

# Notas de Métodos Numéricos

Guido Tagliavini Ponce Universidad de Buenos Aires guido.tag@gmail.com

v1.3 (1 de febrero de 2016)

# Índice

1.	Eler	nentos de Álgebra Lineal	5
	1.1.	Espacio y Subespacio Vectorial	5
	1.2.	Combinación e Independencia Lineal	5
	1.3.	Conjunto de Generadores de un Espacio Vectorial	5
	1.4.	Base de un Espacio Vectorial	6
	1.5.	Dimensión de un Espacio Vectorial	6
	1.6.	Matrices: definición y propiedades	6
		1.6.1. Rango	6
		1.6.2. Inversibilidad	6
		1.6.3. Determinante	6
		1.6.4. Traza	7
	1.7.	Operaciones sobre matrices	7
		1.7.1. Suma	7
		1.7.2. Igualdad	7
		1.7.3. Producto por escalar	7
		1.7.4. Producto	7
		1.7.5. Inversa	7
		1.7.6. Transpuesta	7
	1.8	Matrices Elementales	8
	1.0.	1.8.1. Identidad	8
		1.8.2. Matrices de permutación	8
		1.8.3. Triangular	9

		1.8.4. Diagonal	9
		1.8.5. (????)	9
		1.8.6. (????)	10
	1.9.	Transformaciones lineales	10
	1.10.	Imagen y Nucleo	11
	1.11.	Teorema de la Dimensión	11
	1.12.	Matrices ortogonales	11
	1.13.	Autovalores	11
	1.14.	Diagonalización	12
า	Non		13
4.	Nor	Definiciones	13
			14
		Normas matriciales clásicas	14
	2.4.	Estabilidad de un sistema y número de condición	14
3.	Arit	mética de la computadora	16
	3.1.	Representación estándar IEEE	16
	3.2.	Aproximación de los reales mediante números de máquina	16
	3.3.	Distribución de los números de máquina sobre la recta real $\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	17
	3.4.	Error absoluto y error relativo	18
	3.5.	Epsilon de máquina	18
	3.6.	Errores de redondeo clásicos	19
		3.6.1. Suma de números de órdenes muy distintos	19
		3.6.2. Resta de números cercanos	19
		3.6.3. Multiplicación por números grandes o dividisión por números pequeños $\dots \dots \dots \dots$	20
	3.7.	Generalización	20
4.	Siste	emas de ecuaciones lineales	21
	4.1.	Problema	21
	4.2.	Existencia y unicidad de la solución	21
	4.3.	Resolución de un sistema lineal	21
	4.4.	Eliminación gaussiana sin pivoteo	22
	4.5.	Eliminación gaussiana con pivoteo	23
	4.6.	Pivoteo parcial	24
	4.7.	Factorización LU	24
		4.7.1. Existencia y unicidad de la factorización LU	25
		4.7.2. Aplicación	25
		4.7.3. Familias de matrices que admiten factorización LU	25
	4.8.	Matrices banda	26
	4.9.	Matrices simétricas definidas positivas y factorización de Cholesky	26
		4.9.1. Matrices simétricas y definidas positivas	26

		4.9.2. Factorización de Cholesky	26
	4.10	. Estabilidad numérica de Cholesky	28
<b>5.</b>	Fac	torización QR	29
	5.1.	Método de rotaciones (Givens)	29
		5.1.1. Extensión al caso general	30
		5.1.2. Costo del algoritmo	31
	5.2.	Método de reflexiones (Householder)	31
		5.2.1. Costo del algoritmo	33
	5.3.	Observaciones finales	33
6.	Cál	culo de autovalores y autovectores	34
	6.1.	Problema	34
	6.2.	Método de las potencias	34
	6.3.	Cálculo de un autovector asociado	35
	6.4.	Método de las potencias inversas	36
7.	Des	scomposición en valores singulares	37
	7.1.	Problema	37
	7.2.	Lemas auxiliares	37
	7.3.	Teorema de descomposición en valores singulares	37
8.	Mét	todos iterativos para resolución de sistemas lineales	39
	8.1.	Definiciones	39
	8.2.	Problema	39
	8.3.	Métodos exactos vs. métodos iterativos	39
	8.4.	Método de Jacobi	40
		8.4.1. Forma matricial	40
	8.5.	Método de Gauss - Seidel	41
		8.5.1. Forma matricial	41
	8.6.	Análisis de convergencia	42
	8.7.	Familias de matrices que aseguran la convergencia	43
	8.8.	Comparación entre los métodos	43
9.	Mét	todo del gradiente conjungado	44
	9.1.	Problema	44
	9.2.	El método	44
	9.3.	Elección de las direcciones	45
	9.4.	Generación de direcciones $A$ -conjugadas	46
	9.5.	Comparación con Cholesky	46
10	$0.  ext{Int} \epsilon$	erpolación polinómica	47
	10.1	. Problema	47
	10.2	Polinomio interpolador de Lagrange	47

	10.3. Diferencias divididas	47
	10.4. Interpolación segmentada	48
	10.4.1. Lineal	48
	10.4.2. Cuadrática	48
	10.4.3. Cúbica	48
11	.Integración numérica	51
	11.1. Problema	51
	11.2. Regla del trapecio $(n=1)$	51
	11.3. Regla de Simpson $(n=2)$	51
	11.4. Grado de precisión	51
	11.5. Reglas compuestas	52
	11.5.1. Regla compuesta del trapecio	52
	11.5.2. Regla compuesta de Simpson	52
	11.6. Métodos adaptativos	52
12	2.Cuadrados mínimos lineales	<b>5</b> 4
	12.1. Problema	54
	12.2. Intuición geométrica	55
	12.3. Solución	55
	12.4. Ecuaciones normales	56
	12.5. Resolución por QR	56
	12.6. Resolución por SVD	57
13	3.Ceros de función	59
	13.1. Problema	59
	13.2. Propuesta	59
	13.3. Velocidad u orden de convergencia	59
	13.3.1. Interpretación	59
	13.4. Criterios de parada	60
	13.5. Método de Bisección	60
	13.5.1. Ventajas y desventajas	61
	13.6. Problemas de punto fijo	61
	13.7. Método de Newton	62
	13.7.1. Interpretación geométrica	63
	13.7.2. Ventajas y desventajas	63
	13.8. Método de la Secante	64
	13.8.1. Ventajas y desventajas	64
	13.9. Método Regula Falsi	65
	13.9.1. Ventajas y desventajas	65

14. Referencias

## 1. Elementos de Álgebra Lineal

Esta sección provee nociones básicas de Álgebra Lineal necesarias para el curso, pero no se pretende profundizar demasiado, ya que no es una materia especifica de Álgebra Lineal.

### 1.1. Espacio y Subespacio Vectorial

**Definición 1.1.** Un Espacio Vectorial  $(V, +, \bullet, K)$  es una estructura algebraica creada sobre el conjunto no vacio V, con una operación interna llamada suma definida para los elementos del conjunto V y una operación externa llamada producto definida entre los elementos del conjunto V y el conjunto K, que debe tener estructura de cuerpo. Dicha estructura debe cumplir las siguientes 8 propiedades:

- 1. La suma debe ser conmutativa, es decir:  $u+v=v+u \quad \forall \ u,v \in V$
- 2. La suma debe ser asociativa, es decir:  $u + (v + w) = (u + v) + w \quad \forall u, v, w \in V$
- 3. La suma debe tener elemento neutro, es decir:  $\exists 0 \in V : u + 0 = u \quad \forall u \in V$
- 4. La suma debe tener elemento inverso, es decir:  $\forall u \in V, \exists -u \in V : u + (-u) = 0$
- 5. El producto debe ser asociativo, es decir:  $a \cdot (b \cdot u) = (a \cdot b) \cdot u \quad \forall \ a,b \in K, \ \forall \ u \in V$
- 6. El producto debe tener elemento neutro, es decir:  $\exists \ 1 \in K : 1 \cdot u = u \quad \forall \ u \in V$
- 7. El producto debe ser distributivo respecto la suma de vectores, es decir:  $a \cdot (u+v) = a \cdot u + a \cdot v \quad \forall \ a \in K, \ \forall \ u,v \in V$
- 8. El producto debe ser distributivo respecto la suma de escalares, es decir:  $(a+b)\cdot u = a\cdot u + b\cdot u \quad \forall \ a,b\in K,\ \forall \ u\in V$

**Definición 1.2.** Si  $\mathbb{V}$  es un Espacio Vectorial y  $\mathbb{S} \subset \mathbb{V}$ , decimos que  $\mathbb{S}$  es un Subespacio Vectorial de  $\mathbb{V}$  si:

- $0 \in \mathbb{S}$  (o que  $\mathbb{S} \neq \emptyset$ ).
- $u, v \in \mathbb{S} \implies u + v \in \mathbb{S}$
- $u \in \mathbb{S}, \ \lambda \in K \implies \lambda \cdot u \in \mathbb{S}$

De ahora en más vamos a suponer que el conjunto V es, por ejemplo,  $\mathbb{R}^n$  y el cuerpo K es  $\mathbb{R}$ .

### 1.2. Combinación e Independencia Lineal

Sea  $\mathbb{V}$  un Espacio Vectorial y sean  $\{v_1, \ldots, v_k\} \subset \mathbb{V}$ .

**Definición 1.3.** Decimos que  $w \in \mathbb{V}$  es combinación lineal de  $\{v_1, \ldots, v_k\}$  si  $\exists \lambda_1, \ldots, \lambda_k \in \mathbb{R}/w = \lambda_1 v_1 + \cdots + \lambda_k v_k$ 

**Definición 1.4.** Decimos que  $\{v_1, \dots, v_k\}$  es linealmente independiente si la única combinación lineal de ellos igualada a  $0 \in \mathbb{V}$  es la combinación lineal "trivial" (coeficientes nulos)

$$\lambda_1 v_1 + \cdots + \lambda_k v_k = 0 \implies \lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_k = 0$$

#### 1.3. Conjunto de Generadores de un Espacio Vectorial

Sea  $\mathbb{V}$  un Espacio Vectorial y sean  $\{v_1, \ldots, v_k\} \subset \mathbb{V}$ .

**Definición 1.5.** Decimos que  $\langle v_1, \dots, v_k \rangle$  es un *conjunto generador* y genera el conjunto de todas las combinaciones lineales de  $\{v_1, \dots, v_k\}$ , o lo que es lo mismo:

$$\langle v_1, \dots, v_k \rangle = \{\lambda_1 v_1 + \dots + \lambda_k v_k / \lambda_1, \dots, \lambda_k \in \mathbb{R}\}$$

### 1.4. Base de un Espacio Vectorial

Sea  $\mathbb{V}$  un Espacio Vectorial y sean  $\{v_1,\ldots,v_k\}\subset\mathbb{V}$ , un conjunto de generadores linealmente independientes.

**Definición 1.6.** Decimos que  $\{v_1, \ldots, v_k\}$  forman una *Base* de  $\mathbb{V}$  y todo elemento de  $\mathbb{V}$  se puede escribir como combinación lineal de  $v_1, \ldots, v_k$ .

### 1.5. Dimensión de un Espacio Vectorial

Sea  $\mathbb{V}$  un Espacio Vectorial y sean  $\{v_1,\ldots,v_k\}\subset\mathbb{V}$  una Base de  $\mathbb{V}$ .

**Definición 1.7.** La dimensión de  $\mathbb{V}$  es la cantidad de vectores en la Base, es decir k, y se denota  $dim(\mathbb{V})$ .

### 1.6. Matrices: definición y propiedades

**Definición 1.8.** Una matriz A de  $m \times n$  es un arreglo de m filas y n columnas.

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,n} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \cdots & a_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & a_{m,3} & \cdots & a_{m,n} \end{bmatrix}$$

#### 1.6.1. Rango

El rango de una matriz es el número de filas (o columnas) linealmente independientes.

### 1.6.2. Inversibilidad

Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Se dice que A es inversible sii  $\exists B \in \mathbb{R}^{n \times n}/A \cdot B = B \cdot A = I$ .

B se nota como  $A^{-1}$ 

Obs:

- Si  $\exists A^{-1}$  entonces es única
- $\blacksquare \ \exists A^{-1} \iff \det(A) \neq 0 \iff (Ax = 0 \implies x = 0) \iff \text{las columnas de } A \text{ son l.i.} \iff \text{las filas de } A \text{ son l.i.}$

Nomenclatura: Si A es inversible, se dice **no singular**. Si es **singular**, es no inversible.

#### 1.6.3. Determinante

Sea 
$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$
.  $det(A) \in \mathbb{R}$   
Obs:

- $det(A \cdot B) = det(A) \cdot det(B)$
- $det(A) \neq 0 \Leftrightarrow \exists A^{-1}$

#### 1.6.4. Traza

Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ .

**Definición 1.9.** Definimos la traza de A como la suma de los elementos de la diagonal:

$$tr(A) = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} a_{ii}$$

### 1.7. Operaciones sobre matrices

Sobre las matrices se pueden aplicar las siguientes operaciones:

#### 1.7.1. Suma

A+B=C sii A y B tienen la misma dimesión (i.e.,  $A,B\in\mathbb{R}^{m\times n}\Rightarrow C\in R^{m\times n}$ ).

$$a_{i,j} + b_{i,j} = c_{i,j}$$
  $\forall i = 1 \cdots m \ \forall j = 1 \cdots n$ 

### 1.7.2. Igualdad

A=B sii A y B tienen la misma dimensión.

$$a_{i,j} = b_{i,j}$$
  $\forall i = 1 \cdots m \ \forall j = 1 \cdots n$ 

#### 1.7.3. Producto por escalar

Sea  $\lambda \in \mathbb{R}$ .  $\lambda \cdot A = B \ (A \in \mathbb{R}^{m \times n} \Rightarrow B \in \mathbb{R}^{m \times n})$ 

$$\lambda \cdot a_{i,j} = b_{i,j}$$
  $\forall i = 1 \cdots m, j = 1 \cdots n$ 

### 1.7.4. Producto

 $A \cdot B = C$  sii  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $B \in \mathbb{R}^{n \times p} \Rightarrow C \in \mathbb{R}^{m \times p}$ 

$$c_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} \cdot b_{k,j}$$

Observar que no necesariamente vale que AxB = BxA.

#### 1.7.5. Inversa

Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  inversible y  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  dicha matriz inversa, entonces:  $A^{-1} = B$  Obs:

- $(A^{-1})^{-1} = A$
- $\blacksquare$  Sean A y  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  inversibles. Entonces  $(A \cdot B)^{-1} = B^{-1} \cdot A^{-1}$

### 1.7.6. Transpuesta

Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Se define  $A^t \in \mathbb{R}^{n \times m}$  como

$$(A^t)_{i,j} = A_{j,i}$$
  $\forall i = 1 \cdots n, j = 1 \cdots m$ 

 $\underline{\mathrm{Obs}}$ :

 $(A+B)^t = A^t + B^t$ 

 $\quad \blacksquare \ (A \cdot B)^t = B^t \cdot A^t$ 

 $(A^{-1})^t = (A^t)^{-1}$ 

### 1.8. Matrices Elementales

#### 1.8.1. Identidad

I matriz identidad.  $I \in R^{n \times n}$ 

$$I_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad \forall i, j = 1 \cdots n$$

Consecuentemente, la forma de la matriz identidad de  $\mathbb{R}^{n\times n}$  es:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Obs: 
$$I \cdot A = A \cdot I = A$$
  $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 

### 1.8.2. Matrices de permutación

Una matriz de permutación P es una matriz que permite permutar filas o columnas de una matriz A al realizar:

- $\blacksquare P \cdot A$  permuta las filas de A
- $\blacksquare$   $A \cdot P$  permuta las columnas de A

La matriz P se obtiene permutando las columnas de la matriz identidad (I). Observemos en un ejemplo de  $3 \times 3$  en el que llamamos 1, 2 y 3 a las columnas de la matriz identidad de la siguiente forma:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = (1, 2, 3)$$

Si permutamos, por ejemplo, las filas 1 y 2, obtenemos la siguiente matriz de permutación P:

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = (2, 1, 3)$$

Si multiplicamos a izquierda esta matriz con cualquier otra, el resultado será esa misma matriz pero con la primer y segunda fila cambiadas de lugar (pues obtuvimos P permutando la primer y segunda columnas de la identidad).

Obs: esta notación con índices permite almacenar una matriz de permutación  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$  en sólamente n elementos, en lugar de en los  $n^2$  que normalmente tomaría.

#### 1.8.3. Triangular

Una matriz es Triangular si los elementos por debajo o por arriba de la diagonal principal son cero.

En el primer caso, decimos que es Triangular Superior:

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Análogamente, en el segundo caso decimos que es Triangular Inferior:

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

#### 1.8.4. Diagonal

Una matriz es Diagonal cuando los únicos elementos distintos de cero son los elementos de la diagonal principal:

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & d_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \vdots & d_{nn} \end{bmatrix}$$

Obs: dicha matriz es a la vez Triangular Superior e Inferior.

#### 1.8.5. (????)

Una matriz de (????) E es una matriz que permite multiplicar toda una fila o columna de una matriz A por un escalar dado, al realizar:

- $E \cdot A$  multiplica una fila de A por un escalar  $\lambda$ .
- $A \cdot E$  multiplica una columna de A por un escalar  $\lambda$ .

Dado el escalar  $\lambda$ , definimos la matriz E de la forma:

$$E = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{con } \lambda \in \mathbb{R}$$

Si  $\lambda$  está en la fila s de la matriz E, entonces la fila s de la matriz  $B = E \cdot A$  es la fila s de la matriz A multiplicada por  $\lambda$ . Las restantes filas quedan iguales.

Ejemplos en  $4 \times 4$ :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 5 & 9 & 13 \\ 2 & 6 & 10 & 14 \\ 3 & 7 & 11 & 15 \\ 4 & 8 & 12 & 16 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 9 & 13 \\ 2 & 6 & 10 & 14 \\ 3 \cdot \lambda & 7 \cdot \lambda & 11 \cdot \lambda & 15 \cdot \lambda \\ 4 & 8 & 12 & 16 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 5 & 9 & 13 \\ 2 & 6 & 10 & 14 \\ 3 & 7 & 11 & 15 \\ 4 & 8 & 12 & 16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 9 \cdot \lambda & 13 \\ 2 & 6 & 10 \cdot \lambda & 14 \\ 3 & 7 & 11 \cdot \lambda & 15 \\ 4 & 8 & 12 \cdot \lambda & 16 \end{bmatrix}$$

### 1.8.6. (????)

Una matriz de (????) E es una matriz que permite sumar dos filas o columnas de una matriz A, multiplicando una de ellas por un escalar dado.

Dado el escalar  $\lambda$ , se define E como:

$$E = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & \lambda & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

(Observar que es la matriz identidad con  $\lambda$  en algún lugar de algún 0).

Suponiendo que  $\lambda$  está en la fila i y columna j, vale que

- $E \times A$  multiplica la j-ésima fila de A por  $\lambda$  y se la suma a la i-ésima fila de A.
- $A \times E$  multiplica la j-ésima columna de A por  $\lambda$  y se la suma a la i-ésima columna de A.

#### Ejemplo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 4 & -7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 2 \cdot \lambda + 3 & 5 \cdot \lambda + 6 & 8 \cdot \lambda + 9 \end{bmatrix}$$

### 1.9. Transformaciones lineales

Sean  $\mathbb{V}$ ,  $\mathbb{W}$  dos Espacios Vectoriales con cuerpo en  $\mathbb{R}$ 

**Definición 1.10.** Una función  $f: \mathbb{V} \to \mathbb{W}$  se llama trasnformación lineal si respeta las operaciones:

- $f(u+v) = f(u) + f(v) \quad \forall u, v \in \mathbb{V}$
- $f(\lambda \cdot u) = \lambda \cdot f(u) \quad \forall u \in \mathbb{V}, \ \forall \lambda \in \mathbb{R}$

**Teorema 1.1.** Si  $f: \mathbb{V} \to \mathbb{W}$  es una transformación lineal  $\implies f(0) = 0$ 

**Teorema 1.2.** Si  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y definimos  $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$  con la forma f(x) = Ax.

Entonces, f es una transformación lineal y lo llamamos transformación lineal asociada a A.

Propiedad 1.1. Si f es transformación lineal asociada a una matriz A, entonces

 $A \ es \ inversible \iff f \ es \ biyectiva$ 

Obs: La matriz asociada a  $f^{-1}$  es  $A^{-1}$ .

### 1.10. Imagen y Nucleo

Sea  $f: \mathbb{V} \to \mathbb{W}$  una transformación lineal y  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Entonces,

Definición 1.11. Definimos el Nucleo (Nu) como

- $Nu(f) = \{v \in \mathbb{V} : f(v) = 0\}$  subespacio de  $\mathbb{V}$
- $Nu(A) = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0 \in \mathbb{R}^m\}$  subespacio de  $\mathbb{R}^n$

Definición 1.12. Definimos la Imagen (Im) como

- $Im(f) = \{f(v)/v \in \mathbb{V}\}$  subespacio de  $\mathbb{W}$
- $Im(A) = \{Ax/x \in \mathbb{R}^n\}$  subespacio de  $\mathbb{R}^m$

Obs: Im(A) es igual al espacio generado por las columnas de A.

### 1.11. Teorema de la Dimensión

**Teorema 1.3.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , y su transformación lineal asociada  $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ . Entonces,

$$dim(Nu(A)) + dim(Im(A)) = dim(\mathbb{R}^n) = n$$

Obs: dim(Im(A)) es igual al rango columna de A, que a su vez es igual a la cantidad de columnas linealmente independientes de A (rango columna) y la cantidad de filas linealmente independientes de A (rango fila).

### 1.12. Matrices ortogonales

**Definición 1.13.** Una matriz  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se dice ortogonal si  $Q^{-1} = Q^t$ .

**Observación 1.1.** Si Q es ortogonal entonces  $Q^t = Q^{-1}$  también, pues  $((Q^t)^{-1})^t = ((Q^t)^t)^{-1} = Q^{-1} = Q^t$ .

En lo que sigue, Q es una matriz ortogonal de  $n \times n$ .

**Lema 1.1.** Q preserva norma 2, i. e.,  $||Qx||_2 = ||x||_2$ .

**Lema 1.2.**  $||Q||_2 = 1$ .

**Corolario 1.1.**  $\kappa_2(Q) = 1$ .

Esto nos dice que las matrices ortogonales son estables, lo cual se condice con el hecho de que preservan norma 2, es decir, que no deforman vectores, haciendo que el error de las componentes escalares no sea amplificado. Este motivo hace a las matrices ortogonales atractivas desde el punto de vista numérico. Además, el cómputo de su inversa no requiere más que una transposición de elementos, y por lo tanto no introduce error.

### 1.13. Autovalores

**Definición 1.14.** Decimos que  $\lambda \in \mathbb{R}$  es un *autovalor* de  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  sii  $\exists x \neq 0 / Ax = \lambda x$ , y x se llama *autovector* asociado a  $\lambda$ .

Corolario 1.2. Equivalentemente,  $\lambda \in \mathbb{R}$  es un autovalor de  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  sii

$$Ax = \lambda x \iff Ax - \lambda x = 0$$

$$\iff Ax - \lambda I x = 0$$

$$\iff (A - \lambda I)x = 0$$

$$\iff det(A - \lambda I) = 0$$

$$\iff P(\lambda) = 0$$

Con P el polinomio característico de A, cuyas raices son los autovalores de A.

**Propiedad 1.2.** Sean  $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$  autovalores distintos de  $A \in \mathbb{R}^{m \times n} \implies v_1, \ldots, v_k$  autovectores asociados son linealmente independientes.

Las siguientes propiedades valen si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simetrica.

**Propiedad 1.3.** A tiene autovalores y autovectores reales.

Propiedad 1.4. A tiene autovalores y autovectores reales.

**Propiedad 1.5.** Sean  $(\lambda, u)$  y  $(\alpha, v)$  dos autovalores de A con un autovector asociado, y  $\lambda \neq \alpha \implies u \perp v$ .

**Propiedad 1.6.**  $\lambda$  autovalor de  $A \iff \lambda$  autovalor de  $QAQ^t$ , con Q ortogonal.

**Propiedad 1.7.**  $\exists \ Q \ ortogonal \ / \ QAQ^t = T \ triangular \ superior, \ o \ inferior.$ 

**Propiedad 1.8.**  $\exists Q \ ortogonal \ / \ QAQ^t = D \ diagonal, \ y \ las \ filas \ de \ Q \ son \ autovectores \ de \ A.$ 

Corolario 1.3. A tiene base de autovectores ortonormal.

### 1.14. Diagonalización

Sean  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ .

**Definición 1.15.** Decimos que A y B son *semejantes* si  $\exists$  P matriz inversible tal que  $A = P^{-1}BP$ 

**Propiedad 1.9.** Si A y B son semejantes  $\implies$  tienen mismos autovalores.

**Definición 1.16.** Decimos que A es diagonalizable por semejanza si es semejante a una matriz diagonal D, es decir  $A = P^{-1}DP$ 

**Propiedad 1.10.** A es diagonalizable por semejanza  $\iff$  tiene base de autovectores.

### 2. Normas

#### 2.1. Definiciones

**Definición 2.1.** Si  $\mathbb{V}$  es un Espacio Vectorial (en  $\mathbb{R}$ ), una función  $|| \bullet || : \mathbb{V} \to \mathbb{R}$  es una norma vectorial si cumple:

- 1.  $||v|| \ge 0 \quad \forall v \in \mathbb{V} \text{ y } ||v|| = 0 \iff v = 0.$
- 2.  $||\lambda v|| = |\lambda| ||v|| \quad \forall \ v \in \mathbb{V}, \ \forall \ \lambda \in \mathbb{R}.$
- 3.  $||v + w|| \le ||v|| + ||w|| \quad \forall \ v, w \in \mathbb{V}$ .

Algunos ejemplos de normas vectoriales son:

- $\|x\|_2 = \sqrt{(x_1)^2 + (x_2)^2 + \dots + (x_n)^2} = \left(\sum_{i=1}^n (x_i)^2\right)^{1/2}$
- $\|x\|_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} |x_i|$

El concepto se extiende naturalmente para matrices.

**Definición 2.2.** Una función  $F: \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$  es una norma matricial si cumple:

- 1. F(A) > 0 para toda  $A \neq 0$  y F(0) = 0.
- 2.  $F(\lambda A) = |\lambda| F(A)$ .
- 3.  $F(A+B) \le F(A) + F(B)$ .

Un ejemplo de norma matricial es la norma de Frobenius, una extensión aparentemente natural de la norma 2:

Una propiedad no necesaria, aunque deseable, es la de submultiplicatividad.

**Definición 2.3.** Si  $F: \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$  es una norma matricial, F se dice submultiplicativa si

para todas  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

Otra propiedad notable de las normas es la de consistencia.

**Definición 2.4.** Si  $F: \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$  es una norma matricial y  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  es una norma vectorial, F se dice consistente con f si

para todos  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$ .

**Propiedad 2.1.** Designaldad de Cauchy-Schwarz-Bunyakovsky: Sean  $x, y \in \mathbb{R}^n$ . Entonces,  $|x^ty| \le ||x||_2 ||y||_2$ 

**Propiedad 2.2.** Sea  $x \in \mathbb{R}^n$ . Entonces, vale que:

- $||x||_{\infty} \le ||x||_1$
- $||x||_1 \le n||x||_{\infty}$
- $||x||_{\infty} \le ||x||_2$

Propiedad 2.3.  $\lim_{p\to\infty}||x||_p=||x||_\infty$ 

#### 2.2. Normas inducidas

**Definición 2.5.** Sea  $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  una norma vectorial. Definimos  $F: \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$  como

$$F(A) = \max_{x:f(x)=1} f(Ax)$$

F resulta una norma matricial y se la llama norma inducida por f.

A partir de ahora simbolizaremos tanto las normas vectoriales como sus respectivas normas matriciales inducidas mediante  $\|\cdot\|$ , y el significado quedará claro por el contexto.

Las normas inducidas son de especial interés por lo siguiente.

**Proposición 2.1.**  $Si \parallel \cdot \parallel : \mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$  es una norma matricial inducida, entonces  $\parallel \cdot \parallel$  es submultiplicativa y consistente, es decir que

- 1.  $||AB|| \le ||A|| \, ||B||$
- $2. \|Ax\| \le \|A\| \|x\|$

#### 2.3. Normas matriciales clásicas

Proposición 2.2. Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Entonces

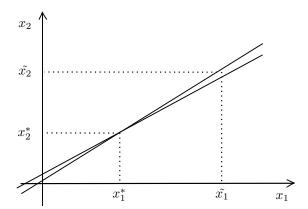
$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \left\| \operatorname{col}_j(A) \right\|_1$$

**Proposición 2.3.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Entonces

$$||A||_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} ||fil_i(A)||_1$$

### 2.4. Estabilidad de un sistema y número de condición

Consideremos un sistema lineal Ax = b de  $2 \times 2$ . Geométricamente se representa mediante dos rectas en el plano. Supongamos que estas rectas son *casi paralelas*.



Este sistema tiene solución única  $x^* = \begin{pmatrix} x_1^* \\ x_2^* \end{pmatrix}$ . Al resolverlo numéricamente encontramos una aproximación de la solución dada por  $\tilde{x} = \begin{pmatrix} \tilde{x_1} \\ \tilde{x_2} \end{pmatrix}$  que, debido a la proximidad entre rectas, es tal que  $A\tilde{x} = \tilde{b}$  con  $\tilde{b}$  parecido a b. Sin embargo, pese a este parecido,  $\tilde{x}$  está muy lejos de la solución exacta  $x^*$ .

En este caso, en que una pequeña variación respecto del resultado exacto significa una gran imprecisión en la aproximación obtenida, se dice que el sistema está mal condicionado.

La siguiente proposición formaliza esta idea intuitiva.

**Proposición 2.4.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  inversible. Sea  $x^*$  solución de Ax = b. Sea  $\tilde{x}$  solución de  $Ax = \tilde{b}$ . Si  $\|\cdot\|$  es una norma inducida cualquiera, entonces

1. 
$$||x^* - \tilde{x}|| \le ||b - \tilde{b}|| ||A^{-1}||$$

2. 
$$\frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|} \le \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|}$$

**Definición 2.6.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es inversible y  $\|\cdot\|$  es una norma inducida, definimos el número de condición de A como

$$\kappa(A) = ||A|| ||A^{-1}||$$

Con esta definición, podemos reescribir el resultado anterior como

Corolario 2.1.

$$\frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|} \le \kappa(A) \frac{\left\|b - \tilde{b}\right\|}{\|b\|}$$

Este resultado nos dice que cuanto más chico sea  $\kappa(A)$  entonces bajo un pequeño error relativo  $\frac{\|b-\tilde{b}\|}{\|b\|}$  (es decir, que el resultado obtenido es similar al buscado) podremos asegurar con mayor certeza un pequeño error relativo  $\frac{\|x^*-\tilde{b}\|}{\|x^*\|}$  (es decir, que la aproximación es precisa).

Observación 2.1.  $\kappa(A) \ge ||I|| = 1$ 

Observación 2.2.  $\kappa(\lambda A) = \kappa(A)$ 

Observación 2.3.  $\kappa(AB) \leq \kappa(A)\kappa(B)$ 

## 3. Aritmética de la computadora

Dado que en una computadora todos los números son representados mediante una cantidad de dígitos finita y fija, valores como  $\pi$  o  $\sqrt{2}$  no se pueden manipular con completa exactitud, pues al ser irracionales tienen infinitos decimales no periódicos. Los irracionales no son los únicos números no representables correctamente en una computadora: aquellos racionales con una cola decimal no periódica suficientemente grande tampoco lo serán. En una computadora sólo se pueden representar con precisión un subconjunto de los números racionales. Esto hace que al hacer cómputos con números reales se genere un error numérico.

### 3.1. Representación estándar IEEE

El estándar fijado por la IEEE contempla varias representaciones que se distinguen por su precisión. Las dos más frecuentemente utilizadas son *single* (32 bits) y *double* (64 bits). Las dos restantes son *half* (16 bits) y *quadruple* (128 bits). Todas estas representaciones son binarias y de punto flotante.

La precisión double tiene la siguiente estructura:



- **Signo** (s) 1 bit. El número representado es positivo si s=0 y negativo si no.
- Exponente (e) 11 bits. La base del exponente es 2. Para poder representar números con valor absoluto menor a 1 es necesario admitir exponentes negativos. Por esto, el exponente está representado en exceso a  $2^{10} 1$ , es decir, el exponente del número representado será  $(e)_2 (2^{10} 1)$ . Como e tiene 11 bits entonces  $0 \le (e)_2 \le 2^{11} 1 \Rightarrow -(2^{10} 1) \le (e)_2 (2^{10} 1) \le 2^{11} 1 (2^{10} 1) \Rightarrow -2^{10} + 1 \le (e)_2 (2^{10} 1) \le 2^{10}$ .
- Mantisa (m) 52 bits. Se considera una mantisa normalizada, i. e., el número representado tiene mantisa  $(1, m)_2$ .

En definitiva, el número representado es

$$(-1)^s \cdot (1,m)_2 \cdot 2^{(e)_2 - (2^{10} - 1)}$$

**Definición 3.1.** Decimos que un cómputo genera *underflow* si su resultado es menor que el mínimo positivo representable, en módulo. Análogamente, decimos que genera *overflow* si su resultado es mayor que el máximo positivo representable, en módulo.

### 3.2. Aproximación de los reales mediante números de máquina

En esta sección estudiaremos cuán eficaz es la aproximación de un número real mediante un sistema con las características del presentado previamente. El tipo de sistemas a los que nos referimos son representaciones de punto flotante con una longitud de mantisa fija y exponente acotado.

Supongamos que nuestro conjunto de números de máquina es

$$\mathcal{M} = \{ x \in \mathbb{R} : x = \pm (0, d_1 d_2 \cdots d_k) \cdot 10^e, 0 \le d_i \le 9, d_1 \ne 0, e_1 \le e \le e_2 \}$$

dadas ciertas constantes k,  $e_1$  y  $e_2$ . Esta es una representación normalizada con mantisa de k dígitos y exponente entre  $e_1$  y  $e_2$ . Es un sistema decimal y no binario como el de la IEEE, porque así será más fácil razonar sobre él. Todos los resultados que veremos en esta sección aplican, mutatis mutandi, a un sistema similar que utilice una base b > 1 cualquiera.

También por simplicidad, asumiremos que  $e_1 = -\infty$  y  $e_2 = +\infty$ . Esto ahorra hablar del rango en el que corre el exponente, lo cual, como veremos, no hace a la esencia de los resultados.

**Definición 3.2.** Si  $x \in \mathbb{R}$  es cualquiera, no necesariamente de máquina, llamamos fl(x) a la aproximación de x vía números de máquina.

Es definición depende del modo en que realicemos la aproximación. Consideremos la escritura

$$x = (0, d_1 \cdots d_k d_{k+1} \cdots) \cdot 10^e$$

con  $d_1 \neq 0$  (esta escritura es única dado que  $d_1 \neq 0$ ). Entonces dos formas de aproximar x son:

**Truncamiento.** Simplemente descartamos los dígitos  $d_{k+1}, d_{k+2}, \cdots$ , para obtener

$$fl(x) = (0, d_1 \cdots d_k) \cdot 10^e$$

■ Redondeo. Si  $d_{k+1} < 5$  entonces truncamos. Si no, sumamos 0,  $\underbrace{0 \cdots 05}_{k+1 \text{ digitos}} \cdot 10^e = 5 \cdot 10^{-(k+1)} \cdot 10^e$  a x y truncamos.

En este último caso lo que queda es

$$fl(x) = [(0, d_1 \cdots d_k) + 10^{-k}] \cdot 10^e$$

Una forma equivalente de enunciar estos criterios es la siguiente. Sea  $x^-$  es el máximo número de máquina menor o igual que x. Análogamente, sea  $x^+$  el mínimo número de máquina mayor o igual que x. Entonces, el truncamiento aproxima por  $x^-$  mientras que el redondeo aproxima por aquel valor de  $x^-$  o  $x^+$  más cercano a x.

En general, las computadoras utilizan la aproximación por redondeo.

### 3.3. Distribución de los números de máquina sobre la recta real

**Observación 3.1.** Un número de máquina con exponente e cae en el intervalo  $[10^{e-1}, 10^e)$ .

**Lema 3.1.** Dado  $x \in \mathcal{M}$  con exponente e, el número de máquina que lo sucede es  $x' = x + 10^{-k} \cdot 10^e$ .

La distribución de  $\mathcal{M}$  no es uniforme sobre la recta real. Para ver por qué, contemos la cantidad de números de máquina que hay en el intervalo  $[10^i, 10^{i+1})$  con  $i \in \mathbb{Z}$  una constante entera.

**Proposición 3.1.** La cantidad de números de máquina  $x \in \mathcal{M}$  tal que  $x \in [10^i, 10^{i+1})$  es  $9 \cdot 10^{k-1}$ .

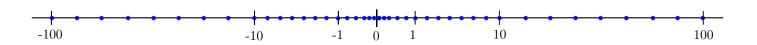
Corolario 3.1. Los números de máquina no están uniformemente distribuidos.

Intuitivamente, cuanto más nos alejemos de 0, más esparcidos estarán los números de máquina. Lo próximo que queremos es medir cuán esparcidos están, según el intervalo  $[10^i, 10^{i+1})$  en el que caigan.

**Lema 3.2.** Sea  $x \in \mathcal{M} \cap [10^i, 10^{i+1})$  y sea x' su succesor. Entonces  $x' - x = 10^{i+1-k}$ .

Corolario 3.2. En cada intervalo  $[10^i, 10^{i+1})$  los números de máquina consecutivos estan equiespaciados.

Más aún, a medida que i crece, la brecha entre elementos consecutivos en  $[10^i, 10^{i+1})$  se hace mayor. De aquí se deduce que la distribución de los números de máquina tiene el siguiente aspecto



Esta distribución puede parecer extraña. Contrariamente a lo intuitivo, que haría pensar que una distribución uniforme sería más útil, esta distribución exponencial de los números de máquina resulta práctica pues se basa en la idea de que cuanto más chicos sean los números del rango en el que estamos trabajando, más pequeñas serán las variaciones que estaremos interesados en hacer. Contrariamente, cuanto más grandes sean los números con los que trabajemos, más grandes serán las variaciones con las que vayamos a trabajar. Esta noción se formaliza en la siguiente sección.

### 3.4. Error absoluto y error relativo

**Definición 3.3.** Sea  $x \in \mathbb{R}$ . Sea  $x^* \in \mathbb{R}$  un valor que pretende aproximar a x.

- El error absoluto de aproximar x por  $x^*$  es  $|x x^*|$ .
- $\blacksquare$  El error relativo de aproximar x por  $x^*$  es  $\frac{|x-x^*|}{|x|}.$

Notemos que la diferencia entre estas dos medidas de error, es que el absoluto no contempla el tamaño del valor que estamos aproximando mientras que el relativo sí lo hace. Esto determina que, en general, el error absoluto no sea una buena medida para el error, puesto que en ciertos contextos podemos tener un error absoluto aparentemente grande aunque la aproximación sea buena (por ejemplo, si aproximáramos la distancia entre la Tierra y la Luna con un error absoluto de 1000m) y en otros contextos podemos tener un error absoluto aparentemente chico aunque la aproximación sea mala (por ejemplo, si aproximáramos el perímetro de una célula vegetal con un error absoluto de 1mm).

Supongamos que queremos aproximar una magnitud que vale x = 1000, y nos piden que el error relativo sea a lo sumo 0,01. Si nuestra medición es  $x^* = 990$  entonces el error relativo será

$$\frac{|x - x^*|}{|x|} = \frac{10}{1000} = 0,01$$

con lo cual esta medición satisface lo pedido. Es fácil ver que cualquiera sea  $x^* \in [990, 1010]$  cumple.

Supongamos que ahora estamos buscando medir una magnitud x=10. La precisión buscada es la misma que antes, lo cual tiene sentido pues está expresada en términos relativos. Notemos que la medición  $x^*=9$  no será aceptada, porque el error relativo será de 0,1. Refinando la medición a  $x^*=9,9$  conseguimos un error relativo de 0,01 y es claro que cualquier valor  $x^*\in[9,9;10,1]$  no sobrepasa este error.

En ambas situaciones los errores relativos eran los mismos, sin embargo la diferencia en valor absoluto entre x y los valores de  $x^*$  aceptados era mucho mayor en el primer caso que en el segundo caso. La discusión del final de la sección anterior cobra ahora mucho más sentido.

A continuación estudiamos el error relativo al aproximar un número real por un número de máquina.

**Proposición 3.2.** Si fl(x) se obtiene truncando x entonces

$$\frac{|x - fl(x)|}{|x|} \le 10^{1-k}$$

**Proposición 3.3.** Si fl(x) se obtiene redondeando x entonces

$$\frac{|x - fl(x)|}{|x|} \le \frac{1}{2} \cdot 10^{1-k}$$

Corolario 3.3. En una máquina con representación de punto flotante decimal con mantisa de k dígitos, el error de redondeo es  $\mathcal{O}(10^{-k})$ .

El máximo error relativo que se puede cometer, según lo calculado en la Proposición 3.3, tiene un nombre particular.

### 3.5. Epsilon de máquina

**Definición 3.4.** Llamamos epsilon de máquina al máximo error relativo que puede cometerse por redondeo. Lo notamos  $\varepsilon$ .

En el caso de la máquina  $\mathcal{M}$  con la que venimos trabajando, el epsilon de máquina es  $\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot 10^{1-k}$ .

**Proposición 3.4.**  $\varepsilon$  es el mínimo real positivo x tal que  $fl(1+x) \neq 1$ .

Observación 3.2. La validez de este resultado proviene de la fuerte relación que hay entre la cota superior para el error relativo y la distancia entre 1 y el número de máquina que lo sucede.

Observación 3.3. El epsilon de máquina no tiene ninguna relación con el mínimo real positivo representable. De hecho, el mínimo representable depende del rango en el que se mueve el exponente, y no de la precisión de la mantisa.

La noción de  $\varepsilon$  permite dar cotas superiores sobre el error cometido al realizar distintas operaciones en una máquina, independientemente de las características del sistema de representación de números que utilice la misma. Las cuatro operaciones estándar que realiza una computadora son,

$$x \oplus y = fl(fl(x) + fl(y))$$
$$x \ominus y = fl(fl(x) - fl(y))$$
$$x \otimes y = fl(fl(x) \times fl(y))$$
$$x \oslash y = fl(fl(x)/fl(y))$$

que representan, respectivamente, la suma, la resta, el producto y el cociente de dos números reales x e y.

**Proposición 3.5.** Sean  $x, y \in \mathbb{R}$  no nulos, con igual signo. En cualquier máquina con suma  $\oplus$ , que utilice redondeo, vale

$$\frac{|(x+y) - (x \oplus y)|}{|x+y|} \le 2\varepsilon + \varepsilon^2$$

#### 3.6. Errores de redondeo clásicos

#### 3.6.1. Suma de números de órdenes muy distintos

Supongamos que tenemos un número real de valor absoluto pequeño, y otro de valor absoluto grande. Entonces la suma de máquina de los dos puede hacer que el más pequeño desaparezca.

Para ejemplificar, supongamos que nuestra aritmética tiene una precisión de k=5 dígitos de mantisa. Sean  $x=0,8888888 \cdot 10^7$  e  $y=0,1 \cdot 10^2$ . Entonces

$$x \oplus y = fl(fl(x) + fl(y))$$

$$= fl(0, 88888 \cdot 10^7 + 0, 1 \cdot 10^2)$$

$$= fl(0, 888881 \cdot 10^7)$$

$$= 0, 88888 \cdot 10^7$$

El término x ha absorbido a y.

#### 3.6.2. Resta de números cercanos

Al restar dos números cercanos, el resultado estará próximo a cero, lo que puede ocasionar que se pierdan dígitos significativos. Este fenómeno se conoce como cancelación catastrófica, y tiene un gran impacto en el error relativo.

A modo de ejemplo, supongamos nuevamente que la precisión es de k=5 dígitos, y sean que x=0,12346923 e y=0,12345175 entonces

$$x \ominus y = fl(fl(x) - fl(y))$$

$$= fl(0, 12347 - 0, 12345)$$

$$= fl(0, 00002)$$

$$= 0, 00002$$

Sin embargo x-y=0,00001748, lo que muestra que hemos perdido 3 dígitos significativos del resultado en la operación con redondeo.

#### 3.6.3. Multiplicación por números grandes o dividisión por números pequeños

En este caso, se produce una amplificación del error absoluto acarreado. Supongamos que  $x^*$  es una aproximación de máquina de x. Dividiendo a  $x^*$  por un número muy pequeño, digamos  $10^{-n}$  para cierto n > 0, obtenemos el número de máquina  $x^*/10^{-n}$  que aproxima a  $x/10^{-n}$  con un error absoluto de

$$|x^*/10^{-n} - x/10^{-n}| = |x^* - x| \cdot 10^n$$

El error absoluto  $|x^* - x|$  del primer redondeo se ve amplificado en un factor de  $10^n$ .

#### 3.7. Generalización

Como hemos dicho al principio de esta sección, hemos estudiado la representación de los números de máquina utilizando un sistema de base 10 exclusivamente por comodidad. Todos los resultados que vimos son fácilmente generalizables a una base arbitraria b>1. A modo de ejemplo, en un conjunto análogo a  $\mathcal{M}$  pero de base 2, el epsilon de máquina resulta ser  $\varepsilon=\frac{1}{2}\cdot 2^{1-k}=2^{-k}$ .

Otro ejemplo interesante es la representación IEEE de precisión doble, cuyo conjunto de números de máquina es similar a  $\mathcal{M}$  pero es de base 2 y tiene k=52+1 dígitos de precisión (52 dígitos de mantisa más 1 dígito de precisión que agrega la normalización de la misma). Entonces, el epsilon de máquina en una computadora que use representación IEEE de precisión doble será  $\varepsilon=2^{-53}$ . Éste es el máximo error relativo que una computadora típica cometerá por redondeo.

### 4. Sistemas de ecuaciones lineales

#### 4.1. Problema

Dadas n ecuaciones lineales, cada una con n incógnitas

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \vdots \\ a_{1n}x_1 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

con coeficientes reales, queremos hallar valores de  $x_1, \dots, x_n$  que satisfagan todas las ecuaciones simultaneamente. En forma matricial escribimos el problema definiendo

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

de modo tal que buscamos soluciones de la ecuación Ax = b.

### 4.2. Existencia y unicidad de la solución

Notemos que

$$Ax = b \Leftrightarrow x_1 \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} + \dots + x_n \begin{pmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

En otras palabras, Ax = b tiene solución si y sólo si b es combinación lineal de las columnas de A. Usando esto podemos separar en casos:

- Si las columnas de A son linealmente independientes, entonces forman una base de  $\mathbb{R}^n$  (porque son n), y en consecuencia la combinación lineal existe y es única.
- Si las columnas de A no son linealmente independientes, entonces una tal combinación lineal puede existir como no. Si existe alguna entonces hay infinitas combinaciones lineales que cumplen la condición.

En definitiva Ax = b tiene solución única si y sólo si las columnas de A son l. i. Si no son l. i. entonces hay inifinitas soluciones o no hay ninguna.

### 4.3. Resolución de un sistema lineal

1. Caso A diagonal. El sistema tiene la forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & = b_1 \\ & \ddots & \\ & a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Pueden pasar dos cosas:

- $\blacksquare$  Si  $a_{ii}\neq 0$  para todo i, entonces la única solución es  $x_i=\frac{b_i}{a_{ii}},\,i=1,\cdots,n.$
- Si no, existe  $i_0 \in \{1, \dots, n\}$  tal que  $a_{i_0 i_0} = 0$ . Entonces la ecuación  $a_{i_0 i_0} x_{i_0} = b_{i_0}$  es equivalente a  $b_{i_0} = 0$ .
  - Si  $b_{i_0} \neq 0$  entonces tenemos una contradicción y el sistema no tiene solución.

• Si  $b_{i_0} = 0$  entonces la ecuación se cumple para cualquier  $x_{i_0}$ . Si existe solución (depende de lo que suceda con las restantes ecuaciones) entonces habrá infinitas.

El costo del cómputo en este caso es claramente  $\mathcal{O}(n)$ .

2. Caso A triangular superior. El sistema tiene la forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Pueden pasar dos cosas:

■ Si  $a_{ii} \neq 0$  para todo i, entonces las columnas de A son l. i. y la solución es única. Más aún, es

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

$$x_{n-1} = \frac{b_{n-1} - a_{(n-1)n}x_n}{a_{(n-1)(n-1)}}$$

$$\vdots$$

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n}{a_{11}}$$

Este algoritmo para computar las soluciones de un sistema de ecuaciones triangular superior determinado, recibe el nombre de backward substitution. Cuando el sistema es triangular inferior determinado, la sustitución se realiza comenzando desde la primer ecuación, y recibe el nombre de forward substitution.

- Si no, existe  $i_0 \in \{1, \dots, n\}$  tal que  $a_{i_0 i_0} = 0$ . Entonces la ecuación  $a_{i_0 i_0} x_{i_0} = b_{i_0} a_{i_0 (i_0+1)} x_{i_0+1} \dots a_{i_0 n} x_n$  es equivalente a  $0 = b_{i_0} a_{i_0 (i_0+1)} x_{i_0+1} \dots a_{i_0 n} x_n$ .
  - Si el lado derecho es distinto de 0 entonces tenemos una contradicción y el sistema no tiene solución.
  - Si no, la ecuación se cumple para cualquier  $x_{i_0}$ . Si existe solución (depende de lo que suceda con las restantes ecuaciones) entonces habrá infinitas.

El costo del cómputo en este caso es  $\mathcal{O}(n^2)$ , pues para la incógnita  $x_i$   $(i = 1, \dots, n)$  se realizan  $\mathcal{O}(n)$  operaciones, y son n incógnitas en total.

3. Caso general. Para resolver el problema para una matriz A cualquiera, la transformaremos mediante operaciones elementales de filas y luego usaremos backward substitution. El algoritmo para transformar el sistema en uno triangular superior se conoce como eliminación gaussiana.

#### 4.4. Eliminación gaussiana sin pivoteo

El algoritmo opera sobre la matriz ampliada del sistema. Llamamos

$$M^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)} & b_1^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

a la matriz ampliada luego de k pasos del algoritmo. Inicialmente, asumamos que  $a_{(k+1)(k+1)}^{(k)} \neq 0$  para todo k. La entrada es  $M^{(0)} = \begin{pmatrix} A \mid b \end{pmatrix}$ . En el primer paso, el algoritmo de eliminación gaussiana fuerza, mediante operaciones de filas, la aparición de ceros en la primer columna, debajo de la diagonal,

Paso 1: 
$$F_i \leftarrow F_i - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} F_1 \text{ para } i = 2, \cdots, n$$

Paso 2: 
$$F_i \leftarrow F_i - \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} F_2 \text{ para } i = 3, \dots, n$$

En el paso k < n, colocamos ceros en la columna k, debajo de la diagonal,

Paso k: 
$$F_i \leftarrow F_i - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} F_k$$
 para  $i = k+1, \cdots, n$ 

El último será el

Paso n - 1: 
$$F_i \leftarrow F_i - \frac{a_{i(n-1)}^{(n-2)}}{a_{(n-1)(n-1)}^{(n-2)}} F_{n-1}$$
 para  $i=n$ 

El invariante fundamental de este proceso es que al principio del paso k, las primeras k-1 columnas tienen únicamente ceros debajo de la diagonal. Al concluir los n-1 pasos obtendremos la matriz  $M^{(n-1)}$  que es triangular superior.

Podemos relajar levemente la hipótesis  $a_{(k+1)(k+1)}^{(k)} \neq 0$  para cada k, notando que si en el paso k se tiene  $a_{(k+1)(k+1)}^{(k)} = 0$  pero todos los valores de la columna k debado de esta entrada también son nulos, podemos pasar inmediatamente al siguiente paso del proceso, y el invariante se mantiene. El algoritmo de eliminación gaussiana requiere que la matriz de entrada cumpla esta propiedad, y de lo contrario falla.

### Algorithm 1: Eliminación gaussiana sin pivoteo

```
1 for k = 1 to n - 1 do
            if a_{kk} = 0 then
 2
                   if a_{ik} \neq 0 para algún k < i \le n then
 3
                         error
 4
 5
                   end
 6
            else
                   \begin{array}{c|c} \mathbf{for} \ i = k+1 \ \mathbf{to} \ n \ \mathbf{do} \\ m_{ik} = \frac{a_{ik}}{a_{kk}} \\ F_i \leftarrow F_i - m_{ik} F_k \end{array}
 7
 8
 9
10
            end
11
12 end
```

La complejidad del algoritmo es claramente  $\mathcal{O}(n^3)$ , pues para cada una de las n columnas se hacen  $\mathcal{O}(n)$  operaciones de fila, y cada una de estas operaciones de fila son  $\mathcal{O}(n)$  operaciones escalares. Un análisis más fino muestra que la cantidad de operaciones de punto flotante que realiza la eliminación gaussiana es aproximadamente  $\frac{1}{3}n^3$ .

### 4.5. Eliminación gaussiana con pivoteo

Se llama pivote al elemento  $a_{kk}^{(k-1)}$  de cada iteración del algoritmo, utilizado para computar los coeficientes  $m_{ik}$  e introducir ceros debajo de la diagonal. Puede suceder que al principio de cierto paso de la eliminación gaussiana, digamos el k, el elemento  $a_{kk}^{(k-1)}$  sea 0. En este caso no podemos usar  $a_{kk}^{(k-1)}$  como pivote. Tenemos dos posibilidades:

- Si  $a_{ik}^{(k-1)} = 0$  para todo  $i = k+1, \dots, n$ , entonces la columna k ya tiene todos ceros debajo de la diagonal, y por lo tanto no es necesario realizar ninguna acción en este paso.
- Si no, debemos intercambiar la fila k por alguna otra fila  $i_0 > k$  tal que  $a_{i_0k}^{(k-1)} \neq 0$ , y continuar con la eliminación normalmento.

Repitiendo esto cada vez que ocurra el problema a lo largo de la ejecución del algoritmo, llegaremos nuevamente a una matriz triangular inferior.

Observación 4.1. Si ahora esas mismas permutaciones de filas fueran realizadas en el mismo orden sobre A, entonces se puede probar que la matriz que se obtiene admite eliminación gaussiana sin pivoteo. En términos matriciales, existe una matriz  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$  que es producto de matrices elementales de permutación tal que PA admite eliminación gaussiana sin pivoteo.

Observación 4.2. Toda matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  admite eliminación gaussiana con pivoteo, aunque no necesariamente sin pivoteo.

### 4.6. Pivoteo parcial

Los coeficientes  $m_{ik}$  de cada paso dependen de  $a_{ik}^{(k-1)}$  y  $a_{kk}^{(k-1)}$  que son resultados de operaciones realizadas a lo largo de las iteraciones  $1, \dots, k-1$  y que, en consecuencia, acarrean un error de redondeo. Si al computar el cociente  $\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{ik}^{(k-1)}}$ 

resulta que el divisor  $a_{kk}^{(k-1)}$  es un número con valor absoluto pequeño, el error que acumulaba  $a_{ik}$  se ve amplificado. Por esta razón, es deseable que  $a_{kk}$  tenga valor absoluto lo más grande posible. Con este objetivo se implementa la estrategia de *pivoteo parcial*: al comienzo del k-ésimo paso, se permuta la fila k con alguna fila  $i_0 \ge k$  tal que  $|a_{i_0k}^{(k-1)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k-1)}|$ .

Cuanto mayor sea el pivote, más pequeño será  $m_{ik}$  y en consecuencia la operación  $F_i \leftarrow F_i - m_{ik}F_k$  sobre la matriz ampliada del sistema no hará variar sus entradas en gran medida. Intuitivamente, la variación del valor absoluto de los elementos de la matriz ampliada a lo largo de las iteraciones es una medida de la efectividad del pivoteo parcial. En este sentido definimos lo siguiente.

**Definición 4.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Como antes, sea  $A^{(k)}$  la matriz ampliada de un sistema que tiene a A como matriz, luego de k pasos de eliminación gaussiana con pivoteo parcial. Sea  $a_k = \max_{1 \le i,j \le n} |a_{ij}^{(k)}|$ . Definimos el factor de crecimiento de A como

$$\rho = \frac{\max\limits_{1 \le k \le n-1} a_k}{a_0}$$

Por lo dicho arriba, es conveniente que  $\rho$  sea lo más pequeño posible. El siguiente resultado establece una cota para este factor en ciertos tipos de matrices.

Proposición 4.1. Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

- Si A es una matriz arbitraria entonces  $\rho < 2^{n-1}$ .
- Si A es una matriz de Hessemberg (sus coeficientes debajo de la primer subdiagonal son nulos) entonces  $\rho \leq n$ .
- Si A es una matriz tridiagonal entonces  $\rho \leq 2$ .

Si bien en una matriz arbitraria el factor de crecimiento es a lo sumo  $2^{n-1}$ , este máximo ocurre rara vez y, en general, la estrategia de pivoteo parcial es una estrategia numéricamente estable.

### 4.7. Factorización LU

**Definición 4.2.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Se llama factorización LU de A a una escritura de la forma A = LU con  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$  triangular inferior con unos en la diagonal y  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  triangular superior.

Como muestra el siguiente resultado, esta forma de escribir a una matriz no es más que una síntesis del procedimiento de triangulación descripto previamente. La demostración de la existencia de la escritura es constructiva, exhibiendo un procedimiento para calcularla.

**Proposición 4.2.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Entonces A tiene factorización LU si y sólo si admite eliminación gaussiana sin pivoteo.

Debido a lo inherente que es la factorización LU al proceso de eliminación gaussiana, el costo de computar esta factorización es claramente  $\mathcal{O}(n^3)$ .

#### 4.7.1. Existencia y unicidad de la factorización LU

Observación 4.3. No toda matriz tiene factorización LU. Si  $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$  tiene factorización LU entonces existen  $a,b,c,d \in \mathbb{R}$  tal que

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & c \\ 0 & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & c \\ ab & ac + d \end{pmatrix}$$

Teniendo en cuenta esta condición necesaria, es fácil ver que la matriz  $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  no tiene factorización LU.

Observación 4.4. Remitiéndonos a la Observación 4.1, deducimos que existe  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$  producto de matrices de permutación tal que PA tiene factorización LU. Pero P es producto de matrices inversibles, con lo cual existe  $P^{-1}$ , y llegamos a la escritura  $A = P^{-1}LU$ , que se llama factorización PLU. Observemos que como una tal matriz P siempre existe entonces también existirá siempre una factorización PLU.

Con respecto a la unicidad, se tiene el siguiente resultado,

**Proposición 4.3.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  inversible. Si A tiene factorización LU entonces dicha escritura es única.

Observación 4.5. En general, la factorización LU de una matriz no es única. Por ejemplo, la matriz nula admite infinitas factorizaciones LU.

#### 4.7.2. Aplicación

Supongamos que dada una matriz A con factorización LU y vectores  $b_1, \dots, b_k$  queremos calcular una solución de  $Ax = b_i$  para cada  $i = 1, \dots, k$ . Si usáramos el algoritmo de eliminación gaussiana junto con backward substitution para resolver cada uno de los sistemas, tendríamos un costo de  $\mathcal{O}(n^3)$  por cada sistema.

Por otro lado, factoricemos A = LU. Esta escritura se puede calcular, como dijimos antes, en  $\mathcal{O}(n^3)$ . Para cada sistema  $Ax = b_i$  hacemos:

- Calculamos una solución de  $Ly = b_i$ , mediante forward substitution.
- $\blacksquare$  Calculamos una solución de Ux = y, mediante backward substitution.

Esto requiere tiempo  $\mathcal{O}(n^2)$ . Notemos que como L es inversible,  $Ux = y \Leftrightarrow LUx = Ly \Leftrightarrow Ax = b_i$ . En definitiva, podemos resolver  $Ax = b_i$  en  $\mathcal{O}(n^2)$ , para cada i, pagando una única vez, inicialmente, un costo de  $\mathcal{O}(n^3)$ .

#### 4.7.3. Familias de matrices que admiten factorización LU

**Definición 4.3.** Una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se dice estrictamente diagonal dominante por filas si

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{ij}|$$

para todo  $i = 1, \dots, n$ .

**Proposición 4.4.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es e. d. d. f. entonces A admite factorización LU.

**Proposición 4.5.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es e. d. d. f. entonces A es no singular (inversible).

**Proposición 4.6.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  inversible. Entonces A tiene factorización LU si y sólo si sus n menores principales son no nulos.

#### 4.8. Matrices banda

Decimos que  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es una matriz banda p, q si si todos sus elementos son cero fuera de una zona diagonal cuyo rango se determina por las constantes p y q:

$$a_{i,j} = 0$$
 si  $j < i - p$  o  $j > i + q$ ;  $p, q > 0$ .

Los valores p y q son el "semiancho" de banda izquierdo y derecho respectivamente. El "ancho de banda" de una matriz es p + q + 1, y se puede definir como el número menor de diagonales adyacentes con valores no nulos.

Una matriz banda con p = q = 0 es una matriz diagonal

Una matriz banda con p = q = 1 es una matriz tridiagonal; cuando p = q = 2 se tiene una matriz pentadiagonal y así sucesivamente.

**Observación 4.6.** Si A es una matriz banda p,q y tiene factorización LU, entonces L tiene p bandas, y U tiene q bandas.

### 4.9. Matrices simétricas definidas positivas y factorización de Cholesky

#### 4.9.1. Matrices simétricas y definidas positivas

**Definición 4.4.** Una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se dice simétrica si  $A = A^t$ .

**Definición 4.5.** Una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se dice antisimétrica si  $A^t = -A$ .

**Definición 4.6.** Una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se dice definida positiva si  $x^t A x > 0$  para todo  $x \neq 0$ .

**Proposición 4.7.**  $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , existen S matriz simétrica y T matriz antisimétrica tales que A = S + T.

**Proposición 4.8.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es definida positiva entonces es inversible.

**Proposición 4.9.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es definida positiva entonces sus submatrices principales son definidas positivas e inversibles.

Corolario 4.1. Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es definida positiva entonces admite factorización LU y es única.

**Proposición 4.10.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  inversible y simétrica, que admite factorización LU. Entonces existen matrices  $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$  triangular inferior con unos en la diagonal y  $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$  diagonal tal que  $A = LDL^t$ . Esta escritura se conoce como factorización LDL.

Corolario 4.2. Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es simétrica y tiene todos sus menores principales no nulos, entonces admite factorización LDL.

### 4.9.2. Factorización de Cholesky

**Definición 4.7.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Se llama factorización de Cholesky de A a una escritura de la forma  $A = LL^t$  con L una matriz triangular inferior con elementos en la diagonal positivos.

**Proposición 4.11.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Entonces A es simétrica definida positiva si y sólo si admite factorización de Cholesky.

Supongamos que A tiene factorización de Cholesky, de modo tal que podemos escribir

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \ell_{21} & \ell_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \cdots & \ell_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_{11} & \ell_{21} & \cdots & \ell_{n1} \\ 0 & \ell_{22} & \cdots & \ell_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \ell_{nn} \end{pmatrix} = LL^{t}$$

con  $\ell_{ii} > 0$  para todo i. Para calcular el coeficiente de la fila i y columna j  $(j \le i)$ , computamos el producto de la fila i de L contra la columna j de  $L^t$ :

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} \ell_{i1} & \cdots & \ell_{ij} & \cdots & \ell_{ii} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_{j1} \\ \vdots \\ \ell_{jj} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \ell_{i1}\ell_{j1} + \cdots + \ell_{ij}\ell_{jj} = \sum_{k=1}^{j} \ell_{ik}\ell_{jk}$$

Usando esta ecuación se deduce que:

• Si j = i = 1 entonces

$$a_{11} = \ell_{11}^2 \Leftrightarrow \ell_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

• Si j = 1 < i entonces

$$a_{i1} = \ell_{i1}\ell_{11} \Leftrightarrow \ell_{i1} = \frac{a_{i1}}{\ell_{11}}$$

• Si 1 < j = i entonces

$$a_{jj} = \ell_{j1}^2 + \dots + \ell_{jj}^2 \Leftrightarrow \ell_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{jk}^2}$$

• Si 1 < j < i entonces

$$a_{ij} = \ell_{i1}\ell_{j1} + \dots + \ell_{ij}\ell_{jj} \Leftrightarrow \ell_{ij} = \frac{1}{\ell_{jj}} \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{ik}\ell_{jk} \right)$$

Para calcular cada una de las entradas de la descomposición procedemos por columnas, primero calculando los coeficientes  $\ell_{i1}$ , luego los  $\ell_{i2}$  y así sucesivamente. Se puede ver que de esta forma respetamos las dependencias entre las ecuaciones anteriores.

Esto nos da un algoritmo para computar la matriz L de la factorización. Más aún, como cada  $\ell_{ij}$  está univocamente determinado, hemos probado que la factorización de Cholesky es única.

### Algorithm 2: Factorización de Cholesky

```
1 \ell_{11} = \sqrt{a_{11}};

2 for i = 2 to n do

3 | \ell_{i1} = \frac{a_{i1}}{\ell_{11}};

4 end

5 for j = 2 to n do

6 | \ell_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{jk}^2};

7 | for i = j + 1 to n do

8 | \ell_{ij} = \frac{1}{\ell_{jj}} \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \ell_{ik} \ell_{jk} \right);

9 | end

10 end
```

La complejidad del algoritmo es cúbica, que es la misma que la de LU. Sin embargo, en términos prácticos el cómputo de la factorización de Cholesky resulta ser el doble de rápido que el de LU. Además, al igual que LU, permite resolver eficientemente el problema de la resolución sucesiva de sistemas de misma matriz A.

**Proposición 4.12.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Entonces tanto  $A^tA$  como  $AA^t$  son matrices simetricas definidas positivas.

### 4.10. Estabilidad numérica de Cholesky

A diferencia de LU, Cholesky no depende de pivoteos, manteniendo así el error acotado. El único problema que puede sufrir esta escritura es la presencia del cómputo de raíces cuadradas. Si bien los números a los que se les toma raíz son siempre positivos, si éstos son suficientemente pequeños se pueden tornar negativos a lo largo del cómputo, debido al error de redondeo, siendo imposible continuar con el algoritmo. Pese a que ésto sólo sucede en matrices muy mal condicionadas, para evitarlo puede optarse por sumarle a la matriz A otra matriz diagonal con entradas de valor absoluto chico, y así reforzar su condición de definida positiva. La desventaja en este caso es que se pierde precisión en el resultado.

## 5. Factorización QR

**Definición 5.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Se llama factorización QR de A a una escritura de la forma A = QR con  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  una matriz ortogonal y  $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$  triangular superior.

Notemos que de tener la factorización QR, tenemos la cadena de equivalencias  $Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Rx = Q^tb$  y este último sistema se puede resolver mediante backward substitution, con error mínimo.

### 5.1. Método de rotaciones (Givens)

Dado  $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$  queremos encontrar una transformación lineal  $W : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$  que rote en un ángulo  $\theta$  todo vector en el plano. Es fácil ver en forma geométrica que W actúa del siguiente modo sobre la base canónica,

$$W\begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta\\ -\sin\theta \end{pmatrix}$$

$$W\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sin\theta\\\cos\theta\end{pmatrix}$$

Entonces

$$W = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

Se puede probar que esto vale para cualquier  $\theta \in \mathbb{R}$  (separando en casos, según el cuadrante en que se encuentre  $\theta$ ). De este modo quedan caracterizadas todas las rotaciones en  $\mathbb{R}^2$ . Notemos que W es ortogonal.

Supongamos que dado  $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$  no nulo, queremos encontrar una rotación  $W : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$  que rote v sobre el eje positivo de las abscisas, es decir, tal que  $Wv = \begin{pmatrix} ||v||_2 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Usando la forma de una rotación en  $\mathbb{R}^2$ , tenemos que

$$Wv = \begin{pmatrix} \|v\|_2 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \|v\|_2 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} v_1 \cos \theta + v_2 \sin \theta = \|v\|_2 \\ -v_1 \sin \theta + v_2 \cos \theta = 0 \end{cases}$$

Tomemos  $\theta$  tal que  $\cos\theta = \frac{v_1}{\|v\|_2}$  y  $\sin\theta = \frac{v_2}{\|v\|_2}$ . Este  $\theta$  existe y es único  $(\cos\theta$  y  $\sin\theta$  se pueden pensar como las coordenadas x e y respectivamente de un punto sobre la circunferencia unitaria), y se puede verificar que así tomado satisface las ecuaciones previas. De este modo, hemos probado lo siguiente,

Proposición 5.1. Sea  $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$  un vector no nulo. La única rotación  $W : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$  que cumple  $Wv = \begin{pmatrix} \|v\|_2 \\ 0 \end{pmatrix}$ 

$$W = \begin{pmatrix} \frac{v_1}{\|v\|_2} & \frac{v_2}{\|v\|_2} \\ -\frac{v_2}{\|v\|_2} & \frac{v_1}{\|v\|_2} \end{pmatrix}$$

Sea ahora  $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$  cualquiera y pongamos  $v = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix}$ . Si v = 0 entonces A es triangular superior y por lo tanto  $I_2A$  es una factorización QR de A. Si  $v \neq 0$  construimos, usando la proposición anterior, una rotación W tal que  $Wv = \begin{pmatrix} \|v\|_2 \\ 0 \end{pmatrix}$ , con lo cual

$$WA = \begin{pmatrix} \|v\|_2 & * \\ 0 & * \end{pmatrix} = R$$

Luego WA = R con R triangular superior y en definitiva  $A = W^t R$  es una factorización QR de A.

**Proposición 5.2.** Si  $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$  entonces A tiene factorización QR.

#### 5.1.1. Extensión al caso general

Definimos para cada  $1 \le i < j \le n$  y  $v \in \mathbb{R}^2$  no nulo, las matrices

$$W_{ij}(v) = \begin{pmatrix} I_{(i-1)} & \frac{v_1}{\|v\|_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{v_2}{\|v\|_2} \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ -\frac{v_2}{\|v\|_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{v_1}{\|v\|_2} \\ & & & & I_{(n-j)} \end{pmatrix}$$

Los espacios en blanco representan ceros. Es fácil ver que estas matrices siempre son ortogonales.

Sea  $A = (a_{ij})_{i,j} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Vamos a ir multiplicando sucesivamente a izquierda la matriz A por matrices ortogonales  $W_{ij}$ , de modo tal de colocar ceros en la primer columna, luego en la segunda, y así continuando. Escribamos  $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})_{i,j}$  a la matriz que se obtiene luego de k multiplicaciones sobre A. A cada una de estas matrices  $A^{(k)}$  la llamamos matriz transitoria.

Paso 1: Definimos  $v = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix}$  y sea  $W_{12} = W_{12}(v)$ . Entonces

$$W_{12}A = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ a_{31}^{(1)} & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & * & \cdots & * \end{pmatrix} = A^{(1)}$$

Paso 2: Definimos  $v=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)}\\ a_{31}^{(1)} \end{pmatrix}$  y sea  $W_{13}=W_{13}(v).$  Entonces

$$W_{13}W_{12}A = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(2)} & * & \cdots & * \end{pmatrix} = A^{(2)}$$

Continuando así, llegaremos al

Paso n - 1: Definimos  $v=egin{pmatrix} a_{11}^{(n-2)}\\ a_{n1}^{(n-2)} \end{pmatrix}$  y sea  $W_{1n}=W_{1n}(v).$  Entonces

$$W_{1n} \cdots W_{12} A = \begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} = A^{(n-1)}$$

Si en alguno de los pasos resulta que v=0 entonces no es necesario multiplicar por ninguna matriz para colocar un cero en una determinada posición, y podemos saltar al paso siguiente.

Análogamente, para poner ceros en la segunda columna definimos  $W_{2j}, j=3,\cdots,n$ . En general, al poner ceros en la columna i definimos  $W_{ij}, j=i+1,\cdots,n$ . Notar que al multiplicar por las matrices  $W_{ij}$ , las columnas  $1,\cdots,i-1$  no son modificadas.

El último paso será el

Paso n(n - 1)/2: Definimos  $W_{(n-1)n}$  como se indica arriba, de modo tal que

$$W_{(n-1)n}\cdots W_{23}W_{1n}\cdots W_{12}A=R$$

con R triangular superior. Luego, como cada  $W_{ij}$  es ortogonal,

$$A = W_{12}^t \cdots W_{(n-1)n}^t R$$

y como producto de matrices ortogonales es una matriz ortogonal, definiendo  $Q = W_{12}^t \cdots W_{(n-1)n}^t$ , llegamos a que A = QR, que es la factorización QR de A.

**Proposición 5.3.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  entonces A tiene factorización QR.

#### 5.1.2. Costo del algoritmo

El costo está dado por

$$\sum_{i=1}^{n-1} (\text{costo de colocar ceros en la columna } i)$$

Para colocar ceros en la columna i de la matriz transitoria la multiplicamos por n-i matrices  $W_{ij}$ ,  $j=i+1,\cdots,n$ . El costo de armar  $W_{ij}$  es  $\mathcal{O}(1)$  suponiendo una representación óptima en el sentido espacial, pues sólo es necesario almacenar 4 elementos. Para computar el producto de  $W_{ij}$  por la matriz transitoria, sólo es necesario multiplicar las filas i y j de  $W_{ij}$ , pues el resto de las filas son vectores canónicos que dejan intactas las correspondientes filas de la matriz transitoria. Las filas i y j de  $W_{ij}$  sólo contienen dos entradas no nulas, que son las únicas que se multiplican y suman contra las n-i+1 últimas columnas de la matriz transitoria (las únicas no nulas debajo de la diagonal).

Sumando estos costos, resultan en total

$$\mathcal{O}\left(\sum_{i=1}^{n-1} (n-i)(1+2\cdot 2\cdot (n-i+1)))\right) = \mathcal{O}(n^3)$$

Un análisis más fino permite ver que el método de rotaciones realiza aproximadamente  $\frac{4}{3}n^3$  operaciones de punto flotante.

### 5.2. Método de reflexiones (Householder)

Dado un vector  $u \in \mathbb{R}^n$ ,  $||u||_2 = 1$ , busco una transformación lineal  $W : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$  que refleje todo vector sobre el hiperplano H perpendicular a u. Notemos que una tal W cumple:

- Wu = -u
- $\blacksquare$  Wv = v para todo  $v \in H$

Estas condiciones caracterizan unívocamente a W, porque indican cómo actúa sobre u y sobre una base de H, y esta información define a W sobre una base de  $\mathbb{R}^n$ . Calculemos entonces esta transformación lineal.

Consideremos  $P = uu^t \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Se tiene

$$Pu = uu^t u = u(u^t u) = u$$

$$Pv = uu^t v = u(u^t v) = 0$$

A partir de P, definimos W = I - 2P, que cumple

$$Wu = u - 2Pu = u - 2u = -u$$

$$Wv = v - 2Pv = v - 0 = v$$

Entonces  $W = I - 2P = I - 2uu^t$  es la única transformación lineal que cumple lo pedido. Esta transformación lineal se llama reflexión sobre el hiperplano ortogonal a u. De este modo, hemos caracterizado todas las reflexiones en  $\mathbb{R}^n$ . Notemos que esta matriz W es ortogonal.

Supongamos ahora que tenemos dos vectores  $v, w \in \mathbb{R}^n$  con misma norma 2. Queremos encontrar una reflexión W, que refleje v en w. En otras palabras, buscamos un vector  $u \in \mathbb{R}^n$  tal que la reflexión sobre el hiperplano perpendicular a u mande v en w.

**Proposición 5.4.** Sean  $v, w \in \mathbb{R}^n$  tal que  $||v||_2 = ||w||_2$ . Entonces existe una reflexión W tal que Wv = w.

A partir de esto vamos a construir una factorización QR de una matriz  $A = (a_{ij})_{i,j} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Vamos a ir multiplicando a la matriz A sucesivamente por matrices de reflexión, para poner ceros en la primera columna, luego en la segunda, y así sucesivamente. Como de costumbre, llamemos  $A^{(k)}$  a la matriz A luego de k multiplicaciones.

Paso 1: Definimos v como la primera columna de A, es decir,  $v = \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ , y sea  $w = \begin{pmatrix} a_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ . Entonces

 $\|v\|_2 = \|w\|_2$  con lo cual existe una reflexión  $W_1 = I - 2u_1u_1^t \in \mathbb{R}^{n \times n}$  tal que  $W_1v = w$ , que cumple

$$W_1 A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} = A^{(1)}$$

Paso 2: Definimos v como la primer columna de la submatriz de  $A^{(1)}$  que se obtiene sacando su primera fila y columna,

es decir, 
$$v = \begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n-1}$$
, y sea  $w = \begin{pmatrix} \|v\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n-1}$ . Entonces existe  $\overline{W}_2 = I - 2\overline{u}_2\overline{u}_2^t \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$  reflexión

tal que 
$$\overline{W}_2 v = w$$
. Si llamamos  $u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \overline{u}_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$  y  $W_2 = I - 2u_2 u_2^t = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \overline{W}_2 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$ , entonces

$$W_2 W_1 A = W_2 A^{(1)} = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & * \end{pmatrix} = A^{(2)}$$

El paso k < n es análogo,

Paso k: Definimos v como la primer columna de la submatriz de  $A^{(k-1)}$  que se obtiene sacando sus primeras k-1 filas

y columnas, es decir, 
$$v = \begin{pmatrix} a_{kk}^{(k-1)} \\ \vdots \\ a_{nk}^{(k-1)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n-k+1}$$
, y sea  $w = \begin{pmatrix} \|v\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n-k+1}$ . Con estos, definimos la correspondiente reflexión  $\overline{W}_k$  de  $\mathbb{R}^{(n-k+1)\times(n-k+1)}$  con vector normal  $\overline{u}_k$  y luego la extiendo a una reflexión  $W_k$  de  $\mathbb{R}^{n\times n}$  definiendo

$$u_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \overline{u}_k \end{pmatrix}$$
. Entonces

$$W_k \cdots W_1 A = A^{(k)}$$

El último es el

Paso n - 1: Definimos  $W_{n-1}$  como se indica arriba, de modo tal que

$$W_{n-1}\cdots W_2W_1A=R$$

con R triangular superior. Como toda reflexión es ortogonal, entonces transponiendo  $W_1, \dots, W_{n-1}$  llegamos a la factorización QR.

#### 5.2.1. Costo del algoritmo

Si computáramos el producto matricial en forma naïve  $\mathcal{O}(n^3)$  el costo de  $W_{n-1}\cdots W_1A$  sería  $\mathcal{O}(n^4)$ . Podemos usar la escritura  $W_i = I - 2u_iu_i^t$  de las matrices ortogonales para computar el producto en forma más eficiente. Notemos que  $W_1A = (I - 2u_1u_1^t)A = A - 2u_iu_i^tA$ . Si asociamos en la forma  $A - 2u_i(u_i^tA)$ , se puede ver que el costo de cada una de las operaciones es  $\mathcal{O}(n^2)$ . En definitiva, podemos computar  $W_1A = A^{(1)}$  en  $\mathcal{O}(n^2)$ . Lo mismo sucede para  $W_2A^{(1)}$  y así siguiendo. En total son n-1 multiplicaciones, totalizando un costo  $\mathcal{O}(n^3)$ .

El método de reflexiones realiza aproximadamente  $\frac{2}{3}n^3$  operaciones de punto flotante.

#### 5.3. Observaciones finales

El método de las rotaciones es particularmente útil cuando la matriz A es rala. Como dicho método coloca ceros de a una posición a la vez, podemos evitar hacerlo para cada una de las entradas de A que contengan ceros. En contraste, el método de reflexiones coloca en cada paso ceros en toda una columna.

Por otra parte, a lo largo del desarrollo hemos pedido que la matriz A fuese cuadrada. Sin embargo esto no es necesario, y es posible adaptar cualquiera de los métodos anteriores para obtener una factorización QR de una matriz no necesariamente cuadrada. Se tiene la siguiente generalización,

**Proposición 5.5.** Si  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  entonces existen  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  ortogonal y  $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$  triangular superior, tal que A = QR.

### 6. Cálculo de autovalores y autovectores

#### 6.1. Problema

Dada  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  queremos calcular su *autovalor principal* (aquel de módulo máximo) y un autovector asociado. Para esto, vamos a construir una sucesión  $\{a_k\}_k$  de números reales convergente al autovalor principal, y una sucesión  $\{z^{(k)}\}_k$  de vectores convergente a un autovector asociado.

### 6.2. Método de las potencias

Supongamos que existe una base  $\{v_1, \dots, v_n\}$  de  $\mathbb{R}^n$  formada por autovectores de A (i. e. A es diagonalizable) y sean  $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$  los autovalores asociados. Notar que estos son todos los autovalores de A (con posibles repeticiones). Supongamos que A tiene un único autovalor de módulo máximo. Sin pérdida de generalidad, podemos suponer

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$$

Nuestro objetivo es calcular  $|\lambda_1|$ . Sea  $x \in \mathbb{R}^n$  cualquiera, con componente en la dirección de  $v_1$ , el autovector de la base asociado al autovalor principal (de ahora en más simplemente autovector principal), no nula. Entonces existen  $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{C}$ ,  $\alpha_1 \neq 0$ , tales que

$$x = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i$$

Multiplicando por  $A^k$  en ambos miembros:

$$A^k x = \sum_{i=1}^n \alpha_i A^k v_i$$

$$= \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k v_i$$

$$= \lambda_1^k \left( \alpha_1 v_1 + \alpha_2 \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k v_2 + \dots + \alpha_n \left( \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k v_n \right)$$

Consideremos  $\phi: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  una función contínua, que a lo sumo se anula en 0, y que saca escalares afuera (i. e.  $\phi(\lambda v) = |\lambda|\phi(v)$ ). Ejemplos de funciones que cumplen esto son todas las normas en  $\mathbb{R}^n$ . Entonces

$$\frac{\phi(A^k x)}{\phi(A^{k-1} x)} = \frac{\left|\lambda_1^k\right| \phi\left(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k v_2 + \dots + \alpha_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k v_n\right)}{\left|\lambda_1^{k-1}\right| \phi\left(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-1} v_2 + \dots + \alpha_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{k-1} v_n\right)}$$

$$= \left|\lambda_1\right| \frac{\phi\left(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k v_2 + \dots + \alpha_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k v_n\right)}{\phi\left(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-1} v_2 + \dots + \alpha_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{k-1} v_n\right)}$$

Como  $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}|<1$  para todo i>1 entonces  $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k\xrightarrow[k\to\infty]{}0$ , y en definitiva

$$\frac{\phi(A^kx)}{\phi(A^{k-1}x)} \xrightarrow[k \to \infty]{} |\lambda_1| \frac{\phi(\alpha_1v_1)}{\phi(\alpha_1v_1)} = |\lambda_1|$$

Esto último vale por ser  $\phi$  contínua, y además como a lo sumo se anula en 0 entonces  $\phi(\alpha_1 v_1) \neq 0$  pues  $\alpha_1 \neq 0$  y  $v_1 \neq 0$ . Hemos probado que,

**Proposición 6.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  diagonalizable y con un autovalor principal  $\lambda_1$ . Sea  $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$  como antes. Sea  $x \in \mathbb{R}^n$  cualquiera, con componente no nula en la dirección de un autovector principal. Entonces  $\left\{\frac{\phi(A^k x)}{\phi(A^{k-1}x)}\right\}_{k \in \mathbb{N}}$ converge  $a |\lambda_1|$ .

Definimos las sucesiones  $\{a_k\}_k$  y  $\{x^{(k)}\}_k$  como sigue. El término inicial  $x^{(0)}$  lo elegimos arbitrariamente pero con componente en la dirección de un autovector principal no nula, y además

$$x^{(k)} = Ax^{(k-1)}$$

Se tiene entonces  $x^{(k)} = A^k x^{(0)}$ . Por otra parte, definimos

$$a_k = \frac{\phi(x^{(k)})}{\phi(x^{(k-1)})}$$

Entonces

$$a_k = \frac{\phi(A^k x^{(0)})}{\phi(A^{k-1} x^{(0)})}$$

Por la proposición anterior, esta sucesión converge a  $|\lambda_1|$ . Utilizando estas dos sucesiones obtenemos el siguiente algoritmo:

#### Algorithm 3: Método de las potencias

- 1 Definir  $x^{(0)}$ :
- 2 for k = 1 to N do
- $\begin{cases} x^{(k)} = Ax^{(k-1)}; \\ a_k = \frac{\phi(x^{(k)})}{\phi(x^{(k-1)})}; \end{cases}$

Observación 6.1. En la práctica es difícil escoger un  $x^{(0)}$  cuya componente en la dirección de un autovector principal sea no nula. En general no conocemos una base de autovectores sin antes calcular los autovalores asociados, con lo cual se hace imposible la escritura de un vector en la base de autovectores. Por este motivo  $x^{(0)}$  se suele elegir en forma completamente arbitraria y se ejecuta el método. En caso de que no converja, se elige nuevamente el término inicial. Repetimos este proceso sucesivamente hasta lograr la convergencia. Se puede probar que si el método converge lo hace necesariamente a  $|\lambda_1|$ .

#### 6.3. Cálculo de un autovector asociado

Para calcular un autovector principal, observemos que como

$$A^{k}x = \lambda_{1}^{k} \left( \alpha_{1}v_{1} + \alpha_{2} \left( \frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}} \right)^{k} v_{2} + \dots + \alpha_{n} \left( \frac{\lambda_{n}}{\lambda_{1}} \right)^{k} v_{n} \right)$$

entonces si k es suficientemente grande

$$A^k x \approx \lambda_1^k \alpha_1 v_1$$

En otras palabras, si k es grande,  $A^k x$  es un múltiplo del autovector principal  $v_1$ . Entonces  $\frac{A^k x}{\|A^k x\|}$  es aproximadamente un múltiplo normalizado del autovector principal  $v_1$ . Esta normalización es conveniente por cuestiones numéricas, al evitar que las componentes del vector crezcan desmedidamente.

Definida la sucesión  $\{x^{(k)}\}_k$  como antes, definimos una nueva sucesión  $\{z^{(k)}\}_k$  con la siguiente regla,

$$z^{(k)} = \frac{x^{(k)}}{\|x^{(k)}\|}$$

Pero entonces

$$z^{(k)} = \frac{A^k x^{(0)}}{\|A^k x^{(0)}\|}$$

Luego, por lo anterior, para k grande  $z^{(k)}$  se aproxima a un múltiplo de  $v_1$  de norma igual a 1. Esta idea da lugar a una segunda versión del Método de las potencias, más completa.

#### Algorithm 4: Método de las potencias

- 1 Definir  $x^{(0)}$ ; 2 for k=1 to N do  $x^{(k)} = Ax^{(k-1)};$
- $z^{(k)} = \frac{x^{(k)}}{\|x^{(k)}\|};$   $a_k = \frac{\phi(x^{(k)})}{\phi(x^{(k-1)})};$

#### 6 end

#### 6.4. Método de las potencias inversas

Supongamos que ahora los autovalores son tales que

$$|\lambda_1| \ge \cdots \ge |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n|$$

y deseamos calcular el autovalor de módulo mínimo  $|\lambda_n|$ . Notemos que

$$\left| \frac{1}{\lambda_n} \right| > \left| \frac{1}{\lambda_{n-1}} \right| \ge \dots \ge \left| \frac{1}{\lambda_1} \right|$$

Recordemos que si A es una matriz inversible y  $\lambda \in \mathbb{C}$  no nulo es autovalor de A con autovector asociado v, entonces  $\frac{1}{\lambda}$ es autovalor de  $A^{-1}$  con el mismo autovector v. Por lo tanto, aplicando el Método de las potencias para  $A^{-1}$  podemos calcular el autovalor de módulo máximo  $\left| \frac{1}{\lambda_n} \right|$ .

## 7. Descomposición en valores singulares

### 7.1. Problema

Dada  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  queremos descomponer  $A = U \Sigma V^t$  con  $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$  ortogonal,  $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$  diagonal y  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ortogonal.

#### 7.2. Lemas auxiliares

Para llegar al resultado principal de esta sección necesitaremos algunos resultados auxiliares.

**Observación 7.1.** El producto interno canónico en  $\mathbb{C}^n$  es la forma  $\Phi: \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$  tal que

$$\Phi(x,y) = x^t \overline{y}$$

donde  $\overline{y}$  es la conjugación de y coordenada a coordenada. Notar que restringido a  $\mathbb{R}^n$ , coincide con el producto interno canónico en  $\mathbb{R}^n$ .

En lo que sigue, todos los productos internos considerados serán el canónico en  $\mathbb{C}^n$ , y lo notaremos con  $\langle , \rangle$ .

Observación 7.2. Si  $\alpha \in \mathbb{C}$  y  $x, y \in \mathbb{C}^n$ , entonces

$$\langle \alpha x, y \rangle = (\alpha x)^t \overline{y} = \alpha x^t \overline{y} = \alpha \langle x, y \rangle$$

$$\langle x, \alpha y \rangle = x^t \overline{\alpha y} = x^t (\overline{\alpha} \overline{y}) = \overline{\alpha} x^t \overline{y} = \overline{\alpha} \langle x, y \rangle$$

**Observación 7.3.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es simétrica y  $v, w \in \mathbb{C}^n$ , entonces

$$\langle Av, w \rangle = (Av)^t \overline{w} = v^t A^t \overline{w} = v^t A \overline{w} = v^t \overline{Aw} = v^t \overline{Aw} = \langle v, Aw \rangle$$

**Lema 7.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simétrica. Entonces todos sus autovalores son reales.

**Lema 7.2.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simétrica. Si  $\lambda \in \mathbb{R}$  es autovalor de A entonces  $\lambda$  tiene un autovector asociado con coordenadas reales.

**Proposición 7.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simétrica. Entonces existen  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ortogonal y  $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$  diagonal tal que

$$A = QDQ^t$$

**Lema 7.3.** En las condiciones de la proposición anterior, las columnas de Q son autovectores de A y los elementos de la diagonal de D son autovalores de A. Más precisamente  $col_i(Q)$  es autovector de A de autovalor  $D_{ii}$ .

**Teorema 7.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simétrica. Entonces existe una base ortonormal de  $\mathbb{R}^n$  formada por autovectores reales de A.

## 7.3. Teorema de descomposición en valores singulares

**Teorema 7.2.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  arbitraria. Entonces existen  $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$  ortogonal,  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ortogonal y  $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$  diagonal tal que

$$A = U\Sigma V^t$$

Los elementos no nulos de la diagonal de  $\Sigma$ ,  $\sigma_1, \cdots, \sigma_r$ , se llaman valores singulares de A. Si bien la descomposición en valores singulares no es única, las matrices U,  $\Sigma$  y V siempre cumplen ciertas propiedades

Proposición 7.2. Sea  $A = U\Sigma V^t$  una descomposición en valores singulares. Sean  $\sigma_1, \dots, \sigma_r$  los valores singulares. Sean  $u_1, \dots, u_m$  las columnas de  $U, y v_1, \dots, v_n$  las columnas de V. Entonces

- $\blacksquare u_i$  es autovector de  $AA^t$ .
- $v_i$  es autovector de  $A^tA$ .

En ambos casos, si  $i \leq r$  entonces el autovalor asociado es  $\sigma_i^2$  y es 0 en caso contrario.

# 8. Métodos iterativos para resolución de sistemas lineales

### 8.1. Definiciones

**Definición 8.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . El polinomio característico de A es

$$\chi_A(x) = \det(xI_n - A)$$

**Definición 8.2.**  $\lambda \in \mathbb{C}$  se dice autovalor de  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  si existe un vector  $v \in \mathbb{C}^n$  no nulo tal que  $Av = \lambda v$ . El vector v se llama autovector asociado al autovalor  $\lambda$ .

**Proposición 8.1.**  $\lambda \in \mathbb{C}$  es autovalor de A sí y sólo si  $\lambda$  es raíz de  $\chi_A$ .

**Definición 8.3.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . El radio espectral de A es

$$\rho(A) = \max_{\lambda \text{ autovalor de } A} |\lambda|$$

**Proposición 8.2.**  $\rho(A) \leq ||A||$  para toda norma matricial inducida compleja.

**Definición 8.4.** Decimos que una matriz  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es convergente si

$$\lim_{k \to \infty} (A^k)_{ij} = 0$$

para todo i, j.

**Proposición 8.3.** A es convergente si y sólo si  $\rho(A) < 1$ .

**Proposición 8.4.** Si  $\rho(A) < 1$  entonces I - A es inversible y además

$$\sum_{k=0}^{\infty} A^k = (I - A)^{-1}$$

## 8.2. Problema

Dado un sistema lineal, queremos construir una sucesión de vectores  $\{x^{(k)}\}_{k\in\mathbb{N}_0}$  tal que  $x^{(k)}\xrightarrow[k\to\infty]{}x^*$ , donde  $x^*$  sea una solución del sistema.

## 8.3. Métodos exactos vs. métodos iterativos

Ya hemos visto cómo resolver sistemas lineales en forma directa y exacta. La pregunta lógica es ¿por qué buscar una solución iterativa al problema si ya tenemos una directa? Para sistemas de ecuaciones pequeños, los métodos iterativos resultan más lentos que los directos, pues demandan más tiempo para realizar las suficientes iteraciones de modo de aproximar con exactitud la solución. Sin embargo, en dos situaciones los métodos iterativos resultan una mejor opción:

- Sistemas de ecuaciones ralos (la matriz del sistema presenta muchos ceros). Aquí los métodos iterativos son más eficientes tanto en términos temporales como espaciales. Si la matriz del sistema es rala, los métodos iterativos son compatibles con la utilización de representaciones adecuadas que reduzcan el espacio y tiempo de las operaciones, mientras que los métodos directos no. Por ejemplo, la eliminación gaussiana opera con filas completas, haciendo desaparecer los ceros presentes inicialmente en una fila. Otro ejemplo es la factorización LU que, aunque A sea rala, no asegura que L y U sean ralas.
- Sistemas de ecuaciones muy grandes. Dado que la solución se aproxima mediante iteraciones sucesivas, la cantidad de iteraciones necesarias para obtener una aproximación tan buena como se desee depende de nuestro criterio. Para sistemas grandes, acotar la cantidad de iteraciones es un factor determinante en el costo temporal.

## 8.4. Método de Jacobi

Sean  $A=(a_{ij})_{i,j}\in\mathbb{R}^{n\times n}$  y  $b=(b_i)_i\in\mathbb{R}^n$  los componentes del sistema Ax=b que queremos resolver. Vamos a suponer que  $a_{ii}\neq 0$  para todo i. Fijemos  $x^{(0)}=(x_1^{(0)},\cdots,x_n^{(0)})$  cualquiera. Definimos  $x^{(1)}$  del siguiente modo. Para cada  $i=1,\cdots,n$  tomamos la ecuación i-ésima del sistema

$$a_{i1}x_1 + \dots + a_{in}x_n = b_i$$

Reemplazamos  $x_j$  por  $x_j^{(0)}$  para cada  $j \neq i$ y despejamos  $x_i$  para definir

$$x_i^{(1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_i - \sum_{j \neq i}^n a_{ij} x_j^{(0)} \right)$$

En general, para definir  $x^{(k)}$  usamos  $x^{(k-1)}$ :

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

### Algorithm 5: Método de Jacobi

```
1 Definir x^{0};

2 for k = 1 to N do

3 | for i = 1 to n do

4 | x_{i}^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left( b_{i} - \sum_{j \neq i}^{n} a_{ij} x_{j}^{(k-1)} \right);

5 | end

6 end
```

Es claro que el costo de cada iteración del método es  $\mathcal{O}(n^2)$ .

Con este algoritmo podemos aprovechar los ceros que presente la matriz A. Supongamos que tenemos una representación adecuada para dicha matriz en la cual, en cada fila, sólo almacenamos las entradas no nulas. Con esta representación, en cada iteración de Jacobi, sólo necesitamos computar los productos  $a_{ij}x_j^{(k-1)}$  cuando  $a_{ij}$  sea no nulo. Observar que como la matriz A no es modificada a lo largo del proceso, nunca destruimos la representación.

### 8.4.1. Forma matricial

Nos proponemos dar una forma completamente matricial del método. Escribamos

$$A = D - L - U$$

donde

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ & \ddots \\ 0 & a_{nn} \end{pmatrix}$$

es la matriz que consta sólo de los elementos de la diagonal de A,

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & \ddots & \\ -a_{ij} & & 0 \end{pmatrix}$$

es la matriz que consta de los elementos debajo de la diagonal de A negados, y

$$U = \begin{pmatrix} 0 & & -a_{ij} \\ & \ddots & \\ 0 & & 0 \end{pmatrix}$$

es la matriz que consta de los elementos encima de la diagonal de A negados. Por hipótesis, D es inversible, pues todos los elementos de la diagonal son no nulos. Se tiene  $Ax = b \Leftrightarrow (D - L - U)x = b \Leftrightarrow Dx - (L + U)x = b \Leftrightarrow Dx = b + (L + U)x \Leftrightarrow x = D^{-1}b + D^{-1}(L + U)x$ . Esta igualdad motiva la definición de la iteración

$$x^{(k)} = D^{-1}b + D^{-1}(L+U)x^{(k-1)}$$

que en caso de converger, lo hace a una solución de Ax = b.

**Observación 8.1.** Podemos pensar esto como un problema de punto fijo. Si definimos la función  $g(x) = D^{-1}b + D^{-1}(L+U)x$ , entonces estamos buscando un punto fijo de g, utilizando la iteración  $x^{(k)} = g(x^{(k-1)})$ .

Calculemos  $x^{(k)}$  en términos de los elementos de A y B y veamos que coincide con el algoritmo de Jacobi. Se tiene

$$D^{-1}b = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

$$D^{-1}(L+U) = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -a_{ij} \\ & \ddots & \\ -a_{ij} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Entonces

$$x^{(k)} = D^{-1}b + D^{-1}(L+U)x^{(k-1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} \left( b_1 - \sum_{j\neq 1}^n a_{1j} x_j^{(k-1)} \right) \\ \vdots \\ \frac{1}{a_{nn}} \left( b_n - \sum_{j\neq n}^n a_{nj} x_j^{(k-1)} \right) \end{pmatrix}$$

como queríamos ver.

### 8.5. Método de Gauss - Seidel

Construimos la iteración en forma análoga a Jacobi, con la única diferencia de que para calcular  $x_i^{(k)}$  usamos las coordenadas  $x_1^{(k)}, \cdots, x_{i-1}^{(k)}$  ya calculadas:

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

### 8.5.1. Forma matricial

Se tiene  $Ax = b \Leftrightarrow (D - L - U)x = b \Leftrightarrow (D - L)x - Ux = b \Leftrightarrow (D - L)x = b + Ux \Leftrightarrow x = (D - L)^{-1}b + (D - L)^{-1}Ux$ . Esta última equivalencia vale debido a que D - L es inversible, pues D es inversible. Definimos entonces la iteración

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

### Algorithm 6: Método de Gauss - Seidel

```
1 Definir x^{(0)};

2 for k=1 to N do

3 | for i=1 to n do

4 | 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);

5 | end

6 end
```

Veamos que esta definición coincide con el algoritmo de Gauss - Seidel. Vamos a despejar las componentes de  $x^{(k)}$  a partir de la igualdad  $(D-L)x^{(k)} = b + Ux^{(k-1)}$ . Tenemos

$$b + Ux^{(k-1)} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -a_{ij} \\ & \ddots & \\ 0 & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k-1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 - \sum_{j=2}^n a_{1j} x_j^{(k-1)} \\ b_2 - \sum_{j=3}^n a_{2j} x_j^{(k-1)} \\ & \vdots \\ & b_n \end{pmatrix}$$

Entonces

$$(D-L)x^{(k)} = b + Ux^{(k-1)} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ \vdots & \ddots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} x^{(k)} = \begin{pmatrix} b_1 - \sum_{j=2}^n a_{1j} x_j^{(k-1)} \\ b_2 - \sum_{j=3}^n a_{2j} x_j^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow x^{(k)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} \left( b_1 - \sum_{j=2}^n a_{1j} x_j^{(k-1)} \right) \\ \frac{1}{a_{22}} \left( b_2 - a_{21} x_1^{(k)} - \sum_{j=3}^n a_{2j} x_j^{(k-1)} \right) \\ \vdots \\ \frac{1}{a_{nn}} \left( b_n - \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} x_j^{(k)} \right) \end{pmatrix}$$

que es lo que queríamos ver.

## 8.6. Análisis de convergencia

Hasta ahora propusimos dos iteraciones distintas, aunque nunca probamos que efectivamente convergieran a una solución. Observemos que tanto Jacobi como Gauss - Seidel, son iteraciones del tipo

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

donde  $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$  y  $c \in \mathbb{R}^n$  están fijos. A continuación proveemos una condición necesaria y suficiente sobre estas matrices-coeficientes para asegurar la convergencia.

**Proposición 8.5.** Consideremos el sistema lineal x = Tx + c y sea  $x^*$  una solución del mismo. Sea  $\{x^{(k)}\}_{k \in \mathbb{N}_0}$  una sucesión de vectores tal que

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

para todo k > 0. Entonces  $\{x^{(k)}\}_k$  converge a  $x^*$  para todo  $x^{(0)}$  si y sólo si T es convergente.

Corolario 8.1.  $\{x^{(k)}\}_k$  converge a  $x^*$  para todo  $x^{(0)}$  si y sólo si  $\rho(T) < 1$ .

Este corolario nos brinda un criterio útil para determinar la convergencia de una iteración. Recordemos que Jacobi usaba  $T = D^{-1}(L+U)$  mientras que Gauss - Seidel tomaba  $T = (D-L)^{-1}U$ , de modo tal que, fijada A, basta determinar si el radio espectral de la respectiva T es o no menor que 1.

## 8.7. Familias de matrices que aseguran la convergencia

**Proposición 8.6.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es e. d. d. f. entonces Jacobi converge.

**Proposición 8.7.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es e. d. d. f. entonces Gauss - Seidel converge.

**Proposición 8.8.** Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es simétrica definida positiva entonces Gauss - Seidel converge.

Observación 8.2. Si  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es simétrica definida positiva entonces Jacobi no necesariamente converge.

## 8.8. Comparación entre los métodos

El método de Gauss - Seidel tiene dos ventajas sobre el método de Jacobi:

- Tiene un menor requerimiento espacial. Notar que es posible usar un sólo arreglo para almacenar las sucesivas iteraciones (uno que contiene parte de la iteración actual y parte de la anterior), a diferencia de Jacobi que necesita dos (uno para el actual y otro para el anterior).
- Se conocen más familias de matrices convergentes.

La ventaja de Jacobi es su mayor simplicidad.

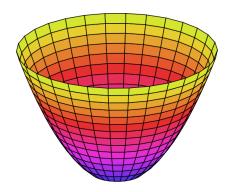
# 9. Método del gradiente conjungado

### 9.1. Problema

Dada  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  simétrica definida positiva, queremos calcular la única solución del sistema lineal Ax = b.

La idea que usaremos es la siguiente. Consideraremos una función  $Q: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  que alcanza el mínimo absoluto en la solución  $A^{-1}b$  del sistema dado. Comenzando con un punto cualquiera sobre el gráfico de Q, vamos a movernos en una dirección dada, una cierta distancia, acercándonos al mínimo. Repetimos este proceso sucesivas veces hasta llegar al mínimo.

La función Q que consideraremos no es cualquiera entre las que tienen un mínimo absoluto en A. Para poder asegurar que siempre que nos movamos estemos acercándonos al mínimo queremos que el gráfico de Q sea un paraboloide cóncavo.



#### 9.2. El método

Definimos

$$Q(x) = x^t A x - 2x^t b$$

Como A es simétrica definida positiva, Q resulta tener la forma deseada y además alcanza su mínimo absoluto en  $x=A^{-1}b$ . Para ver esto último notemos que podemos reescribir  $Q(x)=(A^{-1}b-x)^tA(A^{-1}b-x)-b^tA^{-1}b$ . Como A es definida positiva entonces  $(A^{-1}b-x)^tA(A^{-1}b-x)\geq 0$ , con lo cual  $Q(x)\geq -b^tA^{-1}b$ . Luego Q alcanzará el mínimo  $-b^tA^{-1}b$  si y sólo si  $(A^{-1}b-x)^tA(A^{-1}b-x)=0$   $\Leftrightarrow A^{-1}b-x=0$ , nuevamente debido a que A es definida positiva.

Fijemos un punto inicial  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  y recorramos en dirección  $d^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  una cierta distancia dada por  $\alpha_0 \in \mathbb{R}$ , definiendo así un nuevo punto  $x^{(1)} = x^{(0)} + \alpha_0 d^{(0)}$ . Con este mismo razonamiento definimos una sucesión  $\{x^{(k)}\}_k$  que es tal que

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}$$

Supongamos que la dirección  $d^{(k)}$  está fija y es no nula, y miremos  $Q(x^{(k+1)}) = Q(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$  como función de  $\alpha$ . Si pensamos en la forma que tiene Q(x) al mirarla sobre la recta  $t(\alpha) = x^{(k)} + \alpha d^{(k)}$  obtendremos una parábola cóncava, y el punto de dicha parábola más cercano al mínimo será el punto crítico. Calculemos  $D(Q(t(\alpha)))$ ,

$$D(Q(t(\alpha))) = (\nabla Q(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}))^t D(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$$

$$= (2A(x^{(k)} + \alpha d^{(k)}) - 2b)^t d^{(k)} \qquad \text{(pues } \nabla Q(x) = 2Ax - 2b)$$

$$= 2(Ax^{(k)} - b + \alpha Ad^{(k)})^t d^{(k)}$$

$$= 2(-(b - Ax^{(k)}) + \alpha Ad^{(k)})^t d^{(k)}$$

$$= 2(-(b - Ax^{(k)})^t d^{(k)} + \alpha (d^{(k)})^t A^t d^{(k)})$$

$$= 2(-(b - Ax^{(k)})^t d^{(k)} + \alpha (d^{(k)})^t Ad^{(k)})$$

Llamemos  $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$  al residuo (lo que falta para llegar a la solución). Entonces

$$D(Q(t(\alpha))) = 2(-(r^{(k)})^t d^{(k)} + \alpha(d^{(k)})^t A d^{(k)})$$

Como  $d^{(k)} \neq 0$  y A es definida positiva, entonces  $(d^{(k)})^t A d^{(k)} \neq 0$ . Luego, el mínimo se alcanza cuando

$$D(Q(t(\alpha))) = 0 \Leftrightarrow \alpha = \frac{(r^{(k)})^t d^{(k)}}{(d^{(k)})^t A d^{(k)}}$$

Entonces elegimos

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)})^t d^{(k)}}{(d^{(k)})^t A d^{(k)}}$$

De este modo, conociendo las direcciones, podemos calcular los  $\alpha_k$  óptimos para cada paso.

**Observación 9.1.** Como A es simétrica definida positiva, la forma  $\Phi(x,y)=x^tAy$  es un producto interno. Notamos  $\Phi(x,y)=\langle x,y\rangle_A$ .

**Observación 9.2.** Recordemos que dado un producto interno  $\langle,\rangle$  y vectores  $u,v\in\mathbb{R}^n$ , la proyección ortogonal de u sobre v es

$$\operatorname{proy}_v(u) = \frac{\langle u, v \rangle}{\langle v, v \rangle} v$$

Si escribimos a u en una base de  $\langle v \rangle \oplus \langle v \rangle^{\perp}$ , entonces la proyección  $\operatorname{proy}_v(u)$  es la componente en la dirección de v. Geométricamente, esto es trazar un hiperplano perpendicular a  $\langle v \rangle$  que pase por u y tomar su intersección con  $\langle v \rangle$ .

Al producto interno canónico en  $\mathbb{R}^n$ ,  $\Phi(x,y)=x^ty$ , lo notamos  $\Phi(x,y)=\langle x,y\rangle_2$ . Entonces podemos escribir

$$\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, d^{(k)} \rangle_2}{\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A} = \frac{\langle e^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A}{\langle d^{(k)}, d^{(k)} \rangle_A}$$

donde  $e^{(k)} = A^{-1}b - x^{(k)}$  es el error. Entonces  $\alpha_k d^{(k)}$  es la proyección ortogonal de  $e^{(k)}$  sobre  $d^{(k)}$  para el producto interno  $\langle , \rangle_A$ . Esto muestra que en cada paso, el método suma la componente del error en la dirección dada.

## 9.3. Elección de las direcciones

Notemos que dependiendo de cómo elijamos las direcciones, convergeremos más o menos rápido, o inclusive podemos no converger. Por lo tanto, queremos estudiar cómo elegir las direcciones para converger al mínimo lo más rápido posible. Pensemos el problema para algunos casos particulares de Q(x) en  $\mathbb{R}^2$ :

• A diagonal y b = 0:

$$Q(x) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2$$

Las curvas de nivel de Q son elipses centradas en el origen. En este caso, conviene elegir una dirección paralela al eje x y otra paralela al eje y.

• A diagonal y  $b \neq 0$ :

$$Q(x) = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_{11}x_1^2 + a_{11}x_2^2 + b_1x_1 + b_2x_2$$

Las curvas de nivel de Q son elipses con centro  $(x_0, y_0) \neq 0$ . Conviene elegir una dirección paralela al eje  $x = x_0$  y otra paralela al eje  $y = y_0$ .

## ■ En general:

Las curvas de nivel de Q son elipses rotadas en un ángulo  $\theta$ , con centro  $(x_0, y_0)$ . Conviene elegir dos direcciones, cada una paralela a uno de los ejes rotados de las elipses.

Notemos que en todos los casos alcanzan con dos pasos para converger a la solución. Como es de esperarse, en  $\mathbb{R}^n$  alcanzan n pasos para asegurar la convergencia. Esto es lo que probaremos a continuación.

**Definición 9.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  definida positiva. Dos vectores  $x, y \in \mathbb{R}^n$  se dicen direcciones A-conjugadas si  $x^t A y = 0$ . En otras palabras,  $x \in y$  son A-conjugadas si son vectores ortogonales para el producto interno  $\langle , \rangle_A$ .

**Observación 9.3.** Si  $x, y \in \mathbb{R}^n$  entonces  $\langle x, y \rangle_A = x^t A y = (A^t x)^t y = \langle A^t x, y \rangle_2$ . En particular, si A es simétrica resulta que  $\langle x, y \rangle_A = \langle Ax, y \rangle_2$ , es decir que x e y son A-conjugadas si y sólo si Ax e y son ortogonales para el producto interno canónico.

**Lema 9.1.** Sea  $\{v_1, \dots, v_n\} \subset \mathbb{R}^n$  un conjunto ortogonal para un producto interno  $\langle,\rangle$  y de elementos no nulos. Entonces el conjunto es linealmente independiente.

**Lema 9.2.** Sea  $w \in \mathbb{R}^n$  y  $\{v_1, \dots, v_n\} \subset \mathbb{R}^n$  un conjunto ortogonal para un producto interno  $\langle , \rangle$  y de elementos no nulos. Si  $\langle w, v_i \rangle = 0$  para todo  $i = 1, \dots, n$ , entonces w = 0.

El resultado fundamental es el siguiente,

**Proposición 9.1.** Sea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  s. d. p. Sean  $d^{(0)}, \dots, d^{(n-1)}$  direcciones A-conjugadas de a pares y no nulas. Sea  $\{x^{(k)}\}_k$  definida como antes. Entonces  $Ax^{(n)} = b$ , es decir que el método del gradiente conjugado converge a lo sumo en n pasos.

## 9.4. Generación de direcciones A-conjugadas

La forma de generar direcciones A-conjugadas se basa en el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt. Repasemos este último. Dada una base  $\{v_1, \dots, v_n\}$  de  $\mathbb{R}^n$ , el proceso genera una base ortogonal  $\{w_1, \dots, w_n\}$  para un producto interno  $\langle, \rangle$ . Más aún, estos vectores generados son de la forma

$$w_k = v_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, w_i \rangle}{\langle w_i, w_i \rangle} w_i$$

Generamos una secuencia de direcciones A-conjugadas del siguiente modo. Fijado  $x^{(0)}$ , definimos  $d^{(0)} = -r^{(0)}$ . Para k > 0 definimos

$$d^{(k)} = -r^{(k)} - \frac{\langle -r^{(k)}, d^{(k-1)} \rangle_A}{\langle d^{(k-1)}, d^{(k-1)} \rangle_A} d^{(k-1)}$$

Los vectores  $-r^{(k)}$  juegan el papel de los  $v_k$ , y los  $d^{(k)}$  el de los  $w_k$ . La razón de que  $d^{(k)}$  sólo dependa de  $d^{(k-1)}$  y no de  $d^{(j)}$  con j < k-1 (como en el esquema anterior de Gram-Schmidt) es que  $\langle -r^{(k)}, d^{(j)} \rangle_A = 0$  para j < k-1. Entonces los vectores  $d^{(0)}, \cdots, d^{(n-1)}$  así generados son ortogonales respecto del producto interno  $\langle , \rangle_A$ , es decir, son A-conjugados.

## 9.5. Comparación con Cholesky

Hemos visto que en el caso de A simétrica definida positiva, la resolución de Ax = b se puede hacer vía la factorización de Cholesky. El método del gradiente conjugado es iterativo, con lo cual las ventajas frente al método directo son las anteriormente mencionadas.

## 10. Interpolación polinómica

### 10.1. Problema

Al igual que antes, supongamos que tenemos una muestra de valores  $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ . Queremos encontrar un polinomio P que interpole dichos puntos, es decir, que cumpla  $P(x_i) = y_i$  para cada  $i = 0, \dots, n$ .

## 10.2. Polinomio interpolador de Lagrange

**Teorema 10.1.** Consideremos n+1 puntos  $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n) \in \mathbb{R}^2$  con  $x_i \neq x_j$  si  $i \neq j$ . Entonces existe un único polinomio  $P \in \mathbb{R}[x]$  de grado menor o igual que n tal que  $P(x_i) = y_i$  para todo  $i = 0, \dots, n$ .

Este polinomio se conoce con el nombre de polinomio interpolador de Lagrange. En particular, este polinomio se puede utilizar para aproximar una función f(x) interpolando puntos  $(x_0, f(x_0)), \dots, (x_n, f(x_n))$ . Por este motivo, interesa conocer una expresión de la forma

$$f(x) = P(x) + R(x)$$

donde R(x) es el error de la aproximación.

**Proposición 10.1.** Sean  $x_0, \dots, x_n \in [a, b]$  distintos. Sea  $f \in C^{n+1}([a, b])$ . Sea P el polinomio interpolador de Lagrange en  $(x_0, f(x_0)), \dots, (x_n, f(x_n))$ . Entonces para todo  $x \in [a, b]$  existe  $\xi(x) \in (a, b)$  tal que

$$f(x) = P(x) + \frac{f^{n+1}(\xi(x))}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)$$

Por claridad, cuando tratemos con puntos  $x_0, \dots, x_n$ , llamaremos  $P_{m_1, \dots, m_k}$   $(m_i \neq m_j \text{ si } i \neq j \text{ y } m_i \in \{0, \dots, n\})$  al polinomio interpolador de Lagrange en los puntos  $x_{m_1}, \dots, x_{m_k}$ .

A continuación damos una fórmula recursiva para calcular un polinomio interpolador de n + 1 puntos, dados ciertos otros dos polinomios de n puntos.

**Lema 10.1.** Sean  $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n) \in \mathbb{R}^2$  con  $x_i \neq x_j$  si  $i \neq j$ . Entonces, si  $i \neq j$ ,

$$P_{0,\dots,n}(x) = \frac{(x-x_j)P_{0,\dots,j-1,j+1,\dots,n}(x) - (x-x_i)P_{0,\dots,i-1,i+1,\dots,n}(x)}{x_i - x_j}$$

### 10.3. Diferencias divididas

Planteamos un nuevo problema. Supongamos que se tiene una interpolación de n puntos y se la desea extender con un punto nuevo. La forma del polinomio interpolador vista antes no nos provee una forma de aprovechar el polinomio ya calculado, y nos obliga a computar un polinomio interpolador para n+1 puntos desde cero. Queremos encontrar una forma para el polinomio interpolador que permita agregar secuencialmente nuevos puntos con un menor costo.

**Definición 10.1.** Sean  $x_0, \dots, x_n$  distintos y f una función real. Se define la diferencia dividida de orden 0 de f respecto de  $x_i$  como

$$f[x_i] = f(x_i)$$

Para k > 0 se define la diferencia dividida de orden k de f respecto de  $x_i, \dots, x_{i+k}$  como

$$f[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

La importancia de las diferencias divididas radica en el siguiente resultado:

Proposición 10.2.

$$P_{0 \dots n}(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \dots + a_n(x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{n-1})$$

 $con \ a_k = f[x_0, \cdots, a_k].$ 

## 10.4. Interpolación segmentada

Los polinomios tienen una gran desventaja como interpoladores y es que cuanto mayor es su grado, más oscilan. Un procedimiento alternativo consiste en construir, dados  $x_0 < \cdots < x_n$ , un polinomio interpolador entre cada par consecutivo de puntos  $x_i$  y  $x_{i+1}$ , y a partir de estos construir una función que interpole todos los puntos. Es decir, construimos  $S_0, \dots, S_{n-1}$  polinomios, tal que  $S_i$  interpola  $x_i$  y  $x_{i+1}$ , y definimos

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x) & \text{si } x \in [x_0, x_1] \\ \vdots \\ S_{n-1}(x) & \text{si } x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

#### 10.4.1. Lineal

Consiste en interpolar cada par de puntos con un polinomio de grado 1. En otras palabras,  $S_i$  es el polinomio interpolador de Lagrange en los puntos  $x_i$  y  $x_{i-1}$ . La desventaja de este tipo de interpolación es que en los extremos de los subintervalos no hay garantía de que S sea derivable (geométricamente la curva no es suave).

### 10.4.2. Cuadrática

Utilizamos  $S_i(x) = a_i + b_i x + c_i x^2$  para ciertas constantes  $a_i, b_i$  y  $c_i$ . Si f es la función que estamos aproximando, estas constantes deben ser ajustadas de modo tal que

- 1.  $S(x_i) = f(x_i)$  para todo  $i = 0, \dots, n$ .
- 2.  $S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1})$ , para todo  $i = 0, \dots, n-2$ .
- 3.  $S'_{i+1}(x_{i+1}) = S'_i(x_{i+1})$ , para todo  $i = 0, \dots, n-2$ .

Las condiciones 1 y 2 aseguran que S esté bien definido y sea contínuo en  $[x_0, x_n]$ . La condición 3 asegura que sea derivable en  $(x_0, x_n)$ . Una curva diferenciable definida por partes mediante polinomios se denomina *spline*.

Notemos que en total son 3n-1 ecuaciones y 3n incógnitas, dejando un grado de libertad.

El inconveniente de esta interpolación es que muchas veces se desea fijar condiciones para S'(x) en los extremos  $x_0$  y  $x_n$ , y sin embargo no hay constantes suficientes para ello. Los polinomios cúbicos solucionan este problema.

### 10.4.3. Cúbica

Un spline cúbico para f es una función S que cumple las siguientes condiciones

- $1. \ S(x) = \left\{ \begin{array}{ll} S_0(x) & \text{ si } x \in [x_0,x_1] \\ \vdots & , \text{ con } S_i \text{ un polinomio cúbico.} \\ S_{n-1}(x) & \text{ si } x \in [x_{n-1},x_n] \end{array} \right.,$
- 2.  $S(x_i) = f(x_i)$  para todo  $i = 0, \dots, n$ .
- 3.  $S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1})$  para todo  $i = 0, \dots, n-2$ .
- 4.  $S'_{i+1}(x_{i+1}) = S'_i(x_{i+1})$  para todo  $i = 0, \dots, n-2$ .
- 5.  $S''_{i+1}(x_{i+1}) = S''_i(x_{i+1})$  para todo  $i = 0, \dots, n-2$ .
- 6. Se satisface una de las siguientes condiciones frontera:
  - $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$  (spline libre o natural).
  - $S'(x_0) = f'(x_0)$  y  $S'(x_n) = f'(x_n)$  (spline sujeto).

Las condiciones 2 y 3 aseguran que S esté bien definido y sea contínuo en  $[x_0, x_n]$ . Las condiciones 4 y 5 aseguran que S sea dos veces derivable y, más aún, como es unión de polinomios, entonces las derivadas son contínuas. Las condiciones de frontera sujeta se utilizan cuando tengo esa información sobre la derivada de la función, y dan lugar a aproximaciones más exactas.

Estudiemos las ecuaciones que determinan las condiciones anteriores. Por conveniencia, vamos a considerar polinomios cúbicos de la forma

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

La condición 2 equivale a  $S_i(x_i) = f(x_i)$  y  $S_{n-1}(x_n) = f(x_n)$ . Como  $S_i(x_i) = a_i$  entonces tenemos

$$a_i = f(x_i) \text{ para todo } i = 0, \dots, n-1$$
  
$$a_{n-1} + b_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + c_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 + d_{n-1}(x_n - x_{n-1})^3 = f(x_n)$$

La condición 3 equivale a  $S_i(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$ . Entonces

$$a_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 = a_{i+1}$$
 para todo  $i = 0, \dots, n-2$ 

Observar que  $S'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x - x_i)^2$ . Como  $S'_{i+1}(x_{i+1}) = b_{i+1}$  entonces la condición 4 equivale a

$$b_i + 2c_i(x_{i+1} - x_i) + 3d_i(x_{i+1} - x_i)^2 = b_{i+1}$$
 para todo  $i = 0, \dots, n-2$ 

Observar que  $S_i''(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_i)$ . Como  $S_{i+1}''(x_{i+1}) = 2c_{i+1}$  entonces la condición 5 equivale a

$$2c_i + 6d_i(x_{i+1} - x_i) = 2c_{i+1}$$
 para todo  $i = 0, \dots, n-2$ 

Finalmente, si el spline es libre, la condición 6 equivale a

$$2c_0 = 0$$
$$2c_{n-1} + 6d_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 0$$

Definamos  $a_n = f(x_n)$ ,  $c_n = 0$  y  $h_i = x_{i+1} - x_i$ . Entonces las ecuaciones son

- 1.  $a_i = f(x_i)$  para todo  $0 \le i \le n$ .
- 2.  $a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = a_{i+1}$  para todo  $0 \le i \le n-1$ .
- 3.  $b_i + 2c_ih_i + 3d_ih_i^2 = b_{i+1}$  para todo  $0 \le i \le n-2$ .
- 4.  $2c_i + 6d_ih_i = 2c_{i+1}$  para todo  $0 \le i \le n-1$ .
- 5.  $c_0 = 0$ .

De la ecuación 4 despejamos

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i}$$

Sustituyendo esto último y la ecuación 1 en la ecuación 2 y despejando

$$b_{i} = \frac{1}{h_{i}} \left( f(x_{i+1}) - f(x_{i}) - c_{i}h_{i}^{2} - d_{i}h_{i}^{3} \right)$$

$$= \frac{1}{h_{i}} \left( f(x_{i+1}) - f(x_{i}) - c_{i}h_{i}^{2} - \frac{(c_{i+1} - c_{i})h_{i}^{3}}{3h_{i}} \right)$$

$$= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i})}{h_{i}} - c_{i}h_{i} - \frac{1}{3}(c_{i+1} - c_{i})h_{i}$$

$$= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i})}{h_{i}} - \frac{h_{i}}{3} \left( 2c_{i} + c_{i+1} \right)$$

Sustituyendo en la ecuación 3 y despejando

$$0 = b_{i} - b_{i+1} + 2c_{i}h_{i} + 3d_{i}h_{i}^{2}$$

$$= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i})}{h_{i}} - \frac{h_{i}}{3}(2c_{i} + c_{i+1}) - \frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{h_{i+1}} + \frac{h_{i+1}}{3}(2c_{i+1} + c_{i+2})$$

$$+ 2c_{i}h_{i} + 3\frac{c_{i+1} - c_{i}}{3h_{i}}h_{i}^{2}$$

$$= \left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i})}{h_{i}} - \frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{h_{i+1}}\right] - \frac{2}{3}h_{i}c_{i} - \frac{1}{3}h_{i}c_{i+1} + \frac{2}{3}h_{i+1}c_{i+1} + \frac{1}{3}h_{i+1}c_{i+2}$$

$$+ 2h_{i}c_{i} + h_{i}c_{i+1} - h_{i}c_{i}$$

$$= \left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i})}{h_{i}} - \frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{h_{i+1}}\right] + \frac{1}{3}h_{i}c_{i} + \frac{2}{3}(h_{i} + h_{i+1})c_{i+1} + \frac{1}{3}h_{i+1}c_{i+2}$$

Equivalentemente

$$h_i c_i + 2(h_i + h_{i+1})c_{i+1} + h_{i+1}c_{i+2} = 3\left[\frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{h_{i+1}} - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_i}\right]$$

Esta ecuación, que vale para  $i=0,\cdots,n-2$ , contiene toda la información de las demás (pues la obtuvimos a través de sustituciones sucesivas). Juntando estas n-1 ecuaciones con  $c_0=0$  y  $c_n=0$  tenemos un sistema de n+1 ecuaciones y n+1 incógnitas

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ h_0 & 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 \\ & & \ddots & & \\ & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) & h_{n-1} \\ & & & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

La matriz del sistema es estrictamente diagonal dominante (pues  $h_i = x_{i+1} - x_i > 0$ ), por lo tanto es inversible. Luego, la solución es única, i.e., existe un único spline cúbico natural para  $x_0, \dots, x_n$ . Más aún, como la matriz es tridiagonal puede ser almacenada y operada eficientemente. En particular, el costo de la eliminación gaussiana sobre esta matriz es  $\mathcal{O}(n)$ .

Procediendo en forma análoga se puede demostrar que si el spline cúbico es sujeto también es único. Más aún, también se obtiene un sistema tridiagonal estrictamente diagonal dominante.

# 11. Integración numérica

### 11.1. Problema

Dada una función  $f:[a,b]\to R$ , queremos calcular  $\int_a^b f(x)dx$ . Conociendo una primitiva F, entonces por la Regla de Barrow podemos calcular la integral y vale  $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$ . En la mayoría de los casos calcular una primitiva de f es muy difícil o no es posible. Es por esto que queremos encontrar métodos numéricos que permitan aproximar la integral.

Dado que los polinomios se pueden integrar fácilmente y que además sabemos cómo aproximar una función via polinomios, vamos a utilizar la escritura

$$f(x) = P_n(x) + E_n(x)$$

donde  $P_n$  es el polinomio interpolador de Lagrange en n+1 puntos en el intervalo [a,b] y  $E_n$  es el error de la aproximación. Integrando:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a}^{b} P_{n}(x)dx + \int_{a}^{b} E_{n}(x)dx$$

Estas fórmulas se llaman fórmulas de cuadraturas (geométricamente cuadran el área debajo de la curva).

## 11.2. Regla del trapecio (n = 1)

Tomamos  $x_0 = a$ ,  $x_1 = b$  y consideramos  $P_1$  que interpola  $x_0$  y  $x_1$ . Sea h = b - a la longitud del intervalo de integración. Entonces

$$\int_{a}^{b} P_1(x)dx = \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1))$$

$$\int_{a}^{b} E_{1}(x)dx = -\frac{h^{3}}{12}f''(\mu)$$

 $con \mu \in (a, b).$ 

## 11.3. Regla de Simpson (n=2)

Tomamos  $x_0 = a$ ,  $x_1 = \frac{a+b}{2}$ ,  $x_2 = b$  y consideramos  $P_2$  que interpola  $x_0$ ,  $x_1$  y  $x_2$ . Sea  $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \frac{b-a}{2}$  la longitud de los subintervalos. Entonces

$$\int_{a}^{b} P_2(x)dx = \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$

$$\int_{a}^{b} E_{2}(x)dx = -\frac{h^{5}}{90}f^{(4)}(\mu)$$

con  $\mu \in (a, b)$ .

## 11.4. Grado de precisión

**Definición 11.1.** Se llama grado de precisión de una fórmula de cuadratura al máximo entero positivo n tal que la fórmula es exacta para todo polinomio de grado menor o igual a n.

El grado de precisión se puede deducir de la fórmula del error de los métodos. En el caso de trapecio, el error involucra una derivada segunda, con lo cual el grado de precisión es 1 (es exacta para todo polinomio de grado 0 o 1 pero existen polinomios de grado 2 para los cuales no lo es). En el caso de Simpson, el grado de precisión es 3.

## 11.5. Reglas compuestas

Al intervalo de integración lo dividimos en subintervalos y en cada uno de ellos aplicamos alguno de los métodos conocidos.

### 11.5.1. Regla compuesta del trapecio

Si dividimos al intervalo [a,b] en n subintervalos, entonces cada uno tendrá longitud  $h=\frac{b-a}{n}$ . La aproximación es ahora.

$$\frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right)$$

El error es

$$-\frac{b-a}{12}h^2f''(\mu)$$

con  $\mu \in (a, b)$ .

## 11.5.2. Regla compuesta de Simpson

Recordemos que Simpson utilizaba tres puntos del intervalo para aproximar. Entonces, si dividimos al intervalo [a, b] en n subintervalos, la regla de Simpson se aplicará sobre cada par consecutivo de ellos. Por lo tanto, necesitamos una cantidad n de subitervalos par. La aproximación es

$$\frac{h}{3} \sum_{k=0}^{n/2-1} \left( f(x_{2k}) + 4f(x_{2k+1}) + f(x_{2k+2}) \right)$$

El error es

$$-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\mu)$$

 $con \mu \in (a, b).$ 

## 11.6. Métodos adaptativos

Supongamos que queremos integrar una función cuyo comportamiento es irregular. En cierto subintervalo, la función tiene una gran variación, lo cual obliga a utilizar una aproximación con una partición fina del subintervalo sobre la cual utilizar una regla compuesta. Sin embargo en otro subintervalo disjunto, la función tiene una variación muy pequeña, haciéndola apta para un método de aproximación sin demasiado refinamiento.

En este tipo de situaciones se utilizan métodos adaptativos, que analizan en cada subintervalo cuál es la precisión de una aproximación de la integral y en caso de no ser suficiente, utilizan una aproximación más fina partiendo en otros subintervalos.

Estudiemos el método basado en la regla de Simpson compuesta. Llamemos S(x, y) a la aproximación de Simpson del intervalo [x, y] para la función f. Supongamos que queremos integrar el intervalo [a, b].

Paso 1: Tomamos dos subintervalos, cada uno de tamaño  $h = \frac{b-a}{2}$ , aplicando Simpson, obteniendose

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = S(a,b) - \frac{h^{5}}{90}f^{(4)}(\mu)$$

Paso 2: Partimos cada subintervalo en otros dos de tamaño  $\frac{h}{2}$ . Aplicamos la regla compuesta de simpson en  $\left[a, \frac{a+b}{2}\right]$  y  $\left[\frac{a+b}{2}, b\right]$ , obteniendose

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = S\left(a, \frac{a+b}{2}\right) + S\left(\frac{a+b}{2}, b\right) - \frac{1}{180} \left(\frac{h}{2}\right)^{4} (b-a)f^{(4)}(\tilde{\mu})$$

Como  $h = \frac{b-a}{2}$ , el resto se puede reescribir como

$$-\frac{1}{16}\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\tilde{\mu})$$

Supongamos que  $f^{(4)}(\mu) \approx f^{(4)}(\tilde{\mu})$ , entonces si igualamos las expresiones obtenidas en los pasos 1 y 2:

$$\begin{split} & \int_a^b f(x) dx = S(a,b) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\mu) = \int_a^b f(x) dx = S\left(a,\frac{a+b}{2}\right) + S\left(\frac{a+b}{2},b\right) - \frac{1}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\mu) \\ & \Leftrightarrow -\frac{15}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\mu) = S\left(a,\frac{a+b}{2}\right) + S\left(\frac{a+b}{2},b\right) - S(a,b) \\ & \Leftrightarrow -\frac{1}{16} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\mu) = \frac{1}{15} \left(S\left(a,\frac{a+b}{2}\right) + S\left(\frac{a+b}{2},b\right) - S(a,b)\right) \end{split}$$

Es decir que el error al subdividir los intervalos es

$$\frac{1}{15} \left( S\left(a, \frac{a+b}{2}\right) + S\left(\frac{a+b}{2}, b\right) - S(a, b) \right)$$

Si este valor es suficientemente chico, concluyo la subdivisión. En caso contrario, procedo recursivamente, volviendo al paso 1, sobre los intervalos  $\left[a,\frac{a+b}{2}\right]$  y  $\left[\frac{a+b}{2},b\right]$ 

## 12. Cuadrados mínimos lineales

### 12.1. Problema

Supongamos que disponemos de una muestra de valores provenientes de un experimento

$\boldsymbol{x}$	y
$x_1$	$y_1$
$x_2$	$y_2$
i	:
$x_m$	$y_m$

y queremos encontrar una relación entre los valores de x e y. Tenemos dos opciones:

- 1. Encontrar una función f tal que  $f(x_i) = y_i$  para todo  $i = 1, \dots, m$ .
- 2. Encontrar una función f tal que  $f(x_i) \approx y_i$  para todo  $i = 1, \dots, m$ .

Cuando tratamos con muestras observadas, en general estamos lidiando con valores que ya poseen un error, proveniente de la medición. Esto implica que buscar relaciones exactas (del tipo 1) pierda sentido pues en realidad sólo conocemos aproximaciones de los valores reales. Por este motivo, nos concentraremos en la opción 2.

Suponiendo que contamos con una familia de funciones  $\mathcal{F}$  de la cual queremos extraer una de ellas, necesitamos un criterio para comparar funciones que contiene. Tres criterios posibles son:

 $\min_{f \in \mathcal{F}} \max_{1 \le i \le m} |f(x_i) - y_i|$ 

Minimiza el máximo error en un punto. La desventaja de este criterio es que es muy susceptible a la presencia de outliers (valores atípicos).

Minimiza el error. Este criterio sobrepasa el problema de los outliers. La desventaja que tiene es que queremos encontrar el mínimo de una función que involucra un valor absoluto, que sabemos que no es derivable en el origen, lo cual dificulta la tarea.

 $\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - y_i)^2$ 

Minimiza el error cuadrático. Este criterio no padece de ninguno de los problemas anteriores.

Utilizaremos este último criterio. La familia de funciones que vamos a considerar es

$$\mathcal{F} = \{a_1\phi_1 + \dots + a_n\phi_n : a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}\}\$$

donde las funciones reales  $\phi_1, \dots, \phi_n$  están fijas. En otras palabras, estamos considerando el subespacio de funciones

$$\mathcal{F} = \langle \phi_1, \cdots, \phi_n \rangle_{\mathbb{R}}$$

Entonces el problema es encontrar los coeficientes  $a_1, \dots, a_n$  que realizan el mínimo

$$\min_{a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^m (a_1 \phi_1(x_i) + \dots + a_n \phi_n(x_i) - y_i)^2$$

Consideremos

$$A = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_n(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \cdots & \phi_n(x_2) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \cdots & \phi_n(x_n) \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

Entonces el mínimo a calcular lo podemos escribir como

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$$

### Observación 12.1.

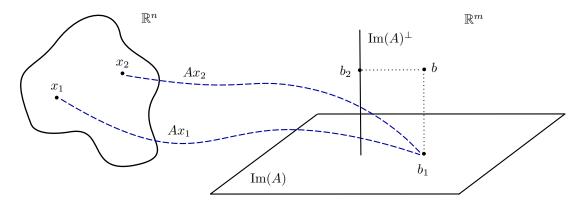
- 1. No necesitamos conocer el valor de las  $\phi_i$  en todo su dominio, sino sólo en los puntos  $x_1, \dots, x_m$ .
- 2. Para que el problema tenga sentido necesitamos más datos que incógnitas, i.e.,  $m \ge n$ .

Abstrayéndonos de las funciones  $\phi_1, \dots, \phi_n$  y de las muestras  $(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)$ , definimos el problema de cuadrados mínimos lineales del siguiente modo. Dadas  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $b \in \mathbb{R}^m$ , hallar  $x \in \mathbb{R}^n$  que minimice  $||Ax - b||_2^2$ . Lo estudiaremos y atacaremos desde un punto de vista puramente algebraico.

## 12.2. Intuición geométrica

En primer lugar, observemos que si el sistema Ax = b tiene solución, entonces cualquiera de ellas realiza el mínimo, que es 0.

Si Ax = b no tiene solución, entonces es evidente que el mínimo es mayor que 0. Para entender cómo elegir un vector x que lo realice, pensemos en Ax y b como vectores en  $\mathbb{R}^m$ . El mínimo se alcanza cuando la distancia euclídea entre estos dos vectores es mínima. Pero el único de estos dos vectores que se mueve es Ax, con lo cual hay que elegirlo de modo tal que esté lo más cerca posible de b. Recordemos que el conjunto de valores que puede tomar Ax es el subespacio  $\text{Im}(A) = \{Ax : x \in \mathbb{R}^n\}$ . Luego, queremos encontrar la distancia del punto b al subespacio Im(A), y es sabido que el punto sobre el subespacio que realiza la distancia es la proyección ortogonal de b sobre Im(A).



En la figura,  $b_1 = \text{proy}_{\text{Im}(A)}(b)$  es el punto que realiza la distancia,  $b_2 = \text{proy}_{\text{Im}(A)^{\perp}}(b)$ , y  $x_1$  y  $x_2$  son soluciones.

## 12.3. Solución

Como  $\mathbb{R}^m = \operatorname{Im}(A) \oplus \operatorname{Im}(A)^{\perp}$  entonces b se escribe en forma única como  $b = b_1 + b_2$  con  $b_1 \in \operatorname{Im}(A)$  y  $b_2 \in \operatorname{Im}(A)^{\perp}$ . Recordemos que  $b_1$  es la proyección ortogonal de b sobre  $\operatorname{Im}(A)$  y  $b_2$  es la proyección ortogonal de b sobre  $\operatorname{Im}(A)^{\perp}$ .

**Proposición 12.1.** Sea  $b = b_1 + b_2$  la escritura en forma única como  $b_1 \in Im(A)$  y  $b_2 \in Im(A)^{\perp}$ . Entonces el mínimo  $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$  se realiza si y sólo si  $Ax = b_1$ .

Observemos que como  $b_1 \in \text{Im}(A)$  entonces siempre existe un vector x que realiza el mínimo. Es decir, cuadrados mínimos lineales siempre tiene solución. Estudiemos ahora la unicidad de la misma.

Es importante notar que la unicidad no depende del conjunto Im(A) si no de cómo la matriz A transforma los vectores. Es por esto que la transformación lineal  $f_A(x) = Ax$  juega un rol fundamental aquí.

Lema 12.1. La solución de cuadrados mínimos es única si y sólo si  $f_A$  es monomorfismo.

En términos de los elementos de la matriz, tenemos el siguiente resultado,

**Proposición 12.2.** La solución de cuadrados mínimos lineales es única si y sólo el rango columna de A es completo, es decir, sus columnas son l. i.

Notar que en caso de ser A cuadrada, si tiene rango columna completo entonces también es inversible, con lo cual  $b \in \text{Im}(A)$  y el problema equivale a resolver un sistema de ecuaciones, para lo cual ya hemos estudiado diversos métodos.

#### 12.4. Ecuaciones normales

Nuestro próximo objetivo es caracterizar la solución en términos de A y de b.

**Lema 12.2.**  $Im(A)^{\perp} = Nu(A^t)$ .

**Proposición 12.3.**  $x \in \mathbb{R}^n$  es solución de cuadrados mínimos lineales si y sólo si  $A^tAx = A^tb$ .

Entonces resolver cuadrados mínimos equivale a resolver el sistema  $A^tAx = A^tb$ . Este sistema de ecuaciones recibe el nombre de ecuaciones normales. Sin embargo, la resolución vía este sistema puede no ser númericamente estable, pues la matriz  $A^tA$  suele estar mal condicionada aún estando A bien condicionada. Por ejemplo,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \qquad A^t A = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 + \varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

En este caso  $A^tA$  está muy mal condicionada. Si  $\varepsilon$  es chico, entonces  $\varepsilon^2$  es despreciable, y en un contexto de aritmética finita puede ser absorbido en la suma, obteniéndose  $fl(fl(1)+fl(\varepsilon^2))=1$ . Con este redondeo resulta que  $A^tA=\begin{pmatrix} 1&1\\1&1 \end{pmatrix}$  de modo que las ecuaciones normales tendrán infinitas soluciones. Sin embargo A tiene columnas l. i. con lo cual la solución de cuadrados mínimos es única.

## 12.5. Resolución por QR

Sean  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  y  $b \in \mathbb{R}^m$  y supongamos sin pérdida de generalidad que  $m \ge n$  (si no fuera este el caso, agregamos filas de 0 en A y b). Sea A = QR su factorización QR. Como  $Q^t$  preserva norma 2 entonces

$$||Ax - b||_2^2 = ||Q^t(Ax - b)||_2^2 = ||Q^t(QRx - b)||_2^2 = ||Rx - Q^tb||_2^2$$

Tenemos dos casos:

 $\blacksquare$  Las columnas de A son l. i.:

Como Q es inversible entonces rg(A) = rg(R). Entonces, en este caso, las columnas de R también son l. i. y por lo tanto tiene la forma

$$R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

con  $R_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$  triangular superior. Escribamos además

$$Q^t b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

con  $c \in \mathbb{R}^n$  y  $d \in \mathbb{R}^{m-n}$ . Entonces

$$||Ax - b||_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} R_1 x \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} R_1 x - c \\ -d \end{pmatrix} \right\|_2^2 = ||R_1 x - c||_2^2 + ||d||_2^2$$

Entonces el mínimo se realiza si y sólo si  $R_1x = c$  y este sistema tiene solución única pues  $R_1$  es una matriz cuadrada de rango máximo.

■ Las columnas de A no son l. i.: Entonces las columnas de R no son l. i., y si rg(A) = r < n entonces

$$R = \begin{pmatrix} R_1 & R_2 \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

con  $R_1 \in \mathbb{R}^{r \times r}$  triangular superior y  $R_2 \in \mathbb{R}^{r \times (n-r)}$ . Además escribimos

$$Q^t b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

ahora con  $c \in \mathbb{R}^r$ ,  $d \in \mathbb{R}^{m-r}$ ,  $x_1 \in \mathbb{R}^r$  y  $x_2 \in \mathbb{R}^{n-r}$ . Luego

$$||Ax - b||_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} R_1 x_1 + R_2 x_2 - c \\ -d \end{pmatrix} \right\|_2^2 = ||R_1 x_1 + R_2 x_2 - c||_2^2 + ||d||_2^2$$

Entonces el mínimo se realiza si y sólo si  $R_1x_1 + R_2x_2 = c$ . Este sistema (de r ecuaciones y n > r incógnitas) tiene infinitas soluciones, que se obtienen fijando  $x_2 = \overline{x}_2$  y resolviendo  $R_1x_1 = c - R_2\overline{x}_2$  que tiene solución única por ser  $R_1$  cuadrada y de rango máximo.

## 12.6. Resolución por SVD

Consideremos ahora la descomposición en valores singulares  $A = U\Sigma V^t$ . Sean  $\sigma_1, \dots, \sigma_r$  los valores singulares. Tenemos que

$$||Ax - b||_2^2 = ||U^t(Ax - b)||_2^2 = ||U^t(U\Sigma V^t x - b)||_2^2 = ||\Sigma V^t x - U^t b||_2^2$$

Como  $V^t$  es inversible entonces sustituyendo  $y = V^t x$ :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\|Ax - b\right\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\|\Sigma V^t x - U^t b\right\|_2^2 = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \left\|\Sigma y - U^t b\right\|_2^2$$

Separemos en los mismos dos casos de antes:

■ Las columnas de A son l. i.: Notemos que como U y V son inversibles entonces  $\operatorname{rg}(A) = \operatorname{rg}(\Sigma) = r$ . Entonces, en este caso, r = n y  $\Sigma$  tiene la forma

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_n \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Escribiendo

$$U^t b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

con  $c \in \mathbb{R}^n$  y  $d \in \mathbb{R}^{m-n}$ , tenemos

$$\|\Sigma y - U^t b\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 y_1 \\ \vdots \\ \sigma_n y_n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 y_1 - c_1 \\ \vdots \\ \sigma_n y_n - c_n \end{pmatrix} \right\|_2^2 + \|d\|_2^2$$

Entonces el mínimo se alcanza si y sólo si  $y = \begin{pmatrix} c_1/\sigma_1 \\ \vdots \\ c_n/\sigma_n \end{pmatrix}$ . Lo que resta es encontrar el único x tal que  $V^t x = y$ .

■ Las columnas de A no son l. i.: En este caso hay r < n valores singulares en la diagonal de  $\Sigma$ . Escribiendo

$$U^t b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

con  $c \in \mathbb{R}^r$  y  $d \in \mathbb{R}^{m-r}$ , tenemos

$$\|\Sigma y - U^t b\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 y_1 \\ \vdots \\ \sigma_r y_r \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 y_1 - c_1 \\ \vdots \\ \sigma_r y_n - c_r \end{pmatrix} \right\|_2^2 + \|d\|_2^2$$

Entonces el mínimo se alcanza si y sólo si  $y=\begin{pmatrix}c_1/\sigma_1\\\vdots\\c_r/\sigma_r\\y_{r+1}\\\vdots\\y_n\end{pmatrix}$  siendo  $y_{r+1},\cdots,y_n\in\mathbb{R}$  arbitrarios. Las infinitas soluciones provienen de la libertad de elección para  $y_i$  con i>r.

## 13. Ceros de función

### 13.1. Problema

Dada  $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ , buscamos un  $x^* \in \mathbb{R}$  tal que  $f(x^*) = 0$ . El número  $x^*$  se llama cero o raíz de f.

En ciertos casos, como por ejemplo para f(x) un polinomio de grado menor o igual que 2, el problema tiene una solución que sabemos calcular en forma exacta. En otros casos, por ejemplo para  $f(x) = e^x - \ln(x^2)$ , no parece tan claro cómo calcular una raíz, si es que existe una.

## 13.2. Propuesta

Para calcular una raíz, construiremos una sucesión  $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$  de modo tal que  $x_n\xrightarrow[n\to\infty]{}x^*$ . Más aún, definiremos dicha sucesión en forma recurrente, de modo tal que a partir de  $x_0$  podamos computar  $x_1$ , luego  $x_2$  y así sucesivamente. Esto nos da un método iterativo, en el cual a medida que el número de iteraciones n crece, la aproximación  $x_n$  de  $x^*$  es cada vez mejor, en el sentido de que el valor absoluto  $|x_n-x^*|$  es cada vez más pequeño.

Sin saber aún cómo construir  $\{x_n\}_n$ , surgen algunas preguntas:

- 1. ¿Cuán rápido convergerá  $x_n$  a  $x^*$ ? En otras palabras, ¿con qué velocidad la diferencia  $|x_n x^*|$  converge a 0?
- 2. ¿Cuánto es necesario iterar para obtener una buena aproximación? Recordemos que la raíz  $x^*$ , a la que queremos converger, no es conocida de antemano, con lo cual, en general, no sabemos cuán cerca está  $x_n$  de  $x^*$  en un instante dado de la iteración.
- 3. Dado que no podemos iterar infinitamente, necesitamos establecer criterios para decidir cuándo finalizar la iteración, que no dependan de la distancia entre  $x_n$  y  $x^*$ .

## 13.3. Velocidad u orden de convergencia

Como hemos planteado, nos interesa medir la velocidad con la que  $\{x_n\}_n$  se aproxima a  $x^*$ .

**Definición 13.1.** Sea  $\{x_n\}_n$  una sucesión que converge a  $x^*$ , pero  $x_n \neq x^*$  para todo n. Decimos que  $\{x_n\}_n$  tiene orden de convergencia p > 0 si

$$\lim_{n \to \infty} \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^p} = c \neq 0$$

para cierta constante  $c \in \mathbb{R}$ . Si p = 1 decimos que la convergencia es lineal. Si 1 decimos que la convergencia es supralineal. Si <math>p = 2 decimos que la convergencia es cuadrática.

Observemos que si el orden de convergencia es p entonces  $|x_{n+1}-x^*|$  es asintóticamente equivalente a  $|x_n-x^*|^p$ . Esto implica que, asintóticamente, el error absoluto se reduce polinomialmente, con exponente p.

Dado que algunas sucesiones convergen con velocidad variable, no siempre es posible aplicar la anterior definición. Hay una medida más general de la velocidad de convergencia, dada por la siguiente

**Definición 13.2.** Sea  $\{\alpha_n\}_n$  convergente a  $\alpha$ . Sea  $\{\beta_n\}_n$  convergente a 0. Decimos que  $\{\alpha_n\}_n$  tiene orden de convergencia  $\mathcal{O}(\beta_n)$  (o que  $\alpha_n$  converge tan rápido como  $\beta_n$ ) si existe una constante c > 0 tal que  $|\alpha_n - \alpha| \le c\beta_n$  para todo n suficientemente grande.

En este caso, si  $\{\beta_n\}_n$  tiene orden de convergencia p, decimos que  $\{\alpha_n\}_n$  tiene orden de convergencia al menos p.

### 13.3.1. Interpretación

¿Qué significa que  $\{x_n\}_n$  converja a  $x^*$  con orden p? Llamemos  $e_n = x_n - x^*$ . Según la definición de antes, esto significa que  $\lim_{n \to \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p} = c$  para cierta constante  $c \neq 0$ . Que c no sea infinito, significa que  $|e_n|^p$  no tiende a 0 más rápido de lo que lo hace  $|e_{n+1}|$ . Que c sea no nulo, significa que  $|e_{n+1}|$  tampoco lo hace más rápido que  $|e_n|^p$ . Por lo tanto,  $|e_{n+1}|$  y  $|e_n|^p$  convergen a 0 con la misma velocidad o, dicho de otro modo, son asintóticamente equivalentes.

A su vez, es posible interpretar el significado de esta velocidad, en términos prácticos. Dada la equivalencia asintótica de  $|e_{n+1}|$  y  $|e_n|^p$ , vamos a suponer que para n suficientemente grande  $|e_{n+1}| \approx |e_n|^p$ . Supongamos que hasta el término n-ésimo llevamos calculados k dígitos decimales del valor  $x^*$ , es decir que  $|e_n| \approx 10^{-k}$ . Entonces,  $|e_{n+1}| \approx (10^{-k})^p = 10^{-kp}$ , es decir que en el (n+1)-ésimo término, la cantidad de decimales calculados se multiplica por p.

Entonces, por ejemplo, que una sucesión converja cuadráticamente significa, a nivel práctico, que la cantidad de dígitos decimales calculados se duplica a cada paso.

## 13.4. Criterios de parada

Respondemos a la tercera pregunta que nos hicimos previamente.

- Fijar un número máximo N de iteraciones.
- Fijar  $\varepsilon > 0$  y terminar cuando  $|x_n x_{n-1}| < \varepsilon$ .

Esto es, terminar cuando los saltos de la sucesión sean chicos.

Este criterio puede fallar. Por ejemplo, tomemos  $x_n = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}$  la sucesión de números armónicos. Como  $x_n - x_{n-1} = \frac{1}{n} \xrightarrow[n \to \infty]{} 0$  entonces para cualquier  $\varepsilon > 0$  existirá un valor de n suficientemente grande para el cual dos términos sucesivos disten menos de  $\varepsilon$ . Sin embargo, es bien sabido que los números armónicos divergen.

- Fijar  $\varepsilon > 0$  y terminar cuando  $\frac{|x_n x_{n-1}|}{|x_{n-1}|} < \varepsilon$ . Esto es, terminar cuando la sucesión no de saltos demasiado grandes en términos relativos.
- Fijar  $\varepsilon > 0$  y terminar cuando  $|f(x_n)| < \varepsilon$ .

Este criterio se basa en que si  $x_n$  converge a una raíz, entonces cuando la sucesión converja,  $f(x_n)$  será pequeño. También puede fallar. Por ejemplo, en el caso en que f(x) está muy cerca de cero en un punto pero no tiene una raíz en el entorno (e. g.  $f(x) = \frac{1}{x}$ ).

- Fijar  $\varepsilon > 0$  y terminar cuando  $|f(x_n) f(x_{n-1})| < \varepsilon$ .
- $\bullet$  Fijar  $\varepsilon>0$ y terminar cuando  $\frac{|f(x_n)-f(x_{n-1})|}{|f(x_{n-1})|}<\varepsilon.$

Dado que todos estos criterios son heurísticos, pueden fallar. La elección del criterio adecuado dependerá del contexto. A continuación exploraremos algunas formas de encontrar una tal sucesión  $\{x_n\}_n$  que converja a una raíz.

## 13.5. Método de Bisección

Supongamos que tenemos una función  $f:[a,b]\to\mathbb{R}$  contínua, a la que le queremos calcular una raíz. Supongamos, además, que f(a)f(b)<0, es decir, f(a) y f(b) tienen signos opuestos. Consideremos el Algoritmo 7, que asume que estamos en estas condiciones.

## Algorithm 7: Método de Bisección

```
1 Sean a_0 = a, b_0 = b

2 for k = 1 to N do

3 c_{k-1} = \frac{a_{k-1} + b_{k-1}}{2}

4 Si f(c_{k-1}) cumple con el criterio de parada, terminar

5 Si f(c_{k-1})f(a_{k-1}) < 0, entonces a_k = a_{k-1}, b_k = c_{k-1}

6 Si f(c_{k-1})f(b_{k-1}) < 0, entonces a_k = c_{k-1}, b_k = b_{k-1}

7 end
```

El algoritmo determina tres sucesiones  $\{a_n\}_n$ ,  $\{b_n\}_n$  y  $\{c_n\}_n$ . En cada paso elige a  $c_n$  como el punto medio entre  $a_n$  y  $b_n$ .

Observación 13.1. Las lineas 5 y 6 garantizan que

•  $a_n \leq c_n \leq b_n$  para todo n.

- $f(a_n)f(b_n) < 0$  para todo n.
- La sucesión  $\{a_n\}_n$  es creciente, mientras que  $\{b_n\}_n$  es decreciente.

Veamos que la sucesión  $\{c_n\}_n$  converge a una raíz de f.

#### Lema 13.1.

$$b_n - a_n \le \frac{b_0 - a_0}{2^n}$$

En particular, esto muestra que  $\lim_{n\to\infty} (b_n - a_n) = 0$ .

**Proposición 13.1.** La sucesion  $\{c_n\}_n$  es convergente. Más aún  $\lim_{n\to\infty} c_n$  es una raíz de f.

Esto demuestra que el método siempre converge a una raíz de la función. En lo que sigue llamaremos  $x^* = \lim_{n \to \infty} c_n$ .

**Observación 13.2.** De la monotonía de las sucesiones se deduce que  $a_n \leq x^* \leq b_n$  para todo n.

Proposición 13.2.

$$|c_n - x^*| \le \frac{b_0 - a_0}{2^{n+1}}$$

Corolario 13.1. El orden de convergencia de  $\{c_n\}_n$  es al menos lineal.

### 13.5.1. Ventajas y desventajas

## Ventajas

- Para cada  $a_n$  y  $b_n$ , nos alcanza con conocer el signo de  $f(a_n)$  y el de  $f(b_n)$  con lo cual podría no ser necesario evaluar la función f en esos puntos. Esto es conveniente en contextos en los cuales la evaluación es una operación costosa y es posible conocer el signo por alguna vía sencilla.
- Tenemos una cota para el error absoluto.
- Es fácil encontrar puntos iniciales  $a_0$  y  $b_0$  factibles.

#### Desventajas

Asegura una convergencia de orden al menos lineal, aunque puede resultar lenta.

### 13.6. Problemas de punto fijo

**Definición 13.3.** Sea  $g:[a,b]\to\mathbb{R}$ . Un punto  $p\in[a,b]$  se llama punto fijo de g si g(p)=p.

Un problema de cálculo de raíces de una función f(x) puede ser transformado en un problema de punto fijo. Por ejemplo si g(x) = x + f(x) entonces p es raíz de f si y solo si p es punto fijo de g.

La conveniencia de transformar el problema de cálculo de una raíz en un problema de punto fijo, se debe a que se conocen varios métodos para resolver esto último, como veremos a continuación.

**Proposición 13.3.** Sea  $g:[a,b] \to [a,b]$  contínua. Entonces g tiene punto fijo en [a,b]. Si además es derivable y |g'(x)| < 1 para todo  $x \in (a,b)$ , entonces el punto fijo es único.

Dadas estas condiciones de existencia y unicidad de punto fijo, construimos una sucesión convergente a un punto fijo.

**Proposición 13.4.** Sea  $g:[a,b] \to [a,b]$  contínua y derivable, tal que existe una constante no negativa k tal que  $|g'(x)| \le k < 1$  para todo  $x \in (a,b)$ . Sea  $\{x_n\}_n$  una sucesión tal que

$$x_0 \in [a,b]$$
 
$$x_{n+1} = g(x_n) \ si \ n \ge 0$$

Entonces  $\{x_n\}_n$  converge al único punto fijo de g.

Esta técnica para encontrar el punto fijo se llama iteración de punto fijo. Bajo ciertas condiciones podemos asegurar el orden de convergencia de la sucesión.

**Proposición 13.5.** Sea  $g \in C^r([a,b])$  tal que  $p \in (a,b)$  es punto fijo y

$$g'(p) = g''(p) = \dots = g^{(r-1)}(p) = 0, \ g^{(r)}(p) \neq 0$$

Entonces, si  $x_{n+1} = g(x_n)$  converge a p, su orden de convergencia es r.

### 13.7. Método de Newton

Supongamos que dada una  $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ , queremos hallar una raíz. Para esto queremos encontrar una función  $g: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ , cuya expresión involucre a f, de modo tal que los puntos fijos de g sean raíces de f. Más aún, vamos a pedir que la iteración de punto fijo asociada a g converja cuadráticamente.

Proponemos g(x) = x - h(x)f(x) siendo h una función que todavía no conocemos. Notemos que si p es punto fijo de g entonces p = g(p) = p - h(p)f(p), con lo cual si  $h(p) \neq 0$  resulta que f(p) = 0. Por lo tanto, todo punto fijo de g es una raíz de f, sea cual sea la función h tal que  $h(p) \neq 0$ .

Como queremos un orden de convergencia cuadrático, pedimos que g'(p) = 0. Como g'(x) = 1 - h'(x)f(x) - h(x)f'(x), entonces

$$g'(p) = 0 \Leftrightarrow 1 - h'(p)f(p) - h(p)f'(p) = 0$$
$$\Leftrightarrow 1 - h(p)f'(p) = 0$$
$$\Leftrightarrow h(p) = \frac{1}{f'(p)}$$

suponiendo que  $f'(p) \neq 0$ . Entonces podemos tomar  $h(x) = \frac{1}{f'(x)}$ , que cumple  $h(p) \neq 0$ . Así, queda

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

con lo cual la iteración de punto fijo asociada es

$$x_{n+1} = g(x_n) = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

En lo que sigue vamos a ver que esta sucesión efectivamente converge a un punto fijo de g (bajo ciertas condiciones), y lo hace cuadráticamente.

**Proposición 13.6.** Sea  $f \in C^2([a,b])$ . Sea  $p \in (a,b)$  tal que f(p) = 0,  $f'(p) \neq 0$ . Entonces existe  $\delta > 0$  tal que toda sucesión  $\{x_n\}_n$  con

$$x_0 \in [p - \delta, p + \delta]$$
 
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \text{ si } n \ge 0$$

está bien definida y converge.

Observemos que este resultado sólo asegura la convergencia cuando comenzamos la iteración dentro de un entorno suficientemente chico del punto fijo. En general, no conocemos la localización del punto fijo así como tampoco cuán chico debe ser el entorno. Por esta razón, se suele partir desde un punto arbitrario, e iterar, revisando si se logra converger. En caso negativo, se elige otro punto de partida y se repite la iteración.

Otra forma de sortear el problema es aplicar, inicialmente, algunas iteraciones del método de Bisección y cuando el entorno que contiene a la raíz es suficientemente chico, proceder con Newton.

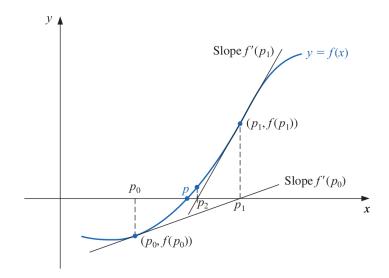
**Proposición 13.7.** Sea  $f \in C^2$  y  $p \in \mathbb{R}$  una raíz de f. Sea  $\{x_n\}_n$  la iteración de punto fijo dada por  $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ . Supongamos que está bien definida y que nunca vale p. Si  $e_n = x_n - p$ , entonces

$$\frac{e_{n+1}}{e_n^2} = \frac{1}{2} \frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)}$$

con  $\xi_n$  un valor entre  $x_n$  y p. Más aún, si  $f'(p), f''(p) \neq 0$  y la iteración converge a p, entonces lo hace con orden cuadrático.

## 13.7.1. Interpretación geométrica

Este método tiene una muy linda interpretación geométrica. Dada una función f, tomamos un punto  $p_0$  y consideramos la recta tangente que pasa por el punto  $(p_0, f(p_0))$ . Definimos  $p_1$  como la intersección entre dicha recta y el eje x. Ahora tomamos la recta tangente que pasa por el punto  $(p_1, f(p_1))$  y definimos  $p_2$  como la intersección entre esta recta y el eje x. Continuando de esta forma nos iremos aproximando cada vez más a una raíz p de f. La siguiente imágen ilustra este proceso.



Sea  $\{x_n\}_n$  una iteración de Newton. Dado  $x_n$ , definimos  $x_{n+1}$  como la abscisa de la intersección entre la recta tangente a f en  $x_n$  y el eje x. La recta tangente a f en  $x_n$  es  $y = f'(x_n)x + b$  siendo b la ordenada al origen. Para  $x = x_n$ , esta recta toma el valor  $y = f(x_n)$ , con lo cual  $f(x_n) = f'(x_n)x_n + b$ , i. e.,  $b = f(x_n) - x_n f'(x_n)$ . Luego, la recta tangente a f en  $x_n$  es

$$y = f'(x_n)x + f(x_n) - x_n f'(x_n)$$

La intersección entre esta recta y el eje x se da para un valor x tal que  $f'(x_n)x + f(x_n) - x_n f'(x_n) = 0$ , i. e.,  $x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ . Habíamos definido  $x_{n+1}$  como este valor, con lo cual

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

## 13.7.2. Ventajas y desventajas

### Ventajas

 Bajo ciertas condiciones, el método converge con velocidad cuadrática, lo que significa que, a nivel práctico, el número de cifras decimales correctas calculadas se duplica a cada paso.

### Desventajas

- La convergencia está asegurada sólo en un entorno del punto fijo buscado. En general, no conocemos dicho punto y mucho menos cuán cerca del mismo debemos comenzar a iterar.
- La velocidad de convergencia, a nivel práctico, puede resultar lenta lejos del punto fijo. Esto se debe a que, como vimos antes,

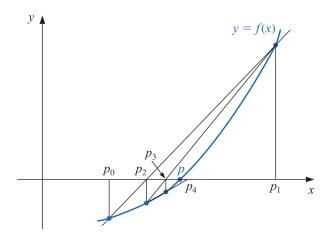
$$\frac{e_{n+1}}{e_n^2} = \frac{1}{2} \frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)}$$

con lo cual, si  $|f'(x_n)|$  es chico, el error decrece lento.

■ Es necesario computar  $f'(x_n)$  en cada iteracion. En ciertas situaciones esto puede ser caro de computar o directamente imposible. El método de la Secante viene a salvar este problema.

## 13.8. Método de la Secante

El método comienza con dos puntos  $x_0$  y  $x_1$ . La iteración  $x_{n+1}$  es igual a la iteración de Newton, excepto que aproximamos  $f'(x_n)$  por la pendiente de la recta secante que pasa por  $f(x_n)$  y  $f(x_{n-1})$ .



Explícitamente, la aproximación que estamos usando es

$$f'(x_n) = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$$

Por lo tanto, la sucesión que usa este método está dada por

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}} = x_n - \frac{f(x_n)(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Se puede demostrar que la velocidad de este método es supralineal.

## 13.8.1. Ventajas y desventajas

## Ventajas

• No es necesario computar ningún valor de f'.

## Desventajas

- La velocidad de convergencia es más lenta que la del método de Newton.
- A medida que n crece y  $x_n$  va convergiendo,  $x_n \approx x_{n-1}$  y  $f(x_n) \approx f(x_{n-1})$ , lo que produce una pérdida de dígitos significativos debido al redondeo en el término  $\frac{f(x_n)(x_n-x_{n-1})}{f(x_n)-f(x_{n-1})}$ . El método Regula Falsi provee una solución a este problema.

## 13.9. Método Regula Falsi

Genera aproximaciones del mismo modo que el método de la Secante, pero en cada paso verifica que la raíz buscada quede entre dos iteraciones sucesivas, en forma análoga al método de Bisección.

Comienza con dos puntos  $x_0$  y  $x_1$  tal que  $f(x_0)f(x_1) < 0$ . Dados  $x_{n-1}$  y  $x_n$ , el punto  $x_{n+1}$  se calcula mediante la intersección de la recta secante que pasa por  $f(x_{n-1})$  y  $f(x_n)$ , y el eje x. Luego, redefine  $x_n$  como aquel valor  $x_{n-1}$  o  $x_n$  que tiene distinto signo (evaluado en f) que  $x_{n+1}$ . La fórmula de la iteración sigue siendo la misma del método de la Secante.

En otras palabras, es idéntico al método de Bisección excepto que, en lugar de quedarse con el punto medio, toma la intersección entre la secante y el eje x.

Se puede probar que la velocidad de convergencia del método es al menos  $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ .

## 13.9.1. Ventajas y desventajas

#### Ventajas

■ Desde el punto de vista numérico, ahora  $f(x_n)$  y  $f(x_{n-1})$  siempre tendrán distinto signo, con lo cual  $f(x_n) - f(x_{n-1})$  es una resta entre números de distinto signo (podemos pensar que es una suma), evitando una cancelación catastrófica.

## Desventajas

• Requiere más operaciones que el método de la secante.

# 14. Referencias

- Clases de la materia Métodos Numéricos dictadas por la Dra. Isabel Mendez Diaz.
- R. Burden y J.D.Faires, Análisis numérico, International Thomson Editors, 1998.
- R. Duran, S. B. Lasalle y J. D. Rossi, Elementos del Cálculo Numérico.
- Apuntes de www.cubawiki.com.ar.
  - http://www.cubawiki.com.ar/images/6/61/Metnum\_apunte\_jsackmann.pdf.
  - http://www.cubawiki.com.ar/images/7/7d/Metnum\_overview.pdf.
- D. Goldberg, What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic, ACM Computing Surveys, Volumen 23 Issue 1, marzo 1991, páginas 5-48.