CÀLCUL NUMÈRIC (GM) **Examen final (part I)**

(Durada: 2h 30min) **12 de gener de 2015**

Cognoms: **Nom:**

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

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

amb les condicions de contorn

$$u(a) = \alpha \quad ; \quad \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(b) = \beta \tag{2}$$

A les equacions (1) i (2), són dades 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).

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 $\mathbf{A}$ i del vector $\mathbf{f}$ del sistema d'equacions $\mathbf{Au} = \mathbf{f}$ resultant.

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 $dy/dx = f(x, y)$

$$Y_{i+1} = Y_i + h(b_1k_1 + b_2k_2) \text{ amb } \begin{cases} k_1 = f(x_i, Y_i) \\ k_2 = f(x_i + ch, Y_i + hak_1) \end{cases}$$

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

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.

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 $h = H$.

c) 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.

a) Multiplicant l'equació diferencial per una funció de pes v, integrant, i aplicant integració per parts al primer terme, s'obté l'equació integral

$$\int_a^b \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + v(a)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(a) - v(b)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(b) + \int_a^b v\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b vu\ \mathrm{d}x = \int_a^b vf\ \mathrm{d}x.$$

Tenint en compte que les funcions de pes són zero al contorn de Dirichlet, és a dir $v(a) = 0$, i que $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(b) = \beta$, la forma feble del problema és: "trobar u tal que $u(a) = \alpha$ i

$$\int_a^b \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b v\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b vu\ \mathrm{d}x = \int_a^b vf\ \mathrm{d}x + \beta v(b)$$

per a tot v tal que $v(a) = 0$".
Substituint $v = N_i$ per $i = 1, \ldots n$ (la funció N_0 no ha de ser funció de test) i l'aproximació

$$u(x) \approx u^h(x) = \alpha N_0(x) + \sum_{j=1}^{n} u_j N_j(x)$$

(on s'ha tingut en compte que $u(a) = \alpha$) a la forma feble, s'obté el sistema d'equacions

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

on

$$a_{ij} = \int_a^b \frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}N_j}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b N_i\frac{\mathrm{d}N_j}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b N_iN_j\ \mathrm{d}x,$$

$$f_i = \int_a^b N_i f\ \mathrm{d}x + \beta\delta_{in} - \alpha\Big(\int_a^b \frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}N_0}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b N_i\frac{\mathrm{d}N_0}{\mathrm{d}x}\ \mathrm{d}x + \int_a^b N_iN_0\ \mathrm{d}x\Big),$$

per $i, j = 1, \ldots, n$, i el vector d'incògnites és

$$\mathbf{u} = (u_1, \ldots, u_n)^T.$$

b) És un mètode de Runge-Kutta explícit de 2 etapes que, com a molt, tindrà ordre 2. El problema es pot reformular com un problema de valor inicial (PVI)

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{y}}{\mathrm{d}x} = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y} = (\alpha, s)^T$$

amb $\mathbf{y} = (y_{(1)}, y_{(2)})^T := (u, \mathrm{d}u/\mathrm{d}x)^T$ i $\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = (y_{(2)}, \mathrm{d}y_{(1)}/\mathrm{d}x + y_{(1)} - f)^T$. La segona component de la condició inicial, s, és desconeguda i es determina, segons el mètode del tret, imposant la condició de contorn $y_{(2)}(b; s) = \beta$. Aquesta condició es reescriu com $g(s) := y_{(2)}(b; s) - \beta = 0$. Cal doncs determinar iterativament el zero de la funció $g(s)$. Cada iteració comporta la resolució d'un PVI per obtenir $y_{(2)}(b; s^k)$. Per no haver de calcular derivades de la funció $g(s)$, una bona elecció és el mètode de la secant.

c) Podem estimar l'error relatiu r de l'aproximació obtinguda amb la discretització més grollera, $U_{10}^{h=0.1}$, utilitzant com a referència l'aproximació obtinguda amb la discretització més fina, $U_{20}^{h=0.05}$:

$$r = \left|\frac{U_{10}^{h=0.1} - U_{20}^{h=0.05}}{U_{20}^{h=0.05}}\right| = \left|\frac{0.279513 - 0.284332}{0.284332}\right| = 0.169485 \cdot 10^{-1} \qquad (3)$$

Determinem ara el pas $\widehat{h}$ que cal prendre per obtenir 3 xifres significatives correctes (és a dir, un error relatiu de $\widehat{r} = 0.5 \cdot 10^{-3}$). Suposant que triem un mètode òptim, d'ordre $p = s = 2$:

$$\frac{r}{\hat{r}} = \left(\frac{h}{\widehat{h}}\right)^2 \Rightarrow \widehat{h} = h\sqrt{\frac{\widehat{r}}{r}} = 0.1\sqrt{\frac{0.5 \cdot 10^{-3}}{0.169485 \cdot 10^{-1}}} = 1.71759 \cdot 10^{-2} \tag{4}$$

Per tant, calen aproximadament $1/\widehat{h} \approx 59$ intervals per aconseguir la precisió desitjada.

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 algoritmes iteratius, fent servir dues aproximacions inicials diferents.

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

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

a) Per a cada un dels algoritmes 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 identifiques l'ordre de convergència.

b) 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.

a) Fent servir com a aproximació inicial $x^0 = 1$, els dos algoritmes convergeixen linealment, però ho fan cap a arrels diferents: el primer convergeix a $\alpha_1 \simeq 0.23196$ mentre que el segon convergeix a $\alpha_2 \simeq 2.6778$.
Si es fa servir com a aproximació inicial $x^0 = 3$, el segon algoritme convergeix linealment cap a la mateixa arrel, però el primer no convergeix.

La convergència lineal s'observa veient que l'error en cada iteració és divideix aproximadament per una constant, que correspón al factor assimptòtic de convergència.

b) Algoritme 1:

- Consistència: el mètode és consistent, ja que l'esquema iteratiu s'ha obtingut aillant x a l'equació.
- Convergència:
  Per analitzar la convergència, avaluem la derivada de la funció d'iteració en l'arrel. En aquest cas

$$\phi(x) = \frac{1}{2}\exp(x-1), \text{ i } \phi'(x) = \frac{1}{2}\exp(x-1) = \phi(x).$$

  Per tant, en aquest cas, $\phi'(\alpha) = \phi(\alpha) = \alpha$, i el mètode és convergent si $|\alpha| < 1$. Es a dir, convergirà per a la primera arrel $\alpha_1 = 0.23196$, però no per a la segona $\alpha_2 = 2.6784$. Per les dues arrels es té $\phi'(\alpha) \neq 0$ i, per tant, la convergència és lineal. Aquest és el comportament observat en els resultats: convergeix linealment en el primer cas però no en el segon.

Algoritme 2:

- Consistència: el mètode és consistent, ja que l'esquema iteratiu s'ha obtingut aillant x a l'equació.
- Convergència:
  Per analitzar la convergència, avaluem la derivada de la funció d'iteració en l'arrel

$$\phi(x) = \ln(2x) + 1, \text{ i } \phi'(x) = \frac{1}{x}$$

  En aquest cas, el mètode convergeix linealment per arrels $|\alpha| > 1$. Per tant, tal i com es veu en els resultats, convergeix a la segona arrel $\alpha_2 = 2.6784$ (pot ser que per alguna altra aproximació inicial el mètode no convergeixi).

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

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

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

a) L'spline $\mathcal{C}^1$ cúbic es pot determinar a partir del valor de la funció $f_i = f(x_i)$ i de les derivades s'_i als 11 punts base. Com que tenim com a dada només el valor de la funció, podem calcular una aproximació de les derivades fent servir derivació numèrica

$$s'_0 = \frac{f_1 - f_0}{h}, \quad s'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \text{ per } i = 1, \ldots, 9, \quad s'_n = \frac{f_n - f_{n-1}}{h}.$$

L'spline a cada interval (x_i, x_{i+1}) s'expressa com

$$S_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i$$

on els 4 coeficients a_i, b_i, c_i, d_i es determinen impossant les 4 dades a l'interval

$$S_i(x_i) = f_i, \quad S_i(x_{i+1}) = f_{i+1}, \quad S'_i(x_i) = s'_i, \quad S'_i(x_{i+1}) = s'_{i+1}.$$

b) L'espai de les funcions spline cúbiques $\mathcal{C}^1$, amb 11 punts base, té dimensió 22. Donat que tenim 101 dades, més que la dimensió de l'espai, per determinar l'spline convé fer servir un criteri de *mínims quadrats*. Per calcular l'spline es pot considerar una *base de l'espai*, per exemple, tal que

$$S(x) = \sum_{i=0}^{11} s_i \Phi_i(x) + \sum_{i=0}^{11} s'_i \hat{\Phi}_i(x),$$

i determinar els coeficients (valor de l'spline s_i i de les derivades s'_i als punts base) resolent les *equacions normals* amb el producte escalar discret

$$< u, v >= \sum_{k=0}^{n} u(x_k)v(x_k).$$

4. [1 punt] Els polinomis de Txebixov 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) Demostra que $T_n(x)$ és un polinomi de grau n en x. Indicació: per $n \geq 2$ es verifica la identitat $\cos(n\theta) = 2\cos\big((n-1)\theta\big)\cos\theta - \cos\big((n-2)\theta\big)$.

b) Demostra que els polinomis de Txebixov són ortogonals amb el producte escalar

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

a) La demostració es pot fer per inducció. Per $n = 0, 1$ es fàcil comprovar que

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$$

Suposem ara que T_i és un polinomi de grau i en x, per $i = 0, \ldots, n-1$. Aleshores, fent servir la indicació, i que $cos(\theta) = x$,

$$T_n(x) = \cos(n\theta) = 2\cos\big((n-1)\theta\big)\cos\theta - \cos\big((n-2)\theta\big) = 2T_{n-1}(x)x - T_{n-2}(x).$$

Per tant, donat que $T_{n-1}(x)x$ és de grau n i $T_{n-2}(x)$ és de grau $n-2$ (i no pot cancelar el monomi de grau n), podem concloure que $T_n(x)$ és un polinomi de grau n en x.

b) Aplicant el canvi de variable $x = \cos(\theta)$ a la integral corresponent al producte escalar de dos polinomis T_n, T_m

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) T_m(x)\, dx &= \int_{\pi}^{0} \frac{1}{\sqrt{1-\cos^2(\theta)}} \cos(n\theta)\cos(m\theta)(-sin(\theta)\; d\theta) \\ &= \int_{0}^{\pi} \cos(n\theta)\cos(m\theta)\; d\theta = 0\end{aligned}$$

si $n \neq m$.

5. [1 punt] En els mètodes quasi-Newton *inversos* per a resoldre sistemes no lineals $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 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

$$(\mathbf{S}^k)^{-1} = \left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\mathbf{v}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] (\mathbf{S}^{k-1})^{-1} \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{v}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] + \frac{\Delta\mathbf{x}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}} \tag{5}$$

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

a) Té l'esquema (5) la propietat de *simetria hereditària* (és a dir, $(\mathbf{S}^{k-1})^{-1}$ simètrica $\Rightarrow (\mathbf{S}^k)^{-1}$ simètrica)?

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

a) Suposem que $(\mathbf{S}^{k-1})^{-1}$ és una matriu simètrica, i transposem la matriu $(\mathbf{S}^k)^{-1}$:

$$\begin{aligned}(\mathbf{S}^k)^{-T} &= \left(\left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\mathbf{v}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] (\mathbf{S}^{k-1})^{-1} \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{v}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] + \frac{\Delta\mathbf{x}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right)^T \\ &= \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{v}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right]^T (\mathbf{S}^{k-1})^{-T} \left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\mathbf{v}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right]^T + \left(\frac{\Delta\mathbf{x}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right)^T \\ &= \left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\mathbf{v}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] (\mathbf{S}^{k-1})^{-1} \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{v}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] + \frac{\Delta\mathbf{x}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}} = (\mathbf{S}^k)^{-1}\end{aligned}$$

Veiem doncs que l'esquema (5) *sí* té la propietat de simetria hereditària.

b) L'equació quasi-Newton per la matriu secant $\mathbf{S}^k$ és $\mathbf{S}^k\Delta\mathbf{x} = \Delta\mathbf{f}$ amb $\Delta\mathbf{f}^k := \mathbf{f}^k - \mathbf{f}^{k-1}$. Premultiplicant per la matriu $(\mathbf{S}^k)^{-1}$ obtenim l'equació quasi-Newton *inversa*:

$$(\mathbf{S}^k)^{-1}\Delta\mathbf{f} = \Delta\mathbf{x} \tag{6}$$

Reemplaçant l'esquema (5) en l'equació (6) obtenim

$$\begin{aligned}(\mathbf{S}^k)^{-1}\Delta\mathbf{f} &= \left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\mathbf{v}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] (\mathbf{S}^{k-1})^{-1} \left[\mathbf{I} - \frac{\mathbf{v}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] \Delta\mathbf{f} + \frac{\Delta\mathbf{x}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\Delta\mathbf{f} \\ &= \left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\mathbf{v}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\right] (\mathbf{S}^{k-1})^{-1} \left[\Delta\mathbf{f} - \frac{(\Delta\mathbf{x})^T\Delta\mathbf{f}}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\mathbf{v}\right] + \frac{(\Delta\mathbf{x})^T\Delta\mathbf{f}}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}\Delta\mathbf{x}\end{aligned} \tag{7}$$

Observem que el segon sumand de l'equació (7) és un vector $\alpha\Delta\mathbf{x}$ amb $\alpha = \frac{(\Delta\mathbf{x})^T\Delta\mathbf{f}}{(\Delta\mathbf{x})^T\mathbf{v}}$. Aquesta observació suggereix provar amb $\mathbf{v} := \Delta\mathbf{f}$. D'aquesta manera obtenim $\alpha = 1$

i aconseguim també anular el primer sumand. L'esquema d'actualització resultant és

$$(\mathbf{S}^k)^{-1} = \left[\mathbf{I} - \frac{(\Delta\mathbf{x})\Delta\mathbf{f}^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\Delta\mathbf{f}}\right](\mathbf{S}^{k-1})^{-1}\left[\mathbf{I} - \frac{\Delta\mathbf{f}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\Delta\mathbf{f}}\right] + \frac{\Delta\mathbf{x}(\Delta\mathbf{x})^T}{(\Delta\mathbf{x})^T\Delta\mathbf{f}} \tag{8}$$

Nota: L'esquema (8) correspon a l'anomenat mètode BFGS. Es pot demostrar que, a més de simetria hereditària, té la propietat de definició positiva hereditària. És un mètode quasi-Newton molt utilitzat per obtenir aproximacions secants de matrius SDP.

Cognoms: **Nom:**

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

$$p(t) = \frac{L}{1 + c\exp(r(t - t_0))} \tag{9}$$

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

Es vol emprar la llei (9) per aproximar les dades de la taula

t_i	1910	1930	1950	1970	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 (9) 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 $t_0 = 1900$. Escriu 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?

a) L'equació (9) es pot reescriure com

$$\ln\left(\frac{L}{p(t)} - 1\right) = \ln(c) + r(t - t_0).$$

Donat que L és conegut, aquesta equació es pot escriure com l'equació lineal

$$y(t) = A + r(t - t_0), \qquad \text{amb } y(t) = \ln\left(\frac{L}{p(t)} - 1\right),\ A = \ln(c).$$

Els paràmetres A i r es poden determinar ara amb un ajust lineal per mínims quadrats, mitjançant les equacions normals amb el producte escalar discret i la base $\{\psi_0(t) = 1, \psi_1(t) = t - t_0\}$:

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n}(t_i - t_0) \\ \sum_{i=1}^{n}(t_i - t_0) & \sum_{i=1}^{n}(t_i - t_0)^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} A \\ r \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n}(t_i - t_0)y_i \end{Bmatrix}$$

amb $y_i = y(t_i)$ per $i = 1, \ldots, n$. Desfent el canvi es pot calcular $c = \exp(A)$.

b) Fent servir les dades de la taula, tenim que

y_i	0.6939	0.4277	0.1255	−0.2655	−0.6507

El sistema d'equacions normals és

$$\begin{bmatrix} 5 & 250 \\ 250 & 16500 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} A \\ r \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.3309 \\ -51.1049 \end{Bmatrix}$$

que té solució

$$A = 0.9118 \qquad r = -0.0169$$

Desfent el canvi, trobem els paràmetres de l'ajust que busquem:

$$c = \exp(A) = 2.4888 \qquad r = -0.0169.$$

c) L'estimació de la població en l'any 2100 és:

$$p(2100) = \frac{L}{1 + c\exp(r(t - t_0))} = \frac{60}{1 + 2.4888\exp(-0.0169 \cdot 200)} = 55.32$$

d) Si L no és conegut, cal determinar 3 paràmetres a partir de 5 dades, i es pot fer amb el criteri de mínims quadrats. En aquest cas, però, si no coneixem el valor de L, no és possible transformar l'equació en una relació lineal i, per tant, l'ajust per mínims quadrats no es pot fer amb les equacions normals. Cal resoldre un problema de minimització no lineal que porta a un sistema d'equacions no lineal.

---

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 $I = \displaystyle\int_0^1 \exp(x^2)\mathrm{d}x$.

a) El pes que s'ha de fer servir és $w_0 = 1$ (longitud de l'interval d'integració). En general, aquesta quadratura és d'ordre 0 (integra exactament constants) excepte si el punt és $x_0 = 1/2$, que correspon a la quadratura de Gauss-Legendre i té ordre 1.

b) Per a determinar la quadratura, podem imposar que integri exactament polinomis de grau menor o igual que 2:

$$\begin{cases} 1 = w_0 + w_1 \\ \dfrac{1}{2} = w_0 x_0 + w_1 x_1 \\ \dfrac{1}{3} = w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 \end{cases}$$

Tot i que és un sistema no lineal, es pot resoldre fàcilment:

- De la primera equació tenim que $w_1 = 1 - w_0$
- Substituint a la segona i resolent per w_0 tenim $w_0 = \frac{1}{2}\frac{2x_1 - 1}{x_1 - x_0}$
- Finalment, substituim aquests valors a la tercera equació i obtenim

$$x_1 = \frac{1}{3}\frac{3x_0 - 2}{2x_0 - 1}$$

Una altra opció per a obtenir la quadratura és tenir en compte que, fent servir dos punts, l'error d'integració és

$$E = \frac{1}{6}\int_0^1 (x - x_0)(x - x_1) f''(\mu) \mathrm{d}x$$

Per a polinomis de grau 2, $f''(\mu)$ és una constant i, per tant, podem obtenir una quadratura d'ordre 2 imposant que aquest error sigui 0:

$$\int_0^1 (x - x_0)(x - x_1) \mathrm{d}x = 0, \qquad \frac{1}{3} - \frac{x_0}{2} - \frac{x_1}{2} + x_0 x_1 = 0$$

$$x_1 = \frac{1}{3}\frac{3x_0 - 2}{2x_0 - 1}$$

Un cop determinada la posició del punt x_1, els pesos d'integració es poden calcular integrant els polinomis de Lagrange:

$$w_0 = \int_0^1 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\mathrm{d}x = \frac{1 - 2x_1}{2(x_0 - x_1)} \qquad w_1 = \int_0^1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\mathrm{d}x = \frac{2x_0 - 1}{2(x_0 - x_1)}$$

La quadratura que hem obtingut és, en general, d'ordre 2 excepte si el punt x_0 coincideix amb un dels punts de Gauss-Legendre ($x_0 = \pm\frac{1}{2}\frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{1}{2}$). En aquest cas, serà d'ordre 3.

d) Si $x_0 = 0.2$, tenim que

$$x_1 = \frac{1}{3}\frac{3x_0 - 2}{2x_0 - 1} = 0.7777$$

$$w_0 = \frac{1 - 2x_1}{2(x_0 - x_1)} = 0.48077 \qquad w_1 = \frac{2x_0 - 1}{2(x_0 - x_1)} = 0.5192$$

Fent servir aquesta quadratura podem aproximar la integral

$$I \approx w_0 \exp(x_0^2) + w_1 \exp(x_1^2) = 1.4511$$
