

CÀLCUL NUMÈRIC (GM)

Examen parcial (1a PART)

(Durada: 1h30min)

10 de novembre de 2014

Cognoms:

Nom:

1. [3 punts] Es vol aproximar una funció $f(x)$, amb expressió analítica coneguda, per un polinomi de grau m amb el criteri de mínims quadrats amb el producte escalar continu a l'interval $[-1, 1]$.

- a) Proposar detalladament¹ una metodologia per a calcular el polinomi aproximant fent servir la base natural de polinomis.

Tenim la base $\gamma_0(x) = 1, \gamma_1(x) = x, \dots, \gamma_m(x) = x^m$.

I volem $p(x)$ de la forma $p(x) = \sum_{i=0}^m c_i \gamma_i(x)$ on c_i c'tks.

Al aplicar MC busquem $\min_{c_0, \dots, c_m} \|f - p\|^2 = \min_{c_0, \dots, c_m} \langle f - p, f - p \rangle$. Per tant, imposarem $\frac{\partial \langle f - p, f - p \rangle}{\partial c_i} = 0$. Si desenvolupem així tenim:

$$\frac{\partial \langle f, f \rangle - 2 \langle f, p \rangle + \langle p, p \rangle}{\partial c_i} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \frac{\partial \langle f, f \rangle}{\partial c_i} = 0, & \frac{\partial \langle f, p \rangle}{\partial c_i} = \langle f, \gamma_i \rangle \\ \frac{\partial \langle p, p \rangle}{\partial c_i} = 2 \langle p, \gamma_i \rangle = 2 \sum_{j=0}^m c_j \langle \gamma_j, \gamma_i \rangle. \end{cases}$$

Així, obtindrem les EQ. NORMALS: $\sum_{j=0}^m c_j \langle \gamma_j, \gamma_i \rangle = \langle f, \gamma_i \rangle$, i per tant, el sistema lineal a resoldre és:

$$\begin{bmatrix} \langle \gamma_0, \gamma_0 \rangle & \langle \gamma_1, \gamma_0 \rangle & \dots & \langle \gamma_m, \gamma_0 \rangle \\ \langle \gamma_0, \gamma_1 \rangle & \langle \gamma_1, \gamma_1 \rangle & \dots & \langle \gamma_m, \gamma_1 \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \gamma_0, \gamma_m \rangle & \langle \gamma_1, \gamma_m \rangle & \dots & \langle \gamma_m, \gamma_m \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, \gamma_0 \rangle \\ \langle f, \gamma_1 \rangle \\ \vdots \\ \langle f, \gamma_m \rangle \end{bmatrix} \quad \text{on } \langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 u(x) \cdot v(x) dx.$$

Un cop resolt hauríem trobat la nostra aproximació $p(x)$.

- b) Proposar detalladament una metodologia eficient per a calcular el polinomi aproximant fent servir la base de polinomis ortogonals de Legendre $\{P_i(x)\}_{i=0}^m$.

Ara la nostra base és $\gamma_0(x) = P_0(x), \dots, \gamma_m(x) = P_m(x)$.

Seguirem exactament el mateix procediment que abans per arribar al sistema de les eq. normals, però, si aprofitem la ortogonalitat dels polinomis de Legendre ($P_m(x) \perp P^{n-1}$), obtindrem:

$$\begin{bmatrix} \langle \gamma_0, \gamma_0 \rangle & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \langle \gamma_1, \gamma_1 \rangle & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \langle \gamma_m, \gamma_m \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, \gamma_0 \rangle \\ \langle f, \gamma_1 \rangle \\ \vdots \\ \langle f, \gamma_m \rangle \end{bmatrix} \Rightarrow \boxed{c_i = \frac{\langle f, \gamma_i \rangle}{\langle \gamma_i, \gamma_i \rangle}}$$

matriu diagonal.

on, com abans $\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 u(x) \cdot v(x) dx$.

Així, $p(x) = c_0 \cdot P_0(x) + \dots + c_m \cdot P_m(x)$ on $c_i = \frac{\langle f, P_i \rangle}{\langle P_i, P_i \rangle}$.

¹L'algorisme proposat ha de ser prou detallat i tenir la informació necessària per que algú sense coneixements de mètodes numèrics pogués calcular el polinomi.

0.5

c) Suposem ara que es vol fer servir la base de polinomis ortogonals de Tchebixov. Proposar detalladament una metodologia per a calcular el polinomi aproximant. S'obtidria el mateix polinomi que amb els mètodes proposats als apartats anteriors? Per què?

Fem servir ara $\Psi_n(x) = T_n(x)$ polinomis de Tchebixov ortogonals de

Anubrem al mateix sistema que a l'apartat anterior:

$c_i = \frac{\langle f, T_i \rangle}{\langle T_i, T_i \rangle}$, però, si tenim en compte una propietat dels polinomis de Tchebixov, que és la seva paritat, $T_{2k} = \text{parells}$, $T_{2k+1} = \text{imparells}$.

coneixem que f és parella, per exemple, tenim que els coeficients $c_{2k+1} = \frac{\langle f, T_{2k+1} \rangle}{\langle T_{2k+1}, T_{2k+1} \rangle} = 0$, cosa que agilitza el càlcul, ja que hem de fer menys operacions.

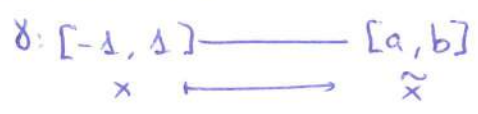
~~Tchebixov és un polinomi de grau n que té n arrels diferents en l'interval $[-1, 1]$. Probablement, hauria de partir de polinomis de grau n .~~

Quan utilitzem Tchebixov fem servir el p.e. continu $u, v = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} u(x)v(x) dx$ que dona més pes als extrems, així que pot ser que senti un polinomi diferent.

0.3

d) Suposem ara que es vol aproximar la funció $f(x)$ a un altre interval $[a, b]$ donat. Proposar una base de polinomis ortogonals a l'interval $[a, b]$ que es pugui calcular a partir de la base de Legendre. Justificar que la base proposada és ortogonal.

Volem passar de l'interval $[-1, 1]$ a un interval $[a, b]$, així, que hauriem de fer una transformació de variable als Polinomis de Legendre:



I considerarem els polinomis $\tilde{P}_i(\tilde{x})$, obtinguts a partir dels de Legendre.

$\tilde{P}_i(x)$ Legendre

Aquests són ortogonals ja que només hem aplicat un canvi de variable, el resultat de la integral (del producte escalar) ha de ser el mateix.

Falta la demostració

$\langle P_i, P_{i-1} \rangle = 0 \stackrel{no?}{\implies} \langle \tilde{P}_i, \tilde{P}_{i-1} \rangle = 0$

Per tant, la base és ortogonal.

✓ 0.5

e) Suposem ara que es vol aproximar la funció per un spline C^2 cúbic amb $m+1$ punts base equiespaiats a l'interval $[a, b]$. Quina és la dimensió de l'espai d'splines C^2 cúbics? I la de l'espai d'splines naturals? Justifica la teva resposta.

Volem aproximar per splines cúbics C^2 . $S(x) = S_i(x)$ si $x \in [x_i, x_{i+1}]$ on $i = 0, \dots, m-1$
m splines.

Spline cúbic: $S_i(x) = (a_i)(x-x_i)^3 + (b_i)(x-x_i)^2 + (c_i)(x-x_i) + (d_i)$ ← m eqs.

⇒ Tenim $4m$ incògnites (a_i, b_i, c_i, d_i) .

Imposarem:

$$C^0) S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1}) \leftarrow m-1 \text{ eqs.}$$

$$C^1) S_i'(x_{i+1}) = S_{i+1}'(x_{i+1}) \leftarrow m-1 \text{ eqs}$$

$$C^2) S_i''(x_{i+1}) = S_{i+1}''(x_{i+1}) \leftarrow m-1 \text{ eqs}$$

$$\left. \begin{array}{l} C^0) \\ C^1) \\ C^2) \end{array} \right\} 3(m-1) \Rightarrow 4m - 3(m-1) = \\ = 4m - 3m + 3 = \\ = m + 3 = (m+1) + 2.$$

⇒ La dimensió dels splines C^2 cúbics és $m+3$.

Ara, un spline natural és un spline cúbic C^2 imposant, a més, que $S_0'' = S_m'' = 0$. ~~Per tant, hem d'imposar dues restriccions més.~~ Així,

dim splines naturals = dim splines C^2 cúbics - 2 = $m+3-2 = m+1$

f) Proposar una metodologia per al càlcul de l'*spline natural* que s'ajusta a la funció amb el criteri de mínims quadrats amb el producte escalar continu.

Volem calcular $S(x) = S_i(x)$ si $x \in [x_i, x_{i+1}]$ sabent que

és de la forma $S_i(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i) + d_i$.

i imposant que $S_0'' = S_m'' = 0$. → avo ~~ende~~ ens dona un altre sistema.

Si ho volem fer utilitzant M.C., només cal considerar la base
 $\Psi_0^j(x) = (x-x_j)^0 = 1$, $\Psi_1^j(x) = (x-x_j)^1$, ..., en definitiva $\Psi_i^j(x) = (x-x_j)^i$

per a cada tros de l'spline i procedir com habitualment, resolent el sistema que donen les equacions normals.

NO

1.1

2. [1.5 punts] Per al disseny d'una muntanya russa es disposa de l'alçada de la muntanya a determinats punts del recorregut, $\{l_k, h_k\}_{k=0}^n$. A partir d'aquestes alçades es vol definir l'alçada a tot el recorregut $h(l)$ on, òbviament, $h(l)$ ha de ser una funció suau, amb derivada (pendent) i derivada segona (curvatura) contínues. A més, evidentment, es requereix que a l'inici i al final el pendent sigui zero.

0.7

a) Proposar raonadament un mètode per a definir la funció alçada $h(l)$ donades les dades $\{l_k, h_k\}_{k=0}^n$.

Com disposem de les dades $\{l_k, h_k\}_{k=0}^n$ i ens demanen condicions sobre la continuïtat de la nostra funció la qual volem aproximar, i, aquestes són, per tant, condicions sobre el nostre aproximat, l'ideal seria utilitzar splines. Ja que podem controlar la continuïtat i suavitat de la funció. En aquest cas demanen $h(l)$ suau i amb les dues primeres derivades contínues. Per tant, jo esculliria un spline C^2 , cúbic, on això es compleix directament (C^0, C^1, C^2) i, a més, imposarem que $h'(l_0) = h'(l_n) = 0$ i les dades. (Disposarem de dues condicions extres als splines cúbics C^2 com he explicat al ex 1.e.)

0.4

b) Explicar breument com es faria el càlcul de la funció aproximant.

Si utilitzarem splines C^2 cúbics amb $h'(l) = 0, h'(l_n) = 0$, obtenim un aproximat a bossos de la forma:

$$H(l) = H_i(l) \text{ si } l \in [l_i, l_{i+1}] \text{ amb } H_i(l) = a_i \cdot (l-l_i)^3 + b_i(l-l_i)^2 + c_i(l-l_i) + d_i$$

Aquestes incògnites es troben imposant les continuïtats, i resolent el sistema:

Convé utilitzar la fórmula de pendents

$$\begin{cases} H_i(l_i) = h_i \\ H_i(l_{i+1}) = h_{i+1} \\ H_i''(l_i) = h_i'' \\ H_i''(l_{i+1}) = h_{i+1}'' \end{cases} \Rightarrow \text{obtenim } a_i, b_i, c_i, d_i \text{ en funció de } h_i, h_{i+1}, h_i'', h_{i+1}''$$

Ara, ens falta imposar $C^1: H_i'(l_{i+1}) = H_{i+1}'(l_{i+1})$ relació, no són les derivades d'una ct. expressions en funció de h_i, \dots conegudes.

$$\text{obtenim un sistema d'eq. de l'estil } \boxed{e_i} \cdot b_{i-1} + \boxed{d_i} \cdot b_i + \boxed{f_i} \cdot b_{i+1} = \boxed{g_i}$$

Tenim un sistema de $n-1$ eq amb $n+1$ incògnites, però tenim que imposarem que $h'_0 = h'_n = 0$, per tant, tenim $n-1$ eq, $n+1$ incògnites.

D'on acabarem de trobar finalment els valors de les pendents.

I, per tant, ja tenim tota la informació necessària per definir el nostre aproximat.

1.3

3. [2 punts] L'evolució en el temps de la concentració amb que un dispositiu subministra un medicament per via intravenosa a un pacient es pot aproximar per una funció de la forma

$$c(t) = Cte^{-\alpha t}$$

amb C i α constants positives. Per al calibrat dels paràmetres C i α es disposa de mesures experimentals $\{t_k, c_k\}_{k=0}^n$.

- a) Plantejar el problema de mínims quadrats no lineal per al calibrat dels paràmetres C i α i deduir el sistema d'equacions no lineal a resoldre.
- b) Reduir el problema a la resolució d'una equació escalar amb una incògnita.
- c) Proposar raonadament un mètode numèric per a la resolució del sistema d'equacions no lineals plantejat a a) i per a la resolució del problema de zeros de funcions plantejat a b). Quina de les dues estratègies per a resoldre el problema no lineal aconsellaries? Per què?

1 a) Aprox: $c(t) = Ct \cdot e^{-\alpha t}$ i tenim les dades $\{t_i, c_i\}_{i=0}^m$. Per evitar problemes de notació direm que tenim les dades $\{t_i, f(t_i)\}$ i que f és la funció que volem aproximar (les dades que volem aproximar).

HC: $\min_{C, \alpha} \|f - c\| = \min_{C, \alpha} \langle f - c, f - c \rangle \Rightarrow$ Imposarem $\begin{cases} \frac{\partial \langle f - c, f - c \rangle}{\partial C} = 0 \\ \frac{\partial \langle f - c, f - c \rangle}{\partial \alpha} = 0 \end{cases}$

Tenim $\frac{\partial \langle f, f \rangle}{\partial \alpha} = \frac{\partial \langle f, f \rangle}{\partial C} = 0$

$$\frac{\partial \langle f, c \rangle}{\partial C} = \frac{\partial \sum_{i=0}^m f(t_i) \cdot c(t_i)}{\partial C} = \frac{\partial \sum_{i=0}^m c_i \cdot C \cdot t_i \cdot e^{-\alpha t_i}}{\partial C} = \sum_{i=0}^m c_i \cdot t_i \cdot e^{-\alpha t_i}$$

$$\frac{\partial \langle f, c \rangle}{\partial \alpha} = \dots = \frac{\partial \sum_{i=0}^m c_i \cdot C \cdot t_i \cdot e^{-\alpha t_i}}{\partial \alpha} = - \sum_{i=0}^m c_i \cdot C \cdot (t_i)^2 \cdot e^{-\alpha t_i}$$

$$\frac{\partial \langle c, c \rangle}{\partial C} = \frac{\partial \sum_{i=0}^m (c(t_i))^2}{\partial C} = \frac{\partial \sum_{i=0}^m C^2 \cdot t_i^2 \cdot e^{-2\alpha t_i}}{\partial C} = 2 \cdot \sum_{i=0}^m C \cdot t_i^2 \cdot e^{-2\alpha t_i}$$

$$\frac{\partial \langle c, c \rangle}{\partial \alpha} = \dots = \frac{\partial \sum_{i=0}^m C^2 \cdot t_i^2 \cdot e^{-2\alpha t_i}}{\partial \alpha} = (-2) \cdot \sum_{i=0}^m C^2 \cdot t_i^3 \cdot e^{-2\alpha t_i}$$

Per tant, ens queden les equacions:

$$\begin{cases} 0 + \cancel{2} \cdot \left(\sum_{i=0}^m c_i \cdot t_i \cdot e^{-\alpha t_i} \right) + \cancel{2} \cdot \sum_{i=0}^m C \cdot t_i^2 \cdot e^{-2\alpha t_i} = 0 \\ 0 + \cancel{2} \cdot \left(- \sum_{i=0}^m c_i \cdot C \cdot (t_i)^2 \cdot e^{-\alpha t_i} \right) - \cancel{2} \cdot \sum_{i=0}^m C^2 \cdot t_i^3 \cdot e^{-2\alpha t_i} = 0 \end{cases}$$

SNL d'equacions.

(es pot continuar darrera)

b)

0

c) Per a la resolució del sistema no lineal trobat a l'apartat a podríem fer ~~utilitzar~~ ^{0,3} Newton-Raphson directament, en comptes d'un mètode quasi-Newton per aproximar les derivades, ja que, treballarem amb funcions ~~exponenciàlies~~ que contenen [✓] exponencials i termes polinòmics, així que no ha de ser difícil de [✓] calcular a mà i així no perdrem la convergència quadràtica. [✓]
Per a la resolució dels zeros de funcions

CÀLCUL NUMÈRIC (GM)

(Durada: 1h)

Examen parcial (2a PART)

10 de novembre de 2014

Cognoms:

Nom:

4. [3.5 punts] Es vol fer servir el mètode de Newton

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}$$

per trobar les arrels de la funció $f(x) = 3x^5 - 8x^4 - 12x^3 + 32x^2 + 12x - 32$.

- a) Feu servir el mètode de Newton prenent com a aproximació inicial $x^0 = 3$. Té la convergència esperada? Per què? Quantes iteracions es necessiten per tenir la solució amb, com a mínim, 5 xifres significatives correctes? Justifiqueu la resposta. Escriviu els resultats obtinguts en les dues primeres i les dues darreres iteracions que heu calculat.
- b) Repetiu l'apartat anterior, prenent com a aproximació inicial $x^0 = 1$. S'observa alguna diferència en el comportament del mètode? A què és deguda?

Per millorar el comportament del mètode, es proposa emprar la següent modificació:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{2f(x^k)}{f'(x^k)}$$

- c) Feu servir aquest mètode, prenent com a aproximació inicial $x^0 = 1$ i mostreu els resultats obtinguts en una taula. Com és la convergència en aquest cas?
- d) Feu una anàlisi de la convergència asimptòtica de l'esquema iteratiu proposat, que permeti explicar el seu comportament.
- e) Es pot fer servir aquest mètode per determinar l'arrel trobada en l'apartat a)? Per què?

a) $x^0 = 3$.

El mètode té els errors:

$$\begin{cases} 7,6 \cdot 10^{-2} \\ 3,6 \cdot 10^{-2} \\ 8,2 \cdot 10^{-3} \\ 3,8 \cdot 10^{-4} \\ 8,4 \cdot 10^{-7} \end{cases}$$

Veiem que al principi va una mica lent i només vaia en un orde el seu error, però a la última iteració es pot veure el comportament quadràtic de 10^{-4} a 10^{-7} .

Per tant, té convergència quadràtica que és el que esperàvem.

Tenim que x^k té 5 xifres significatives si $r^k = \left| \frac{x^k - x^{k+1}}{x^{k+1}} \right| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-5}$

Aquí toquem que $r^5 = 8,4 \cdot 10^{-7} \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-5} \Rightarrow$ Tria 4 iteracions a obtenir 5 xifres significatives (x^4 té 5 xifres significatives).

Resultats obtinguts

$$x^1 = 2.7848$$

$$x^2 = 2.66966540892295$$

$$x^4 = 2.66666890935833.$$

$$x^5 = 2.666666666667786. \leftarrow \text{* soluci\u00f3 aproximada obtinguda.}$$

b) $x^0 = 1.$

Si utilitzem com a aproximaci\u00f3 inicial $x^0 = 1$, el m\u00e8tode de Newton fa moltes m\u00e9s iteracions que abans, obtenim fins a x^{15} . ✓

En aquest cas, als eucors observem un comportament molt lent (lineal)

$1.7 \cdot 10^{-1}$	$8.7 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-5}$
$7.5 \cdot 10^{-2}$	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-5}$
$3.5 \cdot 10^{-2}$	$2.1 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-4}$	$8.4 \cdot 10^{-6}$
$1.7 \cdot 10^{-2}$	$1.08 \cdot 10^{-3}$	$6.77 \cdot 10^{-5}$	

La soluci\u00f3 obtinguda \u00e9s $x^{15} = 1.41420159105981$.

Si avaluem $f'(x^{15}) = 7.19 \cdot 10^{-4}$, que \u00e9s prou proper a 0, aix\u00ed, pot ser que l'anel a la que ens aproximem en aquest cas, que \u00e9s diferent a l'anterior, sigui una anel doble i, per a anels dobles el m\u00e8tode de Newton \u00e9s converg\u00e8ncia lineal, ~~per\u00f2~~ ^{per} que quadra amb els resultats trobats. ✓

c) Resultats obtinguts utilitzant el m\u00e8tode proposat:

k	x^k	r^k
0	1	$0.30 \approx 3.03 \cdot 10^{-1}$
1	1.43478260869565	$1.4561188 \cdot 10^{-2}$
2	1.414190316543	$1.6437260014 \cdot 10^{-5}$
3	1.4142356233904	X

En aquest cas tenim converg\u00e8ncia quadr\u00e0tica.

Assignatura: Càlcul Numèric

Estudiant/a: _____

Data: 10/11/2014

d)e)
 junts.

Fer una anàlisi de la conv. asimptòtica de l'esquema iteratiu proposat.

Tenim $x^{k+1} = \phi(x^k)$ on $\phi(x) = x - 2 \frac{f(x)}{f'(x)}$ en aquest cas

$$E^k := x^k - \alpha \quad E^{k+1} := x^{k+1} - \alpha \quad \phi(x) = x - \frac{2 \cdot f(x)}{f'(x)} \stackrel{\alpha}{=} \alpha \quad \checkmark \text{ (MÈTODE CONSISTENT)}$$

$$\Rightarrow x^{k+1} = \phi(x^k + E^k) \stackrel{\text{Des. Taylor}}{=} \phi(\alpha) + \phi'(\alpha) E^k + \frac{1}{2} \phi''(\alpha) (E^k)^2 + O((E^k)^3)$$

$$\Rightarrow E^{k+1} = \phi'(\alpha) \cdot E^k + \frac{1}{2} \phi''(\alpha) (E^k)^2 + O((E^k)^3)$$

$$\Rightarrow |E^{k+1}| \leq |\phi'(\alpha)| \cdot |E^k| + \frac{1}{2} |\phi''(\alpha)| \cdot (E^k)^2 + O(|E^k|^3)$$

calculem $|\phi'(\alpha)|$:

$$\phi(x) = x - 2 \frac{f(x)}{f'(x)} \Rightarrow \phi'(x) = 1 - 2 \cdot \left(\frac{f'(x)f'(x) - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} \right) =$$

$$= 1 - 2 + 2 \frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'(x)^2} = -1 + 2 \frac{f(x) \cdot f''(x)}{f'(x)^2}$$

$$\Rightarrow \phi'(\alpha) = -1 + 2 \cdot \frac{f(\alpha) \cdot f''(\alpha)}{f'(\alpha)^2} \stackrel{f'(\alpha)=0}{=} -1 \Rightarrow |\phi'(\alpha)| = 1$$

\Rightarrow Tenim $|\phi'(\alpha)| = 1 \leftarrow$ El mètode no tendria ni perquè

$$\text{convergui: } |E^{k+1}| \leq |E^k| + O(|E^k|^2) \approx |E^{k+1}| \leq |E^k|$$

perquè tenim igualtat en algun punt i perquè la convergència

En el cas en que la nostra aproximació inicial és $\frac{1}{2}$, el mètode arriba molt ràpidament a l'aval 1.414235 ,

però això pot ser per "sort", en el sentit de que, justament,

aplicant $\frac{1}{2}$ del valor de la derivada de $f'(x)$, en comptes de

$\frac{1}{2}$ com al mètode de Newton, aconseguim arribar a la

resposta, però per a altres aproximacions, com la de

e) l'apuntat a) $x^0 = 3$, no convergeix. Per tant, podem

arribar a trobar l'aval de l'apuntat a) $2.666\dots$?, doncs

potser tenim sort i trobem algun altre punt x^0 que hi

arriba, però en principi, no tindriem per què arribar-hi.

CÀLCUL NUMÈRIC (GM)

Examen final (part I)

(Durada: 2h 30min)

12 de gener de 2015

Cognoms:

Nom:

2.1

1. [2.5 punts] Un procés estacionari de difusió-convecció-reacció es pot modelitzar amb l'equació diferencial

$$-\frac{d^2u}{dx^2}(x) + \frac{du}{dx}(x) + u(x) = f(x) \quad , \quad a < x < b \quad (1)$$

amb les condicions de contorn

$$u(a) = \alpha \quad ; \quad \frac{du}{dx}(b) = \beta \quad (2)$$

A les equacions (1) i (2), són donades els valors de a, b, α i β i la funció $f(x)$ (terme font), i és incògnita la funció $u(x)$. Estem interessats en resoldre aquest problema amb el mètode dels elements finits (MEF).

1

a) Dedueix la forma feble del problema. Discretitza la forma feble obtinguda utilitzant l'aproximació

$$u(x) \approx u^h(x) = \sum_{j=0}^n u_j N_j(x)$$

Indica clarament l'expressió de la matriu A i del vector f del sistema d'equacions $Au = f$ resultant.

Tenim $u \in EDO$: $-u''(x) + u'(x) + u(x) = f(x) \implies r(u(x)) = -u''(x) + u'(x) + u(x) - f(x)$

Busquem $u(x)$ tq $u(a) = \alpha$, $u'(b) = \beta$ tal que

$$0 = \int_a^b r(u(x)) \cdot v(x) \quad \forall v(x) \text{ funció tal que } v(a) = 0. \quad \checkmark$$

$$0 = \int_a^b r(u(x)) \cdot v(x) dx = \int_a^b v(x) \cdot (-u''(x) + u'(x) + u(x) - f(x)) dx = \int_a^b -v(x) \cdot u''(x) + v(x) u'(x) + v(x) \cdot u(x) - f(x) \cdot v(x) dx$$

$$\implies \int_a^b f(x) \cdot v(x) dx = \underbrace{- \int_a^b v(x) \cdot u''(x) dx}_{- [v u']_a^b} + \int_a^b v(x) (u'(x) + u(x)) dx - \int_a^b f(x) \cdot v(x) dx$$

$$- [v u']_a^b + \int_a^b u'(x) \cdot v(x) dx = -v(b) \cdot u'(b) + \frac{v(a) \cdot u'(a)}{v(a)=0} + \int_a^b u'(x) \cdot v'(x) dx \cdot$$

FORMA FEBLE: Busquem una funció $u(x)$ tal que $u(a) = \alpha$, $u'(b) = \beta$ que compleixi:

$$\int_a^b u'(x) \cdot (v(x) + v'(x)) + u(x) \cdot v(x) dx = \int_a^b f(x) \cdot v(x) dx + v(b) \cdot \beta.$$

$\forall v(x)$ funció que compleixi $v(a) = 0$. ✓

Considerem la discretització $u(x) \approx u^h(x) = \sum_{j=0}^m u_j N_j(x) = \underbrace{\alpha \cdot N_0(x)}_{\Psi(x)} + \sum_{j=1}^m u_j \cdot N_j$

Considerem a més, $w(x) = N_i(x)$ $i = 1, \dots, m$.
 $\Rightarrow u'(x) \approx (u^h)'(x) = \underbrace{\Psi'(x)}_{\alpha \cdot N_0'(x)} + \sum_{j=1}^m u_j N_j'(x)$

Així: $\int_a^b u'(w(x) + w(x)) dx + u(x) \cdot w(x) dx = \int_a^b f(x) w(x) dx + w(b) \cdot \beta$

$\Rightarrow \int_a^b (\Psi'(x) + \sum_{j=1}^m u_j N_j'(x)) (N_i'(x) + N_i(x)) + (\Psi(x) + \sum_{j=1}^m u_j N_j) \cdot N_i(x) dx = \int_a^b f(x) \cdot N_i(x) dx + N_i(b) \cdot \beta$

$\Rightarrow \int_a^b \Psi'(x) (N_i'(x) + N_i(x)) dx + \sum_{j=1}^m \left[\int_a^b N_j'(x) (N_i'(x) + N_i(x)) dx \right] u_j + \int_a^b \Psi(x) \cdot N_i(x) dx + \sum_{j=1}^m \left[\int_a^b N_j(x) \cdot N_i(x) dx \right] u_j =$
 $= \int_a^b f(x) \cdot N_i(x) dx + N_i(b) \cdot \beta$

$\Rightarrow \sum_{j=1}^m \left[\int_a^b N_j'(x) (N_i'(x) + N_i(x)) + N_j(x) \cdot N_i(x) dx \right] u_j = \int_a^b f(x) N_i(x) - \Psi'(x) (N_i'(x) + N_i(x)) - \Psi(x) \cdot N_i(x) dx + N_i(b) \cdot \beta$

A_{ij} f_i

Tenim un sistema $\underline{A} \underline{u} = \underline{F}$ on:

$\underline{A} = (A_{ij})$ on $A_{ij} = \int_a^b N_j'(x) (N_i'(x) + N_i(x)) + N_j(x) \cdot N_i(x) dx$
 $\hat{I}_{m \times m}$ $i = 1, \dots, m$
 $j = 1, \dots, m$

$\underline{u} = (u_j) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{pmatrix}$

$\underline{F} = (f_i) = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix}$ on $f_i = \int_a^b f(x) N_i(x) - \Psi'(x) (N_i'(x) + N_i(x)) - \Psi(x) \cdot N_i(x) dx + N_i(b) \cdot \beta$

El problema de contorn correspon, de fet, a una EDO de segon ordre. Es proposa ara resoldre el problema amb un mètode numèric per a EDOs de la forma $dy/dx = f(x, y)$

$$Y_{i+1} = Y_i + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) \text{ amb } \begin{cases} k_1 = f(x_i, Y_i) \\ k_2 = f(x_i + ch, Y_i + h a k_1) \end{cases}$$

on k_1, k_2, a, b_1, b_2 i c són paràmetres del mètode.

0,6

b) A quina família de mètodes pertany aquest esquema? Quin ordre pot arribar a tenir el mètode? Detalla com aplicaries el mètode a la EDO (1) i com tractaries les condicions de contorn del problema.

Aquest esquema pertany a la família de mètodes Runge-Kutta explícits. En aquest cas, tenim que és un mètode amb $s=2$ (s punt d'integració a cada subinterval), per tant, tenim ordre $p=s=2$.
 \Rightarrow Ordre quadràtic. \checkmark

Per aplicar el mètode RK explícit, el primer que hem de fer és passar d'una EDO de segon ordre a un sistema de dues EDOs de primer ordre mitjançant un canvi de variables: Tenim el probl. de contorn $\begin{cases} -u''(x) + u'(x) + u(x) = f(x) \\ u(a) = \alpha, u'(b) = \beta. \end{cases}$

Considerem $u_{(1)} \equiv u_{(1)}(x), u_{(2)} \equiv u_{(2)}(x)$

$$\begin{aligned} u_{(1)} = u & \Rightarrow u'_{(1)} = u' = u_{(2)} \\ u_{(2)} = u' & \Rightarrow u'_{(2)} = u'' = -f(x) + u' + u = -f(x) + u_{(2)} + u_{(1)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \bar{u} = \begin{pmatrix} u_{(1)} \\ u_{(2)} \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{d\bar{u}}{dx} = \begin{pmatrix} u'_{(1)} \\ u'_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{(2)} \\ u_{(1)} + u_{(2)} - f(x) \end{pmatrix} =: f(x, \bar{u})$$

\Rightarrow Tenim ~~dos~~ ^{el sistema} EDOs de 1r ordre $\frac{d\bar{u}}{dx} = f(x, \bar{u})$.

Així, aplicarem el mètode: Si $\bar{u}_i^h \approx \bar{u}_i$,

$$\bar{u}_{i+1}^h = \bar{u}_i^h + h \cdot (b_1 \bar{K}_1 + b_2 \bar{K}_2) \text{ on } \begin{cases} \bar{K}_1 = \bar{f}(x_i, \bar{u}_i^h) \\ \bar{K}_2 = \bar{f}(x_i + ch, \bar{u}_i^h + h \cdot a \cdot \bar{K}_1) \end{cases}$$

Per a les condicions de contorn:

Tenim $\bar{u}(a) = \begin{pmatrix} u_{(1)}(a) \\ u_{(2)}(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ u_{(2)}(a) \end{pmatrix}$ $\bar{u}(b) = \begin{pmatrix} u_{(1)}(b) \\ u_{(2)}(b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{(1)}(b) \\ \beta \end{pmatrix}$

\downarrow no conegut

Tenim una condició de Dirichlet a a i una condició de Neumann a b (condicions de contorn mixtes).

4 condicions de contorn per el problema de 2n ordre?

El problema es resol per $a = 0$, $b = 1$, $\alpha = \beta = 0$ i $f(x) = 1$ amb el mètode de segon ordre i s'obtenen les solucions numèriques

$$u(1) \simeq U_{10}^{h=0.1} = 0.279513, \quad u(1) \simeq U_{20}^{h=0.05} = 0.284332$$

on $U_i^{h=H}$ denota la solució al punt x_i amb pas $h = H$.

- 0.5 \otimes Calcula una estimació de l'error en l'aproximació de $u(1)$ per al càlcul amb $h = 0.1$, i fes una previsió de quants intervals caldria fer servir per tenir una aproximació de $u(1)$ amb 3 xifres significatives correctes.

Sabem que el mètode és 2n ordre, per tant, si $m = \frac{b-a}{h}$

$$E_m = \frac{C}{m^2} \quad \text{Però com } h = \frac{b-a}{m}$$

$$E_h = \frac{C}{\left(\frac{b-a}{h}\right)^2} = \frac{C \cdot h^2}{(b-a)^2} \stackrel{b-a=1}{=} C \cdot h^2$$

Com calculem l'error comès amb $h = 0.1$, per a això, utilitzarem com a aprox. a la solució $u \approx U_{20}^{0.05}$ (cal tenir h més petita, és a dir, més precisa) 1 x.s. correcta.

$$E_{0.1} \approx \frac{|U_{10}^{0.1} - U_{20}^{0.05}|}{|U_{20}^{0.05}|} = \frac{0.279513 - 0.284332}{0.284332} = 0.1695 \cdot 10^{-1} \quad \checkmark$$

$$\text{Ara, } E_h = C \cdot h^2 \rightarrow 0.1695 \cdot 10^{-1} = E_{0.1} = C \cdot (0.1)^2 \Rightarrow C = \frac{0.1695 \cdot 10^{-1}}{(0.1)^2} = 1.695$$

Per tenir 3 x.s. correctes necessitem que $E_h \leq 0.5 \cdot 10^{-3}$.

$$0.5 \cdot 10^{-3} \geq E_h = C \cdot h^2 \Rightarrow h \leq \sqrt{\frac{0.5 \cdot 10^{-3}}{C}} = \sqrt{\frac{0.5 \cdot 10^{-3}}{1.695}} = 0.01718$$

$$h \leq 0.01718 \Rightarrow \frac{b-a}{m} \leq 0.01718 \Rightarrow m \geq \frac{1}{0.01718} = 58.2237 \Rightarrow \boxed{\text{Necessitem almenys 59 intervals.}} \quad \checkmark$$

1.3

2 [1.5 punts] Volem determinar les arrels de l'equació $2x - \exp(x - 1) = 0$. A les taules següents es mostren els resultats obtinguts amb dos algorismes iteratius, fent servir dues aproximacions inicials diferents.

Algoritme 1: $x^{k+1} = \frac{1}{2} \exp(x^k - 1)$

x^k	r^k	x^k	r^k
1.00000	1.00e + 00	3.0000e + 00	1.88e - 01
0.50000	6.49e - 01	3.6945e + 00	5.01e - 01
0.30327	2.17e - 01	7.3993e + 00	9.75e - 01
0.24910	5.57e - 02	3.0070e + 02	1.00e + 00
0.23597	1.32e - 02	7.2083e + 129	NaN
0.23289	3.08e - 03	Inf	NaN
0.23218	7.16e - 04	Inf	NaN
0.23201	1.66e - 04	Inf	NaN
0.23197	3.85e - 05	Inf	NaN
0.23196	8.94e - 06	Inf	NaN

Algoritme 2: $x^{k+1} = \ln(2x^k) + 1$

x^k	r^k	x^k	r^k
1.0000	4.09e - 01	3.0000	7.46e - 02
1.6931	2.37e - 01	2.7918	2.65e - 02
2.2197	1.09e - 01	2.7198	9.69e - 03
2.4905	4.42e - 02	2.6937	3.59e - 03
2.6056	1.70e - 02	2.6841	1.34e - 03
2.6508	6.44e - 03	2.6805	4.99e - 04
2.6680	2.42e - 03	2.6791	1.86e - 04
2.6745	9.04e - 04	2.6786	6.95e - 05
2.6769	3.38e - 04	2.6785	2.60e - 05
2.6778	1.26e - 04	2.6784	9.69e - 06

0.4

a) Per a cada un dels algorismes i cada una de les aproximacions inicials, comenta el comportament del mètode: convergeixen els mètodes? En cas afirmatiu, quin és l'ordre de convergència? Explica com identifiqués l'ordre de convergència.

ALGORITME 1: d'algoritme 1, donada $x^0 = 1$, convergeix cap a la solució, però amb $x^0 = 3$ divergeix. El que ens fa veure ~~passar~~ que no és un mètode convergent per a tota aproximació inicial.
 dicom convergeix té una convergència ^{aproximadament} lineal (baixa "d'un en un" l'exponent de l'euro en cada iteració). no, + lent

ALGORITME 2: En aquests cas, per a les dues aprox. inicials donades el mètode convergeix, però no sabem si divergeix o no per a la resta de condicions inicials. Podria passar ^{aproximadament}.
 En aquests casos, té una convergència lineal. (pel mateix motiu que a l'algoritme 1, encara que aquest sembla més lent, té més iteracions en disminuir l'exponent de 10 de l'euro).

Per veure l'ordre de convergència em fixo en la variació de l'exponent de l'euro, que indica el ritme de decreixement (o creixement quan divergeix) d'aquest.
 $\frac{r^{k+1}}{r^k} \approx \lambda$ FAC

0.9

0.9) Fes una anàlisi de la consistència i convergència dels mètodes. Comenta si concorden les conclusions de l'anàlisi amb el comportament de cada un dels mètodes. **FALTA**

* ALGORITME 1: $x^{k+1} = \frac{1}{2} \cdot e^{x^k - 1} \Rightarrow \phi(x^k) = x^{k+1} \quad \phi(x) = \frac{1}{2} e^{x-1}$

consistència: $\phi(\alpha) \stackrel{?}{=} \alpha$. ✓

$\phi(\alpha) = \frac{1}{2} \cdot e^{\alpha-1} \stackrel{?}{=} \frac{1}{2} \cdot 2\alpha = \alpha$ ✓ El mètode és consistent.
com a mel $\Rightarrow 2\alpha = e^{\alpha-1}$

convergència: $x^{k+1} = \phi(x^k) = \phi(\alpha + E^k) \stackrel{\text{Taylor}}{=} \phi(\alpha) + \phi'(\alpha) \cdot E^k + \frac{\phi''(\alpha)}{2} \cdot (E^k)^2 + O((E^k)^3)$
 $E^k = x^k - \alpha$

$\Rightarrow |E^{k+1}| \leq |\phi'(\alpha)| |E^k| + \frac{|\phi''(\alpha)|}{2} |E^k|^2 + O(|E^k|^3)$

tenim que $\phi'(x) = \frac{1}{2} \cdot e^{x-1} \cdot 1$. $\phi'(\alpha) = \frac{1}{2} e^{\alpha-1} = \frac{2\alpha}{2} = \alpha$.

Si $|\phi'(\alpha)| = |\alpha| < 1$ convergeix. i té conv. lineal ja que $\alpha \neq 0$.

Si $|\phi'(\alpha)| = |\alpha| > 1$ divergeix.

* ALGORITME 2: $x^k = \ln(2x^k) + 1 \rightarrow \phi(x) = \ln(2x) + 1$.

consistència: $\phi(\alpha) \stackrel{?}{=} \alpha$ $2\alpha = e^{\alpha-1}$

$\phi(\alpha) = \ln(2\alpha) + 1 = \ln(e^{\alpha-1}) + 1 = \alpha - 1 + 1 = \alpha$ ✓

\Rightarrow El mètode és consistent.

$(\ln u)' = \frac{u'}{u}$

convergència: $|E^{k+1}| \leq |\phi'(\alpha)| |E^k| + \frac{|\phi''(\alpha)|}{2} |E^k|^2 + O(|E^k|^3)$

$\phi'(x) = (\ln(2x) + 1)' = \frac{2}{2x} = \frac{1}{x} \Rightarrow |\phi'(\alpha)| = \left| \frac{1}{\alpha} \right| = \frac{1}{|\alpha|}$

convergeix si $|\phi'(\alpha)| < 1 \Leftrightarrow \frac{1}{|\alpha|} < 1 \Leftrightarrow 1 < |\alpha| \Rightarrow$ conv. lineal ja que $\frac{1}{|\alpha|} \neq 0 \forall \alpha \in \mathbb{R}$.

Divergeix si $|\phi'(\alpha)| > 1 \Leftrightarrow |\alpha| < 1$.

0.5

3. [1 punt] Es vol aproximar una funció f amb un spline cúbic $S \in C^1$ amb $n+1 = 11$ punts base equiespaiats a l'interval $[0, 1]$.

✓ ~~a~~ Com calcularies l'spline (C^1 cúbic) si es considera com a dada el valor de la funció f en els 11 punts base?

Tenim $n+1 = 11$ punts: x_0, \dots, x_n i sabem $f(x_0), \dots, f(x_n)$.

~~Es splines~~ Dividirem l'interval $[0, 1]$ en n subintervalls i a cadascun calcularem el spline cúbic e^i corresponent de la següent forma:

$$S_i(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i) + d_i \rightarrow 4n \text{ coefs a determinar.}$$

Impossem: $e^0 \quad S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1}) \rightarrow n-1$ imposicions.

$e^1 \quad S'_i(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1}) \rightarrow n-1$ imposicions.

$$4n - 2(n-1) = 2n+2 = \frac{2 \cdot (n+1)}{\text{graus de llibertat}} \rightarrow n+1 \text{ dades } (f(x_i))$$

Ens queden $n+1$ graus de llibertat per als valors de $S_i(x_i)$. El que podríem fer, en comptes de posar nombres qualsevol, és fer una aproximació de les derivades de f , com per exemple, una aprox. endavant:

$$\frac{df}{dx}(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad \checkmark$$

Considerem tant els punts com el valor de la funció f en ells.

~~b~~ Com calcularies l'spline (C^1 cúbic amb els 11 punts base esmentats) si es considera com a dada el valor de la funció f en 101 punts equiespaiats a $[0, 1]$?

Tenim el mateix cas que abans, però ara no tenim com a imposició els punts base, sinó que podem escollir-ne 11 de 101 donats.

En aquest cas tenim 101 punts de f en un interval $[0, 1]$ equiespaiats, és a dir, tenim un punt avaluat de f cada 0.01.

Això són moltíssims punts per a un interval $([0, 1])$ relativament petit per a 101 punts d'avaluació. Jo flucia en gràfic amb aquests 101 punts avaluats a $[0, 1]$ i això em podia donar una idea aproximada força bona del comportament de la funció f i distribuïria els 11 punts base, que ara no tenen que ser equiespaiats, segons la forma que vegi als gràfics. A zones amb oscil·lacions més marcades posaria més punts (és a dir, splines es més petits) que a zones amb oscil·lacions més suaus.

4. [1 punt] Els polinomis de Txeixov es poden definir com

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$$

per $x \in [-1, 1]$ i $n \geq 0$. Es a dir, $T_n(x) = \cos(n\theta)$ amb $x = \cos(\theta)$.

✓ a) Demosta que $T_n(x)$ és un polinomi de grau n en x . Indicació: per $n \geq 2$ es verifica la identitat $\cos(n\theta) = 2 \cos((n-1)\theta) \cos\theta - \cos((n-2)\theta)$.

Considerem $n=0 \Rightarrow T_0(x) = \cos(0) = 1$ (polinomi de grau 0) ✓

$n=1 \Rightarrow T_1(x) = \cos(\theta) = \cos(\arccos x) = x$ (polinomi de grau 1) ✓

Demostrem-ho per inducció: suposem que $T_m(x)$ és un polinomi de grau $m \forall m < n$. Ara:

$$T_n(x) = \cos(n\theta) = 2 \cos((n-1)\theta) \cos\theta - \cos((n-2)\theta) = \cos(\theta) = x$$

$$= 2 \cdot T_{n-1}(x) \cdot x - T_{n-2}(x)$$

per $n=2$ Ara $T_{n-1}(x) \in \mathcal{P}^{n-1} \Rightarrow T_{n-2}(x) \cdot x \in \mathcal{P}^n$

per hipòtesi $T_{n-2}(x) \in \mathcal{P}^{n-2} \Rightarrow \mathbb{R}$

$$\Rightarrow \underbrace{2T_{n-1}(x)}_{\mathcal{P}^n} \cdot x - \underbrace{T_{n-2}(x)}_{\mathcal{P}^{n-1}} \in \mathcal{P}^n \Rightarrow T_n(x) \text{ és un polinomi de grau } n.$$

✓ b) Demosta que els polinomis de Txeixov són ortogonals amb el producte escalar

$$\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} u(x)v(x) dx$$

Volem veure que $\langle T_n(x), q(x) \rangle = 0 \forall q(x) \in \mathcal{P}^{n-1}$, $\{T_n(x)\}$ família de polinomis ortogonals.

Ens és suficient amb veure que, considerant $q_m(x) = x^m$:

$$\langle T_n(x), q_m(x) \rangle = 0 \forall m = 1, \dots, n-1. \text{ És a dir, } 0 = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) q_m(x) dx$$

$$\Rightarrow \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) q_m(x) dx = \int_{-\pi}^0 \frac{1}{\sqrt{1-\cos^2\theta}} \cdot \cos(n\theta) \cdot (\cos\theta)^m \cdot (-\sin\theta) d\theta =$$

canvi variable
 $x = \cos\theta$
 $x=1 \rightarrow \theta=0$
 $x=-1 \rightarrow \theta=-\pi$
 $dx = -\sin\theta d\theta$

$$= \int_{-\pi}^0 \frac{-1}{\sin\theta} \cdot \cos(n\theta) (\cos\theta)^m \cdot (-\sin\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(n\theta) (\cos\theta)^m d\theta = 0$$

$-\cos(n\theta) (\cos\theta)^m$ f. imparella per ser $\cos(\theta)$ imparella.

funció imparella en interval simètric.

$\Rightarrow T_n(x)$ amb el producte $\langle u, v \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} u(x)v(x) dx$ són una família de polinomis ortogonals.

0.5

5. [1 punt] En els mètodes quasi-Newton *inversos* per a resoldre sistemes no lineals $f(x) = 0$ s'actualitza la *inversa* de l'aproximació secant de la matriu jacobiana. Considereu un mètode quasi-Newton invers amb un esquema d'actualització de la forma

$$(S^k)^{-1} = \underbrace{\left[I - \frac{(\Delta x)v^T}{(\Delta x)^T v} \right]}_A (S^{k-1})^{-1} \underbrace{\left[I - \frac{v(\Delta x)^T}{(\Delta x)^T v} \right]}_B + \frac{\Delta x(\Delta x)^T}{(\Delta x)^T v} \quad (3)$$

on $\Delta x := x^k - x^{k-1}$ (diferència de les dues aproximacions més recents)

0.5 a) Té l'esquema (3) la propietat de *simetria hereditària* (és a dir, $(S^{k-1})^{-1}$ simètrica $\Rightarrow (S^k)^{-1}$ simètrica)?

Si $\Delta x = (\Delta x^1, \dots, \Delta x^n)$, $v = (v_1, \dots, v_n)$ tenim:

$(S^k)^{-1} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \Delta x^i v_i} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 - \Delta x^1 v_1 & \Delta x^1 v_2 & \dots & \Delta x^1 v_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta x^n v_1 & \Delta x^n v_2 & \dots & 1 - \Delta x^n v_n \end{pmatrix}}_A \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 - v_1 \Delta x^1 & v_1 \Delta x^2 & \dots & v_1 \Delta x^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_n \Delta x^1 & v_n \Delta x^2 & \dots & 1 - v_n \Delta x^n \end{pmatrix}}_B + \begin{pmatrix} (\Delta x^1)^2 & \Delta x^1 \Delta x^2 & \dots & \Delta x^1 \Delta x^n \\ \Delta x^2 \Delta x^1 & (\Delta x^2)^2 & \dots & \Delta x^2 \Delta x^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta x^n \Delta x^1 & \Delta x^n \Delta x^2 & \dots & (\Delta x^n)^2 \end{pmatrix}$

\uparrow
 simètrica \uparrow \uparrow \uparrow
 simètrica jo que $A^T = B$, i S^{k-1} simètrica. \uparrow simètrica.

\Rightarrow Donada $(S^{k-1})^{-1}$ simètrica $\Rightarrow (S^k)^{-1}$ simètrica. ✓

0 b) Proposa raonadament una expressió pel vector v de manera que $(S^k)^{-1}$ verifiqui l'equació quasi-Newton (és a dir, la condició de matriu secant)

Cognoms:

Nom:

6. [1.5 punts] L'evolució temporal de la població es pot modelitzar mitjançant una llei

$$p(t) = \frac{L}{1 + c \exp(r(t - t_0))} \quad (4)$$

que depèn de tres paràmetres L , r i c (t_0 és un instant inicial fixat).

Es vol emprar la llei (4) per aproximar les dades de la taula

t_i	⁰ 1910	¹ 1930	² 1950	³ 1970	⁴ 1990
p_i	19.99	23.68	28.12	33.96	39.43

que corresponen a la població d'Espanya (en milions d'habitants) en diferents anys.

- a) En una primera anàlisi, se suposa que el paràmetre L és conegut. Transforma la llei (4) per poder realitzar un ajust lineal de mínims quadrats. Detalla el procediment que cal seguir per realitzar l'ajust.
- b) Fes servir les dades de la taula per aproximar la població, suposant $L = 60$ i fent servir com a instant inicial $t_0 = 1900$. Escribeu el sistema d'equacions que has resolt per trobar els coeficients i la solució obtinguda. Estima la població en l'any 2100 utilitzant el resultat de l'apartat anterior.
- c) Si L no fos conegut, es pot fer un ajust per mínims quadrats? En què canvia l'anàlisi?

7. [1.5 punts] Volem construir una quadratura per aproximar integrals en l'interval $[0, 1]$ que tingui el màxim ordre possible.

Si només coneixem el valor de la funció en un punt x_0 ,

- a) Quin pes s'hauria d'emprar? Quin és l'ordre de la quadratura obtinguda?
- Per a millorar l'aproximació, se'ns permet avaluar la funció en un altre punt x_1 que triarem nosaltres.
- b) Determina la posició x_1 i els pesos w_0 i w_1 (en funció de x_0) que defineixen la millor quadratura possible. Quin és l'ordre de la quadratura que s'obté en aquest cas?
- c) Particularitza la quadratura obtinguda en l'apartat anterior pel cas $x_0 = 0.2$ i fes-la servir per aproximar la integral $I = \int_0^1 \exp(x^2) dx$.

Assignatura: Càlcul Numèric

Estudiant/a: _____

 Data: 12/01/2015

6)
$$p(t) = \frac{L}{1 + c \exp(r(t-t_0))}$$
 L, r, c paràmetres
 $t_0 =$ instant inicial.

 Dades: $t_i \quad i = 0, \dots, 4$

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=0}^n$$

a) L conegut
 Volem tenir $p(t) = c \cdot \gamma_0(t) + r \cdot \gamma_1(t)$

 En el nostre cas $n = 4$.

Com no he pogut linealitzar, ho fare amb la funció no lineal.

 Per aproximar l'ajust ^{no lineal} en mínims quadrats hem d'imposar:

$$\frac{\partial \langle p(t) - p_i, p(t) - p_i \rangle}{\partial c} = \frac{\partial \langle p(t) - p_i, p(t) - p_i \rangle}{\partial r} = 0.$$

$$\frac{\partial \langle p(t), p(t) \rangle}{\partial c} = \frac{\partial \left(\sum_{i=0}^4 p(t_i)^2 \right)}{\partial c} = \frac{\partial \left(\sum_{i=0}^4 \frac{L^2}{(1 + c e^{r(t_i-t_0)})^2} \right)}{\partial c} =$$

$$= \sum_{i=0}^4 \frac{-L^2 \cdot 2(1 + c e^{r(t_i-t_0)}) \cdot e^{r(t_i-t_0)}}{(1 + c e^{r(t_i-t_0)})^4}$$

$$\frac{\partial \langle p(t), p_i \rangle}{\partial c} = \frac{\partial \left(\sum_{i=0}^4 \frac{p_i \cdot L}{1 + c e^{r(t_i-t_0)}} \right)}{\partial c} = \sum_{i=0}^4 \frac{-p_i \cdot L \cdot e^{r(t_i-t_0)}}{(1 + c e^{r(t_i-t_0)})^2}$$

$$\frac{\partial \langle p(t), p(t) \rangle}{\partial r} = \frac{\partial \left(\sum_{i=0}^4 \frac{L^2}{(1 + c e^{r(t_i-t_0)})^2} \right)}{\partial r} =$$

$$= \sum_{i=0}^4 \frac{-L^2 \cdot 2(1 + c e^{r(t_i-t_0)}) \cdot c \cdot (t_i-t_0) e^{r(t_i-t_0)}}{(1 + c e^{r(t_i-t_0)})^4}$$

$$\frac{\partial \langle p(t), p_i \rangle}{\partial r} = \frac{\partial \left(\sum_{i=0}^4 \frac{p_i \cdot L}{1 + c e^{r(t_i-t_0)}} \right)}{\partial r} =$$

$$= \frac{-p_i \cdot L \cdot c \cdot (t_i-t_0) \cdot e^{r(t_i-t_0)}}{(1 + c e^{r(t_i-t_0)})^2}$$

OBS. $\frac{\partial \langle p_i, p_i \rangle}{\partial c} = \frac{\partial \langle p_i, p_i \rangle}{\partial r} = 0.$

$$\langle p(t) - p_i, p(t) - p_i \rangle = \langle p(t/2), p(t) \rangle - 2 \langle p(t), p_i \rangle + \langle p_i, p_i \rangle$$

Tenim el sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=0}^4 - \frac{L^2 \cdot 2 \cdot (\Delta + c \cdot e^{r(t_i - t_0)}) \cdot e^{r(t_i - t_0)}}{(\Delta + c \cdot e^{r(t_i - t_0)})^3} + \frac{2 \cdot p_i \cdot L \cdot e^{r(t_i - t_0)}}{(\Delta + e^{r(t_i - t_0)})^2} = 0 \\ \sum_{i=0}^4 - \frac{L^2 \cdot 2 \cdot c \cdot (t_i - t_0) \cdot e^{r(t_i - t_0)}}{(\Delta + c \cdot e^{r(t_i - t_0)})^3} + \frac{2 \cdot p_i \cdot L \cdot (t_i - t_0) \cdot c \cdot e^{r(t_i - t_0)}}{(\Delta + c \cdot e^{r(t_i - t_0)})^2} = 0 \end{array} \right.$$

✓

b) En aquest cas, per trobar r i c , hem de resoldre el sistema no lineal, utilitzarem Newton-Raphson.

Solució?

c) Si L no fos conegut, podríem fer un ajust per mínims quadrats però aquest cap tindriem

$$p = L \cdot \mathcal{T}_0(x) + c \cdot \mathcal{T}_2(x) + r \cdot \mathcal{T}_2(x) \quad \times$$

Aproximariem per polinomis de grau major.

Si no coneixen L , el problema no es pot linealitzar

Assignatura: càlcul numèric

Estudiant/a: _____

Data: 12/01/2014

7) a) Normes coneixem $f(x_0)$

$$L_i(x) = \frac{\prod_{j \neq i} (x - x_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}$$

Alleshores,

$$\int_0^1 f(x) dx \approx$$

Aproximem $f(x) \approx p_n(x) + R_n(x)$ on $p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot L_i(x)$

$$\approx w_0 \cdot f(x_0)$$

Alleshores, si prenem $L_0(x) = 1$,

$$w_0 = \int_0^1 1 dx = 1 \Rightarrow \boxed{w_0 = 1} \checkmark$$

Ordre de la quadratura:

$$E_0 = \int_0^1 R_0(x) dx = \int_0^1 \frac{f'(\xi)}{1!} (x - x_0) dx = \int_0^1 f'(\xi) \cdot (x - x_0) dx =$$

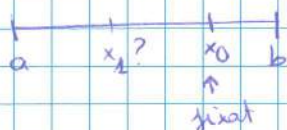
$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \underbrace{L_n(x)}_{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}$$

$$= \frac{f'(\xi)}{1!} \int_0^1 x - x_0 dx = f'(\xi) \cdot \frac{1}{2} - f'(\xi) \cdot x_0 = f'(\xi) \left(\frac{1}{2} - x_0 \right)$$

$$\Rightarrow E_0 = C_1 f'(\xi) \text{ on } C_1 = \left(\frac{1}{2} - x_0 \right) \Rightarrow \text{Ordre } 0.$$

si $x_0 = 1/2$, té ordre 1

b) Ara podem escollir un altre x_0 . Determinem x_0, w_0, w_1 per a tenir la milla quadratura possible



En aquest cas tenim una quadratura de Newton-Cotes (Trapezi) ?

Demanem ordre 2: perquè tenim 3 incògnites.

$$1 = \int_0^1 1 = w_0 + w_1$$

$$\frac{1}{2} = \int_0^1 x = w_0 \cdot x_0 + w_1 \cdot x_1$$

↑
fixat.

$$\frac{1}{3} = \int_0^1 x^2 = w_0 \cdot x_0^2 + w_1 \cdot x_1^2$$

↑
fixat.

sist. eq. no lineals.

$$w_1 \cdot x_1 = \frac{1}{2} - w_0 \cdot x_0$$

Tenim $\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^m f(x_i) \cdot w_i$ on $w_i = \int_a^b L_i(x) dx$

Ara $w_0 = \int_0^1 \frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)} dx = \frac{1}{(x_0-x_1)} \left(\frac{1}{2} - x_1 \right)$ ✓

$w_1 = \int_0^1 \frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)} dx = \frac{1}{(x_1-x_0)} \left(\frac{1}{2} - x_0 \right)$ ✓

Ens falta buscar el x_1 òptim segons x_0 .

Per a això minimitzarem l'error:

$$\min_{x_1, \frac{1}{2}} E_n = \min_{x_1, \frac{1}{2}} \int \frac{f''(\xi)}{2!} (x-x_1)(x-x_0)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial E_n}{\partial x_1} = 0 \Rightarrow$$

De fet, podem fer que la quadratura sigui d'ordre 2 imponent

$$\int_0^1 (x-x_0)(x-x_1) dx = 0$$