Tópico 3 - Sistemas Lineares

João B. Florindo

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Universidade Estadual de Campinas - Brasil
jbflorindo@ime.unicamp.br

Outline

1. Introdução
2. Solução de Sistemas Lineares
3. Sistemas Triangulares
4. Eliminação de Gauss
5. Fatoração LU
6. Fatoração de Cholesky
7. Matriz Banda

Introdução

$$5i_1 + 5i_2 = V, \quad \text{ABFG Horário}$$

$$i_3 - i_4 - i_5 = 0, \quad \text{Nó C}$$

$$2i_4 - 3i_5 = 0, \quad \text{CDE Anti-Horário}$$

$$i_1 - i_2 - i_3 = 0, \quad \text{Nó B}$$

$$5i_2 - 7i_3 - 2i_4 = 0. \quad \text{BCEF Anti-Horário}$$

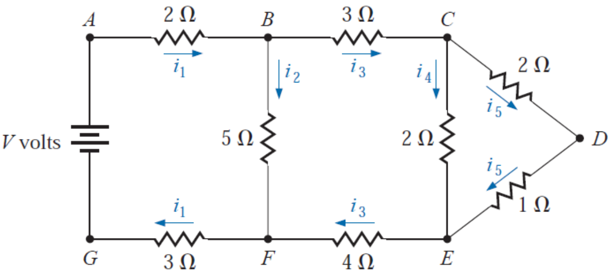

Figura : Fonte: Burden & Faires

Introdução

- Muitos problemas em análise numérica recaem em sistemas de equações lineares
- Solução de equações diferenciais por diferenças finitas, mínimos quadrados, aproximação polinomial, problema de auto-valores, etc.
- Notação de matrizes é compacta e poderosa

Introdução

Sistema de equações lineares:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned} \tag{1}$$

Definição de matriz:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

ou ainda, mais compacto: $A = (a_{ij})$
Dizemos que A possui m **linhas** e n **colunas** e é de **ordem** $m \times n$. Se $m = n$ a matriz é **quadrada** de ordem n. Se $n = 1$ temos um **vetor coluna** e se $m = 1$, um **vetor linha**. Vetores são denotados com letras minúsculas em negrito.

Introdução

Seguindo na linha de notações compactas, podemos representar as variáveis x_j e valores b_i do lado direito por vetores-coluna:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Assim, podemos agora representar o sistema linear (1) de uma forma compacta e ideal para representação computacional:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Outline

1. Introdução
2. Solução de Sistemas Lineares
3. Sistemas Triangulares
4. Eliminação de Gauss
5. Fatoração LU
6. Fatoração de Cholesky
7. Matriz Banda

Solução de Sistemas Lineares

1. Solução única:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 3 \\ x_1 - 3x_2 = -2 \end{cases} \quad x = [1 \quad 1]^T$$

2. Infinitas soluções:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 3 \\ 4x_1 + 2x_2 = 6 \end{cases} \quad x = [\alpha \quad 3 - 2\alpha]^T, \forall \alpha \in \Re$$

3. Nenhuma solução:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 3 \\ 4x_1 + 2x_2 = 2 \end{cases}$$

Solução de Sistemas Lineares

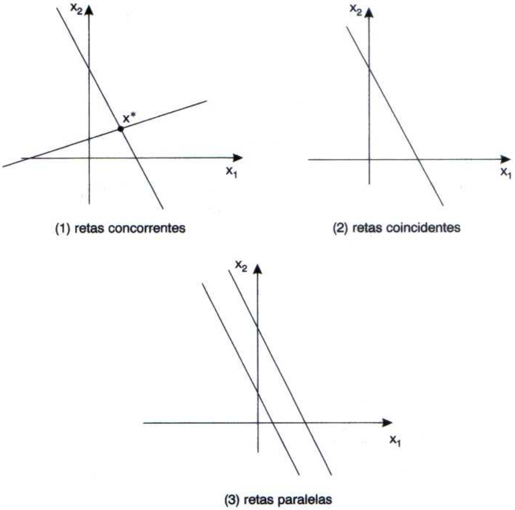

Figura : Fonte: Ruggiero & Lopes

Solução de Sistemas Lineares

DEFINIÇÃO: Imagem $Im(A)$ de uma matriz A de ordem $m \times n$:

$$Im(A) = \{\mathbf{y} \in \Re^m : \exists \mathbf{x} \in \Re^n : \mathbf{y} = A\mathbf{x}\}$$

Solução de Sistemas Lineares

Se $\mathbf{a_1}, \mathbf{a_2}, \ldots, \mathbf{a_n}$ são vetores-colunas da matriz A de ordem $m \times n$, esses são ditos linearmente independentes se

$$x_1\mathbf{a_1} + x_2\mathbf{a_2} + x_n\mathbf{a_n} = 0 \text{ somente se } x_1 = x_2 = \cdots = x_n = 0$$

Se $\mathbf{a_1}, \mathbf{a_2}, \ldots, \mathbf{a_n}$ são linearmente independentes, então qualquer vetor-coluna **b** pode ser escrito como combinação linear destes vetores, os quais formam então o que se chama de **base** para todo vetor-coluna.

$$b = x_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{bmatrix} + \cdots + x_n \begin{bmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ a_{3n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix}$$

DEFINIÇÃO: $Posto(A) =$ Número de colunas (ou linhas) independentes em A

Solução de Sistemas Lineares

Checklist

```
se Posto(A) < min(m, n) então
    se b ∈ Im(A) então
        INFINITAS SOLUÇÕES
    fim
    se b ∉ Im(A) então
        INCOMPATÍVEL
    fim
fim
se Posto(A) = min(m, n) então
    se m = n então
        COMPATÍVEL DETERMINADO
    fim
    se m < n então
        INFINITAS SOLUÇÕES
    fim
    se m > n então
        se b ∈ Im(A) então
            SOLUÇÃO ÚNICA
        fim
        se b ∉ Im(A) então
            INCOMPATÍVEL
        fim
    fim
fim
```

Solução Numérica de Sistemas Lineares

Teorema

Se A é uma matriz quadrada $n \times n$, as seguintes afirmações são equivalentes:

- O sistema homogêneo $A\mathbf{x} = 0$ possui apenas a solução trivial $\mathbf{x} = 0$
- Para qualquer $\mathbf{b}$, o sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ tem uma solução
- A é inversível

Solução Numérica de Sistemas Lineares

- Focaremos em sistemas do tipo $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ com solução única para todo $\mathbf{b}$
- Tais sistemas devem possuir o mesmo número de equações e variáveis desconhecidas (matriz A quadrada) e inversível (vide Teorema anterior)
- No caso, $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$. Usualmente, a inversibilidade é checada pelo cálculo do determinante (A é inversível se $det(A) \neq 0$)
- Não usaremos determinantes aqui devido a seu alto custo de cálculo

Solução Numérica de Sistemas Lineares

- Métodos numéricos podem ser **diretos** ou **iterativos**
- Métodos diretos obtêm soluções exatas a menos de problemas intrínsecos à representação (arredondamento, instabilidade, etc.). Ex.: Cramer calcula $n+1$ determinantes: $n=20$ demoraria anos!
- Métodos iterativos partem de uma aproximação inicial e vão obtendo soluções aprimoradas iterativamente
- As matrizes A podem ser **densas** (poucos elementos nulos, geralmente ordem < 100) ou **esparsas** (poucos elementos não-nulos, geralmente com ordem alta)

Outline

1. Introdução
2. Solução de Sistemas Lineares
3. Sistemas Triangulares
4. Eliminação de Gauss
5. Fatoração LU
6. Fatoração de Cholesky
7. Matriz Banda

Propriedades de Matrizes

Matrizes diagonal e triangular

Em uma matriz quadrada $A = (a_{ij})$ de ordem n, os elementos $a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn}$ são chamados de diagonais.
Os elementos a_{ij} para os quais $i < j$ são super-diagonais e se $i > j$, sub-diagonais.

Se todos os elementos não-diagonais forem zero, A é chamada **matriz diagonal**. Se todos os super-diagonais forem zero A é uma matriz **triangular inferior** e se todos os sub-diagonais forem zero, A é **triangular superior**.

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}}_{\text{D}} \quad B = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 5 & -2 & 0 \\ 2 & 2 & 4 \end{bmatrix}}_{\text{TI}} \quad C = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 8 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}}_{\text{TS}}$$

Introdução

A solução de um sistema linear pode ser obtida facilmente se A for triangular superior. EXEMPLO:

$$\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & + & a_{14}x_4 & = & b_1 \\
 & & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & + & a_{24}x_4 & = & b_2 \\
 & & & & a_{33}x_3 & + & a_{34}x_4 & = & b_3 \\
 & & & & & & a_{44}x_4 & = & b_4
\end{array}$$

Calculamos o vetor $\mathbf{x}$ de baixo para cima:

$x_4 = b_4/a_{44}$

$x_3 = (b_3 - (a_{34}x_4))/a_{33}$

$x_2 = (b_2 - (a_{23}x_3 + a_{24}x_4))/a_{22}$

$x_1 = (b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4))/a_{11}$

Introdução

Dada a matriz triangular superior A de ordem $n \times n$, com nenhum elemento nulo na diagonal, e o n-vetor $\mathbf{b}$, então os elementos $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_1$ do vetor $\mathbf{x}$ no sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ podem ser obtidos por:

Algoritmo 1: Substituição regressiva

para $k = n, n-1, \ldots$ **até** 1 **hacer**
  $S \leftarrow 0$;
  para $j = k+1$ **até** n **hacer**
    $S \leftarrow S + a_{kj}x_j$;
  fin
  $x_k \leftarrow \frac{b_k - S}{a_{kk}}$;
fin
retorna $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_1$

Introdução

NÚMERO DE OPERAÇÕES:

Usamos a notação "big-Oh", em que uma função $f(x)$ tem ordem de complexidade $g(x)$ ou é $\mathcal{O}(g(x))$:

$$f(x) = \mathcal{O}(g(x)) \Leftrightarrow \exists M, x_0 \in \Re : |f(x)| \leq M|g(x)|, \forall x > x_0$$

Na prática, estimamos o número de operações em função de algum parâmetro (no caso, a ordem n do sistema) e verificamos qual termo simples nesta estimativa possui a maior taxa de crescimento

O maior número de multiplicações (mais caras computacionalmente) ocorre no *loop* mais interno, que se repete $n(n-k) = n^2 - kn$ vezes e então é $\mathcal{O}(n^2)$

Outline

1. Introdução
2. Solução de Sistemas Lineares
3. Sistemas Triangulares
4. Eliminação de Gauss
5. Fatoração LU
6. Fatoração de Cholesky
7. Matriz Banda

Eliminação de Gauss

O método da eliminação baseia-se no seguinte teorema para converter um sistema qualquer em um equivalente triangular superior

Teorema

Dado um sistema qualquer $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, pode-se obter um sistema equivalente $\tilde{A}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}}$ (mesma solução) aplicando-se as seguintes operações em qualquer ordem:

- Multiplicação de uma equação por constante não-nula
- Adição do múltiplo de uma equação com outra
- Troca de lugar entre duas equações

Eliminação de Gauss

- Realizada em $n-1$ etapas: $k = 1, 2, \ldots, n-1$
- Na etapa k, a variável x_k é eliminada das equações nas linhas $i = k+1, k+2, \ldots, m$
- Como uma operação aplicada à linha i será também aplicada a b_i, definimos um vetor-linha $L_i = [a_{i1} a_{i2} a_{i3} \ldots a_{in} b_i]$

Eliminação de Gauss

- Na prática, trabalhamos com uma matriz $n \times (n+1)$, chamada **matriz aumentada**, em que as n primeiras colunas contêm A e a coluna $n+1$ contém $\mathbf{b}$
- O sobrescrito $^{(k)}$ denota o valor de um elemento na etapa k. Faz-se então:

$$L_i^{(k)} \leftarrow \begin{cases} L_i^{(k-1)} & \text{se } i \leq k \\ L_i^{(k-1)} - m_{ik} L_k^{(k-1)} & \text{se } i > k \end{cases}$$

tal que $m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ (multiplicador) e a_{kk} é o pivô.

CUIDADO! Se o pivô for nulo, uma solução é procurar o próximo pivô não-nulo entre as linhas seguintes e trocar de lugar

Eliminação de Gauss

EXEMPLO:

$$\begin{cases} 3x_1 & + & 2x_2 & + & 5x_3 & = & 4 \\ x_1 & + & x_2 & + & 3x_3 & = & 2 \\ 2x_1 & + & 4x_2 & + & 3x_3 & = & -3 \end{cases}$$

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 1 & 1 & 3 \\ 2 & 4 & 3 \end{bmatrix} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

Usando a notação concatenada:

$$[A^{(0)}|\mathbf{b}^{(0)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 1 & 1 & 3 & 2 \\ 2 & 4 & 3 & -3 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & a_{23}^{(0)} & b_2^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} & a_{32}^{(0)} & a_{33}^{(0)} & b_3^{(0)} \end{array}\right]$$

Eliminação de Gauss

Definições iniciais para $L_i^{(0)}$:

$$\begin{aligned} L_1^{(0)} &= [3 \quad 2 \quad 5 \quad 4] \\ L_2^{(0)} &= [1 \quad 1 \quad 3 \quad 2] \\ L_3^{(0)} &= [2 \quad 4 \quad 3 \quad -3] \end{aligned}$$

ETAPA 1 $(k = 1)$: Eliminar x_1 das Equações 2 e 3

$$L_1^{(1)}(i \leq k) \leftarrow L_1^{(0)} = [3 \quad 2 \quad 5 \quad 4]$$

$$L_2^{(1)}(i > k) \leftarrow L_2^{(0)} - m_{21} L_1^{(0)}$$

Calculando o multiplicador m_{21}:

$$m_{21} = \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{1}{3}$$

Eliminação de Gauss

Voltando a L_2:

$$L_2^{(1)} = [1 \quad 1 \quad 3 \quad 2] - \frac{1}{3}[3 \quad 2 \quad 5 \quad 4] = [0 \quad \frac{1}{3} \quad \frac{4}{3} \quad \frac{2}{3}]$$

Igualmente, para L_3:

$$L_3^{(1)} \leftarrow L_3^{(0)} - m_{31} L_1^{(0)}$$

e o multiplicador:

$$m_{31} = \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{2}{3}$$

e portanto:

$$L_3^{(1)} = [2 \quad 4 \quad 3 \quad -3] - \frac{2}{3}[3 \quad 2 \quad 5 \quad 4] = [0 \quad \frac{8}{3} \quad -\frac{1}{3} \quad -\frac{17}{3}]$$

Eliminação de Gauss

Ao final da etapa 1 temos a seguinte matriz $[A|\mathbf{b}]$:

$$[A^{(1)}|\mathbf{b}^{(1)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{17}{3} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & b_3^{(1)} \end{array}\right]$$

ETAPA 2 $(k = 2)$: Eliminar x_2 da Equação 3

$$L_1^{(2)}(i \leq k) \leftarrow L_1^{(1)} = [3 \quad 2 \quad 5 \quad 4]$$

$$L_2^{(2)}(i \leq k) \leftarrow L_2^{(1)} = [0 \quad \frac{1}{3} \quad \frac{4}{3} \quad \frac{2}{3}]$$

No L_3, vamos ter mudança em relação à etapa anterior:

$$L_3^{(2)} \leftarrow L_3^{(1)} - m_{32} L_2^{(1)}$$

Eliminação de Gauss

e agora o multiplicador é dado por:

$$m_{32} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} = \frac{8}{3} / \frac{1}{3} = 8$$

e portanto:

$$L_3^{(2)} = [0 \quad \frac{8}{3} \quad -\frac{1}{3} \quad -\frac{17}{3}] - 8[0 \quad \frac{1}{3} \quad \frac{4}{3} \quad \frac{2}{3}] = [0 \quad 0 \quad -11 \quad -11]$$

Finalmente, chegamos então ao sistema triangularizado desejado $[A|\mathbf{b}]$:

$$[A^{(2)}|\mathbf{b}^{(2)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & -11 & -11 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & b_1^{(2)} \\ a_{21}^{(2)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ a_{31}^{(2)} & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & b_3^{(2)} \end{array}\right]$$

Eliminação de Gauss

Resolvendo o sistema triangular:

$$
\begin{aligned}
x_3 &= b_3/a_{33} = (-11)/(-11) = 1 \\
x_2 &= (b_2 - (a_{23}x_3))/a_{22} = (\tfrac{2}{3} - (\tfrac{4}{3} * 1))/\tfrac{1}{3} = -\tfrac{2}{3}/\tfrac{1}{3} = -2 \\
x_1 &= (b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3))/a_{11} = (4 - (2 * (-2) + 5 * 1))/3 = 1
\end{aligned}
$$

Algoritmo 2: Eliminação de Gauss. Dado sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ de ordem n.

```
para k = 1 até n − 1 hacer                               /* Etapa k */
    para i = k + 1 até n hacer                /* Elimina x_k da linha i */
        m ← a_ik / a_kk ;                              /* multiplicador */
        a_ik ← 0 ;              /* k primeiros elementos de L_i serão 0 */
        para j = k + 1 até n hacer
            a_ij ← a_ij − m a_kj
        fin
        b_i ← b_i − m b_k ;                    /* último elemento de L_i */
    fin
fin
```

Pivoteamento Parcial

- Vimos que o cálculo do multiplicador na etapa k envolve uma divisão pelo pivô a_{kk}
- Cálculo não é possível se $a_{kk} = 0$ e se a_{kk} estiver muito próximo de 0 podemos incorrer em erros de arredondamento significativos

EXEMPLO: Resolver o seguinte sistema em aritmética de 4 dígitos:

$$\begin{cases} 0.003000x_1 + 59.14x_2 = 59.17 \\ 5.291x_1 - 6.130x_2 = 46.78 \end{cases}$$

cuja solução exata é $x_1 = 10.00$ e $x_2 = 1.000$.

$$m_{21} = \frac{5.291}{0.003000} \approx 1763.66 \approx 1764 \text{ (4 dígitos)}$$

$$a_{22}^{(1)} = a_{22}^{(0)} - m_{21} a_{12}^{(0)} = -6.130 - (1764 * 59.14) \approx -6.130 - 104300 = 104300$$

$$b_2^{(1)} = b_2^{(1)} - m_{21} b_1^{(0)} = 46.78 - (1764 * 59.17) \approx 46.78 - 104400 = -104400$$

Pivoteamento Parcial

Ficamos então com o sistema triangular:

$$\begin{cases} 0.003000x_1 + 59.14x_2 = 59.17 \\ \qquad\qquad\quad 104300x_2 = 104400 \end{cases}$$

cuja solução é:

$$x_2 = 104400/104300 \approx 1.001$$

$$x_1 = (59.17 - (59.14 * 1.001))/0.003000 \approx (59.17 - 59.20)/0.003000 =$$
$$= -0.03/0.003000 = -10$$

- Estratégia de pivoteamento permite contornar o problema

Pivoteamento Parcial

- Na etapa k escolher para pivô o elemento de maior módulo entre os coeficientes $a_{ik}^{(k-1)}, i = k, k+1, \ldots, n$
- Para que esta escolha seja possível sem alterar a solução do sistema, trocar entre si as linhas k e i (se $i \neq k$) (incluir os respectivos b's)

Pivoteamento Parcial

No caso anterior:

$$\begin{cases} 5.291x_1 - 6.130x_2 = 46.78 \\ 0.003000x_1 + 59.14x_2 = 59.17 \end{cases}$$

$$m_{21} = \frac{0.003000}{5.291} \approx 0.0005670$$

$$a_{22}^{(1)} = a_{22}^{(0)} - m_{21} a_{12}^{(0)} = 59.14 + (0.0005670 * 6.130) \approx 59.14 + 0.003476 = 59.14$$

$$b_2^{(1)} = b_2^{(1)} - m_{21} b_1^{(0)} = 59.17 - (0.0005670 * 46.78) \approx 59.17 - 0.02652 = 59.14$$

Solução:

$$x_2 = b_2 / a_2 2 = 1.000$$
$$x_1 = (b_1 - (a_{12} * x_2))/a_{11} = (46.78 + (6.130 * 1.000))/5.291 =$$
$$= (46.78 + 6.130)/5.291 = 52.91/5.291 = 10.00$$

Pivoteamento Parcial

EXEMPLO: Retomando o exemplo anterior:

$$[A^{(0)}|\mathbf{b}^{(0)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 1 & 1 & 3 & 2 \\ 2 & 4 & 3 & -3 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & a_{23}^{(0)} & b_2^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} & a_{32}^{(0)} & a_{33}^{(0)} & b_3^{(0)} \end{array}\right]$$

Para pivô da etapa 1 devemos escolher:

$$\max\{|a_{i1}^{(0)}|, i = 1, 2, 3\} = \max\{|3|, |1|, |2|\} = 3$$

Como 3 já é o pivô a_{11} não temos nenhuma troca de linha.

Pivoteamento Parcial

Porém na etapa 2, já vimos que devemos partir da seguinte matriz:

$$[A^{(1)}|\mathbf{b}^{(1)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{17}{3} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & b_3^{(1)} \end{array}\right]$$

Nosso pivô agora deve ser escolhido de acordo com:

$$\max\{|a_{i2}^{(1)}|, i = 2, 3\} = \max\{|\frac{1}{3}|, |\frac{8}{3}|\} = \frac{8}{3}$$

Devemos então trocar a linha 2 com a 3:

$$[A^{(1)}|\mathbf{b}^{(1)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 0 & \frac{8}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{17}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{2}{3} \end{array}\right]$$

O multiplicador agora será: $m_{32} = \frac{1}{3}/\frac{8}{3} = \frac{1}{8}$

Note que antes meu multiplicador era 8 e agora é muito menor, propagando menos erro!

Pivoteamento Total

Pivoteamento Total

- Na etapa k escolher para pivô o elemento de maior módulo entre todos os que ainda atuam no processo de eliminação, ou seja, qualquer $a_{ij}^{(k-1)}$ tal que $i \geq k$ e $j \geq k$
- Se tal elemento se encontra em linha e/ou coluna diferente de k realizar as respectivas trocas

Pivoteamento Total

EXEMPLO: Fazendo uma pequena alteração no sistema anterior:

$$[A^{(0)}|\mathbf{b}^{(0)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 5 & 4 \\ 1 & 1 & 7 & 2 \\ 2 & 4 & 3 & -3 \end{array}\right]$$

O elemento de maior módulo (7) está na linha 2 e coluna 3. Devemos então trocar a linha 1 com a linha 2 e em seguida a coluna 1 com a coluna 3, de modo que resulte em:

$$[A^{(0)}|\mathbf{b}^{(0)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 7 & 1 & 1 & 2 \\ 5 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 2 & -3 \end{array}\right]$$

$\Rightarrow$ Posso começar pela troca de colunas também, a ordem não importa
$\Rightarrow$ CUIDADO: No novo sistema o primeiro elemento do vetor-solução será x_3 e o terceiro, x_1!
$\Rightarrow$ Pouca utilidade prática devido ao excesso de comparações entre elementos e trocas de linhas e colunas

Eliminação de Gauss - Número de operações

Os três *loops* aninhados no Algoritmo 2 são repetidos de fora para dentro $n-1$, $n-k$ e $n-k$ vezes, totalizando:

$$(n-1)(n-k)(n-k) = (n^2-(k+1)n+k)(n-k) = n^3-(2k+1)n^2+(k^2+2k)n-k^2 \approx \mathcal{O}(n^3)$$

Então, no *loop* mais interno temos da ordem de n^3 multiplicações, que são juntamente com as divisões as operações aritméticas mais complexas computacionalmente

Demonstração mais detalhada em [Burden & Faires]

Outline

1. Introdução
2. Solução de Sistemas Lineares
3. Sistemas Triangulares
4. Eliminação de Gauss
5. Fatoração LU
6. Fatoração de Cholesky
7. Matriz Banda

Fatoração LU

FATORAÇÃO LU:

- Representar matriz A como produto de duas matrizes triangulares L e U
- L triangular inferior com diagonal unitária; U triangular superior
- Resolver $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ é equivalente a resolver $LU\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ou ainda $L(U\mathbf{x}) = \mathbf{b}$ (ASSOCIATIVO)
- Chamando $U\mathbf{x}$ de $\mathbf{y}$ e quebrando em dois sistemas mais simples:
  1. $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$
  2. $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$
- Lembremos que a solução pela eliminação de Gauss era $\mathcal{O}(n^3)$ enquanto sistemas triangulares eram $\mathcal{O}(n^2)$. Ao contrário de Gauss, triangularização é feita só uma vez. Para um novo $\mathbf{b}$ a alteração é mínima

Fatoração LU

TEOREMA DA FATORAÇÃO LU: Se A é matriz quadrada de ordem n, A_k é a sub-matriz contendo as primeiras k colunas e k linhas de A e $det(A_k) \neq 0$ para $k = 1, 2, \ldots, n$, então existe uma fatoração LU única para A. E mais: $det(A) = u_{11}u_{12}u_{13}\ldots u_{nn}$.

Vamos tentar obter os elementos de L e U a partir da eliminação de Gauss, partindo da matriz A inicial $A = (a_{ij})$

Fatoração LU

Mostremos que $A^{(1)} = C^{(0)}A^{(0)}$, em que $C^{(0)}$ é triangular inferior com diagonal unitária e $c_{1i} = -m_{1i}$ para $i = 2, 3$:

$$C^{(0)}A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & a_{23}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} & a_{32}^{(0)} & a_{33}^{(0)} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} - m_{21}a_{11}^{(0)} & a_{22}^{(0)} - m_{21}a_{12}^{(0)} & a_{23}^{(0)} - m_{21}a_{13}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} - m_{31}a_{11}^{(0)} & a_{32}^{(0)} - m_{31}a_{12}^{(0)} & a_{33}^{(0)} - m_{31}a_{13}^{(0)} \end{bmatrix} = A^{(1)}$$

Note como na matriz resultante, temos $L_i = L_i - m_{i1}L_1$ para $i = 2, 3$ exatamente como na definição de $A^{(1)}$

Fatoração LU

Temos também que $A^{(2)} = C^{(1)}A^{(1)}$, em que $C^{(1)}$ é triangular inferior com diagonal unitária e $c_{2i} = -m_{2i}$ para $i = 3$:

$$C^{(1)}A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -m_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} - m_{32}a_{21}^{(1)} & a_{32}^{(1)} - m_{32}a_{22}^{(1)} & a_{33}^{(1)} - m_{32}a_{23}^{(1)} \end{bmatrix} = A^{(2)}$$

Temos portanto que:

$$A^{(2)} = C^{(1)}A^{(1)} = C^{(1)}(C^{(0)})A^{(0)} = C^{(1)}C^{(0)}A$$

Podemos escrever então:

$A = (C^{(1)}C^{(0)})^{-1}A^{(2)} = (C^{(0)})^{-1}(C^{(1)})^{-1}A^{(2)}$ (INVERSA DO PRODUTO)

Fatoração LU

Podemos calcular $(C^{(0)})^{-1}$ e $(C^{(1)})^{-1}$ pela definição de inversa e chegar a:

$$(C^{(0)})^{-1}(C^{(1)})^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & m_{32} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

Finalmente:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{bmatrix} = LU$$

e encontramos as matrizes triangulares desejadas.

Fatoração LU

Pode-se mostrar também que o vetor $\mathbf{y}$ solução de $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$ é igual ao vetor $\mathbf{b}^{(2)}$ obtido ao final da eliminação de Gauss:

$$L\mathbf{y} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{y} = L^{-1}\mathbf{b}$$

Mas temos a definição de L:

$$L = (C^{(0)})^{-1}(C^{(1)})^{-1} \Rightarrow L^{-1} = C^{(1)}C^{(0)}$$

e deste modo:

$$\mathbf{y} = C^{(1)}C^{(0)}\mathbf{b}$$

Vamos primeiro multiplicar $\mathbf{b}$ por $C^{(0)}$ e depois o resultado por $C^{(1)}$:

$$C^{(0)}\mathbf{b} = C^{(0)}\mathbf{b}^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(0)} \\ b_3^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(0)} - m_{21}b_1^{(0)} \\ b_3^{(0)} - m_{31}b_1^{(0)} \end{bmatrix} = \mathbf{b}^{(1)}$$

Fatoração LU

Similarmente agora multiplicando por $C^{(1)}$:

$$C^{(1)}\mathbf{b}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -m_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} - m_{32} b_2^{(1)} \end{bmatrix} = \mathbf{b}^{(2)}$$

Fatoração LU

EXEMPLO: Seja o sistema já apresentado

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 1 & 1 & 3 \\ 2 & 4 & 3 \end{bmatrix} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

Já sabemos da eliminação que L é dado por:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{2}{3} & 8 & 1 \end{bmatrix}$$

e U:

$$U = A^{(2)} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} \\ 0 & 0 & -11 \end{bmatrix}$$

Fatoração LU

Resolvendo $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$:

$$\begin{cases} y_1 & = & 4 \\ \frac{1}{3}y_1 + y_2 & = & 2 \\ \frac{2}{3}y_1 + 8y_2 + y_3 & = & -3 \end{cases}$$

cuja solução é $\mathbf{y} = [4 \quad \frac{2}{3} \quad -11]^T$ (Coincidiu com $\mathbf{b}^{(2)}$ como esperado!)

Agora, resolvendo $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$:

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 5x_3 & = & 4 \\ \frac{1}{3}x_2 + \frac{4}{3}x_3 & = & \frac{2}{3} \\ -11x_3 & = & -11 \end{cases}$$

e chegamos à solução já conhecida $\mathbf{x} = [1 \quad -2 \quad 1]^T$.

Fatoração LU com Pivoteamento

O pivoteamento parcial também pode ser aplicado na fatoração LU

Cuidar que tanto os fatores L e U quanto os sistemas triangulares sejam resolvidos levando em conta as trocas de linha tanto em A quanto em $\mathbf{b}$

Para facilitar os algoritmos que veremos, vamos representar a troca de linhas por uma **matriz de permutação** P de ordem n.

P é a matriz identidade de ordem n com linhas trocadas e multiplicar P por uma matriz qualquer A também de ordem n equivale a trocar estas mesmas linhas na matriz A.

Fatoração LU com Pivoteamento

EXEMPLO:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 1 & 1 & 3 \\ 2 & 4 & 3 \end{bmatrix} \text{ e } P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$PA = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 1 & 1 & 3 \\ 2 & 4 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 2 & 4 & 3 \\ 3 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

Fatoração LU com Pivoteamento

Seja A' a matriz permutada, b' o vetor submetido à mesma permutação, e L e U os fatores LU obtidos com permutação.

Temos então

$$A' = PA \qquad b' = Pb$$

e o sistema se torna

$$A'x = b' \Rightarrow PAx = Pb \Rightarrow LUx = Pb$$

Assim, os sistemas triangulares que precisamos resolver para obter a solução do sistema original são:

1. $Ly = Pb$
2. $Ux = y$

Fatoração LU com Pivoteamento

EXEMPLO:

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

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} 3 & -4 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 4 & 0 & -3 \end{bmatrix}$$

Etapa 1: Permutamos linhas 1 e 3

$$A'^{(0)} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & -3 \\ 1 & 2 & 2 \\ 3 & -4 & 1 \end{bmatrix} \qquad P^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad A'^{(0)} = P^{(0)} A^{(0)}$$

Fatoração LU com Pivoteamento

Eliminação em $A'^{(0)}$:

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & -3 \\ \boxed{1/4} & 2 & 11/4 \\ \boxed{3/4} & -4 & 13/4 \end{bmatrix}$$

Etapa 2: Permutamos linhas 2 e 3

$$A'^{(0)} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & -3 \\ \boxed{3/4} & -4 & 13/4 \\ \boxed{1/4} & 2 & 11/4 \end{bmatrix} \qquad P^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad A'^{(1)} = P^{(1)}A^{(1)}$$

Eliminação em $A'^{(1)}$:

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & -3 \\ \boxed{3/4} & -4 & 13/4 \\ \boxed{1/4} & \boxed{-1/2} & 35/8 \end{bmatrix}$$

Fatoração LU com Pivoteamento

Os fatores L e U são então

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/4 & 1 & 0 \\ 1/4 & -1/2 & 1 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} 4 & 0 & -3 \\ 0 & -4 & 13/4 \\ 0 & 0 & 35/8 \end{bmatrix}$$

Estes são os fatores da matriz $A' = PA$, sendo $P = P^{(1)}P^{(0)}$:

$$A' = PA = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & -4 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 4 & 0 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & -3 \\ 3 & -4 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Fatoração LU com Pivoteamento

Sistema triangular $Ly = Pb$:

$$Pb = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 \\ 3 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 9 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} y_1 & = -2 \\ 3/4y_1 + y_2 & = 9 \\ 1/4y_1 - 1/2y_2 + y_3 & = 3 \end{cases} \Rightarrow y = \begin{bmatrix} -2 \\ 21/2 \\ 35/4 \end{bmatrix}$$

Sistema triangular $Ux = y$:

$$\begin{cases} 4x_1 + 0x_2 - 3x_3 & = -2 \\ -4x_2 + 13/4x_3 & = 21/2 \\ 35/8x_3 & = 35/4 \end{cases} \Rightarrow x = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Fatoração LU-Algoritmo

Dado o sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ com a matriz A não-singular:

Algoritmo 3: Fatoração LU sem pivoteamento

$L \leftarrow zeros(n,n), U \leftarrow zeros(n,n)$;
para $k = 1$ **até** $n-1$ **hacer**
    para $i = k+1$ **até** n **hacer**
        $m \leftarrow a_{ik}/a_{kk}$;
        para $j = k+1$ **até** n **hacer**
            $u_{ij} \leftarrow a_{ij} - ma_{kj}$;
        fin
        $l_{ik} \leftarrow m$;
    fin
    $l_{kk} = 1$;
fin
retorna L, U

Outline

1. Introdução
2. Solução de Sistemas Lineares
3. Sistemas Triangulares
4. Eliminação de Gauss
5. Fatoração LU
6. Fatoração de Cholesky
7. Matriz Banda

Fatoração de Cholesky

Uma matriz A de ordem $n \times n$ é positiva definida se $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0, \forall \mathbf{x} \in \Re^n, \mathbf{x} \neq 0$

EXEMPLO: Mostre que a matriz abaixo é positiva definida:

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

Fatoração de Cholesky

Aplicando a definição:

$$\mathbf{x}^T A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2x_1 - x_2 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 \\ -x_2 + 2x_3 \end{bmatrix} =$$

$$= 2x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_2x_3 + 2x_3^2$$

Rearranjando:

$$\mathbf{x}^T A\mathbf{x} = x_1^2 + (x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2) + (x_2^2 + 2x_2x_3 + x_3^2) + x_3^2 =$$
$$= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2$$

cuja soma é sempre > 0 a menos que tenhamos $x_1 = x_2 = x_3 = 0$.

Fatoração de Cholesky

Matrizes **positivas definidas e simétricas** aparecem com frequência e para estas a eliminação de Gauss pode ser feita sem troca de linhas

TEOREMA:
Além disso, podem ser fatoradas de maneira única em:

$$A = GG^T$$

em que G é uma matriz $n \times n$ triangular inferior com diagonal estritamente positiva. Esta é a **Fatoração de Cholesky**.

Fatoração de Cholesky - Demonstração

Se a matriz A de ordem $n \times n$ pode ser decomposta em LU, podemos substituir U por DV, em que D é matriz diagonal e V é V é triangular superior com diagonal unitária, já que:

$$DV = \begin{bmatrix} d_{11} & & & & \\ & d_{22} & & & \\ & & d_{33} & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & d_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & v_{12} & v_{13} & \dots & v_{1n} \\ & 1 & v_{23} & \dots & v_{2n} \\ & & 1 & \dots & v_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & 1 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} d_{11} & v_{12}d_{11} & v_{13}d_{11} & \dots & v_{1n}d_{11} \\ & d_{22} & v_{23}d_{22} & \dots & v_{2n}d_{22} \\ & & d_{33} & \dots & v_{3n}d_{33} \\ & & & \ddots & \\ & & & & d_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ & & & \ddots & \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Basta então que se escolha $d_{ii} = u_{ii}$ e $v_{ij} = u_{ij}/u_{ii}$

Fatoração de Cholesky - Demonstração

Podemos então reescrever a fatoração LU como $A = LDV$

Se A for simétrica, demonstra-se que $V = L^T$ e então $A = LDL^T$

Como A é positiva definida, para qualquer $x \neq 0$:

$$0 < x^T Ax = x^T LDL^T x$$

Usando associatividade e a propriedade da transposta da do produto $(AB)^T = B^T A^T$, podemos definir $y = L^T x$ e escrever

$$x^T LDL^T x = y^T Dy > 0$$

Façamos agora y ser e_i: vetor com elementos nulos em todas as posições exceto na posição i, em que vale 1:

Fatoração de Cholesky - Demonstração

$$e_i^T D e_i = \begin{bmatrix} 0_1 \\ 0_2 \\ \vdots \\ 1_i \\ \vdots \\ 0_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_{22} & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & d_{ii} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & d_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0_1 & 0_2 & \dots & 1_i & \dots & 0_n \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ d_{ii} \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix} = d_{ii}$$

Portanto, $d_{ii} > 0$ e a diagonal de D é estritamente positiva, o que permite que D seja reescrita como $\overline{D}\overline{D}$, se definirmos $\overline{d}_{ii} = \sqrt{d_{ii}}$.

Fatoração de Cholesky - Demonstração

Nestas condições, escrevemos:

$$A = L\overline{D} \quad \overline{D}L^T$$

Se $G = L\overline{D}$ temos $A = GG^T$, sendo G triangular inferior com diagonal estritamente positiva.

Fatoração de Cholesky - Cálculo dos Fatores

Partindo da seguinte matriz A simétrica e definida positva:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Como G é triangular inferior com diagonal positiva e $A = GG^T$:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{21} & \dots & g_{n1} \\ & g_{22} & \dots & g_{n2} \\ & & \ddots & \\ & & & g_{nn} \end{bmatrix}$$

Fatoração de Cholesky - Cálculo dos Fatores

Calcular os fatores da matriz já vista:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & \\ g_{21} & g_{22} & \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} \\ & g_{22} & g_{32} \\ & & g_{33} \end{bmatrix}$$

Fatoração de Cholesky - Cálculo dos Fatores

Vamos calcular por coluna. Coluna 1:

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}^2 \\ g_{21}g_{11} \\ \vdots \\ g_{n1}g_{11} \end{bmatrix}$$

resultando que

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{2}$$
$$g_{21} = a_{21}/g_{11} = -\sqrt{2}/2$$
$$g_{31} = a_{31}/g_{11} = 0$$
$$g_{j1} = a_{j1}/g_{11}, j = 2, 3, \ldots, n$$

Fatoração de Cholesky - Cálculo dos Fatores

Coluna 2:

$$\begin{bmatrix} a_{21} \\ a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}g_{21} \\ g_{21}^2 + g_{22}^2 \\ g_{31}g_{21} + g_{32}g_{22} \\ \vdots \\ g_{n1}g_{21} + g_{n2}g_{22} \end{bmatrix}$$

g_{21} já está calculado:

$$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{21}^2} = \sqrt{2 - (-\sqrt{2}/2)^2} = \sqrt{3/2} = \sqrt{6}/2$$
$$g_{32} = (a_{32} - g_{31}g_{21})/g_{22} = (-1 - 0 * (-\sqrt{2}/2))/(\sqrt{6}/2) = -\sqrt{6}/3$$

Para $j = 2, 3, \ldots, n$ temos: $g_{j2} = (a_{j2} - g_{j1}g_{21})/g_{22}$
dado que g_{j1} já está calculado na Coluna 1

Fatoração de Cholesky - Cálculo dos Fatores

Coluna 3:

$$\begin{bmatrix} a_{31} \\ a_{32} \\ a_{33} \\ \vdots \\ a_{n3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}g_{31} \\ g_{21}g_{31} + g_{22}g_{32} \\ g_{31}^2 + g_{32}^2 + g_{33}^2 \\ \vdots \\ g_{n1}g_{21} + g_{n2}g_{32} + g_{n3}g_{33} \end{bmatrix}$$

$$g_{33} = \sqrt{a_{33} - g_{31}^2 - g_{32}^2} = \sqrt{2 - 0^2 - (-\sqrt{6}/3)^2} = \sqrt{12/9} = 2\sqrt{3}/3$$

$$G = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & & \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{6}/2 & \\ 0 & -\sqrt{6}/3 & 2\sqrt{3}/3 \end{bmatrix} \quad G^T = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & -\sqrt{2}/2 & 0 \\ & \sqrt{6}/2 & -\sqrt{6}/3 \\ & & 2\sqrt{3}/3 \end{bmatrix}$$

Fatoração de Cholesky - Cálculo dos Fatores

De um modo geral, chegamos à Coluna k com $g_{ik}, i = 1, 2, \ldots, (k-1)$ já calculados e podemos obter:

$$g_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} g_{kj}^2 \right)^{1/2}$$

e

$$g_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} g_{ij} g_{kj} \right) / g_{kk}, i = (k+1), (k+2), \ldots, n$$

Fatoração de Cholesky - Algoritmo

Algoritmo 4: Fatoração de Cholesky

```
para k = 1 até n hacer
    s ← 0;
    para j = 1 até (k − 1) hacer
        s ← s + g_kj^2;
    fin
    r ← a_kk − s;
    g_kk ← r^(1/2);
    para i = (k + 1) até n hacer
        s ← 0;
        para j = 1 até (k − 1) hacer
            s ← s + g_ij g_kj
        fin
        g_ik ← (a_ik) − s)/g_kk;
    fin
fin
retorna G
```

Fatoração de Cholesky - Algoritmo

Maior número de multiplicações no *loop* de $s \leftarrow s + g_{ij} g_{kj}$:
$n(n-k)(k-1)$. Mas k depende de n. Escrevendo em função de k:

$$(n^2 - nk)(k-1) = -nk^2 + (n^2+n)k - n^2$$

Derivada:

$$-2nk + n^2 + n$$

Igualando a zero:

$$k = (n+1)/2$$

Este é o valor de k que maximiza a expressão acima. Neste caso:

$$n(n-k)(k-1) = n(\frac{n-1}{2})(\frac{n-1}{2}) = n(\frac{n^2-2n+1}{4}) = \frac{n^3-2n^2+n}{4}$$

e então a operação é de ordem $\mathcal{O}(n^3)$.
Algoritmo também usado para descobrir se A é positiva definida: se em algum momento $r \leq 0$, sabemos que não é!

Outline

1 Introdução

2 Solução de Sistemas Lineares

3 Sistemas Triangulares

4 Eliminação de Gauss

5 Fatoração LU

6 Fatoração de Cholesky

7 Matriz Banda

Matriz Banda

Matriz Banda

Uma matriz quadrada de ordem n é chamada de matriz banda se existem inteiros p e q, $p > 1$, $q < n$, tais que

$$a_{ij} = 0, \text{ se } i > j + p \text{ ou } j > i + q$$

A **largura da banda** é $p + q + 1$

EXEMPLOS:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 & 0 \\ 6 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix} B = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & -1 & 0 \\ 6 & -3 & 4 & 5 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} C = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 2 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & -3 & 3 \end{bmatrix}$$

Para $A : p = 1, q = 1;$ $B : p = 2, q = 1;$ $C : p = 1, q = 3$

Matriz Tridiagonal

Matriz Tridiagonal

Uma matriz banda em que $p = q = 1$ é chamada de tridiagonal. (A no exemplo anterior)

Fatoração LU especial pode ser usada (método de Crout):

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & & \\ & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & & & \\ l_{21} & a_{22} & & & & \\ & l_{32} & l_{33} & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_{n-1,n-2} & l_{n-1,n-1} & \\ & & & & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & & & & \\ & 1 & u_{23} & & & \\ & & 1 & u_{34} & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & u_{n-1,n} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$