Resolución de sistemas lineales: métodos directos

Sean $A \in \mathcal{GL}_n$ (matriz $n \times n$ con coeficientes en $\mathbb{K}$ que es invertible) y $b \in \mathbb{K}^n$. Buscamos $x \in \mathbb{K}^n$ tal que

$$Ax = b.$$

1. Sistemas diagonales (A diagonal)

$$Ax = b \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix} x = b \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} a_{11}x_1 = b_1 \\ a_{22}x_2 = b_2 \\ \quad \vdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Como A es invertible entonces $a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn} \neq 0$ y

$$\boxed{\text{para } i = 1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad x_i = \frac{b_i}{a_{ii}}.}$$

2. Sistemas triangulares superiores (A triangular superior)

$$Ax = b \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & a_{n,n} \end{pmatrix} x = b$$

$$\Longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{ccccccccccl} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1,n-1}x_{n-1} & + & a_{1n}x_n & = b_1 \\ & & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2,n-1}x_{n-1} & + & a_{2n}x_n & = b_2 \\ & & & & & & & & \vdots & \\ & & & & & & a_{n-1,n-1}x_{n-1} & + & a_{n-1,n}x_n & = b_{n-1} \\ & & & & & & & & a_{nn}x_n & = b_n \end{array} \right.$$

Resolviendo de abajo hacia arriba, y como en una matriz triangular invertible los elementos de su diagonal son distintos de cero,

$$\boxed{\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}}, \\ \text{para } i = n-1, n-2, \ldots, 2, 1 \quad \longrightarrow \quad x_i = \dfrac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \displaystyle\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j \right). \end{cases}}$$

3. Sistemas triangulares inferiores (A triangular inferior)

$$Ax = b \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} a_{11} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} & \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} x = b$$

$$\Longrightarrow \quad \begin{cases} a_{11}x_1 & & & & & & & & = b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & & & & & & = b_2 \\ & & & & & & & & \vdots \\ a_{n-1,1}x_1 & + & a_{n-1,2}x_2 & + & \cdots & + & a_{n-1,n-1}x_{n-1} & & = b_{n-1} \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{n,n-1}x_{n-1} & + \; a_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

Resolviendo de arriba hacia abajo, y como en una matriz triangular invertible los elementos de su diagonal son distintos de cero,

$$\boxed{\begin{cases} x_1 = \dfrac{b_1}{a_{11}}, \\ \text{para } i = 2, 3, \ldots, n-1, n \quad \longrightarrow \quad x_i = \dfrac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j \right). \end{cases}}$$

4. Eliminación Gaussiana

Supongamos que $A \in \mathcal{M}_{m\times n}$. Se trata de construir una matriz triangular superior $U \in \mathcal{M}_{m\times n}$ tal que

$$MA = U,$$

para cierta matriz $M \in \mathscr{GL}_m$.

Nos centraremos en el caso en que $A \in \mathscr{GL}_n$ (es decir, $m = n$ y A invertible), pero la idea es aplicar este mismo método en matrices de la forma $[A|b] \in \mathscr{M}_{n\times n+1}$, donde $A \in \mathscr{GL}_n$ y $b \in \mathbb{K}^n$ son, respectivamente, la matriz de coeficientes y el vector de términos independientes de un sistema $Ax = b$, de forma que se obtenga una matriz triangular $[U|c]$ que representa un sistema equivalente, esto es: $x \in \mathbb{K}^n$ es solución de $Ux = c$ si y sólo si es solución de $Ax = b$.

La idea es construir una sucesión de matrices $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(n)}$ donde

$$A^{(1)} = A$$

y

$$A^{(k)} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} a_{11}^{(2)} & \cdots & a_{1,k-1}^{(2)} & a_{1k}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{k-1,k-1}^{(k)} & a_{k-1,k}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)} \\ \hline & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & \mathbf{0} & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{array}\right), \qquad k = 2, \dots, n.$$

(En cada paso $k = 2, \dots, n$, las $k-1$ primeras filas no cambian). Evidentemente, la matriz $U = A^{(n)}$ es triangular superior. Dada $A^{(k)}$ con $k = 1, \dots, n-1$, la idea es fijar la submatriz

$$A_k^{(k)} = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ \hline a_{k+1k}^{(k)} & a_{k+1k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{nk}^{(k)} & a_{nk+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{array}\right)$$

y construir por eliminación gaussiana (ver más adelante)

$$A_k^{(k+1)} = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{kk}^{(k+1)} & a_{kk+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{kn}^{(k+1)} \\ \hline 0 & a_{k+1k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1n}^{(k+1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{nk+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)} \end{array}\right).$$

Entonces se define $A^{(k+1)}$ como la matriz $A^{(k)}$ sustituyendo el bloque $A_k^{(k)}$ por $A_k^{(k+1)}$:

$$A^{(k+1)} = \left(\begin{array}{ccc|c|ccc} a_{11}^{(2)} & \cdots & a_{1,k-1}^{(2)} & a_{1,k}^{(2)} & a_{1,k+1}^{(2)} & \cdots & a_{1,n}^{(2)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{k-1,k-1}^{(k)} & a_{k-1,k}^{(k)} & a_{k-1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)} \\ \hline & & & a_{k,k}^{(k+1)} & a_{k,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k+1)} \\ \cline{4-7} & & & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ & \mathbf{0} & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & 0 & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{n,n}^{(k+1)} \end{array}\right).$$

Eliminación gaussiana en la primera columna: A continuación vemos cómo realizar la eliminación gaussiana para hacer ceros en la primera columna de una matriz $A_k^{(k)}$. Para ello podemos suponer suponemos sin pérdida de generalidad que $A_k^{(k)} = A^{(1)}$ y queremos construir $A^{(2)}$ mediante operaciones por filas de forma que $a_{21}^{(2)} = a_{22}^{(2)} = \ldots = a_{n1}^{(2)}$.

1. **Elección del pivote (máximo).** Elegir un elemento no nulo cualquiera en la primera columna (sabemos que existe al menos uno porque estamos asumiendo $A^{(1)}$ invertible. Es decir, si todos fueran cero, tendríamos una columna de ceros y $\det(A^{(1)}) = 0$). Por razones de precisión, conviene tomar el elemento que tenga mayor módulo, aunque desde un punto de vista teórico esto no es necesario. Denotamos por i_1 el número de la fila elegida, es decir, i_1 tal que
$$\left|a_{i_1 1}\right| \geq |a_{i1}| \quad \text{para todo } i \neq i_1.$$
2. **Permutación.** Colocar el pivote en la primera fila. Para ello hay que permutar la fila i_1 con la 1. Es decir, construimos una matriz auxiliar $\mathscr{A}^{(1)} = (\alpha_{ij}^{(1)})$ donde
$$\alpha_{ij}^{(1)} = \begin{cases} a_{i_1 j} & i = 1, \\ a_{ij} & i \neq 1, i_1, \\ a_{1j} & i = i_1. \end{cases}$$
3. **Eliminación.** Hacer ceros por debajo bajo el pivote haciendo operaciones por filas:
$$A^{(2)} = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ \hline 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n1}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{array}\right)$$

con

$$a_{ij}^{(2)} = \begin{cases} \alpha_{ij}^{(1)} & i = 1, \\ \alpha_{ij}^{(1)} - \dfrac{\alpha_{i1}^{(1)}}{\alpha_{11}^{(1)}} \alpha_{1j}^{(1)} & i \geq 2. \end{cases}$$

Observación. El método de eliminación gaussiana se puede adaptar para, una vez obtenida la forma triangular superior, hacer ceros por encima de la diagonal superior y obtener una forma diagonal equivalente. Esto es útil para calcular la inversa de una matriz $A \in \mathscr{GL}_n$: la idea es aplicar el método de eliminación gaussiana a la matriz $[A|I_n] \in \mathscr{M}_{n\times 2n}$, de forma que se obtiene una matriz triangular superior equivalente $[U|*]$, y por eliminación gaussiana por encima de la diagonal, obtener $[I_n|A^{-1}]$, donde el bloque derecho de la matriz contiene los coeficientes de la inversa de A.

5. Eliminación Gaussiana: Cálculo de M

La matriz auxiliar $\mathscr{A}^{(1)} = (\alpha_{ij}^{(1)})$ se obtiene permutando filas las filas i_1 y 1. Esta permutación puede obtenerse multiplicando (por la izquierda) por una matriz de permutación $P_1 = P^{1,i_1}$:

$$\mathscr{A}^{(1)} = (\alpha_{ij}^{(1)}) = P_1 A^{(1)}.$$

Una matriz de permutación $P^{k,l}$ entre filas k y l viene dada por

$$(P_{ij}^{k,l}) = \begin{cases} 1 & \text{si } (i,j) \in \{(k,l),(l,k)\}, \\ 0 & \text{si } (i,j) \in \{(k,k),(l,l)\}, \\ \delta_{ij} & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

El paso de eliminación también puede representarse como el producto (por la izquierda) de una matriz

$$A^{(2)} = E_1 \mathscr{A}^{(1)} = E_1 P_1 A^{(1)},$$

donde

$$E_1 = \left(\begin{array}{c|c} 1 & \\ \hline -\frac{\alpha_{21}^{(1)}}{\alpha_{11}^{(1)}} & \\ \vdots & I_{m-1} \\ -\frac{\alpha_{m1}^{(1)}}{\alpha_{11}^{(1)}} & \end{array}\right) = I + \ell_1 e_1^\top = I - \underbrace{\frac{1}{\alpha_{11}^{(1)}} \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha_{21}^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_{m1}^{(1)} \end{pmatrix}}_{\ell_1 \in \mathscr{M}_{m\times 1}} \underbrace{\big(1, 0, \cdots, 0\big)}_{e_1^\top \in \mathscr{M}_{1\times m}}.$$

Dada

$$A^{(k)} = E_{k-1} P_{k-1} \cdots E_1 P_1 A^{(1)}$$

con $k = 2, \dots, n-1$, como el método de eliminación gaussiana se realiza sobre la submatriz $A_k^{(k)}$, podemos construir

$$A_k^{(k+1)} = \widetilde{E}_k \widetilde{P}_k A_k^{(k)},$$

donde las matrices $\widetilde{P}_k$ y $\widetilde{E}_k$ son las correspondientes matrices de permutación y eliminación del bloque $A_k^{(k)}$. Por tanto, escribiendo

$$P_k = \left(\begin{array}{c|c} I_{n-k} & 0 \\ \hline 0 & \widetilde{P}_k \end{array}\right) \qquad \text{y} \qquad E_k = \left(\begin{array}{c|c} I_{n-k} & 0 \\ \hline 0 & \widetilde{E}_k \end{array}\right)$$

se obtiene las respectivas matrices de permutación y eliminación tales que

$$A^{(k+1)} = E_k P_k A^{(k)}.$$

Más concretamente, las matrices E_k tienen la forma:

$$E_k = \left(\begin{array}{c|c|c} I_{k-1} & & \\ \hline & 1 & \\ \hline & -\frac{\alpha_{k+1,k}^{(k)}}{\alpha_{kk}^{(k)}} & \\ & \vdots & I_{m-k} \\ & -\frac{\alpha_{mk}^{(k)}}{\alpha_{kk}^{(k)}} & \end{array}\right) = I + \ell_k e_k^\top = I - \underbrace{\frac{1}{\alpha_{kk}^{(k)}} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_{k+1,k}^{(k)} \\ \vdots \\ \alpha_{m,k}^{(k)} \end{pmatrix}}_{\ell_k} (0, \cdots, 0, \overset{k}{1}, 0, \cdots, 0).$$

De esta forma podemos calcular la matriz invertible M tal que $MA = U$:

$$U = A^{(n)} = \underbrace{E_{n-1} P_{n-1} \cdots E_1 P_1}_{M} A^{(1)} = MA.$$

6. Factorización $PA = LU$

Si podemos factorizar la matriz A como LU, donde L es una matriz triangular inferior y U una matriz triangular superior, entonces podemos resolver el sistema $Ax = b$ de forma sencilla resolviendo dos sistema triangulares: primero resolviendo y en el sistema triangular inferior $Ly = b$, y posteriormente resolviendo x el sistema triangular superior $Ux = y$.

No obstante, la descomposición $A = LU$ no es siempre posible. Sin embargo, siempre podremos encontrar una matriz de permutación P de forma que $PA = LU$.

Por el método de eliminación gaussiana del apartado anterior sabemos que

$$MA = U$$

con

$$M = E_{n-1}P_{n-1}\cdots E_1P_1.$$

La idea es reescribir esta M como el producto de una matriz triangular inferior E (con 1's en la diagonal) y una matriz de permutación P, de forma que $EPA = U$ y tomando $L = E^{-1}$ se obtiene $PA = LU$.

Propiedades de las matrices E_k y P_k:

1. Si $P^{i,j}$ es una matriz de permutación de dos filas cualesquiera i y j, entonces $(P^{i,j})^{-1} = P^{i,j}$.

2. Si $E_k = I + \ell_k e_k^\top$, entonces $E_k^{-1} = I - \ell_k e_k^\top$.

3. Si $P^{i,j}$ con $j \geq i > k$ es la matriz de permutación de las filas i y j, entonces

   $$P^{i,j}E_k = E'_k P^{i,j},$$

   donde

   $$E'_k = I + \ell'_k e_k^\top = I + P^{i,j}\ell_k e_k^\top,$$

   siendo $\ell'_k = P^{i,j}\ell_k$ el vector ℓ_k con los elementos i y j permutados:

   $$\ell'_{m,k} = \begin{cases} \ell_{m,k} & m \neq i, j, \\ \ell_{j,k} & m = i, \\ \ell_{i,k} & m = j. \end{cases}$$

4. $E_1E_2\cdots E_m = I + \sum_{i=1}^{m} \ell_m e_m^\top$ es triangular inferior con 1's en la diagonal.

Construcción de L y U: Por eliminación gaussiana hemos obtenido U triangular superior de forma que $MA = U$ con

$$M = E_{n-1}P_{n-1}\cdots E_1P_1.$$

Para $k = 1, \ldots, n-2$, dado que $P_k = P^{k,i_k}$ con $i_k \geq k$ entonces $P_{k+1}E_k = E'_k P_{k+1}$, con $E'_k = I + P_{k+1}\ell_k e_k^\top$. Por tanto,

$$\begin{aligned} M = & \; E_{n-1}(P_{n-1}E_{n-2})\cdots(P_2E_1)P_1 \\ = & \; E_{n-1}(E'_{n-2}P_{n-1})\cdots(E'_1P_2)P_1 \\ = & \; E_{n-1}E'_{n-2}(P_{n-1}E'_{n-3})\cdots(P_3E'_1)P_2P_1 \\ = & \; E_{n-1}E'_{n-2}(E''_{n-3}P_{n-1})\cdots(E''_1P_3)P_2P_1, \end{aligned}$$

donde en el último paso hemos aplicado la fórmula general

$$P_{k+1}E^{(r)}_{i-r} = E^{(r+1)}_{i-r}P_{k+1}.$$

Repitiendo este argumento finalmente llegamos a

$$M = \underbrace{E_{n-1}E'_{n-2}E''_{n-3}\cdots E_2^{(n-3)}E_1^{(n-2)}}_{=E}\underbrace{P_{n-1}P_{n-2}P_{n-3}\cdots P_2P_1}_{=P} = EP,$$

donde E es triangular inferior con 1's en la diagonal y P es una matriz de permutaciones. Tomando $L = E^{-1}$ tenemos una nueva matriz triangular inferior con 1's en la diagonal tal que

$$LU = LMA = LEPA = PA.$$

7. Factorización $A = LU$

Como hemos visto, la matriz P en la descomposición $PA = LU$ es una matriz de permutaciones. Además, sabemos que si todos los menores principales de A son no nulos, es decir,

$$\delta_k = \det\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{pmatrix} \neq 0 \qquad \forall k \in \{1, \cdots, n\},$$

entonces $P = I$, de forma que

$$A = LU$$

con U triangular superior y L triangular inferior con 1's en la diagonal. Además, la descomposición es única.

Es decir, a la hora de elegir pivote en cada paso del método de eliminación gaussiana, el correspondiente elemento $a_{k,k}^{(k)}$ será distinto de cero, por lo que no hace falta realizar el paso de intercambio de filas, lo que finalmente implicará que $P = I$.

Bajo esta hipótesis, podemos programar la descomposición $A = LU$ de forma directa.

Dado que $\ell_{ik} = 0$ si $k > i$ y $u_{kj} = 0$ si $k > j$, entonces

$$A = LU \qquad \Longrightarrow \qquad a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \ell_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{\text{mín}\{i,j\}} \ell_{ik} u_{kj}.$$

Por tanto, despejando convenientemente fila a fila se obtiene:

$$\boxed{\text{para } i = 1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} \ell_{ii} = 1, \\[2ex] u_{ii} = a_{ii} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik} u_{ki}, \\[2ex] \text{para } j = i+1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} u_{ij} = a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik} u_{kj}, \\[2ex] \ell_{ji} = \dfrac{1}{u_{ii}} \left(a_{ji} - \displaystyle\sum_{k=1}^{i-1} \ell_{jk} u_{ki} \right). \end{cases} \end{cases}}$$

8. Factorización $PA = LU$ (planteamiento alternativo)

Volviendo al caso de la factorización con $P \neq I$ (es decir, sin la condición de que los menores principales de A sean distintos de cero), como L es triangular inferior con 1's en la diagonal y U es triangular superior, ambas matrices pueden almacenarse como una única matriz almacenando los elementos de L por debajo de la diagonal de 1's en los ceros de la matriz U:

$$U + (L - I) = \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,n-1} & u_{1,n} \\ \ell_{2,1} & u_{1,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,n-1} & u_{2,n} \\ \ell_{3,1} & \ell_{3,2} & u_{3,3} & \cdots & u_{3,n-1} & u_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \ell_{n-1,1} & \ell_{n-1,2} & \ell_{n-1,3} & \cdots & u_{n-1,n-1} & u_{n,n} \\ \ell_{n,1} & \ell_{n,2} & \ell_{n,3} & \cdots & \ell_{n,n-1} & u_{n,n} \end{pmatrix}$$

Siguiendo una idea similar, pueden construirse las matrices L y U de forma simultánea de la siguiente manera: en el método de eliminación gaussiana, en lugar de construir una sucesión de matrices $A^{(1)} = A, A^{(2)}, A^{(3)}, \dots, A^{(n)} = U$, se construye una sucesión

$$\widetilde{A}^{(1)}, \widetilde{A}^{(2)}, \widetilde{A}^{(3)}, \dots, \widetilde{A}^{(n)}$$

donde cada $\widetilde{A}^{(k+1)}$ se obtiene de $\widetilde{A}^{(k)}$ haciendo ceros por debajo de la diagonal en la columna $k+1$ y posteriormente añadiendo los coeficientes correspondientes E_k que se han usado para hacer ceros:

$$\widetilde{A}^{(1)} = A,$$

$$\widetilde{A}^{(k)} = \left(\begin{array}{ccccc|ccc}
a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & \cdots & a_{1,k-2}^{(2)} & a_{1,k-1}^{(2)} & a_{1k}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
(\ell_1)_2^{(2)} & a_{22}^{(3)} & \cdots & a_{2,k-2}^{(3)} & a_{2,k-1}^{(3)} & a_{2k}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(3)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots & \\
(\ell_1)_{k-2}^{(k-2)} & (\ell_2)_{k-2}^{(k-2)} & \cdots & a_{k-2,k-2}^{(k-1)} & a_{k-2,k-1}^{(k-1)} & a_{k-2,k}^{(k-1)} & \cdots & a_{k-2,n}^{(k-1)} \\
(\ell_1)_{k-1}^{(k-1)} & (\ell_2)_{k-1}^{(k-1)} & \cdots & (\ell_{k-2})_{k-1}^{(k-1)} & a_{k-1,k-1}^{(k)} & a_{k-1,k}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)} \\
\hline
(\ell_1)_{k}^{(k-1)} & (\ell_2)_{k}^{(k-1)} & \cdots & (\ell_{k-2})_{k}^{(k-1)} & (\ell_{k-1})_{k}^{(k-1)} & a_{k,k}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
(\ell_1)_{n}^{(k-1)} & (\ell_2)_{n}^{(k-1)} & \cdots & (\ell_{k-2})_{n}^{(k-1)} & (\ell_{k-1})_{n}^{(k-1)} & a_{mk}^{(k)} & \cdots & a_{mn}^{(k)}
\end{array}\right).$$

Se puede construir $\widetilde{A}^{(k+1)}$ a partir de $\widetilde{A}^{(k)}$ por el método de eliminación gaussiana: realizando la elección de pivote de la misma manera sobre la columna correspondiente (k), haciendo intercambio de filas a toda la matriz (incluidos los coeficientes "ℓ") y haciendo la eliminación de ceros sin afectar a los coeficientes "ℓ" a la izquierda de la columna donde se está haciendo la eliminación. Es decir, empezando por:

$$\widetilde{A}^{(k)} = \left(\begin{array}{ccc|cccc}
 & * & & & & * & \\
\hline
(\ell_1)_{k}^{(k-1)} & \cdots & (\ell_{k-1})_{k}^{(k-1)} & a_{k,k}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\
(\ell_1)_{k+1}^{(k-1)} & \cdots & (\ell_{k-1})_{k+1}^{(k-1)} & a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
(\ell_1)_{n}^{(k-1)} & \cdots & (\ell_{k-1})_{n}^{(k-1)} & a_{m,k}^{(k)} & a_{m,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{m,n}^{(k)}
\end{array}\right),$$

se elige el pivote en la columna k, y se hace la permutación de filas correspondiente

(filas completas incluyendo los "ℓ")

$$\widetilde{\mathscr{A}}^{(k)} = P_k \widetilde{A}^{(k)} = \left(\begin{array}{ccc|cccc} & * & & & * & & \\ \hline (\ell_1)_k^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_k^{(k)} & \alpha_{k,k}^{(k)} & \alpha_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & \alpha_{k,n}^{(k)} \\ (\ell_1)_{k+1}^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_{k+1}^{(k)} & \alpha_{k+1,k}^{(k)} & \alpha_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & \alpha_{k+1,n}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\ell_1)_n^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_n^{(k)} & \alpha_{m,k}^{(k)} & \alpha_{m,k+1}^{(k)} & \cdots & \alpha_{m,n}^{(k)} \end{array}\right),$$

donde hemos denotado $(\ell_{\cdots}^{(k-1)})' = \ell_{\cdots}^{(k)}$. A continuación se eliminan los ceros debajo del elemento $\alpha_{k,k}^{(k)}$ sin alterar los "ℓ" a la izquierda:

$$(I + \ell_k e_k^{(k)})\widetilde{\mathscr{A}}^{(k)} = \left(\begin{array}{ccc|cccc} & * & & & * & & \\ \hline (\ell_1)_k^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_k^{(k)} & \alpha_{k,k}^{(k)} & \alpha_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & \alpha_{k,n}^{(k)} \\ (\ell_1)_{k+1}^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_{k+1}^{(k)} & 0 & a_{k,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\ell_1)_n^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_n^{(k)} & 0 & a_{m,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{m,n}^{(k+1)} \end{array}\right),$$

donde han aparecido los $a_{\cdots}^{(k+1)}$. Y finalmente, tras definir $a_{k,\cdot}^{(k+1)} = \alpha_{k,\cdot}^{(k)}$ se añaden las componentes del vector $(\ell_k)^{(k)} = \ell_k$ usadas para la eliminación en los ceros debajo de $a_{k,k}^{(k+1)} = \alpha_{k,k}^{(k)}$:

$$\widetilde{A}^{(k+1)} = \left(\begin{array}{ccc|cccc} & * & & & * & & \\ \hline (\ell_1)_k^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_k^{(k)} & a_{k,k}^{(k+1)} & a_{k,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k,n}^{(k+1)} \\ (\ell_1)_{k+1}^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_{k+1}^{(k)} & (\ell_k)_{k+1}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\ell_1)_n^{(k)} & \cdots & (\ell_{k-1})_n^{(k)} & (\ell_{k-2})_n^{(k)} & a_{m,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{m,n}^{(k+1)} \end{array}\right).$$

Este proceso culmina de igual manera en la matriz $\widetilde{A}^{(n)} = U + (L - I)$, a partir de la cual es sencillo obtener U y L.

9. Factorización de Cholesky

Si $A \in \mathscr{M}_n(\mathbb{R})$ es simétrica y definida positiva (análogamente, $A \in \mathscr{M}_n(\mathbb{C})$ hermítica y definida positiva), entonces los menores principales de A son no nulos, por lo que A puede descomponerse como $A = LU$ de forma única. Además, la simetría de A implica que

$$LU = A = A^\top = U^\top L^\top,$$

donde $U^\top$ es triangular inferior y $L^\top$ es triangular superior (con 1's en la diagonal).

Es más, bajo estas hipótesis, puede asumirse que $U = L^\top$, es decir, que existe una matriz $B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ triangular inferior con $b_{ii} > 0$ tal que

$$A = BB^\top.$$

A esta factorización se la conoce como *factorización de Cholesky*, y además es única.

A continuación, dada $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ simétrica ($A^\top = A$) y def. positiva ($A > 0$), vemos las fórmulas directas para el cálculo de los coeficientes de B triangular inferior tal que $A = BB^\top$:

$$\boxed{\text{para } i = 1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} b_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}^2}, \\ \text{para } j = i+1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad b_{ji} = \dfrac{1}{b_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} b_{jk} \right). \end{cases}}$$

De forma similar, dada $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ hermítica ($A^* = A$) y def. positiva ($A > 0$),

$$\boxed{\text{para } i = 1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} b_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |b_{ik}|^2}, \\ \text{para } j = i+1, \ldots, n \quad \longrightarrow \quad b_{ji} = \dfrac{1}{b_{ii}} \left(\overline{a_{ij}} - \sum_{k=1}^{i-1} \overline{b_{ik}} b_{jk} \right). \end{cases}}$$