Sistemas Lineares (SLs)

Álgebra Linear Computacional - Fabricio Murai

Aula anterior

- Fundamentos teóricos do PCA
  - Matriz de covariância
  - Mudança de base
  - Maximização da variância (minimização do ruído)
  - Relação entre SVD e PCA

Aula de hoje

- Existência e unicidade de soluções
- Perspectiva geométrica de SLs
- Perspectiva vetorial de SLs
- Exemplos de matrizes escalonadas
    - Matriz quadrada: posto, autovalores e determinante
- Solução de sistemas triangulares

Este sistema linear possui solução?

$$\begin{aligned} x + y + z &= 3 \\ x + 2y + 3z &= 0 \\ x + 3y + 4z &= -2 \end{aligned} \longleftrightarrow \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 1 & 3 & 4 & -2 \end{array}\right| \longleftrightarrow \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 2 & -3 \\ 0 & 2 & 3 & -5 \end{array}\right| \longleftrightarrow \left|\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 6 \\ 0 & 1 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{array}\right|$$

Resposta: Sim, pois é possível obter um sistema equivalente do tipo Ux=d, onde U é triangular superior, cuja solução é única.

Teorema fundamental

Para qualquer SL de equações Ax=b, vale uma de 3 possibilidades:

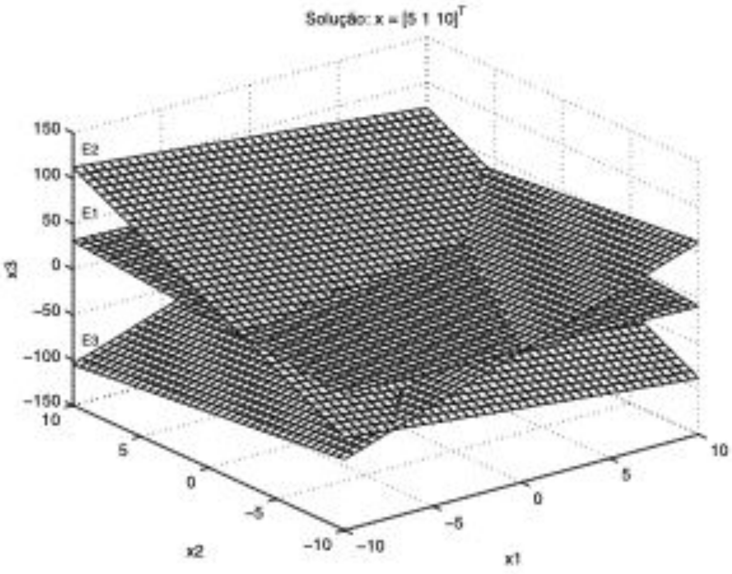
- É inconsistente (não possui solução)
- É consistente:
  - Possui uma única solução
  - Possui infinitas soluções

Objetivo de aprendizagem: entender a intuição geométrica de por que não existem sistemas com número finito (maior que 1) de soluções.

Perspectiva: interseção de hiperplanos

Sistema com 3 equações 3 variáveis:

$$\begin{vmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & 1 \\ -20 & 5 & 3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 22 \\ -12 \\ -65 \end{vmatrix}$$



$$x = [5, 1, 10]^\top$$

Fonte: CAMPOS, filho. Algoritmos Numéricos. 3a. edição.

Perspectiva: SL como combinação linear

Encontrar a solução x para $A_{mxn}x_{nx1} = b_{mx1}$ equivale a encontrar a combinação linear das colunas de A que satisfazem:

$$x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + \ldots + x_n\mathbf{a}_n = \mathbf{b}$$

Pergunta: Quando existe solução?

Resposta: Quando b está no espaço S de colunas de A

$$S = \{x_1\mathbf{a}_1 + \ldots + x_n\mathbf{a}_n | x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}\}$$

Objetivo de aprendizagem: entender a relação entre o espaço de colunas de A e a solução de Ax=b.

Exemplos de matrizes escalonadas

Quiz: posto e existência

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad N = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- Mx = b

  gorda; posto de linha completo; infinitas soluções p/ qualquer b (2 vars livres)

- Nx = b

  magra; posto de coluna completo; inconsistente p/ alguns b e solução única p/ outros

- Px = b

  quadrada; posto incompleto; inconsistente p/ alguns b e infinitas p/ outros

Objetivo de aprendizagem: entender a relação entre o posto de linha e a existência de solução e a relação entre posto de coluna e unicidade da solução.

Caso particular: matriz quadrada

Fatos importantes sobre matriz quadrada A_{nxn}:

- Posto é igual ao número de autovalores não-nulos
- Produto dos autovalores é igual ao determinante

$$\det(\mathbf{A}) = \prod_i \lambda_i$$

- Soma dos autovalores é igual ao traço(A)

$$\text{traço}(\mathbf{A}) = \sum_i \lambda_i$$

Objetivo de aprendizagem: conhecer as relações entre determinante, traço, posto e autovalores de uma matriz quadrada.

Perguntas sobre matrizes quadradas

- Qual a relação entre posto e determinante?

$$\text{posto}(A) = n \iff \det(\mathbf{A}) \neq 0$$

- Para todo b, Ax=b tem solução única. Qual posto(A)? Qual a solução x?

$$\text{posto}(\mathbf{A}) = n$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

Determinante pela expansão de Laplace

Cofator i,j da matriz B: $C_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$,

onde Mij é o menor i,j de B (determinante da matriz (n-1)x(n-1) que resulta ao deletar a linha i e coluna j)

Teorema. O determinante |B| da matriz B_{nxn} é dado por

$$
\begin{aligned}
|B| &= b_{i1}C_{i1} + b_{i2}C_{i2} + \cdots + b_{in}C_{in} \\
&= b_{1j}C_{1j} + b_{2j}C_{2j} + \cdots + b_{nj}C_{nj} \\
&= \sum_{j'=1}^{n} b_{ij'}C_{ij'} = \sum_{i'=1}^{n} b_{i'j}C_{i'j}
\end{aligned}
$$

Objetivo de aprendizagem: conhecer a expansão de Laplace e a complexidade computacional do cálculo do determinante através dela.

Determinante pela expansão de Laplace

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}.$$

Usando a Linha 1:

$$|B| = 1 \cdot \begin{vmatrix} 5 & 6 \\ 8 & 9 \end{vmatrix} - 2 \cdot \begin{vmatrix} 4 & 6 \\ 7 & 9 \end{vmatrix} + 3 \cdot \begin{vmatrix} 4 & 5 \\ 7 & 8 \end{vmatrix}$$

Usando a Coluna 2:

$$|B| = -2 \cdot \begin{vmatrix} 4 & 6 \\ 7 & 9 \end{vmatrix} + 5 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 7 & 9 \end{vmatrix} - 8 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 4 & 6 \end{vmatrix}$$

COLA

$$\begin{aligned} |B| &= b_{i1}C_{i1} + b_{i2}C_{i2} + \cdots + b_{in}C_{in} \\ &= b_{1j}C_{1j} + b_{2j}C_{2j} + \cdots + b_{nj}C_{nj} \\ &= \sum_{j'=1}^{n} b_{ij'}C_{ij'} = \sum_{i'=1}^{n} b_{i'j}C_{i'j} \end{aligned}$$

O que podemos dizer sobre o posto de B?

Sistemas triangulares

Lx=c é dito **sistema triangular inferior** quando L é triangular inferior.

Pode ser resolvido pelo método das substituições sucessivas.

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{c_1}{l_{11}} \\
x_2 &= \frac{c_2 - l_{21}x_1}{l_{22}} \\
\ldots &= \ldots \\
x_i &= \frac{c_i - l_{i1}x_1 - l_{i2}x_2 - \ldots l_{i,i-1}x_{i-1}}{l_{ii}}
\end{aligned}
$$

Objetivo de aprendizagem: aprender a identificar e resolver sistemas triangulares.

Método das substituições sucessivas

Entrada: matriz triangular inferior L_{nxn}, vetor c_{nx1}

Saída: vetor solução x_{nx1}

```
Para i=1 até n:
    Soma = 0
    Para j=1 até i-1:
        Soma += L[i,j]*x[j]
    x[i] = (c[i] - soma)/L[i,i]
Retorna x
```

Objetivo de aprendizagem: aprender a implementar o método das substituições sucessivas e sua complexidade.

Método das substituições sucessivas

Entrada: matriz triangular inferior L_{nxn}, vetor c_{nx1}

Saída: vetor solução x_{nx1}

```
Para i=1 até n:
    soma = 0
    Para j=1 até i-1:
        soma += L[i,j]*x[j]
    x[i] = (c[i]-Soma)/L[j,j]
Retorna x
```

Quantas adições, multiplicações e divisões?

Sistemas triangulares

Ux=d é dito **sistema triangular superior** quando U é triangular superior.

Pode ser resolvido pelo método das substituições retroativas.

$$x_n = \frac{d_n}{u_{nn}}$$

$$x_{n-1} = \frac{d_{n-1} - u_{n-1,n}x_n}{u_{nn}}$$

$$\ldots = \ldots$$

$$x_i = \frac{d_i - u_{i,i+1}x_{i+1} - u_{i,i+2}x_{i+2} - \ldots u_{i,n}x_{i,n}}{u_{ii}}$$

Quando Ax=b possui solução?

Relação entre posto de A_{mxn} e posto da matriz aumentada $A|b$

- posto(A) = posto(A|b): consistente (possui solução)
  - posto(A) = n: solução única
  - posto(A) < n: infinitas soluções
- posto (A) < posto(A|b): inconsistente (não possui solução)

Aula anterior

- Existência e unicidade de soluções
- Perspectiva geométrica de SLs
- Perspectiva vetorial de SLs
- Exemplos de matrizes escalonadas
  - Matriz quadrada: posto, autovalores e determinante
- Solução de sistemas triangulares

Aula de hoje

- Como transformar Ax=b em Ux=d?
  - Operações L-elementares
- Implementação da Eliminação de Gauss
  - Cálculo do número de operações
- Quando a Eliminação falha
  - Pivotação parcial

Como transformar $Ax=b$ em $Ux=d$?

Operações L-elementares

Usada para transformar $Ax=b$ em um **sistema equivalente** $Bx=c$ (mesma solução):

- Trocar linhas i e j   det(B) = -det(A)
- Multiplicar uma linha por $c \neq 0$ det(B) = c det(A)
- Adicionar s vezes linha i à linha j   det(B) = det(A)

Quanto vale det(B) após Eliminação de Gauss?

Objetivo de aprendizagem: conhecer as operações L-triangulares e seu efeito no determinante.

Eliminação de Gauss

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 6 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \\ -15 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \\ -36 \end{bmatrix}.$$

Dispositivo Prático (CAMPOS, filho 2018).

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4		0	$\underline{2}$	3	7	$2L_1 + L_2$
5	$m_{32} = 6/2 = 3$	0	6	-3	-15	$-4L_1 + L_3$
6		0	0	$\underline{-12}$	-36	$-3L_4 + L_5$

Qual o determinante?

Objetivo de aprendizagem: reconhecer os multiplicadores envolvidos na Eliminação de Gauss; calcular o determinante de uma matriz usando escalonamento.

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	pivô A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2		-2	8	-1	-15	
3		4	-6	5	29	
4						
5						
6						

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4						
5						
6						

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4						$2L_1 + L_2$
5						
6						

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4		0	$\underline{2}$	3	7	$2L_1 + L_2$
5						
6						

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4		0	$\underline{2}$	3	7	$2L_1 + L_2$
5		0	6	-3	-15	$-4L_1 + L_3$
6						

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4		0	$\underline{2}$	3	7	$2L_1 + L_2$
5	$m_{32} = 6/2 = 3$	0	6	-3	-15	$-4L_1 + L_3$
6						

Eliminação de Gauss: dispositivo prático

L	Multiplicador	A			b	Operações
1		$\underline{1}$	-3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1	-15	
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5	29	
4		0	$\underline{2}$	3	7	$2L_1 + L_2$
5	$m_{32} = 6/2 = 3$	0	6	-3	-15	$-4L_1 + L_3$
6		0	0	$\underline{-12}$	-36	$-3L_4 + L_5$

.

Eliminação de Gauss: Implementação v1

Entrada: A_{nxn}, b_{nx1}

Saída: U_{nxn}, d_{nx1}

```
U = A.copy()
d = b.copy()
Para j=1 até n-1:
    Para i=j+1 até n:
        M = U[i,j]/U[j,j]
        Para k=j até n:
            U[i,k] = -M*U[j,k] + U[i,k]
        d[i] = -M*d[j]+d[i]
Retorna U,d
```

Objetivo de aprendizagem: aprender a implementar a Eliminação de Gauss.

Eliminação de Gauss: Implementação v1

Entrada: A_{nxn}, b_{nx1}

Saída: U_{nxn}, d_{nx1}

Como reduzir o número de divisões?

Posso pular k=j?

```
U=A.copy()
d=b.copy()
Para j=1 até n-1:
    R = 1/U[j,j]
    Para i=j+1 até n:
        m = U[i,j]*r
        for k=j+1 até n:
            U[i,k] = U[i,k]-m*U[j,k]
        d[i] = d[i]-m*d[j]
retorna triu(U), d
```

Objetivo de aprendizagem: reconhecer as diferenças nos custos de diferentes operações algébricas e oportunidades para otimização.

Eliminação de Gauss: Implementação v2

Entrada: A_{nxn}, b_{nx1}

Saída: U_{nxn}, d_{nx1}

```
U=A.copy()
d=b.copy()
Para j=1 até n-1:
    r = 1/U[j,j]
    Para i=j+1 até n:
        m = U[i,j]*r
        U[i,j+1:] = U[i,j+1:]-m*U[j,j+1:]
        d[i] = d[i]-m*d[j]
retorna triu(U), d
```

Como reduzir o tempo de execução?

Eliminação de Gauss: Implementação v3

Entrada: A_{nxn}, b_{nx1}

Saída: U_{nxn}, d_{nx1}

```
U=A.copy()
d=b.copy()
Para j=1 até n-1:
    r = 1/U[j,j]
    Para i=j+1 até n:
        m = U[i,j]*r
        U[i,j+1:n] = U[i,j+1:n]-m*U[j,j+1:n]
        d[i] = d[i]-m*d[j]
retorna triu(U), d
```

Complexidade da Eliminação de Gauss

Quantas divisões, adições (+ ou -) e multiplicações **no cálculo de U**?

Divisões: n-1

Adições:

$$\sum_{a=1}^{n-1} a^2 = \frac{(n-1)n(2n-1)}{6}$$

$$= \frac{n^3}{3} - \frac{n^2}{2} + \frac{n}{6}$$

j=1
i=2
k=2
…
k=n
…
i=n

$(n-1)^2$ vezes

j=2
i=3
k=3
…
k=n
…
i=n

$(n-2)^2$ vezes

j=n-1
i=n
i=n

1^2 vezes

Objetivo de aprendizagem: calcular o custo computacional da Eliminação de Gauss.

Complexidade da Eliminação de Gauss

Quantas divisões, adições (+ ou -) e multiplicações **no cálculo de U**?

Divisões: n-1

Adições: $\frac{n^3}{3} - \frac{n^2}{2} + \frac{n}{6}$

Multiplicações:

$$\frac{n^3}{3} - \frac{n^2}{2} + \frac{n}{6} + \frac{n(n-1)}{2} =$$

$$\frac{n^3}{3} - \frac{n}{3}$$

$$j=1 \left\{ \begin{array}{l} i=2 \\ \ldots \\ i=n \end{array} \right.$$ **(n-1) vezes**

$$j=2 \left\{ \begin{array}{l} i=3 \\ \ldots \\ i=n \end{array} \right.$$ **(n-2) vezes**

$$j=n-1 \left\{ \begin{array}{l} i=n \end{array} \right.$$ **1 vez**

Quando a eliminação falha ou tem erro grande?

- Quando o pivô é zero, eliminação falha.
- Quando pivô é relativamente pequeno, temos m > 1, o que pode aumentar muito o erro de arredondamento.

Teórico: $\text{res} \leftarrow a_{21} - m \cdot a_{11}$

Real: $\widehat{\text{res}} \leftarrow \hat{a}_{21} - \hat{m} \cdot \hat{a}_{11}$

$$rd(\text{res}) \leftarrow rd(a_{21}) - m \cdot a_{11} + \hat{m} \cdot \hat{a}_{11}$$

Como m e $\hat{m}$ são aproximadamente iguais,

$$rd(\text{res}) \leftarrow rd(a_{21}) - \hat{m} \cdot rd(a_{11})$$

$$|rd(\text{res})| \leftarrow |rd(a_{21}) - \hat{m} \cdot rd(a_{11})|$$

Erro de arredondamento: $rd(x) = x - \hat{x}$

Quanto maior m, maior o erro de arredondamento.

Fonte:https://ocw.mit.edu/courses/chemical-engineering/10-34-numerical-methods-applied-to-chemical-engineering-fall-2005/lecture-notes/lecturenotes123.pdf

Quando a eliminação falha ou tem erro grande?

Solução

Trocar linha de modo a tornar o pivô não-nulo.
Mas existem várias opções. Qual é a melhor?

O melhor é escolher como pivô elemento da coluna de maior valor absoluto (técnica chamada **pivotação parcial**).

Eliminação de Gauss com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	Multiplicador	A			b	Operações
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	−3	2	11	
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	−2	8	−1	−15	
3		$\underline{4}$	−6	5	29	
4	$m_{12} = (-1{,}5)/5 = -0{,}3$	0	−1,5	0,75	3,75	$-0{,}25L_3 + L_1$
5		0	$\underline{5}$	1,5	−0,5	$0{,}5L_3 + L_2$
6		0	0	$\underline{1{,}2}$	3,6	$0{,}3L_5 + L_4$

Aula anterior

- Como transformar Ax=b em Ux=d?
  - Operações L-elementares
- Implementação da Eliminação de Gauss
  - Cálculo do número de operações
- Quando a Eliminação de Gauss falha
  - Solução: pivotação parcial

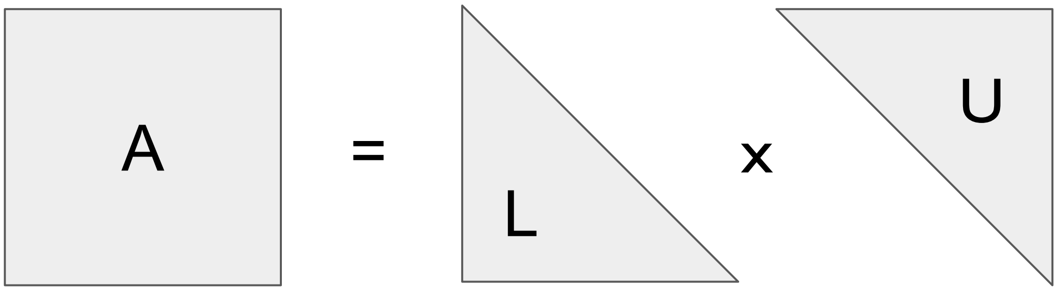
Aula de hoje

- Fatoração LU
  - Resolvendo Ax=b usando fatoração A=LU
  - Como obter fatores LU
  - Implementando LU
  - Instabilidade numérica de A=LU
- Fatoração PA=LU
  - Como obter P
  - Resolvendo Ax=b usando PA=LU
  - Implementando PA=LU

E se eu mudar o vetor b para b'?
Qual o custo para resolver o novo sistema?

Fatoração LU (ou Decomposição LU)

É a decomposição $A_{nxn}=L_{nxn}U_{nxn}$ onde L é triangular inferior e U é triangular superior.



Fatoração LU

Pode ser usada para resolver sistemas Ax=b

Como?

$$Ax=b$$

$$L\underbrace{Ux}_{y}=b$$

Qual o custo para resolver Ax=b assim?

Sistema tri. #1

$Ly=b$

Encontra y

Sistema tri. #2

$Ux=y$

Encontra x

Objetivo de aprendizagem: entender como resolver sistema Ax=b a partir da fatoração LU e qual o custo da solução.

Como obter os fatores L e U?

Usando a própria eliminação de Gauss:

Zerar a coluna 1 equivale a pré-multiplicar A por matriz tri inf L_1.
Quem é L_1?

Zerar a coluna 2 equivale a pré-multiplicar L_1A por matriz tri inf L_2.
Quem é L_2?

...

Como obter os fatores L e U?

$$U = L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A$$

$$(L_{n-1} \cdots L_2 L_1)^{-1} U = A$$

$$\underbrace{L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}}_{L} U = A$$

Dois golpes de sorte:

- L_i^{-1} é obtida trocando-se o sinal da coluna não-nula de L_i abaixo da diagonal
- O produto L_i^{-1} e L_j^{-1} é obtido preenchendo-se as colunas i e j abaixo da matriz identidade com colunas dessas matrizes

Fatoração LU a partir da Eliminação de Gauss

L	Multiplicador	A		
1		$\underline{1}$	-3	2
2	$m_{21} = (-2)/1 = -2$	-2	8	-1
3	$m_{31} = 4/1 = 4$	4	-6	5
4		0	$\underline{2}$	3
5	$m_{32} = 6/2 = 3$	0	6	-3
6		0	0	$\underline{-12}$

~~b~~
~~11~~
~~−15~~
~~29~~

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -12 \end{bmatrix}.$$

A L U

Exemplo da resolução de Ax=b usando LU

Sistema triangular inferior Ly=b

- Substituições sucessivas $Ly = b$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix},$$

$$y_1 = 11,$$

$$-2y_1 + y_2 = -15, \; y_2 = -15 + 2(11) \rightsquigarrow y_2 = 7 \text{ e}$$

$$4y_1 + 3y_2 + y_3 = 29, \; y_3 = 29 - 4(11) - 3(7) \rightsquigarrow y_3 = -36.$$

- Vetor intermediário: $y = [11 \;\; 7 \;\; -36]^T$.

Exemplo da resolução de Ax=b usando LU

Sistema triangular superior Ux=y

- Substituições retroativas

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 7 \\ -36 \end{bmatrix},$$

$$-12x_3 = -36,\ x_3 = \frac{-36}{-12} \leadsto x_3 = 3,$$

$$2x_2 + 3x_3 = 7,\ x_2 = \frac{7-3(3)}{2} \leadsto x_2 = -1 \text{ e}$$

$$x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 11,\ x_1 = \frac{11+3(-1)-2(3)}{1} \leadsto x_1 = 2.$$

- Vetor solução: $x = [2\ \ -1\ \ 3]^T$.

Eliminação de Gauss: Implementação v3

Entrada: A_{nxn}, b_{nx1}

Saída: U_{nxn}, d_{nx1}

Que mudanças devemos fazer?

```
U=A.copy()
d=b.copy()
Para j=1 até n-1:
    r = 1/U[j,j]
    Para i=j+1 até n:
        m = U[i,j]*r
        U[i,j+1:n] = U[i,j+1:n]-m*U[j,j+1:n]
        d[i] = d[i]-m*d[j]
retorna triu(U), d
```

Implementando LU

Entrada: A_{nxn}

Saída: U_{nxn}

Uma diferença importante: não precisamos da coluna **b**

```
U=A.copy()
L=np.eye(n)   # matriz identidade de ordem n
Para j=1 até n-1:
    r = 1/U[j,j]
    Para i=j+1 até n:
        L[i,j] = U[i,j]*r
        U[i,j+1:n] = U[i,j+1:n]-L[i,j]*U[j,j+1:n]
retorna L, triu(U)
```

LU tem mesmo problema que Eliminação

Como LU é essencialmente Eliminação de Gauss, pivôs pequenos também são problemáticos. Ex:

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \qquad L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \qquad U = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & 1-10^{20} \end{bmatrix}.$$

Suponha $\varepsilon_{machine} = 10^{-16}$. Nesse caso, $1\text{-}10^{20}$ não será representado de forma exata:

$$\hat{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix}, \qquad \hat{U} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{bmatrix}. \qquad \hat{L}\hat{U} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Por que isso é ruim?

LU tem mesmo problema que Eliminação

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$\hat{L}\hat{U} = \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Suponha $b=(1,0)^T$.

Qual a solução correta para Ax=b? $\tilde{x} = (-1, 1)^\top$

Qual a solução obtida? $x \approx (0, 1)^\top$

Como resolver o problema?

Fatoração PA=LU

- Para resolver a instabilidade numérica da fatoração LU, podemos usar a **pivotação parcial** (permuta de linhas).
- É como permutar as linhas de A antes de fazer a fatoração:

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4	$m_{12} = (-1{,}5)/5 = -0{,}3$	0	$-1{,}5$	$0{,}75$	$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5		0	$\underline{5}$	$1{,}5$	$0{,}5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6		0	0	$\underline{1{,}2}$	$0{,}3L_5 + L_4$	$\underline{1}$

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix}$$

$$PA = \begin{bmatrix} 4 & -6 & 5 \\ -2 & 8 & -1 \\ 1 & -3 & 2 \end{bmatrix}$$

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

Diferença: não precisamos da coluna **b**

L	m	A			Operações	p
1		1	−3	2		1
2		−2	8	−1		2
3		$\underline{4}$	−6	5		$\underline{3}$
4						
5						
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2		-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4						
5						
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	−3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	−2	8	−1		2
3		$\underline{4}$	−6	5		$\underline{3}$
4						
5						
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4						1
5						$\underline{2}$
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4					$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5						$\underline{2}$
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4					$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5					$0{,}5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	−3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	−2	8	−1		2
3		$\underline{4}$	−6	5		$\underline{3}$
4		0	−1,5	0,75	$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5					$0{,}5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4		0	$-1{,}5$	$0{,}75$	$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5		0	$\underline{5}$	$1{,}5$	$0{,}5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	$\underline{p}$
1	$m_{11} = 1/4 = 0,25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0,5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4	$m_{12} = (-1,5)/5 = -0,3$	0	$-1,5$	0,75	$-0,25L_3 + L_1$	1
5		0	$\underline{5}$	1,5	$0,5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6						

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	$\underline{p}$
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4	$m_{12} = (-1{,}5)/5 = -0{,}3$	0	$-1{,}5$	$0{,}75$	$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5		0	$\underline{5}$	$1{,}5$	$0{,}5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6					$0{,}3L_5 + L_4$	$\underline{1}$

LU com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ -15 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

L	m	A			Operações	p
1	$m_{11} = 1/4 = 0{,}25$	1	-3	2		1
2	$m_{21} = (-2)/4 = -0{,}5$	-2	8	-1		2
3		$\underline{4}$	-6	5		$\underline{3}$
4	$m_{12} = (-1{,}5)/5 = -0{,}3$	0	$-1{,}5$	$0{,}75$	$-0{,}25L_3 + L_1$	1
5		0	$\underline{5}$	$1{,}5$	$0{,}5L_3 + L_2$	$\underline{2}$
6		0	0	$\underline{1{,}2}$	$0{,}3L_5 + L_4$	$\underline{1}$

Outro exemplo

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & -4 & 1 \\ 5 & 0 & 5 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ -3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Outro exemplo

L	m	A				Operações	p
1	$m_{11} = 4/5 = 0{,}8$	4	−1	0	−1		1
2	$m_{21} = 1/5 = 0{,}2$	1	−2	1	0		2
3	$m_{31} = 0/5 = 0$	0	4	−4	1		3
4		$\underline{5}$	0	5	−1		$\underline{4}$

Outro exemplo

L	m	A				Operações	p
1	$m_{11} = 4/5 = 0{,}8$	4	−1	0	−1		1
2	$m_{21} = 1/5 = 0{,}2$	1	−2	1	0		2
3	$m_{31} = 0/5 = 0$	0	4	−4	1		3
4		$\underline{5}$	0	5	−1		$\underline{4}$
5	$m_{12} = (-1)/4 = -0{,}25$	0	−1	−4	−0,2	$-0{,}8L_4 + L_1$	1
6	$m_{22} = (-2)/4 = -0{,}5$	0	−2	0	0,2	$-0{,}2L_4 + L_2$	2
7		0	$\underline{4}$	−4	1	$0L_4 + L_3$	$\underline{3}$
8		0	0	$\underline{-5}$	0,05	$0{,}25L_7 + L_5$	$\underline{1}$
9	$m_{23} = (-2)/(-5) = 0{,}4$	0	0	−2	0,7	$0{,}5L_7 + L_6$	2
10		0	0	0	$\underline{0{,}68}$	$-0{,}4L_8 + L_9$	$\underline{2}$

Resolvendo Ax=b usando PA=LU

Pode ser usada para resolver sistemas Ax=b

Como?

$$Ax=b$$

$$PAx=Pb$$

$$L\underbrace{Ux}_{y}=Pb$$

Qual o custo para resolver Ax=b assim?

Sistema tri. #1	Sistema tri. #2
$Ly=Pb$	$Ux=y$
Encontra y	Encontra x

Objetivo de aprendizagem: entender como resolver sistema Ax=b a partir da fatoração PA=LU e qual o custo da solução.

Aula anterior

Quiz: condições necessárias à LU

- Fatoração LU
  - Resolvendo Ax=b usando fatoração A=LU
  - Como obter fatores LU
  - Implementando LU
  - Instabilidade numérica de A=LU
- Fatoração PA=LU
  - Como obter P
  - Resolvendo Ax=b usando PA=LU
  - Implementando PA=LU

Aula de hoje

- Estabilidade numérica
- Uso da decomposição
  - Cálculo do determinante
  - Refinamento de solução
  - Cálculo da inversa
- Decomposição de Cholesky
  - Matrizes definidas positivas

Algoritmo preciso

Desejamos resolver problema f usando algoritmo $\tilde{f}$.

Algoritmo $\tilde{f}$ pode ser visto como uma sequência de operações que transforma entrada A em saída $\tilde{f}(A)$.

Um bom algoritmo deve produzir erro relativo pequeno, ou seja,

$$\frac{|f(A)-\tilde{f}(A)|}{|f(A)|} = \mathcal{O}(\epsilon_{machine})$$

Neste caso, dizemos que o algoritmo $\tilde{f}$ é **preciso**.

Fonte: https://www.ime.unicamp.br/~valle/Teaching/2015/MS211/Aula2.pdf

Estabilidade

Porém, a noção de algoritmo preciso pode ser um pouco ambiciosa em muitos contextos pois inevitavelmente cometeremos erros de arredondamento em ponto flutuante.

No lugar da precisão, requeremos que o algoritmo seja estável.

Algoritmo regressivamente estável: um algoritmo $\tilde{f}$ usado para resolver um problema *f* é dito regressivamente estável (*backward stable*) se

$$f(\tilde{A}) = \tilde{f}(A)$$

para algum $\tilde{A}$ com

$$\frac{|A-\tilde{A}|}{|A|} = \mathcal{O}(\epsilon_{machine})$$

Estabilidade vs. estabilidade retroativa

Seja f(x) a resposta de um problema x. Um algoritmo $\hat{f}$ retorna a solução aproximada $\hat{f}(x)$ para um problema x. Ele é denominado:

- **Estável**: quando retorna a resposta quase "exata" para um problema y quase igual a x.

$$\frac{\|\hat{f}(x) - f(y)\|}{\|f(y)\|} = \mathcal{O}(\varepsilon_{machine}) \qquad \frac{\|y - x\|}{\|y\|} = \mathcal{O}(\varepsilon_{machine})$$

- **Regressivamente estável**: quando retorna a resposta "exata" para um problema y quase igual a x

$$\hat{f}(x) = f(y) \qquad \frac{\|y - x\|}{\|y\|} = \mathcal{O}(\varepsilon_{machine})$$

Estabilidade vs. estabilidade retroativa

Embora para o nosso problema "x" (decomposição de A), o PA=LU tenha retornado uma solução exata para uma matriz $\tilde{A} \approx A$, é possível escolher outros "x" onde isso não acontece.

Um algoritmo só é considerado regressivamente estável se ele satisfaz a condição para qualquer problema x.

Estabilidade de PA=LU

O erro da fatoração PA=LU, é descrito por

$$\hat{L}\hat{U} = \hat{P}A + \delta A, \quad \frac{\delta A}{A} = \mathcal{O}(\rho \varepsilon_{machine})$$

onde

$$\rho = \frac{\max_{i,j} |u_{ij}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}$$

é um fator de crescimento.

Portanto, PA=LU não é *backward stable* na teoria, mas na prática,

In fifty years of computing, no matrix problems that excite an explosive instability are known to have arisen under natural circumstances." [Trefethen]

Cálculo do determinante

Quiz: cálculo do determinante

Usando propriedades dos determinantes:

PA = LU

det(P)det(A) = det(L)det(U)

det(A) = det(U)/det(P)

$$\det(A) = (-1)^t \prod_i u_{ii}$$

onde t é o número de trocas de linhas necessárias para transformar P na matriz identidade. **Número de inversões** e t possuem mesma paridade.

Refinamento de solução

Devido a erros de arredondamento, a solução $x^{(0)}$ obtida para $Ax=b$ pode não ser exata. Podemos verificar calculando o resíduo

$$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$$

Assuma que exista um vetor $c^{(0)}$ tal que $x^{(1)} = x^{(0)} + c^{(0)}$ é uma solução refinada. Como obter $c^{(0)}$?

Refinamento de solução

$$Ax^{(1)}=b$$

$$A(x^{(0)}+c^{(0)})=b$$

$$Ax^{(0)}+Ac^{(0)}=b$$

$$Ac^{(0)}=b-Ax^{(0)}$$

$$Ac^{(0)}=r^{(0)}$$

Podemos reutilizar uma decomposição de A para encontrar $c^{(0)}$ com custo $O(n^2)$. A nova solução aproximada é $x^{(1)}=x^{(0)}+c^{(0)}$.

Refinamento de solução usando PA=LU

1. Faça a decomposição PA=LU
2. Encontre x resolvendo $LUx^{(0)}=Pb$
3. Para i=0,1,...
   a. Calcule o resíduo $r^{(i)}=b-Ax^{(i)}$
   b. Encontre $c^{(i)}$ resolvendo $LUc^{(i)}=Pr^{(i)}$
   c. Faça $x^{(i+1)}=x^{(i)}+c^{(i)}$
   d. Se $|c^{(i)}| < TOL$; então retorne $x^{(i+1)}$

Exemplo

Resolver o sistema abaixo e refinar a solução até que $\|c\|_\infty < 10^{-3}$

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & -1 \\ -3 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ 19 \\ 11 \end{bmatrix}.$$

Decomposição PA=LU

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0{,}67 & 1 & 0 \\ -0{,}33 & 0{,}42 & 1 \end{bmatrix}, \; U = \begin{bmatrix} -3 & 5 & 6 \\ 0 & 6{,}33 & 3 \\ 0 & 0 & 2{,}74 \end{bmatrix} \text{ e } P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Exemplo

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0{,}67 & 1 & 0 \\ -0{,}33 & 0{,}42 & 1 \end{bmatrix},\ U = \begin{bmatrix} -3 & 5 & 6 \\ 0 & 6{,}33 & 3 \\ 0 & 0 & 2{,}74 \end{bmatrix} \text{ e } P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$Ax^0 = b \longrightarrow LUx^0 = Pb,$$

$$Lt = Pb \rightsquigarrow t = \begin{bmatrix} 19 \\ 8{,}73 \\ 13{,}6034 \end{bmatrix} \text{ e } Ux^0 = t \rightsquigarrow x^0 = \begin{bmatrix} 1{,}9731 \\ -0{,}9738 \\ 4{,}9647 \end{bmatrix}.$$

$$r^0 = b - Ax^0 = \begin{bmatrix} -0{,}0601 \\ 0 \\ 0{,}0712 \end{bmatrix},\quad LUc^0 = Pr^0 \rightsquigarrow c^0 = \begin{bmatrix} 0{,}0268 \\ -0{,}0262 \\ 0{,}0352 \end{bmatrix},$$

$$x^1 = x^0 + c^0 = \begin{bmatrix} 1{,}9999 \\ -1{,}0000 \\ 4{,}9999 \end{bmatrix},$$

$$r^1 = b - Ax^1 = \begin{bmatrix} 0{,}0001 \\ 0 \\ 0{,}0002 \end{bmatrix},\quad LUc^1 = Pr^1 \rightsquigarrow c^1 = \begin{bmatrix} 0{,}0001 \\ 0{,}0000 \\ 0{,}0001 \end{bmatrix},$$

$$x^2 = x^1 + c^1 = \begin{bmatrix} 2{,}0000 \\ -1{,}0000 \\ 5{,}0000 \end{bmatrix}.$$

Refinamento interrompido: $\|c^1\|_\infty = 0{,}0001 < 10^{-3}$

Cálculo da inversa

Calcular a inversa de uma matriz A equivale a resolver n sistemas

$$Ax_1=e_1,\ Ax_2=e_2,\ \ldots,\ Ax_n=e_n$$

A inversa A^{-1} é a concatenação dos vetores coluna x_1, x_2, …, x_n.

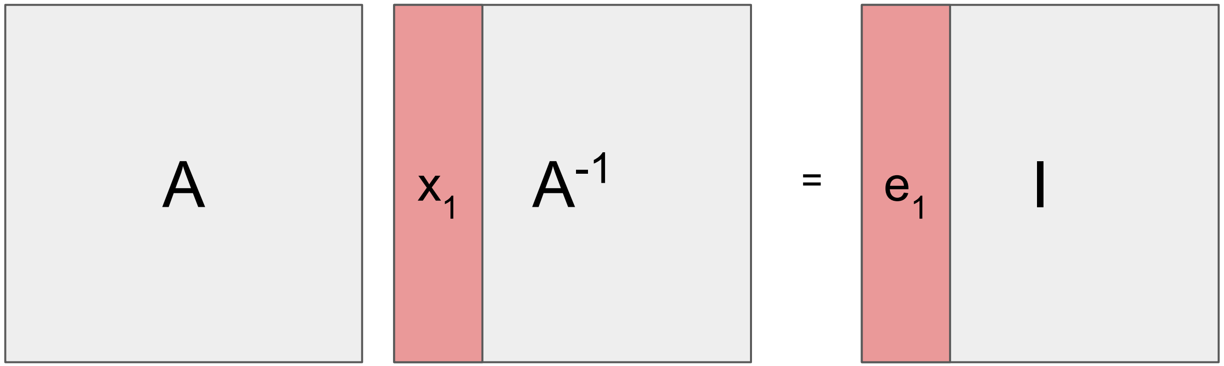
$$A \quad A^{-1} \quad = \quad I$$

Cálculo da inversa

Calcular a inversa de uma matriz A equivale a resolver n sistemas

$$Ax_1=e_1,\ Ax_2=e_2,\ \ldots,\ Ax_n=e_n$$

A inversa A^{-1} é a concatenação dos vetores coluna $x_1, x_2, \ldots, x_n$.

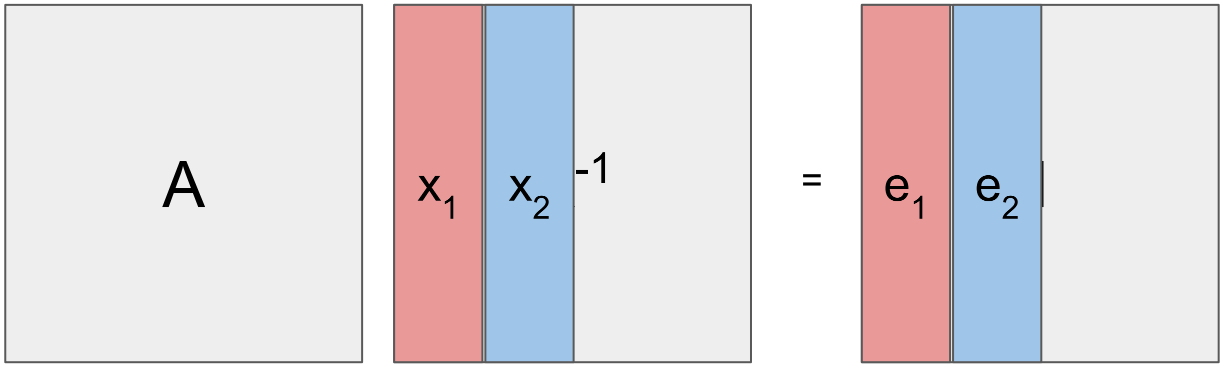


Cálculo da inversa

Calcular a inversa de uma matriz A equivale a resolver n sistemas

$$Ax_1=e_1,\ Ax_2=e_2,\ \ldots,\ Ax_n=e_n$$

A inversa A^{-1} é a concatenação dos vetores coluna $x_1, x_2, \ldots, x_n$.



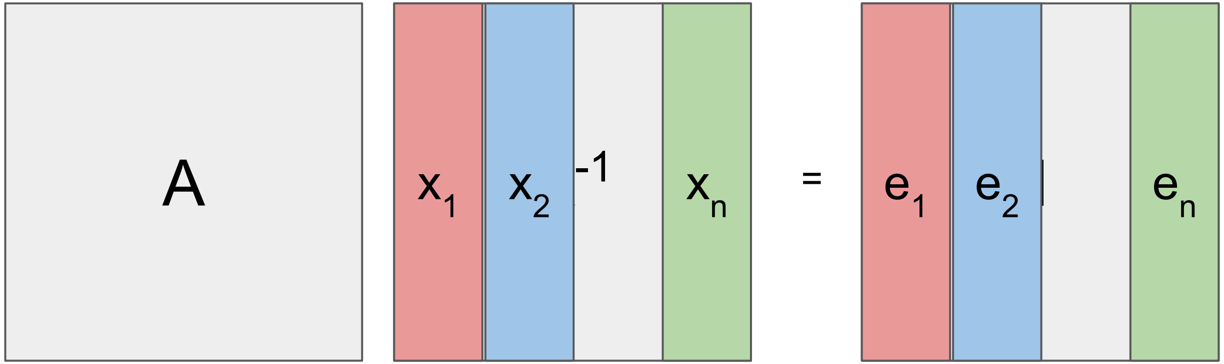
Cálculo da inversa

Calcular a inversa de uma matriz A equivale a resolver n sistemas

$$Ax_1=e_1,\ Ax_2=e_2,\ \ldots,\ Ax_n=e_n$$

A inversa A^{-1} é a concatenação dos vetores coluna $x_1, x_2, \ldots, x_n$.

Qual o custo usando LU?



Decomposição de Cholesky

- Matrizes simétricas **definidas positivas** podem ser decompostas em fatores triangulares 2x mais rápido que matrizes gerais
- O algoritmo padrão para isso é a fatoração de Cholesky

  $$A=LL^T,$$

  que fatora A em uma triangular inferior L e uma triangular superior L^T. Ela opera do lado esquerdo e direito da matriz simultaneamente, preservando e explorando a simetria.

Matrizes simétricas

A é uma matriz simétrica se possui mesmas entradas abaixo e acima da diagonal, i.e., $a_{ij}=a_{ji}$, logo, $A=A^T$.

Matrizes simétricas podem ser classificadas segundo o sinal da forma quadrática $\phi(v)=v^TAv$, onde v é um vetor não-nulo arbitrário ou, equivalentemente, segundo seus autovalores:

Forma quadrática	Nome de A	Autovalores de A
$v^TAv > 0$	definida positiva	$\lambda_i > 0$
$v^TAv \geq 0$	semidefinida positiva	$\lambda_i \geq 0$
$v^TAv < 0$	definida negativa	$\lambda_i < 0$
$v^TAv \leq 0$	semidefinida negativa	$\lambda_i \leq 0$

Matrizes simétricas definidas positivas

Seja A uma matriz simétrica definida positiva. As seguintes afirmações são verdadeiras e equivalentes:

- Para todo vetor v não-nulo, $v^T A v > 0$.
- Os autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ de A são positivos.

Teorema (Cholesky). Se A for uma matriz simétrica definida positiva, então existe uma única matriz triangular inferior L com elementos da diagonal positivos tal que $A = LL^T$.

Cálculo do fator

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & l_{41} \\ 0 & l_{22} & l_{32} & l_{42} \\ 0 & 0 & l_{33} & l_{43} \\ 0 & 0 & 0 & l_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}.$$

Elemento l_{44}

$$l_{41}^2 + l_{42}^2 + l_{43}^2 + l_{44}^2 = a_{44} \to l_{44} = \sqrt{a_{44} - (l_{41}^2 + l_{42}^2 + l_{43}^2)} \rightsquigarrow l_{44} = \sqrt{a_{44} - \sum_{k=1}^{3} l_{4k}^2}.$$

Elemento qualquer da diagonal de L

$$\boxed{l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}, \; j = 1, 2, \ldots, n.}$$

Cálculo do fator

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & l_{41} \\ 0 & l_{22} & l_{32} & l_{42} \\ 0 & 0 & l_{33} & l_{43} \\ 0 & 0 & 0 & l_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}.$$

Elemento l_{43}

$$l_{41}l_{31} + l_{42}l_{32} + l_{43}l_{33} = a_{43} \to l_{43} = \frac{a_{43} - (l_{41}l_{31} + l_{42}l_{32})}{l_{33}} \leadsto l_{43} = \frac{a_{43} - \sum_{k=1}^{2} l_{4k}l_{3k}}{l_{33}}.$$

Elemento qualquer abaixo da diagonal principal

$$\boxed{l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}l_{jk}}{l_{jj}}, \; j = 1, 2, \ldots, n-1 \;\text{ e }\; i = j+1, j+2, \ldots, n.}$$

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1			
2	-2	10		2			
3	2	-7	30	3			

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	-2	10		2			
3	2	-7	30	3			

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	−2	10		2	−1		
3	2	−7	30	3			

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	-2	10		2	-1		
3	2	-7	30	3	1		

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	−2	10		2	−1	3	
3	2	−7	30	3	1		

.

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	−2	10		2	−1	3	
3	2	−7	30	3	1	−2	

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	−2	10		2	−1	3	
3	2	−7	30	3	1	−2	5

Dispositivo prático

Obtenha a decomposição de Cholesky da matriz $\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 10 & -7 \\ 2 & -7 & 30 \end{bmatrix}$

A				L			
i\j	1	2	3	i\j	1	2	3
1	4			1	2		
2	−2	10		2	−1	3	
3	2	−7	30	3	1	−2	5

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

Quiz: dispositivo prático Cholesky

Implementação Fatoração de Cholesky v1

Entrada: A_{nxn}
Saída: L_{nxn}

L=np.zeros(n)
Para...
retorna L

Implementação Fatoração de Cholesky v1

Entrada: A_{nxn}

Saída: L_{nxn}

```
L=np.zeros(n)
Para j=1 até n:
    L[j,j]=sqrt(A[j,j]- sum(L[j,1:j-1]^2) )
    Para i=j+1 até n:
        L[i,j] = (A[i,j]-sum(L[i,1:j-1]*L[j,1:j-1]) )/L[j,j]
retorna L
```

Como reduzir o número de divisões?

Implementação Fatoração de Cholesky v1

Entrada: A_{nxn}

Saída: L_{nxn}

```
L=np.zeros(n)
Para j=1 até n:
    L[j,j]=sqrt(A[j,j]- sum(L[j,1:j-1]²) )
    r = 1/L[j,j]
    Para i=j+1 até n:
        L[i,j] = (A[i,j]-sum(L[i,1:j-1]*L[j,1:j-1]) )*r
retorna L
```

Qual o custo de Cholesky?

Custo da fatoração de Cholesky

Radiciações: n

Divisões: n

Multiplicações:

$$\sum_{j=1}^{n}(j-1)+(n-j)j=$$

$$\frac{n^3}{6}+\frac{n^2}{2}-\frac{2n}{3}$$

Adições:

$$\frac{n^3}{6}+\frac{n^2}{2}-\frac{2n}{3}+n=$$

$$\frac{n^3}{6}+\frac{n^2}{2}+\frac{n}{3}$$

j=1 $\begin{cases} \text{i=2} \\ \dots \\ \text{i=n} \end{cases}$ 0+ **(n-1)*1 vezes**

j=2 $\begin{cases} \text{i=3} \\ \dots \\ \text{i=n} \end{cases}$ 1+ **(n-2)*2 vezes**

j=n-1 $\begin{cases} \text{i=n} \end{cases}$ n-2+ **1*(n-1) vezes**

j=n n-1+ **0 vezes**

Resolução de sistema pela fatoração de Cholesky

Pode ser usada para resolver sistemas $Ax=b$

Como?

$$Ax=b$$

$$\underbrace{LL^T x}_{y}=b$$

Qual o custo para resolver $Ax=b$ assim?

Sistema tri. #1

$Ly=b$

Encontra y

Sistema tri. #2

$L^T x=y$

Encontra x

Objetivo de aprendizagem: entender como resolver sistema Ax=b a partir da fatoração LU e qual o custo da solução.

Estabilidade da fatoração de Cholesky

Fatoração de Cholesky é sempre estável.

Teorema: Seja A uma matriz definida positiva e $A=LL^T$ sua fatoração de Cholesky. Para todos $\varepsilon_{machine}$ suficientemente pequenos, garante-se que o algoritmo executa até o final, gerando um fator $\tilde{L}$ que satisfaz

$$\tilde{L}\tilde{L}^\top = A + \delta A, \quad \frac{|\delta A|}{|A|} = \mathcal{O}(\epsilon_{machine})$$

Intuição: os elementos em L não podem ser muito grandes, pois $\|A\|_2 = \|L\|_2^2$

Condicionamento de matrizes

Alguns sistemas Ax=b são mais suscetíveis a erros de arredondamento (ou erros de medição) do que outros.

Exemplo 1:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0{,}99 \\ 0{,}99 & 0{,}98 \end{bmatrix} \text{ e } b = \begin{bmatrix} 1{,}99 \\ 1{,}97 \end{bmatrix}.$$

- Solução exata: $x=[1 \ \ 1]^T$
- Vetor $b'=[1{,}99 \ \ 1{,}98]^T$
- Solução exata de $Ay=b'$ = $[100 \ \ -99]^T$

Condicionamento de matrizes

Alguns sistemas Ax=b são mais suscetíveis a erros de arredondamento (ou erros de medição) do que outros.

Exemplo 2:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0{,}99 \\ 0{,}99 & 0{,}98 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 1{,}99 \\ 1{,}97 \end{bmatrix}.$$

- Solução exata: $x=[1\ \ 1]^T$
- Matriz A'= $\begin{bmatrix} 1 & 0{,}99 \\ 0{,}99 & 0{,}99 \end{bmatrix} \approx A.$
- Solução exata de A'z=b = $[2\ \ -1/99]^T$

O que é que a matriz A tem de especial?

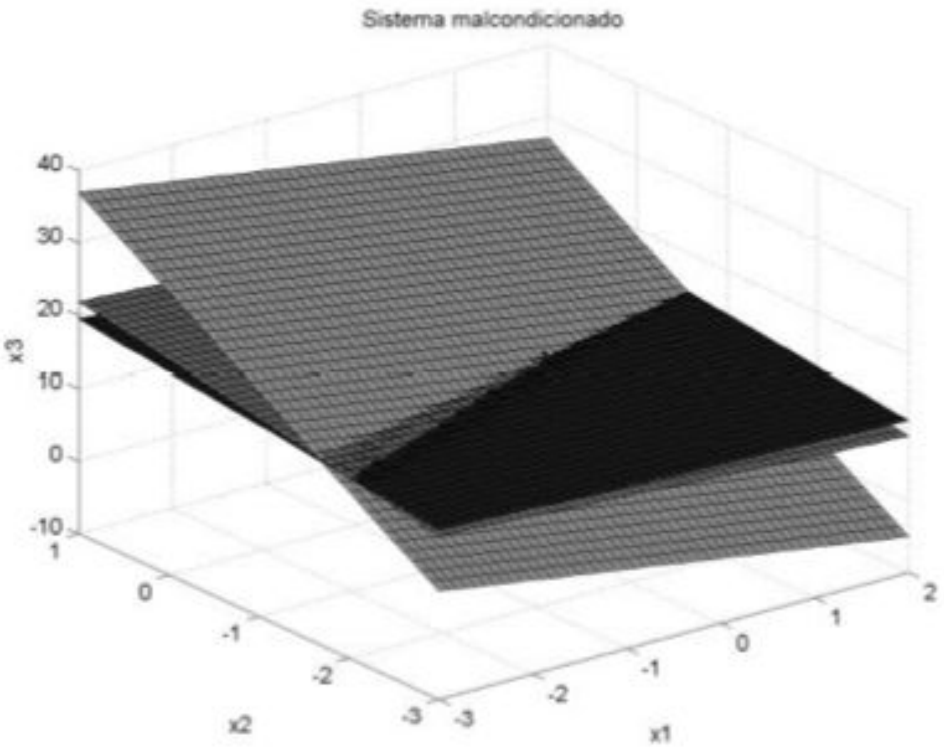
Malcondicionamento não está ligado ao determinante

- det(A) ≈ 0 não indica necessariamente malcondicionamento
- Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 0{,}001 & 0{,}001 \\ -0{,}001 & 0{,}001 \end{bmatrix}$$

- det(A) = 2x10^{-6}, e é muito bem condicionada
- Note que podemos multiplicar Ax=b por 10^{3} e obter um sistema equivalente. Na prática não existe diferença entre os dois sistemas.

Interpretação geométrica de malcondicionamento



Número de condição

- Escalar associado a matriz A
- Determina a relação entre perturbações em A (ou b) e perturbações em x
- Dado por

$$\text{condição}(A) = \kappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\|.$$

- || . || é uma norma matricial qualquer
- Valor depende da norma, mas não difere muito conforme a escolha
- Matriz é malcondicionada se $\kappa(A) \gg 1$ (e.g. 10^6)