

MÉTODOS ITERATIVOS PARA SOLUÇÃO DE SISTEMAS LINEARES ALTAMENTE ANISOTRÓPICOS

Vitor M. V. Ferreira¹

Universidade Federal de Uberlândia, Av. João Naves de Ávila, 2121.
vitormacielvilela@yahoo.com.br

Millena M. Villar²

mmvillar@mecanica.ufu.br

Aristeu da Silveira Neto²

aristeus@mecanica.ufu.br

Resumo: *Objetiva-se com este trabalho a solução de sistemas lineares para problemas com elevada anisotropia resultante de fluidos com diferentes densidades. Para tanto, métodos iterativos (solvers) são implementados, tais como S.O.R, Multigrid, Gradiente Conjugado, Gradiente Conjugado Pré-Condicionado, Nested CG e Nested Multigrid. O domínio do problema tratado é tridimensional em coordenadas cartesianas. A discretização espacial é realizada pelo método dos Volumes Finitos, adotando-se malha uniforme. As matrizes dos coeficientes e do termo direito do sistema linear são geradas via funções manufaturadas. Para situações nas quais apresenta anisotropia, associações entre métodos de otimização e multi-nível se mostraram mais eficazes e eficientes.*

Palavras-chave: *Anisotropia, Multigrid, Gradiente Conjugado, Volumes Finitos, Funções Manufaturadas.*

1. INTRODUÇÃO

Equações elípticas são utilizadas como modelos matemáticos de fenômenos físicos estacionários sujeitos a condições de contorno. Em problemas da mecânica dos fluidos, esta equação surge do acoplamento entre pressão e velocidade da equação de Navier-Stokes.

Os coeficientes da equação elíptica discretizada são funções da malha euleriana gerada pela discretização e do campo de massa específica. No caso de escoamentos monofásicos (ex. cavidade com tampa deslizante), a matriz do sistema linear gerado por estes coeficientes é simétrica e a solução daquele não envolve grandes esforços computacionais. Todavia, para o caso de escoamentos bifásicos (ex. simulação do desprendimento de gotas d'água no ar) esta matriz se torna assimétrica e, quanto mais intenso for o salto de propriedade entre as fases, mais difícil torna a convergência dos métodos iterativos.

Uma possível classificação dos métodos iterativos para solução de sistemas lineares é feita baseada no princípio de busca pela solução (estacionários ou não-estacionários) e no número de níveis visitados (único ou multi-níveis).

Os métodos estacionários são aqueles que têm como meio de solução o isolamento da variável desejada (ex. Gauss-Seidel, S.O.R); Métodos não-estacionários, ou também denominados métodos de otimização, são aqueles que buscam o valor da variável utilizando direções de busca denominadas gradientes (ex. Gradiente Conjugado). Se, ao executar a busca pela solução, o método se utiliza da equação residual, de restrições e interpolações entre malhas, então este método é do tipo multi-nível.

Para uma correta validação das técnicas implementadas mediante as variadas condições de contorno e diferentes saltos entre a propriedade física ρ (massa específica), recorre-se às soluções

¹ Acadêmico do curso de Engenharia Mecânica

² Orientadores

manufaturadas, as quais permitem observar a ordem de convergência dos métodos de discretização utilizados, ou seja, 2ª ordem.

A função manufaturada aqui utilizada é empregada para a pressão e suas possíveis condições de contorno são pressão imposta (Dirichlet) e derivada da pressão imposta (Neumann).

2. METODOLOGIA

Com o objetivo de exemplificar uma aplicação dos métodos numéricos aqui estudados no ambiente da mecânica dos fluidos computacional, primeiramente o sistema linear $A\phi = B$, gerado pela discretização da equação elíptica (Equação 1), é construído a partir do problema físico denominado cavidade com tampa deslizante. Para tanto, as equações de Navier-Stokes são discretizadas temporalmente pelo método de Euler Explícito e o acoplamento é realizado com o método dos Passos-Fracionados, mais informações em Fortuna (2000). Uma sequência de testes que permitem verificar a influência dos altos saltos de propriedade física no comportamento dos *solvers* implementados é realizada através de soluções manufaturadas.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = f(x, y, z) \quad (1)$$

Onde,

Γ : Representa o inverso da massa específica ou um campo manufaturado equivalente;

ϕ : Representa a pressão ou um campo manufaturado equivalente;

$f(x, y, z)$: Denomina-se termo forçante e é definido pelo divergente da estimativa da velocidade (Equação 2) ou numericamente a partir do campo manufaturado (Equação 3).

$$B = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot u \quad (2)$$

$$B = A\phi^{\text{manufaturada}} \quad (3)$$

2.1 Método dos Volumes Finitos

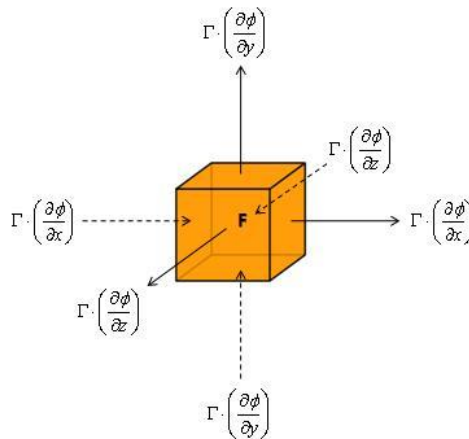


Figura 1: Volume infinitesimal para o qual é válida a equação elíptica.

A discretização espacial da Equação 1 é realizada utilizando Volumes Finitos. Aplicando o método dos Volumes Finitos em malha uniforme ($dx = dy = dz = h$), tem-se:

$$\int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dx dy dz = \int_b^f \int_s^n \int_w^e f(x, y, z) dx dy dz \quad (4)$$

$$\left[\left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s + \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_f - \left(\Gamma \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b \right] \cdot h^2 = f(x, y, z) \cdot h^3 \quad (5)$$

Onde,

$$\begin{aligned} \Gamma_e &= \frac{\Gamma_{i+1,jk} + \Gamma_{ijk}}{2}; \Gamma_w = \frac{\Gamma_{i-1,jk} + \Gamma_{ijk}}{2}; \Gamma_n = \frac{\Gamma_{ij+1,k} + \Gamma_{ijk}}{2} \\ \Gamma_s &= \frac{\Gamma_{ij-1,k} + \Gamma_{ijk}}{2}; \Gamma_f = \frac{\Gamma_{ijk+1} + \Gamma_{ijk}}{2}; \Gamma_b = \frac{\Gamma_{ijk-1} + \Gamma_{ijk}}{2} \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e &= \frac{\phi_{i+1,jk} - \phi_{ijk}}{h}; \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{i-1,jk}}{h}; \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n = \frac{\phi_{ij+1,k} - \phi_{ijk}}{h} \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s &= \frac{\phi_{ijk} - \phi_{ij-1,k}}{h}; \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_f = \frac{\phi_{ijk+1} - \phi_{ijk}}{h}; \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b = \frac{\phi_{ijk} - \phi_{ijk-1}}{h} \end{aligned} \quad (7)$$

Agrupando os coeficientes, tem-se:

$$A_p \cdot \phi_{ijk} + A_e \cdot \phi_{i+1,jk} + A_w \cdot \phi_{i-1,jk} + A_n \cdot \phi_{ij+1,k} + A_s \cdot \phi_{ij-1,k} + A_f \cdot \phi_{ijk+1} + A_b \cdot \phi_{ijk-1} = B_{ijk} \quad (8)$$

$$A_e = \frac{\Gamma_e}{h^2}; A_w = \frac{\Gamma_w}{h^2}; A_n = \frac{\Gamma_n}{h^2}; A_s = \frac{\Gamma_s}{h^2}; A_f = \frac{\Gamma_f}{h^2}; A_b = \frac{\Gamma_b}{h^2} \quad (9)$$

$$A_p = - (A_e + A_w + A_n + A_s + A_f + A_b) \quad (10)$$

2.2 Funções Manufaturadas

A função manufaturada para a pressão é dada pela Equação 11 e ilustrada na Figura 2.

$$\phi^{manufaturada} = 2 \cdot x^2 - 5 \cdot y^2 + 4 \cdot z^2 - \frac{1}{3} \quad (11)$$

Esta função admite duas condições de contorno:

$$\text{Dirichlet: } \phi_F = 2 \cdot \phi_f^{manufaturada} - \phi_P \quad \text{Neumann: } \phi_F = \phi_P \pm h \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} (\phi_f^{manufaturada})$$

Onde,

F : Representa o centro da célula fantasma e f a fronteira correspondente;

P : Representa o centro da célula de análise, vizinha a F ;

h : é a distância entre o centro das células e multiplica a derivada da função em uma das direções cartesianas;

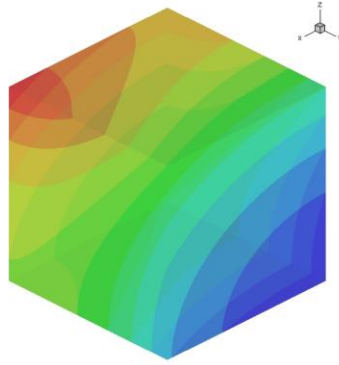


Figura 2: Função manufaturada para a pressão.

A função manufaturada para a massa específica é dada a seguir.

$$\rho = 1 + K \cdot \left[\sin(f \cdot \pi \cdot x) \cdot \sin(f \cdot \pi \cdot y) \cdot \sin(f \cdot \pi \cdot z) \right]^e \quad (12)$$

Onde,

K : Parâmetro que define o salto de propriedade entre as fases;

f : Número de onda. Define o número de bolhas no domínio;

e : Parâmetro que define a espessura de transição entre as fases;

A Figura 3 mostra dois campos distintos de massa específica, obtidos pela Equação 12, alterando-se apenas o valor de f .

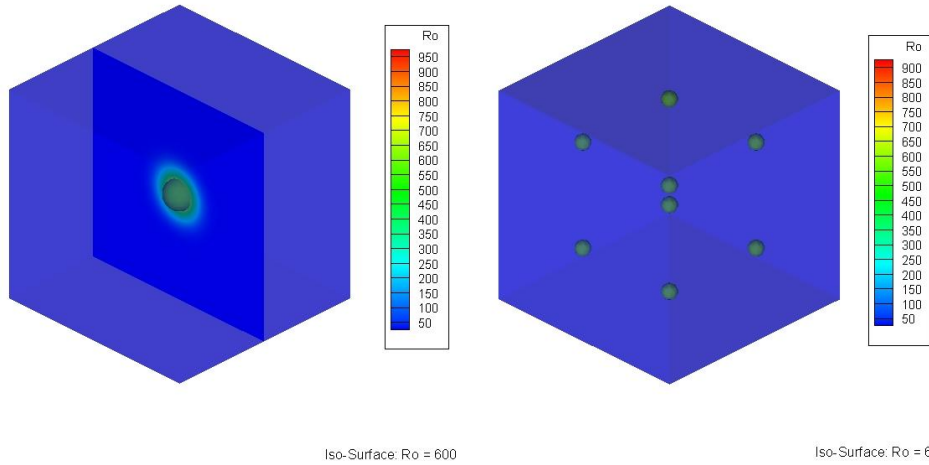


Figura 3: Dois campos de massa específica, ambos com valor de $K = 1000$, e valores de $f = 1$ e 2 , respectivamente.

A Figura 4 ilustra esta função unidimensional para melhor visualização da influência dos parâmetros. Estes são: $K = 1000$, $f = 2$, $e = 10, 20$. Para $e = 20$ a transição é mais brusca.

A partir das Equações 11 e 12 é possível obter o lado direito da Equação 1, ou seja, $B = A\phi^{manuf.}$. A solução deste sistema linear resulta em uma solução numérica $\bar{\phi}$, onde $\bar{\phi} - \phi^{manuf.} = erro$. À medida que a malha é refinada este erro tende a cair a uma razão 2^q , onde q é a ordem de discretização considerada.

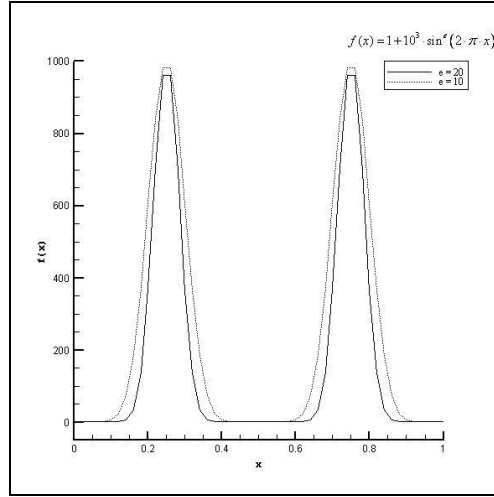


Figura 4: Função manufaturada para a massa específica unidimensional.

2.3 Métodos Iterativos

Métodos Iterativos, também chamados *solvers*, são algoritmos que possuem o objetivo de resolver iterativamente sistemas de equações matemáticas. Esta iteração é expressa computacionalmente através de *loops* que buscam aproximar o valor das variáveis. Desta forma, os *solvers* geram uma sequência de aproximações que sob hipóteses adequadas convergem para a solução. Os métodos iterativos são mais adequados à resolução de sistemas lineares esparsos de grande porte, uma vez que tais métodos não provocam preenchimentos na estrutura da matriz, preservando sua esparsidade.

2.3.1 S.O.R

O método das Sobre-relaxações Sucessivas utiliza para atualizar o valor de cada célula, da mesma forma que o método de Gauss-Seidel, os valores das variáveis calculadas no ciclo corrente (Maliska, 2004).

Este método tem o diferencial de procurar acelerar o processo de convergência via um coeficiente de sobre ou sob relaxação ($w > 1$ ou $w < 1$, respectivamente). Entretanto, muito cuidado deve ser tomado na escolha deste coeficiente, pois ele possui um valor ideal para cada tipo de problema, podendo, na escolha de um valor ruim, perder eficiência ou mesmo divergir.

As Equações 13 e 14 são referentes aos métodos de Gauss-Seidel e das Sobre-relaxações Sucessivas, respectivamente.

$$\phi_i^{n+1} = \frac{\left(B_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} \phi_j^{n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} \phi_j^n \right)}{a_{ij}} \quad i = 1, \dots, n \quad (13)$$

$$\phi_i^{n+1} = \frac{w \left(B_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} \phi_j^{n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} \phi_j^n \right) - (1-w) a_{ij} \phi_i^n}{a_{ij}} \quad i = 1, \dots, n \quad (14)$$

2.3.2 Multigrid

O Método Multigrid aqui apresentado é chamado de Método de Correção por Malha Grosseira. Ele é composto por funções de restrição e interpolação que transferem informações entre

as malhas virtuais por ele geradas e a malha física, onde as condições de contorno heterogêneas são empregadas.

Estas malhas são ilustradas na Figura 5 e tem como papel resolver todo o espectro de frequência da solução do problema. Isto porque, quanto mais refinada é a malha, mais alta é a frequência por ela resolvida, necessitando de malhas grosseiras para resolverem as baixas frequências e acelerarem o processo de convergência (Briggs, 1987).

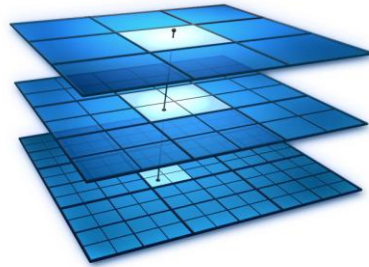


Figura 5: Sucessivas malhas utilizadas pelo Método Multigrid.

O algoritmo do Multigrid é apresentado a seguir:

- (1) Iterar n vezes $A\phi = B$ com algum solver base (Gauss-Seidel) para obter aproximação;
- (2) Calcular o resíduo $R = B - A\phi$ e restringir para malha grosseira seguinte;
- (3) Iterar m vezes a equação residual $Ae = R$ para obter uma aproximação do erro;
- (4) Repetir o passo (2) e (3) até a malha mais grosseira;
- (5) Interpolat as aproximações obtidas do erro, iterar k vezes em todas as malhas até a malha física e nesta corrigir a aproximação inicial $\phi = \phi + e$.

O ciclo do Multigrid utilizado neste trabalho é o V(2,2), que corresponde a duas iterações pelo *solver* base na descida (anteriormente ao processo de restrição) e duas na subida (posteriormente ao processo de interpolação e correção).

2.3.3 Gradiente Conjugado e Gradiente Conjugado Pré-Condicionado

Seja $f(x)$ a função da qual se deseja encontrar as raízes e $F(x)$ a sua forma quadrática, o Método do Gradiente Conjugado é o método de solução de sistemas lineares que utiliza duas direções perpendiculares de busca (gradientes) para otimizar $F(x)$. Encontrando, desta forma, a raiz de $f(x)$ (Shewchuk, 1994).

A Figura 6 ilustra esta operação com um exemplo analítico simples. Para sistemas lineares, $f(x)$ é o sistema linear $A\phi = B$ e $F(x)$ é dada por $\frac{1}{2} \cdot \phi^T A \phi - B^T \phi + c$.

$f(x) = 0$ $2 \cdot x + 3 = 0$ $x = -1,5 \rightarrow \text{Raiz}$	\Rightarrow	$F(x) = 0$ $\text{Minimo} \Rightarrow \frac{\partial F(x)}{\partial x} = 0$ $8 \cdot x + 12 = 0$ $x = -1,5 \rightarrow \text{raiz}$
PARA SISTEMAS LINEARES: GRADIENTE = RESÍDUO		

Figura 6: Operação da busca de solução via gradiente, exemplo analítico.

O algoritmo do Gradiente Conjugado e Gradiente Conjugado Pré-Condicionado é mostrado na Figura 7. O pré-condicionamento realizado neste trabalho é pelo Jacobi, mais informações em Barrett *et all* (2006). As setas na Figura 7 indicam o acréscimo da equação $Me = R$ e os círculos laranja indicam a troca de variável.

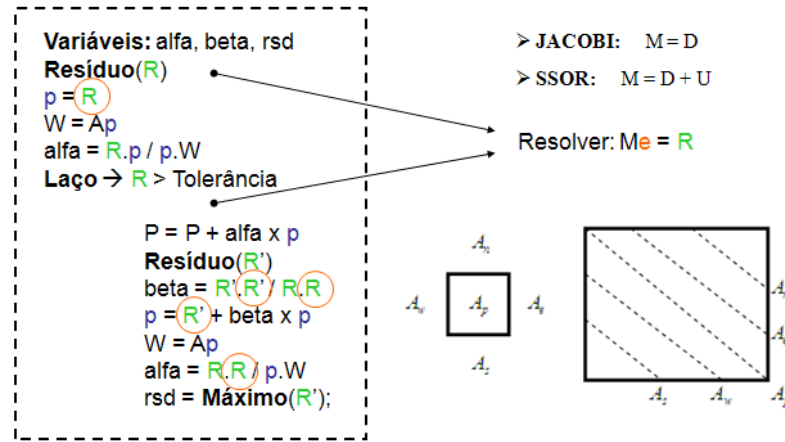


Figura 7: Algoritmo do Gradiente Conjugado.

2.3.4 Nested

O Método Nested é um processo de solução do sistema linear $A\phi = B$ em malhas grosseiras seguido da interpolação para malhas refinadas, gerando com isto valores iniciais para ϕ . Este processo acelera a convergência nas malhas mais finas, as quais possuem alto custo computacional por formarem sistemas com alto grau de liberdade. Ele trabalha sob o mesmo princípio do espectro de frequência da solução, buscando solucionar as baixas frequências primeiramente através dos sistemas com menor grau de liberdade (Briggs, 1987). Neste trabalho o Nested é empregado com o Multigrid e com o Gradiente Conjugado.

3. RESULTADOS

Para a solução do sistema linear $A\phi = B$ gerado com o intuito de estimar o campo de pressão do problema da cavidade com tampa deslizante (Figura 8), foram testados os *solvers*: S.O.R, Multigrid e Gradiente Conjugado (CG \equiv CG-Jacobi, neste caso).

Este problema é citado neste trabalho para analisar a eficiência e robustez dos *solvers* em problemas monofásicos cuja condição de contorno é derivada da pressão imposta (Neumann).

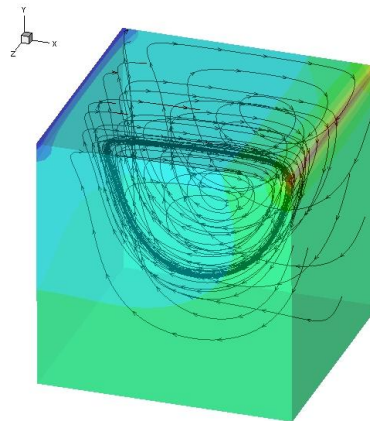


Figura 8: Campo de pressão e linhas de corrente do escoamento laminar em cavidade com tampa deslizante ($Re = 100$, $t = 60s$).

Como o problema é transiente, comparou-se o número de iterações necessárias para atingir a convergência ($\epsilon = h^2$) em cada instante de simulação, ou seja, em cada passo de tempo. No caso do Multigrid, a ordenada corresponde ao número de ciclos realizados (Figura 9).

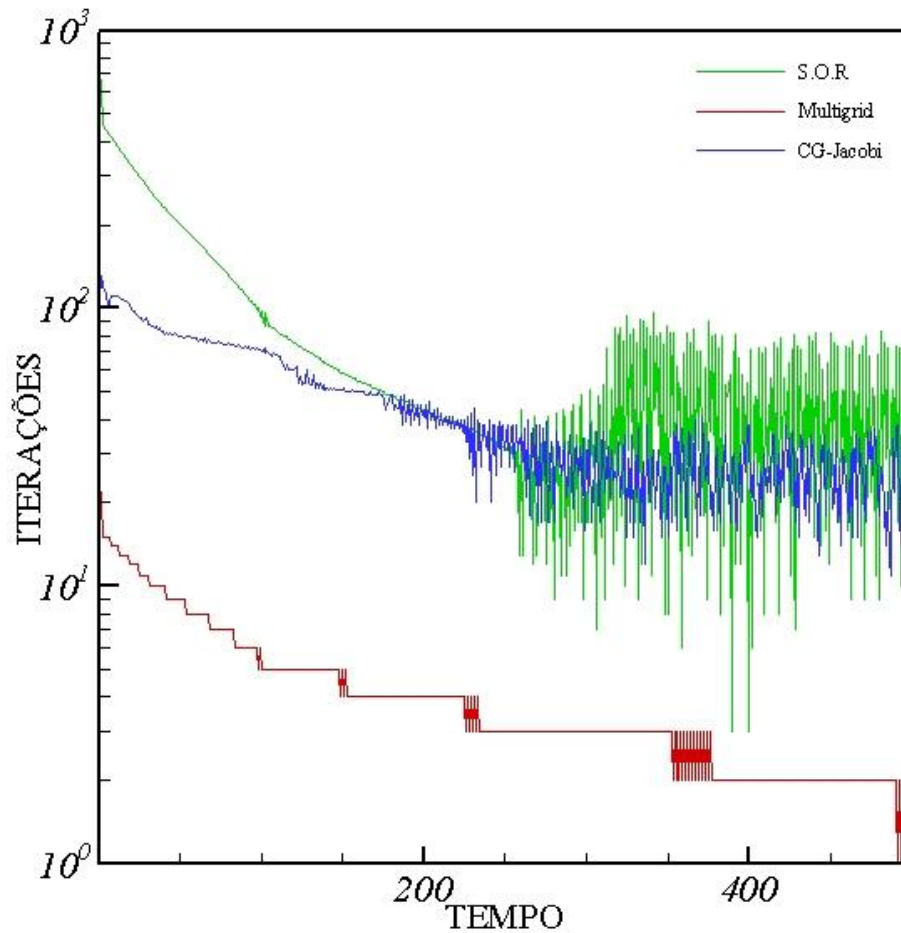


Figura 9: Número de iterações até a convergência em função do tempo $N = 32^3$.

Através desta simulação é possível verificar a eficiência do método Multigrid na solução de escoamentos monofásicos. No entanto, como citado por MacLachlan *et al* (2008), o mesmo não acontece quando se tem escoamentos bifásicos. Busca-se, portanto, *solvers* que não sejam apenas eficientes, mas também robustos.

Para análise do comportamento dos *solvers* quando se têm escoamentos bifásicos, apenas a equação elíptica é discretizada. Neste caso, os coeficientes e o termo direito do sistema linear são construídos utilizando-se funções manufaturadas. As condições de contorno empregadas são pressão imposta (Dirichlet) e derivada da pressão imposta (Neumann). A malha utilizada é $N = 64^3$ e o critério de convergência é $\epsilon = 1.0E^{-8}$.

Os *solvers* testados para cada uma destas situações são: Multigrid (MG-GS), Gradiente Conjugado (CG), Gradiente Conjugado Pré-Condicionado (CG-JACOBI), Nested Multigrid (NESTED MG-GS) e Nested Gradiente Conjugado (NESTED CG).

A Figura 10 apresenta o tempo gasto para que o resíduo alcance a tolerância $\epsilon = 1.0E^{-8}$ para os diversos *solvers*, considerando a presença de apenas uma interface contendo um salto de 1 para 1000. Na Figura 11 o mesmo comportamento é avaliado considerando a presença de quatro interfaces, ou seja, quatro regiões com salto de 1 para 1000.

Na Figura 11 se observa que nem todos os Métodos Iterativos convergem. Isto mostra a dificuldade de se obter métodos robustos capazes de convergirem a altas razões de densidade.

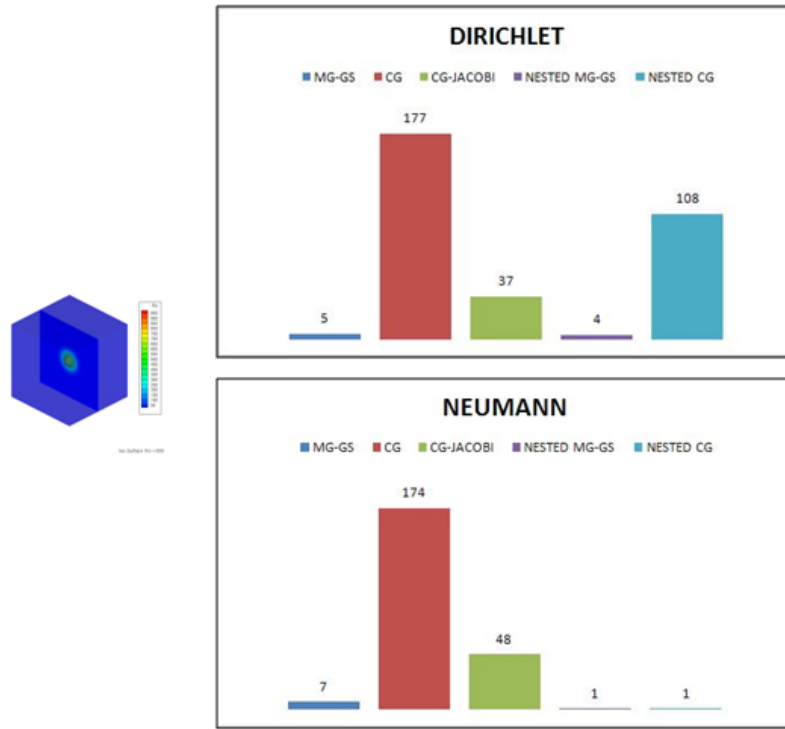


Figura 10: Tempo computacional gasto para cada *solver* com campo manufaturado ($K=1000, f=1$).

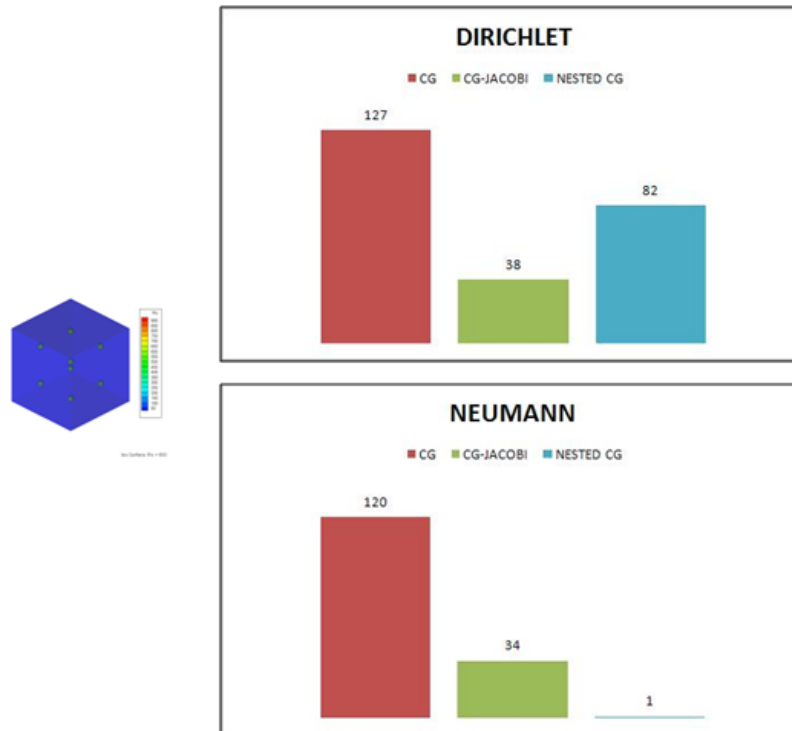


Figura 11: Tempo computacional gasto para cada *solver* com campo manufaturado ($K=1000, f=2$).

O Método do Gradiente Conjugado, apesar de não ser o mais indicado pela literatura para sistemas assimétricos, se mostrou eficaz para estes testes. Porém, por não ser um método multi-nível, sua eficiência diminui muito para sistemas com $N > 64^3$. A literatura trás algumas alternativas para se trabalhar com métodos de otimização visando sistemas assimétricos, tais como Gradiente Bi-Conjugado e Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado.

Surpreendentemente o Nested CG se mostrou eficaz e eficiente, uma vez que convergiu com rapidez nas situações mais críticas.

Posteriormente será verificado o comportamento de tal método nas aplicações que envolvam sistemas transientes, onde é necessário resolver a equação de Poisson a cada passo de tempo.

3. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Petrobrás pelo apoio financeiro através dos convênios 0050.0022712.06.5 e 0050.0022712.06.4.

4. REFERÊNCIAS

- Barrett, R., Berry, M., Chan, T. F., Demmel, J. Donato, J. M., Dongarra, J., Eijkhout, V., Pozo, R., Romine, C. and Van der Vorst, H., 2006, “Templates for the Solution of Linear Systems: Building Block for Iterative Methods”, 2nd edition, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Briggs, W. L., 1987, “A Multigrid Tutorial”, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Chapra, S. C. and Canale, R. P., 2006, “Numerical Methods for Engineers”, 5th edition, The McGraw-Hill Companies, Inc.
- Fortuna, A. O., 2000, “Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos”, EDUSP.
- Lebrón, S. C. “A Técnica de Multi Grelha na Solução de Problemas de Lubrificação Elasto-Hidrodinâmica”, Universidade Federal de Uberlândia.
- MacLachlan, S. P., Tang, J. M., Vuik, C., 2008, “Fast and Robust Solvers for Pressure Correction in Bubbly Flow Problems”, Delft University of Technology.
- Maliska, C. R., 2004, “Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional”, 2^a edição, LTC.
- Rabi, J. A. “Aplicação do Método Multigrid na Solução Numérica de Problemas 2D Simples de Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor”.
- Shewchuk, J. R., 1994, “An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain”, Carnegie Mellon University.
- Villar, M. M., 2007, “Análise Numérica Fina de Escoamentos Multifásicos Bidimensionais”, Universidade Federal de Uberlândia.

ITERATIVE METHODS FOR LINEAR SYSTEMS AT HIGH ANISOTROPY

Vitor Maciel Vilela Ferreira

Federal University of Uberlândia, Avenue João Naves de Ávila, 2121.
vitormacielvilela@yahoo.com.br

Abstract: *Our purpose with this work is the solution of linear systems to problems with high anisotropy resulting from fluids with different density. For this, iterative methods (solvers) were implemented, like S.O.R., Multigrid, Conjugate Gradient, Preconditioned Conjugate Gradient, Nested CG and Nested Multigrid. The domain of the treated problem is three dimensional in cartesian coordinates. The spatial discretization is made by the Finite Volume Method, adopting uniform mesh. The matrices of the coefficients and of the right hand side of the linear system are generated by manufactured functions. In situations which present anisotropy, associations between the optimization methods and multi-level show to be more effective and efficient.*

Keywords: *Anisotropy, Multigrid, Conjugate Gradient, Finite Volumes, Manufactured Functions.*