



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
GRADUAÇÃO EM FÍSICA

WAGNER RODRIGUES DE SENA

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

FORTALEZA

2014

WAGNER RODRIGUES DE SENA

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

Monografia de Bacharelado apresentada à
Coordenação da Graduação do Curso de
Física, da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Bacharel em Física.

Orientador: André Auto Moreira

FORTALEZA

2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca do Curso de Física

-
- S477s Sena, Wagner Rodrigues de
Solução numérica de sistemas de equações lineares / Wagner Rodrigues de Sena. – Fortaleza, 2014.
41 f. : il. algumas color. enc.; 30 cm.
- Monografia (Graduação em Física) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física, Curso de Bacharelado em Física, Fortaleza, 2014.
Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.
Área de concentração: Física da Matéria Condensada.
1. Física Matemática. 2. Sistemas lineares. 3. Matrizes esparsas. 4. Métodos de gradiente conjugado. 5. Métodos de gradiente biconjugado. 6. Laplace, equação de. 7. Equação de convecção-difusão. I. Moreira, André Auto. II. Título.


WAGNER RODRIGUES DE SENA

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES

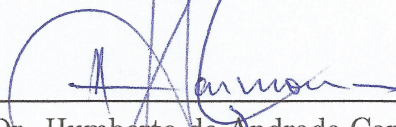
Monografia de Bacharelado apresentada à
Coordenação da Graduação do Curso de
Física, da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Bacharel em Física.

Aprovada em 05/12/2014

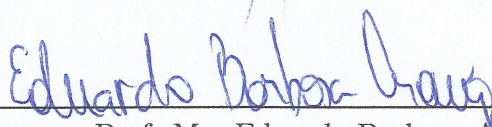
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. André Auto Moreira (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)



Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona
Universidade Federal do Ceará (UFC)



Prof. Me. Eduardo Barbosa Araujo
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do
Ceará (IFCE)

Aos Meus Pais

AGRADECIMENTOS

Agradeço principalmente aos meus pais por sempre me incentivar a continuar estudando e a minha irmã que sempre esteve presente quando precisei.

Ao meu professor do ensino médio, **Prof. Cicero**, que me convidou a participar das aulas para olímpias de física e assim despertando minha paixão pela física.

Ao meu orientador, **Prof. Dr. André Auto**, por me apresentar o ramo das simulações computacionais, pela paciência e competência em me orientar neste trabalho e em todos os outros realizados.

Aos professores do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, por proporcionarem todo o aprendizado adquirido ao longo da graduação.

Aos meus amigos de graduação, **Jonathan Sales, Daniel Linhares, Matheus Falcão, Pedro Henrique, Laura Barth, Victor Nocrato, Ícaro Lavor, João Paulo Nobre e Rafael Farias**, por sempre estarem presentes em todas as dificuldades e alegrias encontradas ao longo do curso.

Ao **CNPq**, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pela bolsa de iniciação científica.

RESUMO

Muitos fenômenos físicos, como por exemplo a dinâmica dos fluídos, eletromagnetismo, difusão, mecânica quântica, entre outros, são descritos por equações diferenciais parciais que quando são resolvidas numericamente produzem sistemas lineares de grandes dimensões. Neste trabalho utilizamos dois métodos iterativos, um para resolver o potencial elétrico descrito pela equação de Laplace e outro para resolver a equação de convecção-difusão.

Palavras-chave: Sistema Linear Esperso. Matriz Esparsa. Gradiente Conjugado. Gradiente Biconjugado.

ABSTRACT

Many physical phenomena, such as fluid dynamics, electromagnetism, diffusion, quantum mechanics, and others, are described by partial differential equations that, when they are solved numerically produce linear very large systems. In this work we used two iterative methods, one to solve the electric potential described by the Laplace equation and the other to solve the equation of convection-diffusion.

Keywords: Sparse Linear Systems. Sparse Matrix. Conjugate Gradient. Biconjugate Gradient. .

LISTA DE FIGURAS

1	Algoritmo para multiplicar uma matriz esparsa, no formato CSC , por um vetor a direita.	p. 15
2	Algoritmo para multiplicar a transposta de uma matriz esparsa, no formato CSC , por um vetor a direita.	p. 15
3	Algoritmo para o método do Gradiente Conjugado.	p. 20
4	Algoritmo para o método do Gradiente Biconjugado.	p. 22
5	Gráfico para o potencial elétrico obtido pelo método do Gradiente Conjugado com $\epsilon = 10^{-7}$	p. 32
6	Gráfico da solução analítica para o potencial com $\Phi_0 = 1$ e $a = 1$	p. 32
7	Gráfico da solução numérica para equação de convecção-difusão estacionária para condições de Dirichlet constante.	p. 38

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 11
1.1	Sistemas Lineares	p. 11
1.2	Organização do trabalho	p. 12
2	MATRIZES ESPARSAS	p. 13
2.1	Método de armazenamento de matrizes esparsas	p. 13
2.1.1	Armazenagem por coluna comprimida (CSC)	p. 14
3	MÉTODO NUMÉRICO	p. 16
3.1	Método do Gradiente Conjugado	p. 16
3.2	Método do Gradiente Biconjugado	p. 20
4	EQUAÇÃO DE LAPLACE	p. 23
4.1	Discretização	p. 23
4.2	Exemplo com condição de contorno constante	p. 28
4.2.1	Solução numérica	p. 29
5	EQUAÇÃO DE CONVECCÃO-DIFUSÃO ESTACIONÁRIA	p. 33
5.1	Discretização	p. 34
5.2	Exemplo com condição de contorno constante	p. 36
6	CONCLUSÃO	p. 39
	REFERÊNCIAS	p. 40

1 INTRODUÇÃO

1.1 Sistemas Lineares

Sistemas lineares são formados por várias equações lineares. Seja o sistema formado por n equações com m incógnitas dado por:

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \cdots + a_{1,m}x_m = b_1 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \cdots + a_{2,m}x_m = b_2 \\ \vdots \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \cdots + a_{n,m}x_m = b_n \end{cases} \quad (1.1)$$

Usando a notação de matrizes, o sistema linear acima pode ser representado pela seguinte equação matricial:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (1.2)$$

onde \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,m} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,m} \end{pmatrix}_{n \times m} \quad (1.3)$$

\mathbf{x} é o vetor das incógnitas,

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}_{m \times 1} \quad (1.4)$$

e \mathbf{b} é o vetor dos termos independentes

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}_{n \times 1} \quad (1.5)$$

Os métodos de resolução de sistemas lineares podem ser agrupados em duas classes: a dos métodos diretos e a dos iterativos. Os métodos diretos caracterizam-se por encontrarem a solução exata do sistema linear, salvo erros de arredondamento, através de um número pré-definido de passos. Os Métodos de Eliminação de Gauss, Decomposição LU, Decomposição QR e Decomposição de Cholesky são exemplos de métodos diretos. Tais métodos são encontrados em [18].

Já os métodos iterativos buscam a solução através de aproximações sucessivas dos valores das incógnitas do sistema até um limite aceitável de erro ou um número máximo de iterações ser alcançado. Os Métodos de Jacobi, de Gauss-Seidel, *Successive Over-Relaxation* (SOR), Método do Gradiente Conjugado e Método do Gradiente Biconjugado são exemplos de métodos iterativos. Esses e outros métodos iterativos são encontrados em [3, 21].

Neste trabalho são abordados dois métodos iterativos de resolução, o método do Gradiente Conjugado e o método do Gradiente Biconjugado. Esses métodos foram escolhidos por serem eficientes e simples na resolução de sistemas lineares esparsos.

1.2 Organização do trabalho

O texto foi dividido em seis capítulos. Nesse primeiro capítulo é feita uma breve apresentação de sistemas lineares e os métodos de resoluções.

No segundo capítulo é feita uma breve explicação sobre o que são matrizes esparsas. Nele são apresentados vários formatos de armazenamento de matrizes esparsas, mas com foco no formato de coluna comprimida que é o usado neste trabalho.

Terceiro capítulo trata dos dois métodos iterativos utilizados nesse trabalho, o método do Gradiente Conjugado e o método do Gradiente Biconjugado.

O quarto e o quinto capítulos são reservados para as soluções da equação de Laplace e da equação de convecção-difusão, respectivamente. E no sexto capítulo as conclusões.

2 MATRIZES ESPARSAS

Matrizes esparsas são matrizes onde a grande maioria dos elementos são nulos. Uma matriz pode ser chamada esparsa quando técnicas especiais podem ser usadas para tirar vantagem do grande número de zeros e sua localização. Equações diferenciais parciais são a maior fonte de problemas da álgebra linear numérica onde se tem matrizes esparsas.

2.1 Método de armazenamento de matrizes esparsas

Se uma matriz é dita esparsa, podemos utilizar métodos para armazenar apenas seus elementos não nulos e assim economizar um espaço significativo na memória. Essa não é a única vantagem quando temos uma matriz esparsa, além de proporcionar otimização no armazenamento, também podemos ter otimização nas operações algébricas, como por exemplo, na multiplicação da matriz esparsa por um vetor.

A forma de armazenamento de uma matriz esparsa não é única. Dependendo de como os elementos não nulos se localizam na matriz, existem formas indicadas de armazenar os elementos. Abaixo temos uma lista de algumas das formas para armazenar os elementos não nulos de uma matriz dita esparsa:

- *Compressed Sparse Row format (CSR)*
- *Compressed Sparse Column format (CSC)*
- *Coordinate format (COO)*
- *Diagonal format (DIA)*
- *Modified Compressed Sparse Row format (MSR)*
- *Symmetric Skyline format (SSK)*
- *Block Sparse Row format (BSR)*

Mais formas de armazenamento e como elas são definidas são encontradas em [20].

2.1.1 Armazenagem por coluna comprimida (CSC)

A razão de escolher o formato **CSC** para o armazenamento de uma matriz esparsa é por ser um dos algoritmos mais simples e apresentar vantagem na multiplicação de um vetor à direita da matriz esparsa.

Para a armazenagem por coluna comprimida são utilizados três vetores: **val** para os valores não nulos, à medida que eles são percorridos coluna por coluna, *row_ind* para os correspondentes índices de linha de cada valor e *col_ptr* para as locações nos dois arranjos que iniciam uma coluna. Temos que, $val[k] = \mathbf{A}[i][j]$, então $row_ind[k] = i$. O primeiro elemento não nulo da coluna j está em $col_ptr[j]$ e o ultimo está em $col_ptr[j+1]-1$. Dessa forma $col_ptr[0]$ é sempre zero, e por convenção definimos $col_ptr[n]$ igual ao número de elementos não nulos. Vemos que a dimensão do vetor *col_ptr* é $n + 1$, onde n é o número de colunas da matriz **A**.

Para ilustrar como é o armazenamento **CSC** vamos utilizar a seguinte matriz

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 6 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 8 & 0 \end{pmatrix}_{5 \times 5}$$

Vemos que a matriz **A** possui 9 elementos não nulos, logo os vetores *val* e *row_ind* possuem dimensões iguais a 9. Já o vetor *col_ptr* tem dimensão igual a 6, pois $n = 5$. Abaixo temos um esquema para os vetores *val*, *row_ind* e *col_ptr*:

índice k	0	1	2	3	4	5	6	7	8
val[k]	3	9	1	1	-1	1	6	8	2
row_ind[k]	0	2	4	1	3	0	1	4	3

índice i	0	1	2	3	4	5
col_ptr[i]	0	3	4	5	8	9

Tabela 1: Esquema dos vetores para armazenagem por coluna comprimida.

Como já foi dito, algumas formas de armazenar uma matriz esparsa possuem certas vantagens nas operações algébricas. Um dos recursos mais importante de uma matriz

no modo de armazenagem por coluna comprimida é multiplicar um vetor a sua direita. Abaixo temos uma figura com o algoritmo para a multiplicação de uma matriz esparsa, no formato **CSC**, por um vetor a direita:

Algoritmo 1: Multiplicação de uma matriz por um vetor a direita

Entrada: Vetor x
Saída: Vetor y

```

1 for  $j \leftarrow 0$  to  $ncols-1$  do
2   | for  $i \leftarrow col\_ptr[j]$  to  $col\_ptr[j+1] - 1$  do
3   |   |  $y[row\_ind[i]] = y[row\_ind[i]] + val[i] * x[j]$ ;
4   |   end
5 end
```

Figura 1: Algoritmo para multiplicar uma matriz esparsa, no formato **CSC**, por um vetor a direita.

É também simples multiplicar a transposta da matriz por um vetor a direita. Abaixo vemos o algoritmo para isto:

Algoritmo 2: Multiplicação da transposta de uma matriz por um vetor a direita

Entrada: Vetor x
Saída: Vetor y

```

1 for  $i \leftarrow 0$  to  $ncols-1$  do
2   | for  $j \leftarrow col\_ptr[i]$  to  $col\_ptr[i+1] - 1$  do
3   |   |  $y[i] = y[i] + val[j] * x[row\_ind[i]]$ ;
4   |   end
5 end
```

Figura 2: Algoritmo para multiplicar a transposta de uma matriz esparsa, no formato **CSC**, por um vetor a direita.

Uma estrutura de dados escrita em C++ para o formato **CSC** e as operações descritas pelas figuras 1 e 2 pode ser encontrada em [18].

3 MÉTODO NUMÉRICO

Os métodos iterativos de resolução de sistemas lineares têm sido bastante utilizados nos últimos anos, pois quando se trabalha com matrizes esparsas de grande porte, os métodos iterativos possibilitam otimizações no armazenamento, além de fornecerem a resolução de forma eficiente.

Os algoritmos iterativos, em geral, fazem uma aproximação inicial da solução do sistema e, a cada nova iteração, uma nova aproximação conforme as regras do método. As iterações chegam ao fim quando o critério de parada é satisfeito.

Nesse capítulo vamos mostrar como construir os algoritmos para o Método do Gradiente Conjugado e para o Método do Gradiente Biconjugado.

3.1 Método do Gradiente Conjugado

O método foi desenvolvido independentemente, no início dos anos cinquenta, por Hestenes e Stiefel [13] e mostrado de forma didática por Shewchuk [22].

O método do Gradiente Conjugado (CG) é um dos métodos mais eficientes para solução de sistemas cuja matriz dos coeficientes é positiva definida e simétrica.

O algoritmo é baseado no objetivo de minimizar o seguinte funcional quadrático

$$F(x) = \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} \quad (3.1)$$

O funcional é mínimo quando seu gradiente

$$\nabla F = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \quad (3.2)$$

é zero, isto é,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} = 0$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (3.3)$$

Minimizar $F(x)$ é equivalente a obter a solução do sistema linear $n \times n$ sempre que a matriz A é positiva definida e simétrica.

O procedimento básico consiste em gerar uma sequência de soluções aproximadas, obter os resíduos correspondentes e as direções de busca usadas para atualizar as soluções e os resíduos. O vetor com a solução aproximada é atualizado em cada iteração por um múltiplo do vetor que armazena a direção de busca

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i \quad (3.4)$$

Já o vetor do resíduo é atualizado por

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_{i+1} \quad (3.5)$$

substituindo 3.4 em 3.5

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot (\mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i)$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i \quad (3.6)$$

O valor de α_i é escolhido de forma que o resíduo da iteração seguinte seja ortogonal ao resíduo atual, isto é,

$$\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_{i+1} = 0$$

$$\mathbf{r}_i \cdot (\mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i) = 0$$

$$\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i = 0$$

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i}{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i} \quad (3.7)$$

O vetor da direção de busca é atualizado através do vetor de resíduo pela seguinte relação

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i \quad (3.8)$$

Fazendo com que as direções de busca sejam \mathbf{A} -ortogonais às direções de busca anteriores podemos obter o valor de β_i como

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{i+1} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i) &= 0 \\ (\mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i) \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i) &= 0 \\ \mathbf{r}_{i+1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i + \beta_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i &= 0 \end{aligned}$$

$$\beta_i = -\frac{\mathbf{r}_{i+1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i}{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i} \quad (3.9)$$

mas da equação 3.6 podemos notar que

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i = -\frac{1}{\alpha_i} (\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i) \quad (3.10)$$

e

$$\alpha_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i = \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \quad (3.11)$$

substituindo 3.10 e 3.11 em 3.9 concluímos que

$$\beta_i = \frac{\mathbf{r}_{i+1} \cdot \mathbf{r}_{i+1}}{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i} \quad (3.12)$$

Da equação 3.8 podemos ver que

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{p}_i - \beta_{i-1} \mathbf{p}_{i-1} \quad (3.13)$$

e assim obter a seguinte relação

$$\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i = (\mathbf{p}_i - \beta_{i-1} \mathbf{p}_{i-1}) \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i \quad (3.14)$$

Podemos então reescrever o valor de α_i como

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i}{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i} \quad (3.15)$$

O método do CG determina a solução exata com no máximo n iterações, mas isso só é possível com aritmética exata. Numericamente, como há erros de arredondamento devemos então, considerar o processo como um procedimento genuinamente iterativo, para ser interrompido quando algum critério de tolerância apropriado é atingido.

O critério para que o método seja interrompido pode ser obtido analisando a norma do resíduo. Podemos usar como critério [18]

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|}{\|\mathbf{b}\|} \leq \epsilon \quad (3.16)$$

onde ϵ é a tolerância imposta, isto é, quando a razão entre a norma do resíduo e a norma do vetor \mathbf{b} é menor ou igual a ϵ o algoritmo é interrompido.

Podemos resumir o método pelas seguintes relações:

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i}{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i} \quad (3.17a)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i \quad (3.17b)$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i \quad (3.17c)$$

$$\beta_i = \frac{\mathbf{r}_{i+1} \cdot \mathbf{r}_{i+1}}{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i} \quad (3.17d)$$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i \quad (3.17e)$$

juntamente com o critério de tolerância 3.16.

Na figura 3 temos o algoritmo para o método do CG. Neste algoritmo \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes, \mathbf{b} é o vetor do lado direito, \mathbf{x}_0 é o vetor com a estimativa inicial para a solução, \mathbf{r}_0 é o vetor resíduo inicial, \mathbf{p}_{i+1} e \mathbf{p}_i são os vetores com as direções de busca da iteração atual e da anterior respectivamente, α_i e β_i são escalares que guardam o passo de procura e a correção da direção de busca respectivamente.

Algoritmo 3: Método do CG.

```

1 Escolhe uma estimativa inicial  $\mathbf{x}_0$ ;
2 Calcule  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_0$ ;  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$ ;
3  $i = 0$ ;
4 while  $\|\mathbf{r}_i\|/\|\mathbf{b}\| > \epsilon$  do
5    $\alpha_i = (\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i)/(\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i)$ ;
6    $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$ ;
7    $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i$ ;
8    $\beta_i = (\mathbf{r}_{i+1} \cdot \mathbf{r}_{i+1})/(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i)$ ;
9    $\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i$ ;
10   $i = i + 1$ 
11 end

```

Figura 3: Algoritmo para o método do Gradiente Conjugado.

3.2 Método do Gradiente Biconjugado

Quando a matriz \mathbf{A} não é simétrica não podemos usar o método do Gradiente Conjugado, pois os vetores residuais não podem ser feitos ortogonais [7]. O método do Gradiente Biconjugado [3, 21] usa uma outra abordagem, trocando a sequência ortogonal dos resíduos por duas sequências mutuamente ortogonais.

As relações de atualização para o método do Gradiente Biconjugado são semelhantes ao do método do Gradiente Conjugado, mas utilizando também a matriz transposta, \mathbf{A}^T . As duas sequências de resíduos são atualizados por:

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i \quad (3.18)$$

$$\mathbf{r}_{i+1}^* = \mathbf{r}_i^* - \alpha_i \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{p}_i^* \quad (3.19)$$

Já as duas sequências de direção de busca são dadas por:

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i \quad (3.20)$$

$$\mathbf{p}_{i+1}^* = \mathbf{r}_{i+1}^* + \beta_i \mathbf{p}_i^* \quad (3.21)$$

e os valores de α_i e β_i são:

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{r}_i^* \cdot \mathbf{r}_i}{\mathbf{p}_i^* \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i} \quad (3.22)$$

$$\beta_i = \frac{\mathbf{r}_{i+1}^* \cdot \mathbf{r}_{i+1}}{\mathbf{r}_i^* \cdot \mathbf{r}_i} \quad (3.23)$$

A atualização da solução continua a mesma

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i; \quad (3.24)$$

Assim como no método do Gradiente Conjugado, o método Biconjugado deve ser interrompido de acordo com algum critério de tolerância. Podemos utilizar o mesmo critério 3.16

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|}{\|\mathbf{b}\|} \leq \epsilon$$

O método do Gradiente Conjugado é o caso especial do método do Gradiente Biconjugado quando a matriz \mathbf{A} é simétrica e escolhemos $\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$. Então $\mathbf{r}_i^* = \mathbf{r}_i$ e $\mathbf{p}_i^* = \mathbf{p}_i$ para todo i .

Na figura 4 abaixo temos o algoritmo para o método Biconjugado, onde \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes e \mathbf{A}^T sua transposta, \mathbf{b} é o vetor do lado direito, \mathbf{x}_0 é o vetor com a estimativa inicial para a solução, \mathbf{r}_0 e \mathbf{r}_0^* são os vetores residuais iniciais, \mathbf{p}_i e \mathbf{p}_i^* são os vetores com as direções de busca, α_i e β_i são escaleres que guardam o passo de procura e a correção da direção de busca respectivamente e ϵ é a tolerância.

Algoritmo 4: Método do Gradiente Biconjugado.

```

1 Escolhe uma estimativa inicial  $\mathbf{x}_0$ ;
2 Calcule  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_0$ ;
3  $\mathbf{r}_0^* = \mathbf{r}_0$ ;  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$ ;  $\mathbf{p}_0^* = \mathbf{r}_0^*$ ;
4  $i = 0$ ;
5 while  $\|\mathbf{r}_i\|/\|\mathbf{b}\| > \epsilon$  do
6    $\alpha_i = (\mathbf{r}_i^* \cdot \mathbf{r}_i)/(\mathbf{p}_i^* \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i)$ ;
7    $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$ ;
8    $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_i$ ;
9    $\mathbf{r}_{i+1}^* = \mathbf{r}_i^* - \alpha_i \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{p}_i$ ;
10   $\beta_i = (\mathbf{r}_{i+1}^* \cdot \mathbf{r}_{i+1})/(\mathbf{r}_i^* \cdot \mathbf{r}_i)$ ;
11   $\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i$ ;
12   $\mathbf{p}_{i+1}^* = \mathbf{r}_{i+1}^* + \beta_i \mathbf{p}_i^*$ ;
13   $i = i + 1$ 
14 end

```

Figura 4: Algoritmo para o método do Gradiente Biconjugado.

4 EQUAÇÃO DE LAPLACE

Como exemplo para a utilização do método do Gradiente Conjugado vamos determinar o potencial elétrico, em uma região sem cargas, descrita pela equação de Laplace definida por:

$$\nabla^2 V = 0 \quad (4.1)$$

Para um problema bidimensional podemos escrever a equação 4.1 como:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = 0 \quad (4.2)$$

e com as seguintes condições de Dirichlet:

$$V(x, 0) = u_1(x) \quad (4.3a)$$

$$V(x, a) = u_2(x) \quad (4.3b)$$

$$V(0, y) = u_3(y) \quad (4.3c)$$

$$V(b, y) = u_4(y) \quad (4.3d)$$

4.1 Discretização

Para resolver a equação 4.2 com as condições de contorno 4.3 numericamente, devemos discretizar a região. Utilizando o método das diferenças finitas [6] podemos escrever as derivadas parciais como:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \approx \frac{V(x_{i-1}, y_j) - 2V(x_i, y_j) + V(x_{i+1}, y_j)}{(x_{i+1} - x_i)^2} = \frac{V_{i-1,j} - 2V_{i,j} + V_{i+1,j}}{(\Delta x)^2} \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \approx \frac{V(x_i, y_{j-1}) - 2V(x_i, y_j) + V(x_i, y_{j+1}))}{(y_{j+1} - y_j)^2} = \frac{V_{i,j-1} - 2V_{i,j} + V_{i,j+1}}{(\Delta y)^2} \quad (4.5)$$

onde a malha produzida é dada pelos pontos:

$$(x_i, y_j) = (i\Delta x, j\Delta y), \quad 0 \leq i \leq n, \quad 0 \leq j \leq m \quad (4.6)$$

com os pontos interiores dados por:

$$(x_i, y_j) = (i\Delta x, j\Delta y), \quad 1 \leq i \leq (n-1), \quad 1 \leq j \leq (m-1) \quad (4.7)$$

Já as condições de contorno discretizadas ficam:

$$V_{i,0} = u_1(i\Delta x) \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (4.8a)$$

$$V_{i,m} = u_2(i\Delta x) \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (4.8b)$$

$$V_{0,j} = u_3(j\Delta y) \quad j = 0, \dots, m \quad (4.8c)$$

$$V_{n,j} = u_4(j\Delta y) \quad j = 0, \dots, m \quad (4.8d)$$

Substituindo 4.4 e 4.5 em 4.2 com $\Delta x = \Delta y = h$ obtemos a equação de Laplace discretizada:

$$\frac{V_{i-1,j} - 2V_{i,j} + V_{i+1,j}}{h^2} + \frac{V_{i,j-1} - 2V_{i,j} + V_{i,j+1}}{h^2} = 0 \Rightarrow$$

$$4V_{i,j} - V_{i-1,j} - V_{i+1,j} - V_{i,j-1} - V_{i,j+1} = 0 \quad (4.9)$$

Como a função V é calculada em cinco pontos, esta discretização em diferenças finitas para a equação de Laplace é chamada de fórmula dos cinco pontos.

Para cada ponto interior da malha obtemos uma equação, logo temos um sistema linear de $(n-1) \times (m-1)$ equações com o mesmo número de incógnitas. Não existe uma maneira fixa de ordenar os pontos da malha, assim não podemos obter imediatamente uma representação matricial para o problema discretizado. Precisamos antes escolher uma ordenação para os pontos da malha, e como existem várias ordenações possíveis, existem várias matrizes associadas. Talvez a forma mais simples de ordenação seja a ordem lexicográfica. Nesta ordem, os pontos da malha são percorridos linha por linha, da

esquerda para a direita, de baixo para cima:

$$V_{1,1}, V_{2,1}, \dots, V_{n-1,1}, V_{1,2}, V_{2,2}, \dots, V_{n-1,2}, \dots, V_{n-1,1}, V_{n-1,2}, \dots, V_{n-1,m-1}$$

Assim podemos escrever a matriz dos coeficientes como uma matriz $(n-1)(m-1)$ x $(n-1)(m-1)$ que pode ser escrita como uma matriz de $(m-1)^2$ blocos de dimensão $(n-1)$ x $(n-1)$ na forma:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & -\mathbf{I} & & & \\ -\mathbf{I} & \mathbf{B} & -\mathbf{I} & & \\ & -\mathbf{I} & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -\mathbf{I} \\ & & & -\mathbf{I} & \mathbf{B} & -\mathbf{I} \\ & & & & -\mathbf{I} & \mathbf{B} \end{pmatrix}_{(m-1) \times (m-1)} \quad (4.10)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade $(n-1)$ x $(n-1)$ e \mathbf{B} é a matriz $(n-1)$ x $(n-1)$ dada por:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 4 & -1 \\ & & & & -1 & 4 \end{pmatrix}_{(n-1) \times (n-1)} \quad (4.11)$$

observe que a matriz \mathbf{A} é uma matriz simétrica, pentadiagonal e esparsa.

Já o vetor dos termos independentes $(n-1)(m-1)$ x 1 é dado por:

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 \\ \mathbf{D}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{D}_{m-2} \\ \mathbf{D}_{m-1} \end{pmatrix}_{(m-1) \times 1} \quad (4.12)$$

onde

$$\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} u_1(h) + u_3(h) \\ u_1(2h) \\ \vdots \\ u_1((n-2)h) \\ u_1((n-1)h) + u_4(h) \end{pmatrix}_{(n-1) \times 1} \quad (4.13)$$

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} u_3(jh) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_4(jh) \end{pmatrix}_{(n-1) \times 1} \quad j = 2, \dots, m-2 \quad (4.14)$$

$$\mathbf{D}_{m-1} = \begin{pmatrix} u_2(h) + u_3((m-1)h) \\ u_2(2h) \\ \vdots \\ u_2((n-2)h) \\ u_2((n-1)h) + u_4((m-1)h) \end{pmatrix}_{(n-1) \times 1} \quad (4.15)$$

Não podemos esquecer do vetor das incógnitas dado por:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} V_{1,1} \\ V_{2,1} \\ \vdots \\ V_{n-1,1} \\ V_{1,2} \\ V_{2,2} \\ \vdots \\ V_{n-1,m-1} \end{pmatrix}_{(n-1)(m-1) \times 1} \quad (4.16)$$

Assim temos o seguinte sistema linear para resolver e encontrar o potencial em cada ponto da região desejada:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (4.17)$$

Para ilustrar melhor as matrizes vamos usar como exemplo o caso em que discretiza-

mos a região com $n = 4$ e $m = 4$. Dessa forma a matriz \mathbf{A} é dada por:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & -\mathbf{I} & \\ -\mathbf{I} & \mathbf{B} & -\mathbf{I} \\ & -\mathbf{I} & \mathbf{B} \end{pmatrix}_{3 \times 3} \quad (4.18)$$

onde a matriz \mathbf{B} é:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}_{3 \times 3} \quad (4.19)$$

assim a forma explícita da matriz \mathbf{A} é:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}_{9 \times 9} \quad (4.20)$$

Já o vetor com o potencial de cada ponto da região é:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} V_{1,1} \\ V_{2,1} \\ V_{3,1} \\ V_{1,2} \\ V_{2,2} \\ V_{3,2} \\ V_{1,3} \\ V_{2,3} \\ V_{3,3} \end{pmatrix}_{9 \times 1} \quad (4.21)$$

e por fim temos o vetor dos termos independentes dado por:

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} u_1(h) + u_3(h) \\ u_1(2h) \\ u_1(3h) + u_4(h) \\ u_3(2h) \\ 0 \\ u_4(2h) \\ u_2(h) + u_3(3h) \\ u_2(2h) \\ u_2(3h) + u_4(3h) \end{pmatrix}_{9 \times 1} \quad (4.22)$$

E assim temos o seguinte sistema linear:

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} V_{1,1} \\ V_{2,1} \\ V_{3,1} \\ V_{1,2} \\ V_{2,2} \\ V_{3,2} \\ V_{1,3} \\ V_{2,3} \\ V_{3,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1(h) + u_3(h) \\ u_1(2h) \\ u_1(3h) + u_4(h) \\ u_3(2h) \\ 0 \\ u_4(2h) \\ u_2(h) + u_3(3h) \\ u_2(2h) \\ u_2(3h) + u_4(3h) \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

4.2 Exemplo com condição de contorno constante

Como exemplo, vamos estudar um sistema formado por duas placas metálicas infinitas e aterradas que estão paralelas ao plano xz , uma em $y = 0$, e a outra em $y = a$. A extremidade esquerda, em $x = 0$, está fechada por uma faixa infinita isolada das duas placas e mantida a um potencial constante.

A configuração é independente de z , de forma que devemos resolver a equação de Laplace bidimensional.

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = 0 \quad (4.24)$$

sujeita às seguintes condições de contorno:

$$V(x, 0) = 0 \quad (4.25a)$$

$$V(x, a) = 0 \quad (4.25b)$$

$$V(0, y) = \Phi_0 \quad (4.25c)$$

$$V(\infty, y) = 0 \quad (4.25d)$$

A solução analítica é [11, 16]:

$$V(x, y) = \frac{2\Phi_0}{\pi} \operatorname{arctg} \left(\frac{\operatorname{sen}(\pi y/a)}{\operatorname{senh}(\pi x/a)} \right) \quad (4.26)$$

4.2.1 Solução numérica

Para calcular a solução numérica, devemos primeiramente dizer como vamos discretizar a região. Observe que a região se estende para o infinito na direção x , de modo que não podemos simular numericamente a condição de contorno 4.25d dessa forma. Vamos reescrever a condição 4.25d como:

$$V(b, y) = 0 \quad (4.27)$$

com b grande o suficiente para simular a condição desejada.

Pela solução analítica percebemos que o potencial cai muito rapidamente na direção x , podemos então escolher $b = 4a$.

Vamos discretizar a região com $n = 400$ divisões na direção x e $m = 100$ divisões na direção y , de forma que o espaçamento entre os pontos da grade é:

$$\Delta x = \Delta y = h = \frac{a}{100} \quad (4.28)$$

Para $\Phi_0 = 1$ e $a = 1$ temos as seguintes condições de contorno discretizadas:

$$V_{i,0} = 0 \quad i = 1, \dots, 399 \quad (4.29a)$$

$$V_{i,100} = 0 \quad i = 1, \dots, 399 \quad (4.29b)$$

$$V_{0,j} = 1 \quad j = 0, \dots, 100 \quad (4.29c)$$

$$V_{400,j} = 0 \quad j = 0, \dots, 100 \quad (4.29d)$$

Assim as matrizes associadas ao sistema linear são:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & -\mathbf{I} & & & & & \\ -\mathbf{I} & \mathbf{B} & -\mathbf{I} & & & & \\ & -\mathbf{I} & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & -\mathbf{I} & & \\ & & & & -\mathbf{I} & \mathbf{B} & -\mathbf{I} \\ & & & & & -\mathbf{I} & \mathbf{B} \end{pmatrix}_{99 \times 99} \quad (4.30)$$

com

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & & & & \\ -1 & 4 & -1 & & & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & & \\ & & & -1 & 4 & -1 & \\ & & & & -1 & 4 \end{pmatrix}_{399 \times 399} \quad (4.31)$$

Dessa forma vemos que temos um sistema linear com 39.501 equações e incógnitas.

O vetor dos termos independentes é:

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 \\ \mathbf{D}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{D}_{m-2} \\ \mathbf{D}_{m-1} \end{pmatrix}_{99 \times 1} \quad (4.32)$$

onde

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{399 \times 1} \quad j = 1, \dots, m - 1 \quad (4.33)$$

Armazenando a matriz \mathbf{A} no formato de coluna comprimida, como descrito no capítulo dois, vamos resolver o sistema utilizando o método do Gradiente Conjugado. Utilizando como tolerância $\epsilon = 10^{-7}$ conseguimos obter a solução para o potencial rapidamente. As figuras 5 e 6 mostram os gráficos para o potencial calculado numericamente, pelo método do Gradiente Conjugado, e analiticamente, pela equação 4.26, respectivamente.

Percebemos que a solução numérica está perfeitamente de acordo com a solução analítica. Podemos ver que os métodos utilizados estão de acordo com a teoria.

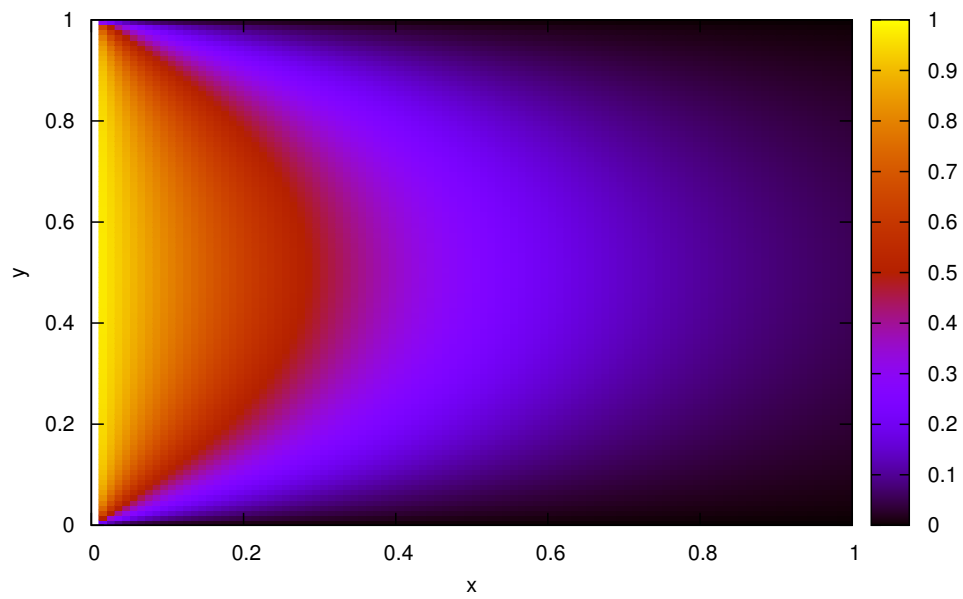


Figura 5: Gráfico para o potencial elétrico obtido pelo método do Gradiente Conjugado com $\epsilon = 10^{-7}$.

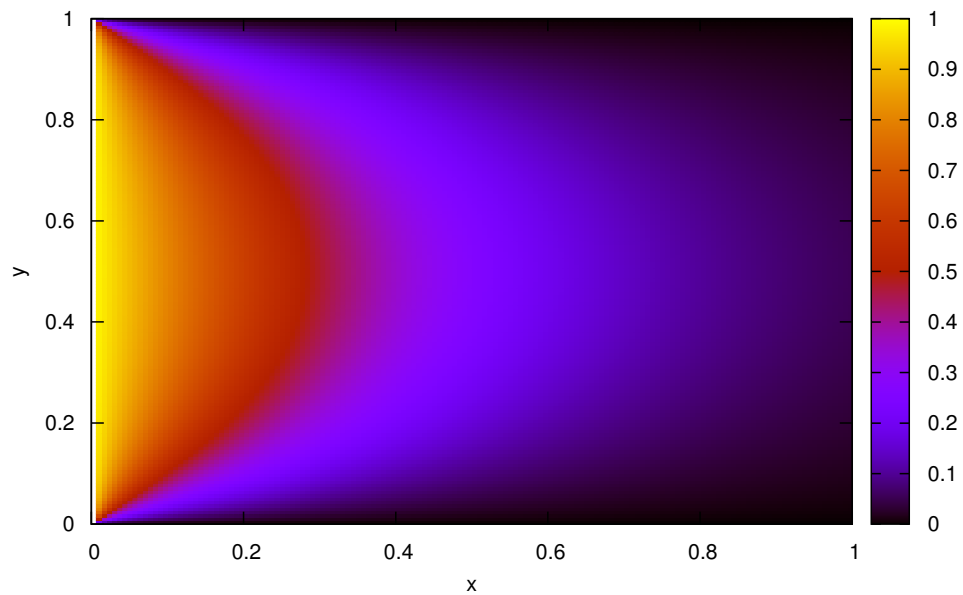


Figura 6: Gráfico da solução analítica para o potencial com $\Phi_0 = 1$ e $a = 1$.

5 EQUAÇÃO DE CONVECÇÃO-DIFUSÃO ESTACIONÁRIA

Agora, como exemplo para a utilização do método do Gradiente Biconjugado vamos determinar a solução numérica para a equação de convecção-difusão estacionária:

$$\nabla \cdot (D\nabla\phi) - \nabla \cdot (\mathbf{v}\phi) = 0 \quad (5.1)$$

O primeiro termo da equação 5.1 representa o processo de difusão e o segundo termo o processo de convecção ou advecção, onde D é o coeficiente de difusão e \mathbf{v} é a velocidade com que a quantidade se move.

Vamos estudar o caso bidimensional com o coeficiente de difusão constante e o divergente da velocidade \mathbf{v} nulo. Podemos então reescrever a equação 5.1 como:

$$D \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) - v_x \frac{\partial \phi}{\partial x} - v_y \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (5.2)$$

com as seguintes condições de Dirichlet:

$$\phi(x, 0) = u_1(x) \quad (5.3a)$$

$$\phi(x, a) = u_2(x) \quad (5.3b)$$

$$\phi(0, y) = u_3(y) \quad (5.3c)$$

$$\phi(b, y) = u_4(y) \quad (5.3d)$$

5.1 Discretização

Utilizando novamente o método das diferenças finitas, podemos escrever as derivadas parciais como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2h} \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} \approx \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j-1}}{2h} \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \approx \frac{\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{h^2} \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \approx \frac{\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{h^2} \quad (5.7)$$

Assim a equação 5.2 pode ser discretizada como:

$$\alpha \phi_{i,j} - \beta_+ \phi_{i-1,j} - \beta_- \phi_{i+1,j} - \gamma_+ \phi_{i,j-1} - \gamma_- \phi_{i,j+1} = 0 \quad (5.8)$$

onde

$$\alpha = \frac{8D}{h} \quad (5.9)$$

$$\beta_+ = \frac{2D}{h} + v_x \quad (5.10)$$

$$\beta_- = \frac{2D}{h} - v_x \quad (5.11)$$

$$\gamma_+ = \frac{2D}{h} + v_y \quad (5.12)$$

$$\gamma_- = \frac{2D}{h} - v_y \quad (5.13)$$

As condições de contorno ficam:

$$\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} \gamma_+ u_1(h) + \beta_+ u_3(h) \\ \gamma_+ u_1(2h) \\ \vdots \\ \gamma_+ u_1((n-2)h) \\ \gamma_+ u_1((n-1)h) + \beta_- u_4(h) \end{pmatrix}_{(n-1) \times 1} \quad (5.18)$$

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} \beta_+ u_3(jh) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_- u_4(jh) \end{pmatrix}_{(n-1) \times 1} \quad j = 2, \dots, m-2 \quad (5.19)$$

$$\mathbf{D}_{m-1} = \begin{pmatrix} \gamma_- u_2(h) + \beta_+ u_3((m-1)h) \\ \gamma_- u_2(2h) \\ \vdots \\ \gamma_- u_2((n-2)h) \\ \gamma_- u_2((n-1)h) + \beta_- u_4((m-1)h) \end{pmatrix}_{(n-1) \times 1} \quad (5.20)$$

Observe que a matriz \mathbf{A} não é mais simétrica, devido as derivadas parciais de primeira ordem. Isso mostra que não devemos usar o método do Gradiente Conjugado, mas sim o método do Gradiente Biconjugado para resolver o sistema linear.

5.2 Exemplo com condição de contorno constante

Como exemplo, sejam as seguintes condições de contorno:

$$\phi(x, 0) = 0 \quad (5.21a)$$

$$\phi(x, 1) = 0 \quad (5.21b)$$

$$\phi(0, y) = 1 \quad (5.21c)$$

$$\phi(1, y) = 0 \quad (5.21d)$$

Discretizando a região com $n = 100$ e $m = 100$ obtemos as seguintes condições de contorno discretizadas:

$$\phi_{i,0} = 0 \quad i = 1, \dots, 99 \quad (5.22a)$$

$$\phi_{i,100} = 0 \quad i = 1, \dots, 99 \quad (5.22b)$$

$$\phi_{0,j} = 1 \quad j = 0, \dots, 100 \quad (5.22c)$$

$$\phi_{100,j} = 0 \quad j = 0, \dots, 100 \quad (5.22d)$$

dessa forma o espaçamento entre cada ponto é $h = 0,01$:

Para $(D, v_x, v_y) = (2, 0, 20)$ temos as seguintes matrizes:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & -380\mathbf{I} & & & & & & & \\ -420\mathbf{I} & \mathbf{C} & -380\mathbf{I} & & & & & & \\ & -420\mathbf{I} & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & -380\mathbf{I} & & & & \\ & & & -420\mathbf{I} & \mathbf{C} & -380\mathbf{I} & & & \\ & & & & -420\mathbf{I} & \mathbf{C} & & & \\ & & & & & & & & & \end{pmatrix}_{99 \times 99} \quad (5.23)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade 99×99 e \mathbf{C} é a matriz 99×99 dada por:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1600 & -400 & & & & & & & \\ -400 & 1600 & -400 & & & & & & \\ & -400 & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & -400 & & & & \\ & & & -400 & 1600 & -400 & & & \\ & & & & -400 & 1600 & & & \\ & & & & & & & & & \end{pmatrix}_{99 \times 99} \quad (5.24)$$

e o seguinte vetor para os termos independentes:

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 \\ \mathbf{D}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{D}_{m-2} \\ \mathbf{D}_{m-1} \end{pmatrix}_{99 \times 1} \quad (5.25)$$

onde

$$\mathbf{D}_j = \begin{pmatrix} 400 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{99 \times 1} \quad j = 1, \dots, 99 \quad (5.26)$$

Vemos que o sistema é formado por 9.801 equações e incógnitas. Como já foi dito, a matriz \mathbf{A} não é simétrica, logo vamos utilizar o método do Gradiente Biconjugado, mostrado na seção 3.2.

Armazenando a matriz \mathbf{A} no formato de coluna comprimida e utilizando o método do Gradiente Biconjugado, com a tolerância $\epsilon = 10^{-7}$, conseguimos obter a solução para o sistema e reproduzir o seguinte gráfico para a quantidade ϕ :

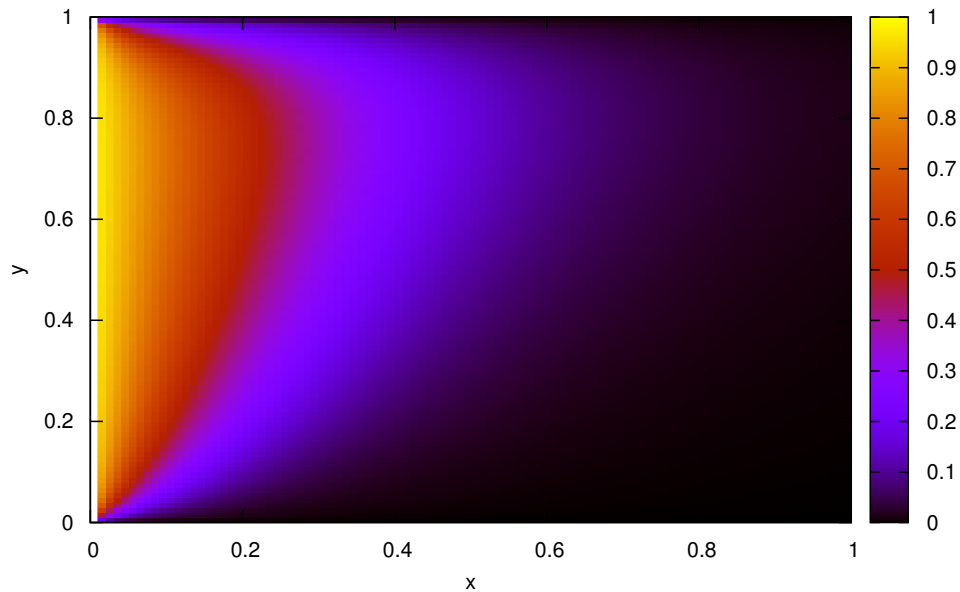


Figura 7: Gráfico da solução numérica para equação de convecção-difusão estacionária para condições de Dirichlet constante.

Comparando as figuras 7 e 5 vemos que a solução para a equação de convecção-difusão obtida é semelhante a solução da equação de Laplace. Isso era de se esperar, pois a diferença entre os dois problemas foi que na convecção-difusão tivemos o termo com a velocidade. Pelos parâmetros utilizados era esperado que houvesse um deslocamento da direção y .

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho tivemos como objetivo obter a solução numérica de sistemas de equações lineares de dimensões elevadas. Vimos que a discretização de equações diferenciais parciais são fontes de sistemas lineares esparsos.

Foram utilizados dois métodos iterativos para obter a solução de sistemas lineares, o método do Gradiente Conjugado e o método do Gradiente Biconjugado. Usando o formato de armazenagem por coluna comprimida para as matrizes esparsas conseguimos otimizar os métodos iterativos.

No capítulo quatro vimos que a discretização da equação de Laplace gerou um sistema linear esparsos, onde a matriz associada ao sistema era simétrica. Utilizando o método do Gradiente Conjugado conseguimos obter a solução para o potencial onde as condições de Dirichlet eram constantes. Pelas figuras 5 e 6 observamos que a solução obtida numericamente está perfeitamente de acordo com a solução analítica.

Já no capítulo cinco obtemos uma matriz não simétrica a partir da discretização da equação de convecção-difusão estacionária. Nesse caso foi utilizado o método do Gradiente Biconjugado para resolver o sistema gerado e assim obter o resultado esperado.

Por fim podemos concluir que os métodos aqui mostrados são perfeitamente satisfatórios para a resolução de sistemas de equações lineares comportados, podendo ser aplicados para resolver um grande número de fenômenos físico.

REFERÊNCIAS

- [1] ANTON, H. *Elementary linear algebra*. John Wiley & Sons, 2010.
- [2] ARFKEN, G. B., AND WEBER, H. J. *Mathematical Methods For Physicists International Student Edition*. Academic press, 2005.
- [3] BARRETT, R., BERRY, M. W., CHAN, T. F., DEMMEL, J., DONATO, J., DONGARRA, J., ELJKHOUT, V., POZO, R., ROMINE, C., AND VAN DER VORST, H. *Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods*, vol. 43. Siam, 1994.
- [4] BELLMAN, R., BELLMAN, R. E., BELLMAN, R. E., AND BELLMAN, R. E. *Introduction to matrix analysis*, vol. 960. SIAM, 1970.
- [5] CAMPOS, F. F. Algoritmos numéricos. *Editora LTC* (2007).
- [6] CAUSON, D., AND MINGHAM, C. *Introductory Finite Difference Methods for PDEs*. Bookboon, 2010.
- [7] FABER, V., AND MANTEUFFEL, T. Necessary and sufficient conditions for the existence of a conjugate gradient method. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 21, 2 (1984), 352–362.
- [8] FORSYTHE, G. E., AND MOLER, C. B. *Computer solution of linear algebraic systems*, vol. 7. Prentice-Hall Englewood Cliffs, NJ, 1967.
- [9] GIORDANO, N. J., AND NAKANISHI, H. *Computational physics*. Pearson Education India, 2006.
- [10] GOLUB, G. H., AND VAN LOAN, C. F. *Matrix computations*, vol. 3. JHU Press, 2012.
- [11] GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Electrodynamics; 3rd ed.* Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, 1999.
- [12] HARARI, I., AND HUGHES, T. J. Stabilized finite element methods for steady advection—diffusion with production. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 115, 1 (1994), 165–191.
- [13] HESTENES, M. R., AND STIEFEL, E. *Methods of conjugate gradients for solving linear systems*, vol. 49. National Bureau of Standards Washington, DC, 1952.
- [14] HORN, R. A., AND JOHNSON, C. R. *Matrix analysis*. Cambridge university press, 2012.

- [15] JAMSA, K., AND KLANDER, L. Programando em c/c++, a bíblia. *Ed. Makron Books* (1999).
- [16] MACHADO, K. D. *Eletromagnetismo, Vol. 1*. TODAPALAVRA, 2012.
- [17] PAMBOUKIAN, S. V. D., ZAMBONI, L. C., AND BARROS, E. D. A. Aplicações científicas em c++: da programação estruturada à programação orientada a objetos. *São Paulo: Páginas & Letras* (2010).
- [18] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*, 3 ed. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2007.
- [19] REDDY, J. N. *An introduction to the finite element method*, vol. 2. McGraw-Hill New York, 1993.
- [20] SAAD, Y. Sparskit: a basic tool kit for sparse matrix computations - version 2, 1994.
- [21] SAAD, Y. *Iterative methods for sparse linear systems*. Siam, 2003.
- [22] SHEWCHUK, J. R. An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain, 1994.