MS211 - Cálculo Numérico

Aula 06 – Fatoração de Cholesky e Condicionamento de uma Matriz.

Marcos Eduardo Valle
Matemática Aplicada
IMECC - Unicamp

A aula de hoje está dividida em duas partes. Na primeira parte estudaremos a fatoração de Cholesky. Na segunda parte estudaremos o condicionamento de uma matriz.

A aula de hoje está dividida em duas partes. Na primeira parte estudaremos a fatoração de Cholesky. Na segunda parte estudaremos o condicionamento de uma matriz.

A fatoração de Cholesky pode ser interpretada como uma variação da fatoração LU que leva em considerações a estrutura da matriz.

A aula de hoje está dividida em duas partes. Na primeira parte estudaremos a fatoração de Cholesky. Na segunda parte estudaremos o condicionamento de uma matriz.

A fatoração de Cholesky pode ser interpretada como uma variação da fatoração LU que leva em considerações a estrutura da matriz.

O condicionamento de uma matriz está relacionado à credibilidade da solução obtida por um método numérico.

Parte 1

Fatoração de Cholesky

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

O método da eliminação de Gauss e a 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.

O método da eliminação de Gauss e a 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, apresentaremos a fatoração de Cholesky que pode ser usada como alternativa para a fatoração LU quando a matriz do sistema linear é simétrica e definida positiva.

O método da eliminação de Gauss e a 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, apresentaremos a fatoração de Cholesky que pode ser usada como alternativa para a fatoração LU quando a matriz do sistema linear é simétrica e definida positiva.

Matriz Simétrica

Definição 1 (Matriz Simétrica)

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

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

Matriz Simétrica

Definição 1 (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 2

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 1 (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 2

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 3 (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 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq 0$.

Matriz Definida Positiva

Definição 3 (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 4 (Decomposição de Cholesky)

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

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

Matriz Definida Positiva

Definição 3 (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 4 (Decomposição de Cholesky)

Uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *é simétrica e definida positiva se e somente se* $\mathbf{A}$ *pode ser decomposta de forma única no produto* $\mathbf{G}^T \mathbf{G}$*, em que* $\mathbf{G}$ *é uma matriz triangular superior 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.

Cálculo do Fator de Cholesky

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

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

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{12} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & g_{2n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \dots & g_{1n} \\ & g_{22} & \dots & g_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & g_{nn} \end{bmatrix}$$

Cálculo do Fator de Cholesky

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

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

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{12} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & g_{2n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \dots & g_{1n} \\ & g_{22} & \dots & g_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & g_{nn} \end{bmatrix}$$

Identificando as matrizes do lado esquerdo e direito da equação por por colunas, encontramos:

- Primeira coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{12} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & g_{2n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}^2 \\ g_{12}g_{11} \\ \vdots \\ g_{1n}g_{11} \end{bmatrix}$$

- Primeira coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{12} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & g_{2n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}^2 \\ g_{12}g_{11} \\ \vdots \\ g_{1n}g_{11} \end{bmatrix}$$

Logo,

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} \quad \text{e} \quad g_{1j} = \frac{a_{1j}}{g_{11}}, \quad j = 2, \ldots, n.$$

- Segunda coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{12} & g_{22} & & & \\ g_{13} & g_{23} & g_{33} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ g_{1n} & g_{2n} & g_{3n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{12} \\ g_{22} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}g_{12} \\ g_{12}^2 + g_{22}^2 \\ g_{13}g_{12} + g_{23}g_{22} \\ \vdots \\ g_{1n}g_{12} + g_{2n}g_{22} \end{bmatrix}$$

- Segunda coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & \\ g_{12} & g_{22} & & & \\ g_{13} & g_{23} & g_{33} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ g_{1n} & g_{2n} & g_{3n} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{12} \\ g_{22} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11}g_{12} \\ g_{12}^2 + g_{22}^2 \\ g_{13}g_{12} + g_{23}g_{22} \\ \vdots \\ g_{1n}g_{12} + g_{2n}g_{22} \end{bmatrix}$$

Logo,

$$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{12}^2} \quad \text{e} \quad g_{2j} = \frac{a_{2j} - g_{1j}g_{12}}{g_{22}}, \quad j = 3, \dots, n.$$

- i-ésima coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{ii} \\ \vdots \\ a_{ji} \\ \vdots \\ a_{ni} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & & \\ g_{1i} & \dots & g_{ii} & & & & \\ \vdots & \dots & \vdots & \ddots & & & \\ g_{1j} & \dots & g_{ij} & \dots & g_{jj} & & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & \dots & g_{in} & \dots & g_{jn} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{1i} \\ \vdots \\ g_{ii} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

- *i*-ésima coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{ii} \\ \vdots \\ a_{ji} \\ \vdots \\ a_{ni} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & & \\ g_{1i} & \dots & g_{ii} & & & & \\ \vdots & \dots & \vdots & \ddots & & & \\ g_{1j} & \dots & g_{ij} & \dots & g_{jj} & & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & \dots & g_{in} & \dots & g_{jn} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{1i} \\ \vdots \\ g_{ii} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

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

- i-ésima coluna:

$$\begin{bmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{ii} \\ \vdots \\ a_{ji} \\ \vdots \\ a_{ni} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & & \\ g_{1i} & \dots & g_{ii} & & & & \\ \vdots & \dots & \vdots & \ddots & & & \\ g_{1j} & \dots & g_{ij} & \dots & g_{jj} & & \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \\ g_{1n} & \dots & g_{in} & \dots & g_{jn} & \dots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{1i} \\ \vdots \\ g_{ii} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

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

$$a_{ji} = a_{ij} = g_{1j}g_{1i} + \ldots + g_{ij}g_{ii} \quad \Longrightarrow \quad g_{ij} = \frac{1}{g_{ii}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{kj}g_{ki}\right),$$

para $j = i+1, \ldots, n$.

Fatoração de Cholesky

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

para $i = 1 : n$ **faça**

- $$g_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ki}^2}.$$

  para $j = i + 1 : n$ **faça**

  - $$g_{ij} = \frac{1}{g_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{kj} g_{ki} \right).$$

  fim

fim

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

Exemplo 5

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 5

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: Vamos calcular a fatoração de Cholesky de **A**.

Primeiro, calculamos os elementos

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{2}, \quad g_{12} = \frac{a_{12}}{g_{11}} = \frac{-1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{a_{13}}{g_{11}} = 0.$$

Primeiro, calculamos os elementos

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{2}, \quad g_{12} = \frac{a_{12}}{g_{11}} = \frac{-1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{a_{13}}{g_{11}} = 0.$$

Depois, calculamos os elementos

$$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{2 - (1/2)} = \sqrt{\frac{3}{2}},$$

Primeiro, calculamos os elementos

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{2}, \quad g_{12} = \frac{a_{12}}{g_{11}} = \frac{-1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{a_{13}}{g_{11}} = 0.$$

Depois, calculamos os elementos

$$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{2 - (1/2)} = \sqrt{\frac{3}{2}},$$

e

$$g_{23} = \frac{a_{23} - g_{13}g_{12}}{g_{22}} = \frac{-1 - 0 \cdot (-\sqrt{2}/2)}{\sqrt{3}/2} = -\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Primeiro, calculamos os elementos

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{2}, \quad g_{12} = \frac{a_{12}}{g_{11}} = \frac{-1}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{a_{13}}{g_{11}} = 0.$$

Depois, calculamos os elementos

$$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{2 - (1/2)} = \sqrt{\frac{3}{2}},$$

e

$$g_{23} = \frac{a_{23} - g_{13}g_{12}}{g_{22}} = \frac{-1 - 0 \cdot (-\sqrt{2}/2)}{\sqrt{3}/2} = -\sqrt{\frac{2}{3}}.$$

Finalmente, calculamos

$$g_{33} = \sqrt{a_{33} - g_{13}^2 - g_{23}^2} = \sqrt{2 - 0^2 - 2/3} = \frac{\sqrt{2}}{3}.$$

Portanto, temos $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T\mathbf{G}$ em que

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

Vamos agora calcular a fatoração de Cholesky de **C**.

Vamos agora calcular a fatoração de Cholesky de **C**.
Primeiro, temos

$$g_{11} = \sqrt{6}, \quad g_{12} = \frac{c_{12}}{g_{11}} = \frac{4}{\sqrt{6}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{c_{13}}{g_{11}} = \frac{-3}{\sqrt{6}}.$$

Vamos agora calcular a fatoração de Cholesky de **C**. Primeiro, temos

$$g_{11} = \sqrt{6}, \quad g_{12} = \frac{c_{12}}{g_{11}} = \frac{4}{\sqrt{6}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{c_{13}}{g_{11}} = \frac{-3}{\sqrt{6}}.$$

Depois, precisamos calcular

$$g_{22} = \sqrt{c_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{-2 - 4^2/6}.$$

Vamos agora calcular a fatoração de Cholesky de **C**.
Primeiro, temos

$$g_{11} = \sqrt{6}, \quad g_{12} = \frac{c_{12}}{g_{11}} = \frac{4}{\sqrt{6}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{c_{13}}{g_{11}} = \frac{-3}{\sqrt{6}}.$$

Depois, precisamos calcular

$$g_{22} = \sqrt{c_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{-2 - 4^2/6}.$$

Note que devemos calcular a raiz de um número negativo, o que não é possível usando os números reais.

Vamos agora calcular a fatoração de Cholesky de **C**.
Primeiro, temos

$$g_{11} = \sqrt{6}, \quad g_{12} = \frac{c_{12}}{g_{11}} = \frac{4}{\sqrt{6}} \quad \text{e} \quad g_{13} = \frac{c_{13}}{g_{11}} = \frac{-3}{\sqrt{6}}.$$

Depois, precisamos calcular

$$g_{22} = \sqrt{c_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{-2 - 4^2/6}.$$

Note que devemos calcular a raiz de um número negativo, o que não é possível usando os números reais.

Logo, embora simétrica, a matriz **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!

[1] `from scipy.linalg import cholesky.`

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!

[1] `from scipy.linalg import cholesky`.

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. $\mathbf{G}^T\mathbf{y} = \mathbf{b}$.
2. $\mathbf{Gx} = \mathbf{y}$.

[1] `from scipy.linalg import cholesky`.

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. $\mathbf{G}^T\mathbf{y} = \mathbf{b}$.
2. $\mathbf{Gx} = \mathbf{y}$.

No `Python`, a fatoração de Cholesky de uma matriz $\mathbf{A}$ simétrica e definida positiva é obtida através do comando:

```
» G = cholesky(A)
```

da biblioteca `Scipy`[1].

[1] `from scipy.linalg import cholesky`.

Parte 2

Condicionamento de uma Matriz

Nas primeiras aulas, falamos sobre os erros de arredondamento na representação de ponto flutuante e suas operações aritméticas.

Nas primeiras aulas, falamos sobre os erros de arredondamento na representação de ponto flutuante e suas operações aritméticas.

Em termos gerais, erros sempre existirão quando resolvemos um problema contínuo (e.g. em $\mathbb{R}$) num computador.

Nas primeiras aulas, falamos sobre os erros de arredondamento na representação de ponto flutuante e suas operações aritméticas.

Em termos gerais, erros sempre existirão quando resolvemos um problema contínuo (e.g. em $\mathbb{R}$) num computador.

Consequentemente, um método numérico raramente produz a solução exata de um problema matemático contínuo.

Nas primeiras aulas, falamos sobre os erros de arredondamento na representação de ponto flutuante e suas operações aritméticas.

Em termos gerais, erros sempre existirão quando resolvemos um problema contínuo (e.g. em $\mathbb{R}$) num computador.

Consequentemente, um método numérico raramente produz a solução exata de um problema matemático contínuo.

Na aula de hoje, veremos quando o arredondamento em ponto flutuante e suas operações aritméticas influenciam na credibilidade do resultado produzido por um método para a resolução de um sistema linear.

Nas primeiras aulas, falamos sobre os erros de arredondamento na representação de ponto flutuante e suas operações aritméticas.

Em termos gerais, erros sempre existirão quando resolvemos um problema contínuo (e.g. em $\mathbb{R}$) num computador.

Consequentemente, um método numérico raramente produz a solução exata de um problema matemático contínuo.

Na aula de hoje, veremos quando o arredondamento em ponto flutuante e suas operações aritméticas influenciam na credibilidade do resultado produzido por um método para a resolução de um sistema linear.

Iniciaremos apresentando a definição de norma, conceito matemático utilizado para medir tamanho ou distância.

Norma Vetorial

Norma Vetorial

Uma norma vetorial associa um vetor $\mathbf{x} \in [x_1, \ldots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ à um número real não-negativo denotado por $\|\mathbf{x}\|$.

Exemplos de normas vetorais incluem:

- $$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| = |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n|.$$

Norma Vetorial

Norma Vetorial

Uma norma vetorial associa um vetor $\mathbf{x} \in [x_1, \ldots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ à um número real não-negativo denotado por $\|\mathbf{x}\|$.

Exemplos de normas vetorais incluem:

- $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| = |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n|.$
- $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2}.$ (norma Euclidiana)

Norma Vetorial

Norma Vetorial

Uma norma vetorial associa um vetor $\mathbf{x} \in [x_1, \ldots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ à um número real não-negativo denotado por $\|\mathbf{x}\|$.

Exemplos de normas vetorais incluem:

- $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| = |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n|$.
- $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2}$. (norma Euclidiana)
- $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{i=1:n}\{|x_i|\} = \max\{|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_n|\}$.

Exemplo 6

Para o vetor $\mathbf{x} = [3, -4]^T$, temos:

$$\|\mathbf{x}\|_1 = |3| + |-4| = 7,$$
$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{3^2 + (-4)^2} = 5,$$
$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|3|, |-4|\} = 4.$$

Exemplo 6

Para o vetor $\mathbf{x} = [3, -4]^T$, temos:

$$\|\mathbf{x}\|_1 = |3| + |-4| = 7,$$
$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{3^2 + (-4)^2} = 5,$$
$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|3|, |-4|\} = 4.$$

No `python`, podemos calcular as normas $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_2$ e $\|\cdot\|_\infty$ de um vetor $\mathbf{x}$ usando os comandos da biblioteca `numpy (np)`:

» `np.linalg.norm(x,1)`

» `np.linalg.norm(x)` ou » `np.linalg.norm(x,2)`

» `np.linalg.norm(x,np.inf)`

respectivamente.

Norma Matricial

Norma Matricial

Uma norma matricial associa um matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ à um número real não-negativo denotado por $\|\mathbf{A}\|$.

Exemplos de normas matriciais incluem:

- A norma de Frobenius de uma matriz $\mathbf{A}$ é dada por:

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2}.$$

Usando a biblioteca `numpy (np)` em `python`, o comando `np.linalg.norm(A)` fornece a norma de Frobenius de $\mathbf{A}$.

- $\|\mathbf{A}\|_1$ é o valor máximo da soma dos valores absolutos das colunas de $\mathbf{A}$, ou seja,

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max\{\|\mathbf{a}_1\|_1, \ldots, \|\mathbf{a}_n\|_1\} = \max_{j=1:n} \left\{ \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}| \right\}.$$

No `python`, usamos o comando `np.linalg.norm(A,1)`.

- $\|\mathbf{A}\|_2$ é o maior valor singular de matriz $\mathbf{A}$. No `python`, usamos o comando `np.linalg.norm(A,2)`.
- $\|\mathbf{A}\|_\infty$ é o valor máximo da soma dos valores absolutos das linhas de $\mathbf{A}$, ou seja,

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max\{\|\mathbf{a}_1^T\|_1, \ldots, \|\mathbf{a}_m^T\|_1\} = \max_{i=1:m} \left\{ \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right\},$$

em que $\mathbf{a}_i^T$ denota a i-ésima linha de $\mathbf{A}$. No `python`, usamos o comando `np.linalg.norm(A,inf)`.

Erro Absoluto e Erro Relativo

Suponha que resolvemos um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, em que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz não-singular e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, usando um método numérico como, por exemplo, o método da eliminação de Gauss.

Erro Absoluto e Erro Relativo

Suponha que resolvemos um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, em que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz não-singular e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, usando um método numérico como, por exemplo, o método da eliminação de Gauss.

Vamos denotar por $\tilde{\mathbf{x}}$ a solução encontrada pelo método numérico e $\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ a solução exata.

Erro Absoluto e Erro Relativo

Suponha que resolvemos um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, em que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz não-singular e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, usando um método numérico como, por exemplo, o método da eliminação de Gauss.

Vamos denotar por $\tilde{\mathbf{x}}$ a solução encontrada pelo método numérico e $\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ a solução exata.

Para avaliar a qualidade da solução produzida pelo método numérico, comparamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ com a solução exata $\mathbf{x}^*$ usando uma norma vetorial. Especificamente, calculamos o erro absoluto E_a ou o erro relativo E_r dados por:

$$E_a = \|\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}\| \quad \text{e} \quad E_r = \frac{\|\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}^*\|}.$$

Resíduo

Na prática, não conhecemos a solução exata $\mathbf{x}^*$ do sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Portanto, não podemos calcular o erro.

Resíduo

Na prática, não conhecemos a solução exata $\mathbf{x}^*$ do sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Portanto, não podemos calcular o erro.

Como alternativa, calculamos o chamado **resíduo absoluto** R_a ou o **resíduo relativo** R_r definidos por

$$R_a = \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\| \quad \text{e} \quad R_r = \frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{b}\|}.$$

Resíduo

Na prática, não conhecemos a solução exata $\mathbf{x}^*$ do sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Portanto, não podemos calcular o erro.

Como alternativa, calculamos o chamado **resíduo absoluto** R_a ou o **resíduo relativo** R_r definidos por

$$R_a = \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\| \quad \text{e} \quad R_r = \frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{b}\|}.$$

Em algumas situações, é conveniente definir os vetores

$$\mathbf{e} = \mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}} \quad \text{e} \quad \mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}},$$

chamados respectivamente **erro** e **resíduo**.

Matriz Gerada Aleatoriamente

Para valiar a qualidade da solução de um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ produzida pelo método da eliminação de Gauss, geramos uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$ cujos elementos a_{ij} possuem distribuição normal padrão.

Matriz Gerada Aleatoriamente

Para valiar a qualidade da solução de um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ produzida pelo método da eliminação de Gauss, geramos uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100\times 100}$ cujos elementos a_{ij} possuem distribuição normal padrão.

Além disso, definimos $\mathbf{x}^* = [1, \ldots, 1]^T$ e $\mathbf{b} = \mathbf{Ax}^*$.

Matriz Gerada Aleatoriamente

Para valiar a qualidade da solução de um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ produzida pelo método da eliminação de Gauss, geramos uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$ cujos elementos a_{ij} possuem distribuição normal padrão.

Além disso, definimos $\mathbf{x}^* = [1, \ldots, 1]^T$ e $\mathbf{b} = \mathbf{Ax}^*$.

Determinamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ usando o método da eliminação de Gauss e calculamos o erro e o resíduo relativo.

Matriz Gerada Aleatoriamente

Para valiar a qualidade da solução de um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ produzida pelo método da eliminação de Gauss, geramos uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$ cujos elementos a_{ij} possuem distribuição normal padrão.

Além disso, definimos $\mathbf{x}^* = [1, \ldots, 1]^T$ e $\mathbf{b} = \mathbf{Ax}^*$.

Determinamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ usando o método da eliminação de Gauss e calculamos o erro e o resíduo relativo.

Repetimos o processo 1000 vezes. A média dos erros e resíduos relativos foram 6.10×10^{-14} e 1.54×10^{-15}, respectivamente.

Matriz Gerada Aleatoriamente

Para valiar a qualidade da solução de um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ produzida pelo método da eliminação de Gauss, geramos uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100\times 100}$ cujos elementos a_{ij} possuem distribuição normal padrão.

Além disso, definimos $\mathbf{x}^* = [1, \ldots, 1]^T$ e $\mathbf{b} = \mathbf{Ax}^*$.

Determinamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ usando o método da eliminação de Gauss e calculamos o erro e o resíduo relativo.

Repetimos o processo 1000 vezes. A média dos erros e resíduos relativos foram 6.10×10^{-14} e 1.54×10^{-15}, respectivamente.

Note que o resíduo forneceu uma boa estimativa para o erro!

Comandos do `python`

```python
import numpy as np
Er = list()
Rr = list()
for i in range(1000):
  A = np.random.randn(100,100)
  xs = np.ones((100,1))
  b = A@xs
  xt = np.linalg.solve(A,b)
  Ea = np.linalg.norm(xs-xt)
  Er.append(Ea/np.linalg.norm(xs))
  Ra = np.linalg.norm(b-A@xt)
  Rr.append(Ra/np.linalg.norm(b))
np.mean(Er),np.mean(Rr)
```

Matriz de Hilbert

Considere a matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100\times 100}$ cujos elementos são

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

Matriz de Hilbert

Considere a matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100\times 100}$ cujos elementos são

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

Definimos $\mathbf{x}^* = [1,\ldots,1]^T$, $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}^*$ e determinamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ usando o método da eliminação de Gauss.

Matriz de Hilbert

Considere a matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100\times 100}$ cujos elementos são

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

Definimos $\mathbf{x}^* = [1, \ldots, 1]^T$, $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}^*$ e determinamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ usando o método da eliminação de Gauss.

O erro relativo e o resíduo relativo foram

$$E_r = \frac{\|\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}\|_2}{\|\mathbf{x}^*\|_2} = 78.19 \quad \text{e} \quad R_r = \frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} = 1.71 \times 10^{-15}.$$

Matriz de Hilbert

Considere a matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{100\times 100}$ cujos elementos são

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

Definimos $\mathbf{x}^* = [1,\ldots,1]^T$, $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}^*$ e determinamos a solução numérica $\tilde{\mathbf{x}}$ usando o método da eliminação de Gauss.

O erro relativo e o resíduo relativo foram

$$E_r = \frac{\|\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}\|_2}{\|\mathbf{x}^*\|_2} = 78.19 \quad \text{e} \quad R_r = \frac{\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} = 1.71 \times 10^{-15}.$$

Ao contrário do exemplo anterior, temos resíduo relativo muito pequeno mas um erro relativo grande.

Comandos do `python`

```python
import numpy as np
from scipy.linalg import hilbert

A = hilbert(100)
xs = np.ones((100,1))
b = A@xs
xt = np.linalg.solve(A,b)

Ea = np.linalg.norm(xs-xt)
Er = Ea/np.linalg.norm(xs)
Ra = np.linalg.norm(b-A@xt)
Rr = Ra/np.linalg.norm(b)

Er, Rr
```

Sistemas Lineares Mal-Condicionados

Em termos gerais, um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ é mal-condicionado se pequenas perturbações na matriz $\mathbf{A}$ ou no vetor $\mathbf{b}$ causam grandes variações na solução.

Sistemas Lineares Mal-Condicionados

Em termos gerais, um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ é mal-condicionado se pequenas perturbações na matriz $\mathbf{A}$ ou no vetor $\mathbf{b}$ causam grandes variações na solução.

Nesse caso, devido aos erros na representação e operações de pontos flutuantes, não devemos esperar uma solução precisa de um método numérico!

Sistemas Lineares Mal-Condicionados

Em termos gerais, um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ é mal-condicionado se pequenas perturbações na matriz $\mathbf{A}$ ou no vetor $\mathbf{b}$ causam grandes variações na solução.

Nesse caso, devido aos erros na representação e operações de pontos flutuantes, não devemos esperar uma solução precisa de um método numérico!

Além disso, num sistema linear mal-condicionado, o resíduo pode não revelar a natureza do erro!

Sistemas Lineares Mal-Condicionados

Em termos gerais, um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ é mal-condicionado se pequenas perturbações na matriz $\mathbf{A}$ ou no vetor $\mathbf{b}$ causam grandes variações na solução.

Nesse caso, devido aos erros na representação e operações de pontos flutuantes, não devemos esperar uma solução precisa de um método numérico!

Além disso, num sistema linear mal-condicionado, o resíduo pode não revelar a natureza do erro!

O condicionamento de uma matriz $\mathbf{A}$ é definido em termos de sua norma e a norma de sua inversa.

Número de Condição de uma Matriz

O número de condição de uma matriz $\mathbf{A}$, também chamado condicionamento de $\mathbf{A}$, é definido por

$$cond(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|.$$

Relação entre E_r e R_r:

Vale a relação entre o erro relativo e o resíduo relativo:

$$E_r \leqslant cond(\mathbf{A})R_r.$$

- Se $cond(\mathbf{A})$ é próximo de 1, o erro relativo E_r e o resíduo relativo R_r tem magnitudes semelhantes.

Número de Condição de uma Matriz

O número de condição de uma matriz $\mathbf{A}$, também chamado condicionamento de $\mathbf{A}$, é definido por

$$cond(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|.$$

Relação entre E_r e R_r:

Vale a relação entre o erro relativo e o resíduo relativo:

$$E_r \leqslant cond(\mathbf{A})R_r.$$

- Se $cond(\mathbf{A})$ é próximo de 1, o erro relativo E_r e o resíduo relativo R_r tem magnitudes semelhantes.
- Se $cond(\mathbf{A})$ é grande, o erro relativo pode ser muito maior que o resíduo relativo.

O número de condição de uma matriz **A** pode ser calculada no `python` usando a biblioteca `numpy` comando:

```
» np.linalg.cond(A)
```

O número de condição de uma matriz **A** pode ser calculada no `python` usando a biblioteca `numpy` comando:

```
» np.linalg.cond(A)
```

Calculamos o condicionamento da matriz de Hilbert como segue:

```
» np.linalg.cond(hilbert(100))
1.15e+20
```

O número de condição de uma matriz **A** pode ser calculada no `python` usando a biblioteca `numpy` comando:

```
» np.linalg.cond(A)
```

Calculamos o condicionamento da matriz de Hilbert como segue:

```
» np.linalg.cond(hilbert(100))
1.15e+20
```

Com base nos números do exemplo anterior, temos

$$\underbrace{78.19}_{E_r} \leqslant \underbrace{1.15 \times 10^{20}}_{cond(\mathbf{A})} \cdot \underbrace{1.71 \times 10^{-15}}_{R_r} = 1.98 \times 10^5.$$

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos a fatoração de Cholesky: Uma matriz simétrica ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$) e definida positiva ($\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$) é escrita como $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T\mathbf{G}$, em que $\mathbf{G}$ é triangular superior.

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos a fatoração de Cholesky: Uma matriz simétrica ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$) e definida positiva ($\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$) é escrita como $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T\mathbf{G}$, em que $\mathbf{G}$ é triangular superior.

Na aula de hoje apresentamos também os conceitos de norma vetorial e norma matricial; e mostramos como esses conceitos podem ser usados para determinar o erro relativo de um sistema linear.

Considerações Finais

Na aula de hoje apresentamos a fatoração de Cholesky: Uma matriz simétrica ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$) e definida positiva ($\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$) é escrita como $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T\mathbf{G}$, em que $\mathbf{G}$ é triangular superior.

Na aula de hoje apresentamos também os conceitos de norma vetorial e norma matricial; e mostramos como esses conceitos podem ser usados para determinar o erro relativo de um sistema linear.

Finalmente destacamos que se $cond(\mathbf{A})$ é grande, dizemos que a matriz é mal-condicionada. Nesse caso, não podemos confiar na solução fornecida por um método numérico.

Muito grato pela atenção!