FisComp Feb 2016

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

16 de Febrero de 2016

Examen de Física Computacional -

Nombre y Apellidos:

DNI y Firma:

Advertencias: La calculadora en modo de **radianes**. Sus cuentas deben justificar las respuestas que usted escriba.

1. [2.25 puntos] Sea $A = \lim_{h\to 0} A(h)$ donde $A(h) = (1+2h)^{1/h}$.

   i) Se calcula $A(h)$ para $h = 0.04,\ 0.02,\ 0.01$ y a los valores obtenidos se les llama A_1, A_2 y A_3, respectivamente. ¿Qué combinación de A_1, A_2, A_3 proporciona *la mejor aproximación posible* del valor exacto A?

   ii) El error de esta aproximación será obviamente de la forma $\mathcal{O}(h^p)$ para un cierto p. ¿Cuál es el valor de p?

   iii) Calcular numéricamente A_1, A_2, A_3 y el valor óptimo obtenido en i). Comparar éste con el límite A. Nota: A se saca con una cuenta de primer curso de Físicas-bachillerato.

   iv) Supongamos ahora que $A(h) = (1+h)^{1/h}$. La combinación óptima de A_1, A_2, A_3 obtenida en i), ¿sería la misma?

2. [2.25 puntos] Sea
$$F(x,y) = \begin{pmatrix} x^2+y^2-3 \\ 2x^2+y^2/4-3 \end{pmatrix}.$$

   a) Hacer un dibujo de $F(x,y) = 0$ para ver donde se encuentran las soluciones e indicarlo en formato medicinas (ver pizarra). Indicar las simetrías obvias del sistema.

   b) Escribir explícitamente el método de Newton-Raphson para resolver $F(x,y) = 0$ calculando la matriz Jacobiana asociada, así como su inversa (cuando exista).

   c) Tomando como punto incial $(x_0, y_0) = (-1, 2)$, encontrar las dos primeras aproximaciones $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ proporcionadas por dicho método. Trabajar en aritmética exacta (por ejemplo, 5/21 y no 0.238095).

   d) Si $(x_0, y_0) = (I, I)$, con $\sqrt{I} = -1$, ¿serían x_1, y_1 también imaginarios puros? ¿Y x_2, y_2? ¿Seía este Newton-Raphson convergente?

3. [2.5 puntos] Sea la matriz
$$A = \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{pmatrix}.$$

   a) Factorizar A en la forma LDU, donde L es una matriz triangular inferior con 1's en la diagonal principal, U es triangular superior también con 1's en la diagonal principal, y D es una matriz diagonal. Ayuda: La descomposición es única. y claramente no hace falta pivoteo parcial.

   b) ¿Para qué valores de a es definida positiva la forma cuadrática $\mathbf{v}^t A\, \mathbf{v}$?.

   Definida **positiva** quiere decir que el número $\mathbf{v}^t A\, \mathbf{v}$ es estrictamente positivo y que es igual a cero sólo si $\mathbf{v} = 0$. Como en clase, $\mathbf{v}$ es el vector columna $(x, y, z)^t$.

1

$$A(h) = A + a_1 h + a_2 h^2 + a_3 h^3 + \dots$$

obviously, $A = e^2$. Why?

$1 + 2h \sim e^{2h}$ if $h \to 0$

$(1+2h)^{1/h} \sim e^2$ if $h \to 0$ then.

See back of the page for details..

$$A(-h) = (1-2h)^{-1/h} = \frac{1}{(1-2h)^{1/h}}$$

: $A(-h)$ is not equal to $A(h)$ or $-A(h)$.

Consequently:

$$A(h) = e^2 + a_1 h + a_2 h^2 + a_3 h^3 + \dots \quad (*)$$

$h = 0.04$ —— $A_1 = A(0.04) = 6.848475196$

$h = 0.02$ —— $A_2 = A(0.02) = 7.106683347$

$h = 0.01$ —— $A_3 = A(0.01) = 7.244646118$.

a) Start with $h = 0.04$ and calculate A_1, followed by A_2 (half the previous h), and then A_3 (half again):

$$A_1 = e^2 + a_1 h + a_2 h^2 + a_3 h^3 + \dots$$

$$A_2 = e^2 + a_1 \frac{h}{2} + a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + a_3\left(\frac{h}{2}\right)^3 + \dots$$

$$A_3 = e^2 + a_1 \frac{h}{4} + a_2\left(\frac{h}{4}\right)^2 + a_3\left(\frac{h}{4}\right)^3 + \dots$$

not necessary really

- A_1
- A_2
- A_3

$$2A_2 - A_1 = e^2 - \frac{a_2}{2}h^2 - \frac{3}{4}a_3 h^3 - \frac{7}{8}a_4 h^4 - \dots$$

$$2A_3 - A_2 = e^2 - \frac{a_2}{8}h^2 - \frac{3}{32}a_3 h^3 - \frac{7}{128}a_4 h^4 - \dots$$

this also can be obtained changing $h \to \frac{h}{2}$ in $2A_2 - A_1$

$$\frac{8A_3 - 6A_2 + A_1}{3} = e^2 + \frac{a_3}{8}h^3 + \frac{7}{32}a_4 h^4 + \dots$$

The more accurate combination is

$$\frac{8A_3 - 6A_2 + A_1}{3}.$$

$\frac{8-6+1}{3} = 1$ ↑ ok

b) obviously, $p = 3$: → that 3

$$\frac{8A_3 - 6A_2 + A_1}{3} = e^2 + \frac{a_3}{8} h^3 + \dots$$

c) $2A_2 - A_1 =$

$2A_3 - A_2 =$

$\frac{1}{3}(8A_3 - 6A_2 + A_1) = 7.388514685$

$e^2 (\text{exact}) = 7.389056099$

d) Case $A(h) = (1+h)^{1/h}$

Again

$A(h) = e + b_1 h + b_2 h^2 + \dots$ (same structure than (*))

and the best combination is (the same) again

$$\frac{1}{3}(8A_3 - 6A_2 + A_1) = e + \frac{b_3}{8} h^3 + \frac{7}{32} b_4 h^4 + \dots$$

$A_1 = A(0.04) = 2.665836332$

$A_2 = A(0.02) = 2.691588029$

$A_3 = A(0.01) = 2.704813829$

$2A_2 - A_1 = 2.717339726$

$2A_3 - A_2 = 2.718039629$

igual de "malos" o de "buenos". Son del mismo orden...

$\frac{1}{3}(8A_3 - 6A_2 + A_1) = 2.718272930$

$e = 2.718281828$

$A(h) = +A(-h)$, then $A = a_0 + a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \dots$ and not (+)

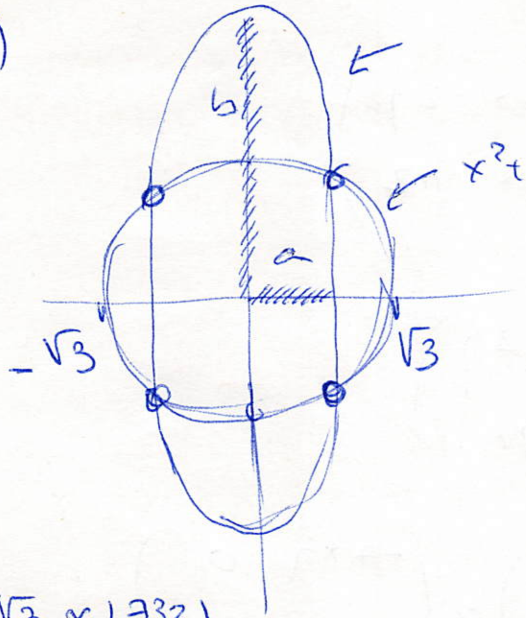
$A(h) = -A(-h)$, then $A = a_1 h + a_3 h^3 + a_5 h^5 + \dots$

[Creía que sabíais esto... Caramba!!!!!]

② $\begin{cases} x^2+y^2=3 & \to \text{circumference} \\ 2x^2+y^2/4=3 & \to \text{ellipse.} \end{cases}$

$$\frac{x^2}{3/2}+\frac{y^2}{12}=1$$

a)



Solutions: four with multiplicities
1-1-1-1.

$\sqrt{3} \simeq 1.7321$

$a = \sqrt{\frac{3}{2}} \simeq 1.2247$

$b = \sqrt{12} = 2\sqrt{3}$

the system is invariant under

$(x,y) \to (-x,-y)$

$(x,y) \to (-x,y)$

$(x,y) \to (x,-y)$

$(x,y) \not\to (y,x)$

So if you know the solution in the 1st quadrant (say (x_s,y_s)), you know all the others, $(-x_s,y_s)$ etc...)

b)

$f_1 \equiv x^2+y^2-3$

$f_2 \equiv 2x^2+y^2/4-3$

$$F(x,y) = \begin{pmatrix} f_1(x,y) \\ f_2(x,y) \end{pmatrix}$$

$$F(x,y) = \underset{F_0}{\underset{\shortparallel}{F(x_0,y_0)}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix}_0}_{J_0 \text{ : Jacobian matrix evaluated at } (x_0,y_0)} \begin{pmatrix} x-x_0 \\ y-y_0 \end{pmatrix} + \ldots$$

quadratic, cubic terms...

terms in $(x-x_0)^2$, ...

Newton-Raphson defines $\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ s.t.

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = F_0 + J_0 \begin{pmatrix} x_1-x_0 \\ y_1-y_0 \end{pmatrix}.$$

or

$$\begin{pmatrix}x_1\\ y_1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_0\\ y_0\end{pmatrix} - J_0^{-1}F_0 \qquad (**)$$

Here we have:

$$J \equiv \begin{pmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y}\\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2x & 2y\\ 4x & y/2\end{pmatrix}$$

$$J^{-1} = -\frac{1}{7xy}\begin{pmatrix}y/2 & -2y\\ -4x & 2x\end{pmatrix}$$

Checking:

$$\begin{pmatrix}2x & 2y\\ 4x & y/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y/2 & -2y\\ -4x & 2x\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-7xy & 0\\ 0 & -7xy\end{pmatrix}$$

$$J^{-1}F = -\frac{1}{7xy}\begin{pmatrix}y/2 & -2y\\ -4x & 2x\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x^2+y^2-3\\ 2x^2+\frac{y^2}{4}-3\end{pmatrix}$$

Then, (**) is ...

$$\begin{pmatrix}x_1\\ y_1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x_0\\ y_0\end{pmatrix} + \frac{1}{7x_0y_0}\begin{pmatrix}y_0/2 & -2y_0\\ -4x_0 & 2x_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_0^2+y_0^2-3\\ 2x_0^2+\frac{y_0^2}{4}-3\end{pmatrix}$$

Application: $\begin{pmatrix}x_0\\ y_0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\ 2\end{pmatrix}$ substituted affords

$$\begin{pmatrix}x_1\\ y_1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\ 2\end{pmatrix} - \frac{1}{14}\begin{pmatrix}1 & -4\\ 4 & -2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\\ 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\ 2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}-1/7\\ -4/7\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-8/7\\ 10/7\end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix}x_2\\ y_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-8/7\\ 10/7\end{pmatrix} - \frac{\cancel{7}}{80}\begin{pmatrix}5/\cancel{7} & -20/\cancel{7}\\ 32/\cancel{7} & -16/\cancel{7}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}17/49\\ 6/49\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}-8/7\\ 10/7\end{pmatrix} - \frac{1}{80}\begin{pmatrix}5 & -20\\ 32 & -16\end{pmatrix}\begin{pmatrix}17/49\\ 6/49\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}-8/7\\ 10/7\end{pmatrix} - \frac{1}{80}\begin{pmatrix}-5/7\\ 64/7\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\frac{127}{112}\\ 46/35\end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix}-1.133929\\ 1.314286\end{pmatrix}$$

d) Suppose now that the input is $\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix}$,
$i^2 = -1$. Look up at

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + \frac{1}{7x_0y_0} \begin{pmatrix} y_0/2 & -2y_0 \\ -4x_0 & 2x_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0^2 + y_0^2 - 3 \\ 2x_0^2 + \frac{y_0^2}{4} - 3 \end{pmatrix}$$

we conclude that x_0^2 is real, y_0^2 is real, x_0y_0 is real, so $\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\ldots \\ i\ldots \end{pmatrix}$ are pure imaginary.

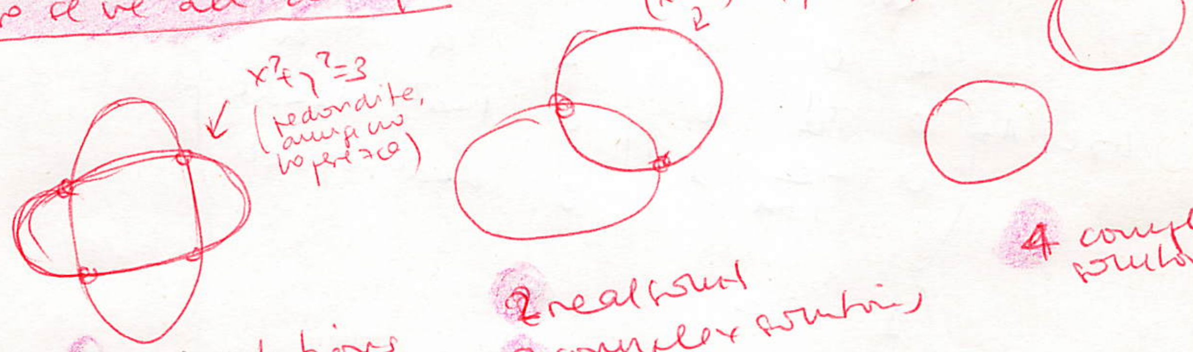
Similarly $\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\ldots \\ i\ldots \end{pmatrix}$ are pure imaginary too.

Has the system $\begin{cases} x^2 + y^2 = 3 \\ 2x^2 + y^2/4 = 3 \end{cases}$ complex solutions?
Obviously <u>not</u>. So, the method with input (i, i) <u>does not</u> converge.

elimine y^2 y escribe un polinomio de segundo orden para x (lo que realice). Tiene solo <u>dos</u> soluciones reales.
<u>Pero se ve del dibujo</u>

x $(x-2)^2 + (y-3)^2 = 3$; $(x-9)^2 + (y-10)^2 = 3$

$x^2 + y^2 = 3$ (redondito, aunque no lo parece)



4 real solutions

2 real solut
2 complex solutions

4 complex solutions

③
$$A = \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{pmatrix}$$

Tanteo: $a=0$, $A = \mathbb{I}$, the identity matrix. Positive matrix because is associated to the quadratic form $x^2+y^2+z^2$.
Means that b) has at least an answer: $a=0$.

$a=1$, $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$. Singular matrix. Means that one (or more) entries of D is zero. Means also that $v^t \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} v = 0$ but $v \neq 0$. $a=1$ is not an answer in b).

To factorize A multiply on the left by

$$L_1 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ -a & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ 0 & 1-a^2 & a-a^2 \\ 0 & a-a^2 & 1-a^2 \end{pmatrix}$$

notice...a symmetric matrix too

$$L_2 L_1 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{a}{1+a} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ 0 & 1-a^2 & a-a^2 \\ 0 & a-a^2 & 1-a^2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ 0 & 1-a^2 & a-a^2 \\ 0 & 0 & \frac{(1-a)(1+2a)}{1+a} \end{pmatrix}.$$

then

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ a & \frac{a}{1+a} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ 0 & 1-a^2 & a-a^2 \\ 0 & 0 & \frac{(1-a)(1+2a)}{1+a} \end{pmatrix} = \longrightarrow$$

this 1

$$
= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ a & \frac{a}{1+a} & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-a^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-a)(1+2a)}{1+a} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 1 & a & a \\ 0 & 1 & \frac{a}{1+a} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

$$\underset{L}{\parallel} \qquad \underset{D}{\parallel} \qquad \underset{U = L^t}{\parallel}$$

expected...

Notice that $A = L D L^t$

b) $v^t A v = v^t L D L^t v = (L^t v)^t D (L^t v)$. , $v = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$.

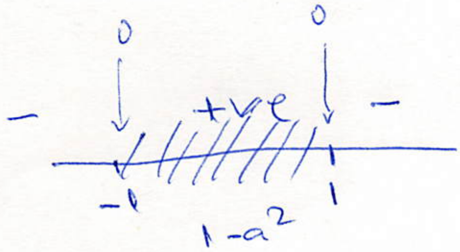
Observe that

$$L^t v = \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ 0 & 1 & \frac{a}{1+a} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + a(y+z) \\ y + \frac{az}{1+a} \\ z \end{pmatrix},$$

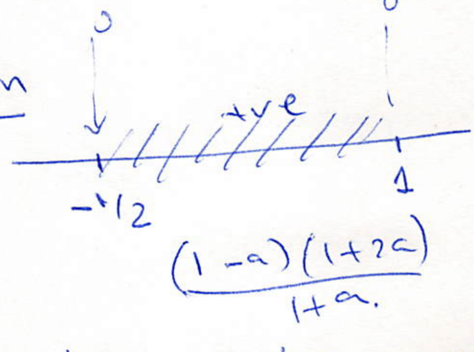
and consequently

$$v^t A v = 1 \left(x + a(y+z)\right)^2 + (1-a^2)\left(y + \frac{az}{1+a}\right)^2 + \frac{(1-a)(1+2a)}{1+a} z^2.$$

The quantities $1, 1-a^2, \frac{(1-a)(1+2a)}{1+a}$ are the key of positiveness.



intersection with



Then, A is "a symmetric positive definite matrix" when $a \in (-1/2, 1)$ → open at $-1/2, 1$. (Not included a)