Resolução de sistemas de equações lineares: Fatorações de matrizes

Marina Andretta/Franklina Toledo

ICMC-USP

27 de fevereiro de 2015

Baseado no livro Análise Numérica, de R. L. Burden e J. D. Faires.

Fatoração de matrizes

Como vimos, o Método de eliminação de Gauss usa $O(n^3)$ operações para transformar um sistema em outro sistema triangular inferior equivalente.

Para resolver este sistema linear equivalente, são usadas $O(n^2)$ operações com o Método de substituição regressiva.

Uma maneira de resolver um sistema linear $Ax = b$ é fatorar a matriz A, ou seja, escrevê-la como o produto de duas outras matrizes.

Fatoração de matrizes

Um caso de interesse é quando a matriz A é decomposta em $A = LU$, com L matriz triangular inferior e U triangular superior. Esta fatoração é chamada de fatoração LU.

De posse destas matrizes L e U, o sistema original $Ax = b$ pode ser facilmente resolvido.

Note que $Ax = LUx = b$. Então, primeiro resolvemos o sistema $Ly = b$, usando o Método de substituição regressiva. Em seguida, com y conhecido, resolvemos o sistema $Ux = y$, usando o Método de substituição progressiva.

Método de eliminação de Gauss

Antes de analisarmos em que casos é possível fazer esta fatoração e como ela pode ser feita, analisemos o caso em que o Método de eliminação de Gauss pode ser aplicado sem que nenhuma troca de linhas seja necessária.

O primeiro passo do Método de eliminação de Gauss consiste em efetuar, para cada $j = 2, 3, ..., n$, as operações

$$(E_j - m_{j1} E_1) \to (E_j),$$

em que

$$m_{j1} = \frac{a_{j1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}.$$

Método de eliminação de Gauss

Estas operações fazem com que o sistema equivalente calculado tenha elementos nulos em todas as linhas abaixo da diagonal da primeira coluna.

Executar estas operações é equivalente a multiplicar a matriz original A, à esquerda, pela matriz

$$M^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -m_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Método de eliminação de Gauss

Denotamos o produto da matriz $M^{(1)}$ pela matriz original $A \equiv A^{(1)}$ por $A^{(2)}$. E o produto da matriz $M^{(1)}$ pelo vetor $b \equiv b^{(1)}$ por $b^{(2)}$.

Ou seja, temos que

$$A^{(2)}x = M^{(1)}Ax = M^{(1)}b = b^{(2)}.$$

Método de eliminação de Gauss

De forma análoga, podemos construir a matriz $M^{(2)}$ como sendo a matriz identidade, com cada elemento da segunda coluna e da linha j, abaixo da diagonal (ou seja, $j = 3, ..., n$), substituído por

$$m_{j2} = \frac{a_{j2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}.$$

O produto da matriz $M^{(2)}$ pela matriz $A^{(2)}$ tem zeros nos elementos abaixo da diagonal das duas primeiras colunas. Ou seja,

$$A^{(3)}x = M^{(2)}A^{(2)}x = M^{(2)}M^{(1)}Ax = M^{(2)}M^{(1)}b = M^{(2)}b^{(2)} = b^{(3)}.$$

Método de eliminação de Gauss

De maneira geral, com a matriz $A^{(k)}$ formada, podemos multiplicá-la à esquerda pela matriz $M^{(k)}$, dada por

$$M^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -m_{(k+1)k} & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -m_{(n-1)k} & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -m_{nk} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

e geramos a matriz $A^{(k+1)}$.

Método de eliminação de Gauss

Assim,

$$A^{(k+1)}x = M^{(k)}A^{(k)}x = M^{(k)}...M^{(1)}Ax =$$

$$M^{(k)}...M^{(1)}b = M^{(k)}b^{(k)} = b^{(k+1)}.$$

O Método de eliminação de Gauss termina com a geração da matriz triagular superior $A^{(n)}$,

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix},$$

dada por

$$A^{(n)} = M^{(n-1)} M^{(n-2)} \dots M^{(1)} A.$$

Fatoração LU

Lembre-se de que estamos interessados em escrever a matriz A como um produto $A = LU$, com L triangular inferior e U triangular superior.

Vamos denotar a matriz triangular superior $A^{(n)}$ por U.

Vejamos agora como obter a matriz triangular inferior L.

Fatoração LU

Primeiramente, lembre-se que

$$A^{(k+1)}x = M^{(k)}A^{(k)}x = M^{(k)}b^{(k)} = b^{(k+1)},$$

onde o produto de $M^{(k)}$ por $A^{(k)}$ representa as operações

$$(E_j - m_{jk}E_k) \rightarrow (E_j),$$

para $j = k+1, ..., n$.

Fatoração LU

A matriz inversa de $M^{(k)}$, que denotaremos por $L^{(k)}$, é dada por

$$L^{(k)} = (M^{(k)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & m_{(k+1)k} & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & m_{(n-1)k} & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & m_{nk} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Fatoração LU

Note que

$$L^{(1)}L^{(2)}...L^{(n-2)}L^{(n-1)}U =$$

$$L^{(1)}L^{(2)}...L^{(n-2)}L^{(n-1)}M^{(n-1)}M^{(n-2)}...M^{(2)}M^{(1)}A =$$

$$(M^{(1)})^{-1}(M^{(2)})^{-1}...(M^{(n-2)})^{-1}(M^{(n-1)})^{-1}M^{(n-1)}M^{(n-2)}...M^{(2)}M^{(1)}A = A$$

Fatoração LU

Como

$$L = L^{(1)}L^{(2)}...L^{(n-1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ m_{(n-1)1} & m_{(n-1)2} & \dots & 1 & 0 \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{n(n-1)} & 1 \end{pmatrix}$$

é triangular inferior, denotaremos $L = L^{(1)}L^{(2)}...L^{(n-1)}$.

Assim, $LU = A$.

Teorema 1: *Se o Método de eliminação de Gauss puder ser aplicado ao sistema linear* $Ax = b$*, sem trocas de linhas, então a matriz* A *pode ser fatorada como o produto de uma matriz triangular inferior* L *e uma matriz triangular superior* U*, tal que* $A = LU$*, com* $m_{ji} = \frac{a_{ji}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}$*,*

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ m_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad e \quad U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

Exemplo

Considere o sistema linear

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 3x_4 = 4, \\ 2x_1 + x_2 - x_3 + x_4 = 1, \\ 3x_1 - x_2 - x_3 + 2x_4 = -3, \\ -x_1 + 2x_2 + 3x_3 - x_4 = 4. \end{cases}$$

Exemplo

Ao aplicar o Método de eliminação de Gauss, executamos as operações $(E_2 - 2E_1) \to (E_2)$, $(E_3 - 3E_1) \to (E_3)$, $(E_4 - (-1)E_1) \to (E_4)$, $(E_3 - 4E_2) \to (E_3)$, $(E_4 - (-3)E_2) \to (E_4)$ para obter o seguinte sistema equivalente

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcrcr} x_1 & + & x_2 & & & + & 3x_4 & = & 4, \\ & - & x_2 & - & x_3 & - & 5x_4 & = & -7, \\ & & & & 3x_3 & + & 13x_4 & = & 13, \\ & & & & & - & 13x_4 & = & -13. \end{array}\right.$$

Exemplo

Os multiplicadores m_{ij} e a matriz triangular superior produzem a fatoração

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} = LU.$$

Exemplo

Esta fatoração permite que qualquer sistema linear, envolvendo a matriz A, seja facilmente resolvido.

Por exemplo, para resolver o sistema

$$Ax = LUx = b = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix},$$

definimos $Ux = y$.

Exemplo

Então, resolvemos o sistema

$$Ly = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix},$$

obtendo a solução

$$y_1 = 4, \ y_2 = -7, \ y_3 = 13, \ y_4 = -13.$$

Exemplo

Em seguida, resolvemos o sistema

$$Ux = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ -7 \\ 13 \\ -13 \end{pmatrix},$$

obtendo a solução para o sistema original

$$x_1 = -1, \; x_2 = 2, \; x_3 = 0, \; x_4 = 1.$$

Fatoração LU

Para que a fatoração LU seja única, usamos o Método de Dootlitle, que exige que os elementos da diagonal da matriz L sejam iguais a um.

Outras formulações são possíveis, mas apresentaremos o algoritmo apenas para esta.

Algoritmo

Fatoração LU: dadas a dimensão n e uma matriz A, com n linhas e colunas, devolve uma matriz triangular inferior L e uma superior U, tais que $A = LU$, ou emite uma mensagem de erro.

Passo 1: Faça $L \leftarrow 0$ e $U \leftarrow 0$. Para $j = 1, ..., n$, faça $l_{jj} \leftarrow 1$.

Passo 2: Para $j = 1, ..., n$, faça $u_{1j} \leftarrow a_{1j}$. Se $u_{11} = 0$ então

escreva "fatoração impossível" e pare.

Passo 3: Para $i = 2, ..., n$, faça $l_{i1} \leftarrow \frac{a_{i1}}{u_{11}}$.

Algoritmo - continuação

Passo 4: Para $i = 2, ..., n - 1$, execute os passos 5 a 6:

Passo 5: Faça $u_{ii} \leftarrow a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{ki}$. Se $u_{ii} = 0$ então escreva "fatoração impossível" e pare.

Passo 6: Para $j = i + 1, ..., n$, execute os passos 7 a 8:

Passo 7: Faça $u_{ij} \leftarrow \frac{1}{l_{ii}}(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj})$.

Passo 8: Faça $l_{ji} \leftarrow \frac{1}{u_{ii}}(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki})$.

Passo 9: Faça $u_{nn} \leftarrow a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk} u_{kn}$.

Passo 10: Devolva L e U e pare.

Uma vez computada a fatoração da matriz $A = LU$, a solução do sistema linear $Ax = b$ pode ser obtida resolvendo os sistemas $Ly = b$ e $Ux = y$.

Como a matriz L é triangular inferior, temos que

$$y_1 = \frac{b_1}{l_{11}}$$

e, para cada $i = 2, ..., n$,

$$y_i = \frac{1}{l_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j).$$

Resolução do sistema linear

Depois de calculado o valor de y, encontramos o valor de x, resolvendo o sistema $Ux = y$.

Como a matriz U é triangular superior, calculamos

$$x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}$$

e, para $i = n - 1, ..., 1$,

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j).$$

Permutação

A fatoração LU definida anteriormente parte do princípio que não serão necessárias trocas de linhas para a aplicação do Método de eliminação de Gauss.

No entanto, este nem sempre é o caso.

Para descrever quais alterações devem ser feitas no algoritmo da fatoração LU para abranger os casos em que trocas de linhas são necessárias, vamos definir o que é uma matriz de permutação.

Permutação

Uma matriz de permutação $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é obtida a partir da reorganização das linhas da matriz identidade I_n.

Isso resulta em uma matriz com exatamente um elemento unitário em cada linha e em cada coluna, com o restante dos elementos nulos.

Permutação - exemplo

A matriz

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

é uma matriz de permutação 3×3.

Permutação - exemplo

Se multiplicarmos qualquer matriz $A \in \boldsymbol{R}^{3\times 3}$, à esquerda, por P, obtemos uma nova matriz que é igual à matriz A, trocando-se a segunda e terceira linhas:

$$PA = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix}.$$

Permutação - exemplo

Analogamente, se multiplicarmos qualquer matriz $A \in \boldsymbol{R}^{3\times 3}$, à direita, por P, obtemos uma nova matriz que é igual à matriz A, trocando-se a segunda e terceira colunas:

$$AP = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{13} & a_{12} \\ a_{21} & a_{23} & a_{22} \\ a_{31} & a_{33} & a_{32} \end{pmatrix}.$$

Permutação

Há duas propriedades importantes sobre matrizes de permutação que se relacionam ao Método de eliminação de Gauss.

Suponha que $k_1, k_2, ..., k_n$ seja uma permutação dos números inteiros $1, 2, ..., n$ e que a matriz de permutação P seja definida por

$$p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = k_i, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Permutação

Então,

- PA permuta as linhas de A. Isto é,

$$PA = \begin{pmatrix} a_{k_1 1} & a_{k_1 2} & \dots & a_{k_1 n} \\ a_{k_2 1} & a_{k_2 2} & \dots & a_{k_2 n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k_n 1} & a_{k_n 2} & \dots & a_{k_n n} \end{pmatrix}.$$

- P^{-1} existe e $P^{-1} = P^T$.

Permutação e fatoração LU

Como vimos anteriormente, para qualquer matriz A não-singular, o sistema linear $Ax = b$ pode ser resolvido usando o Método de eliminação de Gauss com possibilidade de pivotamento.

Se soubéssemos, de antemão, quais as permutações necessárias para que o Método de eliminação de Gauss seja aplicado, poderíamos aplicar estas permutações à matriz A e, depois, aplicar o Método de eliminação de Gauss sem permutações.

Permutação e fatoração LU

Ou seja, quando A é não-singular, sempre é possível aplicar uma permutação P, obtendo PA tal que é possível aplicar o Método de eliminação de Gauss sem trocas de linhas para resolver o sistema $PAx = Pb$.

Isso significa que, quando A é não-singular, é possível calcular $PA = LU$.

Como $P^{-1} = P^T$, temos que

$$A = P^{-1}LU = P^T LU = (P^T L)U.$$

Permutação e fatoração LU - exemplo

Considere a matriz

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 2 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Como $a_{11} = 0$, não é possível calcular a fatoração LU de A.

Permutação e fatoração LU - exemplo

No entanto, se fizermos a troca $(E_1) \leftrightarrow (E_2)$, podemos executar as operações $(E_3 + E_1) \rightarrow (E_3)$ e $(E_4 - E_1) \rightarrow (E_4)$, obtendo

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Permutação e fatoração LU - exemplo

Depois, trocamos $(E_3) \leftrightarrow (E_4)$ e executamos a operação $(E_3 - E_2) \rightarrow (E_3)$, obtendo

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Permutação e fatoração LU - exemplo

A matriz de permutação associada às trocas de linhas $(E_1) \leftrightarrow (E_2)$ e $(E_3) \leftrightarrow (E_4)$ é

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Permutação e fatoração LU - exemplo

O Método de eliminação de Gauss sem trocas de linhas pode ser aplicado à matriz PA, fornecendo

$$PA = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = LU.$$

Permutação e fatoração LU - exemplo

Logo,

$$A = P^{-1}LU = P^TLU = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Vamos agora tratar de um caso especial de matrizes: as matrizes definidas positivas.

Uma matriz $A \in \boldsymbol{R}^{n \times n}$ é dita definida positiva se A é simétrica e, para todo $x \in \boldsymbol{R}^n$, $x \neq 0$, $x^T Ax > 0$.

Matrizes definidas positivas - exemplo

Considere a matriz simétrica

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Matrizes definidas positivas - exemplo

Tomando $x \neq 0$, temos

$$x^T A x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 \\ -x_2 + 2x_3 \end{pmatrix} = 2x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_2x_3 + 2x_3^2.$$

Matrizes definidas positivas - exemplo

Rearranjando os termos, temos que

$$x^T Ax = x_1^2 + (x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2) + (x_2^2 - 2x_2x_3 + x_3^2) + x_3^2 =$$

$$x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 > 0,$$

a menos que $x_1 = x_2 = x_3 = 0$.

Portanto, A é definida positiva.

Verificar se uma matriz é definida positiva apenas usando a definição pode ser muito difícil.

Mas existem algumas propriedades que podem ser usadas.

Teorema 2: *Se $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ for definida positiva, então*

- *A tem inversa.*
- $a_{ii} > 0$, *para* $i = 1, ..., n$.
- $\max_{1 \leq k,j \leq n} |a_{kj}| \leq \max_{1 \leq i \leq n} |a_{ii}|$.
- $a_{ij}^2 < a_{ii} a_{jj}$, $i \neq j$.

Embora as condições do **Teorema 2** sejam necessárias para determinar se uma matriz A é definida positiva, elas não são suficientes.

Vejamos uma definição que nos levará a uma condição necessária e suficiente.

Uma submatriz principal dominante A_k de uma matriz A, para algum k, $1 \leq k \leq n$, é dada por

$$A_k = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix}.$$

Matrizes definidas positivas

Teorema 3: *Uma matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é definida positiva se, e somente se, cada uma de suas submatrizes principais dominantes tiver determinante estritamente maior do que zero.*

Considere, por exemplo, a matriz simétrica

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Matrizes definidas positivas - exemplo

Note que

$$\det(A_1) = \det\left(\begin{pmatrix} 2 \end{pmatrix}\right) = 2 > 0,$$

$$\det(A_2) = \det\left(\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\right) = 4 - 1 = 3 > 0$$

e

$$\det(A_3) = \det(A) = 4 > 0.$$

Assim, pelo **Teorema 3**, A é definida positiva.

Matrizes definidas positivas

Teorema 4: *Uma matriz simétrica A é definida positiva se, e somente se, o Método de eliminação de Gauss puder ser aplicado à resolução de sistemas do tipo $Ax = b$, sem que haja trocas de linhas e com os elementos pivôs sempre positivos.*

Corolário 1: *Uma matriz simétrica A é definida positiva se, e somente se, A puder ser fatorada na forma $A = LDL^T$, com L triangular inferior, com 1s na diagonal, e D matriz diagonal com elementos positivos na diagonal.*

Corolário 2: *Uma matriz simétrica A é definida positiva se, e somente se, A puder ser fatorada na forma $A = LL^T$, com L triangular inferior com elementos não-nulos na diagonal.*

Fatoração LDL^T: dadas a dimensão n e uma matriz A, com n linhas e colunas, devolve uma matriz triangular inferior L e uma diagonal D, tais que $A = LDL^T$, ou emite uma mensagem de erro.

Passo 1: Faça $L \leftarrow 0$ e $D \leftarrow 0$.

Passo 2: Para $i = 1, ..., n$, execute os passos 3 a 5:

Passo 3: Para $j = 1, ..., i-1$, faça $v_j \leftarrow l_{ij} d_{jj}$.

Passo 4: Faça $d_{ii} \leftarrow a_{ii} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} v_j$. Se $d_{ii} = 0$, então escreva "matriz não é definida positiva" e pare.

Passo 5: Para $j = i+1, ..., n$, faça $l_{ji} \leftarrow \frac{1}{d_{ii}}(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} v_k)$.

Passo 6: Devolva L e D e pare.

Algoritmo

Fatoração de Cholesky: dadas a dimensão n e uma matriz A, com n linhas e colunas, devolve uma matriz triangular inferior L, tal que $A = LL^T$, ou emite uma mensagem de erro.

Passo 1: Faça $L \leftarrow 0$ e $D \leftarrow 0$.

Passo 2: Se $a_{11} \leq 0$ então escreva "matriz não é definida positiva" e pare.

Senão, faça $l_{11} \leftarrow \sqrt{a_{11}}$.

Passo 3: Para $j = 2, ..., n$, faça $l_{j1} \leftarrow \frac{a_{j1}}{l_{11}}$.

Algoritmo - continuação

Passo 4: Para $i = 2, \ldots, n-1$, execute os passos 5 a 7:

Passo 5: Faça $v \leftarrow a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2$.

Passo 6: Se $v \leq 0$, então

escreva "matriz não é definida positiva" e pare.

Senão, faça $l_{ii} \leftarrow \sqrt{v}$.

Passo 7: Para $j = i+1, \ldots, n$, faça $l_{ji} \leftarrow \frac{1}{l_{ii}}(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} l_{ik})$.

Passo 8: Faça $v \leftarrow a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}^2$.

Passo 9: Se $v \leq 0$, então escreva "matriz não é definida positiva" e pare.

Senão, faça $l_{nn} \leftarrow \sqrt{v}$.

Passo 10: Devolva L e pare.

Fatorações LDL^T e Cholesky - exemplo

Considere a matriz definida positiva

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.50 \end{pmatrix}.$$

Fatorações LDL^T e Cholesky - exemplo

A fatoração LDL^T fornece a decomposição

$$A = LDL^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.25 & 1 & 0 \\ 0.25 & 0.75 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -0.25 & 0.25 \\ 0 & 1 & 0.75 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Fatorações LDL^T e Cholesky - exemplo

A fatoração de Cholesky fornece a decomposição

$$A = LL^T = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -0.5 & 2 & 0 \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 2 & 1.5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$