Resolución de sistemas lineales: métodos iterativos

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

$$Ax = b.$$

Asumimos que los elementos en la diagonal de A son no nulos:

$$a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn} \neq 0.$$

Los métodos iterativos se basan en la construcción de una sucesión de puntos $\{x^k\}_k \subset \mathbb{K}^n$ de forma iterativa

$$\begin{cases} x^k = F(x^{k-1}), & k \in \mathbb{N}, \\ x^0 \in \mathbb{K}^n, \end{cases}$$

tal que $x^k \longrightarrow x$ cuando $k \longrightarrow \infty$. Lo ideal es coger $F : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^n$ lo más simple posible, por lo que tomamos F lineal:

$$F(y) = By + c$$

para cierta matriz $B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{K})$ y cierto vector $\mathbb{K}^n$ tales que la solución x de $Ax = b$ sea un punto fijo de F:

$$Ax = b \qquad \Longleftrightarrow \qquad x = Bx + c.$$

El siguiente resultado establece las condiciones generales para la convergencia de dicha sucesión.

Teorema 1 (Convergencia de las iteradas al punto fijo)**.** *Sea $B \in \mathcal{M}_n$. Son equivalentes:*

1. *Para cualquier $x^0 \in \mathbb{K}^n$, el método iterativo $x^k = Bx^{k-1} + c$ converge al único punto fijo de $x = Bx + c$.*

2. *$\rho(B) < 1$.*

3. *Existe una norma matricial $|||\cdot|||$ tal que $|||B||| < 1$.*

Además, si $|||B||| < 1$, entonces $\|x - x^k\| \leq |||B|||^k \|x - x^0\|$.

¿Cómo construir B y c?

Los métodos iterativos tienen en común el siguiente planteamiento para la construcción de la matriz B. Primero descomponemos la matriz del sistema como

$$A = D - L - U,$$

donde D es una matriz diagonal, L es triangular inferior con ceros en la diagonal y U es triangular superior con ceros en la diagonal. Es decir:

$$\begin{cases} d_{ii} = a_{ii}, & i = 1,\dots,n, \\ u_{ij} = -a_{ij}, & i = 1,\dots,n-1,\ j = i+1,\dots,n, \\ \ell_{ij} = -a_{ij}, & i = 2,\dots,n,\ j = 1,\dots,i-1. \end{cases}$$

Usando las matrices D, L y U, se escribe una descomposición de la forma

$$A = M - N$$

con $M \in \mathcal{GL}_n$. Reemplazando en $Ax = b$ se obtiene lo siguiente:

$$x = \underbrace{M^{-1}N}_{B} x + \underbrace{M^{-1}b}_{c}$$

En el siguiente Teorema adaptamos el resultado de convergencia anterior para tener condiciones más específicas sobre M y N.

Teorema 2. *Sea $A \in \mathcal{M}_n$ hermítica ($A^* = A$) y definida positiva ($A > 0$). Si $A = M - N$ con $M \in \mathcal{GL}_n$ tal que $M^* + N$ es definida positiva, entonces $\rho(M^{-1}N) < 1$ y la iteración $x^{k+1} = M^{-1}Nx^k + M^{-1}b$ converge para cualesquiera $x^0, b \in \mathbb{K}^n$.*

1. Método de Jacobi ($M = D$ y $N = L + U$)

Definimos la matriz del método de Jacobi como

$$\mathscr{J} = B = M^{-1}N = D^{-1}(L+U) = D^{-1}(D-A) = I - D^{-1}A.$$

Obsérvese que D^{-1} es fácilmente calculable como la matriz diagonal

$$D^{-1} = \operatorname{diag}\left(\frac{1}{a_{11}}, \frac{1}{a_{22}}, \dots, \frac{1}{a_{nn}}\right).$$

Por tanto la iteración sería

$$x^{k+1} = \mathscr{J} x^k + D^{-1}b.$$

Y escribiendo componente a componente:

$$\boxed{x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^k - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^k\right), \qquad i = 1,2,\dots,n.}$$

2. Método de Gauss-Seidel ($M = D - L$ y $N = U$)

Definimos la matriz del método de Gauss-Seidel como

$$\mathscr{L}_1 = B = M^{-1}N = (D-L)^{-1}U.$$

Por tanto la iteración sería

$$x^{k+1} = \mathscr{L}_1 x^k + (D-L)^{-1}b.$$

Equivalentemente, multiplicando por la izquierda por $D-L$ y reordenando términos:

$$Dx^{k+1} = Lx^{k+1} + Ux^k + b.$$

Y escribiendo componente a componente:

$$\boxed{x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^k\right), \qquad i = 1,2,\ldots,n.}$$

Obsérvese que cada componente de x^{k+1} depende sólo de las anterior, por lo que puede calcularse la iteración siguiendo el orden $i = 1,2,\ldots,n$.

3. Método de Relajación con parámetro $w > 0$

Este método es una adaptación del Método de Gauss-Seidel dado por la iteración

$$\boxed{x_i^{k+1} = \frac{w}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^k\right) + (1-w)x_i^k, \qquad i = 1,2,\ldots,n.}$$

Es decir, cada iteración x^{k+1} se obtiene como una combinación lineal entre la fórmula del Método de Gauss-Seidel y el valor anterior de la sucesión x^k.

De la misma forma, cada componente de x^{k+1} depende sólo de las anteriores, por lo que pueden calcularse todas a partir de la fórmula anterior siguiendo el orden $i = 1,2,\ldots,n$.

En este caso, la matriz del método es

$$\mathscr{L}_w = B = M^{-1}N = \left(\tfrac{1}{w}D - L\right)^{-1}\left(\tfrac{1-w}{w}D + U\right).$$

Se observa fácilmente que para $w = 1$ se tiene exactamente la matriz $\mathscr{L}_1$ del Método de Gauss-Seidel.

4. Convergencia del Método de Jacobi

Teorema 3. *Sea $A \in \mathcal{M}_n$ una matriz de diagonal estrictamente dominante, es decir*

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

para todo $i = 1, \ldots, n$. Entonces $\rho(\mathcal{J}) < 1$ y el método de Jacobi es convergente.

5. Convergencia de Relajación $(0 < w < 2)$

Teorema 4 (Ostrowski-Reich)**.** *Sea $A \in \mathcal{M}_n$ hermítica y definida positiva y $0 < w < 2$. Entonces el Método de Relajación (y en particular el de Gauss-Seidel) es convergente.*

6. Test de parada

Hemos visto que es posible construir sucesiones de forma iterativa que convergen a la solución exacta de $Ax = b$. Sin embargo, a la hora de programar estos métodos no podemos calcular los infinitos términos de las sucesión y tenemos que parar la iteración en un momento dado. Se introducen para ello dos controles:

1. Error relativo de la aproximación (tolerancia): Se fija una tolerancia del error relativo $\varepsilon > 0$. Para la iteración k-ésima, si el error relativo es más pequeño que ε,

$$\frac{\|Ax^k - b\|}{\|b\|} < \varepsilon,$$

se detiene el algoritmo y se devuelve x^k.

2. Límite para el número de iteraciones: Se fija un número máximo de iteraciones $k_{\max}$. Si la iteración llega a $k = k_{\max}$ sin que sea haya cumplido el primer criterio de parada anterior, se detiene el algoritmo y se devuelve $x^{k_{\max}}$ indicando que se ha alcanzado el número máximo de iteraciones y que la aproximación no es lo suficientemente buena.