UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
DEPARTAMENTO DE FISICA TEORICA I
MJRPlaza

Física Computacional - Exámenes

NOTA

La calculadora en **radianes**. Siempre que sea **razonable** es conveniente comprobar los resultados.

FEBRERO de 2012

1. [2.5 puntos] (A mano o con calculadora) Sea el generador de congruencias lineales

$$x_{i+1} = 29\,x_i \mod 32.$$

a) Utilizando un teorema visto en clase determinar si tiene período máximo. b) Tomando una semilla impar, 7 por ejemplo, ¿cuál es el período? ¿Y tomando como semilla 15? ¿Y tomando un 4? ¿Y si la semilla es 6? A la vista de lo obtenido en estas preguntas, ¿depende el período de este generador de que la semilla elegida sea par o impar? c) Con el resultado de los apartados a) y b), ¿podría enunciar una regla general acerca del período máximo de generadores multiplicativos con módulo $m = 2^k$?

Sol: a) No, 32 is not prime. Besides 29 is not a primitive root of 32 b) Yes, it depends: $8, 8, 2, 4$. c) Conjecture: that the maximum period is $m/4$.

2. [2.5 puntos] a) Determinar las constantes a, b, c tal que la regla de cuadratura

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

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

b) Usar la regla para aproximar la siguiente integral (con a, b, c los valores calculados en a), por supuesto)

$$\int_0^4 e^{\sqrt{x}}\,dx.$$

Sol: a) $a = 1/6$, $b = 5/6$, $c = 1/\sqrt{6}$, for instance. The precision of the rule is 5 (es exacta hasta orden 5, para 6 ya no). Un extra de esta cuadratura: también es exacta para cualquier $f(x)$ impar, lo que quiere decir que cuando se calcule su error (sabe hacerlo?, si no sabe consulte el examen de Junio de 2012) y se escriba $f^{(6)}(\xi)$ con ξ un número en $[-1, 1]$, ese número será forzosamente cero si $f(x)$ es impar. Recuerde que si f es impar f' es par, f'' impar, and so on. b) 16.7012016. Esto no se pedía pero la integral tiene como primitiva $2\,e^{\sqrt{x}}(\sqrt{x} - 1)$ y el valor exacto es pues 16.7781122.

JUNIO de 2012

3. [2 puntos] a) Sea $f(x) = \dfrac{1}{x} - 3$ y sea $x_1, x_2, \ldots$ la secuencia obtenida mediante un *método de Newton* con input inicial x_0. Si $e_n \equiv x_n - 1/3$, encuentre C tal que

$$e_{n+1} = C\,e_n^2.$$

Utilice esta relación para demostrar que el método converge si $0 < x_0 < 2/3$. ¿Qué sucede si $x_0 = 2/3$?

b) ¿Qué calcula el método iterativo $x_{n+1} = 3(x_n - 3x_n^2 + 3x_n^3)$? Con la misma definicion de e_n que en el apartado anterior calcular C y s tales que

$$e_{n+1} = C\, e_n^s.$$

Sol: a) Newton's iteration scheme: $x_{n+1} = 2x_n - 3x_n^2$. From here follows as an identity thr value $C = -3$. If $x_0 = 2/3$ one has the sequence $2/3, 0, 0, \ldots$ reaching 0 all the time, a fixed point of the numerical scheme. This is a perfectly correct answer, mathematically speaking, but it is not the fixed point of our interest (remember that we want to solve $f(x) = 0$). b) It calculates, in principle, the fixed points of $g(x) = 3(x - 3x^2 + 3x^3)$, o sea, que calcula $0, 1/3, 2/3$ en decimales. Also $C = 9, s = 3$, as an identity too (no need of taking limits).

4. [3 puntos] i) Determinar las constantes a, b, c, d tal que la regla de cuadratura

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx af(-1) + bf(1) + cf'(-1) + df'(1)$$

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

ii) Usar la regla para aproximar la integral

$$\int_{-1}^{1} e^{\sin x}\, dx.$$

iii) Estimar la misma integral mediante la *regla de Simpson extendida*, primero con $N = 2$, es decir, dividiendo el intervalo en dos subintervalos de $h = 1$, y después con $N = 4$, y $h = 0.5$. Si el valor exacto de la integral es 2.283194521, ¿cuál de las tres aproximaciones es mejor?

iv) Suponga que a la fórmula del apartado i) se le añade un término de error a la derecha, ¿cual de las cuatro opciones sería la correcta (**razone** el resultado, por favor):

a) $\frac{1}{25} f^{(4)}(\xi)$, b) $\frac{2}{45} f^{(4)}(\xi)$, c) $-\frac{2}{45} f^{(5)}(\xi)$, d) $-\frac{2}{45} f^{(4)}(\xi)$,
donde ξ es un punto de $[-1, 1]$.

Sol: i) $a = b = 1, c = -d = 1/3$. The precision of the rule is 3 (vale hasta orden 3, para 4 ya no). It is not valid for $f(x) = x^4$ since the lhs is different to the rhs ($2/5$ against $-2/3$). The missing part, $16/15$, is the error. Write then, $2/5 = -2/3 + error$. ii) 2.410629624, o con menos cifras, es igual. Note que $\sin 1$ quiere decir 1 radián, no un grado. Los **grados** sólo valen para ir al Polo, no para cálculos. iii) Aplicando Simpson una vez: 2.25028426, aplicando dos 2.28319452. De las tres aproximaciones, ésta es la mejor. iv) El error debe ser exacto para cualquier $f(x)$. Tome en particular $f(x) = x^4$ que es el primer polinomio para el que la cosa falla, el $error = 16/15$ corresponde a b). Esta es la respuesta correcta. No hay más que justificar.

SEPTIEMBRE de 2012

5. [2.5 puntos] (A mano o con calculadora) Sea el generador de congruencias lineales

$$x_{i+1} = 13\, x_i \mod 100.$$

a) Utilizando un teorema visto en clase determinar si tiene período máximo. b) Calcular el período cuando se toma como semilla $x_1 = 1$. c) Lo mismo pero con semilla $x_1 = 5$. d) Con el resultado obtenido en los apartados b) y c) contestar a la siguiente pregunta: ¿depende el período de este generador del valor de la semilla?

Sol: a) No, 100 is not prime b) 20 c) 4 d) Sí, depende.

6. [2.5 puntos] a) ¿Qué calcula el método iterativo $x_{n+1} = \dfrac{x_n^2+3}{5}$?

   b) Si $x_0 = 0$, escribir los cuatro términos siguientes obtenidos con el esquema. Hacer lo mismo si $x_0 = 1$.

   c) Demostrar que el método representa una aplicación contractiva en $[0,1]$ (de donde se concluye que tiene un único punto fijo en este conjunto).

   Sol: a) En principio (sin echar ninguna otra cuenta) calcula las cantidades $(5+\sqrt{13})/2$, $(5-\sqrt{13})/2$. b) con cualquier input x_0 de $[0,1]$ se llega a $(5-\sqrt{13})/2$.

7. [1.5+1.5 puntos] i) Determinar las constantes reales p, q tal que la regla de cuadratura

$$\int_0^h f(x)\,dx \approx p\,h f\left(\frac{h}{3}\right) + \frac{h}{3} f(q\,h)$$

   sea exacta para polinomios del mayor grado posible (h es un número positivo dado). Diga claramente cuál es el grado máximo y escriba el error, si lo hubiere, al integrar un polinomio de segundo grado.

   ii) Calcular (usando el método que usted prefiera) una aproximación de la integral de $\sqrt{x}$ entre 1.00 y 1.30 que sea exacta en las cuatro primeras cifras decimales.

FEBRERO de 2013

8. [3 puntos] Sea

$$F(x,y) = \begin{pmatrix} x^2/4 + y^2/9 - 1 \\ x - y - 1 \end{pmatrix}.$$

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

   b) Tomando como punto incial $(x_0, y_0) = (2, 0)$, encontrar las dos primeras aproximaciones $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ proporcionadas por dicho método.

9. [2 puntos] Un algoritmo (malo) para generar números aleatorios es la secuencia de Fibonacci

$$x_{n+1} = (x_n + x_{n-1}) \mod 16.$$

   Calcular: i) el período de la secuencia cuando se toman las semillas $x_0 = 1$, $x_1 = 1$.

   ii) Si se disponen los puntos generados en un espacio tridimensional, se observan unos planos. Encontrar las ecuaciones de dichos planos así como el número de ellos.

10. [2.5 puntos] i) Calcular las factorizaciones $A = LU$ de Doolitle, Crout y Cholesky (si ésta es posible) de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -4 & -2 & -2 \\ -4 & 9 & 6 & 3 \\ -2 & 6 & 9 & 6 \\ -2 & 3 & 6 & 16 \end{pmatrix}.$$

    ii) Obtener el determinante de A de cualquiera de las factorizaciones anteriores.

11. [2.5 puntos] a) Encontrar los coeficientes a, b, c tal que la regla de cuadratura

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx af(0) + bf(1) + cf(2)$$

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

b) Escribir el error de la fórmula anterior.

c) Transformar la integral $\int_0^3 \frac{1}{t^2+1}\,dt$ en una integral de la forma $\int_0^1 f(x)\,dx$ mediante un cambio de variable y utilizar la regla obtenida en a) para calcular su valor. Estimar también el valor de la integral usando la fórmula trapezoidal extendida con $N = 2$. ¿Cuál de los dos resultados es más exacto?

SEPTIEMBRE de 2013

12. [3 puntos] Sea

$$F(x, y) = \begin{pmatrix} x^2 + y^2 - 4 \\ e^x + y - 1 \end{pmatrix}.$$

a) Hacer un dibujo de $F(x, y) = 0$ para ver donde se encuentran las soluciones.

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 $(x_0, y_0) = (1, -1)$, encontrar las dos primeras aproximaciones $(x_1, y_1), (x_2, y_2)$ proporcionadas por dicho método.

13. [2 puntos] Dos algoritmos cuadráticos para generar números aleatorios son los siguientes

$$x_{n+1} = (5x_n^2 + 8x_n + 3) \mod 14, \qquad x_{n+1} = (7x_n^2 + 8x_n + 3) \mod 14.$$

Calcular: i) el período de ambas secuencias tomando como semilla $x_0 = 0$.

ii) ¿Tiene alguno de ellos período máximo? Si la contestación es **sí**, diga claramente cuál. Ahora cambie la semilla a $x_0 = 1$. ¿Sigue teniendo período máximo?

14. [3 puntos] i) Calcular la factorización $A = LU$ de Doo**l**itle, o de Cro**u**t o de Cholesky (la que usted prefiera de las tres) de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 3 & 6 & 10 & 15 \\ 1 & 4 & 10 & 20 & 35 \\ 1 & 5 & 15 & 35 & 70 \end{pmatrix}.$$

ii) Utilizando la factorización del apartado i) obtener la solución del sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} x + y + z + u + w = 1 \\ x + 2y + 3z + 4u + 5w = 0 \\ x + 3y + 6z + 10u + 15w = 0 \\ x + 4y + 10z + 20u + 35w = 0 \\ x + 5y + 15z + 35u + 70w = 0 \end{cases}$$

Sol: $A = LU$ is

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 6 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

L is the matrix on the left and U the matrix on the right. Both have the main diagonal with all entries equal to 1. Also U is the transpose matrix of L. In this case, the three factorizations coincide. The solution of the system of linear equations is $x = 5, y = -10, z = 10, u = -5, w = 1$.

Puse esta matriz porque aunque gorda (es 5×5) los números son facilísimos ya que son todos números combinatorios.

15. [2 puntos] a) Encontrar los coeficientes p, q tal que la regla de cuadratura

$$\int_0^1 f(x)\, dx \approx pf\left(\frac{1}{3}\right) + \frac{1}{3} f(q)$$

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

b) Escribir el error de la fórmula anterior.

c) Con los resultados a) y b) se puede deducir $\int_0^h f(x)$. Escriba esta integral con la potencia adecuada de h en el error.

Nota: Este ejercicio era un trozo del de Sept2012. Os remito a éste.

FEBRERO de 2014

16. [1.5+1.5 puntos] i) Resolver mediante *eliminación Gaussiana* y **pivoteo parcial** el sistema

$$\begin{cases} 2x + 2y + 4z = 2 \\ x + y + z = 1 \\ x + 4y + 6z = -5. \end{cases}$$

ii) a) Usar eliminación Gaussiana **sin pivoteo y aritmética exacta** para resolver

$$\begin{cases} x + y = 0 \\ x + \dfrac{401}{400} y = 20 \end{cases}$$

b) Resolver nuevamente el sistema anterior con eliminación Gaussiana sin pivoteo pero redondeando cada cálculo intermedio a **cuatro dígitos significativos**. En este caso usted debe obtener una solución que no se parece a la del apartado a). ¿Cuál es la razón de este desajuste/desbarajuste?

Nota: 0.0047 tiene dos cifras significativas (4 y 7); 0.00470 tiene tres cifras significativas (4,7, y el último 0); 1006 tiene cuatro, 1000 tiene 1; 1000.0 tiene cinco.

17. [1.5+1.5 puntos] a) Suponga que una regla de cuadratura, cuando se discretiza en N trozos, tiene un desarrollo del error dado por

$$I - I_N = \frac{a_1}{N} + \frac{a_2}{N^2} + \frac{a_3}{N^3} + \cdots$$

Suponga también que para un cierto valor de N hemos evaluado I_N, I_{2N} e I_{3N}. i) Con estos datos calcular la *mejor aproximación posible* del valor xexacto I de la integral. ii) El error de esta aproximación será obviamente de la forma $\mathcal{O}(1/N^p)$ para un cierto p. ¿Cuál es el valor de p?

b) Usar cuatro iteraciones de un Romberg (método trapezoidal con N=1,2,4,8 divisiones del intervalo) para estimar

$$\pi = \int_0^1 dx\, \frac{4}{1 + x^2},$$

comentando brevemente sobre la exactitud del resultado.

18. [2 puntos] En el método de congruencias lineales

$$x_{n+1} = (ax_n + 2) \mod 45,$$

a es una constante distinta de 1. i) Utilizando un teorema visto en clase decir para qué valores de a el método tiene período máximo. Para **cada uno** de estos valores haga los apartados ii) iii) siguientes: ii) calcular el menor entero positivo r tal que $a^r = 1, \mod 45$, iii) con semilla $x_0 = 0$ escribir los diez primeros números aleatorios generados por el método.

A la vista de estas secuencias de números (tantas como distintas aes, no lo olvide), ¿qué correlación/conclusión observa usted?

19. [2 puntos] El método iterativo

$$x_{n+1} = x_n - \cos x_n \cdot \sin x_n + R \cos^2 x_n,$$

donde R es una constante positiva, se obtiene de aplicar un método de Newton a una cierta función $f(x)$. i) ¿Que calcula este método iterativo? ii) Diga quien es $f(x)$. iii) Calcule **eso que calcula el método** cuando $R = 3$ con exactitud de cinco cifras decimales. Elija bien x_0 y llegará enseguida. Rechace soluciones no deseadas.