ESTADISTICA COMPUTACIONAL

Capítulo I. Matrices y solución de Ecuaciones lineales

Referencias:

1. Datta, B. (1995) Numerical Linear Algebra. Brooks Cole
2. Golub, G. and Van Loan, C. (1989) Matrix Computations, John Hopkins University Press
3. Kennedy and Gentle, (1980) Statistical Computing. Marcel Dekker.
4. Monahan. J.F., (2000) Numerical Methods of Statistics. Cambridge University Press.

Contenido

1. Matrices

2. Solución de sistemas de ecuaciones

3.

Una matriz A es un arreglo rectangular de números reales. Más específicamente, una matriz de orden m por n se representa por

$$A=(a_{ij})=\begin{bmatrix} a_{11} & .... & a_{1n} \\ ..... & ...... & ...... \\ a_{m1} & .... & a_{mn} \end{bmatrix}$$

1.1 Operaciones con matrices

Suma de matrices: Si A y B son dos matrices m x n entonces su suma es una matriz C de orden m x n definida por

$C=A+B \Rightarrow c_{ij}=a_{ij}+b_{ij}$

Multiplicación por un escalar: Si A es una matriz m x n y λ es un escalar entonces

$C=\lambda A \Rightarrow c_{ij}=\lambda a_{ij}$

Multiplicación de matrices: Sea A una matriz m x p y B una matriz p x n, entonces el producto es una matriz C de orden m x n definida por

$$C=AB \Rightarrow c_{ij}=\sum_{k=1}^{p} a_{ik}b_{kj}$$

Transpuesta de una matriz: Si A es una matriz m x n entonces su transpuesta se representa por A' o A^t y es una matriz tal que

$$C=A' \Rightarrow (c_{ij})=(a_{ji})$$

Ejemplo1. Dadas las matrices

$$A=\begin{bmatrix} 8 & 3 & 2 \\ 5 & 7 & 6 \\ 4 & 11 & 9 \end{bmatrix} \qquad B=\begin{bmatrix} 9 & 13 & 2 \\ 15 & 6 & 7 \\ 8 & 6 & 13 \end{bmatrix} \text{ y } C=\begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 9 \end{bmatrix}$$

Usar **R** para efectuar las siguientes operaciones

a) A+B b) 2A-3B c) AB d) (½)A'B' e) BC f) C'C g) C'A

Solución

```
> A=matrix(c(8,3,2,5,7,6,4,11,9),ncol=3,byrow=T)
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    8    3    2
[2,]    5    7    6
[3,]    4   11    9

> B=matrix(c(9,13,2,15,6,7,8,6,13),ncol=3,byrow=T)
> B
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    9   13    2
[2,]   15    6    7
[3,]    8    6   13
>
> C=matrix(c(4,5,9),ncol=1,byrow=T)
> C
     [,1]
[1,]    4
[2,]    5
```

```
[3,]    9
>
> A+B
     [,1] [,2] [,3]
[1,]   17   16    4
[2,]   20   13   13
[3,]   12   17   22
> 2*A-3*B
     [,1] [,2] [,3]
[1,]  -11  -33   -2
[2,]  -35   -4   -9
[3,]  -16    4  -21
> A%*%B
     [,1] [,2] [,3]
[1,]  133  134   63
[2,]  198  143  137
[3,]  273  172  202
> .5*t(A)%*%t(B)
     [,1] [,2]  [,3]
[1,] 72.5 89.0  73.0
[2,] 70.0 82.0 104.5
[3,] 57.0 64.5  84.5
> B%*%C
     [,1]
[1,]  119
[2,]  153
[3,]  179
> t(C)%*%C
     [,1]
[1,]  122
> t(C)%*%A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]   93  146  119
```

1.2. Tipos especiales de matrices:

Consideremos la matriz $A=(a_{ij})$, entonces se dice que A es

Matriz Diagonal: Si $a_{ij}=0$ para $i \neq j$

Matriz triangular superior: Si $a_{ij}=0$ para $i > j$

Matriz triangular inferior: Si $a_{ij}=0$ para $i < j$

Matriz Tridiagonal: Si $a_{ij}=0$ para $|i - j|>1$

Matriz simétrica: Si A’=A

1.3 Determinante de una matriz cuadrada.

El determinante de una matriz cuadrada A consiste de la suma de ciertos productos de los elementos de A, cada uno de los productos es multiplicado por +1 o –1 de acuerdo a ciertas reglas. El determinante de la matriz A se representa por |A| o det(A).

Ejemplo 9. El determinante de la matriz A de orden 2x2 está dado por

$$\det(A) = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

El determinante es una función que le asigna a una matriz de orden *n*, un único número real.

Ejemplo:

```
> A=rbind(c(3,5,6),c(6,11,2),c(5,1,15))
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    3    5    6
[2,]    6   11    2
[3,]    5    1   15
> det(A)
[1] -205
>
```

Si una matriz tiene determinante cero se dice que es singular.

1.4. Rango de una matriz. Indica el número de columnas (o filas) independientes que tiene una matriz. Algunas veces ocurre que una columna (o fila) de una matriz es una combinación lineal de las otras columnas o fila. Si el rango de la matriz es igual al número de columnas entonces se dice que la matriz es de rango completo.

1.5 Matriz Identidad. Es una matriz cuadrada cuyos elementos de su diagonal son todos unos y los que no estan en la diagonal son todos ceros. La matriz identidad de orden n se denota por I_n. Por ejemplo,

$$I_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Propiedad: Si A es de orden mxn entonces $AI_n=A$ y $I_mA=A$.

1.6. Inversa de una matriz. La inversa de una matriz cuadrada A se representa por A^{-1} y es tal que $AA^{-1}=A^{-1}A=I$. Existen varios métodos de calcular inversas de matrices. El comando **solve** de R calcula la inversa de una matriz.

Ejemplo. Calcular usando R la inversa de la matriz A y verificarla.

$$A=\begin{bmatrix} 8 & 3 & 2 \\ 5 & 7 & 6 \\ 4 & 11 & 9 \end{bmatrix}$$

```
> A=cbind(c(1.0,.5,2),c(4,5,6),c(9,7,11))
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]  1.0    4    9
[2,]  0.5    5    7
[3,]  2.0    6   11

> invA=solve(A)
> invA
         [,1]    [,2]     [,3]
[1,] -0.81250 -0.6250  1.06250
[2,] -0.53125  0.4375  0.15625
[3,]  0.43750 -0.1250 -0.18750

> A%*%invA
     [,1] [,2]         [,3]
[1,]    1    0 1.942890e-16
[2,]    0    1 2.775558e-17
[3,]    0    0 1.000000e+00

> invA%*%A
              [,1]          [,2]         [,3]
[1,]  1.000000e+00  1.332268e-15 2.442491e-15
[2,]  5.551115e-17  1.000000e+00 3.053113e-16
[3,] -5.551115e-17 -1.665335e-16 1.000000e+00
>
```

Propiedad: Si A y B son dos matrices cuadradas entonces

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$$

1.7. Matriz Ortogonal. La matriz A es ortogonal si A'A=I. Si la matriz es cuadrada entonces se cumple que AA'=I.

La inversa de una matriz cuadrada ortogonal es igual a su transpuesta. El producto de dos matrices ortogonales es también ortogonal.

Propiedad. El determinante de una matriz cuadrada ortogonal es +1 o –1.
Ejemplo: de Matriz ortogonal

```
> Q
           [,1]       [,2]        [,3]
[1,] -0.2267787 -0.7093644 -0.02802754
[2,] -0.4535574 -0.5269273 -0.05074571
[3,] -0.2267787  0.1824371 -0.95361331
[4,] -0.8315218  0.4311223  0.29539971
> t(Q)%*%Q
             [,1]         [,2]         [,3]
[1,] 1.000000e+00 9.210297e-17 1.080136e-17
[2,] 9.210297e-17 1.000000e+00 1.528725e-17
[3,] 1.080136e-17 1.528725e-17 1.000000e+00
```

1.8. Matriz definida positiva: Si $x'Ax > 0$ para todo $x \neq 0$.
Una matriz A es definida positiva si y solo si todos sus menores principales son positivos. El i-ésimo menor principal es el determinante de una submatriz de A formadas sin tomar en cuenta las primeras i filas y i primeras columnas de la matriz.
Si una matriz es definida positiva entonces todas las entradas de su diagonal deben ser positivas.
Si una matriz es definida positiva el mayor elemento de toda la matriz debe estar en la diagonal.
Si $A=X'X$ y X es de rango completo entonces A es definida positiva.

2. Solución de sistemas de ecuaciones lineales

Un sistema de ecuaciones lineales puede ser escrito de la forma

$$A\mathbf{x}=\mathbf{b}$$

Donde **x** es el vector de incógnitas a determinar, A es la matriz de coeficientes de las incongnitas y **b** es el vector de términos independientes.

Asumiendo que la matriz es cuadrada de orden n, el sistema de ecuaciones lineales se resolvería por

$$\mathbf{x}=A^{-1}\mathbf{b}$$

donde A^{-1} representa la inversa de la matriz A. Pero calcular la inversa es computacionalmente costosa.
Por ahora consideraremos que la matriz A es nonsingular y por lo tanto que tiene inversa.

2.1. Solución de sistemas triangulares

Consideremos primero que la matriz cuadrada A es diagonal, con n entradas a_i en la diagonal. Luego, la solución del sistema de ecuaciones lineales se obtendrá mediante el siguiente algoritmo

```
  do i=1,n
  x(i)=b(i)/a(i)
 end do
```

Si se desea ahorrar espacio se puede superponer la solución en el vector b. Es decir, la segunda línea puede ser cambiada a

```
       b(i)=b(i)/a(i)
```

Consideremos ahora que A es matriz triangular superior. En este caso la solución se encuentra de abajo hacia arriba mediante el siguiente algoritmo:

```
do i=1,n
i=n+1-i
if (n>i) then
   do j=i+1,n
   b(i)=b(i)-a(i,j)*b(j)
   end do
end if
b(i)=b(i)/a(i,i)
end do
```

La funcion backsolve de R resuelve un sistema triangular tanto inferior como superior.

Ejemplo.

```
> A=matrix(c(5,7,12,0,1,9,0,0,3),ncol=3,byrow=T)
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    5    7   12
[2,]    0    1    9
[3,]    0    0    3
> b=c(8,4,2)
> y=backsolve(A,b)
> y
[1]  2.8000000 -2.0000000  0.6666667
> A%*%y
     [,1]
[1,]    8
[2,]    4
[3,]    2
>
```

En MATLAB,
El siguiente es un programa donde se crea una función BACKSUB en MATLAB que ejecuta sustitución hacia atras.

```
function [x] = backsub(A,b);
%BACKSUB Back substitution
%x = backsub(A,b) calcula la solucion x de un sistema triangular
%superior Ax = b usando sustitucion hacia atras.
%si A no es triangular superior los elementos debajo de la diagonal
% son ignorados.
%Input  : Matriz A y vector b
%output : salida x


   [m,n] = size(A);
        if m~=n
         error('matriz A no es cuadrada')
        end;
        x = zeros(n,1);
        for i = n:-1:1
          sum = 0;
     if (i ~= n)
            sum = A(i,i+1:n)*x(i+1:n);
     end;
          if (A(i,i) ==0)
             error('matriz A es singular')
          end;
          x(i) = (b(i) - sum ) / A(i,i);
        end;
```

```
» addpath c:\matlab\acuna
» A=[4 6 8; 9 12 21; 17 23 9]

A =

     4     6     8
     9    12    21
    17    23     9

» b=[5;8;12]

b =

     5
     8
    12


» x=backsub(A,b)

x =
```

```
   1.0833
  -1.6667
   1.3333

»
```

En R,

```
> A=matrix(c(4,6,8,9,12,21,17,23,9),ncol=3,byrow=T)
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    4    6    8
[2,]    9   12   21
[3,]   17   23    9
> b=c(5,8,12)
> y=backsolve(A,b)
> y
[1]  1.083333 -1.666667  1.333333
```

Notar que la parte inferior de la matriz A es ignorada en los calculos.

Similarmente se puede resolver un sistema triangular inferior.

2.2 La Descomposición LU y Eliminación Gaussiana

La mayoría de las veces la matriz A no es triangular, pero se la podria triangulizar y luego aplicar el algoritmo anterior. La única manera de obtener esto es premultiplicando ambos lados de la ecuación por una matriz nosingular B, de tal manera que AB sea triangular superior. Es decir, Ax=b es equivalente a BAx=Bb.
La manera básica de triangulizar A es creando una secuencia de matrices $A^{(k)}=M^{(k)}A^{(k-1)}$ donde $M^{(k)}$ es una matriz triangular inferior. La última matriz $A^{(n-1)}$ será triangular superior (este método es llamado Eliminación gaussiana sin pivote)
Sin embargo si un elemento de la diagonal (llamado pivot) de $A^{(k)}$ es cero entonces hay que permutar filas de dicha matriz para resolver el problema Luego, la secuencia de matrices es ahora $A^{(k)}=M^{(k)}P(k,j_k)A^{(k-1)}$
Donde $P(k,j_k)$ representan matrices elementales de permutación donde se intercambian las filas k y j_k. Una matriz de permutación es aquella que tiene un uno en cada fila y columna de la matriz y todas las demás entradas son ceros. No hay que olvidarse de hacer las multiplicaciones correspondientes en el lado derecho del sistema de ecuaciones. Es decir,

$$M^{(n-1)}P(n-1,j_{n-1})\ldots M^{(2)}P(2,j_2)M^{(1)}P(1,j_1)\mathbf{b}$$

En eliminación gaussiana (con pivoteo parcial), la matriz A puede ser factorizada como

$$PA=LU$$

donde $U=A^{(n-1)}$ es una matriz triangular superior y $P= P(n-1,j_{n-1})\ldots..P(2,j_2)P(1,j_1)$ es la matriz permutación que se obtiene multiplicando las matrices de permutaciones elementales. La matriz L es una matriz triangular inferior cuyos elementos en la diagonal son todos 1.

Ejemplo 2. Dada la matriz

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

Usar MATLAB para hallar las matrices P, L y U de la factorización PA=LU

Solución:

```
» a

a =

     1          2         -1          0
    1/2         1          0          1
     0          2        -1/2        3/2
     1         -1         3/2         0

» [l,u,p]=lu(a)

l =

     1          0          0          0
     1          1          0          0
     0        -2/3         1          0
    1/2         0         3/7         1


u =

     1          2         -1          0
     0         -3         5/2         0
     0          0         7/6        3/2
     0          0          0         5/14
```

```
p =

     1     0     0     0
     0     0     0     1
     0     0     1     0
     0     1     0     0


» p*a

ans =

     1     2    -1     0
     1    -1    3/2    0
     0     2   -1/2   3/2
    1/2    1     0     1

» l*u

ans =

     1     2    -1     0
     1    -1    3/2    0
     0     2   -1/2   3/2
    1/2    1     0     1
```

En resumen para resolver el sistema de ecuaciones Ax=b, hay que seguir los siguientes pasos

(a) Permutar el lado derecho y obtener Pb
(b) Resolver el sistema triangular inferior Ly=Pb
(c) Resolver el sistema triangular superior Ux=y para x.

Se puede mostrar que resolver el sistema de ecuaciones Ax=b, calculando la inversa de A toma por lo menos el doble del tiempo que hacerlo mediante la factorización LU.

Sinembargo es más facil convertir el sistema en uno que sea triangular superior, procesando A y b simultáneamente y luego aplicar sustitución hacia atras. Es decir, sin tener que hacer factorización.

Hay otra posibilidad de crear una matriz aumentada Ab=[A | b] y mediante operaciones por fila convertirlo en [I | b*], donde b* sería la solución del sistema de ecuaciones. La función **rref** de MATLAB se usa para este procedimiento. Cada paso de la función **rref** puede ser visto usando la función **rrefmovie** como se muestra en el siguiente ejemplo:

Ejemplo: resolver el sistema de ecuaciones

x+2y – z =1/2
x/2+y+ w =1
2y-z/2+3w/2 =3/2
x – y +3z/2 =2

En Matlab

```
» Au

Au =

    1        2       -1        0      1/2
  1/2        1        0        1        1
    0        2     -1/2      3/2      3/2
    1       -1      3/2        0        2

» rrefmovie(Au)

Press any key to continue. . .
»
  Original matrix

A =

    1        2       -1        0      1/2
  1/2        1        0        1        1
    0        2     -1/2      3/2      3/2
    1       -1      3/2        0        2

Press any key to continue. . .

  pivot = A(1,1)

A =

    1        2       -1        0      1/2
  1/2        1        0        1        1
    0        2     -1/2      3/2      3/2
    1       -1      3/2        0        2

Press any key to continue. . .
  eliminate in column 1

A =

    1        2       -1        0      1/2
  1/2        1        0        1        1
```

```
     0          2        -1/2        3/2        3/2
     1         -1         3/2         0          2
```

Press any key to continue. . .

A =

```
     1          2         -1          0         1/2
     0          0         1/2         1         3/4
     0          2        -1/2        3/2        3/2
     0         -3         5/2         0         3/2
```

Press any key to continue. . .
  swap rows 2 and 4

A =

```
     1          2         -1          0         1/2
     0         -3         5/2         0         3/2
     0          2        -1/2        3/2        3/2
     0          0         1/2         1         3/4
```

Press any key to continue. . .
  pivot = A(2,2)

A =

```
     1          2         -1          0         1/2
     0          1        -5/6         0        -1/2
     0          2        -1/2        3/2        3/2
     0          0         1/2         1         3/4
```

Press any key to continue. . .
  eliminate in column 2

A =

```
     1          2         -1          0         1/2
     0          1        -5/6         0        -1/2
     0          2        -1/2        3/2        3/2
     0          0         1/2         1         3/4
```

Press any key to continue. . .

A =

1	0	2/3	0	3/2
0	1	-5/6	0	-1/2
0	0	7/6	3/2	5/2
0	0	1/2	1	3/4

Press any key to continue. . .
pivot = A(3,3)

A =

1	0	2/3	0	3/2
0	1	-5/6	0	-1/2
0	0	1	9/7	15/7
0	0	1/2	1	3/4

Press any key to continue. . .
eliminate in column 3

A =

1	0	2/3	0	3/2
0	1	-5/6	0	-1/2
0	0	1	9/7	15/7
0	0	1/2	1	3/4

Press any key to continue. . .

A =

1	0	0	-6/7	1/14
0	1	0	15/14	9/7
0	0	1	9/7	15/7
0	0	0	5/14	-9/28

Press any key to continue. . .
pivot = A(4,4)

A =

1	0	0	-6/7	1/14
0	1	0	15/14	9/7
0	0	1	9/7	15/7
0	0	0	1	-9/10

Press any key to continue. . .
eliminate in column 4

A =

1	0	0	-6/7	1/14
0	1	0	15/14	9/7
0	0	1	9/7	15/7
0	0	0	1	-9/10

Press any key to continue. . .

A =

1	0	0	0	-7/10
0	1	0	0	9/4
0	0	1	0	33/10
0	0	0	1	-9/10

La solución se lee en la última columna.

En R, se usa la función solve.

```
> A=rbind(c(1,2,-1,0),c(.5,1,0,1),c(0,2,-.5,1.5),c(1,-1,1.5,0))
> A
     [,1] [,2] [,3] [,4]
[1,]  1.0    2 -1.0  0.0
[2,]  0.5    1  0.0  1.0
[3,]  0.0    2 -0.5  1.5
[4,]  1.0   -1  1.5  0.0
> b=c(0.5,1,1.5,2)
> b
[1] 0.5 1.0 1.5 2.0
> solve(A,b)
[1] -0.70  2.25  3.30 -0.90
>
```