

Pivotamento, Fatoração LU, Método de Thomas

MS211 – Cálculo Numérico

Giuseppe Romanazzi

20 Outubro 2020

Conteúdo

- 1 Método de Eliminação de Gauss com pivotamento
 - Algoritmo
- 2 Fatoração de matrizes
 - Fatoração LU
- 3 Resolução de Sistemas Tridiagonais, Método de Thomas

Algoritmo otimizado no uso da memória

Require: n , $A = (a_{ij})$, $b = (b_i)$

for $k = 1, \dots, n - 1$ **do**

Determinar o índice $\tilde{i} \in \{k, k + 1, \dots, n\}$ tal que

$$|a_{\tilde{i}k}^{(k-1)}| = \max_{i=k, \dots, n} |a_{ik}^{(k-1)}|$$

Trocar linha k do sistema com a linha \tilde{i}

for $i = k + 1, \dots, n$ **do**

$$m = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}};$$

$$a_{ik} \leftarrow m;$$

$$b_i = b_i - mb_k;$$

for $j = k + 1, \dots, n$ **do**

$$a_{ij} = a_{ij} - m \cdot a_{kj}$$

end for

end for

end for

O algoritmo permite de gravar todos os passos na mesma estrutura $(A|b)$ sem necessidade de nova memória respeito aquela disponível do input.

Fatoração

Definição (Fatoração de uma matriz)

Se existem duas matrizes "simples" C e D que são fatores de A ou seja tais que $A = C \cdot D$

*então a decomposição $A = C \cdot D$ chama-se **fatoração da matrix A***

Considere o sistema linear $Ax = b$ com $A = C \cdot D$. Notamos que os seguintes problemas são equivalentes

$$Ax = b \iff C \cdot Dx = b \iff \begin{cases} \text{(passo 1), resolver } Cy = b; \\ \text{(passo 2), usa } y \text{ do passo 1 e resolve } Dx = y; \end{cases}$$

Chamaremos a seguir este último algoritmo: **estratégia dos dois passos** para resolver sistemas lineares com A fatorizável.

Vantagens da Fatoração na resolução de sistemas lineares

- Se as matrizes C e D tem uma estrutura conhecida e simples, como as matrizes diagonais, triangulares ou em geral com uma distribuição de zero conhecida a priori, então será mais simples resolver os dois sistemas $Cy = b$ e $Dx = y$ respeito ao resolver o sistema completo $Ax = b$
- Uma vez que temos a fatoração da matriz A podemos resolver com mínimo custo todos os sistemas do tipo $Ax = b$, $Ax = c$, $Ax = d$, com b, c, d vetores diferentes. Usaremos sempre a estratégia dos dois passos vista anteriormente.
Esta estratégia dá uma vantagem enorme porque permite de poupar o custo computacional, respeito a :
 - aplicar cada vez o método de eliminação de Gauss, que tem um custo $O(n^3)$,
 - usar o método de Cramer que tem custo $O(n^n)$.

Vantagens da Fatoração na resolução de sistemas lineares

- Note que se os fatores C e D foram triangulares (como vai ser na fatoração LU) o custo da estratégia dos dois passos para resolver $Ax = b$ tem custo $n^2 + n^2 = 2n^2 = O(n^2)$

Aplicar o método de eliminação de Gauss para resolver três sistemas terá um custo $3 \cdot O(n^3)$ em vez com a estratégia dos dois passos com os fatores triangulares C, D conhecidos teremos um custo de $6n^2 = O(n^2)$.

Uso da fatoração para obter a inversa de matrizes

A fatoração pode ser usada também para achar a matriz inversa A^{-1} .
Porque a matriz A^{-1} corresponde a única matriz $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que $AX = I$ onde I é a matriz diagonal com todos 1 na diagonal.

Se indicamos com $\bar{x}_i \in \mathbb{R}^n$ as colunas de X teremos que $A\bar{x}_i = \bar{e}_i$ onde $\bar{e}_i = (0 \ \cdots \ 0 \ 1 \ 0 \ \cdots \ 0)^t$ é um vetor coluna que tem todos zeros e tem 1 somente na posição com índice i .

Se foram conhecidos os fatores C e D da matriz A , podemos achar os \bar{x}_i , como solução de $A\bar{x}_i = \bar{e}_i$, com um custo computacional do tipo $n \cdot O(n^2) = O(n^3)$ que será sempre menor do custo de resolver n sistemas com eliminação de Gauss que terá em vez um custo $nO(n^3) = O(n^4)$.

Fatoração LU e eliminação de Gauss

Definição (Fatoração LU)

Uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tem fatoração LU se existem a matriz triangular inferior $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ com 1 na diagonal principal, e a matriz triangular superior $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tais que $A = L \cdot U$.

O método de eliminação de Gauss clássico pode ser utilizado para achar a fatoração do tipo LU da matriz A .

Fatoração LU e eliminação de Gauss

Durante o método da eliminação (clássico) de Gauss se gravamos todos os multiplicadores $m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ podemos construir a matriz L da fatoração LU da matriz A .

A última matriz obtida do método, ou seja $A^{(n-1)}$, é a matriz triangular superior U da fatoração.

Vale o seguinte teorema...

Teorema da fatoração LU

Seja A uma matriz não singular tal que $\det(A_k) \neq 0$, onde A_k é formada das primeiras k linhas e colunas de A , com $k = 1, \dots, n$, então existe uma única fatoração LU de A , que é obtida com

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & \cdots & m_{nn-1} & 1 \end{pmatrix};$$

$$U = A^{(n-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & 0 & \ddots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

Algoritmo da fatoração LU sem fill-in

Modificamos o algoritmo da eliminação de Gauss para gravar os multiplicadores m_{ik} na parte triangular inferior da matriz A . Note que esta parte da matriz não é utilizada após a eliminação de Gauss, porque continha somente os zeros.

Require: n , $A = (a_{ij})$, $b = (b_i)$

for $k = 1, \dots, n - 1$ **do**

for $i = k + 1, \dots, n$ **do**

$$m = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}};$$

$$a_{ik} \leftarrow m;$$

$$b_i = b_i - mb_k;$$

for $j = k + 1, \dots, n$ **do**

$$a_{ij} = a_{ij} - m \cdot a_{kj}$$

end for

end for

end for

Output: $(L)_{i>j} = (a_{ij})_{i>j}$, $(U)_{i\leq j} = (a_{ij})_{i\leq j}$

Fatoração e o método de eliminação de Gauss

Sendo que o método de eliminação de Gauss pode ser usado para achar a fatoração LU da matriz dos coeficientes A do sistema, teremos que

o custo computacional para achar a fatoração LU é $\frac{2}{3}n^3 + \frac{n^2}{2} - \frac{7}{6}n = O(n^3)$.

Portanto a vantagem computacional da fatoração respeito o método de eliminação de Gauss reside somente quando queremos resolver mais sistemas lineares do tipo

$$Ax = \bar{b}$$

com a mesma matriz A dos coeficientes e com \bar{b} que varia.

Exemplo de resolução do sistema linear com a eliminação de Gauss e com gravação da fatoração LU

$$\text{Considere } \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 2 \\ 4x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 3 \end{cases} \quad m_{21} = \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{1}{3}; \quad m_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}} = \frac{4}{3}$$

$$\begin{aligned} a_{22}^{(1)} &= a_{22} - m_{21}a_{12} = 1 - \frac{1}{3}2 = \frac{1}{3}; & a_{23}^{(1)} &= a_{23} - m_{21}a_{13} = 2 - \frac{1}{3}4 = \frac{2}{3} \\ a_{32}^{(1)} &= a_{32} - m_{31}a_{12} = 3 - \frac{4}{3}2 = \frac{1}{3}; & a_{33}^{(1)} &= a_{23} - m_{31}a_{13} = 2 - \frac{4}{3}4 = -\frac{10}{3} \\ b_2^{(1)} &= b_2 - m_{21}b_1 = 2 - \frac{1}{3}1 = \frac{5}{3}; & b_3^{(1)} &= b_3 - m_{31}b_1 = 3 - \frac{4}{3}1 = \frac{5}{3}. \end{aligned}$$

Gravando os m_{21} e m_{31} nas posições (2, 1) e (3, 1) obtemos no passo 1 a

$$\text{estrutura } (\widetilde{A^{(1)}}|b^{(1)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 4 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{5}{3} \\ 4 & 1 & -\frac{10}{3} & \frac{5}{3} \end{array} \right)$$

No segundo passo obtemos somente o multiplicador $m_{32} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} = \frac{\frac{1}{3}}{\frac{1}{3}} = 1$

e os coeficientes

$$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - m_{32}a_{23}^{(1)} = -\frac{10}{3} - \frac{2}{3} = -4, \quad b_3^{(2)} = b_3^{(1)} - m_{32}b_2^{(1)} = \frac{5}{3} - \frac{5}{3} = 0$$

Assim levando o m_{32} na posição (3, 2) da matriz teremos no fim do

segundo passo a estrutura $(\tilde{A}^{(2)}|b^{(2)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 4 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{5}{3} \\ \frac{4}{3} & 1 & -4 & 0 \end{array} \right)$ então L

será uma matriz triangular inferior com 1 na diagonal principal e com a sua parte inferior que é igual a parte inferior da matriz $\tilde{A}^{(2)}$:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{4}{3} & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

e U é a parte triangular superior de $\tilde{A}^{(2)}$: $U = A^{(2)} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix}$

A resolução do sistema será sempre baseada no resolver $A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$ que é o mesmo que resolver $Ux = L^{-1}b$, ou seja temos $A^{(n-1)} = U$ mas também $b^{(n-1)} = L^{-1}b$.

No nosso exemplo, o sistema triangular superior final é

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Da última equação obtemos $x_3 = 0$,

Da segunda obtemos: $x_2 = \frac{\frac{5}{3} - \frac{2}{3} \cdot 0}{\frac{1}{3}} = 5$

Da primeira equação obtemos

$$3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 3x_1 + 10 = 1 \rightarrow x_1 = -\frac{9}{3} = -3$$

Método de Thomas

O método (ou algoritmo) de Thomas é um método direto para resolver sistemas tridiagonais.

Este método pode ser visto como uma estratégia para determinar rapidamente a fatoração LU de matrizes tridiagonais.

Por causa da presença de muitos zeros (esparsidade) na matriz A este método a diferença do método de eliminação de Gauss tem um custo computacional baixo de $O(n)$.

Fatoração LU de matrizes tridiagonais usando o Método de Thomas

$$A = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ \beta_2 & 1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \beta_{n-1} & 1 & \\ & & & & \beta_n & 1 \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 & c_1 & & & & \\ & \alpha_2 & c_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \alpha_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & & & \alpha_n & \end{pmatrix}}_U$$

onde

$$\alpha_1 = a_1,$$

$$\beta_i = \frac{b_i}{\alpha_{i-1}} \quad \text{e} \quad \alpha_i = a_i - \beta_i c_{i-1}, \quad \text{por } i = 2, \dots, n$$

Método de Thomas

Dado o sistema linear $Ax = \bar{b}$ onde $\bar{b} = (\bar{b}_1, \dots, \bar{b}_n)^t$ é o vetor dos termos independentes, a solução do sistema pode ser obtida resolvendo os sistemas lineares triangulares:

$$Ly = \bar{b} \quad \text{e} \quad Ux = y$$

Usando as matrizes L e U obtidas na slide anterior, concluímos que

$$y_1 = \bar{b}_1, \quad y_i = \bar{b}_i - \beta_i y_{i-1}, \quad \text{com } i = 2, \dots, n$$
$$x_n = \frac{y_n}{\alpha_n}, \quad x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{\alpha_i}, \quad i = n-1, \dots, 1$$

Este método de Thomas, permite de calcular a solução de sistemas lineares tridiagonais com $O(n)$ operações aritméticas.