Métodos Numéricos I

Tema 3. Sistemas de Equações Lineares e Algébricas. Métodos Iterativos.

Prof. Dany S. Dominguez dsdominguez@gmail.br Sala 1 – NBCGIB (73) 3680 5212 – ramal 30

ROTEIRO

- Métodos iterativos
- Método de Jacobi
- Método de Gauss-Seidel
- Métodos de Relaxamento
- Comentários finais

- Os métodos iterativos clássicos foram propostos no final do século XVIII
 - Método de Jacobi
 - Método de Gauss-Seidel
- Características:
 - A solução é construída em um processo iterativo
 - O número de operações não é conhecido "a priori"
 - Apresentam erros de truncamento e arredondamento

- Quando devemos usar métodos iterativos?
- Técnicas iterativas não são apropriadas para sistemas pequenos,
- Nesses casos métodos diretos são mais eficientes,
- Para sistemas grandes e/ou caracterizados por matrizes esparzas os métodos iterativos são eficientes

Uma técnica iterativa para resolver o sistema

$$Ax = b$$

começa com uma aproximação inicial $x^{(0)}$ para a solução x e gera uma sequência $\left\{x^{(k)}\right\}_{k=0}^{\infty}$ que converge para x

Técnicas iterativas transformam o problema

$$Ax = b$$
 em $x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c$

• Após a escolha da aproximação inicial usamos a fórmula iterativa para gerar os $x^{(k)}$ para k=1,2,3,...

- Elementos de um método iterativo
 - Aproximação inicial $oldsymbol{\mathcal{X}}^{(0)}$
 - Fórmula iterativa $x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c$ (define o método)
 - Critério de parada
- Aproximação inicial
 - Imprescindível para começar o processo iterativo
 - Em princípio, para um método iterativo estável qualquer aproximação inicial pode ser utilizada
 - É recomendável escolher uma aproximação inicial que reduza o número de iterações

- Aproximação inicial . . .
 - A maioria dos autores recomendam

$$x_i^{(0)} = b_i$$
 ou $x_i^{(0)} = \frac{b_i}{a_{ii}}$

- Critério de parada
 - Necessário para encerrar as iterações
 - Envolve um valor de tolerância ε
 - Deve garantir que a diferencia entre a solução aproximada e a solução exata seja menor que a tolerância
 - Semelhante ao cálculo de raízes, envolve iterações consecutivas do vetor solução $\chi_i^{(k+1)}$ e $\chi_i^{(k)}$

- Critério de parada . . .
 - Como avaliar o diferença entre dois vetores?
 - O critério de parada envolve a norma do vetor desvio relativo entre duas iterações consecutivas

$$\left\| \frac{\vec{\chi}^{(k+1)} - \vec{\chi}^{(k)}}{\vec{\chi}^{(k+1)}} \right\| < \varepsilon$$

- O que é a norma do vetor?
- Podem ser utilizadas
 - Norma máxima

$$\left\| \frac{\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x}^{(k)}}{\vec{x}^{(k+1)}} \right\| = \max_{1 \le i \le n} \left| \frac{x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}}{x_i^{(k+1)}} \right| < \varepsilon$$

- Critério de parada . . .
 - Podem ser utilizadas
 - Norma euclidiana

$$\left\| \frac{\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x}^{(k)}}{\vec{x}^{(k+1)}} \right\|_{E} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{x_{i}^{(k+1)} - x_{i}^{(k)}}{x_{i}^{(k+1)}} \right)^{2}} < \varepsilon$$

- Das normas apresentadas qual é mais utilizada? Porque?
 - Norma máxima, menor esforço computacional, garante que erro relativo em cada elemento do vetor é menor que a tolerância

- Obtemos a fórmula iterativa do método de Jacobi a partir da notação algébrica de sistemas de equações
- Dado o problema

- Fazer no quadro para n = 3
- Utilizamos a equação i para calcular o elemento x_i do vetor incógnita,
- Para isso isolamos x_i em cada equação

- Os elementos do lado direito representam a iteração (k), os do lado esquerdo a iteração (k+1)
- O resultado

$$\begin{split} x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{11}} \Big[b_1 - a_{12} x_2^{(k)} - a_{13} x_3^{(k)} - \dots - a_{1n} x_n^{(k)} \Big] \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{22}} \Big[b_2 - a_{21} x_1^{(k)} - a_{23} x_3^{(k)} - \dots - a_{2n} x_n^{(k)} \Big] \\ & \vdots \\ x_n^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{nn}} \Big[b_{nn} - a_{n1} x_1^{(k)} - a_{n2} x_2^{(k)} - \dots - a_{n,n-1} x_{n-1}^{(k)} \Big] \end{split}$$

Generalizando para qualquer elemento de i

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

 Exemplo 1: Realize três iterações pelo método de Jacobi para resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 6 & -1 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \\ 3 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 10 \\ 16 \end{bmatrix}$$

 Em cada iteração compute o erro aproximado da solução considerando a norma máxima

$$e_a^{(k+1)} = \max_{1 \le i \le n} \left| \frac{x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}}{x_i^{(k+1)}} \right|$$

Exemplo 1...

Equações iterativas

$$x_1^{(k)} = \frac{1}{6} \left(13 + x_2^{(k-1)} - 3x_3^{(k-1)} \right)$$

$$x_2^{(k)} = \frac{1}{3} \left(10 - x_1^{(k-1)} - x_3^{(k-1)} \right)$$

$$x_3^{(k)} = \frac{1}{5} \left(16 - 3x_1^{(k-1)} + x_2^{(k-1)} \right)$$

Aproximação inicial

$$x_1^{(0)} = \frac{b_1}{a_1} = 2,16667$$
 $x_2^{(0)} = \frac{b_2}{a_2} = 3,33333$
 $x_3^{(0)} = \frac{b_3}{a_3} = 3,20000$

• Exemplo 1...

- Iteração 1

$$x_1^{(1)} = 1,12222$$
 $e_{a,1}^{(1)} = 93,069$ $e_a^{(1)} = 115,83$ $x_2^{(1)} = 1,54444$ $e_{a,2}^{(1)} = 115,83$ $e_{a,3}^{(1)} = 2,56667$ $e_{a,3}^{(1)} = 24,675$

- Iteração 2

$$x_1^{(2)} = 1,14074$$
 $e_{a,1}^{(2)} = 1,6223$ $e_a^{(2)} = 26,585$ $x_2^{(2)} = 2,10370$ $e_{a,2}^{(2)} = 26,585$ $e_{a,2}^{(2)} = 2,83556$ $e_{a,3}^{(2)} = 9,4828$

• Exemplo 1...

Iteração 3

$$x_1^{(3)} = 1,09951$$
 $e_{a,1}^{(3)} = 3,7503$ $e_a^{(3)} = 4,7713$
 $x_2^{(3)} = 2,00790$ $e_{a,2}^{(3)} = 4,7713$
 $x_3^{(3)} = 2,93630$ $e_{a,3}^{(3)} = 3,4309$

Solução exata

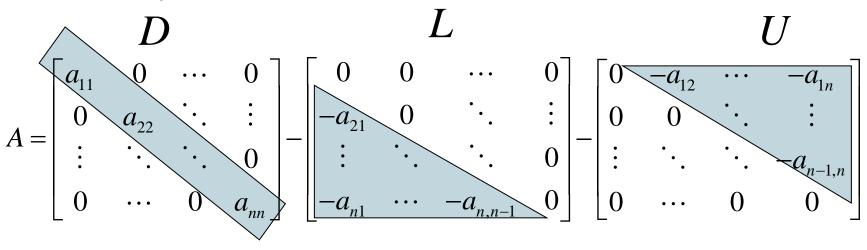
$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

- O erro da solução aproximada diminui com o aumento de k
- Soluções mais precisas podem ser obtidas exigindo uma menor tolerância com maior custo computacional

 Podemos obter a fórmula iterativa de Jacobi partindo da notação matricial

$$Ax = b$$

Decompomos a matriz A na forma



$$A = D - L - U$$
$$(D - L - U)x = b$$

Fórmula iterativa em notação matricial . . .

$$Dx - (L+U)x = b$$

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

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

$$D^{-1} = \begin{bmatrix} 1/a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1/a_{nn} \end{bmatrix} \qquad x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} b_i - \sum_{\substack{j=1 \ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

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

Algoritmo

```
ENTRADA: número de incógnitas e equações n matriz ampliada A*=(a_{ij}) i=1:n j=1:n+1 tolerância tol número máximo de iterações N
```

SAÍDA: solução do sistema x_1 , x_2 , ..., x_n ou mensagem de que o método falhou

Algoritmo

```
PASSO 1:Para i=1:n faça passo 2
  PASSO 2:x0_i=A_{in}/A_{ii}
PASSO 3:Faça k=1
PASSO 4: Enquanto (k<N) faça passos 5-8
     PASSO 5:Para i=1:n faça x_i = Eq. Jacobi
     PASSO 6:Se ||x-x0|| < tol Saída (x_1, ..., x_n), FIM
     PASSO 7: k=k+1
     PASSO 8:Para i=1:n faça x0_i = x_i
PASSO 9: Saída (Método Falhou), FIM
```

- Qual o custo computacional do método de Jacobi?
- Avaliamos o número de operações
 - Aproximação inicial
 - *n*, divisões
 - Para cada iteração k
 - Para cada incógnita x_i
 - − 1, divisão
 - -(n-2)+1, somas e subtrações
 - − n-1, multiplicações
 - Total de uma incógnita: 2n-1
 - Total de uma iteração n(2n-1)

- Avaliamos o numero de operações . . .
 - Para cada iteração $k \dots$
 - Calculo do erro
 - − *n*, subtrações
 - − *n*, divisões
 - − *n*, comparações
 - − Total: *3n*
 - Multiplicando pelo numero de iterações e somando todas as etapas

$$NOP_{JAC} = n + k[n(2n - 1) + (3n)]$$

 $NOP_{JAC} = n + 2k(n^2 + n)$

- Qual o custo computacional do método de Jacobi?
 - Algoritmo: $O(k)O(n^2)$
 - Quadrático no tamanho da matriz
 - Linear no número de iterações

- Quando devemos usar o Jacobi ou Eliminação de Gauss?
 - Quando o numero de iterações (k) for menor que o tamanho da matriz
 - Isto geralmente ocorre em sistemas grandes (n>50)

- O método iterativo de Gauss-Seidel é um aprimoramento do método de Jacobi,
- Ao calcularmos o elemento $x_i^{(k)}$ usando a fórmula de Jacobi

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

• usamos apenas informação da iteração anterior $x^{(k-1)}$ entretanto os valores $x_j^{(k)}$ para i < j já estão disponíveis

- Parece razoável calcular $x_i^{(k)}$ utilizando a informação mais recente
- Modificamos a formula iterativa de Jacobi para utilizar as melhores estimativas disponíveis no cálculo de $x_i^{(k)}$
- A formula iterativa de Gauss-Seidel

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

 Exemplo 2: Realize três iterações pelo método de Gauss-Seidel para resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 6 & -1 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \\ 3 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 10 \\ 16 \end{bmatrix}$$

- a) Em cada iteração calcule o erro relativo da solução considerando a norma máxima
- b) Compare os resultados com os obtidos para o método de Jacobi

Exemplo 2 . . .

Equações iterativas

$$x_1^{(k)} = \frac{1}{6} \left(13 + x_2^{(k-1)} - 3x_3^{(k-1)} \right)$$

$$x_2^{(k)} = \frac{1}{3} \left(10 - x_1^{(k)} - x_3^{(k-1)} \right)$$

$$x_3^{(k)} = \frac{1}{5} \left(16 - 3x_1^{(k)} + x_2^{(k)} \right)$$

Aproximação inicial

$$x_1^{(0)} = \frac{b_1}{a_1} = 2,16667$$
 $x_2^{(0)} = \frac{b_2}{a_2} = 3,333333$
 $x_3^{(0)} = \frac{b_3}{a_3} = 3,20000$

• Exemplo 2...

- Iteração 1

$$x_1^{(1)} = 1,12222$$
 $e_{a,1}^{(1)} = 93,069$ $e_a^{(1)} = 93,069$ $x_2^{(1)} = 1,89259$ $e_{a,2}^{(1)} = 76,125$ $e_{a,3}^{(1)} = 2,90519$ $e_{a,3}^{(1)} = 10,148$

Iteração 2

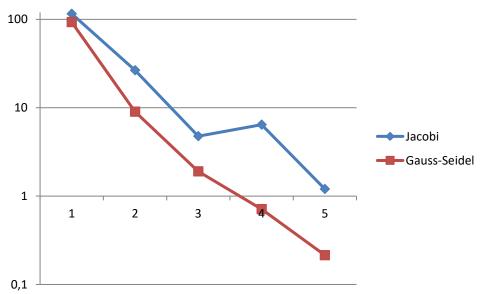
$$x_1^{(2)} = 1,02951$$
 $e_{a,1}^{(2)} = 9,0059$ $e_a^{(2)} = 9,0059$ $x_2^{(2)} = 2,02177$ $e_{a,2}^{(2)} = 6,3893$ $e_{a,3}^{(2)} = 2,98665$ $e_{a,3}^{(2)} = 2,7276$

• Exemplo 2...

- Iteração 3

$$x_1^{(3)} = 1,01030$$
 $e_{a,1}^{(3)} = 1,9007$ $e_a^{(3)} = 1,9007$ $x_2^{(3)} = 2,00102$ $e_{a,2}^{(3)} = 1,0372$ $e_{a,3}^{(3)} = 2,99402$ $e_{a,3}^{(3)} = 0,2462$

Comparação do erro



• Exemplo 2...

- O método de Gauss-Seidel converge mais rapidamente que o método de Jacobi
- O número de iterações para a mesma tolerância é sempre menor no método de Gauss-Seidel
- Podemos obter a formula iterativa de GS a partir da notação matricial,
- Para isso usamos um procedimento semelhante ao mostrado no método de Jacobi
- O resultado aparece na forma

$$x^{(k)} = D^{-1}Lx^{(k)} + D^{-1}Ux^{(k-1)} + D^{-1}b$$

• Que modificações devemos fazer no algoritmo de Jacobi para obtermos o algoritmo de Gauss-Seidel?

```
PASSO 1:Para i=1:n faça passo 2
  PASSO 2:x0_i=A_{in}/A_{ii}
PASSO 3:Faça k=1
PASSO 4: Enquanto (k<N) faça passos 5-8
     PASSO 5: Para i=1:n faça x_i = Eq. Gauss-Seidel
     PASSO 6:Se ||x-x0|| < \text{tol Saída}(x_1, ..., x_n), FIM
     PASSO 7: k=k+1
     PASSO 8:Para i=1:n faça x0_i = x_i
PASSO 9: Saída (Método Falhou), FIM
```

 Qual é o custo computacional do método de Gauss-Seidel?

$$NOP_{GS} = NOP_{JAC} = n + 2k(n^2 + n)$$

- Algoritmo: $O(k)O(n^2)$
- Quadrático no tamanho da matriz
- Linear no número de iterações
- O número de iterações sempre é menor em GS que em Jacobi
- Por motivos de eficiência sempre deve-se utilizar GS em lugar de Jacobi

- Condição de convergência
 - **Teorema:** Se A é *diagonalmente dominante de maneira estrita*, então com qualquer escolha de $x^{(0)}$, tanto o método de Jacobi como Gauss-Seidel geram seqüências $x^{(k)}$ que convergem para a solução única do sistema Ax=b
 - Diagonal dominante

$$\left|a_{i,i}\right| > \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} \left|a_{i,j}\right|$$

O valor absoluto do elemento da diagonal é maior que a soma dos valores absolutos dos elementos da mesma linha.

 Existe alguma relação entre o conceito de convergência e os erros de truncamento?

- Condição de convergência . . .
 - A condição de convergência é apenas condição suficiente
 - Isto significa, se a condição for satisfeita o método converge
 - Se a condição não for satisfeita, não podemos afirmar que o método converge ou diverge
 - Como verificar o comportamento do método quando a condição de convergência não for satisfeita?
 - Deve-se monitorar o comportamento do erro
 - Se o erro decresce, o método converge
 - Se o erro aumenta, ou oscila, o método diverge

• Exemplo 3: Verifique se a matriz do sistema

$$\begin{bmatrix} 6 & -1 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \\ 3 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 10 \\ 16 \end{bmatrix}$$

é estritamente diagonal dominante.

$$|6| > |-1| + |3|$$
 $|3| > |1| + |1|$ **OK**
 $|5| > |3| + |-1|$

- Os métodos de relaxamento são uma alternativa ao método de Gauss-Seidel, que visa:
 - Acelerar a convergência
 - Encontrar a convergência em sistemas que divergem ou convergem muito lentamente
- Nos métodos de relaxamento os valores de $x_i^{(k)}$ obtidos pelo método de GS são corrigidos por uma média ponderada entre os resultados da iteração k e k-l, na forma

$$x_{i_{REL}}^{(k)} = \omega x_{i_{GS}}^{(k)} + (1 - w) x_{i_{REL}}^{(k-1)}$$

onde w es um fator de peso entre 0 e 2.

• Se w=1, teremos o método de Gauss-Seidel

$$x_{i_{REL}}^{(k)} = x_{i_{GS}}^{(k)}$$

- Se 0 < w < 1, teremos sub-relaxamento, neste caso diminuímos o peso dos resultados da nova iteração,
- O sub-relaxamento oferece bons resultados para
 - Obter a convergência em sistemas que não convergem
 - Acelerar a convergência em sistemas com comportamento oscilatório
- Se 1 < w < 2, teremos sobre-relaxamento, neste caso aumentamos o peso da nova iteração,
- Se supõe que a nova iteração está mais próxima do solução exata

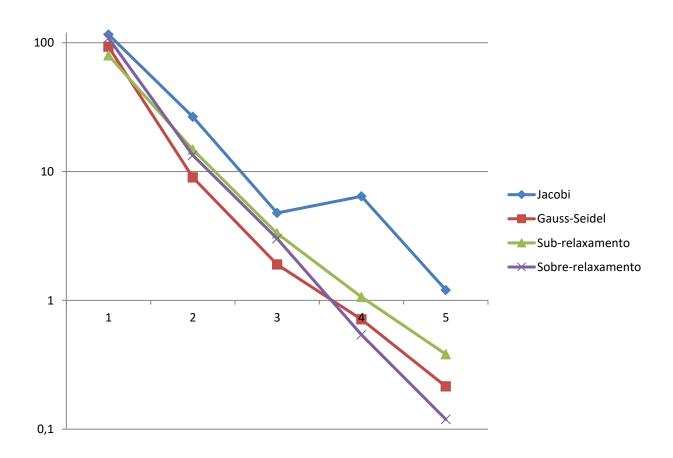
- O sobre-relaxamento acelera a convergência de um sistema já convergente
- A escolha do valor apropriado de w depende criticamente do sistema que está sendo resolvido
- O valor de w ótimo é determinado frequentemente de forma empírica
- Muitos autores sugerem que o valor ótimo de encontra-se entre 1 e 1,2 para a maioria dos sistemas
- Existem expressões para estimar o w_{otm} em função do raio espectral da matriz do sistema

• **Exemplo 4**: Realize três iterações pelos métodos de Sub-relaxamento (w=0.92) e Sobre-relaxamento (w=1.08) para resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 6 & -1 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \\ 3 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 10 \\ 16 \end{bmatrix}$$

- a) Em cada iteração calcule o erro relativo da solução considerando a norma máxima
- b) Compare os resultados com os obtidos para os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel

- Exemplo 3 . . .
 - Arquivo Excel
 - Gráfico dos erros



 Quais modificações devemos fazer no algoritmo de Gauss-Seidel para termos um método de relaxamento?

ENTRADA: número de incógnitas e equações n matriz ampliada $A*=(a_{ij})$ i=1:n j=1:n+1 tolerância tol número máximo de iterações N parâmetro omega w

SAÍDA: solução do sistema x_1 , x_2 , ..., x_n ou mensagem de que o método falhou

Relaxamento - Algoritmo

```
PASSO 1:Para i=1:n faça passo 2
  PASSO 2:x0_i=A_{in}/A_{ii}
PASSO 3:Faça k=1
PASSO 4: Enquanto (k<N) faça passos 5-8
     PASSO 5:Para i=1:n faça
       PASSO 5.1: x_{GSi} = Eq. Gauss-Seidel
       PASSO 5.2: x_i = Eq. Relaxamento
     PASSO 6:Se ||x-x0|| < \text{tol Saída}(x_1, ..., x_n), FIM
     PASSO 7: k=k+1
     PASSO 8:Para i=1:n faça x0_i = x_i
PASSO 9: Saída (Método Falhou), FIM
```

- Qual é o custo adicional por adicionar técnicas de relaxamento ao método de Gauss-Seidel?
 - Operações da fórmula de relaxamento
 - Para cada iteração k
 - Para cada incógnita x_i
 - -2, produtos
 - -2, somas e subtrações
 - Total: 4
 - Somando pelas n incógnitas e multiplicando pelas k iterações: 4kn

Custo computacional . . .

$$NOP_{REL} = NOP_{GS} + 4kn = n + 2k(n^2 + n) + 4kn$$

 $NOP_{REL} = n + 2k(n^2 + 3n)$

- Algoritmo: $O(k)O(n^2)$
- Quadrático no tamanho da matriz
- Linear no número de iterações
- Temos um ligeiro aumento no número de operações ao introduzir o relaxamento
- Geralmente, o aumento do custo é compensado pela diminuição no número de iterações

Comentários finais

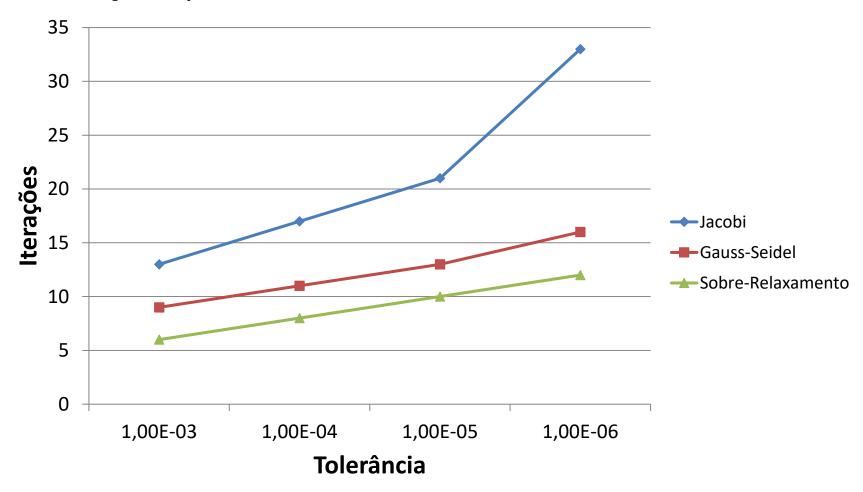
- Os elementos de um método iterativo são
 - Aproximação inicial
 - Formula iterativa
 - Critério de parada
- Os métodos iterativos são apropriados para matrizes grandes
- Os principais métodos iterativos são
 - Método de Jacobi
 - Método de Gauss-Seidel
 - Método de relaxamento

Comentários finais

- O método de Jacobi converge lentamente e não tem valor pratico (apenas acadêmico)
- O método de Gauss-Seidel é apropriado para a maioria das aplicações
- Os métodos de GS e Jacobi podem apresentar problemas de convergência
- O método de GS pode ser acelerado/aprimorado usando técnicas de relaxamento
 - A principal dificuldade nas técnicas de relaxamento é encontrar o valor de w ótimo

Comentários finais

Iterações para uma tolerância determinada



$$NOP_{GS} = NOP_{JAC} = n + 2k(n^2 + n)$$
 $NOP_{REL} = n + 2k(n^2 + 3n)$