

Método iterativo para equações fundamentais de equilíbrio

Francisco D. Moura Neto, Fábio Gonçalves*

Depto de Modelagem Computacional, IPRJ, UERJ,

Caixa Postal 97282

28601-970, Nova Friburgo, RJ

E-mail: fmoura@iprj.uerj.br, fgoncalves@iprj.uerj.br.

Uma classe de modelos matemáticos discretos de variada aplicabilidade prática tem por característica comum a possibilidade de ser representada na forma

$$\begin{cases} C^{-1}\mathbf{y} + A\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ A^t\mathbf{y} = \mathbf{f} \end{cases} \quad (1)$$

onde A e C são operadores lineares, \mathbf{x} e \mathbf{y} definem o estado do sistema e \mathbf{b} e \mathbf{f} são fontes externas ao sistema. Esta abordagem unificadora é apresentada em Strang [2, 4, 3]. O sistema de equações (1) é constituído pelas conhecidas *equações fundamentais de equilíbrio* que descrevem distintas leis físicas de balanço. Por exemplo, em circuitos elétricos, a variável \mathbf{x} pode representar um conjunto de tensões nos nós de uma rede e a variável \mathbf{y} um conjunto de correntes, de tal forma que a lei de Ohm e a lei de corrente de Kirchhoff estariam sendo representadas pela primeira e segunda equação, respectivamente, com $\mathbf{f} = \mathbf{0}$ e C , uma matriz, relacionada às resistências. Na dinâmica de fluidos em meios porosos, \mathbf{x} pode ser interpretado como o campo de pressões e \mathbf{y} como o campo de velocidades de Darcy. Neste caso, a primeira equação representa a Lei de Darcy enquanto que a segunda equação representa o balanço de massa. O operador A é o gradiente, A^t o divergente e C a permeabilidade do meio. Esses são apenas alguns exemplos da aplicabilidade das equações fundamentais de equilíbrio dentre outras aplicações em transferência de calor, estatística, splines e elementos finitos.

Neste trabalho apresentamos um método iterativo, paralelizável, do tipo Jacobi para solucionar equações fundamentais de equilíbrio baseadas em grafos. A formulação na linguagem de grafos exibe de forma simples a estrutura do método iterativo que é uma generalização do algoritmo desenvolvido por Douglas *et al.* [1] através do método de elementos finitos mistos.

As equações fundamentais de equilíbrio podem ser interpretadas com a ajuda de um grafo dirigido constituído por n nós interligados por m arestas orientadas. As variáveis das equações estudadas tem suporte nos nós e nas arestas deste grafo como ilustrado na Figura 1. A cada nó j , associamos uma

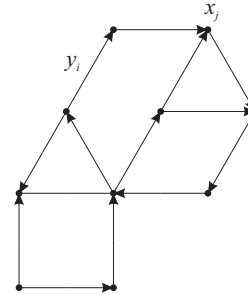


Figura 1: Grafo dirigido.

variável x_j a qual chamamos de potencial e a cada aresta orientada i associamos uma variável y_i , denominada fluxo. A conectividade entre os nós do grafo é bem representada na matriz A das equações fundamentais de equilíbrio, também conhecida por matriz de incidência. Por definição, a matriz $A = (a_{ij})$, de dimensão $m \times n$, é tal que

$$a_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{se o nó } j \text{ for origem da aresta } i; \\ 1, & \text{se o nó } j \text{ for destino da aresta } i; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A partir da matriz de incidência, derivamos outras quatro matrizes de dados que permitem, de forma alternativa, descrever a conectividade entre os nós do grafo. Os elementos de tais matrizes são assim definidos: σ_{i1} e σ_{i2} são, respectivamente, iguais ao índice do nó de origem e de destino da aresta i ; η_{j1} e η_{j2} são, respectivamente, iguais ao total de arestas partindo e chegando ao nó j ; cada j -ésima linha de (α_{jk}) armazena os índices das η_{j1} arestas que partem do nó j ; finalmente, cada j -ésima linha de (ω_{jk}) armazena os η_{j2} índices das arestas que chegam no nó j . Faremos uso dessas matrizes de dados mais adiante.

A matriz $C = (\tilde{c}_{kj})$, $k, j = 1, \dots, m$, é uma matriz simétrica positiva definida que representa a facilidade ou dificuldade dos fluxos através das arestas. Por tal característica, C é chamada de matriz de condutância. Assumimos que a matriz de con-

*Bolsista de Doutorado FAPERJ.

matriz é diagonal,

$$\tilde{c}_{kj} = \begin{cases} c_j, & \text{se } k = j \ (1 \leq k, j \leq m); \\ 0, & \text{se } k \neq j, \end{cases}$$

porque, freqüentemente, essa é a forma com que surge em aplicações.

É importante ressaltar que o sistema de equações (1) tem solução mas não é unicamente determinado, visto que se \mathbf{x} é uma solução das equações fundamentais de equilíbrio, então $\mathbf{x} + \tau \mathbb{1}$ também é uma solução, seja qual for a constante τ , onde $\mathbb{1} \in \mathbb{R}^n$ é um vetor cujas entradas são todas iguais a 1. Isto decorre do fato que $\mathbb{1}$ pertence ao núcleo da matriz A , $A\mathbb{1} = 0$. Uma maneira de selecionar uma solução única é adicionar a equação

$$\mathbb{1}^t \mathbf{x} = 0 \quad (2a)$$

que requer que \mathbf{x} tenha média nula.

A obtenção do algoritmo inicia-se com a introdução de modificações na estrutura do grafo original. Um corte no ponto médio de cada aresta é promovido de modo a dar origem a dois novos nós intermediários. Como consequência, um novo grafo desconexo é gerado. A Figura 2 ilustra todo esse processo. Cada fluxo y_i , previamente representado no grafo dirigido original como ilustrado na Figure 3a, passa a ser representada pelos fluxos \bar{y}_{i1} e \bar{y}_{i2} que estão associados com as duas novas arestas orientadas com direções opostas, veja Figura 3b. Novos potenciais, \bar{x}_{i1} e \bar{x}_{i2} , são introduzidos no ponto médio de cada aresta ligando os nós σ_{i1} e σ_{i2} .

Os novos fluxos e potenciais introduzidos demandam a inclusão de $4m$ novas variáveis. Os novos potenciais são escolhidos de modo a representar valores médios, satisfazendo as equações

$$\bar{x}_{i1} = \bar{x}_{i2} = \frac{x_{\sigma_{i1}} + x_{\sigma_{i2}}}{2}, \quad (2b)$$

que implicam em $2m$ equações. Os novos fluxos satisfazem a relação

$$\bar{y}_{i1} = -\bar{y}_{i2} = y_i. \quad (2c)$$

Portanto, mais $2m$ equações.

O sistema constituído pelas equações (1) e (2) é equivalente ao sistema de equações (3), abaixo listado, onde $i = 1, \dots, n$ e $j = 1, \dots, m$:

$$\bar{y}_{i1} = y_i; \quad (3a)$$

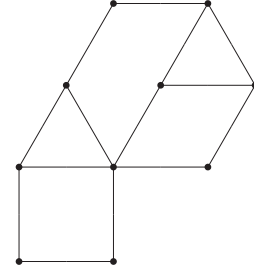
$$\bar{x}_{i1} - \bar{x}_{i2} = \beta(\bar{y}_{i1} + \bar{y}_{i2}), \quad (3b)$$

que é uma condição de interface do tipo Robin, partindo do lado relativo ao novo potencial \bar{x}_{i1} e β é um parâmetro de ajuste *ad hoc*, estritamente positivo;

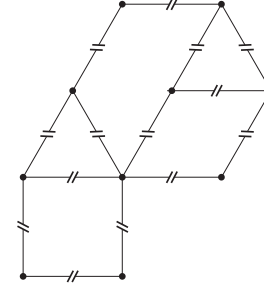
$$\bar{x}_{i1} - \bar{x}_{i2} = -\beta(\bar{y}_{i1} + \bar{y}_{i2}), \quad (3c)$$

que é semelhante a Eq. (3b), desta vez partindo do lado relativo ao novo potencial \bar{x}_{i2} ;

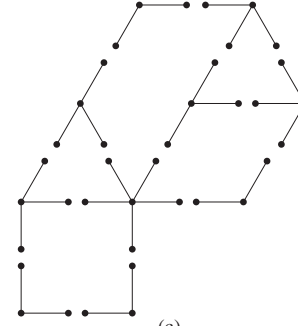
$$c_i^{-1} \bar{y}_{i1} + 2(\bar{x}_{i1} - x_{\sigma_{i1}}) = b_i; \quad (3d)$$



(a)



(b)



(c)

Figura 2: (a) O grafo original; (b) O grafo exibindo cortes; (c) O grafo foi estendido de tal maneira que cada nó original é agora o centro de uma célula com novos nós.

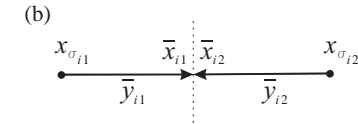
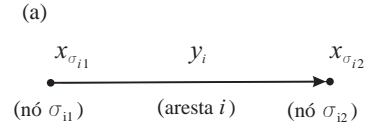


Figura 3: a) Representação original; b) Representação estendida.

$$c_i^{-1} \bar{y}_{i2} + 2(\bar{x}_{i2} - x_{\sigma_{i2}}) = -b_i; \quad (3e)$$

$$-\sum_{k=1}^{\eta_{j2}} \bar{y}_{\omega_{jk}2} - \sum_{k=1}^{\eta_{j1}} \bar{y}_{\alpha_{jk}1} = f_j; \quad (3f)$$

e, finalmente,

$$\sum_{j=1}^n x_j = 0. \quad (3g)$$

O algoritmo iterativo para solucionar o sistema de equações expandido dado pelas Eqs. (3), obedece a seguinte estrutura:

Passo 1. Comece com as variáveis x_j^0 , \bar{x}_{i1}^0 , \bar{x}_{i2}^0 , \bar{y}_{i1}^0 e \bar{y}_{i2}^0 , para $i = 1, \dots, m$ e $j = 1, \dots, n$;

Passo 2. Se o código for em paralelo então troque informações entre computadores, caso contrário, continue;

Passo 3. Para $j = 1, \dots, n$:

- i. Calcule os novos potenciais para cada nó original a partir de valores antigos dos potenciais e fluxos de nós e arestas pertencentes a células vizinhas:

$$x_j^{r+1} \leftarrow \frac{-f_j + \sum_{k=1}^{\eta_{j2}} \xi_{\omega_{jk}} \psi_{\omega_{jk}1}^r}{\sum_{k=1}^{\eta_{j2}} \xi_{\omega_{jk}} + \sum_{k=1}^{\eta_{j1}} \xi_{\alpha_{jk}}} + \frac{\sum_{k=1}^{\eta_{j1}} \xi_{\alpha_{jk}} \psi_{\alpha_{jk}2}^r}{\sum_{k=1}^{\eta_{j2}} \xi_{\omega_{jk}} + \sum_{k=1}^{\eta_{j1}} \xi_{\alpha_{jk}}},$$

onde r é o contador de iteração, $\xi_i = \frac{2c_i}{1+2c_i\beta}$ e $\psi_{is}^r = (-1)^{s+1} \frac{b_i}{2} + (\bar{x}_{is}^r + \beta \bar{y}_{is}^r)$;

- ii. Para $k = 1, \dots, \eta_{j1}$, atualize os fluxos das arestas que originalmente estão deixando o nó j :

$$\bar{y}_{\alpha_{jk}1}^{r+1} \leftarrow \xi_{\alpha_{jk}} \left(x_j^{r+1} - \psi_{\alpha_{jk}2}^r \right);$$

- iii. Para $k = 1, \dots, \eta_{j2}$, atualize os fluxos das arestas que originalmente estão chegando no nó j :

$$\bar{y}_{\omega_{jk}2}^{r+1} \leftarrow \xi_{\omega_{jk}} \left(x_j^{r+1} - \psi_{\omega_{jk}1}^r \right);$$

- iv. Atualize os potenciais médios para $k = 1, \dots, \eta_{j1}$:

$$\bar{x}_{\alpha_{jk}1}^{r+1} \leftarrow \bar{x}_{\alpha_{jk}2}^r + \beta(\bar{y}_{\alpha_{jk}1}^{r+1} + \bar{y}_{\alpha_{jk}2}^r);$$

- v. Atualize os potenciais médios para $k = 1, \dots, \eta_{j2}$:

$$\bar{x}_{\omega_{jk}2}^{r+1} \leftarrow \bar{x}_{\omega_{jk}1}^r + \beta(\bar{y}_{\omega_{jk}1}^r + \bar{y}_{\omega_{jk}2}^{r+1});$$

Passo 4. Calcule:

$$M \leftarrow \frac{\sum_{j=1}^n x_j^{r+1}}{n};$$

- i. For $j = 1, \dots, n$:

$$x_j^{r+1} \leftarrow x_j^{r+1} - M;$$

- ii. For $i = 1, \dots, m$ e $k = 1, 2$:

$$\bar{x}_{ik}^{r+1} \leftarrow \bar{x}_{ik}^{r+1} - M;$$

Passo 5. Pare se o critério de convergência for satisfeito, caso contrário, vá para o passo 2.

Uma demonstração da convergência do método numérico proposto foi obtida. A validação do algoritmo é feita mediante a comparação com os resultados obtidos pelo algoritmo derivado por Douglas *et al.* [1] na determinação das pressões e do campo de velocidades relacionados ao escoamento de um fluido no interior de um meio poroso.

Referências

- [1] J. Douglas Jr., P. J. S. Paes Leme, J. E. Roberts, and J. Wang. A parallel iterative procedure applicable to the approximate solution of second order partial differential equations by mixed finite element methods. *Numer. Math.*, 65:95–108, 1993.
- [2] G. Strang. *Introduction to Applied Mathematics*. Wellesley - Cambridge Press, Philadelphia, 1986.
- [3] G. Strang. A framework for equilibrium equations. *SIAM Rev*, 30(2):283–297, 1988.
- [4] G. Strang. *Linear Algebra and its Applications*. Saunders College Publishing - Harcourt College Publishers, 1988.