UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
Helder Geovane Gomes de Lima

ESTIMATIVA DO NÚMERO DE CONDIÇÃO DE UM PRECONDICIONADOR ST PARA PROBLEMAS INDEFINIDOS

Curitiba
2009

Helder Geovane Gomes de Lima

ESTIMATIVA DO NÚMERO DE CONDIÇÃO DE UM PRECONDICIONADOR ST PARA PROBLEMAS INDEFINIDOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Paraná, na área de concentração Matemática, como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Yuan Jin Yun

Curitiba

2009

Dedicatória

Aos meus amados pais, irmãos e namorada.

Agradecimentos

À todos que me apoiaram durante o desenvolvimento deste trabalho, e àqueles que foram infinitamente compreensivos e pacientes comigo, mesmo quando não pude lhes dar a devida atenção.

"Faz-se ciência com os fatos, como se faz uma casa com pedras; mas uma acumulação de fatos não é ciência, assim como um monte de pedras não é uma casa."

Henri Poincaré

Resumo

Neste trabalho, é discutido o uso de precondicionadores para transformar problemas de ponto de sela em problemas cuja matriz seja simétrica e definida positiva. Os precondicionadores estudados baseiam-se na decomposição de matrizes como produto de uma matriz simétrica por uma triangular (decomposição ST). Sendo assim, em uma parte inicial são mostrados alguns resultados existentes sobre este tipo decomposição, no caso em que S é definida positiva e também na situação em que T possui apenas o valor 1 em todas as entradas de sua diagonal. Inclui-se ainda um estudo das propriedades espectrais de três precondicionadores ST, bem como estimativas para o número de condição dos sistemas que resultam ao se fazer tais precondicionamentos. Posteriormente, estuda-se um outro precondicionador, também baseado na decomposição ST, que tem como casos particulares dois dos primeiros precondicionadores apresentados. A grande contribuição deste trabalho é a obtenção de novas estimativas para o número de condição de sistemas obtidos quando se aplica este precondicionador a problemas indefinidos. São estabelecidas quatro diferentes estimativas para este número de condição, uma delas baseada em um problema de autovalor quadrado.

Palavras-chave: Decomposição ST, precondicionador ST, problemas indefinidos, número de condição.

Abstract

In this work, it is discussed the use of preconditioners to transform saddle point problems to problems whose matrix is symmetric and positive defined. The preconditioners studied are based on the decomposition of matrices as a product of a symmetric by a triangular matrix (ST decomposition). Thus, in an initial part of the work it is shown some available results on such decomposition, in the case where S is positive defined and also in the situation where T has only the value 1 in each entry of its diagonal. It is also included a study of spectral properties of three ST preconditioners, as well as estimates for the condition number of the systems that result when it is made such preconditioning. Subsequently, it is studied another preconditioner, also based on the ST decomposition, which has as particular cases two of the first preconditioners presented. The great contribution of this work is the obtainment of new estimates for the condition number of the system obtained when the new preconditioner is applied to undefined problems. Are set four different estimates for this condition number, one of them based on a quadratic eigenvalue problem.
Keywords: ST decomposition, ST preconditioner, indefinite problems, condition number.

Sumário

Lista de Figuras

Capítulo 1

Introdução

1.1 Estrutura da dissertação

Neste trabalho, são abordados alguns precondicionadores para problemas indefinidos, sendo discutidas certas propriedades espectrais destes precondicionadores, e deduzidas algumas estimativas para o número de condição dos problemas precondicionados.

Este capítulo introdutório inclui determinados conceitos básicos que estão presentes no decorrer de todo o trabalho. Aqui também encontram-se alguns teoremas sobre a decomposição ST, que permite decompor matrizes como o produto de uma matriz simétrica por uma triangular.

Nos capítulos 2, 3 e 4 são mostrados três precondicionadores existentes, baseados na decomposição ST, que podem ser aplicados aos sistemas cuja forma seja como em 1.6. No decorrer destes capítulos, também são apresentados fatos conhecidos sobre o espectro dos sistemas precondicionados resultantes, bem como estimativas já existentes para o novo número de condição.

No capítulo 5, tem início a parte mais relevante deste trabalho, na qual um novo precondicionador é apresentado e são deduzidas três estimativas para o número de condição do sistema que resulta do uso deste novo precondicionador.

Como uma continuação do capítulo que o precede, o capítulo 6 apresenta outra grande contribuição: depois de mostrar algumas propriedades espectrais do novo precondicionador, é utilizado um problema de autovalor quadrado para obter uma nova estimativa para o número de condição do sistema que resulta ao se fazer o precondicionamento.

Finalmente, no capítulo 7 são exibidos alguns experimentos numéricos e em seguida são feitas algumas considerações finais.

1.2 Decomposição ST

No ano de 2002, Golub e Yuan demonstraram alguns resultados garantindo que toda matriz com certas propriedades pode ser decomposta como o produto de uma matriz simétrica por uma matriz triangular [GY02]. Uma vez que esta decomposição não é única, se forem feitas as escolhas adequadas, pode-se obter uma decomposição estável.

Um dos motivos para o interesse nesta decomposição, é que ela permite trocar uma matriz A sem propriedades interessantes, pelo produto de duas matrizes (S e T), cujas características são bastante favoráveis à implementação de certos algoritmos. Deste modo, a resolução numérica de problemas que estejam de alguma forma associados a matriz A, pode ser feita utilizando-se de algoritmos que explorem a positividade de S ou a triangularidade de T, obtendo assim maior eficiência.

Alguns algoritmos e também vários experimentos que mostram a estabilidade numérica deste tipo de decomposição podem ser encontrados nos artigos [GY02, San02, SY03, CY06]. Os principais teoremas relacionados a estas decomposições ST são apresentados a seguir.

Teorema 1.1. *Se A é uma matriz $n \times n$ não-simétrica e não-singular, cujas submatrizes principais são também não-singulares, então existe alguma matriz simétrica S e ao menos uma matriz triangular T, com diagonal unitária, tais que $A = ST$.*

Demonstração. Ver [GY02]. □

Teorema 1.2. *Se A é uma matriz $n \times n$ não-simétrica e não-singular, cujas submatrizes principais são também não-singulares, então existe alguma matriz triangular T, com diagonal unitária, e ao menos uma matriz simétrica S tais que $A = TS$.*

Demonstração. A prova pode ser feita por indução na dimensão n da matriz A, seguindo um roteiro análogo àquele presente em [GY02], na demonstração do teorema anterior:

Se $n = 2$, tem-se:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

Para que o resultado se verifique neste caso, é necessário e suficiente que se tenha

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t_{21} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ t_{21}s_{11} + s_{12} & t_{21}s_{12} + s_{22} \end{pmatrix}, \tag{1.2}$$

que é possível, bastando tomar $s_{11} = a_{11}$ e $s_{12} = a_{12}$, pois neste caso $t_{21} = (a_{21} - a_{12})/a_{11}$ e $s_{22} = a_{22} - t_{21}s_{12}$ garantem as demais igualdades. Note-se que $a_{11} \neq 0$, pois é uma das submatrizes principais de A, que é não-singular por hipótese. Além disso, t_{21} só se anularia se A fosse simétrica, mas para as matrizes simétricas o resultado vale trivialmente uma vez que $A = I_nA = AI_n$.

Suponha-se que o resultado é válido para $n = k$. Para que ele continue valendo para uma matriz A de ordem $(k+1) \times (k+1)$, será preciso que se verifique uma igualdade da seguinte forma

$$\left(\begin{array}{c|c} a_{11} & a_{12} \\ \hline a_{21} & a_{22} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} t_{11} & 0_{k\times 1} \\ \hline t_{21} & 1 \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{c|c} s_{11} & s_{12} \\ \hline s_{12}^\top & s_{22} \end{array}\right)$$
$$= \left(\begin{array}{c|c} t_{11}s_{11} & t_{11}s_{12} \\ \hline t_{21}s_{11} + s_{12}^\top & t_{21}s_{12} + s_{22} \end{array}\right) \tag{1.3}$$

onde, desta vez, a_{11}, t_{11} e s_{11} são matrizes de ordem $k \times k$, a_{12} e s_{12} são matrizes $k \times 1$, a_{21} e t_{21} são matrizes $1 \times k$ e a_{22} e s_{22} são números. Na equação acima, t_{11} tem cada entrada da de sua diagonal igual a 1, e s_{11} é simétrica.

Como a_{11} é uma matriz $k \times k$, e por hipótese é não-singular, a hipótese de indução implica que existem t_{11} e s_{11}, com t_{11} triangular inferior e s_{11} simétrica, tais que $a_{11} = t_{11}s_{11}$. Além disso, t_{11} e s_{11} são não-singulares, pois a_{11} não é singular. Logo, $s_{12} = t_{11}^{-1}a_{12}$. Do mesmo modo, $t_{21} = (a_{21} - s_{12}^\top)s_{11}^{-1}$ e, finalmente, $s_{22} = a_{22} - t_{21}s_{12}$.

Desta maneira, mostrou-se que a decomposição $A = TS$ nas condições do teorema é possível para uma matriz quadrada A de dimensão arbitrária. □

Teorema 1.3. *Se A é uma matriz $n \times n$ não-simétrica e não-singular, cujas submatrizes principais são também não-singulares, então existe alguma matriz triangular T, e ao menos uma matriz simétrica e definida positiva S tais que $A = TS$.*

Demonstração. Ver [GY02]. □

Teorema 1.4. *Se A é uma matriz $n \times n$ não-simétrica e não-singular, cujas submatrizes principais são também não-singulares, então existe alguma matriz simétrica e definida positiva S, e ao menos uma matriz triangular T tais que $A = ST$.*

Demonstração. Ver [GY02].

O resultado pode ser provado usando indução, de forma inteiramente análoga àquela apresentada em [GY02] na demonstração do teorema anterior. Para mostrar que S é simétrica e positiva definida, é suficiente provar que ela tem uma decomposição $S = LL^\top$, sendo L uma matriz triangular inferior não-singular.

No caso de uma matriz quadrada A de dimensão $n = 1$, pode-se tomar simplesmente $t_{11} = \operatorname{sign}(a_{11})$ e $S = |a_{11}|$, pois neste caso, T será uma matriz triangular e S será simétrica e definida positiva.

Já no caso de $n = 2$, a decomposição é possível se, e somente se,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{12} & s_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ 0 & t_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11}t_{11} & s_{11}t_{12} + s_{12}t_{22} \\ s_{12}t_{11} & s_{12}t_{12} + s_{22}t_{22} \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

Sendo A não-singular, para que ocorra $A = ST$, é preciso que cada um dos fatores seja não-singular. Em particular, nenhum dos elementos da diagonal de T pode ser nulo. Uma forma de se obter tal diagonal sem elementos nulos é fixar $t_{11} = a_{11}$ e $t_{22} = \det A$, pois por hipótese estes valores são diferentes de zero. Com esta escolha, resulta que para se ter a igualdade é necessário que $s_{11} = 1$ e também $s_{12} = s_{21} = a_{21}/a_{11}$. Consequentemente, deve-se ter $t_{21} = a_{12} - a_{21} \det A/a_{11}$ e portanto $s_{22} = 1/a_{11} + (a_{21}/a_{11})^2$.

Se o teorema é válido para matrizes quadradas de ordem $n = k$, e A é uma matriz de ordem $(k+1) \times (k+1)$ nas condições do enunciado, para que exista uma decomposição $A = ST$, com $S = LL^\top$, será preciso que se verifique uma igualdade da seguinte forma

$$\left(\begin{array}{c|c} a_{11} & a_{12} \\ \hline a_{21} & a_{22} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} l_{11} & 0_{k\times 1} \\ \hline l_{21} & l_{22} \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{c|c} l_{11}^\top & l_{21}^\top \\ \hline 0_{1\times k} & l_{22} \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{c|c} t_{11} & t_{12} \\ \hline 0_{1\times k} & t_{22} \end{array}\right)$$
$$= \left(\begin{array}{c|c} l_{11}l_{11}^\top t_{11} & l_{11}(l_{11}^\top t_{12} + t_{22}l_{21}^\top) \\ \hline l_{21}l_{11}^\top t_{11} & l_{21}l_{11}^\top t_{12} + t_{22}(l_{21}l_{21}^\top + l_{22}^2) \end{array}\right) \tag{1.5}$$

onde, a_{11}, l_{11} e t_{11} são matrizes de ordem $k \times k$, a_{12} e t_{12} são matrizes $k \times 1$, a_{21} e l_{21} são matrizes $1 \times k$, enquanto a_{11} e l_{22} são números.

A igualdade acima recai em quatro igualdades, que correspondem aos blocos nos quais a matriz A foi dividida.

A primeira delas tem solução, pois pela hipótese de indução, existem l_{11} e t_{11}, com t_{11} e $l_{11}^\top$ sendo matrizes triangulares inferiores, tais que $a_{11} = l_{11}l_{11}^\top t_{11}$. Como os blocos l_{11} e t_{11} são não-singulares, tem-se como consequência que $l_{21} = a_{21}t_{11}^{-1}l_{11}^{-\top}$.

Deve-se ter ainda $t_{12} = l_{11}^{-\top}(l_{11}^{-1}a_{12} - t_{22}l_{21}^\top)$ e também $l_{22} = \sqrt{\frac{a_{22}-l_{21}l_{11}^{-1}a_{12}}{t_{22}}}$, consequentemente t_{22} não pode ser nulo e deve ser tal que $\frac{a_{22}-l_{21}l_{11}^{-1}a_{12}}{t_{22}} \geq 0$.

Para que $S = LL^\top$ seja definida positiva, basta que $a_{22} - l_{21}l_{11}^{-1}a_{12} =$

$= a_{22} - a_{21}a_{11}^{-1}a_{12} \neq 0$. Para mostrar isto, note que a matriz

$$\bar{A} = \left(\begin{array}{c|c} a_{11}^{-1} & 0_{k\times 1} \\ \hline -a_{21}a_{11}^{-1} & 1 \end{array}\right)$$

é não-singular, e consequentemente

$$\bar{A}A = \left(\begin{array}{c|c} I_{k\times k} & a_{11}^{-1}a_{12} \\ \hline 0_{1\times k} & a_{22} - a_{21}a_{11}^{-1}a_{12} \end{array}\right)$$

também é não-singular.

Em particular, tem-se $a_{22} - a_{21}a_{11}^{-1}a_{12} \neq 0$, e deste modo, $l_{22} > 0$ e S é definida positiva.

□

Teorema 1.5. *Se A é uma matriz $n \times n$ não-simétrica e não-singular, cujas submatrizes principais são também não-singulares, então existe alguma matriz simétrica e definida positiva S, e ao menos uma matriz triangular T tais que $TA = S = LL^\top$ ou $AT = S = LL^\top$.*

Demonstração. Ver [GY02]. □

Também no artigo [GY02], é derivado um algoritmo para se decompor uma matriz não-singular e não-simétrica A como o produto de uma matriz triangular inferior T por uma matriz simétrica e definida positiva S. Uma continuação do que foi apresentado neste trabalho é vista nas aplicações descritas em [WGCY08].

1.3 Problemas indefinidos

Conforme o já citado [GY02], e também [WGCY08], a decomposição ST tem entre suas aplicações a criação de precondicionadores para a resolução do problema de ponto de sela, que é um sistema indefinido e simétrico, que toma a forma

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}, \tag{1.6}$$

onde $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ é uma matriz simétrica, $B \in \mathbb{R}^{n\times m}$ e $m < n$. Durante todo o trabalho, será considerado este tipo de problema, cuja matriz M associada é indefinida e tem a forma

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix},$$

Este problema aparece em vários contextos, incluindo dinâmica de fluidos computacional [Glo84], otimização com restrições [PEGW81, Wri97], economia [KJAU58], redes e circuitos elétricos [Ber86], eletromagnetismo [Bos98], finanças [Mar91], reconstrução de imagens [Hal79], registro de imagens [HM04], interpolação de dados dispersos [LNW02], elasticidade linear [Bra01], geração de malhas para computação gráfica [LdSS+01], aproximações de equações diferenciais parciais por elementos finitos mistos [Bre74, ES96, ESW97], redução de ordem de modelos para sistemas dinâmicos [Sty06], controle ótimo [BS01], problemas de identificação de parâmetros [HA01], e problemas de mínimos quadrados generalizados, com restrições e com pesos [Bjö96, GVL96, Yua93, Yua96].

Observando-se que para a resolução de problemas simétricos e definidos positivos existem vários métodos eficientes (como a decomposição de Cholesky, o método dos gradientes conjugados, ou mesmo o método dos gradientes conjugados precondicionado e também o método multigrade algébrico), é interessante tentar transformar um sistema não-simétrico (ou simétrico, mas indefinido) em outro que lhe seja equivalente, mas que tenha propriedades boas como a simetria e a positividade.

Para se alcançar este objetivo, a ideia é multiplicar ambos os membros do sistema original por uma matriz T, e deste modo precondicionar o sistema. Fazendo isso, o sistema resultante tem a seguinte forma:

$$TM \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

A escolha de T é feita com o objetivo de conseguir que a matriz $N = TM$ correspondente ao novo sistema precondicionado tenha melhores propriedades numéricas do que a matriz M original, por exemplo buscando que N seja definida positiva, ou que seu número de condição $\kappa(N)$ seja menor do que o número de condição $\kappa(M)$ do sistema original.

Capítulo 2

Precondicionador 1

Neste capítulo, faz-se o estudo do primeiro dos três precondicionadores apresentados em [WGCY08], mostrando algumas de suas propriedades espectrais e a estimativa existente para o número de condição do sistema resultante deste precondicionamento.

O precondicionador é construído da seguinte maneira: Dado $\beta > 0$, considere a matriz triangular

$$T_1 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ (\beta+1)B^\top A^{-1} & -\beta I \end{pmatrix}.$$

Deste modo

$$N_1 = T_1 M = \begin{pmatrix} I & 0 \\ (\beta+1)B^\top A^{-1} & -\beta I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & (\beta+1)B^\top A^{-1} B \end{pmatrix}.$$

e o sistema resultante é

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & (\beta+1)B^\top A^{-1} B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ (\beta+1)B^\top A^{-1} p - \beta q \end{pmatrix}.$$

Conforme será mostrado na próxima seção, a matriz N_1 associada a este sistema é simétrica e definida positiva.

2.1 Propriedades espectrais

No artigo [WGCY08], demonstra-se que além de serem todos positivos, os autovalores da nova matriz N_1 estão relacionados aos autovalores do bloco A. Os detalhes aparecem nos lemas a seguir.

Lema 2.1. *Se a matriz A em 1.6 for simétrica e definida positiva, e B tiver posto completo, então para todo $\beta > 0$ a matriz $N_1 = T_1 M$ é simétrica e definida positiva.*

Demonstração. Ver [WGCY08]. Considerando que A é simétrica e definida positiva, o mesmo vale para a matriz $B^\top A^{-1} B$.

De fato, tem-se $x^\top(B^\top A^{-1}B)x = (Bx)^\top A^{-1}(Bx)$. Como B tem posto completo, Bx é não-nulo quando $x \neq 0$. Além disso, se $\lambda > 0$ é um autovalor de A, $\lambda^{-1} > 0$ é um autovalor de A^{-1}. Assim, como os autovalores de A^{-1} são positivos, esta matriz simétrica é definida positiva e consequentemente, $(Bx)^\top A^{-1}(Bx) > 0$, para todo x não-nulo.

Logo, pode-se escrever

$$\begin{aligned} N_1 &= \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & (\beta+1)B^\top A^{-1}B \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A^{1/2} & 0 \\ B^\top A^{-1/2} & \sqrt{\beta}(B^\top A^{-1}B)^{1/2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A^{1/2} & A^{-1/2}B \\ 0 & \sqrt{\beta}(B^\top A^{-1}B)^{1/2} \end{pmatrix} = LL^\top \end{aligned}$$

Disto se conclui que N_1 é simétrica e definida positiva pois:

$$N_1^\top = (LL^\top)^\top = LL^\top = N_1$$

e

$$x^\top(LL^\top)x = (L^\top x)^\top(L^\top x) = \|L^\top x\|^2 > 0$$

□

Lema 2.2. *Dado $\beta > 0$, tem-se os seguintes resultados*

1. *Se λ é um autovalor de A associado ao autovetor $x \in \ker(B^\top)$, então*

$$N_1 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}$$

   ou seja, λ é um autovalor de N_1.

2. *Se B tem posto completo e $z = (x^\top, y^\top)^\top$ é um autovetor de N_1, então $x \neq 0$.*

Demonstração. Ver [WGCY08]. Primeiramente, note que se λ é um autovalor de A associado ao autovetor $x \in \ker(B^\top)$, então

$$N_1 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & (\beta+1)B^\top A^{-1}B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Ax \\ B^\top x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda x \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix},$$

donde λ é um autovalor de N_1. Além disso, suponha que $N_1(x^\top, y^\top)^\top = \lambda(x^\top, y^\top)^\top$. Se ocorresse $x = 0$, valeria

$$\begin{cases} By & = & 0 \\ (\beta+1)B^\top A^{-1}By & = & \lambda y \end{cases}$$

Como B tem posto completo, da primeira igualdade se concluiria que $y = 0$. Então, como $(x^\top, y^\top)^\top$ é um autovalor, e portanto não-nulo, seria concluído que

$x \neq 0$, uma contradição com $x = 0$.

□

2.2 Estimativa do número de condição

Um resultado preliminar que se mostrou muito útil na dedução de estimativas para o número de condição dos sistemas resultantes do precondicionamento é apresentado no próximo lema:

Lema 2.3. *Para quaisquer $X \in \mathbb{R}^n$, $Y \in \mathbb{R}^n$ e $\theta > 0$ tem-se*

$$2\left|X^\top Y\right| \leq \theta X^\top X + \frac{1}{\theta} Y^\top Y,$$

Demonstração. Sabendo que

$$0 \leq \left(\sqrt{\theta}X \pm \frac{1}{\sqrt{\theta}}Y\right)\left(\sqrt{\theta}X \pm \frac{1}{\sqrt{\theta}}Y\right) = \theta X^\top X \pm 2X^\top Y + \frac{1}{\theta}Y^\top Y$$

tem-se

$$2\left|X^\top Y\right| \leq \theta X^\top X + \frac{1}{\theta} Y^\top Y,$$

para todo $\theta > 0$. □

O próximo teorema, mostra uma estimativa existente para o número de condição de N_1. Para conseguir este resultado, será utilizado o seguinte lema, que decorre imediatamente do Lema 2.3:

Lema 2.4. *Se A é simétrica definida positiva, então para quaisquer que sejam $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$ e $\theta > 0$, vale*

$$2\left|x^\top By\right| \leq \theta x^\top Ax + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top A^{-1} By$$

Demonstração. Segue do Lema 2.3, com $X = A^{1/2}x \in \mathbb{R}^n$ e $Y = A^{-1/2}By \in \mathbb{R}^n$. □

Teorema 2.5. *Se A é simétrica definida positiva, B de posto completo e $\beta > 0$, então N_1 é simétrica definida positiva. Além disso, se λ_m e λ_M são o menor e o maior autovalor de A, e μ_m e μ_M o menor e o maior autovalor de $B^\top A^{-1}B$, respectivamente, então uma cota superior para $\kappa(N_1)$, o número de condição de N_1, é*

$$\kappa(N_1) = \frac{1+\theta}{1-\tilde{\theta}}\kappa(A),$$

onde

$$\theta = \frac{\sqrt{4\tau_M + (\alpha\tau_M - 1)^2} + (\alpha\tau_M - 1)}{2},$$

$$\tilde{\theta} = \frac{\sqrt{4\tau_m + (\alpha\tau_m - 1)^2} - (\alpha\tau_m - 1)}{2},$$

$$\tau_M = \frac{\mu_M}{\lambda_M} \text{ } e \text{ } \tau_m = \frac{\mu_m}{\lambda_m}.$$

Demonstração. Ver [WGCY08]. Seja λ um autovalor de N_1 associado ao autovetor unitário $z = (x^\top, y^\top)^\top$. Então $z^\top N_1 z = \lambda z^\top z = \lambda$. Denotando $\alpha = \beta + 1 > 1$, e desenvolvendo o produto $z^\top N_1 z$, segue que

$$\lambda = x^\top Ax + 2x^\top By + \alpha y^\top B^\top A^{-1} By. \tag{2.1}$$

Como A é simétrica definida positiva, o Lema 2.4 garante que para qualquer $\theta > 0$ há uma limitação superior para o termo $2\left|x^\top By\right|$ da qual resulta

$$\begin{aligned}\lambda &\leq x^\top Ax + \left(\theta x^\top Ax + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top A^{-1} By\right) + \alpha y^\top B^\top A^{-1} By \\ &= (1+\theta) x^\top Ax + \left(\alpha + \frac{1}{\theta}\right) y^\top B^\top A^{-1} By \\ &\leq (1+\theta)\lambda_M x^\top x + \left(\alpha + \frac{1}{\theta}\right) \mu_M y^\top y. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Novamente a partir da Equação 2.1 e do Lema 2.4, obtém-se de forma análoga que para $\tilde{\theta} > 0$ arbitrário vale:

$$\begin{aligned}\lambda &\geq (1-\tilde{\theta}) x^\top Ax + \left(\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right) y^\top B^\top A^{-1} By \\ &\geq (1-\tilde{\theta})\lambda_m x^\top x + \left(\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right) \mu_m y^\top y. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Caso $y = 0$, a Equação 2.1 torna-se simplesmente $\lambda = x^\top Ax$, donde segue $\lambda > 0$. Caso contrário, para $\tilde{\theta} = 1$, resulta

$$\lambda \geq (\alpha - 1)\, \mu_M y^\top y > 0.$$

Isto comprova que todos os autovalores de N_1 são positivos e consequentemente esta matriz é simétrica definida positiva.

Por outro lado, se em 2.2 for escolhido θ de modo que

$$(1+\theta)\lambda_M = \left(\alpha + \frac{1}{\theta}\right) \mu_M, \tag{2.4}$$

a limitação superior para os autovalores de N_1 se torna

$$\lambda \leq (1+\theta)\lambda_M \left(x^\top x + y^\top y\right) = (1+\theta)\lambda_M,$$

pois z tem norma unitária.

Analogamente, se em 2.3 for escolhido $\tilde{\theta}$ de modo que

$$(1-\tilde{\theta})\lambda_m = \left(\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right)\mu_m, \tag{2.5}$$

a limitação inferior para os autovalores de N_1 passa a ser simplesmente

$$\lambda \geq (1-\tilde{\theta})\lambda_m \left(x^\top x + y^\top y\right) = (1-\tilde{\theta})\lambda_m$$

Assim,

$$(1-\tilde{\theta})\lambda_m \leq \lambda \leq (1+\theta)\lambda_M,$$

e portanto, lembrando que $\kappa(N_1) = \left|\frac{\lambda_{\max(N_1)}}{\lambda_{\min(N_1)}}\right|$

$$\kappa(N_1) = \frac{1+\theta}{1-\tilde{\theta}}\frac{\lambda_M}{\lambda_m}.$$

Uma vez que θ e $\tilde{\theta}$ foram escolhidos de modo que 2.4 e 2.5 sejam válidas, tem-se

$$\theta = \frac{1}{2\lambda_M}\left[\sqrt{4\lambda_M\mu_M + (\alpha\mu_M - \lambda_M)^2} + (\alpha\mu_M - \lambda_M)\right] \text{ e} \tag{2.6}$$

$$\tilde{\theta} = \frac{1}{2\lambda_m}\left[\sqrt{4\lambda_m\mu_m + (\alpha\mu_m - \lambda_m)^2} - (\alpha\mu_m - \lambda_m)\right] < 1. \tag{2.7}$$

Denotando $\tau_M = \frac{\mu_M}{\lambda_M}$ e $\tau_m = \frac{\mu_m}{\lambda_m}$, e fazendo as simplificações necessárias, seguem as expressões mais sucintas para θ e $\tilde{\theta}$:

$$\theta = \frac{\sqrt{4\tau_M + (\alpha\tau_M - 1)^2} + (\alpha\tau_M - 1)}{2},$$

$$\tilde{\theta} = \frac{\sqrt{4\tau_m + (\alpha\tau_m - 1)^2} - (\alpha\tau_m - 1)}{2}.$$

□

Uma vez que para diferentes escolhas de $\alpha > 1$ tem-se valores distintos para o coeficiente $\frac{1+\theta}{1-\tilde{\theta}}$, pode-se escolher α de modo que este coeficiente seja o menor possível, ou seja, tomar α como

$$\alpha = \alpha_{\min} = \min_{\alpha>1}\left\{\frac{1+\theta}{1-\tilde{\theta}}\right\} = \min_{\alpha>1}\left\{\frac{\alpha\tau_M - 1 + \sqrt{4\tau_M + (\alpha\tau_M - 1)^2}}{\alpha\tau_m + 1 - \sqrt{4\tau_m + (\alpha\tau_m - 1)^2}}\right\}.$$

Capítulo 3

Precondicionador 2

Neste capítulo, é estudado o segundo precondicionador apresentado em [WGCY08]. Conforme será mostrado na próxima seção, a matriz N_2 associada a este sistema é simétrica e definida positiva. Mais adiante, o Teorema 3.2 fornece uma expressão para os autovalores da matriz N_2, e determina o número de condição desta matriz.

Supondo que A é simétrica e definida postiva e tomando $\alpha > 0$, obtém-se o precondicionador T_2 para o problema 1.6, escolhendo da seguinte maneira:

$$T_2 = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ B^\top A^{-2} + \alpha(B^\top A^{-1}B)^{-1}B^\top A^{-1} & -\alpha(B^\top A^{-1}B)^{-1} \end{pmatrix}.$$

Deste modo, ao multiplicar a matriz do problema original por T_2 obtém-se

$$N_2 = T_2 \cdot \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ B^\top A^{-1} & B^\top A^{-2}B + \alpha I \end{pmatrix},$$

e o sistema resultante é

$$\begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ B^\top A^{-1} & B^\top A^{-2}B + \alpha I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1}p \\ B^\top A^{-2}p + \alpha(B^\top A^{-1}B)^{-1}(B^\top A^{-1}p - q) \end{pmatrix}.$$

3.1 Positividade do novo sistema

Lema 3.1. *Sendo A simétrica e definida postiva e $\alpha > 0$, a matriz $N_2 = T_2 M$ é simétrica e definida positiva.*

Demonstração. Ver [WGCY08]. A matriz N_2 é obviamente simétrica, então resta mostrar que é definida positiva. Isto será feito provando que os autovalores desta matriz são positivos. De fato, se λ é um autovalor de N_1 associado ao autovetor $(x^\top, y^\top)^\top$, então por definição tem-se

$$\begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ B^\top A^{-1} & B^\top A^{-2}B + \alpha I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

donde

$$\begin{cases} x + A^{-1}By & = \lambda x \\ B^\top A^{-1}x + B^\top A^{-2}By + \alpha y & = \lambda y \end{cases},$$

Se $\lambda \neq 1$, pode-se escrever x em termos de y a partir da primeira equação, obtendo

$$x = \frac{1}{\lambda - 1}A^{-1}By.$$

Substituindo esta expressão na segunda equação resulta

$$B^\top A^{-1}\left[\frac{1}{\lambda - 1}A^{-1}By\right] + B^\top A^{-2}By = (\lambda - \alpha)y,$$

e multiplicando ambos os membros por $\lambda - 1 \neq 0$, tem-se:

$$\left[B^\top A^{-2}B + (\lambda - 1)\left(B^\top A^{-2}B\right)\right] y = (\lambda - 1)(\lambda - \alpha)y,$$

ou seja,

$$\lambda\left(B^\top A^{-2}B\right) y = (\lambda - 1)(\lambda - \alpha)y.$$

Sendo μ um autovalor de $B^\top A^{-2}B$, associado ao autovetor y, se deduz a seguinte equação em λ:

$$\lambda\mu = (\lambda - 1)(\lambda - \alpha).$$

Disto se conclui que $\lambda = \frac{1}{2}\left(1 + \alpha + \mu \pm \sqrt{(1 + \alpha + \mu)^2 - 4\alpha}\right)$, que é positivo para quaisquer $\alpha > 0$ e $\mu > 0$.

□

3.2 Propriedades espectrais e número de condição

Teorema 3.2. *Suponha que A é simétrica e definida positiva, e que B tem posto completo. Se $\alpha > 1$ e λ é um dos autovalores de N_2, então*

1. *$\lambda = 1$ ou $\lambda = \frac{1}{2}\left(1 + \alpha + \mu \pm \sqrt{(1 + \alpha + \mu)^2 - 4\alpha}\right)$, onde $\mu > 0$ é um autovalor de $B^\top A^{-2}B$.*

2. *Se μ_n é o raio espectral de $B^\top A^{-2}B$, então*

$$\begin{aligned} \lambda &\leq \tfrac{1}{2}\left(1 + \alpha + \mu_n + \sqrt{(1 + \alpha + \mu_n)^2 - 4\alpha}\right) \quad e \\ \lambda &\geq \tfrac{1}{2}\left(1 + \alpha + \mu_n - \sqrt{(1 + \alpha + \mu_n)^2 - 4\alpha}\right). \end{aligned} \tag{3.1}$$

3. *O número de condição de N_2 é*

$$\kappa(N_2) = \frac{1}{4\alpha}\left(1 + \alpha + \mu_n + \sqrt{(1 + \alpha + \mu_n)^2 - 4\alpha}\right)^2. \tag{3.2}$$

Demonstração. Ver [WGCY08]. Considere as funções f e g definidas por

$$\begin{aligned} f(x) &= \tfrac{1}{2}\left(1+\alpha+x+\sqrt{(1+\alpha+x)^2-4\alpha}\right) \text{ e} \\ g(x) &= \tfrac{1}{2}\left(1+\alpha+x-\sqrt{(1+\alpha+x)^2-4\alpha}\right). \end{aligned} \tag{3.3}$$

A primeira afirmação deste teorema é uma consequência imediata da prova apresentada para o Lema 3.1.

Para demonstrar a segunda, observe que em cada x tem-se $g(x) \leq f(x)$. Além disso, para $\alpha > 1$, f é crescente e g é decrescente em relação a x.

De fato, tem-se:

$$f'(x) = \frac{1}{2} + \frac{1+\alpha+x}{2\sqrt{(1+\alpha+x)^2-4\alpha}} > 0$$

e

$$g'(x) = \frac{-2\alpha}{(1+\alpha+x+\sqrt{(1+\alpha+x)^2-4\alpha})\sqrt{(1+\alpha+x)^2-4\alpha}} < 0.$$

Assim, se $0 < \mu_1 \leq \ldots \leq \mu_n$ são os autovalores da matriz $B^\top A^{-2}B$, então

$$g(\mu_n) \leq \ldots \leq g(\mu_1) \leq f(\mu_1) \leq \ldots \leq f(\mu_n).$$

Isto garante que os autovalores de N_2 que forem distintos de 1 satisfazem a desigualdade 3.1. Além disso, o caso $\lambda = 1$ é imediato, já que a hipótese $\alpha > 1$ implica

$$g(\mu) - 1 = \frac{-2\mu}{-1+\mu+\alpha+\sqrt{(1+\alpha+\mu)^2-4\alpha}} < 0, \text{ e}$$

$$f(\mu) - 1 = \frac{-1+\mu+\alpha+\sqrt{(1+\alpha+\mu)^2-4\alpha}}{2} > 0.$$

Finalmente, uma vez provadas as desigualdades que aparecem em 3.1, e lembrando que $\kappa(N_2) = \left|\frac{\lambda_{\max(N_2)}}{\lambda_{\min(N_2)}}\right|$ tem-se

$$\kappa(N_2) = \frac{f(\mu_n)}{g(\mu_n)}.$$

Substituindo as expressões para f e g, resulta:

$$\kappa(N_2) = \frac{1+\alpha+\mu_n+\sqrt{(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha}}{1+\alpha+\mu_n-\sqrt{(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha}}.$$

Multiplicando o numerador e o denominador pela expressão do numerador, segue:

$$\kappa(N_2) = \frac{\left(1+\alpha+\mu_n+\sqrt{(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha}\right)^2}{(1+\alpha+\mu_n)^2-[(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha]},$$

ou seja,

$$\kappa(N_2) = \frac{1}{4\alpha}\left(1+\alpha+\mu_n+\sqrt{(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha}\right)^2.$$

$\square$

Corolário 3.3. *Se μ_n é o raio espectral de $B^\top A^{-2}B$, então o valor ótimo para o parâmetro α é $\alpha_0 = \mu_n + 1 > 1$ e para este valor de α tem-se*

$$\kappa(N_2) = 2\mu_n + 1 + 2\sqrt{\mu_n(\mu_n+1)} \tag{3.4}$$

e

$$\frac{1}{2} < \frac{1}{1+\sqrt{\frac{\mu_n}{\mu_n+1}}} \leq \lambda \leq (\mu_n+1)\left(1+\sqrt{\frac{\mu_n}{\mu_n+1}}\right) < 2(\mu_n+1) \tag{3.5}$$

Demonstração. Ver [WGCY08]. Por 3.2, o número de condicão da matriz N_2 é uma função do parâmetro α. Logo, seu valor mínimo é obtido quando a derivada em relação a α for nula. Mas

$$\kappa'(\alpha) = \frac{\left(1+\alpha+\mu_n+\sqrt{(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha}\right)^2}{4\alpha^2\sqrt{(1+\alpha+\mu_n)^2-4\alpha}}\left(\alpha-1-\mu_n\right),$$

então $\kappa'(\alpha_0) = 0$ se, e somente se, $\alpha_0 = \mu_n + 1$

Ao substituir α_0 na expressão 3.2, segue

$$\kappa(N_2) = \frac{1}{4(\mu_n+1)}\left(1+(\mu_n+1)+\mu_n+\sqrt{(1+(\mu_n+1)+\mu_n)^2-4(\mu_n+1)}\right)^2.$$

Simplificando a expressão no segundo membro, obtém-se

$$\kappa(N_2) = \frac{1}{2(\mu_n+1)}\left((\mu_n+1)+\sqrt{\mu_n(\mu_n+1)}\right)^2.$$

Desenvolvendo a expressão que está elevada ao quadrado, resulta

$$\kappa(N_2) = \frac{(\mu_n+1)^2 + 2(\mu_n+1)\sqrt{\mu_n(\mu_n+1)} + \mu_n(\mu_n+1)}{2(\mu_n+1)}$$

e cancelando as várias ocorrências de (μ_n+1) segue

$$\kappa(N_2) = \frac{(\mu_n+1) + 2\sqrt{\mu_n(\mu_n+1)} + \mu_n}{2},$$

donde resulta 3.4. Substituindo $\alpha_0 = \mu_n + 1$ nas expressões de f e g, segue de 3.1:

$$1+\mu_n-\sqrt{\mu_n(\mu_n+1)} \leq \lambda \leq 1+\mu_n+\sqrt{\mu_n(\mu_n+1)}.$$

Manipulando estas desigualdades, resulta 3.5.

$\square$

Capítulo 4

Precondicionador 3

O terceiro precondicionador apresentado em [WGCY08] para o problema 1.6 resulta escolhendo um parâmetro $\alpha > \frac{1}{\lambda_m} > 0$, onde λ_m é o menor autovalor da matriz A. Define-se então T_3 da seguinte forma:

$$T_3 = \begin{pmatrix} \alpha A - I & 0 \\ \alpha B^\top & -I \end{pmatrix}.$$

Ao multiplicar a matriz do problema original por T_3 obtém-se:

$$N_3 = T_3 \cdot \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha A^2 - A & \alpha AB - B \\ \alpha B^\top A - B^\top & \alpha B^\top B \end{pmatrix},$$

e o sistema resultante é

$$\begin{pmatrix} \alpha A^2 - A & \alpha AB - B \\ \alpha B^\top A - B^\top & \alpha B^\top B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha Ap - p \\ \alpha B^\top p - q \end{pmatrix}.$$

A matriz N_3 associada a este sistema é simétrica e definida positiva, conforme será demonstrado na próxima seção.

4.1 Propriedades espectrais

Lema 4.1. *Seja A uma matriz simétrica e definida positiva e B uma matriz de posto completo. Se $\alpha > 1/\lambda_m(A)$ (o menor autovalor de A), então a matriz $N_3 = T_3 M$ é simétrica e definida positiva e os autovalores de $\alpha A^2 - A$ são $\alpha\lambda_i(A)^2 - \lambda_i(A) > 0$.*

Demonstração. Ver [WGCY08]. A matriz N_3 é simétrica definida positiva pois pode ser escrita na forma $N_3 = LL^\top$, onde L é a matriz

$$L = \begin{pmatrix} L_0 & 0 \\ L_1 & L_2 \end{pmatrix},$$

cujas entradas da diagonal são estritamente positivas. De fato, para que tal decomposição de N_3 seja possível, é preciso que

$$\begin{pmatrix} \alpha A^2 - A & \alpha AB - B \\ \alpha B^\top A - B^\top & \alpha B^\top B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_0 L_0^\top & L_0 L_1^\top \\ L_1 L_0^\top & L_1 L_1^\top + L_2 L_2^\top \end{pmatrix}.$$

Sendo $\alpha > 1/\lambda_m(A)$, a matriz $\alpha A^2 - A$, que corresponde ao bloco $(1,1)$ de N_3, é simétrica e definida positiva, e portanto admite a decomposição de Cholesky $L_0 L_0^\top = \alpha A^2 - A = A(\alpha A - I)$.

Além disso, como B tem posto completo, a matriz $B^\top A^{-1} B$ é simétrica e definida positiva e consequentemente possui decomposição de Cholesky $L_2 L_2^\top = B^\top A^{-1} B$.

Deste modo, se for tomado $L_1 = B^\top (\alpha A - I) L_0^{-\top}$, resultará

$$L_1 L_0^\top = \left[B^\top (\alpha A - I) L_0^{-\top}\right] L_0^\top = B^\top (\alpha A - I) = \alpha B^\top A - B^\top$$

$$L_0 L_1^\top = \left(L_1 L_0^\top\right)^\top = \left(\alpha B^\top A - B^\top\right)^\top = \alpha AB - B$$

$$\begin{aligned} L_1 L_1^\top + L_2 L_2^\top &= \left[B^\top (\alpha A - I) L_0^{-\top}\right] \left[B^\top (\alpha A - I) L_0^{-\top}\right]^\top + \left[B^\top A^{-1} B\right] \\ &= \left[B^\top (\alpha A - I)\right] \left[L_0 L_0^\top\right]^{-1} (\alpha A - I) B + B^\top A^{-1} B \\ &= B^\top \left[(\alpha A - I)(A(\alpha A - I))^{-1}(\alpha A - I) + A^{-1}\right] B \\ &= B^\top \left[A^{-1}(\alpha A - I) + A^{-1}\right] B = \alpha B^\top B. \end{aligned}$$

Finalmente, se λ é um autovalor de A associado ao autovetor x, então:

$$(\alpha A^2 - A)x = \alpha A^2 x - Ax = \alpha A(\lambda x) - \lambda x = \alpha \lambda^2 x - \lambda x = (\alpha \lambda^2 - \lambda)x,$$

ou seja, $\alpha\lambda^2 - \lambda$ é um autovalor de $\alpha A^2 - A$, também associado a x. $\square$

Lema 4.2. *Dados $\alpha > 1/\lambda_m(A)$ e $N_3 = T_3 M$, valem os seguintes resultados:*

1. *Se λ é um autovalor de A associado ao autovetor $x \in \ker(B^\top)$, então*

$$N_3 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda(\alpha\lambda - 1) \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix},$$

   ou seja, $\lambda(\alpha\lambda - 1)$ é um autovalor de N_3.

2. *Se $z = (x^\top, y^\top)^\top$ é um autovetor de N_3, então $x \neq 0$.*

Demonstração. Ver [WGCY08]. Em primeiro lugar, se λ é um autovalor de A

associado ao autovetor $x \in \ker(B^\top)$, então

$$\begin{aligned} N_3 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} (\alpha A - I)Ax \\ \alpha B^\top Ax - B^\top x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda(\alpha A - I)x \\ \lambda\alpha B^\top x - B^\top x \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda(\lambda\alpha - 1)x \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda(\lambda\alpha - 1) \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{4.1}$$

donde $\lambda(\lambda\alpha - 1)$ é um autovalor de N_3.

Em segundo lugar, se μ fosse um autovalor de N_3 associado a algum vetor da forma $z = (0, y^\top)^\top$, então:

$$\begin{cases} (\alpha A - I)By &= 0 \\ \alpha B^\top By &= \mu y \end{cases}.$$

Consequentemente, já que $\alpha A - I$ é invertível e B tem posto completo, da primeira igualdade se concluiria que $y = 0$. Mas isto não é possível, pois todo autovetor é não-nulo.

□

4.2 Estimativa do número de condição

Teorema 4.3. *Sejam $\lambda_m = \lambda_m(A)$ e $\lambda_M = \lambda_M(A)$ o menor e o maior autovalor de A, e $\sigma_m = \sigma_m(B)$ e $\sigma_M = \sigma_M(B)$ o menor e o maior valor singular de B, respectivamente. Se $\alpha > 1/\lambda_m$, então tem-se a seguinte limitação para o número de condição de N_3*

$$\kappa(N_3) = \gamma\kappa(B)^2,$$

sendo

$$\gamma = \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\alpha\theta + 1}{\alpha\tilde{\theta} - 1}$$

uma função de α, e $\tilde{\theta}$ e θ dados por

$$\theta = \frac{\sqrt{[(\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M - \alpha\sigma_M^2]^2 + 4(\alpha\lambda_M - 1)^2\sigma_M^2} - [(\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M - \alpha\sigma_M^2]}{2(\alpha\lambda_M - 1)^2} \quad e$$

$$\tilde{\theta} = \frac{(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m - \alpha\sigma_m^2 + \sqrt{[(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m - \alpha\sigma_m^2]^2 + 4(\alpha\lambda_m - 1)^2\sigma_m^2}}{2(\alpha\lambda_m - 1)^2}.$$

Demonstração. Ver [WGCY08]. Seja λ um autovalor de N_3 associado ao autovetor unitário $z = (x^\top, y^\top)^\top$. Então $z^\top N_3 z = \lambda z^\top z = \lambda$, ou ainda

$$\lambda = x^\top(\alpha A - I)Ax + 2x^\top(\alpha A - I)By + \alpha y^\top B^\top By. \tag{4.2}$$

Como $\alpha A - I$ é simétrica e definida positiva (pois por hipótese $\alpha > 1/\lambda_m$), o

Lema 2.4 garante que para qualquer $\theta > 0$ há uma limitação superior para o termo $2\left|x^\top(\alpha A - I)By\right|$ da qual resulta

$$\begin{aligned}\lambda &\leq x^\top(\alpha A - I)Ax + \left(\theta x^\top(\alpha A - I)^2 x + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top By\right) + \alpha y^\top B^\top By \\ &\leq \left[(\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M + \theta(\alpha\lambda_M - 1)^2\right] x^\top x + \sigma_M^2 \left[\alpha + \frac{1}{\theta}\right] y^\top y. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Novamente, a partir da Equação 4.2, obtém-se do Lema 2.4 de forma análoga que para $\tilde{\theta} > 0$ arbitrário, vale

$$\begin{aligned}\lambda &\geq x^\top(\alpha A - I)Ax - \tilde{\theta} x^\top(\alpha A - I)^2 x + \left[-\frac{1}{\tilde{\theta}} + \alpha\right] y^\top B^\top By \\ &\geq \left[(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m - \tilde{\theta}(\alpha\lambda_m - 1)^2\right] x^\top x + \sigma_m^2 \left[\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right] y^\top y. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Se em 4.3 for escolhido θ de modo que

$$(\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M + \theta(\alpha\lambda_M - 1)^2 = \sigma_M^2 \left[\frac{1}{\theta} + \alpha\right] \tag{4.5}$$

a limitação superior para os autovalores de N_3 se torna

$$\lambda \leq \sigma_M^2 \left[\alpha + \frac{1}{\theta}\right] \left(x^\top x + y^\top y\right) = \sigma_M^2 \left[\alpha + \frac{1}{\theta}\right],$$

pois z tem norma unitária.

Analogamente, se for escolhido $\tilde{\theta}$ de modo que em 4.4 se tenha

$$(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m - \tilde{\theta}(\alpha\lambda_m - 1)^2 = \sigma_m^2 \left[\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right] \tag{4.6}$$

a limitação inferior para os autovalores de N_3 passa a ser simplesmente

$$\lambda \geq \sigma_m^2 \left[\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right] \left(x^\top x + y^\top y\right) = \sigma_m^2 \left[\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right].$$

Assim,

$$\sigma_m^2 \left[\alpha - \frac{1}{\tilde{\theta}}\right] \leq \lambda \leq \sigma_M^2 \left[\alpha + \frac{1}{\theta}\right],$$

e portanto

$$\kappa(N_3) = \gamma\kappa(B)^2$$

onde

$$\gamma = \frac{\tilde{\theta}}{\theta} \frac{\alpha\theta + 1}{\alpha\tilde{\theta} - 1}.$$

Os valores de θ e $\tilde{\theta}$ são obtidos a partir das condições 4.5 e 4.6, das quais se deduz que

$$\theta = \frac{\sqrt{[(\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M - \alpha\sigma_M^2]^2 + 4(\alpha\lambda_M - 1)^2\sigma_M^2} - [(\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M - \alpha\sigma_M^2]}{2(\alpha\lambda_M - 1)^2} \tag{4.7}$$

$$\tilde{\theta} = \frac{\sqrt{[(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m - \alpha\sigma_m^2]^2 + 4(\alpha\lambda_m - 1)^2\sigma_m^2} + [(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m - \alpha\sigma_m^2]}{2(\alpha\lambda_m - 1)^2}. \tag{4.8}$$

□

Lema 4.4. *Sejam $\alpha > 0$ e $f, g : \mathbb{R}_+^2 \mapsto \mathbb{R}$ definidas por*

$$f(x, y) = (\alpha x - 1)x - \alpha y + \sqrt{[(\alpha x - 1)x - \alpha y]^2 + 4y(\alpha x - 1)} \text{ e}$$

$$g(x, y) = (\alpha x - 1)x - \alpha y - \sqrt{[(\alpha x - 1)x - \alpha y]^2 + 4y(\alpha x - 1)}.$$

Então para quaisquer x e y satisfazendo $\alpha x - 1 > 0$ e $\alpha y > \frac{1}{2}$, a função f é crescente em ambas as variáveis, enquanto g é decrescente em ambas as variáveis.

Demonstração. Ver [WGCY08]. Basta observar que para x e y sob as condições do lema, as derivadas parciais de f verificam as seguintes desigualdades:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x, y) = 2\alpha x - 1 + \frac{(2\alpha x - 1)[(\alpha x - 1)x + \alpha y]}{\sqrt{[(\alpha x - 1)x + \alpha y]^2 - 4y(\alpha x - 1)}} > 0 \text{ e}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = \alpha + \frac{(\alpha x - 3/2)^2 + (\alpha y - 1/2)(\alpha y + 1/2)}{\sqrt{[(\alpha x - 1)x + \alpha y]^2 - 4y(\alpha x - 1)}} > 0.$$

Analogamente, com relação a função g, tem-se as seguintes inequações:

$$\frac{\partial g}{\partial x}(x, y) = 2(\alpha x - 1)\left[1 - \frac{(\alpha x - 1)x + \alpha y}{\sqrt{[(\alpha x - 1)x + \alpha y]^2 - 4y(\alpha x - 1)}}\right] < 0 \text{ e}$$

$$\frac{\partial g}{\partial y}(x, y) = \frac{-(\alpha x - 1)(\alpha^2 y - 1)}{h(x, y)\sqrt{[(\alpha x - 1)x + \alpha y]^2 - 4y(\alpha x - 1)}} < 0,$$

sendo que

$$h(x, y) = \alpha[(\alpha x - 1)x + \alpha y] - 2(\alpha x - 1) + \sqrt{[(\alpha x - 1)x + \alpha y]^2 - 4y(\alpha x - 1)} > 0.$$

□

Teorema 4.5. *Sejam $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ simétrica definida positiva e $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ de posto completo, com $m > n$. Considere $\lambda_m = \lambda_m(A)$ e $\lambda_M = \lambda_M(A)$ o menor e o maior autovalor de A, e $\sigma_m = \sigma_m(B)$ e $\sigma_M = \sigma_M(B)$ o menor e o maior valor singular de B, respectivamente. Se $\alpha > \max\{1/\lambda_m, 1/(2\sigma_m)\} > 0$, então o número de condição de N_3, em termos das funções f e g definidas no lema anterior, é dado por*

$$\kappa(N_3) = \frac{f(\lambda_M, \sigma_M^2)}{g(\lambda_M, \sigma_M^2)}.$$

Demonstração. Ver [WGCY08]. Dado um autovalor λ de N_3 associado ao autovetor $(x^\top, y^\top)^\top$, tem-se por definição

$$\begin{pmatrix} (\alpha A - I)A & (\alpha A - I)B \\ B^\top(\alpha A - I) & \alpha B^\top B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

donde

$$\begin{cases} (\alpha A - I)(Ax + By) & = & \lambda x \\ B^\top[(\alpha A - I)x + \alpha By] & = & \lambda y \end{cases}.$$

Como $\alpha A - I$ é invertível, a primeira destas equações fornece:

$$Ax + By = \lambda(\alpha A - I)^{-1}x. \tag{4.9}$$

Por outro lado, rescrevendo a segunda equação e substituindo os termo $Ax + By$ pela expressão 4.9, resulta

$$\lambda y = B^\top[\alpha(Ax + By) - x] = B^\top[\alpha\lambda(\alpha A - I)^{-1}x - x].$$

Considerando novamente a primeira das duas equações, se ambos os seus membros forem multiplicados por λ, surge o termo λy, que pode ser trocado pela expressão anterior resultando em:

$$\begin{aligned} \lambda^2 x &= \lambda(\alpha A - I)Ax + (\alpha A - I)B(\lambda y) \\ &= \lambda(\alpha A - I)Ax + (\alpha A - I)B\left(B^\top[\alpha\lambda(\alpha A - I)^{-1}x - x]\right) \\ &= \left[\lambda(\alpha A - I)A + \alpha\lambda(\alpha A - I)BB^\top(\alpha A - I)^{-1} - (\alpha A - I)BB^\top\right]x. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Multiplicando a equação anterior a esquerda por $(\alpha A - I)^{-1/2}$, e adotando a notação $z = (\alpha A - I)^{-1/2}x$, resulta

$$\lambda^2 z = \left[(\alpha A - I)^{1/2}(\lambda A - BB^\top)(\alpha A - I)^{1/2} + \alpha\lambda(\alpha A - I)^{1/2}BB^\top(\alpha A - I)^{-1/2}\right]z.$$

Transpondo ambos os membros, multiplicando por z e dividindo tudo por $z^\top z$, obtém-se

$$\lambda^2 = \lambda c(z) - m(z),$$

onde

$$c(z) = \frac{z^\top(\alpha A - I)^{1/2}A(\alpha A - I)^{1/2}z + \alpha z^\top(\alpha A - I)^{1/2}BB^\top(\alpha A - I)^{-1/2}z}{z^\top z}$$

e

$$m(z) = \frac{z^\top(\alpha A - I)^{1/2}BB^\top(\alpha A - I)^{1/2}z}{z^\top z}.$$

A equação quadrática para o autovalor λ é equivalente a

$$z^\top \left[\lambda^2 I + \lambda(-c(z) + m(z)\right] z = 0.$$

Portanto, conforme (3.16) no trabalho de [TM01], tem-se:

$$\lambda = \frac{c(z) \pm \sqrt{c^2(z) - 4m(z)}}{2}. \tag{4.11}$$

Comparando a Equação 4.11 com as funções f e g definidas no Lema 4.4, nota-se que se $c(z)$ for trocado por $(\alpha x - 1)x - \alpha y$ e $m(z)$ por $(\alpha x - 1)y$, então $\lambda = f(x, y)/2$ ou $\lambda = g(x, y)/2$.

Mas

$$\begin{aligned}(\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m \leq (\alpha\lambda_m - 1)\lambda_m + \alpha\sigma_m^2 = f(\lambda_m, \sigma_m^2) \leq c(z)&\\ = \frac{x^\top Ax}{x^\top x}\frac{z^\top(\alpha A - I)z}{z^\top z} + \alpha\frac{z^\top(\alpha A - I)^{1/2}BB^\top(\alpha A - I)^{-1/2}z}{z^\top z}&\\ \leq (\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M \leq (\alpha\lambda_M - 1)\lambda_M + \alpha\sigma_M^2&\end{aligned} \tag{4.12}$$

e

$$0 \leq (\alpha\lambda_m - 1)\sigma_m^2 \leq m(z) = \frac{x^\top BB^\top x}{x^\top x}\frac{z^\top(\alpha A - I)z}{z^\top z} \leq (\alpha\lambda_M - 1)\sigma_M^2.$$

Então, como pelo Lema 4.4 tem-se

$$g(\lambda_M, \sigma_M^2) \leq \lambda \leq f(\lambda_M, \sigma_M^2)$$

e segue

$$\kappa(N_3) = \frac{f(\lambda_M, \sigma_M^2)}{g(\lambda_M, \sigma_M^2)}.$$

$\square$

Capítulo 5

Novo precondicionador ST

5.1 Introdução

Neste capítulo, apresenta-se um novo precondicionador baseado na decomposição ST. Conforme será visto, ele inclui como casos particulares os precondicionadores T_1 e T_3 discutidos nos capítulos anteriores.

A sua construção é feita considerando um parâmetro $\beta > 0$ e uma matriz S. Define-se então:

$$T_4 = \begin{pmatrix} X & 0 \\ Y & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AS - \beta I & 0 \\ B^\top S & -\beta I \end{pmatrix}.$$

Deste modo

$$N_4 = T_4 M = \begin{pmatrix} AS - \beta I & 0 \\ B^\top S & -\beta I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(SA - \beta I) & (AS - \beta I)B \\ B^\top(SA - \beta I) & B^\top SB \end{pmatrix}.$$

Demonstra-se nas próximas seções que, com este precondicionador, o sistema resultante deixa de ser indefinido: Conforme o Teorema 5.1, a matriz N_4 é simétrica e definida positiva.

Teorema 5.1. *Se S é uma matriz simétrica definida positiva, e $\beta > 0$ é uma constante tal que $ASA - \beta A$ é definida positiva, então N_4 é simétrica definida positiva.*

Demonstração. Ver [Yua07]. Uma vez que $ASA - \beta A$ é simétrica definida positiva, existe L_0 tal que $L_0 L_0^\top = ASA - \beta A$, e por motivo análogo, pode-se escrever $L_2 L_2^\top = \beta B^\top A^{-1} B$.

Então, é possível escrever

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A(SA - \beta I) & (AS - \beta I)B \\ B^\top(SA - \beta I) & B^\top SB \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} L_0 & 0 \\ L_1 & L_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} L_0^\top & L_1^\top \\ 0 & L_2^\top \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} L_0 L_0^\top & L_0 L_1^\top \\ L_1 L_0^\top & L_1 L_1^\top + L_2 L_2^\top \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{5.1}$$

De fato, para que $L_1 L_0^\top = B^\top(SA - \beta I)$, basta tomar $L_1 = B^\top(SA - \beta I)L_0^{-\top}$.

Com estas escolhas, segue também a igualdade $L_1L_1^\top + L_2L_2^\top = B^\top SB$, bastando substituir as expressões para L_0, L_1 e L_2 em $L_1L_1^\top + L_2L_2^\top$. Concluindo a demonstração.

$\square$

A seguir, é apresentado um lema que mostra a relação entre os autovalores do matriz N_4 e os autovalores do bloco A e da matriz S.

Lema 5.2. *Se S é uma matriz simétrica definida positiva, e $\beta > 0$ é tal que $AS - \beta I$ é não-singular, então:*

1. *Se λ é um autovalor de A, e μ um autovalor de AS, ambos associados ao autovetor $x \in \ker B^\top$, então*

$$N_4 \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda(\mu - \beta) \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix},$$

ou seja, $\lambda(\mu - \beta)$ é um autovalor de N_4.

2. *Se B tem posto completo e $z = (x^\top, y^\top)^\top$ é um autovetor de N_4, então $x \neq 0$.*

Demonstração. Ver [Yua07]. Em primeiro lugar, se λ é um autovalor de A associado ao autovetor $x \in \ker B^\top$, então

$$(AS - \beta I)Ax = \lambda(AS - \beta I)x = \lambda ASx - \lambda\beta x = \lambda(\mu - \beta)x.$$

Analogamente, mostra-se que $B^\top(SA - \beta I)x = 0$. Portanto, $\lambda(\mu - \beta)$ é um autovalor de N_4.

Em segundo lugar, se γ fosse um autovalor de N_4 associado a algum vetor da forma $z = (0, y^\top)^\top$, então:

$$\begin{cases} (AS - \beta I)By &= 0 \\ B^\top SBy &= \gamma y \end{cases}$$

Consequentemente, já que $AS - \beta I$ é não-singular e B tem posto completo, da primeira igualdade concluir-se-ia que $y = 0$. Mas isto não é possível, pois todo autovetor é não-nulo. $\square$

Seja $z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ um autovetor unitário de N_4, associado ao autovalor α. Então

$$\alpha = z^\top N_4 z = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} A(SA - \beta I) & (AS - \beta I)B \\ B^\top(SA - \beta I) & B^\top SB \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

ou seja,

$$\alpha = x^\top A(SA - \beta I)x + 2x^\top(AS - \beta I)By + y^\top(B^\top SB)y.$$

Uma vez que os autovalores da nova matriz são dados pela equação anterior, pode-se obter diferentes estimativas para o número de condição, utilizando o Lema 2.3 com escolhas de X e Y adequadas para que se tenha $X^\top Y = x^\top (AS - \beta I)By$. Esta expressão é justamente a parcela do meio em 5.1, e é a única parcela envolvendo tanto x quanto y.

Os próximos lemas apresentam as desiguladades que resultam de três escolhas possíveis para X e Y.

Lema 5.3. *Para quaisquer que sejam $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$ e $\theta > 0$, vale*

$$2\left|x^\top (AS - \beta I)By\right| \leq \theta x^\top (AS - \beta I)(SA - \beta I)x + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top By.$$

Demonstração. Basta usar o Lema 2.3, com $X = (SA - \beta I)x$ e $Y = By$. □

Lema 5.4. *Se S é simétrica definida positiva, então para quaisquer que sejam $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$ e $\theta > 0$, vale*

$$2\left|x^\top (AS - \beta I)By\right| \leq \theta x^\top (AS - \beta I)S^{-1}(SA - \beta I)x + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top SBy.$$

Demonstração. Basta usar o Lema 2.3, com $X = S^{-1/2}(SA - \beta I)x$ e $Y = S^{1/2}By$. □

Lema 5.5. *Se A é simétrica definida positiva, então para quaisquer que sejam $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$ e $\theta > 0$, vale*

$$2\left|x^\top (AS - \beta I)By\right| \leq \theta x^\top (AS - \beta I)A(SA - \beta I)x + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top A^{-1}By.$$

Demonstração. Basta usar o Lema 2.3, com $X = A^{1/2}(SA - \beta I)x$ e $Y = A^{-1/2}By$. □

Uma vez estabelecidos estes lemas, nas próximas seções serão deduzidas estimativas para o número de condição da matriz N_4, usando as desigualdades obtidas.

5.2 Primeira estimativa

Teorema 5.6. *Considere λ_m e λ_M o menor e o maior autovalores da matriz simétrica e definida positiva $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$, μ_m e μ_M o menor e o maior autovalores de $S \in \mathbb{R}^{m\times m}$ e σ_m e σ_M o menor e o maior valores singulares da matriz de posto cheio $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$, respectivamente. Se $\beta > 0$ é tal que $SA - \beta I$ é definida positiva, então o número de condição de N_4 verifica*

$$\kappa(N_4) \leq \kappa(B)^2 f(\beta),$$

onde $f(\beta) = \frac{\mu_M + \frac{1}{\theta(\beta)}}{\mu_m - \frac{1}{\tilde\theta(\beta)}} = \frac{\tilde\theta}{\theta}\frac{\theta\mu_M + 1}{\tilde\theta\mu_m - 1}$, e θ e $\tilde\theta$ são dados pelas equações 5.3 e 5.4, respectivamente.

Demonstração. Usando o Lema 5.3 na expressão para α, obtém-se a seguinte limitação superior:

$$\alpha \leq x^\top A(SA-\beta I)x + \left(\theta x^\top (AS-\beta I)(SA-\beta I)x + \frac{1}{\theta} y^\top B^\top By\right) + y^\top (B^\top SB)y$$

que pode ser reescrita como:

$$\alpha \leq x^\top \left(A + \theta(AS-\beta I)\right)(SA-\beta I)x + y^\top B^\top \left(S + \frac{1}{\theta} I\right) By$$

e a seguinte limitação inferior:

$$\alpha \geq x^\top \left(\left(A - \theta(AS-\beta I)\right)(SA-\beta I)\right)x + y^\top B^\top \left(S - \frac{1}{\theta} I\right) By.$$

Em termos dos menores e maiores autovalores de A e S (ou seja, λ_m, λ_M, μ_m, μ_M, respectivamente), e dos valores singulares de B (denotados por σ_m e σ_M) resultam as desigualdades:

$$\alpha \leq \left(\lambda_M + \theta(\lambda_M\mu_M - \beta)\right)(\lambda_M\mu_M - \beta)x^\top x + \sigma_M^2 \left(\mu_M + \frac{1}{\theta}\right) y^\top y \text{ e}$$

$$\alpha \geq \theta\beta(\lambda_m\mu_m - \beta)x^\top x + x^\top A(I-\theta S)(SA-\beta I)x + \sigma_m^2 \left(\mu_m - \frac{1}{\theta}\right) y^\top y.$$

Esta última pode ser rescrita, considerando que

$$x^\top A(I-\theta S)(SA-\beta I)x =$$
$$\left[x_1^\top A^{1/2}(SA-\beta I)^{1/2}\right](SA-\beta I)^{-1/2}(I-\theta S)(SA-\beta I)^{1/2}\left[(SA-\beta I)^{1/2}A^{-1/2}x_1\right],$$

onde $x_1 = A^{1/2}x$, obtendo-se então:

$$\begin{aligned}\alpha &\geq \left(\theta\beta(\lambda_m\mu_m - \beta) + \lambda_m(\lambda_m\mu_m - \beta)(1-\theta\mu_M)\right)x^\top x + \sigma_m^2\left(\mu_m - \frac{1}{\theta}\right) y^\top y \\ &\geq \left(\lambda_m(\lambda_m\mu_m - \beta) - \theta(\lambda_m\mu_m - \beta)(\lambda_m\mu_M - \beta)\right)x^\top x + \sigma_m^2\left(\mu_m - \frac{1}{\theta}\right) y^\top y. \quad (5.2)\end{aligned}$$

Igualando os coeficientes de $x^\top x$ e de $y^\top y$ na limitação superior, obtém-se

$$\theta = \theta(\beta) = \frac{\nu + \sqrt{\nu^2 + 4\sigma_M^2(\lambda_M\mu_M - \beta)^2}}{2(\lambda_M\mu_M - \beta)^2}, \quad (5.3)$$

onde $\nu = \lambda_M\beta + (\sigma_M^2 - \lambda_M^2)\mu_M$, e igualando tais coeficientes na limitação inferior, segue

$$\tilde{\theta} = \tilde{\theta}(\beta) = \frac{\eta + \sqrt{\eta^2 + 4\sigma_m^2(\lambda_m\mu_m - \beta)(\lambda_m\mu_M - \beta)}}{2(\lambda_m\mu_m - \beta)(\lambda_m\mu_M - \beta)}, \quad (5.4)$$

sendo $\eta = \lambda_m \beta + (\sigma_m^2 - \lambda_m^2)\, \mu_m$.

Deste modo, como $z^\top z = x^\top x + y^\top y = 1$, o autovalor α satisfaz as seguintes desigualdades:

$$\sigma_m^2 \left(\mu_m - \frac{1}{\tilde{\theta}} \right) \leq \alpha \leq \sigma_M^2 \left(\mu_M + \frac{1}{\theta} \right).$$

Logo,

$$\kappa(N_4) \leq \frac{\sigma_M^2 \left(\mu_M + \frac{1}{\theta} \right)}{\sigma_m^2 \left(\mu_m - \frac{1}{\tilde{\theta}} \right)} = \kappa(B)^2 f(\beta),$$

onde $f(\beta) = \frac{\mu_M + \frac{1}{\theta(\beta)}}{\mu_m - \frac{1}{\tilde{\theta}(\beta)}} = \frac{\tilde{\theta}}{\theta} \frac{\theta \mu_M + 1}{\tilde{\theta} \mu_m - 1}$. □

Na prática, o mais interessante é escolher (calcular) β de modo que o valor do coeficiente $f(\beta)$ seja tão pequeno quanto possível, garantindo, porém, que com tal escolha $AS - \beta I$ ainda seja simétrica definida positiva.

Introduzindo as notações

$$\mu = \frac{\lambda_M}{\sigma_M}, \tilde{\mu} = \frac{\lambda_m}{\sigma_m},$$

$$\tau = \frac{\sigma_M}{\lambda_M \mu_M - \beta}, \tilde{\tau} = \frac{\sigma_m}{\lambda_m \mu_m - \beta}, \hat{\tau} = \frac{\sigma_m}{\lambda_m \mu_M - \beta} \text{ e}$$

$$\nu = \frac{\lambda_m \mu_m - \beta}{\lambda_m \mu_M - \beta},$$

tem-se as seguintes expressões para θ e $\tilde{\theta}$:

$$\theta = \frac{\tau}{2} \left[(\tau \mu_M - \mu) \pm \sqrt{(\tau \mu_M - \mu)^2 + 4} \right]$$

$$\tilde{\theta} = \frac{\tilde{\tau}}{2} \left[(\hat{\tau} \mu_m - \tilde{\mu} \nu) \pm \sqrt{(\hat{\tau} \mu_m - \tilde{\mu} \nu)^2 + 4\nu} \right].$$

Se fosse possível trocar μ_M por μ_m nas fórmulas para $\hat{\tau}$ e ν, resultaria $\hat{\tau} = \tilde{\tau}$ e $\nu = 1$, e a expressão para $\tilde{\theta}$ tornar-se-ia simplesmente:

$$\tilde{\theta} = \frac{\tilde{\tau}}{2} \left[(\tilde{\tau} \mu_m - \tilde{\mu}) \pm \sqrt{(\tilde{\tau} \mu_m - \tilde{\mu})^2 + 4} \right].$$

5.3 Segunda estimativa

Teorema 5.7. *Considere λ_m e λ_M o menor e o maior autovalores de $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, μ_m e μ_M o menor e o maior autovalores da matriz simétrica e definida positiva $S \in \mathbb{R}^{m \times m}$ e σ_m e σ_M o menor e o maior valores singulares de $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, respectivamente. Se $\beta > 0$ é tal que $SA - \beta I$ é definida positiva, então, o número de condição de N_4 verifica*

$$\kappa(N_4) \leq g(\beta) \kappa(B)^2 \kappa(S),$$

onde $g(\beta) = \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\theta+1}{\tilde{\theta}-1}$ *é uma função de* β*, e* θ *e* $\tilde{\theta}$ *são dados pelas equações* 5.6 *e* 5.7*, respectivamente.*

Demonstração. Usando o Lema 5.4 na expressão para α, obtém-se

$$\begin{aligned}\alpha \leq\ & x^\top A(SA-\beta I)x + \left(\theta x^\top (AS-\beta I)S^{-1}(SA-\beta I)x + \tfrac{1}{\theta} y^\top B^\top SBy\right) \\ & + y^\top (B^\top SB)y,\end{aligned} \tag{5.5}$$

ou seja,

$$\alpha \leq x^\top \left(A + \theta(AS-\beta I)S^{-1}\right)(SA-\beta I)x + y^\top B^\top \left(1+\frac{1}{\theta}\right) SBy.$$

Além disso, a outra limitação é

$$\alpha \geq x^\top \left(A - \theta(AS-\beta I)S^{-1}\right)(SA-\beta I)x + y^\top B^\top \left(1-\frac{1}{\theta}\right) SBy.$$

Em termos dos autovalores, a limitação superior é assim:

$$\alpha \leq \left(\lambda_M + \theta\frac{\lambda_M\mu_M - \beta}{\mu_m}\right)(\mu_M\lambda_M - \beta)x^\top x + \sigma_M^2\mu_M\left(1+\frac{1}{\theta}\right) y^\top y.$$

Já a limitação inferior pode ser obtida considerando que

$$\alpha \geq x^\top \left(A - \theta(AS-\beta I)S^{-1}\right)(SA-\beta I)x + \sigma_m^2\mu_m\left(1-\frac{1}{\theta}\right) y^\top y$$

e que

$$x^\top \left(A - \theta(AS-\beta I)S^{-1}\right)(SA-\beta I)x = x^\top \left(\theta\beta S^{-1} + (1-\theta)A\right)(SA-\beta I)x.$$

Donde

$$\alpha \geq \left(\lambda_m + \theta(\frac{\beta}{\mu_M} - \lambda_m)\right)(\mu_m\lambda_m - \beta)x^\top x + \sigma_m^2\mu_m\left(1-\frac{1}{\theta}\right) y^\top y.$$

Igualando os coeficientes de $x^\top x$ e de $y^\top y$ na limitação superior, obtém-se

$$\theta = \frac{\mu_m}{2}\frac{\nu + \sqrt{\nu^2 + \frac{4\sigma_M^2\mu_M(\lambda_M\mu_M-\beta)^2}{\mu_m}}}{(\lambda_M\mu_M-\beta)^2}, \tag{5.6}$$

onde $\nu = \sigma_M^2\mu_M - \lambda_M(\lambda_M\mu_M - \beta)$ e igualando tais coeficientes na limitação inferior, segue

$$\tilde{\theta} = \frac{\lambda_M}{2}\frac{\eta + \sqrt{^2 + \frac{4\sigma_m^2\mu_m(\beta-\lambda_m\mu_M)(\lambda_m\mu_m-\beta)}{\mu_M}}}{(\beta-\lambda_m\mu_M)(\lambda_m\mu_m-\beta)}, \tag{5.7}$$

sendo $\eta = \sigma_m^2\mu_m - \lambda_m(\lambda_m\mu_m - \beta)$. Consequentemente, o autovalor α verifica:

$$\sigma_m^2\mu_m\left(1-\frac{1}{\theta}\right) \leq \alpha \leq \sigma_M^2\mu_M\left(1+\frac{1}{\theta}\right).$$

Logo,

$$\kappa(N_4) \leq \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\sigma_M^2}{\sigma_m^2}\frac{\mu_M}{\mu_m}\frac{\theta+1}{\tilde{\theta}-1} = \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\theta+1}{\tilde{\theta}-1}\kappa(B)^2\kappa(S) = g(\beta)\kappa(B)^2\kappa(S),$$

onde $g(\beta) = \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\theta+1}{\tilde{\theta}-1}$ é uma função de β. □

Na prática, deve-se procurar um valor de β que torne $g(\beta)$ tão pequeno quanto possível, e S também deve ser escolhida com um número de condição pequeno, de modo que o número de condição do novo problema seja menor.

Com as notações

$$\mu = \frac{\lambda_M}{\sigma_M}, \tilde{\mu} = \frac{\lambda_m}{\sigma_m},$$

$$\tau = \frac{\sigma_M}{\lambda_M\mu_M - \beta}, \tilde{\tau} = \frac{\sigma_m}{\lambda_m\mu_m - \beta}, \hat{\tau} = \frac{\sigma_m}{\lambda_m\mu_M - \beta} \text{ e}$$

$$\nu = \frac{\lambda_m\mu_m - \beta}{\lambda_m\mu_M - \beta},$$

tem-se as seguintes expressões para θ e $\tilde{\theta}$:

$$\theta = \frac{\mu_m\tau}{2}\left[(\tau\mu_M - \mu) \pm \sqrt{(\tau\mu_M - \mu)^2 + 4\kappa(S)}\right] \text{ e}$$

$$\tilde{\theta} = \frac{\mu_M\tilde{\tau}}{2}\left[(\tilde{\mu}\nu - \hat{\tau}\mu_m) \pm \sqrt{(\tilde{\mu}\nu - \hat{\tau}\mu_m)^2 + 4\frac{\nu}{\kappa(S)}}\right].$$

5.4 Terceira estimativa

Teorema 5.8. *Considere μ_m e μ_M o menor e o maior autovalores de $S \in \mathbb{R}^{m\times m}$, s_m e s_M o menor e o maior autovalores de $B^\top A^{-1}B \in \mathbb{R}^{n\times n}$, onde A é simétrica e definida positiva. Se σ_m e σ_M são menor e o maior valores singulares de $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$, respectivamente, então o número de condição de N_4 verifica*

$$\kappa(N_4) \leq \frac{\sigma_M^2\mu_M + \frac{s_M}{\theta}}{\sigma_m^2\mu_m + \frac{s_m}{\tilde{\theta}}} = \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\sigma_M^2\mu_M\theta + s_M}{\sigma_m^2\mu_m\tilde{\theta} + s_m},$$

onde θ e $\tilde{\theta}$ são dados pelas equações 5.9 e 5.10, respectivamente.

Demonstração. Usando a desigualdade do Lema 5.5 na expressão para α, segue

$$\begin{aligned}\alpha \leq\ & x^\top A(SA-\beta I)x + \left(\theta x^\top(AS-\beta I)A(SA-\beta I)x + \tfrac{1}{\theta}y^\top B^\top A^{-1}By\right) \\ & + y^\top(B^\top SB)y,\end{aligned} \qquad (5.8)$$

ou ainda,

$$\alpha \leq x^\top (A + \theta(AS - \beta I)A)(SA - \beta I)x + y^\top B^\top \left(S + \frac{1}{\theta}A^{-1}\right) By.$$

Analogamente,

$$\alpha \geq x^\top (A - \theta(AS - \beta I)A)(SA - \beta I)x + y^\top B^\top \left(S - \frac{1}{\theta}A^{-1}\right) By.$$

A primeira destas inequações resulta em

$$\alpha \leq (\lambda_M + \theta\lambda_M(\lambda_M\mu_M - \beta))(\mu_M\lambda_M - \beta)x^\top x + \left(\sigma_M^2\mu_M + \frac{1}{\theta}s_M\right) y^\top y,$$

onde s_M é o maior autovalor do complemento de Schur $B^\top A^{-1}B$. A segunda, implica

$$\alpha \geq (\lambda_m - \theta\lambda_M(\lambda_m\mu_m - \beta))(\mu_m\lambda_m - \beta)x^\top x + \left(\sigma_m^2\mu_m - \frac{1}{\theta}s_m\right) y^\top y,$$

sendo s_m o menor autovalor de $B^\top A^{-1}B$.

Igualando os coeficientes, obtém-se θ e $\tilde{\theta}$ tais que

$$\sigma_m^2\mu_m - \frac{s_m}{\tilde{\theta}} \leq \alpha \leq \sigma_M^2\mu_M - \frac{s_M}{\theta}.$$

Donde

$$\kappa(N_4) \leq \frac{\sigma_M^2\mu_M + \frac{s_M}{\theta}}{\sigma_m^2\mu_m + \frac{s_m}{\tilde{\theta}}} = \frac{\tilde{\theta}}{\theta}\frac{\sigma_M^2\mu_M\theta + s_M}{\sigma_m^2\mu_m\tilde{\theta} + s_m}.$$

Igualando os coeficientes de $x^\top x$ e de $y^\top y$, tem-se as seguintes expressões para θ e $\tilde{\theta}$:

$$\begin{aligned}\theta = {} & \frac{\sigma_M^2\mu_M}{\lambda_M(\lambda_M\mu_M - \beta)^2} - \frac{1}{\lambda_M\mu_M - \beta} + \\ & + \sqrt{\left[\frac{\sigma_M^2\mu_M}{\lambda_M(\lambda_M\mu_M - \beta)^2} - \frac{1}{\lambda_M\mu_M - \beta}\right]^2 + 4\frac{s_M}{\lambda_M(\lambda_M\mu_M - \beta)^2}}\end{aligned} \tag{5.9}$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{\theta} = {} & \frac{\sigma_m^2\mu_m}{\lambda_m(\lambda_m\mu_m - \beta)^2} - \frac{\lambda_m}{\lambda_M}\frac{1}{\lambda_m\mu_m - \beta} + \\ & + \sqrt{\left[\frac{\sigma_m^2\mu_m}{\lambda_m(\lambda_m\mu_m - \beta)^2} - \frac{\lambda_m}{\lambda_M}\frac{1}{\lambda_m\mu_m - \beta}\right]^2 + 4\frac{s_m}{\lambda_m(\lambda_m\mu_m - \beta)^2}}.\end{aligned} \tag{5.10}$$

□

Capítulo 6

Estimativa usando autovalores quadrados

6.1 Um problema de autovalor quadrado

Além das propriedades estabelecidas no capítulo anteior, o sistema precondicionado por T_4 possui ainda uma propriedade adicional: Os autovalores da matriz N_4 são soluções de um problema de autovalor quadrado. Isto significa que se λ é um autovalor de N_4, vale uma igualdade da forma

$$\lambda^2 I - \lambda M + \beta C = 0$$

O Teorema 6.1 estabelece de maneira precisa esta propriedade. A partir desta igualdade, resulta do trabalho [TM01] uma expressão para os autovalores de N_4, torna-se então possível obter uma quarta estimativa para o número de condição de N_4 (e consequentemente de N_1 e N_3). Isto é feito logo após o Teorema 6.1

Teorema 6.1. *Se S é uma matriz simétrica definida positiva, $\beta > 0$ tal que $AS - \beta I$ é definida positiva e λ um autovalor da matriz*

$$N_4 = \begin{pmatrix} A(SA - \beta I) & (AS - \beta I)B \\ B^\top (SA - \beta I) & B^\top S B \end{pmatrix},$$

então $\lambda > 0$ satisfaz a equação

$$\lambda^2 I - \lambda M + \beta C = 0,$$

onde

$$\begin{cases} M = (AS - \beta I)^{1/2} A (AS - \beta I)^{1/2} + (AS - \beta I)^{1/2} B B^\top S (AS - \beta I)^{-1/2} \\ C = (AS - \beta I)^{1/2} B B^\top (AS - \beta I)^{1/2} \end{cases}$$

Portanto:

$$\lambda = \frac{m(z) \pm \sqrt{m^2(z) - 4c(z)\beta}}{2},$$

com

$$m(z) \equiv t(ts - \beta) + s\mu$$

e

$$c(z) \equiv (ts - \beta)\mu$$

sendo que t, s e μ são autovalores de A, S e $BB^\top$ respectivamente.

Demonstração. Ver [Yua07]. Dado um autovalor λ de N_4 associado ao autovetor $(x^\top, y^\top)^\top$, tem-se por definição

$$\begin{pmatrix} (AS - \beta I)A & (AS - \beta I)B \\ B^\top(SA - \beta I) & B^\top SB \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

donde

$$\begin{cases} (AS - \beta I)(Ax + By) & = & \lambda x \\ B^\top[S(Ax + By) - \beta x] & = & \lambda y \end{cases}.$$

Como $AS - \beta I$ é invertível, pode-se isolar $Ax + By$ na primeira destas equações e substituir na segunda, obtendo

$$\lambda y = B^\top[S\left[\lambda(AS - \beta I)^{-1}x\right] - \beta x] = \lambda B^\top S(AS - \beta I)^{-1}x - \beta B^\top x.$$

Se na primeira das duas equações ambos os membros forem multiplicados por λ, surge o termo λy, que pode ser trocado pela expressão anterior resultando em:

$$\begin{aligned} \lambda^2 x &= (AS - \beta I)\left(\lambda Ax + B\left(\lambda y\right)\right) \\ &= (AS - \beta I)\left(\lambda Ax + B\left(\lambda B^\top S(AS - \beta I)^{-1}x - \beta B^\top x\right)\right) \\ &= (AS - \beta I)\left(\lambda A + \lambda BB^\top S(AS - \beta I)^{-1} - \beta BB^\top\right)x. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Multiplicando a equação anterior a esquerda por $(AS - \beta I)^{-1/2}$, e adotando a notação $z = (AS - \beta I)^{-1/2}x$, resulta

$$\lambda^2 z = (AS - \beta I)^{1/2}\left[(\lambda A - \beta BB^\top)(AS - \beta I)^{1/2} + \lambda BB^\top S(AS - \beta I)^{-1/2}\right]z.$$

Transpondo ambos os membros, multiplicando por z e dividindo tudo por $z^\top z$, obtém-se

$$\lambda^2 z^\top z - \lambda z^\top Mz + \beta z^\top Cz = 0,$$

onde

$$M = (AS - \beta I)^{1/2}A(AS - \beta I)^{1/2} + (AS - \beta I)^{1/2}BB^\top S(AS - \beta I)^{-1/2}$$

e

$$C = (AS - \beta I)^{1/2} BB^\top (AS - \beta I)^{1/2}.$$

portanto, conforme (3.16) no trabalho de [TM01], tem-se:

$$\lambda = \frac{m(z) \pm \sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)}}{2} \tag{6.2}$$

sendo

$$m(z) = \frac{z^\top M z}{z^\top z} = \frac{x^\top A x}{x^\top x} \frac{z^\top (AS - \beta I) z}{z^\top z} + \frac{z^\top (AS - \beta I)^{1/2} BB^\top S (AS - \beta I)^{-1/2} z}{z^\top z}$$

e

$$c(z) = \frac{z^\top C z}{z^\top z} = \frac{x^\top BB^\top x}{x^\top x} \frac{z^\top (AS - \beta I) z}{z^\top z}.$$

Mas $AS - \beta I$ é semelhante a $S^{1/2} A S^{1/2} - \beta I$, ao mesmo tempo em que se tem $(AS - \beta I)^{1/2} BB^\top S (AS - \beta I)^{-1/2}$ semelhante a $S^{1/2} BB^\top S^{1/2}$. Então

$$\lambda_m (\lambda_m s_m - \beta) + s_m \mu_m^2 \leq m(z) \leq \lambda_M (\lambda_M s_M - \beta) + s_M \mu_M^2$$

e

$$(\lambda_m s_m - \beta) \mu_m^2 \leq c(z) \leq (\lambda_M s_M - \beta) \mu_M^2,$$

onde s_m e s_M são o menor e o maior autovalores de S.

Deste modo, pode-se tomar as seguintes funções:

$$m(z) \equiv t(ts - \beta) + s\mu$$

e

$$c(z) \equiv (ts - \beta)\mu.$$

□

Definam-se f e g como:

$$f(s, t, \mu) = \frac{1}{2} \left(m(z) + \sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} \right) \text{ e}$$

$$g(s, t, \mu) = \frac{1}{2} \left(m(z) - \sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} \right).$$

Uma vez que os autovalores da nova matriz N_4 estão relacionados a estas funções, e considerando que o número de condição de uma matriz pode ser dado em termos de seu maior e menor autovalor, é de interesse saber os valores máximo e mínimo das funções acima. Sendo assim, nos próximos lemas será analisado o crescimento das duas funções em relação a cada uma de suas variáveis.

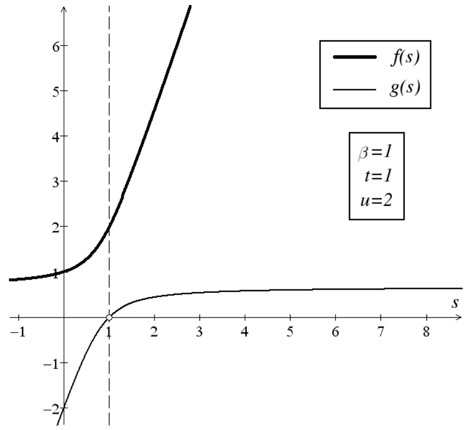

Figura 6.1: Gráfico das funções f e g em relação à variável s, quando $\beta = 1$, $t = 1$ e $\mu = 2$.

Lema 6.2. *As funções f e g são crescentes na variável s, sempre que $s > 0$, $t > 0$, $\mu > 0$, $\beta > 0$ e $st - \beta > 0$.*

Antes de se proceder à prova propriamente dita, observe na Figura 6.1 um exemplo típico dos gráficos de f e g em relação a sua primeira variável.

Com este exemplo em mente, pode-se seguir com a verificação formal de que estas funções são crescentes.

Demonstração. Tem-se:

$$\frac{\partial f}{\partial s}(s,t,\mu) = \frac{1}{2\sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)}} \left(\frac{\partial m}{\partial s}(z) \left(\sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} + m(z) \right) - 2\beta \frac{\partial c}{\partial s}(z) \right).$$

Considerando que $\frac{\partial m}{\partial s}(z) = t^2 + u > 0$, segue:

$$\frac{\partial f}{\partial s}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow \sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} > 2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial s}(z)}{\frac{\partial m}{\partial s}(z)} - m(z).$$

Se a expressão no segundo membro é negativa, então a desigualdade acima é verificada trivialmente (uma vez que a raiz quadrada é sempre positiva). Caso contrário, tem-se a seguinte equivalência:

$$\frac{\partial f}{\partial s}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow m^2(z) - 4\beta c(z) > \left(2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial s}}{\frac{\partial m}{\partial s}} - m(z) \right)^2.$$

Deixando todos os termos no segundo membro e desenvolvendo a expressão resultante, obtém-se sucessivamente:

$$
\begin{aligned}
& 0 > \frac{1}{\left[\frac{\partial m}{\partial s}\right]^2}\left[2\beta\frac{\partial c}{\partial s} - m(z)\frac{\partial m}{\partial s}\right]^2 + \left[4\beta c(z) - m^2(z)\right] \\
\Leftrightarrow\ & 0 > \left[2\beta\frac{\partial c}{\partial s} - m(z)\frac{\partial m}{\partial s}\right]^2 + \left(\frac{\partial m}{\partial s}\right)^2\left[4\beta c(z) - m^2(z)\right] \\
\Leftrightarrow\ & 0 > 4\beta\left(\beta\left(\frac{\partial c}{\partial s}\right)^2 - \frac{\partial c}{\partial s}\frac{\partial m}{\partial s}m(z) + \left(\frac{\partial m}{\partial s}\right)^2 c(z)\right), \qquad (6.3)
\end{aligned}
$$

sendo que o ponto z onde são calculadas as derivadas parciais foi omitido apenas para simplicidade da notação.

Dividindo por 4β, e substituindo o valor de cada derivada parcial, resulta:

$$
\begin{aligned}
& 0 > \beta(t\mu)^2 - (t\mu)(t^2+\mu)[(t^2+\mu)s - \beta t] + (t^2+\mu)^2[(ts-\beta)\mu] \\
\Leftrightarrow\ & 0 > (t\mu)^2 + t^2\mu(t^2+\mu) - \mu(t^2+\mu)^2 \\
\Leftrightarrow\ & 0 > (t\mu)^2 + (t^2\mu - \mu(t^2+\mu))(t^2+\mu) \\
\Leftrightarrow\ & 0 > (t\mu)^2 - \mu^2(t^2+\mu) \\
\Leftrightarrow\ & 0 > -\mu^3. \qquad (6.4)
\end{aligned}
$$

Como $\mu > 0$, esta última desigualdade é verdadeira, logo $\frac{\partial f}{\partial s}(s,t,\mu) > 0$ e consequentemente, f é crescente na variável s.

Analogamente, tem-se

$$
\frac{\partial g}{\partial s}(s,t,\mu) = \frac{1}{2\sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)}}\left(\frac{\partial m}{\partial s}\left(\sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} - m(z)\right) + 2\beta\frac{\partial c}{\partial s}\right),
$$

donde:

$$
\frac{\partial g}{\partial s}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow \sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} - m(z) > -2\beta\frac{\frac{\partial c}{\partial s}}{\frac{\partial m}{\partial s}} = -2\beta\frac{t\mu}{t^2+\mu},
$$

ou seja, assim como no caso da função f, tem-se

$$
\frac{\partial g}{\partial s}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow m^2(z) - 4\beta c(z) > \left(\frac{2\beta t\mu}{t^2+\mu} - m(z)\right)^2.
$$

Portanto, tem-se também $\frac{\partial g}{\partial s}(s,t,\mu) > 0$ e a função g é crescente na variável s. □

Lema 6.3. *Em relação à variável t, a função f é crescente e a função g é:*

1. *Crescente se $t \in \left(\frac{\beta}{s}, \frac{3\beta+\sqrt{\beta^2+16s^2\mu}}{4s}\right)$;*

2. *Decrescente se $t > \frac{3\beta+\sqrt{\beta^2+16s^2\mu}}{4s}$.*

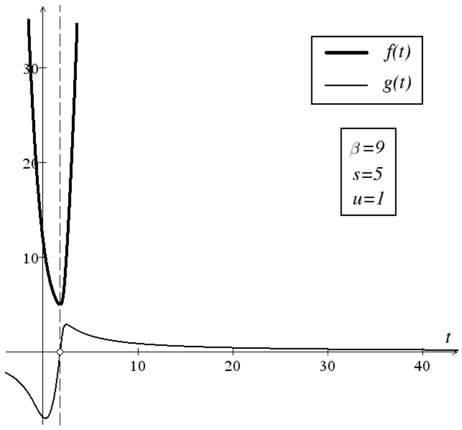

Figura 6.2: Gráfico das funções f e g em relação à variável t, quando $\beta = 9$, $s = 5$ e $\mu = 1$.

Para exemplificar o comportamento destas funções em relação à segunda variável, observe-se o gráfico mostrado Figura 6.2.

A demonstração do lema é dada a seguir.

Demonstração. Procedendo como no lema anterior, mas agora em relação à variável t, obtém-se:

$$\frac{\partial f}{\partial t}(s,t,\mu) = \frac{1}{2\sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)}} \left(\frac{\partial m}{\partial t}(z) \left(\sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} + m(z) \right) - 2\beta \frac{\partial c}{\partial t}(z) \right).$$

Lembrando que $\frac{\partial m}{\partial t}(z) = 2st - \beta = st + (st - \beta) > 0$, segue:

$$\frac{\partial f}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow \sqrt{m^2(z) - 4\beta c(z)} > 2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial t}(z)}{\frac{\partial m}{\partial t}(z)} - m(z) = \frac{2\beta \frac{\partial c}{\partial t}(z) - m(z) \frac{\partial m}{\partial t}(z)}{\frac{\partial m}{\partial t}(z)}.$$

Se a expressão no segundo membro é negativa, então a desigualdade acima é verificada trivialmente (uma vez que a raiz quadrada é sempre positiva), para quaisquer $s > 0$, $t > 0$, $u > 0$ e $\beta > 0$ que satisfazem $st - \beta > 0$. Caso contrário, tem-se a seguinte equivalência:

$$\frac{\partial f}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow m^2(z) - 4\beta c(z) > \left(2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial t}}{\frac{\partial m}{\partial t}} - m(z) \right)^2,$$

ou ainda, depois de fazer cálculos análogos aos que forneceram a desigualdade 6.3

$$\frac{\partial f}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow 0 > \beta \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right)^2 - \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial m}{\partial t} m(z) + \left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)^2 c(z).$$

Consequentemente, calculando e substituindo na expressão acima o valor de cada derivada parcial, e cancelando β, segue:

$$\begin{aligned}
&0 > \beta\,(s\mu)^2 - s\mu(2st-\beta)[t(st-\beta)+s\mu] + (2st-\beta)^2\,[(st-\beta)\mu] \\
\Leftrightarrow\ &0 > \beta s^2\mu - s(2st-\beta)[t(st-\beta)+s\mu] + (2st-\beta)^2\,(st-\beta) \\
\Leftrightarrow\ &0 > \beta s^2\mu + (2st-\beta)\left[-st(st-\beta) - s^2\mu + (2st-\beta)(st-\beta)\right] \\
\Leftrightarrow\ &0 > \beta s^2\mu + (2st-\beta)\left[(st-\beta)((2st-\beta)-st) - s^2\mu\right] \\
\Leftrightarrow\ &0 > \beta s^2\mu + (2st-\beta)\left[(st-\beta)^2 - s^2\mu\right] \\
\Leftrightarrow\ &0 > \beta s^2\mu + (2st-\beta)(st-\beta)^2 - s^2\mu(2st-\beta) \\
\Leftrightarrow\ &0 > (2st-\beta)(st-\beta)^2 - s^2\mu((2st-\beta)-\beta) \\
\Leftrightarrow\ &0 > (2st-\beta)(st-\beta) - 2s^2\mu \\
\Leftrightarrow\ &0 > 2(st)^2 - 3\beta st + \beta^2 - 2s^2\mu. \qquad (6.5)
\end{aligned}$$

Denotando $p(t) = (2s^2)t^2 - (3\beta s)t + (\beta^2 - 2s^2\mu)$, deve-se mostrar que $p(t) < 0$. No entanto, é preciso considerar todos os valores de $t > 0$ para os quais

$$q(t) = 2\beta\frac{\partial c}{\partial t} - m\frac{\partial m}{\partial t} > 0$$

e tais que $st - \beta > 0$ (ou seja, $t > \max\left\{0, \frac{\beta}{s}\right\}$), e somente eles.

Em primeiro lugar, se observa que

$$p\left(\frac{\beta}{s}\right) = (2s^2)\left(\frac{\beta}{s}\right)^2 - (3\beta s)\left(\frac{\beta}{s}\right) + (\beta^2 - 2s^2\mu) = -2s^2\mu < 0.$$

Além disso, derivando a função p, tem-se

$$p'(t) = 4s^2t - 3\beta s,$$

Donde se conclui que a função quadrática p é convexa e tem ponto de mínimo em $t_0 = \frac{3\beta}{4s}$. Logo, p é crescente no intervalo $\left(\frac{3\beta}{4s}, +\infty\right)$, e em particular para os valores de t que tornam $st - \beta$ positivo, ou seja, $t \in (\frac{\beta}{s}, +\infty)$. Tem-se ainda que $p(t) < 0$ sempre que o valor de t estiver entre as duas raízes de p, ou seja, quando $t \in (t_1, t_2)$, onde

$$t_1 = \frac{1}{4s}\left(3\beta - \sqrt{\beta^2 + 16s^2\mu}\right) < \frac{\beta}{s} < \frac{1}{4s}\left(3\beta + \sqrt{\beta^2 + 16s^2\mu}\right) = t_2.$$

Resta saber se os valores de $t \in (\frac{\beta}{s}, +\infty)$ para os quais vale

$$q(t) = 2\beta\frac{\partial c}{\partial t} - m\frac{\partial m}{\partial t} > 0$$

são ou não pontos que também estão no intervalo $(\frac{\beta}{s}, t_2) = (\frac{\beta}{s}, +\infty) \cap (t_1, t_2)$. A resposta é afirmativa e segue facilmente se for constatado que

- $q(\frac{\beta}{s}) > 0$,
- q é decrescente em $(\frac{\beta}{s}, +\infty)$ e
- $q(t_2) < 0$,

pois, neste caso, existe uma única raiz t_3 de q em $(\frac{\beta}{s}, t_2)$ e portanto q é positiva em $(\frac{\beta}{s}, t_3)$.

Primeiramente,

$$q\left(\frac{\beta}{s}\right) = 2\beta s\mu - \beta - \left(\frac{\beta}{s}\left(s\frac{\beta}{s} - \beta\right) + s\mu\right)\left(2s\left(\frac{\beta}{s}\right) - \beta\right) = \beta s\mu > 0.$$

Em segundo lugar, sendo

$$q(t) = 2\beta\frac{\partial c}{\partial t} - m\frac{\partial m}{\partial t} = 2\beta s\mu - (t(st-\beta) + s\mu)(2st - \beta),$$

segue

$$q'(t) = -\left[(2st-\beta)^2 + 2s(t(ts-\beta) + s\mu)\right] < 0.$$

Logo, q é decrescente em $(\frac{\beta}{s}, +\infty)$.

Finalmente $q(t_2) < 0$, pois

$$q(t_2) = 2\beta s\mu - [st_2^2 - \beta t_2 + su](2st_2 - \beta).$$

Mas,

$$t_2^2 = \frac{1}{16s^2}\left(3\beta + \sqrt{\beta^2 + 16s^2\mu}\right)^2 = \frac{1}{8s^2}\left(5\beta^2 + 3\beta\sqrt{\beta^2+16s^2\mu} + 8s^2\mu\right),$$

donde

$$\begin{aligned} s \cdot t_2^2 - \beta \cdot t_2 + su =& \frac{1}{8s}\left(5\beta^2 + 3\beta\sqrt{\beta^2+16s^2\mu} + 8s^2\mu\right) \\ &- \frac{\beta}{4s}\left(3\beta + \sqrt{\beta^2+16s^2\mu}\right) + su \\ =& \frac{16s^2\mu - \beta^2 + \beta\sqrt{\beta^2+16s^2\mu}}{8s}. \end{aligned} \tag{6.6}$$

Além disso,

$$2s \cdot t_2 - \beta = \frac{1}{2}\left(\beta + \sqrt{\beta^2+16s^2\mu}\right),$$

então, substituindo e simplificando, resulta:

$$\begin{aligned} q(t_2) &= 2\beta s\mu - \left[\frac{16s^2\mu - \beta^2 + \beta\sqrt{\beta^2+16s^2\mu}}{8s}\right]\left[\frac{1}{2}\left(\beta + \sqrt{\beta^2+16s^2\mu}\right)\right] \\ &= -s\mu\sqrt{\beta^2+16s^2\mu} < 0. \end{aligned} \tag{6.7}$$

Analogamente ao que foi feito para a função f, deduz-se que

$$\frac{\partial g}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow \sqrt{m^2 - 4\beta c} > m - 2\beta\frac{\frac{\partial c}{\partial t}}{\frac{\partial m}{\partial t}} = \frac{m\frac{\partial m}{\partial t} - 2\beta\frac{\partial c}{\partial t}}{\frac{\partial m}{\partial t}}.$$

Como antes, quando $m - 2\beta\frac{\frac{\partial c}{\partial t}}{\frac{\partial m}{\partial t}} < 0$, tem-se $\beta > 0$ e a última desigualdade é trivialmente verdadeira, para quaisquer $s > 0$, $t > 0$, $u > 0$ e β que satisfazem $st - \beta > 0$. Caso contrário, vale a seguinte equivalência:

$$\frac{\partial g}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow m^2 - 4\beta c > \left(m - 2\beta\frac{\frac{\partial c}{\partial t}}{\frac{\partial m}{\partial t}}\right)^2 = \left(2\beta\frac{\frac{\partial c}{\partial t}}{\frac{\partial m}{\partial t}} - m\right)^2.$$

Observando que esta é a mesma equivalência que foi obtida no caso da função f, segue:

$$\frac{\partial g}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow 0 > \beta\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)^2 - \frac{\partial c}{\partial t}\frac{\partial m}{\partial t}m(z) + \left(\frac{\partial m}{\partial t}\right)^2 c(z).$$

Ao substituir na expressão acima o valor de cada derivada parcial, e fazendo as simplificações, segue:

$$\frac{\partial g}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow 0 > (2s^2)t^2 - (3\beta s)t + (\beta^2 - 2s^2\mu) = p(t).$$

Mas

$$p(t) < 0 \Leftrightarrow t \in (t_1, t_2),$$

onde

$$t_1 = \frac{1}{4s}\left(3\beta - \sqrt{\beta^2 + 16s^2\mu}\right) < \frac{\beta}{s} < \frac{1}{4s}\left(3\beta + \sqrt{\beta^2 + 16s^2\mu}\right) = t_2,$$

então, levando em consideração que $s > 0$, $t > 0$, $u > 0$, $\beta > 0$ e $st - \beta > 0$, tem-se

$$\frac{\partial g}{\partial t}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow t \in (\frac{\beta}{s}, t_2).$$

Observe que, por ser $\beta > 0$, tem-se $t_2 > 0$. Então, há tanto um intervalo de crescimento quanto um intervalo de decrescimento para a função g em relação a t. □

Lema 6.4. *As funções f e g são crescentes na variável μ, sempre que $s > 0$, $t > 0$, $\mu > 0$, $\beta > 0$ e $st - \beta > 0$.*

Para se ter uma ideia do comportamento destas funções, agora em relação à terceira variável, observe a Figura 6.3.

A prova do lema é dada adiante.

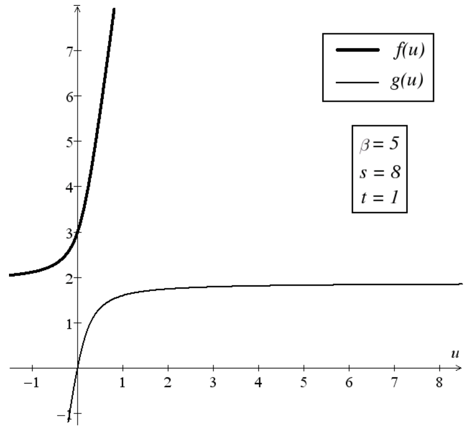

Figura 6.3: Gráfico das funções f e g em relação à variável μ, quando $\beta = 5$, $s = 8$ e $t = 1$.

Demonstração. Procedendo como nas seções anteriores, deduz-se que

$$\frac{\partial g}{\partial u}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow \sqrt{m^2 - 4\beta c} > 2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}} - m = \frac{2\beta\frac{\partial c}{\partial \mu} - m\frac{\partial m}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}}.$$

Quando $2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}} - m < 0$, a última desigualdade é trivialmente verdadeira para quaisquer $s > 0$, $t > 0$, $u > 0$ e β que satisfazem $st - \beta > 0$. Caso contrário, é válida a seguinte equivalência:

$$\frac{\partial f}{\partial \mu}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow m^2 - 4\beta c > \left(2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}} - m\right)^2.$$

Além disso,

$$\frac{\partial f}{\partial \mu}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow 0 > \beta\left(\frac{\partial c}{\partial \mu}\right)^2 - m\frac{\partial c}{\partial \mu}\frac{\partial m}{\partial \mu} + c\left(\frac{\partial m}{\partial \mu}\right)^2.$$

Calculando e substituindo na expressão acima os valores de m, c e de cada derivada parcial, segue:

$$\begin{aligned}
&0 > \beta(st-\beta)^2 - [t(st-\beta) + s\mu](st-\beta)s + (st-\beta)\mu s^2 \\
\Leftrightarrow\ &0 > (st-\beta)(\beta(st-\beta) - [t(st-\beta) + s\mu]s + \mu s^2) \\
\Leftrightarrow\ &0 > (st-\beta)(\beta(st-\beta) - ts(st-\beta) - s^2\mu + \mu s^2) \\
\Leftrightarrow\ &0 > (st-\beta)^2(\beta - ts) \\
\Leftrightarrow\ &0 > -(st-\beta)^3. \qquad (6.8)
\end{aligned}$$

Logo, f é crescente em relação à variável μ, sempre que $s > 0$, $t > 0$, $u > 0$, $\beta > 0$ e $st - \beta > 0$.

Quanto à função g, tem-se

$$\frac{\partial g}{\partial \mu}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow \sqrt{m^2 - 4\beta c} > m - 2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}}.$$

Se $m - 2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}} < 0$, tem-se $\beta > 0$ e a última desigualdade é trivialmente verdadeira, para quaisquer $s > 0$, $t > 0$, $u > 0$ e β que satisfazem $st - \beta > 0$. Caso contrário, vale a seguinte equivalência:

$$\frac{\partial g}{\partial \mu}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow m^2 - 4\beta c > \left(2\beta \frac{\frac{\partial c}{\partial \mu}}{\frac{\partial m}{\partial \mu}} - m\right)^2.$$

Como esta é a mesma equivalência obtida no caso da função f, segue:

$$\frac{\partial g}{\partial \mu}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow 0 > \beta \left(\frac{\partial c}{\partial \mu}\right)^2 - \frac{\partial c}{\partial \mu}\frac{\partial m}{\partial \mu} m(z) + \left(\frac{\partial m}{\partial \mu}\right)^2 c(z),$$

ou seja,

$$\frac{\partial g}{\partial \mu}(s,t,\mu) > 0 \Leftrightarrow 0 > -(st - \beta)^3.$$

□

Teorema 6.5. *Considere*

$$\begin{cases} s_1, \ldots, s_n > 0 & \text{os autovalores de } S\text{, em ordem decrescente;} \\ t_1, \ldots, t_n > 0 & \text{os autovalores de } A\text{, em ordem decrescente;} \\ \mu_1, \ldots, \mu_m > 0 & \text{os valores singulares de } B^\top B\text{, em ordem decrescente.} \end{cases}$$

Os autovalores da matriz N_4 são $f(s,t,\mu)$ ou $g(s,t,\mu)$, onde t, s e μ são autovalores de A, S e $BB^\top$ respectivamente, e tem-se:

- *Se $t_i \in \left(\frac{\beta}{s_n}, \frac{3\beta + \sqrt{\beta^2 + 16 s_n^2 \mu_m}}{4 s_n}\right)$, então $\kappa = \frac{f(s_1,t_1,\mu_1)}{g(s_n,t_n,\mu_m)}$;*
- *Se $t_i > \frac{3\beta + \sqrt{\beta^2 + 16 s_n^2 \mu_m}}{4 s_n}$, então $\kappa = \frac{f(s_1,t_1,\mu_1)}{g(s_n,t_1,\mu_m)}$.*

Demonstração. Basta usar os lemas 6.2, 6.3 e 6.4. □

Conforme os lemas anteriores, apenas o comportamento de g em relação à variável t é diferente dos demais. Mostrou-se que ela é crescente até certo ponto, depois sempre decresce. Note que o valor máximo de g é menor que $s\mu$. De fato, $g(s,t,\mu) < s\mu$, pois caso contrário aconteceria

$$[t(ts - \beta) + s\mu] - 2s\mu \geq \sqrt{[t(ts - \beta) + s\mu]^2 - 4\beta\mu(ts - \beta)}.$$

Disto resultaria

$$(t(ts-\beta)-s\mu)^2 \geq [t(ts-\beta)+s\mu]^2 - 4\beta\mu(ts-\beta),$$

ou seja

$$-2t(ts-\beta)s\mu \geq 2t(ts-\beta)s\mu - 4\beta\mu(ts-\beta).$$

Cancelando $2(ts-\beta)\mu$, concluir-se-ia uma contradição com a hipótese $ts-\beta > 0$.

Sendo assim, como ao estimar o número de condição procura-se um valor mínimo para g, é de interesse saber quando é que $g(s,t,\mu) > k$, para uma constante k dada. Certamente isto só acontecerá se $k < s\mu$, pelo exposto anteriormente.

O próximo lema fornece os pontos exatos onde o gráfico de g corta a reta horizontal de altura k.

Lema 6.6. *Dada a função g, definida por*

$$g(s,t,\mu) = \frac{1}{2}\left([t(ts-\beta)+s\mu] - \sqrt{[t(ts-\beta)+s\mu]^2 - 4\beta\mu(ts-\beta)}\right),$$

se $k < s\mu$, então $g(s,t,\mu) > k \Leftrightarrow t \in (t_0, \bar{t}_0)$, onde

$$p(\beta,s) = \frac{1}{2ks}\left[\beta(k+s\mu) - \sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2 + 4k^2s(k-s\mu)}\right]$$

e

$$q(\beta,s) = \frac{1}{2ks}\left[\beta(k+s\mu) + \sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2 + 4k^2s(k-s\mu)}\right].$$

Demonstração. Tem-se

$$g(s,t,\mu) > k \Leftrightarrow [t(ts-\beta)+s\mu] - 2k > \sqrt{[t(ts-\beta)+s\mu]^2 - 4\beta\mu(ts-\beta)}.$$

Isolando t, segue da desigualdade anterior que

$$g(s,t,\mu) > k \Leftrightarrow t \in (t_0, \bar{t}_0)$$

onde $t_0 = p(\beta,s)$ e $\bar{t}_0 = p(\beta,s)$ são as raízes da equação $g(s,t,\mu) = k$, dadas por

$$\begin{aligned} p(\beta,s) &= \frac{\beta(k+s\mu) - \sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2 + 4k^2s(k-s\mu)}}{2ks} \\ &= \frac{\beta(k+s\mu) - \sqrt{(k-s\mu)(4k^2s + \beta^2(k-s\mu))}}{2ks} \text{ e} \end{aligned} \tag{6.9}$$

$$\begin{aligned} q(\beta,s) &= \frac{\beta(k+s\mu) + \sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2 + 4k^2s(k-s\mu)}}{2ks} \\ &= \frac{\beta(k+s\mu) + \sqrt{(k-s\mu)(4k^2s + \beta^2(k-s\mu))}}{2ks}. \end{aligned} \tag{6.10}$$

□

A seguir, será determinado para quais valores de s e de β tem-se $g(s,t,\mu) > k$, para todo $t \in [t^A_{\min}, t^A_{\max}]$.

Lema 6.7. *Fixadas as matrizes A e B, e uma constante $k < s\mu$, tem-se:*

1. *As funções $p(\beta, s)$ e $q(\beta, s)$ são crescentes na variável β;*

2. *A função $p(\beta, s)$ é decrescente na variável s, e $q(\beta, s)$ é crescente nesta variável.*

Demonstração. Primeiramente, observa-se que sendo $k - s\mu < 0$, a expressão dentro da raíz é não-negativa se $|\beta| > \frac{2k\sqrt{s}}{\sqrt{s\mu - k}}$.

Além disso,

$$\frac{\partial p}{\partial \beta}(\beta, s) = \frac{1}{2ks}\left((k + s\mu) - \frac{1}{2}\frac{2\beta(k - s\mu)^2}{\sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2 + 4k^2 s(k - s\mu)}}\right).$$

Sendo $k - s\mu < 0$, tem-se $\sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2 + 4k^2 s(k - s\mu)} < \sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2} = \beta(s\mu - k)$. Neste caso,

$$\frac{\partial p}{\partial \beta}(\beta, s) > \frac{1}{2ks}\left((k + s\mu) - \frac{\beta(k - s\mu)^2}{\beta(s\mu - k)}\right) = \frac{1}{2ks}\left((k + s\mu) + (k - s\mu)\right) = \frac{1}{s} > 0.$$

Por outro lado, é imediato que

$$\frac{\partial q}{\partial \beta}(\beta, s) = \frac{1}{2ks}\left((k + s\mu) + \frac{1}{2}\frac{2\beta(k - s\mu)^2}{\sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2 + 4k^2 s(k - s\mu)}}\right) > 0.$$

Com relação a s, tem-se:

$$\frac{\partial p}{\partial s}(\beta, s) = \frac{\beta^2(k - s\mu) + 2k^2 s - \sqrt{(k - s\mu)(4k^2 s + \beta^2(k - s\mu))}}{2s^2\sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2 + 4k^2 s(k - s\mu)}}.$$

Sendo $k - s\mu < 0$, resulta $4k^2 s + \beta^2(k - s\mu) \leq 0$ (porque a expressão dentro da raiz não pode ser negativa). Então

$$\beta^2(k - s\mu) + 2k^2 s = [4k^2 s + \beta^2(k - s\mu)] - 2k^2 s < 0.$$

Portanto,

$$\frac{\partial p}{\partial s}(\beta, s) < 0.$$

Analogamente, tem-se

$$\frac{\partial q}{\partial s}(\beta, s) = \frac{-[\beta^2(k - s\mu) + 2k^2 s] - \sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2 + 4k^2 s(k - s\mu)}}{2s^2\sqrt{[\beta(k - s\mu)]^2 + 4k^2 s(k - s\mu)}}.$$

Mas $\sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2+4k^2s(k-s\mu)} < \beta(s\mu-k)$, então considerando que $k-s\mu<0$ e $4k^2s+\beta^2(k-s\mu)\leq 0$ tem-se:

$$\begin{aligned}
&-[\beta^2(k-s\mu)+2k^2s]-\sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2+4k^2s(k-s\mu)}\\
&>-[\beta^2(k-s\mu)+2k^2s]+\beta(s\mu-k)\\
&=-[\beta^2(k-s\mu)+4k^2s]+\beta(s\mu-k)+2k^2s\\
&\geq \beta(s\mu-k)+2k^2s>0. \qquad (6.11)
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\frac{\partial q}{\partial s}(\beta,s)>0.$$

□

Para que se verifique $g(s,t,\mu)>k$, para todo $t\in[t^A_{\min},t^A_{\max}]$, é suficiente escolher β e s de tal maneira que $t_0<t^A_{\min}\leq t^A_{\max}<\bar{t}_0$. O próximo teorema fornece uma maneira de obter estas desigualdades.

Teorema 6.8. *Dada uma constante k, se s e β são tais que $k<s\mu$,*

$$s\geq\frac{\beta^2\mu-\beta k t^A_{min}-k^2}{\beta\mu t^A_{min}-k\mu-{t^A_{min}}^2k}\ \ e\ \beta>\frac{k}{2\mu}\left(t^A_{max}+\sqrt{{t^A_{max}}^2+8\mu}\right)$$

então $t_0<t^A_{min}\leq t^A_{max}<\bar{t}_0$. Em particular, $g(s,t,\mu)>k$, para todo $t\in[t^A_{min},t^A_{max}]$.

Demonstração. Dados β e μ, para que $q(\beta,s)$ esteja bem definida é preciso que e $s\geq s_0=\frac{\beta^2k}{\beta^2\mu-4k^2}=\frac{1}{\frac{\mu}{k}-\frac{4k}{\beta^2}}\geq\frac{k}{\mu}$.

Como q é crescente na variável s, seu valor mínimo (assumido no ponto s_0) é dado por:

$$q(\beta,s_0)=\frac{\beta(k+s_0\mu)}{2ks_0}=\frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{s_0}+\frac{\mu}{k}\right)=\frac{\beta}{2}\left(\frac{\mu}{k}-\frac{4k}{\beta^2}+\frac{\mu}{k}\right)=\beta\left(\frac{\mu}{k}-\frac{2k}{\beta^2}\right).$$

Deste modo, qualquer que seja $s>s_0$, pode-se obter $\bar{t}_0=q(\beta,s)>t^A_{\max}$ bastando que se escolha

$$\beta>\frac{k}{2\mu}\left(t^A_{\max}+\sqrt{{t^A_{\max}}^2+8\mu}\right).$$

Uma vez fixado β como acima, pode-se determinar s de modo que $p(\beta,s)=t^A_{\min}$. De fato, para que isto ocorra, s deve ser tal que:

$$\sqrt{[\beta(k-s\mu)]^2+4k^2s(k-s\mu)}=\beta(k+s\mu)-(2kt^A_{\min})s$$

ou equivalentemente

$$\sqrt{\mu(\beta^2\mu-4k^2)s^2-2k(\beta^2\mu-2k^2)s+\beta^2k^2}=(\beta\mu-2kt^A_{\min})s+\beta k$$

$$\mu(\beta^2\mu - 4k^2)s^2 - 2k(\beta^2\mu - 2k^2)s + \beta^2k^2 = (\beta\mu - 2kt^A_{\min})^2s^2 + 2\beta k(\beta\mu - 2kt^A_{\min})s + \beta^2k^2$$
$$\mu(\beta^2\mu - 4k^2)s - 2k(\beta^2\mu - 2k^2) = (\beta\mu - 2kt^A_{\min})^2s + 2\beta k(\beta\mu - 2kt^A_{\min})$$
$$(\beta\mu - 2kt^A_{\min})^2s - \mu(\beta^2\mu - 4k^2)s = -2k(\beta^2\mu - 2k^2) - 2\beta k(\beta\mu - 2kt^A_{\min})$$
$$(\beta^2\mu^2 - 4\beta\mu kt^A_{\min} + 4k^2{t^A_{\min}}^2 - \mu^2\beta^2 + 4\mu k^2)s = 2k(-\beta^2\mu + 2k^2 - \beta^2\mu + 2\beta kt^A_{\min})$$
$$4k(-\beta\mu t^A_{\min} + k{t^A_{\min}}^2 + \mu k)s = 4k(-\beta^2\mu + k^2 + \beta kt^A_{\min})$$

Donde se conclui que

$$s = \frac{\beta^2\mu - \beta kt^A_{\min} - k^2}{\beta\mu t^A_{\min} - k\mu - {t^A_{\min}}^2k}.$$

Como t_0 decresce com s, para qualquer $s > \frac{\beta^2\mu - \beta kt^A_{\min} - k^2}{\beta\mu t^A_{\min} - k\mu - {t^A_{\min}}^2k}$, tem-se $t_0 < t^A_{\min} \leq t^A_{\max} < \bar{t_0}$. Deste modo, $g(s,t,\mu) > k$, para todo $t \in [t^A_{\min}, t^A_{\max}]$. □

Corolário 6.9. *Sob as condições do teorema anterior, tem-se*

$$\kappa(N_4) = \frac{f_{max}}{g_{min}} \leq \frac{f_{max}}{k} = \frac{f(s_n, t_n, \mu_n)}{k}.$$

Capítulo 7

Experimentos numéricos

Nesta seção será apresentada uma análise da solução numérica do problema exemplificado em [GWY01]. Para isto, será considerado um fluxo em um domínio quadrado com lados unitários Ω cujas equações de Stokes são:

$$\begin{aligned}
-v\Delta u + p_x &= 0 \text{ em } \Omega,\\
-v\Delta v + p_y &= 0 \text{ em } \Omega,\\
u_x + v_y &= 0 \text{ em } \Omega,\\
u = 1 \text{ em } y = 1,\ u &= 0 \text{ no resto de } \Gamma,\\
v &= 0 \text{ em } \Gamma,
\end{aligned}$$

onde Γ é a fronteira de Ω, u e v são as componentes da velocidade nas direções x e y, e p é a pressão. É usado o método dos elementos finitos para discretizar as equações, obtendo-se o sistema linear

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}, \tag{7.1}$$

para o qual, $x = (u^\top, v^\top)^\top$ representa velocidades aproximadas nos nós e nos pontos médios de cada aresta de uma triangulação do domínio. Com a escolha feita para a malha triangulada, resulta que $A \in \mathbb{R}^{1922\times1922}$ é uma matriz simétrica definida positiva e $B \in \mathbb{R}^{1922\times288}$.

Conforme testes em MATLAB realizados em [WGCY08], o número de condição do problema 1.6 acima é $2.1846e+6$, enquanto o da equação normal correspondente é igual a $4.7725e + 12$.

Uma vez que este sistema assume a forma 1.6, serão consideradas a seguir algumas escolhas possíveis de S e de β para o novo precondicionador T_4 que, segundo a discussão dos dois capítulos anteriores pode ser aplicado ao sistema 1.6. Tal precondicionador, conforme foi visto, é dado por:

$$T_4 = \begin{pmatrix} X & 0 \\ Y & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AS - \beta I & 0 \\ B^\top S & -\beta I \end{pmatrix}$$

Comparando-se os precondicionadores T_1 e T_3 com este precondicionador T_4, vê-se que os dois primeiros são casos particulares do último. De fato, se na criação do precondicionador T_4 for escolhida a matriz $S = (\beta+1)A^{-1}$, seguirá:

$$T_4 = \begin{pmatrix} A[(\beta+1)A^{-1}] - \beta I & 0 \\ B^\top[(\beta+1)A^{-1}] & -\beta I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ (\beta+1)B^\top A^{-1} & -\beta I \end{pmatrix} = T_1$$

e se em vez disso, for tomado em T_4 o parâmetro $\beta = 1$ e a matriz $S = \alpha I$, resultará:

$$T_4 = \begin{pmatrix} A[\alpha I] - I & 0 \\ B^\top[\alpha I] & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha A - I & 0 \\ \alpha B^\top & -I \end{pmatrix} = T_3$$

Sendo assim, a análise apresentada em [GY02] acerca dos precondicionadores T_1 e T_3 é válida também para o precondicionador T_4, com as escolhas de S e β feitas acima.

Em particular, segue daquela análise que o número de condição do novo sistema, quando $T_4 = T_1$ assume os valores dados na tabela a seguir.

$\beta+1$	$\kappa(N_4)$
0	$2.1846e+06$
50	$4.4584e+04$
100	$2.2067e+04$
1000	$2.1868e+03$
2600	$1.5714e+03$
3000	$1.7439e+03$

Nota-se que para $\alpha = 2600$, o número de condição de N_4 assume seu valor mínimo. No entanto, mesmo para os demais valores testados, $\kappa(N_4)$ tem um valor menor que o número de condição do sistema original (ou seja, quando $\beta + 1 = 0$).

Ainda conforme [GY02], quando $T_4 = T_3$ e se toma $\alpha = 100$, o número de condição do sistema precondicionado fica igual a $2.0246e+09$, um valor maior que o do sistema original, mas não tão grande quanto o número de condição $4.7725e+12$ da equação normal.

Como se pode ver, conforme a escolha feita para S e β, pode acontecer ou não que o número de condição da matriz associada ao problema original diminua ao ser feito o precondicionamento com a matriz T_4. No entanto, de acordo com os resultados apresentados, consegue-se pelo menos que a nova matriz seja simétrica definida positiva, e isto já é alguma melhoria em relação ao sistema original.

Conclusão

Através deste trabalho, foi constatada a grande utilidade da decomposição ST no precondicionamento de sistemas. É graças a esta decomposição que se pode explorar boas propriedades matriciais como a simetria, a positividade ou a triangularidade, mesmo na resolução de sistemas que em princípio não possuem tais propriedades: Alguns dos teoremas apresentados mostram que toda matriz não-simétrica e não-singular pode ser escrita como o produto de duas outras, das quais uma é triangular e a outra é simétrica. Mais do que isso, tal decomposição não é única, e deste modo é possível conseguir que a matriz simétrica seja também definida positiva, ou que a matriz triangular tenha todos os elementos de sua diagonal iguais a 1. Uma vez que existem métodos eficientes para se tratar problemas cujas matrizes associadas possuem estas boas propriedades, é razoável explorar esta decomposição de modo a permitir que estes métodos sejam utilizados eficientemente. Conforme alguns dos artigos consultados, uma das aplicações da decomposição ST é justamente a criação de precondicionadores para problemas de ponto de sela.

Sendo assim, nesta pesquisa, após relacionar as propriedades da decomposição ST e de diversos precondicionadores derivados de tal decomposição matricial, e que são aplicados em problemas da forma 1.6, foi possível deduzir estimativas para a o número de condição de um sistema que seja equivalente, mas que goze da simetria e da positividade. As estimativas foram obtidas em analogia com resultados existentes para outros precondicionadores, sendo uma das novas estimativas obtida a partir de um problema de autovalor quadrado que os autovalores do sistema precondicionado verificam. O último precondicionador estudado envolve blocos definidos a partir de um parâmetro β e uma matriz S. Deste modo, conforme a aplicação, pode-se então escolher S e β que sejam os mais adequados para se minimizar o valor do número de condição do novo sistema. Com isto, é possível trocar um sistema dado, onde não se tem boas propriedades, por um novo sistema que além de ser definido positivo, tem o número de condição associado limitado superiormente pelas cotas apresentadas.

7.1 Trabalho futuro

Para pesquisas futuras, será de interesse explorar outras possíveis escolhas do parâmetro β e da matriz S que aparecem no precondicionador estudado, de modo que se tenham as menores limitações superiores possíveis para número de condição dos sistemas precondicionados, e uma convergência rápida para os métodos iterativos que se aplicam a estes sistemas (simétricos e com matriz definida positiva).

Referências Bibliográficas

[Ber86] A. R. Bergen, *Power Systems Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1986. 6

[Bjö96] Å. Björck, *Numerical Methods for Least Squares Problems*, Society for Industrial Mathematics, 1996. 6

[Bos98] A. Bossavit, *"Mixed"systems of algebraic equations in computational electromagnetics*, COMPEL **17** (1998), no. 1/2, 3. 6

[Bra01] D. Braess, *Finite Elements. Theory, Fast Solvers, and Applications in Solid Mechanics*, 2 ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2001. 6

[Bre74] F. Brezzi, *On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers*, Rev. Francaise Automat. Informat. Recherche Operationnelle Ser. Rouge **8** (1974), 129–151. 6

[BS01] A. Battermann and E.W. Sachs, *Block Preconditioners for KKT Systems in PDE-Governed Optimal Control Problems*, Fast Solution of Discretized Optimization Problems: Workshop Held at the Weierstrass Institute for Applied Analysis and Stochastics, Berlin, May 8-12, 2000, Birkhäuser, 2001. 6

[CY06] C.J. Cordeiro and J.Y. Yuan, *Row-wise algorithms of STdecomposition*, Applied Mathematics and Computation **175** (2006), no. 1, 748–761. 2

[ES96] HC Elman and DJ Silvester, *Fast Nonsymmetric Iterations and Preconditioning for Navier-Stokes Equations*, SIAM Sci. Comput. **17** (1996), 33–46. 6

[ESW97] HE Elman, DJ Silvester, and AJ Wathen, *Iterative methods for problems in computational fluid dynamics, Iterative Methods in Scientific Computing (RH Chan, TF Chan, and GH Golub, eds.)*, 1997. 6

[Glo84] R. Glowinski, *Numerical methods for nonlinear variational problems*, Springer-Verlag, New York, 1984. 6

[GVL96] G.H. Golub and C.F. Van Loan, *Matrix computations*, 1996. 6

[GWY01] Gene H. Golub, X. Wu, and Jin-Yun Yuan, *SOR-like Methods for Augmented Systems*, BIT Numerical Mathematics **41** (2001), no. 1, 71–85. 46

[GY02] G.H. Golub and J.Y. Yuan, *Symmetric-Triangular Decomposition and its Applications Part I: Theorems and Algorithms*, BIT Numerical Mathematics **42** (2002), no. 4, 814–822. 2, 3, 5, 47

[HA01] E. Haber and U.M. Ascher, *Preconditioned all-at-once methods for large, sparse parameter estimation problems*, INVERSE PROBLEMS **17** (2001), no. 6, 1847–1864. 6

[Hal79] E.L. Hall, *Computer Image Processing and Recognition*, Academic Pr, 1979. 6

[HM04] E. Haber and J. Modersitzki, *Numerical methods for volume preserving image registration*, Inverse Problems **20** (2004), no. 5, 1621–1638. 6

[KJAU58] L. Hurwicz K. J. Arrow and H. Uzawa, *Studies in Linear and Nonlinear Programming,*, Stanford University Press, Stanford, CA, 1958. 6

[LdSS+01] J. Liesen, E. de Sturler, A. Sheffer, Y. Aydin, and C. Siefert, *Preconditioners for indefinite linear systems arising in surface parameterization*, Proceedings of the 10th International Meshing Round Table (2001), 71–81. 6

[LNW02] T. Lyche, T.K. Nilssen, and R. Winther, *Preconditioned Iterative Methods for Scattered Data Interpolation*, Advances in Computational Mathematics **17** (2002), no. 3, 237–256. 6

[Mar91] H.M. Markowitz, *Portfolio Selection: Efficient Diversification of Investments*, Blackwell Publishing, 1991. 6

[PEGW81] W. Murray P. E. Gill and M. H. Wright, *Practical Optimization*, Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich], London, 1981. 6

[San02] C. Santiago, *Numerical Experiments on ST decomposition*, Master's thesis, UFPR, 2002. 2

[Sty06] T. Stykel, *Balanced truncation model reduction for semidiscretized Stokes equation*, Linear Algebra and Its Applications **415** (2006), no. 2-3, 262–289. 6

[SY03] C.D. Santiago and J.Y. Yuan, *Modified ST algorithms and numerical experiments*, Applied Numerical Mathematics **47** (2003), no. 2, 237–253. 2

[TM01] F. Tisseur and K. Meerbergen, *The quadratic eigenvalue problem*, SIAM **43** (2001), 235–286. 22, 31, 33

[WGCY08] X. Wu, G.H. Golub, J.A. Cuminato, and J.Y. Yuan, *Symmetric-triangular decomposition and its applications part II: Preconditioners for indefinite systems*, BIT Numerical Mathematics **48** (2008), no. 1, 139–162. 5, 7, 8, 10, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 20, 21, 46

[Wri97] Stephen Wright, *Stability of Augmented System Factorizations in Interior-Point Methods*, SIAM J. Matrix Anal. Appl. **18** (1997), no. 1, 191–222. 6

[Yua93] J. Y. Yuan, *Iterative Methods for Generalized Least Squares Problems*, Ph.D. thesis, IMPA, Rio de Janeiro, Brazil, 1993. 6

[Yua96] J.Y. Yuan, *Numerical methods for generalized least squares problems*, Journal of Computational and Applied Mathematics **66** (1996), no. 1-2, 571–584. 6

[Yua07] ______, *Quadratic Eigenvalue Functionals of ST Preconditioners for Saddle Point Problems*, Tech. report, Universidade Federal do Paraná, Departamento de Matemática - UFPR, Centro Politécnico, CP: 19.081, CEP: 81531-990, Curitiba, Paraná, Brazil, 2007. 23, 24, 32

Índice Remissivo