

Curso de Métodos Numéricos

DEMAT, Universidad de Guanajuato

Clase 8: Métodos directos para matrices simétricas y tridiagonales

- Matrices simétricas definidas positivas.
- Factorización \mathbf{LDL}^T .
- 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

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

Proposición 1

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

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

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

Matrices simétricas definidas positivas (II)

Proposición 2

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

Proposición 3

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

Proposición 4

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

Sea \mathbf{A} una matriz no singular y simétrica.

Si $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, con \mathbf{L} teniendo 1's en la diagonal. Entonces,

$$\mathbf{LU} = \mathbf{A} = \mathbf{A}^T = (\mathbf{LU})^T = \mathbf{U}^T \mathbf{L}^T$$

Sea \mathbf{A} una matriz no singular y simétrica.

Si $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, con \mathbf{L} teniendo 1's en la diagonal. Entonces,

$$\mathbf{LU} = \mathbf{A} = \mathbf{A}^T = (\mathbf{LU})^T = \mathbf{U}^T \mathbf{L}^T$$

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

$$\mathbf{U}(\mathbf{L}^T)^{-1} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{U}^T$$

Sea \mathbf{A} una matriz no singular y simétrica.

Si $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, con \mathbf{L} teniendo 1's en la diagonal. Entonces,

$$\mathbf{LU} = \mathbf{A} = \mathbf{A}^T = (\mathbf{LU})^T = \mathbf{U}^T \mathbf{L}^T$$

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

$$\mathbf{U}(\mathbf{L}^T)^{-1} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{U}^T$$

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 $\mathbf{U}(\mathbf{L}^T)^{-1} = \mathbf{D}$, y

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU} = \mathbf{LDL}^T.$$

Algoritmo para la factorización LDL^T (I)

Sea $\mathbf{L} = [l_{ij}]$ y $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$. 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^T (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

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{d_1} \quad i = 2, \dots, n.$$

Algoritmo para la factorización LDL^T (III)

Algoritmo 1: Algoritmo LDL^T

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

Resultado: Las matrices \mathbf{L} y \mathbf{D} .

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

$l_{jj} = 1$;

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

for $i = j + 1, \dots, n$ **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^T (I)

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

Esta matriz tiene la siguiente factorización LU :

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

Determinar la factorización LDL^T .

Factorización de Cholesky (I)

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

Proposición

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

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

Podemos mostrar que \mathbf{D} es definida positiva.

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

$$\mathbf{D}^{1/2} = \text{diag}(\sqrt{d_1}, \dots, \sqrt{d_n}).$$

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

Factorización de Cholesky (II)

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T = \mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{L}^T = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}^T \quad \text{con} \quad \hat{\mathbf{L}} = \mathbf{L}\mathbf{D}^{1/2}.$$

Algoritmo de la factorización de Cholesky (I)

Algoritmo 2: Factorización de Cholesky LL^T

Entrada: Una $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ s.p.d y su tamaño n .

Resultado: La matriz \mathbf{L} .

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

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

for $i = j + 1, \dots, n$ **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)

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

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

Proposición

Las siguientes proposiciones son equivalentes:

- ① **A** es s.d.p.
- ② El proceso de eliminación Gaussiana se puede realizar sin intercambiar las filas del sistema **Ax = b**.
- ③ **A** se puede factorizar como **LL^T**, donde **L** es triangular inferior con entradas positivas en la diagonal.
- ④ **A** se puede factorizar como **LDL^T**, donde **L** es triangular inferior con 1's en la diagonal y **D** > 0 diagonal.

Matriz diagonal dominante

Definición

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

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

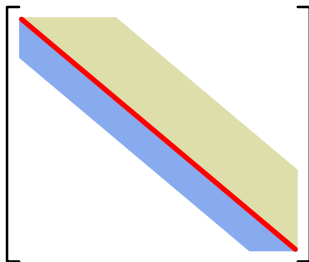
Si se cumple la desigualdad

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

se dice que \mathbf{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

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{d}$$

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

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

es decir, es tridiagonal.

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

Solución del sistema tridiagonal (I)

Tenemos que

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

De las dos primeras ecuaciones

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

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

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

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

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

Si

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

Solución del sistema tridiagonal (III)

$$\bar{b}_i x_i + \bar{c}_i x_{i+1} = \bar{d}_i \quad i = 2, \dots, n-1$$

$$\bar{b}_i = \bar{b}_{i-1} b_i - a_i \bar{c}_{i-1}$$

$$\bar{c}_i = \bar{b}_{i-1} c_i$$

$$\bar{d}_i = \bar{b}_{i-1} d_i - a_i \bar{d}_{i-1}$$

Finalmente, para $i = n$,

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

$$(\bar{b}_{n-1} b_n - a_n \bar{c}_{n-1}) x_n = \bar{b}_{n-1} d_n - a_n \bar{d}_{n-1}$$

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)

$$x_i = \frac{\bar{d}_i - \bar{c}_i x_{i+1}}{\bar{b}_i} \quad i = n-1, \dots, 1$$

$$\bar{b}_i = \bar{b}_{i-1} b_i - a_i \bar{c}_{i-1}$$

$$\bar{c}_i = \bar{b}_{i-1} c_i$$

$$\bar{d}_i = \bar{b}_{i-1} d_i - a_i \bar{d}_{i-1}$$

Matrices tridiagonales (I)

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

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

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

Matrices tridiagonales (II)

Definimos

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

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

$$x_i = \frac{\bar{d}_i - \bar{c}_i x_{i+1}}{\bar{b}_i} \quad i = n-1, \dots, 1$$

$$\bar{b}_i = \bar{b}_{i-1}b_i - a_i\bar{c}_{i-1}$$

$$\bar{c}_i = \bar{b}_{i-1}c_i$$

$$\bar{d}_i = \bar{b}_{i-1}d_i - a_i\bar{d}_{i-1}$$

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,

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

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

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,

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

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

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

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

$$\mathbf{x} = (0.5, 0.5, \dots, 0.5)^T.$$

Proposición 1

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

Este resultado implica que el mismo espacio usado para almacenar la matriz \mathbf{A} puede ser usado para almacenar su factorización LU.

Para almacenar la matriz $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ se puede usar una matriz $\mathbf{B} = [b_{ij}]$ 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 $p = q = 1$

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