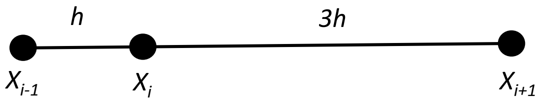
CÀLCUL NUMÈRIC (GM) **Examen final**

Durada: 3 hores **14 de gener de 2016** **Grau en Matemàtiques (FME)**

Cognoms: **Nom:**

---

1. [1 punt] La figura mostra una discretització amb tres nodes *no* equiespaiats.



L'objectiu d'aquest problema és obtenir una aproximació *de segon ordre* a la primera derivada, del tipus

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}(x_i) = \frac{a y_{i+1} + b y_i + c y_{i-1}}{d} + \mathcal{O}(h^2) \tag{1}$$

a) Dedueix el valor de les constants a, b, c i d.

b) Utilitza la fórmula de derivació numèrica (1), amb les constants obtingudes a l'apartat anterior, per aproximar la derivada de la funció $y(x) = x^5$ en el punt $x = 1$ amb quatre valors de la distància h: $h = 10^{-1}$, $h = 10^{-2}$, $h = 10^{-3}$ i $h = 10^{-4}$. Té el mètode el comportament esperat? Raona la teva resposta.

a) La idea és adaptar la deducció de l'aproximació centrada al fet que els punts no són equiespaiats. Fent dos desenvolupaments en sèrie de Taylor obtenim

$$y_{i+1} = y_i + 3h\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}(x_i) + \frac{1}{2}(3h)^2\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2}(x_i) + \mathcal{O}(h^3)$$
$$y_{i-1} = y_i - h\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}(x_i) + \frac{1}{2}h^2\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2}(x_i) + \mathcal{O}(h^3)$$

Per cancel·lar el terme en derivada segona, restem la segona equació multiplicada per 9 a la primera equació

$$y_{i+1} - 9y_{i-1} = -8y_i + 12h\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}(x_i) + \mathcal{O}(h^3)$$

i aïllem la primera derivada:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}(x_i) = \frac{y_{i+1} + 8y_i - 9y_{i-1}}{12h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Així doncs, les constants són $a = 1$, $b = 8$, $c = -9$ i $d = 12h$.

b) La taula 1 mostra la derivada numèrica de $y(x) = x^5$ en el punt $x = 1$ i l'error respecte de la derivada analítica $y'(1) = 5$ pels quatre valors de h indicats.

Taula 1: Aproximació de segon ordre a la primera derivada

Distància h	$(y_{i+1} + 8y_i - 9y_{i-1})/12h$	Error
10^{-1}	5.33210	$3.3210 \cdot 10^{-1}$
10^{-2}	5.0030302	$3.0302 \cdot 10^{-3}$
10^{-3}	5.000030030	$3.0030 \cdot 10^{-5}$
10^{-4}	5.00000030003	$3.0003 \cdot 10^{-7}$

El mètode té la convergència quadràtica esperada: al dividir la distància h per 10, l'error en l'aproximació numèrica a la derivada es divideix per 100.

---

2. [3 punts] El sistema d'equacions diferencials

$$\left.\begin{aligned} u'' &= 2w - 3u \\ w'' &= 3u - 2w \end{aligned}\right\} \quad , \quad 0 < x < 1$$

amb les condicions de contorn

$$u(0) = 1 \quad , \quad w(0) = 0 \quad , \quad u'(1) = 0 \quad , \quad w'(1) = 0$$

modelitza la difusió i reacció de dues espècies contaminants, representades per les concentracions $u(x)$ i $w(x)$.

L'objectiu d'aquest exercici és plantejar la resolució d'aquest problema de contorn amb dues tècniques numèriques diferents: el mètode dels elements finits (MEF) i el mètode d'Euler endavant.

<u>Mètode dels elements finits</u>

a) Dedueix la forma feble del problema.
Indicació: la forma feble és un sistema de *dues* equacions integrals acoblades.

b) Discretitza la forma feble utilitzant les aproximacions d'elements finits

$$u(x) \approx u^h(x) = \sum_{j=0}^{n} u_j N_j(x), \qquad w(x) \approx w^h(x) = \sum_{j=0}^{n} w_j N_j(x).$$

Indica clarament l'expressió de la matriu $\mathbf{A}$ i els vectors $\mathbf{c}$ i $\mathbf{f}$ del sistema d'equacions $\mathbf{Ac} = \mathbf{f}$ resultant. Quina és la dimensió d'aquest sistema?

<u>Mètode d'Euler endavant</u>

c) Planteja detalladament com resoldre el problema de contorn amb el mètode d'Euler endavant, fent èmfasi en *i)* la transformació a un problema de primer ordre i *ii)* el tractament de les condicions de contorn.

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

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x - v(1)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(1) + v(0)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(0) + 2\int_0^1 vw\mathrm{d}x - 3\int_0^1 vu\mathrm{d}x = 0$$

Fent el mateix per la segona equació diferencial, s'obté

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x - v(1)\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}x}(1) + v(0)\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}x}(0) + 3\int_0^1 vu\mathrm{d}x - 2\int_0^1 vw\mathrm{d}x = 0$$

Tenint en compte que les funcions de pes s'anul·len al contorn de Dirichlet, és a dir $v(0) = 0$, i que $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x(1) = \mathrm{d}w/\mathrm{d}x(1) = 0$, la forma feble del problema és

"Trobar u i w tals que $u(0) = 1$, $w(0) = 0$ i

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + 2\int_0^1 vw\mathrm{d}x - 3\int_0^1 vu\mathrm{d}x = 0\\
\int_0^1 \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + 3\int_0^1 vu\mathrm{d}x - 2\int_0^1 vw\mathrm{d}x = 0
\end{aligned}$$

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

b) Substituint $v = N_i$ per $i = 1, \ldots, n$ (la funció de forma N_0 no ha de ser funció de test) i les aproximacions

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

(on s'ha tingut en compte que $u(0) = 1$ i $w(0) = 0$) a la forma feble, s'obté el sistema lineal d'equacions de dimensió $2n$

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

amb

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} - 3\mathbf{M} & 2\mathbf{M} \\ 3\mathbf{M} & \mathbf{K} - 2\mathbf{M} \end{bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{c} = \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{w} \end{Bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{f} = \begin{Bmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{Bmatrix}$$

on $\mathbf{K}, \mathbf{M} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ amb coeficients

$$k_{ij} = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}N_j}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x \quad ; \quad m_{ij} = \int_0^1 N_i N_j \mathrm{d}x \qquad i, j = 1, \ldots, n$$

i $\mathbf{u}, \mathbf{w}, \mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ definits com

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= (u_1, u_2, \ldots, u_n)^T \quad ; \quad & \mathbf{w} &= (w_1, w_2, \ldots, w_n)^T \\
\mathbf{p} &= (p_1, 0, \ldots, 0)^T \quad ; \quad & \mathbf{q} &= (q_1, 0, \ldots, 0)^T
\end{aligned}$$

amb

$$p_1 = -\int_0^1 \frac{\mathrm{d}N_1}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}N_0}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + 3\int_0^1 N_1 N_0 \mathrm{d}x \quad ; \quad q_1 = -3\int_0^1 N_1 N_0 \mathrm{d}x$$

c) El sistema de dues equacions diferencials de segon ordre es pot transformar en el sistema de quatre equacions diferencials de primer ordre

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{y}}{\mathrm{d}x} = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \quad , \quad 0 < x < 1$$

amb

$$\mathbf{y} = \begin{Bmatrix} y_{(1)} \\ y_{(2)} \\ y_{(3)} \\ y_{(4)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} u \\ u' \\ w \\ w' \end{Bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) = \begin{Bmatrix} y_{(2)} \\ 2y_{(3)} - 3y_{(1)} \\ y_{(4)} \\ 3y_{(1)} - 2y_{(3)}) \end{Bmatrix}$$

i les condicions de contorn

$$y_{(1)}(0) = 1 \quad , \quad y_{(2)}(1) = 0 \quad , \quad y_{(3)}(0) = 0 \quad , \quad y_{(4)}(1) = 0$$

Per resoldre el problema de contorn s'utilitza el mètode del tret. Les condicions de contorn es reemplacen per les condicions inicials

$$y_{(1)}(0) = 1 \quad , \quad y_{(2)}(0) = \alpha \quad , \quad y_{(3)}(0) = 0 \quad , \quad y_{(4)}(0) = \beta$$

Els paràmetres α i β es determinen resolent el sistema d'equacions $\mathbf{g}(\alpha, \beta) = \mathbf{0}$ amb

$$\begin{aligned} g_1(\alpha, \beta) &= y_{(2)}(x = 1; \alpha, \beta) \\ g_2(\alpha, \beta) &= y_{(4)}(x = 1; \alpha, \beta) \end{aligned}$$

En cada iteració del mètode del tret, el problema de valor inicial es resol amb el mètode d'Euler endavant

$$\begin{aligned} &\mathbf{Y}_0 = (1, \alpha^k, 0, \beta^k)^T \\ &\mathbf{Y}_{i+1} = \mathbf{Y}_i + h\mathbf{f}(x_i, \mathbf{Y}_i) \quad i = 0, \ldots, m-1 \end{aligned}$$

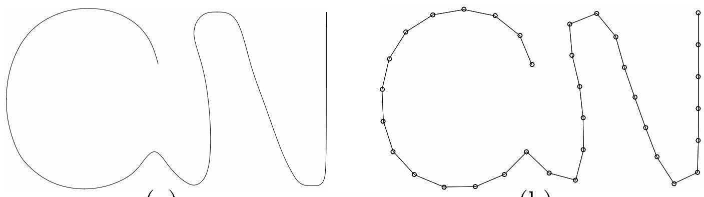
on s'ha suposat una discretització uniforme amb $m+1$ punts $x_0 = 0, x_1, \ldots, x_m = 1$ equiespaiats (pas $h = 1/m$).

---

3. [3 punts] En diversos camps (visualització gràfica, simulació -MEF-...), donada una corba $\gamma : [a, b] \to \mathbb{R}^n$ diferenciable i regular, és necessari trobar una distribució equiespaiada de punts sobre la corba. Per a fer-ho, s'usa el paràmetre arc,

$$s(t) = \int_a^t \|\gamma'(\xi)\| \, \mathrm{d}\xi$$

per trobar la parametrització natural (amb velocitat unitària) de la corba $\tilde{\gamma}(s) = \gamma(t(s))$, on $t(s)$ és la inversa de $s(t)$. D'aquesta forma es pot obtenir la distribució desitjada sobre la corba, definint-la prèviament a $[s(a), s(b)]$ i usant $\tilde{\gamma}$, veure exemple 2D a la figura 1.

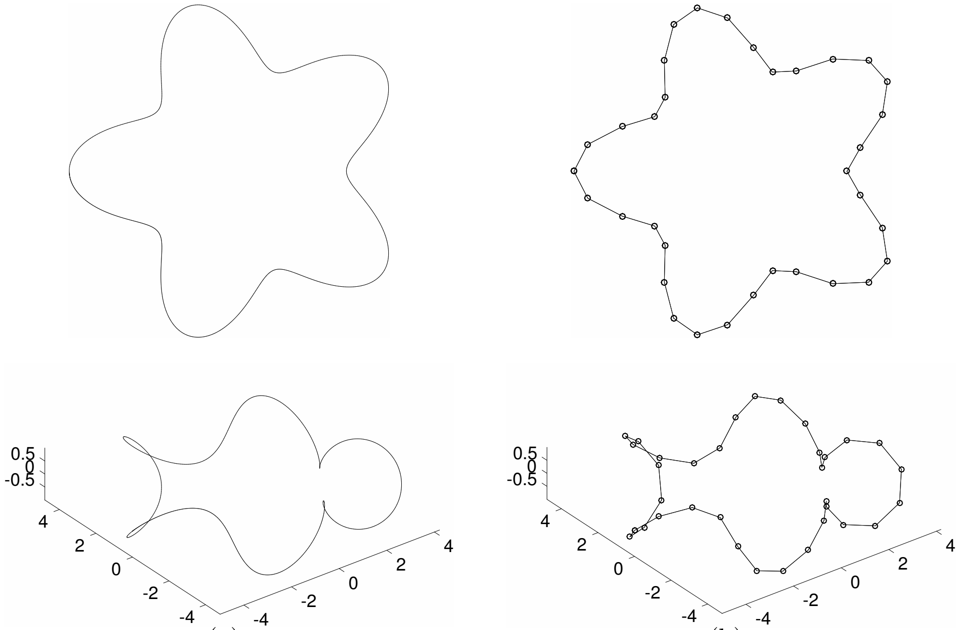


(a) (b)

Figura 1: (a) Corba al pla amb les sigles de l'assignatura. (b) Punts equiespaiats sobre la corba calculats usant el paràmetre arc.

Donada la corba a l'arxiu `corba.mat`, il·lustrada a la Figura 2(a), es demana:

a) Implementa una funció que, donat un valor de t, calculi $s(t)$ usant una quadratura composta de Simpson amb m intervals. Determina m per a que $s(b)$ tingui 4 xifres significatives correctes i escriu el valor obtingut de $s(b)$. Comenta com has obtingut aquest valor de m.
Indicació: executa `load corba` per carregar la funció `gamma` i la seva primera derivada `dgamma`, i els extrems a i b que defineixen el seu espai paramètric.



(a) (b)

Figura 2: (a) Corba sobre un torus proporcionada al fitxer `corba.mat`. (b) Punts equiespaiats sobre la corba calculats usant el paràmetre arc.

A partir d'aquest punt, usarem una quadratura de Simpson composta amb $m = 100$ intervals.

b) Proposa un mètode per a calcular l'antimatge $t \in [a, b]$ corresponent a un valor donat de $s \in [s(a), s(b)]$. Explica el mètode numèric considerat per resoldre el problema i justifica raonadament la teva tria.

c) Implementa en una rutina el mètode proposat a l'apartat *b)*. Escriu el valor de $s = (s(a) + s(b))/2$ i de l'antimatge t corresponent amb 4 xifres significatives.
Indicació: Per tal de simplificar el càlcul de les derivades, si és necessari, la funció `numericalDerivative.m` calcula la derivada numèrica d'una funció en un punt donat.

d) Usa la rutina anterior per calcular una distribució equiespaiada de 35 punts sobre la corba. Escriu com a resultat les coordenades paramètriques t_i i les corresponents coordenades físiques $p_i = (x_i, y_i, z_i)$ dels 3 primers punts, usant 4 xifres significatives. Per a comprovar visualment la implementació pots, per exemple, dibuixar els punts sobre la corba i veure si estan equiespaiats.

a) Volem trobar m tal que:

$$E_m = \frac{I_m - I}{I} \leq 0.5 \cdot 10^{-q}$$

Com que no podem calcular el valor exacte de I l'aproximarem. La primera opció és usar per una certa m un valor de referència de la integral calculat amb $k \cdot m$ intervals. Tenint en compte que la convergència és quàrtica en m, escollint $k > 1$ obtindrem correctament el nombre de xifres significatives desitjades. Escollint $k = 2$ i iterant sobre m fins a assolir la desigualtat, obtenim que amb $m = 16$ intervals s'obtenen 4 xifres significatives correctes. La segona opció per la que es pot optar és calcular la integral amb molta precisió, fent servir per exemple la funció `integral` de matlab on podem triar la tolerància desitjada (o bé usar un nombre d'intervals molt elevat usant la mateixa regla de Simpson composta), i usar aquest valor de referència per aproximar I i trobar la m adequada. Usant aquesta altra opció, s'obté també $m = 16$.

Alternativament, acceptant l'aproximació $C_m = \frac{(b-a)^5}{2880} f^{4)}(\mu_m) \approx C$, podem calcular l'error amb un cert nombre de subintervals M i dividir per l'error desitjat per tal d'eliminar el terme de l'error que s'aproxima com a constant:

$$\frac{E_M}{E_m} \approx \frac{C/M^4}{C/m^4} = \frac{m^4}{M^4}$$

El terme constant de l'error ho és només assimptòticament (C_m tendeix a C quan $m \to \infty$ si $f^{4)}$ és fitada). A causa de la mala parametrització de la corba l'aproximació de $C_M, C_m \approx C$ és molt grollera i els valors obtinguts de m poden oscil·lar entre 5 i 36 depenent del valor de M escollit.

Usant 16 intervals, el valor obtingut de $s(b)$ és 40.3822.

b) Donat un $s_i \in [s(a), s(b)]$ l'antimatge d'aquest punt es pot calcular com la t_i solució de la igualtat $s(t_i) = s_i$, que podem reescriure com el zero de la funció $f_i(t) = s(t) - s_i$. Per resoldre el zero de f podem aplicar el mètode de la bisecció o la secant si volem evitar l'ús de derivades, o alternativament, aplicar el mètode de Newton calculant la derivada analítica o usant `numericalDerivative.m` per calcular la derivada numèrica. També podem usar la funció `fzero` de `Matlab`, que usa el mètode de Brent, si s'indica adequadament i s'especifica una tolerància desitjada.

c) $s = (s(a) + s(b))/2 = 20.1911$ i la seva antimatge és $t = 0.7071$.

d) Les coordenades paramètriques dels 3 primers punts són 0, 0.1644 i 0.2363. Les corresponents coordenades físiques són:

	x	y	z
p_1	-5.0000	-0.0000	0
p_2	-4.5932	-0.7881	0.7510
p_3	-3.5858	-1.3118	0.9833

---

4. [3 punts] Es vol aproximar una funció $f(x)$ per un polinomi $p(x)$ imposant que coincideixin el valor de les funcions i de les seves derivades a $n + 1$ punts donats $\{x_i\}_{i=0}^n$.

a) Quin ha de ser el grau del polinomi aproximant per a que quedi determinat de forma única quan s'imposen les condicions d'igualtat de la funció i de la derivada als $n+1$ punts?

Considerem una base, $\{P_k\}_{k=0}^n \cup \{Q_k\}_{k=0}^n$, de l'espai de polinomis, en la que l'interpolant s'escriu com

$$f(x) \simeq p(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) P_k(x) + \sum_{k=0}^{n} f'(x_k) Q_k(x) \tag{2}$$

b) Escriu les condicions que compleixen els polinomis de la base, $\{P_k\}_{k=0}^n \cup \{Q_k\}_{k=0}^n$, als punts $\{x_i\}_{i=0}^n$ i que els determinen de forma única.

La fórmula d'aproximació (2) es fa servir ara per a definir una quadratura numèrica de la forma

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \simeq \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(x_k) + \sum_{k=0}^{n} \tau_k f'(x_k), \tag{3}$$

que aproxima la integral d'una funció f a partir del valor de la funció i de la derivada als $n + 1$ punts.

c) Escriu l'expressió dels pesos d'integració, $\{\omega_k\}_{k=0}^n$ i $\{\tau_k\}_{k=0}^n$, en funció de la base de polinomis.

d) Quin és l'ordre de la quadratura? Justifica la teva resposta.

Es vol deduir ara una quadratura, triant els $n+1$ punts de manera adequada, per tal que només es facin servir el valors de la funció i no les derivades. Es volen determinar, per tant, els punts $\{x_i\}_{i=0}^n$ que compleixen

$$\tau_k(x_0, \ldots, x_n) = 0 \quad k = 0, \ldots, n. \tag{4}$$

Es pot demostrar que el sistema (4) té solució.

e) Quina és la solució per a $n = 4$? Justifica la teva resposta.

a) Amb $2(n+1)$ condicions podem determinar de manera única $2(n+1)$ coeficients. És a dir, podem determinar de forma única un polinomi de grau $2n+1$.

b) Imposant

$$f(x_i) = p(x_i) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) P_k(x_i) + \sum_{k=0}^{n} f'(x_k) Q_k(x_i) \quad \forall f$$

deduïm $P_k(x_i) = \delta_{ik}$ i $Q_k(x_i) = 0$. Imposant

$$f'(x_i) = p'(x_i) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) P_k'(x_i) + \sum_{k=0}^{n} f'(x_k) Q_k'(x_i) \quad \forall f$$

deduïm $P_k'(x_i) = 0$ i $Q_k'(x_i) = \delta_{ik}$. Per tant, les condicions són

$$P_k(x_i) = \delta_{ik}, \quad P_k'(x_i) = 0, \quad (i, k = 0, \ldots, n),$$

$$Q_k(x_i) = 0, \quad Q_k'(x_i) = \delta_{ik}, \quad (i, k = 0, \ldots, n).$$

c) Integrant l'equació (2), s'obté l'equació (3) amb

$$\omega_k = \int_{-1}^{1} P_k(x)\, dx, \quad \tau_k = \int_{-1}^{1} Q_k(x)\, dx.$$

d) L'aproximant coincideix amb la funció, $p(x) = f(x)$, si $f(x)$ és un polinomi de grau menor o igual a $2n+1$. Per tant, la quadratura donarà el valor exacte de la integral si $f(x)$ és un polinomi de grau menor o igual a $2n+1$. És a dir, la cuadratura és, com a mínim, d'ordre $2n+1$.

e) L'única quadratura d'ordre $2n+1$ amb $n+1$ valors de la funció és la quadratura de Gauss-Legendre. Per tant, la quadratura (3) amb $\tau_i = 0$, i ordre $2n+1$, ha de ser la que té punts d'integració iguals als punts de Gauss. Així la solució del sistema per a $n = 4$, $\{x_i\}_{i=0}^4$, són les coordenades dels punts d'integració de la quadratura de Gauss-Legendre amb 5 punts.