

Eliminação de Gauss

Este capítulo trata das equações algébricas lineares simultâneas que podem ser representadas no caso geral por

$$\begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
 \end{aligned} \tag{9.1}$$

onde os a 's são coeficientes constantes e os b 's são constantes.

A técnica descrita neste capítulo é chamada de *eliminação de Gauss*, pois envolve combinar equações para eliminar variáveis. Apesar de ser um dos métodos mais antigos para resolver equações simultâneas, mantém-se como um dos algoritmos mais importantes em uso hoje em dia e é a base da resolução de equações lineares em muitos pacotes de software populares.

9.1 RESOLUÇÃO DE UM NÚMERO PEQUENO DE EQUAÇÕES

Antes de prosseguir para os métodos computacionais, serão descritos vários métodos que são apropriados para resolver um conjunto pequeno de equações simultâneas ($n \leq 3$) e que não exigem um computador: o método gráfico, a regra de Cramer e a eliminação de variáveis.

9.1.1 O Método Gráfico

Uma solução gráfica para duas equações pode ser obtida esboçando-se seus gráficos em coordenadas cartesianas, com um eixo correspondente a x_1 e o outro a x_2 . Como estamos lidando com sistemas lineares, cada equação é uma reta. Isso pode ser facilmente ilustrado para as equações na forma geral

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

Pode-se isolar x_2 nas duas equações:

$$x_2 = -\left(\frac{a_{11}}{a_{12}}\right)x_1 + \frac{b_1}{a_{12}}$$

$$x_2 = -\left(\frac{a_{21}}{a_{22}}\right)x_1 + \frac{b_2}{a_{22}}$$

Assim, as equações estão agora na forma de equações de retas: isto é, $x_2 =$ (inclinação) $x_1 +$ intersecção com o eixo. Essas retas podem ser traçadas em coordenadas cartesianas com x_2 como a ordenada e x_1 como a abscissa. Os valores de x_1 e x_2 na intersecção das retas representam a solução.

EXEMPLO 9.1

O Método Gráfico para Duas Equações

Enunciado do Problema. Use o método gráfico para resolver o sistema

$$3x_1 + 2x_2 = 18 \quad (\text{E9.1.1})$$

$$-x_1 + 2x_2 = 2 \quad (\text{E9.1.2})$$

Solução. Seja x_1 a abscissa. Isole x_2 na Equação (E9.1.1):

$$x_2 = -\frac{3}{2}x_1 + 9$$

que, quando traçada na Figura 9.1, é uma reta que intercepta o eixo x_2 em 9 e cuja inclinação é $-3/2$.

Também se pode isolar x_2 na Equação (E9.1.2):

$$x_2 = \frac{1}{2}x_1 + 1$$

que também está traçada na Figura 9.1. A solução é a intersecção das duas retas em $x_1 = 4$ e $x_2 = 3$. Esses resultados podem ser verificados substituindo esses valores nas equações originais, o que leva a

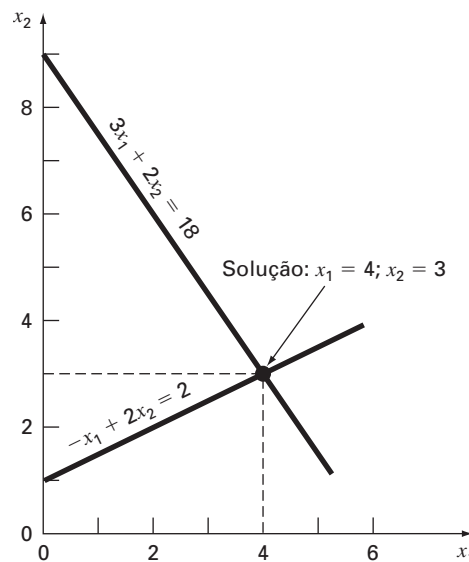
$$3(4) + 2(3) = 18$$

$$-(4) + 2(3) = 2$$

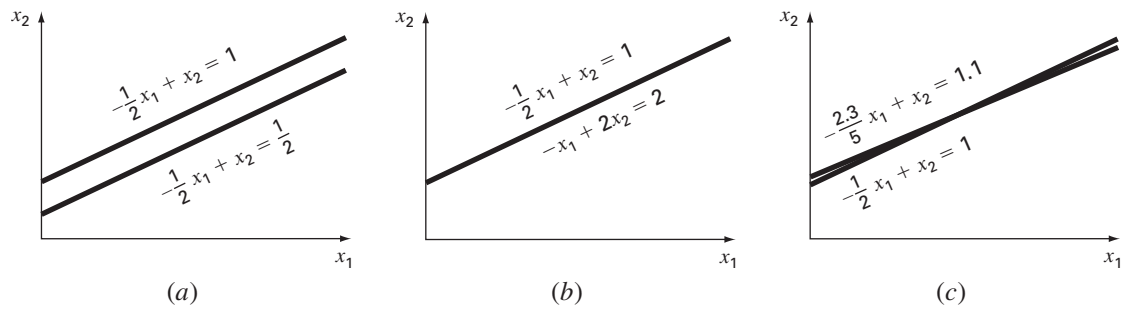
Assim, os resultados coincidem com o lado direito das equações originais.

FIGURA 9.1

Solução gráfica de um conjunto de duas equações algébricas lineares simultâneas. A intersecção das retas representa a solução.



Para três equações simultâneas, cada equação será representada por um plano em um sistema de coordenadas tridimensional. O ponto no qual os planos se interceptam irá representar a solução. Para mais de três equações, os métodos gráficos não funcionam e, conseqüentemente, têm pouco valor prático para resolver equações simultâneas. Apesar disso, às vezes são úteis para visualizar propriedades das soluções. Por exemplo, a Figura 9.2

**FIGURA 9.2**

Descrição gráfica de sistemas singulares e mal condicionados: (a) nenhuma solução, (b) infinitas soluções e (c) sistemas mal condicionados, nos quais as inclinações são tão próximas que o ponto de intersecção é difícil de detectar visualmente.

descreve três casos que podem ser problemáticos quando se resolve um conjunto de equações lineares. A Figura 9.2a mostra o caso em que duas equações representam retas paralelas. Para tais situações, não há solução, pois as retas não se cruzam. A Figura 9.2b mostra o caso em que as duas retas são coincidentes. Para tais situações, há um número infinito de soluções. Ambos os tipos de sistemas são chamados de *singulares*. Além desses, sistemas que estão muito próximos de serem singulares (Figura 9.2c) também podem causar problemas. Esses sistemas são chamados de *mal condicionados*. Graficamente, isso corresponde ao fato de que é difícil identificar o ponto exato no qual as retas se interceptam. Os sistemas mal condicionados também causarão problemas quando forem encontrados durante as soluções numéricas de equações lineares, porque são extremamente sensíveis a erros de arredondamento (lembre-se da Seção 4.2.3).

9.1.2 Determinantes e a Regra de Cramer

A regra de Cramer é outra técnica de resolução que é mais bem adequada a um pequeno número de equações. Antes de descrever esse método, será apresentado brevemente o conceito de determinante, que é usado para implementar a regra de Cramer. Além disso, o determinante é relevante para avaliar o mal condicionamento de uma matriz.

Determinantes. O determinante pode ser ilustrado para um conjunto de três equações:

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

onde $[A]$ é a matriz dos coeficientes:

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

O determinante D desse sistema é formado a partir dos coeficientes da equação, como em

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \quad (9.2)$$

Apesar de o determinante D e a matriz dos coeficientes $[A]$ serem compostos dos mesmos elementos, são conceitos matemáticos completamente diferentes. Por essa razão, são distinguidos visualmente usando-se colchetes para delimitar a matriz e linhas retas para delimitar o determinante. Em contraste com a matriz, o determinante é um único número. Por exemplo, o valor do determinante de segunda ordem

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

é calculado por

$$D = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \quad (9.3)$$

Para o caso de terceira ordem [Equação (9.2)], o valor numérico do determinante pode ser calculado por

$$D = a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \quad (9.4)$$

onde os determinantes dois por dois são chamados de **menores**.

EXEMPLO 9.2

Determinantes

Enunciado do Problema. Calcule os valores dos determinantes dos sistemas dados nas Figuras 9.1 e 9.2.

Solução. Para a Figura 9.1:

$$D = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 3(2) - 2(-1) = 8$$

Para a Figura 9.2a:

$$D = \begin{vmatrix} -1/2 & 1 \\ -1/2 & 1 \end{vmatrix} = \frac{-1}{2}(1) - 1\left(\frac{-1}{2}\right) = 0$$

Para a Figura 9.2b:

$$D = \begin{vmatrix} -1/2 & 1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = \frac{-1}{2}(2) - 1(-1) = 0$$

Para a Figura 9.2c:

$$D = \begin{vmatrix} -1/2 & 1 \\ -2,3/5 & 1 \end{vmatrix} = \frac{-1}{2}(1) - 1\left(\frac{-2,3}{5}\right) = -0,04$$

No exemplo precedente, os sistemas singulares têm determinantes nulos. Além disso, os resultados sugerem que o sistema que é quase singular (Figura 9.2c) tem um determinante próximo de zero. Essas idéias serão examinadas mais a fundo na discussão subsequente de mal condicionamento (Seção 9.3.3).

Regra de Cramer. Essa regra estabelece que cada incógnita em um sistema de equações algébricas lineares pode ser expressa como uma fração de dois determinantes, com denominador D e com o numerador obtido a partir de D trocando-se a coluna de coeficientes da incógnita em questão pelas constantes b_1, b_2, \dots, b_n . Por exemplo, x_1 é calculada por

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}}{D} \quad (9.5)$$

EXEMPLO 9.3

Regra de Cramer

Enunciado do Problema. Use a regra de Cramer para resolver

$$0,3x_1 + 0,52x_2 + x_3 = -0,01$$

$$0,5x_1 + x_2 + 1,9x_3 = 0,67$$

$$0,1x_1 + 0,3x_2 + 0,5x_3 = -0,44$$

Solução. O determinante D pode ser escrito como [Equação (9.2)]

$$D = \begin{vmatrix} 0,3 & 0,52 & 1 \\ 0,5 & 1 & 1,9 \\ 0,1 & 0,3 & 0,5 \end{vmatrix}$$

Os menores são [Equação (9.3)]

$$A_1 = \begin{vmatrix} 1 & 1,9 \\ 0,3 & 0,5 \end{vmatrix} = 1(0,5) - 1,9(0,3) = -0,07$$

$$A_2 = \begin{vmatrix} 0,5 & 1,9 \\ 0,1 & 0,5 \end{vmatrix} = 0,5(0,5) - 1,9(0,1) = 0,06$$

$$A_3 = \begin{vmatrix} 0,5 & 1 \\ 0,1 & 0,3 \end{vmatrix} = 0,5(0,3) - 1(0,1) = 0,05$$

Esses podem ser usados para calcular o determinante, como em [Equação (9.4)]

$$D = 0,3(-0,07) - 0,52(0,06) + 1(0,05) = -0,0022$$

Aplicando a Equação (9.5), a solução é

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} -0,01 & 0,52 & 1 \\ 0,67 & 1 & 1,9 \\ -0,44 & 0,3 & 0,5 \end{vmatrix}}{-0,0022} = \frac{0,03278}{-0,0022} = -14,9$$

$$x_2 = \frac{\begin{vmatrix} 0,3 & -0,01 & 1 \\ 0,5 & 0,67 & 1,9 \\ 0,1 & -0,44 & 0,5 \end{vmatrix}}{-0,0022} = \frac{0,0649}{-0,0022} = -29,5$$

$$x_3 = \frac{\begin{vmatrix} 0,3 & 0,52 & -0,01 \\ 0,5 & 1 & 0,67 \\ 0,1 & 0,3 & -0,44 \end{vmatrix}}{-0,0022} = \frac{-0,04356}{-0,0022} = 19,8$$

Para mais de três equações, a regra de Cramer torna-se impraticável, pois à medida que o número de equações cresce, os determinantes demoram mais para ser calculados à mão (ou pelo computador). Consequentemente, são usadas alternativas mais eficientes. Algumas dessas alternativas são baseadas na última técnica de solução não-computacional, estudada na próxima seção — a eliminação de variáveis.

9.1.3 A Eliminação de Variáveis

A eliminação de variáveis pela combinação de equações é uma abordagem algébrica que pode ser ilustrada para um conjunto de duas equações:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \quad (9.6)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \quad (9.7)$$

A estratégia básica é multiplicar as equações por constantes de modo que uma das variáveis seja eliminada quando as duas equações são combinadas. O resultado é uma única equação que pode ser resolvida determinando a variável restante. Então, esse valor pode ser substituído em qualquer uma das equações originais para calcular a outra variável.

Por exemplo, a Equação (9.6) pode ser multiplicada por a_{21} e a Equação (9.7) por a_{11} para fornecer

$$a_{11}a_{21}x_1 + a_{12}a_{21}x_2 = b_1a_{21} \quad (9.8)$$

$$a_{21}a_{11}x_1 + a_{22}a_{11}x_2 = b_2a_{11} \quad (9.9)$$

Subtrair a Equação (9.8) da Equação (9.9) irá, portanto, eliminar o termo x_1 da equação, dando

$$a_{22}a_{11}x_2 - a_{12}a_{21}x_2 = b_2a_{11} - b_1a_{21}$$

que pode ser resolvida por

$$x_2 = \frac{a_{11}b_2 - a_{21}b_1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \quad (9.10)$$

A Equação (9.10) pode então ser substituída na Equação (9.6), a qual é resolvida por

$$x_1 = \frac{a_{22}b_1 - a_{12}b_2}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \quad (9.11)$$

Observe que as Equações (9.10) e (9.11) seguem diretamente da regra de Cramer, a qual afirma que

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} b_1 & a_{12} \\ b_2 & a_{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}} = \frac{b_1a_{22} - a_{12}b_2}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}$$

$$x_2 = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & b_1 \\ a_{21} & b_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}} = \frac{a_{11}b_2 - b_1a_{21}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}$$

EXEMPLO 9.4

Eliminação de Variáveis

Enunciado do Problema. Use a eliminação de variáveis para resolver (lembre-se do Exemplo 9.1)

$$3x_1 + 2x_2 = 18$$

$$-x_1 + 2x_2 = 2$$

Solução. Usando as Equações (9.11) e (9.10),

$$x_1 = \frac{2(18) - 2(2)}{3(2) - 2(-1)} = 4$$

$$x_2 = \frac{3(2) - (-1)18}{3(2) - 2(-1)} = 3$$

que é consistente com a solução gráfica (Figura 9.1).

A eliminação de variáveis pode ser estendida a sistemas com mais do que duas ou três equações. Porém, os numerosos cálculos necessários para sistemas maiores tornam o método extremamente tedioso para ser implementado à mão. Mas, como se verá na próxima seção, a técnica pode ser formalizada e rapidamente programada para o computador.

9.2 ELIMINAÇÃO DE GAUSS INGÊNUA

Na seção anterior, a eliminação de variáveis foi usada para resolver um par de equações simultâneas. O processo consiste em dois passos:

1. As equações são manipuladas para eliminar uma das variáveis das equações. O resultado desse passo de *eliminação* foi que se obteve uma equação com uma variável.
2. Consequentemente, essa equação pode ser resolvida diretamente e o resultado *substituído regressivamente* em uma das equações originais para determinar a variável remanescente.

Essa abordagem básica pode ser estendida a conjuntos maiores de equações desenvolvendo-se um esquema sistemático ou um algoritmo para eliminar variáveis e substituir regressivamente. A *eliminação de Gauss* é o mais básico desses esquemas.

Esta seção inclui técnicas sistemáticas para eliminação progressiva e substituição regressiva que compõem a eliminação de Gauss. Apesar de essas técnicas serem hipoteticamente adequadas para implementação em computadores, algumas modificações serão necessárias para se obter um algoritmo confiável. Em particular, o programa de computador deve evitar a divisão por zero. O método a seguir é chamado de *eliminação de Gauss "ingênua"* porque não evita esse problema. Seções subsequentes irão tratar das características adicionais necessárias para um programa de computador efetivo.

A abordagem é planejada para resolver um conjunto arbitrário de n equações:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (9.12a)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \quad (9.12b)$$

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \end{array}$$

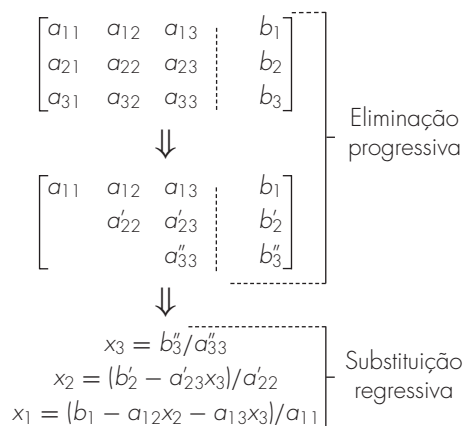
$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \quad (9.12c)$$

Da mesma forma como no caso da solução de duas equações, a técnica para n equações consiste em duas fases: a eliminação de variáveis e a solução por meio da substituição regressiva.

Eliminação Progressiva de Variáveis. A primeira fase é projetada para reduzir o conjunto de equações a um sistema triangular superior (Figura 9.3). O passo inicial será eliminar a primeira variável, x_1 , da segunda até a n -ésima equação. Para fazer isso, multiplique a Equação (9.12a) por a_{21}/a_{11} para obter

FIGURA 9.3

As duas fases da eliminação de Gauss: eliminação progressiva e substituição regressiva. As linhas indicam o número de vezes que os coeficientes e as constantes foram modificados.



$$a_{21}x_1 + \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}x_2 + \cdots + \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{1n}x_n = \frac{a_{21}}{a_{11}}b_1 \quad (9.13)$$

Agora, essa equação pode ser subtraída da Equação (9.12b) para se obter

$$\left(a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}\right)x_2 + \cdots + \left(a_{2n} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{1n}\right)x_n = b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}b_1$$

ou

$$a'_{22}x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$

onde as linhas indicam que o elemento foi modificado de seu valor original.

O processo é repetido para as equações seguintes. Por exemplo, a Equação (9.12a) pode ser multiplicada por a_{31}/a_{11} e o resultado, subtraído da terceira equação. Repetindo o procedimento para as equações restantes, obtém-se o seguinte sistema modificado:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (9.14a)$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2 \quad (9.14b)$$

$$a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3 \quad (9.14c)$$

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \end{array}$$

$$a'_{n2}x_2 + a'_{n3}x_3 + \cdots + a'_{nn}x_n = b'_n \quad (9.14d)$$

Para os passos precedentes, a Equação (9.12a) é chamada de *equação pivô* e a_{11} é chamado de *coeficiente* ou *elemento pivô*. Observe que o processo de multiplicar a primeira linha por a_{21}/a_{11} é equivalente a dividi-la por a_{11} e multiplicá-la por a_{21} . Às vezes, essa operação de divisão é chamada de *normalização*. Fazemos essa distinção porque um elemento pivô nulo pode interferir na normalização, já que provoca uma divisão por zero. Voltaremos a esse assunto importante depois de completar a descrição da eliminação de Gauss ingênua.

Agora, repita o que foi feito para eliminar a segunda variável das Equações (9.14c) até (9.14d). Para fazer isso, multiplique a Equação (9.14b) por a'_{32}/a'_{22} e subtraia o resultado da Equação (9.14c). Faça uma eliminação semelhante nas equações restantes para obter

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$

$$a''_{33}x_3 + \cdots + a''_{3n}x_n = b''_3$$

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \end{array}$$

$$a''_{n3}x_3 + \cdots + a''_{nn}x_n = b''_n$$

onde as linhas duplas indicam que os elementos foram modificados duas vezes.

O processo pode continuar usando as equações pivô remanescentes. A última coisa a fazer é usar a $(n-1)$ -ésima equação para eliminar o termo x_{n-1} da n -ésima equação. Nesse ponto, o sistema terá sido transformado em um sistema triangular superior (lembre-se do Quadro PT3.1):

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (9.15a)$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2 \quad (9.15b)$$

$$a''_{33}x_3 + \cdots + a''_{3n}x_n = b''_3 \quad (9.15c)$$

$$a^{(n-1)}_{nn}x_n = b^{(n-1)}_n \quad (9.15d)$$

Um pseudocódigo para implementar a eliminação progressiva é apresentado na Figura 9.4a. Observe que três laços encaixados fornecem uma representação concisa do processo. O laço exterior move-se para baixo na matriz de uma linha pivô para a próxima. O laço do meio move-se para baixo da linha pivô, para cada uma das linhas subseqüentes onde a eliminação é efetuada. Finalmente, o laço interior progride ao longo das colunas para eliminar ou modificar os elementos de uma linha particular.

Substituição Regressiva. A Equação (9.15d) pode agora ser resolvida para determinar x_n :

$$x_n = \frac{b^{(n-1)}_n}{a^{(n-1)}_{nn}} \quad (9.16)$$

Esse resultado pode ser substituído de volta na $(n-1)$ -ésima equação para determinar x_{n-1} . O processo, que é repetido para determinar os x 's remanescentes, pode ser representado pela seguinte fórmula:

$$x_i = \frac{b^{(i-1)}_i - \sum_{j=i+1}^n a^{(i-1)}_{ij}x_j}{a^{(i-1)}_{ii}} \quad \text{para } i = n-1, n-2, \dots, 1 \quad (9.17)$$

Um pseudocódigo para implementar as Equações (9.16) e (9.17) é apresentado na Figura 9.4b. Observe a semelhança entre esse pseudocódigo e aquele na Figura PT3.4 para a multiplicação de matrizes. Como na Figura PT3.4, uma variável temporária, *soma*, é usada para acumular as somas da Equação (9.17). Isso resulta em uma execução um pouco mais rápida do que se as somas fossem acumuladas em b_i . Mais importante, permite um aperfeiçoamento eficiente se a variável, *soma*, for declarada em dupla precisão.

FIGURA 9.4

Pseudocódigo para efetuar
(a) eliminação progressiva e (b)
substituição regressiva.

```
(a)  DOFOR k = 1, n - 1
      DOFOR i = k + 1, n
        fator = ai,k / ak,k
        DOFOR j = k + 1 to n
          ai,j = ai,j - fator · ak,j
        END DO
        bi = bi - fator · bk
      END DO
    END DO

(b)  xn = bn / an,n
      DOFOR i = n - 1, 1, -1
        soma = bi
        DOFOR j = i + 1, n
          soma = soma - ai,j · xj
        END DO
        xi = bi / ai,i
      END DO
```

EXEMPLO 9.5

Eliminação de Gauss Ingênua

Enunciado do Problema. Use eliminação de Gauss para resolver

$$3x_1 - 0,1x_2 - 0,2x_3 = 7,85 \quad (\text{E9.5.1})$$

$$0,1x_1 + 7x_2 - 0,3x_3 = -19,3 \quad (\text{E9.5.2})$$

$$0,3x_1 - 0,2x_2 + 10x_3 = 71,4 \quad (\text{E9.5.3})$$

Use seis algarismos significativos durante os cálculos.

Solução. A primeira parte do processo é a eliminação progressiva. Multiplique a Equação (E9.5.1) por $(0,1)/3$ e subtraia o resultado da Equação (E9.5.2) para obter

$$7,00333x_2 - 0,293333x_3 = -19,5617$$

Então, multiplique a Equação (E9.5.1) por $(0,3)/3$ e subtraia da Equação (E9.5.3) para eliminar x_1 . Depois dessas operações, o conjunto de equações é

$$3x_1 \quad - 0,1x_2 \quad - 0,2x_3 = 7,85 \quad (\text{E9.5.4})$$

$$7,00333x_2 - 0,293333x_3 = -19,5617 \quad (\text{E9.5.5})$$

$$-0,190000x_2 + 10,0200x_3 = 70,6150 \quad (\text{E9.5.6})$$

Para completar a eliminação progressiva, x_2 deve ser removida da Equação (E9.5.6). Para fazer isso, multiplique a Equação (E9.5.5) por $-0,190000/7,00333$ e subtraia o resultado da Equação (E9.5.6). Isso elimina x_2 da terceira equação e reduz o sistema a um sistema triangular superior, como em

$$3x_1 \quad - 0,1x_2 \quad - 0,2x_3 = 7,85 \quad (\text{E9.5.7})$$

$$7,00333x_2 - 0,293333x_3 = -19,5617 \quad (\text{E9.5.8})$$

$$10,0120x_3 = 70,0843 \quad (\text{E9.5.9})$$

Agora, é possível resolver essas equações por substituição regressiva. Primeiro, a Equação (E9.5.9) pode ser resolvida para determinar

$$x_3 = \frac{70,0843}{10,0120} = 7,0000 \quad (\text{E9.5.10})$$

Esse resultado pode ser substituído na Equação (E9.5.8):

$$7,00333x_2 - 0,293333(7,0000) = -19,5617$$

que pode ser resolvida por

$$x_2 = \frac{-19,5617 + 0,293333(7,0000)}{7,00333} = -2,50000 \quad (\text{E9.5.11})$$

Finalmente, as Equações (E9.5.10) e (E9.5.11) podem ser substituídas na Equação (E9.5.4):

$$3x_1 - 0,1(-2,50000) - 0,2(7,0000) = 7,85$$

a qual pode ser resolvida por

$$x_1 = \frac{7,85 + 0,1(-2,50000) + 0,2(7,0000)}{3} = 3,00000$$

Tais resultados são idênticos à solução exata $x_1 = 3$, $x_2 = -2,5$ e $x_3 = 7$. Isso pode ser verificado substituindo-se os resultados no conjunto original de equações

$$3(3) - 0,1(-2,5) - 0,2(7) = 7,85$$

$$0,1(3) + 7(-2,5) - 0,3(7) = -19,3$$

$$0,3(3) - 0,2(-2,5) + 10(7) = 71,4$$

9.2.1 Contando Operações

O tempo de execução da eliminação de Gauss depende da quantidade de *operações com ponto flutuante* (ou *flops*) envolvidas no algoritmo. Em computadores modernos usando co-processadores matemáticos, o tempo consumido para efetuar uma adição/subtração ou uma multiplicação/divisão é mais ou menos o mesmo. Portanto, a contagem dessas operações fornece informação sobre quais partes do algoritmo consomem mais tempo e sobre como o tempo de computação cresce à medida que o sistema fica maior.

Antes de analisar a eliminação de Gauss ingênua, primeiro é preciso definir algumas quantidades que facilitam a contagem de operações:

$$\sum_{i=1}^m cf(i) = c \sum_{i=1}^m f(i) \quad \sum_{i=1}^m f(i) + g(i) = \sum_{i=1}^m f(i) + \sum_{i=1}^m g(i) \quad (9.18a,b)$$

$$\sum_{i=1}^m 1 = 1 + 1 + 1 + \cdots + 1 = m \quad \sum_{i=k}^m 1 = m - k + 1 \quad (9.18c,d)$$

$$\sum_{i=1}^m i = 1 + 2 + 3 + \cdots + m = \frac{m(m+1)}{2} = \frac{m^2}{2} + O(m) \quad (9.18e)$$

$$\sum_{i=1}^m i^2 = 1^2 + 2^2 + 3^2 + \cdots + m^2 = \frac{m(m+1)(2m+1)}{6} = \frac{m^3}{3} + O(m^2) \quad (9.18f)$$

onde $O(m^n)$ significa “termos de ordem m^n e menores”.

Em seguida, o algoritmo de eliminação de Gauss ingênua (Figura 9.4a) é examinado em detalhes. Primeiro, contam-se os flops no estágio de eliminação. Na primeira passagem pelo laço exterior, $k = 1$. Então, os limites no laço do meio são de $i = 2$ até n . De acordo com a Equação (9.18d), isso significa que o número de iterações do laço do meio será

$$\sum_{i=2}^n 1 = n - 2 + 1 = n - 1 \quad (9.19)$$

Para cada uma dessas iterações há uma divisão para definir o fator. Então, o laço interior executa uma única multiplicação e subtração para cada iteração de $j = 2$ até n . Finalmente, há uma multiplicação e uma subtração adicionais para determinar o valor do lado direito. Assim, para cada iteração do laço do meio, o número de multiplicações é

$$1 + [n - 2 + 1] + 1 = 1 + n \quad (9.20)$$

O total de multiplicações para a primeira passagem pelo laço exterior é, portanto, obtida pela multiplicação da Equação (9.19) pela Equação (9.20), o que dá $[n - 1](1 + n)$. De modo semelhante, o número de subtrações é calculado como $[n - 1](n)$.

Raciocínios semelhantes podem ser usados para estimar os flops para as iterações subseqüentes do laço exterior. Isso pode ser resumido por

| Laço Exterior k | Laço do Meio i | Flops Adição/Subtração | Flops Multiplicação/Divisão |
|----------------------|---------------------|---------------------------|--------------------------------|
| 1 | 2, n | $(n - 1)(n)$ | $(n - 1)(n + 1)$ |
| 2 | 3, n | $(n - 2)(n - 1)$ | $(n - 2)(n)$ |
| . | . | . | . |
| . | . | . | . |
| . | . | . | . |
| k | $k + 1, n$ | $(n - k)(n + 1 - k)$ | $(n - k)(n + 2 - k)$ |
| . | . | . | . |
| . | . | . | . |
| $n - 1$ | n, n | $(1)(2)$ | $(1)(3)$ |

Então, o total de flops de adição/subtração para a eliminação pode ser calculado por

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(n+1-k) = \sum_{k=1}^{n-1} [n(n+1) - k(2n+1) + k^2]$$

ou

$$n(n+1) \sum_{k=1}^{n-1} 1 - (2n+1) \sum_{k=1}^{n-1} k + \sum_{k=1}^{n-1} k^2$$

Aplicar algumas das relações da Equação (9.18) resulta em

$$[n^3 + O(n)] - [n^3 + O(n^2)] + \left[\frac{1}{3}n^3 + O(n^2) \right] = \frac{n^3}{3} + O(n) \quad (9.21)$$

Uma análise parecida para os flops de multiplicação/divisão resulta em

$$[n^3 + O(n^2)] - [n^3 + O(n)] + \left[\frac{1}{3}n^3 + O(n^2) \right] = \frac{n^3}{3} + O(n^2) \quad (9.22)$$

Somando os resultados, tem-se

$$\frac{2n^3}{3} + O(n^2)$$

Assim, o número total de flops é igual a $2n^3/3$ mais uma componente adicional proporcional a termos de ordem n^2 e menores. O resultado é escrito dessa forma porque, à medida que n fica maior, o $O(n^2)$ e termos menores ficam desprezíveis. Pode-se então concluir, justificadamente, que para n grande, o esforço envolvido na eliminação progressiva converge para $2n^3/3$.

Como apenas um único laço foi utilizado, a substituição regressiva é muito mais simples de ser avaliada. O número de flops de adição/subtração é igual a $n(n-1)/2$. Por causa da divisão extra anterior ao laço, o número de flops de multiplicação/divisão é $n(n+1)/2$. Isso pode ser somado para se obter um total de

$$n^2 + O(n)$$

Assim, o esforço total na eliminação de Gauss ingênua pode ser representado por

$$\underbrace{\frac{2n^3}{3} + O(n^2)}_{\text{Eliminação progressiva}} + \underbrace{n^2 + O(n)}_{\text{Substituição regressiva}} \xrightarrow{\text{quando } n \text{ cresce}} \frac{2n^3}{3} + O(n^2) \quad (9.23)$$

Duas conclusões gerais úteis podem ser tiradas dessa análise:

1. À medida que o sistema fica maior, o tempo de computação cresce bastante. Como na Tabela 9.1, a quantidade de flops cresce quase três ordens de grandeza para cada aumento na ordem de grandeza da dimensão.
2. A maior parte do esforço vem do passo de eliminação. Assim, os esforços para tornar o algoritmo mais eficiente devem provavelmente concentrar-se nesse passo.

TABELA 9.1 Número de flops para a eliminação de Gauss.

| n | Eliminação | Substituição Regressiva | Total de Flops | $2n^3/3$ | Porcentagem Devida à Eliminação |
|------|--------------------|-------------------------|--------------------|--------------------|---------------------------------|
| 10 | 705 | 100 | 805 | 667 | 87,58% |
| 100 | 671550 | 10000 | 681550 | 666667 | 98,53% |
| 1000 | $6,67 \times 10^8$ | 1×10^6 | $6,68 \times 10^8$ | $6,67 \times 10^8$ | 99,85% |

9.3 ARMADILHAS DOS MÉTODOS DE ELIMINAÇÃO

Embora existam muitos sistemas de equações que podem ser resolvidas pela eliminação de Gauss ingênua, há algumas armadilhas que precisam ser exploradas antes de escrever um programa de computador geral para implementar o método. Apesar de o material a seguir se relacionar diretamente ao método de eliminação de Gauss ingênua, a informação é relevante também para outras técnicas de eliminação.

9.3.1 Divisão por Zero

A principal razão para que a técnica anterior seja chamada de “ingênua” é que tanto durante a fase de eliminação quanto durante a de substituição é possível ocorrer uma divisão por zero. Por exemplo, se for usada a eliminação de Gauss ingênua para resolver

$$2x_2 + 3x_3 = 8$$

$$4x_1 + 6x_2 + 7x_3 = -3$$

$$2x_1 + x_2 + 6x_3 = 5$$

a normalização da primeira linha iria envolver a divisão por $a_{11} = 0$. Também podem surgir problemas quando um coeficiente está muito próximo de zero. A técnica de *pivotamento* foi desenvolvida para evitar parcialmente esses problemas. Ela será descrita na Seção 9.4.2.

9.3.2 Erros de Arredondamento

Embora a solução no Exemplo 9.5 estivesse próxima da resposta verdadeira, havia uma pequena discrepância no resultado de x_3 [Equação (E9.5.10)]. Essa discrepância, que corresponde a um erro relativo de $-0,00043\%$, decorreu do uso de seis algarismos significativos durante os cálculos. Se tivessem sido usados mais algarismos significativos, o erro no resultado seria ainda mais reduzido. Se tivessem sido usadas frações em vez de decimais (e, conseqüentemente, fossem evitados erros de arredondamento), as respostas seriam exatas. De qualquer forma, como os computadores usam apenas um número limitado de algarismos significativos (lembre-se da Seção 3.4.1), os erros de arredondamento podem ocorrer e devem ser considerados quando se avaliam os resultados.

O problema de erros de arredondamento pode tornar-se particularmente importante quando se resolve um número grande de equações, por causa do fato de que cada resultado depende dos resultados anteriores. Conseqüentemente, um erro nas etapas iniciais tende a se propagar — isto é, irá causar erros nas etapas subseqüentes.

Especificar o tamanho do sistema no qual os erros de arredondamento se tornam significativos é complicado pelo fato de que o tipo do computador e as propriedades das equações são fatores determinantes. Uma regra empírica é que os erros de arredondamento podem ser importantes quando se lida com 100 ou mais equações. De qualquer modo, você deve sempre substituir suas respostas no sistema original para verificar se erros substanciais ocorreram. Entretanto, como será discutido a seguir, as ordens de grandezas dos próprios coeficientes podem influenciar no fato de tal verificação de erros garantir ou não um resultado confiável.

9.3.3 Sistemas Mal Condicionados

A adequação da solução depende do condicionamento do sistema. Na Seção 9.1.1, foi desenvolvida uma descrição gráfica do condicionamento do sistema. Como discutido na Seção 4.2.3, *sistemas bem condicionados* são aqueles em que uma pequena mudança em um ou mais coeficientes resulta em uma pequena mudança similar nas soluções. *Sistemas mal condicionados* são aqueles para os quais pequenas mudanças nos coeficientes resultam em grandes mudanças nas soluções. Uma interpretação alternativa do mal condicionamento é que uma gama ampla de respostas pode satisfazer aproximadamente as equações. Como os erros de arredondamento podem induzir pequenas mudanças nos coeficientes, essas mudanças artificiais são capazes de conduzir a erros grandes nas soluções nos sistemas mal condicionados, como ilustrado no seguinte exemplo.

EXEMPLO 9.6

Sistemas Mal Condicionados

Enunciado do Problema. Resolva o seguinte sistema:

$$x_1 + 2x_2 = 10 \quad (\text{E9.6.1})$$

$$1,1x_1 + 2x_2 = 10,4 \quad (\text{E9.6.2})$$

A seguir, resolva novamente com o coeficiente de x_1 na segunda equação levemente modificado para 1,05.

Solução. Usando as Equações (9.10) e (9.11), a solução é

$$x_1 = \frac{2(10) - 2(10,4)}{1(2) - 2(1,1)} = 4$$

$$x_2 = \frac{1(10,4) - 1,1(10)}{1(2) - 2(1,1)} = 3$$

Entretanto, com a pequena variação do coeficiente a_{21} de 1,1 para 1,05, o resultado muda de forma dramática para

$$x_1 = \frac{2(10) - 2(10,4)}{1(2) - 2(1,05)} = 8$$

$$x_2 = \frac{1(10,4) - 1,1(10)}{1(2) - 2(1,05)} = 1$$

Observe que a razão principal para as discrepâncias entre os dois resultados é que o denominador representa a diferença de dois números quase iguais. Como ilustrado previamente na Seção 3.4.2, tais diferenças são altamente sensíveis a pequenas variações nos números manipulados.

Nesse ponto, você poderia sugerir que a substituição dos resultados nas equações originais deveria alertá-lo para o problema. Infelizmente, em geral esse não é o caso para sistemas mal condicionados. A substituição dos valores errados $x_1 = 8$ e $x_2 = 1$ nas Equações (E9.6.1) e (E9.6.2) leva a

$$8 + 2(1) = 10 = 10$$

$$1,1(8) + 2(1) = 10,8 \cong 10,4$$

Assim, embora $x_1 = 8$ e $x_2 = 1$ não sejam a solução verdadeira, a verificação de erro é suficientemente próxima para possivelmente levá-lo a concluir, de maneira errônea, que essa solução é adequada.

Como foi feito anteriormente na seção sobre métodos gráficos, uma representação visual do mal condicionamento pode ser desenvolvida traçando-se as Equações (E9.6.1) e (E9.6.2) (lembre-se da Figura 9.2). Como as inclinações das retas são quase iguais, é difícil determinar visualmente o ponto exato onde elas se interceptam. Essa dificuldade visual é refletida quantitativamente nos resultados nebulosos do Exemplo 9.6. Pode-se caracterizar matematicamente a situação escrevendo as duas equações na forma geral:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \quad (9.24)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \quad (9.25)$$

Dividindo a Equação (9.24) por a_{12} e a Equação (9.25) por a_{22} e reorganizando, teremos versões alternativas que estão no formato de retas [$x_2 = (\text{inclinação}) x_1 + \text{intersecção com o eixo}$]:

$$x_2 = -\frac{a_{11}}{a_{12}}x_1 + \frac{b_1}{a_{12}}$$

$$x_2 = -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1 + \frac{b_2}{a_{22}}$$

Conseqüentemente, se as inclinações forem quase iguais,

$$\frac{a_{11}}{a_{12}} \cong \frac{a_{21}}{a_{22}}$$

ou, multiplicando em cruz,

$$a_{11}a_{22} \cong a_{12}a_{21}$$

o que pode ser expresso por

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \cong 0 \quad (9.26)$$

Agora, lembrando que $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ é o determinante do sistema de duas equações [Equação (9.3)], chega-se à conclusão geral de que um sistema mal condicionado é aquele com determinante próximo de zero. De fato, se o determinante for exatamente zero, as duas inclinações serão idênticas, o que implica que o sistema não tem solução ou que tem infinitas soluções, como no caso dos sistemas singulares esboçados nas Figuras 9.2a e 9.2b.

É difícil especificar quão perto de zero o determinante deve estar para indicar mal condicionamento. Isso é complicado pelo fato de que o determinante pode ser alterado pela multiplicação de uma ou mais das equações por um fator escalar, sem mudar a solução. Conseqüentemente, o determinante é um valor relativo que é influenciado pela ordem de grandeza dos coeficientes.

EXEMPLO 9.7

Efeito da Escala no Determinante

Enunciado do Problema. Calcule o determinante dos seguintes sistemas:

(a) Do Exemplo 9.1:

$$3x_1 + 2x_2 = 18 \quad (\text{E9.7.1})$$

$$-x_1 + 2x_2 = 2 \quad (\text{E9.7.2})$$

(b) Do Exemplo 9.6:

$$x_1 + 2x_2 = 10 \quad (\text{E9.7.3})$$

$$1,1x_1 + 2x_2 = 10,4 \quad (\text{E9.7.4})$$

(c) Repita (b), com as equações multiplicadas por 10.

Solução.

(a) O determinante das Equações (E9.7.1) e (E9.7.2), que são bem condicionadas, é

$$D = 3(2) - 2(-1) = 8$$

(b) O determinante das Equações (E9.7.3) e (E9.7.4), que são mal condicionadas, é

$$D = 1(2) - 2(1,1) = -0,2$$

(c) Os resultados de (a) e (b) parecem levar à conclusão de que sistemas mal condicionados têm determinantes próximos de zero. Porém, suponha que o sistema mal condicionado em (b) seja multiplicado por 10 dando

$$10x_1 + 20x_2 = 100$$

$$11x_1 + 20x_2 = 104$$

A multiplicação de uma equação por uma constante não tem efeito na sua solução. Além disso, ele é ainda mal condicionado. Isso pode ser verificado pelo fato de que a multiplicação por uma constante não tem efeito na solução gráfica. Porém, o determinante é afetado de maneira dramática:

$$D = 10(20) - 20(11) = -20$$

Não apenas aumentou duas ordens de grandeza, como é agora mais que o dobro do determinante do sistema bem condicionado em (a).

Como ilustrado pelo exemplo anterior, o valor dos coeficientes introduz um efeito de escala que complica a relação entre condicionamento do sistema e o tamanho do determinante. Uma forma de evitar parcialmente essa dificuldade é mudar a escala das equações de modo que o elemento máximo em qualquer linha seja igual a 1.

EXEMPLO 9.8**Mudando a Escala**

Enunciado do Problema. Faça uma mudança de escala nos sistemas de equações do Exemplo 9.7 para um valor máximo 1 e calcule novamente seus determinantes.

Solução.

(a) Para o sistema bem condicionado, a mudança de escala resulta em

$$\begin{aligned}x_1 + 0,667x_2 &= 6 \\ -0,5x_1 + x_2 &= 1\end{aligned}$$

e o determinante é

$$D = 1(1) - 0,667(-0,5) = 1,333$$

(b) Para o sistema mal condicionado, mudando a escala tem-se

$$\begin{aligned}0,5x_1 + x_2 &= 5 \\ 0,55x_1 + x_2 &= 5,2\end{aligned}$$

e o determinante é

$$D = 0,5(1) - 1(0,55) = -0,05$$

(c) No último caso, mudar a escala muda o sistema para a mesma forma obtida em (b) e o determinante é novamente $-0,05$. Assim, o efeito da escala foi removido.

Quadro 9.1 Cálculo de Determinantes Usando Eliminação de Gauss

Na Seção 9.1.2, afirmamos que o cálculo de determinantes por expansão em menores era pouco prático para conjuntos grandes de equações. Assim, concluímos que a regra de Cramer seria aplicável apenas para sistemas pequenos. No entanto, como foi mencionado na Seção 9.3.3, o determinante tem utilidade na avaliação do condicionamento do sistema. Seria, portanto, útil ter um método prático para calculá-lo.

Felizmente, a eliminação de Gauss fornece uma forma simples de fazer isso. O método se baseia no fato de que o determinante de uma matriz triangular pode ser calculado simplesmente como o produto dos elementos da diagonal:

$$D = a_{11}a_{22}a_{33} \cdots a_{nn} \quad (\text{Q9.1.1})$$

A validade dessa afirmação pode ser ilustrada para um sistema 3 por 3:

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{vmatrix}$$

onde o determinante pode ser calculado por [lembre-se da Equação 9.4]

$$D = a_{11} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12} \begin{vmatrix} 0 & a_{23} \\ 0 & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13} \begin{vmatrix} 0 & a_{22} \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$

ou, calculando os menores (isto é, os determinantes 2 por 2),

$$D = a_{11}a_{22}a_{33} - a_{12}(0) + a_{13}(0) = a_{11}a_{22}a_{33}$$

Lembre-se de que o passo de eliminação progressiva na eliminação de Gauss resulta em um sistema triangular superior. Como o valor do determinante não muda no processo de eliminação progressiva, o determinante pode ser calculado simplesmente no fim desse processo por

$$D = a_{11}a'_{22}a''_{33} \cdots a^{(n-1)}_{nn} \quad (\text{Q9.1.2})$$

onde os subscritos significam o número de vezes que os elementos foram modificados pelo processo de eliminação. Assim, podemos aproveitar o esforço que já foi despendido para reduzir o sistema a uma forma triangular e, de brinde, obter uma estimativa simples do determinante.

Há uma pequena modificação nessa abordagem quando o programa utiliza pivotamento parcial (Seção 9.4.2). Nesse caso, o determinante troca de sinal toda vez que uma linha é pivotada. Uma forma de representar isso é modificar a Equação (Q9.1.2):

$$D = a_{11}a'_{22}a''_{33} \cdots a^{(n-1)}_{nn}(-1)^p \quad (\text{Q9.1.3})$$

onde p indica o número de vezes que as linhas foram pivotadas. Essa modificação pode ser incorporada de modo simples em um programa; meramente mantenha controle do número de pivotamentos que ocorreram durante os cálculos e então use a Equação (Q9.1.3) para calcular o determinante.

Em uma seção anterior (Seção 9.1.2), foi sugerido que o determinante é difícil de calcular para mais do que três equações simultâneas. Assim sendo, pode parecer que não fornece um meio prático de avaliar o condicionamento do sistema. Porém, como se verá no Quadro 9.1, existe um algoritmo simples que vem da eliminação de Gauss que pode ser usado para calcular os determinantes.

Além da abordagem usada no exemplo anterior, há uma variedade de outras formas de avaliar o condicionamento do sistema. Por exemplo, existem métodos alternativos para normalizar os elementos (ver Stark, 1970). Além disso, como descrito no próximo capítulo (Seção 10.3), a inversa e as normas da matriz podem ser usadas para avaliar o condicionamento do sistema. Finalmente, um teste simples (mas que gasta muito tempo) é modificar levemente os coeficientes e repetir a solução. Se tais modificações levarem a resultados drasticamente diferentes, o sistema provavelmente é mal condicionado.

Como se pode ver da discussão precedente, sistemas mal condicionados são problemáticos. Felizmente, em sua maior parte as equações algébricas lineares originárias de problemas de engenharia são naturalmente bem condicionadas. Além disso, algumas técnicas esboçadas na Seção 9.4 ajudam a amenizar o problema.

9.3.4 Sistemas Singulares

Na seção anterior, aprendemos que uma forma pela qual um sistema de equações pode ser mal condicionado é quando duas ou mais equações são quase iguais. Obviamente, é ainda pior quando duas equações são idênticas. Em tais casos, perderíamos um grau de liberdade, e estaríamos tratando do caso impossível de $n - 1$ equações com n incógnitas. Tais casos podem não ser óbvios para você, particularmente ao lidar com um conjunto grande de equações. Conseqüentemente, seria ótimo ter alguma forma de detectar a singularidade automaticamente.

A resposta para esse problema é oferecida naturalmente pelo fato de o determinante de um sistema singular ser zero. Essa idéia pode, por sua vez, ser relacionada à eliminação de Gauss, reconhecendo-se que, após a etapa de eliminação, o determinante pode ser calculado como o produto dos elementos da diagonal (ver Quadro 9.1). Assim, um algoritmo computacional pode testar para detectar se foi criado um elemento nulo na diagonal durante o processo de eliminação. Se algum for descoberto, os cálculos podem ser interrompidos imediatamente e uma mensagem é mostrada para alertar o usuário. Serão mostrados detalhes de como isso é feito na apresentação de um algoritmo completo para a eliminação de Gauss mais adiante neste capítulo.

9.4 TÉCNICAS PARA MELHORAR SOLUÇÕES

As seguintes técnicas podem ser incorporadas ao algoritmo da eliminação de Gauss ingênua para evitar algumas das armadilhas discutidas na seção anterior.

9.4.1 Uso de Mais Algarismos Significativos

O remédio mais simples para o mal condicionamento é usar mais algarismos significativos nos cálculos. Se sua aplicação puder ser estendida para manipular palavras de tamanho maior, tal recurso vai reduzir bastante o problema. Entretanto, deve-se pagar um preço na forma de uso elevado de memória e recursos computacionais associado ao uso de precisão estendida (lembre-se da Seção 3.4.1).

9.4.2 Pivotamento

Como mencionado no começo da Seção 9.3, problemas óbvios ocorrem quando um elemento pivô é zero, pois o passo de normalização leva a uma divisão por zero. Problemas também podem surgir quando o elemento pivô é muito próximo de zero, em vez de exatamente igual a zero, porque, se a ordem de grandeza do elemento pivô é pequena comparada com a dos outros elementos, então podem ocorrer erros de arredondamento.

Assim, antes que cada linha seja normalizada, é vantajoso determinar o maior coeficiente disponível na coluna abaixo do elemento pivô. As linhas podem ser trocadas de modo que o maior coeficiente seja o elemento pivô. Isso é chamado de *pivotamento parcial*. Se procurarmos o maior elemento também nas colunas, além de nas linhas, e então trocarmos, o processo é chamado de *pivotamento completo*. O pivotamento completo é usado raramente, pois trocar colunas muda a ordem dos x 's e, conseqüentemente, acrescenta uma complexidade significativa e normalmente injustificada ao programa de computador. O próximo exemplo ilustra as vantagens do pivotamento parcial. Além de evitar a divisão por zero, o pivotamento também minimiza os erros de arredondamento. Assim, serve como um remédio parcial para o mal condicionamento.

EXEMPLO 9.9**Pivotamento Parcial**

Enunciado do Problema. Use eliminação de Gauss para resolver

$$0,0003x_1 + 3,0000x_2 = 2,0001$$

$$1,0000x_1 + 1,0000x_2 = 1,0000$$

Observe que dessa forma o primeiro elemento pivô, $a_{11} = 0,0003$, é muito próximo de zero. Então, repita os cálculos, mas use pivotamento parcial, trocando a ordem das equações. As soluções exatas são $x_1 = 1/3$ e $x_2 = 2/3$.

Solução. Multiplicando a primeira equação por $1/(0,0003)$, obtém-se

$$x_1 + 10,000x_2 = 6667$$

o que pode ser usado para eliminar x_1 da segunda equação:

$$-9999x_2 = -6666$$

a qual pode ser resolvida por

$$x_2 = \frac{2}{3}$$

Esse resultado pode ser substituído na primeira equação para calcular x_1 :

$$x_1 = \frac{2,0001 - 3(2/3)}{0,0003} \quad (\text{E9.9.1})$$

Entretanto, por causa do cancelamento na subtração, o resultado é muito sensível ao número de algarismos significativos nos cálculos:

| Algarismos Significativos | x_2 | x_1 | Valor Absoluto do Erro Relativo Percentual para x_1 |
|------------------------------|-----------|-----------|--|
| 3 | 0,667 | -3,33 | 1099 |
| 4 | 0,6667 | 0,0000 | 100 |
| 5 | 0,66667 | 0,30000 | 10 |
| 6 | 0,666667 | 0,330000 | 1 |
| 7 | 0,6666667 | 0,3330000 | 0,1 |

Observe como a solução para x_1 é altamente dependente do número de algarismos significativos. Isso ocorre porque, na Equação (E9.9.1), estamos subtraindo dois números quase iguais. Por outro lado, se as equações forem resolvidas na ordem inversa, a linha com elemento pivô maior é normalizada. As equações são

$$1,0000x_1 + 1,0000x_2 = 1,0000$$

$$0,0003x_1 + 3,0000x_2 = 2,0001$$

```

p = k
maior = |ak,k|
DOFOR ii = k+1, n
  dummy = |aii,k|
  IF (dummy > big)
    maior = dummy
    p = ii
  END IF
END DO
IF (p ≠ k)
  DOFOR jj = k, n
    dummy = ap,jj
    ap,jj = ak,jj
    ak,jj = dummy
  END DO
  dummy = bp
  bp = bk
  bk = dummy
END IF

```

FIGURA 9.5

Pseudocódigo para implementar o pivotamento parcial.

A eliminação e a substituição resultam em $x_2 = 2/3$. Para números diferentes de algarismos significativos, x_1 pode ser calculado da primeira equação, como em

$$x_1 = \frac{1 - (2/3)}{1} \quad (\text{E9.9.2})$$

Esse caso é muito menos sensível ao número de algarismos significativos nos cálculos:

| Algarismos Significativos | x_2 | x_1 | Valor Absoluto do Erro Relativo Percentual para x_1 |
|---------------------------|-----------|-----------|---|
| 3 | 0,667 | 0,333 | 0,1 |
| 4 | 0,6667 | 0,3333 | 0,01 |
| 5 | 0,66667 | 0,33333 | 0,001 |
| 6 | 0,666667 | 0,333333 | 0,0001 |
| 7 | 0,6666667 | 0,3333333 | 0,00001 |

Assim, a estratégia com pivotamento é muito mais satisfatória.

Os programas de computador com propósitos gerais devem incluir uma estratégia de pivotamento. A Figura 9.5 fornece um algoritmo simples para implementar tal estratégia. Observe que o algoritmo consiste em dois laços principais. Depois de armazenar o elemento pivô atual e o número da linha nas variáveis, *maior* e *p*, o primeiro laço compara o elemento pivô com os elementos abaixo dele para verificar se algum deles é maior que o elemento pivô. Se isso ocorre, o novo maior elemento e sua linha são armazenados em *maior* e *p*. Então o segundo laço troca a linha do pivô original com aquela com o maior elemento para que essa última se torne a nova linha pivô. Esse pseudocódigo pode ser integrado a um programa baseado nos outros elementos da eliminação de Gauss esboçado na Figura 9.4. A melhor forma de fazer isso é empregar uma abordagem modular e escrever a Figura 9.5 como uma sub-rotina (ou um procedimento) que será chamado diretamente após o começo do primeiro laço na Figura 9.4a.

Observe que o segundo IF/THEN construído na Figura 9.5 troca fisicamente as linhas. Para matrizes maiores, isso pode tornar-se bastante demorado. Conseqüentemente, a maioria dos códigos não troca de fato as linhas, mas mantém um controle das linhas pivô armazenando os índices apropriados em um vetor. Então, esse vetor fornece uma base para especificar a ordenação de linhas apropriada durante a eliminação progressiva e a substituição regressiva. Assim, dizemos que as operações são implementadas *no lugar*.

9.4.3 Mudando a Escala

Na Seção 9.3.3, foi proposto que a mudança de escala é valiosa na padronização do tamanho do determinante. Além dessa aplicação, ela tem utilidade na minimização de erros de arredondamento para aqueles casos nos quais algumas equações do sistema têm coeficientes muito maiores que as outras. Tais situações são encontradas freqüentemente na prática da engenharia quando unidades muito diferentes são usadas na dedução de equações simultâneas. Por exemplo, em problemas de circuitos elétricos, as voltagens indeterminadas podem ser expressas em unidades variando de microvolts até quilovolts. Exemplos similares podem surgir em todos os campos da engenharia. Desde que cada equação seja consistente, o sistema será tecnicamente correto e solúvel. No entanto, o uso de unidades que difiram muito pode levar a coeficientes de ordens de grandeza muito diferentes. Isso, por sua vez, pode ter um impacto nos erros de arredondamento, já que afeta o pivotamento, como ilustrado no próximo exemplo.

```

SUB Gauss (a, b, n, x, tol, er)
  DIMENSION s(n)
  er = 0
  DOFOR i = 1, n
    si = ABS(ai,1)
    DOFOR j = 2, n
      IF ABS(ai,j) > si THEN si = ABS(ai,j)
    END DO
  END DO
  CALL Eliminate(a, s, n, b, tol, er)
  IF er ≠ -1 THEN
    CALL Substitute(a, n, b, x)
  END IF
END Gauss

SUB Eliminate (a, s, n, b, tol, er)
  DOFOR k = 1, n - 1
    CALL Pivot (a, b, s, n, k)
    IF ABS (ak,k/sk) < tol THEN
      er = -1
      EXIT DO
    END IF
    DOFOR i = k + 1, n
      fator = ai,k/ak,k
      DOFOR j = k + 1, n
        ai,j = ai,j - fator*ak,j
      END DO
      bi = bi - fator * bk
    END DO
  END DO
  IF ABS(ak,k/sk) < tol THEN er = -1
END Eliminate

SUB Pivot (a, b, s, n, k)
  p = k
  maior = ABS(ak,k/sk)
  DOFOR ii = k + 1, n
    dummy = ABS(aii,k/sii)
    IF dummy > maior THEN
      maior = dummy
      p = ii
    END IF
  END DO
  IF p ≠ k THEN
    DOFOR jj = k, n
      dummy = ap,jj
      ap,jj = ak,jj
      ak,jj = dummy
    END DO
    dummy = bp
    bp = bk
    bk = dummy
    dummy = sp
    sp = sk
    sk = dummy
  END IF
END Pivot

SUB Substitute (a, n, b, x)
  xn = bn/an,n
  DOFOR i = n - 1, 1, -1
    soma = 0
    DOFOR j = i + 1, n
      soma = soma + ai,j * xj
    END DO
    xi = (bi - soma) / ai,i
  END DO
END Substitute

```

FIGURA 9.6

Pseudocódigo para implementação da eliminação de Gauss com pivotamento parcial.

EXEMPLO 9.10

Efeito da Mudança de Escala no Pivotamento e nos Erros de Arredondamento

Enunciado do Problema.

- (a) Resolva o seguinte conjunto de equações usando a eliminação de Gauss e a estratégia de pivotamento:

$$2x_1 + 100.000x_2 = 100.000$$

$$x_1 + x_2 = 2$$

- (b) Repita a solução depois de mudar a escala das equações de modo que o maior coeficiente em cada linha seja 1.
- (c) Finalmente, use os coeficientes normalizados para determinar se o pivotamento é necessário. Entretanto, resolva de fato as equações com os valores originais dos coeficientes. Em todos os casos, trabalhe apenas com três algarismos significativos. Observe que as respostas corretas são $x_1 = 1,00002$ e $x_2 = 0,99998$ com três algarismos significativos, $x_1 = x_2 = 1,00$.

Solução.

- (a) Sem mudar a escala, aplica-se a eliminação progressiva e obtém-se

$$\begin{aligned} 2x_1 + 100.000x_2 &= 100.000 \\ -50.000x_2 &= -50.000 \end{aligned}$$

o que pode ser resolvido por substituição regressiva, fornecendo

$$\begin{aligned} x_2 &= 1,00 \\ x_1 &= 0,00 \end{aligned}$$

Apesar de x_2 estar correto, x_1 está 100% errado, por causa dos erros de arredondamento.

- (b) Mudando a escala das equações originais, obtém-se

$$\begin{aligned} 0,00002x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$

Portanto, as linhas devem ser pivotadas para pôr o maior valor na diagonal.

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 0,00002x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned}$$

A eliminação dá

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ x_2 &= 1,00 \end{aligned}$$

o que pode ser resolvido por

$$x_1 = x_2 = 1$$

Assim, a mudança de escala conduziu à resposta correta.

- (c) Os coeficientes depois da mudança de escala indicam que o pivotamento é necessário. Então, pivotamos, mas mantemos os coeficientes originais obtendo

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 2x_1 + 100.000x_2 &= 100.000 \end{aligned}$$

A eliminação dá

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ 100.000x_2 &= 100.000 \end{aligned}$$

o que pode ser resolvido dando a resposta correta: $x_1 = x_2 = 1$. Assim, a mudança de escala foi útil para determinar quando o pivotamento é necessário, mas não foi necessária uma mudança de escala nas próprias equações para se chegar a uma resposta correta.

Como no exemplo anterior, a mudança de escala tem utilidade na minimização de erros de arredondamento. No entanto, deve ser observado que a própria mudança de escala também leva a erros de arredondamento. Por exemplo, dada a equação

$$2x_1 + 300.000x_2 = 1$$

e usando três algarismos significativos, a mudança de escala leva a

$$0,00000667x_1 + x_2 = 0,00000333$$