

Càlcul numèric - Treball pràctic 1

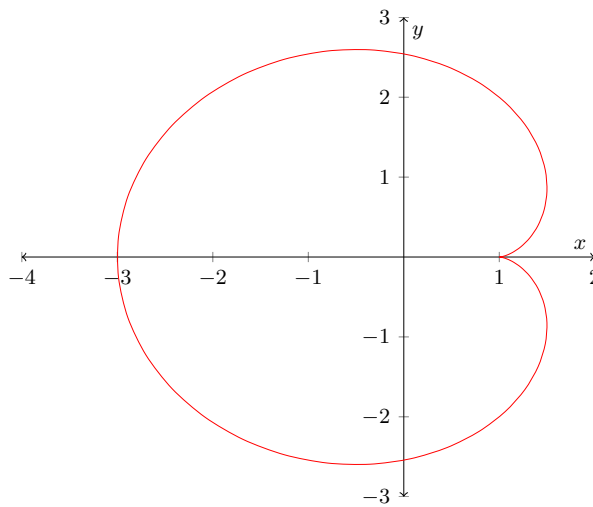
Victor Ruiz, Louis Clergue

October 27, 2016

1 La corba *cardioide*

Agafant la següent parametrització

$$x(t) = 2 \cos(t) - \cos(2t), \quad y(t) = 2 \sin(t) - \sin(2t) \text{ amb } t \in [0, 2\pi]$$



Per trobar la projecció d'un punt $P = (x_0, y_0)$ sobre la corba, és a dir obtenir un punt $Q = (x(\tau), y(\tau))$, imposarem l'ortogonalitat de \overline{PQ} respecte al vector tangent de la corba $(\dot{x}(t), \dot{y}(t))$.

Determinarem τ buscant un zero de:

$$f(t) = (x(t) - x_0)\dot{x}(t) + (y(t) - y_0)\dot{y}(t)$$

- a) Primera i segona derivades de la parametrització. Derivada de $f(t)$ segons la parametrització.

$$\dot{x}(t) = 2 \sin(2t) - 2 \sin(t)$$

$$\dot{y}(t) = 2 \cos(t) - 2 \cos(2t)$$

$$\ddot{x}(t) = 4 \cos(2t) - 2 \cos(t)$$

$$\ddot{y}(t) = 4 \sin(2t) - 2 \sin(t)$$

$$\dot{f}(t) = \dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2 + (x(t) - x_0)\ddot{x}(t) + (y(t) - y_0)\ddot{y}(t)$$

- b) Càlcul de 4 iteracions del mètode de Whitaker per la projecció de $P_1 = (2.134141, 0.864141)$ agafant d'aproximacions inicials $t_0 = 2$ i $m = 7 \approx f'(t_0)$

IT1 > sol = 0.782926 r = 1.554520e+00

IT2 > sol = 0.934842 r = 1.625040e-01

IT3 > sol = 1.016498 r = 8.033091e-02

IT4 > sol = 1.040933 r = 2.347414e-02

Solution 1.0409326818572713

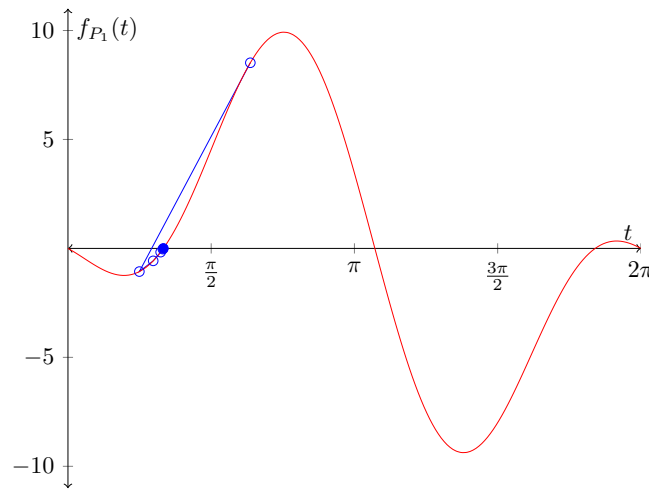
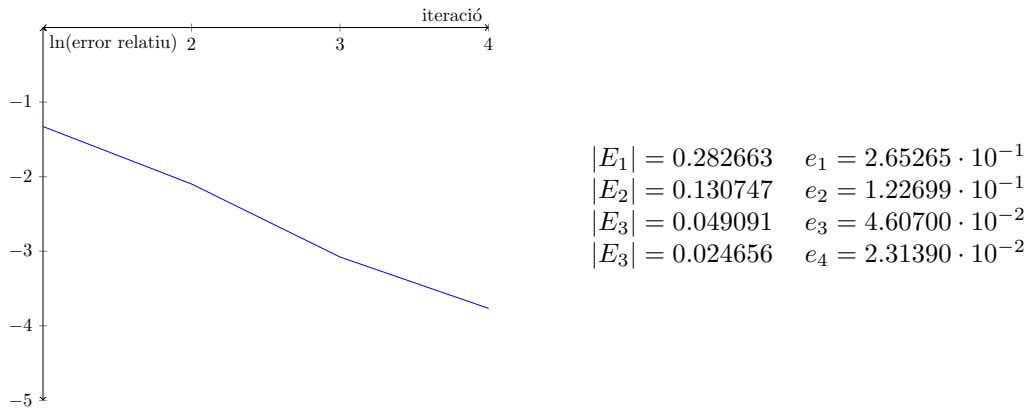


Figure 1: Representació de f per P_1 i les solucions x^k

- c) Considerant que la projecció de P_1 li correspon $\tau_1 = 1.04655892$, determinació del factor asimptòtic de convergència del mètode i càlcul de l'error en les aproximacions anteriors.

Representem els errors absoluts i relatius per visualitzar la convergència:



Podem observar, més clar en els errors relatius, la convergència lineal en les nostres 4 primeres iteracions. Correspon a la convergència esperada per una execució del mètode de Whittaker en el que hem usat una m prou bona.

- d) Valoració del mètode de Whittaker per calcular zeros de funcions sense emprar derivades.

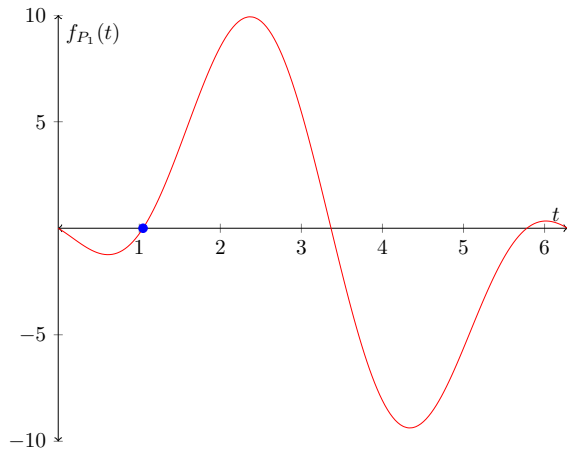
El mètode de Whittaker té l'únic avantatge de ser molt senzill d'implementar i de tenir requisits mínims (només evaluar f) però no és gens robust en quan a convergència. Si trobem un valor de m prou proper a la derivada tindrem un comportament similar a Newton però això necessita que la derivada sigui pràcticament constant ja que no modifiquem el valor de m al llarg de l'algorisme. Com podem veure en la Figura 1 la solució i l'aproximació inicial es troben en un tram on f' és quasi lineal i per tant $f'(t^0)$ és una bona aproximació de la derivada el que ens permet convergir prou ràpidament, però això en general no passa. Si no volem computar derivades el mètode de la secant és molt millor que el de Whittaker i no gaire més complicat.

- e) Identificació de P_1 i P_2 a partir d'errors absoluts en el mètode de Newton. Comportament esperat del mètode segons les dades.

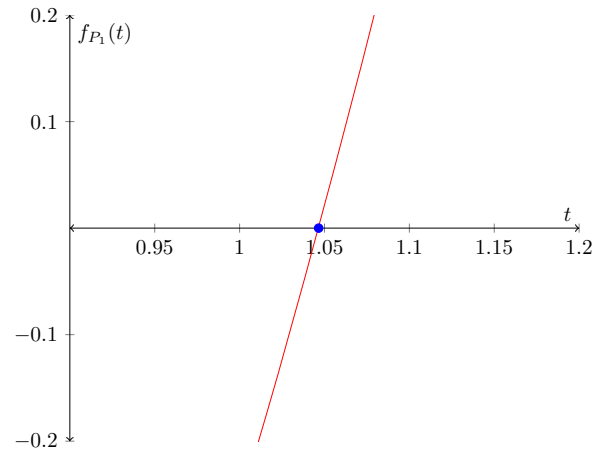
Podem calcular $|E^0|$ per un dels dos punts al tenir totes les dades neceseràries, per exemple per P_1 :

$$|E^0| = |t^0 - \tau| = |2 - 1.04655891| = 9.53441 \cdot 10^{-1}$$

Podem deduir que el punt A és el punt P_1 . El mètode de Newton té comportament esperat en els dos casos: pel punt P_1 convergeix quadràticament al tractar-se d'una arrel simple i pel punt P_2 linealment degut a la duplictat de l'arrel.

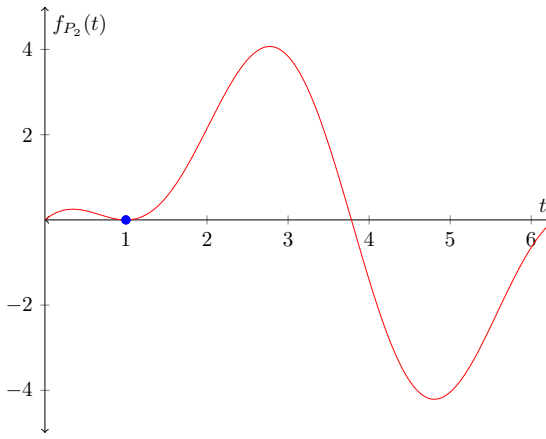


(a) f per P_1

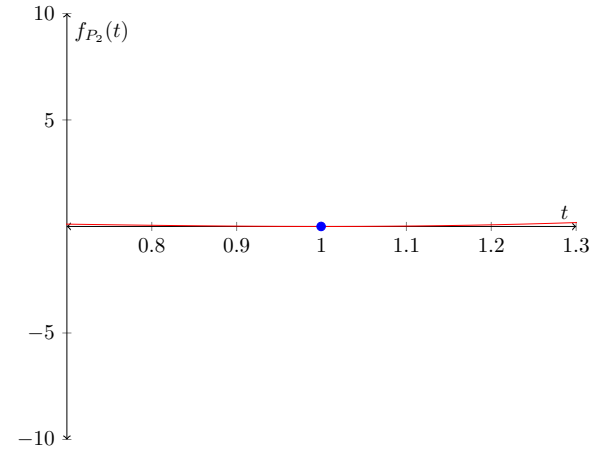


(b) Entorn de l'arrel de f per P_1

Figure 2: Cas P_1



(a) f per P_2



(b) Entorn de l'arrel de f per P_2

Figure 3: Cas P_2

2 El sistema mecànic

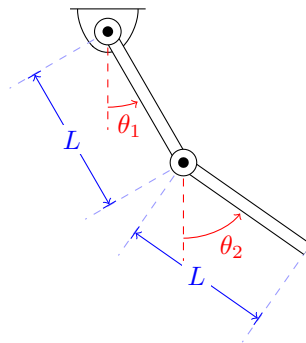


Figure 4: Sistema mecànic

Per trobar les configuracions d'equilibri buscarem extrems del lagrangiana i obtenim aquestes equacions:

$$f_1(\theta_1, \theta_2) := \left(\frac{L\Omega^2}{g} \right) \cos(\theta_1)(8 \sin(\theta_1) + 3 \sin(\theta_2)) - 9 \sin(\theta_1) = 0$$

$$f_2(\theta_1, \theta_2) := \left(\frac{L\Omega^2}{g} \right) \cos(\theta_2)(3 \sin(\theta_1) + 2 \sin(\theta_2)) - 3 \sin(\theta_2) = 0$$

Volem resoldre el següent problema:

$$\left. \begin{array}{l} f_1(\theta_1, \theta_2) = 0 \\ f_2(\theta_1, \theta_2) = 0 \end{array} \right\} \iff f(\theta_1, \theta_2) := (f_1(\theta_1, \theta_2), f_2(\theta_1, \theta_2)) = (0, 0)$$

És a dir que buscarem un 0 de la funció vectorial f

2.1 Mètode de Newton

- a) Plantejament de la resolució del sistema no lineal amb el mètode de Newton. Justificació del càlcul de la jacobiana.

Aplicarem el mètode de Newton sobre la funció f anterior calculant la jacobiana a cada iteració de forma exacta i amb aproximació inicial $x_0 = (1, 1)$, punt on la jacobiana no és nul·la.

Calculem la jacobiana analíticament ja que al tractar-se d'un polinomi de grau 2 en funcions trigonomètriques no és gaire feina i la convergència està assegurada.

- b) Algorisme anterior en Octave.

Veure 1r apartat del fitxer problema2.m

- c) Resolució del problema per $L\Omega^2/g = 2$ i discussió del resultats.

```
Resolució del sistema amb Newton, aprox inicial [1,1]
IT 1 > sol = [1.1887;1.3123] r = 2.060666e-01
IT 2 > sol = [1.1551;1.2595] r = 3.660582e-02
IT 3 > sol = [1.1542;1.2586] r = 7.483574e-04
IT 4 > sol = [1.1542;1.2586] r = 3.777677e-07
IT 5 > sol = [1.1542;1.2586] r = 1.004089e-13
IT 6 > sol = [1.1542;1.2586] r = 1.300256e-16
Solution [1.154246740097763;1.258550720909845]
```

Com ens esperem de manera intuïtiva els angles són similars amb θ_2 lleugerament major a θ_1 . L'angle θ_2 és major que θ_1 ja que a més distància de l'eix de rotació l'energia cinètica augmenta més que la potencial i l'equilibri és amb un angle major.

2.2 Mètode de Broyden

- d) Plantejament de la resolució del sistema no lineal amb el mètode de Broyden. Justificació del càlcul de la jacobiana.

Pel mètode de Broyden usarem el valor de la jacobiana en el punt inicial $S^0 = J(x^0) = J(1, 1)$ com a aproximació inicial. Els altres paràmetres són iguals a la resolució amb Newton.

- e) Algorisme anterior en Octave.

Veure 2n apartat del fitxer problema2.m

- f) Resolució del problema per $L\Omega^2/g = 2$ i discussió del resultats. Comparació amb Newton.

```
Resolució del sistema amb Broyden, aprox inicial [1,1] i S0 = jacobiana([1,1])
IT 1 > sol = [1.1887;1.3123] r = 2.060666e-01
IT 2 > sol = [1.1488;1.2511] r = 4.298322e-02
IT 3 > sol = [1.1542;1.2584] r = 5.292977e-03
IT 4 > sol = [1.1542;1.2586] r = 9.690284e-05
IT 5 > sol = [1.1542;1.2586] r = 5.495809e-06
IT 6 > sol = [1.1542;1.2586] r = 7.035628e-07
IT 7 > sol = [1.1542;1.2586] r = 9.764774e-10
IT 8 > sol = [1.1542;1.2586] r = 6.111329e-14
IT 9 > sol = [1.1542;1.2586] r = 1.300256e-16
Solution [1.154246740097763;1.258550720909845]
```

Com era d'esperar la convergència és més lenta que amb el mètode de Newton, tot i que obtenim la mateixa solució amb el gran avantatge de no haver de computar la jacobiana a cada iteració.

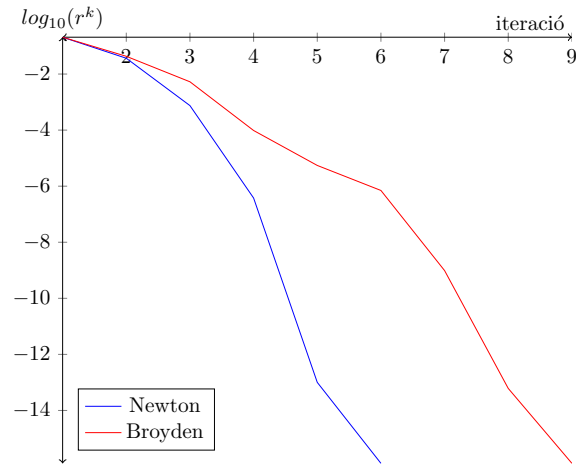


Figure 5: Convergència comparada de Broyden i Newton

2.3 Influència de la velocitat de rotació

g) Resolució per valors creixents de Ω començant amb $\Omega = 0$.

Veure la funció "evolució" de l'arxiu problema2.m.

Com tenim les derivades analítiques de la funció, és lògic usar el mètode de Newton en comptes de Broyden. La nostra funció usa el mètode per resoldre el problema amb valors creixents de la constant en l'interval que desitgem.

El mètode de Newton ja estava implementat de tal forma que li poguéssim passar el valor de $L\Omega^2/g$ sense haver de retocar res.

h) Representació gràfica de la relació entre $L\Omega^2/g$ i θ_1, θ_2 .

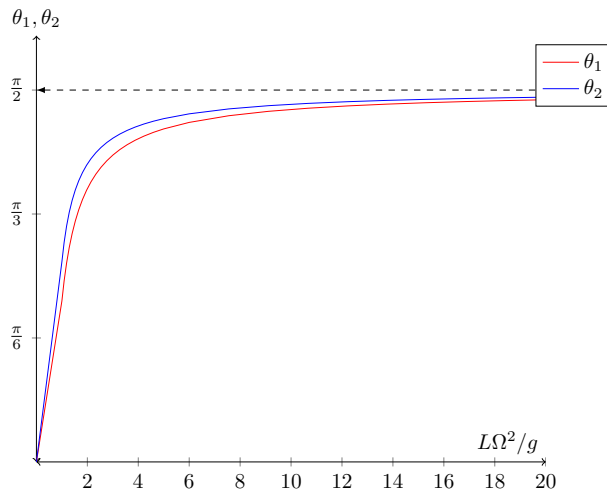


Figure 6: Influència de $L\Omega^2/g$ en la solució (θ_1, θ_2)

Després de representar la relació amb punts equiespaiats veiem que la funció creix molt rapidament abans d'estabilitzar-se a $\pi/2$, per això usarem mostres a escala logarítmica per tenir més precisió al principi.

A la gràfica s'observa que, quan augmentem la constant, els 2 angles òptims tendeixen a $\pi/2rad$, cosa raonable ja que és el que s'observa a la natura quan un sistema com aquest gira a cada vegada més velocitat; les varetes s'inclinen fins a ser quasi paral·leles al sòl.

2.4 Extensió al cas de tres varetes

Extensió del problema físic al cas d'un sistema mecànic format per tres varetes.

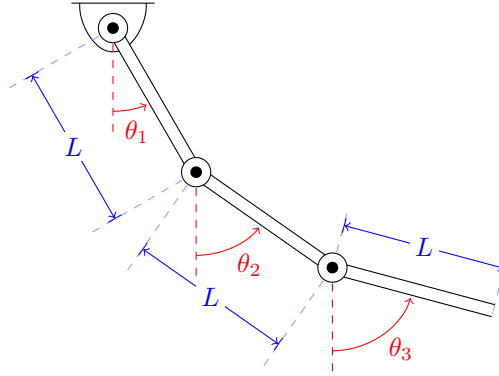


Figure 7: Extensió del sistema mecànic

2.4.1 Plantejament del sistema

Per resoldre el nou problema ens cal determinar les condicions d'equilibri, per això ens cal calcular el valor de l'energia cinètica i potencial del sistema amb 3 barres.

$$K(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \frac{1}{2} I_t \Omega^2 = \frac{\Omega^2}{2} (I_1 + I_2 + I_3) \quad I_i = \text{moment d'inèrcia de la barra } i$$

Usant que el moment d'inèrcia d'una barra inclinada un angle α , de longitud L i massa m per un eix que passa pel centre de masses és:

$$I_{cm} = \frac{1}{12} L^2 m \sin^2 \alpha$$

Aplicant el teorema de Steiner determinem el moment d'inèrcia per a cada barra del sistema:

$$\begin{aligned} I_1 &= m \left(\frac{L}{2} \sin \theta_1 \right)^2 + \frac{L^2 m}{12} \sin^2 \theta_1 \\ I_2 &= m \left(L \sin \theta_1 + \frac{L}{2} \sin \theta_2 \right)^2 + \frac{L^2 m}{12} \sin^2 \theta_2 \\ I_3 &= m \left(L \sin \theta_1 + L \sin \theta_2 + \frac{L}{2} \sin \theta_3 \right)^2 + \frac{L^2 m}{12} \sin^2 \theta_3 \end{aligned}$$

I llavors l'energia cinètica és:

$$K(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \frac{mL^2\Omega^2}{2} \left(\frac{7}{3} \sin^2 \theta_1 + \frac{4}{3} \sin^2 \theta_2 + \frac{1}{3} \sin^2 \theta_3 + 3 \sin \theta_1 \sin \theta_2 + \sin \theta_2 \sin \theta_3 + \sin \theta_3 \sin \theta_1 \right)$$

L'energia potencial del sistema agafant el 0 al punt de suport de la primera barra:

$$K(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = -\frac{mgL}{2} (5 \cos \theta_1 + 3 \cos \theta_2 + \cos \theta_3)$$

Ara si busquem punts que anul·len el gradient del lagrangiana $\mathcal{L}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = K(\theta_1, \theta_2, \theta_3) - V(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, ens queda el sistema següent:

$$\begin{aligned} f_1(\theta_1, \theta_2, \theta_3) &= \frac{2}{mgL} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_1} = \frac{L\Omega^2}{g} \cos \theta_1 \left(\frac{14}{3} \sin \theta_1 + 3 \sin \theta_2 + \sin \theta_3 \right) - 5 \sin \theta_1 &= 0 \\ f_2(\theta_1, \theta_2, \theta_3) &= \frac{2}{mgL} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_2} = \frac{L\Omega^2}{g} \cos \theta_2 \left(\frac{8}{3} \sin \theta_2 + 3 \sin \theta_1 + \sin \theta_3 \right) - 3 \sin \theta_2 &= 0 \\ f_3(\theta_1, \theta_2, \theta_3) &= \frac{2}{mgL} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_3} = \frac{L\Omega^2}{g} \cos \theta_3 \left(\frac{2}{3} \sin \theta_3 + \sin \theta_2 + \sin \theta_1 \right) - \sin \theta_3 &= 0 \end{aligned}$$

2.4.2 Resolució del problema i convergència

Hem resolt l'extensió aprofitant els mètodes genèrics de Newton-Raphson i Broyden programats als apartats anteriors, sense haver de modificar-los. Hem decidit calcular la derivada de f analíticament encara que fos llarg perquè el mètode de Newton convergis adequadament (i no tenir problemes numèrics amb aquesta).

Hem triat una extensió natural al punt inicial del problema normal el $[1,1,1]$ on la jacobiana no és singular. Per a Broyden l'aproximació inicial S^0 ha sigut el valor de la jacobiana en el punt inicial. Les resolucions són per la constant $L\Omega^2/g = 2$.

```
Resolucio del sistema amb Newton, aprox inicial [1,1,1]
IT 1 > sol = [1.3935;1.4774;1.5326]      r = 3.208563e-001
IT 2 > sol = [1.2842;1.3455;1.3824]      r = 9.830058e-002
IT 3 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 2.292099e-003
IT 4 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 2.817538e-006
IT 5 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 4.383514e-012
IT 6 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 9.603035e-017
Solution [1.280731015125012;1.342434351772724;1.379863005045501]
```

```
Resolució del sistema amb Broyden, aprox inicial [1,1,1] i S0 = jacobiana([1,1,1])
IT 1 > sol = [1.3935;1.4774;1.5326]      r = 3.208563e-001
IT 2 > sol = [1.2595;1.319;1.3542]      r = 1.204611e-001
IT 3 > sol = [1.2802;1.3417;1.3789]      r = 1.704606e-002
IT 4 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 5.780661e-004
IT 5 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 2.930553e-005
IT 6 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 6.406858e-006
IT 7 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 1.096094e-007
IT 8 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 1.899945e-008
IT 9 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 6.302554e-011
IT10 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 1.488347e-014
IT11 > sol = [1.2807;1.3424;1.3799]      r = 9.603035e-017
Solution [1.280731015125012;1.342434351772724;1.379863005045501]
```

Les solucions obtingudes per $\theta_1\theta_2$ són majors que les del primer cas; al afegir la 3a barra a mateixa velocitat de rotació augmenta l'energia cinètica més que l'energia potencial; llavors l'equilibri anterior es desplaça cap a més potencial, és a dir, majors angles.

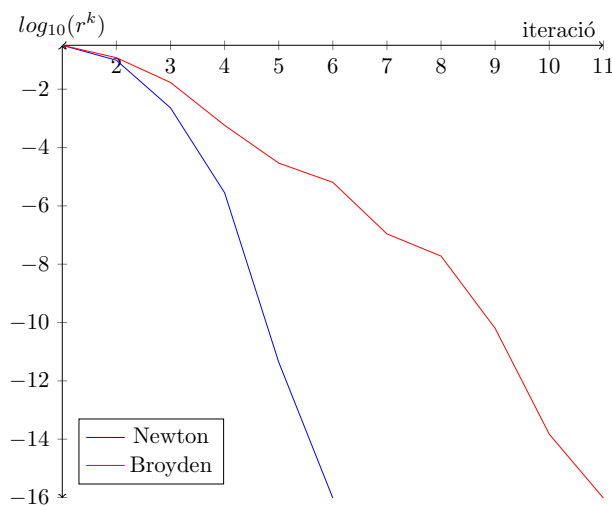


Figure 8: Convergència comparada de Broyden i Newton

Com es pot observar a la gràfica, el mètode de Newton té la convergència esperada (quadràtica) i el mètode de Broyden també, ja que no és tan ràpid com el de Newton però es significativament millor que un amb convergència lineal.

2.4.3 Influència de la velocitat de rotació

Si, de la mateixa manera que per 2 barres, resollem el problema per diferents valors de velocitat angular, obtenim una evolució dels angles similar al cas anterior.

És interessant veure que com més lluny del centre és una barra més gran és el seu angle.

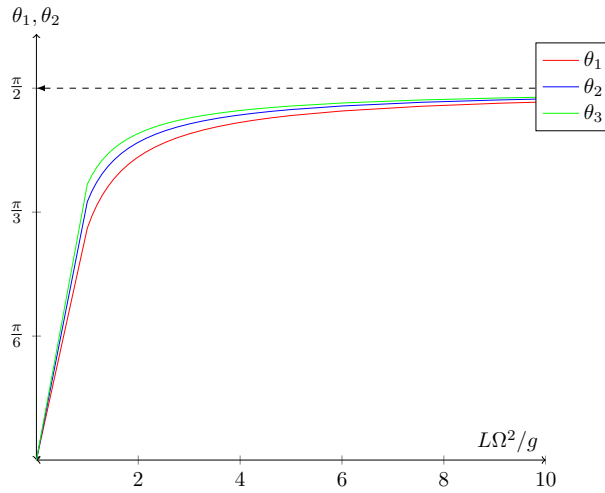


Figure 9: Influència de $L\Omega^2/g$ en la solució $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$

3 La malla triangularitzada

És habitual aproximar un domini continu per la unió disjunta de triangles (o altres elements) anomenada malla. En aquest problema, donada una matriu que conté les coordenades dels vèrtexs i la matriu de connectivitats, on cada fila i conté els números dels nodes del triangle i -èssim, volem minimitzar la distorsió de la malla.

- a) Càlcul de la distorsió de la malla a l'arxiu calculaDistorsioMalla.m i resultats mostrats.

Veure l'arxiu calculaDistorsioMalla.m. El valor de la distorsió és 24.002.

- b) Plantejament per minimitzar la distorsió fent servir Newton, F i les seves derivades.

Utilitzarem el Mètode de Newton per trobar un zero del gradient de F (mètode de Newton per a optimització de funcions no lineals), i, per tant, necessitarem calcular la Jacobiana de F i la seva Hessiana a cada iteració. Cada iteració del mètode de Newton en aquest cas es realitza de la forma següent:

$$y_{k+1} = y_k - H(y_k)^{-1} J(y_k)$$

Aprofitarem els mètodes ja implementats per a computar la Jacobiana i la Hessiana de F de forma numèrica al tractar-se d'una funció complicada de derivar de forma analítica.

- c) Ompliment de mainNewton.m, distorsió de la malla obtinguda i iteracions del mètode de Newton.

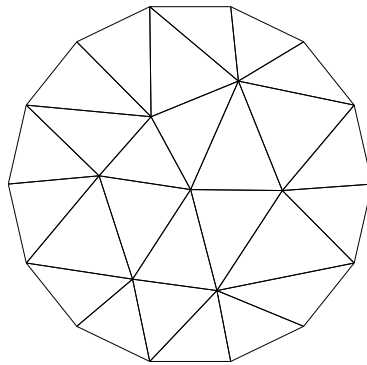
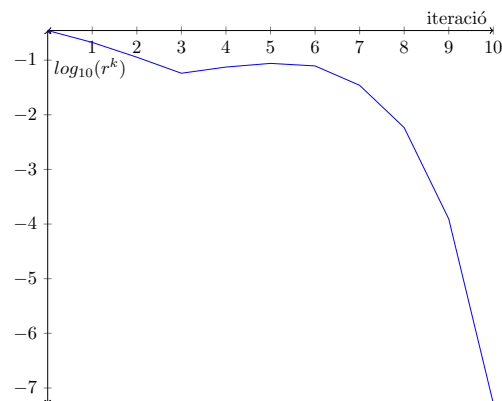


Figure 10: Malla òptima

La distorsió de la malla obtinguda ha estat de 6.578517, molt menys que la original. El mètode de Newton ha necessitat 10 iteracions per satisfer el criteri de convergència (error relatiu d'ordre 10^{-5} o menys):

Valor inicial de la distorsio: 24.002204
 Iteracio 0: Distorsio = 24.0022039, Error relatiu y = 3.48e-001
 Iteracio 1: Distorsio = 15.4575717, Error relatiu y = 2.11e-001
 Iteracio 2: Distorsio = 10.9405410, Error relatiu y = 1.13e-001
 Iteracio 3: Distorsio = 8.7932983, Error relatiu y = 5.76e-002
 Iteracio 4: Distorsio = 7.6829333, Error relatiu y = 7.48e-002
 Iteracio 5: Distorsio = 7.0409080, Error relatiu y = 8.73e-002
 Iteracio 6: Distorsio = 6.7000920, Error relatiu y = 7.84e-002
 Iteracio 7: Distorsio = 6.5905758, Error relatiu y = 3.46e-002
 Iteracio 8: Distorsio = 6.5787430, Error relatiu y = 5.82e-003
 Iteracio 9: Distorsio = 6.5785174, Error relatiu y = 1.24e-004
 Iteracio 10: Distorsio = 6.5785173, Error relatiu y = 5.22e-008
 Valor final de la distorsio: 6.578517

d) Convergència del mètode de Newton. Gràfica de convergència del mètode:



Podem observar que en les 3 últimes iteracions, el mètode convergeix quadràticament i, per tant, té la convergència esperada si estem suficientment a prop de la solució (error relatiu d'ordre 10^{-4}). Com estàvem bastant lluny del valor òptim de la solució el mètode ha necessitat bastantes iteracions per començar a convergir quadràticament.

És interessant remarcar com les primeres 3 iteracions tenen un comportament lineal tot i no estar en una arrel simple.