Relatório

Marina Mantovani Meneghel

February 2024

1 Introduction

Na grande maioria dos fenômenos descritos por equações diferencias parciais (EDPs) não há formas analíticas ou explícitas de se conseguir uma solução. Dessa forma, métodos numéricos são necessários para resolver esses problemas.

O Método dos Elementos Finitos é uma poderosa ferramenta utilizada em diversas áreas das ciência computacional, para simulação de fenômeos físicos e problemas de engenharia. O método consiste em dividir o domínio, processo conhecido como discretização, em número finito decelementos menores (subdomínios), os quais estão conectados por nós, formando uma malha. Com isso, utilizando formulações variacionais das equações governantes que descrevem o problema, constrói-se soluções aproximadas, através da contribuição dos elementos.

Para isso, as equações governantes que descrevem o comportamento de cada elemento são assembladas em uma matriz global, o que permite a construção de um sistema linear de equações que será resolvido em todo o domínio.

Uma variação do método tradicional de Elementos Finitos é a aplicação de formulações mistas, onde a pressão e o fluxo são aproximados simultanemamente. Essa abordagem é comumente utilizada para descrever a dinâmica dos fluidos. Nela, são consideradas funções pertencentes ao espaço de aproximação H(div), que fornece aproximações localmente conservativas.

A matriz resultante da aplicação desse método é do tipo ponto de sela, a qual é esparsa e não é positiva definida. Resolver sistemas lineares desse tipo é um problema desafiador, o qual exige técnicas especiais para sua resolução, uma vez que apenas a aplicação de métodos tradicionais não são suficientes para a resolução desses problemas.

O sistema linear em questão é representado da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f \\ g \end{Bmatrix} \tag{1}$$

sendo A, B, C e D blocos de matrizes que formam a matriz geral S.

Se o sistema descreve um problema de ponto de sela, apresentam um ou mais dos seguintes aspectos:

1. A é simétrica
2. a parte simétrica de A é positiva semidefinida
3. B = C
4. D é simétrica e positivo semidefinido
5. C = 0

Um sistema de ponto de sela, originado de um problema incompressível como de Stokes, Elasticidade ou Darcy, é o caso em que todas essas condições são satisfeitas, apresentando a forma abaixo:

$$\begin{bmatrix} A & B \\ B^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} x \\ y \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f \\ g \end{Bmatrix} \tag{2}$$

2 Introduction

Problemas que geram sistema de ponto de sela aparecem em uma variedade de aplicações técnicas e científicas, como na dinâmica dos fluidos, otimização constrained, circutos elétricos e redes, least square estimation, mecânica das estruturas, elementos finitos mistos, até em áreas da economia e de finanças.

Alguns métodos númericos já foram formuçados para resolução destes sistemas, sendo a maioria desenvolvido para uma classe de problemas específica.

O objetivo é a solução do sistema linear em blocos, da seguinte forma:

Quando esse sistemas descreve um problema ponto de sela, os blocos obedecem uma ou mais das seguintes condições:

Quando todas as condições são satisfeitas, como em problemas de Stokes da mecânica dos fluidos, temos o seguinte sistema:

Quarquer solução do sistema é um ponto de sela do Lagrangiano:

Problemos no qual o bloco C é não nulo aparecem no contexto de método dos elementos finitos misto estabilizado, descretização de equações que descrvem fluidos com certa compressibilidade.

Métodos Iterativos são melhores quando a matriz é grande e esparça. Métodos diretos, no entanto, são preferidos na área de otimização, além de usados muito para solução de precondicionadores.

Frequentemente, problemas ponto de sela aparecem quando certa variável deve ser minimizada, sob certas condições limitantes (linear constraints). Neste caso, o vetor y é o multiplicador de Lagrange, é geralmente tem uma interpretação física, como em problemas de fluidos incompressíveis, onde x é o vetor do fluxo (velocidade) e y é o vetor de pressão.

Algoritmos de resolução de problemas ponto de sela, além de divisão clássica direta e iterativa, podem ser subdivididos em segregados e conjunto. Métodos segregados calculam as duas incógnitas vetores separadamente, resolvendo um sistema linear menor que o original, sistema reduzido. A principal representação dessa metodologia segregada é a redução pelo complemento de Schur.

Conjunto lida com o sistema por inteiro, computando x e y simultaneamente

Algoritmos Iterativos Estacionários.

Método de Uzawa é bastante popular na mecanica dos fluidos

Sistema de ponto de sela é equivalente a resolver o problema de minimização

$$j(x) = (1/2)x^T Ax - f^T x \tag{3}$$

limitado a, condicionado por

$$Bx = g \tag{4}$$

Bloco A é positivo definido e $C = 0$

Sequências decrescentes de α, com $\alpha \to 0$, são usadas para computar melhores aproximações de x, com menos iterações.

Sistema de ponto de sela regularizado permite encontrar uma solução inicial estável do problema alterado.

3 Methods

Os métodos diretos são responsáveis por fornecer a solução exata, dentro de um número finito de passos, sendo o problema resolvido através da decomposição da matriz. Entre as técnicas mais conhecidas, estão a decomposição LU, Cholesky e QR.

Os métodos iterativos fazem uso de sucessivas aproximações, a partir de um chute inicial x_0, para chegar a soluções de maior acurácia, ou seja, que se aproximam mais da solução do sistema linear a cada passo (iteração), até atingir uma tolerância de parada estabelecidade. Portanto, não se obtém, a partir desses métodos, a resposta exata, mas sim soluções muito próximas do sistema linear, ou seja, que o resíduo das equações se aproxime de zero.

4 Objectives

A resolução de sistemas lineares do tipo ponto de sela é um problema desafiador, o qual exige técnicas especiais. Portanto, o objetivo desta pesquisa é a análise da metodologia proposta de resolução de sistemas lineares de equações advindos do Método dos Elementos Finitos, e comparação com outras formas de resolver esses problemas. Comparação das técnicas de decomposição direta e iterativa aplicadas a problemas esparsos de ponto de sela, oriundo de aplicações do Método dos Elementos Finitos.

Para isso, serão implementados problemas modelos que gerem sistemas lineares representativos para análise e realização dos testes, fim de analisar as metodologias de resolução desses sistemas. As matrizes serão geradas a partir de problemas de mecânica computacional podendo variar parâmetro de penalização, a dimensão do problemas, ordem de aproximação, refinamento de malha.

Com essas matrizes, as diferentes metodologias de resolução serão testadas e dados significativos para as análises de performace serão coletados. Por fim, os dados obtidos serão comparados e conclusões sobre os métodos de resolução de sistema para problemas esparsos de ponto de sela serão realizadas.

5 Activities

Inicialmente dedicou-se à ambientação e estudos das ideias principais do Método de Elementos Finitos. Em seguida, um estudo mais aprofundado em métodos numéricos para resolução de sistemas lineares foi realizado.

A partir dos conhecimentos adquiridos, foram executados testes de resolução de sistemas lineares através da linguagem do Mathematica, a partir da implementação simples de métodos diretos e iterativos mais usuais, mas especificamente, Método de Jacobi, . Com isso, é possível observar como se constrói um algoritmo de resolução e como as iterações se dão

Paralelamente, foi necessário estudo da linguagem C++, com ênfase na programação orientada à objetos, com o objetivo de familiarização com a biblioteca NeoPZ, desenvolvida no Laboratório de Mecânica Computacional para cálculos de Elementos Finitos para diversos problemas da mecânica computacional.

Implementou-se um problema de Darcy, dado da seguinte forma:

foi gerando a matriz de rigidez, com o intuito de analisar as metodologias de resolu c ao de sistema.

O método implementado inicialmente não foi condensado. Foram testados diferentes valores de penalização, denominado α, com o intuito de averiguar o comportamente. Avaliar a influência de penalização α na convergência do problema, testes computacionais variando esse parâmetro.

- Tabela das situações consideradas - Tabela com os resultados obtidos

Um teste de convergência foi realizado, variando o valor de α, e analisando o número de iterações necessárias para a convergência do problema. A relação entre o número de iterações necessárias para cada α e o erro foi analisada, e, a fim de verificar a relação linear entre α e o erro, foi feito um gráfico com escala logarítmica.

- problema não condensado - variar alpha - testes de convergencia - relação linear entre alpha e erro - número de iterações - taxa de convergência - big O notation - erro de arredondamento/limite do computador - tempo de execução

Depois, o mesmo teste foi foi para uma ordem polinomial maior do problema. Em escala logarítimica, a inclinação da "reta" representa a taxa de convergência. Logo, quanto maior a inclinação, mais rápido a convergência do problema.

ao realizados experimentos num ericos para avaliar as caracter ısticas de esta- bilidade e convergencia da formulac ˆ ao

Sempre valores descendentes de alpha para computar melhores aproximações de x, com menos iterações, classificado como metodo iterativo estacionário. Em alguns casos a escolha de alpha leva em conta considerações físicas do problema (pesquisar isso).

O teste de convergência considera a diferença dos elementos do vetor x e x$_a$*prox.Quandoadiferençaémenorqueatolerânciaestabelecida, asoluçãoéatingidaeoprocessamento*

6 Bibliography