Joaquim João Júdice

Texto de Apoio às Aulas de Álgebra Linear Numérica

e ao livro "Sistemas de Equações Lineares", de Joaquim Júdice e João Patrício

Departamento de Matemática
Universidade de Coimbra
2003

Conteúdo

1 Normas Vectoriais e Matriciais

1. **Norma Vectorial** $\|\cdot\|$ satisfaz

$$\begin{aligned} \|x\| &\geq 0 \\ \|x\| = 0 &\Leftrightarrow x = 0 \\ \|\lambda x\| &= |\lambda| \|x\| \\ \|x + y\| &\leq \|x\| + \|y\| \end{aligned}$$

para todos $x, y \in \mathbb{R}^n$ e $\lambda \in \mathbb{R}^1$.

2. **Normas** ℓ_p:

$$\begin{aligned} \|x\|_1 &= \sum_{i=1}^{n} |x_i| \\ \|x\|_2 &= \left(\sum_{i=1}^{n} (x_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ \|x\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \end{aligned}$$

3. **Norma matricial** $\| \ \|$ satisfaz:

$$\begin{aligned} \|A\| &\geq 0 \\ \|A\| = 0 &\Leftrightarrow A = 0 \\ \|\lambda A\| &= |\lambda| \, \|A\| \\ \|A + B\| &\leq \|A\| + \|B\| \\ \|AB\| &\leq \|A\| \, \|B\| \end{aligned}$$

4. **Normas matriciais** ℓ_p:

$$\|A\|_p = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} = \max_{\|x\|_p = 1} \|Ax\|_p$$

com $p = 1, 2, \infty$. Então para $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$,

$$\begin{aligned} \|A\|_1 &= \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \\ \|A\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \\ \|A\|_2 &= \sqrt{\rho(A^T A)} \end{aligned}$$

com $\rho(B)$ o raio espectral de B, isto é

$$\rho(B) = \max\{|\lambda_i| : \ \lambda_i \text{ é valor próprio de } B\}$$

5. **Resultados**:

   (i) Normas vectoriais e matriciais ℓ_p são compatíveis, isto é

   $$\|Ax\|_p \leq \|A\|_p \, \|x\|_p, \ \forall A, x$$

   (ii)

   $$\rho(A) \leq \|A\|$$

   (iii)

   $$\rho(A) = \|A\|_2, \text{ se } A \text{ é simétrica}$$

2 Número de Condição de uma Matriz Quadrada

$$\text{cond}(A) = \|A\| \, \|A^{-1}\|$$

Se A é singular, então $\text{cond}(A) = \infty$.

Resultados

Consideremos duas normas vectorial e matricial compatíveis, isto é,

$$\|Ax\| \leq \|A\| \, \|x\|, \ \forall x, A$$

1. Se $Ax = b$ e $A(x + \delta x) = b + \delta b$, então

   $$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

   isto é, pequenas perturbações no vector dos termos independentes implicam pequenos erros na solução se $\text{cond}(A)$ é pequeno, mas podem implicar erros elevados se $\text{cond}(A)$ é grande.

2. Se x é a solução exacta de $Ax = b$ (não é conhecida em geral) e $\overline{x}$ é a solução calculada por um processo qualquer, então

   $$\frac{\|x - \overline{x}\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}$$

   com

   $$r = b - A\overline{x}$$

   o vector resíduo (fácil de calcular). Portanto se $\text{cond}(A)$ é pequeno, soluções com resíduo $\|r\|$ pequeno são boas, enquanto que essas soluções podem ter má precisão quando $\text{cond}(A)$ é elevado.

3. Se A é simétrica, então

   $$\text{cond}_2(A) = \frac{\max |\lambda_i|}{\min |\lambda_i|}$$

   com λ_i os valores próprios de A, $i = 1, \ldots, n$.

4. $\text{cond}(A) \geq 1$.

3 Matrizes de Permutação

1. Matriz P_{ij}: matriz que se obtém da identidade por troca das linhas (ou colunas) i e j ($P_{ij} = P_{ij}^T = P_{ij}^{-1}$).

$$\begin{cases} P_{ij}A & \rightarrow \text{ troca linhas } i \text{ e } j \text{ de } A \\ AP_{ij} & \rightarrow \text{ troca colunas } i \text{ e } j \text{ de } A \end{cases}$$

2. Matriz de Permutação P: produto de matrizes P_{ij}.

3. P^TAP: permutação principal de A: matriz que se obtém de A usando uma ordem diferente da ordem natural para as linhas e as colunas.

   Exemplo: se $P = P_{12}P_{31}$, então
   $$P^TAP$$
   é a matriz A com ordenação [3 1 2] em vez de [1 2 3].

4 Sistema de Equações Lineares com Matriz Triangular

$$Lx = b \text{ (ou } Ux = b)$$

Processos orientados por Linhas ou por Colunas.

1. Vector b é transformado (inicia como dado e termina como solução do sistema).

2. Processos simples e fáceis de implementar tanto para uma matriz densa como para uma matriz esparsa.

3. Processo estável, pois
   $$(L + E)x = b \Rightarrow \|E\|_\infty \leq 1.01 \,\|L\|_\infty \varepsilon_M$$
   com ε_M a precisão da máquina.

4. Número total de operações:
   $$\frac{n(n-1)}{2} \text{ multiplicações } + n \text{ divisões}$$
   Se os elementos diagonais são todos unitários, então as divisões não existem (elementos não precisam de ser divididos, nem considerados).

5 Transformada Principal e Complemento de Schur

Dada
$$A = \begin{bmatrix} A_{II} & A_{IJ} \\ A_{JI} & A_{JJ} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$
com $A_{II} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ não singular, a Transformada Principal de A com Pivot A_{II} é a matriz $\bar{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$:
$$\bar{A} = \begin{bmatrix} A_{II}^{-1} & -A_{II}^{-1}A_{IJ} \\ A_{JI}A_{II}^{-1} & (A|A_{II}) \end{bmatrix}$$

em que

$$(A|A_{II}) = A_{JJ} - A_{JI}A_{II}^{-1}A_{IJ} \in \mathbb{R}^{(n-p)\times(n-p)}$$

é o chamado Complemento de Schur de A_{II} em A.

Resultados

1. Se A_{II} é não singular, então

$$\begin{bmatrix} y_I \\ y_J \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{II} & A_{IJ} \\ A_{JI} & A_{JJ} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_I \\ x_J \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} x_I \\ y_J \end{bmatrix} = \bar{A} \begin{bmatrix} y_I \\ x_J \end{bmatrix}$$

2. **Fórmula de Schur:** Se A_{II} é não singular e A é quadrada, então

$$\det(A) = \det(A_{II}) \det(A|A_{II})$$

   Em particular, se $a_{11} \neq 0$,

$$\det(A) = a_{11} \det(A|a_{11})$$

6 Decomposição LU de uma Matriz Quadrada Não Singular

1. Existência

$A = LU$, com L triangular inferior de elementos diagonais unitários e U triangular superior não singular se e só se as matrizes

$$A_{kk} = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{bmatrix}, \ k = 1, \dots, n-1$$

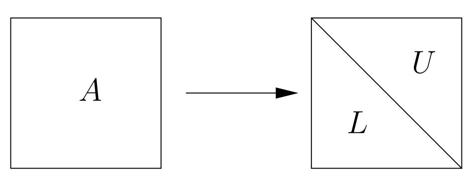
são não singulares.

Outra condição $\Leftrightarrow$: $A \in \mathrm{T}$, com T a classe de matrizes definida por

$$a_{11} \neq 0 \text{ e } (A|a_{11}) \in \mathrm{T}$$

2. Processo de decomposição LU

1.



   por transformação dos elementos de acordo com determinadas regras.

2.
$$A = (I + u^1(e^1)^T)\dots(I + u^{n-1}(e^{n-1})^T)U$$

com I a matriz identidade de ordem n, $e^k \in \mathbb{R}^n$ vectores de componentes

$$e_j^k = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad k = j \\ 0 & \text{se} \quad k \neq j \end{cases}$$

e $u^k \in \mathbb{R}^n$ vectores da forma

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_{k+1} \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \leftarrow k \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \qquad \beta_i = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}},\ i = k+1, \dots, n$$

e $A^{(k)} = \left[a_{ij}^{(k)}\right] \in \mathbb{R}^{(n-k+1)\times(n-k+1)}$ a matriz Complemento de Schur na iteração $k = 1, \dots, n-1$ ($A^{(1)} = A$).

Portanto $A = LU$ com

$$L = (I + u^1(e^1)^T)\dots(I + u^{n-1}(e^{n-1})^T)$$

3. $(I - u^{n-1}(e^{n-1})^T)\dots(I - u^1(e^1)^T)A = U$

4. **Método dos Bordos:** Em cada iteração determina uma linha de L e uma coluna de U (útil em matrizes esparsas).

3. Estabilidade

Se $A + E = LU$, então
$$\|E\|_\infty \leq n^2 g_A \|A\|_\infty \varepsilon_M$$

com ε_M a precisão da máquina e
$$g_A = \frac{\max\limits_{i,j\geq k} \left|a_{ij}^{(k)}\right|}{\max\limits_{i,j} |a_{ij}|}$$

o factor de crescimento de A. Portanto o processo é estável se e só se é possível e o factor de crescimento é pequeno.

4. Operações

O número total de operações para uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ densa é

$$\sum_{k=1}^{n-1} \left[(n-k) + (n-k)^2\right] = \frac{n(n^2-1)}{3} \simeq \frac{n^3}{3}$$

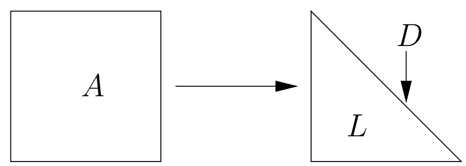
7 Decomposição LDL^T de uma Matriz Simétrica

1. Existência

$$A = LDL^T \Leftrightarrow A \in \mathrm{T} \Leftrightarrow \det(A_{kk}) \neq 0,\ k = 1, \ldots, n-1$$

2. Processos

Só considera L e D diagonal

1. 

2. Método dos Bordos (em cada iteração determina uma linha de L e um elemento diagonal de D).

3. Estabilidade

Semelhante ao caso não simétrico, isto é, é estável se existe e o factor de crescimento é pequeno.

4. Operações

$$\frac{n^3 + 3n^2 - 4n}{6} \simeq \frac{n^3}{6}$$

8 Escolhas de Pivot

1. Escolha Parcial de Pivot

Em cada iteração k,

$$\left|a_{rk}^{(k)}\right| = \max\left\{\left|a_{ik}^{(k)}\right| :\ i \geq k\right\}$$

com $A^{(k)} = \left[a_{ij}^{(k)}\right]$ a matriz Complemento de Schur respectiva (A se $k = 1$). Se $|a_{rk}^{(k)}| = 0$ então A é singular. Se $r > k$, então troca as linhas r e k (aplica matriz P_{rk} à esquerda). Então ou A é singular ou então

$$P_{n-1} \ldots P_1 A = LU \Leftrightarrow PA = LU$$

com P_i matrizes de permutação P_{kj} ou identidade. Além disso, a característica de A é o número de elementos não nulos da matriz U ($u_{ii} \neq 0$, $\forall i$, se A é não singular) da sua decomposição LU (se $|a_{rk}^{(k)}| = 0$, então $u_{rr} = 0$ e $l_{ir} = 0$, $\forall i > r$).

Estabilidade: Prova-se que $g_A \leq 2^{n-1}$, mas em geral g_A é muito pequeno.

Utilidade: Matrizes densas e só essas.

2. Escolha Limite de Pivot

Em cada iteração k:

Se $\max_{i \geq k} \left| a_{ik}^{(k)} \right| = 0$, A é singular. De outro modo, seja $r \geq k$ tal que

$$\left| a_{rk}^{(k)} \right| \geq u \max_{i \geq k} \left| a_{ik}^{(k)} \right|$$

onde u é um número real dado satisfazendo $0 < u < 1$ (na prática $u = 0.1$). Se $r > k$, então troca linhas r e k. Então também

$$P_{n-1} \dots P_1 A = LU \Leftrightarrow PA = LU$$

com P_i matrizes P_{kj} ou matrizes identidade.

Estabilidade: Prova-se que

$$g_A \leq \left(1 + \frac{1}{u} \right)^{n-1}$$

mas em geral g_A é pequeno.

Utilidade: matrizes esparsas, pois escolha de pivot é mais livre.

9 Resolução de Sistemas Lineares com Matrizes Quadradas usando a Decomposição LU

$$\begin{aligned} Ax = b \quad &\Leftrightarrow \quad PAx = Pb \\ &\Leftrightarrow \quad LUx = Pb \end{aligned}$$

Portanto:

(i) Calcula $Pb \rightarrow$ troca componentes de $b \rightarrow b$.

(ii) Resolve $Ly = Pb \rightarrow b$.

(iii) Resolve $Ux = y \rightarrow b$.

1. **Operações:** $\dfrac{n(n-1)}{2} + \dfrac{n(n-1)}{2} + n = n^2$
2. **Processo estável**
3. Se P não existe, então apenas (ii) e (iii) são efectuados.
4. Se A é esparsa, processos de resolução por linhas e por colunas podem ser necessários.
5. Se ℓ é o número de matrizes P_{ij} da decomposição (matrizes são armazenadas num vector de $\mathbb{R}^n$ que também contém ℓ como última componente), então

$$\det(A) = (-1)^{\ell} u_{11} \dots u_{nn}$$

10 Escolhas de Pivot em Matrizes Simétricas

1. Se A é simétrica, então, em cada iteração k, há três possíveis escolhas para pivot:

   - a_{kk}
   - a_{rr}, com r linha obtida pelo Critério de Escolha Parcial ou Limite de Pivot ($r \geq k$)
   - $\begin{bmatrix} a_{kk} & a_{kr} \\ a_{rk} & a_{rr} \end{bmatrix}$, com $r > k$

   Portanto

   $$P^T AP = LDL^T$$

   com P produto de matrizes P_{ij} ou identidade, L triangular inferior com elementos diagonais unitários e D uma matriz diagonal com blocos diagonais de ordens 1 ou 2 (pivots).

2. **Estabilidade:** Processo é estável (g_A é pequeno em geral).

3. **Utilidade:** Matrizes indefinidas densas (escolha parcial de pivot) ou esparsas (escolha limite de pivot).

4. **Aplicação na resolução de sistemas:**

   $$Ax = b \Leftrightarrow P^T AP(P^T x) = P^T b \Leftrightarrow LDL^T(P^T x) = P^T b$$

   Portanto

(i) Calcular	$P^T b$	$\longrightarrow$	b
(ii) Resolver	$Ly = P^T b$	$\longrightarrow$	b
	$Dz = y$	$\longrightarrow$	b
	$L^T \bar{x} = z$	$\longrightarrow$	b
(iii) Calcular	$x = P\bar{x}$	$\longrightarrow$	b

11 Matrizes Positivas Definidas e Semi–Definidas

$$\begin{aligned} A \in \text{PD} &\Leftrightarrow \forall_{x \neq 0}\, x^T Ax > 0 \\ A \in \text{PSD} &\Leftrightarrow \forall_x\, x^T Ax > 0 \\ A \in \text{SPD(SPSD)} &\Leftrightarrow A \in \text{PD(PSD) e é simétrica} \end{aligned}$$

Propriedades

1. $A \in \text{PD(SPD)} \Leftrightarrow A + A^T \in \text{SPD(SPSD)}$

2. $A \in \text{PD(PSD)} \Leftrightarrow A_{II} \in \text{PD(PSD)},\ \forall_I$

3. $A \in \text{PD(PSD)} \Rightarrow \forall_i\ a_{ii} > 0 (a_{ii} \geq 0)$

4. $A \in \text{PSD}$ e $a_{ii} = 0 \Rightarrow \forall_j a_{ij} = -a_{ji}$

   $A \in \text{SPSD}$ e $a_{ii} = 0 \Rightarrow A_{\cdot i} = A_{i \cdot} = 0$

5. $A \in \text{PD} \Rightarrow \det(A) \neq 0$ (não é válida para $A \in \text{PSD}$)

6. Se A é diagonal, então

$$\begin{aligned} A \in \text{PD} &\Leftrightarrow \forall_i \; a_{ii} > 0 \\ A \in \text{PSD} &\Leftrightarrow \forall_i \; a_{ii} \geq 0 \end{aligned}$$

7. Se B é não singular, então

$$A \in \text{PD(PSD)} \Leftrightarrow B^T AB \in \text{PD(PSD)}$$

8. $A \in \text{PD(PSD)} \Leftrightarrow A^T \in \text{PD(PSD)}$

9. $A \in \text{PD(SPD)} \Leftrightarrow A^{-1} \in \text{PD(SPD)}$
   $A \in \text{PSD(SPSD)}$ e A não singular $\Leftrightarrow A^{-1} \in \text{PSD(SPSD)}$

10. $A \in \text{PD(PSD)} \Rightarrow \bar{A} \in \text{PD(PSD)}$

11. $A \in \text{PD(SPD)} \Rightarrow (A|A_{II}) \in \text{PD(SPD)}, \forall_I$
    $A \in \text{PSD(SPSD)}$ e A_{II} não singular $\Rightarrow (A|A_{II}) \in \text{PSD(SPSD)}$

12. $A \in \text{PD} \Rightarrow A = LU$ com $u_{ii} > 0, \ \forall_i$

13. $A \in \text{SPD} \Leftrightarrow A = LDL^T$, com $d_{ii} > 0$, $\forall_i$
    $A \in \text{SPSD} \Leftrightarrow P^T AP = LDL^T$, com $d_{ii} \geq 0$, $\forall_i$
    $A \in \text{SPD} \Leftrightarrow A = LL^T$, com $l_{ii} > 0$, $\forall_i$

Nota Importante: Propriedade 13 fornece critérios importantes:

Para verificar se A é PD:

Caso Simétrico: Determinar decomposição LDL^T de A. Se todos $d_{ii} > 0$, então $A \in \text{SPD}$. Se se encontrar um $d_{ii} \leq 0$ durante o processo, então $A \notin \text{SPD}$.

Caso Não Simétrico: Usar processo anterior para $A + A^T$.

Para verificar se A é PSD:

Caso Simétrico: Determinar decomposição LDL^T de A com Escolha de Pivot. Se os pivots forem todos diagonais e $d_{ii} \geq 0$, $\forall i$, então $A \in \text{SPSD}$. De outro modo não é SPSD.

Caso Não Simétrico: Usar processo anterior para $A + A^T$.

14. $A \in \text{PD(SPD)} \Rightarrow \det(A) > 0$
    $A \in \text{PSD(SPSD)} \Rightarrow \det(A) \geq 0$

15. $A \in \text{SPD} \Leftrightarrow$ Todos os valores próprios são positivos
    $A \in \text{SPSD} \Leftrightarrow$ Todos os valores próprios são não negativos

16. $A \in \text{SPSD}$ e não singular $\Leftrightarrow A \in \text{SPD}$

$A \in \text{PSD}$ e $A + A^T$ não singular $\Leftrightarrow A \in \text{PD}$

17. Estabilidade das Decomposições:

$A \in \text{SPD} \Rightarrow A = LDL^T$, com $g_A \leq 1$

$A \in \text{PD}$ e $\forall_{i \neq j} a_{ij} \leq 0 \Rightarrow A = LU$, com $g_A \leq 2$

A decomposição LU para $A \in \text{PD}$ não é em geral estável sem escolha parcial (ou limite) de pivot.

12 Outras Classes de Matrizes

1.

$$\begin{array}{lcll} A \in \text{ND} & \Leftrightarrow & -A \in \text{PD} & \text{(negativa definida)} \\ A \in \text{NSD} & \Leftrightarrow & -A \in \text{PSD} & \text{(negativa semi–definida)} \\ A \in \text{IND} & \Leftrightarrow & A \notin \text{PSD e } A \notin \text{NSD} & \text{(indefinida)} \end{array}$$

É fácil de obter propriedades para essas matrizes a partir das apresentadas anteriormente. Em particular, A é indefinida simétrica se e só se:

(i) $P^T AP = LDL^T$, com D diagonal por blocos de ordens 1 e 2 ou apenas diagonal com pelo menos dois elementos diagonais de sinais contrários.

(ii) A tem pelo menos um valor próprio positivo e outro negativo.

2.

$$\begin{array}{rcl} A \in \text{P} & \Leftrightarrow & \det(A_{II}) > 0, \ \forall_I \\ A \in \text{P}_0 & \Leftrightarrow & \det(A_{II}) \geq 0, \ \forall_I \end{array}$$

Notar que

$$\begin{array}{rcl} \text{PD} & \subset & P \text{ e PD} = \text{P para matrizes simétricas} \\ \text{PSD} & \subset & P_0 \text{ e PSD} = \text{P}_0 \text{ para matrizes simétricas} \end{array}$$

3. Diagonalmente Dominantes por Linhas (RDD) e por Colunas (CDD)

$$\begin{array}{rcl} A \in \text{RDD} & \Leftrightarrow & |a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad \forall i = 1, \ldots, n \\ A \in \text{CDD} & \Leftrightarrow & |a_{jj}| \geq \sum_{i \neq j} |a_{ij}|, \quad \forall j = 1, \ldots, n \end{array}$$

Diagonalmente Dominantes Estritas: substituir $\geq$ por $>$.
Resultado: Se $A \in \text{RDD}$ (CDD) e não singular, então $A = LU$ e $g_A \leq 2$.

4. Matrizes M não singulares (K) e H

$$\begin{aligned}
A \in \mathrm{Z} &\Leftrightarrow a_{ij} \le 0, \text{ para todos } i \ne j \\
A \in \mathrm{K} &\Leftrightarrow A \in \mathrm{Z} \text{ e } A \in \mathrm{P} \\
A \in \mathrm{H} &\Leftrightarrow \Omega(A) \in \mathrm{K}, \text{ com} \\
&\quad \Omega(A) = B = [b_{ij}]\,,\ b_{ij} = \begin{cases} |a_{ij}| & \text{se} \quad i = j \\ -|a_{ij}| & \text{se} \quad i \ne j \end{cases}
\end{aligned}$$

Resultados:

(i) $A \in \mathrm{K} \Leftrightarrow A^{-1} \ge 0$ e $A \in \mathrm{Z}$

(ii) $A \in \mathrm{K(H)} \Rightarrow A = LU$ e g_A é limitado

(iii) $\mathrm{K} \subset \mathrm{H}$

13 Equações Normais

$$Ax = b \Leftrightarrow A^T Ax = A^T b$$

Método das Equações Normais consiste em resolver sistema $A^T Ax = A^T b$ em vez de $Ax = b$.

Resultados:

(i) A é não singular $\Rightarrow A^T A \in \mathrm{SPD}$

(ii) $\mathrm{cond}_2(A^T A) = [\mathrm{cond}_2(A)]^2$

Consequências: Decomposição LDL^T de $A^T A$ existe e é estável sem escolhas de pivot. Por outro lado a matriz $A^T A$ pode ser muito mal condicionada.

Utilidade: matrizes esparsas apenas e uso de refinamento iterativo (ver mais adiante).

14 Sistema Aumentado

$$\begin{aligned}
Ax = b &\Leftrightarrow A^T Ax = A^T b \Leftrightarrow \begin{cases} A^T r &= 0 \\ -Ax + b &= r \end{cases} \\
&\Leftrightarrow \begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Processo do Sistema Aumentado consiste em resolver o último sistema (matriz de ordem $2n$) em vez de $Ax = b$. A matriz é indefinida e muito esparsa (se A é esparsa) e simétrica. Pode ser útil apenas em matrizes esparsas.

15 Formas Triangulares por Blocos

Se

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & & & \\ A_{21} & A_{22} & & \\ \vdots & & & \\ A_{p1} & A_{p2} & \dots & A_{pp} \end{bmatrix}, \; A_{ii} \text{ não singulares}$$

é triangular inferior por blocos, então $Ax = b$ pode-se resolver a partir de p sistemas com as matrizes A_{ii}, $i = 1, \ldots, p$ e produtos matriz por vector. A mesma conclusão é válida para uma matriz triangular superior por blocos. O Processo é simples de implementar e aparece descrito nos apontamentos.

16 Processo do Complemento de Schur

Se

$$A = \begin{bmatrix} B & C \\ D & E \end{bmatrix}, \; E \in \mathbb{R}^{p\times p}, \; A \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

com B não singular, então A é não singular se e só se $(A|B)$ é não singular e tem-se

$$A = \begin{bmatrix} B & C \\ D & E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B & 0 \\ D & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & B^{-1}C \\ 0 & (A|B) \end{bmatrix}$$

ou seja, A é o produto de duas formas triangulares por blocos. Essa decomposição pode ser explorada para desenvolver um processo que permite resolver $Ax = b$ a partir de $(p + 2)$ sistemas com a matriz B (apenas uma factorização é usada) e um sistema com $(A|B)$. O processo aparece descrito nos apontamentos.

Utilidade

(i) B é uma matriz diagonal ou tem uma estrutura muito especial que permita calcular B^{-1} de um modo muito fácil.

(ii) B é esparsa e pode ser decomposta com pivots diagonais apenas (em particular, B tridiagonal) e p é pequeno.

17 Matrizes Tridiagonais

Uma matriz é tridiagonal se

$$a_{ij} = 0 \text{ para todos } (i, j) : |i - j| > 1$$

Então os elementos não nulos estão dispostos ao longo da diagonal da matriz e das duas subdiagonais imediatamente antes e depois da diagonal.

A decomposição LU (ou LDL^T) com pivots diagonais pode ser implementada usando apenas 3(2) vectores. O número total de operações para a decomposição e resolução de um sistema com essa matriz é $5n - 4$.

As matrizes tridiagonais constituem o caso mais simples das matrizes com estrutura de banda, que são discutidas nos apontamentos.

18 Escalonamento

Consiste em encontrar matrizes diagonais R e S tais que

$$\mathrm{cond}(RAS) < \mathrm{cond}(A)$$

e resolver o sistema com RAS em vez de A. Tem-se

$$RAS(S^{-1}x) = Rb$$

e portanto o sistema $Ax = b$, com $b \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, é resolvido por:

(i) $P(RAS) = LU$				
(ii) Calcula	PRb	$\to n$ multiplicações e trocas		
(iii) Resolve	$Ly = PRb$ e $U\bar{x} = y$		$\longrightarrow$	b
(iv) Calcula	$x = S\bar{x}$	$\to n$ multiplicações	$\longrightarrow$	b

1. É boa prática escolher R e S de modo a que

$$B = RAS = [b_{ij}] \text{ satisfaça } |b_{ij}| \leq 1,\ \forall i, j$$

2. Se A é simétrica, então deve-se fazer $R = S^T$, para manter a simetria do sistema a resolver. Nesse caso, a decomposição LDL^T deve ser usada em vez da LU.

19 Refinamento Iterativo

Considere-se o sistema $Ax = b$. Se $\bar{x}$ é a solução do sistema, então o resíduo é o vector

$$r = b - A\bar{x}$$

Se $\|r\|$ é muito pequeno, então, como vimos anteriormente, a solução $\bar{x}$ só pode ter má precisão para matrizes mal condicionadas. Contudo se $\|r\|$ ainda tem um valor não muito pequeno, podemos melhorar a solução a partir da resolução do sistema

$$Az = r$$

Com efeito

$$Az = b - A\bar{x} \Rightarrow A(\bar{x} + z) = b$$

e o resíduo de $\bar{x} + z$ deve ser menor do que o de $\bar{x}$. Portanto o refinamento iterativo consiste em refinar a solução $\bar{x}$ a partir da resolução de sistemas com a mesma matriz A e vectores independentes que são os resíduos da solução anterior que se pretende refinar. O processo tem a forma:

Resolve	$Ax = b$	$\longrightarrow \bar{x}$
Calcula	$r = b - A\bar{x}$	
Enquanto	$\|r\| \geq \varepsilon$	faz
	Resolve	$Az = r$
	Actualiza	$\bar{x} \to \bar{x} + z$
		$r = b - A\bar{x}$

com $\varepsilon > 0$ a precisão pretendida.

O processo encontra apenas utilidade na resolução de sistemas com matrizes esparsas, em que o método das equações normais ou semi–normais foi usado. Notar que, se as equações normais são usadas, então os sistemas $Ax = b$ e $Az = r$ são resolvidos a partir de

$$A^T Ax = A^T b \text{ e } A^T Az = A^T r$$

mas o resíduo é calculado usando a matriz A. A prática tem mostrado que uma ou duas (no máximo) iterações do refinamento iterativo é bastante eficaz neste caso.

Em matrizes densas, o refinamento iterativo tem muito pouco interesse, pois a escolha parcial de pivot fornece sempre soluções com resíduos muito pequenos.

20 Estimativa do Número de Condição

$$\text{cond}(A) = \|A\| \, \|A^{-1}\|$$

A estimativa do número de condição consiste em encontrar um valor aproximado de $\|A^{-1}\|$. O Estimador de Hager, descrito no Anexo 1, fornece uma boa aproximação de $\|A^{-1}\|_1$ a partir de um processo iterativo que utiliza em cada iteração a decomposição LU de A (ou LDL^T, se A é simétrica) e resolve 4 sistemas triangulares por iteração.

21 Armazenagem de Vectores e Matrizes Esparsas

1. **Vectores Esparsos são armazenados** usando 2 vectores IND e VAL de dimensão igual ao número de componentes nulas NZ.

2. **Matrizes Esparsas são armazenadas** por linhas ou colunas usando um esquema de colecção de vectores que contém 3 vectores IND, VAL e PNT.

Em matrizes simétricas ou não simétricas com elementos diagonais não nulos é usado um vector DIAG adicional, que armazena os elementos diagonais como se tratasse de um vector denso. Além disso, matrizes simétricas de posição não simétricas são armazenadas por linhas (abaixo da diagonal) e colunas (acima da diagonal) usando um único vector (IND) para os índices e outro para os ponteiros (PNT).

Outros tipos de armazenagem podem ser considerados para matrizes estruturadas. Salientam-se nesse sentido os esquemas de banda e de banda variável descritos nos apontamentos.

22 Operações com Vectores e Matrizes Esparsas

1. Produto Escalar de 2 vectores.

2. Adição de 2 vectores.

3. Produto de uma matriz esparsa por um vector (caso simétrico e não simétrico).

4. Resolução de sistemas triangulares.

Processos simples de implementar e aparecem descritos nos apontamentos.

23 Resolução de Sistemas de Equações Lineares com Matrizes Esparsas

Distingue-se do caso das matrizes densas pela existência de uma Fase de Análise prévia (por vezes é executada ao mesmo tempo que a factorização) que prepara a matriz dada para a Factorização ser executada com um número menor possível de operações e enchimentos. Vários casos devem ser distinguidos, que são apresentados a seguir.

1. Matrizes SPD

Fases de Análise, Factorização e Solução estão separadas, o que é uma enorme vantagem para resolver vários sistemas com a mesma matriz, ou com matrizes SPD da mesma estrutura.

Fase de Análise: Determina uma reordenação das linhas e das colunas (permutação principal de A) usando o algoritmo do grau mínimo e termina com a armazenagem da matriz permutada num esquema de colecção de vectores para matrizes simétricas com a diagonal separada.

Fase de Factorização: Utiliza o método dos bordos para matrizes simétricas de forma a obter as matrizes L e D por transformação dos elementos da matriz A (L é armazenada na colecção de vectores PNT, IND, VAL, pois os seus elementos diagonais não são considerados; D é armazenada em DIAG).

Fase de Solução: Resolve os sistemas

$$Ly = P^T b, \; Dz = y, \; L^T \bar{x} = y, \; x = P\bar{x}$$

usando as estruturas de dados das matrizes L e D. Notar que $Ly = P^T b$ é resolvido por um processo orientado por linhas e $L^T \bar{x} = y$ por um processo orientado por colunas com a estrutura de dados de L.

É importante acrescentar que outros tipos de algoritmos e estruturas de dados podem ser usados na Fase de Análise. Salientam-se nesse sentido os algoritmos e estruturas de dados para matrizes com estruturas de banda e de banda variável (invólucro), que aparecem descritos nos apontamentos.

2. Matrizes Não Simétricas, Simétricas de Posição com Pivots Diagonais Estáveis

Fases de Análise, Factorização e Solução completamente separadas.

Fase de Análise: Como o grafo de A é indirecto, então o algoritmo do grau mínimo é usado como no caso anterior. A estrutura de dados armazena a matriz A com alguns elementos nulos (correspondentes aos enchimentos) por linhas abaixo da diagonal e por colunas acima da diagonal, com os vectores:

VALL: valores numéricos abaixo da diagonal (L)

VALU: valores numéricos acima da diagonal (U)

DIAG: valores numéricos dos elementos diagonais (D)

IND: índices das colunas de L e das linhas de U

PNT: ponteiros de referência das linhas de L e colunas de U

Fase de Factorização: Utiliza o método dos bordos para matrizes não simétricas e obtém as matrizes L e U da decomposição LU de A. Além disso essas matrizes são armazenadas usando a estrutura de dados anterior e tem-se

$$L \left\{ \begin{array}{l} \text{VALL} \\ \text{IND} \\ \text{PNT} \end{array} \right. \qquad U \left\{ \begin{array}{l} \text{DIAG} \\ \text{VALU} \\ \text{IND} \\ \text{PNT} \end{array} \right.$$

Fase de Solução: Resolve os sistemas

$$Ly = P^T b,\ U\bar{x} = y \text{ e } x = P\bar{x}$$

com processos orientados por linhas e por colunas respectivamente.

3. Matrizes Não Simétricas de Posição com Pivots Diagonais Instáveis

A Análise e Factorização são executadas ao mesmo tempo. São utilizados os Critérios de Markowitz e de Escolha Limite de Pivot. Essa fase termina com as matrizes L e U armazenadas por linhas ou separadamente com L na forma produto de matrizes elementares (ver processo (ii) da decomposição LU de uma matriz).

A Fase de Solução resolve os sistemas

$$PAQ(Q^T x) = Pb \Leftrightarrow LU(Q^T x) = Pb$$

a partir de

(i) Calcula	Pb	$\rightarrow$ permutação de componentes de $b \rightarrow$	b
(ii) Resolve	$Ly = Pb$	$\longrightarrow$	b
(iii) Resolve	$U\bar{x} = y$	$\longrightarrow$	b
(iv) Calcula	$x = Q\bar{x}$	$\rightarrow$ permutação de componentes de $\bar{x} \rightarrow$	b

e usando os processos de solução para matrizes esparsas.

4. Matrizes Não Simétricas de Posição com Pivots Diagonais Estáveis

Processo 1: Transformar a matriz A em simétrica de posição por consideração de alguns elementos nulos como se fossem não nulos. Utilizar o Processo descrito em Caso 2.

Processo 2: Utilizar o Processo descrito no Caso 3, mas escolhendo apenas os pivots na diagonal da matriz e o Critério de Markowitz.

5. Matrizes Simétricas de Posição com Pivots Diagonais Instáveis

Processo 1: Processo descrito em Caso 3.

Processo 2:

(i) **Fase de Análise** exactamente igual à do Caso 2.

(ii) **Fase de Factorização:** Ordem de pivotagem é a obtida na Fase de Análise. Em cada iteração k tem-se:

- Se $|a_{kk}^{(k)}| \geq u \max_{i \geq k} |a_{ik}^{(k)}|$ $(u = 0.1)$ então $a_{kk}^{(k)}$ é aceite como pivot.
- Se $|a_{kk}^{(k)}| < u \max_{i \geq k} |a_{ik}^{(k)}|$, então

$$\exists_{\lambda_k \in \mathbb{R}} |a_{kk}^{(k)} + \lambda_k| \geq u \max_{i \geq k} |a_{ik}^{(k)}|$$

e $a_{kk}^{(k)} + \lambda_k$ é pivot.

No fim do Processo de Factorização tem-se

$$A + \sum_{k \in J} \lambda_k e^k = LDL^T$$

com J o conjunto de índices onde ocorreram alterações nos elementos diagonais. Então tem-se

$$\begin{array}{rcllcl} Ax = b & \Leftrightarrow & \left(A + \sum_{k \in J} \lambda_k e^k \right) x & - \sum_{k \in J} \lambda_k y_k & = & b \\ & & x_k & -y_k & = & 0, \ k \in J \end{array}$$

ou seja

$$\begin{bmatrix} B & D \\ C & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

com $y \in \mathbb{R}^{|J|}$ e $|J|$ o número de elementos de J. Há vantagem de neste caso usar um processo orientado por colunas para obter as matrizes L e U (ver método directo descrito nos apontamentos).

(iii) **Fase de Solução:** Resolver sistema

$$\begin{bmatrix} B & D \\ C & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

usando a técnica do Complemento de Schur. Notar que a decomposição de B foi calculada na Fase de Factorização e que o processo necessita de resolver $(|J| + 2)$ sistemas com essa matriz e um sistema com a matriz Complemento de Schur. Por isso esse processo só é usado quando o número $|J|$ de alterações é pequeno.

6. Matrizes Simétricas Indefinidas

Processo 1: Semelhante ao Processo 2 do caso anterior, mas com decomposição LDL^T em vez de decomposição LU.

Processo 2: Fases de Análise e Factorização efectuadas simultaneamente e uso de pivots 1×1 e 2×2 de acordo com o processo explicado anteriormente. Esses pivots são escolhidos usando os Critérios de Limite de Pivot e de Markowitz. Como

$$\begin{aligned} Ax = b & \Leftrightarrow P^T A P (P^T x) = P^T b \\ & \Leftrightarrow LDL^T (P^T x) = P^T b \end{aligned}$$

então a Fase de Solução consiste em:

(i) Calcular	Pb	$\rightarrow$ permutação de componentes de $b \rightarrow$	b
(ii) Resolver	$Ly = P^T b$	$\longrightarrow$	b
	$Dz = y$	$\longrightarrow$	b
	$L^T \bar{x} = z$	$\longrightarrow$	b
(iii) Calcular	$x = P\bar{x}$	$\rightarrow$ permutação de componentes de $\bar{x} \rightarrow$	b

A matriz L é armazenada num esquema de colecção de vectores sem diagonal (elementos diagonais são unitários) e por isso na resolução dos sistemas $Ly = P^T b$ e $L^T \bar{x} = z$ são usados processos orientados por linhas e por colunas.

7. Equações Normais

Consiste em resolver $A^T Ax = A^T b$ em vez de $Ax = b$ e pode ser usado em matrizes não simétricas de posição com pivots diagonais instáveis. O Processo tem os seguintes passos:

(i) Análise em Grafo de $A^T A \in$ SPD, como em Caso 1.

(ii) Introduzir elementos de $A^T A$ não nulos e nulos correspondentes a enchimentos na estrutura de dados que resulta da Fase de Análise.

(iii) Calcular $A^T b \longrightarrow b$ (produto de matriz esparsa A^T por vector denso usando a estrutura de dados de A).

(iv) Factorização e Solução como em Caso 1.

(v) Refinamento iterativo (1 ou 2 iterações).

8. Sistema Aumentado

Consiste em resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

em vez de $Ax = b$. A matriz é simétrica, muito esparsa e indefinida e portanto utiliza-se um dos processos discutidos no Caso 6.

9. Formas Triangulares por Blocos

- As matrizes dos blocos não diagonais são armazenadas por colunas (ou linhas) em esquema de colecção de vectores.
- Decomposições são efectuadas apenas nas matrizes dos blocos diagonais.
- Solução: consiste em p Fases de Solução, com p o número de blocos diagonais.

10. Complemento de Schur

Consiste em resolver um sistema

$$Az = f \Leftrightarrow \begin{bmatrix} B & D \\ C & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}$$

com $B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ esparsa de ordem elevada e $E \in \mathbb{R}^{p \times p}$ de ordem pequena, a partir de $(p+2)$ sistemas com B e um sistema com $(A|B)$. As Fases de Análise e Factorização só são efectuadas uma vez, pelo que o processo se resume a:

1. Fases de Análise e Factorização (separadas ou não) para a matriz B.
2. $(p+2)$ Fases de Solução com a mesma matriz B.
3. 1 sistema com uma matriz densa $(A|B)$ usando escolha parcial de pivot.

24 Matrizes Ortogonais

$$Q \text{ é ortogonal} \Leftrightarrow Q^T = Q^{-1}$$

Portanto toda a matriz ortogonal é quadrada e não singular. Além disso se

$$Q = \begin{bmatrix} q^1 & q^2 & \dots & q^n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

então

$$\begin{aligned} \|q^i\|_2 &= 1, \; i = 1, \dots, n \\ (q^i)^T (q^j) &= 0, \; i, j = 1, \dots, n, \; i \neq j \end{aligned}$$

Resultados:

(i) Se Q é ortogonal, então $\det(Q) = \pm 1$.

(ii) Q ortogonal $\Leftrightarrow Q^T$ ortogonal.

(iii) Q_1, Q_2 ortogonais $\Rightarrow Q_1 Q_2$ ortogonal.

(iv) Se Q é ortogonal, então A e $Q^T A Q$ têm os mesmos valores próprios.

(v) Se Q é ortogonal, então

$$\begin{aligned} \|Qx\|_2 &= \|x\|_2 \\ \|QA\|_2 &= \|A\|_2 \\ \|AQ\|_2 &= \|A\|_2 \end{aligned}$$

para quaisquer vector x e matriz A.

(vi) Se Q é ortogonal, então

$$\begin{aligned} \text{cond}_2(QA) &= \text{cond}_2(A) \\ \text{cond}_2(AQ) &= \text{cond}_2(A) \\ \text{cond}_2(Q) &= 1 \end{aligned}$$

Matriz de Householder de ordem n

$$P = \left(I_n - \frac{2}{v^T v} v v^T \right), \text{ com } v \in \mathbb{R}^n - \{0\}$$

Resultados:

(i) Matriz de Householder P é ortogonal.

(ii) Px é calculado sem formar P explicitamente, pois

$$Px = x - \alpha v$$

com

$$\alpha = \left(\frac{2}{v^T v} \right) v^T x = \beta (v^T x)$$

(iii) Matriz de Householder é armazenada considerando apenas o vector $v \in \mathbb{R}^n$ e o escalar $\beta = \frac{2}{v^T v}$.

(iv) Se $x \in \mathbb{R}^n$ então

$$v = x + \|x\|_2 e^1 \Rightarrow Px = -\|x\|_2 e^1$$

Matriz de Givens

Matriz de Givens de ordem 2

$$J = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}, \text{ com } c^2 + s^2 = 1$$

Existe um só θ tal que

$$\begin{cases} c & = & \cos\theta \\ s & = & \sin\theta \end{cases}, \ \theta \in [0, 2\pi[$$

e por isso a matriz J representa-se normalmente por $J(\theta)$.

Resultados:

(i) $J(\theta)$ é ortogonal.

(ii) Se $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^2$ e

$$c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, s = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$$

então

$$J(\theta)x = \begin{bmatrix} \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|x\|_2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Matriz de Givens de ordem n

$$
J(\theta, i, j) = \begin{array}{cl}
\begin{bmatrix}
1 &&&&&&&&&& \\
& \ddots &&&&&&&&& \\
&& 1 &&&&&&&& \\
&&& c &&&& s &&& \\
&&&& 1 &&&&&& \\
&&&&& \ddots &&&&& \\
&&&&&& 1 &&&& \\
&&& -s &&&& c &&& \\
&&&&&&&& 1 && \\
&&&&&&&&& \ddots & \\
&&&&&&&&&& 1
\end{bmatrix} &
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \longleftarrow i \\ \\ \\ \\ \longleftarrow j \\ \\ \\ \\
\end{array} \\
\begin{array}{ccccccccccc}
&&& \uparrow &&&& \uparrow &&& \\
&&& i &&&& j &&&
\end{array} &
\end{array}
$$

Se $x \in \mathbb{R}^n$ e

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, s = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

então

$$J(\theta, i, j)x = \bar{x}$$

com

$$\bar{x}_k = \begin{cases} x_k & \text{se } k \neq i, j \\ \sqrt{x_i^2 + x_j^2} & \text{se } k = i \\ 0 & \text{se } k = j \end{cases}$$

25 Decomposição QR de uma Matriz

1. A quadrada não singular de ordem n

$$A \text{ é não singular } \Leftrightarrow A = QR$$

com Q uma matriz ortogonal e R triangular superior não singular.

A decomposição pode ser obtida usando:

(i) $(n-1)$ matrizes de Householder, ou seja,

$$A = P_1 \dots P_{n-1} R$$

com P_i matrizes de Householder.

(ii) $\frac{n(n-1)}{2}$ matrizes de Givens (menos conveniente).

2. A **rectangular de característica completa** $r = n < m$

$$A \text{ característica completa } \Leftrightarrow A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

com $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ortogonal e R triangular superior não singular.

(i) Além disso, a decomposição pode ser obtida usando n matrizes de Householder, isto é,

$$A = P_1 P_2 \dots P_{n-1} P_n \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

ou matrizes de Givens (menos conveniente).

(ii) A implementação do processo de decomposição QR para uma matriz densa $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ com $m \geq n$ é fácil de fazer. Cada iteração k tem dois passos:

1. Formar matriz de Householder P_k e armazená-la.
2. Multiplicar P_k pelas colunas j da matriz reduzida na iteração k ($j \geq k$).

No fim do processo as matrizes de Householder

$$P_k(v^k, \beta_k) \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

e a matriz triangular superior $R = [r_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ são armazenadas no espaço referente a A e em mais dois vectores de ordem n:

$$A \longrightarrow \begin{bmatrix} v_1^1 & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ v_2^1 & v_2^2 & r_{23} & \dots & r_{2n} \\ v_3^1 & v_3^2 & v_3^3 & \dots & r_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_n^1 & v_n^2 & v_n^3 & \dots & v_n^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_m^1 & v_m^2 & v_m^3 & \dots & v_m^n \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \dots & \beta_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

$$\text{DIAGR} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{22} & r_{33} & \dots & r_{nn} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

Para matrizes esparsas, as matrizes de Householder não devem ser armazenadas, pois isso constitui um grande espaço de armazenagem.

A característica de uma matriz pode ser determinada a partir do cálculo da decomposição QR de uma permutação de A e é exactamente igual ao número de elementos diferentes de zero da diagonal de R.

26 Resolução de Sistemas de Equações Lineares com Matrizes Quadradas Não Singulares usando a Decomposição QR

$$Ax = b \wedge A = QR \Rightarrow QRx = b$$

e

$$Ax = b \Leftrightarrow Rx = Q^T b$$

Processo:

(i) Calcular $\bar{b} = Q^T b \longrightarrow b$
(ii) Resolver $Rx = \bar{b} \longrightarrow b$

Consequências:

(i) Processo é estável, pois a decomposição QR também o é,

$$A + E = QR \Rightarrow \|E\|_2 \leq c\,\|A\|_2 \varepsilon_M$$

com $c \in \mathbb{R}^1$ e aproximadamente igual a n^2.
(ii) Operações $\simeq \frac{2n^3}{3}$.
(iii) Armazenagem para matrizes densas $= n^2 + 3n$.

Processo pouco utilizado para matrizes densas, devido ao elevado número de operações (dobro da decomposição LU). Como afirmámos anteriormente, nunca deve ser utilizado para matrizes esparsas.

Equações Semi–Normais

$$A = QR \Rightarrow A^T A = (QR)^T (QR) = R^T Q^T Q R = R^T R$$

e

$$Ax = b \Leftrightarrow A^T A x = A^T b$$

Então o método das Equações Semi–Normais tem os seguintes passos:

1. Determinar decomposição QR de A sem armazenar Q.
2. Calcular $\bar{b} = A^T b$.
3. Resolver $R^T R x = \bar{b} \Leftrightarrow R^T y = \bar{b}$ e $Rx = y$.

Processo muito recomendado para matrizes esparsas. À semelhança das equações normais, há uma Fase de Análise prévia que permite determinar uma ordem para as colunas de A. O Processo tem então os seguintes passos:

1. Fase de Análise para $A^T A \in$ SPD e determinação da matriz de permutação P.
2. Fase de Factorização: Decomposição QR de (AP) sem armazenar Q.
3. Calcular $A^T b$ usando a estrutura de dados de A.
4. Resolver
$$R^T y = P^T A^T b \longrightarrow b$$
$$R\bar{x} = y, x = P\bar{x} \longrightarrow b$$
usando processos orientados por linhas e por colunas e a estrutura de dados de R.
5. Refinamento iterativo (1 ou 2 iterações) calculando o resíduo $r = -Ax + b$ a partir da estrutura de dados de A.

27 Decomposição SVD

$$
\begin{aligned}
A \in \mathbb{R}^{m\times n} \quad \Rightarrow \quad & A = USV^T,\ S = \mathrm{diag}(\sigma_1,\ldots,\sigma_p),\ \sigma_1 \geq \sigma_2 \ldots \geq \sigma_p \geq 0 \\
& \text{e } U \in \mathbb{R}^{m\times m},\ V \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ matrizes ortogonais.}
\end{aligned}
$$

Resultados

(Ver Anexo 2 para as demonstrações dos resultados)

(i) Decomposição SVD de $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ existe sempre. Além disso a característica r da matriz A satisfaz

$$
r = \begin{cases} 0 & \text{se } \sigma_i = 0, \forall i = 1,\ldots,p \\ \max\{i : \sigma_i > 0\} & \text{de outro modo} \end{cases}
$$

(ii) σ_i, $i = 1,\ldots,p$ dizem-se Valores Singulares. Se

$$
U = \begin{bmatrix} u^1 & u^2 & \ldots & u^m \end{bmatrix},\ V = \begin{bmatrix} v^1 & v^2 & \ldots & v^n \end{bmatrix}
$$

então

$$
\begin{array}{rcl} Av^i & = & \sigma_i u^i \\ A^T u^i & = & \sigma_i v^i \end{array},\ i = 1,\ldots,p
$$

$$
\left\{ \begin{array}{lcl} u^i & - & \text{vector singular à esquerda} \\ v^i & - & \text{vector singular à direita} \end{array} \right\} \text{associados a } \sigma_i
$$

(iii)

$$
\forall_{x:\|x\|_2=1} \sigma_p \leq \|Ax\|_2 \leq \sigma_1
$$

$$
\|A\|_2 = \sigma_1
$$

$$
\min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_p
$$

(iv)

$$
\begin{aligned}
m \leq n \quad &\Rightarrow \quad \left[\sigma_i \text{ é valor singular de } A \Leftrightarrow \sigma_i^2 \text{ é valor próprio de } AA^T\right] \\
m \geq n \quad &\Rightarrow \quad \left[\sigma_i \text{ é valor singular de } A \Leftrightarrow \sigma_i^2 \text{ é valor próprio de } A^T A\right] \\
A \text{ simétrica} \quad &\Rightarrow \quad \left[|\lambda_i| \text{ é valor singular de } A \Leftrightarrow \lambda_i \text{ é valor próprio de } A\right]
\end{aligned}
$$

Pseudoinversa $\mathbf{A}^+$ de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\mathbf{m}\times\mathbf{n}}$ e $\mathbf{r} = \mathbf{c}(\mathbf{A}) \leq \mathbf{p} = \min\{\mathbf{m},\mathbf{n}\}$

$$
A = USV^T \in \mathbb{R}^{m\times n} \Rightarrow A^+ = VS^+U^T \in \mathbb{R}^{n\times m}
$$

com $S^+ = \mathrm{diag}(\mu_1,\ldots,\mu_p) \in \mathbb{R}^{n\times m}$ e

$$
\mu_i = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i}, & i = 1,\ldots,r \\ 0, & i = r+1,\ldots,p \end{cases}
$$

Resultados:

(i)

$$\begin{aligned} A^+A &= V\text{diag}(e_1,\ldots,e_p)V^T \\ AA^+ &= U\text{diag}(e_1,\ldots,e_p)U^T \end{aligned}$$

(ii)

$$r = m = n \Rightarrow A^+ = A^{-1}$$

(iii)

$$\begin{aligned} r = m < n \quad &\Rightarrow \quad AA^+ = I_m \\ & \qquad A^+ = A^T(AA^T)^{-1} \end{aligned}$$

(iv)

$$\begin{aligned} r = n < m \quad &\Rightarrow \quad A^+A = I_n \\ & \qquad A^+ = (A^TA)^{-1}A^T \end{aligned}$$

(v) $x = A^+b$ é a solução de norma ℓ_2 mínima do Problema de Mínimos Quadrados Lineares

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

Além disso x pode ser obtido resolvendo um sistema:

$$\begin{cases} r = m = n & \Rightarrow \quad Ax = b \\ r = m < n & \Rightarrow \quad x = A^Ty, \text{ com } (AA^T)y = b \\ r = n < m & \Rightarrow \quad (A^TA)x = A^Tb \end{cases}$$

Número de Condição de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\mathbf{m\times n}}$

Se $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, então $A = USV^T$, com $S = \text{diag}(\sigma_1,\ldots,\sigma_p)$ e

$$A^+ = VS^+U^T$$

Então

$$\text{cond}(A) = \|A\|\,\|A^+\|$$

Resultados:

(i) $\text{cond}_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_p}$, sendo infinito se $r = c(A) < p = \min\{m,n\}$.

(ii) $r = n \le m \Rightarrow \text{cond}_2(A^TA) = [\text{cond}_2(A)]^2$

$r = m \le n \Rightarrow \text{cond}_2(AA^T) = [\text{cond}_2(A)]^2$

(iii) Se A é quadrada e não singular, então

$$\text{cond}(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|$$

28 Resolução de Sistemas de Equações Lineares com Matrizes Rectangulares de Característica Completa

1. Sistema Horizontal

$$Ax = b,\ A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ r = c(A) = m < n$$

(i) Sistema é Possível e Indeterminado.

(ii) Solução de Norma Mínima de $Ax = b$ é única e satisfaz

$$\begin{array}{c} \min \|x\|_2 \\ \text{sujeito a } Ax = b \end{array}$$

ou seja,

$$x = A^T y,\ \text{com } AA^T y = b$$

Processos

(i) **Equações Normais:**

$$\begin{aligned} AA^T y &= b \\ x &= A^T y \end{aligned}$$

1. Útil em matrizes esparsas e densas, pois $AA^T \in$ SPD.
2. Dificuldade: $\text{cond}_2(AA^T) = [\text{cond}(A)]^2$
3. Necessidade de refinamento iterativo.

(ii) **Sistema Aumentado:**

$$\left\{ \begin{array}{rcr} x &=& A^T y \\ AA^T y &=& b \end{array} \right. \Leftrightarrow \begin{bmatrix} -I & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ b \end{bmatrix}$$

1. Útil em matrizes esparsas (matriz simétrica indefinida).
2. Dificuldade: $(m + n)$ equações e incógnitas, o que pode ser um número muito elevado.

(iii) **Decomposição QR:**

$$A^T = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow A = \begin{bmatrix} R^T & 0 \end{bmatrix} Q^T,\ Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

e

$$Ax = b \Leftrightarrow \begin{bmatrix} R^T & 0 \end{bmatrix} Q^T x = b$$

Seja

$$y = Q^T x \in \mathbb{R}^n$$

Então

$$x = Qy \text{ e } \|x\|_2 = \|y\|_2$$

e

$$\begin{array}{c} Ax = b \\ \|x\|_2 \text{ mínimo} \end{array} \Leftrightarrow \begin{array}{c} \begin{bmatrix} R^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y^1 \\ y^2 \end{bmatrix} = b \\ \|y\|_2 \text{ mínimo} \end{array} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} R^T y^1 & = & b \\ y^2 & = & 0 \end{array} \right.$$

Então obtém-se o seguinte processo:

(i) $A^T = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}, \ Q \in \mathbb{R}^{n\times n}, \ R \in \mathbb{R}^{m\times m}$
(ii) $R^T y^1 = b, \ y^1 \in \mathbb{R}^n$
(iii) $x = Q \begin{bmatrix} y^1 \\ 0 \end{bmatrix}$

Processo é útil em matrizes densas, mas não deve ser usado para matrizes esparsas de ordens elevadas.

(iv) **Equações Semi–Normais:**

$$A^T = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow AA^T = \begin{bmatrix} R^T & 0 \end{bmatrix} Q^T Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = R^T R$$

Então obtém-se o seguinte processo para matrizes esparsas:

(i) Fase de Análise para AA^T e determinar P.
(ii) Decomposição QR de $(A^T P)$ sem armazenar Q.
(iii) Solução de $R^T R y = P^T b \Leftrightarrow R^T z = P^T b, \ R\bar{y} = z, \ y = P\bar{y}$.
(iv) Cálculo de $x = A^T y$.
(v) Refinamento Iterativo (1 ou 2 iterações).

2. Sistema Vertical

$$Ax = b, \ A \in \mathbb{R}^{m\times n}, \ r = c(A) = n < m$$

(i) Sistema impossível em geral.

(ii) Solução dos Mínimos Quadrados Lineares é única e satisfaz:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

ou seja,

$$A^T A x = A^T b$$

Processos

(i) **Equações Normais:**

$$A^T A x = A^T b$$

1. Útil em matrizes esparsas e densas, pois $A^T A \in$ SPD.
2. Dificuldade: $\text{cond}_2(A^T A) = [\text{cond}_2(A)]^2$
3. Necessidade de refinamento iterativo.

(ii) **Sistema Aumentado:** Se $r = b - Ax$, então

$$A^T A x = A^T b \iff \left\{ \begin{array}{rcl} A^T r & = & 0 \\ r + Ax & = & b \end{array} \right.$$
$$\iff \begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

1. Útil em matrizes esparsas (matriz simétrica indefinida).
2. Dificuldade: $(m + n)$ equações e incógnitas, o que pode ser um número muito elevado.

(iii) **Decomposição QR:** Se $A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$, então

$$\|Ax - b\|_2 = \left\| Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} x - b \right\|_2 = \left\| Q \left(\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} x - Q^T b \right) \right\|_2$$

ou seja

$$\|Ax - b\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} x - Q^T b \right\|_2$$

Se

$$\bar{b} = Q^T b = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \end{bmatrix}$$

então

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 \iff \left\{ \begin{array}{rcl} Rx & = & b^1 \\ \|Ax - b\|_2 & = & \|b^2\|_2 \end{array} \right.$$

Processo:

(i) $A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$

(ii) Calcular $Q^T b = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \end{bmatrix}$

(iii) Resolver $Rx = b^1$ e erro $= \|b^2\|_2$

Processo é útil em matrizes densas.

(iv) **Equações Semi–Normais:**

$$A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow A^T A = \begin{bmatrix} R^T & 0 \end{bmatrix} Q^T Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = R^T R$$

Processo para matrizes esparsas:

(i) Fase de Análise para $A^T A$ e determinar P.
(ii) Decomposição QR de (AP) sem armazenar Q.
(iii) Solução de $R^T R x = P^T A^T b \Leftrightarrow R^T y = P^T A^T b,\ R\bar{x} = y,\ x = P\bar{x}$
(iv) Refinamento Iterativo (1 ou 2 iterações).

29 Métodos Iterativos

Resolvem sistema $Ax = b$, com A quadrada não singular de ordem n, gerando uma sucessão de vectores $\{x^{(k)}\}_{k\in\mathbb{N}}$ que tende para a solução $\bar{x}$ do sistema.

1. Métodos Iterativos Básicos ou de Partição

$$A = [a_{ij}] \text{ com } a_{ii} \neq 0 \text{ para todo } i = 1, \ldots, n$$

Partição: $A = B - C$, com B não singular.
Então

$$Ax = b \Leftrightarrow Bx = b + Cx$$

e

Processo:

Dado $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$
Para $k = 0, 1, \ldots$
$Bx^{(k+1)} = Cx^{(k)} + b$
Termine quando:

$$\|Ax^{(k+1)} - b\| < \varepsilon_1$$

ou

$$\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\max\{1, \|x^{(k+1)}\|\}} < \varepsilon_2$$

ou ambos (melhor), com ε_1 e ε_2 positivos e pequenos.

Casos Particulares:

Seja $A = D - L - U$, com

$$D = \operatorname{diag}(a_{11}, \ldots, a_{nn}), L = -\begin{bmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & 0 \end{bmatrix}, \; U = -\begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ & 0 & & a_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

Então:

Método de Jacobi $\longrightarrow B = D$;
Método de Gauss–Seidel $\longrightarrow B = D - L$;
Método SOR $\longrightarrow B = \frac{1}{\omega}(D - \omega L)$, $0 < \omega < 2$.

Resultados:

(i) Método da Partição converge para solução do sistema $Ax = b$ se e só se

$$\rho(B^{-1}C) < 1$$

com $\rho(E)$ o raio espectral de E.

(ii) Se $A = B - C$ é uma Partição P-regular, isto é, se $B + C \in$ PD e $A \in$ SPD, então método da partição converge para solução do sistema $Ax = b$.

(iii) Se $A \in \mathrm{SPD} \cap \mathrm{H}$, então método da partição converge para solução de $Ax = b$, desde que B contenha a diagonal de A e seja simétrica.

(iv) Se $A \in \mathrm{SPD} \cap \mathrm{H}$, método de Jacobi converge para solução de $Ax = b$.

(v) Se $A \in$ SPD, método SOR converge para a solução de $Ax = b$ (em particular método de Gauss–Seidel converge para solução de $Ax = b$).

Implementação:

B deve ser escolhida de modo a ter uma estrutura e esparsidade convenientes para determinar a sua decomposição LU ou LDL^T. Para:

Método de Jacobi – B é diagonal

Métodos SOR e Gauss–Seidel – B é triangular inferior

e portanto não é necessário calcular a decomposição de B.

2. Método de Gradientes Conjugados

Caso 1 $-$ $A \in$ SPD de ordem n

Um conjunto de vectores $p_i \in \mathbb{R}^n$ é constituído por direcções A–conjugadas se

$$\forall_{i \neq j} p_i^T A p_j = 0$$

Teorema das direcções A–conjugadas: Se $x^0 \in \mathbb{R}^n$, $p_k \in \mathbb{R}^n$ são direcções A–conjugadas dadas, $k = 0, 1, \ldots, n-1$ e

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k p_k$$

com

$$\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k} \quad (r_k = Ax^k - b)$$

então x^n é solução do sistema $Ax = b$.

Contudo erros de arredondamento tornam o processo iterativo.

Determinação de Direcções A–conjugadas:

Processo Recursivo:

$$p_0 = -r_0 = b - Ax^0$$

$$p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k p_k, \ k = 0, 1, \ldots$$

com

$$r_{k+1} = Ax^{k+1} - b$$

$$\beta_k = \frac{p_k^T A r_{k+1}}{p_k^T A p_k}$$

Consequências do Processo Recursivo:

(i) $p_k^T A p_{k+1} = 0, \ \forall k = 0, 1, \ldots$

(ii) Se $v_k = Ap_k$, então $r_{k+1} = r_k - \alpha_k v_k$

(iii)
$$\left.\begin{array}{rcl} p_k^T r_{k+1} & = & 0 \\ p_k^T r_k & = & -r_k^T r_k \\ r_k^T r_{k+1} & = & 0 \end{array}\right\} \forall k = 0, 1, \ldots$$

o que implica que,

$$\alpha_k = -\frac{r_k^T r_k}{v_k^T p_k} \text{ e } \beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}, \ \forall k = 0, 1, \ldots$$

Algoritmo de Gradientes Conjugados:

$$
\begin{array}{rl}
\text{Dado } x_0 & \in \mathbb{R}^n \\
r_0 = & Ax_0 - b \\
p_0 = & -r_0 \\
\text{Para} & k = 0, 1, \ldots \\
& \gamma_k = r_k^T r_k \\
& v_k = Ap_k \\
& \alpha_k = \dfrac{\gamma_k}{v_k^T p_k} \\
& x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \\
& r_{k+1} = r_k + \alpha_k v_k \\
& \text{Se } \theta_{k+1} = \|r_{k+1}\|_2^2 \leq \varepsilon \text{ pára. De outro modo} \\
& \qquad\qquad \beta_k = \dfrac{\theta_{k+1}}{\gamma_k} \\
& \qquad\qquad p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_k p_k
\end{array}
$$

Implementação do processo requer 5 vectores de ordem n: x, r, p, v, b, e a matriz A armazenada por linhas ou colunas num esquema de colecção de vectores.

Resultados:

(i) Algoritmo converge para solução única de $Ax = b$, independentemente da escolha do vector inicial x_0.

(ii) Se $\bar{x}$ é a solução única de $Ax = b$, então

$$\|x_k - \bar{x}\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\text{cond}_2(A)} - 1}{\sqrt{\text{cond}_2(A)} + 1} \right)^k \|x_0 - \bar{x}\|_A$$

com $\|\ \ \|_A$ a norma definida por

$$\|y\|_A = \sqrt{y^T A y}$$

Consequências:

(i) Fácil de implementar e muito aconselhado para a resolução de sistemas com matrizes SPD de grandes dimensões esparsas.

(ii) Dificuldade: matrizes mal–condicionadas podem impedir a obtenção de solução com boa precisão numérica.

Técnica de Precondicionamento

Consiste em encontrar matriz $M \in$ SPD e resolver sistema

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b$$

pelo método de Gradientes Conjugados ou outro processo iterativo sem usar explicitamente M^{-1}. M diz-se matriz de precondicionamento.

Método de Gradientes Conjugados com Precondicionamento M:

Processo anterior com um vector adicional $\tilde{r}_k \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz:

$$M\tilde{r}_k = r_k,\ k = 0, 1, \ldots$$

e cálculo de γ_k, β_k e p_{k+1} a partir das fórmulas:

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \tilde{r}_k^T r_k \\ \beta_k &= \frac{\tilde{r}_{k+1}^T r_{k+1}}{\gamma_k} \\ p_{k+1} &= -\tilde{r}_{k+1} + \beta_k p_k,\ k = 0, 1, \ldots \end{aligned}$$

Consequências:

(i) Cada iteração do método com Precondicionamento requer a solução de um sistema de equações lineares com a matriz M, além do esforço computacional do processo sem precondicionamento.

(ii) A matriz M deve ser escolhida de forma a ser SPD e ter uma boa estrutura e esparsidade para se resolver muito eficientemente um sistema com M.

(iii) **Precondicionamentos mais usuais:**

Diagonal: $M = \text{diag}(a_{11}, \ldots, a_{nn})$.

Decomposição Incompleta: Efectuar decomposição LDL^T de A sem permitir enchimentos e fazer

$$M = LDL^T\ (\neq A)$$

Esse processo é sempre possível de efectuar se $A \in \text{SPD} \cap H$, mas não em geral.

Partição: $A = M - N$, com $M \in \text{SPD}$ e esparsa. Se $A \in \text{SPD} \cap H$, então qualquer matriz M que contenha a diagonal de A e seja simétrica é SPD e portanto há uma grande liberdade na escolha de M. Notar que a Decomposição Incompleta e o Precondicionamento Diagonal são casos particulares da Partição.

2. $A \notin$ SPD quadrada ou rectangular de característica completa

Método das Equações Normais usando algoritmo iterativo para resolver o sistema $A^T Ax = A^T b$.

Não é necessário calcular $A^T A$ ou AA^T explicitamente, pois é apenas necessário determinar

$$v = A^T Ap\ \ (\text{ou } v = AA^T p)$$

e isso é conseguido através de

(i) $u = Ap$ $(u = A^T p)$

(ii) $v = A^T u$ $(v = Au)$

ou seja, através de duas multiplicações matriz por vector usando a estrutura de dados de A (produtos orientados por linhas e por colunas).

A grande desvantagem deste processo é consequência de

$$\begin{aligned} \mathrm{cond}_2(A^T A) &= [\mathrm{cond}_2(A)]^2 \\ \mathrm{cond}_2(AA^T) &= [\mathrm{cond}_2(A)]^2 \end{aligned}$$

Processo tem muitas dificuldades em obter solução com boa precisão numérica quando A é mal condicionada e há por isso a necessidade de encontrar bons precondicionamentos.

Por isso tem sido propostos outros métodos iterativos para a resolução de sistemas de equações lineares neste caso (alguns destes processos estão implementados em `MATLAB` – ver Anexo 3).

Anexo 1 – Estimador de Hager

1. Estimativa de $\|B\|_1$ com $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$

Da definição de norma ℓ_1 tem-se

$$\|B\|_1 = \max_{x\neq 0} \frac{\|Bx\|_1}{\|x\|_1} = \max_{\|x\|_1=1} \|Bx\|_1$$

e

$$\|B\|_1 = \max_{1\leq j\leq n} \sum_{i=1}^{m} |b_{ij}| = \sum_{i=1}^{m} |b_{ir}| = \|Be^r\|_1$$

com e^r o vector r da base canónica, isto é

$$e_i^r = \begin{cases} 1 & \text{se } i = r \\ 0 & \text{se } i \neq r \end{cases}, \ i = 1, 2, \ldots, n$$

Consideremos agora a função

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^1 \\ x &\longmapsto f(x) = \|Bx\|_1 = \sum_{i=1}^{m} \left| \sum_{j=1}^{n} b_{ij} x_j \right| \end{aligned}$$

e o conjunto

$$K = \{x \in \mathbb{R}^n : \ \|x\|_1 \leq 1\}$$

Então verificam-se as seguintes propriedades:

(P1) K é um conjunto convexo.

(P2) f é uma função convexa em K.

(P3) O máximo de f em K é atingido num ponto fronteiro de K, isto é, num ponto x satisfazendo $\|x\|_1 = 1$.

(P4) Para qualquer $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Bx \neq 0$, f é diferenciável e o seu gradiente $\nabla f(x)$ é dado por

$$\nabla f(x) = B^T \eta$$

onde

$$\eta = \text{sgn}(x) = [\eta_i], \ w = Bx$$

com

$$\eta_i = \begin{cases} 1 & \text{se } w_i \geq 0 \\ -1 & \text{se } w_i < 0 \end{cases}$$

(P5) Se $\|\nabla f(x)\|_\infty \leq \nabla f(x)^T x$, então x é Máximo Local de f em K.

(P6) O Máximo Global de f em K é atingido em pelo menos um vector e^j da base canónica.

O Estimador de Hager determina um Máximo Local da função f em K. De acordo com as propriedades apresentadas, esse máximo local é um limite inferior de $\|B\|_1$ e será igual a $\|B\|_1$ se o máximo for global. Além disso tal máximo deve ser procurado entre os vectores da base canónica e^j, $j = 1, 2, \ldots, n$.

Algoritmo de Hager

Passo 0: Determinação de um Ponto Inicial (Ponto Fronteiro de K):

$$x = (\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \ldots, \frac{1}{n})$$

Passo 1: Calcule $z = \nabla f(x)$:

$$\begin{aligned} w &= Bx \\ \eta &= \operatorname{sgn}(w) \\ z &= B^T \eta \end{aligned}$$

Passo 2: Se $\|z\|_\infty \leq z^T x$, então termine com $\|w\|_1$ a estimativa de $\|B\|_1$.

Passo 3: Seja r tal que

$$\|z\|_\infty = |z_r| = \max_{1 \leq i \leq n} |z_i|$$

Faça $x = e^r$ e volte para Passo 1.

Exemplo

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

Então $\|B\|_1 = 6$. Apliquemos o algoritmo de Hager para determinar uma estimativa $\|w\|_1$ dessa norma. Inicialmente

$$x = (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3})^T$$

e

$$w = Bx = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \eta = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow z = B^T \eta = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Então $\|z\|_\infty = 6$ e

$$z^T x = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{bmatrix} = \frac{15}{3} = 5$$

Donde $z^T x < \|z\|_\infty$ e o Passo 3 deve ser efectuado.
Mas

$$|z_3| = \max |z_i| = 6 \Rightarrow r = 3$$

e

$$x = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Na segunda iteração tem-se

$$w = Bx = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \eta = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \Rightarrow z = B^T\eta = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Agora

$$\|z\|_\infty = 6$$

$$z^T x = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 6$$

Então $\|z\|_\infty \leq z^T x$ e o algoritmo termina com

$$\|w\|_1 = \sum_{i=1}^{3} w_i = 1 + 3 + 2 = 6$$

Então a estimativa é igual ao valor da norma ℓ_1 de B.

2. Estimativa do número de condição de $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

Da definição de número de condição de A, tem-se

$$\mathrm{cond}_1(A) = \|A\|_1 \, \|A^{-1}\|_1$$

A norma ℓ_1 de A é fácil de calcular a partir de

$$\|A\|_1 = \max_{1\leq j\leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

Para estimar $\|A^{-1}\|_1$, pode-se usar o algoritmo de Hager com $B = A^{-1}$. De notar que, se $B = A^{-1}$, então

$$w = Bx \Leftrightarrow w = A^{-1}x \Leftrightarrow Aw = x$$

$$z = B^T\eta \Leftrightarrow z = A^{-T}\eta \Leftrightarrow A^T z = \eta$$

Portanto cada iteração do algoritmo necessita da resolução de dois sistemas com as matrizes A e A^T. Se a decomposição LU de A é conhecida, isto é, se

$$PA = LU$$

então

$$A^T P^T = U^T L^T$$

pelo que cada iteração do algoritmo necessita da resolução de quatro sistemas triangulares.

Após determinar a estimativa β de $\|A^{-1}\|_1$ usando o algoritmo de Hager, então a estimativa do número de condição é dada por

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\|_1\beta$$

Anexo 2 – Decomposição de Valores Singulares (SVD)

1. Decomposição SVD

Teorema 1 *Se $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ então existem matrizes ortogonais $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ e $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ tais que*

$$A = USV^T$$

com

$$S = diag(\sigma_1, \ldots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m\times n},\ p = \min\{m, n\}$$

e $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \sigma_p \geq 0$. Além disso a característica de A é igual a

$$r = \begin{cases} \max\{i:\ \sigma_i > 0\} \\ 0 \text{ se } \sigma_i = 0,\ \forall i = 1, \ldots, p \end{cases}$$

Notação: $S = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)$:

Caso 1: $p = m = n \Rightarrow S = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_m \end{bmatrix}$

Caso 2: $p = m < n \Rightarrow S = \left[\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & \sigma_m & \end{array}\right]$

Caso 3: $p = n < m \Rightarrow S = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & \end{bmatrix}$

Demonstração:

(i) Se $A = 0$ então

$$A = I_m 0 I_n,\ r = 0$$

(ii) Se $A \neq 0$, sejam $x \in \mathbb{R}^m$ e $y \in \mathbb{R}^n$ tais que

$$\begin{aligned} \|Ax\|_2 &= \|A\|_2 = \max_{\|z\|_2=1} \|Az\| \\ y &= \frac{Ax}{\|A\|_2} \end{aligned}$$

Então $\|x\|_2 = \|y\|_2 = 1$. Seja $\sigma_1 = \|A\|_2$. Donde

$$Ax = \|A\|_2 y = \sigma_1 y$$

Como x e y têm normas unitárias, então existem matrizes ortogonais $\overline{U}$, $\overline{V}$ (resultado de Álgebra Linear) tais que

$$\overline{U} = \begin{bmatrix} y & U_2 \end{bmatrix},\ \overline{V} = \begin{bmatrix} x & V_2 \end{bmatrix},\ U_2 \in \mathbb{R}^{m\times(m-1)},\ V_2 \in \mathbb{R}^{n\times(n-1)}$$

Portanto

$$\begin{aligned}\overline{U}^T A \overline{V} &= \begin{bmatrix} y^T \\ U_2^T \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} x & V_2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} y^T A x & y^T A V_2 \\ U_2^T A x & U_2^T A V_2 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Mas

$$\begin{aligned} y^T A x &= \frac{(Ax)^T (Ax)}{\|A\|_2} = \frac{\|A\|_2^2}{\|A\|_2} = \|A\|_2 = \sigma_1 \\ U_2^T A x = U_2^T y = 0 \end{aligned}$$

Sejam

$$\begin{cases} B &= U_2^T A V_2 \in \mathbb{R}^{(m-1)\times(n-1)} \\ \\ w &= V_2^T A y \end{cases}$$

Então

$$\overline{U}^T A \overline{V} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & w^T \\ 0 & B \end{bmatrix} = A_1$$

Mas

$$A_1 \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & w^T \\ 0 & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 + w^T w \\ Bw \end{bmatrix}$$

e

$$\|A\|_2 = \|A_1\|_2 \geq \frac{\left\| A_1 \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ w \end{bmatrix} \right\|_2}{\left\| \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ w \end{bmatrix} \right\|_2} \geq \frac{\sigma_1^2 + w^T w}{\sqrt{\sigma_1^2 + w^T w}} = \sqrt{\sigma_1^2 + w^T w}$$

Donde

$$\sigma_1^2 \geq \sigma_1^2 + w^T w \Rightarrow w^T w \leq 0 \Rightarrow w = 0$$

Portanto

$$\overline{U}^T A \overline{V} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}$$

Além disso $B \in \mathbb{R}^{(m-1)\times(n-1)}$ satisfaz

$$\|B\|_2 \leq \|A\|_2 = \sigma_1$$

Agora, ou $B = 0$ e o teorema é verdadeiro com $r = 1$, ou então, tal como anteriormente, existem matrizes ortogonais $\widetilde{U} \in \mathbb{R}^{(m-1)\times(m-1)}$ e $\widetilde{V} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ tais que

$$\widetilde{U}^T B \widetilde{V} = \begin{bmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix}$$

com $C \in \mathbb{R}^{(m-2)\times(n-2)}$ satisfazendo $\|C\|_2 \leq \|B\|_2 = \sigma_2$. Se

$$U = \overline{U} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{U} \end{bmatrix}, \; V = \overline{V} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{V} \end{bmatrix}$$

então

$$U^T AV = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \sigma_2 & \\ & & C \end{bmatrix}$$

com $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \|C\|_2$. O teorema é então verdadeiro por indução sobre o número p, ou seja, existem matrizes ortogonais $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ e $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ tais que

$$U^T AV = \text{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)$$

ou equivalentemente

$$A = U\text{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)V^T$$

□

É importante notar que contrariamente às decomposições LU e QR, este teorema não fornece um processo para calcular decomposição SVD de uma matriz. Esse algoritmo é bem mais complexo do que os das outras decomposições e não será explicado nestes apontamentos.

A título de exemplo, seja

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Então tem-se

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Como

$$U = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \text{ e } V = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

são matrizes ortogonais, então

$$A = USV^T \tag{1}$$

com $S = \text{diag}(1, 1)$. Notemos que esta decomposição não é única, pois as matrizes

$$U = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \text{ e } V = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

também satisfazem a igualdade (1) com $S = \text{diag}(1, 1)$.

Os números reais σ_i são denominados Valores Singulares da matriz A e são por definição não negativos. Como iremos ver mais adiante, estes números têm relações importantes com os valores próprios das matrizes $A^T A$ e AA^T, e de A no caso simétrico.

2. Propriedades dos valores singulares

(i) Como

$$A = U\mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)V^T$$

então

$$AV = U\mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)$$

$$U^T A = \mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)V^T$$

Se escrevermos

$$U = \begin{bmatrix} u^1 & \dots & u^m \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} v^1 & \dots & v^n \end{bmatrix}$$

então tem-se

$$\begin{cases} Av^i &= \sigma_i u^i \\ A^T u^i &= \sigma_i v^i \end{cases} , i = 1, 2, \dots, p = \min\{m, n\} \tag{2}$$

À semelhança dos vectores próprios, u^i e v^i dizem-se vectores singulares à esquerda e à direita de A associados a σ_i respectivamente.

(ii) Se

$$A = U\mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)V^T$$

com

$$U = \begin{bmatrix} u^1 & \dots & u^m \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} v^1 & \dots & v^n \end{bmatrix}$$

então podemos escrever

$$A = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i (u^i)(v^i)^T \tag{3}$$

(iii) Seja $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|x\|_2 = 1$. Então

$$\begin{aligned} \|Ax\|_2^2 &= \|USV^Tx\|_2^2 = \left(USV^Tx\right)^T \left(USV^Tx\right) \\ &= x^T V S^T U^T U S V^T x \\ &= y^T \left(S^T S\right) y = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i^2 y_i^2 \end{aligned}$$

com $y = V^T x$. Mas

$$\|y\|_2 = \|V^T x\|_2 = \|x\|_2 = 1$$

e portanto

$$\underset{x:\ \|x\|_2=1}{\forall} \quad \sigma_p \leq \|Ax\|_2 \leq \sigma_1 \tag{4}$$

Em particular

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_1 \tag{5}$$

e

$$\min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_p \tag{6}$$

(iv) Seja $A = USV^T$ a decomposição SVD de A. Se $m \geq n$ então $p = n$ e

$$\begin{aligned} A^T A &= \left(USV^T\right)^T \left(USV^T\right) \\ &= VS^T U^T USV^T = V\left(S^T S\right) V^T \end{aligned}$$

ou seja,

$$A^T A = V \ \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2) V^T \tag{7}$$

Por outro lado, se $m \leq n$, então $p = m$ e

$$\begin{aligned} AA^T &= \left(USV^T\right)\left(USV^T\right)^T \\ &= USV^T VS^T U = U(SS^T)V \end{aligned}$$

ou seja

$$AA^T = U \ \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \ldots, \sigma_m^2) U^T \tag{8}$$

Como U e V são matrizes ortogonais, então verifica-se o seguinte teorema:

Teorema 2 *Seja $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.*

1. *Se $m \leq n$, então σ_i é valor singular de A se e só se σ_i^2 é valor próprio de AA^T.*
2. *Se $m \geq n$, então σ_i é valor singular de A se e só se σ_i^2 é valor próprio de $A^T A$.*

3. Matrizes simétricas, decomposição espectral e decomposição SVD

Teorema 3 *Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica, então λ_i é valor próprio de A se e só se $|\lambda_i|$ é valor singular de A.*

Demonstração: Como A é simétrica, então $A^T A = AA^T = A^2$ e o resultado é consequência do teorema anterior. □

Teorema 4 (Decomposição espectral de A) *Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica, então*

$$A = U \ \mathit{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) U^T \tag{9}$$

com λ_i, $i = 1, \ldots, n$ os valores próprios de A e $U = \begin{bmatrix} u^1 & \ldots & u^m \end{bmatrix}$ uma matriz ortogonal cuja coluna u^i é um vector próprio de A associado a λ_i.

Notar que a decomposição espectral se pode escrever na forma

$$A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left(u^i\right)\left(u^i\right)^T \tag{10}$$

Se a matriz A é SPSD, então as decomposições SVD e espectral coincidem. Se A não é SPSD, então tem pelo menos um valor próprio negativo e por isso as duas decomposições não podem coincidir. Para verificar a relação entre as duas decomposições, consideremos a matriz

$$A = \begin{bmatrix} \frac{3}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{bmatrix} \in \mathrm{SPD}$$

Para determinar os valores próprios de A, tem-se

$$\begin{aligned}
\det(A-\lambda I)=0 \quad &\Leftrightarrow \quad \det\begin{bmatrix} \frac{3}{2}-\lambda & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2}-\lambda \end{bmatrix}=0 \\
&\Leftrightarrow \quad \left(\frac{3}{2}-\lambda\right)^2-\left(\frac{1}{2}\right)^2=0 \\
&\Leftrightarrow \quad \left(\frac{3}{2}-\lambda+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{2}-\lambda-\frac{1}{2}\right)=0 \\
&\Leftrightarrow \quad \lambda_1=2 \text{ ou } \lambda_2=1
\end{aligned}$$

Para construir $U=\begin{bmatrix} u^1 & u^2 \end{bmatrix}$ temos que encontrar dois vectores u^i, $i=1,2$ tais que

$$\begin{cases} Au^i=\lambda_i u^i, \ i=1,2 \\ \\ \|u^i\|_2=1, \ i=1,2 \\ \\ \left(u^1\right)^T u^2=0 \end{cases}$$

Se

$$u^1=\begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{21} \end{bmatrix} \text{ e } u^2=\begin{bmatrix} u_{12} \\ u_{22} \end{bmatrix}$$

então u_{11}, u_{12}, u_{21} e u_{22} têm que satisfazer às seguintes equações

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}u_{11}+\frac{1}{2}u_{21} &= 0 \\ \\ -\frac{1}{2}u_{12}+\frac{1}{2}u_{22} &= 0 \\ \\ u_{11}^2+u_{21}^2 &= 1 \\ \\ u_{12}^2+u_{22}^2 &= 1 \\ \\ u_{11}u_{12}+u_{21}u_{22} &= 0 \end{cases}$$

Este sistema não tem solução única, mas

$$u_{11}=\frac{\sqrt{2}}{2}, \ u_{21}=\frac{\sqrt{2}}{2}, \ u_{12}=\frac{\sqrt{2}}{2}, \ u_{22}=-\frac{\sqrt{2}}{2}$$

satisfazem as equações. Então

$$U=\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} u^1 & u^2 \end{bmatrix}$$

e

$$A=\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

ou seja

$$A = 2\left(u^1\right)\left(u^1\right)^T + \left(u^2\right)\left(u^2\right)^T$$

é a decomposição espectral de A, que também é a decomposição SVD de A, com $U = V$.

Consideremos agora a matriz indefinida

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Então $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_2 = -1$ são os valores próprios de A e a decomposição espectral de A é

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Como $\lambda_2 = -1$, então esta decomposição não é SVD. Para a calcular, notemos que os valores singulares de A são

$$\sigma_i = |\lambda_i|,\ i = 1, 2 \Rightarrow \sigma_1 = \sigma_2 = 1$$

A decomposição SVD tem a forma

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Notar que $U \neq V$ nessa decomposição.

4. Pseudoinversa de uma matriz

Seja $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ uma matriz de característica $r \leq p = \min\{m, n\}$. Então

$$A = USV^T$$

com $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $S = \text{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)$ e $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_p \geq 0$. A Pseudoinversa de A é a matriz $A^+ \in \mathbb{R}^{n\times m}$ definida por

$$A^+ = VS^+U^T \tag{11}$$

com $S^+ = \text{diag}(\mu_1, \ldots, \mu_p) \in \mathbb{R}^{n\times m}$ e

$$\mu_i = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i}, & i = 1, \ldots, r \\ 0, & i = r+1, \ldots, p \end{cases}$$

Da definição facilmente se conclui que

$$\begin{aligned} A^+A &= VS^+U^TUSV^T = V\left(S^+S\right)V^T \\ &= V\ \text{diag}(e_1, \ldots, e_p)V^T \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} AA^+ &= USV^TVS^+U^T = U\left(SS^+\right)U^T \\ &= U \ \mathrm{diag}(e_1,\ldots,e_p)U^T \end{aligned}$$

com

$$e_i = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad i=1,\ldots,r \\ 0 & \text{se} \quad i=r+1,\ldots,p \end{cases}$$

Então há três casos a considerar que são discutidos a seguir.

Caso 1- $r=m=n$. Então

$$\mathrm{diag}(e_1,\ldots,e_p) = I_n$$

e

$$AA^+ = A^+A = I_n$$

Portanto $A^+ = A^{-1}$.

Caso 2- $r=m<n$. Então

$$\mathrm{diag}(e_1,\ldots,e_p) = I_m$$

e

$$AA^+ = I_m$$

Além disso

$$A^+ = A^T\left(AA^T\right)^{-1} \tag{12}$$

Para demonstrar esta igualdade, tem-se

$$\begin{aligned} AA^T &= \left(USV^T\right)\left(USV^T\right)^T \\ &= USV^TVS^TU^T = USS^TU^T \\ &= U \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \vdots & \\ & \ddots & & \vdots & 0 \\ & & \sigma_m & \vdots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_m \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & \end{bmatrix} U^T \\ &= U \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_m^2 \end{bmatrix} U^T \end{aligned}$$

Como U é ortogonal,

$$\left(AA^T\right)^{-1} = U \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sigma_m^2} \end{bmatrix} U^T$$

e

$$
\begin{aligned}
A^T\left(AA^T\right)^{-1} &= \left(USV^T\right)^T U \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sigma_m^2} \end{bmatrix} U^T \\
&= V \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_m \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sigma_m^2} \end{bmatrix} U^T \\
&= V \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sigma_m} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ & 0 & \end{bmatrix} U^T = A^+
\end{aligned}
$$

Caso 3- $r = n < m$. Então $A^+A = I_n$ e além disso

$$A^+ = \left(A^TA\right)^{-1} A^T \tag{13}$$

A demonstração desta última igualdade é semelhante à usada para estabelecer (12) e é por isso omitida.

5. Resolução de sistemas usando a decomposição SVD

Seja $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ e consideremos o sistema de equações lineares

$$Ax = b$$

com $b \in \mathbb{R}^m$ um vector dado. A existência e unicidade de solução desse sistema depende da característica da matriz A e dos seus números de linhas e de colunas. É no entanto possível estabelecer o seguinte resultado:

Teorema 5 *Se A^+ é a pseudoinversa de A, então $x = A^+b$ é a solução de norma ℓ_2 mínima do problema*

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 \tag{14}$$

Demonstração: Seja $A = USV^T$ a decomposição SVD de A, com $S = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)$ e $p = \min\{m, n\}$. Então

$$
\begin{aligned}
\|Ax - b\|_2 &= \|USV^Tx - b\|_2 \\
&= \|U(SV^Tx - U^Tb)\|_2 \\
&= \|Sy - U^Tb\|_2
\end{aligned}
$$

com $y = V^Tx$. Notar que $\|y\|_2 = \|V^Tx\|_2 = \|x\|_2$ e portanto

$$\min_{\substack{x\in\mathbb{R}^n \\ \|x\|_2 \text{ mínima}}} \|Ax - b\|_2 \Leftrightarrow \min_{\substack{y\in\mathbb{R}^n \\ \|y\|_2 \text{ mínima}}} \|Sy - \overline{b}\|_2$$

com $\overline{b} = U^T b$. Esse mínimo é atingido a partir de

$$\begin{cases} \sigma_i y_i = \overline{b}_i, & i = 1, \ldots, r \\ y_i = 0, & i = r+1, \ldots, p \end{cases}$$

com r a característica de A. Então

$$\begin{cases} y_i = \dfrac{\overline{b}_i}{\sigma_i}, & i = 1, \ldots, r \\ y_i = 0, & i = r+1, \ldots, p \end{cases}$$

e portanto

$$y = S^+ \overline{b} = S^+ U^T b$$

Mas

$$y = V^T x \Rightarrow x = Vy$$

e portanto

$$x = V S^+ U^T b = A^+ b$$

o que demonstra o teorema. □

Casos Particulares:

(i) Se $r = m = n$ então $A^+ = A^{-1}$ e a solução de $x = A^{-1}b$ é a única solução óptima de

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

e o valor óptimo é nulo.

(ii) Se $r = m < n$, então $A^+ = A^T(AA^T)^{-1}$ e $x = A^T(AA^T)^{-1}b$ é a solução óptima de norma ℓ_2 mínima de

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

e o valor óptimo é nulo. Portanto, $x = A^T(AA^T)^{-1}b$ é a solução óptima única de

$$\begin{array}{rl} \min & \|x\|_2 \\ \text{sujeito a} & Ax = b \end{array}$$

(iii) Se $r = n < m$, então $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$ e $x = (A^T A)^{-1} A^T b$ é a solução óptima única de

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

que em geral tem valor óptimo positivo (o sistema $Ax = b$ é em geral inconsistente).

Podemos assim concluir que se a característica da matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é completa, isto é, se $r = \min\{m, n\}$, então a solução óptima x de norma ℓ_2 mínima do Problema de Mínimos Quadrados Lineares

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

é única e obtém-se resolvendo um sistema de equações lineares, podendo acontecer um dos seguintes casos:

(i) $r = m = n \Rightarrow Ax = b$;

(ii) $r = m < n \Rightarrow x = A^T y$, com $(AA^T)y = b$;

(iii) $r = n < m \Rightarrow (A^T A)x = A^T b$.

Sugerimos o Capítulo 10 para a descrição dos processos para a resolução do Problema de Mínimos Quadrados Lineares e da Norma Mínima de Sistemas de Equações Lineares Rectangulares.

6. Número de condição de uma matriz e decomposição SVD

Seja $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ e

$$A = USV^T$$

a sua decomposição SVD, com $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrizes ortogonais, $S = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)$ e $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_p \geq 0$. Definimos Número de Condição de A a partir de

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\| \; \|A^+\| \tag{15}$$

com $A^+ = VS^+U^T$ a pseudoinversa de A.

Se usarmos a norma ℓ_2, então a decomposição SVD permite calcular o número de condição

$$\begin{aligned} \mathrm{cond}_2(A) &= \|A\|_2 \; \|A^+\|_2 \\ &= \|S\|_2 \; \|S^+\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_p} \end{aligned}$$

sendo infinito se a característica de A for menor do que $p = \min\{m, n\}$. Notemos que se A é uma matriz quadrada não singular, então $A^+ = A^{-1}$ e

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\| \; \|A^{-1}\| \tag{16}$$

corresponde à definição usual de número de condição introduzida no Capítulo 2. Tendo em conta o Teorema 5, é fácil de concluir que, à semelhança dos sistemas de equações lineares com matrizes quadradas, o número de condição definido por (15) tem uma grande importância em relação à precisão numérica da solução de norma mínima do problema de mínimos quadrados (14). Assim matrizes mal condicionadas podem conduzir a soluções de má precisão numérica, enquanto que a precisão da solução é boa quando o número de condição é pequeno. Além disso, pequenas mudanças nos dados do problema de mínimos quadrados (14) podem provocar grandes alterações na solução do problema em matrizes mal condicionadas, mas isso não acontece se a matriz for bem condicionada.

Para terminar esta secção, iremos demonstrar um resultado que relaciona o número de condição de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ de característica completa $r = \min\{m, n\}$ com os números de condição na norma ℓ_2 das matrizes AA^T e $A^T A$.

Teorema 6 *Seja r a característica de $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Então*

(i) $r = n \leq m \Rightarrow cond_2(A^T A) = [cond_2(A)]^2$;

(ii) $r = m \leq n \Rightarrow cond_2(AA^T) = [cond_2(A)]^2$.

Demonstração: Os resultados são consequências do Teorema 2, pois tem-se

(i) $r = n \leq m \Rightarrow [\text{cond}_2(A)]^2 = \dfrac{\sigma_1^2}{\sigma_p^2} = \dfrac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)} = \text{cond}_2(A^T A);$

(ii) $r = m \leq n \Rightarrow [\text{cond}_2(A)]^2 = \dfrac{\sigma_1^2}{\sigma_p^2} = \dfrac{\lambda_{\max}(AA^T)}{\lambda_{\min}(AA^T)} = \text{cond}_2(AA^T).$

□

Anexo 3 – Álgebra Linear Numérica em `MATLAB`

Decomposição LU:

- Matrizes densas com escolha parcial de pivot.
- Matrizes esparsas com escolha–limite de pivot e critério de Markowitz

Decomposições LDL^T e de Cholesky:

- Decomposição LDL^T disponível na *toolbox* de Processamento Digital de Sinal do `MATLAB`.
- Decomposição de Cholesky para matrizes SPD densas e esparsas; se a matriz não for simétrica positiva definida termina com uma mensagem de erro.

Decomposição QR:

- Matrizes densas: fornece as matrizes Q (produto explícito das matrizes de Householder) e R;
- Matrizes esparsas: fornece apenas a matriz R (isso permite ao utilizador implementar o método das equações semi–normais).

Decomposição SVD:

- Matrizes densas: fornece as matrizes U, S e V e em particular os valores singulares da matriz.
- Matrizes esparsas: Apenas alguns valores e vectores singulares são calculados.
- Determinação da pseudoinversa.

Mínimos Quadrados Lineares:

- Método das equações normais para matrizes densas e esparsas.
- Resolução com a decomposição QR para matrizes densas (a implementar pelo utilizador).
- Método das equações semi–normais para matrizes esparsas (a implementar pelo utilizador) .
- Utilizador pode implementar o processo de resolução do problema da Norma Mínima de um sistema indeterminado usando as equações normais, a decomposição QR ou as equações semi–normais.

Número de condição:

- Matrizes densas: quociente entre o maior e o menor valores singulares da matriz.
- Estimador do número de condição para matrizes densas e esparsas.

Métodos iterativos para sistemas de equações lineares:

- Método dos Gradientes Conjugados com ou sem Precondicionamento.
- Precondicionamentos diagonal, decomposição LU ou Cholesky incompletas, ou outros dados pelo utilizador.

- Outros métodos estacionários: BICG, BICGSTAB, CGS, GMRES, MINRES, QMR e SYMMLQ.

Valores e Vectores Próprios:

- Matrizes densas: conjunto completo.
- Matrizes esparsas: apenas alguns valores e vectores próprios são calculados.