

Introdução à Fatoração de Matrizes

Prof. Alexandre Salles da Cunha e Profa. Ana Paula Couto

2023/2



UNIVERSIDADE FEDERAL
DE MINAS GERAIS



O que é fatorar uma matriz A de dimensões $m \times n$?

- Independentemente da forma de A (quadrada, quando $m = n$ ou retangular esbelta $n \ll m$, ou larga $n \gg m$), fatorar uma matriz consiste no processo algorítmico que permite escrever A como produto de outras matrizes com topologia particular, mais conveniente para algum propósito específico.
- $A = LU$, L triangular inferior, com a diagonal unitária, U triangular superior.
- $PA = LU$, idem acima, onde P é uma matriz de permutação.
- Cholesky: $A = LL^T$, onde L é triangular inferior, com a diagonal positiva.
- Espectral: A é simétrica e $A = Q\Lambda Q^T$, onde Λ é uma matriz diagonal com os autovalores de A e Q é ortogonal, como os autovetores de A em suas colunas.
- $A = QR$, onde Q é uma matriz ortonormal e R triangular superior.
- Singular Value Decomposition (SVD): $A = U\Sigma V^T$.

- Resolver um ou vários sistemas lineares definidos pela mesma matriz de coeficientes A .
- Obter o espectro de A , assim como seus autovetores.
- Conhecer os valores singulares de A , assim como seus vetores singulares.
- Conhecer espaços vetoriais associados à matriz.
- Resolver problemas aplicados da Ciência da Computação em Otimização, em Inteligência Artificial, em Processamento de Imagens e de Sinais, apenas para citar algumas aplicações.
- Essencialmente, a fatoração revela informação sobre a matriz A e sobre o sistema que ela representa.

- 1 Eliminação de Gauss, com ($PA = LU$) e sem ($A = LU$) pivoteamento parcial. Na prática, não existe a possibilidade de não usarmos pivoteamento.
- 2 Fatoração de Cholesky, quando A é simétrica e positiva definida.

- 1 Uma matriz A , quadrada de ordem n , é triangular inferior se todos elementos acima da diagonal principal são nulos: $a_{ij} = 0$ para todo $i, j : 1 \leq i < j \leq n$.
- 2 Naturalmente, A é triangular superior se A^T é triangular inferior.
- 3 Um sistema linear $Ax = b$ é triangular, inferior ou superior, se a matriz de coeficientes A é triangular, inferior ou superior.
- 4 Vamos deduzir algoritmos para resolver sistemas lineares triangulares superiores (Método de Substituições Retroativas) e inferiores (Método de Substituições Sucessivas).

Exemplos: U é triangular superior e L é triangular inferior.

$$\textcircled{1} \quad U = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & -1 & 0 \\ 4 & 1 & -3 & 3 \end{bmatrix}$$

- $\textcircled{2}$ Como resolveríamos o sistema linear $Lx = b$, onde b é um vetor qualquer, por exemplo $b = (2 \ 3 \ 2 \ 9)^T$?

L é triangular inferior, isto é: $l_{ij} = 0 : j > i$.

$$\sum_{j=1}^n l_{ij}x_j = b_i \quad i = 1, \dots, n$$

$$\sum_{j=1}^i l_{ij}x_j + \sum_{j=i+1}^n l_{ij}x_j = b_i \quad i = 1, \dots, n$$

$$\sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j + l_{ii}x_i = b_i \quad i = 1, \dots, n$$

Expressão que permite deduzir o algoritmo

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j}{l_{ii}} \quad i = 1, \dots, n$$

Trecho de interesse do algoritmo

```
for i=1:n
    soma = 0.0;
    for k = 1:i-1
        soma = soma + L(i,k)*y(k)
    end
    y(i) = (b(i)-soma)/L(i,i);
end
```

- 1 Vamos contar as operações aritméticas de ponto flutuante.
- 2 Cada operação $(+, -, \times, \div)$ tem o mesmo peso, 1.
- 3 Lembrando que $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$.
- 4 Complexidade total: $\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{i-1} 2 + \sum_{i=1}^n 2 = n(n+1)$ operações aritméticas.
- 5 Algoritmo é quadrático em n : $O(n^2)$.

$$U = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} -10 \\ 10 \\ 1 \\ 12 \end{bmatrix}.$$

U é triangular superior, isto é: $u_{ij} = 0 : j < i$.

$$\sum_{j=1}^n u_{ij}x_j = y_i \quad i = n, n-1, \dots, 1$$

$$\sum_{j=1}^{i-1} u_{ij}x_j + \sum_{j=i}^n u_{ij}x_j = y_i \quad i = n, n-1, \dots, 1$$

$$u_{ii}x_i + \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j = y_i \quad i = n, n-1, \dots, 1$$

Expressão que permite deduzir o algoritmo

$$x_i = \frac{y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j}{u_{ii}} \quad i = n, n-1, \dots, 1$$

Assumimos que a matriz A foi fatorada na forma $A = LU$.

- $Ax = b \rightarrow L(Ux) = b$
- Resolvemos dois sistemas lineares triangulares:
 - $Ly = b$
 - $Ux = y$

Eliminação de Gauss

- 1 Transformar um sistema linear $Ax = b$ em outro **equivalente** $Ux = y$, onde U é triangular superior.
- 2 Dois sistemas lineares $Ax = b$ e $Ux = y$ são **equivalentes se possuem o mesmo conjunto de soluções**.
- 3 Para tanto, são empregadas operações l-elementares, que preservam o conjunto de soluções dos sistemas lineares aos quais são aplicadas.
- 4 O sistema triangular superior $Ux = y$ pode ser resolvido em $O(n^2)$ operações aritméticas, pelo método de **Substituições Retroativas**.

- (T1) Troca da ordem de duas linhas do sistema linear
(de início vamos assumir que não será necessário aplicar T1)
- (T2) Multiplicação de uma linha por uma constante não nula.
- (T3) Substituição de uma linha do sistema pela soma da própria linha mais um múltiplo de outra linha do sistema linear.

Sendo i a linha que será substituída e j a linha que será multiplicada por m , temos que

$$\sum_{k=1}^n a_{ik}x_k = b_i$$

é substituída por

$$\sum_{k=1}^n (a_{ik} + ma_{jk})x_k = b_i + mb_j.$$

Transformar o sistema $Ax = b$ em um sistema $Ux = y$.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 7 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Usaremos a matriz expandida $[A|b] : n \times (n + 1)$

op 0 (representação do sistema original)

$$[A|b] = [A^0|b^0] = \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 3 & 1 & 3 \\ 8 & 7 & 9 & 5 & 7 \\ 6 & 7 & 9 & 8 & 3 \end{array} \right]$$

Em cada operação de pivotemento (op):

Calculamos $m_{i,j}$: mutiplicador associado à i -ésima linha, na j -ésima (op), ou j -ésima coluna de A

Para $j = 1$, temos: $m_{2,1} = -2$, $m_{3,1} = -4$, $m_{4,1} = -3$

op 1 ao final da primeira operação de pivoteamento (op).

$$[A^1|b^1] = \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 & 3 \\ 0 & 4 & 6 & 8 & 0 \end{array} \right]$$

Para $j = 2$ temos $m_{3,2} = -3, m_{4,2} = -4$

op 2 ao final da segunda (op).

$$[A^2|b^2] = \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & -4 \end{array} \right]$$

Para $j = 3$ temos $m_{4,3} = -1$

op 3 ao final da terceira (op).

$$[A^3|b^3] = \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -4 \end{array} \right]$$

- Ao final de $(n - 1)$ ops, obtivemos um sistema linear triangular superior acima.
- Por Substituições Retroativas: $x = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 2 & -2 \end{bmatrix}^T$

- 1 Implicitamente, estamos pré-multiplicando o sistema $[A|b]$ por uma sequência de $(n - 1)$ matrizes de multiplicadores, cada uma representando uma operação de pivoteamento.

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 3 & 1 & 3 \\ 8 & 7 & 9 & 5 & 7 \\ 6 & 7 & 9 & 8 & 3 \end{array} \right]$$

- 2 Por construção, obtivemos:

$$\begin{aligned} M_{n-1}M_{n-2}\dots M_2M_1[A|b] &= [U|y] \\ &\Rightarrow \\ M_{n-1}M_{n-2}\dots M_2M_1A &= U \\ M_{n-1}M_{n-2}\dots M_2M_1b &= y \end{aligned}$$

- Vamos considerar a matriz $M_{n-1}M_{n-2}\dots M_2M_1$.
- Será que a matriz acima admite inversa ?
- Veja que $L = M_1^{-1}M_2^{-1}\dots M_{n-2}^{-1}M_{n-1}^{-1}$ é a inversa da matriz acima.
- L existe uma vez que cada uma das matrizes $M_j^{-1} : j = 1, \dots, n-1$ existe.

$$A = M_1^{-1}M_2^{-1}\dots M_{n-2}^{-1}M_{n-1}^{-1}U$$

$$A = LU$$

$$b = M_1^{-1}M_2^{-1}\dots M_{n-2}^{-1}M_{n-1}^{-1}y$$

$$b = Ly$$

- Cada matriz M_j difere da identidade de mesma ordem, I_n , apenas pela j -ésima coluna, nos elementos abaixo da diagonal principal. Por exemplo:

$$M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & m_{3,2} & 1 & 0 \\ 0 & m_{4,2} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

No exemplo anterior:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & m_{4,3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & m_{2,3} & 1 & 0 \\ 0 & m_{2,4} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ m_{2,1} & 1 & 0 & 0 \\ m_{3,1} & 0 & 1 & 0 \\ m_{4,1} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & | & 1 \\ 4 & 3 & 3 & 1 & | & 3 \\ 8 & 7 & 9 & 5 & | & 7 \\ 6 & 7 & 9 & 8 & | & 3 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ -4 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & | & 1 \\ 4 & 3 & 3 & 1 & | & 3 \\ 8 & 7 & 9 & 5 & | & 7 \\ 6 & 7 & 9 & 8 & | & 3 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & | & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & | & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & | & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & | & -4 \end{bmatrix}.$$

- A inversa de M_j , M_j^{-1} , possui forma idêntica, diferindo da identidade I_n também apenas pela j -ésima coluna e nos elementos abaixo da diagonal para aquela coluna. Suas entradas daquela coluna são simétricas às entradas de M_j .

$$M_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -m_{3,2} & 1 & 0 \\ 0 & -m_{4,2} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

No exemplo anterior, temos, $A = M_1^{-1} M_2^{-1} M_3^{-1} U$:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} = LU$$

- Então temos $A = M_1^{-1} \dots M_{n-1}^{-1} U = LU$.
- L é triangular inferior, com a diagonal unitária e tem a seguinte propriedade: $l_{ij} = -m_{ij}$ para todo $j = 1, \dots, n-1, i > j$.

- No exemplo anterior: $L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -m_{2,1} & 1 & 0 & 0 \\ -m_{3,1} & -m_{3,2} & 1 & 0 \\ -m_{4,1} & -m_{4,2} & -m_{4,3} & 1 \end{bmatrix}$

```
function [U,L] = EliminacaoGauss(A,n)
U = A
L = eye(n,n)
for j=1:n-1
    for i = j+1:n
        L(i,j) = U(i,j)/U(j,j)
        U(i,j:n) = U(i,j:n) - L(i,j)*U(j,j:n)
    end
end
endfunction
```

Lembrando: $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$ e $\sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n}{6}(n+1)(2n+1)$.

$$\sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=j+1}^n \sum_{k=j+1}^n 1 =$$

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

$$\sum_{j=1}^{n-1} (n-j)^2 =$$

$$\sum_{j=1}^{n-1} n^2 - 2n \sum_{j=1}^{n-1} j + \sum_{j=1}^{n-1} j^2 =$$

$$\sum_{j=1}^{n-1} j^2 =$$

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

- 1 Basta que os multiplicadores sejam armazenados.
- 2 Para resolver $Ax = b$, fatoramos a matriz $A = LU$ e resolvemos dois sistemas triangulares.

$$Ax = b$$

$$LUx = b$$

$$Ly = b$$

Sistema I

$$Ux = y$$

Sistema II

- 3 O vetor y é a imagem da transformação linear construída para transformar A em U aplicada em b .
- 4 Ou seja, uma vez que o custo computacional de fatorar $A = LU$ foi incorrido, resolver um sistema linear qualquer onde A é a matriz de coeficientes custa $O(n^2)$, o custo de resolver dois sistemas triangulares.

- ① $A = LU \rightarrow \det(A) = \det(L) \det(U) = \det(U) = \prod_{i=1}^n u_{ii}$
- ② $\det(A) = 0$ então existe $u_{ii} = 0$ para algum $i \in \{1, \dots, n\}$.
- ③ A é não singular $\iff \text{span}(A_1, A_2, \dots, A_n) = \mathbb{R}^n$.
Existe solução única para $Ax = b$, para qualquer b .
- ④ A é singular:
 - ① $\text{posto}(A|b) = \text{posto}(A) \rightarrow b \in \text{span}(A_1, A_2, \dots, A_n)$.
Sistema linear possui infinitas soluções.
 - ② $\text{posto}(A|b) = 1 + \text{posto}(A) \rightarrow b \notin \text{span}(A_1, A_2, \dots, A_n)$.
Sistema linear não possui solução.

- ❶ Os multiplicadores podem não ser definidos se houver um zero na linha pivotal.
- ❷ Se o denominador no cálculo dos multiplicadores não for zero, mas se for muito pequeno, o módulo do multiplicador tende a ser muito grande. Erros numéricos tendem a crescer.
- ❸ O ideal é que os multiplicadores tenham módulo limitado.

Lembrando das duas fontes principais de erros numéricos:

- Subtração de quantidades muito próximas.
- Soma de quantidades muito díspares.

- 1 Dada uma permutação $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n)$ dos inteiros $\{1, \dots, n\}$, uma matriz P é uma permutação (de linhas, associado a π) da matriz identidade I_n se a i -ésima linha de P for a π_i -ésima linha de I_n .
- 2 Se P é matriz de permutação, $P^{-1} = P^T$. (propriedade de qualquer matriz ortogonal ou unitária).
- 3 Seja $\hat{A}$ uma matriz que contém as mesmas linhas de A , em ordem diferente. Então existe uma matriz P de permutação de linhas da identidade, tal que $\hat{A} = PA$.
- 4 Se A é não singular (logo, $\det(A) \neq 0$), então existe uma matriz de permutação P tal que podemos aplicar o Método de Eliminação de Gauss à matriz PA , sem que ocorra divisão por zero, no cálculo dos multiplicadores.
- 5 Logo $PA = LU$.

- Na j -ésima coluna, identificamos o elemento de maior módulo dentre os elementos nas linhas $j, j+1, \dots, n$, para ser o pivot e definir a linha de base para o cálculo dos multiplicadores. As linhas $1, 2, \dots, j-1$ estão prontas e não participam da escolha.
- Usamos uma estrutura de dados adicional, vetor *pivot*, inicializado como $\text{pivot}(i) = i, i = 1, \dots, n$. O valor inteiro $\text{pivot}(i)$ indica o índice da linha do sistema original representado na linha i . Com este vetor, ao final do processo, recuperamos a matriz P .
- Sempre que houver troca de linha, por exemplo a linha j trocar de lugar com a linha p , trocamos o conteúdo de $\text{pivot}(j)$ e $\text{pivot}(p)$.

Se o elemento de maior módulo não estiver (originalmente) na posição da linha j , fazemos a troca da linha. Na sequência:

- Calculamos $(n - j)$ multiplicadores m_{ij} e com eles uma matriz de multiplicadores M_j .
- À linha $k \in \{j + 1, \dots, n\}$, corresponde o multiplicador m_{ij} tal que i indica o índice da linha original do sistema linear armazenado na posição k , isto é, $\text{pivot}(k) = i$.

- (op1) $j = 1$

- $[A|b] = \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 3 & 1 & 3 \\ 8 & 7 & 9 & 5 & 7 \\ 6 & 7 & 9 & 8 & 3 \end{array} \right] \begin{array}{l} (E1) \\ (E2) \\ (E3) \\ (E4) \end{array}$

- $a_{p1} = 8, p = 3$.
- Atualizamos " $pivot(1) = pivot(3), pivot(3) = pivot(1)$ ", trocamos o conteúdo das linhas 1/3.
- Pre-multiplicamos por P_1 , que difere de I nas linhas 1 e 3 apenas.
- $m_{11} = -\frac{1}{4}, m_{21} = -\frac{1}{2}, m_{41} = -\frac{3}{4}$

- $M_1 P_1 [A|b] = \left[\begin{array}{cccc|c} 8 & 7 & 9 & 5 & 7 \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{3}{4} \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} & -\frac{9}{4} \end{array} \right] \begin{array}{l} (E3) \\ (E2') \\ (E1') \\ (E4') \end{array}$

- (op2) $j = 2$

$$\bullet M_1 P_1[A|b] = \left[\begin{array}{cccc|cc} 8 & 7 & 9 & 5 & 7 & (E3) \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & (E2') \\ 0 & -\frac{3}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{5}{4} & -\frac{3}{4} & (E1') \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} & -\frac{9}{4} & (E4') \end{array} \right]$$

- $a_{p2} = \frac{7}{4}$, $p = 4$.
- Trocamos o conteúdo da linha $j = 2$ pela linha $p = 4$, que corresponde a fazer “pivot(2) = pivot(4), pivot(4) = pivot(2)”.
- Pré-multiplicamos por P_2 , que difere de I nas linhas 2 e 4 apenas.
- $m_{22} = \frac{2}{7}$, $m_{12} = \frac{3}{7}$

$$\bullet M_2 P_2 M_1 P_1[A|b] = \left[\begin{array}{cccc|cc} 8 & 7 & 9 & 5 & 7 & (E3) \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} & -\frac{9}{4} & (E4') \\ 0 & 0 & -\frac{2}{7} & -\frac{2}{7} & -\frac{12}{7} & (E1'') \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} & -\frac{8}{7} & (E2'') \end{array} \right]$$

- (op3) $j = 3$:

$$\bullet M_2 P_2 M_1 P_1 [A|b] = \left[\begin{array}{cccc|cc} 8 & 7 & 9 & 5 & 7 & (E3) \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} & -\frac{9}{4} & (E4') \\ 0 & 0 & -\frac{2}{7} & \frac{4}{7} & -\frac{12}{7} & (E1'') \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} & -\frac{8}{7} & (E2'') \end{array} \right]$$

- $a_{p3} = -\frac{6}{7}$, $p = 4$.
- Trocamos o conteúdo da linha $j = 3$ pela linha $p = 4$, que corresponde a fazer “pivot(3) = pivot(4), pivot(4) = pivot(3)”.
- Pré-multiplicamos por P_3 , que difere de I apenas nas linhas 3 e 4.
- $m_{13} = -\frac{1}{3}$

$$\bullet M_3 P_3 M_2 P_2 M_1 P_1 [A|b] = \left[\begin{array}{cccc|cc} 8 & 7 & 9 & 5 & 7 & (E3) \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} & -\frac{9}{4} & (E4') \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} & -\frac{8}{7} & (E2'') \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{4}{3} & (E1''') \end{array} \right]$$

- Resolvemos $PAx = Pb$ via $LUx = Pb$.

- $\text{pivot} = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 2 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

- $U = \begin{bmatrix} 8 & 7 & 9 & 5 \\ 0 & \frac{7}{4} & \frac{9}{4} & \frac{17}{4} \\ 0 & 0 & -\frac{6}{7} & -\frac{2}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$

- $m_{11} = -\frac{1}{4}, m_{21} = -\frac{1}{2}, m_{41} = -\frac{3}{4}$
- $m_{22} = \frac{2}{7}, m_{12} = \frac{3}{7}$
- $m_{13} = -\frac{1}{3}.$

A partir dos multiplicadores armazenados, como definir L ?

Os valores $-m_{ij} : j = 1, \dots, k-1$ são empregados na linha k de L , antes do elemento da diagonal principal; o índice k satisfaz $\text{pivot}(k) = i$.

- $m_{11} = -\frac{1}{4}, m_{21} = -\frac{1}{2}, m_{41} = -\frac{3}{4}, m_{22} = \frac{2}{7}, m_{12} = \frac{3}{7},$
 $m_{13} = -\frac{1}{3}.$

- $$L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \frac{3}{4} & 1 & & \\ \frac{1}{2} & -\frac{2}{7} & 1 & \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{7} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix}$$

Outra maneira de se formalizar as operações de eliminação é verificar que, a cada op, subtraímos de A uma matriz de rank 1, e depois operamos sobre a diferença:

- Na primeira operação:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \text{vez a linha pivot 1} \\ l_{21} & \text{vez a linha pivot 1} \\ l_{31} & \text{vez a linha pivot 1} \\ l_{41} & \text{vez a linha pivot 1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \text{vez a linha pivot 1} \\ l_{21} & \text{vez a linha pivot 1} \\ l_{31} & \text{vez a linha pivot 1} \\ l_{41} & \text{vez a linha pivot 1} \end{bmatrix} + A_2$$

$\Rightarrow$ Ou seja, $A = L_1 u_1^T + A_2$

- $l_{21} = a_{21}/a_{11}, l_{31} = a_{31}/a_{11}, l_{41} = a_{41}/a_{11}$.
- Veja que estes multiplicadores l_{21}, l_{31}, l_{41} são os simétricos de m_{21}, m_{31}, m_{41} que deduzimos na visão por linhas.

No nosso exemplo, na primeira op temos:

- $A = A1 = L_1 u_1^T + A2.$

- $$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix}$$

- $$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 2 & 2 & 0 \\ 8 & 4 & 4 & 0 \\ 6 & 3 & 3 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix}$$

No nosso exemplo, na segunda op temos:

- $A2 = L_2 u_2^T + A3.$

- $A2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} =$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

- $A2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 5 & 5 \\ 0 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 3 & 3 \\ 0 & 4 & 4 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{bmatrix}$

No nosso exemplo, na terceira op temos:

- $A3 = L_3 u_3^T + A4.$

- $A3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{bmatrix}$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

O quarto termo de rank-1, equivalente a uma quarta op que na visão por linhas, não foi implementada:

- $A_4 = L_4 u_4^T = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$

Formalizando as operações para uma matriz $n \times n$ (assumindo pivots não nulos):

- $A = A1 = L_1 u_1^T + A2$
- $A2 = L_2 u_2^T + A3$
- $\dots$
- $A(n-1) = L_{n-1} u_{n-1}^T$
- $An = L_n u_n^T$.

Substituindo:

- $A = L_1 u_1^T + A_2$
- $A = L_1 u_1^T + L_2 u_2^T + A_3$
- ...
- $A = \sum_{i=1}^n L_i u_i^T$

Ou seja, escrevemos A como uma soma de matrizes de rank-1.

Organizando de uma forma mais conveniente temos:

$$A = \left[\begin{array}{c|c|c|c} | & | & \cdots & | \\ L_1 & L_2 & \cdots & L_n \\ | & | & \cdots & | \end{array} \right] \begin{bmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ \vdots \\ u_n^T \end{bmatrix} = LU$$

- A linha pivot (que gera as operações linhas) é a linha onde se encontra o elemento de maior módulo na coluna da operação de pivoteamento. Para recuperar a matriz P , armazenamos o índice das linhas que geraram o pivoteamento no vetor pivot.

- Assim, na primeira op deve produzir o resultado:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 7 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix}$$

- Vamos guardar os vetores $\tilde{L}_i$ sem nos preocupar com a forma

triangular (inferior) para eles. $u_1^T = [2 \ 4 \ 8] \ \tilde{L}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.5 \\ 1 \end{bmatrix}$

$$A = \tilde{L}_1 u_1^T + A_2 \rightarrow A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- Note que a terceira linha de A_2 (e não a primeira) é toda composta de zeros. $\text{pivot}(1) = 3$.

- Há empate para escolha do pivot. Adotamos $pivot(2) = 1$.
- A segunda operação de pivoteamento deve gerar o resultado

$$A2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- $u_2^T = [0 \ 1 \ 1]$, $\tilde{L}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$.

- $A2 = \tilde{L}_2 u_2^T + A3 \rightarrow A3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

- $\text{pivot}(3) = 2$.

- $u_3^T = [0 \ 0 \ 2]$, $\tilde{L}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$.

- $A_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

Escrevendo a A como soma de matrizes de rank-1 que acumulamos:

- $A = \tilde{L}_1 u_1^T + \tilde{L}_2 u_2^T + \tilde{L}_3 u_3^T = \tilde{L}U$

- A fatoração não está na forma desejada, uma vez que $\tilde{L}$ ainda não tem a forma triangular inferior:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0.5 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 8 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

- $\text{pivot} = (3, 1, 2) \rightarrow P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$

- Pré-multiplicando por P a fatoração acima, temos:
 $PA = (P\tilde{L})U = LU$

- $PA = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 8 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0.5 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 8 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$

Resolvemos $PAx = Pb$ via $LUx = Pb$.

- Assuma $b = (1 \ 2 \ 3)^T$.

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

- $Ly = Pb \rightarrow y = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ -0.5 \end{bmatrix}$

- $Ux = y \rightarrow x = \begin{bmatrix} 0 \\ 1.25 \\ -0.25 \end{bmatrix}$

- Aplicável para **matrizes simétricas positivas definidas (SPD)**.
- **Simetria**: $A = A^T$
- **Positividade**: Depende do valor assumido pela forma quadrática $f(x) = x^T A x : x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$.

(Recordando) Se para qualquer $x \neq 0$,

$$x^T A x \begin{cases} \geq 0 & \text{semi-positiva definida} \\ > 0 & \text{positiva definida} \\ \leq 0 & \text{semi-negativa definida} \\ < 0 & \text{negativa definida} \end{cases}$$

Se não satisfizer alguma destas condições, A é **indefinida**.

Quando A seja **simétrica positiva definida (SPD)**:

- Simetria: dados dois vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$, vale $x^T A y = y^T A x$
- A condição $x^T A x = \langle x, A x \rangle > 0$ para qualquer $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ indica que o ângulo formado entre x e sua imagem por A , Ax , é sempre menor que $\frac{\pi}{2}$.

- 1 Os autovalores são reais uma vez que a matriz é simétrica.
- 2 A positividade garante que os autovalores são positivos.
- 3 Seu determinante é não nulo, uma vez que $\det(A) = \prod_i \lambda_i$.
- 4 A matriz admite inversa.
- 5 $a_{ii} > 0$ para todo $i = 1, \dots, n$.

A =

```
1.  -1.  3.  -4.  
-1.  5.  -1.  2.  
3.  -1.  14. -9.  
-4.  2.  -9.  22.
```

--> spec(A)

ans =

```
0.0139839  
4.8264375  
8.1805547  
28.979024
```

Teorema de Cholesky

Uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é SPD **se e somente se** possui uma fatoração (chamada fatoração de Cholesky) da forma:

$$A = LL^T$$

onde L é uma matriz triangular inferior com diagonal positiva. Esta fatoração é única.

$$A \text{ é SPD} \iff A = LL^T : l_{ii} > 0, i = 1, \dots, n$$

- 1 É uma forma eficiente de verificar a positividade da matriz simétrica.
- 2 É um caso particular da fatoração $PA = LU$, onde $P = I$ e $U = L^T$, $l_{ii} = u_{ii} > 0 : i = 1, \dots, n$.
- 3 $\det(A) = \det(L)^2 = \prod_{j=1}^n l_{jj}^2$
- 4 Uma vez que a fatoração seja disponível, para resolver o sistema linear $Ax = b$: $LL^T x = b$, $Ly = b$, $L^T x = y$.
- 5 Utiliza aproximadamente metade das operações elementares da decomposição LU, da memória e **é numericamente mais estável**.

Usando o Teorema de Cholesky

Assume-se que A seja SPD e, então, que existe L com a diagonal positiva tal que $A = LL^T$.

Logo $a_{ij} = l_i^T l_j : i, j = 1, \dots, n$ onde l_i denota a i -ésima linha de A .

Se A não for SPD, o algoritmo de Cholesky vai caracterizar a não positividade.

$$A = \begin{bmatrix} 1. & -1. & 3. & -4. \\ -1. & 5. & -1. & 2. \\ 3. & -1. & 14. & -9. \\ -4. & 2. & -9. & 22. \end{bmatrix}$$

Determinação dos elementos na diagonal de L

L é triangular inferior $\iff l_{ij} = 0, j > i$. l_i é a i -ésima linha de L .

$$\begin{aligned}a_{jj} &= l_j^T l_j \\&= \sum_{k=1}^n l_{jk}^2 \\&= \sum_{k=1}^j l_{jk}^2 + \sum_{k=j+1}^n l_{jk}^2 \\&= \sum_{k=1}^j l_{jk}^2 \\&= l_{jj}^2 + \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2\end{aligned}$$

$$l_{jj} = +\sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2} \quad \text{para } j = 1, \dots, n$$

Determinação dos elementos l_{ij} , abaixo da diagonal de L , i.e., $i > j$.

L é triangular inferior $\iff l_{ij} = 0, j > i$. l_i é a i -ésima linha de L .

$$\begin{aligned}a_{ij} &= l_i^T l_j \\&= \sum_{k=1}^n l_{ik} l_{jk} \\&= \sum_{k=1}^j l_{ik} l_{jk} + \sum_{k=j+1}^n l_{ik} l_{jk} \\&= \sum_{k=1}^j l_{ik} l_{jk} \\&= l_{ij} l_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}\end{aligned}$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}} \quad \text{para } i = j+1, \dots, n$$

L é triangular inferior $\iff l_{ij} = 0, j > i$.

- Para todo $j = 1, \dots, n$:

① Calcula-se o elemento l_{jj} , via $a_{jj} = l_j^T l_j$:

$$l_{jj} = +\sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}$$

② Se $l_{jj}^2 > 0$, calcula-se os elementos l_{ij} , para todo $i = j + 1, \dots, n$, via $a_{ij} = l_i^T l_j$:

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} l_{ik}}{l_{jj}}$$

Sabemos que $\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}$ e $\sum_{i=1}^n i^2 = \frac{n}{6}(n+1)(2n+1)$.

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^n \sum_{i=j+1}^n \sum_{k=1}^{j-1} 1 &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=j+1}^n (j-1) \\&= \sum_{j=1}^n (n-j)(j-1) \\&= \sum_{j=1}^n ((n+1)j - n - j^2) \\&= \frac{n(n+1)^2}{2} - n^2 - \frac{n}{6}(n+1)(2n+1) \\&= \frac{n^3}{6} + O(n^2)\end{aligned}$$

- Veja que podemos escrever A como o produto dos fatores:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & w^T \\ w & K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & 0 \\ s & \hat{R}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & s^T \\ 0 & \hat{R} \end{bmatrix}$$

- Para a primeira operação (coluna e linha), temos:

$$r_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$s = \frac{w}{r_{11}}$$

$$\hat{R}^T \hat{R} = K - ss^T$$

- Aplicamos o algoritmo (recursivamente ou não) à matriz simétrica positiva definida $\hat{R}^T \hat{R}$.

Outer Cholesky: Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 & -4 \\ -1 & 5 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 14 & -9 \\ -4 & 2 & -9 & 22 \end{bmatrix}$$

- Primeira op, determinamos a primeira linha de $L^T = R$.

$$r_{11} = \sqrt{a_{11}} = 1$$

$$s^T = \frac{w^T}{r_{11}} = (-1, 3, -4)$$

- Termo que sobra $R^T R$:

$$\begin{aligned} \hat{R}^T \hat{R} &= \begin{bmatrix} 5 & -1 & 2 \\ -1 & 14 & -9 \\ 2 & -9 & 22 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 3 & -4 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 5 & 3 \\ -2 & 3 & 6 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 5 & 3 \\ -2 & 3 & 6 \end{bmatrix}$$

- Segunda op, determinamos a segunda linha de $L^T = R$.

$$r_{22} = \sqrt{4} = 2$$

$$s^T = \frac{w^T}{2} = (1, -1)$$

- Termo que sobra $R^T R$:

$$\begin{aligned} \hat{R}^T \hat{R} &= \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 4 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$$

- Terceira op, determinamos a terceira linha de $L^T = R$.

$$r_{33} = \sqrt{4} = 2$$

$$s^T = \frac{w^T}{2} = (2)$$

- Termo que sobra $R^T R$:

$$\hat{R}^T \hat{R} = 5 - (2)(2)^T = 1$$

[1]

- Quarta op, determinamos a quarta linha de $L^T = R$.

$$r_{44} = \sqrt{1} = 1$$

- que nos permite concluir estabelecendo o fator:

$$L^T = R = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 & -4 \\ & 2 & 1 & -1 \\ & & 2 & 2 \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$