CIV 2552 – Métodos Numéricos em Problemas de Fluxo e Transporte em Meios Porosos – 2008.2

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":

$$
\left[\begin{array}{ccccccccccccccc}
X & X \\
-1 & 2+2/r & -1 \\
& -1 & 2+2/r & -1 \\
& & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & & & & & & -1 & 2+2/r & -1 \\
& & & & & & & & & & & & & X & X
\end{array}\right]
\cdot
\left\{\begin{array}{c}
\cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{i-1}^{m+1} \\ u_{i}^{m+1} \\ u_{i+1}^{m+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot
\end{array}\right\}
=
\left\{\begin{array}{c}
X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X \\ X
\end{array}\right\}
$$

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].

$$
\begin{array}{l}
b_1 u_1 + c_1 u_2 = d_1 \\
a_2 u_1 + b_2 u_2 + c_2 u_3 = d_2 \\
\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\qquad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\qquad\qquad a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = d_i \\
\qquad\qquad\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
\qquad\qquad\qquad a_n u_{n-1} + b_n u_n = d_n
\end{array}
$$

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:

$$
\begin{aligned}
\alpha_{i-1} u_{i-1} + c_{i-1} u_i &= S_{i-1} \\
a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} &= d_i
\end{aligned}
$$

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:

$(i=2:n) \rightarrow \boxed{\alpha_i = b_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} c_{i-1}}$ 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:

$\left(b_n - \frac{a_n c_{n-1}}{\alpha_{n-1}} \right) u_n = d_n - \frac{a_n S_{n-1}}{\alpha_{n-1}}$, 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:

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

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

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.