Cálculo Numérico 2024 Trabajo Práctico 2

Métodos directos para sistemas de ecuaciones lineales

Consideraciones importantes: A partir de este práctico se solicitará que desarrollen funciones de Octave para implementar los algoritmos de los diferentes métodos. Habrá ejercicios en los cuales se solicitarán dichas funciones, por lo que la regla, para tener uniformidad y tener una buena corrección de los ejercicios será respetar el nombre propuesto en el ejercicio, como así también el orden de las variables de entrada y salida. Esto es, porque se solicitarán el las diferentes instancias evaluativas, los scripts que resuelvan los ejercicios, pero no las funciones internas utilizadas.

Ejercicio 1. Demuestre que si una matriz A es estrictamente diagonal dominante (e.d.d), es decir que sus elementos a_{ij} verifican

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

entonces resulta ser no singular. Ayuda: pruebe por contradicción que Ax = 0 implica x = 0.

Ejercicio 2. i) - Defina matriz simétrica definida positiva (s.d.p), ii) - Demuestre que si la matriz A es de orden n y s.d.p, entonces es no singular. Ayuda: pruebe por contradicción que Ax = 0 implica x = 0.

Ejercicio 3. Determine si la siguiente matriz es e.d.d y s.d.p. Justifique su respuesta.

$$A = \left[\begin{array}{rrr} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{array} \right]$$

Ejercicio 4. (Aula)

- (a) Escriba funciones de Octave x=sust_atras(A,b) y x=sust_adelante(A,b) que implementen los algoritmos para resolver un sistema triangular *superior* por sustitución hacia atrás y un sistema triangular *inferior* por sustitución hacia adelante respectivamente en forma vectorizada (eliminando lazos anidados). Las funciones reciben una matriz triangular (la que corresponda al método) y el vector de términos independientes, y devuelve la solución del sistema.
- (b) Póngalas a prueba sobre los siguientes sistemas:
 - Sustitución hacia atrás

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8 \\ 6 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix}$$

 Sustitución hacia adelante: utilice la traspuesta de la matriz del sistema anterior y el mismo vector de términos independientes. (c) Realice el conteo analítico de operaciones involucradas tanto en la sustitución hacia adelante como en la sustitución hacia atrás y responda cuál es la complejidad de los algoritmos.

Ejercicio 5. Considere una mezcla de gases de n-componentes no reactivos. Utilizando un espectrómetro de masa el compuesto es bombardeado con electrones de baja energía. 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-ésimo pico es una combinación lineal de las presiones parciales de los gases de la mezcla $p_i, j = 1, \ldots, n$, con lo cual se obtiene,

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

donde s_{ij} son los "coeficientes de sensibilidad". Para determinar las presiones parciales de los gases se requiere resolver este sistema lineal.

Suponiendo que luego de una inspección espectroscópica se presentan los siguientes siete picos más relevantes: $h_1 = 17.1$, $h_2 = 65.1$, $h_3 = 186.0$, $h_4 = 82.7$, $h_5 = 84.2$, $h_6 = 63.7$ y $h_7 = 119.7$ y que los coeficientes de sensibilidad están dados por la tabla siguiente,

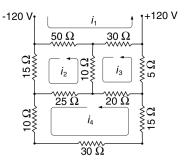
Indice	Hidrogeno (1)	Metano (2)	Etileno (3)	Etano (4)	Propileno (5)	Propano (6)	n-Pentano (7)
1	16.87	0.1650	0.2019	0.3170	0.2340	0.1820	0.1100
2	0.0	27.70	0.8620	0.0620	0.0730	0.1310	0.1200
3	0.0	0.0	22.35	13.05	4.420	6.001	3.043
4	0.0	0.0	0.0	11.28	0.0	1.110	0.3710
5	0.0	0.0	0.0	0.0	9.850	1.1684	2.108
6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2990	15.98	2.107
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 $38.78\mu m$ de Hg. Obtenga conclusiones del resultado obtenido y de la comparación.

Ejercicio 6. Considere un circuito eléctrico como el que se muestra en la figura.

- (a) Aplicar las leyes de Kirchhoff y construir un sistema de ecuaciones donde las incógnitas sean las corrientes i_1 , i_2 , i_3 e i_4 .
- (b) Aplique el método de eliminación de Gauss para obtener el valor de las corrientes.



Ejercicio 7. (Aula) Dado el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{cases} x_1 = 0, \\ -x_{i-1} + 2x_i - x_{i+1} = 1/N^2, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ x_N = 0. \end{cases}$$

- (a) Realice un script que resuelva el sistema para N = 100, utilizando eliminación de Gauss.
- (b) Suponiendo que la solución obtenida corresponde a una función y = x(t) evaluada en N puntos uniformemente distribuidos en el intervalo [0,1], graficar la solución y = x(t) obtenida.

Eliminación de Gauss y factorización de Doolittle: La eliminación de Gauss, en cualquiera de los ordenamientos kij, kji y jki (donde los índices k, i, j designan las posiciones de pivote, fila y columna respectivamente) permite reproducir la factorización de Doolittle A = LU (donde L una matriz triangular inferior con unos en su diagonal y U es triangular superior). En el algoritmo, se opta por escribir los elementos de las matrices L y U sobre los de la matriz del sistema original, con lo cual se pierde dicha matriz pero se ahorra memoria RAM. Cuando se realiza intercambio de filas durante la eliminación, lo que se obtiene es la factorización LU de la matriz PA, donde P es la matriz de permutación.

El siguiente es el algoritmo de Eliminación de Gauss, usando pivoteo parcial. El vector r almacena las permutaciones de filas, sin necesidad de realizarlas físicamente.

```
function [x] = gauss_p(A,b)
n=length(b);
A=[A b];
r=1:n;
epsilon=1e-9;
for k=1:n-1
    % la funcion max devuelve
    % pmax: el pivote de mayor valor absoluto
    % p: posicion donde se encuentra pmax (local)
    [pmax,p] = max(abs(A(r(k:n),k)));
    if pmax<epsilon
      disp('Los posibles pivots son CERO')
      break
    endif
    p = p+k-1; %actualizamos pos. a numeracion global
    if p^{-k}
      r([p k])= r([k p]); %actualiza el pivote
    A(r(k+1:n),k) = A(r(k+1:n),k)/A(r(k),k);
    A(r(k+1:n),k+1:n+1) = A(r(k+1:n),k+1:n+1)-...
                        A(r(k+1:n),k)*A(r(k),k+1:n+1);
endfor
x=sust_atras(A(r,:));
```

Ejercicio 8. (Aula)

- (a) Tomando de referencia la función de eliminación de Gauss anterior, escriba funciones de Octave que realice la factorización de Doolittle con y sin pivoteo con el siguiente encabezado: function A = doolittle(A) y function [A,r] = doolittle_p(A), donde A es la matriz a factorizar (modificamos sobre A para devolver la matriz factorizada) y r es el vector de índices de permutación.
- (b) Pruebe *ambas* funciones sobre los sistemas lineales formados por las siguientes matrices, asumiendo que el vector de términos independientes es el mismo para todos ellos $(b = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}^T)$. Para esto, realice un script de Octave que realice lo siguiente:
 - Defina las matrices y el vector b.
 - Invoque a las funciones correspondientes.
 - \bullet Construya las matrices L y U correspondientes en cada caso.

• Realice las sustituciones hacia adelante y hacia atrás para resolver el sistema.

Calcule el residuo y saque conclusiones en cada caso.

Ayuda: La matriz A que devuelve el pivoteo está desordenada. Para obtener PA sin calcular P se realiza PA = A(r, :). Esta matriz PA es la que debe usar para obtener L y U.

$$A_1 = \begin{bmatrix} 8 & 4 & 1 \\ 2 & 6 & 2 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 5.00e - 02 & 5.57e + 02 & -4.00e - 02 \\ 1.98e + 00 & 1.94e + 02 & -3.00e - 03 \\ 2.74e + 02 & 3.11e + 00 & 7.50e - 02 \end{bmatrix}, \quad A_3 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Ejercicio 9. Para la siguiente matriz, encuentre la factorización de Doolittle $(L_1)U$ de la matriz A permutada, con intercambio de filas según lo indica la estrategia de *pivoteo parcial*. Luego verifique que se cumple que $PA = L_1U$.

$$A = \left[\begin{array}{rrrr} 1 & -2 & 3 & 0 \\ 3 & -6 & 9 & 3 \\ 2 & 1 & 4 & 1 \\ 1 & -2 & 2 & -2 \end{array} \right]$$

Ejercicio 10. (Opcional)

(a) Encuentre las factorizaciones de Doolittle y Cholesky en lápiz y papel de la siguiente matriz y verifique en todos los casos que efectivamente se recupera la matriz A.

$$A = \left[\begin{array}{ccc} 60 & 30 & 20 \\ 30 & 20 & 15 \\ 20 & 15 & 12 \end{array} \right]$$

- (b) Escriba una función de Octave que implemente el algoritmo correspondiente a la factorización de Cholesky y compruebe las cuentas realizadas en el item (a). La función recibe la matriz A y devuelve la matriz L (factor de Cholesky).
- (c) Comente las condiciones que debe presentar la matriz A para tener factorización de Cholesky. Qué tipo de condiciones son?

Ejercicio 11. (Aula) 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**.

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

Ejercicio 12. Resuelva los ejercicios 5 y 6 7 aplicando factorización de Doolittle seguido de las sustituciones hacia adelante y hacia atrás para obtener las soluciones.

Ejercicio 13. (Aula) Considere la matriz de coeficientes del Ejercicio 7.

- (a) Obtenga la factorización LU para dicha matriz.
- (b) Considere el mismo sistema, modificando las ecuaciones del medio por $-x_{i-1} + 2x_i x_{i+1} = 1/N^k$, para k = 1, 2, ..., 10. Calcule, para cada valor de k, el valor máximo de la solución x.
- (c) Grafique los valores máximos del inciso anterior en función del valor k usando eje logarítmico en la dirección vertical (función semilogy() de Octave).