Métodos computacionais para sistemas lineares

Irineu Lopes Palhares Junior

FCT/UNESP,
irineu.palhares@unesp.br

Conteúdos

Informações sobre os conteúdos

Introdução

Uma variedade de problemas pode ser resolvido através da análise linear; entre eles podemos citar:

- determinação do potencial em redes elétricas;
- cálculo da tensão na estrutura metálica da construção civil;
- cálculo da razão de escoamento num sistema hidráulico com derivações;
- previsão da concentração de reagentes sujeitos à reações químicas simultâneas;
- resolver problemas de equações diferenciais parciais.

Uma Equação linear

Uma equação é linear se cada termo contém não mais do que uma variável e cada variável aparece na primeira potência. Por exemplo,
$3x + 4y - 10z = 3$ é linear, mas $xy - 3z = 3$ não é, pois o primeiro termo contém duas variáveis. Também $x^3 + y - z = 0$ não é linear, pois o primeiro termo contém uma variável elevada ao cubo.

Sistema de n equações lineares

Vamos considerar n equações lineares com n variáveis (incógnitas) e vamos nos referir a elas como um Sistema de n Equações Lineares ou um Sistema Linear de ordem n. Uma solução para esse sistema de equações consiste de valores para as n variáveis, tais que quando esses valores são substituídos nas equações, todas elas são satisfeitas simultaneamente.
Por exemplo, considere o seguinte sistema linear de ordem 3:

$$\begin{cases} x + y + z = 1 \\ x - y - z = 1 \\ 2x + 3y - 4z = 9 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 2 & 3 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 9 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Sistema de n equações lineares

De um modo geral um sistema de n equações lineares é escrito como:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 \ldots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \ldots\ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{2}$$

e é representado na forma matricial como

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad Ax = b. \tag{3}$$

Classificação de um sistema linear

A classificação de um sistema linear é feita em função do número de soluções que ele admite, da seguinte maneira:

a) **Sistema Possível ou Consistente**: É todo sistema que possui pelo menos uma solução. Um sistema linear possível é:
   - **determinado** se admite uma única solução, e,
   - **indeterminado** se admite mais de uma solução.

b) **Sistema Impossível ou Inconsistente**: É todo sistema que não admite solução.

Exemplo

Example

Classifique os seguintes sistemas lineares de acordo com o número de soluções:

a)

$$\begin{cases} x + y = 6 \\ x - y = 2 \end{cases} \tag{4}$$

b)

$$\begin{cases} x + y = 1 \\ 2x + 2y = 2 \end{cases} \tag{5}$$

c)

$$\begin{cases} x + y = 1 \\ x + y = 4 \end{cases} \tag{6}$$

Métodos numéricos

Nosso objetivo aqui será o de desenvolver métodos numéricos para resolver sistemas lineares de ordem n, que tenham solução única. Observe que tais sistemas são aqueles onde a matriz dos coeficientes é não singular, isto é, $\det \mathbf{A} \neq 0$.

Métodos numéricos para solução de sistemas de equação lineares são divididos em dois grupos:

- **Métodos Exatos**: são aqueles que forneceriam a solução exata, não fossem os erros de arredondamento, com um número finito de operações.
- **Métodos Iterativos**: são aqueles que permitem obter a solução de um sistema com uma dada precisão através de um processo infinito convergente.

Sistemas lineares equivalentes

Definition

Dois sistemas lineares são equivalentes quando admitem a mesma solução.

Com base nesta definição não fica difícil deduzir que uma maneira de obter a solução de um sistema linear através de métodos numéricos é transformá-lo em outro equivalente cuja solução seja facilmente obtida. Em geral, nos métodos exatos, transformamos o sistema original num sistema equivalente, cuja solução é obtida resolvendo-se sistemas triangulares.

Solução de sistemas triangulares

Como já dissemos, resolver sistemas triangulares é muito fácil; entretanto, apresentaremos aqui a solução de tais sistemas com o objetivo de auxiliar a elaboração de projetos que envolvam a resolução dos mesmos.

i) Um sistema linear de ordem n é triangular se tiver a forma:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 & = b_3 \\ \ldots\ldots & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \tag{7}$$

onde $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, 2, \ldots, n$. Assim a solução de um sistema linear triangular inferior é obtida por substituição direta.

Determinamos o valor de x_1 na primeira equação; substituímos esse valor na segunda equação e determinamos o valor de x_2 e assim por diante. Algebricamente podemos resolvê-lo pelas fórmulas:

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{b_1}{a_{11}}, \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j}{a_{ii}}, \;\; i = 2, 3, \ldots, n. \end{cases} \tag{8}$$

Example

Resolva o seguinte sistema triangular superior:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + 3x_3 = 11 \\ x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_3 = 4 \end{cases} \tag{9}$$

Example

Resolva o seguinte sistema triangular inferior:

$$\begin{cases} 3x_1 = 9 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \\ 2x_1 - 4x_2 + x_3 = 7 \end{cases} \tag{10}$$

Decomposição **LU**

Theorem

Sejam $A = (a_{ij})$ *uma matriz quadrada de ordem* n, *e* A_k *o menor principal, constituído das* k *primeiras linhas e* k *primeiras colunas de* A. *Assumimos que* $\det(A_k) \neq 0$ *para* $k = 1, 2, \ldots, n-1$. *Então, existe uma única matriz triangular inferior* $L = (l_{ij})$, *com* $l_{11} = l_{22} = \ldots = l_{nn} = 1$, *e uma única matriz triangular superior* $U = (u_{ij})$, *tal que* $LU = A$. *Além disso,* $\det(A) = u_{11}u_{22}\ldots u_{nn}$.

Esquema prático para a decomposição **LU**

Observe que, teoricamente, para obtermos as matrizes L e U, devemos calcular a inversa de L_{k-1} e U_{k-1}. Entretanto, na prática, podemos calcular L e U simplesmente aplicando a definição de produto e de igualdade de matrizes, isto é, impondo que a matriz A seja igual a LU.

$$LU = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & \mathcal{O} & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ & \mathcal{O} & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn} \end{pmatrix} \tag{11}$$

Fórmulas gerais

As formulas gerais para se determinar as matrizes L e U são:

$$\begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, & i \leq j \\ l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right) / u_{jj}, & i > j. \end{cases} \tag{12}$$

Aplicação da decomposição LU à solução de sistemas lineares

Vejamos agora como podemos aplicar a decomposição LU para obtermos a solução de sistemas lineares.
Seja o sistema linear $Ax = b$ de ordem n determinado, onde A satisfaz as condições da decomposição LU. Então, o sistema $Ax = b$ pode ser escrito como:

$$LUx = b. \tag{13}$$

Portanto, transformamos o sistema linear $Ax = b$ no sistema linear equivalente $LUx = b$, cuja solução é facilmente obtida. De fato, fazendo $Ux = y$, a equação anterior reduz-se a $Ly = b$. Resolvendo o sistema linear triangular inferior $Ly = b$, obtemos o vetor y. Substituindo o valor de y no sistema linear $Ux = y$, obtemos um sistema linear triangular superior cuja solução é o vetor x que procuramos.
Assim, a aplicação da decomposição LU na resolução de sistemas lineares requer a solução de dois sistemas triangulares.

Exemplo

Seja:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 4 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

a) Verificar se A satisfaz as condições da decomposição LU.
b) Decompor A em LU.
c) Através da decomposição LU, calcular o determinante de A.
d) Resolver o sistema linear $Ax = b$, onde $b = (0, -7, -5)^t$, usando a decomposição LU.

Exercícios

1. Aplicando-se o método da decomposição LU à matriz:

$$A = \begin{pmatrix} \dots & \dots & 3 & \dots \\ 4 & -1 & 10 & 8 \\ \dots & -3 & 12 & 11 \\ 0 & -2 & -5 & 10 \end{pmatrix} \tag{15}$$

obteve-se as matrizes:

$$L = \begin{pmatrix} \dots & 0 & \dots & \dots \\ 2 & \dots & \dots & \dots \\ 3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 1 & \dots \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \dots & -1 & \dots & 5 \\ \dots & 1 & \dots & -2 \\ \dots & 0 & 3 & -4 \\ 0 & \dots & 0 & 10 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Preencher os espaços pontilhados com valores adequados.

Exercícios

2. Considere o sistema linear:

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 = -12 \\ -x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 20 \\ 2x_1 - 3x_2 + 10x_3 = 3 \end{cases} \tag{17}$$

   a) Resolva-o usando decomposição LU.
   b) Calcule o determinante de A usando a decomposição.

3. Seja A, $n \times n$, decomponível em LU. Sejam A_i, $i = 1, 2, \ldots, n$ os menores principais de ordem i. Mostre que:

$$u_{ii} = \frac{\Delta_i}{\Delta_{i-1}}, i = 1, 2, \ldots, n, \tag{18}$$

onde:

$$\Delta_i = \det A_i, \qquad \Delta_n = \det A \ \text{ e } \ \Delta_0 = 1. \tag{19}$$

Exercícios

4. Considere a matriz A, $n \times n$, com todas as sub-matrizes principais não singulares. Exiba as fórmulas da decomposição LU, onde L é matriz triangular inferior e U é a matriz triangular superior com 1 na diagonal. (A decomposição de uma matriz no produto LU onde U tem 1 na diagonal é conhecida também como **Método de Crout**.)
5. Resolva o sistema linear $Ax = b$, onde:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & -1 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \ \text{e} \ b = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

usando a decomposição LU do exercício anterior.

Exercícios

6. Mostre que se A satisfaz as hipóteses da decomposição LU, então A se decompõe de maneira única no produto LDU, onde L e U são matrizes triangulares inferior e superior, respectivamente, ambas com 1 na diagonal, e D é matriz diagonal. Além disso, $\det A = d_{11} d_{22} \dots d_{nn}$.
7. Mostre que se A é uma matriz simétrica e satisfaz as hipóteses da decomposição LU, então $A = LDU$ implica $U = L^T$ (transposta de L).
8. Mostre que se A é uma matriz simétrica, positiva definida e satisfaz as hipóteses da decomposição LU, então $A = LDL^T$, onde os elementos diagonais de D são todos positivos.

Seja o sistema linear $Ax = b$, onde A tem todas as submatrizes principais não singulares, isto é, $\det(A_k) \neq 0$, $k = 1, 2, \ldots, n$.
O **Método de Eliminação de Gauss**, também chamado de **Método de Gauss Simples**, consiste em transformar o sistema linear dado num sistema triangular equivalente através de uma sequência de operações elementares sobre as linhas do sistema original, isto é, o sistema equivalente é obtido através da aplicação repetida da operação:

"*Substituir uma equação pela diferença entre essa mesma equação e uma outra equação multiplicada por uma constante diferente de zero.*"

É claro que tal operação não altera a solução do sistema linear, isto é, obtém-se com ela outro sistema linear equivalente ao original. O objetivo é organizar essa sequência de operações de tal forma que o sistema linear resultante seja triangular superior.

O k^o passo do método de elinação de Gauss é obtido por:

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - a_{k,j}^{(k)} \dfrac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}, \\ \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - b_k^{(k)} \dfrac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}, \end{cases} \tag{21}$$

onde

$$\begin{aligned} k &= 1, 2, \ldots, n-1, \\ i &= k+1, \ldots, n, \\ j &= k, k+1, \ldots, n. \end{aligned} \tag{22}$$

Exemplo

Example

Resolver o sistema linear:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 1 \\ 3 & 2 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 7 \\ 13 \end{pmatrix} \tag{23}$$

usando o método de eliminação de Gauss.

Exemplo

Example

Resolver, usando o método de eliminação de Gauss, o sistema linear:

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 + x_3 = 7 \\ 2x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 - x_2 + 5x_3 = 5. \end{cases} \tag{24}$$

A eliminação de Gauss e a Decomposição LU

O método de Eliminação de Gauss pode ser interpretado como um método para obtenção das matrizes L e U da decomposição LU. De fato, chamando de $(A|b)^{(1)}$ a matriz aumentada, o cálculo feito para obtenção de $(A|b)^{(2)}$ é equivalente a multiplicar $(A|b)^{(1)}$ por uma matriz M_1, onde:

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & \dots & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1 \end{pmatrix}, \qquad (25)$$

onde $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $i = 2, 3, \dots, n$.

Assim, $(A|b)^{(2)} = M_1\,(A|b)^{(1)}$.
De maneira semlhante: $(A|b)^{(3)} = M_2\,(A|b)^{(2)}$, onde:

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & -m_{32} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & -m_{n2} & & & 1 \end{pmatrix}, \tag{26}$$

com $m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$, $i = 3, \ldots, n$, e assim sucessivamente. Logo:

$$(A|b)^{(n)} = M_{n-1}\,(A|b)^{(n-1)} = \ldots = M_{n-1}\ldots M_1\,(A|b)^{(1)}\,. \tag{27}$$

Deste modo, temos: $A^{(n)} = MA^{(1)} = MA = U$ (onde U é matriz triangular superior da decomposição LU). Como M é um produto de matrizes não singulares, então é inversível; logo, existe $M^{-1} = M_1^{-1} M_2^{-1} \dots M_{n-1}^{-1}$ e, portanto, $A = M^{-1}U$.
É fácil verificar que:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & & & 1 \end{pmatrix} = L, \tag{28}$$

onde L é a matriz triangular inferior da decomposição LU.
Assim, o método de Eliminação de Gauss nada mais é do que o método da Decomposição LU.

Observe que devemos resolver apenas o sistema linear $Ux = b^{(n)}$, desde que o vetor final $b^{(n)}$ é obtido de b através da equação: $b = Lb^{(n)}$. Assim, se $Ax = b$, $A = LU$, $b = Lb^{(n)}$, obtemos:

$$LUx = Lb^{(n)} \Rightarrow Ux = b^{(n)}, \tag{29}$$

pois, como já dissemos, L é não singular. Portanto, o vetor solução x é obtido resolvendo-se apenas um sistema linear triangular.

O exemplo

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 + x_3 = 7 \\ 2x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 - x_2 + 5x_3 = 5 \end{cases} \tag{30}$$

apresenta um sistema de equações lineares para o qual as hipóteses do Teorema da decomposição LU não são satisfeitas. Entretanto, resolvemos o sistema linear utilizando a estratégia de troca de linhas. Para visualizar por que isso foi possível, observe que podemos construir uma matriz P, chamada matriz de permutação, a qual será formada pela permutação das linhas da matriz identidade, de forma que em cada linha o único elemento não nulo é igual a 1. Se durante o processo não permutarmos as linhas do sistema linear, então P é a matriz identidade. Mas, se durante o processo permutarmos a linha i com a linha j, então, na matriz P, a linha i será permutada com a linha j.

Matriz de permutação

Assim, no exemplo anterior, permutamos durante o processo a linha 2 com a linha 3. Assim:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 \\ 2/3 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 0 & -2 & 14/3 \\ 0 & 0 & -5/3 \end{pmatrix}, \tag{31}$$

e a matriz P, neste caso, será:

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{32}$$

Observação

Pode ser visto facilmente que, com a troca de linhas, a decomposição obtida não satisfaz a igualdade $A = LU$, mas satisfaz $PA = LU$, isto é, o produto LU reproduz a matriz A com suas linhas permutadas. Assim, foi possível resolver o sistema linear do exemplo passado, pois a troca de linhas na decomposição funciona como se estivéssemos efetuado troca de linhas no sistema linear antes de começarmos a decomposição. A estratégia de troca de linhas para resoler um sistema linear é extremament útil para os métodos baseados na decomposição LU e é conhecida como pivotamento. Descreveremos mais adiante o método de Eliminação de Gauss com pivotamento parcial.

Exercícios

1. Considere o sistema linear:

$$\begin{pmatrix} 2 & -3 & 1 \\ 4 & -6 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ -7 \\ 4 \end{pmatrix}. \quad (33)$$

   a) Resolva-o pelo método de Eliminação de Gauss.
   b) Calcule o determinante de A usando a matriz triangular obtida no item a).

2. Verificar, usando o método de Eliminação de Gauss, que o sistema linear:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 + 3x_2 + x_3 = 5 \\ 3x_1 + 5x_2 + 2x_3 = 1 \end{cases} \quad (34)$$

não tem solução.

Exercícios

1. Usando o método de Eliminação de Gauss, verificar que o sistema linear:

$$\begin{cases} x_1 + 4x_2 + \alpha x_3 = 6 \\ 2x_1 - x_2 + 2\alpha x_3 = 3 \\ \alpha x_1 + 3x_2 + x_3 = 5 \end{cases} \tag{35}$$

   a) possui uma única solução quando $\alpha = 0$,
   b) possui infinitas soluções quando $\alpha = 1$ e
   c) não tem solução quando $\alpha = -1$.

Além dos problemas já citados nesta apresentação para os métodos baseados na decomposição LU, existe outro problema mais sério que está relacionado com a propagação dos erros de arredondamento do computador. Assim, para ilustrar esta situação, consideremos um exemplo hipotético (sistema linear de ordem 2, com uma máquina que trabalha apenas com três dígitos significativos). Tal exemplo servirá para ilustrar o que acontece com um sistema linear de grande porte num computador qualquer. visto que os mesmos operam com um número fixo e finito de algarismos significativos.

Exemplo

Example

Através do método de Eliminação de Gauss, resolver o sistema linear:

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + 1.00x_2 = 1.00 \\ 1.00x_1 + 1.00x_2 = 2.00 \end{cases} \tag{36}$$

usando em todas as operações três dígitos significativos.

Solução do exemplo

Usando o método de Eliminação de Gauss, com três dígitos significativos em todas as operações, obtemos:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0.000100 & 1.00 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 & 2.00 \end{array}\right) \approx \left(\begin{array}{cc|c} 0.000100 & 1.00 & 1.00 \\ & -10000 & -10000 \end{array}\right) \tag{37}$$

cuja solução é:

$$x = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{38}$$

Entretanto, é fácil verificar que a solução deste sistema linear é

$$x = \begin{pmatrix} 1.00010 \\ 0.99990 \end{pmatrix}. \tag{39}$$

Portanto, obtemos uma solução muito diferente da solução exata do sistema linear dado.

Propagação do erro

A propagação de erros ocorre principalmente quando multiplicamos um número muito grande por outro que já contém erro de arredondamento. Por exemplo, suponha que um dado número z tenha um erro de arredondamento ϵ. Este número pode então ser escrito na forma: $\bar{z} = z + \epsilon$. Se agora multiplicamos esse número por p, então obtemos $p\bar{z} = pz + p\epsilon$, e assim o erro no resultado será $p\epsilon$. Assim, se p for um número grande, este erro poderá ser muito maior que o original. Dizemos, neste caso, que o erro em z foi amplificado.

Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial

No método de Eliminação de Gauss, vários produtos com os multiplicadores são efetuados. Análises de propagação de erros de arredondamento para o algoritmo de Gauss indicam a conveniência de serem todos os multiplicadores (as constantes $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ do k^o passo) menores que 1 em módulo; ou seja, o pivô deve ser o elemento de maior valor absoluto da coluna, da diagonal (inclusive) para baixo.
Podemos então, em cada passo, escolher na coluna correspondente o elemento de maior valor absoluto, da diagonal (inclusive) para baixo, e fazer uma permutação nas equações do sistema, de modo que esse elemento venha a ocupar a posição de pivô. A este procedimento chamamos **Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial**.

A matriz de Hilbert é famosa por produzir um exemplo de sistema linear que, se não utilizamos pivotamento, a solução obtida poderá estar completamente errada. Os elementos desta matriz são dados por:

$$h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i = 1, 2, \ldots, n; \quad j = 1, 2, \ldots, n. \tag{40}$$

Assim, a matriz de Hilbert de ordem 4 é dada por:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \end{pmatrix} \tag{41}$$

Exercício

1. Considere um sistema linear de ordem 12 que tem a matriz de Hilbert como matriz dos coeficientes e que a solução exata seja o vetor que possui todas as componentes iguais a 1. Resolva o sistema linear usando:
   a) o método de Eliminação de Gauss;
   b) o método de Eliminação de Gauss com pivotamento parcial.

No caso em que a matriz do sistema linear é simétrica podemos simplificar os cálculos da decomposição LU significativamente, levando em conta a simetria. Esta é a estratégia do **método de Cholesky**, o qual se baseia no seguinte corolário.

Corollary

Se A é simétrica, positiva definida, então A pode ser decomposta unicamente no produto GG^T, onde G é matriz triangular inferior com elementos diagonais positivos.

Esquema prático para a decomposição GG^T

Do mesmo modeo que na da decomposição LU para obtermos a matriz G, aplicamos a definição de produto e igualdade de matriz. Seja então:

$$GG^T = \begin{pmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{21} & g_{22} & & & \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & & \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & g_{n3} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & \cdots & g_{n1} \\ & g_{22} & g_{32} & \cdots & g_{n2} \\ & & g_{33} & \cdots & g_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & g_{nn} \end{pmatrix} \tag{42}$$

Algoritmo da decomposição de Cholesky

A fórmula geral da decomposição de Cholesky é dada por

$$\begin{cases} g_{11} = \sqrt{a_{11}}, \\ g_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n. \end{cases} \tag{43}$$

e

$$\begin{cases} g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}, & i = 2, 3, \ldots, n, \\ g_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk} \right) / g_{jj}, & 2 \leq j < i. \end{cases} \tag{44}$$

Observações

i) Se A satisfaz as condições do método de Cholesky, a aplicação do método requer menos cálculos que a decomposição LU.

ii) O fato de A ser positiva definida garante que na decomposição teremos somente raízes quadradas de números positivos.

iii) O método de Cholesky pode também ser aplicado a matrizes simétricas que não sejam positivas definidas desde que trabalhemos com aritmética complexa. Entretanto, só usaremos o método de Cholesky se pudermos trabalhar com aritmética real.

iv) Vimos no caso da decomposição LU, que $\det(A) = u_{11}u_{22}\ldots u_{nn}$, uma vez que os elementos diagonais de L eram unitários. No caso do Método de Cholesky temos que: $A = GG^T$ e portanto:

$$\det(A) = (\det G)^2 = (g_{11}g_{22}\ldots g_{nn})^2 \tag{45}$$

Aplicação à solução de sistemas lineares

Vejamos agora como podemos aplicar a decomposição GG^T para obtermos a solução de sistemas lineares.
Seja o sistema $Ax = b$ de ordem n determinado, onde A satisfaz as condições do processo de Cholesky. Uma vez calculado a matriz G a solução $Ax = b$ fica reduzida, como no método da Decomposição LU, à solução do par de sistemas triangulares:

$$\begin{cases} Gy = b \\ G^T x = y. \end{cases} \tag{46}$$

Exemplo

Example

Seja:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & -4 \\ 2 & 10 & 4 \\ -4 & 4 & 9 \end{pmatrix} \tag{47}$$

a) Verificar se A satisfaz as condições do método de Cholesky.

b) Decompor A em GG^T.

c) Calcular o determinante de A, usando a decomposição obtida.

d) Resolver o sistema $Ax = b$, onde $b = (0, 6, 5)^T$.

Método de Jacobi-Richardson

Método de Gauss-Seidel

Decomposição do método SOR

O Método de Sobre-Relaxação Sucessiva ou *Successive Over-Relaxation (SOR)* pode ser visto como um melhoramento do método de Gauss-Seidel (ou simplesmente uma generalização do mesmo) para a solução de sistemas de equações lineares. A partir da decomposição da matriz A^* como

$$A^* = L^* + I + R^*, \tag{48}$$

podemos reenscrever a igualdade acima como

$$A^* = L^* + \frac{1}{\omega} I + \left(1 - \frac{1}{\omega}\right) I + R^*. \tag{49}$$

O parâmetro ω tem por objetivo acelerar a convergência para a solução do sistema.

Substituindo a decomposição (49) ao sistema linear $A^* x = b$, resulta em

$$\left(L^* + \frac{1}{\omega} I + \left(1 - \frac{1}{\omega}\right) I + R^*\right) x = b^*, \tag{50}$$

que implica em

$$\left(L^* + \frac{1}{\omega} I\right) x = -\left(\left(1 - \frac{1}{\omega}\right) I + R^*\right) x + b^*. \tag{51}$$

Aplicando os índices das iterações, resulta em

$$\left(L^* + \frac{1}{\omega} I\right) x^{(k+1)} = -\left(\left(1 - \frac{1}{\omega}\right) I + R^*\right) x^{(k)} + b^* \tag{52}$$

Algoritmo do método SOR

Mediante algumas munipulações algébricas na equação (52), obtemos

$$x^{(k+1)} = (1-\omega)\,x^{(k)} + \omega\left(-L^{*}x^{(k+1)} - R^{*}x^{(k)} + b^{*}\right), \qquad (53)$$

ou ainda, em termos das componentes do vetor x:

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)\,x_i^{(k)} + \omega\left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}^{*}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{*}x_j + b_{*i}\right), \qquad (54)$$

para $i = 1, 2, \ldots, n$.

Determinando o parâmetro ω

Como determinar o valor ótimo do parâmetro ω?

Caso	Resultado
$0 < \omega < 1$	Método sub-relaxado
$\omega = 1$	Método de Gauss-Seidel
$1 < \omega < 2$	Método sobre-relaxado
$\omega < 0$ ou $\omega \geq 2$	O método SOR diverge.

Tabela 1: Fator de relaxação ω.

Observações sobre ω

- Usamos $0 < \omega < 1$ quando:
    - O sistema não converge para Gauss-Seidel
    - Queremos obter uma taxa de convergência maior que o método de Jacobi.
- Usamos $1 < \omega < 2$ quando:
    - Podemos obter uma taxa de convergência mais rápida do que Gauss-Seidel.

Teoremas que auxiliam o cálculo de ω

Theorem

Se $a_{ii} \neq 0$ para todos os valores de i, então $\rho(B_{SOR}) \geq |\omega - 1|$ (B_{SOR} é a matriz de iteração e ρ representa seus autovalores). Isso implica que o Método SOR somente converge para $0 < \omega < 2$.

Theorem

Se A é uma matriz positiva definida e $0 < \omega < 2$, então o método SOR converge para qualquer aproximação inicial de x_i.

Theorem

Se A é uma matriz positiva definida e tridiagonal, então $\rho(B_{Gauss}) = \rho(B_{Jacobi})^2 < 1$ e a opção ótima para ω é dada por $\omega = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho(B_{Jacobi})^2}}$

Exemplos

Example

Resolva o sistema linear dado usando o método SOR com $\omega = 1.2$, $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\epsilon < 10^{-2}$.

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 5 \end{pmatrix}. \tag{55}$$

Example

Resolva o sistema linear abaixo usando o método SOR.

$$\begin{aligned} 9x_1 + 4x_2 &= 20 \\ 4x_1 + 9x_2 - x_3 &= 12. \\ -x_2 + 9x_3 &= 51 \end{aligned} \tag{56}$$

Nesta seção veremos o método dos gradientes e, na sequência, o método dos gradientes conjugados. A ideia central destes métodos é substituir o problema de se determinar a solução de um sistema linear pelo problema de se minimizar uma função. Para isto, consideremos o sistema linear da forma

$$Ax = b \Longleftrightarrow Ax - b = 0, \tag{57}$$

onde A é uma matriz simétrica e positiva definida. Note que, se $\bar{x}$ for a solução exata, então $A\bar{x} - b = 0$. Entretanto, se v é uma aproximação da solução $\bar{x}$, então a diferença $Av - b$ irá gerar um resíduo, ou seja,

$$Av - b = r. \tag{58}$$

Multiplicando ambos os membros da Eq. (58) por v^T, resulta em

$$v^T Av - v^T b = v^T r, \tag{59}$$

ou na forma de produto interno (é o produto escalar usual)

$$< Av, v > - < b, v >=< r, v > . \tag{60}$$

Abrindo os termos $< Av, v >$ e $< b, v >$

Observe que $< Av, v >$ e $< b, v >$ são números, dados por

$$\begin{cases} < Av, v >= \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} v_j v_i \\ < b, v >= \displaystyle\sum_{i=1}^{n} b_i v_i \end{cases} \tag{61}$$

Além disso, observe que

$$\begin{cases} \dfrac{\partial < Av, v >}{\partial v_i} = 2 \displaystyle\sum_{j=1}^{n} a_{ij} v_j \\ \dfrac{\partial < b, v >}{\partial v_i} = b_i. \end{cases} \tag{62}$$

Construção da função F

Assim, definido a função F como

$$F(v) = \frac{1}{2} < Av, v > - < b, v >, \tag{63}$$

resulta que

$$\nabla F(v) = Av - b = r. \tag{64}$$

Além disso, se $r = 0$, então teremos que v é ponto de mínimo da função F, uma vez que A é positiva definida.
Portanto, queremos fazer com que $r \to 0$ mediante a busca pelo ponto de mínimo da função F.

Ideia inicial do algoritmo

A partir de um valor inicial v da solução $\bar{x}$, queremos determinar um valor v' de tal forma que $F(v') < F(v)$, que resultará em $r' < r$.
Seja v a solução inicial e $r = Av - b$ o resíduo. Escolhemos uma direção p e variamos v nessa direção, com o objetivo de diminuir $F(v)$, para ir atingindo seu ponto de minimo que é a solução do sistema, ou seja, tentamos anular o resíduo na direção p.
Assim, variando v na direção p, isto é, tomando:

$$v' = v + tp, \tag{65}$$

procuramos determinar o parâmetro t de modo que a função F diminua. Logo, devemos procurar o mínimo de F na direção p.

Determinação do parâmetro t

Temos então que:

$$
\begin{aligned}
&F(v') = \frac{1}{2} < Av', v' > - < b, v' > \\
&= \frac{1}{2} \left(< Av, v > +2t < Av, p > +t^2 < Ap, p >\right) - 2 < b, v > -2t < b, p > \\
&= F(v) + \frac{t^2}{2} < Ap, p > +t < Av - b, p > \\
&= F(v) + \frac{t^2}{2} < Ap, p > +t < r, p >,
\end{aligned} \tag{66}
$$

que é função do parâmetro t.

Determinação do parâmetro t

Finalmente, o parâmetro t é selecionado de tal forma que F é mínimo dentro do conjunto acima examinado. A condição necessária para isso ocorro é:

$$\frac{\partial F(v')}{\partial t} = t < Ap, p > + < r, p >= 0, \tag{67}$$

que implica em

$$t = -\frac{< r, p >}{< Ap, p >}, \tag{68}$$

que é um ponto estacionário da F.

Teorema do método dos métodos de relaxação

Theorem

Para o ponto de mínimo v' com $t = t_{min}$ o novo resíduo $r' = Av' - b$ é ortogonal à direção p da relaxação.