Sistemas de Equações Algébricas Lineares

Disciplina: Métodos Numéricos em Termofluidos Professor: Adriano Possebon Rosa

> Departamento de Engenharia Mecânica Faculdade de Tecnologia Universidade de Brasília

1 Motivação

Considere a equação do calor para o caso unidimensional permanente (T = T(x)),

$$\frac{d^2T}{dx^2} = 0 (1)$$

para 0 < x < 1 e com condições de contorno dadas por

$$T(x=0) = 0$$
 e $T(x=1) = 1$. (2)

Utilizando expansões em série de Taylor, podemos aproximar a segunda derivada de T com relação a x por

$$\frac{d^2T}{dx^2} \approx \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} \ . \tag{3}$$

Essa aproximação contém um erro $O(\Delta x^2)$. Da substituição dessa aproximação de volta na equação governante (1), resulta

$$\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} = 0 . (4)$$

Essa é a EDF (Equação de Diferenças Finitas) desse problema. Podemos reescrevê-la como

$$T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1} = 0. (5)$$

Note que agora $\tilde{\mathbf{nao}}$ é possível encontrar diretamente o valor de cada T_i pois, ao tentar isolá-los em (5), temos

$$T_i = \frac{T_{i+1} + T_{i-1}}{2} \ , \tag{6}$$

o que não ajuda muito, pois não conhecemos os valores da temperatura nos pontos vizinhos de i. As temperaturas estão **acopladas**: para encontrar o valor de T_i em um ponto i, é necessário encontrar em todos os pontos.

Vamos analisar um caso particular em que o domínio é dividido em 5 partes iguais, ou seja, N=5. A figura (1) mostra o nosso domínio discretizado. Pelas condições de contorno, os pontos dos extremos já estão definidos. Assim,

$$T_0 = 0$$
 e $T_5 = 1$. (7)

Temos que descobrir, portanto, os valores de T_1 , T_2 , T_3 e T_4 .

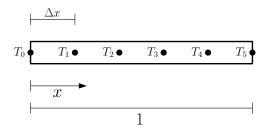


Figura 1: Barra discretizada com comprimento 1.

A equação geral, para qualquer ponto i, é a equação (5). Vamos abrir essa equação em cada ponto:

$$i = 1 T_2 - 2T_1 + T_0 = 0$$

$$i = 2 T_3 - 2T_2 + T_1 = 0$$

$$i = 3 T_4 - 2T_3 + T_2 = 0$$

$$i = 4 T_5 - 2T_4 + T_3 = 0$$
(8)

Somando essas 4 equações com as condições de contorno, resulta no seguinte conjunto de equações lineares acopladas:

$$T_{0} = 0$$

$$T_{2} - 2T_{1} + T_{0} = 0$$

$$T_{3} - 2T_{2} + T_{1} = 0$$

$$T_{4} - 2T_{3} + T_{2} = 0$$

$$T_{5} - 2T_{4} + T_{3} = 0$$

$$T_{5} = 1$$

$$(9)$$

Podemos deixar assim, ou podemos substituir os valores dos pontos dos cantos nas equações dos seus vizinhos. Isso é feito da seguinte maneira:

$$T_2 - 2T_1 = 0$$

$$T_3 - 2T_2 + T_1 = 0$$

$$T_4 - 2T_3 + T_2 = 0$$

$$-2T_4 + T_3 = -1$$
(10)

Esse é o nosso **Sistema de Equações Algébricas Lineares**. Na forma matricial, ele pode ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$
 (11)

Temos 4 equações e 4 incógnitas. Encontrar a solução numérica aproximada da EDO original é equivalente a encontrar a solução para esse sistema.

Em muitos problemas numéricos (Volumes Finitos, Elementos Finitos, Elementos de Contorno), a etapa final da solução consiste na resolução de um sistema de equações lineares. **Por isso, o estudo de métodos para resolver esses sistemas é muito importante.** Nas próximas seções veremos alguns desses métodos. Antes, porém, serão apresentadas algumas definições sobre matrizes que nos serão úteis.

2 Definições

No caso geral, temos um sistema com n equações dado por

$$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \dots + A_{1n}x_n = b_1$$

$$A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \dots + A_{2n}x_n = b_2$$

$$\dots \qquad \dots$$

$$A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \dots + A_{nn}x_n = b_n$$
(12)

Na representação indicial,

$$\sum_{i=1}^{n} A_{ij} x_j = b_i \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n$$
 (13)

Na representação matricial,

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \ . \tag{14}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix}$$
 (15)

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{16}$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \tag{17}$$

 \mathbf{A} é a matriz dos coeficientes (*input*), \mathbf{b} é a matriz dos termos independentes (*input*) e \mathbf{x} é a matriz de incógnitas (*output*).

Na componente A_{ij} da matriz \mathbf{A} , i representa a equação e j representa a variável, como mostra a figura (2).

Exemplo: com n=2 temos

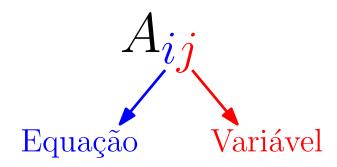


Figura 2: Componente da matriz A.

$$\begin{cases}
A_{11}x_1 + A_{12}x_2 = b_1 \\
A_{21}x_1 + A_{22}x_2 = b_2
\end{cases}$$
(18)

Nessa situação, temos 4 possibilidades (ver figura 3):

- i) Solução Única
- ii) Sem solução
- iii) Número infinito de soluções
- iv) Solução trivial $(\mathbf{x} = \mathbf{0})$ para um sistema homogêneo $(\mathbf{b} = \mathbf{0})$

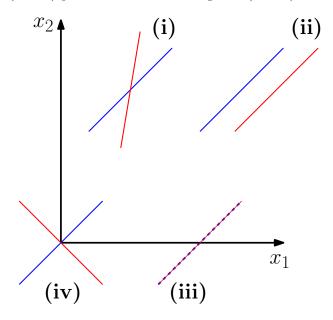


Figura 3: Possibilidades para o caso em que n=2.

2.1 Produto de matrizes

Vamos definir o produto entre matrizes como

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \qquad b_i = \sum_{j=1}^n A_{ij}b_j \tag{19}$$

$$\mathbf{AB} = \mathbf{C} \qquad C_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} B_{kj}$$
 (20)

2.2 Tipos Especiais de Matrizes

Matriz Quadrada: mesmo número de linhas e colunas.

Vetor coluna: n linhas e 1 coluna.

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{21}$$

Vetor linha: 1 linha e n colunas.

$$\mathbf{y} = \left[\begin{array}{ccc} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{array} \right] \tag{22}$$

Matriz diagonal: $D_{ij} = 0$ se $i \neq j$.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44} \end{bmatrix}$$
 (23)

Matriz identidade: $D_{ij} = 0$ se $i \neq j$ e $D_{ij} = 1$ se i = j ou $D_{ij} = \delta_{ij}$.

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{24}$$

$$\mathbf{IA} = \mathbf{A} \tag{25}$$

$$\mathbf{I}\mathbf{x} = \mathbf{x} \tag{26}$$

Matriz Triangular Superior: $U_{ij} = 0$ se i > j.

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ 0 & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ 0 & 0 & U_{33} & U_{34} \\ 0 & 0 & 0 & U_{44} \end{bmatrix}$$
(27)

Matriz Tridiagonal:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 & 0 & 0 \\ T_{12} & T_{22} & T_{23} & 0 & 0 \\ 0 & T_{32} & T_{33} & T_{34} & 0 \\ 0 & 0 & T_{43} & T_{44} & T_{45} \\ 0 & 0 & 0 & T_{54} & T_{55} \end{bmatrix}$$

$$(28)$$

Matriz Transposta: $A_{ij}^T = A_{ji}$.

$$\mathbf{A}^{T} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{31} & A_{41} \\ A_{12} & A_{22} & A_{32} & A_{42} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} & A_{43} \\ A_{14} & A_{24} & A_{34} & A_{44} \end{bmatrix}$$
(29)

Matriz Simétrica: $A_{ij} = A_{ji}$, ou $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{12} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} & A_{34} \\ A_{14} & A_{24} & A_{34} & A_{44} \end{bmatrix}$$
(30)

Matriz Esparsa: a maioria dos elementos é zero.

Matriz Diagonal Dominante: temos

$$|A_{ii}| \ge \sum_{j=1, j \ne i}^{n} |A_{ij}| \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n$$
 (31)

O valor absoluto do elemento da diagonal principal é maior ou igual que a soma dos valores absolutos dos outros elementos da mesma linha, **com a desigualdade válida em pelo menos uma linha.**

Exemplo de matriz diagonal dominante:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$
(32)

Matriz Inversa: A^{-1} . Propriedade:

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I} \tag{33}$$

Para o sistema que estamos tentando encontrar a solução:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{34}$$

$$\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A}\mathbf{x}) = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \tag{35}$$

$$\left(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right)\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \tag{36}$$

$$Ix = A^{-1}b (37)$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \tag{38}$$

2.3 Determinante

O **determinante** é um número associado a uma matriz quadrada e será representado por $\det(\mathbf{A})$ ou por $|\mathbf{A}|$.

Para n=2:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \tag{39}$$

$$\det(\mathbf{A}) = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} \tag{40}$$

Para n = 3:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}$$
(41)

$$\det(\mathbf{A}) = A_{11}A_{22}A_{33} + A_{12}A_{23}A_{31} + A_{13}A_{21}A_{32} - A_{11}A_{23}A_{32} - A_{12}A_{21}A_{33} - A_{13}A_{22}A_{31}$$
(42)

Para $n \geq 4$: método dos cofatores.

Se $det(\mathbf{A}) = 0$, a matriz \mathbf{A} é singular (não admite inversa) e o **sistema linear correspondente não tem solução única** (pode ter infinitas soluções ou não ter solução).

3 Métodos de Solução de Sistemas Lineares

Temos dois tipos de métodos usados para resolver sistemas lineares: os **Métodos Diretos** e os **Métodos Iterativos**.

Métodos Diretos são aqueles que dão a **solução exata** (a menos do erro de máquina) após um certo número de passos. Exemplos de Métodos Diretos:

- 1. Eliminação Simples
- 2. Eliminação de Gauss
- 3. Decomposição LU
- 4. Eliminação de Gauss-Jordan

5. Algoritmo de Thomas

Métodos Iterativos, por sua vez, obtêm uma **solução aproximada** para o sistema de equações, a partir de uma resposta inicial (*chute*) e de um algoritmo de iteração. Alguns exemplos de Métodos Iterativos:

- 1. Gauss-Jacobi
- 2. Gauss-Seidel
- 3. SOR
- 4. Gradiente Conjugado
- 5. Multigrid

4 Método Direto: Eliminação de Gauss

Os métodos diretos consistem, basicamente, na aplicação de uma sequência de operações entre as equações para que se consiga isolar as incógnitas. O método mais conhecido é o de **eliminação** de Gauss. O objetivo é transformar o sistema original

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{43}$$

em um sistema do tipo

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{c} , \qquad (44)$$

em que \mathbf{U} é uma matriz triangular superior. Para isso, vamos considerar a matriz \mathbf{A}^* do sistema,

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & b_1 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & b_2 \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & b_3 \end{bmatrix}$$
(45)

que envolve as matrizes \mathbf{A} e \mathbf{b} . Podemos realizar as seguintes operações de linha (sem que o resultado seja alterado):

- qualquer linha pode ser multiplicada por uma constante (scaling);
- a ordem das linhas pode ser trocada (pivoting);
- qualquer linha pode ser trocada por uma combinação linear desta linha com qualquer outra linha (elimination).

Vamos ver como resolver um sistema usando o método de eliminação no exemplo a seguir.

Exemplo: considere o sistema

$$4x_1 - 1x_2 - 1x_3 = 1$$

$$-1x_1 + 2x_2 - 1x_3 = 1$$

$$-1x_1 - 1x_2 + 6.5x_3 = 1$$
(46)

Na forma matricial temos:

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 6.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$(47)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 6.5 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$
 (48)

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 2 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 6.5 & 1 \end{bmatrix}$$
 (49)

A primeira linha será chamada de L_1 , a segunda linha de L_2 e a terceira de L_3 . Vamos começar.

PASSO 1:

$$L_2 \leftarrow L_2 - (A_{21}/A_{11})L_1 \tag{50}$$

$$L_3 \leftarrow L_3 - (A_{31}/A_{11})L_1 \tag{51}$$

Resulta:

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 1\\ 0 & 1.75 & -1.25 & 1.25\\ 0 & -1.25 & 6.25 & 1.25 \end{bmatrix}$$
 (52)

PASSO 2:

$$L_3 \leftarrow L_3 - (A_{32}/A_{22})L_2 \tag{53}$$

Resulta:

$$\mathbf{A}^* = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 1\\ 0 & 1.75 & -1.25 & 1.25\\ 0 & 0 & 37.5/7 & 15/7 \end{bmatrix}$$
 (54)

Com isso, nosso sistema passa a ser

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 \\ 0 & 1.75 & -1.25 \\ 0 & 0 & 37.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1.25 \\ 15 \end{bmatrix}$$
 (55)

Transformamos a matriz \mathbf{A} em uma matriz diagonal superior. O último passo consiste em resolver o problema começando pela última equação.

PASSO 4 (substituição para trás):

$$x_3 = \frac{b_3}{A_{33}} \tag{56}$$

$$x_2 = \frac{b_2 - A_{23}x_3}{A_{22}} \tag{57}$$

$$x_1 = \frac{b_1 - A_{12}x_2 - A_{13}x_3}{A_{11}} \tag{58}$$

Assim:

$$x_3 = 0.4$$
 (59)

$$x_2 = \frac{1.25 + 1.25 \times 0.4}{1.75} = 1\tag{60}$$

$$x_1 = \frac{1+1\times 1 + 1\times 0.4}{4} = 0.6\tag{61}$$

Solução final:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.6\\1\\0.4 \end{bmatrix} \tag{62}$$

Chegamos na solução exata após um certo número de passos. Esse é um método direto típico.

Nosso foco aqui, porém, será nos **Métodos Iterativos**. Esses métodos são mais vantajosos para os nossos problemas, que envolvem matrizes esparsas. Temos pelo menos 3 vantagens:

- no método iterativo não é necessário montar a matriz **A** (esse é um problema sério em duas e três dimensões);
- com um *chute* inicial bom, o método iterativo converge com algumas poucas iterações;
- o método direto nos dá a solução exata, mas muitas vezes uma solução aproximada já é o suficiente, pois já existe um erro associado à própria aproximação das derivadas no problema.

Nas próximas seções veremos alguns métodos iterativos.

5 Métodos Iterativos

Métodos Iterativos resolvem

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{63}$$

por meio de um algoritmo de repetição/iteração. Começamos com uma iteração inicial

$$\mathbf{x}^{(0)}$$
 . (64)

O número entre parênteses indica a iteração. Essa solução, $\mathbf{x}^{(0)}$, juntamente com a equação original, é usada para calcular uma solução melhorada $\mathbf{x}^{(1)}$. Depois, $\mathbf{x}^{(1)}$ é usada para calcular $\mathbf{x}^{(2)}$ e assim sucessivamente. O processo é repetido até que a convergência seja alcançada, ou seja, até que não haja mais variação significativa entre a solução dada em uma iteração e a próxima.

5.1 Método de Jacobi

Considere o nosso sistema com n equações:

$$\sum_{i=1}^{n} A_{ij} x_j = b_i \qquad i = 1, 2, \dots, n .$$
 (65)

Separando o termo em que i = j do somatório, podemos reescrever esse sistema como:

$$A_{ii}x_i + \sum_{j=1, i \neq j}^{n} A_{ij}x_j = b_i . {(66)}$$

Isolando x_i , temos

$$x_{i} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1, i \neq j}^{n} A_{ij} x_{j} \right) . \tag{67}$$

Essa última equação sugere um procedimento iterativo para encontrar um valor de \mathbf{x} melhorado, dado um valor inicial (bem parecido com o método do ponto fixo). Seguindo essa ideia:

$$x_i^{(1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, i \neq j}^n A_{ij} x_j^{(0)} \right) . \tag{68}$$

Depois, com os valores de $\mathbf{x}^{(1)}$, podemos encontrar os valores de $\mathbf{x}^{(2)}$:

$$x_i^{(2)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, i \neq j}^n A_{ij} x_j^{(1)} \right) . \tag{69}$$

De maneira geral, para conhecendo o valor de $\mathbf{x}^{(ITER)}$, podemos encontrar $\mathbf{x}^{(ITER+1)}$:

$$x_i^{(ITER+1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, i \neq j}^n A_{ij} x_j^{(ITER)} \right) . \tag{70}$$

Esse é o Método de Jacobi. Vamos só trabalhar um pouco mais nessa última equação, para destacar a variação entre iterações consecutivas. Vamos adicionar e subtrair $x_i^{(ITER)}$ no lado direito da equação (70):

$$x_{i}^{(ITER+1)} = x_{i}^{(ITER)} - x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1, i \neq j}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - A_{ii} x_{i}^{(ITER)} - \sum_{j=1, i \neq j}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$
(71)

Assim, o Método de Jacobi pode ser apresentado como:

$$x_i^{(ITER+1)} = x_i^{(ITER)} + R_i^{(ITER)} \qquad i = 1, 2, \dots, n \quad ,$$
 (72)

em que

$$R_i^{(ITER)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j^{(ITER)} \right) . \tag{73}$$

 R_i é chamado de **resíduo**. As iterações convergem se a matriz **A** é diagonal dominante. Vamos ver alguns exemplos.

Exemplo 1. Vamos resolver o seguinte sistema usando o método de Jacobi:

$$4x_1 + 2x_2 + x_3 = 7$$

$$3x_2 + x_3 = 4$$

$$2x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 9$$

$$(74)$$

Na forma matricial temos:

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 4 \\ 9 \end{bmatrix}$$
 (75)

Começando com o chute inicial:

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{76}$$

Para a primeira iteração:

$$R_1^{(0)} = \frac{1}{A_{11}} \left(b_1 - A_{11} x_1^{(0)} - A_{12} x_2^{(0)} - A_{13} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{4} (7 - 4 \times 0 - 2 \times 0 - 1 \times 0) = 1.75$ (77)

$$x_1^{(1)} = x_1^{(0)} + R_1^{(0)} = 0 + 1.75 = 1.75$$
 (78)

$$R_2^{(0)} = \frac{1}{A_{22}} \left(b_2 - A_{21} x_1^{(0)} - A_{22} x_2^{(0)} - A_{23} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{3} (4 - 0 \times 0 - 3 \times 0 - 1 \times 0) = 1.33$ (79)

$$x_2^{(1)} = x_2^{(0)} + R_2^{(0)} = 0 + 1.33 = 1.33$$
 (80)

$$R_3^{(0)} = \frac{1}{A_{33}} \left(b_3 - A_{31} x_1^{(0)} - A_{32} x_2^{(0)} - A_{33} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{5} (9 - 2 \times 0 - 2 \times 0 - 5 \times 0) = 1.80$ (81)

$$x_3^{(1)} = x_3^{(0)} + R_3^{(0)} = 0 + 1.80 = 1.80$$
 (82)

Portanto, a primeira iteração nos dá

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.75 \\ 1.33 \\ 1.80 \end{bmatrix} \tag{83}$$

Repetindo os mesmos passos para a segunda iteração, temos

$$R_1^{(1)} = \frac{1}{A_{11}} \left(b_1 - A_{11} x_1^{(1)} - A_{12} x_2^{(1)} - A_{13} x_3^{(1)} \right)$$

$$= \frac{1}{4} \left(7 - 4 \times 1.75 - 2 \times 1.33 - 1 \times 1.80 \right) = -1.12$$
(84)

$$x_1^{(2)} = x_1^{(1)} + R_1^{(1)} = 1.75 - 1.12 = 1.63$$
 (85)

$$R_2^{(1)} = \frac{1}{A_{22}} \left(b_2 - A_{21} x_1^{(1)} - A_{22} x_2^{(1)} - A_{23} x_3^{(1)} \right)$$

$$= \frac{1}{3} \left(4 - 0 \times 1.75 - 3 \times 1.33 - 1 \times 1.80 \right) = -0.60$$
(86)

$$x_2^{(2)} = x_2^{(1)} + R_2^{(1)} = 1.33 - 0.60 = 0.73$$
 (87)

$$R_3^{(1)} = \frac{1}{A_{33}} \left(b_3 - A_{31} x_1^{(1)} - A_{32} x_2^{(1)} - A_{33} x_3^{(1)} \right)$$

$$= \frac{1}{5} \left(9 - 2 \times 1.75 - 2 \times 1.33 - 5 \times 1.80 \right) = -1.23$$
(88)

$$x_3^{(2)} = x_3^{(1)} + R_3^{(1)} = 1.80 - 1.23 = 0.57$$
 (89)

Portanto, a segunda iteração nos dá

$$\mathbf{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.63 \\ 0.73 \\ 0.57 \end{bmatrix} \tag{90}$$

Repetindo esse processo iterativo, temos:

$$\mathbf{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 1.24 \\ 1.14 \\ 1.25 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.86 \\ 0.92 \\ 0.85 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^{(5)} = \begin{bmatrix} 1.08 \\ 1.05 \\ 1.09 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^{(6)} = \begin{bmatrix} 0.95 \\ 0.97 \\ 0.95 \end{bmatrix} \qquad \cdots \qquad (91)$$

E assim por diante. Note que as soluções obtidas pelo processo iterativo se aproximam cada vez mais da solução exata,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} , \tag{93}$$

mas nunca a alcançam. Outro ponto importante é que essa convergência parece ser muito lenta.

Exemplo 2. Vamos resolver agora o seguinte sistema:

$$4x_1 + 2x_2 + x_3 = 7$$

$$2x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 9$$

$$3x_2 + x_3 = 4$$
(94)

Na forma matricial temos:

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 5 \\ 0 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 9 \\ 4 \end{bmatrix}$$
 (95)

Essas equações são **idênticas** às equações do exemplo anterior, mas estão em uma ordem diferente. Agora a matriz **A** do sistema não é mais **diagonalmente dominante**.

Vamos resolver, novamente, usando o método de Jacobi, começando com o chute inicial:

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{96}$$

Para a primeira iteração:

$$x_1^{(1)} = x_1^{(0)} + R_1^{(0)} (97)$$

$$R_1^{(0)} = \frac{1}{A_{11}} \left(b_1 - A_{11} x_1^{(0)} - A_{12} x_2^{(0)} - A_{13} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{4} (7 - 4 \times 0 - 2 \times 0 - 1 \times 0) = 1.75$ (98)

$$x_2^{(1)} = x_2^{(0)} + R_2^{(0)} (99)$$

$$R_2^{(0)} = \frac{1}{A_{22}} \left(b_2 - A_{21} x_1^{(0)} - A_{22} x_2^{(0)} - A_{23} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{2} (9 - 2 \times 0 - 2 \times 0 - 5 \times 0) = 4.50$ (100)

$$x_3^{(1)} = x_3^{(0)} + R_3^{(0)} (101)$$

$$R_3^{(0)} = \frac{1}{A_{33}} \left(b_3 - A_{31} x_1^{(0)} - A_{32} x_2^{(0)} - A_{33} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{1} (4 - 0 \times 0 - 3 \times 0 - 1 \times 0) = 4.00$ (102)

Portanto, a primeira iteração nos dá

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.75 \\ 4.50 \\ 4.00 \end{bmatrix} \tag{103}$$

Repetindo esse processo iterativo, temos:

$$\mathbf{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} -1.50 \\ -7.25 \\ -9.50 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 7.75 \\ 29.75 \\ 25.75 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^{(4)} = \begin{bmatrix} -19.5625 \\ -67.625 \\ -85.25 \end{bmatrix} \cdots$$
 (104)

$$\mathbf{x}^{(10)} = \begin{bmatrix} -11533 \\ -39387 \\ -47866 \end{bmatrix} \dots$$
(105)

E assim por diante. Note que as soluções obtidas **não convergem para a solução exata.** Isso acontece porque a matriz dos coeficientes não é diagonal dominante.

Conclusão: as equações nos dois exemplos são idênticas, mas a forma como são arranjadas é diferente, o que faz com que o método funcione em um caso e não funcione no outro.

5.2 Convergência e Critério de Parada

Ter uma matriz de coeficientes diagonalmente dominante é condição suficiente para garantir que os métodos de Jacobi, Gauss-Seidel e SOR (esses dois últimos serão apresentados daqui a pouco) convirjam para qualquer chute inicial. Se a matriz dos coeficientes não é diagonalmente dominante, deve ser usado um método direto para resolver o sistema.

O número de iterações para a convergência depende:

- do grau de dominância da diagonal principal;
- do método usado:
- da solução inicial (chute inicial):
- do critério de parada.

5.2.1 Critério de convergência ou parada

Como não sabemos a solução exata, vamos usar a variação entre a solução de uma iteração e a próxima como critério de parada. A **tolerância** ϵ é um valor definido por quem está resolvendo o problema. Temos dois tipos de critérios de parada: os absolutos e os relativos.

Critérios absolutos: você deve parar quando

$$\left| (R_i^{(ITER)})_{MAX} \right| \le \epsilon$$
 ou $\sum_{i=1}^n \left| R_i^{(ITER)} \right| \le \epsilon$ ou $\left[\sum_{i=1}^n \left(R_i^{(ITER)} \right)^2 \right]^{1/2} \le \epsilon$ (106)

Critérios relativos: você deve parar quando

$$\left| \frac{(R_i^{(ITER)})_{MAX}}{x_i^{(ITER)}} \right| \le \epsilon \quad \text{ou} \quad \sum_{i=1}^n \left| \frac{R_i^{(ITER)}}{x_i^{(ITER)}} \right| \le \epsilon$$

$$\text{ou} \quad \left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{R_i^{(ITER)}}{x_i^{(ITER)}} \right)^2 \right]^{1/2} \le \epsilon$$
(107)

Atenção: use apenas um dos critérios acima em seu código. O critério aparece como condição para sair do *loop* de iterações.

5.3 Método de Gauss-Seidel

O método de Gauss-Seidel é muito parecido com o método de Jacobi. A diferença é que na nova iteração já são utilizados os valores de x_i que já foram atualizados. Vamos ver os detalhes do desenvolvimento desse método.

Considere, novamente, o nosso sistema com n equações:

$$\sum_{i=1}^{n} A_{ij} x_j = b_i \qquad i = 1, 2, \dots, n \quad . \tag{108}$$

Vamos dividir a somatória em 3 partes: para i < j, para i = j e para i > j. Assim:

$$\sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j + A_{ii} x_i + \sum_{j=i+1}^n A_{ij} x_j = b_i . {109}$$

Isolando x_i , temos

$$x_i = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^n A_{ij} x_j \right) . \tag{110}$$

Essa última equação sugere um procedimento iterativo para encontrar um valor de \mathbf{x} melhorado, dado um valor inicial. No entanto, note que os valores de x_i na primeira somatória do lado direito já foram calculados na nova iteração. Assim, vamos utilizar esses valores novos, em vez de utilizar os valores antigos. Seguindo essa ideia, o processo iterativo é dado por:

$$x_i^{(ITER+1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(ITER+1)} - \sum_{j=i+1}^n A_{ij} x_j^{(ITER)} \right) . \tag{111}$$

Esse é o Método de Gauss-Seidel. Vamos só trabalhar um pouco mais nessa última equação, para destacar a variação entre iterações consecutivas. Vamos adicionar e subtrair $x_i^{(ITER)}$ no lado direito da equação (111):

$$x_{i}^{(ITER+1)} = x_{i}^{(ITER)} - x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_{j}^{(ITER+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_{j}^{(ITER+1)} - A_{ii} x_{i}^{(ITER)} - \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_{j}^{(ITER+1)} - \sum_{j=i}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_{j}^{(ITER+1)} - \sum_{j=i}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_{j}^{(ITER+1)} - \sum_{j=i}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

$$= x_{i}^{(ITER)} + \frac{1}{A_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_{j}^{(ITER+1)} - \sum_{j=i}^{n} A_{ij} x_{j}^{(ITER)} \right)$$

Assim, o Método de Gauss-Seidel pode ser apresentado como:

$$x_i^{(ITER+1)} = x_i^{(ITER)} + R_i^{(ITER)} \qquad i = 1, 2, \dots, n$$
 (113)

em que

$$R_i^{(ITER)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(ITER+1)} - \sum_{j=i}^{n} A_{ij} x_j^{(ITER)} \right)$$
(114)

A diferença entre Jacobi e Gauss-Seidel está nessa primeira somatória do lado direito da equação (114). O método de Gauss-Seidel converge mais rapidamente (com um número menor de iterações) porque já utiliza na própria iteração os novos valores recentemente calculados.

No entanto, o método de Jacobi é paralelizável e o método de Gauss-Seidel não. Por quê?

Exemplo. Vamos resolver o seguinte sistema utilizando o método de Gauss-Seidel:

$$4x_1 + 2x_2 + x_3 = 7$$

$$3x_2 + x_3 = 4$$

$$2x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 9$$
(115)

Na forma matricial temos:

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 4 \\ 9 \end{bmatrix}$$
 (116)

Vamos resolver usando o método de Gauss-Seidel, começando com o chute inicial:

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{117}$$

Para a primeira iteração:

$$R_1^{(0)} = \frac{1}{A_{11}} \left(b_1 - A_{11} x_1^{(0)} - A_{12} x_2^{(0)} - A_{13} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{4} (7 - 4 \times 0 - 2 \times 0 - 1 \times 0) = 1.75$ (118)

$$x_1^{(1)} = x_1^{(0)} + R_1^{(0)} = 0 + 1.75 = 1.75$$
 (119)

$$R_2^{(0)} = \frac{1}{A_{22}} \left(b_2 - A_{21} x_1^{(1)} - A_{22} x_2^{(0)} - A_{23} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{3} (4 - 0 \times 1.75 - 3 \times 0 - 1 \times 0) = 1.33$ (120)

$$x_2^{(1)} = x_2^{(0)} + R_2^{(0)} = 0 + 1.33 = 1.33$$
 (121)

$$R_3^{(0)} = \frac{1}{A_{33}} \left(b_3 - A_{31} x_1^{(1)} - A_{32} x_2^{(1)} - A_{33} x_3^{(0)} \right)$$

= $\frac{1}{5} \left(9 - 2 \times 1.75 - 2 \times 1.33 - 5 \times 0 \right) = 0.57$ (122)

$$x_3^{(1)} = x_3^{(0)} + R_3^{(0)} = 0 + 0.57 = 0.57$$
 (123)

Portanto, a primeira iteração nos dá

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.75 \\ 1.33 \\ 0.57 \end{bmatrix} \tag{124}$$

Repetindo os mesmo passos, para a segunda iteração temos

$$R_1^{(1)} = \frac{1}{A_{11}} \left(b_1 - A_{11} x_1^{(1)} - A_{12} x_2^{(1)} - A_{13} x_3^{(1)} \right)$$

$$= \frac{1}{4} \left(7 - 4 \times 1.75 - 2 \times 1.33 - 1 \times 0.57 \right) = -0.81$$
(125)

$$x_1^{(2)} = x_1^{(1)} + R_1^{(1)} = 1.75 - 0.81 = 0.94$$
 (126)

$$R_2^{(1)} = \frac{1}{A_{22}} \left(b_2 - A_{21} x_1^{(2)} - A_{22} x_2^{(1)} - A_{23} x_3^{(1)} \right)$$

$$= \frac{1}{3} \left(4 - 0 \times 0.94 - 3 \times 1.33 - 1 \times 0.57 \right) = -0.19$$
(127)

$$x_2^{(2)} = x_2^{(1)} + R_2^{(1)} = 1.33 - 0.19 = 1.14$$
 (128)

$$R_3^{(1)} = \frac{1}{A_{33}} \left(b_3 - A_{31} x_1^{(1)} - A_{32} x_2^{(1)} - A_{33} x_3^{(0)} \right)$$

$$= \frac{1}{5} \left(9 - 2 \times 0.94 - 2 \times 1.14 - 5 \times 0.57 \right) = 0.40$$
(129)

$$x_3^{(2)} = x_3^{(1)} + R_3^{(1)} = 0.57 + 0.40 = 0.97$$
 (130)

Portanto, a segunda iteração nos dá

$$\mathbf{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.94\\1.14\\0.97 \end{bmatrix} \tag{131}$$

Repetindo esse processo iterativo, temos:

$$\mathbf{x}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0.94\\1.01\\1.02 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.99\\0.99\\1.01 \end{bmatrix} \qquad \cdots \tag{132}$$

E assim por diante. Note que as soluções obtidas pelo processo iterativo se aproximam cada vez mais da solução exata,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1\\1\\1 \end{bmatrix} , \tag{133}$$

mas nunca a alcançam (pra ver isso é necessário utilizar mais algarismos). Note também que agora o processo de **convergência** é **muito mais rápido** do que no caso com Jacobi. Aqui, com 4 iterações já temos um erro próximo a 1%. No método de Jacobi foram necessárias 9 iterações para alcançar precisão semelhante.

6 Método SOR

O método de Gauss-Seidel pode ser melhorado com a inclusão de um fator ω para multiplicar o resíduo em cada iteração. Esse novo método é conhecido como SOR (Successive-over-relaxation), e é dado por

$$x_i^{(ITER+1)} = x_i^{(ITER)} + \omega R_i^{(ITER)} \qquad i = 1, 2, \dots, n$$
 (134)

em que

$$R_i^{(ITER)} = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(ITER+1)} - \sum_{j=i}^{n} A_{ij} x_j^{(ITER)} \right)$$
(135)

 ω é o fator de relaxação e geralmente

$$1 < \omega < 2 \ . \tag{136}$$

Para $\omega=1$ temos o método de Gauss-Seidel e para $\omega=2$ o método diverge. O valor ótimo de ω , ou seja, o valor para o qual o número de iterações é mínimo, deve ser determinado por tentativa e erro. Esse valor se aproxima de 2 para grandes sistemas.

7 Implementação

Em anexo é apresentada a implementação em Python dos dois exemplos aqui do texto. Nesses exemplos temos sistemas com 3 equações. A generalização desses casos e a implementação da solução usando funções do Python vai ficar para vocês.

Bibliografia

 $\rm HOFFMAN,~J.~D.~\it Numerical~\it Methods~\it for~\it Engineers~\it and~\it Scientists,~1.~$ ed. Nova Iorque: McGraw-Hill, 1992.

KIUSALAAS, J. Numerical Methods in Engineering with Python 3, 1. ed. Nova Iorque: Cambridge University Press, 2013.