



EFICIÊNCIA COMPUTACIONAL EM PROBLEMAS COM GRANDE NÚMERO DE GRAUS DE LIBERDADE EM PROGRAMAS ADAPTATIVOS HIERÁRQUICOS NO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

Raul Bernardo Vidal Pessolani

Pesquisador da FAPERJ - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro
Universidade Federal Fluminense
Faculdade de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica
Rua Passos da Pátria, 156 - São Domingos, CEP 24210-240 - Niterói, R J, Brasil
Email: rpessolani@globalmail.com.br

***Resumo:** Neste trabalho, discute-se a conveniência da utilização de solvers iterativos em programas Auto-Adaptativos Hierárquicos no Método dos Elementos de Contorno para problemas de Elasticidade em duas dimensões. A solução hierárquica pressupõe o cálculo por meio de iterações, o que a torna excessivamente lenta, para um número grande de graus de liberdade. O uso de solvers iterativos em programas adaptativos reduz o tempo de processamento, pois, na nova iteração pode ser utilizada a resposta da iteração anterior. Apresentam-se dois indicadores e estimadores de erro, e fazem-se algumas observações no que se refere ao tempo computacional gasto por cada um. Ilustram-se as conclusões com um exemplo comparando o ganho obtido com o solver iterativo em relação à forma convencional.*

***Palavras-chave:** Métodos Numéricos, Método dos Elementos de Contorno, Procedimentos Adaptativos, Solvers Iterativos*

1. INTRODUÇÃO

Um dos maiores problemas dos programas adaptativos é o custo computacional em problemas com grande número de graus de liberdade provocado pelas sucessivas iterações que estes programas realizam.

Dentre os principais causadores desse problema, podem se enumerar, o cálculo dos coeficientes com a montagem do sistema final de equações, o algoritmo que resolve este sistema, e o indicador e estimador que avalia o erro cometido local e globalmente.

A formulação hierárquica, no qual as informações são armazenadas de uma iteração para a outra, evitando o cálculo dos coeficientes dos nós antigos para as novas iterações, bastando

somente agregar os novos termos da matriz, minimizou o tempo de montagem do sistema, porém as dificuldades com a resolução do sistema, e a análise do erro continuaram.

Este artigo, propõe soluções que procuram minimizar o tempo computacional gasto nos programas Hierárquicos Adaptativos, verificando a eficiência e o ganho de tempo que introduz a incorporação de Solvers Iterativos. Igualmente faz-se uma análise de tempos computacionais de duas diferentes técnicas de medição de erro.

2. FORMULAÇÃO H-HIERÁRQUICA ADAPTATIVA

No Método dos Elementos de Contorno, a formulação H-hierárquica foi aplicada por Charafi, Neves e Wrobel (1995), e por Parreira (1992). A idéia é a de se incluir pontos de colocação intermediários ao elemento com funções de interpolação da mesma ordem das funções precedentes, que podem ser as Langrangeanas convencionais.

A formulação P procura, através do aumento do grau da função de interpolação, convergir para a resposta correta. No presente trabalho utilizou-se uma base de funções hierárquicas formada pela família de polinômios de Legendre Integrados que são utilizados no Método dos Elementos Finitos (MEF), e possuem uma série de propriedades que conduzem à uma grande estabilidade numérica.

Segundo Zienkiewicz e Zhu (1989), no MEF a formulação H fornece para funções lineares e quadráticas uma precisão entre 5 a 10% medidos na norma global de energia, sendo especialmente eficiente para $p=2$ (funções quadráticas). Também sabe-se que, em elementos cuja resposta é singular, a formulação H converge exponencialmente para a resposta correta enquanto que na P há problemas de convergência. Por outro lado, em elementos cuja resposta é suave, a técnica P converge com mais precisão e rapidez e com menos graus de liberdade. Portanto, quando se requer uma alta precisão com um menor número de graus de liberdade, o recurso à formulação H-P é necessário.

A estratégia da formulação HP foi estudada anteriormente por Pessolani (1995) e pode ser melhor visualizada na fig. 1. O sistema inicial é composto de funções Lagrangeanas quadráticas. Conforme a posição do elemento, define-se uma estratégia H ou P para este, gerando-se novos pontos de Colocação, adicionando linhas e colunas ao sistema original. Após a resolução deste novo sistema, faz-se o cálculo das incógnitas e, em seguida, aplica-se um medidor de erro para aferir o quanto a malha está adequada. Caso se requeira um novo refinamento, novos pontos de colocação são gerados com novas funções de interpolação, e adicionados como linhas e colunas na matriz do sistema, resolvendo-se e aferindo-se outra vez o erro. Este processo é repetido até se obter a precisão requerida.

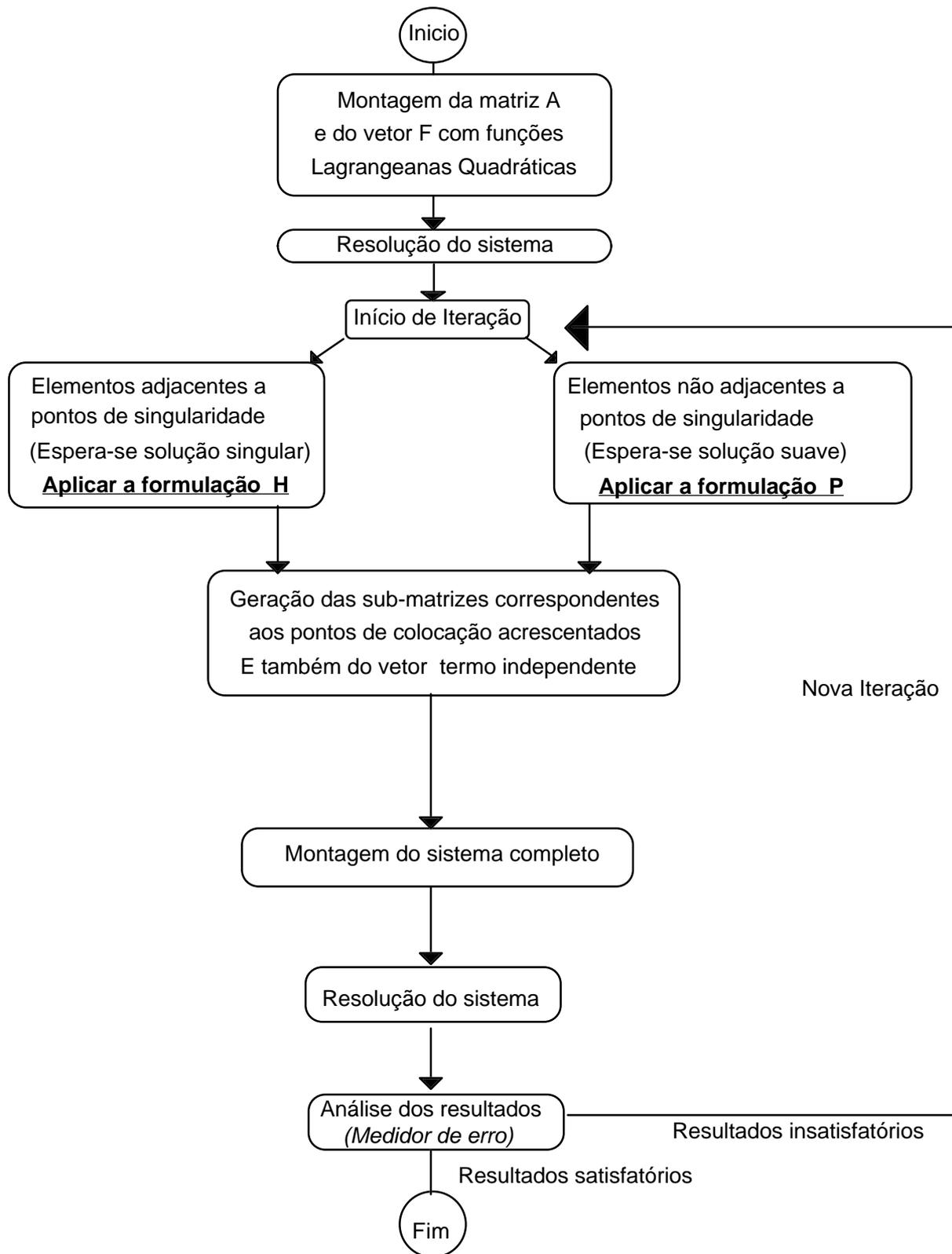


Figura 1 - Estratégia HP-Adaptativa

3. ESTIMADORES E INDICADORES DE ERRO

A chave do processo adaptativo é o medidor de erro que fornece um conhecimento aproximado a respeito do tamanho e da distribuição do erro. Esse conhecimento do erro chama-se *indicador* se for local, e *estimador* se manifestar a medida de erro global.

Com o advento da formulação h-hierárquica, Parreira e Dong (1992) desenvolveram procedimentos de cálculo envolvendo resíduos adimensionais. Esse cálculo baseia-se na obtenção do chamado *resíduo característico* da solução, e interpolando este resíduo através da expressão:

$$r^k = \sum_{i=0}^m N_k r_i^k \quad (1)$$

onde N_k são funções de interpolação Lagrangeanas associadas aos $\mathbf{m}+1$ nós dentro do elemento k. Pelo Método da Colocação no MEC, sabe-se que para uma aproximação de grau \mathbf{n} , o resíduo é nulo nos $\mathbf{n}+1$ pontos de colocação. Calcula-se, portanto, os resíduos nos pontos de colocação acrescentados:

$$r^k = \sum_{i=n+1}^m N_i r_i^k \quad (2)$$

As funções de grau entre N_{N+1} e N_M são as acrescentadas no processo hierárquico. Calcula-se o resíduo em cada nó hierárquico, utilizando-se os termos adicionais da matriz \mathbf{A} e do vetor \mathbf{b} :

$$r_i^k = A_{21} \bar{x}_1 - b_2 = \sum_{l=1}^{N_e} A_{il} \bar{x}_l - b_i \quad (3)$$

sendo \bar{x}_i a solução atual..

Uma vez calculados os valores de r_i^k , os indicadores são calculados a partir da expressão:

$$\left(\lambda_i^k\right)^2 = \sum_{l,m} C_{lm} r_i^l r_k^m \quad (4)$$

onde na norma L_2 .

$$C_{lm} = L_k \int_{-1}^1 N_l N_m d\eta \quad (5)$$

Analisando-se esta estratégia, nota-se que esta formulação utiliza os próprios coeficientes calculados no processo hierárquico, agilizando o processo. Há porém críticas quanto à definição do resíduo característico, necessário para tornar o medidor adimensional.

Numa outra linha de estimadores e indicadores de erro, há a técnica chamada de Reanálise Local cujo algoritmo é mostrado na fig. 2.

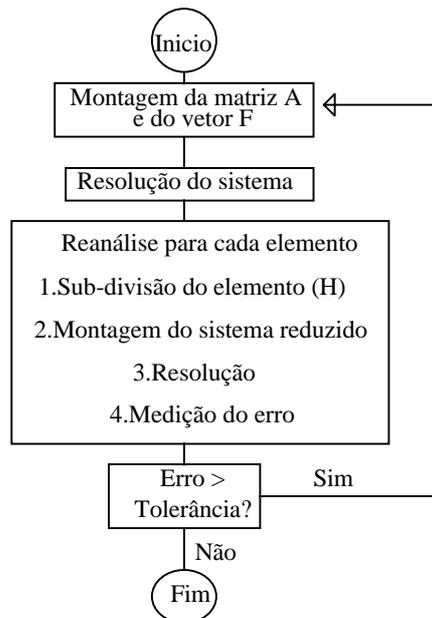


Figura 2. Fluxograma da Reanálise elemento por elemento.

Esta técnica mede o grau de alteração da solução no elemento. Para tal, discretiza-se somente o elemento que está sob análise e monta-se um sistema admitindo somente como incógnitas os valores nesse elemento. Verifica-se assim, o grau de alteração da solução que o elemento terá, avaliando-se em função disso o erro. Uma crítica que de antemão pode ser feita, é que este procedimento torna-se demasiado lento quando o número de elementos cresce exageradamente.

4. SOLVERS ITERATIVOS

O Solver Iterativo parte de um vetor solução inicial e através de uma série de iterações converge para a resposta correta dentro de uma tolerância pré-fixada. A taxa de convergência aumenta na medida em que este vetor inicial está mais próximo do vetor solução final. A utilização do Solver Iterativo nos programas adaptativos traz um grande atrativo pelo fato de que o vetor pode ser inicializado com a solução da iteração anterior, estando portanto já mais próxima da solução final. A tolerância pode ser fixada com valores que fornecem uma resposta pouco acurada (1.e-3), acurada (1.e-6) ou muito acurada (1.e-10).

O Solver implementado usa o algoritmo GMRES desenvolvido por Saad e Schultz (1983) e por Shakib e Hughes (1989). Para sua utilização é necessária a definição do subespaço de Krylov utilizado para representar o vetor solução. Este subespaço se for superdimensionado exigirá um considerável espaço de memória, e, ao contrário, se for subdimensionado, o solver fornecerá respostas incorretas. É importante encontrar um ponto ideal que forneça bons resultados com um desempenho racional da máquina. Em micros com pouca capacidade de memória a tendência será utilizar dimensões menores.

5. EXEMPLOS

Para uma primeira comparação entre os Solvers, discretizou-se o exemplo da fig. 3 com um refinamento uniforme ao longo do contorno. Na tabela 1 ilustra-se o tempo computacional gasto com diferentes números de graus de liberdade, dimensionando o subespaço de Krylov com 20 e 50% da dimensão total do sistema e tolerância muito acurada, e compara-se com o tradicional método de eliminação de Gauss.

Tabela 1.- Comparação dos tempos computacionais totais dos solvers.

Graus de Lib.	Gauss	Krylov=20%	Krylov=50%
48	43'''	94'''	61'''
96	3''80'''	8''80'''	6''70'''
192	41''64'''	48''02'''	40''52'''
296	2'45''07	4'51''10'''	2'47''96'''
446	10'03''17'''	9'46''15'''	6'58''30'''

Dessa tabela pode-se concluir que a utilização de Solvers Iterativos traz um ganho substancial no tempo de processamento quando se trabalha com um maior número de graus de liberdade. No tocante à definição do subespaço de Krylov, verificou-se que este funcionou para valores entre 20 a 50% do tamanho total do sistema. A redução desse valor para menos de 20% trouxe problemas com a resposta encontrada. Ao se acrescentar para valores superiores a 50%, o tempo computacional aumentou e a resposta permaneceu inalterada. Esse valor deve ser convenientemente estudado para cada exemplo e malha adotada.

Para se testar a eficiência dos medidores em conjunto com os solvers para um maior número de Graus de Liberdade, foi resolvido o problema proposto abaixo com o uso da formulação H, adotando-se a discretização inicial que está mostrada na fig. 3, com a indicação da numeração dos elementos.

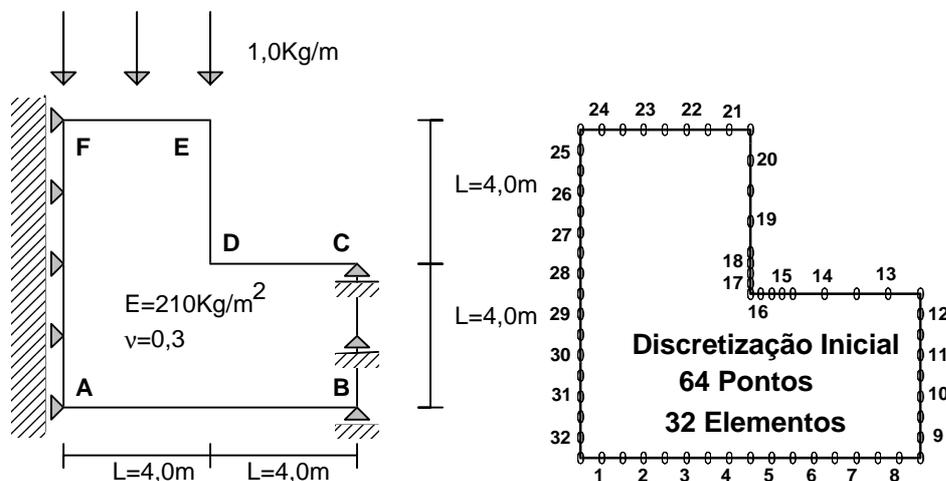


Figura 3 - Exemplo adotado com discretização inicial

No medidor baseado no cálculo do resíduo foi adotado uma tolerância pequena de 0,025, ao passo que no medidor da Reanálise a tolerância foi de 0,01. Para se evitar problemas de super-refinamento que podem levar a problemas de integração e de mau condicionamento, foi permitida a discretização somente até a 2ª iteração nos elementos situados no engaste (25 a 32) e na adjacência aos do engaste (1 e 24).

Os resultados finais das discretizações estão mostrados na fig. 4. Na 1ª iteração o medidor da Reanálise discretizou os elementos 2 a 21 e 24 a 32. Na 2ª, os elementos 9 a 21 e 25 a 32, e na 3ª os elementos 9 a 11 e 13 a 21. Com o medidor de Parreira, além de serem discretizados

todos os elementos da 1ª para a 2ª, na 2ª foram discretizados os elementos 2, 3, 14 a 19 e 31. Na 3ª foram discretizados os elementos 15 a 19.

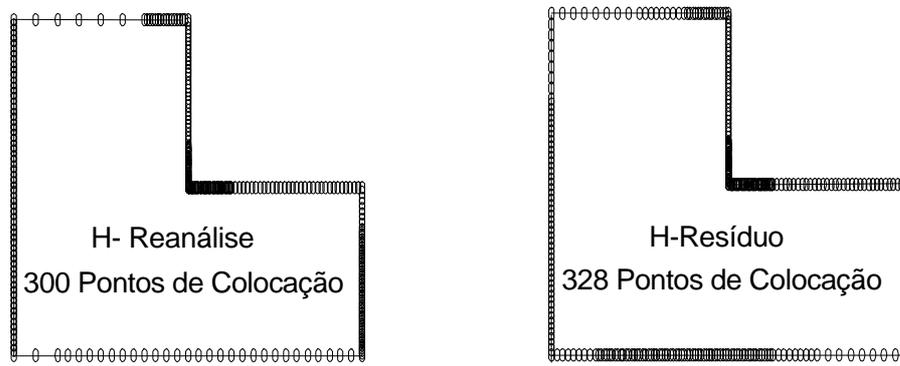


Figura 4 - Discretização final para os medidores.

Na figura 5 ilustra-se a resposta final nos elementos críticos onde houve diferença de discretização entre os dois medidores. Nota-se que a diferença entre as duas soluções é desprezível, o que leva à conclusão que o medidor da Reanálise discretizou em demasia os elementos, talvez pelo fato de se ter fixado um valor para a tolerância muito pequeno.

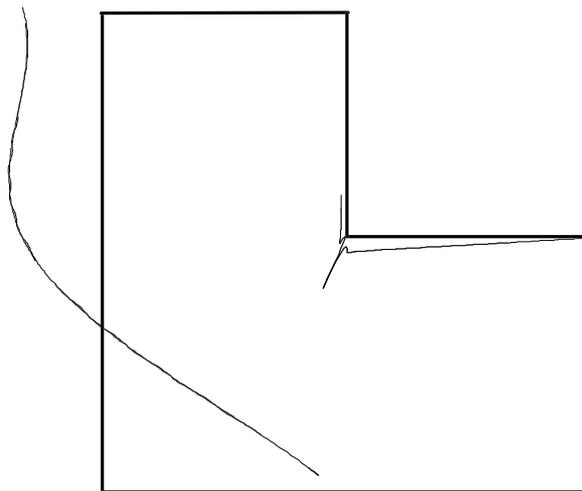


Figura 5 - Comparação entre as respostas das forças de superfície e dos deslocamentos dos medidores da Reanálise e do Resíduo nos elementos 12 a 18 e 25 a 32 indicados na fig. 3.

Os tempos computacionais totais ilustram-se na tabela 2. Para os Solvers Iterativos, nas iterações intermediárias colocou-se uma tolerância que fornece uma resposta acurada e na última uma tolerância muito acurada, com vistas a se diminuir o tempo de processamento.

Tabela 2 - Comparação dos tempos computacionais totais dos respectivos medidores

	Gauss	Krylov=50%
Reanálise	13'40"	11'50"
Parreira	10'04"	7'07"

Como pode-se reparar, o medidor de Resíduo mesmo utilizando um maior número de graus de liberdade traz um ganho computacional da ordem de 40% em relação ao medidor da Reanálise. O rendimento é ainda melhor quando se utiliza em conjunto com um solver

iterativo, que inicializa o vetor solução com a solução da iteração anterior com uma tolerância acurada nas iterações intermediárias e muito acurada na iteração final.

A dimensão do subespaço de Krylov deve ser melhor estudada. Para computadores com grande capacidade de memória, o usual será tentar começar com valores mais altos.

6. CONCLUSÕES

Os medidores de erro analisados mostraram, quanto à discretização, serem semelhantes e eficientes. O indicador de Parreira é mais direto, pois se vale da formulação adaptativa calculando os seus termos mediante as linha e colunas acrescentadas. Isso possibilitou uma considerável economia computacional. Também apresentou uma maior estabilidade numérica, com um refinamento mais uniforme ao longo do contorno.

O indicador da Reanálise, por vezes refinou exageradamente determinados elementos provocando problemas de convergência. Também mostrou ser mais dispendioso na medida em que exige a montagem de pequenos sistemas de equações para cada elemento que sofre a reanálise. A solução deste sistema é rápida, porém o somatório do tempo gasto nas montagens ao longo de todo o contorno, é demorado exigindo um maior tempo computacional. Esta dificuldade cresce com um maior número de elementos ou de graus de liberdade.

Por último, a utilização de um Solver Iterativo em problemas com um número elevado de graus de liberdade (mais que 300) em programas adaptativos é vantajosa, na medida em que a iteração seguinte começa com as respostas da iteração anterior, o que leva a uma economia de tempo de processamento computacional.

REFERÊNCIAS

- Parreira P.; Dong Y.F, 1992 , Adaptive Hierarchical Boundary Elements, Advances in Engng. Software, pags 249 a 259.
- Pessolani, R.B.V., 1995, Formulação HP-Hierárquica Adaptativa para Elasticidade com o Método dos Elementos de Contorno, Dissertação de Doutorado, COPPE-UFRJ.
- Saad, Y.; Schultz, M.H.,1983, GMRES: A Generalized Minimum Residual Algorithm for Solving Non Symmetric linear systems, Research Report YALEV/DCS/RR-254, Department of Computer Science, Yale University.
- Shakib, F.; Hughes J.R.; Johan,1989 , A Multi-Element Group Preconditioned GMRES Algorithm for Nonsymmetric Systems Arising in Finite Element Analysis , Comp. Meth. in Appl Mech and Engng, 75, 415-456.
- Zienkiewickz, O.C.; Zhu, J.Z., 1987, A Simple Error Estimator and Adaptive Procedure for Practical Engng Analysis, Int. J. Num. Meth. Engng, 24, 337-357.

*COMPUTATIONAL EFFICIENCY IN PROBLEMS WITH A LARGER
NUMBER OF DEGREES OF FREEDOM FOR ADAPTIVE H-P HIERARCHICAL
FORMULATION APPLIED TO BOUNDARY ELEMENT METHOD*

Abstract: *The present paper is concerned with the analysis of the HP-Adaptive Hierarchical formulation applied to the Boundary Element Method for problems which have a great numbers of degrees of freedom. An iterative solver is tested to compare the convergence tax whith the standard one. Also, some suggestions and observations about the error's indicators and estimators are made to improve the solution.*

Keywords: *Numerical Methods, Boundary Element Method, Adaptive Procedures, Iterative Solver's*