CIV 2552 – Métodos Numéricos em Problemas de Fluxo e Transporte em Meios Porosos

Sistema de equações tridiagonal

Como resultado da solução do problema da difusão 1D pelo método implícito de Crank-Nicolson, tem-se um sistema de equações para solução no passo m+1, cuja matriz de coeficientes tem um formato do tipo "tridiagonal":

$$\begin{bmatrix} X & X & & & & & & & & & & & & & \\ -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & & & & & & & \\ & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & & & & & & \\ & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & & & & & \\ & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & & & & \\ & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & & & \\ & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & & \\ & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & & \\ & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & & \\ & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & & \\ & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & & \\ & & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & & \\ & & & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 & \\ & & & & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\ & & & & & & & & & & & & & X & X \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ u_{i-1}^{m+1} \\ u_i^{m+1} \\ u_{i+1}^{m+1} \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \end{Bmatrix}$$

Esse sistema tipo de sistema de equações aparece na solução numérica de vários fenômenos físicos. O sistema pode ser resolvido por métodos diretos (eliminação de Gauss, método de Cholesky, etc.) ou por métodos iterativos. Pode-se explorar o formato tridiagonal da matriz e obter uma resposta de forma muito eficiente, tal como mostrado abaixo, utilizando eliminação de Gauss[1].

$$\begin{aligned} &b_1u_1 + c_1u_2 &&= d_1 \\ &a_2u_1 + b_2u_2 + c_2u_3 &&= d_2 \\ &\quad . \quad . \quad . && \\ &\qquad . \quad . \quad . && \\ &\qquad\qquad a_iu_{i-1} + b_iu_i + c_iu_{i+1} &&= d_i \\ &\qquad\qquad\quad . \quad . \quad . && \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad a_nu_{n-1} + b_nu_n &&= d_n \end{aligned}$$

Neste sistema de equações, os coeficientes a's, b's, c's e d's são conhecidos. A primeira equação pode ser usada para eliminar u_1 da segunda equação, a nova segunda equação usada para eliminar u_2 da terceira equação, e assim por diante até finalmente a nova penúltima equação ser usada para eliminar u_{n-1} da última equação, resultando em uma equação com uma única incógnita u_n. Esse processo é denominado "eliminação avante" (*forward elimination*). As incógnitas u_{n-1}, u_{n-2}, . . ., u_2 e u_1 podem ser encontradas fazendo uma "substituição reversa" (*back substitution*).

Forward elimination

Observando que o coeficiente c_i em cada nova equação é o mesmo da correspondente antiga equação, considere que o seguinte estágio de eliminação foi alcançado:

$$\begin{aligned} \alpha_{i-1}u_{i-1} + c_{i-1}u_i &= S_{i-1} \\ a_iu_{i-1} + b_iu_i + c_iu_{i+1} &= d_i \end{aligned}$$

sendo que:

[1] Smith, G.D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Diference Methods*, Third Edition, Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series, 1985.

$(i=1) \;\rightarrow\; \boxed{\alpha_1 = b_1}$ e $\boxed{S_1 = d_1}$.

Eliminado u_{i-1} resulta em:

$$u_{i-1} = -\frac{c_{i-1}}{\alpha_{i-1}} u_i + \frac{S_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \;\Rightarrow\; \left(b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\alpha_{i-1}}\right) u_i + c_i u_{i+1} = d_i - \frac{a_i S_{i-1}}{\alpha_{i-1}}.$$

Isto é, $\boxed{\alpha_i u_i + c_i u_{i+1} = S_i}$, resultando em:

$$(i=2:n) \;\rightarrow\; \boxed{\alpha_i = b_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} c_{i-1}} \text{ e } \boxed{S_i = d_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} S_{i-1}}.$$

O último par de equações simultâneas é:

$$\begin{aligned} \alpha_{n-1} u_{n-1} + c_{n-1} u_n &= S_{n-1} \\ a_n u_{n-1} + b_n u_n &= d_i \end{aligned}.$$

A eliminação de u_{n-1} resulta em:

$$\left(b_n - \frac{a_n c_{n-1}}{\alpha_{n-1}}\right) u_n = d_n - \frac{a_n S_{n-1}}{\alpha_{n-1}}, \text{ isto é, } \boxed{\alpha_n u_n = S_n}.$$

Back substitution

Utilizando as equações $\boxed{\alpha_i u_i + c_i u_{i+1} = S_i}$ e $\boxed{\alpha_n u_n = S_n}$, pode-se calcular as incógnitas de trás para frente:

$$(i=n) \;\rightarrow\; \boxed{u_n = \frac{S_n}{\alpha_n}}$$

$$(i=n-1:1) \;\rightarrow\; \boxed{u_i = \frac{1}{\alpha_i}\left(S_i - c_i u_{i+1}\right)}.$$

Em muitos problemas α_i e a_i / α_{i-1} são constantes independentes do tempo e precisam ser calculadas apenas uma vez, não importando o número de passos de tempo.