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 detalladament[1] una metodologia per a calcular el polinomi aproximant fent servir la base natural de polinomis.

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

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

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.

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.

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.

a) Donat que l'aproximant es pot expressar en funció d'una base, es poden plantejar directament les *equacions normals*. El polinomi aproximant és

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m$$

on $\mathbf{a} = (a_0, a_1, \ldots, a_m)^T$ és solució del sistema lineal $\mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{b}$ amb

$$A_{ij} = \int_{-1}^{1} x^{i+j}\, dx, \quad b_i = \int_{-1}^{1} x^i f(x)\, dx, \quad i, j = 0, \ldots, m$$

o, equivalentment,

$$A_{ij} = < x^i, x^j > \quad b_i = < x^i, f > \ dx, \quad i, j = 0, \ldots, m,$$

amb el producte escalar continu

$$< u, v > = \int_{-1}^{1} u(x) v(x)\, dx. \tag{1}$$

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

b) Donat que la base és ortogonal amb el producte escalar (1), en aquest cas la matriu de les equacions normals és diagonal i l'aproximant es pot expressar com

$$p(x) = \sum_{i=0}^{m} c_i P_i(x), \quad \text{amb} \quad c_i = \frac{< P_i, f >}{< P_i, P_i >}$$

c) Els polinomis de Txebyxov $\{T_i\}_{i=0}^{m}$ són ortogonals amb el producte escalar

$$< u, v >_T = \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} u(x) v(x)\, dx$$

El polinomi aproximant en aquest cas és

$$p_T(x) = \sum_{i=0}^{m} \widetilde{c}_i T_i(x), \quad \text{amb} \quad \widetilde{c}_i = \frac{< T_i, f >_T}{< T_i, T_i >_T}.$$

El polinomi no és en general el mateix que als apartats anteriors perque s'està ajustant la funció amb un producte escalar diferent que dóna més pes al valor de la funció a prop del extrems de l'interval. És a dir, el problema de minimització de l'error d'aproximació es fa amb una altra mesura de la distància entre funcions i, per tant, el polinomi que minimitza l'error és diferent.

Cal notar que si es fes l'ajust del polinomi fent servir el producte escalar (1), les equacions normals no tindrien matriu diagonal.

d) Considerem la base de Legendre $\{P_i(z)\}_i$ ortogonal per $z \in (-1, 1)$ i el canvi de variable de $(-1, 1)$ a (a, b)

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} z, \quad \text{i el seu invers} \quad z = \left[x - \frac{a+b}{2} \right] \frac{2}{b-a}.$$

Aleshores, els polinomis definits com

$$P_i^{ab}(x) := P_i \left(\left[x - \frac{a+b}{2} \right] \frac{2}{b-a} \right)$$

són ortogonals en (a, b). En efecte, emprant el canvi de variable,

$$\int_a^b P_i^{ab}(x) P_j^{ab}(x)\, dx = \int_a^b P_i \left(\left[x - \frac{a+b}{2} \right] \frac{2}{b-a} \right) P_j \left(\left[x - \frac{a+b}{2} \right] \frac{2}{b-a} \right) dx$$
$$= \int_{-1}^{1} P_i(z) P_j(z) \frac{b-a}{2}\, dz = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} P_i(z) P_j(z)\, dz = \frac{b-a}{2} < P_i, P_j > = \delta_{ij} \alpha_i,$$

amb $\alpha_i = \frac{b-a}{2} < P_i, P_i >$.

e) La dimensió de l'espai de funcions cúbiques a trossos és $4m$ (4 coeficients per a cadascun dels m subintervals). Si s'imposa continuitat de la funció, de la derivada i de la segona derivada als $m-1$ punts interiors, són $3(m-1)$ condicions. Per tant, la dimensió de l'espai de funcions cúbiques a trossos amb continuitat $\mathcal{C}^2$ és $4m - 3(m-1) = m + 3$.

Els splines naturals són splines cúbics amb continuitat $\mathcal{C}^2$ i amb curvatura nula als extrems, $S''(x_0) = S''(x_m) = 0$. Per tant, afegint aquestes dues condicions addicionals, la dimensió de l'espai és $(m+3) - 2 = m + 1$.

f) L'espai d'splines naturals és un espai vectorial de dimensió $m+1$. Considerem una base d'aquest espai $\{\psi_i\}_{i=0}^m$. Per exemple, podríem prendre la base dels splines que verifiquen $\psi(x_j) = \delta_{ij}$, de manera que un spline natural qualsevol s'expressaria com

$$S(x) = \sum_{i=0}^{m} c_i \psi_i(x),$$

on $\{c_i\}_{i=0}^m$ són els valors de l'spline als punts base. Si el criteri per aproximar fos interpolació aquests valors serien dades $c_i = f(x_i)$. En aquest cas, però, els valors als punts base $\{c_i\}_{i=0}^m$ són paràmetres que s'ajusten amb el criteri de mínims quadrats. Plantejant les equacions normals, $\mathbf{c} = (c_0, \ldots, c_m)^T$ és la solució del sistema lineal d'equacions $\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{b}$ on

$$A_{ij} =< \psi_i, \psi_j >, \quad b_i =< \psi_i, f >$$

amb el producte escalar continu (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.

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

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

a) Es proposa interpolar les dades amb un spline cúbic $\mathcal{C}^2$, $S(x)$, amb derivada nula als extrems, $S'(l_0) = S'(l_n) = 0$. Aquesta funció satisfà els requeriments de ser $\mathcal{C}^2$, passar exactament pels punts $\{l_k, h_k\}_{k=0}^n$ i de tenir pendent zero a l'inici i al final. A més, de totes les funcions que verifiquen aquests requeriments, $S(x)$ és la més suau possible.
En efecte, considerem una funció $f \in \mathcal{C}^2((l_0, l_n))$ qualsevol que verifiqui $f(l_k) = h_k$, per $k = 1, \ldots, n$, i $f'(l_0) = f'(l_n) = 0$. Reproduint la demostració feta a classe per a la demostració de la suavitat de l'spline natural, s'arriba a

$$\int_{l_0}^{l_n} [f''(l)]^2 \, dl - \int_{l_0}^{l_n} [S''(l)]^2 \, dl = \int_{l_0}^{l_n} [f'' - S'']^2 \, dl + 2S''(f' - S')|_{l_0}^{l_n}.$$

Donat que $f'(l_0) = S'(l_0) = f'(l_n) = S'(l_n) = 0$, l'equació anterior es simplifica a

$$\int_{l_0}^{l_n} [f''(l)]^2 \, dl - \int_{l_0}^{l_n} [S''(l)]^2 \, dl = \int_{l_0}^{l_n} [f'' - S'']^2 \, dl \geq 0.$$

D'on deduïm que

$$\int_{l_0}^{l_n} [f''(l)]^2 \, dl \geq \int_{l_0}^{l_n} [S''(l)]^2 \, dl,$$

tal i com volíem demostrar.

b) Per a calcular l'spline es pot fer servir una expressió de la cúbica a cada interval en funció de les derivades als punts base. És a dir, a cada interval

$$S(x) = S_i(x) = a_i(x - l_i)^3 + b_i(x - l_i)^2 + c_i(x - l_i) + d_i \quad x \in [l_i, l_{i+1}], \qquad (2)$$

on els coeficients a_i, b_i, c_i i d_i tenen expressions en funció de s'_i i s'_{i+1}, que s'obtenen imposant el valor de la funció i les derivades, $S_i(l_i) = h_i$, $S_i(l_{i+1}) = h_{i+1}$, $S'_i(l_i) = s'_i$, $S'_{i+1}(l_{i+1}) = s'_{i+1}$. Notem que h_i i h_{i+1} són dades, mentre que les derivades s'_i, s'_{i+1} són paràmetres a determinar. Per construcció, l'spline té continuitat de la funció i de la derivada. Falta, per tant, imposar la continuitat de la segona derivada.

Imposant que $S''_{i-1}(l_i) = S''_i(l_i)$ per $i = 1, \dots, n-1$ ($n-1$ punts base interiors), s'arriba a un sistema d'equacions lineals, amb $n-1$ equacions i $n+1$ incógnites per a les derivades $\{s'_i\}_{i=0}^n$. Imposant que $s'_0 = s'_n = 0$ el sistema es redueix a un sistema $(n-1) \times (n-1)$.

Per tant, per a calcular l'spline cal (i) resoldre el sistema lineal $(n-1) \times (n-1)$ per a calcular les derivades $\{s'_i\}_{i=0}^n$ i, (ii) calcular els coeficients i avaluar l'expressió de l'spline (2) a cada interval.

---

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?

a) El paramètres C i α es trien per a minimitzar la suma d'errors al quadrat $E(C, \alpha)$, és a dir, la distància entre $c(t)$ i les dades amb producte escalar discret,

$$E(C, \alpha) := \sum_k \left[c(t_k) - c_k\right]^2 .$$

Imposant condicions de mínim local tenim

$$0 = \frac{\partial E}{\partial C} = 2 \sum_k \left[c(t_k) - c_k\right] t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k},$$

$$0 = \frac{\partial E}{\partial \alpha} = -2C \sum_k \left[c(t_k) - c_k\right] t_k^2 \mathrm{e}^{-\alpha t_k}.$$

Per tant, el sistema no lineal 2×2 és

$$f_1(C,\alpha) := \sum_k \left[C t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k} - c_k\right] t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k} = 0, \tag{3}$$

$$f_2(C,\alpha) := \sum_k \left[C t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k} - c_k\right] t_k^2 \mathrm{e}^{-\alpha t_k} = 0. \tag{4}$$

on s'ha suposat que $C \neq 0$.

b) L'equació (3) es pot reescriure com

$$C \sum_k \left[t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k}\right]^2 = \sum_k c_k \left[t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k}\right]$$

d'on es pot aïllar

$$C(\alpha) = \frac{\sum_k c_k \left[t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k}\right]}{\sum_k \left[t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k}\right]^2} \tag{5}$$

Substituint a la segona equació (4) s'arriba a l'equació escalar no lineal

$$f(\alpha) := f_2(C(\alpha), \alpha) = 0. \tag{6}$$

Per tant, per trobar la solució del problema de mínims quadrats es pot resoldre primer el problema de zero de funcions $f(\alpha) = 0$ i després calcular C amb (5).

c) Per a la resolució del sistema no lineal 2×2 es pot emprar el mètode de Newton, de convergència quadràtica. Les derivades de les funcions f_1 i f_2 respecte a C i α es poden calcular analíticament. Per exemple,

$$\frac{\partial f_1}{\partial C} = \sum_k \left[t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k}\right]^2, \quad \frac{\partial f_1}{\partial \alpha} = \sum_k t_k^2 \mathrm{e}^{-\alpha t_k} \left[-2C t_k \mathrm{e}^{-\alpha t_k} + c_k\right]$$

Per a resoldre el problema de zeros de funcions (6), es pot fer servir també el mètode de Newton, amb convergència quadràtica. La derivada de la funció es pot calcular analíticament com

$$\frac{df}{d\alpha}(\alpha) = \frac{\partial f_2}{\partial C}(C(\alpha),\alpha)\frac{dC(\alpha)}{d\alpha} + \frac{\partial f_2}{\partial \alpha}(C(\alpha),\alpha).$$

També seria adequat fer servir el mètode de la secant, amb convergència superlineal, i amb un cost computacional menor (només una avaluació de la funció per iteració i no cal calcular derivades).

Resoldre el problema de zeros de funcions és més eficient, amb menys cost computacional, i més senzill (per exemple, per dibuixar la funció i proposar una bona aproximació inicial) que resoldre el sistema d'equacions no lineals. Gairebé sempre és més eficient computacionalment fer analíticament tots els càlculs i simplificacions que siguin possibles.

CÀLCUL NUMÈRIC (GM)	**Examen parcial (2a PART)**
(Durada: 1h)	**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) En la taula es poden veure els resultats obtinguts,

k	x^k	r^k
0	3.00000000	7.6087e − 02
1	2.78787879	3.6515e − 02
2	2.68966541	8.2320e − 03
3	2.66770479	3.8845e − 04
4	2.66666891	8.4101e − 07
5	2.66666667	

on l'error relatiu es calcula com $r^k = |x^{k+1} - x^k|/|x^{k+1}|$. Per tenir 5 xifres significatives correctes cal que l'error relatiu sigui menor que $0.5\ 10^{-5}$ i, per tant, x^4 ja té la precisió desitjada.

Respecte el comportament del mètode, podem veure com en la darrera iteració el número de xifres significatives correctes es dobla i, per tant, s'ha arribat a convergència asimptòtica quadràtica. Aquest és el comportament que s'espera pel mètode de Newton quan es busca una arrel simple.

(b) En aquest cas, per trobar la solució amb 5 xifres significatives correctes calen 15 iteracions. Si observem l'evolució de l'error, ens adonem que en aquest cas la convergència del mètode és lineal. De fet, en cada pas l'error es divideix per 2 i aquest és el comportament esperat pel mètode de Newton per arrels dobles (convergència lineal amb F.A.C. = 1/2).

(c) En la taula es poden veure els resultats obtinguts.

k	x^k	r^k
0	1.00000000	3.0303e − 01
1	1.43478261	1.4561e − 02
2	1.41419032	1.6437e − 05
3	1.41421356	0.0000e + 00
4	1.41421356	

En només 3 iteracions s'aconsegueix la solució amb precisió de màquina. Si mirem l'evolució de l'error, podem veure que el mètode convergeix molt ràpidament, possiblement amb ordre 2 o superior.

(d) Volem analitzar el comportament del mètode

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

per arrels dobles. En aquest cas, la funció es pot escriure com

$$f(x) = (x-\alpha)^2 g(x), \text{ amb } g(\alpha) \neq 0,$$

i la seva derivada és

$$f'(x) = 2(x-\alpha)g(x) + (x-\alpha)^2 g'(x).$$

- Consistència

$$\phi(x) = x - \frac{2f(x)}{f'(x)} = x - \frac{2(x-\alpha)^2 g(x)}{2(x-\alpha)g(x) + (x-\alpha)^2 g'(x)} = x - \frac{2(x-\alpha)g(x)}{2g(x) + (x-\alpha)g'(x)}$$

$$\phi(\alpha) = \alpha - \frac{2(\alpha-\alpha)g(\alpha)}{2g(\alpha) + (\alpha-\alpha)g'(\alpha)} = \alpha - \frac{0}{g(\alpha)} = \alpha$$

- Convergència

$$\phi'(x) = 1 - \frac{2g(x) + 2(x-\alpha)g'(x)}{2g(x) + (x-\alpha)g'(x)} + \frac{2(x-\alpha)g(x)\Big(3g'(x) + (x-\alpha)g''(x)\Big)}{\Big(2g(x) + (x-\alpha)g'(x)\Big)^2}$$

$$\phi'(\alpha) = 1 - \frac{2g(\alpha)}{2g(\alpha)} + \frac{0}{4g(\alpha)^2} = 0$$

Per tant, podem assegurar que el mètode convergeix amb ordre $p \geq 2$.

(e) Si fem servir $x^0 = 1$, observem que el mètode no convergeix. Tot i que és consistent, per arrels simples la convergència no està assegurada:

$$\begin{aligned}
\phi'(x) &= 1 - \frac{2\Big(f'(x)\Big)^2}{\Big(f'(x)\Big)^2} + \frac{2f(x)f''(x)}{\Big(f'(x)\Big)^2} \\
\phi'(\alpha) &= 1 - 2 + 0 = -1
\end{aligned}$$