

Capítulo 2 - Sistemas de Equações Lineares

Carlos Balsa

balsa@ipb.pt

Departamento de Matemática
Escola Superior de Tecnologia e Gestão de Bragança

2º Ano - Eng. Civil e Electrotécnica



Sumário

- 1 Existência Unicidade e Condicionamento
 - Singularidade e Não-Singularidade
 - Normas
 - Numero de Condição
 - Majorantes do Erro
- 2 Resolução por Métodos Directos
 - Processo de Eliminação de Gauss
 - Factorização LU
 - Factorização de Cholesky
- 3 Resolução por Métodos Iterativos
 - Métodos Iterativos Estacionários
 - Métodos Iterativos Não-Estacionários
 - Critério de Paragem de um Método Iterativo
- 4 Considerações Finais

Sistemas de Equações Lineares

- Dada uma matriz A , $m \times n$, e um vector b , $n \times 1$, queremos encontrar um vector x , $n \times 1$, que verifique a igualdade

$$Ax = b$$

- Corresponde a perguntar: “Existe algum vector b que seja combinação linear das colunas de A ?” (o mesmo que $b \in \text{span}(A)$?)
- Se sim, os coeficientes da combinação linear correspondem às componentes de x
- A solução pode ou não existir e pode ou não ser única
- Neste capítulo vamos considerar apenas o caso $m = n$ (matriz dos coeficiente quadrada)

Exemplo 1: Sistemas de Equações Lineares

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \Leftrightarrow Ax = b$$

$$\Leftrightarrow x_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{bmatrix} + \cdots + x_n \begin{bmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Singularidade e Não-Singularidade

Uma matriz A , $n \times n$, é **não-singular** se verificar qualquer uma das seguintes propriedades

- 1 A inversa de A , designada por A^{-1} , existe
- 2 $\det(A) \neq 0$
- 3 Característica(A) = n
- 4 Para qualquer $z \neq 0$, $Az \neq 0$
- 5 Valores próprios de A são todos diferentes de zero ($\lambda_i \neq 0$ para $i = 1, 2, \dots, n$)

Existência e Unicidade

- Existência e unicidade da solução de $Ax = b$ depende de A ser ou não singular
- Pode depender igualmente de b , mas apenas no caso de A ser singular
- Se $b \in \text{span}(A)$, o sistema diz-se consistente (ou possível)

A	b	Nº de soluções
não-singular	arbitrário	uma (única)
singular	$b \in \text{span}(A)$	infinitas
singular	$b \notin \text{span}(A)$	nenhuma

Interpretação Geométrica

- A duas dimensões (no plano), cada equação representa uma linha recta
- A solução é o ponto de intersecção das duas rectas
- Se as duas rectas não forem paralelas (não-singular), o ponto de intersecção é único
- Se as duas rectas forem paralelas (singular), das duas uma, ou as rectas não se intersectam (não há solução) ou então coincidem (existem infinitas soluções)
- Para maiores dimensões, as equações correspondem a hiperplanos; se a matriz for não-singular a intersecção dos hiperplanos ocorre apenas num ponto (solução única)

Exemplo 2: não-singularidade

- Sistema 2×2

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 = b_1 \\ 5x_1 + 4x_2 = b_2 \end{cases}$$

ou em notação matricial

$$Ax = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = b$$

é não-singular independentemente do valor de b

- Por exemplo, se $b = [8 \ 13]^T$, então $x = [1 \ 2]^T$ é a solução única

Exemplo 3: singularidade

- Sistema 2×2

$$Ax = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = b$$

é singular independentemente do valor de b

- Com $b = [4 \ 7]^T$ não existe solução
- Com $b = [4 \ 8]^T$, $x = [\alpha \ (4 - 2\alpha)/3]^T$ é solução para qualquer valor real α , pelo que existem infinitas soluções

Normas Vectoriais

- **Norma** de um vector é uma generalização da magnitude ou módulo de um escalar
- Utilizaremos apenas normas- p , definidas como

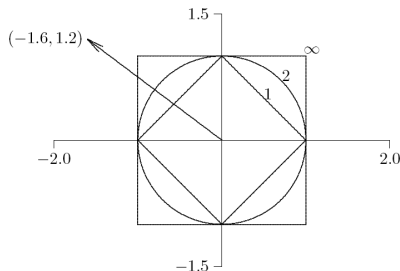
$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}$$

para o inteiro $p > 0$ e o vector x de dimensão n

- Casos particulares importantes
 - norma-1: $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
 - norma-2: $\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2}$
 - norma- ∞ : $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$

Exemplo 4: Normas Vectoriais

- Desenho mostra a esfera unitária em duas dimensões para cada uma das normas



- Para o vector desenhado as normas tem os seguintes valores

$$\|x\|_1 = 2.8, \quad \|x\|_2 = 2.0, \quad \|x\|_\infty = 1.6$$

- Em geral, para $x \in \mathbb{R}^n$, tem-se $\|x\|_1 \geq \|x\|_2 \geq \|x\|_\infty$

Propriedades das Normas Vectoriais

- Para qualquer norma vectorial
 - $\|x\| > 0$ se $x \neq 0$
 - $\|\gamma x\| = |\gamma| \cdot \|x\|$ para qualquer escalar γ
 - $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (desigualdade do triângulo)
 - $||\|x\| - \|y\|| \leq \|x - y\|$

Normas Matriciais

- **Norma matricial** correspondente a uma dada norma vectorial é definida como

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

- Norma matricial mede o alongamento máximo que a matriz produz sobre um vector quando é multiplicada por esse vector

Normas Matriciais, continuação

- Norma-1 matricial correspondente à maior das somas obtidas por coluna

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$$

- Norma-inf' matricial correspondente à maior das somas obtidas por linha

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

- Uma forma fácil de memorizar estas normas consiste em lembrar-se que estas correspondem às normas vectoriais quando a matriz é do tipo $n \times 1$

Exemplo 5: Normas Matriciais

Considerando a seguinte matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 4 & 6 & 0 \\ -5 & 1 & 7 \end{bmatrix}$$

calcule $\|A\|_1$ e $\|A\|_\infty$

Resposta: $\|A\|_1 = \max \{11, 10, 8\} = 11$ e

$\|A\|_\infty = \max \{6, 10, 13\} = 13$

Propriedades das Normas Matriciais

- Qualquer norma matricial verifica
 - $\|A\| > 0$ se $A \neq 0$
 - $\|\gamma A\| = |\gamma| \cdot \|A\|$ para qualquer escalar γ
 - $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$
- As normas matriciais que definimos verificam igualmente
 - $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$
 - $\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$ para qualquer vector x

Numero de Condição

- **Numero de Condição** de uma matriz quadrada não-singular é definido por

$$\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

- Por convenção, $\text{cond}(A) = \infty$ se A for singular
- Uma vez que

$$\text{cond}(A) = \left(\max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \right) \cdot \left(\min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \right)^{-1}$$

o número de condição mede a razão entre o alongamento máximo e o encolhimento máximo provocado pela matriz sobre um vector não nulo

- $\text{cond}(A)$ elevado significa que A é **aproximadamente singular**

Propriedades do Número de Condição e Aproximação do seu Valor

- Propriedades do número de condição
 - Para qualquer matriz A , $\text{cond}(A) \geq 1$
 - Para a matriz identidade I , $\text{cond}(I) = 1$
 - Para qualquer matriz A e escalar γ , $\text{cond}(\gamma A) = \text{cond}(A)$
 - Para qualquer matriz diagonal $D = \text{diag}(d_i)$,
$$\text{cond}(D) = \frac{\max |d_i|}{\min |d_i|}$$
- Definição de número de condição exige a matriz inversa pelo que o seu cálculo é caro do ponto de vista computacional
- Na prática, é feita uma estimativa de baixo custo do número de condição

Erro em Função de Perturbações no Termo Independente

- Seja x a solução de $Ax = b$ e $\bar{x}$ a solução de $A\bar{x} = b + \Delta b$
- Se $\Delta x = \bar{x} - x$ verifica-se o limite superior

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$$

para a mudança relativa na solução x devida à mudança relativa no termo independente b

Erro em Função de Perturbações na Matriz dos Coeficientes

- Verifica-se um resultado semelhante para mudanças relativas na matriz: se $(A + \Delta E)\bar{x} = b$, então

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\Delta E\|}{\|A\|}$$

- Se os dados introduzidos forem exactos até à precisão máquina, o limite superior do erro em x é

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \epsilon_{maq}$$

Significa que a solução calculada perde aproximadamente $\log_{10}(\text{cond}(A))$ dígitos exactos em comparação com o input

Resíduo

- O vector resíduo da solução aproximada $\bar{x}$ do sistema $Ax = b$ é definido por

$$r = b - A\bar{x}$$

- Em teoria, se A é não singular, então $\|\bar{x} - x\| = 0$ se e só se $\|r\| = 0$, mas não são obrigatoriamente pequenos em simultâneo
- Dado que

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|\bar{x}\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|A\| \cdot \|\bar{x}\|}$$

um pequeno resíduo relativo implica um pequeno erro relativo na solução aproximada apenas se A é bem condicionada

Exemplo 6: Resíduo e condicionamento

- Considere o seguinte sistema de equações lineares

$$Ax = \begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.457 & 0.330 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.254 \\ 0.127 \end{bmatrix} = b.$$

Considere duas soluções aproximadas

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} -0.0827 \\ 0.5 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \bar{y} = \begin{bmatrix} 0.999 \\ -1.001 \end{bmatrix}$$

As normas dos respectivos resíduos são

$$\|r_x\|_1 = 2.1 \times 10^{-4} \quad \text{and} \quad \|r_y\|_1 = 2.4 \times 10^{-3}$$

Qual é a melhor solução?

- Resposta: a melhor aproximação é $\bar{y}$ pois a resposta exacta é $[1 \ -1]^T$

Tipos de Sistemas

- A é **estritamente diagonalmente dominante por linhas** se

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

- A é **estritamente diagonalmente dominante por colunas** se

$$|a_{jj}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}| \quad j = 1, \dots, n$$

- A é **Simétrica** se $A = A^T$
- A é **Positiva Definida** se $A^T y A > 0$ para qualquer $y \neq 0 \in \mathbb{R}^n$
 - Todos os *pivots* são positivos
 - Todos determinantes superiores esquerdos > 0
 - Todos valores próprios com parte real positiva

Exemplo 7: Matriz Diagonalmente Dominante

- $A = \begin{bmatrix} 23 & 11 & 10 \\ 12 & -20 & 5 \\ 0 & -4 & 30 \end{bmatrix}$

- É estritamente diagonalmente dominante por linhas pois

$$|23| > |11| + |10|$$

$$|-20| > |12| + |5|$$

$$|30| > |0| + |-4|$$

- É estritamente diagonalmente dominante por colunas pois

$$|23| > |12| + |0|$$

$$|-20| > |11| + |-4|$$

$$|30| > |5| + |10|$$

Métodos Directos *versus* Tipos de Sistemas

- Método a aplicar na resolução do sistema $Ax = b$, com $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $x, b \in \mathbb{R}^n$, depende sobretudo das propriedades da matriz A
- **Método da factorização LU**: A não é simétrica e estritamente diagonalmente dominante por colunas
- **Método da factorização LU com pivotagem parcial**: A não é simétrica e não é estritamente diagonalmente dominante por colunas
- **Método da factorização de Cholesky**: A é simétrica e positiva definida

Resolução por Métodos Directos

- Resolver um sistema consiste muitas vezes em transformá-lo num sistema equivalente (com a mesma solução) e mais fácil de resolver
- **Pré-multiplicar** (à esquerda) os dois membros do sistema $Ax = b$ por uma matriz não singular M que anula uma ou mais variáveis
- Pré-multiplicar pela **matriz de permutação** P para trocar a ordem das linhas na matriz
 - P apenas contém um 1 em cada linha e em cada coluna, os restantes elementos são todos 0 (é uma permutação da matriz identidade)
 - Observa-se que $P^{-1} = P^T$

Exemplo 8: Permutação de Duas Linhas de uma Matriz

- Para permutar a posição relativa de duas linhas temos de multiplicar a matriz por uma matriz P obtida à partir da matriz identidade permutando as linhas correspondentes
- Consideramos a seguinte matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

A permutação da linha 1 com a linha 3 ($L_1 \leftrightarrow L_3$) faz-se através de

$$PA = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

Sistemas de Equações Lineares triangulares

- Os sistemas **triangulares** são facilmente resolvidos por substituição
- Se U é **triangular superior** as entradas abaixo da diagonal principal são todas nulas: $u_{ij} = 0$ para $i > j$ e o sistema $Ux = b$ é resolvido por **substituição regressiva**

$$x_n = b_n / u_{nn}, \quad x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j \right) / u_{ii}, \quad i = n-1, \dots, 1$$

- Se L é **triangular inferior** as entradas acima da diagonal principal são todas nulas: $\ell_{ij} = 0$ para $i < j$ e o sistema $Lx = b$ é resolvido por **substituição progressiva**

$$x_1 = b_1 / \ell_{11}, \quad x_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij} x_j \right) / \ell_{ii}, \quad i = 2, \dots, n$$

Processo de Eliminação de Gauss

- Para transformar um sistema genérico num sistema triangular utiliza-se o método de eliminação de Gauss em que temos de anular determinados elementos não-nulos da matriz
- Pode ser conseguido através da combinação linear de linhas
- Se quisermos anular a_2 no vector

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

- Se $a_1 \neq 0$ então

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -a_2/a_1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Matrizes de Eliminação Elementares

- Genericamente, podemos anular todas as entradas abaixo da posição k de um vector a de dimensão n através da transformação

$$M_k a = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & -m_{k+1} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -m_n & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ \textcolor{red}{a}_k \\ a_{k+1} \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_k \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

em que $m_i = a_i / \textcolor{red}{a}_k$ para $i = k + 1, \dots, n$

- Divisor a_k , chamado *pivot*, tem de ser diferente de zero

Exemplo 9: Matriz de Eliminação Elementar

Para anular as duas últimas coordenadas do vector $v = [3 \ 5 \ 2]^T$ efectua-se a seguinte multiplicação

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -5/3 & 1 & 0 \\ -2/3 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -5/3 \times 3 + 5 \\ -2/3 \times 3 + 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Factorização LU

- Multiplicando sucessivamente a matriz A por $n - 1$ matrizes deste tipo, de forma a anular todos os elementos abaixo da diagonal, começando pela primeira coluna, obtemos uma matriz triangular superior

$$M_{n-1} \dots M_2 M_1 A = U$$

- O produto das matrizes elementares origina uma matriz triangular inferior

$$M_{n-1} \dots M_2 M_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & -m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -m_{n1} & -m_{n2} & \cdots & -m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} = M$$

Factorização LU, continuação

- Como $MA = U$ então $A = M^{-1}U$ e dada a estrutura particular da matriz M (matriz triangular com diagonal unitária) tem-se que

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

- Obtemos assim uma factorização da matriz A no produto de uma matriz triangular inferior $L = M^{-1}$ por uma matriz triangular superior U , i.e.,

$$A = LU$$

este processo é designado por **factorização LU**

Factorização LU, continuação

- $A = LU$
 - Matriz L constituída por todos os multiplicadores m_{ij} utilizados para anular elementos não-nulos de A abaixo da diagonal principal
 - Matriz U é a matriz que resulta da condensação de A à forma triangular superior
- Uma vez obtida a factorização de A , o sistema $Ax = b$ pode ser resolvido facilmente em duas etapas, pois

$$Ax = b \Leftrightarrow (LU)x = b \Leftrightarrow L(Ux) = b \Leftrightarrow Ly = b \quad \text{com} \quad y = Ux$$

e consequentemente a sua resolução efectua-se através de

- 1 Resolver por substituição progressiva $Ly = b$
- 2 Resolver por substituição regressiva $Ux = y$

Exemplo 10: Resolução por Factorização LU

- Resolver o sistema $Ax = b$ por Factorização LU

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 7 \\ 17 \\ 15 \end{bmatrix} = b$$

- Para efectuar a factorização da matriz A , começamos por anular as entradas da primeira coluna abaixo da diagonal

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix}$$

Exemplo 10, continuação

- De seguida, a anulação das entradas da segunda coluna corresponde a

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

- Finalmente, a anulação da entrada abaixo da diagonal da coluna 3

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \Leftrightarrow A = LU$$

Exemplo 10, continuação

- De seguida, resolve-se por substituição progressiva o sistema

$$Ly = b \Leftrightarrow \begin{cases} y_1 & & & & = & 3 \\ 2y_1 & + & y_2 & & & = & 7 \\ 4y_1 & + & 3y_2 & + & y_3 & & = & 17 \\ 3y_1 & + & 4y_2 & + & y_3 & + & y_4 & = & 15 \end{cases}$$

cujas solução é o vector $y = [3 \ 1 \ 2 \ 0]^T$

- A solução do sistema é obtida resolvendo por substituição regressiva o sistema

$$Ux = y \Leftrightarrow \begin{cases} 2x_1 & + & x_2 & + & x_3 & & & = & 3 \\ & & x_2 & + & x_3 & + & x_4 & = & 1 \\ & & & & 2x_3 & + & 2x_4 & = & 2 \\ & & & & & & 2x_4 & = & 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 & = & 1 \\ x_2 & = & 0 \\ x_3 & = & 1 \\ x_4 & = & 0 \end{cases}$$

Factorização LU com Pivotagem Parcial

- O método da factorização LU falha se surgir um *pivot* igual a zero ou muito pequeno (a divisão por um valor de baixa magnitude pode provocar um *overflow*)
- Para evitar este problema permutam-se as linhas de A de maneira a que o elemento da coluna com maior valor absoluto fique na posição de *pivot*
- Desta forma obtemos a factorização LU de uma permutação de A , i.e, $PA = LU$
- Como o sistema a resolver $Ax = b$ é equivalente a $P Ax = P b$

$$(LU)x = Pb \Leftrightarrow L(Ux) = Pb \Leftrightarrow Ly = Pb \quad \text{com} \quad y = Ux$$

a sua resolução efectua-se através de

- 1 Resolver por substituição progressiva $Ly = Pb$
- 2 Resolver por substituição regressiva $Ux = y$

Exemplo 11: Factorização LU com Pivotagem Parcial

- Resolver por factorização LU com pivotagem parcial o sistema

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 7 \\ 17 \\ 15 \end{bmatrix}$$

- Começamos pela factorização da matriz A , permutando a linha 1 com a linha 3

$$P_1 A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

Exemplo 11, continuação

- Agora na matriz resultante vamos anular as entradas da primeira coluna que estão abaixo da diagonal principal através das operações

$$\ell_2 \leftarrow \ell_2 - 1/2\ell_1$$

$$\ell_3 \leftarrow \ell_3 - 1/4\ell_1$$

$$\ell_4 \leftarrow \ell_4 - 3/4\ell_1$$

- Na forma matricial estas operações correspondem a

$$P_1 A = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{3}{4} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ 0 & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \end{bmatrix}$$

Exemplo 11, continuação

- Agora a linha 2 permuta com a linha 4, pela que a operação matricial corresponde é

$$P_2 P_1 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ 0 & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{6} & -\frac{5}{4} \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}$$

- Continuando com o processo de eliminação na segunda coluna obtemos

$$P_2 P_1 A = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ 0 & 0 & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \end{bmatrix}$$

Exemplo 11, continuação

- Agora permutamos a 3ª linha com a 4ª multiplicando por P_3 :

$$\begin{aligned}
 P_3 P_2 P_1 A &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

- A última etapa da eliminação que consiste em fazer $\ell_3 \leftarrow \ell_3 - \begin{pmatrix} -2/7 \\ -6/7 \end{pmatrix} \ell_2$ é então

$$\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

Exemplo 11, continuação

- Obtemos assim a factorização $PA = LU$

$$\Leftrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{PA} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} \end{bmatrix}}_U$$

com

$$P = P_3 P_2 P_1$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_P = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{P_3} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{P_2} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{P_1}$$

Exemplo 11, continuação

- De seguida, resolve-se por substituição progressiva o sistema

$$Ly = Pb \Leftrightarrow \begin{cases} y_1 & & & & = 17 \\ \frac{3}{4}y_1 + y_2 & & & & = 15 \\ \frac{1}{2}y_1 + -\frac{2}{7}y_2 + y_3 & & & & = 7 \\ \frac{1}{4}y_1 + -\frac{3}{7}y_2 + \frac{1}{3}y_3 + y_4 & & & & = 13 \end{cases}$$

cujas solução é o vector $y = [17 \ 9/4 \ -6/4 \ 0]^T$

- A solução do sistema é obtida resolvendo por substituição regressiva o sistema $Ux = y$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 8x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 17 \\ \frac{7}{4}x_2 + \frac{9}{4}x_3 + \frac{17}{4}x_4 = \frac{9}{4} \\ -\frac{6}{7}x_3 + -\frac{2}{7}x_4 = -\frac{6}{4} \\ \frac{2}{3}x_4 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 0 \\ x_3 = 1 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

Factorização LU no Octave

No Octave, a resolução do sistema $Ax = b$ por factorização LU:

Factorização: $[L, U, P] = lu(A)$

Resolução:

- 1 $y = L \setminus (P * b)$
- 2 $x = U \setminus y$

Factorização de Cholesky

- Se A é *simétrica e positiva definida* é possível fazer a decomposição

$$A = LL^T$$

em que L é uma matriz triangular inferior

- Método é conhecido como *Factorização de Cholesky* e tem a vantagem de necessitar apenas de determinar o factor L para se poder resolver o sistema $Ax = b$
 - 1 Resolver por substituição progressiva $Ly = b$
 - 2 Resolver por substituição regressiva $L^T x = y$

Factorização de Cholesky, continuação

- Versão em que a matriz L substitui progressivamente a matriz A

ALGORITMO: FACTORIZAÇÃO DE CHOLESKY

Input: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Output: $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ($\ell_{ij} = 0$ se $i < j$)

For $k = 1 : n$

$$a_{kk} = \sqrt{a_{kk}}$$

For $i = k + 1 : n$

$$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$$

End

For $j = k + 1 : n$

For $i = k + 1 : n$

$$a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} \cdot a_{jk}$$

End

End

End

Exemplo 12: Factorização de Cholesky

- Exercício: resolver o sistema $Ax = b$ igual a

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = b$$

- Começamos por calcular a raiz quadrada da entrada sobre a diagonal da primeira coluna $\sqrt{3} \approx 1.7321$ e dividimos os restantes elementos da coluna por este valor, obtendo

$$\begin{bmatrix} 1.7321 & & \\ -0.5774 & 3 & \\ -0.5774 & -1 & 3 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 12, continuação

- A segunda coluna é actualizada subtraindo-lhe a entrada $(2, 1)$, -0.5774 , vezes a entrada da primeira coluna situada sobre a mesma linha, a terceira coluna é actualizada subtraindo-lhe a entrada $(3, 1)$, também -0.5774 , vezes a entrada correspondente da primeira coluna, obtendo-se

$$\begin{bmatrix} 1.7321 & & \\ -0.5774 & 2.6667 & \\ -0.5774 & -1.3333 & 2.6667 \end{bmatrix}.$$

- A segunda coluna é então dividida pela raiz quadrada da sua entrada diagonal, $\sqrt{2.6667} \approx 1.6330$, originando

$$\begin{bmatrix} 1.7321 & & \\ -0.5774 & 1.6330 & \\ -0.5774 & -0.8165 & 2.6667 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 12, continuação

- A terceira coluna é actualizada subtraindo-lhe a entrada (3, 2), -0.8165 , vezes a entrada da segunda coluna situada sobre a mesma linha e obtém-se

$$\begin{bmatrix} 1.7321 & & \\ -0.5774 & 1.6330 & \\ -0.5774 & -0.8165 & 2.0000 \end{bmatrix}.$$

- Calculando a raiz quadrada da terceira entrada sobre obtemos, $\sqrt{2.0000} \approx 1.4142$, obtemos resultado final

$$L = \begin{bmatrix} 1.7321 & & \\ -0.5774 & 1.6330 & \\ -0.5774 & -0.8165 & 1.4142 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 12, continuação

Para obter a solução do sistema $Ax = b$

- 1 Resolver por substituição progressiva $Ly = b$

$$\begin{cases} 1.7321y_1 & = 1 \\ -0.5774y_1 + 1.6330y_2 & = 1 \\ -0.5774y_1 + -0.8165y_2 + 1.4142y_3 & = 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} y_1 = 0.577 \\ y_2 = 0.816 \\ y_3 = 1.414 \end{cases}$$

- 2 Resolver por substituição regressiva $L^T x = y$

$$\begin{cases} 1.7321x_1 - 0.5774x_2 - 0.5774x_3 & = 0.5773 \\ & 1.6330x_2 - 0.8165x_3 & = 0.8165 \\ & & 1.4142x_3 & = 1.4142 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \\ x_3 = 1 \end{cases}$$

Exercício 1: Factorização de Cholesky

Resolver o sistema $Ax = b$ igual a

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -1 & -2 \\ -1 & 7 & -3 \\ -2 & -3 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = b$$

Factorização de Cholesky no Octave

No Octave, a resolução do sistema $Ax = b$:

Factorização: $R = chol(A)$, em que $R = L^T$

Resolução:

- 1 $y = R' \backslash b$
- 2 $x = R \backslash y$

Métodos Iterativos

- Os métodos iterativos dividem-se em Estacionários, por exemplo:
 - Jacobi
 - Gauss-Seidel
 - SOR
- Não-estacionários, por exemplo:
 - Gradiente Conjugado se A é simétrica e positiva definida
 - MINRES se A é simétrica
 - GMRES para qualquer A
- Os métodos iterativos conduzem a uma solução aproximada, mas com erro controlado, têm vantagens computacionais e implicam menos recursos de memória do que os métodos directos

Métodos Iterativos Estacionários

- A resolução do sistema $Ax = b$ por um método iterativo **estacionário** consiste em fazer a decomposição $A = M - N$, com M não singular, de maneira a obter a relação

$$\begin{aligned}Ax = b &\Leftrightarrow (M - N)x = b \\&\Leftrightarrow Mx = Nx + b \\&\Leftrightarrow x = M^{-1}Nx + M^{-1}b\end{aligned}$$

sobre a qual se baseia o esquema iterativo

$$x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + c$$

- Método convergente se $\rho(G) = \rho(M^{-1}N) < 1$ e quanto mais pequeno for o raio espectral de G mais rápida será a convergência, pelo que M deve ser escolhida de forma a minimizar $\rho(G)$ e a facilitar os cálculos (deve ser próxima de A e ter uma forma simples como diagonal ou triangular)

Métodos de Jacobi

- **Método de Jacobi** consiste na decomposição $M = D$ e $N = -(L + U)$, em que D é uma matriz diagonal igual à diagonal principal de A , L é uma matriz triangular inferior igual à parte inferior à diagonal principal de A e U é uma matriz triangular superior igual à parte superior à diagonal principal de A
- Assumindo que A não tem entradas nulas sobre a diagonal principal, de maneira a que D não seja singular, o método de Jacobi consiste em

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

que em termos de componente equivale a

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \dots, n$$

Métodos de Gauss-Seidel

- A lenta convergência do método de Jacobi é devida em parte ao facto de não fazer uso da informação mais recente disponível
- **Método de Gauss-Seidel** remedia isto utilizando cada nova componente da solução assim que elas são calculadas

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, \dots, n$$

- Usando a mesma notação que anteriormente, o método de Gauss-Seidel consiste em fazer a decomposição $M = D + L$ e $N = -U$ que origina o seguinte esquema iterativo na forma matricial

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

Convergência dos Métodos de Jacobi e de Gauss-Seidel

- Se a matriz A for estritamente diagonalmente dominante por linhas os métodos de Jacobi e de Gauss-Seidel são convergentes
- Condição suficiente mas não necessária; métodos poderão convergir mesmo não se verificando, em particular se A não for estritamente diagonalmente dominante em todas as suas linhas mas apenas diagonalmente dominante
- Estes dois métodos convergem simultaneamente para a solução mas o método de Gauss-Seidel é mais rápido pois o raio espectral da sua matriz de iteração é igual à raiz quadrada do da matriz de iteração do método de Jacobi, i.e, $\rho(G_{GS}) = \sqrt{\rho(G_J)}$

Exemplo 13: Métodos de Jacobi e de Gauss-Seidel

- Descreva os esquemas iterativos de Jacobi e de Gauss-Seidel para a resolução do sistema

$$Ax = b \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 2 & 9 \\ 7 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 54 \\ 20 \\ 7 \end{bmatrix}$$

- Alterando a ordem das equações obtemos um sistema diagonalmente dominante por linhas

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 9 \\ 7 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 54 \\ 20 \\ 7 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 7 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \\ 1 & 2 & 9 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20 \\ 7 \\ 54 \end{bmatrix}$$

Exemplo 13, continuação

- Escrevendo o sistema em termos das suas componentes obtemos

$$\begin{cases} 7x_1 + x_2 + x_3 = 20 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 2x_2 + 9x_3 = 54 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = (20 - x_2 - x_3)/7 \\ x_2 = (7 - x_1 - x_3)/5 \\ x_3 = (54 - x_1 - 2x_2)/9 \end{cases}$$

- Esquema iterativo de Jacobi é

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (20 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)})/7 \\ x_2^{(k+1)} = (7 - x_1^{(k)} - x_3^{(k)})/5 \\ x_3^{(k+1)} = (54 - x_1^{(k)} - 2x_2^{(k)})/9 \end{cases} \quad \text{para } k = 0, 1, 2, \dots$$

- Esquema iterativo de Gauss-Seidel é

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (20 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)})/7 \\ x_2^{(k+1)} = (7 - x_1^{(k+1)} - x_3^{(k)})/5 \\ x_3^{(k+1)} = (54 - x_1^{(k+1)} - 2x_2^{(k+1)})/9 \end{cases} \quad \text{para } k = 0, 1, 2, \dots$$

Successive Over-Relaxation

- Método *Successive Over-Relaxation* (SOR) permite melhorar a taxa de convergência do método de Gauss-Seidel
- Utiliza o passo na direcção da próxima iteração de Gauss-Seidel como direcção de procura, mas com um parâmetro de procura fixo designado por ω
- Começando com $x^{(k)}$, calcula a próxima iteração dada pelo método de Gauss-Seidel, $x_{GS}^{(k+1)}$, depois em vez desta define a próxima iteração como sendo

$$\begin{aligned}x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \omega \left(x_{GS}^{(k+1)} - x^{(k)} \right) \\&= (1 - \omega)x^{(k)} + \omega x_{GS}^{(k+1)}\end{aligned}$$

que corresponde a uma média ponderada entre a iteração corrente e a próxima iteração de Gauss-Seidel

Successive Over-Relaxation, continuação

- ω é o parâmetro de **relaxação** fixo escolhido para acelerar a convergência
- $\omega > 1$ origina **sobre-relaxação**, $\omega < 1$ origina **sub-relaxação** e $\omega = 1$ origina o método de Gauss-Seidel
- Método diverge se não se verificar $0 < \omega < 2$, mas é geralmente muito difícil escolher o valor óptimo de ω

Métodos Iterativos Não-Estacionários

- Nos métodos **não-estacionários** a matriz de iteração não é constante
- Procuram obter em cada iteração a melhor aproximação à solução de acordo com certas restrições e utilizando a informação das iterações anteriores
- Grande variedade (maior parte recentes): CG, MINRES, GMRES,...
- Tipo de método escolhido depende das propriedades do sistema a resolver
- Muito eficientes (numérica e computacionalmente) na resolução de sistemas esparsos de grandes dimensões (um sistema é esparsa se possuir muito mais entradas nulas do que não-nulas)

Método do Gradiente Conjugado

- Sistema $Ax = b$ pode ser resolvido pelo método do **Gradiente Conjugado** (CG) se a matriz A for simétrica e positiva definida
- Em cada iteração k o CG procura o valor de $x^{(k)} \in \text{span} \{b, Ab, A^2b, \dots, A^{k-1}b\}$ que minimiza $\|e\|_A$, em que $e = x^* - x^{(k)}$ é o erro absoluto, x^* é a solução exacta e $\|e\|_A = \sqrt{e^T A e}$
- O conjunto gerado pelos vectores $\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{k-1}b\}$ é designado por **Subspaço de Krylov** e a norma- A do erro absoluto ($\|e\|_A$) é conhecida por **norma energia** do sistema

Método do Gradiente Conjugado, continuação

ALGORITMO: GRADIENTE CONJUGADO

Input: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $b, x_0 \in \mathbb{R}^n$

Output: $x_k \in \mathbb{R}^n$

$$r_0 = b - Ax_0$$

$$s_0 = r_0$$

For $k = 1, 2, 3, \dots$

$$\alpha_k = r_k^T r_k / s_k^T A s_k$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k s_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A s_k$$

$$\beta_{k+1} = r_{k+1}^T r_{k+1} / r_k^T r_k$$

$$s_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} s_k$$

End

Outros Métodos

- Existe uma grande variedade de métodos iterativos, pois trata-se de um campo em plena expansão devido à crescente capacidade de computação disponibilizada pelos modernos computadores
- Alguns exemplos:
 - MINRES: se A é simétrica mas não Positiva Definida
 - GMRES: se A não é simétrica
 - E muitos outros...

Critério de Paragem de um Método iterativo

- Uma vez que em teoria um método iterativo só atinge a solução após um numero infinito de iterações, põem-se a questão de saber quando devemos parar
- Com base na qualidade da aproximação:

Aproximação do erro relativo

$$\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(k+1)}\|} \leq tol$$

Resíduo relativo

$$\frac{\|b - Ax^{(k)}\|_2}{\|b\|_2} \leq tol$$

- Com base num número máximo de iterações:

$$k \leq k_{\max}$$

Exemplo 14: Critério de Paragem

- Aproxime a solução do sistema apresentado no Exemplo 13 pelo método de Gauss-Seidel de maneira a obter

$$\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_1}{\|x^{(k+1)}\|_1} \leq 10^{-3}$$

- Iniciando o processo iterativo de Gauss-Seidel a partir do vector $x^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T$ por exemplo, obtemos

$$\begin{cases} x_1^{(1)} = (20 - x_2^{(0)} - x_3^{(0)})/7 \\ x_2^{(1)} = (7 - x_1^{(1)} - x_3^{(0)})/5 \\ x_3^{(1)} = (54 - x_1^{(1)} - 2x_2^{(1)})/9 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1^{(1)} = 20/7 = 2.8571 \\ x_2^{(1)} = (7 - 2.8571)/5 = 0.82857 \\ x_3^{(1)} = (54 - 2.8571 - 2(0.82857))/9 = 5.4984 \end{cases}$$

- Calculamos agora o erro associado a $x^{(1)}$ que é $\frac{\|x^{(1)} - x^{(0)}\|_1}{\|x^{(1)}\|_1} = 1$, como este é maior do que a tolerância 10^{-3} continuamos com o processo iterativo calculando $x^{(2)}$

Exemplo 14, continuação

$$\begin{cases} x_1^{(2)} = (20 - x_2^{(1)} - x_3^{(1)})/7 \\ x_2^{(2)} = (7 - x_1^{(2)} - x_3^{(1)})/5 \\ x_3^{(2)} = (54 - x_1^{(2)} - 2x_2^{(2)})/9 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = 1.95329 \\ x_2^{(2)} = -0.09034 \\ x_3^{(2)} = 5.80304 \end{cases}$$

$$\frac{\|x^{(2)} - x^{(1)}\|_1}{\|x^{(2)}\|_1} \approx 0.28 > tol$$

A tabela seguinte apresenta um resumo dos cálculos efectuados até à convergência

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	erro
0	0	0	0	
1	2.8571	0.82857	5.4984	1
2	1.95329	-0.09034	5.80304	2.8e-1
3	2.04104	-0.16882	5.81073	2.2e-2
4	2.05115	-0.17238	5.81040	1.8e-3
5	2.05171	-0.17242	5.81035	8.2e-5

Obtemos assim a solução aproximada $x \approx [2.05171 \quad -0.17242 \quad 5.81035]^T$

Métodos Disponíveis no Octave e na NMLibforOctave

Octave:

- Factorização LU: $[L, U, P] = \text{lu}(A)$
- Factorização de Cholesky: $[U] = \text{chol}(A)$
- CG: $[x, \text{flag}, \text{rres}, k, \text{eig}] = \text{pcg}(A, b, \text{tol}, \text{maxit})$

NMLibforOctave:

- Jacobi: $[x, r, \text{its}] = \text{jacobi}(A, b, x0, \text{itmax}, \text{tol})$
- Gauss-Seidel: $[x, r, \text{its}] = \text{gauss_seidel}(A, b, x0, \text{itmax}, \text{tol})$
- MINRES: $[x, \text{flag}, \text{relres}, \text{its}, \text{resvec}] = \text{minres}(A, b, \text{rtol}, \text{maxit})$
- GMRES: $[x, \text{its}, \text{bck_er}, \text{flag}] = \text{gmres}(A, b, x0, \text{itmax}, M, \text{tol})$

Bibliografia

Exposição baseada essencialmente no capítulo 2 de

- Michael T. Heath. "Scientific Computing an Introductory Survey". McGraw-Hill, 2002, New York.

e no capítulo 5 de

- Alfio Quarteroni e Fausto Saleri. "Cálculo Científico com MATLAB e Octave". Springer, 2006, Milão.