(Universidade de São Paulo)
Trabalho 01 - Temperaturas no Grafo de Manhattan

Métodos do Cálculo Numérico I – SME0205
Docente: Antonio Castelo Filho

Julia Guazzelli Monteiro – 15465383
Vinícius de Sá Ferreira – 15491650

21 abr. 2025

1 Modelagem do problema

Suponha $T : \mathbb{N} \times (\mathbb{R} \setminus \mathbb{R}^-) \to \mathbb{R}$ definida por $T(x,t) =$ `temperatura no ponto` x `ao tempo` t. Temos a equação do calor em 1D da seguinte forma

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}$$

onde $\alpha > 0$ é a difusão térmica. Assim podemos fazer a aproximação por série de Taylor para um t_0 fixo, ao redor de x

$$T(x+1) = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{T^{(j)}(x)(\cancel{x}+1-\cancel{x})^j}{j!} = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{T^{(j)}(x)}{j!} = T(x) + T'(x) + \frac{T''(x)}{2} + \frac{T^{(3)}(x)}{6} + \frac{T^{(4)}(x)}{24} + \cdots$$

$$T(x-1) = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{T^{(j)}(x)(\cancel{x}-1-\cancel{x})^j}{j!} = \sum_{j=0}^{+\infty} (-1)^j \frac{T^{(j)}(x)}{j!} = T(x) - T'(x) + \frac{T''(x)}{2} - \frac{T^{(3)}(x)}{6} + \frac{T^{(4)}(x)}{24} - \cdots$$

$$T(x+1) + T(x-1) = 2T(x) + T''(x) + \frac{T^{(4)}(x)}{12} + \cdots$$

$$T''(x) = T(x+1) - 2T(x) + T(x-1) - \frac{T^{(4)}(x)}{12} - \cdots$$

$$\therefore T''(x) = T(x+1) - 2T(x) + T(x-1) - \mathcal{O}(1)$$

logo se definirmos $T_i(t) := T(t,i)$, teremos

$$\frac{dT_i(t)}{dt} = \alpha(T_{i+1}(t) - 2T_i(t) + T_{i-1}(t))$$

Portanto, se tivermos $T(t) = \begin{bmatrix} T_1(t) \\ T_2(t) \\ T_3(t) \\ \vdots \\ T_n(t) \end{bmatrix}$, podemos reescrever a equação em função do Laplaciano L do grafo, dado por $L = G - A$, com G a matriz diagonal com o grau de arestas para cada vértice e A a matriz de adjacência. Note que

$$LT = \left(\begin{bmatrix} G_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & G_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & G_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & G_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} & & \\ & A & \\ & & \end{bmatrix} \right)_{n\times n} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_n \end{bmatrix}_{n\times 1} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix}_{n\times 1}$$

em que, para $i = 1, 2, 3, \cdots, n$ teremos

$$C_i = G_i T_i - \sum_{j\to i} T_j$$

onde $j \to i$ indica os vizinhos de i, aqueles que estão conectados com i. No caso 1D, o grau de um ponto i interno é de 2 e possui 2 pontos conexos, o sucessor e o antecessor, logo teremos a equação

$$\frac{dT_i(t)}{dt} = \alpha(T_{i+1}(t) - 2T_i(t) + T_{i-1}(t)) = -\alpha(2T_i(t) - T_{i-1}(t) - T_{i+1}(t)) = -\alpha(G_i T_i(t) - \sum_{j\to i} T_j(t)) = -\alpha(LT)_i$$

Portanto, temos

$$\frac{dT}{dt} = -\alpha LT \ (*)$$

Uma forma de estender $T(t)$ para $\mathbb{R}$ é com $T(t) = e^{(-\alpha Lt)}T(0)$, onde $T(0) = T_0$. Assim

$$\frac{dT}{dt} = \frac{d}{dt}[e^{(-\alpha Lt)}T(0)] = -\alpha L e^{(-\alpha Lt)}T(0) = -\alpha L(e^{(-\alpha Lt)}T(0)) = -\alpha LT(t)$$

que satisfaz $(*)$. Por fim, se fizermos $\lim_{t\to+\infty} T(t) = T_\infty = \begin{bmatrix} c \\ c \\ c \\ \vdots \\ c \end{bmatrix}$, $c \in \mathbb{R}$, logo $\frac{dT}{dt} = 0$ e a equação fica da seguinte forma

$$\frac{dT}{dt} = -\alpha LT_\infty = \vec{0}$$

$$LT_\infty = \vec{0}$$

$$T_{i+1}(t) - 2T_i(t) + T_{i-1}(t) = 0$$

$$\therefore T_i(t) = \frac{T_{i-1}(t) + T_{i+1}(t)}{2}$$

Agora, podemos adicionar condições de contorno, então teremos para b o vetor com a temperatura em alguns pontos

$$\frac{dT}{dt} = -\alpha LT + b = 0$$

$$\alpha LT = b$$

Com a matriz de penalidades, ajustamos a contribuição resultando em

$$(L + P)T = Pb$$

2 Métodos iterativos

2.1 Gauss-Jacobi

Queremos resolver o sistema $Mx = c$, em que $M = (L + P)T$ e $c = Pb$. Assim, temos

$$\begin{gathered}
Mx = c \\
(M - D + D)x = c \\
(M - D)x + Dx = c \\
(M - D)x^{(k)} + Dx^{(k+1)} = c \\
Dx^{(k+1)} = (D - M)x^{(k)} + c \\
x^{(k+1)} = D^{-1}(D - M)x^{(k)} + D^{-1}c \\
x^{(k+1)} = (I - D^{-1}M)x^{(k)} + D^{-1}c \\
x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g
\end{gathered}$$

Como D é a diagonal de M, o determinante é o produtório da diagonal e M que é não-nulo, então D é inversível. O método convergiu em $k = 1280$ iterações e demorou uma média de $3min$ para uma tolerância de $\pm 10^{-3}$.

2.2 Gauss-Seidel

Queremos resolver o sistema $Mx = c$, em que $M = (L + P)T$ e $c = Pb$. Assim, façamos $M = L + R$, onde L é a matriz triangular inferior de M e R, a triangular superior sem a diagonal, então

$$\begin{gathered}
Mx = c \\
(L + R)x = c \\
Lx + Rx = c \\
Lx^{(k+1)} + Rx^{(k)} = c \\
Lx^{(k+1)} = -Rx^{(k)} + c \\
x^{(k+1)} = (-L^{-1}R)x^{(k)} + L^{-1}c \\
x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g
\end{gathered}$$

Como L é triangular inferior, o determinante é o produtório da diagonal de M que é não-nulo, então L é inversível. O método convergiu em $k = 657$ iterações e demorou uma média de $2min$ para uma tolerância de $\pm 10^{-3}$.

2.3 Gradientes conjugados

Queremos resolver o sistema $Mx = c$, em que $M = (L + P)T$ e $c = Pb$. Considere a função

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Mx - c^T x$$

onde M é simétrica positiva definida (SPD). Note que

$$f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} m_{ij}x_i x_j - \sum_{i=1}^{n} c_i x_i$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(x)}{\partial x_k} &= \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} m_{ij}(x_i\delta_{ik} + x_j\delta_{jk})\right) - c_k = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n} m_{ik}x_i + \sum_{j=1}^{n} m_{kj}x_j\right) - c_k \\
&= \frac{1}{\cancel{2}}\left(\cancel{2}\sum_{j=1}^{n} m_{kj}x_j\right) - c_k = \sum_{j=1}^{n} m_{kj}x_j - c_k
\end{aligned}$$

$$\therefore \nabla f(x) = Mx - c$$

Assim, queremos encontrar x (que é único, porque M é SPD) tal que $\nabla f(x) = 0 \iff Mx - c = 0 \iff Mx = c$.

Começamos com um chute inicial x_0, então teremos um resíduo $r_0 = c - Mx_0 = -\nabla f(x_0)$. Teremos a direção inicial dada por $p_0 = r_0$, assim atualizamos

$$x_1 = x_0 + \alpha p_0$$

Temos que $r_1^T \cdot r_0 = 0$, porque são ortogonais, e $r_1 = c - Mx_1$, então

$$r_1^T \cdot r_0 = 0$$
$$(c - Mx_1)^T \cdot r_0 = 0$$
$$[c - M(x_0 + \alpha p_0)]^T \cdot r_0 = 0$$
$$(c - Mx_0)^T \cdot r_0 - \alpha (Mp_0)^T \cdot r_0 = 0$$
$$(c - Mx_0)^T \cdot r_0 - \alpha (Mp_0)^T \cdot p_0 = 0$$
$$(c - Mx_0)^T \cdot r_0 = \alpha (Mp_0)^T \cdot p_0$$
$$\alpha = \frac{(c - Mx_0)^T \cdot r_0}{(Mp_0)^T \cdot p_0}$$
$$\alpha = \frac{r_0^T \cdot r_0}{p_0^T \cdot M \cdot p_0}$$

Agora fazemos $r_1 = r_0 - \alpha(Mp_0)$ e a direção deve ser atualizada de forma conjugada, isto é, $p_{k+1}^T \cdot M \cdot p_k = 0$. Então podemos fazer

$$p_1 = r_1 + \beta p_0$$
$$p_1^T \cdot M \cdot p_0 = 0$$
$$(r_1 + \beta p_0)^T \cdot M \cdot p_0 = 0$$
$$r_1^T \cdot M \cdot p_0 + \beta(p_0^T \cdot M \cdot p_0) = 0$$
$$\beta(p_0^T \cdot M \cdot p_0) = -r_1^T \cdot M \cdot p_0$$
$$\beta = -\frac{r_1^T \cdot M \cdot p_0}{p_0^T \cdot M \cdot p_0} = -\frac{r_1^T \cdot M \cdot p_0}{r_0^T \cdot M \cdot p_0}$$

Como $r_1 = r_0 - \alpha(Mp_0)$, temos $\dfrac{1}{\alpha}(r_0 - r_1) = M \cdot p_0$, então

$$\beta = -\frac{r_1^T \cdot \left[\cancel{\frac{1}{\alpha}}(r_0 - r_1)\right]}{r_0^T \cdot \left[\cancel{\frac{1}{\alpha}}(r_0 - r_1)\right]} = -\frac{\cancel{r_1^T \cdot r_0} - r_1^T \cdot r_1}{r_0^T \cdot r_0 - \cancel{r_0^T \cdot r_1}} = -\frac{-r_1^T \cdot r_1}{r_0^T \cdot r_0}$$

$$\beta = \frac{r_1^T \cdot r_1}{r_0^T \cdot r_0}$$

Portanto, as etapas são

1. Chute inicial x_0;
2. $p_0 = r_0 = c - Mx_0$;
3. $\alpha = \dfrac{r_k^T \cdot r_k}{p_k^T \cdot M \cdot p_k}$;
4. $x_{k+1} = x_k + \alpha p_k$;
5. $r_{k+1} = r_k - \alpha(M \cdot p_k)$;
6. $\beta = \dfrac{r_{k+1}^T \cdot r_{k+1}}{r_k^T \cdot r_k}$;
7. $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta p_k$;
8. Volta para o passo 3, enquanto $\|r_{k+1}\| > \text{tol}$.

Por fim, o método convergiu em $k = 255$ iterações e demorou uma média de $30s$ para uma tolerância de $\pm 10^{-3}$.

2.4 Resultados

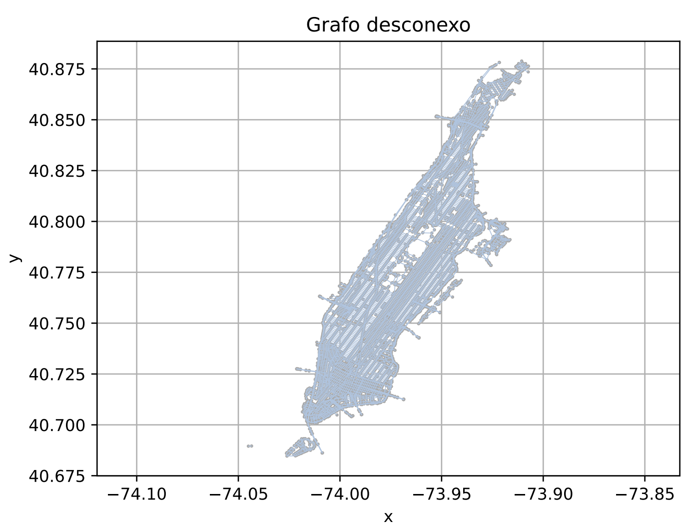
Tolerância: $\pm 10^{-3}$.

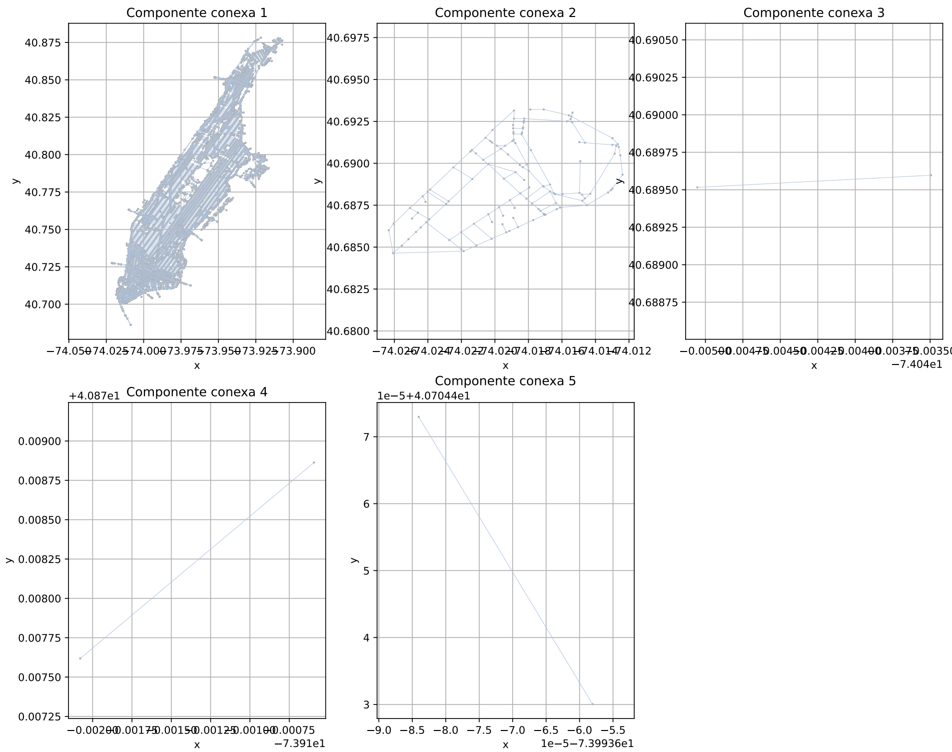
	Gauss-Jacobi	Gauss-Seidel	Gradientes Conjugados
k	1280	657	255
tempo	$3min$	$2min$	$30s$

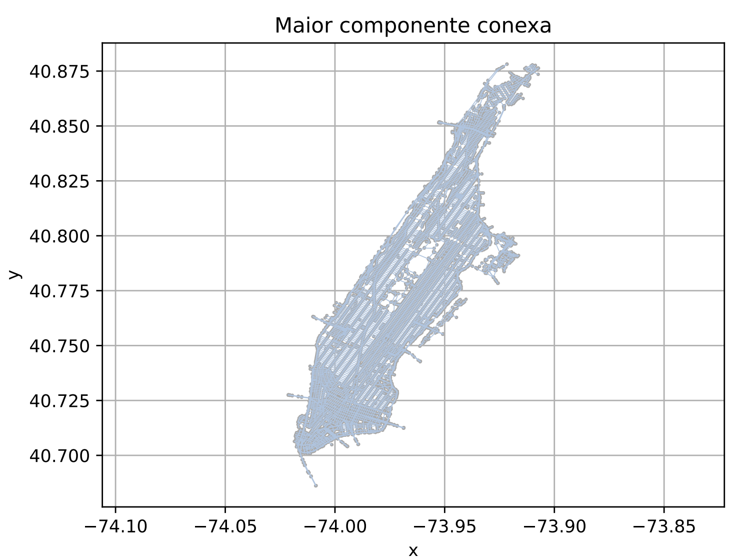
3 Métodos diretos

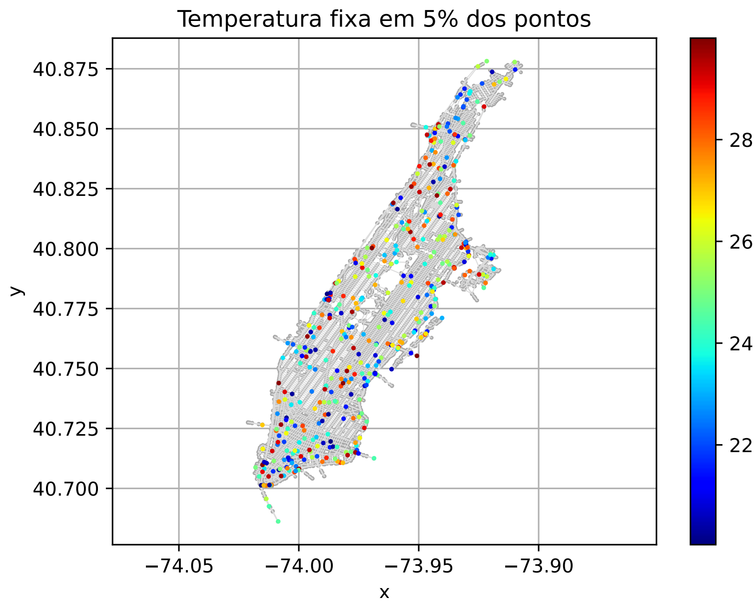
...

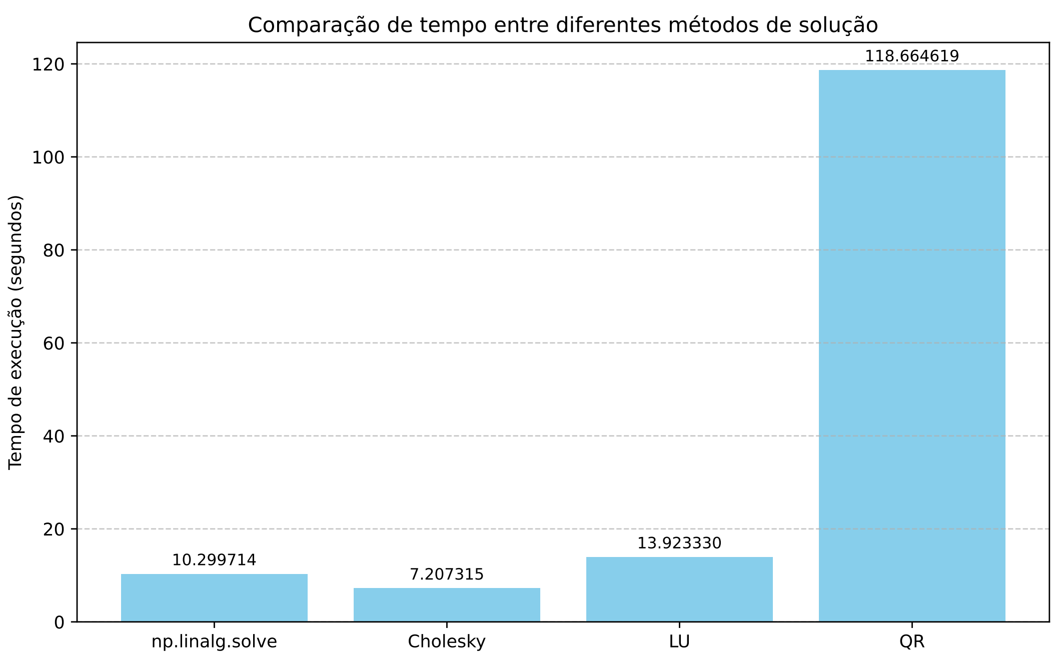
4 Resultado obtido

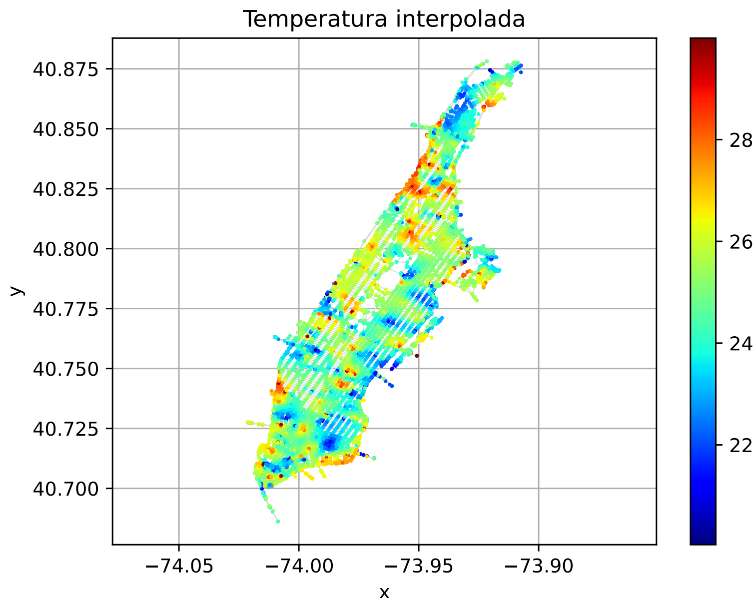


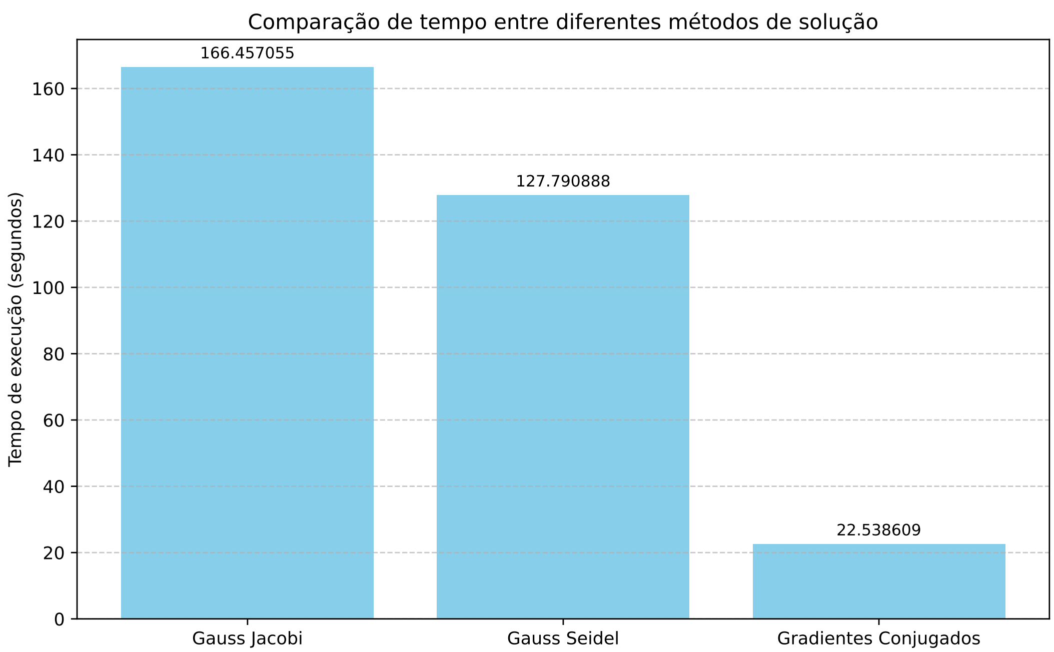

Componente conexa 1
Componente conexa 2
Componente conexa 3
Componente conexa 4
Componente conexa 5
x
y
−7.404e1
+4.087e1
−7.391e1
1e−5+4.07044e1
1e−5−7.39936e1


Maior componente conexa
40.875
40.850
40.825
40.800
40.775
40.750
40.725
40.700
y
−74.10
−74.05
−74.00
−73.95
−73.90
−73.85
x


Temperatura fixa em 5% dos pontos
40.875
40.850
40.825
40.800
40.775
40.750
40.725
40.700
y
−74.05
−74.00
−73.95
−73.90
x
28
26
24
22


Comparação de tempo entre diferentes métodos de solução
Tempo de execução (segundos)
120
100
80
60
40
20
0
10.299714
7.207315
13.923330
118.664619
np.linalg.solve
Cholesky
LU
QR


Temperatura interpolada
40.875
40.850
40.825
40.800
40.775
40.750
40.725
40.700
y
−74.05
−74.00
−73.95
−73.90
x
28
26
24
22


Comparação de tempo entre diferentes métodos de solução
Tempo de execução (segundos)
166.457055
127.790888
22.538609
0
20
40
60
80
100
120
140
160
Gauss Jacobi
Gauss Seidel
Gradientes Conjugados