Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT
Aula 12 - Resolução numérica de sistemas de equações

Ana Leonor Silvestre

Instituto Superior Técnico, $1^{\underline{o}}$ *Semestre, 2020/2021*

Sumário da Aula 12

Cap. 3 - Resolução numérica de sistemas de equações

Convergência dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel em sistemas com matriz de diagonal dominante.

Convergência do método de Gauss-Seidel em sistemas com matriz simétrica e definida positiva.

Raio espetral de uma matriz. Condição necessária e suficiente de convergência.

Método de Newton para a resolução numérica de sistemas não-lineares.

Sistemas de equações lineares

Condições de convergência dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel em termos da matriz A

- Os algoritmos dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel não requerem explicitamente as respetivas matrizes de iteração, uma vez que as entradas da matriz A e as componentes do vetor b são usados diretamente no algoritmo para obter as sucessivas iteradas dos métodos.
- Pretendemos deduzir condições que permitam assegurar a convergência dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel analisando diretamente a matriz A.

Sistemas com matriz de diagonal estritamente dominante

Começamos por tentar perceber o que significa a condição

$$\|C_J\|_\infty < 1$$

em termos de propriedades da matriz A.
É fácil ver que

$$(C_J)_{ij} = \begin{cases} -\dfrac{a_{ij}}{a_{ii}},\ i \neq j, \\ 0,\ i = j \end{cases}$$

pelo que

$$\|C_J\|_\infty < 1 \iff \max_{1\leq i\leq N} \sum_{j=1}^{N} |c_{ij}| < 1$$

$$\iff \max_{1\leq i\leq N} \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1 \Leftrightarrow \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1,\ \forall i \in \{1, ..., N\}$$

ou seja, se a matriz A satisfaz $|a_{ii}| > \sum_{j=1,j\neq i}^{N} |a_{ij}|,\ \forall i \in \{1, ..., N\}$.

Sistemas com matriz de diagonal estritamente dominante

Definição

Diz-se que $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ tem diagonal estritamente dominante por linhas (resp. por colunas) se

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{N} |a_{ij}|, \ \forall i \in \{1, ..., N\}$$

$$\text{(resp. } |a_{jj}| > \sum_{i=1, i\neq j}^{N} |a_{ij}|, \ \forall j \in \{1, ..., N\}\text{)}.$$

Teorema

Seja $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ com diagonal principal estritamente dominante por linhas ou por colunas. Então A é não singular e os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel são convergentes para a solução do sistema $Ax = b$, qualquer que seja a iterada inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^N$.

Sistemas com matriz de diagonal estritamente dominante

Exemplo

No sistema

$$\begin{array}{l} 4x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \\ -2x_1 + 10x_2 - 0.5x_3 = 2 \\ x_1 - 0.5x_2 + 2x_3 = 3 \end{array}$$

a matriz

$$\begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ -2 & 10 & -0.5 \\ 1 & -0.5 & 2 \end{bmatrix}$$

tem diagonal estritamente dominante por linhas e por colunas (é simétrica):

$$4 > |-2| + 1, \; 10 > |-2| + |-0.5|, \; 2 > 1 + |-0.5|.$$

Exemplo

Aplicando o método de Jacobi ao sistema linear equivalente

$$\begin{array}{l} x_1 - 0.5x_2 + 2x_3 = 3 \\ -2x_1 + 10x_2 - 0.5x_3 = 2 \\ 4x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \end{array} \iff \begin{array}{l} 4x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \\ -2x_1 + 10x_2 - 0.5x_3 = 2 \\ x_1 - 0.5x_2 + 2x_3 = 3 \end{array}$$

Fica

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= 3 + 0.5x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} &= 0.2 + 0.2x_1^{(k)} + 0.05x_3^{(k)} \\ x_3^{(k+1)} &= 1 - 4x_1^{(k)} + 2x_3^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Iterando a partir de $x^{(0)} = [1\ 0\ 0]^\mathsf{T}$, obtém-se

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= [3,\ \ 0.4,\ \ -3]^\mathsf{T}, \\ x^{(2)} &= [9.199999999999999,\ \ 0.65,\ \ -10.199999999999999]^\mathsf{T}, \\ x^{(3)} &= [23.724999999999998,\ \ 1.53,\ \ -34.5]^\mathsf{T}, \dots \end{aligned}$$

Parece que não há convergência... Importante: aplicar o método de Jacobi ao sistema em que a matriz tem diagonal dominante.

Sistemas com matriz simétrica e definida positiva

Definição

Uma matriz $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ diz-se definida positiva se

$$x^\mathsf{T} A x > 0, \forall x \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}.$$

Algumas propriedades das matrizes definidas positivas:

- $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida positiva $\Leftrightarrow$ $A + A^\mathsf{T}$ é definida positiva.
- $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida positiva $\Leftrightarrow$ $\det(A_k) > 0$, para todo $k \in \{1, ..., N\}$, onde as submatrizes $A_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ consistem nos elementos das primeiras k linhas e k colunas da matriz A.

Para matrizes simétricas tem-se ainda:

- $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida positiva $\Leftrightarrow$ todos os valores próprios de A são positivos.
- $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida positiva $\Rightarrow$ $z^* A z > 0, \forall z \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$.

Método de Gauss-Seidel para sistemas com matriz simétrica e definida positiva

Teorema

Seja $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ simétrica e definida positiva. Então o método de Gauss-Seidel é convergente para a solução dos sistema $Ax = b$, qualquer que seja a iterada inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^N$.

Raio espetral e relação com normas matriciais

Definição

Se $C \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $\sigma(C) \subset \mathbb{C}$ designa o *espetro* de C, ou seja, o conjunto de todos os valores próprios da matriz C. Ao número $\varrho(C) = \max_{\lambda\in\sigma(C)} |\lambda|$ chama-se raio espetral de C.

A primeira relação entre normas matriciais e raio espetral envolve a norma $\|\cdot\|_2$:

$$\|C\|_2 = (\varrho(C^*C))^{\frac{1}{2}}\,, \forall C \in \mathbb{R}^{N\times N}.$$

Relações entre normas matriciais e raio espetral

O raio espetral pode ser entendido como o *ínfimo de todas as normas matriciais induzidas*, de acordo com os seguintes resultados:

(i) Qualquer que seja a norma matricial induzida $\|\cdot\|$, tem-se

$$\varrho(C) \leq \|C\|, \forall C \in \mathbb{R}^{N\times N}.$$

(ii) Para cada $C \in \mathbb{R}^{N\times N}$ e cada $\varepsilon > 0$, existe uma norma matricial induzida $\|\cdot\|$ tal que

$$\|C\| \leq \varrho(C) + \varepsilon.$$

Fórmula de Gelfand: seja $C \in \mathbb{R}^{N\times N}$. Para qualquer norma matricial induzida $\|\cdot\|$, tem-se

$$\varrho(C) = \lim_{n\to\infty} \|C^n\|^{1/n}.$$

Condição necessária e suficiente de convergência para métodos iterativos para sistemas lineares

Teorema

Sejam $C \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $d \in \mathbb{R}^N$ e suponhamos que $z = Cz + d$. O método do ponto fixo

$$x^{(n+1)} = Cx^{(n)} + d, \quad n \in \mathbb{N}_0,$$

converge para z, qualquer que seja $x^{(0)} \in \mathbb{R}^N$, se e só se

$$\varrho(C) < 1.$$

Se $\varrho(C) = 0$ então z é obtido ao fim de um número finito de iterações (no máximo n).

Demonstração

(i) Se $\varrho(C) < 1$ então existe $\varepsilon > 0$ tal que

$$\varrho(C) + \varepsilon < 1.$$

Neste caso, existe uma norma matricial induzida $\|\cdot\|$ tal que

$$\|C\| \leq \varrho(C) + \varepsilon < 1$$

e, por um teorema anterior, esta condição é suficiente para a existência e unicidade de z e para a convergência do método iterativo.

Demonstração

(ii) Se $\varrho(C) \geq 1$, sejam $\lambda \in \mathbb{C}$ com $|\lambda| \geq 1$ e $v \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$ tais que

$$Cv = \lambda v.$$

Como $z - x^{(n)} = C(z - x^{(n-1)})$, os erros satisfazem

$$z - x^{(n)} = C^n(z - x^{(0)}) \quad (n \in \mathbb{N}_0).$$

Se $v \in \mathbb{R}^N$ e escolhermos $x^{(0)} = z - v$, de

$$z - x^{(n)} = C^n(z - x^{(0)}) = C^n v = \lambda^n v$$

resulta

$$\|z - x^{(n)}\| = |\lambda|^n \|v\| \geq \|v\|, \forall n \in \mathbb{N}_0,$$

para qualquer norma em $\mathbb{R}^N$. Nesta situação, não há convergência.

Demonstração

(iii) Se $\varrho(C) = 0$ então $\lambda = 0$ é o único valor próprio de C e o polinómio característico de p é dado por

$$p(t) = t^N.$$

Pelo Teorema de Caley-Hamilton, tem-se

$$p(C) = C^N = 0$$

e portanto

$$z - x^{(N)} = C^N(z - x^{(0)}) = 0.$$

Rapidez de convergência dos métodos estudados

Seja

$$x^{(n+1)} = Cx^{(n)} + d, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Como

$$z - x^{(n)} = C^n(z - x^{(0)})$$

e

$$\varrho(C) = \lim_{n\to\infty} \|C^n\|^{\frac{1}{n}},$$

tem-se

$$\|z - x^{(n)}\| \approx \varrho(C)^n \|z - x^{(0)}\|, \text{ para } n \text{ suficientemente grande,}$$

pelo que $\varrho(C)$ pode ser entendido como uma medida da rapidez de convergência dos métodos iterativos da forma $x^{(n+1)} = Cx^{(n)} + d$, $n \in \mathbb{N}_0$.
Quanto menor for $\varrho(C)$ mais rápida será a convergência.

Exercício

Considere o método iterativo

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -9x_1^{(k)} - 5\,x_2^{(k)} + 20 \\ x_2^{(k+1)} = -90\,x_1^{(k)} - 59\,x_2^{(k)} + 80, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \end{cases}$$

O que pode dizer sobre a convergência do método?

Exercício

A matriz de iteração é

$$C = -\left[\begin{array}{cc} 9 & 5 \\ 90 & 59 \end{array}\right].$$

Vamos analisar o raio espetral de C:

$$\det(\lambda I - C) = 0 \iff (\lambda + 9)(\lambda + 59) - 450 = 0$$

$$\iff \lambda^2 + 68\lambda + 81 = 0 \iff \lambda = -34 - 5\sqrt{43}, \lambda = -34 + 5\sqrt{43}$$

pelo que

$$\varrho(C) > 1.$$

Assim, não está garantida a convergência para qualquer $x^{(0)} \in \mathbb{R}^2$.

Sistemas de equações não lineares

Exemplo - Sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} x^2 + xy = 10 \\ y + 3xy^2 = 57 \end{cases}$$

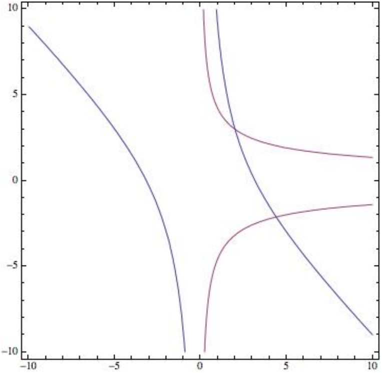

Figura: Localização das raízes através de um gráfico

Exemplo

No Mathematica a função `FindRoot` permite resolver numericamente **equações não lineares**.

$$In : \text{FindRoot}[\{x^2+x*y == 10, y+3x*y^2 == 57\}, \{\{x, 1.5\}, \{y, 3.5\}\}]$$

$$Out : \{x{-}{>}\ 2., y{-}{>}\ 3.\}$$

$$\text{FindRoot}[\{x^2 + x * y == 10, y + 3x * y^2 == 57\}, \{\{x, 5\}, \{y, -1\}\}]$$

$$\{x{-}{>}\ 4.39374, y{-}{>}\ -2.11778\}$$

Método de Newton generalizado

$$\begin{cases} x^{(0)} \text{ dado} \\ J_f(x^{(k)})\Delta x^{(k)} = -f(x^{(k)}) \\ x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \end{cases}$$

Teorema (da convergência local). Seja $f \in C^2(V_z)$, onde V_z é uma vizinhança de z, zero de f, tal que $\det(J_f(z)) \neq 0$. Então o método de Newton converge para z desde que $x^{(0)}$ esteja suficientemente perto de z.

Exemplo

$$\begin{cases} x_1^2 + x_1 x_2 = 10 \\ x_2 + 3x_1 x_2^2 = 57 \end{cases} \Leftrightarrow f(x) = 0$$

com

$$f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$$

$$f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_1^2 + x_1 x_2 - 10 \\ x_2 + 3x_1 x_2^2 - 57 \end{bmatrix}$$

e a matriz Jacobiana de f é dada por

$$J_f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2 & x_1 \\ 3x_2^2 & 1 + 6x_1 x_2 \end{bmatrix}.$$

Exemplo

A primeira iterada do método de Newton $x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)}$ obtém-se resolvendo o sistema linear

$$J_f(x^{(0)})\Delta x^{(0)} = -f(x^{(0)})$$

com $x^{(0)} = [1.5\ 3.5]^T$. Tem-se

$$f(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} -2.5 \\ 1.625 \end{bmatrix} \qquad J_f(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} 6.5 & 1.5 \\ 36.75 & 32.5 \end{bmatrix}$$

e

$$\Delta x^{(0)} = [0.536029\ \ -0.656125]^T$$

pelo que $x^{(1)} = x^{(0)} + \Delta x^{(0)} = [2.03603\ 2.84388]^T$.

Exemplo

Analogamente, $x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta x^{(1)}$, onde $\Delta x^{(1)}$ é a solução do sistema linear

$$J_f(x^{(1)})\Delta x^{(1)} = -f(x^{(1)}).$$

Com $x^{(1)} = [2.03603\ 2.84388]^T$, tem-se

$$f(x^{(1)}) = \begin{bmatrix} -0.0643568 \\ -4.756 \end{bmatrix} \qquad J_f(x^{(1)}) = \begin{bmatrix} 6.91594 & 2.03603 \\ 24.263 & 35.7413 \end{bmatrix}$$

pelo que

$$\Delta x^{(1)} = [-0.0373293\ 0.158408]^T$$

e

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta x^{(1)} = [1.9987\ 3.00229]^T$$

$$x^{(3)} = [1.99999\ 2.99999]^T$$