Trabalho 2 de Cálculo Numérico – Métodos Diretos e Iterativos para resolução de sistemas lineares e não-lineares

Nome: Vinícius Renato Rocha Geraldo

Os métodos abordados para implementação de resoluções de sistemas lineares e não-lineares são conhecidos na literatura para soluções de sistemas como eliminação de Gauss, fatoração LU, fatoração Cholesky para métodos diretos e as utilizações com métodos iterativos como Gauss-Jacobi, Gauss-Seidel e Newton. O foco desse trabalho está em fazer a comparação entre os métodos diretos e iterativos sendo abordado 3 pontos de análise. Esse pontos são convergência, esparsidade da matriz e erros de arredondamento.

a. Convergência

Métodos Diretos: são processos finitos portanto fornecem solução para qualquer sistema linear não-singular, ou seja, cujo determinante não seja nulo.

Métodos Iterativos: têm convergência assegurada sob certas condições, isso implica que para determinados parâmetros de parada uma solução pode ou não convergir para a solução desejada. Para esses métodos iremos abordar melhor com os gráficos gerados nos códigos.

b. Esparsidade da Matriz

Métodos Diretos: em sistemas esparsos provocam o preenchimento da matriz, isto é, no processor de eliminação geram elementos não-nulos, onde originalmente tínhamos elementos nulos. Técnicas especiais de pivoteamento reduzem este preenchimento. Fatoração LU geram bons resultados em função dos cálculos gerados pela matriz inversa e assim gerando uma resposta aproximada. Para esse trabalho iremos analisar a esparsidade da matriz nos métodos diretos.

c. Erros de arredondamento

Métodos Diretos: têm problemas de arredondamento e podem ser amenizados utilizando a técnica de pivoteamento amenizam esses tais erros. Para esse trabalho não utilizamos as técnicas de pivoteamento que consiste em trocas de linhas e colunas e assim gerar uma nova matriz para resolução.

Métodos Iterativos: têm menos erros de arredondamento quando a convergência estiver assegurada.

Abaixo contém uma abordagem sobre cada método e como funciona a implementação dos resultados.

1. Eliminação de Gauss

A eliminação gaussiana, também conhecida como escalonamento, é um método para resolver sistemas lineares. Este método consiste em manipular o sistemas através de determinadas operações elementares, transformando a matriz estendida de entrada em uma matriz triangular que nada mais é que anular todos os elementos abaixo do elemento da diagonal principal para afim de obter a resolução do sistema de forma que substitua o valor das incógnitas.

Naturalmente estas operações elementares devem preservar a solução do sistema e consistem em:

- Multiplicação de uma linha por uma constante não nula;

- Substituição de uma linha por ela mesma somada a um múltiplo da outra linha;

- Permutação de duas linhas. *essa operação acontece para o pivoteamento

Nos códigos gerados podemos ver as soluções com as matrizes aumentadas a fim de gerar um vetor solução como está apresentado na Figura 1 a solução de um exemplo da lista 6 onde foi aplicado os métodos da eliminação de Gauss. É definido uma mantissa de representação do vetor solução para analisa o problema de arredondamento de casas nesse exemplo é usado como mantissa sendo 4 e podemos ver que a precisão de alguns cálculos ainda é mantida.

```
Matriz Original
-2      3       1       5       2
5       1       -1      0       -1
1       6       3       -1      0
4       5       2       8       6


Determinante:  -320


Matriz por Eliminação de Gauss
-2      3       1       5       2
0       8       1       12      4
0       0       2       -9      -2
0       0       0       10      6
[ 0.4313 -0.6125  1.7     0.6   ]
```

Figura 1 – Solução por eliminação de Gauss exercício da lista 6, questão 1c

2. Fatoração LU

A fim de resolver o sistema de equações, a fatoração LU se baseia em fatorar uma matriz de entrada A como sendo um produto de uma matriz L triangular inferior e uma matriz U triangular superior a fim de obter a resolução do sistema linear $Ax = b$.

Isto significa que, ao invés de resolvermos o sistema original, podemos resolver o sistema triangular inferior $Ly = b$ e, então, o sistema triangular superior $Ux = y$, o qual nos fornece a solução do sistema linear.

A matriz L é obtida a partir da matriz identidade I, ao longo do escalonamento de A. Os elementos da matriz L são os múltiplos do primeiro elemento da linha de A a ser zerado dividido pelo pivô acima na mesma coluna. A matriz U é obtida ao final do escalonamento da matriz A.

Na Figura 2 está detalhado um resultado da lista 6 onde foi realizado a fatoração LU do sistema. Podemos ver como fica o formato da matriz e o resultado das soluções de x e y do sistema.

```
L:
[[1.   0.   0.   0.  ]
 [0.25 1.   0.   0.  ]
 [1.25 1.   1.   0.  ]
 [0.5  0.72 1.1  1.  ]]


U:
[[ 4.   -1.    3.    8.  ]
 [ 0.    6.25  1.25 -5.  ]
 [ 0.    0.   -4.   -5.  ]
 [ 0.    0.    0.    6.1 ]]
Solução das matrizes:

Solução Y
[ 43.    -3.75 -42.    35.4 ]


Solução X
[-2.4426  3.3934  3.2459  5.8033]
```

Figura 2 – Solução por fatoração LU do exercício 2a da lista 6

3. Fatoração Cholesky

A fatoração Cholesky é um método utilizado para simplificar a fatoração LU, quando a matriz é simétrica, positiva definida. A definição de matrizes simétricas é sendo $a_{ij} = a_{ji}$ e as matrizes positivas definidas são todos os menores principais têm determinante positivo. Podemos ver que a solução contém a mesma ideia, porém ao invés de utilizar matriz triangulares acontece a definição de matrizes inversas para o cálculo das incógnitas.

O sistemas é definido como $A = GG^T$ para resolver o sistema $Ax = b$, como definição das resoluções utilizamos $Gy = b$ e da $G^Tx = y$. Na Figura 3 vemos a resolução do sistema a partir da fatoração Cholesky, onde temos como resultado a matriz inversa e a matriz original para achar a solução dos sistemas também é apresentado o vetor solução como visto na implementação acima.

```
Matriz Cholesky
9.0     -6.0    3.0

-6.0    5.385164807134504       -7.0

3.0     -1.299867367239363      4.242640687119285

Matriz Transposta de Cholesky (G^t)
9.0     -6.0    3.0

-6.0    5.385164807134504       -1.299867367239363

3.0     -7.0    4.242640687119285

Determinante:  522.0
Vetor solução X:  [ 1.9784  9.0539 15.1346]
Vetor solução Y:  [ 8.886  17.2134  6.7687]
```

Figura 3 – Solução por fatoração Cholesky da questão 3a da lista 6

4. Gauss-Jacobi e Gauss-Seidel

Os dois métodos iterativos básicos para obter a convergência de soluções lineares a partir de aproximações para chegar à resolução e assim vamos utilizando de funções sucessivas para chegar na melhor aproximação desejada.

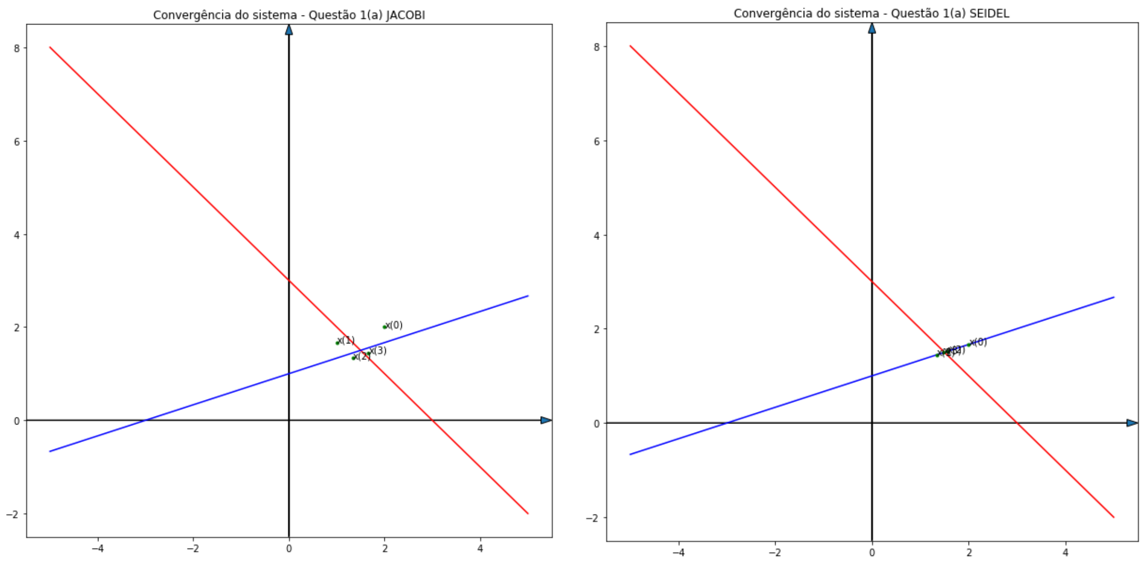
A diferença entre os métodos acontece na parte da atualização dos valores das componentes no método de Jacobi a atualização é feita utilizando o resultado obtido anteriormente, já na de Seidel as componentes são atualizadas conforme são disponíveis para a aproximação. Isso podemos notar que com as gerações dos gráficos com os pontos X vemos se o sistema vai convergir ou não para determinados critérios de execução para determinados sistemas o método de Seidel vai ser melhor na convergência dos valores pois por utilizar de cálculos atualizados a propagação do erro vai ser menor.

Foi adotado para os gráficos uma mantissa fixa de 4 valores após a vírgula para ser justo nas comparações. Abaixo estão apresentados resultados da lista 5 com os devidos gráficos.

```
Iterações:  1
X:  [2. 2.]
NormaRel:  0.5
Iterações:  2
X:  [1.         1.66666667]
NormaRel:  0.6
Iterações:  3
X:  [1.33333333 1.33333333]
NormaRel:  0.2500000000000001
Iterações:  4
X:  [1.66666667 1.44444444]
NormaRel:  0.20000000000000007
Não convergiu


Vetor solução:  [1.66666667 1.44444444]
Iterações total:  4
```

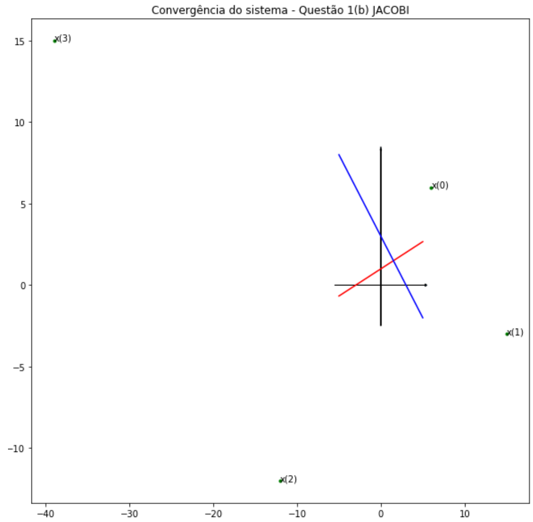
```
Iteração:  0
X:  [2.         1.66666667]
NormaRel:  0.5
Iteração:  1
X:  [1.33333333 1.44444444]
NormaRel:  0.4615384615384616
Iteração:  2
X:  [1.55555556 1.51851852]
NormaRel:  0.1428571428571429
Iteração:  3
X:  [1.48148148 1.49382716]
NormaRel:  0.04958677685950405
Convergiu!!  0


Vetor solução:  [1.48148148 1.49382716]
Iterações total:  4
```

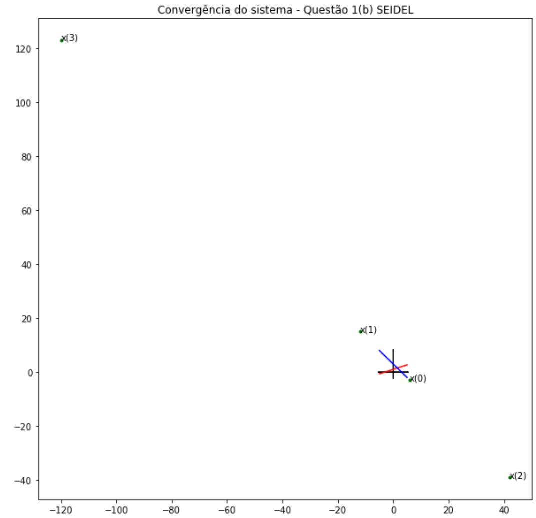
Comparação do mesmo sistema para os métodos de Gauss-Jacobi (esquerda) e Gauss-Seidel (direita)

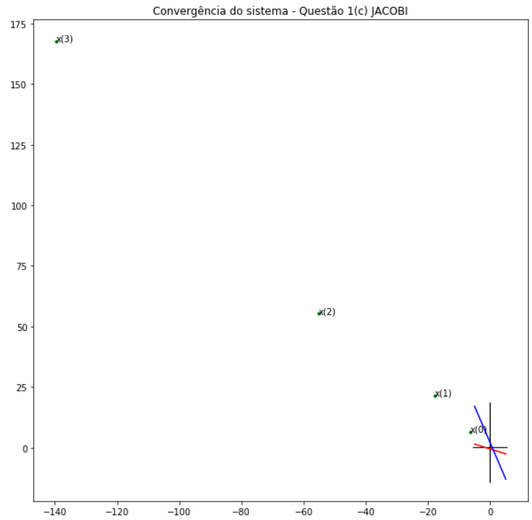


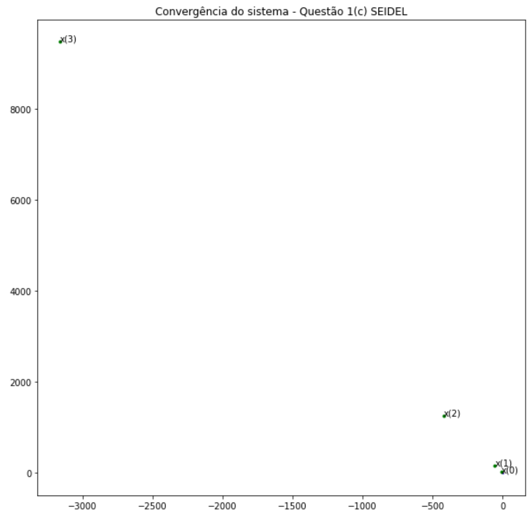
Comparação dos gráficos de convergência para os métodos iterativos

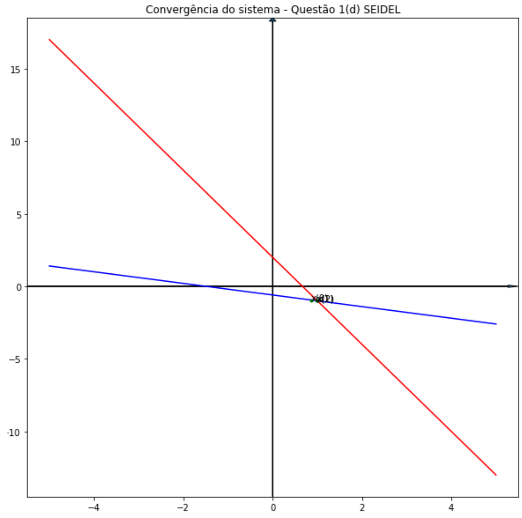
Abaixo contém os gráficos para todos os exercícios da lista que foi realizada a implementação dos métodos. Podemos notar que os sistemas que não convergem para o resultado desejado o gráfico fica cada vez mais distantes os pontos das retas que são projetadas. Isso acontece pelo erro associado e a relação com a quantidade de iterações do método a ser chamado.

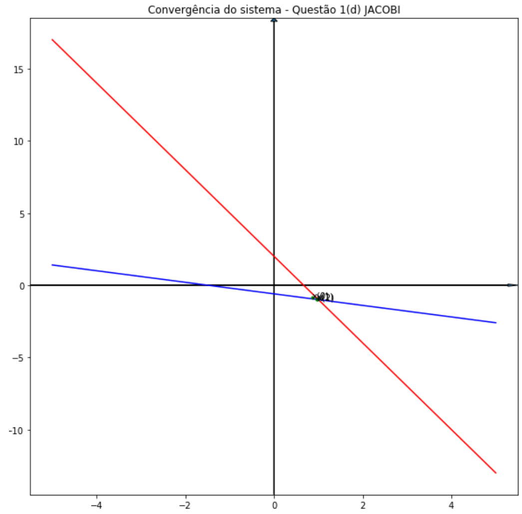












Concluímos que para o mesmo sistema de equações os métodos se diferem enquanto a convergência da resposta. Para essa avaliação é feito o mesmo número de iterações (4) e usado uma precisa de 0.05 como sendo critério de convergência, vemos que a implementação de Seidel pode ser mais eficiente por utilizar de valores atualizados da sua componente.

Podemos observar outras características desses métodos que conforme aumentamos a iteração de execução o sistema tenta convergir o mais aproximado ao valor desejado, como exemplo vemos que a questão A para o método de Jacobi se aumentarmos a iteração ela conseguirá convergir para o valor desejado, ou seja, a rapidez que o método de Seidel para encontrar a solução desejada.

5. Newton

O método mais utilizado e conhecido para resolver sistemas de equações lineares é o método de Newton. Por ser um método iterativo consegue trabalhar da mesma forma como abordado os métodos de Gauss-Jacobi e Gauss-Seidel por substituição, porém esse é utilizado vetores gradientes que nada mais é que um vetor de derivada, e a partir deles gera uma Matriz Jacobiana.

Os cálculos são feitos por aproximações da solução do sistema linear e para descrever seu funcionamento melhor iremos detalhar os seus passos de algoritmo:

a. A avaliação da matriz Jacobiana em $x^{(k)}$
b. A resolução do sistema linear $J(x^{(k)}).\Delta x^{(k)} = -F(x^{(k)})$

Abaixo na Figura 4 é feito uma chamada do seu método no trabalho e implementação gerando o vetor solução do sistema, o número de iterações e o cálculo do delta aproximado.

```
Questão (a)

Iteração: 1
DELTA = [-1.35810811 -1.80405405  0.91891892]
Solução Iterativa [-0.35810811  3.19594595  1.91891892]

Iteração: 2
DELTA = [ 0.38074295 -0.73362927 -0.31197209]
Solução Iterativa [0.02263484 2.46231668 1.60694683]

Iteração: 3
DELTA = [ 0.23236904 -0.21119515 -0.02369484]
Solução Iterativa [0.25500388 2.25112153 1.58325199]

Iteração: 4
DELTA = [ 0.02849957 -0.02649026  0.00045724]
Solução Iterativa [0.28350345 2.22463127 1.58370923]


Solução final da convergência:  [0.28350345 2.22463127 1.58370923]
Total de Iterações:  4
```

Figura 4 – Solução da questão (a) da lista 7 da implementação Newton – resolução de sistemas não-lineares