

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE BURGERS EMPREGANDO UMA FORMULAÇÃO IMPLÍCITA E MÉTODOS DE KRYLOV

Ricardo Dias dos Santos e Helio Pedro Amaral Souto

Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Caixa Postal 97282, 28610-974 Nova
Friburgo, RJ, Brasil

Palavras Chave: Matrizes esparsas, Métodos implícitos, Subespaço de Krylov.

Resumo. Neste trabalho foi realizado um estudo comparativo entre diferentes métodos do subespaço de Krylov, *BiConjugate Gradient* (BiCG), *Quasi-Minimal Residual* (QMR) e *BiConjugate Stabilized* (Bi-CGSTAB), quando aplicados na resolução da equação de Burgers inviscida unidimensional. Este estudo foi desenvolvido visando a um melhor entendimento desses métodos para futuras aplicações no método *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH), com a implementação de uma versão empregando um método de integração numérica no tempo do tipo implícito, para a resolução do sistema de equações diferenciais ordinárias originário da discretização espacial das equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia. Algumas características particulares destes métodos do subespaço de Krylov são apresentadas e resultados numéricos são obtidos mediante a resolução da equação de Burgers empregando formulações explícita e implícitas do método de Runge-Kutta (RK) .

*E-mail addresses: ricardoiprj@gmail.com, helio@iprj.uerj.br .

1 INTRODUÇÃO

A simulação computacional têm sido cada vez mais utilizada na resolução de fenômenos físicos abrangendo muitas áreas do conhecimento, dentre as quais pode-se destacar a Dinâmica dos Fluidos. Com exceção de alguns casos simples, não é possível obter-se soluções analíticas para estes problemas e surge, então, a necessidade do emprego de métodos numéricos. Boa parte dos problemas de interesse devem ser resolvidos em regime transiente e, portanto, deve-se empregar técnicas de integração temporal. Uma primeira possibilidade, muito usual, seria a de aplicar-se métodos explícitos com esta finalidade, devido à sua simplicidade e eficiência computacional. Entretanto, estes métodos frequentemente são somente condicionalmente estáveis e estão sujeitos a severas restrições na escolha do passo no tempo. Para problemas advectivos governados por equações hiperbólicas, essa restrição é conhecida como a condição de *Courant-Friedrichs-Lewy* (CFL). Quando da necessidade de buscar-se soluções numéricas para grandes períodos de tempo, essa condição torna-se um empecilho uma vez que o valor máximo do incremento de tempo não deve violar a condição de CFL. A fim de contornar-se essa barreira, métodos implícitos (geralmente incondicionalmente estáveis) de integração temporal são utilizados, apesar do seu maior custo computacional.

Atualmente, na literatura, há bem poucos relatos de trabalhos que utilizaram o método *Smoothed Particle Hydrodynamics* conjuntamente com métodos implícitos de integração temporal. Inicialmente, Monaghan [10] propôs uma formulação implícita para a resolução de problemas de dinâmica dos gases. Por outro lado, Knapp [6] apresentou uma formulação implícita, empregando métodos de Krylov e o método de Newton-Raphson na resolução de um problema não-linear. A transferência de calor é resolvida implicitamente via o método de Crank-Nicolson em [12]. Recentemente, Laibe e Price [7] também utilizaram uma formulação implícita e o método SPH na resolução de problemas astrofísicos. Por último, Lanzafame [8] introduziu uma metodologia implícita na qual não é necessária a inversão da matriz jacobiana dos coeficientes para a obtenção da solução numérica.

Sabe-se que a utilização dos métodos implícitos implica na resolução de um sistema algébrico, cujo número de equações depende do tamanho da malha computacional utilizada, o que acarreta num custo computacional extra. No método SPH, que usa uma abordagem lagrangiana e não utiliza malhas espaciais, o tamanho do sistema linear, a ser resolvido para a obtenção das grandezas físicas de interesse, será da ordem do número de partículas utilizadas na simulação. Este valor, que pode chegar a centenas de milhares ou mesmo milhões, acaba sendo um fator desestimulador para o uso dos métodos implícitos [3]. Em contrapartida, como o maior custo computacional do método SPH reside na determinação das partículas próximas vizinhas [4], entende-se que o uso de passos de tempo maiores (violando a condição de CFL) podem resultar num ganho de eficiência computacional apesar do custo adicional da resolução de um sistema algébrico de equações, em função da diminuição da necessidade do emprego dos algoritmos de busca pelas partículas vizinhas. Além disso, o método SPH é altamente paralelizável, conforme pode ser visto, por exemplo, em Góes [4].

Neste trabalho as formulações explícita e implícitas do método de Runge-Kutta, empregando os métodos de Krylov na resolução dos sistemas de equações algébricas, são comparadas entre si. Este estudo será desenvolvido por meio da resolução de uma equação não-linear hiperbólica que é a equação de Burgers inviscida unidimensional.

2 METODOLOGIA

Os métodos provenientes do subespaço de Krylov são aplicáveis a uma família de problemas e cabe a cada usuário decidir quais destes métodos carregam as características satisfatórias para a resolução do problema de interesse. Nesta seção são apresentadas as particularidades de alguns desses métodos, a fim de justificar-se a escolha dos mesmos na implementação computacional e na sua futura utilização no método SPH, incluindo uma formulação implícita para a resolução temporal do sistema de equações diferenciais ordinárias resultantes da discretização espacial das equações de balanço [4]. Têm-se interesse, aqui, pelos métodos não-estacionários do subespaço de Krylov, nos quais a análise de convergência numérica encontra-se baseada no cálculo do resíduo.

Os métodos não-estacionários do subespaço de Krylov são: *Conjugate Gradient* (CG), *Minimal Residual* (MINRES), *Symmetric LQ* (SYMMLQ), *Conjugate Gradient on the Normal Equation* (CGNE ou CGNR), *Generalized Minimal Residual* (GMRES), *BiConjugate Gradient* (BiCG), *Quasi-Minimal Residual* (QMR), *Conjugate Gradient Squared* (CGS), *BiConjugate Stabilized* (Bi-CGSTAB) e *Chebyshev iteration* [2].

Algumas questões devem ser levadas em consideração quando se trata de resolver um sistema linear algébrico. Dentre as principais destaca-se a arquitetura física (*hardware*) disponível, que irá definir o balanço entre a memória necessária a ser alocada e o número de operações primordiais exigidas pelo algoritmo. Para os métodos aqui estudados são elas: o produto interno, a multiplicação de uma matriz por um vetor, a soma entre vetores e a resolução do sistema obtido com o pré-condicionamento. Claramente, esta última vai depender do pré-condicionador que melhor irá se adequar à estrutura matricial oriunda do sistema a ser resolvido.

A Fig. 1 apresenta um fluxograma que pode ajudar o usuário na escolha do melhor método de Krylov para as suas aplicações, baseado nas principais características desses métodos [2].

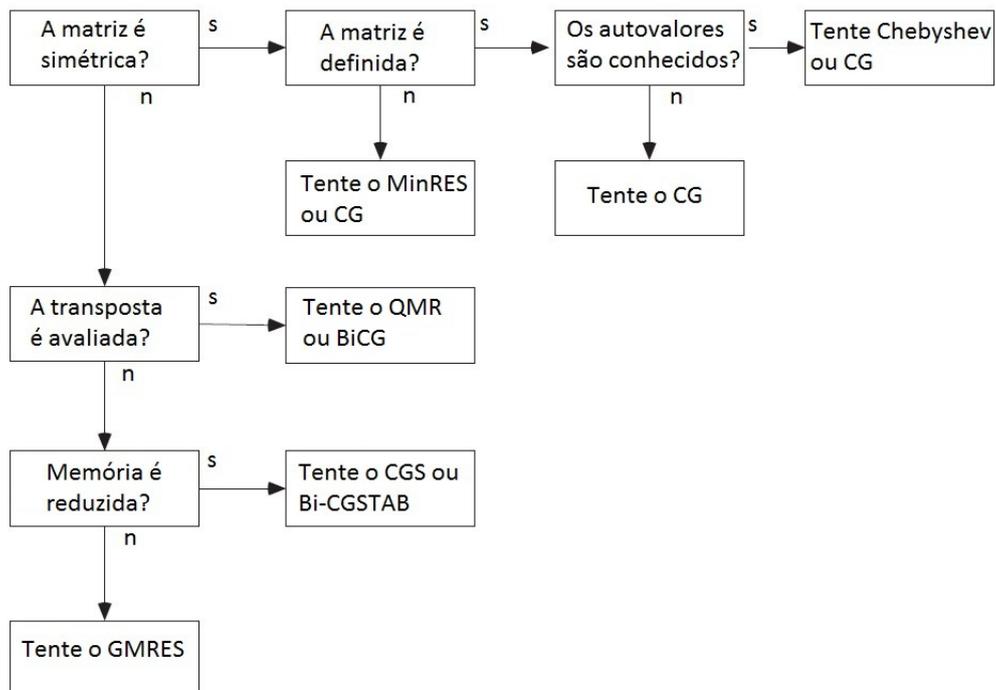


Figura 1: Diagrama para a escolha do método de Krylov de acordo com o problema considerado.

A questão envolvendo o espaço de memória exigido é de suma importância, pois pretende-se resolver sistemas lineares esparsos da ordem do número de partículas empregadas na discretização do domínio de simulação. Uma característica importante dos métodos do subespaço de Krylov é que eles podem ser aplicados em ambientes de execução computacional em paralelo.

Na Tabela 1 mostra-se, para os métodos de Krylov que podem ser aplicados a matrizes não-simétricas, a quantidade de memória necessária por iteração i . Nesta tabela *matriz* denota o espaço necessário para a alocação da matriz e n a ordem da matriz dos coeficientes. No método SPH a matriz dos coeficientes que representa o sistema algébrico não tem uma estrutura definida, sendo do tipo esparsa e, em geral, não é uma matriz simétrica. Assim sendo, não se pode utilizar os métodos específicos para matrizes simétricas. Os métodos de Krylov não-estacionários que podem ser aplicados a matrizes não-simétricas são: o GMRES, o BiCG, o QMR, o CGS e o Bi-CGSTAB.

Tabela 1: Espaço de memória exigido por iteração i .

Método	Espaço de memória
GMRES	$matriz + (i + 5)n$
BiCG	$matriz + 10n$
QMR	$matriz + 16n$
CGS	$matriz + 11n$
Bi-CGSTAB	$matriz + 10n$

O GMRES é um método que conduz ao menor valor do resíduo para um número fixo de passos iterativos, mas esses passos tornam-se extremamente caros computacionalmente. O número de produtos internos cresce linearmente com o número de iterações até o ponto de reinicialização. Numa implementação empregando um processo de Gram-Shimidt simples os produtos internos são independentes. Por outro lado, em uma implementação mais estável com um processo de Gram-Shimidt modificado a cada produto interno tem-se um ponto de sincronização [2].

No algoritmo BiCG são necessárias operações de multiplicação de matriz por vetor envolvendo a matriz dos coeficientes e a sua transposta. Tal fato limita a aplicação deste método quando a matriz dos coeficientes é dada somente de forma implícita como um operador, uma vez que, em geral, não é conhecido o operador transposto correspondente. O método pode ser paralelizado e as propriedades de paralelização são independentes da matriz dos coeficientes, mas altamente dependentes do pré-condicionador utilizado [2].

O QMR foi concebido de modo a evitar-se o comportamento irregular da convergência do BiCG. Comporta-se de forma semelhante ao BiCG para cada passo iterativo. No entanto, enquanto este último pode estagnar ou divergir temporariamente, ele ainda pode reduzir o valor do resíduo mesmo que lentamente. Suas propriedades de paralelização são semelhantes às do BiCG [2].

Em se tratando do CGS, ele converge (ou diverge) aproximadamente duas vezes mais rápido que o BiCG. A convergência pode apresentar um comportamento irregular, que pode levar a uma perda de acurácia na atualização do resíduo. Tende a divergir caso a estimativa inicial estiver muito próxima da condição inicial [2].

O método Bi-CGSTAB tem um custo computacional semelhante ao do BiCG mas não requer

operações com a matriz transposta. Representa uma alternativa ao método CGS evitando os padrões de convergência irregulares e mantendo aproximadamente a mesma taxa de convergência. Como resultado verifica-se, com frequência, uma menor perda de acurácia a cada atualização do resíduo [2].

Na Tabela 2 apresenta-se, para alguns métodos de Krylov, o número de operações necessárias a cada iteração i . O termo “1/1” significa que será realizada uma operação com a matriz e outra com a sua transposta e SAXPY representa o número de operações realizadas de adição escalar entre vetores. Para o método QMR o sobrescrito “ a ” indica que o número de operações depende do tipo de atualização do resíduo. Para atualizações não recursivas este número é menor.

Tabela 2: Sumário das operações por iteração i .

Método	Produto interno	SAXPY	Produto Matriz-vetor	Resolução do Pré-condicionador
GMRES	$i + 1$	$i + 1$	1	1
BiCG	2	5	1/1	1/1
QMR	2	$8 + 4^a$	1/1	1/1
CGS	2	6	2	2
Bi-CGSTAB	4	6	2	2

O pré-condicionador de Jacobi foi empregado em todos os métodos e foi descartada a hipótese de utilização do método GMRES, pois o número de operações e o espaço em memória exigidos tendem a aumentar consideravelmente para grandes sistemas de equações, que vem a ser o caso das nossas aplicações futuras. Também desconsiderou-se o uso do método CGS em função das suas características de convergência. Conforme ressaltado anteriormente, ela pode apresentar um comportamento irregular.

Portanto, levando em consideração todas as questões levantadas previamente, optou-se por utilizar os métodos BiCG, Bi-CGSTAB e QMR. Os respectivos algoritmos destes métodos encontram-se descritos nos Algoritmos 1, 2 e 3 [2].

3 MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA SSP

Uma questão importante que deve ser considerada quando emprega-se métodos de integração no tempo diz respeito à garantia de estabilidade numérica destes métodos. Métodos que preservam fortemente a estabilidade surgiram, inicialmente, com o objetivo de resolver-se numericamente equações diferenciais parciais hiperbólicas contendo descontinuidades nas suas soluções. Para a uma lei de conservação do tipo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(u) = 0 \quad (1)$$

o primeiro passo para o entendimento destes métodos consiste na introdução de uma discretização espacial, $-F(u)$, na aproximação da derivada espacial $\frac{\partial}{\partial x} f(u)$, produzindo, assim, um sistema semi-discreto de equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F(u) \quad (2)$$

Algoritmo 1: Método BiCG pré-condicionado.

- 1 **Passo:** Calcule o resíduo $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ para a estimativa inicial $x^{(0)}$;
 - 2 **Passo:** Escolha \bar{r} , por exemplo, $\bar{r} = r^{(0)}$;
 - 3 **Passo:** Para $i = 1, 2, \dots, \text{IMAX}$; Início do processo iterativo;
 - 4 Resolva o pré-condicionamento $Mz^{(i-1)} = r^{(i-1)}$
 - 5 Resolva o pré-condicionamento $M^T \hat{z}^{(i-1)} = \hat{r}^{(i-1)}$
 - 6 $\rho_{i-1} = z^{(i-1)T} \hat{r}^{(i-1)}$
 - 7 **Se** $\rho_{i-1} = 0$ método falha
 - 8 **Se** $i = 1$ **então** $p^{(i)} = z^{(i-1)}$; $\hat{p}^{(i)} = \hat{z}^{(i-1)}$
 - 9 **Senão** $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$
 - 10 $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$
 - 11 $\hat{p}^{(i)} = \hat{z}^{(i-1)} + \beta_{i-1} \hat{p}^{(i-1)}$
 - 12 $q^{(i)} = Ap^{(i)}$
 - 13 $\hat{q}^{(i)} = A^T \hat{p}^{(i)}$
 - 14 $\alpha_i = \rho_{i-1} / \hat{q}^{(i)T} q^{(i)}$
 - 15 $x^{(i)} = x^{(i-1)} - \alpha_i p^{(i)}$
 - 16 $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$
 - 17 $\hat{r}^{(i)} = \hat{r}^{(i-1)} - \alpha_i \hat{q}^{(i)}$
 - 18 Verifique a convergência; continue se necessário
-

Algoritmo 2: Método Bi-CGSTAB pré-condicionado.

- 1 **Passo:** Calcule o resíduo $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ para a estimativa inicial $x^{(0)}$;
 - 2 **Passo:** Escolha \bar{r} , por exemplo, $\bar{r} = r^{(0)}$;
 - 3 **Passo:** Para $i = 1, 2, \dots, \text{IMAX}$; Início do processo iterativo;
 - 4 $\rho_{i-1} = \bar{r}^T r^{(i-1)}$
 - 5 **Se** $\rho_{i-1} = 0$ método falha
 - 6 **Se** $i = 1$ **então** $p^{(i)} = r^{(i-1)}$
 - 7 **Senão** $\beta_{i-1} = (\rho_{i-1} / \rho_{i-2})(\alpha_{i-1} / \omega_{i-1})$
 - 8 $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)})$
 - 9 Resolva o pré-condicionamento $M\hat{p} = p^{(i)}$
 - 10 $v^{(i)} = A\hat{p}$; $\alpha_i = \rho_{i-1} / \bar{r}^T v^{(i)}$; $s = r^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}$
 - 11 Verificar $\|s\|$; se pequeno o suficiente, estabeleça $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p}$ e pare.
 - 12 Resolva o pré-condicionamento $M\hat{s} = s$
 - 13 $t = A\hat{s}$; $\omega_i = t^T s / t^T t$
 - 14 $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p} + \omega_i \hat{s}$
 - 15 $r^{(i)} = s - \omega_i t$
 - 16 Verifique a convergência; continue se necessário
 - 17 Para continuar é necessário que $\omega_i \neq 0$
-

Por outro lado, sabe-se que para equações diferenciais parciais hiperbólicas não-lineares com soluções descontínuas, a análise de estabilidade de von Neumann baseada na norma L^2 não é suficiente para garantir-se as condições necessárias para a estabilidade numérica. Logo, técnicas que asseguram a estabilidade não-linear, na norma máxima, na semi-norma da variação

Algoritmo 3: Método QMR pré-condicionado.

-
- 1 **Passo:** Calcule o resíduo $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ para a estimativa inicial $x^{(0)}$;
 - 2 **Passo:** $\hat{v}^{(1)} = r^{(0)}$; **Resolva** $M_1 y = \hat{v}^{(1)}$; $\rho_1 = \|y\|_2$;
 - 3 **Passo:** Escolha $\hat{\omega}^{(1)}$; $\xi_1 = \|z\|_2$;
 - 4 **Passo:** Resolva $M_2^T z = \hat{\omega}^{(1)}$; $\xi_1 = \|z\|_2$;
 - 5 **Passo:** Faça $\gamma_0 = I$; $\eta_0 = -1$;
 - 6 **Passo:** Para $i = 1, 2, \dots, \text{IMAX}$; *Início do processo iterativo*;
 - 7 **Se** $\rho_i = 0$ **ou** $\xi_i = 0$ o método falha
 - 8 $v^{(i)} = \hat{v}^{(i)}/\rho_i$; $y = y/\rho_i$
 - 9 $\omega^{(i)} = \hat{\omega}^{(i)}/\xi_i$; $z = z/\xi_i$
 - 10 $\delta_i = z^T y$; **Se** $\delta_i = 0$ o método falha
 - 11 **Resolva** $M_2 \hat{y} = y$; $M_1 \hat{z} = z$
 - 12 **Se** $i = 1$ **então** $p^{(1)} = \hat{y}$; $q^{(1)} = \hat{z}$
 - 13 **Senão** $p^{(i)} = \hat{y} - (\xi_i \delta_i / \epsilon_{i-1}) p^{(i-1)}$; $q^{(i)} = \hat{z} - (\rho_i \delta_i / \epsilon_{i-1}) q^{(i-1)}$
 - 14 $\hat{p} = Ap^{(i)}$; $\epsilon_i = q^{(i)T} \hat{p}$; **Se** $\epsilon_i = 0$ o método falha
 - 15 $\beta_i = \epsilon_i / \delta_i$; **Se** $\beta_i = 0$ o método falha
 - 16 $\hat{v}^{(i+1)} = \hat{p} - \beta_i v^{(i)}$; **Resolva** $M_1 y = \hat{v}^{(i+1)}$
 - 17 $\rho_{i+1} = \|y\|_2$; $\hat{\omega}^{(i+1)} = A^T q^{(i)} - \beta_i \omega^{(i)}$; **Resolva** $M_2^T z = \hat{\omega}^{(i+1)}$
 - 18 $\xi_{i+1} = \|z\|_2$; $\theta_i = \rho_{i+1} / (\gamma_{i-1} |\beta_i|)$; $\gamma_i = 1 / \sqrt{1 + \theta_i^2}$; **Se** $\gamma_i = 0$ o método falha
 - 19 $\eta_i = -\eta_{i-1} \rho_i \gamma_i^2 / (\beta_i \gamma_{i-1}^2)$
 - 20 **Se** $i = 1$ **então** $d^{(1)} = \eta_1 p^{(1)}$; $s^{(1)} = \eta_1 \hat{p}$
 - 21 **Senão** $d^{(i)} = \eta_i p^{(i)} + (\theta_{i-1} \gamma_i)^2 d^{i-1}$; $s^{(i)} = \eta_i \hat{p} + (\theta_{i-1} \gamma_i)^2 s^{i-1}$
 - 22 $x^{(i)} = x^{(i-1)} + d^{(i)}$; $r^{(i)} = r^{(i-1)} - s^{(i)}$
 - 23 Verifique a convergência; continue se necessário
-

limitada (ou variação total) ou pelo menos propriedades que produzam soluções numéricas não-oscilatórias são imprescindíveis.

Segundo Gottlieb, Ketcheson and Chi-Wang Shu [5] a ideia por trás da obtenção de métodos que preservam fortemente a estabilidade é a de se começar com uma formulação semi-discreta que seja fortemente estável para uma certa norma, semi-norma ou um funcional convexo, empregando um método de Euler avançado no tempo, cujo passo de tempo Δt é restrito, e então tentar-se encontrar um novo esquema de integração no tempo que possua uma maior ordem de aproximação e que mantenha fortemente a estabilidade numérica para esta mesma norma, possivelmente sob uma nova restrição no passo de tempo. Em outras palavras, dada a forma semi-discreta, Eq. (2), assume-se que existe um valor Δt_{FE} (*Forward Euler*) tal que:

$$\|u + \Delta t F(u)\| \leq \|u\| \quad \text{com } 0 \leq \Delta t \leq \Delta t_{FE} \text{ para todo } u \quad (3)$$

Portanto, diz-se que o método é *Strong Stability Preserving* (SSP) com coeficiente “ C_S ” se a solução numérica da Eq. (2) implica em

$$\|u^{n+1}\| \leq \|u^n\| \quad (4)$$

sempre que a condição (3) for verificada e que o passo de tempo satisfizer à restrição $\Delta t \leq C_S \Delta t_{FE}$.

Os métodos de Runge-Kutta SSP foram inicialmente introduzidos por Shu e Osher [13] para garantir que discretizações espaciais, que são *Total Variation Diminishing* (TVD), quando combinadas com o método de Euler, ainda irão produzir soluções TVD quando obtidas com métodos de Runge-Kutta de mais alta ordem. Por essa razão é que os métodos SSP foram inicialmente conhecidos como métodos TVD.

Embora este desenvolvimento tenha sido apresentado pensando-se num método explícito, resultados similares podem ser obtidos para os métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos [5].

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Para um melhor entendimento e posterior comparação dos métodos abordados neste estudo, foi implementado um caso teste a fim de comprovar-se a eficácia da metodologia empregada. Neste sentido, escolheu-se para esta finalidade a implementação numérica da resolução da equação de Burgers inviscida unidimensional, que representa um problema não-linear que admite soluções descontínuas:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0 \quad (5)$$

onde $u^2/2$ representa a função de fluxo para esta lei de conservação. Esta equação será resolvida, inicialmente, considerando-se um problema misto (valor inicial e condições de contorno), que será chamado de Primeiro Problema Teste. Em seguida, Segundo Problema Teste, será obtida a sua solução numérica considerando-se um problema de valor inicial: um problema de Riemann.

A equação de Burgers inviscida é uma equação hiperbólica, que admite soluções fracas entrópicas representadas por ondas de choque ou de rarefação em função das condições inicial e de contorno [9]. Como é sabido, a obtenção de uma solução numérica convergente para esta equação diferencial parcial depende das condições de consistência e de estabilidade do método numérico empregado na sua resolução. Além da convergência, a acurácia da solução numérica está condicionada à ordem de aproximação destes métodos, de modo a minimizar-se a difusão e a dispersão numéricas que são normalmente introduzidas no processo de discretização. Cuidado especial também deve ser tomado a fim de evitar-se o aparecimento de oscilações numéricas espúrias, que não encontram justificativa no comportamento do fenômeno físico governado pela equação diferencial. Da teoria dos métodos numéricos para equações diferenciais parciais [9] sabe-se que a resolução dessa equação, pelos métodos numéricos de integração temporal explícitos, implica em que a condição de CFL, $C \leq 1$, seja verificada para que tenha-se um método estável. Nesta condição C é o número de Courant ($C = u\Delta t/\Delta x$), sendo Δt o incremento de tempo e Δx a distância entre os nós da malha espacial.

Na resolução numérica da equação de Burgers emprega-se uma discretização espacial e a equação diferencial ordinária resultante é resolvida pelo método de Runge-Kutta. Quando da discretização espacial é utilizado um limitador de fluxo do tipo *Total Variation Diminishing* (TVD) conhecido como *Super-Bee* [9]. Na avaliação da integração temporal, que é o principal objetivo deste trabalho, foram implementadas versões explícita e implícitas do método de Runge-Kutta [1]. A versão explícita é designada como ERK(2,2) (*Explicit Runge-Kutta*), onde os números em parênteses indicam que trata-se de um método a dois estágios e de segunda ordem:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + q_i^{(2)} + O(\Delta t^2) \quad (6)$$

$$q_i^{(1)} = \Delta t f(t_n, u_i^n) \quad (7)$$

$$q_i^{(2)} = \Delta t f(t_n + \Delta t/2, u_i^n + q_i^{(1)}/2) \quad (8)$$

As versões implícitas consideradas são a DIRK(1,2) (*Diagonally Implicit Runge-Kutta*) a um estágio e também de segunda ordem

$$u_i^{n+1} = u_i^n + q_i^{(1)} + O(\Delta t^2) \quad (9)$$

$$q_i^{(1)} = \Delta t f(t_n + \Delta t/2, u_i^n + q_i^{(1)}/2) \quad (10)$$

a DIRK(2,3) a dois estágios e de terceira ordem

$$u_i^{n+1} = u_i^n + (q_i^{(1)} + q_i^{(2)})/2 + O(\Delta t^3) \quad (11)$$

$$q_i^{(1)} = \Delta t f \left(t_n + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} \Delta t, u_i^n + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} q_i^{(1)} \right) \quad (12)$$

$$q_i^{(2)} = \Delta t f \left(t_n + \frac{3 - \sqrt{3}}{6} \Delta t, u_i^n - \frac{\sqrt{3}}{3} q_i^{(1)} + \frac{3 + \sqrt{3}}{6} q_i^{(2)} \right) \quad (13)$$

e a DIRK(2,2) a dois estágios e de segunda ordem

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \alpha q_i^{(1)} + (1 - \alpha) q_i^{(2)} + O(\Delta t^3) \quad (14)$$

$$q_i^{(1)} = \Delta t f \left(t_n + \alpha \Delta t, u_i^n + \alpha q_i^{(1)} \right) \quad (15)$$

$$q_i^{(2)} = \Delta t f \left(t_n + \Delta t, u_i^n + (1 - \alpha) q_i^{(1)} + \alpha q_i^{(2)} \right) \quad (16)$$

sendo que esta última, segundo Alexander [1], para $\alpha = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}$ fornece um método de Runge-Kuta que é *Strong Stability Preserving*.

4.1 Primeiro Problema Teste

Neste primeiro problema teste a equação de Burgers inviscida unidimensional é resolvida numericamente considerando-se uma condição inicial dada por

$$u(x, 0) = \text{sen}(\pi x) \quad (17)$$

e condições de contorno do tipo Dirichlet

$$u(0, t) = 0 \tag{18}$$

e

$$u(1, t) = 0 \tag{19}$$

A fim de poder-se validar a solução numérica obtida com o método de Runge-Kutta, foi utilizado o Método das Características [11] na obtenção da solução exata, nos instantes de tempo desejados, da equação de Burgers inviscida unidimensional.

As Figs. 2, 3, 4 e 5 apresentam as soluções numéricas empregando os diferentes métodos de integração temporal, para diferentes instantes de tempo, conjuntamente com os resultados obtidos com o método das características (triângulos). Estas soluções foram determinadas para $\Delta x = 5,0 \times 10^{-3}$, $\Delta t = 5,0 \times 10^{-3}$ e $C \leq 1$ para o método explícito e $\Delta x = 5,0 \times 10^{-3}$, $\Delta t = 5,0 \times 10^{-2}$ e $C_{max} = 10$ para os implícitos, onde C_{max} representa o máximo valor do número de Courant. A tolerância estabelecida como critério de parada para os métodos do subespaço de Krylov foi de 10^{-9} . As curvas apresentadas nestas figuras correspondem, respectivamente, aos instantes de tempo iguais a 0,0, 0,2, 0,4 e 0,6 segundos.

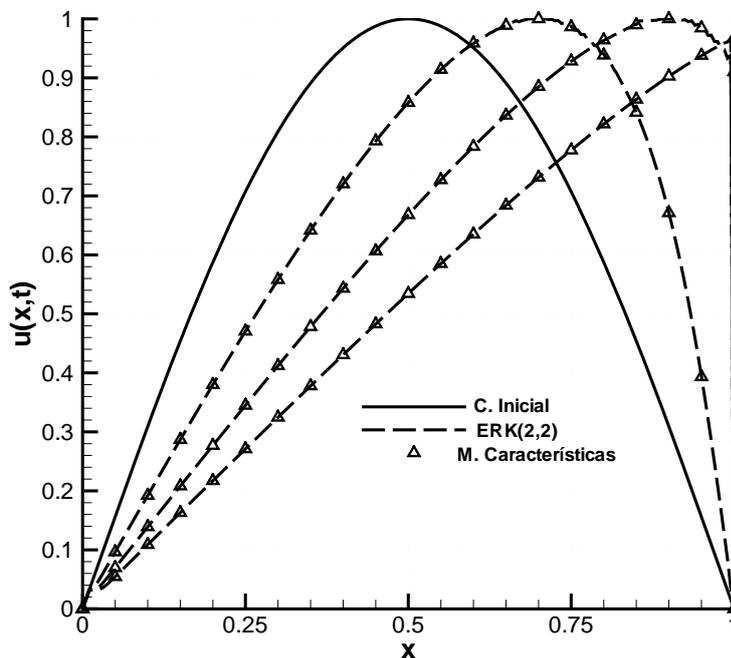


Figura 2: Solução numérica da equação de Burgers utilizando o método ERK(2,2) e para $C \leq 1$.

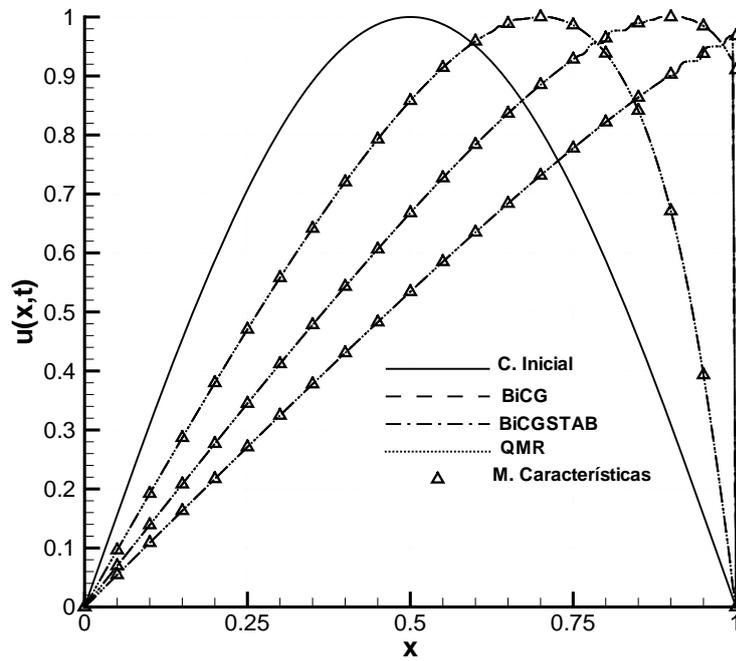


Figura 3: Solução numérica da equação de Burgers utilizando o método DIRK(1,2) e para $C_{max} = 10$.

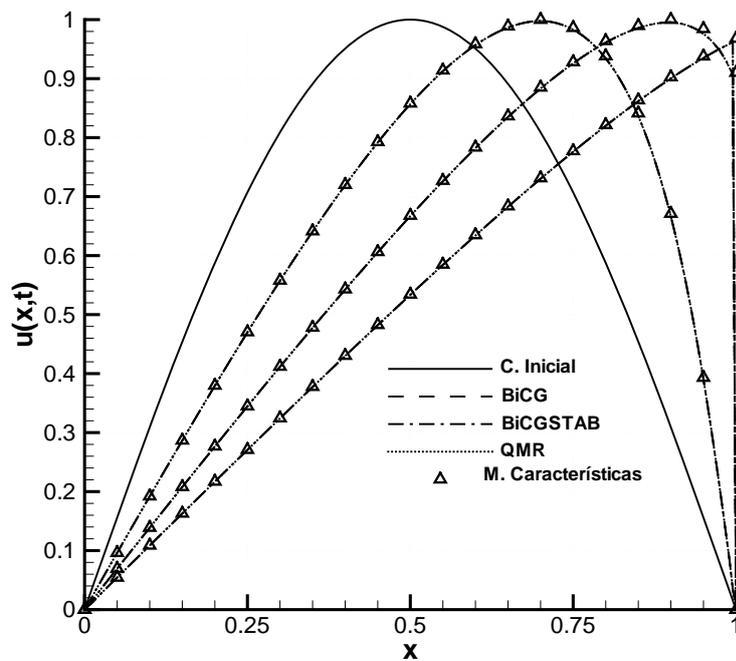


Figura 4: Solução numérica da equação de Burgers utilizando o método DIRK(2,3) e para $C_{max} = 10$.

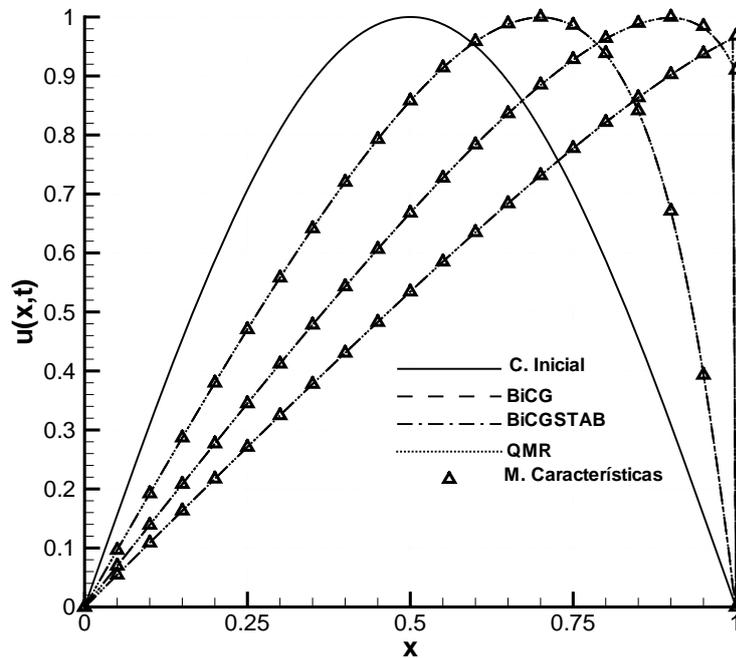


Figura 5: Solução numérica da equação de Burgers utilizando o método DIRK(2,2) e para $C_{max} = 10$.

Da observação dessas figuras verifica-se que para todas as formulações empregadas as soluções estão de acordo com a solução obtida com o método das características.

Conforme esperado, a formulação explícita torna-se instável para $C > 1$. Entretanto, as formulações implícitas foram capazes de fornecer resultados acurados mesmo para números de Courant bem superiores a 1. Para valores extremamente elevados de C a solução numérica pode vir a oscilar nas regiões próximas às singularidades, como o choque, ou introduzir uma difusão numérica apreciável, conforme pode ser observado na Fig. 6, onde os valores máximos de $u(x, t)$ são inferiores a unidade. Estes resultados foram obtidos com os métodos Bi-CGSTAB e DIRK(2,3), empregando-se $\Delta x = 1,0 \times 10^{-4}$, $\Delta t = 1,0 \times 10^{-1}$, $C_{max} = 1.000$ e para os tempos $t = 0,2, 0,4, 0,6$ e $0,8$ segundos.

Nas Tabelas 3-5 são apresentados, para os métodos de Krylov e para os diferentes métodos de Runge-Kutta empregados, o número máximo de iterações necessárias para que o resíduo fosse inferior ao critério de convergência. Destes valores pode-se concluir que o melhor desempenho foi obtido com o método Bi-CGSTAB. Como discutido anteriormente, esse método converge tipicamente em torno da metade do número de iterações do método BiCG. Tal fato ocorreu em função do problema teste escolhido, para o qual a matriz dos coeficientes apresenta um padrão estrutural e, em alguns casos, pode mesmo vir a ser simétrica.

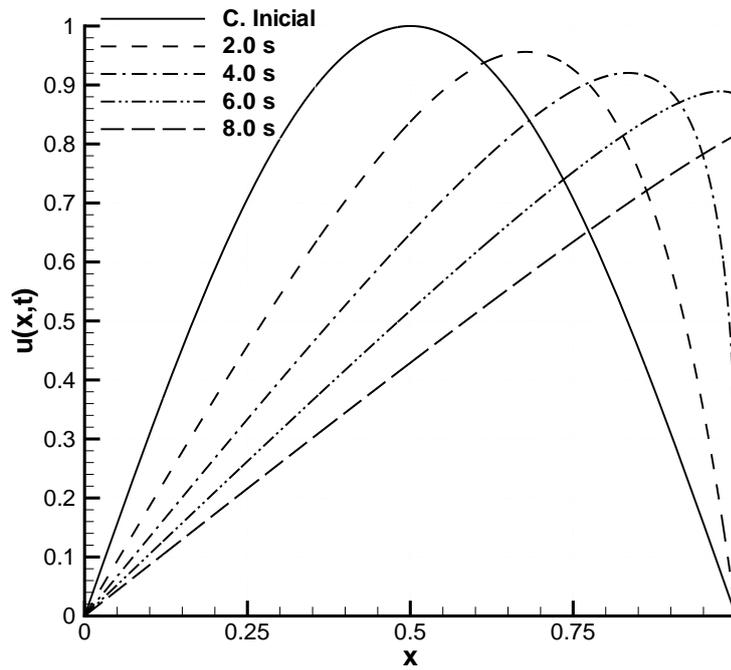


Figura 6: Solução numérica da equação de Burgers utilizando o método DIRK(2,3), o Bi-CGSTAB e para $C_{max} = 1.000$.

Tabela 3: Número máximo de iterações e resíduo máximo final dentre todas as iterações - DIRK(1,2).

Método	Número de iterações	Resíduo
BiCG	43	$9,86 \times 10^{-10}$
Bi-CGSTAB	16	$9,96 \times 10^{-10}$
QMR	43	$9,79 \times 10^{-10}$

Tabela 4: Número máximo de iterações e resíduo máximo final dentre todas as iterações - DIRK(2,3).

Método	Número de iterações	Resíduo
BiCG	35	$9,97 \times 10^{-10}$
Bi-CGSTAB	12	$9,67 \times 10^{-10}$
QMR	34	$9,93 \times 10^{-10}$

Tabela 5: Número máximo de iterações e resíduo máximo final dentre todas as iterações - DIRK(2,2).

Método	Número de iterações	Resíduo
BiCG	53	$9,82 \times 10^{-10}$
Bi-CGSTAB	33	$9,89 \times 10^{-10}$
QMR	46	$9,96 \times 10^{-10}$

4.2 Segundo Problema Teste

O segundo problema teste foi idealizado pensando-se em demonstrar a característica não-oscilatória do método de Runge-Kutta SSP DIRK(2,2), que garante preservar as propriedades TVD da discretização sob uma limitação no passo de tempo em comparação com o método de Euler implícito [5], que resulta em um método que é TVD. Trata-se da resolução da equação de Burgers inviscida para um problema de Riemann dado por

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{se } x < 0,5 \\ 0 & \text{se } x > 0,5 \end{cases} \quad (20)$$

Assim sendo, de modo a ressaltar a importância do uso de métodos de Runge-Kutta SSP diagonalmente implícitos, o segundo problema teste envolve a comparação das soluções calculadas com as formulações DIRK(2,3) e DIRK(2,2), sabendo-se que esta última é SSP.

Da teoria das equações diferenciais hiperbólicas [9] entende-se que as soluções fracas entrópicas admissíveis do problema de Riemann, ondas de rarefação ou choque, são determinadas a partir da função de fluxo da lei de conservação. Para a equação de Burgers inviscida, $f(u) = \frac{1}{2}u^2$, e para condições iniciais à esquerda (u_l) que são maiores que as condições à direita (u_r) no problema de Riemann, $u_l > u_r$, a solução deste problema será uma onda de choque que irá se propagar com uma velocidade s dada pela condição de Rankine-Hugoniot [9]

$$s = \frac{f(u_l) - f(u_r)}{u_l - u_r} = \frac{\frac{1}{2}(1^2 - 0^2)}{1 - 0} = 0,5 \quad (21)$$

e, portanto, a onda se propagará da esquerda para a direita.

Na simulação deste caso teste apenas o método QMR reproduziu as soluções corretas considerando um incremento de espaço $\Delta x = 5,0 \times 10^{-3}$ e um passo de tempo $\Delta t = 5,0 \times 10^{-2}$. Os demais métodos também conseguem reproduzir corretamente a solução numérica, mas apenas para incrementos de tempo mais restritivos que o considerado neste teste. As soluções mostradas nas Figs. 7 e 8 foram determinadas para os instantes de tempo correspondentes a 0,3 s, 0,6 s e 0,9 s, respectivamente. Conforme pode-se observar nestes gráficos, as soluções calculadas com o método de Runge-Kutta SSP, DIRK(2,2), não apresentou as oscilações espúrias que podem ser vistas nos resultados correspondentes ao método DIRK(2,3), Fig. 7. Estes resultados comprovam que o método DIRK(2,2) mantém limitada a variação total para cada passo de tempo evitando o aparecimento destas oscilações, ou seja, ele é um método do tipo TVD.

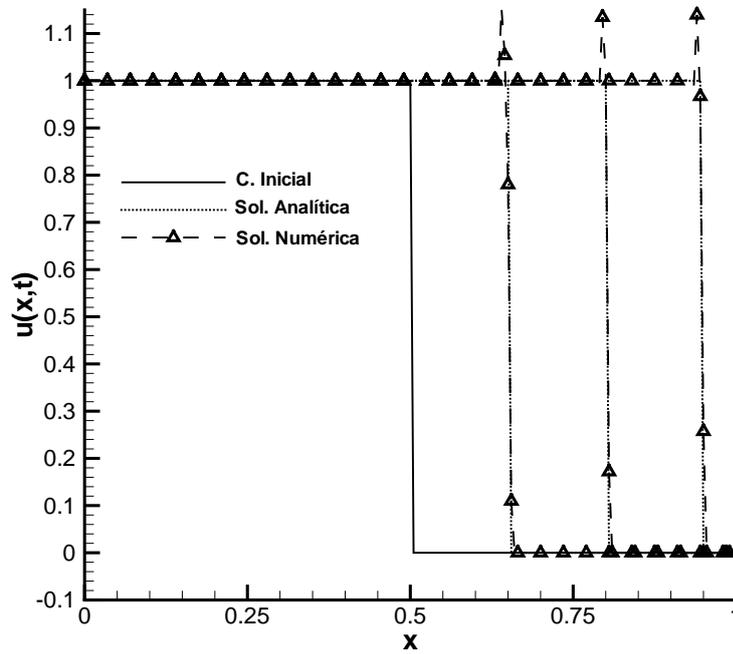


Figura 7: Solução numérica da equação de Burgers utilizando os métodos DIRK(2,3) e QMR, para $C_{max} = 10$.

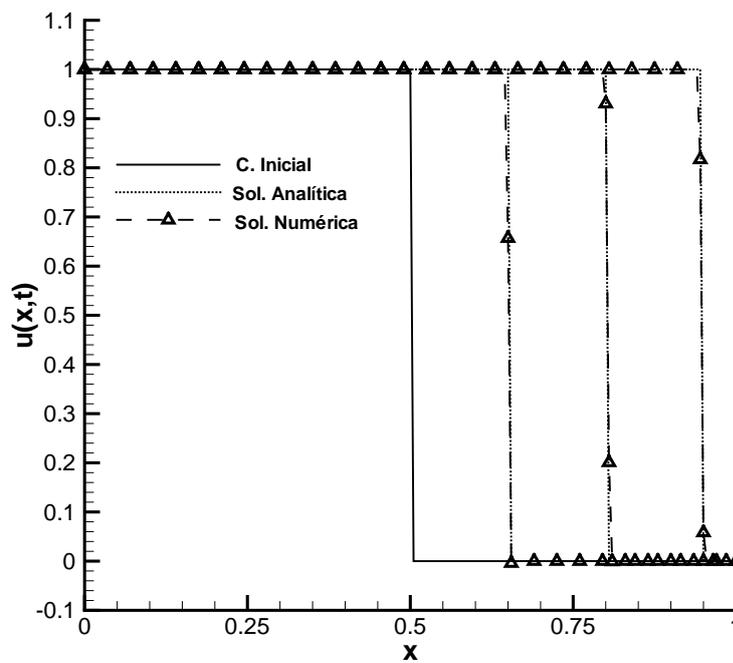


Figura 8: Solução numérica da equação de Burgers utilizando os métodos DIRK(2,2) e QMR, para $C_{max} = 10$.

5 CONCLUSÕES

Foi possível verificar que as soluções numéricas da equação de Burgers inviscida unidimensional, obtidas para o Primeiro Problema Teste, são acuradas mesmo quando empregou-se as formulações implícitas do método de Runge-Kutta. Também verificou-se que dentro os métodos do subespaço de Krylov comparados neste estudo, o método Bi-CGSTAB foi o mais eficiente, convergindo em um menor número de iterações para o mesmo critério de convergência.

Outro resultado importante comprovado foi a propriedade não-oscilatória do método de Runge-Kutta DIRK(2,2), que é um método do tipo *Strong Stability Preserving*, que preserva as propriedades dos esquemas de discretização espacial do tipo TVD quando empregados conjuntamente. Futuramente, pretende-se verificar se o desempenho favorável destes métodos será reproduzido quando da implementação de uma formulação implícita no tempo para o método *Smoothed Particle Hydrodynamics*.

Acknowledgments

Este trabalho contou com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) através do processo 305958/2012-7.

REFERÊNCIAS

- [1] R. Alexander. Diagonally implicit runge-kutta methods for stiff o.d.e.'s. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14(6):1006–1021, 1977.
- [2] R. Barrett, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. M. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. V. Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, 2006.
- [3] J. M. Domínguez, M. Crespo, and S. Dost. Optimization strategies for parallel CPU and GPU implementations of a meshfree particle method. *Computing Research Repository*, abs/1110.3711, 2011.
- [4] J. F. Góes. Resolução numérica de escoamentos compressíveis empregando um método de partículas livre de malhas e o processamento em paralelo (cuda). 2011 . 101 f. Master's thesis, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico, Nova Friburgo, 2011.
- [5] S. Gottlieb, D. Ketcheson, and Chi-Wang Shu. *Strong Stability Preserving Runge-Kutta and Multistep Time Discretizations*. Word Scientific, 2011.
- [6] C. E. Knapp. *An Implicit Smooth Particle Hydrodynamic Code*. PhD thesis, University of New Mexico, Albuquerque, New Mexico, 2000.
- [7] G. Laibe and D. J. Price. Dusty gas with Smoothed Particle Hydrodynamics - ii. implicit timestepping and astrophysical drag regimes. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 420:2365–2376, 2012.
- [8] G. Lanzafame. Implicit integrations for SPH in semi-lagrangian approach: Application to the accretion disc modeling in a microquasar. *Computer Physics Communications*, 184:671–688, 2013.

- [9] Randall J. Leveque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002.
- [10] J. J. Monaghan. Implicit SPH drag and dusty gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 138:801–820, 1987.
- [11] P. J. Olver. *Applied Mathematics Lecture Notes*, chapter Nonlinear Partial Differential Equations, pages 1169–1202. 2006.
- [12] R. Rook, A. J. C. Yildiz, and M. G. Gesteira. Modeling transient heat transfer using SPH and implicit time integration. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 51:1–23, 2007.
- [13] C. W. Shu and S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 83:32–78, 1988.