

## Práctica 11

### Métodos Numéricos y Computación

#### I. Sistemas de ecuaciones no lineales (Tema 6)

En esta práctica, estamos interesados en hallar un valor  $\mathbf{p}$  tal que  $\mathbf{F}(\mathbf{p}) = \mathbf{0}$  donde  $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_n)$  es una función vectorial de modo que  $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  para cada  $i = 1, \dots, n$ . Por ejemplo, para sistemas de tamaño 2, es decir, de la forma

$$\left. \begin{aligned} f_1(x, y) &= 0 \\ f_2(x, y) &= 0 \end{aligned} \right\}$$

cada ecuación  $f_i(x, y) = 0$ ,  $i = 1, 2$ , puede interpretarse como la curva de nivel 0 de la superficie  $z = f_i(x, y)$ , y, por lo tanto, las soluciones del sistema pueden interpretarse como los puntos intersección entre dos curvas de nivel.

Los métodos de resolución de sistemas de ecuaciones no lineales más conocidos son los métodos iterativos de punto fijo. Se basan en escribir la ecuación  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  en la forma equivalente  $\mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$ , con  $\mathbf{G} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ , y construir, a partir de un punto inicial  $\mathbf{p}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ , una sucesión de vectores  $(\mathbf{p}^{(k)})_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^n$  tales que

$$\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{G}(\mathbf{p}^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots,$$

de forma que cada nuevo término de la sucesión esté “más cerca” de la solución  $\mathbf{p}$  buscada. Existen muchas formas de transformar  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  en la forma equivalente  $\mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$ . Una opción, por ejemplo, es elegir una matriz cuadrada no singular de orden  $n$  cualquiera,  $A(\mathbf{x})$ , y considerar

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - A(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x}). \quad (1)$$

**Ejercicio 1** Implementa una función `punto_fijo_sist` que, dada una función vectorial  $\mathbf{G}$ , un punto inicial  $\mathbf{p}_0$ , la tolerancia `tol` y el número máximo de iteraciones `maxiter`, devuelva la solución de  $\mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$  mediante el método general de punto fijo, junto con el número de pasos que sido necesarios. Observa las similitudes y diferencias con la función `punto_fijo` de la Práctica 10. Aplica la función `punto_fijo_sist` dos veces, con los puntos iniciales  $(2, 0)$  y  $(0, 1)$ , una tolerancia de  $10^{-4}$  y un máximo de 50 iteraciones, para resolver el siguiente sistema de ecuaciones no lineal:

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= -0.5x_1^2 + 2x_1 + 0.5x_2 - 0.25 \\ x_2 &= -0.125x_1^2 - 0.5x_2^2 + x_2 + 0.5 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

En las clases de teoría, hemos visto el *método de Newton* que es un caso particular de los métodos de punto fijo (tomando  $A(x) = JF(x)^{-1}$  en (1)) y, a su vez, es una generalización a sistemas de ecuaciones no lineales del método homónimo visto en la práctica anterior para ecuaciones no lineales. Más concretamente, la ley de recurrencia para el método de Newton es  $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{p}^{(k)} - JF(\mathbf{p}^{(k)})^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{p}^{(k)})$ , para todo  $k = 0, 1, \dots$ , donde  $JF$  denota la matriz jacobiana de  $\mathbf{F}$ . Este método generalmente converge siempre que el punto semilla sea próximo a  $\mathbf{p}$  y que  $JF^{-1}(\mathbf{p})$  exista. Un inconveniente del

método de Newton es que el cálculo de la matriz jacobiana y de su inversa no es, en general, un proceso muy eficiente desde el punto de vista numérico. Por ello, a la hora de implementar el método se procede en dos etapas: en la primera se encuentra un vector  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  tal que  $JP(\mathbf{p}^{(k)})\mathbf{y} = -F(\mathbf{p}^{(k)})$  (sistema lineal), y en la segunda se obtiene  $\mathbf{p}^{(k+1)} = \mathbf{p}^{(k)} + \mathbf{y}$ .

**Ejercicio 2** Implementa una función `newton_sist` que, dada una función vectorial  $\mathbf{F}$ , su jacobiano  $\mathbf{JF}$ , un punto inicial  $\mathbf{p0}$ , la tolerancia `tol` y el número máximo de iteraciones `maxiter`, devuelva la solución de  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  mediante el método de Newton, y el número de pasos que han sido necesarios. Usa esta función para resolver los siguientes sistemas no lineales, tomando los puntos semilla dados, una tolerancia de  $10^{-4}$  y un máximo de 50 iteraciones:

$$a) \quad \left. \begin{array}{l} 3x^2 - y^2 = 0 \\ 3xy^2 - x^3 - 1 = 0 \end{array} \right\} \quad \text{con } \mathbf{p}^{(0)} = (1, 1) \quad \text{y } \mathbf{p}^{(0)} = (-1, -1).$$

$$b) \quad \left. \begin{array}{l} -e^{x^2} + 8x \sin(y) = 0 \\ x + y - 1 = 0 \end{array} \right\} \quad \text{con } \mathbf{p}^{(0)} = (2, 2) \quad \text{y } \mathbf{p}^{(0)} = (0, 1).$$

Una alternativa para evitar el cálculo de la matriz jacobiana es aproximar las derivadas parciales por diferencias finitas, de modo que

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{p}^{(k)}) \approx \frac{f_i(\mathbf{p}^{(k)} + h\mathbf{e}_j) - f_i(\mathbf{p}^{(k)})}{h}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3)$$

donde  $h$  es un escalar pequeño en valor absoluto y  $\mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^n$  es el vector cuyo único elemento distinto del cero es 1 en la coordenada  $j$ -ésima.

**Ejercicio 3** Modifica la función `newton_sist` e implementa `newton_approx` de forma que el jacobiano se aproxime según la fórmula (3) con  $h = 10^{-2}$  (ya no necesitaremos  $\mathbf{JF}$  como input). Aplica esta función a los sistemas dados en el ejercicio anterior, compara los resultados y represéntalos gráficamente.

## II. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias con valor inicial (Tema 7)

El objetivo de una ecuación diferencial ordinaria (de primer orden) con valor inicial consiste en obtener una función  $y(t)$  (definida en un intervalo) de forma que satisfaga cierta ecuación en la que aparece su primera derivada, y tome un valor dado en un instante dado (inicial), es decir,

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(a) = \alpha,$$

donde  $t$  es la variable independiente con valores  $a \leq t \leq b$ .

Entre los métodos numéricos más frecuentes para resolver este problema se encuentran los llamados métodos de discretización, que consisten en encontrar los valores aproximados de la función  $y$  en una colección finita de puntos equidistantes  $\{t_k\}$  del intervalo  $[a, b]$  (llamaremos  $h$  a la longitud de cada subintervalo  $[t_k, t_{k+1}]$ ). Recuerda que  $y(t_k)$  representa el valor exacto de la solución en  $t_k$ , mientras que  $y_k$  es el valor aproximado de la solución al aplicar un método numérico. El método más simple es el método de Euler según el cual

$$y_{k+1} = y_k + hf(t_k, y_k), \quad k = 0, 1, \dots$$

**Ejercicio 4** Implementa una función `euler` que, dada una función  $f(t, y)$ , un intervalo  $[a, b]$ , una longitud  $h$  y un valor inicial  $y0$ , devuelva las secuencias  $\{t_k\}$  e  $\{y_k\}$  que generan la poligonal que aproxima la solución de la ecuación diferencial ordinaria con valor inicial. Aplica esta función para aproximar las soluciones de los siguientes problemas:

a)  $y' = \frac{y}{t} - (\frac{y}{t})^2$ ,  $y(1) = 1$  (considera el intervalo  $[1, 2]$  y  $h = 0.2$ ).

b)  $y' = \frac{2-2ty}{1+t^2}$ ,  $y(0) = 1$  (considera el intervalo  $[0, 1]$  y  $h = 0.2$ ).

El error verdadero al aplicar un método de discretización es el máximo de los errores de truncatura, esto es,  $\max_k |y(t_k) - y_k|$ .

**Ejercicio 5** Las soluciones exactas del ejercicio anterior son, respectivamente:

$$a) y(t) = \frac{t}{1 + \ln t}, \quad y \quad b) y(t) = \frac{2t + 1}{t^2 + 1}.$$

Calcula el error verdadero de cada una de las aproximaciones y representa gráficamente la solución exacta y la aproximada.

El método de Euler forma parte de una familia de métodos numéricos conocidos como métodos de Runge-Kutta (en honor de quienes los desarrollaron, C. Runge y M.W. Kutta). Otro método de esta familia es el conocido como *método Runge-Kutta de orden 4*, en el que la fórmula recurrente que se aplica es la siguiente:

$$y_{k+1} = y_k + \frac{s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4}{6},$$

donde  $s_1 = hf(t_k, y_k)$ ,  $s_2 = hf(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{s_1}{2})$ ,  $s_3 = hf(t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{s_2}{2})$ , y  $s_4 = hf(t_k + h, y_k + s_3)$ .

**Ejercicio 6** Implementa una función **RK4**, con los mismos argumentos que la función **euler**, que aproxima la solución de la ecuación diferencial ordinaria con valor inicial empleando el método Runge-Kutta de orden 4. Aplica esta función para aproximar las soluciones de los problemas propuestos en el Ejercicio 4, y compara los resultados obtenidos con ambos métodos.

## Ejercicios para entregar

Crea un script con nombre **PrimerApellido\_SegundoApellido\_Nombre.py** donde resuelvas los siguientes ejercicios teniendo en cuenta las soluciones de los anteriores y los contenidos de las presentaciones de la teoría. Incluye todos aquellos comentarios que consideres oportunos. La entrega deberá realizarse de 16:00 a 20:00 horas del viernes 8 de mayo desde la tarea habilitada en Moodle dentro del Tema 7 con nombre **Práctica 11 - Ejercicios para entregar**.

**Ejercicio 1** Considera el siguiente sistema de ecuaciones no lineales:

$$\left. \begin{aligned} x_1^2 - 2x_1 - x_2 + 0.5 &= 0 \\ x_1^2 + 4x_2^2 - 4 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

a) Transforma el sistema anterior en otro de la forma  $\mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$  de acuerdo con (1) tomando la matriz  $A(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -0.5 & 0 \\ 0 & 0.125 \end{pmatrix}$  (hazlo a mano y transcribe tu solución en el script).

b) Resuelve el sistema transformado usando la función **punto\_fijo\_sist** dos veces: con los puntos iniciales  $(0, 1)$  y  $(2, 0)$ , una tolerancia de  $10^{-4}$  y un máximo de 50 iteraciones. ¿A qué puede deberse el resultado que se obtiene con el segundo punto inicial? Ayúdate de la representación gráfica y los apuntes de teoría.

- c) Los sistemas (2) y (4) son equivalentes. De hecho, (2) se ha obtenido a partir de (4) tomando una matriz  $A(\mathbf{x})$  distinta a la dada en el ejercicio anterior. Aplica el método de Newton al sistema (4) dos veces, con los datos del apartado anterior y comenta los resultados.

**Ejercicio 2** Un experimento biológico relaciona la concentración de una cierta toxina  $C$  con el tiempo mediante el modelo:

$$C(x, \alpha, \beta) = e^{-\alpha x} \sin(x) + e^{-\beta x} \cos(2x), \quad (5)$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros desconocidos. Si denotamos el tiempo como  $x_i$  y la concentración como  $y_i$ , se han recogido los siguientes datos:

$x_i$	0	0.6	0.9	1.3	1.6	2	2.4	2.7	3
$y_i$	1.0	0.3689	0.0371	-0.1620	-0.1608	-0.0718	0.0135	0.0446	0.0482

A fin de calcular los valores de  $\alpha$  y  $\beta$  que minimizan el error cuadrático suponiendo que los datos experimentales siguen el modelo (5), minimizaremos la función:

$$D(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^9 (y_i - C(x_i, \alpha, \beta))^2.$$

En este sentido, los valores  $\alpha$  y  $\beta$  buscados se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones normales que resultan de igualar a cero sus derivadas parciales:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial D(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} &= -2 \sum_{i=1}^9 [(y_i - C(x_i, \alpha, \beta)) x_i e^{-\alpha x_i} \sin(x_i)] = 0 \\ \frac{\partial D(\alpha, \beta)}{\partial \beta} &= -2 \sum_{i=1}^9 [(y_i - C(x_i, \alpha, \beta)) x_i e^{-\beta x_i} \cos(2x_i)] = 0 \end{aligned} \right\}$$

- a) Plantea y resuelve el sistema de ecuaciones normales usando la función `newton_approx` tomando como punto inicial (0.5, 0.5), una tolerancia de  $10^{-6}$  y un máximo de 50 iteraciones.
- b) Representa gráficamente el modelo obtenido junto con los datos experimentales.

**Ejercicio 3** Otro método de la familia Runge-Kutta es el conocido como método del punto medio, cuya ley de recurrencia es

$$y_{k+1} = y_k + hf \left( t_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2} f(t_k, y_k) \right).$$

Implementa la función `punto_medio`, con los mismos argumentos que la función `euler`, que aproxime la solución de la ecuación diferencial ordinaria con valor inicial empleando el métodos del punto medio. Aplica esta función para aproximar la solución del problema  $y' = y - t^2 + 1$ ,  $0 \leq t \leq 2$ ,  $y(0) = 0.5$ ,  $h = 0.2$ . Representa gráficamente el error de truncatura sabiendo que  $y(t) = (t + 1)^2 - 0.5e^t$ .

**Ejercicio 4** Un objeto de masa  $m$  se deja caer desde el reposo. Se supone que la resistencia del aire es proporcional a la velocidad del objeto. Si  $g$  es la aceleración debida a la gravedad, entonces la fuerza que actúa sobre el objeto dirigida hacia abajo es  $mg - cv$ , donde  $c$  es una constante positiva y  $v = v(t)$  es la velocidad del objeto al cabo de  $t$  segundos, entonces de la Segunda Ley de Newton resulta:

$$m \frac{dv}{dt}(t) = mg - cv(t).$$

- a) Aproxima la velocidad del objeto en los cinco primeros segundos de tiempo utilizando las funciones `euler` y `RK4`. Supón que  $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ ,  $m = 5 \text{ Kg}$  y  $c = 1 \text{ Kg/s}$ .
- b) La solución exacta es  $v(t) = (mg/c)(1 - e^{-ct/m})$ . Calcula el error verdadero de cada una de las aproximaciones, y representa gráficamente la solución exacta y las aproximadas. ¿Cuál de los dos métodos es mejor?
- c) ¿Cuál es la distancia recorrida por el objeto en caída al cabo de 5 segundos?