CÓDIGOS

BLAS-1

1. SQRT. Longitud del vector (a,b)
2. DROTG. Rotación real plana de Givens
3. BLAS1-DDOT. Producto escalar DDOT
4. BLAS1-PG. Vectores de progresiones geométricas
5. BLAS1-PG-1. Vectores de progresiones geométricas con razones próximas a 1
6. BLAS1-DZASUM. Suma de los valores absolutos de las partes de un vector complejo

BLAS-2

1. BLAS2-SSYR2. Adaptación de rango 2 para matrices simétricas

BLAS-3

1. BLAS3-STRSM. Resuelve sistemas lineales triangulares con lado derecho múltiple

LAPACK

1. RGE-lapack. Álgebra lineal matriz real general DGETRF, DGETRS, DGETRI, DGEEV
2. HDP-lapack. Álgebra lineal matriz hermítica ZPOTRF, ZPOTRS, ZPOTRI, ZHEEV
3. MINCUA-1-lapack. Mínimos cuadrados lineales DGELS. Nube en R2
4. MINCUA-n-lapack. Mínimos cuadrados lineales DGELS. Nube en Rn

EJEMPLOS BLAS

BLAS1-DROTG: rotación real plana de Givens

Dados a, b calcula c, s, d, z tales que $\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix}$ siendo $d = \sigma\sqrt{a^2+b^2}$,

$$\sigma = \begin{cases} \mathrm{sig}(a) & \text{si } |a| > |b| \\ \mathrm{sig(b)} & \text{si } |a| \le |b| \end{cases}, \quad z = \begin{cases} s & \text{si } |s| < c \text{ ó } c = 0 \\ 1/c & \text{si } 0 < |c| \le s \end{cases}$$

Si $d \neq 0$ las ecuaciones $ca+sb=d$, $-sa+cb=0$ tienen la solución $s=b/d$, $c=a/d$ válida tanto si $a=0$ como si $b=0$. Si $a=b=0$ es $d=0$ y se pone $c=1$, $s=0$.

Ejemplo.- Si $a=3$, $b=4$ entonces $\sigma=1$, $d=5$, $c=-0.6$, $s=0.8$, $z=-1/0.6$

Si $a=6$, $b=-8$ entonces $\sigma=-1$, $d=10$, $c=0.6$, $s=-0.8$, $z=1/0.6$

BLAS2-SSYR2: adaptación de rango 2 para matrices simétricas

Dada la matriz **A**, los vectores **x**, **y** y el escalar α calcula y sustituye **A** por $\mathbf{A}+\alpha\mathbf{x}\mathbf{y}^t+\alpha\mathbf{y}\mathbf{x}^t$.

Ejemplo.- Si $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 6 & 7 \\ 3 & 6 & 8 & 9 \\ 4 & 7 & 9 & 10 \end{pmatrix}$, $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ -3 \\ -4 \end{pmatrix}$, $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}$, $\alpha = 1 \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{pmatrix} -11 & & & \\ -15 & -15 & & \\ -19 & -17 & -16 & \\ -23 & -19 & -16 & -14 \end{pmatrix}$

BLAS3-STRSM: resuelve sistemas triangulares de ecuaciones con lado derecho múltiple

Dada **A** triangular, **B** matriz del lado derecho, `side`, `transA`, α devuelve en **B** la matriz **X** tal que:

$\mathbf{AX} = \alpha\mathbf{B}$ si `side='L'`, `transA='N'`, con $\mathbf{A}(m,m)$

$\mathbf{A}^t\mathbf{X} = \alpha\mathbf{B}$ si `side='L'`, `transA='T'`, con $\mathbf{A}(m,m)$

$\mathbf{XA} = \alpha\mathbf{B}$ si `side='R'`, `transA='N'`, con $\mathbf{A}(n,n)$

$\mathbf{XA}^t = \alpha\mathbf{B}$ si `side='R'`, `transA='T'`, con $\mathbf{A}(n,n)$

Ejemplo.- Si $(\mathbf{A}|\mathbf{B}) = \left(\begin{array}{ccc|cccc} 1 & 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & 2 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & -1 & 0 & 4 & 2 \end{array}\right)$ los cálculos manuales conducen a:

$$\sim \left(\begin{array}{ccc|cccc} 1 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -1 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 5 & -1 & 0 & 4 & 2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|cccc} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{5}{2} & -2 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{9}{10} & \frac{1}{2} & \frac{19}{10} & \frac{1}{5} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{5} & 0 & \frac{4}{5} & \frac{2}{5} \end{array}\right)$$

EJEMPLOS LAPACK

1. ÁLGEBRA LINEAL. MATRIZ REAL GENERAL

Sean $\mathbf{A}=\begin{pmatrix}1&-1&2\\-1&4&-1\\0&3&-1\end{pmatrix}$, $\mathbf{B}=\begin{pmatrix}2&5\\2&4\\2&3\end{pmatrix}$.

(1) La descomposición **LU** de **A** es $\mathbf{A}=\mathbf{LU}=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\0&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&-1&2\\0&3&1\\0&0&-2\end{pmatrix}$.

(2) La solución de los sistemas $\mathbf{AX}=\mathbf{B}$ es $\mathbf{X}=\begin{pmatrix}1&1\\1&2\\1&3\end{pmatrix}$.

(3) La matriz inversa de **A** es $\mathbf{A}^{-1}=\frac{1}{6}\begin{pmatrix}1&-5&7\\1&1&1\\3&3&-3\end{pmatrix}$ y puede obtenerse resolviendo los sistemas $\mathbf{AX}=\mathbf{I}$.

(4) Los autovalores de **A** son $\lambda_1=3,\ \lambda_2=2,\ \lambda_3=-1$. Unos autovectores normalizados asociados son $\mathbf{v}_1=\frac{1}{\sqrt{26}}(1,\ 4,\ 3)$, $\mathbf{v}_2=\frac{1}{\sqrt{3}}(1,\ 1,\ 1)$, $\mathbf{v}_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,\ 0,\ -1)$. Llamando $\mathbf{D}=diag\left(3,\ 2,\ -1\right)$, $\mathbf{V}=\left(\mathbf{v}_1\middle|\mathbf{v}_2\middle|\mathbf{v}_3\right)$ se verifica $\mathbf{AV}=\mathbf{VD}$, esto es $\mathbf{A}=\mathbf{VDV}^{-1}$

Las subrutinas LAPACK utilizadas para los cálculos en (1), (2), (3), (4) son, respectivamente: DGETRF, DGETRS, DGETRI, DGEEV.

Los autovalores de la matriz $\mathbf{A}=\begin{pmatrix}1&-1&2\\-1&4&-1\\20/11&3&-1\end{pmatrix}$ son $\lambda_1=-2,\ \lambda_2=3+\frac{2}{\sqrt{11}}i,\ \lambda_3=3-\frac{2}{\sqrt{11}}i$.

2. ÁLGEBRA LINEAL. MATRIZ HERMÍTICA DEFINIDA POSITIVA

Sean $\mathbf{A}=\begin{pmatrix}5&-1+2i&4-i\\-1-2i&4&1+i\\4+i&1-i&10\end{pmatrix}$, $\mathbf{B}=\begin{pmatrix}14-37i&36+13i\\4+i&-3-19i\\43-60i&30+20i\end{pmatrix}$.

(1) La matriz triangular inferior $\mathbf{L}$ de la descomposición de Cholesky de $\mathbf{A}$, tal que $\mathbf{A}=\mathbf{LL}^*$ es $\mathbf{L}=\begin{pmatrix} 2.236 & & \\ -.447-.894i & 1.732 & \\ 1.789+.447i & 1.27-1.386i & 1.751 \end{pmatrix}$

(2) La solución de los sistemas $\mathbf{AX}=\mathbf{B}$ es $\mathbf{X}=\begin{pmatrix} 2-3i & 4+2i \\ 1+i & -1-3i \\ 3-5i & 2+i \end{pmatrix}$.

(3) La matriz inversa de $\mathbf{A}$ es $\mathbf{A}^{-1}=\begin{pmatrix} .826 & .283-.543i & -.413+.109i \\ .283+.543i & .717 & -.239-.261i \\ -.413-.109i & -.239+.261i & .326 \end{pmatrix}$ y puede obtenerse resolviendo los sistemas $\mathbf{AX}=\mathbf{I}$.

(4) Los autovalores de $\mathbf{A}$ son $\lambda_1=.616,\ \lambda_2=6.059,\ \lambda_3=12.325$. Unos autovectores unitarios asociados son $\mathbf{v}_1=(-.683,\ -.284-.546i,\ .380+.101i)$, $\mathbf{v}_2=(.545,-.374-.694i,\ -.282-.057i)$, $\mathbf{v}_3=(-.486,-.019-.010i,-.849-.205i)$. Llamando $\mathbf{D}=diag\left(.616,\ 6.059,\ 12.325\right)$, $\mathbf{V}=\left(\mathbf{v}_1\middle|\mathbf{v}_2\middle|\mathbf{v}_3\right)$ se verifica $\mathbf{AV}=\mathbf{VD}$, esto es $\mathbf{A}=\mathbf{VDV}^{-1}$ y es $\mathbf{V}^{-1}=\mathbf{V}^*=\overline{\mathbf{V}}^t$.

3. MÍNIMOS CUADRADOS LINEALES

3.1. Nube de puntos en $\mathbb{R}^2$

Sea la nube de puntos $\left\{(t_i,y_i)\middle|\ \forall i\in\{1,\cdots,m\}\right\}$ con $m=15$, $t_i=i\ \ \forall i\in\{1,\cdots,m\}$, $\mathbf{y}=(7,\ 5,\ 8,\ 11,\ 11,\ 10,\ 8,\ 11,\ 12,\ 10,\ 4,\ 9,\ 8,\ 5,\ 9)$.

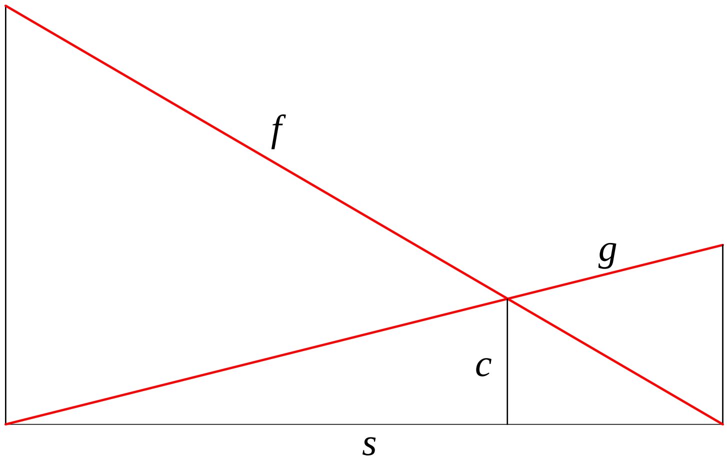
Poniendo $a_{i1}=1,\ a_{i2}=t_i,\ b_i=y_i\ \ \forall i\in\{1,\cdots,m\}$ el problema de calcular la función lineal (recta) $y=x_1+tx_2$ que más se aproxima a la nube de puntos en el sentido de los mínimos cuadrados se puede convertir en calcular la solución de mínimos cuadrados del sistema $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$, esto es, encontrar $\mathbf{x}$ que $\mathbf{x}=\arg\min\left\|\mathbf{b}-\mathbf{Ax}\right\|^2$. En efecto, si $F(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{m}(y_i-x_1-t_ix_2)^2$ se tiene que $F(\mathbf{x})=\left\|\mathbf{b}-\mathbf{Ax}\right\|^2$ donde $\mathbf{b}=\mathbf{y}$, $\mathbf{A}=(\mathbf{1}\,|\,\mathbf{t})$, $\mathbf{x}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$.

La solución $\mathbf{x}$ verifica $\mathbf{A}^t\mathbf{Ax}=\mathbf{A}^t\mathbf{b}$ y si $rg(\mathbf{A})=2$ será $\mathbf{x}=(\mathbf{A}^t\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^t\mathbf{b}$ (desde el punto de vista numérico es mejor, en tiempo y precisión, resolver el sistema para calcular $\mathbf{x}$ que invertir la matriz y multiplicar).

La solución para estos datos es $\mathbf{x}=(x_1,x_2)=(8.847619,\ -0.0392857)$ con suma de cuadrados de los residuales 83.301190.

3.2. Nube de puntos en $\mathbb{R}^k$

Sea s la separación entre dos paredes verticales entre las cuales están apoyadas dos escaleras de longitudes f, g que se cruzan a una altura c del suelo, como indica la figura siguiente (la separación s se puede obtener resolviendo una ecuación polinómica de cuarto grado).



Sea la nube de $m = 12$ puntos:

a_{i2}	a_{i3}	a_{i4}	b_i
10	6	1	5.89046768976
10	5	2	4.28971012718
11	7	1	6.90781966523
11	6	2	5.44092827501
12	8	2	7.58340398691
12	7	3	5.61256850746
13	9	2	8.64040776011
13	8	3	6.85819627794
14	10	3	9.08615726941
14	9	4	6.76353879363
15	11	3	10.1973112930
15	11	4	9.19479898208

donde $b_i \equiv s$ es la separación entre dos paredes verticales entre las cuales están apoyadas las escaleras de longitudes $a_{i2} \equiv f$, $a_{i3} \equiv g$ que se cruzan a la altura $a_{i4} \equiv c$ del suelo.

Poniendo $a_{i1} = 1 \;\; \forall i \in \{1, \cdots, m\}$ el problema de calcular la función lineal $y = x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + a_4 x_4$ que más se aproxima a la nube de puntos en el sentido de los mínimos cuadrados se puede convertir en calcular la solución de mínimos cuadrados del sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, esto es, encontrar $\mathbf{x}$ que $\mathbf{x} = \arg\min \left\| \mathbf{b} - \mathbf{Ax} \right\|^2$. En este caso es $F(\mathbf{x}) = \left\| \mathbf{b} - \mathbf{Ax} \right\|^2$ donde $\mathbf{A} = (\mathbf{1} \mid \mathbf{a}_2 \mid \mathbf{a}_3 \mid \mathbf{a}_4)$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^t$.

La solución es $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4) = (-1.238942, 0.250396, 0.937494, -0.9054577)$ con suma de cuadrados de los residuales 0.2679066.