Fatoração LU, Método de Thomas

MS211 – Cálculo Numérico – Turma C

Giuseppe Romanazzi

Setembro 2024

Conteúdo

Fatoração

Definição (Fatoração de matrizes)

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 matriz** A

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

$$Ax = b \iff C \cdot Dx = b \iff \left[\begin{array}{l} \text{(passo 1), resolver } Cy = b; \\ \text{(passo 2), use } y \text{ do passo 1 e resolva } Dx = y; \end{array} \right.$$

Chamaremos a seguir este algoritmo como **estrategia 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 muitos zeros 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 estrategia dos dois passos vista anteriormente.
  Esta estrategia 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 estrategia 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 $3 \cdot O(n^3) = O(n^3)$ em vez com a estrategia dos dois passos com os fatores triangulares C, D conhecidos teremos um custo de $3 \cdot 2n^2 = 6n^2 = O(n^2)$.

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 inversa A^{-1} é igual 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 $\bar{e}_i = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^t$ é um vetor coluna que tem todos zeros e tem 1 somente na posição com indez 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 a estrategia dos dois passos e assim ter um custo computacional $n \cdot O(n^2) = O(n^3)$ que é sempre menor do custo para resolver n sistemas com eliminação de Gauss que tem 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 existirem 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 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 $k = 1, \ldots, n$, então existe uma única fatoração LU de A, que é obtida com

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

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

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 ela contem somente os zeros.

Require: n, $A = (a_{ij})$, $b = (b_i)$
    for $k = 1, \ldots, n-1$ **do**
        for $i = k+1, \ldots, n$ **do**
            $m = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$;
            $a_{ik} \leftarrow m$;
            $b_i = b_i - mb_k$;
            for $j = k+1, \ldots, n$ **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

$$Ax = \overline{b}$$

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

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

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

$a_{22}^{(1)} = a_{22} - m_{21}a_{12} = 1 - \frac{1}{3}2 = \frac{1}{3}$; $a_{23}^{(1)} = a_{23} - m_{21}a_{13} = 2 - \frac{1}{3}4 = \frac{2}{3}$

$a_{32}^{(1)} = a_{32} - m_{31}a_{12} = 3 - \frac{4}{3}2 = \frac{1}{3}$; $a_{33}^{(1)} = a_{23} - m_{31}a_{13} = 2 - \frac{4}{3}4 = -\frac{10}{3}$

$b_2^{(1)} = b_2 - m_{21}b_1 = 2 - \frac{1}{3}1 = \frac{5}{3}$; $b_3^{(1)} = b_3 - m_{31}b_1 = 3 - \frac{4}{3}1 = \frac{5}{3}$.

Gravando os m_{21} e m_{31} nas posições $(2,1)$ e $(3,1)$ obtemos no passo 1 a estrutura $(\widetilde{A^{(1)}}|b^{(1)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 4 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{5}{3} \\ \frac{4}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{10}{3} & \frac{5}{3} \end{array}\right)$

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

e os coeficientes
$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - m_{32}a_{23}^{(1)} = -\frac{10}{3} - \frac{2}{3} = -4,\ b_3^{(2)} = b_3^{(1)} - m_{32}b_2^{(1)} = \frac{5}{3} - \frac{5}{3} = 0$
Assim levando o m_{32} na posição $(3,2)$ da matriz teremos no fim do

segundo passo a estrutura $(\widetilde{A^{(2)}}|b^{(2)}) = \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 4 & 1 \\ \dfrac{1}{3} & \dfrac{1}{3} & \dfrac{2}{3} & \dfrac{5}{3} \\ \dfrac{4}{3} & 1 & -4 & 0 \end{array}\right)$ 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 $\widetilde{A^{(2)}}$: $U = A^{(2)} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix}$

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

Matrizes e Sistemas Tridiagonais

Uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ que tem três diagonais como na figura em baixo

$$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & & \\ & b_3 & a_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & b_n & a_n \end{pmatrix}$$

chama se **matriz tridiagonal**. Estas matrizes são caraterizadas em ter $a_{ij} = 0$ para cada $i, j \in 1, \ldots, n$ tal que $|i - j| > 1$.
Um sistema linear $Ax = b$ com A matriz triadiagonal é dito **sistema tridiagonal**.

Método de Thomas

O método de Thomas é um método direto para resolver sistemas tridiagonais.
Este método pode ser visto como uma estrategia 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

$$\alpha_1 = a_1,$$

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

Método de Thomas

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

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

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

$$y_1 = \bar{b}_1, \quad y_i = \bar{b}_i - \beta_i y_{i-1}, \quad \text{com } i = 2, \ldots, n$$

$$x_n = \frac{y_n}{\alpha_n}, \quad x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{\alpha_i}, \quad i = n-1, \ldots, 1$$

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

Problema do calor num segmento discretizado

Sistemas tridiagonais saem se queremos resolver o problema do calor estacionario no segmento $[0,1]$

$$\begin{cases} -u'' = f \\ u(0) = w_0, \;\; u(1) = w_1 \end{cases}$$

Usamos uma formula de diferenças finitas de segunda ordem para proximar a derivada segunda nos pontos $x_i = ih$, $i = 0, \ldots, n$ com $h = b - a/n$

$$u''(x_i) \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

$$-u''(x_i) = f(x_i) \to -\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = f(x_i), \quad \text{para } i = 1, \ldots, n-1$$

Obtemos o seguinte sistema tridiagonal

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{w_0}{h^2} + f(0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{n-1}) \\ \frac{w_1}{h^2} + f(1) \end{pmatrix}$$