MAP 2320 - Métodos Numéricos em EDP's Equações Elípticas

Marco Alexandre Claudino* IME/USP

1 A equação de Laplace no quadrado unitário

Vamos iniciar o estudo dos métodos de resolução numérica das equações elípticas por meio da chamada **Equação de Poisson**:

$$-\Delta u = u_{xx} + u_{yy} = f(x, y) \quad (x, y) \in \Omega$$
 (1)

onde $f: \Omega \mapsto \mathbb{R}$ é uma função contínua e para simplificar a apresentação, consideraremos $\Omega = (0,1) \times (0,1)$. Para que o problema possua uma única solução é necessário que sejam fornecidas condições de contorno para os trechos [t,0],[1,t],[t,1] e [0,t] com $t \in [0,1]$ (isto é, as fronteiras do quadrado). Temos três tipos de condições possíveis:

- 1) Condições de Dirichlet: São fornecidos valores para a função na fronteira.
- 2) Condições de Neumann: São fornecidas as derivadas normais em cada ponto da fronteira.
- 3) Condições de Robin: São fornecidas ponderações entre as derivadas normais e valores da função na fronteira.

Para facilitar o estudo, trabalharemos apenas com condições de Dirichlet no contorno. Logo, será dada também a condição

$$u(x,y) = g(x,y) \quad (x,y) \in \partial\Omega$$
 (2)

Observe que a solução u(x,y) deve ser tal que $u \in \mathcal{C}^2(\Omega) \cap \mathcal{C}(\overline{\Omega})$, ou seja, de classe \mathcal{C}^2 no interior de Ω e contínua até o bordo.

2 Discretização do problema

Dado N um número natural, considere a discretização do quadrado unitário em espaçamentos uniformes dados por $h=\frac{1}{N}$. Denotamos por $u_{ij}\approx u(x_i,y_j)$ a aproximação da função u e no ponto $x_i=ih,\ y_j=ih$ para i,j=1,2,...,N-1. Para os índices igual a 0 ou igual a N a condição de contorno do problema é fornecida.

Para obter a discretização da segunda derivada em x e em y vamos utilizar a combinação das Séries de Taylor avançada e retrógrada:

$$u(x_{i+1}, y_j) = u(x_i, y_j) + hu_x(x_i, y_j) + \frac{h^2}{2}u_{xx}(x_i, y_j) + \frac{h^3}{6}u_{xxx}(x_i, y_j) + \frac{h^4}{24}u_{xxxx}(x_i, y_j) + \cdots$$
(3)

$$u(x_{i-1}, y_j) = u(x_i, y_j) - hu_x(x_i, y_j) + \frac{h^2}{2} u_{xx}(x_i, y_j) - \frac{h^3}{6} u_{xxx}(x_i, y_j) + \frac{h^4}{24} u_{xxxx}(x_i, y_j) + \cdots$$
(4)

^{*}claudino@ime.usp.br

Somando as equações (3) e (4) temos que

$$u_{xx} = \frac{u(x_{i-1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i+1}, y_j)}{h^2} + \tau_x(x_i, y_j)$$
(5)

onde $\tau_x(x_i, y_j) = \mathcal{O}(h^2)$ é o erro de discretização local cometido por esta aproximação no ponto (x_i, y_j) . Analogamente, obtemos que a segunda derivada em relação a y é dada por:

$$u_{yy} = \frac{u(x_i, y_{j-1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j+1})}{h^2} + \tau_y((x_i, y_j))$$
(6)

Substituindo (5) e (6) na equação (1) temos que

$$\frac{-u(x_{i-1}, y_j) - u(x_i, y_{j-1}) + 4u(x_i, y_j) - u(x_{i+1}, y_j) - u(x_i, y_{j+1})}{h^2} = f(x_i, y_j) + \underbrace{\tau_x(x_i, y_j) + \tau_y(x_i, y_j)}_{\mathcal{T}_h = \mathcal{O}(h^2)}$$
(7)

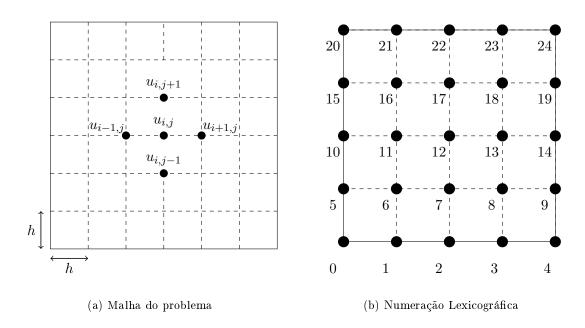


Figura 1: Descrição da Malha do problema.

Ignorando o erro de discretização local, temos que as aproximações nos pontos interiores satisfazem a seguinte relação

$$\frac{-u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 4u_{i,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1}}{h^2} = f(x_i, y_i)$$

Podemos ainda reescrever esta equação como um sistema linear contendo (N-1) equações e (N-1) incógnitas, dado por

$$-u_{i-1,j} - u_{i,j-1} + 4u_{i,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1} = h^2 f(x_i, y_i)$$
(8)

de forma que, utilizando a enumeração lexicográfica (veja na Figura 2(b)), temos que as aproximações são obtidas através da resolução do sistema linear

Observe que cada elemento da diagonal relaciona-se a, no máximo, outros quatro elementos. Naturalmente, as questões a serem abordadas a partir de agora são:

- Este sistema sempre possui solução?
- As aproximações obtidas convergem para a solução do problema quando $h \to 0$?
- Qual a maneira mais eficiente de resolver o sistema associado?

3 Existência de Solução do Sistema Linear

3.1 Demonstração da existência via álgebra linear

Considere as seguintes definições:

Definição 3.1. Uma matriz $A = [a_{i,j}]_{n \times n}$ é dita irredutível se não existir uma matriz de permutação P tal que

$$PAP^T = \left[\begin{array}{cc} B & C \\ 0 & D \end{array} \right]$$

onde k < n, $B = [b_{i,j}]_{k \times k}$, $C = [c_{i,j}]_{k \times (n-k)}$ e $D = [d_{i,j}]_{(n-k) \times (n-k)}$. Ou seja, a matriz não pode ser decomposta de forma que um conjunto de variáveis fique independente das outras.

Definição 3.2. Seja n um inteiro. Uma matriz $A = [a_{i,j}]_{n \times n}$ é dita diagonal dominante se

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^{n} |a_{i,j}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

e é dita fracamente diagonal dominante se

$$|a_{ii}| \ge \sum_{j=1, j \ne i}^{n} |a_{i,j}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

e vale a desigualdade estrita para alguma linha.

Observe no exemplo (9) que os pontos próximos da fronteira possuem a desigualdade estrita enquanto que o ponto interior u_{12} possui a entrada da diagonal igual a soma dos outros elementos da linha 12. Além disso, é possível mostrar que a matriz do sistema é irredutível, de forma que o resultado a seguir garante a existência e unicidade de solução para os sistemas em estudo:

Teorema 3.3 (Existência de Solução do sistema). Toda matriz diagonal dominante é inversivel e toda matriz fracamente diagonal dominante e irredutível é inversível.

Demonstração. Seja A uma matriz diagonal dominante e suponha, por absurdo, que det(A) = 0. Então existe um vetor $x \neq \vec{0}$ tal que $Ax = \vec{0}$. Seja i o índice tal que

$$|x_i| = M = \max_j |x_j|$$

Temos que a i-ésima linha do sistema é dada por

$$\sum_{j=1}^{n} a_{i,j} x_j = 0 \Rightarrow a_{ii} x_i = -\sum_{j \neq i} a_{i,j} x_j \Rightarrow x_i = -\sum_{j \neq i} \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} x_j$$

Tomando o módulo dos dois lados, temos que

$$|x_i| = \Big| \sum_{j \neq i} \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} x_j \Big| \le \sum_{j \neq i} \Big| \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} \Big| |x_j| \le \underbrace{\sum_{j \neq i} \Big| \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} \Big|}_{\leq 1} M < M \quad \text{(contradição!)}$$

Logo $det(A) \neq 0$. No caso em que a matriz é fracamente diagonal dominante, note que

$$\sum_{j \neq i} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} |x_j| = M$$

ocorre se, e somente se

$$|x_j| = M$$
 quando $a_{i,j} \neq 0$

Como a matriz é irredutível, podemos reordenar os índices onde $|x_j| = M$ de forma a colocá-los em sequência crescente. Como existe pelo menos uma linha onde a desigualdade é estrita, nesta linha caimos novamente no caso anterior.

3.2 Demonstração da existência via princípio do máximo discreto

Para que o sistema (8) possua uma única solução é necessário e suficiente que o problema homogêneo associado admita apenas o vetor nulo como solução. Isto implica dizer que o problema

$$\begin{cases}
\Delta_h w_h(x,y) = 0, & (x,y) \in \Omega \\
w_h(x,y) = 0, & (x,y) \in \Gamma
\end{cases}$$
(10)

possui como única solução $w(x,y) \equiv 0$.

Definição 3.4 (Funções harmônicas). Seja Ω um aberto contido no \mathbb{R}^n e $w: \Omega \to \mathbb{R}$ uma função de classe $C^2(\Omega)$ tal que $\Delta w = 0$. Então, dizemos que w é uma função harmônica.

Sendo w uma função harmônica e w_h sua restrição à malha Ω_h , observe que

$$\Delta_h w_h(x_i, y_j) = 0 \quad (x_i, y_j) \in \Omega \Leftrightarrow w(x_i, y_j) = \frac{1}{4} \left(w(x_{i-1}, y_j) + w(x_{i+1}, y_j) + w(x_i, y_{j-1}) + w(x_i, y_{j+1}) \right)$$

ou seja, $w(x_i, y_j)$ é a média aritmética dos quatro vizinhos. Os resultados a seguir garantem que o máximo (e o mínimo) de uma função harmônica são atingidos na fronteira.

Proposição 3.5 (Princípio do Máximo Discreto). Seja $u: \overline{\Omega}_h \to \mathbb{R}$ uma função de classe $C^2(\Omega)$. Se $\Delta_h u \geq 0$ em Ω_h , então:

$$\max_{(x,y)\in\Omega_h} u(x,y) = \max_{(x,y)\in\Gamma_h} u(x,y) \tag{11}$$

Demonstração. Suponha, por absurdo, que u assuma o valor máximo em um ponto $(x_i, y_j) \in \Omega_h$. Sendo $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ temos que

$$\Delta_h u(x_i, y_j) = \frac{1}{4} \left(u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 4u_{i,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} \right)$$

$$= \frac{1}{4} \left(\underbrace{\left(u_{i+i,j} - u_{i,j} \right)}_{\leq 0} + \underbrace{\left(u_{i-1,j} - u_{i,j} \right)}_{\leq 0} + \underbrace{\left(u_{i,j+1} - u_{i,j} \right)}_{\leq 0} + \underbrace{\left(u_{i,j-1} - u_{i,j} \right)}_{\leq 0} \right)$$

$$< 0$$

Por hipótese, temos que $\Delta_h u \geq 0$. Logo $\Delta_h u(x_i, y_i) = 0$ o que implica que u é constante em $\overline{\Omega}_h$.

Trocando u por -u no resultado anterior, se $\Delta_h v \leq 0$ em Ω_h então

$$\min_{(x,y)\in\Omega_h} u(x,y) = \min_{(x,y)\in\Gamma_h} u(x,y) \tag{12}$$

Teorema 3.6. Seja $u: \overline{\Omega}_h \to \mathbb{R}$ uma função de classe $C^2(\Omega)$. Se $\Delta_h u = 0$ em Ω_h , então:

$$\min_{(x,y)\in\Gamma_h} u(x,y) \le u(\bar{x},\bar{y}) \le \max_{(x,y)\in\Gamma_h} u(x,y), \quad \forall (\bar{x},\bar{y}) \in \Omega_h$$
(13)

Demonstração. O resultado é imediato a partir das igualdades (11) e (12).

Utilizando este resultado aplicado ao problema (10), temos que

$$w(x,y) = 0$$

para todo ponto $(x,y) \in \Omega_h$ e, portanto, o sistema possui solução única para todo valor de h.

4 Análise de convergência

Seja $e_h(x_i, y_j) = u(x_i, y_j) - u_{i,j}$ o erro cometido na aproximação de um dado ponto de $(x_i, y_j) \in \Omega_h$. Utilizando a linearidade do operador Δ_h temos que o erro satisfaz o problema

$$\begin{cases} \Delta_h e_h = \mathcal{T}_h \text{ em } \Omega_h \\ e_h = 0 \text{ em } \Gamma_h \end{cases}$$
 (14)

onde \mathcal{T}_h é o erro local de discretização cometido no ponto (x_i, y_j) . Sabemos, pela construção da Série de Taylor, que $\mathcal{T}_h = \mathcal{O}(h^2)$, para qualquer $h \to 0$. Para garantirmos que $e_h \to 0$ quando $h \to 0$, considere o seguinte resultado:

Teorema 4.1. Sejam $u: \overline{\Omega}_h \to \mathbb{R}$ uma função de classe $C^2(\Omega)$ e $f: \Omega_h \to \mathbb{R}$ tais que

$$\begin{cases} \Delta_h u = f \ em \ \Omega_h \\ u = 0 \ em \ \Gamma_h \end{cases}$$

Então, para todo $(x,y) \in \Omega_h$, temos que

$$|u(x,y)| \le \frac{1}{8} \max_{(x,y)\in\Omega_h} |f(x,y)|$$
 (15)

A aplicação desse resultado ao problema (14) equivale dizer que

$$|e_h(x,y)| \le \frac{1}{8} \max_{(x,y) \in \Omega_h} |\mathcal{T}_h| \Rightarrow |e_h(x,y)| \le Ch^2, \quad \forall (x,y) \in \Omega_h$$

Logo

$$|e_h(x,y)| \to 0$$
 quando $h \to 0$

concluindo assim a convergência do método em estudo.

Vamos a demonstração do Teorema (4.1):

Demonstração. Seja $||f||_{\infty} = \max_{\Omega_h} |f|$. Então, para todo ponto $(x,y) \in \Omega_h$, temos que

$$-||f||_{\infty} \le f(x,y) \le ||f||_{\infty}$$
 (16)

Considere a função $w: \bar{\Omega} \to \mathbb{R}$ definida por

$$w(x,y) = \frac{1}{4} \left[\left(x - \frac{1}{2} \right)^2 + \left(y - \frac{1}{2} \right)^2 \right]$$

Observe que o valor máximo assumido por w na fronteira é $\frac{1}{8}$ e w satisfaz

$$\Delta_h w = 1, \quad \forall (x, y) \in \Omega$$

pois $\frac{\partial^p w}{\partial x^p} = 0$ e $\frac{\partial^p w}{\partial y^p} = 0$ para todo p > 2 (w é um polinômio de ordem dois). Assim, o erro de discretização associado ao operador discreto é zero, pois ele é proporcional às derivadas de quarta ordem em x e y. Usando a desigualdade (16), temos que

$$-||f||_{\infty} \le \Delta_h u \le ||f||_{\infty}$$

e, portanto

$$\Delta_h u + ||f||_{\infty} \ge 0 \text{ em } \Omega_h$$

Como

$$||f||_{\infty} = ||f||_{\infty} \underbrace{\Delta_h w}_{=1} = \Delta_h(||f||_{\infty} w)$$

podemos escrever que

$$\Delta_h u + \Delta_h(||f||_{\infty} w) \ge 0 \Rightarrow \Delta_h(u + ||f||_{\infty} w) \ge 0 \text{ em } \Omega_h$$

Usando o princípio do máximo

$$u + ||f||_{\infty} w \le \max_{\Gamma_h} (u + ||f||_{\infty} w) = \max_{\Gamma_h} (||f||_{\infty} w)$$

Como $w(x,y) \ge 0$, concluimos que

$$u \le \max_{\Gamma_h}(||f||_{\infty}w) \Rightarrow u \le \frac{1}{8}||f||_{\infty} \tag{17}$$

Por outro lado

$$\Delta_h u - ||f||_{\infty} \le 0$$
 em $\Omega_h \Rightarrow \Delta_h (u - ||f||_{\infty} w) \le 0$ em Ω_h

Usando o princípio do mínimo

$$u - ||f||_{\infty} w \ge \min_{\Gamma_h} (-||f||_{\infty} w) \Rightarrow u \ge -\max_{\Gamma_h} (||f||_{\infty} w)$$

$$u \ge -\frac{1}{8}||f||_{\infty} \tag{18}$$

Logo, de (17) e (18) temos que

$$-\frac{1}{8}||f||_{\infty} \le u \le \frac{1}{8}||f||_{\infty}$$

e, portanto

$$|u| \le \frac{1}{8} ||f||_{\infty} = \frac{1}{8} \max_{(x,y) \in \Omega_h} |f(x,y)|$$

5 Métodos Iterativos para a resolução de sistemas lineares

Antes de iniciarmos o estudo de métodos iterativos para a resolução de sistemas lineares, uma pergunta interessante a ser feita é: Por que utilizar métodos iterativos para resolver sistemas lineares?

Sabemos que as aproximações do problema (1) sujeito à condição de contorno (2) serão obtidas através da resolução de um sistema linear cuja matriz possui $(N-1)^2$ elementos, onde apenas 5 deles são não nulos em cada uma das linhas. Utilizando o método de **Eliminação de Gauss seriam necessárias em torno de** $(N-1)^6$ **operações** para construir as aproximações do problema em estudo.

Para exemplificar o tempo de processamento que seria gasto, considere uma malha com N=100 (ou seja, h=0.01) e que todas as operações realizadas demorem o mesmo tempo de execução de uma multiplicação. Desta forma, utilizando um computador capaz de realizar 10^{10} multiplicações por segundo seriam necessários aproximadamente 95 segundos. Porém, aumentando o valor para N=200 (h=0.005) o tempo necessário aumenta para aproximadamente 1 hora e 43 minutos e para e N=500 (h=0.002) o tempo aumenta para mais de 17 dias. Com isto, podemos concluir que o método de Eliminação de Gauss não é uma boa estratégia para a resolução deste problema. Considere $A=[a_{i,j}]_{n\times n}$ uma matriz real tal que $det(A)\neq 0$ e o sistema linear Ax=b. Nossa estratégia será escrever A=M-N, de modo que seja possível escrever um método iterativo da forma

$$Mx - Nx = b \Rightarrow Mx^{k+1} = b + Nx^k$$

Considere também a hipótese de que $det(M) \neq 0$. Assim, caso tal processo seja convergente, então o limite do processo será a solução do sistema Ax = b pois, se

$$\lim_{k \to \infty} x^k = \bar{x} \Rightarrow M\bar{x} = b + N\bar{x} = (M - N)\bar{x} = b \Rightarrow A\bar{x} = b$$

Definição 5.1. Seja A uma matriz diagonalizável. Dizemos que o maior autovalor (em módulo) de uma matriz A é o raio espectral da matriz, denotado por $\rho(A)$.

Proposição 5.2 (Condição necessária para a convergência dos métodos iterativos). Seja A = (M - N), onde A e M são inversíveis. Um método iterativo será convergente se, e somente se, $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Demonstração. Definindo $e^k = \bar{x} - x^k$ temos que

$$Me^{k+1} = Ne^k \Rightarrow e^{k+1} = M^{-1}Ne^k \Rightarrow e^k = (M^{-1}N)^k e^0$$

Logo,

$$e^k \to 0 \Leftrightarrow (M^{-1}N)^k \to 0$$

Mas isto ocorre se, e somente se, $\rho(M^{-1}N)^k < 1$.

Escrevendo A = L + D + U, onde L é a parte triangular inferior (lower), D a diagonal da matriz e U a parte triangular superior (upper), podemos escrever os métodos de **Jacobi** e **Gauss-Seidel**

Método de Jacobi: M = D, N = L+U.
 O método será convergente se, e somente se

$$\rho(D^{-1}(L+U)) < 1$$

- Método de Gauss-Seidel: M = L+D, N = UO método será convergente se, e somente se

$$\rho((D+L)^{-1}U) < 1$$

Gostaríamos agora de saber se estes métodos podem ser aplicados para a resolução do sistema (8). O teorema a seguir fornece algumas condições nas quais os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel são convergentes.

Teorema 5.3. Se A é uma matriz irredutível e fracamente diagonal dominante, então os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel são convergentes.

Demonstração.

• Método de Jacobi: Seja λ um autovetor da matriz $D^{-1}(L+U)$. Temos que

$$det(D^{-1}(L+U) - \lambda I) = 0 \Rightarrow det(D^{-1}(L+U - \lambda D)) = 0 \Rightarrow det(D^{-1})det((L+U - \lambda D)) = 0$$

Como A é fracamente diagonal dominante e irredutível, temos que $det(D) \neq 0$ e, portanto, $det(D^{-1}) \neq 0$. Logo

$$det((L+U-\lambda D))=0$$

Caso $|\lambda| \geq 1$ temos que $(L+U-\lambda D)$ é irredutível e fracamente diagonal dominante. Pelo Teorema (3.3), temos que a matriz é inversível e, portanto, $det((L+U-\lambda D)) \neq 0$. Logo, $|\lambda| < 1$ para todos os autovalores de $D^{-1}(L+U)$ de modo que $\rho(D^{-1}(L+U)) < 1$. Pela Proposição (5.2), temos que o método será convergente.

• Método de Gauss-Seidel: Seja λ um autovetor da matriz $(D+L)^{-1}U$. Temos que

$$det((D+L)^{-1}U - \lambda I) = 0 \Rightarrow det((D+L)^{-1}(U - \lambda(D+L))) = 0$$

$$\Rightarrow det((D+L)^{-1})det(U - \lambda(D+L)) = 0$$

Por hipótese¹ $det((D+L)^{-1} \neq 0$, de modo que

$$det(U - \lambda(D + L)) = 0$$

Caso $|\lambda| \geq 1$ temos que $(U - \lambda(D + L))$ é irredutível e fracamente diagonal dominante. Novamente pelo Teorema (3.3) a matriz $U - \lambda(D + L)$ é inversível e $det(U - \lambda(D + L)) \neq 0$. Logo, $|\lambda| < 1$ para todos os autovalores de $(D + L)^{-1}U$ de modo que $\rho(-(D + L)^{-1}U) < 1$. Pela Proposição (5.2), segue a convergência do método.

Agora que sabemos que ambos os métodos são convergentes, seria interessante que pudessemos estimar a velocidade de convergência de cada um desses métodos. Para isto, considere \bar{x} a solução do sistema $Ax = b, x^k$ a aproximação obtida na k-ésima iteração do método, $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n = \rho(M^{-1}N)$ e v^1, v^2, \cdots, v^n os autovalores e autovetores da matriz $M^{-1}N$. Assim

$$x^k - \bar{x} = (M^{-1}N)^k (x^0 - \bar{x})$$

Como os autovetores formam uma base para o \mathbb{R}^n , podemos escrever

$$\sum_{i=1}^{n} c_i v^i = x^0 - \bar{x}$$

e, para $k \to \infty$

$$(M^{-1}N)^{k}(x^{0} - \bar{x}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_{i}^{k} c_{i} v^{i} = \underbrace{\lambda_{n}^{k} \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{\lambda_{1}}{\lambda_{n}}\right)^{k} c_{i} v^{i}}_{1} + c_{n} \lambda_{n}^{k} v^{n}$$

¹A matriz de iteração deve ser inversível, para que o sistema possa ser resolvido a cada iteração do método.

Desta forma, podemos concluir que

$$||x^{k+1} - x^k|| \approx \rho(M^{-1}N)^k ||x^k - \bar{x}|| \tag{19}$$

e a taxa de convergência das aproximações é controlada pelo valor de $\rho(M^{-1}N)$. Assim, para que um dado método iterativo apresente rápida convergência para a solução do problema devemos ter que $\rho(M^{-1}N)$ deve ser pequeno o suficiente para que poucas iterações sejam suficientes para fornecer boas aproximações.

Para avaliar a convergência do método de Jacobi iremos aplicar o método aos vetores $\psi_{k,l}$, $1 \le k, l \le N-1$, cujas componentes são dadas por

$$(\psi_{k,l})_{i,j} = \sin(k\pi x_i)\sin(l\pi y_j) \quad 1 \le i, j \le N - 1$$

Temos que

$$[D^{-1}(L+U)] (\psi_{k,l})_{i,j} = -\frac{1}{h^2} \left[\left(\sin(k\pi x_{i+1}) + \sin(k\pi x_{i-1}) \right) \sin(l\pi y_j) + \left(\sin(l\pi y_{i+1}) + \sin(l\pi y_{i-1}) \right) \sin(k\pi x_i) \right]$$
$$= -\frac{1}{h^2} \left[2\cos(k\pi h) + 2\cos(l\pi h) \right] (\psi_{k,l})_{i,j}$$

Portanto

$$\left[D^{-1}(L+U)\right]\psi_{k,l} = \left(\frac{\cos(k\pi h) + \cos(l\pi h)}{2}\right)\psi_{k,l}$$

Desta forma, temos que os vetores $\psi_{k,l}$ formam uma base de autovetores para a matriz $[D^{-1}(L+U)]$, com os autovalores dados por

$$\mu_{k,l} = \frac{\cos(k\pi h) + \cos(l\pi h)}{2}$$

O maior valor de $\mu_{k,l}$ será dado quando k=l=1 e assim

$$\rho([D^{-1}(L+U)]) = \cos(\pi h) \approx 1 - \frac{h^2 \pi^2}{2} < 1 \tag{20}$$

o que mostra que o método de Jacobi possui uma baixa velocidade de convergência.

De maneira análoga, obtemos que para o método de Gauss-Seidel

$$\rho([D^{-1}(L+U)]) = \cos^2(\pi h) \approx 1 - h^2 \pi^2 < 1 \tag{21}$$

de forma que o método de Gauss-Seidel possui a velocidade de convergência um pouco maior do que o método de Jacobi. Em ambos os casos, quando $h \to 0$ a velocidade de convergência da solução vai diminuindo, pois o raio espectral de ambas as matrizes tendem a 1. Ou seja, quanto mais refinada a malha, menor a velocidade de convergência dos métodos de Jacobi e de Gauss-Seidel.

Visando aumentar a velocidade de convergência vamos inserir um parâmetro livre no problema de forma que com a manipulação desse parâmetro seja possível aumentar a velocidade de convergência dos métodos numéricos. Dado o sistema Ax=b e considerando $\omega\in\mathbb{R}$, vamos escrever a k-ésima iteração do método como uma combinação ponderada entre a (k-1)-ésima aproximação e a k-ésima aproximação obtida pelo método de Gauss-Seidel. Isto equivale a escrever

$$x_{i}^{k} = \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j < i} a_{i,j} x_{j}^{k} - \sum_{j > i} a_{i,j} x_{j}^{k} \right) + (1 - \omega) x_{i}^{k-1}$$

Na forma matricial, temos que

$$(D + \omega L)x^{k} = ((1 - \omega)D - \omega U)x^{k-1} + \omega b$$

onde a matriz de iteração do método será dada por

$$S = (D + \omega L)^{-1}((1 - \omega)D - \omega U)$$

e o método será convergente se, e somente se, $\rho(S) < 1$. Este método conhecido como Sucessive Over-Relaxation ou SOR.

Os resultados a seguir apresentam os resultados de convergência e de velocidade de convergência do método SOR. As demonstrações não serão feitas aqui, pois utilizam alguns conceitos que fogem ao escopo de uma primeira apresentação. Ao leitor interessado, a referência [2] contém as provas dos resultados a seguir:

Teorema 5.4. Se o método SOR é convergente, então $0 < \omega < 2$.

Teorema 5.5. O parâmetro ótimo para o método SOR quando aplicado a matriz do sistema gerado por (8) é dado por:

$$\omega = \frac{2}{1 + \sin(h\pi)}$$

Com este parâmetro, o raio espectral da matriz de iteração é

$$\rho(S) = \frac{1 - \sin \pi h}{1 + \sin \pi h} \approx 1 - 2\pi h$$

Assim como nos métodos de Jacobi e de Gauss Seidel, observa-se que o raio espectral da matriz tende a 1 quando h tende a 0. Porém, neste método a convergência é linear, enquanto que nos outros métodos a convergência é quadrática.

Vamos analisar como isso influência o erro na prática: Sendo e^k o erro cometido na k-ésima iteração, pela desigualdade (19) temos que o erro na próxima iteração depende diretamente do raio espectral da matriz do método, o qual denotaremos apenas por ρ . Dado um erro e^k vamos a quantidade L de iterações necessárias para o erro ser igual a ε vezes este erro, para algum $\varepsilon < 1$.

Para isto, da desigualdade (19) temos que

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{k+L} = \varepsilon e^k \\ e^{k+L} \approx \rho^L e^k \end{array} \right. \Rightarrow \rho^L \approx \varepsilon$$

e, portanto

$$L \approx \frac{\ln \varepsilon}{\ln \rho}$$

Como o raio espectral ρ pode ser escrito da forma $\rho = 1 - \delta$ para algum δ pequeno, podemos utilizar que $\ln(1 - \delta) \approx -\delta$. Assim

$$L \approx \frac{\ln \varepsilon}{\ln \rho} = \frac{\ln \varepsilon^{-1}}{-\ln \rho} = \frac{\ln \varepsilon^{-1}}{-\ln(1-\delta)} \approx \frac{\ln \varepsilon^{-1}}{\delta} \Rightarrow L \approx \frac{\ln \varepsilon^{-1}}{\delta}$$

Assim, temos que

• Método de Jacobi:

$$L \approx \frac{2}{\pi^2} \ln \varepsilon^{-1} N^2$$

• Método de Gauss-Seidel:

$$L \approx \frac{1}{\pi^2} \ln \varepsilon^{-1} N^2$$

• Método SOR (parâmetro ótimo):

$$L \approx \frac{1}{2\pi} \ln \varepsilon^{-1} N$$

Tomando como exemplo N=100 temos que para reduzir o erro em um décimo ($\varepsilon=0.1$) são necessárias

- Método de Jacobi: $L \approx 0.467N^2 = 4670$ iterações.
- Método de Gauss-Seidel: $L \approx 0.234N^2 = 2340$ iterações.
- Método SOR (parâmetro ótimo): $L \approx 0.364N = 37$ iterações.

5.1 Implementação computacional

Na resolução numérica do Problema (1) sujeito à condição (2) iremos utilizar no vetor de soluções do sistema dois índices, um representando a linha e outro representando a coluna. A aplicação dos métodos de Jacobi, Gauss-Seidel e SOR seguem a mesma estrutura:

- 1. Inicialize o vetor $u_{i,j}$ com alguma aproximação inicial. Caso não tenha nenhuma informação sobre o problema, utilize o vetor nulo;
- 2. Inicialize o lado direito do sistema com as informações da função f;
- 3. Utilize a função g para atribuir os valores aos contornos do domínio (isto é, para os índices i, j = 0 ou N);
- 4. Atualize os pontos internos de acordo com o método utilizado;
- 5. Calcule a diferença entre as duas iterações.;
- 6. Se a diferença for maior do que uma tolerância TOL, retorne ao passo (4). Caso contrário, encerre.

Observe que a tolerância TOL pode ser uma estimativa muito pequena, de modo que o algoritmo pode demorar muito para convergir. Desta forma, é aconselhavel que seja colocado também uma restrição no número máximo de passos a ser executado pelo código.

Algorithm 1: Método de Jacobi.

```
//Inicialize vetor de soluções com alguma condição inicial (ou zero);
//Inicialize o lado direito do sistema;
//Insira as condições de contorno;
para eps < TOL ou k < ITMAX faça
   para j = 1 até N - 1 faça
       para i = 1 até N - 1 faça
          unovo_{i,j} = \frac{1}{4} (b_{i,j} + u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1});
       fim para
   fim para
   //Calcule a diferença entre as iterações;
   para j = 1 até N - 1 faça
       para i = 1 até N - 1 faça
          u_{i,j} = unovo_{i,j};
       fim para
   fim para
   k = k + 1;
fim para
```

Algorithm 2: Método de Gauss-Seidel.

```
//Inicialize o vetor de soluções com alguma condição inicial (ou zero); //Inicialize o lado direito do sistema; //Insira as condições de contorno; para eps < TOL ou k < ITMAX faça para j = 1 até N-1 faça para i = 1 até N-1 faça  c = \frac{1}{4} \left( u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} + h^2 b_{i,j} \right);   u_{i,j} = u_{i,j} + c;  fim para //Utilize o incremento c para calcular a norma da diferença entre duas iterações; fim para  k = k+1;  fim para
```

A diferença entre os dois métodos está no fato que o método de Gauss-Seidel pode ser implementado utilizando apenas um vetor pois as novas aproximações já são armazenadas nas entradas correspondentes e utilizadas para construir as aproximações dos outros pontos. Já o método de Jacobi precisa de dois vetores: um para armazenar as novas aproximações e um para armazenar as aproximações anteriores.

Algorithm 3: Método SOR com parâmetro ω .

Em ambas as implementações não foi preciso armazenar as matrizes do sistema linear pois sua estrutura é conhecida e permite que os algoritmos considerem apenas as operações com suas entradas não nulas.

Referências

- [1] Stoer, J and Burlisch, R. Introduction to Numerical Analysis Springer 3rd Ed. 2002.
- [2] Strikwerda, J.C.- Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations SIAM 2nd ed. 2004.
- [3] LeVeque, R.J. Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations -Steady-State and Time-Dependent problems - SIAM - 2007
- [4] Burden, R.L. and Faires, J.D. Numerical Analysis 9th ed. Brooks/Cole 2010