UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

6 de Septiembre de 2016

Examen de Física Computacional - 2015/2016

Nombre y Apellidos:

DNI y Firma:

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

1. [2 puntos] Sean los siguientes tres métodos iterativos

$$x_{n+1} = f_1(x_n), \quad x_{n+1} = f_2(x_n), \quad x_{n+1} = f_3(x_n),$$

donde

$$f_1(x) = \sqrt{2x+3}, \qquad f_2(x) = \frac{3}{x-2}, \qquad f_3(x) = \frac{x^2-3}{2}.$$

Cada uno de estos métodos calcula los ceros de una cierta función.

a) Diga de qué función se trata en cada caso.

b) Calcule **a mano** esos ceros (que es muy fácil hacerlo).

Conteste razonadamente a las siguientes **cinco** preguntas: c1) ¿Qué esquemas no convergen a ninguna de las raíces si los input están en el intervalo $[4,5]$? c2) ¿Qué esquemas convergen a la raíz mayor con inputs en $[4,5]$? c3) ¿Qué esquemas convergen a la raíz menor con inputs en $[4,5]$? c4) Dos esquemas convergen con la misma rapidez. ¿Cuáles son y a qué punto fijo converge cada uno? c5) Uno de los esquemas es un **método de Newton**. ¿Es verdadera o falsa esta afirmacion? Explique su respuesta.

2. [0.75+0.75+1] a) Determinar si el generador de números aleatorios,

$$x_{n+1} = (137x_n + 187) \mod 256$$

tiene *período máximo* utilizando un teorema enunciado en clase.

b) Tomando como semilla $x_0 = 0$, escribir los primeros diez números obtenidos con este generador.

c) Al dibujar los puntos (x_n, x_{n+1}) en dos dimensiones se obtienen 32 rectas cuyas ecuaciones son

$$x + d\,y - 29 = 0, \mod 64.$$

Mediante operaciones con el generador, o como a usted se le ocurra, encuentre el valor del menor entero positivo d. Recuerde que x es x_n, e y es x_{n+1}, como siempre.

3. [1.25 puntos] a) Utilizar **pivoteo parcial** para obtener la factorización $PA = LU$ de la matriz

$$\text{i)} \quad \text{A} = \begin{pmatrix} 5 & 10 & 9 \\ 10 & 26 & 26 \\ 15 & 54 & 66 \end{pmatrix}, \quad \text{ii)} \quad \text{A} = \begin{pmatrix} 0 & 4 & -15 \\ 10 & 0 & 15 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

b) Calcular, usando la factorización, el determinante de cada matriz A.

Recuerde que L tiene 1's en la diagonal principal y debajo de la diagonal las entradas son, en valor absoluto, igual o menor que 1. L es triangular inferior y U superior. P es una matriz permutación.

4. [2 puntos] a) Encontrar los coeficientes a, b, c tal que la regla de cuadratura a **dos** puntos

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx af(-1) + b\, f(c)$$

sea exacta para polinomios del mayor grado posible. Decir claramente cuál es el grado máximo.

b) Escribir el error de la fórmula anterior.

FisComp - Sept 2016

(1) a) Los esquemas iterativos del tipo

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

calculan (si hay convergencia, se entiende) los puntos fijos p de $f(x)$, o sea, las soluciones p de

$$p = f(p).$$

i) $p = \sqrt{2p+3}$ or
$p^2 = 2p+3$:
"$x_{n+1} = f_1(x_n)$" : calcula, pues, las soluciones de

$$x^2 - 2x - 3 = 0$$

ii) $p = \frac{3}{p-2}$,
$p(p-2) - 3 = 0$ or $p^2 - 2p - 3 = 0$.
Este esquema tb calcula las soluciones de

$$x^2 - 2x - 3 = 0$$

iii) $p = \frac{p^2-3}{2}$ or $p^2 - 2p - 3 = 0$
Este también.

En resumen, todos los esquemas de este examen calculan los ceros de la misma función, del polinomio:

$$x^2 - 2x - 3 = 0$$

b) A mano, very easy,

$$x^2 - 2x - 3 = (x-3)(x+1) = 0 \quad , \; x \begin{cases} 3 \\ -1 \end{cases}$$

c) En las preguntas que siguen es obligatorio hablar de la derivada $f'(x)$ si el esquema es

$$x_{n+1} = f(x_n).$$

Lo vimos en clase de teoría. "El valor de $f'(p)$ si el pto fijo p indica, en cada esquema, es "atractivo", "repulsivo" o... "indiferente" (esto se estudia tb a ver qué le pasa). El criterio es

$|f'(p)|<1$: el pto fijo p es atractivo.

$|f'(p)|>1$ El pto fijo p es repulsivo (o sea, que $x_0, x_1, x_2, \ldots$ no converge a p). (salvo si usted da la sucesión $p, p, p, p, \ldots$)

$|f'(p)|=1$ ... se estudia...

<u>nota importantísima</u>: Fíjese que <u>no</u> se estudia $|f'(x)|$ en algún pto x de $[4,5]$ o de otro lugar, se estudia $f'(\underline{p})$ o sea, en el pto fijo que se va a calcular.

(*) $\ulcorner x_{n+1}=f_1(x_n)$ // $f_1(x)=\sqrt{2x+3}$, $f_1'(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2x+3}}$

$|f_1'(-1)|=1$ // $|f_1'(3)|=\frac{1}{3}$ [obligatorio calcular esto... ...así se puede]

$\llcorner$

$\ulcorner x_{n+1}=f_2(x_n)$ // $f_2(x)=\dfrac{3}{x-2}$, $f_2'(x)=-\dfrac{3}{(x-2)^2}$

$|f_2'(-1)|=\dfrac{1}{3}$ // $|f_2'(3)|=3$

$\llcorner$

$\ulcorner x_{n+1}=f_3(x_n)$ // $f_3(x)=\frac{1}{2}(x^2-3)$, $f_3'(x)=x$

$|f_3'(-1)|=1$, $|f_3'(3)|=3$

$\llcorner$

(*) A veces no se sabe $f'(p)$ [mejor, casi nunca se sabe. Pero sólo necesito saber si $|f'(p)|<1$]

Thus, just looking at the table,

$|f_1'(-1)| = 1$, $|f_1'(3)| = 1/3$,

$|f_2'(-1)| = 1/3$, $|f_2'(3)| = 3$,

$|f_3'(-1)| = 1$, $|f_3'(3)| = 3$,

we answer:

c1) $\boxed{\text{Scheme 3}}$
Cannot converge to $p=3$ because ($|f_3'(3)|=3$) is a repulsive point. Could converge to -1? Try with some inputs in [2,5], and the answer will be no.

c2) To $p=3$ converges $\boxed{\text{Scheme 1}}$

c3) $\boxed{\text{Scheme 2}}$ not scheme 1 or 3.

c4) El enunciado pregunte "con la mínima rapidez". Eso significa $\frac{1}{3} > \frac{1}{3}$. Y la mínima rapidez sólo se puede saber echando la cuenta con los derivados. no por descarte de posibilidades.
Answer: f_1 to $p=3$ and f_2 to $p=-1$
How fast is the convergence is measured with the value $|f'(p)|$.

c5) False. Newton method has $|f'(p)|=0$
Besides,

$$x_{n+1} = f_N(x_n)$$

with

$$f_N(x) \equiv \frac{1}{2}\left(\frac{x^2+3}{x-1}\right)$$

Pla cuenta: $P(x) = x^2-2x-3$, $P'(x) = 2x-2$

$$x - \frac{P(x)}{P'(x)} = x - \frac{(x^2-2x-3)}{2x-2}$$

$$= \frac{2x^2-\cancel{2x}-x^2+\cancel{2x}+3}{2x-2}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{x^2+3}{x-1}\right)$$

L

② $x_{n+1} = 137 x_n + 187, \mod 256$

$a = 137, \ c = 187, \ m = 2^8$ (famoso)

1) c y m no tienen divisores comunes excepto el 1. Aquí se ve muy fácilmente: m sólo es divisible por 2, y c no lo es. No importa si 187 es primo o no. En general (aquí tb) se calcula el gcd(256, 187), y se calcula por el "algoritmo de Euclides" (que aquí no hace falta pero se evita que tengamos que romper en factores primos 256, 187 que pueden, que no sepamos si los números son muy grandes, o no lo sabe nuestra máquina (Maple ifactor, mucho se "atasca", se atasca en ifactor(...)).

El método bueno

Euclides:

$$\begin{array}{r|l} 256 & 187 \\ \hline 69 & 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{r|l} 187 & 69 \\ \hline 49 & 2 \end{array}$$

$$\begin{array}{r|l} 69 & 49 \\ \hline 20 & 1 \end{array}$$

$$\begin{array}{r|l} 49 & 20 \\ \hline 9 & 2 \end{array}$$

$$\begin{array}{r|l} 20 & 9 \\ \hline 2 & 2 \end{array}$$

$$\begin{array}{r|l} 9 & 2 \\ \hline 1 & 4 \end{array}$$

$$\begin{array}{r|l} 2 & 1 \\ \hline 0 & 2 \end{array}$$

el anterior es el gcd(256, 187) = 1. As expected.

2) a−1 = 136 is a multiple of 2 (remember, 2 is the only prime divisor of $m = 2^8$)

3) m is a multiple of 4, a−1 = 136 is also a multiple of 4 because 36 is a multiple of 4.

$\Rightarrow$ The generator has full period and it is equal to 256 (not 255... because c is not a zero)

$x_0 = 0$, then $x_1, x_2, \ldots$ are

0, 187, 206, 249, 252, 151, 138, 149, 120, 243, 198, 177, ...

Estos números se pueden hacer a mano o a máquina. Yo probando cosas he visto que $137 = 17 \cdot 2^3 + 1$ $= (16+1)2^3 + 1 = 2^7 + 2^3 + 1$, $137^2 = 2^6 + 2^4 + 1$, ... pero no he seguido por ahí. He hecho ... otras posibilidades, tb valen...

$$\begin{array}{r} 256 \\ \times 2 \\ \hline 512 \end{array} \quad \begin{array}{r} 256 \\ \times 3 \\ \hline 768 \end{array} \quad \begin{array}{r} 256 \\ \times 4 \\ \hline 1024 \end{array} \quad \begin{array}{r} 256 \\ \times 5 \\ \hline 1280 \end{array}$$

$x_0 = 0$

$x_1 = 137 \cdot 0 + 187 = 187$

$x_2 = 137 \cdot 187 + 187 = 25806 = 25600 + 206 = 206$

$x_3 = 137 \cdot 206 + 187 = 28409 = 25600 + 2809$

$= 2809 - 2560 = 249$

$x_4 = 249 \cdot 137 + 187 = 34300 = 8700 - 7680$

$= 1024 = -4 = 252$

$x_5 = 252 \cdot 137 + 187 = 34711 = 25600 + 8911$

$= 7680 + 1431 = 1431 - 1280 = 151$,

$\vdots$

O a máquina: $28409/256. = 110.9726562$,

$(\boxed{\ } - 110) \times 256 = 248.999872$,

i.e. 249.

---

c) La constante d se puede calcular de muchas maneras. Una de ellas es ésta. Antes dije que va a salir

$$\boxed{d=7}.$$

With $(x_1, x_2) = (187, 206)$, for instance, we have that

$$187 + d\cdot 206 - 29 = \text{multiple of } 64.$$

This is also

$$158 + d\cdot 206 = 64k \quad " \quad k \text{ an integer}$$

and also

$$79 + d\cdot 103 = 32k$$

with d, k integers. Let us solve this equation. in the integers (*). First the solution. The solution of

$$79 + d\,103 = 32k \qquad k, u \text{ integers}$$

is

$$d = 7 - 32q$$
$$k = 25 - 103q$$

with $q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, the integer that you wish ($q=0$ is "our" number). Conclusion

$$d = 7, \quad k = 25$$

en el examen con los 10 pedidos vale...

Try with $d=7$ and check with **all** the numbers of the generator ~~that~~ the relation:

$$x_n + 7x_{n+1} - 29 = k\cdot 64$$

holds for $k = 0, 1, 2, \dots, 31.$ Los 32 restos!!

(*) Recuerde que en uno de los laboratorios les expliqué cómo resolver aquel problema del señor que iba a una tienda a comprar una bufanda que costase, ... no recuerdo... un entero, sólo tenía billetes de 3 euros y la dependiente sólo de 5 para devolver. Lo recuerda? Pues se hace igual...

[Solving $79 + d103 = 32k$ in the integers.

$$k = \frac{79}{32} + \frac{d103}{32} = 2 + \frac{15}{32} + \left(3 + \frac{7}{32}\right)d$$

$$= 2 + 3d + l \quad \text{''} \quad \text{with } l = \frac{15}{32} + \frac{7}{32}d \text{ an integer;}$$

$$32l = 15 + 7d$$

$$d = \frac{32}{7}l - \frac{15}{7} = \left(4 + \frac{4}{7}\right)l - \left(2 + \frac{1}{7}\right)$$

$$= 4l - 2 + p \quad \text{''} \text{ with } p = \frac{4l}{7} - \frac{1}{7} \text{ an integer;}$$

$$7p = 4l - 1$$

$$l = \frac{7p}{4} + \frac{1}{4} = \left(2 - \frac{1}{4}\right)p + \frac{1}{4}$$

$$= 2p + q \quad \text{''} \quad q = -\frac{p}{4} + \frac{1}{4} \text{ an integer:}$$

$4q = -p + 1$ or

$$\boxed{p = 1 - 4q}$$
$$\boxed{l = 2 - 7q}$$
$$\boxed{d = 7 - 32q}$$
$$\boxed{k = 25 - 103q}$$

Take $q = 0$, $d = 7$, $k = 25$.
]

---

(3) Partial pivoting is
permute + eliminate + permute + eliminate + ...
to ensure stability when working in floating point (most of the time). Not now, though. This is just an exam!

i)
$$A = \begin{pmatrix} 5 & 10 & 9 \\ 10 & 26 & 26 \\ 15 & 54 & 66 \end{pmatrix}$$

1st column: 15 is largest value in absolute terms (value).

Move the 3rd row to the 1st one with matrix permutation P_1 given by

$$P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

now $$P_1 A = \begin{pmatrix} 15 & 54 & 66 \\ 10 & 26 & 26 \\ 5 & 10 & 9 \end{pmatrix}.$$

Eliminate with L_1. (Remember that eliminate is write in echelon form $\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot \end{pmatrix}$).

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{10}{15} & 1 & 0 \\ -\frac{5}{15} & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{L_1} \underbrace{\begin{pmatrix} 15 & 54 & 66 \\ 10 & 26 & 26 \\ 5 & 10 & 9 \end{pmatrix}}_{P_1 A} = \begin{pmatrix} 15 & 54 & 66 \\ 0 & -10 & -18 \\ 0 & -8 & -13 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{rrr} -10 & -36 & -44 \\ 10 & 26 & 26 \\ \hline 0 & -10 & -18 \end{array} \quad ; \quad \begin{array}{rrr} -5 & -18 & -22 \\ 5 & 10 & 9 \\ \hline 0 & -8 & -13 \end{array}$$

No more permutations are needed since $|-10| > |-8|$ in $\begin{pmatrix} -10 & -18 \\ -8 & -13 \end{pmatrix}$

Eliminate again:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{8}{10} & 1 \end{pmatrix}}_{L_2} \begin{pmatrix} 15 & 54 & 66 \\ 0 & -10 & -18 \\ 0 & -8 & -13 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 15 & 54 & 66 \\ 0 & -10 & -18 \\ 0 & 0 & 7/5 \end{pmatrix}}_{U}$$: final step.

$$\begin{array}{rr} 8 & \frac{8 \cdot 18}{10} \\ -8 & -13 \\ \hline 0 & 7/5 \end{array}$$

$$P_1 A = \overbrace{L_2^{-1} L_1^{-1}}^{\text{call it } L} \cdot U$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2/3 & 1 & 0 \\ 1/3 & 4/5 & 1 \end{pmatrix}}_{\equiv\ L} \underbrace{\begin{pmatrix} 15 & 54 & 66 \\ 0 & -10 & -18 \\ 0 & 0 & 7/5 \end{pmatrix}}_{\equiv\ U}$$

$$\det A = \underset{\substack{\uparrow \\ \det P_1 \text{ is } -1}}{-1} \cdot (15)(-10)\left(\frac{7}{5}\right) = 210.$$

(ii)

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 4 & -15 \\ 10 & 0 & 15 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$P_1 A = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$\det P_1 = -1$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{10} & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\equiv\ L_1} \begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 0 & -1 & -5/2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{ccc} -1 & 0 & -3/2 \\ 1 & -1 & -1 \\ \hline 0 & -1 & -5/2 \end{array}$$

no more permutation needed.

$$\begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 0 & -1 & -5/2 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1 \end{pmatrix}}_{\equiv\ L_2} \begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 0 & 0 & -\frac{25}{4} \end{pmatrix}.$$

$$\begin{array}{cc} +1 & -15/4 \\ -1 & -5/2 \\ \hline 0 & -25/4 \end{array}$$

Thus

$$L_2 L_1 P_1 A = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 0 & 0 & -\frac{25}{4} \end{pmatrix} \text{''}$$

$$P_1 A = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/10 & -1/4 & 1 \end{pmatrix}}_{L} \underbrace{\begin{pmatrix} 10 & 0 & 15 \\ 0 & 4 & -15 \\ 0 & 0 & -25/4 \end{pmatrix}}_{U}. \quad \therefore \boxed{\det A = 250}$$

(4) $\int_{-1}^{1} dx\, f(x) = a f(-1) + b f(c)$

We calculate a, b, c imposing that this formula is exact for $f(x) = 1, x, x^2, \ldots$

$f(x) = 1$, $\int_{-1}^{1} dx\, 1 = 2$, $\boxed{2 = a + b}$

$f(x) = x$, $\int_{-1}^{1} dx\, x = 0$ $\boxed{0 = -a + bc}$

$f(x) = x^2$, $\int_{-1}^{1} dx\, x^2 = \frac{2}{3}$, $\boxed{\frac{2}{3} = a + bc^2}$

Three equations, for three unknowns. Solve for a, b, c

1st + 2nd equation: $2 = b(1+c)$
2nd + 3rd equation: $\frac{2}{3} = \underline{bc(1+c)}$ $\Rightarrow \boxed{c = \frac{1}{3}}$

is a 2

$2 = b(1+c)$ and $c = \frac{1}{3}$ gives $\boxed{b = 3/2}$

$2 = a + b$ and $b = 3/2$ gives $\boxed{a = 1/2}$

Result: $a = \frac{1}{2}$, $b = \frac{3}{2}$, $c = \frac{1}{3}$.

But

$$\int_{-1}^{1} dx\, f(x) = \frac{1}{2} f(-1) + \frac{3}{2} f\left(\frac{1}{3}\right)$$

is not exact for $f(x) = x^3$ since $0 \neq -\frac{4}{9}$

$$\left[-\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \frac{1}{27} = -\frac{4}{9} \right]$$

The formula has to be corrected in this (and others) case but it is exact for all polynomials of order ≤ 2.

Calculating the error:
Consider $f(x) = x^3$, we know that

$$0 = -\frac{4}{9} + \text{error},$$

so

$$\text{error} = \frac{4}{9}.$$

Assuming (reasonable...) that the error has the form

$$\text{error} = C_1 \cdot f'''(\xi)$$

[Reasonable because $1, x, x^2$ have all third derivatives equal to zero, hence, no error at all]

We find C_1:

$$\frac{4}{9} = C_1 \cdot 6 \quad C = \frac{2}{27}$$

Last step: "All together now" – Beatles: write the complete formula:

$$\int_{-1}^{1} dx\, f(x) = \frac{1}{2} f(-1) + \frac{3}{2} f\left(\frac{1}{3}\right) + \frac{2}{27} f'''(\xi)$$

Equal, not $\simeq$

with $\xi \in (-1, 1)$

Note: This Gaussian quadrature is known as a Radau Integration method. This here is the simplest case, the following case being

$$\int_{-1}^{1} dx\, f(x) \simeq \frac{2}{9} f(-1) + \frac{16+\sqrt{6}}{18} f\left(\frac{1-\sqrt{6}}{5}\right) + \frac{16-\sqrt{6}}{18} f\left(\frac{1+\sqrt{6}}{5}\right).$$

I dont write the error. It is in books.