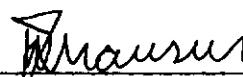


TECNICAS ITERATIVAS PARA A SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES
LINEARES ORIUNDOS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

Francisco Célio de Araújo

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

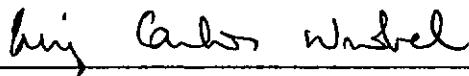
Aprovada por:



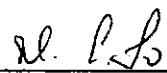
Prof. Webe João Mansur - Ph. D.
(Presidente)



Prof. José Claudio de Faria Telles - Ph. D.



Prof. Luiz Carlos Wrobel - Ph.D.



Prof. Humberto Lima Soriano - D.Sc.



Prof. Ney Augusto Dumont - Dr.Ing.

DE ARAÚJO, FRANCISCO CÉLIO

Técnicas Iterativas para a Solução
de Sistemas de Equações Lineares
Oriundos do Método dos Elementos de
Contorno Rio de Janeiro 1989

ix , 116 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ,
M. Sc., Engenharia Civil, 1989)

Tese - Universidade Federal do Rio
de Janeiro, COPPE

1. Resolução de Sistemas de Equa-
ções associados ao Método dos
Elementos de Contorno

I. COPPE/UFRJ II. Título (Série)

A meu pai (In memorium)

Agostinho Araújo

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Webe J. Mansur pela orientação e incentivo necessários à realização desta tese.

Ao Professor Roberto F. Oliveira, tanto pelos ensinamentos de matemática, como pelas discussões sobre alguns pontos deste trabalho.

À minha família pelo apoio fornecido.

Aos colegas mais íntimos que também são importantes.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências (M. Sc.)

TÉCNICAS ITERATIVAS PARA A SOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES ORIUNDOS DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

Francisco Célio de Araújo

MAIO DE 1989

Orientador: Webe João Mansur

Programa : Engenharia Civil

A avaliação da solução dos sistemas de equações lineares originados quando da resolução de problemas físicos através do Método dos Elementos de Contorno, tem sido realizada, realmente, apenas por técnicas diretas, principalmente, por essas serem as únicas técnicas que possibilitam a resolução de tais sistemas de maneira confiável, embora cara.

Este trabalho objetiva propor "solvers" iterativos que possam ser aplicados, confiável e economicamente, à solução dos sistemas mencionados acima.

Para isso, técnicas iterativas que podem ser vistas como processos de aceleração polinomial de métodos iterativos foram implementadas, e problemas de Engenharia foram simulados e resolvidos com uso dos "solvers" aqui desenvolvidos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as partial
fulfillment of the requirements for the degree of
Master of Science (M. Sc.)

ITERATIVE TECHNIQUES FOR SOLVING BOUNDARY ELEMENT
METHOD LINEAR SYSTEMS OF EQUATIONS

Francisco Célio de Araújo

May, 1989

Thesis Supervisor: Webe João Mansur
Department : Civil Engineering

Direct Gauss elimination is the only technique employed so far for solving BEM linear systems of equations. Although trustful mainly when pivoting is employed, Gauss elimination is very expensive.

This work aims to investigate the possibility of applying iterative "solvers" to BEM analysis, and to select (or work out) those which show to be efficient and trustful.

To accomplish this task iterative techniques resulting from polynomial acceleration processes were implemented and tested.

INDICE

	Pág.
<u>CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO</u>	1
<u>CAPÍTULO II - GENERALIDADES</u>	6
<u>CAPÍTULO III - O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO</u> ...	11
III.1 - Descrição do Método	11
III.2 - Características das Matrizes do MEC	15
<u>CAPÍTULO IV - MÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOS</u>	17
IV.1 - Geração dos Métodos Iterativos Básicos	17
IV.2 - Exemplos de Métodos Iterativos Básicos	22
IV.2.1 - O Método RF	23
IV.2.2 - O Método de Jacobi	24
IV.2.3 - O Método de Gauss-Seidel	26
IV.2.4 - O Método da Fatoração Incompleta	28
IV.2.5 - Comentários Finais	31
<u>CAPÍTULO V - ACELERAÇÃO POLINOMIAL</u>	33
V.1 - Aceleração Polinomial dos Métodos Iterativos Básicos	33
<u>CAPÍTULO VI - PROCEDIMENTOS DE ACELERAÇÃO POLINOMIAL</u> ..	39
VI.1 - Aceleração de Gradiente Conjugado	39
VI.1.1 - Derivação do Método	39

ÍNDICE - (Continuação)

	Pág.
VI.1.2 - O Método de Gradiente Conjugado Visto como Procedimento de Aceleração Polinomial	60
VI.1.3 - Aplicação do Procedimento de Aceleração de Gradiente Conjugado aos Sistemas de Equações Lineares Oriundos do MEC	65
VI.2 - Aceleração de Gradiente Conjugado Genera- lizado Idealizado (GCGI)	66
VI.3 - Aceleração de Lanczos	77
VI.3.1 - O Método de Lanczos	77
VI.3.2 - Aplicação do Algoritmo de Lanczos na Reso- lução de Sistemas de Equações Lineares	85
<u>CAPÍTULO VII - APLICAÇÕES</u>	97
<u>CAPÍTULO VIII - CONCLUSÕES</u>	109
<u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u>	114

SIMBOLOGIA

- A - matriz dos coeficientes, real, não-singular de ordem $N \times N$
- b - vetor dos termos independentes
- G - matriz de iteração de um método iterativo básico
- K - vetor real conhecido associado ao método iterativo
- Q - matriz de partição ou de preconditionamento
- $k(\tilde{A})$ - número de condicionamento espectral da matriz \tilde{A}
- $S(\tilde{A})$ - raio espectral da matriz \tilde{A}
- u - solução exata de $\tilde{A}u = \tilde{b}$
- $m(\tilde{A})$ - autovalor de \tilde{A} algebricamente menor
- $M(\tilde{A})$ - autovalor de \tilde{A} algebricamente maior
- I - matriz identidade
- B, L - matrizes de iteração dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel, respectivamente
- Ω - domínio onde um dado problema é definido
- Γ - contorno do domínio de um problema
- $K_n(\delta^0, \tilde{A})$ - subespaço de Krylov associado à matriz \tilde{A} e o vetor δ^0

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Consta, como parte fundamental da análise numérica de todo e qualquer problema de Engenharia, ou a resolução de sistemas de equações lineares, ou a resolução de problemas de autovalor, podendo esses últimos, inclusive, depender dos primeiros.

A esta Tese compete o tratamento da resolução de sistemas de equações lineares oriundos do Método dos Elementos de Contorno através de técnicas iterativas.

Tanto no Método dos Elementos de Contorno, como no Método dos Elementos Finitos, o tempo referente à resolução dos sistemas de equações resultantes corresponde à maior parte do tempo total necessário à análise, principalmente quando esses sistemas possuem ordem elevada, já que quanto maior a ordem do sistema, maior o tempo de resolução em relação ao tempo de montagem da matriz.

No que diz respeito ao Método dos Elementos Finitos, muitos estudos objetivando otimizar os custos computacionais associados à resolução dos sistemas de equações resultantes já foram realizados, não apenas considerando o uso de técnicas diretas, bem como evidenciando o uso de técnicas iterativas.

Todavia, em se tratando do Método dos Elementos Finitos, tira-se muito proveito das características favoráveis das matrizes resultantes, dentre as quais cita-se, por exemplo, o fato das matrizes provenientes do Método dos Elementos Finitos serem, normalmente, simétricas e positivas-definidas.

Relativamente ao Método dos Elementos de Contorno, tem-se que as matrizes resultantes apresentam características bem desfavoráveis, como por exemplo, o fato de não serem simétricas, nem positivas-definidas, o que já impossibilita o uso de uma gama de métodos iterativos na avaliação da solução dos sistemas de equações associados (Ver Referência [1]) de modo que a maneira mais confiável, e inclusive mais econômica, para a avaliação da solução desses, tem sido, realmente, o uso de técnicas diretas.

O objetivo desta Tese é, portanto, a elaboração de um "solver" iterativo com o qual se possa resolver eficientemente os sistemas de equações lineares associados ao Método de Elementos de Contorno, onde com a palavra "eficientemente" se quer dizer, com custos computacionais reduzidos, bem como com garantia de convergência (ao menos teoricamente!). Além disso, objetiva-se também enfatizar, ainda que sob um ponto de vista matemático bastante resumido, a natureza teórica dos métodos iterativos, com o intuito de que, além dos algoritmos finais já prontos, outros algoritmos possam ser desenvolvidos.

Visando-se tornar mais direto o entendimento do texto, no Capítulo II agruparam-se, sob a forma de generalidades, definições e teoremas matemáticos que serão utilizados na formulação dos métodos iterativos aqui comentados.

No Capítulo III, procurou-se, além de comentar a idéia básica do Método dos Elementos de Contorno, descrever algumas das características associadas às matrizes resultantes, mesmo que essas, muitas vezes, ainda não sejam fatos matematicamente comprovados, mas apenas o resultado da experiência de professores e pesquisadores.

Nos capítulos IV, V e VI, é desenvolvida a formulação dos métodos iterativos propriamente. No Capítulo IV apresentam-se, dentre os métodos iterativos básicos, aqueles que se mostram mais econômicos e dos quais se pode tirar proveito na resolução dos sistemas de equações oriundos do Método dos Elementos de Contorno, quando da utilização de algum procedimento de aceleração polinomial sobre esses. No Capítulo V, é visto do que consiste a aceleração polinomial de métodos iterativos básicos e, no Capítulo VI, alguns procedimentos de aceleração polinomial foram estudados. Nesse mesmo capítulo, os algoritmos para a implementação computacional dos procedimentos de aceleração polinomial estudados são fornecidos, inclusive de maneira genérica, possibilitando ao leitor aplicá-lo, não apenas sobre os métodos iterativos básicos que são comentados nesta tese, mas sobre um método iterativo básico qualquer que lhe for mais conveniente.

Atenta-se aqui para o fato de que embora se tenha comentado a respeito da fatoração incompleta de uma matriz, a implementação computacional desse algoritmo não foi efetuada neste trabalho. No entanto, esses comentários fornecem os elementos essenciais para a implementação computacional, por exemplo, do processo de aceleração de Lanczos sobre o método de fatoração incompleta em trabalhos posteriores, e desse modo também atende aos objetivos deste trabalho.

No Capítulo VII, são feitas aplicações dos "solvers" implementados, na resolução dos sistemas de equações resultantes de vários problemas físicos que foram analisados utilizando-se o Método dos Elementos de Contorno. Três desses problemas referem-se à elasticidade bidimensional (estado plano de tensão), onde visou-se, primeiramente, verificar a eficiência dos vários "solvers" iterativos utilizados, seja em relação aos diretos, seja em relação a eles mesmos. No quarto e último problema analisado, dado que alguns dos "solvers" iterativos já se mostravam eficientes, procurou-se constatar o comportamento desses diante de uma aplicação industrial, e então analisou-se o problema de verificação da proteção catódica de uma plataforma semi-submersível.

As conclusões do presente trabalho são mais otimistas que aquelas apresentadas previamente por BETTESS [3], PARREIRA [6] e HENCIS e MULLEN [5].

Cabe ressaltar, porém, que em trabalho recen-

te desenvolvido por Chang-Ho Lee (ver referência [15]), um "solver" é proposto para resolver sistemas de equações oriundos da aplicação do Método dos Elementos de Contorno a problemas dinâmicos escalares de interação fluido-estrutura, e os resultados obtidos são excelentes. Entretanto, a alternativa seguida naquele trabalho foi descartada já nos estudos iniciais, posto que a formulação lá desenvolvida só se aplica a matrizes positivas-reais, o que vai contra os objetivos deste trabalho, que consistem, ultimamente, da elaboração de "solvers" absolutamente gerais. "Solvers" particulares só devem ser desenvolvidos após estudos mais rigorosos das características das matrizes provenientes do Método dos Elementos de Contorno.

CAPÍTULO IIGENERALIDADES

Com finalidade de facilitar o entendimento do texto desenvolvido neste trabalho é que apresenta-se neste capítulo algumas definições e teoremas matemáticos necessários à formulação dos métodos iterativos aqui estudados.

Definição II.1 - Seja U um subconjunto de \mathbb{R}^N , onde cada vetor \underline{u} pertencente a U é dado por

$$\underline{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}, \quad u_i \in \mathbb{R};$$

e seja o funcional $F : U \rightarrow \mathbb{R}$, com $F \in C^1(U)$. O gradiente de F em \underline{u} é dado pelo vetor

$$\nabla F(\underline{u}) = \begin{bmatrix} \partial F / \partial u_1 \\ \partial F / \partial u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \partial F / \partial u_N \end{bmatrix}$$

Definição II.2 - Seja $F \in C^1(U)$. Diz-se que F é estacionário em \bar{u} , ou equivalentemente, \bar{u} é ponto estacionário de F , se $\nabla F(\bar{u}) = 0$.

TEOREMA II.1 - Seja $F \in C^1(\mathbb{R}^N)$, então, dentre todas as direções p em algum ponto \underline{u} , aquela na qual F varia mais rapidamente em torno de \underline{u} é dada por $p = \nabla F(\underline{u})$.

TEOREMA II.2 - Seja $F \in C^1(U)$. Se $\bar{u} \in U$ é um extremo local de F , então F é estacionário em \bar{u} .

Definição II.3 - Um funcional quadrático é um funcional do tipo

$$F(\underline{u}) = \frac{1}{2} (\underline{u}, \underline{A} \underline{u}) - (\underline{u}, \underline{b}) + c, \quad (II.1)$$

onde \underline{u} e \underline{b} são vetores de \mathbb{R}^N ,

\underline{A} é uma matriz real, e

c é uma constante real.

Observa-se que, da equação (II.1), facilmente encontra-se que $\nabla F(\underline{u}) = -(\underline{b} - \underline{A} \underline{u})$. Também, por meio de simples manipulações matemáticas, tem-se que o funcional quadrático dado por (II.1), quando \underline{A} for simétrica, pode ser reescrito como

$$F(\underline{u}) = \frac{1}{2} \left[(\underline{u} - \bar{\underline{u}}), \underline{A} (\underline{u} - \bar{\underline{u}}) \right] + \bar{c}, \quad (II.2)$$

onde $\bar{c} = -\frac{1}{2} (\bar{u}, \bar{b}) + c$, e \bar{u} é ponto estacionário de \bar{A} .

Definição II.4 - Uma matriz real \bar{A} é simétrica positiva-definida (SPD), se se tiver para todo \underline{u} e $\underline{v} \in \mathbb{R}^N$, e \underline{u} e \underline{v} não nulos, que

$$(\underline{u}, \bar{A} \underline{v}) = (\underline{v}, \bar{A} \underline{u}) > 0. \quad (\text{II.3})$$

Definição II.5 - Uma matriz real \bar{A} é dita positiva-real (PR), se e só se $(\bar{A} + \bar{A}^T)$ for SPD.

Definição II.6 - Uma matriz \bar{A} é diagonalmente dominante, se

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Definição II.7 - O produto interno de energia e a norma de energia correspondentes a uma matriz positiva-definida \bar{A} são dados, respectivamente, por

$$(\underline{u}, \underline{v})_{\bar{A}} = \underline{u}^T \bar{A} \underline{v}, \quad (\text{II.4})$$

e

$$\|\underline{u}\|_{\bar{A}} = (\underline{u}, \underline{u})_{\bar{A}}^{1/2} = (\underline{u}^T \bar{A} \underline{u})^{1/2} \quad (\text{II.5})$$

Definição II.8 - \bar{A} é uma matriz de Hessenberg (na forma) superior, se $a_{ij} = 0$, para $i \geq j + 2$; e \bar{A} é uma ma-

matriz de Hessenberg (na forma) inferior, se $a_{ij} = 0$, para $j \geq i + 2$.

Definição II.9 - Uma matriz que é, simultaneamente, matriz de Hessenberg superior e inferior, é chamada de matriz tri-diagonal.

Definição II.10 - O raio espectral $S(\tilde{A})$, de uma matriz \tilde{A} de ordem N é definido como o máximo dos módulos dos autovalores de \tilde{A} , ou seja, se $\{\lambda_i\}$, $i = 1, 2, \dots, N$, é a sequência de autovalores de \tilde{A} , então

$$S(\tilde{A}) \equiv \max |\lambda_i|.$$

Definição II.11 - Para quaisquer matrizes não-singulares \tilde{A} e \tilde{L} define-se o número de condicionamento de \tilde{A} em relação a \tilde{L} por

$$K_{\tilde{L}}(\tilde{A}) = \|\tilde{A}\|_{\tilde{L}} \|\tilde{A}^{-1}\|_{\tilde{L}},$$

onde

$$\|\tilde{A}\|_{\tilde{L}} = \sqrt{S \left[(\tilde{L} \tilde{A} \tilde{L}^{-1}) (\tilde{L} \tilde{A} \tilde{L}^{-1})^H \right]}.$$

Para o caso em que $\tilde{L} = \tilde{I}$, tem-se então que

$$k(\tilde{A}) = k_{\tilde{I}}(\tilde{A}) = \|\tilde{A}\|_{\tilde{I}} \|\tilde{A}^{-1}\|_{\tilde{I}},$$

onde

$$\|\tilde{A}\|_I = \sqrt{S(\tilde{A} \tilde{A}^H)}.$$

Definição II.12 - Dado um vetor \tilde{v}^0 não-nulo e uma matriz \tilde{A} , define-se, espaço de Krylov $K_n(\tilde{v}^0, \tilde{A})$, como sendo o espaço definido por

$$K_n(\tilde{v}^0, \tilde{A}) = \text{SPAN} \left\{ \tilde{v}^0, \tilde{A} \tilde{v}^0, \dots, \tilde{A}^{n-1} \tilde{v}^0 \right\}.$$

CAPÍTULO III

O MÉTODO DOS ELEMENTOS DE CONTORNO

III.1 - DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Além do método dos elementos finitos há ainda um outro importante método numérico, que nos últimos anos tem ganhado bastante espaço na resolução de problemas de Engenharia. Tal método é o já tão conhecido nos meios da engenharia científica como o Método dos Elementos de Contorno (MEC), ou ainda, o Método da Equação Integral de Contorno (MEIC).

Importantes problemas de engenharia podem ser analisados utilizando-se o MEC, dentre os quais podem-se citar, por exemplo, problemas de transferência de calor, problemas de elasticidade, problemas de hidrodinâmica, problemas de eletrostática, problemas de proteção catódica e muitos outros.

A idéia básica dessa técnica é a formulação matemática de problemas físicos, que têm incógnitas tanto no interior do domínio Ω do problema quanto no contorno Γ , como função apenas dos valores de contorno.

Desse modo determinam-se em primeiro lugar as incógnitas de contorno, para então serem determinadas as incógnitas internas desejadas.

Para os problemas regidos pela equação de Laplace ou Poisson (problemas de potencial), a equação integral de contorno correspondente a um dado ponto-fonte ξ é dada por

$$c(\xi) u(\xi) + \int_{\Gamma} u(x) q^*(\xi, x) d\Gamma(x) = \int_{\Gamma} q(x) u^*(\xi, x) d\Gamma(x), \quad (\text{III.1})$$

onde

$u(x)$ é a função de potencial,

$q(x)$ é a função de fluxo,

$u^*(\xi, x)$ é a solução fundamental,

$q^*(\xi, x)$ é a derivada de $u^*(\xi, x)$ na direção normal ao contorno, e

$c(\xi)$ é um coeficiente associado às características geométricas do contorno, que para contornos suaves é igual a $\frac{1}{2}$.

Expressando-se (III.1) para o nó de ordem i de uma malha que aproxima o contorno Γ com elementos constantes, por exemplo, obtém-se que

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma_j} q^* d\Gamma \right) u_j = \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma \right) q_j, \quad (\text{III.2})$$

onde as variáveis ξ e x foram suprimidas para simplificar a notação. Escrevendo-se (III.2) para cada um dos nós da malha, chega-se então ao seguinte conjunto de equações:

$$\underline{H} \underline{u} = \underline{G} \underline{q}, \quad (\text{III.3})$$

onde

$$h_{ij} = \begin{cases} \int_{\Gamma_j} q^* d\Gamma, & \text{se } i \neq j \ (\xi = i) \\ \int_{\Gamma_j} q^* d\Gamma + \frac{1}{2}, & \text{se } i = j \ (\xi = i) \end{cases}, \quad (\text{III.4})$$

e

$$g_{ij} = \int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma \quad (\xi = i). \quad (\text{III.5})$$

O método dos elementos de contorno é um método misto, onde para cada nó da malha é conhecido, no caso, ou o potencial ou o fluxo. Substituindo-se então esses valores conhecidos na equação (III.3) e realizando-se uma troca de colunas entre \underline{H} e \underline{G} de tal sorte a ter-se no primeiro membro apenas as incógnitas do problema, e no segundo, apenas valores prescritos do potencial ou do fluxo, obtém-se, finalmente, o sistema de equações lineares do método dos elementos de contorno

$$\underline{A} \underline{u} = \underline{b}, \quad (\text{III.6})$$

onde

\underline{A} é a matriz dos coeficientes do MEC, que em geral contém coeficientes tanto de \underline{G} como de \underline{H} , e
 \underline{u} é o vetor de incógnitas.

Para problemas de elasticidade uma equação integral semelhante à dada por (III.1) é obtida. Aqui tem-se, porém que

$$c_{ij}(\xi) u_j(\xi) + \int_{\Gamma} P_{ij}^*(\xi, x) u_j(x) d\Gamma(x) = \\ = \int_{\Gamma} u_{ij}^*(\xi, x) p_j(x) d\Gamma(x), \quad (III.7)$$

onde agora

$u_j(x)$ é a função de deslocabilidades segundo a direção j ,
 $p_j(x)$ é a função de carregamento segundo a direção j , e
 $u_{ij}^*(\xi, x)$ e $P_{ij}^*(\xi, x)$ são, respectivamente, a solução fundamental e a derivada dessa na direção normal ao contorno.

Os coeficientes c_{ij} também representam as características geométricas do contorno onde o ponto-fonte ξ se localiza, só que agora, relativamente a cada ponto-fonte, tem-se uma matriz \underline{C} da ordem da dimensão do problema, ou seja, se o problema é bidimensional \underline{C} é de ordem 2, e se o problema é tridimensional \underline{C} é de ordem 3.

Discretizando-se o contorno Γ e repetindo-se o mesmo procedimento que foi realizado para o problema de potencial, chega-se então ao sistema de equações lineares que resolve o problema de elasticidade.

III.2 - CARACTERÍSTICAS DAS MATRIZES DO MEC

Do pouco que se sabe em relação ao comportamento das matrizes associadas ao método dos elementos de contorno, aponta-se primordialmente, que essas são completamente cheias, não-simétricas e não-singulares (ou quasi-singulares quando da utilização de elementos descontínuos), não se podendo garantir porém, que essas sejam positivas-definidas ou, pelo menos, positivas-reais ou diagonalmente dominantes.

No entanto, a partir da experiência de pesquisadores, alguns outros detalhes (práticos) associados a essas matrizes podem ser revelados. Dessa forma é sabido que para os problemas de potencial as matrizes dos coeficientes apresentam um condicionamento bem melhor que as dos problemas de elasticidade. Sabe-se ainda que, para os problemas que são diferenciados apenas pelas condições de contorno, se forem prescritos apenas um tipo de condição de contorno (problema de Dirichlet ou de Neumann), então a matriz final dos coeficientes apresenta melhor condicionamento que a matriz resultante de problemas onde são prescritos agora os dois tipos de condição de contorno (problema de Cauchy).

Um outro detalhe prático está associado aos erros de arredondamento, quando da resolução do sistema de equações lineares. Assim para se evitar tais erros, é usual modificar-se os coeficientes de \underline{A} que pertencem à matriz \underline{G} (normalmente menores que os da matriz \underline{H}), multiplicando-os por uma constante, muitas vezes conhecida como o fator-escala.

Na referência [7], quando da elaboração de um programa computacional voltado para a resolução de problemas bidimensionais da elasticidade, foi usado pelos autores um fator-escala, arbitrariamente escolhido, igual ao módulo de elasticidade longitudinal do material.

Neste trabalho não se deteve sobre esse tipo de problema, o que até talvez fosse importante, já que o fator-escala, além da finalidade de evitar erros de arredondamento, pode também ser escolhido objetivando-se otimizar o condicionamento da matriz dos coeficientes, e consequentemente acelerar um dado esquema iterativo. Para mais esclarecimentos ver referência [3], onde estudos foram feitos a esse respeito.

CAPÍTULO IVMÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOSIV.1 - GERAÇÃO DOS MÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOS

Ainda que não se faça uso, única e exclusivamente, de algum método iterativo básico na resolução de sistemas de equações lineares associados ao MEC, será de fundamental importância tomar conhecimento de tais métodos, já que muitas das poderosas técnicas iterativas apresentadas posteriormente se utilizam desses.

Objetiva-se portanto, com este capítulo, fornecer os fundamentos dos demais métodos iterativos básicos utilizados na resolução de um sistema de equações lineares do tipo

$$\underline{A} \underline{u} = \underline{b} , \quad (IV.1)$$

onde \underline{A} é uma matriz real e não-singular de ordem $N \times N$, e \underline{b} é um vetor real.

Tais métodos podem ser definidos como métodos iterativos lineares, estacionários e de primeiro grau, que podem ser expressos na forma

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{G} \underline{u}^n + \underline{k} , \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (IV.2)$$

onde \underline{G} é uma matriz real de ordem $N \times N$ - a denominada ma-

triz de iteração do método, e

\underline{k} é um vetor real conhecido associado ao método iterativo.

Mas antes de se entrar em detalhes da obtenção da matriz \underline{G} e do vetor \underline{k} , que aparecem na equação (IV.2), far-se-ão, primeiro, comentários a respeito das definições dos termos apresentados no parágrafo anterior. Assim, define-se que o método é do primeiro grau se \underline{u}^{n+1} depende explicitamente, apenas de \underline{u}^n , e não, da história dos vetores \underline{u}^i obtidos em cada iteração anterior. Se nem \underline{G} nem \underline{k} depende de \underline{u}^n , diz-se que o método é linear, e por último, diz-se que o método é estacionário se nem \underline{G} nem \underline{k} depende de n .

Como afirmado acima, os métodos básicos podem ser expressos pela equação (IV.2). Desse modo comenta-se agora como se chega ao método iterativo definido por (IV.2), a partir do sistema de equações lineares dado em (IV.1). Para isso é necessário, apenas, definir-se uma partição qualquer para a matriz de coeficientes do sistema, ou melhor, define-se uma partição para \underline{A} em (IV.1), e a partir de simples manipulações matemáticas, consegue-se estabelecer uma fórmula iterativa associada a essa partição, que é do tipo da fornecida pela equação (IV.2). Essa partição será expressa através de uma matriz não-singular, representada por \underline{Q} e denominada matriz de partição ("splitting matrix") do método iterativo.

Expressando-se simbolicamente, tem-se: dada a

matriz de partição \underline{Q} , prē-multiplicam-se ambos os lados de (IV.1) por \underline{Q}^{-1} para a obtenção de

$$\underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{u} = \underline{Q}^{-1} \underline{b}. \quad (\text{IV.3})$$

Somando-se a matriz identidade à matriz dos coeficientes e subtraindo-a da mesma, obtém-se

$$(\underline{I} - \underline{I} + \underline{Q}^{-1} \underline{A}) \underline{u} = \underline{Q}^{-1} \underline{b}, \quad (\text{IV.4})$$

donde, finalmente, é possível exprimir-se a fórmula iterativa para a solução de (IV.1), qual seja,

$$\underline{u}^{n+1} = (\underline{I} - \underline{Q}^{-1} \underline{A}) \underline{u}^n + \underline{Q}^{-1} \underline{b}. \quad (\text{IV.5})$$

Comparando-se (IV.5) com (IV.2), vê-se que a matriz de iteração \underline{G} e o vetor \underline{k} associados ao método iterativo são dados por

$$\underline{G} = \underline{I} - \underline{Q}^{-1} \underline{A} \quad \text{e} \quad \underline{k} = \underline{Q}^{-1} \underline{b}. \quad (\text{IV.6})$$

Como visto acima, os métodos iterativos básicos têm natureza relativamente simples, e caso algumas das razões dos procedimentos tomados na geração de tais métodos, ou mesmo de denominações utilizadas, não estejam ainda claras ao leitor, certamente que ficarão a partir do contacto com exemplos práticos de métodos iterativos que serão apresentados mais adiante.

Em relação à escolha da matriz de partição \underline{Q} que definirá um determinado método iterativo, é importante saber que, na verdade, existem alguns critérios para tal escolha que são determinantes na eficiência do método associado. A saber, uma boa matriz de partição deve obedecer às seguintes propriedades:

- 1) o número de condicionamento de $\underline{Q}^{-1} \underline{A}$ é significativamente menor que o número de condicionamento de \underline{A} ;
- 2) os coeficientes de \underline{Q} são facilmente determinados, e
- 3) \underline{Q}^{-1} é facilmente obtida.

No que diz respeito ainda aos comentários gerais dos métodos iterativos básicos, há também algumas propriedades das quais devemos tomar conhecimento. Sabendo-se que as matrizes \underline{A} e \underline{Q} são não-singulares, tem-se então que

$$\underline{\bar{u}} = \underline{A}^{-1} \underline{b} \quad (\text{IV.7})$$

é a única solução de (IV.1), bem como única solução do sistema associado

$$(\underline{I} - \underline{G}) \underline{u} = \underline{k} \quad , \quad (\text{IV.8})$$

e o método iterativo (IV.2) será dito completamente consistente.

Baseado nisso pode-se estabelecer que, se $\{\underline{u}^n\}$ é a seqüência dos vetores \underline{u} obtidos por (IV.2) ao longo das iterações, então tem-se que (a) se $\underline{u}^n = \bar{\underline{u}}$ para algum n , então $\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^{n+2} = \dots = \bar{\underline{u}}$, e (b) se a seqüência $\{\underline{u}^n\}$ converge para algum $\hat{\underline{u}}$, então $\hat{\underline{u}} = \bar{\underline{u}}$. As proposições acima são facilmente verificadas, como será mostrado a seguir.

Suponha que para algum n tenha-se que $\underline{u}^n = \bar{\underline{u}}$, então da equação (IV.5) tem-se que

$$\underline{u}^{n+1} = (\underline{I} - \underline{Q}^{-1} \underline{A}) \underline{u}^n + \underline{Q}^{-1} \underline{b} \quad (\text{IV.9})$$

Pela consistência completa, tem-se que $\bar{\underline{u}}$ é dado por (IV.7), que substituído em (IV.9) fornece que

$$\underline{u}^{n+1} = (\underline{I} - \underline{Q}^{-1} \underline{A}) \underline{A}^{-1} \underline{b} + \underline{Q}^{-1} \underline{b} = \underline{A}^{-1} \underline{b} = \bar{\underline{u}}. \quad (\text{IV.10})$$

Utilizando-se agora o processo indutivo, mostra-se que $\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^{n+2} = \dots = \bar{\underline{u}}$. Para fazer-se a verificação da proposição (b), afirma-se inicialmente que uma seqüência $\{\underline{u}^n\}$ converge para algum $\hat{\underline{u}}$, se para algum n tem-se que $\underline{u}^n = \underline{u}^{n+1} = \dots = \hat{\underline{u}}$. Mas como mostrado acima, se $\underline{u}^n = \underline{u}^{n+1} = \dots$, então $\underline{u}^n = \bar{\underline{u}}$ (proposição (a) pelo avesso), logo $\hat{\underline{u}} = \bar{\underline{u}}$.

Há ainda uma outra propriedade dos métodos iterativos básicos, qual seja, a propriedade da convergência. O método iterativo será dito convergente se para um vetor de partida \underline{u}^0 qualquer, a seqüência $\underline{u}^1, \underline{u}^2, \dots$ definida

por (IV.2) converge para \bar{u} . Uma condição necessária e suficiente para que isso aconteça é que o raio espectral da matriz de iteração \underline{G} seja menor que 1, ou seja,

$$S(\underline{G}) < 1 \quad (IV.11)$$

IV.2 - EXEMPLOS DE MÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOS

Após terem sido feitos comentários gerais sobre a natureza dos métodos iterativos básicos, apresentar-se-ão agora, alguns exemplos práticos de tais métodos.

Existem pelo menos cinco métodos básicos que são bem conhecidos nos meios científico-matemáticos, a saber, o método RF, o método de Jacobi, o método de Gauss-Seidel, o método da sobreralaxação sucessiva (SOR - successive overrelaxation) e o método da sobreralaxação sucessiva simétrica (SSOR - symmetric successive overrelaxation). Além desses há ainda um importante método, que é o método da fatoração incompleta, que também pode ser visto como um método iterativo básico, como será mostrado mais adiante.

Dos métodos mencionados acima, far-se-á uso neste trabalho apenas dos métodos RF, de Jacobi, de Gauss-Seidel e da fatoração incompleta, já que os métodos da SOR e da SSOR, para que se mostrem eficientes, dependem do cálculo de um parâmetro que otimiza a razão de convergência desses métodos. Esse parâmetro é avaliado a partir de informações dos autovaletores das respectivas matrizes de iteração dos métodos. No

entanto, dada a complexidade das matrizes dos coeficientes oriundas do MEC, se é forçado, ao menos no âmbito deste trabalho, a descartá-los.

Visto isso, apresentar-se-ão abaixo os métodos iterativos básicos dos quais tirar-se-á proveito, ao longo deste trabalho, na resolução dos sistemas de equações lineares provenientes do método dos elementos de contorno.

IV.2.1 - O Método RF

É o mais simples dos métodos iterativos, e é definido por

$$\underline{u}^{n+1} = (\underline{I} - \underline{A}) \underline{u}^n + \underline{b} , \quad (IV.12)$$

onde por comparações com (IV.5), vê-se que a matriz de partição deste método é dada por

$$\underline{Q} = \underline{I} , \quad (IV.13)$$

e a respectiva matriz de iteração, por

$$\underline{G} = (\underline{I} - \underline{A}) . \quad (IV.14)$$

Para algum autovalor v_i de \underline{A} existe um correspondente autovalor u_i de \underline{G} , dado pela seguinte relação:

$$u_i = 1 - v_i .$$

Então tem-se que o raio espectral de \underline{G} será dado por

$$S(\underline{I} - \underline{A}) = \max(|1 - m(\underline{A})|, |1 - M(\underline{A})|) , \quad (IV.15)$$

onde $m(\underline{A})$ e $M(\underline{A})$ são, respectivamente, os autovalores algebraicamente menor e maior.

Quando a matriz \underline{A} for SPD, o método será convergente se, e somente se,

$$M(\underline{A}) < 2. \quad (IV.16)$$

IV.2.2 - O Método de Jacobi

Para a apresentação do método de Jacobi, bem como do método de Gauss-Seidel que será visto a seguir, expressar-se-á a matriz \underline{A} do sistema de equações dado em (IV.1), por

$$\underline{A} = \underline{D} - \underline{C}_L - \underline{C}_U , \quad (IV.17)$$

onde

$$\underline{D} = \begin{bmatrix} a_{11} & & & 0 \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \underline{C}_L = - \begin{bmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e}$$

$$\underline{C}_U = - \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & 0 & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & \dots & 0 & \dots & a_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

(IV.18)

O método de Jacobi é definido por

$$a_{ii} u_i^{n+1} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_{ij} u_j^n + b_i, \quad i = 1, N, \quad (IV.19)$$

que expressa em notação matricial fica:

$$\underline{D} \underline{u}^{n+1} = (\underline{C}_L + \underline{C}_U) \underline{u}^n + \underline{b}, \quad (IV.20)$$

de onde obtém-se

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{D}^{-1} (\underline{C}_L + \underline{C}_U) \underline{u}^n + \underline{D}^{-1} \underline{b}. \quad (IV.21)$$

Mas de (IV.17) tem-se que,

$$\underline{C}_L + \underline{C}_U = \underline{D} - \underline{A} \quad (IV.22)$$

que substituída em (IV.21), resulta em

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{D}^{-1} (\underline{D} - \underline{A}) \underline{u}^n + \underline{D}^{-1} \underline{b}, \quad (IV.23)$$

de onde tem-se por último que

$$\underline{u}^{n+1} = (\underline{I} - \underline{D}^{-1} \underline{A}) \underline{u}^n + \underline{D}^{-1} \underline{b} . \quad (\text{IV.24})$$

A matriz de iteração do método de Jacobi, que definir-se-á por \underline{B} será dada, portanto, por

$$\underline{B} = (\underline{I} - \underline{D}^{-1} \underline{A}) , \quad (\text{VI.25})$$

e a respectiva matriz de partição, por

$$\underline{Q} = \underline{D} . \quad (\text{IV.26})$$

A convergência do método de Jacobi é garantida se, e somente se

$$S(\underline{B}) < 1 .$$

IV.2.3 - O Método de Gauss-Seidel

A definição do método de Gauss-Seidel é dada por

$$a_{ii} u_i^{n+1} = - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} u_j^{n+1} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} u_j^n + b_i , \quad (\text{IV.27})$$

que expressada em termos das matrizes definidas em (IV.18)

torna-se

$$(\underline{D} - \underline{C}_L) \underline{u}^{n+1} = \underline{C}_U \underline{u}^n + \underline{b}. \quad (IV.28)$$

De (IV.28) obtém-se que

$$\underline{u}^{n+1} = (\underline{D} - \underline{C}_L)^{-1} \underline{C}_U \underline{u}^n + (\underline{D} - \underline{C}_L)^{-1} \underline{b}; \quad (IV.29)$$

mas a partir de (IV.17) pode-se exprimir \underline{C}_U como:

$$\underline{C}_U = \underline{D} - \underline{C}_L - \underline{A}, \quad (IV.30)$$

que substituído na equação (IV.29) fornece finalmente, que

$$\underline{u}^{n+1} = \left[\underline{I} - (\underline{D} - \underline{C}_L)^{-1} \underline{A} \right] \underline{u}^n + (\underline{D} - \underline{C}_L)^{-1} \underline{b}. \quad (IV.31)$$

Novamente, comparando-se (IV.31) com (IV.5), vê-se que as matrizes de iteração e de partição do método de Gauss-Seidel são dadas respectivamente por

$$\underline{L} = \underline{I} - (\underline{D} - \underline{C}_L)^{-1} \underline{A} \quad (IV.32)$$

e

$$\underline{Q} = \underline{D} - \underline{C}_L = \begin{bmatrix} a_{11} & & & & & \\ a_{21} & a_{22} & & & & \\ \vdots & & \ddots & & & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & \cdots & a_{NN} & \end{bmatrix}. \quad (IV.33)$$

Em relação a convergência, pode-se mostrar que, desde que \underline{A} e \underline{D} sejam matrizes simétricas e positivas-definidas, então o método de Gauss-Seidel sempre converge.

IV.2.4 - O Método da Fatoração Incompleta

O que se faz para a obtenção de tal método é, basicamente, aproximar-se a matriz \underline{A} do sistema (IV.1) pelo produto de fatores \underline{L} e \underline{U} que são respectivamente matrizes triangulares inferior e superior. Desse modo tem-se que

$$\underline{A} = \underline{L} \underline{U} + \underline{R} \quad (\text{IV.34})$$

onde \underline{R} representa o erro associado à fatoração incompleta de \underline{A} .

Substituindo-se a equação (IV.34) em (IV.1), obtém-se,

$$(\underline{L} \underline{U} + \underline{R}) \underline{u} = \underline{b} , \quad (\text{IV.35})$$

de onde pode-se formular o seguinte esquema iterativo:

$$(\underline{L} \underline{U}) \underline{u}^{n+1} = -\underline{R} \underline{u}^n + \underline{b} , \quad (\text{IV.36})$$

ou ainda,

$$\underline{u}^{n+1} = -(\underline{L} \underline{U})^{-1} (\underline{A} - \underline{L} \underline{U}) \underline{u}^n + (\underline{L} \underline{U})^{-1} \underline{b} , \quad (\text{IV.37})$$

que resulta finalmente em

$$\underline{u}^{n+1} = \left[\underline{I} - (\underline{L} \ \underline{U})^{-1} \ \underline{A} \right] \ \underline{u}^n + (\underline{L} \ \underline{U})^{-1} \ \underline{b} . \quad (IV.38)$$

A equação (IV.38) fornece portanto, a fórmula iterativa para o método básico da fatoração incompleta, cujas matrizes de iteração e de partição são dadas, respectivamente, por

$$\underline{G} = \left[\underline{I} - (\underline{L} \ \underline{U})^{-1} \ \underline{A} \right], \quad (IV.39)$$

e

$$\underline{Q} = \underline{L} \ \underline{U} . \quad (IV.40)$$

Existem várias maneiras de se obter a fatoração incompleta de \underline{A} mostrada em (IV.34), mas antes de apresentar-se alguns modelos que podem ser adotados na fatoração incompleta de uma matriz, mostrar-se-á inicialmente, o algoritmo que fornece os fatores \underline{L} e \underline{U} quando da fatoração completa dessa matriz.

O algoritmo para a decomposição completa de uma matriz quadrada \underline{A} de ordem $N \times N$ é dado como segue. Inicialmente faz-se

$$u_{11} = a_{11} \quad \text{e} \quad \lambda_{11} = 1 . \quad (IV.41)$$

A seguir, para $j = 2, 3, \dots, N$,

$$\ell_{jj} = 1, \quad \ell_{j1} = a_{j1}/u_{11}$$

$$u_{1j} = a_{1j},$$

$$\left. \begin{array}{l} \ell_{ji} = (a_{ji} - \sum_{m=1}^{i-1} \ell_{jm} u_{mi})/u_{ii} \\ u_{ij} = a_{ij} - \sum_{m=1}^{i-1} \ell_{im} u_{mj} \end{array} \right\}, \quad i = 1, 2, \dots, j-1$$

e por último

$$u_{jj} = a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} \ell_{jm} u_{mj}, \quad j = 2, 3, \dots, N. \quad (IV.42)$$

A partir do algoritmo dado pelas equações (IV.41) e (IV.42) pode-se então obter o algoritmo para a fatoração in completa de \underline{A} , cuja idéia básica é realizar o procedimento dado em (IV.41) e (IV.42) apenas para os coeficientes de \underline{A} que são diferentes de zero ou grandes segundo um dado critério de magnitude, anulando-se portanto, os coeficientes de \underline{L} ou \underline{U} que correspondem a coeficientes de \underline{A} que são nulos ou pequenos segundo o critério de magnitude mencionado acima.

Tendo-se em vista que as matrizes de contorno normalmente não apresentam coeficientes nulos (desde que não haja sub-região), então é preferível utilizar-se algum critério de magnitude na rejeição dos coeficientes de \underline{A} , que ao longo do processo de fatoração serão meramente substituídos por zero.

Como visto acima, a formação do método iterativo báscio da fatoração incompleta também não apresenta qualquer dificuldade, já que consiste basicamente de uma modificação do algoritmo dado por (IV.41) e (IV.42); entretanto, para informações mais precisas recomenda-se consultar as referências [2], [3] e [4].

IV.2.5 - Comentários Finais

Como afirmado logo durante o primeiro item deste capítulo, não se fará uso, única e exclusivamente, dos métodos iterativos báscios.

As razões dessa decisão estão associadas ao fato de que esses métodos não atendem aos objetivos báscios deste trabalho, quais sejam, a elaboração de solvers iterativos que possam ser eficientemente aplicado na resolução de sistemas de equações lineares provenientes da aplicação do MEC na resolução de problemas de Engenharia, onde a palavra "eficientemente" significa mais econômico em relação aos métodos diretos e com garantia de convergência.

A partir dos breves comentários feitos sobre a convergência dos métodos báscios, vê-se que, aparentemente, dadas as características desfavoráveis das matrizes oriundas do MEC, tais métodos não teriam condições de competir com os métodos diretos. Além disso, a partir dos trabalhos de outros pesquisadores como MULLEN e RENCIS [5], PARREIRA [6]

e outros mais, não se tem qualquer dúvida a respeito da ineficiência de tais métodos.

No entanto, as matrizes de partição de tais métodos podem ser usadas como matriz de preconditionamento em esquemas iterativos mais complexos, ou, em outras palavras, os métodos básicos podem ser acelerados por procedimentos de aceleração polinomial, o que será apresentado no capítulo seguinte.

CAPÍTULO VACELERAÇÃO POLINOMIALV.1 - ACELERAÇÃO POLINOMIAL DOS MÉTODOS ITERATIVOS BÁSICOS

Considerar-se-á aqui um procedimento de aceleração destinado a aumentar a razão de convergência de um método iterativo báscio qualquer. Este procedimento de aceleração, que será denominado de procedimento de aceleração polinomial, consiste basicamente da formação de uma nova seqüência de vetores, obtida a partir da seqüência de vetores fornecida diretamente pelo método iterativo báscio dado por (IV.2). Observa-se aqui que a única condição exigida para a derivação deste procedimento é que o método iterativo báscio seja completamente consistente; portanto, doravante fica subentendido que um método iterativo báscio qualquer que seja considerado atende a essa condição.

Desse modo, sendo $\underline{w}^1, \underline{w}^2, \dots \underline{w}^n$ a seqüência de vetores gerados por um método iterativo a partir de \underline{w}^0 , que é o vetor de partida, define-se o procedimento de aceleração polinomial como

$$\underline{u}^n = \sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} \underline{w}^i \quad (V.1)$$

onde os $\alpha_{n,i}$ são escalares, aos quais é imposta a restrição de que

$$\sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} = 1, \quad (V.2)$$

e os \underline{w}^i são dados, como já mencionado acima, por

$$\begin{cases} \underline{w}^0 = \text{vetor de partida} \\ \underline{w}^{i+1} = \underline{G} \underline{w}^i + \underline{K}, \quad i = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (V.3)$$

Observa-se aqui que com a condição (V.2) fica assegurado que $\underline{u}^n = \underline{\bar{u}}$ sempre que $\underline{w}^0 = \underline{\bar{u}}$!

Seja o vetor-erro $\underline{\varepsilon}^n$ associado a \underline{u}^n dado por

$$\underline{\varepsilon}^n = \underline{u}^n - \underline{\bar{u}}. \quad (V.4)$$

Por meio das relações (V.1) e (V.2) pode-se escrever (V.4) como

$$\underline{\varepsilon}^n = \sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} \underline{w}^i - \sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} \underline{\bar{u}} = \sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} (\underline{w}^i - \underline{\bar{u}}). \quad (V.5)$$

Seja considerar-se agora o vetor-erro $\underline{\varepsilon}^i$ associado a \underline{w}^i ; tem-se então que

$$\underline{\varepsilon}^i = \underline{w}^i - \underline{\bar{u}} = \underline{G} \underline{w}^{i-1} + \underline{k} - \underline{\bar{u}} \quad (V.6)$$

Mas como visto no Capítulo IV ao comentar-se a consistência completa de um método iterativo, pode-se escrever $\underline{\bar{u}}$ como

$$\tilde{u} = \underline{G} \tilde{u} + \underline{k}, \quad (V.7)$$

onde tem-se que

$$\underline{k} = \tilde{u} - \underline{G} \tilde{u}. \quad (V.8)$$

Substituindo-se então (V.8) em (V.6) obtém-se que

$$\underline{\varepsilon}^i = \underline{G} (\underline{w}^{i-1} - \tilde{u}) = \underline{G} \underline{\varepsilon}^{i-1}. \quad (V.9)$$

Por um processo indutivo pode-se escrever, finalmente, que

$$\underline{\varepsilon}^i = \underline{G} \underline{\varepsilon}^{i-1} = \underline{G}^2 \underline{\varepsilon}^{i-2} = \dots = \underline{G}^i \underline{\varepsilon}^0 \quad (V.10)$$

De (V.1) tem-se que

$$\underline{u}^0 = \alpha_{0,0} \underline{w}^0, \quad (V.11)$$

e de (V.2), que

$$\alpha_{0,0} = 1, \quad (V.12)$$

logo,

$$\underline{u}^0 = \underline{w}^0, \quad (V.13)$$

onde conclui-se que

$$\underline{\varepsilon}^0 = \underline{u}^0 - \tilde{u} = \underline{w}^0 - \tilde{u} = \underline{\varepsilon}^0. \quad (V.14)$$

Desse modo substituindo-se (V.10) e (V.14) em (V.5) obtém-se que

$$\underline{\varepsilon}^n = \sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} \underline{G}^i \underline{\varepsilon}^0, \quad (V.15)$$

ou de outra maneira,

$$\underline{\varepsilon}^n = P_n(\underline{G}) \underline{\varepsilon}^0, \quad (V.16)$$

onde o polinômio $P_n(\underline{G})$ é dado por

$$P_n(\underline{G}) = \alpha_{n,0} \underline{I} + \alpha_{n,1} \underline{G} + \dots + \alpha_{n,n} \underline{G}^n =$$

$$= \sum_{i=0}^n \alpha_{n,i} \underline{G}^i \quad (V.17)$$

E devido à fórmula (V.16), para o vetor-erro associado aos vetores \underline{u}^i , que o procedimento de aceleração apresentado acima é conhecido como procedimento de aceleração polinomial de um método iterativo básico.

No entanto, tal procedimento pode também ser caracterizado em termos de um conjunto de subespaços de Krylov, como será mostrado pelo teorema dado abaixo.

Antes de apresentar-se tal teorema, definir-se-á primeiro o vetor pseudo-residual, do qual far-se-á uso no respectivo teorema. Para isso seja \underline{u}^0 o vetor de partida para um dado método iterativo, então o vetor pseudo-resi

dual inicial associado a tal método será dado por

$$\underline{\delta}^0 = \underline{k} - (\underline{I} - \underline{G}) \underline{u}^0. \quad (V.18)$$

Visto isso apresenta-se o seguinte teorema que fornece uma caracterização alternativa do procedimento de aceleração polinomial.

TEOREMA V.1 - Um procedimento iterativo para a geração dos vetores $\underline{u}^1, \underline{u}^2, \dots$ a partir de um dado \underline{u}^0 , tal que $\underline{\delta}^0$ seja diferente de zero, é um procedimento de aceleração polinomial baseado num método iterativo básico qualquer se, e somente se, para $n = 1, 2, \dots$, tiver-se que

$$\underline{u}^n - \underline{u}^0 \in K_n(\underline{\delta}^0, \underline{I} - \underline{G}), \quad (V.19)$$

onde $K_n(\underline{\delta}^0, \underline{I} - \underline{G})$ é o subespaço de Krylov associado à $\underline{I} - \underline{G}$ e $\underline{\delta}^0$, de ordem n .

Não será apresentado prova do teorema acima, todavia, essa poderá ser encontrada junto à referência [8].

Dentre os métodos de aceleração polinomial citam-se por exemplo, os métodos de gradiente conjugado e o método de Lanczos. Há ainda outros, tais como o método de Chebyschev. Desse método, porém, não se fará uso, já que esse requer o cálculo de parâmetros de iteração que devem ser adequadamente escolhidos para que se obtenha a razão máxima de convergência, onde para o cálculo de tais parâme-

tos seriam necessárias informações sobre os autovalores extremos da matriz de iteração de um dado método básico, o que para os sistemas de equações que se objetiva tratar neste trabalho pode se tornar anti-econômico. Mesmo neste caso, onde é possível, inclusive, a presença de autovalores complexos, já existem alguns estudos que devem ser considerados em pesquisas posteriores. Na referência [9], por exemplo, é analisada a iteração de Chebyschev para sistemas não-simétricos.

CAPÍTULO VIPROCEDIMENTOS DE ACELERAÇÃO POLINOMIALVI.1 - ACELERAÇÃO DE GRADIENTE CONJUGADOVI.1.1 - Derivação do Método

O método de gradiente conjugado tem se mostrado como uma atraente técnica iterativa para a solução de sistemas de equações lineares, principalmente porque apesar de ser uma técnica iterativa, converge para a solução verdadeira em no máximo N iterações; onde N é a ordem do sistema, quando as operações são realizadas em matemática infinita.

Essa técnica consiste basicamente em se extremar iterativamente o funcional quadrático correspondente ao sistema de equações lineares que se deseja resolver. Em outras palavras, considerando-se o sistema de equações genérico dado por (IV.1), tem-se correspondendo a esse sistema o seguinte funcional quadrático:

$$F(\underline{u}) = \frac{1}{2} (\underline{u}, \underline{A}\underline{u}) - (\underline{u}, \underline{b}) + c, \quad (VI.1)$$

cujos pontos que o tornam extremo são os pontos \bar{u} que atendem à condição

$$\nabla F(\underline{u}) - (\underline{b} - \underline{A}\underline{u}) = \underline{0}, \quad (VI.2)$$

e consequentemente são as soluções de (IV.1).

Dado que \tilde{A} é não-singular, o que será sempre considerado, então \tilde{u} pode ser unicamente determinado por

$$\tilde{u} = \tilde{A}^{-1} \tilde{b}. \quad (\text{VI.3})$$

Para encontrar-se \tilde{u} iterativamente a partir de uma dada solução inicial \underline{u}^0 , muitas vezes se adota a seguinte fórmula recursiva:

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n, \quad (\text{VI.4})$$

onde \underline{p}^n é uma direção de busca ("search direction") escolhida segundo algum critério, e λ_n é um escalar obtido com a condição de extremar o funcional quadrático nessa direção \underline{p}^n (ou com a restrição \underline{p}^n).

Visto isso, apresentar-se-á agora, propriamente, a determinação da direção de busca \underline{p}^n e do escalar λ_n .

Supondo-se que \underline{p}^n já seja conhecido, far-se-á primeiramente a determinação de λ_n . Desse modo, substituindo-se (VI.4) em (VI.1), obtém-se

$$F(\underline{u}^{n+1}) = \frac{1}{2} \left[(\underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n), \tilde{A} (\underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n) \right] - \left[(\underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n), \tilde{b} \right], \quad (\text{VI.5})$$

ou ainda,

$$F(\underline{u}^{n+1}) = \frac{1}{2} (\lambda_n \underline{u}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n + \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{u}^n + \lambda_n^2 \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n) - \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{b} + F(\underline{u}^n), \quad (VI.6)$$

que, como pode ser claramente visto, representa, agora, uma função quadrática em λ_n . Mas antes de continuar-se a desenvolver o processo, observa-se aqui novamente, que a matriz \underline{A} ainda está sendo considerada não-simétrica.

Como mencionado acima, λ_n é determinado com a condição de tornar extremo o funcional quadrático segundo a direção \underline{p}^n , que é supostamente conhecida. Assim, aplicando-se a condição de extremo à equação dada em (VI.6), ou seja, fazendo-se

$$\frac{dF}{d\lambda_n}(\underline{u}^{n+1}) = 0, \quad (VI.7)$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{dF}{d\lambda_n}(\underline{u}^{n+1}) &= \frac{1}{2} (\underline{u}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n + \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{u}^n + 2 \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n) - \underline{p}^{n,T} \underline{b} = \\ &= \frac{1}{2} (\underline{u}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n + \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{u}^n - 2 \underline{p}^{n,T} \underline{b}) + \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n = \\ &= \frac{1}{2} \left[\underline{u}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n - \underline{b}^T \underline{p}^n + \underline{p}^{n,T} (\underline{A} \underline{u}^n - \underline{b}) \right] + \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n = \\ &= \frac{1}{2} \left[(\underline{A}^T \underline{u}^n - \underline{b})^T \underline{p}^n + \underline{p}^{n,T} (\underline{A} \underline{u}^n - \underline{b}) \right] + \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n = 0 \quad (VI.8) \end{aligned}$$

Definindo-se o resíduo na n -ésima iteração por

$$\underline{r}^n = \underline{b} - \underline{A} \underline{u}^n \quad (\text{VI.9})$$

e substituindo-o em (VI.8), chega-se a

$$\frac{dF(\underline{u}^{n+1})}{d\lambda_n} = \frac{1}{2} \left[(\underline{A}^T \underline{u}^n - \underline{b})^T \underline{p}^n - \underline{p}^{n,T} \underline{r}^n \right] + \lambda_n \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n = 0 \quad (\text{VI.10})$$

onde obtém-se finalmente, que

$$\lambda_n = \frac{\frac{1}{2} \left[-(\underline{A}^T \underline{u}^n - \underline{b})^T \underline{p}^n + \underline{p}^{n,T} \underline{r}^n \right]}{\underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n} \quad (\text{VI.11})$$

Feito isso, apresentar-se-á agora a determinação de \underline{p}^n .

Para o método conhecido como método do "steepest descent", o critério para a determinação da direção de busca \underline{p}^n é, para um dado ponto \underline{u}^n , escolhê-la tal que F varie mais rapidamente em torno de \underline{u}^n , ou seja,

$$\underline{p}^n = -\nabla F(\underline{u}^n), \quad (\text{VI.12})$$

ou de outra maneira,

$$\underline{p}^n = \underline{r}^n. \quad (\text{VI.13})$$

Sendo assim, o método do "steepest descent" para matrizes não-simétricas pode ser expresso da seguinte forma:

\underline{u}^0 (escolhido arbitrariamente), e

para $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\underline{r}^n = \underline{b} - \underline{A} \underline{u}^n$$

$$\lambda_n = \frac{\frac{1}{2} \left[-(\underline{A}^T \underline{u}^n - \underline{b})^T \underline{r}^n + \underline{r}^{n,T} \underline{r}^n \right]}{\underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^n} \quad (\text{VI.14})$$

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \lambda_n \underline{r}^n.$$

Observa-se, por último, que substituindo-se a fórmula recursiva para \underline{u}^n em (VI.9), tem-se que

$$\underline{r}^n = \underline{b} - \underline{A} (\underline{u}^{n-1} + \lambda_{n-1} \underline{r}^{n-1}) \quad (\text{VI.15})$$

ou ainda,

$$\underline{r}^n = \underline{r}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{A} \underline{r}^{n-1} \quad (\text{VI.16})$$

que, como se vê, é uma expressão mais econômica para o cálculo do resíduo, já que o produto $\underline{A} \underline{r}^{n-1}$ uma vez obtido, poderá ser usado para a obtenção de \underline{r}^n na próxima iteração.

No entanto, a direção de busca \underline{p}^n , que para o método do "steepest descent" foi escolhida como sendo o

gradiente da forma quadrática em \underline{u}^n , pode ser escolhida com o critério de minimizar a norma do erro $\|\underline{\varepsilon}^n\|_{\underline{A}}$, a cada iteração, dentro de um certo subconjunto de \mathbb{R}^N , definindo-se assim o método do gradiente conjugado (MGC).

Mas sendo que o erro $\underline{\varepsilon}^n$ na iteração de ordem n é dado por

$$\underline{\varepsilon}^n = \underline{u}^n - \underline{\bar{u}} , \quad (\text{VI.17})$$

que é função de $\underline{\bar{u}}$, é mais conveniente desenvolver-se, primeiramente, a expressão de sua norma, de tal forma a exprimí-la como função apenas do resíduo \underline{r}^n , para então dar-se prosseguimento ao desenvolvimento do método em si.

Assim tem-se de (VI.9) que

$$\underline{u}^n = \underline{A}^{-1} (\underline{b} - \underline{r}^n) , \quad (\text{VI.18})$$

onde obtém-se que

$$\underline{u}^n - \underline{\bar{u}} = -\underline{A}^{-1} \underline{r}^n = \underline{\varepsilon}^n \quad (\text{VI.19})$$

Desenvolvendo-se então a expressão da norma do erro, tem-se que

$$\|\underline{\varepsilon}^n\|_{\underline{A}} = \left[(\underline{u}^n - \underline{\bar{u}}), (\underline{u}^n - \underline{\bar{u}}) \right]_{\underline{A}}^{1/2} = \left[(\underline{u}^n - \underline{\bar{u}})^T \underline{A} (\underline{u}^n - \underline{\bar{u}}) \right]^{1/2} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \left[(-\underline{A}^{-1} \underline{r}^n)^T \underline{A} (-\underline{A}^{-1} \underline{r}^n) \right]^{1/2} = \left[(\underline{A}^{-1} \underline{r}^n)^T \underline{r}^n \right]^{1/2} = \\
 &= (\underline{r}^n, T \underline{A}^{-T} \underline{r}^n)^{1/2} = (\underline{r}^n, \underline{r}^n)_{\underline{A}^{-T}}^{1/2} = \|\underline{r}^n\|_{\underline{A}^{-T}} ,
 \end{aligned}$$

ou simplificadamente,

$$\|\underline{\varepsilon}^n\|_{\underline{A}} = \|\underline{r}^n\|_{\underline{A}^{-T}}. \quad (\text{VI.20})$$

Para o método do gradiente conjugado supõe-se-á que as direções de busca são dadas por

$$\underline{p}^n = \begin{cases} \underline{r}^0, & n = 0 \\ \underline{r}^n + \alpha_n \underline{p}^{n-1}, & n \geq 1 \end{cases}, \quad (\text{VI.21})$$

onde o escalar α_n será determinado com a condição de que a respectiva direção de busca seja tal, que o erro $\|\underline{\varepsilon}^n\|_{\underline{A}}$ sobre um certo subconjunto de \mathbb{R}^N seja mínimo.

Analogamente à equação (VI.16), tem-se aqui também que o resíduo pode ser dado por

$$\underline{r}^n = \underline{r}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{p}^{n-1} \quad (\text{VI.22})$$

Aplicando-se (VI.21) e (VI.22) recursivamente, obtém-se que \underline{r}^n pode ser escrito, para quaisquer $\alpha_1, \alpha_2, \dots$, em função de coeficientes γ_i (ver Ref. [2]), como:

$$\underline{r}^n = \underline{r}^0 + \gamma_1 \underline{A} \underline{r}^0 + \gamma_2 \underline{A}^2 \underline{r}^0 + \dots + \gamma_n \underline{A}^n \underline{r}^0, \quad (VI.23)$$

ou de outra maneira, definindo-se S_n como o subespaço de \mathbb{R}^N dado por $S_n = \text{SPAN} \{A \underline{r}^0, A^2 \underline{r}^0, \dots, A^n \underline{r}^0\}$ (\underline{r}^0 é mostrado que S_n é um subespaço vetorial) tem-se que o resíduo \underline{r}^n pode ser dado adicionando-se a \underline{r}^0 um vetor \underline{h} , onde $\underline{h} \in S_n$.

Visto isso apresenta-se em seguida o teorema que determina o método do gradiente conjugado.

TEOREMA VI.1 - O parâmetro α_n no processo iterativo dado por (VI.4), (VI.11) e (VI.21), quando \underline{A} for SPD, é dado por

$$\alpha_n = - \frac{(\underline{r}^n, \underline{A} \underline{p}^{n-1})}{(\underline{p}^{n-1}, \underline{A} \underline{p}^{n-1})}, \quad (VI.24)$$

se for imposta a condição de que

$$\|\underline{r}^n\|_{A^{-1}} = \min \|\underline{r}\|_{A^{-1}}, \quad (VI.25)$$

onde $\underline{r} = \underline{r}^0 \in S_n$; e além disso, tem-se que

$$\underline{r}^n,^T \underline{r}^m = 0, \quad \text{se } m \neq n \quad (VI.26)$$

e

$$\underline{p}^n,^T \underline{A} \underline{p}^m = 0, \quad \text{se } m \neq n \quad (VI.27)$$

Demonstração: A condição (VI.25) pode ser escrita, de (VI.23), como

$$\|\underline{r}^0 + \underline{h}^n\|_{\underline{A}^{-1}} = \min_{n \in S_n} \|\underline{r}^0 + \underline{h}\|_{\underline{A}^{-1}}, \quad (\text{VI.28})$$

onde $\underline{h}^n = \underline{r}^n - \underline{r}^0$. Dado que \underline{r}^0 é conhecido, então o problema agora consiste de encontrar um vetor \underline{h}^n , $\underline{h}^n \in S_n$, tal que a condição (VI.28) seja atendida. Há um teorema da álgebra linear que garante que \underline{h}^n existe, é único, e tem a propriedade de tornar o resíduo $\underline{r}^n = \underline{r}^0 + \underline{h}^n$ ortogonal a todo \underline{h} , $\underline{h} \in S_n$, em relação a \underline{A}^{-1} , ou seja,

$$(\underline{r}^0 + \underline{h}^n)^T \underline{A}^{-1} \underline{h} = 0, \quad \forall \underline{h}, \underline{h} \in S_n. \quad (\text{VI.29})$$

Para facilitar o entendimento, faz-se na Figura VI.1 uma interpretação geométrica dos resultados do Teorema mencionado acima.

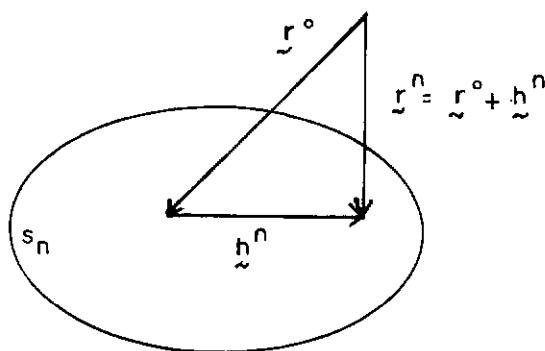


Fig. VI.1. Interpretação Geométrica do $\underline{h} \in S_n$ que Minimiza $\|\underline{r}^0 + \underline{h}\|_{\underline{A}^{-1}}$

Considere agora um vetor \underline{r} tal que $\underline{r} - \underline{r}^0 \in S_{n-1}$, então tem-se que

$$\underline{r} - \underline{r}^0 = \gamma_1 \underline{A} \underline{r}^0 + \gamma_2 \underline{A}^2 \underline{r}^0 + \dots + \gamma_{n-1} \underline{A}^{n-1} \underline{r}^0, \quad (\text{VI.30})$$

onde obtém-se que

$$\underline{A} \underline{r} = \underline{A} \underline{r}^0 + \gamma_1 \underline{A}^2 \underline{r}^0 + \dots + \gamma_{n-1} \underline{A}^n \underline{r}^0; \quad (\text{VI.31})$$

ou seja, correspondente a esse vetor \underline{r} , existe um vetor $\underline{h} = \underline{A} \underline{r}$, $\underline{h} \in S_n$.

Substituindo $\underline{h} = \underline{A} \underline{r}$ em (VI.29), obtém-se que

$$\underline{r}^{n,T} \underline{r} = 0, \quad \forall r \text{ tal que } \underline{r} - \underline{r}^0 \in S_{n-1}, \quad (\text{VI.32})$$

e a relação (VI.26) fica estabelecida desde que tenha-se $m < n$.

De (VI.22) tem-se que

$$\underline{A} \underline{p}^n = -(\underline{r}^{n+1} - \underline{r}^n) \frac{1}{\lambda_n}, \quad (\text{VI.33})$$

e de (VI.21), que

$$\underline{p}^m = \underline{r}^m + \alpha_n \underline{p}^{n-1} \quad (\text{VI.34})$$

Desenvolvendo-se (VI.34) recursivamente, obtém-se que

$$\begin{aligned}
 \underline{p}^m &= \underline{r}^m + \alpha_m \underline{p}^{m-1} = \\
 &= \underline{r}^m + \alpha_m (\underline{r}^{m-1} + \alpha_{m-1} \underline{p}^{m-2}) = \\
 &= \underline{r}^m + \alpha_m \underline{r}^{m-1} + \alpha_m \alpha_{m-1} \underline{p}^{m-2} = \\
 &= \underline{r}^m + \alpha_m \underline{r}^{m-1} + \dots + \alpha_m \alpha_{m-1} \dots \alpha_1 \underline{p}^0
 \end{aligned} \tag{VI.35}$$

Premultiplicando-se agora ambos os lados de (VI.33) por \underline{p}^m chega-se a

$$\underline{p}^{m,T} \underline{A} \underline{p}^n = - \frac{1}{\lambda_n} \underline{p}^{m,T} (\underline{r}^{n+1} - \underline{r}^n) \tag{VI.36}$$

desde que $\underline{p}^0 = \underline{r}^0$, então substituindo-se (VI.35) no lado direito de (VI.36) resulta que

$$\underline{p}^{m,T} \underline{A} \underline{p}^n = - \frac{1}{\lambda_n} (\underline{r}^m + \alpha_m \underline{r}^{m-1} + \dots + \alpha_m \alpha_{m-1} \dots \alpha_1 \underline{r}^0) (\underline{r}^{n+1} - \underline{r}^n). \tag{VI.37}$$

Utilizando-se agora a relação (VI.26), tem-se portanto, quando $m < n$, que

$$\underline{p}^{m,T} \underline{A} \underline{p}^n = 0 , \tag{VI.38}$$

e a relação (VI.27) fica desse modo estabelecida.

A relação (VI.24) pode então ser facilmente obtida de (VI.27) e (VI.21) fazendo-se

$$0 = \underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^{n-1} = (\underline{r}^n + \alpha_n \underline{p}^{n-1})^T \underline{A} \underline{p}^{n-1},$$

onde tem-se que

$$\alpha_n = - \frac{(\underline{r}^n, \underline{A} \underline{p}^{n-1})}{(\underline{p}^{n-1}, \underline{A} \underline{p}^{n-1})},$$

e a demonstração está completa.

Observa-se que para a introdução do teorema VI.1 foi imposto que a matriz \underline{A} precisa ser simétrica, positiva-definida; do contrário vê-se claramente, que a simples relação estabelecida em (VI.24) tomaria caminhos mais complexos.

Observa-se também que dessa consideração tem-se que a fórmula para λ_n dada em (VI.11) fica simplificada para

$$\lambda_n = \frac{\underline{p}^{n,T} \underline{r}^n}{\underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n} \quad (VI.39)$$

já que $\underline{A}^T \underline{u}^n - \underline{b} = \underline{A} \underline{u}^n - \underline{b} = -\underline{r}^n$.

Portanto, o processo iterativo definido pelo teorema VI.1, qual seja,

$$\underline{u}^0 \quad (\text{escolhido arbitrariamente})$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\underline{r}^n = \underline{r}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{A} \underline{p}^{n-1}$$

$$\lambda_n = \frac{\underline{p}^{n,T} \underline{r}^n}{\underline{p}^{n,T} \underline{A} \underline{p}^n}$$

$$\underline{p}^n = \begin{cases} \underline{r}^0 & , \quad n = 0 \\ \underline{r}^n + \alpha_n \underline{p}^{n-1} & , \quad n \geq 1 \end{cases}, \quad (\text{VI.40})$$

$$\alpha_n = - \frac{(\underline{r}^n, \underline{A} \underline{p}^{n-1})}{(\underline{p}^{n-1}, \underline{A} \underline{p}^{n-1})}$$

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n$$

é conhecido como o método de gradiente conjugado ou método de gradiente conjugado padrão ou ainda método de gradiente conjugado "two-term form".

Ver-se-á agora que as fórmulas para cálculo de λ_n e α_n podem ser dadas de outras maneiras inclusive mais econômicas. Pré-multiplicando-se ambos os lados de (VI.22) por \underline{p}^{n-1} tem-se, por exemplo, que

$$\underline{p}^{n-1,T} \underline{r}^n = \underline{p}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{p}^{n-1} \underline{A} \underline{p}^{n-1}. \quad (\text{VI.41})$$

Mas de (VI.39) sabe-se que

$$\lambda_{n-1} = \frac{\underline{p}^{n-1, T} \underline{r}^{n-1}}{\underline{p}^{n-1, T} \underline{A} \underline{p}^{n-1}}$$

que substituído em (VI.41) fornece que

$$\underline{p}^{n-1, T} \underline{r}^n = \underline{p}^{n-1} \underline{r}^{n-1} - \frac{\underline{p}^{n-1, T} \underline{r}^{n-1}}{(\underline{p}^{n-1, T} \underline{A} \underline{p}^{n-1})} (\underline{p}^{n-1} \underline{A} \underline{p}^{n-1}) = 0. \quad (VI.42)$$

Substituindo-se porém (VI.21) em (VI.39) utilizando-se a relação (VI.42), tem-se então, que

$$\lambda_n = \frac{(\underline{r}^n + \alpha_n \underline{p}^{n-1})^T \underline{r}^n}{\underline{p}^{n, T} \underline{A} \underline{p}^n} = \frac{\underline{r}^{n, T} \underline{r}^n}{\underline{p}^{n, T} \underline{A} \underline{p}^n}$$

$$(VI.43)$$

De (VI.22) tem-se também que

$$\underline{A} \underline{p}^{n-1} = - \frac{1}{\lambda_{n-1}} (\underline{r}^n - \underline{r}^{n-1}). \quad (VI.44)$$

Substituindo-se agora (VI.44) e (VI.35) em (VI.24) utilizando-se a relação (VI.26), obtém-se que

$$\alpha_n = \frac{\lambda_{n-1}^{-1} \underline{r}^{n, T} (\underline{r}^n - \underline{r}^{n-1})}{-\lambda_{n-1}^{-1} (\underline{r}^{n-1} + \alpha_{n-1} \underline{r}^{n-2} + \dots + \alpha_{n-1} \alpha_{n-2} \dots \alpha_1 \underline{r}^0)^T (\underline{r}^n - \underline{r}^{n-1})} = \frac{\underline{r}^{n, T} \underline{r}^n}{\underline{r}^{n-1, T} \underline{r}^{n-1}} \quad (VI.45)$$

Obtido o m todo de gradiente conjugado apresentar-se-  agora atrav s do teorema abaixo uma importante propriedade desse, qual seja, a propriedade de termina o finita, j  comentada nos primeiros par grafos deste item.

TEOREMA VI.2 - O m todo de gradiente conjugado tem a propriedade de que $\underline{u}^m = \underline{u}$ para algum $m \leq N$, onde N   a ordem da matriz de coeficientes \underline{A} , quando as opera es s o realizadas em matem tica infinita.

Demonstra o: supondo-se que isso n o seja verdadeiro, ter-se-ia ent o que $\underline{r}^m \neq 0$ para $m = 0, 1, 2, \dots, N$. Como os vetores-res duos do m todo de gradiente conjugado atendem   rela o (VI.26), ter-se-ia desse modo $N+1$ vetores de \mathbb{R}^N mutuamente ortogonais (linearmente independentes). Desde que isso   um absurdo, o teorema fica demonstrado.

Visto isso apresenta-se em seguida o algoritmo para a implementa o computacional do m todo de gradiente conjugado padr o. Dentre os muitos algoritmos que representam o esquema iterativo de gradiente conjugado, escolheu-se aqui aquele apontado por Reid, que realizou estudo comparativo entre esses (ver Refer ncia [10]), como mais eficiente. Desse modo tem-se:

ALGORITMO VI.1 - Algoritmo para a implementa o computacional do m todo de gradiente conjugado padr o para matrizes SPD.

$$\underline{u} = \underline{u}^0 ; \quad \underline{r} = \underline{b}$$

$$\underline{r} = \underline{r} - \underline{A} \underline{u} ; \quad \delta\theta = \underline{r}^T \underline{r}$$

IF. $\delta\theta \leq \text{TOLERÂNCIA} \longrightarrow \text{STOP}$

$$\underline{p} = \underline{r}$$

$$R: \underline{h} = \underline{A} \underline{p}$$

$$\lambda = \delta\theta / \underline{p}^T \underline{h}$$

$$\underline{u} = \underline{u} + \lambda \underline{p}$$

$$\underline{r} = \underline{r} - \lambda \underline{h} ; \quad \delta\iota = \underline{r}^T \underline{r}$$

IF $\delta\iota \leq \text{TOLERÂNCIA} \longrightarrow \text{STOP}$

$$\alpha = \delta\iota / \delta\theta ; \quad \delta\theta = \delta\iota$$

$$\underline{p} = \underline{r} + \alpha \underline{p}$$

GO TO R.

Apesar dos resultados de Reid (ver referência [10]) já terem comprovado a eficiência da implementação computacional do MGC segundo o algoritmo VI.1 em relação às diversas formas que o MGC pode ser implementado, apresenta-se aqui uma implementação alternativa para o mesmo. Essa forma alternativa foi proposta por Engeli e outros (ver referência [11]) e consiste da apresentação do MGC "three-term

form", qual seja,

$$\underline{u}^{n+1} = \rho_{n+1} (\gamma_{n+1} \underline{r}^n + \underline{u}_n) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{u}^{n-1}, \quad (\text{VI.46})$$

onde

$$\gamma_{n+1} = \frac{\underline{r}^{n,T} \underline{r}^n}{\underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^n} \quad (\text{VI.47})$$

e

$$\rho_{n+1} = \begin{cases} 1 & , \quad \text{se} \quad n=0 \\ \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{\underline{r}^{n,T} \underline{r}^n}{\underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1}} \cdot \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1} & \end{cases} \quad (\text{VI.48})$$

Sendo assim, ver-se-á agora como as fórmulas do MGC na forma "three-term" podem ser obtidas. Uma maneira é, por exemplo, eliminar \underline{p}^n e \underline{p}^{n-1} do par de equações

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n \quad (\text{VI.49})$$

e

$$\underline{u}^n = \underline{u}^{n-1} + \lambda_{n-1} \underline{p}^{n-1} \quad (\text{VI.50})$$

Desse modo substituindo-se (VI.21) em (VI.49), tem-se que

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \lambda_n (\underline{r}^n + \alpha_n \underline{p}^{n-1}) = \underline{u}^n + \lambda_n \underline{r}^n + \lambda_n \alpha_n \underline{p}^{n-1}. \quad (\text{VI.51})$$

De (VI.50) resulta que

$$\underline{p}^{n-1} = \frac{1}{\lambda_{n-1}} (\underline{u}^n - \underline{u}^{n-1}), \quad (\text{VI.52})$$

que substituído em (VI.51) fornece que

$$\begin{aligned} \underline{u}^{n+1} &= \underline{u}^n + \lambda_n \underline{r}^n + \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \alpha_n (\underline{u}^n - \underline{u}^{n-1}) = \\ &= (1 + \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}) \underline{u}^n + \frac{(1 + \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}})}{\lambda_n \underline{r}^n - \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \underline{u}^{n-1}} = \\ &= (1 + \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}) \left[\underline{u}^n + (1 + \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}})^{-1} \lambda_n \underline{r}^n \right] + \\ &+ \left[1 - (1 + \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}) \right] \underline{u}^{n-1} = \\ &= \rho_{n+1} (\underline{u}^n + \gamma_{n+1} \underline{r}^n) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{u}^{n-1}, \end{aligned}$$

onde

$$\rho_{n+1} = 1 + \alpha_n \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \quad (\text{VI.53})$$

e

$$\gamma_{n+1} = \frac{\lambda_n}{\rho_{n-1}} \quad (\text{VI.54})$$

As fórmulas (VI.47) e (VI.48) podem então ser obtidas desenvolvendo-se (VI.53) e (VI.54) utilizando-se as fórmulas do MGC padrão.

Alternativamente, essas podem ser obtidas a partir da condição de que os resíduos são mutuamente ortogonais (relação (VI.26)). Desse modo, sabendo-se que o resíduo na iteração $n+1$ é dado por

$$\underline{r}^{n+1} = \underline{b} - \underline{A} \underline{u}^{n+1}, \quad (\text{VI.55})$$

pode-se, substituindo-se (VI.46) nessa, obter uma fórmula equivalente e inclusive mais econômica para cálculo do resíduo, qual seja,

$$\underline{r}^{n+1} = \rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \underline{A} \underline{r}^n + \underline{r}^n) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n+1} \quad (\text{VI.56})$$

Utilizando-se agora a condição de ortogonalidade mencionada acima e sabendo-se que $\rho_{n+1} \neq 0$, tem-se que

$$\begin{aligned} \underline{r}^{n+1, T} \underline{r}^n &= \left[\rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \underline{A} \underline{r}^n + \underline{r}^n) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n+1} \right]^T \underline{r}^n = \\ &= \rho_{n+1} \left[-\gamma_{n+1} (\underline{A} \underline{r}^n)^T \underline{r}^n + \underline{r}^{n, T} \underline{r}^n \right] + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n-1, T} \underline{r}^n = \\ &= \rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \underline{r}^{n, T} \underline{A} \underline{r}^n + \underline{r}^{n, T} \underline{r}^n) = 0 \end{aligned}$$

onde tem-se portanto, que

$$\gamma_{n+1} = \frac{\underline{r}^{n, T} \underline{r}^n}{\underline{r}^{n, T} \underline{A} \underline{r}^n}$$

Considerando agora a relação (VI.26) na forma $r^{n+1,T} \underline{r}^n = 0$, obtém-se que

$$\begin{aligned}
 \underline{r}^{n+1,T} \underline{r}^n &= \left[\rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \underline{A} \underline{r}^n + \underline{r}^n) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n-1} \right]^T \underline{r}^{n-1} = \\
 &= \rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^{n-1} + \underline{r}^{n,T} \underline{r}^{n-1}) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1} = \\
 &= \rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^{n-1}) + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1} = 0
 \end{aligned} \tag{VI.57}$$

Desenvolvendo-se o produto interno de \underline{r}^n por ele mesmo, obtém-se que

$$\begin{aligned}
 \underline{r}^{n,T} \underline{r}^n &= \underline{r}^{n,T} \left[\rho_n (-\gamma_n \underline{A} \underline{r}^{n-1} + \underline{r}^{n-1}) + (1 - \rho_n) \underline{r}^{n-2} \right] = \\
 &= \rho_n (-\gamma_n \underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^{n-1} + \underline{r}^{n,T} \underline{r}^{n-1}) + (1 - \rho_n) \underline{r}^{n,T} \underline{r}^{n-2} = \\
 &= \rho_n (-\gamma_n \underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^{n-1}) ,
 \end{aligned}$$

onde tem-se que

$$\underline{r}^{n,T} \underline{A} \underline{r}^{n-1} = - \frac{1}{\rho_n \gamma_n} \cdot \underline{r}^{n,T} \underline{r}^n \tag{VI.58}$$

Substituindo-se agora (VI.58) em (VI.57) se estabelece que

$$\begin{aligned}
 \rho_{n+1} \left[-\gamma_{n+1} \left(-\frac{1}{\rho_n \gamma_n} \right) \underline{r}^{n,T} \underline{r}^n \right] + \\
 + (1 - \rho_{n+1}) \underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1} = 0 ,
 \end{aligned}$$

onde tem-se que

$$\rho_{n+1} \left[\frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{\underline{r}^{n,T} \underline{r}^n}{\rho_n} - \underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1} \right] = -\underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1}. \quad (\text{VI.59})$$

Dividindo-se ambos os lados de (VI.59) por $\underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1}$, obtém-se

$$\rho_{n+1} \left[\frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{\underline{r}^{n,T} \underline{r}^n}{\underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1}} \cdot \frac{1}{\rho_n} - 1 \right] = -1,$$

onde conclui-se finalmente que

$$\rho_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{\underline{r}^{n,T} \underline{r}^n}{\underline{r}^{n-1,T} \underline{r}^{n-1}} \cdot \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1}$$

Visto isso apresenta-se abaixo o algoritmo para a implementação computacional do MGC "three-term form"

ALGORITMO VI.2 - Implementação do MGC na forma "three-term" quando \underline{A} for SPD.

$$n = 0$$

$$\underline{u} = \underline{u}^0 ; \quad \underline{r} = \underline{b} ; \quad \underline{u}_1 = \underline{r}_1 = \emptyset ; \quad \rho = 1$$

$$\underline{r} = \underline{r} - \underline{A} \underline{u}$$

$$\delta = \underline{r}^T \underline{r}$$

IF $\delta \leq \text{TOLERÂNCIA}$ \longrightarrow STOP

R: $n = n + 1$

$$\underline{h} = \underline{A} \underline{r}$$

$$\delta_1 = \underline{r}^T \underline{h} ; \gamma = \delta / \delta_1$$

$$\text{IF } n = 1 \text{ THEN } \rho = 1 ; \text{ ELSE } \rho = \left[1 - \frac{\gamma}{\gamma \varnothing} \frac{\delta}{\delta \varnothing} \frac{1}{\rho} \right]^{-1}$$

$$\underline{u}_2 = \rho (\underline{u} + \gamma \underline{r}) + (1 - \rho) \underline{u}_1$$

$$\underline{r}_2 = \rho (-\gamma \underline{h} + \underline{r}) + (1 - \rho) \underline{r}_1$$

$$\delta \varnothing = \delta ; \gamma \varnothing = \gamma$$

$$\delta = \underline{r}_2^T \underline{r}_2$$

IF $\delta \leq \text{TOLERÂNCIA}$ \longrightarrow STOP

$$\underline{u}_1 = \underline{u} ; \underline{r}_1 = \underline{r}$$

$$\underline{u} = \underline{u}_2 ; \underline{r} = \underline{r}_2$$

GO TO R

VI.1.2 - O Método de Gradiente Conjugado visto como Procedimento de Aceleração Polinomial

Depois de ter sido obtida a derivação do método de gradiente conjugado, mostrar-se-á agora que esse pode ser visto como um procedimento de aceleração polinomial so-

bre o método RF, bem como que esse pode ser modificado para representar um procedimento de aceleração polinomial sobre outros métodos básicos.

Da equação (VI.23) tem-se que, para o MGC, o resíduo \underline{r}^n pode ser dado por

$$\underline{r}^n = \underline{r}^0 + \gamma_1 \underline{A} \underline{r}^0 + \gamma_2 \underline{A}^2 \underline{r}^0 + \dots + \gamma_n \underline{A}^n \underline{r}^0.$$

Substituindo-se nessa, da forma como mostrado abaixo, as expressões para \underline{r}^n e \underline{r}^0 , obtém-se que

$$\underline{b} - \underline{A} \underline{u}^n = \underline{b} - \underline{A} \underline{u}^0 + \gamma_1 \underline{A} \underline{r}^0 + \gamma_2 \underline{A}^2 \underline{r}^0 + \dots + \gamma_n \underline{A}^n \underline{r}^0, \quad (\text{VI.60})$$

que fornece que

$$\underline{u}^n - \underline{u}^0 = \gamma_1' \underline{r}^0 + \gamma_2' \underline{A} \underline{r}^0 + \dots + \gamma_n' \underline{A}^{n-1} \underline{r}^0, \quad (\text{VI.61})$$

onde $\gamma_i' = -\gamma_i$. De outra maneira (VI.61) pode ser dada por:

$$\underline{u}^n - \underline{u}^0 = \gamma_1' \underline{r}^0 + \gamma_2' (\underline{I} - \underline{G}) \underline{r}^0 + \dots + \gamma_n' (\underline{I} - \underline{G})^{n-1} \underline{r}, \quad (\text{VI.62})$$

onde

$$\underline{G} = \underline{I} - \underline{A}$$

é a matriz de iteração do método RF (ver Capítulo IV). Da equação (VI.62) vê-se claramente que $\underline{u}^n - \underline{u}^0 \in K_n (\underline{r}^0, \underline{I} - \underline{G})$, portanto, pelo Teorema V.1, tem-se que o MGC representa um

procedimento de aceleração sobre o método RF.

Se em vez de ter-se considerado o sistema (IV-1), tivesse sido considerado o sistema

$$\underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{u} = \underline{Q}^{-1} \underline{b} , \quad (\text{VI.63})$$

onde \underline{Q} representa a matriz de partição de um método iterativo básico qualquer, ver-se-ia facilmente, repetindo-se o mesmo procedimento feito para o método RF, que o MGC quando aplicado para a resolução de (VI.63), considerando-se agora que a matriz dos coeficientes é dada por $\underline{Q}^{-1} \underline{A}$ e o vetor dos termos independentes é $\underline{Q}^{-1} \underline{b}$, representa um procedimento de aceleração polinomial sobre o método iterativo básico cuja matriz de partição é \underline{Q} . Desse modo, se \underline{Q} por exemplo, é a matriz de partição do método de Jacobi, tem-se então aceleração de gradiente conjugado sobre o método de Jacobi.

Alguns autores, como por exemplo, Axelsson, utilizam em vez de "aceleração", o termo "precondicionamento", e assim ter-se-ia, para o exemplo dado acima, método de gradiente conjugado com precondicionamento de Jacobi, e a matriz de partição \underline{Q} recebe agora a denominação de matriz de precondicionamento de Jacobi.

Considerando-se portanto, a matriz de partição (ou de precondicionamento) \underline{Q} de um método iterativo básico qualquer, pode-se estabelecer os seguintes algoritmos:

ALGORITMO VI.3 - Algoritmo para a implementação computacional do MGC padrão com preconditionamento \underline{Q} .

$$\underline{u} = \underline{u}^0 ; \underline{r} = \underline{b}$$

$$\underline{r} = \underline{r} - \underline{A} \underline{u}$$

$$\underline{\delta} = \underline{Q}^{-1} \underline{r}$$

$$\text{DELTA}\emptyset = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF $\text{DELTA}\emptyset \leq \text{TOLERÂNCIA} \longrightarrow \text{STOP}$

$$\underline{p} = \underline{\delta}$$

$$R: \underline{h} = \underline{A} \underline{p}$$

$$\underline{h}_1 = \underline{Q}^{-1} \underline{h}$$

$$\lambda = \text{DELTA}\emptyset / \underline{p}^T \underline{h}_1$$

$$\underline{u} = \underline{u} + \lambda \underline{p}$$

$$\underline{\delta} = \underline{\delta} - \lambda \underline{h}_1 ; \text{ DELTA}1 = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF $\text{DELTA}1 \leq \text{TOLERÂNCIA} \longrightarrow \text{STOP}$

$$\alpha = \text{DELTA}1 / \text{DELTA}\emptyset ; \text{ DELTA}\emptyset = \text{DELTA}1$$

$$\underline{p} = \underline{\delta} + \alpha \underline{p}$$

GO TO R

ALGORITMO VI.4 - Algoritmo para a implementação computacional do MGC "three-term form" com preconditionamento \underline{Q} .

$$n = 0$$

$$\underline{u} = \underline{u}^0 ; \underline{r} = \underline{b} ; \underline{u}_1 = \underline{r}_1 = \emptyset$$

$$\underline{r} = \underline{r} - \underline{A} \underline{u}$$

$$\underline{\delta} = \underline{Q}^{-1} \underline{r}$$

$$\text{DELTA} = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF DELTA \leq TOLERÂNCIA — STOP

R: $n = n + 1$

$$\underline{h} = \underline{A} \underline{\delta}$$

$$\underline{h}_1 = \underline{Q}^{-1} \underline{h}$$

$$\text{DELTA1} = \underline{\delta}^T \underline{h}_1 ; = \text{DELTA} / \text{DELTA1}$$

$$\text{IF } n = 1 \text{ THEN } \rho = 1 ; \text{ ELSE } \rho = \left[1 - \frac{\gamma}{\gamma\emptyset} \cdot \frac{\text{DELTA}}{\text{DELTA}\emptyset} \cdot \frac{1}{\rho} \right]^{-1}$$

$$\underline{u}_2 = \rho (\underline{u} + \gamma \underline{\delta}) + (1 - \rho) \underline{u}_1$$

$$\underline{\delta}_2 = \rho (-\gamma \underline{h}_1 + \underline{\delta}) + (1 - \rho) \underline{r}_1$$

$$\text{DELTA}\emptyset = \text{DELTA} ; \gamma\emptyset = \gamma$$

$$\text{DELTA} = \underline{\delta}_2^T \underline{\delta}_2$$

IF DELTA \leq TOLERÂNCIA — STOP

$$\underline{u}_1 = \underline{u} ; \underline{r}_1 = \underline{\delta}$$

$$\underline{u} = \underline{u}_2 ; \underline{\delta} = \underline{\delta}_2$$

GO TO R

Observa-se nos algoritmos dados anteriormente que a introdução da matriz de precondicionamento \underline{Q} não foi realizada através da premultiplicação explícita de ambos os lados de (IV.1) por \underline{Q}^{-1} , mas sim, implicitamente ao longo do processo iterativo.

VI.1.3 - Aplicação do Procedimento de Aceleração de Gradiente Conjugado aos Sistemas de Equações Lineares Oriundos do MEC

Como visto acima, para a derivação do método de gradiente conjugado foi imposta a condição de que a matriz dos coeficientes do sistema de equações lineares precisa ser simétrica (Teorema VI.1). Isso, todavia, não é o que acontece com as matrizes dos coeficientes resultantes do método dos elementos de contorno. Tendo-se em vista esse fato utiliza-se então o artifício de premultiplicar ambos os lados de (IV.1) por \underline{A}^T , donde obtém-se um novo sistema de equações dado por

$$\underline{A}^T \underline{A} \underline{u} = \underline{A}^T \underline{b}, \quad (\text{VI.64})$$

cuja matriz dos coeficientes $\underline{A}^T \underline{A}$ agora é simétrica.

Vê-se então, que mesmo quando \underline{A} for não-simétrica é possível aplicar o processo iterativo de gradiente conjugado, além disso, sem que para isso seja necessário aumentar significativamente o número de operações por iteração, já que a premultiplicação pela transposta, a exem-

pto do que foi visto no item anterior, pode ser realizada implicitamente ao longo do processo.

Comparando-se os sistemas de equações dados por (VI.64) e (VI.63), vê-se que esses são análogos. Assim conclui-se que os algoritmos para a implementação computacional do MGC quando a matriz \underline{A} for não-simétrica podem ser dados pelos algoritmos VI.3 e VI.4, substituindo-se nesses, porém, \underline{Q}^{-1} por \underline{A}^T .

VI.2 - ACELERAÇÃO DE GRADIENTE CONJUGADO GENERALIZADO IDEALIZADO (GCGI)

Como apresentado anteriormente, para a aplicação do MGC aos sistemas oriundos do MEC foi necessário então considerar-se o sistema equivalente dado em (VI.64). Desse consideração resulta porém que o número de condicionamento da matriz final do sistema, $k(\underline{A}^T \underline{A})$, torna-se muito maior que o número de condicionamento da matriz original não simétrica $k(\underline{A})$, o que faz com que a solução de (VI.63) pelo procedimento de aceleração de gradiente conjugado, em muitos casos, não seja mais rápida que a solução do sistema não-simétrico original por um método iterativo básico qualquer.

Desse modo ver-se-á abaixo um outro procedimento de aceleração para a avaliação da solução de um sistema não-simétrico, sem que esse seja considerado na forma equivalente dada por (VI.64). O procedimento de aceleração, o qual foi referido acima, é denominado aceleração de gradiente conjugado generalizado idealizado.

O processo de aceleração de gradiente conjugado, pode ser obtido alternativamente (ver Referência [8]), sabendo-se de antemão que $\underline{u}^n - \underline{u}^0 \in K_n(\underline{r}^0, \underline{A})$, impondo-se a condição de que $\|\underline{u}^n - \underline{u}\|_{\underline{A}} \leq \|\underline{w} - \underline{u}\|_{\underline{A}}$ para todo \underline{w} tal que $\underline{w} - \underline{u}^0 \in K_n(\underline{r}^0, \underline{A})$, onde \underline{A} é SPD. O procedimento de aceleração de GCGI será obtido de maneira análoga, contudo, utilizando-se uma condição de minimização mais abrangente que aquela mencionada acima, qual seja,

$$(\underline{Z} \underline{A} (\underline{u}^n - \underline{u}), \underline{v}) = (\underline{Z} \underline{r}^n, \underline{v}) = 0 \quad (\text{VI.65})$$

para todo $\underline{v} \in K_n(\underline{r}^0, \underline{A})$, onde \underline{Z} é uma matriz auxiliar tal que $\underline{Z} \underline{A}$ seja apenas positiva-real, mas não necessariamente, SPD.

A condição (VI.65) é conhecida por condição de Galerkin.

Normalmente encontram-se três tipos de implementação do procedimento de aceleração de gradiente conjugado generalizado, quais sejam, ORTHODIR, ORTHOMIN e ORTHORES. Nesses dois últimos tipos no entanto, além de se requerer que $\underline{Z} \underline{A}$ seja PR, é requerido que a própria matriz auxiliar \underline{Z} o seja, portanto, esses foram descartados, já que a matriz auxiliar \underline{Z} , neste trabalho, foi escolhida como sendo \underline{A}^T , a qual não é, garantidamente, positiva-real.

Dos tipos de implementação mencionados acima considerou-se portanto, apenas o ORTHODIR, no qual se exige, apenas, que \underline{Z} seja tal que $\underline{Z} \underline{A}$ seja PR.

E interessante saber também que o procedimento de aceleração de GCGI apresenta também a importante propriedade de terminação finita, que já foi definida anteriormente.

Seja agora considerar-se o seguinte teorema.

TEOREMA VI.3 - Seja \underline{v} ser um vetor qualquer não-nulo em \mathbb{R}^N , e seja \underline{A} ser uma matriz não-singular em $\mathbb{R}^{N,N}$. Seja \underline{H} qualquer matriz PR em $\mathbb{R}^{N,N}$ e seja d um inteiro não-negativo qualquer tal que os vetores $\underline{v}, \underline{Av}, \dots, \underline{A}^d \underline{v}$ são linearmente independentes. Então os vetores $\underline{w}^0, \underline{w}^1, \dots, \underline{w}^d$ definidos por

$$\begin{cases} \underline{w}^0 = \underline{v} \\ \underline{w}^n = \underline{A} \underline{w}^{n-1} + \beta_{n,n-1} \underline{w}^{n-1} + \dots + \beta_{n,0} \underline{w}^0, \quad n=1,2,\dots,d \end{cases} \quad (\text{VI.66})$$

onde

$$\beta_{n,i} = - \frac{(\underline{H} \underline{A} \underline{w}^{n-1}, \underline{w}^i) + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{n,j} (\underline{H} \underline{w}^j, \underline{w}^i)}{(\underline{H} \underline{w}^i, \underline{w}^i)}, \quad (\text{VI.67})$$

$$i = 0, 1, \dots, n-1 \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, d$$

são linearmente independentes e satisfazem à condição

$$(\underline{H} \underline{w}^i, \underline{w}^j) = 0 \quad , \quad j < i \quad ; \quad i, j = 0, 1, \dots, d.$$

$$(\text{VI.68})$$

Além disso, para cada $n = 1, 2, \dots, d$, existem coeficientes $c_{n,0}, c_{n,1}, \dots, c_{n,n-1}$ tais que

$$\underline{w}^n = c_{n,0} \underline{v} + c_{n,1} \underline{A} \underline{v} + \dots + c_{n,n-1} \underline{A}^{n-1} \underline{v} + \underline{A}^n \underline{v}, \quad n=1,2,\dots,d, \quad (\text{VI.69})$$

bem como coeficientes $e_{n,0}, e_{n,1}, \dots, e_{n,n-1}$, tal que

$$\underline{A}^n \underline{v} = e_{n,0} \underline{w}^0 + e_{n,1} \underline{w}^1 + \dots + e_{n,n-1} \underline{w}^{n-1} + \underline{w}^n \quad (\text{VI.70})$$

Não será apresentado prova do teorema acima, todavia, essa poderá ser encontrada na referência [8].

Para descrever-se a obtenção do procedimento de aceleração de GCGI (ORTHODIR), tendo-se a priori uma matriz auxiliar \underline{Z} tal que $\underline{Z} \underline{A}$ seja PR, construir-se-á primeiro, dado um vetor de partida \underline{u}^0 , tal que $\underline{r}^0 = \underline{b} - \underline{A} \underline{u}^0 \neq 0$, um conjunto de vetores $\underline{q}^0, \underline{q}^1, \dots, \underline{q}^t$, que são "semi-ortogonais" em relação a $\underline{Z} \underline{A}$, ou seja,

$$(\underline{Z} \underline{A} \underline{q}^i, \underline{q}^j) = 0 \quad , \quad j < i \quad ; \quad i, j = 0, 1, \dots, t, \quad (\text{VI.71})$$

e tal que para cada n , $\underline{q}^n \in K_{n+1}(\underline{r}^0, \underline{A})$, onde t é o maior inteiro não-negativo tal que os vetores $\underline{r}^0, \underline{A} \underline{r}^0, \dots, \underline{A}^t \underline{r}^0$ são linearmente independentes.

Esses vetores \underline{q}^i , no entanto, podem ser construídos aplicando-se diretamente o Teorema VI.3 com $\underline{v} = \underline{r}^0$, $d = t$, $\underline{w}^n = \underline{q}^n$, e $\underline{H} = \underline{Z} \underline{A}$. Desse modo obtém-se que

$$\begin{cases} \underline{q}^0 = \underline{r}^0 \\ \underline{q}^n = \underline{A} \underline{q}^{n-1} + \beta_{n,n-1} \underline{q}^{n-1} + \dots + \beta_{n,0} \underline{q}^0, \quad n=1,2,\dots,t, \end{cases} \quad (\text{VI.72})$$

onde

$$\beta_{n,i} = \frac{-(\underline{A}^2 \underline{q}^{n-1}, \underline{q}^i) + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{n,j} (\underline{A} \underline{q}^j, \underline{q}^i)}{(\underline{A} \underline{q}^i, \underline{q}^i)}, \quad (\text{VI.73})$$

$$i = 0, 1, \dots, n-1; \quad n = 1, 2, \dots, t.$$

Esses são linearmente independentes e, de (VI.68), atendem à condição de "semi-ortogonalidade" (VI.71). Além disso, para $i = 1, 2, \dots, t$, tem-se, de (VI.69), que

$$\underline{q}^i = c_{i,0} \underline{r}^0 + c_{i,1} \underline{A} \underline{r}^0 + \dots + c_{i,i-1} \underline{A}^{i-1} \underline{r}^0 + \underline{A}^i \underline{r}^0 \quad (\text{VI.74})$$

para alguns $c_{i,0}, c_{i,1}, \dots, c_{i,i-1}$, bem como, de (VI.70), que

$$\underline{A}^i \underline{r}^0 = e_{i,0} \underline{q}^0 + \dots + e_{i,i-1} \underline{q}^{i-1} + \underline{q}^i, \quad (\text{VI.75})$$

para alguns $e_{i,0}, e_{i,1}, \dots, e_{i,i-1}$. De (VI.74) vê-se claramente que o conjunto de vetores $\{\underline{q}^0, \underline{q}^1, \dots, \underline{q}^i\}$ define o subespaço de Krylov $K_{i+1}(\underline{r}^0, \underline{A})$.

Repetindo-se novamente a idéia básica do procedimento de aceleração GCGI (ORTHODIR) tem-se que esse consiste basicamente, em para cada n , encontrar-se um vetor \underline{u}^n tal que

$$\underline{u}^n - \underline{u}^0 \in K_n(\underline{r}^0, \underline{A}) \quad (VI.76)$$

e

$$(\underline{z} \underline{r}^n, \underline{v}) = 0 \quad (VI.77)$$

para todo $\underline{v} \in K_n(\underline{r}^0, \underline{A})$.

Como mostrado acima, tem-se que os q^0, q^1, \dots, q^{n-1} definem $K_n(\underline{r}^0, \underline{A})$, portanto, para que (VI.77) se mantenha, é necessário e suficiente que

$$(\underline{z} \underline{r}^n, q^i) = 0 \quad , \quad i = 0, 1, \dots, n-1 \quad (VI.78)$$

Impondo-se a condição (VI.76) a \underline{u}^n , tem-se, para alguns coeficientes $\lambda_{n,0}, \lambda_{n-1}, \dots, \lambda_{n,n-1}$, que

$$\underline{u}^n = \underline{u}^0 + \lambda_{n,0} q^0 + \dots + \lambda_{n,n-1} q^{n-1} \quad (VI.79)$$

Considere-se agora o teorema dado abaixo, que se rā apresentado sem demonstração.

TEOREMA VI.4 - Seja $\underline{r}^0 \neq 0$, e seja t o maior inteiro tal que $\underline{r}^0, \underline{A} \underline{r}^0, \dots, \underline{A}^t \underline{r}^0$ são linearmente independentes. Então,

$$\bar{\underline{u}} - \underline{u}^0 \in K_{t+1}(\underline{r}^0, \underline{A}) ; \quad (VI.80)$$

e, além disso, se $\bar{\underline{u}} - \underline{u}^0 \in K_m(\underline{r}^0, \underline{A})$ para algum inteiro m , então $m \geq t + 1$.

Pelo teorema acima tem-se portanto, que,

$$\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{u}}^0 + \hat{\lambda}_0 \underline{\underline{q}}^0 + \dots + \hat{\lambda}_t \underline{\underline{q}}^t , \quad (VI.81)$$

para alguns $\hat{\lambda}_0, \hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_t$. Desse modo de (VI.79) e (VI.81) tem-se então que

$$\underline{\underline{u}}^n - \underline{\underline{u}} = \sum_{i=0}^{n-1} (\lambda_{n,i} - \hat{\lambda}_i) \underline{\underline{q}}^i + \sum_{i=n}^t \hat{\lambda}_i \underline{\underline{q}}^i \quad (VI.82)$$

Impondo-se agora a condição de Galerkin dada por (VI.78) na forma $\int \underline{\underline{A}} (\underline{\underline{u}}^n - \underline{\underline{u}}^n), \underline{\underline{q}}^i \] (ver relação (VI.65)), bem como utilizando-se a relação (VI.71), mostra-se indutivamente (ver referência [8]), que$

$$\lambda_{n,i} = \hat{\lambda}_i , \quad i = 0, 1, \dots, n-1 . \quad (VI.83)$$

De (VI.79) tem-se portanto, que,

$$\underline{\underline{u}}^n = \underline{\underline{u}}^0 + \hat{\lambda}_0 \underline{\underline{q}}^0 + \dots + \hat{\lambda}_{n-1} \underline{\underline{q}}^{n-1} , \quad (VI.84)$$

$$n = 0, 1, \dots, t ,$$

onde obtém-se, expressando-se (VI.84) para $\underline{\underline{u}}^{n+1}$ e calculando-se $\underline{\underline{u}}^{n+1} - \underline{\underline{u}}^n$, que

$$\underline{\underline{u}}^{n+1} = \underline{\underline{u}}^n + \hat{\lambda}_n \underline{\underline{q}}^n , \quad n = 0, 1, \dots, t , \quad (VI.85)$$

e, consequentemente,

$$\underline{\underline{r}}^{n+1} = \underline{\underline{r}}^n - \hat{\lambda}_n \underline{\underline{A}} \underline{\underline{q}}^n , \quad n = 0, 1, \dots, t . \quad (VI.86)$$

Na referência [8] é mostrado também de forma indutiva que

$$\hat{\lambda}_n = \frac{(\underline{Z} \underline{r}^n, \underline{q})}{(\underline{Z} \underline{A} \underline{q}^n, \underline{q}^n)}, \quad n = 0, 1, \dots, t \quad (VI.87)$$

O esquema iterativo do ORTHODIR pode então ser definido por

$$\underline{u}^0 \quad (\text{vetor de partida})$$

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \hat{\lambda}_n \underline{q}^n, \quad n = 0, 1, \dots, t$$

$$\underline{q}^n = \begin{cases} \underline{r}^0, & n = 0 \\ \underline{A} \underline{q}^{n-1} + \beta_{n,n-1} \underline{q}^{n-1} + \dots + \beta_{n,0} \underline{q}^0 & n=1,2,\dots,t \end{cases}$$

$$\beta_{n,i} = -\frac{(-\underline{Z} \underline{A}^2 \underline{q}^{n-1}, \underline{q}^i) + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{n,j} (\underline{Z} \underline{A} \underline{q}^j, \underline{q}^i)}{(\underline{Z} \underline{A} \underline{q}^i, \underline{q}^i)},$$

$$i = 0, 1, \dots, n-1, \quad n = 1, 2, \dots, t.$$

$$\hat{\lambda}_n = \frac{(\underline{Z} \underline{r}^n, \underline{q}^n)}{(\underline{Z} \underline{A} \underline{q}^n, \underline{q}^n)}, \quad n = 0, 1, \dots, t$$

Como afirmado acima, adotou-se neste trabalho $\underline{Z} = \underline{A}^T$. Dessa escolha resulta porém que $\underline{Z} \underline{A}$ é SPD, logo tem-se que

$$(\underline{z} \underline{A} \underline{q}^j, \underline{q}^i) = (\underline{q}^j, \underline{z} \underline{A} \underline{q}^i) = 0, \text{ se } i \neq j \quad (\text{VI.88})$$

Visto isso tem-se que a fórmula para cálculo dos coeficientes $\beta_{n,i}$ dada por (VI.73) torna-se simplificada para

$$\begin{aligned} \beta_{n,i} &= - \frac{(\underline{A}^T \underline{A}^2 \underline{q}^{n-1}, \underline{q}^i)}{(\underline{A}^T \underline{A} \underline{q}^i, \underline{q}^i)} = \\ &= - \frac{(\underline{A}^2 \underline{q}^{n-1}, \underline{A} \underline{q}^i)}{(\underline{A} \underline{q}^i, \underline{A} \underline{q}^i)}, \quad i = 0, 1, \dots, n-1 \\ &\quad n = 1, 2, \dots, t. \end{aligned} \quad (\text{VI.89})$$

Considerando-se já o sistema precondicionado (VI.63), o esquema iterativo do ORTHODIR fica, portanto,

\underline{u}^0 (vetor de partida)

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \hat{\lambda}_n \underline{q}^n, \quad n = 0, 1, \dots, t$$

$$\underline{q}^n = \begin{cases} \underline{\delta}^0 = \underline{Q}^{-1} \underline{r}, & n = 0 \\ \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^{n-1} + \beta_{n,n-1} \underline{q}^{n-1} + \dots + \beta_{n,0} \underline{q}^0, & n = 1, 2, \dots, t \end{cases}$$

$$\beta_{n,i} = - \frac{[(\underline{Q}^{-1} \underline{A})^2 \underline{q}^{n-1}, \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^i]}{(\underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^i, \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^i)} \quad i = 0, 1, \dots, n-1; \\ n = 1, 2, \dots, t.$$

$$\hat{\lambda}_n = \frac{(\underline{\delta}^n, \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^n)}{(\underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^n, \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}^n)}, \quad n = 0, 1, \dots, t.$$

Apresenta-se agora, o algoritmo para a implementação computacional do esquema iterativo dado acima.

ALGORITMO VI.5 - Algoritmo para a implementação do procedimento de aceleração de GCGI (ORTHODIR).

$$IT = 1, IA = 1$$

$$\underline{u} = \underline{u}^0$$

$$\underline{r} = \underline{b} - \underline{A} \underline{u} ; \underline{\delta} = \underline{Q}^{-1} \underline{r}$$

$$ERRO = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF ERRO \leq TOLERÂNCIA \longrightarrow STOP

$$\underline{q}(IA) = \underline{\delta}$$

$$R: \underline{v}(IA) = \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{q}(IA)$$

$$\Delta\vartheta = \underline{\delta}^T \underline{v}(IA)$$

$$\Delta\vartheta(IA) = \underline{v}(IA)^T \underline{v}(IA)$$

$$\lambda = \Delta\vartheta / \Delta\vartheta(IA)$$

$$\underline{u} = \underline{u} + \lambda * \underline{q}(IA)$$

$$\underline{\delta} = \underline{\delta} - \lambda * \underline{v}(IA) ; ERRO = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF ERRO \leq TOLERÂNCIA \longrightarrow STOP

$$\underline{v1} = \underline{Q}^{-1} \underline{A} \underline{v}(IA)$$

$$K = IA$$

$$IA = IA + 1$$

$$\underline{q}(\text{IA}) = \underline{v}(K)$$

$$\rightarrow I = 1, IT$$

$$\text{DELTA}2 = \underline{v}1 * \underline{v}(I)$$

$$\beta = -\text{DELTA}2 / \text{DELTA}1(I)$$

$$\underline{q}(\text{IA}) = \underline{q}(\text{IA}) + \beta * \underline{q}(I)$$

$$IT = IT + 1$$

GO TO R

Uma desvantagem gritante no procedimento de aceleração de GCGI é o fato do cálculo dos vetores-direção exigirem o conhecimento de toda a história deles. Uma maneira apontada para a solução desse problema é truncar parte dessa história, ou seja, arbitra-se um número qualquer dos vetores \underline{q}^i anteriores que devem ser considerados para cálculo da próxima direção, e então desprezam-se os restantes que ficaram aquém desse número. Uma outra maneira de abordar esse problema é adotar a técnica de "restarting", que consiste em adotar um número k de iterações, dentro do qual se procede na forma idealizada, ou seja, considerando toda a história, sendo que, na iteração de ordem $k+1$, faz-se $\underline{u}^0 = \underline{u}^k$ e realiza-se o mesmo número de iterações.

Adotando-se a técnica de truncar parte da história dos vetores-direção já foram encontrados casos nos quais ocorreram falhas no processo iterativo. Quanto à técnica de "restarting" não se sabe apenas se o processo convergirá,

no entanto, no mínimo esse não falhará. Para maiores detalhes a respeito das técnicas utilizadas para abordar o problema de memória no processo iterativo de gradiente conjugado generalizado, ver referências [8] e [12].

VI.3 - ACELERAÇÃO DE LANCZOS

VI.3.1 - O Método de Lanczos

Sejam \underline{c}^1 e $\bar{\underline{c}}^1$ vetores conhecidos. Então duas seqüências de vetores $\{\underline{c}^{k+1}\}$ e $\{\bar{\underline{c}}^{k+1}\}$, onde $k = 1, 2, \dots, N$ sendo N a ordem de \underline{A} , podem ser derivadas respectivamente de \underline{A} e \underline{A}^T a partir do seguinte conjunto de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_{k+1} \underline{c}^{k+1} = \underline{A} \underline{c}^k - \sum_{i=1}^k h_{ik} \underline{c}^i \\ \bar{\delta}_{k+1} \bar{\underline{c}}^{k+1} = \underline{A}^T \bar{\underline{c}}^k - \sum_{i=1}^k \bar{h}_{ik} \bar{\underline{c}}^i \end{array} \right. \quad (VI.90)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_{k+1} \underline{c}^{k+1} = \underline{A} \underline{c}^k - \sum_{i=1}^k h_{ik} \underline{c}^i \\ \bar{\delta}_{k+1} \bar{\underline{c}}^{k+1} = \underline{A}^T \bar{\underline{c}}^k - \sum_{i=1}^k \bar{h}_{ik} \bar{\underline{c}}^i \end{array} \right. \quad (VI.91)$$

onde os h_{ik} e \bar{h}_{ik} são escolhidos de tal forma que \underline{c}^{k+1} seja ortogonal a $\underline{c}^1, \underline{c}^2, \dots, \underline{c}^k$ e $\bar{\underline{c}}^{k+1}$ seja ortogonal a $\bar{\underline{c}}^1, \bar{\underline{c}}^2, \dots, \bar{\underline{c}}^k$, respectivamente, e os δ_{k+1} e $\bar{\delta}_{k+1}$ são escalares introduzidos por conveniência numérica (normalmente fatores normalizadores).

Dado que os vetores $\underline{c}^1, \underline{c}^2, \dots, \underline{c}^N$ são linearmente independentes entre si, bem como os vetores $\bar{\underline{c}}^1, \bar{\underline{c}}^2, \dots, \bar{\underline{c}}^N$ o são (ver referência [13]), conclui-se que $\underline{c}^{N+1} = \bar{\underline{c}}^{N+1} = 0$, porque, pelas condições de ortogonalidade expostas acima, esses, que pertencem a \mathbb{R}^N , são ortogonais

a N vetores linearmente independentes, logo têm de ser nulos.

Em decorrência disso, as equações dadas por (VI.90) e (VI.91) podem ser escritas na forma matricial da maneira como apresentado, abaixo.

A equação (VI.90), por exemplo, na forma matricial fica:

$$\underline{A} \begin{bmatrix} \underline{c}^1 & \underline{c}^2 & \dots & \underline{c}^N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{c}^1 & \underline{c}^2 & \dots & \underline{c}^N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1N} \\ \delta_2 & h_{22} & \dots & h_{2N} \\ \delta_3 & h_{33} & \dots & h_{3N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_N & h_{NN} \end{bmatrix} \quad (\text{VI.92})$$

ou ainda,

$$\underline{A} \underline{c} = \underline{c} \underline{H} , \quad (\text{VI.93})$$

onde $\underline{c} = \begin{bmatrix} \underline{c}^1, & \underline{c}^2, & \dots, & \underline{c}^N \end{bmatrix}$ e

$$\underline{H} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1N} \\ \delta_2 & h_{22} & \dots & h_{2N} \\ \delta_3 & h_{33} & \dots & h_{3N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_N & h_{NN} \end{bmatrix}$$

Analogamente para (VI.91), obtém-se que

$$\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{\bar{C}}} = \underline{\underline{\bar{C}}} \underline{\underline{H}} \quad (\text{VI.94})$$

onde

$$\underline{\underline{\bar{C}}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{\bar{c}}}^1 & \underline{\underline{\bar{c}}}^2 & \dots & \underline{\underline{\bar{c}}}^N \end{bmatrix} \quad (\text{VI.95})$$

e

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{h}}_{11} & \underline{\underline{h}}_{12} & \dots & \dots & \underline{\underline{h}}_{1N} \\ \delta_2 & \underline{\underline{h}}_{22} & \dots & \dots & \underline{\underline{h}}_{2N} \\ \delta_3 & \underline{\underline{h}}_{33} & \dots & \dots & \underline{\underline{h}}_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \delta_N & \underline{\underline{h}}_{NN} & & & \end{bmatrix}$$

Expressando-se agora matricialmente as condições de ortogonalidade de $\underline{\underline{c}}^{k+1}$ em relação a $\underline{\underline{c}}^1, \underline{\underline{c}}^2, \dots, \underline{\underline{c}}^k$ e de $\underline{\underline{c}}^{k+1}$ em relação a $\underline{\underline{c}}^1, \underline{\underline{c}}^2, \dots, \underline{\underline{c}}^k$, obtém-se, respectivamente, as seguintes equações:

$$\underline{\underline{\bar{C}}}^T \underline{\underline{c}} = \underline{\underline{L}} \quad (\text{VI.95})$$

e

$$\underline{\underline{C}}^T \underline{\underline{\bar{C}}} = \underline{\underline{L}}^T, \quad (\text{VI.96})$$

onde $\underline{\underline{L}}$ e $\underline{\underline{L}}^T$ são matrizes triangulares inferiores.

Manipulando-se as equações (VI.95) e (VI.96) conclui-se que

$$\underline{\underline{C}}^T \underline{\underline{C}} = \underline{\underline{L}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{C}}^T & \underline{\underline{C}} \end{bmatrix}^T = \underline{\underline{L}}^T ,$$

ou seja,

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{L}}^T . \quad (\text{VI.97})$$

Dessa relação constata-se portanto, que ambas as matrizes $\underline{\underline{L}}$ e $\underline{\underline{L}}$ são diagonais, podendo portanto, ser denotadas por $\underline{\underline{D}}$.

Premultiplicando ambos os lados de (VI.93) por $\underline{\underline{C}}^{-1}$ resulta que

$$\underline{\underline{H}} = \underline{\underline{C}}^{-1} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{C}} \quad (\text{VI.98})$$

Expressando-se então $\underline{\underline{C}}^{-1}$ a partir de (VI.95) obtém-se que

$$\underline{\underline{C}}^{-1} = \underline{\underline{D}}^{-1} \underline{\underline{C}}^T , \quad (\text{VI.99})$$

onde vê-se facilmente que

$$\underline{\underline{C}} = (\underline{\underline{C}})^{-T} \underline{\underline{D}} . \quad (\text{VI.100})$$

Substituindo-se agora (VI.99) e (VI.100) em (VI.98) é obtido que

$$\underline{\underline{H}} = \underline{\underline{D}}^{-1} \underline{\underline{C}}^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{C}}^{-T} \underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}^{-1} \begin{bmatrix} \underline{\underline{C}}^{-1} & \underline{\underline{A}}^T & \underline{\underline{C}} \end{bmatrix}^T \underline{\underline{D}} \quad (\text{VI.101})$$

Mas de (VI.94) tem-se, a exemplo de (VI.98), que

$$\underline{\underline{H}} = \underline{\underline{C}}^{-1} \underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{C}} , \quad (VI.102)$$

que levado a (VI.101) fornece que

$$\underline{\underline{H}} = \underline{\underline{D}}^{-1} \underline{\underline{H}}^T \underline{\underline{D}} . \quad (VI.103)$$

Vê-se no entanto da equação acima, que no lado esquerdo tem-se uma matriz de Hessenberg na forma superior, enquanto no lado direito tem-se uma matriz de Hessenberg na forma inferior, o que implica em ambas serem tridiagonais, logo

$$h_{ik} = \bar{h}_{ik} = 0 , \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, k-2 , \quad (VI.104)$$

o que mostra que se $\underline{\underline{A}} \underline{\underline{C}}^k$ for ortogonalizado em relação a $\underline{\underline{C}}^{k-1}$ e a $\underline{\underline{C}}^k$, então fica automaticamente ortogonalizado em relação a todo $\underline{\underline{C}}^i$ anterior, e analogamente para $\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{C}}^k$.

Realizando-se o produto matricial no lado direito de (VI.103) e estabelecendo-se a identidade matricial de forma explícita, obtém-se também que

$$h_{kk} = \bar{h}_{kk} \quad \text{e} \quad h_{k,k+1} \delta_{k+1} = \bar{h}_{k,k+1} \bar{\delta}_{k+1} \quad (VI.105)$$

Sabendo-se que as matrizes $\underline{\underline{H}}$ e $\underline{\underline{H}}^T$ são tridiagonais, então é mais simples usar a seguinte notação:

$$\left\{ \begin{array}{l} h_{kk} = \bar{h}_{kk} = \alpha_k \\ h_{k,k+1} = \beta_{k+1} \\ \bar{h}_{k,k+1} = \bar{\beta}_{k+1} \end{array} \right. \quad (VI.106)$$

Assim as fórmulas dadas por (VI.90) e (VI.91), juntamente com a notação dada por (VI.106) ficam resumidas a

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta_{k+1} \underline{c}^{k+1} = \underline{A} \underline{c}^k - \alpha_k \underline{c}^k - \beta_k \underline{c}^{k-1} \end{array} \right. \quad (VI.107)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\delta}_{k+1} \bar{\underline{c}}^{k+1} = \underline{A}^T \bar{\underline{c}}^k - \alpha_k \bar{\underline{c}}^k - \bar{\beta}_k \bar{\underline{c}}^{k-1} \end{array} \right. , \quad (VI.108)$$

onde, de (VI.105),

$$\beta_{k+1} \delta_{k+1} = \bar{\beta}_{k+1} \bar{\delta}_{k+1} . \quad (VI.109)$$

Visto isso, será feito agora o cálculo dos coeficientes α_k , β_k e $\bar{\beta}_k$. De (VI.93) tem-se que

$$\underline{C}^T \underline{A} \underline{c} = \bar{\underline{C}}^T \bar{\underline{c}} \underline{H} . \quad (VI.110)$$

Sendo que

$$D = \bar{\underline{C}}^T \underline{c} = \begin{bmatrix} (\bar{\underline{C}}^1)^T \underline{c}^1 & 0 \\ 0 & (\bar{\underline{C}}^N)^T \underline{c}^N \end{bmatrix}, \quad (VI.111)$$

então (VI.110) escrita na forma matricialmente explícita fica

$$\begin{bmatrix} (\underline{c}^1)^T \underline{A} \underline{c}^1 & (\underline{c}^1)^T \underline{A} \underline{c}^2 & \dots & (\underline{c}^1)^T \underline{A} \underline{c}^N \\ (\underline{c}^2)^T \underline{A} \underline{c}^1 & (\underline{c}^2)^T \underline{A} \underline{c}^2 & \dots & (\underline{c}^2)^T \underline{A} \underline{c}^N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\underline{c}^N)^T \underline{A} \underline{c}^1 & \dots & \dots & (\underline{c}^N)^T \underline{A} \underline{c}^N \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} (\underline{c}^1)^T \underline{c}^1 \alpha_1 & (\underline{c}^1)^T \underline{c}^1 \beta_2 \\ (\underline{c}^2)^T \underline{c}^2 \delta_2 & (\underline{c}^2)^T \underline{c}_2 \alpha_2 \\ & \ddots \\ & (\underline{c}^N)^T \underline{c}^N \alpha_N \end{bmatrix},$$

(VI.112)

onde tem-se, para k variando de 1 a N , que

$$\alpha_k = \frac{(\underline{c}^k)^T \underline{A} \underline{c}^k}{(\underline{c}^k)^T \underline{c}^k}, \quad (VI.113)$$

e

$$\beta_k = \frac{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{A} \underline{c}^k}{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{c}^{k-1}} \quad (VI.114)$$

Procedendo-se de maneira análoga em relação a (VI.94), conclui-se que

$$\bar{\beta}_k = \frac{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{A}^T \underline{c}^k}{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{c}^{k-1}} \quad (VI.115)$$

Observa-se aqui que, obtendo-se o coeficiente α_k a partir das equações oriundas de (VI.94), chega-se à mesma expressão dada em (VI.112).

As expressões de β_k e $\bar{\beta}_k$ dadas por (VI.114) e (VI.115) podem no entanto ser simplificadas, como será mostrado abaixo. Para simplificar-se β_k , por exemplo, obtém-se primeiro de (VI.108) que

$$\underline{A}^T \underline{c}^{k-1} = \bar{\delta}_k \underline{c}^k + \alpha_k \underline{c}^{k-1} + \beta_k \underline{c}^{k-2} \quad (VI.116)$$

Substituindo-se então (VI.116) em (VI.114) resulta que

$$\beta_k = \frac{(\underline{A}^T \underline{c}^{k-1})^T \underline{c}^k}{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{c}^{k-1}} = \frac{(\bar{\delta}_k \underline{c}^k + \alpha_k \underline{c}^{k-1} + \beta_k \underline{c}^{k-2})^T \underline{c}^k}{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{c}^{k-1}} \quad (VI.117)$$

Utilizando-se agora o fato de que \underline{c}^k é ortogonal a \underline{c}^{k-1} e a \underline{c}^{k-2} , então (VI.117) reduz-se a

$$\beta_k = \frac{\bar{\delta}_k (\underline{c}^k)^T \underline{c}^k}{(\underline{c}^{k-1})^T \underline{c}^{k-1}}. \quad (VI.118)$$

Similarmente, tem-se que

$$\bar{\beta}_k = \delta_k \frac{(\tilde{c}^k)^T \tilde{c}^k}{(\tilde{c}^{k-1})^T \tilde{c}^{k-1}} \quad (\text{VI.119})$$

O método definido pelas equações (VI.107), (VI.108), (VI.113), (VI.118) e (VI.119) constitui o método de Lanczos, que além de ser uma técnica simples de se tridiagonalizar uma matriz, o que pode ser facilmente identificado, tem aplicações ainda na resolução de sistemas de equações lineares, o que será visto a seguir.

VI.3.2 - Aplicação do Algoritmo de Lanczos na Resolução de Sistemas de Equações Lineares

Considerando-se a fórmula iterativa

$$\tilde{u}^{n+1} = \rho_{n+1} \gamma_{n+1} \tilde{r}^n + \rho_{n+1} \tilde{u}^n + (1 - \rho_{n+1}) \tilde{u}^{n-1} \quad (\text{VI.120})$$

para a obtenção da solução do sistema dado em (IV.1), tem-se que o resíduo a cada iteração é dado por (ver equação (VI.56))

$$\tilde{r}^{n+1} = \rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} A \tilde{r}^n + \tilde{r}^n) + (1 - \rho_{n+1}) \tilde{r}^{n-1}. \quad (\text{VI.121})$$

Dividindo-se (VI.121) por $-\gamma_{n+1} \rho_{n+1}$, obtém-se que

$$\left(-\frac{1}{\gamma_{n+1} \rho_{n+1}} \right) \tilde{r}^{n+1} = A \tilde{r}^n - \left(\frac{1}{\gamma_{n+1}} \right) \tilde{r}^n - \left[\frac{(1 - \rho_{n+1})}{\gamma_{n+1} \rho_{n+1}} \right] \tilde{r}^{n-1} \quad (\text{VI.122})$$

onde \underline{r}^{n+1} tem o aspecto dos vetores \underline{c}^{n+1} derivados de \underline{A} pelo algoritmo de Lanczos.

Isso sugere a criação de um vetor auxiliar $\underline{\bar{r}}^{n+1}$ do aspecto de $\underline{\bar{c}}^{n+1}$, dado por

$$\left(-\frac{1}{\bar{\gamma}_{n+1} \bar{\rho}_{n+1}} \right) \underline{\bar{r}}^{n+1} = \underline{A}^T \underline{\bar{r}}^n - \left(\frac{1}{\bar{\gamma}_{n+1}} \right) \underline{\bar{r}}^n - \left[\frac{(1 - \bar{\rho}_{n+1})}{\bar{\gamma}_{n+1} \bar{\rho}_{n+1}} \right] \underline{\bar{r}}^{n-1} \quad (\text{VI.123})$$

Forçando-se agora que \underline{r}^{n+1} e $\underline{\bar{r}}^{n+1}$ sejam realmente vetores obtidos segundo o algoritmo de Lanczos dado anteriormente, tem-se, por comparação de (VI.122) e (VI.123) com (VI.107) e (VI.108) respectivamente, as seguintes equações:

$$-\frac{1}{\gamma_{n+1} \rho_{n+1}} = \delta_{n+1} \quad (\text{VI.124})$$

$$\frac{1}{\gamma_{n+1}} = \frac{1}{\bar{\gamma}_{n+1}} = \alpha_n = \frac{(\underline{\bar{r}}^n)^T \underline{A} \underline{r}^n}{(\underline{\bar{r}}^n)^T \underline{r}^n} \quad (\text{VI.125})$$

$$\frac{(1 - \rho_{n+1})}{\gamma_{n+1} \rho_{n+1}} = \beta_n = \bar{\delta}_n \left[\frac{(\underline{\bar{r}}^n)^T \underline{r}^n}{(\underline{\bar{r}}^{n-1})^T \underline{r}^{n-1}} \right] \quad (\text{VI.126})$$

$$\frac{(1 - \bar{\rho}_{n+1})}{\gamma_{n+1} \bar{\rho}_{n+1}} = \bar{\beta}_n = \delta_n \left[\frac{(\underline{\bar{r}}^n)^T \underline{r}^n}{(\underline{\bar{r}}^{n-1})^T \underline{r}^{n-1}} \right] \quad (\text{VI.127})$$

$$- \frac{1}{\gamma_{n+1} \bar{\rho}_{n+1}} = \bar{\delta}_{n+1} \quad (\text{VI.128})$$

De (VI.125) tem-se, imediatamente, que

$$\gamma_{n+1} = \bar{\gamma}_{n+1} = \frac{(\bar{r}^n)^T \bar{r}^n}{(\bar{r}^n)^T \bar{A} \bar{r}^n} , \quad (\text{VI.129})$$

onde a igualdade entre os coeficientes γ_{n+1} e $\bar{\gamma}_{n+1}$ já foi inclusive usada nas equações (VI.127) e (VI.128).

Obtendo-se $\bar{\delta}_n$ a partir de (VI.128), substituindo-o em (VI.126) e desenvolvendo a expressão resultante chega-se a

$$\rho_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{(\bar{r}^n)^T \bar{r}^n}{(\bar{r}^{n-1})^T \bar{r}^{n-1}} \cdot \frac{1}{\gamma_n} \right]^{-1} \quad (\text{VI.130})$$

Fazendo o mesmo para (VI.124) e (VI.127) obtém-se que

$$\bar{\rho}_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{(\bar{r}^n)^T \bar{r}^n}{(\bar{r}^{n-1})^T \bar{r}^{n-1}} \cdot \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1} \quad (\text{VI.131})$$

Definindo-se que $\rho_1 = \bar{\rho}_1 = 1$, então nas equações (VI.130) e (VI.131) tem-se, para $n = 1$, que

$$\rho_2 = \left[1 - \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \cdot \frac{(\tilde{r}^1)^T \tilde{r}^1}{(\tilde{r}^0)^T \tilde{r}^0} \right] = \bar{\rho}_2 \quad (\text{VI.132})$$

Prosseguindo com esse processo indutivo, conclui-se finalmente que

$$\rho_{n+1} = \bar{\rho}_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \frac{(\tilde{r}^n)^T \tilde{r}^n}{(\tilde{r}^{n-1})^T \tilde{r}^{n-1}} \cdot \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1}, \text{ se } n \geq 1, \quad (\text{VI.133})$$

e resíduo auxiliar \tilde{r}^{n+1} dado por (VI.123) pode ser escrito por

$$\tilde{r}^{n+1} = \rho_{n+1} (-\gamma_{n+1} \tilde{A}^T \tilde{r}^n + \tilde{r}^n) + (1 - \rho_{n+1}) \tilde{r}^{n-1} \quad (\text{VI.134})$$

O processo definido por (VI.120), (VI.121), (VI.129), (VI.133) e (VI.134) constitui o processo de aceleração de Lanczos para a solução de sistemas de equações lineares.

Considerando agora o sistema de equações precondicionado dado por (VI.63) pode-se fornecer o seguinte algoritmo para o processo de aceleração de Lanczos.

ALGORITMO VI.6 - Algoritmo para a implementação computacional do método de Lanczos com precondicionamento \tilde{Q} .

$$n = 0$$

$$u = \tilde{u}^0$$

$$\underline{r} = \underline{b} - \underline{A} \underline{u} ; \quad \underline{u}_1 = \underline{\delta}_1 = \overline{\underline{\delta}}_1 = 0$$

$$\underline{\delta} = \underline{Q}^{-1} \underline{r} ; \quad \overline{\underline{\delta}} = \underline{\delta}$$

$$\text{DELTA} = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF DELTA < TOLERÂNCIA \longrightarrow STOP

R: $n = n + 1$

$$\underline{h} = \underline{A} \underline{\delta}$$

$$\underline{h}_1 = \underline{Q}^{-1} \underline{h}$$

$$\text{DELTA1} = \underline{\delta}^T \underline{h}_1 ; \quad \gamma = \text{DELTA/DELTA1}$$

$$\text{IF } n = 1 \text{ THEN } \rho = 1; \text{ ELSE } \rho = \left[1 - \frac{\gamma}{\gamma_0} \cdot \frac{\text{DELTA}}{\text{DELTA0}} \cdot \frac{1}{\rho} \right]^{-1}$$

$$\underline{u}_2 = \rho (\underline{u} + \gamma \underline{\delta}) + (1 - \rho) \underline{u}_1$$

$$\underline{\delta}_2 = \rho (-\gamma \underline{h}_1 + \underline{\delta}) + (1 - \rho) \underline{\delta}_1$$

$$\underline{h} = \underline{Q}^{-T} \gamma$$

$$\underline{h}_1 = \underline{A}^T \underline{h}$$

$$\overline{\underline{\delta}}_2 = \rho (-\gamma \underline{h}_1 + \overline{\underline{\delta}}) + (1 - \rho) \underline{\delta}_1$$

$$\gamma_0 = \gamma$$

$$\text{DELTA0} = \text{DELTA}$$

$$\text{DELTA} = \underline{\delta}_2^T \underline{\delta}_2$$

IF DELTA < TOLERÂNCIA \longrightarrow STOP

$$\text{DELTA} = \underline{\delta}_2^T \bar{\underline{\delta}}_2$$

$$\underline{u}_1 = \underline{u} ; \underline{\delta}_1 = \delta ; \bar{\underline{\delta}}_1 = \bar{\delta}$$

$$\underline{u} = \underline{u}_2 ; \underline{\delta} = \underline{\delta}_2 ; \bar{\delta} = \bar{\underline{\delta}}_2$$

GO TO R

Como já comentado anteriormente, por ocasião da apresentação do método de Lanczos em si, tem-se aqui também, já que os \underline{r}^i são idênticos aos \underline{c}^i , que $\underline{r}^N = 0$, ou seja, o método converge em no máximo N iterações. Em outras palavras o método de Lanczos apresenta a seguinte propriedade (ver equação (VI.111)):

$$(\underline{r}^i, \bar{\underline{r}}^j) = 0 , \quad i \neq j \quad (\text{VI.135})$$

onde, sabendo-se que os $\bar{\underline{r}}^j$ são linearmente independentes entre si e que $\underline{r}^N \in \mathbb{R}^N$ é ortogonal $\underline{r}^0, \underline{r}^1, \dots, \underline{r}^{N-1}$, então tem-se que

$$\underline{r}^N = 0 . \quad (\text{VI.136})$$

O processo de aceleração de Lanczos pode também ser expresso numa forma que assemelha-se ao método de gradiente conjugado "two-term form".

Seja portanto, a fórmula iterativa dada por

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \lambda_n \underline{p}^n , \quad (\text{VI.137})$$

onde \underline{p}^n é da forma

$$\underline{p}^n = \begin{cases} \underline{r}^0 & , \quad n = 0 \\ \underline{r}^n + \alpha_n \underline{p}^{n-1} & \end{cases} \quad (\text{VI.138})$$

Desse modo, a exemplo de (VI.22), tem-se que

$$\underline{r}^n = \underline{r}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{A} \underline{p}^{n-1} \quad (\text{VI.139})$$

Considerando agora as fórmulas iterativas auxiliares, quais sejam,

$$\underline{\bar{r}}^n = \underline{\bar{r}}^{n-1} - \lambda_{n-1} \underline{A}^T \underline{\bar{p}}^{n-1} \quad (\text{VI.140})$$

e

$$\underline{\bar{p}}^n = \begin{cases} \underline{\bar{r}}^0 = \underline{r}^0 & , \quad n = 0 \\ \underline{\bar{r}}^n + \alpha_n \underline{\bar{p}}^{n-1} & \end{cases} \quad (\text{VI.141})$$

pode-se então aplicar a relação (VI.135) para a obtenção dos coeficientes do esquema iterativo proposto acima.

Da equação (VI.139) obtém-se que

$$\underline{A} \underline{p}^n = -\frac{1}{\lambda_n} (r^n - r^{n+1}) \quad (\text{VI.142})$$

Escrevendo-se (VI.141), para a m -ésima iteração, da forma de (VI.35), tem-se então que

$$\begin{aligned} \underline{\underline{p}}^m &= \underline{\underline{r}}^m + \alpha_m \underline{\underline{r}}^{m-1} + \alpha_m \alpha_{m-1} \underline{\underline{r}}^{m-2} + \dots + \\ &+ \alpha_m \alpha_{m-1} \dots \alpha_1 \underline{\underline{r}}^0. \end{aligned} \quad (\text{VI.143})$$

Premultiplicando-se (VI.142) por (VI.143), quando $m < n$, e utilizando-se a condição (VI.135), conclui-se que

$$\underline{\underline{p}}^m,^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{p}}^n = 0 \quad (\text{VI.144})$$

Fazendo-se o mesmo com (VI.140) e (VI.138) obtém-se que

$$\underline{\underline{p}}^m,^T \underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{p}}^n = 0, \quad \text{se } m < n. \quad (\text{VI.145})$$

Desde que $\underline{\underline{p}}^m,^T \underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{p}}^n = \underline{\underline{p}}^n,^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{p}}^m = 0$, conclui-se finalmente que

$$\underline{\underline{p}}^i,^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{p}}^j = 0, \quad \text{se } i \neq j. \quad (\text{VI.146})$$

Premultiplicando-se agora (VI.139) por $(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T$, obtém-se que

$$(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^n = (\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^{n-1} - \lambda_{n-1} (\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{p}}^{n-1}, \quad (\text{VI.147})$$

onde utilizando-se a relação (VI.135) chega-se a

$$\lambda_{n-1} = \frac{(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^{n-1}}{(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{p}}^{n-1}} \quad (\text{VI.148})$$

Mas de (VI.141) tem-se que

$$\underline{\underline{r}}^{n-1} = \underline{\underline{p}}^{n-1} - \alpha_{n-1} \underline{\underline{p}}^{n-2} \quad (\text{VI.149})$$

que substituído em (VI.148), juntamente com a relação (VI.146), fornece

$$\lambda_{n-1} = \frac{(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^{n-1}}{(\underline{\underline{p}}^{n-1})^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{p}}^{n-1}} \quad (\text{VI.150})$$

Para a obtenção de α_n , premultiplica-se (VI.138) por $\underline{\underline{r}}^{n-1}$, o que resulta em

$$(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{p}}^n = (\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^n + \alpha_n (\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{p}}^{n-1} \quad (\text{VI.151})$$

Escrevendo-se $\underline{\underline{p}}^{n-1}$ da forma de $\underline{\underline{p}}^m$ em (VI.143) e aplicando a relação (VI.135), então a equação (VI.151) fica reduzida a

$$(\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{p}}^n = \alpha_n (\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^{n-1} \quad (\text{VI.152})$$

Mas de (VI.140) tem-se que

$$\underline{\underline{r}}^{n-1} = \underline{\underline{r}}^n + \lambda_{n-1} \underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{p}}^{n-1} , \quad (\text{VI.153})$$

que levado a (VI.152) juntamente com a relação (VI.146) fornece que

$$(\underline{\underline{r}}^n)^T \underline{\underline{p}}^n = \alpha_n (\underline{\underline{r}}^{n-1})^T \underline{\underline{r}}^{n-1} \quad (\text{VI.154})$$

Expandindo-se então \underline{p}^n da maneira mencionada acima e aplicando-se novamente a condição (VI.135), chega-se a

$$\alpha_n = \frac{(\underline{r}^n)^T \underline{r}^n}{(\underline{r}^{n-1})^T \underline{r}^{n-1}} \quad (\text{VI.155})$$

O processo iterativo definido por (VI.137) a (VI.141), (VI.150) e (VI.155) é uma variante do processo de aceleração de Lanczos conhecido por processo de aceleração de gradiente biconjugado (GBC).

Considerando-se o sistema precondicionado (VI.63) pode-se estabelecer o seguinte algoritmo.

ALGORITMO VI.7 - Algoritmo para a implementação do método de gradiente biconjugado com precondicionamento \underline{Q} .

$$\underline{u} = \underline{u}^0$$

$$\underline{r} = \underline{b} - \underline{A} \underline{u}$$

$$\underline{\delta} = \underline{Q}^{-1} \underline{r}$$

$$\text{DELTA} = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF $\text{DELTA} \leq \text{TOLERÂNCIA} \longrightarrow \text{STOP}$

$$\underline{p} = \underline{\bar{p}} = \underline{\bar{\delta}} = \underline{\delta}$$

$$R: \underline{h} = \underline{A} \underline{p}$$

$$\underline{h}_1 = \underline{Q}^{-1} \underline{h}$$

$$\underline{\lambda} = \text{DELTA} / \underline{\underline{p}}^T \underline{h}_1$$

$$\underline{u} = \underline{u} + \lambda \underline{p}$$

$$\underline{\delta} = \underline{\delta} - \lambda \underline{h}_1 \quad ; \quad \text{DELTA1} = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

IF DELTA \leq TOLERÂNCIA \longrightarrow STOP

$$\underline{h} = \underline{\underline{Q}}^{-T} \underline{p}$$

$$\underline{h}_1 = \underline{\underline{A}}^T \underline{h}$$

$$\underline{\delta} = \underline{\delta} - \lambda \underline{h}_1$$

$$\text{DELTA1} = \underline{\delta}^T \underline{\delta}$$

$$\alpha = \text{DELTA1} / \text{DELTA0} \quad ; \quad \text{DELTA0} = \text{DELTA1}$$

$$\underline{p} = \underline{\delta} + \alpha \underline{p}$$

$$\underline{\underline{p}} = \underline{\delta} + \alpha \underline{\underline{p}}$$

GO TO R

Antes de mais nada ressalta-se aqui que, tanto para o método de Lanczos, bem como para o método de gradiente biconjugado, não foi feita a restrição de que a matriz $\underline{\underline{A}}$ deva ser simétrica. Portanto, dado que as matrizes de coeficientes oriundas do MEC são não-singulares, então esses são perfeitamente aplicáveis.

Desse modo fica, portanto, encerrada a parte teórica referente a este trabalho, restando assim, apenas a aplicação dos algoritmos apresentados, na resolução de sis-

temas de equações resultantes da aplicação do método dos elementos de contorno a problemas práticos de Engenharia.

CAPÍTULO VIIAPLICAÇÕES

São mostrados, agora, os vários problemas que foram solucionados com o intuito de se obter, dentre os algoritmos apresentados no capítulo anterior, quais os que se mostram mais eficientes.

Porém antes de se apresentar os resultados, comenta-se, primeiramente, a respeito dos algoritmos realmente implementados.

Fazendo-se $\underline{Q}^{-1} = \underline{A}^T$ nos algoritmos VI.3 e VI.4, obtiveram-se, respectivamente, os "solvers" do método de gradiente conjugado "two-term form" (GC-2) e "three-term form" (GC-3); todavia observa-se aqui que \underline{A}^T não é matriz de preconditionamento do sistema de equações, já que ela não melhora o condicionamento da matriz, mas ao contrário disso, piora.

Do algoritmo VI.5 fez-se a implementação computacional do esquema ORTHODIR em três "solvers", que estão associados a diferentes escolhas de \underline{Q} . No primeiro deles escolheu-se \underline{Q} como sendo a matriz identidade, e obteve-se assim o "solver" de aceleração de GCGI sobre o método RF (esquema ORTHODIR-RF); nos dois últimos escolheu-se \underline{Q} como sendo as matrizes de preconditionamento de Jacobi e Gauss-Seidel, o que resultou nos "solvers" de aceleração de GCGI sobre o

método de Jacobi (esquema ORTHODIR-JACOBI) e sobre o método de Gauss-Seidel (esquema ORTHODIR/GAUSS-SEIDEL), respectivamente.

A exemplo dos esquemas ORTHODIR-RF, ORTHODIR-JACOBI e ORTHODIR/GAUSS-SEIDEL, obtiveram-se também, dos algoritmos VI.6 e VI.7, os "solvers" LANCZOS-RF, LANCZOS-JACOBI, LANCZOS/GAUSS-SEIDEL, GBC-RF, GBC-JACOBI e GBC/GAUSS-SEIDEL, respectivamente.

Para medir a eficiência dos esquemas iterativos apresentados acima, implementaram-se também quatro "solvers" baseados no método de eliminação gaussiana, quais sejam, "GAUSS SIMPLES", onde o pivô é sempre o elemento da diagonal correspondente à linha onde a eliminação está sendo processada, "GAUSS TROCANDO-SE LINHAS", onde escolhe-se como pivô o maior coeficiente, em módulo, da coluna, abaixo da posição de pivô, "GAUSS TROCANDO-SE COLUNAS", onde escolhe-se como pivô o maior coeficiente, em módulo, da linha, situada à direita da posição de pivô, e por último, "GAUSS TROCANDO-SE LINHAS E COLUNAS", onde o pivô agora é escolhido como o máximo, em módulo, dentre os coeficientes da submatriz situada além da posição de pivô.

Visto isso apresentam-se abaixo os problemas que foram resolvidos utilizando-se os "solvers" acima mencionados, bem como, na forma de tabela, os resultados que foram obtidos.

Aplicação VII.1 - Trata-se da resolução da placa quadrada mostrada na Figura VII.1 dada a seguir.

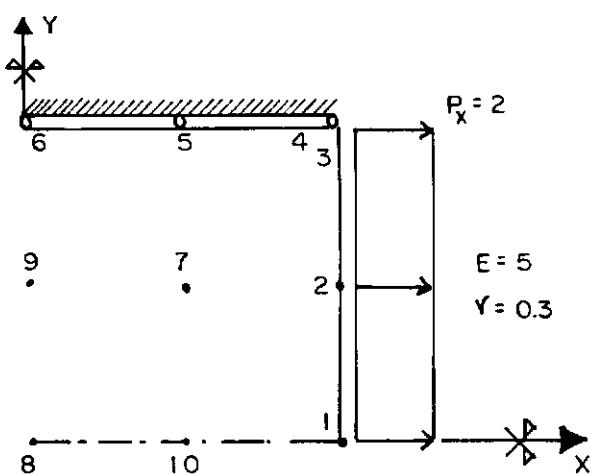


Fig.VII.1. Problema da Placa Quadrada

O problema acima foi resolvido com malhas obtidas dividindo-se cada superelemento da malha grosseira da acima, em 8, 12, 25, 37 e 62 elementos iguais, o que resultou em sistemas de 68, 100, 204, 300 e 500 equações lineares, respectivamente.

Na Tabela VII.1 são apresentados os tempos de processamento e números de iterações obtidos quando da resolução dos sistemas de equações mencionados acima. Observa-se, tanto na Tabela VII.1, como nas fornecidas posteriormente, que os sistemas não foram resolvidos por todos os "solvers" implementados, sendo isso em decorrência do fato de já ter sido constatado a ineficiência em termos ou de tempo de processamento ou de instabilidade numérica, ou ainda, por não se achar necessária a resolução para se concluir sobre a eficiência ou ineficiência de um determinado "solver".

		NÚMERO DE ITERAÇÕES / TEMPO DE PROCESSAMENTO (SEGUNDO)				
Nº DE EQUAÇÕES SOLVER		68	100	204	300	500
GAUSS SIMPLES	- / 2.28	- / 7.21	- / 61.42	- / 194.37	- / 884.36	
GAUSS TROCANDO-SE LINHAS E COLUNAS	-	-	- / 94.11	-	-	
GC-2	96/16.19	148/52.77	283/417.52	-	-	
GC-3	98/15.99	127/44.91	229/331.52	-	-	
ORTHODIR-RF	57/14.32	-	-	-	-	
ORTHODIR-JACOBI	24/5.80	26/13.05	EXPON OVERFLOW	-	-	
ORTHODIR/GAUSS-SEIDEL	25/9.32	30/24.20	-	-	-	
GBC-RF	64/10.57	73/25.68	104/152.88	-	160/1388.09	
GBC-JACOBI	32/5.35	35/12.58	44/65.05	51/162.52	66/572.07	
GBC/GAUSS-SEIDEL	28/8.65	33/21.79	45/136.29	-	64/1390.53	
LANCZOS-RF	72/12.03	75/26.75	125/189.63	-	180/1552.72	
LANCZOS-JACOBI	31/5.29	35/12.81	45/67.28	51/161.99	69/597.14	
LANCZOS/GAUSS-SEIDEL	27/8.20	33/22.42	48/144.45	-	64/1399.97	

TABELA VII.1 - Valores obtidos para o número de iterações e tempo de processamento referentes à solução dos sistemas associados ao problema da Figura VII.1, com tolerância 10^{-6}

Aplicação VII.2 - Nesta aplicação foi resolvida a placa finita com cavidade no centro dada na Figura VII.2.

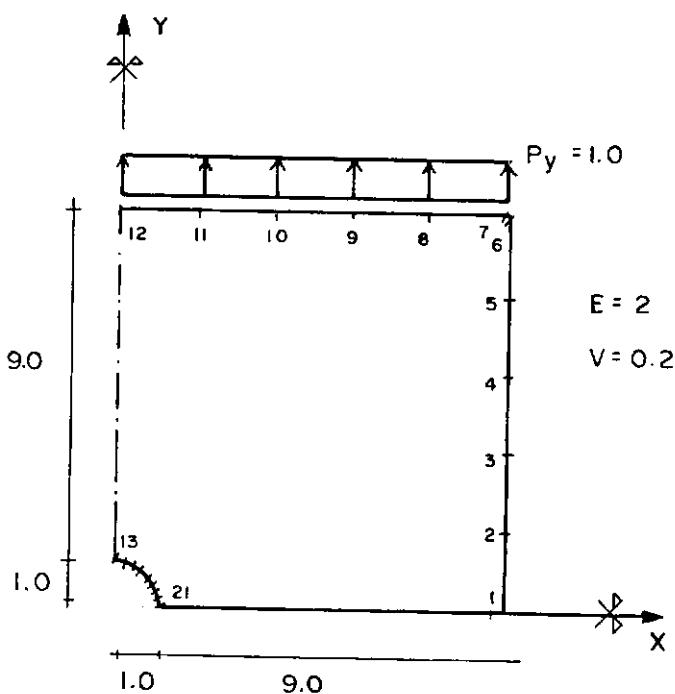


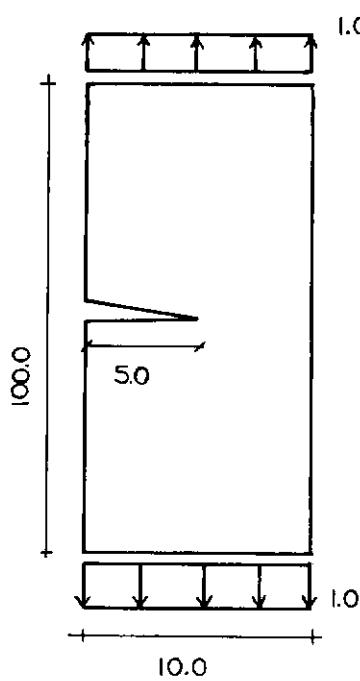
Fig.VII.2. Problema da Placa Finita com Cavidade no Centro

Nesse problema utilizou-se inicialmente uma malha de 18 elementos o que resultou em um sistema de 42 equações. Posteriormente, essa malha foi refinada para 46, 64 e 126 elementos, originando sistemas de 98, 134 e 258 equações, respectivamente. Os resultados obtidos para o número de iterações e tempo de processamento da resolução dos sistemas acima estão mostrados na Tabela VII.2.

Nº DE EQUAÇÕES SOLVER	NÚMERO DE ITERAÇÕES / TEMPO DE PROCESSAMENTO (SEGUNDO)			
	42	98	134	258
GAUSS SIMPLES	- / 0.54	- / 6.50	- / 17.00	- / 122.29
GAUSS TROCANDO-SE LINHAS E COLUNAS	- / 0.90	-	-	-
GC-2	25/1.68	31/10.83	47/31.00	35/86.19
GC-3	26/1.75	32/10.92	47/30.26	36/86.00
ORTHODIR-RF	13/1.18	14/ 6 .42	19/16.18	20/60.63
ORTHODIR-JACOBI	14/1.33	15/ 6 .90	19/16.21	19/57.81
ORTHODIR/GAUSS-SEIDEL	11/1.65	11/10.70	14/25.96	16/138.76
GBC-RF	13/0.84	14/ 4 .70	20/12.68	22/51.04
GBC-JACOBI	14/0.94	15/ 5 .16	19/12.20	20/47.07
GBC/GAUSS-SEIDEL	12/1.50	12/10.20	14/23.73	17/134.26
LANCZOS-RF	13/0.88	14/ 5 .00	20/13.00	22/52.14
LANCZOS-JACOBI	14/1.00	15/ 5 .36	19/12.50	20/47.78
LANCZOS/GAUSS-SEIDEL	12/1.55	12/10.55	14/24.35	17/136.12

TABELA VII.2 - Valores obtidos para o número de iterações e tempo de processamento referentes à solução dos sistemas de equações associados ao problema da Figura VII.2, com tolerância 10^{-6}

Aplicação VII.3 - Trata-se da resolução do problema de mecânica da fratura dado pela Figura VII.3(a)



(a)

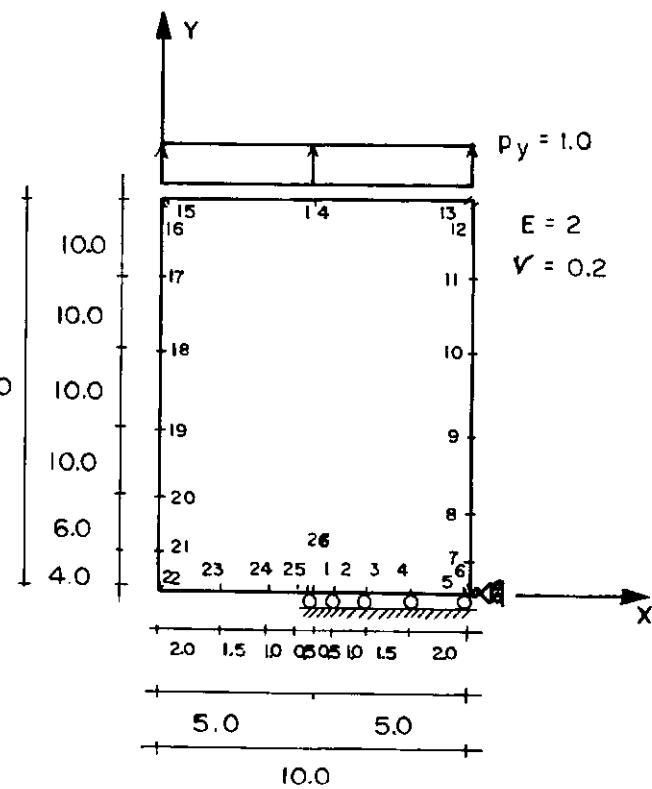


Fig. VII.3. (a) Problema da Mecânica da Fratura; (b) Malha Inicial Referente ao Problema Equivalente.

Na Figura VII.3(b) é apresentada a malha inicial correspondente ao problema equivalente, que consiste de 22 elementos, o que fornece um sistema de 52 equações. Essa malha, porém, foi refinada para 62, 150 e 300 elementos, resultando desse modo em sistemas de 132, 308 e 608 equações. Observa-se aqui que, devido à forte variação na função de tensão em torno dos nós 1 e 26 (Ver Figura VII.3(b)), o refinamento foi realizado com uma maior concentração de elementos em torno desses nós.

Os resultados correspondentes ao número de iterações obtidas, bem como ao tempo de processamento da re solução dos sistemas mencionados anteriormente, são apresentados na Tabela VII.3.

Aplicação VII.4 - Com o objetivo de simular uma aplicação industrial dos "solvers" desenvolvidos neste trabalho, optou-se pelo problema apresentado na referência [14], que consiste da verificação do sistema de proteção catódica da plataforma semi-submersível mostrada na Figura VII.4(a), o que nada mais é do que um problema de potencial em três dimensões.

O sistema de proteção é constituído por 4 anodes de corrente impressa que figuram como fontes concentradas, e os valores de contorno são os valores de potencial elétrico ϕ , correspondentes aos u 's, e de corrente elétrica i , que correspondem aos q 's (ver Capítulo III), sendo que no caso tem-se $i = kq$.

Nas Figuras VII.4(b) e VII.4(c) são mostrados, respectivamente, o modelo estrutural a ser analisado e a malha de superelementos de contorno, na qual esse modelo foi discretizado, já considerando a simetria do problema.

Esse problema foi tratado, relativamente às condições de contorno, de duas maneiras. Primeiro, no problema intitulado "SEMI-SUBMERSÍVEL/1", essas foram adotadas como sendo apenas valores de intensidade de corrente, a qual é dada pela relação linear

		NÚMERO DE ITERAÇÕES / TEMPO DE PROCESSAMENTO (SEGUNDO)			
Nº DE EQUAÇÕES SOLVER		52	132	308	608
GAUSS SIMPLES		- / 1.00	- / 16.43	- / 210.86	- / 1627.66
GC-22		97/9.14	201/123.47	444/1460.54	-
GC-3		105/10.02	364/221.06	515/1670.84	-
ORTHODIR-RF		77/12.88	EXPON OVERFLOW	-	-
ORTHODIR-JACOBI		60/10.22	EXPON OVERFLOW	-	-
ORTHODIR/GAUSS-SEIDEL		38/ 7.81	EXPON OVERFLOW	-	-
GBC-RF		55/ 5.32	190/115.84	319/1042.85	-
GBC-JACOBI		42/ 4.15	55/33.89	72/237.92	90/1155.90
GBC/GAUSS-SEIDEL		27/ 4.56	41/47.61	74/492.75	93/2780.36
LANCZOS-RF		61/ 5.97	191/117.09	NÃO CONV. (*)	-
LANCZOS-JACOBI		52/ 5.20	156/ 96.59	96/316.63	122/1540.64
LANCZOS/GAUSS-SEIDEL		28/ 4.86	53/ 59.11	74/496.11	96/2850.08

(*) Não convergiu para 1000 iterações.

TABELA VII.3 - Valores obtidos para o número de iterações e tempo de processamento referentes à solução dos sistemas de equações associados ao problema da Figura VII.3, com tolerância 10^{-6}

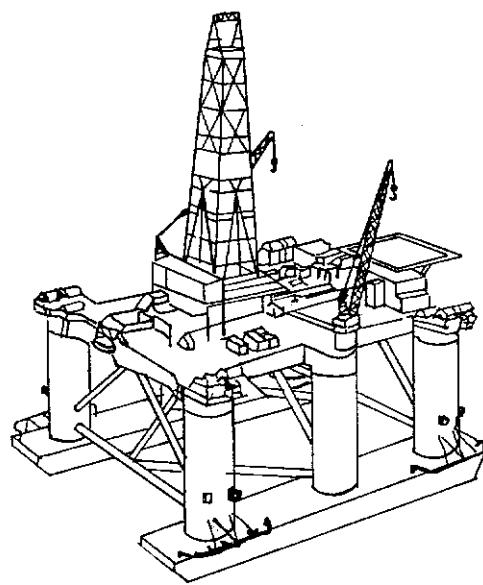


Fig.VII.4 (a). Plataforma Semi-submersível

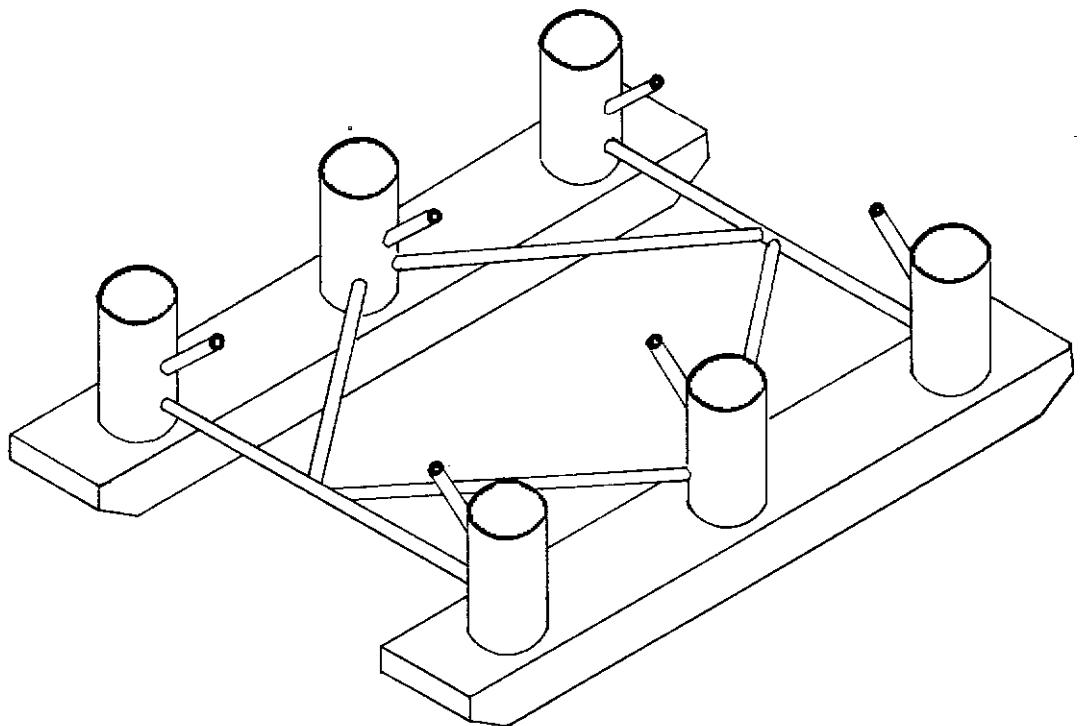


Fig.VII.4 (b). Modelo Estrutural Adotado

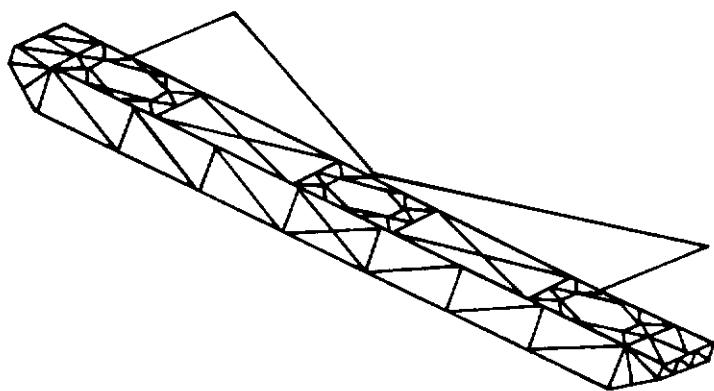


Fig.VII.4(c)- Malha de Superelemento de Contorno Adotada

$$i = a \phi + b , \quad (VII.1)$$

onde nesse caso, os coeficientes da matriz \underline{A} (ver Capítulo III) são todos do tipo

$$a_{ij} = h_{ij} - ag_{ij} . \quad (VII.2)$$

Em segundo lugar, no problema intitulado "SEMI-SUBMERSIVEL/ 2", adotaram-se, tanto condições de contorno do tipo das fornecidas pela equação (VII.1) como valores de potencial elétrico ϕ , e nesse caso, os coeficientes de \underline{A} são ou do tipo dos dados pela relação (VII.2) ou do tipo

$$a_{ij} = h_{ij} . \quad (VII.3)$$

Nos dois casos acima, a malha adotada conti-

nha 424 elementos, o que resultou em sistemas de 510 equa
ções lineares.

Na Tabela VII.4 são fornecidos os resultados do número de iterações e tempo de processamento da resolu
ção dos sistemas pelos "solvers" utilizados.

S O L V E R	Nº DE ITERAÇÕES / TEMPO DE C.P.U. (SEG.)	
	SEMI-SUBMERSIVEL/1	SEMI-SUBMERSIVEL/2
GAUSS SIMPLES	- / 951.158	- / 971.84
GBC-JACOBI	14 / 124.29	62 / 549.97
LANCZOS-JACOBI	14 / 129.05	62 / 555.12
LANCZOS/GAUSS-SEIDEL	12 / 748.89	-

TABELA VII.4 - Valores obtidos para o número de iterações e tempo de processamento referentes à solu
ção dos sistemas associados ao problema das Figuras VII.4(a), (b) e (c)

CAPÍTULO VIIICONCLUSÕES

Encerrada a parte teórica necessária à formulação de "solvers" iterativos, bem como a aplicação dos mesmos aos problemas apresentados no capítulo anterior, será feita, agora, uma análise dos resultados obtidos, onde é comentado o comportamento de cada "solver", diante das aplicações realizadas.

Comentando-se inicialmente, os "solvers" de gradiente conjugado "two- e three-term form" aplicados a matrizes não-simétricas, conclui-se aqui o mesmo fato já observado por outros pesquisadores: esses são caros. Para problemas cujas matrizes resultantes são bem condicionadas, até pode ser que esses se comportem de maneira eficiente, relativamente aos "solvers" diretos, fato esse que pode ser observado quando da utilização desses no problema da Aplicação VII.2, onde tem-se um problema que só possui forças prescritas (chapa auto-equilibrada) e, consequentemente, os coeficientes da matriz \underline{A} são todos da matriz \underline{H} o que indica um melhor condicionamento da matriz \underline{A} . Para problemas de potencial, talvez se obtenha também um comportamento bom dos "solvers" de gradiente conjugado, já que nesses problemas muitas vezes tem-se um bom condicionamento. Todavia, quando da utilização desses nos problemas da Aplicação VII.1 e VII.3, obteve-se que esses se comportaram de maneira inefi-

ciente (tempo de processamento elevado em relação aos "solvers" diretos).

Em relação aos esquemas iterativos baseados na aceleração de gradiente conjugado generalizado (ORTHODIR), tem-se que esses se mostram eficientes em alguns casos, como por exemplo, na Aplicação VII.2, onde a matriz \underline{A} do sistema de equações é bem condicionada, e o processo iterativo prosseguiu até o fim. Também para as aplicações VII.1 e VII.3 observou-se que esses se mostraram eficientes, quando o processo foi totalmente concluído; no entanto, quando a ordem dos sistemas desses problemas aumentava, esses "solvers" apresentaram-se instáveis.

Os "solvers" baseados no processo iterativo de Lanczos (LANCZOS e GBC) é que, no entanto, apresentaram maior eficiência, principalmente quando utilizados com o precondicionamento de Jacobi, onde ressalta-se, desde já, a importância fundamental do precondicionamento adotado. Analisando-se apenas a eficiência proporcionada pelo tipo de precondicionamento escolhido, conclui-se que o precondicionamento de Gauss-Seidel, na maioria das vezes, reduz o número de iterações necessárias para a convergência, no entanto, esse torna o custo por iteração relativamente mais caro que quando utiliza-se o precondicionamento de Jacobi, o que faz com que o tempo de processamento da resolução de sistemas por esses "solvers" normalmente seja bem maior que o tempo de processamento obtido por aqueles "solvers" (LANCZOS ou GBC) que utilizam precondicionamento de Jacobi. Em relação aos

"solvers" LANCZOS-RF e GBC-RF, vê-se que, exceto para o problema da Aplicação VII.2, onde o comportamento deles é tão bom quanto o dos "solvers" LANCZOS-JACOBI e GBC-JACOBI, esses, normalmente, são menos eficientes que aqueles, sendo nitidamente ineficientes, no caso do problema de mecânica da fratura, inclusive em relação aos "solvers" LANCZOS/GAUSS-SEIDEL e GBC/GAUSS-SEIDEL.

Comparando-se agora, para um dado precondicionamento, os "solvers" de LANCZOS e GBC, conclui-se que esses que utilizam a formulação de gradiente biconjugado ("two-term form") apresentam-se ainda mais eficientes que os "solvers" de LANCZOS ("three-term form"), ou seja, os "solvers" GBC são mais eficientes.

Em relação aos "solvers" diretos, a eficiência dos "solvers" iterativos GBC-JACOBI e LANCZOS-JACOBI, principalmente o "solver" GBC-JACOBI, foi constatada, em todos os problemas nos quais esses foram utilizados, quando o sistema de equações de um dado problema atingia certa ordem. A economia proporcionada por esses chegou mesmo a ser surpreendente no problema da verificação da proteção catódica da plataforma semi-submersível, onde enquanto com o "solver" direto o sistema de equações foi processado em 951 segundos, com os "solvers" GBC-JACOBI e LANCZOS-JACOBI esse foi processado em, respectivamente, 124 e 129 segundos.

O fato da eficiência dos "solvers" iterativos só se manifestar depois que os sistemas de equações atingem

uma determinada ordem, está associado ao fato de que o tempo de processamento dos "solvers" diretos é proporcional a N^3 , enquanto que, nos iterativos, é proporcional a pN^2 , onde N é a ordem do sistema, e p é o número de iterações necessárias para a convergência. Desse modo, quanto maior a ordem do sistema, os esforços computacionais associados aos métodos diretos tendem a aumentar mais que os esforços computacionais associados aos métodos iterativos, principalmente, quando p é bem menor que N . Esse fato desperta a atenção para um estudo bem mais aprofundado do fator-escala, já que com isso, pode-se obter resultados bem mais econômicos, fazendo-se uso de "solvers" iterativos em vez de diretos.

Feitos os comentários a respeito dos resultados obtidos com o uso de "solvers" iterativos nos problemas apresentados no capítulo anterior, passa-se agora, às sugestões que podem ser úteis em pesquisas posteriores.

Em primeiro lugar sugere-se aqui a implementação do precondicionamento por fatoração incompleta nos algoritmos de Lanczos e gradiente biconjugado, cujos elementos para isso são inclusive encontrados ao longo desse trabalho. Não menos interessante numa fase inicial, e com o intuito de completar esse trabalho básico, seria muito importante, que sejam feitas aplicações dos melhores "solvers" aqui implementados, bem como desse último comentado, que não está implementado neste trabalho, a um número maior de problemas de Engenharia, principalmente problemas de elasticidade.

dade bi e tridimensional, que normalmente apresentam características mais desfavoráveis.

Numa segunda fase, sugere-se que o estudo do fator-escala, que já foi inclusive comentado anteriormente, seja mais investigado, dado que isso pode proporcionar maiores vantagens dos "solvers" iterativos em relação aos diretos, principalmente para sistemas de equações de grande ordem.

É sugerido, por último, caso através de mais aplicações seja realmente comprovada a eficiência dos "solvers" iterativos que melhor têm se comportado em relação aos diretos, a implementação desses operando em bloco, para que sistemas de equações com ordem realmente elevada (acima de 1000 equações) possam ser resolvidos.

REFERÉNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] HAGEMAN, L.A. and YOUNG, D.M. - Applied Iterative Methods, New York, Academic Press, Inc., First Edition, 1981.
- [2] AXELSSON, O. and BARKER, V.A. - Finite Element Solution of Boundary Value Problems, Florida, Academic Press, Inc., First Edition, 1984.
- [3] BETTESS, J.A. - Efficient Methods for the Solution of Boundary Integral Matrix Equations, Thesis for the Degree of Master of Science, University of Newcastle, 1985.
- [4] CRISFIELD, M.A. - Finite Elements and Solution Procedures for Structural Analysis, Swansea, U.K., Pineridge Press, First Edition, 1986.
- [5] MULLEN, R.L. and RENCIS, J.J. - "Iterative Methods for Solving Boundary Element Equations", Computers & Structures, Vol. 25, nº 5, pp. 713-723, 1987.
- [6] PARREIRA, P.G.S.V. - Análise do Erro no Método dos Elementos de Fronteira em Elasticidade, Tese de Doutorado, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa, 1987.
- [7] BREBBIA, C.A.; TELLES, J.C.F. and WROBEL, L. C. - Boundary Element Techniques, Heidelberg, Springer

Verlag, First Edition, 1984.

- [8] YOUNG, D.M.; HAYES, L.J. and JEA, K.C. - "Generalized Conjugate Gradient Acceleration of Iterative Methods", Part I and II, Research Report CNA 162 and CNA 163 Center for Numerical Analysis, University of Texas at Austin, 1980.
- [9] MANTEUFFEL, T.A. - "The Chebyshev Iteration for Non-symmetric Linear Systems", Vol. 28, pp. 307-327, 1977.
- [10] REID, J.K. - "On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Equations", In Large Sparse Sets of Linear Equations (J.K. Reid ed.), pp. 231-254, New York, Academic Press, 1971.
- [11] ENGELI, M., GINSBURG, M.; RUTISHAUSER, H. and STIEFEL, E. - "Refined Iterative Methods for the Computation of the Solution and the Eigenvalues of Self-adjoint Boundary Value Problems". Inst. Angew. Math. ETH, Zürich, Nr. 8, Basel-Stuttgart, 1959.
- [12] YOUNG, D.M. and JEA, K.C. - "Generalized Conjugate Gradient Acceleration of Nonsymmetrizable Iterative Methods", Linear Algebra and Its Applications, Vol. 34, pp. 159-194, 1980.
- [13] WILKINSON, J.H. - The Algebraic Eigenvalue Problem,

Oxford, Clarendon Press, 1965.

- [14] TELLES, J.C.F.; MARINHO, M.G.; MANSUR, W.J.; WROBEL, L.C. and SANTIAGO, J.A.F. - "Computer Aided Design of Cathodic Protection Problems Using the 'PROCAT' System", Anais da Conferênci a Brasil Offshore, Rio de Janeiro, 1987.
- [15] LEE, C.H. - Numerical Methods for Boundary Integral Equations in Wave-Body Interactions, Thesis of D. Sc., Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, 1988.