COPPEAD/UFRJ

RELATÓRIO COPPEAD Nº 15

"IDENTIFICAÇÃO RÁPIDA DE MATRIZES POSITIVAS (NEGATIVAS) DEFINIDAS E SUA APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO CLÁSSICA".

Jorge A. García Gómez*

Maio de 1978

* Doutor em Engenharia de Produção pela Universidade Federal do Rio de Janeiro e Professor Adjunto do programa de Mestrado em Administração da COPPE/UFRJ. o autor agradece a ajuda financeira prestada pela FINEP para a elaboração desta pesquisa.

I. INTRODUÇÃO

O problema que vamos considerar é o seguinte: seja $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ uma função de n variáveis, sem restrições, que se deseja otimizar. Uma condição necessária para que $\underline{x^*} = (x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*)$ seja um ponto de ótimo é que $\partial f/\partial x_i = 0$ para toda $i = 1, 2, \ldots, n$. Até aqui, sabemos que $\underline{x^*}$ é um ponto estacionário, porém não podemos identificá-lo como um ponto de máximo ou de mínimo. Para tal efeito, é necessário avaliarmos a matriz Hessiana no ponto $\underline{x^*}$, definida como:

$$H = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}_{x^*}$$

sabemos pelo cálculo diferencial que

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$$

para toda f contínua no seu domínio. Além disso, pode-se demonstrar que:

(i) Se H avaliada em $\underline{x^*}$ é positiva definida, então $\underline{x^*}$ é um ponto de mínimo.

(ii) Se H avaliada em $\underline{x^*}$ é negativa definida, então $\underline{x^*}$ é um ponto de máximo.

(iii) Se H avaliada em $\underline{x^*}$ não é positiva nem negativa definida, não podemos garantir nada acerca da natureza de $\underline{x^*}$.

Desse modo, o problema que tratamos de abordar nesta pesquisa é o de identificar, da forma mais rápida e eficiente, a definição de uma matriz simétrica e real (a matriz Hessiana) para conhecer a natureza do ponto estacionário, no qual ela foi avaliada. No segundo capítulo apresentamos algumas propriedades fundamentais da álgebra de matrizes, que serão referenciadas no decorrer desta pesquisa e que achamos conveniente incluir na pesquisa para maior facilidade de leitura. No capítulo três, é apresentado o teorema fundamental da decomposição LU de matrizes e os teoremas nos quais a dita decomposição se baseia. No quarto capítulo, apresentamos três métodos que solucionam o problema aqui abordado. Os primeiors são bastante conhecidos na literatura específica ao assunto e se fundamentam na teoria exposta no capítulo três. O terceiro método é a contribuição apresentada nesta pesquisa pelo autor como método alternativo de solução ao problema aqui abordado e cuja eficiência é comparada no capítulo cinco com os dois métodos interiormente expostos. No anexo I, apresentamos o programa de computador utilizado para o cálculo da eficiência dos métodos.

II. ALGUMAS PROPRIEDADES FUNDAMENTAIS DA ÁLGEBRA DE MATRIZES

Nesta seção, apresentam-se algumas das propriedades fundamentais da álgebra de matrizes, que serão referenciadas no decorrer desta pesquisa.

Para efeitos de estudo nesta seção, será considerada a matriz A, como uma matriz quadrada de ordem n, isto é, $A = \left[a_{ij}\right]$ para toda $i,j = 1, 2,\ldots,n$.

Propriedade 2.1

A é uma matriz simétrica se, e somente se, $a_{ij} = a_{ji}$ para toda $i,j = 1, 2, \ldots, n$

Propriedade 2.2

O determinante de uma matriz quadrada A de ordem n, det(A), se define como o número resultante da seguinte soma dos n^2 elementos de A:

$$\det(A) = \Sigma(\pm)a_{1_i}a_{2_j}a_{3_k} \ldots a_{n_r}$$

tomando-se a soma sobre todas as permutações dos segundos subíndices. Será dado sinal positivo, se (i, j, k, ..., r) for uma permutação par de (1, 2, 3, ..., n), e sinal negativo, se se tratar de uma permutação ímpar.

Propriedade 2.3

Para toda matriz B de ordem m x n, considere a submatriz R formada ao se considerarem somente k linhas e k colunas de A. Assim, det(R) é um menor de ordem k de A. Se se tomam os primeiros k linhas e as primeiras k colunas de A, diz-se que $\Delta_k = \det(R)$ é o menor principal de ordem k de B.

Propriedade 2.4

Quando a linha j é multiplicada por um escalar e a somamos à linha

$i(i \neq j)$ da matriz A, o valor do det(A) não se altera.

Propriedade 2.5

Quando se multiplica cada elemento da linha i de A por um escalar λ, o det(A) é multiplicado também por λ. Se são $k(k \leq n)$ as linhas multiplicadas por λ, o valor do det(A) é então multiplicado por λ^k.

Propriedade 2.6

A é uma matriz positiva definida, se, e somente se, cada menor principal de A é positivo, isto é, se $\Delta_k > 0$ para toda $k = 1, 2, \ldots, n$.

Propriedade 2.7

Se A é positiva definida, então $a_{ii} > 0$ para toda $i = 1, 2, \ldots, n$.

Propriedade 2.8

A é uma matriz negativa definida se, e somente se, cada menor principal de ordem k multiplicado por $(-1)^k$ é positivo, isto é, se:

$$\Delta_1<0;\ \Delta_2>0;\ \Delta_3<0;\ \Delta_4>0;\ \ldots$$

III. A DECOMPOSIÇÃO LU (Teorema de Comte (1))

Uma matriz quadrada A de ordem n pode ser fatorizada no produto $A = LU$, onde L é uma matriz triangular interior e U uma matriz triangular superior, se todos os menores principais de A são não-singulares, isto é, se $\Delta_k \neq 0$ para toda $k = 1, 2, \ldots, n$. Além disto, se fixamos apriori os valores dos elementos da diagonal principal de L ou de U, esta fatorização é única.

Considere-se o caso onde os elementos da diagonal principal de $L(\ell_{ii}$ $i = 1, 2, \ldots, n)$ são unitários. Como

$$\det(A) = \det(L)\det(U)$$

e o determinante de uma matriz diagonal é o produto dos elementos de sua diagonal principal, então

$$\det(A) = \Pi_{i=1}^{i=n} \ell_{ii} \; \Pi_{i=1}^{i=n} u_{ii}$$

Forsythe e Moler (3) demonstraram, sob as mesmas hipóteses, que a matriz U, do teorema anterior, pode se fatorizar numa forma única como $DU_1 = U$, onde D é uma matriz diagonal e U_1 é uma matriz triangular superior, com sua diagonal principal unitária. Neste caso,

$$\det(A) = \det(L)\det(D)\det(U)$$

implicando em que

$$\det(A) = \det(D) = \Pi_{i=1}^{i=n} d_{ii}$$

Consideremos alguns casos particulares da matriz A:

<u>Teorema 3.1</u>

Se A é simétrica, então a decomposição $A = LDU$ implica em que $U = L^T$.

Demonstração:

por definição

por hipótese $A = LDU$

então $A = A^T$

$A = (LDU)^T$

$\therefore$ $A = L^T D^T U^T$

Além disso, como toda matriz diagonal é simétrica, temos que $D = D^T$. Assim, se $A = A^T$, temos que:

$$LDU = U^T D L^T$$

portanto

$$U = L^T$$

e

$$U^T = (L^T)^T = L$$

C.Q.D.

<u>Teorema 3.2</u>

Se A é positiva definida e $\Delta_k = \Pi_{i=1}^{i=k} d_{ii}$ para toda k = 1, 2, ..., n então, necessariamente $d_{ii} > 0$ para toda i.

Demonstração:

$$\text{Seja } D^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{d_{11}} & & \bigcirc \\ & \ddots & \\ \bigcirc & & \sqrt{d_{nn}} \end{bmatrix}$$

fazendo

$$G = LD^{1/2} \rightarrow G^T = (D^{1/2})^T L^T = D^{1/2} L^T$$

então

$$A = GG^T = LD^{1/2} D^{1/2} L^T = LDL^T = LDU$$

C.Q.D.

Corolário 3.1

A é uma matriz simétrica, positiva definida se, e somente se, pode ser decomposta unicamente em GG^T, onde G é uma matriz triangular inferior com elementos na diagonal principal positivos.

IV. MÉTODOS PROPOSTOS PARA SOLUCIONAR O PROBLEMA

4.1 - Primeiro Método

Este método é baseado no corolário 3.1, que conclui que A é positiva definida e simétrica, se , e somente se, $A = GG^T$, onde G é uma matriz triangular inferior.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & 0 \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \cdots & g_{1n} \\ & g_{22} \cdots & g_{2n} \\ 0 & \ddots & \vdots \\ & & g_{nn} \end{bmatrix}$$

Para se obter um elemento típico da diagonal principal de A, fazemos

$$a_{ii} = \Sigma_{k=1}^{k=i} g_{ik}^2 \quad \text{para toda } i = 1, 2, \ldots, n$$

Se a_{ij} está abaixo da diagonal principal, então

$$a_{ij} = \Sigma_{k=1}^{k=j} g_{ik}\, g_{jk} \quad \text{para toda } i > j$$

Por último

$$a_{ij} = a_{ji} \quad \text{para toda} \quad i < j$$

Se calculamos os elementos de G abaixo da diagonal na primeira coluna e, em seguida, os da segunda coluna e assim sucessivamente, podemos fatorizar toda a matriz G em forma iterativa. Isto pode ser obtido por meio do algoritmo de Cholesky, comumente conhecido como o método da raíz quadrada para se fatorizar uma matriz positiva definida. Computacionalmente, o método é o seguinte:

```
      G(1,1) =  SQRT(A(1,1))
      DO  1Ø  I = 2, N
1Ø    G(I,1) = A(I,1)/G(1,1)
      DO  2Ø  5 = 2, N
      JN1 = J-1
      S = Ø.Ø
      DO  3Ø  K = 1, JN1
3Ø    S = S + G(J,K)* G(J,K)
      G(J,J) = SQRT (A(J,J) - S)
      IF(J-N)  35, 2Ø, 2Ø
```

```
35    JM1 = J + 1
      DO  4Ø  I = JM1, N
      S = Ø.Ø
      OO  5Ø  K = 1, JN1
5Ø    S = S + G(I,K)* G(J,K)
      G(I,J) = (A(I,J) - S)/G(J,J)
4Ø    CONTINUE
2Ø    CONTINUE
```

Note-se bem que não se levam em consideração os elementos de A acima da diagonal principal. Também chamamos a atenção para o fato de que esta metodologia de fatorização somente é possível para matrizes simétricas, positivas definidas. Quando se trata de fatorizar uma matriz que não seja positiva definida por meio deste algoritmo, se nos apresentam qualquer um dos casos a seguir: (1) raízes quadradas de números negativos (no primeiro somatório, representado pelo comando DO 3Ø K = 1, JN1), e (2) divisão por zero (quando G(J,J) = Ø).

Um possível critério que propomos para determinar a natureza de A consiste em iniciar a fatorização anterior, parando somente quando suceda um dos casos anteriores, já que, neste caso, a matriz em estudo não é positiva definida. Em compensação, se o algoritmo chega a seu fim, a matriz em questão é, então, positiva definida.

O método anteriormente descrito identifica matrizes positivas definidas; resta, portanto, discutir como proceder quando a matriz em estudo é negativa definida. Primeiramente, temos de saber que tipo de matriz estamos tratando de identificar (positiva ou negativa definida), antes de iniciar o algoritmo. Isto pode ser feito comparando a_{11} com zero. Se a_{11} é maior do que zero, procuramos identificar a matriz A como positiva definida, já que não pode ser negativa definida. Se a_{11} é menor do que zero, procuramos, então, saber se A é negativa definida, pois, nesse caso, não poderia ser positiva definida, como se demonstra nas propriedades fundamentais da álgebra de matrizes 2.6, 2.7 e 2.8.

Até aqui, se a_{11} é maior do que zero não temos problemas, porém, se a_{11} é menor do que zero, o algoritmo parará no primeiro comando computacional. Portanto, existe a necessidade de se relacionar numa matriz positiva definida com uma matriz negativa definida. Para tal, demonstraremos o seguinte teorema:

Teorema 4.1

Seja A uma matriz de ordem n, simétrica e positiva definida. Então $B = -A$, é simétrica e negativa definida.

Demonstração:

por construção

$$b_{ij} = -a_{ij}$$

e

$$b_{ji} = -a_{ji}$$

pela hipótese

$$a_{ij} = a_{ji}$$

e

$$-a_{ij} = -a_{ji}$$

então

$$b_{ij} = b_{ji}$$

$\therefore$ a matriz B é simétrica.

Seja A_k (ou B_k), $k = 1, 2, \ldots, n$ a submatriz formada pelas primeiras k linhas e k colunas de A ou B. Desse modo, pela hipótese $\Delta_k = \det(A_k) > 0$ para toda $k = 1, 2, \ldots, n$. Podemos considerar a submatriz B_k formada ao multiplicar A_k por um escalar $\lambda = -1$. Pela propriedade 2.5, temos que

$$\det(B_k) = (-1)^k \det(A_k)$$

por definição

$$\det(A_k) > 0 \quad \text{para toda } k = 1, 2, \ldots, n$$

então

$$\det(B_k) < 0 \quad \text{para toda } k = 1, 3, 5, \ldots$$

e

$$\det(B_k) > 0 \quad \text{para toda } k = 2, 4, 6, \ldots$$

então

$$\det(B_1) < 0;\ \det(B_2) > 0;\ \det(B_3) < 0;\ \det(B_4) > 0;\ \ldots$$

$\therefore$ B é negativa definida.

A demonstração da condição de suficiência deste teorema é trivial e decorre da demonstração da condição de necessidade do mesmo.

C.Q.D.

4.2 - Segundo Método

Hildebrand (7) considera o problema de determinar se uma forma quadrática é ou não é positiva definida, sem ter que reduzí-la a sua forma canônica, nem ter de avaliar seus valores característicos. Ele demonstrou a propriedade 2.6, ou seja, que A é positiva definida se, e somente se, $\Delta_k > 0$ para toda $k = 1, 2, \ldots, n$. Portanto, este método consiste em avaliar os menores principais e com estes determinar a natureza de A. Seguindo a metodologia geral para a decomposição LU, podemos utilizá-la para avaliar estes menores eficientemente, pois $\det(A) = \det(L)\det(U)$. No entanto, se $\det(L) = 1$, implica em que $\det(A) = \det(U)$. Este é o conceito no qual Hildebrand se apóia para avaliar os menores principais, pois o determinante principal k de A e de U são iguais. Mais ainda, é igual ao produto dos elementos da diagonal de U, ou seja

$$\Delta_k = \Sigma_{i=1}^{i=k} u_{i,i}$$

O anteriormente exposto pode ser facilmente demonstrado, pois o determinante de uma matriz não se altera, se a uma linha sua somamos outra linha

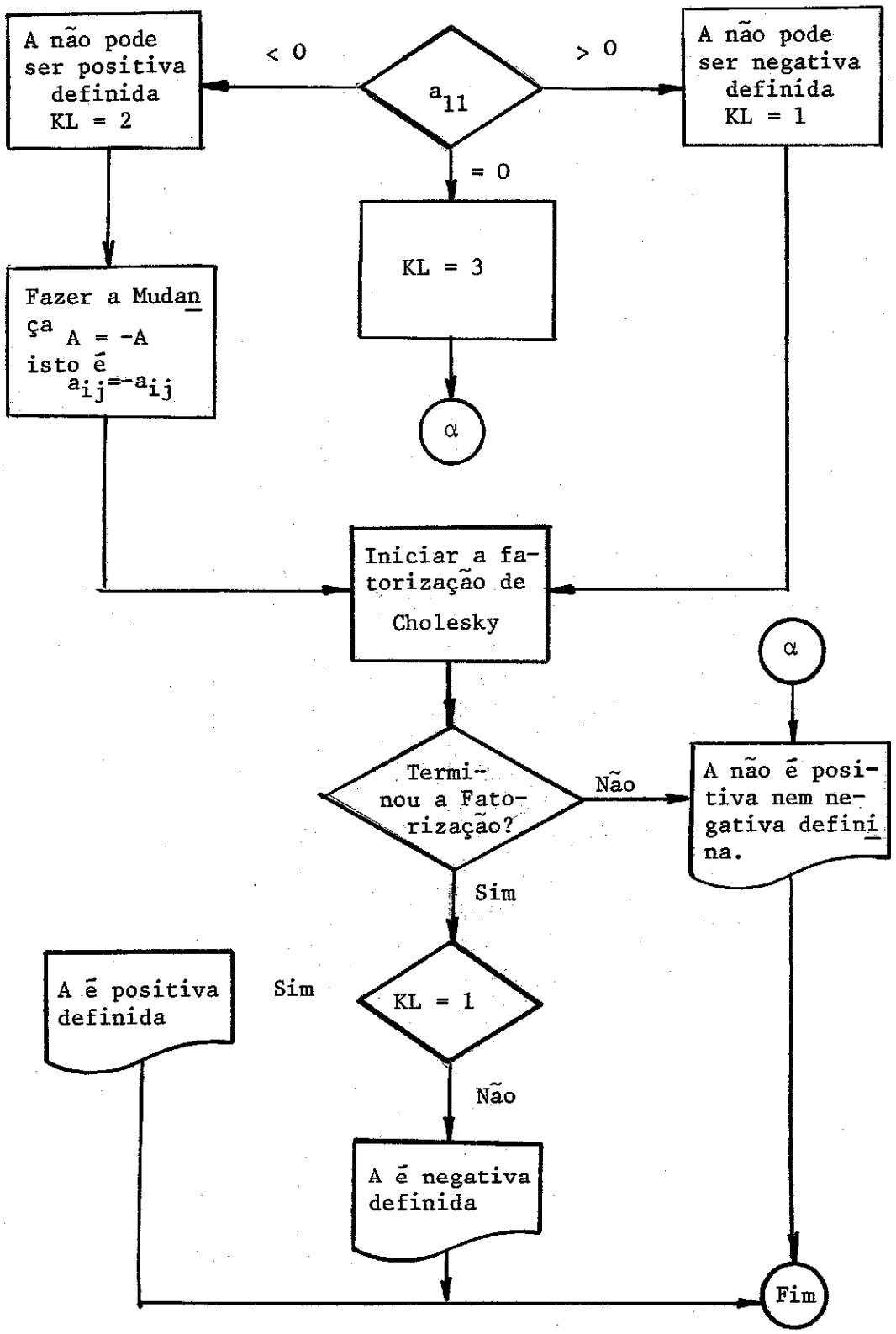

Fig. 4.1 - Diagrama de Fluxo do primeiro método proposto.

da mesma matriz, multiplicada esta última linha por uma constante. (Propriedade 2.4). Neste princípio está baseado o método de eliminação de Grauss para obter U.

Seja $E_i(\lambda|j)$ a matriz resultante da operação de somar-lhe à linha i, λ vezes a linha $j(j \neq i)$, quando se pre-multiplique à matriz A. Esta matriz elemental tem a seguinte configuração:

$$E_i(\lambda|j) = \begin{array}{c} \\ \\ i \\ \\ \\ j \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & i & & & j & \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccccc} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & \lambda & & & 1 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{array}\right] \end{array}$$

Hadley (6) demonstra que:

$$E_i^{-1}(\lambda|j) = E_i(-\lambda|j)$$

Agora, se efetuamos repetidamente este tipo de transformações elementais podemos eventualmente transformar A em U, isto é:

$$U = (E_n, E_{n-1}, \ldots, E_2, E_1)\ A = \underline{E}A$$

onde

$$E_i = \Sigma E_i(\lambda|j) \quad \text{para toda } e_{ij} \text{ com } i \neq j.$$

Pre-multiplicando ambos os membros por $\underline{E}^{-1}$, temos

$$A = \underline{E}^{-1}U = LU$$

onde

$$L = (E_n, E_{n-1}, \ldots, E_2, E_1,)^{-1} = E_1^{-1}, E_2^{-1}, \ldots, E_{n-1}^{-1}, E_n^{-1}$$

No entanto, se definimos

$$F_i = E_i^{-1}, \text{ então } L = F_1, F_2, \ldots, F_{n-1}, F_n$$

sendo esta a representação final que procuramos, pois os elementos da diagonal de cada E_i são unitários. Devemos notar que $E_i(-\lambda|j) \neq -E_i(\lambda|j)$, pois não devem ser alterados os elementos da diagonal.

Fox (5), por sua vez, demonstra que o elemento m_{ij} da matriz L é dado por

$$m_{ij} = a_{ij}^{(k)}/a_{jj}^{(k)}$$

onde o supraíndice k indica que a matriz original A tem-se transformado (k-1) vezes mediante operações elementais, cada uma consistindo em colocar zeros nos elementos da coluna j abaixo da diagonal principal. Assim,

por identidade $A^{(1)} = A$

$$A^{(k+1)} = E_k \Delta^{(k)}$$

$$E_k = \Pi_{i=1}^{i=k} E_{k-i}$$

por indução

$$U = A^{(n)}$$

Ainda que os elementos da diagonal de L sejam fixados arbitrariamente como unitários, a matriz U é única, existindo, porém, mais de uma forma de se chegar a ela. Fox menciona e analiza os métodos de eliminação de Gauss, de Jordan e de Aitken; assim como os métodos de eliminação compacta de Doolittle, Crout, Banachiewicz e Cholesky. Em todos eles é necessário considerar somente os elementos da diagonal principal da matriz triangular, comforme vai-se formando, pois, quando não satisfaça determinadas condições necessárias (sinais dos menores principais), pode-se a apriori truncar o processo. Portanto, para todos os métodos citados, aplica-se, de modo geral, o seguinte diagrama de Fluxo:

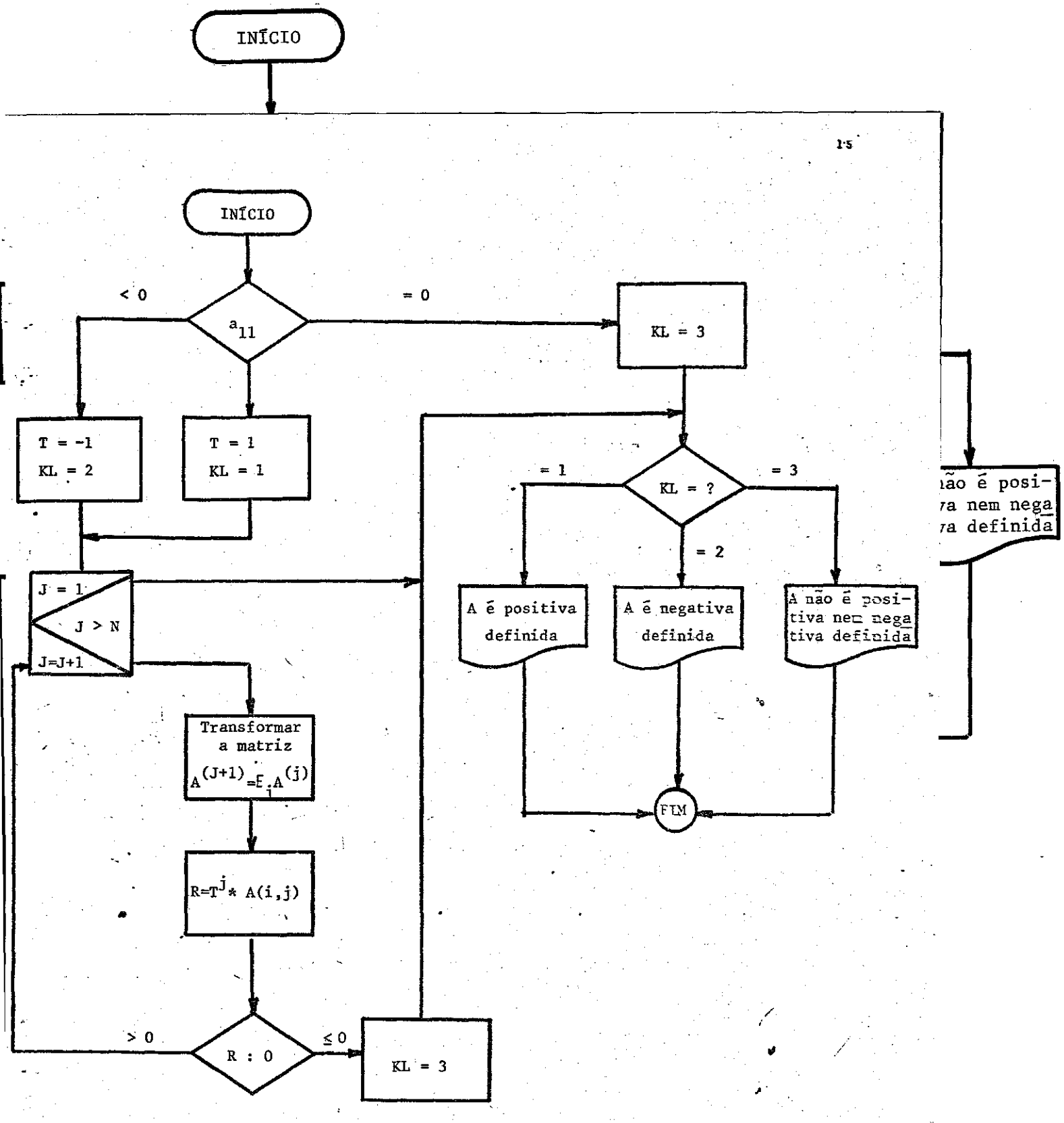

Fig. 4.2 - Diagrama de Fluxo do segundo método proposto.

4.3 - Terceiro Método

Este último método que temos a propor fundamenta-se no método de eliminação de Gauss e é bastante conhecido na literatura como o método de "Condensação pivotal" para o cálculo de detrminantes. Convém aqui notar que o método e sua utilização são bastante difundidos para o fim específico do cálculo de determinantes, única e exclusivamente. Entretanto, uma das contribuições desta pesquisa, consiste em mostrar que, com ligeiras modificações, o método pode ser utilizado para resolver o problema de que aqui tratamos.

O método de condensação pivotal, para o cálculo de determinantes, consiste na transformação seqüencial de uma matriz quadrada, real, de ordem n — associada ao determinante em questão — numa matriz triangular, por meio de sucessivas operações elementais de linha ou de coluna.

Podemos considerar como o método da "força bruta" — para resolver o problema abordado nesta pesquisa — como o que consiste em avaliar os n determinantes principais associados aos n menores principais da matriz Hessiana e, dependendo dos sinais algébricos de tais menores, decidir-se sobre a natureza do ponto estacionário em questão. É interessante observar que o que realmente interessa é o sinal algébrico dos menores e não seu valor absoluto.

Quando da aplicação do método de condensação pivotal para a obtenção do valor de uma determinante, a série de escalares que pré-multiplicam o determinante é o valor dos menores associados a essa matriz. Tome-se por exemplo a seguinte matriz A, real, de ordem 2.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$

aplicando o método de condensação pivotal, temos:

$$\det(A) = a_{11}\det(A') = a_{11}\det\begin{pmatrix} 1 & \dfrac{a_{12}}{a_{12}} \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{12}}{a_{11}} \cdot a_{21} \end{pmatrix}$$

e pela segunda transformação, temos:

$$\det(A) = a_{11}\left(a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\, a_{21}\right)\det(A'')$$

$$= a_{11}\left(a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\, a_{21}\right)\det\begin{pmatrix} 1 & \dfrac{a_{12}}{a_{11}} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

onde

$$\det(A) = a_{11}\left(a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\, a_{21}\right)$$

$$= a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

No entanto, antes de obtermos o valor final do det(A), na seqüência que o define

$$\det(A) = a_{11}\left(a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\, a_{21}\right)$$

temos os valores dos dois menores principais associados à matriz A, tanto em valor absoluto como em sinal algébrico, isto é:

$$\Delta_1 = a_{11}$$

$$\Delta_2 = a_{11}\left(a_{22} - \frac{a_{12}}{a_{11}}\, a_{21}\right) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

Portanto, o k-ésimo menor principal de uma matriz, transformada nesta forma, corresponde à multiplicação seqüencial dos k primeiros valores (escalares) da seqüência que pré-multiplica o determinante associado à matriz Hessiana. Mais ainda, por indução, pode-se provar a validez do método para matrizes quadradas de ordem $n > 2$.

V. AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DOS MÉTODOS PROPOSTOS COM OS EXISTENTES

Os principais critérios que podem ser levados em consideração, quando se trata de comparar a eficiência de métoods computacionais alternativos, são os seguintes:

1. Rapidez em chegar à solução procurada. Geralmente, considera-se o número de operações aritméticas como um fator inversamente proporcional à rapidez do método.
2. Precisão dos resultados obtidos.
3. Mínima capacidade de armazenamento requerida para se efetuarem as operações.

O problema abordado nesta pesquisa não requer resultados finais precisos, mas apenas de seu sinal algébrico. Portanto, podemos considerar este fator como constante para todos os métodos.

Toda matriz Hessiana é simétrica, de tal forma que o problema de capacidade de memória se reduz enormemente e, a não ser que tratemos de um problema de otimização com muitas variáveis, podemos considerá-lo como um fator constante para todos os métodos.

Ainda que os métodos propostos possam ser truncados antes de se efetuar a transformação completa da matriz Hessiana numa matriz triangular, consideraremos para efeito da análise operacional, o número de operações elementais que cada método deve realizar para se obter uma transformação completa, isto é, qual o número máximo de operações necessárias para se triangularizar uma matriz quadrada de ordem n.

Iniciaremos avaliando o segundo método, no qual foi considerada a eliminação compacta de Gauss para se efetuar a decomposição LU, como recomenda

Fox (5), pág 181.

Os elementos da primeira linha de U são os os mesmos da primeira linha de A e não requerem operação elemental alguma. Os (n-1) elementos restantes da primeira coluna de L, são obtidos com as seguintes equações:

$$m_{i1}u_{i1} = a_{i1}$$

de tal forma que são necessárias uma divisão $(1/u_{11})$ e (n-1) multiplicações. Os (n-1) elementos da seguinte linha de U podem ser calculados com a equação:

$$m_{i1}u_{1j} + u_{2j} = a_{2j}$$

necessitando-se, para cada linha, de uma multiplicação e de uma soma.

Os (n-2) elementos da segunda coluna de L procedem de:

$$m_{i1}u_{12} + m_{i2}u_{22} = a_{i2}$$

necessitando-se de duas multiplicações, uma soma e uma divisão para toda a coluna.

Continuando nesta forma, podemos ver que, para se obter L são necessários:

n	divisões
$\Sigma_{k=1}^{k=n} k(n-k)$	multiplicações
$\Sigma_{k=1}^{k=n} (k-1)(n-k)$	Somas

ao passo que, para calcular U, são necessários:

$\Sigma_{k=1}^{k=n} k(n-k)$	multiplicações

e

$\Sigma_{k=1}^{k=n} k(n-k)$	Somas.

Empregando as seguintes operações algébricas bem conhecidas:

$$\Sigma_{k=1}^{k=n} k = n(n+1)/2$$

e

$$\Sigma_{k=1}^{k=n} k^2 = n(n+1)(2n+1)/6$$

chegamos ao total de operações necessárias para a decomposição:

n	divisões
$\frac{1}{3} n(n^2 - 1)$	multiplicações

e

$\frac{1}{3} n^3 - \frac{1}{2} n^2 + \frac{1}{6} n$	Somas

Note-se que o método de Gauss funciona também para matrizes não-simétricas, donde podemos tirar alguma vantagem, devido ao fato de que, para o problema em questão, só trabalhamos com matrizes simétricas. Hildebrand (7) demonstra que, para matrizes simétricas, a seguinte relação se cumpre:

$$m_{ij}\, u_{jj} = u_{ji}$$

e que pelo mesmo o número de operações se reduz a um fator próximo a 2.

Isaacson e Keller (9), bem como Fox (4), concluem que para o método de Cholesky são necessários

n	divisões
$\frac{1}{6} n^3 + \frac{1}{2} n^2 - \frac{2}{3} n$	multiplicações

e

$\frac{1}{6} n^3 - \frac{1}{6} n$	Somas
n	raízes quadradas

Um dos métodos mais eficientes para se identificarem matrizes é calcular os valores característicos de A, mediante o método de Housenholder combinado com o teorema de Gershgorin. Para este algoritmo já reportado à literatura são necessárias:

para tridiagonalizar

$\frac{2}{3} n^3$	multiplicações
$\frac{1}{2} (n-2)(n-1)$	raízes quadradas

e para cumprir com o teorema de Wilkinson:

$3(n-1)$	multiplicações
$2(n-1) + 1$	Somas.

Para avaliarmos a eficiência do terceiro método proposto, precisamos calcular as operações necessárias à transformação de uma matriz quadrada real, de ordem n, numa matriz triangular superior e diagonal unitária, para se obter a seqüência de escalares que pré-multiplica a matriz final de ordem n e diagonal unitária (cujo determinante é 1). As operações necessárias são, segundo Fox (4) pág. 176,

n	divisões
$\frac{1}{3} n(n^2 - 1)$	multiplicações
$\frac{1}{3} n^3 - \frac{1}{2} n^2 + \frac{1}{6} n$	somas

o que corresponde exatamente ao mesmo número de operações de que o método de decomposição LU precisa.

VI. CONCLUSÕES

Se comparamos os métodos de decomposição LU e de Condensação pivotal com os métodos que calculam os valores característicos — e ainda a equação característica — vemos que os primeiros requerem um menor número de operações, em relação aos segundos, como mostramos na tavela V.1.

Método	Divisões	Multiplicações	Somas	Raiz quadrada
Decomposição	n	$\frac{1}{3}\,n(n^2-1)$	$\frac{1}{3}\,n^3-\frac{1}{2}\,n^2+\frac{1}{6}\,n$	
Condensação Pivotal	n	$\frac{1}{3}\,n(n^2-1)$	$\frac{1}{3}\,n^3-\frac{1}{2}\,n^2+\frac{1}{6}\,n$	
cholesky	n	$\frac{1}{6}\,n^3+\frac{1}{2}\,n^2-\frac{2}{3}\,n$	$\frac{1}{6}\,n^3-\frac{1}{6}\,n$	n
Gershgorin & Householder		$\frac{2}{3}\,n^3+3(n-1)$	$2(n-1)+1$	$\frac{1}{2}\,(n-2)(n-1)$

Tabela V.1 - Eficiência Operacional dos Métodos

Entre os métodos propostos, existe uma ligeira dominância dos primeiros em relação aos segundos, não só em termos operacionais, como também quando fosse necessário adaptar o segundo método para matrizes simétricas e o número de operações para ambos fosse aproximadamente o mesmo. O método de cholesky modificado requer menos capacidade de memória, pois só é necessário calcular uma triangularização de matriz.

Fox (4) analiza também os métodos de ortogonalização, tais como o método de Jacobi, Householder e Givens. Estes métodos se fundamentam conceitualmente nos métodos de ortogonalização e afirma que não existe vantagem real sobre os métodos de eliminação, como, por exemplo, a decomposição LU.

Por último, é necessário salientar que, na transformação LDU quando $U = L^T$, pode-se perceber facilmente que não se cumpre a relação $L^{-1} = L^T$, pois L^{-1} é a mesma matriz com os elementos abaixo da diagonal com sinal trocado. Isto é, L^{-1} é uma matriz triangular inferior e L^T é uma matriz triangular superior. Pelo fato de não se cumprir a relação anterior, L não é ortogonal e pelo mesmo os valores característicos de A são iguais aos valores característicos de LDU, que constituem os elementos da matriz diagonal.

JAGG/pct.

BIBLIOGRAFIA

1. CONTE, S.D. Elementary numerical analysis. New York, McGraw-Hill, 1965, 278 p.

2. FADDEEV, D.K. & FADDEEVA, V.N. Computational methods of linear algebra. San Francisco, W.H. Freeman & Co., 1963. 621 p.

3. FORSYTHE, George E. & MOLER, Cleve B. Computer solution of linear algebraic systems. Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall, 1967. 148 p.

4. FOX, L. An Introduction to numerical linear algebra. Oxford, Clarendon Press, 1968. 328 p.

5. FOX, L. & MAYERS, D.F. Computing methods for scientists and engineers. Osford, Clarendon Press, 1968.

6. HADLEY, G. Linear algebra. Reading, MA, ADDISON-WESLEY, 1969. 290 p. (World Student Series Edition).

7. HILDEBRAND, Francis B. Methods of applied mathematics. 2. ed., Englewood Cliffs, N.J., Printice-Hall, 1965. 362 p.

8. HOHN, F.E. Elementary matrix algebra. 2. ed., New York, McMillan, 1964.

9. ISAACSON, E. & KELLER, H.B. Analysis of numerical methods. New York, John Wiley & Sons, 1966. 541 p.

ANEXO 1

Programa de Computação para
Verificação dos Resultados.

```
FILE  5 (KIND=READER)
FILE  6 (KIND=PRINTER)
C*  METODOS DE IDENTIFICACAO RAPIDA DE MATRIZES POSITIVAS
C*  (NEGATIVAS) DEFINIDAS E SUA APLICACAO A OTIMIZACAO
C*  CLASSICA.
C*        PROGRAM CHOLESKY * * * * * * * * * * * * * * * *
      DIMENSION A (20, 20),  G (20, 20)
      IN = 5
      IOUT = 6
      READ (IN, /)  N
      READ (IN, /)  ((A(I,J), J=1,N), I=1,N)
      DO 400  I=1,N
         WRITE (IOUT, 300) N, ( A(I,J), J=1,N)
400   CONTINUE
300   FORMAT ( * (F8.3, 4X) )
      IF ( A(1,1) )  14, 13, 12
12    KL = 1
      GO TO 20
13    KL = 3
      GO TO 50
14    KL = 2
      DO 15  I=1,N
      DO 15  J=1,N
         A (I,J) = -A (I,J)
15    CONTINUE
20    G(1,1) = SQRT ( A(1,1) )
      DO 21  I=2,N
         G (I,1) = A(I,1) / G(1,1)
21    CONTINUE
      DO 22  J=2,N
         JN1 = J-1
         S = 0.0
```

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
NÚCLEO DE COMPUTAÇÃO ELETRÔNICA
AGAPRESS
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
E COMPUTAÇÃO ELETRÔNICA

UNIVERSIDADE NÚCLEO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO NÚCLEO DE COMPUTAÇÃO ELETRÔNICA
AGAPRESS

```
      DO 23  K=1, JN1
          S = S + G(J,K)* G(J,K)
23    CONTINUE
      R = A(J,J) - S
      IF (R)  13, 13, 24
24    G (J,J) = SQRT (R)
      IF (J-N)  35, 22, 22
35    JN1 = J + 1
      DO 40  I=JN1, N
         S = 0.0
         DO 45  K=1, JN1
             S = S + G(I,K)*G(J,K)
45       CONTINUE
         G (I,J)  =  ( A(I,J)-S )  /  G (J,J)
40    CONTINUE
22    CONTINUE
50    GO TO (1,2,3), KL
1     WRITE (IOUT, 4)
4     FORMAT (1H0, 20X, 'A MATRIZ -A- E'' POSITIVA DEFINIDA.')
      GO TO 100
2     WRITE (IOUT, 5)
5     FORMAT (1H0, 20X, 'A MATRIZ E'' NEGATIVA DEFINIDA.')
      GO TO 100
3     WRITE (IOUT, 6)
6     FORMAT (1H0, 20X, 'A MATRIZ -A- NAO E'' POSITIVA NEM',
     *                  ' NEGATIVA DEFINIDA.')
C*---------------- C O M P R O V A C A O ----------------
100   DO 101  J=1,N
         A (J,J) = 0.0
         DO 102  K=1, 5
            A(J,J) = A (J,J) + G (J,K)*G (J,K)
102    CONTINUE
         IF (J-N)  103, 101, 101
103    JN1 = J + 1
```

```
          DO 104  I=JN1, N
             S = 0.0
             DO 106  K=1,J
                S = S + G(I,K)*G(J,K)
106        CONTINUE
             A (I,J) = S
104     CONTINUE
101    CONTINUE
       DO 200  I=1,N
          WRITE (IOUT, 300)  N, ( A(I,J), J=1,N)
200     CONTINUE
       WRITE (IOUT, 600)
600    FORMAT (1H0,//)
       DO 500  I=1,N
          WRITE (IOUT, 300) N, ( G(I,J), J=1,N)
500    CONTINUE
1000   WRITE (IOUT, 1001)
1001   FORMAT (1H0,////,58X, 'FIM DO PROGRAMA')
       CALL EXIT
       END
```

```
NO ERRORS DETECTED.  NUMBER OF CARDS = 87.
COMPILATION TIME = 9 SECONDS ELAPSED.  1.88 SECONDS PROCESSING.
D2 STACK SIZE = 7 WORDS.  FILESIZE = 0 WORDS.  ESTIMATED CORE STOR
TOTAL PROGRAM CODE = 371 WORDS.  ARRAY STORAGE = 800 WORDS.
NUMBER OF PROGRAM SEGMENTS = 7.  NUMBER OF DISK SEGMENTS = 32.
PROGRAM CODE FILE = (CCD23001)CHOLESKY ON PACK, COMPILER COMPILED
```

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
NÚCLEO DE COMPUTAÇÃO ELETRÔNICA
E FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
DE COMPUTAÇÃO ELETRÔNICA

DIR01/JORGE/CHOLESKY/DADOS (03/27/78)

100	3
200	4
300	-1
400	2
500	-1
600	3
700	1
800	2
900	1
1000	6

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
NÚCLEO DE COMPUTAÇÃO ELETRÔNICA

4.000	-1.000	2.000
-1.000	3.000	1.000
2.000	1.000	6.000

A MATRIZ -A- E' POSITIVA DEFINIDA.

4.000	-1.000	2.000
-1.000	3.000	1.000
2.000	1.000	6.000

2.000	0.000	0.000
-0.500	1.658	0.000
1.000	0.905	2.045

FIM DO PROGRAM

ERAL DO RIO DE JANEIRO
IPUTAÇÃO ELETRÔNICA