Cálculo Numérico 2013

Trabajo Práctico 2

Métodos directos para sistemas de ecuaciones lineales

Duilio, Biondi – DNI 30489481

Ejercicio 9 (Entregar) Considere una mezcla de gases de n-componentes no reactivos. Utilizando un espectrómetro de masa el compuesto es bombardeado con electrones de baja energía. Entonces la mezcla resultante de iones es analizada con un galvanómetro, el cual muestra "picos" correspondientes a relaciones específicas de masa/carga. Sólo se considerarán los n-picos más relevantes. Se puede conjeturar que la altura h_i del i-esimo pico es una combinación lineal de las presiones parciales de los gases de la mezcla p_j, $j = 1, \dots, n$, con lo cual se obtiene,

$$\sum_{j=1}^{n} \mathrm{s_{ij}}\, p_j = h_i, \qquad i = 1, \dots, n$$

donde s_{ij} son los coeficientes de sensibilidad. La determinación de las presiones parciales requiere resolver este sistema lineal.

Suponiendo que luego de una inspección espectroscópica se presentan los siguientes siete picos más relevantes: *h1 = 17,1, h2 = 65,1, h3 = 186,0, h4 = 82,7, h5 = 84,2, h6 = 63,7 y h7 = 119,7* y que los coeficientes de sensibilidad están dados por la tabla siguiente,

Índice	**Hidrogeno (1)**	**Metano (2)**	**Etileno (3)**	**Etano (4)**	**Propileno (5)**	**Propano (6)**	**n-Pentano (7)**
1	16.87	0.1650	0.2019	0.3170	0.2340	0.1820	0.1100
2	0.0	27.70	0.8620	0.0620	0.0730	0.1310	0.1200
3	0.0	0.0	22.35	13.05	4.420	6.001	3.043
4	0.0	0.0	0.0	11.28	0.0	1.110	0.3710
5	0.0	0.0	0.0	0.0	9.850	11.684	2.108
6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2990	15.98	2107
7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.670

Cuadro 1: Coeficientes de sensibilidad de la mezcla de gases

se pide calcular las presiones parciales de los componentes de la mezcla y la presión total de la mezcla. Compare este resultado con la presión de la mezcla medida durante el ensayo, igual a 38,78µm de Hg.

De la tabla de coeficientes de sensibilidad obtenemos la siguiente matriz

$$\begin{bmatrix} 16,87 & 0,1650 & 0,2019 & 0,3170 & 0,2340 & 0,1820 & 0,1100 \\ 0 & 27,70 & 0,8620 & 0,0620 & 0,0730 & 0,1310 & 0,1200 \\ 0 & 0 & 22,35 & 13,05 & 4,420 & 6,011 & 3,043 \\ 0 & 0 & 0 & 11,28 & 0 & 1,110 & 0,3710 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9,850 & 1,1684 & 2,108 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,2990 & 15,98 & 2,107 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,670 \end{bmatrix}$$

Incorporando a esta matriz las relaciones específicas de masa/carga más relevantes (coeficientes del sistema), obtenemos la siguiente matriz aumentada.

h1 = 17,1; h2 = 65,1; h3 = 186,0; h4 = 82,7; h5 = 84,2; h6 = 63,7 y h7 = 119,7

$$\begin{bmatrix} 16,87 & 0,1650 & 0,2019 & 0,3170 & 0,2340 & 0,1820 & 0,1100 & 17,1 \\ 0 & 27,70 & 0,8620 & 0,0620 & 0,0730 & 0,1310 & 0,1200 & 65,1 \\ 0 & 0 & 22,35 & 13,05 & 4,420 & 6,001 & 3,043 & 186,0 \\ 0 & 0 & 0 & 11,28 & 0 & 1,110 & 0,3710 & 82,7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9,850 & 1,1684 & 2,108 & 84,2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,2990 & 15,98 & 2,107 & 63,7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,670 & 119,7 \end{bmatrix}$$

Para calcular las presiones parciales de los componentes de la mezcla, reduciremos la matriz aumentada a una triangular superior equivalente aplicándole la siguiente operación elemental, facilitando así la resolución del sistema de ecuaciones lineales.

$$R_6 \rightarrow R_6 + \left(\frac{-0,2990}{9,85O}\right) \times R_5$$

Matriz triangular superior, equivalente a la matriz original aumentada.

$$\begin{bmatrix} 16,87 & 0,1650 & 0,2019 & 0,3170 & 0,2340 & 0,1820 & 0,1100 & 17,1 \\ 0 & 27,70 & 0,8620 & 0,0620 & 0,0730 & 0,1310 & 0,1200 & 65,1 \\ 0 & 0 & 22,35 & 13,05 & 4,420 & 6,001 & 3,043 & 186,0 \\ 0 & 0 & 0 & 11,28 & 0 & 1,110 & 0,3710 & 82,7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9,850 & 1,1684 & 2,108 & 84,2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 15,94 & 2,043 & 61,14 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4,670 & 119,7 \end{bmatrix}$$

Ecuaciones lineales resultantes.

$$16{,}87p_1 + 0{,}1650p_2 + 0{,}2019p_3 + 0{,}3170p_4 + 0{,}2340p_5 + 0{,}1820p_6 + 0{,}1100p_7 = 17{,}1$$

$$27{,}70p_2 + 0{,}8620p_3 + 0{,}0620p_4 + 0{,}0730p_5 + 0{,}1310p_6 + 0{,}1200p_7 = 65{,}1$$

$$22{,}35p_3 + 13{,}05p_4 + 4{,}420p_5 + 6{,}001p_6 + 3{,}043p_7 = 186{,}0$$

$$11{,}28p_4 + 1{,}110p_6 + 0{,}3710p_7 = 82{,}7$$

$$9{,}850p_5 + 1{,}1684p_6 + 2{,}108p_7 = 84{,}2$$

$$15{,}94p_6 + 2{,}043p_7 = 61{,}14$$

$$24{,}670p_7 = 119{,}7$$

Por retro sustitución, aplicando redondeo a 5 cifras, obtenemos las incógnitas del sistema:

$24{,}670p_7 = 119{,}7$

$p_7 = \left(\frac{119{,}7}{24{,}670}\right)$

$\boldsymbol{p_7 = 25{,}632}$

$15{,}94p_6 + 2{,}043p_7 = 61{,}14$

$15{,}94p_6 + (2{,}043 \times 25{,}632) = 61{,}14$

$p_6 = \left(\frac{61{,}14 - 52{,}366}{15{,}94}\right)$

$\boldsymbol{p_6 = 0{,}55027}$

$9{,}850p_5 + 1{,}1684p_6 + 2{,}108p_7 = 84{,}2$

$9{,}850p_5 + (1{,}1684 \times 0{,}55027) + (2{,}108 \times 25{,}632) = 84{,}2$

$p_5 = \left(\frac{84{,}2 - 54{,}032 - 0{,}64293}{9{,}850}\right)$

$\boldsymbol{p_5 = 2{,}9975}$

$11{,}28p_4 + 1{,}110p_6 + 0{,}3710p_7 = 82{,}7$

$11{,}28p_4 + (1{,}110 \times 0{,}55027) + (0{,}3710 \times 25{,}632) = 82{,}7$

$p_4 = \left(\frac{82{,}7 - 9{,}5095 - 0{,}61080}{11{,}28}\right)$

$\boldsymbol{p_4 = 6{,}4344}$

$22{,}35p_3 + 13{,}05p_4 + 4{,}420p_5 + 6{,}001p_6 + 3{,}043p_7 = 186{,}0$

$22{,}35p_3 + (13{,}05 \times 6{,}4344) + (4{,}420 \times 2{,}9975) + (6{,}001 \times 0{,}55027)$

$+(3{,}043 \times 25{,}632) = 186{,}0$

$p_3 = \left(\frac{186{,}0 - 83{,}969 - 13{,}249 - 3{,}3022 - 77{,}998}{22{,}35}\right)$

$\boldsymbol{p_3 = 0{,}33472}$

$27{,}70p_2 + 0{,}8620p_3 + 0{,}0620p_4 + 0{,}0730p_5 + 0{,}1310p_6 + 0{,}1200p_7 = 65{,}1$

$27{,}70p_2 + (0{,}8620 \times 0{,}33472) + (0{,}0620 \times 6{,}4344) + (0{,}0730 \times 2{,}9975)$

$+(0{,}1310 \times 0{,}55027) + (0{,}1200 \times 25{,}632) = 65{,}1$

$p_2 = \left(\frac{65{,}1 - 0{,}28853 - 0{,}39893 - 0{,}21882 - 0{,}07209 - 3{,}0758}{27{,}70}\right)$

$\boldsymbol{p_2 = 2{,}2038}$

$16{,}87p_1 + 0{,}1650p_2 + 0{,}2019p_3 + 0{,}3170p_4 + 0{,}2340p_5 + 0{,}1820p_6 + 0{,}1100p_7 = 17{,}1$

$16{,}87p_1 + (0{,}1650 \times 2{,}2038) + (0{,}2019 \times 0{,}33472) + (0{,}3170 \times 6{,}4344)$

$+(0{,}2340 \times 2{,}9975) + (0{,}1820 \times 0{,}55027) + (0{,}1100 \times 25{,}632) = 17{,}1$

$p_1 = \left(\frac{17{,}1 - 0{,}36363 - 0{,}06758 - 2{,}0397 - 0{,}70142 - 0{,}10015 - 2{,}8195}{16{,}87}\right)$

$\boldsymbol{p_1 = 0{,}65252}$

Para el cálculo de la presión total, simplemente sumamos todas las incógnitas recién calculadas.

PRESION TOTAL **=** $0{,}65252 + 2{,}2038 + 0{,}33472 + 6{,}4344 + 2{,}9975 + 0{,}55027 + 25{,}632$

PRESION TOTAL = 38,805

Cálculo de Error.

Presión de la mezcla medida durante el ensayo, 38,78µm de Hg.
Presión de la mezcla calculada, 38,805 µm de Hg.

Error Absoluto = $|38{,}78 - 38{,}805| = 0{,}025$

Error Relativo = $\frac{|38{,}78-38{,}805|}{|38{,}78|} = 0{,}64466 \times 10^{-3}$

CONCLUSIÓN:

Como la matriz original no es estrictamente diagonal dominante y tampoco es simétrica definida positiva, para resolver el sistema de ecuaciones fue conveniente aplicar reducción a una matriz equivalente mediante operaciones elementales. Dicho de otro modo, aplicamos método de Gauss, lo que sumado a la aplicación de redondeo a 5 cifras en los cálculos, nos llevó a una presión total de la mezcla con apenas un error absoluto de 0,025 y un error relativo de $0{,}64466 \times 10^{-3}$ en comparación con la presión total de la mezcla obtenida durante el ensayo.

Ejercicio 10 (Entregar) Realice la factorización LU de la siguiente matriz siguiendo el orden de Doolittle, con y sin pivoteo parcial (con lo cual, si P es distinta de la identidad, en realidad se tiene PA = LU). Luego, calcule las matrices residuales A=LU y PA=LU y justifique las diferencias que ocurren.

Factorización LU con pivoteo parcial, orden de Doolittle.(Secuencia de Matrices, U-L-P).

$$\begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 3 & 6 & 4 \end{bmatrix} R_3 \leftrightarrow R_1 \begin{bmatrix} 3 & 6 & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$R_2 \rightarrow R_2 - \tfrac{2}{3} \times R_1 \; ; \; R_3 \rightarrow R_3 - \tfrac{1}{3} \times R_1 \begin{bmatrix} 3 & 6 & 3 \\ 0 & -2 & \frac{52}{3} \\ 0 & -1+0.5e^{-15} & \frac{5}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$R_3 \rightarrow R_3 - \left[\left(\frac{-1+0.5e^{-15}}{-2}\right)\right] \times R_2 \begin{bmatrix} 3 & 6 & 3 \\ 0 & -2 & \frac{52}{3} \\ 0 & 0 & \left(\frac{42-2.6e^{-14}}{-6}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \left(\frac{-1+0.5e^{-15}}{-2}\right) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Matrices Resultantes.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 3 & 6 & 4 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \left(\frac{-1+0.5e^{-15}}{-2}\right) & 1 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 3 & 6 & 3 \\ 0 & -2 & \frac{52}{3} \\ 0 & 0 & \left(\frac{42-2.6e^{-14}}{-6}\right) \end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Calculo de matriz residual, **(PA-LU)**:

Al aplicar pivoteo parcial en la Factorización LU, obtenemos una matriz de permutación P, distinta de la matriz Identidad, por lo tanto el cálculo de la matriz residual es:

PA—LU =

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 3 & 6 & 4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \left(\frac{-1+0.5e^{-15}}{-2}\right) & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 3 & 6 & 3 \\ 0 & -2 & \frac{52}{3} \\ 0 & 0 & \left(\frac{42-2.6e^{-14}}{-6}\right) \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 6 & 4 \\ 2 & 2 & 20 \\ 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 & 6 & 4 \\ 2 & 2 & 20 \\ 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Factorización **LU** sin pivoteo parcial. (Secuencia de Matrices, U-L-P).

$$\begin{bmatrix}1 & 1+0.5e^{-15} & 3\\ 2 & 2 & 20\\ 3 & 6 & 4\end{bmatrix} R_2 \to R_2 - 2\times R_1\,;\, R_3 \to R_3 - 3\times R_1 \begin{bmatrix}1 & 1+0.5e^{-15} & 3\\ 0 & -e^{-15} & 14\\ 0 & 3-1.5e^{-15} & -5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 2 & 0 & 0\\ 3 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$R_3 \to R_3 - (3-1.5e^{-15})\times R_2 \begin{bmatrix}1 & 1+0.5e^{-15} & 3\\ 0 & -e^{-15} & 14\\ 0 & 0 & \left(\frac{-42+2.6e^{-14}}{-e^{-15}}\right)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 2 & 0 & 0\\ 3 & \left(\frac{3-1.5e^{-15}}{-e^{-15}}\right) & 0\end{bmatrix}$$

Matrices resultantes.

$$A = \begin{bmatrix}1 & 1+0.5e^{-15} & 3\\ 2 & 2 & 20\\ 3 & 6 & 4\end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 2 & 1 & 0\\ 3 & \left(\frac{3-1.5e^{-15}}{-e^{-15}}\right) & 1\end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix}1 & 1+0.5e^{-15} & 3\\ 0 & -e^{-15} & 14\\ 0 & 0 & \left(\frac{-42+2.6e^{-14}}{-e^{-15}}\right)\end{bmatrix}$$

$$P = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

Matriz Residual, **(A-LU)**:

En este caso como la factorización LU no aplica pivoteo parcial la matriz de permutación resultante P es igual a la matriz identidad por lo tanto el cálculo de matriz residual es:

A–LU =

$$\begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 3 & 6 & 4 \end{bmatrix} - \left[\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & \left(\dfrac{3-1.5e^{-15}}{-e^{-15}}\right) & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 0 & -e^{-15} & 14 \\ 0 & 0 & \left(\dfrac{-42+2.6e^{-14}}{-e^{-15}}\right) \end{bmatrix}\right] =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 3 & 6 & 4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 1+0.5e^{-15} & 3 \\ 2 & 2 & 20 \\ 3 & 6 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$