Resolución de sistemas de ecuaciones

Cálculo Numérico y Estadística
Grado en Química y Grado en Enología

J.L. Bravo

Curso 2021-2022

Resolución de sistemas de ecuaciones

Planteamiento del problema

Sea un sistema de ecuaciones lineales

$$
\begin{aligned}
&a_{11}x_1 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1,\\
&a_{21}x_1 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2,\\
&\ldots\\
&a_{n1}x_1 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n,
\end{aligned}
$$

- $a_{11}, \ldots, a_{nn}, b_1, \ldots, b_n$ son los coeficientes del sistema, conocidos.
- Matriz del sistema: $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in M_{mxn}$
- Vector de términos independientes: $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
- Vector de variables: $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$

Planteamiento del problema

Este tipo de sistemas aparecen en multitud de aplicaciones como:

- Simulación
- Linealización
- Análisis y procesamiento de datos

En la asignatura de Álgebra, hemos estudiado cómo resolverlos mediante métodos directos:

- Regla de Cramer
- Método de Gauss

Sin embargo, los métodos directos producen inconvenientes cuando se aplican a sistemas de grandes dimensiones, pues requieren muchas operaciones y son sensibles a errores de redondeo.
Los métodos iterativos están especialmente indicados en la resolución de este tipo de sistemas, o en aquellos en las que las matrices son dispersas (poseen muchos ceros).

Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

En este tema, estudiaremos cómo resolver sistemas de ecuaciones lineales mediante:

1. Nuevos métodos directos:
    1. Método de Gauss con pivoteo parcial
    2. Factorización LU
        - Factorización LU con pivote
        - Factorización LU de Cholesky
2. Métodos iterativos:
    1. Método de Jacobi

Métodos directos: Gauss con pivoteo parcial

El método de Gauss consiste en transformar el sistema en uno equivalente, de modo que la matriz del sistema sea triangular superior: es decir, que

$$a_{ij} = 0, \quad i > j$$

$[\mathbf{A}|\mathbf{b}]$. Si $a_{11} \neq 0$, la primera fila pivote es la F_1. Las modificaciones en la matriz ampliada son:

$$F_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} F_1, \; F_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}} F_1, \; \ldots$$

Después, hacemos lo mismo con la fila siguiente, hasta lograr la matriz triangular superior. Este proceso se denomina **eliminación gaussiana**.

Ejemplo Gauss

Ejemplo 1:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 & 3 \\ 0 & 6 & 0 & 4 & 4 \end{array}\right) \underset{F_3 - 5F_1}{\longrightarrow} \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & -2 \\ 0 & 6 & 0 & 4 & 4 \end{array}\right)$$

$$\underset{F_4 - 3F_2}{\longrightarrow} \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & -2 \end{array}\right)$$

Ejemplo Gauss

Una vez que tenemos el sistema con matriz triangular superior:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & -2 \end{array}\right)$$

Basta resolverlo de "abajo hacia arriba": **sustitución regresiva**

$$-8x_4 = -2 \rightarrow x_4 = 1/4$$

$$-12x_3 = -2 \rightarrow x_3 = 1/6$$

$$2x_2 + 4x_4 = 2 \rightarrow x_2 = 1/2(2 - 4 \cdot 1/4) = 1/2$$

$$x_1 = 1 - 3x_3 = 1/2$$

Ejemplo pivoteo parcial

El **pivoteo parcial** consiste en aplicar este método eligiendo la fila pivote como aquella cuyo elemento pivote sea el de mayor valor absoluto de su columna (en la diagonal o por debajo). Una vez elegida, se intercambian las filas como sea necesario.

Ejemplo 2:

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 3 & | & 1 \\ 1 & 2 & 0 & | & 2 \\ 2 & 0 & 4 & | & 4 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 1 & 2 & 0 & | & 2 \\ 1 & 3 & 3 & | & 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 0 & 2 & -2 & | & 0 \\ 0 & 3 & 1 & | & -1 \end{pmatrix}$$

$$\to \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 0 & 3 & 1 & | & -1 \\ 0 & 2 & -2 & | & 0 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 0 & 3 & 1 & | & -1 \\ 0 & 0 & -8/3 & | & 2/3 \end{pmatrix}$$

Factorización LU

Decimos que una matriz invertible $\mathbf{A}$ admite una factorización LU si se puede escribir en la forma:

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

donde

- $\mathbf{L}$ es una matriz triangular inferior ($l_{ij} = 0$ si $i > j$).
- $\mathbf{U}$ es una matriz triangular superior ($u_{ij} = 0$ si $i < j$).

Podemos calcular el determinante como:

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

y la ventaja es que el determinante de una matriz triangular es el producto de los elementos de su diagonal: $|\mathbf{L}| = l_{11} \cdot l_{22} \cdots$, $|\mathbf{U}| = u_{11} \cdot u_{22} \cdots$

Resolución de sistemas mediante factorización LU

Si conocemos una factorización LU de una matriz $\mathbf{A}$, $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, podemos resolver el sistema $\mathbf{LUx} = \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ con el siguiente procedimiento:

- Llamamos $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ y resolvemos mediante sustitución progresiva el sistema
$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}.$$
- Obtenemos la solución $\mathbf{x}$ resolviendo el sistema
$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}.$$

La factorización LU es la versión matricial de la eliminación gaussiana.

Si tenemos que resolver un mismo sistema para múltiples valores de $\mathbf{b}$ es más rápida que la eliminación gaussiana. Para un único sistema son equivalentes.

Ejemplo de resolución de un sistema mendiante factorización LU

Consideremos el sistema:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Tenemos que

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & -12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 \end{pmatrix} = \mathbf{LU}$$

Ejemplo de resolución de un sistema mendiante factorización LU

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

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{y} = (1, 2, -2, -2)$$

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

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & -12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x} = (1/2, 1/2, 1/6, 1/4)$$

Cálculo de la matriz inversa

Si conocemos una factorización LU de una matriz $\mathbf{A}$, $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, podemos obtener la inversa de A símplemente resolviendo el sistema $\mathbf{AX} = \mathbf{I}$, donde I es la matriz identidad.

Por ejemplo, consideremos:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & 0 \\ 5 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 5 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -12 \end{pmatrix} = \mathbf{LU}$$

Entonces resolvemos $\mathbf{LY} = \mathbf{I}$, $\mathbf{UX} = \mathbf{Y}$, obteniendo:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -5 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} -1/4 & 0 & 1/4 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 5/12 & 0 & -1/12 \end{pmatrix}.$$

Cálculo de la factorización LU

¿Cómo obtenemos una factorización LU de una matriz **A**?

El sistema

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

donde los elementos de **L** y **U** son las incógnitas, posee n^2 ecuaciones y $n^2 + n$ incógnitas.

Debemos fijar entonces n condiciones más para conseguir que tenga una única solución. Una forma de hacerlo es imponer que la matriz **L** tenga unos en la diagonal. Entonces la factorización obtenida es equivalente a la eliminación gaussiana (sin pivoteo), aplicada a la matriz **A**.

- La matriz **U** será la obtenida en la eliminación gaussiana.
- La matriz **L** está formada por unos en la diagonal y por los multiplicadores. Es decir, si en el paso i, hemos restado a la fija j la fila i (pivote) multiplicada por λ, $F_j - \lambda F_i$, entonces $l_{ij} = \lambda$.

Ejemplo del cálculo de la factorización LU

Ejemplo:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 5 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 4 \end{pmatrix} \underset{\substack{F_3 - 5F_1 \\ F_4 - 3F_2}}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & -12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 \end{pmatrix} = \mathbf{U}$$

La matriz de los multiplicadores es:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{5} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \mathbf{3} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Factorización LU con pivote

Al igual que la eliminación gaussiana, la factorización LU puede fallar aún cuando la matriz $\mathbf{A}$ sea invertible. Para evitar esto, la factorización LU con pivote trata de resolver

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$$

para cierta matriz de permutaciones $\mathbf{P}$ (una matriz tal que en cada fila y en cada columna tiene un único 1 y el resto de posiciones son ceros)

$\mathbf{PA}$ produce una permutación de las filas de $\mathbf{A}$, indicada por la posición de los unos en $\mathbf{P}$.

Obtener la factorización $\mathbf{LU}$ con pivote es equivalente a realizar la eliminación gaussiana con pivoteo parcial.

Factorización LU con pivote

Si la matriz $\mathbf{A}$ es invertible, entonces admite una factorización LU con pivote. En tal caso, dado el sistema

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

donde la factorización $\mathbf{LU}$ con pivote de $\mathbf{A}$ es:

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$$

Para resolver el sistema, resolveremos

$$\begin{aligned} \mathbf{Ly} &= \mathbf{Pb} \\ \mathbf{Ux} &= \mathbf{y} \end{aligned}$$

Factorización LU de Cholesky

Una matriz simétrica $\mathbf{A}$ ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^\top$) es definida positiva si $\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ para todo vector no nulo $\mathbf{x}$.

Una matriz es simétrica y definida positiva si y sólo si todos los menores principales son no nulos.

Una matriz $\mathbf{A}$ es simétrica y definida positiva si y sólo si admite una factorización LU de Cholesky, es decir, existe una matriz triangular inferior $\mathbf{L}$ tal que los elementos de su diagonal son positivos y

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^\top.$$

Nótese que esta es una descomposición LU, pues $\mathbf{L}^\top$ es triangular superior.

Métodos Iterativos

Los métodos directos tienen inconvenientes en sistemas de ecuaciones de grandes dimensiones, porque requieren muchas operaciones.

Los métodos iterativos están especialmente inidicados en este tipo de sistemas. Consisten en definir una sucesión de puntos $\mathbf{x_0}$, $\mathbf{x_1}$, ... que converjan a la sucesión del sistema.

Si x es la solución del sistema $Ax = b$ y x_n la aproximación tras de dicha solución, se denomina **vector de error** a $x - x_n$ y **vector residual** a $r = b - Ax_n$.

Método de Jacobi

El **método de Jacobi** consiste en que la expresión para la función de punto fijo $\mathbf{F}(x)$ la obtenemos despejando de cada ecuación una incógnita.
Por ejemplo:

$$\begin{array}{lcl} 2x - y & = & 9 \\ x + 6y - 2z & = & 15 \\ 4x - 3y + 8z & = & 1 \end{array}$$

Despejamos x de la primera ecuación, y de la segunda, z de la tercera:

$$\begin{array}{lcl} 2x & = & y + 9 \\ 6y & = & -x + 2z + 15 \\ 8z & = & -4x + 3y + 1 \end{array}$$

Y partiendo de un punto inicial $\mathbf{x_0} = (x_0, y_0, z_0)$ calculamos el siguiente mediante estas ecuaciones.

Método de Jacobi

Partiendo de $\mathbf{x_0} = (x_0, y_0, z_0) = (0, 0, 0)$, $\mathbf{x_1}$ se calcula:

$$\begin{aligned} 2x_1 &= y_0 + 9 = 9 \\ 6y_1 &= -x_0 + 2z_0 + 15 = 15 \\ 8z_1 &= -4x_0 + 3y_0 + 1 = 1 \end{aligned}$$

con lo cual $\mathbf{x}_1 = (x_1, y_1, z_1) = (4.5, 2.5, 0.125)$
De forma análoga vamos calculando más puntos de la sucesión:

- $\mathbf{x}_2 = (5.75, 1.7916667, -1.1875)$
- $\mathbf{x}_3 = (5.3958333, 1.14583333, -2.078125)$
- $\mathbf{x}_4 = (5.07291667, 0.90798611, -2.14322917)$

que convergen a la solución real, que en este caso, es $(5, 1, -2)$

Método de Jacobi

El **método de iteración de Jacobi** consiste en definir

$$\mathbf{M} = \mathbf{D},\ \ \mathbf{N} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})$$

donde

- $\mathbf{D}$ es la matriz diagonal con la misma diagonal que $\mathbf{A}$
- $\mathbf{L}$ es la matriz tal que $l_{ij} = a_{ij}$ si $i < j$ y $l_{ij} = 0$ en caso contrario.
- $\mathbf{U}$ es la matriz tal que $u_{ij} = a_{ij}$ si $i > j$ y $u_{ij} = 0$ en caso contrario.

con lo cual $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$, y el sistema $\mathbf{Mx} = \mathbf{Nx} + \mathbf{b}$ es equivalente a resolver $\mathbf{Dx} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{b}$
Así, la sucesión se construye partiendo de un valor inicial $\mathbf{x}_0$ y definiendo

$$\mathbf{Dx}_{k+1} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}_k + \mathbf{b},\ \ k \geq 0$$

Ejemplo de Métodos iterativos

Ejemplo 4: Dado el sistema de ecuaciones

$$\begin{array}{lcl} 2x - y & = & 9 \\ x + 6y - 2z & = & 15 \\ 4x - 3y + 8z & = & 1 \end{array}, \text{ con } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 6 & -2 \\ 4 & -3 & 8 \end{pmatrix}$$

tenemos:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 4 & -3 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Partimos de un valor inicial

$$\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$$

Ejemplo de Métodos iterativos

El método de Jacobi consiste en definir

$$\mathbf{D}\mathbf{x}_{k+1} = -(\mathbf{L}+\mathbf{U})\mathbf{x}_k + \mathbf{b}, \;\; k \geq 0$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \\ 4 & -3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \\ z_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 9 \\ 15 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} 2x_{k+1} &= y_k + 9 \\ 6y_{k+1} &= -x_k + 2z_k + 15 \\ 8z_{k+1} &= -4x_k + 3y_k + 1 \end{aligned}$$

Partiendo de $\mathbf{x}_0 = (0,0,0)$, $$\begin{aligned} 2x_1 &= y_0 + 9 = 9 \\ 6y_1 &= -x_0 + 2z_0 + 15 = 15 \\ 8z_1 &= -4x_0 + 3y_0 + 1 = 1 \end{aligned}$$

Ejemplo de Métodos iterativos

Para el método de Jacobi, tenemos:

- $\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$
- $\mathbf{x}_1 = (4.5, 2.5, 0.125)$
- $\mathbf{x}_2 = (5.75, 1.7916667, -1.1875)$
- $\mathbf{x}_3 = (5.3958333, 1.14583333, -2.078125)$
- $\mathbf{x}_4 = (5.07291667, 0.90798611, -2.14322917)$

Nótese que, en este caso, el sistema es resoluble, y la solución real es $(5, 1, -2)$, hacia la cual converge la sucesión creada por el método.

Convergencia de los métodos iterativos

Decimos que una matriz $\mathbf{A} = (a_{ij})$ es diagonalmente dominante si

$$|a_{kk}| > \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |a_{kj}|, \quad k = 1, 2, \ldots, n.$$

Teorema

Dado el sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$*:*

- *Si* $\mathbf{A}$ *es diagonalmente dominante, o*
- *si* $\mathbf{A}^\top$ *es diagonalmente dominante*

entonces existe una única solución del sistema y el método de Jacobi produce una sucesión de vectores que converge a dicha solución.