ANÁLISE NUMÉRICA I

1º Semestre de 2020 MS512A

Profa.: Sandra Augusta Santos sala IM111

Primeiro Projeto: Envelopes de Matrizes Esparsas

(Data de entrega: 22 de abril)

Instruções. O projeto será desenvolvido em equipes com no mínimo 3 e no máximo 4 alunos. O relatório a ser entregue deve conter: uma breve *Introdução*; o *Desenvolvimento*, com as resoluções comentadas dos itens deste roteiro; uma breve *Conclusão* (explicitando principais descobertas e dificuldades enfrentadas), e as *Referências* (bibliográficas e webgráficas) consultadas, nos moldes de um trabalho científico. O código da implementação desenvolvida no item 5 deve ser apresentado em um *Apêndice*.

Na segunda lista de exercícios trabalhamos com matrizes com estruturas especiais, entre as quais as do tipo *banda*. Uma ideia mais geral para contemplar matrizes esparsas, isto é, com grande quantidade de zeros relativamente ao seu total de elementos, mas sem estrutura específica, e que permite economizar a memória utilizada para o armazenamento é a noção do *envelope* de uma matriz.

O *envelope orientado por colunas* da porção triangular superior de uma matriz A é um conjunto de pares ordenados (i, j), $i < j$, que representam as posições dos elementos não nulos. Mais especificamente, (i, j) pertence ao envelope de A se, e somente se, $a_{k,j} \neq 0$ para algum $k \leq i$. Assim, se o primeiro elemento não nulo da j-ésima coluna é $a_{m,j}$ e $m < j$, então (m, j), $(m + 1, j)$, $\ldots, (j - 1, j)$ são membros do envelope de A para a j-ésima coluna[1].

Uma estrutura de dados razoavelmente simples pode ser usada para armazenar o envelope orientado por colunas da porção triangular superior de uma matriz esparsa $n \times n$. Esta estrutura consiste de quatro vetores. O primeiro, um vetor real de n posições, DIAG, é usado para armazenar a diagonal da matriz. O segundo, também um vetor real, ENV, é usado para armazenar sequencialmente o envelope da matriz. O terceiro é um vetor de inteiros com $n + 1$ posições, ENVcol, usado para armazenar os apontadores para ENV. Em geral, ENVcol(J) contém o índice da posição de ENV que armazena o primeiro elemento não nulo da J-ésima coluna da matriz. No entanto, caso a matriz não possua elementos distintos de zero na coluna J acima da diagonal principal, então ENVcol(J) apontará para a coluna $J + 1$. Com isso, a ausência de elementos na coluna J acima da diagonal principal é reconhecida por ENVcol(J) = ENVcol($J + 1$). Além disso, ENVcol($n + 1$) aponta para a primeira posição livre após a armazenagem do envelope, ENVcol(1)=1 e ENVcol($J+1$)$-$ENVcol(J) é o número de elementos na coluna J da matriz que pertencem ao envelope. O quarto vetor, também de inteiros, ENVlin, armazena os índices das linhas de cada elemento do envelope: ENVlin(I) contém o índice da linha do elemento armazenado em ENV(I). O vetor ENVlin tem, portanto, a mesma dimensão do vetor ENV.

[1] Cf. Watkins, p.57

Vejamos como fica esse esquema para a seguinte matriz triangular superior[2]:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & a_{14} & 0 & 0 \\ & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & a_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & a_{44} & 0 & a_{46} \\ & & & & a_{55} & 0 \\ & & & & & a_{66} \end{bmatrix}$$

DIAG	a_{11}	a_{22}	a_{33}	a_{44}	a_{55}	a_{66}		
ENV	a_{12}	a_{23}	a_{14}	a_{24}	a_{34}	a_{46}	a_{56}	
ENVcol	1	1	2	3	6	6	8	
ENVlin	1	2	1	2	3	4	5	

Note que, embora os elementos a_{24}, a_{34} e a_{56} sejam nulos em A, eles pertencem ao envelope, conforme definido anteriormente.

1. Escreva um algoritmo para resolver o sistema linear $Ux = b$, $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$ por substituição regressiva supondo que a matriz U é triangular superior e está armazenada segundo a estrutura de envelope por colunas. Note que, nesse caso, para tirar proveito dessa estrutura é essencial trabalhar por colunas.

2. Suponha que $A^{n\times n}$ é uma matriz esparsa, cuja porção triangular superior é armazenada em um *envelope orientado por colunas* e a porção triangular inferior é armazenada em um *envelope orientado por linhas*, o qual é definido de maneira análoga, com a troca adequada de papel entre linhas e colunas.

   Para fixar idéias, suponha $A \in \mathbb{R}^{7\times 7}$ com elementos não nulos indicados pelo símbolo $*$ e localizados da seguinte maneira:

$$A = \begin{bmatrix} * & & & & & & \\ & * & & & * & & \\ & & * & & & & \\ & * & & * & & * & \\ & & & & * & & \\ & * & & & & * & * \\ & & & & & & * \end{bmatrix}.$$

   Para tal matriz, explicite o envelope *orientado por colunas* para sua porção triangular superior e o envelope *orientado por linhas* para sua porção triangular inferior, fazendo, nesse segundo caso, as adaptações necessárias na definição e nos vetores de índices correspondentes às linhas e colunas. Para tanto, exiba as estruturas de dados $\boxed{\mathsf{DIAG}}$, $\boxed{\mathsf{ENV}_{\text{sup}},\ \mathsf{ENVcol}_{\text{sup}},\ \mathsf{ENVlin}_{\text{sup}}}$ e $\boxed{\mathsf{ENV}_{\text{inf}},\ \mathsf{ENVlin}_{\text{inf}},\ \mathsf{ENVcol}_{\text{inf}}}$.

   Observe que os pares que compõem os envelopes contemplam a possibilidade de preenchimento de posições originalmente nulas ao se efetuar operações de redução por linhas sobre a matriz: a estrutura foi pensada para acomodar o pior caso.

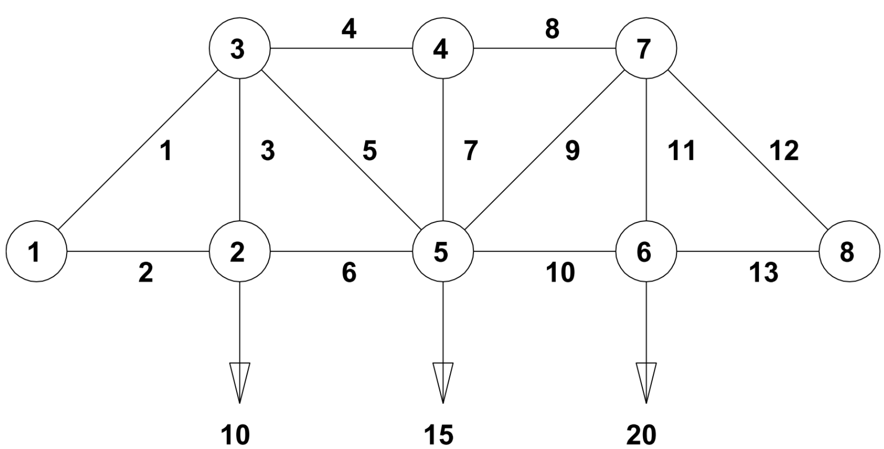
[2]Baseado no Exemplo 1.5.15 de Watkins.

3. Supondo que a fatoração LU de $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ esteja bem definida, mostre[3] que o envelope de L (por linhas) é igual ao envelope da parte triangular inferior de A, e que o envelope de U (por colunas) coincide com o envelope da porção triangular superior de A.

4. Amplie o escopo do item anterior, supondo agora pivoteamento parcial, de modo que $PA = LU$, sendo $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matriz de permutação. Assumindo conhecida a matriz P, mostre que o resultado do item anterior se aplica aos envelopes de L e U, relativamente aos envelopes das porções triangular inferior e superior de PA, respectivamente.

5. Com o objetivo de resolver o sistema $Ax = b$, suponha conhecida *a priori* a matriz de permutação P, de modo que você trabalhará com $PAx = Pb$. Adapte o algoritmo da eliminação Gaussiana estudado em *Cálculo Numérico*, para construir os fatores L e U tais que $PA = LU$, trabalhando com os envelopes das porções triangular inferior (por linhas) e superior (por colunas) de PA. As matrizes triangulares L e U devem ser armazenadas em envelopes, orientados por linhas e por colunas, respectivamente. Para computar o vetor solução x, os sistemas triangulares envolvendo as matrizes L e U devem ser resolvidos explorando-se as respectivas estruturas de envelope em que foram armazenadas. Apresente primeiramente o esquema algorítmico completo *em palavras*, organizado em módulos (ou subrotinas) para facilitar tanto a compreensão quanto a programação, para então implementá-lo na linguagem de sua preferência (`Matlab`, `Octave`, `Python`, etc.).

6. Este item[4] modela um problema estrutural simples, e visa validar a implementação do item anterior. A figura a seguir exibe uma estrutura plana, denominada *treliça*, com 13 *barras* (numeradas como indicado), conectadas por 8 *nós* (numerados com círculos). Há cargas (em toneladas) aplicadas nos nós 2, 5 e 6, e o objetivo é determinar as forças atuantes em cada uma das barras da treliça.



[3] Este item está baseado no Exercício 1.7.38 de Watkins.
[4] Baseado no Exercício 2.3 do livro de Moler.

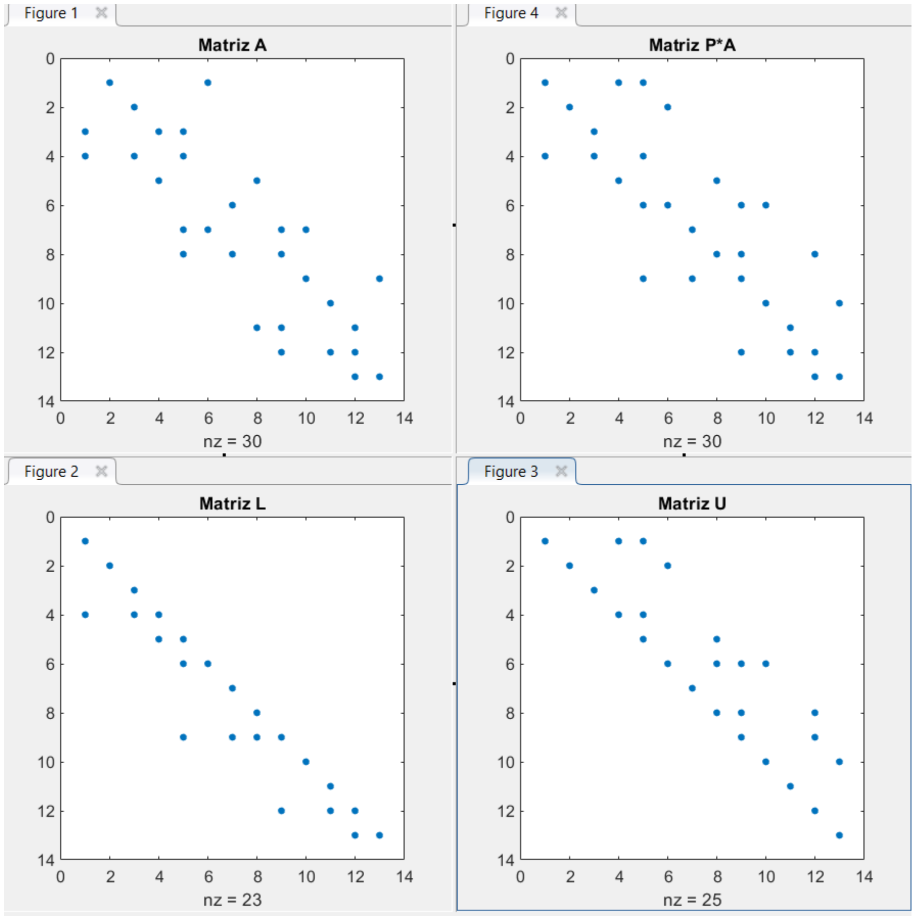
Para que a treliça fique em equilíbrio estático, o saldo de forças em cada um dos nós, tanto na horizontal quanto na vertical, deve ser nulo. Dessa maneira, podemos determinar a força atuante em cada barra igualando, em cada um dos nós, as forças horizontais à direita e à esquerda, assim como as forças verticais, para cima e para baixo. Para os 8 nós, produziríamos 16 equações, que superam as 13 forças a serem determinadas. Para que a treliça fique em equilíbrio estático, de modo que o sistema possua solução única, assumimos que o nó 1 está rigidamente preso tanto na vertical quanto na horizontal, e que o nó 8 só pode se mover horizontalmente (i.e. fixamos 3 graus de liberdade). Impondo o equilíbrio nas componentes horizontal e vertical, e definindo $\alpha = 1/\sqrt{2}$, obtemos o seguinte sistema de equações lineares para as forças nas barras f_i:

$$
\begin{aligned}
\text{Nó 2:}\quad & f_2 = f_6, \\
& f_3 = 10, \\
\text{Nó 3:}\quad & \alpha f_1 = f_4 + \alpha f_5, \\
& \alpha f_1 + f_3 + \alpha f_5 = 0, \\
\text{Nó 4:}\quad & f_4 = f_8, \\
& f_7 = 0, \\
\text{Nó 5:}\quad & \alpha f_5 + f_6 = \alpha f_9 + f_{10}, \\
& \alpha f_5 + f_7 + \alpha f_9 = 15, \\
\text{Nó 6:}\quad & f_{10} = f_{13}, \\
& f_{11} = 20, \\
\text{Nó 7:}\quad & f_8 + \alpha f_9 = \alpha f_{12}, \\
& \alpha f_9 + f_{11} + \alpha f_{12} = 0, \\
\text{Nó 8:}\quad & f_{13} = \alpha f_{12}.
\end{aligned}
$$

Resolva esse sistema, da forma $Af = b$, utilizando a implementação desenvolvida no item 5 para fatorar PA, utilizando a matriz de permutação P definida pelo seguinte vetor de índices das linhas:

$$\big(2, 3, 1, 4, 5, 7, 6, 9, 10, 11, 8, 12, 13\big).$$

A figura a seguir, produzida no `Matlab` por meio dos comandos `spy(A)`, `spy(P*A)`, `spy(L)` e `spy(U)`, respectivamente, permite acompanhar o padrão de elementos não nulos das matrizes envolvidas na fatoração para esse exemplo. Observe as relações entre os envelopes correspondentes presentes na figura. Observe também os preenchimentos com novos elementos, tanto em L quanto em U, decorrentes do processo de eliminação Gaussiana. Utilize visualizações similares, de acordo com a linguagem de trabalho escolhida, para validar a sua implementação.



Referências

- C. B. Moler, *Numerical Computing with MATLAB*, Philadelphia: SIAM, 2004.
- D. S. Watkins, *Fundamentals of Matrix Computations*, New Jersey: John Wiley & Sons, 2 ed., 2002.