Análisis numérico

Clase 1: Preliminares, algoritmos y computación

Joaquin Cavieres

Instituto de Estadística, Universidad de Valparaíso

UNIVERSIDAD DE VALPARAISO CHILE

Outline

¿Qué es el Análisis Numérico?

Definición "formal"

El análisis numérico es la rama de las matemáticas que se ocupa de resolver problemas matemáticos en computadores para la búsqueda de respuestas numéricas, en contraposición a respuestas simbólicas. Estas soluciones numéricas proporcionan respuestas adecuadas para aplicaciones prácticas y del mundo real. En cambio, las soluciones simbólicas son exactas, pero pueden ser difíciles o imposibles de encontrar [1]

¿Qué es el Análisis Numérico?

Objetivos

- Eficiencia necesaria para llegar a una solución
- Precisión de la solución encontrada (cuan cerca estamos del valor real).
- Precisión o el nivel de detalle de nuestra solución

El Análisis Numérico se puede aplicar en diferentes campos que requieren soluciones numéricas a preguntas complejas. Por ejemplo, en videojuegos, ciencias ambientales, física, química, etc. Por lo tanto,

¿Qué es el Análisis Numérico?

Objetivos

- Eficiencia necesaria para llegar a una solución
- Precisión de la solución encontrada (cuan cerca estamos del valor real).
- Precisión o el nivel de detalle de nuestra solución

El Análisis Numérico se puede aplicar en diferentes campos que requieren soluciones numéricas a preguntas complejas. Por ejemplo, en videojuegos, ciencias ambientales, física, química, etc. Por lo tanto, el Análisis Numérico puede aplicarse en cualquier campo en donde las computadoras son utilizadas para resolver problemas matemáticos.

¿Qué es el Análisis Numérico?

El Análisis Numérico no se centra sólo en la busqueda de soluciones numéricas, también se centra en encontrar estimaciones que sean utilizables provenientes de esas mismas soluciones. A partir del error ya sabemos que tan factible es nuestra estimación.

¿Qué es el Análisis Numérico?

Limitantes

- Tamaño de los datos disponibles.
- Algoritmos apropiados para resolver problemas numéricos (diferentes cualidades y beneficios).

¿Como lidiar con estas problemáticas?

Limitantes

- Tamaño de los datos disponibles.
- Algoritmos apropiados para resolver problemas numéricos (diferentes cualidades y beneficios).

¿Como lidiar con estas problemáticas? Mediante la programación en paralelo (cálculo en paralelo) de operaciones complejas ante un gran número de observaciones (datos).

Cálculos o programación en paralelo no se verá en este curso

Objetivos del curso

General

Capacitar al estudiante con herramientas útiles para resolver problemas en el ámbito de modelación, simulación y aproximación. Fomentar el trabajo en equipo e interdisciplinario. Brindar oportunidades de mejorar las técnicas de comunicación y presentación.

Específicos

- Resolver problemas matemáticos mediante software de programación.
- Creación de algoritmos específicos para la busqueda de una solución aproximada.
- Comprensión y análisis de los problemas desarrollados.

Estructura del curso

Contenidos

- Capítulo 1: Preliminares mátemáticos, Algoritmos y computación.
- Capítulo 2: Matrices y solución de ecuaciones lineales.
- Capítulo 3: Problemas de valores y vectores propios.
- Capítulo 4: Funciones: interpolación, suavizamiento y aproximación.
- Capítulo 5: Integración numérica y métodos de Monte Carlo.

Estructura del curso

Software

- `R` (principal del curso)
  - The `R` project: `www.r-project.org`
  - Disponible en Windows, MacOSX, Linux
- `Python` (uso opcional)
  - `https://www.python.org/`
- `Matlab` (uso opcional)
  - `https://www.mathworks.com/`

Las clases estaran basadas completamente en `R` pero los alumnos pueden crear sus algoritmos, funciones o programas en cualquier de los mencionados anteriormente.

¿Por que usar R?

- R es un software de uso libre.
- No necesita una licencia.
- Cualquiera puede usar o modificar los códigos disponibles ('source').
- Es uno de los softwares más utilizados por los Data Scientist para el análisis de datos y creación de modelos predictivos.

`R` contiene una variedad de 'librerías' base para hacer diferentes tipos de análisis estadísticos y más de 12000 librerías adicionales que han sido desarrolladas. Estas librerías nos permiten trabajar con:

- Distribuciones de probabilidad.
- Test estadísticos.
- Modelado lineal, no lineal, semiparamétrico, no parametríco, etc.
- Análisis multivariado.
- Series de tiempo.
- Estadística espacial.
- Mapas.
- Machine learning, Deep learning.
- ....

Además de permitir realizar análisis estadísticos, R se ha convertido en un ambiente de desarrollo con extensiones tales como:

- Desarrollo de API's.
- Interfaz con Shiny.
- Interfaz con LaTeX mediante Rmarkdown.
- Interfaz con *c++* a través de Rcpp.
- Interfaz con álgebra lineal a través de RcppArmadillo.
- Interfaz con análisis númerico a través de RcppNumerical.
- Creación de páginas web con blogdown
- ....

Referencias bibliográficas

Obligatoria

- **Burden, R and Faires, D., 2011**. *Numerical Analysis. 9th Edition. Brooks/Cole. 2011*
- **Collins, G.W., 2003** *Fundamental Numerical Methods and Data Analysis. 2003.*
- **Howard, J. P., 2017**. *Computational Methods for Numerical Analysis with R. CRC Press.*

Complementaria

- **Bloomfield, V. A., 2018**. *Using R for numerical analysis in science and engineering. CRC Press.*
- **Lange, K., 2010**. *Numerical Analysis for Statisticians Second Edition. Springer Science+ Business Media, LLC.*

Evaluaciones

Preliminares

- 2 pruebas escritas (20% y 25% respectivamente)
- Trabajo semestral (55%)
  - (incluye: 3 presentaciones, simulación del problema, reporte final y presentación de los resultados).

Límite y continuidad

Definición 1.1

Una función f definida en un conjunto X de números reales, tiene un límite L hacia x_0 escrito como:

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = L, \tag{1}$$

por tanto, si cualquier número real $\epsilon < 0$, existe un otro número real $\delta > 0$ tal que:

$$|f(x) - L| < \epsilon, \text{ siempre que } x \in X \text{ y } 0 < |x - x_0| < \delta \tag{2}$$

Límite y continuidad

Definición 1.2

Si función f está definida en un conjunto X de números reales y $x_0 \in X$, entonces se dice que f es **continua** en x_0 si:

$$\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0) \tag{3}$$

La función f es **continua en el conjunto** X si es continua en cada número en X.

Definición 1.3

Sea $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ una sucesión infinita de números reales. Esta sucesión tiene el límite x (converge a x) si, para cualquier $\epsilon > 0$, existe un entero positivo $N(\epsilon)$ tal que $|x_n - x| < \epsilon$ siempre que $n > N(\epsilon)$. Esto es:

$$\lim_{n \to \infty} x_n = x, \quad o \;\; x_n \to x \;\; en \;\; n \to \infty \tag{4}$$

significa que $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ converge a x.

Límite y continuidad

Definición 1.4

Si f es una función definida en un conjunto de números reales X y $x_0 \in X$, entonces los siguientes enunciados:

- f es continua en x_0.
- Si $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ es una sucesión que converge a x_0, entonces $\lim_{n\to\infty} f(x_n) = f(x_0)$

son equivalentes

En este curso se asume que las funciones que utilizaremos (mediante lo métodos numéricos) son continuas ya que estas pueden presentar un comportamiento predecible.

Límite y continuidad

Ejemplo

- f es continua en x_0.
- Si $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ es una sucesión que converge a x_0, entonces $\lim_{n\to\infty} f(x_n) = f(x_0)$

son equivalentes

En este curso se asume que las funciones que utilizaremos (mediante lo métodos numéricos) son continuas ya que estas pueden presentar un comportamiento predecible.

Integración

Definición

La integral de Riemann de una función f dentro del intervalo $[a, b]$ se puede expresar como el siguiente límite siempre y cuando:

$$\int_b^a f(x)dx = \lim_{\max \Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{n} f(z_i)\Delta x_i, \tag{5}$$

donde $x_0, x_1, ..., x_n$ satistafacen $a = x_0 \leq x_1 \leq ... \leq x_n = b$, donde $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ para cada $i = 1, 2...., n$. El número z_i se selecciona de manera arbitraria entre $[x_{i-1}, x_i]$.

Integración

Una funión que es continua en el intervalo $[a, b]$ también es Riemann integrable en $[a, b]$. Así podemos elegir los puntos x_i equitativamente en el intervalo $[a, b]$ para cada $i = 1, 2..., n$ con el fin de seleccionar $z_i = x_i$. Esto sería:

$$\int_b^a f(x)dx = \lim_{n \to \infty} \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \tag{6}$$

Polinomios y series de Taylor

Teorema de Taylor

Suponga que $f \in C^n[a,b]$, $f^{(n+1)}$ existe en $[a,b]$ y $x_0 \in [a,b]$. Para cada $x \in [a,b]$ existe un número $\epsilon(x)$ entre x_0 y x que satisface:

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x), \tag{7}$$

donde:

$$\begin{aligned} P_n(x) =& f(x_0) + f^{'}(x_0)(x-x_0) + \frac{f^{''}(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + ... + \frac{f^n(x_0)}{n!}(x-x_0)^n \quad (8)\\ =& \sum_{k=0}^{n} \frac{f^k(x_0)}{k!}(x-x_0)^k \quad (9) \end{aligned}$$

y

$$R_n(x) = \frac{f^{n+1}(\epsilon(x))}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \tag{10}$$

Polinomios y series de Taylor

Teorema de Taylor

Suponga que $f \in C^n[a,b]$, $f^{(n+1)}$ existe en $[a,b]$ y $x_0 \in [a,b]$. Para cada $x \in [a,b]$ existe un número $\epsilon(x)$ entre x_0 y x que satisface:

- $P_n(x)$ es el $n-$ésimo polinomio de Taylor para f alrededor de x_0.
- $R_n(x)$ es el residuo (o error de truncamiento)
- $\epsilon(x)$ depende del valor de x donde se evalua $P_n(x)$ y es una función de la variable x.

El teorema de Taylor garantiza que la función existe y que su valor se encuentra entre x y x_0

Polinomios y series de Taylor

Ejemplo: Si $f(x) = cos(x)$ y x_0, determine:

- El segundo polinomio de Taylor para f alredefor de x_0
- El tercer polinomio de Taylor para f alredefor de x_0

Polinomios y series de Taylor

Solución:

Ya que $f \in C^{\infty}\mathscr{R}$, el teorema de Taylor se puede aplicar a cualquier $n \geq 0$, entonces:

$$f^{'}(x) = -\sin x, \quad f^{''}(x) = -\cos x, \quad f^{'''}(x) = \sin x \quad f^{''''}(x) = \cos x$$

por tanto:

$$f(0) = 1, \quad f^{'}(0) = 0, \quad f^{''}(0) = -1, \quad , f^{'''}(0) = 0$$

así finalmente para $n = 2$ y $x_0 = 0$ obtenemos:

$$\begin{aligned}\cos x =& f(0) + f^{'}(0)x + \frac{f^{''}(0)}{2!}x^2 + \frac{f^{'''}(\epsilon(x))}{3!}x^3 \\ =& 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 \sin \epsilon(x)\end{aligned}$$

Polinomios y series de Taylor

Solución:
continuar viendo ejercicio de pagina 11 del libro guia

Vectores

Un **vector** es una coleción ordenada de *m* números reales, por ejemplo:

$$\vec{x} = (x_1, x_2, ..., x_m)^t = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

Los vectores a menudo son denotados con el símbolo "$\rightarrow$" o escritos en "negrita" (dependiendo del contexto en que se esta representando).

Matrices

Por otra parte, una **matriz** es un arreglo (estructura) rectangular de números reales y puede representarse como:

$$A_{m\times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

donde m es el número de filas y n el número de columnas.

Transpuesta de una matriz

La transpuesta de una matriz, denotada generalmente como A^T, es una matriz $n \times m$ filas y columnas de la matriz A intercambiadas:

$$(A^T)_{n\times m} = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{m1} \\ a_{12} & \dots & a_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Transpuesta de una matriz

Si una matriz $A_{m\times n} = (a_{ij})_{i=1,..,m;j=1,...,n}$ entonces su transpuesta es $(A^T)_{m\times n} = (a_{ji})_{j=1,..,n;i=1,...,m}$, por ejemplo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{bmatrix}$$

Operaciones vectoriales

Las operaciones vectoriales, como por ejemplo la multiplicación escalar o la suma de vectores, se definen de modo que la suma de vectores sea equivalente a formar la resultante de los dos vectores (fuerza) mediante la regla del paralelogramo. Así, si los vectores x e y representan fuerzas, la suma $x + y$ es la fuerza resultante de x e y.

Operaciones vectoriales

Suma de vectores y la multiplicación escalar comparten muchas de las propiedades habituales de la suma y la multiplicación de números reales.

Definición

Si $\alpha \in \mathbb{R}$ y $\vec{x}, \vec{y}$ son vectores, entonces:

$$\begin{aligned} \alpha\vec{x} &= (\alpha x_1, \alpha x_2, ..., \alpha x_n)^T, \\ \vec{x}+\vec{y} &= (x_1+y_2, x_2+y_2, ..., x_n+y_n)^T \end{aligned}$$

Operaciones vectoriales

Una de las operaciones más importantes es el producto entre vectores o entre un vector y un escalar.

Definición

Dado dos vectores $\vec{x}, \vec{y}$, el producto vector-vector o producto vector-escalar es un número real

$$\mathbb{A} = \left\{ \begin{matrix} \vec{x} * \vec{y} \\ \text{o} \\ \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle \\ \text{o} \\ (\vec{x}, \vec{y}) \end{matrix} \right\} := x_1 y_1 + x_2 y_2 +, ..., +x_n y_n$$

Operaciones vectoriales

Otro tipo de operación importante es la norma Euclideana, por ejemplo, consideremos al vector $\vec{x}$:

$$||x||_2 = \sqrt{\vec{x} * \vec{x}} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + ... + x_n^2}$$

Otra operación importante

El producto entre dos vectores tambien puede ser escrito como:

$$\boldsymbol{xy} = \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{y}$$

Operaciones matriciales

Una multiplicación matriz-matriz es una extensión directa de una multiplización matriz-vector:

Definición

Si $A_{m\times n}$ es una matriz y $x_{n\times 1}$ es un vector de tamaño n, el producto $\boldsymbol{Ax}$ es un vector de tamaño m dado por:

$$(Ax)_i := \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j$$

Si y es un vector de tamaño $m \times 1$, entonces podemos multiplicar $\boldsymbol{y}^T$ con $\boldsymbol{A}$ para obtener la transpuesta de un vector de tamaño n dado por:

$$(\boldsymbol{y}^T A)_j = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}y_i$$

Operaciones matriciales

La multiplicación entre matrices es posible si estas tienen tamaños compatibles. Por ejemplo, podemos multiplicar AB si el número de columnas de A es igual al número de filas de B, esto es:

Definición

$$A_{m\times n}B_{n\times p} = C_{m\times p}$$

y para este mismo caso:

$$(AB)_{ij} := \sum_{l=1}^{n} A_{il}B_{lj}, \quad i = 1, ..., m; \quad j = 1, ..., p$$

Las entradas i, j en AB es el producto escalar entre: La i-esima vector fila en A * j-esima vector columna en B.

Generalmente la aritmética de una calculadora es distinta a la de una computadora. Nosotros podriamos esperar que 3 + 3 = 6 y 5*2 = 10 o $(\sqrt{3})^2 = 3$ siempre sean verdaderas. Si embargo en la aritmética computacional no son realmente exáctos. Para comprender esto debemos estudiar un poco sobre la aritmética de dígitos finitos.

Nos vemos la siguiente clase!...

Howard, J. P. (2017). Computational Methods for Numerical Analysis with R. CRC Press.