

Resolución de Sistemas de Ecuaciones Lineales

Métodos Directos

Prof. Alejandro G. Marchetti

Departamento de Ciencias de la Computación
Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura (FCEIA)
Universidad Nacional de Rosario (UNR)

September 22, 2021

Matriz Simétrica

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es simétrica si y solo si

$$a_{ij} = a_{ji}, \quad 1 \leq i, j \leq n$$

A simétrica significa que $A^T = A$.

Teorema

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz simétrica real. Luego, existe un conjunto de n pares autovalor-autovector $\{\lambda_i, \mathbf{v}_i\}$, $i = 1, \dots, n$, que satisfacen las siguientes propiedades:

- a) Los autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, son las raíces del polinomio característico $f(\lambda)$ de A . Todos los autovalores λ_i son números reales, y pueden repetirse de acuerdo a su multiplicidad.*

- b) Los autovectores $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ son ortogonales entre sí, y pueden elegirse de longitud unitaria:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j &= 0, & 1 \leq i, j \leq n, & \quad i \neq j \\ \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i &= 1, & 1 \leq i \leq n\end{aligned}$$

- c) Para cada vector $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ existe un único vector $\mathbf{c} = [c_1, c_2, \dots, c_n]^T$ tal que:

$$\mathbf{x} = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_n \mathbf{v}_n$$

Si los autovectores son de longitud unitaria, las constantes están dadas por

$$c_i = \mathbf{x}^T \mathbf{v}_i, \quad i = 1, \dots, n$$

d) Sea la matriz de autovectores

$$P = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n]$$

Luego

$$P^T A P = D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}$$

Además,

$$P P^T = P^T P = \mathbf{I}$$

$$A = P D P^T$$

Matriz Definida Positiva

Definición

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz simétrica.

- A es **definida positiva** si sus autovalores son positivos, es decir, $\lambda_i > 0$, $i = 1, \dots, n$.
- A es **semidefinida positiva** si sus autovalores son no negativos, es decir, $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, \dots, n$.
- A es **definida negativa** si sus autovalores son negativos, es decir, $\lambda_i < 0$, $i = 1, \dots, n$.
- A es **semidefinida negativa** si sus autovalores son no positivos, es decir, $\lambda_i \leq 0$, $i = 1, \dots, n$.
- A es **indefinida** si no cumple ninguna de las definiciones anteriores.

Teorema

Una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica es semidefinida positiva si y solo si A se puede factorizar como $A = B^T B$, y A es definida positiva si y solo si B es no singular.

Demostración. Siendo $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica, existe una matriz ortogonal P tal que $A = PDP^T$, donde $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ es real. Si $\lambda_i \geq 0$, para $i = 1, \dots, n$, luego $D^{1/2}$ existe,

$$A = PDP^T = PD^{1/2}D^{1/2}P^T = B^TB, \quad \text{con } B = D^{1/2}P^T$$

Siendo $\text{rango}(P) = n$, y $\text{rango}(D^{1/2}) = n$ si y solo si $\lambda_i > 0$, para $i = 1, \dots, n$, se cumple que B es no singular si y solo si $\lambda_i > 0$, para $i = 1, \dots, n$.

A la inversa, si A se puede factorizar como $A = B^TB$, luego todos los autovalores de A son no negativos ya que para cualquier par autovalor-autovector $(\lambda_i, \mathbf{v}_i)$, $i = 1, \dots, n$, tenemos:

$$\lambda_i = \frac{\mathbf{v}_i^T A \mathbf{v}_i}{\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i} = \frac{\mathbf{v}_i^T B^T B \mathbf{v}_i}{\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i} = \frac{\|B \mathbf{v}_i\|^2}{\|\mathbf{v}_i\|^2} \geq 0$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma vectorial euclídea. Si B es no singular, luego $B\mathbf{v}_i \neq \mathbf{0}$ y $\lambda_i > 0$. □

Teorema

Una matriz simétrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es definida positiva si y solo si $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0$, para todo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$.

Demostración. Si A es definida positiva, luego $A = B^T B$, para B no singular, luego

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \mathbf{x}^T B^T B \mathbf{x} = \|B \mathbf{x}\|^2 \geq 0$$

con igualdad si y solo si $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

A la inversa, si $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0$ para todo $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, luego para cada par autovalor-autovector $(\lambda_i, \mathbf{v}_i)$, $i = 1, \dots, n$, tenemos

$$\lambda_i = \frac{\mathbf{v}_i^T A \mathbf{v}_i}{\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i} > 0$$

lo cual completa la demostración. □

Teorema

Para matrices A reales simétricas, los siguientes enunciados son equivalentes y sirven como definición de matriz definida positiva.

- $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}.$
- *Todos los autovalores de A son estrictamente positivos.*
- $A = B^T B$ para alguna matriz B no singular. B no es única, pero existe una única matriz triangular superior R con elementos diagonales positivos tal que $A = R^T R$. Esta es la factorización de Cholesky de A .
- *Toda submatriz principal de A es definida positiva.*

Sistemas de Ecuaciones Lineales - Métodos Directos

Los métodos directos para resolver sistemas de ecuaciones lineales son métodos con un número finito de pasos, y obtienen la solución exacta provisto que todas las operaciones aritméticas sean exactas. El método directo más conocido y utilizado es la eliminación Gaussiana.

Eliminación de Gauss

El método de eliminación de Gauss consiste en operar sobre la matriz ampliada del sistema hasta hallar la forma escalonada (una matriz triangular superior). Así, se obtiene un sistema fácil de resolver por sustitución regresiva. Las dos etapas del métodos son:

1. Eliminación progresiva de incógnitas. Consiste en transformar el sistema en un sistema triangular superior usando operaciones elementales sobre las filas de la matriz ampliada.
2. Resolución del sistema triangular superior mediante sustitución regresiva.

Denotamos el sistema lineal original como $A^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$, y definimos la matriz ampliada

$$[A|\mathbf{b}] = [A^{(1)}|\mathbf{b}^{(1)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array} \right]$$

Este sistema inicial se reduce en $n - 1$ pasos a la forma:

$$[A^{(n)}|\mathbf{b}^{(n)}] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array} \right]$$

Luego, el sistema triangular superior $A^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$ se resuelve por sustitución regresiva.

Algoritmo de Eliminación de Gauss

PASO 1: Supongamos que $a_{11}^{(1)} \neq 0$. Sean los multiplicadores de fila

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

Estos multiplicadores se usan para eliminar x_1 de las ecuaciones 2 a n . Definimos

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)}, & i, j &= 2, \dots, n \\ b_i^{(2)} &= b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)}, & i &= 2, \dots, n \end{aligned}$$

La primera fila de la matriz ampliada $[A^{(1)}|\mathbf{b}^{(1)}]$ no se modifica, y la primera columna de $A^{(1)}$, debajo de la diagonal, se lleva a cero.

La matriz ampliada $[A^{(2)}|\mathbf{b}^{(2)}]$ tiene la forma

$$[A^{(2)}|\mathbf{b}^{(2)}] = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array} \right] \begin{array}{l} \longleftarrow E_1^{(1)} \\ \longleftarrow E_2^{(2)} \\ \vdots \\ \longleftarrow E_n^{(2)} \end{array}$$

donde empleamos la notación $E_i^{(k)}$ para denotar la fila i de la matriz ampliada en el paso k . Esta fila representa la ecuación i del sistema $A^{(k)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)}$.

PASO k:

Suponga que para $i = 1, \dots, k - 1$ los x_i han sido eliminados de las ecuaciones $i + 1, \dots, n$. Tenemos:

$$[A^{(k)} | \mathbf{b}^{(k)}] = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ \vdots & & 0 & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array} \right] \begin{array}{l} \longleftarrow E_1^{(1)} \\ \longleftarrow E_2^{(2)} \\ \vdots \\ \longleftarrow E_k^{(k)} \\ \vdots \\ \longleftarrow E_n^{(k)} \end{array}$$

Supongamos que el elemento pivote $a_{kk}^{(k)} \neq 0$. Definimos los multiplicadores de fila

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k + 1, \dots, n$$

Estos multiplicadores se usan para eliminar x_k de las ecuaciones $k + 1, \dots, n$:

$$E_i^{(k+1)} = E_i^{(k)} - m_{ik} E_k^{(k)}, \quad i = k + 1, \dots, n$$

Continuando de esta manera, después de $n - 1$ pasos, obtenemos el sistema escalonado (triangular superior) $A^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$.

Sustitución regresiva:

Primero obtenemos x_n de la última ecuación del sistema escalonado $A^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$,

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}$$

Este resultado se puede sustituir hacia atrás en la $(n - 1)$ -ésima ecuación y despejar x_{n-1} , y así para las incógnitas restantes.

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i)}} \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j \right), \quad \text{para } i = n - 1, n - 2, \dots, 1$$

Esto completa el algoritmo de eliminación de Gauss.

Ejemplo

Resolver el sistema lineal

$$\begin{aligned}x_1 + 2x_2 + x_3 &= 0 \\2x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \\-x_1 - 3x_2 &= 2\end{aligned}$$

Representamos este sistema lineal con la matriz ampliada

$$[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -1 & -3 & 0 & 2 \end{array} \right]$$

En el siguiente diagrama, las flechas indican los pasos de la eliminación, y los multiplicadores utilizados se indican al costado de las flechas:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \\ -1 & -3 & 0 & 2 \end{array} \right] \xrightarrow[m_{31}=-1]{m_{21}=2} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array} \right]$$

$$\xrightarrow{m_{32}=\frac{1}{2}} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right]$$

Resolviendo el sistema $A^{(3)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(3)}$,

$$x_3 = 1, \quad x_2 = -1, \quad x_1 = 1$$

Pivoteo Parcial

En cada paso del proceso de eliminación visto en la sección anterior, supusimos que los elementos pivote eran distintos de cero, $a_{kk}^{(k)} \neq 0$. Para eliminar esta hipótesis, podemos emplear pivoteo parcial. En el caso de que $a_{kk}^{(k)} = 0$, examinamos los elementos $a_{ik}^{(k)}$ en las filas $E_i^{(k)}$ para $i = k + 1, \dots, n$. Siendo A no singular, se puede demostrar que al menos uno de dichos elementos es distinto de cero. La ecuación $E_i^{(k)}$ con $a_{ik}^{(k)} \neq 0$ se intercambia con $E_k^{(k)}$ y luego se continua el proceso de eliminación.

Ejemplo

Resolver el sistema lineal

$$6x_1 + 2x_2 + 2x_3 = -2$$

$$2x_1 + \frac{2}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = 1$$

$$x_1 + 2x_2 - x_3 = 0$$

utilizando una calculadora decimal con una mantisa de 4 dígitos.

La solución exacta es

$$x_1 = 2,6 \quad x_2 = -3,8 \quad x_3 = -5,0$$

Veamos la solución que se obtiene aplicando el proceso de eliminación de gauss con la aritmética de la calculadora.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 6,000 & 2,000 & 2,000 & -2,000 \\ 2,000 & 0,6667 & 0,3333 & 1,000 \\ 1,000 & 2,000 & -1,000 & 0,000 \end{array} \right] \xrightarrow{\substack{m_{21}=0,3333 \\ m_{31}=0,1667}}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 6,000 & 2,000 & 2,000 & -2,000 \\ 0,000 & 0,0001000 & -0,3333 & 1,667 \\ 0,000 & 1,667 & -1,333 & 0,3334 \end{array} \right] \xrightarrow{m_{32}=16670}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 6,000 & 2,000 & 2,000 & -2,000 \\ 0,000 & 0,0001000 & -0,3333 & 1,667 \\ 0,000 & 0,000 & 5555 & -27790 \end{array} \right]$$

Resolviendo por sustitución regresiva obtenemos

$$x_1 = 1,335 \quad x_2 = -0,000 \quad x_3 = -5,003$$

Vemos que la solución obtenida difiere mucho de la solución verdadera. Este error se debe a que el elemento pivote $a_{22}^{(2)} = 0,0001000$ debió haber sido igual a cero, pero no lo es debido a los errores de redondeo. Este elemento pivote tiene un error relativo infinito.

Para evitar este problema podemos intercambiar las ecuaciones $E_2^{(2)}$ y $E_3^{(2)}$, y luego continuar la eliminación:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 6,000 & 2,000 & 2,000 & -2,000 \\ 0,000 & 1,667 & -1,333 & 0,3334 \\ 0,000 & 0,0001000 & -0,3333 & 1,667 \end{array} \right] \xrightarrow{m_{32}=0,00005999}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 6,000 & 2,000 & 2,000 & -2,000 \\ 0,000 & 1,667 & -1,333 & 0,3334 \\ 0,000 & 0,000 & -0,3332 & 1,667 \end{array} \right]$$

Mediante sustitución regresiva obtenemos en este caso

$$x_1 = -2,602 \quad x_2 = -3,801 \quad x_3 = -5,003$$

que se aproxima mucho más a la solución real del sistema.

Vemos en el Ejemplo que no es suficiente simplemente pedir que los elementos pivote sean distintos de cero. Puede ocurrir que un elemento sea distinto de cero debido a errores de redondeo, lo cual conduce a errores gruesos en los cálculos subsiguientes.

Para evitar esto, introducimos el siguiente procedimiento de pivoteo parcial:

En el paso k , calcular

$$c = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$$

Si el elemento $|a_{kk}^{(k)}| < c$, luego intercambiar la ecuación $E_k^{(k)}$ con la correspondiente ecuación tal que $|a_{kk}^{(k)}| = c$.

Con el pivoteo parcial, los multiplicadores m_{ik} satisfacen:

$$\begin{aligned} |m_{ik}| &\leq 1, & i &= k+1, \dots, n \\ & & k &= 1, \dots, n-1 \end{aligned}$$

Número de Operaciones del Método de Gauss

Para analizar el número de operaciones necesarias para resolver el sistema $Ax = b$ por eliminación de Gauss, consideraremos separadamente la generación de $A^{(n)}$ a partir de $A^{(1)}$, la modificación de $b^{(1)}$ a $b^{(n)}$, y finalmente la obtención de la solución x por sustitución regresiva.

1. Cálculo de $A^{(n)}$. En el paso 1, se necesitan $n - 1$ divisiones para calcular los multiplicadores m_{i1} , $2 \leq i \leq n$. Luego, se usan $(n - 1)^2$ multiplicaciones y $(n - 1)^2$ sumas para crear los nuevos elementos $a_{ij}^{(2)}$. Continuando de esta manera en cada paso, obtenemos el conteo de operaciones indicado en la Tabla.

Table: Conteo de operaciones en la eliminación gaussiana.

Paso	Sumas	Multiplicaciones	Divisiones
1	$(n - 1)^2$	$(n - 1)^2$	$n - 1$
2	$(n - 2)^2$	$(n - 2)^2$	$n - 2$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
$n - 1$	1	1	1
Total	$\frac{n(n - 1)(2n - 1)}{6}$	$\frac{n(n - 1)(2n - 1)}{6}$	$\frac{n(n - 1)}{2}$

Denotamos por $SR(\cdot)$ el número de sumas y restas, y por $MD(\cdot)$ el número de multiplicaciones y divisiones. Luego,

$$SR(A^{(1)} \rightarrow A^{(n)}) = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} \approx \frac{n^3}{3}$$

$$MD(A^{(1)} \rightarrow A^{(n)}) = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} + \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n(n^2-1)}{3} \approx \frac{n^3}{3}$$

siendo las estimaciones finales válidas para valores grandes de n .

2. Modificación de $\mathbf{b}^{(1)}$ a $\mathbf{b}^{(n)}$.

$$SR(\mathbf{b}^{(1)} \longrightarrow \mathbf{b}^{(n)}) = (n-1) + (n-2) + \cdots + 1 = \frac{n(n-1)}{2}$$

$$MD(\mathbf{b}^{(1)} \longrightarrow \mathbf{b}^{(n)}) = \frac{n(n-1)}{2}$$

3. Solución de $A^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$.

$$SR(\mathbf{x}) = \frac{n(n-1)}{2}$$

$$MD(\mathbf{x}) = \frac{n(n+1)}{2}$$

Vemos que, para valores de n grandes, el principal costo computacional de la eliminación de Gauss se da en la generación de $A^{(n)}$ a partir de $A^{(1)}$. Puede entonces afirmarse que para sistemas de grandes dimensiones el número de operaciones de la eliminación de Gauss es del orden de $\frac{2n^3}{3}$.

Caso Especial: Matriz Estrictamente Diagonal Dominante

Definición

Decimos que una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es estrictamente diagonal dominante si

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

Teorema

Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ estrictamente diagonal dominante es no singular. Para estas matrices, el sistema $Ax = b$ se puede resolver por eliminación de Gauss sin necesidad de pivoteo.

Caso Especial: Matriz Definida Positiva

Teorema

Para toda matriz A simétrica y definida positiva, el sistema $Ax = b$ se puede resolver por eliminación de Gauss sin necesidad de pivoteo, siendo todos los elementos pivotes positivos.

Método de Gauss-Jordan

El método de Gauss-Jordan es una variante de la eliminación de Gauss en el que se eliminan las incógnitas tanto por encima como por debajo de la diagonal. En este método, la matriz ampliada $[A|\mathbf{b}]$ se convierte luego de n pasos en la matriz $[\mathbf{I}|\mathbf{x}]$, obteniéndose de este modo la solución \mathbf{x} .

PASO k:

1. Normalizar $E_k^{(k)}$ dividiéndolo por $a_{kk}^{(k)}$.

$$a_{kj}^{k+1} = \frac{a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad j = k, \dots, n$$
$$b_k^{(k+1)} = \frac{b_k^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

2. Eliminación de x_k en las ecuaciones por encima y por debajo de la ecuación k .

$$a_{ij}^{k+1} = a_{ij}^{(k)} - a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k+1)}$$
$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - a_{ik}^{(k)} b_k^{(k+1)}$$

para $j = k, \dots, n$, $i = 1, \dots, n$, $i \neq k$.

El método de Gauss-Jordan usa del orden de $\frac{n^3}{2}$ multiplicaciones y divisiones y $\frac{n^3}{2}$ sumas y restas, por lo que requiere un mayor número de operaciones que la eliminación de Gauss.

Factorización LU

Factorización LU a partir de la Eliminación Gaussiana

Mediante la eliminación de Gauss, supuesta sin pivoteo, obtenemos el sistema triangular superior $Ux = g$, con $U = A^{(n)}$, y $g = b^{(n)}$,

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & u_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{con } u_{ij} = a_{ij}^{(i)}$$

Definimos la matriz triangular inferior L , basada en los multiplicadores m_{ik} de la eliminación gaussiana,

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ m_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Teorema (Factorización LU)

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz no singular, y sean L y U las matrices triangular inferior y triangular superior, definidas anteriormente usando la eliminación de Gauss. Luego, si U es generada sin pivoteo se tiene

$$A = LU$$

Resolver el sistema $Ax = b$ es equivalente a resolver $LUx = b$, lo cual es equivalente a resolver dos sistemas triangulares:

$Lg = b$ Sistema triangular inferior. (sustitución progresiva)

$Ux = g$ Sistema triangular superior. (sustitución regresiva)

Para resolver la sustitución progresiva y regresiva se requieren en total alrededor de n^2 multiplicaciones y divisiones y n^2 sumas y restas. Para determinar las matrices L y U se requiere el mismo número de operaciones que las que se necesitan para generar la matrix $A^{(n)} = U$ en la eliminación de Gauss. Sin embargo, una vez que se tiene la factorización, los sistemas en los que intervenga la matriz A pueden resolverse fácilmente para cualquier número de vectores b .

Unicidad de la factorización LU

Teorema (Unicidad de la factorización LU)

Si $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es tal que la eliminación de Gauss puede realizarse sin pivoteo, luego A puede factorizarse como $A = LU$, donde $U = A^{(n)}$ es el resultado final de la eliminación de Gauss aplicada a A , y L es una matriz triangular inferior con $l_{ii} = 1$, $i = 1, \dots, n$, y $l_{ij} = m_{ij}$, $i > j$. Dicha factorización es única.

Factorización LU con Matriz de Permutación

En el razonamiento previo hemos supuesto que A es tal que el sistema $Ax = b$ puede resolverse mediante el método de eliminación de Gauss sin intercambios de filas (sin pivoteo).

Cuando se requieren intercambios de filas se puede usar una matriz de permutación.

Definición (Matriz de permutación)

Una matriz de permutación $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, es una matriz en la que hay exactamente una entrada cuyo valor es 1 en cada fila y en cada columna, siendo todas las demás entradas iguales a 0.

Ejemplo:

$$PA = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}$$

Teorema

Para toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ no singular, existe una matriz de permutación P tal que PA posee una factorización LU, es decir, $PA = LU$.

Las matrices P , L y U se pueden generar al programar la eliminación de Gauss con pivoteo parcial, teniendo en cuenta los intercambios de filas requeridos.

Una vez obtenida la factorización $PA = LU$, el sistema $Ax = b$ se resuelve permutando primero los elementos en b para construir $\tilde{b} = Pb$. Luego se resuelve los sistemas triangulares $Ly = \tilde{b}$ y $Ux = y$ por sustitución progresiva y regresiva, respectivamente.

Método de Doolittle

Ejemplificamos para un sistema de 3×3 .

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

Luego

$$\begin{aligned} a_{11} &= u_{11}, & a_{12} &= u_{12}, & a_{13} &= u_{13} \\ a_{21} &= m_{21} u_{11}, & a_{31} &= m_{31} u_{11} \end{aligned}$$

con lo cual obtenemos la primera columna de L y la primera fila de U (suponiendo $u_{11} \neq 0$).

Multiplicamos la fila 2 de L por las columnas 2 y 3 de U:

$$a_{22} = m_{21}u_{12} + u_{22}$$

$$a_{23} = m_{21}u_{13} + u_{23}$$

De estas ecuaciones obtenemos u_{22} y u_{23} .

Multiplicamos la fila 3 de L por las columnas 2 y 3 de U:

$$m_{31}u_{12} + m_{32}u_{22} = a_{32}$$

$$m_{31}u_{13} + m_{32}u_{23} + u_{33} = a_{33}$$

De estas ecuaciones obtenemos m_{32} y u_{33} (suponiendo que $u_{22} \neq 0$).

Descomposición de Crout

Es una descomposición LU alternativa que usa una matriz U con números 1 en la diagonal. Se resuelve de manera similar al método de Doolittle. Ejemplificamos para un sistema de 3×3 .

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} \\ 0 & 1 & u_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$l_{11} = a_{11}, \quad l_{21} = a_{21}, \quad l_{31} = a_{31}$$

$$u_{12} = \frac{a_{12}}{l_{11}}, \quad u_{13} = \frac{a_{13}}{l_{11}}$$

$$l_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}, \quad l_{32} = a_{32} - l_{31}u_{12}$$

$$u_{23} = \frac{a_{23} - l_{21}u_{13}}{l_{22}}, \quad l_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$$

Factorización de Cholesky

Teorema

La matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es definida positiva si y solo si existe una única matriz triangular superior R con elementos diagonales positivos tal que $A = R^T R$. Esta es la factorización de Cholesky de A .

Resolver el sistema $Ax = b$ es equivalente a resolver $R^T R x = b$, lo cual es equivalente a resolver dos sistemas triangulares:

$R^T g = b$ Sistema triangular inferior (sustitución progresiva).

$Rx = g$ Sistema triangular superior (sustitución regresiva).

Factorización QR

Sea $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $A = [\mathbf{a}_1 | \mathbf{a}_2 | \dots | \mathbf{a}_n]$ una matriz con columnas $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$ linealmente independientes (esto implica $m \geq n$). Aplicando Gram-Schmidt a las columnas de A , resulta una base ortogonal normalizada $\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n\}$ del espacio columna de A , donde

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{a}_1}{\nu_1} \quad \text{y} \quad \mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{a}_k^T \mathbf{q}_i) \mathbf{q}_i}{\nu_k}, \quad k = 2, \dots, n$$

donde

$$\nu_1 = \|\mathbf{a}_1\| \quad \text{y} \quad \nu_k = \left\| \mathbf{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{a}_k^T \mathbf{q}_i) \mathbf{q}_i \right\|, \quad k = 2, \dots, n$$

Reordenando estas ecuaciones, tenemos

$$\mathbf{a}_1 = \nu_1 \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_k = (\mathbf{a}_k^T \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + \cdots + (\mathbf{a}_k^T \mathbf{q}_{k-1}) \mathbf{q}_{k-1} + \nu_k \mathbf{q}_k, \quad k = 2, \dots, n$$

En forma matricial:

$$[\mathbf{a}_1 | \mathbf{a}_2 | \dots | \mathbf{a}_n] = [\mathbf{q}_1 | \mathbf{q}_2 | \dots | \mathbf{q}_n] \begin{bmatrix} \nu_1 & \mathbf{a}_2^T \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^T \mathbf{q}_1 & \dots & \mathbf{a}_n^T \mathbf{q}_1 \\ 0 & \nu_2 & \mathbf{a}_3^T \mathbf{q}_2 & \dots & \mathbf{a}_n^T \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \nu_3 & \dots & \mathbf{a}_n^T \mathbf{q}_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \nu_n \end{bmatrix}$$

o bien,

$$A = QR$$

donde

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$: matriz con columnas linealmente independientes

$Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$: base ortogonal normalizada del espacio columna de A

$R \in \mathbb{R}^{n \times n}$: matriz diagonal superior con elementos diagonales positivos

Teorema (Factorización QR)

Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ con columnas linealmente independientes puede factorizarse de manera única como $A = QR$ con Q y R definidas anteriormente.

Si $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es no singular, tenemos $Q^T = Q^{-1}$, ya que Q tiene columnas ortogonales normalizadas. El sistema $Ax = QRx = \mathbf{b}$ es equivalente al sistema

$$Rx = Q^T \mathbf{b}$$

el cual es un sistema triangular superior que se resuelve por sustitución regresiva.