# Computação Científica

# Sistema Lineares

## Métodos Diretos

## Métodos Iterativos Estacionários

Lucia Catabriga

LCAD - Laboratório de Computação de Alto Desempenho

Departamento de Informática - CT/UFES

# Referências

## www.inf.ufes.br/~luciac


- **Barret, R, et al., ``Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods'', SIAM, 1994.**
- **Shewchuk, J. R., ``An Introduction to the Conjugate Gradient Method Withuot the Agonizing Pain'', 1994.**
- Dongarra, J.J., Duff, I.S., Sorasen, D.C., Van der Vorst, H.A., Numerical LInear Algebra for High-Performance Computers, SIAM, 1998.
- Golub, G. and Van Loan, C., "Matrix Computations", The John Hopkins University Press,1993.
- Kelley C.T., "Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations", SIAM, 1995.
- **Saad, Y., "Iterative Methods for Sparse Linear Systems", PWS Publishing Company, 1996.**
- **White, R.E., "Computational Modeling with Methods and Analysis", 2003.**

# Solução de Sistemas Lineares Métodos Diretos

- Introdução
- Solução de sistemas triangulares
- Eliminação de Gauss
- Decomposição LU
- Métodos diretos x Matrizes Esparsas

# Introdução

- Característica:
  - encontra a solução exata a menos de erros de arredontamento
- Objetivo:
  - transformar o sistema em um sistema trivial (sistema triangular)
- Complexidade:
  - em torno de $n^3$ (número de operações de ponto flutuante)

# Sistemas triangulares

## Sistema Triangular Inferior Lx = c

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \Rightarrow x_i = \frac{c_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j}{l_{ii}}, \; i = 1, 2, \cdots, n$$

Substituição (Complexidade: ≈n²)

## Sistema Triangular Superior Ux = d

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1,n-1} & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2,n-1} & u_{2,n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3,n-1} & u_{3,n} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ & & & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix} \Rightarrow x_i = \frac{d_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j}{u_{ii}}, \; i = 1, 2, \cdots, n$$

Retrosubstituição
(Complexidade: ≈n²)

# Redução a Sistemas triangulares

## Eliminação de Gauss

$$Ax = b \quad \underbrace{\Rightarrow}_{\substack{\text{Operações Elementares} \\ L_i \leftarrow L_i - m_{ij} L_j \\ L_i \leftarrow \lambda L_j \\ L_i \leftrightarrow L_j}} \quad Ux = d$$

Complexidade ≈ $n^3$

## Decomposição LU

$$Ax = b \underbrace{\Rightarrow}_{A=LU} L\underbrace{Ux}_{d} = b \Rightarrow \begin{array}{l} Ld = b \\ Ux = d \end{array}$$

# Redução a Sistemas triangulares

## Processo de Eliminação de Gauss

$$A|b = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} & |b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2,n} & |b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3,n-1} & a_{3,n} & |b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & a_{n-1,3} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} & |b_{n-1} \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} & |b_n \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} m_{i1} &= \frac{a_{i1}}{a_{11}} \\ L_i &\leftarrow L_i - m_{i1}L_1 \\ a_{ij} &\leftarrow a_{ij} - m_{i1}a_{1j} \\ b_i &\leftarrow b_i - m_{i1}b_1 \\ ij &= 2,\cdots,n \end{aligned} \rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} & |b_1 \\ 0 & a_{22}^1 & a_{23}^1 & \cdots & a_{2,n-1}^1 & a_{2,n}^1 & |b_2^1 \\ 0 & a_{32}^1 & a_{33}^1 & \cdots & a_{3,n-1}^1 & a_{3,n}^1 & |b_3^1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \\ 0 & a_{n-1,2}^1 & a_{n-1,3}^1 & \cdots & a_{n-1,n-1}^1 & a_{n-1,n}^1 & |b_{n-1}^1 \\ 0 & a_{n2}^1 & a_{n3}^1 & \cdots & a_{n,n-1}^1 & a_{nn}^1 & |b_n^1 \end{bmatrix}$$

$$A^{k-1}|b^{k-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & |b_1 \\ & a_{22}^1 & \cdots & a_{2k}^1 & \cdots & a_{2,n}^1 & |b_2^1 \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & |\vdots \\ & & & a_{kk}^{k-1} & \cdots & a_{kn}^{k-1} & |b_k^{k-1} \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots & |\vdots \\ & & & a_{nk}^{k-1} & \cdots & a_{nn}^{k-1} & |b_n^{k-1} \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} m_{ik} &= \frac{a_{ik}}{a_{kk}} \\ L_i &\leftarrow L_i - m_{ik}L_k \\ a_{ij} &\leftarrow a_{ij} - m_{ik}a_{kj} \\ b_i &\leftarrow b_i - m_{ik}b_k \\ ij &= k+1,\cdots,n \end{aligned} \rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & |b_1 \\ & a_{22}^1 & \cdots & a_{2k}^1 & \cdots & a_{2,n}^1 & |b_2^1 \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & |\vdots \\ & & & a_{kk}^{k-1} & \cdots & a_{kn}^{k-1} & |b_k^{k-1} \\ & & & & \ddots & \vdots & |\vdots \\ & & & & \cdots & a_{nn}^{k} & |b_n^{k} \end{bmatrix}$$

n-1 etapas totalizando complexidade em torno de $n^3$

# Redução a Sistemas triangulares

## Processo de Decomposição LU

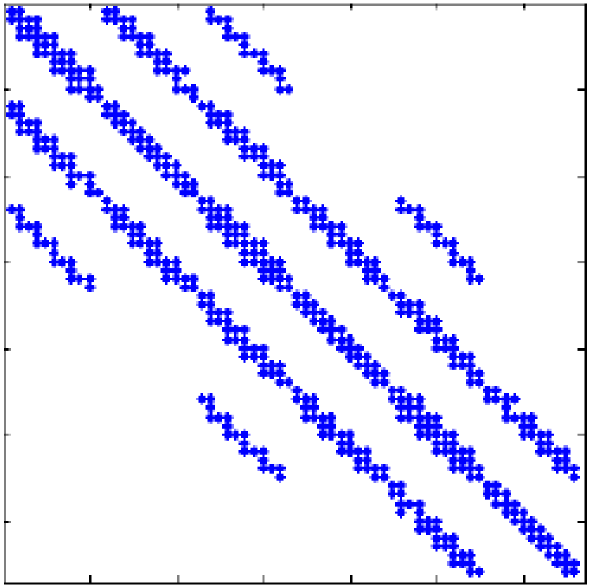
$$\overbrace{L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & m_{n-1,3} & \cdots & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{1} & \cdots & a_{2k}^{1} & \cdots & a_{2,n}^{1} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{k-1} & \cdots & a_{kn}^{k-1} \\ & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & a_{nn}^{k} \end{bmatrix}}^{A=LU}$$

$$Ax = b \ \underbrace{\Rightarrow}_{A=LU} \ L\underbrace{Ux}_{d} = b \Rightarrow \begin{matrix} Ld = b \\ Ux = d \end{matrix}$$

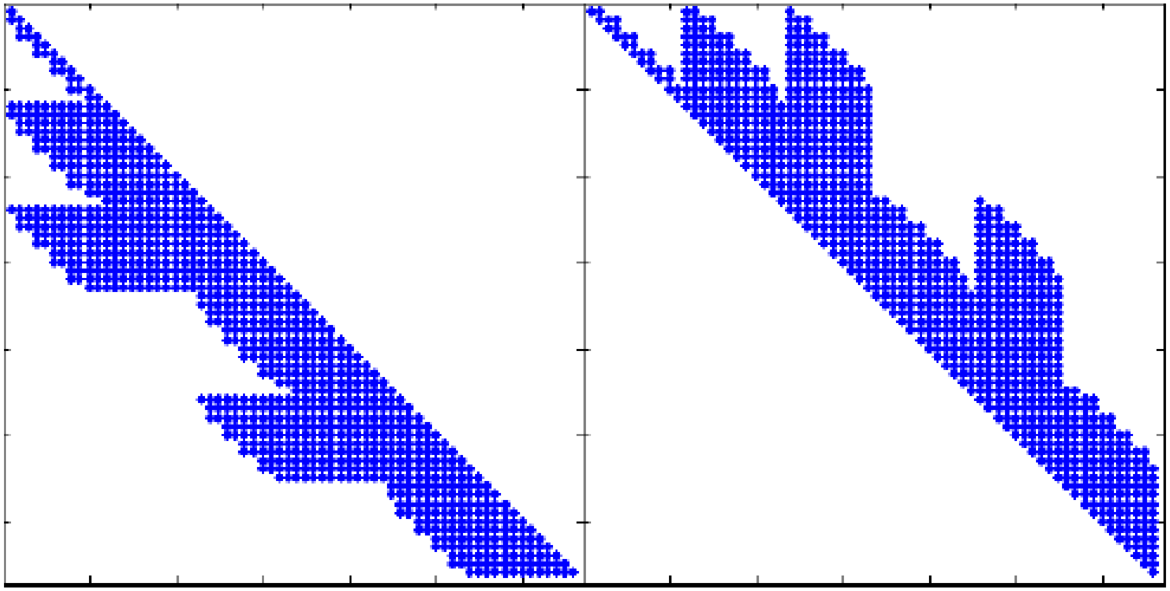
n-1 etapas totalizando complexidade em torno de $n^3$

# Métodos Diretos x Matrizes Esparsas

Matrix $A$ : 582 nonzero entries.



$A = LU$ : 1950 total nonzero entries.



- O processo de decomposição preenche com coeficientes não-nulos posições orginalmente nulas!
- Armazenamento SKL ou banda completa.

# Solução de Sistemas Lineares Métodos Iterativos Estacionários

- Introdução
- Critérios de convergência e Parada
- Jacobi
- Seidel
- SOR
- Métodos iterativos x Matrizes Esparsas

# Introdução

- Características:
  - encontra a solução aproximada com precisão pré-fixada,
  - depende de critérios de convergência relacionados a matriz dos coeficientes $A$.
- Objetivo:
  - transformar o sistema em uma expressão recurssiva tal que $x_{(k+1)} = F(x_{(k)}, A, b)$ para uma condição inicial $x_{(0)}$ conhecida.
- Complexidade:
  - em torno de $n^2$ por iteração.

# Introdução

$$Ax = b \Rightarrow x = Cx + g \underbrace{\Rightarrow}_{Definição} x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g$$

- **Resultado necessário e suficiente**: O método iterativo $x^{(k+1)} = Cx^{(k)}+g$ converge com qualquer valor inicial $x^{(0)}$ se, e somente se, $\rho(C) < 1$.

  $\rho(C)$ é o raio espectral de $C$ (maior autovalor em módulo)

- **Resultado suficiente**: O método iterativo $x^{(k+1)} = Cx^{(k)}+g$ converge com qualquer valor inicial $x^{(0)}$ se $||C|| < 1$.

- **Critérios de Parada**: $x^{(k+1)}$ é solução aproximada com tolerância $\varepsilon$ se:

$$\frac{\left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\|}{\left\| x^{(k)} \right\|} < \varepsilon \quad ou \quad \|r\| = \|b - Ax\| < \varepsilon$$

# Métodos Jacobi, Seidel e SOR

$$\begin{matrix} Ax = b \\ (L+D+U)x = b \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} Dx = -(L+U)x + b \\ (L+D)x = -Ux + b \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} x_J^{(k+1)} = -D^{-1}(L+U)x_J^{(k)} + D^{-1}b \\ x_S^{(k+1)} = -D^{-1}Lx_S^{(k+1)} - D^{-1}Ux_S^{(k)} + D^{-1}b \end{matrix}$$

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

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

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_{SOR} = w\left(x_i^{(k+1)}\right)_S + (1-w)\left(x_i^{(k)}\right)_{SOR}$$

- O método SOR converge para 0<w<2
- Os coeficientes de A e b não são alterados durante o processo iterativo

# Métodos Iterativos Estacionários x Matrizes Esparsas

- Somente os coeficientes não nulos necessitam ser armazenados
- A linha genérica i do sistema resultante da discretização por diferenças finitas para um problema bidimensional é:

$$a_{i,i-n}x_{i-n} + a_{i,i-1}x_{i-1} + a_{ii}x_i + a_{i,i+1}x_i + a_{i,i+n}x_{i+n} = b_i$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_J = \frac{b_i - a_{i,i-n}x_{i-n}^{(k)} - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{i,i+1}x_i^{(k)} - a_{i,i+n}x_{i+n}^{(k)}}{a_{ii}}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_S = \frac{b_i - a_{i,i-n}x_{i-n}^{(k+1)} - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_i^{(k)} - a_{i,i+n}x_{i+n}^{(k)}}{a_{ii}}$$

$$\left(x_i^{(k+1)}\right)_{SOR} = w\left(\frac{b_i - a_{i,i-n}x_{i-n}^{(k+1)} - a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k+1)} - a_{i,i+1}x_i^{(k)} - a_{i,i+n}x_{i+n}^{(k)}}{a_{ii}}\right) + (1-w)x_i^k$$