Trabajo práctico Nº2: Métodos Directos

Darién Julián Ramírez
Universidad Nacional del Litoral. ianshalaga@gmail.com

A continuación se muestran las resoluciones de los ejercicios 9 y 10 de la guía de trabajos prácticos número 2.

I. Ejercicio 9.

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_j , j = 1, . . . , n, con lo cual se obtiene,

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

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 siete picos más relevantes representados en el siguiente vector:

$$h=\begin{bmatrix} 17{,}1 \\ 65{,}1 \\ 186{,}0 \\ 82{,}7 \\ 84{,}2 \\ 63{,}7 \\ 119{,}7 \end{bmatrix}$$

y que los coeficientes de sensibilidad están dados por la matriz siguiente,

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

Matriz S: Coeficientes de sensibilidad de la mezcla de gases

Se procede a calcular las presiones parciales resolviendo el sistema Sp = h mediante el algoritmo de eliminación gaussiana con sustitución hacia atrás con pivoteo parcial y la presión total como la suma de los elementos del vector p:

$$p=\begin{bmatrix}0{,}65252\\2{,}20382\\0{,}33475\\6{,}43436\\2{,}99748\\0{,}55055\\25{,}63169\end{bmatrix}$$; presiones parciales de la mezcla. $P^*=\sum_{i=1}^{7} p_i=38{,}805$; presión total de la mezcla.

Se comparará el resultado obtenido con la presión de la mezcla medida durante el ensayo, igual a 38.78µm de Hg mediante el cálculo del error relativo:

$$\frac{|P-P^*|}{|P^*|}=\frac{|38{,}78-38{,}805|}{|38{,}805|}=6{,}4844\,x\,10^{-4}$$

A pesar de que el algoritmo utilizado para resolver el sistema utiliza pivoteo parcial, este no fue necesario debido a que la matriz presenta sus elemento más grandes en la diagonal. El vector de presiones parciales presenta valores menores a uno y mayores pero cercanos a uno a excepción del séptimo elemento que presenta una variación relativamente mayor. El número de condición de la matriz es 6,2995 con lo cual es bastante cercano a uno haciendo que la matriz S se encuentre bien condicionada.

La suma de las presiones parciales es similar a la presión de la mezcla medida durante el ensayo. Al compararlas con el error relativo se puede apreciar que difieren relativamente poco.

Se puede decir que el método utilizado donde se toman los picos de altura más relevantes es bueno ya que por el condicionamiento de la matriz los resultados de p no diferirán mucho y además se acerca con buena precisión al valor real medido.

II. Ejercicio 10.

Se efectuará la factorización LU de la matriz $A=\begin{bmatrix}1 & 1+0{,}5e^{-15} & 3\\2 & 2 & 20\\3 & 6 & 4\end{bmatrix}$ por el método de Doolittle,

con y sin pivoteo parcial (con lo cual, si P es distinta de la identidad, en realidad se tiene PA=LU). Luego, se calculan las matrices residuales A−LU y PA−LU.

Al realizar factorización de Doolittle sin pivoteo se obtiene:

$$L=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\2 & 1 & 0\\3 & -3{,}3777e^{15} & 1\end{bmatrix};\ U=\begin{bmatrix}1 & 1 & 3\\0 & -8{,}8818e^{16} & 14\\0 & 0 & 4{,}7288e^{16}\end{bmatrix}$$

$$A-LU=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 4\end{bmatrix};\ \|A-LU\|_\infty=4$$

Aplicando Doolittle con pivoteo parcial se obtiene:

$$L=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0{,}66667 & 1 & 0\\0{,}33333 & 0{,}5 & 1\end{bmatrix};\ U=\begin{bmatrix}3 & 6 & 4\\0 & -2 & 17{,}33333\\0 & 0 & -7\end{bmatrix};\ P=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\\0 & 1 & 0\\1 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$PA-LU=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & -8{,}8818e^{-16}\end{bmatrix};\ \|PA-LU\|_\infty=8{,}8818e^{-16}$$

Utilizando la norma infinito de las matrices residuales como criterio de comparación se puede observar que la factorización de Dollittle con pivoteo da como resultado un valor notablemente menor que la opción sin pivoteo ya que el error de redondeo causado por el término a_{12} de A al realizar las operaciones con renglones no es arrastrado durante el proceso de factorización.

De este modo, es recomendable siempre evitar tener valores de pivotes demasiado cercanos a cero.

III. Algoritmos.

Utilizados en el ejercicio 9:

```
function [x,indx,t] = e_gauss_pp_indx(A,b)
  tic();
  #b debe ser un vector columna
  n = length(A); #n = length(b);
  indx = [1:n]';
  for d=1:n #Pivot, recorre la diagonal
    [val p] = max(abs(A(indx(d:n),d))); #Fila del pivot
    p = p + d - 1; #Actualiza la posicion para lo que queda de la matriz
    indx([p d]) = indx([d p]);
    m = A(indx(d+1:n),d)/A(indx(d),d);
    A(indx(d+1:n),d:n) = A(indx(d+1:n),d:n) - m*A(indx(d),d:n);
    b(indx(d+1:n)) = b(indx(d+1:n)) - m*b(indx(d));
  endfor
  x = sust_back_pp_indx(A,b,n,indx);
  t = toc();
endfunction
```

```
function [x] = sust_back_pp_indx(A,b,n,indx)
  x(indx(n)) = b(indx(n))/A(indx(n),n);
  for i=n-1:-1:1
    x(indx(i)) = (b(indx(i)) - sum(A(indx(i),i+1:n).*x(indx(i+1:n))))/A(indx(i),i);
  endfor
  x(1:n) = x(indx);
  x = x';
endfunction
```

Utilizados en el ejercicio 10:

```
function [L,U,t] = doolittle(A)
  tic();
  n = length(A);
  for d=1:n #Pivot, recorre la diagonal
    m = A(d+1:n,d)/A(d,d);
    A(d+1:n,d+1:n) = A(d+1:n,d+1:n) - m*A(d,d+1:n);
    A(d+1:n,d) = m;
  endfor
  L = eye(n,n) + tril(A,-1);
  U = triu(A);
  t = toc();
endfunction
```

```
function [P,L,U,t] = doolittle_pp_indx(A)
  tic();
  n = length(A);
  indx = [1:n]';
  for d=1:n #Pivot, recorre la diagonal
    [val p] = max(abs(A(indx(d:n),d))); #Fila del pivot
    p = p + d - 1; #Actualiza la posicion para lo que queda de la matriz
    indx([p d]) = indx([d p]);
    m = A(indx(d+1:n),d)/A(indx(d),d);
    A(indx(d+1:n),d+1:n) = A(indx(d+1:n),d+1:n) - m*A(indx(d),d+1:n);
    A(indx(d+1:n),d) = m;
  endfor
  P = eye(n,n)(indx,:);
  L = eye(n,n) + tril(A(indx,:),-1);
```

```
  U = triu(A(indx,:));
  t = toc();
endfunction
```

REFERENCIAS

[1] Richard L. Burden & J.Douglas Faires, *Análisis Numérico*.