Cálculo Numérico - Elementos de Cálculo Numérico

Número de condición - Gauss - LU - PALU

Mercedes Pérez Millán

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

11 de septiembre de 2024

Teorema:

Sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, A inversible. Sea $b \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ y x tal que $Ax = b$. Sean $\tilde{b}$ y $\tilde{x}$ tales que $A\tilde{x} = \tilde{b}$. Sea $|||\cdot|||$ norma vectorial.

$$\frac{1}{|||A|||\,|||A^{-1}|||}\frac{|||b-\tilde{b}|||}{|||b|||} \leq \frac{|||x-\tilde{x}|||}{|||x|||} \leq |||A|||\,|||A^{-1}|||\frac{|||b-\tilde{b}|||}{|||b|||}.$$

Definición:

Llamamos *número de condición de la matriz A en norma* $|||\cdot|||$ al número $\mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A) = |||A|||\,|||A^{-1}|||$.

Observación:

- $\mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A) = \mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A^{-1})$
- $|||I||| = 1$ para toda $|||\cdot|||$ subordinada a una norma vectorial (¿por qué?).

$$1 = |||I||| = |||AA^{-1}||| \leq |||A||| |||A^{-1}||| = \mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A).$$

Una matriz se dice *mal condicionada* cuando su condición es mucho mayor que 1.

Dem. del Teo.:

$$|||b-\tilde{b}||| = |||A(x-\tilde{x})||| \leq |||A||| \, |||x-\tilde{x}|||$$

$$|||x||| = |||A^{-1}b||| \leq |||A^{-1}||| \, |||b|||$$

Luego, $\frac{|||x-\tilde{x}|||}{|||x|||} \geq \frac{1}{|||A||| \, |||A^{-1}|||} \frac{|||b-\tilde{b}|||}{|||b|||}$.

$$|||x-\tilde{x}||| = |||A^{-1}(b-\tilde{b})||| \leq |||A^{-1}||| \, |||b-\tilde{b}|||$$

$$|||b||| = |||Ax||| \leq |||A||| \, |||x|||$$

Luego, $\frac{|||x-\tilde{x}|||}{|||x|||} \leq |||A||| \, |||A^{-1}||| \frac{|||b-\tilde{b}|||}{|||b|||}$, como queríamos probar. $\square$

Ejemplo:

A simétrica e inversible, sean $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ los autovalores de A y $v_1, \ldots, v_n$ los autovectores asociados que forman una bon.
Llamemos:

- λ_{max} a un autovalor de A tal que $|\lambda_{max}| \geq |\lambda_i|\ \forall i$, y sea v_{max} su autovector asociado.
- λ_{min} a un autovalor de A tal que $|\lambda_{min}| \leq |\lambda_i|\ \forall i$, y sea v_{min} su autovector asociado.

Sea $b \neq 0$ en el autoespacio de λ_{max}, entonces $Ab = \lambda_{max} b$ y $x = A^{-1}b = \frac{1}{\lambda_{max}} b$.
Sea $\tilde{b} = b + \varepsilon v_{min}$. Entonces,

$$x - \tilde{x} = A^{-1}b - A^{-1}(b + \varepsilon v_{min}) = -A^{-1}\varepsilon v_{min} = -\frac{\varepsilon}{\lambda_{min}} v_{min}.$$

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|_2}{\|x\|_2} = \frac{\| - \frac{\varepsilon}{\lambda_{min}} v_{min}\|_2}{\| \frac{1}{\lambda_{max}} b\|_2} = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|} \frac{\| - \varepsilon v_{min}\|_2}{\|b\|_2} = \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|} \frac{\|b - \tilde{b}\|_2}{\|b\|_2}$$

Pero $|\lambda_{max}| = \rho(A) = \|A\|_2$ y $\frac{1}{|\lambda_{min}|} = \rho(A^{-1}) = \|A^{-1}\|_2$ (verificar).

Luego, $\dfrac{\|x - \tilde{x}\|_2}{\|x\|_2} = \mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A) \dfrac{\|b - \tilde{b}\|_2}{\|b\|_2}$.

¿Y si tomamos b en la dirección de v_{min} y $b - \tilde{b}$ en la dirección de v_{max}?

Teorema:

Sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ inversible, $|||\cdot|||$ norma vectorial.

$$\frac{1}{\mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A)} = \inf_{B \text{ singular}} \frac{|||A-B|||}{|||A|||}.$$

<u>*Dem.:*</u> Sea B singular, entonces existe $\hat{x} \neq 0$ tal que $B\hat{x} = 0$.

$|||\hat{x}||| = |||A^{-1}A\hat{x}||| = |||A^{-1}(A\hat{x} - B\hat{x})||| \leq |||A^{-1}|||\,|||A-B|||\,|||\hat{x}|||.$

Como $|||\hat{x}||| \neq 0$, $1 \leq |||A^{-1}|||\,|||A-B|||$ y por lo tanto

$$\frac{1}{\mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A)} = \frac{1}{|||A|||\,|||A^{-1}|||} \leq \frac{|||A-B|||}{|||A|||}.$$

Sea $y \neq 0$ tal que $|||y||| = \frac{1}{|||A^{-1}|||}$ y tal que $|||A^{-1}y||| = |||A^{-1}||| \, |||y|||$.

Sea x tal que $Ax = b$, luego $|||x||| = |||A^{-1}y||| = |||A^{-1}||| \, |||y||| = 1$.

Se puede probar que existe z tal que

$$\langle z, x\rangle = 1, \ \langle z, u\rangle \leq 1 \ \forall u \text{ tal que } |||u||| = 1.$$

Notar que si $|||u||| = 1$, se tiene que $||| - u||| = 1$ y entonces $\langle z, u\rangle \leq 1$, $\langle z, -u\rangle \leq 1$ y por lo tanto $|\langle z, u\rangle| = |z^t u| \leq 1$.

Sea $B = A - yz^t$. Vale que $Bx = Ax - yz^t x = y - y = 0$, y por lo tanto B es singular.

$$|||yz^t u||| = |||y||| \cdot |z^t u| \leq |||y||| = \frac{1}{|||A^{-1}|||}, \quad \forall |||u||| = 1.$$

$$|||A - B||| = |||yz^t u||| \leq \frac{1}{|||A^{-1}|||},$$

y esto implica $\frac{|||A-B|||}{|||A|||} \leq \frac{1}{|||A||| \, |||A^{-1}|||} = \frac{1}{\mathrm{cond}_{|||\cdot|||}(A)}$. $\square$

Métodos directos para la resolución de sistemas lineales

Eliminación Gaussiana (sin pivoteo):

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 3 & -4 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \underset{\substack{F_2+3F_1\to\tilde{F}_2 \\ F_3-F_1\to\tilde{F}_3}}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \underset{\tilde{F}_3+\frac{1}{2}\tilde{F}_2\to\tilde{\tilde{F}}_3}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$L_1 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 3 & -4 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = A^{(2)}$$

$$L_2(L_1 A) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = A^{(3)} = U$$

Descomposición LU:

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

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \; L_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \; L = L_1^{-1} L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 1 & 0 \\ 1 & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$ (triangular inferior, con unos en la diagonal).

En general:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -\ell_{21} & 1 & & & \\ -\ell_{31} & 0 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -\ell_{n1} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \ell_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}} \quad \text{si} \quad a_{11} \neq 0.$$

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ 0 & 1 & & & & \\ \vdots & -\ell_{32} & 1 & & & \\ \vdots & -\ell_{42} & 0 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & -\ell_{n2} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \ell_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad \text{si} \quad a_{22}^{(2)} \neq 0.$$

Notemos que $a_{22}^{(2)} = -\ell_{21} a_{12} + a_{22} \neq 0 \Leftrightarrow a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12} \neq 0$.

Si $A_k^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{1k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{kk}^{(k)} \\ a_{k+1,k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{nk}^{(k)} \end{pmatrix}$, buscamos L_k tal que $L_k A_k^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{1k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{kk}^{(k)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$.

Luego, $\ell_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$ para $k < i \leq n$.

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

$$= I - \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \ell_{k+1,k} \\ \vdots \\ \ell_{nk} \end{pmatrix} (0, \ldots, 0, \overbrace{1}^{k}, 0, \ldots, 0) = I - \ell_k e_k^t.$$

$$(I - \ell_k e_k^t)(I + \ell_k e_k^t) = I - \ell_k \underbrace{e_k^t \ell_k}_{=0} e_k^t = I \;\Rightarrow\; L_k^{-1} = I + \ell_k e_k^t.$$

Además,

$$
\begin{aligned}
L_k^{-1} L_{k+1}^{-1} &= (I + \ell_k e_k^t)(I + \ell_{k+1} e_{k+1}^t) \\
&= I + \ell_k e_k^t + \ell_{k+1} e_{k+1}^t + \ell_k \underbrace{e_k^t \ell_{k+1}}_{=0} e_{k+1}^t = I
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \; L_k^{-1} L_{k+1}^{-1} = \begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
& \ddots & & & & & \\
& & 1 & & & & \\
& & \ell_{k+1,k} & 1 & & & \\
& & \ell_{k+2,k} & \ell_{k+2,k+1} & 1 & & \\
& & \vdots & \vdots & & \ddots & \\
& & \ell_{nk} & \ell_{n,k+1} & & & 1
\end{pmatrix}.
$$

Luego,

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ \ell_{2,1} & 1 & & & & \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ell_{n,2} & \dots & & \ell_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}.$$

Algoritmo de eliminación gaussiana sin pivoteo

```
U=A, L=I,
para k=1 hasta n-1
   para i=k+1 hasta n
      L[i,k]=U[i,k]/U[k,k]
      U[i,k:n]=U[i,k:n]-L[i,k]*U[k,k:n]
```

Son aproximadamente $\frac{2}{3}n^3$ operaciones (Trefethen & Bau, p.152).

Teorema:

Sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ tal que en el procedimiento de eliminación gaussiana no aparecen pivotes nulos ($a_{kk}^{(k)} \neq 0, k = 1, \ldots, n$). Entonces existen únicas matrices L y U, L triangular inferior con unos en la diagonal y U triangular superior tales que $A = LU$.

Veamos la unicidad: supongamos $A = LU = \widetilde{L}\widetilde{U}$.

$$\det(A) = \det(L)\det(U) = \det(\widetilde{L})\det(\widetilde{U}) = \prod_{k=1}^{n} a_{kk}^{(k)} \neq 0.$$

Luego, U y $\widetilde{U}$ (y L y $\widetilde{L}$) son inversibles. Tenemos:

$$\underbrace{\widetilde{L}^{-1}L}_{\substack{\text{triangular inferior, con}\\ \text{unos en la diagonal}}} = \underbrace{D}_{\text{diagonal}} = \underbrace{\widetilde{U}U^{-1}}_{\text{triangular superior}}$$

$$\Rightarrow \; D = I \; \Rightarrow L = \widetilde{L}, U = \widetilde{U}.$$

Si $A = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 3 & -4 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, como $a_{11} = 0$, **no** puedo hacer eliminación gaussiana.

Permuto filas: $P = P_{12}$ y obtengo $PA = \begin{pmatrix} 3 & -4 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ y ahora sí puedo.

Teorema:

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ inversible, existen una matriz de permutación P, una matriz L triangular inferior con unos en la diagonal y una matriz U triangular superior tales que $PA = LU$.