Métodos numéricos para sistemas lineales

M.C. Rivara, 2011

Referencia: Mathews-Fink

- La solución numérica de EDPs lineales necesita de la solución numérica de sistemas de ecuaciones lineales. Las matrices son grandes y sparse (5 o 6 elementos distintos de cero por fila)
- Métodos directos tipo Gauss
    - Resuelve el sistema de manera 'exacta'. Recordar que siempre aparecen errores al usar operaciones de punto flotante.
    - Hay métodos especiales y software para matrices sparse. Se requiere mucho almacenamiento

- Métodos iterativos
    - Pueden implementarse guardando solo los elementos distintos de 0 de la matriz. Eficientes en cuanto a almacenamiento.
    - Requieren una estimación inicial de la solución del sistema para comenzar.
    - Criterio de detención es complicado de manejar para asegurar precisión en la solución aproximada obtenida.

Recordemos: $\boxed{\text{Métodos Directos}}$

$\boxed{\text{Método de Gauss}}$: pivoteo y eliminación

$$[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}] = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} & b_N \end{array}\right]. \tag{7}$$

Un sistema $\boxed{\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{B}}$, cuya matriz ampliada viene dada en (7), puede resolverse realizando las operaciones elementales con las filas de la matriz ampliada $[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}]$. Las variables x_k no sirven más que para marcar el sitio de los coeficientes y pueden ser omitidas hasta el final de los cálculos.

Teorema 3.8 (Operaciones elementales con las filas). Cualquiera de las siguientes operaciones aplicada a la matriz ampliada (7) produce un sistema lineal equivalente.

(8) Intercambio: El orden de las filas puede cambiarse.

(9) Escalado: Multiplicar una fila por una constante no nula.

(10) Sustitución: Una fila puede ser reemplazada por la suma de esa fila más un múltiplo de cualquier otra fila; o sea, $\text{fila}_r = \text{fila}_r - m_{rq} \times \text{fila}_q$.

Como se conoce de los cursos previos de álgebra lineal, la forma habitual de usar (10) es reemplazar una fila por la diferencia entre esa fila y un múltiplo de otra.

Definición 3.3 (Pivotes y multiplicadores). El elemento a_{qq} de la matriz de los coeficientes en el paso $q+1$ que se usará en la eliminación de a_{rq}, para $r = q+1, q+2, \ldots, N$, se llama q-ésimo ***pivote*** y la fila q-ésima se llama ***fila pivote***. Los números $m_{rq} = a_{rq}/a_{qq}$ ($r = q+1, q+2, \ldots, N$) por los que se multiplica la fila pivote para restarla de las correspondientes filas posteriores se llaman ***multiplicadores*** de la eliminación. ▲

EJEMPLO

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + x_3 + 4x_4 &= 13 \\ 2x_1 + 0x_2 + 4x_3 + 3x_4 &= 28 \\ 4x_1 + 2x_2 + 2x_3 + x_4 &= 20 \\ -3x_1 + x_2 + 3x_3 + 2x_4 &= 6. \end{aligned}$$

La matriz ampliada es

$$\begin{array}{l} \text{pivote} \rightarrow \\ m_{21} = 2 \\ m_{31} = 4 \\ m_{41} = -3 \end{array} \left[\begin{array}{rrrr|r} \underline{1} & 2 & 1 & 4 & 13 \\ 2 & 0 & 4 & 3 & 28 \\ 4 & 2 & 2 & 1 & 20 \\ -3 & 1 & 3 & 2 & 6 \end{array}\right].$$

La primera fila se usa para eliminar los elementos de la primera columna que están por debajo de la diagonal principal. En este paso, esta primera fila es la fila pivote y su elemento $a_{11} = 1$ es el elemento pivote. Los valores $m_{k1} = a_{k1}/a_{11}$ (para $k = 2, 3, 4$) son los multiplicadores, o sea, los escalares por los que hay que multiplicar la primera fila para, restando de la fila k-ésima el correspondiente múltiplo de la primera fila, hacer cero el elemento a_{k1}. El resultado de la eliminación es

$$\begin{array}{l} \\ \text{pivote} \rightarrow \\ m_{32} = 1.5 \\ m_{42} = -1.75 \end{array} \left[\begin{array}{rrrr|r} 1 & 2 & 1 & 4 & 13 \\ 0 & \underline{-4} & 2 & -5 & 2 \\ 0 & -6 & -2 & -15 & -32 \\ 0 & 7 & 6 & 14 & 45 \end{array}\right].$$

Ahora, usamos la segunda fila para eliminar los elementos de la segunda columna que están por debajo de la diagonal principal. Esta segunda fila es la fila pivote y los valores $m_{k2} = a_{k2}/a_{22}$ (para $k = 3, 4$) son los multiplicadores. El resultado de la eliminación es

$$\begin{array}{l} \\ \\ \text{pivote} \rightarrow \\ m_{43} = -1.9 \end{array} \left[\begin{array}{rrrr|r} 1 & 2 & 1 & 4 & 13 \\ 0 & -4 & 2 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & \underline{-5} & -7.5 & -35 \\ 0 & 0 & 9.5 & 5.25 & 48.5 \end{array}\right].$$

Finalmente, restamos de la cuarta fila la tercera multiplicada por $m_{43} = a_{43}/a_{33} = -1.9$ y el resultado es el sistema triangular superior

$$\left[\begin{array}{rrrr|r} 1 & 2 & 1 & 4 & 13 \\ 0 & -4 & 2 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & -5 & -7.5 & -35 \\ 0 & 0 & 0 & -9 & -18 \end{array}\right]. \tag{11}$$

Se resuelve de abajo hacia arriba!

$$-9x_4 = -18$$

MÉTODOS ITERATIVOS

Método de iteración de Jacobi

Ejemplo 3.26. Consideremos el sistema de ecuaciones

$$
\begin{aligned}
4x - y + z &= 7 \\
4x - 8y + z &= -21 \\
-2x + y + 5z &= 15.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Solución (2, 4, 3)

Estas ecuaciones las podemos escribir como

$$
\begin{aligned}
x &= \frac{7 + y - z}{4} \\
y &= \frac{21 + 4x + z}{8} \\
z &= \frac{15 + 2x - y}{5},
\end{aligned}
\tag{2}
$$

lo que sugiere el siguiente proceso iterativo:

$$
\boxed{
\begin{aligned}
x_{k+1} &= \frac{7 + y_k - z_k}{4} \\
y_{k+1} &= \frac{21 + 4x_k + z_k}{8} \\
z_{k+1} &= \frac{15 + 2x_k - y_k}{5}.
\end{aligned}
}
\tag{3}
$$

Necesitamos valores iniciales (x_0, y_0, z_0) para calcular (x_1, y_1, z_1)

Ver programa en Matlab en Mathews-Fink

Para el ejemplo converge!

Vamos a comprobar que si empezamos con $\boxed{\boldsymbol{P}_0 = (x_0, y_0, z_0) = (1, 2, 2)}$, entonces la iteración (3) parece converger a la solución $(2, 4, 3)$.

Sustituyendo $x_0 = 1$, $y_0 = 2$ y $z_0 = 2$ en el miembro derecho de la relación (3), obtenemos

$$x_1 = \frac{7 + 2 - 2}{4} = 1.75$$
$$y_1 = \frac{21 + 4 + 2}{8} = 3.375$$
$$z_1 = \frac{15 + 2 - 2}{5} = 3.00.$$

El nuevo punto $\boldsymbol{P}_1 = (1.75, 3.375, 3.00)$ está más cerca de $(2, 4, 3)$ que $\boldsymbol{P}_0$. En la Tabla 3.2 se muestra cómo los puntos $\{\boldsymbol{P}_k\}$ generados por la iteración (3) convergen a $(2, 4, 3)$. ∎

Este proceso se conoce como ***método de iteración de Jacobi*** y puede usarse para resolver algunas clases de sistemas de ecuaciones lineales. Tras 19 pasos, vemos que, al aplicarlo al sistema (3), conseguimos 9 cifras decimales de aproximación $(2.00000000, 4.00000000, 3.00000000)$.

Tabla 3.2 Convergencia del método iterativo de Jacobi para el sistema (1).

k	x_k	y_k	z_k
0	1.0	2.0	2.0
1	1.75	3.375	3.0
2	1.84375	3.875	3.025
3	1.9625	3.925	2.9625
4	1.99062500	3.97656250	3.00000000
5	1.99414063	3.99531250	3.00093750
⋮	⋮	⋮	⋮
15	1.99999993	3.99999985	2.99999993
⋮	⋮	⋮	⋮
19	2.00000000	4.00000000	3.00000000

EJEMPLO DE $\boxed{\text{DIVERGENCIA}}$

Ejemplo 3.27. Reordenemos el sistema (1) como sigue:

$$
\begin{aligned}
-2x + \;\; y + 5z &= \;\;15 \\
4x - 8y + \;\; z &= -21 \\
4x - \;\; y + \;\; z &= \;\;\;7.
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Sistema reordenado

Si escribimos estas ecuaciones como

$$
\begin{aligned}
x &= \frac{-15 + y + 5z}{3} \\
y &= \frac{21 + 4x + z}{8} \\
z &= 7 - 4x + y,
\end{aligned}
\tag{5}
$$

entonces el método iterativo de Jacobi es, en este caso,

$$
\begin{aligned}
x_{k+1} &= \frac{-15 + y_k + 5z_k}{3} \\
y_{k+1} &= \frac{21 + 4x_k + z_k}{8} \\
z_{k+1} &= 7 - 4x_k + y_k.
\end{aligned}
\tag{6}
$$

Veamos que si empezamos con el punto $\boldsymbol{P}_0 = (x_0, y_0, z_0) = (1, 2, 2)$, entonces el proceso iterativo (6) diverge.

Sustituimos $x_0 = 1$, $y_0 = 2$ y $z_0 = 2$ en el miembro derecho de (6) y obtenemos los nuevos valores x_1, y_1 y z_1 siguientes:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{-15 + 2 + 10}{2} = -1.5 \\
y_1 &= \frac{21 + 4 + 2}{8} = 3.375 \\
z_1 &= 7 - 4 + 2 = 5.00.
\end{aligned}
$$

El nuevo punto $\boldsymbol{P}_1 = (-1.5, 3.375, 5.00)$ está más lejos de la solución $(2, 4, 3)$ que $\boldsymbol{P}_0$. De hecho, el proceso iterativo (6) diverge como se muestra en la Tabla 3.3. ■

k	x_k	y_k	z_k
0	1.0	2.0	2.0
1	−1.5	3.375	5.0
2	6.6875	2.5	16.375
3	34.6875	8.015625	−17.25
4	−46.617188	17.8125	−123.73438
5	−307.929688	−36.150391	211.28125
6	502.62793	−124.929688	1202.56836
⋮	⋮	⋮	⋮

DIVERGE!

Método iterativo de Gauss-Seidel

Algunas veces podemos acelerar la convergencia. Observemos que en el método iterativo de Jacobi (3) produce tres sucesiones $\{x_k\}$; $\{y_k\}$ y $\{z_k\}$ que convergen, respectivamente a $2, 4$ y 3 (véase la Tabla 3.2). Puesto que x_{k+1} es, probablemente, mejor aproximación al límite que x_k, sería razonable usar x_{k+1} en vez de x_k a la hora de calcular y_{k+1} y, de forma semejante, sería mejor usar x_{k+1} e y_{k+1} en el cálculo de z_{k+1}. El siguiente ejemplo muestra lo que ocurre cuando se aplica este razonamiento al sistema de ecuaciones del Ejemplo 3.26.

Ejemplo 3.28. Consideremos el sistema de ecuaciones dado en (1) y el proceso iterativo, llamado ***método de Gauss-Seidel***, sugerido por (2):

$$
\boxed{
\begin{aligned}
x_{k+1} &= \frac{7 + y_k - z_k}{4} \\
y_{k+1} &= \frac{21 + 4x_{k+1} + z_k}{8} \\
z_{k+1} &= \frac{15 + 2x_{k+1} - y_{k+1}}{5}.
\end{aligned}
}
\tag{7}
$$

Tabla 3.4 Convergencia del método iterativo de Gauss-Seidel para el sistema (1).

k	x_k	y_k	z_k
0	1.0	2.0	2.0
1	1.75	3.75	2.95
2	1.95	3.96875	2.98625
3	1.995625	3.99609375	2.99903125
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
8	1.99999983	3.99999988	2.99999996
9	1.99999998	3.99999999	3.00000000
10	2.00000000	4.00000000	3.00000000

Veamos que si empezamos con $\boldsymbol{P}_0 = (x_0, y_0, z_0) = (1, 2, 2)$, entonces el proceso iterativo (7) converge a la solución $(2, 4, 3)$.

Sustituyendo $y_0 = 2$ y $z_0 = 2$ en la primera ecuación de (7) obtenemos

$$x_1 = \frac{7 + 2 - 2}{4} = 1.75.$$

Sustituyendo ahora $x_1 = 1.75$ y $z_0 = 2$ en la segunda ecuación de (7) obtenemos

$$y_1 = \frac{21 + 4(1.75) + 2}{8} = 3.75.$$

Finalmente, sustituyendo $x_1 = 1.75$ e $y_1 = 3.75$ en la tercera ecuación de (7) obtenemos

$$z_1 = \frac{15 + 2(1.75) - 3.75}{5} = 2.95.$$

El nuevo punto $\boldsymbol{P}_1 = (1.75, 3.75, 2.95)$ está más cerca de $(2, 4, 3)$ que $\boldsymbol{P}_0$ y es mejor que el punto obtenido en el Ejemplo 3.26. En la Tabla 3.4 se muestra cómo los puntos $\{\boldsymbol{P}_k\}$ generados por la iteración (7) convergen a $(2, 4, 3)$. ∎

Bajo qué condiciones hay convergencia?

Condición suficiente pero no necesaria de convergencia. Jacobi

Definición 3.6. Se dice que una matriz $\boldsymbol{A}$ de orden $N \times N$ es de *diagonal estrictamente dominante* cuando

(8) $$|a_{kk}| > \sum_{\substack{j=1\\ j\neq k}}^{N} |a_{kj}| \quad \text{para } k = 1,\ 2,\ \ldots,\ N. \qquad \blacktriangle$$

Teorema 3.15 (Método iterativo de Jacobi). Supongamos que $\boldsymbol{A}$ es una matriz de diagonal estrictamente dominante. Entonces el sistema de ecuaciones lineales $\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{B}$ tiene solución única $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{P}$. Además, el proceso iterativo dado por la fórmula (10) produce una sucesión de vectores $\{\boldsymbol{P}_k\}$ que converge a $\boldsymbol{P}$ cualquiera que sea el vector de partida $\boldsymbol{P}_0$.

Demostración. La demostración puede encontrarse en textos de análisis numérico de carácter avanzado.

Otros métodos:

- Sobrerelajación sucesiva