Cálculo Numérico - Elementos de Cálculo Numérico

Gauss - LU - Cholesky

Mercedes Pérez Millán

Dto. de Matemática–FCEyN–Universidad de Buenos Aires
IMAS-CONICET

26 de abril de 2021

- Queremos resolver sistemas lineales ($Ax = b$). Numéricamente.
- Sabemos triangular matrices.
- Una vez que triangulamos, despejamos x_n, reemplazamos y despejamos x_{n-1}, y así hasta despejar x_1:

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1,n-1} & a_{1,n} & b_1 \\ 0 & \tilde{a}_{12} & \dots & \tilde{a}_{2,n-1} & \tilde{a}_{2,n} & \tilde{b}_2 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \tilde{a}_{n-1,n-1} & \tilde{a}_{n-1,n} & \tilde{b}_{n-1} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \tilde{a}_{n,n} & \tilde{b}_n \end{array}\right)$$

Eliminación Gaussiana

- Se busca transformar un sistema lineal $Ax = b$ en uno triangular superior $Ux = y$ por medio de operaciones lineales entre filas (= multiplicando por matrices a izquierda).

- Se busca transformar A en U introduciendo ceros debajo de la diagonal, multiplicando por matrices triangulares inferiores L_k a izquierda:

$$\underbrace{L_{n-1} \ldots L_2 L_1}_{L^{-1}} A = U \;\Rightarrow\; A = LU.$$

- Se resuelve $Ly = b$ y luego $Ux = y$.

Ejemplo breve con números

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 3 & 8 \\ 2 & -1 & 9 \end{array}\right) \underset{F_2-2F_1\to F_2}{\longrightarrow} \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 3 & 8 \\ 0 & -7 & -7 \end{array}\right).$$

$$x_2 = \frac{-7}{-7} = 1 \quad \Rightarrow \quad x_1 + 3\times 1 = 8 \quad \Rightarrow \quad x_1 = 8-3 = 5.$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}}_{L^{-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 0 & -7 \end{pmatrix}}_{U} \quad \Rightarrow \quad A = LU.$$

Triangulemos la siguiente matriz (sin pivotear):

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

Haciendo eliminación Gaussiana (sin pivoteo):

$$A \xrightarrow[F_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} F_1 \to F_2]{} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[F_3 - \frac{a_{32}}{a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}} F_2 \to F_3]{} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} - \dfrac{a_{23}a_{32}}{a_{22} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}} \end{pmatrix}$$

Busquemos ahora la descomposición LU:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \xrightarrow[F_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} F_1 \to F_2]{} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[F_3 - \frac{a_{32}}{a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}} F_2 \to F_3]{} \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} - \frac{a_{23}a_{32}}{a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}} \end{pmatrix}}_{U}$$

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{a_{32}}{a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow L_2 L_1 A = U \quad \Rightarrow A = \underbrace{(L_2 L_1)^{-1}}_{L} U$$

Observaciones:

- Hicimos:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \underset{F_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} F_1 \to F_2}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \dots$$

Miremos los elementos de la diagonal:

$$a_{11}, \quad a_{22} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} = \frac{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}{a_{11}}, \quad \dots$$

Para que haya descomposición LU *necesitamos* que los primeros menores principales sean no nulos.

Observaciones:

- Si $L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -\ell_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -\ell_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$, entonces

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \ell_{2,1} & 1 & & & \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \ell_{n,1} & \ell_{n,2} & \dots & \ell_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}.$$

Pongamos flotantes:

Resolver el siguiente sistema lineal con aritmética de punto flotante de 2 dígitos y redondeo con eliminación gaussiana sin pivoteo:

$$\begin{aligned} 0{,}001\ x + 2\ y &= 2, \\ 3\ x + 4\ y &= 700. \end{aligned}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0,001 & 2 & 2 \\ 3 & 4 & 700 \end{array}\right)$$

Primero notemos que:

- fl(F1)=F1, fl(F2)=F2;
- queremos hacer $F_2 - \frac{3}{0{,}001} F_1$, donde $\frac{3}{0{,}001} = 3000$ y fl(3000)=3000;
- y además

$$\begin{aligned} \mathrm{fl}(3000F_1) &= (\mathrm{fl}(3000 \times 0,001)\ \mathrm{fl}(3000 \times 2)|\mathrm{fl}(3000 \times 2)) \\ &= (\mathrm{fl}(3)\ \mathrm{fl}(6000)|\mathrm{fl}(6000)) = (3\ 6000 \mid 6000). \end{aligned}$$

La cuenta que debemos hacer, entonces, es:

- $\mathrm{fl}(F_2 - 3000F_1)$=fl($F_2$-(3 6000 | 6000));
- fl(4-6000)=fl(-5996)=-6000, fl(700-6000)=fl(-5300)=-5300.

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0,001 & 2 & 2 \\ 3 & 4 & 7 \end{array}\right) \xrightarrow[\mathrm{fl}(F_2 - \mathrm{fl}(\mathrm{fl}(\frac{3}{0,001})F_1)) \to F_2]{} \left(\begin{array}{cc|c} 0,001 & 2 & 2 \\ 0 & -6000 & -5300 \end{array}\right)$$

Luego, la solución numérica $(\tilde{x}, \tilde{y})$ es:

$$\tilde{y} = \mathrm{fl}\left(\frac{-5300}{-6000}\right) = fl(0{,}88333\dots) = 0{,}88$$

$$\tilde{x} = \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{fl}(2 - \mathrm{fl}(2 \times 0{,}88))}{0,001}\right) = \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{fl}(2 - \mathrm{fl}(1{,}76))}{0,001}\right) =$$

$$= \mathrm{fl}\left(\frac{\mathrm{fl}(2 - 1{,}8)}{0,001}\right) = \mathrm{fl}\left(\frac{0{,}2}{0,001}\right) = 200.$$

Aumenta el error

Pero la verdadera solución es $y = \frac{5300}{5996} \sim 0{,}88392\dots$, $x = \frac{1392000}{5996} \sim 232{,}15$.

Tarea: calcular el error relativo.

Descomposición de Cholesky

- Si A es simétrica y definida positiva, se puede tomar $U = L^t$.
- A es simétrica si $A^t = A$.
- A es definida positiva si y solo si todos sus menores principales son positivos.

Un ejemplo de descomposición de Cholesky con números:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{pmatrix}$$

- Simétrica: OK.
- Definida positiva: $4 > 0$ ✓, $4.\,37 - 12^2 = 4 > 0$ ✓, $\det(A) = 36 > 0$ ✓: OK

Busquemos la descomposición:

$$\begin{pmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} \boxed{\ell_{11} \quad 0 \quad 0} \\ \ell_{21} \quad \ell_{22} \quad 0 \\ \ell_{31} \quad \ell_{32} \quad \ell_{33} \end{pmatrix}}^{L} \overbrace{\begin{pmatrix} \ell_{11} & \ell_{21} & \ell_{31} \\ 0 & \ell_{22} & \ell_{32} \\ 0 & 0 & \ell_{33} \end{pmatrix}}^{L^t}$$

Entonces:

- $\ell_{11}^2 = 4 \Rightarrow \ell_{11} = 2$ (se pide que los elementos de la diagonal de L sean positivos).
- $\ell_{11}\ell_{21} = 12 \Rightarrow \ell_{21} = 6$.
- $\ell_{11}\ell_{31} = -16 \Rightarrow \ell_{31} = -8$.

Sigamos:

$$\begin{pmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 6 & \ell_{22} & 0 \\ -8 & \ell_{32} & \ell_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 6 & -8 \\ 0 & \ell_{22} & \ell_{32} \\ 0 & 0 & \ell_{33} \end{pmatrix}$$

Entonces:

- $36 + \ell_{22}^2 = 37 \;\Rightarrow \ell_{22} = 1.$
- $-48 + \ell_{22}\ell_{32} = -43 \;\Rightarrow \ell_{32} = 5.$
- $64 + \ell_{32}^2 + \ell_{33}^2 = 98 \;\Rightarrow \ell_{33} = 3.$

Luego:

$$L = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 6 & 1 & 0 \\ -8 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$