Numerical Solution of Elliptic Partial Differential Equations", *Sparse Matrix Computations*, eds. Bunch, J.R. e Rose, D.J., Academic Press, New York.
- COUTINHO, A.L.G.A., ALVES, J.L.D., LANDAU, L. e WROBEL, L.C., (1987a), "Element-by-Element Solution of Steady-State Heat Conduction by Lanczos Algorithm", *Numerical Methods*

- for *Thermal Problems*, Eds Lewis, R.W., Morgan, K. e Habashi, W.G., Pineridge Press, Swansea, UK, pp. 1287–1298.
- COUTINHO, A.L.G.A. (1987b), "O Algoritmo de Lanczos Para a Solução de Problemas Estacionários e Transientes pelo Método dos Elementos Finitos", Tese D.Sc. COPPE.
- COUTINHO, A.L.G.A., ALVES, J.L.D., LANDAU, L., WROBEL, L.C. e Ebecken, N.F.F., (1987c), "Element-by-Element Solution of Nonlinear Steady-State Heat Conduction by a Newton-Lanczos Method", *Proc. Int. Conf. Numerical Methods in Engineering : Theory and Applications, NUMETA'87*, Eds. Pande, G.N. e Middleton, J., Martinus Nijhoff Publishers, Vol 2, artigo T83.
- CRISFIELD, M.A. (1986), "*Finite Elements and Solution Procedures for Structural Analysis, Vol. I : Linear Analysis*", Pineridge Press, Swansea, UK.
- DOUGLAS, J. (1955), "On The Numerical Integration of $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial u}{\partial t}$ by Implicit Methods", *Journ. Soc. Ind. Appl. Math.*, vol. III, No. 1, pp. 42–65.
- DOUGLAS, J. e RACHFORD, H.H., (1956), "On the Numerical Solution of Heat Conduction Problems in Two and Three Space Variables", *Trans. Amer. Math. Soc.*, Vol.82, No. 2, pp 421–439.
- DOUGLAS, J. (1962), "Alternating Direction Methods for Three Space Variables", *Numer. Math.*, Vol 4, pp. 41–63.
- DUBOIS, P.F., GREENBAUM, A., e RODRIGUE, G.H., (1979), "Approximating the Inverse of a Matrix for Use in Iterative Algorithms on Vector Processors", *Computing*, 22, pp. 257–268.
- FERENCZ, R.M. (1989), "Element-by-Element Preconditioning Techniques for Large-scale, Vectorized Finite Element Analysis in

Nonlinear Solid and Structural Mechanics", Ph.D. Thesis, Stanford University.

- FOX, R.L. e STANTON, E.L., (1968), "Developments in Structural Analysis by Direct Energy Minimisation", *AIAA J.*, 6(6), 1036–1042.
- FOX, G.C. e SEITZ, C.L., (1983), "Concurrent Processing and the Decomposition of Problems", Research Proposal, submitted to the Department of Energy, *CALT-68-1004*, California Institute of Technology, Pasadena, CA.
- FRIED, I. (1969), "More on Gradient Iterative Methods in Finite Element Analysis", *AIAA Journal*, Vol. 7, pp. 555–567.
- GOLUB, G.H. e VAN LOAN, C.F., (1985), "*Matrix Computations*", Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD.
- HAGEMAN, L.A. e YOUNG, D.M., (1981), "*Applied Iterative Methods*", Academic Press, New York.
- HAYES, L.J. e DEVLOO, Ph., (1984), "An Element-by-Element Block-Iterative Method for Large Nonlinear Problems", *Innovative Methods for Nonlinear Problems*, eds. Liu, W.K., Belytschko, T. e Park, K.C., Pineridge Press, Swansea, UK, pp. 51–62.
- HESTENES, M.R. e STIEFEL, E., (1952), "Methods of Conjugant Gradients for Solving Linear Systems", *Nat. Bur. Standards J. Res.*, 49, pp. 409–436.
- HINTON, E. e OWEN, D.R.J., (1979), "*An Introduction to Finite Element Computations*", Pineridge Press, Swansea, U.K.
- HUGHES, T.J.R., LEVIT, I. e WINGET, J., (1983a), "Implicit, Unconditionally Stable Element-by-Element Algorithms for Heat Conduction Analysis", *ASCE J. Eng. Mech.*, 109, pp. 576–585.
- HUGHES, T.J.R., LEVIT, I. e WINGET, J., (1983b), "An

- Element-by-Element Solution Algorithm for Problems of Structural and Solid Mechanics", *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 36, pp. 241-254.
- HUGHES, T.J.R., LEVIT, I. WINGET, J., e TEZDUYAR, T., (1983c), "New Alternating Procedures in Finite Element Analysis based Upon EBE Approximate Factorizations", *Computer Methods for Nonlinear Solid and Structural Mechanics, AMD* , Vol. 54, ASME, New York, pp. 75-109.
- HUGHES, T.J.R., RAEFSKY, A., MULLER, A., WINGET, J.M. e LEVIT, I., (1984), "A Progress Report on EBE Solution Procedures in Solid Mechanics", in *Numerical Methods for Nonlinear Problems*, Vol 2,(Ed C. Taylor et al.) Pineridge Press, Swansea, pp. 18-26.
- HUGHES, T.J.R. e WINGET, J.M., (1985), "Solution Algorithms for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis Employing Element-by-Element Iterative Strategies", *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng.* Vol. 52, pp.711-815.
- HUGHES, T.J.R., FERENCZ, R.M., HALLQUIST, J.O., (1986), "Large-scale Vectorized Implicit Calculations in Solid Mechanics on a CRAY X-MP/48 Utilizing EBE Preconditioned Conjugate Gradients", *Computational Mechanics - Advances and Trends*, ed. NOOR, A.K., AMD - Vol 75, ASME, New-York, pp. 223-277.
- HUGUES, T.J.R. (1987), "*The Finite Element Method, Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*", Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J.
- ISAACSON, E., e KELLER, H.B., (1966), "*Analysis of Numerical Methods*", Wiley and Sons Inc., New York.

- JENNINGS, A. (1977), "*Matrix Computations for Engineers and Scientists*", John Wiley, London.
- JOHNSON, O.G., MICCHELLI, C.A. e PAUL, G., (1983), "Polynomial Preconditioners for Conjugant Gradient Calculations", *S.I.A.M. J. Numer. Anal.*, 20 , pp. 362–376.
- KAASSCHISTER, E.F. (1988), "A General Finite Element Preconditioning for the Conjugate Gradient Method", TNO–DGV Institute for Applied Geoscience, Delft, *Report PN 88–14*.
- KAMAT, M.P., WATSON, L.T. e VANDENBRINK, D.J., (1984), "Comparison of a Globally Convergent Quasi–Newton Method with an EBE Method for Nonlinear Structural Problems", Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia 24061, U.S.A., *Innovative Methods for Nonlinear Problems*.
- LUENBERGER, D.G. (1973), "*Introduction to Linear and Nonlinear Programming*", Addison–Wesley Publishing Company.
- MARCHUK, G.I. (1974), "*Numerical Methods in Weather Prediction*", Academic Press, New York, N.Y.
- MARCHUK, G.I. (1975), "*Methods of Numerical Mathematics*", Springer–Verlag, New–York, N.Y.
- MEIJERINK, J.A. e VAN DER VORST, H.A., (1977), "An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M–Matrix", *Mathematics of Computation*, 31, pp. 148–162.
- MULLER, A. e HUGHES, T.J.R., (1986), "Precondicionadores Elemento–por–Elemento y Globales. Una Perspectiva", *Revista*

Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería. Vol. 2, 1, pp. 27–41.

- MULLER, A. (1985), "Element-by-Element Iterative Procedures in Structural Finite Element Analysis", Ph.D. Thesis, Stanford University.
- NOBLE, B (1969), "*Applied Linear Algebra*", Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, NJ.
- NOUR-OMID, B. e PARLETT, B.N., (1983), "Element Preconditioning", *Sixth International Conference on Computing Methods in Applied Sciences and Engineering INRIA*, Versailles, December 12–16.
- NOUR-OMID, B. e PARLETT, B.N., (1985), "Element Preconditioning Using Splitting Techniques", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 6, No. 3, pp. 761–770.
- ORTEGA, J.M. (1988), "*Introduction To Parallel and Vector Solution of Linear Systems*", Plenum Press, New York.
- ORTIZ, M., PINSKY, P.M. e TAYLOR, R.L., (1983), "Unconditionally Stable Element-by-Element Algorithms for Dynamic Problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 36, No. 2, 223–239.
- PEACEMAN, D.W. e RACHFORD, H.H., (1955), "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equation", *Journ. Soc. Ind. Appl. Math.*, vol III, pp 28–42.
- RUTISHAUSER, H. (1959), "Theory of Gradient Methods", *Refined Iterative Methods for Computation of the Solution and the Eigenvalues of Self-Adjoint Boundary Value Problems*, Inst. of Applied Mathematics, Zurich, pp. 24–49.
- SAAD, Y. (1985), "Practical Use of Polynomial Preconditionings for the

Conjugant Gradient Method", *S.I.A.M. J. Sci. and Stat. Comput.*, 6, pp.865–881.

SCANDRETT, C. (1987), "A Comparison of Three Iterative Techniques in Solving Symmetric Systems of Linear Equations on a CYBER 205", Supercomputer Computations Research Institute, Florida State Univ., *Report #FSU-SCRI-87-44*, August.

VARGA, R.S. (1962), "*Matrix Iterative Analysis*", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

WILKINSON, J.H. (1965), "*The Algebraic Eigenvalue Problem*", Clarendon Press, Oxford.

WILLIAMS, S.D. e CURRY, D.M., (1977), "An Implicit-Iterative Solution of the Heat Conduction Equation with a Radiation Boundary Condition", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. 11, pp. 1605–1619.

WINGET, J.M. (1983), "Element-by-Element Solution Procedures for Nonlinear Transient Heat Conduction Analysis", Ph.D. Thesis, California Institute of Technology Pasadena, California.

YANENKO, N.N. (1971), "*The Method of Fractional Steps*", Springer-Verlag, New York, N.Y.

YOUNG, D.M. (1971), "*Iterative Solution of Large Linear Systems*", Academic Press, New York.