Unidad 3: Solución de SEL

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Temario:

- Sistemas de Ecuaciones Lineales (SEL)
- Métodos directos vs Iterativos
- Eliminación de Gauss
- Descomposición LU por Doolittle
- Inversión de Matrices
- Método iterativo de Jacobi
- Método iterativo de Gauss-Seidel

Sistemas de ecuaciones lineales (SEL)

Se busca el conjunto de soluciones $[x_1, x_2, \ldots, x_n]$ que satisfacen simultáneamente un conjunto de n ecuaciones:

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

En notación matricial:

$$
\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \rightarrow \mathrm{A} \cdot \mathrm{x} = \mathrm{b}
$$

Donde **b** es el vector de entrada del sistema y **x** es el vector de respuesta

Métodos directos vs iterativos

Existen dos clases de métodos para resolver un SEL, los **directos** y los **iterativos**.

En los directos, **se transforman las ecuaciones** en otras equivalentes, **más simples de resolver**.

En los iterativos se inicia con una **suposición inicial** de la solución **x** y se repite un **proceso iterativo** hasta alcanzar la **convergencia**. Estos métodos son menos eficientes pero son más efectivos si los problemas son de gran tamaño.

Matrices triangulares

Las matrices triangulares son importantes en álgebra lineal porque son simples de resolver.

$$L \cdot x = c$$

$$\begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{matrix} & & L_{11}x_1 & & c_1 \\ & & L_{21}x_1 + L_{22}x_2 & = & c_2 \\ & & L_{31}x_1 + L_{32}x_2 + L_{33}x_3 & & c_3 \end{matrix}$$

Se comienza resolviendo la primer ecuación y se utiliza la solución para resolver la segunda ecuación. Se puede continuar resolviendo **"progresivamente"** todas las ecuaciones, de a una por vez. Este esquema se llama **sustitución hacia adelante** o **progresiva.** Análogamente, un sistema **U x=c** se resuelve mediante la **sustitución regresiva** o **hacia atrás**.

Eliminación de Gauss

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

El método de eliminación de Gauss, es el más común para la resolución de SEL.

El método consta de dos fases, la **fase de eliminación** y la **fase de resolución**.

En la fase de eliminación se busca **transformar el problema en uno triangular superior U x = c**

En la fase de resolución se aplica la **sustitución regresiva**.

Eliminación de Gauss

Fase de eliminación

Se utiliza la operación elemental que multiplica una de las ecuaciones (pivote) por una constante λ y la resta con otra.

Se busca ir transformando el SEL dado por $A\ x = b$ en otro sistema equivalente de la forma $U\ x = y$.

Procedimiento:

1) Se elige la ecuación de pivote E_i (asociada a la fila i-esima).

2) Se elige una fila debajo del pivote E_j y se calcula $\lambda = a_{ji} / a_{ii}$

3) Se reemplaza la ecuación E_j con la operación elemental $E_j - \lambda\ E_i$, para eliminar el término a_{ij}.

Eliminación de Gauss

Ejemplo:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} \boxed{4 & -2 & 1 & 11} \\ -2 & 4 & -2 & -16 \\ 1 & -2 & 4 & 17 \end{array}\right] \leftarrow \text{Ecuación pivote } E_i$$

Eliminación de Gauss

Ejemplo:

$$\begin{array}{l} a_{ii}=4 \\ a_{ji}=-2 \\ a_{ji}=1 \end{array} \left[\begin{array}{ccc|c} \boxed{4} & -2 & 1 & 11 \\ -2 & 4 & -2 & -16 \\ 1 & -2 & 4 & 17 \end{array}\right] \begin{array}{l} \\ \lambda_1=a_{21}/a_{11} = -2/4 \\ \lambda_2=a_{31}/a_{11}=1/4 \end{array}$$

Eliminación de Gauss

Ejemplo:

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

$$\Big\downarrow \begin{array}{l} E_2 - \lambda_1 E_1 \\ E_3 - \lambda_2 E_1 \end{array}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11 \\ 0 & 3 & -3/2 & -21/2 \\ 0 & -3/2 & 15/4 & 57/4 \end{array}\right]$$

Eliminación de Gauss

Ejemplo:

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

$$E_2 - \lambda_1 E_1$$
$$E_3 - \lambda_2 E_1$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11 \\ \boxed{0} & 3 & -3/2 & -21/2 \\ \boxed{0} & -3/2 & 15/4 & 57/4 \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11 \\ 0 & \boxed{3} & -3/2 & -21/2 \\ 0 & -3/2 & 15/4 & 57/4 \end{array}\right]$$

$$\lambda_3 = a_{32}/a_{22} = -1/2 \qquad E_3 - \lambda_3 E_2$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 4 & -2 & 1 & 11 \\ 0 & 3 & -3/2 & -21/2 \\ 0 & \boxed{0} & 3 & 9 \end{array}\right]$$

Eliminación de Gauss

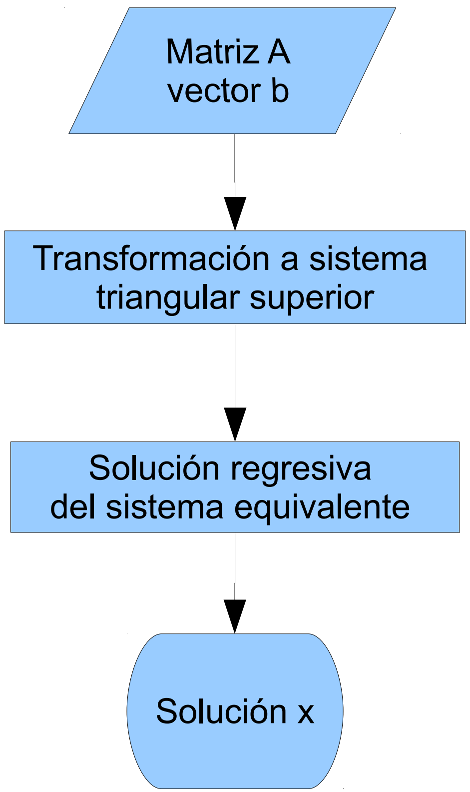
Fase de resolución

Se utiliza la sustitución regresiva. Se empieza resolviendo la última ecuación y se reemplaza el resultado en la anterior. El proceso se repite hasta llegar a la primera ecuación.

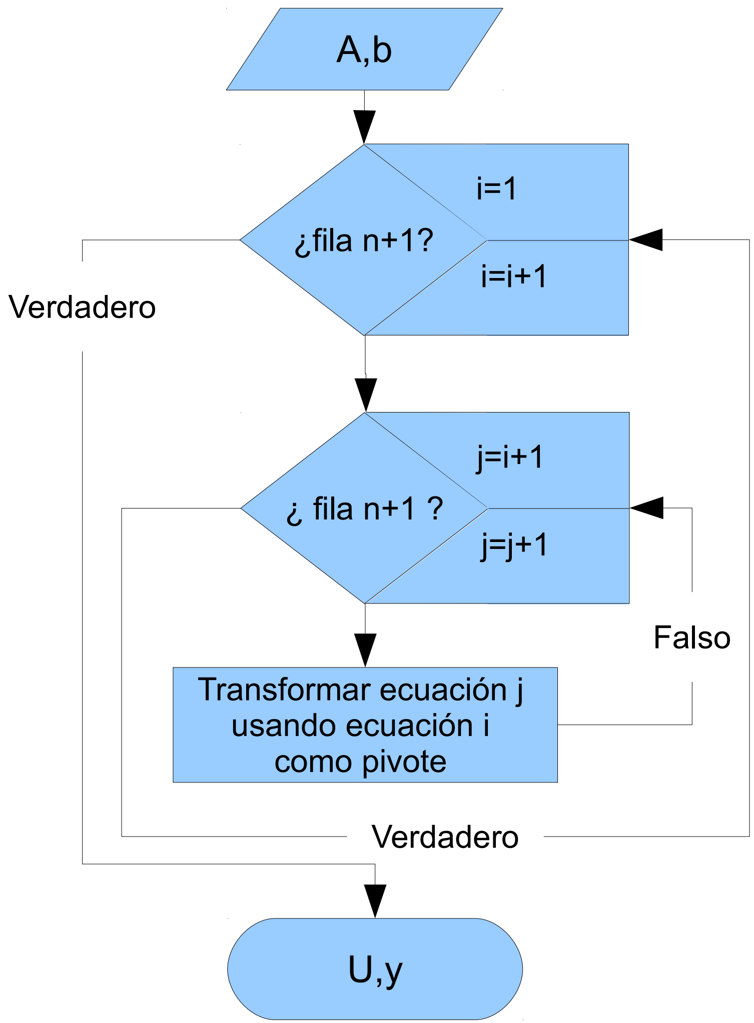
$$\begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -1{,}5 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ -10{,}5 \\ 9 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{matrix} x_3 = 9/3 = 3 \\ 3x_2 - 1{,}5(3) = -10.5 \rightarrow x_2 = -2 \\ 4x_1 - 2(-2) + (3) = 11 \rightarrow x_1 = 1 \end{matrix}$$

Eliminación de Gauss

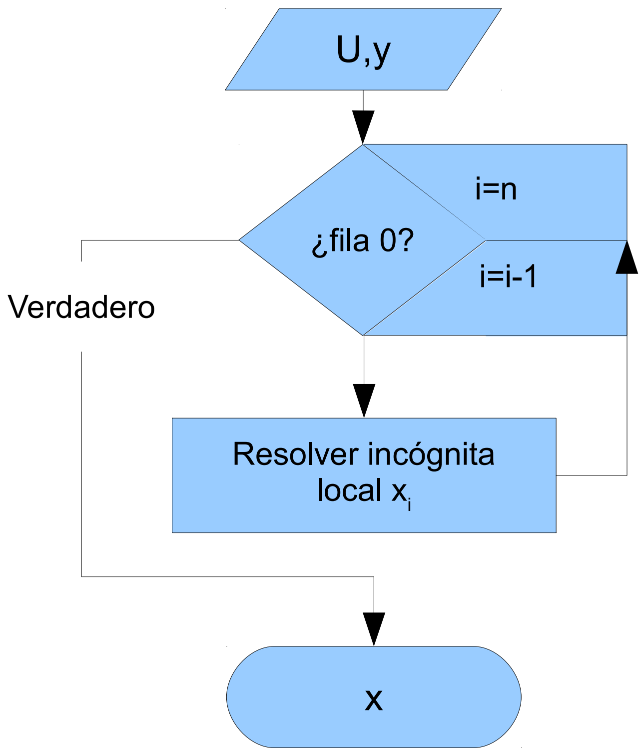
Algoritmo



Transformación a sistema triangular superior



Solución regresiva



Eliminación de Gauss

<u>Generalización de la fase de eliminación</u>

Supongamos que se han transformado las primeras i líneas. La línea pivote es la i-ésima. El primer elemento no nulo es el A_{ii}. La fila debajo del pivote es la j-ésima. Se busca eliminar el elemento A_{ji}.

El multiplicador para la fila j-ésima será: $\lambda_j = a_{ji} / a_{ii}$

La transformación será: $A_{ji} \leftarrow (A_{ji} - \lambda A_{ij}), b_j \leftarrow (b_j - \lambda b_i)$

<u>Generalización de la fase de solución</u>

Supongamos que se han resuelto las últimas i-1 líneas. La línea a resolver es la i-ésima.

$$x_i = \frac{1}{A_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij} x_j \right)$$

Descomposición LU

Toda matriz cuadrada se puede descomponer en el producto de una matriz L por una matriz U de modo que $A = L\,U$

El proceso por el cual se determinan las matrices L y U se llama **descomposición o factorización LU**.

La descomposición necesita algunas **restricciones adicionales** para ser única. Estas restricciones producen métodos de descomposición LU distintos, por ejemplo el de **Doolittle**, el de **Crout** y el de **Choleski**.

Una vez factorizada la matriz, la resolución es sencilla.

$A \cdot x = (LU) \cdot x = c \rightarrow$ Definiendo el vector y como $y = U \cdot x$

Reemplazando en la ecuación original queda $Ly = c$

Descomposición de Doolittle

Dada una matriz U obtenida por eliminación gaussiana, ¿cómo se puede recuperar la matriz A original?

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & u_{12} & u_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

Descomposición de Doolittle

Se premultiplica por las constantes λ obtenidas en el proceso de eliminación.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \lambda_{21} & 1 & 0 \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} = LU = A$$

Descomposición de Doolittle

Se pueden guardar las constantes de multiplicación en los ceros de la matriz U para aprovechar el espacio (recordar que los elementos de la diagonal de L son todos 1 y no es necesario almacenarlos).

$$\mathrm{LU}=\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ L_{21} & U_{22} & U_{23} \\ L_{31} & L_{32} & U_{33} \end{bmatrix}$$

Descomposición de Doolittle

Ejemplo:

$$\begin{aligned} 4x_1 - 2x_2 + x_3 &= 11 \\ -2x_1 + 4x_2 - 2x_3 &= -16 \\ x_1 - 2x_2 + 4x_3 &= 17 \end{aligned}$$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 4 \end{bmatrix}$$

Descomposición de Doolittle

Ejemplo:

$$
\begin{aligned}
4x_1 - 2x_2 + x_3 &= 11\\
-2x_1 + 4x_2 - 2x_3 &= -16\\
x_1 - 2x_2 + 4x_3 &= 17
\end{aligned}
$$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 1 & -2 & 4 \end{bmatrix} \qquad L_{21} = -\frac{1}{2}, L_{31} = \frac{1}{4}$$

$$A' = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -1{,}5 \\ 0 & -1{,}5 & 3{,}75 \end{bmatrix} \qquad L_{32} = -\frac{1}{2}$$

$$A'' = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -1{,}5 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = U$$

Descomposición de Doolittle

Finalmente

$$U=\begin{bmatrix} 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -1{,}5 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}, L=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/4 & -1/2 & 1 \end{bmatrix}$$

Métodos iterativos

Los **métodos directos** logran resolver el SEL en una **cantidad finita de pasos**. En contraposición, los **métodos iterativos** comienzan con una solución de partida e iteran hasta que se encuentra la **convergencia**. Por lo tanto, **son más lentos** que los métodos directos. Sin embargo, poseen las siguientes ventajas:

- Al ser métodos que van corrigiendo la solución, **pueden reducir los errores** asociados a la aritmética de punto flontante.
- Pueden almacenar solamente los valores no nulos de las matrices, con lo cual **permiten trabajar con SEL de mayor tamaño** respecto a los métodos directos.

Número de condición de una matriz

Para determinar que tan próxima está la matriz a la singularidad, se utiliza el **número de condición**.

El número de condición se define como:

$$cond(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

Si el número es cercano a 1, la matriz está bien condicionada y el SEL tiene solución única. Si en cambio el número crece hacia infinito significa que la matriz es singular y el SEL no se puede resolver.

Los resultados obtenidos a través de **matrices mal condicionadas no deben ser considerados**, ya que **los pequeños errores** numéricos que aparecen por aritmética de punto flotante **se amplifican** en la solución.

Soluciones iterativas de SEL

Queremos resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales (SEL)

$$\begin{aligned} 4x - y + z &= 7 \\ 4x - 8y + z &= -21 \\ -2x + y + 5z &= 15 \end{aligned}$$

En cada ecuación podemos despejar una de las incógnitas

$$\begin{aligned} x &= (7 + y - z)/4 \\ y &= (21 + 4x + z)/8 \\ z &= (15 + 2x - y)/5 \end{aligned}$$

Se propone la siguiente fórmula recursiva

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= (7 + y_k - z_K)/4 \\ y_{k+1} &= (21 + 4x_k + z_k)/8 \\ z_{k+1} &= (15 + 2x_k - y_k)/5 \end{aligned}$$

Se propone una terna de valores de partida y se utiliza la fórmula recursiva para obtener una aproximación mejor. El esquema se repite hasta alcanzar una tolerancia dada.
Éste es el **método de Jacobi**.

Si aprovechamos la actualización de las variables se puede acelerar el proceso

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= (7 + y_k - z_K)/4 \\ y_{k+1} &= (21 + 4\underline{x_{k+1}} + z_k)/8 \\ z_{k+1} &= (15 + 2\underline{x_{k+1}} - \underline{y_{k+1}})/5 \end{aligned}$$

El proceso es análogo al método de Jacobi.
Éste es el **método de Gauss-Seidel**.

Soluciones iterativas de SEL

Volvamos a ver los métodos pero en forma matricial

$$\begin{aligned} 4x - y + z &= 7 \\ 4x - 8y + z &= -21 \\ -2x + y + 5z &= 15 \end{aligned} \longrightarrow \begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ 4 & -8 & 1 \\ -2 & 1 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ -21 \\ 15 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

La matriz de coeficientes se puede escribir como la suma de dos matrices (Diagonal y el Resto)

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ 4 & -8 & 1 \\ -2 & 1 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 4 & 0 & 1 \\ -2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} + \boldsymbol{R}$$

Reemplazamos en la ecuación original y obtenemos la fórmula recursiva

$$(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{R}) \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \rightarrow \boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{x} \rightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1} \cdot \boldsymbol{b} - \boldsymbol{D}^{-1} \cdot \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{x} \rightarrow \boxed{\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{c} + \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{x}_k}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{bmatrix} 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & -1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 1/5 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 7 \\ -21 \\ 15 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & -1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 1/5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 4 & 0 & 1 \\ -2 & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k}$$

Soluciones iterativas de SEL

Comparemos la ecuación matricial vs las ecuaciones originales

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} 7/4 \\ 21/8 \\ 15/5 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 1/4 \\ -4/8 & 0 & -1/8 \\ -2/5 & 1/5 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k}$$

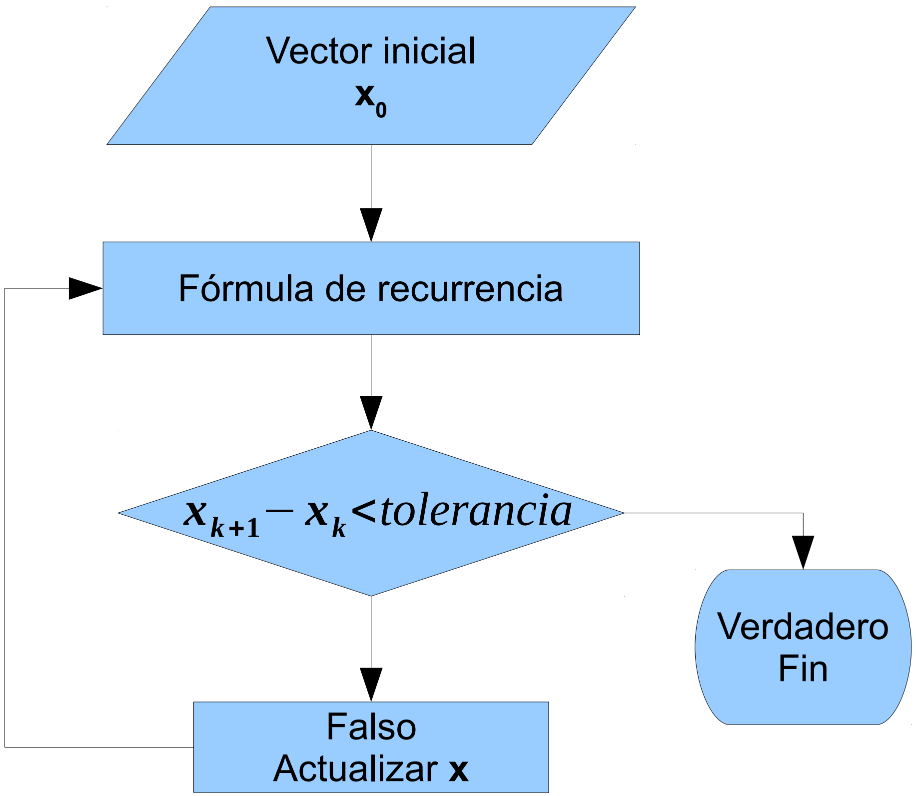
$$x_{k+1} = (7 + y_k - z_K)/4$$
$$y_{k+1} = (21 + 4x_k + z_k)/8$$
$$z_{k+1} = (15 + 2x_k - y_k)/5$$

Para Gauss-Seidel, se separa la matriz T en una triangular superior más una triangular inferior

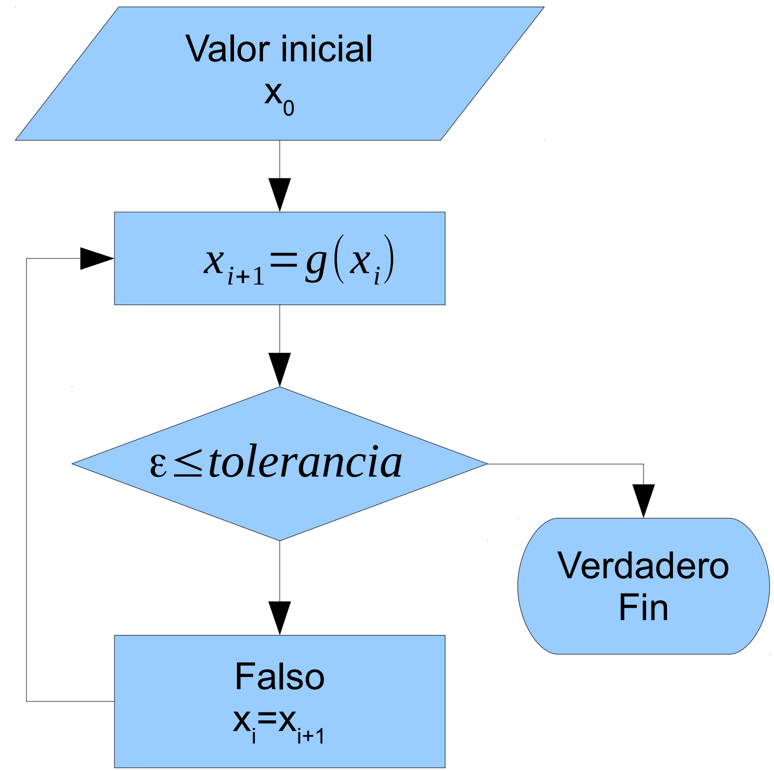
$$\boldsymbol{x_{k+1}} = \boldsymbol{D}^{-1} \cdot \boldsymbol{b} - \boldsymbol{D}^{-1} \cdot \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{c} + \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{x}^k \rightarrow \boldsymbol{x_{k+1}} = \boldsymbol{c} + \boldsymbol{T_L} \cdot \boldsymbol{x}^{k+1} + \boldsymbol{T_U} \cdot \boldsymbol{x}^k$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} 7/4 \\ 21/8 \\ 15/5 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -4/8 & 0 & 0 \\ -2/5 & 1/5 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} - \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & -1/8 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k}$$

Comparación con algoritmo iterativo de búsqueda de raíces



Método iterativo para solución de SEL



Método abierto de búsqueda de raíces

Ejemplo con Jacobi

Ejemplo:

$$\begin{aligned} 4x - y + z &= 7 \\ 4x - 8y + z &= -21 \\ -2x + y + 5z &= 15 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} 7/4 \\ 21/8 \\ 15/5 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 1/4 \\ -4/8 & 0 & -1/8 \\ -2/5 & 1/5 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k}$$

Iteración	x	y	z
0	1,00000000	2,00000000	2,00000000
1	1,75000000	3,37500000	3,00000000
2	1,84375000	3,87500000	3,02500000
3	1,96250000	3,92500000	2,96250000
4	1,99062500	3,97656250	3,00000000
...			
15	1,99999993	3,99999985	2,99999993
...			
19	2,00000000	4,00000000	3,00000000

Ejemplo con Gauss Seidel

Ejemplo:

$$\begin{aligned} 4x - y + z &= 7 \\ 4x - 8y + z &= -21 \\ -2x + y + 5z &= 15 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} 7/4 \\ 21/8 \\ 15/5 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -4/8 & 0 & 0 \\ -2/5 & 1/5 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k+1} - \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 1/4 \\ 0 & 0 & -1/8 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{k}$$

Iteración	x	y	z
0	1,00000000	2,00000000	2,00000000
1	1,75000000	3,75000000	2,95000000
2	1,95000000	3,96875000	2,98625000
3	1,99562500	3,99609375	2,99903125
4	1,99926563	3,99951172	2,99980391
5	1,99992695	3,99993896	2,99998299
6	1,99998899	3,99999237	2,99999712
7	1,99999881	3,99999905	2,99999972
8	1,99999983	3,99999988	2,99999996
9	1,99999998	3,99999999	3,00000000
10	2,00000000	4,00000000	3,00000000

Comandos en GNU Octave

FCEN
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

cond(A) Número de condición de la matriz

x=A\b Solución automática* de SEL

[L, U,p] = lu (A) descomposición LU

L = chol (A) descomposición de Cholesky

*) The selection tree for how the linear equation is solved or a matrix inverse is formed is given by:
1) If the matrix is upper or lower triangular sparse use a forward or backward substitution.
2) If the matrix is square, Hermitian with a real positive diagonal, attempt Cholesky factorization.
3) If the Cholesky factorization failed or the matrix is not Hermitian with a real positive diagonal, and the matrix is square, factorize using the LAPACK xGETRF function.
4) If the matrix is not square, or any of the previous solvers flags a singular or near singular matrix, find a least squares solution