Métodos Numéricos I

Tema 2: Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

Parte 1: Métodos directos

Lidia Fernández

Departamento de Matemática Aplicada
Universidad de Granada

Curso 2022/2023

Contenidos

Problema básico

Problema

Resolver utilizando el ordenador, el sistema de ecuaciones $n \times n$,

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
\vdots \quad &\vdots \quad \vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

¡Cuando n es grande!

¿Cuando *n* es grande?

Evolución histórica del concepto de *grande*

1950: $n = 20$	(Wilkinson)
1965: $n = 200$	(Forsythe & Moler)
1980: $n = 2000$	(LINPACK)
1995: $n = 20000$	(LAPACK)

Sistema de ecuaciones **A x = b**, donde

Definición

Matriz de coeficientes y términos independientes

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

Matriz ampliada:

$$(\mathbf{A}\ \mathbf{b}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

Definición

Solución de un sistema de ecuaciones

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \end{pmatrix},$$

tal que $s_i \in \mathbb{R}$, y $\mathbf{A}\mathbf{s} = \mathbf{b}$.

Métodos de resolución

- Métodos directos Llegan a la solución en un número finito de operaciones.
- Métodos iterativos Se trata de definir una sucesión de vectores $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$, tal que "converja" hacia la solución $\mathbf{s}$.

En cualquier caso, se trata de minimizar el número de operaciones y, por tanto, el error de redondeo.

Sistemas fáciles de resolver

Sistemas diagonales **D x = b**

$$
\begin{array}{ccccc}
d_{11}x_1 & & & = & b_1 \\
& d_{22}x_2 & & = & b_2 \\
& & \ddots & & \\
& & d_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}
$$

Solución: Si $d_{i,i} \neq 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, n$, entonces

$$x_i = \frac{b_i}{d_{i,i}}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Sistemas triangulares

Sistema triangular superior **U x = b**

$$
\begin{array}{cccccc}
u_{11}\,x_1 + & u_{12}\,x_2 + & \cdots + & u_{1n}\,x_n & = & b_1 \\
 & u_{22}\,x_2 + & \cdots + & u_{2n}\,x_n & = & b_2 \\
 & & \ddots & \vdots & & \vdots \\
 & & & u_{nn}\,x_n & = & b_n
\end{array}
$$

Solución: Si $u_{i,i} \neq 0$, se reuelve por sustitución hacia atrás:

$$
\begin{aligned}
x_n &= \frac{b_n}{u_{n,n}} \\
x_i &= \frac{1}{u_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{i,j} x_j \right), \qquad i = n-1, \ldots, 2, 1.
\end{aligned}
$$

Sistemas triangulares

Sistema triangular inferior **L x = b**

$$\begin{array}{ccccccccc}
l_{11}\,x_1 & & & & & & & = & b_1 \\
l_{21}\,x_1 & + & l_{22}\,x_2 & & & & & = & b_2 \\
\vdots & & \vdots & & \ddots & & & & \vdots \\
l_{n1}\,x_1 & + & l_{n2}\,x_2 & + & \cdots & + & l_{nn}\,x_n & = & b_n
\end{array}$$

Solución: Si $l_{i,i} \neq 0$, se resuelve por sustitución hacia adelante:

$$\begin{aligned}
x_1 &= \frac{b_1}{l_{1,1}} \\
x_i &= \frac{1}{l_{i,i}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{i,j}x_j\right), \qquad i = 2, \ldots, n.
\end{aligned}$$

Método de Gauss

Sistemas equivalentes

Dos sistemas de ecuaciones $\mathbf{A\,x = b}$ y $\mathbf{C\,x = d}$ son equivalentes si existe una matriz regular $\mathbf{T}$ tal que

$$\mathbf{T\,A = C} \quad \text{y} \quad \mathbf{T\,b = d}$$

En este caso, toda solución del primer sistema, es solución del segundo; y toda solución del segundo sistema es solución del primero.

Método de Gauss

Dado un sistema de ecuaciones $\mathbf{A\,x = b}$, se trata de transformarlo en otro sistema triangular superior $\mathbf{U\,x = c}$ equivalente al primero y, finalmente, resolver este último por sustitución hacia atrás.

Operaciones elementales

Operaciones elementales sobre ecuaciones (filas en la matriz ampliada). Transforman el sistema en otro equivalente, esto es, no alteran la solución:

1. Intercambiar la posición de dos ecuaciones (filas).
2. Multiplicar una ecuación (fila) por un número no nulo.
3. Sumar a una ecuación (fila) un múltiplo de otra.

Intercambiar la posición de dos ecuaciones (filas), o equivalentemente multiplicar por la matriz

$$
\mathbf{T}_{ij} = \left(\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & 0 & & \cdots & & 1 & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & & \vdots & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & 1 & & \cdots & & 0 & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right)
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \longleftarrow \text{fila } i \\ \\ \\ \\ \longleftarrow \text{fila } j \\ \\ \\ \\
\end{array}
$$

Observemos que $|\mathbf{T}_{ij}| = (-1)^{j-i} \neq 0$

Multiplicar una ecuación (fila) por un número no nulo, o equivalentemente multiplicar por la matriz

$$\mathbf{E}_i = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & m_i & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \longleftarrow \text{fila } i$$

Observemos que $|\mathbf{E}_i| = m_i \neq 0$

Sumar a una ecuación (fila) un múltiplo de otra, o equivalentemente multiplicar por la matriz

$$\mathbf{M}_{ij} = \left(\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & 1 & & & & & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & m_{ji} & & \cdots & & 1 & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right)
\begin{array}{l}
\\
\\
\\
\longleftarrow \text{fila } i \\
\\
\\
\\
\longleftarrow \text{fila } j \\
\\
\\
\\
\end{array}$$

Observemos que $|\mathbf{M}_{ij}| = 1 \neq 0$

Método de Gauss (sin intercambio de filas)

Etapa 1 Si $a_{1,1} \neq 0$, se fija la primera fila, y se utiliza repetidamente la tercera operación para *hacer ceros* bajo $a_{1,1}$.

- Multiplicamos la primera ecuación por $m_{2,1} = -a_{2,1}/a_{1,1}$, y se suma a la segunda.
- Multiplicamos la primera ecuación por $m_{3,1} = -a_{3,1}/a_{1,1}$, y se suma a la tercera.

$$\cdots$$

- Multiplicamos la primera ecuación por $m_{n,1} = -a_{n,1}/a_{1,1}$, y se suma a la n–ésima.

Se obtiene un nuevo sistema en la forma:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \cdots & a_{1,n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & \cdots & a_{2,n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & a_{3,2}^{(2)} & \cdots & a_{3,n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(2)} & \cdots & a_{n,n}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

Etapa 2 Si $a_{2,2}^{(2)} \neq 0$, se fija la primera y la segunda filas, y se utiliza repetidamente la tercera operación para *hacer ceros* bajo $a_{2,2}^{(2)}$.

- Multiplicamos la segunda ecuación por $m_{3,2} = -\, a_{3,2}^{(2)} / a_{2,2}^{(2)}$, y se suma a la tercera.
- Multiplicamos la segunda ecuación por $m_{4,2} = -\, a_{4,2}^{(2)} / a_{2,2}^{(2)}$, y se suma a la cuarta.

$$\cdots$$

- Multiplicamos la segunda ecuación por $m_{n,2} = -\, a_{n,2}^{(2)} / a_{2,2}^{(2)}$, y se suma a la n–ésima.

Se obtiene un sistema en la forma:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & \cdots & a_{1,n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & a_{2,3}^{(2)} & \cdots & a_{2,n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{3,3}^{(3)} & \cdots & a_{3,n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n,3}^{(3)} & \cdots & a_{n,n}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{pmatrix}$$

Etapa 3$\cdots$

Proposición

El método de Gauss funciona si y sólo si $a_{k,k}^{(k)} \neq 0, \quad \forall k = 1, 2, \ldots n.$

Observemos que

$$|\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1,n}^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{k,k}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{n,k}^{(k)} & \cdots & a_{n,n}^{(k)} \end{vmatrix}$$

y por tanto, si el método no fracasa

$$|\mathbf{A}| = a_{1,1}^{(1)} a_{2,2}^{(2)} \cdots a_{n,n}^{(n)}$$

Ejemplo

Obtenga la solución exacta del sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix},$$

usando el método de Gauss.

Ejercicio 1

Haciendo los cálculos con aritmética de cuatro dígitos por redondeo, resuelva el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} 0.003000\,x &+ 59.14\,y = 59.17 \\ 5.291\,x &- 6.130\,y = 46.78 \end{aligned}$$

por el método de Gauss. La solución exacta es $x = 10$ e $y = 1$.

Pivotación

Para evitar los errores de redondeo que provocaría el dividir por cantidades muy pequeñas en el método de Gauss, se hace necesario una estrategia de elección de pivotes.

Hay varias formas de elegir pivote:

Método de Gauss con pivote parcial

Método de Gauss con pivote total

Método de Gauss con pivote parcial

Etapa 1 Se localiza el máximo de los elementos de la primera columna

$$\text{máx}\{|a_{i,1}| : 1 \leq i \leq n\}.$$

Supongamos que el máximo se alcanza en la fila k–ésima,

$$|a_{k,1}| = \text{máx}\{|a_{i,1}| : 1 \leq i \leq n\} \Rightarrow a_{1,1}^{(1)} := a_{k,1}.$$

Este elemento se llama pivote.
Se intercambian la fila 1 y la fila k–ésima, y después se hacen ceros bajo el nuevo $a_{1,1}^{(1)}$.

Método de Gauss con pivote parcial

Etapa 2 Se localiza el máximo de los elementos de la segunda columna,

$$\max\{|a_{i,2}^{(1)}| : 2 \leq i \leq n\}.$$

Supongamos que el máximo se alcanza en la fila m–ésima,

$$|a_{m,2}^{(1)}| = \max\{|a_{i,2}| : 2 \leq i \leq n\} \Rightarrow a_{2,2}^{(2)} := a_{m,2}^{(1)}.$$

Este elemento se llama pivote.
Se intercambian la fila 2 y la fila m–ésima, y después se hacen ceros bajo el nuevo $a_{2,2}^{(2)}$.

Etapa 3 $\cdots$

Método de Gauss con pivote parcial

Proposición

El método de Gauss con pivote parcial funciona si y sólo si la matriz $\mathbf{A}$ es regular.

Corolario

En las condiciones anteriores,

$$|\mathbf{A}| = \pm a_{1,1}^{(1)} a_{2,2}^{(2)} \dots a_{n,n}^{(n)}$$

Ejercicio 1 (continuación)

Resuelva de nuevo el sistema

$$\begin{array}{rcrcr} 0.003000\,x & + & 59.14\,y & = & 59.17 \\ 5.291\,x & - & 6.130\,y & = & 46.78 \end{array}$$

por el método de Gauss con pivote parcial.

Método de Gauss con pivote total

Etapa 1 Se localiza el máximo de los coeficientes del sistema

$$\max\{|a_{i,j}| : 1 \leq i, j \leq n\}.$$

Supongamos que el máximo se alcanza en el elemento

$$|a_{k,l}| = \max\{|a_{i,j}| : 1 \leq i, j \leq n\} \Rightarrow a_{1,1}^{(1)} := a_{k,l}.$$

Este elemento se llama pivote.
Se intercambian la fila 1 y la fila k–ésima, y la columna 1 con la columna l–ésima; y después se hacen ceros bajo el nuevo $a_{1,1}^{(1)}$.

Obsérvese que la estrategia de pivote total supone un posible intercambio de las incógnitas.

Etapa 2 Se localiza el máximo de los elementos de la submatriz que se obtiene al eliminar la primera fila y la primera columna,

$$\max\{|a_{i,j}^{(1)}| : 2 \leq i, j \leq n\}.$$

Supongamos que el máximo se alcanza en elemento

$$|a_{m,p}^{(1)}| = \max\{|a_{i,j}^{(1)}| : 2 \leq i, j \leq n\} \Rightarrow a_{2,2}^{(2)} := a_{m,p}^{(1)}.$$

Este elemento se llama pivote.
Se intercambian la fila 2 y la fila m–ésima, y la columna 2 con la columna p–ésima, y después se hacen ceros bajo el nuevo $a_{2,2}^{(2)}$.

Etapa 3 $\cdots$

Ejemplo

Obtenga la solución exacta del sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 2 & 0 \\ 2 & -2 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 10 \end{pmatrix},$$

usando el método de Gauss con pivotaje total. Explique todos los pasos que realice.

La factorización LU (T. Banachiewicz, 1938)

La primera etapa del método de Gauss es equivalente a multiplicar (por la izquierda) por la matriz

$$\mathbf{M}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{31} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

La segunda etapa del método de Gauss es equivalente a multiplicar (por la izquierda) por la matriz

$$\mathbf{M}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & m_{32} & 1 \cdots & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & m_{n2} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

La tercera etapa ...

Si se puede aplicar el método de Gauss sin intercambio de filas, habremos encontrado $n-1$ matrices triangulares inferiores $\mathbf{M}^{(1)}, \mathbf{M}^{(2)}, \ldots, \mathbf{M}^{(n-1)}$ tales que

$$\mathbf{M}^{(n-1)} \cdot \ldots \cdot \mathbf{M}^{(2)} \cdot \mathbf{M}^{(1)} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{U}$$

donde **U** es una matriz triangular superior.

Lema

i) El producto de matrices triangulares inferiores (superiores) es una matriz triangular inferior (superior).

ii) La inversa de una matriz regular triangular inferior (superior) es una matriz triangular inferior (superior).

Si llamamos $\mathbf{M} = \mathbf{M}^{(n-1)} \cdot \ldots \cdot \mathbf{M}^{(2)} \cdot \mathbf{M}^{(1)}$ y $\mathbf{L} = \mathbf{M}^{-1}$, entonces

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{U} \Rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$$

La factorización LU

Es un método de resolución de sistemas de ecuaciones, equivalente al método de Gauss.

Supongamos un sistema de ecuaciones $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$, y supongamos que se puede escribir $\mathbf{A} = \mathbf{L}\,\mathbf{U}$ donde

- $\mathbf{L}$ es una matriz triangular inferior,
- $\mathbf{U}$ es una matriz triangular superior.

Sustituyendo, se tiene

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \Longleftrightarrow (\mathbf{L}\,\mathbf{U})\;\mathbf{x} = \mathbf{b} \Longleftrightarrow \mathbf{L}\,(\mathbf{U}\;\mathbf{x}) = \mathbf{b}.$$

Si notamos $\mathbf{U}\;\mathbf{x} = \mathbf{y}$, entonces $\mathbf{L}\;\mathbf{y} = \mathbf{b}$. De este modo,

- $\mathbf{L}\;\mathbf{y} = \mathbf{b}$ es un sistema triangular inferior
- $\mathbf{U}\;\mathbf{x} = \mathbf{y}$ es un sistema triangular superior

Ejemplo

Dado el sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 6 & -2 \\ 1 & 10 & -8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -17 \\ -43 \end{pmatrix}$$

Como **A** se puede escribir

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 6 & -2 \\ 1 & 10 & -8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & -5 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Resolviendo los dos sistemas de ecuaciones obtenemos

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -17 \\ -43 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -23 \\ -3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & -5 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -23 \\ -3 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Cálculo de la factorización L U

Dada una matriz **A**, estamos interesados en encontrar aquellas matrices **L** y **U** tales que

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

La factorización L U no es única

Esta condición no determina únicamente a las matrices **L** y **U**.

Cálculo de la factorización L U

En la factorización **L U** es posible elegir el valor de los elementos diagonales, que suelen tomarse unitarios para la matriz **L** o para la matriz **U**

- *Variante de Doolittle:* $l_{ii} = 1, i = 1, 2, \ldots, n.$
- *Variante de Crout:* $u_{ii} = 1, i = 1, 2, \ldots, n.$

Partiendo de la fórmula para la multiplicación de matrices:

$$a_{ij} = \sum_{s=1}^{n} l_{is} u_{sj} = \sum_{s=1}^{min(i,j)} l_{is} u_{sj}$$

y recorriendo los elementos de la matriz **A** de izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, la fórmula permite calcular los elementos de **L** y **U**.

Para $i = 1$ y $j = 1, 2, \ldots, n$ se obtiene

$$a_{1j} = l_{11} u_{1j} = u_{1j}$$

que nos da la primera fila de **U**.
Para $i = 2$ y$j = 1$ tenemos

$$a_{21} = l_{21} u_{11} \Longrightarrow l_{21} = a_{21}/u_{11}$$

y obtenemos la segunda fila de **L**.
Continuando este proceso, calculamos alternativamente una fila de **U** y una fila de **L**
En el paso k, podemos suponer que ya se han calculado las filas $1, 2, \ldots, k-1$ de U, y las filas $1, 2, \ldots, k$ de L.

- Haciendo $i = k$ y $j = k, \ldots, n$ obtenemos

$$a_{kj} = u_{kk} + \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} u_{sj}$$

ecuación que permite determinar u_{kj} para $j = k, \ldots, n$.

- Haciendo $i = k + 1$ y $j = 1, \ldots, k + 1$ obtenemos

$$a_{k+1,j} = \sum_{s=1}^{j} l_{k+1,s} u_{sj}$$

ecuaciones que permiten determinar $l_{k+1,j}$ para $j = 1, \ldots, k$.

Ejemplo 1

Encuentre la factorización de Doolittle de la matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 60 & 30 & 20 \\ 30 & 20 & 15 \\ 20 & 15 & 12 \end{pmatrix}$$

La factorización de Doolittle es:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/3 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 60 & 30 & 20 \\ 0 & 5 & 5 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{pmatrix}$$

Ejemplo 2

Encuentre la factorización de Doolittle de la matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

La factorización de Doolittle debería ser:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

El algoritmo proporciona $u_{22} = 0$ y ya no es posible continuar.
¡La factorización L U no siempre es posible!

Existencia de la factorización LU

Definición

Dada una matriz **A**, llamamos menor principal de orden k de la matriz **A** al determinante obtenido con las k primeras filas y columnas de la matriz.

Proposición

Una condición necesaria y suficiente para que una matriz **A** admita una factorización LU, con **L** y **U** regulares, es que la matriz **A** tenga todos sus menores principales no nulos.

Existencia de la factorización LU

Definición

Una matriz **A** se dice estrictamente diagonal dominante (por filas) (EDD) si

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

Proposición

Si una matriz **A** es EDD, es inversible.

Proposición

Si una matriz **A** es EDD, admite factorización LU (sin intercambio de filas).

Existencia de la factorización LU

Definición

Una matriz simétrica se dice definida positiva si todos sus menores principales son positivos.

Proposición

Si una matriz $\mathbf{A}$ es simétrica y definida positiva, admite factorización LU (sin intercambio de filas).

Teorema

Si una matriz $\mathbf{A}$ es regular, entonces existe una permutación de las filas de $\mathbf{A}$ tal que la matriz permutada admite factorización LU (sin intercambio de filas).

Algoritmo de la factorización L U de Doolittle

input $n, (a_{ij})$
for $k = 1, 2, \ldots, n-1$ **do**
$u_{kk} = a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} u_{sk}$
for $j = k+1, k+2, \ldots, n$ **do**
$u_{kj} \leftarrow a_{kj} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} u_{sj}$
end
for $j = 1, 2, \ldots, k$ **do**
$l_{k+1,j} \leftarrow \left(a_{k+1,j} - \sum_{s=1}^{j-1} l_{k+1,s} u_{sj} \right) / u_{jj}$
end
end
$u_{nn} = a_{nn} - \sum_{s=1}^{n-1} l_{ns} u_{sn}$
output $(l_{ij}), (u_{ij})$

Factorización de Cholesky

Cuando $\mathbf{A}$ es simétrica podemos tratar de factorizarla en la forma $\mathbf{A} = \mathbf{L}\,\mathbf{L}^t$.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \dots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \dots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

Partiendo de la fórmula para la multiplicación de matrices:

$$a_{ij} = \sum_{s=1}^{n} l_{is} l_{js} = \sum_{s=1}^{j} l_{is} l_{js}, \quad \text{para } i \geqslant j$$

y recorriendo los elementos de la matriz $\mathbf{A}$ partiendo de la diagonal, de arriba hacia abajo y de izquierda a derecha, la fórmula permite calcular los elementos de $\mathbf{L}$.

Para $i = 1$ y $j = 1$:

$$a_{11} = l_{11}^2 \Longrightarrow l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

Para $j = 1$ y $i = 2, \ldots, n$ se obtiene

$$a_{i1} = l_{i1} l_{11} \Longrightarrow l_{i1} = a_{i1}/l_{11}$$

que nos da la primera columna de **L**. Para $i = 2$ y$j = 2$ tenemos

$$a_{22} = l_{21}^2 + l_{22}^2 \Longrightarrow l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}$$

Para $j = 2$ y $i = 2, \ldots, n$ se obtiene

$$a_{i2} = l_{i1} l_{21} + l_{i2} l_{22} \Longrightarrow l_{i2} = (a_{i2} - l_{i1} l_{21})/l_{22}$$

que nos da la segunda columna de **L**.
Continuando este proceso, calculamos una a una las columnas de **L**

Algoritmo de la factorización de Cholesky

input $n, (a_{ij})$

for $k = 1, 2, \dots, n$ **do**

$$l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} (l_{ks})^2}$$

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

$$l_{jk} \leftarrow (a_{jk} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{js} l_{ks}) / l_{kk}$$

end

end

output $(l_{ij}), (l_{ij})^t$

Existencia de la factorización de Cholesky

Proposición

Una condición necesaria y suficiente para que una matriz **A** admita factorización de Cholesky es que sea simétrica y definida positiva.

Nota

La factorización de Cholesky es estable numéricamente.