CÀLCUL NUMÈRIC (GM) **Examen parcial**

(Durada: 3 hores) **7 de novembre de 2016**

Cognoms: **Nom:**

---

1. [1 punt] Una certa funció f té dues arrels reals diferents, α_1 i α_2, de multiplicitats m_1 i m_2. Les gràfiques de la figura 1 mostren la convergència del mètode de Newton a cadascuna de les dues arrels.

Determina raonadament les multiplicitats m_1 de l'arrel α_1 i m_2 de l'arrel α_2.

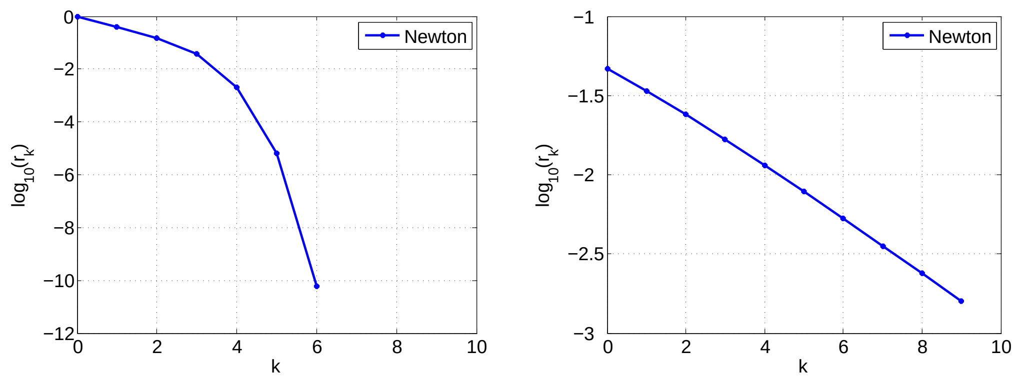

Figura 1: Convergència del mètode de Newton: arrel α_1 (esquerra); arrel α_2 (dreta)

Hem vist a classe que el mètode de Newton té convergència quadràtica per arrels simples (multiplicitat $m = 1$) i convergència lineal per arrels múltiples ($m > 1$).

La gràfica de l'esquerra mostra una convergència quadràtica molt clara: la precisió es dobla (aproximadament) en cadascuna de les darreres iteracions. Per tant, la multiplicitat de l'arrel α_1 és $m_1 = 1$ *(arrel simple)*.

La convergència lineal a la gràfica de la dreta també és molt clara: α_2 és una arrel múltiple. Sabem, a més, que *i)* el factor asímptotic de convergència és $\lambda = 1-(1/m)$ i *ii)* el pendent de la recta és $\log_{10}\lambda$. A partir de la figura, podem estimar el pendent de la recta, que és aproximadament $-1/6$. Això ens permet concloure que $m_2 = 3$ *(arrel triple)*.

---

2. [2 punts] Es vol aproximar la funció $f = \cos(2\pi x)\sin(\pi x)$ en $[-1, 1]$ per un polinomi de grau $m = 6$ fent servir un criteri de mínims quadrats amb producte escalar continu.

a) Calcula el polinomi amb la base de polinomis ortogonals de Legendre, amb el producte escalar

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

Escriu aquí els coeficients del polinomi en la base de Legendre.

Indicació: Per fer els apartats *a)* i *b)* es poden emprar les funcions `integral`, `legendreP` i `chebyshevT` de Matlab.

b) Calcula el polinomi amb la base de polinomis ortogonals de Txebixov, amb el producte escalar en que és ortogonal

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

Escriu aquí els coeficients del polinomi en la base de Txebixov.

c) Es considera també l'ajust per mínims quadrats amb la base natural, $\{1, x, x^2, \dots, x^m\}$, i el producte escalar (1). Coincideixen alguns dels 3 polinomis aproximants? Justifica per què coincideixen o no.

d) En el cas que dos polinomis coincideixin, quin mètode de càlcul recomenaries i per què?

a) Els coeficients en la base de polinomis de Legendre són

$$\mathbf{l}^T = [0 \; -0.31831 \; 0 \; 0.88777 \; 0 \; -0.14601 \; 0].$$

b) Els coeficients en la base de polinomis de Txebixov són

$$\mathbf{c}^T = [0 \; -0.10789 \; 0 \; 0.41736 \; 0 \; -0.19923 \; 0].$$

c) Si fem un ajust amb la base natural i el producte escalar (1) obtindrem el mateix polinomi que a l'apartat *b)*. En efecte, estarem minimitzant l'error amb el mateix producte escalar i en el mateix espai i, per tant, el resultat ha de ser el mateix independentment de la base. El polinomi de l'apartat *a)*, en canvi, correspon a minimitzar l'error amb un producte escalar diferent i, per tant, el resultat és en general diferent.

d) Per al càlcul de l'ajust per mínims quadrats amb el producte escalar (1) és més convenient fer servir la base ortogonal de Txebixov. És més eficient computacionalment, principalment per què no cal resoldre un sistema lineal d'equacions amb matriu plena. El més important, però, és notar que amb la base natural la matriu és mal condicionada i, per tant, convé evitar resoldre el sistema lineal corresponent.

3. [3 punts] Donats els valors de la funció f en $n+1$ punts $\{x_i\}_{i=0}^n$, es considera la interpolació amb un spline **cúbic** $S \in \mathcal{C}^2([x_0, x_n])$ amb derivada nula als extrems, és a dir, $S'(x_0) = S'(x_n) = 0$.

a) Demostra que l'spline S considerat és el més suau possible entre totes les funcions $\mathcal{C}^2$ amb derivada nula als extrems. És a dir, demostra que

$$I(S) \leq I(g) \quad \forall g \in \mathcal{S}$$

amb la funció de rugositat

$$I(u) = \int_{x_0}^{x_n} \left(u''(x)\right)^2\, dx.$$

i l'espai

$$\mathcal{S} = \{u \in \mathcal{C}^2([x_0, x_n]) \mid u'(x_0) = u'(x_n) = 0,\; u(x_i) = f(x_i)\; i = 0, \dots, n\}$$

El més probable és que l'spline considerat S no sigui l'spline natural.

b) Quines condicions compleix l'spline natural? És a dir, què s'entén per spline natural?

c) Quin spline serà més suau si no coincideixen? S o l'spline natural? Justifica o demostra la teva resposta.

a) Considerem $g \in \mathcal{S}$. Reproduint el començament de la demostració de la suavitat de l'spline $\mathcal{C}^2$ natural (vist a classe), fent servir que S''' és constant a cada interval i que $S(x_i) = g(x_i)$ per $i = 0, \ldots, n$, tenim

$$I(g) - I(S) = \int_{x_0}^{x_n} (g'' - S'')^2 \, dx + 2S''(g' - S')]_{x_0}^{x_n} .$$

Ara, com que $g'(x_0) = g'(x_n) = S'(x_0) = S'(x_n) = 0$ tenim

$$I(g) - I(S) = \int_{x_0}^{x_n} (g'' - S'')^2 \, dx \geq 0,$$

per ser la integral d'un quadrat. Per tant, $I(g) \geq I(S)$ $\forall g \in \mathcal{S}$, tal i com volíem demostrar.

b) L'spline natural és l'spline cúbic $\mathcal{C}^2$ amb curvatura zero als extrems. Per tant, l'spline natural és $N(x)$ tal que

$$N(x) = N_i(x) \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \quad i = 0, \ldots, n-1$$

amb $N_i(x)$ polinomi de grau 3 a cada interval $[x_i, x_{i+1}]$ i

$$N_{i-1}(x_i) = N_i(x_i), \quad N'_{i-1}(x_i) = N'_i(x_i), \quad N''_{i-1}(x_i) = N''_i(x_i),$$

per $i = 1, \ldots, n-1$, i

$$N''_0(x_0) = N''_{n-1}(x_n) = 0.$$

En aquest problema es suposa a més que $N(x_i) = f(x_i)$ per $i = 0, \ldots, n$. Les condicions són les mateixes que per l'spline S excepte $N''(x_0) = N''(x_n) = 0$, enlloc de $S'(x_0) = S'(x_n) = 0$.

c) Tenim

$$S = \arg\min_{g \in \mathcal{S}} I(g)$$

i a classe s'ha demostrat que l'Spline natural N verifica

$$N = \arg\min_{g \in \mathcal{N}} I(g)$$

amb $\mathcal{N} = \{u \in \mathcal{C}^2([x_0, x_n]) \mid u(x_i) = f(x_i) \quad i = 0, \ldots, n\}$. Donat que $\mathcal{S} \subset \mathcal{N}$ ($\mathcal{N}$ imposa menys condicions a les funcions), tenim que el mínim a $\mathcal{N}$ serà menor que al subespai $\mathcal{S}$ i, per tant, $I(N) \leq I(S)$. És a dir, l'Spline natural N és més suau que l'spline S.

---

4. [4 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 $\{\mathbf{q}_i\}_{i=1}^n$ és obtingut a partir d'una rotació amb translació a $\mathbb{R}^2$ del punts del conjunt $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^n$. És a dir:

$$\mathbf{q}_i = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{p}_i;\ \mathbf{t}, \theta) = \mathbf{t} + \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \mathbf{p}_i \ , \quad i = 1, \ldots, n \tag{2}$$

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 $\mathbf{t}$.

a) Proposa una estratègia per determinar θ i $\mathbf{t}$ basada en imposar $\|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{p}_i;\mathbf{t},\theta)-\mathbf{q}_i\| = 0$ en uns quants punts. Determina raonadament el nombre de punts, m, on cal imposar l'equació i el sistema d'equacions que s'obté. Planteja la resolució del sistema mitjançant el mètode de Newton.

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

b) Implementa la metodologia proposada a l'apartat *a)*. 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?
Es recomana dibuixar els dos conjunts de punts per comprovar visualment la solució.

c) Com es comporta el mètode de Newton? Té la convergència esperada?

Considerem ara un tercer núvol de punts $\{\mathbf{s}_i\}_{i=1}^n$, que se sap que es pot *aproximar* a partir d'una rotació amb translació del conjunt $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^n$.

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

e) Implementa la metodologia proposada a l'apartat *d)*. 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) Tenim 3 paràmetres a determinar, i 151 possibles equacions per determinar-los. Com que sabem que la rotació és exactament la mateixa per tots els punts, és suficient construir una funció $\mathbf{f}:\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ per $d=3$, on els zeros de la funció siguin la translació i rotació de ϕ. Les components d'aquesta funció són $f_i(\mathbf{t},\theta) = \|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_{\mathbf{j_i}};\mathbf{t},\theta)-\mathbf{y}_{\mathbf{j_i}}\|$, per qualssevol $j_1, j_2, j_3 \in (1,151)$ (amb $j_1 \neq j_2 \neq j_3$). Resoldrem per tant un problema de zeros d'una funció:

$$\begin{array}{rccc} \mathbf{f}: & \mathbb{R}^3 & \longrightarrow & \mathbb{R}^3 \\ & \boldsymbol{\alpha}=(\mathbf{t},\theta)^T & \longrightarrow & \begin{pmatrix} \|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_{\mathbf{j_1}};\mathbf{t},\theta)-\mathbf{y}_{\mathbf{j_1}}\| \\ \|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_{\mathbf{j_2}};\mathbf{t},\theta)-\mathbf{y}_{\mathbf{j_2}}\| \\ \|\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_{\mathbf{j_3}};\mathbf{t},\theta)-\mathbf{y}_{\mathbf{j_3}}\| \end{pmatrix} \end{array}$$

Mitjançant el mètode de Newton iterarem mitjançant la funció:

$$g(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha} - \mathbf{J}^{-1}(\boldsymbol{\alpha})\cdot\mathbf{f}(\boldsymbol{\alpha})$$

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

b) Número d'iteracions: 4
$\mathbf{t} = (120.5006, 91.2500)$
$\theta = 1.5708$

c) Es comporta de la forma esperada, convergint quadràticament. En el cas que s'hagin elevat al quadrat les components de $\mathbf{f}$ la convergència és lineal (el zero té multiplicitat 2).

d) 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:

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

Busquem $\boldsymbol{\alpha}_{sol} = \mathrm{argmin}_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^3} E(\boldsymbol{\alpha})$, 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 $\mathbf{f}$.

e) Número d'iteracions: 4
$\mathbf{t} = (-100.8438, 4.8952)$
$\theta = 1.0479$