Francisco R. Villatoro y Carmen M. García
6 de Noviembre de 2000

ENUNCIADO DE LA TERCERA PRACTICA (PUNTUACIÓN: 0.2)

El objetivo de esta práctica es estudiar algoritmos iterativos de resolución numérica de sistemas lineales utilizando Matlab.

Sea una función $f(x)$ periódica definida en $(0, 2\pi)$ y consideremos su aproximación $f_m \equiv f(x_m)$ en la malla

$$x_m = m\,\Delta x, \qquad m = 0, 1, 2, \ldots M-1, \qquad \Delta x = \frac{2\pi}{M}.$$

Se define su transformada discreta de Fourier (DFT), denotada F_k, como

$$F_k = \frac{1}{M}\sum_{m=0}^{M-1} f_m \exp(-\mathrm{i}\,k\,x_m), \qquad k = -M/2+1, \ldots, 0, \ldots M/2,$$

cuya inversa (IDFT) es

$$f_m = \sum_{k=-M/2+1}^{M/2} F_k \exp(\mathrm{i}\,k\,x_m), \qquad m = 0, 1, \ldots M-1.$$

Si definimos $\tilde{f}$ como el vector de componentes $(\tilde{f})_m = f_m$, $m = 0, 1, 2, \ldots M-1$, y $\tilde{F}$ como el vector de componentes $(\tilde{F})_n = F_{n-M/2+1}$, $n = 0, 1, 2, \ldots M-1$, estas transformadas se pueden interpretar como el producto de una matriz por un vector,

$$\tilde{F} = \mathbb{F}\,\tilde{f}, \qquad (\mathbb{F})_{n,m} = w^{n\,m}, \qquad \tilde{f} = \mathbb{F}^{-1}\,\tilde{F}, \qquad (\mathbb{F}^{-1})_{n,m} = w^{-n\,m},$$

$$n = 0, 1, 2, \ldots M-1, \qquad m = 0, 1, 2, \ldots M-1, \qquad w = \exp(-\mathrm{i}\,\Delta x).$$

Una de las propiedades fundamentales de la DFT es que permite calcular las derivadas espaciales de la función f de la forma

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_m = \sum_{k=-M/2+1}^{M/2} (\mathrm{i}\,k)\,F_k \exp(\mathrm{i}\,k\,x_m), \qquad m = 0, 1, \ldots M-1,$$

$$\left(\frac{d^n f}{dx^n}\right)_m = \sum_{k=-M/2+1}^{M/2} (\mathrm{i}\,k)^n\,F_k \exp(\mathrm{i}\,k\,x_m), \qquad m = 0, 1, \ldots M-1.$$

La DFT permite resolver una ecuación en derivadas parciales con condiciones de contorno periódicas. Sea la ecuación de onda

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0, \qquad (x,t) \in (0, 2\pi) \times \mathbb{R}^+,$$

$$u(x, 0) = f(x), \qquad x \in (0, 2\pi),$$

aproximando $u(x,t)$ en una malla $\{x_n\}$, $u_n(t) = u(x_n, t)$, llamando $\tilde{u}(t)$ al vector formado por estas componentes, y aplicando la DFT

$$\frac{d\tilde{u}(t)}{dt} + \mathbb{F}^{-1}\,(\mathrm{i}\,k)\,\mathbb{F}\,\tilde{u}(t), \qquad \tilde{u}(0) = \tilde{f},$$

donde k denota la matriz diagonal de componentes $(k)_{ii} \in \{-M/2+1, \ldots, 0, \ldots M/2\}$. Para resolver este sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias introducimos una malla temporal $t \equiv t_n = n\,\Delta t$, de forma que $\tilde{u}(t_n) \equiv \tilde{u}^n$, y podemos utilizar un método de Crank-Nicolson o regla del trapecio, que conduce a

$$\frac{\tilde{u}^{n+1} - \tilde{u}^n}{\Delta t} + \mathbb{F}^{-1}\,(\mathrm{i}\,k)\,\mathbb{F}\left(\frac{\tilde{u}^{n+1} + \tilde{u}^n}{2}\right), \qquad \tilde{u}^0 = \tilde{f},$$

que conduce al sistema de ecuaciones lineales

$$\left(I + \frac{\mathbb{F}^{-1}\,(\mathrm{i}\,k)\,\mathbb{F}}{2}\right)\tilde{u}^{n+1} = \left(I - \frac{\mathbb{F}^{-1}\,(\mathrm{i}\,k)\,\mathbb{F}}{2}\right)\tilde{u}^n,$$

cuya solución permite obtener una aproximación $u(x_i, t_n)$ en cada paso de tiempo t_n a partir de la condición inicial $f(x_i)$. Note que dicho sistema se puede escribir como $Az = b$, donde

$$A = \left(I + \frac{\mathbb{F}^{-1}\,(\mathrm{i}\,k)\,\mathbb{F}}{2}\right), \qquad z \equiv \tilde{u}^{n+1}, \qquad b = \left(I - \frac{\mathbb{F}^{-1}\,(\mathrm{i}\,k)\,\mathbb{F}}{2}\right)\tilde{u}^n.$$

1. Escribe un programa en Matlab que calcule las matrices $\mathbb{F}$ y $\mathbb{F}^{-1}$ definidas más arriba. Comprueba que dichas matrices son inversa la una de la otra. Dibuja una gráfica con el número de condición en función de M de la matriz $\mathbb{F}$. ¿Está bien condicionada dicha matriz?

2. Escribe un programa en Matlab para resolver la ecuación de onda unidimensional $u_t + u_x = 0$ con condición inicial $f(x) = \sin^2(x)\,\cos(x)$. Utiliza como método de resolución estándar de Matlab. ¿Cuál es la solución exacta de dicha ecuación? Dibuja la solución numérica en $t = 2$ para los $\Delta t = 0.1, 0.05, 0.01$. Dibuja el error entre la solución exacta y la numérica para dichos pasos de tiempo. ¿Qué norma has utilizado para definir el error? ¿Por qué?

3. Escribe una función que aplique de forma matricial el método iterativo de Gauss-Jacobi para resolver un sistema lineal. ¿Se puede aplicar dicho método a la matriz del sistema lineal del ejercicio anterior? ¿Por qué? Dibuja el número de condición de la matriz de iteración del método en función de M (para al menos 25 valores). Si el método converge, úsalo en el programa que has implementado en el apartado anterior. ¿Qué condiciones utilizas para chequear la convergencia del método de Gauss-Jacobi? ¿Por qué? Compara los resultados obtenidos con los del apartado anterior. Si iteras Gauss-Jacobi solamente una vez, antes de que converja, ¿cómo son los resultados que obtienes para $t = 2$ para los tres pasos de tiempo Δt anteriores? Justifica tus respuestas.

4. Repite el apartado anterior con el método de Gauss-Seidel.

5. Escribe una función que aplique de forma matricial el método de sobrerrelajación sucesiva (SOR) basado en el método de Gauss-Seidel para resolver un sistema lineal. ¿Se puede aplicar dicho método a la matriz del sistema lineal del ejercicio anterior? ¿Por qué? En su caso, úsalo en el programa para resolver la ecuación de onda. ¿Qué condiciones utilizas para chequear la convergencia del método? ¿Por qué? Dibuje el radio espectral de la matriz de convergencia del método en función de w. ¿Cuándo converge?. Determine el w óptimo. Aplica el método a nuestro problema para tres Δt y compara los resultados con los de apartados anteriores. Iterando el método sólo una vez, ¿cómo son los resultados que obtienes? Justifica tus respuestas.

6. ¿Es aplicable el método del gradiente conjugado a la matriz de nuestro problema? En su caso aplícalo utilizando la función de Matlab `cgs`. De los algoritmos generalizados del gradiente conjugado que incluye Matlab `bicg`, `bicgstab`, `gmres`, `pcg` y `qmr`, ¿cuáles convergen para la matriz de nuestro problema? ¿Cuál es el más rápido?