



UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
ESCOLA DE MINAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL



*PARALELIZAÇÃO DE ALGORITMOS MEC VIA
SUBESTRUTURAÇÃO BASEADA EM SOLVERS ITERATIVOS –
APLICAÇÃO A PROBLEMAS 3D ESCALARES E VETORIAIS*

Por

CLEBERSON DORS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA CIVIL

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: ESTRUTURAS METÁLICAS

Orientador: PROFESSOR DR. -ING. FRANCISCO CÉLIO DE ARAÚJO

OURO PRETO
Março/2002

UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO – ESCOLA DE MINAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

**PARALELIZAÇÃO DE ALGORITMOS MEC VIA
SUBESTRUTURAÇÃO BASEADA EM SOLVERS
ITERATIVOS – APLICAÇÃO A PROBLEMAS 3D
ESCALARES E VETORIAIS**

AUTOR: Cleberson Dors

ORIENTADOR: Professor Francisco Célio de Araújo

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Departamento de Engenharia Civil da Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto, como parte integrante dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil, área de concentração: Estruturas Metálicas.

**PARALELIZAÇÃO DE ALGORITMOS MEC VIA
SUBESTRUTURAÇÃO BASEADA EM SOLVERS
ITERATIVOS – APLICAÇÃO A PROBLEMAS 3D
ESCALARES E VETORIAIS**

AUTOR: CLEBERSON DORS

Esta dissertação foi apresentada em seção pública e aprovada em 28 de março de 2002, pela Banca Examinadora composta pelos seguintes membros:

Professor Dr. –Ing. Francisco Célio de Araújo (UFOP)
Orientador

Professor Dr. Ricardo Azoubel da Mota Silveira (UFOP)

Professor Dr. Marcílio Sousa da Rocha Freitas (UFOP)

Professor Ph. D. Webe João Mansur (UFRJ)

DEDICATÓRIA

Ao meu bom Deus que esteve, está e sempre estará presente em minha vida, abençoando e guiando meus caminhos para que sempre plante boas sementes e colha saborosos frutos. A ele que me da força, coragem e perseverança para superar todas as barreiras.

À minha querida e amada família, por tudo o que representa em minha vida. Não existem palavras que possam expressar a importância de meus pais, irmãos e familiares, pois moram em meu coração.

Aos meus eternos amigos, que sempre estarão comigo aonde quer que eu esteja.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador Francisco Célio de Araújo, pela amizade e pelo constante e exaustivo empenho em me guiar durante todo o processo de pesquisa, ensinando-me lições tanto para o presente trabalho, quanto para a vida.

À Universidade Federal de Ouro Preto, funcionários e professores ligados ao curso de mestrado em Engenharia Civil, pela oportunidade de realizar o mesmo, bem como pelos consequentes conhecimentos adquiridos e crescimento pessoal.

Aos prezados colegas de curso que fazem parte das boas lembranças desta trajetória e que, por sua amizade, conquistaram o título de “sempre amigos”.

Aos professores e amigos Roberto Dalledone Machado, Jorge Luiz Milek e Sérgio Scheer, que me deram crédito e incentivo para chegar ao mestrado.

À minha família e aos meus amigos, que sempre me apoiaram em todos os momentos dessa jornada.

RESUMO

Neste trabalho, são apresentados novos desenvolvimentos de pesquisa relacionados com algoritmos de acoplamento BE/BE, utilizados na análise de problemas 3D estáticos e tempo-harmônicos. Os algoritmos são derivados considerando-se diferentes solvers iterativos, e a idéia principal dos mesmos é trabalhar com a matriz esparsa global do sistema acoplado, porém sem levar em conta qualquer dos grandes blocos de zeros associados com os nós desacoplados das diferentes sub-regiões. O uso de solvers iterativos torna possível armazenar e manipular somente blocos de coeficientes não nulos das matrizes, durante o processo de análise. Eficientes solvers pré-condicionados baseados nos métodos de Lanczos, Gradiente Bi-conjugado (BI-CG) e Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES) são usados neste trabalho, para derivar os algoritmos de acoplamento BE/BE. Uma descrição da formulação destes solvers, que são completamente gerais e podem ser aplicados a qualquer sistema de equações não-singular e não hermitiano, é apresentada.

A performance dos algoritmos é verificada através da resolução de alguns problemas. São apresentados nos resultados do trabalho, parâmetros importantes para avaliar a eficiência dos algoritmos, como tempos de CPU, esparsidade matricial e precisão das respostas obtidas.

Implementa-se também um algoritmo paralelo, a partir da estratégia de acoplamento formulada, verificando-se sua performance através de parâmetros de eficiência convenientes.

ABSTRACT

In this work, new developments in research concerning the use of BE/BE coupling algorithms for solving 3D time-harmonic problems are reported. The algorithms are derived by considering different iterative solvers, and their chief idea is to work with the global sparse matrix of the coupled system, however without taking into account any of the great deal of zero blocks associated with the non-coupled nodes of different subregions. The use of iterative solvers makes possible, that only the block matrices with non-zero coefficients be stored and manipulated during the analysis process. The efficient preconditioned iterative solvers based on the Lanczos, BI-Conjugate Gradient (BI-CG) and Generalized Minimal Residual (GMRES) methods are used in this work to derive the BE/BE coupling algorithms. A description of the formulation of these solvers, which are completely general and can be applied to any non-singular, non-hermitian systems of equations, is provided.

The performance of the algorithms is verified by solving some problems. Important parameters for estimating the efficiency of the algorithms as required CPU times, matrix sparsity, and accuracy of the obtained responses are presented in the results of the work.

It is also implemented a parallel algorithm, starting from the BE/BE coupling algorithm formulated, being verified its performance through convenient efficiency parameters.

SUMÁRIO

RESUMO	VI
ABSTRACT	VII
LISTA DE FIGURAS	XI
LISTA DE TABELAS	XIV
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 – FORMULAÇÕES DO MEC	5
2.1. INTRODUÇÃO	5
2.2. REPRESENTAÇÕES INTEGRAIS DE CONTORNO	7
2.3. ALGEBRIZAÇÃO VIA ELEMENTOS DE CONTORNO	10
2.3.1. Integração espacial	14
2.4. FLUXOGRAMA – ASPECTO GERAL	18
2.4.1. Descrição dos módulos	19
2.4.1.1. Alocação de variáveis e entrada dos dados do sistema	19
2.4.1.2. Módulo I	19
2.4.1.3. Módulos II e III	20
CAPÍTULO 3 – SOLVERS DE KRYLOV	23
3.1. INTRODUÇÃO	23
3.2. SOLVERS DE KRYLOV	24
3.2.1. Definição do Subespaço de Krylov	24
3.2.2. Base ortonormal para o Subespaço de Krylov	24
3.2.3. Métodos iterativos básicos	26
3.3. ALGORITMO GMRES	29

3.3.1. Processo de restart	32
3.4. ALGORITMO DE LANCZOS.....	32
3.5. ALGORITMO DO GRADIENTE BI-CONJUGADO	37
3.6. CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA	39
3.7. ELIMINAÇÃO DE LINHAS/COLUNAS	40
3.8. ESCALONAMENTO	41
CAPÍTULO 4 – ACOPLAMENTO EC/EC	44
4.1. INTRODUÇÃO	44
4.2. FORMULAÇÕES DE ACOPLAMENTO GENÉRICO.....	45
4.3. PESQUISA DE NÓS DE ACOPLAMENTO	51
4.3.1. Pesquisa das condições de acoplamento.....	53
4.3.2. Pesquisa das condições de continuidade.....	55
4.3.2.1. Continuidade na interface	55
4.3.2.2. Continuidade no contorno.....	63
4.4. RESOLUÇÃO DO SISTEMA ACOPLADO.....	66
4.4.1. Transferência entre sub-regiões	66
4.4.2. Operações de multiplicação	67
4.5. ESPARSIDADE DO SISTEMA	69
CAPÍTULO 5 – PARALELIZAÇÃO	70
5.1. INTRODUÇÃO	70
5.2. CONCEITO DE PARALELIZAÇÃO.....	71
5.3. ESQUEMA MASTER-SLAVE.....	73
5.3.1. Programa ‘master’.....	74
5.3.2. Programa ‘slave’	74
5.4. DEFINIÇÕES	75
5.4.1. Speedup (S).....	75
5.4.2. Eficiência (E)	75
5.4.2. Granularidade (G).....	76
5.5. SOFTWARE DE SIMULAÇÃO PVM.....	76
5.5. DESCRIÇÃO DO CLUSTER	77

CAPÍTULO 6 – APLICAÇÕES	78
6.1. INTRODUÇÃO	78
6.2. PROBLEMA 1 - TRANSFERÊNCIA DE CALOR.....	79
6.2.1. Objetivo	79
6.2.2. Modelo numérico proposto	79
6.2.3. Resultados	82
6.3. PROBLEMA 2 - BARRAGEM IMPERMEÁVEL COM CORTINA DE ESTACAS, SOBRE SOLO ISOTRÓPICO PERMEÁVEL.....	83
6.3.1. Objetivo	83
6.3.2. Modelo numérico proposto	84
6.3.3. Resultados	86
6.4. PROBLEMA 3 - INTERAÇÃO SOLO-ESTRUTURA (ELASTOSTÁTICA)	88
6.4.1. Objetivo	88
6.4.2. Modelo numérico proposto	90
6.4.3. Resultados	92
6.5. PROBLEMA 4 - INTERAÇÃO SOLO-ESTRUTURA (ELASTODINÂMICA) ..	95
6.5.1. Objetivo	95
6.5.2. Modelo numérico proposto	96
6.5.3. Resultados	97
6.6. PROBLEMA 5 - VIGA SUBMETIDA A CARREGAMENTO DINÂMICO	103
6.6.1. Objetivo	103
6.6.2. Modelo numérico proposto	104
6.6.3. Resultados	106
6.7. PROBLEMA 6 - INTERAÇÃO SOLO-ESTRUTURA (ELASTODINÂMICA) ..	107
6.7.1. Objetivo	107
6.7.2. Modelo numérico proposto	107
6.7.3. Resultados	109
CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES	113
7.1. CONCLUSÕES	113
7.2. ASPECTOS FUTUROS	116

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	117
LIVROS E TESES.....	117
ARTIGOS.....	120
ANEXO I	123
I.1. DETERMINAÇÃO DAS CONTINUIDADES DO GRUPO DE NÓS (NICO)	124
I.2. FIXAÇÃO DOS NÓS ISOLADOS.....	126
I.3. REALOCAÇÃO GERAL DAS INCÓGNITAS.....	127

LISTA DE FIGURAS

CAPÍTULO 2

FIGURA 2.1 – Elementos de contorno típicos	11
FIGURA 2.2 – Subelementos e processo de triangularização	15
FIGURA 2.3 – Fluxograma do programa MEC proposto	18
FIGURA 2.4 – Esquema do módulo I	20
FIGURA 2.5 – Esquema do módulo II	21
FIGURA 2.6 – Esquema do módulo III.....	21

CAPÍTULO 3

FIGURA 3.1 – k-ésima iteração \underline{x}_k com o erro associado $\underline{\epsilon}_k$	30
---	----

CAPÍTULO 4

FIGURA 4.1 – Corpo com sub-regiões	45
FIGURA 4.2 – Matriz do sistema acoplado	50
FIGURA 4.3 – Problema genérico para validação de pesquisa.....	52
FIGURA 4.4 – Elementos acoplados.....	55
FIGURA 4.5 – Grupo de nós pertencentes ao nicho superior	58
FIGURA 4.6 – Grupo de incógnitas do nicho	59
FIGURA 4.7 – Alocação inicial de incógnitas	61
FIGURA 4.8 – Fixação dos nós isolados.....	62
FIGURA 4.9 – Realocação geral de incógnitas.....	63
FIGURA 4.10 – Contorno contendo prescrição da variável \mathbf{u}	64

CAPÍTULO 5

FIGURA 5.1 – Configuração padrão para paralelização – “cluster”	71
FIGURA 5.2 – Fluxograma da subdivisão de domínios para acoplamento EC/EC	72
FIGURA 5.3 – Fluxograma da subdivisão de domínios para EC/EF	73

CAPÍTULO 6

FIGURA 6.1 – Visão geral do problema	79
FIGURA 6.2 – Detalhe das diversas configurações implementadas	81
FIGURA 6.3 – Locação dos pontos internos (exemplo)	83
FIGURA 6.4 – Visão geral do problema	85
FIGURA 6.5 – Detalhe da malha utilizada	85
FIGURA 6.6 – Linhas equipotenciais e distribuição de fluxo.....	86
FIGURA 6.7 – Comparação com a solução analítica	86
FIGURA 6.8 – Número de iterações para os diversos solvers	87
FIGURA 6.9 – Tempo de processamento dos diversos solvers	87
FIGURA 6.10 – Distribuição dos tempos de processamento	87
FIGURA 6.11 – Tensão no solo para placas rígidas.....	89
FIGURA 6.12 – Visão geral do problema	90
FIGURA 6.13 – Detalhe da malha utilizada.....	91
FIGURA 6.14 – Bulbo de tensões para o plano de simetria.....	92
FIGURA 6.15 – Número de iterações para os solvers iterativos.....	93
FIGURA 6.16 – Tempo de CPU dos solvers iterativos.....	93
FIGURA 6.17 – Distribuição dos tempos de análise para $E_f/E_s = 1$	93
FIGURA 6.18 – Comparação da fundação encostada com a homogênea	94
FIGURA 6.19 – Carregamento harmônico aplicado	96
FIGURA 6.20 – Amplitude dos deslocamentos verticais – fundação encostada	98
FIGURA 6.21 – Amplitude dos deslocamentos verticais – fundação embutida (enterrada).....	99
FIGURA 6.22 – Número de iterações para os solvers iterativos.....	100
FIGURA 6.23 – Tempo de CPU dos solvers iterativos.....	101
FIGURA 6.24 – Distribuição dos tempos de análise para $E_f/E_s = 1$	102
FIGURA 6.25 – Visão geral do problema	103
FIGURA 6.26 – Geometria da sub-região	105
FIGURA 6.27 – Detalhe da malha padronizada para cada sub-região.....	105
FIGURA 6.28 – Eficiência do algoritmo paralelo	106
FIGURA 6.29 – Visão geral do problema	108

FIGURA 6.30 – Detalhe da malha utilizada.....	108
FIGURA 6.31 – Deslocamentos nas verticais das fundações.....	110
FIGURA 6.32 – Deslocamento na vertical do ponto médio entre as fundações	111
FIGURA 6.33 – Número de iterações para os solvers iterativos.....	112
FIGURA 6.34 – Tempo de CPU para os solvers iterativos	112
FIGURA 6.35 – Distribuição dos tempos de processamento	112

ANEXO I

FIGURA I.1 – Grupo de nós pertencentes ao nicho central	123
FIGURA I.2 – Alocação inicial das incógnitas	126
FIGURA I.3 – Fixação dos nós isolados	127
FIGURA I.4 – Realocação geral das incógnitas	128

LISTA DE TABELAS

CAPÍTULO 2

TABELA 2.1 – Descrição das rotinas do módulo I.....	20
TABELA 2.2 – Rotinas dos módulos II e III.....	22

CAPÍTULO 4

TABELA 4.1 – Grupo de nós envolvidos em uma continuidade.....	57
TABELA 4.2 – Continuidade obtida no nicho.....	60
TABELA 4.3 – Conjuntos de nós isolados.....	61
TABELA 4.4 – Valores da variável de continuidade - <i>icont</i>	64
TABELA 4.5 – Valores das variáveis de acoplamento (continuidade de contorno).....	65

CAPÍTULO 5

TABELA 5.1 – Descrição das características do cluster.....	77
--	----

CAPÍTULO 6

TABELA 6.1 – Comparação entre resultados numéricos e solução analítica.....	82
TABELA 6.2 – Comparação entre resultados numéricos e solução analítica.....	94
TABELA 6.3 – Eficiência do esquema paralelo.....	103
TABELA 6.4 – Comparação entre solução numérica e analítica.....	106
TABELA 6.5 – Eficiência do esquema paralelo.....	109

ANEXO I

TABELA I.1 – Grupo de nós envolvidos na continuidade.....	124
TABELA I.2 – Grupo de continuidades obtidas no nicho.....	125
TABELA I.3 – Conjuntos de nós isolados.....	126
TABELA I.4 – Valores da variável de continuidade - <i>icont</i>	129

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Na engenharia moderna, diversos problemas formulados não possuem uma solução analítica que possa representar adequadamente os mesmos, e/ou também possuem geometria muito complexa para seu equacionamento. Portanto, necessitam ser avaliados de maneira aproximada, porém satisfatória, através de métodos numéricos.

Diversos são os métodos existentes para a resolução de tais problemas e pode-se classificá-los, de forma geral, em dois tipos:

- Métodos de Domínio;
- Métodos de Contorno.

Os do primeiro tipo são aqueles formulados sobre o domínio do problema, e já foram largamente estudados pela comunidade científica, apresentando vasta implementação computacional. Como exemplo destes métodos pode-se citar o principal deles, chamado Método dos Elementos Finitos (MEF ou FEM) (Zienkiewicz, 1982; Zienkiewicz e Taylor, 1989; Bathe, 1996; Hughes, 2000; Cook, 2001), que é o mais difundido científica e comercialmente.

Os do segundo tipo são formulados sobre o contorno do problema, e são relativamente novos perante os anteriores. Dentre estes diversos métodos existentes, destacamos o Método dos Elementos de Contorno (daqui por diante nomeado de BEM ou MEC) que se constitui em uma técnica muito eficiente para a solução de ampla gama de problemas (Brebbia et al., 1984; Brebbia e Dominguez, 1987; Kane, 1992; Beer e Watson, 1992; Chen e Zhou, 1992; Hall, 1994; Banerjee, 1994; Bonnet, 1999).

Suas vantagens com relação ao MEF são:

- Na maior parte dos casos é possível modelar somente a superfície do problema, reduzindo substancialmente o tamanho do sistema resultante de equações algébricas;

- Já que as técnicas de quadratura numérica são diretamente aplicadas às equações integrais de contorno, as quais são uma solução exata para o problema disponível, altos níveis de precisão podem ser esperados;
- As soluções fundamentais singulares usadas na construção das equações integrais de contorno representam a condição de radiação, ou seja, para domínios abertos a resposta do problema depende apenas das fontes na região de análise (não existe reflexão provinda do infinito).

As principais desvantagens são:

- Embora o sistema algébrico de equações final seja compacto, forma uma matriz cheia e não simétrica;
- Não existem soluções fundamentais para todos os tipos de problemas, implicando na utilização de modelos simplificados ou de outros métodos numéricos;
- A matemática necessária nas equações integrais singulares, embora não difícil, tem um aspecto de novidade que pode ser inquietante para os engenheiros.

Tendo em vista estas características, percebe-se que todo estudo na área do BEM é viável e necessário para aperfeiçoar seus métodos e processos computacionais.

Para aplicar o Método dos Elementos de Contorno a problemas envolvendo materiais não homogêneos (homogêneos por partes), problemas de simulação de barreiras finas (com formulações padrão), fenômenos de fratura, contato, etc., torna-se conveniente o uso de técnicas de subestruturação.

Tais técnicas consistem em subdividir o domínio do problema em sub-regiões isoladas, considerando a equação integral de contorno para cada uma delas separadamente e, em seguida, aplicar as condições de acoplamento entre estas sub-regiões (condições de interface), para compor o equilíbrio completo do sistema.

Aspectos gerais sobre técnicas de subestruturação podem ser encontrados em livros de método dos elementos de contorno (Banerjee, 1994; Kane, 1992), e em uma série de artigos publicados nas últimas duas décadas (Crotty, 1982; Kane et al., 1990; Rigby e

Alliabadi, 1995; Bialecki et al., 1996; Ganguly et al., 1999). Ressalta-se que estes trabalhos adotam estratégias baseadas no uso de solvers diretos.

Para a resolução de problemas de grande porte, a capacidade de processamento torna-se de fundamental importância, devido ao tempo necessário para a realização das tarefas. Como uma máquina de grande porte, com diversos processadores e/ou memória compartilhada, pode apresentar um custo elevadíssimo, inviabilizando muitas vezes sua compra, uma alternativa mais econômica e viável é então a utilização de diversas máquinas menores trabalhando em paralelo. O termo paralelização surgiu então, para nomear este tipo de processamento realizado entre diversos computadores.

Muitos trabalhos na área de paralelização já foram desenvolvidos para formulações de elementos finitos (Zucchini, 2000; Mansur e Bulcão, 2001). Também em análises via elementos de contorno alguns trabalhos já foram desenvolvidos (Kamiya e Iwase, 1996, 1997; Hsiao et al., 2000).

Neste trabalho, objetiva-se o desenvolvimento de uma formulação de acoplamento genérico entre modelos de elementos de contorno (estratégia de subestruturação). A exemplo de trabalhos anteriores nesta área, acima citados, também será adotada aqui uma técnica direta de acoplamento, ou seja, uma técnica que consistirá no estabelecimento de uma matriz para o sistema global acoplado, na qual já se encontram incorporadas as condições de acoplamento. Além disto, mencionam-se as seguintes particularidades do algoritmo desenvolvido:

- Utilização de *solvers* iterativos para desenvolvimento do algoritmo de acoplamento;
- Tratamento implícito da matriz global do sistema;
- Recurso de paralelização.

A dissertação encontra-se estruturada como se mostra a seguir.

- No Capítulo 2, comentam-se aspectos básicos de formulações diretas de elementos de contorno para as classes de problemas tratados no âmbito da pesquisa, a saber, problemas estacionários de potencial e de elasticidade;

- No Capítulo 3 descrevem-se os esquemas iterativos (solvers iterativos) de resolução de sistemas algébricos de equações lineares, dando-se ênfase aos chamados solvers de Krylov (processos de aceleração polinomial);
- No Capítulo 4, apresenta-se a estratégia de acoplamento desenvolvida, detalhando-se todos os passos da pesquisa para a identificação das condições de acoplamento e procedimento de resolução implícita do respectivo sistema;
- A técnica de paralelização considerada e a definição de conceitos correlatos são abordadas no Capítulo 5;
- No Capítulo 6 apresenta-se uma série de aplicações visando validar os módulos computacionais desenvolvidos com base nas técnicas estudadas;
- Por fim, no Capítulo 7, tiram-se as principais conclusões da pesquisa, e também se comentam alternativas futuras para a continuação do trabalho.

CAPÍTULO 2 – FORMULAÇÕES DO MEC

2.1. INTRODUÇÃO

Estabelecido o sistema de equações diferenciais que descrevem a resposta de um dado problema físico, uma interessante alternativa que objetiva a geração de um modelo finito associado (algébrico) pode ser derivada tomando-se por base a correspondente formulação integral de contorno desse problema. Ao contrário de formulações de domínio, que também incluem a discretização do meio para a obtenção de soluções aproximadas, em formulações de contorno o sistema de equações integrais que descreve o problema é identicamente satisfeito em seu domínio de definição (Brebbia et al., 1984), havendo portanto, a necessidade de discretização apenas do contorno deste problema. Isso porque as funções de ponderação utilizadas no MEC são convenientemente escolhidas, de modo a satisfazer a equação de equilíbrio do problema no interior de seu domínio.

Em função da geometria do problema a ser discretizada, e também em consequência da verificação de condições de regularidade e outras particularidades de formulações integrais, várias são as vantagens que resultam de formulações de contorno. Entre outras, citam-se: facilidades para o desenvolvimento de geradores de malha, elevada precisão, sistemas de equações algébricas de ordem relativamente menor, adequação do procedimento para a simulação de domínios que se estendam ao infinito, representação de concentração de tensões, etc.

Nos últimos 20 anos, muitos foram os trabalhos de pesquisa que enfatizaram a aplicação do Método dos Elementos de Contorno (MEC) em diversas áreas da engenharia (Mansur, 1983; Brebbia et al., 1984; Manolis e Beskos, 1988; Banerjee, 1994; Araújo, 1994, Beskos, 1997; Bonnet, 1999), para problemas gerais, estacionários e transientes, lineares e não-lineares. Com a utilização do MEC como ferramenta de análise para uma série de problemas físicos, muitos foram os avanços alcançados, relacionados aos

aspectos de eficiência computacional de algoritmos fundamentados em formulações integrais de contorno. Assim, estudos voltados para o desenvolvimento de eficientes estratégias para a avaliação das integrais singulares envolvidas (Sladek, 1998; Mantic, 1994), e também para o tratamento dos sistemas algébricos resultantes (Araújo et al., 1990; Barra et al., 1992; Barra et al., 1993; Prasad et al., 1994), foram relativamente bem abordados para formulações MEC, nestas últimas décadas.

Neste capítulo apenas apresentam-se, de forma sucinta, as expressões mais importantes envolvidas na formulação dos tipos de problemas aqui tratados, e também se discutem alguns aspectos gerais relacionados com as estratégias de algebrização via elementos de contorno.

2.2. REPRESENTAÇÕES INTEGRAIS DE CONTORNO

Para se formular um problema de valor de contorno, ou seja, a representação integral de contorno de um fenômeno físico, parte-se inicialmente da equação que governa este fenômeno.

Pode-se então convertê-la para um problema de valor de contorno utilizando-se, por exemplo, relações de reciprocidade (Banerjee, 1994), de modo a obterem-se as seguintes expressões:

Para problemas de potencial,

$$\mathbf{c}(\xi)\mathbf{U}(\xi) + \int_{\Gamma} \mathbf{U}(\mathbf{x})\mathbf{P}^*(\xi, \mathbf{x})d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{U}^*(\xi, \mathbf{x})d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{P}(\xi)\mathbf{U}^*(\xi, \mathbf{x})d\Gamma \quad (2.1)$$

onde:

- \mathbf{x} e ξ são o ponto de campo e o ponto fonte respectivamente;
- \mathbf{c} é o termo livre da integral;
- $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ é o vetor de forças de corpo (forças de volume);
- $\mathbf{U}(\mathbf{x})$ e $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ são os vetores contendo as variáveis de contorno;
- $\mathbf{U}^*(\xi, \mathbf{x})$ e $\mathbf{P}^*(\xi, \mathbf{x})$ são as soluções fundamentais para problemas de potencial, dadas para o caso tridimensional por:

$$\mathbf{U}^*(\xi, \mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi k r} \text{ e } \mathbf{P}^*(\xi, \mathbf{x}) = \frac{r_i n_i}{4\pi r^3} \quad (2.2)$$

- k é a constante física (coeficiente de permeabilidade, etc.);
- r é o módulo do vetor raio (\mathbf{r}), que liga o ponto de campo ao ponto fonte;
- r_i e n_i são as componentes na direção i , do vetor raio e do vetor normal externo à superfície de contorno, respectivamente.

Para problemas elastostáticos,

$$\mathbf{c}_{ik}(\xi)\mathbf{U}_i(\xi) + \int_{\Gamma} \mathbf{U}_i(\mathbf{x})\mathbf{P}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x})d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{B}_i(\mathbf{x})\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x})d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{P}_i(\xi)\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x})d\Gamma \quad (2.3)$$

onde:

- \mathbf{x} e ξ são o ponto de campo e o ponto fonte respectivamente;
- \mathbf{c}_{ik} é o termo livre da integral;
- $\mathbf{B}_i(\mathbf{x})$ é o vetor de forças de corpo (forças de volume);
- $\mathbf{U}_i(\mathbf{x})$ e $\mathbf{P}_i(\mathbf{x})$ são os vetores contendo as variáveis de contorno;
- $\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x})$ e $\mathbf{P}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x})$ são as soluções fundamentais para problemas elastostáticos, dadas para o caso tridimensional por:

$$\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}) = \frac{(1+\nu)}{8\pi E(1-\nu)r} \left[(3-4\nu)\delta_{ik} + \frac{r_i r_k}{r^2} \right] \quad \text{e} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{P}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}) = -\frac{1}{8\pi(1-\nu)r^2} \left\{ \begin{array}{l} (1-2\nu) \left(n_k \frac{r_i}{r} - n_i \frac{r_k}{r} \right) + \\ \left[\frac{3r_i r_k}{r^2} + (1-2\nu)\delta_{ik} \right] \frac{r_k n_k}{r^2} \end{array} \right\}$$

- E e ν são as constantes físicas (módulo de elasticidade e coeficiente de Poisson, respectivamente);
- r é o módulo do vetor raio (\mathbf{r}), que liga o ponto de campo ao ponto fonte;
- r_i e n_i são as componentes na direção i , do vetor raio e do vetor normal externo à superfície de contorno, respectivamente;
- δ_{ik} é a função delta de Dirac.

E finalmente para problemas elastodinâmicos dependentes da frequência,

$$\mathbf{c}_{ik}(\xi)\mathbf{U}_i(\xi, \omega) + \int_{\Gamma} \mathbf{U}_i(\mathbf{x}, \omega)\mathbf{P}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}, \omega)\mathbf{d}\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{B}_i(\mathbf{x}, \omega)\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}, \omega)\mathbf{d}\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{P}_i(\xi, \omega)\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}, \omega)\mathbf{d}\Gamma \quad (2.5)$$

onde:

- \mathbf{x} e ξ são o ponto de campo e o ponto fonte respectivamente;
- \mathbf{c}_{ik} é o termo livre da integral;
- $\mathbf{B}_i(\mathbf{x}, \omega)$ é o vetor de forças de corpo (forças de volume);
- $\mathbf{U}_i(\mathbf{x}, \omega)$ e $\mathbf{P}_i(\mathbf{x}, \omega)$ são os vetores contendo as variáveis de contorno;
- $\mathbf{U}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}, \omega)$ e $\mathbf{P}_{ik}^*(\xi, \mathbf{x}, \omega)$ são as soluções fundamentais para problemas elastodinâmicos dependentes da frequência, dadas para o caso tridimensional por:

$$\mathbf{U}_{ik}^*(\mathbf{x}, \xi, \omega) = \frac{1}{4\pi\rho r} \left\{ (3r_i r_{,k} - \delta_{ik}) \left[\frac{1}{r^2\omega^2} \left(e^{\frac{i\omega r}{c_2}} - e^{\frac{i\omega r}{c_1}} \right) - \frac{\mathbf{i}}{r\omega} \left(\frac{1}{c_2} e^{\frac{i\omega r}{c_2}} - \frac{1}{c_1} e^{\frac{i\omega r}{c_1}} \right) \right] + r_i r_{,k} \left(\frac{1}{c_1^2} e^{\frac{i\omega r}{c_1}} - \frac{1}{c_2^2} e^{\frac{i\omega r}{c_2}} \right) + \delta_{ik} \left(\frac{1}{c_2^2} e^{\frac{i\omega r}{c_2}} \right) \right\}$$

e

$$\mathbf{P}_{ik}^*(\mathbf{x}, \xi, \omega) = \frac{n_m}{4\pi r^2} \left\{ -6c_2^2(5r_i r_{,k} r_{,m} - (\delta_{ik} r_{,m} + \delta_{km} r_{,i} + \delta_{mi} r_{,k})) \cdot \left[\frac{1}{r^2\omega^2} \left(e^{\frac{i\omega r}{c_2}} - e^{\frac{i\omega r}{c_1}} \right) - \frac{\mathbf{i}}{r\omega} \left(\frac{1}{c_2} e^{\frac{i\omega r}{c_2}} - \frac{1}{c_1} e^{\frac{i\omega r}{c_1}} \right) \right] + 2(6r_i r_{,k} r_{,m} - (\delta_{ik} r_{,m} + \delta_{km} r_{,i} + \delta_{mi} r_{,k})) \cdot \left(e^{\frac{i\omega r}{c_2}} - \frac{c_2^2}{c_1^2} e^{\frac{i\omega r}{c_1}} \right) - \frac{2i\omega}{c_2} r_i r_{,k} r_{,m} \cdot \left(e^{\frac{i\omega r}{c_2}} - \frac{c_2^3}{c_1^3} e^{\frac{i\omega r}{c_1}} \right) - r_{,k} \delta_{im} \cdot \left(1 - 2\frac{c_2^2}{c_1^2} \right) \cdot \left(1 - i\omega \frac{r}{c_1} \right) e^{\frac{i\omega r}{c_1}} - (\delta_{ik} r_{,m} + \delta_{km} r_{,i}) \cdot \left(1 - i\omega \frac{r}{c_2} \right) e^{\frac{i\omega r}{c_2}} \right\} \quad (2.6)$$

- c_1 e c_2 são as velocidades da onda de compressão e cisalhamento, respectivamente;
- ρ é a massa específica do material;
- r é o módulo do vetor raio (\mathbf{r}), que liga o ponto de campo ao ponto fonte;
- r_i e n_i são as componentes na direção i , do vetor raio e do vetor normal externo à superfície de contorno, respectivamente;
- δ_{ik} é a função delta de Dirac.

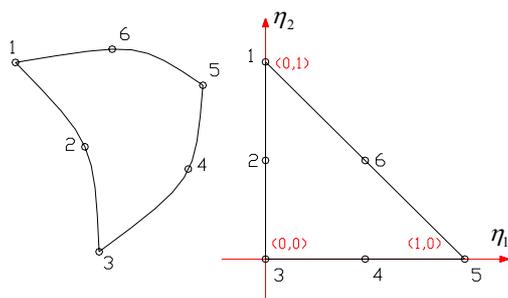
Com variáveis apresentando de forma geral, as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= \overline{\mathbf{U}}, \quad \text{se } \mathbf{x} \in \Gamma_1 \\ \text{e} & \\ \mathbf{P} &= \overline{\mathbf{P}}, \quad \text{se } \mathbf{x} \in \Gamma_2 \end{aligned} \tag{2.7}$$

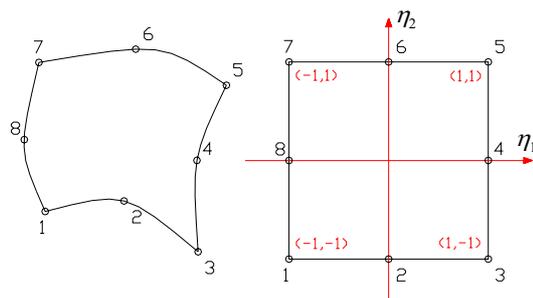
Obtém-se assim a solução de contorno completa para cada um dos problemas físicos citados acima, através da resolução das equações integrais apresentadas, considerando-se as respectivas soluções fundamentais (válidas para materiais homogêneos, isotrópicos e lineares) e as condições de contorno aplicadas.

2.3. ALGEBRIZAÇÃO VIA ELEMENTOS DE CONTORNO

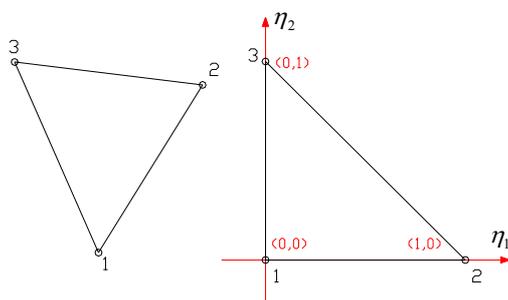
Para aplicar o Método dos Elementos de Contorno em problemas de engenharia, torna-se necessário discretizar o contorno destes problemas em elementos, interpolando as variáveis de campo e geometria ao longo destes elementos, a partir de valores nodais nos mesmos. Uma das formas de realizar esta discretização é através do uso de elementos isoparamétricos, para os quais as funções de forma necessárias à interpolação das variáveis de campo e geometria no interior do elemento, são as mesmas (estes elementos apresentam resultados satisfatórios, sendo que exemplos dos mesmos são mostrados nas Figuras (2.1a), (2.1b), (2.1c) e (2.1d)).



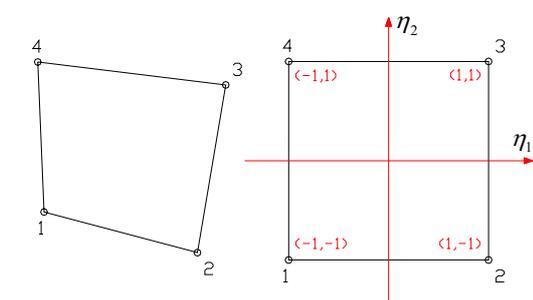
(a) triangular – 6 nós.



(b) quadrangular – 8 nós.



(a) triangular – 3 nós.



(b) quadrangular – 4 nós.

Figura 2.1. Elementos de contorno típicos.

Como mencionado, as variáveis de campo e geométricas de um elemento de contorno, podem ser escritas em função de seus valores nodais, do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}_i &= \mathbf{N}_\alpha(\eta_k) \mathbf{X}_{i\alpha} \\
 \mathbf{u}_i &= \mathbf{N}_\alpha(\eta_k) \mathbf{U}_{i\alpha} \\
 \mathbf{p}_i &= \mathbf{N}_\alpha(\eta_k) \mathbf{P}_{i\alpha}
 \end{aligned}
 \tag{2.8}$$

onde:

- \mathbf{x}_i , \mathbf{u}_i e \mathbf{p}_i são, respectivamente, as coordenadas cartesianas, componentes de deslocamentos e forças de superfície no interior de um elemento;
- \mathbf{X}_i , \mathbf{U}_i e \mathbf{P}_i seus valores nodais;
- \mathbf{N}_α é a α -ésima função de forma do elemento, definida em função das coordenadas naturais η_k deste.

Observa-se que estas funções de forma são as mesmas utilizadas na formulação de Método dos Elementos Finitos, assim para o caso do elemento triangular de seis nós, tem-se

$$\mathbf{N}_\alpha = \begin{cases} \eta_\alpha(2\eta_\alpha - 1) & , \text{ se } \alpha = 1, 2, 3 \\ 4\eta_\beta\eta_\gamma & , \text{ se } \alpha = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (2.9)$$

onde:

- $\beta = \alpha - 3$;
- $\gamma = \alpha - 2$;
- η_1 e η_2 são as coordenadas naturais;
- $\eta_3 = 1 - (\eta_1 + \eta_2)$;
- $\eta_4 = \eta_1$.

Para o elemento quadrangular de oito nós

$$\mathbf{N}_\alpha = \begin{cases} 0,25(1 + \xi_0)(1 + \eta_0)(\xi_0 + \eta_0 - 1) & , \text{ se } \alpha = 1, 3, 5, 7 \\ 0,50(1 + \eta_1^2)(1 - \eta_0) & , \text{ se } \alpha = 2, 6 \\ 0,50(1 + \xi_0^2)(1 - \eta_2^2) & , \text{ se } \alpha = 4, 8 \end{cases} \quad (2.10)$$

onde:

- η_1 e η_2 são as coordenadas naturais;
- $\xi_0 = \eta_1\eta_{1\alpha}$ e $\eta_0 = \eta_2\eta_{2\alpha}$;
- $\eta_{1\alpha}$ e $\eta_{2\alpha}$ são, respectivamente, as coordenadas η_1 e η_2 do nó α .

Para o elemento triangular de três nós e o quadrangular de quatro nós tem-se as seguintes funções de forma:

$$\mathbf{N}_\alpha = \eta_\alpha \quad , \quad \text{se } \alpha = 1, 2, 3 \quad (2.11)$$

e

$$\mathbf{N}_\alpha = 0,25(1 + \xi_0)(1 + \eta_0) \quad , \quad \text{se } \alpha = 1,2,3,4 \quad (2.12)$$

Substituindo as Equações (2.8) em cada uma das Equações (2.1), (2.3) e (2.5) obtém-se de forma genérica:

$$\mathbf{c}_{ik} \mathbf{u}_i(\xi) + \sum_{j=1}^{ne} \left(\int_{\Gamma_j} \mathbf{P}_{ik}^*(\mathbf{x}(\eta), \xi) \mathbf{N}_\alpha(\eta) d\Gamma(\mathbf{x}(\eta)) \right) \mathbf{U}_{i\alpha}^n = \sum_{j=1}^{ne} \left(\int_{\Gamma_j} \mathbf{U}_{ik}^*(\mathbf{x}(\eta), \xi) \mathbf{N}_\alpha(\eta) d\Gamma(\mathbf{x}(\eta)) \right) \mathbf{P}_{i\alpha}^n \quad (2.13)$$

onde:

- ne é o número total de elementos;
- os termos de domínio foram negligenciados.

Observa-se que a contribuição da força de corpo foi omitida por simplificação, sendo que em muitos casos, procedimentos alternativos são utilizados para transformar esta contribuição em uma integral de superfície.

Aplicando-se a Equação integral (2.13) para cada nó funcional do contorno, obtém-se um sistema algébrico que pode ser compactado na seguinte forma matricial

$$\underline{\mathbf{H}} \underline{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{G}} \underline{\mathbf{P}} \quad (2.14)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$ são as matrizes (não hermitianas) dos coeficientes envolvendo $\underline{\mathbf{P}}^*$ e $\underline{\mathbf{U}}^*$, respectivamente;
- $\underline{\mathbf{U}}$ e $\underline{\mathbf{P}}$ são os vetores de deslocamento e força nodais.

Aplicando-se as condições de contorno (2.7) com as conseqüentes trocas das colunas entre $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$ de forma a terem-se todas as incógnitas do lado esquerdo, pode-se escrever o problema acima como:

$$\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{f}} \quad (2.15)$$

Onde:

- $\underline{\mathbf{A}}$ é a matriz cheia e não-simétrica dos coeficientes de influência, obtida a partir de $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$;
- $\underline{\mathbf{x}}$ é o vetor das variáveis desconhecidas;
- $\underline{\mathbf{f}}$ o vetor excitação obtido pelo produto entre a matriz $\underline{\mathbf{G}}$, possivelmente modificada pelas trocas de colunas, e o vetor com os valores prescritos das variáveis.

As integrais da Equação (2.14) são avaliadas numericamente utilizando-se quadratura de Gauss com as opções de subdomínios de integração para o caso de integrais não singulares - onde $\zeta \neq \mathbf{x}$, e concentração de nós em torno do ponto singular, para as integrais singulares da integral no segundo membro da equação. Os termos singulares da integral no primeiro membro da equação, juntamente com o primeiro termo $\mathbf{c}(\zeta)$, são calculados juntos, com a técnica de deslocamento de corpo rígido, conforme é apresentado no próximo tópico.

2.3.1. Integração espacial

Para obter os coeficientes das matrizes em (2.14) utilizam-se as integrais de superfície ou volume. Por se tratarem de integrais de difícil solução analítica, faz-se necessário a utilização de processos numéricos para a sua determinação.

Em elementos de contorno existem, basicamente, quatro tipos de integrais a avaliar:

- integrais não-singulares;

- integrais quasi-singulares;
- integrais fracamente singulares;
- integrais fortemente singulares.

No primeiro caso, o ponto fonte ξ não está sobre o elemento a ser integrado, o que possibilita a utilização do processo de quadratura de Gauss sem maiores problemas (Banerjee, 1994). Portanto, a convergência se dá através do aumento dos pontos de integração. Também, para aumentar a precisão nos resultados (principalmente em problemas elastodinâmicos dependentes do tempo; Araújo, 1994; Wu, 2000) os elementos são divididos em vários subelementos que, por sua vez, são mapeados em um sistema local de coordenadas, conforme Figura (2.2).

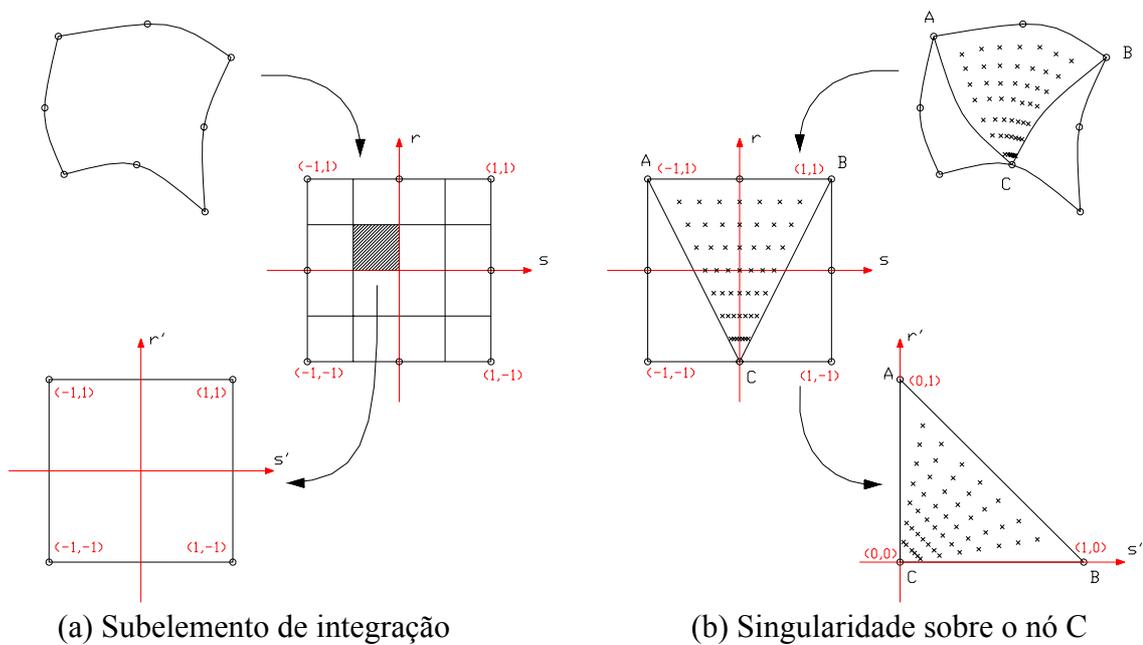


Figura 2.2. Subelementos e processo de triangularização.

Assim, as integrais dadas em (2.13) podem ser obtidas por

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_j} \mathbf{P}_{ik}^*(\mathbf{x}(\eta), \zeta) \mathbf{N}_\alpha(\eta) d\Gamma(\mathbf{x}(\eta)) &= \sum_{k=1}^{nsgk} \sum_{l=1}^{nsgl} \mathbf{P}_{ik}^*(\mathbf{x}(\eta^{kl}), \zeta) \mathbf{N}_\alpha(\eta^{kl}) \mathbf{J}_\Gamma(\eta^{kl}) w^k w^l \\
\int_{\Gamma_j} \mathbf{U}_{ik}^*(\mathbf{x}(\eta), \xi) \mathbf{N}_\alpha(\eta) d\Gamma(\mathbf{x}(\eta)) &= \sum_{k=1}^{nsgk} \sum_{l=1}^{nsgl} \mathbf{U}_{ik}^*(\mathbf{x}(\eta^{kl}), \zeta) \mathbf{N}_\alpha(\eta^{kl}) \mathbf{J}_\Gamma(\eta^{kl}) w^k w^l
\end{aligned} \tag{2.16}$$

onde:

- w^k, w^l e η^{kl} são os pesos e pontos de integração das direções η_1 e η_2 ;
- \mathbf{J}_Γ é a matriz Jacobiana dada por

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_\Gamma(\eta^{kl}) &= \left[\left(\frac{\partial \mathbf{x}_1}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_3}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_2}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_3}{\partial \mathbf{s}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \mathbf{x}_3}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_1}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_1}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_3}{\partial \mathbf{s}} \right)^2 + \right. \\
&\quad \left. \left(\frac{\partial \mathbf{x}_2}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{x}_1}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \mathbf{x}_1}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{x}_2}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{2.17}$$

O segundo caso (integrais quasi-singulares) é um caso particular do primeiro, onde $r \rightarrow 0$ implicando em uma maior imprecisão na integração. Para resolver este problema, poder-se-ia aumentar o número de pontos de integração de acordo com o valor de r ; porém no presente trabalho também será aplicado o mesmo processo de quadratura de Gauss padrão, apresentado no primeiro caso, para a avaliação destas situações.

No terceiro caso (ξ coincide com \mathbf{x} ($r = 0$), mas a singularidade é da ordem r^{-1} quando $r \rightarrow 0$), que está presente na integração dos deslocamentos fundamentais, a avaliação numérica pode ser feita também através da quadratura de Gauss. Porém, diferentemente do caso anterior, para aumentar a precisão do resultado, utiliza-se a transformação de coordenadas polares triangulares (Mang et al., 1985; Araújo, 1994; Wu, 2000), que proporciona concentração de pontos de integração nas proximidades dos pontos singulares (veja Figura (2.2)).

No quarto caso (integrais fortemente singulares onde ξ coincide com \mathbf{x} ($r = 0$), mas a singularidade é da ordem r^{-2} quando $r \rightarrow 0$), que está presente na integração das forças

de superfície fundamentais, estas são obtidas implicitamente a partir do critério de corpo rígido para problemas estáticos. Tal critério se baseia no fato de que, para deslocamento de corpo rígido em um corpo, não existem tensões no mesmo, assim:

$$\mathbf{c}_{ij}(\xi) + \mathbf{H}_{ii} = \begin{cases} -\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \text{st} \mathbf{H}_{ik}, & \text{regiões finitas} \\ 1 - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \text{st} \mathbf{H}_{ik}, & \text{regiões infinitas} \end{cases} \quad (2.18)$$

onde:

- $\text{st} \mathbf{H}_{ik}$ é a força de superfície fundamental dada, por exemplo, para o caso elastostático:

$$\text{st} \mathbf{H}_{ik}(\mathbf{x}, \xi) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)r^2} \left\{ [(1-2\nu)\delta_{ik} + 3r_i r_k] r_n - (1-2\nu)(r_i n_k - r_k n_i) \right\} \quad (2.19)$$

Por sua vez o núcleo da dinâmica, que consiste na solução fundamental elastodinâmica, pode ser obtido através da expressão

$$\mathbf{c}_{ij}(\xi) + {}^{\text{dyn}} \mathbf{H}_{ii} = \mathbf{c}_{ij}(\xi) + \text{st} \mathbf{H}_{ii} + \sum_{e=1}^{nse} \int_{\tau_e} ({}^{\text{dyn}} \mathbf{P}_{ik}^* - \text{st} \mathbf{P}_{ik}^*) \cdot \mathbf{N}(\xi) d\tau \quad (2.20)$$

onde:

- nse é o número de elementos adjacentes ao ponto singular ξ ,
- Maiores detalhes da obtenção de (2.20) podem ser encontrados em Manolis e Beskos (1988).

2.4. FLUXOGRAMA – ASPECTO GERAL

Nesta seção é dada uma breve explanação sobre a estrutura do programa já existente, que foi utilizada como plataforma para o desenvolvimento e implementação de novas rotinas numéricas.

Tal software está baseado na linguagem de programação Fortran (Nyhoff e Leestma, 1996; Chapman, 1997) e dedica-se à simulação numérica de problemas gerais de engenharia, através da formulação de elementos de contorno.

Uma descrição sucinta das rotinas empregadas é apresentada na seqüência, sendo que o fluxograma geral do programa pode ser visto na Figura (2.3).

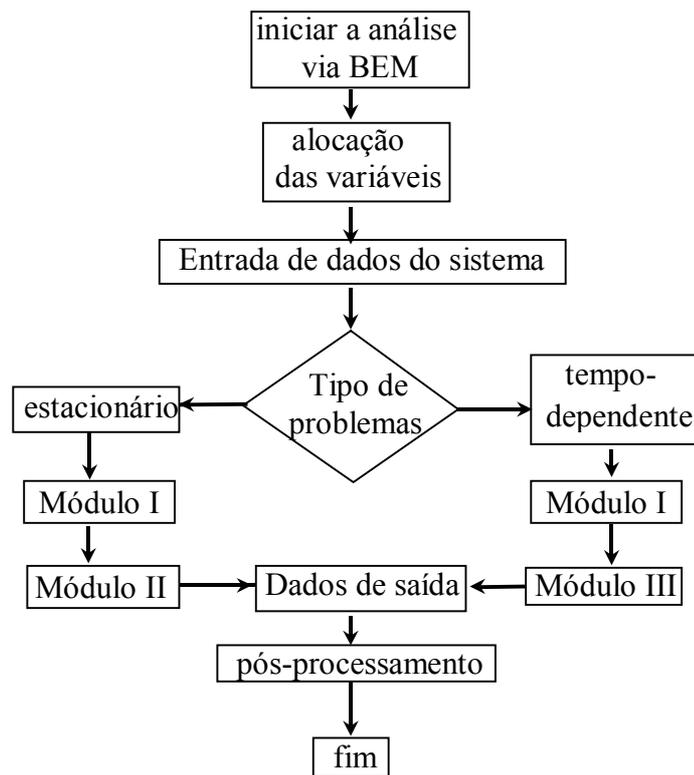


Figura 2.3. Fluxograma do programa MEC proposto.

2.4.1. Descrição dos módulos

2.4.1.1. Alocação de variáveis e entrada dos dados do sistema

Nestes módulos, dados gerais especificando o tipo de problema e suas características geométricas e físicas são fornecidos. O programa é organizado de tal forma que primeiro busca-se armazenar as matrizes de elementos de contorno na memória de acesso randômico (RAM) avaliável, sendo que se esta memória for insuficiente, o disco rígido é usado. Utiliza-se o esquema de vetor de trabalho com dois vetores distintos, um para armazenar variáveis inteiras e outro para as de precisão dupla.

2.4.1.2. Módulo I

Este módulo realiza integrações numéricas. As coordenadas de posição e correspondentes valores de funções de forma, com suas derivadas, são avaliados e armazenados. As posições dos pontos de integração para elementos singulares são determinadas de acordo com o esquema sugerido por Li-Han-Mang (transformação de coordenadas polares triangulares, Mang et al., 1985; Araújo, 1994; Wu, 2000). Em elementos não singulares o processo padrão de Gauss-Legendre é utilizado. Em ambos os casos, singular e não singular, é adicionalmente possível subdividir os elementos de contorno em subelementos de integração. Desta forma a precisão da integração numérica é substancialmente melhorada; de fato, este procedimento é essencial para integrar precisamente os núcleos dependentes do tempo aqui considerados, enquanto que para análise estacionária, deve ser usado somente para integrais quase singulares. O esquema deste módulo é mostrado na Figura (2.4), sendo também visto subsequente na Tabela (2.1), que contém a descrição das rotinas envolvidas.

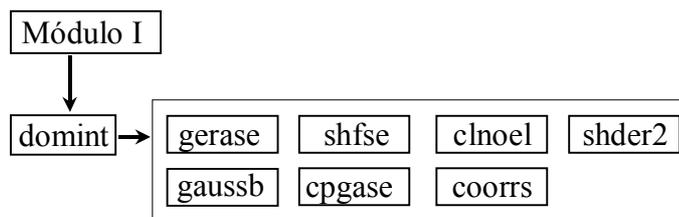


Figura 2.4. Esquema do módulo I.

Tabela 2.1. Descrição das rotinas do módulo I.

<u>Rotina</u>	<u>Descrição</u>
domint	controla as rotinas destinadas a preparar o domínio de integração numérica;
gerase	conduz a geração da malha de ordem n dos subelementos de integração;
gaussb	fornece as posições do ponto de integração e os correspondentes fatores de ponderação;
shfse	avalia as funções de forma bidimensionais nos pontos de Gauss dos subelementos de integração;
cpgase	avalia as coordenadas (η_1, η_2) dos pontos de Gauss dos subelementos de integração;
cnoel	avalia as coordenadas (r,s) dos nós dos elementos;
coorrs	avalia as coordenadas (r,s) de todos os pontos de integração sob eventual consideração de subelementos de integração e transformação de coordenadas triangular polar;
shder2	avalia as funções de forma e correspondentes derivadas em todos os pontos de integração;

2.4.1.3. Módulos II e III:

Nestes módulos o sistema global de equações algébricas é montado e subsequenteemente resolvido. Os esquemas correspondendo aos módulos II (referido aos casos estacionários) e III (referido aos casos transientes) são apresentados, respectivamente, nas Figuras (2.5) e (2.6), e as rotinas associadas são descritas na Tabela (2.2).

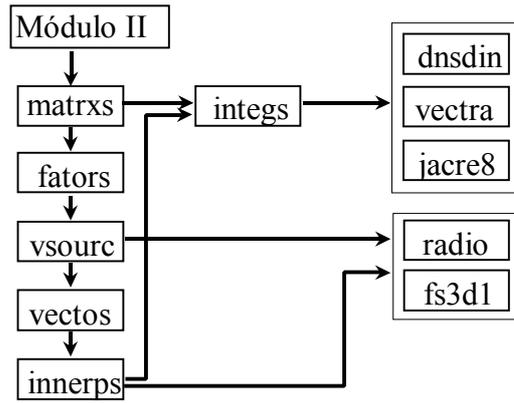


Figura 2.5. Esquema do módulo II.

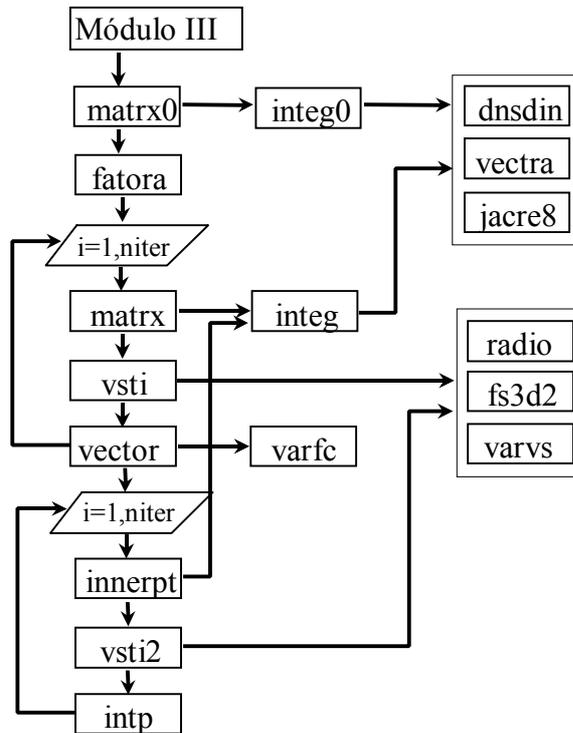


Figura 2.6. Esquema do módulo III.

Tabela 2.2. Rotinas dos módulos II e III.

<u>Rotina</u>	<u>Descrição</u>
matrxs	constrói as matrizes globais $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$ para problemas estacionários;
integs	conduz a avaliação numérica das integrais de contorno para problemas estacionários;
dnsdin	determina o número de subdomínios de integração;
vectra	avalia o raio vetor, seu módulo e suas derivadas no ponto de integração;
jacre8	determina o determinante de Jacobi da superfície do elemento e o vetor normal unitário orientado para fora do corpo, em todos os pontos de integração;
fators	obtém as matrizes $\underline{\mathbf{A}}$ e $\underline{\mathbf{B}}$ (após a introdução das condições de contorno) e conduz a decomposição LU da matriz $\underline{\mathbf{A}}$;
vsourc	considera as contribuições de forças de volume concentradas;
radio	calcula a distância entre dois pontos;
fs3d1	avalia o núcleo potencial fundamental para problemas estacionários no raio;
vectos	obtém o vetor do lado direito do sistema de equações algébricas e a correspondente solução;
innerps	Calcula os potenciais em pontos internos;
matrx0	Constrói as matrizes globais $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$ para o primeiro passo de tempo;
integ0	conduz a avaliação numérica das integrais de contorno no primeiro passo de tempo;
fatora	obtém as matrizes $\underline{\mathbf{A}}$ e $\underline{\mathbf{B}}$ (após a introdução das condições de contorno) e conduz a decomposição LU da matriz $\underline{\mathbf{A}}$;
matrx	constrói as matrizes globais $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$ para o passo de tempo <i>iter</i> ;
integ	conduz a avaliação numérica das integrais de contorno para o passo de tempo <i>iter</i> ;
vsti	Considera a contribuição de forças concentradas de volume dependentes do tempo;
fs3d2	Avalia o núcleo potencial fundamental para problemas dependentes do tempo, no raio;
varvs	Determina a variação temporal das forças de volume dadas;
vector	Obtém o vetor lado direito dos sistemas de equações algébricas e avalia a resposta temporal no corrente passo de tempo;
innerpt	Calcula as matrizes necessárias para a determinação dos potenciais em pontos internos;
vsti2	Considera a contribuição de forças de volume dependentes do tempo quando avaliando a resposta em pontos internos;
intp	Obtém os potenciais em pontos internos para o passo de tempo <i>iter</i> ;

CAPÍTULO 3 – SOLVERS DE KRYLOV

3.1. INTRODUÇÃO

Solvers iterativos são uma ferramenta poderosa para a resolução de sistemas lineares e não lineares, sendo que dentre eles, existe uma família de solvers baseados no chamado espaço de Krylov, de particular interesse neste trabalho.

Primeiramente então, será introduzida a definição do chamado subespaço de Krylov, que é a base para a derivação dos solvers de Krylov.

Na seqüência, o processo de obtenção de solvers iterativos básicos será abordado, objetivando conceber esta técnica de derivação.

Por fim, os algoritmos conhecidos por Algoritmo de Lanczos, Gradiente Bi-conjugado (BI-CG) e Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES) (Saad, 1995), que constituem importantes ferramentas na resolução de problemas de engenharia, serão apresentados, observando-se que as equações apresentadas para estes solvers valem tanto para sistemas lineares reais quanto complexos.

Destaca-se que ao longo do capítulo, técnicas úteis e importantes, como o pré-condicionamento e escalonamento, serão convenientemente apresentadas; também serão explorados a estratégia de exclusão de linhas/colunas devido à consideração de condições de continuidade entre forças de contorno de diferentes subestruturas, e os critérios de convergência dos solvers.

3.2. SOLVERS DE KRYLOV

Solvers de Krylov são todos os solvers iterativos que derivam do subespaço de Krylov (Hageman e Young, 1981; Hackbusch, 1991; Mansur et al., 1992) e, portanto, para se derivar os mesmos, dois conceitos importantes devem ser antes explorados:

- Subespaço de Krylov;
- Solvers iterativos básicos.

3.2.1. Definição do Subespaço de Krylov

O subespaço de Krylov K_{j+1} (Hageman e Young, 1981) é definido por um conjunto de $j+1$ vetores $\{\bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}_2, \dots, \bar{\mathbf{v}}_{j+1}\}$ que obedecem a seguinte equação de geração:

$$\bar{\mathbf{v}}_{j+1} = \underline{\mathbf{A}} \cdot \bar{\mathbf{v}}_j \quad (3.1)$$

Logo, tomando-se um vetor inicial $\bar{\mathbf{v}}_1$ e uma matriz qualquer $\underline{\mathbf{A}}$, $K_{j+1}(\bar{\mathbf{v}}_1, \underline{\mathbf{A}})$ é o subespaço de Krylov com dimensão $j+1$ associado à $\bar{\mathbf{v}}_1$ e $\underline{\mathbf{A}}$.

Para se representar adequadamente este subespaço, uma base ortonormal pode ser gerada utilizando-se o processo de Gram-Schmidt (Wilkinson, 1965), com é demonstrado a seguir:

3.2.2. Base ortonormal para o Subespaço de Krylov

Para um dado conjunto de vetores $\underline{\mathbf{c}}_1, \underline{\mathbf{c}}_2, \dots, \underline{\mathbf{c}}_j$ pertencentes à C^n e linearmente independentes, pode-se aplicar o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, como segue:

$$\underline{\mathbf{v}}_j = \delta_j \bar{\mathbf{v}}_j = \underline{\mathbf{c}}_j - \sum_{i=1}^{j-1} h_{ij} \cdot \bar{\mathbf{v}}_i \quad (3.2)$$

$$h_{ij} = \underline{\mathbf{c}}_j^T \cdot \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i$$

onde:

- $\delta_i = \left(\underline{\mathbf{v}}_i^T \cdot \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_i \right)^{\frac{1}{2}} = \left\| \underline{\mathbf{v}}_i \right\|_{\underline{\mathbf{B}}}$ é a norma do vetor $\underline{\mathbf{v}}_i$ em relação a base $\underline{\mathbf{B}}$;
- $\underline{\bar{\mathbf{v}}}_i$ é o vetor unitário de $\underline{\mathbf{v}}_i$.

Obtém-se assim, um conjunto de vetores $\underline{\bar{\mathbf{v}}}_1, \underline{\bar{\mathbf{v}}}_2, \dots, \underline{\bar{\mathbf{v}}}_j$ B-ortonormalizados, com o primeiro vetor $\underline{\bar{\mathbf{v}}}_1$ dado por

$$\underline{\bar{\mathbf{v}}}_1 = \frac{\underline{\mathbf{c}}_1}{\left\| \underline{\mathbf{c}}_1 \right\|_{\underline{\mathbf{B}}}} \quad (3.3)$$

Para derivar a base do subespaço de Krylov, reescreve-se a Equação (3.2)

$$\underline{\mathbf{v}}_{j+1} = \delta_{j+1} \underline{\bar{\mathbf{v}}}_{j+1} = \underline{\mathbf{c}}_{j+1} - \sum_{i=1}^j h_{i,j+1} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i \quad (3.4)$$

$$h_{i,j+1} = \underline{\mathbf{c}}_{j+1}^T \cdot \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i, \quad \underline{\mathbf{c}}_1 = \underline{\bar{\mathbf{v}}}_1$$

e considera-se o vetor $\underline{\mathbf{c}}_{j+1} = \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_j$ (Vetores de Krylov).

Segue que:

$$\underline{\mathbf{v}}_{j+1} = \delta_{j+1} \underline{\bar{\mathbf{v}}}_{j+1} = \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j+1} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i \quad (3.5)$$

$$h_{i,j+1} = (\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_j)^T \cdot \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i = \underline{\bar{\mathbf{v}}}_j^T \cdot \underline{\mathbf{A}}^T \cdot \underline{\mathbf{B}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i = \left(\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_j, \underline{\bar{\mathbf{v}}}_i \right)_{\underline{\mathbf{B}}}$$

Desenvolvendo para $j = 0, 1, \dots$

$$j = 0: \quad \underline{\bar{\mathbf{v}}}_1 \text{ (vetor inicial)}$$

$$j = 1: \quad \underline{\mathbf{v}}_2 = \delta_2 \underline{\bar{\mathbf{v}}}_2 = \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_1 - h_{12} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_1 \Rightarrow \underline{\bar{\mathbf{v}}}_2 = \delta_2^{-1} \cdot (\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_1 - h_{12} \cdot \underline{\bar{\mathbf{v}}}_1)$$

$$\begin{aligned}
\underline{\mathbf{v}}_3 &= \delta_3 \underline{\mathbf{v}}_3 = \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_2 - h_{13} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1 - h_{23} \cdot \underline{\mathbf{v}}_2 \\
&\Rightarrow \delta_3 \underline{\mathbf{v}}_3 = \underline{\mathbf{A}} \cdot (\delta_2^{-1} \cdot \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1 - \delta_2^{-1} h_{12} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1) - h_{13} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1 \\
&\quad - h_{23} \cdot (\delta_2^{-1} \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1 - \delta_2^{-1} h_{12} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1) \\
j = 2: \\
\underline{\mathbf{v}}_3 &= (\delta_3^{-1} \cdot \delta_2^{-1}) [\underline{\mathbf{A}}^2 \cdot \underline{\mathbf{v}}_1] - \delta_3^{-1} (\delta_2^{-1} h_{12} - \delta_2^{-1} h_{23}) [\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1] - \\
&\quad \delta_3^{-1} (h_{13} - \delta_2^{-1} h_{12} h_{23}) [\underline{\mathbf{v}}_1]
\end{aligned}$$

Por indução resulta,

$$\underline{\mathbf{v}}_{j+1} = \alpha_0 \cdot \underline{\mathbf{v}}_1 + \alpha_1 \cdot [\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{v}}_1] + \alpha_2 \cdot [\underline{\mathbf{A}}^2 \cdot \underline{\mathbf{v}}_1] + \dots + \alpha_i \cdot [\underline{\mathbf{A}}^i \cdot \underline{\mathbf{v}}_1] + \dots + \alpha_j \cdot [\underline{\mathbf{A}}^j \cdot \underline{\mathbf{v}}_1] \quad (3.6)$$

que são exatamente os vetores de Krylov ortonormalizados para um subespaço $K_{j+1}(\underline{\mathbf{v}}_1, \underline{\mathbf{A}})$, como se pretendia demonstrar.

Um passo importante em matéria de *solvers* iterativos é a formulação de solvers iterativos básicos, descrita a seguir. Menciona-se que solvers de Krylov são exatamente procedimentos de aceleração polinomial sobre esses esquemas básicos.

3.2.3. Métodos iterativos básicos

Para gerar um método iterativo, parte-se inicialmente de um sistema de equações matriciais (Araújo, 1989; Martins, 2000),

$$\underline{\mathbf{A}} \mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (3.7)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{A}}$ é não-singular.

Através de um artifício matemático, pode-se obter, a partir de (3.7), o seguinte sistema:

$$(\underline{\mathbf{I}} - \underline{\mathbf{I}} + \underline{\mathbf{Q}}^{-1} \underline{\mathbf{A}}) \cdot \mathbf{u} = \underline{\mathbf{Q}}^{-1} \mathbf{b} \quad (3.8)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{I}}$ é a matriz identidade;
- $\underline{\mathbf{Q}}$ é uma matriz de partição.

Para derivar o processo iterativo básico, reescreve-se a Equação (3.8) com segue:

$$\underline{\mathbf{u}}^{n+1} = (\underline{\mathbf{I}} - \underline{\mathbf{Q}}^{-1} \underline{\mathbf{A}}) \underline{\mathbf{u}}^n + \underline{\mathbf{Q}}^{-1} \underline{\mathbf{b}} \quad (3.9)$$

ou

$$\underline{\mathbf{u}}^{n+1} = \underline{\mathbf{u}}^n + \underline{\mathbf{Q}}^{-1} (\underline{\mathbf{b}} - \underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{u}}^n) \quad (3.10)$$

Assim, através do uso de uma solução inicial arbitrada, aplica-se sucessivamente a relação de recorrência (3.9), gerando-se novas soluções que tendam à resposta correta do sistema (3.7).

Diferentes matrizes de partição $\underline{\mathbf{Q}}$ podem ser utilizadas, obtendo-se desta forma diferentes métodos iterativos. Porém deve-se levar em conta os seguintes aspectos para tornar o processo mais eficiente (Martins, 2000):

- Tornar o número de condicionamento de $\underline{\mathbf{Q}}^{-1} \underline{\mathbf{A}}$ significativamente menor que o número de condicionamento de $\underline{\mathbf{A}}$;
- Buscar uma matriz $\underline{\mathbf{Q}}$ cujos coeficientes sejam facilmente obtidos;
- Buscar uma matriz $\underline{\mathbf{Q}}$ cuja inversa $\underline{\mathbf{Q}}^{-1}$ seja facilmente determinada.

Observa-se que o primeiro item mencionado acima refere-se à técnica de pré-condicionamento do sistema, que é uma importante estratégia utilizada neste trabalho para melhorar a convergência de solvers iterativos de Krylov (Hageman e Young, 1981; Axelsson, 1984; Araújo, 1989, Mansur et al., 1992, Barra, 1993; Prasad et al. 1994).

Alguns exemplos de métodos iterativos básicos são o método RF (Richardson, $\underline{\mathbf{Q}} = \underline{\mathbf{I}}$), o método de Jacobi ($\underline{\mathbf{Q}} = \underline{\mathbf{D}}$) e o método de Gauss-Seidel ($\underline{\mathbf{Q}} = \underline{\mathbf{D}} + \underline{\mathbf{L}}$, onde $\underline{\mathbf{D}}$ contém os coeficientes da diagonal de $\underline{\mathbf{A}}$ e, $\underline{\mathbf{L}}$ os coeficientes da parte inferior à diagonal), sendo que no presente trabalho, a matriz de partição de Jacobi será utilizada como matriz de pré-condicionamento do sistema, visto que apresentou bons resultados em trabalhos anteriores (Araújo e Martins, 2001; Araújo et al., 2001).

Não existe garantia de convergência para os métodos básicos, principalmente para sistemas com matrizes de coeficientes não-simétricas, ou número (espectral) de condicionamento elevado. Em consequência, estas técnicas se tornam pouco eficientes na resolução de sistemas gerais.

Uma forma de se acelerar a razão de convergência de um algoritmo iterativo básico, é através do uso de processos de aceleração polinomial. Tais processos consistem na geração de uma nova seqüência de vetores, a partir da seqüência fornecida nestes métodos básicos.

Prova-se que o procedimento iterativo de criação do espaço de Krylov, aplicado a qualquer método iterativo básico, é um processo de aceleração polinomial.

Em consequência, os solvers baseados neste procedimento são conhecidos como solvers de Krylov, dentre os quais consideram-se os algoritmos de Lanczos, do Gradiente Bi-conjugado (BI-CG) e Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES) (Araújo, 1989; Mansur et al., 1992, Barra et al. 1992).

3.3. ALGORITMO GMRES

Para derivar o solver GMRES (Generalized Minimal Residual procedure; Barra et. al 1992, 1993; Araújo e Martins, 2001), parte-se da definição de subespaço de Krylov (item 3.2.1) e impõe-se que

$$\underline{\mathbf{x}}_k - \underline{\mathbf{x}}_0 \in K_k(\underline{\mathbf{r}}_0, \underline{\mathbf{A}}) \quad (3.11)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{x}}_k$ é a k-ésima iteração;
- $\underline{\mathbf{x}}_0$ é a solução inicial;
- $\underline{\mathbf{r}}_0$ é o resíduo inicial dado por $\underline{\mathbf{r}}_0 = \underline{\mathbf{b}} - \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{x}}_0$;
- $\underline{\mathbf{A}}$ é a matriz do sistema;
- K_k é o subespaço de dimensão k associado à $\underline{\mathbf{r}}_0$ e $\underline{\mathbf{A}}$;
- $\{\underline{\mathbf{v}}_1, \underline{\mathbf{v}}_2, \dots, \underline{\mathbf{v}}_{j+1}\}$ são os vetores normalizados com $\underline{\mathbf{v}}_1$ dado por

$$\underline{\mathbf{v}}_1 = \frac{\underline{\mathbf{r}}_0}{\|\underline{\mathbf{r}}_0\|_{\underline{\mathbf{B}}}},$$

$$\underline{\mathbf{B}} = \underline{\mathbf{I}}$$

A condição (3.11) significa que:

$$\underline{\mathbf{x}}_k - \underline{\mathbf{x}}_0 = \sum_{i=1}^k y_i \underline{\mathbf{v}}_i = \underline{\mathbf{V}}_k \underline{\mathbf{y}}_k = \underline{\mathbf{h}}_k \quad (3.12)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{V}}_k = [\underline{\mathbf{v}}_1 \ \underline{\mathbf{v}}_2 \ \dots \ \underline{\mathbf{v}}_k]$ e $\underline{\mathbf{y}}_k = (y_1 \ y_2 \ \dots \ y_k)^T$;
- $\underline{\mathbf{x}}$ é a solução exata do sistema algébrico (veja Figura (3.1));

- y_1, y_2, \dots, y_k sendo determinados com a condição de $\underline{\mathbf{x}}_k$ ser uma aproximação ótima para $\bar{\underline{\mathbf{x}}}$.

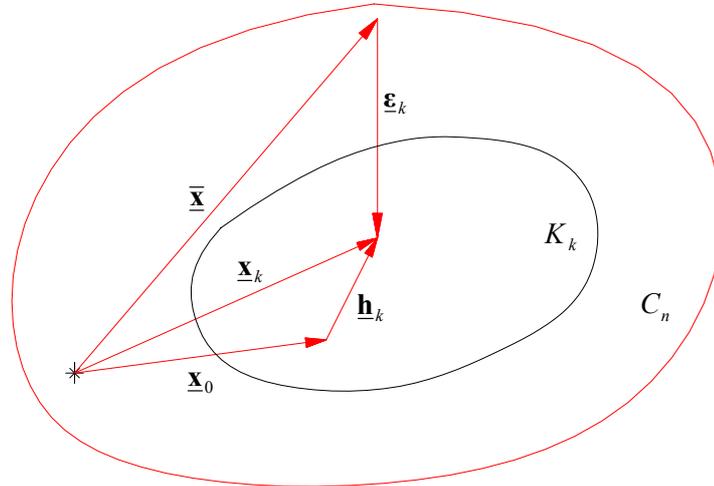


Figura 3.1. k -ésima iteração $\underline{\mathbf{x}}_k$ com o erro associado $\underline{\boldsymbol{\epsilon}}_k$.

O problema torna-se então encontrar $\underline{\mathbf{y}}_k$ tal que

$$\|\underline{\boldsymbol{\epsilon}}_k\| = \|\underline{\mathbf{x}}_k - \bar{\underline{\mathbf{x}}}\| = \|\underline{\boldsymbol{\epsilon}}_0 + \bar{\mathbf{V}}_k \underline{\mathbf{y}}_k\| = \min \|\underline{\boldsymbol{\epsilon}}_0 + \bar{\mathbf{V}}_k \underline{\mathbf{y}}_k\|, \quad \underline{\mathbf{y}}_k \in \mathbb{R}^k \quad (3.13)$$

Impondo-se a condição que $\underline{\boldsymbol{\epsilon}}_k$ seja ortogonal ao subespaço de Krylov $K_k(\bar{\mathbf{V}}_1, \mathbf{A})$, segue:

$$(\underline{\boldsymbol{\epsilon}}_k, \bar{\mathbf{v}}_i) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, k \quad (3.14)$$

Escrevendo-se a Equação (3.5) na forma matricial e observando que $\bar{\mathbf{V}}_k$ é uma matriz ortogonal e que $\mathbf{B} = \mathbf{I}$, tem-se

$$\mathbf{A} \bar{\mathbf{V}}_k = \bar{\mathbf{V}}_k \mathbf{H}_k \quad (3.15)$$

Resultando diretamente do processo de ortogonalização de Gram-Schmidt, que $\underline{\mathbf{H}}_k$ é a matriz de Hessenberg

$$\underline{\mathbf{H}}_k = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1k} \\ \|\underline{\mathbf{v}}_2\| & h_{22} & \cdots & h_{2k} \\ & \|\underline{\mathbf{v}}_3\| & \cdots & h_{3k} \\ & & \vdots & \\ & & & h_{kk} \end{bmatrix}, \text{ com } h_{ij} = (\underline{\mathbf{A}}\bar{\underline{\mathbf{v}}}_j, \bar{\underline{\mathbf{v}}}_i) \quad (3.16)$$

Assim, resolvendo o problema de otimização, segue

$$\underline{\mathbf{y}}_k = \underline{\mathbf{H}}_k^{-1} \|\underline{\mathbf{r}}_0\| \underline{\mathbf{e}}_1, \quad \underline{\mathbf{e}}_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \quad (3.17)$$

O conjunto formado pelas Equações (3.12), (3.13), (3.15), (3.16) e (3.17) compõe o algoritmo do solver GMRES.

A principal vantagem deste solver é:

- Apresentar eficiência elevada na maioria dos casos, com altas taxas de convergência.

As desvantagens são:

- Trabalhar armazenando todo o conjunto de vetores $\bar{\underline{\mathbf{v}}}_k$ gerados durante o processo iterativo, o que implica em considerável alocação adicional de memória. Ressalta-se que k será igual à ordem do sistema;
- Possuir problemas de estagnação, não permitindo a convergência. Observa-se que estagnar significa que em um dado ponto do processo iterativo, a resposta do sistema não mais se altera e em conseqüência, o erro (Equação (3.13)) mantém-se constante.

Existem estratégias para tentar contornar os dois problemas acima citados, e dentre elas destaca-se o processo de "restart". Este procedimento torna possível a diminuição do

conjunto de vetores $\bar{\mathbf{V}}_k$ a serem armazenados, além de melhorar a questão da estagnação.

3.3.1. Processo de Restart

A idéia deste algoritmo é a de reinicializar o processo iterativo do solver GMRES, a cada k iterações ($k <$ ordem do sistema), utilizando a resposta obtida $\underline{\mathbf{x}}_k$, como valor inicial $\underline{\mathbf{x}}_0$ para o próximo ciclo.

Desta forma, o grupo $\bar{\mathbf{V}}_k$ de vetores a serem armazenados diminui significativamente, tornando-se possível controlar o tamanho deste bloco $\bar{\mathbf{V}}_k$ convenientemente. Além disto, a ação de reinicializar o ciclo iterativo é extremamente útil, por geralmente permitir contornar o processo de estagnação, quando este ocorre. Isto porque o novo grupo de vetores $\bar{\mathbf{V}}_k$ criado, parte de uma resposta inicial $\underline{\mathbf{x}}_0$ diferente daquela do ciclo anterior, gerando vetores distintos dos anteriores. Porém, também esta estratégia apresenta algumas exceções, que recaem em estagnação.

3.4. ALGORITMO DE LANCZOS

Conhecido como algoritmo de tridiagonalização de Lanczos (Wilkinson, 1965), este processo de aceleração polinomial, tem sido eficientemente aplicado na resolução de sistemas de equações lineares gerais. A formulação/derivação completa deste algoritmo pode ser encontrada em Araújo (1989), Martins (2000), Araújo et al., (2001) e a seguir, apresenta-se a mesma, de forma resumida.

Sendo $\underline{\mathbf{c}}^1$ e $\bar{\mathbf{c}}^1$ vetores conhecidos, duas seqüências de vetores $\underline{\mathbf{c}}^{k+1}$ e $\bar{\mathbf{c}}^{k+1}$ podem ser derivadas de $\underline{\mathbf{A}}$ e $\bar{\mathbf{A}}^T$ respectivamente, a partir das relações:

$$\delta_{k+1} \underline{\mathbf{c}}^{k+1} = \underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{c}}^k - \sum_{i=1}^k h_{ik} \underline{\mathbf{c}}^i \quad (3.18a)$$

$$\bar{\delta}_{k+1} \bar{\underline{\mathbf{c}}}^{k+1} = \underline{\mathbf{A}}^T \bar{\underline{\mathbf{c}}}^k - \sum_{i=1}^k \bar{h}_{ik} \bar{\underline{\mathbf{c}}}^i \quad (3.18b)$$

onde:

- $k = 1, 2, \dots, n$;
- n é a ordem da matriz;
- h_{ik} e \bar{h}_{ik} são determinados sob imposição das seguintes condições de ortogonalidade:

$$\underline{\mathbf{c}}^{k+1} \perp \bar{\underline{\mathbf{c}}}^1, \bar{\underline{\mathbf{c}}}^2, \bar{\underline{\mathbf{c}}}^3, \dots, \bar{\underline{\mathbf{c}}}^k \quad (3.19a)$$

$$\bar{\underline{\mathbf{c}}}^{k+1} \perp \underline{\mathbf{c}}^1, \underline{\mathbf{c}}^2, \underline{\mathbf{c}}^3, \dots, \underline{\mathbf{c}}^k \quad (3.19b)$$

e

- δ_{k+1} e $\bar{\delta}_{k+1}$ são reais arbitrários.

Mostra-se, indutivamente, que os vetores

$$\underline{\mathbf{c}}^1, \underline{\mathbf{c}}^2, \underline{\mathbf{c}}^3, \dots, \underline{\mathbf{c}}^N \quad (3.20)$$

são vetores de Krylov linearmente independentes entre si, assim como os vetores

$$\bar{\underline{\mathbf{c}}}^1, \bar{\underline{\mathbf{c}}}^2, \bar{\underline{\mathbf{c}}}^3, \dots, \bar{\underline{\mathbf{c}}}^N \quad (3.21)$$

Expressando-se linearmente as relações de (3.18a), tem-se:

$$\underline{\mathbf{A}} \cdot [\underline{\mathbf{c}}^1 \underline{\mathbf{c}}^2 \dots \underline{\mathbf{c}}^N] = [\underline{\mathbf{c}}^1 \underline{\mathbf{c}}^2 \dots \underline{\mathbf{c}}^N] \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1N} \\ \delta_2 & h_{22} & \dots & h_{2N} \\ & \delta_3 & & \vdots \\ 0 & & \ddots & \delta_N & h_{NN} \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

ou ainda

$$\underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{H}} \quad (3.23)$$

Analogamente se expressa (3.18b) como

$$\underline{\mathbf{A}}^T \overline{\underline{\mathbf{C}}} = \overline{\underline{\mathbf{C}}} \overline{\underline{\mathbf{H}}} \quad (3.24)$$

As condições de ortogonalidade (3.19) são matricialmente dadas por:

$$\begin{bmatrix} \underline{\mathbf{c}}^{1,T} \\ \underline{\mathbf{c}}^{2,T} \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{c}}^{N,T} \end{bmatrix} \cdot [\underline{\mathbf{c}}^1 \underline{\mathbf{c}}^2 \dots \underline{\mathbf{c}}^N] = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{c}}^{1,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^1 & \underline{\mathbf{c}}^{1,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^2 & \dots & \underline{\mathbf{c}}^{1,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^N \\ \underline{\mathbf{c}}^{2,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^1 & \underline{\mathbf{c}}^{2,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^2 & \dots & \underline{\mathbf{c}}^{2,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \underline{\mathbf{c}}^{N,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^1 & \underline{\mathbf{c}}^{N,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^2 & \dots & \underline{\mathbf{c}}^{N,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^N \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

$$= \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{c}}^{1,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^1 & & & 0 \\ & \underline{\mathbf{c}}^{2,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \underline{\mathbf{c}}^{N,T} \cdot \underline{\mathbf{c}}^N \end{bmatrix}$$

ou ainda,

$$\underline{\mathbf{C}}^T \overline{\underline{\mathbf{C}}} = \underline{\mathbf{D}} = \overline{\underline{\mathbf{C}}}^T \underline{\mathbf{C}} \quad (3.26)$$

Operando-se com (3.23) e (3.24), pode-se concluir que as matrizes de Hessemberg ($\underline{\mathbf{H}}$ e $\overline{\underline{\mathbf{H}}}$) são tridiagonais e podem ser representadas por:

$$\underline{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & & \\ \delta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & \\ & \delta_3 & \alpha_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_N & \\ & & & \delta_N & \alpha_N & \end{bmatrix}, \quad \overline{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} \overline{\alpha}_1 & \overline{\beta}_2 & & & & \\ \overline{\delta}_2 & \overline{\alpha}_2 & \overline{\beta}_3 & & & \\ & \overline{\delta}_3 & \overline{\alpha}_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \overline{\beta}_N & \\ & & & \overline{\delta}_N & \overline{\alpha}_N & \end{bmatrix}$$

Utilizando-se esta característica adequadamente nas relações (3.18), podem obter-se as seguintes expressões:

$$\delta_{k+1} \underline{\mathbf{c}}^{k+1} = \underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{c}}^k - h_{k-1,k} \underline{\mathbf{c}}^{k-1} - h_{kk} \underline{\mathbf{c}}^k = \underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{c}}^k - \beta_k \underline{\mathbf{c}}^{k-1} - \alpha_k \underline{\mathbf{c}}^k \quad (3.27a)$$

e

$$\overline{\delta}_{k+1} \overline{\mathbf{c}}^{k+1} = \underline{\mathbf{A}}^T \overline{\mathbf{c}}^k - \overline{h}_{k-1,k} \overline{\mathbf{c}}^{k-1} - \overline{h}_{kk} \overline{\mathbf{c}}^k = \underline{\mathbf{A}}^T \overline{\mathbf{c}}^k - \overline{\beta}_k \overline{\mathbf{c}}^{k-1} - \overline{\alpha}_k \overline{\mathbf{c}}^k \quad (3.27b)$$

Através de manipulações algébricas, obtêm-se das Equações (3.27a) e (3.27b), as seguintes relações:

$$\alpha_k = \frac{\overline{\mathbf{c}}^{k,T} \underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{c}}^k}{\overline{\mathbf{c}}^{k,T} \underline{\mathbf{c}}^k} \quad (3.28a)$$

$$\overline{\alpha}_k = \frac{\underline{\mathbf{c}}^{k,T} \underline{\mathbf{A}}^T \overline{\mathbf{c}}^k}{\underline{\mathbf{c}}^{k,T} \overline{\mathbf{c}}^k} = \alpha_k \quad (3.28b)$$

e

$$\overline{\beta}_k = \delta_k \frac{\underline{\mathbf{c}}^{k,T} \overline{\mathbf{c}}^k}{\underline{\mathbf{c}}^{k-1,T} \overline{\mathbf{c}}^{k-1}} \quad (3.29a)$$

$$\beta_k = \overline{\delta}_k \left(\frac{\overline{\mathbf{c}}^{k,T} \underline{\mathbf{c}}^k}{\overline{\mathbf{c}}^{k-1,T} \underline{\mathbf{c}}^{k-1}} \right) \quad (3.29b)$$

O processo definido pelas Equações (3.27a), (3.27b), (3.28a), (3.28b), (3.29a) e (3.29b) constitui o algoritmo de Lanczos para a tridiagonalização de matrizes não-simétricas.

Para estabelecer um algoritmo de resolução de sistemas lineares algébricos, considere-se uma fórmula iterativa básica do tipo:

$$\underline{\mathbf{u}}^{n+1} = \rho_{n+1}\gamma_{n+1}\underline{\mathbf{r}}^n + \rho_{n+1}\underline{\mathbf{u}}^n + (1 - \rho_{n+1})\underline{\mathbf{u}}^{n-1} \quad (3.30)$$

que resulta em um vetor resíduo (erro) do tipo

$$\underline{\mathbf{r}}^{n+1} = \underline{\mathbf{b}} - \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{u}}^{n+1} = -\rho_{n+1}\gamma_{n+1}\underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{r}}^n + \rho_{n+1}\underline{\mathbf{r}}^n + \underline{\mathbf{r}}^{n-1} - \rho_{n+1}\underline{\mathbf{r}}^{n-1} \quad (3.31)$$

Rearranjando a Equação (3.31), observa-se que esta tem o aspecto dos vetores de Lanczos derivados de $\underline{\mathbf{A}}$ (Equação (3.27a)), como pode ser visto a seguir:

$$\left(-\frac{1}{\rho_{n+1}\gamma_{n+1}}\right)\underline{\mathbf{r}}^{n+1} = \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{r}}^n - \left(\frac{1}{\gamma_{n+1}}\right)\underline{\mathbf{r}}^n - \left(\frac{1 - \rho_{n+1}}{\rho_{n+1}\gamma_{n+1}}\right)\underline{\mathbf{r}}^{n-1} \quad (3.32)$$

De maneira análoga, para a matriz $\underline{\mathbf{A}}^T$, tem-se

$$\left(-\frac{1}{\rho_{n+1}\gamma_{n+1}}\right)\bar{\underline{\mathbf{r}}}^{n+1} = \underline{\mathbf{A}}^T\bar{\underline{\mathbf{r}}}^n - \left(\frac{1}{\gamma_{n+1}}\right)\bar{\underline{\mathbf{r}}}^n - \left(\frac{1 - \bar{\rho}_{n+1}}{\rho_{n+1}\gamma_{n+1}}\right)\bar{\underline{\mathbf{r}}}^{n-1} \quad (3.33)$$

Impondo-se então que os vetores $\underline{\mathbf{r}}^{n+1}$ e $\bar{\underline{\mathbf{r}}}^{n+1}$ sejam realmente vetores de Lanczos, e realizando-se as transformações necessárias, chega-se à:

$$\gamma_{n+1} = \bar{\gamma}_{n+1} = \frac{\bar{\underline{\mathbf{r}}}^{n,T} \underline{\mathbf{r}}^n}{\bar{\underline{\mathbf{r}}}^{n,T} \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{r}}^n} \quad (3.34)$$

e

$$\rho_{n+1} = \bar{\rho}_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \left(\frac{\bar{\mathbf{r}}^{n,T} \mathbf{r}^n}{\bar{\mathbf{r}}^{n-1,T} \mathbf{r}^{n-1}} \right) \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1} \quad (3.35)$$

com $\rho_1 = \bar{\rho}_1 = 1$.

O algoritmo de Lanczos para a resolução iterativa de sistemas de equações lineares é então estabelecido pela fórmula (3.30), onde os parâmetros γ_{n+1} e ρ_{n+1} são calculados por (3.34) e (3.35), respectivamente, e \mathbf{r}^n é determinado de (3.32). Para cálculo dos parâmetros ρ_{n+1} e γ_{n+1} é necessário também a determinação do vetor resíduo auxiliar, que é obtido de (3.33).

Este algoritmo é geral, e pode ser aplicado a qualquer sistema não singular. A convergência é garantida em no máximo N iterações, podendo este não ser o caso em consequência de erros de truncamento na execução das operações.

3.5. ALGORITMO DO GRADIENTE BI-CONJUGADO

O processo de aceleração de Lanczos pode também ser expresso na seguinte forma (Araújo, 1989):

$$\underline{\mathbf{u}}^{n+1} = \underline{\mathbf{u}}^n + \lambda_n \underline{\mathbf{p}}^n \quad (3.36)$$

onde os vetores $\underline{\mathbf{p}}^n$, que definem as direções de busca, são dados por:

$$\underline{\mathbf{p}}^n = \begin{cases} \underline{\mathbf{r}}^0 & , n = 0 \\ \underline{\mathbf{r}}^n + \alpha_n \underline{\mathbf{p}}^{n-1} & , n \geq 1 \end{cases} \quad (3.37)$$

Sendo a fórmula iterativa dada por (3.36), segue que o resíduo para a n-ésima iteração é dado por:

$$\underline{\mathbf{r}}^n = \underline{\mathbf{b}} - \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{u}}^n = \underline{\mathbf{r}}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{p}}^{n-1} \quad (3.38)$$

Para as fórmulas iterativas auxiliares obtém-se:

$$\underline{\bar{\mathbf{r}}}^n = \underline{\bar{\mathbf{r}}}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{\mathbf{A}}^T \underline{\bar{\mathbf{p}}}^{n-1} \quad (3.39)$$

e

$$\underline{\bar{\mathbf{p}}}^n = \begin{cases} \underline{\bar{\mathbf{r}}}^0 = \underline{\mathbf{r}}^0 & , n = 0 \\ \underline{\bar{\mathbf{r}}}^n + \alpha_n \underline{\bar{\mathbf{p}}}^{n-1} & , n \geq 1 \end{cases} \quad (3.40)$$

Da imposição da condição de que os vetores-resíduo $\underline{\mathbf{r}}^n$ sejam vetores de Lanczos, ou seja

$$\underline{\mathbf{r}}^{i,T} \underline{\bar{\mathbf{r}}}^j = 0, \quad i \neq j, \quad (3.41)$$

prova-se que as direções de busca $\underline{\mathbf{p}}^j$ são ortogonais às direções de busca auxiliares $\underline{\bar{\mathbf{p}}}^j$ em relação à matriz $\underline{\mathbf{A}}$, ou seja:

$$\underline{\bar{\mathbf{p}}}^{i,T} \underline{\mathbf{A}} \underline{\mathbf{p}}^j = 0, \quad i \neq j \quad (3.42)$$

Com as relações (3.41) e (3.42) demonstra-se facilmente que os parâmetros λ_{n-1} e α_n do processo iterativo são dados por:

$$\lambda_{n-1} = \frac{\underline{\mathbf{r}}^{(n-1),T} \cdot \underline{\mathbf{r}}^{n-1}}{\underline{\mathbf{p}}^{(n-1),T} \cdot \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{p}}^{n-1}}, \quad \alpha_n = \frac{\underline{\mathbf{r}}^{n,T} \cdot \underline{\mathbf{r}}^n}{\underline{\mathbf{r}}^{(n-1),T} \cdot \underline{\mathbf{r}}^{n-1}} \quad (3.43)$$

O processo iterativo estabelecido por (3.36), (3.37), (3.38), (3.39), (3.40) e (3.43) é conhecido como algoritmo do Gradiente Bi-conjugado.

3.6. CRITÉRIO DE CONVERGÊNCIA

Um critério de parada adequado para sistemas algébricos reais, pode ser obtido através da comparação entre a norma do vetor resíduo $\underline{\mathbf{r}}^n$ (que corresponde ao erro no caso do solver GMRES), e uma determinada tolerância (**tol**) adotada, conforme expressão abaixo:

$$\|\underline{\mathbf{r}}^n\| \leq \mathbf{tol} \quad (3.44)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{r}}^n$ é o vetor resíduo para a n-ésima iteração.

Já para sistemas complexos, segundo Martins (2000), esta verificação pode ser feita através da comparação das parcelas real e imaginária do resíduo, com as tolerâncias real (**rtol**) e imaginária (**itol**), respectivamente. Assim, deve-se ter

$$\text{real}(\|\underline{\mathbf{r}}^n\|) \leq \mathbf{rtol} \quad \text{e} \quad \text{imag}(\|\underline{\mathbf{r}}^n\|) \leq \mathbf{itol} \quad (3.45)$$

Uma outra possibilidade para as expressões de ponderação acima, muito utilizada para se evitar perda de precisão oriunda das unidades utilizadas nos problemas, é a de dividir a norma do vetor resíduo $\underline{\mathbf{r}}^n$ pela norma do vetor lado direito $\underline{\mathbf{f}}$ do sistema matricial

$\underline{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \underline{\mathbf{f}}$ (Equação (2.15)), tornando a expressão adimensional. Assim, as expressões (3.44) e (3.45) seriam reescritas da seguinte forma:

$$\frac{\|\mathbf{r}^n\|}{\|\underline{\mathbf{f}}\|} \leq \mathbf{tol} \quad (3.46)$$

e

$$\mathbf{real}\left(\frac{\|\mathbf{r}^n\|}{\|\underline{\mathbf{f}}\|}\right) \leq \mathbf{rtol} \quad \text{e} \quad \mathbf{imag}\left(\frac{\|\mathbf{r}^n\|}{\|\underline{\mathbf{f}}\|}\right) \leq \mathbf{itol} \quad (3.47)$$

3.7. ELIMINAÇÃO DE LINHAS/COLUNAS

Um aspecto muito interessante na resolução de sistemas lineares via solvers iterativos, refere-se a questão da eliminação de linhas/colunas na matriz do sistema $\underline{\mathbf{A}}$.

Considere-se, por exemplo, o sistema linear de ordem 4, dado a seguir:

$$\underline{\mathbf{A}}_{[4,4]} \cdot \underline{\mathbf{u}}_{[4]} = \underline{\mathbf{b}}_{[4]} \quad (3.48)$$

ou matricialmente,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} & \mathbf{a}_{13} & \mathbf{a}_{14} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} & \mathbf{a}_{23} & \mathbf{a}_{24} \\ \mathbf{a}_{31} & \mathbf{a}_{32} & \mathbf{a}_{33} & \mathbf{a}_{34} \\ \mathbf{a}_{41} & \mathbf{a}_{42} & \mathbf{a}_{43} & \mathbf{a}_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \\ \mathbf{u}_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_3 \\ \mathbf{b}_4 \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Imagine-se agora que a primeira e segunda equações do sistema sejam linearmente dependentes e seja necessário, portanto, eliminá-las através de adição, de modo a possibilitar a resolução do mesmo, conforme ilustrado a seguir:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_{11} + \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{12} + \mathbf{a}_{22} & \mathbf{a}_{13} + \mathbf{a}_{23} & \mathbf{a}_{14} + \mathbf{a}_{24} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{a}_{31} & \mathbf{a}_{32} & \mathbf{a}_{33} & \mathbf{a}_{34} \\ \mathbf{a}_{41} & \mathbf{a}_{42} & \mathbf{a}_{43} & \mathbf{a}_{44} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \\ \mathbf{u}_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 \\ 0 \\ \mathbf{b}_3 \\ \mathbf{b}_4 \end{Bmatrix} \quad (3.50)$$

Seria então necessário, no caso de solvers diretos, mover-se a maioria dos coeficientes da matriz $\underline{\mathbf{A}}$ e do vetor $\underline{\mathbf{b}}$ para remontar o sistema resultante, ou mesmo prever uma estratégia de identificação para ignorar estas linhas/colunas nulas, de modo a eliminar a incógnita \mathbf{u}_2 .

O mesmo não acontece para o grupo de solvers de Krylov, pois estes obtêm a solução para o vetor $\underline{\mathbf{u}}$, através de operações de multiplicação matriz-vetor. Logo, para que o processo de convergência aconteça naturalmente, ignorando-se esta linha/coluna nula, basta arbitrar a incógnita \mathbf{u}_2 inicialmente igual a zero.

Isto pode ser generalizado para um grupo n de linhas/colunas eliminadas, e será muito útil na implementação da técnica de acoplamento proposta no Capítulo 4.

A grande vantagem desta técnica ocorre para casos em que seja necessário eliminar alguma equação excedente no sistema linear. Isto porque não será preciso redistribuir os coeficientes da matriz e os vetores deste sistema, bastando substituir as correspondentes linha e coluna desta equação por zeros. Isto implica em dizer que não é necessário renumerar os nós da malha do problema.

3.8. ESCALONAMENTO

Para problemas em que o sistema de equações lineares gerado $\underline{\mathbf{H}}\underline{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{G}}\underline{\mathbf{P}}$ (Equação (2.14)), apresentar valores elevados para a relação entre os coeficientes obtidos na montagem da matriz $\underline{\mathbf{G}}$, e os obtidos na montagem de $\underline{\mathbf{H}}$, faz-se necessário o uso da técnica de escalonamento para melhorar a precisão dos resultados.

Isto porque o sistema final a ser resolvido $\underline{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \underline{\mathbf{f}}$ (Equação (2.15)), apresenta em $\underline{\mathbf{A}}$, colunas de ambas as matrizes $\underline{\mathbf{H}}$ e $\underline{\mathbf{G}}$, o que gera problemas de condicionamento no mesmo.

Esta técnica consiste então, em se multiplicar os coeficientes de uma das matrizes anteriores por um fator convenientemente determinado, de modo a reduzir esta relação, melhorando o condicionamento do sistema.

Esta operação implica na obtenção de uma resposta diferente da que seria originalmente encontrada. Porém, verifica-se facilmente, que a solução original pode ser restaurada, multiplicando-se pelo mesmo fator, as incógnitas correspondentes às colunas cujos coeficientes foram alterados. Para uma melhor compreensão deste processo, apresenta-se o exemplo a seguir:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2 \\ 0 \end{Bmatrix}, \text{ que apresenta a solução } \begin{cases} \mathbf{x} = 1 \\ \mathbf{y} = 1 \end{cases} \quad (3.51)$$

Multiplicando-se a segunda coluna da matriz por 5, tem-se:

$$\begin{bmatrix} 1 & 5 \\ 1 & -5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2 \\ 0 \end{Bmatrix}, \text{ que apresenta a solução } \begin{cases} \mathbf{x} = 1 \\ \mathbf{y} = \frac{1}{5} \end{cases} \quad (3.52)$$

Logo, vê-se que a solução correspondente à segunda coluna, no sistema (3.52), deve ser multiplicada por 5, para apresentar a mesma resposta do sistema (3.51).

Para o caso de sistemas acoplados, onde existem diversos sub-sistemas com diferentes relações entre estes coeficientes, utiliza-se o mesmo procedimento, porém valendo-se da média entre os diversos fatores de escalonamento destes sub-sistemas. As fórmulas utilizadas para o cálculo do fator de escalonamento f_s , em cada um dos três tipos de problemas analisados neste trabalho, são apresentadas a seguir:

$$f_s = \frac{\sum_{i=1}^{nsub} k_i}{nsub}, \quad \text{para problemas de potencial} \quad (3.53)$$

$$f_s = \frac{\sum_{i=1}^{nsub} \frac{E_i}{(1-\nu_i^2)}}{nsub}, \quad \text{para problemas elastostáticos} \quad (3.54)$$

$$f_s = \frac{\sum_{i=1}^{nsub} \frac{E_i}{(1-\nu_i^2)}}{nsub}, \quad \text{para problemas elastodinâmicos (dependentes da} \quad (3.55)$$

frequência)

onde:

- k_i é a propriedade física do material para a sub-região i (coeficiente de permeabilidade, de condutibilidade, etc.);
- E e ν , são respectivamente, o módulo de elasticidade e coeficiente de Poisson do material, para a sub-região i .

Por fim, observa-se que a técnica de escalonamento é muito importante para o aumento da razão de convergência de esquemas iterativos.

CAPÍTULO 4 – ACOPLAMENTO EC/EC

4.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo descreve-se a metodologia para estruturação de um acoplamento EC/EC (elementos de contorno - elementos de contorno), que é utilizado para resolução de problemas compostos por sub-regiões. Aborda-se então a formulação do acoplamento EC/EC genérico (também chamado acoplamento BE/BE genérico), ressaltando-se o esquema de montagem do sistema matricial acoplado.

Na seqüência destacam-se os aspectos importantes da região de acoplamento entre sub-regiões, detalhando-se a formulação de interfaces. Este detalhamento engloba as fases de identificação de interfaces e resolução do sistema acoplado.

Por fim, apresenta-se a definição de esparsidade, que é um parâmetro importante para a estratégia de acoplamento formulada.

4.2. FORMULAÇÃO DE ACOPLAMENTO GENÉRICO

Nesta seção, uma técnica genérica de subestruturação baseada no uso de solvers iterativos é apresentada (Araújo e Martins, 2001; Araújo et al., 2001). Para facilitar a compreensão desta técnica, faz-se uso de um exemplo genérico, representado na Figura (4.1), desenvolvendo-se os conceitos através do mesmo.

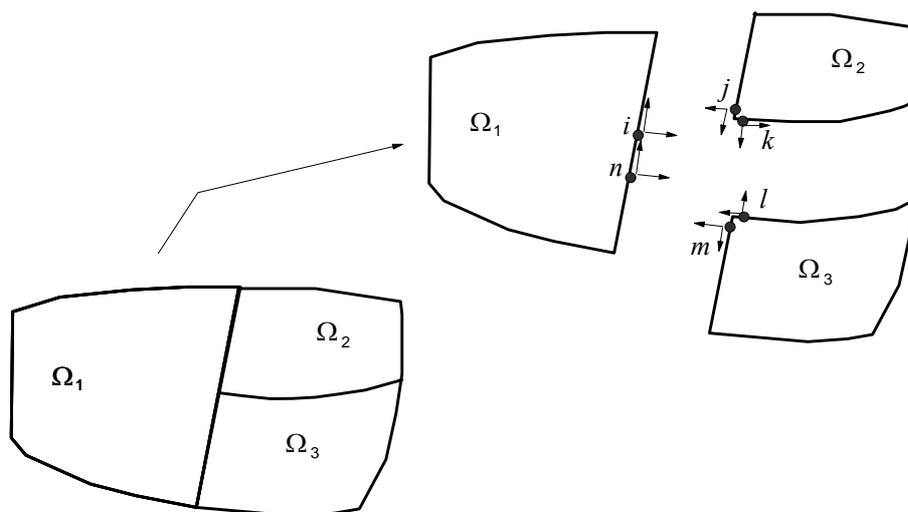


Figura 4.1. Corpo com sub-regiões.

Inicialmente, divide-se o domínio em sub-regiões e aplica-se a expressão $\underline{\mathbf{H}}\underline{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{G}}\underline{\mathbf{P}}$ (Equação (2.14)) para cada sub-região, obtendo-se nsr sistemas do tipo

$$\underline{\mathbf{H}}^k \underline{\mathbf{U}}^k = \underline{\mathbf{G}}^k \underline{\mathbf{P}}^k, \quad \text{com } k = 1, nsr \quad (4.1)$$

onde:

- nsr é o número total de sub-regiões.

Cada sub-região gerada é formada por nós de contorno (contendo uma incógnita para cada equação gerada – \mathbf{u} ou \mathbf{p}), e nós de interface (contendo duas incógnitas para cada

equação gerada – \mathbf{u} e \mathbf{p}). Dessa forma, o sistema matricial para cada sub-região fica da seguinte maneira:

- **Sub-região 1**

$$\left[\begin{array}{ccc} \underline{\mathbf{H}}^1 & \underline{\mathbf{H}}^{1,2} & \underline{\mathbf{H}}^{1,3} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{U}}^1 \\ \underline{\mathbf{U}}^{1,2} \\ \underline{\mathbf{U}}^{1,3} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{ccc} \underline{\mathbf{G}}^1 & \underline{\mathbf{G}}^{1,2} & \underline{\mathbf{G}}^{1,3} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{P}}^1 \\ \underline{\mathbf{P}}^{1,2} \\ \underline{\mathbf{P}}^{1,3} \end{array} \right\} \quad (4.2)$$

- **Sub-região 2**

$$\left[\begin{array}{ccc} \underline{\mathbf{H}}^{2,1} & \underline{\mathbf{H}}^2 & \underline{\mathbf{H}}^{2,3} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{U}}^{2,1} \\ \underline{\mathbf{U}}^2 \\ \underline{\mathbf{U}}^{2,3} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{ccc} \underline{\mathbf{G}}^{2,1} & \underline{\mathbf{G}}^2 & \underline{\mathbf{G}}^{2,3} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{P}}^{2,1} \\ \underline{\mathbf{P}}^2 \\ \underline{\mathbf{P}}^{2,3} \end{array} \right\} \quad (4.3)$$

- **Sub-região 3**

$$\left[\begin{array}{ccc} \underline{\mathbf{H}}^{3,1} & \underline{\mathbf{H}}^{3,2} & \underline{\mathbf{H}}^3 \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{U}}^{3,1} \\ \underline{\mathbf{U}}^{3,2} \\ \underline{\mathbf{U}}^3 \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{ccc} \underline{\mathbf{G}}^{3,1} & \underline{\mathbf{G}}^{3,2} & \underline{\mathbf{G}}^3 \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{P}}^{3,1} \\ \underline{\mathbf{P}}^{3,2} \\ \underline{\mathbf{P}}^3 \end{array} \right\} \quad (4.4)$$

Onde os índices indicam a quais sub-regiões os graus de liberdade dos blocos pertencem, sendo que existem incógnitas tanto nos vetores $\underline{\mathbf{U}}$ quanto nos vetores $\underline{\mathbf{P}}$.

Genericamente, pode-se representar (de forma organizada), cada um dos k sistemas de equações anteriores, como segue:

$$\left[\begin{array}{cc} \underline{\mathbf{A}}_c^k & \underline{\mathbf{H}}_i^k \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{X}}_c^k \\ \underline{\mathbf{U}}_i^k \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cc} \underline{\mathbf{B}}_c^k & \underline{\mathbf{G}}_i^k \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{Y}}_c^k \\ \underline{\mathbf{P}}_i^k \end{array} \right\} \quad (4.5)$$

onde:

$$- \underline{\mathbf{A}}_c^k = \begin{bmatrix} \underline{\mathbf{H}}_{c(\mathbf{u})}^k & -\underline{\mathbf{G}}_{c(\mathbf{p})}^k \end{bmatrix} \text{ e } \underline{\mathbf{X}}_c^k = \begin{Bmatrix} \underline{\mathbf{U}}_c^k \\ \underline{\mathbf{P}}_c^k \end{Bmatrix}; \quad (4.6)$$

$$- \underline{\mathbf{B}}_{\bar{c}}^k = \begin{bmatrix} -\underline{\mathbf{H}}_{c(\bar{\mathbf{u}})}^k & \underline{\mathbf{G}}_{c(\bar{\mathbf{p}})}^k \end{bmatrix} \text{ e } \underline{\mathbf{Y}}_{\bar{c}}^k = \begin{Bmatrix} \underline{\bar{\mathbf{U}}}_c^k \\ \underline{\bar{\mathbf{P}}}_c^k \end{Bmatrix}; \quad (4.7)$$

- o índice i corresponde a parcela ligada as superfícies de interface;
- o índice $c(\mathbf{u})$ define a parcela de contorno da k -ésima sub-região com \mathbf{u} como incógnita;
- o índice $c(\mathbf{p})$ define a parcela de contorno da k -ésima sub-região com \mathbf{p} como incógnita.

Para possibilitar então a resolução destes diversos sistemas torna-se necessário aplicar condições de equilíbrio e continuidade entre as interfaces das diversas sub-regiões, de modo a equiparar o número de incógnitas ao número de equações.

As condições de equilíbrio entre as interfaces surgem dos casos em que dois nós pertencentes a duas diferentes sub-regiões, tem as mesmas coordenadas e os correspondentes vetores normais unitários externos com mesma direção, mas com sentidos opostos. Estas condições são dadas pelas seguintes equações:

$$\underline{\mathbf{U}}^{ij} = \underline{\mathbf{U}}^{ji} \text{ e } \underline{\mathbf{P}}^{ij} = -\underline{\mathbf{P}}^{ji} \quad (4.8)$$

onde $\underline{\mathbf{U}}^{mn}$ e $\underline{\mathbf{P}}^{mn}$ são os vetores com os graus de liberdade de deslocamentos e forças de superfícies pertencentes a sub-região m , apresentando interface com a sub-região n .

Observa-se que para nós comuns a somente duas sub-regiões, existirão sempre duas equações para cada par $(\mathbf{u}$ e $\mathbf{p})$ a ser determinado, não necessitando de condições adicionais. No exemplo da Figura (4.1), condições de equilíbrio surgem entre os nós i e j , m e n e entre os nós k e l .

As condições de continuidade são estabelecidas entre contornos de sub-regiões diferentes, que apresentam o mesmo vetor normal em um nó comum. São necessárias para nós comuns a mais de duas sub-regiões, onde as condições de equilíbrio não são suficientes para equiparar o número de equações ao de incógnitas (caso da Figura (4.1)).

Na Figura (4.1) estas condições podem ser estabelecidas entre os nós i, j, m e n , ressaltando-se que a necessidade das mesmas deve-se ao uso de nós múltiplos para representação de descontinuidades das variáveis de campo.

A continuidade é matematicamente estabelecida pelas seguintes equações:

$$\underline{\mathbf{U}}^{ij} = \underline{\mathbf{U}}^{ji} \quad \text{e} \quad \underline{\mathbf{P}}^{ij} = \underline{\mathbf{P}}^{ji} \quad (4.9)$$

Assim, aplicando todas as condições anteriores para o exemplo da Figura (4.1), tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^i &= \mathbf{u}^j = \mathbf{u}^k = \mathbf{u}^l = \mathbf{u}^m = \mathbf{u}^n \quad , \\ \mathbf{p}^i &= -\mathbf{p}^j = -\mathbf{p}^m = \mathbf{p}^n \quad \text{e} \\ \mathbf{p}^k &= -\mathbf{p}^l \end{aligned} \quad (4.10)$$

Observa-se que com estas condições de acoplamento entre os diversos nós das várias sub-regiões, pode-se montar (genericamente) um sistema global acoplado que matricialmente é representado da seguinte forma,

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} \underline{\mathbf{A}}_c^1 & 0 & \cdots & 0 & \underline{\mathbf{I}}_{12}^1 & \underline{\mathbf{I}}_{13}^1 & \cdots & \underline{\mathbf{I}}_{1n}^1 \\ 0 & \underline{\mathbf{A}}_c^2 & \cdots & 0 & \underline{\mathbf{I}}_{12}^2 & \underline{\mathbf{I}}_{13}^2 & \cdots & \underline{\mathbf{I}}_{1n}^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \underline{\mathbf{A}}_c^n & \underline{\mathbf{I}}_{12}^n & \underline{\mathbf{I}}_{13}^n & \cdots & \underline{\mathbf{I}}_{1n}^n \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{x}}_c^1 \\ \underline{\mathbf{x}}_c^2 \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{x}}_c^n \\ \underline{\mathbf{x}}_{12} \\ \underline{\mathbf{x}}_{13} \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{x}}_{1n} \end{array} \right\} = \left[\begin{array}{cccc} \underline{\mathbf{B}}_c^1 & & & \\ & \underline{\mathbf{B}}_c^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \underline{\mathbf{B}}_c^n \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \underline{\mathbf{y}}_c^1 \\ \underline{\mathbf{y}}_c^2 \\ \vdots \\ \underline{\mathbf{y}}_c^n \end{array} \right\} \quad (4.11)$$

onde:

- $\underline{\mathbf{A}}$ contém as parcelas referentes as incógnitas de contorno;
- $\underline{\mathbf{I}}$ contém as parcelas referentes as incógnitas de interface (matrizes de acoplamento entre sub-regiões);
- $\underline{\mathbf{B}}$ contém as parcelas referentes aos valores de contorno prescritos (variáveis prescritas).

E para o exemplo da Figura (4.1), este sistema global é expresso matricialmente por:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}^1 & \mathbf{H}^{1,2} & -\mathbf{G}^{1,2} & \mathbf{H}^{1,3} & -\mathbf{G}^{1,3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{H}^{2,1} & \mathbf{G}^{2,1} & 0 & 0 & \mathbf{H}^2 & \mathbf{H}^{2,3} & -\mathbf{G}^{2,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{H}^{3,1} & \mathbf{G}^{3,1} & 0 & \mathbf{H}^{3,2} & \mathbf{G}^{3,2} & \mathbf{H}^3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{U}^1 \\ \mathbf{U}^{1,2} \\ \mathbf{P}^{1,2} \\ \mathbf{U}^{1,3} \\ \mathbf{P}^{1,3} \\ \mathbf{U}^2 \\ \mathbf{U}^{2,3} \\ \mathbf{P}^{2,3} \\ \mathbf{U}^3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{G}^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{G}^3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{P}^1 \\ \mathbf{P}^2 \\ \mathbf{P}^3 \end{Bmatrix} \quad (4.12)$$

Onde, agora, o número de equações é exatamente igual ao número de incógnitas.

Por fim, aplicando-se as condições de contorno ao sistema matricial de (4.11)/(4.12), obtém-se o sistema global na forma $\underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{f}}$ (Equação (2.15)), como é ilustrado (para o exemplo da Figura (4.1)) na Figura (4.2).

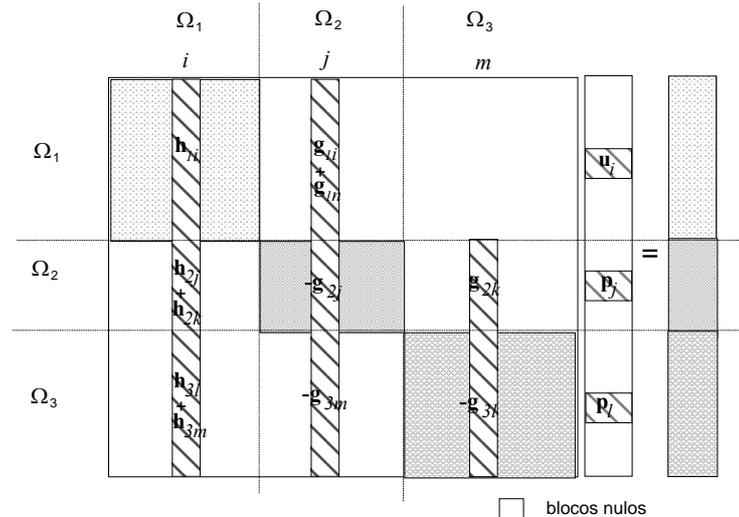


Figura 4.2. Matriz do sistema acoplado.

Porém, a idéia central da estratégia de subestruturação é resolver este sistema explícito global (Figura 4.2), sem realmente montá-lo.

Trabalha-se então com as matrizes das sub-regiões (Equação (4.1)) utilizando-se solvers iterativos, de modo que em cada iteração destes, haja uma transferência dos valores de acoplamento (interface) entre as sub-regiões. Assim, ao longo de cada iteração, procede-se como se os diversos sistemas fossem desacoplados, efetuando-se os produtos parciais matriz-vetor e vetor-vetor sem necessidade de buscar informações de acoplamento. Portanto, pode-se dizer que o sistema matricial explícito é resolvido implicitamente.

As vantagens de tal estratégia são:

- O fato de trabalhar-se com as matrizes locais das sub-regiões implica em um espaço total de memória alocado significativamente inferior ao necessário para montar o sistema global, uma vez que armazenam-se exclusivamente os coeficientes não-nulos;
- O uso de solvers iterativos em conjunto com a estratégia proposta permite implementar diretamente processos de paralelização;
- Pela inexistência da matriz global, não é necessária a otimização de malha, ou seja, a renumeração dos nós.

As desvantagens são:

- Em princípio não há desvantagens. Todavia o procedimento fundamenta-se na aplicação de esquemas iterativos, que apesar de já terem sido adotados na análise de diversos problemas de engenharia de grande porte, ainda carecem de mais experimentos numéricos.

Para facilitar a estratégia de acoplamento, optou-se por criar um processo automatizado e genérico de pesquisa e obtenção das condições de interface. Este processo permite que a subestruturação de qualquer problema seja efetuada sem preocupação com a numeração local das sub-regiões, o que simplifica a tarefa de geração de malha. Conjuntamente faz-se necessário também prever a aplicação destas condições na resolução do sistema acoplado implícito (Equação (4.1)).

Portanto, existem dois problemas distintos a serem resolvidos:

- Obter as condições de interface entre as diversas sub-regiões;
- Aplicar estas condições para a resolução do sistema acoplado.

4.3. PESQUISA DE NÓS DE ACOPLAMENTO

A estratégia adotada para se obter as condições de interface entre um conjunto genérico n de sub-regiões, foi dividida em duas partes:

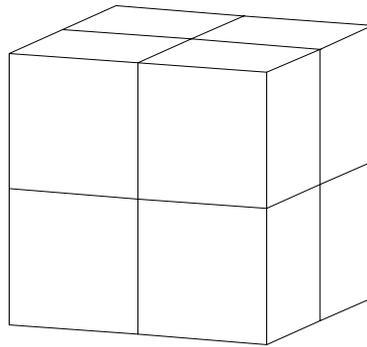
- Pesquisa das condições de acoplamento na interface;
- Pesquisa das condições de continuidade na interface e contorno.

Condições de acoplamento são as condições de ligação (contato) propriamente ditas, entre dois nós, e se verificam entre nós pertencentes a sub-regiões diferentes com vetores normais de mesma direção e sentidos opostos.

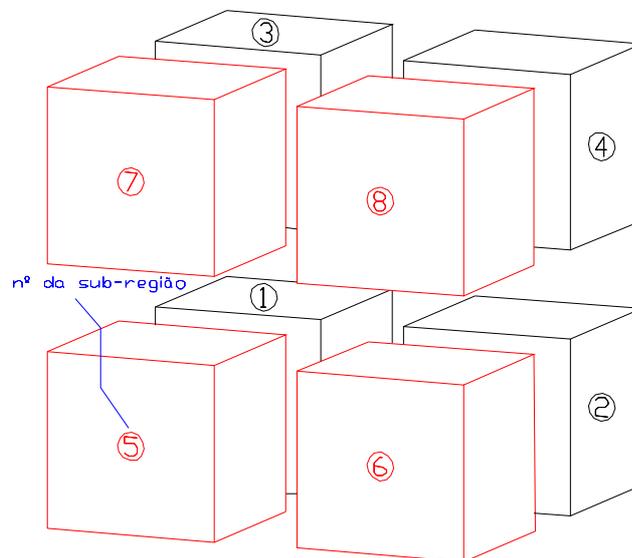
Condições de continuidade são aquelas necessárias para compatibilizar o número de equações com o número de incógnitas, e podem ser obtidas entre nós pertencentes a sub-regiões diferentes, apresentando vetores normais externos de mesma direção e sentido.

Ambas serão exploradas e melhor explicadas nos itens (4.3.1) e (4.3.2) respectivamente, sendo que daqui por diante, quando houver referência a palavra acoplamento, lê-se condições de acoplamento na interface.

Para explicar-se o procedimento completo de obtenção das condições de interface, faz-se uso de um exemplo tridimensional (considerado geral e completo), ilustrado na Figura (4.3a) e (4.3b).



(a) Visão geral do domínio do problema.



(b) Detalhe das sub-regiões criadas.

Figura 4.3. Problema genérico para validação de pesquisa.

Para armazenar os dados de acoplamento de cada sub-região, criaram-se as seguintes variáveis:

- $icoup(i, j)$ → armazena o número do nó acoplado com um dado i -ésimo nó da j -ésima sub-região;
- $isubcoupu(i, j)$ → armazena o número da sub-região, na qual permanecerá a incógnita u deste mesmo i -ésimo nó da j -ésima sub-região;
- $isubcoupp(i, j)$ → armazena o número da sub-região, na qual permanecerá a incógnita p deste mesmo nó i ;
- $icont(i, j)$ → armazena a condição de continuidade deste mesmo nó i .

onde:

- $i = 1, n$, com n sendo o número de graus de liberdade da sub-região em questão;
- $j = 1, nsub$, com $nsub$ sendo o número de sub-regiões existentes.

Também se criou uma nova opção para a variável $ifip$ para indicar, além das condições de contorno (opções já existentes), também a condição de acoplamento. ($ifip(i, j) = 2$).

Observa-se que para nós do contorno, as variáveis $icoup$, $isubcoupu$, $isubcoupp$ e $icont$ possuem valor nulo, e também, que a pesquisa é válida para problemas escalares e vetoriais, pois a mesma é feita por direção, para cada nó de acoplamento.

Ao longo da explanação sobre a pesquisa, estas variáveis serão melhor explicadas.

4.3.1. Pesquisa das condições de acoplamento

A idéia proposta para a obtenção das condições de acoplamento na interface é feita por elemento, e está descrita a seguir:

- Calculam-se as coordenadas dos centros de todos os elementos das diversas sub-regiões (caso tridimensional);

- Faz-se uma varredura de todas as sub-regiões, comparando-se as coordenadas centrais de cada elemento de uma dada sub-região i , com as coordenadas centrais de todos os elementos das demais sub-regiões restantes;
- Caso sejam identificados dois elementos com as mesmas coordenadas centrais, respeitada uma tolerância mínima entre estas coordenadas, procede-se da seguinte forma:
 1. Faz-se uma varredura pela incidência destes dois elementos, comparando-se as coordenadas dos nós do primeiro, com as dos nós do segundo, de modo a obter-se um par de nós com as mesmas coordenadas (nós acoplados), respeitada a devida tolerância;
 2. Por fim, determinam-se todos os pares de nós acoplados restantes, entre os dois elementos, percorrendo-se, de maneira adequada, as incidências destes elementos, a partir do primeiro par encontrado.

Ao final da pesquisa, os seguintes resultados devem ser obtidos:

- As variáveis $icoup(n, nsub)$, $isubcoupu(n, nsub)$ e $isubcoupp(n, nsub)$ devem estar preenchidas seguindo ao seguinte critério:
 1. Quando dois nós são identificados com sendo acoplados, padroniza-se alocar a incógnita u no respectivo nó da menor sub-região, e a incógnita p no da maior. Isto é feito para cada grau de liberdade do nó, salvo quando houver outra prescrição, por exemplo, contato para uma dada direção;
- A variável $icont(n, nsub)$, que diz respeito a continuidade, não foi obtida ainda, mas já possui um valor auxiliar, diferente de zero, para permitir a varredura dos nós que realmente interessam à pesquisa de continuidade. Este valor foi estabelecido durante a pesquisa de acoplamento, para todo e qualquer nó que possui um outro nó duplo na mesma sub-região. Um segundo valor foi estabelecido para nós de sub-regiões que não possuem duplos, mas que fazem parte de casos especiais de continuidade.

Assim, no exemplo da Figura (4.4), para os nós acoplados 1 da sub-região 1, e 5 da sub-região 3, as variáveis de acoplamento ficam da seguinte forma:

$$icoup(6,1) = 2 ; isubcoupu(6,1) = 1 ; isubcoupp(6,1) = 2$$

$$icoup(2,2) = 6 ; isubcoupu(2,2) = 1 ; isubcoupp(2,2) = 2$$

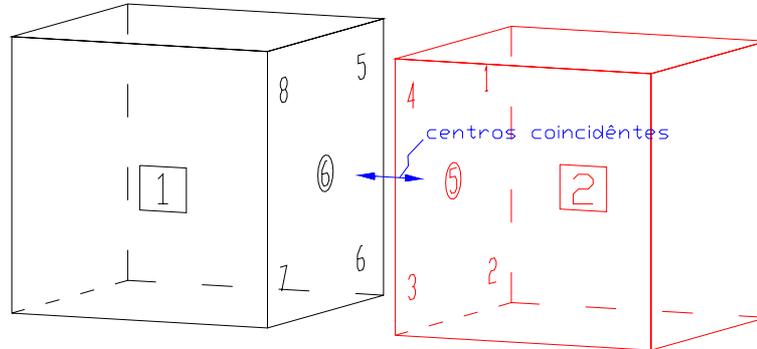


Figura 4.4. Elementos acoplados.

Uma das principais vantagens desse método de pesquisa de interface é que, por trabalhar com as coordenadas dos centros dos elementos, evita o cálculo de vetores normais para identificação de acoplamento, sendo então muito mais eficiente do que uma pesquisa por coordenadas nodais.

4.3.2. Pesquisa das condições de continuidade

Existem basicamente, dois tipos de continuidades a serem consideradas:

- Continuidade de nós da interface;
- Continuidade de nós de contorno, entre sub-regiões que apresentam \mathbf{u} prescrito em ambas.

Para a obtenção destas condições, trabalha-se não mais com pesquisa por elementos, mas sim através dos próprios nós.

4.3.2.1. Continuidade na interface

O objetivo desta pesquisa é eliminar as variáveis excedentes em cada sub-região com relação ao número de equações disponíveis no sistema global. Então, para um dado

ponto do espaço, comum a diversas sub-regiões, deve existir somente uma incógnita por sub-região.

Antes de descrever as etapas envolvidas neste processo, é conveniente citar quais são os possíveis valores assumidos pela variável $icont(n, nsub)$ em função da condição de um dado nó.

- $icont(n, nsub) = 1$ → a incógnita **u** da continuidade será armazenada neste nó;
- $icont(n, nsub) = 2$ → a incógnita **p** da continuidade será armazenada neste nó;
- $icont(n, nsub) = 3$ → esta equação será eliminada por adição a outra (condição de continuidade);
- $icont(n, nsub) = 4$ → esta equação será eliminada por adição a outra (condição de continuidade), com inversão do sinal da incógnita **p**;
- $icont(n, nsub) = 5$ → existência de continuidade de contorno neste nó.

O processo de pesquisa está dividido em quatro etapas, a saber:

- Determinar todos os nós que fazem parte de um "nicho" de continuidade, ou seja, determinar um dado ponto da interface, no qual concorrem mais de duas sub-regiões;
- Determinar todas as continuidades necessárias de modo a igualar o número de incógnitas ao de equações neste ponto;
- Alocar e fixar todos os nós isolados, ou seja, aqueles que não pertencem a nenhuma continuidade, no ponto em questão;
- Promover uma re-alocação geral das variáveis nas diversas sub-regiões envolvidas, de modo a fixar somente uma incógnita em cada sub-região.

Rapidamente, comenta-se a estrutura de cada uma das tarefas, buscando-se simultaneamente no exemplo da Figura (4.1), detalhá-las para esclarecimento.

a) Determinação do grupo de nós (nicho):

Como citado anteriormente, uma separação prévia dos nós de interesse para a pesquisa de continuidade já foi feita durante a pesquisa de acoplamento. Portanto, ressalta-se que a determinação dos grupos de nós de continuidade ficou restrita a uma pequena gama de nós.

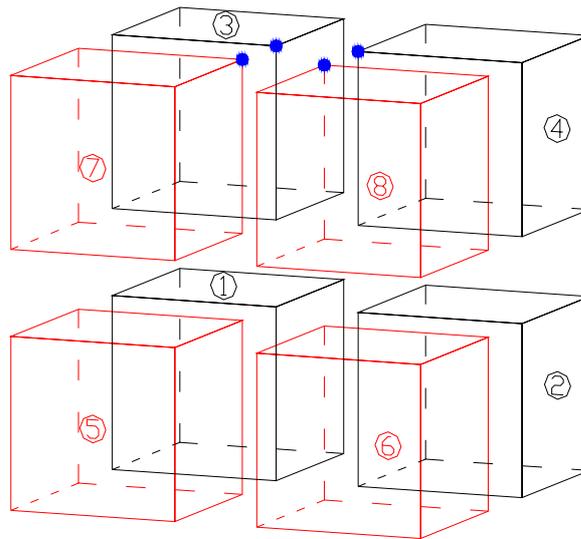
Para determinar quais nós pertencem a um possível grupo de continuidade, procede-se da seguinte forma:

- Dentre os nós remanescentes da pesquisa de acoplamento (possíveis nós de continuidade), faz-se uma varredura partindo da menor sub-região para a maior, comparando-se as coordenadas de cada um destes nós, com as dos nós de todas as sub-regiões restantes, para obter-se todos aqueles de mesmas coordenadas;
- Para cada grupo encontrado, aplicam-se as outras etapas de pesquisa, de modo a já estabelecer completamente as condições de continuidade existentes.

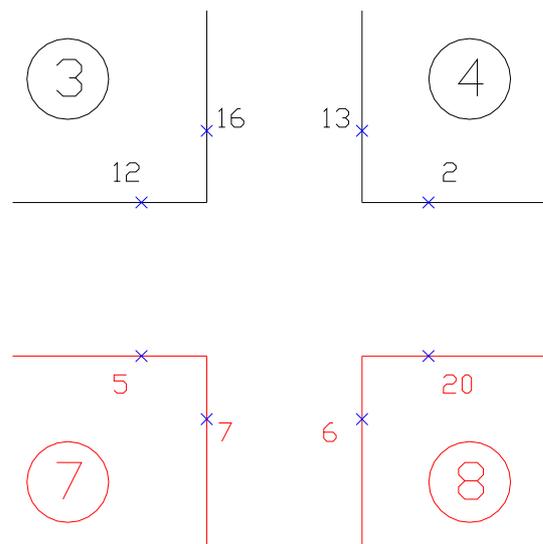
Portanto, aplicando-se esta etapa para o exemplo da Figura (4.1), obteriam-se diversos grupos a serem pesquisados quanto a continuidade. Tomando-se, por exemplo, o grupo apresentado na Figura (4.5a) e (4.5b), ter-se-iam como nós deste grupo os listados na Tabela (4.1).

Tabela 4.1. Grupo de nós envolvidos em uma continuidade.

nós	sub-região
12, 16	3
2, 13	4
5, 7	7
6, 20	8



(a) Visão geral do grupo de nós de continuidade.



(b) Detalhe da numeração dos nós do grupo.

Figura 4.5. Grupo de nós pertencentes ao nicho superior.

b) Determinação das continuidades do grupo de nós (nicho):

Para se saber quantas continuidades são necessárias em um determinado grupo de nós, utiliza-se a seguinte equação:

$$n_{cont} = n_{un} - n_{eq} \quad (4.13)$$

onde:

- $ncont$ é o número de continuidades necessárias;
- nun é o número de incógnitas daquele grupo de nós, dado por:
 - $nun = nnode / 2 + 1$, onde $nnode$ é o número de nós envolvidos no nicho;
- neq é o número de equações existentes, dado por:
 - $neq = nsubnode$, onde $nsubnode$ é o número de sub-regiões envolvidas no nicho.

Destaca-se que o número de incógnitas existentes no nicho é constituído por um u (deslocamento) e $nnode / 2$ p 's (forças). Por este motivo, adotou-se fixar a incógnita u na sub-região de menor ordem envolvida neste nicho, e em seguida distribuir as incógnitas p 's através dos processos adiante descritos.

Pode-se visualizar na Figura (4.6) o grupo de incógnitas do exemplo da Figura (4.5), sendo que o número de continuidades necessárias é dado a seguir:

- $nun = \frac{(2 \times 8)}{2} (p's) + 1 (u) = 5$ (incógnitas);
- $neq = 4$ (nº sub - regiões);
- $ncont = 5 - 4 = 1$, ou seja, é necessária uma continuidade.

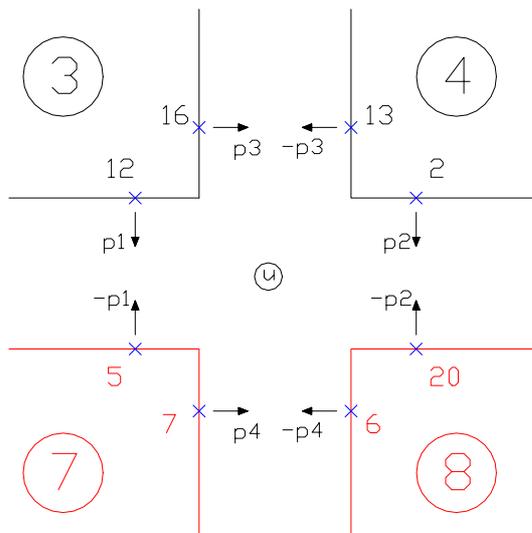


Figura 4.6. Grupo de incógnitas do nicho.

Assim, sabendo-se quantas são as continuidades necessárias, deve-se determinar quais são as existentes no grupo, e se elas são suficientes para eliminar todas as incógnitas p 's excedentes. Para isso, segue-se os procedimentos dados na seqüência:

- Determinam-se os vetores normais de todos os nós existentes no grupo;
- Varrem-se estes nós, comparando-se quais possuem o mesmo vetor normal;
- Identificados dois nós com a mesma normal em diferentes sub-regiões, atribui-se uma continuidade aos mesmos, sendo que estes formarão um grupo de quatro nós, nesta ordem:
 1. primeiro nó de normal identificada e seu nó acoplado;
 2. segundo nó de normal identificada e seu nó acoplado;
 3. Escolhe-se então, um destes quatro nós para receber a variável p do grupo.
- Procede-se continuamente até que o número de continuidades encontrado seja igual ao necessário, sendo que em caso de insuficiência destas continuidades, torna-se impossível resolver o problema para o número de sub-regiões idealizadas.

Observando-se o exemplo na Figura (4.5), e seguindo-se as etapas anteriores, obtém-se a continuidade listada na Tabela (4.2):

Tabela 4.2. Continuidade obtida no nicho.

continuidades / símbolo	nós	sub-regiões	alocação da incógnita p
1 (□)	12	3	-
	5	7	x
	2	4	-
	20	8	-

Pela lógica de alocação de incógnitas, a mesma (continuidade) ficará alocada conforme ilustra a Figura (4.7), através da seta. Na mesma Figura pode-se observar a alocação da variável u .

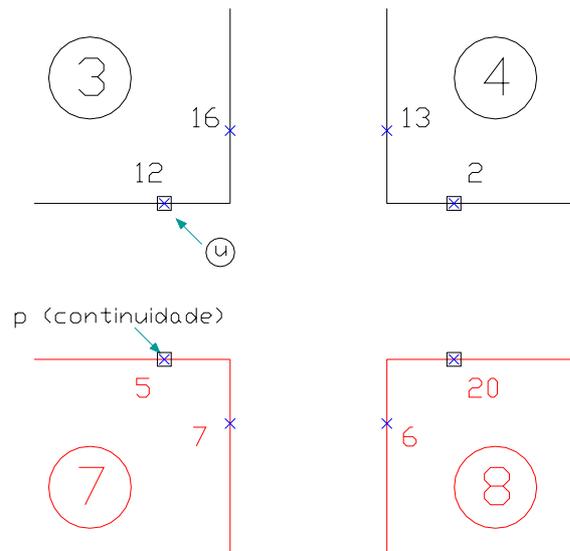


Figura 4.7. Alocação inicial de incógnitas.

c) Fixação dos nós isolados:

A fixação destes nós é necessária para garantir que as incógnitas existentes nos mesmos (**p's**) sejam alocadas.

O que se faz é verificar quais nós não pertencem a nenhuma continuidade, e através de processo iterativo, remanejar as correspondentes incógnitas, para que cada uma seja fixada em uma sub-região diferente. Nesta etapa, podem existir incógnitas de nós isolados alocadas na mesma sub-região das incógnitas de continuidade.

Na Tabela (4.3), são listados os nós isolados para o nicho do exemplo, sendo que cada nó sempre vem acompanhado do seu acoplado.

Tabela 4.3. Conjuntos de nós isolados.

conjunto	nós	sub-regiões	fixação da incógnita p
1	16	3	-
	13	4	x
2	7	7	x
	6	8	-

Pode-se verificar a fixação destas incógnitas na Figura (4.8), pela marcação com um círculo pintado.

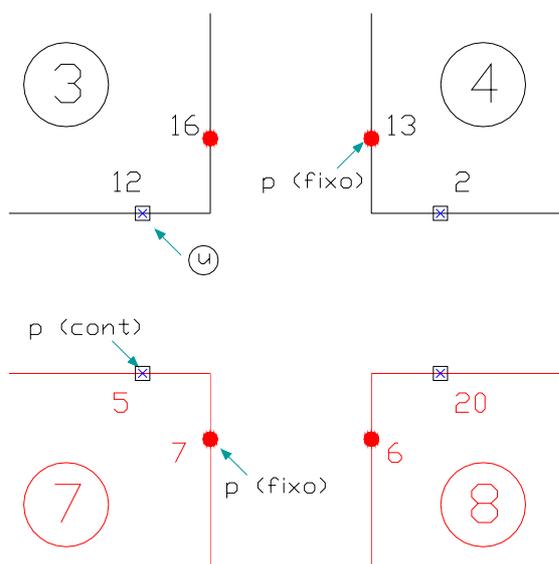


Figura 4.8. Fixação dos nós isolados.

d) Realocação geral das incógnitas:

Por fim, deve-se garantir que existirá somente uma incógnita alocada por sub-região. Observa-se que as incógnitas correspondentes a nós isolados não podem ser mais redistribuídas, restando somente distribuir as incógnitas das continuidades.

Para tanto, aplica-se um processo iterativo sobre as continuidades existentes, de modo a remanejá-las convenientemente. Este processo obedece a seguinte seqüência:

- Percorrem-se todos os nós pertencentes as continuidades, buscando-se sub-regiões sem nenhuma variável alocada;
- Quando for identificada tal sub-região, realoca-se a incógnita da respectiva continuidade envolvida, liberando-se a posição anteriormente alocada. Isto é feito de tal sorte, que a continuidade alterada libere justamente a sub-região com mais de uma incógnita fixada;

- Também se realiza uma pesquisa inversa, ou seja, através de sub-regiões com mais de uma incógnita alocada, para garantir que não se recaia em um processo iterativo estagnado (ciclo infinito).

Dessa forma garante-se que haverá uma redistribuição correta das incógnitas, e em consequência a eliminação completa das variáveis excedentes.

Pode-se acompanhar a tarefa de redistribuição através da Figura (4.9), observando-se que existe uma variável alocada na sub-região 7, a ser remanejada.

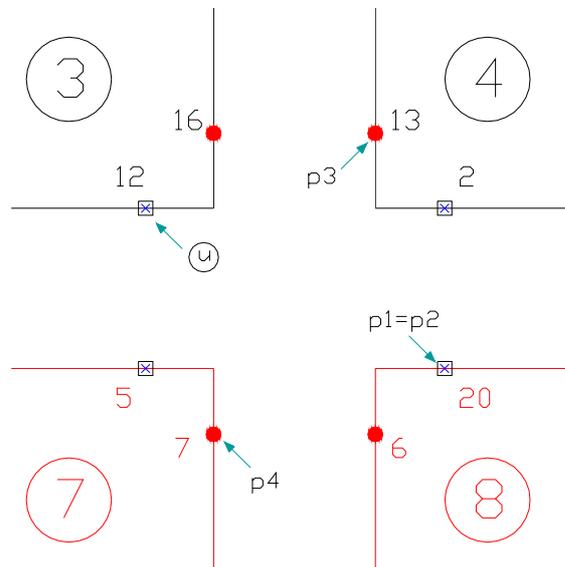


Figura 4.9. Realocação geral de incógnitas.

Dessa forma, a variável u ficará alocada na sub-região 3 e os p 's necessários para compor a solução neste ponto, nas demais sub-regiões. Por consequência, a variável $icont(i, isub)$ de cada um dos nós do grupo, receberá o valor da correspondente opção mencionada anteriormente, conforme apresentado na Tabela (4.4).

De maneira geral, esta pesquisa é feita para todo e qualquer grupo de nós, que necessite de continuidades para eliminar equações desnecessárias. No ANEXO I, encontra-se a seqüência de pesquisa das condições de continuidade para o nicho central do exemplo

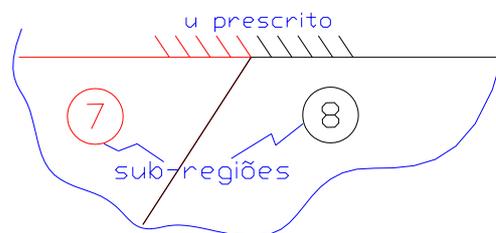
apresentado nas Figuras (4.3a) e (4.3b), que envolve oito sub-regiões e várias continuidades.

Tabela 4.4. Valores da variável de continuidade - *icont*.

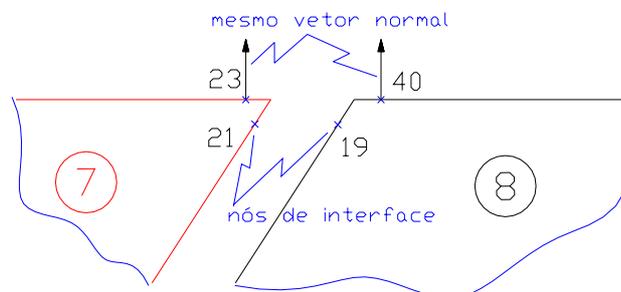
valor de <i>icont</i>	comentário
$icont(12,3) = 1$	incógnita u alocada neste nó;
$icont(16,3) = 3$	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada);
$icont(2,4) = 3$	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada);
$icont(13,4) = 2$	incógnita p alocada neste nó;
$icont(5,7) = 4$	coluna/linha eliminada com inversão de sinal;
$icont(7,7) = 2$	incógnita p alocada neste nó;
$icont(6,8) = 3$	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada);
$icont(20,8) = 2$	incógnita p alocada neste nó.

4.3.2.2. Continuidade no contorno

Existem situações em problemas de subestruturação, em que a variável **u** é prescrita em dois ou mais contornos adjacentes, pertencentes a sub-regiões distintas, conforme ilustrado na Figura (4.10a) e (4.10b).



(a) Visão geral do domínio.



(b) Detalhe da geometria no nicho de continuidade de contorno.

Figura 4.10. Contorno contendo prescrição da variável **u**.

Nesses casos, todos os grupos de nós de mesmas coordenadas existentes entre estas sub-regiões (que apresentem tal prescrição), formarão conjuntos linearmente dependentes. Para solucionar este problema, faz-se necessário eliminar, através de adição, estas equações excedentes (eliminar incógnitas).

A pesquisa de continuidade no contorno fará então o levantamento de todas as situações em que isto ocorrer, procedendo da seguinte forma:

- Pelo mesmo processo de pesquisa que se determina quais nós pertencem a um nicho de continuidade de interface, faz-se a determinação de todos os grupos de nós de contorno (nós com mesmas coordenadas) que apresentam prescrita a variável \mathbf{u} ;
- Calculam-se os vetores normais para cada um dos nós do grupo;
- Verifica-se, na seqüência, se existe continuidade de contorno (normais iguais) entre todos esses nós. Caso esta averiguação não seja atendida, torna-se impossível resolver o problema;
- Adota-se um nó para permanecer com a incógnita \mathbf{p} , transformando-se os demais em nós de interface acoplados com este;
- Adequam-se todas as variáveis de acoplamento dos referidos nós, para simular esta situação, de modo a resolver o problema de forma conveniente. Ressalta-se que a variável $icont(i, isub)$ assume o valor 5.

Assim, as equações excedentes são eliminadas e o sistema fica equilibrado.

Para o exemplo da Figura (4.10), converte-se o nó 40 da sub-região 8, fazendo suas variáveis de acoplamento assumirem os valores apresentados na Tabela (4.5):

Tabela 4.5. Valores das variáveis de acoplamento (continuidade de contorno).

valor de $icont$	comentário
$ifip(40,8) = 2$	nó de interface;
$icoup(40,8) = 23$	nó acoplado onde se encontra a variável \mathbf{p} ;
$isubcoupu(40,8) = 8$	sub-região contendo a incógnita \mathbf{u} , que neste caso não existe (simulação de acoplamento);
$isubcoupp(40,8) = 7$	sub-região contendo a incógnita \mathbf{p} ;
$icont(40,8) = 5$	continuidade de contorno.

Após a realização de todas as pesquisas anteriores, as condições completas de interface entre as diversas sub-regiões estarão estabelecidas. Assim, utilizando-se estas informações contidas nas variáveis de acoplamento, será possível resolver o sistema matricial global explícito, de forma implícita (sem montagem da matriz global).

4.4. RESOLUÇÃO DO SISTEMA ACOPLADO

A resolução do sistema matricial global acoplado de forma implícita baseia-se inteiramente no uso dos solvers iterativos.

Estes solvers, como visto no Capítulo 3, basicamente realizam operações de multiplicação matriz-vetor e vetor-vetor utilizando o sistema matricial global explícito (Figura 4.2).

Estas operações são realizadas sucessivamente ao longo de um processo iterativo, de modo a conduzir a resposta do sistema para a solução correta do problema, respeitada uma certa tolerância preestabelecida.

Como a idéia é resolver o problema realizando estas operações de forma independente entre as diversas sub-regiões, dividem-se as tarefas dos solvers em duas etapas distintas:

- Transferência das variáveis de acoplamento entre todas as sub-regiões;
- Realização das referidas operações de multiplicação, de forma independente para cada sub-região.

4.4.1. Transferência entre sub-regiões

Dizer que um determinado nó de uma sub-região está acoplado, implica em gerar colunas na matriz global que deverão multiplicar variáveis pertencentes a outras sub-regiões, conforme pode ser visualizado na Figura (4.2).

No caso de solvers iterativos, pode-se então buscar os valores destas variáveis, antes de se proceder as multiplicações, em cada nova iteração.

Logo, a fase de transferência visa justamente fornecer todos os valores de variáveis acopladas, para cada uma das sub-regiões envolvidas. Dessa forma, poder-se-á realizar as tarefas de multiplicação de forma independente.

Imagine-se, por exemplo, que em um dado nó de acoplamento pertencente à sub-região A, alocou-se a variável u, e no correspondente nó acoplado de outra sub-região B, a variável p. A cada nova iteração será necessário transferir o valor atual de p para a sub-região A e o de u para a sub-região B.

A fim de tornar possível estas transferências, permitindo realizar de forma organizada todas as operações independentes, criou-se um vetor auxiliar, em cada sub-região, para armazenar os dados de acoplamento.

Este vetor possui os mesmos índices do vetor que contém as incógnitas do problema, e permite desta forma, acesso direto aos valores de acoplamento.

Portanto, basta utilizar as condições de interface, já obtidas na pesquisa de interface (Item 4.3), para realizar de forma organizada todas as transferências entre sub-regiões.

4.4.2. Operações de multiplicação

Como as operações de multiplicação são realizadas independentemente para cada sub-região, sempre que houver uma atualização das variáveis dentro de uma dada iteração, haverá a necessidade de uma nova transferência entre as sub-regiões, para permitir esta independência.

Os sub-sistemas matriciais das diversas sub-regiões estão no formato visualizado na Equação (4.1). Destaca-se que as condições de contorno já foram aplicadas para montar

o vetor lado direito, e portanto, somente serão utilizadas as colunas das matrizes $\underline{\mathbf{H}}^k$ e $\underline{\mathbf{G}}^k$, que corresponderem a incógnitas do sistema.

Merecem consideração especial as multiplicações matriz-vetor, por apresentarem três situações distintas, a saber:

- Quando a coluna da matriz a ser multiplicada pertencer ao contorno;
- Quando a coluna a ser multiplicada pertencer à interface e possuir a variável \mathbf{u} alocada em outra sub-região;
- Quando a coluna a ser multiplicada pertencer à interface e possuir a variável \mathbf{p} alocada em outra sub-região.

No primeiro caso, basta realizar-se a multiplicação da respectiva coluna da matriz $\underline{\mathbf{H}}^k$, pela correspondente incógnita de contorno.

Nos segundo e terceiro caso, existem duas colunas a multiplicar, uma em $\underline{\mathbf{H}}^k$ e outra em $\underline{\mathbf{G}}^k$.

Portanto, se \mathbf{u} for a incógnita alocada nesta sub-região k , significa que a incógnita \mathbf{p} foi transferida da correspondente sub-região acoplada, para a presente sub-região. Desta forma, o produto realizado tem o formato a seguir:

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{g} \cdot \mathbf{p} \tag{4.14}$$

Onde o sinal de adição é devido a duas inversões de sinal:

- A primeira referente a inversão do vetor normal, existente entre os nós acoplados;
- A segunda referente a não transferência da coluna de $\underline{\mathbf{G}}^k$ para a matriz $\underline{\mathbf{H}}^k$, por se estar trabalhando com resolução implícita.

Para o caso em que a incógnita u está alocada em outra sub-região, procede-se da mesma maneira, com exceção da primeira inversão de sinal. Assim, o produto realizado ficará da seguinte forma:

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{p} \tag{4.15}$$

4.5. ESPARSIDADE DO SISTEMA

Um conceito importante a ser apresentado é o de esparsidade.

Esparsidade é a relação entre o número de coeficientes nulos da matriz global do sistema e o número total de coeficientes desse sistema.

Como a estratégia de acoplamento trabalha com as matrizes locais das diversas sub-regiões, a esparsidade torna-se parâmetro importante, pois indica a economia de espaço alocado em memória, com relação à alocação (não realizada) do sistema matricial global (apresentado na Equação (4.11) e Figura (4.2)).

CAPÍTULO 5 – PARALELIZAÇÃO

5.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, será apresentado o conceito de processamento paralelo, atualmente muito explorado para a resolução de problemas de grande porte, uma vez que a idéia central deste tipo de processamento, em termos gerais, é, exatamente, repartir pelo conjunto de processadores disponíveis em um supercomputador ou *cluster* de computadores uma dada tarefa a ser executada. Desse modo objetiva-se tanto diminuir o tempo total de execução de uma determinada análise computacional, como também efetivamente possibilitar análises de modelos de grande porte (com centenas de milhares de graus de liberdade), usuais em análises tridimensionais (Kamiya e Iwase, 1996, 1997; Zucchini, 2000; Hsiao et al., 2000; Mansur e Bulcão, 2001).

Apresentam-se então, as técnicas básicas de paralelização e as definições e conceitos envolvidos neste processo, com ênfase na estratégia de decomposição de domínios.

Destaca-se a questão de simulação virtual do processamento paralelo, realizada por *softwares* específicos (PVM; Geist et al., 1996), que será de grande valia para a validação deste trabalho. Por fim, descreve-se o *cluster* utilizado para testar o algoritmo elaborado.

5.2. CONCEITO DE PARALELIZAÇÃO

O conceito de paralelização é bastante simples e segundo Mansur e Bulcão (2001), consiste em subdividir uma determinada tarefa (problema) a ser resolvida, em subtarefas menores, distribuindo-as entre um grupo com vários processadores/computadores, encarregados de processá-las. Estas subtarefas podem ser independentes ou não, dependendo do tipo de problema a ser resolvido e da técnica utilizada.

Para problemas de grande porte, a paralelização torna-se, muitas vezes, a única alternativa existente para resolver os mesmos, considerando-se os seguintes aspectos:

- Aumento da velocidade de processamento da análise;
- Custo econômico reduzido.

Como uma máquina de grande porte pode apresentar um custo de aquisição elevadíssimo, inviabilizando muitas vezes sua compra, uma alternativa mais econômica e viável, é a utilização de diversas máquinas menores trabalhando em rede. A Figura (5.1) ilustra um esquema padrão de montagem e conexão de um grupo de computadores (denominado "*cluster*") para processamento paralelo.

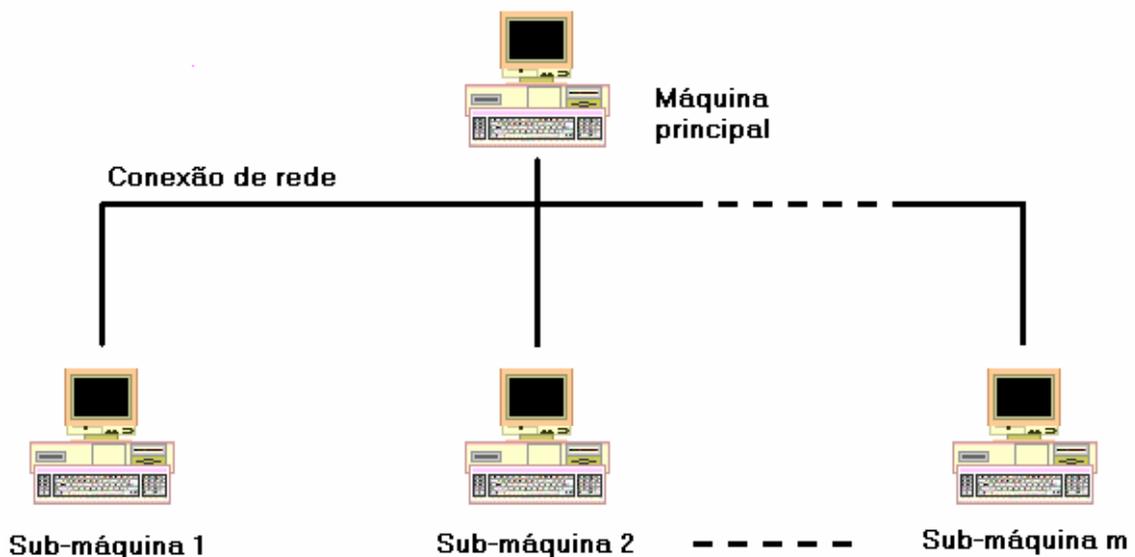


Figura 5.1. Configuração padrão para paralelização – “cluster”.

Existem basicamente duas formas de se paralelizar problemas de engenharia:

- Divisão de tarefas;
- Decomposição de domínios.

A primeira consiste em atribuir para cada uma das máquinas, uma determinada atividade, de modo a dividir as tarefas a serem realizadas. Esta técnica é muito utilizada para problemas dinâmicos, onde se necessita, por exemplo, obter a resposta para várias frequências independentemente. De maneira geral, utiliza-se esta técnica, quando cada máquina do cluster possui capacidade de processamento elevada, permitindo processar uma tarefa completa, individualmente.

A segunda refere-se a divisão da geometria do problema a ser resolvido em diversos domínios, de modo que cada máquina fique responsável, por exemplo, por um deles.

Para ilustrar a paralelização por decomposição de domínios, que é a de maior interesse no presente trabalho, apresenta-se os exemplos de fluxogramas básicos de processamento paralelo, nas Figuras (5.2) e (5.3).

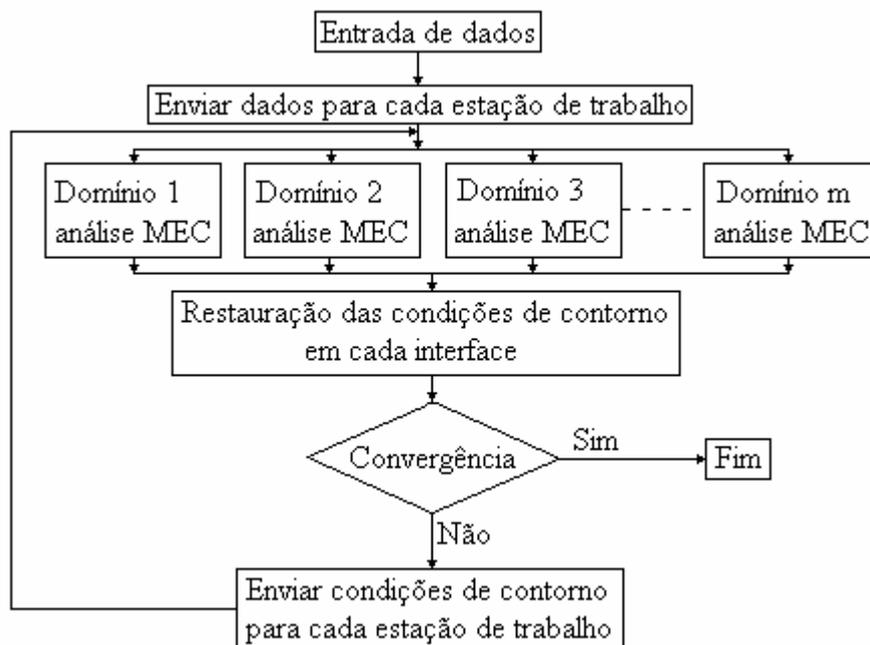


Figura 5.2. Fluxograma da subdivisão de domínios para acoplamento EC/EC.

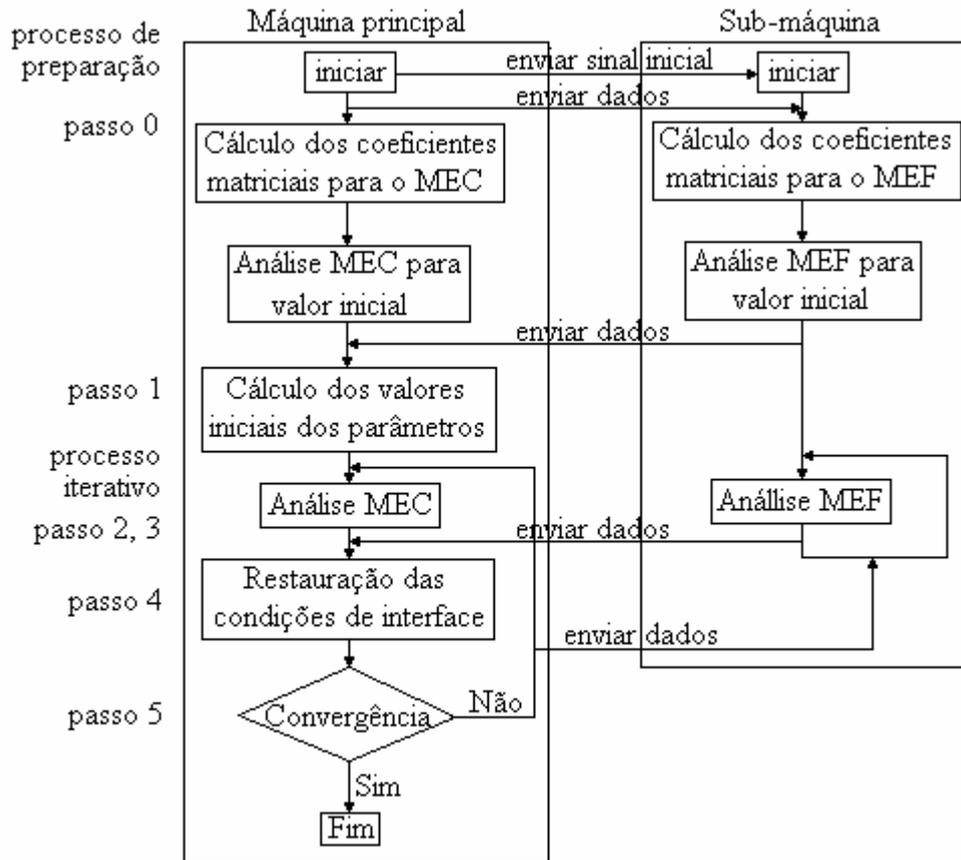


Figura 5.3. Fluxograma da subdivisão de domínios para EC/EF.

5.3. ESQUEMA MASTER-SLAVE

Dentre os diversos esquemas existentes para a resolução de problemas com processamento paralelo, pode-se destacar o esquema master-slave, que será utilizado neste trabalho juntamente com a técnica de decomposição de domínios.

Este esquema trabalha através de dois programas distintos, “um mestre e outro escravo”, que se comunicam transferindo informações pertinentes ao processo. A função principal de cada um deles é descrita na seqüência.

5.3.1. Programa ‘master’

Gerencia todas as operações existentes ao longo da resolução de um problema, sincronizando as diversas tarefas executadas nos *slaves*. Destaca-se que o programa *master* fica alocado em somente um computador, sendo geralmente aquele de interface com o usuário. Dentre as principais atividades realizadas pelo mesmo, destacam-se:

- A inicialização de todos os *slaves*;
- Leitura de todos os dados de entrada;
- Transferência dos dados de cada sub-região, para o respectivo *slave*;
- Sincronização e gerenciamento do processo de montagem matricial e de resolução do sistema acoplado;
- Restauração da resposta acoplada, a partir dos *slaves*, e impressão para arquivo de saída.

5.3.2. Programa ‘slave’

Executa a parte pesada do processamento nos diversos computadores envolvidos no esquema paralelo. Isso é feito através da inicialização do programa *slave* em todas estas máquinas, operação esta, realizada pelo *master*. Desta forma, cada sub-região é automaticamente associada a um determinado equipamento para a realização das operações de transferência e processamento. Dentre as principais tarefas do programa *slave*, realizadas por sub-região (em cada máquina), destacam-se:

- Preparação do domínio de integração;
- Montagem de todas as matrizes e vetores necessários;
- Resolução do sistema matricial acoplado, envolvendo operações de multiplicação e transferência, conforme cada solver iterativo. Observa-se que as transferências realizadas durante o processo iterativo do solver ocorrem diretamente entre os respectivos *slaves* de sub-regiões acopladas.

5.4. DEFINIÇÕES

Existem alguns parâmetros clássicos para avaliar a performance (desempenho) de um esquema paralelo, dentre os quais, destacam-se os seguintes:

5.4.1. Speedup (S)

Parâmetro que avalia o ganho de tempo de execução, decorrente da paralelização de um certo problema, considerando-se sua execução em um determinado número de processadores.

Pode ser obtido através da comparação entre os tempos de execução do programa paralelo em um único processador, com o mesmo código executado em N processadores (Mansur e Bulcão, 2001). A expressão para sua obtenção é dada por,

$$S = \frac{T_1}{T_N} \quad (5.1)$$

onde:

- T_1 é o tempo de execução do código em paralelo em um único processador.
- T_N é o tempo de execução do código em paralelo em N processadores.

5.4.2. Eficiência (E)

Avalia a performance do esquema paralelo através da equação,

$$E = \frac{S}{N} = \frac{T_1}{N \times T_N} \quad (5.2)$$

onde N é o número de processadores em paralelo.

Uma eficiência de 100% indica que resolvendo-se um problema com N processadores, reduz-se o tempo de execução em N vezes, com relação à execução em um único processador.

5.4.3. Granularidade (G)

Parâmetro definido como sendo a relação entre as parcelas dos tempos gastos com processamento (T_{proc}) e com comunicação entre processos (T_{com}), para um determinado programa executado em paralelo com N processadores. A expressão para sua obtenção é,

$$G = \frac{T_{\text{proc}}}{T_{\text{com}}} \quad (5.3)$$

Observa-se que é importante buscar maximizar seu valor para aplicações em paralelo, para que a eficiência do programa seja elevada. Isso pode ser feito através de melhorias no algoritmo do programa, ou também com utilização de hardware mais adequado.

5.5. SOFTWARE DE SIMULAÇÃO PVM

Uma ferramenta importante para possibilitar a implementação de algoritmos paralelos é o software de simulação PVM (Parallel Virtual Machine), disponível para “download” gratuito em diversos endereços de Internet. Este programa é responsável pelo gerenciamento das transferências entre computadores, e trabalha tanto em ambientes Windows quanto Linux.

O software pode atuar de duas formas distintas:

- Como gerenciador de um cluster de computadores real;
- Como emulador, simulando diversos processadores em uma única máquina.

Em ambos os casos, faz-se necessário utilizar comandos específicos da biblioteca PVM, para realizar qualquer tarefa que envolva comunicação entre duas ou mais máquinas.

5.6. DESCRIÇÃO DO CLUSTER

Para realizar testes de eficiência com os algoritmos de acoplamento BE/BE paralelos desenvolvidos, recorreu-se ao uso de um cluster de computadores dedicados, com as seguintes características:

Tabela 5.1. Descrição das características do cluster.

Número de nós (máquinas)	8
Conexão entre os nós	Fast ethernet switch
Processador	Pentium III (Katmai) 550 Mhz - 512 Kb cachê
Memória RAM por nó	768 Mb
Sistema de disco	SCSI RAID5 via NFS
Ambiente	LINUX

CAPÍTULO 6 – APLICAÇÕES

6.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, uma série de aplicações são apresentadas buscando validar as estratégias desenvolvidas ao longo dos capítulos anteriores.

Existem basicamente três algoritmos a serem verificados quanto ao funcionamento e eficiência, a saber:

- Estratégia de pesquisa de interfaces;
- Resolução via solvers iterativos, com a formulação de acoplamento BE/BE idealizada;
- Paralelização da formulação de acoplamento.

As aplicações escolhidas são tridimensionais e foram selecionadas visando explorar da melhor maneira possível as potencialidades do programa como um todo.

6.2. PROBLEMA 1 – TRANSFERÊNCIA DE CALOR

6.2.1. Objetivo

Um ponto fundamental no esquema de acoplamento proposto neste trabalho, é que a pesquisa de interfaces funcione corretamente, para qualquer tipo de geometria ou número de sub-regiões. Com este intuito, um problema simples de transferência de calor é resolvido explorando-se exaustivamente as configurações de malha e número de sub-regiões.

Ressalta-se que todas as configurações exploradas neste problema escalar foram adaptadas e igualmente verificadas para os módulos elastostático e elastodinâmico, apresentando o mesmo resultado de pesquisa. Isto é esperado, já que a técnica de pesquisa trabalha com dados de geometria.

6.2.2. Modelo numérico proposto

A Figura (6.1) apresenta uma visão geral do problema e condições de contorno, destacando-se que as dimensões utilizadas L_1 , L_2 e L_3 , não são constantes, assumindo diversas configurações diferentes.

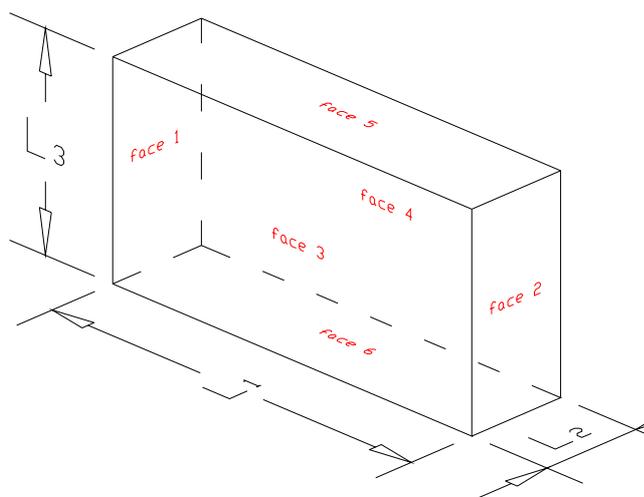


Figura 6.1. Visão geral do problema.

As condições de contorno são:

- Temperatura de 100 °C na face 1;
- Temperatura de 0 °C na face 2;
- Fluxo de calor nulo para as demais faces.

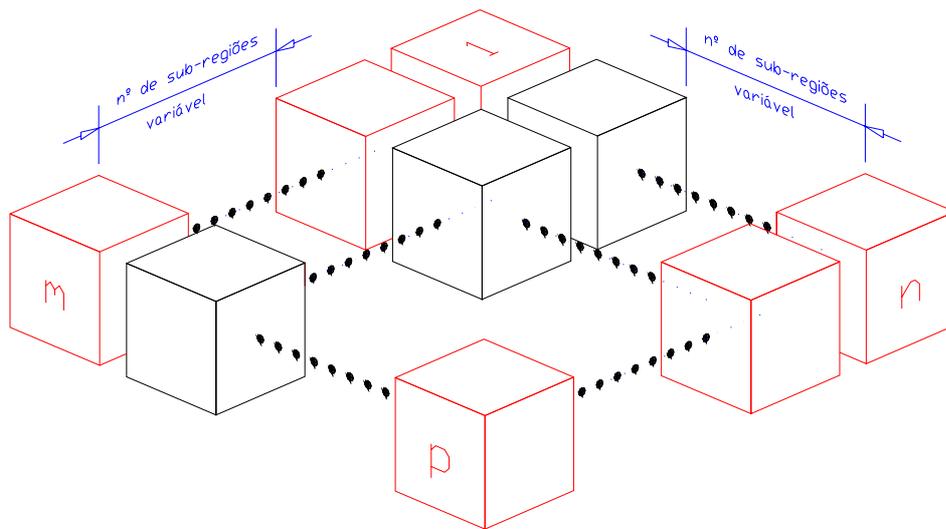
Os parâmetros de malha, integração e solvers são:

- Número de pontos de Gauss por direção de integração $N_p = 8$;
- Número de subelementos $N_{\text{subelementos}} = 1$;
- Esquema triangular polar de integração;
- Tolerância dos solvers $tol = 1,0 \cdot 10^{-5}$;
- Elementos de 3, 4 e 8 nós;
- Malhas com 25, 50, 100 e 500 nós aproximadamente, por sub-região.

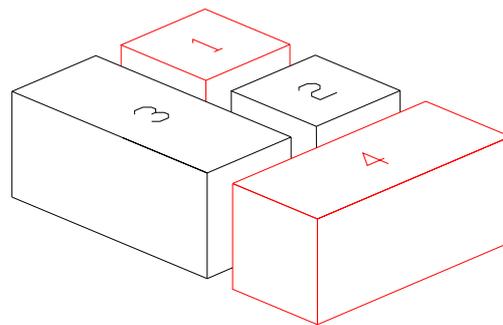
O computador utilizado para a análise possui processador intel de 1GHz e 768 Mbytes de memória RAM. Os solvers utilizados foram Lanczos (com e sem pré-condicionamento de Jacobi), BI-CG (com e sem pré-condicionamento de Jacobi) e GMRES (sem restart).

Como esse tipo de problema apresenta solução analítica simples, dada por uma distribuição linear de temperatura entre as faces 1 e 2, os resultados dos diversos modelos de sub-regiões foram comparados diretamente, através de uma tolerância aceitável (0,1 %).

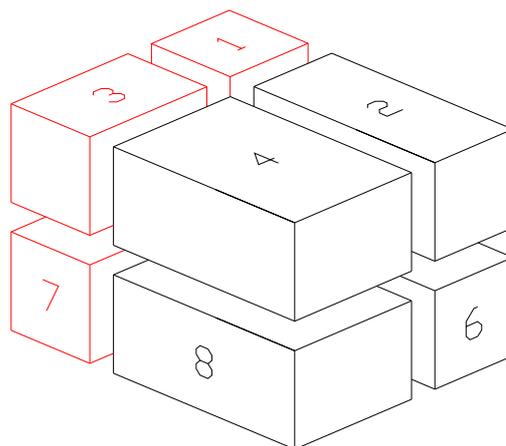
Algumas das configurações analisadas estão apresentadas na Figura (6.2), destacando-se que em cada caso, a ordem de entrada das diversas sub-regiões foi exaustivamente alterada, para promover situações de distribuição diferentes das variáveis de interface.



(a) Modelo 1.

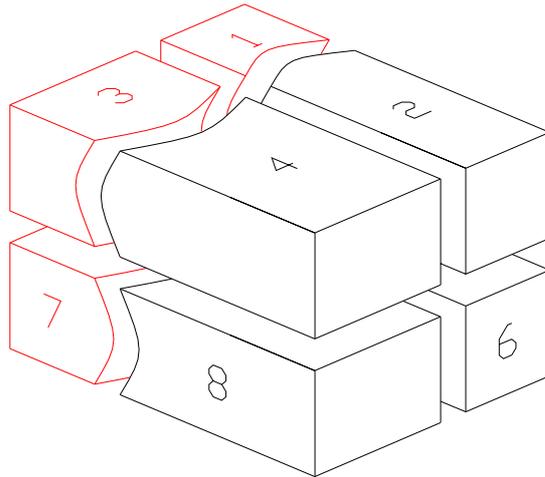


(b) Modelo 2.



(c) Modelo 3.

Figura 6.2. Detalhe das diversas configurações implementadas.



(d) Modelo 4.

Figura 6.2. Detalhe das diversas configurações implementadas.

6.2.3. Resultados

Inicialmente, ressalta-se que todos os resultados de temperaturas no contorno apresentam erro inferior à 0,1%, quando comparados as respectivas respostas analíticas (distribuição linear de temperatura).

Como o objetivo visado nesta gama de problemas resolvidos, é simplesmente verificar a correta determinação das condições de interface, não se faz necessário explorar a fundo as respostas obtidas.

Porém, a título de exemplo apresenta-se a Tabela (6.1), que contém alguns resultados de temperatura para pontos internos, com as respectivas respostas analíticas, referentes ao exemplo da Figura (6.3).

Tabela 6.1. Comparação entre resultados numéricos e solução analítica.

Resultados para a sub-região 1		
Ponto interno	Resultado numérico	Resposta analítica
p1	89,9874	90,0000
p2	83,3330	83,3333
p3	76,6585	76,6667
p4	16,6590	16,6665

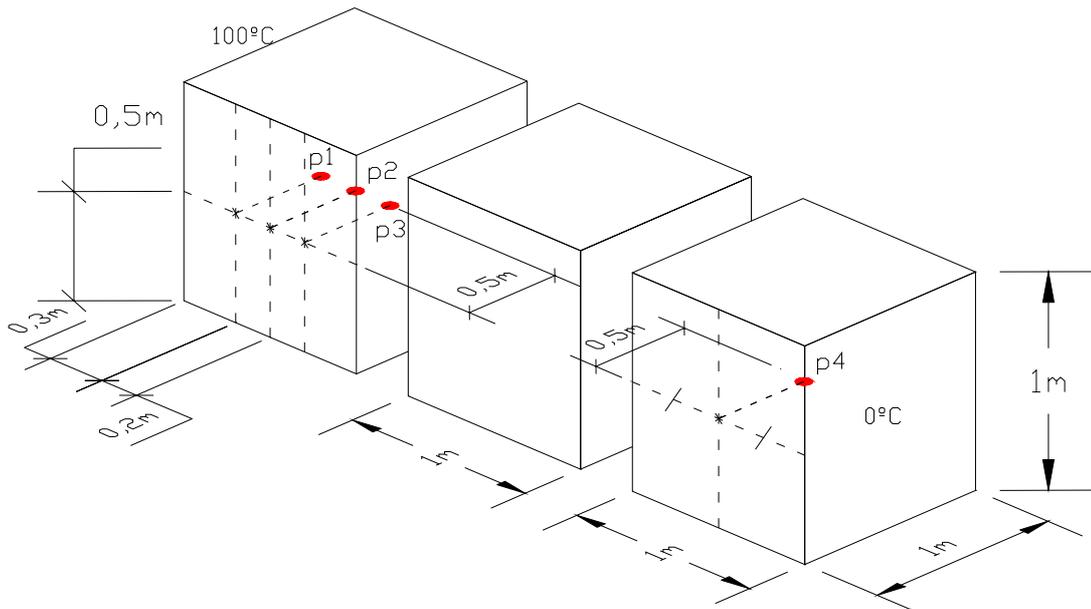


Figura 6.3. Localização dos pontos internos (exemplo).

Por fim ressalta-se que, para todas as configurações de subestruturação, o processo de pesquisa de interface funcionou corretamente, demonstrando-se geral.

6.3. PROBLEMA 2 – BARRAGEM IMPERMEÁVEL COM CORTINA DE ESTACAS, SOBRE SOLO ISOTRÓPICO PERMEÁVEL

6.3.1. Objetivo

Este problema trata do estudo de uma barragem impermeável com cortina de estacas, sobre um solo isotrópico permeável, e visa validar o algoritmo de acoplamento BE/BE para problemas escalares, como também avaliar a eficiência dos solvers iterativos para a estratégia implementada.

Tal problema possui solução analítica bidimensional apresentada por Lambe e Whitman (1969) e também solução numérica bidimensional utilizando o MEC e o MEF, dada por Chang (1979).

Busca-se então resolver a mesma barragem para a formulação tridimensional, simulando-se uma situação plana equivalente que possa ser comparada com tais resultados.

A estratégia de subestruturação torna-se importante neste exemplo por tratar de forma adequada a questão da integração para os elementos no entorno da cortina de estacas. Isto porque estes elementos encontram-se muito próximos uns dos outros, provocando o fenômeno de quasi-singularidade, que torna mais impreciso o processo de integração (para a formulação padrão). Com a divisão do solo em três sub-regiões resolve-se satisfatoriamente tal questão.

6.3.2. Modelo numérico proposto

Nas Figuras (6.4) e (6.5) encontram-se respectivamente a descrição geral do problema e a malha utilizada para simulação. Os dados do problema a serem considerados para a análise são listados a seguir:

Sub-região 1:

- 187 nós e 38 elementos.

Sub-região 2:

- 190 nós e 38 elementos.

Sub-região 3:

- 187 nós e 38 elementos.

Constantes físicas:

- coeficiente de permeabilidade do solo: $5,08 \cdot 10^{-4}$ m/s.

Condições de contorno:

- Potencial 30 m de coluna d'água, aplicado na face superior da sub-região 1;
- Potencial 4 m de coluna d'água, aplicado a na face superior da sub-região 3;

- Fluxo nulo prescrito nas demais faces, com exceção das interfaces entre sub-regiões, onde não existem prescrições.

O critério de parada utilizado para os solvers é $\|\underline{r}^{n+1}\| \leq tol$, com $tol = 10^{-5}$ onde \underline{r}^{n+1} é o vetor resíduo para a iteração corrente.

O computador utilizado para a análise possui processador intel de 1GHz e 768 Mbytes de memória com acesso randômico. Os solvers utilizados foram Lanczos (com e sem pré-condicionamento de Jacobi), BI-CG (com e sem pré-condicionamento de Jacobi) e GMRES (sem restart).

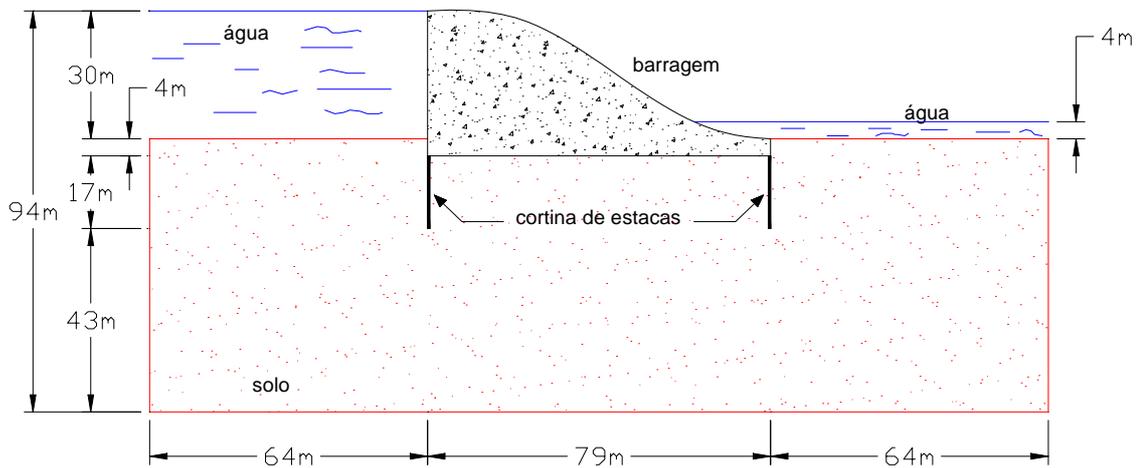


Figura 6.4. Visão geral do problema.

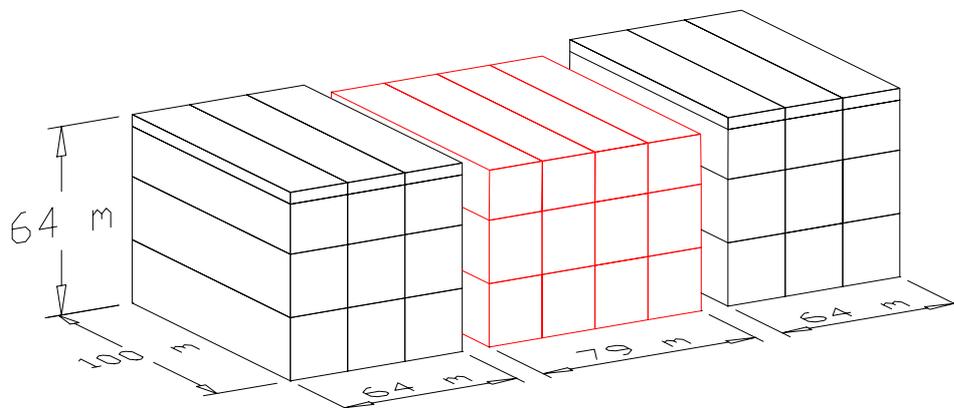


Figura 6.5. Detalhe da malha utilizada.

6.3.3. Resultados

Os resultados de distribuição de potencial e fluxo ao longo do solo, comparação com a solução analítica (Lambe e Whitman, 1969), eficiência para os diversos solvers (escalonados pela ordem N do sistema), tempo de CPU despendido pelos solvers (escalonado pelo tempo em solver direto de Gauss com pivotamento de linhas e colunas), e a distribuição dos tempos ao longo do processo de resolução do problema, são apresentados nas Figuras (6.6), (6.7), (6.8), (6.9) e (6.10), respectivamente.

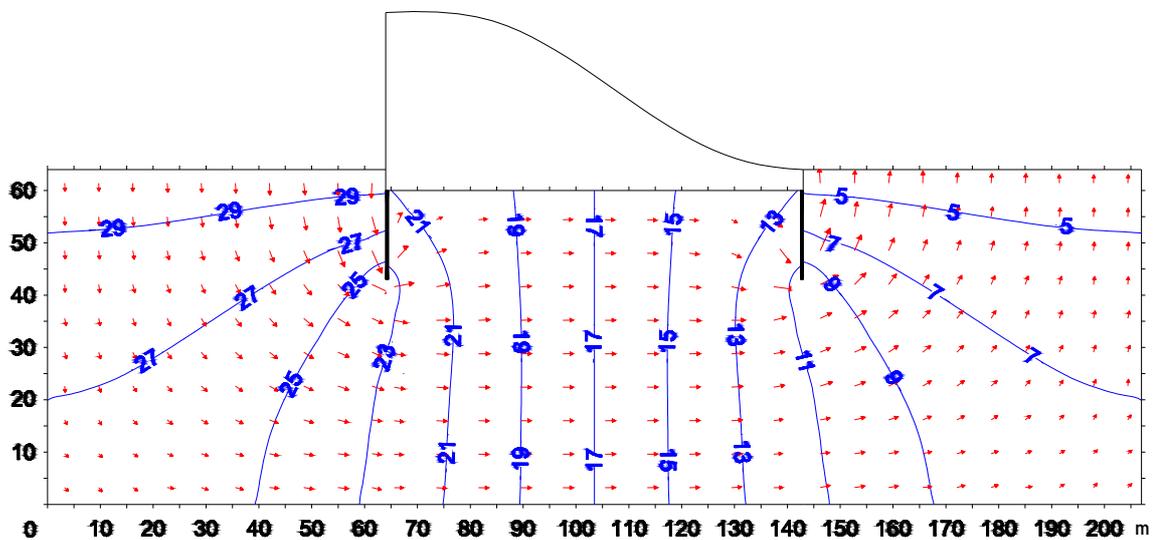


Figura 6.6. Linhas equipotenciais e distribuição de fluxo.

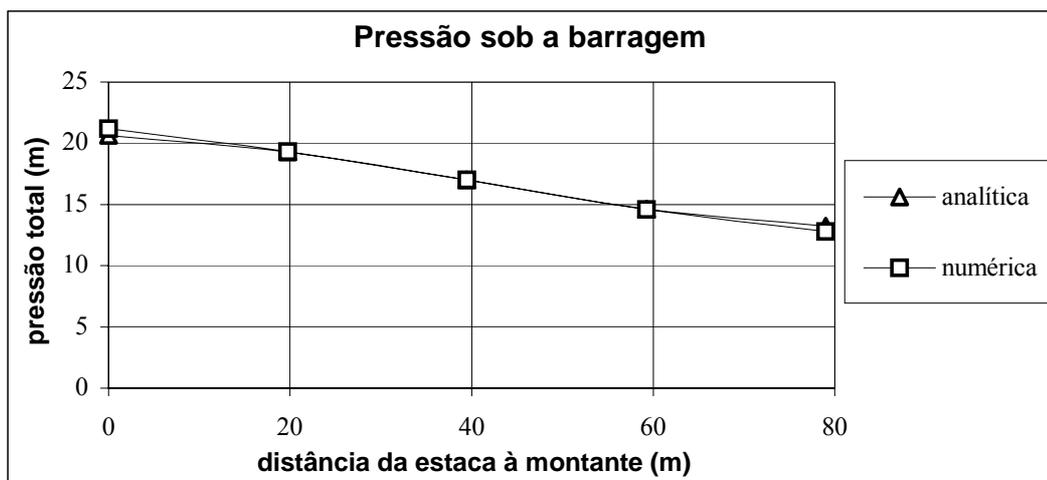


Figura 6.7. Comparação com a solução analítica.

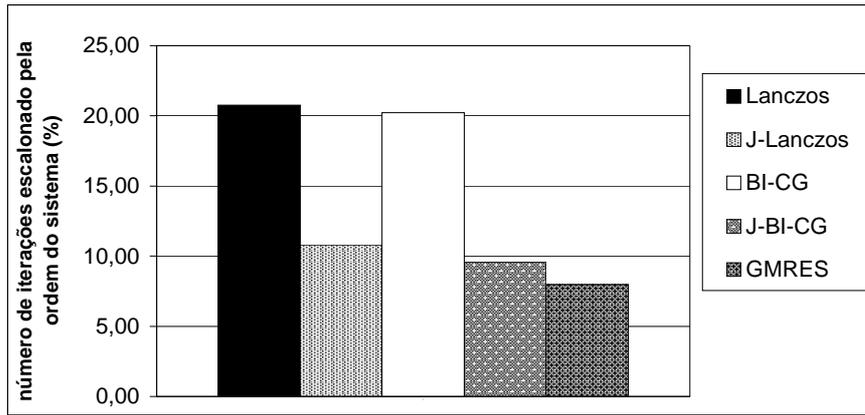


Figura 6.8. Número de iterações para os diversos solvers.

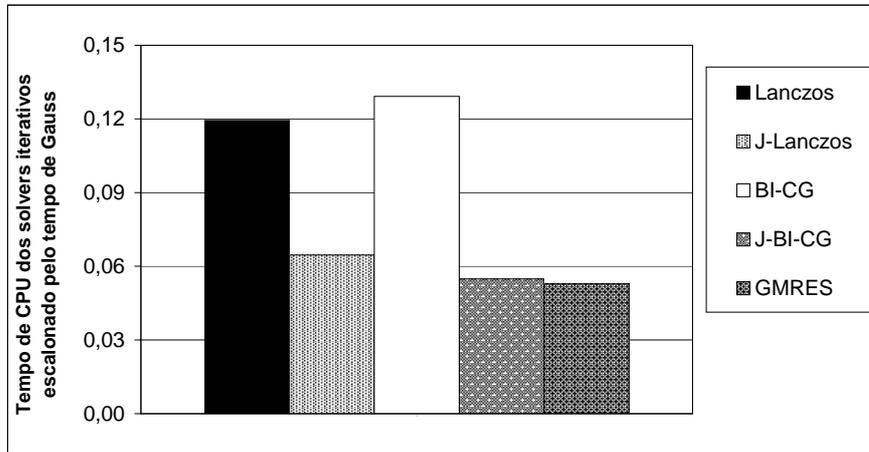


Figura 6.9. Tempo de processamento dos diversos solvers.

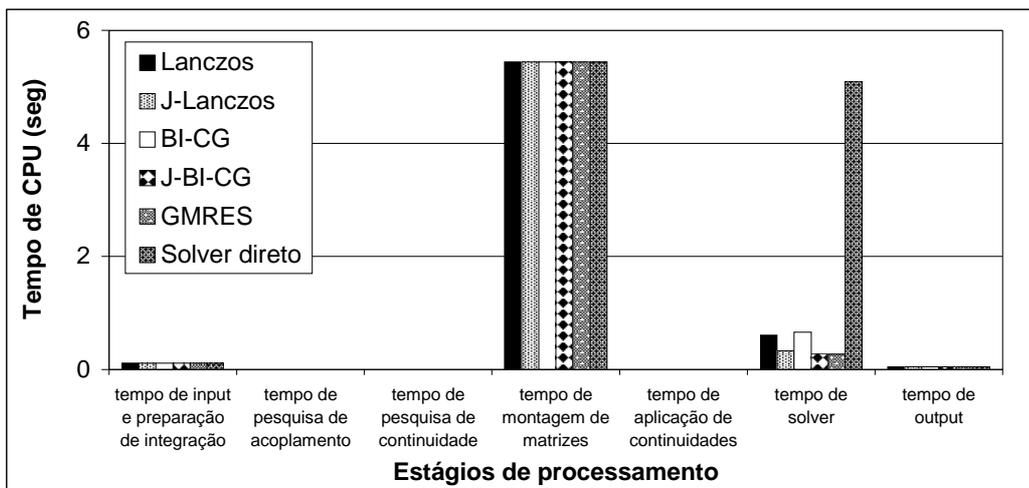


Figura 6.10. Distribuição dos tempos de processamento.

A esparsidade do sistema, definida pela razão entre o número de zeros e o número total de coeficientes do sistema, é igual a 63,6%.

De acordo com a Figura (6.9), observa-se que a eficiência computacional dos solvers iterativos, para este tipo de problema, é bem superior ao método direto citado anteriormente. Também ressalta-se que, dentro da precisão exigida, os solvers iterativos convergiram para o resultado correto.

Verifica-se da Figura (6.10), que os tempos de pesquisa de interface são muito inferiores aos tempos de montagem de matriz e de resolução do sistema. Essa observação é muito importante, para a constatação de que a estratégia de pesquisa apresenta-se eficiente.

Por fim, ressalta-se que foram testados também modelos tridimensionais com larguras de 400m e 1000m (além dos 100m apresentados na Figura (6.5)), para verificar se haveria alteração da resposta encontrada. Como os mesmos resultados foram obtidos, e estes apresentam erro menor que 1%, com relação a resposta analítica dada por Lambe e Whitman(1969), conclui-se que o problema plano foi simulado corretamente.

6.4. PROBLEMA 3 – INTERAÇÃO SOLO-ESTRUTURA (ELASTOSTÁTICA)

6.4.1. Objetivo

Este problema trata do estudo da interação solo-estrutura com carregamento estático atuando, e busca validar o acoplamento para o caso elastostático, sendo que a performance deste acoplamento BE/BE é medida através da divisão do problema em duas sub-regiões (fundação e solo).

Para validar os resultados numéricos obtidos são utilizadas algumas comparações, a saber:

- Solução analítica tridimensional para placas retangulares submetidas a cargas distribuídas uniformemente, e apoiadas em superfície de semi-espaço infinito. Esta solução é apresentada por Newmark (1935), e fornece o valor da tensão vertical para pontos do solo passando pela vertical dos vértices da placa (Figura (6.11));
- Solução analítica para recalques imediatos ou elásticos de placas retangulares rígidas sujeitas a carga uniforme, e apoiadas em superfície de semi-espaço infinito. Esta solução é apresentada por Whitman e Richart (1967), e fornece o deslocamento vertical da base destas placas;
- Solução analítica para deslocamentos na superfície de solos, sujeitos a cargas distribuídas uniformemente sobre área retangular desta superfície. Solução apresentada em diversos livros da área de fundações ;
- Solução homogênea equivalente, composta por somente uma sub-região com a mesma geometria e carregamento do problema proposto.

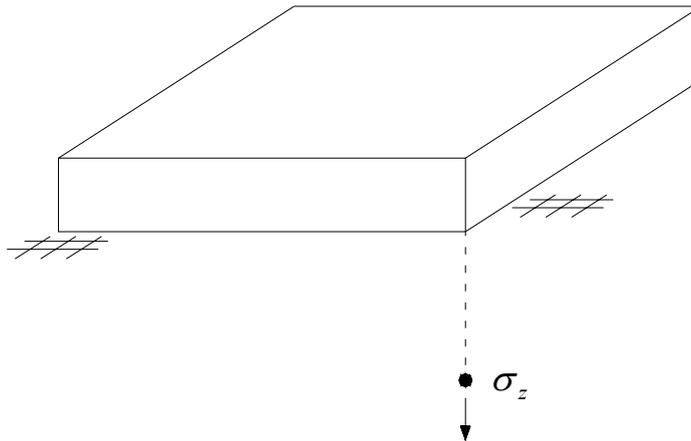


Figura 6.11. Tensão no solo para placas rígidas.

Dessa forma, toda uma faixa de relações entre o módulo de elasticidade do bloco E_f e o módulo de elasticidade do solo E_s , que engloba desde uma fundação flexível até uma fundação rígida, está coberta.

Parâmetros de eficiência dos solvers são apresentados para uma dada relação intermediária entre estes módulos de elasticidade, buscando demonstrar a performance

dos mesmos. Mostra-se também, a título ilustrativo, o bulbo de tensões obtido para o plano que passa pelo eixo de simetria do problema (eixo que divide a fundação em dois retângulos iguais).

6.4.2. Modelo numérico proposto

A descrição geométrica e a correspondente malha adotada para o exemplo encontram-se nas Figuras (6.12) e (6.13), respectivamente.

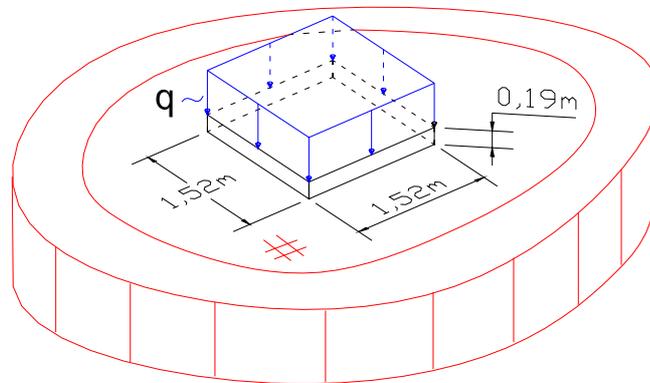


Figura 6.12. Visão geral do problema.

Os dados do problema a serem considerados para a análise são listados a seguir:

Malha:

- bloco de fundação: 450 nós e 128 elementos;
- Solo: 529 nós e 144 elementos; 161 nós de enclosing e 48 elementos de enclosing (veja Araújo et al., 1997, 1998).

Constantes físicas:

- Parâmetros do solo: $E_s = 2,0 \times 10^8 \text{ Nm}^{-2}$, $\nu_s = 0,35$ e $\rho_s = 1800 \text{ Kgm}^{-3}$;
- Fundação: $E_f = E_s$, $E_f = 10E_s$, $E_f = 50E_s$, $E_f = 100E_s$, $E_f = 500E_s$, $E_f = 1000E_s$, $\nu_f = 0.35$ e $\rho_f = 1800 \text{ Kgm}^{-3}$.

Carregamento:

- Um carregamento estático distribuído de amplitude $p_0 = 4,0 \times 10^6 \text{ Nm}^{-2}$, atuando na direção vertical no topo da superfície da fundação é considerado.

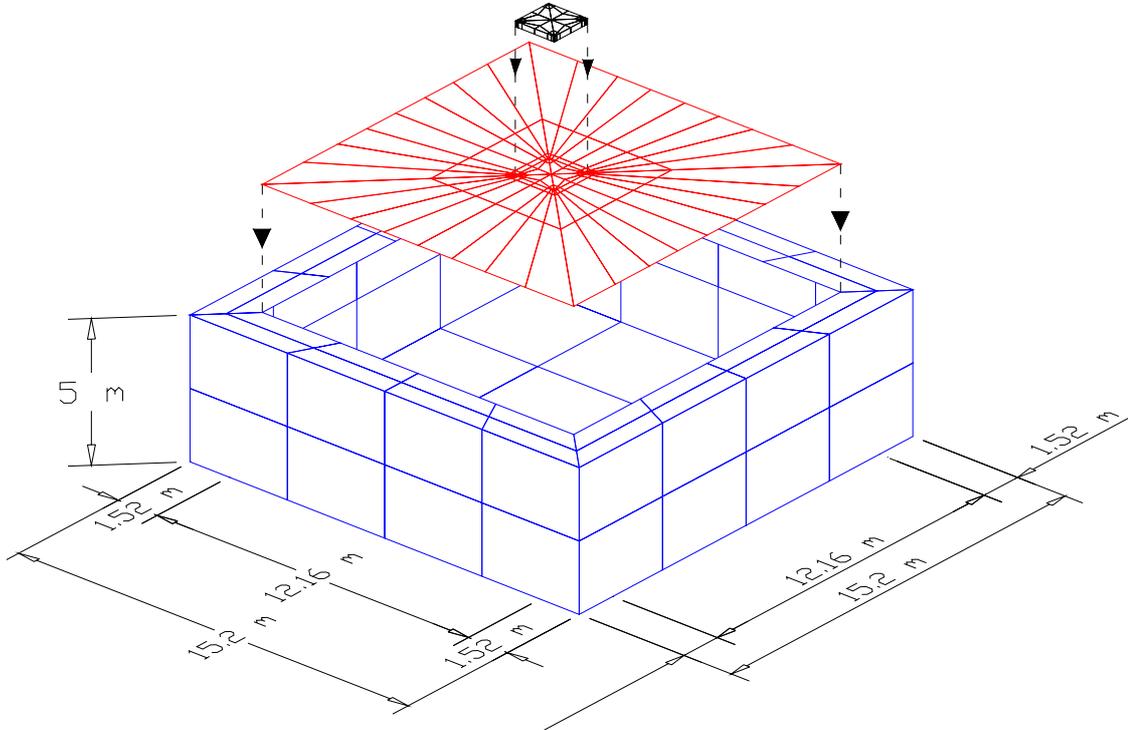


Figura 6.13. Detalhe da malha utilizada.

O critério de parada utilizado para os solvers é $\|\underline{\mathbf{r}}^{n+1}\| \leq tol$, com $tol = 10^{-5}$ onde $\underline{\mathbf{r}}^{n+1}$ é o vetor resíduo para a iteração corrente.

O computador utilizado para a análise possui processador intel de 1GHz e 768 Mbytes de memória com acesso randômico. Os solvers utilizados foram Lanczos (com e sem pré-condicionamento de Jacobi), BI-CG (com e sem pré-condicionamento de Jacobi) e GMRES sem restart (sem restart não apresentado, pois não convergiu devido à estagnação).

6.4.3. Resultados

A resposta do problema de interação solo-fundação é ilustrada na Figura (6.14), em termos do bulbo de tensões para a relação $E_f/E_s = 100$.

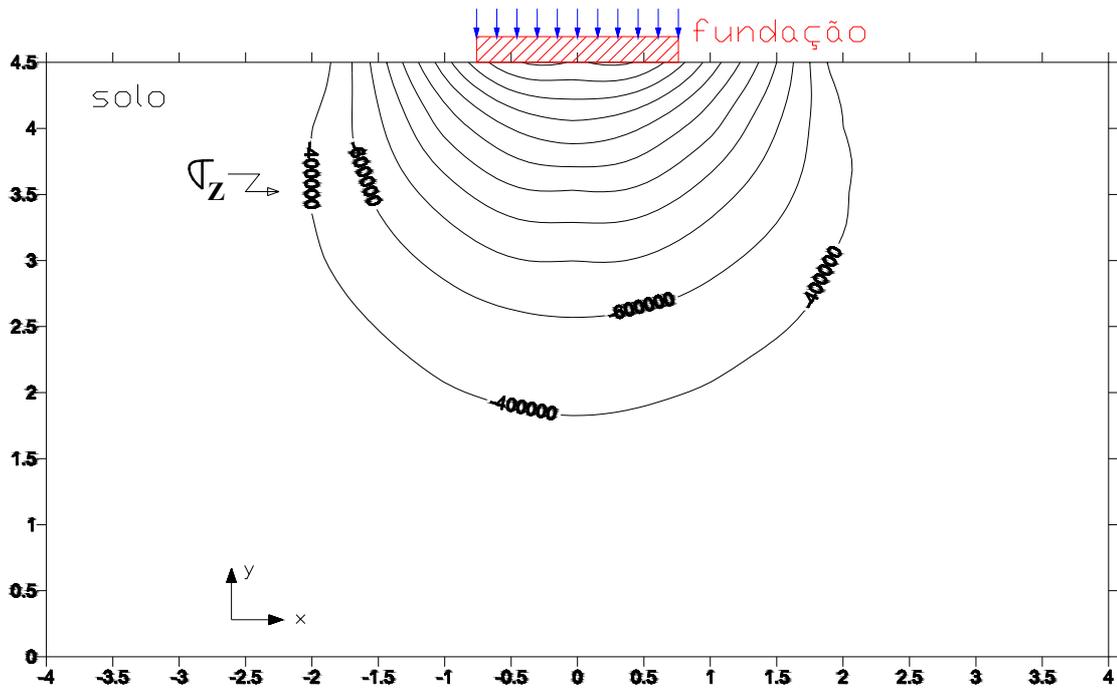


Figura 6.14. Bulbo de tensões para o plano de simetria.

Os resultados de eficiência para os diversos solvers (escalonados pela ordem N do sistema), tempo de CPU despendido pelos solvers (escalonado pelo tempo em solver direto de Gauss com pivotamento de linhas e colunas), e a distribuição dos tempos ao longo do processo de resolução do problema, são apresentados nas Figuras (6.15), (6.16) e (6.17), respectivamente, para as relações E_f/E_s listadas anteriormente. Observa-se que a esparsidade do sistema matricial é igual a 31,6%.

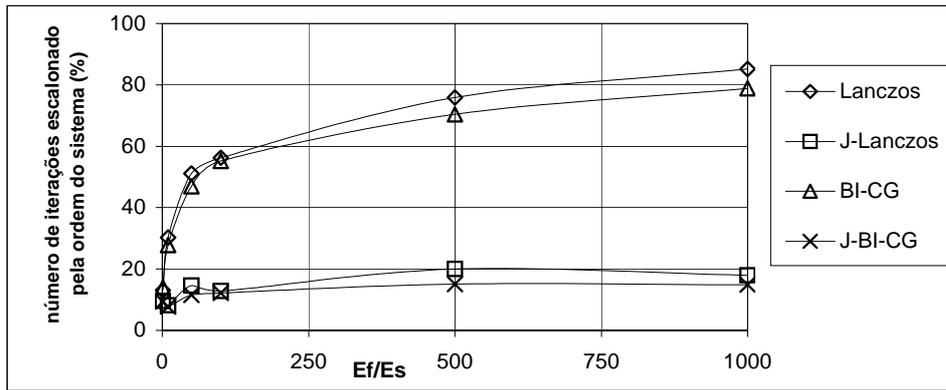


Figura 6.15. Número de iterações para os solvers iterativos.

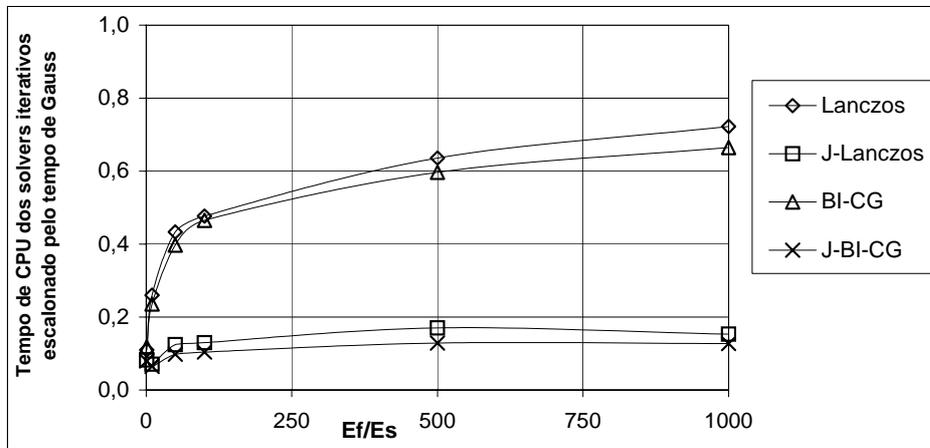


Figura 6.16. Tempo de CPU dos solvers iterativos.

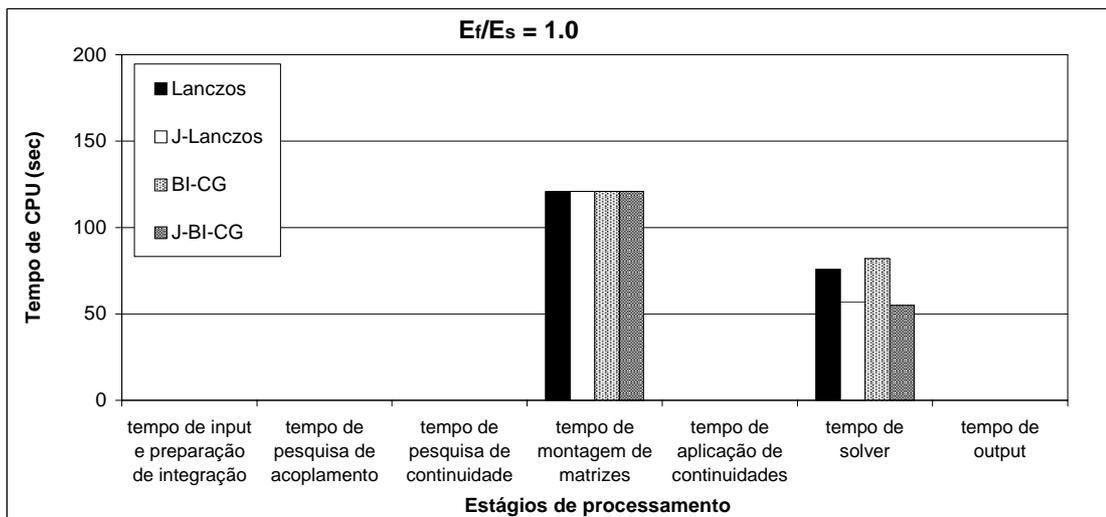


Figura 6.17. Distribuição dos tempos de análise para $E_f/E_s = 1$.

Para validar os resultados obtidos (deslocamentos), utilizou-se como comparativo uma modelagem considerando a fundação homogênea (solo e fundação com mesmas propriedades físicas), resolvendo-a com uma e duas sub-regiões. Desse modo, foi possível comparar todos os deslocamentos, evidenciando-se que o acoplamento apresentava os mesmos resultados que o problema com uma única subestrutura desacoplada, conforme está apresentado na Figura (6.18).

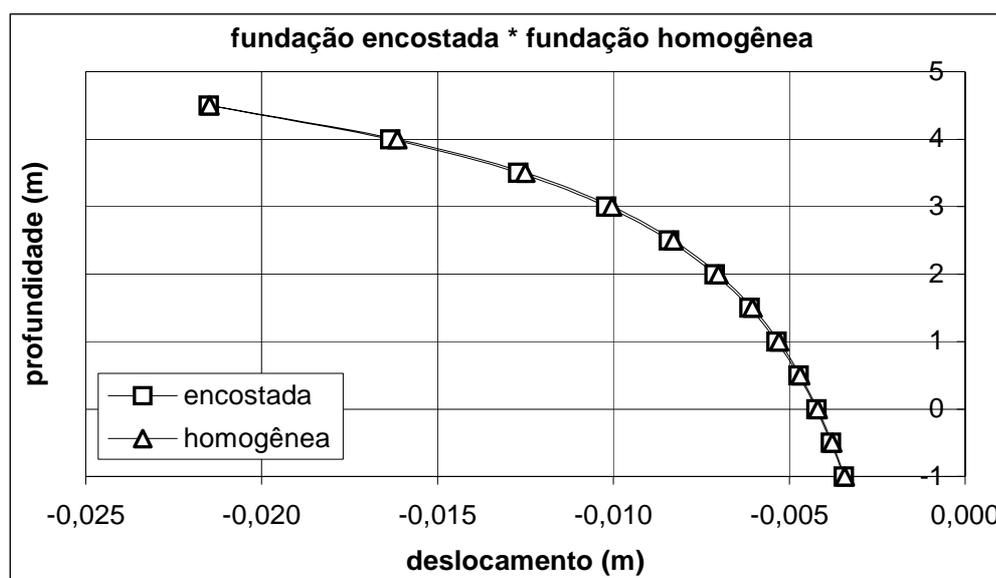


Figura 6.18. Comparação da fundação encostada com a homogênea.

Além dessa comparação, algumas outras foram feitas para situações distintas, dentre as quais pode-se destacar o cálculo do recalque elástico para uma fundação rígida, que foi comparado com solução analítica (Whitman e Richart, 1967). Para simular esse tipo de fundação utilizou-se uma relação $E_f/E_s = 10000$, sendo que os deslocamentos obtidos foram iguais para todos os pontos da base da fundação. O valor deste deslocamento está apresentado na Tabela (6.2).

Tabela 6.2. Comparação entre resultados numéricos e solução analítica.

Recalque na base da fundação		
Resultado numérico	Resposta analítica	Erro
2,37 cm	2,49 cm	5 %

Observa-se que o pré-condicionamento de Jacobi melhorou significativamente os resultados dos algoritmos de Lanczos e BI-CG e, portanto, o mesmo é indispensável para a obtenção de eficiência computacional.

Também ressalta-se que, dentro da precisão exigida, os solvers iterativos convergiram para o resultado correto nas diversas relações de E_f/E_s .

6.5 PROBLEMA 4 – INTERAÇÃO SOLO-ESTRUTURA (ELASTODINÂMICA)

6.5.1. Objetivo

Este problema trata do estudo da interação solo-estrutura com carregamento dinâmico atuando, e busca validar o algoritmo desenvolvido para o caso elastodinâmico no domínio da frequência.

A performance do acoplamento BE/BE é medida através da divisão do problema em duas sub-regiões (fundação e solo), para duas diferentes situações, a saber: fundação encostada no solo e semi-enterrada no mesmo.

Para validar os resultados numéricos obtidos é feita uma comparação com a solução homogênea equivalente, composta por somente uma sub-região com a mesma geometria e carregamento do problema proposto.

O problema também foi resolvido em série e em paralelo, utilizando-se duas máquinas do cluster citado no Capítulo 5. A eficiência do esquema paralelo foi verificada, ressaltando-se que o solver J-BI-CG foi utilizado para esta análise.

6.5.2. Modelo numérico proposto

A descrição geométrica e a correspondente malha adotada para o exemplo encontram-se nas Figuras (6.12) e (6.13), respectivamente.

Os dados do problema a serem considerados para a análise são listados a seguir:

Caso 1: Fundação encostada

- bloco de fundação: 450 nós e 128 elementos;
- Solo: 529 nós e 144 elementos; 161 nós de enclosing e 48 elementos de enclosing.

Caso 2: Fundação semi-enterrada

- bloco de fundação: 546 nós e 160 elementos;
- Solo: 625 nós e 176 elementos; 161 nós de enclosing e 48 elementos de enclosing.

Constantes físicas:

- Parâmetros do solo: $E_s = 2,0 \times 10^8 \text{ Nm}^{-2}$, $\nu_s = 0,35$ e $\rho_s = 1800 \text{ Kgm}^{-3}$, amortecimento hysterético $\zeta = 0.5\%$;
- Fundação: $E_f = E_s$, $E_f = 10E_s$, $E_f = 50E_s$, $E_f = 100E_s$, $E_f = 500E_s$, $E_f = 1000E_s$, $\nu_f = 0,35$ e $\rho_f = 1800 \text{ Kgm}^{-3}$.

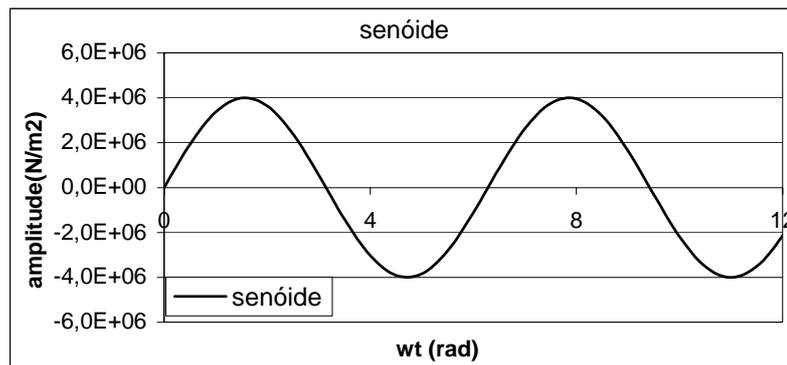


Figura 6.19. Carregamento harmônico aplicado.

Carregamento:

- Um carregamento harmônico (senoidal) distribuído de amplitude $p_0 = 4,0 \times 10^6 \text{ Nm}^{-2}$ e frequência $\omega = 100 \text{ rad}$, atuando na direção vertical no topo da superfície da fundação é considerado, conforme Figura (6.19).

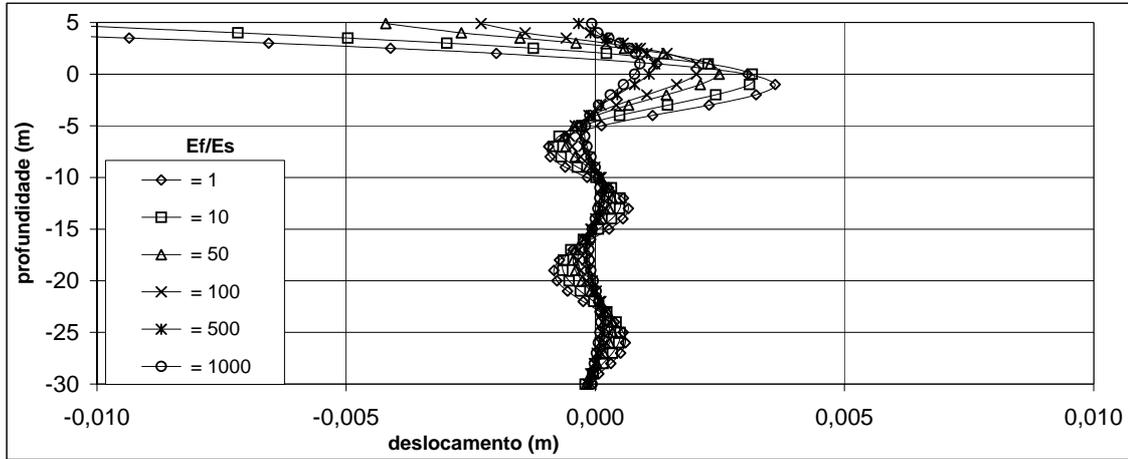
O critério de convergência utilizado para os solvers é $\|\underline{\mathbf{r}}^{n+1}\| \leq tol$, com $tol = 10^{-5}$ onde $\underline{\mathbf{r}}^{n+1}$ é o vetor resíduo para a iteração corrente. Os solvers utilizados foram Lanczos (com e sem pré-condicionamento de Jacobi), BI-CG (com e sem pré-condicionamento de Jacobi) e GMRES com e sem restart (sem restart não apresentado, pois não convergiu devido à estagnação). Observa-se ainda que para os algoritmos de Lanczos e BI-CG com pré-condicionamento, utilizaram-se também versões reais equivalentes (Araújo e Martins, 2001) avaliando-se sua performance com relação às versões complexas; também que o número de blocos de “restart” utilizados para o solver GMRES é igual a 30.

6.5.3. Resultados

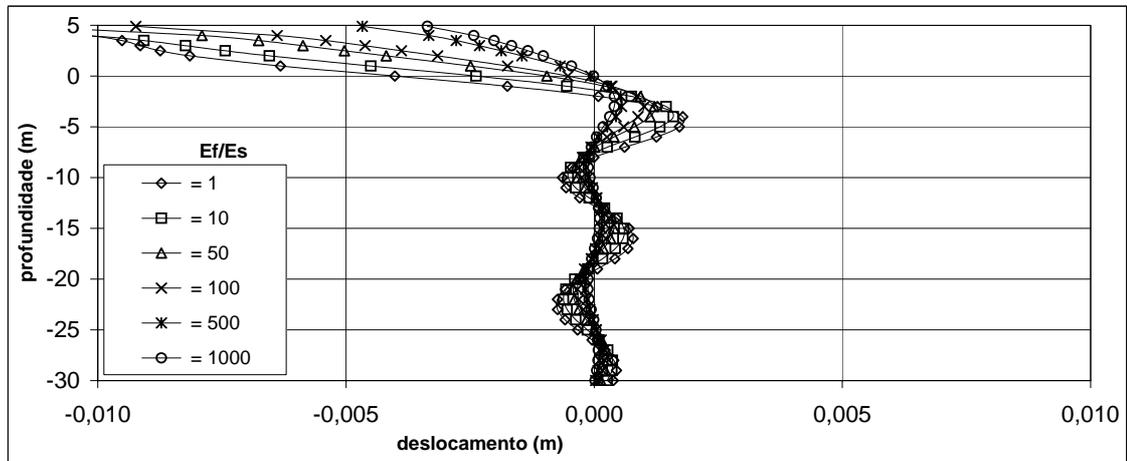
A resposta do problema de interação solo-fundação para os dois casos acima encontra-se nas Figuras (6.20) e (6.21) em termos da amplitude do deslocamento vertical (deslocamento do solo na direção da profundidade) de acordo com as relações E_f/E_s . Os resultados mostrando a eficiência para os diversos solvers (escalonados pela ordem N do sistema), tempo de CPU despendido pelos solvers (escalonado pelo tempo em solver direto de Gauss com pivotamento de linhas e colunas), e a distribuição dos tempos ao longo do processo de resolução do problema, são apresentados nas Figuras (6.22) a (6.24) respectivamente.

Para validar os resultados obtidos (deslocamentos), utilizou-se como comparativo uma modelagem considerando a fundação homogênea (solo e fundação com mesmas propriedades físicas - $E_f = E_s$), resolvendo-a com uma e duas sub-regiões. Desse modo, foi possível comparar todos os deslocamentos, garantindo-se que o acoplamento

fornecia os mesmos resultados que o problema com uma única subestrutura desacoplada.

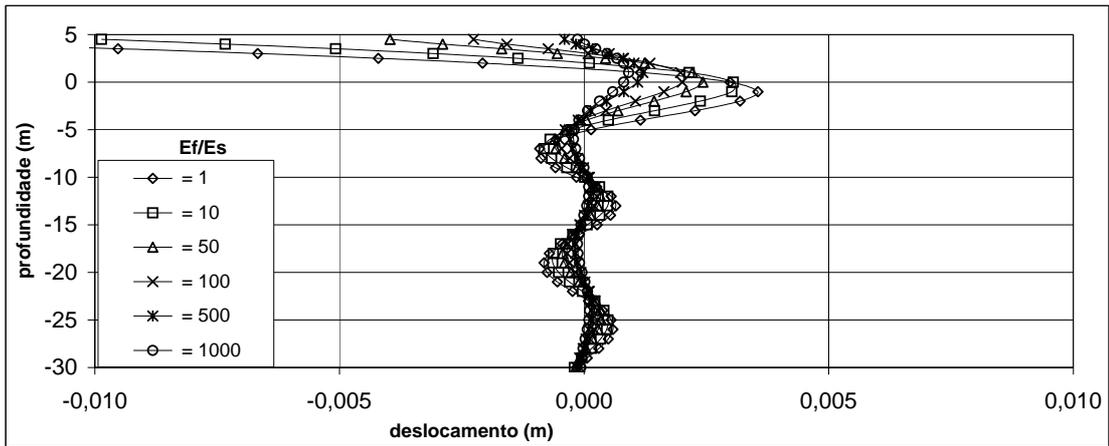


(a) Parte real.

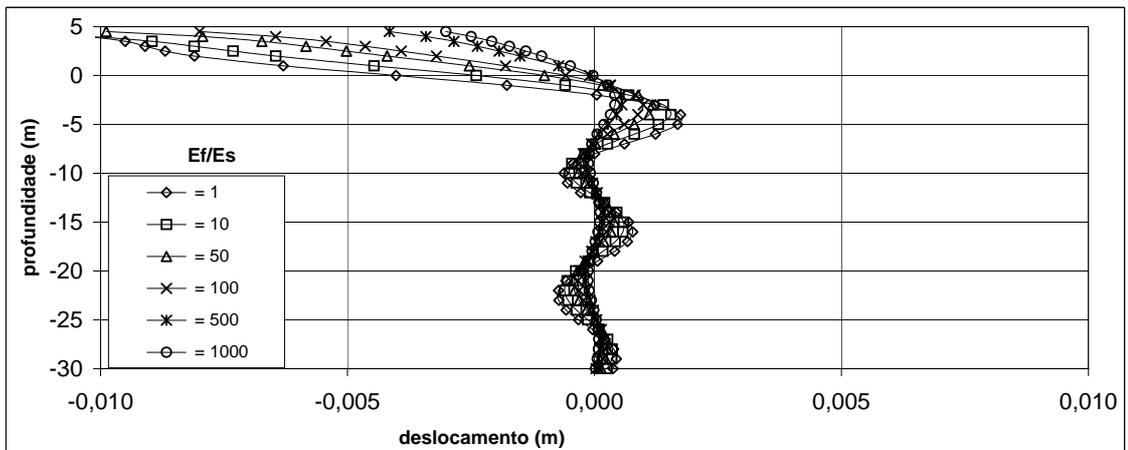


(b) Parte imaginária.

Figura 6.20. Amplitude dos deslocamentos verticais – fundação encostada.

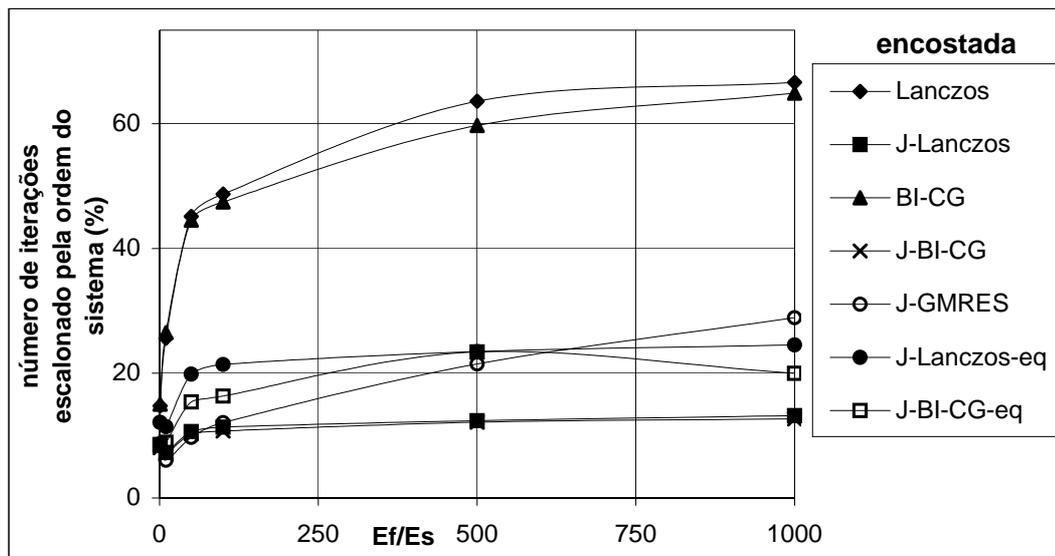


(a) Parte real.

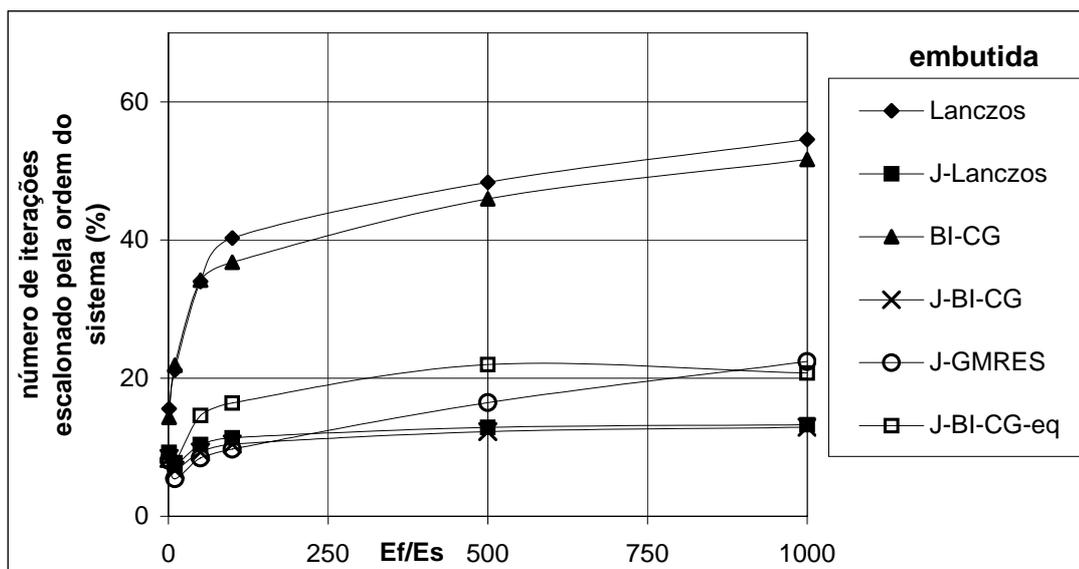


(b) Parte imaginária.

Figura 6.21. Amplitude dos deslocamentos verticais – fundação embutida (enterrada).

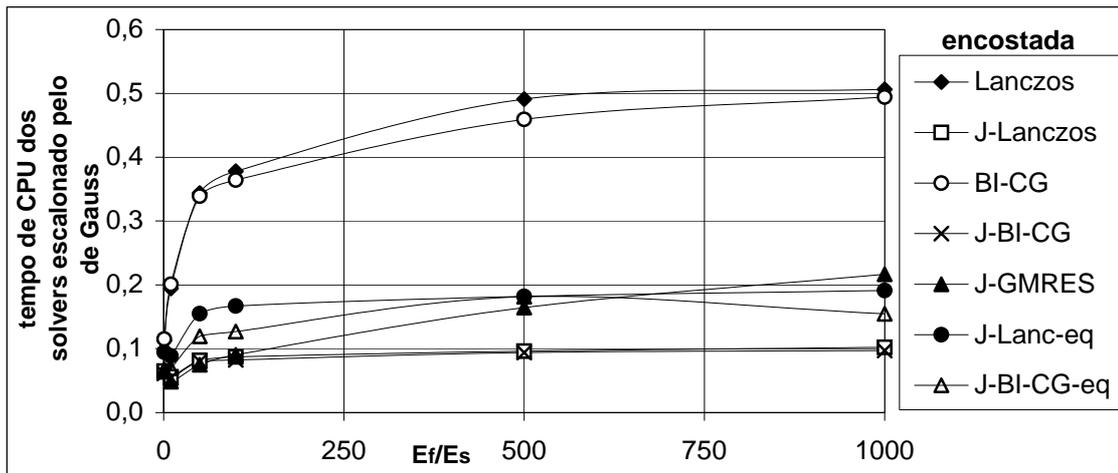


(a) Fundação encostada.

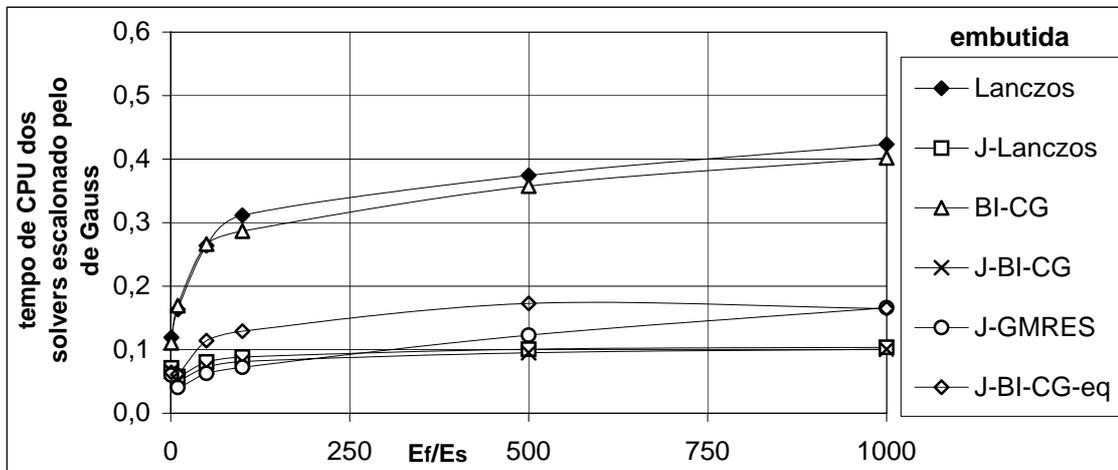


(b) Fundação embutida.

Figura 6.22. Número de iterações para os solvers iterativos.

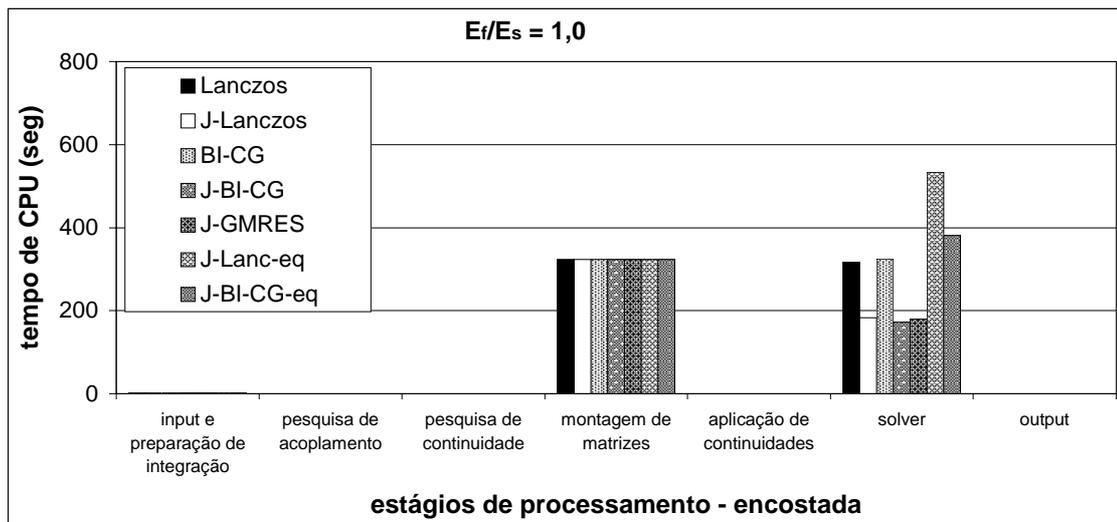


(a) Fundação encostada.

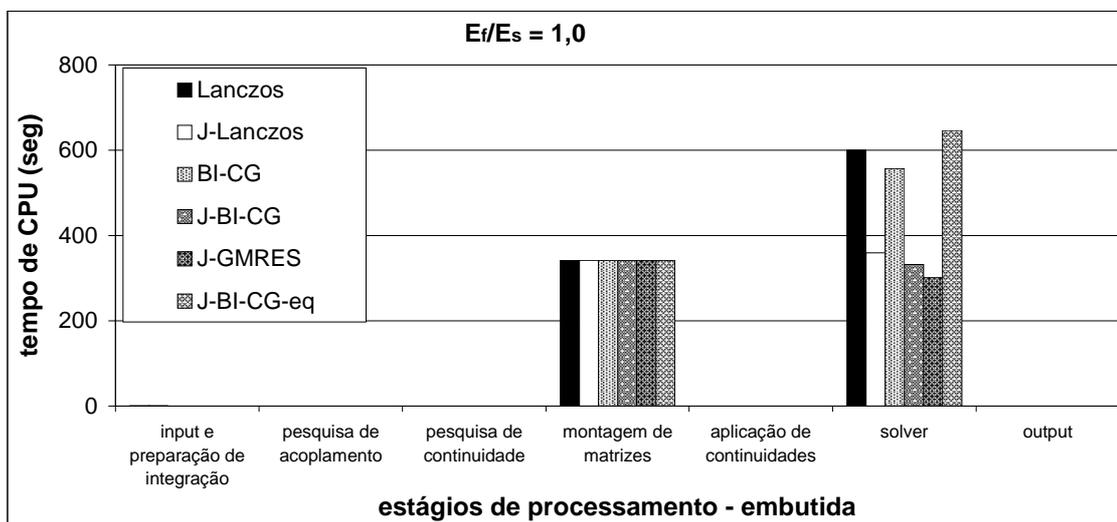


(b) Fundação embutida.

Figura 6.23. Tempo de CPU dos solvers iterativos.



(a) Fundação encostada.



(b) Fundação embutida.

Figura 6.24. Distribuição dos tempos de análise para $E_f/E_s = 1$.

De acordo com a Figura (6.24) observa-se que a eficiência computacional dos solvers iterativos, para este tipo de problema, é superior ao método direto citado anteriormente. Também ressalta-se que dentro da precisão exigida, os solvers iterativos convergiram para o resultado correto nas diversas relações de E_f/E_s . A esparsidade do sistema é igual a 31,6%.

Por fim, apresentam-se os tempos obtidos para a resolução em série e paralelo, e a respectiva eficiência.

Tabela 6.3. Eficiência do esquema paralelo.

	serial	paralelo
tempo total de processamento (segundos)	1196	815
eficiência	73,3 %	

6.6. PROBLEMA 5 – VIGA SUBMETIDA A CARREGAMENTO DINÂMICO

6.6.1. Objetivo

Este problema trata da avaliação de performance de aplicações paralelas, através do estudo no domínio da frequência, de uma viga sujeita a um carregamento dinâmico senoidal, conforme ilustrado na Figura (6.25).

Para obter uma curva de eficiência em função da subestruturação, varia-se então o número de sub-regiões da seguinte forma:

- Mantém-se a malha da sub-região constante, e aumenta-se gradativamente o número de sub-regiões variando de 1 a 8.

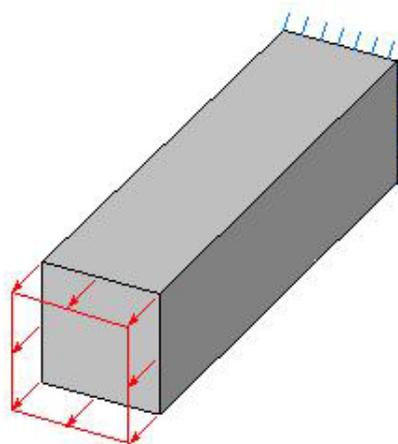


Figura 6.25. Visão geral do problema

Para validar a solução numérica obtida, utiliza-se a solução analítica deste problema, dada por Dominguez (1993), que avalia a amplitude máxima do deslocamento na extremidade carregada da viga através da fórmula dada a seguir:

$$\mathbf{u}(L,t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t), \quad \text{com } A = \frac{p_0}{\sqrt{\rho \cdot E}} \tan\left(\omega \cdot L \cdot \sqrt{\frac{\rho}{E}}\right) \quad (6.1)$$

onde:

- A é a amplitude do deslocamento na extremidade carregada da viga;
- ω é a frequência angular da excitação;
- p_0 é a amplitude da equitação;
- L é o comprimento total da viga;
- E é o módulo de elasticidade do material;
- ρ é a densidade do material.

A análise é feita utilizando-se o cluster de computadores descrito no Capítulo 5 e o solver J-BI-CG.

6.6.2. Modelo numérico proposto

A descrição geométrica e a correspondente malha adotada para o exemplo encontram-se nas Figuras (6.26) e (6.27), respectivamente.

Os dados do problema a serem considerados para a análise são listados a seguir:

Sub-região 1, 2, ..., 8:

- 240 nós e 54 elementos.

Constantes físicas:

- $E_s = 1,0 \times 10^4 \text{ Nm}^{-2}$, $\nu_s = 0$ e $\rho_s = 0,01 \text{ Kgm}^{-3}$, sem amortecimento histerético.

Condições de contorno:

- Carregamento harmônico (senoidal) distribuído com amplitude $p_0 = 1,0 \times 10^2 \text{ Nm}^{-2}$ (Figura (6.19)), aplicado na face 2 da barra e frequência $\omega = 100 \text{ rad}$;
- Face 1 engastada;
- Demais faces com carregamento nulo prescrito.

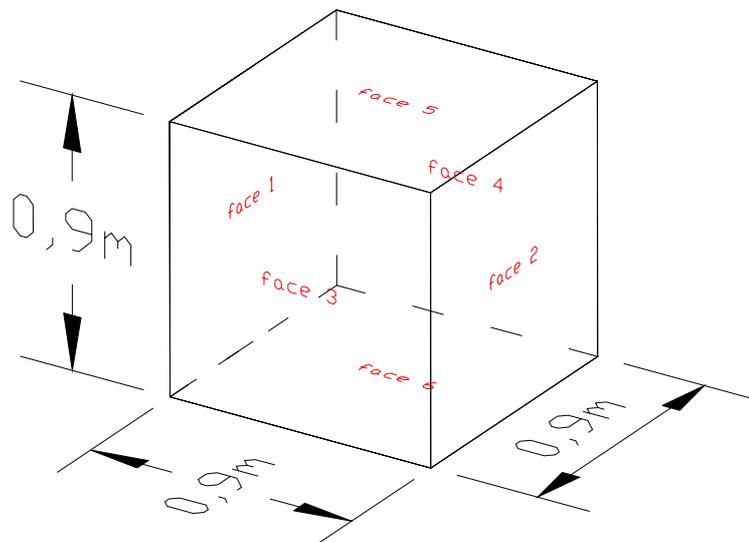


Figura 6.26. Geometria da sub-região.

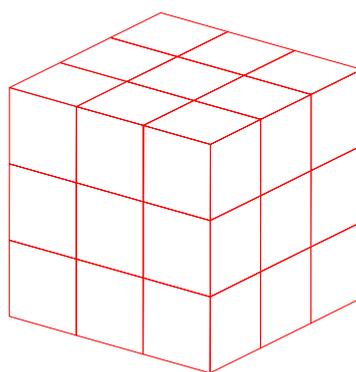


Figura 6.27. Detalhe da malha padronizada para cada sub-região.

O critério de parada utilizado para o solver é $\|\underline{\mathbf{r}}^{n+1}\| \leq tol$, com $tol = 10^{-8}$, onde $\underline{\mathbf{r}}^{n+1}$ é o vetor resíduo para a iteração corrente.

6.6.3. Resultados

Comparando-se os resultados numéricos com as respectivas soluções analíticas, verifica-se que ocorre um erro médio menor que 1%, conforme apresentado na Tabela (6.4) para os quatro primeiros modelos (1 a 3 sub-regiões).

Tabela 6.4. Comparação entre solução numérica e analítica.

Amplitude dos deslocamentos na extremidade carregada das vigas.			
Nº de sub-regiões	Solução numérica (10^{-2} m)	Solução analítica (10^{-2} m)	Erro (%)
1	0,900270	0,900389	0,01
2	1,803051	1,803116	0,01
3	2,709226	2,710546	0,05

Não é o interesse aqui apresentar tais resultados, mas sim, traçar a curva de eficiência (apresentada no Capítulo 5) do algoritmo paralelo com relação ao número de sub-regiões utilizadas. Este gráfico é apresentado na Figura (6.28), sendo que foram utilizadas 8 máquinas do cluster, alocando-se uma sub-região em cada máquina.

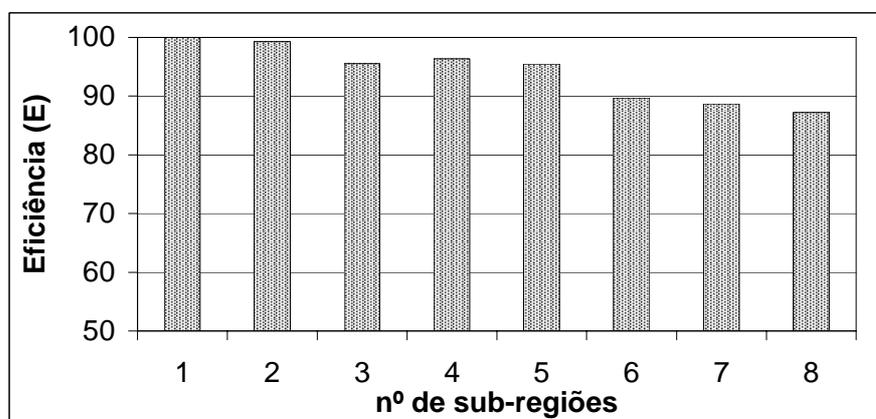


Figura 6.28. Eficiência do algoritmo paralelo.

6.7. PROBLEMA 6 – INTERAÇÃO SOLO-ESTRUTURA (ELASTODINÂMICA)

6.7.1. Objetivo

Este problema trata do estudo da interação entre duas fundações e o solo, com carregamento dinâmico atuando.

A performance do acoplamento BE/BE é medida através da divisão do problema em três sub-regiões (duas fundações encostadas em solo).

Para validar os resultados numéricos obtidos é feita uma comparação com a solução homogênea equivalente, composta por somente uma sub-região com a mesma geometria e carregamento do problema proposto.

O problema é resolvido em série e em paralelo, utilizando-se três máquinas do cluster citado no Capítulo 5. Mais uma vez a eficiência do esquema paralelo é analisada, ressaltando-se que o solver J-BI-CG foi utilizado para esta análise.

6.7.2. Modelo numérico proposto

A descrição geométrica e a correspondente malha adotada para o exemplo encontram-se nas Figuras (6.29) e (6.30), respectivamente.

Os dados do problema a serem considerados para a análise são listados a seguir:

- blocos de fundação: 450 nós e 128 elementos;
- Solo: 1041 nós e 288 elementos; 333 nós de enclosing e 104 elementos de enclosing.

Constantes físicas:

- Parâmetros do solo: $E_s = 2,0 \times 10^8 \text{ Nm}^{-2}$, $\nu_s = 0,35$ e $\rho_s = 1800 \text{ Kgm}^{-3}$, amortecimento histerético $\zeta = 0,5\%$;

- Fundação: $E_f = E_s$, $E_f = 10E_s$, $E_f = 100E_s$, $E_f = 1000E_s$, $\nu_f = 0,35$ e $\rho_f = 1800\text{Kg m}^{-3}$.

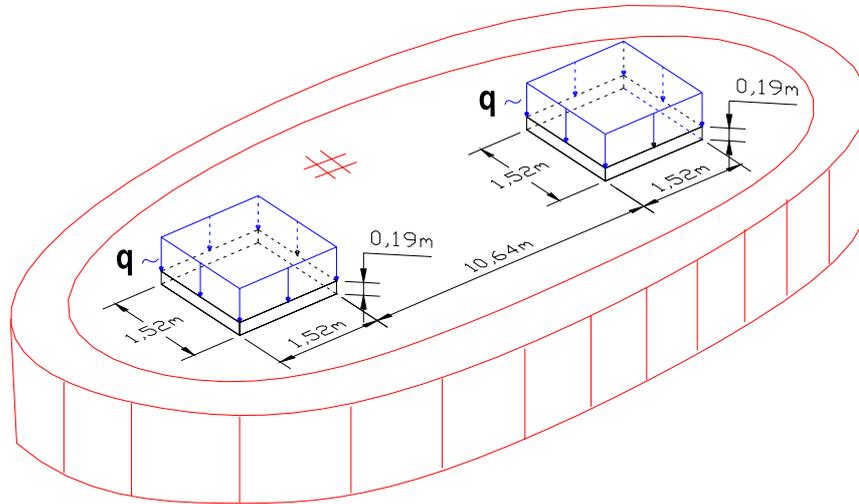


Figura 6.29. Visão geral do problema.

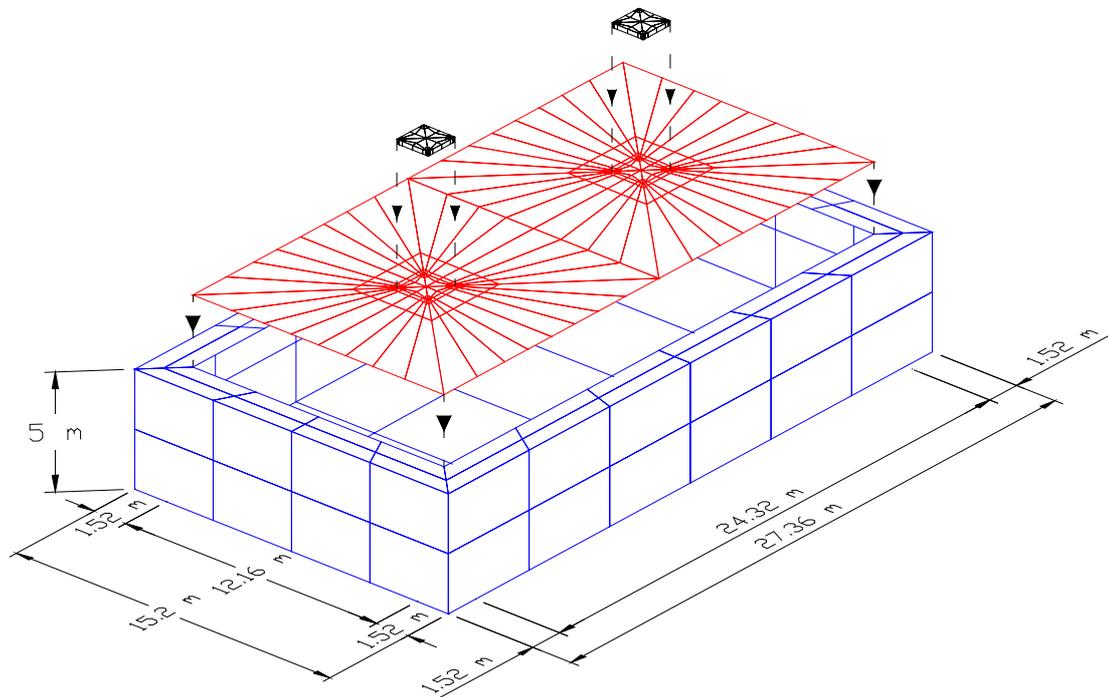


Figura 6.30. Detalhe da malha utilizada.

Carregamento:

- Um carregamento harmônico (senoidal) distribuído de amplitude $p_0 = 4,0 \times 10^6 \text{ Nm}^{-2}$ e frequência $\omega = 100 \text{ rad}$ (Figura (6.19)), atuando na direção vertical no topo da superfície das duas fundações é considerado.

O critério de parada utilizado para os solvers é $\|\underline{\mathbf{r}}^{n+1}\| \leq \text{tol}$, com $\text{tol} = 10^{-5}$ onde $\underline{\mathbf{r}}^{n+1}$ é o vetor resíduo para a iteração corrente.

6.7.3. Resultados

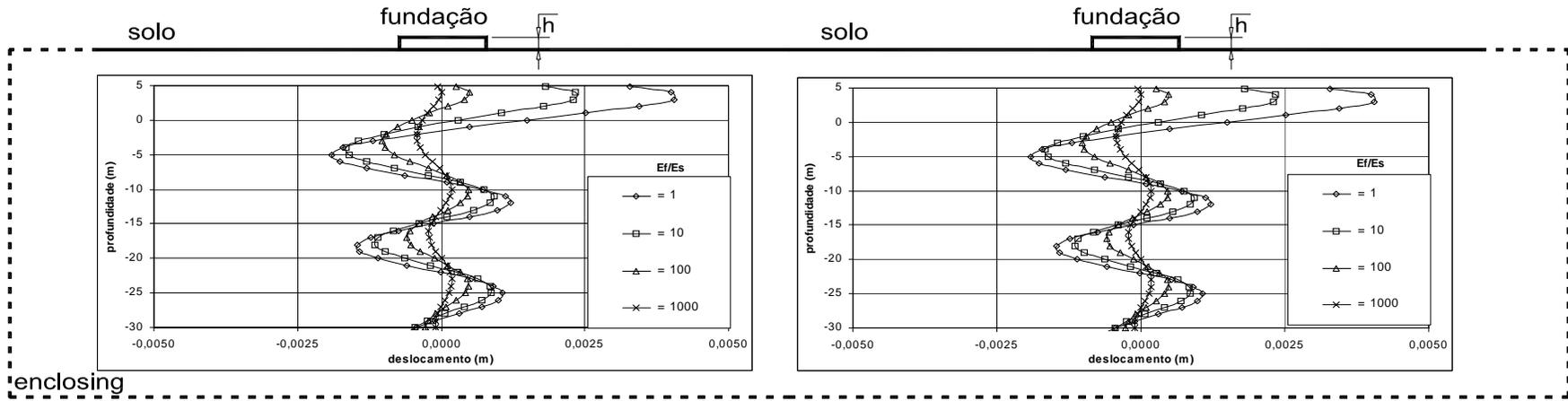
A resposta do problema de interação fundações-solo encontra-se nas Figuras (6.31) e (6.32), em termos da amplitude do deslocamento vertical de acordo com as relações E_f/E_s , para pontos na vertical do centro das fundações e pontos na vertical do ponto central equidistante das duas fundações. Os resultados mostrando a eficiência para os diversos solvers (escalonados pela ordem N do sistema), tempo de CPU despendido pelos solvers (escalonado pelo tempo em solver direto de Gauss com pivotamento de linhas e colunas), e a distribuição dos tempos ao longo do processo de resolução do problema, são apresentados nas Figuras (6.33), (6.34) e (6.35), respectivamente.

A esparsidade do sistema é igual a 46,5%.

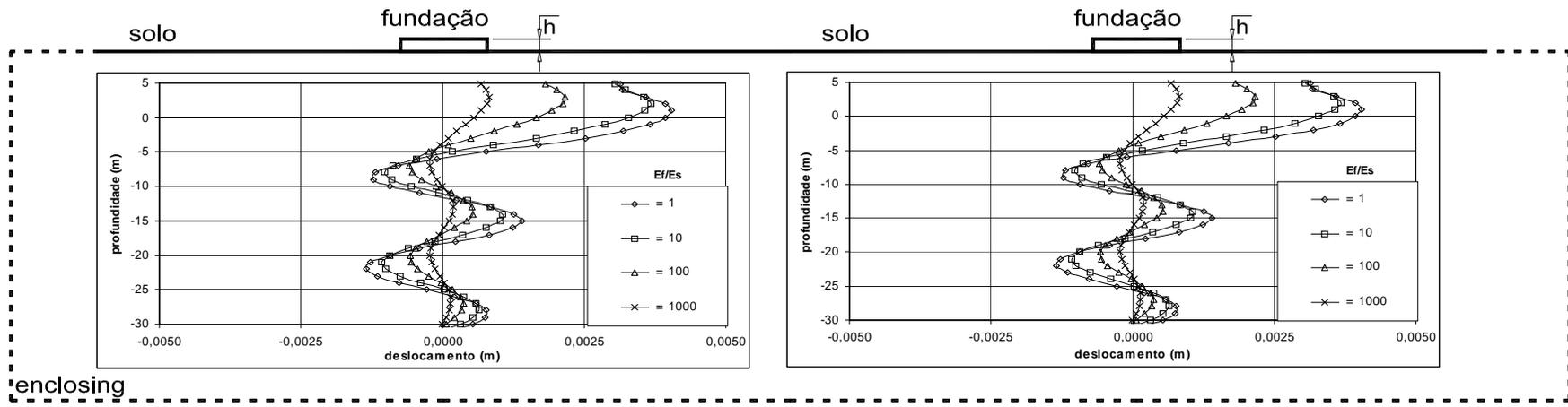
A eficiência do algoritmo paralelo é apresentada na Tabela (6.5). Observa-se que a queda da mesma, com relação aos valores obtidos para os problemas anteriores (seção (6.6)), se deve ao fato de existir heterogeneidade entre as sub-regiões, ou seja, estas apresentarem número de graus de liberdade diferentes. Como toda e qualquer atividade realizada nos diversos “slaves” deve ser sincronizada para que uma nova tarefa possa se iniciar, as máquinas que possuem sub-regiões menores ficaram em estado de espera até que a atividade seja concluída em todos estes “slaves”, implicando em perda de eficiência.

Tabela 6.5. Eficiência do esquema paralelo.

	serial	paralelo
tempo total de processamento (segundos)	5842	2906
eficiência	67 %	

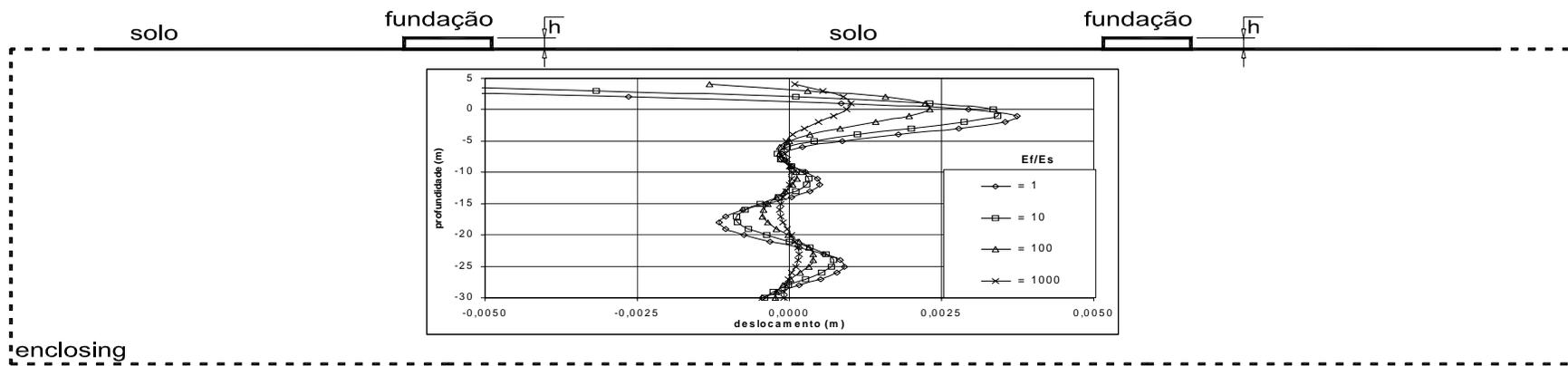


(a) Parte Real.

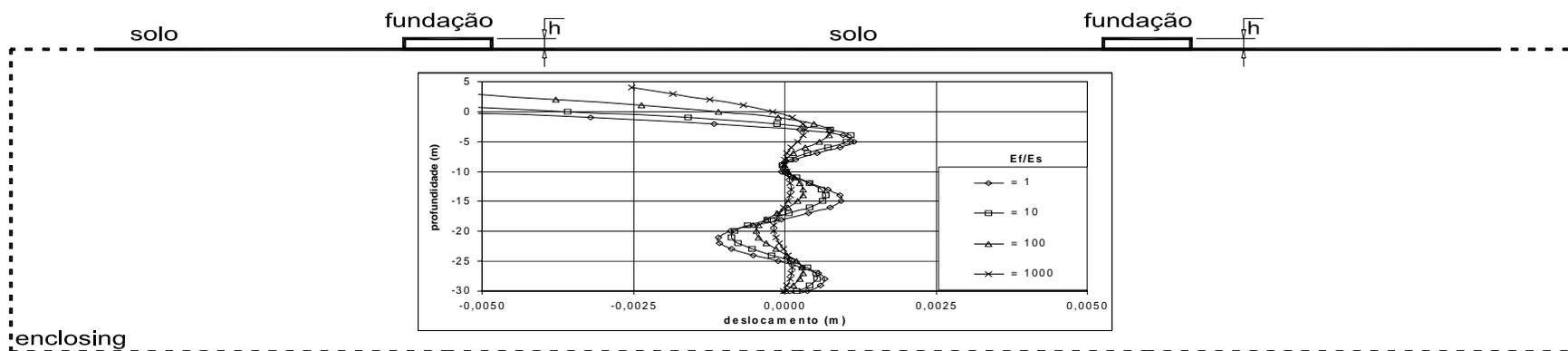


(b) Parte Imaginária.

Figura 6.31. Deslocamentos nas verticais das fundações.



(a) Parte Real.



(b) Parte Imaginária.

Figura 6.32. Deslocamento na vertical do ponto médio entre as fundações.

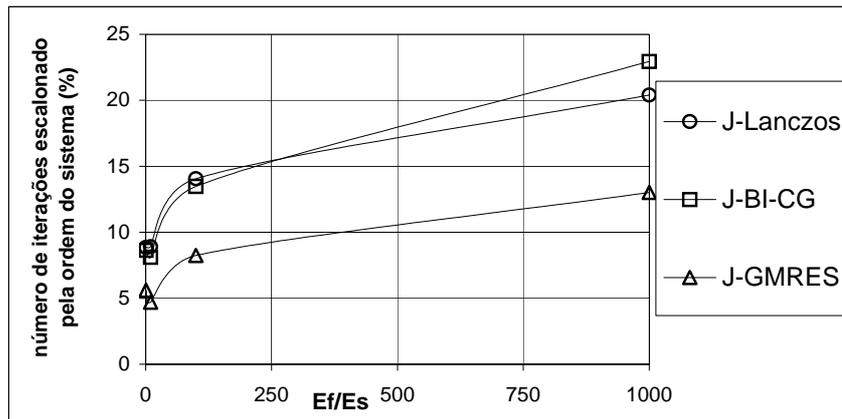


Figura 6.33. Número de iterações para os solvers iterativos.

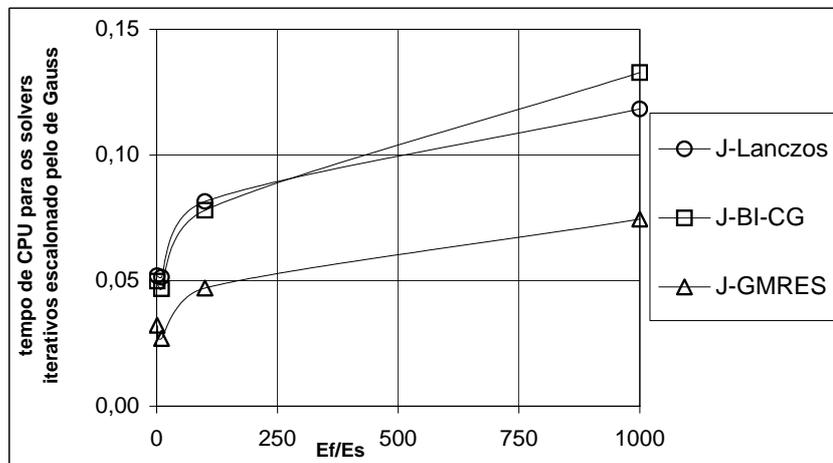


Figura 6.34. Tempo de CPU para os solvers iterativos.

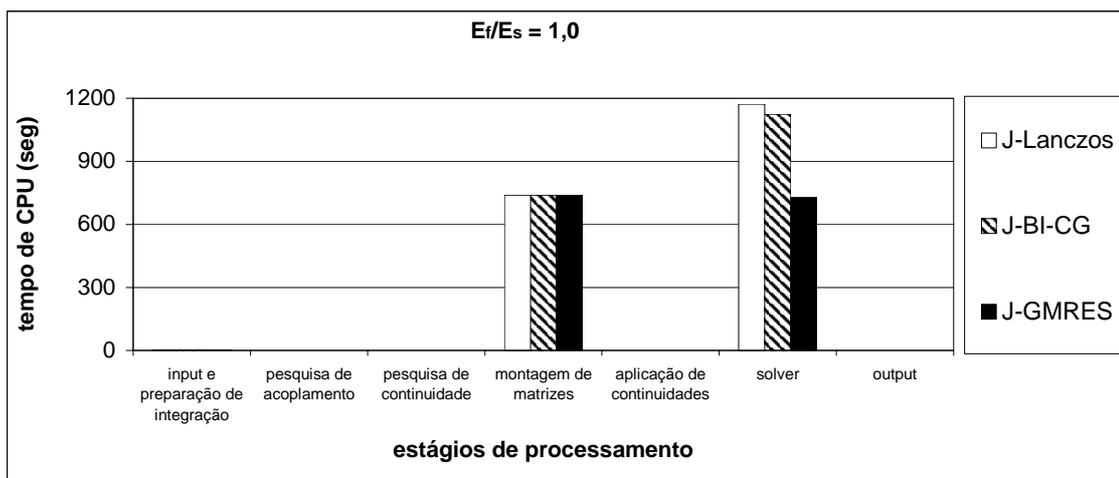


Figura 6.35. Distribuição dos tempos de processamento.

CAPÍTULO 7 – CONCLUSÕES

7.1. CONCLUSÕES

Quando da observação dos resultados dos problemas analisados, dois aspectos foram considerados:

- a precisão da resposta;
- a eficiência dos algoritmos.

O aspecto de observação que se relaciona com a precisão da resposta visa a conclusões sobre a correta implementação dos módulos desenvolvidos. Para isso resultados de comparação (analíticos e numéricos) foram considerados, e como se vê, comparando-se as respostas apresentadas, pode-se concluir que há uma boa concordância entre as obtidas com os algoritmos desenvolvidos no âmbito do trabalho e as fornecidas por outros pesquisadores.

Na verdade as observações mais importantes da pesquisa desenvolvida relacionam-se com a verificação da eficiência computacional do programa, sendo aqui dois pontos observados:

- a eficiência dos *solvers*, importante para a eficiência do algoritmo de acoplamento como um todo;
- a eficiência do algoritmo paralelizado.

Com relação aos *solvers*, os seguintes parâmetros de análise foram observados:

- o tempo de processamento;
- o número de iterações;
- a esparsidade da matriz.

Note-se que esses parâmetros são importantes para a avaliação da velocidade de processamento e alocação de memória.

Da análise dos gráficos em que se mostram dados do tempo de processamento e do número de iterações, pode-se notar que os esquemas iterativos do BI-CG e do GMRES, ambos com pré-condicionamento de Jacobi, são os mais eficientes, convergindo, em média, em um tempo de processamento que varia de 10 a 20% do tempo do solver direto com opções de pivotamento. Note-se que o esquema BI-CG pré-condicionado convergiu em todos os problemas analisados, enquanto o esquema GMRES, sem a opção de *restart*, para os problemas estáticos de interação solo-fundação não convergiu mesmo para relações relativamente baixas entre os módulos de elasticidade da fundação e do solo ($E_f/E_s > 10$). A razão desta não-convergência deve-se a problemas de estagnação associados ao esquema GMRES. Alguns trabalhos têm sido publicados apontando alternativas para a resolução deste problema. A opção de *restart*, que foi idealizada com fins de resolver o problema de memória de alocação de variáveis, também constitui uma alternativa para evitar problemas de estagnação, como se puderam verificar nos problemas elastodinâmicos analisados.

No caso das análises harmônicas no tempo, que se relacionam com sistemas complexos, também consideraram-se versões reais equivalentes dos correspondentes algoritmos complexos, sendo que, em nenhum dos problemas analisados, aqueles algoritmos se mostraram mais eficientes do que esses.

Ressaltam-se ainda dois pontos importantes com relação aos esquemas iterativos, que são, a saber:

- a consideração de pré-condicionamento;
- a consideração do fator de escalonamento.

A importância do pré-condicionamento, que já foi enfatizada em uma série de artigos publicados sobre o tema, pode ser diretamente concluída observando-se os gráficos apresentados no Capítulo 6, em que se indicam o tempo de processamento e número de iterações; o tempo de processamento aumenta consideravelmente se o pré-condicionamento não for considerado.

O fator de escalonamento também se mostra muito importante, quando no sistema a ser analisado há materiais com diferentes propriedades físicas, que apresentem valores

elevados de relação entre si. Resultados que apontem a importância do escalonamento não são apresentados no Capítulo 6, todavia foram verificados em análises realizadas para a pesquisa deste trabalho.

A etapa de resolução do sistema de equações constitui uma das etapas mais importantes da análise total, a qual para sistemas de grande porte tratados com esquemas diretos compreende a maior parte de toda a análise. Com relação a isso que se note, por exemplo, para o problema 2 (análise de percolação em barragem com cortinas do tipo estaca-prancha, seção (6.3)) que, quando da consideração do *solver* direto, verifica-se uma equiparação entre tempo de montagem e de resolução do sistema; já com a utilização dos esquemas iterativos reduziu-se, em média, o tempo de resolução a 6% do tempo de montagem. Note-se que para os outros problemas, o tempo de resolução em comparação ao tempo de montagem situa-se, nas situações mais desfavoráveis, em torno de 80%.

Com relação aos recursos de paralelização, a questão de interesse diz respeito meramente à medida da eficiência computacional, visto que os resultados obtidos com as versões serial e paralelizada são exatamente os mesmos. Também o número de iterações dos esquemas iterativos são, obviamente, iguais, de modo que há diferenças apenas quanto à medida do tempo de processamento, que no algoritmo paralelizado é agora função também do tempo de transferência entre máquinas.

Para as análises realizadas, verificou-se que o esquema paralelizado apresentou eficiência excelente, não chegando, em nenhuma situação, a ser inferior a 60%. Ressalta-se que para o caso do problema 5 (viga sob carregamento harmônico, seção 6.6), a eficiência ficou entre 87 e 99%. Observa-se que para esse caso, em face da uniformidade das malhas de cada subestrutura (malhas com mesmo número de nós), há uma minimização do tempo de espera para sincronismo das tarefas; daí a eficiência elevada. Uma conclusão interessante é que as malhas das subestruturas a serem consideradas devam ser geradas de modo que sejam relativamente uniformes (no sentido mencionado acima).

7.2. ASPECTOS FUTUROS

Abaixo enumeram-se alguns tópicos importantes para a continuação desta pesquisa:

1. Exaustiva análise de modelos acoplados de grande porte, de onde se possa mais solidamente concluir sobre a real eficiência do processo de acoplamento;
2. Implementação de elemento descontínuo na formulação de acoplamento, para facilitar a consideração de condições de acoplamento em nós comuns a mais de duas interfaces;
3. Aplicação da estratégia de acoplamento a problemas transientes (domínio do tempo);
4. Consideração das opções de análise para a simulação de problemas tridimensionais de contato unilateral;
5. Estratégias para a eliminação do problema de estagnação do algoritmo GMRES, que pode ocorrer em algumas aplicações desse algoritmo, muito embora não se tenha verificado para os problemas analisados;
6. Exploração de outras estratégias de paralelização, com vistas à eficiência;
7. Idealizar e avaliar a performance de outros pré-condicionadores;
8. Acoplamento BE/FE multi-domínio (várias sub-regiões de elementos finitos e de elementos de contorno).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

LIVROS E TESES:

1. Araújo FC, (1994). *Zeitbereichslösung linearer dreidimensionaler Probleme der Elastodynamik mit einer gekoppelten BE/FE-Methode*. Ph.D. Thesis, Institut für Angewandte Mechanik, Technische Universität Braunschweig.
2. Araújo FC, (1989). *Técnicas iterativas para resolução de sistemas de equações lineares originados do método dos elementos de contorno*. Dissertação de Mestrado, COPPE – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.
3. Axelsson O e Barker VA, (1984). *Finite Element Solution of Boundary Value Problems – Theory and Computation*. Academic Press, Inc..
4. Banerjee PK, (1994). *The Boundary Element Methods in Engineering*. McGraw-Hill, London.
5. Bathe KJ, (1996). *Finite Element Procedures in Eng. Analysis*. Prentice-Hall, Inc., New Jersey.
6. Beer G e Watson JO, (1992). *Introduction to Finite and Boundary Element Methods for Engineers*. J. Wiley.
7. Bonnet M, (1999). *Boundary Integral Equation Methods for Fluids and Solids*. J. Wiley.
8. Brebbia CA e Dominguez, (1987). *Boundary Elements – an introduction course*. McGraw Hill Book Company.
9. Brebbia CA, Telles JCF e Wrobel LC, (1984). *Boundary Element Techniques*. Springer Verlag, Berlin.

10. Chang OV, (1979). *Boundary Elements Applied to Seepage Problems in Zoned Anisotropic Soils*. M.Sc. Thesis, Southampton University.
11. Chapman SJ, (1997). *Fortran 90/95 for Scientists and Engineers*.
12. Chen G e Zhou J, (1992). *Boundary Element Methods*. Academic Press Limited.
13. Cook RD, (2001). *Concepts And Applications Of Finite Element Analysis*. John Wiley & Sons Inc.
14. Dominguez J, (1993). *Boundary Elements in Dynamics*. Computer Mechanics Publications, Southampton, & Elsevier, London.
15. Hackbusch W, (1991). *Iterative Lösung Grosser Schwachbesetzter Gleichungssysteme*. B. G. Teubner Stuttgart.
16. Hageman LA e Young DM, (1981). *Applied Iterative Methods*. Academic Press, Inc..
17. Hall WS, (1994). *The Boundary Element Method*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
18. Hachich W, Falconi FF, Saes JL, Frota RGO, Carvalho CS e Niyama S, (1998). *Fundações – Teoria e Prática*. Editora Pini.
19. Hughes TJR, (2000). *The Finite Element Method, Linear Static And Dynamic Finite Element Analysis*. Prentice-Hall.
20. Kane JH, (1992). *Boundary Element Analysis in Engineering Continuum Mechanics*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
21. Lambe TW e Whitman RV, (1969). *Soil Mechanics*. J. Wylie, New York.
22. Manolis GD e Beskos DE, (1988). *Boundary Element Methods in Elastodynamics*. Unwin Hyman.

23. Mansur WJ, (1983). *A time-stepping technique to solve wave propagation problems using the boundary element method*. Ph.D. thesis, University of Southampton.
24. Martins CJ, (2000). *Análise de problemas 3D no domínio da frequência via processo de acoplamento multidomínio BE/BE*. Dissertação de Mestrado, Deptº Engenharia Civil, Universidade Federal de Ouro Preto.
25. Nyhoff LR e Leestma S, (1996). *Fortran 90 for Engineers and Scientists*.
26. Saad Y, (1995). *Iterative Methods For Sparse Linear Systems*. PWS Publishing Company, Boston.
27. Sladek V e Sladek J, (1998). *Singular Integrals in Boundary Element Methods*. WIT Press.
28. Whitman RV e Richart FE Jr, (1967). *Design Procedures for Dynamically Loaded Foundations*. JSMFD,ASCE, vol.93, SM6, novembro, pg. 169-193.
29. Wilkinson JH, (1965). *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Clarendon Press, Oxford.
30. Wu TW, (2000). *Boundary Element Acoustics – Fundamentals and Computer Codes*. WIT Press.
31. Wylie CR e Barrett LC, (1985). *Advanced Engineering Mathematics*. McGraw-Hill.
32. Zienkiewicz OC e Taylor RL, (1989). *The Finite Element Method*. Vol. 1-2, McGraw-Hill.
33. Zienkiewicz OC, (1982). *Finite Element Aproximation*. John Wiley & Sons Inc.

ARTIGOS:

34. Araújo FC e Martins CJ, (2001). *A Study of efficiency of multizone BE/BE coupling algorithms based on iterative solvers - applications to 3D time-harmonic problems*. In M. Denda, M. H. Aliabadi & A. Charafi (eds.), Proc. Joint Meeting of Boundary Element Techniques and International Association for Boundary Elements, New Brunswick–NJ–USA, 16–18 July 2001. Advances in Boundary Element Techniques II. Geneva: Hoggar, v.1. p.21-29.
35. Araújo FC, Martins CJ e Mansur WJ, (2001). *An efficient BE iterative-solver-based substructuring algorithm for 3D time-harmonic problems in elastodynamics*. Engineering Analysis with Boundary Elements.
36. Araújo FC, Mansur WJ e Nishikava LK, (1998). *Determination of 3D time domain responses in layered media by using a coupled BE/FE process*. In Boundary Elements XX, ed. A. Kassab, C. A. Brebbia, M. Chopra, Orlando, Florida, USA. Computational Mechanics Publications.
37. Araújo FC, Nishikava LK e Mansur WJ, (1997). *On the consideration of enclosing elements in 3D elastodynamic analyses with the BEM and BE/FE coupled process*. In XVIII Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais para Engenharia, vol. I, Brasília.
38. Araújo FC, Mansur WJ e Malaghini JE, (1990). *Biconjugate Gradient Acceleration for Large BEM Systems of Equations*. Boundary Elements XII, Vol. 1, pp.99-110, Springer – Verlag, Berlin.
39. Barra LPS, Coutinho ALGA, Telles JCF e Mansur WJ, (1993). *Multi-level hierarchical preconditioners for boundary element systems*. Engng. Anal. Boundary Elements, **12**, 103 – 109.
40. Barra LPS, Coutinho ALGA, Mansur WJ e Telles JCF, (1992). *Iterative solution of BEM equations by GMRES algorithm*. Computers & Structures, **44**, 1249-1253.

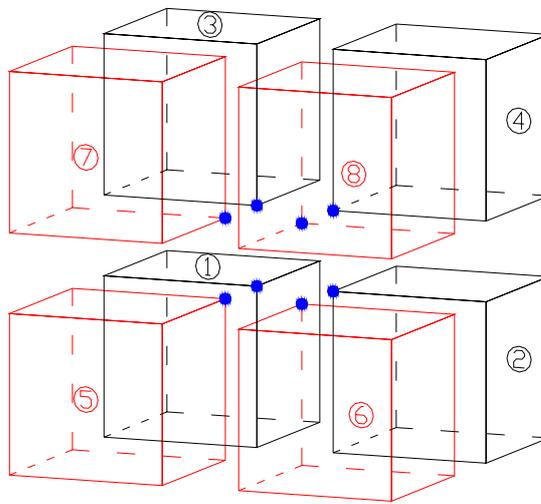
41. Bialecki RA, Merkel M, Mews H e Kuhn G, (1996). *In- and out-of-core BEM equation solver with parallel and non-linear options*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 39:4215–4242.
42. Beskos DE, (1997). *Boundary element methods in dynamic analysis: Part II (1986-1996)*. Applied Mechanics Reviews, vol. 50, nº 3, pp. 149-197.
43. Crotty JM, (1982). *A block equation solver for large unsymmetric matrices arising in the boundary element method*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 18:997– 1017.
44. Ganguly S, Layton JB, Balakrishna C e Kane JH, (1999). *A fully symmetric multi-zone Galerkin boundary element method*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 44:991–1009.
45. Geist GA, Kohl JA, Papadopoulos PM, (1996). *PVM and MPI: a Comparison of Features*.
46. Hsiao GC, Steinbach O e Wendland WL, (2000). *Domain decomposition methods via boundary integral equations*. Journal of Computational and Applied Mathematics , vol. 125, 521-537.
47. Kamiya N e Iwase H, (1996). *BEM and FEM Combination Parallel Analysis Using Conjugated Gradient and Condensation*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 18, 209-216.
48. Kamiya N, Iwase H e Kita E, (1997). *Parallel implementation of boundary element method with domain decomposition*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 20, 319-326.
49. Kane JH, Kumar BL e Saigal S, (1990). *An arbitrary condensing, noncondensing solution strategy for large scale, multi-zone boundary element analysis*. Comput. Meth. Appl. Mech. Engng, 79: 219–244.

50. Mang H, Li H e Han G, (1985). *A new method for evaluating singular integrals in stress analysis of solids by the direct BEM*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 21, 2071 – 2098.
51. Mansur WJ e Bulcão A, (2001). *Modelagens Acústicas 2d e 3d em Paralelo: Análise do Desempenho Computacional*. 22nd Iberian Latin-american Congress on Computational Methods in Engineering, November.
52. Mansur WJ, Araújo FC e Malaghini JEB, (1992). *Solution of BEM Systems of Equations via Iterative Techniques*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 33, 1823-1841.
53. Mantic V, (1994). *On Computing Boundary Limiting Values of Boundary Integrals with Strongly Singular and Hypersingular Kernels in 3D BEM for Elastostatics*. Engineering Analysis with Boundary Elements, nº 13, pp 115-134.
54. Newmark NM, (1935). *Simplified Computation of Vertical Pressures in Elastic Foundations*. University of Illinois Engineering, Experimental Station – Circular 24, vol. 33, n. 34.
55. Prasad KG, Kane JH, Keyes DE e Balakrishna C, (1994). *Preconditioned Krylov solvers for BEA*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 37, 1651-1672.
56. Rigby RH e Alliabadi MH, (1995). *Out-of-core solver for large, multi-zone boundary element matrices*. Int. J. Num. Methods in Engineering, 38:1507–1533.
57. Zucchini A, (2000). *A parallel preconditioned conjugate gradient solution method for finite element problems with coarse-fine mesh formulation*. Computers & Structures, vol. 78, 781-787.

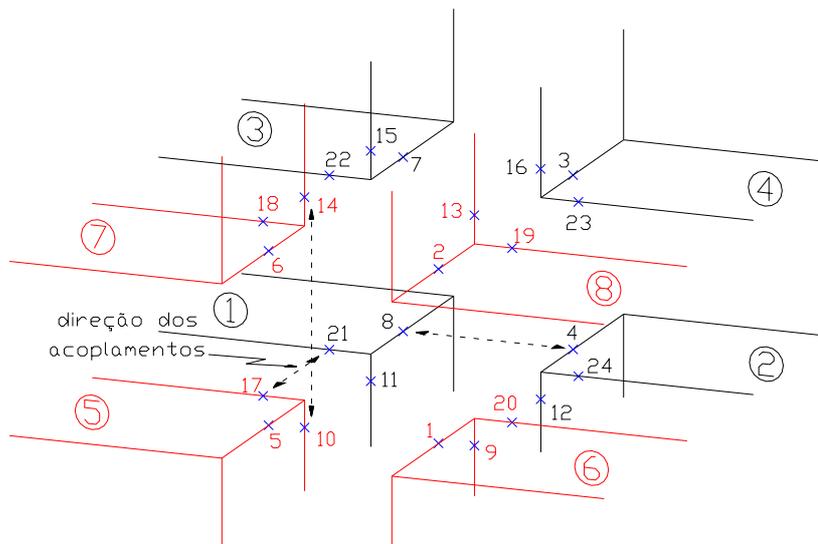
ANEXO I – CONTINUIDADE ESPACIAL

Neste anexo apresenta-se a seqüência de obtenção das condições de continuidade (Capítulo 4), para um caso de “nicho” de nós envolvendo oito sub-regiões.

O grupo de nós apresentado refere-se ao exemplo das Figuras (4.3a) e (4.3b), e encontra-se indicado nas Figuras (I.1a) e (I.1b). Na Tabela (I.1) listam-se os nós pertencentes ao respectivo “ninho”.



(c) Visão geral do grupo de nós de continuidade.



(d) Detalhe da numeração dos nós do grupo.

Figura I.1. Grupo de nós pertencentes ao nicho central.

Tabela I.1. Grupo de nós envolvidos na continuidade.

nós	sub-região
8, 11, 21	1
4, 12, 24	2
7, 15, 22	3
3, 16, 23	4
5, 10, 27	5
1, 9, 20	6
6, 14, 18	7
2, 13, 19	8

I.1. DETERMINAÇÃO DAS CONTINUIDADES DO GRUPO DE NÓS (NICHOS)

Para se saber quantas continuidades são necessárias no grupo de nós, utiliza-se a equação:

$$n_{cont} = n_{un} - n_{eq} \quad (I.1)$$

Logo:

$$n_{un} = 24 / 2 (\mathbf{p}'\mathbf{s}) + 1 (\mathbf{u}) = 13 \text{ (incógnitas);}$$

$$n_{eq} = 8 \text{ (nº sub - regiões);}$$

$$n_{cont} = 13 - 8 = 5, \quad \text{ou seja, são necessárias cinco continuidades.}$$

Assim, sabendo-se quantas são as continuidades necessárias, deve-se determinar quais são as existentes no grupo, e se elas são suficientes para eliminar todas as incógnitas $\mathbf{p}'\mathbf{s}$ excedentes.

Para isto, segue-se os procedimentos já descritos no Capítulo 4, obtendo-se as continuidades listadas na Tabela (I.2).

Tabela I.2. Grupo de continuidades obtidas no nicho.

continuidades / símbolo	nós	sub-regiões	alocação da incógnita p
1 (□)	8	1	-
	4	2	x
	7	3	-
	3	4	-
2 (Δ)	11	1	-
	15	3	x
	12	2	-
	16	4	-
3 (O)	21	1	-
	17	5	x
	24	2	-
	20	6	-
4 (⊗)	22	3	-
	18	7	x
	23	4	-
	19	8	-
5 (✱)	5	5	-
	1	6	x
	6	7	-
	2	8	-

Pela lógica de alocação de incógnitas, as mesmas ficarão distribuídas conforme ilustra a Figura (I.2), através das setas.

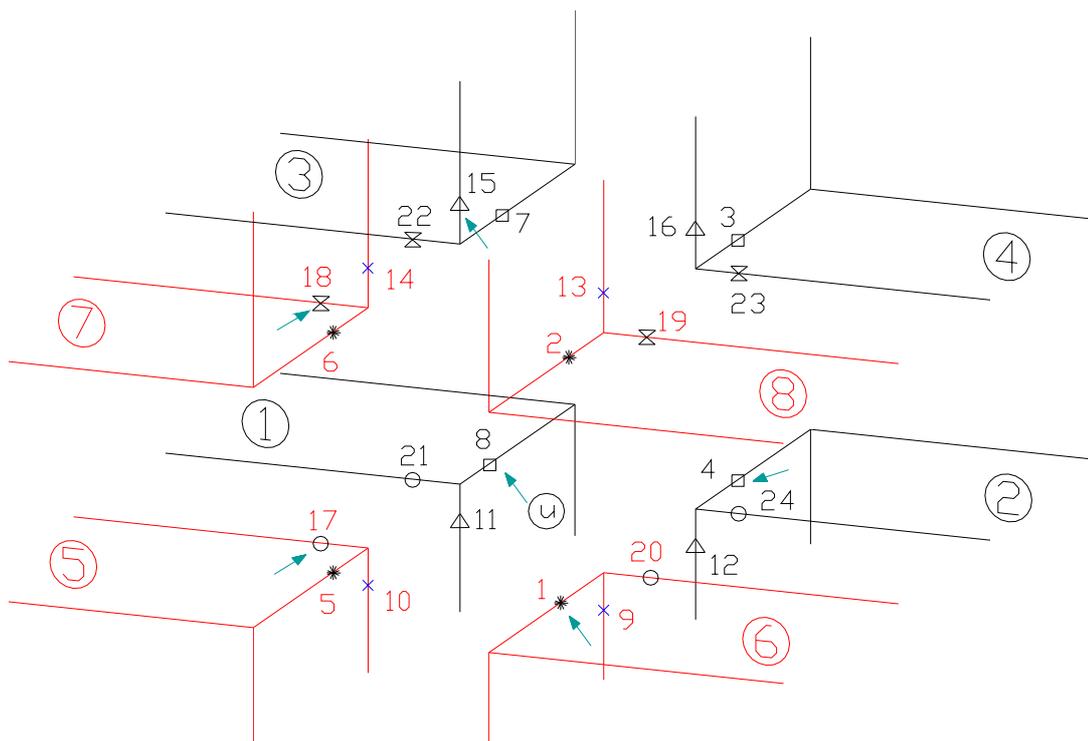


Figura I.2. Alocação inicial das incógnitas.

I.2. FIXAÇÃO DOS NÓS ISOLADOS

A fixação destes nós é necessária para garantir que as incógnitas (**p's**) existentes nos mesmos sejam alocadas. Na Tabela (I.3), são listados os nós isolados para o nicho do exemplo, sendo que cada nó sempre vem acompanhado do seu acoplado. Na Figura (I.3) pode-se verificar a fixação destas incógnitas, pela marcação com um círculo pintado.

Tabela I.3. Conjuntos de nós isolados.

conjunto	nós	sub-regiões	fixação da incógnita p
1	10	5	x
	14	7	-
2	9	6	x
	13	8	-

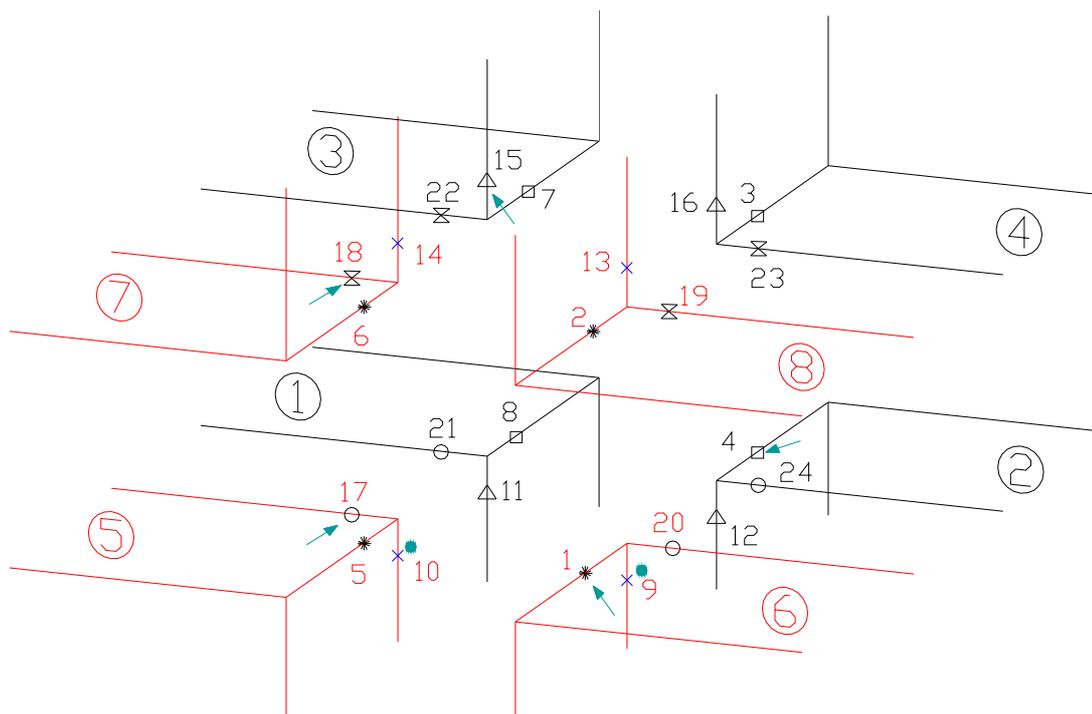


Figura I.3. Fixação dos nós isolados.

I.3. REALOCAÇÃO GERAL DAS INCÓGNITAS

Por fim, deve-se garantir que existirá somente uma incógnita alocada por sub-região. Observa-se que as incógnitas correspondentes a nós isolados não podem ser mais redistribuídas, restando somente distribuir as incógnitas das continuidades.

Pode-se acompanhar a tarefa de redistribuição através da Figura (I.4), observando-se que existem duas variáveis alocadas, tanto na sub-região 5 quanto na 6, a serem remanejadas.

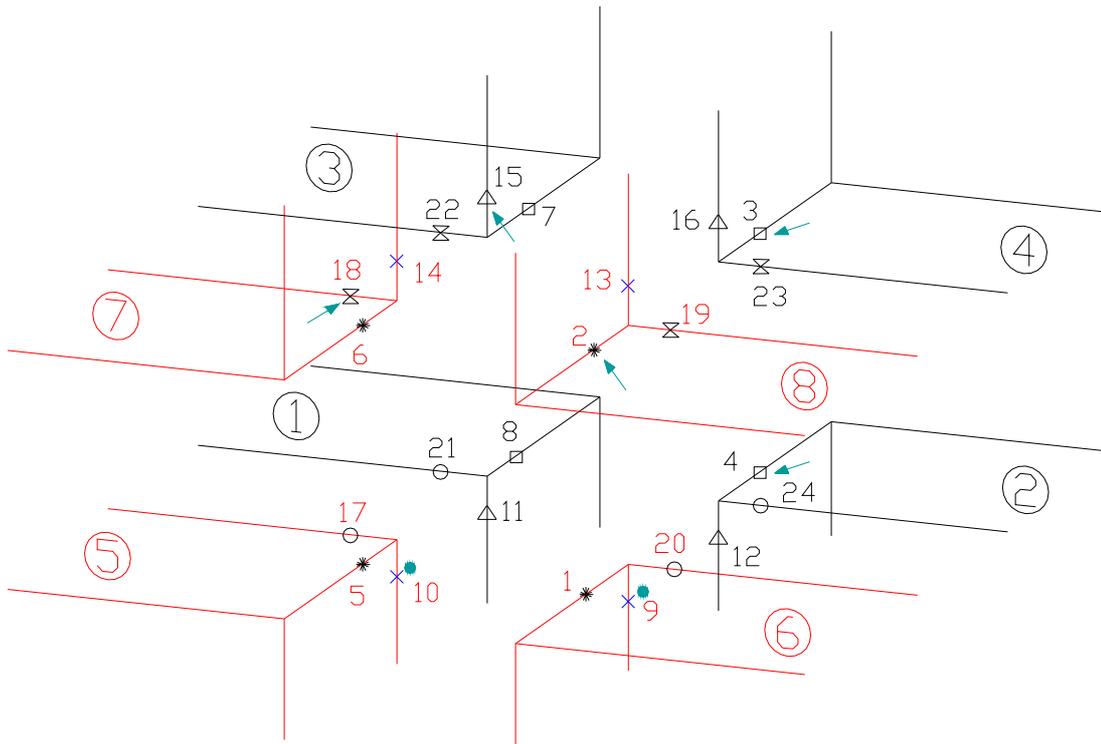


Figura I.4. Realocação geral das incógnitas.

Desta forma, a variável \mathbf{u} ficará alocada na sub-região 1 e os \mathbf{p} 's necessários para compor a solução neste ponto, nas demais sub-regiões. Por consequência, a variável $icont(i, isub)$ de cada um dos nós do grupo, receberá o valor da correspondente opção mencionada no Capítulo 4, conforme apresentado na Tabela (I.4).

De maneira geral, esta pesquisa é feita para todo e qualquer grupo de nós, que necessite de continuidades para eliminar equações desnecessárias.

Tabela I.4. Valores da variável de continuidade - *icont*.

valor de <i>icont</i>	comentário
<i>icont</i> (8,1) = 1	incógnita u alocada neste nó.
<i>icont</i> (11,1) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (21,1) = 4	coluna/linha eliminada com inversão de sinal
<i>icont</i> (4,2) = 4	coluna/linha eliminada com inversão de sinal
<i>icont</i> (12,2) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (24,2) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (7,3) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (15,3) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (22,3) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (3,4) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (16,4) = 4	coluna/linha eliminada com inversão de sinal
<i>icont</i> (23,4) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (5,5) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (10,5) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (17,5) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (1,6) = 4	coluna/linha eliminada com inversão de sinal
<i>icont</i> (9,6) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (20,6) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (6,7) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (14,7) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (18,7) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (2,8) = 2	incógnita p alocada neste nó.
<i>icont</i> (13,8) = 3	coluna/linha eliminada do sistema (adicionada)
<i>icont</i> (19,8) = 4	coluna/linha eliminada com inversão de sinal