Algoritmos Numéricos por Computadora

COM - 14105

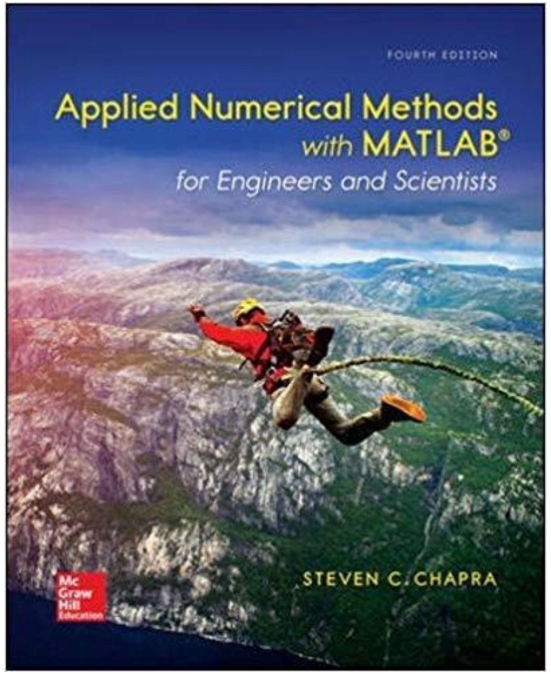
"Actually, a person does not really understand something until he can teach it to a computer"
Donald Knuth, 1974

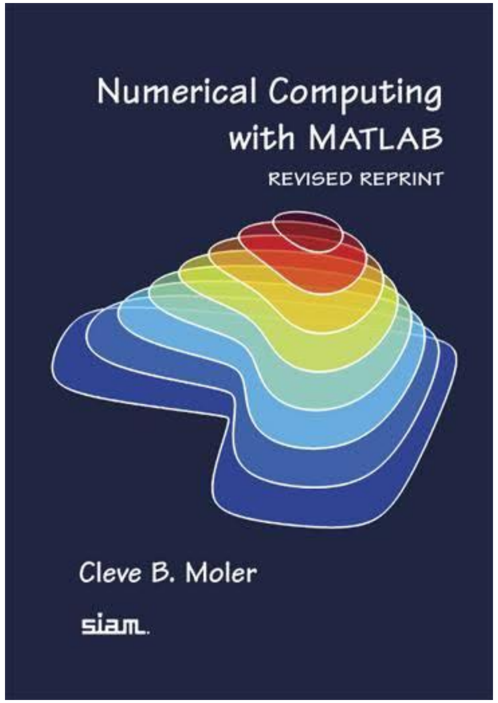
Temario

1. Introducción
    1. Modelado de sistemas dinámicos
    2. Truncamiento y redondeo
    3. Raíces de funciones y optimización
2. Sistemas de ecuaciones
    1. Valores y vectores propios
    2. Eliminación de Gauss
    3. Factorizaciones
    4. Métodos iterativos
    5. Sistemas no lineales
3. Ecuaciones diferenciales ordinarias
    1. Interpolación e integración
    2. Soluciones analíticas sencillas
    3. Problemas con valor inicial
    4. Sistemas de ecuaciones lineales de primer orden
    5. ODE de orden superior
    6. Métodos de paso variable, multipasos e implícitos
    7. Problemas con valores en la frontera
4. Ecuaciones diferenciales parciales (lineales de segundo orden)

Bibliografía

Steven Chapra, *Applied Numerical Methods with MATLAB for Engineers and Scientists*, McGraw- Hill, Fourth edition, 2018.





Cleve Moler, *Numerical Computing with MATLAB*, SIAM, 2008.

Valores y vectores propios

$$Ax = \lambda x$$

$$(A - \lambda I)x = 0, \;\; x \neq 0$$

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

Polinomio característico

```
A = gallery(3)
```

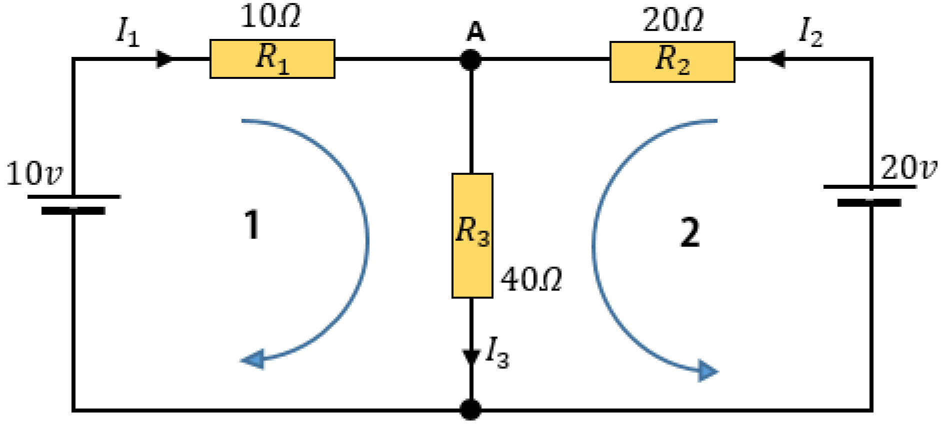
$$A = \begin{pmatrix} -149 & -50 & -154 \\ 537 & 180 & 546 \\ -27 & -9 & -25 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \lambda^3 - 6\lambda^2 + 11\lambda - 6 \\ &= (\lambda - 1)(\lambda - 2)(\lambda - 3) \end{aligned}$$

$\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 2$, and $\lambda_3 = 3$

Circuito eléctrico

Calcula la corriente que pasa en la resistencia R3 del siguiente circuito eléctrico



https://www.fisimat.com.mx/leyes-de-kirchhoff/

Métodos directos

- Eliminación de Gauss
- Factorización
  - LU
  - Cholesky
- Sistemas tridiagonales

Eliminación de Gauss

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} 10x_1 - 7x_2 \phantom{{}+6x_3} &= 7 \\ -3x_1 + 2x_2 + 6x_3 &= 4 \\ 5x_1 - x_2 + 5x_3 &= 6 \end{aligned}$$

Eliminación (de incógnitas) hacia adelante

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.1 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 6.1 \\ 2.5 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & -0.1 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.1 \end{pmatrix}$$

Intercambio de renglones

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.2 \end{pmatrix}$$

Sistema triangular superior
row echelon form

Sustitución hacia atrás

$$6.2x_3 = 6.2$$

$$2.5x_2 + (5)(1) = 2.5.$$

$$10x_1 + (-7)(-1) = 7$$

$$x = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Factorización LU

La matriz A de coeficientes puede expresarse en términos de productos que involucran matrices con una estructura más simple

$$Ax = b$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ -0.3 & -0.04 & 1 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.2 \end{pmatrix}$$

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

$$LU = PA$$

Factorización LU $\quad Ax = b$

1. Factorización *PA = LU*

$PAx = LUx = L(Ux)$ $\quad$ *% Ux = y* vector intermedio

$= Ly = Pb$

2. Solución en dos pasos
   1. $Ly = Pb$ sustitución hacia adelante
   2. $Ux = y$ sustitución hacia atrás

Errores de redondeo

error

$$e = x - x_*$$

residual

$$r = b - Ax_*$$

La eliminación de Gauss con pivoteo parcial produce residuales pequeños

Operador backslash

$$Ax = b$$

$$7x = 21$$

$$x = \frac{21}{7} = 3$$

$$x = A^{-1} * b$$

$$x = A\backslash \mathrm{b}$$

$$x = U \backslash (\mathrm{L} \backslash \mathrm{Pb})$$

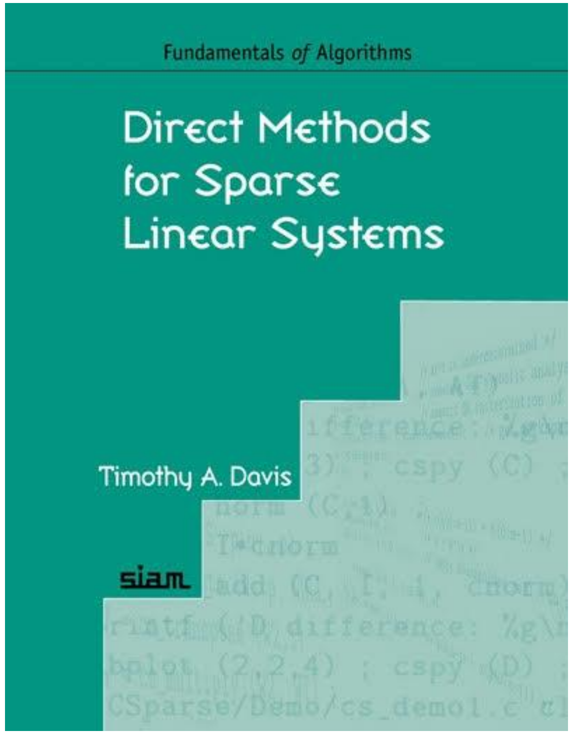
Sistemas tridiagonales

$$\begin{bmatrix} f_1 & g_1 & & & & & \\ e_2 & f_2 & g_2 & & & & \\ & e_3 & f_3 & g_3 & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & e_{n-1} & f_{n-1} & g_{n-1} \\ & & & & & e_n & f_n \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-1} \\ x_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ r_{n-1} \\ r_n \end{Bmatrix}$$

3 vectores de n elementos $3n < n^2$

$e(1)=0$ y $g(n)=0$

Matrices dispersas



A= [4.5 0.0 3.2 0.0
3.1 2.9 0.0 0.9
0.0 1.7 3.0 0.0
3.5 0.4 0.0 1.0]

Ax = [4.5,3.1,3.5,2.9,1.7,0.4,3.2,3.0,0.9,1.0]

Compressed-column form

Ap = [1,4,7,9,11]

Ai = [1,2,4,2,3,4,1,3,2,4]

Métodos iterativos

- Jacobi
- Gauss – Seidel

- Máxima inclinación
- Gradiente conjugado

- Newton (sistemas no lineales)

$x_{k+1} = f(x_k)$

$x_0 = zeros(n,1)$ guess

$x = f(x_p)$

Jacobi $A*x = b$

$10x(1) \quad -1x(2) \; + 2x(3) \; + 0x(4) = 6$

$-1x(1) + 11x(2) \quad -1x(3) \; + 3x(4) = 25$

$2x(1) \quad -1x(2) + 10x(3) \quad -1x(4) = -11$

$0x(1) \; + 3x(2) \quad -1x(3) \; + 8x(4) = 15$

$\mathbf{x(1)} = (6 - (-1x(2) + 2x(3) + 0x(4))) / 10$

$\mathbf{x(2)} = (25 - (-1x(1) - 1x(3) + 3x(4))) / 11$

$\mathbf{x(3)} = (-11 - (2x(1) - 1x(2) \; - 1x(4))) / 10$

$\mathbf{x(4)} = (15 - (0x(1) + 3x(2) \; - 1x(3))) / 8$

$A = D + L + U$

x(3) = (b(3)-(L(3,1:2)*xp(1:2)+U(3,4)*xp(4))/D(3,3)

Jacobi

A = D + L + U

- $\boldsymbol{x_{i+1}} = \boldsymbol{T x_i} + \boldsymbol{c}$
- $x_{i+1} = -D^{-1}(L+U)x_i + D^{-1}b$

converge si $\rho(T) < 1$

A es de diagonal estrictamente dominante

- $\boldsymbol{x_{i+1}} = \boldsymbol{x_i} + \propto_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{d_i}$
- $x_{i+1} = x_i + D^{-1} r_i$

$r_i = b - \mathrm{A} x_i$

Gauss-Seidel $A*x = b$

$$10x(1) \; -1x(2) + 2x(3) + 0x(4) = 6$$

$$-1x(1) + 11x(2) \; -1x(3) + 3x(4) = 25$$

$$2x(1) \; -1x(2) + 10x(3) \; -1x(4) = -11$$

$$0x(1) + 3x(2) \; -1x(3) + 8x(4) = 15$$

$$\mathbf{x(1)} = (6 - (-1x(2) + 2x(3) + 0x(4))) \,/\, 10$$

$$\mathbf{x(2)} = (25 - (-1\mathbf{x(1)} \; -1x(3) + 3x(4))) \,/\, 11$$

$$\mathbf{x(3)} = (-11 - (2\mathbf{x(1)} \; -1\mathbf{x(2)} \; -1x(4))) \,/\, 10$$

$$\mathbf{x(4)} = (15 - (0\mathbf{x(1)} + 3\mathbf{x(2)} \; -1\mathbf{x(3)})) \,/\, 8$$

Gauss-Seidel

A = D + L + U

- $\boldsymbol{x_{i+1}} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{c}$
- $x_{i+1} = -(D+L)^{-1}Ux_i + (D+L)^{-1}b$

- $\boldsymbol{x_{i+1}} = \boldsymbol{x_i} + \propto_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{d_i}$
- $x_{i+1} = x_i + (D+L)^{-1}r_i$

$r_i = b - \mathrm{A}x_i$

Optimización multidimensional

Sistema de ecuaciones

$$Ax = b$$

x es la solución

Forma cuadrática

$$f(x) = ½\, x'Ax - b'x + c$$

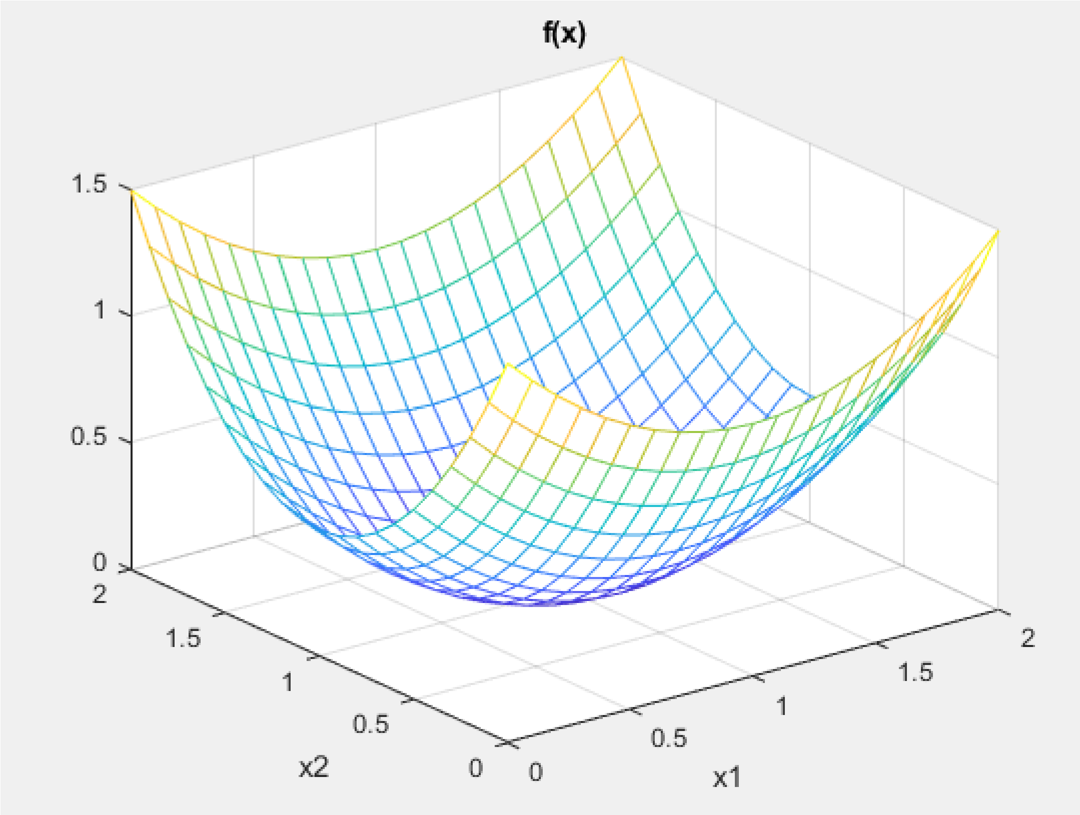
x minimiza la función

Forma cuadrática

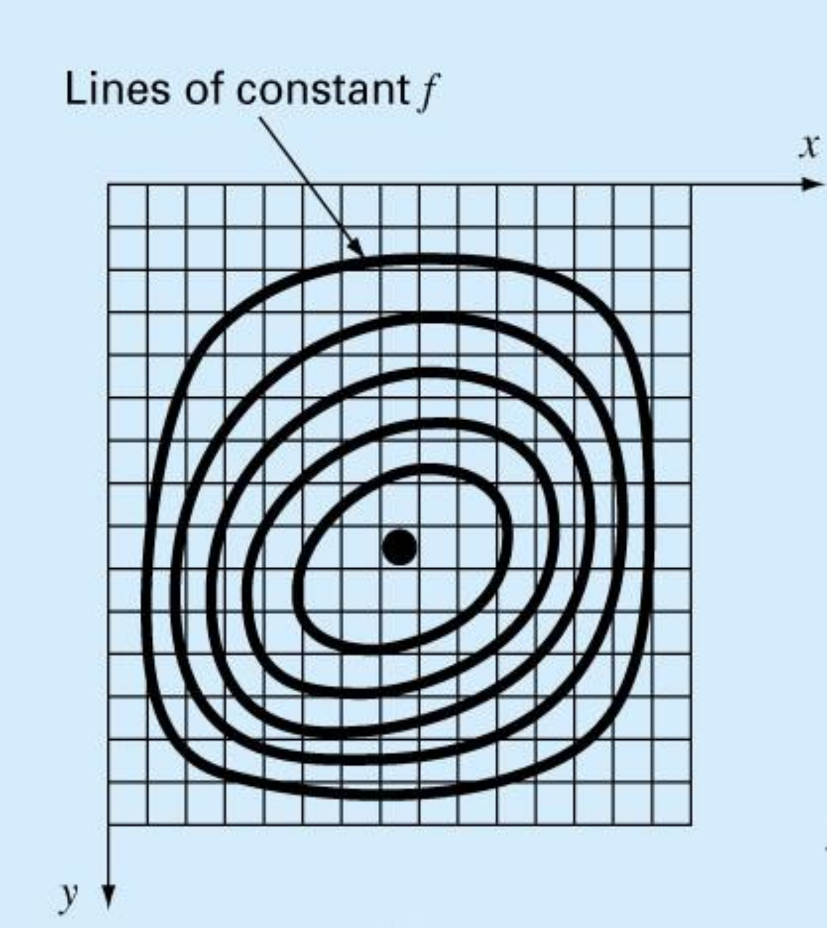
La función es convexa si y solo si

A es definida positiva

$$x'A\,x > 0 \quad \forall x \neq 0$$

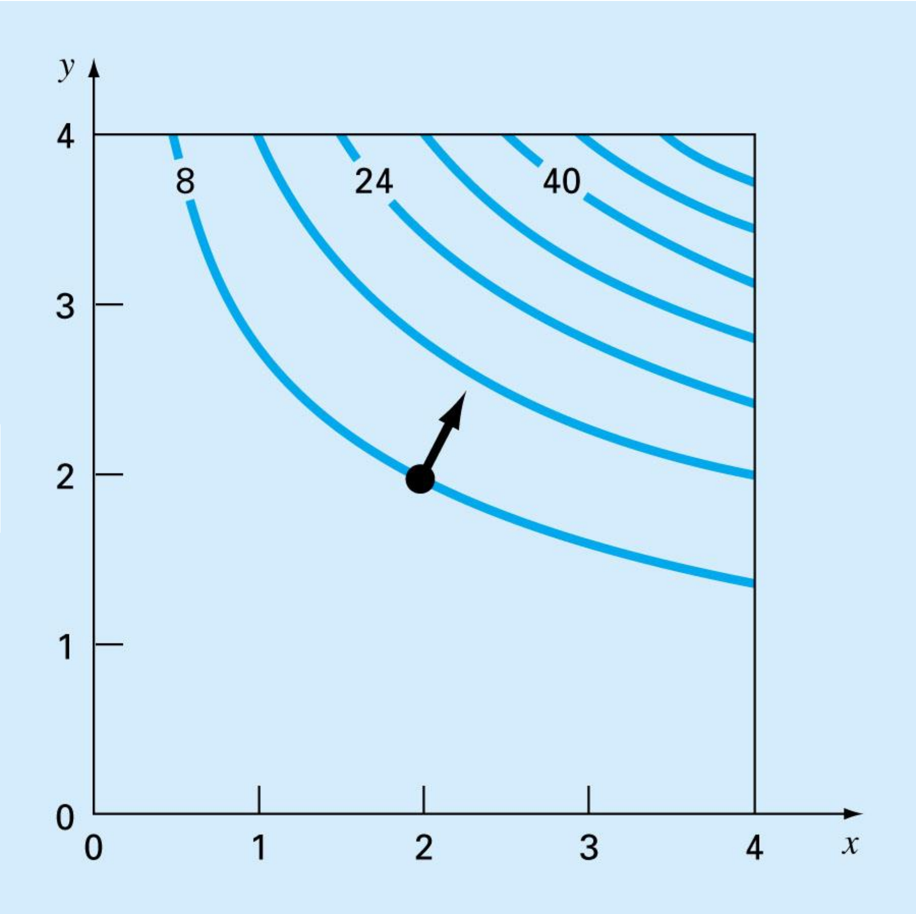


Curvas de nivel



Gradiente

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{j}$$



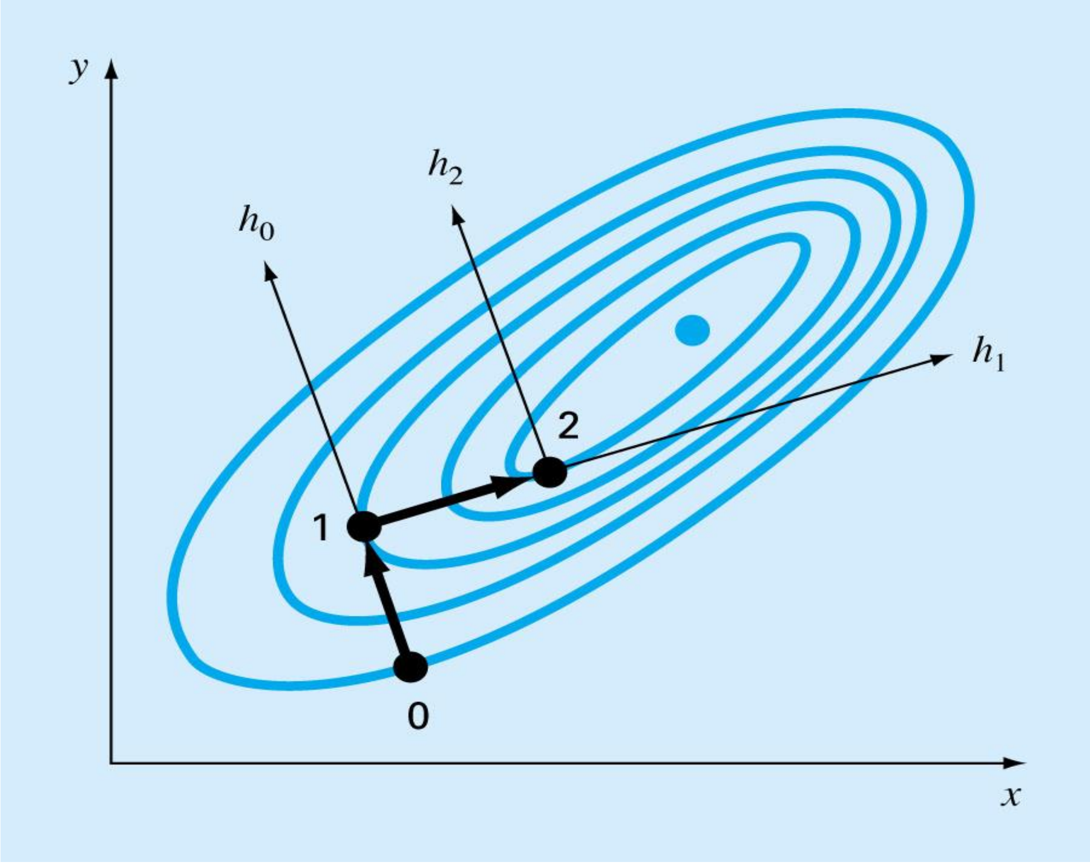
$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{Bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}) \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{Bmatrix}$$

Método de máxima inclinación

- Inicia en un punto (x_i,y_i)
- Determina la dirección de descenso máximo,

$$h_i = -\nabla_i = \mathrm{r}_\mathrm{i}$$

- Sigue esta dirección, h_i, hasta encontrar un mínimo de f en esta dirección (x_{i+1},y_{i+1})
- Repite el proceso



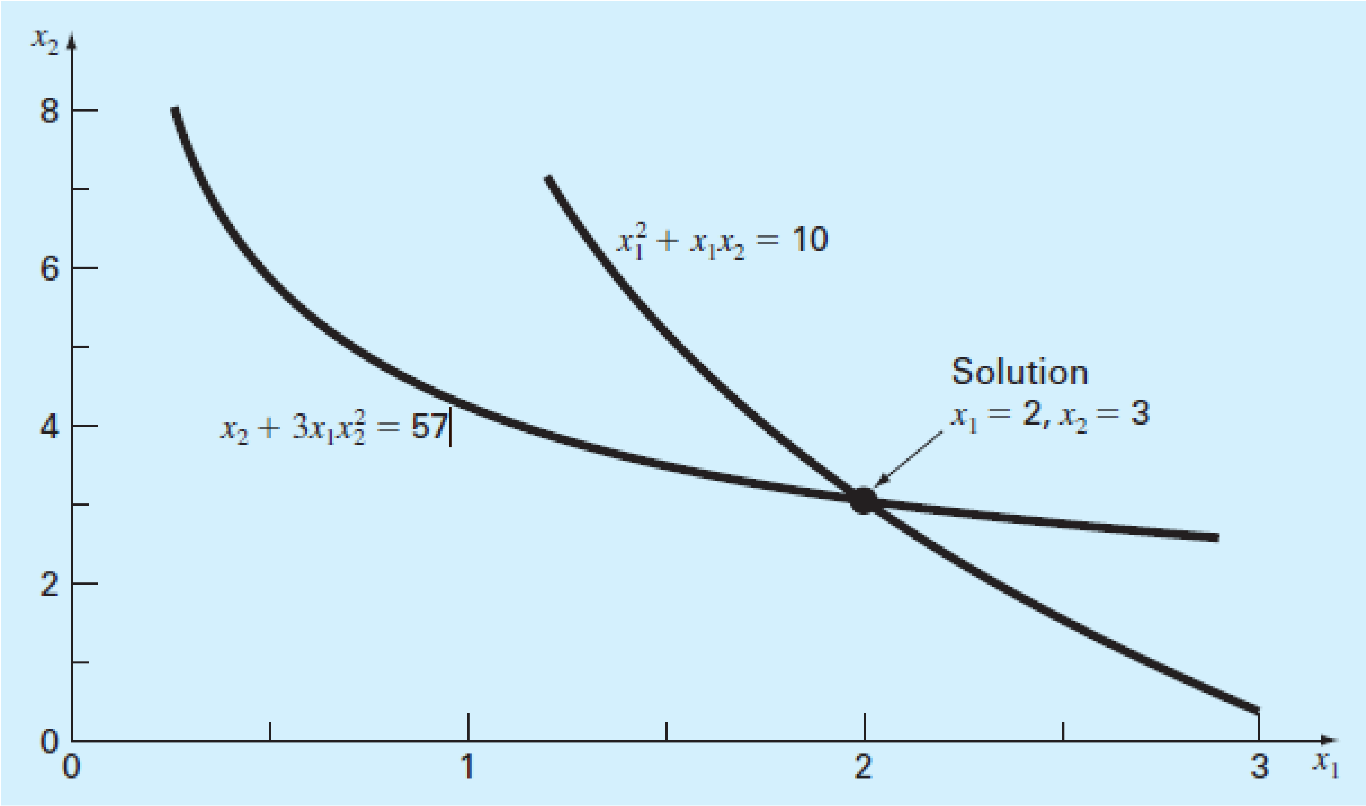
Método de máxima inclinación

$x_{i+1} = x_i + \propto_i d_i$

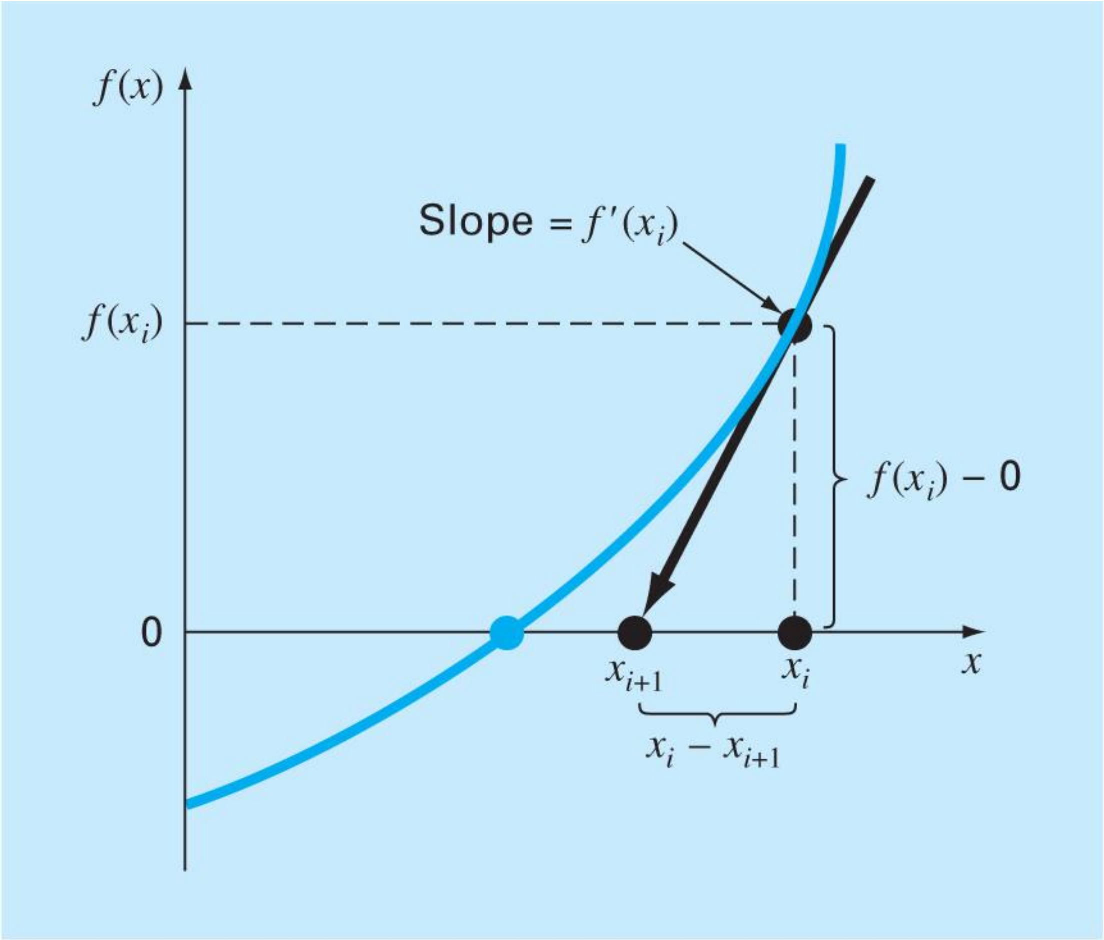
El problema tiene dos partes

- Determinar la “mejor dirección” d_i (h_i en la figura anterior)
  - $d_i = r_i = b - Ax_i$
- Determinar el “mejor valor” $\propto_i$ a lo largo de esa dirección
  - $\propto_i = \frac{dot(r_i, r_i)}{r_i' A r_i}$

Sistemas no lineales



Newton-Raphson



$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

$$x_{n+1} = x_n - J^{-1}(x_n) f(x_n)$$

Gradiente y Jacobiana

f: $R^n \rightarrow R$

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

f: $R^n \rightarrow R^m$

$$J_x(f) = \left. \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} \right|_x$$

Matrices dispersas