Introdução a Métodos Computacionais em EDOs

Notas de aula - Processos Iterativos Matriciais Lineares e Resolução Iterativa de Sistemas Lineares

Prof. Yuri Dumaresq Sobral

Departamento de Matemática Universidade de Brasília

2025

- Já aprendemos a analisar processos iterativos escalares, ou seja, aqueles processos iterativos definidos em termos de funções g: IR → IR.
- Usamos estes processos para construir métodos iterativos para resolver equações algébricas. E se quiséssemos resolver um sistema de equações algébricas simultâneas?
- Como construir métodos iterativos para estes casos?
 Precisamos de processos iterativos associados simultaneamente a várias variáveis!
- Será que estes processos têm as mesmas propriedades que os processos iterativos escalares, e será que geram métodos eficientes quando aplicados a sistemas muito grandes?
- Precisamos estudar com um pouco mais de detalhe os processos iterativos construídos com matrizes! Vamos nos concentrar inicialmente apenas nos processos lineares. (Lembrete: eles governam o erro de processos iterativos nas vizinhanças de seus pontos fixos!)

Relembrando:

• Considere uma função $g: IR \rightarrow IR$ tal que possamos construir, com base nela, o seguinte processo iterativo escalar:

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

• O processo iterativo escalar linear mais geral que podemos construir é tomando g(x) = ax + b, isto é:

$$x_{n+1}=ax_n+b.$$

Estudamos detalhadamente a estabilidade do seu ponto fixo

$$x^* = \frac{b}{1-a}.$$

- Se |a| < 1, então temos que x^* é ponto fixo assintóticamente estável do processo iterativo linear.
- Se |a| > 1, então temos que x* é ponto fixo instável do processo iterativo linear.
- Se a = 0, então temos que $x^* = b$ é ponto fixo estável (trivial) do processo iterativo linear.

- Considere, agora, uma matriz T quadrada de ordem m, isto é, de tamanho $m \times m$. Considere os vetor $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in IR^m$.
- O processo iterativo matricial linear mais geral que podemos construir é

$$\mathbf{x}_{n+1} = T\mathbf{x}_n + \mathbf{b}$$

• Vamos considerar o caso mais simples com $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, isto é, $\mathbf{x}_{n+1} = T\mathbf{x}_n$, e vamos considerar \mathbf{x}_0 como valor inicial do processo. Neste caso, o processo iterativo se dá da seguinte maneira:

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{T}\mathbf{x}_0, \qquad \mathbf{x}_2 = \mathbf{T}\mathbf{x}_1 = \mathbf{T}(\mathbf{T}\mathbf{x}_0) = \mathbf{T}^2\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{x}_3 = \mathbf{T}\mathbf{x}_2 = \mathbf{T}^3\mathbf{x}_0, \qquad \dots \qquad \mathbf{x}_n = \mathbf{T}\mathbf{x}_{n-1} = \mathbf{T}^n\mathbf{x}_0.$$

• Portanto, o processo iterativo é determinado por potências da matriz T! Muito parecido ao processo iterativo escalar linear $x_{n+1} = ax_n$, cuja solução é $x_n = a^n x_0$, com $a \in IR$.

- Apesar da semelhança com o caso escalar, não é possível encontrar um padrão óbvio em potências de matrizes. Vamos ver isto num exemplo.
- Exemplo: Considere $\mathbf{x}_{n+1} = T\mathbf{x}_n$ com m = 2 e

$$T = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{x}_n = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}.$$

Então, o processo iterativo é dado por:

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x_{n+1} = 0.6x_n + 0.2y_n \\ y_{n+1} = 0.2x_n + 0.6y_n \end{cases}$$

Assim, o processo será dado por:

$$\left(\begin{array}{c} x_1 \\ y_1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} x_0 \\ y_0 \end{array}\right),$$

$$\left(\begin{array}{c} x_2 \\ y_2 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} x_1 \\ y_1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} x_0 \\ y_0 \end{array}\right) =$$

$$\cdots = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix}^{2} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.24 \\ 0.24 & 0.4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} x_{3} \\ y_{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2} \\ y_{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix}^{3} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix} =$$

$$\cdots = \begin{pmatrix} 0.288 & 0.224 \\ 0.224 & 0.288 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix},$$

$$\vdots$$

$$\begin{pmatrix} x_{10} \\ y_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix}^{10} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.05373... & 0.05363... \\ 0.05363... & 0.05373... \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix},$$

$$\vdots$$

$$\begin{pmatrix} x_{100} \\ y_{100} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{pmatrix}^{100} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1.02 \cdot 10^{-10} & 1.02 \cdot 10^{-10} \\ 1.02 \cdot 10^{-10} & 1.02 \cdot 10^{-10} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{0} \\ y_{0} \end{pmatrix},$$

$$\vdots$$

Conclusão: Parece que $\mathbf{x}_n \to \mathbf{0}$ com $n \to \infty$. E parece que $T^n \to \mathbb{O}$ (matriz nula, isto é, $\{T^n\}_{ij} \to 0$), com $n \to \infty$.

- Vemos, portanto, que é muito difícil determinar o comportamento do sistema a partir das potências das matrizes.
- Será que não seria possível encontrar uma estrutura similar àquela dos processos iterativos escalares lineares?
- A idéia, portanto, seria tentar escrevermos o resultado do processo iterativo matricial linear como

$$\mathbf{x}_n = \lambda^n \mathbf{v}, \quad \mathbf{v} \neq \mathbf{0},$$

com algum $\lambda \in IR$ e algum vetor $\mathbf{v} \in IR^m$. Mas será que isto funciona?

Vamos testar:

$$\mathbf{x}_{n+1} = T\mathbf{x}_n \Leftrightarrow \lambda^{n+1}\mathbf{v} = T\lambda^n\mathbf{v} \Leftrightarrow \lambda\mathbf{v} = T\mathbf{v}$$

• Portanto, se encontrarmos λ , \mathbf{v} que satisfaçam $T\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$, a solução do processo iterativo será $\mathbf{x}_n = \lambda^n \mathbf{v}$ e conseguiremos determinar o que acontece com $n \to \infty$ de maneira mais trivial.

- Os números λ que satisfazem $T\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$ são chamados de autovalores da matriz T.
- os vetores **v** que que satisfazem T**v** = λ **v** são chamados de autovetores da matriz T.
- Os autovalores são encontrados a partir do polinômio característico de T:

$$T\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} \Leftrightarrow T\mathbf{v} - \lambda \mathbf{v} = \mathbf{0} \Leftrightarrow (T - \lambda I)\mathbf{v} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \det(T - \lambda I) = 0.$$

- Como o polinômio característico tem grau m e todos seus coeficientes são IR, uma matriz T tem m autovalores complexos, com alguns podendo ser valores repetidos (multiplicidade!).
- Então, para cada par λ , \mathbf{v} , o processo iterativo terá seu comportamento determinado por $\mathbf{x}_n = \lambda^n \mathbf{v}$. Mas e o caso geral? Vamos apenas considerar um caso geral mais simples:

 Se a matriz T for tal que seus m autovetores v₁...v_m forem base de IR^m, isto é, se eles forem linearmente independentes e se qualquer vetor de IR^m puder ser escrito como uma combinação linear deles, então

$$\mathbf{x}_n = c_1 \lambda_1^n \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2^n \mathbf{v}_2 + \dots + c_m \lambda_m^n \mathbf{v}_m.$$

e as constantes $c_1 \dots c_m \in IR$ serão unicamente determinadas pelo valor de \mathbf{x}_0 .

 Vamos voltar ao exemplo anterior e reescrevê-lo de acordo com o que aprendemos agora:

$$\left(\begin{array}{c} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc} 0.6 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} x_n \\ y_n \end{array}\right).$$

Então, para determinarmos os autovalores da matriz T:

$$\det\left(\left(\begin{array}{cc}0.6 & 0.2\\0.2 & 0.6\end{array}\right) - \left(\begin{array}{cc}\lambda & 0\\0 & \lambda\end{array}\right)\right) = 0 \ \Leftrightarrow \ \det\left(\begin{array}{cc}0.6 - \lambda & 0.2\\0.2 & 0.6 - \lambda\end{array}\right) = 0$$

$$\Leftrightarrow (0.6-\lambda)^2 - 0.04 = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - 1.2\lambda - 0.32 = 0 \Leftrightarrow \lambda_1 = 0.8, \ \lambda_2 = 0.4$$

• O autovetor associado ao autovalor $\lambda_1 = 0.8$ será dado por:

$$(T - \lambda_1 I) \mathbf{v}_1 = \mathbf{0} \iff (T - 0.8I) \mathbf{v}_1 = \mathbf{0} \iff$$

$$\begin{pmatrix} 0.6 - 0.8 & 0.2 \\ 0.2 & 0.6 - 0.8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{1x} \\ \mathbf{v}_{1y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} -0.2 & 0.2 \\ 0.2 & -0.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{1x} \\ \mathbf{v}_{1y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{v}_{1x} = \mathbf{v}_{1y} \iff \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

• O autovetor associado ao autovalor $\lambda_2 = 0.4$ será dado por:

$$\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$
.

 Desta forma, podemos finalmente escrever a solução geral do processo iterativo:

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{c_1} \cdot 0.8^n \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \mathbf{c_2} \cdot 0.4^n \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

• Conhecendo o valor de x_0 , podemos calcular c_1 e c_2 :

$$\mathbf{x}_n = 0.8^n \frac{\mathbf{x}_0 + \mathbf{y}_0}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + 0.4^n \frac{\mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_0}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- E, agora, podemos ver claramente que tanto 0.8^n quanto 0.4^n tendem a 0 quando $n \to \infty$, isto é, $\mathbf{x}_n \to \mathbf{0}$ $n \to \infty$.
- Vemos, também, que a convergência para o ponto fixo assintoticamente estável $\mathbf{x}^* = \mathbf{0}$ é dominada pelo maior autovalor $\lambda_1 = 0.8$, pois, com $n \to \infty$:

$$\mathbf{x}_{n} = 0.8^{n} \left(\underbrace{\frac{x_{0} + y_{0}}{2} \left(\frac{1}{1}\right)}_{\text{constants}} + \underbrace{0.5^{n} \frac{y_{0} - x_{0}}{2} \left(\frac{-1}{1}\right)}_{\text{10}} \right) \approx 0.8^{n} \frac{x_{0} + y_{0}}{2} \left(\frac{1}{1}\right) \to \mathbf{0}.$$

- Finalmente, vemos que quando $\mathbf{x}_n \to \mathbf{0}$, seu módulo $|\mathbf{x}_n| \to 0$. Estas condições são equivalentes. Então, vamos usar com certa frequência esta condição ao invés da condição vetorial.
- Com a intuição que ganhamos com os resultados deste exemplo, podemos agora sedimentar os seguintes conceitos fundamentais:
- O ponto fixo $\mathbf{x}^* = \mathbf{0}$ será assintoticamente estável se e somente se todos os autovalores λ_i da matrix T tiverem módulo menor que um, isto é, $|\lambda_i| < 1$. Se algum tiver módulo maior (ou igual) que 1, o ponto fixo do processo iterativo será instável (estável).
- Se uma matriz T é tal que todos seus autovalores, $|\lambda_i| < 1$, então $T^n \to \mathbb{O}$ com $n \to \infty$, isto é, todos os seus elementos $\{T^n\}_{ij} \to 0$ com $n \to \infty$. Dizemos que T é uma matriz convergente.

• O autovalor λ_i (complexo ou real) de maior módulo da matriz T, é chamado de raio espectral de T, denotado por $\rho(T)$.

$$\rho(T) = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, \dots, |\lambda_m|\}$$

- Portanto, uma matriz T será convergente se e somente se seu raio espectral $\rho(T) < 1$.
- O raio espectral de T determina quão rápido o processo vai convergir (ou divergir) para seu ponto fixo, pois:

$$\begin{aligned} |\mathbf{x}_{n}| &= |c_{1}\lambda_{1}^{n}\mathbf{v}_{1} + c_{2}\lambda_{2}^{n}\mathbf{v}_{2} + \dots + c_{m}\lambda_{m}^{n}\mathbf{v}_{m}| \\ &\leq |c_{1}\lambda_{1}^{n}\mathbf{v}_{1}| + |c_{2}\lambda_{2}^{n}\mathbf{v}_{2}| + \dots + |c_{m}\lambda_{m}^{n}\mathbf{v}_{m}| \text{ (designal dade triangular)} \\ &\leq |\lambda_{1}^{n}||c_{1}\mathbf{v}_{1}| + |\lambda_{2}^{n}||c_{2}\mathbf{v}_{2}| + \dots + |\lambda_{m}^{n}||c_{m}\mathbf{v}_{m}| \\ &\leq |\lambda_{1}^{n}||c_{1}||\mathbf{v}_{1}| + |\lambda_{2}^{n}||c_{2}||\mathbf{v}_{2}| + \dots + |\lambda_{m}^{n}||c_{m}||\mathbf{v}_{m}| \end{aligned}$$

Como $\rho(T) = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, \dots, |\lambda_m|\}$, então:

$$|\mathbf{x}_{n}| \leq |\lambda_{1}|^{n}|c_{1}||\mathbf{v}_{1}| + |\lambda_{2}|^{n}|c_{2}||\mathbf{v}_{2}| + \dots + |\lambda_{m}|^{n}|c_{m}||\mathbf{v}_{m}|$$

$$\leq \rho(T)^{n}\left(\underbrace{|c_{1}||\mathbf{v}_{1}| + |c_{2}||\mathbf{v}_{2}| + \dots + |c_{m}||\mathbf{v}_{m}|}_{K \in \mathbb{R}}\right) = K\rho(T)^{n}$$

- Portanto, se $\rho(T) < 1$, temos que $|\mathbf{x}_n| \le K \rho(T)^n \to 0$, quando $n \to \infty$, $\mathbf{x}^* = \mathbf{0}$ é um ponto fixo assintoticamente estável e T é uma matriz convergente. Caso contrário, se $\rho(T) \ge 1$, $\mathbf{x}^* = \mathbf{0}$ é um ponto fixo instável ou apenas estável.
- Quanto menor for $\rho(T)$, mais rapidamente o processo iterativo converge.
- Portanto, vamos querer construir processos iterativos com matrizes com o menor $\rho(T)$ possível! (lembra a escolha de $|g'(x^*)|$ no caso de processos iterativos escalares!)
- PROBLEMA: calcular autovalores é caro, principalmente para sistemas grandes. Teremos que ser espertos!

- Agora que conhecemos um pouco mais sobre os processos iterativos matriciais e sua convergência, podemos construir métodos iterativos para resolver sistemas de equações lineares.
- Para tal, vamos nos concentrar em problemas do tipo

$$Ax = b$$
,

em que a matriz dos coeficientes A é inversível, ou seja, existe A^{-1} (matriz inversa), e o sistema possui uma única solução.

 Vamos tentar, portanto, transformar este sistema em um processo iterativo do tipo

$$\mathbf{x}_{n+1} = T\mathbf{x}_n + \mathbf{c},$$

em que T é construída a partir da matriz dos coeficientes A e o vetor \mathbf{c} a partir de A e de \mathbf{b} . Queremos que a solução do sistema seja o ponto fixo \mathbf{x}^* deste processo iterativo, isto é

$$A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$$
 \Leftrightarrow $\mathbf{x}^* = T\mathbf{x}^* + \mathbf{c}$.

- A idéia, portanto, é construir os processos iterativos de tal forma que x* seja um ponto fixo assintoticamente estável.
- Para isto, precisamos analisar como o erro do processo iterativo evolui ao longo das iterações:

$$\mathbf{e}_{n+1} = \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}^* = (T\mathbf{x}_n + \mathbf{c}) - (T\mathbf{x}^* + \mathbf{c}) = T(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}^*) = T\mathbf{e}_n \Leftrightarrow$$

$$\mathbf{e}_{n+1} = T\mathbf{e}_n.$$

 Portanto, o erro do processo itertativo satisfaz um processo iterativo matricial linear, e já sabemos que sua solução geral é

$$\mathbf{e}_n = T^n \mathbf{e}_0.$$

• Então, teremos $\mathbf{e}_n \to \mathbf{0}$ com $n \to \infty$ se e somente se a matriz T for convergente, isto é, $T^n \to \mathbb{O}$ com $n \to \infty$. Para isto, precisamos que seu raio espectral $\rho(T) < 1$.

- Desta forma, devemos ter cuidado com a maneira de construir os processos iterativos!
- Mas como construir estes métodos a partir do sistema original? Vamos ver alguns exemplos.
- Vamos começar com um exemplo de um sistema típico com três equações e três incógnitas:

$$\begin{cases} a_{11}x + a_{12}y + a_{13}z = b_1 \\ a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z = b_2 \\ a_{31}x + a_{32}y + a_{33}z = b_3 \end{cases}$$

 Uma maneira ingênua de gerar um processo iterativo é isolando uma variável em cada uma das equações. Por exemplo, se a_{ii} ≠ 0:

$$\begin{cases} a_{11}x = b_1 - a_{12}y - a_{13}z \\ a_{22}y = b_2 - a_{21}x - a_{23}z \\ a_{33}z = b_3 - a_{31}x - a_{32}y \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x = \frac{b_1}{a_{11}} - \frac{a_{12}}{a_{11}}y - \frac{a_{13}}{a_{11}}z \\ y = \frac{b_2}{a_{22}} - \frac{a_{21}}{a_{22}}x - \frac{a_{23}}{a_{22}}z \\ z = \frac{b_3}{a_{33}} - \frac{a_{31}}{a_{33}}x - \frac{a_{32}}{a_{33}}y \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_{n+1} = \frac{b_1}{a_{11}} - \frac{a_{12}}{a_{11}} y_n - \frac{a_{13}}{a_{11}} z_n \\ y_{n+1} = \frac{b_2}{a_{22}} - \frac{a_{21}}{a_{22}} x_n - \frac{a_{23}}{a_{22}} z_n \\ z_{n+1} = \frac{b_3}{a_{33}} - \frac{a_{31}}{a_{33}} x_n - \frac{a_{32}}{a_{33}} y_n \end{cases}$$

 Este sistema pode ser escrito em forma matricial da seguinte forma:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}_{n+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 \end{pmatrix}}_{T} \underbrace{\begin{pmatrix} x_n \\ y_n \\ z_n \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}_n} + \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \end{pmatrix}}_{\mathbf{c}}.$$

 Notem que esta é exatamente a forma que temos em mente para o processo iterativo. PORÉM... Já fica clara uma grande limitação destes métodos: é muito difícil (ou impossível) determinar a priori se T será ou não uma matriz convergente.

- Vamos generalizar o método ingênuo que discutimos acima. Consideremos um sistema de M equações e M incógnitas dado por $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.
- Vamos decompor a matriz dos coeficientes A da seguinte maneira:

$$A = L + D + U,$$

isto é, decompomos a matriz A em suas partes estritamente triangular inferior L, diagonal D e estritamente triangular superior U, e reescrevemos o sistema como:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{D}\mathbf{x} + (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow$$

$$D\mathbf{x} = -(\mathbf{L} + U)\mathbf{x} + \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{x}_{n+1} = -D^{-1}(\mathbf{L} + U)\mathbf{x}_n + D^{-1}\mathbf{b}.$$

• Portanto, $T_J = -D^{-1}(L + U)$ e $\mathbf{c} = D^{-1}\mathbf{b}$. Este processo iterativo é chamado de Método de Gauss-Jacobi.

- Um processo iterativo um pouco mais sofisticado pode ser intuitivamente determinado a partir do Método de Gauss-Jacobi.
- No processo iterativo do Método de Gauss-Jacobi, cada nova aproximação n + 1 de uma variável é determinada apenas a partir das antigas aproximações n. Por exemplo:

$$\begin{cases} x_{n+1} = \frac{b_1}{a_{11}} - \frac{a_{12}}{a_{11}} y_n - \frac{a_{13}}{a_{11}} z_n \\ y_{n+1} = \frac{b_2}{a_{22}} - \frac{a_{21}}{a_{22}} x_n - \frac{a_{23}}{a_{22}} z_n \\ z_{n+1} = \frac{b_3}{a_{33}} - \frac{a_{31}}{a_{33}} x_n - \frac{a_{32}}{a_{33}} y_n \end{cases}$$

- A priori, já teríamos uma melhor estimativa para a variável x, calculada na primeira equação, que poderia ter sido utilizada nas equações subsequentes.
- De fato, o processo iterativo para o sistema acima poderia ser dado por:
 b₁ a₁₂ a₁₃ a₁₃

$$\begin{cases} x_{n+1} = \frac{b_1}{a_{11}} - \frac{a_{12}}{a_{11}} y_n - \frac{a_{13}}{a_{11}} z_n \\ y_{n+1} = \frac{b_2}{a_{22}} - \frac{a_{21}}{a_{22}} x_{n+1} - \frac{a_{23}}{a_{22}} z_n \\ z_{n+1} = \frac{b_3}{a_{33}} - \frac{a_{31}}{a_{33}} x_{n+1} - \frac{a_{32}}{a_{33}} y_{n+1} \end{cases}$$

- Este processo também pode ser escrito em uma forma matricial. Note que os termos que já são conhecidos na nova iteração n+1 são aqueles que correspondem aos coeficientes abaixo da diagonal principal de A (associados à matriz L).
- Considerando a mesma decomposição da matriz A feita anteriormente, temos:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\underline{L} + \underline{D} + \underline{U})\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\underline{L} + \underline{D})\mathbf{x} + \underline{U}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow$$

$$(\mathbf{L}+\mathbf{D})\mathbf{x}=-U\mathbf{x}+\mathbf{b}\Leftrightarrow \mathbf{x}_{n+1}=-(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}U\mathbf{x}_n+(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\mathbf{b}.$$

- Portanto, $T_S = -(L+D)^{-1}U$ e $\mathbf{c} = (L+D)^{-1}\mathbf{b}$. Este processo iterativo é chamado de Método de Gauss-Seidel.
- Tal como no Método de Gauss-Jacobi, no Método de Gauss-Seidel não temos como garantir a priori que a matriz T_S será convergente.

- Além disto, apesar de parecer ser melhor, não há garantias de que o Método de Gauss-Seidel será de fato melhor, isto é, que ele convergirá quando o Método de Gauss-Jacobi divergir, e que será mais rápido que o Método de Gauss-Jacobi.
- Como vimos antes, não podemos afirmar, a priori, se as matrizes T_J e T_S serão convergentes. Para isto, precisamos determinar seu raio espectral, o que é muito caro.
- Um resultado que pode facilitar um pouco a análise é o seguinte: é possível mostrar, para qualquer matriz A, que

$$\rho(A) \leq \max_{i=1,\ldots,M} \sum_{j=1}^{M} |a_{ij}| = S_{\ell}^{Max}.$$

• Isto é, o raio espectral é limitado pelo maior valor da soma dos valores absolutos de todos os elementos de uma linha, S_{ℓ}^{Max} .

- Um caso particular bem conhecido, e bastante frequente em problemas reais, é o caso de sistemas lineares cuja matriz de coeficientes A é estritamente diagonalmente dominante.
- Nestas matrizes, o valor absoluto do elemento da diagonal, |a_{ii}|, é estritamente maior que a soma dos valores absolutos de todos os outros elementos da linha, S_i^p.
- Exemplo:

$$A = \left(\begin{array}{ccccc} \mathbf{10} & 0 & -1 & 2 & 4 \\ -2 & -\mathbf{18} & 2 & 1 & -5 \\ 0 & 2 & \mathbf{6} & 1 & -1 \\ -1 & -2 & -1 & -\mathbf{7} & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & \mathbf{14} \end{array} \right) \begin{array}{c} S_p^p = |0| + |-1| + |2| + |4| = 7 < |\mathbf{10}| = |a_{11}| \\ S_p^p = |-2| + |2| + |1| + |-5| = 10 < |-\mathbf{18}| = |a_{22}| \\ S_p^3 = |0| + |2| + |1| + |-1| = 4 < |\mathbf{6}| = |a_{33}| \\ S_p^4 = |-1| + |-2| + |-1| + |1| = 5 < |-\mathbf{7}| = |a_{44}| \\ S_p^5 = |0| + |2| + |1| + |0| = 3 < |\mathbf{14}| = |a_{55}| \end{array}$$

• Neste caso, por causa da divisão pelos elementos da diagonal nos Métodos de Gauss-Jacobi e de Gauss-Seidel, é fácil perceber que $S_\ell^{Max} < 1$ (estritamente menor que 1) e, portanto, tanto $\rho(T_J) < 1$, como $\rho(T_S) < 1$.

- Note que, tanto no Método de Gauss-Jacobi, como no Método de Gauss-Seidel, a matriz T tem elementos nulos na diagonal.
 Isto quer dizer que valores das iterações anteriores da própria variável não entram no cálculo das próximas iterações.
- Podemos, então, pensar similarmente ao que feito no Método de Gauss-Seidel e tentar melhorar a convergência dos métodos.
- Para isto, vamos considerar, como anteriormente, a decomposição da matriz A da seguinte forma:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\underline{L} + \underline{D} + \underline{U})\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

 Vamos reescrever, agora, esta decomposição da seguinte maneira:

$$(L + D + U)\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (L + (1 + \alpha - \alpha)D + U)\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow$$
$$[L + \alpha D + (1 - \alpha)D + U]\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

 Vamos pensar em construir um método com base no Método de Gauss-Seidel. Portanto:

$$[\underline{\mathbf{L}} + \alpha D + (1 - \alpha)D + U]\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\underline{\mathbf{L}} + \alpha D)\mathbf{x} = -[(1 - \alpha)D + U]\mathbf{x} + \mathbf{b},$$

e, normalmente, dividimos tudo por α e tomamos $\omega = 1/\alpha$, obtendo o seguinte processo iterativo:

$$\mathbf{x}_{n+1} = (\omega L + D)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U] \mathbf{x}_n + \omega (\omega L + D)^{-1} \mathbf{b}.$$

Portanto, a matriz que define este processo iterativo é

$$T_{\omega} = (\omega L + D)^{-1}[(1 - \omega)D - \omega U],$$

e vemos que ela depende de um parâmetro livre ω . Será que podemos escolher adequadamente ω para minimizar (ou pelo menos diminuir) o seu raio espectral $\rho(T_{\omega})$?

- Precisamos associar, de alguma maneira, $\rho(T_{\omega})$ com ω .
- Vamos calcular o determinante de T_{ω} :

$$\det(T_{\omega}) = \det\left((\omega L + D)^{-1}[(1 - \omega)D - \omega U]\right) =$$

$$= \det\left((\omega L + D)^{-1}\right) \det\left((1 - \omega)D - \omega U\right).$$

- Como L e U são matrizes estritamente triangulares, os elementos de suas diagonais são todos zero. Portanto, os determinantes das matrizes $\omega L + D$ e $(1 \omega)D \omega U$ são determinados apenas por D.
- Usando as propriedades do determinante de uma matriz, temos, então:

$$\det(T_{\omega}) = \det\left((\omega L + D)^{-1}\right) \det((1 - \omega)D - \omega U) = \frac{1}{\det(D)} (1 - \omega)^{M} \det(D)$$

- E, portanto, $\det(T_{\omega}) = (1 \omega)^{M}$.
- Por outro lado, assumindo que T_{ω} tem M autovalores e seus M autovetores forem base de IR^{M} (já vimos esta hipótese antes!), é possível mostrar que

$$\det(T_{\omega}) = \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \lambda_3 \cdot \ldots \cdot \lambda_M,$$

isto é, o determinante de T_{ω} é dado pelo produto de seus M autovalores.

• Comparando os dois resultados:

$$|\det(T_{\omega})| = |(1 - \omega)^{M}| = |\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \lambda_3 \cdot \ldots \cdot \lambda_M| \le \rho(T_{\omega})^{M}.$$

• Como precisamos que $\rho(T_{\omega}) < 1$ para que T_{ω} seja convergente, então:

$$|(1 - \omega)^{M}| \le \rho(T_{\omega})^{M} < 1 \Leftrightarrow |1 - \omega| < 1 \Leftrightarrow$$
$$-1 < 1 - \omega < 1 \Leftrightarrow 0 < \omega < 2.$$

- Assim, não podemos escolher qualquer valor para $\omega!$
- O parâmetro ω é chamado de parâmetro de relaxação do método e dizemos que o método é:
 - sub-relaxado, se $0 < \omega < 1$
 - Gauss-Seidel, se $\omega = 1$
 - sobre-relaxado, se $1 < \omega < 2$
- Se ω < 0 ou ω > 2, claramente o método diverge.
- Normalmente, os métodos sobre-relaxados são os mais eficientes!
- Para algumas matrizes especiais, é possível calcular o valor ótimo de ω para que $\rho(T_{\omega})$ seja mínimo!
- Exemplo: matrizes simétricas, tridiagonais por blocos, positivas definidas $(\mathbf{x}^T \cdot A \cdot \mathbf{x} > 0 \ \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0})$ são tais que:

$$\rho(T_J)^2 = \rho(T_S), \ \omega_{ot} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(T_S)}} \ e \ \rho(T_\omega) = \omega_{ot} - 1.$$

• Então, se tivermos uma matriz A tal como acima com $\rho(T_J) = 0.99$ (péssimo!), então teremos que

$$\rho(T_S) = \rho(T_J)^2 = 0.99^2 = 0.9801$$

$$\omega_{ot} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - 0.9801}} = 1.7527 \text{ e } \rho(T_{\omega}) = 0.7527.$$

- Fazendo as contas, vemos que $\rho(T_\omega) \approx \rho(T_S)^{14} \approx \rho(T_J)^{28}$!!!! O método sobre-relaxado é 28 vezes mais rápido que o método de Gauss-Jacobi para estas matrizes!
- Os métodos sobre-relaxados costumam ser chamados de Métodos SOR (successive over-relaxation) e, de fato, podemos reescrevê-los de uma maneira bem fácil e intuitiva!

 Relembrando o método de Gauss-Seidel em sua forma matricial:

$$\mathbf{x}_{n+1} = -(\underline{L} + \underline{D})^{-1} U \mathbf{x}_n + (\underline{L} + \underline{D})^{-1} \mathbf{b} \Leftrightarrow (\underline{L} + \underline{D}) \mathbf{x}_{n+1} = -U \mathbf{x}_n + \mathbf{b}.$$

• E, portanto, podemos escrevê-lo como:

$$D\mathbf{x}_{n+1} = -U\mathbf{x}_n + \mathbf{b} - L\mathbf{x}_{n+1} \Leftrightarrow \mathbf{x}_{n+1}^{Sei} = D^{-1} \left(-U\mathbf{x}_n + \mathbf{b} - L\mathbf{x}_{n+1} \right).$$

• Por outro lado, voltando ao método SOR:

$$\mathbf{x}_{n+1} = (\omega L + D)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U] \mathbf{x}_n + \omega (\omega L + D)^{-1} \mathbf{b} \Leftrightarrow$$

$$(\omega L + D) \mathbf{x}_{n+1} = [(1 - \omega)D - \omega U] \mathbf{x}_n + \omega \mathbf{b} \Leftrightarrow$$

$$D \mathbf{x}_{n+1} = (1 - \omega)D \mathbf{x}_n - \omega U \mathbf{x}_n + \omega \mathbf{b} - \omega L \mathbf{x}_{n+1} \Leftrightarrow$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = (1 - \omega)\mathbf{x}_n + \omega D^{-1} \Big(-U \mathbf{x}_n + \mathbf{b} - L \mathbf{x}_{n+1}. \Big) \Leftrightarrow$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = (1 - \omega)\mathbf{x}_n + \omega \mathbf{x}_{n+1}^{Sei} \qquad (SOR)$$

- Finalmente, temos que decidir quando parar as iterações destes métodos! Existem vários critérios de parada diferentes.
- Todos se baseiam em um determinado valor de tolerância, TOL, que podemos escolher tão pequeno quanto quisermos.
 Quanto menor for TOL, mais iterações serão necessárias.
- Alguns exemplos de critérios frequentemetne usados são:
 - máxima diferença absoluta das componentes do vetor x em duas iterações consecutivas:

$$\delta_{n+1} = \max_{1 \le i \le M} |x_{i_{n+1}} - x_{i_n}| < TOL$$

• erro relativo associado a δ_{n+1} :

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{\delta_{n+1}}{\max\limits_{1 < i < M} |x_{i_{n+1}}|} < TOL$$

• norma euclidiana dos resíduos R_{n+1} :

$$\mathbf{R}_{n+1} = \mathbf{b} - A \cdot \mathbf{x}_{n+1}, \quad |\mathbf{R}_{n+1}| = \sqrt{\sum_{i=1}^{M} R_{i,n+1}^2} < TOL$$