Métodos numéricos en álgebra lineal

PID_00285408

Roberto Casado Vara Beatriz Salvador Mancho Teresa Sancho Vinuesa

Tiempo mínimo de dedicación recomendado: 4 horas





© FUOC • PID_00285408 Métodos numéricos en álgebra lineal

Roberto Casado Vara

Beatriz Salvador Mancho

Teresa Sancho Vinuesa

Segunda edición: febrero 2022 © de esta edición, Fundació Universitat Oberta de Catalunya (FUOC) Av. Tibidabo, 39-43, 08035 Barcelona Autoría: Roberto Casado Vara, Beatriz Salvador Mancho, Teresa Sancho Vinuesa Producción: FUOC Todos los derechos reservados

Índice

ln	trodu	icción	5
1	Erro	or en los métodos numéricos	9
2	Noc	iones avanzadas de álgebra lineal: repaso	12
	2.1	Matrices	12
	2.2	Valores y vectores propios	13
	2.3	Normas matriciales	14
3	Mét	odos directos de resolución de sistemas	
	de e	cuaciones lineales	18
	3.1	Eliminación gaussiana	18
	3.2	Método de Gauss-Jordan	20
	3.3	Descomposición LU	21
4	Mét	odos iterativos de resolución de sistemas de ecuaciones	3
	line	ales	27
	4.1	Método iterativo de Jacobi	29
	4.2	Método iterativo de Gauss-Seidel	31
	4.3	Convergencia y estimación del error	34
	4.4	Método iterativo para la aproximación de autovalores y	
		autovectores: método de la potencia y de la potencia inversa.	40
	4.5	Método de la potencia	40
Bil	bliog	rafía	45

Introducción

El objetivo de esta guía es servir como texto de apoyo en el curso de Métodos numéricos en la ciencia de datos. Se incluye una breve introducción teórica suficiente para abordar los retos propuestos en la asignatura, con referencias a manuales clásicos de métodos numéricos. Los problemas seleccionados aquí no van a cubrir todos los aspectos de los métodos numéricos relacionados con el álgebra lineal, pero motivarán su uso e ilustrarán el procedimiento de aplicación de los métodos más básicos. Además, se os darán las herramientas necesarias para solucionar cualquier problema de álgebra lineal que se os pueda presentar, así como diseñar vuestros propios algoritmos en el lenguaje de programación R.

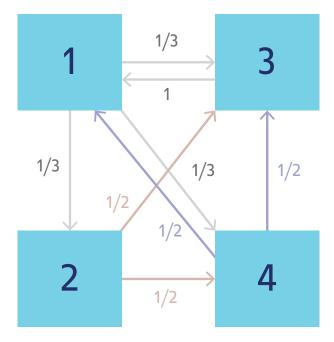
En disciplinas como la física, la ingeniería o la ciencia de datos, con frecuencia se utilizan los métodos numéricos para resolver problemas modelados matemáticamente. Una vez terminado el proceso de discretización, en el que se sustituye el modelo continuo por una versión simplificada cuya dimensión es finita, generalmente se tiene que resolver un sistema de ecuaciones que casi siempre es lineal. Los métodos de discretización más habituales son la interpolación de funciones y la aproximación con familias de funciones lineales. Aunque no lo trabajaremos en este curso, la resolución de ecuaciones en derivadas parciales, tan habitual en sistemas dinámicos, también requiere la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Este es el motivo por el que la resolución numérica de sistemas de ecuaciones lineales es tan importante y nuclear aquí.

En este primer bloque de la asignatura nos dedicaremos, básicamente, a buscar la solución de un sistema Ax = b en el que el número de ecuaciones es igual al número de incógnitas. Las técnicas que se utilizarán para hacerlo se pueden clasificar en métodos directos y métodos iterativos. Mediante los métodos directos se encuentra la solución del sistema a través de un número finito de operaciones y la solución sería exacta si no cometiéramos errores al efectuar las operaciones. En los métodos iterativos se utiliza una relación de recurrencia que, a partir de una estimación inicial, permiten determinar una sucesión de valores que converge en la solución que se busca, a partir de un valor inicial cercano a la solución.

A continuación, vamos a presentar un ejemplo que ilustra la necesidad de resolver sistemas de ecuaciones lineales mediante métodos numéricos. Actualmente, el algoritmo matemático que utiliza Google para nuestras búsquedas es una combinación de algoritmos que se basan en cinco características: análisis de los términos de búsqueda, búsqueda de coincidencias, posicionamiento

de las páginas útiles, personalización de los resultados y análisis de la calidad de los resultados. A mediados de los noventa, varios motores de búsqueda se dedicaban a encontrar qué páginas tenían las palabras clave que buscaba el usuario y cuántas veces aparecían. En 1998, Larry Page y Sergei Brin publicaron un artículo donde describían un nuevo algoritmo: Page Rank.

De entre un conjunto de páginas enlazadas las unas con las otras, el interés está en saber cuál es la página más relevante (una página lo es si está enlazada por páginas relevantes). Cogemos, por ejemplo cuatro páginas (que podemos identificar como los nodos 1, 2, 3 y 4), cada una con una determinada relevancia que «reparte» al resto. Por ejemplo, supongamos que inicialmente cada una tiene una relevancia de 1. Así, la página 1 distribuye su relevancia a partes iguales entre las páginas 2, 3 y 4; la página 2 reparte su relevancia a partes iguales entre la 3 y la 4; la página 3 asigna toda su relevancia a la página 1; la página 4 asigna su relevancia a partes iguales entre la 1 y la 3. De esta forma, la página 1 tiene 1+1/2=3/2 de relevancia; la página 2 tiene 1/3 de relevancia; la página 3 tiene 1/3+1/2+1/2=4/3 de relevancia y la página 4 tiene 1/3+1/2=5/6 de relevancia. Ahora se puede repetir el proceso teniendo en cuenta que su actual relevancia es otra. Si repetimos esta operación muchas veces el resultado acaba estabilizándose de forma que «en el límite» podemos determinar la relevancia que el algoritmo asigna a cada página.



Aunque hay distintas formas de verlo, lo más sencillo es plantearlo, a cada paso, como un sistema de ecuaciones lineales donde la relevancia de la página 1 es x_1 , la relevancia de la página 2 es x_2 , la relevancia de la página 3 es x_3 y la relevancia de la página 4 es x_4 . De acuerdo con lo que hemos explicado para iniciar la distribución de relevancia, podemos plantear el sistema de ecuaciones siguiente:

$$x_{1} = x_{3} + \frac{1}{2}x_{4}$$

$$x_{2} = \frac{1}{3}x_{1}$$

$$x_{3} = \frac{1}{3}x_{1} + \frac{1}{2}x_{2} + \frac{1}{2}x_{4}$$

$$x_{4} = \frac{1}{3}x_{1} + \frac{1}{2}x_{2}$$
(1)

La solución de este sistema de ecuaciones es $x_1 = \frac{48}{31}$, $x_2 = \frac{16}{31}$, $x_3 = \frac{36}{31}$, $x_4 = \frac{24}{31}$. Esto significa que la página más relevante, la que tiene más importancia, es la página 1. Puesto que en Internet hay miles de millones de páginas, la matriz del sistema que deberíamos resolver es enorme y, por lo tanto, no es resoluble a mano. Aunque deberíamos resolver miles de detalles para tener un procedimiento más robusto, hemos podido comprender la base del algoritmo de búsqueda de Google y justificar la necesidad de disponer de métodos que nos permitan resolver sistemas de ecuaciones lineales de forma numérica.

Este ejemplo demuestra la necesidad de buscar una forma de resolver este tipo de sistemas de una manera adecuada que no requiera muchas horas de cálculos. Para ello, podemos emplear los métodos numéricos: una vez que se ha decidido el método y se ha programado, bastaría con introducir la matriz y ejecutar el código. En cuestión de minutos tendremos una solución, mientras que si lo intentásemos calcular a mano podríamos tardar horas, o incluso no podríamos hacerlo.

1. Error en los métodos numéricos

Aunque los babilonios, hace más de cuatro mil años, ya iniciaron la matemática numérica construyendo tablas y haciendo cálculos astronómicos, no es hasta la aparición de los ordenadores, a mediados del s. XX, que nace el denominado *análisis numérico*. Los ordenadores, entendidos como aparatos de cálculo, permiten ejecutar operaciones aritméticas mediante métodos de memorización, manipulación y utilización de instrucciones numéricas. Para ello, es necesario trabajar con números reales de un tipo determinado: expresiones decimales finitas o números racionales. En el caso de números irracionales, su representación será aproximada.

A menudo, no conocemos el valor exacto de una cierta magnitud y debemos trabajar con un valor aproximado. Para medir los errores cometidos al trabajar con valores aproximados utilizaremos dos conceptos: el **error absoluto** y el **error relativo**. Si \tilde{p} es una aproximación de un número cualquiera p, el **error absoluto** es $|p-\tilde{p}|$, y el **error relativo** es $\frac{|p-\tilde{p}|}{|p|}$, siempre y cuando $p \neq 0$.

Para ilustrar esta definición vamos a poner un ejemplo.

Ejemplo 1. Error absoluto y error relativo

Tenemos el número p=179,015625, y vamos a considerar dos aproximaciones que ha realizado el ordenador a este número, $\tilde{p_1}=179,01560974$ y $\tilde{p_2}=179,01564025$. Podríamos preguntarnos cuál de las dos aproximaciones es mejor, ¿pero cómo podríamos medir o validar cuál de ellas es mejor? La solución es sencilla, solamente tenemos que usar los errores relativo y absoluto.

En este caso, el error absoluto es:

$$|p - \tilde{p}_1| = |179,015625 - 179,01560974| = 1,526 \times 10^{-05}$$

 $|p - \tilde{p}_2| = |179,015625 - 179,01564025| = 1,525 \times 10^{-05}$ (2)

y el error relativo es:

$$\frac{|p-\tilde{p}_1|}{|p|} = \frac{|179,015625 - 179,01560974|}{|179,015625|} = 8,524396 \times 10^{-08}$$

$$\frac{|p-\tilde{p}_2|}{|p|} = \frac{|179,015625 - 179,01564025|}{|179,015625|} = 8,518809 \times 10^{-08}$$
(3)

De hecho, en general, no conocemos estos errores exactamente, simplemente conocemos una cota de ellos. En el ejemplo anterior, podemos decir que el error relativo es inferior o igual a 10^{-4} .

Desde un punto de vista numérico, nos interesan tres **fuentes de error**: los errores de redondeo debidos a la finitud del dato con el que trabajamos, los

Consejo

Como medida de exactitud, el error absoluto no es tan significativo como el error relativo; además, puede ser engañoso. Por ejemplo, un error de un gramo es mucho más significativo cuando se calcula la masa de un reactivo químico que cuando se calcula la masa de un avión.

errores de redondeo en los resultados de los cálculos intermedios y los debidos al método numérico utilizado.

Típicamente, en un ordenador los números reales se representan de forma binaria en coma flotante normalizada. Esto significa que la cantidad x se aproxima por $\pm q \cdot 2^n$, donde q es una expresión binaria finita, mayor o igual a 1/2 y menor que 1, y se denomina **mantisa**; n es un número natural y se denomina **exponente**. En función del número de cifras binarias que use el ordenador, el rango de números reales que se podrán representar será distinto. Por ejemplo, si un ordenador utiliza 32 cifras binarias para representar un número real con precisión simple, reserva 24 cifras para la mantisa (con el signo) y 8 para el exponente. De esta forma, es posible representar números en el intervalo [2.938736E-39,1.701412E+38].

Es importante, pues, tener en cuenta que la conversión de un número real x a un número de la máquina \tilde{x} introduce un error (la diferencia) debido a la finitud de la representación digital de un dato al que denominamos **error de redondeo**. Además, cuando hacemos operaciones aritméticas con números representados en coma flotante, introducimos errores de redondeo adicionales.

Ejemplo 2. Error generado

Un error introducido por el resultado de una operación aritmética se denomina **error generado**, y cuando vamos encadenando operaciones aritméticas vamos acumulando errores. Por ejemplo, si tenemos dos números, p y q, con valores aproximados \tilde{p} y \tilde{q} , cuyos errores son e_p y e_q , y queremos sumarlos, tenemos:

$$p+q=(\tilde{p}+e_p)+(\tilde{q}+e_q)=(\tilde{p}+\tilde{q})+(e_p+e_q) \eqno(4)$$

En este caso, el error cometido al sumar dos valores es la suma de los errores.

Veamos otro ejemplo. Si tenemos p=0.54617 y q=0.54601, el valor exacto de restar p y q es: r=p-q=0.00016. Supongamos que la resta se efectúa con cuatro cifras decimales. Al redondear p y q a cuatro dígitos, tenemos que $\tilde{p}=0.5462$ y $\tilde{q}=0.5460$, respectivamente. Por tanto, $\tilde{r}=\tilde{p}-\tilde{q}=0.0002$ es la aproximación a cuatro dígitos de r.

Dado que:

$$\frac{|r - \tilde{r}|}{|r|} = \frac{|0,00016 - 0,002|}{|0,00016|} = 0,25 \tag{5}$$

el resultado tiene un solo dígito significativo, mientras que \tilde{p} y \tilde{q} eran exactos en los primeros dígitos.

Para terminar, el **error de truncamiento** es el que se produce cuando una expresión matemática no es resoluble mediante los métodos clásicos y se sustituye por una expresión más simple. Es el caso de la aproximación de una integral por una suma finita o una derivada por un cociente incremental. Para la mayoría de los métodos disponemos de fórmulas específicas para estimar el error cometido.

Comprobadlo vosotros mismos

En el siguiente enlace podréis comprobar vosotros mismos cómo en algunos casos los errores de precisión pueden afectar a las operaciones matemáticas: https://support.microsoft.com/es-es/help/78113/floating-point-arithmetic-may-give-inaccurate-results-in-excel

Formas de redondear

Hay dos formas de redondear un resultado: por truncamiento o por redondeo. En el primer caso, todos los dígitos que excedan la longitud establecida se descartan; en el segundo caso, si la primera cifra que excede la longitud fijada es menor que 5, truncamos. Si esa cifra es 5 o mayor, hay varias opciones en el caso de que sea igual a 5, pero habitualmente sumamos una unidad al último dígito con la longitud deseada.

Estimar el error cometido en la aproximación numérica a la solución de un problema es fundamental para saber cuánto nos hemos acercado a la solución exacta. A menudo fijaremos una tolerancia determinada antes de iniciar el proceso de aproximación.

2. Nociones avanzadas de álgebra lineal: repaso

Para resolver las actividades de esta asignatura es importante dominar los conceptos básicos del álgebra lineal, por este motivo recordaremos algunos conceptos básicos estudiados en asignaturas previas y presentaremos la nomenclatura que utilizaremos.

2.1 Matrices

Denotaremos por $\mathbb{M}_{m\times n}(\mathbb{K})$ al espacio vectorial de las matrices de m filas y n columnas cuyos coeficientes del conjunto \mathbb{K} son generalmente números reales (\mathbb{R}) o números complejos (\mathbb{C}) . En esta asignatura solo trabajaremos en el conjunto de los reales. Denotaremos por A^T a la matrix $n\times m$ traspuesta de A, por A^* a su matriz conjugada y por Adj(A) a su matriz adjunta (traspuesta de la conjugada).

A continuación, presentamos algunas de las definiciones del álgebra lineal que resultarán útiles para la comprensión de conceptos y la realización de actividades de este bloque.

- La matriz A es simétrica si $A = A^T$.
- La matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$ es unitaria si $A^{-1} = Adj(A)$.
- La matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$ es normal si Adj(A)A = AAdj(A).

Por simplicidad de la notación, a partir de este momento vamos a suponer que A es una matriz cuadrada $n \times n$.

Para algunos de los cálculos que vamos a realizar con los métodos de resolución numérica de sistemas de ecuaciones lineales vamos a necesitar algunas suposiciones teóricas que nos faciliten los cálculos. Aunque muchas de estas afirmaciones ya son conocidas por todos vosotros, las recordaremos con el fin de afianzar estos conocimientos. Siendo $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{K})$, las siguientes afirmaciones son equivalentes:

- A^{-1} existe
- $det(A) \neq 0$
- El sistema lineal Ax = 0 tiene solamente la solución x = 0.
- Para cualquier vector b, el sistema lineal Ax = b tiene solución única.
- Las filas y columnas de A son linealmente independientes.
- El rango de la matriz *A* es *n*.

2.2 Valores y vectores propios

Supongamos que tenemos A una matriz cuadrada $n \times n$. Vamos ahora a definir una serie de elementos que serán útiles para trabajar con las matrices. El objetivo de este subapartado es dar los detalles matemáticos necesarios para entender el marco teórico que hay detrás de las operaciones que realizan los métodos numéricos cuando calculan valores propios, vectores propios y potencias de matrices, entre otros.

- El espectro de A es el conjunto $Esp(A) \subset \mathbb{R}$ descrito por los valores propios o autovalores de A.
- El radio espectral de *A* es el número real positivo:

$$\rho(A) = \max|\lambda_i| \tag{6}$$

donde λ_i son los valores propios de la matriz A.

• Una pareja (λ, x) es un elemento propio de A si x es un vector propio de A asociado al valor propio λ .

A continuación, se presentan los resultados necesarios para entender cómo funcionan los métodos numéricos que nos permiten resolver sistemas de ecuaciones lineales. También nos aportarán la justificación matemática de los métodos iterativos para manejar matrices de grandes dimensiones.

Dada una matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$, las siguientes afirmaciones son ciertas (pero no equivalentes):

- 1) Los valores propios de una matriz simétrica son reales.
- 2) Si (λ, x) es un elemento propio de A, entonces, para cualquier entero positivo m, (λ^m, x) es un elemento propio de A^m .

De esta afirmación sacamos una importante conclusión: los valores propios de una matriz cuadrada A son los mismos que los valores propios de las potencias de A. Este es un resultado muy potente relacionado con el cálculo de potencias de matrices.

Ahora vamos a definir el concepto de matrices semejantes. Se dice que dos matrices cuadradas *A* y *B* son **semejantes** si existe una matriz regular tal que:

$$B = PAP^{-1} \tag{7}$$

Con esta definición podemos enunciar el siguiente resultado, que nos dará las bases teóricas para entender el marco matemático que hay detrás de los cálcu-

los relacionados con las potencias de matrices. Dada una matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$, las siguientes afirmaciones son ciertas:

- 1) La matriz A es semejante a una matriz diagonal si y solo si tiene n vectores propios linealmente independientes.
- 2) Si la matriz A tiene n autovalores distintos, entonces es semejante a una matriz diagonal.

2.3 Normas matriciales

En el siguiente apartado explicaremos los métodos numéricos para obtener las soluciones de sistemas de ecuaciones de la forma Ax = b. Antes de empezar con el estudio de dichos métodos, necesitamos contar primero con un medio que nos permita medir la distancia entre los vectores columna de dimensión n. Ello nos permitirá determinar si una serie de estos vectores converge en una solución del sistema (en el próximo apartado se explicará el concepto de convergencia) o si la solución obtenida por un método directo es suficientemente buena.

Denotemos \mathbb{R}^n el conjunto de todos los vectores columna de dimensión n, cuyas componentes son números reales. Para definir una distancia en \mathbb{R}^n introduciremos el concepto de norma.

Una *norma vectorial* en \mathbb{R}^n es una función $||\cdot||:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ con las siguientes propiedades:

- 1) $||x|| \ge 0$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$
- **2)** ||x|| = 0 si y solo si $x = (0,0,\dots,0)$
- 3) $||\alpha x|| = |\alpha| \cdot ||x||$ para todo $\alpha \in \mathbb{R}$ y $x \in \mathbb{R}^n$
- **4)** $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$ para todo $x, y \in \mathbb{R}^n$

En este material, solo usaremos tres normas específicas en \mathbb{R}^n , que son $l_1 = ||\cdot||_1$, $l_2 = ||\cdot||_2$ y $l_\infty = ||\cdot||_\infty$. Así se definen:

$$||x||_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad ||x||_2 = \left\{\sum_{i=1}^n x_i^2\right\}^{1/2} \quad \text{y} \quad ||x||_{\infty} = \max\{|x_i|\}$$
 (8)

La norma l_2 se llama norma euclidiana del vector x, dado que representa la noción común de distancia respecto del origen en caso de que x esté en \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 o en \mathbb{R}^3 . Por ejemplo, el vector x = (-1,1,-2) en \mathbb{R}^3 tiene las siguientes normas:

Notación

Como los vectores en \mathbb{R}^n son vectores columna, conviene utilizar la notación de la transpuesta que se ha visto en el material de álgebra lineal o se puede consultar en las referencias recomendadas, aunque para facilitar la notación no indicaremos la t de transpuesta en los vectores.

$$||x||_{2} = \sqrt{(-1)^{2} + 1^{2} + (-2)^{2}} = \sqrt{6}$$

$$||x||_{\infty} = \max\{|-1|,|1|,|-2|\} = 2$$
(9)

Si $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ y $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ son vectores de \mathbb{R}^n , las distancias l_2 y l_∞ entre x e y están definidas por:

$$||x - y||_2 = \left\{ \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right\}^{1/2} \quad \text{y} \quad ||x - y||_{\infty} = \max\{|x_i - y_i|\}$$
 (10)

Ejemplo 3. Cálculo del error en la solución de un sistema utilizando normas distintas

Dado el sistema de ecuaciones lineales siguiente:

$$3,3330x_1 + 15920x_2 - 10,333x_3 = 15913$$

 $2,2220x_1 + 1,710x_2 + 8,6120x_3 = 28,544$ (11)
 $1,5611x_1 + 5,1791x_2 + 1,6852x_3 = 8,4254$

tiene la solución $(x_1,x_2,x_3) = (1,1,1)$. Si efectuamos la eliminación gaussiana en la aritmética de redondeo a cinco dígitos utilizando técnicas clásicas de resolución de sistemas de ecuaciones (por ejemplo, el método de gauss), la solución es:

$$\tilde{x} = (1,2001;0,99991;0,92538)$$
 (12)

Así que, calculando la diferencia entre los vectores x y \tilde{x} en las dos normas que hemos definido se tiene:

$$\begin{aligned} ||x-\tilde{x}||_{\infty} &= max\{|1-1,20001|,|1-0,99991|,|1-0,92538|\} = 0,2001\\ ||x-\tilde{x}||_2 &= \sqrt{(1-1,20001)^2 + (1-0,99991)^2 + (1-0,92538)^2} = 0,21356 \end{aligned} \tag{13}$$

En este ejemplo, se puede ver que las aproximaciones de \tilde{x}_2 y \tilde{x}_3 son buenas aproximaciones de x_2 y x_3 , pero que \tilde{x}_1 es una mala aproximación de x_1 .

El concepto de distancia en \mathbb{R}^n también sirve para definir el límite de una sucesión de vectores en ese espacio. Aquí es importante entender que si una sucesión de vectores tiende a un vector, se dice que esa sucesión converge. Es decir, si se tiene una sucesión de vectores que se van acercando a un vector x, se dice que esa sucesión de vectores es convergente. Los métodos iterativos para la resolución de sistemas van a proporcionar una sucesión de soluciones y lo que buscamos es que esa sucesión de soluciones a la larga se aproxime (rápido o despacio) a la solución. Esto es lo mismo que decir que queremos que esa sucesión de soluciones converja a la solución real.

Una vez hecha esta breve introducción al concepto de norma de un vector, estamos en condiciones de aplicar el mismo concepto a las matrices, salvo algunos matices que trataremos con cuidado mientras definimos las normas matriciales y sus propiedades.

En primer lugar, es importante decir que puede demostrarse que todas las normas \mathbb{R}^n son equivalentes respecto a la convergencia. Esto es importante, ya que cuando ahora definamos el concepto de norma de una matriz, y más adelante el concepto de convergencia de sucesiones de matrices respecto de alguna norma, en algunos casos, será más fácil calcular alguna de las normas que otras. Además, podemos establecer una ordenación entre ellas.

Dado cualquier vector $x \in \mathbb{R}^n$,

$$||x||_2 \le ||x||_1 \le \sqrt{n}||x||_2 \tag{14}$$

$$||x||_{\infty} \le ||x||_2 \le \sqrt{n}||x||_{\infty} \tag{15}$$

$$||x||_{\infty} \le ||x||_1 \le n||x||_{\infty}$$
 (16)

De este modo, podemos demostrar que cualquier vector que converja respecto de la norma $||\cdot||_{\infty}$ también lo hace respecto de las normas $||\cdot||_2$, y $||\cdot||_1$, y esto nos quiere decir que a partir de ahora nos será indiferente qué norma utilizar. En la práctica, se suele usar la norma que más fácil sea de calcular.

Si tenemos en cuenta que queremos resolver sistemas de ecuaciones lineales y que estos se pueden expresar de forma matricial, es natural introducir el concepto de norma de una matriz.

Una **norma matricial** sobre el conjunto de todas las matrices $n \times n$ es una función de valor real, $||\cdot||$, definida en este conjunto y que satisface para todas las matrices A y B de $n \times n$, y todos los números reales α :

- 1) $||A|| \ge 0$
- 2) ||A|| = 0, si y solo si A es 0, la matriz con todas las posiciones 0.
- **3)** $||\alpha A|| = |\alpha| ||A||$
- **4)** $||A + B|| \le ||A|| + ||B||$
- 5) $||AB|| \le ||A|| \, ||B||$

Una distancia entre las matrices A y B de $n \times n$ respecto a esta norma matricial es ||A-B||.

De las diferentes maneras de definir una norma matricial trabajaremos con las que son consecuencia natural de las normas vectoriales, es decir, l_1 , l_2 y l_∞ . Como ejemplo, se tiene el siguiente resultado:

Si $||\cdot||$ es una norma vectorial de \mathbb{R}^n , entonces,

$$||A|| = max\{||Ax||\}$$
 (17)

es una norma matricial.

Se trata de una norma matricial natural o inducida asociada a una norma vectorial. En este curso supondremos que todas las normas matriciales son naturales, si no especificamos lo contrario en sus definiciones. El siguiente resultado es muy útil cuando se quiere acotar el valor de ||Ax||.

Para todo vector $x \neq 0$, matriz A y cualquier norma natural $||\cdot||$, tenemos:

$$||Ax|| \le ||A|| \cdot ||x|| \tag{18}$$

Este resultado nos permitirá conocer con cierta exactitud el valor aproximado de ||Ax||.

Algunas normas matriciales naturales pueden calcularse en función de los coeficientes de la matriz:

$$||A||_1 = \max_{j=1,\dots,n} \left(\sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right) = \max_{j=1,\dots,n} \left(|a_{1j}| + |a_{2j}| + \dots + |a_{ij}| + \dots + |a_{nj}| \right)$$
(19)

Es decir, que la norma uno, resulta ser el máximo del conjunto formado por las sumas de los valores absolutos de los elementos de cada una de las columnas de la matriz.

$$||A||_{\infty} = \max_{i=1,\dots,n} \left(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right) = \max_{i=1,\dots,n} \left(|a_{i1}| + |a_{i2}| + \dots + |a_{ij}| + \dots + |a_{in}| \right)$$
 (20)

En este caso, la norma infinito resulta ser el máximo del conjunto formado por las sumas de los valores absolutos de los elementos de cada una de las filas de la matriz.

Con estas definiciones y resultados ya estamos en condiciones de empezar a definir y explicar los métodos de resolución de sistemas de ecuaciones lineales que veremos en este curso. Primero definiremos los métodos directos, y después, los métodos iterativos. Estos últimos son un poco más delicados y requieren entender el concepto de convergencia de sucesiones de matrices. Este concepto es necesario para definir la prueba de parada y encontrar las soluciones óptimas sin que el método itere indefinidamente, creando bucles infinitos.

3. Métodos directos de resolución de sistemas de ecuaciones lineales

Los sistemas de ecuaciones lineales se utilizan en muchos problemas de ingeniería y de las ciencias, así como en aplicaciones de las matemáticas a las ciencias sociales y al estudio cuantitativo de problemas de administración y economía. A continuación, veremos los métodos directos clásicos que permiten resolver numéricamente un sistema de n ecuaciones lineales y n incógnitas:

$$E_{1}: a_{11}x_{1} + a_{12}x_{2} + \dots + a_{1n}x_{n} = b_{1},$$

$$E_{2}: a_{21}x_{1} + a_{22}x_{2} + \dots + a_{2n}x_{n} = b_{2},$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$E_{n}: a_{n1}x_{1} + a_{n2}x_{2} + \dots + a_{nn}x_{n} = b_{n},$$

$$(21)$$

para x_1, \dots, x_n , dadas las a_{ij} con $i, j = 1, 2, \dots, n$ y b_i , para $i = 1, 2, \dots, n$. En forma matricial, un sistema lineal puede escribirse en la forma Ax = b, donde $A \in \mathbb{M}_{n \times n}$ es una matriz cuadrada de n filas y n columnas y $b \in \mathbb{M}_{n \times 1}$ es un vector columna de n componentes. La forma matricial de un sistema con cada una de sus componentes se escribe como sigue:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$
(22)

Los métodos directos para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales proporcionan un resultado en un número fijo de pasos y solamente están sujetos a errores de redondeo.

3.1 Eliminación gaussiana

Entre los métodos directos, el más popular para resolver sistemas lineales es la eliminación gaussiana, que también se utiliza para calcular determinantes e invertir matrices. La idea básica del método, que ilustramos con un ejemplo, consiste en utilizar transformaciones elementales de fila y columna para eliminar sucesivamente las variables, empezando por la primera ecuación y la

Fuente del apartado

Apartado basado en el libro: *Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing* de David Kinkaid. Amer Mathematical Society. Standard No. 9781470411152.

primera variable y continuando con el resto. De esta manera, tras (n-1)n/2 eliminaciones se llega a un sistema equivalente al dado, de matriz triangular superior, que se resuelve directamente por sustitución hacia atrás. El tipo de operaciones que se realizan en la eliminación gaussiana son:

- Multiplicar la ecuación (i) por un escalar λ ≠ 0 y reemplazar dicha ecuación
 (i) por la resultante.
- Multiplicar la ecuación (j) por un escalar μ ≠ 0 y sumársela a la ecuación (i) y reemplazar las ecuaciones (i) o (j) por dicha suma.
- Intercambiar las ecuaciones (i) y (j) entre sí.
- Intercambiar dos filas.
- Multiplicar una fila por un escalar diferente de cero.
- Sumar el múltiplo de una fila a otra fila.

A continuación, mostramos un ejemplo para ver cómo funciona:

$$\begin{pmatrix}
1 & 2 & 3 & 6 \\
2 & 3 & 4 & 9 \\
-1 & 0 & -1 & -2
\end{pmatrix}$$
(23)

haciendo transformaciones elementales utilizando la primera fila, hacemos cero todos los elementos de la primera columna excepto el de la diagonal. En este caso, a la segunda fila le restamos dos veces la primera, y a la tercera fila le hemos sumado la primera.

$$\begin{pmatrix}
1 & 2 & 3 & 6 \\
0 & -1 & -2 & -3 \\
0 & 2 & 2 & 4
\end{pmatrix}$$
(24)

Fijándonos en el elemento diagonal de la segunda fila, hacemos cero todos los elementos de la segunda columna por debajo de la diagonal sumando a la tercera fila dos veces la segunda.

$$\begin{pmatrix}
1 & 2 & 3 & 6 \\
0 & -1 & -2 & -3 \\
0 & 0 & -2 & -2
\end{pmatrix}$$
(25)

Con esto tenemos ya el sistema triangular superior equivalente, que resolvemos por sustitución hacia atrás comenzando por la última ecuación y acabando en la primera. Por lo que tenemos que $x_1 = 1$, $x_2 = 1$ y $x_3 = 1$.

En la eliminación gaussiana tal y como la acabamos de exponer se asume que en la k-ésima eliminación el coeficiente de la variable que se desea eliminar, que se llama pivote y que ocupa la posición (k, k) de la matriz del sistema en ese momento, es distinto de cero. A menudo no sucede así, por lo que se aconseja reordenar las ecuaciones e incluso los términos en cada una de ellas para lograr, por razones de estabilidad numérica, que el pivote sea el mayor posible en valor absoluto.

Existen diferentes estrategias para la elección del pivote, según si la reordenación afecta solo a las filas (pivotación parcial) o tanto a las filas como a las columnas (pivotación total). En principio, podría parecer más conveniente la pivotación total, pero su alto coste numérico, ya que exige en cada eliminación la comparación de todos los elementos de la matriz, hace preferible en la práctica la pivotación parcial con equilibrado de filas y columnas. Este equilibrado tiene como objeto normalizarlas, lo que se consigue multiplicando todos sus elementos por números convenientes. La pivotación parcial se caracteriza por utilizar como pivote el elemento de la primera columna de la matriz que tenga mayor valor absoluto.

La eliminación gaussiana es una de las técnicas más simples pero a la vez más efectivas. Si os fijáis, una vez puesto el sistema lineal de ecuaciones en su forma matricial, solo tenemos que conseguir transformar esa matriz en una matriz diagonal superior (es decir, que en la parte que está por debajo de la diagonal solo encontremos ceros) y a partir de ahí resolver hacia atrás. Es decir, primero tenemos la última incógnita y la sustituimos en el resto de las ecuaciones, y así sucesivamente hasta tener el resultado del sistema de ecuaciones lineales.

3.2 Método de Gauss-Jordan

El método de Gauss-Jordan es el método directo óptimo para encontrar la inversa de una matriz cuando esta no tiene ninguna estructura particular. En el método de Gauss-Jordan se dispone la matriz cuadrada no singular A de dimensión $n \times n$ que se desea invertir a la izquierda y la matriz identidad I_n a su derecha. Se realizan sucesivas eliminaciones gaussianas mediante transformaciones elementales de fila y columna hasta tener a la izquierda la matriz identidad I_n , en cuyo caso, a la derecha tendremos la inversa A^{-1} . Una vez calculada la inversa de la matriz A, la solución del sistema lineal Ax = b se obtiene en términos de la matriz inversa como $x = A^{-1}b$. Veamos con el mismo ejemplo cómo se calcula la inversa de la matriz A.

Fuente del subapartado

La matriz identidad I_n es una matriz de n filas y n columnas que tiene un 1 en todos los elementos de la diagonal y un 0 en el resto.

$$\begin{pmatrix}
1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\
2 & 3 & 4 & 0 & 1 & 0 \\
-1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\xrightarrow{F_2-2F_1}
\begin{pmatrix}
1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\
0 & -1 & -2 & -2 & 1 & 0 \\
0 & 2 & 2 & 1 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\xrightarrow{F_2-2F_2}
\xrightarrow{F_3+2F_2}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & -3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\frac{1}{2}F_3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 3/2 & -1 & -1/2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\frac{F_2-2F_3}{F_1-3F_3}}$$

$$\begin{pmatrix}
1 & 2 & 0 & -7/2 & 3 & 3/2 \\
0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 \\
0 & 0 & 1 & 3/2 & -1 & -1/2
\end{pmatrix}
\xrightarrow{F_1 - 2F_2}
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & -3/2 & 1 & -1/2 \\
0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 \\
0 & 0 & 1 & 1/2 & -1 & -1/2
\end{pmatrix}$$

Por tanto:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3/2 & 1 & -1/2 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1/2 & -1 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 \\ 9 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (26)

3.3 Descomposición LU

El método de descomposición LU es una variante del método de Gauss y consiste en factorizar la matriz A del sistema lineal que se quiere resolver en dos matrices, una triangular inferior, que llamaremos L (lower), y otra triangular superior, que llamaremos U (upper). Una vez obtenida la descomposición, se encuentra la solución resolviendo el sistema lineal:

$$(LU)x = L(Ux) = b (27)$$

Donde resolvemos sucesivamente los dos sistemas lineales triangulares siguientes:

$$Ly = b$$

$$Ux = y$$
(28)

Existen muchas formas de realizar esta descomposición. Calcular la factorización LU de A es equivalente a resolver el siguiente sistema no lineal de n^2

ecuaciones y $n^2 + n$ incógnitas, siendo estas los coeficientes de la matriz triangular L y U:

$$a_{ij} = \sum_{r=1}^{\min(i,j)} l_{ir} u_{rj}$$
 (29)

Si fijamos n coeficientes iguales a 1, por ejemplo, la diagonal de la matriz L o U, tenemos los métodos de descomposición de Doolite o de Crout, respectivamente, los cuales ofrecen una forma eficiente de resolver el sistema (29). Estas factorizaciones existen y son únicas si y solo si las submatrices principales A_i de A de orden, $i = 1, 2, \ldots, n-1$ son no singulares.

En el caso de la descomposición de Doolite, donde l_{kk} = 1, en primer lugar se obtiene la k-ésima fila de U y luego la k-ésima columna de L como sigue:

Para $k = 1, \ldots, n$

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}$$
 $j = k, \dots, n$ (30)

$$l_{ik} = \frac{1}{u_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} \right) \qquad i = k+1, \dots, n$$
 (31)

La factorización de Crout, con $u_{kk} = 1$ se genera de forma similar, sin embargo, en ese caso se calcula primero la k-ésima columna de L y luego la k-ésima fila de U, de la forma siguiente:

Para $k = 1, \ldots, n$

$$l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}$$
 $i = k, ..., n$ (32)

$$u_{kj} = \frac{1}{l_{kk}} \left(a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj} \right) \qquad j = k+1, \dots, n$$
 (33)

La descomposición LU es una técnica de descomposición de matrices muy importante. Y, de hecho, muchos métodos de resolución de ecuaciones lineales y no lineales (que no trabajaremos en este curso) se van a basar en hacer descomposiciones LU, entre otras cosas, para resolverlos. Comprender bien esta técnica os facilitará la comprensión de algunos de los métodos que estudiaremos a continuación.

Ejemplo 4. Descomposición LU, factorización de Doolite

Os invitamos a comprobar los cálculos de la resolución del siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$x_1 + x_2 + 3x_4 = 4$$

$$2x_1 + x_2 - x_3 + x_4 = 1$$

$$3x_1 - x_2 - x_3 + 2x_4 = -3$$

$$-x_1 + 2x_2 + 3x_3 - x_4 = 4$$
(34)

La secuencia de operaciones $(E_2-2E_1) \longrightarrow (E_2)$, $(E_3-3E_1) \longrightarrow (E_3)$, $(E_4-(-1)E_1) \longrightarrow (E_4)$, $(E_3-4E_2) \longrightarrow (E_3)$, $(E_4-(-3)E_2) \longrightarrow (E_4)$ lo convierte en el sistema triangular:

$$x_1 + x_2 + 3x_4 = 4$$

$$-x_2 - x_3 - 5x_4 = -7$$

$$3x_3 + 13x_4 = 13$$

$$-13x_4 = -13$$
(35)

La descomposición de la matriz A usando la factorización de Doolite es la siguiente:

$$A = \left(\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 3 & -1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{ccccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{ccccc} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{array}\right) = LU$$

Para calcular los coeficientes l_{ij} , u_{ij} , procedemos por identificación como sigue:

$$u_{11}=1; \quad u_{12}=1; \quad u_{13}=0; \quad u_{14}=3;$$

$$l_{21}u_{11}=2 \longrightarrow l_{21}=2; \quad l_{31}u_{11}=3 \longrightarrow l_{31}=3; \quad l_{41}u_{11}=-1 \longrightarrow l_{41}=-1;$$

$$l_{21}u_{12}+u_{22}=1 \longrightarrow u_{22}=-1; \quad l_{21}u_{13}+u_{23}=-1 \longrightarrow u_{23}=-1; \quad l_{21}u_{14}+u_{24}=1 \longrightarrow u_{24}=-5;$$

$$l_{31}u_{12}+l_{32}u_{22}=-11 \longrightarrow l_{32}=4; \quad l_{41}u_{12}+l_{42}u_{22}=2 \longrightarrow l_{42}=-3;$$

$$l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23}+u_{33}=-1; \longrightarrow u_{33}=3; \quad l_{31}u_{14}+l_{32}u_{24}+u_{34}=2 \longrightarrow u_{34}=13;$$

$$l_{41}u_{13}+l_{42}u_{23}+l_{43}u_{33}=3; \longrightarrow l_{43}=0; \quad l_{41}u_{14}+l_{42}u_{24}+l_{43}u_{34}+u_{44}=-1 \longrightarrow u_{44}=-13;$$

De esta forma, la matriz A se descompone en su factorización LU:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} = LU$$
(36)

Esta factorización nos permite resolver fácilmente el sistema que contiene la matriz A. Por ejemplo, para resolver:

$$Ax = LUx = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 7 \\ 14 \\ -7 \end{pmatrix}$$
(37)

Primero introducimos la sustitución y = Ux. Luego Ly = b, es decir,

$$LUx = Ly = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 7 \\ 14 \\ -7 \end{pmatrix}$$
(38)

Este sistema se resuelve para y mediante un simple proceso de sustitución hacia delante, el resultado es $y_1 = 8$, $y_2 = -9$, $y_3 = 26$ y, por último, $y_4 = -26$. Y entonces resolvemos Ux = y para x, o sea, la solución del sistema original, es decir,

$$LUx = Ly = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -9 \\ 26 \\ -26 \end{pmatrix}$$
(39)

Al emplear, en este caso, la sustitución hacia atrás, obtenemos $x_4=2$, $x_3=0$, $x_2=-1$ y $x_1=3$.

Ejemplo 5. Descomposición LU, factorización de Crout

Mostramos con un ejemplo práctico de la factorización de Crout.

Factorización *LU*

En este ejemplo se puede ver de forma práctica cómo calcular las matrices *L* y *U*.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ -1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} \\ 0 & 1 & u_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(40)

Para calcular estos coeficientes procedemos sucesivamente por identificación:

$$l_{11} = 1; \quad l_{21} = 2; \quad l_{31} = -1$$

$$l_{11}u_{12} = 2 \longrightarrow u_{12} = 2; \quad l_{11}u_{13} = 3 \longrightarrow u_{13} = 3;$$

$$l_{21}u_{12} + l_{22} = 3 \longrightarrow l_{22} = -1; \quad l_{31}u_{12} + l_{32} = 3; \longrightarrow l_{32} = 2;$$

$$l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23} = 4 \longrightarrow u_{23} = 2;$$

$$l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33} = -1 \longrightarrow l_{33} = -2;$$

$$(41)$$

Resolviendo este sistema se obtienen los valores de l_{ij} y de u_{ij} . Una vez obtenida la factorización, resolvemos los dos sistemas triangulares.

El primero de ellos, Ly = b, lo resolvemos por sustitución hacia delante:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 9 \\ -2 \end{pmatrix}$$
 (42)

donde $y_1 = 6$, $y_2 = 3$ y, por último, $y_3 = 1$. El segundo sistema, Ux = y, se resuelve por sustitución hacia atrás.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (43)

donde $x_1 = 1$, $x_2 = 1$ y, por último, $x_3 = 1$.

Si la matriz A del sistema no es simétrica, o tiene muchos ceros, etc., y no converge por otros métodos iterativos (que veremos en el siguiente apartado), la descomposición LU es el método más aconsejable.

1) Resolved el sistema lineal Ax = b mediante la descomposición que estiméis oportuna:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(44)$$

Solución: x = (1, 1, 2, -1)

2) Resolved el sistema lineal Ax = b mediante la descomposición que estiméis oportuna:

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 100 \\ 200 \\ 200 \\ 200 \\ 100 \end{pmatrix}$$
(45)

Solución:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 46.153 \\ 84.615 \\ 92.307 \\ 84.6152 \\ 46.153 \end{pmatrix}$$
(46)

4. Métodos iterativos de resolución de sistemas de ecuaciones lineales

Cuando planteamos la resolución de un sistema de ecuaciones lineales mediante un método iterativo, lo que buscamos es encontrar una solución suficientemente buena mediante aproximaciones sucesivas. Para ello, a partir de una semilla inicial, calculamos una primera aproximación, y con esa aproximación calculamos la siguiente y así sucesivamente. De este modo, al cabo de varias repeticiones de este procedimiento, donde empleamos una aproximación para generar la siguiente, obtenemos un conjunto de vectores donde el último calculado está más cerca de la solución exacta que los anteriores.

Expresado de manera formal, un método iterativo para resolver el sistema de ecuaciones lineales Ax = b comienza con una aproximación inicial, $x^{(0)}$, a la solución x y genera una sucesión de vectores $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ de \mathbb{R}^n que se aproximan a la solución x del sistema, es decir:

$$\lim_{k \to \infty} x^{(k)} = x = A^{-1}b$$

Ejemplo 6. Sucesión de vectores

A continuación mostramos con un ejemplo qué es una sucesión de vectores y cómo debemos interpretar el límite anterior. Para ello, tomamos una sucesión $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ de \mathbb{R}^2 dada por $x^k = \left(\frac{1}{k}, \frac{1}{k}\right)$. Esta sucesión toma los siguientes valores para $k = 1, 2, 3 \dots$:

$$\left\{ (1,1), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{5}, \frac{1}{5}\right) \dots \right\}$$

Se observa que la sucesión de vectores se aproxima al vector (0,0) a medida que k se hace grande. Por tanto, para este ejemplo se tiene $\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = (0,0)$.

Los métodos iterativos conllevan un proceso que convierte el sistema Ax = b en otro equivalente de la forma x = Tx + c para alguna matriz fija T y un vector c. Después de seleccionar el valor inicial $x^{(0)}$, la sucesión de vectores de la solución se genera de la manera siguiente:

$$\begin{cases} x^{(0)} \in \mathbb{R}^n \\ x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c \end{cases}$$
 (47)

para k = 1, 2, ..., donde el vector $x^{(0)}$ es un vector arbitrario que se toma como aproximación inicial y la matriz $T \in \mathcal{M}_{n \times n}$ y el vector $c \in \mathbb{R}^n$ se construyen en

Sucesión numérica

Una sucesión de números (o numérica) es un conjunto ordenado de números, en la mayoría de los casos infinito. Cada uno de los números es denominado término (también elemento o miembro) de la sucesión. De la misma forma podemos definir una sucesión de vectores o una sucesión de funciones.

función de la matriz A y b del sistema. La matriz T y el vector c son conocidos como matriz y vector del método iterativo, respectivamente. Los elementos $\{x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}...\}$ son los iterantes y cada paso k del método se denomina iteración. La solución del sistema se aproxima por un cierto iterante (k) y el método iterativo se repite hasta que el iterante se aproxima a la solución tanto como queramos o cuando se supera el número máximo de iteraciones indicado. Este resultado es muy potente, ya que permite resolver sistemas complejos con un grado de precisión tan alto como se quiera, es decir, se puede elegir el error que se quiere cometer.

Los métodos iterativos rara vez se usan para resolver sistemas lineales de pequeña dimensión, ya que el tiempo necesario para conseguir una exactitud satisfactoria es superior al que requieren los métodos directos explicados en el apartado anterior. Sin embargo, en el caso de sistemas grandes con un alto porcentaje de ceros, son eficientes tanto en almacenamiento de computadora como en el tiempo de cómputo. Este tipo de sistemas se presenta en muchas aplicaciones, por ejemplo, en el análisis de circuitos y en la solución numérica de los problemas con valor en la frontera de las ecuaciones diferenciales parciales.

Todos los métodos iterativos que estudiaremos para resolver el sistema lineal Ax = b se basan en una descomposición de la matriz A del tipo A = M - N, con M una matriz invertible. Sustituyendo A por su descomposición, el sistema lineal se escribe de este modo:

$$Ax = b \iff (M - N)x = b \iff Mx - Nx = b \iff Mx = Nx + b \iff x = M^{-1}(Nx + b)$$

Por lo que se obtiene $x = (M^{-1}N)x + M^{-1}b$, que escribimos de forma equivalente como x = Tx + c con $T = M^{-1}N$ y $c = M^{-1}b$.

Se define así el esquema iterativo de punto fijo:

$$\begin{cases} x^{(0)} \in \mathbb{R}^n \\ x^{(k+1)} = (M^{-1}N)x^{(k)} + M^{-1}b \,. \end{cases}$$
 (48)

Para los estudios de los métodos que veremos en esta guía, método de Jacobi y método de Gauss-Seidel, consideramos la siguiente descomposición de la matriz A del sistema, la cual asumimos no singular y con elementos diagonales no nulos, A = D - L - U, donde D es una matriz diagonal de componentes no nulas, L es una matriz estrictamente triangular inferior y U es una matriz estrictamente triangular superior. De esta forma, si A es la matriz del sistema dada por:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \tag{49}$$

la matriz diagonal D tiene como elementos no nulos $d_{ii} = a_{ii} \neq 0$ para i = 1, 2, ..., n,

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & a_{33} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$
 (50)

y las matrices L y U verifican que $l_{ij} = -a_{ij}$ para i > j y $u_{ij} = -a_{ij}$ para i < j, respectivamente, de esta forma:

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -a_{n1} & \cdots & \cdots & -a_{nn-1} & 0 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & -a_{23} & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & 0 & 0 & -a_{34} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & -a_{n-1n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$(51)$$

4.1 Método iterativo de Jacobi

El método de Jacobi es un método iterativo de resolución de sistemas lineales de la forma Ax = b que se basa en una descomposición de la matriz A del tipo A = M - N, con M = D, parte diagonal de la matriz A cuyos elementos se suponen no nulos, y N = L + U, donde L y U son las partes triangulares inferior y superior respectivamente de la matriz A cambiadas de signo. La descomposición propuesta satisface los criterios de selección expuestos, donde las matrices D, L y U se han descrito previamente en (50) y (51). De esta forma:

$$Ax = b \iff (D - (L + U))x = b \iff Dx = (L + U)x + b \iff x = D^{-1}((L + U)x + b)$$
.

Por tanto, el método iterativo está dado por:

$$\begin{cases} x^{(0)} \in \mathbb{R}^n \\ x^{(k+1)} = Jx^{(k)} + D^{-1}b \,. \end{cases}$$
 (52)

donde $J = D^{-1}(L + U)$ es la matriz del método de Jacobi.

Ejemplo 7. Método iterativo de Jacobi

A continuación aplicamos el método de Jacobi para resolver sistemas lineales de la forma Ax = b.

En primer lugar, consideramos el caso:

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} \tag{53}$$

Con el fin de construir la matriz J del sistema, la matriz A del sistema se descompone en las siguientes matrices:

$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (54)

Así obtenemos la matriz del método iterativo de Jacobi $J = D^{-1}(L + U)$,

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1/3 & 0 \end{pmatrix} \tag{55}$$

Considerando el iterante inicial $x^0 = (0,0)^t$, obtenemos la siguiente sucesión de iterantes:

$$x^{(1)} = Jx^{(0)} + D^{-1}b = (2,4/3)^{t}$$

$$x^{(2)} = Jx^{(1)} + D^{-1}b = (2/3,2/3)^{t}$$

$$x^{(3)} = Jx^{(2)} + D^{-1}b = (4/3,10/9)^{t}$$

$$x^{(4)} = Jx^{(3)} + D^{-1}b = (8/9,8/9)^{t}$$
(56)

Podemos ver que la sucesión de iterantes se acerca a la solución exacta del sistema dada por $x = (1,1)^t$.

Sin embargo, si ahora consideramos el siguiente sistema lineal, cuya solución exacta es también $x = (1,1)^t$, y lo resolvemos de nuevo mediante el método de Jacobi,

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 2 \\ 1 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/2 \\ 4/3 \end{pmatrix}$$
 (57)

La matriz A del sistema se descompone en las siguientes matrices:

$$D = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (58)

Así obtenemos la siguiente matriz del método iterativo de Jacobi $J = D^{-1}(L + U)$,

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -4 \\ -3 & 0 \end{pmatrix} \tag{59}$$

Por tanto, si consideramos el iterante inicial $x^0 = (0,0)^t$, se obtiene la siguiente sucesión:

$$x^{(1)} = Jx^{(0)} + D^{-1}b = (5,4)^{t}$$
(60)

$$x^{(2)} = Jx^{(1)} + D^{-1}b = (-11, -11)^t$$
(61)

$$x^{(3)} = Jx^{(2)} + D^{-1}b = (49,37)^{t}$$
(62)

En este caso, si continuamos calculando los sucesivos iterantes, podemos observar que la sucesión no se acerca a la solución del sistema.

Como consejo, debemos decir que, cuando tengáis un sistema de ecuaciones lineales y estéis pensado en qué método vais a usar, el método de Jacobi debería estar en las primeras posiciones de la lista.

4.2 Método iterativo de Gauss-Seidel

El método de Gauss-Seidel, es un método iterativo basado en una descomposición de la matriz A del tipo A = M - N, con M = D - L y N = U. Las matrices D, L y U se han descrito en (50) y (51). En cada iteración se tiene que resolver un sistema triangular por sustitución hacia delante de la siguiente forma:

$$Ax = b \iff ((D-L)-U)x = b \iff (D-L)x = Ux + b$$
.

Por tanto, el método iterativo está dado por:

$$\begin{cases} x^{(0)} \in \mathbb{R}^n \\ x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + (D-L)^{-1}b \,. \end{cases}$$
 (63)

donde $G = (D - L)^{-1}U$ es la matriz del método de Gauss-Seidel.

La mecánica de cada paso del método de Gauss-Seidel es, por tanto, más complicada que en el método de Jacobi, pero la velocidad de convergencia es superior. Una de las características del método de Gauss-Seidel, es que las componentes de la iteración $x_i^{(k)}$ se emplean para calcular el resto de componentes $x_{i+1}^{(k)}$ de ese mismo iterante $x^{(k)}$. Mientras que en el método de Jacobi, las componentes del iterante $x^{(k)}$ solo se utilizan para calcular el iterante $x^{(k+1)}$.

Ejemplo 8. Método iterativo de Gauss-Seidel

A continuación, resolvemos empleando el método iterativo de Gauss-Seidel los sistemas lineales (53) y (57) abordados previamente con el método de Jacobi.

En primer lugar, consideramos el sistema siguiente:

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} \tag{64}$$

De nuevo, podemos escribir la matriz A del sistema como una combinación de las matrices D, L y U definidas en (54) para el método de Jacobi, que ahora es la matriz del método iterativo $G = (D-L)^{-1}U$:

$$\begin{pmatrix}
0 & -1 \\
0 & 1/3
\end{pmatrix}$$
(65)

Si consideramos el iterante inicial $x^{(0)} = (0,0)^t$, se obtiene la siguiente sucesión de iterantes resolviendo los siguientes sistemas triangulares inferiores:

$$(D - L)x^{(1)} = Ux^{(0)} + b$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$
 (66)

que es equivalente a:

$$\begin{cases} 2x_1^{(1)} = 0 + 4 & \longrightarrow x_1^{(1)} = 2\\ x_1^{(1)} + 3x_2^{(1)} = 0 + 4 & \longrightarrow x_2^{(1)} = (4 - x_1)/3 \end{cases}$$
(67)

Resolviendo de forma análoga los sucesivos sistemas triangulares inferiores se obtiene la siguiente sucesión de iterantes:

$$(D-L)x^{(1)} = Ux^{(0)} + b \longrightarrow x^{(1)} = (2,2/3)^{t}$$

$$(D-L)x^{(2)} = Ux^{(1)} + b \longrightarrow x^{(2)} = (4/3,8/9)^{t}$$

$$(D-L)x^{(3)} = Ux^{(2)} + b \longrightarrow x^{(3)} = (10/9,26/27)^{t}$$
(68)

Si continuamos calculando los siguientes iterantes, podemos comprobar que van aproximándose al vector solución $x = (1,1)^t$.

Consideremos ahora el caso siguiente:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 2 \\ 1 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/2 \\ 4/3 \end{pmatrix}$$
 (69)

Veamos si, a diferencia de Jacobi, Gauss-Seidel nos da una sucesión de iterantes próximos a la solución del sistema.

La matriz A del sistema se descompone en las mismas matrices D, U y L definidas en (58) para este mismo sistema. Sin embargo, en este caso la matriz del método iterativo está dada por $G = (D-L)^{-1}U$:

$$G = \begin{pmatrix} 0 & -4 \\ 0 & 12 \end{pmatrix} \tag{70}$$

Considerando el iterante inicial $x^{(0)} = (0,0)^t$, obtenemos la siguiente sucesión de iterantes resolviendo los siguientes sistemas triangulares inferiores:

$$(D-L)x^{(1)} = Ux^{(0)} + (D-L)^{-1}b \longrightarrow x^{(1)} = (5, -11)^t$$
(71)

$$(D-L)x^{(2)} = Ux^{(1)} + (D-L)^{-1}b \longrightarrow x^{(2)} = (49, -143)^t$$
(72)

$$(D-L)x^{(3)} = Ux^{(2)} + (D-L)^{-1}b \longrightarrow x^{(3)} = (577, -1727)^t$$
(73)

Observamos que con el método de Gauss-Seidel la solución obtenida también se aleja de la solución del sistema $x=(1,1)^t$.

A continuación, mostramos con un ejemplo sencillo cómo intervienen cada una de las componentes en ambos métodos para mostrar la principal diferencia entre ellos:

Ejemplo 9. Planteamiento del esquema iterativo: Jacobi y Gauss-Seidel

Consideramos el sistema lineal Ax = b de dos ecuaciones y dos incógnitas definido de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} 3 & -2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 4 \end{pmatrix} \tag{74}$$

Si calculamos las matrices D, L y U, se tiene:

$$D = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 (75)

Por tanto, el esquema de Jacobi está dado por $Dx^{(k+1)} = (L+U)x^{(k)} + b$. De esta forma, para calcular cada iterante se tiene que resolver el siguiente sistema:

$$\begin{cases} 3x_1^{(k+1)} = 2x_2^{(k)} + 6 \\ 4x_2^{(k+1)} = -2x_1^{(k)} + 4 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{2}{3}x_2^{(k)} + 2 \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{2}x_1^{(k)} + 2 \end{cases}$$
(76)

En el caso del método iterativo de Gauss-Seidel, el sistema a resolver para cada uno de los iterantes es $(D-L)x^{(k+1)} = Ux^{(k)} + b$, que equivale con el siguiente sistema:

$$\begin{cases} 3x_1^{(k+1)} = 2x_2^{(k)} + 6 \\ 2x_1^{(k+1)} + 4x_2^{(k+1)} = 4 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{3}x_1^{(k)} + 2 \\ x_2^{(k+1)} = 1 - \frac{1}{2}x_1^{(k+1)} \end{cases}$$
(77)

Comparando ambos métodos podemos observar que, cómo habíamos mencionado previamente, empleando el método de Jacobi, para el iterante k+1, necesitamos el iterante k. Sin embargo, en el caso de Gauss-Seidel, para el cálculo de la componente i del iterante k+1, necesitamos la componente i-1 del mismo iterante k+1.

4.3 Convergencia y estimación del error

En los ejemplos anteriores, hemos observado que los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel no siempre nos dan una aproximación de la solución. Sin embargo, cuando elegimos un método iterativo nos interesa que la sucesión de iterantes se aproxime poco a poco a la solución exacta del sistema. Por tanto, cuando se programa un método iterativo para la resolución de algún sistema de ecuaciones lineales, una de las principales preguntas que uno se puede hacer es: ¿el método iterativo da una buena aproximación de la solución?. Y en caso afirmativo, ¿cuándo debemos detener este método? Pues la respuesta es: cuando sea tan preciso como queramos. Esta afirmación plantea una nueva pregunta: ¿cuándo la solución va a tener la precisión que queremos? Para poder dar respuesta a esta pregunta, vamos a necesitar introducir en este subapartado el concepto de convergencia.

Dado un sistema de ecuaciones lineales Ax = b y un método iterativo:

$$\begin{cases} x^{(0)} \in \mathbb{R}^n \\ x^{(k+1)} = (M^{-1}N)x^{(k)} + M^{-1}b \end{cases}$$
 (78)

con $x^{(0)}$ un iterante inicial arbitrario, diremos que el método iterativo es convergente a la solución x del sistema si, a medida que calculamos iterantes, estos se aproximan cada vez más a la solución exacta, de modo que a partir de un cierto iterante el error de ese iterante y el de los sucesivos iterantes es tan pequeño como queramos.

Es decir, si a partir de un cierto momento, la diferencia entre el último iterante y la solución exacta es tan pequeña como queremos. La forma de medir esta diferencia nos la proporciona una norma vectorial.

De forma equivalente, un método iterativo converge cuando podamos encontrar un iterante k tal que x^k esté tan cerca de la solución x como deseemos.

Dado un método iterativo de la forma $x^{(k+1)} = Tx^{(k)} + c$, una condición suficiente para la convergencia del método con cualquier iterante inicial $x^{(0)}$ es que ||T|| < 1 para alguna norma matricial.

Hay que tener en cuenta que si no encontramos una norma para la cual se satisfaga $\|T\|<1$, no podemos concluir que el método no sea convergente, ya que podría existir alguna otra norma matricial para la cual la norma de la matriz del método fuese menor que 1. El radio espectral de la matriz, $\rho(T)$, definido previamente, es un número que caracteriza a la matriz y que es siempre mayor o igual que cualquiera de las normas de la matriz, por tanto la convergencia del método quedará asegurada si el radio espectral es estrictamente menor que uno. Lo que da lugar al siguiente resultado.

Dado un método iterativo de la forma $x^{(k+1)} = Tx^{(k)} + c$. la sucesión de vectores $\{x^{(k)}\}$ converge en la solución del sistema Ax = b para cualquier elección de $x^{(0)}$ si, y solo si, el radio espectral de la matriz del método iterativo es estrictamente menor que 1, es decir, $\rho(T) < 1$.

Este resultado es muy potente para la resolución de sistemas lineales, ya que nos va a permitir saber cuándo vamos a poder utilizar un método iterativo sin miedo a crear bucles infinitos o a tener soluciones inexactas.

La rapidez de convergencia de un procedimiento depende del radio espectral de la matriz relacionada con el método. Por ello, una forma de seleccionar un procedimiento que acelere la convergencia consiste en seleccionar un método cuya matriz asociada tenga un radio espectral mínimo. No existen resultados generales que nos digan cuál de los dos métodos, Jacobi o Gauss-Seidel, converge más rápido para un sistema lineal arbitrario. Sin embargo, en casos especiales, sí conocemos la respuesta, como podemos ver en el siguiente resultado conocido como teorema de Stein-Rosenberg.

Si $a_{ij} \le 0$ para cada $i \ne j$ y $a_{ii} > 0$ para cada i = 1, 2, ..., n entonces se cumple una de las cuatro condiciones siguientes:

- $0 < \rho(T_{GS}) < \rho(T_I) < 1$
- $1 < \rho(T_I) < \rho(T_{GS})$
- $\rho(T_{GS}) = \rho(T_I) = 0$
- $\rho(T_{GS}) = \rho(T_I) = 1$

Por tanto, o bien los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel convergen y Gauss-Seidel lo hace más rápido, o ninguno de los dos métodos converge.

Finalmente, presentamos otro resultado que puede ser útil en el caso de que la matriz del sistema sea diagonal estrictamente dominante. Una matriz es diagonal estrictamente dominante por filas o por columnas si satisface:

por filas
$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n$$
 (79)

por columnas
$$|a_{ii}| > \sum_{k=1}^{n} |a_{ki}|$$
 $i = 1, ..., n$ (80)

Si tenemos un sistema Ax = b y la matriz A del sistema es diagonal estrictamente dominante, entonces tanto el método de Jacobi como el de Gauss-Seidel convergen.

Es necesario señalar que la condición de que la matriz de un sistema tenga diagonal estrictamente dominante es condición suficiente pero no necesaria para la convergencia de los métodos. En ocasiones calcular el radio espectral resulta complejo dependiendo de la dimensión de la matriz, por tanto es importante tener en cuenta otros resultados sobre convergencia del método iterativo.

Además del estudio de la convergencia introducido previamente, a continuación presentamos un nuevo modo de medir el grado de aproximación de la solución de un sistema lineal a la verdadera solución con el fin de saber qué método iterativo puede resultar más conveniente para resolver el sistema.

Si tenemos $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ una aproximación a la solución del sistema lineal definido por Ax = b, el vector residual de \tilde{x} respecto de este sistema es $r = b - A\tilde{x}$. Desde el punto de vista intuitivo, parece razonable que si \tilde{x} es una aproximación a la solución x de Ax = b y el vector residual $r = b - A\tilde{x}$ tiene la propiedad de que ||r|| es pequeño, entonces $||x - \tilde{x}||$ también será pequeño. A menudo este es el caso, pero algunos sistemas no tienen este comportamiento.

Ejemplo 10. El residuo y la exactitud de la aproximación

En este ejemplo vamos a ver, con un sistema de ecuaciones lineal, que no todas las aproximaciones que consideremos son siempre las óptimas para poder encontrar la solución al sistema de ecuaciones lineales que queremos resolver.

El sistema lineal Ax = b dado por:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1,0001 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3,0001 \end{pmatrix}$$
 (81)

tiene la solución única $x = (1,1)^t$. Vamos a suponer que la aproximación $\tilde{x} = (3,0)^t$ es la solución del sistema. Calculamos el valor residual y obtenemos:

$$r = b - A\tilde{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3,0001 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1,0001 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -0,0002 \end{pmatrix}$$
 (82)

de modo que $||r||_{\infty}=0,0002$. Aunque la norma del vector residual es pequeña, la aproximación $\tilde{x}=(3,0)^t$ es evidentemente muy deficiente; de hecho, $||x-\tilde{x}||_{\infty}=2$.

A partir de este ejemplo, se puede ver la dificultad que tiene interpretar el resultado de un cálculo numérico a partir de la estimación del error. Bajo ciertas condiciones, se puede conseguir información "fiable" sobre el error si se consideran las normas de la matriz A y la de su inversa, A^{-1} . A continuación, vamos a dar un resultado importante para este cálculo. Supongamos que \tilde{x} es una aproximación de la solución de Ax = b, que A es una matriz no singular y que r es el vector residual de \tilde{x} . Entonces, para toda norma natural (recordemos que las normas naturales son aquellas normas inducidas por una norma vectorial, por ejemplo, $||\cdot||_1$, $||\cdot||_2$, $||\cdot||_\infty$):

$$||x - \tilde{x}|| \le ||r|| \cdot ||A^{-1}||$$

$$y$$

$$\frac{||x - \tilde{x}||}{||x||} \le ||A|| \cdot ||A^{-1}|| \cdot \frac{||r||}{||b||}$$
(83)

Estas desigualdades nos indican que las cantidades $||A^{-1}||$ y $||A|| \cdot ||A^{-1}||$ ofrecen un indicio de la conexión entre el vector residual r y la exactitud de la aproximación. En general, el error relativo $\frac{||x-\bar{x}||}{||x||}$ es de gran interés, y de acuerdo con el anterior teorema, está acotado por $||A|| \cdot ||A^{-1}||$ con el residual relativo de esta aproximación $\frac{||r||}{||b||}$. En esta aproximación, puede usarse cualquier norma adecuada, siempre que se use la misma durante todo el proceso. El producto $||A^{-1}|| \cdot ||A||$ recibe el nombre de condición de la matriz (K(A)). El condicionamiento de una matriz mide la sensibilidad de la solución de un sistema de ecuaciones lineales de matriz A respecto de la variación de la matriz de coeficientes y también respecto de la variación en el vector de los términos independientes. En la práctica, si K(A) es menor que 1, la matriz A está bien condicionada, mientras que si A0 es mayor que 1, la matriz está mal condicionada. Esto es muy importante en la práctica, ya que no se puede asegurar que un vector residual pequeño implique una solución aproximada exacta.

Ejemplo 11. Resolución de un sistema lineal mediante métodos iterativos: estudio de convergencia y cálculo del residuo

Veamos con un ejemplo cómo resolver un sistema lineal mediante los métodos iterativos introducidos en esta guía, y estudiaremos la convergencia del método aplicando los resultados introducidos previamente.

Se trata de resolver el sistema lineal:

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 10 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (84)

cuya solución es el vector $x = (-1,5;3;-0,5)^t$.

Teniendo en cuenta los criterios de convergencia introducidos en esta guía, sabemos que como la matriz A es diagonal estrictamente dominante, los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel convergen en la solución del sistema.

Importante

En una matriz bien condicionada (K(A) < 1), un vector residual (r) pequeño implica una seguridad relativa de que una solución aproximada será exacta.

Por tanto, con el fin de resolver el sistema lineal mediante los métodos iterativos introducidos en esta guía, en primer lugar se descompone la matriz del sistema, A, como A = D - L - U, es decir, tenemos que calcular las matrices D, L y U, dadas por:

$$D = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(85)

Si resolvemos el sistema empleando el método de Jacobi, las matrices M y N se corresponden con M=D y N=L+U. Además, la matriz del método, $J=D^{-1}(L+U)$, es:

$$J = \left(\begin{array}{ccc} 0 & -1/4 & 0 \\ -1/4 & 0 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 0 \end{array} \right)$$

Si queremos estudiar la convergencia del método empleando el radio espectral, debemos calcular los autovalores de la matriz J, que son $\lambda_1 = -1/\sqrt{8}$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = 1/\sqrt{8}$, por tanto, el radio espectral es $\rho(J) = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, |\lambda_3|\} = 1/\sqrt{8} < 1$. De esta forma, con el estudio del radio espectral de la matriz J también podemos concluir que el método de Jacobi nos calcula una sucesión de iterantes que convergen a la solución. Además, estudiando alguna norma matricial de J, por ejemplo, $\|J\|_1$, observamos:

$$||J||_1 = \max_{j=1,2,3} \sum_{i=1}^3 |J_{ij}| = \max\left\{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right\} = \frac{1}{2} < 1$$

De este modo, el cálculo de la norma matricial también nos permite concluir que el método de Jacobi converge.

La elección del estimador inicial no influye en la convergencia, pero sí en el número de iteraciones para llegar a una solución aceptable. Si se conoce una aproximación de la solución, se usará como estimador inicial. En caso de que no sea así, se puede tomar como estimador inicial bien el término independiente, bien un vector de componentes todas iguales a 1 o a 0. Nosotros tomaremos aquí como estimador inicial un vector que satisfaga la primera ecuación del sistema lineal $x^{(0)} = (-1,1,-1)^t$.

Previamente hemos probado que el método de Jacobi para este sistema converge en la solución, para mostrar que efectivamente dicha convergencia se está produciendo, vamos a calcular el residuo de cada iteración. En este caso, tomamos por comodidad la norma $||\cdot||_{\infty}$ y lo siguiente:

$$||r^{(0)}|| = ||Ax^{(0)} - b||_{\infty} = 8$$
 (86)

Demos el primer paso del esquema:

$$Dx^{(1)} = Nx^{(0)} + b = (L + U)x^{(0)} + b$$
(87)

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -3 \\ 10 \\ 1 \end{pmatrix}$$
(88)

Aclaración

En este ejemplo se ha estudiado la convergencia del método con distintos procedimientos, sin embargo, en el momento en que uno de los mecanismos nos confirme que el método converge, no necesitamos aplicar el resto de resultados.

es decir,

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow x^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(89)

con

$$||r^{(1)}||_{\infty} = 2 \tag{90}$$

Por tanto, el residuo ha disminuido. Si seguimos iterando:

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -1.5 \\ 2.75 \\ -0.5 \end{pmatrix}; \quad ||r^{(2)}||_{\infty} = 1$$

$$x^{(5)} = \begin{pmatrix} -1,4922\\ 3,0000\\ -0,4522 \end{pmatrix}; \quad ||r^{(5)}||_{\infty} = 0,0313$$
 (91)

$$x^{(9)} = \begin{pmatrix} -1,4999 \\ 3,0000 \\ -0.4999 \end{pmatrix}; \quad ||r^{(9)}||_{\infty} = 4,8828 \times 10^{-4}$$

Observamos que el residuo es cada vez menor, como se podía esperar.

A continuación ilustramos el algoritmo de Gauss-Seidel para el mismo ejemplo. Al igual que con el método de Jacobi, como la matriz del sistema es diagonal estrictamente dominante, sabemos que el método de Gauss-Seidel calcula una sucesión de iterantes que converge en la solución. Os animamos a que estudiéis la convergencia de dicho método, con alguno de los otros resultados presentados previamente. En el caso del método de Gauss-Seidel, las matrices M y N están dadas por M = D - L y N = U. Demos el primer paso del esquema:

$$Mx^{(1)} = Nx^{(0)} + b = Ux^{(0)} + b$$
(92)

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -3 \\ 10 \\ 1 \end{pmatrix}$$
(93)

Y tendremos, por tanto, que resolver el sistema triangular inferior:

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} -4 \\ 11 \\ 1 \end{pmatrix}$$
 (94)

que se resuelve por sustitución hacia delante, por lo que obtenemos:

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} -1,0000\\ 3,0000\\ -0,5000 \end{pmatrix} \tag{95}$$

con

$$||r^{(1)}||_{\infty} = 2 \tag{96}$$

En el paso siguiente se obtiene el resultado con cuatro decimales:

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -1,0000 \\ 3,0000 \\ -0.5000 \end{pmatrix} \tag{97}$$

Se constata un comportamiento mucho mejor que el del método de Jacobi. Os proponemos hacer un estudio comparativo entre la convergencia de los dos métodos iterativos presentados para ver que el método de Gauss-Seidel converge más rápido que el método de Jacobi.

4.4 Método iterativo para la aproximación de autovalores y autovectores: método de la potencia y de la potencia inversa

La solución de muchos problemas de la física y otros campos requiere calcular, o al menos eliminar, los valores propios y los correspondientes vectores propios de una matriz. Ya hemos visto que una matriz A de $n \times n$ tiene exactamente n valores propios que son raíces del polinomio $p(\lambda) = det(A - \lambda I)$. En teoría, los valores propios de A se obtienen calculando las n raíces del polinomio $p(\lambda)$; después, se resuelven los sistemas lineales asociados para determinar los vectores propios correspondientes.

En la práctica es difícil obtener el polinomio característico $p(\lambda)$ y, excepto para los valores pequeños de n, también es difícil determinar las raíces del polinomio de grado n. Para obtener los valores y vectores propios, se necesitan los métodos de aproximación.

4.5 Método de la potencia

Supongamos que la matriz A es diagonalizable y que tiene un valor propio dominante que denotaremos λ_1 , luego:

$$|\lambda_1| \ge |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n| \tag{98}$$

Sea $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ la base de vectores propios asociada, de modo que $Ax_i = \lambda_i x_i$ para $i = 1, \dots, n$. Este método determina λ_1 y un vector propio asociado x_1 . Veamos su fundamento e ilustremos su aplicación con un ejemplo.

Cualquier vector arbitrario $x \in \mathbb{R}^n$ se expresa de una única forma como combinación lineal de los vectores propios de la base.

$$x = C_1 x_1 + C_2 x_2 + \dots + C_n x_n \tag{99}$$

con $C_i \in \mathbb{R}$ para $i = 1, \dots, n$.

Multiplicando los dos miembros de la ecuación anterior por las potencias A^k de A con $k \in \mathbb{N}$:

$$A^{k}x = A^{k}(C_{1}x_{1} + C_{2}x_{2} + \dots + C_{n}x_{n}) = C_{1}\lambda_{1}^{k}x_{1} + C_{2}\lambda_{2}^{k}x_{2} + \dots + C_{n}\lambda_{n}^{k}x_{n} =$$

$$= \lambda_{1}^{k} \left[C_{1}x_{1} + C_{2} \left(\frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}} \right)^{k} x_{2} + \dots + C_{n} \left(\frac{\lambda_{m}}{\lambda_{1}} \right)^{k} x_{n} \right]$$
(100)

Puesto que $|\lambda_1| > |\lambda_i|$ para $i \ge 2$, los cocientes $\frac{\lambda_i}{|\lambda_1|}$ son valores más pequeños que 1. Esto quiere decir que, a medida que la K se hace mayor, los cocientes $\left(\frac{\lambda_i}{|\lambda_1|}\right)^k$ son cada vez más pequeños, es decir, prácticamente 0.

En consecuencia, podemos decir que cuando k crece $A^{(k)}x$ es aproximadamente igual a $\lambda_1^k C_1 x_1$:

$$A^k x \approx \lambda_1^k C_1 x_1 \tag{101}$$

Si elegimos una estimadora inicial adecuada $x^{(0)}$, se puede construir la siguiente sucesión:

$$x^{(k+1)} = Ax^{(k)} \longrightarrow x^{(k)} = A^k x^{(0)} = A^k x$$
 (102)

Por tanto, si en la ecuación anterior sustituimos el valor de $A^k x^{(0)}$ de la ecuación 101, se tiene:

$$x^{(k)} \approx \lambda_1^k C_1 x_1 = \lambda_1^k C_1 \tag{103}$$

y si ahora iteramos un paso más (de k a k+1), se tiene:

$$x^{(k+1)} \approx \lambda_1^{(k+1)} C_1 x_1 = \lambda_1^{(k+1)} C_1 \tag{104}$$

Si ahora dividimos las ecuaciones 104 entre la ecuación 103, se obtiene la siguiente expresión, que nos permite calcular λ_1 :

$$\frac{\chi^{(k+1)}}{\gamma^{(k)}} = \lambda_1 \tag{105}$$

luego si $x_1^{(k)} = 1$, entonces $x_1^{(k+1)} = \lambda_1$. Si a continuación escalamos $x^{(k+1)}$ para que $x_1^{(k+1)} = 1$, entonces $x_1^{(k+2)} = \lambda_1$, etc.

En el siguiente ejemplo vamos a aplicar el algoritmo al cálculo del valor propio λ_1 ; de este modo, el siguiente ejemplo nos va a demostrar que aplicando este método iterativo vamos a ser capaces de calcular el valor propio mayor en valor absoluto de la matriz A. Fijaos en que en este ejemplo se da el valor de λ_1 = 6 y se pide comprobarlo. Daos cuenta de que, si en algún momento tuvierais que calcular el valor propio de mayor valor absoluto de una matriz, no tendríais que calcular el polinomio característico y resolverlo, bastaría con usar este método.

Ejemplo 12. Método de la potencia para el cálculo de valores propios

Vamos a ver el método de la potencia con un ejemplo para calcular un valor propio de una matriz, de la que previamente vamos a conocer sus valores propios; así, vamos a comprobar que el resultado es correcto. Por tanto, dada la siguiente matriz:

$$\begin{pmatrix}
-4 & 14 & 0 \\
-5 & 13 & 0 \\
-1 & 0 & 2
\end{pmatrix}$$
(106)

que tiene los valores característicos $\lambda_1=6,\ \lambda_2=3\ y\ \lambda_3=2,$ suponemos $x^{(0)}=(1,\ 1,\ 1),\ y$ entonces:

$$y^{(1)} = Ax^{(0)} = (10,8,1) \tag{107}$$

Así que:

$$||y^{(1)}||_{\infty} = 10; \quad y_1^{(1)} = 10; \quad x^{(1)} = \frac{y^{(1)}}{10} = (1; 0.8; 0.1)$$
 (108)

Continuando de esta manera se generan los valores de la siguiente tabla, donde λ es la aproximación al valor propio dominante de la matriz, que en este caso es 6. Este método, además, nos dará su vector propio asociado, tal y como se puede observar en la tabla que recoge las doce primeras iteraciones del método de la potencia:

Probadlo vosotros mismos

Os invitamos a resolver con detalle el ejercicio y llegar a los resultados que se aportan en él.

Tabla con	los valores	de las	iteraciones	del mé	todo de	· la	notencia

Número de iteración	λ	x
0	_	(1,1,1)
1	10	(1; 0,8; 0,1)
2	7,2	(1; 0,75; -0,11)
3	6,5	(1; 0,730769; -0,188803)
4	6,250769	(1; 0,722200; -0,220850)
5	6,111000	(1; 0,718182; -0,235915)
6	6,054546	(1; 0,716216; -0,243095)
7	6,027027	(1; 0,715247; -0,246588)
8	6,013453	(1; 0,714765; -0,248306)
9	6,006711	(1; 0,714525; -0,249157)
10	6,003352	(1; 0,714405; -0,249579)
11	6,001675	(1; 0,714346; -0,249790)
12	6,000837	(1; 0,714316; -0,249895)

Como se puede ver, la aproximación al valor propio dominante (es decir, el valor propio de mayor valor absoluto) es λ_1 = 6,000837 \approx 6; como se esperaba, además, este método nos da el vector propio asociado a este valor propio.

Método de la potencia inversa

Se puede obtener el valor propio de menor valor absoluto de A y su vector propio asociado aplicando el método de la potencia a A^{-1} , cuyos valores propios son, como sabemos, los recíprocos de los valores de A. El recíproco del menor valor propio de A en valor absoluto es el de mayor absoluto de A^{-1} . En la práctica, se utiliza la descomposición A = LU para resolver este problema en vez de calcular A^{-1} .

Una vez elegido el estimador inicial $x^{(0)}$ se calcula $x^{(1)}$ resolviendo el sistema

$$Ax^{(1)} = (LU)x^{(1)} = x^{(0)}$$
(109)

Si A^{-1} no existe, 0 es el valor propio de menor valor absoluto y cualquier vector del núcleo de A se puede tomar como vector propio asociado. El resto de los valores propios y de los vectores propios asociados se pueden obtener aplicando reiteradamente la siguiente idea. Una vez conocido el elemento propio (λ_1, x_1) , se selecciona un estimador inicial que sea ortogonal a x_1 y aplicando el método de las potencias se obtiene λ_2 y un vector propio asociado x_2 . Para obtener λ_3 se elige un vector inicial que sea ortogonal tanto a x_1 como a x_2 y se sigue el proceso hasta tener todos los valores propios calculados y sus respectivos vectores propios asociados a los valores propios.

Convergencia

Cuando definíamos el concepto de convergencia, es posible que no quedase demasiado claro, pero aquí tenemos un claro ejemplo. Si os fijáis en los valores del valor propio dominante, a medida que el número de iteraciones aumenta, este va tendiendo a 6; se puede decir entonces que λ converge a 6 en este ejemplo.

Hasta el momento se han presentado algunos de los métodos directos o iterativos principales para resolver los sistemas de ecuaciones lineales. Resumiendo, podemos decir que lo primero que debéis hacer es colocar el sistema en forma de matriz, decidir cuál es el error que queréis tener y, por último, decidir qué método es más eficiente para resolverlo.

Después de la introducción a los métodos numéricos para resolver los sistemas de ecuaciones lineales tenéis el nivel suficiente para afrontar el primer ejemplo de esta guía, con el que se motivaba el porqué de la importancia de usar los métodos numéricos para buscar la solución en sistemas de ecuaciones lineales. ¿Habéis vuelto a buscar la solución de ese sistema? ¿Qué método elegiríais?

Pista

Probad a resolverlo con el vector unidad como primera aproximación.

Bibliografía

Atkinson, L. V.; Harley, P. J. (1987). *Introducción a los métodos numéricos con Pascal*. Argentina: Ed. Addison-Wesley.

Douglas Faires, J.; Burden, R. (2004). *Análisis numérico*. México: International Thomson Editores.

Kincaid, D. (2009). *Numerical analysis: mathematics of scientific computing*. Providence, R.I.: American Mathematical Society.