Análisis Numérico para Ingeniería

Clase Nro. 5

*“Por desgracia no se puede explicar lo que es **Matrix**. Tienes que verlo con tus propios ojos.”*

Morpheus

Temas a tratar en esta clase :

- Método de Triangulación de Gauss
- Método de Diagonalización de Gauss-Jordan
- Tácticas de Pivoteo
- Inversión de una Matriz
- Refinamiento Iterativo de la Solución
- Método de Thomas
- Factorización de Crout

Algunos tipos de Matrices

- *Matriz Densa*
- *Matriz Rala*
- *Matriz Triangular Inferior*
- *Matriz Triangular Superior*
- *Matriz Diagonal*
- *Matriz Tri-Diagonal*
- *Matriz de Banda*

Matrices Densas

Las matrices **densas** tienen **pocos** elementos **nulos**.

$$\begin{bmatrix} -415 & -30 & -61 & 27 & 56 & -20 & -2 & 0 \\ 4 & -22 & -61 & 10 & 13 & -7 & -9 & 5 \\ -47 & 7 & 77 & -25 & -29 & 10 & 5 & -6 \\ -49 & 12 & 34 & -15 & -10 & 6 & 2 & 2 \\ 12 & -7 & -13 & -4 & -2 & 2 & -3 & 3 \\ -8 & 3 & 2 & -6 & -2 & 1 & 4 & 2 \\ -1 & 0 & 0 & -2 & -1 & -3 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -4 & -1 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Matrices poco densas (Ralas)

En las matrices **ralas** o poco densas, la mayoría de sus valores son **nulos**.

$$\begin{pmatrix}
0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 \\
0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 \\
2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \\
0 & 0 & 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0
\end{pmatrix}$$

Sistema Triangular Inferior

Dado el siguiente Sistema Triangular Inferior

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

Su solución se obtiene por sustitución progresiva:

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \quad ; \quad x_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} \cdot x_k}{a_{ii}} \quad ; \quad i = 2,3,\ldots,n$$

Sistema Triangular Superior

Dado el siguiente Sistema Triangular Superior

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

Su solución se obtiene por sustitución regresiva:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \quad ; \quad x_i = \frac{b_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} \cdot x_k}{a_{ii}} \quad ; \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

Sistema Diagonal

Dado el siguiente Sistema Diagonal

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

Su solución se obtiene como:

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \quad ; \quad x_2 = \frac{b_2}{a_{22}} \quad ; \quad x_3 = \frac{b_3}{a_{33}} \quad ; \quad x_4 = \frac{b_4}{a_{44}}$$

Ejemplos de aplicación

1) Las plantas con la presencia del sol convierten durante su proceso de fotosíntesis, el dióxido de carbono y el agua en glucosa y oxígeno.

Simbólicamente el proceso puede ser representado así:

Dióxido de carbono(CO_2) + Agua(H_2O) → Glucosa($C_6H_{12}O_6$) + Oxígeno(O_2)

2) Cuando se quema **gas propano**, éste se combina con **oxígeno** para formar **dióxido de carbono** y **agua**, de acuerdo con la siguiente ecuación :

Propano($C_3 H_8$) + Oxígeno(O_2) → Dióxido de carbono(CO_2) + Agua(H_2O)

En ambos casos, se pueden plantear las ecuaciones de balance, para hallar la solución correspondiente.

Notación explícita

Notación explícita para un **Sistema de Ecuaciones Lineales** de la forma: **Ax=b**

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3+\ldots+a_{1\mathrm{n}}x_n&=b_1\\
a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3+\ldots+a_{2\mathrm{n}}x_n&=b_2\\
a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3+\ldots+a_{3\mathrm{n}}x_n&=b_3\\
\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots&\quad\ldots\quad\ldots\\
a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+a_{n3}x_3+\ldots+a_{nn}x_n&=b_n
\end{aligned}
$$

Notación Matricial

Notación matricial para un **Sistema de Ecuaciones Lineales** de la forma: **Ax=b**

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Métodos Directos

Métodos de Resolución

- Triangulación de Gauss
- Diagonalización de Gauss-Jordan
- Método de Thomas

Métodos de Factorización

- Factorización de Crout
- Factorización de Doolittle
- Factorización de Choleski

Carl Freidrich Gauss

Nació el 30 de abril de 1777 en Braunschweig, Alemania.

Gauss tuvo una importante influencia en diversos campos de la matemática y es considerado como uno de los matemáticos más influyentes de la historia.

Desarrolló temas como la teoría de números, estadística, análisis, geometría diferencial, geodesia, geofísica, electrostática, astronomía y óptica.

Falleció el 23 de febrero de 1855 en Göttingem, Alemania.

Matriz Ampliada

La matriz ampliada es una matriz que contiene los elementos de la matriz original junto con los elementos de los términos independientes, colocados como columnas adicionales.

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right)$$

Método de Gauss (I)

Matriz ampliada del sistema original

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{array}\right]$$

<u>Objetivo Tablero 1</u>:

Hacer cero los elementos debajo del 1er. pivote

$$\left.\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & a'_{34} & b'_3 \\ 0 & a'_{42} & a'_{43} & a'_{44} & b'_4 \end{array}\right. \quad \begin{array}{l} \\ \rightarrow \quad F'_2 = F_2 - \frac{F_1}{a_{11}} \cdot a_{21} \\ \rightarrow \quad F'_3 = F_3 - \frac{F_1}{a_{11}} \cdot a_{31} \\ \rightarrow \quad F'_4 = F_4 - \frac{F_1}{a_{11}} \cdot a_{41} \end{array}$$

Método de Gauss (II)

Resultados del Tablero 1

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & a'_{34} & b'_3 \\ 0 & a'_{42} & a'_{43} & a'_{44} & b'_4 \end{array}\right]$$

Objetivo Tablero 2:
Hacer cero los elementos debajo del 2do. pivote

$$\begin{array}{cccc|cll} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 & & \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 & & \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 & \rightarrow & F''_3 = F'_3 - \dfrac{F'_2}{a'_{22}} \cdot a'_{32} \\ 0 & 0 & a''_{43} & a''_{44} & b''_4 & \rightarrow & F''_4 = F'_4 - \dfrac{F'_2}{a'_{22}} \cdot a'_{42} \end{array}$$

Método de Gauss (III)

Resultados del Tablero 2

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 \\ 0 & 0 & a''_{43} & a''_{44} & b''_4 \end{array}\right]$$

<u>Objetivo Tablero 3</u>:

Hacer cero los elementos debajo del 3er. pivote

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 \\ 0 & 0 & 0 & a'''_{44} & b'''_4 \end{array}\right] \rightarrow \quad F'''_4 = F''_4 - \frac{F''_3}{a''_{33}} \cdot a''_{43}$$

Código de Gauss

```
SUBROUTINE Gauss(matriz, term_indep)
! Metodo de Gauss
REAL(8), DIMENSION(:,:), INTENT(IN) :: matriz, term_indep
REAL(8), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: mat_amp
INTEGER t, fila, orden

orden = SIZE(matriz, DIM=1)

CALL creaMatrizAmpliada(matriz, term_indep, mat_amp)
```

Sique en la próxima página

Código de Gauss (Cont.)

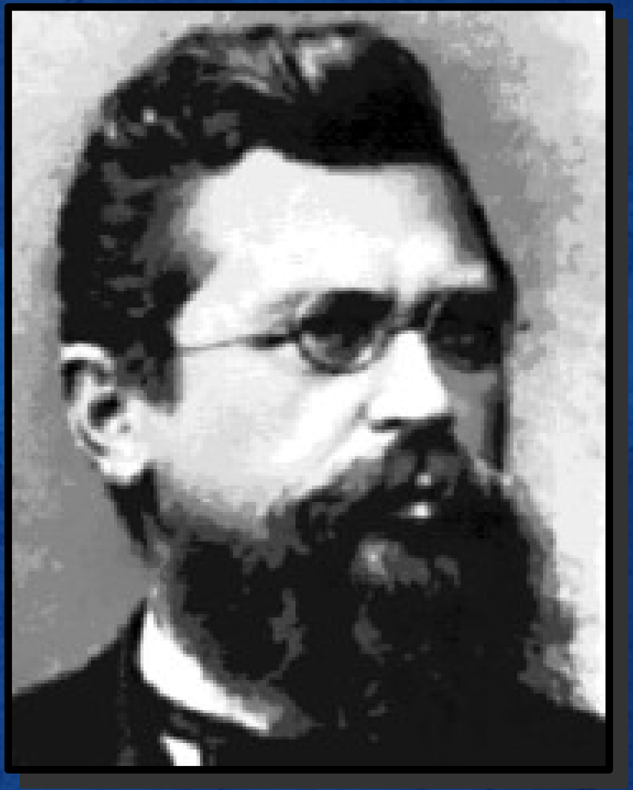
```
DO t=1, orden

  DO fila=t+1, orden
    mat_amp(fila,t+1:) = mat_amp(fila,t+1:) - mat_amp(t,t+1:)*mat_amp(fila,t) / mat_amp(t,t)
      mat_amp(fila,t) = 0.0
    ENDDO

  ENDDO

  CALL imprimeMatriz(mat_amp(:,orden+1:))

  DEALLOCATE(mat_amp)

END SUBROUTINE
```

Wilhelm Jordan

Nació el 1 de marzo de 1842 en Ellwangen, Alemania.

Debido a que los métodos de mínimos cuadrados eran muy importantes en topografía, una disciplina de gran importancia para su época, desarrolló el método conocido como Gauss-Jordan para resolver ese tipo de problemas.

Falleció el 17 de abril de 1899 en Hannover, Alemania.



Método de Gauss-Jordan (I)

Matriz ampliada del sistema original

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{array}\right]$$

<u>Objetivo Tablero 1</u>:

Hacer cero los elementos debajo del 1er. pivote

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & a'_{34} & b'_3 \\ 0 & a'_{42} & a'_{43} & a'_{44} & b'_4 \end{array}\right] \begin{array}{l} \\ \rightarrow \quad F'_2 = F_2 - \frac{F_1}{a_{11}} \cdot a_{21} \\ \rightarrow \quad F'_3 = F_3 - \frac{F_1}{a_{11}} \cdot a_{31} \\ \rightarrow \quad F'_4 = F_4 - \frac{F_1}{a_{11}} \cdot a_{41} \end{array}$$

Método de Gauss-Jordan (II)

Resultados del Tablero 1

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & a'_{32} & a'_{33} & a'_{34} & b'_3 \\ 0 & a'_{42} & a'_{43} & a'_{44} & b'_4 \end{array}\right]$$

Objetivo Tablero 2:

Hacer cero los elementos encima y por debajo del 2do. pivote.

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a'_{11} & 0 & a'_{13} & a'_{14} & b'_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 \\ 0 & 0 & a''_{43} & a''_{44} & b''_4 \end{array}\right] \begin{array}{l} \rightarrow F'_1 = F_1 - \dfrac{F'_2}{a'_{22}} \cdot a'_{12} \\ \\ \rightarrow F''_3 = F'_3 - \dfrac{F'_2}{a'_{22}} \cdot a'_{32} \\ \rightarrow F''_4 = F'_4 - \dfrac{F'_2}{a'_{22}} \cdot a'_{42} \end{array}$$

Método de Gauss-Jordan (III)

Resultados del Tablero 2

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a'_{11} & 0 & a'_{13} & a'_{14} & b'_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 \\ 0 & 0 & a''_{43} & a''_{44} & b''_4 \end{array}\right]$$

<u>Objetivo Tablero 3</u>:

Hacer cero los elementos encima y por debajo del 3er. pivote

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a''_{11} & 0 & 0 & a''_{14} & b''_1 \\ 0 & a''_{22} & 0 & a''_{24} & b''_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 \\ 0 & 0 & 0 & a'''_{44} & b'''_4 \end{array}\right]
\begin{array}{l} \rightarrow \ F''_1 = F'_1 - \dfrac{F''_3}{a''_{33}} \cdot a'_{13} \\ \rightarrow \ F''_2 = F'_2 - \dfrac{F''_3}{a''_{33}} \cdot a'_{23} \\ \\ \rightarrow \ F'''_4 = F''_4 - \dfrac{F''_3}{a''_{33}} \cdot a''_{43} \end{array}$$

Método de Gauss-Jordan (IV)

Resultados del Tablero 3

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a''_{11} & 0 & 0 & a''_{14} & b''_1 \\ 0 & a''_{22} & 0 & a''_{24} & b''_2 \\ 0 & 0 & a''_{33} & a''_{34} & b''_3 \\ 0 & 0 & 0 & a'''_{44} & b'''_4 \end{array}\right]$$

<u>Objetivo Tablero 4</u>:

Hacer cero los elementos encima del 4to. pivote

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a'''_{11} & 0 & 0 & 0 & b'''_1 \\ 0 & a'''_{22} & 0 & 0 & b'''_2 \\ 0 & 0 & a'''_{33} & 0 & b'''_3 \\ 0 & 0 & 0 & a'''_{44} & b'''_4 \end{array}\right]$$

$\rightarrow \quad F'''_1 = F''_1 - \dfrac{F'''_4}{a'''_{44}} \cdot a''_{14}$

$\rightarrow \quad F'''_2 = F''_2 - \dfrac{F'''_4}{a'''_{44}} \cdot a''_{24}$

$\rightarrow \quad F'''_3 = F''_3 - \dfrac{F'''_4}{a'''_{44}} \cdot a''_{34}$

Código de Gauss-Jordan

```
SUBROUTINE GaussJordan(matriz, term_indep)
! Metodo de Gauss-Jordan
REAL(8), DIMENSION(:,:), INTENT(IN) :: matriz, term_indep
REAL(8), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: mat_amp
INTEGER t, fila, orden

orden = SIZE(matriz, DIM=1)

CALL creaMatrizAmpliada(matriz, term_indep, mat_amp)
```

Sique en la próxima página

Código de Gauss-Jordan (Cont.)

```
 DO t=1, orden

   DO fila=1, t -1
     mat_amp(fila,t+1:) = mat_amp(fila,t+1:) - mat_amp(t,t+1:)*mat_amp(fila,t) / mat_amp(t,t)
     mat_amp(fila,t) = 0.0
   ENDDO

   DO fila=t+1, orden
     mat_amp(fila,t+1:) = mat_amp(fila,t+1:) - mat_amp(t,t+1:)*mat_amp(fila,t) / mat_amp(t,t)
     mat_amp(fila,t) = 0.0
   ENDDO
 ENDDO

 CALL imprimeMatriz(mat_amp(:,orden+1:))

 DEALLOCATE(mat_amp)

END SUBROUTINE
```

Resolución Simultánea de Sistemas

Es posible utilizar los métodos antes mencionados, para resolver **n sistemas simultáneamente**. Lo único que hay que hacer es agregar a la matriz ampliada los **n** vectores de términos independientes.

$$
\left(\begin{array}{ccccc|ccccc}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 & c_1 & d_1 & \cdots & w_1 \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & b_2 & c_2 & d_2 & \cdots & w_2 \\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & b_3 & c_3 & d_3 & \cdots & w_3 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & b_n & c_n & d_n & \cdots & w_n
\end{array}\right)
$$

Tácticas de pivoteo

- Las tácticas de pivoteo se emplean para evitar la amplificación de los errores producidos por trabajar con aritmética finita.

- Por lo tanto se busca que los elementos de mayor valor absoluto, se encuentren en los pivotes.

- Las estrategias de pivoteo más utilizadas son el pivoteo parcial por filas, o por columnas y el pivoteo total.

Pivoteo parcial por filas

- Se compara el valor absoluto del elemento pivote con los valores absolutos de los elementos de la columna por debajo del elemento pivote.
- Si alguno de los elementos de la columna, por debajo del elemento pivote es mayor en valor absoluto que el elemento pivote, se intercambian la fila de dicho elemento con la fila del pivote.
- Se realizan las operaciones necesarias para obtener ceros por debajo del pivote.
- Se continúa con el siguiente pivote y se repite el procedimiento hasta finalizar.

Inversión de una Matriz

La solución del sistema **A.x = v_1**, donde **v_1** es el **1er. Versor**,

$$\left[\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & 0 \end{array}\right]$$

equivale a : $\boxed{x = A^{-1} \cdot v_1}$

Es decir, dicha solución es la primer columna de la inversa de la matriz A

Inversión de una Matriz

La solución del sistema **A.x = v$_2$**, donde **v$_2$** es el **2do. Versor**,

$$\left.\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{matrix}\right| \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix}$$

equivale a : $x = A^{-1} \cdot v_2$

Es decir, dicha solución es la segunda columna de la inversa de la matriz A

Inversión de una Matriz

Para hallar la **inversa** de una matriz por medio del método de **Gauss-Jordan**. Simplemente se ingresan tantos **versores** como sea el **orden de la matriz** y se aplica el método a todos los sistemas simultáneamente. Como la solución de cada sistema corresponde a cada una de las columnas de la **matriz inversa**, al finalizar el proceso de diagonalización, se obtendrá la matriz inversa completa.

$$
\left.\begin{array}{ccccc}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn}
\end{array}\right|
\begin{array}{ccccc}
1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 1
\end{array}
$$

Inversión de una Matriz

Implementación con Gauss-Jordan

```
SUBROUTINE Inversa(matriz)
! Calcula la inversa de una matriz, por Gauss-Jordan
REAL(8), DIMENSION(:,:), INTENT(IN) :: matriz
REAL(8), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: matrizIdentidad
INTEGER orden

orden = SIZE(matriz, DIM=1)

  CALL creaMatrizIdentidad(orden, matrizIdentidad)

  CALL GaussJordan(matriz, matrizIdentidad)

  DEALLOCATE(matrizIdentidad)

END SUBROUTINE
```

Refinamiento Iterativo (I)

La solución exacta de un sistema de ecuaciones lineales es:

$$A \cdot x - b = 0$$

Como solo podemos calcular una solución aproximada **x*** , nos queda un residuo **r**.

$$A \cdot x^{*} - b = r \neq 0$$

Si restamos ambas expresiones, obtenemos :

$$A \cdot x^{*} - b = r$$

-

$$A \cdot x - b = 0$$

$$A \cdot (x^{*} - x) = r \quad \Rightarrow \quad A \cdot (\Delta x) = r$$

Refinamiento Iterativo (II)

Por lo tanto podemos hallar la solución del siguiente sistema:

$$\boxed{A \cdot \Delta x = r}$$

Sin embargo, como no conocemos el valor exacto, tenemos:

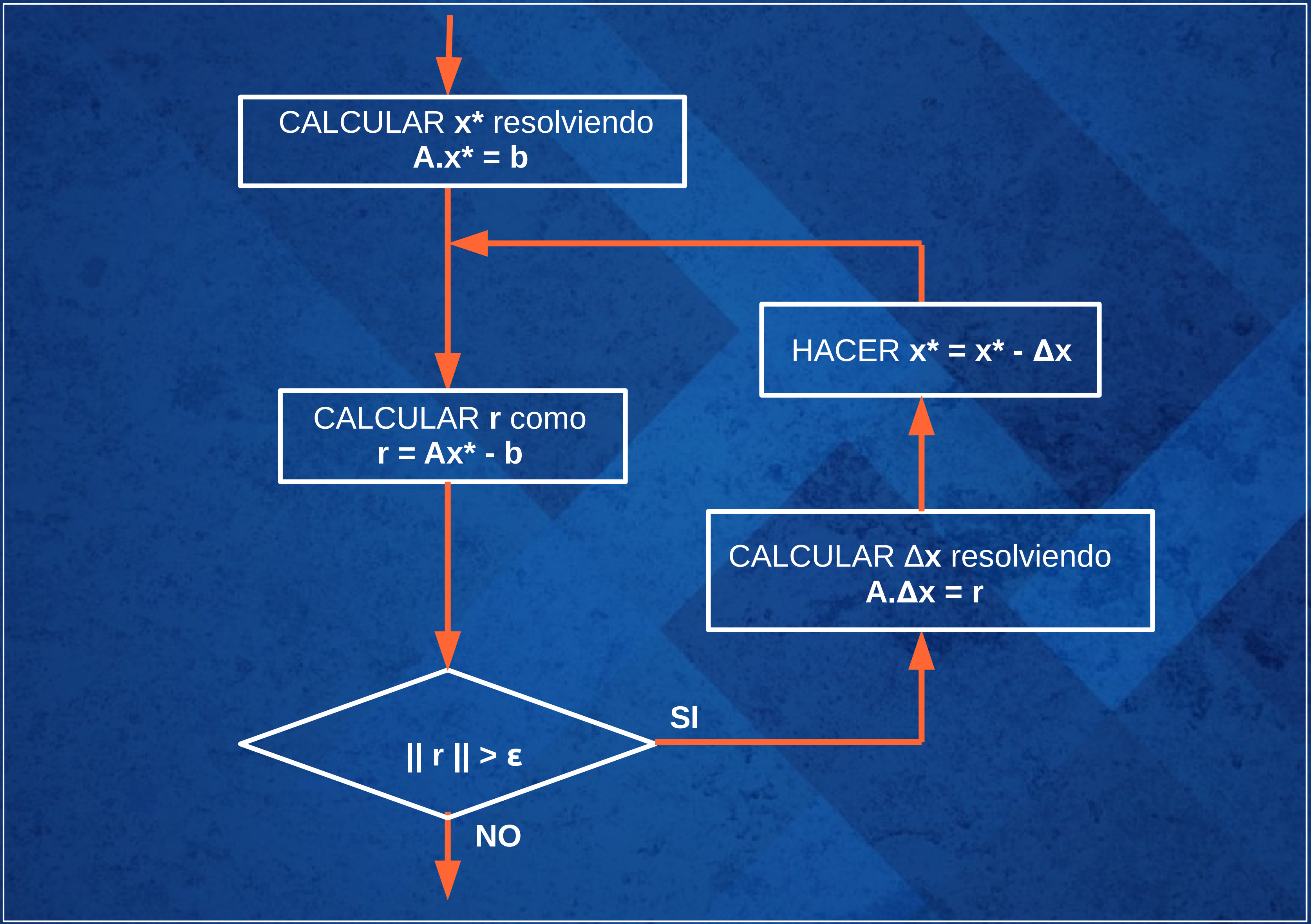
$$\boxed{A \cdot \Delta x_0 = r_0} \qquad \boxed{A \cdot (x_0 - x_1) = r_0}$$

Esta solución a su vez, nos permite calcular un nuevo valor $\mathbf{x_{i+1}}$

$$\boxed{x_{i+1} = x_i - \Delta x_i}$$

Con este nuevo **valor de x**, podemos calcular un nuevo residuo y compararlo con una **cota establecida**. Si dicha cota no se ha alcanzado, se repite el proceso.

Refinamiento Iterativo (III)



Llewellyn Hilleth Thomas

Nació el 21 de octubre de 1903 en Londres, Inglaterra.

Realizó importantes contribuciones en el campo de la física atómica y cuántica

En 1926 propuso la ”precesión de Thomas” para explicar las diferencias entre las predicciones de la teoría del acoplamiento del spin-órbita y las observaciones experimentales.

Falleció el 20 de abril de 1992 en Raileigh, Carolina del Norte.

Método de Thomas

El método de Thomas es una optimización del método de Gauss, para resolver sistemas cuyas matrices son tri-diagonales.

$$\begin{bmatrix} d_1 & u_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_1 & d_2 & u_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & l_2 & d_3 & u_3 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & l_3 & d_4 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & d_{n-1} & u_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_{n-1} & d_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

Variables en el método de Thomas

Para trabajar con vectores del mismo tamaño, a los vectores que almacenan los valores de las diagonales secundarias, se los completa con un **0**, según corresponda. Esto simplifica enormemente el algoritmo.

u =	u_1	u_2	u_3	u_4	. . .	0	← Diagonal Superior
	u(1)	u(2)	u(3)	u(4)	. . .	u(n)	
d =	d_1	d_2	d_3	d_4	. . .	d_n	← Diagonal Principal
	d(1)	d(2)	d(3)	d(4)	. . .	d(n)	
l =	0	l_1	l_2	l_3	. . .	l_{n-1}	← Diagonal Inferior
	l(1)	l(2)	l(3)	l(4)	. . .	l(n)	

Implementación del método de Thomas (I)

```
SUBROUTINE Thomas(u_orig, d_orig, l_orig, term_indep)
! Metodo de Thomas para matrices Tri-Diagonales
REAL(8), DIMENSION(:,:), INTENT(IN) :: term_indep
REAL(8), DIMENSION(:), INTENT(IN) :: u_orig, d_orig, l_orig
REAL(8), DIMENSION(:,:), ALLOCATABLE :: b
REAL(8), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: u, d, l
INTEGER orden, cant_vec, i

orden = SIZE(term_indep, DIM=1)
cant_vec = SIZE(term_indep, DIM=2)

! Realiza copias del original
ALLOCATE(u(orden), d(orden), l(orden))
u = u_orig
d = d_orig
l = l_orig
ALLOCATE(b(orden, cant_vec))
b = term_indep
```

Sique en la próxima página

Implementación del método de Thomas (II)

```
! Aqui comienza el algoritmo
DO i=1, orden-1
  u(i) = u(i) / d(i)
  b(i,:) = b(i,:) / d(i)
  d(i) = 1.0

  d(i+1) = d(i+1) - l(i+1)*u(i)
  b(i+1,:) = b(i+1,:) - l(i+1)*b(i,:)
  l(i+1) = 0.0
ENDDO

! Obtencion de la solucion por Sustitucion Inversa
  b(orden,:) = b(orden,:)/d(orden)
  DO i=orden-1, 1, -1
    b(i,:) = b(i,:) - u(i)*b(i+1,:) / d(i)
  END DO

  CALL imprimeMatriz(b)

DEALLOCATE(u, d, l, b)
END SUBROUTINE
```

Métodos de Factorización Triangular

- La **factorización LU (o factorización triangular)** de una matriz A, consiste en reescribir dicha matriz, como producto de dos matrices triangulares L y U. Donde la matriz L es triangular inferior y la matriz U es triangular superior.

- Los métodos de factorización triangular más conocidos son:
  - **La Reducción de Crout (LU_1)**
  - **El método de Doolittle (L_1U)** **(Ver video en el Campus Virtual)**
  - **Método de Choleski para matrices A positivas definidas.**

- Las matrices L_1 y U_1 son matrices triangulares que poseen valores unitarios en la diagonal.

Métodos de Factorización Triangular

- Transformar una **matriz A** en el producto de dos matrices triangulares por medio de la **factorización LU (o factorización triangular)** facilita algunas operaciones posteriores con dicha matriz.

- Aprovechando estas propiedades:
  - $\mathbf{A^{-1} = L^{-1} * U^{-1}}$
  - **DET (A) = DET (L) * DET(U)**

- Calcular la inversa, así como el determinante de Matrices Triangulares es mucho más sencillo que hacerlo con una Matriz normal.

Métodos de Factorización

- **Factorización de Crout**

  Se especifica $u_{11}= u_{22}= u_{33}= \ldots = 1$

- **Factorización de Doolittle**

  Se especifica $l_{11}= l_{22}= l_{33}= \ldots = 1$

- **Factorización de Choleski**

  Se especifica $l_{ii}= u_{ii}$

Son otras variantes para calcular las matrices LU

Prescott Durand Crout

Nació el 28 de julio de 1907 en Columbus, Ohio, USA.

Fue profesor de la Facultad de Matemáticas del MIT desde 1934 hasta 1973.

Trabajó en el Laboratorio de radiación entre 1941 y 1945.

Fue nombrado profesor emérito del MIT en 1973.

Falleció el 25 de septiembre de 1984 en Suiza.

Factorización de Crout (LU_1)

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Elementos a calcular

Si multiplicamos las filas de L por la 1er. columna de U_1 podemos observar que los elementos de la 1er. columna de L son iguales a los elementos de la 1er. columna de A.

$$l_{11}=a_{11} \quad ; \quad l_{21}=a_{21} \quad ; \quad l_{31}=a_{31} \quad ; \quad l_{41}=a_{41}$$

Factorización de Crout (LU_1) (I)

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Elementos a calcular

Si multiplicamos la primera fila de L por las columnas de U_1 obtenemos:

$$l_{11} = a_{11} \quad ; \quad l_{11} \cdot u_{12} = a_{12} \quad ; \quad l_{11} \cdot u_{13} = a_{13} \quad ; \quad l_{11} \cdot u_{14} = a_{14}$$

Por lo tanto podemos calcular los valores de la primera fila de U_1 como:

$$u_{12} = \frac{a_{12}}{l_{11}} \quad ; \quad u_{13} = \frac{a_{13}}{l_{11}} \quad ; \quad u_{14} = \frac{a_{14}}{l_{11}}$$

Factorización de Crout (LU_1) (II)

Elementos a calcular

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Si multiplicamos las filas desde 2 hasta n, de L por las 2da. columna de U_1 obtenemos:

$$l_{21} \cdot u_{12} + l_{22} = a_{22} \quad ; \quad l_{31} \cdot u_{12} + l_{32} = a_{32} \quad ; \quad l_{41} \cdot u_{12} + l_{42} = a_{42}$$

Por lo tanto podemos calcular los valores de la segunda columna de L_1 como:

$$l_{22} = a_{22} - l_{21} \cdot u_{12} \quad ; \quad l_{32} = a_{32} - l_{31} \cdot u_{12} \quad ; \quad l_{42} = a_{42} - l_{41} \cdot u_{12}$$

Factorización de Crout (LU_1) (III)

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Repitiendo el mismo esquema, obtenemos:

$$l_{21} \cdot u_{13} + l_{22} \cdot u_{23} = a_{23} \quad ; \quad l_{21} \cdot u_{14} + l_{22} \cdot u_{24} = a_{24}$$

Por lo tanto podemos calcular los valores de la segunda fila de U_1 como:

$$u_{23} = \frac{a_{23} - l_{21} \cdot u_{13}}{l_{22}} \quad ; \quad u_{24} = \frac{a_{24} - l_{21} \cdot u_{14}}{l_{22}}$$

Factorización de Crout (LU_1) (IV)

Elementos a calcular

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & \boxed{l_{33}} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & \boxed{l_{43}} & l_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Si multiplicamos las filas desde 3 hasta n, de L por las 3ra. columna de U_1 obtenemos:

$$l_{31} \cdot u_{13} + l_{32} \cdot u_{23} + l_{33} = a_{33} \quad ; \quad l_{41} \cdot u_{13} + l_{42} \cdot u_{23} + l_{43} = a_{43}$$

Por lo tanto podemos calcular los valores de la tercera columna de L_1 como:

$$l_{33} = a_{33} - l_{31} \cdot u_{13} - l_{32} \cdot u_{23} \quad ; \quad l_{43} = a_{43} - l_{41} \cdot u_{13} - l_{42} \cdot u_{23}$$

Factorización de Crout (LU_1) (V)

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & \boxed{u_{34}} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Elementos a calcular

Repitiendo el mismo esquema, obtenemos:

$$l_{31} \cdot u_{14} + l_{32} \cdot u_{24} + l_{33} \cdot u_{34} = a_{34}$$

Por lo tanto podemos calcular los valores de la segunda fila de U_1 como:

$$u_{34} = \frac{a_{34} - l_{31} \cdot u_{14} - l_{32} \cdot u_{24}}{l_{33}}$$

Factorización de Crout (LU_1) (VI)

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & \boxed{l_{44}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Elementos a calcular

Si multiplicamos la filas 4, de L por las 4ta. columna de U_1 obtenemos:

$$l_{41} \cdot u_{14} + l_{42} \cdot u_{24} + l_{43} \cdot u_{34} + l_{44} = a_{44}$$

Por lo tanto podemos calcular el último valor de L_1 como:

$$l_{44} = a_{44} - l_{41} \cdot u_{14} - l_{42} \cdot u_{24} - l_{43} \cdot u_{34}$$

Implementación de la Reducción de Crout

```
REAL(8) A(n,n)
INTEGER fila, col, i, k

A(1,2:)=A(1,2:) / A(1,1)

DO i=2, orden
! Calcula la columna i
  DO fila=i, orden
    DO k=1,i-1
      A(fila,i)=A(fila,i) - A(fila,k)*A(k,i)
    END DO
  END DO
! Calcula fila i
  DO col=i+1, orden
    DO k=1,i-1
      A(i, col)=A(i,col) - A(i,k)*A(k,col)
    END DO
    A(i,col) = A(i,col) / A(i,i)
  END DO
END DO
```

Solución a partir de Crout (I)

Dado que la matriz **A** se ha transformado en el producto **L.U$_1$**

$$A \cdot x = b \quad \rightarrow \quad L \cdot U_1 \cdot x = b \quad \rightarrow \quad L \cdot (U_1 \cdot x) = b$$

Si llamamos **c** a **(U$_1$.x)** , el sistema se transforma en:

$$L \cdot (U_1 \cdot x) = b \quad \rightarrow \quad L \cdot c = b$$

Como la matriz **L** es una matriz triangular inferior, podemos obtener los valores de c, aplicando sustitución progresiva.

$$c_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \quad ; \quad c_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} \cdot c_k}{l_{ii}} \quad ; \quad i = 2,3,\ldots,n$$

Solución a partir de Crout (II)

Una vez obtenidos los valores de **c**, como:

$$L \cdot (U_1 \cdot x) = b \quad \rightarrow \quad L \cdot c = b$$

Nos queda el siguiente sistema:

$$U_1 \cdot x = c$$

Y como la matriz $\mathbf{U_1}$ es una matriz triangular superior, podemos obtener los valores de **x**, aplicando sustitución regresiva.

$$x_n = c_n \quad ; \quad x_i = c_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} \cdot x_k \quad ; \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

Obtención de la solución

```
REAL(8) A(n,n)
INTEGER fila, col, i, k

! Calcula el vector c
c(1) = b(1) / A(1,1)
DO i=2, orden
  c(i) = b(i)
  DO k=1, i-1
    c(i) = c(i) - A(i,k)*c(k)
  END DO
  c(i) = c(i) / A(i,i)
END DO

! Calcula la Solución
x(orden) = c(orden)
DO i=(orden-1), 1, -1
  x(i) = c(i)
  DO k=i+1,orden
    x(i) = x(i) - A(i,k)*x(k)
  END DO
END DO
```

Preguntas . . .