Métodos computacionais para decomposição matricial

Irineu Lopes Palhares Junior

FCT/UNESP,
irineu.palhares@unesp.br

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:

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

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)

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

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.

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:

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

Exemplos

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:

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

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.

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.

Algoritmo da eliminação gaussiana

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

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - a_{k,j}^{(k)} \dfrac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}, \\ \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - b_k^{(k)} \dfrac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}, \end{cases} \tag{15}$$

onde

$$\begin{aligned} k &= 1, 2, \ldots, n-1, \\ i &= k+1, \ldots, n, \\ j &= k, k+1, \ldots, n. \end{aligned} \tag{16}$$

Exemplo

Example

Resolver o sistema linear:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 1 \\ 3 & 2 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 7 \\ 13 \end{pmatrix} \tag{17}$$

usando o método de eliminação de Gauss.

Exemplo

Example

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

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 + x_3 = 7 \\ 2x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 - x_2 + 5x_3 = 5. \end{cases} \tag{18}$$

Decomposição de Cholesky

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:

$$GG^T = \begin{pmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{21} & g_{22} & & & \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & & \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & g_{n3} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & \cdots & g_{n1} \\ & g_{22} & g_{32} & \cdots & g_{n2} \\ & & g_{33} & \cdots & g_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & g_{nn} \end{pmatrix} \tag{19}$$

A fórmula geral da decomposição de Cholesky é dada por

$$\begin{cases} g_{11} = \sqrt{a_{11}}, \\ g_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n. \end{cases} \tag{20}$$

e

$$\begin{cases} g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}, & i = 2, 3, \ldots, n, \\ g_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk} \right) / g_{jj}, & 2 \leq j < i. \end{cases} \tag{21}$$

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:

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

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:

$$\begin{cases} Gy = b \\ G^T x = y. \end{cases} \tag{23}$$

Exemplo

Example

Seja:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & -4 \\ 2 & 10 & 4 \\ -4 & 4 & 9 \end{pmatrix} \tag{24}$$

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 $b = (0, 6, 5)^T$.

Decomposição **QR**

Decomposição **SVD**