

CAPÍTULO 3

3 - CÁLCULO DE DESLOCAMENTOS E REACÇÕES COM O PROGRAMA *FEMIX*

3.1 - CONSIDERAÇÕES GERAIS

O programa *femix* lê como ficheiro de dados o resultado da execução do programa *prefemix*, que consiste num ficheiro não formatado (binário) com todos os dados do problema já validados (ver também o Anexo D). É no programa *femix* que são efectuadas a maioria das operações relacionadas com o método dos elementos finitos, tais como o cálculo da matriz de rigidez dos elementos recorrendo à integração de Gauss (*ntype* de 1 a 6 e 9) ou a TKT^T (*ntype* 7 ou 8) (ver Anexo C), cálculo das forças nodais equivalentes às acções nos elementos, assemblagem da matriz de rigidez global e respectivos vectores solicitação para os diversos casos de carga, resolução do sistema de equações por um método directo ou iterativo e cálculo dos deslocamentos e das reacções.

O programa *femix* é o que exige maiores recursos do computador na resolução de grandes problemas, sendo conveniente uma pré-avaliação da quantidade de memória necessária durante a resolução do sistema de equações, para que o tempo despendido na preparação dos dados não seja perdido devido à insuficiência de recursos (ver Secção 3.2). Os graus de liberdade prescritos não contribuem para a dimensão do sistema de equações, não sendo penalizante calcular, por exemplo, um pórtico plano com o elemento de 6 graus de liberdade por nó e ter 3 graus de liberdade impedidos em todos os nós.

Como resultado da execução do programa *femix* são gravados dois ficheiros não formatados com as extensões *_di.bin* (deslocamentos) e *_re.bin* (reacções). Durante a execução do programa são gravados no directório corrente diversos ficheiros temporários com a extensão *.tmp*, que são apagados automaticamente quando o programa termina. Se a execução for interrompida, estes ficheiros devem ser apagados pelo utilizador. O facto de ter ficheiros temporários com nome fixo tem a vantagem de permitir que eles sejam apagados sempre que o programa é iniciado e o inconveniente de não permitir diversas execuções simultâneas no mesmo directório em ambientes multi-tarefa. Se houver necessidade de enviar para *background* um conjunto de cálculos, deve ser criada uma *shell script* (*macro* ou *batch file*) com o conjunto das tarefas e em seguida executar essa *shell script* em *background*. É possível ter várias execuções em simultâneo, desde que o programa seja executado a partir de directórios distintos. Este procedimento é desaconselhado porque todos os processos vão requisitar memória ao computador, podendo esta tornar-se insuficiente.

3.2 - MÉTODOS DE RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES

No programa *femix* encontram-se disponíveis dois métodos de resolução do sistema de equações, um directo e o outro iterativo, cabendo ao utilizador decidir qual deles utilizar (Álvaro Azevedo e Barros, 1990).

O método directo é o de eliminação de Gauss com armazenamento em semibanda de largura constante e com toda a matriz na memória central. Em sistemas com memória virtual a performance ainda é

aceitável se a quantidade de memória necessária for 2 ou 3 vezes superior à disponível. É ainda necessário que exista no disco espaço suficiente para a paginação da parte da matriz que não cabe na memória central.

Para a avaliação da quantidade de memória necessária pelo método directo, devem ser anotados os seguintes valores que o programa *femix* coloca no monitor logo que eles são calculados:

=> *N. of lines of the system of linear eq. (compacted) = ntotc*

=> *N. of columns of the half band (compacted) = nhbac*

O número de *bytes* ocupados pela matriz de rigidez global é:

$ntotc \times nhbac \times sizeof(double)$ em que $sizeof(double) = 8$ (em geral).

O método iterativo é o dos gradientes conjugados com pré condicionamento diagonal e com armazenamento dos termos não nulos da matriz de rigidez global. A totalidade dos termos não nulos deve caber na memória central disponível para que não exista uma significativa degradação da performance. Se a quantidade de memória central não for suficiente, a totalidade da matriz de rigidez terá de ser paginada com o disco em cada iteração. No caso de grandes problemas o número de iterações pode atingir um número da ordem dos milhares. Esta exagerada quantidade de paginação provoca uma degradação de performance, sendo o método iterativo não apropriado nestes casos.

Para calcular a quantidade de memória necessária à resolução pelo método iterativo, deve também ser anotado o seguinte valor que o programa *femix* coloca no monitor após a montagem da matriz de rigidez global:

P N. of non zero terms in KAA = nnzte

O número de *bytes* ocupados durante o processo iterativo é aproximadamente dado pela seguinte expressão:

$5 \times ntotc \times sizeof(double) + 2 \times ntotc \times sizeof(int) + nnzte \times [sizeof(int) + sizeof(double)]$

em que

$sizeof(double) = 8$ (em geral),

$sizeof(int) = 4$ (em geral),

Convém ainda salientar que o armazenamento dos termos não nulos, utilizado em conjunto com o método iterativo, requer uma muito menor quantidade de memória do que o armazenamento em semibanda associado ao método directo.

3.3 - CRITÉRIO PARA A SELECÇÃO DO MÉTODO DE RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES

A eficiência relativa de um método em relação ao outro só pode ser conhecida após a resolução pelo método iterativo, porque não é possível saber antecipadamente quantas iterações vão ser necessárias. O número de iterações depende essencialmente do erro que se tolera na solução final e do grau de condicionamento da matriz de rigidez global. Em problemas de grandes dimensões pode considerar-se que, do ponto de vista prático, o grau de condicionamento não pode ser obtido directamente, restando a sua avaliação por critérios semi empíricos baseados na experiência do utilizador. Assim, pode-se estabelecer as seguintes regras:

Erro tolerado mais pequeno	=>	mais iterações
Matriz mal condicionada	=>	mais iterações
Utilização de um sistema de unidades tal que os valores dos deslocamentos e rotações tenham ordens de grandeza diferentes	=>	matriz mal condicionada
Idem para forças e momentos	=>	matriz mal condicionada
Presença na malha de elementos muito distorcidos, de elementos com dimensões muito diferentes e de materiais com módulos de elasticidade muito diferentes	=>	matriz mal condicionada
Coexistência de deslocamentos e rotações na formulação (<i>n_{type}</i> = 5, 6, 7 ou 9)	=>	matriz mal condicionada

Em problemas em que a matriz de rigidez global não seja mal condicionada é de esperar um número de iterações da ordem de grandeza de cerca de metade do número de equações. Em problemas mal condicionados, o número de iterações pode crescer muito.

O tempo de execução pelo método directo é muito pouco afectado pelo número de casos de carga, porque todos os vectores solicitação são eliminados com uma só redução da matriz de rigidez global.

O tempo de execução pelo método iterativo varia linearmente com o número de casos de carga, porque para cada um deles é necessário recomençar o ciclo iterativo.

A dimensão da semibanda apenas afecta a resolução pelo método directo, quer em memória necessária, quer em tempo de execução. Em problemas tridimensionais, o facto de a semibanda ser quase sempre grande penaliza muito a resolução pelo método directo.

Como conclusão final aconselha-se a utilização do método directo sempre que a matriz de rigidez caiba na memória central. Em problemas de muito grandes dimensões (número de equações superior a 1 000 - 10 000) o método iterativo pode ser o único capaz de resolver o problema, devido à menor necessidade de memória. Em problemas grandes em que a matriz de rigidez não seja muito mal condicionada, o método iterativo conduz a menores tempos de resolução.

NOTA IMPORTANTE: em estruturas hipostáticas, o método directo detecta o aparecimento de termos nulos na diagonal e interrompe a execução. Nestes casos, se o método iterativo for utilizado há que distinguir duas situações:

- i) estrutura hipostática com forças não nulas segundo um grau de liberdade que possui rigidez nula;
- ii) estrutura hipostática não solicitada segundo os graus de liberdade que possuem rigidez nula.

Na situação i) o método iterativo diverge, enquanto que na situação ii) obtém-se os resultados correctos. A situação de potencial perigo reside no facto de o utilizador não ser avisado de que a estrutura é hipostática, i.e., altamente instável. A situação ii) tem no entanto a vantagem de não obrigar o utilizador a adicionar apoios que terão reacção nula e que apenas se destinam a eliminar os termos nulos da diagonal.

3.4 - FÓRMULAS APROXIMADAS DESTINADAS A PREVER TEMPOS DE EXECUÇÃO

Fórmulas aproximadas que permitem prever aproximadamente o tempo de execução num computador com 1MFlops (um milhão de *floating point operations* por segundo) são apresentadas em seguida. Se toda a informação couber na memória central, num computador com *n* MFlops o tempo de execução será *n* vezes menor. Como exemplo refere-se que um computador com processador Pentium II a 300 MHz possui uma performance de cerca de 100 MFlops.

Método directo:

$$T \text{ (segundos)} \cong n_{totc} \times nhbac^2 / 500000$$

Método iterativo:

$$T \text{ (segundos)} \cong n_{case} \times nnzte \times niter / 50000$$

sendo:

ntotc = *n. of lines of the system of linear eq. (compact)*

nhbac = *n. of columns of the half hand (compact)*

ncase = *n. of load cases*

nnzte = *n. of non zero terms in KAA*

niter = *n. of iterations ($\cong n_{totc} / 2$)*

KAA é uma matriz que inclui os termos da matriz de rigidez relativos a graus de liberdade não prescritos.

3.5 - PARÂMETROS QUE QUANTIFICAM O ERRO ASSOCIADO À SOLUÇÃO FINAL

Na resolução pelo método iterativo, logo no início da execução, é necessário indicar o valor de um parâmetro designado por "*preconditioned residual decay (adimensional)*" (*redec*), que tem como valor por defeito $1.0e-06$ (1.0^{-6}) e que controla a interrupção do ciclo iterativo. Como o método dos gradientes conjugados é aplicado à matriz de rigidez pré condicionada, durante o ciclo iterativo apenas é calculada a norma dos resíduos pré condicionados. Para tornar o critério de interrupção do ciclo iterativo o mais independente possível do tipo de problema que se está a resolver e do sistema de unidades utilizado, considera-se que as iterações terminam quando o erro é inferior ao erro inicial vezes o parâmetro *redec*. Assim, ao atribuir a *redec* o valor $1.0e-06$ (1.0^{-6}), está-se a garantir que a norma dos resíduos pré condicionados final é um milhão de vezes inferior à inicial. Este valor de *redec* é em geral suficiente, garantindo 4 a 5 algarismos significativos correctos na solução final, para a generalidade dos problemas.

No final da execução do programa *femix* é enviado para o monitor, e guardado no ficheiro com extensão *_sv.bin*, um diagnóstico da solução final para cada caso de carga. Este diagnóstico é independente do método de resolução do sistema de equações utilizado e consiste nos seguintes parâmetros:

- ⇒ norma do vector dos resíduos (A)
- ⇒ norma do vector solicitação (B)
- ⇒ trabalho dos resíduos (em valor absoluto) nos deslocamentos (em valor absoluto) (C)
- ⇒ trabalho das acções nos deslocamentos (D)
- ⇒ erro relativo adimensional (normas) (=A/B)
- ⇒ erro relativo adimensional (trabalho) (= C/D)

O parâmetro C/D deve ser inferior a $1.0e-06$ (1.0^{-6}), quando é utilizado o método directo e deve ser da ordem da grandeza do "*preconditioned residual decay*" (*redec*), quando é utilizado o método iterativo. Os restantes parâmetros não são tão importantes, sendo apenas necessária a sua consulta nos casos particulares em que o vector solicitação e/ou o vector dos deslocamentos finais tem todas as componentes nulas. Estas situações conduziriam a um denominador nulo no cálculo do erro relativo, caso ele fosse calculado.