Matrizes de Banda Simétricas Definidas Positivas

EP2 - CompIII - **Data de entrega: 23/10/2023**

1 Introdução

Matrizes com estrutura de banda são comuns em aplicações e esta estrutura pode ser explorada na fatoração LU para se evitar cálculos desnecessários. Se a matriz for também simétrica definida positiva, consegue-se ainda um ganho adicional na eficiência. Neste exercício-programa você irá implementar uma fatoração para matrizes simétricas definidas positivas com estrutura de banda e realizar alguns testes. Esta implementação será usada posteriormente no último exercício-programa, que envolverá uma aplicação.

2 Matrizes com estrutura de banda

Dizemos que uma matriz A $n \times n$ é uma matriz de banda, com banda inferior b_L e banda superior b_U se $a_{ij} = 0$ quando $i > j + b_L$ ou $j > i + b_U$:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,b_U+1} & & & 0 \\ \vdots & & & a_{2,b_U+2} & & \\ & & & & \ddots & \\ a_{b_L+1,1} & & & & & \\ & a_{b_L+2,2} & & & & a_{n-b_U,n} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & & a_{n,n-b_L} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Quando $b_L = b_U$, damos nomes especiais. Dizemos que A é tridiagonal se $b_l = b_U = 1$, pentadiagonal se $b_L = b_U = 2$, heptadiagonal se $b_L = b_U = 3$, etc...

Se A for uma matriz de banda tal que é possível obter a sua fatoração LU sem trocas de linhas, então temos o seguinte resultado: L tem banda inferior b_L e U tem banda superior b_U (**Exercício 1:** Demonstre esse resultado). Logo, pode-se evitar o cálculo de coeficientes que sabemos serem nulos e, quando b_L e b_U são pequenos relativamente a n, o número de operações aritméticas para se obter a fatoração é aproximadamente $2n \cdot b_L \cdot b_U$.

3 Matrizes simétricas definidas positivas (SDP)

Uma matriz A $n \times n$ é simétrica definida positiva (SDP) se:

(i) $A^T = A$ (ela é simétrica); **(ii)** $x^T Ax > 0$ para todo $x \neq 0$ em $\mathbb{R}^n$.

Quando A é SDP, pode-se obter a sua fatoração LU sem trocas de linhas. Além disso, verifica-se que $U = DL^T$, onde D é uma matriz diagonal com elementos positivos na sua diagonal. Isso nos dá a fatoração LDL^T de A:

Se A é SDP, então existem uma única matriz diagonal $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ com elementos diagonais positivos ($d_i > 0$) e uma única matriz triangular inferior L com elementos diagonais iguais a 1 tais que

$$A = LDL^T. \tag{1}$$

Conhecendo-se a fatoração LDL^T, pode-se resolver o sistema linear $Ax = b$ resolvendo-se

$$\begin{aligned} Ly &= b, \\ L^T x &= D^{-1} y \text{ (note que } (D^{-1}y)_i = y_i/d_i, 1 \le i \le n). \end{aligned}$$

Os coeficientes da fatoração LDL^T podem ser obtidos pelo seguinte algoritmo:

FATORAÇÃO LDL^T

para $i = 1, \ldots, n$

$v_j = l_{ij} d_j$, $1 \le j \le i-1$

$d_i = a_{ii} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} v_j$; se $d_i \le 0$ PARE (a matriz não é SDP)

$l_{ji} = (a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} v_k)/d_i$, $j = i+1, \ldots, n$

fim

Exercício 2: Deduza o algoritmo acima a partir de (1).

3.1 Matrizes SDP com estrutura de banda

Uma matriz de banda simétrica tem obviamente bandas superior e inferior iguais: $b_U = b_L = b_S$. Se ela for SDP, a sua fatoração LDL^T pode ser calculada de forma eficiente, pois sabemos de antemão que $l_{ij} = 0$, se $i > j + b_S$, $l_{ii} = 1$, $1 \le i \le n$ e L é triangular inferior. Há várias maneiras de se armazenar uma matriz de banda simétrica e vamos fixar uma delas.

Como vamos operar na diagonal e nas b_S diagonais secundárias abaixo da diagonal, podemos armazenar estas informaçãoes em uma matriz retangular $b_S + 1 \times n$ (com o excedente de algumas entradas que jamais serão usadas). Por exemplo, uma matriz de ordem 9 heptadiagonal ($b_S = 3$) seria armazenada na forma

11	22	33	44	55	66	77	88	99
21	32	43	54	65	76	87	98	
31	42	53	64	75	86	97		
41	52	63	74	85	96			

Os espaços vazios não são usados, mas é um pequeno preço a pagar.

O resultado da fatoração LDL^T pode também ser armazenado em uma matriz com a mesma estrutura, com d_i, $1 \le i \le n$ na primeira linha e os elementos de L abaixo da diagonal nas linhas abaixo (os elementos diagonais de L não precisam ser armazenados pois são iguais a 1).

Exercício 3: Deduza as expressões para a fatoração LDL^T de uma matriz A SDP com estrutura de banda, usando o armazenamento descrito acima. Apresente também as fórmulas para a resolução de um sistema linear $Ax = b$ a partir da fatoração LDL^T, usando o mesmo armazenamento.

4 Tarefa

Implemente em Python a fatoração LDL^T de uma matriz A SDP com estrutura de banda usando o armazenamento descrito na Seção 3.1. Implemente também a resolução de um sistema linear $Ax = b$ a partir da fatoração LDL^T, usando o mesmo armazenamento. O programa deve imprimir, usando este armazenamento, a matriz A e a fatoração LDL^T. Para o sitema linear, imprima também o lado direito b e a solução calculada. Estruture o seu programa de forma que um usuário possa fazer testes.

Você irá gerar os própios testes, usando o seguinte fato: se A é uma matriz $n \times n$ *simétrica* tal que $a_{ii} > 0$, $1 \leq i \leq n$, e é estritamente diagonal dominante,

$$a_{ii} > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}| \quad \text{para } i = 1, \ldots, n, \tag{2}$$

então A é SDP. Os elementos fora da diagonal podem ser gerados aleatoriamente e os elementos diagonais podem ser escolhidos satisfazendo (2). Use $n = 20$ e faça testes para matrizes tridiagonais ($b_S = 1$), pentadiagonais ($b_S = 2$) e heptadiagonais ($b_S = 3$). Compare A com o resultado do produto LDL^T.

Descreva seus resultados em um relatório e inclua nele a solução dos três exercícios propostos nesse enunciado. Comente bem os seus programas de modo que os algoritmos fiquem claros. Divirtam-se!