

Capítulo 2 – Sistemas de Equações Lineares

Introdução:

Pretendemos calcular a **Solução** de um **Sistema de Equações Lineares**, cuja **Forma Geral** é,

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

onde: $x_1, x_2, \dots, x_n$ são as incógnitas
 $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{nn}$ os coeficientes
 $b_1, b_2, \dots, b_n$ os segundos membros do sistema

O Sistema pode também escrever-se na sua **Forma Matricial**

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

onde,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Os **Métodos de Resolução** de Sistemas de Equações Lineares, classificam-se em,

- **Métodos Directos:**

Teoricamente permitem calcular a **solução** (ou soluções) **exacta** (s) usando um número **finito** de operações aritméticas elementares.

Na prática, devido aos erros de arredondamento, cancelamento subtrativo,... permitem apenas a uma **solução aproximada**.

Exemplos: Regra de Cramer, Eliminação de Gauss, Decomposição **LU**, Método de Choleski.

- **Métodos Iterativos:**

A solução é definida como um **limite de uma sucessão** (**infinita**) de vectores.

Na prática, calcula-se apenas um número finito de vectores da sucessão, isto é, calcula-se um **número finito de iterações**.

Exemplos: Método de Jacobi, Método de Gauss-Seidel.

Definição: Diz-se que um sistema de equações lineares é **determinado** se tem uma única solução.

Teorema: Um sistema de equações lineares (escrito na sua forma matricial) é **determinado se e só se** verificar qualquer das duas condições equivalentes:

- 1) $\mathbf{A}^{-1}$ existir
- 2) $\det \mathbf{A} \neq 0$

{ No que se segue deste capítulo, assumiremos que todos os sistemas são de dimensão $n \times n$ e determinados }

Métodos directos:

⇒ Método do Cálculo da Matriz Inversa

Se o sistema é determinado, então existe $\mathbf{A}^{-1}$ e podemos escrever

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$$

Em geral, este processo envolve um número de operações demasiado elevado, para o cálculo de $\mathbf{A}^{-1}$.

⇒ Regra de Cramer

Teorema: Seja $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ a forma matricial de um sistema de equações lineares onde a matriz $\mathbf{A}$ é invertível. Então,

$$x_i = \frac{\det(\mathbf{A}_i)}{\det(\mathbf{A})} = \frac{\Delta_i}{\Delta}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

onde $\mathbf{A}_i$ é a matriz que se obtém de $\mathbf{A}$, substituindo a coluna i pelo vector dos segundos membros $\mathbf{b}$.

Nota: A Regra de Cramer exige o cálculo de $n+1$ determinantes de ordem n , o que conduz a uma complexidade computacional $\mathcal{O}(n!)$

Observação:

A tabela seguinte compara os **tempos** necessários à resolução de um sistema de equações lineares de dimensão $n \times n$, num supercomputador Cray J90, utilizando o **Método de Eliminação de Gauss** ou a **Regra de Cramer**:

n	Eliminação de Gauss	Regra de Cramer
2	6×10^{-12} seg	6×10^{-12} seg
3	1.7×10^{-11} seg	2.4×10^{-11} seg
4	3.6×10^{-11} seg	1.2×10^{-10} seg
5	6.5×10^{-11} seg	7.2×10^{-10} seg
6	1.06×10^{-11} seg	5.04×10^{-09} seg
10	4.3×10^{-10} seg	3.99168×10^{-05} seg
20	3.06×10^{-9} seg	1.622 anos
100	3.433×10^{-7} seg	2.9889×10^{138} séculos
1000	3.3433×10^{-4} seg	

⇒ Método de Eliminação de Gauss

Estratégia: Transformar o sistema original $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
num sistema **equivalente** $\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}}$, mas cuja matriz seja **triangular**

Definição: Dois sistemas de equações lineares dizem-se **equivalentes** se possuírem o mesmo conjunto de soluções.

Como transformar? Por uma sequência de operações elementares.

Definição: São **operações elementares** sobre as linhas de uma matriz as operações:

- permutação de duas linhas
- multiplicação de uma linha por um escalar não nulo
- soma a uma linha do produto de outra linha por um escalar.

Definição: Cada sistema de equações lineares $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ tem associada a sua **matriz ampliada** (ou **completa**)

$$\mathbf{A}' = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right]$$

A matriz obtida da matriz ampliada do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, depois de se aplicarem operações elementares, é **a matriz ampliada de um sistema de equações equivalente** ao sistema original.

Definição: Uma matriz diz-se **escalonada por linhas** (ou em escada de linhas) se:

- o primeiro elemento não nulo de cada linha (com excepção da primeira) situa-se à direita do primeiro elemento não nulo da linha anterior.
- os elementos que se situam por baixo do primeiro elemento não nulo de cada linha (com excepção da última) são todos nulos.

O objectivo do **Método de eliminação de Gauss** é **obter uma matriz ampliada em escada** de linhas, a partir da matriz ampliada do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$:

$$[\mathbf{A}|\mathbf{b}] \xrightarrow{\text{Operações Elementares}} [\widetilde{\mathbf{A}}|\widetilde{\mathbf{b}}]$$

exemplo: Dado o sistema,

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3 \\ -x_1 - 3x_2 = 2 \end{cases}$$

em notação matricial,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 3 \\ -1 & -3 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

e matriz ampliada,

$$\mathbf{A}' = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{array} \right] \equiv \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -1 & -3 & 0 & 2 \end{array} \right]$$

como escalonar por linhas?

Na primeira linha $a_{11}^{(1)} = 1 (\neq 0)$ pode ser escolhido para **pivot**

e definimos os multiplicadores, $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, i = 2, 3$

$$m_{21} = \frac{2}{1} = 2 \text{ e } m_{31} = \frac{-1}{1} = -1$$

e subtraindo a cada linha (2 e 3) a primeira, depois de multiplicada:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & b_3^{(2)} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array} \right]$$

Na segunda linha $a_{22}^{(2)} = -2 (\neq 0)$ pode ser escolhido para **pivot**

e definimos o multiplicador, $m_{32} = \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = \frac{-1}{-2} = \frac{1}{2}$

e subtraindo à terceira linha a segunda, depois de multiplicada:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right]$$

Assim obtivemos um sistema **equivalente** ao original, mas cuja matriz é **triangular**.

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Basta agora resolver este sistema, por sucessivas substituições ascendentes:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ -2x_2 + x_3 = 3 \\ \frac{1}{2}x_3 = \frac{1}{2} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = -1 \\ x_3 = 1 \end{cases}$$

Técnicas de selecção de *pivot* :

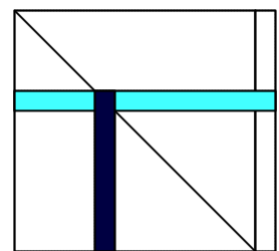
- Quando aparece um **candidato a pivot nulo**, deverá efectuar-se uma **troca de linhas** (com uma linha em posição inferior na matriz) de forma a obter um elemento **pivot diferente de zero**.
- A escolha de elementos pivot **muito pequenos** (próximos de zero) pode causar a ampliação dos **erros de arredondamento**. De facto, em cada passo de eliminação $k = 1, 2, \dots, n$ determinamos os multiplicadores,

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k + 1, k + 2, \dots, n$$

se utilizarmos pivots próximos de zero obtemos **multiplicadores de grandeza elevada**, o que poderá originar **perda de algarismos significativos**.

* *Pivotação Parcial*

Nesta técnica escolhemos para pivot **o elemento que tiver maior valor absoluto na coluna** que estamos a considerar (entre as linhas que se encontram numa posição igual ou inferior)



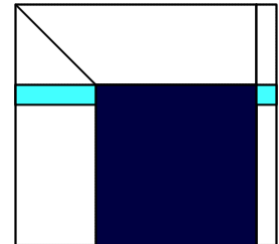
Designa-se por **pivotação parcial** ou **escolha parcial de pivot** o processo de troca de linhas que conduz ao pivot nestas condições. Assim, no início do passo de eliminação k seleccionamos como **pivot** o elemento tal que:

$$\left| a_{pk}^{(k)} \right| = \max_{k \leq i \leq n} \left| a_{ik}^{(k)} \right|$$

Se $p \neq k$ trocamos as linhas p e k .

* **Pivotação Total**

Neste caso, no início do passo de eliminação k , tornam-se **candidatos a pivot** todos os elementos **abaixo e à direita** de k , na parte activa de $A^{(k)}$.



É escolhido para **pivot** o elemento tal que:

$$\left| a_{pk}^{(k)} \right| = \max_{k \leq i, j \leq n} \left| a_{ij}^{(k)} \right|$$

Se $p \neq k$ trocamos as linhas p e k .

Se $q \neq k$ trocamos as colunas q e k .

Observações:

- A troca de colunas **não preserva a equivalência** dos sistemas.
(a **ordem das incógnitas** foi alterada)
- A técnica de pivotação total envolve um **número de operações superior** ao da pivotação parcial.

* *Pivotação parcial com escala ou equilibragem de matrizes*

Para quê?

Um exemplo: Consideremos o sistema,

$$\begin{bmatrix} 1.000 & 1000. \\ 0.5000 & 0.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1001. \\ 0.5001 \end{bmatrix}$$

que tem como solução: $x_1 = x_2 = 1.0$

Usando aritmética decimal, com **4 dígitos** e **pivotação parcial**, obtemos:

$$\begin{bmatrix} 1.000 & 1000. \\ 0.0000 & -500.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1001. \\ -501.0 \end{bmatrix}$$

donde viria: $x_2 = \frac{501.0}{500.0} = 1.002$

$$x_1 = 1001 - 1000 \times 1.002 = -1.000$$

Enquanto que o valor de x_2 ainda é “aceitável”, o de x_1 está **errado**!

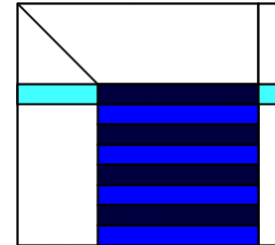
Porquê?

As linhas da matriz têm elementos de grandezas muito diferentes.

É necessário equilibrar a grandeza dos elementos!

Pretendemos escolher o **elemento pivot** no passo de eliminação k :

Começamos por identificar, **em cada linha** $k, k+1, \dots, n$
o seu **elemento de maior valor absoluto**.



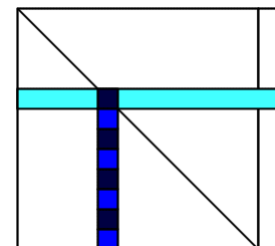
Sejam esses elementos:

$$s_r = \max \{ |a_{rk}|, |a_{rk+1}|, \dots, |a_{rn}| \} \quad \text{para } r = k, k+1, \dots, n$$

A **linha p** que vai fornecer o elemento pivot é aquela em que se verifica:

$$\frac{|a_{pk}^{(k)}|}{s_p} = \max \left\{ \frac{|a_{kk}|}{s_k}, \frac{|a_{k+1k}|}{s_{k+1}}, \dots, \frac{|a_{nk}|}{s_n} \right\}$$

Se $p \neq k$ trocamos as linhas p e k .



Observação:

- O efeito deste **escalonamento** é assegurar que **o maior elemento em cada linha** tenha uma **magnitude relativa de 1**, antes de fazer a comparação para a possível troca de linhas.

voltando ao exemplo:

$$\begin{bmatrix} 1.000 & 1000. \\ 0.5000 & 0.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1001. \\ 0.5001 \end{bmatrix}$$

Começemos por calcular os **factores**:

$$s_1 = \max\{|1.000|, |1000|\} = 1000$$

$$s_2 = \max\{|0.5000|, |0.0001|\} = 0.5000$$

que nos permitem **calibrar**:

$$\frac{|a_{11}|}{s_1} = 0.0010 \quad ; \quad \frac{|a_{21}|}{s_2} = 1.000$$

e decidir **trocar** as linhas:

$$\begin{bmatrix} 0.5000 & 0.0001 \\ 1.000 & 1000. \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5001 \\ 1001. \end{bmatrix}$$

Donde, definindo o **multiplicador** $m_{21} = 2$ obtemos:

$$\begin{bmatrix} 0.5000 & 0.0001 \\ 0.0000 & 1000. \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5001 \\ 1000. \end{bmatrix}$$

sistema linear equivalente ao original, com solução: $x_1 = x_2 = 1.0$

⇒ Método de factorização LU

Seja $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ um sistema de n equações a n incógnitas, determinado.

Suponhamos que $\mathbf{A}$ pode ser escrita duma maneira única na forma

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{U}$$

sendo $\mathbf{L}$ uma matriz **triangular inferior**, cujos **elementos da diagonal são iguais a 1** e $\mathbf{U}$ uma matriz **triangular superior**.

Substituindo, obtemos: $(\mathbf{L} \mathbf{U}) \mathbf{x} = \mathbf{b}$

ou, de forma equivalente: $\mathbf{L} (\mathbf{U} \mathbf{x}) = \mathbf{b}$

onde, fazendo $\mathbf{y} = \mathbf{U} \mathbf{x}$

podemos **decompor** o sistema original em **dois sistemas triangulares**:

$$1) \quad \mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

$$2) \quad \mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{b}$$

Assim, após calculada a **decomposição LU** da matriz $\mathbf{A}$,

o sistema **2)** é resolvido por **substituição directa** e, calculado $\mathbf{y}$,

o sistema **1)** é resolvido por **substituição inversa** para obter $\mathbf{x}$.

por exemplo: para o sistema,

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 3 \\ -x_1 - 3x_2 = 2 \end{cases}$$

depois de efectuada a decomposição,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 3 \\ -1 & -3 & 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

começamos por resolver (por substituição **descendente**) o sistema $\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{b}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \text{cuja solução é} \quad \begin{cases} y_1 = 0 \\ y_2 = 3 \\ y_3 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

e por fim resolvemos (por substituição **ascendente**) o sistema $\mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{y}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

cuja solução é a do sistema original:

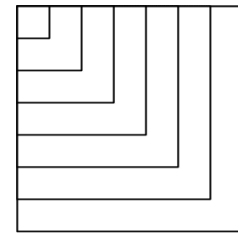
$$\begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = -1 \\ x_3 = 1 \end{cases}$$

* Quando é possível e única a decomposição LU?

Teorema: Seja $\mathbf{A}$ uma matriz quadrada de ordem n ,
 $\mathbf{A}_k$ a matriz formada pelas primeiras k linhas e primeiras k colunas de $\mathbf{A}$.

Existe uma única matriz triangular inferior $\mathbf{L}$,
 cujos elementos da diagonal são todos iguais a 1,
 e uma única matriz triangular superior $\mathbf{U}$ tal que $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$,

se e só se todos os $\det(\mathbf{A}_k) \neq 0$, $k = 1, 2, \dots, n-1$.



Observação Importante:

Se for possível efectuar a eliminação de Gauss **sem mudança de linhas** então a matriz $\mathbf{A}$ pode ser factorizada de maneira única em $\mathbf{LU}$:

- $\mathbf{L}$ é a matriz triangular inferior, de diagonal unitária, constituída no triângulo inferior pelos multiplicadores m_{ij} do método de eliminação de Gauss.
- $\mathbf{U}$ é a matriz triangular superior que se obtém de $\mathbf{A}$ por aplicação do método de eliminação de Gauss.

por exemplo:

para o mesmo sistema,

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -1 & -3 & 0 & 2 \end{array} \right]$$

calculámos $m_{21} = \frac{2}{1} = 2$ e $m_{31} = \frac{-1}{1} = -1$ e $m_{32} = \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = \frac{-1}{-2} = \frac{1}{2}$

(note que $m_{11} = m_{22} = m_{33} = 1$)

e portanto temos, $\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 1/2 & 1 \end{bmatrix}$

e a matriz triangular obtida pelo Método de Gauss dá-nos,

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Observação:Se **det (A) $\neq 0$** , o método de eliminação de Gauss é **sempre possível**.

Mas a **necessidade de trocar de linhas** (provocada por algum $a^{(k)}_{kk} = 0$)
pode impossibilitar a construção anterior.

*Contudo, existem certos rearranjos (**permutações**) de linhas, para os quais ainda é possível obter as matrizes **L** e **U** através do processo de eliminação de Gauss ...*

* Matrizes de Permutação

{ matrizes com um 1 em cada linha e em cada coluna e 0 nos restantes elementos }

Definição:

Uma matriz quadrada de ordem n é uma **matriz de permutação** se pode ser obtida da matriz identidade de ordem n por permuta de linhas ou de colunas.

Propriedade:

Se P for uma matriz de **permutação de linhas** e A uma matriz qualquer, então a matriz produto **PA** apresenta, relativamente à matriz A , a **mesma permutação de linhas** que originou P a partir da matriz identidade.

Assim, de $Ax = b$

multiplicando por P

$$P(Ax) = Pb$$

$$(PA)x = Pb$$

e nesse caso, se $PA = LU$

$$(LU)x = Pb$$

$$L(Ux) = Pb$$

que podemos **decompor** nos **dois sistemas triangulares**:

- $Ly = Pb$
- $Ux = y$

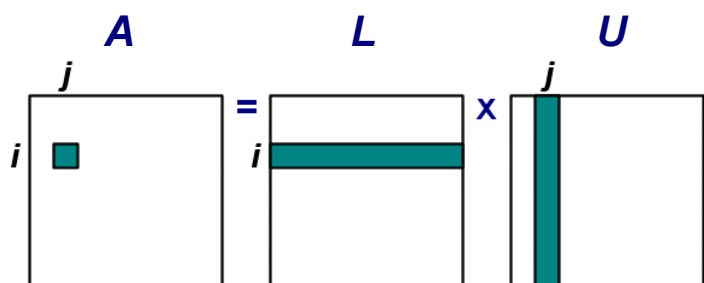
* Forma Compacta da decomposição LU

Observações:

- A decomposição LU de uma matriz **A** é efectivamente uma variante do processo de Eliminação de Gauss.
- Em vez de construir as matrizes **L** e **U** por **eliminações sucessivas**, podemos calculá-las directamente a partir da **equação matricial** **A = L U**.
- Para isso é necessário e suficiente que a **decomposição LU exista e seja única** (condições do Teorema da pág. 15).
- Essas condições garantem que, ao longo do processo, não irão aparecer zeros em nenhum dos elementos $a^{(k)}_{kk}$.
- Caso contrário, podemos ainda aplicar o Método Compacto à matriz **PA**, onde **P** é a matriz das permutações efectuadas nas linhas.

Consideremos então a equação matricial **A = L U** :

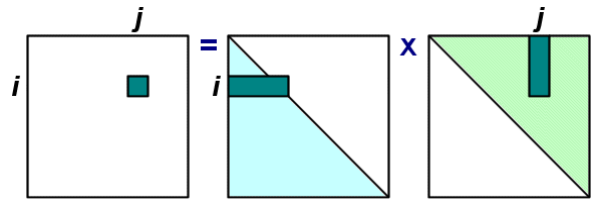
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kj} \quad i, j = 1, 2, \dots, n$$



mas, como **L** é uma matriz **triangular inferior**, $l_{ik} = 0$ para $i < k$

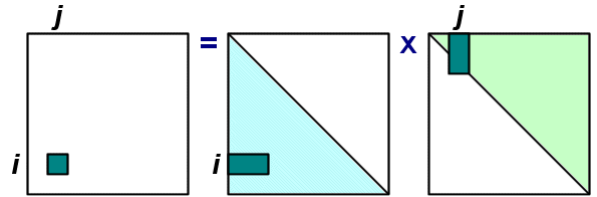
como **U** é uma matriz **triangular superior**, $u_{kj} = 0$ para $k > j$

Assim, quando $i \leq j$



$$1) \quad a_{ij} = \sum_{k=1}^i l_{ik} u_{kj} \quad (i \leq j)$$

e quando $i > j$



$$2) \quad a_{ij} = \sum_{k=1}^j l_{ik} u_{kj} \quad (i > j)$$

Além disso, como pretendemos que $l_{11} = l_{22} = \dots l_{nn} = 1$

de 1) para $i = 1$ obtemos $u_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, 2, \dots, n$

e de 2) para $j = 1$ obtemos $l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}, \quad i = 2, \dots, n$

De modo análogo se podem calcular os restantes elementos,

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = 2, \dots, n, \quad j = i, i+1, \dots, n,$$

$$l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}}{u_{ii}}, \quad i = 2, \dots, n-1, \quad j = i+1, \dots, n$$

Esta formulação permite a construção do:

*** Algoritmo para o cálculo da decomposição LU**

$$u_{11} \leftarrow a_{11}$$

para $i = 2, 3, \dots, n$ fazer

$$u_{1i} \leftarrow a_{1i}$$

$$l_{i1} \leftarrow a_{i1}/u_{11}$$

fimpara

para $i = 2, 3, \dots, n - 1$ fazer

$$u_{ii} \leftarrow a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{ki}$$

para $j = i + 1, i + 2, \dots, n$ fazer

$$u_{ij} \leftarrow a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}$$

$$l_{ji} \leftarrow (a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}u_{ki})/u_{ii}$$

fimpara

fimpara

$$u_{nn} \leftarrow a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}u_{kn}$$

*{ É simples verificar que este algoritmo é $\mathcal{O}(n^3)$,
tanto em multiplicações como em somas. }*

*** Implementação do Algoritmo em MATLAB**

para o exemplo anterior:

```
a=[1 2 1 ; 2 2 3 ; -1 -3 0]
```

```
[N N]=size(a);
```

```
U=zeros(N,N);
```

```
L=eye(N,N);
```

```
U(1,1)=a(1,1);
```

```
for i=2: N
```

```
    U(1,i)=a(1,i);
```

```
    L(i,1)=a(i,1)/U(1,1);
```

```
end
```

```
for i=2:N-1
```

```
    U(i,i)=a(i,i)-L(i,1:i-1)*U(1:i-1,i);
```

```
    for j=i: N
```

```
        U(i,j)=a(i,j)-L(i,1:i-1)*U(1:i-1,j);
```

```
        L(j,i)=(a(j,i)-L(j,1:i-1)*U(1:i-1,i))/U(i,i);
```

```
    end
```

```
end
```

```
U(N,N)=a(N,N)-L(N,1:N-1)*U(1:N-1,N);
```

* Matrizes simétricas definidas positivas

Definição: Uma matriz $\mathbf{A}$ de ordem n diz-se **simétrica** se,

$$a_{ij} = a_{ji} \quad \forall i, j = 1, 2, \dots, n$$

isto é, se $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$.

Definição: Uma matriz $\mathbf{A}$ de ordem n diz-se **definida positiva** se,

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$$

Teorema: Uma matriz $\mathbf{A}$ de ordem n é **definida positiva se e só se**,

$$\det(\mathbf{A}_k) > 0 \quad \forall k = 1, 2, \dots, n.$$

onde $\mathbf{A}_k$ é a matriz formada pelas primeiras k linhas e colunas de $\mathbf{A}$.

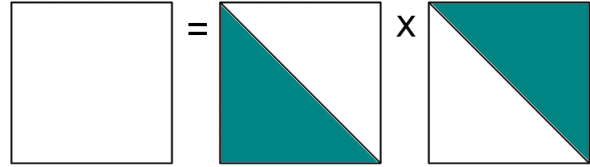
Exemplo: A matriz $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 6 & -4 & 5 \\ 2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ é definida positiva porque,

$$\det(\mathbf{A}_1) = 1 > 0, \quad \det(\mathbf{A}_2) = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 6 & -4 \end{vmatrix} = 2 > 0$$

$$\det(\mathbf{A}_3) = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 6 & -4 & 5 \\ 2 & 0 & 0 \end{vmatrix} = 2 \begin{vmatrix} -1 & 2 \\ -4 & 5 \end{vmatrix} = 6 > 0$$

Teorema: Seja $\mathbf{A}$ uma matriz **simétrica definida positiva** de ordem n . Então existe uma matriz **triangular inferior** $\mathbf{L}$ com **elementos diagonais positivos**, tal que

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$$



O cálculo de forma compacta da matriz $\mathbf{L}$ é muito semelhante ao da decomposição $\mathbf{LU}$, permitindo a construção do:

*** Algoritmo para o cálculo da decomposição $\mathbf{LL}^T$**

$$l_{11} \leftarrow \sqrt{a_{11}}$$

para $i = 2, 3, \dots, n$ fazer

$$l_{ii} \leftarrow \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}$$

para $j = i + 1, \dots, n$ fazer

$$l_{ji} \leftarrow (a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{ii}$$

fimpara

fimpara

⇒ Método de Choleski

Seja $\mathbf{A}$ uma matriz de ordem n **simétrica e definida positiva** e seja $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$.

Pelo teorema anterior, **existe** uma matriz $\mathbf{L}$ **triangular inferior** tal que $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$.

Então, substituindo em $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$,

$$(\mathbf{L} \mathbf{L}^T) \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{L} (\mathbf{L}^T \mathbf{x}) = \mathbf{b}$$

onde, fazendo $\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$ obtemos, $\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{b}$

Assim, quando a matriz $\mathbf{A}$ for **simétrica e definida positiva** podemos **resolver o sistema de equações** $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pelo **Método de Choleski** :

1. Obter uma matriz triangular inferior $\mathbf{L}$ pela **decomposição** $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$
2. Calcular a solução $\mathbf{y}$ do **sistema triangular inferior** $\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{b}$
3. Calcular a solução $\mathbf{x}$ do **sistema triangular superior** $\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$

por exemplo: para resolver o seguinte sistema, pelo Método de Choleski :

$$\begin{cases} x + y + z = -4 \\ x + 5y + 5z = -4 \\ x + 5y + 14z = 23 \end{cases}$$

onde,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -4 \\ -4 \\ 23 \end{bmatrix}$$

verificamos que $\mathbf{A}$ é **simétrica** pois $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$

e também que é **definida positiva** pois,

$$\det(\mathbf{A}_1) = 1 > 0$$

$$\det(\mathbf{A}_2) = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{vmatrix} = 4 > 0$$

$$\det(\mathbf{A}_3) = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{vmatrix} = 36 > 0$$

então existe uma matriz $\mathbf{L}$ **triangular inferior** tal que $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$,

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

Calculemos os elementos l_{ij} : de **cima para baixo** e da **esquerda para a direita** :

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

donde $l_{11} \times l_{11} = 1 \implies l_{11} = 1$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

donde $l_{21} \times l_{11} = 1 \implies l_{21} = 1$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

donde $l_{31} \times l_{11} = 1 \implies l_{31} = 1$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

donde, com $l_{21} = 1$, $l_{21}^2 + l_{22}^2 = 5 \implies l_{22} = 2$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

donde, com $l_{31} = 1$ $l_{21} = 1$ $l_{22} = 2$

$$l_{31} \times l_{21} + l_{32} \times l_{22} = 5 \implies l_{32} = 2$$

e por fim,

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}$$

donde $l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 = 14 \implies l_{33} = 3$

Portanto,
$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}$$

{ nesta altura convém conferir que $\mathbf{L} \mathbf{L}^T = \mathbf{A}$ }

Continuando o Método de Choleski,

2. Calcular a solução $\mathbf{y}$ do **sistema triangular inferior** $\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{b}$

Por substituição descendente,

$$\begin{cases} y_1 = -4 \\ y_1 + 2y_2 = -4 \\ y_1 + 2y_2 + 3y_3 = 23 \end{cases} \iff \begin{cases} y_1 = -4 \\ y_2 = (-4 + 4)/2 = 0 \\ y_3 = (23 + 4 + 0)/3 = 9 \end{cases}$$

3. Calcular a solução $\mathbf{x}$ do **sistema triangular superior** $\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{y}$

Por substituição ascendente,

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = -4 \\ 2x_2 + 2x_3 = 0 \\ 3x_3 = 9 \end{cases} \iff \begin{cases} x_1 = (-4 + 3 - 3) = -4 \\ x_2 = (0 - 6)/2 = -3 \\ x_3 = 3 \end{cases}$$

Que é a **solução** procurada.

Notas sobre o Método de Choleski:

- O **número de operações** na decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ é cerca de **metade** das operações da decomposição geral $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$.

- De
$$l_{ii}^2 = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2$$

resulta que
$$\sum_{k=1}^i l_{ik}^2 = a_{ii} \quad \text{e que} \quad l_{ik} \leq \sqrt{a_{ii}}.$$

Assim, os elementos de $\mathbf{L}$ estão **limitados superiormente** pelos elementos da diagonal da matriz $\mathbf{A}$, nunca tomando valores demasiado elevados.

- Por isso, com o método de Choleski **não é necessário usar escolha de pivot**. O método é **estável**.
- Considerando $\mathbf{U} = \mathbf{L}^T$ conclui-se que:
Se $\mathbf{A}$ é uma **matriz simétrica definida positiva** então existe **$\mathbf{U}$ triangular superior**, tal que $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \mathbf{U}$.

Assim, o **Método de Cholesky** pode consistir em:

1. Obter a matriz triangular superior $\mathbf{U}$ tal que $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \mathbf{U}$
(no MATLAB: `chol(A)`)
2. Calcular a solução $\mathbf{y}$ do sistema triangular inferior $\mathbf{U}^T \mathbf{y} = \mathbf{b}$
3. Calcular a solução $\mathbf{x}$ sistema do triangular superior $\mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{y}$

* Matrizes Tridiagonais (tópico suplementar)

Considere-se um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{f}$ em que a matriz do sistema $\mathbf{A}$ é uma **matriz tridiagonal**:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_1 & c_1 & & 0 \\ b_2 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & b_n & a_n \end{bmatrix}$$

Se $\mathbf{A}$ é **não singular** então a decomposição $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ é

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ \beta_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \beta_n & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & c_1 & & 0 \\ & \alpha_2 & \ddots & \\ & & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & \alpha_n \end{bmatrix}$$

onde, $\alpha_1 = a_1, \beta_i = \frac{b_i}{\alpha_{i-1}}, \alpha_i = a_i - \beta_i c_{i-1}, i = 2, \dots, n$

Por isso, a decomposição habitual

- $\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{f}$
- $\mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{y}$

requer apenas a **resolução de dois sistemas bidiagonais**.

* Algoritmo de Thomas (para Matrizes Tridiagonais)

Dados: uma matriz **A** tridiagonal de ordem **n** não singular e um vector **f**.

Resultado: um vector **x** tal que **A x = f**

1. Calcular os elementos da decomposição **L U**

```

 $\alpha_1 \leftarrow a_1$ 
para  $i = 2, 3, \dots, n$  fazer
     $\beta_i \leftarrow b_i / \alpha_{i-1}$ 
     $\alpha_i \leftarrow a_i - \beta_i c_{i-1}$ 
fimpara

```

2. Resolver o sistema **L y = f**

```

 $y_1 \leftarrow f_1$ 
para  $i = 2, 3, \dots, n$  fazer
     $y_i \leftarrow f_i - \beta_i y_{i-1}$ 

```

3. Resolver o sistema **U x = y**

```

 $x_n \leftarrow y_n / \alpha_n$ 
para  $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$  fazer
     $x_i \leftarrow (y_i - c_i x_{i+1}) / \alpha_i$ 

```

{ Neste caso, a complexidade do algoritmo é apenas $\mathcal{O}(n)$ operações }

Notas sobre o Algoritmo de Thomas:

- A matriz **A** pode ser dada usando **apenas 3 vectores** correspondentes às diagonais
- O algoritmo de Thomas é **estável**
- É possível **eliminar as divisões** no passo 3, considerando a decomposição,

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{M}^T \quad \begin{bmatrix} \gamma_1^{-1} & 0 & & 0 \\ b_2 & \gamma_2^{-1} & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & b_n & \gamma_n^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_1 & & & 0 \\ & \gamma_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \gamma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_1^{-1} & c_1 & & 0 \\ 0 & \gamma_2^{-1} & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & 0 & \gamma_n^{-1} \end{bmatrix}$$

onde $\gamma_i = (a_i - b_i \gamma_{i-1} c_{i-1})^{-1}, i = 1, \dots, n$

(assumindo que $\gamma_0 = b_1 = c_n = 0$)

As substituições ascendentes são dadas por:

$$(\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{f}) \quad y_1 = \gamma_1 f_1, y_i = \gamma_i (f_i - b_i y_{i-1}), i = 2, \dots, n$$

$$(\mathbf{U} \mathbf{x} = \mathbf{y}) \quad x_n = y_n \quad x_i = y_i - \gamma_i c_i x_{i+1}, \quad i = n-1, \dots, 1$$

Algoritmo de Thomas Modificado

(de: *Numerical Mathematics* , Quarteronni et al)

```
function [x] = modthomas (a,b,c,f)
%MODTHOMAS modified version of the Thomas algorithm
% X=MODTHOMAS(A,B,C,F) solves the system  $T^*X=F$  where T
% is the tridiagonal matrix  $T=\text{tridiag}(B,A,C)$ .
n=length(a);
b=[0; b];
c=[c; 0];
gamma(1)=1/a(1);
for i=2:n
    gamma(i)=1/(a(i)-b(i)*gamma(i-1)*c(i-1));
end
y(1)=gamma(1)*f (1);
for i =2:n
    y(i)=gamma(i)*(f(i)-b(i)*y(i-1));
end
x(n,1)=y(n);
for i=n-1:-1:1
    x(i,1)=y(i)-gamma(i)*c(i)*x(i+1,1);
end
return
```

* **Melhoramento de soluções de sistemas lineares**

Em geral, a solução de um sistema de equações lineares (obtida por qualquer dos métodos directos) **não é a solução exacta**, devido aos **erros de arredondamento**.

Como **melhorar** a solução obtida?

⇒ **Método dos Resíduos**

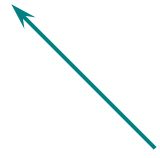
Seja $\mathbf{x}^{(0)}$ **uma solução** de um sistema, obtida por um método directo qualquer e $\mathbf{x}$ a **solução exacta**.

Podemos então escrever, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{e}$ onde $\mathbf{e}$ é o **erro**.

Temos assim um sistema, $\mathbf{A} (\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{e}) = \mathbf{b}$

donde, $\mathbf{A} \mathbf{e} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(0)}$

vector resíduo de $\mathbf{x}^{(0)}$
 $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(0)}$



Calculado $\mathbf{r}$,

Podemos resolver o sistema $\mathbf{A} \mathbf{e} = \mathbf{r}$ cuja solução é um valor aproximado de $\mathbf{e}$

Corrigida a solução inicial, obtemos uma nova (melhor) aproximação,

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{e}$$

Repetido o processo, podemos obter,

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{e}$$

... e assim sucessivamente.

por exemplo: o sistema linear

$$\begin{cases} 6x_1 - x_2 - x_3 = 11.33 \\ -x_1 + 6x_2 - x_3 = 32 \\ -x_1 - x_2 + 6x_3 = 42 \end{cases}$$

resolvido pelo Método de Eliminação de Gauss, com aproximação a **3 casas decimais**, tem como solução:

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) = (4.670, 7.620, 9.050)$$

Para **melhorar esta solução** para **4 casas decimais**, pelo **Método dos Resíduos**, começamos por calcular o **vector resíduo** $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(0)}$

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} 11.33 \\ 32 \\ 42 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 6 & -1 & -1 \\ -1 & 6 & -1 \\ -1 & -1 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4.670 \\ 7.620 \\ 9.050 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.02 \\ 0 \\ -0.01 \end{bmatrix}$$

resolvemos o sistema $\mathbf{A} \mathbf{e} = \mathbf{r}$ que tem como solução,

$$\mathbf{e} = (-0.0039, -0.0011, -0.0025)$$

que nos permite **melhorar** a aproximação da solução para 4 casa decimais,

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{e} = (4.6661, 7.6189, 9.0475)$$

e podíamos continuar ...