ALVARO F. M. AZEVEDO; JOAQUIM A. O. BARROS

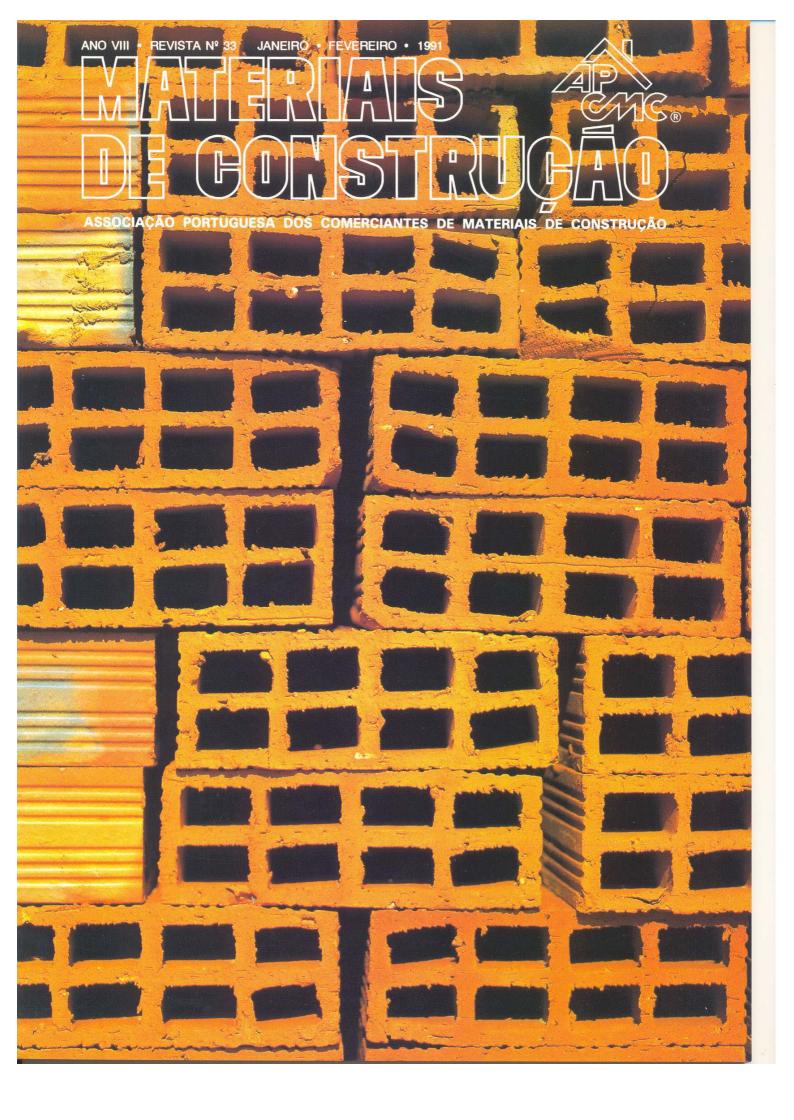
Análise Comparativa de Métodos Directos e Iterativos na Resolução de Grandes Sistemas de Equações Lineares

Publicado na revista "Materiais de Construção" da Associação

Portuguesa dos Comerciantes de Materiais de Construção

N.º 33 - Ano VIII - Janeiro-Fevereiro 1991

pp. 38-41



ANÁLISE COMPARATIVA DE MÉTODOS DIRECTOS E ITERATIVOS NA RESOLUÇÃO DE GRANDES SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

sendo neste trabalho apresentados os resultados mais significativos.
Os métodos iterativos e as

métodos, directos e iterativos,

Os métodos iterativos e as técnicas de armazenamento associadas revelam-se mais vantajosos que os métodos directos sempre que o número de equações ultrapassa a ordem das centenas. Esta vantagem traduz-se numa grande economia de tempo de execução e memória, acentuando-se significativamente à medida que o número de equações aumenta.

2-MÉTODOS DE RESOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

2.1 Métodos directos

Numa fase preliminar, foram implementados e comparados os métodos de eliminação de Gauss e de decomposição $\overline{LDL^T}$. Ambos os métodos apresentaram tempos de execução e necessidade de memória semelhantes. No tipo de problemas utilizados para comparar os algoritmos, as matrizes apresentavam semibanda de largura constante, não apresentando qualquer vantagem a utilização da técnica de armazenamento em "skyline". Por estes motivos, na comparação com os métodos iterativos apenas se utilizou o método de eliminação de Gauss com armazenamento em semibanda de largura constante.

2.2 Métodos iterativos

A bibliografia relativa a métodos iterativos é extensa e muito diversificada, tendo sido necessária uma avaliação prévia das característica de alguns desses métodos. Com esse objectivo foram implementados os métodos de Gauss-Seidel [1] e varias versões do método dos gradientes conjuga-

dos [2-8]. A comparação entre estes métodos permitiu concluir que o método dos gradientes conjugados na versão da Ref. [2] com pré-condicionamento [8] se revelou o mais eficiente. Na Ref. [4] o método de Lanczos foi comparado com o dos gradientes conjugados, tendo o primeiro apresentado uma maior fiabilidade na resolução de sistemas mal condicionados. Porém o método de Lanczos necessita de grande quantidade de memória, o que dificulta a resolução de problemas com grandes dimensões. Os tempos de resolução são da mesma ordem de grandeza com uma ligeira desvantagem para o método de Lanczos.

2.2.1 Método dos gradientes conjugados

O método iterativo utilizado no presente trabalho foi o dos gradientes conjugados [2], cujo algoritmo se baseia na determinação em cada iteração da direcção conjugada e do respectivo passo. Nos Quadros I e II apresenta-se a nomenclatura utilizada e o algoritmo associado ao método iterativo adoptado.

Quadro I - Nomenclatura.

<u>A</u>	matriz dos coeficientes
<u>b</u>	vector dos termos independentes
<u>x</u>	solução
$\underline{A} \underline{x} = \underline{b}$	sistema de equações lin eares
n	número de equações
k	número de iterações
$r_{k} = \underline{A} \underline{x}_{K} - \underline{b}$	erro associado à solução corrente
$d_{_{K}}$	direcção conjugada na
	iteração k
α_{K}	passo na iteração k
$\underline{C} = [diag(\underline{A})]^{-1/2}$	matriz de
	pré-condicionamento

Alvaro Azevedo Ass. da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto Joaquim A. O. Barros Ass. da Universidade do Minho

1-INTRODUÇÃO

A aplicação do método dos elementos finitos (MEF) a problemas lineares e não lineares, no domínio da Engenharia, conduz geralmente à necessidade de resolver sistemas de equações lineares. constante evolução da capacidade de memória e da velocidade de processamento dos computadores permite a resolução de problemas com um crescente número de variáveis. Porém, das diferentes fases associadas à resolução de problemas pelo MEF, a obtenção da solução do sistema de equações passou a ser preponderante em termos de tempo de execução e memória necessária. Torna-se então evidente que para dotar de maior eficiência a aplicação do MEF, é fundamental melhorar a fase de resolução do sistema de equações. Nesse sentido foram testados e comparados diversos

A dedução teórica do algoritmo apresentado no Quadro II baseouse no facto de existirem n direcções conjugadas, o que implicaria a necessidade de efectuar um número de iterações pelo menos igual ao número de equações. Contudo, a resolução dos problemas apresentados neste trabalho tornou evidente que um número de iterações da ordem de 1 a 5% do número de equações é suficiente para obter uma solução com três a quatro algarismos significativos.

de não ser possível obter convergência em sistemas muito mal condicionados.

Para que o método dos gradientes conjugados seja aplicável com eficiência é desejável que a matriz seja positiva definida. Em problemas de análise de estruturas tal requisito é quase sempre respeitado.

À solução inicial nula foi a que conduziu à obtenção da solução final num menor número de iterações.

 \underline{A} , foi considerada como matriz de pré-condicionamento uma matriz \underline{C} tal que, $\underline{C}^T \underline{D} \underline{C} = I$ em que \underline{I} é a matriz identidade. Para que (1) se verifique, a matriz \underline{C} tem de ser igual a $\underline{D}^{-1/2}$. Ao aplicar esta técnica de pré-condicionamento à matriz \underline{A} vem,

$$(\underline{D}^{-1/2})^T \underline{A} (\underline{D}^{-1/2}) = \underline{\overline{A}}$$

sendo $\underline{\underline{A}}$ a matriz pré-condicionada. O sistema de equações a resolver traduz-se agora por,

Quadro II - Algoritmo de resolução de sistemas de equações lineares pelo método dos gradientes conjugados sem pré-condicionamento [2] Quadro III -Algoritmo de resolução de sistemas de equações lineares pelo método dos gradientes conjugados com pré-condicionamento [8].

```
Passo
             1: k = 0
Passo 2: r_0 = Ax_0 - b
             3: d_0 = -r_0
Passo
            4: \alpha_k = -(r_k^T d_k)/(d_k^T A d_k)
Passo
             5: x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k
Passo
            6: \underline{r}_{k+1} = \underline{r}_k + \alpha_k \underline{A} \underline{d}_k
Passo
             7: Se r_{k+1} < \epsilon fim
Passo
                   das iterações.
             8: \beta_k = (\underline{r}_{k+1}^T \underline{A} \underline{d}_k) / (\underline{d}_k^T \underline{A} \underline{d}_k)
Passo
             9: d_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k d_k
Passo
Passo 10: k = k + 1 e retorno ao
                   passo 4.
```

Passo 1:
$$k=0$$

Passo 2: $r_0 = C^T(\underline{A}\underline{x}_0 - \underline{b})$

Passo 3: $d_0 = -r_0$

Passo 4: $x_0 = C^{-1}\underline{x}_0$

Passo 5: $w_k = C\underline{d}_k$

Passo 6: $\alpha_k = -(r_k^T\underline{d}_k)/(w_k^T\underline{A}\underline{w}_k)$

Passo 7: $x_{k+1} = x_k + \alpha_k\underline{d}_k$

Passo 9: Se $x_{k+1} = x_k + \alpha_k\underline{d}_k$

Passo 9: Se $x_{k+1} = x_k + \alpha_k\underline{d}_k$

Passo 10: $x_k = Cx_k = x_k$

Passo 10: $x_k = Cx_k = x_k$

Passo 10: $x_k = (r_k^T\underline{d}_k)/(w_k^T\underline{d}_k)$

Passo 11: $x_k = x_k + x_k = x_k$

Passo 12: $x_k = x_k + x_k = x_k$

Verificou-se ainda que o número de iterações e o tempo de resolução é independente da numeração dos nós da malha.

Em cada iteração é predominante o tempo de execução do produto $\underline{\hat{A}} \underline{d}_k$. As restantes operações são efectuadas com vectores, sendo o respectivo tempo de execução de ordem inferior. O facto de o tempo de execução ser consumido essencialmente no produto de uma matriz por um vector torna possível recorrer a técnicas de armazenamento que conduzem a uma grande economia de memória e número de operações. O principal inconveniente da utilização do método dos gradientes conjugados consiste no risco

2.2.2 Pré-condicionamento

Com o objectivo de diminuir o número de iterações e tornar possível a obtenção da solução em sistemas mal condicionados, foram utilizadas por alguns autores diversas técnicas de pré-condicionamento.

As técnicas de pré-condicionamento mais complexas só são justificáveis em sistemas mal condicionados, dado que o tempo que consomem na sua aplicação não compensa o tempo ganho com a diminuição do número de iterações. Apresenta-se em seguida a técnica de pré-condicionamento [8] utilizada no presente trabalho.

Sendo \underline{D} a matriz diagonal de

$$(\underline{C}^T\underline{A}\underline{C})(\underline{C}^{-1}\underline{x}) = (\underline{C}^T\underline{b})$$

ou

 $\underline{\underline{A}} \ \underline{\underline{x}} = \underline{\underline{b}}$

sendo

 $\underline{C} = \underline{D}^{-1/2}$

Após a obtenção de \underline{x} a solução final ser obtida pela expressão

$$\underline{x} = \underline{C} \underline{x}$$

Apresenta-se no Quadro III o algoritmo do método dos gradientes conjugados (Quadro II) ao qual se aplicou a técnica de précondicionamento atrás referida (expressões 1 a 5).

3-TÉCNICAS DE ARMAZENAMENTO

3.1 Elemento por elemento (EBE-element by element)

Conforme foi referido na Secção 2.2.1, a operação que requer maior tempo de execução é o produto de uma matriz por um vector. Esta é a matriz de rigidez da estrutura (\underline{K}) que é obtida por assemblagem das matrizes de rigidez dos elementos (\underline{K}).

Uma grande economia de memória é conseguida substituindo o produto $\underline{K} \underline{d}$ por $\sum \underline{K}_{\ell} \underline{d}$, evitando-se deste modo a assemblagem da matriz de rigidez global (\underline{K}) . O produto $(\underline{K},\underline{d})$ tem de ser efectuado atendendo à correspondência entre os graus de liberdade do elemento e da estrutura. Esta técnica de armazenamento tem como inconvenientes a necessidade de efectuar uma assemblagem em cada iteração e de não atender à esparsidade das matrizes de rigidez dos elementos.

3.2 Armazenamento dos termos não nulos (NTZ -Non Zero Terms)

O principal objectivo que levou ao desenvolvimento desta técnica de armazenamento foi o de eliminar a assemblagem em cada iteração, operando na fase iterativa apenas com os termos não nulos da matriz de rigidez global.

Para evitar a assemblagem em semibanda da totalidade da matriz de rigidez global, foi implementado o seguinte algoritmo:

- a) Construção de uma tabela que indica para cada nó da malha o número de elementos a ele conectados, a lista desses elementos e a identificação do nó do elemento.
 - b) Para cada nó da malha:
- b₁) Assemblagem da respectiva submatriz da matriz de rigidez global. Nessa submatriz o número de linhas é igual ao número de graus de liberdade do nó e o número de colunas é igual à semibanda.
- b₂) Armazenamento dos termos não nulos desta submatriz em três vectores cujos conteúdos são os

seguintes: número de termos não nulos de cada linha da matriz de rigidez global, valores dos termos não nulos da matriz de rigidez global, coluna correspondente a cada um destes termos.

Na fase iterativa correspondente ao método dos gradientes conjugados (Quadro III), o produto $\underline{A} \underline{w}_{k}$ é efectuado com a informação armazenada nos três vectores referidos em b_{a}).

4-APLICAÇÃO AO CÁLCULO ESTRUTURAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

Os métodos de resolução de sistemas de equações lineares expostos nas secções anteriores são aplicáveis a diferentes tipos de problemas. No presente trabalho, a comparação entre os diversos métodos foi efectuado no domínio da análise de estruturas. Com esse fim, o método dos elementos finitos, na formulação deslocamentos, foi aplicado a duas estruturas contínuas, sendo uma bidimensional e a outra tridimensional. Para avaliar o comportamento de cada método com o aumento do número de equações, foram efectuados sucessivos refinamentos das respectivas malhas.

4.1Problemas bidimensionais

Na Fig. 1 está representada uma estrutura plana e a respectiva solicitação. Admite-se que esta estrutura tem espessura unitária e está sujeita a um estado plano de tensão. A estrutura foi discretizada com elementos Lagrangeanos de quatro nós.

A vantagem em termos de tempo de resolução do método dos gradientes conjugados com pré-condicionamento, especialmente com a técnica de armazenamento NZT é evidenciada no gráfico apresentado na Fig. 2.

A relação entre a memória necessária durante a fase de resolução e o número de equações é apresentada na Fig. 3. Verifica-se que a técnica de armazenamento NZT requer sempre menor quantidade de memória.

4.2 Problemas tridimensionais

Na Fig. 4 está representada uma estrutura tridimensional.

Tal como nos problemas bidi-

mensionais, dos métodos de resolução de sistemas de equações lineares apresentados neste trabalho, aquele que apresenta menores tempos de resolução (Fig. 5) e memória necessária (Fig. 6) é o método dos gradientes conjugados com pré-condicionamento e com a técnica de armazenamento NZT. É de salientar que a referida vantagem é mais significativa nos problemas tridimensionais que nos bidimensionais.

5-CONCLUSÕES

Conforme se pode observar nos gráficos da secção 4, o método de eliminação de Gauss apresenta tempos de resolução e memória necessária cujo ritmo de crescimento com o número de equações torna proibitiva a sua aplicação a grandes sistemas de equações. Estes sistemas podem ser resolvidos de um modo muito mais eficiente com o recurso a métodos iterativos.

A técnica de armazenamento em que apenas são manipulados os termos não nulos da matriz de rigidez global (NZT) revelou-se vantajosa em relação à técnica elemento por elemento (EBE), por ter sido eliminada a necessidade de efectuar uma assemblagem em cada iteração.

As vantagens referidas são mais evidentes nos problemas tridimensionais pelo facto de estes apresentarem uma maior semibanda para o mesmo número de equações.

6-REFERÊNCIAS

[1] - Erwin Kreyszig, "Advanced Engineering Mathematics", sixth edition.

[2]-David G. Luenberger, "Linear and Nonlinear Programming", Addison-Wesley Publishing Company, 1984.

[3] - Lamberto Briseghella, Raffaello Molfese. "Element-By-Element Preconditioned Conjugate Gradient Algorithm for Problems of Structural Mechanics", Microcomputers in Engineering, edited by B.A. Schrefler e R.W. Lewis, Pineridge Press, 1986.

[4] - A.L.G.A. Coutinho, J.L.D. Alves, L. Landau, N.F.F. Ebecken, "Some Experiences on the Iterative Solution of Finite Element Equations on High Speed Computers", X Congresso Ibero-Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia, 1989, Vol 1, pp. A-431 a A-447.

[5] - Thomas J.R. Hughes, Robert M.

Ferencz, John O. Hallquist, "Large Scale Vectorial Implicit Calculations in Soil Mechanics on a Cray X-MP/ 48 Utilizing EBE Preconditioned Conjugate Gradients", Symposium on Future Directions of Computational Mechanics, ASME Winter Annual Meeting, Dc. 7-12, 1986Anaheim,CA. [6] - T.J.R. Hughes, I. Levit, T.E.

Tezduyar, "New Alternating Procedures in Finite Element Analysis Based upon EBE Approximate Factorizations", Computer Method for Nonlinear Solids and Structural Mechanics, edited by S. Atluri and N. Perrone, AMD, Vol. 54, 1983, pp. 75-109.

[7] - R.T. Haftka, "Simultaneous

Analysis and Design", AIAA Journal, July 1985.

[8]-Isaac Fried, "A Gradient Computational Procedure for the Solution of Large Problems Arising from the Finite Element Discretization Method", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 2, 1970, pp. 477-494.

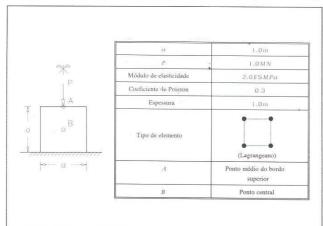


Fig. 1- Dados correspondentes a oproblema bidimensional.

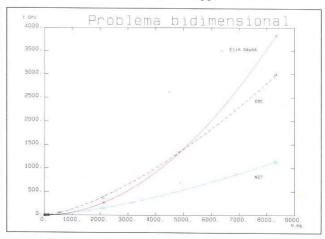
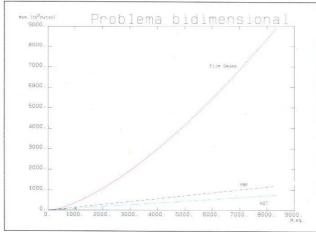


Fig. 2-Tempode CPU em função do número de equações.





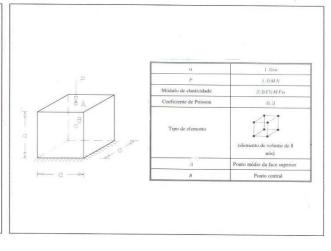


Fig. 4- Dados correspondentes a oproblematri dimensional.

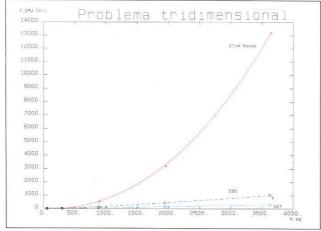


Fig.5-TempodeCPUemfunçãodonúmerode equações.

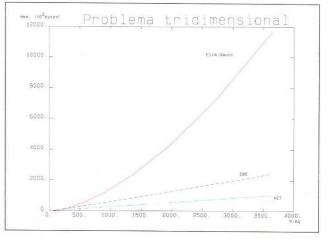


Fig. 6-Mem'oriane cess'aria em função do n'umero de equações. [eq.]