CÀLCUL NUMÈRIC (GM) **Examen parcial**

(Durada: 3 hores) **11 de novembre de 2015**

Cognoms: **Nom:**

1. [3 punts] Es vol determinar l'angle amb què s'ha de disparar un projectil per arribar a un objectiu situat a 500 m.

El càlcul de la trajectòria del projectil és un problema de tir parabòlic amb fregament, que es pot plantejar com un sistema de 4 Equacions Diferencials Ordinàries (EDOs),

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -R||\mathbf{v}||\mathbf{v} + \mathbf{g} \tag{1}$$

on les funcions incògnita són les dues components de la posició $\mathbf{x} = (x(t), y(t))^T$ i de la velocitat $\mathbf{v} = (\dot{x}(t), \dot{y}(t))^T$, $\mathbf{g} = (0, -9.8)^T$ m/s^2 és l'acceleració de la gravetat i R és coeficient de fregament. Aquest coeficient depèn principalment de l'àrea projectada de l'objecte i de la densitat de l'aire, i aquí es pren com $R = 0.00132$ m^{-1}. Per poder resoldre el problema de forma única cal donar condicions inicials, en aquest cas

$$\mathbf{x}(0) = (0,0)^T, \quad \mathbf{v}(0) = v_0(\cos\theta, \sin\theta)^T \tag{2}$$

on $v_0 = 100$ m/s és el mòdul de la velocitat inicial i θ és l'angle sobre l'horitzontal amb qué es fa el llançament.

La funció `distancia.m`, donat un angle θ, resol numèricament el sistema d'EDOs, per una certa velocitat inicial v_0 i amb les condicions inicials, i retorna la distància horitzontal a la que el projectil toca terra. Aquesta funció, implementada en Matlab, es pot descarregar de la intranet de l'assignatura.

a) Quina equació s'ha de resoldre per a trobar l'angle de llançament? Avalua la funció corresponent per $\theta = 0.25$, $\theta = 0.5$, $\theta = 0.75$ i $\theta = 1$.

b) A la vista dels resultats anteriors, quantes solucions té el problema proposat? Justifica la teva resposta.

c) Fes servir Matlab per determinar l'angle θ amb què s'ha de disparar el projectil per arribar a l'objectiu situat a 500 m.

Explica quin mètode has emprat per solucionar el problema i com has triat l'aproximació inicial.

d) Si es vol resoldre el problema mitjançant el mètode de Newton, es pot fer servir la funció `distancia.m` per aproximar la derivada? Com?

Solució

a) Per determinar l'angle de llançament, hem de resoldre l'equació

$$f(\theta) = \text{distancia}(\theta) - 500.$$

En la taula es troben els valors de la funció en els angles proposats a l'enunciat:

θ	0.25	0.50	0.75	1
$f(\theta)$	-150.7198	4.4464	36.7286	-32.0504

b) L'abast varia de forma contínua amb l'angle de llançament. En la taula de resultats podem veure que la funció canvia de signe, com a mínim, dues vegades i, per tant, podem assegurar que com a mínim té dues arrels: una en l'interval $(0.25, 0.50)$ i l'altra en $(0.75, 1)$.

c) Per resoldre l'equació podem:

- Definir la funció en Matlab `f = @(x)(distancia(x)-500);`
- Fer servir la funció `fzero` per resoldre-la: `fzero(f, x0)`, on `x0` és l'aproximació inicial.

Podem triar com a aproximació inicial els punts de la taula de l'apartat *a)* que queden més a prop de la solució.

- Triant $\theta^0 = 0.5$ s'obté un angle $\theta = 0.4878$
- Triant $\theta^0 = 1.0$ s'obté un angle $\theta = 0.9207$

d) Per fer servir el mètode de Newton cal conèixer la derivada de la funció $f(\theta)$. És clar que no podem calcular aquesta derivada analíticament, però la podem aproximar:

$$f'(\theta) \approx \frac{f(\theta+h) - f(\theta)}{h} = \frac{\text{distancia}(\theta+h) - \text{distancia}(\theta)}{h},$$

prenent, per exemple, $h = 10^{-5}$.

---

2. [3 punts] Es vol construir una funció polinòmica a trossos (spline) amb punts base $\{x_i\}_{i=0}^n$. Es disposa del valor de la funció $\{f_i\}_{i=0}^n$ i de les derivades $\{f'_i\}_{i=0}^n$ als punts base. En primer lloc es planteja construir un spline amb polinomis de grau 4.

a) Donades les $2(n+1)$ dades, fins a quin ordre es pot imposar continuïtat de les derivades? Cal imposar condicions addicionals per determinar l'spline de manera única? En cas afirmatiu, quantes?

b) Proposa un algorisme per al càlcul de l'spline. Tria les dades addicionals de la manera que et resulti més convenient i de forma que no calgui resoldre un sistema lineal d'equacions per al càlcul de l'spline.

En segon lloc es planteja construir un spline amb polinomis de grau 5 i continuïtat $\mathcal{C}^2$, fent servir un cop més les $2(n+1)$ dades.

c) Cal imposar condicions addicionals per a determinar l'spline de manera única? En cas afirmatiu, quantes?

d) Proposa un algorisme per al càlcul de l'spline. Tria les dades addicionals de la manera que et resulti més convenient i de forma que no calgui resoldre un sistema lineal d'equacions per al càlcul de l'spline.

e) Quina és la dimensió de l'espai d'splines $\mathcal{C}^2$ de grau 5? Proposa una base de l'espai d'splines que permeti escriure l'spline com

$$S(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \phi_i(x) + \sum_{i=0}^{n} f'_i \widehat{\phi}_i(x) + \dots$$

Quines condicions compleixen les funcions de la base? Dibuixa les funcions de la base associades a un punt interior x_i: ϕ_i, $\widehat{\phi}_i$, ...

Solució

a) S'han de determinar 5 coeficients a cada un dels n intervals (polinomi de grau 4 a cada interval) i hem d'imposar $2(n+1)$ dades. Per tant, queden $5n-2(n+1) = 3n-2$ graus de llibertat o paràmetres lliures. Podem imposar, per tant, continuïtat de la funció, de les derivades i de les segones derivades a cadascun dels $n-1$ punts interiors, que correspon a $3(n-1)$ condicions de continuïtat. És a dir, podem imposar continuïtat $\mathcal{C}^2$.

Imposant continuïtat $\mathcal{C}^2$, queda $(3n-2)-3(n-1) = 1$ paràmetre lliure. És a dir, hem d'imposar una condició addicional per determinar de manera única l'spline.

b) Si prenem com a dada addicional el valor de la segona derivada al primer punt, podem calcular l'spline de manera recursiva:

- Amb els 2 valors de la funció, els 2 valors de la derivada i el valor de la derivada segona al primer punt, tenim 5 dades per determinar l'spline (polinomi de grau 4) al primer interval, $S_1(x)$.
- Avaluem la derivada segona al segon punt, $S_2(x_1) = S_1(x_1)$, i disposem un cop més de 5 dades per a calcular l'spline al segon interval, $S_2(x)$,
- ... (recursivament calculem l'spline a cada interval)

c) S'han de determinar 6 coeficients a cadascun dels n intervals (polinomi de grau 5 a cada interval) i hem d'imposar $2(n+1)$ dades i 3 condicions de continuïtat a cadascun dels $n-1$ punts interiors. Queden, per tant, $6n-2(n+1)-3(n-1) = n+1$ paràmetres lliures, o condicions addicionals per determinar de manera única l'spline.

d) Si considerem com a dades addicionals el valor de la segona derivada a cadascun dels $n+1$ punts base, tindrem el valor de la funció, de les derivades, i de les segones derivades als extrems de cadascun dels intervals. És a dir, tenim 6 dades per a determinar el polinomi de grau 5 a cada interval, de forma desacoplada.

e) L'espai d'splines té $6n$ coeficients a determinar i $3(n-1)$ condicions de continuïtat. La dimensió de l'espai és, per tant, $6n-3(n-1) = 3(n+1)$. L'spline es pot expressar com

$$S(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \phi_i(x) + \sum_{i=0}^{n} f'_i \widehat{\phi}_i(x) + \sum_{i=0}^{n} f''_i \widehat{\widehat{\phi}}_i(x)$$

on les funcions de la base verifiquen

$$\phi_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad \frac{d\phi_i}{dx}(x_j) = 0, \quad \frac{d^2\phi_i}{dx^2}(x_j) = 0,$$

$$\widehat{\phi}_i(x_j) = 0, \quad \frac{d\widehat{\phi}_i}{dx}(x_j) = \delta_{ij}, \quad \frac{d^2\widehat{\phi}_i}{dx^2}(x_j) = 0,$$

$$\widehat{\widehat{\phi}}_i(x_j) = 0, \quad \frac{d\widehat{\widehat{\phi}}_i}{dx}(x_j) = 0, \quad \frac{d^2\widehat{\widehat{\phi}}_i}{dx^2}(x_j) = \delta_{ij},$$

per $i, j = 0, \ldots, n$.

---

3. [2 punts] En aquest problema es planteja com definir bases de polinomis ortogonals en 2 dimensions.

a) Proposa una base de polinomis $\psi_{ij}(x,y)$ ortogonals al quadrat $S = (-1,1) \times (-1,1)$ amb el producte escalar continu

$$< u, v >_S = \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} u(x,y) v(x,y) \, dy \, dx$$

fent servir la base de polinomis de Legendre en una dimensió $\{P_i(x)\}_i$. Justifica que la base proposada és ortogonal.

Els polinomis de Jacobi $P_i^{\alpha,\beta}(x)$ són ortogonals a l'interval $(-1,1)$ amb el producte escalar

$$< u, v >= \int_{-1}^{1} (1-x)^\alpha (1+x)^\beta u(x)v(x)\, dx,$$

i, per al cas particular $\beta = 0$, compleixen

$$< P_i^{\alpha,0}, P_i^{\alpha,0} >= \frac{2}{\alpha + 2i + 1}.$$

Es consideren les funcions en dues variables

$$\psi_{ij}(x,y) = \left(\frac{1-s}{2}\right)^i P_j^{2i+1,0}(s) P_i^{0,0}(r)$$

amb

$$s = y, \quad r = 2\frac{1+x}{1-y} - 1$$

o, equivalentment,

$$x = (1-s)(1+r)/2 - 1, \quad y = s.$$

Observa que el canvi de variable anterior passa del quadrat $S = \{(r,s) \mid r, s \in (-1,1)\}$ al triangle $T = \{(x,y) \mid x > -1,\ y > -1,\ x+y < 0\}$.

b) Justifica que $\psi_{ij}(x,y)$ és un polinomi en x i y. Quin grau té en cadascuna de les variables?

c) Calcula el producte escalar al triangle T de dos polinomis de la família

$$< \psi_{ij}, \psi_{kl} >_T = \int_T \psi_{ij}(x,y)\psi_{kl}(x,y)\, dy\, dx.$$

El resultat del càlcul ha de ser una expressió en funció (exclusivament) de i, j, k i l.

d) Què es pot dir de la família $\{\psi_{ij}(x,y) \mid i + j \le m\}$? Són una base de l'espai de polinomis de grau menor o igual que m en (x,y)? Són ortogonals? Justifica les respostes.

Solució

a) Els polinomis de Legendre $\{P_i\}_i$ són ortogonals amb el producte escalar continu

$$< u, v >= \int_{-1}^{1} u(r)v(r)\, dr$$

Per tant, els polinomis $\psi_{ij}(x,y) := P_i(x)P_j(y)$ són ortogonals amb el producte escalar $< u, v >_S$. Efectivament,

$$< \psi_{ij}, \psi_{kl} >_S = \int_{-1}^{1} P_i(x)P_k(x)\, dx \int_{-1}^{1} P_j(y)P_l(y)\, dy =< P_i, P_k >< P_j, P_l >= 0$$

excepte si $i = k$ i $j = l$.

b) Aplicant el canvi de variable, observem que, donat que $P_i^{0,0}$ és de grau i, $(1-y)^i P_i^{0,0}\left(\frac{1+2x+y}{1-y}\right)$ és un polinomi de grau i en x i en y. Per tant, el polinomi

$$\psi_{ij}(x,y) = \underbrace{P_j^{2i+1,0}(y)}_{\text{grau } j \text{ en } y} \underbrace{\left(\frac{1-y}{2}\right)^i P_i^{0,0}\left(\frac{1+2x+y}{1-y}\right)}_{\text{polinomi de grau } i \text{ en } x,\, y}$$

és de grau i en x i grau $(i+j)$ en y.

c) El canvi de variable ens permet escriure la integral sobre el quadrat S:

$$\begin{aligned}
< \psi_{ij}, \psi_{kl} >_T &= \int_T \psi_{ij}(x,y)\psi_{kl}(x,y)\, dy\, dx \\
&= \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \left[\left(\frac{1-s}{2}\right)^i P_j^{2i+1,0}(s)P_i^{0,0}(r)\right] \left[\left(\frac{1-s}{2}\right)^k P_l^{2k+1,0}(s)P_k^{0,0}(r)\right] \frac{1-s}{2}\, dr\, ds \\
&= \int_{-1}^{1} P_i^{0,0}(r)P_k^{0,0}(r)\, dr \int_{-1}^{1} \left(\frac{1-s}{2}\right)^{i+k+1} P_j^{2i+1,0}(s)P_l^{2k+1,0}(s)\, ds \\
&=< P_i^{0,0}, P_k^{0,0} > \int_{-1}^{1} \left(\frac{1-s}{2}\right)^{i+k+1} P_j^{2i+1,0}(s)P_l^{2k+1,0}(s)\, ds \\
&= \delta_{ik}\frac{2}{2i+1} \int_{-1}^{1} \left(\frac{1-s}{2}\right)^{2i+1} P_j^{2i+1,0}(s)P_l^{2i+1,0}(s)\, ds \\
&= \delta_{ik}\frac{2}{2i+1}\,\frac{1}{2^{2i+1}} < P_j^{2i+1,0}, P_l^{2i+1,0} >= \delta_{ik}\delta_{jl}\frac{1}{2^{2i}(2i+1)(i+j+1)}
\end{aligned}$$

d) La família $\{\psi_{ij}(x,y) \mid i+j \le m\}$ conté $(m+2)(m+1)/2$ polinomis de grau menor o igual que m en x i en y. A l'apartat anterior, hem comprovat que aquests polinomis són ortogonals i, per tant, són linealment independents. Donat que la dimensió de l'espai de polinomis de grau menor o igual que m és $(m+2)(m+1)/2$, els polinomis $\{\psi_{ij}(x,y) \mid i+j \le m\}$ són una base de l'espai.

---

4. [2 punts] Tant en modelització numèrica com en visualització, és habitual aproximar un domini continu Ω per la unió disjunta d'elements (triangles, quadrilàters, tetraedres, o altres), anomenada malla. En aquest problema, es considera una malla composta per triangles, donada per una matriu $\mathbf{X}$, que conté les coordenades dels vèrtexs, $\mathbf{X}(i,:) = (x_i, y_i)$ per $i = 1 \ldots N$, i l'anomenada matriu de connectivitats $\mathbf{T}$. Cada fila e de la matriu de connectivitats conté els números dels nodes del triàngle e-éssim. Per exemple, per a la malla a la Figura 1 les matrius són

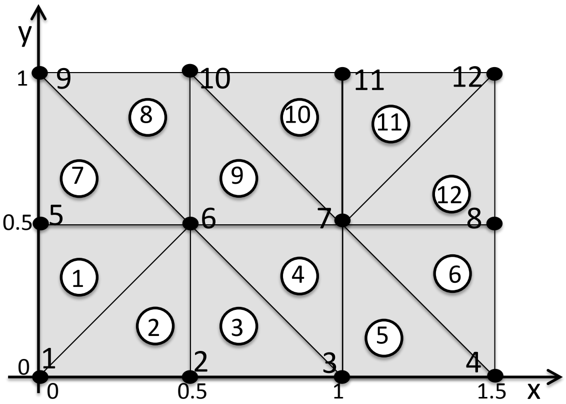

Figura 1: Malla amb 12 vèrtexs (cercles negres) i 12 elements triangulars (cercles blancs) per al domini $\Omega = (0, 1.5) \times (0, 1)$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0.5 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \\ 1 & 0.5 \\ 1.5 & 0.5 \\ 0 & 1 \\ 0.5 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1.5 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 1 & 2 & 6 \\ 2 & 3 & 6 \\ 3 & 7 & 6 \\ 3 & 4 & 7 \\ 4 & 8 & 7 \\ 5 & 6 & 9 \\ 6 & 10 & 9 \\ 6 & 7 & 10 \\ 7 & 11 & 10 \\ 7 & 12 & 11 \\ 7 & 8 & 12 \end{bmatrix}$$

Amb aquestes definicions, $\mathbf{X}_e := \mathbf{X}(\mathbf{T}(e,:),:) \in \mathbb{R}^{3\times 2}$ és una matriu amb les coordenades dels 3 vèrtexs del triangle e-èssim.

Per a la resolució numèrica d'Equacions en Derivades Parcials (EDPs) és convenient que els elements siguin poc distorsionats; és a dir, que siguin el més semblants possible a un triangle equilàter. En aquest problema considerem la següent funció per a mesurar la distorsió d'un triangle

$$\eta_{tri}(\mathbf{X}_e) = \frac{\|\mathbf{D}\phi\|_F^2}{2|\det(\mathbf{D}\phi)|}, \tag{3}$$

on ϕ és la transformació afí del triangle equilàter de vèrtexs $(0,0)$, $(1,0)$ i $(\sqrt{3}/2, 1/2)$ al triangle de vèrtexs donats per $\mathbf{X}_e$, $\mathbf{D}\phi$ és la matriu diferencial de ϕ, i $\|\cdot\|_F$ és la norma de Frobenius (`norm(·,'fro')` a Matlab). Amb aquestes definicions, la matriu diferencial $\mathbf{D}\phi$ es pot calcular com

$$\mathbf{D}\phi = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_e(2,:) - \mathbf{X}_e(1,:) \\ \mathbf{X}_e(3,:) - \mathbf{X}_e(1,:) \end{pmatrix}^T,$$

Per a mesurar la distorsió de la malla, es pot avaluar la funció

$$\eta(\mathbf{X}, \mathbf{T}) = \sqrt{\sum_{e=1}^{N_{tri}} [\eta_{tri}(\ \mathbf{X}(\mathbf{T}(e,:),:)\ )]^2}, \tag{4}$$

on N_{tri} és el nombre de triangles de la malla.

a) Omple l'arxiu proporcionat `calculaDistorsioMalla.m`, de forma que, donades $\mathbf{X}$ i $\mathbf{T}$, retorni la distorsió de la malla. Avalua i escriu aquí el valor de la distorsió per a la malla a l'arxiu `malla.mat`, representada a la Figura 2.
Indicació: executa `load malla` per carregar les variables $\mathbf{X}$ i $\mathbf{T}$ emmagatzemades.

Es vol ara optimitzar la posició dels vèrtexs interiors per a minimitzar la distorsió, fixada la posició dels vèrtexs del contorn. Per això, es defineix el vector $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{2N_{int}}$ que conté les coordenades dels N_{int} nodes interiors. Per exemple, per a la malla a la Figura 1, seria $\mathbf{y} = (x_6, y_6, x_7, y_7)^T$. La funció `F` definida a l'arxiu `mainNewton.m` avalua la distorsió de la malla per les posicions donades al vector $\mathbf{y}$, fent servir la funció `calculaDistorsioMalla.m` implementada a l'apartat anterior.

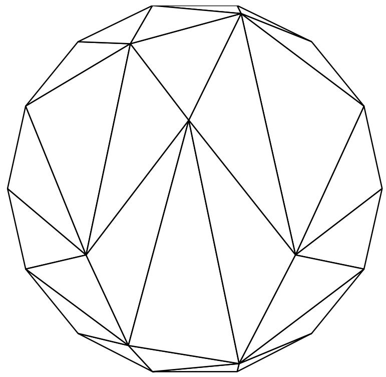

Figura 2: Malla a l'arxiu `malla.mat`. Es vol trobar la posició dels vèrtexs interiors que minimitza la distorsió de la malla, mantenint fixos els vèrtexs del contorn.

b) Proposa una metodologia per a minimitzar la distorsió fent servir el mètode de Newton, i la funció `F` i les seves derivades.

L'arxiu `mainNewton.m` és un script per a calcular les iteracions del mètode de Newton i avaluar l'error.

c) Completa l'script `mainNewton.m` implementant la metodologia proposada a l'apartat anterior i executa'l. Per tal de simplificar el càlcul de les derivades, les funcions `numericalDerivative.m` i `numericalHessian.m` calculen la derivada numèrica i la hessiana numèrica d'una funció en un punt donat.

Quina és la distorsió de la malla obtinguda? Quantes iteracions ha necessitat el mètode de Newton per a satisfer el criteri de convergència implementat?

d) La figura 3 de Matlab mostra la convergència del mètode. Té el comportament esperat? Justifica la teva resposta.

Solució

a) La distorsió de la malla és 24.002204.

b) Minimitzar la funció $\mathtt{F} : \mathbb{R}^{2N_{int}} \to \mathbb{R}$ és equivalent a trobar els zeros de $\mathtt{JF} : \mathbb{R}^{2N_{int}} \to \mathbb{R}^{2N_{int}}$. Usant el mètode de Newton, obtenim la següent funció d'iteració:

$$\phi(\mathbf{y}) = \mathbf{y} - \mathtt{HF}^{-1}(\mathbf{y}) \cdot \mathtt{JF}(\mathbf{y}),$$

on $\mathtt{HF} \in \mathbb{R}^{2N_{int} \times 2N_{int}}$ és la matriu hessiana de `F`.

c) La distorsió de la malla optimitzada és 6.578517, i s'ha necessitat 10 iteracions del mètode de Newton per convergir a aquesta solució.

d) La convergència del mètode té el comportament esperat. Lluny de l'arrel, el mètode de Newton té una convergència que no és quadràtica (de fet, no se'n pot assegurar res), però un cop s'apropa a l'arrel el mètode adquireix la convergència quadràtica esperada i s'arriba a la tolerància desitjada ràpidament.