Cálculo Numérico - Estudos

Jorge Augusto Salgado Salhani

Março, 2024

1 Sistemas Lineares - Métodos Diretos

Seja uma transformação linear L, entendemos u como um vetor de "causas" e f como um vetor de "efeitos" de modo que

$$Lu = f$$

Conhecendo a transformação L e a causa u, sabemos o efeito. Mas também podemos, conhecendo o efeito f, determinar a causa "u"

Considerando A matriz $n \times n$, A é não-singular se

- A possui inversa A^{-1} tal que $AA^{-1} = A^{-1}A = I$
- $det(A) \neq 0$
- $rank(A) = n$ (número máximo de colunas ou linhas LI)
- $Ker(A) = 0$ (única solução de $Ax = 0$ é $x = 0$)

e caso A não-singular, vale que x é solução única de modo que $x = A^{-1}b$

1.1 Sistemas LU

Seja A tal que possa ser escrito $A = LU$, onde L matriz triangular inferior e U matriz triangular superior

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} = LU$$

Neste caso, teremos que

$$Ax = b \implies LUx = b$$
$$Ux = y$$
$$Ly = b$$

Que facilita, já que a resolução de sistemas triangulares pode ser feita por substituição direta

1.2 Substituição progressiva

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} l_{11}x_1 = b_1 &\implies x_1 = b_1/l_{11} \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 = b_2 &\implies x_2 = (b_2 - l_{21}x_1)/l_{22} \\ l_{31}x_1 + l_{32}x_2 + l_{33}x_3 = b_3 &\implies x_3 = (b_3 - l_{31}x_1 - l_{32}x_2)/l_{33} \end{aligned}$$

E para o termo geral, temos

$$x_i = \frac{1}{l_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j\right]$$

1.3 Substituição regressiva

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{21} & u_{31} \\ 0 & u_{22} & u_{32} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} u_{33}x_3 = b_3 &\implies x_3 = b_3/u_{33} \\ u_{22}x_2 + u_{32}x_3 = b_2 &\implies x_2 = (b_2 - u_{32}x_3)/u_{22} \\ u_{11}x_1 + u_{21}x_2 + u_{31}x_3 = b_1 &\implies x_1 = (b_1 - u_{31}x_3 - u_{21}x_2)/u_{11} \end{aligned}$$

Com termo geral

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=i}^{n} u_{ij}x_j\right]$$

1.4 Decomposição LU

Podemos utilizar o que determinamos anteriormente para encontrar soluções da equação $Ax = b$. Mas para isso, precisamos de um método que decomponha A de modo que $A = LU$.

Assim, temos que

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} = LU$$

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ l_{21}u_{11} & l_{21}u_{12} + u_{22} & l_{21}u_{13} + u_{23} \\ l_{31}u_{11} & l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} & l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} \end{bmatrix}$$

Linha 1

$$u_{11} = a_{11}$$

$$u_{12} = a_{12}$$

$$u_{13} = a_{13}$$

Coluna 1

$$l_{21} = a_{21}/u_{11}$$

$$l_{31} = a_{31}/u_{11}$$

Linha 2

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$$

$$u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$$

Coluna 2

$$l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12})/u_{22}$$

Linha 3

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$$

Com termo geral

$$u_{1j} = a_{1j}$$

$$l_{i1} = a_{i1}/u_{11}$$

$$u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j}$$

$$l_{i2} = (a_{i2} - l_{i1}u_{12})/u_{22}$$

Logo

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right]$$

1.5 Decomposição Cholesky

Uma outra forma de decomposição de $A = BC$ pode ser de modo que $C = B$. De outra forma, $A = B^2$. Considerando que H seja simétrica positiva definida (SPD), se

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} & 0 \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix}$$

Então

$$A = HH^T = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} & 0 \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{21} & h_{31} \\ 0 & h_{22} & h_{32} \\ 0 & 0 & h_{33} \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11}^2 & h_{11}h_{21} & h_{11}h_{31} \\ h_{21}h_{11} & h_{21}^2 + h_{22}^2 & h_{21}h_{31} + h_{22}h_{32} \\ h_{31}h_{11} & h_{31}h_{21} + h_{32}h_{22} & h_{31}^2 + h_{32}^2 + h_{33}^2 \end{bmatrix}$$

Assim, em ordem de colunas, temos

$$h_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$h_{21} = a_{21}/h_{11}$$

$$h_{31} = a_{31}/h_{11}$$

$$h_{22} = \sqrt{a_{22} - h_{21}^2}$$

$$h_{32} = (a_{32} - h_{31}h_{21})/h_{22}$$

$$h_{33} = \sqrt{a_{33} - h_{31}^2 - h_{32}^2}$$

Com termo geral

$$h_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} h_{ik}^2}$$

$$h_{ij} = \frac{1}{h_{jj}} \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} h_{ik} h_{jk} \right]$$

1.6 Eliminação de Gauss

Uma das formas de resolver $Ax = b$ pode ser pensada não decompondo A em novas matrizes, mas transformando-a em triangular via escalonamento.

Seja a matriz aumentada $[\ A \mid b\ ]$

$$[\ A \mid b\ ] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_{11} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_{12} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_{13} \end{bmatrix}$$

Então, conseguimos transformá-la em triangular superior anulando os elementos coluna a coluna executando transformações lineares ao longo de cada linha

$$a_{21} - a_{21}a_{11}/a_{11} \to a_{21}$$
$$a_{31} - a_{31}a_{11}/a_{11} \to a_{31}$$

De forma geral,

$$L_i + m_{ij}L_j \to L_i$$
$$m_{ij} = a_{ij}/a_{jj}$$

Como teremos problemas caso $a_{jj} = 0$, podemos proceder com o pivoteamento da matriz. Sendo matrizes invariantes à operações de troca entre linhas e também à operações lineares quando aplicadas sobre linhas ou colunas, podemos trocar linhas de lugar de modo que $a_{jj} \neq 0$.

Para também evitar casos de arredondamento, onde $a_{jj} \approx 0$, escolhemos a linha do pivot p tal que

$$|a_{pk}| = \max |a_{ik}|, i = k, \ldots, n$$

Sendo a permutação de linhas ou colunas uma operação linear, então

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 5/2 \end{bmatrix} \quad e \quad P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

de modo que

$$PA = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 5/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 5/2 \\ 0 & 1 & 2 \\ -2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

E, caso multiplicado à direita

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 5/2 \end{bmatrix} \quad e \quad P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

de modo que

$$AP = \begin{bmatrix} -2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 5/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & -2 \\ 2 & 1 & 0 \\ 5/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Logo, temos que PA opera permutações de linhas, e AP opera permutações de colunas.

Podemos aplicar o pivoteamento para a decomposição LU. Como para a eliminação de Gauss para o sistema $Ax = b$ operamos uma sequência de trocas P_i também sobre b tal que $PAx = Pb$, até o escalonamento final (com uma matriz triangular superior U) temos

$$\begin{aligned} [(P_n \dots P_2 P_1)A]x &= (P_n \dots P_2 P_1)b \\ Ux &= Pb \end{aligned}$$

Lembrando que a decomposição LU é tal que o sistema $Ax = b$ fique $LUx = b$ podemos então decompor $PA = LU$.

$$\begin{aligned} U &= (P_n \dots P_2 P_1)A & \implies \\ (P_n \dots P_2 P_1)^{-1}U &= A & \implies \\ P(P_n \dots P_2 P_1)^{-1}U &= PA & \implies \\ L &= P(P_n \dots P_2 P_1)^{-1} \end{aligned}$$

Dessa forma, sendo $PAx = Pb \implies LUx = Pb$, temos

$$\begin{aligned} Ly &= Pb \\ Ux &= y \end{aligned}$$

que podemos utilizar para determinar o valor de x.