CAPÍTULO 10

Decomposição *LU* e Inversão de Matrizes

Este capítulo trata de uma classe de métodos de eliminação chamados de técnicas de decomposição *LU*. O interesse principal da decomposição *LU* é que o passo de eliminação, que consome muito tempo, pode ser formulado de modo que envolva apenas operações na matriz dos coeficientes, $[A]$. Assim, ele se adapta bem àquelas situações nas quais muitos vetores à direita, $\{B\}$, devem ser calculados para um único valor de $[A]$. Apesar de haver uma variedade de maneiras pelas quais isso pode ser feito, vamo-nos concentrar em mostrar como o método de eliminação de Gauss pode ser implementado como uma decomposição *LU*.

Um motivo para introduzir a decomposição *LU* é que ela fornece uma maneira eficiente de calcular a matriz inversa, a qual tem um grande número de aplicações valiosas na prática da engenharia. A decomposição *LU* também fornece um meio de avaliar o condicionamento do sistema.

10.1 DECOMPOSIÇÃO *LU*

Como descrito no capítulo anterior, a eliminação de Gauss é projetada para resolver sistemas de equações algébricas lineares,

$$[A]\{X\} = \{B\} \tag{10.1}$$

Embora certamente represente um método seguro de resolver tais sistemas, ele se torna ineficiente ao se resolver equações com os mesmos coeficientes $[A]$, mas com diferentes constantes à direita (os b's).

Lembre-se que a eliminação de Gauss envolve dois passos: a eliminação progressiva e a substituição regressiva (Figura 9.3). Desses, a eliminação progressiva compreende o maior volume de esforço computacional (lembre-se da Tabela 9.1). Isso é particularmente verdadeiro para grandes sistemas de equações.

Os métodos de decomposição LU separam a eliminação da matriz $[A]$, que consome tempo, das manipulações do lado direito $\{B\}$. Assim, uma vez que $[A]$ tenha sido "decomposta", vetores múltiplos à direita podem ser calculados de maneira eficiente.

É interessante observar que a própria eliminação de Gauss pode ser escrita como uma decomposição *LU*. Antes de mostrar como isso pode ser feito, inicialmente será fornecida uma visão matemática geral da estratégia da decomposição.

10.1.1 Uma Visão Geral da Decomposição *LU*

Do mesmo modo como no caso da eliminação de Gauss, a decomposição *LU* requer pivotamento para se evitar divisões por zero. Entretanto, para simplificar a descrição a seguir, a questão do pivotamento será adiada até que a abordagem principal seja elaborada. Além disso, a explicação seguinte está limitada a um conjunto de três equações simultâneas. Os resultados podem ser estendidos diretamente a sistemas de n dimensões.

A Equação (10.1) pode ser reorganizada como

$$[A]\{X\} - \{B\} = 0 \tag{10.2}$$

Suponha que a Equação (10.2) possa ser escrita como um sistema triangular superior:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{Bmatrix} \tag{10.3}$$

Perceba que isso é parecido com os cálculos que ocorrem no primeiro passo da eliminação de Gauss. Ou seja, a eliminação é usada para reduzir o sistema a uma forma triangular superior. A Equação (10.3) também pode ser escrita em notação matricial e reorganizada para dar

$$[U]\{X\} - \{D\} = 0 \tag{10.4}$$

Agora, suponha que exista uma matriz triangular inferior com 1's na diagonal,

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \tag{10.5}$$

que tenha a propriedade de que, quando o primeiro membro da Equação (10.4) for multiplicado à esquerda por ela, o resultado seja o primeiro membro da Equação (10.2). Isto é,

$$[L]\{[U]\{X\} - \{D\}\} = [A]\{X\} - \{B\} \tag{10.6}$$

Se essa equação for válida para todo {X}, segue das regras de multiplicação de matrizes que

$$[L][U] = [A] \tag{10.7}$$

e

$$[L]\{D\} = \{B\} \tag{10.8}$$

Uma estratégia de dois passos (ver Figura 10.1) para obter soluções pode basear-se nas Equações (10.4), (10.7) e (10.8):

1. *Passo da decomposição LU*. $[A]$ é fatorada ou "decomposta" em matrizes triangulares inferior $[L]$ e superior $[U]$.
2. *Passo de substituição.* $[L]$ e $[U]$ são usadas para determinar a solução $\{X\}$ para um lado direito $\{B\}$. Esse passo consiste em duas etapas. Primeiro, a Equação (10.8) é usada para gerar um vetor intermediário $\{D\}$ por substituição progressiva. A seguir, o resultado é substituído na Equação (10.4), que pode ser resolvida por substituição regressiva, determinando-se $\{X\}$.

Agora, vejamos como a eliminação de Gauss pode ser implementada dessa forma.

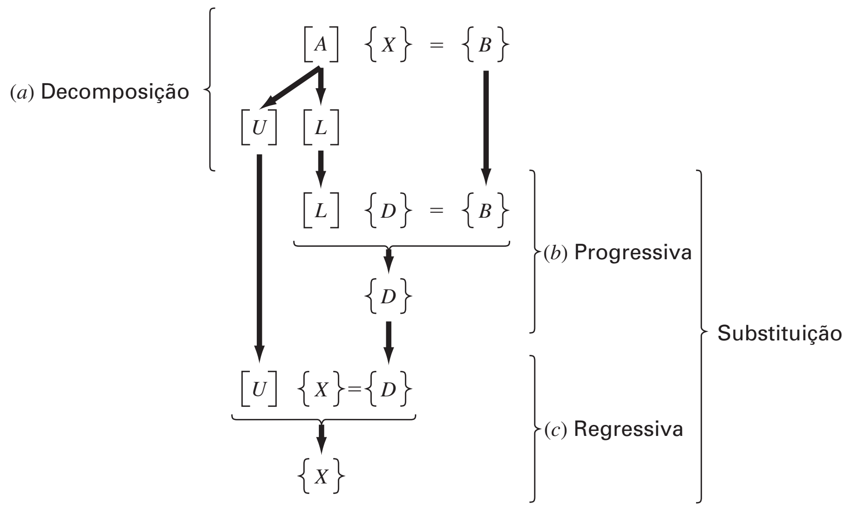

FIGURA 10.1
Os passos da decomposição *LU*.

10.1.2 A Versão da Eliminação de Gauss por Decomposição *LU*

Embora à primeira vista pareça não estar relacionada com a decomposição *LU*, a eliminação de Gauss pode ser usada para decompor $[A]$ em $[L]$ e $[U]$. Isso pode ser visto facilmente para $[U]$, que é um produto direto da eliminação progressiva. Lembre-se que o passo de eliminação progressiva tem por objetivo reduzir a matriz original dos coeficientes $[A]$ para a forma

$$[U] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} \\ 0 & 0 & a''_{33} \end{bmatrix} \tag{10.9}$$

que está na forma triangular superior procurada.

Embora possa não ser tão aparente, a matriz $[L]$ também é produzida durante essa etapa. Isso pode ser prontamente ilustrado para um sistema de três equações,

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{Bmatrix}$$

A primeira etapa da eliminação de Gauss é multiplicar a linha 1 pelo fator [lembre-se da Equação (9.13)]

$$f_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}}$$

e subtrair o resultado da segunda linha para eliminar a_{21}. Analogamente, a linha 1 é multiplicada por

$$f_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}}$$

e o resultado é subtraído da terceira linha para eliminar a_{31}. O passo final é multiplicar a segunda linha modificada por

$$f_{32} = \frac{a'_{32}}{a'_{22}}$$

e subtrair o resultado da terceira linha para eliminar a'_{32}.

Agora, suponha que foram meramente efetuadas todas essas manipulações na matriz $[A]$. Claramente, se não se quer modificar a equação, também se deve fazer o mesmo com o lado direito $\{B\}$. Mas não há nenhuma razão que obrigue a efetuar essas operações simultaneamente. Assim, pode-se salvar os f's e manipular $\{B\}$ depois.

Onde serão armazenados os fatores f_{21}, f_{31} e f_{32}? Lembre-se que a idéia por trás da eliminação era criar zeros em a_{21}, a_{31} e a_{32}. Assim, é possível armazenar f_{21} em a_{21}, f_{31} em a_{31} e f_{32} em a_{32}. Depois da eliminação, a matriz $[A]$ poderia, portanto, ser escrita como

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ f_{21} & a'_{22} & a'_{23} \\ f_{31} & f_{32} & a''_{33} \end{bmatrix} \tag{10.10}$$

Essa matriz, de fato, representa um armazenamento eficiente da decomposição *LU* de $[A]$,

$$[A] \rightarrow [L][U] \tag{10.11}$$

onde

$$[U] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} \\ 0 & 0 & a''_{33} \end{bmatrix}$$

e

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ f_{21} & 1 & 0 \\ f_{31} & f_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

O exemplo a seguir confirma que $[A] = [L][U]$.

EXEMPLO 10.1 Decomposição *LU* com Eliminação de Gauss

Enunciado do Problema. Obtenha uma decomposição *LU* baseada na eliminação de Gauss efetuada no Exemplo 9.5.

Solução. No Exemplo 9.5, foi resolvido um sistema com a matriz

$$[A] = \begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0{,}1 & 7 & -0{,}3 \\ 0{,}3 & -0{,}2 & 10 \end{bmatrix}$$

Após a eliminação progressiva, foi obtida a seguinte matriz triangular superior:

$$[U] = \begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0 & 7{,}00333 & -0{,}293333 \\ 0 & 0 & 10{,}0120 \end{bmatrix}$$

Os fatores empregados para obter a matriz triangular superior podem ser reunidos em uma matriz triangular inferior. Os elementos a_{21} e a_{31} foram eliminados usando-se os fatores

$$f_{21} = \frac{0{,}1}{3} = 0{,}03333333 \qquad f_{31} = \frac{0{,}3}{3} = 0{,}1000000$$

e o elemento a'_{32} foi eliminado usando-se o fator

$$f_{32} = \frac{-0{,}19}{7{,}00333} = -0{,}0271300$$

Assim, a matriz triangular inferior é

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0{,}0333333 & 1 & 0 \\ 0{,}100000 & -0{,}0271300 & 1 \end{bmatrix}$$

Conseqüentemente, a decomposição *LU* é

$$[A] = [L][U] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0{,}0333333 & 1 & 0 \\ 0{,}100000 & -0{,}0271300 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0 & 7{,}00333 & -0{,}293333 \\ 0 & 0 & 10{,}0120 \end{bmatrix}$$

Esse resultado pode ser verificado efetuando-se a multiplicação de $[L][U]$ para obter

$$[L][U] = \begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0{,}0999999 & 7 & -0{,}3 \\ 0{,}3 & -0{,}2 & 9{,}99996 \end{bmatrix}$$

cujas pequenas discrepâncias se devem a erros de arredondamento.

A seguir tem-se um pseudocódigo para uma sub-rotina que implemente a fase de decomposição:

```
SUB Decompose (a, n)
  DOFOR k = 1, n − 1
    DOFOR i = k + 1, n
      fator = a_{i,k}/a_{k,k}
      a_{i,k} = fator
      DOFOR j = k + 1, n
        a_{i,j} = a_{i,j} − fator * a_{k,j}
      END DO
    END DO
  END DO
END Decompose
```

Observe que esse algoritmo é "ingênuo" no sentido que o pivotamento não está incluído. Esse recurso será acrescentado mais tarde, quando será desenvolvido um algoritmo completo para a decomposição *LU*.

Depois que a matriz é decomposta, pode-se produzir uma solução para um valor particular do vetor à direita $\{B\}$, o que é feito em duas etapas. Primeiro, uma substituição progressiva é executada, resolvendo-se a Equação (10.8) para $\{D\}$. É importante reconhecer que isso significa simplesmente efetuar as manipulações da eliminação em $\{B\}$. Assim, ao final desse passo, o lado direito estará no mesmo estado em que estaria se tivesse sido efetuada a eliminação progressiva em $[A]$ e $\{B\}$ simultaneamente.

O passo de substituição progressiva pode ser representado de modo conciso por

$$d_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} d_j \qquad \text{para } i = 2, 3, \ldots, n \tag{10.12}$$

O segundo passo, então, resume-se simplesmente em implementar a substituição regressiva, como na Equação (10.4). Novamente, é importante perceber que isso é idêntico à fase de substituição regressiva da eliminação de Gauss convencional. Assim, de maneira similar às Equações (9.16) e (9.17), o passo de substituição regressiva pode ser representado concisamente por

$$x_n = d_n / a_{nn} \tag{10.13}$$

$$x_i = \frac{d_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j}{a_{ii}} \qquad \text{para } i = n-1, n-2, \ldots, 1 \tag{10.14}$$

EXEMPLO 10.2

Os Passos de Substituição

Enunciado do Problema. Complete o problema iniciado no Exemplo 10.1, determinando a solução final por substituição progressiva e regressiva.

Solução. Como foi dito, o objetivo da substituição progressiva é impor as manipulações da eliminação, que foram aplicadas anteriormente a $[A]$, no vetor do lado direito, $\{B\}$. Lembre-se que o sistema resolvido no Exemplo 9.5 é

$$\begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0{,}1 & 7 & -0{,}3 \\ 0{,}3 & -0{,}2 & 10 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 7{,}85 \\ -19{,}3 \\ 71{,}4 \end{Bmatrix}$$

e que a fase de eliminação progressiva da eliminação de Gauss convencional resultou em

$$\begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0 & 7{,}00333 & -0{,}293333 \\ 0 & 0 & 10{,}0120 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 7{,}85 \\ -19{,}5617 \\ 70{,}0843 \end{Bmatrix} \tag{E10.2.1}$$

A fase de substituição progressiva é implementada aplicando-se a Equação (10.7) ao problema,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0{,}0333333 & 1 & 0 \\ 0{,}100000 & -0{,}0271300 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 7{,}85 \\ -19{,}3 \\ 71{,}4 \end{Bmatrix}$$

ou multiplicando o lado esquerdo,

$$\begin{aligned} d_1 \qquad\qquad\qquad &= 7{,}85 \\ 0{,}0333333 d_1 + \qquad d_2 \qquad &= -19{,}3 \\ 0{,}1 d_1 - 0{,}02713 d_2 + d_3 &= 71{,}4 \end{aligned}$$

Pode-se determinar d_1 a partir da primeira equação,

$$d_1 = 7{,}85$$

o que pode ser substituído na segunda equação para determinar

$$d_2 = -19{,}3 - 0{,}0333333(7.85) = -19{,}5617$$

Ambos, d_1 e d_2, podem então ser substituídos na terceira equação para dar

$$d_3 = 71{,}4 - 0{,}1(7{,}85) + 0{,}02713(-19{,}5617) = 70{,}0843$$

Assim,

$$\{D\} = \begin{Bmatrix} 7{,}85 \\ -19{,}5617 \\ 70{,}0843 \end{Bmatrix}$$

que é idêntico ao lado direito da Equação (E10.2.1).

Esse resultado pode ser substituído na Equação (10.4), $[U]\{X\} = \{D\}$, para dar

$$\begin{bmatrix} 3 & -0{,}1 & -0{,}2 \\ 0 & 7{,}00333 & -0{,}293333 \\ 0 & 0 & 10{,}0120 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 7{,}85 \\ -19{,}5617 \\ 70{,}0843 \end{Bmatrix}$$

que pode ser resolvida por substituição regressiva (ver Exemplo 9.5 para detalhes) para determinar a solução final,

$$\{X\} = \begin{Bmatrix} 3 \\ -2{,}5 \\ 7{,}00003 \end{Bmatrix}$$

A seguir tem-se um pseudocódigo para uma sub-rotina que implementa as duas fases de substituição:

```
SUB Substitute (a, n, b, x)
  'substituição progressiva
  DOFOR i = 2, n
    soma = b_i
    DOFOR j = 1, i − 1
      soma = soma − a_i,j * b_j
    END DO
    b_i = soma
  END DO
  'substituição regressiva
  x_n = b_n / a_n,n
  DOFOR i = n − 1, 1, −1
    soma = 0
    DOFOR j = i + 1, n
      soma = soma + a_i,j * x_j
    END DO
    x_i = (b_i − soma)/a_i,i
  END DO
END Substitute
```

O algoritmo de decomposição *LU* exige o mesmo número de flops de multiplicação/divisão que a eliminação de Gauss. A única diferença é que um pouco menos de esforço é gasto na fase de decomposição, já que as operações não são aplicadas ao lado direito. Assim, o número de flops de multiplicação/divisão envolvidos na fase de decomposição pode ser calculado por

$$\frac{n^3}{3} - \frac{n}{3} \xrightarrow{\text{quando } n \text{ cresce}} \frac{n^3}{3} + O(n) \tag{10.15}$$