# Introdução à Computação em Física

SISTEMAS LINEARES (PARTE 2)

PROF. WALBER

Refs.:
Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais (2nd edição), M. A. G. Ruggiero, V. L. da Rocha Lopes

# Sistemas lineares

Anteriormente iniciamos o estudo de alguns esquemas numéricos para a solução de sistemas lineares (que são bem comuns em Física), que podem ser apresentados no seguinte formato geral:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \cdots\cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + a_{m3}x_3 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

$a_{ij}$: coeficientes ($1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$ )

$x_j$: variáveis ($1 \leq j \leq n$ )

$b_i$: constantes ($1 \leq i \leq m$ )

# Sistemas lineares

Pode ser escrito na forma matricial:

$$Ax = b$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Matriz dos coeficientes

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{pmatrix}$$

Vetor das variáveis

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_m \end{pmatrix}$$

vetor constante

Resolução consiste na obtenção dos valores de $x_j$ ($j = 1, \ldots, n$) caso eles existam, que satisfaçam as m equações simultaneamente.

# Métodos de resolução

Os métodos numéricos podem ser classificados em duas categorias:

1. Métodos iterativos (anterior): fornecem uma sequência de aproximações para a solução x a partir de uma solução inicial $x^{(0)}$. Ideia central é generalizar os métodos vistos na busca de raízes de uma equação.

2. Métodos diretos: fornecem solução exata através da realização de um número finito de operações. Erros de máquina somente.

# Métodos diretos

# Métodos diretos:

- Buscamos uma solução exata através da realização de um número finito de operações aplicadas.

- São baseados no processo de escalonamento (simplificação) de sistemas e matrizes. Nesse sentido, pode-se usar o seguinte teorema sobre uma sequência de operações elementares:

Seja $Ax = b$ um sistema linear. Aplicando sobre as equações deste sistema uma sequência de operações elementares escolhidas entre:

- trocar duas equações;
- multiplicar uma equação por uma constante não nula;
- adicionar um múltiplo de uma equação a uma outra equação;

obtemos um novo sistema $\tilde{A}x = \tilde{b}$, e os sistemas $Ax = b$ e $\tilde{A}x = \tilde{b}$ são equivalentes.

# Métodos diretos:

- Regra de Cramer para um sistema linear (Ax = b) de ordem n:

$$x_i = \frac{det(A_i)}{det(A)}, i = 1, \ldots, n$$

Pode-se mostrar que o custo computacional

$$custo \approx 2.7 \times (n+1)!$$

Flops (floating-point operations per second)
(Unidade para se quantificar o desempenho associado a cálculos)

Para n = 49 : $custo \approx 8.21 \times 10^{64}$ Flops

# Sistemas triangulares:

- Vale lembrar que sistemas triangulares (triangular superior) podem ser resolvidos com certa facilidade:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \cdots\cdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

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

A partir de $x_n$, obtêm-se os demais $x_i$

$$x_i = \left(\frac{1}{a_{ii}}\right)\left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)$$

Substituições retroativas

$i = n, n-1, \ldots, 1$

# Sistemas triangulares:

- Exemplo para implementação:

A partir de $x_n$, obtêm-se os demais $x_i$

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

$$x_i = \left(\frac{1}{a_{ii}}\right)\left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)$$

$$\begin{cases} 4x_1 - 2x_2 + x_3 = 11 \\ 3x_2 - 1.5x_3 = -10.5 \\ 3x_3 = 9.0 \end{cases}$$

# Método de eliminação de Gauss

# Método de eliminação de Gauss

Método consiste em transformar um dado sistema linear original em um outro sistema linear triangular equivalente.

Será feito através de uma sequência de operações elementares sobre as linhas do sistema original, que não irá alterar a solução.
Sistema será representado pela matriz estendida:

$$A^{(0)}|b^{(0)} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \dots & a_{1n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \dots & a_{2n}^{(0)} & b_2^{(0)} \\ . & . & & . & \\ . & . & & . & \\ . & . & & . & \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & \dots & a_{nn}^{(0)} & b_n^{(0)} \end{array}\right)$$

Iremos considerar:

$$det(A) \neq 0$$

Admite uma única solução.

# Método de eliminação de Gauss

Iremos denotar as linhas da matriz estendida por $L_i^{(k)}$ (i = 1, ..., n), k será o índice relacionado as etapas que serão feitas.

Etapa 1: temos que eliminar a variável $x_1$ das equações i = 2, ...,n nas demais equações. Isso pode ser feito utilizando multiplicadores, da seguinte maneira:

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$$

$$a_{11}^{(0)}$$

Pivô da primeira etapa para cada linha i

$$\begin{aligned} L_1^{(0)} &\rightarrow L_1^{(1)} \\ L_2^{(0)} - m_{21}L_1^{(0)} &\rightarrow L_2^{(1)} \\ L_3^{(0)} - m_{31}L_1^{(0)} &\rightarrow L_3^{(1)} \\ &\cdots \\ L_n^{(0)} - m_{n1}L_1^{(0)} &\rightarrow L_n^{(1)} \end{aligned}$$

# Método de eliminação de Gauss

Etapa 1: temos que eliminar a variável $x_1$ das equações i = 2, ...,n nas demais equações. Isso pode ser feito utilizando multiplicadores, da seguinte maneira:

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$$

$$\begin{array}{r} L_1^{(0)} \rightarrow L_1^{(1)} \\ L_2^{(0)} - m_{21}L_1^{(0)} \rightarrow L_2^{(1)} \\ L_3^{(0)} - m_{31}L_1^{(0)} \rightarrow L_3^{(1)} \\ \dots \\ L_n^{(0)} - m_{n1}L_1^{(0)} \rightarrow L_n^{(1)} \end{array}$$

$$A^{(1)}|b^{(1)} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & . & & . & \\ . & . & & . & \\ . & . & & . & \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array}\right)$$

Com isso elimina-se $x_1$ das linhas i = 2, ..., n

# Método de eliminação de Gauss

Etapa 1: Novos coeficientes são dados em termos dos multiplicadores

$$A^{(1)}|b^{(1)} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array}\right)$$

$$a_{1j}^{(1)} = a_{1j}^{(0)} \qquad b_1^{(1)} = b_1^{(0)}$$

j = 1,...,n

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - m_{i1} a_{1j}^{(0)}$$

i = 2,...,n
j = 1,...,n

$$b_i^{(1)} = b_i^{(0)} - m_{i1} b_1^{(0)}$$

i = 2,...,n

# Método de eliminação de Gauss

Etapa 2: Considerando novos multiplicadores podemos eliminar a variável $x_2$

Novo pivô $a_{22}^{(1)} \neq 0$ $\Rightarrow$ $m_{i2} = \dfrac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$ i = 3,...,n

$$\begin{aligned} L_1^{(1)} &\rightarrow L_1^{(2)} \\ L_2^{(1)} &\rightarrow L_2^{(2)} \\ L_3^{(1)} - m_{32}L_2^{(1)} &\rightarrow L_3^{(2)} \\ &\dots \\ L_n^{(1)} - m_{n2}L_2^{(1)} &\rightarrow L_n^{(2)} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$A^{(2)}|b^{(2)} = \left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} & b_1^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ 0 & 0 & \dots & & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right)$$

# Método de eliminação de Gauss

Etapa 2: Novos coeficientes

$$A^{(2)}|b^{(2)} = \left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} & b_1^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ 0 & 0 & \dots & & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right)$$

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)}$$ i = 1,2 e j = i, i+1, … n

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)}$$ i = 1,2

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i2}a_{2j}^{(1)}$$ i = 3, …, n
j = 2, …, n

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i2}b_2^{(1)}$$ i = 3, …, n

# Método de eliminação de Gauss

Após etapa (n-1), teremos ao final uma matriz de coeficientes triangular superior

$$A^{(n-1)}|b^{(n-1)} = \left(\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & a_{13}^{(n-1)} & \dots & a_{1n}^{(n-1)} & b_1^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(n-1)} & a_{23}^{(n-1)} & \dots & a_{2n}^{(n-1)} & b_2^{(n-1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(n-1)} & \dots & a_{3n}^{(n-1)} & b_3^{(n-1)} \\ . & . & & & . & \\ . & . & & & . & \\ 0 & 0 & & \dots & a_{nn}^{(n-1)} & b_n^{(n-1)} \end{array}\right)$$

Solução retroativa para se obter x

$$A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$$

sistema linear triangular superior e equivalente ao sistema linear original

Deve-se ter em mente que todos processos se baseiam na existência de pivôs não nulos, além de que consideramos que o sistema linear possui solução única.

# Método de eliminação de Gauss

Algoritmo simplificado para os processos de eliminação para um sistema linear (nxn):

```
Para k = 1, ..., n-1                          Índice da coluna
    Para i = k+1, ..., n                      Índice da linha (inicia em 2)
        #### cálculo dos multiplicadores
        m = aik/akk

        Para j = k+1, ..., n                  Índice da coluna
          aij = aij – m*akj
          bi = bi – m*bk
```

Há outras técnicas de obtenção do pivô (pivotamento)

Solução retroativa

# Método de eliminação de Gauss (atv. prática)

Implementação da eliminação de Gauss para o seguinte sistema linear

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 2 \\ 4x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1 \\ \frac{1}{3}x_2 + \frac{2}{3}x_3 = \frac{5}{3} \\ -8x_3 = 0 \end{cases}$$

Solução exata

$$x = \begin{pmatrix} -3 \\ 5 \\ 0 \end{pmatrix}$$

# Fatoração LU

# Fatoração LU

No contexto da solução de sistemas lineares, idéia é decompor a matriz dos coeficientes A em outras suas matrizes, L e U

$$Ax = (LU)x = b$$

Sendo:

$$Ly = b$$

$$\Downarrow$$

$$Ux = y$$

Onde:

Triangular inferior

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Triangular superior

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

# Fatoração LU

Teorema:

Dada uma matriz quadrada $A$ de ordem $n$, seja $A_k$ a matriz constituída das primeiras $k$ linhas e colunas de A. Suponha que $det(A_k) \neq 0$ para $k = 1, 2, \ldots, (n-1)$. Então, existe uma única matriz triangular inferior $L = (m_{ij})$, com $m_{ii} = 1, 1 \leq i \leq n$ e uma única matriz triangular superior $U = (u_{ij})$ tais que $LU = A$. Ainda mais, $det(A) = u_{11}u_{22}...u_{nn}$.

Note que:

Triangular inferior Triangular superior

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ l_{21} & 1 & \ldots & 0 \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ l_{n1} & l_{n2} & \ldots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \ldots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \ldots & u_{2n} \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ 0 & 0 & \ldots & u_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

# Fatoração LU

Primeiro precisamos obter matrizes L e U. Posteriormente, pelos métodos de solução sucessivas e retroativas obtemos a solução x:

$$Ly = b$$

Soluções sucessivas (triangular inferior)

Soluções sucessivas de um sistema triangular inferior:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{23}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \\ \cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j\right)$$

i=1,2, ..., n

Implementar

# Fatoração LU

Em seguida, podemos obter a solução do seguinte sistema:

$$Ux = y$$

Soluções retroativas (triangular superior)

Soluções retroativas de um sistema triangular superior:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \cdots\cdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

i = n, n-1, ..., 1

$$x_i = \left(\frac{1}{a_{ii}}\right)\left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)$$

Implementado anteriormente

# Fatoração LU

Precisamos agora encontrar as matrizes L e U.

A matriz U (triangular superior) pode ser obtida pelo método de eliminação de Gauss;

Já a matriz L é obtida através dos multiplicadores (como estabelecido no teorema anterior)

$$L = (m_{ij})$$

$$m_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ m_{21} & 1 & \dots & 0 \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

diagonal principal unitária

# Fatoração LU

Tendo L e U em mãos, podemos prosseguir encontrando y e depois x, através dos métodos de substituição:

Soluções sucessivas

$$Ly = b$$ → Calcula-se y

Soluções retroativas

$$Ux = y$$ → Calcula-se x

Implementar método

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ 3x_1 + x_2 + 4x_3 = -7 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 = -5 \end{cases}$$

solução x = (0, 1, -2)

# Fatoração LU

Vantagens do método:

Uma vez obtidas as matrizes L e U, as soluções são obtidas facilmente pelos métodos de substituição. Solução de dois sistemas triangulares.

Nos cálculos de L e U, não utilizamos o vetor b. Logo para sistemas lineares distintos porém com mesma matriz A, as soluções podem ser obtidas facilmente só trocando o vetor b.

Além disso, fornece um algoritmo bastante eficiente para o cálculo do determinante de uma matriz:

$$det(A) = u_{11}u_{22}...u_{nn}$$

## Alguns pontos importantes sobre os métodos

- Métodos diretos quando aplicados a matrizes esparsas de grande porte (grande quantidade de elementos nulos), podem provocar o preenchimento de elementos nulos, após um dado número de operações;

- Associados estão os erros de arredondamento, que podem ser amplificados quando se tem operações envolvendo multiplicação com números grandes;

- Matrizes de grande porte podem impor limitações aos métodos diretos;

- Métodos iterativos podem ser paralelizados (Gauss-Jacobi); além disso permitem controle na precisão.

- Ponto ruim é que só são aplicados considerando dadas condições;