3.3.4 Fatoração LU

$$A\underline{x} = \underline{b} \qquad A = LU$$

L – triangular inferior
U – triangular superior

Vamos observar o exemplo introdutório

$$A^{(0)}\begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 1 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 \end{bmatrix} \qquad \begin{aligned} &Pivo = 3 \\ &mult.\ M_{21} = 1/3 \\ & M_{31} = 4/3 \end{aligned}$$

$$A^{(1)}\begin{bmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 \\ 0 & 1/3 & -22/3 \end{bmatrix} \qquad pivo = 1/3 \quad mult.\ \ M_{32} = 1$$

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

Observe que a matriz $A^{(1)}$ pode ser obtida de $A^{(0)}$ pré-multiplicado-a por uma matriz conveniente, no caso:

$$M_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -M_{21} & 1 & 0 \\ -M_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1 & 0 \\ -4/3 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Da mesma forma a matriz $A^{(2)}$ é obtida pré-multiplicando-a por:

$$M_{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -M_{32} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Assim,

$$A^{(2)} = M_2 \; M_1 \; A^{(0)}$$

$A^{(2)}$ *é uma matriz triângular* sup *erior*.

$$A^{(0)} = M_1^{-1} \, M_2^{-1} \; A^{(0)}$$

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -M_{21} & 1 & 0 \\ -M_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -M_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \diagdown & & A^{(2)} \\ & \diagdown & \\ & & \diagdown \end{bmatrix}$$

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ M_{21} & 1 & 0 \\ M_{3} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & M_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \diagdown & & A^{(2)} \\ & \diagdown & \\ & & \diagdown \end{bmatrix}$$

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ M_{21} & 1 & 0 \\ M_{31} & M_{32} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \diagdown & & A^{(2)} \\ & \diagdown & \\ & & \diagdown \end{bmatrix}$$

$$A^{(0)} = L \; U$$

A matriz L é uma matriz triangular inferior, pois é resultante do produto de matrizes triangulares inferiores elementares.

A decomposição LU não é única..

Seja D uma matriz diagonal não singular qualquer, então:

$\overline{L} = LD$ é triangular inferior
$\overline{U} = D^{-1}U$ é triangular superior
$A = LU = L\,DD^{-1} = \overline{L}\,\overline{U}$

De modo que $\overline{L}\,\overline{U}$ também é uma decomposição *LU*. Isto sugere a possibilidade de se normalizar as decomposições *LU*.

Seja a transformação $A = LDU$

Onde: *L* é triangular inferior unitário (diagonal)
D é diagonal
U triangular superior unitária (diagonal)

Pode-se mostrar que a decomposição *LDU* de uma matriz *A* é única, se suas submatrizes principais guias $A^{[1]}, A^{[2]}, \ldots\ldots, A^{[n-1]}$ são todos não-singulares.

$$A \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots\ldots\ldots\ldots & a_{1\,n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots\ldots\ldots\ldots & a_{2n-1} & a_{2n} \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \ldots\ldots\ldots\ldots & a_{n-1\;n-1} & a_{n-1\,n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots\ldots\ldots\ldots & a_{n\;n-1} & a_{n\,n} \end{bmatrix}$$

isto garante pivôs não nulos.

$A = L_1 D_1 U_1$ $\qquad\qquad$ $A = L_2 D_2 U_2$

$$L_1 D_1 U_1 = L_2 D_2 U_2$$

L_1^{-1} *existe*

U_2^{-1} *existe*

D_1^{-1} *existe*

L_1 *Triang.*inf *erior unitário*

U_2 *Triang.Superior unitário*

$$D_1^{-1}\, L_1^{-1}\, L_1\, D_1\, U_1\, U_2^{-1} = D_1^{-1}\, L_1^{-1}\, D_2\, U_2\, U_2^{-1}$$

$$U_1\, U_2^{-1} = D_1^{-1}\, L_1^{-1}\, L_2\, D_2 \rightarrow triang.\text{sup}\,erior\ unitário$$

Produto de 2 matrizes triang. sup. unitário resulta matriz triang sup. unitário. Isto força o ser diagonal $\Rightarrow$ Identidade.

$U_1\, U_2^{-1} = I \qquad U_1 = U_2$ da mesma forma pode-se chegar $L_1 = L_2 \ e \ D_1 = D_2$.

Diferentes decomposições LU:

$\mathrm{A} = (LD)U = \overline{L}\,U \rightarrow$ onde: U é triângular superior unitário – **Decomposição de Crout**

$\mathrm{A} = L\,(DU) = L\overline{U} \rightarrow$ onde: L *é* triângular superior unitário – **Decomposição de Doolittle**

Se A for simétrica:

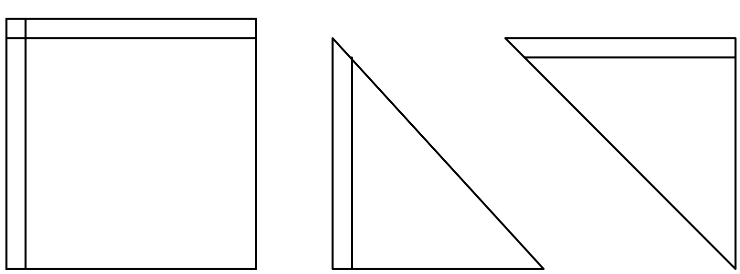
$$\mathrm{A} = LDL^{+}$$

$$se\ D > 0 \qquad D = {}^{1\!/\!2}\ D^{1\!/\!2}$$

$$A = \left(LD^{1\!/\!2}\right)\left(D^{1\!/\!2}U\right) = \overline{L}\,\overline{L}^{t} \rightarrow Decomposição\ de\ Cholesky$$

Algoritmo para Decomposição de Crout

$A = LU \rightarrow$ U *é* triângular superior com diagonal unitária



$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{mim\{i,j\}} l_{ik}\, u_{kj} \qquad i, j = 1, \ldots, n$$

Como $u_{11} = 1$:

$$a_{i1} = l_{i1}u_{11} = l_{i1}, \quad i = 1,....., n$$

ou seja a primeira coluna de é igual a primeira coluna de *L*.

Além disso:

$$a_{ij} = l_{11}u_{1j}$$

$$u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}} \qquad j = 1,.......n$$

Assim determinamos 1° linha de *U*.

Suponha que as primeiras (p –1) colunas de *L* e as primeiras (p – 1) linhas de *U* tenham sido calculadas e como $u_{kk} = 1$.

$$a_{ip} = l_{ip} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp} \qquad (i = p, p+1,.............n)$$

portanto a p^{esima} coluna de *L* é dada por:

$$l_{ip} = a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} U_{kp} \qquad (i = p, p+1,.....n)$$

Da mesma forma

$$a_{pj} = l_{pp} u_{pj} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} u_{kj} \qquad (j = p+1,....n)$$

onde

$$u_{pj} = \frac{1}{l_{pp}} \left(a_{pj} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pj} u_{kj} \right) (j = p+1,..n)$$

Observe que não há necessidade de calcular-se para j = p, pois, $u_{pp} = 1$.

OBS: Pode-se verificar que, após a_{ij} Ter sido utilizado para calcular l_{ij} *ou* u_{ij}, ele não é mais utilizado, assim, os elementos não nulos de L e U podem ser escritos sobre os elementos correspondentes de A.

Algoritmo para Redução de Crout: para p = 1, 2,.....,n:

1. $a_{ip} \leftarrow l_{ip} = a_{ip} - \sum_{k-1}^{p-1} l_{ik} u_{kp}, \qquad i = p,....., n$
2. $a_{pj} \leftarrow u_{pj} = l_{pp}^{-1} \left(a_{pj} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} U_{kj} \right), \qquad j = p+1,......n$

- Os elementos l_{pp} são pivôs na redução de Grauss e são $\neq 0$, se as submatrizes principais guias de *A* são não – singulares.
- Produtos internos devem ser acumulados em precisão dupla.

A utilização de pivôs pequenos podem provocar erros de arredondamento que contaminam significativamente a solução. Uma solução é utilizar o pivoteamento parcial, isto é, fazer uma pesquisa na coluna do pivô de forma a encontrar o elemento de maior valor absoluto. O elemento com maior valor absoluto é utilizado como pivô, para tanto, permuta-se a linha do elemento com a linha do pivô.

É importante observar que, quando forem executadas as etapas de substituição direta e inversa, as permutações realizada no pivotemameto devem ser realizados no vetor independente do sistema de equação linear.

Def. Matriz de Permutação

Matriz quadrada de ordem n obtida da matriz identidade de ordem n pela permutação de suas linhas.

A pré-multiplicação de uma matriz A por uma matriz de permutação P resulta em uma matriz A', obtida de A com a mesma seqüência de permutações de linhas , realizados na matriz P.

Seja o sistema linear $A\underline{x} = \underline{b}$ e sejam os fatores *LU* obtidos por redução de Crout com pivoteamento parcial. Portanto, *LU* são fatores de *A'*.

Onde:

$$A' = PA$$

As mesmas permutações devem ser efetuados sobre $\underline{b}$.

$$\underline{b}' = P\underline{b}$$

Algoritmo redução de Crout com permutação de linhas.

Para p=1, 2,.........n

1. $a_{ip} \leftarrow l_{ip} = a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} U_{kp} \qquad (i = p, ..., n)$
2. $Achar \;\; \rho_p \;\;\; tal \;\; que \; \left| l_{\rho_p, p} \right| \geq \left| l_{ip} \right| \;\; (i = p, ...n)$
3. $a_{pj} \;\leftarrow a_{\rho_p j} \; (j = 1,2, ...n)$
4. $a_{pj} \leftarrow u_{pj} = l_{pp}^{-1} \left(a_{p1} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} \; u_{kj} \right) (j = k+1, ...n)$

OBS: O algoritmo de Crout com pivoteamneto parcial pode ser considerado um algoritmo estável.

3.3.5 Decomposição de Cholesky

Considerandoo:

A Simétrica e definida positiva

Tem-se

$$A = LL^t$$

Teorema: Se A é simétrica positiva definida então existe uma única matriz L com elementos diagonais positivos tal que $A = LL^t$.

OBS 1: A matriz A é positiva definida se $\underline{x}^T A\underline{x} > 0$ para qualquer vetor $\underline{x}$ diferente de zero.
OBS 2: Os elementos diagonais de uma matriz definida positiva são sempre positivos.

$$e_i^T \; A e_i = a_{ii} \; > 0$$

e_i – vetor com elemento igual a 1 na posição i e o restante igual a zero.

A prova do teorema é feita por indução.

$$A = \begin{bmatrix} d & v^T \\ v & \overline{H} \end{bmatrix} \qquad onde: \; d \;\; escalar \;\; positiva \; e \; \overline{H} \;\; submatriz \; de \; ordem \;\; n-1 \times n-1$$

A matriz particionada pode ser escrito como o produto:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ \dfrac{v}{\sqrt{d}} & I_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{d} & v^T / \sqrt{d} \\ 0 & I_{n-i} \end{bmatrix}$$

$H = \overline{H} - \dfrac{vv^T}{d}$ a matriz H é simétrica e também positiva definida, pois para qualquer vetor $\underline{x}$ de comprimento n-1.

$$\begin{bmatrix} -\dfrac{\underline{x}^T v}{d}, \underline{x}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d & v^T \\ v & \overline{H} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\dfrac{\underline{x}^T v}{d} \\ \underline{x} \end{bmatrix} = \underline{x}^T \left(\overline{H} - \frac{vv^T}{d} \right) \underline{x} = \underline{x}^T H \underline{x}$$

$\underline{x}^T H \underline{x} > 0$, pois a matriz original é positiva definida por.

Por indução H, pode ser fatorado como $L_H\, L_H^T$ com elementos diagonais positivos. Portanto, A pode ser dada por:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ \frac{v}{\sqrt{d}} & I_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & o \\ o & L_H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L_H^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{d} & v^T \big/ \sqrt{d} \\ 0 & I_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ \frac{v}{\sqrt{d}} & L_H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{d} & \frac{v^T}{\sqrt{d}} \\ 0 & L_H^T \end{bmatrix} = LL^T$$

Para provar a unidade, tem-se:

$$A = \begin{bmatrix} d & v^T \\ v & \overline{H} \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$L = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ \underline{l^-} & \overline{L} \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$A = LL^T = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ \underline{l} & \overline{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & \underline{l}^T \\ 0 & \overline{L}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & \lambda \underline{l}^T \\ \lambda\, \underline{l} & \overline{L}\overline{L}^T \end{bmatrix} \quad (3)$$

De (1) e (3) tem-se:

$$\lambda^2 = d \qquad ou \qquad \lambda = \sqrt{d}$$

$$\lambda\, \underline{l}^T = v^T \qquad\qquad l^T = \frac{v^T}{\lambda}$$

$$\lambda l = v \qquad\qquad l = \frac{v}{\lambda}$$

Como podemos ver, os fatores $\underline{l}$ são únicos para λ positivo. Este procedimento pode ser estendido por indução aos fatores seguintes.

Computação dos fatores

Suponha a matriz particionado como $A = \begin{bmatrix} M & \underline{u} \\ \underline{u}^T & 5 \end{bmatrix}$ onde os fatores $L_M\, L_M^T$ da submatriz principal M já foram obtidos. Os fatores da matriz A podem se dado por:

$$\mathrm{A} = \begin{bmatrix} L_M & 0 \\ \underline{w^T} & t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_M^T & \underline{w} \\ 0 & t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M & \underline{u} \\ \underline{u}^T & s \end{bmatrix}$$

$$L_M\, \underline{w} = \underline{u}$$

$$\underline{w^T}\, \underline{w} + t^2 = s \quad \Rightarrow \quad t = (s - \underline{w^T}\, \underline{w})^{1/2}$$

Para i = 1, 2, ...n

Solucione $\begin{bmatrix} l_{11} & & & 0 & \\ . & . & & & \\ . & & . & & \\ . & & & . & \\ l_{i-1,1} & . & . & . & l_{i-1,i-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{i1} \\ \\ \\ \\ l_{i,i-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{i1} \\ \\ \\ \\ a_{i,i-1} \end{bmatrix}$

Compute $l_{ii} = \left[a_{ii} - \sum_{K=1}^{i-1} l_{ik}^2 \right]$

Exemplo 2x2.

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ w^T & t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & w \\ 0 & t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

$2w = 1 \qquad\qquad w = 1/2$

$w^T w + t^2 = 3$

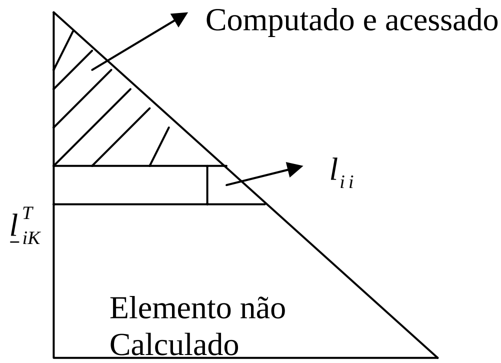
$t = \left(3 - w^t w\right)^{1/2} = \sqrt{11/4}$

$$\begin{bmatrix} 2 & \\ 1/2 & \sqrt{11/4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1/2 \\ & \sqrt{11/4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

$L_M \; \underline{w} = \underline{u}$

$$\begin{bmatrix} 2 & \\ 1/2 & \sqrt{11/4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$t = \left(5 - W^T W\right)^{1/2}$



Pela simetria de *A*, apenas é necessário se trabalhar com sua metade inferior. Além disso, os elementos de *L* podem ser escritos sobre os de *A*.

Algoritmo
Para K = 1, 2, ...n
1. $Para \quad i = 1, 2, ...K-1$

$$a_{Ki} \leftarrow l_{Ki} = \frac{1}{l_{ii}}\left(a_{Ki} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}\, l_{Kj}\right)$$

2. $a_{KK} \leftarrow l_{KK} = \sqrt{a_{KK} - \sum_{j=1}^{K-1} l_{kj}^2}$

OBS: A decomposição de Cholesky requer $n^3/6$ multiplicações, isto é, a metade das exigidas pela redução de Crout. Os produtos internos devem ser acumulados em precisão dupla, para se obter exatidão adicional.
O algoritmo de Cholesky é incondicionalmente estável. Como *A* é positiva definida, não há necessidade de pivoteamento, pois neste caso ela sempre é diagonal dominante.

3.4 Solução de Sistemas Lineares

A partir das decomposições de Crout e Cholesky vistas anteriormente, pode-se resolver os sistemas lineares através de substituições.

Seja o sistema Linear:

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

3.4.1 Decomposição LU

$$PA = LU$$

$$LU\,\underline{x} = P\underline{b}$$

Substituição Direta

$$L\underline{y} = P\underline{b} = \underline{b}^{'}$$

Substituição Inversa

$$U\underline{x} = \underline{y}$$

Substituição Direta

$$L\underline{y} = P\underline{b} = \underline{b}^{'}$$

Atualização por linhas

$$y_i = \left(\underline{b}_i^{'} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right) / l_{ii} \qquad i = 1, 2, ...n$$

Substituição Inversa $\quad U\underline{x} = \underline{y}$

$$x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) \qquad i = n-1, ..., 1$$

Substituição Direta

Atualização por colunas.

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & \\ l_{21} & l_{22} & \\ & & \\ l_{n1} & & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^1 \\ b_2 \\ \\ b_n \end{bmatrix}$$

Coluna 1

$$b_1^{'} = \frac{b_1}{l_{11}}$$

$$b_2^{'} = b_2^{'} - l_{21} b_1^{'}$$

$$b_3^{''} = b_3^{'} - l_{31} b_1^{'}.$$

$$\vdots$$

$$b_n^{''} = b_n^{'} - l_{n1} b_1^{'}$$

Coluna 2

$$b_2^{'} = \frac{b'_2}{l_{22}}$$

$$b_3 = b_3 - l_{32} b'_2$$

$$\vdots$$

$$b'_n = b_n - l_{n2} b'_2$$

Coluna n

$$b'_n = \frac{b'_n}{l_{nn}}$$

No final $\underline{y} = \underline{b}'$, observe que as atualizações foram feitas por colunas.

Algoritmo para atualização por colunas

$Para \quad j = 1.......n-1$

$b'_j = b'_j / l_{jj}$

$Para \quad k = j+1, n$

$b'_K = b'_K - b'_j \, l_{kj}$

Continue

Continue

$b'_n = {b'_n}/{l_{nn}}$

$\underline{y} = \underline{b}'$

As substituições direta e inversa requerem η^2 multiplicações.

3.4.2 Decomposição de Cholesky

Neste caso não há necessidade de utilizar permutações.

$$A = LL^T$$

$$LL^T \underline{x} = \underline{b}$$

Substituições direta $L\underline{Y} = \underline{b}$

Substituições Inversa $L^T \underline{x} = \underline{y}$