Quinta práctica voluntaria — Técnicas Numéricas

Francisco R. Villatoro y Carmen M. García — 12 de Marzo de 2003

FECHA DE ENTREGA: 2 de Abril de 2003

ENUNCIADO DE LA QUINTA PRACTICA (PUNTUACIÓN: 0.3)

Algoritmos de resolución de sistemas no lineales en Matlab.

Para resolver la ecuación diferencial

$$-\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -e^{x(t)}, \quad t \in (0,1) \qquad x(0) = x(1) = 0,$$

podemos definir una malla $\{t_i\}$, tal que $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_{N+1} = 1$, y utilizar el siguiente método en diferencias finitas

$$-x_{i-1} + 2\,x_i - x_{i+1} = -\Delta t^2\, e^{x_i}, \qquad i = 1, 2, \ldots, N,$$

$$x_0 = x_{N+1} = 0.$$

Dado Δt y N, estas ecuaciones se pueden escribir como $f(x) = 0$, donde $f : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}^N$ es una función vectorial de variable vectorial. Es decir,

$$f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_N) \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_N) \\ \vdots \\ f_N(x_1, x_2, \ldots, x_N) \end{pmatrix}, \qquad f_i(x) = -x_{i-1} + 2\,x_i - x_{i+1} - \Delta t^2\, e^{x_i}.$$

1. Para aplicar el método de Newton hay que calcular la matriz jacobiana $Df(x)$, donde $(Df(x))_{ij} = \partial f_i / \partial x_j$. Escriba una fila de dicha matriz, así como un código Matlab para calcular la matriz completa.

2. Demuestre que la matriz jacobiana es simétrica y definida positiva.

3. Considere el siguiente programa Matlab:

   ```
   dt=0.1; dt2=dt*dt;
   N=10; X=diag(zeros(N));
   A = sparse(2:N,1:N-1,-1,N,N) + sparse(1:N,1:N,2,N,N) ...
                                + sparse(1:N-1,2:N,-1,N,N);
   Df = A - dt2*sparse(1:N,1:N,exp(X),N,N);
   [R,p]=chol(Df);
   b=A*X-dt2*exp(X);
   X=X-R\(R'\b);
   ```

   que implementa el método de Newton resolviendo el sistema por factorización de Cholesky y usando matrices dispersas. Recuerde que el método de Newton en formulación delta se puede escribir como

   $$Df(x^k)\,\delta x^k = -f(x^k), \qquad x^{k+1} = x^k + \delta x^k.$$

   Explique detalladamente cada una de las instrucciones de dicho código.

4. ¿Cómo estimarías una condición inicial para el método de Newton que garantice que éste converge? Hazlo, y luego itera el método de Newton. ¿Qué criterio de error utilizas para parar la iteración?

5. Itere el método de Newton para la condición nula. ¿Cuántas iteraciones necesita? Más o menos que en el apartado anterior. Justifique sus resultados
6. Aplique el método de Newton con relajación (explicado en teoría). Escriba la formulación de dicho método. Dado que la matriz jacobiana cambia en cada iteración, el parámetro de relajación w óptimo, o cuasi-óptimo, varía con cada iteración. ¿Cómo puede determinar dicho parámetro óptimo dependiendo de cada iteración? Hágalo. ¿Y cómo puede determinar un parámetro w óptimo, o cuasi-óptimo, constante para el método global (constante para todas las iteraciones)? Hágalo.
7. Aplique el método de Newton con los parámetros "óptimos" que ha obtenido en el apartado anterior y para las condiciones iniciales de los apartados (4) y (5). Compare el número de iteraciones de todos estos métodos entre sí. ¿Cuál es el mejor?
8. Considere un método de Newton modificado de tal forma que se mantenga constante la matriz Jacobiana y sólo se cambie cada 5 iteraciones. De esta forma, se descompone la matriz jacobiana por Cholesky sólo un quinto de las iteraciones. Considere las condiciones iniciales de los apartados (4) y (5). ¿Cuántas iteraciones da este método modificado? Compare el número de estas iteraciones con las dadas en los apartados anteriores. Compare el coste computacional de este método con los de apartados anteriores. ¿Cuál es el mejor de estos métodos? Justifique todas sus respuestas.
9. Cómo podría aplicar el método de la secante para resolver el sistema de ecuaciones no lineal de este ejercicio. Implemente dicho método en Matlab y compare los resultados con los obtenidos en apartados anteriores.