Cálculo Numérico 2022
Trabajo Práctico 2

Métodos directos para sistemas de ecuaciones lineales

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

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

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.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Ejercicio 4 (Aula):

(a) Escriba funciones de Octave que implementen los algoritmos para resolver un sistema triangular *superior* por sustitución hacia atrás y un sistema triangular *inferior* por sustitución hacia adelante en forma vectorizada (eliminando lazos anidados).

(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.

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
    endif
    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 5 (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 ($b = [1 \quad 2 \quad 3]^T$). Para esto, realice un script de Octave que realice lo siguiente:

- Defina las matrices y el vector b.
- Invoque a las funciones correspondientes.
- 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 6: 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 $PA = L_1U$.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 & 0 \\ 3 & -6 & 9 & 3 \\ 2 & 1 & 4 & 1 \\ 1 & -2 & 2 & -2 \end{bmatrix}$$

Ejercicio 7 (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.

$$A = \begin{bmatrix} 60 & 30 & 20 \\ 30 & 20 & 15 \\ 20 & 15 & 12 \end{bmatrix}$$

(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 8: 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 $p_j, j = 1, \ldots, n$, con lo cual se obtiene,

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

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 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 38.78μm de Hg. **Obtenga conclusiones del resultado obtenido y de la comparación**.

Ejercicio 9 (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 10: Considere un circuito eléctrico como el que se muestra en la Figura 1. Se pide aplicar las leyes de Kirchhoff para calcular las corrientes $i1$, $i2$, $i3$ e $i4$.

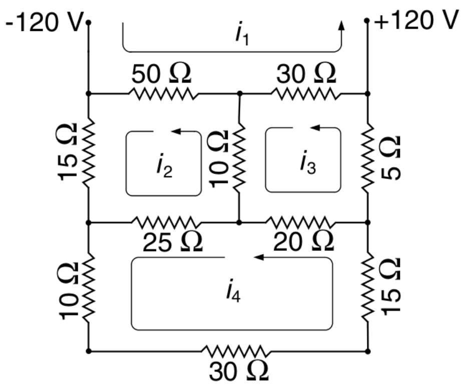

Figura 1: Circuito ejercicio 10.