Computación Numérica
Segunda Práctica de Fortran 90
Sistemas de ecuaciones. Curso 2007 – 2008

En esta práctica se propone la programación de los tres métodos numéricos siguientes:

1. **LU** adaptado para resolver sistemas de ecuaciones lineales cuya matriz de coeficientes es tridiagonal.
2. **QR** para resolver sistemas de ecuaciones lineales.
3. **Newton** para resolver sistemas no lineales de ecuaciones.

En los métodos LU para matrices tridiagonales y QR, construye una subrutina para leer de un fichero: n, número de ecuaciones del sistema, la matriz de coeficientes (almacenada mediante tres vectores en el caso de LU tridiagonal) y el vector de términos independientes. Además, mediante otra subrutina, escribe en un fichero la solución obtenida.

Newton

- Las funciones que describen las ecuaciones del sistema no lineal y las componentes de la matriz jacobiana deberán estar en un MODULE.
- El número máximo de iteraciones y la tolerancia de error se pedirán por teclado.
- La escritura de resultados presentará los datos empleados: vector inicial, el número máximo de iteraciones y la tolerancia. Además se mostrará el vector aproximación obtenido, el error asociado y el número de iteraciones realizadas.
- En cada iteración resolvemos el sistema lineal mediante el método LU para matrices tridiagonales.

Características generales del programa

1. Elabora un programa principal con un menú de selección del método de resolución: LUtrid, QR ó Newton.
2. Las subrutinas pueden ser externas o ir incluidas en modules.
3. Verificar el funcionamiento de los algoritmos con ejemplos de solución conocida.

MEMORIA
Consta de los siguientes apartados:

1. Código fuente. Listado de los programas elaborados.
2. Tests. Donde figuren los diferentes tests realizados para validar los algoritmos.

Aplicación

El siguiente sistema no lineal surge en microelectrónica cuando se simulan numéricamente dispositivos semiconductores tales como diodos pn:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) := A\mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{u}) - \mathbf{b} = \mathbf{0}\,,$$

donde $\mathbf{u} = (u_i)_{i=1}^n$ representa el potencial eléctrico y la matriz A tridiagonal de dimensión $n \times n$ es

$$A := \lambda^2(n+1)^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Además, $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = (f_i(\mathbf{u}))_{i=1}^n$ y $\mathbf{b} = (b_i)_{i=1}^n$ denotan la función vectorial no lineal y el vector cuyas componentes son

$$f_i(\mathbf{u}) := 2K\sinh(u_i) \qquad \text{y} \qquad b_i = \begin{cases} -1 & \text{si } i \le \frac{n}{2} \\ 1 & \text{si } i > \frac{n}{2} \end{cases} \qquad \forall i = 1, \dots, n.$$

Considérese el parámetro $n = 35$ y las constantes positivas $\lambda = \sqrt{1.67}\cdot 10^{-2}$, $K = 6.77\cdot 10^{-6}$ y resuélvase este sistema no lineal con el método de Newton partiendo de la aproximación inicial

$$\mathbf{u}^0 := (u_i^0)_{i=1}^n \qquad \text{con} \quad u_i^0 = \begin{cases} 0 & \text{si } i \le \frac{n}{2} \\ 10 & \text{si } i > \frac{n}{2} \end{cases} \qquad \forall i = 1, \dots, n.$$

TIEMPO DE REALIZACIÓN: 5 semanas