## Introdução ao Cálculo Numérico



- Método de eliminação de Gauss
  - Objetivo: resolver o sistema não-singular de equações lineares Ax = b
  - O método consiste da aplicação de operações elementares às linhas de A e elementos de b correspondentes, de forma a transformar A numa matriz triangular superior



- Método de eliminação de Gauss
  - Para se eliminar os elementos abaixo da diagonal k (i.e. os elementos das linhas  $k+1,k+2,\ldots,n$  na coluna k), usa-se o elemento  $A_{k,k}$  como  $piv\hat{o}$  e calcula-se o multiplicador  $z=A_{i,k}/A_{k,k}$  para se multiplicar a linha k de A e subtraí-la da linha i de A (o mesmo é feito sobre os elementos  $b_k$  e  $b_i$ , resp.)

- Método de eliminação de Gauss
  - Ao final do método, obtém-se o sistema triangular superior  $\tilde{A}x=y$
  - A solução do sistema, x, é então obtida através do processo de retro-substituição
  - O método pode ser escrito em forma algorítmica como segue:



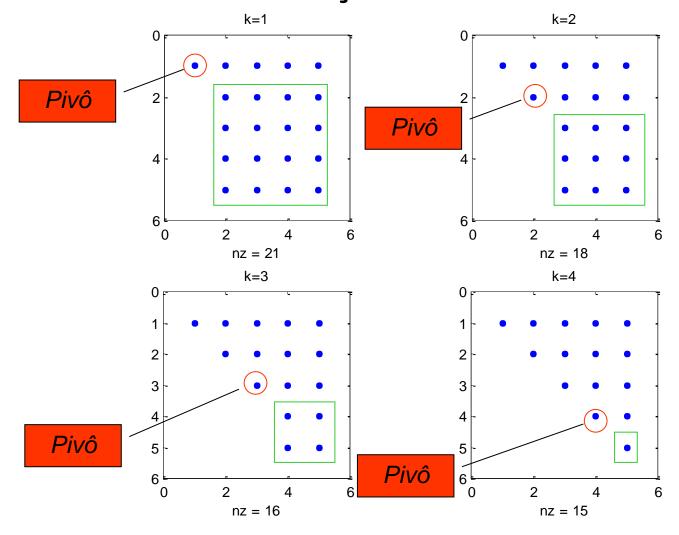
```
proc eliminacao gaussiana (entrada: n, A, b; saida: x, resultado)
  resultado:= 0
  para k:=1 até n-1 faça
    se A(k, k) == 0 então
      resultado:= -k
      retorna
    fim se
    para i:=k+1 até n faça
      z := A(i,k)/A(k,k)
      para j:=k+1 até n faça
        A(i,j) := A(i,j) - z * A(k,j)
      fim para
      b(i) = b(i) - z*b(k)
    fim para
  fim para
  se A(n,n) == 0 então
    resultado:= -n
    retorna
  fim se
  ! Resolve sistema triangular inferior
  retro substituicao(n, A, b, x)
end proc
```



- Método de eliminação de Gauss
  - Se nós efetuarmos a eliminação gaussiana com o algoritmo acima, e exibirmos o conteúdo da matriz A a cada iteração k (i.e., imediatamente após o término do laço), obteremos o seguinte gráfico:



## Método de eliminação de Gauss





- A retro-substituição
  - O processo de retro-substituição

$$x_{i} = \frac{b_{i} - \sum_{j=i+1}^{n} A_{i,j} x_{j}}{A_{i,i}}$$

para i = n, n - 1, ..., 1, desde que  $A_{i,i} \neq 0 \ \forall i$  e considerando que  $\sum_{j=i+1}^{n} A_{i,j} x_j = 0$  se i = n, pode ser implementado como descrito a seguir:



## A retro-substituição

```
proc retro substituicao(entrada: n,A,b; saida: x,resultado)
  para i:=n até 1 por -1 faça
    s := 0.0
    para j:=i+1 até n faça
      s := s + A(i,j) *x(j)
    fim para
    se A(i,i)/=0.0 então
      x(i) := (b(i) - s) / A(i, i)
    senão
      resultado:= -i
      retorna
    fim se
  fim para
fim proc
```

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

- Método de eliminação de Gauss
  - Retomando o método de eliminação de Gauss, o problema com o algoritmo visto anteriormente é que ele não leva em consideração os efeitos numéricos nefastos causados pela divisão por A(k,k) quando  $|A(k,k)| \cong 0$
  - Evidentemente que a troca de linhas também deve ser feita, para evitar o uso de pivôs nulos



- Método de eliminação de Gauss
  - Por exemplo, considere

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, 0 < \epsilon \ll 1$$

cuja solução é exata é

$$x_1 = \frac{1}{1 - \epsilon} \cong 1, x_2 = \frac{1 - 2\epsilon}{1 - \epsilon} \cong 1$$



- Método de eliminação de Gauss
  - Aplicando o algoritmo acima, para  $\epsilon \ll 1$ , obteremos:

$$x_2 = \frac{2 - \epsilon^{-1}}{1 - \epsilon^{-1}} \cong 1, x_1 = (1 - x_2)\epsilon^{-1} \cong 0$$

o que obviamente é errado!



- Método de eliminação de Gauss
  - Se implementarmos o algoritmo acima em Fortran 90, em precisão simples – REAL(KIND=4)
    - obteremos os seguintes valores de x:

$\epsilon$	$x_1$	$x_2$
$10^{-4}$	1,000166	0,999000
$10^{-6}$	1,013279	0,999990
$10^{-8}$	0,000000	1,000000



- Método de eliminação de Gauss
  - Por essa razão, o método de eliminação de Gauss deve considerar não só a troca de linhas mas, também, o escalonamento das mesmas, de forma a evitar problemas como o visto anteriormente
  - Evidentemente que a troca de linhas também deve ser feita, para evitar o uso de pivôs nulos:
    - A troca de linhas é feita de forma implícita, utilizando um arranjo de índices para fazer o acesso indireto das linhas da matriz A e do vetor b



- Método de eliminação de Gauss
  - O algoritmo para o método de eliminação de Gauss, incorporando pivotamento parcial e escalonamento, pode ser descrito como segue:



```
proc eliminacao gaussiana pivo (entrada: n,A,b; saida:
  A,b,x,resultado)
  resultado:= 0
  ! Inicializa o arranjo de permutação e os valores de escalonamento
  para i:=1 até n faça
    p(i) := i
    s(i) := -MAXR
    para j:=1 até n faça
      s(i) := max(s(i), abs(A(i,j)))
    fim para
  fim para
  para k:=1 até n-1 faça
    ! Localiza o pivô, indicado pelo valor de j
    i := k
    para i:=k+1 até n faça
      se abs(A(p(i),k))/s(p(i))>abs(A(p(j),k))/s(p(j)) então
        j:= i
        para
      fim se
    fim para
    ! Indica a troca entre as linhas k e j
    q := p(k) ; p(k) := p(j) ; p(j) = q
```



```
se A(p(k),k))/=0.0 então
      para i:=k+1 até n faça
        z := A(p(i),k)/A(p(k),k)
        para j:=k+1 até n faça
          A(p(i),j) := A(p(i),j) - z * A(p(k),j)
        fim para
        b(p(i)) := b(p(i)) - z*b(p(k))
      fim para
    senão
      resultado:= -p(k)
      retorna
    fim se
  fim para
  se A(p(n), n) == 0.0 então
    resultado:= -p(n)
    retorna
  fim se
  ! Resolve sistema triangular inferior
  retro substituicao pivo(n, A, b, p, x)
end proc
```



## A retro-substituição com pivotamento

```
proc retro_substituicao_pivo(entrada: n,A,b,p; saida: x)
  para i:=n até 1 por -1 faça
    s:= 0.0
    para j:=n até i+1 por -1 faça
        s:= s+A(p(i),j)*x(j)
    fim para
    x(i):= (b(p(i))-s)/A(p(i),i)
    fim para
  fim proc
```



- Método de eliminação de Gauss
  - Se implementarmos os algoritmos com pivotamento em Fortran 90, em precisão simples – REAL(KIND=4) – obteremos os seguintes valores de x, os quais são aceitáveis:

$\epsilon$	$x_1$	$x_2$
$10^{-4}$	1,000100	0,999000
$10^{-6}$	1,000001	0,999990
$10^{-8}$	1,000000	1,000000



- Análise da quantidade de multiplicações
  - Considerando apenas as multiplicações (que são mais demoradas do que somas e subtrações), o algoritmo da eliminação gaussiana pode ser sumarizado como segue:

```
para k:=1 até n-1
...

para i:=k+1 até n
para j:=k+1 até n
1 multiplicação
fim para
1 multiplicação
fim para
fim para
```



- Análise da quantidade de multiplicações
  - Escrevendo na notação de somatórios e expandindo os termos, vem:

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^{n} \left( 1 + \sum_{j=k+1}^{n} 1 \right) =$$

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

$$\frac{1}{2} (n^3 - n)$$



- Análise da quantidade de multiplicações
  - A quantidade de multiplicações efetuadas na retrosubstituição é

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} 1 = \frac{1}{2} (n^2 - n)$$

• Somando os resultados de ambas as expressões, a quantidade de multiplicações,  $c_{\times}$ , é dada por

a quantidade de multiplicações, 
$$c_{\times}$$
, é dada por 
$$c_{\times} = \frac{1}{3}(n^3-n) + \frac{1}{2}(n^2-n)$$



- Análise da quantidade de multiplicações
  - Para *n* grande, podemos escrever

$$c_{\times} \cong \frac{n^3}{3}$$

• Logo, dependendo do valor de n, a solução do sistema utilizando eliminação gaussiana pode se tornar inviável, em termos do tempo computacional necessário para obter a solução.

