Métodos iterativos para Sistemas Lineares

Introdução

Num método iterativo para resolver um sistema de equações lineares $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, começa-se com uma aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$ da solução $\mathbf{x}$ e é gerada uma sucessão de aproximações $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$. Os métodos iterativos são em geral usados para sistemas de grande dimensão (por exemplo, se A é da ordem de 10000) onde A tem uma grande percentagem de elementos nulos (matriz esparsa). Sistemas deste tipo surgem por exemplo depois da aplicação de métodos numéricos a problemas de valores na fronteira e equações com derivadas parciais.

Relembremos que, no capítulo 2, para as equações da forma $f(x) = 0$, obtiveram-se métodos iterativos do ponto fixo $x_{k+1} = g(x_k)$, depois de se reescrever a equação dada $f(x) = 0$ na forma $x = g(x)$.

No caso dum sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, que é uma equação da forma

$$\underbrace{A\mathbf{x} - \mathbf{b}}_{F(x)} = \mathbf{0}, \tag{1}$$

também começamos por obter uma equivalência $\mathbf{x} = G(\mathbf{x})$. Como veremos na secção seguinte, em geral isso pode ser feito através duma decomposição da matriz A, a qual permite reescrever o sistema numa forma equivalente

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Longleftrightarrow \mathbf{x} = \underbrace{C\mathbf{x} + \mathbf{d}}_{G(\mathbf{x})}, \tag{2}$$

onde C é uma certa matriz apropriada e $\mathbf{d}$ um vector. O método iterativo associado a G será então:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = G(\mathbf{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{3}$$

ou,usando (2),

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = C\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}, \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{4}$$

Seja

$$\mathbf{x}^{(0)} = [x_1^{(0)}\ x_2^{(0)}\ x_3^{(0)}\ \ \ldots x_n^{(0)}]^T$$

um vector aproximação inicial para

$$\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ x_3 \ldots x_n]^T,$$

onde

$$\begin{array}{l} x_1^{(0)}\text{é aprox. para }\ x_1, \\ x_2^{(0)}\text{é aprox. para }\ x_2, \\ ..... \\ x_n^{(0)}\text{é aprox. para }\ x_n \end{array}$$

Então construímos aproximações:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{x}^{(1)} = [x_1^{(1)}\ x_2^{(1)}\ x_3^{(1)}\ \ \ldots x_n^{(1)}]^T \\
&\mathbf{x}^{(2)} = [x_1^{(2)}\ x_2^{(2)}\ x_3^{(2)}\ \ \ldots x_n^{(2)}]^T \\
&\vdots
\end{aligned}$$

aplicando sucessivamente a fórmula (4), ou seja, fazendo:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{x}^{(1)} = C\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{d} \\
&\mathbf{x}^{(2)} = C\mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{d} \\
&\mathbf{x}^{(3)} = C\mathbf{x}^{(2)} + \mathbf{d} \\
&\vdots
\end{aligned}$$

O objectivo é determinar aproximações (iteradas) até se chegar suficientemente próximo de $\mathbf{x}$. Por outras palavras, interessa-nos que a sucessão de aproximações $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, ..., \mathbf{x}^{(k)}, ...$ seja convergente para $\mathbf{x}$:

$$\lim_{k\to\infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{x} \tag{5}$$

Ou, doutro modo, interessa-nos que as "distâncias" (medidas por intermédio duma norma) de $\mathbf{x}$ às sucessivas iteradas $\mathbf{x}^{(k)}$ tenda para zero:

$$\lim_{k\to\infty} \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}\| = 0 \tag{6}$$

Concluímos esta introdução relembrando que, para as equações $f(x) = 0$, diferentes funções g geravam métodos do ponto fixo (ou sucessões) diferentes. No caso dum sistema, também há diferentes maneiras de reescrevê-lo na forma (2), ou seja, são possíveis diferentes escolhas da matriz C (e consequentemente do vector $\mathbf{d}$), por forma a que (1) seja equivalente a (2). Essas diferentes escolhas conduzem a métodos diferentes para a equação matricial dada. Neste capítulo estudaremos, em particular, os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel.

Os Métodos de Jacobi e Gauss-Seidel

Vamos começar por apresentar dois métodos iterativos, utilizando um exemplo concreto.

Exemplo 1

Seja o sistema

$$\begin{bmatrix} 10 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \\ 2 & 3 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ -8 \\ 6 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \text{que tem solução exacta:} \\ x_1 = 1,\ x_2 = -2 \\ \text{e } x_3 = 1. \end{bmatrix}$$

Em forma explícita, temos:

$$\left\{ \begin{array}{rcr} 10x_1 + 2x_2 + x_3 & = & 7 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 & = & -8 \\ 2x_1 + 3x_2 + 10x_3 & = & 6 \end{array} \right. \tag{7}$$

O Método de Jacobi

Resolvendo a primeira equação de (7) em ordem a x_1, a segunda em ordem a x_2 e a terceira em ordem a x_3, obtém-se o sistema equivalente

$$\begin{array}{rclcccl} x_1 & = & (7 & - & 2x_2 & - & x_3)/10 \\ x_2 & = & (-8 & - & x_1 & - & x_3)/5 \\ x_3 & = & (6 & - & 2x_1 & - & 3x_2)/10 \end{array} \tag{8}$$

Sendo $\mathbf{x} = [x_1\ x_2\ x_3]^T$ e designando por $g_1(x_1, x_2, x_3)$, $g_2(x_1, x_2, x_3)$, $g_3(x_1, x_2, x_3)$, respectivamente, as expressões do lado direito de (8), temos, equivalentemente,

$$\begin{array}{l} x_1 = g_1(x_1, x_2, x_3) \\ x_2 = g_2(x_1, x_2, x_3) \\ x_3 = g_3(x_1, x_2, x_3) \end{array} \quad \Longleftrightarrow \mathbf{x} = G(\mathbf{x}) \tag{9}$$

Em seguida associamos a G o método do ponto fixo $\mathbf{x}^{(k+1)} = G(\mathbf{x}^{(k)})$. Isto é, no lado esquerdo das equações substitui-se cada x_i por $x_i^{(k+1)}$ e, no lado direito, por $x_i^{(k)}$. Obtém-se assim o chamado método de Jacobi, definido por

$$\begin{array}{rclcccll} x_1^{(k+1)} & = & (7 & - & 2x_2^{(k)} & - & x_3^{(k)})/10 & = 0.7 - 0.2x_2^{(k)} - 0.1x_3^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} & = & (-8 & - & x_1^{(k)} & - & x_3^{(k)})/5 & = -1.6 - 0.2x_1^{(k)} - 0.2x_3^{(k)} \\ x_3^{(k+1)} & = & (6 & - & 2x_1^{(k)} & - & 3x_2^{(k)})/10 & = 0.6 - 0.2x_1^{(k)} - 0.3x_2^{(k)}, \end{array} \tag{10}$$

com $k = 0, 1, 2, ...$ Suponhamos que se começa com uma aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)} = [0.7 \ \ -1.6 \ \ 0.6]^T$. Para obter as iteradas seguintes, utiliza-se (10), dando-se sucessivos valores a k:

$k = 0$ (cálculo de $\mathbf{x}^{(1)}$)

$$\begin{aligned}
x_1^{(1)} &= 0.7 - 0.2x_2^{(0)} - 0.1x_3^{(0)} = -0.2 \times (-1.6) - 0.1 \times (0.6) + 0.7 = 0.9600 \\
x_2^{(1)} &= -1.6 - 0.2x_1^{(0)} - 0.2x_3^{(0)} = -0.20 \times (0.7) - 0.2 \times (0.6) - 1.6 = -1.8600 \\
x_3^{(1)} &= 0.6 - 0.2x_1^{(0)} - 0.3x_2^{(0)} = -0.20 \times (0.7) - 0.3 \times (-1.6) + 0.6 = 0.9400
\end{aligned}$$

$k = 1$ (cálculo de $\mathbf{x}^{(2)}$)

$$\begin{aligned}
x_1^{(2)} &= 0.7 - 0.2x_2^{(1)} - 0.1x_3^{(1)} = -0.2 \times (-1.86) - 0.1 \times (0.94) + 0.7 = 0.9780 \\
x_2^{(2)} &= -1.6 - 0.2x_1^{(1)} - 0.2x_3^{(1)} = -0.20 \times (0.96) - 0.2 \times (0.94) - 1.6 = -1.9800 \\
x_3^{(2)} &= 0.6 - 0.2x_1^{(1)} - 0.3x_2^{(1)} = -0.20 \times (0.96) - 0.3 \times (-1.86) + 0.6 = 0.9660
\end{aligned}$$

$k = 2$ (cálculo de $\mathbf{x}^{(3)}$)

$$\begin{aligned}
x_1^{(3)} &= 0.7 - 0.2x_2^{(2)} - 0.1x_3^{(2)} = -0.2 \times (-1.98) - 0.1 \times (0.966) + 0.7 = 0.9994 \\
x_2^{(3)} &= -1.6 - 0.2x_1^{(2)} - 0.2x_3^{(2)} = -0.20 \times (0.978) - 0.2 \times (0.966) - 1.6 = -1.9988 \\
x_3^{(3)} &= 0.6 - 0.2x_1^{(2)} - 0.3x_2^{(2)} = -0.20 \times (0.978) - 0.3 \times (-1.98) + 0.6 = 0.9984
\end{aligned}$$

O Método de Gauss-Seidel

O método de Gauss-Seidel pode ser considerado como uma modificação do método de Jacobi. No exemplo que estamos a tratar, observemos o seguinte.

É dada a aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)} = [x_1^{(0)} \ x_2^{(0)} \ x_3^{(0)}]^T$. No cálculo da iterada seguinte, $\mathbf{x}^{(1)}$, pelo método de Jacobi, começa-se por obter a primeira componente $x_1^{(1)}$. Em seguida, para determinar a componente $x_2^{(1)}$, são usados $x_1^{(0)}, x_3^{(0)}$. Ora, no método de Gauss-Seidel, substitui-se $x_1^{(0)}$ por $x_1^{(1)}$, que já se conhece nesta altura. Também no cálculo de $x_3^{(1)}$, o método de Gauss-Seidel usa as aproximações mais recentes $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}$, em vez de $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}$, respectivamente. Assim, para o método de Gauss-seidel, viria

(expressão de $\mathbf{x}^{(1)}$)

$$\begin{aligned}
x_1^{(1)} &= 0.7 - 0.2x_2^{(0)} - 0.1x_3^{(0)} = -0.2 \times (-1.6) - 0.1 \times (0.6) + 0.7 = 0.9600 \\
x_2^{(1)} &= -1.6 - 0.2x_1^{(1)} - 0.2x_3^{(0)} = -0.20 \times (0.9600) - 0.2 \times (0.6) - 1.6 = -1.912 \\
x_3^{(1)} &= 0.6 - 0.2x_1^{(1)} - 0.3x_2^{(1)} = -0.20 \times (0.9600) - 0.3 \times (-1.912) + 0.6 = 0.9816
\end{aligned}$$

Passemos a deduzir a *fórmula geral* para obtenção de $\mathbf{x}^{(k+1)}$, a partir da expressão

(10) do método de Jacobi. O método de Gauss-Seidel resulta de se fazerem algumas modificações:

A expressão da componente $x_1^{(k+1)}$ fica como no método de Jacobi. Na expressão da componente $x_2^{(k+1)}$, substitui-se $x_1^{(k)}$ por $x_1^{(k+1)}$. Na expressão da componente $x_3^{(k+1)}$ substitui-se $x_1^{(k)}$ por $x_1^{(k+1)}$ e $x_2^{(k)}$ por $x_2^{(k+1)}$.

Com base nessas observações, o método de Gauss-Seidel para o exemplo dado é o método iterativo definido por:

$$\begin{array}{lclllll} x_1^{(k+1)} & = & (7 & - & 2x_2^{(k)} & - & x_3^{(k)})/10 \quad = 0.7 - 0.2x_2^{(k)} - 0.1x_3^{(k)} \\ x_2^{(k+1)} & = & (-8 & - & x_1^{(k+1)} & - & x_3^{(k)})/5 \quad = -1.6 - 0.2x_1^{(k+1)} - 0.2x_3^{(k)} \\ x_3^{(k+1)} & = & (6 & - & 2x_1^{(k+1)} & - & 3x_2^{(k+1)})/10 \quad = 0.6 - 0.2x_1^{(k+1)} - 0.3x_2^{(k+1)}, \end{array} \tag{11}$$

com $\qquad k = 0, 1, 2, ...$

Vemos que o método de Gauss-Seidel se distingue do método de Jacobi no facto de utilizar os novos elementos à medida que eles vão sendo calculados. Embora pareça natural pensar que, no caso de ambos convergirem, o método de Gauss-Seidel é ”mais rápido” do que o método de Jacobi (no sentido de ”chegar próximo” da solução exacta num menor número de iterações), isso nem sempre acontece. Há mesmo casos em que o método de Jacobi converge e o de Gauss-Seidel diverge.

Começámos por apresentar os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel duma maneira directa e bastante simples. Contudo, para o estudo da convergência desses métodos, é conveniente recorrer à sua formulação matricial. Isso é o que faremos na secção seguinte, mas para já ilustramos com um exemplo.

Exemplo 2

Consideremos de novo o exemplo 1 e mostremos que o método de Jacobi (10) é da forma

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = C_J\ \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}.$$

Com efeito, reescrevendo a igualdade (10) na forma matricial, vem:

$$\begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ x_3^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -0.2 & -0.1 \\ -0.2 & 0 & -0.2 \\ -0.2 & -0.3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.7 \\ -1.6 \\ 0.6 \end{bmatrix} \Longleftrightarrow \mathbf{x}^{(k+1)} = C_J\ \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}$$

À matriz C_J acima chamamos *matriz de iteração do método de Jacobi.*

Exemplo 3

Verifique que também é possível expressar o método de Gauss-Seidel (11) numa forma $\mathbf{x}^{(k+1)} = C_{GS}\,\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}$, onde C_{GS} é uma matriz e $\mathbf{d}$ um vector adequado.

Veremos que as matrizes C_J e C_{GS} têm um papel importante na convergência dos métodos.

Obtenção de Métodos Iterativos.

Dado o sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, vamos agora descrever uma maneira de se obterem métodos iterativos da forma

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = C\,\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}$$

e, em particular, os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel. Começamos por decompor a matriz A na soma de outras duas:

$$A = M + N, \text{ onde } M \text{ é uma matriz invertível,} \tag{12}$$

donde resulta

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff (M+N)\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{13}$$

Desenvolvendo a igualdade da direita obtém-se sucessivamente

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff M\mathbf{x} = \mathbf{b} - N\mathbf{x} \iff \mathbf{x} = \underbrace{-M^{-1}N}_{C}\ \mathbf{x} + \underbrace{M^{-1}\mathbf{b}}_{\mathbf{d}} \tag{14}$$

Quer dizer, obteve-se a equivalência

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff \mathbf{x} = C\mathbf{x} + \mathbf{d} \tag{15}$$

e somos naturalmente conduzidos a métodos iterativos da forma

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = C\,\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d}, \tag{16}$$

ou seja,

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \underbrace{-M^{-1}N}_{C}\ \mathbf{x}^{(k)} + M^{-1}\mathbf{b} \tag{17}$$

k=0,1,2,... , onde $\mathbf{x}^{(0)}$ é um vector dado (aproximação inicial).

Diferentes escolhas das matrizes M, N resultam em diferentes "rearranjos" do sistema na forma $\mathbf{x} = C\ \mathbf{x} + \mathbf{d}$, que, por sua vez, conduzem a diferentes métodos iterativos. A matriz C é chamada matriz de iteração. Designaremos as matrizes de iteração dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel por C_J e C_{GS}, respectivamente.

O que são as matrizes M, N no caso dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel?

A decomposição A=L+D+U

Nos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel a escolha das matrizes M e N é baseada na igualdade $A = L + D + U$, que a seguir descrevemos.

Ao sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, da forma:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

associamos as matrizes L, U, D definidas do seguinte modo:

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn-1} & 0 \end{bmatrix}; U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ 0 & 0 & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & a_{n-1n} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}; D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Então, tem-se:

$$A = L + D + U \tag{18}$$

Formulação matricial dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel

Método de Jacobi

Com base na igualdade (18), vem:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{bx} \Longleftrightarrow (\underbrace{D}_{M} + \underbrace{L + U}_{N})\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{19}$$

Substituindo $M = D$ e $N = L + U$ em (17) resulta o método de Jacobi:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \underbrace{-D^{-1}(L+U)}_{C_J}\mathbf{x}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{b}\ , \qquad \mathbf{x}^{(0)} \text{ dado.}$$

Ou seja, o método de Jacobi é um método iterativo da forma (17) com: $M = D$ e $N = L + U$ e, consequentemente, matriz de iteração $C_J = -D^{-1}(L + U)$. Estamos a supor que os elementos da diagonal de D são diferentes de zero.

Exemplo 4

Seja o exemplo 1 já considerado: $\begin{bmatrix} 10 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \\ 2 & 3 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ -8 \\ 6 \end{bmatrix}$

Vem

$$M = D = \begin{bmatrix} 10 & & \\ & 5 & \\ & & 10 \end{bmatrix}, \qquad N = L + U = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \end{bmatrix}$$

e a matriz de iteração do método de Jacobi é:

$$C_J = -D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 1/10 & & \\ & 1/5 & \\ & & 1/10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -2 & -3 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -0.2 & -0.1 \\ -0.2 & 0 & -0.2 \\ -0.2 & -0.3 & 0 \end{bmatrix}$$

que é de facto a matriz já obtida no exemplo 2.

Dedução da expressão geral do método de Jacobi

É útil deduzir a expressão geral do método de Jacobi, para efeitos de implementação do método no computador.

Da igualdade $D\mathbf{x}^{(k+1)} = -(L+U)\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}$ obtemos as equações

$$\begin{array}{ccccccccccccc}
a_{11}x_1^{(k+1)} & = & - & \Big(a_{12}x_2^{(k)} & + & a_{13}x_3^{(k)} & + & a_{14}x_4^{(k)} & + & \ldots & + & a_{1n}x_n^{(k)}\Big) & + \; b_1 \\
a_{22}x_2^{(k+1)} & = & - & \Big(a_{21}x_1^{(k)} & + & a_{23}x_3^{(k)} & + & a_{24}x_4^{(k)} & + & \ldots & + & a_{2n}x_n^{(k)}\Big) & + \; b_2 \\
a_{33}x_3^{(k+1)} & = & - & \Big(a_{31}x_1^{(k)} & + & a_{32}x_2^{(k)} & + & a_{34}x_4^{(k)} & + & \ldots & + & a_{3n}x_n^{(k)}\Big) & + \; b_3 \\
\vdots & = & & \vdots & + & \vdots & + & \vdots & + & \ldots & + & \vdots & + \; \vdots \\
a_{nn}x_3^{(k+1)} & = & - & \Big(a_{n1}x_1^{(k)} & + & a_{n2}x_2^{(k)} & + & a_{n3}x_3^{(k)} & + & \ldots & + & a_{nn-1}x_{n-1}^{(k)}\Big) & + \; b_n
\end{array}$$

e portanto,

$$\begin{array}{cclcccccccl}
x_1^{(k+1)} & = & \Big[b_1 - \Big(a_{12}x_2^{(k)} & + & a_{13}x_3^{(k)} & + & a_{14}x_4^{(k)} & + & \ldots & + & a_{1n}x_n^{(k)}\Big)\Big]/a_{11} \\
x_2^{(k+1)} & = & \Big[b_2 - \Big(a_{21}x_1^{(k)} & + & a_{23}x_3^{(k)} & + & a_{24}x_4^{(k)} & + & \ldots & + & a_{2n}x_n^{(k)}\Big)\Big]/a_{22} \\
x_3^{(k+1)} & = & \Big[b_3 - \Big(a_{31}x_1^{(k)} & + & a_{32}x_2^{(k)} & + & a_{34}x_4^{(k)} & + & \ldots & + & a_{3n}x_n^{(k)}\Big)\Big]/a_{33} \\
\vdots & & \quad\vdots & & \vdots & & \vdots & & & & \vdots \\
x_3^{(k+1)} & = & \Big[b_n - \Big(a_{n1}x_1^{(k)} & + & a_{n2}x_2^{(k)} & + & a_{n3}x_3^{(k)} & + & \ldots & + & a_{nn-1}x_{n-1}^{(k)}\Big)\Big]/a_{nn}
\end{array}$$

Em geral, $x_i^{(k+1)}$ pode ser obtido pela fórmula:

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} \right) / a_{ii}, \; i = 1, 2, \ldots, n \tag{20}$$

Exemplo 5

Se aplicarmos a expressão acima ao exemplo 1, resultam as equações já obtidas anteriormente:

$$\begin{array}{rclcccccl} x_1^{(k+1)} & = & [7 & - & (2x_2^{(k)} & + & x_3^{(k)})] & /10 \\ x_2^{(k+1)} & = & [-8 & - & (x_1^{(k)} & + & x_3^{(k)})] & /5 \\ x_3^{(k+1)} & = & [6 & - & (2x_1^{(k)} & + & 3x_2^{(k)})] & /10 \end{array}$$

Na prática, é mais fácil utlizar o processo descrito para o exemplo 1, usando (8) e (10), para obter a expressão da iterada genérica.

Método de Gauss-Seidel

Com base na igualdade (18), associamos as matrizes do seguinte modo:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{bx} \Longleftrightarrow (\underbrace{D + L}_{M} + \underbrace{U}_{N})\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{21}$$

O método de Gauss-Seidel é um método iterativo da forma (17), com $M = D+L$ e $N = U$ e, consequentemente, matriz de iteração dada por $C_{GS} = -M^{-1}N = -(D+L)^{-1}U$. Ou seja, é o método definido por

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \underbrace{-(D+L)^{-1}U}_{C_{GS}}\mathbf{x}^{(k)} + (D+L)^{-1}\mathbf{b} \tag{22}$$

A fórmula geral para o cálculo de $\mathbf{x}^{(k+1)}$ pode ser obtida de maneira análoga à utilizada para o método de Jacobi, usando a igualdade (equivalente a (22)):

$$(D+L)\mathbf{x}^{(k+1)} = -U\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}, \tag{23}$$

donde se obtém

$$D\ \mathbf{x}^{(k+1)} = -L\ \mathbf{x}^{(k+1)} - U\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}. \tag{24}$$

Igualando componente a componente, chega-se a

$$x_i^{(k+1)} = \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)} + b_i\right)/a_{ii}, \ \ i = 1, 2, \ldots, n \tag{25}$$

Note-se que a expressão acima também pode ser deduzida a partir da expressão geral (20) do método de Jacobi, fazendo as modificações seguintes. No método de Gauss-Seidel utilizam-se os valores $x_j^{(k+1)}, j = 1, 2, \ldots, i-1$, que são aproximações actualizadas de $x_j, j = 1, 2, \ldots, i-1$, em vez dos valores $x_j^{(k)}, j = 1, 2, \ldots, i-1$.

Convergência dos Métodos Iterativos

Teorema 1 *(Condição suficiente de convergência) Seja o sistema linear* $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *e suponhamos que o mesmo tenha sido transformado no sistema equivalente*

$$\mathbf{x} = C\mathbf{x} + \mathbf{d} \tag{26}$$

onde C *é uma matriz quadrada e* $\mathbf{d}$ *é um vector, e consideremos o método iterativo*

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = C\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d} \tag{27}$$

com $\mathbf{x}^{(0)}$ *um vector qualquer do* $\mathbf{R}^{\mathbf{n}}$*. Se existe alguma norma induzida (ou natural) de matrizes tal que* $\|C\| < 1$*, então o método iterativo (27) converge para a solução* $\mathbf{x}$ *do sistema (26) qualquer que seja o vector* $\mathbf{x}^{(0)}$ *dado. E têm-se as fórmulas de erro*

$$(I) \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq \|C\| \, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\| \tag{28}$$

$$(II) \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq \|C\|^{k+1} \, \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}\| \tag{29}$$

$$(III) \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq \frac{\|C\|}{1 - \|C\|} \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| \tag{30}$$

Dem. Seja $\mathbf{x}$ a solução de (26) e portanto de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ e seja

$$\mathbf{e}^{(k)} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}$$

o erro da iterada $\mathbf{x}^{(k)}$.

Subtraindo (26) de (27) vem:

$$\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)} = C\mathbf{x} - C\mathbf{x}^{(k)} = C(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}), k = 0, 1, 2, ...$$

ou seja,

$$\mathbf{e}^{(k+1)} = C\mathbf{e}^{(k)} \tag{31}$$

Dando sucessivos valores a k obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{(1)} =& \quad C\mathbf{e}^{(0)} \\ \mathbf{e}^{(2)} =& \quad C\mathbf{e}^{(1)} = C(C\mathbf{e}^{(0)}) = C^2\mathbf{e}^{(0)} \\ \mathbf{e}^{(3)} =& \quad C\mathbf{e}^{(2)} = C(C^2\mathbf{e}^{(0)}) = C^3\mathbf{e}^{(0)} \\ \vdots \quad & \quad \vdots \end{aligned}$$

e, em geral,

$$\mathbf{e}^{(k+1)} = C^{(k+1)}\mathbf{e}^{(0)} \tag{32}$$

Seja $\|\cdot\|$ uma norma de vector e consideremos a norma de matriz associada. A fórmula (I), ou seja,(28), resulta de se aplicarem normas à igualdade (31):

$$\|\mathbf{e}^{(k+1)}\| = \|C\mathbf{e}^{(k)}\| \leq \|C\|\|\mathbf{e}^{(k)}\| \qquad \text{(I)} \qquad (33)$$

Por outro lado, aplicando normas à igualdade (32), obtém-se:

$$\|\mathbf{e}^{(k+1)}\| = \|C^{(k+1)}\mathbf{e}^{(0)}\| \leq \|C^{(k+1)}\|\|\mathbf{e}^{(0)}\|$$

e, notando que:

$$\begin{array}{l} \|C^2\| = \|CC\| \leq \|C\|\|C\| = \|C\|^2 \\ \|C^3\| = \|CC^2\| \leq \|C\|\|C^2\| = \|C\|^3 \\ \|C^4\| = \|CC^3\| \leq \|C\|\|C^3\| = \|C\|^4 \\ \vdots \qquad\quad \vdots \end{array}$$

obtém-se, em geral, para $k \geq 0$: $\|C^{(k+1)}\| \leq \|C\|^{(k+1)}$. Substituindo acima, resulta a fórmula:

$$\|\mathbf{e}^{(k+1)}\| \leq \|C\|^{(k+1)}\|\mathbf{e}^{(0)}\| \qquad \text{(II)}$$

As fórmulas (I) e (II) são válidas para qualquer norma vectorial e correspondente norma matricial induzida.

Convergência

A fórmula (II), juntamente com a hipótese de que existe uma norma tal que $\|C\| < 1$, pode ser utilizada para provar convergência. Com efeito, sendo $\|C\| < 1$, então

$$\lim_{k\to\infty} \|C^{(k+1)}\| = 0 \Longrightarrow \|\mathbf{e}^{(k+1)}\| \stackrel{k\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

ou seja, $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \stackrel{k\to\infty}{\longrightarrow} 0 \implies \mathbf{x}^{(k+1)} \stackrel{k\to\infty}{\longrightarrow} \mathbf{x}$ qualquer que seja $\mathbf{x}^{(0)}$.

Portanto, provámos que o método converge para $\mathbf{x}$ qualquer que seja $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbf{R^n}$

Para finalizar a demonstração do teorema, falta provar a fórmula de erro (III), ou seja, a desigualdade (30), que é válida sob a hipótese de que existe uma norma tal que $\|C\| < 1$.

Da equação $\mathbf{e}^{(k+1)} = C\mathbf{e}^{(k)}$ temos:

$$\begin{array}{l} \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)} = C(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}) \\ \implies \mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)} = C(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}) \end{array}$$

Aplicando a norma $\|\cdot\|$ vem:

$$\begin{array}{l} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| = \|C(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)})\| \leq \|C\|\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| \\ \leq \|C\| \left(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| + \|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|\right) = \|C\|\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| + \|C\|\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| \\ \implies \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| - \|C\|\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq \|C\|\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| \\ \implies (1 - \|C\|)\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq \|C\|\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| \end{array}$$

Finalmente, atendendo a que $\|C\|\| < 1$, vem

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\| \leq \frac{\|C\|}{1 - \|C\|}\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\| \qquad \text{(III)}$$

$\square$

Corolário 1 *O método iterativo (27) converge para a solução* $\mathbf{x}$ *do sistema (26) qualquer que seja o vector* $\mathbf{x}^{(0)}$ *dado, se alguma das condições se verificar:*

$$(1) \quad \|C\|_\infty < 1 \qquad (34)$$

$$(2) \quad \|C\|_1 < 1. \qquad (35)$$

Observação: Pode não se dar (1) nem (2) e o método ser convergente.

Exemplo 6

Seja de novo o exemplo $\begin{bmatrix} 10 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \\ 2 & 3 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ -8 \\ 6 \end{bmatrix}$, cuja solução exacta é $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$. Mostre que o método de Jacobi converge para a solução exacta do sistema e obtenha um majorante para $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(2)}\|_\infty$

Já obtivémos a matriz de iteração do método de Jacobi:

$$C_J = -D^{-1}(L + U) = \begin{bmatrix} 0 & -0.2 & -0.1 \\ -0.2 & 0 & -0.2 \\ -0.2 & -0.3 & 0 \end{bmatrix}$$

Então facilmente vemos que:

$$\|C_J\|_\infty = max\{0.3, 0.4, 0.5\} = 0.5 < 1$$

e a convergência fica provada. Dado que $\mathbf{x}^{(1)} = [0.960 \quad -1.86 \quad 0.940]^T$ e $\mathbf{x}^{(2)} = [0.978 \quad -1.98 \quad 0.966]^T$ temos o seguinte majorante para o erro:

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(2)}\|_\infty \leq \frac{\|C\|_\infty}{1 - \|C\|_\infty}\|\mathbf{x}^{(2)} - \mathbf{x}^{(1)}\|_\infty$$

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(2)}\|_\infty \leq \frac{0.5}{1 - 0.5}\|0.018 \quad -0.12 \quad 0.026\|_\infty = 1.0 \times (0.12) = 0.12$$

Teorema 2 *(Critério de Conv. Mét. Jacobi) Considere o sistema linear* $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$*. Se* A *é uma matriz de diagonal estritamente dominante por linhas ou por colunas então o método de Jacobi converge para a solução de* $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *qualquer que seja o vector inicial* $\mathbf{x}^{(0)}$.

Dem. Vamos supor primeiramente que A é de diagonal estritamente dominante por linhas. Neste caso, a convergência resulta como corolário do teorema 1. A matriz de iteração do método $C_J = -D^{-1}(L+U)$ é dada por

$$C_J = -\begin{bmatrix} 0 & a_{12}/a_{11} & a_{13}/a_{11} & \dots & a_{1n}/a_{11} \\ a_{21}/a_{22} & 0 & a_{23}/a_{22} & \dots & a_{2n}/a_{22} \\ \vdots & ... & ... & & \vdots \\ \vdots & ... & ... & & \vdots \\ a_{n1}/a_{nn} & a_{n2}/a_{nn} & \dots & a_{n-1n}/a_{nn} & 0 \end{bmatrix}$$

Como A é de diagonal estritamente dominante por linhas

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \ \forall i \iff \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1 \iff \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |c_{ij}| < 1 \ \forall i$$

Acima designámos por c_{ij} os elementos da matriz C_J e a relação anterior significa que $\|C_J\|_\infty < 1$. Ou seja, a condição de A ser de diagonal estritamente dominante por linhas é equivalente a ter-se $\|C_J\|_\infty < 1$. E estamos nas condições do teorema (1). Consequentemente, podemos concluir que o método de Jacobi converge, qualquer que seja o vector inicial $\mathbf{x}^{(0)}$.

Passando agora à condição de A ser de diagonal estritamente dominante por colunas, é interessante notar que ela não implica que $\|C_J\|_1 < 1$. Basta considerar o exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -2 \\ 1 & -8 & 1 \\ 1 & 1 & 5 \end{bmatrix}$$

A é de diagonal estritamente dominante por colunas mas facilmente se verifica que para a matriz C_J vem $\|C_J\|_1 > 1$.

Voltando à demonstração do teorema, sendo A de diagonal estritamente dominante por colunas, é possível mostrar que existe uma norma (não necessariamente a norma $\|.\|_1$) tal que $\|C_J\| < 1$ e, do teorema 1, de novo se conclui a convergência do método de Jacobi, qualquer que seja o vector inicial $\mathbf{x}^{(0)}$. $\square$

Também é válido um resultado análogo ao teorema (2) para o método de Gauss-Seidel, mas cuja demonstração é mais trabalhosa.

Teorema 3 *(Critério de Conv. Mét. Gauss-Seidel) Considere o sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Se A é uma matriz de diagonal estritamente dominante por linhas ou por colunas então o método de Gauss-Seidel converge para a solução de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ qualquer que seja o vector inicial $\mathbf{x}^{(0)}$.*

Exemplo 7

Seja o sistema $\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ 4 & -8 & 1 \\ -2 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ -21 \\ 15 \end{bmatrix}$. Conclua sobre a convergência ou não dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel.

A matriz A não é de diagonal estritamente dominante por colunas, pois falha na primeira coluna: $|a_1 1| = 4 < 4 + 2$.

Contudo, A é de diagonal estritamente dominante por linhas: $|a_{11}| = 4 > 1 + 1 = 2; |a_{22}| = 8 > 4 + 1 = 5; |a_{33}| = 5 > 2 + 1 = 3$. Pelos teoremas anteriores, (2) e (3), podemos concluir que os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel convergem para a solução exacta do sistema, $\forall \mathbf{x}^{(0)}$.

Tem-se ainda o resultado seguinte apenas para o método de Gauss-Seidel:

Teorema 4 *(Crit. Conv. Gauss-Seidel) Se A é simétrica e definida positiva então o método de Gauss-Seidel aplicado ao sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ converge para a solução do mesmo,qualquer que seja o vector inicial $\mathbf{x}^{(0)}$.*

Concluímos com um resultado geral de convergência para qualquer método da forma (27).

Teorema 5 *(condição necessária e suficiente de convergência) O método iterativo definido por*

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = C\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{d},$$

converge para a solução do sistema linear $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, qualquer que seja o vector inicial $\mathbf{x}^{(0)}$, se e somente se $\rho(C) < 1$.

Exemplo 8 *Considere o sistema*

$$x_1 + 3x_2 = 2$$
$$x_1 + 4x_2 = 3$$

Mostre que os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel convergem para a solução do sistema, qualquer que seja a aproximação inicial.

Notando que A não é de diagonal estritamente dominante por linhas nem por colunas, nada se conclui sobre convergência ou divergência dos métodos, pelos teoremas (2) e (3). Calculemos as respectivas matrizes de iteração.

a) Método de Jacobi

Tem-se $C_J = -D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ -1/4 & 0 \end{bmatrix}$

Então $\|C_J\|_\infty = max\{3, 1/4\} = 3 > 1$, como já era de esperar, e $\|C_J\|_1 = max\{1/4, 3\} = 3 > 1$. Também nada se conclui pelo teorema 1.

Calculemos o raio espectral de C_J. Tem-se $\rho(C_J) = \max|\lambda_i(C_J)|$ e vem:

$$|C_J - \lambda\, I| = \begin{vmatrix} -\lambda & -3 \\ -1/4 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 3/4 = 0 \Longleftrightarrow \lambda = \pm\sqrt{3/4}$$

Logo, $\rho(C_J) \simeq 0.866025 < 1$, pelo que o método converge, $\forall \mathbf{x^{(0)}}$.

b) Faça o estudo da convergência do método de Gauss-Seidel.

Exemplo 9 *Considere o sistema de equações*

$$\left\{ \begin{array}{ccccccc} 2x & + & y & + & \epsilon\, cos z & = & -1 \\ x & + & 3y & - & 3\epsilon\, x\, z & = & 0 \\ \epsilon\, x^2 & + & y & + & 3\, z & = & 0 \end{array} \right. \tag{36}$$

onde ϵ é um número real conhecido. No caso de $\epsilon = 0$ justifique que o método de Jacobi converge para a solução do sistema e, se tomarmos $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$ (vector nulo), mostre que as iteradas satisfazem a desigualdade

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty \leq \left(\frac{1}{2}\right)^{(k+1)}$$

Para $\epsilon = 0$, o sistema não-linear acima, reduz-se ao sistema linear

$$\begin{cases} 2x + y = -1 \\ x + 3y = 0 \\ y + 3z = 0 \end{cases} \tag{37}$$

Uma condição suficiente para que o método de Jacobi aplicado ao sistema linear acima convirja para a solução do mesmo, $\forall \mathbf{x}^{(0)}$, é que $\|C_J\| < 1$ onde $\| \cdot \|$ é uma norma de matrizes. Tem-se

$$C_J = -D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 0 & -1/2 & 0 \\ -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & -1/3 & 0 \end{bmatrix}$$

logo $\|C_J\|_\infty = \max[1/2, 1/3, 1/3] = 1/2 < 1$. Portanto, podemos concluir que o método de Jacobi aplicado ao sistema linear converge para a solução do mesmo, qualquer que seja $\mathbf{x}^{(0)}$.

Por outro lado, se tomarmos $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$, pelo método de Jacobi obtemos $\mathbf{x}^{(1)} = C_J\mathbf{x}^{(0)} + D^{-1}\mathbf{b} = [-1/2 \;\; 0 \; 0]^T$. Agora, aplicando a seguinte fórmula do erro

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty \leq \frac{C_J^{k+1}}{1 - C_J} \|\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}\|_\infty$$

obtemos

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty \leq \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^{k+1}}{1 - \left(\frac{1}{2}\right)} (1/2 - 0) = \left(\frac{1}{2}\right)^{k+1}$$