# Métodos Directos de resolución de SEAL

Victorio E. Sonzogni



Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Sistema de ecuaciones lineales

Un sistema de ecuaciones algebraicas lineales

$$E_1: a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$E_2: \quad a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2$$

• •

$$E_n: a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n$$

puede representarse matricialmente:

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

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

#### Sistema de ecuaciones lineales

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

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

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Sistemas de ecuaciones lineales

- Las características de la matriz determinan si el sistema de ecuaciones tiene solución; si ésta única; si es poco sensible a la variación en los datos; si es fácil o dificil de resolver; etc.
- El sistema de ecuaciones anterior tiene solución única si se da una de las siguientes (equivalentes) condiciones:
  - La matriz A es invertible
  - El rango de A es n ( su determinante no es nulo)
  - El sistema Ax = 0 admite solamente la solución nula.

#### Tipos de matrices

En cuanto a la estructura de las matrices, éstas se denominan:

- Matriz general: el caso más general que no corresponde a alguno de los listados abajo
- Matriz simétrica: cuando  $a_{ij} = a_{ji}$
- Matriz diagonal: cuando solamente los elemento  $a_{ii}$  son distintos de cero
- Matriz triangular: cuando los elementos estrictamente por arriba de la diagonal son nulos (diagonal inferior) o los elementos estrictamente por debajo de la diagonal son nulos (diagonal superior)
- Matriz banda: cuando hay una banda, alrededor de la diagonal principal, donde pueden estar los elementos no nulos. Fuera de esa banda son todos nulos.
- Matriz rala (sparse): matriz poblada de ceros con pocos elementos no nulos.

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Tipos de matrices

<u>Definición</u>: **Matriz diagonalmente dominante**:
 Una matriz se dice *estrictamente diagonal dominante* si

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

- Una matriz estrictamente diagonal dominante es no singular.
- <u>Definición</u>: Matriz simétrica definida positiva:
   Una matriz A simetrica se dice definida positiva si

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

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



#### Tipos de matrices

- Tambien una matriz es definida positiva si y solo si todos sus autovalores son positivos.
- Si una matriz simetrica A es definida positiva, entonces:
  - a) A no es singular
  - b)  $a_{ii} > 0$   $\forall i$
  - c)  $\max_{\substack{1 \le i \le n \\ 1 \le j \le n}} |a_{ij}| \le \max_{1 \le i \le n} |a_{ii}|$
  - d)  $a_{ij}^2 < a_{ii}a_{jj} \qquad \forall i \neq j$



Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Sistemas de ecuaciones lineales

- La resolución de un SEAL puede realizarse de diferentes métodos que suelen clasificarse en:.
  - Métodos directos
     En ellos a través un número finito de pasos se obtiene la solución del problema.
  - Métodos iterativos
     En estos se contruye una secuencia de soluciones que se aproxima a la solución.



#### Sistemas de ecuaciones lineales

- Sistemas equivalentes: Dos sistemas  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  y  $\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{d}$  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 ecuación por un escalar  $(\neq 0)$ :  $\lambda E_i \to E_i$
  - Sumar a una ecuación un multiplo de otra:  $E_i + \lambda E_j \leftrightarrow E_i$

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### 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.
- ¿Que sistemas pueden ser fáciles para resolver? Por ejemplo:
  - 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:

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

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

# Sistemas con matrices triangulares

Para un sistema con matriz triangular superior:

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

ullet La resolución comienza con el término  $x_n$  y progresa hacia arriba

$$x_n = b_n/a_{nn}$$
  
 $x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n)/a_{n-1,n-1}$   
...  
 $x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j)/a_{ii}$  para  $i = n-1, ... 1$ 

Análogamente se resuelve un sistema con matriz triangular inferior.

- 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.
- ullet En un sistema de n ecuaciones se efectuan n-1 pasos de eliminación.
- La matriz  ${\bf A}$  del sistema, va siendo transformada en matrices  ${\bf A^{(k)}}$  en cada paso k de la eliminación.
- ullet El vector de términos independientes va transformándose también en sucesivos vectores  ${f b}^{({f k})}$
- Se introducirá el método a través de un ejemplo sencillo.



Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Eliminación de Gauss

Ejemplo:

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

Se propone transformar el sistema en varios pasos En el primer paso se propone un sistema:

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

En el segundo paso se propone un sistema:

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

En el tercer paso:

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

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### 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:

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

- ullet Se forma una sucesión de sistemas con matrices  ${f A}^{(k)}$
- 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*



Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Eliminación de Gauss

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{cases} a_{11}^{(k)} & \dots & a_{1,k-1}^{(k)} & a_{1k}^{(k)} & \dots & a_{1j}^{(k)} & \dots & a_{1n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kj}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{ik}^{(k)} & \dots & a_{ij}^{(k)} & \dots & a_{in}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nj}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

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

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

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

## Algoritmo para eliminación de Gauss

Input: n,  $\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A} \ \mathbf{b}]$ 

**Output**: x, o mensaje de error

Eliminacion

end

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

# Algoritmo para eliminación de Gauss (cont.)

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

Retrosustitucion

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

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Factorización LU

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

$$A = LU$$

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:

$$Ax = LUx = b$$

LLamando

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$$

El sistema queda

$$Ly = b$$

De esta última ecuación se obtiene el vector y y de la anterior, el vector x



La solución se hace entonces en tres etapas:

1) Factorización de la matriz

$$A = LU$$

2) Solución del sistema

$$Ly = b$$

por sustitución hacia adelante

3) Solución del sistema

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$$

por sustitución hacia atrás



Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Factorización LU

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

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

$$E_{1}$$

$$E_{2} - \frac{a_{21}}{a_{11}} E_{1}$$

$$E_{3} - \frac{a_{31}}{a_{11}} E_{1}$$

$$E_{4} - \frac{a_{41}}{a_{11}} E_{1}$$

En la segunda:

$$E_{1}$$

$$E_{2}$$

$$E_{3} - \frac{a_{32}}{a_{2}} E_{2}$$

$$E_{4} - \frac{a_{42}}{a_{22}} E_{2}$$

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Factorización LU

• En la tercera etapa:

$$E_1$$
 $E_2$ 
 $E_3$ 
 $E_4 - \frac{a_{43}}{a_{33}}E_3$ 

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

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

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  ${\bf L}$  de la transparencia anterior, son los factores de la matriz  ${\bf A}$ .

- <u>Teorema</u>: Si todos los elementos  $a_{kk}^{(k)}$  de la descomposicion de Gauss son distintos de cero, entonces  $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$ , 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 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).

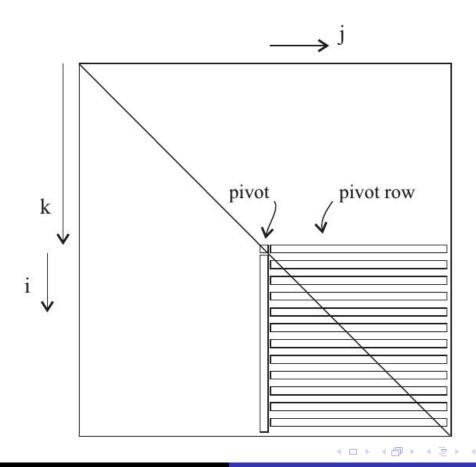
Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Factorización LU kij

$$\begin{array}{lllll} & \text{for } k=1,2,\dots n-1 \text{ do} & \text{fila pivotal} \\ & \text{for } i=k+1,\dots n \text{ do} \\ & s \leftarrow a_{ik}/a_{kk} & \\ & a_{ik} \leftarrow s & l_{ik} \\ & \text{for } j=k+1,\dots n \text{ do} \\ & a_{ij} \leftarrow a_{ij}-s \ a_{kj} & u_{ij} \\ & \text{end} & \\ & \text{end} & \\ & \text{end} & \\ & \end{array}$$

## Factorización LU kij



Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Factorización LU

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

990

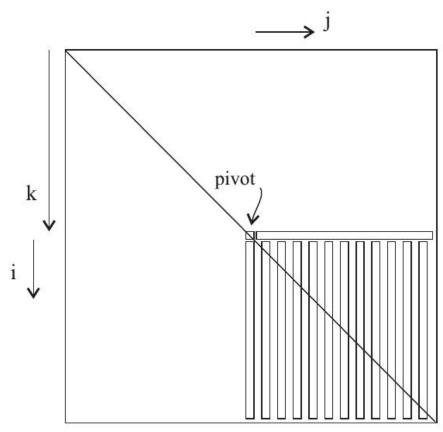
# Factorización LU kji

$$\begin{array}{c} \text{for } k=1,\dots n-1 \text{ do} \\ \text{ for } i=k+1,\dots n \text{ do} \\ s \leftarrow a_{ik}/a_{kk} \\ a_{ik} \leftarrow s \\ \text{ end} \\ \\ \text{for } j=k+1,\dots n \text{ do} \\ \text{ for } i=k+1,\dots n \text{ do} \\ a_{ij} \leftarrow a_{ij}-a_{ik} \ a_{kj} \\ \text{ end} \\ \\ \text{end} \\ \\ \text{end} \end{array}$$

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

# Factorización LU kji



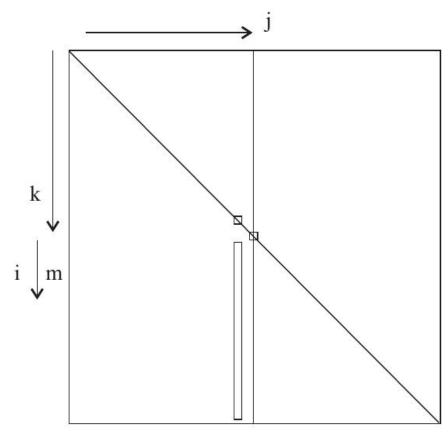
# Factorización LU jki

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

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

# Factorización LU jki



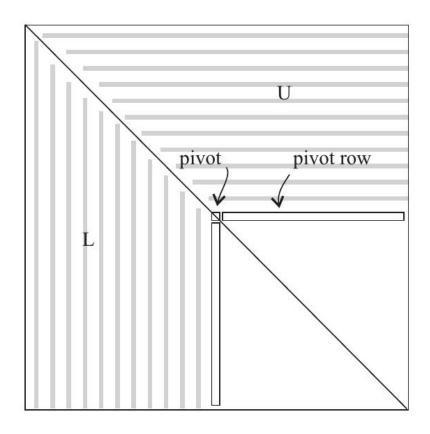
- En realidad los tres ciclos imbricados pueden recorrerse de 6, maneras diferentes:
  - kij
  - kji
  - ijk
  - ikj
  - jik
  - jki



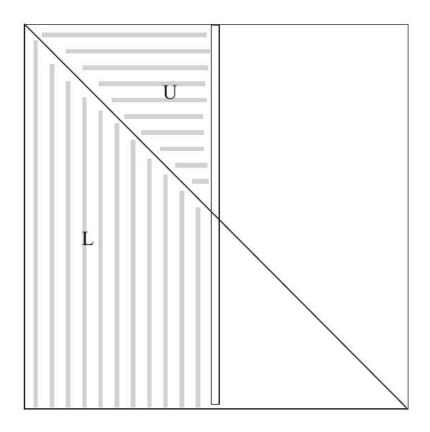
Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

# Factorización LU kij y kji



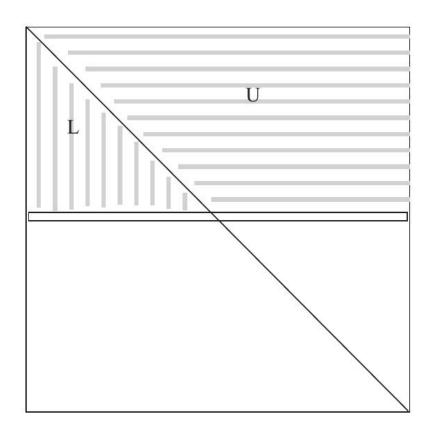
# Factorización LU jik y jki



Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

# 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:

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

aplicando el método de Gauss

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



Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Pivoteo

y de allí puede obtenerse

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

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

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.

#### Pivoteo

- Este problema 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 **r** que indica el orden en que se ha realizado la factorización.



Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Factorización kij con pivoteo parcial

```
for i = 1, \dots n do
            r_i = i
end
for k = 1, \ldots n - 1 do
                                                                                     fila pivotal
            buscar p \in \{k, k+1, \dots n\}
                         \mathsf{tal} \; \mathsf{que} \; |a_{r_p k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{r_i k}|
            if a_{r_n k} = 0 \rightarrow \text{mensaje de error}
            if r_p \neq r_k
                                      z \leftarrow r_p
                                      r_p \leftarrow r_k
                                      r_k \leftarrow z
            for i = k + 1, \dots n do
                         s \leftarrow a_{r_i k}/a_{r_k k}
                         a_{r_ik} \leftarrow s
                         for j = k + 1, \dots n do
                                      a_{r_ij} \leftarrow a_{r_ij} - s \ a_{r_kj}
                         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:

$$Ly = Pb$$

$$Ux = y$$

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

## 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  $\frac{|a_{r_p k}|}{s_{r_p}} = \max_{k \le i \le n} \frac{|a_{r_i k}|}{s_{r_i}}$ 



## Algoritmo fact. LU con pivoteo parcial escalado

```
Input: n, A
Output: L y U (sobre A)
for i = 1, 2, \dots n do
           s_i = \max_{i \le j \le n} |a_{ij}|
end
for k = 1, 2, ... n - 1 do
                                                                                                 fila pivotal
          se busca p \in \{k, k+1, \dots n\} tal que \frac{|a_{r_p k}|}{s_{r_n}} = \max_{k \leq i \leq n} \frac{|a_{r_i k}|}{s_{r_i}}
           si a_{r_pk} = 0 \rightarrow \text{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,\ldots n do
                      m \leftarrow a_{r_i k}/a_{r_k k}
                      a_{r_ik} \leftarrow m
                      for j = k + 1, k + 2, ... n do
                                 a_{r_ij} \leftarrow a_{r_ij} - m \ a_{r_kj}
                      end
           end
end
```

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

ma a

#### Conteo de operaciones solucíon con descomposición 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 solucíon con descomposición LU

#### 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:

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

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Conteo de operaciones solucíon con descomposición LU

#### En resumen:

- para factorizar:  $\frac{1}{3}n^3$
- ullet 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

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

Demostración:

Como A es simétrica ( o sea  $A = A^T$ ):

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{A^T} = \mathbf{U^TL^T}$$
  $\mathbf{L^{-1}LU} = \mathbf{L^{-1}U^TL^T}$   $\mathbf{U} = \mathbf{L^{-1}U^TL^T}$   $\mathbf{UL^{T-1}} = \mathbf{L^{-1}U^TL^TL^{T-1}}$   $\mathbf{UL^{T-1}} = \mathbf{L^{-1}U^T}$ 

◆ロト ◆昼 ト ◆ 壹 ト ○ 壹 ○ りへ○

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Factorización de Cholesky

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. Así, deben ser ambos miembros matrices diagonales.

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

luego:

$$U = DL^T$$

y entonces

$$A = LU = LDL^{T}$$

#### Factorización de Cholesky

Puede demostrarse que M es una matriz definida positiva y N no es singular, si y solo is  $NMN^T$  es definida positiva. Como A es definida positiva también lo es D, y por ser ésta diagonal sus términos son positivos. Haciendo:

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

se puede escribir:

$$A = CC^{T}$$

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

Lo cual completa la demostración.

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



Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

## Factorización de Cholesky

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

Input: n, A (simétrica, definida positiva)

Output: C (sobreescrita en el triángulo inferior de A)

$$\begin{array}{c} \text{for } i=2,\dots n \text{ do} \\ c_{i1} \leftarrow a_{i1}/c_{11} \\ \text{end} \\ \text{for } i=2,\dots n-1 \text{ do} \\ \\ c_{ii} \leftarrow \left(a_{ii}-\sum_{s=1}^{i-1}c_{is}^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ \text{for } j=i+1,i+2,\dots n \text{ do} \\ c_{ji} \leftarrow \left(a_{ji}-\sum_{s=1}^{i-1}c_{js}c_{is}\right)/c_{ii} \end{array}$$

end

end

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

# Normas, radio espectral y número de condición

◆ロト ◆部ト ◆ミト ◆ミト ミ りゅ(

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

# Normas, radio espectral y número de condición

- Veremos aquí algunas medidas que se pueden hacer sobre una matriz, tales como norma, radio espectral y número de condición.
- Ellas permiten evaluar el comportamiento de la matriz en la solución de un SEAL, cuan fácili o rápido será la solución, o cuan estables serán los resultados frente a errores en los datos.

#### 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)  $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \le \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$  si  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$

(Con doble raya se designa la norma. Así  $\|\mathbf{x}\|$  se lee norma de  $\mathbf{x}$ )

- 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  $L_1$ 

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

Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Normas Vectoriales

ullet 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:

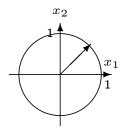
$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{2}$$

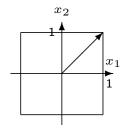
$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = 1$$

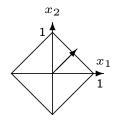
$$\|\mathbf{x}\|_1 = 2$$

#### 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  $\mathbb{R}^2$  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).







Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Normas Matriciales

- Una norma para matrices, debe cumplir las tres condiciones mencionadas.
- Si bien puede definirse de distintas formas, se la suele definir asociada a una definición de norma vectorial; Estas normas se denominan naturales, o inducidas, o subordinadas, o asociadas a una norma vectorial. Y se define como:

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

 Puede verificarse que esta definición de norma natural cumple las tres condiciones pedidas.

#### Normas Matriciales

• Además, de la definición surge una importante consecuencia:

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

Demostración:

Para x = 0, se verifica.

Para  $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{v} = \mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|$ , es tal que $\|\mathbf{v}\| = 1$ De la definición de norma matricial:

$$\|\mathbf{A}\| \ge \|\mathbf{A}\mathbf{v}\| = \|\frac{1}{\|\mathbf{x}\|}\mathbf{A}\mathbf{x}\| = \frac{1}{\|\mathbf{x}\|}\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|$$

Luego

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

Lo que completa la demostración.



Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Normas Matriciales

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

Para la norma vectorial  $\|.\|_{\infty}$ :

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

la norma matricial subordinada es:

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



#### Normas Matriciales

#### Otros 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  $\alpha$ .



Victorio E. Sonzogni

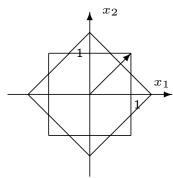
Métodos Directos

#### 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  $\sqrt{2}$



## Radio espectral

• Se define como radio espectral de una matriz A:

$$\rho(\mathbf{A}) = \max\{|\lambda| \mid det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0\}$$

•  $\lambda$  son los autovalores de **A**, soluciones de la ecuación:

$$det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$$

Una matriz de  $n \times n$  tiene n autovalores (algunos pueden ser repetidos; los autovalores pueden ser reales o complejos)

•  $\rho(\mathbf{A})$  es el módulo del mayor autovalor; o sea el radio del menor círculo en el plano complejo, que contiene a todos los autovalores.

◆ロ ト ◆昼 ト ◆ 夏 ト ◆ 夏 ・ か へ ○

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

## Radio Espectral

- Se puede demostrar que:
  - $[\rho(\mathbf{A}^T\mathbf{A})]^{1/2} = ||\mathbf{A}||_2$
  - $\rho(\mathbf{A}) \leq \|\mathbf{A}\|$  para toda norma de  $\mathbf{A}$
- En particular, si A es simétrica:

$$\rho(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_2$$

ullet Si el  $ho({f A}) < 1$  la matriz se llama **convergente** y ello equivale a

$$\lim_{k \to \infty} (a_{ij})^k = 0$$

para cada elemento  $a_{ij}$  de la matriz. Esto será útil para estudiar la convergencia de procedimientos iterativos, en el próximo capítulo.

#### Número de condición

• Sea  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ . Supóngase que existe  $\mathbf{A}^{-1}$ . Luego

$$x = A^{-1}b$$

• 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:

$$\|\mathbf{e}\| = \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\| = \|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{b}}\| = \|\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}})\| \le \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}\|$$

El error relativo

$$\frac{\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \|\mathbf{A}^{-1}\| \|(\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}})\| \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{b}\|} \frac{1}{\|\mathbf{x}\|} \le \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\| \frac{\|(\mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}})\|}{\|\mathbf{b}\|} \frac{\|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Victorio E. Sonzogni

Métodos Directos

#### Número de condición

• Esta expresión puede escribirse:

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

• Donde 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 (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  $\|.\|_{\infty}$ :

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

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

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. < ロ > < 昼 > < 邑 > ◆ 邑 > ● ● 9 へ ©

Métodos Directos

#### Número de condición

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

$$Ae = r$$

- Los errores relativos de los datos y la solución están asociados por la misma relación funcional que los datos y la solución.
- Puede verse que

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

De donde

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

#### Número de condición

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

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

- ullet Si  $\kappa({f A})$  pequeño (o moderado) o matriz bien condicionada
- ullet Si  $\kappa({f A})$  grande o matriz mal condicionada



Victorio E. Sonzogni

**Métodos Directos** 

#### Resumen

En este capítulo hemos visto:

- Los métodos directos de resolución de SEAL
- En particular:
  - el método de eliminación de Gauss
  - ullet factorización (o descomposición)  ${f L}{f U}$
  - ullet una particularización de  ${f LU}$  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, radio espectral y número de condición de una matriz y la implicancia de este último en la solución del sistema.

