Métodos Numéricos

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Equipe:
ABNER DE LIMA ARAÚJO – Matrícula: 398067
EDEALCIA REGINA ALVES LUCIANO – Matrícula: 372164
FRANCISCO THIAGO SANTOS MARQUES – Matrícula: 343167
FRANCISCO WANDSON GOES SANTOS – Matrícula: 398777
MARCOS VINICIUS GOMES DE SANTANA – Matrícula: 400685
MILTON CASSUL MIRANDA – Matrícula: 404877
THIAGO FRAXE CORREIA – Matrícula: 397796

Trabalho 2

Uma determinada reação química produz uma quantidade c de CO_2 medida em ppm (parte por milhão) que pode variar dependendo das condições ambientais. Nesse caso, podem-se ter quantidades $c_1, c_2, \ldots, c_n$ diferentes. Essas quantidades podem ser calculadas a partir da solução de um sistema de equações lineares $Ac = d$ por fatoração LU da matriz A diretamente, usando a definição de produto de matrizes. Esquemas desse tipo são conhecidos como compactos, e o equivalente à fatoração $A=LU$ com L triangular inferior com diagonal unitária e U triangular superior é chamado de redução de Doolittle. O processo é baseado em alguns passos:

a) primeiro multiplica-se a primeira linha de L pela j-ésima coluna de U e iguala-se a a1j, obtendo-se os elementos u1j;
b) depois multiplica-se a i-ésima linha de L pela primeira coluna de U, igualando-se a ai1 de onde se obtém os elementos li1;
c) repete-se o processo para as demais linhas e colunas até se obter os demais elementos de L e U. Desenvolva um sistema para calcular todos as quantidades desejadas com requisitos dados a seguir:

a) Implementar algoritmo para calcular {c} pela fatoração LU, usando a pivotação.

- O método de resolução de sistemas lineares utilizando fatoração LU consiste em decompor a matriz A em dois fatores L triangular inferior e U triangular superior. A = LU
- L possui diagonal unitária. Os elementos aij tais que j > i são nulos. Os elementos aij tais que i > j são os respectivos fatores utilizados na eliminação de Gauss.
- U corresponde à matriz A escalonada utilizando eliminação de Gauss.

a) Implementar algoritmo para calcular {c} pela fatoração LU, usando a pivotação.

- Transformamos o sistema $Ax = b$ em $Ly = b$ e $Ux = y$
- Quando utilizamos pivotação, é necessário manter uma matriz P de permutações e multiplicá-la por b para que as operações de troca de linha sejam efetuadas.
- A vantagem de utilizar esse método está em poder realizar a fatoração uma vez para uma certa matriz A, obtendo as matrizes L, U e P. Em seguida oferecer um vetor b qualquer para obtermos a solução x correspondente.

b) Implementar algoritmo para calcular {c} pela redução de Doolittle, sem pivotação.

- A redução de Doolittle é outra maneira de fazer a fatoração LU.
- A vantagem desse método é evitar o uso da eliminação de Gauss:
  - Calcula-se as entradas de L e U de modo que a multiplicação das duas matrizes resulte na matriz A.
  - Uma vez feita a fatoração, para resolver o sistema basta fazer substituições sucessivas e depois substituições retroativas.
  - Assim, a eliminação de Gauss nunca é realizada.

b) Implementar algoritmo para calcular {c} pela redução de Doolittle, sem pivotação.

Ideia por trás do algoritmo de Doolittle:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} = LU$$

$a_{1,1} = u_{1,1}$, $a_{1,2} = u_{1,2}$, $a_{1,3} = u_{1,3}$;

$a_{2,1} = m_{2,1}u_{1,1}$, $a_{22} = m_{2,1}u_{1,2} + u_{2,2}$, $a_{22} = m_{21}\,u_{13} + u_{23}$;

$a_{31} = m_{31}\,u_{11}$, $a_{32} = m_{31}u_{12} + m_{32}u_{22}$, $a_{33} = m_{31}\,u_{13} + m_{32}u_{23} + u_{23}$

Resolve-se então as equações para u e l.

b) Implementar algoritmo para calcular {c} pela redução de Doolittle, sem pivotação.

Algoritmo:

Para cada k = 1, 2...n faça:

$u_{k,m} = a_{k,m} - \sum^{k-1}_{j=1} l_{k,j} u_{j,m}$, para m = k, k+1, ….. , n. Produz k-ésima linha de U.

$l_{i,k} = (a_{i,k} - \sum^{k-1}_{j=1} l_{i,j} u_{j,k}) / u_{k,k}$, para i = k+1, k+2, …, n. Produz k-ésima coluna de L.

Em que $u_{k,m}$, $l_{i,k}$, $a_{i,k}$ são as entradas da matriz ***U***, ***L*** e ***A***, respectivamente. ***A*** é a matriz original que está sendo fatorada em LU.

c) Calibrar sistema feito usando como padrão a matriz [A] e o vetor {d} dados abaixo.

Método	x_1	Erro x_1	x_2	Erro x_2	x_3	Erro x_3
LU	0.00153002	0.00153002	1.00069	0.00069	0.996061	0.00394
Doolittle	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000

Resultados oriundos de uma execução do código

d) Fornecer quadro resposta para cada método, variando os valores de [A] e os de {d}.

$$[A]=\begin{bmatrix} 20 & 7 & 9 \\ 7 & 30 & 8 \\ 9 & 8 & 30 \end{bmatrix} \quad \{d\}=\begin{Bmatrix} 16 \\ 38 \\ 38 \end{Bmatrix}$$

Dados de entrada: n (número de quantidades), termos de [A]nxn e termos de{d}nx1. Dados de saída: termos de {c}nx1 que representam as c quantidades c1, c2,..., cn.

d) Fornecer quadro resposta para cada método, variando os valores de [A] e os de {d}.

para um sistema de reações químicas:

$2.x1 + 10.x2 - 5.x3 = -21$

$7.x1 + x2 + 4.x3 = 25$ Solução = (2, -1, 3)

$-8.x1 + 3.x2 + 6.x3 = -1$

- Fatoração LU com pivotação: (2.05, -1.03, 3.08)
- Doolittle: (1.5, -0.94, 3.16)

Conclusão

- Quando calibrado com a matriz padrão:
  - Redução de Doolittle foi mais precisa.
  - Redução de Doolittle se mostrou mais rápida.
    - Redução de Doolittle: 5,1 x 10^{-5} ms
    - Fatoração LU com pivotação: 19,1 x 10^{-5} ms

$$[A] = \begin{bmatrix} 20 & 7 & 9 \\ 7 & 30 & 8 \\ 9 & 8 & 30 \end{bmatrix} \quad \{d\} = \begin{Bmatrix} 16 \\ 38 \\ 38 \end{Bmatrix}$$

- Comportamento geral:
  - Fatoração LU com pivotação é mais precisa, porém se mostra mais lenta.
  - Redução de Doolittle se mostra mais rápida, porém menos precisa.