Física Computacional

Escuela de Física

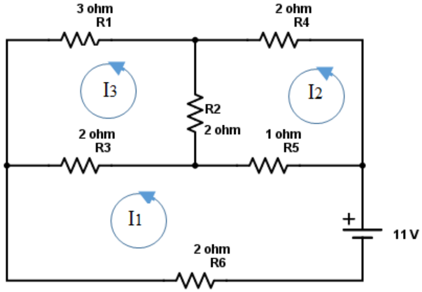
M.R.Fulla[1]

[1]Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-408

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

October 11, 2023



$$
\begin{aligned}
5I_1 - I_2 - 2I_3 &= 11 \\
-I_1 + 5I_2 - 2I_3 &= 0 \\
-2I_1 - 2I_2 + 7I_3 &= 0
\end{aligned}
$$

Método gráfico

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
\cdot \qquad\qquad & \cdot \\
\cdot \qquad\qquad & \cdot \\
\cdot \qquad\qquad & \cdot \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

Caso simple

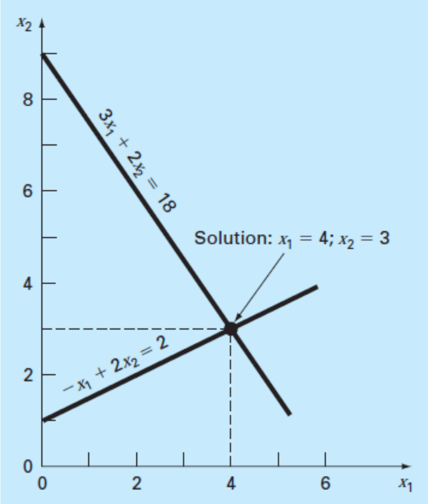
$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 &= b_2
\end{aligned}
$$

$$x_2 = -\left(\frac{a_{11}}{a_{12}}\right)x_1 + \frac{b_1}{a_{12}}$$

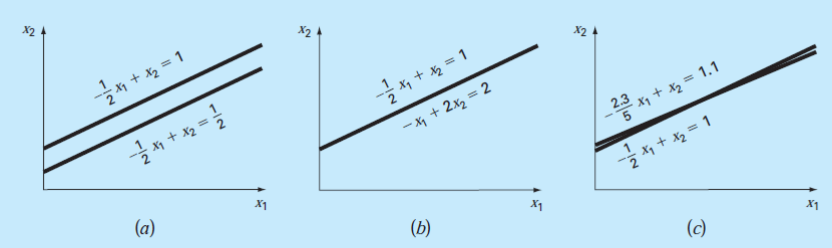
$$x_2 = -\left(\frac{a_{21}}{a_{22}}\right)x_1 + \frac{b_2}{a_{22}}$$

Método gráfico

$$3x_1 + 2x_2 = 18$$
$$-x_1 + 2x_2 = 2$$



Método gráfico



Sin solución

Infinitas soluciones

Mal condicionada

Consideremos el sistema:

$$4x_1 + 4x_2 - 5x_3 + 2x_4 = 7$$
$$3x_1 + 3x_2 + 5x_3 - x_4 = 9$$
$$2x_1 + x_2 - x_3 + x_4 = 9$$
$$-x_1 + x_2 - x_3 + x_4 = 1$$

$$lin = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -5 & 2 & 7 \\ 3 & 3 & 5 & -1 & 9 \\ 2 & 1 & -1 & 1 & 4 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$lin = \begin{bmatrix} 4 & 4 & -5 & 2 & 7 \\ 3 & 3 & 5 & -1 & 9 \\ 2 & 1 & -1 & 1 & 4 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$fila_2 = fila_2 - 3/4 * fila_1$$
$$fila_3 = fila_3 - 2/4 * fila_1$$
$$fila_4 = fila_4 + 1/4 * fila_1$$

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \\ 0.0 & -1.0 & 1.5 & 0.0 & 0.5 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \end{bmatrix}$$

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \\ 0.0 & -1.0 & 1.5 & 0.0 & 0.5 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \end{bmatrix}$$

Buscamos el pivote e intercambiamos filas

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & -1.0 & 1.5 & 0.0 & 0.5 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \end{bmatrix}$$

Continua...

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & -1.0 & 1.5 & 0.0 & 0.5 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \end{bmatrix}$$

$fila_3 = fila_3 + 1/2 * fila_2$

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & 0.0 & 0.375 & 0.75 & 1.875 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \end{bmatrix}$$

Continua...

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & 0.0 & 0.375 & 0.75 & 1.875 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \end{bmatrix}$$

Buscamos el pivote e intercambiamos filas

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \\ 0.0 & 0.0 & 0.375 & 0.75 & 1.875 \end{bmatrix}$$

Continua...

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \\ 0.0 & 0.0 & 0.375 & 0.75 & 1.875 \end{bmatrix}$$

$$fila_4 = fila_4 - 0.375/8.75 * fila_3$$

$$lin = \begin{bmatrix} 4.0 & 4.0 & -5.0 & 2.0 & 7.0 \\ 0.0 & 2.0 & -2.25 & 1.5 & 2.75 \\ 0.0 & 0.0 & 8.75 & -2.5 & 3.75 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.857 & 1.714 \end{bmatrix}$$

$$x_4 = 2$$
$$x_3 = 1$$
$$x_2 = 1$$
$$x_1 = 1$$

Nótese que en el proceso hay dos pasos muy importantes:

1. Busqueda del pivote e intercambio de filas

2. En la reducción i-ésima, para $k = i+1, i+2, ..., n$

$$fila_k = fila_k - \frac{lin(k,i)}{lin(i,i)} * fila_i$$

Algoritmo de la Eliminación Gaussiana

1. Entre las componentes de la matriz del sistema lineal.

2. para $i = 1, .., n$ realice lo siguiente:

   2.1 Encuentre la entrada $lin(k, i)$, $k = i, i + 1, .., n$ que tiene el máximo valor absoluto y usarla como pivote.

   2.2 Si el pivote es cero, entonces desplegar un mensaje indicando que el sistema es singular (cercanamente) y terminar el programa. En otro caso continuar

   2.3 Intercambiar las filas i y k

   2.4 Para $j = i + 1, n$, realice lo siguiente:
   adicionar $-lin(j, i)/lin(i, i)$ veces la fila i-ésima a la fila j-ésima para eliminar x(i) de la j-ésima ecuación.

3. Haga $x(n) = lin(n, n + 1)/lin(n, n)$

4. Para $j = n - 1$ hasta 1, con un paso de -1, realice lo siguiente:
   sustituya los valores de x(j+1),...,x(n) en la j-ésima ecuación y resolver para x(j).

Eliminación Guassiana

```
      PROGRAM sistema_lineal
      IMPLICIT NONE
      !limrow: número máximo de filas en la matriz
      !lincol: número máximo de columnas en la matriz
      !n     : número de incógnitas
      !i,j   : índices
      !lin   : matriz del sistema lineal de ecuaciones
      !singul: bandera del proceso
      !
      !ENTRADA: número de ecuaciones y la matriz
      !SALIDA : vector solución del sistema o un mensaje indicando que el sistema
      !         es cercanamente singular
      INTEGER,PARAMETER:: limrow=10,limcol=limrow+1
      REAL(4)::lin(limrow,limcol),x(limrow)
      INTEGER::n,i,j
      LOGICAL singul

      !se leen el número de incógnitos y las entradas de la matriz
      WRITE(*,*) "Introduzca el número de incógnitas(n):"
      READ(*,*) n
      entradas:DO i=1,n
          WRITE(*,*) "introduzca la fila: ", i
          READ(*,*) (lin(i,j),j=1,n+1)
      ENDDO entradas

      !se llama la subrutina gauss para encontrar la solución y desplegarla
      CALL gauss(lin,limrow,limcol,n,x,singul)
      IF(.NOT.singul) THEN
          WRITE(*,*) "SOLUCIÓN DEL SISTEMA LINEAL:"
          DO i=1,n
              WRITE(*,1)i,x(i)
1             FORMAT(1x,"x(",I2,")=",F8.3)

          ENDDO
      ELSE
          WRITE(*,*) "Advertencia: la matriz es cercanamente singular"
      ENDIF
      WRITE(*,*) "FIN"
      END PROGRAM sistema_lineal
```

Eliminación Guassiana

```
      !****************************** SUBROUTINE GAUSS *******************************
      ! Esta subrutina encuentra la solución de un sistema de ecuaciones lineales de
      ! n ecuaciones con n incógnitas usando eliminación Gaussiana una vez se pruebe que
      ! existe una solución única. Los coeficientes y las ocnstantes del sistema lineal
      ! se almacenan en la matriz lin, la cual tiene limrow filas y limcol columnas.
      ! Si el sistema es singular, singul retorna un valor verdadero y la solución x es
      ! indefinida.
      !i,j,k  : índices
      !mult   : factor multiplicativo para eliminar incógnitas
      !abspiv : valor absoluto del pivote
      !pivrow : fila que contiene el pivote
      !epsil  : tolerancia
      !tem    : utilizado para intercambiar filas y columnas
      !
      !ENTRADA: arreglo bidimensional lin, enteros limrow, limcol y n
      !SALIDA : arreglo unidimensional x y el valor lógico singul
      !*******************************************************************************
      SUBROUTINE gauss(lin,limrow,limcol,n,x,singul)
      REAL(4)::lin(limrow,limcol),x(limrow),temp,mult
      REAL(4),PARAMETER::epsil=1E-6
      INTEGER::n,pivrow
      LOGICAL singul
      singul=.FALSE.

      DO i=1,n
          !localiza el pivote
          abspiv=ABS(lin(i,i))
          pivrow=i

          DO k=i+1,n
              IF( ABS(lin(k,i))>abspiv ) THEN
                  abspiv=ABS(lin(k,i))
                  pivrow=k
              ENDIF
          ENDDO

          !chequea si la matriz es cercanamente singular
          IF(abspiv<epsil) THEN
              singul=.TRUE.
              RETURN
          ENDIF
```

Eliminación Guassiana

```
!si no es cercanamente singular, entonces intercambia las filas pivrow e i si es necesario
    IF(pivrow/=i) THEN
        DO j=1,n+1
            temp=lin(i,j)
            lin(i,j)=lin(pivrow,j)
            lin(pivrow,j)=temp
        ENDDO
    ENDIF

    !Elimina la variable i-ésima de las ecuaciones i+1,...,n
    DO j=i+1,n
        mult=-lin(j,i)/lin(i,i)
        DO k=i,n+1
            lin(j,k)=lin(j,k)+mult*lin(i,k)
        ENDDO
    ENDDO

ENDDO

!Encuentra la solución por sustitución regresiva
x(n)=lin(n,n+1)/lin(n,n)
DO j=1,1,-1
    x(j)=lin(j,n+1)
    DO k=j+1,n
        x(j)=x(j)-lin(j,k)*x(k)
    ENDDO
    x(j)=x(j)/lin(j,j)
ENDDO

END SUBROUTINE
```

```
 Introduzca el numero de incognitas(n):
4
 introduzca la fila:           1
4 -4 -5 2 7
 introduzca la fila:           2
3 3 5 -1 9
 introduzca la fila:           3
2 1 -1 1 4
 introduzca la fila:           4
-1 2 -1 1 1
 SOLUCION DEL SISTEMA LINEAL:
 x( 1)=   0.048
 x( 2)=  -2.857
 x( 3)=   6.048
 x( 4)=  12.810
 FIN
Press any key to continue . . .
```

```
 Introduzca el numero de incognitas(n):
3
 introduzca la fila:           1
1 1 1 1
 introduzca la fila:           2
2 3 4 2
 introduzca la fila:           3
3 4 5 3
 Advertencia: la matriz es cercanamente singular
 FIN
Press any key to continue . . .
```

Estudiar el código fuente suministrado. Modificar el programa para que permita manipular cantidades de doble precisión y lea el sistema lineal (matriz y constantes) de un archivo.