Métodos Directos

de resolución de SEAL

Victorio E. Sonzogni

Un sistema de ecuaciones algebraicas lineales

$$
\begin{array}{lcl}
E_1: \quad a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\
E_2: \quad a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \ldots + a_{2n}x_n & = & b_2 \\
\ldots & & \\
E_n: \quad a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \ldots + a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}
$$

puede representarse matricialmente:

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

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

Sistema de ecuaciones lineales

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

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

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 $\mathbf{A}$ es invertible
  - El rango de $\mathbf{A}$ es n (su determinante no es nulo)
  - El sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ 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.

Tipos de matrices

- Definición: **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.
- Definición: **Matriz simétrica definida positiva**:
  Una matriz $\mathbf{A}$ simetrica se dice *definida positiva* si

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

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

Tipos de matrices

- Tambien una matriz es definida positiva si y solo si todos sus autovalores son positivos.
- Si una matriz simetrica $\mathbf{A}$ es definida positiva, entonces:

a) $\mathbf{A}$ no es singular

b) $a_{ii} > 0 \qquad \forall i$

c) $\max\limits_{\substack{1 \le i \le n \\ 1 \le j \le n}} |a_{ij}| \le \max\limits_{1 \le i \le n} |a_{ii}|$

d) $a_{ij}^2 < a_{ii} a_{jj} \qquad \forall i \ne j$

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 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ y $\mathbf{Bx} = \mathbf{d}$ 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 $(\neq 0)$: $\lambda E_i \rightarrow E_i$
  - Sumar a una ecuación un multiplo de otra: $E_i + \lambda E_j \leftrightarrow E_i$

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:

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

Sistemas con matrices triangulares

- Para un sistema con matriz triangular superior:

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

- La resolución comienza con el término x_n y progresa hacia arriba

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

- Análogamente se resuelve un sistema con matriz triangular inferior.

Eliminación de Gauss

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

Eliminación de Gauss

Ejemplo:

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

Se propone transformar el sistema en varios pasos

En el primer paso se propone un sistema:

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

Eliminación de Gauss

En el segundo paso se propone un sistema:

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

En el tercer paso:

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

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:

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

Eliminación de Gauss

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

Eliminación de Gauss

$$
\mathbf{A}^{(k)} = \begin{array}{rc}
 & \begin{array}{cccccccc} \quad & \quad & \quad & col.k & \quad & col.j & \quad & \quad \end{array} \\
\begin{array}{r} \\ \\ fila\ k \\ \\ fila\ i \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{bmatrix}
a_{11}^{(k)} & \dots & a_{1,k-1}^{(k)} & a_{1k}^{(k)} & \dots & a_{1j}^{(k)} & \dots & a_{1n}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \dots & 0 & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kj}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \dots & 0 & a_{ik}^{(k)} & \dots & a_{ij}^{(k)} & \dots & a_{in}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \dots & 0 & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nj}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)}
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

Eliminación de Gauss

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

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

Algoritmo para eliminación de Gauss

Input: n, $\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A}\ \mathbf{b}]$
Output: x, o mensaje de error

Eliminacion

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
end

Algoritmo para eliminación de Gauss (cont.)

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

Retrosustitucion

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

Factorización LU

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

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:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{b}$$

LLamando

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$$

El sistema queda

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$$

De esta última ecuación se obtiene el vector $\mathbf{y}$ y de la anterior, el vector $\mathbf{x}$

Factorización LU

La solución se hace entonces en tres etapas:

1) Factorización de la matriz

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$$

2) Solución del sistema

$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$$

por sustitución hacia adelante

3) Solución del sistema

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

por sustitución hacia atrás

Factorización LU

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

Factorización LU

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

$$
\begin{array}{l}
E_1 \\
E_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} E_1 \\
E_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}} E_1 \\
E_4 - \frac{a_{41}}{a_{11}} E_1
\end{array}
$$

- En la segunda:

$$
\begin{array}{l}
E_1 \\
E_2 \\
E_3 - \frac{a_{32}}{a_2} E_2 \\
E_4 - \frac{a_{42}}{a_{22}} E_2
\end{array}
$$

Factorización LU

- En la tercera etapa:

$$\begin{aligned} &E_1 \\ &E_2 \\ &E_3 \\ &E_4 - \frac{a_{43}}{a_{33}} E_3 \end{aligned}$$

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

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

Factorización LU

- 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 $\mathbf{L}$ de la transparencia anterior, son los factores de la matriz $\mathbf{A}$.
- Teorema: Si todos los elementos $a_{kk}^{(k)}$ de la descomposicion de Gauss son distintos de cero, entonces $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, 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 $\mathbf{LU}$ 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).

Factorización LU kij

for $k = 1, 2, \dots n-1$ do — *fila pivotal*

for $i = k+1, \dots n$ do

$s \leftarrow a_{ik}/a_{kk}$

$a_{ik} \leftarrow s$ — l_{ik}

for $j = k+1, \dots n$ do

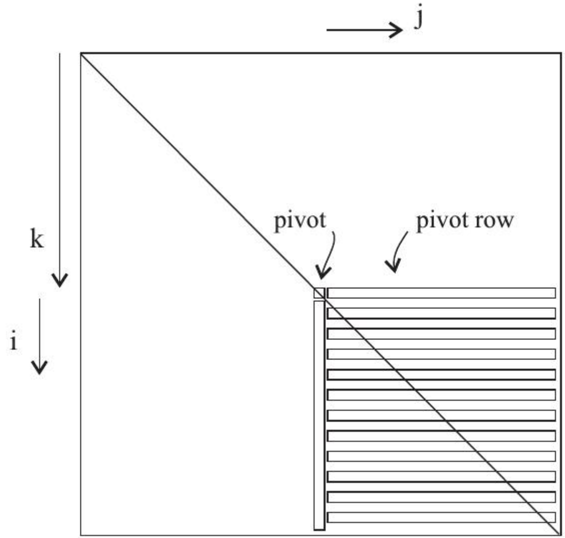
$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - s\, a_{kj}$ — u_{ij}

end

end

end

Factorización LU kij



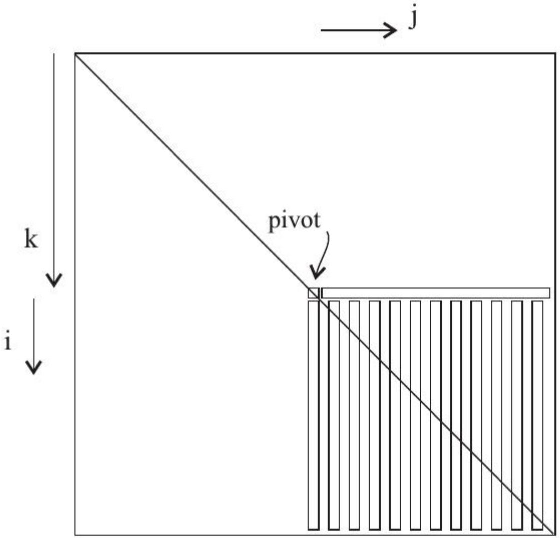
Factorización LU

- 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 $\mathbf{L}$.
- A la derecha de la diagonal va quedando formada la matriz $\mathbf{U}$.
- Esta descomposición puede hacerse de distintas formas. La indicada se denomina kij por el orden en que se realizaron las cuentas.
- A continuación se muestran las factorizacions kji y jki

Factorización LU kji

for $k = 1, \ldots n-1$ do
    for $i = k+1, \ldots n$ do
        $s \;\leftarrow\; a_{ik}/a_{kk}$
        $a_{ik} \;\leftarrow\; s$ l_{ik}
    end
    for $j = k+1, \ldots n$ do
        for $i = k+1, \ldots n$ do
            $a_{ij} \;\leftarrow\; a_{ij} - a_{ik}\, a_{kj}$ u_{ij}
        end
    end
end

Factorización LU kji

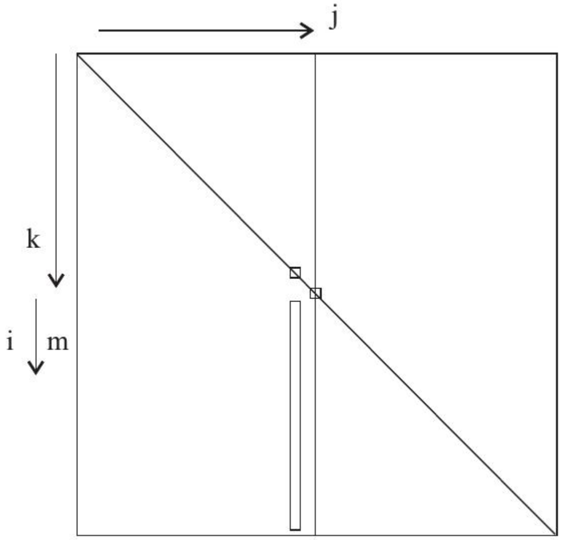


Factorización LU jki

for $j = 2, \dots n$ do
    for $m = j, \dots n$ do
        $s \;\leftarrow\; a_{m,j-1}/a_{j-1,j-1}$
        $a_{m,j-1} \;\leftarrow\; s$ $\qquad l_{mk}$
    end

    for $k = 1, \dots j-1$ do
        for $i = k+1, \dots n$ do
            $a_{ij} \;\leftarrow\; a_{ij} - a_{ik}\, a_{kj}$ $\qquad u_{ij}$
        end
    end
end

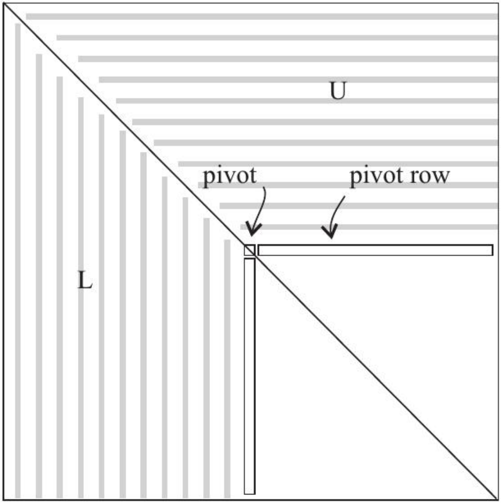
Factorización LU jki



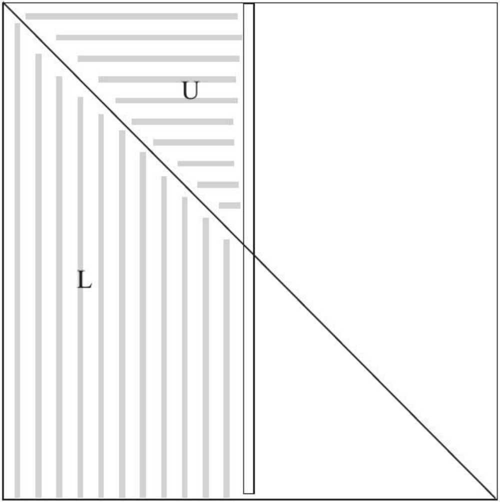
Factorización LU

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

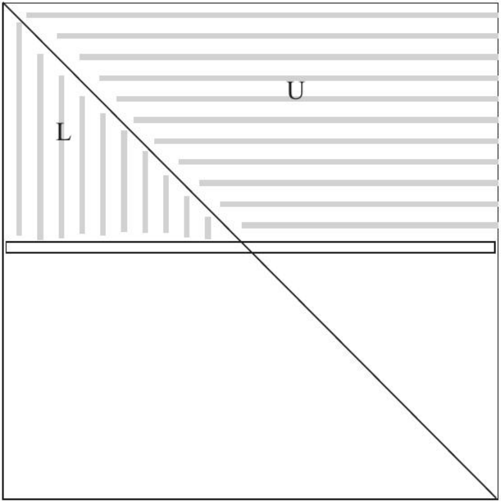
Factorización LU kij y kji



Factorización LU jik y jki



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:

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

aplicando el método de Gauss

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

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 $\mathbf{r}$ que indica el orden en que se ha realizado la factorización.

Factorización kij con pivoteo parcial

for $i = 1, \dots n$ do
    $r_i = i$
end
for $k = 1, \dots n-1$ do   *fila pivotal*
    buscar $p \in \{k, k+1, \dots n\}$
        tal que $|a_{r_p k}| = \max\limits_{k \leq i \leq n} |a_{r_i k}|$
    if $a_{r_p k} = 0 \;\rightarrow\;$ 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
        $s \;\leftarrow\; a_{r_i k}/a_{r_k k}$
        $a_{r_i k} \;\leftarrow\; s$
        for $j = k+1, \dots n$ do
            $a_{r_i j} \;\leftarrow\; a_{r_i j} - s\, a_{r_k j}$
        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:

$$Ly = Pb$$

$$Ux = y$$

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 $p \in \{k, k+1, \ldots n\}$ tal que $\dfrac{|a_{r_p k}|}{s_{r_p}} = \max\limits_{k \leq i \leq n} \dfrac{|a_{r_i k}|}{s_{r_i}}$

Algoritmo fact. LU con pivoteo parcial escalado

Input: n, $\mathbf{A}$
Output: $\mathbf{L}$ y $\mathbf{U}$ (sobre $\mathbf{A}$)

for $i = 1, 2, \ldots n$ do
$$s_i = \max_{i \le j \le n} |a_{ij}|$$
$$r_i = i$$
end
for $k = 1, 2, \ldots n-1$ do *fila pivotal*
se busca $p \in \{k, k+1, \ldots n\}$ tal que $\dfrac{|a_{r_p k}|}{s_{r_p}} = \max\limits_{k \le i \le n} \dfrac{|a_{r_i k}|}{s_{r_i}}$
si $a_{r_p k} = 0 \;\rightarrow\;$ 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
$$m \leftarrow a_{r_i k}/a_{r_k k}$$
$$a_{r_i k} \leftarrow m$$
for $j = k+1, k+2, \ldots n$ do
$$a_{r_i j} \leftarrow a_{r_i j} - m\, a_{r_k j}$$
end
end
end

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:* $\displaystyle\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$)

- 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: $\displaystyle\sum_{k=1}^{n} k = \frac{1}{2}n(n+1)$ *)*

La retrosustitución

- Hay 1 flop para calcular la incógnita x_n; 2 flops para calcular x_{n-1}; etc. Luego son:
  $$1+2+3+\ldots+n \;=\; \frac{1}{2}n^2-\frac{1}{2}n$$

Conteo de operaciones solucíon con descomposición LU

<u>En resumen:</u>

- para factorizar: $\frac{1}{3}n^3$
- 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 $\mathbf{A}$ es matriz real, simétrica y definida positiva, entonces tiene una factorización *única* $\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{C}^{\mathbf{T}}$, donde $\mathbf{C}$ es matriz triangular inferior con diagonal positiva.

Demostración:

Como $\mathbf{A}$ *es simétrica (o sea* $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$*):*

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{A}^{\mathbf{T}} = \mathbf{U}^{\mathbf{T}}\mathbf{L}^{\mathbf{T}}$$

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

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

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

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

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.

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

luego:

$$\mathbf{U} = \mathbf{D}\mathbf{L}^{\mathbf{T}}$$

y entonces

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^{\mathbf{T}}$$

Factorización de Cholesky

Puede demostrarse que $\mathbf{M}$ *es una matriz definida positiva y* $\mathbf{N}$ *no es singular, si y solo is* $\mathbf{NMN^T}$ *es definida positiva.*
Como $\mathbf{A}$ *es definida positiva también lo es* $\mathbf{D}$*, 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:

$$\boxed{\mathbf{A} = \mathbf{CC^T}}$$

donde $\mathbf{C} = \mathbf{LD}^{\frac{1}{2}}$
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 $\sqrt{d_{ii}}$.

Factorización de Cholesky

Input: n, $\mathbf{A}$ (simétrica, definida positiva)
Output: $\mathbf{C}$ (sobreescrita en el triángulo inferior de $\mathbf{A}$)

$c_{11} \leftarrow \sqrt{a_{11}}$
for $i = 2, \dots n$ do
    $c_{i1} \leftarrow a_{i1}/c_{11}$
end
for $i = 2, \dots n-1$ do

$$c_{ii} \leftarrow \left(a_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} c_{is}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

    for $j = i+1, i+2, \dots n$ do

$$c_{ji} \leftarrow \left(a_{ji} - \sum_{s=1}^{i-1} c_{js} c_{is} \right) / c_{ii}$$

    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

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) $\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ 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
$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

Normas Vectoriales

- 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:

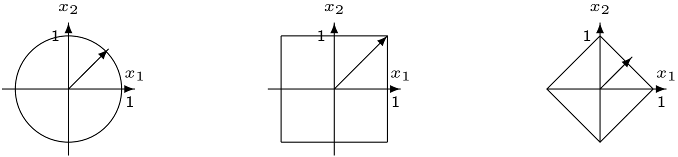
$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{2}$$

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

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

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).



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:

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

- 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 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, *se verifica.*

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

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

Luego

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

Lo que completa la demostración.

Normas Matriciales

- Además de las condiciones (1) a (3), la norma matricial subordinada verifica:
  - $\|\mathbf{I}\| = 1 \qquad (\mathbf{I}$ matriz identidad)
  - $\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\|$
- Ejemplo:
  Para la norma vectorial $\|.\|_\infty$:

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

la norma matricial subordinada es:

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

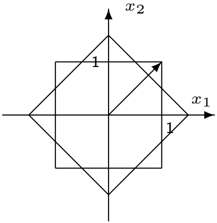
Normas Matriciales

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 α.

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: $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \sqrt{2}$
- 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 $\mathbf{A}$:

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

  - λ son los autovalores de $\mathbf{A}$, 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.

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 $\mathbf{A}$ es simétrica:

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

- Si el $\rho(\mathbf{A}) < 1$ 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 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Supóngase que existe $\mathbf{A}^{-1}$. Luego
$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$
- 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:
$$\|\mathbf{e}\| = \|\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}\| = \|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}-\mathbf{A}^{-1}\tilde{\mathbf{b}}\| = \|\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{b}-\tilde{\mathbf{b}})\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{b}-\tilde{\mathbf{b}}\|$$
El error relativo
$$\frac{\|\mathbf{x}-\tilde{\mathbf{x}}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|(\mathbf{b}-\tilde{\mathbf{b}})\|\frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{b}\|}\frac{1}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\|\frac{\|(\mathbf{b}-\tilde{\mathbf{b}})\|}{\|\mathbf{b}\|}\frac{\|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

Número de condición

- Esta expresión puede escribirse:

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

- 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 $(\mathbf{b})$ 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 $\|.\|_\infty$*:*

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

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

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.

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 $\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b} = \mathbf{r}$
- Allí $\mathbf{r}$ es el residuo, definido también como: $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \tilde{\mathbf{b}}$
- Restando $\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b} = \mathbf{0}$ y $\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{0}$ se obtiene:

$$\mathbf{A}\mathbf{e} = \mathbf{r}$$

- 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

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

De donde

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

Número de condición

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

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

- Si $\kappa(\mathbf{A})$ pequeño (o moderado) $\rightarrow$ *matriz bien condicionada*
- Si $\kappa(\mathbf{A})$ grande $\rightarrow$ *matriz mal condicionada*

Resumen

En este capítulo hemos visto:

- Los métodos *directos* de resolución de SEAL
- En particular:
  - el método de eliminación de Gauss
  - factorización (o descomposición) $\mathbf{LU}$
  - una particularización de $\mathbf{LU}$ 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.