

Capítulo 3

Sistemas de ecuaciones lineales

3.1. Problemas del álgebra lineal

Un problema lineal es un problema planteado de la forma

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= d_1 \\a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= d_2 \\a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &= d_m\end{aligned}$$

donde tenemos m ecuaciones y n incógnitas. Un problema de este estilo se puede escribir de forma compacta como

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{d}$$

donde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

Los problemas lineales tienen como objetivo la resolución de sistemas de ecuaciones lineales y problemas asociados como

1. Operaciones con matrices

$$\begin{aligned}A + B &= C \\AB &= C\end{aligned}$$

2. Determinantes

$$|A| = \sum_P \varepsilon_P a_{1P_1} a_{2P_2} \cdots a_{nP_n} \quad P = (P_1, P_2, \dots, P_n) \quad \varepsilon_P \text{ paridad de la permutación } P.$$

3. Inversas de matrices

Determinar A^{-1} que cumple $AA^{-1} = A^{-1}A = I$.

4. Valores y vectores propios

Determinar los escalares λ (valores propios) y vectores asociados x_λ (vectores propios) que satisfacen $Ax_\lambda = \lambda x_\lambda$.

En el caso de pequeñas dimensiones, estos problemas se pueden resolver a mano o con la ayuda de una pequeña calculadora, pero frecuentemente aparecen situaciones donde es necesario resolver sistemas de centenares o incluso centenares de miles de ecuaciones, en problemas mal condicionados numéricamente (definiremos más adelante con precisión el concepto de mal condicionamiento). En este caso, disponer de métodos numéricos eficientes es crucial. La regla de Cramer, que se estudia en cursos elementales, es pesada de aplicar en sistemas de más de tres incógnitas, ya que el cálculo de determinantes de matrices de orden mayor que tres es complicado. En los cálculos de sistemas de orden pequeño, se emplea usualmente el método de eliminación de Gauss, que describo a continuación.

3.2. Método de eliminación de Gauss

El método de eliminación de Gauss utiliza las propiedades de los sistemas lineales para eliminar incógnitas sucesivamente, de forma que el sistema se reduzca a la forma triangular. Sumando la primera ecuación multiplicada por un coeficiente adecuado a cada una de las ecuaciones siguientes, se elimina la primera incógnita desde la segunda ecuación hasta la última. Sumando la segunda ecuación del nuevo sistema multiplicada por el coeficiente correspondiente a las ecuaciones de la tercera a la última, se elimina la segunda incógnita de estas ecuaciones, y así sucesivamente. Veamos como se aplica en un caso práctico. Consideremos el sistema de ecuaciones,

$$\begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \\ 4x_1 + 7x_2 + 7x_3 &= 1 \\ -2x_1 + 4x_2 + 5x_3 &= -7 \end{aligned}$$

Restando a la segunda ecuación 2 veces la primera y sumando la primera a la tercera, obtenemos

$$\begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \\ 3x_2 + x_3 &= -5 \\ 6x_2 + 8x_3 &= -4 \end{aligned}$$

Finalmente, restando a la tercera ecuación dos veces la segunda, queda:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 3 \\ 3x_2 + x_3 &= -5 \\ 6x_3 &= 6 \end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones ha sido reducido a la denominada *forma triangular*. En esta forma, el sistema se resuelve fácilmente por sustitución hacia atrás:

$$\begin{aligned}x_3 &= 1 \\x_2 &= \frac{-5 - x_3}{3} = -2 \\x_1 &= \frac{3 - 2x_2 - 3x_3}{2} = 2\end{aligned}$$

Podemos aplicar este procedimiento a un sistema de ecuaciones arbitrario, donde en general hay más incógnitas que ecuaciones:

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\&\vdots \\a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &= b_m\end{aligned}$$

Cuando tenemos un sistema de este estilo, es mejor utilizar la notación matricial. Escribimos

$$Ax = b$$

donde A es una matriz y b un vector. Se define la matriz ampliada como $[A : b]$ dada por

$$[A : b] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & : & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & : & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} & : & b_m \end{bmatrix}$$

Si procedemos a eliminar las primeras m incógnitas, obtendremos en general al final del proceso la siguiente matriz ampliada:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1r} & u_{1,r+1} & \cdots & u_{1n} & : & c_1 \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2r} & u_{2,r+1} & \cdots & u_{2n} & : & c_2 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{rr} & u_{rr+1} & \cdots & u_{rn} & & c_r \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & & d_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & & d_2 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & & d_{m-r} \end{bmatrix}$$

Esta matriz ampliada la podemos escribir en forma compacta utilizando la notación de cajas, es decir, como una matriz cuyos elementos son submatrices, de la forma

$$\begin{bmatrix} U & B & c \\ 0 & 0 & d \end{bmatrix}$$

donde c y d son vectores columna de dimensión r y $m - r$, respectivamente, U es una matriz de dimensión $r \times r$ triangular superior

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1r} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{rr} \end{bmatrix}$$

y B es una matriz $r \times (n - r)$. Los dos 0 son matrices con todos los elementos nulos y de dimensiones correspondientes con las otras matrices. Si descomponemos el vector de incógnitas como $x = [y, z]$ donde y está compuesto por las primeras r incógnitas y z por las $m - r$ restantes, podemos escribir el sistema de ecuaciones como:

$$\begin{aligned} Uy + Bz &= c \\ 0y + 0z &= d \end{aligned}$$

De esta expresión obtenemos de forma inmediata una discusión del sistema de ecuaciones inicial. Si $r < m$ y $d \neq 0$, el sistema es inconsistente, es decir, no existe ninguna solución que lo satisfaga. Si $d = 0$ y $r < m$ podemos escribir

$$Uy = c - Bz$$

Podemos elegir libremente el valor de las componentes de z y resolver y por sustitución hacia atrás. El sistema es por lo tanto indeterminado. Si $r = m = n$ el sistema es determinado y se puede resolver por sustitución hacia atrás. El ejemplo que hemos visto al inicio de esta sección es un caso de sistema determinado.

3.3. Pivotado

Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} x_1 + 3x_2 - 2x_3 - 4x_4 &= 3 \\ 2x_1 + 6x_2 - 7x_3 - 10x_4 &= -2 \\ -x_1 - x_2 + 5x_3 + 9x_4 &= 14 \\ -3x_1 - 5x_2 + 15x_4 &= -6 \end{aligned}$$

Cuando se realiza el primer paso del método de eliminación de Gauss, la matriz ampliada queda como:

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 3 & -2 & -4 & : 3 \\ 0 & 0 & -3 & -2 & : -8 \\ 0 & 2 & 3 & 5 & : 17 \\ 0 & 4 & -6 & 3 & : 3 \end{array} \right]$$

Con lo cual no podemos proseguir el método de eliminación de forma directa, ya que al anularse el segundo elemento de la segunda fila, ya no podemos utilizar esta fila para anular la segunda columna de las filas tercera y cuarta. La única alternativa que queda para continuar el proceso de eliminación es intercambiar o dos filas o dos columnas. El primer procedimiento es más conveniente puesto que no nos obliga a reordenar las incógnitas. De hecho, para reducir los errores numéricos, aunque no se anule el elemento con el que toca eliminar, es conveniente intercambiar las filas de forma que el elemento utilizado para eliminar sea lo mayor posible. Este procedimiento se conoce como *pivotado*. Las razones quedan ilustradas en el siguiente ejemplo:

$$\begin{aligned} 10^{-n}x + y + z &= 2 \\ x + 2y - z &= 2 \\ -x + y + z &= 1 \end{aligned}$$

El primer paso de eliminación da

$$\begin{aligned} 10^{-n}x + y + z &= 2 \\ (2 - 10^n)y - (1 + 10^n)z &= 2(1 - 10^n) \\ (1 + 10^n)y + (1 + 10^n)z &= 2 \cdot 10^n + 1 \end{aligned}$$

Si trabajamos con una precisión numérica relativamente baja, tendremos que nuestro procesador dará como resultado $10^n + 2 = 10^n$. En este caso, el proceso de eliminación completo dará el resultado:

$$\begin{aligned} 10^{-n}x + y + z &= 2 \\ -10^n y - 10^n z &= -2 \cdot 10^n \\ 0 \cdot z &= 0 \end{aligned}$$

es decir, nos queda un sistema indeterminado, con solución $y = 2 - z$, $x = 0$, z indeterminado. En cambio, si reordenamos las ecuaciones de la forma

$$\begin{aligned} x + 2y - z &= 2 \\ 10^{-n}x + y + z &= 2 \\ -x + y + z &= 1 \end{aligned}$$

entonces llegamos a la solución correcta $x = y = z = 1$ con una precisión de 10^{-n} . El procedimiento de intercambiar ecuaciones, de forma que se realice la eliminación de una incógnita dada utilizando la ecuación de mayor coeficiente en dicha incógnita, se conoce con el nombre de *pivotado*. El pivotado se utiliza de forma sistemática en la solución de sistemas lineales para evitar la generación de errores de redondeo que disminuyan la precisión de la solución numérica. El pivotado puede ser parcial o total; cuando se intercambian sólo filas, como en el ejemplo anterior, se llama *pivotado parcial*; cuando también se intercambian columnas, alterando el orden del vector de las incógnitas, se denomina *pivotado total*. Aunque el pivotado parcial se emplea de forma sistemática en la solución de sistemas lineales, el pivotado total sólo es necesario en raros problemas especialmente mal condicionados, un concepto que abordamos en la siguiente sección.

3.4. Mal condicionamiento

Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones lineales, aparentemente sin ninguna complicación:

$$\begin{aligned}x - y &= 1 \\x - 1,000001y &= 0\end{aligned}$$

La solución es $y = 1,000,000$ y $x = 1,000,001$, como se encuentra fácilmente restando la primera ecuación de la segunda ecuación, y sustituyendo el resultado para y en la segunda ecuación. Consideremos ahora el sistema “próximo”:

$$\begin{aligned}x - y &= 1 \\x - 0,999999y &= 0\end{aligned}$$

Se encuentra fácilmente que la solución es $y = -1,000,000$, $x = -999,999$. Vemos que una pequeña variación en los coeficientes ha producido una gran variación en la solución. Desde el punto de vista geométrico, se puede interpretar este resultado como consecuencia de que estas dos ecuaciones corresponden a dos líneas casi paralelas, y que un cambio extremadamente pequeño en una de ellas produce un cambio enorme del punto de intersección. El casi-paralelismo se puede interpretar como una casi dependencia lineal. Cuando dos ecuaciones son linealmente dependientes el determinante del sistema se anula. Si calculamos el determinante de este sistema de ecuaciones, vemos que vale $\Delta = -0,000001$ en el primer caso y $\Delta = 0,000001$ en el segundo. Cuando el valor del determinante es muy pequeño, decimos que la matriz es *casi-singular*. La casi-singularidad de la matriz de los coeficientes es una marca de mal condicionamiento de un sistema de ecuaciones. La resolución de sistemas de ecuaciones especialmente mal condicionados se puede tratar eficientemente mediante el pivotado total.

3.5. Representación matricial del método de eliminación de Gauss

El método de eliminación de Gauss es equivalente a una transformación lineal. De hecho, es inmediato comprobar que la primera etapa del método la podemos escribir como

$$A = L_1 A_1$$

donde A es la matriz de coeficientes (consideramos por simplicidad matrices cuadradas),

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

A_1 es la matriz de coeficientes, después de la primera etapa,

$$A_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a'_{n2} & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}$$

donde $a'_{ki} = a_{ki} - \frac{a_{k1}}{a_{11}} a_{1i}$ y L_1 es la matriz triangular inferior con 1 en la diagonal (*matriz triangular inferior unidad*)

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \cdots & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 & 0 \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 \\ l_{n1} & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

con $l_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}$. En el caso de un sistema de ecuaciones $Ax = b$, tendremos además que $b = L_1 b_1$. Análogamente, la segunda etapa del método de reducción la podemos escribir como

$$A_1 = L_2 A_2$$

con L_2 la matriz triangular inferior unidad:

$$L_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & l_{42} & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & l_{n2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

con $l_{i2} = \frac{a'_{i2}}{a'_{22}}$, $i = 3, 4, \dots, n$. El vector de términos independientes b_2 satisface $b_1 = L_2 b_2$. Repitiendo el proceso $n - 1$ veces, tendremos al final:

$$\begin{aligned} A &= L_1 L_2 L_3 \dots L_{n-1} U \\ b &= L_1 L_2 L_3 \dots L_{n-1} c \end{aligned}$$

donde L_j es una matriz triangular inferior unidad, cuyos únicos elementos no nulos están en la diagonal y la parte inferior a la diagonal de la columna j :

$$L_j = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & l_{j+1,j} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & l_{nj} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

y U es una matriz triangular superior

$$U = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n-1}^{(1)} & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{jj}^{(j-1)} & \dots & a_{jn}^{(j-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

Una propiedad de las matrices triangulares inferiores es que el producto de dos matrices triangulares inferiores es una matriz triangular inferior (lo que también es válido para matrices triangulares inferiores unidad).

Ejercicio: Demostrar las afirmaciones anteriores.

Tenemos por lo tanto que la matriz L definida por

$$L = L_1 L_2 \dots L_{n-1}$$

es una matriz triangular inferior unidad. Por consiguiente, el método de eliminación de Gauss es equivalente a la descomposición

$$\begin{aligned} A &= LU \\ b &= Lc \end{aligned}$$

La inversa de una matriz triangular inferior (o superior) es también una matriz triangular inferior (o superior). La característica de matriz triangular unidad, también se mantiene para las matrices

inversas. Por lo tanto, el método de eliminación de Gauss consiste en aplicar la transformación L^{-1} al sistema $Ax = b$, obteniendo $L^{-1}Ax = L^{-1}b$, o sea $Ux = c$, por lo que podemos resolver fácilmente este último sistema por sustitución hacia atrás. Si hemos realizado permutaciones de filas como consecuencia del pivotado parcial, podemos denotar P la matriz de permutaciones y escribir

$$PLUx = b$$

Una matriz de permutaciones que cambia la fila i por la j tiene todos los elementos de la diagonal 1, salvo los elementos P_{ii} y P_{jj} que valen 0. Todos los elementos fuera de la diagonal son nulos salvo $P_{ij} = P_{ji} = 1$. Podemos considerar una matriz de permutación como una matriz identidad con las filas cambiadas de orden. Si además hemos realizado un pivotado total, la matriz de permutaciones de columnas la denotamos por Q de forma que Qx será el vector de incógnitas al final del proceso de eliminación. Las matrices de permutaciones son matrices ortogonales, que satisfacen $PP^T = I$, por lo que $P^{-1} = P^T$. Además, una matriz de una permutación de sólo dos elementos, P_{ij} , satisface $P_{ij}^2 = I$. Por lo tanto, el sistema reducido después de pivotado total será

$$LUQ^T(Qx) = P^T b$$

con Qx el vector reordenado de incógnitas y LUQ^T la matriz de coeficientes reducida y $P^T b$ el vector de términos independientes después del proceso de pivotado. El método de eliminación de Gauss no es un método excesivamente eficiente de resolver un sistema de ecuaciones. Sin embargo proporciona la clave para obtener métodos edicientes, que es la descomposición LU . Vamos a hacer una pequeña digresión sobre la descomposición LU antes de abordar métodos eficientes numéricamente de resolver sistemas de ecuaciones. Una matriz triangular superior se puede siempre descomponer en el producto una matriz triangular superior unidad y una matriz diagonal. Análoga afirmación es válido para una matriz triangular inferior. La demostración es inmediata pues se ve fácilmente que

$$U = DV$$

con

$$U = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

y

$$V = \begin{bmatrix} 1 & a_{12}/a_{11} & \cdots & a_{1n}/a_{11} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2n}/a_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Por lo tanto el método de eliminación de Gauss nos dice que podemos descomponer una matriz no singular como

$$A = LDV$$

con D una matriz diagonal y L y V una matrices inferior y superior unidad, respectivamente. Podemos multiplicar L y D con lo cual tenemos que la descomposición LU la podemos hacer de forma que la matriz triangular unidad sea la inferior o la superior. Cuando descomponemos una matriz A de la forma LU con L una matriz inferior unidad, se denomina *descomposición de Crout*. Si por el contrario U es una matriz superior unidad, se denomina *descomposición de Doolittle*. Ambas descomposiciones son equivalentes. Por otro lado, se puede demostrar que la descomposición LDV es única, y por lo tanto también las descomposiciones de Crout y Doolittle.

3.6. Métodos de eliminación compactos

La descomposición LU se puede realizar por métodos numéricamente más eficientes que el método de eliminación de Gauss. Para ello escribimos

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

y procedemos a identificar elementos. Multiplicando la primera fila de L por las n columnas de U obtenemos que la primera fila de U viene dada por

$$u_{1i} = a_{1i}$$

y multiplicando las n filas de L por la primera columna de U resulta

$$l_{i1}u_{11} = a_{i1}$$

con lo que obtenemos la primera columna de L

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}$$

Multiplicando la segunda fila de L por cada una de las columnas $2, 3, \dots, n$ de U obtenemos:

$$a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22}$$

que proporciona $u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$. De aquí, la multiplicación de cada fila de L por la segunda columna de U

$$l_{k1}u_{21} + l_{k2}u_{22} = a_{k2}$$

proporciona la segunda columna de L

$$l_{k2} = \frac{a_{k2} - l_{k1}u_{21}}{u_{22}}$$

y la multiplicación de la segunda fila de L por cada una de las columnas de U posteriores a la segunda da

$$l_{21}u_{1k} + u_{2k} = a_{2k}$$

proporciona la segunda fila de U :

$$u_{2k} = a_{2k} - l_{21}u_{1k}$$

.Análogamente tenemos que la tercera fila de U y la tercera columna de L se deducen de

$$a_{33} = u_{33} + l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23}$$

que da

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$$

y del producto de la tercera fila de L por cada una de las filas $k > 3$ de U obtenemos

$$a_{3k} = u_{3k} + l_{31}u_{1k} + l_{32}u_{2k}$$

que proporciona

$$u_{3k} = a_{3k} - l_{31}u_{1k} - l_{32}u_{2k}$$

Del producto de las filas $k > 3$ de L por la tercera fila de U se obtiene

$$l_{k3} = \frac{1}{u_{33}}(a_{k3} - l_{k1}u_{31} - l_{k2}u_{32})$$

Este procedimiento se prosigue $n - 1$ veces, obteniendo en cada etapa k

$$u_{kk} = a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki}u_{ik}$$

$$u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki}u_{ij}) \quad j > k$$

Estas dos ecuaciones se pueden escribir en una sola como

$$u_{kj} = (a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki}u_{ij}) \quad j \leq k \quad (3.1)$$

Los elementos de L en la etapa k se obtienen de

$$l_{jk} = \frac{1}{u_{kk}} \left(a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ji}u_{ik} \right) \quad j > k \quad (3.2)$$

Notemos que en cada paso determinamos una fila de U y una columna de L , y que en los pasos posteriores no se necesita de nuevo las filas y columnas de A que han servido para determinar las correspondientes filas y columnas de las matrices L y U .

3.6.1. Pivotado en la descomposición LU

En la ecuación 3.2, la división por u_{kk} puede plantear problemas numéricos si u_{kk} es muy pequeño. El pivotado consiste en permutar las filas de forma que el elemento u_{kk} sea lo mayor posible. Para ello, en la etapa k se calculan todos los valores

$$w_{kj} = a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ji}u_{ik}$$

y se determina cual es el mayor de todos ellos. Si el mayor elemento sucede para la fila $j > k$, entonces se intercambian las filas j y k , con lo que el nuevo elemento u_{kk} toma el mayor valor posible. Como las permutaciones de filas no cambian el orden de las incógnitas, no es necesario mantener una matriz de permutación correspondiente a cada etapa. Basta con partir del vector de permutaciones $(1, 2, \dots, n)$ y en cada etapa permutar los elementos correspondientes a la permutación de filas producida por el pivotado. La paridad del vector de permutaciones final nos da la paridad de la permutación global, que es lo único que necesitamos a fin de calcular el signo del determinante de A .

El método de descomposición LU se utiliza para resolver un amplio espectro de problemas lineales, que describimos a continuación.

En la práctica, para evitar consumo innecesario de memoria, los programas de descomposición LU devuelven la matriz U almacenada en la parte superior de A , y los términos distintos de la unidad de la matriz L en la parte inferior de A . Devuelven, aparte, el vector de permutaciones P .

Ejemplo: Descomponer en la forma LU la matriz

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \end{bmatrix}$$

utilizando pivotado parcial en las filas.

1) Determinamos que fila produce el mayor valor de u_{11} . Observamos que el elemento de mayor valor absoluto en la primera columna corresponde a la segunda fila. Intercambiamos por lo tanto la primera y la segunda fila. Tenemos como vector de permutación $P = (2, 1, 3, 4)$ y

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}$$

con lo que tenemos $u_{11} = 3$, $u_{12} = 0$, $u_{13} = 1$, $u_{14} = 2$. $l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}} = 0$, $l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}} = \frac{2}{3}$, $l_{41} = \frac{a_{41}}{u_{11}} = \frac{1}{3}$. El resultado final del primer paso, en el que hemos determinado la primera columna de L y la

primera fila de U , es

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & l_{32} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}$$

con $P = (2, 1, 3, 4)$.

2) Vemos cual de las filas da el mayor valor de u_{22} . Construimos las cantidades $w_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 1$, $w_{32} = a_{32} - l_{31}u_{12} = 3$, $w_{42} = a_{42} - l_{41}u_{12} = 2$. Como el mayor de todos es w_{32} , intercambiamos la fila 2 por la fila 3 con lo que el vector de permutación queda $P = (2, 3, 1, 4)$ y $u_{22} = w_{32} = 3$. De aquí $l_{32} = \frac{w_{22}}{u_{22}} = \frac{1}{3}$ y $l_{42} = \frac{w_{42}}{u_{22}} = \frac{2}{3}$ (Notemos que u_{22} se refiere al valor después del intercambio mientras que w_{22} es antes del intercambio. Tenemos además $u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = -\frac{2}{3}$ y $u_{24} = a_{24} - l_{21}u_{14} = -\frac{1}{3}$. Por lo tanto, al final del segundo paso tenemos

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}$$

con $P = (2, 3, 1, 4)$.

3) En del tercer paso volvemos a determinar si hace falta algún intercambio de filas. Tenemos que ver que fila da el mayor valor de u_{33} . Construimos $w_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = \frac{20}{9}$, $w_{34} = a_{34} - l_{41}u_{13} - l_{42}u_{23} = 3 - \frac{1}{3} + \frac{4}{9} = \frac{28}{9}$. Como el mayor es w_{34} , intercambiamos las filas 3 y 4, con lo que el vector de permutación queda como $P = (2, 3, 4, 1)$. Tenemos $u_{33} = \frac{28}{9}$, $l_{43} = \frac{w_{33}}{u_{33}} = \frac{20}{28} = \frac{5}{7}$. $u_{34} = a_{34} - l_{31}u_{14} - l_{32}u_{24} = 0 + \frac{2}{9} - \frac{2}{3} = -\frac{4}{9}$. Por lo tanto al final del tercer paso tenemos

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{5}{7} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{28}{9} & -\frac{4}{9} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}$$

con $P = (2, 3, 4, 1)$.

4) El último elemento, u_{44} , se calcula de igualar el producto de la cuarta fila de L por la cuarta columna de U a a_{44} : $u_{44} = a_{44} - l_{41}u_{14} - l_{42}u_{24} - l_{43}u_{34} = 3 + \frac{1}{9} + \frac{20}{63} = 3 + \frac{3}{7} = \frac{24}{7}$. Por lo tanto, el resultado final es

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{5}{7} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{28}{9} & -\frac{4}{9} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{24}{7} \end{bmatrix}$$

con vector de permutación $P = (2, 3, 4, 1)$. Este vector corresponde a una matriz de permutación

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Podemos verificar que la matriz original A cumple

$$A = PLU$$

Muchos programas de descomposición LU, para ahorrar memoria, suelen sobrescribir la matriz A con los elementos de L y U , a medida que se van calculando, escribiendo U en la parte superior de A y los elementos de L inferiores a la diagonal en la parte inferior de A . Devuelven, además el vector de permutaciones. Esta forma de presentar la descomposición LU , se denomina la descomposición LU empaquetada. En el ejemplo anterior, estos programas devolverían la matriz

$$LU = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 & 2 \\ \frac{2}{3} & 3 & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{28}{9} & -\frac{4}{9} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{5}{7} & \frac{24}{7} \end{bmatrix}$$

junto con el vector $P = (3, 3, 4, 1)$.

3.7. Solución de problemas lineales mediante la descomposición LU

3.7.1. Resolución de sistemas lineales

En muchas circunstancias hay que resolver varios sistemas de ecuaciones lineales que sólo se diferencian en los términos independientes. Vamos a plantear la solución de ecuaciones lineales en este caso. Si tenemos un conjunto de n sistemas de ecuaciones lineales que sólo se, diferencian en los vectores de términos independientes, podemos escribirlo en notación compacta como

$$Ax = B$$

donde B es una matriz cuyas columnas son los vectores b_1, b_2, \dots, b_n de términos independientes. Si descomponemos $A = PLU$, donde P es la matriz de permutaciones, tenemos

$$LUx = P^T B$$

Resolvemos en primer lugar el sistema

$$Ly = P^T B$$

3.7. SOLUCIÓN DE PROBLEMAS LINEALES MEDIANTE LA DESCOMPOSICIÓN LU⁵¹

por sustitución hacia adelante. Finalmente, la resolución por sustitución hacia atrás de

$$Ux = y$$

nos proporciona la matriz X de soluciones del sistema inicial de ecuaciones. Sus columnas serán las soluciones correspondientes a los términos independientes dados por las correspondientes columnas de la matriz B . En la práctica, la matriz P se tiene en cuenta mediante un vector de permutaciones, como en el apartado anterior.

3.7.2. Determinantes

Como el determinante de una matriz A viene dado por

$$|A| = \sum_P \varepsilon_P a_{1P_1} a_{2P_2} \cdots a_{nP_n}$$

donde ε_P es la paridad de la permutación (P_1, P_2, \dots, P_n) es obvio que el determinante de una matriz triangular es el producto de los términos de la diagonal, pues las otras permutaciones implican un elemento nulo. Tenemos por lo tanto que si

$$A = PLU$$

por las propiedades de los determinantes

$$|A| = |P||L||U|$$

Tenemos que $|L| = 1$, $|U| = u_{11}u_{22} \dots u_{nn}$ y $|P| = (-1)^p$ donde p es la paridad de la permutación, 1 o 0. Tenemos por lo tanto,

$$|A| = (-1)^p u_{11}u_{22} \dots u_{nn}$$

3.7.3. Inversas de matrices

El problema de encontrar la inversa de una matriz consiste en encontrar una matriz A^{-1} de forma que

$$AA^{-1} = I$$

Esto es equivalente a resolver n sistemas de ecuaciones diferentes donde los vectores de incógnitas son las columnas de A^{-1} y los vectores de términos independientes son las columnas de la matriz identidad. Si descomponemos A de la forma LU , tenemos que este problema consiste en resolver

$$LUA^{-1} = P^T I$$

que es una notación compacta para los n sistemas de ecuaciones

$$LUC_k = e_k$$

dobe c_k es la columna k de A^{-1} , y e_k es un vector columna con todos los elementos nulos salvo un 1 en la columna k . Resolvemos

$$Ly_k = e_k$$

por sustitución hacia adelante y

$$Uc_k = y_k$$

por sustitución hacia atrás.

Un método alternativo es invertir

$$A = PLU$$

con lo que obtenemos

$$A^{-1} = U^{-1}L^{-1}P^T$$

Si calculamos L^{-1} y U^{-1} podemos calcular A^{-1} directamente mediante producto de matrices. Aunque este procedimiento parezca en principio más complicado, no lo es en realidad, ya que la inversa de una matriz triangular es una matriz triangular del mismo tipo. Así, L^{-1} es una matriz triangular inferior unidad y U^{-1} una matriz triangular superior. El cálculo de estas dos inversas requiere, por lo tanto, un reducido número de operaciones, incluso inferior que en el primer método.

3.8. Matrices simétricas definidas positivas

Un caso particularmente frecuente en diversas ramas de la ciencia es el de matrices simétricas. Una matriz es simétrica si $a_{ik} = a_{ki}$. En un gran número de circunstancias aparecen matrices que, además de simétricas, son definidas positivas. Esto quiere decir que todos los elementos u_{kk} en la descomposición LU cumplen $u_{kk} > 0$. En este caso, tenemos que utilizando la descomposición LDV

$$A = LDV$$

se debe cumplir

$$A^T = V^T D L^T$$

Como la descomposición LDV es única y $A = A^T$, deducimos $L = V^T$ y $V = L^T$ y por lo tanto podemos escribir

$$A = LDL^T$$

Además, podemos escribir para la matriz diagonal D

$$D = EE$$

donde E es una matriz diagonal, cuyos elementos son las raíces de los elementos de D . Como una matriz diagonal es simétrica, podemos escribir

$$A = LEE^T L^T = MM^T$$

donde $M = LE$, es una matriz triangular inferior. La descomposición de una matriz simétrica y definida positiva en la forma MM^T se conoce como método de Cholesky. Este es el método de descomposición más eficiente en caso de matrices simétricas y definidas positiva.

3.8.1. Método de Cholesky

Dada una matriz A simétrica y definida positiva, escribimos

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ m_{12} & m_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{1n} & m_{2n} & \cdots & m_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ 0 & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & m_{nn} \end{bmatrix}$$

Para obtener los elementos de la matriz M procedemos multiplicando la primera fila de M y las n columnas de M^T

$$a_{11} = m_{11}^2$$

$$a_{1k} = m_{11}m_{1k}$$

de donde

$$m_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$m_{1k} = \frac{a_{1k}}{m_{11}}$$

Multiplicando la segunda fila de M y las $n - 1$ últimas columnas de M^T obtenemos

$$a_{22} = m_{12}^2 + m_{22}^2$$

de donde obtenemos

$$m_{22} = \sqrt{a_{22} - m_{12}^2}$$

Multiplicando la segunda fila de M por la fila k de M^T obtenemos

$$a_{2k} = m_{12}m_{1k} + m_{22}m_{2k} \quad k > 2$$

de donde

$$m_{2k} = \frac{a_{2k} - m_{12}m_{1k}}{m_{22}} \quad k > 2$$

Procedemos análogamente hasta la etapa n , obteniendo en la etapa i

$$m_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} m_{ik}^2 \right)^{1/2}$$

$$m_{ij} = \frac{1}{m_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} m_{ik}m_{jk} \right) \quad j > i$$

El método de Cholesky es un método robusto que no necesita pivotado. El determinante de A viene dado por

$$|A| = (m_{11}m_{22}\dots m_{nn})^2$$

por lo que es siempre positivo.

Ejemplo: Descomponer mediante el metodo de Cholesky, la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -2 \\ 2 & 2 & -3 \\ -2 & -3 & 14 \end{bmatrix}$$

Obtenemos $m_{11}^2 = 4$ de donde $m_{11} = 2$. De $m_{11}m_{1k} = a_{1k}$ obtenemos $m_{12} = 1$ y $m_{13} = -1$. En la segunda etapa tenemos $m_{22} = \sqrt{a_{22} - m_{12}^2} = 1$ de donde obtenemos

$$m_{23} = \frac{a_{23} - m_{12}m_{13}}{m_{22}} = \frac{-3 + 1}{1} = -2$$

y finalmente $m_{33}^2 = a_{33} - m_{13}^2 - m_{23}^2 = 14 - 1 - 4 = 9$ con lo que $m_{33} = 3$. La matriz M queda por lo tanto

$$M = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & -2 & 3 \end{bmatrix}$$