CÀLCUL NUMÈRIC (GM) **Examen final**

(Durada: 3 hores) **12 de gener de 2017**

Cognoms: **Nom:**

---

1. [2 punts] Donats dos conjunts de punts $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^n$ i $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$, $\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^2$ se sap que el conjunt $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$ es pot aproximar a partir d'una rotació amb translació a $\mathbb{R}^2$ del punts del conjunt $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^n$. És a dir:

$$\mathbf{q}_i \;\approx\; \boldsymbol{\phi}(\mathbf{p}_i;\; \mathbf{t}, \theta) \;=\; \mathbf{t} \;+\; \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \mathbf{p}_i \;, \quad i = 1, \ldots, n \tag{1}$$

on $\theta \in [0, 2\pi]$ i $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^2$. L'objectiu d'aquest problema és calcular l'angle de la rotació θ i la translació $\mathbf{t}$.

L'arxiu `dades_examen.mat` conté els conjunts $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^n$ i $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$. Es proporcionen també les funcions `numericalDerivative.m` (gradient d'una funció $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$) i `numericalHessian.m` (matriu hessiana d'una funció $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$), que pots usar per tal de no fer derivació analítica.

a) Proposa detalladament una metodologia per calcular l'angle de la rotació θ i la translació $\mathbf{t}$ per tal d'aproximar $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$ com a $\{\boldsymbol{\phi}(\mathbf{p}_i; \mathbf{t}, \theta)\}_{i=1}^n$. Justifica la teva resposta.

b) Implementa la metodologia proposada a l'apartat *a*. Utilitza el mètode de Newton per resoldre qualsevol sistema no lineal involucrat. Pren com a translació inicial $\mathbf{t} = (0, 0)$ i angle inicial $\theta = 0$. Quantes iteracions del mètode de Newton són necessàries per obtenir 4 xifres significatives correctes? Quins són la translació i l'angle obtinguts?

a) Com que la translació no és exacta, l'enunciat es tradueix en buscar la millor aproximació mitjançant una rotació del tipus $\boldsymbol{\phi}$ de les dades $\mathbf{s}_i$ com a $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{p}_i)$. Buscarem per tant la millor aproximació sota el criteri de mínims quadrats, i.e., volem trobar $\boldsymbol{\alpha} = (\mathbf{t}, \theta)$ tal que minimitzin el funcional:

$$E(\boldsymbol{\alpha}) \equiv E(\mathbf{t}, \theta) = \sum_{i=1}^{n=151} \|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{p_i}; \mathbf{t}, \theta) - \mathbf{q_i}\|^2$$

Busquem $\boldsymbol{\alpha}_{sol} = \text{argmin}_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^3} E(\boldsymbol{\alpha})$, és a dir:

$$\nabla E(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0},$$

on ∇E és el gradient de E. Aquest es tracta d'un sistema no lineal d'equacions, el qual seguint l'enunciat, resoldrem usant el mètode de Newton, obtenint la següent funció d'iteració:

$$g(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{\alpha}) \cdot \nabla E(\boldsymbol{\alpha})$$

on $\mathbf{J}$ és la matriu Jacobiana de $\mathbf{f}$.

b) Número d'iteracions: 3
$\mathbf{t} = (-1.5714, 2.2219)$
$\theta = 0.4771$

2. [2 punts] La quadratura de Gauss-Legendre amb $n+1=3$ punts és

$$\int_{-1}^{1} f(z)\,dz = w_0 f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + w_2 f\left(\sqrt{3/5}\right) + A f^{q)}(\mu), \qquad \text{amb } \mu \in [-1,1]$$

amb valors adequats de les constants w_0, w_2, A i q.

a) Determina raonadament els pesos w_0 i w_2.

b) Quin és l'ordre de la quadratura? Determina raonadament els valors de les constants de l'error, q i A.

a) Per integrar exactament constants, la suma dels pesos ha de ser 2. D'altra banda, tenint en compte la simetria de la quadratura, els pesos han de ser simètrics i, per tant, tenim $w_0 = w_2 = w$ amb $2w + 8/9 = 2$. D'on deduïm

$$w_0 = w_1 = 5/9.$$

b) La quadratura de Gauss-Legendre de $n+1$ punts té ordre $2n+1$. En aquest cas, $n=2$ i, per tant, la quadratura és d'ordre 5 i

$$q = 6.$$

Ara, calculant l'error d'integració per a la funció $f = z^6$ tenim $f^{6)}(z) = 720$, i

$$\frac{2}{7} = \int_{-1}^{1} z\,dz = 2(5/9)(3/5)^3 + 720\,A$$

d'on podem aïllar

$$A = \frac{1}{15750} \simeq 0.6349\ 10^{-4}.$$

---

3. [3 punts] L'equació diferencial

$$E\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2} - \ell^2\frac{\mathrm{d}^4u}{\mathrm{d}x^4}\right) + b = 0 \quad , \quad 0 < x < L \tag{2}$$

amb les condicions de contorn

$$u(0) = 0 \quad , \quad u(L) = 0 \quad , \quad u''(0) = 0 \quad , \quad u''(L) = 0 \tag{3}$$

és un model unidimensional d'elasticitat no local per determinar el desplaçament $u(x)$. Són dades del problema les constants positives L (longitud del domini), ℓ (longitud característica) i E (mòdul elàstic), i la funció $b(x)$ (força per unitat de longitud).

L'objectiu d'aquest exercici és plantejar la resolució d'aquest problema de contorn amb el mètode dels elements finits (MEF).

a) Dedueix la forma feble del problema.
Indicació: l'ordre màxim de derivació a la forma feble és 2.

b) Tria raonadament una de les dues opcions següents com a funcions de forma $N_j(x)$: 1) splines lineals $\mathcal{C}^0$ o 2) splines cúbics $\mathcal{C}^1$.

c) A la vista de la forma feble obtinguda a l'apartat *a* i de les funcions de forma triades a l'apartat *b*, proposa raonadament una quadratura numèrica per al càlcul dels coeficients de la matriu del sistema lineal.

a) Multiplicant l'equació diferencial per una funció de pes v, integrant en el domini, i aplicant integració per parts una vegada al primer terme i dues vegades al segon terme, s'obté l'equació integral

$$E\left(vu'|_0^L - \int_0^L v'u'\mathrm{d}x\right) - E\ell^2\left(vu'''|_0^L - v'u''|_0^L + \int_0^L v''u''\mathrm{d}x\right) + \int_0^L vb\,\mathrm{d}x = 0$$

Tenint en compte que les funcions de pes s'anul·len als extrems (contorn de Dirichlet), $v(0) = v(L) = 0$, i les condicions de contorn $u''(0) = u''(L) = 0$, la forma feble del problema és

"Trobar u tal que $u(0) = u(L) = 0$ i

$$E\int_0^L v'u'\mathrm{d}x + E\ell^2\int_0^L v''u''\mathrm{d}x = \int_0^L vb\,\mathrm{d}x$$

per a tota v tal que $v(0) = v(L) = 0$."

b) Discretitzant la forma feble amb el MEF, s'obté un sistema lineal d'equacions $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$ amb

$$k_{ij} = E\int_0^L N_i'N_j'\mathrm{d}x + E\ell^2\int_0^L N_i''N_j''\mathrm{d}x$$

Atès que a la segona integral hi ha derivades *segones* de les funcions de forma, cal triar els splines cúbics $\mathcal{C}^1$.

c) En cada element finit, el primer integrand, $N_i'N_j'$, és un polinomi de grau 4 i el segon integrand, $N_i''N_j''$, un polinomi de grau 2. Cal treballar amb una quadratura d'ordre 4 per calcular exactament els coeficients k_{ij}. La més indicada és la quadratura de Gauss-Legendre amb $n + 1 = 3$ punts, que té ordre $2n + 1 = 5$.

4. [3 punts] Es considera el problema de contorn del problema 3 amb els valors adimensionalitzats següents,

$$E = 1, \quad \ell = 2, \quad b = 0.1, \quad L = 10,$$

i es planteja ara la seva resolució amb un métode per a resoldre EDOs. Mitjançant el mètode del tret, es calculen els valors inicials

$$u'(0) = 0.30267714, \quad u'''(0) = -0.049330715,$$

podent escriure el problema com un problema de valor inicial (PVI) de la forma

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})\ x \in (0, L), \qquad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{\alpha}.$$

a) Escriu les expressions de $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y})$ i $\boldsymbol{\alpha}$ que defineixen el PVI.

b) Calcula $u'(L)$ amb 40 passos del mètode d'Euler endavant. Explica breument com has fet els càlculs.

c) Calcula $u'(L)$ amb 10 passos del mètode de Runge-Kutta de quart ordre següent

$$Y_{i+1} = Y_i + \frac{h}{6}\left[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right]$$

amb

$$\begin{aligned} k_1 &= f(\ t_i\ ,\ Y_i\ ) \\ k_2 &= f(\ t_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ Y_i + \tfrac{h}{2}k_1\ ) \\ k_3 &= f(\ t_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ Y_i + \tfrac{h}{2}k_2\ ) \\ k_4 &= f(\ t_i + h\ ,\ Y_i + hk_3\ ) \end{aligned}$$

d) La solució analítica és $u'(L) = -0.30267714$. Calcula l'error relatiu de les aproximacions obtingudes als apartats anteriors. Fes una predicció de quants passos caldria fer amb el mètode d'Euler per tenir les mateixes xifres significatives correctes que amb 10 passos del mètode de Runge-Kutta de quart ordre.

e) Es considera ara una longitud $L = 20$. Planteja el mètode del tret per a determinar els valors inicials $u'(0) = \beta_1$, $u'''(0) = \beta_2$.

f) Calcula els valors inicials, β_1 i β_2 per al nou valor de la longitud L. Escriu el resultat amb 3 xifres significatives. Els problemes de valor inicial es poden resoldre amb el mètode de Runge-Kutta o amb la funció `ode45` de Matlab.

a) $\boldsymbol{y} = (u, u', u'', u''')^T$, $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) = (y_{(2)}, y_{(3)}, y_{(4)}, (b/E + y_{(3)})/\ell^2)^T$, $\boldsymbol{\alpha} = (0, \beta_1, 0, \beta_2)^T$

b) El mètode d'Euler és

$$\boldsymbol{Y}^{n+1} = \boldsymbol{Y}^n + h\boldsymbol{f}(x^n, \boldsymbol{Y}^n)$$

amb $\boldsymbol{Y}^0 = \boldsymbol{\alpha}$. Fent 40 passos amb aquest esquema amb pas $h = L/40$ obtenim

$$\boldsymbol{Y}^{40} = (0.0246,\ -0.3521,\ -0.0251,\ 0.0370)^T$$

i, per tant, $u'(L) \simeq \boldsymbol{Y}^{40}_{(2)} = -0.3521$.

c) Fent 10 passos del mètode de Runge-Kutta de quart ordre amb $h = L/10$ obtenim

$$\boldsymbol{Y}^{10} = (-0.0007,\ -0.3030,\ -0.0002,\ 0.0492)^T$$

i, per tant, $u'(L) \simeq \boldsymbol{Y}^{10}_{(2)} = -0.3030$.

d) Els errors són

$$r^{Euler}_{40} = |-0.3521 - u'(L)|/|u'(L)| \simeq 0.16,$$
$$r^{RK4}_{10} = |-0.3030 - u'(L)|/|u'(L)| \simeq 0.12\ 10^{-2} < 0.5\ 10^{-2}$$

Per tant, el mètode de Runge-Kutta proporciona una aproximació de $u'(L)$ amb 2 xifres significatives correctes. Assumint que l'error del mètode d'Euler es comporta com $r^{Euler}_m \simeq C/m$, on m és el número de passos, i subtituint l'error obtingut amb $m = 40$ tenim

$$r^{Euler}_m \simeq 6.4/m$$

Imposant que $r^{Euler}_{m^*} \simeq 0.5\ 10^{-2}$, obtenim $m^* = 1280$ pasos.

e) Es defineix una funció $F(\boldsymbol{\beta})$ que, donat $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2)^T$ qualsevol, resol el PVI de l'apartat *a*, per calcular $\boldsymbol{y}(L)$, i retorna el vector $\mathbf{r} = (y_{(1)}(L), y_{(3)}(L))^T$, o la seva aproximació donada per la solució del PVI amb un mètode numèric.

Un cop definida la funció $F(\boldsymbol{\beta})$ es calcula la solució del sistema no lineal 2×2 $F(\boldsymbol{\beta}) = (0, 0)^T$, per exemple, amb el mètode de Newton amb aproximació de les derivades o amb el mètode de Broyden o amb la funció `fsolve`. La solució del sistema no lineal $\boldsymbol{\beta}^*$ correspon als valors de les condicions inicials per tal que la solució del PVI de l'apartat *a* compleixi les condicions de conton a $x = L$, obtenint, per tant, la solució del problema de contorn.

f) Implementant el mètode del tret per $L = 20$ s'obtenen els valors $\beta_1^* = 0.800$, $\beta_2^* = -0.0500$.