

Métodos Computacionais em Física I (FIW234)

Turmas IFA e IFB

Sistemas Lineares

Edivaldo M. Santos e João R. T. de Mello Neto

Aula 11

Introdução

- Muitos problemas físicos (e infelizmente não todos) podem ser escritos na forma de um sistema de equações lineares com a seguinte forma:

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N &= b_1 \\a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N &= b_1 \\&\dots \quad \dots \\a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + \cdots + a_{MN}x_N &= b_1\end{aligned}$$

onde um total de M equações lineares devem ser satisfeitas por N incógnitas x_i ($i = 1, \dots, N$) as quais se deseja determinar, dados NM a_{ij} e M b_i 's.

Introdução

- Muitos problemas físicos (e infelizmente não todos) podem ser escritos na forma de um sistema de equações lineares com a seguinte forma:

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N &= b_1 \\a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N &= b_1 \\&\dots \quad \dots \\a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + \cdots + a_{MN}x_N &= b_1\end{aligned}$$

onde um total de M equações lineares devem ser satisfeitas por N incógnitas x_i ($i = 1, \dots, N$) as quais se deseja determinar, dados NM a_{ij} e M b_i 's.

- Você certamente já resolveu algum sistema linear de equações antes. E provavelmente foi um sistema com poucas equações: 2 ou 3 equações acopladas no máximo.
- Quando o número de equações e incógnitas é muito grande, precisamos lançar mão de métodos numéricos sistemáticos para encontrar a solução.

Introdução

- Muitos problemas físicos (e infelizmente não todos) podem ser escritos na forma de um sistema de equações lineares com a seguinte forma:

$$\begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N & = & b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N & = & b_1 \\ & \dots & \dots \\ a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + \cdots + a_{MN}x_N & = & b_1 \end{array}$$

onde um total de M equações lineares devem ser satisfeitas por N incógnitas x_i ($i = 1, \dots, N$) as quais se deseja determinar, dados NM a_{ij} e M b_i 's.

- Você certamente já resolveu algum sistema linear de equações antes. E provavelmente foi um sistema com poucas equações: 2 ou 3 equações acopladas no máximo.
- Quando o número de equações e incógnitas é muito grande, precisamos lançar mão de métodos numéricos sistemáticos para encontrar a solução.
- Num sistema em que o número de equações M é igual ao número de incógnitas ($M = N$), em grande parte das vezes, o sistema de equações acima terá solução única.
- Em alguns casos, se uma ou mais das equações é uma combinação das outras, ou se todas as colunas do lado direito do sistema contêm certas variáveis sempre na mesma combinação linear, o sistema de equações é dito *degenerado* ou *singular* e possui um número infinito de soluções. No primeiro caso, o sistema é dito ter uma *degenerescência de linha* e no segundo uma *degenerescência de coluna*.

- Analiticamente, as condições de singularidade de um sistema estão perfeitamente bem definidas e mesmo sistemas para os quais seja possível formar uma combinação linear de um certo subconjunto de linhas que difiram de outra linha por uma quantidade ϵ pequena são considerados não-singulares.
- Numericamente, no entanto, a limitação na representação de números, implica em erros de arredondamento e mesmo sistemas analiticamente não-degenerados, podem ser classificados como singulares pela máquina.
- Em especial, para sistemas grandes, os erros de aproximação se acumulam e tais problemas tornam-se ainda mais comuns.

Forma Matricial

- A eficiência na solução de sistemas lineares numericamente reside em grande parte no fato de que o sistema de equações lineares é equivalente a uma equação matricial

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}, \text{ ou seja, } \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}}_{\mathbf{b}} \quad (1)$$

de modo que a solução depende de métodos de inversão e multiplicação matriciais.

- Você já deve saber do seu curso de Álgebra Linear que resolver o sistema em questão é equivalente a encontrar a matriz inversa $\mathbf{A}^{-1}$, cuja propriedade é: $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{1}$, onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade, já que

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \implies \underbrace{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}}_{\mathbf{1}} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \implies \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \quad (2)$$

Forma Matricial

- A eficiência na solução de sistemas lineares numericamente reside em grande parte no fato de que o sistema de equações lineares é equivalente a uma equação matricial

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}, \text{ ou seja, } \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}}_{\mathbf{b}} \quad (1)$$

de modo que a solução depende de métodos de inversão e multiplicação matriciais.

- Você já deve saber do seu curso de Álgebra Linear que resolver o sistema em questão é equivalente a encontrar a matriz inversa $\mathbf{A}^{-1}$, cuja propriedade é: $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{1}$, onde $\mathbf{1}$ é a matriz identidade, já que

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \implies \underbrace{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}}_{\mathbf{1}} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \implies \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \quad (2)$$

- O método a seguir implementa um algoritmo de inversão numérica de matrizes.

Um pouco de Álgebra Linear

- Antes de apresentar o método de Eliminação de Gauss-Jordan, um pouco de Álgebra Linear será necessário para compreender o método.
- Podemos associar à equação matricial 1 a chamada **matriz ampliada do sistema** e definida como

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ & \cdots & & \cdots & \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} & b_N \end{array} \right), \quad (3)$$

onde simplesmente agregou-se uma coluna adicional contendo o vetor **b**.

Um pouco de Álgebra Linear

- Antes de apresentar o método de Eliminação de Gauss-Jordan, um pouco de Álgebra Linear será necessário para compreender o método.
- Podemos associar à equação matricial 1 a chamada **matriz ampliada do sistema** e definida como

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ & \cdots & & \cdots & \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} & b_N \end{array} \right), \quad (3)$$

onde simplesmente agregou-se uma coluna adicional contendo o vetor **b**.

- Define-se também as chamadas **operações elementares** sobre as linhas:
 - 1 permutação da i-ésima e j-ésima linhas: $L_i \rightarrow L_j$
 - 2 multiplicação da i-ésima linha por um escalar α não-nulo: $(L_i \rightarrow \alpha L_i)$
 - 3 Substituição da i-ésima linha por i-ésima linha mais α vezes a j-ésima linha: $(L_i \rightarrow L_i + \alpha L_j)$.
- Diz-se que uma matriz **B** é **linha equivalente** a **A** se **B** foi obtida a partir de **A** por um número finito de operações elementares sobre linhas.

Um pouco de Álgebra Linear

- Antes de apresentar o método de Eliminação de Gauss-Jordan, um pouco de Álgebra Linear será necessário para compreender o método.
- Podemos associar à equação matricial 1 a chamada **matriz ampliada do sistema** e definida como

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ & \cdots & & \cdots & \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} & b_N \end{array} \right), \quad (3)$$

onde simplesmente agregou-se uma coluna adicional contendo o vetor **b**.

- Define-se também as chamadas **operações elementares** sobre as linhas:
 - 1 permutação da i-ésima e j-ésima linhas: $L_i \rightarrow L_j$
 - 2 multiplicação da i-ésima linha por um escalar α não-nulo: $(L_i \rightarrow \alpha L_i)$
 - 3 Substituição da i-ésima linha por i-ésima linha mais α vezes a j-ésima linha: $(L_i \rightarrow L_i + \alpha L_j)$.
- Diz-se que uma matriz **B** é **linha equivalente** a **A** se **B** foi obtida a partir de **A** por um número finito de operações elementares sobre linhas.
- De posse das definições acima, o seguinte teorema (cuja demonstração pode ser encontrado em muitos livros textos de Álgebra Linear) é válido:
Teorema: Dois sistemas que possuem matrizes ampliadas equivalentes são equivalente, ou seja, possuem a mesma solução.

Eliminação de Gauss-Jordan

- No método de Eliminação de Gauss-Jordan, uma sequência de operações elementares é executada sobre a matriz ampliada de um sistema até que a sub-matriz **A** seja transformada na identidade **1**. Quando isso ocorre, a solução do sistema equivalente é direta, pois:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} & b_N \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{operações elementares}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & b'_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_N \end{pmatrix}$$

De modo que para o sistema equivalente

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \cdots \\ b'_N \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \cdots \\ b'_N \end{pmatrix}$$

Eliminação de Gauss-Jordan

- No método de Eliminação de Gauss-Jordan, uma sequência de operações elementares é executada sobre a matriz ampliada de um sistema até que a sub-matriz **A** seja transformada na identidade **1**. Quando isso ocorre, a solução do sistema equivalente é direta, pois:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} & b_N \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{operações elementares}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & b'_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_N \end{pmatrix}$$

De modo que para o sistema equivalente

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \cdots \\ b'_N \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \cdots \\ b'_N \end{pmatrix}$$

- Por outro lado, as mesmas operações elementares aplicadas sobre a identidade devem produzir a matriz inversa **A**⁻¹ de **A**.
- No método de Eliminação de Gauss-Jordan, obtém-se simultaneamente o vetor solução **x** e a inversa **A**⁻¹.

Eliminação de Gauss-Jordan

- O primeiro passo é aplicar a operação elementar de multiplicação da primeira linha pelo escalar $1/a_{11}$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & b_N \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1N}}{a_{11}} & \frac{b_1}{a_{11}} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & \frac{b_2}{a_{11}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & \frac{b_N}{a_{11}} \end{pmatrix}$$

Eliminação de Gauss-Jordan

- O primeiro passo é aplicar a operação elementar de multiplicação da primeira linha pelo escalar $1/a_{11}$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & b_N \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1N}}{a_{11}} & \frac{b_1}{a_{11}} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & b_N \end{pmatrix}$$

- Em seguida, a operação $L_i \rightarrow L_i + \alpha L_1$ é realizada para todas as linhas restantes ($i = 2, \dots, N$) escolhendo $\alpha = -a_{i1}$, de modo a zerar todos os elementos a_{i1} . Após esse passo, a primeira coluna é igual à correspondente coluna da identidade:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1N}}{a_{11}} & \frac{b_1}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & \cdots & a_{2N} - \frac{a_{1N}a_{21}}{a_{11}} & b_2 - \frac{b_1a_{21}}{a_{11}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{N2} - \frac{a_{12}a_{N1}}{a_{11}} & \cdots & a_{NN} - \frac{a_{1N}a_{N1}}{a_{11}} & b_N - \frac{b_1a_{N1}}{a_{11}} \end{pmatrix} \quad (4)$$

Eliminação de Gauss-Jordan

- O primeiro passo é aplicar a operação elementar de multiplicação da primeira linha pelo escalar $1/a_{11}$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & b_N \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1N}}{a_{11}} & \frac{b_1}{a_{11}} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & \frac{b_2}{a_{11}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & \frac{b_N}{a_{11}} \end{pmatrix}$$

- Em seguida, a operação $L_i \rightarrow L_i + \alpha L_1$ é realizada para todas as linhas restantes ($i = 2, \dots, N$) escolhendo $\alpha = -a_{i1}$, de modo a zerar todos os elementos a_{i1} . Após esse passo, a primeira coluna é igual à correspondente coluna da identidade:

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1N}}{a_{11}} & \frac{b_1}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & \cdots & a_{2N} - \frac{a_{1N}a_{21}}{a_{11}} & b_2 - \frac{b_1a_{21}}{a_{11}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{N2} - \frac{a_{12}a_{N1}}{a_{11}} & \cdots & a_{NN} - \frac{a_{1N}a_{N1}}{a_{11}} & b_N - \frac{b_1a_{N1}}{a_{11}} \end{pmatrix} \quad (4)$$

- As operações acima são então repetidas normalizando-se agora o elemento 22 da diagonal a 1 e realizando-se a operação $L_i \rightarrow L_i + \alpha L_2$ ($i \neq 2$) para as demais linhas. Ao final dessa etapa, a segunda coluna da matriz também será igual à da matriz identidade.
- Repete-se o procedimento, até que toda a sub-matriz $N \times N$ à esquerda esteja na forma da identidade.

Eliminação de Gauss-Jordan

- Na prática, o procedimento é um pouco mais elaborado, pois a escolha dos chamados **pivots**, isto é, os elementos que serão normalizados a cada passo não necessariamente segue a ordem de elementos da diagonal.
- Pode-se decidir permutar duas linhas (ou duas colunas) de modo que o número a ser tomado como pivot seja sempre o maior possível. Isso se deve ao fato de que pivots grandes diminuem a influência do acúmulo de erros de aproximação durante todo o processo de eliminação.
- De fato, a prática diz que jamais deve-se aplicar o método de Eliminação de Gauss-Jordan sem pivoteamento, pois a precisão do método se deteriora rapidamente à medida que as operações são realizadas, e leva a resultados completamente errados, em especial para sistemas grandes.
- Perceba também que uma vez aplicada o método para um dado vetor **b**, se você precisar resolver o sistema para um novo **b**, não é necessário repetir o método, pois a matriz inversa $\mathbf{A}^{-1}$ já está disponível e tudo que é preciso é multiplicá-la por **b** para obter a nova solução.

Decomposição LU

- Suponha que seja possível decompor a matriz $\mathbf{A}$ no seguinte produto

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}, \quad (5)$$

onde $\mathbf{L}$ e $\mathbf{U}$ são matrizes triangulares inferior (Lower) e superior (Upper):

$$L_{ij} = 0 \text{ para } j > i \quad (6)$$

$$U_{ij} = 0 \text{ para } i > j \quad (7)$$

ou seja, todos os elementos acima da diagonal de $\mathbf{L}$ são nulos e todos os elementos abaixo da diagonal de $\mathbf{U}$ também.

- No caso particular $N = 4$ teríamos

$$L = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & 0 \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{pmatrix} \text{ e } U = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ 0 & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ 0 & 0 & \beta_{33} & \beta_{34} \\ 0 & 0 & 0 & \beta_{44} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Decomposição LU

- A solução de um sistema linear em que **A** possui uma tal decomposição é direta pois

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{L(Ux)} = \mathbf{b}, \quad (9)$$

de modo que podemos primeiro resolver o sistema para um vetor de incógnitas **y**

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \quad (10)$$

e depois para o vetor de final de incógnitas **x**

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}, \quad (11)$$

Decomposição LU

- A solução de um sistema linear em que **A** possui uma tal decomposição é direta pois

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{L(Ux)} = \mathbf{b}, \quad (9)$$

de modo que podemos primeiro resolver o sistema para um vetor de incógnitas **y**

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \quad (10)$$

e depois para o vetor de final de incógnitas **x**

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}, \quad (11)$$

- A vantagem de tal decomposição é ambos os sistemas acima são bastante diretos de se resolver usando-se **substituição progressiva** para **y**:

$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}}, \quad y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j \right] \quad (i = 2, \dots, N) \quad (12)$$

e em seguida **substituição regressiva** para **x**

$$x_N = \frac{y_N}{\beta_{NN}}, \quad x_i = \frac{1}{\beta_{ii}} \left[y_i - \sum_{j=i+1}^N \beta_{ij} x_j \right] \quad (i = N-1, \dots, 1) \quad (13)$$

Decomposição LU

- Você deve obviamente estar se perguntando como é possível decompor **A** no produto **LU**?
- Isso pode ser feito por meio do **algoritmo de Crout**.

Decomposição LU

- Você deve obviamente estar se perguntando como é possível decompor **A** no produto **LU**?
- Isso pode ser feito por meio do **algoritmo de Crout**.
- A decomposição LU é equivalente a resolver um sistema de N^2 equações lineares, uma para cada elemento de **a**. O elemento a_{ij} dessa matriz da origem à seguinte equação:

$$\alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots = a_{ij}, \quad (14)$$

e o número de termos não nulos da soma à esquerda depende dos valores de i e j . Há 3 casos:

$$i < j: \quad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{ij} = a_{ij}$$

$$i = j: \quad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{jj} = a_{ij}$$

$$i > j: \quad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ij}\beta_{jj} = a_{ij}$$

Decomposição LU

- Você deve obviamente estar se perguntando como é possível decompor **A** no produto **LU**?
- Isso pode ser feito por meio do **algoritmo de Crout**.
- A decomposição LU é equivalente a resolver um sistema de N^2 equações lineares, uma para cada elemento de **a**. O elemento a_{ij} dessa matriz da origem à seguinte equação:

$$\alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots = a_{ij}, \quad (14)$$

e o número de termos não nulos da soma à esquerda depende dos valores de i e j . Há 3 casos:

$$i < j: \quad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{ij} = a_{ij}$$

$$i = j: \quad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{ij} = a_{ij}$$

$$i > j: \quad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ij}\beta_{jj} = a_{ij}$$

- Perceba no entanto que o número de incógnitas no sistema são os $\frac{N^2-N}{2} + N = \frac{N^2+N}{2}$ α 's e os $\frac{N^2+N}{2}$ β 's, num total de $N^2 + N > N^2$ incógnitas.
- O sistema a ser resolvido possui um número infinito de soluções. Basta especificar N valores das incógnitas e o restante é uma função dessas.
- Se escolhermos os N $\alpha_{ii} = 1$, a solução do restante das incógnitas é dada pelo algoritmo de Crout. O aluno interessado pode buscar na literatura a descrição do algoritmo. Nos limitaremos aqui a descrever apenas o resultado de uma decomposição LU típica encontrada em muitas bibliotecas.

Decomposição LU

- Numa implementação típica de decomposição LU usando-se o algoritmo de Crout, o usuário fornece a matriz $N \times N$ a ser decomposta e recebe de volta uma matriz $N \times N$, onde a diagonal e a parte superior contêm os elementos β 's e a parte inferior à diagonal contêm os α 's. Explicitamente para $N = 4$

$$\begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ \alpha_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \beta_{33} & \beta_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \beta_{44} \end{pmatrix} \quad (15)$$

Decomposição LU

- Numa implementação típica de decomposição LU usando-se o algoritmo de Crout, o usuário fornece a matriz $N \times N$ a ser decomposta e recebe de volta uma matriz $N \times N$, onde a diagonal e a parte superior contêm os elementos β 's e a parte inferior à diagonal contêm os α 's. Explicitamente para $N = 4$

$$\begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ \alpha_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \beta_{33} & \beta_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \beta_{44} \end{pmatrix} \quad (15)$$

- Veja que na matriz acima os $N \alpha_{ii}$ da diagonal não são retornados, e em seu lugar posiciona-se os β_{ii} . Isso não é um problema, já que sabemos que esses elementos foram explicitamente escolhidos iguais a 1 no algoritmo de Crout.
- A vantagem do formato matricial de retorno acima é que apenas uma matriz é necessária durante todo o processo, pois a matriz original passada por referência para a função de decomposição é reescrita com os elementos α e β da decomposição acima.

Decomposição LU

- Numa implementação típica de decomposição LU usando-se o algoritmo de Crout, o usuário fornece a matriz $N \times N$ a ser decomposta e recebe de volta uma matriz $N \times N$, onde a diagonal e a parte superior contêm os elementos β 's e a parte inferior à diagonal contêm os α 's. Explicitamente para $N = 4$

$$\begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ \alpha_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \beta_{33} & \beta_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \beta_{44} \end{pmatrix} \quad (15)$$

- Veja que na matriz acima os $N \alpha_{ii}$ da diagonal não são retornados, e em seu lugar posiciona-se os β_{ii} . Isso não é um problema, já que sabemos que esses elementos foram explicitamente escolhidos iguais a 1 no algoritmo de Crout.
- A vantagem do formato matricial de retorno acima é que apenas uma matriz é necessária durante todo o processo, pois a matriz original passada por referência para a função de decomposição é reescrita com os elementos α e β da decomposição acima.
- Além da decomposição matricial acima o usuário também recebe de volta um vetor de índices com os registros das permutações efetuadas sobre as linhas de $\mathbf{A}$ para a escolha do melhor pivot a cada iteração. E por fim, também retorna-se um número que pode ser +1 ou -1, dependendo se o número de permutações efetuadas foi par ou ímpar, respectivamente.

PARA FAZER EM SALA DE AULA

- 1 Dada uma decomposição LU de uma matriz $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, sua inversa pode ser calculada a partir das inversas $\mathbf{L}^{-1}$ e $\mathbf{U}^{-1}$ de $\mathbf{L}$ e $\mathbf{U}$, respectivamente.

$$\mathbf{A}^{-1} = (\mathbf{LU})^{-1} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{L}^{-1} \quad (16)$$

- 2 Escreva um programa para encontrar a inversa de uma matriz $\mathbf{A}$ a partir da sua decomposição $\mathbf{LU}$, utilizando os algoritmos de substituição progressiva e regressiva.
- 3 Utilize as rotinas ludcmp.c, lubksb.c.