UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA
CAMPUS CENTRAL
FACULTAD DE CIENCIAS Y HUMANIDADES

Iniciativa Académica de Métodos Numéricos 2

1 Identificación

Curso:	MM3025 – Métodos Numéricos 2	**Créditos:**	4
Ciclo:	Segundo	**Requisitos:**	Métodos Numéricos 1
Año:	2024		Álgebra Lineal 2
			Análisis Real 1
			Programación y Algoritmos

Profesor:	Alan Reyes–Figueroa	**Horario:**	Martes – 19:00-20:35 – CIT 312
Email:	`agreyes`	**Sala:**	Jueves – 19:00-20:35 – CIT 312

Sitio Web del Curso:

- https://pfafner.github.io/opt2024

Office Hours:

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

2 Descripción

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

1. Álgebra lineal computacional.
2. Optimización numérica.

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

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

Finalmente, se estudian algunos métodos de optimización discreta y combinatoria. Se estudian métodos de tipo combinatorio como la búsqueda en anchura y búsqueda en profundidad y se introducen los métodos heurísticos. El material se complementa con el estudio de algoritmos genéticos, y algunos otros métodos evolutivos. Finalmente, se hace una introducción a métodos estocásticos como los algoritmos de estimación de distribución, enfriamiento simulado, y nociones de optimización estocástica.

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

3 Competencias a Desarrollar

Competencias genéricas

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

Competencias específicas

1.1 Entiende y domina los fundamentos matemáticos que formaliza los algoritmos principales en cómputo científico de precisión y la optimización numérica.

1.2 Conoce los principales métodos de álgebra lineal computacional.

1.3 Comprende los conceptos teóricos subyacentes a los métodos de optimización no-restricta y restricta.

2.1 Aplica métodos y técnicas para la solución de sistemas de ecuaciones lineales, de manera eficiente, y aplica técnicas para matrices ralas, cuando sea conveniente.

2.2 Aplica de forma efectiva técnicas de optimización de funciones continuas o discretas.

2.3 Utiliza un enfoque global para resolver problemas. Se apoya en herramientas auxiliares para su solución, como análisis, álgebra lineal, optimización, así como desarrolla habilidades para el uso de software de cómputo científico y optimización.

3.1 Desarrolla todas las etapas de una investigación o proyecto aplicado donde se utilizan elementos de la optimización numérica: anteproyecto, exploración de datos, diseño experimental, metodología, solución numérica y conclusiones.

3.2 Escribe un reporte técnico sobre la solución de un problema de optimización, usando datos reales. Concreta un análisis riguroso y conclusiones importantes.

3.3 Comunica de manera efectiva, en forma escrita, oral y visual, los resultados de su investigación.

4 Metodología Enseñanza Aprendizaje

El curso se desarrollará durante diecinueve semanas, con cuatro períodos semanales de cuarenta y cinco minutos para desenvolvimiento de la teoría, la resolución de ejemplos y problemas, comunicación didáctica y discusión. Se promoverá el trabajo colaborativo de los estudiantes por medio de listas de ejercicios, y ejemplos de implementación numérica.

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

5 Contenido

1. Álgebra lineal numérica:
   Solución de sistemas lineales: método de Gauss, método de Gauss-Jordan. Estabilidad de matrices. Métodos iterativos: método de Jacobi, método de Gauss-Seidel, SOR. Construcción de métodos eficientes para matrices ralas de dimensiones grandes. Análisis de sensibilidad y convergencia.
   Factoraciones de matrices: Descomposición LU, LL^T, LDL^T. Descomposición QR. Descomposición SVD. La pseudoinversa. Ortonormalización de Gram-Schmidt y matrices de Hessenberg. Estabilidad y condicionamiento.

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

3. Optimización Continua:
   Optimización no restricta: Descenso gradiente. Métodos de búsqueda en línea, condiciones de búsqueda. Tasa de convergencia. Métodos de Newton modificado. Métodos de región de confianza. Gradiente conjugado. Métodos quasi-Newton: SR1, DFP, BFGS. Métodos libres de derivada. Mínimos cuadrados y Gauss-Newton.

4. Optimización con restricciones: Teoría de optimización con restricciones: condiciones de optimalidad KKT. Programación Lineal: el método Simplex. Programación Cuadrática.

5. Optimización Discreta:
   Representación de problemas discretos. Algoritmos en grafos: Dijkstra, Floyd-Warshall, Bellman-Ford, Kruskal, Prim. Métodos de búsqueda en anchura y profundidad. Heurísticas y A*. Algoritmos genéticos. Operadores y función de *fitness*. Enfriamiento simulado. Introducción a los métodos de estimación de distribución (EDA).

6 Bibliografía

Textos:

- L. Threfethen y L. Bau III (1997). *Numerical Linear Algebra*. SIAM Press.
- J. Nocedal y S. Wright (2006). *Numerical Optimizacion*. Springer.
- D. Luenberger y Y. Ye (2016). *Linear and Nonlinear Programming*. Springer.

Referencias adicionales:

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

Referencias para programación lineal:

- J. Matousek y B. Gärtner. (2007). *Understanding and Using Linear Programming*. Springer.
- A. Schrijver. (1999). *Theory of Linear and Integer Programming*. John Wiley & Sons.

7 Actividades de evaluación

Actividad	Cantidad aproximada	Porcentaje
Listas de ejercicios	entre 5 y 8	40%
Proyectos	2	40%
Cortos	4	20%

8 Cronograma

Semana	Tópico	Fecha	Actividades
1	Introducción al curso. Normas matriciales. Descomposición Espectral. Descomposición SVD.	01-05 julio	
2	Condicionamiento y estabilidad. Eliminación gaussiana. Factoración LU y $PA = LU$.	08-12 julio	
3	Métodos de Crout y Cholesky y LDL^T. Métodos iterativos: Jacobi, Seidel, SOR.	15-19 julio	
4	Ortogonalización. Método de Household. Descomposición QR.	22-26 julio	
5	Cálculo espectral. Método de las potencias. Cociente de Rayleigh. El método QR. Reducción a la forma de Hessemberg.	29 julio-02 agosto	
6	Métodos y estrategias para matrices ralas. Aplicaciones de cálculo en matrices ralas.	05-09 agosto	
7	**Optimización**. Conceptos de cálculo vectorial y derivación vectorial. Taylor.	12-16 agosto	
8	Condiciones de optimalidad. Funciones convexas. Elementos de optimización convexa.	19-23 agosto	
9	Descenso gradiente. Algoritmos para optimización 1-dimensional.	26-30 agosto	
10	Búsqueda en línea. Condiciones de búsqueda. Condición de Zoutendijk y análisis de convergencia.	02-06 septiembre	Proyecto
	Semana de asueto	09-13 septiembre	
11	Métodos de región de confianza. Punto de Cauchy. Gradiente conjugado lineal (CG). Precondicionadores.	16-20 septiembre	
12	CG no lineal: Fletcher-Reeves, Polak-Ribière. Hestenes-Stiefel. Métodos Quasi-Newton. Métodos $SR1$, DFP, $BFGS$.	23-26 septiembre	
13	Métodos libres de derivada: Método de Nelder-Mead. Mínimos cuadrados. Método de Gauss-Newton.	30 sept-04 octubre	
14	**Optimización con restricciones**. Teoría: Conos, conjuntos factibles y direcciones factibles.	07-11 octubre	
15	Condiciones de optimalidad KKT: primera y segunda condición. Principio de Dualidad.	14-18 octubre	
16	Programación lineal. El método Simplex. Ejemplos, aplicaciones y otros métodos.	21-25 octubre	
17	**Optimización combinatoria**. Algoritmos en grafos. Representación. DFS y BFS. Heurísticas.	28 octubre-01 nov	
18	Algoritmos genéticos. Representaciones y estrategias. Otras estrategias evolutivas.	04-08 noviembre	
19	Enfriamiento o recocido simulado. Introducción a métodos de estimación de distribuciones.	11-15 noviembre	
20	Presentación de proyectos.	18-22 noviembre	Proyecto