Apuntes Computación Científica I

WARNING: Estos apuntes son experimentales y tienen como objetivo crear un documento de trabajo colaborativo para el aprendizaje en el curso de Computación Científica, Departamento de Informática, UTFSM. Se agradece de antemano el envío de correciones y sugerencias para la mejora del documento.[1]

Versión generada el 23 de febrero de 2016

[1]Claudio Torres L., ctorres@inf.utfsm.cl

Los siguientes apuntes están basados en el texto guía **NUMERICAL ANALYSIS** Second Edition - Timothy Sauer y en los apuntes efectuados por el Profesor Claudio Torres. Estos aún pueden presentar errores, por lo que deben ser utilizados como ayuda para el estudio.

Las secciones fueron traspasadas a Latex por:

Sección	Autor	Rol	e-mail
Sección 1	Patricio Ramirez	201273033-3	luis.ramirez.12@sansano.usm.cl
Sección 2	Ian Zamorano	201273018-k	ian.zamorano.12@sansano.usm.cl
Sección 3	Felipe Osses	682015101-k	fosses@alumnos.inf.utfsm.cl
Sección 4	Francisco Salazar	2012733104-6	francisco.salazar.12@sansano.usm.cl
Sección 5	Laura Bermeo	201273002-3	laura.bermeo.12@sansano.usm.cl
Sección 6	Yerson Escobar	201273084-8	yerson.escobar.12@sansano.usm.cl
Sección 7	Yerson Escobar	201273084-8	yerson.escobar.12@sansano.usm.cl
Sección 8	Javier Ortiz	201073071-1	javier.ortizg@alumnos.usm.cl
Sección 9	Germán Marcelo Treimun	201173085-2	german.treimun@alumnos.usm.cl
Sección 10	Marco Rojas	201073005-0	marco.rojaso@alumnos.usm.cl
Sección 11	Diego Reyes	201173046-1	diego.reyes@alumnos.usm.cl
Sección 12	Alfredo Gallardo	201073026-3	agallard@alumnos.inf.utfsm.cl
Sección 13	Alfredo Gallardo	201073026-3	agallard@alumnos.inf.utfsm.cl
Sección 14	Renata Mella	201273010-4	renata.mella.12@sansano.usm.cl

Cuadro 1: Autores Apuntes CC1 - 2015.

Índice

1. Introducción a Álgebra Lineal **3**
1.1. Transformación lineal . . . 7
1.2. Combinación lineal . . . 7
1.3. In/Dependencia lineal . . . 7
1.4. Dependencia lineal . . . 7
1.5. Independencia lineal . . . 7
1.6. Más definiciones y propiedades . . . 11
1.6.1. Transpuesta . . . 11
1.6.2. Adjoint . . . 12
1.6.3. Producto interno . . . 12
1.6.4. Vectores ortogonales . . . 12
1.6.5. Componentes de un vector . . . 12
1.7. Matrices unitarias . . . 13

2. Normas Vectoriales **15**
2.1. Las normas más FAMOSAS: . . . 15
2.2. Normas Matriciales inducidas por normas vectoriales . . . 16
2.3. Cauchy-Schwarz e Inegualdad de Hölder . . . 16
2.4. Normas generales de matrices . . . 17

3. Fundamentos **23**
3.1. Forma Avanzada: (Horner's method) . . . 23
3.2. Notación de " punto flotante" de Números Reales ($\mathbb{R}$): . . . 24
3.3. Regla IEEE de redondeo al más cercano . . . 26
3.4. Representación de Máquina . . . 28
3.5. Casos Especiales de "P" (exponente): . . . 29
3.6. Pérdida de Significancia . . . 30

4. Raíces en 1D **35**
4.1. Método de la Bisección . . . 36
4.2. Iteración de Punto Fijo . . . 37
4.3. Geometría de la iteración de Punto Fijo (cobweb diagram) . . . 39
4.4. Newton's method: . . . 42
4.5. Convergencia cuadrática: . . . 43
4.6. Convergencia lineal del método de Newton: . . . 43
4.7. Método de la Secante: . . . 44
4.8. Criterios de parada . . . 44
4.9. The Wilkinson polynomial (Wilkinson 1994) . . . 46
4.10. Sensitividad . . . 46

5. Sistemas de Ecuaciones Lineales **48**
5.1. Eliminación Gaussiana Simple . . . 50
5.2. Backward Substitution . . . 53
5.3. La factorización LU de A . . . 55
5.4. Origen de los Errores . . . 58

5.5. Factorización $PA = LU$ 60

6. La factorización de Cholesky **63**

7. Métodos iterativos **68**
7.1. Método de Jacobi 68
7.2. Método de Gauss-Seidel 70
7.3. Succesive Over-Relaxation (ω) 71
7.4. Convergencia 72
7.5. Comentarios varios 73

8. El método del gradiente conjugado **75**
8.1. $\therefore$ El método del gradiente descendente 76
8.2. Gradiente conjugado 80
8.3. Método de Newton en $\mathbb{R}^n$ 83

9. Interpolación (1D) **86**
9.1. Matriz de Vandermonde 87
9.2. Interpolación de Lagrange 87
9.3. Diferencias divididas de Newton 90
9.4. Error de Interpolación 93
9.5. Interpolación de Chebyshev 94
9.6. Cambio de Variable 98

10. Splines **99**

11. QR - Factorization **105**
11.1. Gram-Schmidt orthogonalization and least squares 105

12. Least Squares **112**

13. A survey of Models **118**
13.1. Linear Model 118
13.2. Quadratic Model 119
13.3. Periodic Model 120
13.4. Exponential Model 121
13.5. Power law 122

14. Generalized Minimum Residual (GMRes) Method **123**

1. Introducción a Álgebra Lineal

Ver "Apéndice A" del texto guía y apuntes previos "www.inf.utfsm.cl/∼parce/cc1/" (¡ver videos sugeridos!)

- Un vector columna es: $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$ o <u>un vector fila</u>: $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{bmatrix}$
- Una Matriz $A \in \mathbb{R}^{mxn}$ es:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

- El producto matriz-vector es:

$$A \cdot \mathbf{u} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$$

¿Qué es m? ¿Qué es n?

¿Existe alguna compatibilidad requerida?

$$\Rightarrow A\,\mathbf{u} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_\square \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} \cdot u_1 + a_{12} \cdot u_2 + \cdots + a_{1n} \cdot u_\square \\ \vdots \\ a_{m1} \cdot u_1 + a_{m2} \cdot u_2 + \cdots + a_{mn} \cdot u_\square \end{bmatrix}$$

¿Qué es $A\,\mathbf{u}$? ¿Vector o matriz?

¿Qué tal si vemos A como una colección de vectores columna?

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a_1} & | & \mathbf{a_2} & | & \cdots & | & \mathbf{a_n} \end{bmatrix}$$

$$\text{donde } \mathbf{a_k} = \begin{bmatrix} a_{1k} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow A\,\mathbf{u} = u_1\,\mathbf{a_1} + u_2\,\mathbf{a_2} + \cdots + u_n\,\mathbf{a_n} = \sum_{i=1}^{n} u_i\,\mathbf{a_i} \Leftrightarrow \text{combinación lineal de las columnas de } A!$$

¿Es esto importante?

- Producto matriz-matriz, sea $A \in \mathbb{R}^{mxn}$ y $B \in \mathbb{R}^{nxl}$

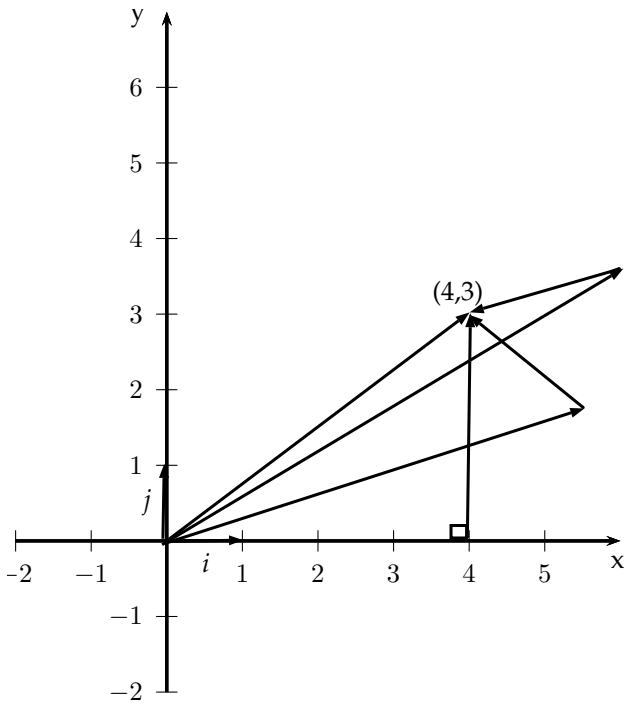
$$A\,B = \begin{bmatrix} \mathbf{a_1} & | & \mathbf{a_2} & | & \cdots & | & \mathbf{a_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b_1} & | & \mathbf{b_2} & | & \cdots & | & \mathbf{b_i} & | & \mathbf{b_l} \end{bmatrix} = C \in \mathbb{R}^{mxl}$$

$$\Rightarrow \mathbf{c_i} = \sum_{k=1}^{n} b_{k,i}\,\mathbf{a_k} = A\,\mathbf{b_i}\text{ , para } i = 1 : n \text{ y donde } \mathbf{b_{k,i}} \Rightarrow \text{el } k\text{-ésimo elemento del vector } \mathbf{b_i}$$

- Espacio vectorial:

  Ej: El espacio $\mathbb{R}^n$ consiste en todos los vectores columnas con "n" componentes

  Ej:



$$\Rightarrow < 4,3 >= 4 \cdot \hat{\imath} + 3 \cdot \hat{\jmath} = 4 \cdot < 1,0 > + 3 \cdot < 0,1 >$$

<u>Definición:</u> Un espacio vectorial es un conjunto no vacío V de objetos, llamados vectores, en el cual hay 2 operaciones definidas, llamadas "adición" y "multiplicación por escalar" (números reales), restringido a los siguientes axiomas. Los axiomas deben ser válidos para todos los vectores $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$, $\mathbf{w}$ de V y para todos los escalares c y d.

1. La suma de $\mathbf{u}$ y $\mathbf{v}$, denotada como $\mathbf{u} + \mathbf{v}$, es en V
2. $\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u}$ (conmutatividad)
3. $(\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w})$ (asociatividad de adición)
4. Hay un vector nulo $\mathbf{0}$ en V de tal forma $\mathbf{u} + \mathbf{0} = \mathbf{u}$
5. Para cada $\mathbf{u}$ en V, hay un vector $-\mathbf{u}$ en V de tal forma que $\mathbf{u} + (-\mathbf{u}) = \mathbf{0}$
6. El múltiplo escalar de $\mathbf{u}$ por c, denotado por $c \cdot \mathbf{u}$, está en V
7. $c\,(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = c\,\mathbf{u} + c\,\mathbf{v}$

8. $(c+d)\,\mathbf{u} = c\,\mathbf{u} + d\,\mathbf{u}$
9. $c\,(d\,\mathbf{u}) = (c\,d)\,\mathbf{u}$
10. $1\,\mathbf{u} = \mathbf{u}$

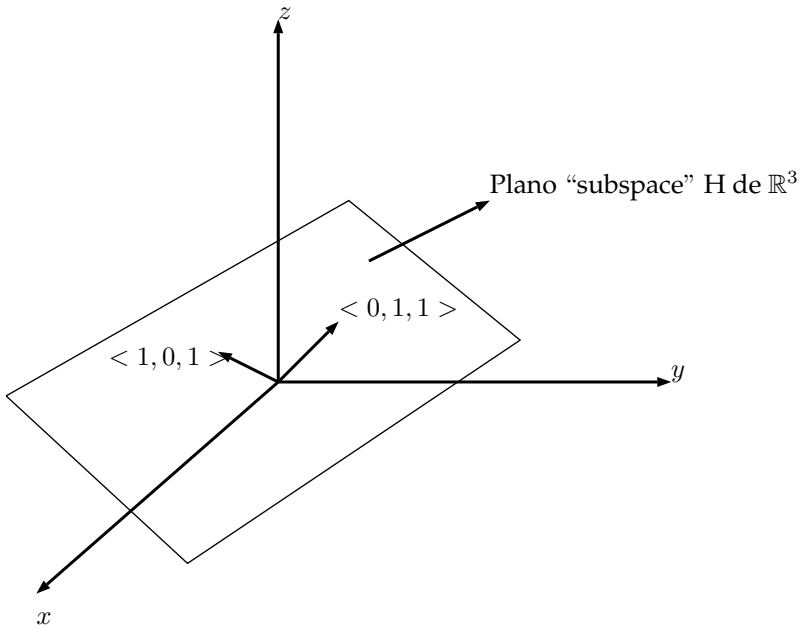
$$A\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{x} = A^{-1}\,\mathbf{b}$$
$$I\,\mathbf{x} = \mathbf{c} \rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{c}$$

Def: Un "subespacio vectorial H" de un espacio vectorial V es un sub-conjunto de V que tiene 3 propiedades:

a) El vector nulo de V está en H.

b) H es cerrado bajo la adición. Esto es, para cada $\mathbf{u}$ y $\mathbf{v}$ en H , la suma $\mathbf{u}+\mathbf{v}$ está en H.

c) H es cerrado bajo la multiplicación escalar. Esto es, para cada $\mathbf{u}$ en H y cada escalar c, el vector $c\,\mathbf{u}$ está en H.



$H = a\ < 0,1,1 > + b\ < 1,0,1 > =$ span$(< 0,1,1 >, < 1,0,1 >)$

¿Pertenece $(1,1,0)$ a H?

1.1. Transformación lineal

$$\text{Sea } A \in \mathbb{R}^{nxn}\,,\, x, y \in \mathbb{R}^n \text{ y } \alpha \in \mathbb{R} \Rightarrow A\,(x+y) = A\,x + A\,y \quad \text{y} \quad A\,(\alpha\,x) = \alpha\,A\,x$$

1.2. Combinación lineal

$$\text{Sea } \mathbf{x}\,,\,\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n\,,\, \alpha \in \mathbb{R}\,,\, \alpha \neq 0 \text{ y } \mathbf{x} \neq \beta\,\mathbf{y}$$

$$\text{Ex: } \mathbf{v_1} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$$
$$\mathbf{v_2} = \alpha\,\mathbf{x}$$
$$\mathbf{v_3} = \frac{1}{\alpha}\,\mathbf{y}$$

1.3. In/Dependencia lineal

¿Son $\mathbf{v_2}$ y $\mathbf{x}$ linealmente independientes?

¿Son $\mathbf{v_1}$, $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ linealmente independientes?

¿Son $\mathbf{v_2}$ y $\mathbf{v_3}$ linealmente independientes?

1.4. Dependencia lineal

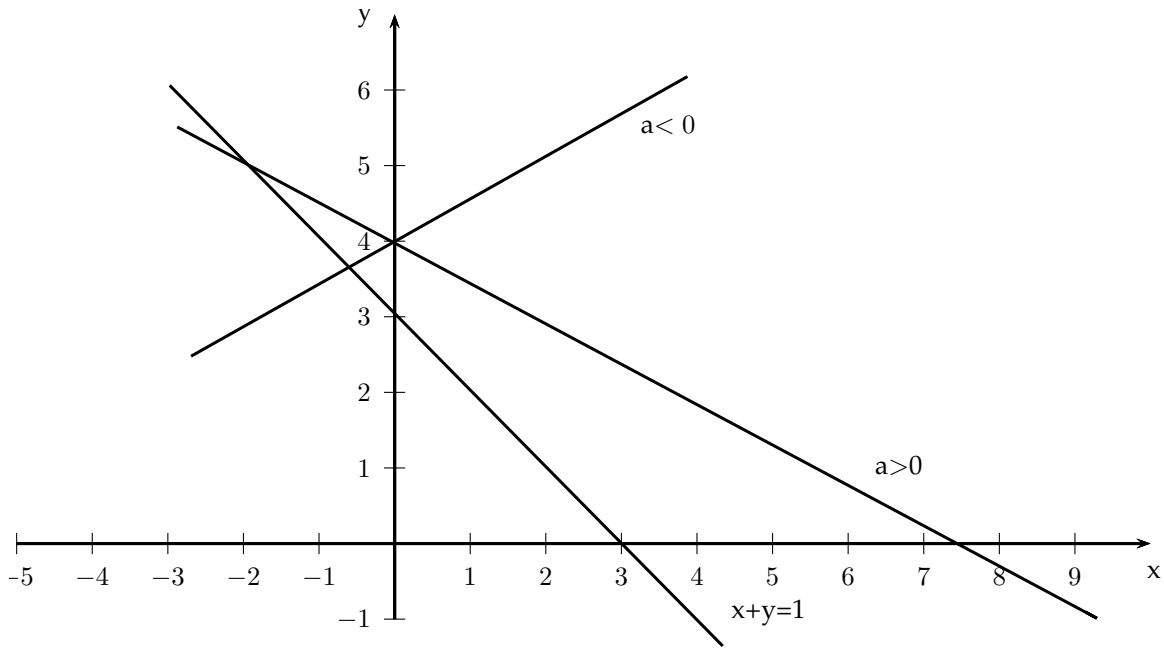
$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m} \lambda_i\,\mathbf{x_i} = \mathbf{0} \Rightarrow \exists \lambda_i \neq 0$$

1.5. Independencia lineal

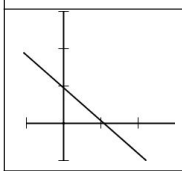
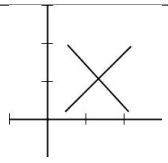
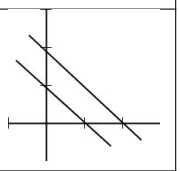
$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m} \lambda_i\,\mathbf{x_i} = \mathbf{0} \Rightarrow \lambda_i = 0\,,\, i = 1:m$$

Ejemplo: Resolver $x + y = 1$**,** $a\,x + y = b$

$$a\,x + y = b \Rightarrow y = b - a\,x$$
$$x + y = 1 \Rightarrow y = 1 - x$$

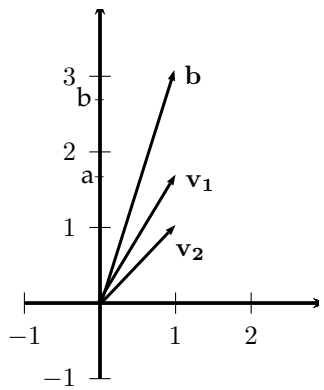


Casos:

1	2	3
$a = 1$	$a \neq 1$	$a = 1$
$b = 1$		$b \neq 1$
$y = 1 - x$	$x = \dfrac{b-1}{a-1}$	
	$y = \dfrac{a-b}{a-1}$	
∞ soluciones	1 solucion	No solution
		

$$x + y = 1\,,\, ax + y = b \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ a & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow x \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ a \end{pmatrix}}_{\mathbf{v_1}} + y \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{v_2}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}}_{\mathbf{b}}$$



¿Podemos encontrar las coordenadas x e y para construir $\mathbf{b}$?

i.e. $\mathbf{b} = x\,\mathbf{v_1} + y\,\mathbf{v_2}$?

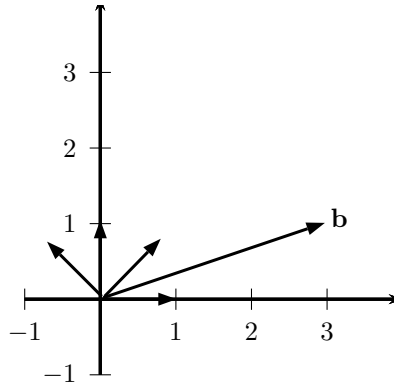
$\Rightarrow$ si "a" es $\neq 1 \Rightarrow \mathbf{v_1}$ y $\mathbf{v_2}$ son linealmente independientes

$\Rightarrow \mathbf{v_1}$ y $\mathbf{v_2}$ forman una base para $\mathbb{R}^2$

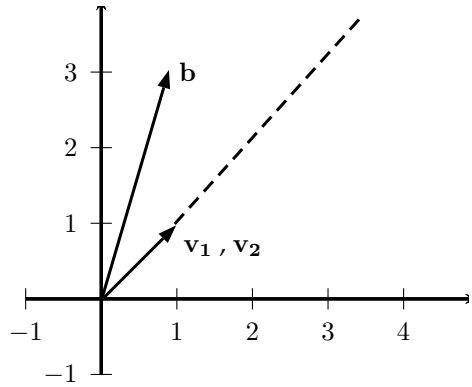
<u>Otro ejemplo</u>

¿Cuál sería una mejor base para encontrar las coordenadas x e y?

i.e. $\mathbf{b} = x\,\mathbf{v_3} + y\,\mathbf{v_4}$



Volviendo al caso anterior y considerando $a = 1$



$$a = 1 \Rightarrow \mathbf{v_1} = \mathbf{v_2}$$

Considerando el gráfico superior:
¿Cuándo no hay solución?

¿Cuándo hay solución? ¿Interpretación gráfica?

(*Ver Numerical Linear Algebra, by L. Trefethenl D. Bau, III edición*)

- Th. Range(A) es el espacio vectorial "spanned" por las columnas de A.
- Nullspace de A , $null(A)$, es el conjunto de vectores $\mathbf{x}$ que satisfacen $A\mathbf{x} = \mathbf{0}$,

  i.e. $A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{a_1} & | & \mathbf{a_2} & | & \cdots & | & \mathbf{a_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x_1} \\ \mathbf{x_2} \\ \vdots \\ \mathbf{x_n} \end{bmatrix} = x_1\,\mathbf{a_1} + \cdots + x_n\,\mathbf{a_n}$

  $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow < 0, 0, 1 > \rightarrow A \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, $A \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

- Rank:
  - Column Rank: es la dimensión del column space
  - Row Rank: es la dimensión del row space

Th: La matriz $A \in \mathbb{R}^{mxn}$ con $m \geq n$ tiene full rank si y solo si no mapea 2 vectores distintos al mismo vector.
Inversa: Una matriz es invertible si es cuadrada y de full rank.

$$\Rightarrow \quad A\,Z = Z\,A = \underbrace{I}_{\text{Identidad}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$Z = A^{-1}$, la inversa de A

Th: Para $A \in \mathbb{R}^{mxm}$, las siguientes condiciones son equivalentes:

1. A tiene inversa A^{-1}
2. $Rank(A) = m$
3. $Range(A) = \mathbb{R}^m$
4. $null(A) = (\mathbf{0}) \quad A\mathbf{x} = \mathbf{0}$
5. 0 no es un valor propio de A
6. 0 no es un valor singular (singular value) de A
7. $det(A) \neq 0$

$$A \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \leftrightarrow A\,x = b \leftrightarrow A \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = A^{-1} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$A^{-1} \Rightarrow A\,Z = I$ $\mathbf{b}$: coeficientes (coordenadas) de la expansión de $\mathbf{b}$ en las bases canónicas
$e_i =< 0, 0, \cdots, 0, 1, 0, \cdots, 0 >$
$A^{-1}\,b$: coordenadas de la expansión de $\mathbf{b}$ en la base $< \mathbf{a_1}, \mathbf{a_2}, \cdots, \mathbf{a_n} >$

Si se multiplica $\mathbf{b}$ por A^{-1} se obtiene $a^{-1}\,b$

Si se multiplica $A^{-1}\,\mathbf{b}$ por A se obtiene $\mathbf{b}$

1.6. Más definiciones y propiedades

1.6.1. Transpuesta

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{bmatrix} \Rightarrow A^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \end{bmatrix}$$

1.6.2. Adjoint

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{bmatrix} \Rightarrow A^* = \begin{bmatrix} \overline{a_{11}} & \overline{a_{21}} & \overline{a_{31}} \\ \overline{a_{12}} & \overline{a_{22}} & \overline{a_{32}} \end{bmatrix}$$

donde $z = a + ib \Rightarrow \overline{z} = a - ib$

Si $A \in \mathbb{R}^{nxn} \Rightarrow A^* = A^T$
Si $A = A^* \Rightarrow A$ es hermitiana

Ej: $A = \begin{bmatrix} a & a - i\,c \\ a + i\,c & b \end{bmatrix} \Rightarrow A^* = \begin{bmatrix} a & a - i\,c \\ a + i\,c & b \end{bmatrix}$

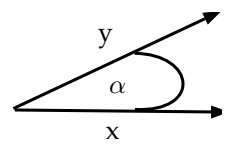
OBS: Hermitiana $\neq$ Simétrica

1.6.3. Producto interno

Sea $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^m \Rightarrow x^* y = \sum_{i=1}^{m} \overline{x_i}\,\overline{y_i}$ $\sum_{i=1}^m \bar{x}_i\,y_i$

$\Rightarrow$ Euclidean length $\Rightarrow \|x\|_2 = \sqrt{x^* x} = (\sum_{i=1}^{m} |x_i|^2)^{1/2}$

También recuerde $x^* y = \|x\|\,\|y\|\,\cos(\alpha)$



$(AB)^* = B^* A^*$ y $(A\,B)^{-1} = B^{-1}\,A^{-1}$

1.6.4. Vectores ortogonales

- Dos vectores $\mathbf{x}, \mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ son ortogonales si $x^* y = 0$

  Ej: $\mathbf{x} =< 1, 0 >$, $\mathbf{y} =< 0, 1 > \Rightarrow \mathbf{xy} = 1\,0 + 0\,1 = 0$

- Un conjunto de vectores son ortonormales si son ortogonales y $\|x\| = 1$, para cada uno.

1.6.5. Componentes de un vector

, donde $\mathbf{q}_i$ $\forall \in \mathbb{R}^n$

Sea $Q =< \mathbf{q_1}, \mathbf{q_2}, \cdots, \mathbf{q_m} >$ un conjunto ortonormal $\in \mathbb{R}$ y sea $\mathbf{v}$ un vector arbitrario.

$$\Rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{r} + \sum_{i=1}^{m} a_i\,\mathbf{q_i}$$

en donde r es el residuo ortogonal a Q ,

$$\Rightarrow \mathbf{q_k}^* \, v = \mathbf{q_k}^* \, r + \sum_{i=1}^{m} a_i \, \mathbf{q_k}^* \, \mathbf{q_i}$$

$$\Rightarrow \mathbf{q_k}^* \, v = \qquad\qquad +$$

$$\Rightarrow a_k = \mathbf{q_k}^* \, v \Rightarrow v = r + \sum_{i=1}^{m} (\mathbf{q_i}^* \, v) \, \mathbf{q_i}$$

¿Qué pasa si $m = n$?

$$\boxed{\Rightarrow v = \qquad\qquad\qquad\qquad}$$

$$\Rightarrow v = \sum_{i=1}^{n} (q_i{}^* \, v) \, \mathbf{q_i} = \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{q_i} \, \mathbf{q_i}^*) \, v$$

1.7. Matrices unitarias

$\in \mathbb{C}^{m\times m}$

Sea Q una matriz cuadrada $\cancel{in \mathbb{C}^{mxm}}$, $\Rightarrow Q^* = Q^{-1}$, $Q^* \, Q = I$

$$\begin{bmatrix} q_1^* \\ q_2^* \\ \vdots \\ q_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

¿Es útil tener matrices unitarias?

Ej: $A\,x = b \to Q\,x = b \to x = Q^{*}b \to$ ¡Bastante más simple que calcular $A^{-1}b$ en general!
Nota: En general no es recomendado calcular A^{-1} explícitamente. Es más fácil calcular $A^{-1}b$
Ejemplo: "El teorema de Pitágoras" asegura que para un conjunto de "n" vectores ortogonales $\mathbf{x_i}$,
$\|\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x_i}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{x_i}\|_2^2$

1. Demuestre esto para el caso de $n = 2$ por computación explícita de $\|\mathbf{x_1} + \mathbf{x_2}\|_2^2$
2. Demuéstrelo para el caso general

2. Normas Vectoriales

Normas vectoriales:

Una norma es una función $\|\bullet\| : \quad \mathbb{C}^m \to \mathbb{R}$ que asigna un valor real (largo, tamaño) a cada vector.

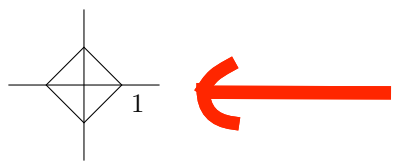
Formalmente, una norma debe satisfacer las siguientes 3 condiciones, para todo vector $\boldsymbol{x}$ y $\boldsymbol{y}$, y escalar $\alpha \in \mathbb{C}$

$$\begin{array}{lll} (1) & \|\boldsymbol{x}\| \leq 0, \ \text{ y } \|\boldsymbol{x}\| = 0 & \Rightarrow \quad \boldsymbol{x} = \vec{0} \\ (2) & \|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\| \leq \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\| & \text{Desigualdad triagular} \\ (2) & \|\alpha \boldsymbol{x}\| = |\alpha| \cdot \|\boldsymbol{x}\| & \end{array}$$

2.1. Las normas más FAMOSAS:

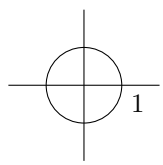
¡Estos son isocontornos!

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$



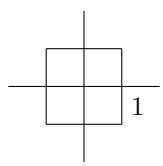
$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = 1$$
$$|x_1| + |x_2| = 1$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x^* x}$$



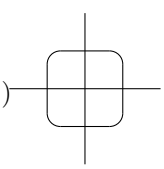
$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = 1$$
$$x_1^2 + x_2^2 = 1^2$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \operatorname*{máx}_{i=1}^{n} |x_i|$$



$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = 1$$
$$\text{máx} \left\{ |x_1|, |x_2| \right\} = 1$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \ (1 \leq p \leq \infty)$$



$$\|\boldsymbol{x}\|_p = 1$$

W-p-norms (Weighted p-norms)

$$\|\boldsymbol{x}\|_W = \|W\boldsymbol{x}\| = \left\| \begin{bmatrix} w_1 & & & 0 \\ & w_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & w_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \right\|_{\square}$$

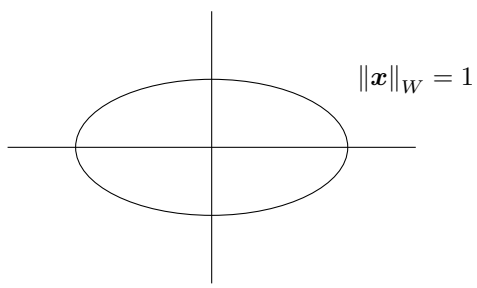
Alguna norma

donde $w_i \neq 0$,

Ej:

$$\|\boldsymbol{x}\|_W = \left(\sum_{i=1}^{n} |w_i \cdot x_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

¡Los pesos w_i hacen que se vea como una elipse!



2.2. Normas Matriciales inducidas por normas vectoriales

Dada las normas vectoriales $\|\bullet\|_{(n)}$ y $\|\bullet\|_{(m)}$ en el dominio y rango de $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $\Rightarrow$ la norma matricial inducida $\|A\|_{(m,n)}$ es el número "C" más pequeño posible que hace válida la siguiente igualdad para todo $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$:

$$\|A \cdot X\|_{(m)} \leq \mathrm{C} \cdot \|X\|_{(n)}$$

2.3. Cauchy-Schwarz e Inegualdad de Hölder

Sea p y q que se satisfacen $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, donde $1 \leq p, q \leq \infty$, entonces la inegualdad de Hölder para cualesquier vectores $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$

$$|\boldsymbol{x}^* \cdot \boldsymbol{y}| \leq \|\boldsymbol{x}\|_p \cdot \|\boldsymbol{y}\|_q$$

La desigualdad de Cauchy-Schwarz es el caso especial de $p = q = 2$

$$|\boldsymbol{x}^* \boldsymbol{y}| \leq \|\boldsymbol{x}\|_2 \cdot \|\boldsymbol{y}\|_2$$

2.4. Normas generales de matrices

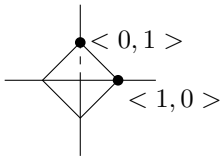
Nótese que las normas matriciales no necesariamente deben ser inducidas de normas vectoriales, pero deben seguir las siguientes 3 condiciones:

$$
\begin{aligned}
&(1)\ \|A\| \leq 0,\ \text{y}\ \|A\| = 0 \ \Rightarrow\ A = 0 \\
&(2)\ \|A + B\| \leq \|A\| + \|B\| \\
&(3)\ \|\alpha \cdot A\| = |\alpha| \cdot \|A\|
\end{aligned}
$$

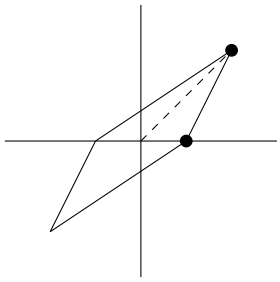
Ejemplo:

Sea $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$

1-norm:



$\Rightarrow$



¿De donde viene el 4?

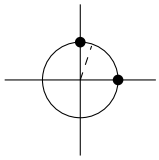
$\|A\|_1 = 4$

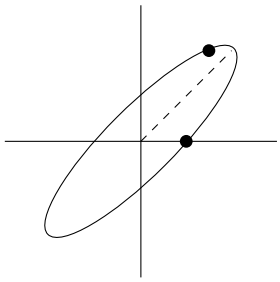
$$\|A\|_1 , \|A \cdot \boldsymbol{x}\|_1 \leq C \cdot \|\boldsymbol{x}\|_1$$

$$\left\| \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \right\|_1 \leq C \cdot \left\| \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \right\|_1$$

¿De donde viene el 2.9208...?

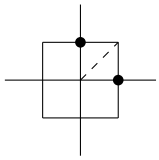
2-norm:

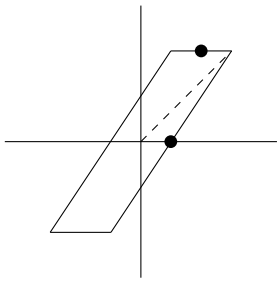




$\|A\|_2 \approx 2{,}9208$

∞-norm:





¿De donde viene el 3...?

$\|A\|_\infty = 3$

1-Norm de una matriz $\Rightarrow$ "Máxima suma de columnas"
∞-Norm de una matriz $\Rightarrow$ "Máxima suma de filas"

¡Se debe sumar el valor absoluto de cada elemento!

La más conocida es la norma de Frobenius:

$$\begin{aligned}\|A\|_F &= \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(\sum_{j=1}^{n}\|a_j\|_2^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \sqrt{tr(A^*A)} = \sqrt{tr(A\cdot A^*)}\end{aligned}$$

Recuerda que dijimos que si el determinante de una matriz es 0, esto implica que la matriz es singular. ¿Que podemos concluir de una matriz si la traza de esta es 0?

donde $tr(B)$ denota la traza, i.e. la suma de los elementos de la diagonal de la matriz B.

Th: Para cualquier $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ y $Q\,\mathbb{C}^{m\times n}$ unitaria, tenemos

$$\|QA\|_2 = \|A\|_2 \quad , \quad \|QA\|_F = \|A\|_F$$

Dem:

$$\begin{aligned}\|Q\cdot A\|_F = \sqrt{tr((QA)^*QA)} &= \sqrt{tr(A^*Q^*QA)} \\ Q^* = Q^{-1} \\ &= \sqrt{tr(A^*A)} = \|A\|_F\end{aligned}$$

Ejemplo:

"El teorema de Pitágoras" asegura que para un conjunto de n vectores ortogonales $\boldsymbol{x}_i$,

$$\left\|\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i\right\|^2 = \sum_{i=1}^{n}\|\boldsymbol{x}_i\|^2$$

(a) Demuestre esto para el caso $n = 2$ por computación explicita de $\|\boldsymbol{x}_1 * \boldsymbol{x}_2\|$.
(b) Demuéstrelo para el caso general

$$
\begin{aligned}
\|w\|^2 &= w^* w \\
\left\| \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \right\|^2 &= \left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \right)^* \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \right) \\
&= \left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i^* \right) \left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i^* \left(\sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{x}_j \right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i^* \cdot \boldsymbol{x}_i \\
&= \sum_{i=1}^{n} \|\boldsymbol{x}_i\|^2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&(A+B)^{-1} \\
&\neq A^{-1} + B^{-1} \\
&\frac{1}{x+y} \neq \frac{1}{x} + \frac{1}{y}
\end{aligned}
$$

	$\boldsymbol{x_1}$	$\boldsymbol{x_2}$	$\cdots$	$\boldsymbol{x_n}$
$\boldsymbol{x_1}^*$	$\square$	0	$\cdots$	0
$\boldsymbol{x_2}^*$	0	$\square$		
$\vdots$			$\ddots$	
$\boldsymbol{x_n}^*$				$\square$

Ej:
Sea $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ Hermitiana. Un eigenvector m (vector propio) de A es un vector no-nulo $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}$ de tal forma que $\boxed{A \cdot \boldsymbol{x} = \lambda \cdot \boldsymbol{x}}$ para algún $\lambda \in \mathbb{C}$, donde λ es el valor propio correspondiente (eigenvalue)
(a) Demuestre que todos los eigenvalues de A son reales.
(b) Demuestre que si $\boldsymbol{x}$ y $\boldsymbol{y}$ son eigenvectors correspondientes a eigenvalues diferentes $\Rightarrow$ $\boldsymbol{x}$ y $\boldsymbol{y}$ son ortogonales.

$$
\begin{aligned}
&(1)\boldsymbol{x}^* A \quad \boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}^* \boldsymbol{x} \\
&\quad \boldsymbol{x}^* A^* \boldsymbol{x} = \overline{\lambda} \boldsymbol{x}^* \boldsymbol{x} \\
&(2)\boldsymbol{x}^* A \quad \boldsymbol{x} = \overline{\lambda} \boldsymbol{x}^* \boldsymbol{x} \\
&(1) - (2) = \vec{0} = (\lambda - \overline{\lambda}) \cdot \|\boldsymbol{x}\|^2 \\
&\qquad\qquad\qquad \lambda = a + bi \\
&\qquad\qquad\qquad \overline{\lambda} = a - bi
\end{aligned}
$$

$$(A \cdot B)^* = B^* \cdot A^*$$
$$((\boldsymbol{x}^* A)\boldsymbol{x})^*$$
$$(\boldsymbol{x}^* \cdot (\boldsymbol{x}^* \cdot A)^*)$$
$$\boldsymbol{x}^* \cdot A^* \cdot \boldsymbol{x}$$

$$\lambda - \overline{\lambda} = \ +2 \cdot b \cdot i$$

$$0 = 2 \cdot b \cdot i \cdot \|\boldsymbol{x}\|^2$$

$$\Rightarrow b = 0$$

3. Fundamentos

Ideas Útiles:

el polinomio

¿Cuál es la mejor forma de evaluar P(x)?

$$P(x) = c_5\,x^4 + c_4\,x^3 + c_3\,x^2 + c_2\,x + c_1$$

Forma directa

$$\begin{array}{rcl} c_5\,x^4 & = & 4\,x \\ c_4\,x^3 & = & 3\,x \\ c_3\,x^2 & = & 2\,x \\ c_2 x & = & 1\,x \\ c_1 & = & 0\,x \\ & & +\,4\,sumas \\ \hline & & 14\,operaciones \end{array}$$

3.1. Forma Avanzada: (Horner's method)

$$P(x) = c_1 + x\,(c_2 + x\,(c_3 + x\,(c_4 + c_5\,x))$$

$$\underline{\underline{\#\,8}}$$

Números Binarios:

Debiera haber una sección llamada número binarios aquí

$$B = ...b_3 b_2 b_1 . b_{-1} b_{-2} b_{-3} ...$$

Ejemplo

El punto separa la parte entera de la parte fraccionaria, ¡igual que siempre!

$$(1001\,.\,01)_2$$

$$\begin{array}{rcccccccccccc} \Rightarrow 1\cdot 2^3 & + & 0\cdot 2^2 & + & 0\cdot 2^1 & + & 1\cdot 2^0 & + & 0\cdot 2^{-1} & + & 1\cdot 2^{-2} \\ 8 & + & 0 & + & 0 & + & 1 & + & 0 & + & \frac{1}{4} \end{array}$$

$$(9\,.\,25)_{10}$$

Pregunta

¿Qué es $(0.\overline{10})_2$ en base 10?

$$(0.101010...)_2$$

$$(0\ \underbrace{.101010\ldots}_{2^{-1}+2^{-3}+2^{-5}\ldots}\ )_2 \quad = \sum_{i=0}^{\infty} 2^{-(2i+1)} \quad = \frac{1}{2}\cdot\sum_{i=0}^{\infty}(2^{-2})^i \quad = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{1-\frac{1}{4}} \quad = \frac{1}{2}\cdot\frac{4}{4} \quad = \frac{2}{3}$$

Recuerde la serie geométrica:

$$1 + r + r^2 + r^3 + \ldots \quad = \sum_{i=0}^{\infty} r^i \quad = \frac{1}{1-r}$$

$$|r| \; < 1$$

3.2. Notación de " punto flotante" de Números Reales ($\mathbb{R}$):

Es: "notación científica en base 2"

(IEEE 754 Floating point standard)

$$\boxed{\underbrace{\pm}_{\text{signo}} \; \underbrace{1}_{\text{siempre } 1} \, . \, \underbrace{bbbbbb\ldots}_{\text{mantisa}} \cdot 2^{p \longmapsto \text{exponente}}} \rightarrow \text{palabra (word)}$$

Ejemplo

$$\begin{array}{rcccl}
9 & = & (1001.)_2 & = & +1.001 \cdot 2^3 \quad \Rightarrow 1 \cdot 2^3 + 1 \cdot 2^0 = (1 + 1 \cdot 2^{-3}) \cdot 2^3 = +1.001 \cdot 2^3 \\
2 & = & 10 & = & +1.00 \cdot 2^1 \\
0.5 & = & \frac{1}{2} & = & +1.00 \cdot 2^{-1} \\
0.75 & = & \frac{1}{2} + \frac{1}{4} = (0.11)_2 & = & +1.10 \cdot 2^{-1}
\end{array}$$

Formatos de ejemplo: (bits usados)

Precisión	Signo	Exponente	Mantisa	Total
Single	1	8	23	32
Double	1	11	52	64
Long Double	1	15	64	80

Formato Normalizado: $\pm 1 \, . \, bbb\ldots \cdot 2^p$

$\downarrow$

(Justificado a la Izquierda - "left justified")

Ejemplo

- ¿Qué es "1" en "Double Precision" ?

Signo : 1
Exponente: 11
Mantisa: 52

$$1 = +1 \, . \underbrace{0000000000000000000000000000000000000000000000000000}_{\text{mantisa } (52 \longmapsto 0's)} \cdot 2^0$$

- ¿Cúal es el siguiente número representable? (Double Precision)

El "3" es un typo

$$1+\text{“}2^{-52}\text{”} = +1\,\boldsymbol{.}\,00\ldots\ldots\ldots\cancel{3}\boxed{}\boxed{}\boxed{}\boxed{1}\cdot 2^0$$

Definición. *El número "Machine Epsilon", ϵ_{mach}, es la distancia entre 1 y el menor número representable mayor a 1. Para IEEE double precision FPS,*

$$\epsilon_{mach} = 2^{-52} \approx 2\cdot 10^{-16}$$

¿Cuáles son los problemas?

"Truncamiento v/s Redondeo"

Ejemplo

$$\begin{aligned}(9\,\boldsymbol{.}\,4)_{10} &= (1001\,\boldsymbol{.}\,\overline{0110})_2\\ &= \boxed{+\,1.001\ \underline{0110}\ \underline{0110}\ldots\ \underline{0110}\ \underline{0110}\ 0}\ \underbrace{110}_{\substack{\downarrow\\ \text{Esto no se puede almacenar}}}\ldots\cdot\boxed{2^3}\end{aligned}$$

¿Qué hacemos?

?

Truncamiento $\Rightarrow$

Redondeo $\Rightarrow$

3.3. Regla IEEE de redondeo al más cercano

Para "double precision", si el 53vo bit a la derecha del punto binario es 0, redondear hacia abajo (truncar después del bit 52). Si el 53vo bit es 1, entonces redondear hacia arriba (agregar 1 al bit 52), a menos que todos los bits "conocidos" a la derecha de 1 son 0, en este caso 1 es agregado al bit 52 iff el bit 52 es 1.

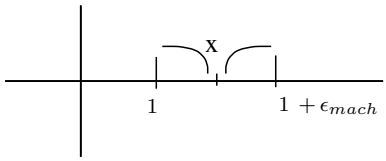
$$+1\,.\,___

Definición. *En el modelo IEEE de aritmética de máquina, el error relativo de redondeo de $\underline{fl}(x)$ no es más que la mitad de ϵ_{mach}:*

$$\frac{|\ \underline{fl}(x) - x\ |}{|\ x\ |} \leqslant \frac{1}{2} \cdot \epsilon_{mach}$$

¡MUY IMPORTANTE!

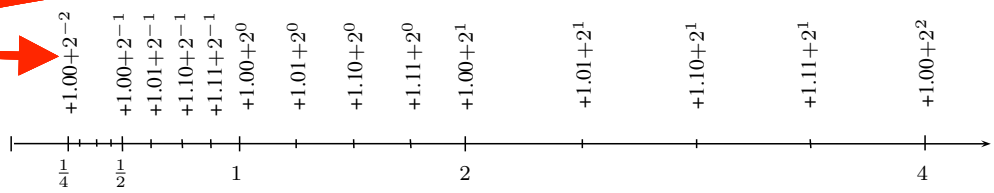
O mejor:



$$\boxed{|\ \underline{fl}(x) - x\ | \leqslant \frac{1}{2} \cdot \epsilon_{mach} \cdot |\ x\ |}$$

i.e. El error de representar un número en FPS es proporcional al tamaño del número original.

Typo: Todos estos número escritos verticalmente deben ser de la forma +1.XX*2^{X}, es decir, el signo + que aparece al centro es un error, ¡¡debe ser una multiplicación!!



$\epsilon_{mach} = 2^{-2}$

El número de $\underline{fl(x)}$ entre potencias de 2 es constante

$\underline{+1.0\cdots\cdots\cdots0 \cdot 2^{52}}$

¿Cuál es el primer entero no representable para es caso?
Considere que hay disponible solo 2 bits en la mantisa
y 3 bits para el exponente.
Extra: Sería un buen ejercicio que escribiera todos los
número representables para este caso.

3.4. Representación de Máquina

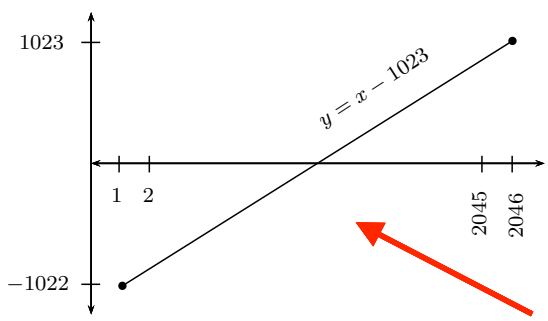
Double precision : 8-byte word o 64 bits

$\Rightarrow$

s	$e_1 e_2 \ldots e_{10} e_{11}$	$b_1 b_2 \ldots\ldots\ldots\ldots b_{51} b_{52}$
1- bit	11 bits	52 bits

$$s : \begin{cases} 0, \text{ si el número es positivo} \\ 1, \text{ si es negativo} \end{cases}$$

$$e_1 \ldots e_{11} : \qquad 0 - 2047 \Leftrightarrow \begin{array}{ccc} -1022 & a & 1023 \\ \downarrow & & \downarrow \\ 1 & - & 2046 \end{array}$$



$o \quad y + 1023 = x$

Lo que se almacena

Como se interpreta

¡El shift! y como se interpreta matemáticamente.

$\underline{0}$ & $\underline{2047}$ son "diferentes"

$$\begin{aligned} 1023 &= 2^{10} - 1 \quad : \text{"Exponent bias"} \\ &= \underline{2^{11} - 1} \quad \hookrightarrow \text{Convierte exponentes negativos en exponentes positivos para ser usado en su almacenamiento.} \end{aligned}$$

Debe ser: $2^{11-1}-1$. ¡Así queda igual que la línea anterior!

b_i: "Los bits de la representación de punto Flotante"

$$\pm 1 \,.\, b_1\, b_2 \ldots b_{52} \cdot 2^p = \pm(2^0 + b_1 \cdot 2^{-1} + b_2 \cdot 2^{-2} + \ldots + b_{52} \cdot 2^{-52}) \cdot 2^p$$

$$\boxed{\underbrace{\pm}_{\text{signo}} \underbrace{(1 + \sum_{i=1}^{52} b_i \cdot 2^{-i})}_{\text{mantisa}} \cdot 2^{p \longrightarrow \text{exponente}}}$$

$$\underline{Donde:}\ p = e_1 \cdot 2^{10} + e_2 \cdot 2^9 e_3 \cdot 2^8 + \ldots + e_{11} \cdot 2^0 - 1023$$

$$= (\sum_{i=1}^{11} e_{12-i} \cdot 2^{i-1}) - 1023$$

3.5. Casos Especiales de "P" (exponente):

$$\begin{array}{ccc} 0 & y & 2047 \\ \downarrow & & \downarrow \\ \underbrace{0\ldots0}_{e_1\ldots e_{11}} & & \underbrace{1\ldots1}_{e_1\ldots e_{11}} \end{array}$$

$$\underline{2047}: \boxed{11111111111} = \boxed{e_1 e_2 e_3 \ldots e_{11}}$$

S	e_1	e_2	e_3	$\ldots$	e_{11}	b_1	b_2	$\ldots$	b_{52}	lo que representa	
0	1	1	1	$\ldots$	1	0	0	$\ldots$	0	$+\infty$	1/0
1	1	1	1	$\ldots$	1	0	0	$\ldots$	0	$-\infty$	-1/0
1	1	1	1	$\ldots$	1	x	x	$\ldots$	x	$\underline{NaN}$	0/0

$$0: \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad = \quad e_1 \quad e_2 \quad \ldots \quad e_{11}$$

$\Rightarrow$ "Non-normalized FP number"

$$\Rightarrow \begin{array}{c|ccccccccccc|cccc} S & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_1 & b_2 & \ldots & b_{52} \\ \hline & e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 & e_7 & e_8 & e_9 & e_{10} & e_{11} & & & & \end{array}$$

$$\Rightarrow \pm 0 \,.\, b_1\ b_2\ b_3\ \ldots\ b_{52}\ \cdot 2^{-1022}$$

$\hookrightarrow$ Sub-normal FP numbers

$\Rightarrow$ El número más pequeño representable es

$$\begin{array}{c|ccc|\overset{0}{\cancel{b_1}}\ \overset{0}{\cancel{b_2}}\ \ldots\ 0\ 1} \\ \hline 0 & 0 & \ldots & 0 & b_1 & \ldots & \ldots & e_{51} & e_{52} \\ S & e_1 & \ldots & e_{11} & & & & & \end{array}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow\ & +(0\,.\,0\ldots0\,1)\cdot 2^{-1022} \\ =\ & (b_1\cdot 2^{-1} + b_2\cdot 2^{-2} + \ldots + b_{52}\cdot 2^{-52})\cdot 2^{-1022} \\ =\ & 1\cdot 2^{-52}\cdot 2^{-1022} \\ =\ & 2^{-1074} \approx 4{,}94\cdot 10^{-324} \end{aligned}$$

Además tenemos 2 formas de representar 0

0	0 0 $\ldots$ 0	0 $\ldots$ 0	**+0**
1	0 0 $\ldots$ 0	0 $\ldots$ 0	**-0**

3.6. Pérdida de Significancia

Calcula " $\sqrt{9.01} - 3$" en un computador con aritmética de 3-dígitos-decimales.

$$\boxed{\text{Ayuda}: \sqrt{9.01} = 3.00|16}$$

$$\sqrt{9.01} - 3 = 0$$

Resultado "exacto": $\boxed{1.6 \cdot 10^{-3}}$

¿Qué podemos hacer?

Ex: $E_1(x) = \dfrac{1 - cos(x)}{sin^2 x}$, $E_2(x) = \dfrac{1}{1 + cos(x)}$ ¿ son $E_1(x)$ y $E_2(x)$ iguales?

En latex cos se interpreta como el producto de “c”, “o” y “s”, por lo tanto se debe usar $\cos$ y $\sin$ respectivamente.

Ex: Encuentre las raíces de $x^2 + 9^{12} \cdot x = 3$

Ex: ¿Cuándo habría problemas?

$$f(x) = \frac{1-(1-x)^3}{x}, g(x) = \frac{1}{1+x} - \frac{1}{1-x}$$

Ex: Diseñe un algoritmo para calcular las raíces de, $x^2 + b \cdot x - 10^{-12} = 0, b \geqslant 100$, lo más "exactamente" posible.

Estudiar páginas 19 a la 23 del libro guía

Review de Cálculo (Matemáticas)

NUMERICAL ANALYSIS Second Edition - Timothy Sauer

Ver Appendix A: Matrix Algebra página 583 - 589

A.1 Matrix Fundamentals

A.2 Block Multiplication

A.3 Eigenvalues and Eigenvectors

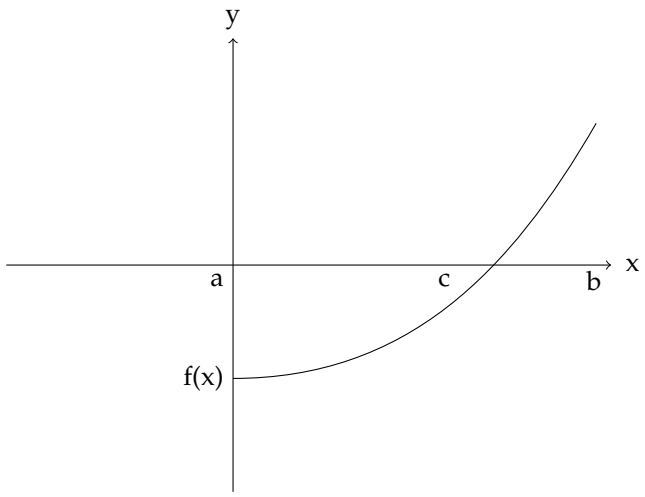
A.4 Symmetric Matrices

A.5 Vector Calculus

4. Raíces en 1D

Def: La función $f(x)$ tiene una raíz en $x = r$ si $f(r) = 0$.
Th: Sea f una función continua en $[a, b]$, satisfaciendo $f(a) \cdot f(b) < 0$. Entonces f tiene una raíz entre a y b, esto es, existe un número r que satisface $a < r < b$ y $f(r) = 0$.

Ej: $f(x) = x^3 + x - 1$



$$\Uparrow$$

$f(r) = 0$,
¿Cómo obtengo r?

Digamos $a = 0$, $f(a) = -1$ y f es continua.

$$b = 1,\ f(b) = 1$$

$$\Rightarrow f(a) \cdot f(b) = (-1) \cdot 1 = -1 < 0$$

$\therefore$ Existe una raíz entre $a < r < b$.

4.1. Método de la Bisección

Dado un intervalo inicial $[a, b]$ y $f(a) \cdot f(b) < 0$

```
while (b − a)/2 > TOL do
    c = (a + b)/2
    if f(c) = 0 then
        stop, end
    end if
    if f(a) · f(c) < 0 then
        b = c
    else
        a = c
    end if
end while
```

- El intervalo final $[a, b]$ contiene una raíz.
- La aproximación a la raíz es $r \approx \frac{(a+b)}{2}$

~~¡Ver MatLab!~~ ¡Ver Jupyter notebook!

¿Qué tan exacto y qué tan rápido?

<u>Bisección:</u>

- Largo intervalo inicial $(b - a)$
- Largo intervalo 1era iteración $\frac{(b-a)}{2}$
- $\vdots$
- Largo intervalo tras n-ésima iteración $\frac{(b-a)}{2^n}$

$\Rightarrow$ Error de la solución: $|x_c - r| < \frac{(b-a)}{2^{n+1}}$

donde $x_c = \frac{a_n + b_n}{2}$

y requiere $n + 2$ evaluaciones de f.

Def: Una solución es correcta en p decimales si el error es menor que $0{,}5 \cdot 10^{-p}$.

Ej 1.2: Use el método de la Bisección para encontrar una raíz de $f(x) = \cos x - x$ en el intervalo $[0, 1]$ correcta en 6 decimales.

$$\Rightarrow |x_c - r| < \frac{1-0}{2^{n+1}} < 0{,}5 \cdot 10^{-6}$$

$$\Rightarrow n > \frac{6}{\log_{10} 2} \approx 19{,}9$$

$$\therefore n = 20.$$

~~¡Ver Matlab!~~ ¡Ver Jupyter notebook!

4.2. Iteración de Punto Fijo

- Aplicar "cos" repetidas veces en una calculadora, ¡asegúrese que está en radianes!

Punto fijo de una Función

Def: El número real "r" es un punto fijo de la función $g(x)$ si $g(r) = r$.

Iteración de punto fijo

x_0 = "Initial guess"
$x_{i+1} = g(x_i),\ i = 0, 1, 2, ..., \infty$

$$\begin{aligned} \Rightarrow i = 0 : x_1 &= g(x_0) \\ i = 1 : \ x_2 &= g(x_1) \\ i = 2 : \ x_3 &= g(x_2) \\ &\vdots \\ i = n : \ x_{n+1} &= g(x_n) \end{aligned}$$

Th: Sea f una función continua en un vecindario de x_0, y asume que $\lim_{n\to\infty} x_n = x_0$. Then,

$$\lim_{n\to\infty} f(x_n) = f(\lim_{n\to\infty} x_n) = f(x_0)$$

$$\Rightarrow g(r) = g(\lim_{i\to\infty} x_i) = \lim_{i\to\infty} g(x_i) = \lim_{i=\infty} x_{i+1} = r$$

$\therefore x_{i+1} = \cos(x_i) \Rightarrow g(x) = \cos(x)$ y $f(x) = x - \cos(x)$

~~Ver MatLab~~ para $x^3 + x - 1 = 0$

¡Ver Jupyter notebook!

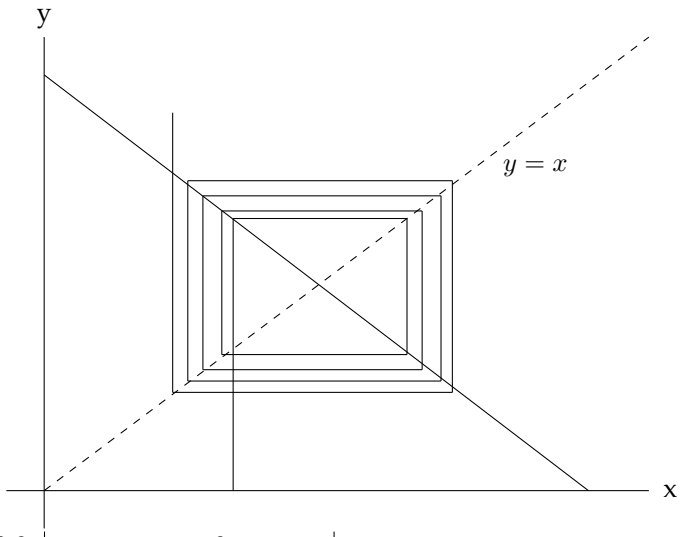
① $$x = 1 - x^3 = g_1(x)$$

② $$x = \sqrt[3]{1 - x} = g_2(x)$$

③
$$\begin{aligned} x^3 + x - 1 &= 0 \qquad / + 1 \\ x^3 + x &= 1 \qquad / + 2x^3 \\ 3x^3 + x &= 1 + 2x^3 \\ x(3x^2 + 1) &= 1 + 2x^3 \\ x &= \frac{1 + 2x^3}{1 + 3x^2} = g_3(x) \end{aligned}$$

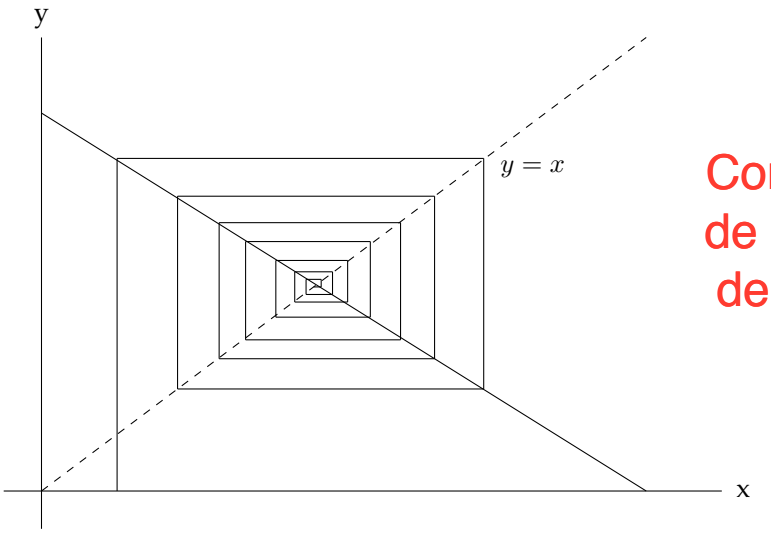
4.3. Geometría de la iteración de Punto Fijo (cobweb diagram)

Divergencia de la iteración de punto fijo.



$x_0 = 0{,}9$	$x_0 = 0$	
1.15	$x_1 = \frac{5}{2} = 2{,}5 = g_1(x_0)$	
0.77	$x_2 = -1{,}25 = g(x_1)$	$g_1(x) = \frac{-3}{2} \cdot x + \frac{5}{2}$
1.33	$x_3 = 4{,}375$	
0.49	$x_4 = -4{,}0625$	
1.75		

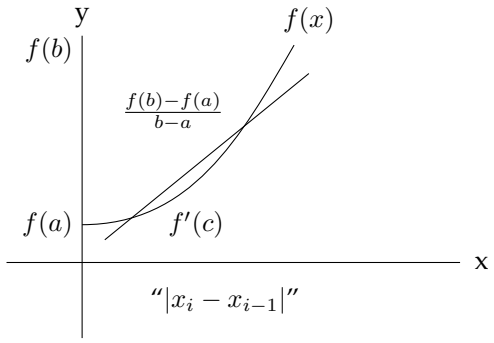
$$x_{i+1} = g_1(x_i) \Rightarrow \begin{array}{c} r = 1 \\ y = g_1(x) \\ y = x \end{array}$$



Convergencia de la iteración de punto fijo.

$$x_0 = 0{,}1$$
$$g_2(x) = \frac{-1}{2} \cdot x + \frac{3}{2}$$
$$r = 1$$

<u>Th:</u> "Teorema del valor medio": Sea f una función continua y diferenciable en el intervalo $[a, b]$. Entonces existe un número "c", entre a y b de tal forma que $f'(c) = \frac{f(b)-f(a)}{(b-a)}$.



<u>Def:</u> Sea $e_i = |x_i - r|$ el error del paso i de un método iterativo. Si:

$$\lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i} = S < 1,$$

el método se dice que obedece 'convergencia lineal" con tasa S.

<u>Th:</u> Asuma que $g(x)$ es continua y diferenciable, que $g(r) = r$, y que $S = |g'(r)| < 1$. Entonces la iteración de Punto Fijo converge linealmente con tasa S al punto fijo r para "initial guesses"lo suficientemente cerca de r.

<u>Dem:</u> Sea x_i el resultado de la iteración i. De acuerdo al teorema del valor medio $\left(f'(c) = \frac{(f(b)-f(a))}{(b-a)}\right)$

$$g'(c_i) = \frac{(g(x_i)-g(r))}{x_i - r}$$

$$a = r$$
$$b = x_i$$

y recuerde $x_{i+1} = g(x_i)$ y $r = g(r)$

$$\Rightarrow g'(c_i) = \frac{(x_{i+1}-r)}{(x_i - r)}$$

$$\Rightarrow x_{i+1} - r = g'(c_i) \cdot (x_i - r)$$

$$\Rightarrow e_{i+1} = |g'(c_i)| \cdot e_i$$

Si $S = |g'(r)| \Rightarrow$ Existe un pequeño vecindario alrededor de r tal que para $x \in [r - \epsilon, r + \epsilon] \Rightarrow |g'(x)| \leq \frac{S+1}{2}$

$$\Rightarrow \qquad e_{i+1} = |g'(c_i)| \cdot e_i < \frac{S+1}{2} \cdot e_i$$

$$\Rightarrow \qquad \lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i} = \lim_{i\to\infty} |g'(c_i)| = |g'(r)| = S \qquad \square$$

$$\Rightarrow e_{i+1} \approx S \cdot e_i$$

<u>Def:</u> Un método iterativo es llamado localmente convergente a "r"si el método converge a r para "initial guesses"suficientemente cercanos a r.

<u>Th:"Teorema de Taylor"(con residuo)</u>. Sea "x" y "x_0" números reales, y "f" "$k+1$" - veces continua y diferenciable en el intervalo entre "x" y "x_0", entonces existe un número "c" entre "x" y "x_0" tal que:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!} \cdot (x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} \cdot (x - x_0)^k + \frac{f^{(k+1)}(c)}{(k+1)!} \cdot (x - x_0)^{k+1}$$

<u>Intro a Newton's Method</u> (o Newton - Raphson Method)

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \frac{f''(c)}{2!} \cdot (x - x_0)^2$$

Considere si $x = r$, la raíz.

$$f(r) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (r - x_0) + \frac{f''(c)}{2!} \cdot (r - x_0)^2$$

$$x = r \Rightarrow f(r) = 0$$

$$0 = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (r - x_0) + \frac{f''(c)}{2!} \cdot (r - x_0)^2$$

¿Qué podemos hacer?

$$\begin{aligned}
-f'(x_0) \cdot (r - x_0) &= f(x_0) + \frac{f''(c)}{2!} \cdot (r - x_0)^2 \\
r - x_0 &= -(f'(x_0))^{-1} \cdot f(x_0) - (f'(x_0))^{-1} \cdot \frac{f''(c)}{2} \cdot (r - x_0)^2 \\
\therefore r &= x_0 - (f'(x_0))^{-1} \cdot f(x_0) - (f'(x_0))^{-1}(f'(x_0))^{-1} \\
\Rightarrow x_{i+1} &= x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \\
&= g_n(x_i)
\end{aligned}$$

4.4. Newton's method:

$$x_0 = \text{“initial guess”}$$
$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)},\ i = 0, 1, ...$$

¿Recuerda? $f(x) = x^3 + x - 1$
$f'(x) = 3x^2 + 1$

$$\Rightarrow x_{i+1} = x_i - \frac{x_i^3 + x - 1}{3x_i^2 + 1}$$
$$x_{i+1} = \frac{2x_i^3 + 1}{3x_i^2 + 1}$$

i	x_i	e_i	$\frac{e_i}{e_{i-1}^2}$
0	-0.7	1.38	-
1	0.12	0.55	0.2906
2	0.95	0.27	0.8933
3	0.73	0.052	0.6924
4	0.6845	0.0022	0.8214
5	0.682332	0.00000437	0.8527
6	0.68232780	0.00000000	0.8541
7	0.68232780	0.00000000	¿XXX?

Def: Sea e_i el error de la iteración “i”. La iteración converge cuadráticamente si:

$$M = \lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} < \infty$$

Th: Sea “f”dos veces continuamente diferenciable y $f(r) = 0$. Si $f'(r) \neq 0$, entonces el método de Newton es local y cuadráticamente convergente a “r”. El error e_i en el paso i es:

$$\lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = M$$
$$\text{donde}$$
$$M = \frac{|f''(r)|}{2|f'(r)|}$$

Demostración: FPI con $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$

$$\Rightarrow g'(x) = 1 - \frac{f'(x)^2 - f(x)\cdot f''(x)}{f'(x)^2} = \frac{f(x)\cdot f''(x)}{f'(x)^2}$$
$$\text{pero} f(r) = 0 \quad \text{y} \quad f'(r) \neq 0$$
$$\Rightarrow g'(r) = \frac{f(r)\cdot f''(r)}{(f'(r))^2} = 0$$

4.5. Convergencia cuadrática:

$$
\begin{aligned}
f(r) &= f(x_i) + f'(x_i)\cdot(r-x_i) + \frac{f''(c_i)}{2}\cdot(r-x_i)^2 \\
0 &= f(x_i) + (r-x_i)\cdot f'(x_i) + (r-x_i)^2\cdot\frac{1}{2}\cdot f''(c_i) \\
\frac{-f(x_i)}{f'(x_i)} &= r - x_i + (r-x_i)^2\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{f''(c_i)}{f'(x_i)} \\
x_i - r &= (r-x_i)^2\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{f''(c_i)}{f'(x_i)} \\
\Rightarrow \frac{e_{i+1}}{e_i^2} &= \frac{1}{2}\cdot\frac{|f''(c_i)|}{|f'(x_i)|} \\
\therefore \lim_{i\to\infty}\frac{e_{i+1}}{e_i^2} &= \left|2^{-1}\cdot\frac{f''(r)}{f'(r)}\right|
\end{aligned}
$$

x_{i+1}

Def: Asuma que r es una raíz de f y que f es diferenciable, esto es, asuma que $f(r) = 0$. Entonces si $0 = f(r) = f'(r) = \cdots = f^{(m-1)}(r)$, pero $f^{(m)}(r) \neq 0$, decimos que f tiene una raíz de multiplicidad "m" en r. Decimos que f tiene una raíz múltiple si $m > 1$, en otro caso $(m = 1)$, la raíz se dice que es simple.

4.6. Convergencia lineal del método de Newton:

Ex: $f(x) = x^2, \quad f(r) = 0 \quad \Rightarrow \quad r = 0$

$$
\begin{aligned}
x_{i+1} &= x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \qquad f'(x) = 2x \\
\Rightarrow x_{i+1} &= x_i - \frac{x_i^2}{2\cdot x_i} \\
&= \frac{x_i}{2}
\end{aligned}
$$

i	x_i	e_i	$\frac{e_i}{e_{i-1}}$
0	1	1	-
1	$\frac{1}{2}$	0.5	0.5
2	0.25	0.25	0.5
3	0.125	0.125	0.5

Ex: $f(x) = x^m$, $f'(x) = m\cdot x^{m-1}$

$\Rightarrow x_{i+1} = x_i - \frac{x_i^m}{m\cdot x_i^{m-1}} = \frac{m-1}{m}\cdot x_i \qquad \therefore$ Convergencia lineal... :'(

Th: Asuma que f es una función $(m+1)$ - veces continua y diferenciable en $[a, b]$ y tiene una multiplicidad "m" en la raíz "r". Entonces el método de Newton es localmente convergente a "r" y el error e_i es:

$$\lim_{i\to\infty}\frac{e_{i+1}}{e_i} = S = \frac{m-1}{m} \neq 0$$

Th: Si f es $(m+1)$ - veces continua y diferenciable en $[a,b]$, donde hay una raíz "r" de multiplicidad $m>1$, entonces el método modificado de Newton

$$x_{i+1} = x_i - m \cdot \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Converge local y cuadráticamente a "r".

4.7. Método de la Secante:

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{x-(x-\Delta x)} = \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x}$$

$$\left(\text{Newton's Method:} \quad \begin{aligned} x_0 &= \text{"initial guess"} \\ x_{i+1} &= x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \end{aligned} \right)$$

$$\begin{aligned} x_0 \ , \ x_1 &= \text{"Initial guesses"}, \quad x_0 \neq x_1 \\ x_{i+1} &= x_i - \frac{f(x_i)}{\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}} \\ &= x_i - \frac{f(x_i)\cdot(x_i - x_{i-1})}{f(x_i)-f(x_{i-1})} \end{aligned}$$

Si $f'(r) \neq 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow e_{i+1} &\approx \left| \frac{f''(r)}{2\cdot f'(r)} \right| \cdot e_i \cdot e_{i-1} \\ &= \left| \frac{f''(r)}{2\cdot f'(r)} \right|^{\alpha-1} \cdot e_i^{\alpha} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ Convergencia super-lineal, $\alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1{,}62$

4.8. Criterios de parada

① $|x_{i+1} - x_i| < TOL$

② $\frac{|x_{i+1} - x_i|}{x_{i+1}} < TOL$

Falta el valor absoluto en (2)

③ $\frac{|x_{i+1} - x_i|}{\max(|x_{i+1}|, \Theta)} < TOL$, por ejemplo $\Theta = 10^{-10}$

Def: Asuma que f es una función y que r es su raíz, i. e. $f(r) = 0$. Asuma que x_a es una aproximación a r. Para el problema de encontrar una raíz, el backward-error de la aproximación x_a es $|f(x_a) - 0|$ y el forward error es $|x_a - r|$.

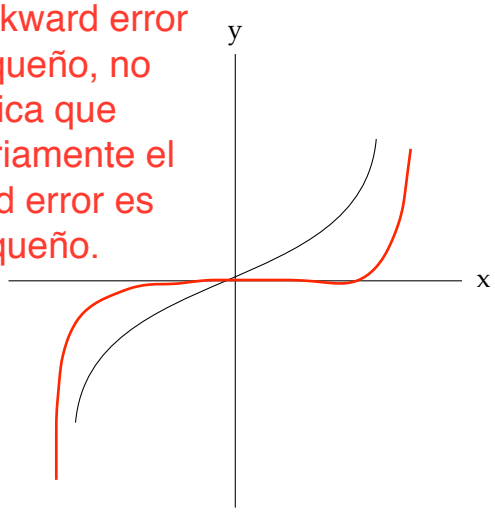
$$f(r) = f(x_a) + f'(c) \cdot (r - x_a)$$

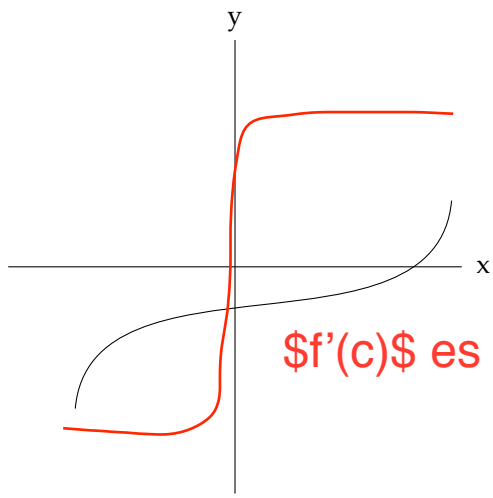
$$\Rightarrow \underbrace{|(f(r) - f(x_a)|}_{\text{Backward - error}} = \underbrace{|f'(c)| \cdot |r - x_a|}_{\text{Forward - error}}$$

Solo esto es forward error

$f'(c)$ es muy pequeño

Si el backward error es pequeño, no implica que necesariamente el forward error es pequeño.





$f'(c)$ es muy grande

Ver curvas rojas solamente

$$f(x_a) = f(r) + f'(r) \cdot (r - x_a) + \cdots + \frac{f^{(m+1)}(c)}{(m+1)!} \cdot (r - x_a)^{m+1}$$

$$\Rightarrow |f(r) - f(x_a)| = \left| \frac{f^{(m+1)}(c)}{(m+1)!} \right| \cdot |r - x_a|^m$$

Lo que se quiere en búsqueda de ceros es que el forward error sea pequeño pero para poder medirlo necesitamos conocer la solución (¡que es precisamente lo que andamos buscado!) por lo cual lo que se hace es obtener al backward error y concluir sobre el forward error.
Es IMPORTANTÍSIMO que se entienda este punto, backward error pequeño no necesariamente implica forward error pequeño, solo es válido cuando el problema es “bien condicionado”.

4.9. The Wilkinson polynomial (Wilkinson 1994)

Se debe expandir el polinomio de Wilkinson (¡sympy!) y luego buscar sus raíces.

$$W(x) = \prod_{i=1}^{20}(x-i), \text{ roots} = 1, 2, ..., 20$$

$$W(x) = x^{20} - 210 \cdot x^{19} + \cdots + 1206647803780373360 \cdot x^6 + \cdots + 243 \cdots 000(19digitos)$$

$$fzero(@wilkpoly, 16) \Rightarrow 16{,}0148...$$

$$16{,}0000...{,}0$$

$$|x - x_a| \approx 10^{-2}$$

Función de MatLab para busqueda de ceros, ¿Que ocurre con Jupyter notebooks?

4.10. Sensitividad

Problema: Encontrar r, dado $f(r) = 0$, para pequeñas perturbaciones agregadas $\epsilon \cdot g(x), \epsilon << 1$

$$\Rightarrow f(r + \Delta r) + \epsilon \cdot g(r + \Delta r) = 0$$

Expandiendo:

$$f(r) + \Delta r \cdot f'(r) + \epsilon \cdot g(r) + \epsilon \Delta r \cdot g'(r) + O(\Delta r^2) = 0$$

$$\Rightarrow \Delta r \approx \frac{-\epsilon \cdot g(r)}{f'(r) + \epsilon \cdot g'(r)} \quad \text{y asumiendo} \quad \epsilon g'(r) << f'(r)$$

$$\Delta r \approx -\epsilon \cdot \frac{g(r)}{f'(r)}$$

<u>Ex:</u> Estime la sensitividad de $r = 16$ para cambios en x^{15}

donde:

$$W(x) = \prod_{i=1}^{20}(x-i) = x^{20} + ... - 1672280820 \cdot x^{15} + \cdots$$

$$\Rightarrow W_\epsilon(x) = W(x) + \epsilon \cdot g(x), \quad w'(16) = 15!4!$$

$$\Rightarrow \Delta r = \frac{-\epsilon \cdot g(r)}{f'(r)} \approx \frac{16^{15} \cdot 1672280820}{15!4!} \cdot \epsilon \approx 6{,}14 \cdot 10^{13} \cdot \epsilon$$

$$\Rightarrow \Delta r \approx 6{,}14 \cdot 10^{13} \cdot (\pm Emach)$$

$$\approx 6{,}14 \cdot 10^{13} \cdot (\pm 2{,}22 \cdot 10^{-16}) \approx \pm 0{,}0136$$

$$\approx |x - x_a|$$

Condicionamiento ("primer encuentro")

"Magnificación del error por parte del problema teórico"

$$K = \frac{\text{relative Forward error}}{\text{relative backward error}} = \frac{\frac{|x_a - r|}{|r|}}{\frac{|f(x_a)-f(r)|}{|f(r)|}} \Rightarrow \frac{\frac{|\Delta r|}{|r|}}{|\frac{\Delta f}{f}|} = \frac{|f|}{|\frac{\Delta f}{\Delta r}| \cdot |r|} = \frac{\epsilon \cdot |g(r)|}{|r| \cdot |f'(r)|}$$

$$\text{Donde} \quad f(r) + \epsilon \cdot g(r) = 0$$

<u>Ex:</u>

$$\begin{aligned}
x^2 - 2 \cdot x + 1 = 0 \quad &\Leftrightarrow \quad (x-1)^2 = 0 \\
\Rightarrow x^2 - 2x + 1 - \epsilon &= 0 \\
\Rightarrow x_1 &= 1 - \sqrt{\epsilon} \\
\Rightarrow x_2 &= 1 + \sqrt{\epsilon} \\
\text{Si} \quad \epsilon &\approx 10^{-8} \\
\Rightarrow x^2 - 2x + 1 - 10^{-8} &= 0 \\
x^2 - 2x + 0{,}99999999 &= 0 \\
\Rightarrow x_1 &= 1 - 10^{-4} = 0{,}9999 \\
x_2 &= 1 + 10^{-4} = 1{,}0001
\end{aligned}$$

¡Una pequeña perturbación en la data ($1-\vareps$), genera perturbaciones mucho más grandes en el resultado!

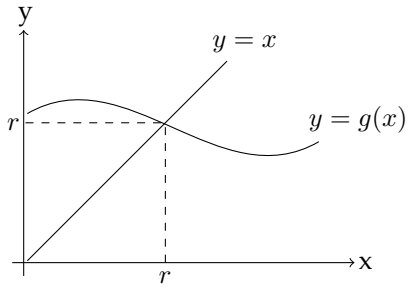
Volviendo a $W(x)$

$$K = \frac{|g(r)|}{|r||f'(r)|} = \frac{16^{15} \cdot 1672280820}{15!4!16} \approx 3{,}8 \cdot 10^{12}$$

$\Rightarrow$ Se espera perder "12"dígitos de "accuracy".
recuerda $16 \approx 16{,}014...$

5. Sistemas de Ecuaciones Lineales

Recuerde:

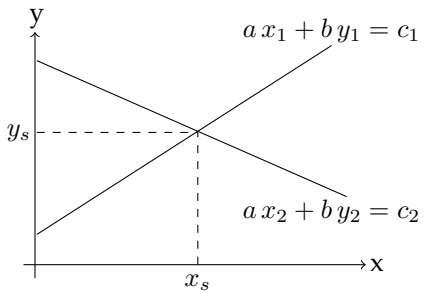


$\Rightarrow\ r = g(r)$

o más general

$$\boxed{\begin{aligned} y - x &= 0 \\ y - g(x) &= 0 \end{aligned}}$$

Ahora: "algo más simple... por ahora"



(1) $a_1\,x_s + b_1\,y_s = c_1$

(2) $a_2\,x_s + b_2\,y_s = c_2$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_s \\ y_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

$\uparrow$

2 ecuaciones y
2 incógnitas

$Ax = c$ $\longleftarrow$ Sistema de ecuaciones lineales

donde: $x = A^{-1}c$ $\longleftarrow$

Solución: (Por substitución) ⓐ

$$(1) \Rightarrow x = \frac{c_1 - b_1\, y}{a_1} \qquad (3)$$

$$(3) \text{ en } (2) \Rightarrow a_2 \left(\frac{c_1 - b_1\, y}{a_1} \right) + b_2\, y \;=\; c_2 \qquad \text{(1 ecuación y 1 incógnita)}$$

$$\text{despejando } y = \frac{c_2 - a_2\, \frac{c_1}{a_1}}{b_2 - a_2\, \frac{b_1}{a_1}} \;=\; \frac{a_1\, c_2 - a_2\, c_1}{a_1\, b_2 - a_2\, b_1}$$

Solución: (Usando regla de Cramer) ⓑ

$$y \;=\; \frac{\begin{vmatrix} a_1 & c_1 \\ a_2 & c_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}} \;=\; \frac{a_1\, c_2 - a_2\, c_1}{a_1\, b_2 - a_2\, b_1}$$

$$\text{¿Cómo obtengo } x\text{?} \rightarrow x = \frac{c_1}{a_1} - \frac{b_1}{a_1}\, y$$

$$= \frac{\begin{vmatrix} c_1 & b_1 \\ c_2 & b_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}}$$

ⓐ Simple pero un poco compleja para "algoritmizar"

ⓑ Muy simple de explicar pero MUY costosa computacionalmente.

¿Cuál es un sistema de ecuaciones lineales simple pero no trivial de resolver?

$$\begin{array}{l} \underline{a}\, x + \underline{b}\, y = \underline{d} \\ \underline{0}\, x + \underline{c}\, y = \underline{e} \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} -- & -- \\ -- & -- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -- \\ -- \end{bmatrix}$$

¡Exacto!

5.1. Eliminación Gaussiana Simple

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} a_1\, x + b_1\, y &= c_1 \\ a_2\, x + b_2\, y &= c_2 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ <u>tableau</u> $\rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \end{array}\right] \quad R_2 = R_2 - \frac{a_2}{a_1} R_1$

$\rightarrow$ coeficiente necesario para eliminar a_2 de la segunda fila

$$\Rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} a_1 & b_1 & c_1 \\ 0 & b_2 - \frac{a_2}{a_1} b_1 & c_2 - \frac{a_2}{a_1} c_1 \end{array}\right]$$

$$\boxed{\begin{aligned} a_1\, x + b_1\, y &= c_1 \\ 0\, x + \left(b_2 - \frac{a_2}{a_1} b_1\right) y &= c_2 - \frac{a_2}{a_1} c_1 \end{aligned}}$$

$\uparrow$
Forma "simple"

$$\Rightarrow y = \frac{c_2 - \frac{a_2}{a_1} c_1}{b_2 - \frac{a_2}{a_1} b_1}$$

$$\Rightarrow x = \frac{c_1 - b_1\, y}{a_1}$$

<u>Algoritmo:</u>

1. $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}$ $\rightarrow$ construir <u>tableau</u>
2. Aplicar operaciones fila para dejar la matriz triangular superior y modificar $\boldsymbol{c}$ $\Rightarrow$ $U\boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{c}}$
3. Resolver $U\boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{c}}$ usando <u>backward substitution</u>.

~~¡Ver Matlab!~~

¡Ver Jupyter notebook!

En forma general: $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} A & b \\ & \end{array}\right]$$

$\uparrow$
tableau general

$$A\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \underset{\text{G.E.}}{\longrightarrow} \quad U\,\boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{b}} \quad \underset{\text{B.S.}}{\longrightarrow} \quad \boldsymbol{x}$$

<u>G.E.:</u>

(1) **for** $j = 1 : n-1$ **do**
(2) **for** $i = j+1 : n$ **do**
(3)   mult $= B(i,j)/B(j,j)$
(4) $B(i, j+1 : n+1) = B(i, j+1 : n+1) - \text{mult} \cdot B(j, j+1 : n+1)$
 end
end

¿Cuánto se demora G.E.?

<u>Previo:</u>

ⓐ $1 + 1 + 1 + \cdots + 1 = \sum_{i=1}^{n} 1 = n$

ⓑ $1 + 2 + 3 + \cdots + n = \sum_{i=1}^{n} i = \dfrac{n\,(n+1)}{2}$

ⓒ $1^2 + 2^2 + 3^2 + \cdots + n^2 = \sum_{i=1}^{n} i^2 = \dfrac{n\,(n+1)\,(2\,n+1)}{6}$

Contemos cuántas operaciones se realizan en G.E.

línea	# operaciones
(3)	1
(4)	2 (“$n+1\ -\ (j+1-1)$”-veces)

$$
\begin{aligned}
\text{Total} &= \underbrace{\sum_{j=1}^{n-1}}_{(1)} \underbrace{\sum_{i=j+1}^{n}}_{(2)} \Big(\underbrace{1}_{(3)} + \underbrace{2\,(n-j+1)}_{(4)} \Big) \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-j} \big(1 + 2\,(n-j+1)\big) \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} \big(1 + 2\,(n-j+1)\big)\,(n-j) \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} \big(3\,n - 3\,j + 2\,n^2 - 4\,n\,j + 2\,j^2\big) \\
&= (3\,n + 2\,n^2)\ \left[\sum_{j=1}^{n-1} 1\right] - 3\,\left(\sum_{j=1}^{n-1} j\right) - 4\,n\,\left(\sum_{j=1}^{n-1} j\right) + 2\,\sum_{j=1}^{n-1} j^2 \\
&= (3\,n + 2\,n^2)\,(n-1)\ -\ 3\,\frac{(n-1)\,n}{2}\ -\ 4\,n\,\frac{(n-1)\,n}{n}\ +\ 2\,\frac{(n-1)\,n\,(2n-1)}{6} \\
&= \frac{2}{3}\,n^3 + \frac{1}{2}\,n^2 - \frac{7}{6}\,n \\
&\sim \frac{2}{3}\,n^3
\end{aligned}
$$

5.2. Backward Substitution

$$U\boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{b}} \quad \Leftrightarrow \quad \left[\begin{array}{ccccc|c} u_{11} & u_{12} & \cdots & & u_{1n} & \widetilde{b}_1 \\ 0 & u_{22} & & & u_{2n} & \widetilde{b}_2 \\ \vdots & 0 & \ddots & & & \vdots \\ & & \ddots & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} & \\ 0 & & \cdots & 0 & u_{nn} & \widetilde{b}_n \end{array}\right]$$

$\uparrow$ triangular superior

(1) última ecuación (ecuación n) :

$$u_{nn}\, x_n = \widetilde{b}_n$$

$$\Rightarrow x_n = \frac{\widetilde{b}_n}{u_{nn}}$$

(2) ecuación $(n-1)$:

$$u_{n-1,n-1}\, x_{n-1} + u_{n-1,n}\, x_n = \widetilde{b}_{n-1}$$

$$\Rightarrow x_{n-1} = \frac{\widetilde{b}_{n-1} \; - \; u_{n-1,n}\, x_n}{u_{n-1,n-1}}$$

$\vdots$

(i) i-ésima ecuación :

$$u_{i,i}\, x_i \; + \sum_{j=i+1}^{n} u_{i,j}\, x_j = \widetilde{b}_i$$

$$\Rightarrow x_i = \frac{\left(\widetilde{b}_i \; - \sum_{j=i+1}^{n} u_{i,j}\, x_j\right)}{u_{i,i}}$$

B. Substitution

```
(1) for i = n : -1 : 1 do
(2) |  for j = i + 1 : n do
(3) |  |  b(i) = b(i) - u(i,j) · x(j)        2 op.
(4) |  end
(5) |  x(i) = b(i)/u(i,i)                    1 op.
(6) end
```

operaciones

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \sum_{i=n}^{1} \left[\left(\sum_{j=i+1}^{n} 2 \right) + 1 \right] \\
&= \sum_{i=1}^{n} \left[2 \left(\sum_{j=i+1}^{n} 1 \right) + 1 \right] \\
&= \sum_{i=1}^{n} \left[2\,(n - i + 1 - 1) + 1 \right] \\
&= 2\,n \left(\sum_{i=1}^{n} 1 \right) - 2 \left(\sum_{i=1}^{n} i \right) + \sum_{i=1}^{n} 1 \\
&= 2\,n\,n - 2\,\frac{n\,(n+1)}{2} + n \\
&= 2\,n^2 - n^2 - n + n \\
&= n^2
\end{aligned}
$$

□

Ver p.78, ex 5, 6.

5.3. La factorización LU de A

Def 2.2 Una matriz $m \times n$ L es triangular inferior si sus coeficientes satisfacen $l_{ij} = 0$ para $i < j$. Una matriz $m \times n$ U es triangular superior si sus coeficientes satisfacen $u_{ij} = 0$ para $i > j$.

Fact 1: Sea $L_{ij}(-c)$ la matriz triangular inferior la cual tiene coeficientes no-cero en su diagonal y la posición (i, j). La diagonal son "1"s y en la posición (i, j) es $(-c)$. Entonces $L_{ij}(-c) \cdot A$ representa la operación fila "restar la fila j multiplicada por $-c$ a la fila i".

Ex: $A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$, $\quad L_{21}(-c) \cdot A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -c & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} - c\,a_{11} & a_{22} - c\,a_{21} \end{bmatrix}$

Fact 2: $L_{ij}(-c)^{-1} = L_{ij}(c)$, recuerde $A \cdot A^{-1} = I$

Ex:
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -c & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -c & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ c & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -c & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ c - c & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Fact 3: La siguiente ecuación matricial es cierta:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ c_1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ c_2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & c_3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ c_1 & 1 & 0 \\ c_2 & c_3 & 1 \end{bmatrix}$$

Ex:
$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{7}{3} & 1 \end{bmatrix}}_{L_3} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L_2} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L_1} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & -2 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}}_{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} = U$$

$\leftarrow$ fact 1

$A =$

$L_1^{-1}\, L_2^{-1}\, L_3^{-1} U$ $\quad \hookleftarrow$ Fact 2

$= \widetilde{L}_1\, \widetilde{L}_2\, \widetilde{L}_3\, U$ $\quad \hookleftarrow$ Fact 3

$= L\, U$

$$L_3\, L_2\, L_1\, A = U$$

¿Cómo se utiliza la factorización LU de A para resolver $Ax = b$?

$$A\,x = b$$

$$L\,\underbrace{U\,x}_{c} = b \quad \rightarrow \quad \text{Resolver} \qquad \begin{array}{c} \text{incógnita} \\ \downarrow \\ L\,c = b \\ \uparrow \quad \uparrow \\ L \text{ y } b \text{ conocidas} \end{array}$$

$$\begin{array}{c} c = L^{-1}\,b \\ \uparrow \\ \text{NO calcule la inversa} \\ \text{utilice Forward Substitution} \end{array}$$

Recuerde: $L\,c = b \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \ddots & 0 \\ l_{31} & \cdots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & \\ l_{n1} & & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$

Ok, ahora conocemos $\boldsymbol{c}$, ¿y de qué sirve?

$$\begin{array}{c} L\,c = b \\ \uparrow\uparrow \quad \uparrow \\ \text{conocido} \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{c} \text{incógnita} \\ \downarrow \\ U\,x = c \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{conocido} \end{array}$$

$\therefore x = U^{-1}\,c \qquad \Rightarrow \qquad$ "Usar Backward Substitution!"

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \text{"}\boldsymbol{x}\text{"}$$

$$\begin{array}{l} \text{\# Operaciones elementales para} \\ \qquad \text{calcular } A = L\,U \end{array} \quad : \quad \frac{2}{3}n^3$$

¿Cuándo es útil?

1 Secuencia de sistemas de ecuaciones lineales

$$\begin{aligned} A\,\boldsymbol{x}_1 &= \boldsymbol{b}_1 \\ A\,\boldsymbol{x}_2 &= \boldsymbol{b}_2 \\ &\vdots \\ A\,\boldsymbol{x}_m &= \boldsymbol{b}_m \end{aligned} \qquad \Leftrightarrow \qquad A_{n\times n}\,X_{n\times m} = B_{n\times m}$$

$$A\,X + X\,A = B \Rightarrow \widetilde{A}\,\boldsymbol{x} = \widetilde{b}$$

¿Cómo resolvemos esto?

(i) Calcular $LU = A$

(ii) m B.S. $\Rightarrow$ Costo $= \frac{2}{3}\,n^3 + m\cdot 2\,n^2$

(iii) m F.S.

y si lo hubiéramos resuelto para cada uno intependientemente: $\underline{\underline{\frac{2}{3}\,m\cdot n^3}} + 2m\cdot n^2$

por ej: si $m >> n$.

2

$$A^l\,\boldsymbol{x} = b$$

$$\downarrow$$

$$\underbrace{(A\,A\,A\cdots A)}_{l\text{-veces}}\,\boldsymbol{x} = b$$

$$\begin{aligned} A\,c_1 &= b_1 \\ A\,c_2 &= b_2 \\ &\vdots \\ A\,c_l &= c_{l-1} \end{aligned}$$

$$A\,\underbrace{A^{l-1}\,x}_{c_{l-1}} = b$$

$$A\,\underbrace{A^{l-2}\,x}_{c_{l-2}} = c_{l-1}$$

$$\Rightarrow \qquad \boldsymbol{c}_l = \boldsymbol{x} \qquad \square$$

Entonces: Cuando decimos $A\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x} = A^{-1}\,\boldsymbol{b}$ pensamos lo siguiente:

$$\begin{aligned} A\,x &= b \qquad \hookleftarrow L\,U \\ L\,U\,x &= b \\ U\,X &= \underbrace{L^{-1}\,b}_{\text{F.S.}} \\ x &= \underbrace{U^{-1}\,(L^{-1}\,b)}_{\text{B.S.}} \end{aligned}$$

recuerde $A^{-1} = (L\,U)^{-1} = U^{-1}\,L^{-1}$.

5.4. Origen de los Errores

Def: Sea $\boldsymbol{x}_a$ una solución aproximada al sistema de ecuaciones lineales $A\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$. El vector residual es definido como $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\,\boldsymbol{x}_a$. El backward-error es $||\boldsymbol{b} - A\,\boldsymbol{x}_a||$ y el forward-error es $||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a||$.

Ex: $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 3 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$, $\begin{aligned} \boldsymbol{x} &= [2,1]^T \\ \boldsymbol{x}_a &= [1,1]^T \end{aligned}$

$$\underbrace{||b - A\,\boldsymbol{x}_a||_\infty}_{\text{Backward-Error}} = \left|\left|\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = \left|\left|\begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = 3.$$

$$\underbrace{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a||_\infty}_{\text{Forward-Error}} = \left|\left|\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = \left|\left|\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = 1.$$

Ex: "Muy importante"

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1+\epsilon & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2+\epsilon \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{x} = [1,1]^T \quad , \quad \boldsymbol{x}_a = [-1, 3+\epsilon]^T$$

$$\begin{aligned} \underbrace{||b - A\,\boldsymbol{x}_a||_\infty}_{\text{Backward-Error}} &= \left|\left|\begin{bmatrix} 2 \\ 2+\epsilon \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1+\epsilon & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 \\ 3+\epsilon \end{bmatrix}\right|\right|_\infty \\ &= \left|\left|\begin{bmatrix} 2 \\ 2+\epsilon \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2+\epsilon \\ 2 \end{bmatrix}\right|\right|_\infty \\ &= \left|\left|\begin{bmatrix} -\epsilon \\ \epsilon \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = \epsilon \qquad \square \end{aligned}$$

$$\underbrace{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a||_\infty}_{\text{Forward-Error}} = \left|\left|\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 1+\epsilon \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = \left|\left|\begin{bmatrix} 2 \\ -2-\epsilon \end{bmatrix}\right|\right|_\infty = 2+\epsilon, \quad \epsilon > 0$$

¿Qué es lo que queremos?
Queremos un Forward-Error pequeño.

¿Qué es lo que podemos medir?
Podemos medir en general solamente el Backward-Error.

¿Cómo están relacionados?
de condición.

El número de condición lo llamamos
$\kappa(A)=\frac{\max_i |\lambda_i|}{\min_i |\lambda_i|}$,
donde λ_i son los valores propios de A.

<u>Th:</u> El número de condición de una matriz cuadrada A de $n \times n$ es

$$\text{cond}(A) = \kappa(A) = ||A|| \cdot ||A^{-1}|| \geq 1.$$

¿Y cómo están relacionados los F & B errors?

$$\boxed{\frac{1}{\kappa(A)} \cdot \frac{||\boldsymbol{b} - A \cdot \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{b}||} \leq \frac{||\boldsymbol{x}_a - \boldsymbol{x}||}{||\boldsymbol{x}||} \leq \kappa(A) \cdot \frac{||\boldsymbol{b} - A \cdot \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{b}||}}$$

¡¡¡MUY MUY MUY MUY MUY MUY IMPORTANTE!!!

¿Qué pasa en nuestro ejemplo previo?

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1+\epsilon & 1 \end{bmatrix} \quad , \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1+\epsilon & -1 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{\epsilon}$$

$$||A||_\infty = 2 + \epsilon \quad , \quad ||A^{-1}|| = \frac{2}{\epsilon} + 1$$
$$\Rightarrow \kappa_\infty(A) = ||A||_\infty \cdot ||A^{-1}||_\infty = \frac{4}{\epsilon} + 4 + \epsilon$$

$$||\boldsymbol{b} - A \cdot \boldsymbol{x}_a|| = \epsilon \quad , \quad ||b|| = 2 + \epsilon$$
$$||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a|| = 2 + \epsilon \quad , \quad ||x|| = 1$$

$$\begin{aligned} \frac{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{x}||} &\leq \kappa(A) \cdot \frac{||\boldsymbol{b} - A \cdot \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{b}||} \\ &\leq \left(\frac{4}{\epsilon} + 4 + \epsilon\right) \cdot \frac{\epsilon}{2+\epsilon} \end{aligned}$$

$$2 + \epsilon = \frac{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{x}||} \leq \underbrace{2 + \epsilon}_{\text{estimado}}$$

$\therefore$ No importa qué tan pequeño hagamos $||\boldsymbol{b} - A \cdot \boldsymbol{x}_a||$, no obtendremos $\boldsymbol{x}$ si $\kappa(A) \to \infty$.

En general $\log_{10} \kappa(A)$ me dice cuántos dígitos se perderán en la computación de $\boldsymbol{x}$.

Recuerde: $\dfrac{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{x}||} \leq \kappa(A) \cdot \dfrac{||\boldsymbol{b} - A \cdot \boldsymbol{x}_a||}{||\boldsymbol{b}||}$

- Ver ejemplo con la matriz de Hilbert.

¡Ver Jupyter notebook!

5.5. Factorización $PA = LU$

Ej: (2.13) $\begin{bmatrix} \delta & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}$, $\delta = 1e - 20$,

$$A = L\,U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{20} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10^{-20} & 1 \\ 0 & -10^{20} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{x}_a = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$P\,A\,\boldsymbol{x} = P\,b \quad , \quad P = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ \delta & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\hookrightarrow \quad \begin{bmatrix} & & \\ & L & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & & \\ & U & \\ & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^{-20} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow \boldsymbol{x}_a = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ mucho mejor.

~~¡Ver MatLab!~~

¡Ver Jupyter notebook!

<u>Idea:</u> Dejar en la diagonal el $\max_{i>j} |a_{ij}|$.

1er paso de LU $\qquad (\widetilde{L}\,A = U)$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{bmatrix}}_{P_1} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 4 & 4 & -4 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix}}_{A} = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 2 & 1 & 5 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} \qquad \overset{P}{\begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{bmatrix}} \qquad \overset{L}{\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & \\ \frac{-1}{2} & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}}_{L_1} \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 2 & 1 & 5 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & -1 & 7 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 & & \\ \frac{1}{2} & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ \frac{-1}{4} & & 1 \end{bmatrix}}_{L_2} \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & -1 & 7 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & -1 & 7 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 & & \\ \frac{1}{2} & 1 & \\ \frac{1}{4} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 0 & 1 \\ & +1 & 0 \end{bmatrix}}_{P_2} \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & -1 & 7 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 7 \end{bmatrix} \qquad P_2 \cdot P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} 1 & & \\ \frac{1}{4} & 1 & \\ \frac{1}{2} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & \frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} & 1 & \\ & & 1 \\ 1 & & \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 & & \\ \frac{1}{4} & 1 & \\ \frac{1}{2} & \frac{-1}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 4 & 4 & -4 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{-1}{2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix}$$

$$P\,A\,Q = L\,U$$

~~¡Ver MatLab!~~

$$P\,A\,Q = L\,U?$$

¡Ver Jupyter notebook!

En general P no es conocido a priori y se calcula durante la ejecución:

$$\begin{aligned} A \\ P_1 A \\ L_1' P_1 A \\ P_2 L_1' P_1 A \\ L_2' P_2 L_1' P_1 A \\ \vdots \\ PA = LU \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ 0 & \ddots & & & \\ \vdots & 0 & (a_{jj} & \cdots & a_{jn}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & (a_{kj} & \cdots & a_{kn}) \\ 0 & 0 & \vdots & & \vdots \end{bmatrix}$$

$$|a_{k,j}| \geq |a_{l,j}|, \quad \forall l \geq j$$

Permutar filas

$$\begin{bmatrix} \ddots & & & \cdots & \\ 0 & \ddots & & \cdots & \\ \vdots & 0 & a_{kj} & \cdots & a_{kn} \\ & & a_{j+1,j} & & a_{j+1,n} \\ & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & a_{j,j} & \cdots & a_{j,n} \\ 0 & 0 & \vdots & & \vdots \end{bmatrix}$$

, luego continuamos la Eliminación Gaussiana.

6. La factorización de Cholesky

Sólo funciona para matrices definidas positivas y simétricas.

¿Qué es una matriz definida positiva?

$x^T A x > 0$, why?

$A = A^T$

Ejemplo para matriz de 2×2.

$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$, $\qquad det(A) =$ _____ $>$ _____

Ahora queremos encontrar la siguiente factorización

$$A = R^T R = \begin{bmatrix} \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddots & \cdots \\ 0 & \ddots \end{bmatrix}$$

¿Cómo se obtiene?

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & 0 \\ r_{21} & r_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{21} \\ 0 & r_{22} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11}^2 & r_{11}\, r_{21} \\ r_{11}\, r_{21} & r_{21}^2 + r_{22}^2 \end{bmatrix}$$

$$a = r_{11}^2 \qquad \Longrightarrow \; r_{11} = \pm\sqrt{a} = \sqrt{a}$$

$$b = r_{11}\, r_{21} \qquad \Longrightarrow \; r_{21} = \frac{b}{\sqrt{a}}$$

$$c = r_{21}^2 + r_{22}^2 \;\Longrightarrow\; c = \frac{b^2}{a} + r_{22}^2 \;\Longrightarrow \qquad r_{22} = \frac{\pm\sqrt{ac - b^2}}{\sqrt{a}}$$

$$r_{22} = \frac{\sqrt{ac - b^2}}{\sqrt{a}}$$

$\boxed{\text{¿Es } a \cdot c - b^2 > 0\text{ ?}}$ Sí/No Why?

$$\Longrightarrow \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a} & 0 \\ \frac{b}{\sqrt{a}} & \sqrt{\frac{ac-b^2}{a}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a} & \frac{b}{\sqrt{a}} \\ 0 & \sqrt{\frac{ac-b^2}{a}} \end{bmatrix}$$
$$= R^T R$$

¿Cómo se utiliza para resolver un sistema de ecuaciones lineales?

$$A \underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{b}$$ ("A.es simétrica y positiva definida)

$$\downarrow$$

$$R^T R x = b$$

$$\left.\begin{array}{r} R^T c = b, \text{ Forward substitution} \\ R x = c, \text{ Backward substitution} \end{array}\right\} \text{Similar a } PA = LU \text{ o } A = LU.$$

En general: $A = R^T R$

$$A = \left[\begin{array}{c|c} a & b^T \\ \hline b & C \end{array}\right] = \begin{bmatrix} R_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ R_{21} & R_{22} & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ R_{n1} & \cdots & & R_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{21} & \cdots & R_{n1} \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & R_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow \begin{bmatrix} a \\ \hline b \end{bmatrix} = R_{11} \begin{bmatrix} R_{11} \\ R_{21} \\ \vdots \\ R_{n1} \end{bmatrix} \Longrightarrow \qquad \begin{aligned} R_{11} &= \sqrt{a} \\ R_{2:n,1} &= \frac{b}{\sqrt{a}} \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow A = \left[\begin{array}{c|c} a & b^T \\ \hline b & C \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} \sqrt{a} & 0 \\ \hline \frac{b}{\sqrt{a}} & R_1^T \end{array}\right] \cdot \left[\begin{array}{c|c} \sqrt{a} & b^T/\sqrt{a} \\ \hline 0 & R_1 \end{array}\right]$$

$$= \left[\begin{array}{c|c} a & b^T \\ \hline b & \frac{b}{\sqrt{a}} \cdot \frac{b^T}{\sqrt{a}} + R_1^T R_1 \end{array}\right]$$

$$\therefore \quad C = \frac{b \cdot b^T}{a} + R_1^T R_1$$

¿Cómo encontramos $R_1^T R_1$?

$$\Longrightarrow C - \frac{1}{a} b \cdot b^T = R_1^T R_1$$

¡Tenemos que hacer Cholesky otra vez!

Pero para una matriz más pequeña. Hasta que ... ¡lleguemos a una matriz de 2×2!

Recuerde: $A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a} & 0 \\ \frac{b}{\sqrt{a}} & \sqrt{c - \frac{b^2}{a}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a} & \frac{b}{\sqrt{a}} \\ 0 & \sqrt{c - \frac{b^2}{a}} \end{bmatrix}$

<u>Ejemplo:</u> Resolver $\begin{bmatrix} 4 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\underset{A_0}{\begin{bmatrix} 4 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & 3 \end{bmatrix}} \rightarrow \underset{R_0}{\begin{bmatrix} 4 & 0 & -1 \\ 0 & & \\ 0 & R_1 & \end{bmatrix}} \qquad \Longrightarrow C = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}, \frac{b}{\sqrt{a}} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\frac{b \cdot b^T}{a} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow R_1^T R_1 = C - \frac{1}{a} b \cdot b^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\underset{A_1}{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}} = \underset{R_1^T}{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}} \underset{R_1}{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}} \qquad \begin{aligned} c &= 2 \\ c - \frac{b \cdot b^T}{a} &= 2 - \frac{1 \cdot 1}{1} = 1 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow \qquad \underset{R^T}{\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}} \underset{\underset{\sim}{c}}{\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}} = \underset{\underset{\sim}{b}}{\begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}} \qquad \Longrightarrow$$

Forward Substitution

$$\begin{aligned} c_1 &= 2 \\ c_2 &= 2 \\ -1 \cdot 2 + 1 \cdot 2 + c_3 &= 0 \\ c_3 &= 0 \end{aligned}$$

$$R \cdot \underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{c}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \Longrightarrow$$

Backward Substitution

$$\begin{aligned} x_3 &= 0 \\ x_2 &= 2 \\ x_1 &= 1 \end{aligned}$$

Recuerde:

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 1 \\ -2 & 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

o

$$1 \cdot \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} + 2 \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + 0 \cdot \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

7. Métodos iterativos

Métodos iterativos para resolver $A\underset{\sim}{x} = b$

Cholesky

$$PA = LU\,, \qquad \sim \frac{2}{3}n^3 \quad , \quad A = R^T R\,, \qquad \sim \frac{1}{3}n^3$$

Métodos Directos: Encuentran la "solución" después de un número finito de operaciones elementales.

Métodos iterativos: Encuentran una "solución aproximada" en "menos" tiempo que los métodos directos.

7.1. Método de Jacobi

(Forma matricial) Sea $A = L + D + U$ WARNING: ¡L y U son diferentes de $PA = LU$ o $A = LU$!

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & a_{22} & \vdots \\ \vdots & & \ddots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & \cdots & & 0 \\ a_{21} & 0 & & \vdots \\ a_{31} & a_{32} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}}_{L} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & & & 0 \\ & a_{22} & & \\ & & a_{33} & \\ 0 & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix}}_{D} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & a_{23} & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix}}_{U}$$

Descomposición "simple"de A

¿Recuerdan la iteración de punto fijo? ¿Qué se hace?

$$f(x) = ax - b$$
$$\downarrow$$
$$x_{i+1} = g(x_i)$$
$$x_0 = \text{“dato”}$$

Ahora la derivación:

$$A\,\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{b} \qquad \Longleftrightarrow \quad \vec{\mathbf{F}}\left(\underset{\sim}{x}\right) = A\,\underset{\sim}{x} - \underset{\sim}{b}$$

$$(L + D + U)\,\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{b} \qquad \vec{\mathbf{F}}\left(\underset{\sim}{r}\right) = 0$$

$$L\,\underset{\sim}{x} + D\,\underset{\sim}{x} + U\,\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{b}$$

mover a la derecha

$$D\,\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{b} - L\,\underset{\sim}{x} - U\,\underset{\sim}{x}$$

multiplicamos por la izquierda por D^{-1} donde D no es singular.

$$\underset{\sim}{x} = D^{-1}\left(b - L\,\underset{\sim}{x} - U\,\underset{\sim}{x}\right)$$

$\therefore$ <u>Método de Jacobi</u>

$$\underset{\sim}{x}^0 = \text{“dato inicial”}$$

$$\underset{\sim}{x}^{n+1} = D^{-1}\left(b - (L + U)\,\underset{\sim}{x}^n\right)$$

Iteración de punto fijo de la forma

$$\underset{\sim}{X}^{n+1} = G\left(\underset{\sim}{x}^n\right)$$

Matlab 2,19
2,20

¡Jupyter notebook!

Nota:

$$
\begin{aligned}
\underset{\sim}{x}^{n+1} &= D^{-1}\left(b-(L+U)\,\underset{\sim}{x}^{n}\right) = D^{-1}\,b - D^{-1}\cdot(L+U)\,\underset{\sim}{x}^{n}\\
&= D^{-1}\left(b-(L+U+D-D)\,\underset{\sim}{x}^{n}\right)\\
&= D^{-1}\left(b-A\,\underset{\sim}{x}^{n}+D\,\underset{\sim}{x}^{n}\right)\\
&= D^{-1}\left(b-A\,\underset{\sim}{x}^{n}\right)+D^{-1}\,D\,\underset{\sim}{x}^{n}\\
\underset{\sim}{x}^{n+1} &= \underset{\sim}{x}^{n}+D^{-1}\left(b-A\,\underset{\sim}{x}^{n}\right)\\
\underset{\sim}{x}^{n+1} &= \underset{\sim}{x}^{n}+D^{-1}\,r_n
\end{aligned}
$$

donde $r_n = b - A\,\underset{\sim}{x}^{n}$ es el vector residual.

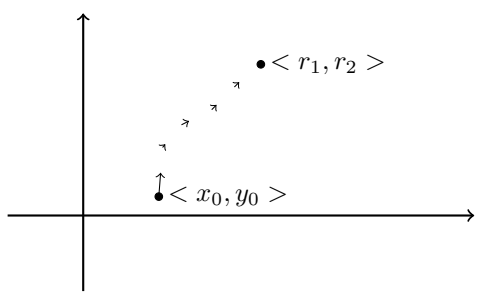
7.2. Método de Gauss-Seidel

Derivación:

$$
\begin{aligned}
& A\,\underset{\sim}{x} = b\\
& (L+D+U)\,\underset{\sim}{x} = b\\
& (L+D)\,\underset{\sim}{x} + U\,\underset{\sim}{x} = b\\
& (L+D)\,\underset{\sim}{x} = b - U\,\underset{\sim}{x}\\
\Longrightarrow\quad & \underset{\sim}{x}^{0} = \text{“dato inicial”}\\
& \underset{\sim}{x}^{i+1} = \underset{\uparrow}{(L+D)}^{-1}\left(b-U\,\underset{\sim}{x}^{i}\right) = (L+D)^{-1}\,b-(L+D)^{-1}\,U\,\underset{\sim}{x}^{i}
\end{aligned}
$$

Triangular inferior $\Longrightarrow$ Forward Substitution

$$
\begin{aligned}
\Longrightarrow \underset{\sim}{x}^{i+1} &= (L+D)^{-1}\left(b-(L+U+D)\,\underset{\sim}{x}^{i}+(L+D)\,\underset{\sim}{x}^{i}\right)\\
\underset{\sim}{x}^{i+1} &= \underset{\sim}{x}^{i}+(L+D)^{-1}\,r_n
\end{aligned}
$$



7.3. Succesive Over-Relaxation (ω)

Ahora la derivación:

$$
\begin{aligned}
A\,\underset{\sim}{x} &= \underset{\sim}{b} && \text{escalar} \\
(L+D+U)\,\underset{\sim}{x} &= \underset{\sim}{b} && \overset{\uparrow}{/\cdot\omega}\ ,\omega \neq 0 \\
\omega\,(L+D+U)\,\underset{\sim}{x} &= \omega\,\underset{\sim}{b} && /+D\,\underset{\sim}{x} \\
\omega\,L\,\underset{\sim}{x} + \omega\,D\,\underset{\sim}{x} + \omega\,U\,\underset{\sim}{x} + D\,\underset{\sim}{x} &= \omega\,\underset{\sim}{b} + D\,\underset{\sim}{x} \\
(\omega\,L+D)\,\underset{\sim}{x} &= \omega\,\underset{\sim}{b} + (1-\omega)\,D\,\underset{\sim}{x} - \omega\,U\,\underset{\sim}{x}
\end{aligned}
$$

$\Longrightarrow$

$$
\begin{aligned}
\underset{\sim}{x}^0 &= \text{“dato inicial”} \\
\underset{\sim}{x}^{i+1} &= (\omega\,L+D)^{-1}\left(\omega\,b + [(1-\omega)\,D - \omega\,U]\,\underset{\sim}{x}^i\right) \\
&= (\omega\,L+D)^{-1}\,\omega\,b + (\omega\,L+D)^{-1}\,[(1-\omega)\,D - \omega\,U]\,\underset{\sim}{x}^i \\
\underset{\sim}{x}^{i+1} &= \underset{\sim}{x}^i + \left(L + \frac{D}{\omega}\right)^{-1} r_n
\end{aligned}
$$

Resumen:

	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = G\left(\underset{\sim}{x}^i\right)$	$M \cdot \underset{\sim}{x}^i + \hat{b}$	$\underset{\sim}{x}^i + N r_{\underset{\sim}{n}}$
Jacobi	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = -D^{-1}\left(b - (L+U)\,\underset{\sim}{x}^i\right)$	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = D^{-1}\,(L+U)\,\underset{\sim}{x}^i + D^{-1}\,b$	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \underset{\sim}{x}^i + D^{-1}\,r_n$
G-S	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = (L+D)^{-1}\left(b - U\,\underset{\sim}{x}^i\right)$	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = -(L+D)^{-1}\,U\,\underset{\sim}{x}^i + (L+D)^{-1}\,b$	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \underset{\sim}{x}^i + (L+D)^{-1}\,r_n$
SOR(ω)	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = (\omega\,L+D)^{-1}\left(\omega\,b + [(1-\omega)\,D - \omega\,U]\,\underset{\sim}{x}^i\right)$	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = (\omega\,L+D)^{-1}\,[(1-\omega)\,D - \omega\,U]\,\underset{\sim}{x}^i + (\omega\,L+D)^{-1}\,\omega\,b$	$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \underset{\sim}{x}^i + \left(L + \frac{D}{\omega}\right)^{-1} r_{\underset{\sim}{n}}$

Entender muy bien que significa cada columna,
¡es lo mimo escrito de 3 formas diferentes!

7.4. Convergencia

:

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = M \cdot \underset{\sim}{x}^{i} + \hat{\underset{\sim}{b}}$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+2} = M \cdot \underset{\sim}{x}^{i} + \hat{\underset{\sim}{b}}$$

Debe ser x^{i+1}

$$\underset{\sim}{x}^{i+2} - \underset{\sim}{x}^{i+1} = M \cdot \underset{\sim}{x}^{i+1} + \hat{\underset{\sim}{b}} - M \cdot \underset{\sim}{x}^{i} - \hat{\underset{\sim}{b}}$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+2} - \underset{\sim}{x}^{i+1} = M \cdot \left(\underset{\sim}{x}^{i+1} - \underset{\sim}{x}^{i}\right)$$

& $$e_{i+1} = \left\|\underset{\sim}{x}^{i+2} - \underset{\sim}{x}^{i+1}\right\|$$

$$\Longrightarrow \left\|\underset{\sim}{x}^{i+2} - \underset{\sim}{x}^{i+1}\right\| \leq \|M\| \cdot \left\|\underset{\sim}{x}^{i+1} - \underset{\sim}{x}^{i}\right\|$$

$$e_{i+1} \leq \|M\| \cdot e_i$$

Por ejemplo: $\|M\|_\infty$ = máxima suma absoluta de filas.

Def: La matriz $A = (a_{ij})$ cuadrada de dimensión $n \times n$ es estrictamente diagonal dominante si para cada $1 \leq i \leq n$, $|a_{ij}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$.

Th: Si la matriz A de $n \times n$ es estrictamente diagonal dominante:

(1) A es una matriz no singular.

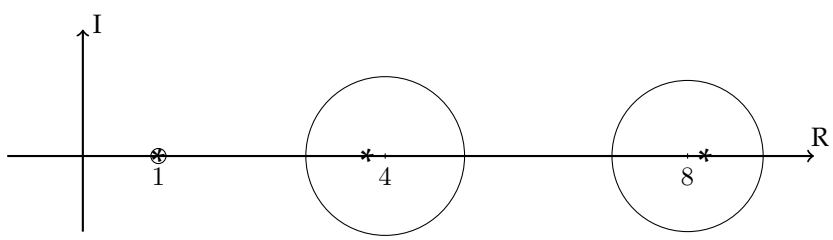
(2) El método de Jacobi converge a la solución única de $Ax = b$, $\forall\, b$ y $\forall\, \underset{\sim}{x}^0$.

Gershgorin circle theorem: Sea A una matriz de $n \times n$. Cada valor propio λ de A pertenece por lo menos a uno de los discos $|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$.

Ej:

$$\begin{pmatrix} 8 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 \end{pmatrix}, \ |\epsilon| < 1 \ \Longrightarrow \ \begin{array}{ll} |\lambda - 8| \leq 1 & \lambda_1 = 8{,}23607 \\ |\lambda - 4| \leq 1 + |\epsilon|, & \lambda_2 = 3{,}76397 \\ |\lambda - 1| \leq |\epsilon| & \lambda_3 = 0{,}99965 \end{array}$$

$\epsilon = 0{,}1$



7.5. Comentarios varios

:

$$¿PA = LU \quad \text{vs} \quad \text{Iterativos?}$$

Costo computacional:

$$PA = LU \implies \sim \frac{2}{3}n^3$$

$$\text{Iterativos} \implies \sim I \cdot n^2$$

Iteraciones

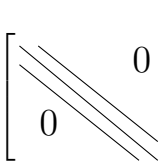
Producto Matriz-vector

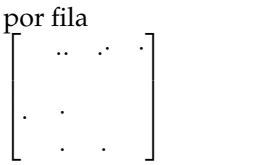
$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = M \cdot \underset{\sim}{x}^{i} + \hat{\underset{\sim}{b}}$$

Si $I << n \implies$ ☺

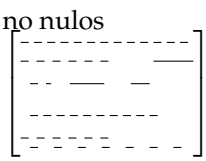
Requerimientos de memoria: Sparse vs Dense

Pocos coeficientes por fila





Muchos coeficientes no nulos



Si A es sparse $\rightarrow$ LU

$Sparse$ $\quad PA = LU$ (PA: sparse, LU: sparse)

$Dense$ $\quad PA = LU$ (PA: sparse, LU: dense)

Iterativos $\rightarrow$ ¡M sigue siendo sparse!

☺

<u>Ejemplo:</u>

$$\begin{aligned} 1 \cdot u + 3 \cdot v &= -1 \\ 5 \cdot u + 4 \cdot v &= 6 \end{aligned} \quad \Longrightarrow \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 4 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = L + D + U \quad , \quad \underset{\sim}{x}^0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$

<u>Jacobi</u>:

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = D^{-1} \cdot \left(b - (L+U) \cdot \underset{\sim}{x}^i \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \begin{bmatrix} 1/5 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \underset{\sim}{x}^i \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 1/5 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 6/5 \\ -1/3 \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{x}^2 = \begin{bmatrix} 1/5 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6/5 \\ -1/3 \end{bmatrix} \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^2 = \begin{bmatrix} 1{,}46 \\ -0{,}73 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\underset{\sim}{x}^{55} = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

<u>Gauss-Seidel</u>:

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = (L+D)^{-1} \cdot \left(b - U \cdot \underset{\sim}{x}^i \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \underset{\sim}{x}^i \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}^{-1} \underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ ¡F.S!}$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 6/5 \\ -0{,}73 \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{x}^2 = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6/5 \\ -0{,}73 \end{bmatrix} \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^2 = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 8{,}93 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 1{,}78 \\ -0{,}92 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\underset{\sim}{x}^{28} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

<u>SOR(ω)</u> , dado $\omega = 1{,}09$

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = (\omega \cdot L + D)^{-1} \left(\omega \cdot b + [(1-\omega) \cdot D - \omega \cdot U] \, \underset{\sim}{x}^i \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ \omega & 3 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \cdot \omega \\ -\omega \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (1-\omega) \cdot 5 & 4 \cdot \omega \\ 0 & (1-\omega) \cdot 3 \end{bmatrix} \underset{\sim}{x}^i \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ \omega & 3 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \cdot \omega \\ -\omega \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (1-\omega) \cdot 5 & 4 \cdot \omega \\ 0 & (1-\omega) \cdot 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^1 = \begin{bmatrix} 1{,}30 \\ -0{,}83 \end{bmatrix}$$

$$\underset{\sim}{x}^{i+1} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ \omega & 3 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 6 \cdot \omega \\ -\omega \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (1-\omega) \cdot 5 & 4 \cdot \omega \\ 0 & (1-\omega) \cdot 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1{,}30 \\ -0{,}83 \end{bmatrix} \right)$$

$$\underset{\sim}{x}^2 = \begin{bmatrix} 1{,}78 \\ -0{,}92 \end{bmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\underset{\sim}{x}^{17} = \begin{bmatrix} 1{,}99 \\ -1{,}00 \end{bmatrix}$$

8. El método del gradiente conjugado

Previo: Definamos la "energía del sistema" de la siguiente forma:

$$\Phi(\vec{y}) = \frac{1}{2}\vec{y}^T\ A\ \vec{y} - \vec{y}^T \cdot \vec{b}$$

$$\Longrightarrow \nabla\Phi(y) = \frac{1}{2}\underbrace{(A^T + A)}\vec{y} - \vec{b} = 0$$

$$\text{A es simétrica y positiva definida} \Longrightarrow \underbrace{A\ y - b = 0}_{A\ y=b}$$

Recuerde:

$$\text{Jacobi} \Longrightarrow \vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + D^{-1} \cdot \vec{r_k}$$

$$\text{G-S} \Longrightarrow \vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + (L + D)^{-1} \cdot \vec{r_k}$$

$$\text{SOR(w)} \Longrightarrow \vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + (L + \frac{D}{W})^{-1} \cdot \vec{r_k}$$

$$\Longrightarrow \vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + \text{"Vector"}$$

$$= \vec{x}^k - \alpha_k \cdot d_k$$

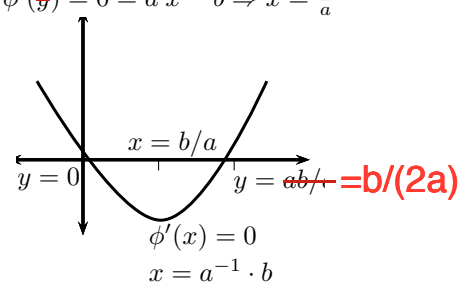
$$r_k = b - A\ \vec{x}^k$$

1D-sketch

$$\phi(y) = \tfrac{1}{2}\ a\ y^2 - y\ b$$

$$\phi'(y) = a\ y - b$$

$$\phi'(\overset{x}{\cancel{y}}) = 0 = a\ x - b \Rightarrow x = \tfrac{b}{a}$$



Primera opción : Definir d_k en la dirección de máximo decrecimiento de la "energía del sistema"

$$\Longrightarrow \nabla\Phi(\vec{x}^k) = A\ \vec{x}^k - b = -\vec{r_k}$$

$$\Longrightarrow \vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + \alpha_k\ \vec{r_k}$$

¿Qué es α_k?

¿Cómo se obtiene α_k ?

$$\Phi(\vec{x}^{k+1}) = \frac{1}{2}\ (\vec{x}^k + \alpha\ \vec{r}^k)^T\ A\ (\vec{x}^k + \alpha\ \vec{r}^k) - (\vec{x}^k + \alpha\ \vec{r}^k)^T\ b$$

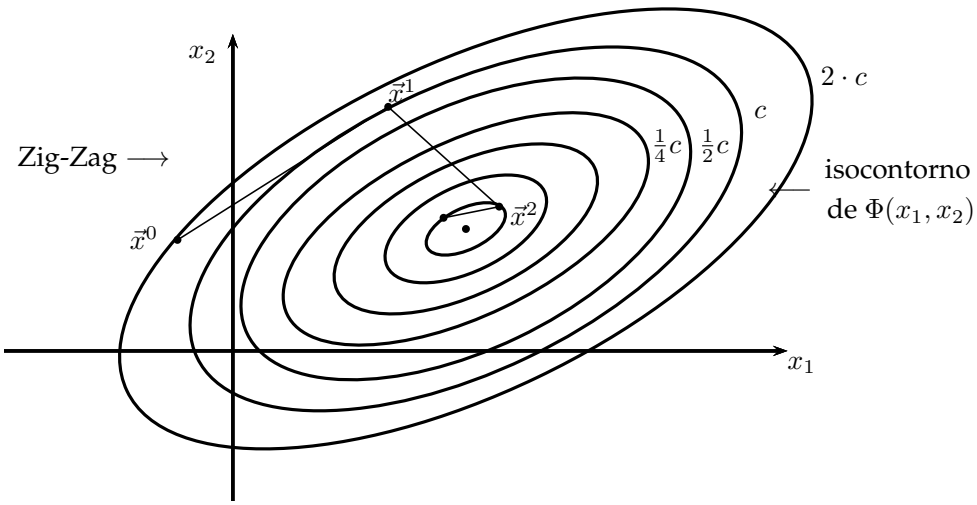
donde $\Phi(\vec{x}^{k+1})$ es una función de α cuando $\vec{x}^k$ y $\vec{r}^k$ son conocidos, $\Longrightarrow f(\alpha) = \Phi(\vec{x}^k + \alpha \cdot \vec{r}^k)$
¿Cómo se obtiene el "óptimo" de "$f(\alpha)$" ?

$$\Longrightarrow f'(\alpha) = 0$$

$$\Longrightarrow \alpha = \frac{(\vec{r}^k)^T\ \vec{r}^k}{(\vec{r}^k)^T\ A\ \vec{r}^k}$$

8.1. ∴ El método del gradiente descendente

1: $\vec{x_0} =$ "dato"
2: **for** $k = 0 \ldots$ **do**
3: $\quad \vec{r}^{(k)} = b - A\,\vec{x}^{(k)}$
4: $\quad \alpha_k = \frac{(r^k)^T\ r^k}{(r^k)^T\ A\ \vec{r}^k}$
5: $\quad \vec{x}^{k+1} = \vec{x}^{(k)} + \alpha_k\ \vec{r}^{(k)}$
6: **end for**



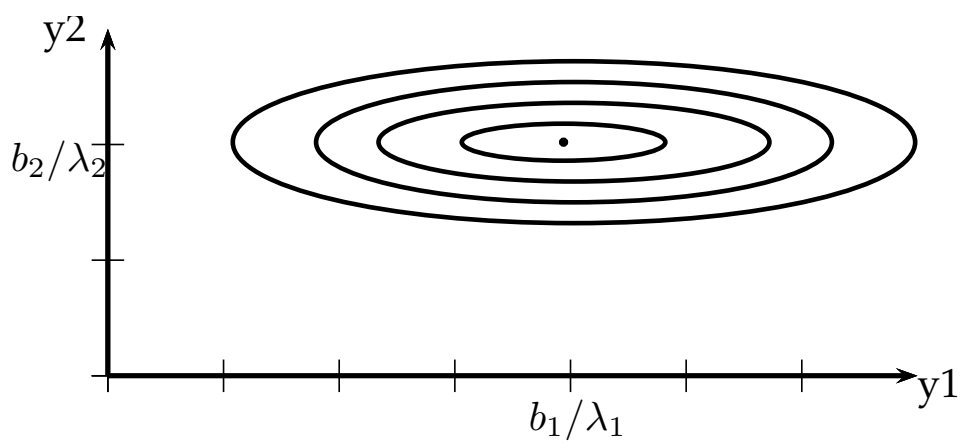
$$\Phi(x_1, x_2) =< x_1, x_2 > \begin{bmatrix} a & b \\ a & b \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - < x_1, x_2 > \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

Th: Sea A una matriz simétrica y positiva definida, entonces el método del gradiente descendente converge a la solución de $A\,x = b$, para cualquier $\vec{x}^0$ y $\vec{b}$, y

$$\left\|\vec{e}^{k+1}\right\|_A \leq \frac{K_2(A)-1}{K_2(A)+1}\left\|\vec{e}^{k}\right\|_A \qquad \Bigg| \quad K(A) = \|A\|\ \left\|A^{-1}\right\|$$

donde $\|\cdot\|_A$ es A-norma, i.e. $\|x\|_A = x^T\ A\ x$ y $\vec{e}^k = \vec{x}^k - \vec{x}$
Ejemplo:

$$\begin{aligned}
A &= \begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}, \lambda_i > 0, 0 < \lambda_2 \leq \lambda_1, \vec{b} =< b_1, b_2 >^T \\
\Longrightarrow \Phi(\vec{y}) &= \frac{1}{2} < y_1, y_2 > \begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\end{pmatrix} - < y_1, y_2 > \begin{pmatrix}b_1\\ b_2\end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\left(\lambda_1\ y_1^2 + \lambda_2\ y_2^2\right) - b_1\ y_1 - b_2\ y_2 = C \\
&\Longrightarrow \underbrace{\left(\frac{y_1 - b_1/\lambda_1}{\sqrt{2/\lambda_1}}\right)^2 + \left(\frac{y_2 - b_2/\lambda_2}{\sqrt{2/\lambda_2}}\right)^2}_{\uparrow\ \text{“elipsis”}} = C + \frac{b_1^2}{2\lambda_1} + \frac{b_2^2}{2\lambda_2}
\end{aligned}$$



Recuerde:

$$\begin{aligned}
\vec{x}^1 &= \vec{x}^0 + \alpha_0\, \vec{r}^0 \\
\vec{x}^2 &= \vec{x}^1 + \alpha_1\, \vec{r}^1 \\
&\vdots \\
\vec{x}^{k+1} &= \vec{x}^k + \alpha_k\, \vec{r}^k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \vec{x}^2 &= \vec{x}^0 + \alpha_0\, \vec{r}^0 + \alpha_1\, \vec{r}^1 \\
\vec{x}^2 &= \vec{x}^0 + \underbrace{\begin{bmatrix} \vec{r}^0 & | & \vec{r}^1 \end{bmatrix}}_{\text{Bare}} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} \\
&\vdots \\
\vec{x}^{k+1} &= \vec{x}^0 + \underbrace{\begin{bmatrix} \vec{r}^0 & | & \dots & | & \vec{r}^k \end{bmatrix}}_{} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_k \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

"k" puede ser mayor que "n",
i.e. la dimensión del espacio

¿Cuántos vectores "linealmente independientes" necesitamos para construir una base de $\mathbb{R}^n$?

_____

¿Necesitamos más de "n" iteraciones entonces?

_____

$$\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + \alpha_k \, \vec{d}_k$$

$$\Longrightarrow A\,x = b, x \approx \vec{x}^k$$

$$A \left(\vec{x}^0 + \left[\vec{d}_0 \quad | \quad \dots \quad | \quad \vec{d_{k-1}} \right] \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_{k-1} \end{bmatrix} \right) = b$$

$$A \left(\vec{x}^0 + \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i \, \vec{d}_i \right) = b$$

$$A \left[\vec{d}_0 \quad | \quad \vec{d}_1 \quad | \quad \dots \quad | \quad \vec{d}_{k-1} \right] \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_{k-1} \end{bmatrix} = b - A\,\vec{x}^0 = \vec{r}^0$$

$$\Longrightarrow A\,\vec{d}_0\,\alpha_0 = \vec{r}^0$$

$$\Longrightarrow \alpha_0 = \frac{\vec{d}_0^{\,T} \cdot \vec{r}^0}{\vec{d}_0^{\,T}\,A\,\vec{d}_0}$$

$$A\,\vec{x} = \vec{b}$$

$$\vec{x} = \beta\,\vec{y}$$

$$A\,\beta\,\vec{y} = \vec{b}$$

$$\beta\,\vec{A}\,\vec{y} = \vec{b}$$

$$\beta \cdot w_1 = b_1$$

$$\beta \cdot w_2 = b_2$$

$$(\beta \cdot w_1 - b_1)$$

$$\begin{aligned}
\vec{x}^{k+1} &= \vec{x_k} + \alpha_k \, \vec{d}_k && / \; -A / + \vec{b} \\
b - A\,\vec{x}^{k+1} &= b - A\,\vec{x}^k - \alpha_k \, A\,\vec{d}_k \\
\vec{r}^{k+1} &= \vec{r}^k - \alpha_k \cdot A\,\vec{d}_k && / \; \vec{d}_k^{\,T} \\
\vec{d}_k^{\,T} \cdot \vec{r_{k+1}} &= \vec{d}_k^{\,T} \cdot \vec{r}^k - \alpha_k \, \vec{d}_k^{\,T} \, A\,\vec{d}_k \\
&\text{if } \alpha_k = \frac{d_k^T \, r_k}{d_k^T \, A \, d_k} \Longrightarrow \vec{d}_k^{\,T} \cdot \vec{r_{k+1}} = 0
\end{aligned}$$

También necesitamos $\vec{d_{k+1}}$

$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \vec{d_{k+1}} &= \vec{r_{k+1}} + \beta_k \, \vec{d}_k && / \; d_k^T A \\
\vec{d}_k^{\,T} \cdot A\,d_{k+1} &= \vec{d}_k^{\,T} \, A\,\vec{r_{k+1}} + \beta_k \, \vec{d}_k^{\,T} \, A\,\vec{d}_k \\
&\text{if } \beta_k = -\frac{d_k^T \, A \, r_{k+1}}{d_k^T \, A \, d_k} \Longrightarrow \vec{d}_k^{\,T} \, A\,\vec{d_{k+1}} = 0
\end{aligned}$$

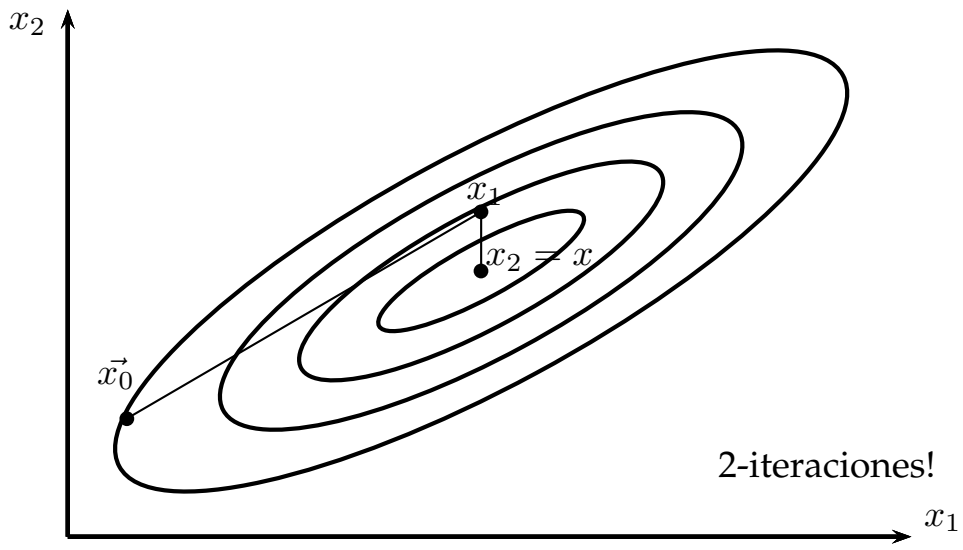
$$\uparrow$$

A-conjugado

$$< d_k, d_{k+1} >_A = 0$$

8.2. Gradiente conjugado

$\vec{x_0} =$ "dato"
$\vec{r_0} = b - A\,\vec{x_0}$
$\vec{d_0} = \vec{r_0}$
for $k = 0 :$ "$n-1$" **do**
  $\alpha_k = d_k^T\,\vec{r_k}$ $/d_k^T\,\boxed{A\,d_k;} \longrightarrow A\,y = \text{afun}(y)$
  $\vec{x}_{k+1} = x_k + \alpha_k\,\vec{d_k}$
  $\vec{r}_{k+1} = r_k - \alpha_k\,A\,d_k = b - A\,\vec{x}_{k+1}$
  $\beta_k = (A\,d_k)^T\,r_{k+1}$ $/(A\,d_k)^T\,d_k$
  $\vec{d}_{k+1} = \vec{r_{k+1}} - \beta_k\,\vec{d_k}$
end for



Th: Sea A una matriz simétrica y positiva definida. El método del gradiente conjugado para resolver $A\vec{x} = \vec{b}$ converge a lo más en "n" pasos usando aritmética exacta.

Versión 2 , Método del Gradiente conjugado

$\vec{x_0} =$ "dato"
$\vec{d_0} = \vec{r_0} = b - A\,\vec{x_0}$
for $k = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ **do**
  if $||r_k|| = 0$ **then**
    Stop
  end if
  $\alpha_k = \vec{r_k}^T \cdot \vec{r_k} / \vec{d_k}^T\, A\, \vec{d_k}$
  $\vec{x}_{k+1} = \vec{x_k} + \alpha_k\, \vec{d_k}$
  $\vec{r}_{k+1} = \vec{r_k} - \alpha_k\, A\, \vec{d_k}$
  $\beta_k = \vec{r}_{k+1}^T \cdot \vec{r}_{k+1} / \vec{r_k}^T \cdot \vec{r_k}$
  $\vec{d}_{k+1} = \vec{r}_{k+1} + \beta_k\, d_k$
end for

¿Cómo se puede mejorar esta propuesta?
¿Qué convendría hacer al momento de la implementación?

Ejemplo: p.129, 14.(a)

$$\vec{x_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$

$$\vec{r_0} = \vec{b} - A\,\vec{x_0} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}^T$$
$$\vec{d_0} = \vec{r_0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_0 = \vec{d_0}^{\,T} \cdot \vec{r_0} \qquad / \vec{d_0}^{\,T}\ A\ d_0$$

$$= \frac{\begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}$$
$$= \frac{\boxed{1} \quad \longrightarrow \quad r_0^T r_0}{\begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}}_{A\ d_0}}$$

$$\boxed{\alpha_0 = \frac{1}{2}}$$

$$\vec{x_1} = \vec{x_0} + \alpha_0\ \vec{d_0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \tfrac{1}{2}\ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$
$$\vec{r_1} = r_0 - \alpha_0\ A\ d_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \tfrac{1}{2}\ \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix}$$
$$\vec{r_1} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\beta_0 = \frac{\vec{r_1}^{\,T} \vec{r_1}}{r_0^T r_0} = \frac{\begin{bmatrix} 1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \end{bmatrix}}{1}$$
$$\boxed{\beta_0 = 1/4}$$
$$\vec{d_1} = \vec{r_1} + \beta_0\ d_0$$
$$= \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} + \tfrac{1}{4}\ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/4 \end{bmatrix}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}}_{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{b}$$

$$k = 1$$

$$\alpha_1 = \frac{r_1^T r_1}{d_1^T\ A\ d_1} = \frac{1/4}{\begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/4 \end{bmatrix}}_{\begin{bmatrix} 1/4 \\ 0 \end{bmatrix}}}$$

$$\boxed{\alpha_1 = \frac{1/4}{1/8} = 2}$$

$$\vec{x_2} = \vec{x_1} + \alpha_1\ d_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1/2 \end{bmatrix} + 2\ \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\vec{r_2} = \vec{r_1} - \alpha_1\ A\ d_1$$

$$= \begin{bmatrix} 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} - 2\ \begin{bmatrix} 1/4 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$\uparrow$$
¡ residual nulo !

$$\beta_1 = 0$$
$$\vec{d_2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + 0\ \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$\therefore \vec{x} = \vec{x_2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \ \&\ \ \vec{r_2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

¡CG terminó en sólo 2 iteraciones!

8.3. Método de Newton en $\mathbb{R}^n$

Recuerde: 1D: $f(x) \Longrightarrow f(r) = 0$

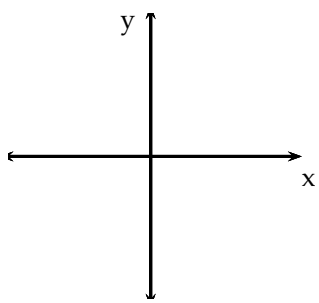
$$\begin{aligned} \text{FPI: } x_{i+1} &= g(x_i) \\ &\longrightarrow x_i + f(x_i) \\ &\longrightarrow x_i + \frac{1}{a} f(x_i) \\ \text{NM: } x_{i+1} &= x_i - f(x_i)/f'(x_i) \end{aligned}$$

<u>En n-D</u>: $\vec{F}(\vec{x}) \Longrightarrow \vec{F}(\vec{r}) = \vec{0}$
<u>Ej</u>:

$$\begin{matrix} x^2 + y^2 = 1 \\ y = x^2 \end{matrix} \Longrightarrow y + y^2 = 1 \Longrightarrow y = \frac{-1+\sqrt{5}}{2}$$

$$y_1 \approx 0{,}61, y_2 \approx -1{,}61$$

$$\Longrightarrow \begin{matrix} x_1 = \underline{\qquad\qquad} \\ x_2 = \underline{\qquad\qquad} \end{matrix}$$



$$\Longrightarrow \vec{F}(\vec{x}) = \vec{F}\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} x^2 + y^2 - 1 \\ y - x^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

<u>En 1D</u>: $\underbrace{f(x_{i+1})}_{0} = f(x_i) + f'(x_i)\,(x_{i+1} - x_i)$

$$\Longrightarrow x_{i+1} = x_i - (f'(x_i))^{-1}\, f(x_i)$$

$\boxed{\text{En } n\text{-D}}$:

$$\begin{aligned}
\underbrace{\vec{F}(\vec{x}_{i+1})}_{\vec{0}} &= \vec{F}(\vec{x}_i) + J(\vec{x}_i)\,(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i) \\
\Longrightarrow -\vec{F}(\vec{x}_i) &= J(\vec{x}_i)\,(\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i) \\
-J^{-1}(\vec{x}_i)\,\vec{F}(\vec{x}_i) &= \vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i \\
\Longrightarrow \vec{x}_{i+1} &= \vec{x}_i - \underbrace{J^{-1}(\vec{x}_i)}_{\substack{\text{Jacobiano} \\ \text{(Jacobian matrix at } \vec{x}_i)}}\,\vec{F}(x_i)
\end{aligned}$$

$$\text{Dado } \vec{F}(\vec{x}) = \vec{F}\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} f_1(\vec{x}) \\ f_2(\vec{x}) \\ \vdots \\ f_n(\vec{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_n) \\ \vdots \\ \vdots \\ f_n(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_n) \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow J(F)\Big|_{\vec{x} = \vec{x}_0} = \left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right]\Bigg|_{\vec{x} = \vec{x}_0} = \begin{bmatrix} \nabla f_1 \\ \nabla f_2 \\ \vdots \\ \nabla f_n \end{bmatrix}\Bigg|_{\vec{x} = \vec{x}_0}$$

$$\underline{\text{Ej}}\text{: 2D} \quad \Longrightarrow \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{bmatrix}\Bigg|_{\vec{x} = \vec{x}_0}$$

Volviendo al ejemplo:

$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{bmatrix} x^2 + y^2 - 1 \\ y - x^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(x,y) \\ f_2(x,y) \end{bmatrix}$$

$$\nabla f_1 =< \frac{\partial f_1}{\partial x}, \frac{\partial f_2}{\partial y} >=< 2x, 2y >$$

$$\nabla f_2 =< -2x, 1 >$$

$$\therefore J(\vec{F}) = \begin{bmatrix} 2\,x & 2\,y \\ -2\,x & 1 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \begin{bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \end{bmatrix} - \left(J(\vec{F}) \,\middle|\, x =< x_i, y_i > \right)^{-1} \begin{bmatrix} f_1(x_i, y_i) \\ f_2(x_i, y_i) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2\,x_i & 2\,y_i \\ -2\,x_i & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} x_i^2 + y_i^2 - 1 \\ y_i - x_i^2 \end{bmatrix}$$

$\therefore$ Newton's Method n-D

1: $\vec{x}_0 =$ "Initial guess" $=$ "data"
2: $\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i - (J(F))^{-1}\, \vec{F}(\vec{x}_i)$

¿Cómo calculamos $\left(J(F) \,\middle|\, x = x_i \right)^{-1}$?

Lista de métodos discutidos hasta la fecha

$A = LU$	$PA = LU$	$Jacobi$
$G.S.$	$SOR(w)$	$Cholesky$
$C.G.$		

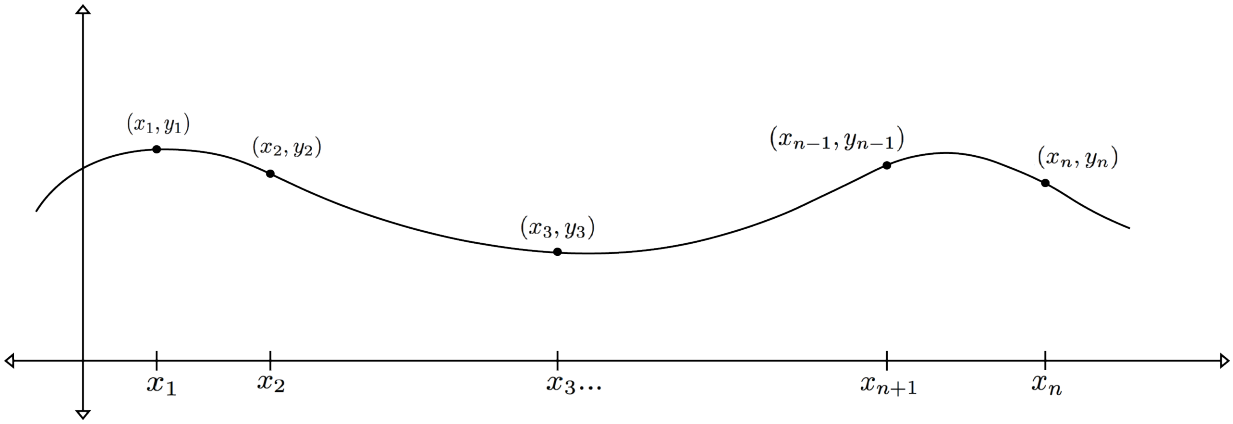
Descripción simple

1: $\vec{x}_0 =$ "data"
2: **for** $i = 0, 1, \ldots$ **do**
3: solve $J(\vec{x}_i)\, \vec{w} = -F(\vec{i})$ for "$\vec{w}$"
4: $\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + w$
5: **end for**

¿Qué ocurre si la matriz $J(\vec{x}_i)$ es singular ?

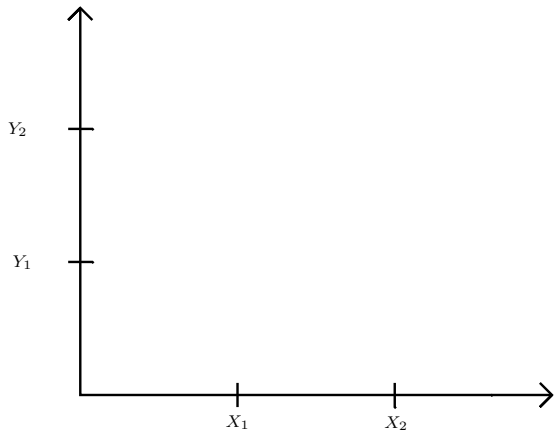
9. Interpolación (1D)

Definición. *La función* $y = P(x)$ *"interpola" los datos* (x_1, y_1),...,(x_n, y_n) *si* $P(x_i) = y_i$ *para cada* $i = 1, ..., n$



Ejemplo ¿Cuál es el polinomio de grado mínimo que interpola (x_1, y_1) y (x_2, y_2)?

lineal o cuadrático o etc...



9.1. Matriz de Vandermonde

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

<u>Recuerde:</u>

$$\frac{||x - \tilde{x}||}{||x||} \leq K(A) \cdot \frac{||b - A \cdot \tilde{x}||}{||b||}$$

9.2. Interpolación de Lagrange

$$\begin{aligned} P_{n-1}(x) &= y_1 \cdot L_1(x) + ... + y_n \cdot L_n(x) \\ &= \sum_{i=1}^{n} y_i \cdot L_i(x) \end{aligned}$$

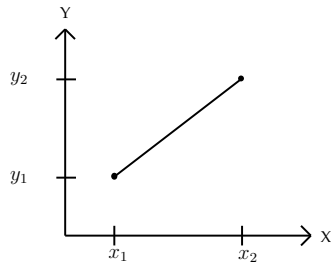
$$\text{donde} \quad L_i(x_i) = 1, \quad L_i(x_J) = 0 \quad \text{para } i \neq J$$

Ejemplo:

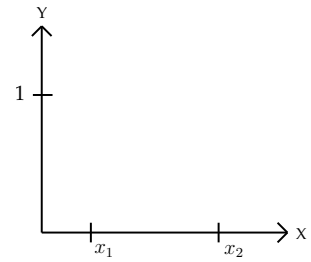
multiplicación

$$\begin{aligned} P_{n-1}(x_J) &= y_1 \cdot L_1(x_J) + ... + y_J \cdot L_J(x_J) + ... + y_n \cdot L_n(x_J) \\ &= y_1 \cdot 0 + ... + \underline{y_J} \cdot 1 + ... + y_n \cdot 0 \\ P_{n-1}(x_J) &= y_J \end{aligned}$$

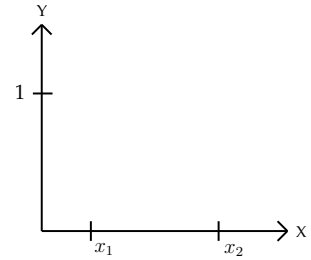
Ejemplo:



$$P_1(x) = y_1 \cdot L_1(x) + y_2 \cdot L_2$$



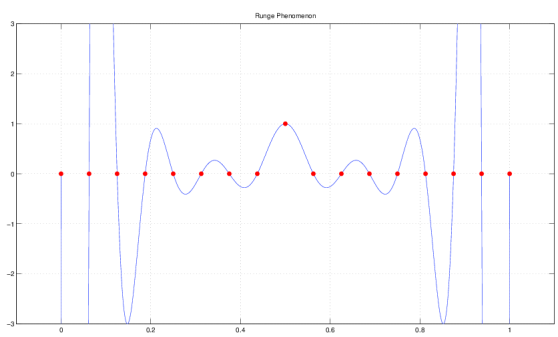
$L_1(x) = \frac{(x-x_2)}{(x_1-x_2)}$



$L_2(x) = \frac{(x-x_2)}{(x_2-x_1)}$

$$\begin{aligned}
P_1(x) &= y_1 \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + y_2 \cdot \frac{(x - x_2)}{(x_2 - x_1)} \\
&= a_0 + a_1 x \ \text{ (similar a la “Matriz de vandermonde”)} \\
&= \underbrace{\left[\frac{y_1 \cdot (-x_2)}{(x_1 - x_2)} + \frac{y_2 \cdot (-x_1)}{(x_2 - x_1)}\right]}_{a_0} + \underbrace{\left[\frac{y_1}{(x_1 - x_2)} + \frac{y_2}{(x_2 - x_1)}\right]}_{a_1} \cdot x
\end{aligned}$$

Para $\overline{\underline{X}} = \{x_1, ..., x_n\}$



¡Ver Jupyter notebook!

$L_k(x) = \frac{l_k(x)}{l_k(x_k)}$

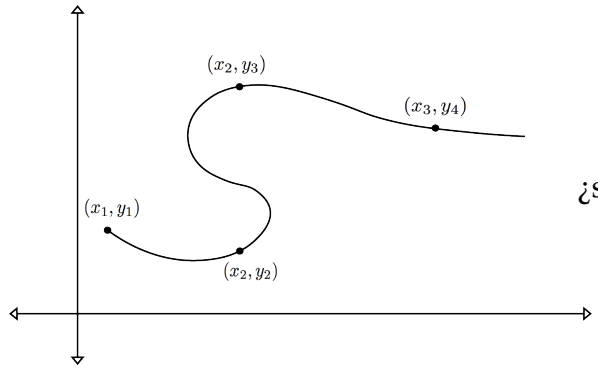
$$L_k(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)...(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})...(x - x_n)}{(x_k - x_1)(x_k - x_2)...(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})...(x_k - x_n)}$$

donde

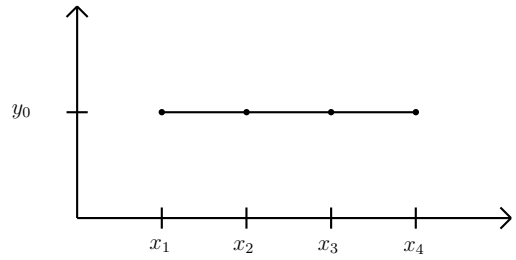
$$(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})...(x-x_n)$$
$$\updownarrow$$
$$l_k(x) = \prod_{i=1, i\neq k}^{n} (x-x_i), L_k(x) = \frac{l_k(x)}{l_k(x_k)}$$

Teorema. *Sea $(x_1, y_1), ..., (x_n, y_n)$ "n" puntos en el plano con <u>distinto</u> "$\underline{x_i}$". entonces existe uno y sólo un polinomio $P(x)$ de grado $n-1$ o "<u>menor</u>" que satisface*

$$P(x_i) = y_i, \ \ \textit{para} \ \ i = 1:n$$



¿se puede?



$P_{n-1}(x) =$ _____

Considerando 2 puntos:

$$\begin{aligned} P_1(x) &= y_0 \cdot \frac{(x-x_2)}{(x_1-x_2)} + y_0 \cdot \frac{(x-x_1)}{(x_2-x_1)} \\ &= y_0 \cdot \left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2} - \frac{x-x_1}{x_1-x_2} \right) \\ &= y_0 \cdot \left(\frac{x_1-x_2}{x_1-x_2} \right) \\ &= \underline{y_0} \end{aligned}$$

9.3. Diferencias divididas de Newton

<u>Recuerde:</u>

$$\begin{aligned} P(x) &= 1 + 2 \cdot x + 3 \cdot x^2 + 4 \cdot x^3 \\ &= 1 + x \cdot (2 + x \cdot (3 + 4 \cdot x)) \\ &\qquad \uparrow \\ &\qquad \text{Mín número de operaciones} \end{aligned}$$

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \cdot x^i \Leftrightarrow \text{ Matriz de Vandermonde}$$

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} Y_i \cdot L_i(x)$$

<u>Def:</u> Denotemos que $\underline{f[x_1, x_2 ... x_{n-1} x_n]}$ es el coeficiente del término x^{n-1} en el único polinomio que interpola $(x_i, \underbrace{f(x_i)}_{Y_i})$.

$$, \quad P_{n-1}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} a_i x^i = a_0 + a_1 \cdot x + ... + \underline{a_{n-1}} \cdot x^{n-1}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow P_{n-1}(x) = f[x_1] &+ f[x_1 \;\; x_2] \cdot (x - x_1) \\ &+ f[x_1 \;\; x_2 \;\; x_3] \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_2) \\ &\vdots \\ &+ f[x_1 ... x_n] \cdot (x - x_1) ... (x - x_{n-1}) \end{aligned}$$

<u>Ej:</u> $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$

x_1	y_1	$= f[x_1]$	$f[x_1 \;\; x_2] = \dfrac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1}$	$f[x_1 \;\; x_2 \;\; x_3] = \dfrac{f[x_2 \;\; x_3] - f[x_1 \;\; x_2]}{x_3 - x_1}$
x_2	y_2	$= f[x_2]$	$f[x_2 \;\; x_3] = \dfrac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2}$	
x_3	y_3	$= f[x_3]$		

$$\Rightarrow P_2(x) = f[x_1] + f[x_1 \;\; x_2] \cdot (x - x_1) + f[x_1 \;\; x_2 \;\; x_3] \cdot (x - x_1) \cdot (x - x_2)$$

Algorítmicamente

Input: $\overline{X} = [x_1, x_2, ..., x_n]$, $\overline{Y} = [y_1, ..., y_n]$
Code:

```
for J = 1 : n do
    f[x_J] = Y_J
end for
for i = 2 : n do
    for J = 1 : n + 1 − i do
        f[x_J ... x_{J+i−1}] = (f[x_{J+1} ... x_{J+i−1}] − f[x_J ... x_{J+i−2}]) / (x_{J+i−1} − x_J)
    end for
end for
```

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f[x_1 ... x_i] \cdot \prod_{J=1}^{i-1} (x - x_J)$$

Ej: $(0,1), (2,3), (3,0)$

Lagrange :

$$P_2(x) = y_1 \cdot L_1(x) + y_2 \cdot L_2(x) + y_3 \cdot L_3(x)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-2)(x-3)}{(0-2)(0-3)}$$
$$L_2(x) = \frac{(x-0)(x-3)}{(2-0)(2-3)}$$
$$L_3(x) = \frac{(x-0)(x-2)}{(3-0)(3-2)}$$
$$P_2(x) = 1 \cdot \frac{(x-2)(x-3)}{6} + 3 \cdot \frac{(x)\cdot(x-3)}{-2} + 0 \cdot L_3(x)$$
$$= 1 + \frac{11}{3} \cdot x - \frac{4}{3} \cdot x^2 = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$$

Vandermonde :

$$P_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

D.D.Newton

0	1		
2	3	1	
3	0	-3	$\frac{-4}{3}$

$\Rightarrow \quad P_2(x) \quad = 1 + 1 \cdot (x-0) + (\frac{-4}{3}) \cdot (x-0)(x-2)$

¿Qué hago si quiero agregar 1 punto nuevo?

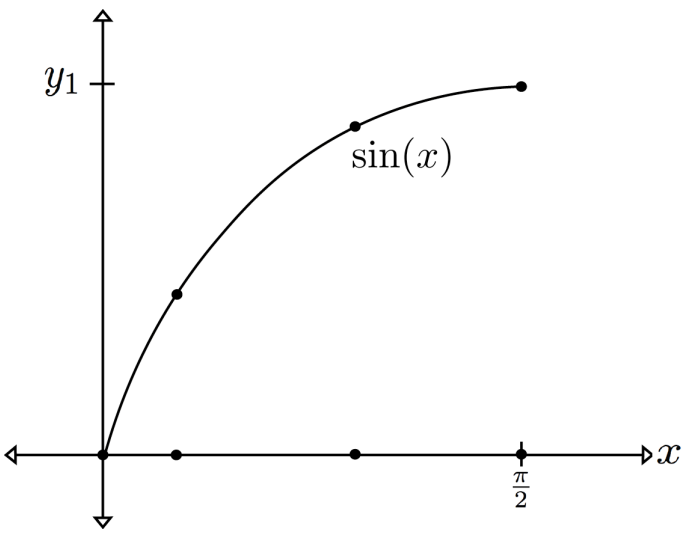
D.D Newton:

x_i	y_i			
0	1			
		1		
2	3		$\frac{-4}{3}$	
		-3		$\frac{-5}{3}$
3	0		$\frac{3}{-1}$	
		0		
1	0			

$$\begin{aligned} P_3(x) &= P_2(x) + (\tfrac{-5}{3}) \cdot (x-0)(x-2) \cdot (x-3) \\ &= 1 + 1 \cdot (x-0) - \frac{4}{3}(x-0)(x-2) \\ &\quad \frac{-5}{3} \cdot (x-0)(x-2)(x-3) \end{aligned}$$

Ejemplo: 3.7

$$f(x) = \sin(x), 4 \text{ puntos equiespaciados en } \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$$



x_i	y_i			
0	0			
		0.9549		
$\frac{\pi}{6}$	$\frac{1}{2}$		-0.2443	
		0.6990		-0.1139
$\frac{2\pi}{6}$	0.8660		-0.4232	
		0.2259		
$\frac{\pi}{2}$	1			

↑ ↑
data

$$\begin{aligned} \Rightarrow P_3(x) = 0 + 0{,}9549 \cdot (x-0) - 0{,}2443 \cdot (x) \cdot \left(x - \frac{\pi}{6}\right) \\ - 0{,}1139 \cdot (x-0)\left(x - \frac{\pi}{6}\right)\left(x - \frac{2\pi}{6}\right) \end{aligned}$$

¡Ver Jupyter notebook!

9.4. Error de Interpolación

Th: Asuma que $P(x)$ es el polinomio interpolador (de grado $n-1$ o menor) que ajusta n puntos $(x_1,\ y_1), ..., (x_n,\ y_n)$. El error de interpolación es

$$f(x) - P(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_n)}{n!} \cdot f^{(n)}(c)$$

donde c está entre el menor y el mayor de los números $x, x_1, ..., x_n$.

Recuerde: $f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + ... + \frac{f^{(n)}(c)}{n!} \cdot (x - x_0)^n$

¿Qué tan buena es la interpolación de $f(x)$ obtenida por $P(x)$?

$$Error(x) = |f(x) - P(x)| \quad \Rightarrow \text{Peor caso} = \max_x |f(x) - P(x)|$$

$$\Rightarrow \max Error = \max_x |(x-x_1)...(x-x_n)| \cdot \frac{|f^{(n)}(c)|}{n!}$$

Ver ejemplo 3.7 en ~~Matlab.~~

Runge Phenomenon $\Leftarrow$ Muy Importante

~~Ver en Matlab.~~

¡Ver Jupyter notebook!

9.5. Interpolación de Chebyshev

Motivación: ¿Qué podemos mejorar de la fórmula de error de interpolación?

Recuerde: $\frac{(x-x_1)\cdot(x-x_2)...(x-x_n)}{n!} \cdot f^{(n)}(c)$

Consideremos $x = [-1, 1]$

¿Podemos encontrar $x_1, ..., x_n$ de tal forma que $(x - x_1)...(x - x_n)$ es minimizado?

Ej: Consideremos n= 2,

$$\begin{array}{lll} \Rightarrow & (x - x_1) \cdot (x- & x_2) \\ \Rightarrow & w(x_1, x_2) = & \text{máx}\,|(x - x_1) \cdot (x - x_2)| \\ & & x \in [-1, 1] \end{array}$$

$$\boxed{\begin{array}{c} [x_1, x_2] = \arg\text{mín}\, w(x_1, x_2) \\ x_1, x_2 \in [-1, 1] \end{array}}$$

¿Cómo obtenemos x_1, x_2 ?

¿Y en general $x_1, ..., x_n$?

Teorema. *La elección de los números reales* $-1 \leq x_1, ..., x_n \leq 1$ *que hace el valor de*

$$\operatorname*{máx}_{-1 \leq x \leq 1} |(x - x_1)...(x - x_n)|$$

lo más pequeño posible es

raíces de los polinomios de Chebyshev $\rightarrow \quad x_i = \cos\left(\frac{(2 \cdot i - 1) \cdot \pi}{2 \cdot n}\right), \; i = 1, ..., n$

y el valor mínimo es $\dfrac{1}{2^{n-1}}$

De hecho, el mínimo es

$$(x - x_1)...(x - x_n) = \frac{1}{2^{n-1}} \cdot T_n(x)$$

¿Es $T_n(x)$ un polinomio realmente?

$\longrightarrow$ donde $T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos(x))$ es el n-ésimo polinomio de Chebyshev

<u>Nota</u>:

$$\begin{aligned} T_{n+1}(x) &= 2 \cdot x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x) \\ T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2 \cdot x^2 - 1 \\ &\vdots \end{aligned}$$

¿Cuál es la interpretación gráfica?

$$x_i = \cos(\theta_i), \quad \theta_i = \frac{(2i-1)\cdot\pi}{2n}, \quad i = 1, ..., n$$

$i = 1 \Rightarrow \theta_1 = \frac{\pi}{2n}$

$n = 5 \Rightarrow \theta_1 = \frac{1}{5}\cdot\frac{\pi}{2}$

$\theta_2 = \frac{3\pi}{2n} = \frac{3\pi}{10}, \qquad \theta_3 = \frac{5\pi}{2\cdot 5} = \frac{\pi}{2}$

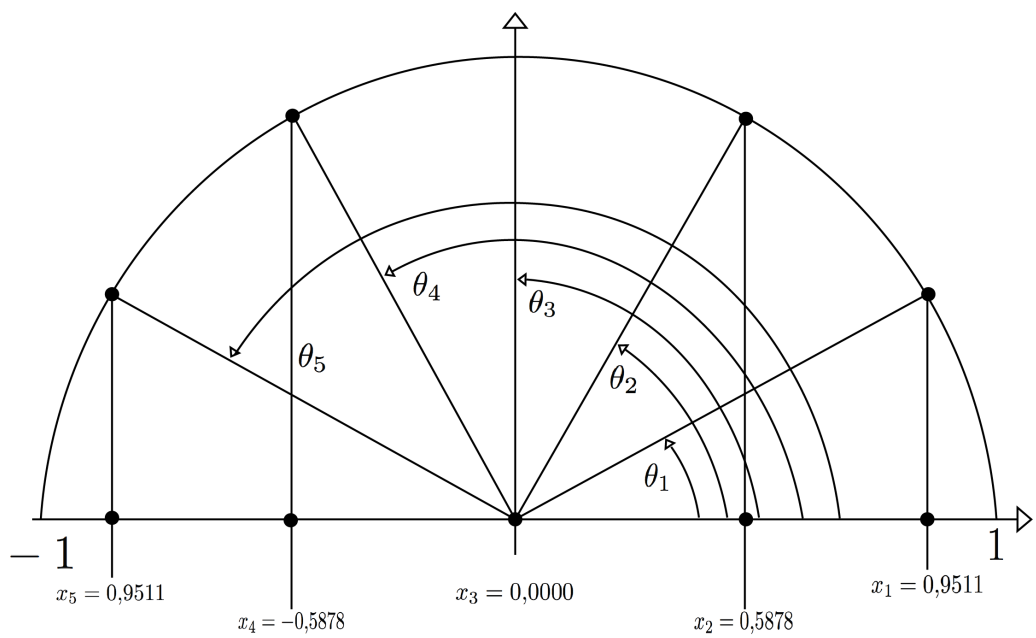
$\theta_4 = \frac{7\pi}{2\cdot 5} = \frac{7\pi}{10}, \qquad \theta_5 = \frac{9\pi}{10}$

$\theta_1 - \theta = \frac{1}{n}\cdot\frac{\pi}{2} = \frac{1}{5}\cdot\frac{\pi}{2}$

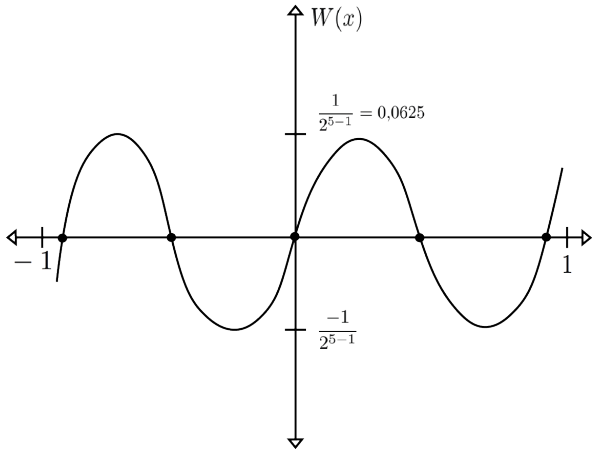
$\theta_{i+1} - \theta_i = \frac{2}{n}\cdot\frac{\pi}{2} = \frac{\pi}{5}$

$\Rightarrow x_i = \cos(\theta_i)$

$x_1 = 0{,}9511, x_2 = 0{,}5878, x_3 = 0{,}0000, x_4 = -0{,}5878, x_5 = -0{,}9511$



Recuerde: $W(x) = \prod_{i=1}^{n}(x - x_i)$



Ejemplo: Ejemplo 3.10, Encuentre el peor caso del error para la diferencia de e^x y el polinomio de Chebyshev de grado 4 en el intervalo $x = [-1, 1]$.

$$\Rightarrow \qquad |e^x - P_4(x)| = \frac{|(x - x_1)...(x - x_5)|}{n!} \cdot |f^{(5)}(c)|$$

$$\leq \frac{1}{2^{5-1}} \cdot \frac{1}{n!}|f^{(5)}(c)|$$

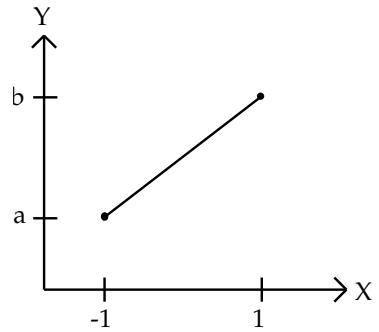
$$f(x) = e^x \Rightarrow f^{(5)}(c) = e^x, \text{max en} [-1, 1] \Rightarrow e^1$$

$$\Rightarrow \qquad |e^x - P_4(x)| \leq \frac{e}{2^4 \cdot 5!} \approx 0{,}00142$$

9.6. Cambio de Variable

Chebyshev points: $-1 \leq x_i \leq 1$ y en general $f(x)$ definido en $a \leq x \leq b$

$\Rightarrow$



$$y = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot x$$

$$\Rightarrow \quad \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Chebyshev} \\ \text{en } a \leq x \leq b}}{\tilde{x}_i} = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Chebyshev points} \\ \text{en } -1 \leq x_i \leq 1}}{x_i}$$

$$\Rightarrow |(x - x_i)...(x - x_n)| \leq \frac{(\frac{b-a}{2})^n}{2^{n-1}} \text{ en } x = [a, b]$$

También se podría hacer un cambio de variable de $[a, b]$ a $[-1, 1]$ y usar la misma teoría.

10. Splines

Idea: Otro método para interpolar data. Sin embargo, la interpolación se realiza localmente con cooperación global.
Considere que se tienen los siguientes puntos: $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$. ¿Qué métodos conocemos?

1. Matriz de Vandermonde
2. Interpolación de Lagrange
3. Diferencias divididas de Newton

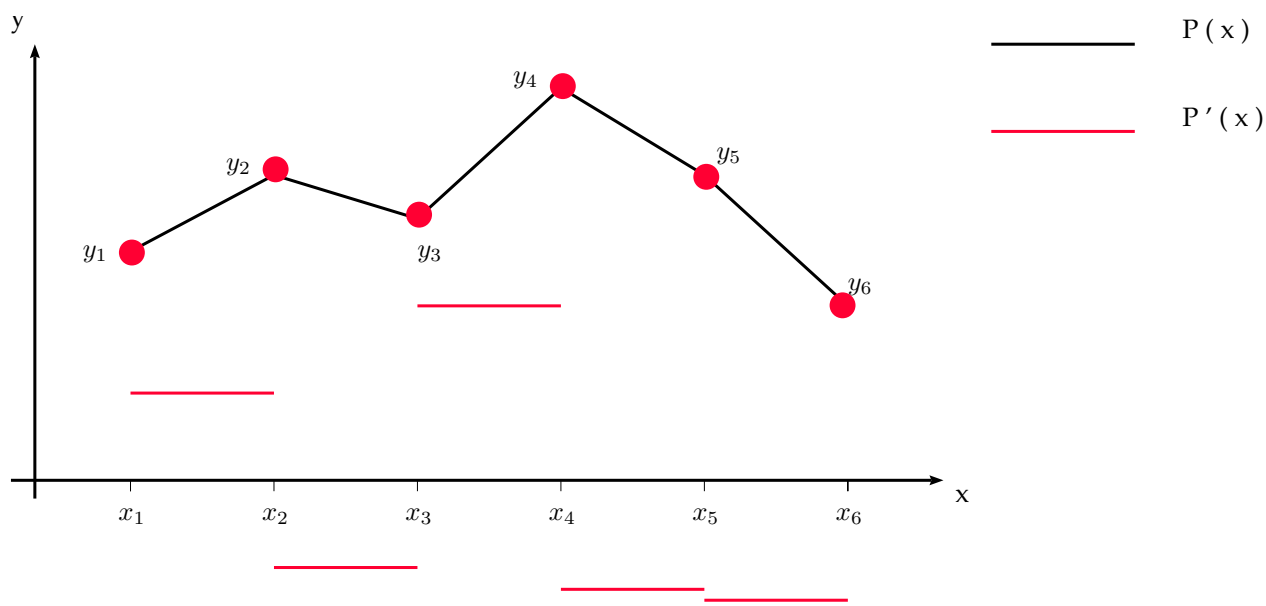
¿Algún problema?

¿Cómo lo podemos resolver?

¿Es posible resolver el problemas en este caso?

¿Qué podemos hacer?

Data:



Formalmente,

$$
\begin{aligned}
S_1(x) &= y_1 + b_1(x - x_1), \quad x \in [x_1, x_2] \\
S_2(x) &= y_2 + b_2(x - x_2), \quad x \in]x_2, x_3] \\
&\vdots \\
S_5(x) &= y_5 + b_5(x - x_5), \quad x \in]x_5, x_6]
\end{aligned}
$$

¿Cómo encontramos b_i?
Continuidad.

$$
\begin{aligned}
S_1(x_2) &= S_2(x_2) \\
y_1 + b_1(x_2 - x_1) &= y_2 \\
b_1(x_2 - x_1) &= y_2 - y_1
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow$$

$$
\begin{bmatrix}
(x_2 - x_1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & (x_3 - x_2) & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & (x_4 - x_3) & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & (x_5 - x_4) & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & (x_6 - x_5)
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} y_2 - y_1 \\ y_3 - y_2 \\ y_4 - y_3 \\ y_5 - y_4 \\ y_6 - y_5 \end{bmatrix}
$$

$$A \cdot x = b$$

¿Cómo resolvemos el sistema de ecuaciones lineales?
PALU, Cholesky, Jacobi, Gauss-Seidel, Gradiente descendente, SOR(w), Gradiente conjugado.
¿Cuáles son las limitaciones de este método?

¿Cómo lo podemos mejorar?

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

Incógnitas: $b_i,\ c_i,\ d_i$

¿Cómo encontramos las incógnitas?

Continuidad de la función

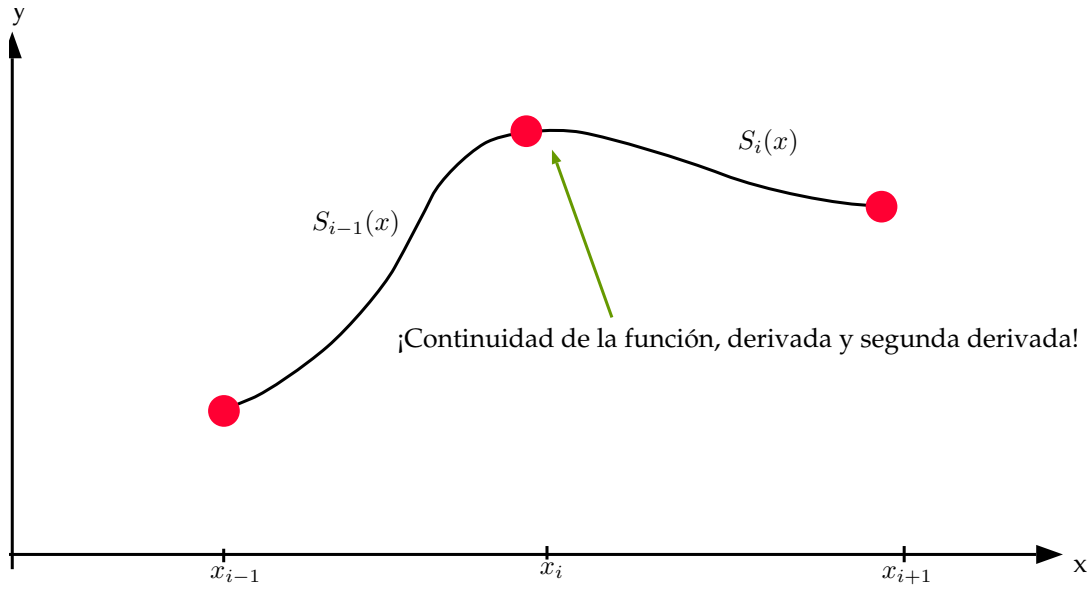
$$P1 : S_i(x_i) = y_i \quad S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}, \quad i = i, \ldots, n-1$$

Continuidad de la derivada

$$P2 : S'_{i-1}(x_i) = S'_i(x_i), \quad i = 2, \ldots, n-1$$

Continuidad de la segunda derivada

$$P3 : S''_{i-1}(x_i) = S''_i(x_i), \quad i = 2, \ldots, n-1$$



Esta enumeración viene del texto guía del curso.

Cantidad de variables: $3n - 3$
Cantidad de ecuaciones: $3n - 5$
¿Es cuadrada la matriz?: **No**
¿Qué falta o que sobra?: **Depende**
¿Qué opciones tenemos?: "**Condiciones de borde**"
K_1 **y** K_2 **valores predefinidos.**

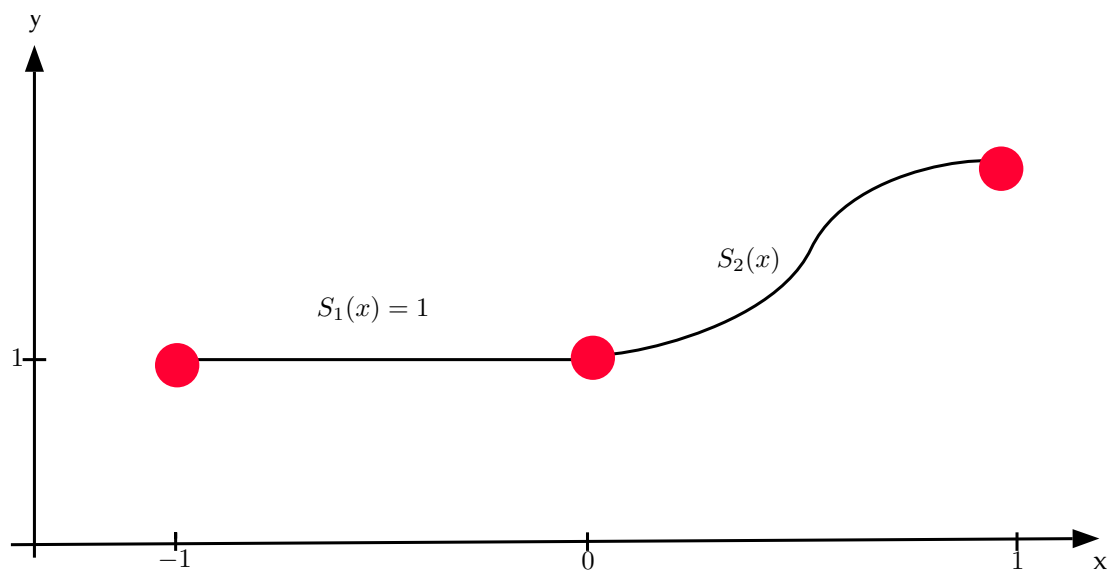
P4a:	Natural Spline	$S_1''(x_1) = 0, \quad S_{n-1}''(x_n) = 0$
P4b:	Curvatura ajustada	$S_1''(x_1) = K_1, \quad S_{n-1}''(x_n) = K_2$
P4c:	Clamped Cubic Spline	$S_1'(x_1) = P_1, \quad S_{n-1}''(x_n) = P_2$
P4d:	Terminada parabólicamente	$d_1 = 0, \quad d_{n-1} = 0$
P4e:	Not-a-knot cubic spline	$S_1'''(x_2) = S_2'''(x_2) \quad \& \quad S_{n-2}'''(x_{n-1}) = S_{n-1}'''(x_{n-1})$

Teorema

Asuma $n \geq 2$. Entonces, para el conjunto de datos $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ y para cualquiera de las condiciones de borde P4a, P4b y P4c, existe una única spline cúbica que satisface las condiciones de borde y se ajusta a los puntos dados. Lo mismo es válido para P4d con $n \geq 3$ y para P4e con $n \geq 4$.

Ejemplo

P.177 q.17. Asuma que la parte izquierda de una spline cúbica natural es $S_1(x) = 1$ en el intervalo [-1,0]. Encuentre 3 diferentes posibilidades para la definición de $S_2(x)$ en [0,1].



$$S_2(x) = 1 + b(x-0) + c(x-0)^2 + d(x-0)^3$$

$$S_1(0) = S_2(0) \quad \surd\surd$$

$$S_1'(0) = 0, S_2'(x) = b + 2cx + 3dx^2$$

$$S_2'(0) = b$$

$$\therefore b = 0$$

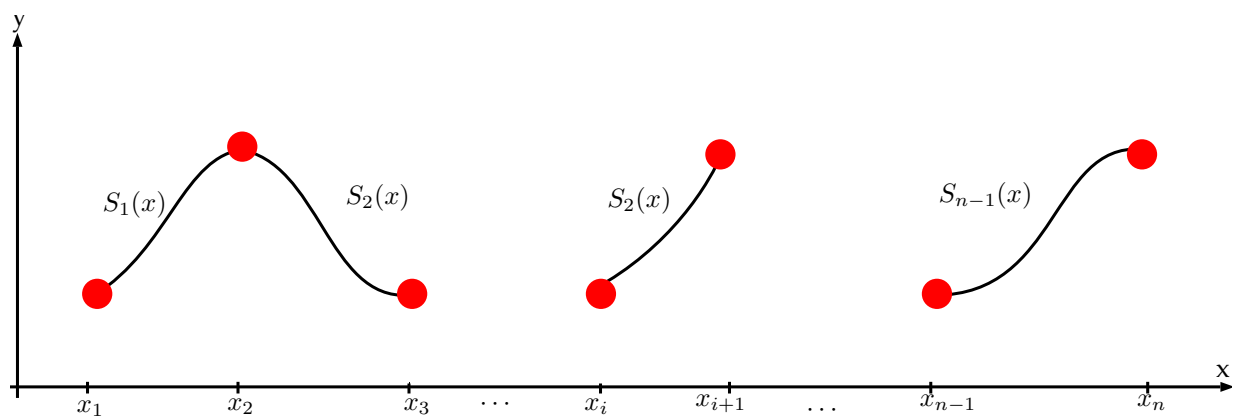
$$S_1''(0) = 0, S_2'(x) = 2c + 6dx$$

$$S_2''(0) = 2c$$

$$\therefore c = 0$$

$$\Rightarrow S_2(x) = 1 + dx^3$$

P4a: $\Rightarrow S_2''(1) = 6d = 0 \Rightarrow d = 0 \Rightarrow S_2(x) = 1$
P4b: $\Rightarrow S_2''(1) = 6d = K_2 \Rightarrow d = K_2/6 \Rightarrow S_2(x) = 1 + x^3 \cdot K_2/6$
P4c: $\Rightarrow S'(1) = 3d \cdot 1^2 = P_2 \Rightarrow d = P_2/3 \Rightarrow S_2(x) = 1 + x^3 \cdot P_2/3$
P4d: $\Rightarrow d = 0 \Rightarrow S_2(x) = 1$
P4e: $\Rightarrow S_1'''(0) = 0, S_2'''(0) = 6d \Rightarrow d = 0 \Rightarrow S_2(x) = 1$
En general



$$S_i(x) = y_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3, \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

Formalmente

$$S(x) = \begin{cases} S_1(x), & x \in [x_1, x_2] \\ S_2(x), & x \in]x_2, x_3] \\ \vdots \\ S_{n-1}(x), & x \in]x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

con las siguientes propiedades:

1. $S_i(x_i) = y_i, S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}, \quad i = 1, \ldots, n-1$
2. $S_i'(x_i) = S_i'(x_i), \quad i = 2, \ldots, n-1$
3. $S_{i-1}''(x_i) = S_i''(x_i), \quad i = 2, \ldots, n-1$

Ejemplo

1. (0,0), (1,1), (2,4). Determine las ecuaciones para construir la spline cúbica considerando todas las posibles condiciones de borde.
2. Encuentre "c" para las siguientes splines cúbicas.

   a)
$$S(x) = \begin{cases} 4 - \frac{11}{4}x + \frac{3}{4}x^3, & x \in [0,1] \\ 2 - \frac{1}{2}(x-1) + c(x-1)^2 - \frac{3}{4}(x-1)^3, & x \in [1,2] \end{cases}$$

   b)
$$S(x) = \begin{cases} 3 - 9x + 4x^2, & x \in [0,1] \\ -2 - (x-1) + c(x-1)^2, & x \in [1,2] \end{cases}$$

3. Decida si las siguientes funciones son splines cúbicas.

   a)
$$S(x) = \begin{cases} x^3 + x - 1, & x \in [0,1] \\ -(x-1)^3 + 3(x-1)^2 + 3(x-1) + 1, & x \in [1,2] \end{cases}$$

   b)
$$S(x) = \begin{cases} 2x^3 + x^2 + 4x + 5, & x \in [0,1] \\ (x-1)^3 + 7(x-1)^2 + 12(x-1) + 12, & x \in [1,2] \end{cases}$$

11. QR - Factorization

Let $\begin{bmatrix} a_1 & | & a_2 & | & \cdots & | & a_n \end{bmatrix}$ be a mxn matrix with $m > n$, and as is the j-th column of A.

<u>Idea:</u> Similar to LU or PA=LU but using orthogonality, and it is different from the SVD.

11.1. Gram-Schmidt orthogonalization and least squares

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Original matrix}}}{A_{mxn}} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{orthogonal matrix}}}{Q_{mxn}} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Upper triangular matrix}}}{R_{nxn}}$$

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a_1} & | & \mathbf{a_2} & | & \cdots & | & \mathbf{a_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & | & q_2 & | & \cdots & | & q_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \cdots & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & & & \vdots \\ 0 & 0 & r_{33} & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & r_{nn} \end{bmatrix} = QR$$

$$\Downarrow$$

$$\| q_i \|_2^2 = q_i^T \cdot q_i$$

$$\&$$

$$q_i^T \cdot q_j = 0, \text{ if } i \neq j$$

<u>Def:</u> A square matrix Q is <u>orthogonal</u> , if $Q^T = Q^{-1}$.

$\uparrow$

So, we can easily compute
the inverse $\Rightarrow$ very easy solve
linear system of equations with it.

<u>Th:</u> If Q is an orthogonal mxm matrix and x is an m-dimensional vector, then $\| Qx \|_2 = \| x \|_2 \leftarrow$ this is only valid for norm <u>2</u>

<u>Proof:</u> $\| Qx \|_2^2 = (Qx)^T \cdot (Qx) = x^T \underbrace{Q^T \cdot Q}_{I} x = x^T x = \| x \|_2^2$

<u>Notice:</u>

$$A_{mxn} = \underbrace{Q_{mxn} \cdot R_{nxn}}_{\text{Reduced QR}} = \underbrace{\overbrace{\begin{bmatrix} Q_{mxn} & | & q_{n+1} & | & \cdots & | & q_n \end{bmatrix}}^{mxm\ matrix} \cdot \overbrace{\begin{bmatrix} & R & \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}}^{mxn\ matrix}}_{Full-QR}$$

How do we get Q & R ?

$$A = QR = \begin{bmatrix} a_1 & | & a_2 & | & a_3 & | & \cdots & | & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & | & q_2 & | & \cdots & | & q_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_1 | & a_2 | & a_3 | & \cdots | & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} \cdot q_1 & | & r_{12} \cdot q_1 + r_{22} \cdot q_2 & | & \cdots & | & \sum_{i=1}^{n} r_{in} \cdot q_i \end{bmatrix}$$

Multiplying $Q\&R$

the k-th term
$\sum_{i=1}^{k} r_{ik} \cdot q_i$

<u>Idea:</u> Each column from the left must be equal to the same column on the right hand side, i.e, the k-th column from left must be equal to the k-th column from the RHS.

	LHS	**RHS**
1st columns:	a_1	$r_{11} \cdot q_1$
2nd columns:	a_2	$r_{12} \cdot q_1 + r_{22} \cdot q_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
k-th columns:	a_k	$\sum_{i=1}^{k} r_{ik} \cdot q_i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
n-th columns	a_n	$\sum_{i=1}^{n} r_{in} \cdot q_i$

1st equation:

$$\underset{\text{Known}}{a_1} = \underset{\text{Unknown}}{r_{11}} \cdot \underset{\text{Unknown}}{q_1}$$

What else do we know? $q_i^T \cdot q_i = 1 \Longleftrightarrow \| q_i \|_2 = 1, \ \& \ q_i^T \cdot q_j = 0$, for $i \neq j$

How do we use that to find r_{11} & q_1?

2 options

$$\| a_1 \|_2 = | r_{11} | \cdot \underbrace{\| q_1 \|}_{1} \qquad\qquad q_1^T \cdot a_1 = r_{11} \cdot \underbrace{q_1^T \cdot q_1}_{1}$$

$$\| a_1 \| = \| r_{11} \| \qquad\qquad q_1^T \cdot a_1 = r_{11}$$

Which option can we use?
Yes, the first one because we don't know "q_1".
However we must define, $r_{ii} > 0 \ \Rightarrow \boxed{r_{11} = \| a_1 \|}$

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Known}}}{a_1} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Known}}}{r_{11}} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Unknown}}}{q_1}$$

How do we find q_1 ?

$$q_1 = \boxed{\frac{a_1}{r_{11}}} \quad :)$$

2nd equation:

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Known}}}{a_2} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Unknown}}}{r_{12}} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Known}}}{q_1} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Unknown}}}{r_{22}} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Unknown}}}{q_2}$$

What can we do here ?
Can we compute the norm of a_2, similar as before?

$$\begin{aligned} \| a_2 \|_2^2 = a_2^T \cdot a_2 &= (r_{12} \cdot q_1 + r_{22} \cdot q_2)^T \cdot (r_{12} \cdot q_1 + r_{22} \cdot q_2) \\ &= (r_{12} \cdot q_1^T + r_{22} \cdot q_2^T) \cdot (r_{12} \cdot q_1 + r_{22} \cdot q_2) \\ &= r_{12}^2 + r_{22}^2 \end{aligned}$$

$$\therefore \quad \| a_2 \|_2 = \sqrt{r_{12}^2 + r_{22}^2} \Rightarrow 1 \text{ eq } l \text{ 2 unknowns...}$$

What property can we use here?

$$q_i^T \cdot q_i = 1 \quad \& \quad q_i^T \cdot q_j = 0 \qquad i \neq j$$

So, we also have 2 options

$$\swarrow \qquad\qquad\qquad\qquad \searrow$$

$$q_1^T \cdot a_2 = r_{12} \cdot \underbrace{q_1^T \cdot q_1}_{1} + r_{22} \cdot \underbrace{q_1^T \cdot q_2}_{0} \quad , \quad q_2^T \cdot a_2 = r_{12} \cdot \underbrace{q_2^T \cdot q_1}_{0} + r_{22} \cdot \underbrace{q_2^T \cdot q_2}_{1}$$

$$q_1^T \cdot a_2 = r_{12} \quad , \quad q_2^T \cdot a_2 = r_{22}$$

$$\underset{\text{known}}{\uparrow} \quad \underset{\text{known}}{\uparrow} \quad \underset{\text{Unknown}}{\uparrow} \qquad\qquad \underset{\text{Unknown}}{\uparrow} \quad \underset{\text{known}}{\uparrow} \quad \underset{\text{Unknown}}{\uparrow}$$

$$\downarrow \qquad\qquad\qquad\qquad \downarrow$$

now, known! $\qquad\qquad$ it does not help...!

$$\uparrow$$

we have a winner!

What do we have?

$$a_2 = r_{12} \cdot q_1 \quad + \quad r_{22} \cdot q_2$$

$$\underset{\text{Knowns}}{\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow} \qquad \underset{\text{Unknowns}}{\uparrow \quad \uparrow}$$

What can we do now? Do you remember what we did before?

$$a_1 = r_{11} \cdot q_1, \quad \text{1st step:} \quad r_{11} = \| a_1 \|, \text{ considering } r_{ii} > 0$$
$$\text{2st step:} \quad q_1 = \frac{a_1}{r_{11}}$$

So, moving known things to the left ...

$$\underbrace{a_2 - r_{12} \cdot q_1}_{\text{this is a known vector}} = \underset{\text{Unknowns}}{\underset{\uparrow}{r_{22} \cdot q_2}}$$

Do you see it now?

$$r_{22} = \| a_2 - r_{12} \cdot q_1 \|_2$$

$$\&$$

$$q_2 = \frac{a_2 - r_{12} \cdot q_1}{r_{22}}$$

In general:

$$a_k = \underset{\substack{\text{Unknown} \\ \downarrow \\ \text{known}}}{\overset{\text{Unknown}}{\overset{\uparrow}{r_{1k}}}} \cdot \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{q_1} + \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{\overset{\text{Unknown}}{\overset{\uparrow}{r_{2k}}}} \cdot \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{q_2} + \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{\overset{\text{Unknown}}{\overset{\uparrow}{r_{3k}}}} \cdot \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{q_3} + \ldots + \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{\overset{\text{Unknown}}{\overset{\uparrow}{r_{k-1,k}}}} \cdot \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Known}}}{q_{k-1}} + \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Unknown}}}{\overset{\text{Unknown}}{\overset{\uparrow}{r_{k,k}}}} \cdot \underset{\substack{\downarrow \\ \text{Unknown}}}{\overset{\text{We don't know the } k\text{-th orthonormal vector}}{q_k}}$$

$\therefore$ We obtain the <u>Classical Gram-Schmidt Orthogonalization</u>

Let a_j, $j = 1 : n$ be a set of linearly independent vectors.

(1)**For** $j = 1 : n$
(2) $Y = a_j$
(3) **For** $i = 1 : j - 1$
(4) $r_{ij} = q_i^T \cdot a_j$ (If we change this line to: $r_{ij} = q_i^T \cdot Y$ we obtain the modified
(5) $Y = Y - r_{ij} \cdot q_i$ Gram-Schmidt orthogonalization which is MUCH BETTER WHY?)
(6) **end**
(7) $r_{jj} = \| Y \|_2$
(8) $q_j = \frac{Y}{r_{jj}}$
(9)**end**

How do we use this with least square problems?

Given

$$A_{mxn} \cdot X_{nx1} = b_{mx1}$$

Find

$$A_{mxn} = Q_{mxm} \cdot [\tfrac{R_{nxn}}{0}] \text{ full } QR$$

Replace

$$Q_{mxm} \cdot [\tfrac{R_{nxn}}{0}] \cdot X = b_{mx1}$$

Multiply by: Q_{mxm}^T

$$\underbrace{Q_{mxm}^T \cdot Q_{mxm}}_{I} \cdot [\tfrac{R_{nxn}}{0}] \cdot X = Q_{mxm}^T \cdot b$$

$$\text{But recall} \quad Q_{mxm} = \overset{\text{reduced } Q}{\overset{\swarrow}{\big[Q_{mxm}}} \quad | \quad q_{n+1} \quad | \quad \cdots \quad | \quad q_m \big]$$

$$\Rightarrow \quad \begin{bmatrix} R_{nxn} \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix} \cdot X \begin{bmatrix} Q_{mxn}^T \\ \hline q_{n+1} \\ \vdots \\ q_m \end{bmatrix} \cdot b$$

So, since the lower part of $\begin{bmatrix} R_{nxn} \\ \hline 0 \end{bmatrix}$ is zero, $q_{n+1}, ..., q_m$ don't play any role in the least square solution, thus.

matrix vector multiplication

$$R_{nxn} \cdot \overline{X} = Q^T_{mxn} \cdot b$$

Upper triangular, so we can use Back-Substitution.

Note: This result could also be derived from the normal equations.
Ex 4.14

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}}_{A} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}}_{b},$$

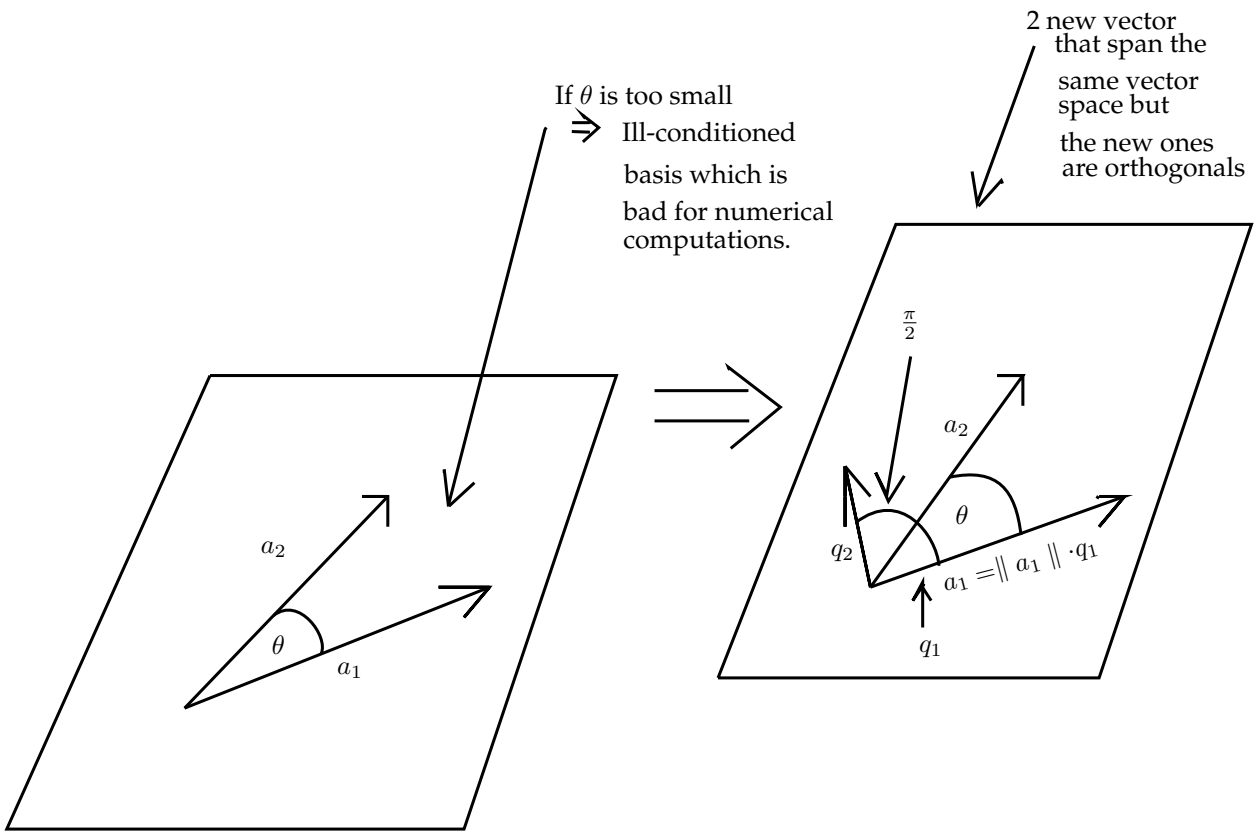
$$\text{A}= \frac{1}{15} \cdot \begin{bmatrix} 5 & -14 & 2 \\ 10 & 5 & 10 \\ 10 & 2 & -11 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{15} \cdot \begin{bmatrix} 5 & 10 & 10 \\ -14 & 5 & 2 \\ 2 & 10 & -11 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ q_1 & q_2 & q_3 \end{matrix}$$

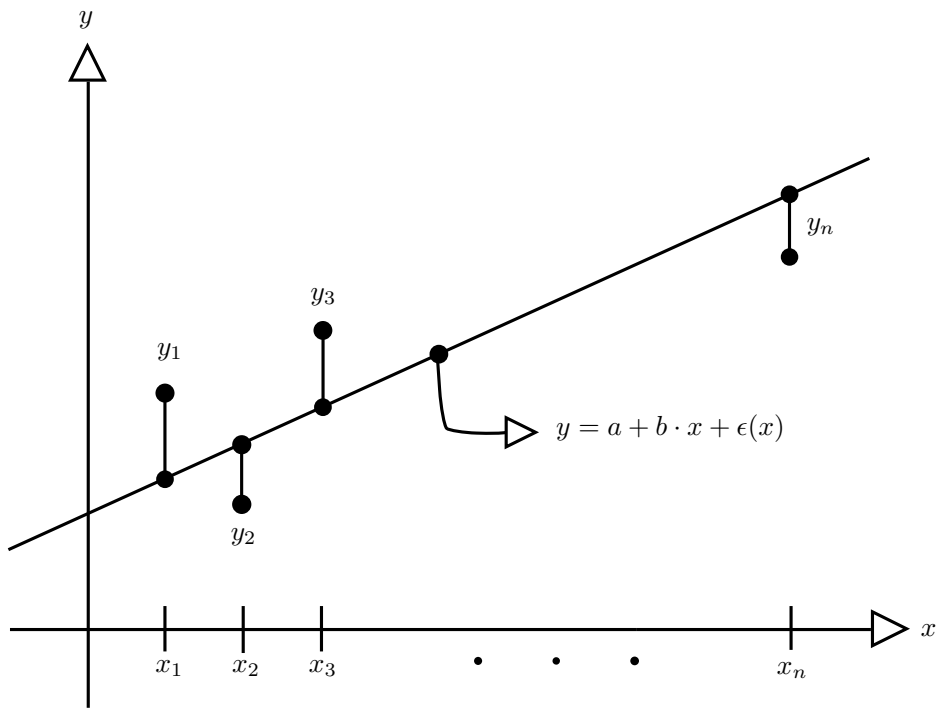
$$\Rightarrow \quad \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \overline{x_1} \\ \overline{x_2} \end{bmatrix} = \frac{1}{15} \cdot \overbrace{\begin{bmatrix} 5 & 10 & 10 \\ -14 & 5 & 2 \end{bmatrix}}^{Q^T_{mxn}} \cdot \overbrace{\begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}}^{b} = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \overline{x_1} = 3{,}8 \quad , \quad \overline{x_2} = 1{,}8$$

Graphycal interpretation


If θ is too small
$\Rightarrow$ Ill-conditioned
basis which is
bad for numerical
computations.
2 new vector
that span the
same vector
space but
the new ones
are orthogonals
a_2
θ
a_1
$\frac{\pi}{2}$
a_2
θ
q_2
$a_1 = \| a_1 \| \cdot q_1$
q_1

12. Least Squares



How do we find "a" & "b" such that we minimize the error, i.e. quadratic error, between y_i & $a + b\,x_i$?

$$\text{Total Error: } \sum_{i=1}^{n} (\underbrace{y_i}_{\text{target } y_i} - \underbrace{a - b\,x_i}_{\text{estimated } \hat{y}_i = a+b})^2 = F(a,b)$$

How do we find the MIN of $F(a,b)$?

$$\bigtriangledown F =< 0, 0 >$$

$$(1) \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial a} = F_a = \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - b\,x_i)^2 = \sum_i 2\,(y_i - a - b\,x_i)\,(-1) = 0$$

$$(2) \Rightarrow \frac{\partial F}{\partial b} = F_a = \frac{\partial}{\partial b} \sum_{i} (y_i - a - b\,x_i)^2 = \sum_i 2\,(y_i - a - b\,x_i)\,(-x_i) = 0$$

$(1) \Rightarrow$

$$\sum_i (y_i - a - b\,x_i) = 0$$

$$\left(\sum_i y_i\right) - a\,n - b\,\left(\sum_i x_i\right) = 0$$

$$\therefore n\,a + \left(\sum_i y_i\right)\,b = \left(\sum_i x_i\right)$$

(2) $\Rightarrow$

$$\sum_i (y_i\,x_i - a\,x_i - b\,x_i^2) = 0$$

$$\left[\sum_i y_i\,x_i\right] - a\,\left(\sum_i x_i\right) - b\,\left(\sum_i x_i^2\right) = 0$$

$$\therefore \left(\sum_i x_i\right)\,a + \left(\sum_i x_i^2\right)\,b = \left(\sum_i y_i\,x_i\right)$$

$\therefore$

$$\begin{pmatrix} n & \left(\sum_i x_i\right) \\ \left(\sum_i x_i\right) & \left(\sum_i x_i^2\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\sum_i y_i\right) \\ \left(\sum_i y_i\,x_i\right) \end{pmatrix}$$

$$a = \frac{\left(\sum_i x_i^2\right)\,\left(\sum_i y_i\right) - \left(\sum_i x_i\right)\,\left(\sum_i y_i\,x_i\right)}{n\,\left(\sum_i x_i^2\right) - \left(\sum_i x_i^2\right)^2}$$

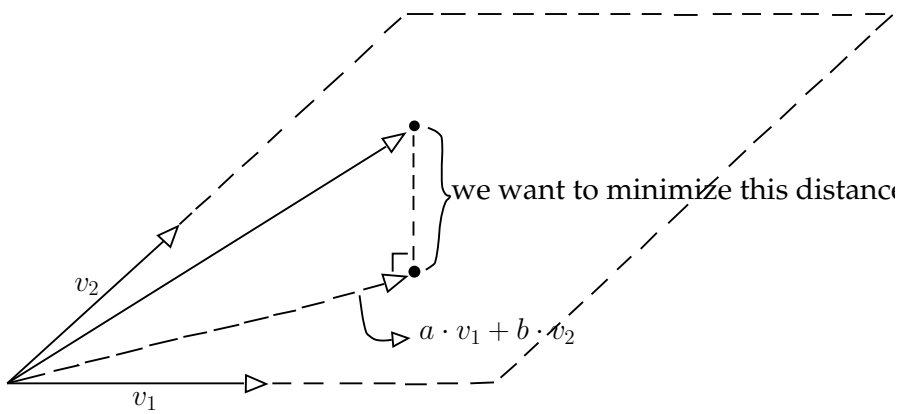
$$b = \frac{n\,\left(\sum_i y_i\,x_i\right) - \left(\sum_i x_i\right)\,\left(\sum_i y_i\right)}{n\,\left(\sum_i x_i^2\right) - \left(\sum_i x_i^2\right)^2}$$

Another way to see this...
For each $x_i \;\Rightarrow\; a + b\,x_i = y_i$
$\Rightarrow$

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

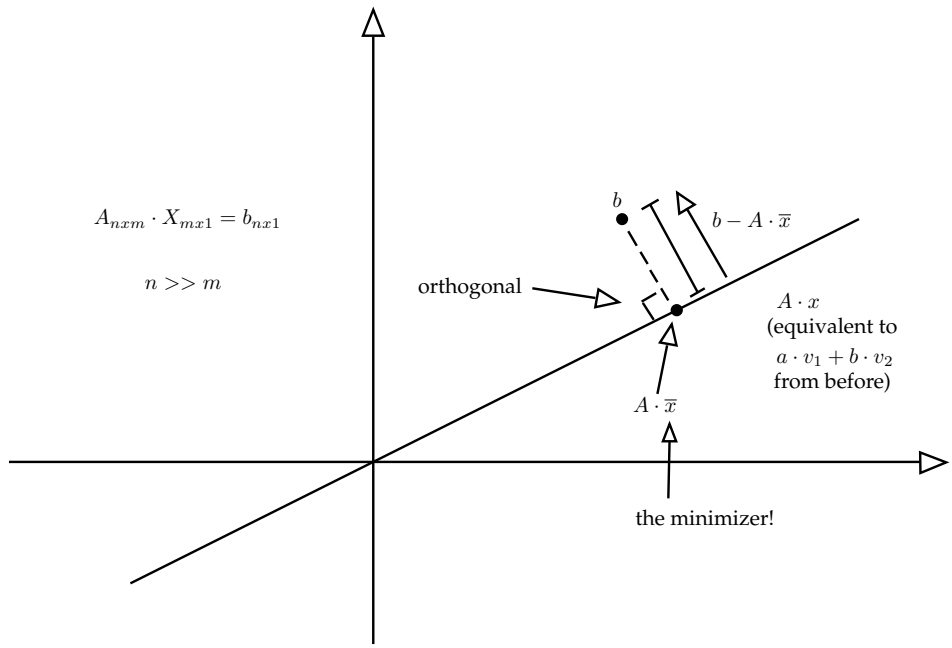
$\Rightarrow$

$$A_{nx2} = [V_1, V_2]$$



basis of "plane" define v_1 & v_2

Again, in general this could be seen as



$$\boxed{\text{Recall that two vectors } (x, y) \text{ are orthogonal if } x^* y = 0}$$

Now, for $\overline{x}$ (the minimizer) we know that $A\,x$ is orthogonal to the vector $b - A\,\overline{x}$
$\Rightarrow$

$$(A\,x)^*\,(b - A\,\overline{x}) = 0$$
$$x^*\,A^*\,(b - A\,\overline{x}) = 0$$

Considering "b" $\neq \overrightarrow{0}$, How do we make 0 the previous equation?

$$\Rightarrow A^*\,(b - A\,\overline{x}) = 0$$
$$\Rightarrow A^*\,b - A^*\,A\,\overline{x} = 0$$

$$\Rightarrow \qquad \underbrace{A^*\,A\,\overline{x} = A^*\,b}_{\text{this is known as the normal equations}}$$

$$\therefore\ \overline{x} = \qquad \underbrace{(A^*\,A)^{-1}\,A^*\,b}_{\text{More-Penrose pseudoinverse}}$$

Ex: 4.2 from text book, $\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}}_{\text{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}}_{\text{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}}_{\text{b}}$

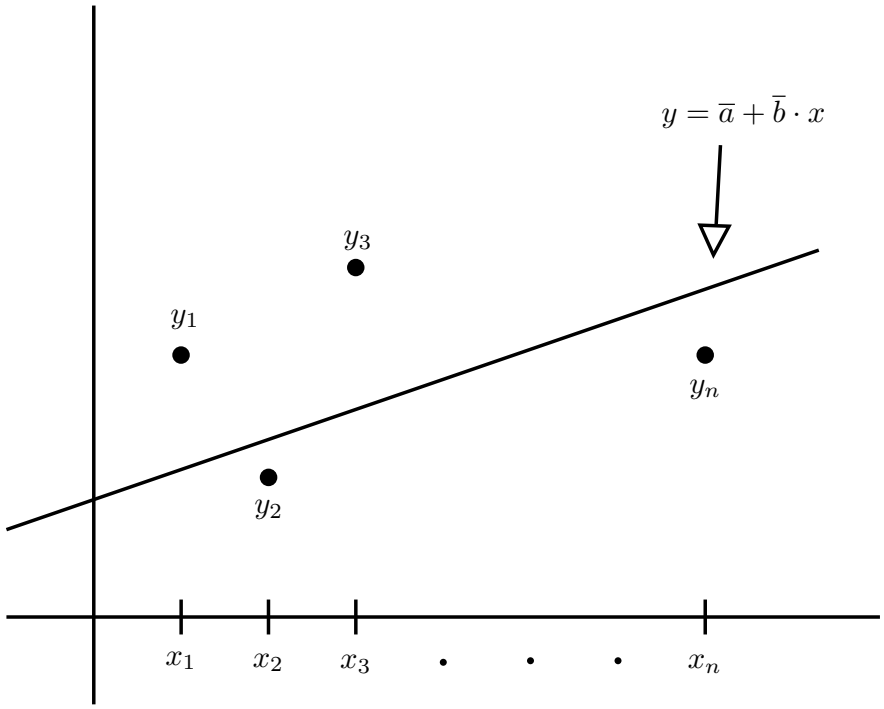
$$\Rightarrow A^* \, A \, \overline{x} = A^* \, b \Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ -4 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}}_{\begin{bmatrix} 9 & 6 \\ 6 & 29 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{x}_1 \\ \overline{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 45 \\ 75 \end{bmatrix}} \overline{x} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ -4 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \overline{x}_1 = 3{,}8 \;\; \& \;\; \overline{x}_2 = 1{,}8$$

$$r = b - A \, \overline{x} = \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3{,}8 \\ 1{,}8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}4 \\ 2 \\ -2{,}2 \end{bmatrix}$$

$\|r\|_2 = \sqrt{(0{,}4)^2 + (2)^2 + (-2{,}2)^2} = 3_{\lrcorner} \rightarrow$ Min.

Recall:



$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}}_{\text{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}}_{\text{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\text{b}}$$

Normal equations: $A^* \, A \, \overline{x} = A^* b$

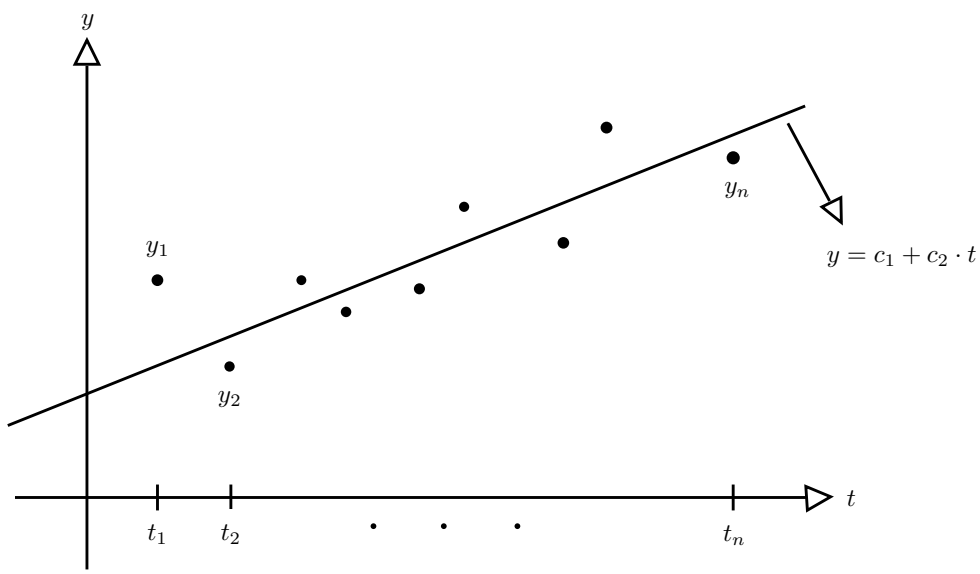
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{a} \\ \overline{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & & 1 \\ x_1 & x_2 & & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i (x_i)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{a} \\ \overline{b} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i x_i \, y_i \end{bmatrix}$$

Same as before!
(see page 2)

13. A survey of Models

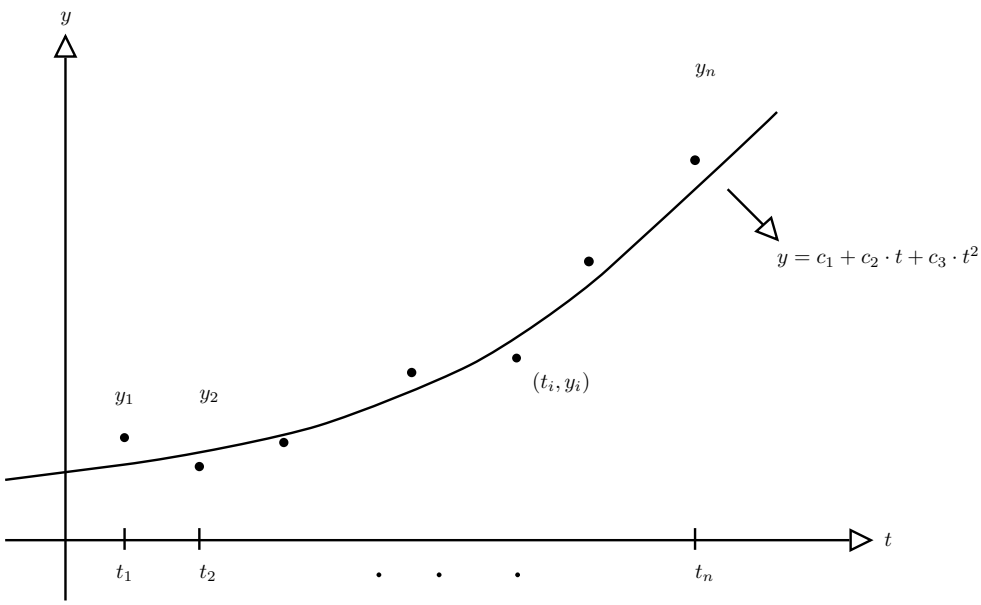
13.1. Linear Model



$$\Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ 1 & t_3 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_n \end{bmatrix}}_{\text{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}}_{\text{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\text{b}}$$

$$\Rightarrow A^* A \, \overline{x} = A^* \, b$$

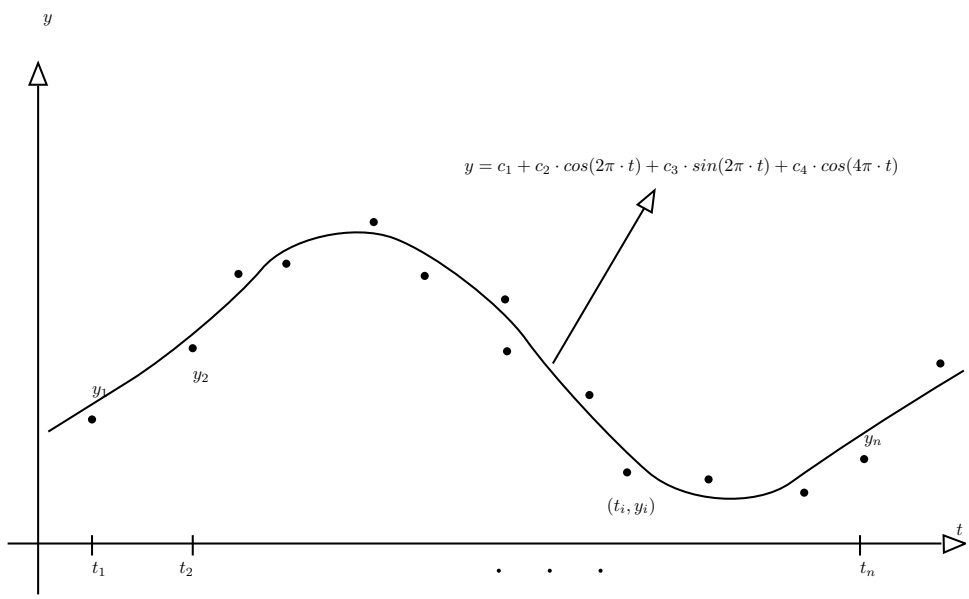
13.2. Quadratic Model



$$\Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ 1 & t_2 & t_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_n & t_n^2 \end{bmatrix}}_{\text{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} C_1 \\ C_1 \\ C_3 \end{bmatrix}}_{\text{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\text{b}}$$

$$\Rightarrow A^* A \, \overline{x} = A^* \, b$$

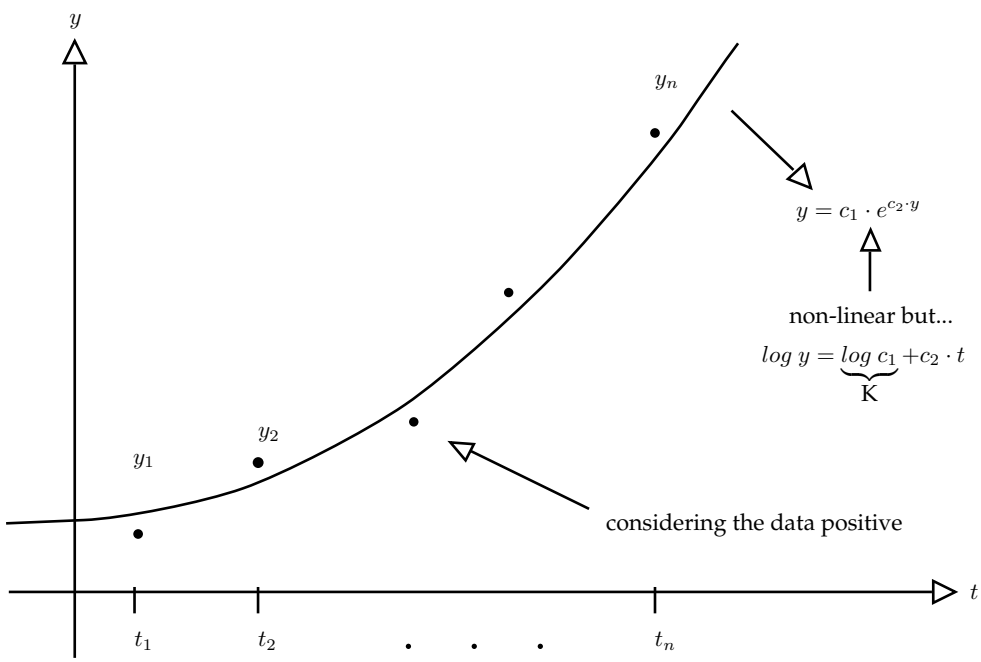
13.3. Periodic Model



$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & \cos(2\pi t_1) & \sin(2\pi t_1) & \cos(4\pi t_1) \\ 1 & \cos(2\pi t_2) & \sin(2\pi t_2) & \cos(4\pi t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cos(2\pi t_n) & \sin(2\pi t_n) & \cos(4\pi t_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{1}$$

$$\Rightarrow A^* A \, \overline{x} = A^* b$$

13.4. Exponential Model

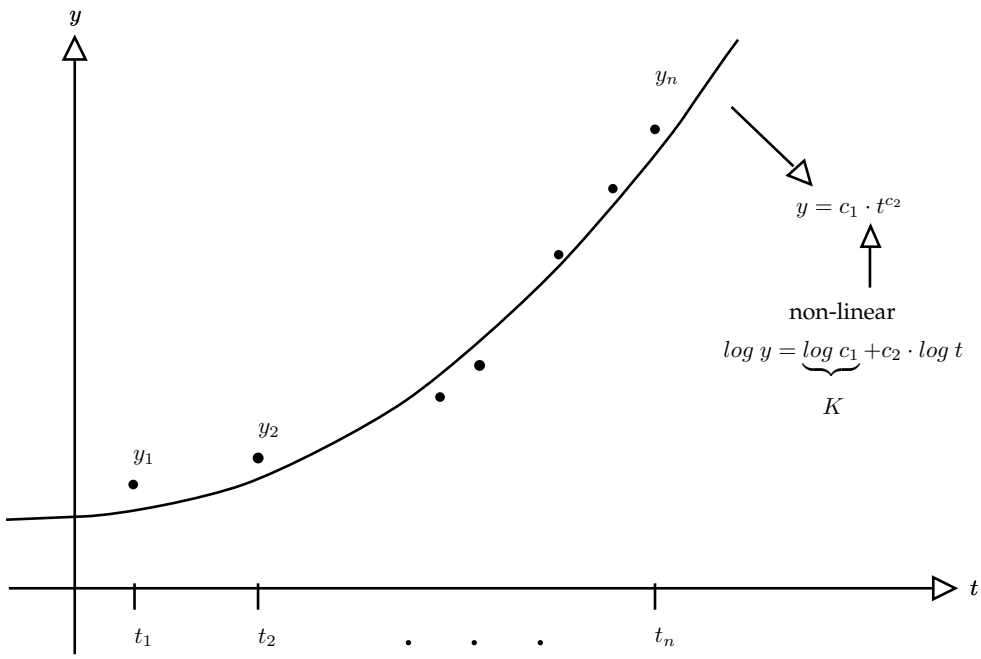


$$\Rightarrow\ log\ y_i = K + c_2\, t_i$$

$$\begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \log y_1 \\ \log y_2 \\ \vdots \\ \log y_n \end{bmatrix}, \text{ then } \overline{C_1} = e^{\overline{K}}$$

$$\Rightarrow A^* A\, \overline{x} = A^* b$$

13.5. Power law

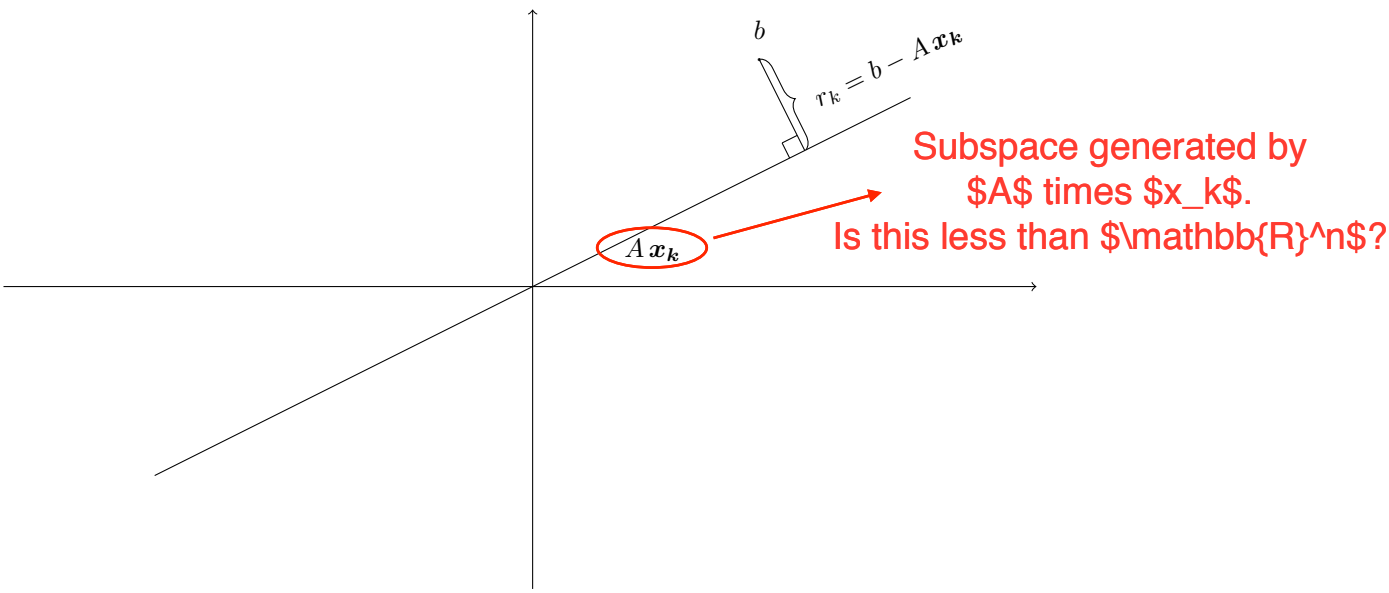


$$\begin{bmatrix} 1 & log\ t_1 \\ 1 & log\ t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & log\ t_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \log y_1 \\ \log y_2 \\ \vdots \\ \log y_n \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow A^* A\,\overline{x} = A^* b$$

14. Generalized Minimum Residual (GMRes) Method

Idea: $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{x_k} \in \mathcal{K}_k$ →Krylov subspace



What is $\mathcal{K}_k$? →It's the Krylov subspace defined by

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_k &= \{r_0, A\,r_0, A^2\,r_0, A^3\,r_0, \cdots, A^{k-1}\,r_0\}\\ r_0 &= b - A\,x_0\end{aligned}$$

What does it mean $\boldsymbol{x_k} \in \mathcal{K}_k$?

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x_k} &= \tilde{c}_1\,r_0 + \tilde{c}_2\,A\,r_0 + \cdots + \tilde{c}_k\,A^{k-1}\,r_0\\ &= \underbrace{\left[\begin{array}{c|c|c|c|c} r_0 & A\,r_0 & A^2\,r_0 & \cdots & A^{k-1}\,r_0 \end{array}\right]}_{\text{krylov basis}} \begin{bmatrix}\tilde{c}_1\\ \tilde{c}_2\\ \vdots\\ \tilde{c}_k\end{bmatrix}\end{aligned}$$

How useful is this? ($\boldsymbol{x_k} \in \mathcal{K}_k$)

So, $\boldsymbol{x} \approx \boldsymbol{x_k} + x_0$

$$\Rightarrow \boldsymbol{x} \approx + \boldsymbol{x_0} \left[\begin{array}{c|c|c|c|c} r_0 & A\,r_0 & A^2\,r_0 & \cdots & A^{k-1}\,r_0 \end{array}\right] \begin{bmatrix}\tilde{c}_1\\ \tilde{c}_2\\ \vdots\\ \tilde{c}_k\end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \qquad Ax = b$$

$$A\,(\boldsymbol{x_k} + \boldsymbol{x_0}) = b$$

$$\Rightarrow \qquad A\,\boldsymbol{x_k} = b - A\,x_0$$

$$A\,\boldsymbol{x_k} = \boldsymbol{r_0}$$

$$\Rightarrow \qquad \underbrace{A}_{A_{m\times m}} \underbrace{\left[\begin{array}{c|c|c|c|c} r_0 & A\,r_0 & A^2\,r_0 & \cdots & A^{k-1}\,r_0 \end{array}\right]}_{K_{m\times k}} \underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{c}_1 \\ \tilde{c}_2 \\ \vdots \\ \tilde{c}_k \end{bmatrix}}_{\tilde{c}_{k\times 1}} = \underbrace{\boldsymbol{r_0}}_{m\times 1}$$

$$\Rightarrow \qquad A_{m\times m}\,K_{m\times k}\,\tilde{\boldsymbol{c}}_{k\times 1} = \tilde{\boldsymbol{r}}_{\boldsymbol{0}\,m\times 1} \qquad \circledast$$

What is $\circledast$?

Yes, it is a least square problem.

$\Rightarrow$ we want to minimize

$$\| \underbrace{A\,\mathcal{K}}_{m\times k} \underbrace{\tilde{c}_k}_{k\times 1} - \underbrace{b}_{m\times 1} \|_2$$

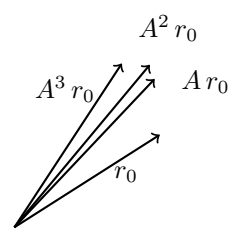
$\uparrow$
this is just a rectangular matrix!

<u>Great!</u> Is there any problem?

Yes... but there is also a solution

What is the problem?

$$\mathcal{K}_k = \{\underbrace{r_0, A\,r_0, A^2\,r_0, \cdots, A^{k-1}\,r_0}_{\text{these are almost parallel!}}\} \text{ is ill-conditioned}$$



What can we can do?

How?

Yes, we need to talk to Gram-Schmidt!

this means $\langle \boldsymbol{r_0}, A\,\boldsymbol{r_0}, A^2\,\boldsymbol{r_0}, \cdots, A^{k-1}\,\boldsymbol{r_0}\rangle = \langle \boldsymbol{q_1}, \boldsymbol{q_2}, \cdots, \boldsymbol{q_k}\rangle$

$\therefore$ Setting $q_1 = r_0/\parallel r_0 \parallel_2$ & using the <u>modified</u> Gram-Schmidt algorithm (a.k.a. Arnoldi iteration in this context) we can find $\boldsymbol{q_i}$, $i = 2\cdots$.

So, the original minimization problem

$$\parallel A\,\mathcal{K}_k\,\tilde{c} - b \parallel_2$$

considering, $\mathcal{K}_k$ $\tilde{\boldsymbol{c}} = x_0 + \underset{\substack{\downarrow \\ [q_1|q_2|\cdots|q_k]}}{Q_k}\,\boldsymbol{c}$

$$\Rightarrow \qquad \parallel A\,(x_0 + Q_k\,\boldsymbol{c}) - b \parallel_2 = \parallel A\,Q_k\,\boldsymbol{c} - (b - A\,x_0) \parallel_2$$

$$= \parallel \underbrace{A\,Q_k}_{m\times k}\,\boldsymbol{c} - r_0 \parallel_2$$

where Q_k is a better basis for $\mathcal{K}_k$.

However, $\parallel \underbrace{A\,Q_k}_{m\times k}\,\boldsymbol{c} - r_0 \parallel_2$ is still a large least square problem. Can we do it even better?

From before: $\langle \boldsymbol{r_0}, A\,\boldsymbol{r_0}, A^2\,\boldsymbol{r_0}, \cdots, A^{k-1}\,\boldsymbol{r_0}\rangle = \langle \boldsymbol{q_1}, \boldsymbol{q_2}, \cdots, \boldsymbol{q_k}\rangle$

So, since we said $\boldsymbol{q_1} = r_0/\parallel r_0 \parallel_2$

$\Rightarrow \qquad A\,\boldsymbol{r_0} = \hat{h}_{11}\,\boldsymbol{q_1} + \hat{h}_{12}\,\boldsymbol{q_2}$ (decomposing Ar_0 in the <u>known</u> direction $\boldsymbol{q_1}$ & the <u>unknown</u> direction $\boldsymbol{q_2}$)

How do we find $\boldsymbol{q_2}$? Same as we did for QR!

$$\left.\begin{aligned} \hat{h}_{11} &= \boldsymbol{q_1}^T A\,\boldsymbol{r_0} \\ \hat{h}_{21} &= \parallel A\,\boldsymbol{r_0} - \hat{h}_{11}\,\boldsymbol{q_1} \parallel_2 \\ \boldsymbol{q_2} &= \frac{A\,\boldsymbol{r_0} - \hat{h}_{11}\,q_1}{h_{21}} \end{aligned}\right\} \text{This is the Arnoldi iteration (or just the modified QR)}$$

$$\Rightarrow \qquad A\,\boldsymbol{r_0} = \left[\begin{array}{c|c} q_1 & q_2 \end{array}\right] \begin{bmatrix} \hat{h}_{11} \\ \hat{h}_{21} \end{bmatrix}$$

Now, instead of using $A\,\boldsymbol{r_0}$ on the left, we use $A\,\boldsymbol{q_1}$, thus,

$$\begin{aligned} A\,\boldsymbol{q_1} &= h_{11}\,\boldsymbol{q_1} + h_{21}\,q_2 \\ \Rightarrow \qquad h_{11} &= \boldsymbol{q_1}^T\,A\,\boldsymbol{q_1} \\ h_{21} &= \| \, a\,\boldsymbol{q_1} - h_{11}\,\boldsymbol{q_1} \, \|_2 \\ \boldsymbol{q_2} &= (A\boldsymbol{q_1} - h_{11}\,q_1)/h_{21} \end{aligned}$$

In general, this gives us the partial Hessemberg decomposition

$$A\,Q_k = Q_{k+1}\,\tilde{H}_k$$

notice the difference!

$$A_{m\times m}\left[\begin{array}{c|c|c|c} q_1 & q_2 & \cdots & q_k \end{array}\right]_{m\times k} = \left[\begin{array}{c|c|c|c|c} q_1 & q_2 & \cdots & q_k & q_{k+1} \end{array}\right]_{m\times(k+1)} \underbrace{\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & & & h_{1,k} \\ h_{21} & h_{22} & & & h_{2,k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & & \\ \vdots & 0 & & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & & h_{k,k} \\ 0 & 0 & & & h_{k+1,k} \end{bmatrix}}_{\tilde{H}_k}_{(k+1)\times k}$$

Is this good? $\boxed{\text{Yes!}}$

$$\Rightarrow \qquad \left\| \, A\,Q_k\,\boldsymbol{c} - r_0 \, \right\|_2 = \left\| \, Q_{k+1}\,\tilde{H}_k\,\boldsymbol{c} - \boldsymbol{r_0} \right\|_2$$

recall $q_1 = \frac{r_0}{\|r_0\|_2} \Rightarrow r_0 = \| \, r_0 \, \|_2 \;\boldsymbol{q_1} = \| \, r_0 \, \|_2 \;Q_{k+1}\,\boldsymbol{e_1}$

$$\boldsymbol{e_1}^T = \underbrace{\langle 1, 0, \cdots, 0 \rangle}_{\text{m components}}^T$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \left\| Q_{k+1}\,\tilde{H}_k\,\boldsymbol{c} - \boldsymbol{r_0} \right\|_2 &= \left\| Q_{k+1}\,\tilde{H}_k\,\boldsymbol{c} - Q_{k+1} \;\| \, \boldsymbol{r_0} \, \|_2 \;\boldsymbol{e_1} \right\|_2 \\ &= \left\| Q_{k+1}\,(\tilde{H}_k\,\boldsymbol{c} - \| \, \boldsymbol{r_0} \, \|_2 \;\boldsymbol{e_1}) \right\|_2 \end{aligned}$$

recall: $\| \, v \, \|_2 = \sqrt{v^*\,v}$

$$= \sqrt{(\tilde{H}_k \cdot \boldsymbol{c} - \| \, \boldsymbol{r_0} \, \|_2 \;e_1)^* \underbrace{Q_{k+1}^*\,Q_{k+1}}_{I_{k+1}} (\tilde{H}_k\,\boldsymbol{c} - \| \, \boldsymbol{r_0} \, \|_2 \;\boldsymbol{e_1})}$$

$$= \Big\| \underbrace{\tilde{H}_k}_{(k+1)\times k} \cdot \underbrace{\boldsymbol{c}}_{k\times 1} - \underbrace{\| \boldsymbol{r_0} \|_2 \; e_1}_{(k+1)\times k} \Big\|_2$$

☺ ← very happy!

what is that?

$$\underbrace{\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & \cdots & h_{1,k} \\ h_{21} & h_{22} & & & h_{2,k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & h_{k,k} \\ 0 & \cdots & & 0 & h_{k+1,k} \end{bmatrix}}_{(k+1)\times k} \underbrace{\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix}}_{k\times 1} = \underbrace{\begin{bmatrix} \| r_0 \| \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}}_{(k+1)\times 1}$$

"tiny" ↓

, it is a $(k+1)\times k$ least square problem.
Before we had $m \times k$

↑ "huge"

$$\therefore \Big\| A\,\mathcal{K}_k\,\tilde{\boldsymbol{c}} - \boldsymbol{b} \Big\|_2 = \Big\| \tilde{H}_k\,\boldsymbol{c} - \| r_0 \|_2 \; e_1 \Big\|_2$$

i.e. we translated a $\underline{m \times k}$ least square problem into a $\underline{(k+1)\times k}$ least square problem!

Generalized Minimum Residual Method (GMRes)

$\boldsymbol{x_0}$ = "initial guess"
$\boldsymbol{r_0} = \boldsymbol{b} - A\,\boldsymbol{x_0}$
$\boldsymbol{q_1} = r_0 / \| r_0 \|_2$
for $k = 1, 2, \cdots, m$ **do**
  $y = A\,\boldsymbol{q_k}$
  for $j = 1, 2, \cdots, k$ **do**
    $h_{jk} = q_j^T\,y$
    $y = y - h_{jk}\,q_j$
  end for
  $h_{k+1,k} = \| y \|_2$ (If $h_{k+1,k} = 0$, skip next line & terminate at bottom)
  $\boldsymbol{q_{k+1}} = y / h_{k+1,k}$
  Minimize $\| \tilde{H}\,\boldsymbol{c_k} - \| r_0 \| \; \boldsymbol{e_1} \|_2$ for $\boldsymbol{c_k}$
  $\boldsymbol{x_k} = Q_k\,\boldsymbol{c_k} + \boldsymbol{x_0}$
end for

The is neat!

where $\tilde{H} = \begin{bmatrix} h_{11} & & & h_{1,k} \\ h_{21} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & 0 & \ddots & h_{k,k} \\ & & & h_{k+1,k} \end{bmatrix}_{(k+1)\times k}$