Métodos Iterativos

Resultados preliminares

Normas Matriciales Inducidas. Toda norma vectorial $\|\cdot\|$ sobre $\mathbb{R}^n$ induce una **norma matricial** sobre $\mathbb{R}^{n\times n}$ (espacio de matrices cuadradas $n \times n$):

$$\|A\| := \max_{x\in\mathbb{R}^n:\ x\neq\theta} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}, \qquad A \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Es fácil verificar que esto define efectivamente una norma sobre $\mathbb{R}^{n\times n}$.

Esta norma se dice que es una norma matricial **inducida** por la norma vectorial y se denota con el mismo símbolo que la norma vectorial.

Proposición. Toda norma **matricial inducida** por una norma vectorial satisface las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} &\|Ax\| \leq \|A\|\,\|x\| && \forall A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n && \text{(compatibilidad)},\\ &\|AB\| \leq \|A\|\|B\| && \forall A, B \in \mathbb{R}^{n\times n} && \text{(submultiplicatividad)}. \end{aligned}$$

Hay formas más sencillas de calcular algunas de las **normas matriciales** más usuales.

Proposición. Sea $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Entonces:

1. $\|A\|_\infty = \max\limits_{1\leq i\leq n} \left(\sum\limits_{1\leq j\leq n} |a_{ij}| \right)$ **(máxima suma de filas).**

2. $\|A\|_1 = \max\limits_{1\leq j\leq n} \left(\sum\limits_{1\leq i\leq n} |a_{ij}| \right)$ **(máxima suma de columnas).**

3. $\|A\|_2 = \sqrt{\rho\left(A^t A\right)}$ **(norma espectral).**

Valores y Vectores Propios.

Definición. Dada una matriz cuadrada A, diremos que un número $\lambda \in \mathbb{C}$ es un **valor propio** (o **autovalor**) de A si existe un vector no nulo, $v \neq \theta$, tal que $Av = \lambda v$. Se dice que v es **vector propio** (o **autovector**) asociado al valor propio λ.
Por otro lado λ es un valor propio si y sólo si es raíz de la **ecuación característica** $\det(A - \lambda I) = 0$.

Definición. El **espectro** de A es el conjunto de todos sus valores propios:

$$\sigma(A) := \Big\{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda \text{ es un valor propio de } A\Big\}.$$

Definición. El **radio espectral** de A es el máximo módulo de sus autovalores:

$$\rho(A) := \max_{\lambda\in\sigma(A)} |\lambda|.$$

Teorema. Si $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es **simétrica** $(A^t = A)$, entonces $\|A\|_2 = \rho(A)$.

Matrices dispersas.

- Una **matriz dispersa** (o sparse) es una matriz de gran tamaño en la que la mayor parte de sus elementos son cero. Estas matrices son ampliamente usadas en la optimización a gran escala, teoría de grafos, teoría de redes, análisis estructural y de circuitos, dinámica de fluidos computacionales y en general en solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales, entre otros.
- Cuando la matriz $\boldsymbol{A}$ del sistema a resolver es **dispersa, pero no banda**, los métodos (directos) estudiados hasta ahora (eliminación de Gauss o Cholesky) presentan el defecto denominado **llenado** (**fill-in**).
- El llenado consiste en que, a medida que el proceso de eliminación avanza, se van creando elementos no nulos en posiciones de $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{U}$ en donde la matriz $\boldsymbol{A}$ tiene ceros.
- Como consecuencia del llenado se tiene, por una parte, el **aumento del número de flop** y con ello el **aumento del error de redondeo**. Por otra parte se tiene el **aumento en las necesidades de memoria** para almacenar las matrices $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{U}$, lo que puede llegar a hacer imposible aplicar estos métodos cuando $\boldsymbol{A}$ es de gran tamaño.
- Los métodos que estudieremos a continuación, llamados **iterativos**, evitan el llenado y sus consecuencias, al trabajar resolviendo reiteradamente sistemas con matriz diagonal o triangular-dispersa.

Esquema general

- Considere el sistema de ecuaciones lineales:
$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},$$
con $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ no singular y $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$.
Un **método iterativo** para resolver el sistema construye, a partir de un vector inicial $\boldsymbol{x}^{(0)}$, una sucesión de vectores $\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \ldots, \boldsymbol{x}^{(k)}, \ldots$ la que, bajo condiciones apropiadas, resultará convergente a $\boldsymbol{x}$, es decir,
$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}.$$
- Si suponemos $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{N} - \boldsymbol{P}$, donde $\boldsymbol{N}$ debe ser invertible, entonces
$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{N}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b} \quad \Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{N}^{-1}\boldsymbol{P}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{N}^{-1}\boldsymbol{b}.$$
- Se usa la igualdad $\boldsymbol{N}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$ para definir un esquema general para construir la sucesión $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$.
- **Algoritmo del esquema general:**

Dado el vector inicial $\boldsymbol{x}^{(0)}$, para $k = 1, 2, \ldots$ resolver: $\quad \boldsymbol{N}\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}^{(k-1)} + \boldsymbol{b}$, hasta que se satisfaga un criterio de detención.

- Definiendo $\boldsymbol{M} := \boldsymbol{N}^{-1}\boldsymbol{P}$ (**matriz de iteración**) y $\boldsymbol{e}^{(k)} := \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}$ (**error de** $\boldsymbol{x}^{(k)}$), para cada $k = 1, 2, \ldots$ se tiene
$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{M}^k \boldsymbol{e}^{(0)}, \qquad k = 1, 2, \ldots$$

Convergencia de métodos iterativos.

- **Lema.** Sea $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Entonces
$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow \rho(\boldsymbol{B}) < 1.$$

- **Teorema.** (Convergencia) La sucesión $\left\{\boldsymbol{x}^{(k)}\right\}$ converge a la solución $\boldsymbol{x}$ de $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, si y sólo si, $\rho(\boldsymbol{M}) < 1$.

  Observación. Si la sucesión $\left\{\boldsymbol{x}^{(k)}\right\}$ converge, necesariamente lo hace a la solución $\boldsymbol{x}$ de $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

- **Lema.** (Cota para el radio espectral) Sea $\boldsymbol{A}$ una matriz cuadrada. Para cualquier norma matricial se tiene que
$$\rho(\boldsymbol{A}) \leq \|\boldsymbol{A}\|.$$

- **Corolario.** (Condición suficiente de convergencia) Una condición suficiente para que la sucesión $\left\{\boldsymbol{x}^{(k)}\right\}$ sea convergente a la solución $\boldsymbol{x}$ de $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ es que
$$\|\boldsymbol{M}\| < 1,$$
donde $\boldsymbol{M}$ es la matriz de iteración del método que genera a $\left\{\boldsymbol{x}^{(k)}\right\}$.

Criterio de detención

- **Detención del proceso.** Cuando el proceso iterativo es convergente, éste se debe detener para un $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ tal que $\left\|\boldsymbol{e}^{(k+1)}\right\| = \left\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k+1)}\right\| \leq \texttt{tol}$, donde `tol` indica un nivel de tolerancia prefijado para el error.

- **Lema.** Para $\|\boldsymbol{M}\| < 1$, se tiene que
$$\left\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k+1)}\right\| \leq \frac{\|\boldsymbol{M}\|}{1 - \|\boldsymbol{M}\|} \left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right\|.$$

- El criterio de detención implica calcular $\|\boldsymbol{M}\|$, lo que en general es difícil. El siguiente lema indica una manera de estimar $\|\boldsymbol{M}\|$.

- **Lema.** Para $k = 1, 2, \ldots$ se tiene:
$$m_k := \frac{\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right\|}{\left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|} \leq \|\boldsymbol{M}\|.$$

  Demostración.
$$\begin{aligned} m_k &= \frac{\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right\|}{\left\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^{(k-1)}\right\|} = \frac{\left\|\left[\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}\right] - \left[\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\right]\right\|}{\left\|\left[\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}\right] - \left[\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{x}\right]\right\|} \\ &= \frac{\left\|\boldsymbol{e}^{(k+1)} - \boldsymbol{e}^{(k)}\right\|}{\left\|\boldsymbol{e}^{(k)} - \boldsymbol{e}^{(k-1)}\right\|} = \frac{\left\|\boldsymbol{M}\left[\boldsymbol{e}^{(k)} - \boldsymbol{e}^{(k-1)}\right]\right\|}{\left\|\boldsymbol{e}^{(k)} - \boldsymbol{e}^{(k-1)}\right\|} \leq \max_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n:\, \boldsymbol{y}\neq 0} \frac{\|\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{y}\|} = \|\boldsymbol{M}\|. \end{aligned}$$

- En el criterio de detención puede utilizarse m_k como una estimación de $\|\boldsymbol{M}\|$.
  En tal caso, el proceso iterativo se detendrá cuando:

$$\boxed{\frac{m_k}{1-m_k}\left\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\right\| \leq \texttt{tol}.}$$

Descomposición de una matriz

- Se considera resolver un sistema $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ con $a_{ii}\neq 0$, para $i=1,\dots,n$.
  Sea $\boldsymbol{x}^{(0)}=\left(x_1^{(0)},\dots,x_n^{(0)}\right)^{\mathrm{t}}$ arbitrario y escribamos la matriz $\boldsymbol{A}$ en la forma

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{E}-\boldsymbol{F},$$

  donde $\boldsymbol{D}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{A})$, $-\boldsymbol{E}$ y $-\boldsymbol{F}$ son:

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} \ddots & & -\boldsymbol{F} \\ & \boldsymbol{D} & \\ -\boldsymbol{E} & & \ddots \end{pmatrix}$$

- Notemos que tanto $\boldsymbol{D}$ como $\boldsymbol{D}-\boldsymbol{E}$ son matrices invertibles, ya que $a_{ii}\neq 0$ para $i=1,\dots,n$.

Método de Jacobi

- El **método de Jacobi** corresponde al esquema iterativo general con

$$\boldsymbol{N}:=\boldsymbol{D} \qquad \text{y} \qquad \boldsymbol{P}:=\boldsymbol{E}+\boldsymbol{F}.$$

- **Algoritmo de Jacobi:**

  Dado el vector inicial $\boldsymbol{x}^{(0)}$,
  para $k=1,2,\dots$ resolver:
  $\quad \boldsymbol{D}\boldsymbol{x}^{(k)}=(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{F})\boldsymbol{x}^{(k-1)}+\boldsymbol{b},$
  hasta que se satisfaga un criterio de detención.

- En la iteración k, el vector $\boldsymbol{x}^{(k)}$ puede obtenerse **por componentes** como sigue:

  Para $i=1,\dots,n:$

$$x_i^{(k)}=\frac{1}{a_{ii}}\left[b_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k-1)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(k-1)}\right].$$

- La matriz de iteración del método de Jacobi verifica:

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{F})=\begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 & -\frac{a_{n-1\,n}}{a_{n-1\,n-1}} \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \cdots & \cdots & -\frac{a_{n\,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{pmatrix}$$

- Para la norma infinito de $\boldsymbol{M}$ se tiene que $\|\boldsymbol{M}\|_\infty = \max_{1\le i\le n}\left\{ \frac{1}{|a_{ii}|}\sum_{\substack{j=1\\ j\ne i}}^{n}|a_{ij}|\right\}$.
- Cuando $\boldsymbol{A}$ es de **diagonal dominante estricta**, es decir, cuando se tiene que
$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\ j\ne i}}^{n}|a_{ij}|, \quad i=1,\dots,n,$$
entonces $\|\boldsymbol{M}\|_\infty < 1$ y el método de Jacobi resulta convergente.

Método de Gauss-Seidel

- El **método de Gauss-Seidel** corresponde al esquema iterativo general con
$$\boldsymbol{N} := \boldsymbol{D}-\boldsymbol{E} \qquad \text{y} \qquad \boldsymbol{P} := \boldsymbol{F}.$$
La matriz de iteración es entonces $\boldsymbol{M} = (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{E})^{-1}\boldsymbol{F}$.
- **Algoritmo de Gauss-Seidel:**

Dado el vector inicial $\boldsymbol{x}^{(0)}$,
para $k=1,2,\dots,$ resolver:
$(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{x}^{(k-1)} + \boldsymbol{b}$,
hasta que se satisfaga un criterio de detención.

- En la iteración k, el vector $\boldsymbol{x}^{(k)}$ puede obtenerse **por componentes** como sigue:

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

Notemos que esto corresponde a aprovechar en el paso k, los valores $x_j^{(k)}$ ya calculados.

Convergencia de los métodos de Jacobi y de Gauss-Seidel

- **Teorema.** Si $\boldsymbol{A}$ es de diagonal dominante estricta, entonces los métodos de Jacobi y de Gauss-Seidel convergen.

  Observación. Para una matriz arbitraria $\boldsymbol{A}$, la convergencia de uno de estos métodos no implica la convergencia del otro.

- **Teorema.** Si $\boldsymbol{A}$ es simétrica y definida positiva, el método de Gauss-Seidel es convergente.

  Observación. Aunque $\boldsymbol{A}$ sea simétrica y definida positiva, el método de Jacobi puede ser divergente.

DMH/VAD.