Curso de Métodos Numéricos

DEMAT, Universidad de Guanajuato

Clase 8: **Métodos directos para matrices simétricas y tridiagonales**

- Matrices simétricas definidas positivas.
- Factorización $\boldsymbol{LDL}^\top$.
- Factorización de Cholesky.
- Matrices bandadas.
- Resolución de sistemas con matrices tridiagonales.

MAT–251

Dr. Joaquín Peña Acevedo
CIMAT A.C.
e-mail: joaquin@cimat.mx

Matrices simétricas definidas positivas (I)

Definición

$\boldsymbol{A}$ es una matriz simétrica y definida positiva (s.d.p) si $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^\top$ y $\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$ para todo $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$.

Proposición 1

Sea $\boldsymbol{X}$ es una matriz no singular. $\boldsymbol{A}$ es s.d.p. si y sólo si $\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$ es s.d.p.

Sea $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ una matriz cuadrada. $\boldsymbol{H}$ es una submatriz principal si

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} a_{jj} & \cdots & a_{jk} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{kj} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix} \qquad \text{para cualquier } 1 \leq j \leq k \leq n.$$

Matrices simétricas definidas positivas (II)

Proposición 2

Si $\boldsymbol{A}$ es s.d.p. y $\boldsymbol{H}$ es cualquier submatriz principal de $\boldsymbol{A}$, entonces $\boldsymbol{H}$ es s.p.d.

Proposición 3

$\boldsymbol{A}$ es s.d.p. si y sólo si $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^\top$ y sus eigenvalores son positivos.

Proposición 4

Si $\boldsymbol{A}$ es s.d.p., entonces $a_{ii} > 0$ y $\max_{ij} |a_{ij}| = \max_i a_{ii} > 0$.

Factorización $\boldsymbol{LDL}^\top$

Sea $\boldsymbol{A}$ una matriz no singular y simétrica.
Si $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$, con $\boldsymbol{L}$ teniendo 1's en la diagonal. Entonces,

$$\boldsymbol{LU} = \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^\top = (\boldsymbol{LU})^\top = \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{L}^\top$$

Como $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{U}$ son no singulares, tenemos

$$\boldsymbol{U}(\boldsymbol{L}^\top)^{-1} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{U}^\top$$

Como la matriz del miembro izquierdo es triangular superior y la del miembro derecho es triangular inferior, se debe tener que la matriz es diagonal. Digamos que $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{L}^\top)^{-1} = \boldsymbol{D}$, y

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU} = \boldsymbol{LDL}^\top.$$

Algoritmo para la factorización $LDL^\top$ (I)

Sea $\boldsymbol{L} = [\, l_{ij} \,]$ y $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$. Entonces

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} d_k l_{jk}.$$

Supongamos que $j \leq i$, entonces

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \sum_{k=1}^{j} l_{ik} d_k l_{jk} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j l_{jj} \\ &= \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j. \end{aligned}$$

En particular, para $j = i$.

$$a_{ii} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k + d_i$$

Algoritmo para la factorización $LDL^\top$ (II)

Esto es,

$$d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_k$$

En particular, $d_1 = a_{11}$.
Ahora, puesto que $1 \leq j < i \leq n$,

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} + l_{ij} d_j.$$

podemos obtener l_{ij}:

$$l_{ij} = \frac{1}{d_j}\left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right]$$

Para $j = 1$, tenemos

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{d_1} \qquad i = 2, \ldots, n.$$

Algoritmo 1: Algoritmo $\boldsymbol{LDL}^\top$

Entrada: Una $\boldsymbol{A} = [\,a_{ij}]$ simétrica y su tamaño n.

Resultado: Las matrices $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{D}$.

for $j = 1, 2, \ldots, n$ **do**

  $l_{jj} = 1;$

  $$d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 d_k;$$

  for $i = j+1, \ldots, n$ **do**

    $l_{ji} = 0;$

    $$l_{ij} = \frac{1}{d_j}\left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk}\right]$$

    ;

  end

end

Ejemplo de factorización $LDL^\top$ (I)

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Esta matriz tiene la siguiente factorización LU:

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3/4 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 2/3 & 1 & 0 \\ 1/4 & 1/3 & 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ 0 & 3/4 & 1/2 & 1/4 \\ 0 & 0 & 2/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Determinar la factorización $\boldsymbol{LDL}^\top$.

Factorización de Cholesky (I)

La factorización de Cholesky es una consecuencia inmediata de lo anterior, cuando la matriz $\boldsymbol{A}$ además de ser simétrica es definida positiva.

Proposición

Si $\boldsymbol{A}$ es una matriz real, simétrica y definida positiva, entonces tiene una única factorización $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^\top$, en la cual $\boldsymbol{L}$ es una matriz triangular inferior con entradas positivas en la diagonal principal.

De lo anterior, tenemos que $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^\top$.

Podemos mostrar que $\boldsymbol{D}$ es definida positiva.

Por tanto, las entradas en la diagonal de $\boldsymbol{D}$ son positivas, y podemos definir

$$\boldsymbol{D}^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \ldots, \sqrt{d_n}).$$

Entonces $\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{D}^{1/2} = \boldsymbol{D}$ y

Factorización de Cholesky (II)

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^\top = \boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{L}^\top = \widehat{\boldsymbol{L}}\widehat{\boldsymbol{L}}^\top \qquad \text{con} \quad \widehat{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}^{1/2}.$$

Algoritmo de la factorización de Cholesky (I)

Algoritmo 2: Factorización de Cholesky $\boldsymbol{LL}^\top$

Entrada: Una $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ s.p.d y su tamaño n.
Resultado: La matriz $\boldsymbol{L}$.

for $j = 1, 2, \ldots, n$ **do**

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2};$$

  for $i = j+1, \ldots, n$ **do**

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} \right];$$

  end

end

Puesto que $l_{jj} > 0$, entonces

Algoritmo de la factorización de Cholesky (II)

$$a_{jj} > \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \geq l_{jk}^2 \qquad k \leq j$$

Esto es, $|l_{jk}| \leq \sqrt{a_{jj}}$. Por tanto, todo elemento de $\boldsymbol{L}$ está acotado por la raíz cuadrada del elemento correspondiente en la diagonal de $\boldsymbol{A}$.

Equivalencias

Proposición

Las siguientes proposiciones son equivalentes:

1. $\boldsymbol{A}$ es s.d.p.
2. El proceso de eliminación Gaussiana se puede realizar sin intercambiar las filas del sistema $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$.
3. $\boldsymbol{A}$ se puede factorizar como $\boldsymbol{LL}^\top$, donde $\boldsymbol{L}$ es triangular inferior con entradas positivas en la diagonal.
4. $\boldsymbol{A}$ se puede factorizar como $\boldsymbol{LDL}^\top$, donde $\boldsymbol{L}$ es triangular inferior con 1's en la diagonal y $\boldsymbol{D} > 0$ diagonal.

Matriz diagonal dominante

Definición

Sea $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ una matriz cuadrada de tamaño n. Se dice que $\boldsymbol{A}$ es diagonal dominante si para cada $i = 1, 2, \ldots, n$ se cumple

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|.$$

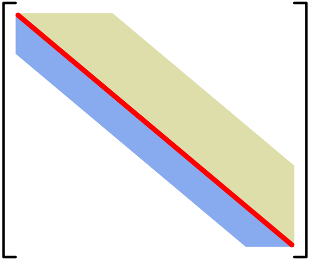
Si se cumple la desigualdad

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|,$$

se dice que $\boldsymbol{A}$ es estrictamente diagonal dominante.

Matrices bandadas

- Una matriz $n \times n$ se dice que es bandada si existen $p, q \in \mathbb{N}$ y $1 < p, q, < n$, tales que $a_{ij} = 0$ si $p \leq j - i$ o $q \leq i - j$.
- El ancho de banda es $w = p + q + 1$.
- Si $p = q$, entonces la condición es $p \leq |i - j|$.



- Si $p = q = 1$, la matriz es tridiagonal.

Matrices tridiagonales

Consideremos el sistema

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{d}$$

donde $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{n-2} & c_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_n & b_n \end{bmatrix},$$

es decir, es tridiagonal.

- El algoritmo de solución es un caso particular de eliminación Gaussiana.

Solución del sistema tridiagonal (I)

Tenemos que

$$\begin{aligned} b_1x_1 + c_1x_2 &= d_1, \\ a_ix_{i-1} + b_ix_i + c_ix_{i+1} &= d_i, \qquad i = 2, \ldots, n-1 \\ a_nx_{n-1} + b_nx_n &= d_n \end{aligned}$$

De las dos primeras ecuaciones

$$\begin{array}{rlrrrr} b_1(& a_2x_1 & +b_2x_2 & +c_2x_3) & = & b_1d_2 \\ -a_2(& b_1x_1 & +c_1x_2 &) & = & -a_2d_1 \\ \hline & & (b_1b_2 - a_2c_1)x_2 & +b_1c_2x_3 & = & b_1d_2 - a_2d_1 \end{array}$$

Si $\bar{b}_2 = b_1b_2 - a_2c_1, \quad \bar{c}_2 = b_1c_2, \quad \bar{d}_2 = b_1d_2 - a_2d_1,$

$$\bar{b}_2x_2 + \bar{c}_2x_3 = \bar{d}_2.$$

Con esto eliminamos x_1. Continuamos de esta forma.

Solución del sistema tridiagonal (II)

Supongamos que ya hemos reducido las ecuaciones para $i = 2, \dots, k$, de modo que tenemos

$$\bar{b}_i x_i + \bar{c}_i x_{i+1} = \bar{d}_i.$$

Entonces para $i = k + 1 < n$, tenemos

$$\begin{array}{rrrrcr}
\bar{b}_k(& a_{k+1}x_k & +b_{k+1}x_{k+1} & +c_{k+1}x_{k+2}) & = & \bar{b}_k d_{k+1} \\
-a_{k+1}(& \bar{b}_k x_k & +\bar{c}_k x_{k+1} &) & = & -a_{k+1}\bar{d}_k \\
\hline
 & & (\bar{b}_k b_{k+1} - a_{k+1}\bar{c}_k)x_{k+1} & +\bar{b}_k c_{k+1} x_{k+2} & = & \bar{b}_k d_{k+1} - a_{k+1}\bar{d}_k
\end{array}$$

Si

$$\bar{a}_1 = 0, \qquad \bar{b}_1 = b_1, \qquad \bar{c}_1 = c_1, \qquad \bar{d}_1 = d_1,$$

Solución del sistema tridiagonal (III)

$$
\begin{aligned}
\bar{b}_i x_i + \bar{c}_i x_{i+1} &= \bar{d}_i \qquad i = 2, \ldots, n-1 \\
\bar{b}_i &= \bar{b}_{i-1} b_i - a_i \bar{c}_{i-1} \\
\bar{c}_i &= \bar{b}_{i-1} c_i \\
\bar{d}_i &= \bar{b}_{i-1} d_i - a_i \bar{d}_{i-1}
\end{aligned}
$$

Finalmente, para $i = n$,

$$
\begin{array}{rlrcr}
\bar{b}_{n-1}(& a_n x_{n-1} & +b_n x_n) & = & \bar{b}_{n-1} d_n \\
-a_n(& \bar{b}_{n-1} x_{n-1} & +\bar{c}_{n-1} x_n) & = & -a_n \bar{d}_{n-1} \\
\hline
 & & (\bar{b}_{n-1} b_n - a_n \bar{c}_{n-1}) x_n & = & \bar{b}_{n-1} d_n - a_n \bar{d}_{n-1}
\end{array}
$$

Si definimos $\bar{b}_n = \bar{b}_{n-1} b_n - a_n \bar{c}_{n-1}$, $\bar{d}_n = \bar{b}_{n-1} d_n - a_n \bar{d}_{n-1}$.

$$
x_n = \frac{\bar{d}_n}{\bar{b}_n}
$$

Solución del sistema tridiagonal (IV)

$$
\begin{aligned}
x_i &= \frac{\bar{d}_i - \bar{c}_i x_{i+1}}{\bar{b}_i} \qquad\qquad i = n-1, \ldots, 1 \\
\\
\bar{b}_i &= \bar{b}_{i-1} b_i - a_i \bar{c}_{i-1} \\
\bar{c}_i &= \bar{b}_{i-1} c_i \\
\bar{d}_i &= \bar{b}_{i-1} d_i - a_i \bar{d}_{i-1}
\end{aligned}
$$

Matrices tridiagonales (I)

$$
\begin{bmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\
 & & a_4 & b_4 & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{bmatrix}
\to
\begin{bmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & \\
 & \bar{b}_2 & \bar{c}_2 & & & & \\
 & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\
 & & a_4 & b_4 & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{bmatrix}
$$

$$
\to
\begin{bmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & \\
 & \bar{b}_2 & \bar{c}_2 & & & & \\
 & & \bar{b}_3 & \bar{c}_3 & & & \\
 & & a_4 & b_4 & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{bmatrix}
\to
\begin{bmatrix}
b_1 & c_1 & & & & & \\
 & \bar{b}_2 & \bar{c}_2 & & & & \\
 & & \bar{b}_3 & \bar{c}_3 & & & \\
 & & & \bar{b}_4 & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{bmatrix}
$$

Para resolver el sistema $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{d}$ se aplica el algoritmo de Thomas:

Matrices tridiagonales (II)

Definimos

$$\bar{a}_1 = 0, \qquad \bar{b}_1 = b_1, \qquad \bar{c}_1 = c_1, \qquad \bar{d}_1 = d_1,$$
$$\bar{b}_n = \bar{b}_{n-1} b_n - a_n \bar{c}_{n-1}, \quad \bar{d}_n = \bar{b}_{n-1} d_n - a_n \bar{d}_{n-1}.$$

$$x_n = \frac{\bar{d}_n}{\bar{b}_n}$$

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{\bar{d}_i - \bar{c}_i x_{i+1}}{\bar{b}_i} \qquad i = n-1, \ldots, 1 \\ \bar{b}_i &= \bar{b}_{i-1} b_i - a_i \bar{c}_{i-1} \\ \bar{c}_i &= \bar{b}_{i-1} c_i \\ \bar{d}_i &= \bar{b}_{i-1} d_i - a_i \bar{d}_{i-1} \end{aligned}$$

Una condición suficiente para el algoritmo

La hipótesis de que podemos dividir entre $\bar{b}_i$ es esencial.

Una condición suficiente es que la matriz sea estrictamente diagonal dominante, es decir,

$$|b_1| > |c_1|, \quad |b_n| > |a_n|, \quad |b_i| > |a_i| + |c_i| \qquad i = 1, 2, \dots, n,$$

Esto garantiza que $\bar{b}_i \neq 0$:

Tenemos que $|\bar{b}_1| = |b_1| > |c_1| \geq 0$. Supongamos que $|\bar{b}_i| > |\bar{c}_i|$ para $i = 1, \dots, k < n$. Entonces

$$\begin{aligned}
|\bar{b}_{k+1}| &= |\bar{b}_k b_{k+1} - a_{k+1}\bar{c}_k| \geq |\bar{b}_k|\,|b_{k+1}| - |a_{k+1}|\,|\bar{c}_k| \\
&> |\bar{b}_k|(|a_{k+1}| + |c_{k+1}|) - |a_{k+1}|\,|\bar{c}_k| = |a_{k+1}|(|\bar{b}_k| - |\bar{c}_k|) + |\bar{b}_k||c_{k+1}| \\
&\geq |\bar{b}_k||c_{k+1}| \geq 0
\end{aligned}$$

Como $|\bar{b}_k||c_{k+1}| = |\bar{c}_{k+1}|$, se tiene que

$$|\bar{b}_{k+1}| > |\bar{c}_{k+1}| \quad \text{esto es} \quad |\bar{b}_{k+1}| > 0.$$

Una condición suficiente para el algoritmo

También se puede mostrar que el $\bar{b}_i \neq 0$ si la matriz es diagonal dominante y que $a_i \neq 0$ y $c_i \neq 0$.

.

Ejemplo. Consideremos la matriz de tamaño 100 de la forma

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Primero se calculan los valores $\bar{b}_i, \bar{c}_i$ y $\bar{d}_i$ para $i = 1, 2, \ldots, n$ y luego se calculan los elementos x_i de la solución:

$$\boldsymbol{x} = (0.5, 0.5, \ldots, 0.5)^\top.$$

Matrices bandadas (I)

Proposición 1

Sea $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Supongamos que existe la factorización LU de $\boldsymbol{A}$. Si $\boldsymbol{A}$ tiene un ancho de banda superior q y un ancho de banda inferior p, entonces $\boldsymbol{L}$ un ancho de banda inferior p y $\boldsymbol{U}$ tiene un ancho de banda q.

Este resultado implica que el mismo espacio usado para almacenar la matriz $\boldsymbol{A}$ puede ser usado para almacenar su factorización LU.
Para almacenar la matriz $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ se puede usar una matriz $\boldsymbol{B} = [b_{ij}]$ de tamaño $n \times (p+q+1)$, con sus elementos

$$b_{i,j-i+q+1} = a_{ij}.$$

Por ejemplo, para una matriz tridiagonal con $p = q = 1$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix} \implies \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 0 & a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{54} & a_{55} & 0 \end{bmatrix}$$