Métodos Directos

de resolución de SEAL

Victorio E. Sonzogni

CIMEC Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería

INTEC, CONICET-UNL

FICH, UNL

Santa Fe, Argentina

Sistema de ecuaciones lineales

Un sistema de ecuaciones algebraicas lineales

$$\begin{aligned}
E_1 : \quad a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
E_2 : \quad a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
\ldots \\
E_n : \quad a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \ldots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}$$

puede representarse matricialmente:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- $\mathbf{x}$ es un vector conteniendo n incógnitas;
- $\mathbf{A}$ una matriz cuadrada de $n \times n$ con los coeficientes del sistema;
- $\mathbf{b}$ un vector con los términos independientes,

Sistemas de ecuaciones lineales

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Sistemas de ecuaciones lineales

- La resolución de un SEAL puede realizarse de diferentes maneras.
- Los métodos *directos*
- Los métodos *iterativos*

Sistema de ecuaciones

- Sistemas equivalentes:
  Dos sistemas $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ y $\mathbf{Bx} = \mathbf{d}$ se dicen equivalentes si tienen la misma solución $\mathbf{x}$
- Se puede demostrar que realizando una serie de *operaciones elementales* sobre un SEAL se obtiene otro equivalente.
- Operaciones elementales:
  - Intercambio de 2 ecuaciones: $E_i \leftrightarrow E_j$
  - Multiplicación de una ec. por un escalar ($\neq 0$): $\lambda E_i \to E_i$
  - Sumar a una ec. un multiplo de otra: $E_i + \lambda E_j \leftrightarrow E_i$

Métodos directos

- Hay métodos que se basan en transformar un SEAL mediante operaciones elementales de modo de obtener un sistema equivalente, más fácil de resolver.
- Sistemas más fáciles para resolver.
  - Sistemas con matrices diagonales
  - Sistemas con matrices triangulares

Sistemas con matrices diagonales

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Su resolución es trivial. La solución es:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} b_1/a_{11} \\ b_2/a_{22} \\ \vdots \\ b_n/a_{nn} \end{bmatrix}$$

Sistemas con matrices triangulares

Para un sistema con matriz triangular superior:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

La resolución comienza con el término x_n y progresa hacia arriba

$x_n = b_n/a_{nn}$

$x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n)/a_{n-1,n-1}$

$\dots$

$x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j)/a_{ii} \qquad \text{para i} = \text{n} - 1, \dots 1$

Análogamente se resuelve un sistema con matriz triangular inferior.

Eliminación de Gauss

- Un método basado en esta transformación del sistema de ecuaciones es el método de Eliminación de Gauss
- Se basa en realizar una serie de transformaciones sobre el sistema de modo de obtener un sistema equivalente, con matriz triangular.
- En un sistema de de n ecuaciones se efectuan $n-1$ pasos de eliminación.
- La matriz $\mathbf{A}$ del sistema, va siendo transformada en matrices $\mathbf{A}^{(\mathbf{k})}$ en cada paso k de la eliminación.
- El vector de términos independientes va transformándose también en sucesivos vectores $\mathbf{b}^{(\mathbf{k})}$
- Se introducirá el método a través de un ejemplo sencillo.

Eliminación de Gauss

Ejemplo:

$$\begin{array}{l} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \end{array} \quad \begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 12 & -8 & 6 & 10 \\ 3 & -13 & 9 & 3 \\ -6 & 4 & 1 & -18 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 34 \\ 27 \\ -38 \end{bmatrix}$$

Se propone transformar el sistema en varios pasos

En el primer paso se propone un sistema:

$$\begin{array}{l} E_1 \\ E_2 - 2E_1 \\ E_3 - \frac{1}{2}E_1 \\ E_4 - (-1)E_1 \end{array} \quad \begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & -12 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ 21 \\ -26 \end{bmatrix}$$

Eliminación de Gauss

En el segundo paso se propone un sistema:

$$
\begin{array}{l}
E_1 \\
E_2 \\
E_3 - 3E_2 \\
E_4 - (-\frac{1}{2})E_2
\end{array}
\qquad
\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 4 & -13 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -21 \end{bmatrix}
$$

En el tercer paso:

$$
\begin{array}{l}
E_1 \\
E_2 \\
E_3 \\
E_4 - 2E_3
\end{array}
\qquad
\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -3 \end{bmatrix}
$$

Eliminación de Gauss

- El sistema ha quedado transformado en uno equivalente con matriz triangular superior, que es más sencillo para resolver.
- La solución del sistema triangular se realiza por retrosustitución, dando:

$$
\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ -3 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

Eliminación de Gauss

- Se forma una sucesión de sistemas con matrices $\mathbf{A}^{(k)}$
- En el paso k la $k - esima$ fila queda inalterada, igual que las filas superiores a ella. Se modifican las filas inferiores.
- En el paso k el elemento a_{kk} se denomina *pivote*. La fila k se llama *fila pivote* y la columna k *columna pivote*

Eliminación de Gauss

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cccccccc} & & & col.k & & col.j & & \end{array} \\ \begin{array}{r} \\ \\ fila\ k \\ \\ fila\ i \\ \\ \\ \end{array} & \begin{bmatrix} a_{11}^{(k)} & \ldots & a_{1,k-1}^{(k)} & a_{1k}^{(k)} & \ldots & a_{1j}^{(k)} & \ldots & a_{1n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & a_{kk}^{(k)} & \ldots & a_{kj}^{(k)} & \ldots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & a_{ik}^{(k)} & \ldots & a_{ij}^{(k)} & \ldots & a_{in}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & a_{nk}^{(k)} & \ldots & a_{nj}^{(k)} & \ldots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \end{array}$$

Eliminación de Gauss

Los elementos de la matriz $\mathbf{A}^{(k+1)}$ se calculan:

$$a_{ij}^{(k+1)} = \begin{cases} a_{ij}^{(k)} & si \quad i \leq k \\ a_{ij}^{(k)} - \left(\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \right) a_{kj}^{(k)} & si \quad i \geq k+1 \;\; y \;\; j \geq k+1 \\ 0 & si \quad i \geq k+1 \;\; y \;\; j \leq k \end{cases}$$

Algoritmo para eliminación de Gauss

Input: n, $\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A} \;\; \mathbf{b}]$
Output: x, o mensaje de error

Eliminacion

for $k = 1, 2, \ldots n-1$ do
    for $i = k+1, k+2, \ldots n$ do
        $m \;\leftarrow\; a_{ik}/a_{kk}$
        $a_{ik} \;\leftarrow\; 0$
        for $j = k+1, k+2, \ldots n+1$ do
            $a_{ij} \;\leftarrow\; a_{ij} - m\, a_{kj}$
        end
    end
end

Algoritmo para eliminación de Gauss (cont.)

if $a_{nn} = 0 \quad \rightarrow$ mens. error: 'no hay sol. unica'

Retrosustitucion

$x_n \;=\; a_{n,n+1}/a_{nn}$
for $i = n-1, n-2, \ldots 1$ do
    $s \;\leftarrow\; a_{i,n+1}$
    for $j = i+1, i+2, \ldots n$ do
        $s \;\leftarrow\; s \;-\; a_{ij}x_j$
    end
    $x_i \;\leftarrow\; s/a_{ii}$
end

Factorización LU

Una forma de abordar la solución de $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ es *factorizar* la matriz. Es decir buscar

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

donde $\mathbf{L}$ y $\mathbf{U}$ son matrices triangulares inferior y superior, respectivamente, tales que multiplicadas dan la matriz $\mathbf{A}$
Si se tiene esa factorización, el sistema se puede escribir:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{b}$$

LLamando

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$$

El sistema queda

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$$

De esta última ecuación se obtiene el vector $\mathbf{y}$ y de la anterior, el vector $\mathbf{x}$

Factorización LU

La solución se hace entonces en tres etapas:

1. Factorización de la matriz
$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$$
2. Solución del sistema
$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$$
por sustitución hacia adelante
3. Solución del sistema
$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$$
por sustitución hacia atrás

Factorización LU

- La factorización $\mathbf{LU}$ no es única
- Factorización de Doolittle: los términos de la diagonal de $\mathbf{L}$ son unitarios
- Factorización de Crout: los términos de la diagonal de $\mathbf{U}$ son unitarios

Factorización LU

- Si se observa el ejemplo de eliminación de Gauss, puede verse que en la primera etapa el sistema se construyó:

$$
\begin{aligned}
&E_1 \\
&E_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} E_1 \\
&E_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}} E_1 \\
&E_4 - \frac{a_{41}}{a_{11}} E_1
\end{aligned}
$$

- En la segunda:

$$
\begin{aligned}
&E_1 \\
&E_2 \\
&E_3 - \frac{a_{32}}{a_2} E_2 \\
&E_4 - \frac{a_{42}}{a_{22}} E_2
\end{aligned}
$$

Factorización LU

- En la tercera etapa:

$$
\begin{aligned}
&E_1 \\
&E_2 \\
&E_3 \\
&E_4 - \frac{a_{43}}{a_{33}} E_3
\end{aligned}
$$

- Los multiplicadores usados pueden colocarse para formar una matriz triangular inferior:

$$
\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & \frac{a_{32}}{a_{22}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{41}}{a_{11}} & \frac{a_{32}}{a_{22}} & \frac{a_{43}}{a_{33}} & 1 \end{bmatrix}
$$

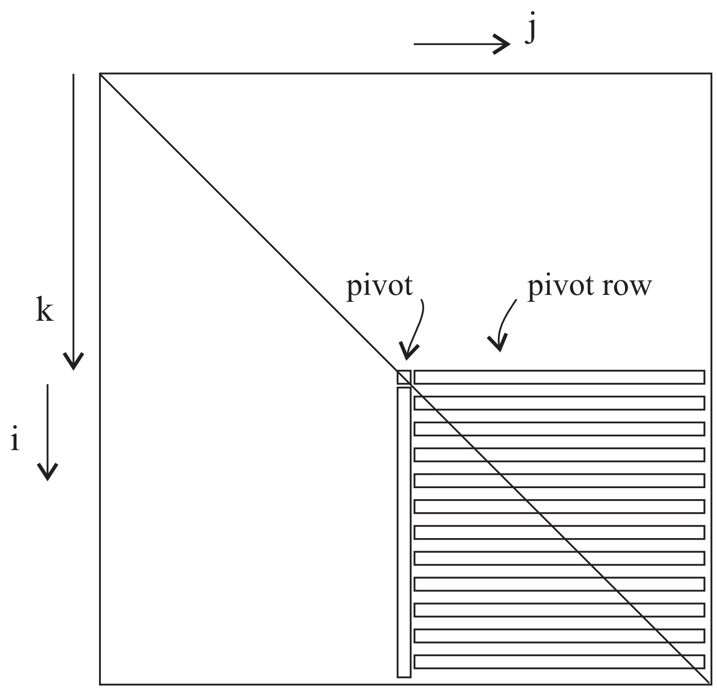
Factorización LU

- Si se define
$$\mathbf{U} = \mathbf{A}^{(n-1)}$$
siendo esta la última matriz obtenida en el proceso de eliminación de Gauss. Ésta matriz, junto con la matriz triangular inferior $\mathbf{L}$ de la transparencia anterior, son los factores de la matriz $\mathbf{A}$.
- Teorema: Si todos los elementos $a_{kk}^{(k)}$ de la descomposicion de Gauss son distintos de cero, entonces $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, donde $\mathbf{L}$ y $\mathbf{U}$, son las matrices triangulares recién definidas.
- Siguiendo las operaciones como en el algoritmo de eliminación de Gauss, el algoritmo para descomposición $\mathbf{LU}$ se muestra a continuación.
- Las matrices $\mathbf{L}$ y $\mathbf{U}$ se almacenan sobre la matriz original $\mathbf{A}$. (La diagonal de $\mathbf{L}$ no precisa almacenarse pues son todos 1).

Factorización LU kij

for $k = 1, 2, \ldots n-1$ do *fila pivotal*
    for $i = k+1, \ldots n$ do
        $s \leftarrow a_{ik}/a_{kk}$
        $a_{ik} \leftarrow s$ l_{ik}
        for $j = k+1, \ldots n$ do
            $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - s\, a_{kj}$ u_{ij}
        end
    end
end

Factorización LU kij



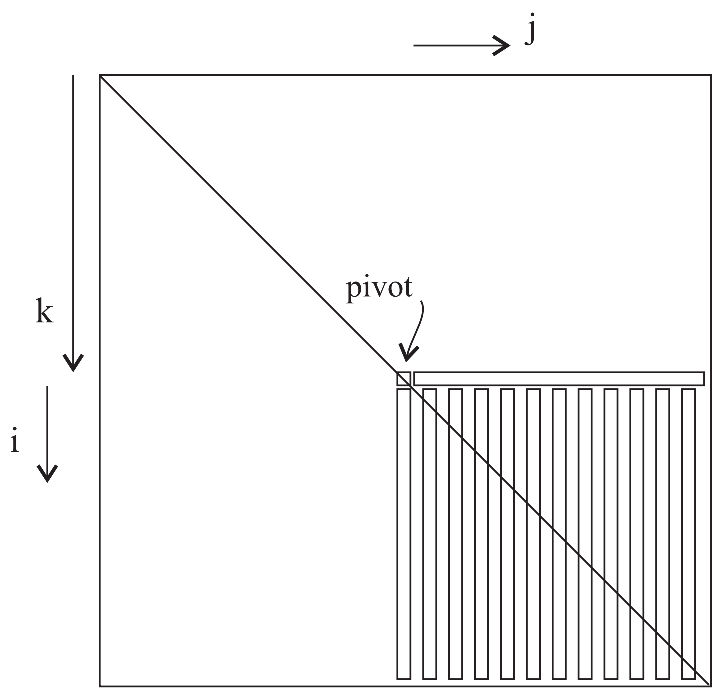
Factorización LU

- Para cada etapa, parándose en el pivot (índice k), se inicia un ciclo sobre las filas (índice i), y otro sobre las columnas (índice j).
- Por debajo del pivot (a_{kk}) queda formada una columna de la matriz $\mathbf{L}$.
- A la derecha de la diagonal va quedando formada la matriz $\mathbf{U}$.
- Esta descomposición puede hacerse de distintas formas. La indicada se denomina kij por el orden en que se realizaron las cuentas.
- A continuación se muestran las factorizacions kji y jki

Factorización LU kji

for $k = 1, \dots n-1$ do
  for $i = k+1, \dots n$ do
    $s \;\leftarrow\; a_{ik}/a_{kk}$
    $a_{ik} \;\leftarrow\; s$ l_{ik}
  end
  for $j = k+1, \dots n$ do
    for $i = k+1, \dots n$ do
      $a_{ij} \;\leftarrow\; a_{ij} - a_{ik}\, a_{kj}$ u_{ij}
    end
  end
end

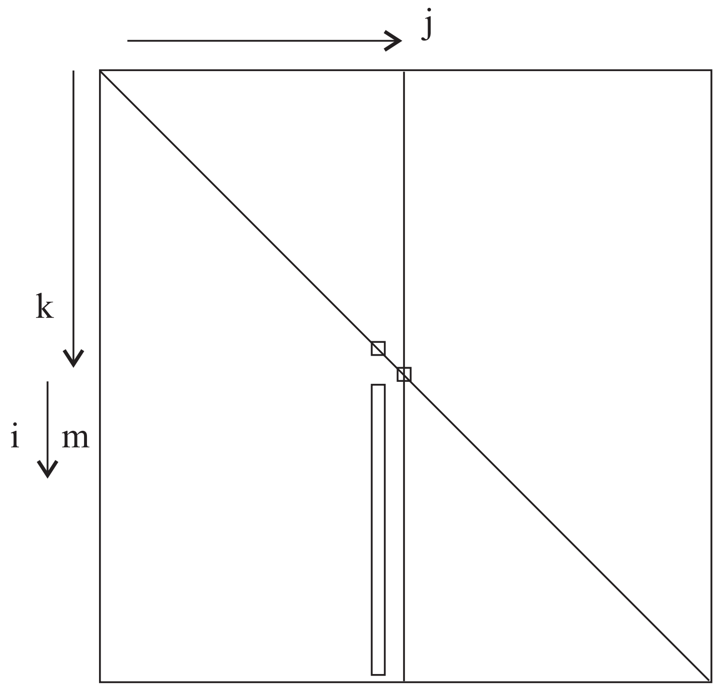
Factorización LU kji



Factorización LU jki

for $j = 2, \ldots n$ do
  for $m = j, \ldots n$ do
    $s \leftarrow a_{m,j-1}/a_{j-1,j-1}$
    $a_{m,j-1} \leftarrow s$ l_{mk}
  end
  for $k = 1, \ldots j-1$ do
    for $i = k+1, \ldots n$ do
      $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik}\, a_{kj}$ u_{ij}
    end
  end
end

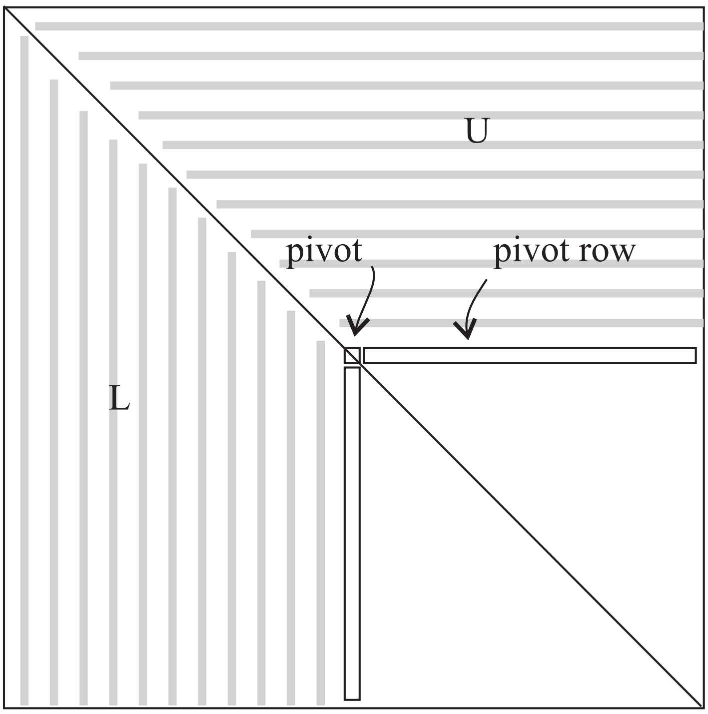
Factorización LU jki



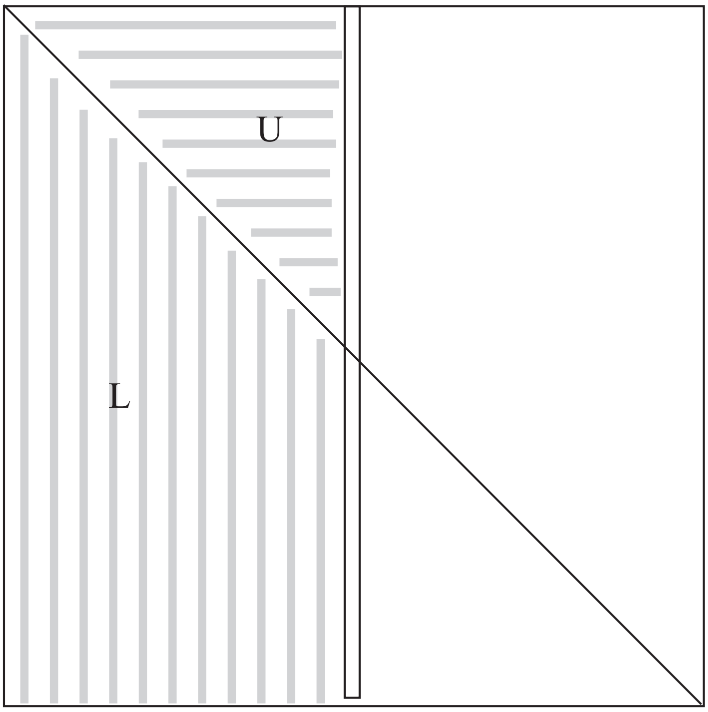
Factorización LU

- En realidad los tres ciclos imbricados pueden recorrerse de 6, maneras diferentes:
  - kij
  - kji
  - ijk
  - ikj
  - jik
  - jki

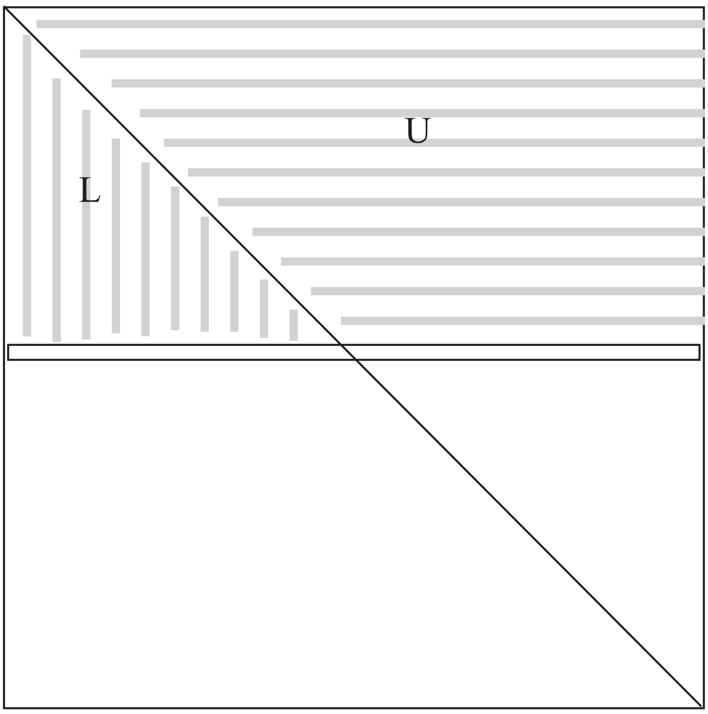
Factorización LU kij y kji



Factorización LU jik y jki



Factorización LU ikj y ijk



Pivoteo

- La factorización descripta puede fallar si alguno de los pivotes (a_{kk}) es cero o un numero muy pequeño.
- Ejemplo:

  Sea el sistema:

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \qquad \text{con } \epsilon << 1$$

  aplicando el método de Gauss

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 0 & 1-\epsilon^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2-\epsilon^{-1} \end{bmatrix}$$

  y de allí puede obtenerse

$$x_2 = \frac{2-\epsilon^{-1}}{1-\epsilon^{-1}} \simeq 1$$

$$x_1 = (1-x_2)\,\epsilon^{-1} \simeq 0$$

Pivoteo

La solución correcta debería ser

$$x_1 = \frac{1}{1-\epsilon} \simeq 1$$

$$x_2 = \frac{1-2\epsilon}{1-\epsilon} \simeq 1$$

La solución numérica es exacta para x_2, pero no para x_1.
El problema se da cuando a_{kk}, de la diagonal, es pequeño frente a los otros coeficientes de la columna.
Si se intercambian filas, no hay error numérico y los resultados son correctos.

- Si ello ocurre puede remediarse intercambiando las filas de la matriz para evitar que ese término (nulo o muy pequeño) quede en la diagonal.
- Hay dos maneras de realizar esos cambios en la matriz: *pivoteo total* o *parcial*
- El pivoteo parcial se describe a continuación.
- En realidad las filas no se intercambian físicamente. Se mantiene un vector $\mathbf{r}$ que indica el orden en que se ha realizado la factorización.

Factorización kij con pivoteo parcial

```
for i = 1,...n do
    r_i = i
end
for k = 1,...n-1 do                                  fila pivotal
    buscar p ∈ {k, k+1,...n}
        tal que |a_{r_p k}| = max_{k≤i≤n} |a_{r_i k}|
    if a_{r_p k} = 0  →  mensaje de error
    if r_p ≠ r_k
            z ← r_p
            r_p ← r_k
            r_k ← z

    for i = k+1,...n do
        s ← a_{r_i k}/a_{r_k k}
        a_{r_i k} ← s
        for j = k+1,...n do
            a_{r_i j} ← a_{r_i j} − s a_{r_k j}
        end
    end
end
```


Solución con pivoteo parcial

- El intercambio de filas equivale a afectar a la matriz con una matriz de permutación P, que es el producto de las matrices de permutación de cada paso k.
- De modo que la factorización se ha hecho para

$$PA = LU$$

- El sistema a resolver es

$$PAx = Pb$$

$$LUx = Pb$$

- y puede escribirse:

$$Ly = Pb$$

$$Ux = y$$

Pivoteo parcial escalado

- A veces el pivoteo parcial no alcanza. Si el término de la diagonal es pequeño frente a los de su fila, no debería ser pivote.
- En el pivoteo parcial escalado se elige el mayor valor absoluto de los a_{ij} en cada fila

$$s_i = \max_{j=1,n} |a_{ij}|$$

la fila pivotal se elige:

se busca $p \in \{k, k+1, \dots n\}$ tal que $\dfrac{|a_{r_p k}|}{s_{r_p}} = \max_{k \le i \le n} \dfrac{|a_{r_i k}|}{s_{r_i}}$

Algoritmo fact. LU con pivoteo parcial escalado

Input: n, $\mathbf{A}$
Output: $\mathbf{L}$ y $\mathbf{U}$ (sobre $\mathbf{A}$)
for $i = 1, 2, \dots n$ do
  $s_i = \max_{i \le j \le n} |a_{ij}|$
  $r_i = i$
end
for $k = 1, 2, \dots n-1$ do *fila pivotal*
  se busca $p \in \{k, k+1, \dots n\}$ tal que $\dfrac{|a_{r_p k}|}{s_{r_p}} = \max_{k \le i \le n} \dfrac{|a_{r_i k}|}{s_{r_i}}$
  si $a_{r_p k} = 0 \;\rightarrow$ mensaje de error y termina.
  si $r_p \neq r_k$
    $x \leftarrow r_p$
    $r_p \leftarrow r_k$
    $r_k \leftarrow x$
  for $i = k+1, k+2, \dots n$ do
    $m \leftarrow a_{r_i k}/a_{r_k k}$
    $a_{r_i k} \leftarrow m$
    for $j = k+1, k+2, \dots n$ do
      $a_{r_i j} \leftarrow a_{r_i j} - m\, a_{r_k j}$
    end
  end
end

Conteo de operaciones

Solucíon directa por método LU

La factorización

- Para la primera fila pivotal se requieren n multiplicaciones y n sumas. Esas n operaciones se hacen para las $(n-1)$ filas o sea: $n(n-1)$ flops. (flop = FLoating point OPerations). Es decir que para la primera fila pivotal se realizan del orden de n^2 flops.
- A medida que avanza el proceso (la fila pivotal) se hacen las mismas cuentas con matrices cada vez menores. En total:

$$n^2+(n-1)^2+(n-2)^2+\ldots+3^2+2^2 \;=\; \frac{1}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2+\frac{1}{6}n \;\simeq\; \frac{1}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2$$

flops.

(Aquí se usó el hecho de que: $\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$)

- Si n es grande, n^3 es dominante, y entonces la factorización LU requiere $\sim \frac{1}{3}n^3$ flops.

Conteo de operaciones

La actualización del vector **b**

- Son $(n-1)$. En el primero hay $(n-1)$ flops; en el segundo $(n-2)$; en el tercero $(n-3)$; y así.
Luego

$$(n-1)+(n-2)+\ldots+1 \;=\; \frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n$$

(Aquí se usó el hecho de que: $\sum_{k=1}^{n} k = \frac{1}{2}n(n+1)$)

La retrosustitución

- Hay 1 flop para calcular la incógnita x_n; 2 flops para calcular x_{n-1}; etc. Luego son:

$$1+2+3+\ldots+n \;=\; \frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n$$

Conteo de operaciones

En resumen:

- para factorizar: $\frac{1}{3}n^3$
- para las 2 sustituciones: n^2

Por eso, si hay varios vectores **b**, conviene hacer la factorización de la matriz, una sola vez ($\frac{1}{3}n^3$ flops) y luego hacer varias veces las sustituciones (n^2 flops).

Factorización de Cholesky

Sea $\mathbf{A}$ matriz real, simétrica y definida positiva.

Definición: Una matriz $\mathbf{A}$ es *definida positiva*, si:

$$\mathbf{x}^{\mathbf{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} > 0 \qquad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Obs: Una matriz B no simétrica es positiva definida si y solo si su parte simétrica $\frac{1}{2}(B + B^T)$ lo es

Teorema: Si $\mathbf{A}$ es definida positiva, entonces:

a) no es singular

b) $a_{ii} > 0 \qquad \forall i$

c) $\max\limits_{\substack{1\le i\le n\\1\le j\le n}} |a_{ij}| \le \max\limits_{1\le i\le n} |a_{ii}|$

d) $a_{ij}^2 < a_{ii}a_{jj} \qquad \forall i \neq j$

Factorización de Cholesky

<u>Teorema</u>: Si $\mathbf{A}$ es matriz real, simétrica y definida positiva, entonces tiene una factorización *única* $\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{C}^{\mathbf{T}}$, donde $\mathbf{C}$ es matriz triangular inferior con diagonal positiva.
Demostración:

Como $\mathbf{A}$ es simétrica (o sea $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$):

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{A}^{\mathbf{T}} = \mathbf{U}^{\mathbf{T}}\mathbf{L}^{\mathbf{T}}$$

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

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

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

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

el miembro izquierdo es una matriz triangular superior y el derecho una triangular inferior. Esto es así dado que se puede demostrar que la inversa de una matriz triangular es también triangular, y si la matriz tiene 1 en su diagonal, también los tiene su inversa. Además el producto de dos matrices triangulares superiores es también una matriz triangular superior.

Factorización de Cholesky

Así, deben ser ambos miembros matrices diagonales.

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

luego:

$$\mathbf{U} = \mathbf{D}\mathbf{L}^{\mathbf{T}}$$

y entonces

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^{\mathbf{T}}$$

Puede demostrarse que $\mathbf{M}$ es una matriz definida positiva y $\mathbf{N}$ no es singular, si y solo is $\mathbf{N}\mathbf{M}\mathbf{N}^{\mathbf{T}}$ es definida positiva. Los términos de $\mathbf{D}$ son positivos.
Haciendo:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}$$

se puede escribir:

$$\boxed{\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{C}^{\mathbf{T}}}$$

donde $\mathbf{C} = \mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}$

La factorización de Cholesky es un caso particular de la factorización LU. En lugar de tener 1 en la diagonal, tiene $\sqrt{d_{ii}}$.

Factorización de Cholesky

Input: n, $\mathbf{A}$ (simétrica, definida positiva)

Output: $\mathbf{C}$ (sobreescrita en el triángulo inferior de $\mathbf{A}$)

$c_{11} \leftarrow \sqrt{a_{11}}$

for $i = 2, \ldots n$ do

  $c_{i1} \leftarrow a_{i1}/c_{11}$

end

for $i = 2, \ldots n-1$ do

$$c_{ii} \leftarrow \left(a_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} l_{is}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

  for $j = i+1, i+2, \ldots n$ do

$$c_{ji} \leftarrow \left(a_{ji} - \sum_{s=1}^{i-1} c_{js} c_{is} \right) / c_{ii}$$

  end

end

$$c_{nn} \leftarrow \left(a_{nn} - \sum_{s=1}^{n-1} c_{ns}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Normas Vectoriales

- Una *norma* para un espacio vectorial V es una función que, aplicada a un vector, da un escalar no nulo, tal que:
  1. $\|\mathbf{x}\| > 0$ si $\mathbf{x} \neq 0, \mathbf{x} \in V$
  2. $\|\lambda \mathbf{x}\| = |\lambda| \|\mathbf{x}\|$ para $\lambda \in \mathbb{R}, \mathbf{x} \in V$
  3. $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ si $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$
- Algunas normas para vectores:
  - Norma Euclídea

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

  - Norma Infinito

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{i=1} |x_i|$$

  - Norma L_1

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

Normas Vectoriales

- Para un vector en $\mathbb{R}^2$:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

la norma euclidea es el módulo del vector.

- Por ejemplo para un vector $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$, será:

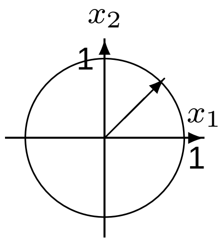
$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{2}$$

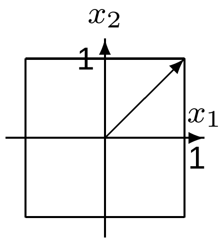
$$\|\mathbf{x}\|_\infty = 1$$

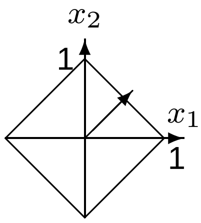
$$\|\mathbf{x}\|_1 = 2$$

Normas Vectoriales

- Todos los vectores en $\mathbb{R}^2$ de $\|\mathbf{x}\|_2 = 1$ tienen su extremo en un círculo (figura de la izq.).
- Todos los vectores en RR^2 de $\|\mathbf{x}\|_\infty = 1$ tienen su extremo en un cuadrado de lado 2 (figura central).
- Todos los vectores en $\mathbb{R}^2$ de $\|\mathbf{x}\|_1 = 1$ tienen su extremo en un cuadrado de lado $\sqrt{2}$ (figura de la derecha).







Normas Matriciales

- Una norma para matrices, debe cumplir las tres condiciones mencionadas. Se la suele definir subordinada o asociada a una definición de norma vectorial

$$\|\mathbf{A}\| = sup\{\ \|\mathbf{Au}\|\ \ : \mathbf{u} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{u}\| = 1\}$$

- Puede verificarse que esta definición cumple las tres condiciones pedidas. Además, de la definición surge una importante consecuencia:

$$\|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|$$

<u>Demostración</u>:
Para $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, se verifica.

Normas Matriciales

Para $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$,

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}, \text{es tal que} \|\mathbf{v}\| = 1$$

De la definición de norma matricial:

$$\|\mathbf{A}\| \geq \|\mathbf{Av}\| = \|\frac{1}{\|\mathbf{x}\|}\mathbf{Ax}\| = \frac{1}{\|\mathbf{x}\|}\|\mathbf{Ax}\|$$

Luego

$$\|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\| \qquad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Lo que completa la demostración.

Normas Matriciales

- Además de las condiciones (1) a (3), la norma matricial subordinada verifica:
  - $\|\mathbf{I}\| = 1$ ($\mathbf{I}$ matriz identidad)
  - $\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\|$
- Ejemplo:
  Para la norma vectorial $\|.\|_\infty$:

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} |x_i|$$

la norma matricial subordinada es:

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

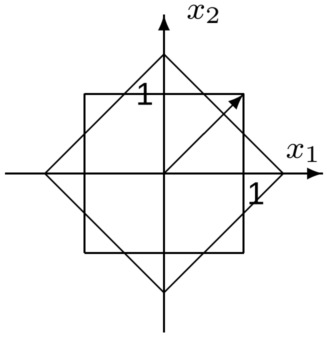
Normas Matriciales

Ejemplos:

- Una transformación de un vector puede mirarse como una matriz.
- La matriz identidad $\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ mantiene inalterado al vector.
- Una matriz $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ por ejemplo cuando multiplicada por un vector, duplica las componentes según x_1. O sea lo *estira* al doble en el sentido de ese eje.
- Una matriz $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}$ cuando multiplicada por un vector, lo hace rotar un ángulo α.

Normas Matriciales

- Supóngase una matriz de rotación con $\alpha = 45^o$:
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$
- La norma infinito es: $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \sqrt{2}$
- Todos los vectores de norma inf. unitaria estan sobre un cuadrado. Al rotar 45^o el de mayor norma inf. es $\sqrt{2}$



Número de condición

- Sea $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Supóngase que existe $\mathbf{A}^{-1}$. Luego
$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$
- Considérese el caso en que se perturba el vector $\mathbf{b}$. En su lugar se tiene $\tilde{\mathbf{b}}$. La solución será:
$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{b}}$$

  El error absoluto es: $\mathbf{e} = \mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}$
  La norma del error absoluto:
$$\|\mathbf{e}\| = \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\| = \|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{b}}\| = \|\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}})\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|$$

  El error relativo
$$\frac{\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|(\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}})\| \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{b}\|} \frac{\mathbf{1}}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\| \frac{\|(\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}})\|}{\|\mathbf{b}\|} \frac{\|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Número de condición

Que puede escribirse:

$$\frac{\|\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \kappa(\mathbf{A})\frac{\|(\mathbf{b}-\tilde{\mathbf{b}})\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

- Se ha definido el **número de condición**:

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\|$$

- Si el número de condición es pequeño, una pequeña perturbación en los datos ($\mathbf{b}$) produce errores relativos pequeños en la solución.
- Si el número de condición es grande el error en la solución es grande.

Número de condición

- Ejemplo: Sea

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1+\epsilon \\ 1-\epsilon & 1 \end{bmatrix}$$

con $\epsilon > 0$.

$$\mathbf{A}^{-1} = \epsilon^{-2}\begin{bmatrix} 1 & -1-\epsilon \\ -1+\epsilon & 1 \end{bmatrix}$$

Usando $\|.\|_\infty$:

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = 2+\epsilon \qquad \text{y} \qquad \|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty = (2+\epsilon)\epsilon^{-2}$$

$$\kappa(\mathbf{A}) = \frac{(2+\epsilon)^2}{\epsilon^2} > \frac{4}{\epsilon^2}$$

Si $\epsilon = 0.01 \rightarrow \kappa(\mathbf{A}) > 4 \times 10^4$
Un error en los datos produce errores 40.000 veces mayor en la solución.

Número de condición

- Una solución aproximada tiene un error: $\mathbf{e} = \mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}$
- De la ecuación se obtiene $\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = \mathbf{0}$, pero si se reemplaza $\mathbf{x}$ por $\tilde{\mathbf{x}}$ se tiene $\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b} = \mathbf{r}$
- Allí $\mathbf{r}$ es el residuo, definido también como: $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}$
- Restando $\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = \mathbf{0}$ y $\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{0}$ se obtiene:

$$\mathbf{Ae} = \mathbf{r}$$

- Los errores relativos de los datos y la solución están relacionados
- Puede verse que

$$\|\mathbf{r}\|\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{Ae}\|\|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{e}\|\|\mathbf{b}\|$$

De donde

$$\frac{1}{\kappa(\mathbf{A})}\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|} \leq \frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Número de condición

- Juntando esto con la expresión obtenida en transparencias anteriores se obtienen cotas superiores e inferiores para el error en la solución:

$$\frac{1}{\kappa(\mathbf{A})}\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|} \leq \frac{\|\mathbf{e}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \kappa(\mathbf{A})\frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

- Si $\kappa(\mathbf{A})$ pequeño (o moderado) $\rightarrow$ *matriz bien condicionada*
- Si $\kappa(\mathbf{A})$ grande $\rightarrow$ *matriz mal condicionada*

Resumen

En este capítulo hemos visto:

- Los métodos *directos* de resolución de SEAL
- En particular:
  - el método de eliminación de Gauss
  - factorización (o descomposición) $\mathbf{LU}$
  - una particularización de $\mathbf{LU}$ para matrices simétricas: el método de Cholesky
- Hicimos un conteo de operaciones de estos métodos observando que el número de operaciones requeridas son de $O(n^3)$ lo que los hace inviables para sistemas muy grandes.
- Vimos luego como calcular *normas* de vectores y matrices.
- Vimos luego como calcular el *número de condición* de una matriz y la implicancia del mismo en la solución del sistema.