Métodos directos de solución para problemas matriciales

Curso de Física Computacional - Guía de apoyo

M. en C. Gustavo Contreras Mayén.

1. Método de eliminación de Gauss.

La eliminación de Gauss es el método más conocido para la solución de ecuaciones simultáneas. Se compone de dos partes:

1. La fase de eliminación.
2. La fase de solución.

1.1. Fase de eliminación

La función de la fase de eliminación es transformar las ecuaciones en la formar $U x = c$. Entonces las ecuaciones son resueltas realizando el procedimiento de sustitución hacia atrás.

Con el fin de ilustrar el procedimiento, vamos a resolver el siguiente sistema de ecuaciones

$$4\,x_1 - 2\,x_2 + x_3 = 11 \tag{1}$$
$$-2\,x_1 + 4\,x_2 - 2\,x_3 = -16 \tag{2}$$
$$x_1 - 2\,x_2 + 4\,x_3 = 17 \tag{3}$$

La fase de eliminación utiliza solamente una de las operaciones elementales: multiplicar una ecuación (por ejemplo, ecuación j) por una constante λ y restarla de otra ecuación (ecuación i).

La representación simbólica de esta operación es

$$Eq.(i) \leftarrow Eq.(i) - \lambda \times Eq.(j)$$

La ecuación que se resta, a saber, la $Eq.(j)$, se llama ecuación pivote.

Comenzamos la eliminación eligiendo la Eq.(1) como ecuación pivote y eligiendo los multiplicadores λ a fin de eliminar x_1 a partir de las Ecs. (2) y (3):

$$\begin{aligned} Eq.(2) &\leftarrow Eq.(2) - (-0.5) \times Eq.(1) \\ Eq.(3) &\leftarrow Eq.(3) - 0.25 \times Eq.(1) \end{aligned}$$

Después de esta transformación, las ecuaciones quedan:

$$4\,x_1 - 2\,x_2 + x_3 = 11 \tag{4}$$
$$3\,x_2 - 1.5\,x_3 = -10.5 \tag{5}$$
$$-1.5\,x_2 + 3.75\,x_3 = 14.25 \tag{6}$$

Con este procedimiento se completa el primer paso.

Ahora elegimos $Eq.(5)$ como ecuación pivote y eliminamos x_2 de la $Eq.(6)$:

$$Eq.(6) \leftarrow Eq.(6) - (-0.5) \times Eq.(5)$$

que nos devuelve

$$4\,x_1 - 2\,x_2 + x_3 = 11 \tag{7}$$
$$3\,x_2 - 1.5\,x_3 = -10.5 \tag{8}$$
$$3\,x_3 = 9 \tag{9}$$

La fase de eliminación está completa. Las ecuaciones iniciales fueron re-emplazadas por un conjunto de ecuaciones equivalentes que pueden resolverse fácilmente por sustitución hacia atrás.

Uso de la matriz aumentada

La matriz de coeficientes aumentada es un instrumento más conveniente para realizar los cálculos.

Así, las ecuaciones originales se escribirían

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11 \\ -2 & 4 & -2 & -16 \\ 1 & -2 & 4 & 17 \end{array}\right]$$

Las ecuaciones equivalentes producidas por el primer y segundo paso de la eliminación de Gauss, quedarían como:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11.00 \\ 0 & 3 & -1.5 & -10.50 \\ 0 & -1.5 & 3.75 & 14.25 \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11.00 \\ 0 & 3 & -1.5 & -10.50 \\ 0 & 0 & 3 & 9.00 \end{array}\right]$$

1.2. Fase de sustitución hacia atrás

Las incógnitas ahora puede ser calculadas por sustitución hacia atrás. Resolviendo las ecuaciones (9), (8) y (7) en ese orden, se obtiene

$$\begin{aligned} x_3 =& 9/3 = 3 \\ x_2 =& (-10.5 + 1.5\, x - 3)/3 = -2 \\ x_1 =& (11 + 2\, x_2 - x_3)/4 = 1 \end{aligned}$$

1.3. Algoritmo para la eliminación de Gauss

Fase de eliminación

Para codificar el algoritmo de la fase de eliminación del método de eliminación.

Supongamos que las primeras k filas de A ya se han transformado a una forma triangular superior. Por lo que la ecuación pivote actual es la k-ésima ecuación, y todas las ecuaciones de abajo están para ser transformadas.

Tenamos entonces que la matriz aumentada es:

$$\begin{bmatrix}
A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1k} & \dots & A_{ij} & \dots & A_{1n} & b_1 \\
0 & A_{22} & A_{23} & \dots & A_{2k} & \dots & A_{2j} & \dots & A_{2n} & b_2 \\
0 & 0 & A_{33} & \dots & A_{3k} & \dots & A_{3j} & \dots & A_{3n} & b_3 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & A_{kk} & \dots & \dots & A_{kj} & \dots & A_{kn} & b_k \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & A_{ik} & \dots & \dots & A_{ij} & \dots & A_{in} & b_i \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & A_{nk} & \dots & \dots & A_{nj} & \dots & A_{nn} & b_n
\end{bmatrix}$$

Operaciones elementales

Sea la i-ésima fila una fila por debajo de la ecuación pivote que será transformada, lo que significa que el elemento A_{ik} se va a eliminar.

Logramos esto mediante la multiplicación de la fila pivote por $\lambda = A_{ik}/A_{kk}$ y restarlo de la fila i-ésima. Los correspondientes cambios en la fila i son

$$\begin{aligned}
A_{ij} &\leftarrow A_{ij} - \lambda A_{kj}, \qquad j = k, k+1, \dots, n \\
b_i &\leftarrow b_i - \lambda b_k
\end{aligned}$$

Para transformar la matriz de coeficientes a una forma triangular superior, los índices k e i en las ecuaciones anteriores debe tener los intervalos $k = 1, 2, \dots, n-1$ (de la fila pivote), $i = k+1, k+2, \dots, n$ (de la fila que se va a transformar) El algoritmo para la fase de eliminación ahora se escribe:

Código 1: Eliminación de Gauss

```
for k in range(0, n-1):
    for i in range(k+1, n):
        if a[i, k] = 0.0:
            lam = a[i, k]/a[k, k]
            a[i, k+1:n] = a[i, k+1:n] - lam * a[k, k+1:n]
            b[i] = b[i] - lam * b[k]
```

Consideraciones

Con el fin de evitar operaciones innecesarias, el algoritmo anterior considera lo siguiente:

1. Si A_{ik} vale cero, la transformación de la fila i se omite.

2. El índice j en la ecuación de transformación comienza con $k+1$ en lugar de k.

   Por lo tanto, A_{ik} no se re-emplaza con cero, pero conserva su valor original.

   Como la fase de solución nunca accede a la parte triangular inferior de la matriz de coeficientes, su contenido es irrelevante.

1.4. Fase de sustitución

Luego de la eliminación de Gauss, la matriz de aumentada tiene la siguiente forma

$$\left[\, A \,\middle|\, b \,\right] = \left[\begin{array}{ccccc|c} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1n} & b_1 \\ 0 & A_{22} & A_{23} & \dots & A_{2n} & b_2 \\ 0 & 0 & A_{33} & \dots & A_{3n} & b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{nn} & b_n \end{array}\right]$$

La última ecuación $A_{nn}x_n = b_n$ se resuelve primero para obtener

$$x_n = \frac{b_n}{A_{nn}}$$

Consideremos ahora la etapa de sustitución hacia atrás donde $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{k+1}$ ya han sido calculados (en ese orden), para determinar x_k de la k-ésima ecuación:

$$A_{kk}x_k + A_{k,k+1}x_{k+1} + \ldots + A_{kn}x_n = b_k$$

La solución es:

$$x_k = \left(b_k - \sum_{j=k+1}^{n} A_{kj}x_j\right)\frac{1}{A_{kk}}, \quad k = n-1, n-2, \dots, 1$$

Con `python` tendremos que:

Código 2: Fase de sustitución

```
for k in range(n-1,-1,-1):
    b[k] = (b[k] - dot(a[k, k+1:n], b[k+1:n]))/a[k,k]
return b
```

Ejercicio

Resuelve el problema $A\,x = b$, donde

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -3 & -1 \\ 3 & 2 & -5 \\ 2 & 4 & -1 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 3 \\ -9 \\ -5 \end{bmatrix}$$

1.5. La función `gaussElimin`.

El siguiente código en `python` implementa las dos fases del procedimiento de eliminación de Gauss:

Código 3: Función gaussElimin

```
def gaussElimin(a, b):
    n = len(b)

    for k in range(0, n-1):
        for i in range(k+1, n):
            if a[i, k] = 0.0:
                lam = a[i, k]/a[k, k]
                a[i, k+1:n] = a[i, k+1:n] - lam * a[k, k+1:n]
                b[i] = b[i] - lam * b[k]

    for k in range(n-1, -1, -1):
        b[k] = (b[k] - dot(a[k, k+1:n], b[k+1:n]))/a[k,k]

    return b
```

Incorporando los arreglos para resolver el problema:

Código 4: Agregando los arreglos

```
a = array([[2., -3, -1],[3, 2, -5],[2, 4, -1]])
b = array([3., -9, -5])
x = gaussElimin(a, b)

print (x)
```

Corroborando el resultado con `solve`

Podemos usar `linalg.solve` para verificar nuestro resultado, hacemos entonces:

Código 5: Usando linalg.solve

```
print (linalg.solve(a,b))
```

Pero nos damos cuenta de que el resultado es completamente diferente:

```
Solución con la función gaussElimin
[ 0.65306122 -1.14285714  1.73469388]

Usando la función solve
[ 0.39032237 -0.10984011  0.45710386]
```

Entonces: ¿qué es lo que pasa?

Lo que ocurre es que al llamar la función gaussElimin(a,b), se modifican los valores de las entradas al llevarse a cabo las operaciones elementales, por lo que los arreglos que se usan para la función linalg.solve(a,b), ya son otros arreglos.

Para corregir esta situación, debemos de garantizar que los arreglos a usar en linalg.solve, son idénticos a los arreglos iniciales, para ello, hacemos una copia:

Código 6: Ajuste a la solución

```
a = array([[2., -3, -1], [3, 2, -5], [2, 4, -1]])
b = array([3., -9, -5])

c = a.copy()
d = b.copy()

print('Solucion con la funcion gaussElimin')
print (gaussElimin(a,b))
print()

print('Solucion con solve')
print (linalg.solve(c,d))
```

Y vemos que ambos resultados son los mismos.

```
Solución con la función gaussElimin
[ 0.65306122 -1.14285714  1.73469388]

Usando la función solve
[ 0.65306122 -1.14285714  1.73469388]
```

1.6. Sistemas de ecuaciones múltiples

Como ya se ha mencionado, a menudo es necesario resolver sistemas de ecuaciones $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ para varios vectores constantes.

Sea m dichos vectores constantes, denotados por $\mathbf{b_1}, \mathbf{b_2}, \ldots, \mathbf{b_m}$ y dejar que los correspondientes vectores solución sean $\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}, \ldots, \mathbf{x_m}$. Escribimos el conjunto de ecuaciones múltiples $\mathbf{A}\,\mathbf{X} = \mathbf{B}$, donde

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x_1}\ \ \mathbf{x_2}\ \ \ldots\ \ \mathbf{x_m}]$$

y

$$\mathbf{B} = [\mathbf{b_1}\ \ \mathbf{b_2}\ \ \ldots\ \ \mathbf{b_m}]$$

son matrices de $n \times m$ cuyas columnas consisten en vectores solución y vectores constantes, respectivamente.

Una manera económica de manejar ecuaciones de este tipo durante la fase de eliminación es incluir todos los m vectores constantes en la matriz de coeficientes aumentada, de modo que se transforman simultáneamente con la matriz de coeficientes.

Las soluciones son luego obtenidas por sustitución hacia atrás de la manera habitual, un vector a la vez. Tendremos que ajustar el método de Gauss para realizar esta tarea.

Ejercicio

Resuelve el sistema de ecuaciones $\mathbf{A}\,\mathbf{X} = \mathbf{B}$, donde:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

2. Método de Gauss-Jordan

El método de Gauss-Jordan es esencialmente la eliminación de Gauss llevada a su límite. En el método de eliminación de Gauss, solo las ecuaciones que se encuentran debajo de la ecuación pivote se transforman.

En el método de Gauss-Jordan, la eliminación también se lleva a cabo en ecuaciones por encima de la ecuación de pivote, lo que da como resultado una matriz de coeficientes diagonales.

La principal desventaja de la eliminación de Gauss-Jordan es que implica aproximadamente $n^3/2$ operaciones largas, que es 1.5 veces más, el número requerido con el procedimiento de eliminación de Gauss.

3. Ejercicios opcionales

Los siguientes ejercicios se resuelven utilizando lo revisado en esta guía y en las clases, estos ejercicios son opcionales, se tomará en cuenta para el examen parcial 2, entregando todos los ejercicios y en el caso de que estén bien resueltos, aportarán **0.5 puntos** adicionales a la calificación del examen parcial 2.

1. Evaluando el determinante, identifica cuáles de las siguientes matrices, son singulares, mal condicionadas o bien condicionadas:

   a) $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}$

   b) $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2.11 & -0.80 & 1.72 \\ -1.84 & 3.03 & 1.29 \\ -1.57 & 5.25 & 4.30 \end{pmatrix}$

   c) $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$

   d) $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & -1 \\ 7 & -2 & 3 \\ 5 & -18 & 13 \end{pmatrix}$

2. Dada la descomposición $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, calcular $\mathbf{A}$ y $|\mathbf{A}|$

   a) $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 5/3 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 0 & 3 & 21 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

   b) $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

3. Usando los resultados de la descomposición LU

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 11/13 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -3 & -1 \\ 0 & 13/2 & -7/2 \\ 0 & 0 & 32/13 \end{pmatrix}$$

   para resolver $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, donde $\mathbf{b}^T = [1 \quad -1 \quad 2]$.

4. Resolver la ecuación $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ con el método de eliminación de Gauss, donde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -4 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

5. Encontrar $\mathbf{L}$ y $\mathbf{U}$ tales que:

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -4 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

usando a) la descomposición de Doolittle y b) la descomposición de Choleski.

6. Utiliza la descomposición de Doolittle para resolver $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, donde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -3 & 6 & -4 \\ 9 & -8 & 24 \\ -12 & 24 & -26 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -3 \\ 65 \\ -42 \end{pmatrix}$$

7. Resolver $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ por el método de descomposición de Doolittle, donde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2.34 & -4.10 & 1.78 \\ -1.98 & 3.47 & -2.22 \\ 2.36 & -15.17 & 6.18 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0.02 \\ -0.73 \\ -6.63 \end{pmatrix}$$

8. Resolver $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$ por el método de descomposición de Doolittle, donde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & -3 & 6 \\ 8 & -3 & 10 \\ -4 & 12 & -10 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

9. Determinar $\mathbf{L}$ que resulta de la descomposición de Choleski para la matriz diagonal

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \dots & \\ 0 & \alpha_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

10. Modifica la función `gaussElimin` de tal manera que resuelva un problema con m vectores constantes:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

11. Un ejemplo clásico de una matriz mal condicionada, es la matriz de Hilbert

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & \dots \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & \dots \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

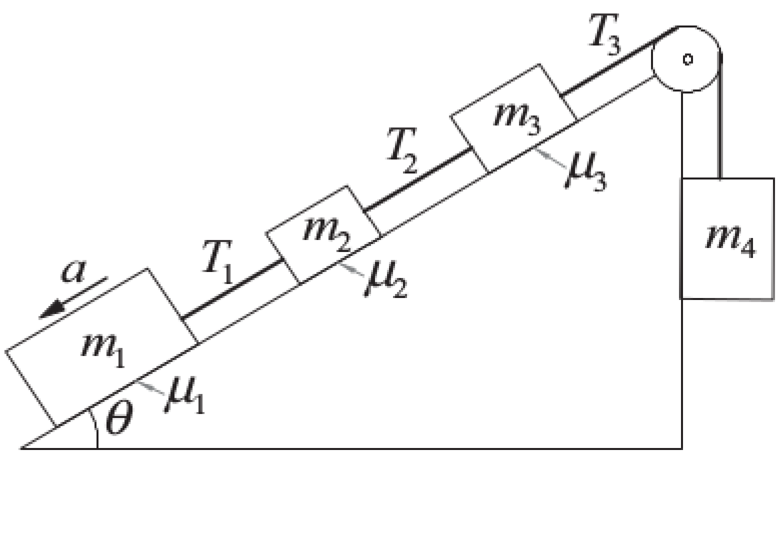
Escribe un programa en python que resuelva el sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ por el método de Doolittle, donde $\mathbf{A}$ es una matriz de Hilbert arbitraria de $n \times n$ y

$$b_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij}$$

El programa no debe de utilizar un valor inicial para n, sino que en tiempo de ejecución, se determine para qué valor de n, la solución es exacta al menos hasta seis cifras significativas comparada con la solución exacta

$$\mathbf{x} = [1 \ 1 \ 1 \ \dots]^T$$

12. Cuatro bloques de diferentes masas m_i están conectados por cuerdas de masa despreciable. Tres de los bloques se encuentran sobre un plano inclinado, los coeficientes de fricción entre los bloques y el plano, están dados por μ_i.



Las ecuaciones de movimiento de los bloques son las siguientes:

$$\begin{aligned} T_1 + m_1 \, a &= m_1 \, g \, (\sin\theta - \mu_1 \, \cos\theta) \\ -T_1 + T_2 + m_2 \, a &= m_2 \, g \, (\sin\theta - \mu_2 \, \cos\theta) \\ -T_2 + T_3 + m_3 \, a &= m_3 \, g \, (\sin\theta - \mu_3 \, \cos\theta) \\ -T_3 + m_4 \, a &= m_4 \, g \end{aligned}$$

donde las T_i representan las fuerzas de tensión en las cuerdas y a es la aceleración del sistema.

Calcula a y T_i si $\theta = 45°$, $g = 9.82\,\mathrm{m\,s^{-2}}$

13. Resolver las siguientes ecuaciones simétricas tridiagonales

$$\begin{aligned} 4x_1 - x_2 &= 9 \\ -x_{i-1} + 4x_i - x_{i+1} &= 5, \qquad i = 2, \ldots, n-1 \\ -x_{n-1} + 4x_n &= 5 \end{aligned}$$

con $n = 10$.