*Departamento de Matemática Aplicada*
**CÁLCULO COMPUTACIONAL.**
**Licenciatura en Química (Curso 2005-06)**
**Sistemas de ecuaciones lineales Práctica 2**

En esta práctica vamos a ver cómo se pueden resolver sistemas de ecuaciones lineales utilizando Matlab.

# 1. Sistemas de ecuaciones lineales

Un sistema de ecuaciones lineales,

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

con $m$ ecuaciones y $n$ incógnitas se puede escribir en forma matricial,

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

donde,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

Vamos a ver mediante algunos ejemplos y ejercicios cómo se pueden resolver los sistemas de ecuaciones lineales utilizando algunos de los comandos de Matlab descritos anteriormente.

**Ejemplo 1** *Consideremos el sistema,*

$$\begin{cases} 2x - y + z = 3 \\ x + y \qquad = 3 \\ \qquad y - 3z = -7 \end{cases}$$

*entonces, siguiendo la notación anterior,*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ -7 \end{pmatrix}$$

*Como se trata de un sistema con solución única, ya que el determinante de $A$ es distinto de cero,*

```
>>det(A)
ans =
    -8
```

*Una forma de resolver el sistema es escribir la matriz orlada (o ampliada)*

```
>>Ab=[A b]
```

*y hacer* `rref(Ab)` *con lo que obtenemos*

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

*es decir, la solución es $x = 1$, $y = 2$, $z = 3$.*

*Otra forma de resolver el sistema consiste en despejar* $\mathbf{x}$*,*

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

*sin más que escribir*

```
>>x=inv(A)*b
x =
     1
     2
     3
```

*Hay otra forma de hacerlo, utilizando lo que en Matlab se denomina como* **división matricial a la izquierda***:*

```
>>x=A\b
x =
     1
     2
     3
```

*En este caso, el resultado es el mismo, pero es diferente la forma en la que trabaja el ordenador. En este segundo caso el método que utiliza es el de la* **factorización LU***, que es una modificación de la eliminación gaussiana.*

*Vamos a ver cómo resuelve Matlab, internamente, el sistema cuando se utiliza la opción:* `>>x=A\b`*. El proceso se puede dividir en tres etapas:*

*1) Calcula una matriz triangular inferior $L$, una matriz triangular superior $U$ y una matriz de permutación $P$ tales que $PA = LU$. $P$ es simplemente la matriz identidad $I$ con sus filas cambiadas de orden.*

*2) Resuelve $L\mathbf{y} = P\mathbf{b}$.*

*3) Por último, se resuelve $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$.*

*La primera etapa es lo que se conoce con el nombre de* **factorización LU** *y es el paso más importante.*

*Por lo tanto, en Matlab sería equivalente utilizar:*

```
>>x=A\b
```

*que utilizar el siguiente proceso:*

```
>>[L,U,P]=lu(A); % Este es el comando que calcula las matrices L, U, P
>>B=P*b;
>>y=L\B;
>>x=U\y
```

**Ejercicio 1** *Resolver el siguiente sistema utilizando los tres procedimientos anteriormente descritos y comprobar que sale la misma solución.*

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

**Ejercicio 2** *Vamos a contar el número de operaciones elementales (sumas y productos) que se utilizan para resolver el sistema utilizando los tres métodos. Para ello vamos a utilizar el comando* `flops`*. Este comando cuenta el número de operaciones elementales que se han realizado en una sesión determinada.*

*Para poner el contador a cero utilizamos el comando* `>>flops(0)`*. Resolver el sistema de una de las formas y contar las operaciones, escribiendo* `>>flops` *y repetir la operación resolviéndolo de otra forma. ¿En cuál de los tres casos se utilizan menos operaciones?*

**Ejercicio 3** *El método* `>>x=A\b` *funciona si hay más ecuaciones que incógnitas (siempre que tenga solución única). E incluso en el caso en el que hay menos ecuaciones que incógnitas, con infinitas soluciones, Matlab ofrece dos de estas soluciones directamente:*

*Con* `>>x=A\b` *nos da una solución que tiene ceros para algunas de las incógnitas.*

*Con otro comando,* `>>x=pinv(A)*b` *se obtiene una solución del sistema donde la norma euclídea de* **x** *es la más pequeña de todas las posibles. ¿Es siempre única esta solución con longitud mínima?*

*Aplicando lo anterior encontrar las soluciones de los sistemas*

$$a)\begin{cases} x+y=1 \\ x-y=1 \\ 2x+y=2 \end{cases} \qquad b)\begin{cases} x+y+z=3 \\ x-y+z=2 \end{cases}$$

*Investigar qué hace el comando* `>>pinv(A)`.

**Ejercicio 4** *Si resolvemos el siguiente sistema con Matlab*

$$\begin{cases} x+y=1 \\ 2x+2y=2 \\ 3x+3y=3 \end{cases}$$

*¿Qué obtenemos con los comandos* `A\b` *y* `pinv(A)*b`*? Dibujar en* $I\!R^2$ *el conjunto de soluciones del sistema y las obtenidas con Matlab.*

**Ejercicio 5** *Estudiar el sistema*

$$\begin{cases} x+y+z=1 \\ x-y-z=2 \\ 3x+3y+3z=1 \\ -x-y+z=1 \end{cases}$$

*¿Qué obtenemos con los comandos* `A\b` *y* `pinv(A)*b`*? ¿Es correcto?*
*¿Que responde Matlab al comando* `rref([A,b])`*?*
*¿Y a los comandos* `x=inv(A)*b`, `lu(A)`*?*
*¿Qué conclusión sacas de esto?*

**Ejercicio 6** *Crear las matrices* `A=rand(7)` *y* `b=rand(7,1)`. *Vamos a resolver el sistema* $A\mathtt{x}=\mathtt{b}$ *con MatLab de varias formas, y vamos a contar los "flops" en cada una de ellas haciendo:*

*i)*

```
>>flops(0),rref([A b]),frref=flops
```

*ii)*

```
>>flops(0),x=inv(A)*b,finv=flops
```

*iii)*

```
>>flops(0),x=A\b,f=flops
```

*iv)*

```
>>flops(0),x=pinv(A)*b,fpinv=flops
```

*Comprobar que*

```
f<finv<frref<fpinv
```

***Nota:*** *De aquí se concluye que, en general, para resolver sistemas, resulta más conveniente utilizar la división matricial a la izquierda,* `x=A\b`. *No resulta conveniente utilizar la pseudoinversa salvo que realmente estemos buscando la solución de norma mínima.*

## 2. Sistemas homogéneos y su aplicación al ajuste de reacciones químicas

Un sistema de ecuaciones lineales

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

con $m$ ecuaciones y $n$ incógnitas se llama **homogéneo**, si todas las constantes $b_1$, $b_2$,...,$b_m$ son cero. Es decir, el sistema general homogéneo está dado por

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = 0 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = 0 \end{cases}$$

En un sistema homogéneo, siempre existe la *solución trivial* (o solución cero):

$$x_1 = x_2 = ... = x_n = 0$$

Por tanto, en un sistema homogéneo caben dos posibilidades:
- o bien solo existe la solución trivial;
- o bien existe un número infinito de soluciones, además de la trivial, llamadas *soluciones no triviales.*

**Ejemplo 2** *Un sistema homogéneo que tiene sólo la solución trivial:*

$$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 + 6x_3 = 0 \\ 4x_1 + 5x_2 + 6x_3 = 0 \\ 3x_1 + x_2 - 2x_3 = 0 \end{cases}$$

*Si escribimos la matriz ampliada*

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & 0 \\ 4 & 5 & 6 & 0 \\ 3 & 1 & -2 & 0 \end{pmatrix},$$

*y aplicamos el comando* `rref`*, obtendremos*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

*lo que quiere decir que la única solución es la trivial,*

$$x_1 = x_2 = x_3 = 0.$$

**Ejemplo 3** *Un sistema homogéneo con un número infinito de soluciones:*

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 = 0 \\ 3x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 0 \\ -x_1 - 11x_2 + 6x_3 = 0 \end{cases}$$

*Haciendo lo mismo que en el ejemplo anterior (y poniendo el resultado en formato racional,* `format rational`*,) obtenemos*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{9} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{-5}{9} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

*lo que quiere decir que, son soluciones todas las ternas de números reales de la forma*

$$\left(\frac{-1}{9}x_3, \frac{5}{9}x_3, x_3\right),$$

*para cualquier valor de $x_3$. En particular, para $x_3 = 0$, obtenemos la solución trivial; para $x_3 = 1$, obtenemos la solución*

$$\left(\frac{-1}{9}, \frac{5}{9}, 1\right),$$

*para $x_3 = 9\pi$, la solución*

$$(-\pi, 5\pi, 9\pi).$$

**Ejemplo 4** *Un sistema homogéneo con más incógnitas que ecuaciones tiene un número infinito de soluciones:*
*Resolvemos el sistema:*

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 = 0 \\ 4x_1 - 2x_2 + 7x_3 = 0 \end{cases}$$

*como en los ejemplos anteriores, escribiendo la matriz ampliada y haciendo* `rref`*, para obtener*

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{5}{6} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{-11}{6} & 0 \end{pmatrix},$$

*lo cual quiere decir que son soluciones todas las ternas de números reales de la forma*

$$\left(\frac{-5}{6}x_3, \frac{11}{6}x_3, x_3\right), \qquad \forall x_3 \in \mathbb{R}$$

**Observación:** Si en estos tres ejemplos hubiéramos escrito la matriz sin ampliar y hubiéramos hecho `rref`, habríamos visto las soluciones más rápidamente:

En el primer ejemplo, puesto que el determinante de la matriz del sistema no era nulo, el resultado era la matriz identidad (solución única.) En el segundo caso, aparece una fila de ceros. Y en el tercer caso, ¿qué sucede?: *lo que sucede siempre que hay un sistema homogéneo con más incógnitas que ecuaciones, que tiene un número infinito de soluciones.*

**Ejercicio 7** *Resolver el sistema homogéneo*

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + x_3 + x_4 = 0 \\ 3x_1 \qquad + 2x_3 - 2x_4 = 0 \\ \qquad 4x_2 - x_3 - x_4 = 0 \\ 5x_1 \qquad + 3x_3 - x_4 = 0 \end{cases}$$

**Ejercicio 8** *Resolver el sistema*

$$\begin{cases} 25x_1 - 16x_2 + 13x_3 + 33x_4 - 57x_5 = 0 \\ -16x_1 + 3x_2 + x_3 \qquad 12x_5 = 0 \\ \qquad -8x_2 \qquad + 16x_4 - 26x_5 = 0 \end{cases}$$

Este estudio de los sistemas homogéneos se puede aplicar al *ajuste* de reacciones químicas:

**Ejemplo 5** *Para ajustar la reacción*

$$Fe_2O_3(s) + C(s) \longrightarrow Fe(l) + CO(g)$$

*que se produce cuando calentamos mineral de óxido de hierro con un exceso de carbono para obtener hierro puro, procedemos de la siguiente manera:*

$$\begin{aligned} Fe: &\quad 2x_1 = x_3 \\ O: &\quad 3x_1 = x_4 \\ C: &\quad x_2 = x_4 \end{aligned}$$

*Es decir, se trata de resolver el siguiente sistema homogéneo de 3 ecuaciones con 4 incógnitas (que, como acabamos de ver, siempre tiene solución no trivial):*

$$\begin{cases} 2x_1 \qquad - x_3 \qquad = 0 \\ 3x_1 \qquad\qquad - x_4 = 0 \\ \qquad x_2 \qquad - x_4 = 0 \end{cases} \tag{1}$$

*O lo que es lo mismo, si consideramos $x_4$ como un parámetro ($x_4 = \lambda$) tratamos de resolver el siguiente sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas*

$$\begin{cases} 2x_1 \qquad - x_3 = 0 \\ 3x_1 \qquad\qquad = \lambda \\ \qquad x_2 \qquad = \lambda \end{cases}$$

*obteniendo la solución*

$$x_4 = \lambda, \quad x_2 = \lambda, \quad x_1 = \frac{\lambda}{3}, \quad x_3 = 2\frac{\lambda}{3}$$

*De modo, que podemos decir que el sistema tiene las infinitas soluciones:*

$$x_1 = \frac{\lambda}{3}, \quad x_2 = \lambda, \quad x_3 = 2\frac{\lambda}{3}, \quad x_4 = \lambda$$

*para cualquier valor de $\lambda \in \mathbb{R}$.*

*En nuestro caso, solo nos interesa la solución de números enteros positivos $x_1, x_2, x_3, x_4$ que no tengan divisor común diferente de 1, es decir, para $\lambda = 3$:*

$$x_1 = 1, \quad x_2 = 3, \quad x_3 = 2, \quad x_4 = 3,$$

*de modo que la reacción ajustada es*

$$Fe_2O_3 + 3C \longrightarrow 2Fe + 3CO$$

**Ejercicio 9** *Ajustar las siguientes reacciones químicas:*

1. $CO_2 + H_2O \longrightarrow C_6H_{12}O_6 + O_2$
2. $AgNO_3 + K_2CrO_4 \longrightarrow Ag_2CrO_4 + KNO_3$
3. $Mg + HCl \longrightarrow MgCl_2 + H_2$

**Ejercicio 10** *Ajustar la siguiente reacción química en la que el permanganato de cromo oxidaría violentamente a la azida de plomo:*

$$Pb(N_3)_2 + Cr(MnO_4)_2 \longrightarrow Cr_2O_3 + MnO_2 + Pb_3O_4 + NO$$

**Ejercicio 11** *Ajustar la siguiente serie de reacciones químicas que se utilizan para producir clorato de sodio:*

1. $KMnO_4 + HCl \longrightarrow KCl + MnCl_2 + H_2O + Cl_2$
2. $Cl_2 + Ca(OH)_2 \longrightarrow Ca(ClO_3)_2 + CaCl_2 + H_2O$
3. $Ca(ClO_3)_2 + Na_2SO_4 \longrightarrow CaSO_4 + NaClO_3$