

Resumo

Devido ao elevado tempo de computação que normalmente exige, a resolução de sistemas de equações algébricas lineares tem uma importância vital em muitos problemas de computação científica. A escolha adequada do método de resolução pode traduzir-se numa grande melhoria do desempenho global de programas de cálculo.

Neste trabalho testa-se o desempenho computacional de diversos métodos iterativos para resolução de sistemas de equações provenientes de um problema de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Para esse efeito, utilizaram-se as matrizes produzidas por um algoritmo de resolução das equações do escoamento (viz SIMPLE), na simulação do escoamento de um fluido, em regime laminar, no interior de uma caixa com tampa deslizante. Estas matrizes têm dimensões de acordo com o número de pontos utilizados para discretizar o domínio (40×40 , 80×80 , 120×80 e 120×120) e dizem respeito à resolução do campo de pressão e velocidade. Os sistemas derivados do cálculo das pressões tem características diferentes dos sistemas derivados da velocidade que tornam a sua resolução mais difícil.

O estudo abrangeu 10 métodos iterativos diferentes, dos quais 1 é um método estacionário (TDMA) e os restantes 9 são métodos não-estacionários, 3 dos quais de projecção oblíqua (BICG, BICGSTAB e TFQMR) e 6 de projecção ortogonal (CG, CGNR, FOM, GMRES, PGMRES e DQGMRES). Os pré-condicionadores utilizados para os sistemas das pressões foram o $ILU(\ell)$ e o $ILUDP(tol, \alpha)$.

Na escolha do melhor método convém distinguir entre métodos com e sem pré-condicionamento. Os nossos resultados mostram que, no caso de não se utilizar pré-condicionamento, o método mais adequado é DQGMRES(2). Este método foi o único que conseguiu resolver todos os sistemas de teste sem pré-condicionamento, no limite máximo de iterações estabelecido. Caso se opte pela utilização de um pré-condicionador, a nossa escolha recai sobre o TFQMR associado ao pré-condicionador $ILU(6)$ ou, em alternativa, sobre o BICGSTAB associado ao pré-condicionador $ILUDP(0.01, 0.75)$. Estes dois métodos com os respectivos pré-condicionadores convergiram em todas as situações analisadas, em tempos próximos ou iguais aos melhores.

Abstract

The solution of systems of linear equations is a time consuming task of vital importance in scientific computing. The right choice of solver may lead to drastic reductions of computing time.

In this thesis the computational performance of a variety of iterative solvers were tested for solving the system of linear algebraic equations originated by a computer code for Computational Fluid Dynamics. Matrices from an algorithm for solving the fluid flow equations governing the laminar flow inside a cavity with a sliding lid, provided the framework for a series of tests. These matrices for solution of the pressure and velocity field varied in dimension between 40×40 , 80×80 , 120×80 and 120×120 . The matrices for solving the pressure field required longer computing times compared with the matrices for solving the velocity field.

The study covered 10 different iterative methods, among which 1 was a stationary method (TDMA) and the remaining 9 were non-stationary, 3 of oblique projection (BICG, BICGSTAB e TFQMR) and 6 of orthogonal projection (CG, CGNR, FOM, GMRES, PGMRES e DQGMRES). $ILU(\ell)$ and $ILUDP(\text{tol}, \alpha)$ were the preconditioners used.

When choosing the most appropriate method one must distinguish between methods with and without pré-condicioner. Ours results showed that in case of methods without preconditioner, DQGMRES(2) appeared as the most suitable because it was the only one that converged in all the cases being tested. In case of methods with preconditioner, TFQMR with $ILU(6)$ preconditioner or BICGSTAB with $ILUDP(0.01, 0.75)$ preconditioner appeared to be superior. These two methods always reached convergence and with computing times close or identical to the best in each of the test cases.