
Mètodes numèrics d'àlgebra lineal

PID_00266169

Roberto Casado Vara

Temps mínim de dedicació recomanat: 3 hores



Roberto Casado Vara

L'encàrrec i la creació d'aquest recurs d'aprenentatge UOC han estat coordinats per la professora: Teresa Sancho (2019)

Primera edició: setembre 2019
© Roberto Casado Vara
Tots els drets reservats
© d'aquesta edició, FUOC, 2019
Av. Tibidabo, 39-43, 08035 Barcelona
Realització editorial: FUOC

Cap part d'aquesta publicació, incloent-hi el disseny general i la coberta, no pot ser copiada, reproduïda, emmagatzemada o transmesa de cap manera ni per cap mitjà, tant si és elèctric com químic, mecànic, òptic, de gravació, de fotocòpia o per altres mètodes, sense l'autorització prèvia per escrit dels titulars del copyright.

Índex

| | |
|---|----|
| Introducció | 5 |
| 1. Error en els mètodes numèrics | 9 |
| 2. Nocions avançades d'àlgebra lineal: repàs | 12 |
| 2.1. Matrius | 12 |
| 2.2. Valors i vectors propis..... | 13 |
| 2.3. Normes matricials..... | 14 |
| 3. Mètodes de resolució de sistemes | |
| d'equacions lineals | 18 |
| 3.1. Mètodes directes | 18 |
| 3.1.1. Eliminació gaussiana | 18 |
| 3.1.2. Mètode de Gauss-Jordan..... | 20 |
| 3.1.3. Descomposició LU..... | 20 |
| 3.1.4. Descomposició QR | 23 |
| 3.2. Mètodes iteratius..... | 24 |
| 3.2.1. Convergència i estimació de l'error..... | 25 |
| 3.2.2. Mètode iteratiu de Jacobi | 27 |
| 3.2.3. Mètode iteratiu de Gauss-Seidel | 30 |
| 3.2.4. Aplicació a l'àlgebra lineal: càlcul de valors i vectors propis. Mètode de la potència i de la potència inversa | 31 |
| Bibliografia | 35 |

Introducció

L'objectiu d'aquest material és servir com a text de suport en el curs de mètodes numèrics en la ciència de dades. S'hi inclou una breu introducció teòrica que creiem que és suficient, amb referències a manuals clàssics de mètodes numèrics. Els problemes que hem seleccionat no satisfan tots els aspectes dels mètodes numèrics relacionats amb l'àlgebra lineal, però en motivaran l'ús. A més, us proporcionaran les eines necessàries per resoldre qualsevol problema d'àlgebra lineal i per dissenyar els vostres algorismes en el llenguatge de programació R.

En disciplines com la física, l'enginyeria o la ciència de dades sovint s'utilitzen els mètodes numèrics per resoldre problemes. Una vegada acabat el procés de discretització, en el qual se substitueix el model continu per una versió simplificada en dimensió finita, generalment s'ha de resoldre un sistema d'equacions que en la majoria dels casos és lineal. Els mètodes de discretització més habituals són la interpolació de funcions i l'aproximació amb famílies de funcions lineals. Tot i que no la treballarem en aquest material, la resolució d'equacions en derivades parcials, tan habitual en sistemes dinàmics, també requereix la resolució de sistemes d'equacions lineals. Aquest és el motiu pel qual la resolució numèrica de sistemes d'equacions lineals és tan important i nuclear en aquest material.

En aquesta primera activitat ens dedicarem a trobar els valors i vectors propis d'una matriu quadrada i de les seves potències i a trobar la solució d'un sistema $Ax = b$, en el qual el nombre d'equacions és igual al nombre d'incògnites. Les tècniques que s'utilitzaran es poden classificar en mètodes directes i mètodes iteratius. En els mètodes directes hi ha la solució en un nombre finit d'operacions i la solució seria exacta si no cometéssim errors en fer les operacions. En els mètodes iteratius s'utilitza una relació de recurrència que, a partir d'una estimació inicial, permet determinar una successió de valors que convergeix a la solució que es busca.

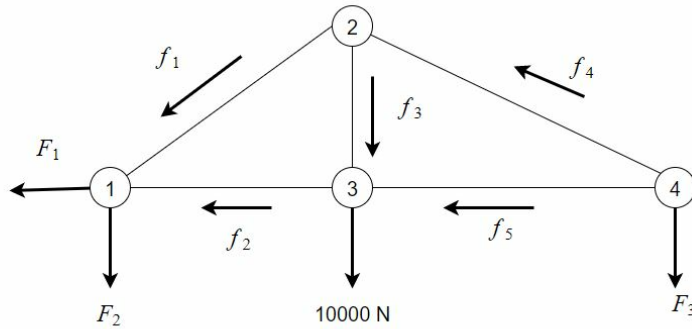
A continuació presentem un exemple amb un bon motiu pel qual és important la resolució de sistemes d'equacions lineals mitjançant mètodes numèrics. Imagineu que esteu treballant en una empresa de qualitat i us demanen que, a partir d'unes dades, comproveu la fiabilitat d'un pont. Presentem el problema en l'exemple següent.

Exemple 1

Les armadures són estructures lleugeres capaces de suportar càrregues pesants. En el disseny de ponts, els membres de l'estructura estan connectats amb juntures rotatòries de passador que permeten transferir les forces d'un membre a un altre. La figura següent mostra una estructura senzilla d'un pont que es manté en equilibri o de manera estacionària en l'extrem inferior esquerre (1), que es desplaça horitzontalment a l'extrem inferior dret (4) i que té juntures de passador en (1),(2),(3) i (4). Es col·loca una càrrega de 10.000 newtons a la junta (5) i les forces que actuen sobre els membres de l'estructura tenen magnituds donades per f_1, f_2, f_3, f_4 i f_5 , com s'observa a la figura. El membre de suport estacionari té una força horitzontal F_1 i una força vertical F_2 , però el membre de suport mòbil té una sola força vertical F_3 .

Proveu-ho vosaltres mateixos

Encara que ara sembli molt complicat, d'aquí a unes setmanes sereu perfectament capaços de resoldre-ho de manera senzilla; per tant, us recomanem que intenteu resoldre aquest sistema amb algun dels mètodes apresos.



Si l'estructura està en equilibri estàtic, les forces a cada junta han d'agregar-se al vector zero, de manera que la suma de les components horitzontals i verticals de les forces a cada junta ha de ser zero. Això genera el sistema d'equacions lineals que expressem a continuació:

| Juntura del pont | Components horitzontals | Components verticals |
|------------------|---|--|
| 1 | $-F_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}f_1 + f_2 = 0$ | $\frac{\sqrt{2}}{2}f_1 - F_2 = 0$ |
| 2 | $\frac{\sqrt{2}}{2}f_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}f_4 = 0$ | $\frac{\sqrt{2}}{2}f_1 - f_3 + \frac{1}{2}f_4 = 0$ |
| 3 | $-f_2 + f_5 = 0$ | $f_3 - 10000 = 0$ |
| 4 | $-\frac{\sqrt{3}}{2}f_4 - f_5 = 0$ | $\frac{1}{2}f_4 - F_3 = 0$ |

Quan ja es tenen totes aquestes forces calculades, cal resoldre aquest sistema d'equacions. Amb l'ajuda d'algun enginyer de l'empresa on sou, podreu posar aquest sistema lineal en forma de matriu (s'ha reordenat el sistema per il·lustrar millor l'exemple):

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 10000 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Òbviament, la resolució d'aquest sistema d'equacions pot comportar moltes hores de feina. Encara que algun de vosaltres s'animés a fer els càlculs de manera manual, la realitat és que aquests sistemes d'equacions solen ser de 100×100 equacions.

Aquest exemple demostra la necessitat de trobar una manera de resoldre adequadament aquest tipus de sistemes que no requereixi moltes hores de càlculs. Per fer-ho, podem emprar els mètodes numèrics; un cop decidit i programat el mètode, n'hi hauria prou d'introduir la matriu i executar el codi. En qüestió de minuts tindrem una solució, mentre que si intentéssim fer el càlcul a mà podríem tardar hores o, fins i tot, no podríem fer-lo.

1. Error en els mètodes numèrics

Els càlculs numèrics que s'efectuen amb calculadora o ordinador no són iguals que aquells que es fan en els cursos d'àlgebra o de càlcul amb paper i llapis. De les nostres experiències passades, esperem tenir sempre expressions tan veritables com $2 + 2 = 4$ i $(\sqrt{3})^2 = 3$. Però la veritat és que en l'aritmètica computacional estàndard (és a dir, l'aritmètica de punt flotant) tindrem alguns casos en els quals les operacions no seran "tan veritables". En efecte, el segon dels exemples no és veritat del tot. Per entendre què passa haurem de fer una breu introducció al terreny de l'aritmètica computacional.

En les matemàtiques tradicionals pot haver-hi nombres amb una quantitat infinita de dígit no periòdics. L'aritmètica que s'empra defineix $\sqrt{3}$ com l'únic nombre positiu que quan es multiplica per si mateix té com a resultat el nombre enter 3. No obstant això, en l'àmbit computacional, tot nombre és representat com un nombre fix i finit de dígit. Com que $\sqrt{3}$ no té una representació de dígit finit, a l'interior de l'ordinador se li dona una representació aproximada que el seu quadrat no serà exactament 3, encara que amb tota probabilitat estarà bastant a prop del 3 i resultarà acceptable en la gran majoria dels casos. Gairebé sempre, la representació matemàtica de l'àlgebra o de l'anàlisi i l'aritmètica computacional són satisfactòries i passen inadvertides o sense problemes, és a dir, deixem que l'ordinador o la calculadora decideixin per defecte el nivell de precisió que tindrà el nombre decimal.

Però recordem que no sempre és així, i hauríem d'estar alerta davant els problemes que pugui ocasionar en els nostres càlculs. Imaginem que fem càlculs per predir les vendes als nostres clients (un cas bastant probable en el vostre futur laboral) i que estem treballant amb xifres molt grans, depenent del volum del client. El "ball" d'algunes xifres pot ocasionar grans maldecaps en els directius de l'empresa, ja que no quadraran els comptes previstos pels vostres informes amb la realitat. És a dir, l'error entre les vostres prediccions i la realitat no serà acceptable.

Per tant, l'**error d'arrodoniment** sorgeix quan fem servir una calculadora o ordinador per efectuar un càlcul. L'error apareix perquè les operacions aritmètiques fetes en una màquina inclouen un nombre finit de dígit, de manera que els càlculs es duen a terme amb representacions aproximades dels nombres reals. En un ordinador normal, tan sols un conjunt relativament petit de nombres reals s'utilitza per representar tots els nombres. Per tant, l'error resultant de reemplaçar un nombre per la representació decimal finita que en fan

Comproveu-ho vosaltres mateixos

En l'enllaç següent podreu comprovar vosaltres mateixos com en alguns casos els errors de precisió poden afectar les operacions matemàtiques:
<https://support.microsoft.com/es-es/help/78113/floating-point-arithmetic-may-give-inaccurate-results-in-excel>

les calculadores i els ordinadors rep el nom d'**error d'arrodoniment**. A continuació volem introduir dues maneres de calcular la precisió d'una solució calculada amb els mètodes numèrics. El primer que cal saber és que la solució que tenim calculada és el que anomenarem *aproximació* (ja que no sabem si és la solució exacta). Per tant, si \tilde{p} és una aproximació d'un nombre qualsevol p , l'**error absolut** és $|p - \tilde{p}|$ i l'**error relatiu** és $\frac{|p - \tilde{p}|}{|p|}$ sempre que $p \neq 0$.

Per il·lustrar aquesta definició, en posarem un exemple.

Exemple 2

Tenim el nombre $p = 179,015625$ i volem considerar dues aproximacions que ha fet l'ordinador a aquest nombre, $\tilde{p}_1 = 179,01560974$ i $\tilde{p}_2 = 179,01564025$. Podríem preguntar-nos quina de les dues aproximacions és millor, però com podríem mesurar o validar quina és millor? La solució és senzilla, tan sols hem de fer servir els errors relatiu i absolut.

En aquest cas, l'error absolut és:

$$|p - \tilde{p}_1| = |179,015625 - 179,01560974| = 1,526 \times 10^{-05} \quad (2)$$

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

i l'error relatiu és:

$$\frac{|p - \tilde{p}_1|}{|p|} = \frac{|179,015625 - 179,01560974|}{|179,015625|} = 8,524396 \times 10^{-08} \quad (3)$$

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

Exemple 3

En aquest exemple veurem que, en fer operacions amb dos nombres qualsevol, és important tenir en compte el nivell de precisió que es vol, és a dir, el nombre de xifres decimals amb el qual es vol treballar. Com es veu en aquest exemple, segons el nombre de xifres decimals que es trien, l'error pot ser molt petit o molt rellevant, la qual cosa provoca que els càlculs realitzats puguin no tenir el grau de precisió desitjat (és a dir, suposeu que aquests nombres són milions, un error en aquests nombres pot suposar pèrdues grans per a la vostra empresa).

Si tenim $p = 0,54617$ i $q = 0,54601$, el valor exacte de restar p i q és: $r = p - q = 0,00016$. Suposem que la resta s'efectua amb quatre xifres decimals. En arrodonir p i q a quatre dígits tenim $\tilde{p} = 0,5462$ i $\tilde{q} = 0,5460$, respectivament. Per tant, $\tilde{r} = \tilde{p} - \tilde{q} = 0,0002$ és l'aproximació a 4 dígits de r .

Com que

$$\frac{|\tilde{r} - r|}{|\tilde{r}|} = \frac{|0,0002 - 0,00016|}{|0,0002|} = 0,25 \quad (4)$$

el resultat té un sol dígit significatiu, mentre que \tilde{p} i \tilde{q} eren exactes en els primers dígits.

Consell

Com a mesura de l'exactitud, l'error absolut no és tan significatiu com l'error relatiu i, a més, pot ser enganyós. Per exemple, un error d'un gram és molt més significatiu quan es calcula la massa d'un reactiu químic que quan es calcula la massa d'un avió.

L'error és un element molt útil quan s'utilitzen mètodes numèrics. Moltes vegades, el més important quan es realitzen càlculs és l'error que ens podem permetre. No és el mateix tenir un error d'un metre en la precisió d'un GPS que tenir un error d'un metre mesurant la longitud d'una parcel·la urbana. Per tant, un bon consell per al vostre futur és que seleccioneu l'error que "us podeu permetre" en fer els càlculs o la tolerància i que empreu aquesta dada com a mesura de parada en els mètodes iteratius per a la resolució dels sistemes d'equacions lineals.

2. Nocions avançades d'àlgebra lineal: repàs

Per resoldre les activitats d'aquesta assignatura és important dominar els conceptes bàsics de l'àlgebra lineal, per la qual cosa recordarem alguns conceptes bàsics que haureu estudiat en assignatures anteriors, així com la nomenclatura que utilitzarem.

2.1. Matrius

Denotarem $\mathbb{M}_{m \times n}(\mathbb{K})$ l'espai vectorial de les matrius de m files i n columnes en què els coeficients del conjunt \mathbb{K} són generalment nombres reals (\mathbb{R}) o nombres complexos (\mathbb{C}). En aquesta assignatura només treballarem en el conjunt dels reals. Denotarem A^T la matriu $n \times m$ transposada de A , A^* la seva matriu conjugada i A^{ad} la seva matriu adjunta (transposada de la conjugada).

A continuació es fa un repàs d'algunes de les definicions de l'àlgebra lineal que resultaran útils durant aquest material:

- La matriu A és simètrica si $A = A^T$.
- La matriu $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$ és unitària si $A^{-1} = A^{ad}$.
- La matriu $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{R})$ és normal si $A^{ad}A = AA^{ad}$.

Per simplicitat de la notació, a partir d'aquest moment suposarem que A és una matriu quadrada $n \times n$.

Per a alguns dels càlculs que farem amb els mètodes de resolució numèrica de sistemes d'equacions lineals necessitarem algunes suposicions teòriques que ens facilitin els càlculs. Encara que moltes d'aquestes afirmacions ja són conegudes per tots vosaltres, les recordarem amb la finalitat d'afermar aquests coneixements. Si $A \in \mathbb{M}_{n \times m}(\mathbb{K})$, les afirmacions següents són equivalents:

- A^{-1} existeix.
- $\det(A) \neq 0$.
- El sistema lineal $Ax = 0$ té solament la solució $x = 0$.
- Per a qualsevol vector b , el sistema lineal $Ax = b$ té solució única.
- Les files i columnes de A són linealment independents.
- El rang de la matriu A és n .

2.2. Valors i vectors propis

Imaginem que tenim A , una matriu quadrada $n \times n$. Ara definirem una sèrie d'elements que seran útils per treballar amb les matrius. L'objectiu d'aquest apartat és donar els detalls matemàtics necessaris per entendre el marc teòric que hi ha darrere de les operacions que fan els mètodes numèrics quan calculen valors propis, vectors propis i potències de matrius, entre d'altres.

- L'espectre de A és el conjunt $Esp(A) \subset \mathbb{R}$ descrit pels valors propis o autovalors de A .
- El radi espectral de A és el nombre real positiu

$$\rho(A) = \max |\lambda_i| \quad (5)$$

en què λ_i són els valors propis de la matriu A .

- Una parella (λ, x) és un element propi de A si x és un vector propi de A associat al valor propi λ .

A continuació es presenten alguns resultats importants que ens aportaran l'evidència matemàtica necessària per entendre com funcionen els mètodes numèrics per resoldre sistemes d'equacions lineals. També ens aportaran la justificació matemàtica dels mètodes iteratius per tractar matrius de grans dimensions.

A partir d'una matriu $A \in \mathbb{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$, les afirmacions següents són certes (però no equivalents):

- 1) Els valors propis d'una matriu simètrica són reals.
- 2) Si (λ, x) és un element propi de A , llavors, per a qualsevol enter positiu m , (λ^m, x) és un element propi de A^m .

D'aquesta afirmació extraïem una conclusió important: els valors propis d'una matriu quadrada A són els mateixos que els valors propis de les potències de A . Aquest és un resultat molt potent relacionat amb el càlcul de potències de matrius.

Ara definirem el concepte de *matrius semblants*. Es diu que dues matrius quadrades A i B són **semblants** si hi ha una matriu regular tal que:

$$B = PAP^{-1} \quad (6)$$

Amb aquesta definició podem enunciar el resultat següent, que ens donarà les bases teòriques per entendre el marc matemàtic que hi ha darrere dels càlculs relacionats amb les potències de matrius. A partir d'una matriu $A \in \mathbb{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$, les afirmacions següents són certes:

- 1) La matriu A és semblant a una matriu diagonal si i només si té n vectors propis linealment independents.
- 2) Si la matriu A té n autovalors diferents, llavors és semblant a una matriu diagonal.

2.3. Normes matricials

En l'apartat següent explicarem els mètodes iteratius per obtenir les solucions de sistemes d'equacions de la forma $Ax = b$. Abans de començar amb l'estudi d'aquests mètodes, primer hem de disposar d'un mitjà que ens permeti mesurar la distància entre els vectors columna de dimensió n . Això ens permetrà determinar si una sèrie d'aquests vectors convergeixen en una solució del sistema (en el proper apartat s'explicarà el concepte de *convergència*). Aquesta "mesura" també és molt necessària quan la solució s'obté pels mètodes directes que explicarem en l'apartat següent.

Denotem \mathbb{R}^n el conjunt de tots els vectors columna de dimensió n , les components de la qual són nombres reals. Per definir una distància en \mathbb{R}^n introduïrem el concepte de *norma*.

Una **norma vectorial** en \mathbb{R}^n és una funció $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ amb les propietats següents:

- 1) $\|x\| \geq 0$ per a tot $x \in \mathbb{R}^n$
- 2) $\|x\| = 0$ si i només si $x = (0, 0, \dots, 0)$
- 3) $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$ per a tot $\alpha \in \mathbb{R}$ i $x \in \mathbb{R}^n$
- 4) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ per a tot $x, y \in \mathbb{R}^n$

En aquest material només farem servir dues normes específiques en \mathbb{R}^n , que són $l_2 = \|\cdot\|_2$ i $l_\infty = \|\cdot\|_\infty$, que es defineixen com s'indica tot seguit:

$$\|x\|_2 = \left\{ \sum_{i=1}^n x_i^2 \right\}^{1/2} \quad \text{i} \quad \|x\|_\infty = \max\{|x_i|\} \quad (7)$$

La norma l_2 s'anomena **norma euclidiana del vector** x , atès que representa la noció comuna de distància respecte de l'origen en cas que x es trobi en \mathbb{R} , en \mathbb{R}^2 o en \mathbb{R}^3 . Per exemple, el vector $x = (-1, 1, -2)$ en \mathbb{R}^3 té les normes següents:

Notació

Com que els vectors en \mathbb{R}^n són vectors columna, convé utilitzar la notació de la transposada que s'ha vist en el material d'àlgebra lineal o es pot consultar en les referències recomanades, encara que per facilitar la notació no indicarem la "t" de transposada en els vectors.

$$\begin{aligned}\|x\|_2 &= \sqrt{(-1)^2 + 1^2 + (-2)^2} = \sqrt{6} \\ \|x\|_\infty &= \max\{|-1|, |1|, |-2|\} = 2.\end{aligned}\tag{8}$$

Si $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ i $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ són vectors de \mathbb{R}^n , les distàncies l_2 i l_∞ entre x i y són definides per:

$$\|x - y\|_2 = \left\{ \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2 \right\}^{1/2} \quad \text{i} \quad \|x - y\|_\infty = \max\{|x_i - y_i|\}\tag{9}$$

Exemple 4

Aquest sistema lineal

$$\begin{aligned}3,3330x_1 + 15920x_2 - 10,333x_3 &= 15913 \\ 2,2220x_1 + 1,710x_2 + 8,6120x_3 &= 28,544 \\ 1,5611x_1 + 5,1791x_2 + 1,6852x_3 &= 8,4254\end{aligned}\tag{10}$$

té la solució $(x_1, x_2, x_3) = (1, 1, 1)$. Si efectuem l'eliminació gaussiana en l'aritmètica d'arrodoniment a cinc dígits utilitzant tècniques clàssiques de resolució de sistemes d'equacions (per exemple, el mètode de Gauss), la solució és:

$$\tilde{x} = (1,2001; 0,99991; 0,92538)\tag{11}$$

Així doncs, en calcular la diferència entre els vectors x i \tilde{x} en les dues normes que hem definit, s'obté:

$$\begin{aligned}\|x - \tilde{x}\|_\infty &= \max\{|1 - 1,20001|, |1 - 0,99991|, |1 - 0,92538|\} = 0,2001 \\ \|x - \tilde{x}\|_2 &= \sqrt{(1 - 1,20001)^2 + (1 - 0,99991)^2 + (1 - 0,92538)^2} = 0,21356\end{aligned}\tag{12}$$

En aquest exemple es pot veure que les aproximacions de \tilde{x}_2 i \tilde{x}_3 són bones aproximacions de x_2 i x_3 , però que \tilde{x}_1 és una mala aproximació de x_1 .

El concepte de **distància en \mathbb{R}^n** també serveix per definir el límit d'una successió de vectors en aquest espai. En aquest sentit, és important entendre que, si una successió de vectors tendeix a un vector, es diu que aquesta successió convergeix. És a dir, si es té una successió de vectors que a mesura que mirem els termes més grans de la successió s'aproximen a un vector x , en altres paraules, els vectors d'aquesta successió s'aproximen molt al valor del vector x , es diu que aquesta successió de vectors és convergent. Això resultarà molt útil quan estiguem resolent sistemes d'equacions lineals per mètodes iteratius. Aquests mètodes proporcionaran una successió de solucions i el que busquem és que aquesta successió de solucions a la llarga s'aproximi (ràpid o a poc a poc) a la solució. Això és el mateix que dir que volem que aquesta successió de solucions convergeixi en la solució real.

Una vegada feta aquesta breu introducció al concepte de *norma d'un vector*, estem en condicions d'aplicar aquesta mateixa teoria a les matrius, excepte alguns matisos que tractarem amb cura mentre definim les normes matricials i la seva propietat.

Primer cal dir que pot demostrar-se que totes les normes \mathbb{R}^n són equivalents respecte a la convergència. Això és important, ja que quan ara definim el concepte de *normes de matrius*, i més endavant el concepte de *convergència de successions de matrius* respecte d'alguna norma, en alguns casos serà més fàcil calcular alguna de les normes que en d'altres. Donat qualsevol vector $x \in \mathbb{R}^n$,

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n}\|x\|_\infty. \quad (13)$$

D'aquesta manera podem demostrar que qualsevol vector que convergeixi respecte de la norma $\|\cdot\|_\infty$ també ho fa respecte de la norma $\|\cdot\|_2$, i això vol dir que a partir d'ara ens serà indiferent quina norma utilitzarem. En la pràctica se sol emprar la norma que sigui més fàcil de calcular.

Si tenim en compte que volem resoldre sistemes d'equacions lineals, i que aquests es poden expressar com a matrius, és natural introduir el concepte de *normes matricials*.

Una **norma matricial** sobre el conjunt de totes les matrius $n \times n$ és una funció de valor real, $\|\cdot\|$, definida en aquest conjunt i que satisfà per a totes les matrius A i B de $n \times n$, i tots els nombres reals α :

- 1) $\|A\| \geq 0$
- 2) $\|A\| = 0$, si i només si A és 0, la matriu amb totes les posicions zero.
- 3) $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$
- 4) $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$
- 5) $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$

Una distància entre les matrius A i B de $n \times n$ respecte a aquesta norma matricial és $\|A - B\|$.

Encara que les normes matricials es poden obtenir de diverses maneres, en aquest material tenim interès en les normes que són conseqüència natural de les normes vectorials, és a dir, l_2 i l_∞ . Com a exemple, es té el resultat següent:

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

$$\|A\| = \max\{\|Ax\|\} \quad (14)$$

és una norma matricial.

Es tracta d'una norma matricial natural o induïda associada a una norma vectorial. En aquest material suposarem que totes les normes matricials són naturals si no especificuem el contrari en les seves definicions. El resultat següent és molt útil quan es vol fitar el valor de $\|Ax\|$.

Per a tot vector $x \neq 0$, matriu A i qualsevol norma natural $\|\cdot\|$ tenim

$$\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|. \quad (15)$$

Es tracta d'un molt bon resultat, ja que ens permetrà conèixer amb certa exactitud el valor aproximat de $\|Ax\|$.

Amb aquestes definicions i resultats ja estem en condicions de començar a definir i explicar els mètodes de resolució de sistemes d'equacions lineals. Definirem els mètodes directes en l'apartat següent i amb els coneixements que teniu fins ara podem afrontar-los amb tota seguretat. No obstant això, els mètodes iteratius són una mica més delicats i requereixen el concepte de *convergència de successions de matrius*. Aquest concepte és necessari per definir la prova de parada i trobar les solucions òptimes sense que el mètode iteri sense control creant bucles infinits.

3. Mètodes de resolució de sistemes d'equacions lineals

Els sistemes d'equacions lineals s'utilitzen en molts problemes d'enginyeria i de les ciències, com també en aplicacions de les matemàtiques a les ciències socials i a l'estudi quantitatiu de problemes d'administració i economia. En aquest apartat es descriuran els mètodes directes i iteratius per resoldre el sistema lineal

$$\begin{aligned}
 E_1 : & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1, \\
 E_2 : & a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2, \\
 & \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 E_n : & a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n,
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

per x_1, \dots, x_n , donades les a_{ij} amb $i, j = 1, 2, \dots, n$ i b_i , per a $i = 1, 2, \dots, n$. Aquestes tècniques són mètodes que proporcionen un resultat en un nombre fix de passos, i només estan subjectes a errors d'arrodoniment.

3.1. Mètodes directes

Queda clar que, encara que sapiguem resoldre sistemes lineals, la solució numèrica obtinguda pot tenir errors significatius respecte al resultat esperat. Estudiarem com podem resoldre de la manera més ràpida i precisa el sistema en qüestió, i començarem pels mètodes directes.

3.1.1. Eliminació gaussiana

Entre els mètodes directes, el més popular que hi ha per resoldre sistemes lineals és l'eliminació gaussiana, que també s'utilitza per calcular determinants i invertir matrius. La idea bàsica del mètode, que il·lustrem amb un exemple, consisteix a utilitzar transformacions elementals de fila i columna per eliminar successivament les variables començant per la primera equació i la primera variable i continuant amb la resta. D'aquesta manera, després d'eliminacions $(n - 1)$ s'arriba a un sistema equivalent al donat, de matriu triangular superior, que es resol directament per substitució cap enrere. Vegem com funciona:

| |
|--|
| Font de l'apartat |
| <p><i>Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing</i> de David Kinkaid. Amer Mathematical Society. Standard No. 9781470411152.</p> |

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 2 & 3 & 4 & 9 \\ -1 & 0 & -1 & -2 \end{array} \right) \quad (17)$$

Aplicant transformacions elementals utilitzant la primera fila, fem zero tots els elements de la primera columna excepte el de la diagonal.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 0 & -1 & -2 & -3 \\ 0 & 2 & 2 & 4 \end{array} \right) \quad (18)$$

Fixant-nos en l'element diagonal de la segona fila, fem zero tots els elements de la segona columna per sota de la diagonal.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 0 & -1 & -2 & -3 \\ 0 & 0 & -2 & -2 \end{array} \right) \quad (19)$$

Amb això ja tenim el sistema triangular superior equivalent, que resollem per substitució cap enrere començant per l'última equació i acabant en la primera. D'aquí s'extreu que $x_1 = 1$, $x_2 = 1$ i $x_3 = 1$.

En l'eliminació gaussiana tal com l'acabem d'exposar s'assumeix que en la k -èsima eliminació el coeficient de la variable que es desitja eliminar, que s'anomena *pivot* i que ocupa la posició (k, k) de la matriu del sistema en aquest moment, és diferent de zero. Sovint no succeeix així, per la qual cosa s'aconseilla reordenar les equacions i, fins i tot, els termes en cada cas per aconseguir, per raons d'estabilitat numèrica, que el pivot sigui el més gran possible en valor absolut.

Hi ha diferents estratègies per a l'elecció del pivot, segons si la reordenació afecta només les files (pivotació parcial) o tant les files com les columnes (pivotació total). En principi podria semblar més convenient la pivotació total, però el seu elevat cost numèric, ja que exigeix en cada eliminació la comparació de tots els elements de la matriu, fa preferible en la pràctica la pivotació parcial amb l'equilibri de files i columnes. Aquest equilibratge té com a objectiu normalitzar-les, la qual cosa s'aconsegueix multiplicant tots els seus elements per nombres convenients.

L'eliminació gaussiana és una de les tècniques més simples i alhora més efectives. Si us hi fixeu, una vegada posat el sistema lineal d'equacions en la seva forma matricial, tan sols hem d'aconseguir transformar aquesta matriu en una matriu diagonal superior (és a dir, que en la part que és per sota de la diagonal tan sols trobem zeros) i a partir d'aquí resoldre cap enrere, això és, primer tenim l'última incògnita i la substituïm en la resta de les equacions i així successivament fins a tenir el resultat del sistema lineal d'equacions.

3.1.2. Mètode de Gauss-Jordan

El mètode de Gauss-Jordan és el mètode directe òptim per trobar la inversa d'una matriu quan aquesta no té cap estructura particular. En el mètode de Gauss-Jordan es disposa la matriu quadrada A de $n \times n$ que es desitja invertir a l'esquerra i la matriu unitat I_n a la seva dreta. Es realitzen successives eliminacions gaussianes mitjançant transformacions elementals de fila i columna fins a tenir a l'esquerra la matriu unitat I_n ; en aquest cas, a la dreta tindrem la inversa A^{-1} . Vegem amb el mateix exemple com es calcula la inversa:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 4 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & -1.5 & 1 & -0.5 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1.5 & -1 & -0.5 \end{array} \right) \quad (20)$$

3.1.3. Descomposició LU

El mètode de descomposició LU és una variant del mètode de Gauss i consisteix a factoritzar la matriu A del sistema lineal que es vol resoldre en dues matrius, una triangular inferior, que anomenarem L , i una altra triangular superior, que rebrà el nom de U . Un cop obtinguda la descomposició, es troba la solució resolent el sistema lineal:

$$(LU)x = L(Ux) = b \quad (21)$$

Resolent successivament els dos sistemes lineals triangulars següents:

$$Ly = b \quad (22)$$

$$Ux = y$$

Hi ha moltes maneres de dur a terme aquesta descomposició. En aquest material n'explicarem una de les més senzilles, l'algorisme de Crout, que funciona sempre que tots els menors principals de A , és a dir, les submatrius de A , siguin diferents de 0. En aquesta descomposició se suposa que la matriu triangular superior U té elements unitat en la diagonal principal.

La descomposició LU és una tècnica de descomposició de matrius molt important. I, de fet, molts mètodes de resolució d'equacions lineals i no lineals (no entren en aquest material) es basaran en descomposicions LU, entre altres coses, per resoldre'ls. Comprendre bé aquesta tècnica us facilitarà la comprensió d'alguns dels mètodes que estudiarem a continuació.

Exemple 5. Descomposició LU

Explicuem aquest mètode amb un exemple pràctic.

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

Factorització LU

En aquest exemple es pot veure de manera pràctica com es calculen les matrius L i U .

Per calcular aquests coeficients procedim successivament per identificació:

$$\begin{aligned} l_{11} &= 1; & l_{21} &= 2; \\ l_{11}u_{12} &= 2 \rightarrow u_{12} = 2; & l_{21}u_{12} + l_{22} &= 3 \rightarrow u_{12} = 2; \\ l_{11}u_{13} &= 3 \rightarrow u_{13} = 3; & l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23} &= 4 \rightarrow u_{23} = 2; \\ l_{31} &= -1 \\ l_{31}u_{12} + l_{32} &= 3; \rightarrow l_{32} = 2; \\ l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33} &= -1 \rightarrow l_{33} = -2; \end{aligned} \quad (24)$$

Resolent aquest sistema s'obtenen els valors de l_{ij} i de u_{ij} . Un cop obtinguda la factorització, resollem els dos sistemes triangulars.

El primer és $Ly = b$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 9 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad (25)$$

del qual es té que $y_1 = 6$, $y_2 = 3$ i, finalment, $y_3 = 1$.

El segon sistema, $Ux = y$, es resol per substitució cap enrere:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

del qual es té que $x_1 = 1$, $x_2 = 1$ i, finalment, $x_3 = 1$.

Si la matriu A del sistema no és simètrica, o amb molts zeros, etc., i no convergeix per altres mètodes iteratius, la descomposició LU és el mètode més aconsellable.

Exemple 6. Descomposició LU

Us animem a comprovar els càlculs de la resolució d'aquest sistema d'equacions lineals:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + 3x_4 &= 4 \\ 2x_1 + x_2 - x_3 + x_4 &= 1 \\ 3x_1 - x_2 - x_3 + 2x_4 &= -3 \\ -x_1 + 2x_2 + 3x_3 - x_4 &= 4 \end{aligned} \quad (27)$$

La seqüència d'operacions $(E_2 - 2E_1) \rightarrow (E_2)$, $(E_3 - 3E_1) \rightarrow (E_3)$, $(E_4 - (-1)E_1) \rightarrow (E_4)$, $(E_3 - 4E_2) \rightarrow (E_3)$, $(E_4 - (-3)E_2) \rightarrow (E_4)$ el converteix en el sistema triangular:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + 3x_4 &= 4 \\ -x_2 - x_3 - 5x_4 &= -7 \\ 3x_3 + 13x_4 &= 13 \\ -13x_4 &= -13 \end{aligned} \quad (28)$$

D'aquesta manera, la matriu A es descompon en la seva factorització LU:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 3 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} = LU \quad (29)$$

Aquesta factorització ens permet resoldre fàcilment el sistema que conté la matriu A . Per exemple, per resoldre

$$Ax = LUx = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 7 \\ 14 \\ -7 \end{pmatrix} \quad (30)$$

primer introduïm la substitució $y = Ux$. Després $Ly = b$, és a dir,

$$LUx = Ly = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 4 & 1 & 0 \\ -1 & -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 7 \\ 14 \\ -7 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Aquest sistema es resol per a y mitjançant un simple procés de substitució cap enrere. El resultat és $y_1 = 8$, $y_2 = -9$, $y_3 = 26$ i, finalment, $y_4 = -26$. I llavors resollem $Ux = y$ per a x , o sigui, la solució del sistema original, és a dir,

$$LUx = Ly = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & -1 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 3 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & -13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -9 \\ 26 \\ -26 \end{pmatrix} \quad (32)$$

i, en emprar la substitució cap enrere, obtenim $x_4 = 2$, $x_3 = 0$, $x_2 = -1$ i $x_1 = 3$.

3.1.4. Descomposició QR

A vegades pot ser que hàgim de resoldre un sistema de n equacions lineals amb m incògnites, és a dir, un sistema $m \times n$. En aquest cas, i sense entrar en gaires detalls en aquest material, n'hi ha prou amb conèixer que la tècnica usual és trobar un vector x que anomenarem *solució per mínims quadrats* (es pot consultar en els llibres de referència). En aquests casos, s'utilitza la tècnica coneguda com a *descomposició QR*.

La descomposició QR d'una matriu $A_{m \times n}$ consisteix a expressar la matriu A com a producte de dues matrius, Q i R , amb $Q_{m \times n}$ ortogonal i R triangular superior. Aquesta descomposició s'empra per resoldre sistemes $m \times n$ amb $m \leq n$ en el sentit de mínims quadrats.

Aclariment

Aquest mètode funciona especialment bé per a matrius simètriques tridiagonals. Si la matriu és simètrica, es pot transformar amb operacions lineals en tridiagonal.

1) Resoleu el sistema lineal $Ax = b$ mitjançant la descomposició que estimeu oportuna:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

solució: $x = (1, 1, -2, -1)$

2) Resoleu el sistema lineal $Ax = b$ mitjançant la descomposició que estimeu oportuna:

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 100 \\ 200 \\ 200 \\ 200 \\ 100 \end{pmatrix} \quad (34)$$

solució:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 46.153 \\ 84.615 \\ 92.307 \\ 84.6152 \\ 46.153 \end{pmatrix} \quad (35)$$

3.2. Mètodes iteratius

Un mètode iteratiu per resoldre el sistema lineal $Ax = b$ comença amb una aproximació inicial $x^{(0)}$ a la solució x i genera una successió de vectors $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ que convergeix a x . Els mètodes iteratius comporten un procés que converteix el sistema $Ax = b$ en un altre d'equivalent de la forma $x = Tx + c$ per a alguna matriu fixa T i un vector c . Després de seleccionar el valor inicial $x^{(0)}$, la successió de vectors de la solució es genera de la manera següent:

$$x^{(k)} = Tx^{(k-1)} + c \quad (36)$$

per a $k = 1, 2, \dots$. Aquest resultat és molt potent, ja que permet resoldre sistemes complexos amb un grau de precisió tan alt com es vulgui, és a dir, es pot triar l'error que es vol cometre.

Els mètodes iteratius gairebé mai s'usen per resoldre sistemes lineals de petita dimensió, ja que el temps necessari per aconseguir una exactitud satisfactòria depassa el que requereixen els mètodes directes explicats en l'apartat anterior. No obstant això, en el cas de sistemes grans amb un alt percentatge de zeros, són eficients tant en emmagatzematge de computadora com en el temps de còmput. Aquest tipus de sistema es presenta constantment en l'anàlisi de circuits i en la solució numèrica dels problemes amb valor a la frontera de les equacions diferencials parcials (no és part del material, però es comenta per il·lustrar alguns exemples d'ús).

Tots els mètodes iteratius que estudiarem per resoldre el sistema lineal $Ax = b$ es basen en una descomposició de la matriu A del tipus $A = M - N$ amb M invertible. Aleshores, el sistema lineal és:

$$Mx = Nx + b \rightarrow x = (M^{-1}N)x + M^{-1}b, \quad (37)$$

que escrivim $x = Tx + c$ amb $T = M^{-1}N$ i $c = M^{-1}b$.

Es defineix així l'esquema iteratiu de punt fix:

$$Mx^{(k+1)} = Nx^{(k)} + b \rightarrow x^{(k+1)} = (M^{-1}N)x^{(k)} + M^{-1}b \quad (38)$$

D'acord amb els resultats que hem anat donant sobre la convergència, aquest mètode serà convergent si i només si $\rho(M^{-1}N) < 1$ (recordem que $\rho(A)$ és el radi espectral de la matriu A).

3.2.1. Convergència i estimació de l'error

Quan es programa un mètode iteratiu per a la resolució d'algun sistema d'equacions lineals, una de les principals preguntes que ens podem fer és: quan es parará aquest mètode? Doncs la resposta és: quan sigui tan precís com vulguem. Aquesta afirmació planteja una nova pregunta: quan tindrà la solució la precisió que volem? Per respondre aquesta pregunta necessitem introduir en aquest apartat el concepte de *convergència*.

Si suposem que la successió de vectors és convergent a x , tenim que

$$x = Tx + c \quad (39)$$

i, per tant, la convergència de la matriu depèn del radi espectral de la matriu T . De fet, a partir d'aquesta afirmació s'enuncia un teorema, que generalitza aquest resultat:

Un esquema iteratiu per resoldre sistemes lineals del tipus

$$x^{(k+1)} = Tx^k + c \quad (40)$$

convergeix si i només si el radi espectral de la matriu T és estrictament menor que la unitat.

Aquest resultat és molt potent per a la resolució de sistemes lineals, ja que ens permetrà saber quan podrem utilitzar un mètode iteratiu sense por de crear bucles infinits o de tenir solucions inexactes.

La rapidesa de convergència d'un procediment depèn del radi espectral de la matriu relacionada amb el mètode. Per això, una manera de seleccionar un procediment que acceleri la convergència consisteix a seleccionar un mètode la matriu associada del qual tingui un radi espectral mínim. Abans de descriure els procediments perquè pugueu triar-los explicarem una nova manera de mesurar el grau d'aproximació de la solució d'un sistema lineal a la veritable solució.

Si tenim $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ una aproximació a la solució del sistema lineal definit per $Ax = b$, el vector residual de \tilde{x} respecte d'aquest sistema és $r = b - A\tilde{x}$. Des del punt de vista intuïtiu sembla raonable que, si \tilde{x} és una aproximació a la solució de x de $Ax = b$ i el vector residual $r = b - A\tilde{x}$ té la propietat que $\|r\|$ és petit, llavors $\|x - \tilde{x}\|$ també serà petit. Sovint aquest és el cas, però alguns sistemes no tenen aquest comportament.

Exemple 7

En aquest exemple veurem, amb un sistema d'equacions lineal, que no totes les aproximacions que considerem són sempre les òptimes per poder trobar la solució al sistema d'equacions lineals que volem resoldre.

El sistema lineal $Ax = b$ donat per

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 10001 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 30001 \end{pmatrix} \quad (41)$$

té la solució única $x = (1, 1)$. Suposem que l'aproximació $\tilde{x} = (3, 0)$ és la solució del sistema. Calculem el valor residual i obtenim:

$$r = b - A\tilde{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 30001 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 10001 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -0,0002 \end{pmatrix}, \quad (42)$$

de manera que $\|r\|_\infty = 0,0002$. Encara que la norma del vector residual és petita, l'aproximació $\tilde{x} = (3,0)$ és evidentment molt deficient; de fet, $\|x - \tilde{x}\|_\infty = 2$.

A partir d'aquest exemple es pot veure la dificultat d'interpretar el resultat d'un càlcul numèric a partir de l'estimació de l'error. Sota certes condicions es pot aconseguir informació "fiable" sobre l'error si es consideren les normes de la matriu A i la de la seva inversa, A^{-1} . A continuació donarem un resultat important per a aquest càlcul. Imaginem que \tilde{x} és una aproximació de la solució de $Ax = b$, que A és una matriu no singular i que r és el vector residual de \tilde{x} . Llavors, per a tota norma natural (recordem que les normes naturals són aquelles normes induïdes per una norma vectorial, per exemple, $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_\infty$):

$$\begin{aligned} \|x - \tilde{x}\| &\leq \|r\| \cdot \|A^{-1}\| \\ &\text{i} \\ \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} &\leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|r\|}{\|b\|} \end{aligned} \quad (43)$$

Aquestes desigualtats ens indiquen que les quantitats $\|A^{-1}\|$ i $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ ofereixen un índex de la connexió entre el vector residual r i l'exactitud de l'aproximació. En general, l'error relatiu $\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|}$ és de gran interès i, d'acord amb el teorema anterior, està fitat per $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ amb el residual relatiu d'aquesta aproximació $\frac{\|r\|}{\|b\|}$. En aquesta aproximació es pot fer servir qualsevol norma adequada, sempre que s'usi la mateixa durant tot el procés. El producte $\|A^{-1}\| \cdot \|A\|$ rep el nom de *condició de la matriu* ($K(A)$) i, en la pràctica, si $K(A)$ és menor que 1, la matriu A està ben condicionada. En canvi, si $K(A)$ és més gran que 1, la matriu està mal condicionada. Això és molt important en la pràctica, ja que no es pot assegurar que un vector residual petit impliqui una solució aproximada exacta.

3.2.2. Mètode iteratiu de Jacobi

Es basa en una descomposició de la matriu A del tipus $A = M - N$, amb $M = D$, part diagonal de la matriu A els elements de la qual són no nuls, i $N = L + U$, en què L , U són les parts triangulars inferior i superior, respectivament, de la matriu A canviades de signe. La descomposició proposada satisfà els criteris de selecció exposats. És possible definir aquestes matrius D , L i U de la mateixa manera que en la descomposició LU:

Important

En una matriu ben condicionada ($K(A) < 1$), un vector residual (r) petit implica una seguretat relativa que una solució aproximada serà exacta.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad (44)$$

de manera que la resultant per aplicar aquest mètode serà:

$$A = M - N = D - (L + U) = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ -a_{21} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & \cdots & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Vegem amb un exemple de com funciona l'esquema general en la descomposició de Jacobi de la matriu A . Es tracta de resoldre el sistema lineal:

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 10 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (46)$$

en què la solució és el vector $x = (-1,5; 3; -0,5)$.

Per tant, es té la següent descomposició que hem descrit en l'equació (45), és a dir, hem de calcular les matrius D , L i U per resoldre el sistema d'equacions mitjançant el mètode de Jacobi:

$$M = D = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (47)$$

amb $N = L + U$.

La tria de l'estimador inicial no influeix en la convergència, però sí en el nombre d'iteracions per arribar a una solució acceptable. Si es coneix una aproximació de la solució, s'usarà com a estimador inicial. En cas que no sigui així, es pot prendre com a estimador inicial el terme independent o bé un vector de components (totes iguals a 1). Nosaltres prendrem com a estimador inicial un vector que pugui satisfer la primera equació del sistema lineal $x^{(0)} = (-1, 1, -1)$.

Per comprovar si estem convergint a la solució, cal disposar d'un bon criteri de convergència. Aquí prenem per comoditat la norma $\|\cdot\|_\infty$ i

$$\|r^{(0)}\| = \|Ax^{(0)} - b\|_\infty = 8 \quad (48)$$

Fem el primer pas de l'esquema:

$$Dx^{(1)} = Nx^{(0)} + b = (L + U)x^{(0)} + b \quad (49)$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -3 \\ 10 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (50)$$

és a dir,

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} -4 \\ 10 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow x^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (51)$$

amb

$$\|r^{(1)}\|_\infty = 2. \quad (52)$$

Per tant, el residu ha disminuït. Si seguim iterant:

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -1,5 \\ 2,75 \\ -0,5 \end{pmatrix}; \quad \|r^{(2)}\|_\infty = 1$$

$$x^{(5)} = \begin{pmatrix} -1,4922 \\ 3,0000 \\ -0,4522 \end{pmatrix}; \quad \|r^{(5)}\|_\infty = 0,0313 \quad (53)$$

$$x^{(9)} = \begin{pmatrix} -1,4999 \\ 3,0000 \\ -0,4999 \end{pmatrix}; \quad \|r^{(9)}\|_\infty = 4,8828 \times 10^{-4}$$

Us aconsellem que quan tingueu un sistema d'equacions lineals, i estigueu valorant els mètodes possibles que fareu servir, el mètode de Jacobi sigui una de les primeres opcions que considereu.

3.2.3. Mètode iteratiu de Gauss-Seidel

Es basa en una descomposició de la matriu A del tipus $A = M - N$, amb $M = D - L$, i $N = U$. En cada iteració s'ha de resoldre un sistema triangular per substitució cap endavant. La mecànica de cada pas del mètode de Gauss-Seidel és, per tant, més complicada que en el mètode de Jacobi, però la velocitat de convergència és superior. Il·lustrem l'algorisme amb el mateix exemple que per al mètode de Jacobi. Fem el primer pas de l'esquema:

$$Mx^{(1)} = Nx^{(0)} + b = Ux^{(0)} + b \quad (54)$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -3 \\ 10 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (55)$$

I, per tant, haurem de resoldre el sistema triangular superior:

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} -4 \\ 11 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (56)$$

que es resol per substitució cap endavant:

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} -1,0000 \\ 3,0000 \\ -0,5000 \end{pmatrix} \quad (57)$$

amb

$$\|r^{(1)}\|_{\infty} = 2. \quad (58)$$

En el pas següent s'obté el resultat amb quatre decimals:

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} -1,0000 \\ 3,0000 \\ -0,5000 \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Es constata un comportament molt millor que el del mètode de Jacobi. Us proposem fer un estudi comparatiu entre la convergència dels dos mètodes iteratius presentats per veure que el mètode de Gauss-Seidel convergeix més ràpidament que el mètode de Jacobi.

3.2.4. Aplicació a l'àlgebra lineal: càlcul de valors i vectors propis. Mètode de la potència i de la potència inversa

La solució de molts problemes de la física i altres camps requereix calcular, o almenys eliminar, els valors propis i els corresponents vectors propis d'una matriu. Ja hem vist que una matriu A de $n \times n$ té exactament n valors propis que són arrels del polinomi $p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$. En teoria, els valors propis de A s'obtenen calculant les n arrels del polinomi $p(\lambda)$; després, es resolen els sistemes lineals associats per determinar els vectors propis corresponents.

En la pràctica és difícil obtenir el polinomi característic $p(\lambda)$ i, llevat que sigui per als valors petits de n , també és difícil determinar les arrels del polinomi de grau n . Per obtenir els valors i vectors propis calen els mètodes d'aproximació.

Mètode de la potència

Imaginem que la matriu A és diagonalitzable i que té un valor propi dominant que denotarem com a λ_1 i, després,

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|. \quad (60)$$

Si $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ és la base de vectors propis associada, de manera que $Ax_i = \lambda_i x_i$ per a $i = 1, \dots, n$. Aquest mètode determina λ_1 i un vector propi associat x_1 . Vegem quin fonament té i il·lustrem-ne l'aplicació amb un exemple.

Qualsevol vector arbitrari $x \in \mathbb{R}^n$ s'expressa d'una sola manera com a combinació lineal dels vectors propis de la base.

$$x = C_1 x_1 + C_2 x_2 + \dots + C_n x_n \quad (61)$$

amb $C_i \in \mathbb{R}$ per a $i = 1, \dots, n$.

Multiplicant els dos membres de l'equació anterior per les potències A^k de A amb $k \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} A^k x &= A^k (C_1 x_1 + C_2 x_2 + \dots + C_n x_n) = C_1 \lambda_1^k x_1 + C_2 \lambda_2^k x_2 + \dots + C_n \lambda_n^k x_n = \\ &= \lambda_1^k \left[C_1 x_1 + C_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k x_2 + \dots + C_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k x_n \right] \end{aligned} \quad (62)$$

Com que $|\lambda_1| > |\lambda_i|$ per a $i \geq 2$, els quocients $\frac{\lambda_i}{|\lambda_1|}$ són valors més petits que 1. Això vol dir que, a mesura que k es fa gran, els quocients $\left(\frac{\lambda_i}{|\lambda_1|}\right)^k$ són cada vegada més petits, són pràcticament 0.

En conseqüència, podem dir que quan k creix $A^{(k \cdot x)}$ és aproximadament igual a $\lambda_1^k C_1 x_1$:

$$A^k x \approx \lambda_1^k C_1 x_1 \quad (63)$$

Si triem una estimadora inicial adequada $x^{(0)}$, es pot construir aquesta successió:

$$x^{(k+1)} = A x^{(k)} \longrightarrow x^{(k)} = A^k x^{(0)} = A^k x \quad (64)$$

Per tant, si en l'equació anterior substituïm el valor de $A^k x^{(0)}$ de l'equació 63, tindrem:

$$x^{(k)} \approx \lambda_1^k C_1 x_1 = \lambda_1^k C_1 \quad (65)$$

I si ara iterem un pas més (de k a $k+1$), tindrem:

$$x^{(k+1)} \approx \lambda_1^{(k+1)} C_1 x_1 = \lambda_1^{(k+1)} C_1 \quad (66)$$

Si ara dividim l'equació 66 entre l'equació 65 s'obté l'expressió següent, que ens permet calcular λ_1 :

$$\frac{x^{(k+1)}}{x^{(k)}} = \lambda_1 \quad (67)$$

aleshores, si $x_1^{(k)} = 1$, llavors $x_1^{(k+1)} = \lambda_1$. Si a continuació escalem $x^{(k+1)}$ perquè $x_1^{(k+1)} = 1$, llavors $x_1^{(k+2)} = \lambda_1$, etc.

En l'exemple següent aplicarem l'algorisme al càlcul del valor propi λ_1 ; d'aquesta manera, l'exemple següent ens permet demostrar que aplicant aquest mètode iteratiu serem capaços de calcular el valor propi més gran en valor

absolut de la matriu A . Fixeu-vos que en aquest exemple es dona el valor de $\lambda_1 = 6$ i es demana comprovar-lo. Adoneu-vos que, si en algun moment haguéssiu de calcular el valor propi de valor absolut més gran d'una matriu, no hauríeu de calcular el polinomi característic i resoldre'l, ja que n'hi hauria prou amb aquest mètode.

Exemple 8

Ara veurem el mètode de la potència amb un exemple per calcular un valor propi d'una matriu, de la qual prèviament coneixerem els valors propis; així doncs, comprovarem que el resultat és correcte. Per tant, a partir de la matriu

$$\begin{pmatrix} -4 & 14 & 0 \\ -5 & 13 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \tag{68}$$

Proveu-ho vosaltres mateixos

Us animem a resoldre amb detall l'exercici i arribar als resultats que s'hi aporten.

que té els valors característics $\lambda_1 = 6$, $\lambda_2 = 3$ i $\lambda_3 = 2$, suposem $x^{(0)} = (1, 1, 1)$, i llavors:

$$y^{(1)} = Ax^{(0)} = (10, 8, 1), \tag{69}$$

així que

$$\|y^{(1)}\|_\infty = 10; \quad y_1^{(1)} = 10; \quad x^{(1)} = \frac{y^{(1)}}{10} = (1; 0,8; 0,1). \tag{70}$$

Continuant d'aquesta manera es generen els valors de la taula següent, en què λ és l'aproximació al valor propi dominant de la matriu, que en aquest cas és 6. Aquest mètode, a més, ens donarà el seu vector propi associat, tal com es pot observar en la taula que recull les dotze primeres iteracions del mètode de la potència:

Taula amb els valors de les iteracions del mètode de la potència

| Número d'iteració | 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) |

Com es pot veure, l'aproximació al valor propi dominant (és a dir, el valor propi de valor absolut més gran) és $\lambda_1 = 6,000837 \approx 6$; com s'esperava, a més, aquest mètode ens dona el vector propi associat a aquest valor propi.

Mètode de la potència inversa

Es pot obtenir el valor propi de valor absolut més petit de A i el seu vector propi associat aplicant el mètode de la potència a A^{-1} , els valors propis de la qual són, com sabem, els recíprocs dels valors de A . El recíproc del valor propi més petit de A en valor absolut és el de major absolut de A^{-1} . En la pràctica, s'utilitza la descomposició $A = LU$ per resoldre aquest problema en comptes de calcular A^{-1} .

Un cop triat l'estimador inicial $x(0)$ es calcula $x^{(1)}$ resolent el sistema

$$Ax^{(1)} = (LU)x^{(1)} = x^{(0)}. \quad (71)$$

Si A^{-1} no existeix, 0 és el valor propi de menys valor absolut i qualsevol vector del nucli de A es pot prendre com a vector propi associat. La resta dels valors propis i dels vectors propis associats es poden obtenir aplicant reiteradament la idea següent. Una vegada conegut l'element propi (λ_1, x_1) , se selecciona un estimador inicial que sigui ortogonal a x_1 i, en aplicar-hi el mètode de les potències, s'obtenen λ_2 i un vector propi associat x_2 . Per obtenir λ_3 es tria un vector inicial que sigui ortogonal tant a x_1 com a x_2 i se segueix el procés fins a tenir tots els valors propis calculats i els corresponents vectors propis associats als valors propis.

Fins ara s'han presentat alguns dels mètodes directes o iteratius principals per resoldre els sistemes d'equacions lineals. En resum, podem dir que el primer que cal fer és col·locar el sistema en forma de matriu, decidir quin és l'error que volem tenir i, finalment, decidir el mètode que és més eficient per resoldre'l.

Després de la introducció als mètodes numèrics per resoldre els sistemes d'equacions lineals teniu prou nivell per afrontar el primer exemple d'aquesta guia, amb el qual es motivava el perquè de la importància de fer servir els mètodes numèrics per trobar la solució en sistemes d'equacions lineals. Heu tornat a buscar la solució d'aquest sistema? Quin mètode triaríeu?

Convergència

Quan hem definit el concepte de *convergència* potser no ha quedat prou clar, però aquí en tenim un bon exemple. Si us fixeu en els valors de λ , a mesura que el nombre d'iteracions augmenta, aquest va tendint a 6; es pot dir, aleshores, que λ convergeix a 6 en aquest exemple.

Pista

Proveu de resoldre'l amb el vector unitat com a primera aproximació.

Bibliografia

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*. Mèxic: International Thomson Editors.

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

