

Métodos iterativos para sistemas lineares

Irineu Lopes Palhares Junior

FCT/UNESP,
irineu.palhares@unesp.br



Informações sobre os conteúdos

- 1 Método de Jacobi-Richardson
- 2 Método de Gauss-Seidel
- 3 Método SOR
- 4 Método dos gradientes
- 5 Método dos gradientes conjugados

Método de Jacobi-Richardson

O método de Jacobi-Richardson é um método iterativo para a resolução de sistemas lineares da forma:

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

onde A é uma matriz quadrada de coeficientes, \mathbf{x} é o vetor solução e \mathbf{b} é o vetor de termos independentes.

O método é baseado em reescrever o sistema como:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + M^{-1}(\mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(k)})$$

onde M é uma matriz de aproximação.

Algoritmo do Método de Jacobi

O método de Jacobi corresponde a uma escolha específica de M . A matriz M é a diagonal de A , isto é:

$$M = D = \text{diag}(A)$$

A equação iterativa se torna:

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

para $i = 1, 2, \dots, n$.

Cada componente da solução é atualizado simultaneamente usando os valores da iteração anterior.

A convergência do método de Jacobi depende das propriedades da matriz A . Em geral, o método converge se a matriz A é diagonalmente dominante ou se é simétrica positiva definida.

A condição para convergência é:

$$\rho(D^{-1}(D - A)) < 1$$

onde ρ é o raio espectral da matriz.

No entanto, o método de Jacobi pode convergir lentamente comparado a outros métodos iterativos, como o método de Gauss-Seidel.

- Método simples e fácil de implementar.
- Útil para sistemas de grande escala, especialmente sistemas esparsos.
- Pode ser computacionalmente ineficiente em comparação com métodos diretos.
- A convergência pode ser lenta, mas é garantida sob certas condições (matriz diagonalmente dominante ou simétrica positiva definida).

Critérios de Convergência

A convergência do método de Jacobi depende das propriedades da matriz do sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Dois critérios principais garantem a convergência do método:

- Matriz diagonalmente dominante.
- Raio espectral da matriz de iteração.

Critério 1: Diagonal Dominante

A matriz A é ****diagonalmente dominante**** se, para cada linha i :

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

Isso significa que o elemento da diagonal em cada linha é maior em módulo que a soma dos outros elementos dessa linha.

****Exemplo:****

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

Aqui, $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ para cada linha, então a matriz é diagonalmente dominante.

Critério 2: Raio Espectral

O método de Jacobi também converge se o raio espectral da matriz de iteração T_J for menor que 1:

$$\rho(T_J) < 1$$

Onde $T_J = D^{-1}(L + U)$, sendo D a parte diagonal de A , e L e U as partes inferiores e superiores estritamente triangulares de A .

O raio espectral $\rho(T_J)$ é o maior valor absoluto dos autovalores de T_J . Se $\rho(T_J) < 1$, a convergência é garantida.

****Condição:****

$$\rho(T_J) = \max |\lambda_i| < 1$$

onde λ_i são os autovalores de T_J .

- ****Simetria e Definição Positiva****: Se a matriz A é simétrica e definida positiva, o método de Jacobi também converge.
- ****Matrizes Esparsas****: O método de Jacobi é frequentemente aplicado em sistemas esparsos, onde a convergência pode ser mais eficiente.

Método de Gauss-Seidel

O método de Gauss-Seidel é um método iterativo para a solução de sistemas lineares da forma:

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

Ele é uma melhoria do método de Jacobi e é mais eficiente, pois utiliza imediatamente os valores mais recentes para atualizar as incógnitas do sistema.

Referência: Neide Franco Bertoldi, *Cálculo Numérico*, capítulo sobre métodos iterativos.

Seja o sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, onde:

$$A = D + L + U$$

com:

- D - matriz diagonal de A ,
- L - matriz triangular inferior estrita,
- U - matriz triangular superior estrita.

A equação de iteração do método de Gauss-Seidel é:

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

Algoritmo do Método de Gauss-Seidel

O algoritmo do método de Gauss-Seidel pode ser descrito como:

- ❶ Comece com um chute inicial $\mathbf{x}^{(0)}$.
- ❷ Para $k = 0, 1, 2, \dots$ até a convergência, faça:
 - Para $i = 1, 2, \dots, n$, atualize:

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

- ❸ Verifique a convergência com um critério adequado, como o erro relativo ou absoluto.

Fonte: Bertoldi, *Cálculo Numérico*.

Vantagens do Método de Gauss-Seidel

- Utiliza as estimativas mais recentes em cada passo da iteração, o que geralmente resulta em uma convergência mais rápida que o método de Jacobi.
- Adequado para grandes sistemas esparsos, como os que surgem na discretização de equações diferenciais parciais.
- Simples de implementar.

Nota: Conforme discutido no livro de Bertoldi, o método é particularmente eficaz quando a matriz A é diagonalmente dominante ou simétrica e definida positiva.

Critérios de Convergência

O método de Gauss-Seidel converge se uma das seguintes condições for satisfeita:

- A matriz A é diagonalmente dominante, isto é:

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad \text{para todo } i.$$

- A matriz A é simétrica e definida positiva.

Exemplo Numérico

Considere o sistema linear:

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 \\ 10 \\ 10 \end{pmatrix}$$

Começando com um chute inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0)^T$, podemos aplicar o método de Gauss-Seidel para obter aproximações iterativas das variáveis x_1 , x_2 e x_3 .

O método de Gauss-Seidel é um dos métodos iterativos mais eficientes para a resolução de sistemas lineares quando aplicado sob condições apropriadas, como a diagonal dominante ou simetria positiva da matriz. Sua simplicidade e eficiência o tornam uma ferramenta indispensável na resolução de sistemas esparsos em problemas de engenharia e ciência aplicada.

Decomposição do método SOR

O Método de Sobre-Relaxação Sucessiva ou *Successive Over-Relaxation* (SOR) pode ser visto como um melhoramento do método de Gauss-Seidel (ou simplesmente uma generalização do mesmo) para a solução de sistemas de equações lineares. A partir da decomposição da matriz A^* como

$$A^* = L^* + I + R^*, \quad (1)$$

podemos reenscrever a igualdade acima como

$$A^* = L^* + \frac{1}{\omega} I + \left(1 - \frac{1}{\omega}\right) I + R^*. \quad (2)$$

O parâmetro ω tem por objetivo acelerar a convergência para a solução do sistema.

Construção do método

Substituindo a decomposição (2) ao sistema linear $A^*x = b$, resulta em

$$\left(L^* + \frac{1}{\omega} I + \left(1 - \frac{1}{\omega} \right) I + R^* \right) x = b^*, \quad (3)$$

que implica em

$$\left(L^* + \frac{1}{\omega} I \right) x = - \left(\left(1 - \frac{1}{\omega} \right) I + R^* \right) x + b^*. \quad (4)$$

Aplicando os índices das iterações, resulta em

$$\left(L^* + \frac{1}{\omega} I \right) x^{(k+1)} = - \left(\left(1 - \frac{1}{\omega} \right) I + R^* \right) x^{(k)} + b^* \quad (5)$$

Algoritmo do método SOR

Mediante algumas manipulações algébricas na equação (5), obtemos

$$x^{(k+1)} = (1 - \omega) x^{(k)} + \omega \left(-L^* x^{(k+1)} - R^* x^{(k)} + b^* \right), \quad (6)$$

ou ainda, em termos das componentes do vetor x :

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega) x_i^{(k)} + \omega \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}^* x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^* x_j^{(k)} + b_{*i} \right), \quad (7)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

Determinando o parâmetro ω

Como determinar o valor ótimo do parâmetro ω ?

Caso	Resultado
$0 < \omega < 1$	Método sub-relaxado
$\omega = 1$	Método de Gauss-Seidel
$1 < \omega < 2$	Método sobre-relaxado
$\omega < 0$ ou $\omega \geq 2$	O método SOR diverge.

Tabela 1: Fator de relaxação ω .

- Usamos $0 < \omega < 1$ quando:
 - O sistema não converge para Gauss-Seidel
 - Queremos obter uma taxa de convergência maior que o método de Jacobi.
- Usamos $1 < \omega < 2$ quando:
 - Podemos obter uma taxa de convergência mais rápida do que Gauss-Seidel.

Ilustração do método SOR

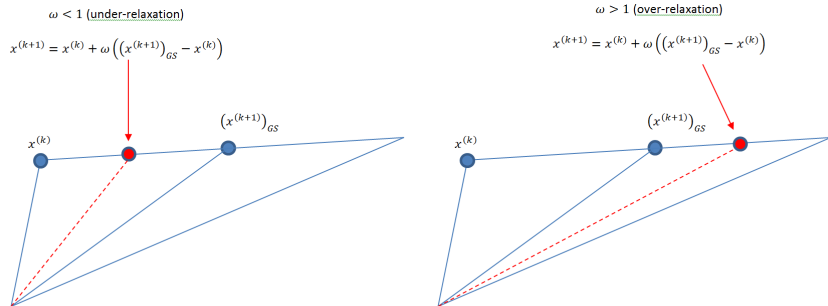


Figura 1: Como na equação da reta, podemos obter o novo x^{k+1} entre x^k e x_{GS}^{k+1} ou “após” x_{GS}^{k+1} .

Teoremas que auxiliam o cálculo de ω

Theorem

Se $a_{ii} \neq 0$ para todos os valores de i , então $\rho(B_{SOR}) \geq |\omega - 1|$ (B_{SOR} é a matriz de iteração e ρ representa seus autovalores). Isso implica que o Método SOR somente converge para $0 < \omega < 2$.

Theorem

Se A é uma matriz positiva definida e $0 < \omega < 2$, então o método SOR converge para qualquer aproximação inicial de x_i .

Theorem

Se A é uma matriz positiva definida e tridiagonal, então $\rho(B_{Gauss}) = \rho(B_{Jacobi})^2 < 1$ e a opção ótima para ω é dada por

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(B_{Jacobi})^2}}$$

Exemplos

Example

Resolva o sistema linear dado usando o método SOR com $\omega = 1.2$,

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } \epsilon < 10^{-2}.$$

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 5 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Example

Resolva o sistema linear abaixo usando o método SOR.

$$\begin{aligned} 9x_1 + 4x_2 &= 20 \\ 4x_1 + 9x_2 - x_3 &= 12. \\ -x_2 + 9x_3 &= 51 \end{aligned} \quad (9)$$

Método dos gradientes

Nesta seção veremos o método dos gradientes e, na sequência, o método dos gradientes conjugados. A ideia central destes métodos é substituir o problema de se determinar a solução de um sistema linear pelo problema de se minimizar uma função. Para isto, consideremos o sistema linear da forma

$$Ax = b \iff Ax - b = 0, \quad (10)$$

onde A é uma matriz simétrica e positiva definida. Note que, se \bar{x} for a solução exata, então $A\bar{x} - b = 0$. Entretanto, se v é uma aproximação da solução \bar{x} , então a diferença $Av - b$ irá gerar um resíduo, ou seja,

$$Av - b = r. \quad (11)$$

Multiplicando ambos os membros da Eq. (11) por v^T , resulta em

$$v^T Av - v^T b = v^T r, \quad (12)$$

ou na forma de produto interno (é o produto escalar usual)

$$\langle Av, v \rangle - \langle b, v \rangle = \langle r, v \rangle. \quad (13)$$

Abrindo os termos $\langle Av, v \rangle$ e $\langle b, v \rangle$

Observe que $\langle Av, v \rangle$ e $\langle b, v \rangle$ são números, dados por

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle Av, v \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} v_j v_i \\ \langle b, v \rangle = \sum_{i=1}^n b_i v_i \end{array} \right. \quad (14)$$

Além disso, observe que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \langle Av, v \rangle}{\partial v_i} = 2 \sum_{j=1}^n a_{ij} v_j \\ \frac{\partial \langle b, v \rangle}{\partial v_i} = b_i. \end{array} \right. \quad (15)$$

Construção da função F

Assim, definido a função F como

$$F(v) = \frac{1}{2} \langle Av, v \rangle - \langle b, v \rangle, \quad (16)$$

resulta que

$$\nabla F(v) = Av - b = r. \quad (17)$$

Além disso, se $r = 0$, então teremos que v é ponto de mínimo da função F , uma vez que A é positiva definida.

Portanto, queremos fazer com que $r \rightarrow 0$ mediante a busca pelo ponto de mínimo da função F .

Teorema - Ponto de mínimo

Theorem

O problema de determinar a solução do sistema linear $Ax = b$, onde A é simétrica e positiva definida, é equivalente ao problema de determinar o ponto de mínimo da função $f(x) = x^T Ax - x^T b$.

Exemplo

Seja o sistema $Ax = b$, dado por

$$\begin{aligned} 100x_1 + x_2 &= 1, \\ x_1 + 100x_2 &= 100. \end{aligned} \tag{18}$$

Calcule a função quadrática dada por $f(x) = x^T Ax - x^T b$ e mostre que o ponto de mínimo desta função é solução do sistema dado.

Ideia inicial do algoritmo

A partir de um valor inicial v da solução \bar{x} , queremos determinar um valor v' de tal forma que $F(v') < F(v)$, que resultará em $r' < r$.

Seja v a solução inicial e $r = Av - b$ o resíduo. Escolhemos uma direção p e variamos v nessa direção, com o objetivo de diminuir $F(v)$, para ir atingindo seu ponto de mínimo que é a solução do sistema, ou seja, tentamos anular o resíduo na direção p .

Assim, variando v na direção p , isto é, tomando:

$$v' = v + tp, \quad (19)$$

procuramos determinar o parâmetro t de modo que a função F diminua. Logo, devemos procurar o mínimo de F na direção p .

Determinação do parâmetro t

Temos então que:

$$\begin{aligned} F(v') &= \frac{1}{2} \langle Av', v' \rangle - \langle b, v' \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\langle Av, v \rangle + 2t \langle Av, p \rangle + t^2 \langle Ap, p \rangle) - 2 \langle b, v \rangle - 2t \langle b, p \rangle \\ &= F(v) + \frac{t^2}{2} \langle Ap, p \rangle + t \langle Av - b, p \rangle \\ &= F(v) + \frac{t^2}{2} \langle Ap, p \rangle + t \langle r, p \rangle, \end{aligned} \tag{20}$$

que é função do parâmetro t .

Determinação do parâmetro t

Finalmente, o parâmetro t é selecionado de tal forma que F é mínimo dentro do conjunto acima examinado. A condição necessária para isso ocorrer é:

$$\frac{\partial F(v')}{\partial t} = t \langle Ap, p \rangle + \langle r, p \rangle = 0, \quad (21)$$

que implica em

$$t = -\frac{\langle r, p \rangle}{\langle Ap, p \rangle}, \quad (22)$$

que é um ponto estacionário da F .

Teorema do método dos métodos de relaxação

Theorem

Para o ponto de mínimo v' com $t = t_{min}$ o novo resíduo $r' = Av' - b$ é ortogonal à direção p da relaxação.

Método dos gradientes

Dado o sistema linear $Ax = b$, com A SPD, construímos a função $f(x)$. Vimos que a solução do sistema linear coincide com o ponto de mínimo de $f(x)$ e que $\nabla f(x) = Ax - b = r$. Aqui, definiremos a direção p de relaxação por:

$$p^{k+1} = -r^k, \text{ para } k = 1, 2, \dots \quad (23)$$

Esta direção é dirigida para o ponto de mínimo.

Todo processo iterativo em que a direção p de relaxação é a do resíduo em sentido oposto é chamado **Método dos Gradientes**.

Temos:

$$\alpha = t_{min} = -\frac{\langle r^k, p^{k+1} \rangle}{\langle Ap^{k+1}, p^{k+1} \rangle} = \frac{\langle r^k, r^k \rangle}{\langle Ar^k, r^k \rangle} \quad (24)$$

Os resíduos consecutivos são ortogonais, isto é,

$$\langle r^{k+1}, r^k \rangle = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (25)$$

Assim, no método dos gradientes, temos que:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + \alpha p^{k+1} \Rightarrow \\ &\Rightarrow x^{k+1} = x^k - \alpha r^k. \end{aligned} \quad (26)$$

Também, temos que

$$r^{k+1} = Ax^{k+1} - b = A(x^k - \alpha r^k) - b = r^k - \alpha Ar^k. \quad (27)$$

- 1 $r^{(0)} = Ax^0 - b,$
- 2 para $k = 0, 1, 2 \dots$
 - a) $\alpha = \frac{\langle r^k, r^k \rangle}{Ar^k, r^k}$
 - b) $x^{k+1} = x^k - \alpha r^k$
 - c) $r^{k+1} = r^k - \alpha Ar^k$
 - d) Se $\frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^{k+1}\|} < \epsilon$, parar, caso contrário fazer passo 2.

Visualização das direções de relaxação com um exemplo simples

Link do exemplo: <https://www.geogebra.org/m/mmh5dnue>

Exemplo:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

- Função $F(x) = x^2 + 2y^2$
- Ponto de mínimo da função $F(x)$: $(0, 0)$
- A matrix $\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 F(x,y)}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 F(x,y)}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 F(x,y)}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 F(x,y)}{\partial y^2} \end{pmatrix}$ coincide com a matriz dos coeficientes A
- O ponto é de mínimo pois a matriz A é positiva definida

Interpretação geométrica do método dos gradientes

A Figura 2 ilustra como o método dos gradientes percorre as direções de relação ao longo das iterações.

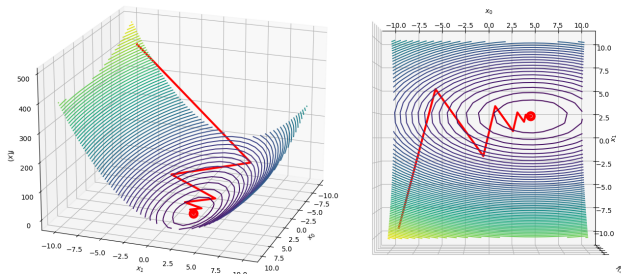


Figura 2: Ilustração das direções no método dos gradientes: (a) gráfico de $F(x)$ e as (b) direções de relaxação.

Interpretação geométrica do método dos gradientes

A Figura 3 ilustra como o método dos gradientes percorre as direções de relação ao longo das iterações.

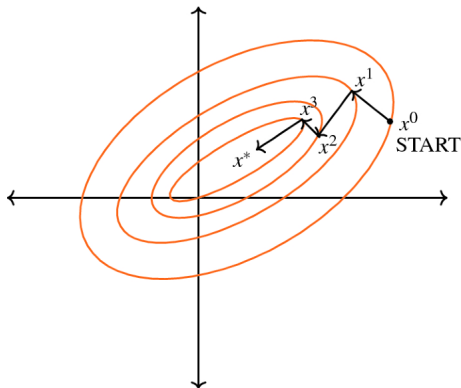


Figura 3: Ilustração das direções no método dos gradientes.

Exemplo

Usando o método dos gradientes, obter a solução do sistema linear:

$$\begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 \\ 1 & 10 & 1 \\ 0 & 1 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 11 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (29)$$

com precisão $\epsilon = 10^{-2}$.

Direções conjugadas

Dada a aplicação linear A , positiva definida, x e y são direções conjugadas se

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle = 0. \quad (30)$$

Método dos gradientes conjugados

No método dos gradientes conjugados a direção de relaxação é calculada de tal modo que p^{k+1} e p^k sejam direções conjugadas, isto é,

$$\langle p^{k+1}, Ap^p \rangle = \langle Ap^{k+1}, p^k \rangle = 0. \quad (31)$$

Além disso, a nova direção de relaxação p^{k+1} é construída como combinação linear do resíduo r^k e da direção de relaxação prévia p^k , ou seja,

$$p^{k+1} = -r^k + \alpha p^k. \quad (32)$$

Determinação do parâmetro α

A partir das equações (31) e (32), resulta em

$$\alpha = \frac{\langle r^k, Ap^k \rangle}{p^k, Ap^k} \quad (33)$$

Algoritmo do método dos gradientes conjugados

Definimos o método dos gradientes conjugados a partir das equações:

- Passo inicial:

- Dado x^0
- $r^0 = Ax^0 - b$
- $p^1 = -r^0$
- $t = -\frac{\langle p^1, r^0 \rangle}{\langle p^1, Ap^1 \rangle}$
- $x^1 = x^0 + tp^1$

- Passos seguintes:

- $r^k = Ax^k - b$
- $\alpha = \frac{\langle r^k, Ap^k \rangle}{\langle p^k, Ap^k \rangle}$
- $p^{k+1} = -r^k + \alpha p^k$
- $t = -\frac{\langle p^{k+1}, r^k \rangle}{\langle p^{k+1}, Ap^{k+1} \rangle}$
- $x^{k+1} = x^k + tp^{k+1}$

- Critério de parada:

- Se $\frac{|x^{k+1} - x^k|}{|x^{k+1}|} < \epsilon$
- $|r^{k+1}| < \epsilon$

- ❶ Resíduos consecutivos são ortogonais:

$$\langle r^k, r^{k-1} \rangle = 0 \quad (34)$$

- ❷ A direção de relaxação e o resíduo do passo são ortogonais:

$$\langle r^k, p^k \rangle = 0 \quad (35)$$

- ❸ O resíduo e a direção do passo anterior são ortogonais:

$$\langle r^k, p^{k-1} \rangle = 0 \quad (36)$$

- ① Verificar as propriedades do slide anterior.
- ② Simplificar as equações do algoritmo do método dos gradientes por meio das propriedades do item anterior, isto é,
 - Simplificar $\alpha = \frac{\langle r^k, Ap^k \rangle}{\langle p^k, Ap^k \rangle}$
 - Simplificar $t = -\frac{\langle p^{k+1}, r^k \rangle}{\langle p^{k+1}, Ap^{k+1} \rangle}$

Teoremas importantes

Theorem

No método dos gradientes conjugados, as direções de relaxação forma um sistema de direções conjugadas e os resíduos forma um sistema ortogonal, isto é, para $i \neq j$, $i, j = 1, 2, \dots$, vale que:

$$\langle Ap^i, p^j \rangle = 0 \text{ e } \langle r^i, r^j \rangle = 0. \quad (37)$$

Theorem

O método dos gradientes conjugados fornece a solução do sistema em no máximo n passos, onde n é a ordem do sistema.

PS: Observe que, em geral, na prática, devido aos erros de arredondamento, não obteremos a solução do sistema em n passos.

Example

Usando o método dos gradientes conjugados, obter a solução do sistema linear dado por

$$\begin{pmatrix} 10 & 1 & 0 \\ 1 & 10 & 1 \\ 0 & 1 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 11 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (38)$$

com precisão de 10^{-4} .