

Determination of the Atomic Weight of Magnesium CHEM 101

John SMITH

September 7, 2015

Date Performed: January 1, 2012
Partners: James Smith
Mary Smith
Instructor: Professor Smith

1 Fundamentos

1.1 Matriz de Google

Se llama Matriz de Google a una matriz estocástica particular utilizada por el algoritmo PageRank del buscador Google. PageRank cuenta la cantidad y calidad de enlaces hacia una página para estimar la importancia de una página web, la hipótesis más importante es que las páginas más importantes probablemente tengan mayor cantidad de enlaces hacia ellas. La matriz de Google representa un grafo, donde los nodos son páginas web y las aristas son links entre páginas. El PageRank de cada página puede ser calculado iterativamente a partir de la matriz de Google usando por ejemplo el método de las potencias, para que el método converja la matriz debe ser estocástica, irreducible y aperiódica.

Matriz de Adyacencias Sea N la cantidad de páginas, se define A matriz de adyacencias que representa la relación entre enlaces como sigue:

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } j \text{ tiene un enlace hacia } i \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (1)$$

Matriz de Markov A partir de A se construye una matriz S que corresponde a las transiciones en una cadena de Markov. Sea k_j el número de enlaces salientes del nodo j a todos los demás nodos:

$$S_{i,j} = \begin{cases} A_{i,j}/k_j & \text{si } j \text{ tiene un enlace hacia } i \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2)$$

Aquellas columnas j cuyos valores son todos cero representan nodos sin enlaces salientes, dichos vectores son reemplazados por otro cuyos valores sean $\frac{1}{N}$. Por construcción la suma de todos los elementos de cada columna j es la unidad, por lo tanto S está bien definida, pertenece a la clase de Cadenas de Markov y a la clase de operadores de Perron-Frobenius.

Matriz de Google Se puede definir la matriz de Google como sigue:

$$G_{i,j} = \alpha S_{i,j} + (1 - \alpha) \frac{1}{N} \quad (3)$$

2 Puntuación de Sitios Web

2.1 1

2.2 Sistema lineal de ecuaciones

$$Gv = \lambda v \quad (4)$$

$$(G - \lambda)v = 0 \quad (5)$$

Subespacio Krylov Un subespacio de Krylov de orden r generado por una matriz $A \in M_{N \times N}$ y un vector v , es el subespacio vectorial generado por $A^k v$ con $k < r$:

$$K_r(A, v) = \text{span}(v, Av, \dots, A^{r-1}v) \quad (6)$$

Matriz de Hassenberg superior Una matriz de Hassenberg superior tiene todos ceros por debajo de la primera subdiagonal.

Método de Arnoldi El método Arnoldi puede ser usado para encontrar todos los valores y vectores propios de la matriz $G \in M_{N \times N}$, pertenece a la clase de algoritmos de álgebra lineal que producen un resultado parcial después de un número relativamente bajo de iteraciones. El algoritmo fue creado en principio para transformar una matriz en forma Hassenberg superior, pero se encontró más adelante que el método podía ser usado para encontrar valores y vectores propios para matrices esparsas de gran tamaño de forma iterativa. Inicialmente el método construye bases del subespacio Krylov¹, después de construido el subespacio, con m elegido como cantidad de bases, podemos calcular aproximaciones a los valores y vectores propios de la matriz esparsa original G . La matriz de Hassenberg $H \in M_{N \times N}$ resultante del método es la clave para calcular esas aproximaciones ya que sus valores propios asociados $\lambda_i^{(m)}$ conocidos como *Valores de Ritz* convergerán hacia los valores propios de la matriz esparsa de gran tamaño A .

Los vectores propios de la matriz de Google G pueden calcularse como sigue:

¹A Krylov subspace is defined as $K(G, q, j) = \text{span}(q, Gq, G^2q, \dots, G^{j-1}q)$.

- a. Calcular el valor propio de interés de H
- b. Obtener el vector propio asociado a ese valor propio.
- c. El vector correspondiente de G se obtiene por:

$$v_i^{(m)} = V_m y_i^{(m)} \quad (7)$$

donde $v_i^{(m)}$ es el vector buscado en G , V_m es el vector con bases del subespacio de Krylov y $y_i^{(m)}$ es el vector propio de H asociado al valor propio de interés.

Algorithm 1 Método Arnoldi

```

1: procedure ARNOLDI
2:    $v_0 =$  arbitrary nonzero starting vector
3:    $v_1 = v_0 / \|v_0\|_2$ 
4:   for  $j = 1, 2, \dots$  do
5:      $w = Av_j$ 
6:     for  $j = 1 : j$  do
7:        $h_{ij} = w * v_i$ 
8:        $w = w - h_{ij}v_i$ 
9:     end for
10:     $h_{j+1,j} = \|w\|_2$ 
11:    if  $h_{j+1,j} = 0$  then stop
12:    end if
13:     $v_{j+1} = w / h_{j+1,j}$ 
14:  end for
15: end procedure

```

2.3 Programas