Aula 8
Variações da Eliminação de Gauss/Fatoração LU.

MS211 - Cálculo Numérico

Marcos Eduardo Valle

Departamento de Matemática Aplicada
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Universidade Estadual de Campinas

O método da eliminação de Gauss/Fatoração LU podem ser adaptados para certos tipos de matrizes que surgem em muitas situações práticas.

Nesse casos, informações adicionais sobre a estrutura da matriz são consideradas de forma a reduzir o esforço computacional do método numérico.

Na aula de hoje, veremos duas variações da eliminação de Gauss/fatoração LU.

Matriz Diagonalmente Estritamente Dominante

Para algumas matrizes, o método da eliminação de Gauss pode ser aplicado sem a estratégia de pivoteamento parcial.

Definição 1

Dizemos que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma **matriz diagonalmente dominante** se

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad \forall i = 1, \ldots, n.$$

Exemplo 2

Determine quais matrizes são diagonalmente estritamente dominante:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 2

Determine quais matrizes são diagonalmente estritamente dominante:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Resposta: A única matriz diagonalmente dominante é a matriz **B**.

Teorema 3

Se $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *é uma matriz diagonalmente dominante, então* $\mathbf{A}$ *é não-singular. Sobretudo, o sistema linear* $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ *pode ser resolvido usando o método da eliminação de Gauss sem pivoteamento.*

A demonstração desse teorema pode ser encontrada em: "*Análise Numérica*, R. L. Burden e J. D. Faires. Editora Pioneira, 2003".

Matriz Simétrica

Definição 4 (Matriz Simétrica)

Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times}$ é simétrica se $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$, ou seja,

$$a_{ij} = a_{ji}, \quad \forall i, j = 1, \dots, n.$$

Exemplo 5

Determine quais matrizes são simétricas:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Matriz Simétrica

Definição 4 (Matriz Simétrica)

Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times}$ é simétrica se $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$, ou seja,

$$a_{ij} = a_{ji}, \quad \forall i, j = 1, \ldots, n.$$

Exemplo 5

Determine quais matrizes são simétricas:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Resposta: As matrizes **A** e **C** são simétricas.

Matriz Definida Positiva

Definição 6 (Matriz Definida Positiva)

Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida positiva se $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq 0$.

Teorema 7 (Decomposição de Cholesky)

Se $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *é uma matriz simétrica e definida positiva, então* $\mathbf{A}$ *pode ser decomposta de forma única no produto* $\mathbf{G}\mathbf{G}^T$*, em que* $\mathbf{G}$ *é uma matriz triangular inferior com diagonal positiva.*

Pode-se demonstrar o teorema acima usando a fatoração LU.

A demonstração pode ser encontrada em: "*Cálculo Numérico – Aspectos Teóricos e Computacionais*, M. Ruggiero e V. Lopes, 2a edição, Editora Pearson, 1997."

Cálculo do Fator de Cholesky

Seja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica e definida positiva.

Vamos escrever $\mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{G}^T$, ou seja,

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

Efetuando o produto por colunas, encontramos:

- Primeira coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}^2 \\ g_{21}g_{11} \\ \vdots \\ g_{n1}g_{11} \end{bmatrix}$$

Logo,

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} \quad \text{e} \quad g_{j1} = \frac{a_{j1}}{g_{11}}, \quad j = 2, \dots, n.$$

- Segunda coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{21} \\ a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{21} & g_{22} & & & \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & g_{n3} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{21} \\ g_{22} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}g_{21} \\ g_{21}^2 + g_{22}^2 \\ g_{31}g_{21} + g_{32}g_{22} \\ \vdots \\ g_{n1}g_{21} + g_{n2}g_{22} \end{bmatrix}$$

Logo,

$$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{21}^2} \quad \text{e} \quad g_{j2} = \frac{a_{j2} - g_{j1}g_{21}}{g_{22}}, \quad j = 3, \dots, n.$$

- Coluna k:

$$\begin{bmatrix} a_{k1} \\ \vdots \\ a_{kk} \\ a_{k+1,k} \\ \vdots \\ a_{k2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & \\ g_{k1} & \cdots & g_{kk} & & & \\ g_{k+1,1} & \cdots & g_{k+1,k} & g_{k+1,k+1} & & \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & \cdots & g_{nk} & g_{n,k+1} & \cdots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{k1} \\ \vdots \\ g_{kk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Logo, teremos

$$a_{kk} = g_{k1}^2 + \ldots + g_{kk}^2 \quad \Longrightarrow \quad g_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} g_{ki}^2},$$

e

$$a_{jk} = g_{j1} g_{k1} + \ldots + g_{jk} g_{kk}, \quad \forall j = k+1, \ldots, n.$$

Portanto,

$$g_{jk} = \frac{1}{g_{kk}} \left(a_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} g_{ji} g_{ki} \right), \quad \forall j = k+1, \ldots, n.$$

Fatoração de Cholesky

Entrada: Matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica e definida positiva.

para $k = 1 : n$ **faça**

- $g_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} g_{kj}^2}$.

  para $i = k + 1 : n$ **faça**

  - $g_{ik} = \frac{1}{g_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} g_{ij} g_{kj} \right)$.

  fim

fim

Saída: Matriz $\mathbf{G}$ triangular inferior com diagonal positiva.

Exemplo 8

Determine, se possível, a fatoração de Cholesky das matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 8

Determine, se possível, a fatoração de Cholesky das matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Resposta: Temos que $\mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{G}^T$ em que

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & & \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}} & \\ 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{2}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}.$$

Ao tentar fatorar a matriz **C**, encontra-se a raiz quadrada de um número negativo. Logo, embora simétrica, **C** não é definida positiva.

A fatoração de Cholesky pode ser usada para verificar se uma matriz é simétrica e definida positiva; se o método falhar, a hipótese é falsa!

A fatoração de Cholesky requer a metade do número de operações efetuadas na fatoração LU!

Conhecendo a fatoração de Cholesky, o sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ é resolvido em dois estágios:

1. $\mathbf{Gy} = \mathbf{b}$.
2. $\mathbf{G}^T\mathbf{x} = \mathbf{y}$.

Matriz Banda

Definição 9 (Matriz Banda)

Dizemos que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz banda se existem inteiros p e q, com $1 < p, q < n$, tais que

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

O valor $p + q + 1$ é chamado **tamanho da banda.** Além disso, p é chamado tamanho da banda inferior e q é o tamanho da banda superior.

Em muitas situações, encontramos matrizes banda que são também diagonalmente dominante ou simétrica e definida positiva.

Exemplo 10

Determine quais matrizes são banda e, no caso afirmativo, o tamanho da banda:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 10

Determine quais matrizes são banda e, no caso afirmativo, o tamanho da banda:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 2 & 0 \\ 3 & 5 & -1 \\ 0 & 5 & -6 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 6 & 4 & -3 \\ 4 & -2 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Resposta: As matrizes **A** e **B** são matrizes banda com tamanho da banda $p = q = 1$.

Definição 11 (Matriz Tridiagonal)

Uma matriz banda $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ com $p = q = 1$ é chamada **matriz tridiagonal**.

De um modo geral, uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tridiagonal é da forma:

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

Logo, o método da eliminação de Gauss deve modificado de modo a introduzir zeros apenas no lugar dos elementos $a_{21}, a_{32}, \ldots, a_{n-1,n}$.

Ideia similar é válida para matrizes banda, de um modo geral!