

MÉTODOS MULTIGRID APLICADOS AO FLUXO SUBTERRÂNEO: uma revisão

João Paulo M. Santos* Edson C. Wendland† Mario Mendiondo ‡

19 de junho de 2011

RESUMO A necessidade de obter solução de grandes sistemas lineares provenientes de processos de discretização conduz a busca de técnicas que sejam robustas, ótimas e adaptativas. A eficiência e generalidade dos métodos multigrid na resolução de equações diferenciais parciais que surgem da modelagem de diferentes fenômenos físicos associadas ao aumento da capacidade de processamento computacional tornam esses métodos atrativos para aplicações em estudos envolvendo o fluxo e o transporte de contaminantes em meio poroso saturado. Este trabalho traz uma revisão de contribuições relevantes no desenvolvimento dos métodos multigrid e aplicações destes métodos na resolução das equações envolvendo as equações do fluxo e do transporte em meio poroso saturado.

ABSTRACT The need for solving large linear systems arising from discretization process leads the search for techniques that are robust, optimal and adaptive. The efficiency and generality of multigrid methods to solve partial differential equations that arise from modeling different physical phenomena associated with the increased capacity of computing power makes these methods attractive for applications in studies involving flow and transport of contaminants in saturated porous media. This paper presents a review of relevant contributions in the development of methods multigrid and applications of these methods in solving equations involving the equations of flow and transport in porous media saturated.

palavras chaves: equações de advecção-difusão, métodos iterativos, adaptatividade.

*Departamento de Engenharia Hidráulica e Saneamento, EE-SC, USP, São Carlos

†Departamento de Engenharia Hidráulica e Saneamento, EESC, USP-São Carlos

‡Departamento de Engenharia Hidráulica e Saneamento, EESC, USP-São Carlos

1 Introdução

A importância da preservação dos recursos hídricos, a previsão precisa dos processos de migração de contaminantes no meio poroso, a recuperação de sítios contaminados reside tanto no interesse econômico, quanto no interesse de manutenção das espécies e estão associados a nossa capacidade de modelar o fenômeno físico e obter soluções confiáveis.

Com o aumento da complexidade dos problemas envolvendo o fluxo subterrâneo tais como a incorporação de reações químicas que ocorrem no meio poroso, processos de biodegradação, transporte de vírus ou bactérias, transporte de substâncias nocivas em geral, a incorporação de características do meio poroso tais como heterogeneidades, fraturas no esqueleto rochoso e anisotropia associados aos grandes domínios irregulares, que em geral são considerados torna-se fundamental a utilização de métodos numéricos robustos e eficientes.

Essa necessidade de solução de grandes sistemas lineares provenientes de processos de discretização de equações diferenciais parciais ou sistemas de equações diferenciais parciais conduz a busca de técnicas que sejam robustas quanto à quantidade de problemas que possam ser resolvidos, ótimas quanto a quantidade de esforço computacional requerido para a resolução destes sistemas lineares, adaptativas de modo que as regiões onde são necessários maior esforço computacional são determinadas automaticamente e os erros são reduzidos, automaticamente, para os limites aceitáveis.

Neste contexto, os métodos multigrid apresentam-se como elementos relevantes pois são apresentados, frequentemente, como métodos que satisfazem tais critérios e tem sido aplicados a problemas envolvendo equações diferenciais parciais elípticas, hiperbólicas ou parabólicas e sistemas de equações diferenciais parciais.

2 Métodos Multigrid: Discussão Geral

Método Multigrid (MG) é um método numérico para resolver sistemas lineares de equações algébricas que surgem da modelagem de fenômenos físicos. Podemos distinguir entre os métodos multigrid geométricos e métodos multigrid algébricos.

Segundo Ruge e Stüben, (1987), o foco na aplicação dos métodos multigrid padrão(geométrico) é o problema contínuo a ser resolvido. Com a geometria do problema conhecida, o usuário discretiza o operador correspondente em uma sequência crescente de malhas, cada malha

sendo geralmente o refinamento uniforme da malha anterior. No entanto, muitos problemas não podem ser resolvidos através das técnicas multigrid, sendo indicado a utilização dos métodos multigrid algébricos (AMG). O AMG é construído para resolver a matriz de equações usando os princípios usuais dos métodos multigrid, utilizando informações contidas na matriz dos coeficientes, e pode ser utilizado para muitos tipos de problemas, onde a aplicação de métodos multigrid padrão é difícil ou impossível (Ruge e Stüben, 1987).

As generalizações dos métodos multigrid são os métodos multiescala e os métodos multinível. Método multiescala é um conceito mais geral que ajuda distinguir entre as diferentes escalas em um dado problema matemático ou físico e método multinível é um conceito mais geral ainda, o qual ajuda a definir e entender a hierarquia da matemática abstrata e usá-la para resolver problemas práticos em diferentes áreas da Matemática e Matemática Aplicada (Shapira, 2008).

Uma das principais vantagens da utilização dos métodos multigrid são eficiência e generalidade (Fulton et al., 1986). A eficiência do procedimento esta baseada no fato de que, para uma dada acurácidate, o número de operações computacionais necessárias para resolver um sistema de N equações algébricas, com N variáveis, é proporcional ao número de variáveis, ou seja, o esforço computacional necessário é $O(N)$ (Brant, 1977) contrastando com $O(N^3)$ para o processo de Eliminação de Gauss. Além disso, esta eficiência não depende da forma do domínio, das condições de fronteira, da malha de discretização e não é sensível a escolha dos parâmetros (Brandt, 1977).

A eficiência dos métodos multigrid é atingida para uma grande classe de problemas, incluindo problemas com valores de contorno, minimização e equações integrais (Fulton, 1989). No entanto, a taxa de convergência pode depender das características dos coeficientes da equação diferencial parcial considerada. Para equações com coeficientes com descontinuidades, coeficientes com variações bruscas ou anisotrópicos, com domínios complexos ou problemas usando procedimento de refinamento não-uniforme a taxa de convergência para métodos multigrid geométricos será muito baixa e é necessário a utilização de técnicas especiais (Xiao et al., 2006).

O refinamento adaptativo da malha, consistindo em estratégias adaptativas e refinamento local, fornece uma forma dinâmica de melhorar a acurácidate computacional sem perder tempo computacional com o procedimento. A idéia essencial essencial desta técnica

numérica é que apenas uma parte limitada do domínio requer alta resolução(isto é, mais esforço computacional), portanto baixa resolução pode ser aceitável nas demais partes do domínio espacial (Li et al., 2005). Métodos multigrid podem ser combinados com o refinamento adaptativo da malha para melhorar a eficiência do procedimento computacional (Li et al., 2005).

Apesar da complexidade $O(N)$ para algoritmos multigrid ser um fato importante na resolução de problemas em Computação Científica, a consideração de problemas que conduzem a grandes sistemas de equações algébricas, tais como sistemas gerados pela discretização de problemas envolvendo fluxo em três dimensões, não podem ser eficientemente resolvidos em computadores em série (McBryan et al., 1991) e requerem a utilização de processamento em paralelo.

3 Componentes Básicos dos Métodos Multigrid

A principal diferença entre os termos algébrico e geométrico para métodos multigrid é devida ao modo de construção dos níveis de refinamento das malhas (Brandt, 1986). Nos métodos geométricos a maneira de construção dos operadores de transferência entre as diversas malhas de discretização esta relacionada geométricamente através dos operadores de refinamento ou desrefinamento enquanto que nos métodos algébricos esses processos estão baseados em considerações puramente algébricas contidas na matrix do sistema de equações algébricas a ser resolvido (Stüben, 1983).

Segundo Verfürth (2007/2008), Algoritmos Multigrid (geométricos) são baseados seguintes observações:

1. Métodos Iterativos Clássicos tais como Gauss-Seidel reduzem rapidamente as frequências altas de oscilações das componentes dos erros, por outro lado são fracos para reduzir frequências baixas nas componentes dos erros;
2. Oscilações suaves nas componentes dos erros podem ser bem resolvidas em uma malha grosseira com poucas variáveis.

O algoritmo Multigrid é baseado em uma sequência de malhas T_0, T_1, \dots, T_r , os quais são obtidas por refinamento local ou global sucessivamente, e o problema discreto associado $Lu_k = f_k, k = 0, 1, 2, \dots, r$, correspondendo a equação diferencial parcial. A malha

mais fina T_r corresponde ao problema atual que desejamos resolver. Além disso, um algoritmo multigrid deve conter três componentes:

1. Um operador de suavização M_k , o qual precisa ser fácil de avaliar e que ao mesmo tempo forneça uma aproximação razoável para L_k^{-1} ;
2. um operador restrição $R_{k,k-1}$, o qual aplica a malha fina T_k na próxima malha grossa T_{k-1} ;
3. um operador de prolongamento $I_{k-1,k}$ que aplica a malha grossa T_{k-1} na próxima malha fina T_k .

Uma descrição detalhada pode ser encontrada em (Brandt, 1977), (Wesseling, 1991), (Briggs et al., 2000)

4 Uma breve revisão dos Métodos Multigrid

O primeiro trabalho descrevendo as idéias dos métodos multigrid é datado de 1935, quando Southwell discute um esquema de relaxação para uma malha de dois níveis(MG-20). Muito depois, em 1964 Fedorenko formulou o primeiro algoritmo multigrid "verdadeiro" para um esquema padrão de diferenças finitas para a equação de Poisson, provando que o trabalho requerido para atingir dada precisão era de $O(N)$ este trabalho foi generalizado para um esquema de diferenças finitas centradas de uma equação diferencial parcial elíptica(Wesseling, 1991). No entanto, as estimativas para o trabalho teórico eram pessimistas e a idéia permaneceu esquecida até Archi Brandt (referencias) publicar uma série de artigos, na década de setenta, apontando a utilidade prática dos métodos multigrid (Wesseling, 1991). A utilidade prática e generalidade tornaram a nova técnica aplicável em diversas áreas tais como Teoria de controle, otimização, "pattern recognition", tomografia computacional e partículas físicas(Wesseling, 1991).

Revisão e discussão dos principais conceitos relacionados com a implementação dos métodos multigrid são apresentadas por (Fulton, 1985). A influência da nova técnica e o crescimento de produção científica associado pode ser visto na extensa lista de publicações apresentadas em (McCormick, 1987), incluindo as contribuições de A. Brandt, D.Braess, W. Hackbusch, U. Trottenberg, S. McCormick, Wesseling , Briggs, entre outros (McCormick, 1987). Detalhes históricos e o descrição detalhada do método podem ser

encontrados (Wesseling, 1991) e (Trottenberg et al., 2001). A influência da técnica multigrid aplicada a dinâmica dos fluidos computacional e os desafios impostos pela resolução dos novos problemas que surgem em aplicações práticas ou em estudos acadêmicos é apresentado por (WESSELING, 2001). A análise das técnicas multigrid incluidas no contexto dos métodos iterativos e a análise dos efeitos destes métodos no avanço da ciência, em geral é analisada por Saad e Vorst, (2000).

5 Métodos Multigrid e Águas Subterrâneas

A análise do fluxo de substâncias em meio poroso envolve uma variedade de fenômenos relacionados, tais como as características do meio poroso, as características dos fluidos que percorrem o meio poroso e as diversas iterações entre os componentes do meio poroso e dos fluidos. Além disso, o comportamento em larga escala dos processos convectivos não são bem entendidos, particularmente quando o fluxo envolve multiplas componentes, multiplos fluidos e fases sólidas e reações químicas complexas (Trangenstein, 2002). Uma discussão detalhada dos processos e desafios envolvendo o fluxo em meio poroso pode ser encontrada em (Dierch e Kolditz, 2002).

As técnicas multigrid tem grande potencial no estudo de águas subterrâneas devido às suas características de eficiência e generalidade. Além disso, a associação das técnicas multigrid com técnicas computacionais tais como processamento em paralelo e técnicas derivadas do processo de discretização tais como adaptatividade, implementada na utilização do método dos elementos finitos, e a utilização das características de esparsidade das matrizes geradas pelo processo de discretização conduz a resolução eficiente de problemas envolvendo o meio poroso.

Métodos multigrid foram aplicados por T.Scott, (1985), para a simulação de reservatórios de petróleo em duas e três dimensões. A consideração de grandes sistemas envolvendo meio poroso, computação em paralelo, métodos multigrid , a influência dos avanços computacionais nas técnicas iterativas e resolução de grandes sistemas lineares são apresentadas por (Holter e Vanderverghe, 1990), (McBryan et. al, 1990), (Oliveira et al., 1991), (Saied e Mahinthakumar, 1998). Recentemente, a utilização do processamento em paralelo para resolução de problemas envolvendo o meio poroso foi apresentado por (Mustapha et al.,2010) e (Di Coumou et al., 2007).

Recentemente, métodos multigrid tem sido extensivamente aplicados na resolução numérica das equações de advecção-difusão por (Muratova e Andreeva, 2009), (Mascarenhas et al., 2009), (Lai et al., 2007) , (Zhang et al., 2002). A adaptatividade associada as técnicas multigrid aplicada ao fluxo subterrâneo é discutida por (Trageinstein, 2002) e a simulação tridimensional, incluindo adaptatividade, é considerada por Li et al.,(2005).

6 Métodos Multigrid Algébricos

AMG é uma classe de métodos baseados nos princípios dos métodos multigrid que dependem pouco ou não dependem nada das informações geométricas contidas no problema, mas ao invés disso usa os conceitos de 'algebraic Smoothness' para determinar processos efetivos de relaxação ou refinamento. Métodos desse tipo assumem alguma característica de '*algebraic smoothness*', especificando as componentes do erro que não são rapidamente eliminadas pelo processo de relaxação que esta sendo usado (Brezina et al., 2006) e não operam diretamente no conjunto de equações algébricas

$$Au = f. \quad (1)$$

A troca dos termos baseados em considerações geométricas tais como malha, submalha, e pontos da malha, presentes nos métodos multrigrid, pelos termos conjunto de variáveis, subconjuntos de variáveis e variáveis simples torna a descrição dos métodos algébricos multigrid semelhante a descrição do método multigrid geométrico(Stüben, 1983), (Brezina, 2006). Uma discussão completa dos termos pode ser encontrada em (Trottenberg, 2001).

Os conceitos dos métodos AMG foram introduzidos por A. Brandt, S. McCormick e J. Ruge (Stüben, 1983) com contribuições de A. Brandt (Brandt, 1987). A apresentação dos principais conceitos envolvendo o método e uma revisão histórica do desenvolvimento do método é apresentada por (Stüben, 2001) e um tratamento completo dos métodos multigrid é apresentado por (Trottenberg, 2001).

O recente interesse nestes métodos reside, principalmente, no potencial para resolver problemas complexos em diversos áreas. Recemente, as técnicas AGM tem sido exploradas no estudo de problemas com coeficientes variáveis (Xiao et al., 2007), fluxo turbulento com densidade variável (Gravemeier e Wall, 2010), equações surgindo em simulações eletro-

mecânicas(Thum et al., 2010) e mecânica estrutural (Brezina et al., 2006), acoplamento das equações de fluxo superficial e fluxo subterrâneo (Layton et al., 2003) e sistemas de equações diferenciais elípticas (A. Borzì e G. Borzì 2003).

Estudos envolvendo equações do transporte, os métodos AMG são explorados por (De Sterck et al., 2004) e (A.Borzì e G.Borzì, 2003) mostram, respectivamente, que os métodos AMG são efetivos no estudo de equações elípticas e hiperbólicas. Comparações dos métodos AMG com outros métodos iterativos, aplicados ao fluxo em meio poroso são apresentados por (Detwiler et al., 2002). As características de refinamento adaptativo e métodos algébricos são combinadas por (Mitchell, 2010).

7 Conclusões

Neste trabalho apresentamos uma breve revisão histórica e bibliográfica dos métodos multigrid, através das categorizações em geométricos e algébricos. Os métodos multigrid são apresentados como métodos que possuem eficiência e generalidade de aplicações, no entanto a teoria matemática é omitida e pode ser encontrada, com um tratamento completo e abrangente, nas referências citadas. As características do método multigrid geométrico e multigrid algébrico tornam estes métodos apropriados para a aplicação em problemas envolvendo o fluxo e o transporte de contaminantes em meio poroso saturado.

Referências

- [1] Stephen F. McCormick(Editor), *Multigrid Methods*, Series: Frontiers in Applied Mathematics, SIAM, 1987.
- [2] Yair Shapira, *Matrix-Based Multigrid: Theory and Applications*, Springer-Verlag, 2008.
- [3] Scott R. Fulton, Paul E.Ciesielski, Wayne H. Schubert, *Multigrid Methods for Elliptic problems: A Review*, Monthly Weather Review, v.14, 943-959, 1986.
- [4] Achi Brandt, *Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems*, Mathematics of Computation, vol.31, no:138, p:333-390, 1977.

- [5] Yingxiong Xiao, Ping Zhang, Shi Shu, *Algebraic multigrid methods for elastic structures with highly discontinuous coefficients*, Mathematics and Computers in Simulation, v.76, 2007, 249-262.
- [6] Ming-Hsu Li, Hwai-Ping Cheng, Gour-Tsyh Yeh, *An adaptive multigrid approach for the simulation of contaminant transport in the 3D subsurface*, Computers & Geosciences, vol.31, 2005, 1028-1041.
- [7] McBryan Oliveira, Paul O. Frederickson, Hohannes Linde and Anton Schüller, Karl Solchenbach, Klaus Stüben, Clemens-August Thole., Ulrich Trottenberg, *Multigrid Methods on Parallel Computers-A Survey*, Impact of Computing in Science and Engineering, vol.3, 17575, 1991.
- [8] Achi Brandt, *Algebraic Multigrid Theory: The Symmetric Case*, Applied Mathematics and Computations, v:19,p: 23-56, 1986.
- [9] Klauss Stüben, *Algebraic Multigrid(AMG): Experiences and Comparisons*, Applied Mathematics and Computation, v: 13, p: 419 - 451, 1983.
- [10] R. Verfürth, *Adaptive Finite Element Methods*, Lecture Notes Winter Term 2007/08.
- [11] Pieter Wesseling, *An introduction to multigrid methods I* Pieter Wesseling, séries: Pure and applied mathematics, John Wiley & Sons Ltd, 294, 1991.
- [12] William L. Briggs, Van Emden Henson, Steve F. McCormick, *A multigrid tutorial*- 2nd. ed., 2000.
- [13] Yousef Saad, Henk A. van der Vorst, *Iterative solution of linear systems in the 20th century*, Journal of Computational and Applied Mathematics, v.123, 2000, 1-33.
- [14] Stephen F.McCormick (Editor), *Multilevel Adaptative Methods for Partial Differential Equations*, SIAM, Frontiers in Applied Mathematics, vol.6, 1989.
- [15] Ulrich Trottenberg, Cornelis W. Oosterlee, Anton Schüller, *Multigrid*, Academic Press, 649p, 2001.
- [16] Peter Wesseling, Cornelis.W. Oosterlee, *Geometric multigrid with applications to computational fluid dynamics*, Journal of Computational and Applied Mathematics, no:128, 311-334, 2001.

- [17] Yousef Saad, *Iterative Methods fo Sparse Linear Systems*, 2nd.ed., SIAM, 2003.
- [18] John A. Trangenstein, *Multi-scale iterative techniques and adaptive mesh refinement for flow in porous media*, Advances in Water Resources, v.25, 2002, 1175-1213.
- [19] H.-J.G. Diersch, O. Kolditz, Variable-density flow and transport in porous media: approaches and challenges, Advances in Water Resources 25 (2002) 899 - 944
- [20] T. Scott, *Multi-grid Methods for Oil Reservoir Simulation in Two and Three Dimensions* , Journal of Computational Physics 59, 290-307, 1985.
- [21] Bill Holter e George VandenBerghe, *A Comparison of Vectorized Methods for Solving the Two-Dimensional Diffusion Equation: Multigrid versus Polynomial Preconditioned Conjugate Gradient*, Applied Mathematics and Computation 40, 77 -103, 1990.
- [22] S. Oliveira, *Parallel multigrid methods for transport equations The anisotropic case*, Parallel Computing 22,1996,1513-537.
- [23] F. Saied and G. Mahinthakumar, *Efficient Parallel Multigrid Based Solvers for Large Scale Groundwater Flow Simulations*, Computers Math. Applic. Vol.35, No.7, pp. 45-54, 1998.
- [24] H. Mustapha, A. Ghorayeb and K.A.Mustapha, *Underground flow simulations using parallel finite element method*, Computers & Geosciences, 36,2010, 161-166.
- [25] Dim Coumou, Stephan Mattha, Sebastian Geiger, Thomas Driesner, *A parallel FEMultigrid scheme to solve fluid flow in complex geologic media*, Computers & Geosciences, v.34, 2008, 1697-1707.
- [26] Galina V. Muratova and Evgeniya M. Andreeva, *Multigrid method for solving convection-diffusion problems with dominant convection*, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol.226, 2009.
- [27] Brendan S. Mascarenhas, Brian T. Helenbrook, Harold L. Atkins, *Coupling p-multigrid to geometric multigrid for discontinuous Galerkin formulations of the convection-diffusion equation*, Journal of Computational Physics,v. 229, 2010, 3664-3674.

- [28] Ming-Chih Lai, Chin-Tien Wu, Yu-Hou Tseng, *An efficient semi-coarsening multigrid method for variable diffusion problems in cylindrical coordinates*, Applied Numerical Mathematics, v.57, 2007, 801-810.
- [29] Marian Brezina, Charles Tong and Richard Beckers, *Parallel Algebraic Multigrids for Structural Mechanics*, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 27, No.5, 2006, pp. 1534-1554.
- [30] Klauss Stüben, *A review of algebraic multigrid*, Journal of Computational and Applied Mathematics 128 (2001) 281–309.
- [31] Volker Gravemeier, Wolfgang A. Wall, *An algebraic variational multiscale-multigrid method for large-eddy simulation of turbulent variable-density flow at low Mach number*, Journal of Computational Physics, v.229, 2010, 6047-6070.
- [32] P. Thum, T. Clees, G. Weyns, G. Nelissen, J. Deconinck, *Efficient algebraic multigrid for migration-diffusion-convection-reaction systems arising in electrochemical simulations*, Journal of Computational Physics, v.229, 2010, 7260-7276.
- [33] William J. Layton, Friedhelm Schieweck and Ivan Yotov, *Coupling Fluid Flow with Porous Media Flow*, SIAM J. Numer. Anal, 2003, Vol.40, No.6, pp.2195-2218
- [34] Alfio Borzì and Giuseppe Borzì, *An Algebraic Multigrid Method for a Class of Elliptic Differential Systems*, SIAM J. Sci. Comput., 2003, Vol.25, No.1, pp. 302-323
- [35] H. De Sterck, Thomas A. Manteuffel, Stephen F. McCormick and Luke Olson, *Least-Squares Finite Element Methods and Algebraic Multigrid Solvers for Linear Hyperbolic PDEs*, SIAM J. Sci. Comput., 2004, Vol.26, No.1, pp. 31-54
- [36] Russel L. Detwiler, Steffen Mehl, Harihar Hajaran, Wendy W. Cheung *Comparison of an Algebraic Multigrid Algorithm to Two Iterative Sovers Used for modeling Ground Water flow and Transport*, Ground Water, v.40, 267-272, 2002.
- [37] William F. Mitchell, *The hp-Multigrid Method Applied to hp-Adaptive Refinement of Triangular Grids*, Numerical Linear Algebra with Applications, v.17, 211-228, 2010.