SOLUÇÃO DIRETA DE SISTEMAS LINEARES ESPARSOS

P.C.Mioralli, J.B.Campos-Silva.
UNESP – Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"
Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, Departamento de Engenharia Mecânica, Av. Brasil Centro 56, Cep. 15385-000, Ilha Solteira – S.P. E-mail: mioralli@dem.feis.unesp.br
Palavras chaves: Sistemas lineares, Matrizes esparsas, Métodos diretos.

RESUMO

Em muitas aplicações de engenharia e processos industriais ocorrem escoamentos de fluidos, modelados por equações diferenciais parciais não lineares, cuja solução analítica só pode ser obtida em casos muito simplificados.

Quando se requer soluções mais representativas dos fenômenos físicos, deve-se recorrer a soluções numéricas ou experimentais. De certa forma os experimentos em laboratório podem ser simulados através de experimentos computacionais. A aplicação de quaisquer métodos numéricos tais como: diferenças finitas, elementos finitos ou volumes finitos para solução de equações diferenciais parciais em problemas de escoamentos de fluidos leva a obtenção de sistemas lineares, geralmente grandes e esparsos.

Grande parte do tempo total de processamento das soluções numéricas é dedicada à parte de resolução de tais sistemas lineares, desta forma, soluções mais eficientes do sistema algébrico podem reduzir de forma significativa o tempo total para a obtenção de resultados. Além de consumir muito tempo de processamento, geralmente, as matrizes dos sistemas lineares ocupam muito espaço de memória em computadores, muitas vezes, tornando inviável soluções mais realísticas, quando se requer malhas mais refinadas para que os resultados sejam confiáveis.

Neste sentido, este trabalho busca formas alternativas em métodos diretos convencionais para solução de sistemas lineares, com o objetivo de verificar opções, caso elas existam, que sejam mais recomendadas nos problemas práticos. Este trabalho é também uma etapa antes da implementação de métodos iterativos que são muito utilizados na atualidade juntamente com técnicas que levam em consideração a esparsidade das matrizes. Geralmente as operações efetuadas nos métodos diretos eliminam em parte a esparsidade das matrizes, o que em termos de armazenamento irá requerer mais capacidade de memória. O trabalho visa também dar ao estudante um conhecimento mais profundo sobre procedimentos de solução de sistemas lineares

Alguns dos métodos a serem testados são variantes do método de eliminação de Gauss: o método de Gauss-Jordan com duplo pivotamento e armazenamento vetorial da matriz dos coeficientes; o método de Doolittle (decomposição LU); o método de Crout e o método de Choleski modificado. Em ambos os casos, o ganho de performance pelo armazenamento vetorial dos coeficientes das matrizes será comparado com o caso de armazenamento convencional da matriz dos coeficientes.

A motivação principal para este trabalho é tentar otimizar um programa desenvolvido por Campos-Silva (1998) para simulação de escoamentos incompressíveis de fluidos viscosos em regime transiente. O modelo numérico desenvolvido foi um método de elementos finitos baseado em volumes de controle (CVFEM) usando elementos finitos com nove pontos nodais.

O método de solução do sistema algébrico resultante no trabalho de Campos-Silva (1998) foi o método frontal, Taylor & Hughes (1981), método prático para computadores de pequeno porte, mas não eficiente do ponto de vista de um menor tempo de computação, por requerer o armazenamento de dados intermediários em memória de disco rígido o que

consome tempos excessivos em problemas onde se requer malhas muito refinadas como freqüentemente ocorre na solução de problemas de escoamento de fluidos.

Outra meta é aproveitar a esparsidade dos sistemas obtidos para reduzir a capacidade de armazenamento e o tempo de processamento. Nos sistemas lineares obtidos a partir de métodos numéricos, geralmente, mais de 90% dos coeficientes da matriz global são nulos. Considerar esta característica das matrizes deverá reduzir em muito o tempo de solução, tornando menos onerosa o processo de simulação numérica de problemas a serem analisados.

Um aspecto importante quanto à resolução de um sistema linear está relacionado com sua triangularização. Tal característica possibilita a resolução de sistemas lineares de maneira fácil por meio de substituições para trás ou para frente. A implementação de uma subrotina em ambiente FORTRAN para a triangularização de sistemas lineares é um dos pontos de partida para a realização desse trabalho. Seja o sistema linear,

$$\begin{array}{l}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + ... + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + ... + a_{2n}x_n = b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + ... + a_{3n}x_n = b_3 \\
a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + ... + a_{4n}x_n = b_4 \\
... \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + a_{n4}x_4 + ... + a_{nn}x_n = b_n
\end{array}$$

onde os a´s e b´s são conhecidos e os x´s desconhecidos. **O problema é: determinar os x´s**.

O sistema acima pode ser escrito na forma matricial como segue

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & a_{3n} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \cdots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & a_{n4} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Definindo $\mathbf{A} \in \Re^{n \times n}$, $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \Re^n$ como segue, o sistema linear pode ser representado por

$$\mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & a_{3n} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \cdots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & a_{n4} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} \equiv \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

Sejam os seguintes sistemas lineares especiais

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + \ldots + a_{3n}x_n &= b_3 \\
a_{44}x_4 + \ldots + a_{4n}x_n &= b_4 \\
\ldots & \\
a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
c_{11}y_1 \quad &= d_1 \\
c_{21}y_1 + c_{22}y_2 \quad &= d_2 \\
c_{31}y_1 + c_{32}y_2 + c_{33}y_3 \quad &= d_3 \\
c_{41}y_1 + c_{42}y_2 + c_{43}y_3 + c_{44}y_4 \quad &= d_4 \\
\ldots & \\
c_{n1}y_1 + c_{n2}y_2 + c_{n3}y_3 + c_{n4}y_4 + \ldots + c_{nn}y_n &= d_n
\end{aligned}
$$

Estes dois sistemas podem ser escritos como **Ax = b** e **Cx = d**, onde as matrizes **A** e **C** são respectivamente triangular superior e triangular inferior. Uma matriz triangular superior têm todos os elementos abaixo da diagonal principal iguais a zero. De modo semelhante uma matriz triangular inferior têm todos elementos acima da diagonal principal iguais a zero.

Os dois sistemas acima podem ser resolvidos por substituição para trás e substituição para frente, respectivamente.

Algumas subrotinas já foram criadas no padrão *fortran 90* para implementação das soluções diretas. Os próximos passos serão a implementação de armazenamento vetorial e uso de técnicas que levam em consideração a esparsidade das matrizes dos coeficientes.

Referências e Bibliografia Básica

- Campos-Silva, J.B. (1998), Simulação Numérica de Escoamentos de Fluidos pelo Método de Elementos Finitos Baseado em Volumes de Controle, *Tese de Doutorado,* Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campinas, SP, Brasil, 159 p.
- Chapman, S. J. (1997), ***Fortran 90/95 for Scientists and Engineers***, 888 pages, 1st edition, McGraw Hill College Div; ISBN: 0070119384.
- Chapra, S.C. & Canale, R.P. (1990). *Numerical Methods for Engineers.* Second Edition, McGraw-Hill, New York, 812p.
- Duff, I., Grimes, R., Lewis, J. (1989), Sparse Matrix Test Problems, ***ACM Trans. Math. Soft.***, 15, pp.1-14.
- Golub, G. H., Loan, C. F. Van (1996), ***Matrix Computations***, 694 pages, 3rd edition, Johns Hopkins Univ. Pr; ISBN: 0801854148.
- Taylor, C. & Hughes, T.G. (1981). *Finite Element Programming of the Navier-Stokes Equations.* Pineridge Press Limited, Swansea, U.K. 244 p.