

ADN: un software de dominio público para la enseñanza de métodos numéricos

Jairo Duque

Resumen

ADN, abreviación de **Análisis Duque Numérico**, es el nombre de un nuevo software de dominio público que opera en los ambientes Windows 95, Windows 98, Windows NT, y sirve para la enseñanza de los algoritmos que se discuten en un curso típico de métodos numéricos. En ADN se han implementado diferentes versiones de eliminación gaussiana, técnicas de factorización de matrices, métodos iterativos para sistemas de ecuaciones lineales, el método de Newton y de la secante para ecuaciones no lineales, interpolación lagrangiana e integración numérica.

Palabras y frases claves: Software educativo, métodos numéricos, eliminación gaussiana, método de Newton, método de la secante, interpolación lagrangiana, integración numérica.

1 Introducción

Los cursos de Métodos numéricos constituyen parte importante en la formación de ingenieros y científicos. Con frecuencia, en nuestro medio, tales cursos se caracterizan, o bien por el énfasis en la programación de los algoritmos o por el estudio de la teoría de convergencia y análisis del error de los métodos, en forma abstracta, sin referencia a problemas concretos de interés para el futuro profesional.

ADN se ha pensado en primer lugar como una herramienta didáctica, en donde el objetivo fundamental es poner a disposición del usuario los algoritmos del análisis numérico. El programa brinda al usuario la posibilidad de experimentar numéricamente con diferentes métodos, variando parámetros o condiciones iniciales. Así, el usuario puede concentrar sus esfuerzos en el análisis y/o comparación de resultados, aprovechando el tiempo que le tomaría la codificación de los algoritmos.

Según la experiencia del autor, ADN permite manejar ejemplos no triviales e interesantes en el marco de un curso introductorio. Esto da al estudiante familiaridad con el tema en cuestión, le muestra los alcances y las limitaciones de un método numérico, sin que sea experto en análisis numérico.

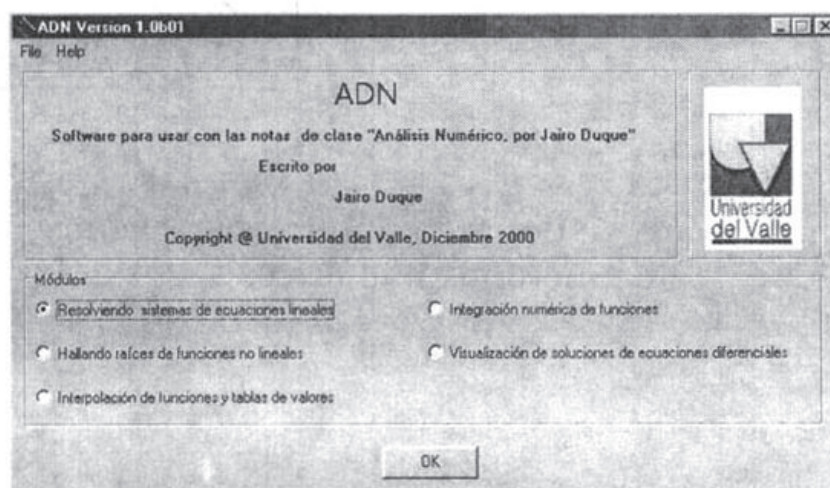


Figura 1: Inicio de una sesión con ADN

En algunas universidades del mundo existen programas con propósitos similares, pero con limitaciones de licencia y en algunos casos incompletos. Fueron estas dificultades las que motivaron el desarrollo de este software. De otro lado, los requerimientos de hardware y software son modestos. ADN tiene incorporada una rutina PARSE que permite encontrar los ceros de cualquier ecuación no lineal e ingresar los coeficientes de una matriz en forma simbólica. Gracias a su diseño el programa corre aún en un PC 486 con procesador matemático.

2 Inicio de una sesión con ADN

Al inicio, ADN se presenta en su ventana principal con una serie de botones de operación tal como se muestra en la Figura 1. En ADN los métodos numéricos están agrupados por módulos, de acuerdo a su función: *sistemas lineales* para los métodos de eliminación gaussiana con pivoteo y sin pivoteo, los métodos iterativos Gauß-Seidel, Jacobi y los métodos de relajación SOR, *hallando ceros de funciones* para los métodos que resuelven ecuaciones no lineales, como el de Newton y de la Secante, *interpolación* para los algoritmos de interpolación polinómica con diferentes selecciones de nodos y finalmente *integración numérica* para los diferentes fórmulas de integración como la del Trapecio, la regla de Simpson y el método de Romberg.

Quizá lo mejor sea ilustrar las capacidades de ADN en casos concretos. Este artículo habrá logrado su objetivo si el lector se anima a obtener el programa y a efectuar sus propios experimentos.

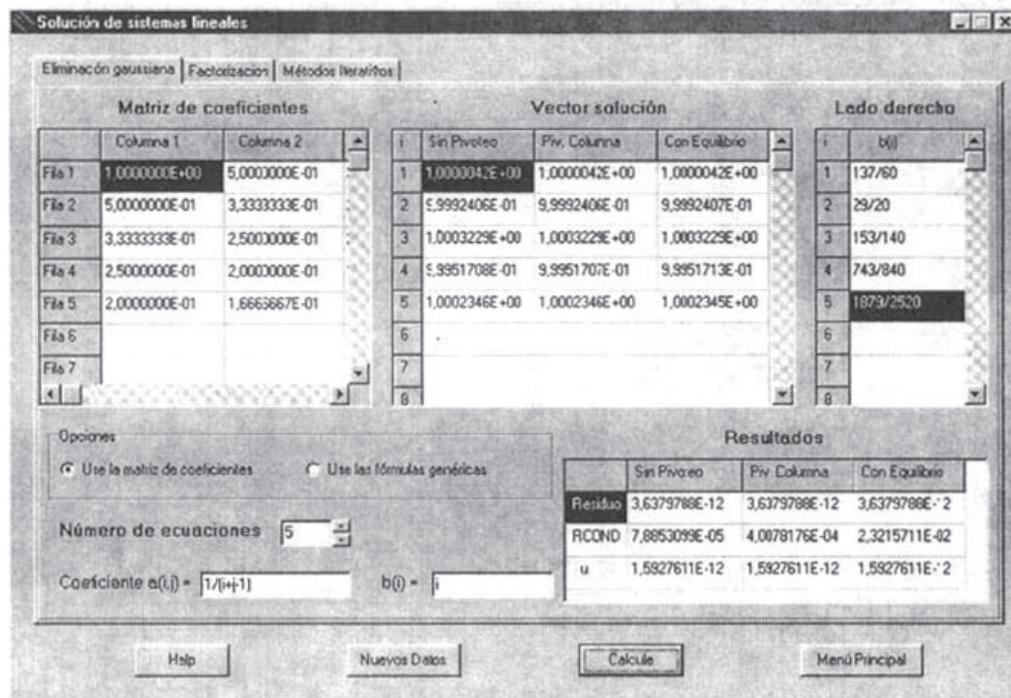


Figura 2: Mal condicionamiento de la matriz de Hilbert

Cómo invertir un sistema de ecuaciones La matriz de Hilbert de orden n se define por $h_{ij} = 1/(i+j-1)$, donde $1 \leq i, j \leq n$. Esta matriz se utiliza con frecuencia para llevar a cabo comprobaciones, debido a su naturaleza mal condicionada. Un problema de prueba interesante consiste en revolver el sistema lineal $H_n x = b$ con valores crecientes de n y con $b_i = \sum_{j=1}^n h_{ij}$. La solución deberá ser $x = (1, 1, \dots, 1)^T$. Para valores pequeños de n la solución calculada es muy exacta, pero conforme n aumenta la precisión se deteriora rápidamente. Usted puede resolver este sistema lineal con ADN, tal como se muestra en la figura 2. Además, en este módulo Usted puede calcular la factorización LU y de Cholesky de la matriz de coeficientes, si éstas existen. En la parte inferior derecha de la figura Usted puede leer información sobre el recíproco del número de condición de la matriz antes y después del condicionamiento del sistema, sobre el residuo y la exactitud de la solución.

Búsqueda de ceros de funciones Con mucha frecuencia resolver sistemas de ecuaciones de la forma $F(x) = 0$ es una tarea difícil y se recurre entonces a un método numérico como el de Newton o el de la secante. En ADN el método de Newton está implementado para sistemas y el de la Secante sólo para una ecuación no lineal. Usted puede prescribir la precisión que desea alcanzar durante las iteraciones y el número máximo

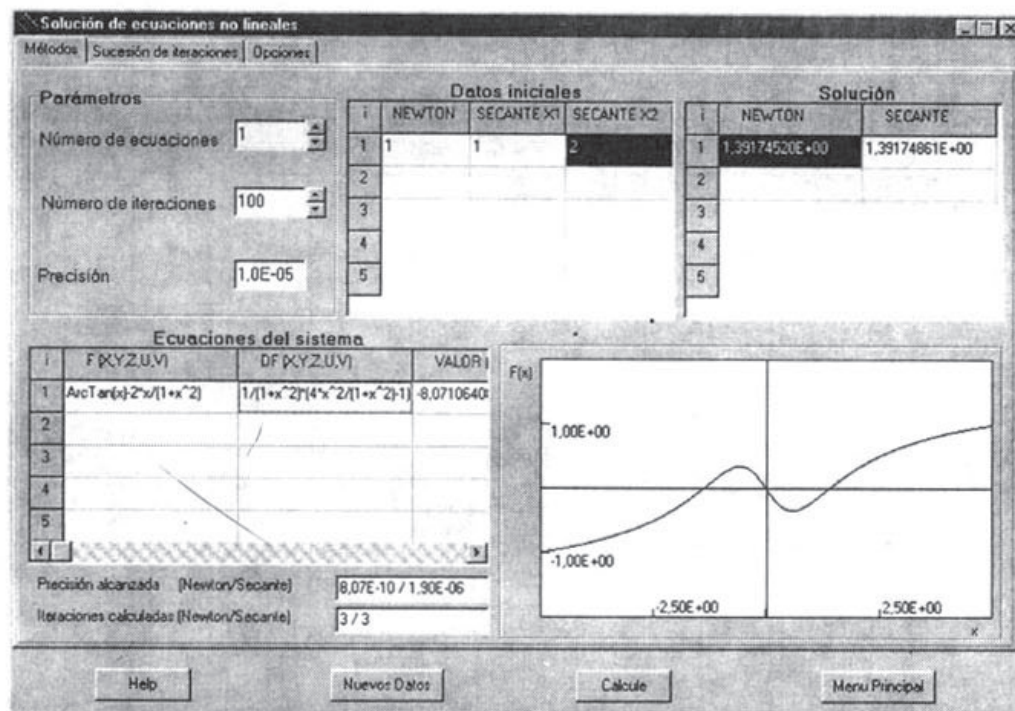


Figura 3: Método de Newton

de iteraciones permitidas. Efectuemos, por ejemplo, cinco iteraciones del método de Newton y de la Secante para la ecuación lineal siguiente

$$\tan^{-1}(x) - \frac{2x}{1+x^2} = 0,$$

con valores iniciales $x_0 = -1$ y $x_0^1 = 1$, $x_0^2 = 2$, respectivamente. El resultado del experimento puede observarse en la figura 3. De la gráfica puede leerse que solo se realizaron 3 iteraciones de los métodos para obtener el cero $x = 1.3917$ con la precisión prescrita. En la parte inferior derecha ADN responde con un gráfico de la función F , con el fin de visualizar la posición de los ceros y/o para seleccionar un dato inicial x_0 apropiado. Obsérvese que la rutina PARSER de ADN permite escribir la ecuación y su derivada en forma simbólica. Además, Usted puede inspeccionar la sucesión de iteraciones haciendo click en la pestaña con el rótulo *Sucesión de iteraciones*. Esta opción es interesante si se desea verificar la convergencia cuadrática del método de Newton.

Resolver sistemas de ecuaciones no lineales con el método de Newton es muy fácil. Usted da a ADN el sistema de ecuaciones y sus derivadas, tal como se describe en la ayuda, de la cual aquí presentamos un extracto (véase Fig. 4).

Encontrando raíces de funciones no lineales

En este módulo Ud. puede encontrar numéricamente las soluciones de la ecuación $F(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = 0$, siendo $F = (F_1, F_2, F_3, F_4, F_5)$ un campo vectorial de componentes F_1, F_2, F_3, F_4 , y F_5 .

En ADN están implementados el método de Newton y el método de la Secante, que para sistemas de ecuaciones es un método tipo Broyden. Antes de calcular cualquier iteración de estos métodos Ud. debe decirle a ADN cuál es el tamaño del sistema, declarando el número de ecuaciones. Dependiendo del número de ecuaciones Ud. dispone de las variables x, y, z, u, v para declarar el campo vectorial F y su derivada (necesaria en cada iteración del método de Newton y para iniciar la iteración del método Broyden).

Considere, por ejemplo, el siguiente sistema de ecuaciones no lineales:

$$F(x_1, x_2) = (3 \cdot x_1^2 - \sin(x_1 \cdot x_2), x_2 - x_1) = 0.$$

Aquí, las componentes F_1, F_2 de F son $3 \cdot x_1^2 - \sin(x_1 \cdot x_2)$, $x_2 - x_1$, respectivamente. Los valores de F_1 y F_2 se ingresan en la tabla Ecuaciones del sistema con sus respectivos gradientes. La primera columna de la tabla representa las entradas F_1, F_2 de F y la segunda los gradientes DF_1 y DF_2 .

$$\begin{array}{ll} F_1 = 3 \cdot x_1^2 - \sin(x_1 \cdot x_2) & \text{en la fila 1 columna 1} \\ F_2 = x_2 - x_1 & \text{en la fila 2 columna 1} \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} DF_1 = (3 \cdot x_1 - \cos(x_1 \cdot x_2), -x_1 \cdot \cos(x_1 \cdot x_2)) & \text{en la fila 1 columna 2} \\ DF_2 = (1, -1) & \text{en la fila 2 columna 2} \end{array}$$

Observe el formato de los gradientes DF_1 y DF_2 . DF_1 es un vector y sus componentes están separados por comas. Los espacios en blanco no son necesarios. Para sistemas con una sola ecuación Ud. no tiene que escribir los paréntesis!

Declarando el sistema de ecuaciones

La rutina **PARSER** implementada en ADN conoce prácticamente todas las funciones y operaciones aritméticas más comunes:

$\sin$, $\cos$, $\tan$, $\arcsin$, $\arccos$, $\arctan$,
 $\exp$, $\ln$, $\sinh$, $\cosh$, $\tanh$, $\sqrt{}$ (raíz cuadrada), $+$, $-$, $*$, $/$ y $^{\wedge}$ (exponenciación)
 $\sqrt{}$ es equivalente a $^{\wedge}0.5$
 Raíces n -ésimas se pueden expresar mediante $^{\wedge}(1/n)$.

Así que Ud. puede declarar en la tabla Ecuaciones del sistema cualquier campo vectorial F , tal como se mostró en el ejemplo anterior.

Figura 4: Método de Newton para sistemas de ecuaciones

Interpolación polinómica Un problema de interpolación polinómica que es recurrente en los cursos de métodos numéricos es el siguiente. Para $n = 5, 10$ y 15 , encuentre el polinomio de interpolación de Newton p_n correspondiente a la función $f(x) = 1/(1 + x^2)$ sobre el intervalo $[-5, 5]$. Utilice nodos uniformemente espaciados. Calcule en cada paso la diferencia $f(x) - p_n(x)$ en 30 puntos distribuidos a iguales distancias en el intervalo $[-5, 5]$, con el fin de observar la divergencia de p_n respecto de f . La solución de este problema representa para el estudiante una inversión de tiempo considerable sólo para visualizar la divergencia de p_n respecto de f cuando n se incrementa. En ADN esta tarea es muy fácil de realizar. Además, el programa muestra un gráfico comparativo de los polinomios interpolantes y la función original (véase Fig. 5).

3 Menús e instrucciones

ADN tiene integrado el manual de instrucciones (*help on line*). Allí se describen paso a paso las instrucciones que un usuario novato necesita para operar exitosamente el programa. Además, la interfase de ADN se ha diseñado pensando en el usuario inmediato, es amigable y usa nombres suficientemente explicativos. Cada módulo está dotado de un botón *Help* que le permite al usuario acceder a la ayuda del módulo correspondiente.

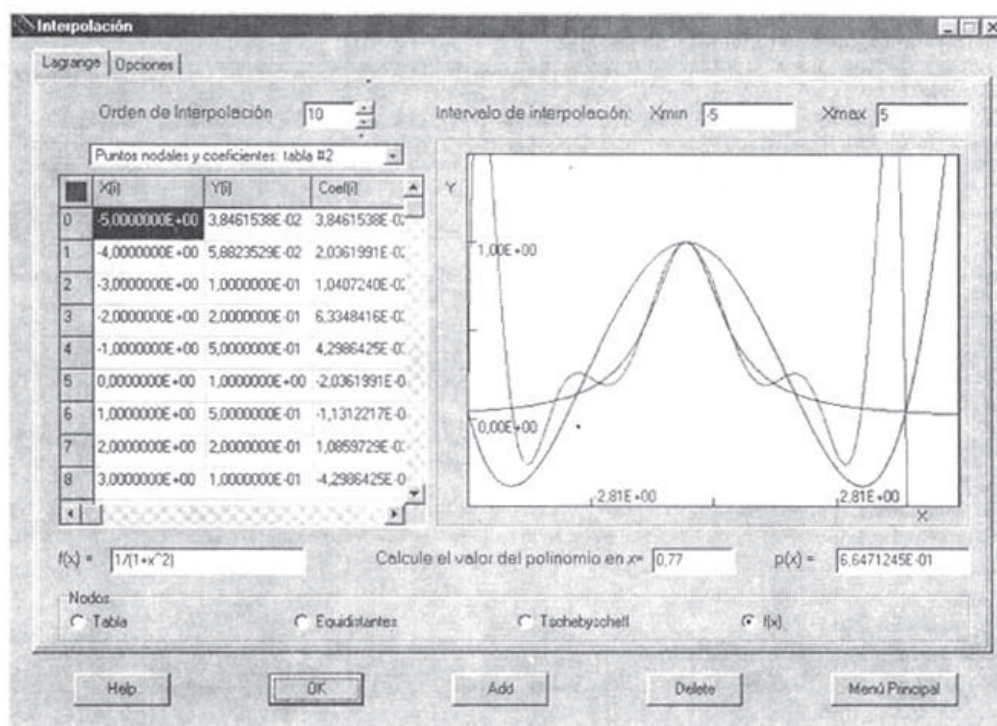


Figura 5: Interpolación polinómica con nodos equidistantes

4 Conclusiones

Independientemente de la presentación del programa o de su facilidad de operación, ADN es una herramienta que ha mostrado su versatilidad en el ámbito pedagógico para el que fué creada. El programa tiene utilidad en la enseñanza de un curso básico de métodos numéricos. Las rutinas numéricas de ADN *están lejos de los estándares computacionales actuales* y no deben usarse para fines de investigación o cómputo científico. En este caso sugerimos el uso de rutinas de cómputo más sofisticadas, como por ejemplo, *Numerical Recipes in C* (véase [3]).

El programa ADN se puede obtener gratuitamente, solicitándolo al autor, por vía Internet en <http://www.univalle.edu.co/~jjduque> o por correo, pagando el flete y el medio magnético (disquete).

El autor espera que este programa sea útil. Pero, al igual que con cualquier otro software de dominio público, se entrega sin garantía alguna de acuerdo con la reglamentación GNU (General Public License).

Referencias

- [1] J. Duque. *Análisis numérico I*, notas de clase (2000), <http://www.univalle.edu.co/~jjduque>.

- [2] D. Kindcaí and W. Cheney. *Análisis numérico: las matemáticas del cálculo científico*, Addison-Wesley Iberoamericana, (1994).
- [3] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Second Edition, (1992).
- [4] J. Stoer, R. Bulirsch. *Numerische Mathematik*, New York, Springer Verlag, Heidelberger Taschenbücher, (1990).
- [5] J. Stoer, R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*, New York, Springer Verlag, (1980).

Dirección del autor: Jairo Duque Universidad del Valle - Meléndez, Depto. de Matemáticas, A.A. 25360, Cali jjduque@univalle.edu.co