Eliminação Gaussiana

Chamamos métodos diretos de resolução aqueles métodos numéricos que permitem transformar um sistema de equações noutro sistema simples, com as mesmas soluções, e que pode ser resolvido em forma simples, obtendo os valores de uma variável após outra. A base destes métodos é a aplicação do método de substituição inversa. Este método pode ser usado também para resolver equações lineares matriciais $A \cdot X = B$ onde A tem forma triangular geral, para alguma escolha de linhas e colunas.

Definição 2.33. *Chamamos equação matricial linear dada por uma* ***matriz ampliada*** $M \in M_{m\times(n+k)}$ *e uma variável incógnita* $X \in M_{n\times k}(\mathbb{R})$ *a equação matricial linear* $A \cdot X = B$ *que tem* X *como incógnita, as primeiras* n *colunas de* M *como matriz de coeficientes* $A \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$*, e as últimas* k *colunas de* M *como matriz de termos independentes* $B \in M_{n\times k}(\mathbb{R})$

Na matriz ampliada podemos distinguir o bloco dos coeficientes A , e o bloco dos termos independentes B. Muitas vezes a matriz escreve-se com um traço vertical para separar estes blocos, a forma $M = [A|B]$.

Numa equação linear matricial $A \cdot X = B$, **onde A tem forma triangular geral com r pivôs**, se reordenamos as linhas $x_1, \ldots, x_n$ da matriz incógnita de forma apropriada, e reordenamos as equações, o sistema pode ser escrito na forma:

$$\begin{bmatrix} U & C \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D \\ E \end{bmatrix}$$

onde $U \in M_{r\times r}(\mathbb{R})$ tem forma triangular superior, com entradas não nulas na diagonal. Neste caso o sistema pode ser escrito como:

$$U \cdot X_1 = D - C \cdot X_2, \qquad 0X_1 + 0X_2 = E$$

e portanto

- Se $E \neq 0$, o sistema não tem soluções (sistema impossível)
- Se $E = 0$, o sistema tem soluções. Para cada escolha de parâmetros $P \in M_{m,n-r}(\mathbb{R})$ arbitrários, existe uma solução com $X_2 = P$, e a componente X_1 está determinada ao resolver por substituição inversa a equação triangular $U \cdot X_1 = D - C \cdot P$.
  Há uma única solução se $n = r$ (sistema possível determinado), e infinitas soluções diferentes se $r < n$

A reordenação de incógnitas e equações é opcional. Se uma equação matricial linear $A \cdot X = B$ tem matriz ampliada $M = [A\,B]$ **com forma triangular geral, correspondendo todos os pivôs a colunas do bloco** A, esta equação pode ser resolvida pelo **método de substituição inversa**, se indicamos que na solução X as linhas x_j com $j \neq j_1, \ldots, j_k$ são arbitrárias, e que as restantes linhas, a começar por x_{j_k}, são obtidas ao resolver as equações, a começar pela situada na linha i_k, e terminando por resolver em ordem a x_{j_1}, na equação situada na linha i_1.

Um problema é que nem todas as equações matriciais $A \cdot X = B$ têm matriz ampliada $M = [A\,B]$ com forma triangular geral e pivôs nas colunas do bloco A. Será possível dar equações equivalentes (equações com as mesmas soluções) onde a matriz ampliada tenha a forma indicada?

Proposição 2.34. *Consideremos a matriz ampliada* $M = [A\,B]$ *duma equação matricial linear* $A \cdot X = B$*. Para qualquer matriz invertível* C *o sistema definido pela nova matriz ampliada* $\overline{M} = C \cdot M = C \cdot [A\,B] = [(CA)\ (CB)]$ *determina uma equação matricial linear com as mesmas soluções do que* M

Demonstração. Se X é solução da equação matricial linear definida por M, temos $A \cdot X = B$ e portanto $C \cdot (A \cdot X) = C \cdot B$. Deduzimos que $(CA) \cdot X = (CB)$, a matriz é solução da equação matricial linear definida por $\overline{M}$

Reciprocamente, se X é solução da equação matricial linear definida por $\overline{M}$, então $(CA) \cdot X = (CB)$ e ao multiplicar com C^{-1} deduzimos $C^{-1} \cdot C \cdot A \cdot X = C^{-1} \cdot C \cdot B$. Tendo em conta que $C^{-1} \cdot C = \mathrm{Id}$ e que esta matriz é a unidade, temos $A \cdot X = B$. A matriz X seria solução da equação matricial linear definida por M. □

Definição 2.35. *Diremos que duas matrizes M, $\overline{M}$ **são equivalentes** se existe uma matriz invertível C para a qual $\overline{M} = C \cdot M$. Escrevemos $\overline{M} \sim M$ (não confundir o significado deste símbolo, não estamos a afirmar que sejam iguais nem aproximadamente iguais)*

As matrizes equivalentes definem equações matriciais com as mesmas soluções. Há uma maneira "básica" para encontrar matrizes equivalentes a uma dada, a aplicação duma "transformação elementar":

Definição 2.36. *Dados dois inteiros $1 \leq i \neq j \leq n$, chamamos **matriz elementar** E^{ij}_λ a matriz:*

$$E^{ij}_\lambda = \begin{array}{c l} \begin{array}{cccccc} & & & \underline{j} & & \end{array} & \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \lambda & & \vdots \\ \vdots & & & 1 & & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \\ \\ | \, i \\ | \, j \\ \\ \\ \end{array} \end{array}$$

Isto é, à matriz que tem entradas todas 1 na diagonal principal, e todas 0 fora da diagonal principal, com a exceção da posição (i, j), onde a entrada é λ.

Temos três propriedades relevantes:

- Para qualquer matriz M o produto $E^{ij}_\lambda \cdot M$ é uma nova matriz com as mesmas linhas que M, salvo a linha i que é soma da linha i de M com λ vezes a linha j de M.
- A matriz E^{ij}_λ é invertível, com inversa $E^{ij}_{-\lambda}$
- Se $i > j$, a matriz E^{ij}_λ é triangular inferior, com entradas 1 na diagonal.

Definição 2.37. *Chamamos **transformação elementar básica** nas linhas duma matriz M a transformação duma linha em M por ela somada com um múltiplo duma linha **anterior** de M. Quando uma matriz $\overline{M}$ é obtida a partir de M pela aplicação duma ou várias transformações elementares, temos certeza que $\overline{M}$ é **equivalente** a M e escrevemos $\overline{M} \sim M$*

Propriedades importantes da definição dada são:

- Se $\overline{M}$ é obtido a partir de M através de sucessivas transformações elementares básicas, então $\overline{M} = L \cdot M$ para uma matriz L triangular inferior ("lower triangular") com entradas 1 na diagonal.
- O conceito de "linha anterior" pode ser alterado se consideramos uma ordem $(i_1, \ldots, i_m)$ diferente da natural para indicar quando uma linha é anterior e quando é posterior. Neste caso, a matriz L indicada é triangular para uma reordenação das linhas na ordem $(i_1, \ldots, i_m)$.
- Se $\overline{M}$ é obtido a partir de M através de sucessivas transformações elementares básicas, então a equação matricial linear (numa incógnita matricial X) definida por M tem as mesmas soluções que a equação matricial linear definida por $\overline{M}$.

A ideia fundamental no algoritmo de eliminação Gaussiana é usar transformações elementares básicas para transformar uma equação matricial $A \cdot X = B$ em outra equivalente $\overline{A} \cdot X = \overline{B}$ cuja matriz ampliada tenha forma triangular geral.

Consideremos a matriz ampliada $M = [A\,B] \in M_{m(n+k)}(\mathbb{R})$ e a incógnita $X \in M_{n\times k}(\mathbb{R})$ duma equação linear matricial $A \cdot X = B$. Se nas linhas $I = (i_1, \dots, i_s)$ a matriz M tem forma triangular geral (para uma lista ordenada de colunas $J = (j_1, \dots, j_s)$) então o seguinte algoritmo determina uma nova linha e coluna i_{s+1}, j_{s+1} e uma matriz $\overline{M}$ equivalente a M, sendo que nas linhas $\overline{I} = (i_1, \dots, i_{s+1})$ a matriz tem forma triangular geral para a lista ordenada de linhas $(i_1, \dots, i_s, i_{s+1})$ e colunas $(j_1, \dots, j_s, j_{s+1})$

Algoritmo de eliminação Gaussiana: Partimos de $M = [A\,B]$ matriz que, restringida às linhas $(i_1, \dots, i_s)$, tem forma triangular geral com pivôs nas linhas $(i_1, \dots, i_s)$, e colunas $(j_1, \dots, j_s)$ do bloco A.

1. **Identificar linhas e colunas com pivô**.
2. **Escolher novo pivô**: Numa linha e coluna sem pivô do bloco A, identificar uma entrada não nula (digamos na linha i_{s+1}, coluna j_{s+1}). Marcar esta entrada como novo pivô.
3. **Eliminar entradas**: Transformar cada linha $i \neq i_1, \dots, i_s, i_{s+1}$ de M nela própria somada com um múltiplo da linha i_{s+1} onde está o pivô. O múltiplo é $-a_{ij_{s+1}}/a_{i_{s+1}j_{s+1}}$, escolhido de maneira que a entrada (i, j_{s+1}) se transforme em 0 (eliminação Gaussiana)
4. Nas linhas $\overline{I} = (i_1, \dots, i_{s+1})$ a matriz $\overline{M}$ resultante irá ter forma triangular geral para a lista ordenada de linhas $(i_1, \dots, i_{s+1})$, e colunas $(j_1, \dots, j_{s+1})$

A escolha de novo pivô em (2.) é feita sempre nas colunas associadas ao bloco A. Se não houver escolhas possíveis, é porque as linhas $i \neq i_1, \dots, i_s$ de A são linhas nulas, e portanto o sistema já tem forma triangular geral, e pode ser resolvido pelo algoritmo de substituição inversa.

Nota 2.38. Existem vários critérios para escolher o novo pivô. As seguintes são as opções mais frequentes para **pesquisa de novo pivô**:

- O de menor custo computacional escolhe a primeira linha e primeira coluna de A sem pivô (**escolha de pivô imediata**).
  Nem sempre é possível esta escolha, porque podemos estar a escolher uma entrada nula. Nestes casos tentaríamos fazer a escolha por outro critério.
- O seguinte de menor custo computacional é a escolha da primeira coluna de A sem pivô, e nesta coluna a entrada maior em valor absoluto. Esta é chamada **escolha parcial de pivô**.
  Nem sempre é possível esta escolha, porque podemos ter entradas todas nulas na coluna indicada, em linhas sem pivô. Se for este o caso devemos fazer a escolha pelo critério total.
- O critério de maior custo computacional é a escolha da maior entrada (em valor absoluto) situado em linhas e colunas de A sem pivô. Esta é chamada **escolha total de pivô**.
- Como no passo de eliminar entradas temos que dividir entre o pivô, quando trabalhamos com matrizes inteiras os cálculos se simplificam se optamos pela **escolha de pivô inteiro invertível** (portanto uma entrada ± 1)

Nota 2.39. As transformações elementares usadas (somar múltiplos de outra linha para obter zeros) podem estar mal condicionadas, nomeadamente estamos a fazer somas de elementos que são opostos um do outro. Isto irá dar exatamente zero no pivô, mas poderá dar valores próximos de zero também em outras entradas. Neste caso a operação (somar valores quase opostos) está mal condicionadal os valores obtidos podem então conter erros relativos maiores do que os originais.

Para fugir a propagação de erros relativos, a análise de erro provou que **os melhores pivôs que podemos escolher são aqueles com maior valor absoluto**. Por isto as escolhas de pivô mais "preguiçosas" podem ter custos devido aos erros de arredondamento que não conseguiremos controlar. Num sistema de cálculo numérico convém usar escolhas de pivô mais específicas, como a parcial ou a total.

Exemplo

Vamos resolver o seguinte sistema através do método de eliminação de Gauss:

$$\left.\begin{aligned} x+2y+t&=4\\ 2x+4y+z+3t&=7\\ x+2y-z+2t&=3\\ 2x+y-3t&=7\end{aligned}\right\}\Leftrightarrow\begin{bmatrix}1&2&0&1\\2&4&1&3\\1&2&-1&2\\2&1&0&-3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\\z\\t\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\7\\3\\7\end{bmatrix}$$

A matriz $M=[A|B]$ *neste caso é* $\begin{bmatrix}1&2&0&1&4\\2&4&1&3&7\\1&2&-1&2&3\\2&1&0&-3&7\end{bmatrix}$. *Aplicamos o método de Gauss. Obtemos então:*

$$\begin{bmatrix}\boxed{1}&2&0&1&4\\2&4&1&3&7\\1&2&-1&2&3\\2&1&0&-3&7\end{bmatrix}\begin{array}{l}\cdot(-2)\quad\cdot(-1)\quad\cdot(-2)\\ +\\ +\\ +\end{array}\sim\begin{bmatrix}\boxed{1}&2&0&1&4\\0&0&1&1&-1\\0&0&-1&1&-1\\0&-3&0&-5&-1\end{bmatrix}$$

agora, para executar o segundo passo, não temos $\bar{a}_{22}\neq 0$. *Não podemos optar pela escolha imediata do segundo pivô. Podemos usar a escolha parcial, que usa a segunda coluna e a primeira entrada não nula nesta coluna, em linha sem pivô:*

$$\begin{bmatrix}\boxed{1}&2&0&1&4\\0&0&1&1&-1\\0&0&-1&1&-1\\0&\boxed{-3}&0&-5&-1\end{bmatrix}$$

As transformações elementares básicas com este pivô implicam somar na segunda e terceira linha zero vezes a linha do pivô (portanto neste caso não é necessário somar nada). Escolhemos o seguinte pivô, primeira entrada não nula na seguinte linha e coluna sem pivôs

$$\begin{bmatrix}\boxed{1}&2&0&1&4\\0&0&\boxed{1}&1&-1\\0&0&-1&1&-1\\0&\boxed{-3}&0&-5&-1\end{bmatrix}\begin{array}{l}\\ \\ +\\ \\ \end{array}\sim\begin{bmatrix}\boxed{1}&2&0&1&4\\0&0&\boxed{1}&1&-1\\0&0&0&\boxed{2}&-2\\0&\boxed{-3}&0&-5&-1\end{bmatrix}$$

O sistema original é então equivalente ao sistema com forma triangular geral (com respeito das escolhas apropriadas de linhas e colunas):

$$\begin{bmatrix}1&2&0&1\\0&0&1&1\\0&0&0&2\\0&-3&0&-5\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}x\\y\\z\\t\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\-1\\-2\\-1\end{bmatrix}$$

que é resolvido por substituição inversa: $t=-2/2=-1$, *então* $z+t=-1\Rightarrow z=-1-t=0$, *depois* $-3y-5t=-1\Rightarrow y=(-1+5t)/(-3)=2$, *e finalmente* $x+2y+t=4\Rightarrow x=4-2y-t=1$.

A solução é única $(x,y,z,t)=(1,2,0,-1)$

Exemplo

Pensemos no sistema de equações

$$3\sqrt{5}x + \sqrt{3}y + z = 5$$
$$5\sqrt{3}x + \sqrt{5}y + z = 5$$
$$\sqrt{5}x + \sqrt{3}y + 3z = 5$$

que sabemos que tem como solução $x = \sqrt{5} \simeq 2.236$, $y = -5\sqrt{3} \simeq -8.66$, $z = 5$.

Se tratamos de resolver o sistema sem escolher pivôs na forma apropriada (pensemos numa máquina com 4 algarismos decimais de precisão):

$$\left.\begin{aligned} 6.708x + 1.732y + z = 5 \\ 8.66x + 2.236y + z = 5 \\ 2.236x + 1.732y + 3z = 5 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{bmatrix} 6.708 & 1.732 & 1 \\ 8.66 & 2.236 & 1 \\ 2.236 & 1.732 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix}$$

A matriz $M = [A|B]$ *associada a este sistema é:*

$$\begin{bmatrix} 6.708 & 1.732 & 1 & 5 \\ 8.66 & 2.236 & 1 & 5 \\ 2.236 & 1.732 & 3 & 5 \end{bmatrix}$$

Se fizéssemos eliminação Gaussiana sem boas escolha do pivô (tomamos primeiro a posição $(1,1)$ *e logo a* $(2,2)$*), teríamos:*

$$\begin{bmatrix} 6.708 & 1.732 & 1 & 5 \\ 8.66 & 2.236 & 1 & 5 \\ 2.236 & 1.732 & 3 & 5 \end{bmatrix} \begin{matrix} \cdot(-8.66/6.708) \\ + \\ \end{matrix} \sim \begin{bmatrix} 6.708 & 1.732 & 1 & 5 \\ 0 & -4.77\cdot 10^{-6} & -0.291 & -1.455 \\ 0 & 1.155 & 2.667 & 3.333 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \cdot(1.155/4.77)10^{6} \\ + \end{matrix} \sim$$

$$\sim \begin{bmatrix} 6.708 & 1.732 & 1 & 5 \\ 0 & -4.77\cdot 10^{-6} & -0.291 & -1.455 \\ 0 & 0 & -7.046\cdot 10^{4} & -3.523\cdot 10^{5} \end{bmatrix}$$

Se resolvemos por substituição, temos primeiro $z = \frac{-3.523\cdot 10^5}{-7.046\cdot 10^4} = 5.$*, a seguir podemos pôr* $y = (-1.455 + 0.291\cdot 5.)/(-4.77\cdot 10^{-6}) = 4.655\cdot 10^{-11}$*, e finalmente* $x = (5 - 1\cdot z - 1.732\cdot y)/6.708 = -1.202\cdot 10^{-11}$*. A solução contém erros devido aos arredondamentos feitos (arredondamentos que numa máquina com 17 algarismos de precisão levam a erros menores, mas ainda excessivos). Os valores de* x *e* y *assim obtidos são duma ordem de grandeza que nada tem a ver com a da autêntica solução (*$4.655\cdot 10^{-11} \neq -8.66$, $-1.202\cdot 10^{-11} \neq 2.236$*).*

Segundo o método de escolha total do pivô, devíamos ter escolhido como pivô o valor 8.66*. Se fazemos eliminação com este pivô, devemos substituir a primeira linha por ela menos* $6.708/8.66$ *vezes a segunda e a terceira linha por ela menos* $2.236/8.66$ *vezes a segunda:*

$$\begin{bmatrix} 6.708 & 1.732 & 1 & 5 \\ \boxed{8.66} & 2.236 & 1 & 5 \\ 2.236 & 1.732 & 3 & 5 \end{bmatrix} \begin{matrix} + \\ \cdot(-6.708/8.66) \quad \cdot(-2.236/8.66) \\ + \end{matrix} \sim \begin{bmatrix} 0 & 3.695\cdot 10^{-6} & 0.225 & 1.127 \\ \boxed{8.66} & 2.236 & 1 & 5 \\ 0 & 1.155 & 2.742 & 3.71 \end{bmatrix}$$

Excluída já a segunda linha, o seguinte pivô deve ser o maior entre os coeficientes restantes (não se devem considerar os termos independentes, que estão na última coluna): $3.695\cdot 10^{-6}$, 0.225, 1.155, 2.742*. O maior deles é* 2.742 *da terceira linha, que utilizamos como pivô. Agora já só temos que substituir a linha restante por ela menos* $0.225/2.742$ *vezes a terceira:*

$$\begin{bmatrix} 0 & 3.695\cdot 10^{-6} & 0.225 & 1.127 \\ \boxed{8.66} & 2.236 & 1 & 5 \\ 0 & 1.155 & \boxed{2.742} & 3.71 \end{bmatrix} \begin{matrix} + \\ \\ \cdot(-0.225/2.742) \end{matrix} \sim \begin{bmatrix} 0 & -0.0948 & 0 & 0.823 \\ 8.66 & 2.236 & 1 & 5 \\ 0 & 1.155 & 2.742 & 3.71 \end{bmatrix}$$

a matriz e escolha de pivôs resultante é $\begin{bmatrix} 0 & \boxed{-0.0948} & 0 & 0.823 \\ \boxed{8.66} & 2.236 & 1 & 5 \\ 0 & 1.155 & \boxed{2.742} & 3.71 \end{bmatrix}$*, e o sistema original é equivalente a:*

$$\left.\begin{aligned} -9.48\cdot 10^{-2}y = 0.823 \\ 8.66x + 2.236y + z = 5 \\ 1.155y + 2.742z = 3.71 \end{aligned}\right\}$$

Neste caso, obtemos $y = 0.823/(-0.0948) = -8.681$, *substituindo na seguinte equação:* $z = (3.71 - 1.155\cdot(-8.681))/2.742$, *obtemos* $z = 5.01$ *e finalmente substituindo na seguinte temos* $x = 2.24$. *As respostas obtidas estão muito mais perto da autêntica solução, e com uma máquina com 17 algarismos de precisão, chegaríamos a uma resposta com um erro aceitável.*

Estivemos a simular uma máquina com 4 algarismos decimais. De facto, com cálculos feitos com 17 algarismos decimais de precisão, obtemos as seguintes respostas:

Solução exata:	(2.236067977499790	−8.660254037844386	5.	)
Escolha arbitrária de pivô:	(2.2862997682665003	−8.854800926934017	4.999999999999972	)
Com escolha total de pivô:	(2.236067977499782	−8.660254037844348	4.999999999999984	)

Podemos pensar que é um erro aceitável, mas tendo em conta que o sistema poderia ter sido de maior tamanho e que este erro para três variáveis poderia propagar-se ao resolver em ordem a novas variáveis, temos motivos para programar o algoritmo com escolha de pivô não imediata, senão mais elaborada.

2.2.1 Decomposição LU de Doolittle e U^tU de Cholesky

O algoritmo de eliminação Gaussiana com escolha de pivô imediata, quando for possível, permite resolver muitas questões:

- Aplicado com **escolha de pivô imediata (se for possível)** numa matriz $[A\,\mathrm{Id}]$ produz $[U\,\bar{L}]$ onde U tem forma triangular geral e $\bar{L}$ é uma matriz triangular inferior com entradas 1 na diagonal. Estas matrizes satisfazem:

$$[A\,\mathrm{Id}] \sim [U\,\bar{L}] \qquad \bar{L}\cdot A = U$$

  A denominação U é por ser U "**upper triangular**". A denominação L é por ser L "**lower triangular**".
- Aplicado com escolha de pivô imediata (se for possível) numa matriz $[\bar{L}\,\mathrm{Id}]$ onde $\bar{L}$ é triangular inferior com 1 na diagonal, produz $[\mathrm{Id}\,L]$ onde L é triangular inferior com 1 na diagonal, inversa de $\bar{L}$

$$[\bar{L}\,\mathrm{Id}] \sim [\mathrm{Id}\,L] \qquad \bar{L} = L^{-1}$$

Combinando ambos resultados temos:

$$A = L\cdot U, \qquad \bar{L}\cdot A = U$$

Conhecer $\bar{L}, U$ é útil na resolução de equações onde aparece A. Nomeadamente:

$$A\cdot x = b \Leftrightarrow \bar{L}A\cdot x = \bar{L}\cdot b \Leftrightarrow U\cdot x = \bar{L}\cdot b$$

Assim se conhecemos $U, \bar{L}$ resolver um sistema com matriz de coeficientes A implica resolver um sistema com forma triangular geral $U\cdot x = \bar{b}$, onde $\bar{b}$ é calculada com um simples produto de matrizes $\bar{b} = \bar{L}\cdot b$

Resulta útil então trabalhar com as matrizes L, U em lugar de usar a matriz A.

Para recuperar A usaríamos $A = \bar{L}^{-1}U = LU$, onde a matriz L é a inversa de $\bar{L}$, simples de obter novamente através do algoritmo de Gauss com transformações elementares básicas:

$$[\bar{L}\,\mathrm{Id}] \sim [\mathrm{Id}\,L] \qquad L\cdot\bar{L} = \mathrm{Id}$$

Esta matriz L triangular inferior com diagonal 1, e a matriz U com forma triangular geral satisfazem $A = L\cdot U$ e é chamada uma **decomposição LU de Doolittle** para a matriz A.

Se vamos multiplicar com A ou resolver equações onde A é a matriz de coeficientes uma ideia é então guardar as matrizes U, L ou guardar as matrizes $U, \bar{L}$ em lugar de guardar A.

Nota 2.40. Há diferentes vantagens em guardar uma matriz através da sua decomposição e não através das entradas da matriz. Em particular, o cálculo da inversa de A é muito mais rápido se conhecemos a decomposição LU. Temos $A = L \cdot U \Rightarrow A^{-1} = U^{-1} \cdot L^{-1}$, onde as inversas de matrizes triangulares só exigem aplicar substituição direta ou inversa. Por outra parte $\operatorname{Det} A = \operatorname{Det} L \cdot \operatorname{Det} U$, sendo o determinante duma matriz triangular o produto das entradas na diagonal.

Devemos indicar que o número de espaços para guardar L, U é o mesmo que o número de espaços necessários para guardar A, porque muitas entradas de L são conhecidas (as entradas 0 por cima da diagonal) e muitas entradas de U são conhecidas (as entradas 0 e as entradas 1 na diagonal).

$$\begin{bmatrix} b_{11} & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ b_{12} & b_{22} & a_{23} & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & a_{n-1n} \\ b_{1n} & \dots & \dots & b_{n-1n} & b_{nn} \end{bmatrix} \to U = \begin{bmatrix} 1 & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ 0 & 1 & a_{23} & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & a_{n-1n} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ b_{1n} & \dots & \dots & b_{n-1n} & b_{nn} \end{bmatrix}$$

Exemplo

Consideremos a seguinte matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 \\ -2 & 0 & -2 \\ 4 & 5 & 15 \end{bmatrix}$$

Aplicamos o algoritmo de Gauss com escolhas de pivô imediata, na matriz $[A \, \mathrm{Id}]$*:*

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 5 & 15 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 7 & -2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \sim$$

$$\sim \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -5 & -3 & 1 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \bar{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -5 & -3 & 1 \end{bmatrix}$$

As matrizes obtidas satisfazem $\bar{L} \cdot A = U$*, e simplificam o problema de resolver equações* $A \cdot X = B$

Ainda podemos ir um paso à frente e aplicar Gauss em $[\bar{L} \, \mathrm{Id}]$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -5 & -3 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 5 & 0 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

Assim temos $L = \bar{L}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$ *, e portanto uma decomposição de Doolittle da matriz:*

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & 4 \\ -2 & 0 & 2 & -2 \\ 4 & 5 & 1 & 15 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = L \cdot U$$

Para poupar memória poderíamos guardar simplesmente:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 \\ -\mathbf{1} & 1 & 2 \\ \mathbf{2} & \mathbf{3} & 1 \end{bmatrix}$$

Há outras decomposições de interesse. Nomeadamente, podemos tentar obter uma decomposição $A = U^t \cdot U$ onde a matriz L triangular inferior seja exatamente a transposta da matriz U triangular superior. Queremos ainda que L tenha inversa (caso contrário seria de pouca utilidade). Isto nem sempre é possível, porque as matrizes $U^t \cdot U$ têm propriedades específicas:

Proposição 2.41. *Se existe uma decomposição $A = L \cdot U$ com L triangular inferior e invertível, $U = L^t$ então:*

- *A é simétrica (isto é, $A^t = A$)*
- *A é **definido-positiva** (isto é, $x^t \cdot A \cdot x > 0$ para qualquer vetor coluna x não nulo)*

Prova: Como $U = L^t$, podemos escrever $A = U^t \cdot U$ com $U = L^t$ invertível. Então:

$$x^t \cdot A \cdot x = x^t \cdot U^t \cdot U \cdot x = y^t \cdot y \qquad (y = U \cdot x)$$

Sabemos que $y^t \cdot y = y_1^2 + y_2^2 + \ldots + y_n^2 \geq 0$ sendo nulo só se $y = 0$, ou seja, se $x = U^{-1} \cdot y = 0$. Realmente A é definido-positiva

A simetria é simples de ver porque $(X \cdot Y)^t = Y^t \cdot X^t$:

$$A^t = (U^t \cdot U)^t = U^t \cdot (U^t)^t = U^t \cdot U = A$$

□

Agora podemos formular a questão oposta: Se A é uma matriz simétrica definido-positiva, será possível encontrar uma decomposição $A = U^t \cdot U$ com U triangular superior?

Proposição 2.42. *Seja A simétrica, definido-positiva, e consideremos os blocos limitados pela primeira linha e coluna:*

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^t & A_{22} \end{bmatrix}$$

onde $a_{11} \in \mathbb{R}$, $a_{12} \in M_{1(n-1)}(\mathbb{R})$, $A_{22} \in M_{(n-1)(n-1)}(\mathbb{R})$

Existem um valor real positivo $\alpha > 0$ e matriz linha $b \in M_{1(n-1)}$, únicos para os quais:

$$A - \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ b^t & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \bar{A}_{22} \end{bmatrix}$$

mais ainda, neste caso $\bar{A}_{22}$ é simétrica, definido-positiva.

Demonstração. A condição que estamos a impor em α, a_{12} indicam:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^t & A_{22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \alpha^2 & \alpha \cdot b \\ \alpha \cdot b^t & b^t \cdot b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \bar{A}_{22} \end{bmatrix}$$

Estaríamos a exigir:

- $a_{11} - \alpha^2 = 0$ para um valor $\alpha > 0$
- $a_{12} - \alpha \cdot b = 0$ para uma linha b
- (equivalente ao anterior) $a_{12}^t - \alpha \cdot b^t = 0$

Sabemos que A é definido-positiva. Portanto $[10 \ldots 0] \cdot A \cdot [10 \ldots 0]^t > 0$, e temos $a_{11} > 0$. Realmente este número positivo vai ter uma única raiz quadrada positiva, que podemos chamar α para termos $a_{11} - \alpha^2 = 0$.

Depois de encontrar $\alpha > 0$, temos a linha $b = \frac{1}{\alpha} a_{12}$.

Realmente $\bar{A}_{22} = A_{22} - b^t \cdot b$ é simétrica (porque A era simétrica e $b^t \cdot b$ é simétrica). Resta saber se $\bar{A}_{22} = A_{22} - b^t \cdot b$ é definido-positivo.

Observamos facilmente:

$$\begin{bmatrix} \frac{-b^t}{\alpha} & \mathrm{Id}_{n-1} \end{bmatrix} \cdot A \cdot \begin{bmatrix} \frac{-b}{\alpha} \\ \mathrm{Id}_{n-1} \end{bmatrix} = A_{22} - b^t \cdot b = \bar{A}_{22}$$

Para qualquer coluna $y \in M_{(n-1)1}(\mathbb{R})$:

$$y^t \cdot \bar{A}_{22} \cdot y \leq 0 \Rightarrow y^t \cdot \begin{bmatrix} \frac{-b^t}{\alpha} & \mathrm{Id}_{n-1} \end{bmatrix} \cdot A \cdot \begin{bmatrix} \frac{-b}{\alpha} \\ \mathrm{Id}_{n-1} \end{bmatrix} \cdot y \leq 0$$

e como A era definido-positivo, isto diria que $\begin{bmatrix} \frac{-b}{\alpha} \\ \mathrm{Id}_{n-1} \end{bmatrix} \cdot y$ deveria ser a coluna nula. No entanto basta observar que as últimas entradas desta coluna são as entradas de y para deduzir que $y^t \cdot \bar{A}_{22} \cdot y \leq 0$ só pode acontecer quando $y = 0$.

Portanto $\bar{A}_{22}$ é realmente simétrica, definido-positiva. □

Aplicar o cálculo do escalar α e da linha b primeiro para a matriz A, a seguir para a matriz restante (de tamanho menor) $\bar{A}_{22}$ e continuar com o processo, é a base para a obtenção duma **decomposição de Cholesky**.

Exemplo

Determinemos se a seguinte matriz simétrica é definido-positiva, e uma decomposição de Cholesky para esta matriz.

$$A = \begin{bmatrix} 9 & -6 & 3 \\ -6 & 8 & -12 \\ 3 & -12 & 30 \end{bmatrix}$$

Começamos o estudo na primeira linha $[\alpha\, b]$ *da matriz* U*:*

$$\begin{bmatrix} 9 & -6 & 3 \\ -6 & 8 & -12 \\ 3 & -12 & 30 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & -10 \\ 0 & -10 & 29 \end{bmatrix}$$

Onde resolvemos $\alpha^2 = 9$, $\alpha \cdot b = [-6\,3]$ *e calculamos a matriz* 2×2 *restante.*

Voltamos a aplicar o método agora com a matriz 2×2*:*

$$\begin{bmatrix} 4 & -10 \\ -10 & 29 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -5 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & -5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

onde novamente resolvemos $\alpha^2 = 4$, $\alpha \cdot b = [-10]$ *Finalmente o resto* $[4]$ *produz* $\alpha^2 = 4$ *portanto* $\alpha = 2$

Se juntamos as três linhas que acabamos de encontrar, a decomposição $A = U^t \cdot U$ *é:*

$$A = U^t \cdot U \qquad U = \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Como existe decomposição de Cholesky, podemos garantir que a matriz simétrica A *é definido-positiva.*

Nota 2.43. Lembremos a definição de $M(A)$ e $m(A)$ com a **norma euclidiana**, nomeadamente

$$M(A) = \max_{\|u\|=1} \|A \cdot u\|$$

$$m(A) = \min_{\|u\|=1} \|A \cdot u\|$$

Como já foi indicado, calcular estes valores não é simples e exige a determinação de autovalores, cálculo de determinantes, e de raízes de polinómios.

No entanto, resulta possível, sem ter que calcular os valores $M(A)$ ou $m(A)$, saber se estes valores ficam por cima dum determinado escalar ou não:

$$M(A) < \lambda \Leftrightarrow \|Au\| < \lambda\, (\forall u \text{ unitário}) \Leftrightarrow (Au)^t(Au) < \lambda^2\, (\forall u \text{ unitário}) \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow u^t(\lambda^2 \mathrm{Id} - A^t A)u > 0\, (\forall u \text{ unitário}) \Leftrightarrow x^t(\lambda^2 \mathrm{Id} - A^t A)x > 0\, (\forall x \neq 0)$$

Podemos então afirmar, com a norma euclidiana, e para qualquer $\lambda \geq 0$:

$$M(A) < \lambda \Leftrightarrow \lambda^2 \mathrm{Id} - A^t A \text{ definido-positivo}$$

em forma análoga podemos provar

$$m(A) > \lambda \Leftrightarrow A^t A - \lambda^2 \mathrm{Id} \text{ definido-positivo}$$

e a determinação duma matriz ser positivo-definida ou não pode ser feito sem necessidade de polinómios caraterísticos ou determinantes. Nomeadamente, basta estudar se no processo de Cholesky encontramos sempre solução das igualdades $\alpha^2 = a_{11}$ que encontramos em cada passo.

Exemplo

Provemos que o produto com a matriz $A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ *consegue multiplicar por* 4 *o comprimento de alguns vetores.*

Isto é, provemos que $M(A) \geq 4$.

Para provar isto, temos que estudar se $M = 4^2\mathrm{Id} - A^t \cdot A$ *é definido-positivo ou não:*

$$M = \begin{bmatrix} 16 & 0 \\ 0 & 16 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 & -7 \\ -7 & 2 \end{bmatrix}$$

Se tratamos de aplicar a decomposição de Cholesky em M *temos que resolver, na primeira linha:* $\alpha^2 = 10, \quad \alpha \cdot a_{12} = -7$, *portanto* $\alpha = \sqrt{10}$, $a_{12} = -7/\sqrt{10}$ *e temos:*

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 \\ -7 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & 0 \\ -7/\sqrt{10} & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sqrt{10} & -7/\sqrt{10} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{-29}{10} \end{bmatrix}$$

Neste ponto não podemos continuar porque $[-29/10]$ *não é definido-positivo.*

Concluímos que $M = 4^2\mathrm{Id} - A^t A$ *não é definido-positivo, e portanto* $M(A) \geq 4$.

2.3 Resolução de sistemas de equações lineares: Métodos iterativos

Consideremos uma equação linear matricial $A \cdot X = B$. Pensemos no caso em que a equação tem solução única, nomeadamente, no caso em que A é invertível, sendo então a única solução $X = A^{-1} \cdot B$.

O produto $A^{-1} \cdot B$ pode estar mal condicionado (dizemos então que o sistema está mal condicionado), e se os dados A,B são introduzidos como A^*, B^* com erros de arredondamento, a solução encontrada para o sistema introduzido $A^* \cdot X = B^*$ pode ser muito diferente da solução do sistema original.

Consideremos então uma equação linear matricial dada por uma matriz invertível bem condicionada $\kappa_p(A) = \kappa_p(A^{-1}) = \|A\|_p \cdot \|A^{-1}\|_p$ pequeno. Nesta situação não deveria existir problemas devidos aos arredondamentos.

No entanto nos métodos diretos estes problemas costumam ser importantes: Uma desvantagem dos métodos diretos é que, aplicados no computador, podem propagar erros nas muitas operações executadas. Assim, ainda que o sistema esteja bem condicionado, a solução obtida no fim pode não ser uma aproximação boa devido às operações intermédias de adição executadas pelo algoritmo.

Uma ideia para superar isto é a de construir um método iterativo, um processo que permita usar um valor aproximado da solução para dar uma nova aproximação melhor.

Consideremos uma equação matricial linear $A \cdot X = B$, com A invertível, e seja $\overline{X} = A^{-1} \cdot B$ a solução (única) da equação.

Se temos um matriz X^* que usamos como aproximação da solução $\overline{X}$ (onde esperamos portanto que $\|X^* - \overline{X}\|$ seja pequeno), existe algum procedimento para construir outra solução aproximada X^{**} a partir de X^*, de maneira que o erro $\|X^{**} - \overline{X}\|$ seja ainda menor?