

INICIATIVA ACADÉMICA DE MÉTODOS NUMÉRICOS 2

1 Identificación

Curso:	MM3025 – Métodos Numéricos 2	Créditos:	4
Ciclo:	Segundo	Requisitos:	Métodos Numéricos 1 Álgebra Lineal 2 Análisis Real 1 Programación y Algoritmos
Año:	2021		
Profesor:	Alan Reyes-Figueroa	Horario:	Lunes y miércoles – 19:00-20:35
Email:	agreyes	Sala:	Por definir

Sitio Web del Curso:

- <https://pfafer.github.io/opt2021>

Office Hours:

- Viernes de 18:00 a 19:00 hrs, o por solicitud del estudiante. También pueden enviar sus dudas a través del correo electrónico institucional.

2 Descripción

Este curso es continuación de los temas estudiados en Métodos Numéricos 1. En esta materia, se estudian o revisan temas no introductorios de algoritmos para cálculo científico o aplicado y su implementación computacional.

Se estudian tres grandes temas:

1. Álgebra lineal computacional.
2. Métodos numéricos para resolver EDO.
3. Optimización numérica.

La primera parte del curso se enfoca en temas sobre cálculo de autovalores y autovectores, solución de sistemas lineales, y cálculo eficiente de determinantes y otros invariantes algebraicos. Se introduce al estudio de métodos eficientes para matrices ralas o *sparse*.

El bloque principal del curso introduce el tema de optimización numérica. Aquí se estudian los principales algoritmos de optimización continua, como los métodos de gradiente: búsqueda en línea, gradiente conjugado, métodos de quasi-Newton, así como los métodos de punto interior. El bloque culmina haciendo un estudio de la teoría de optimización restringida y su aplicación en problemas de programación lineal y programación cuadrática.

Finalmente, haremos una introducción a los métodos de solución de ecuaciones diferenciales ordinarias, haciendo énfasis en métodos de la familia Runge-Kutta, así como los métodos predictor-corrector. Se hace una breve introducción a los métodos adaptativos. El tema se complementa con métodos para resolver numéricamente problemas de valores en la frontera.

El curso cuenta con una parte práctica extensiva, en la que el estudiante implementará en código computacional cada uno de los algoritmos estudiados. Parte fundamental del curso es utilizar las herramientas aprendidas en varios proyectos aplicados donde se trabajará con datos reales y comunicar los resultados mediante reportes técnicos y seminarios.

3 Competencias a Desarrollar

Competencias genéricas

1. Piensa de forma crítica y analítica.
2. Resuelve problemas de forma estructurada y efectiva.
3. Desarrolla habilidades de investigación y habilidades de comunicación a través de seminarios y presentaciones ante sus colegas.

Competencias específicas

- 1.1 Entiende y domina los fundamentos matemáticos que formaliza los algoritmos principales en cómputo científico de precisión y la optimización numérica.
- 1.2 Conoce los principales métodos de álgebra lineal computacional y solución de EDO.
- 1.3 Comprende los conceptos teóricos subyacentes a los métodos de optimización no-restricta y restricta.
- 2.1 Aplica métodos y técnicas para la solución de sistemas de ecuaciones lineales, de manera eficiente, y aplica técnicas para matrices ralas, cuando sea conveniente.
- 2.2 Aplica de forma efectiva técnicas de optimización de funciones continuas, en el ámbito investigativo o para resolver problemas aplicados.
- 2.3 Utiliza un enfoque global para resolver problemas. Se apoya en herramientas auxiliares para su solución, como análisis, álgebra lineal, optimización, teoría de EDO, programación.
- 3.1 Desarrolla todas las etapas de una investigación o proyecto aplicado donde se utilizan elementos de la optimización numérica: anteproyecto, exploración de datos, diseño experimental, metodología, solución numérica y conclusiones.
- 3.2 Escribe un reporte técnico sobre la solución de un problema de optimización, usando datos reales. Concreta un análisis riguroso y conclusiones importantes.
- 3.3 Comunica de manera efectiva, en forma escrita, oral y visual, los resultados de su investigación.

4 Metodología Enseñanza Aprendizaje

El curso se desarrollará durante diecinueve semanas, con cuatro períodos semanales de cuarenta y cinco minutos para desenvolvimiento de la teoría, la resolución de ejemplos y problemas, comunicación didáctica y discusión. Se promoverá el trabajo colaborativo de los estudiantes por medio de listas de ejercicios. El curso cuenta con una sesión de laboratorio semanal para la implementación de algoritmos y la práctica de las técnicas del análisis numérico.

El resto del curso promoverá la revisión bibliográfica y el auto aprendizaje a través de la solución de los ejercicios del texto, y problemas adicionales, y el desarrollo de una monografía. Se espera que el alumno desarrolle su trabajo en grupo o individualmente, y que participe activamente y en forma colaborativa durante todo el curso.

5 Contenido

1. Álgebra lineal numérica:

Solución de sistemas lineales: método de Gauss, método de Gauss-Jordan. Estabilidad de matrices. Métodos iterativos: método de Jacobi, método de Gauss-Seidel, SOR. Construcción de métodos eficientes para matrices ralas de dimensiones grandes. Análisis de sensibilidad y convergencia.

Factorizaciones de matrices: Descomposición LU , LL^T , LDL^T . Descomposición QR . Descomposición SVD . La pseudoinversa. Ortonormalización de Gram-Schmidt y matrices de Hessenberg. Estabilidad y condicionamiento.

2. Cálculo de autovalores y autovectores: método de las potencias, método de las potencias inversas. El método QR . Transformaciones ortogonales. Descomposición de Householder, espacios de Krylov. Métodos iterativos: el método de Arnoldi, GMRES, el método de Lanczos.

3. Optimización numérica:

Optimización no restringida: Descenso gradiente. Métodos de búsqueda en línea, condiciones de búsqueda. Tasa de convergencia. Métodos de Newton modificado. Métodos de región de confianza. Gradiente conjugado. Métodos quasi-Newton: BFGS. Métodos libres de derivada. Mínimos cuadrados y Gauss-Newton. Optimización variacional.

4. Optimización con restricciones: Teoría de optimización con restricciones: condiciones de optimalidad. Programación Lineal: el método Simplex. Programación Cuadrática. Métodos de penalización y métodos de Lagrangiano.

5. Solución numérica de EDO:

Método de Euler. Métodos de Runge-Kutta. Tabla de Butcher. Métodos de cuadratura. Introducción a los métodos adaptativos. Métodos para problemas de valor frontera: *shooting*, diferencias finitas.

6 Bibliografía

Textos:

- L. Threfethen y L. Bau III (1997). *Numerical Linear Algebra*. SIAM Press.
- J. Nocedal y S. Wright (2006). *Numerical Optimizacion*. Springer.

Referencias adicionales:

- A. Quarteroni, R. Sacco y F. Saleri (2000). *Numerical Mathematics*. Springer
- J. Stoer y R. Bulirsch (2002) *Introduction to Numerical Analysis*. Springer.
- G. Golub y C. Van Loan (2012). *Matrix Computations*. John Hopkins Press.
- D. Luengerger y Y. Ye (2016). *Linear and Nonlinear Programming*. Springer.
- S. Boyd y L. Vandenberghe (2009). *Convex Optimization*. MIT Press.

Referencias para programación:

- Q. Kong, T. Siau, A. Bayen. (2020). *Python Programming and Numerical Methods - A Guide for Engineers and Scientists*. Academic Press.
<https://pythonnumericalmethods.berkeley.edu/notebooks/Index.html>
- Jaan Kiusalaas. (2013). *Numerical Methods in Engineering with Python 3*. 3a ed. Cambridge Press.

7 Actividades de evaluación

Actividad	Cantidad aproximada	Porcentaje
Listas de ejercicios	8 a 10	80%
Proyectos	1	20%

8 Cronograma

Semana	Tópico	Fecha	Actividades
1	Introducción y motivación al curso. Álgebra lineal numérica. Sistemas lineales.	05-09 julio	
2	Métodos iterativos: Jacobi, Seidel, SOR. Factoración de matrices: LU , LL^T , LDL^T , QR .	12-16 julio	
3	Descomposición SVD. Ortogonalización y matrices de Hessenberg. Condicionamiento y estabilidad.	19-23 julio	
4	Cálculo espectral. Método de las potencias. Cociente de Rayleigh. Potencias inversas. El método QR .	26-30 julio	
5	Método de Householder. Espacios de Krylov. Métodos iterativos: método de Arnoldi, GMRES, método de Lanczos.	02-06 agosto	
6	Optimización. Conceptos de cálculo vectorial y derivación vectorial. Generalidades. Descenso gradiente.	09-13 agosto	
7	Métodos de búsqueda en línea. Tasa de convergencia. Condiciones de búsqueda: Armijo, Wolfe, Goldstein.	16-20 agosto	
8	Método de Newton, y métodos de Newton modificados. ¿Cómo evaluar y aproximar Hessianas? Convergencia.	23-27 agosto	
9	Descenso coordinado. Métodos de región de confianza. Puntos de Cauchy. Método <i>Dog-leg</i> .	30 agosto-03 sept	
10	Gradiente conjugado. Precondicionadores. Convergencia. Métodos no lineales: Fletcher-Reeves, Polak-Ribière.	06-10 septiembre	
	<i>Semana de asueto</i>	13-17 septiembre	
11	Métodos Quasi-Newton. El método BFGS y variantes.	20-24 septiembre	
12	Métodos libres de derivada: Método de Nelder-Mead. Mínimos cuadrados no lineales. Método de Gauss-Newton.	27 sept - 01 octubre	
13	Optimización de funcionales. Formulación variacional y ecuaciones de Euler-Lagrange.	04-08 octubre	
14	Teoría de Optimización con Restricciones: Conos, conjuntos factibles y direcciones factibles.	11-15 octubre	
15	Condiciones de optimalidad KKT: primera y segunda condición. Dualidad.	18-22 octubre	
16	Programación lineal. El método Simplex.	25-29 octubre	
17		01-05 noviembre	
18	ED Numéricas. Método de Euler. Métodos predictor-.corrector. Métodos de Runge-Kutta, tabla de Butcher.	08-12 noviembre	
19	Métodos adaptativos. Métodos para problemas de valor frontera: <i>shooting</i> y diferencias finitas.	15-19 noviembre	
20	Presentación de proyectos.	22-26 noviembre	Proyecto