

TREBALL PRÀCTIC 1

Data de lliurament: divendres 28 d'octubre de 2016

- Aquest treball s'ha de fer en equips de *dues* o (preferentment) *tres* persones.
- S'ha de lliurar un informe clar i concís (longitud màxima: 10 pàgines). L'informe ha de contestar amb precisió les qüestions plantejades, a més d'incloure el títol, els autors i la data del treball (a la capçalera de la primera pàgina).
- L'informe (en format pdf) i els programes de Matlab o Octave auxiliars (comprimits en un zip) es lliuraran electrònicament a través del Campus Digital, en la data indicada. L'entrega la fa només un dels integrants del grup. Els *noms dels arxius* han de ser TP1***.pdf i TP1***.zip, on *** són els primers cognoms de cadascun dels integrants del grup començant amb majúscules i en ordre alfabètic, sense espais, accents o caràcters especials.

-
1. La corba *cardioide*, representada a la figura 1, es pot parametritzar per

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

Volem calcular projeccions de diversos punts sobre l'esmentada corba. Per fer-ho, donat un punt $P = (x_0, y_0)$ cal determinar el valor del paràmetre τ , corresponent al punt $Q = (x(\tau), y(\tau))$ de la corba, tal que \overline{PQ} sigui ortogonal al vector tangent a la corba $(\dot{x}(\tau), \dot{y}(\tau))$. És a dir, cal determinar τ tal que $f(\tau) = 0$ amb

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

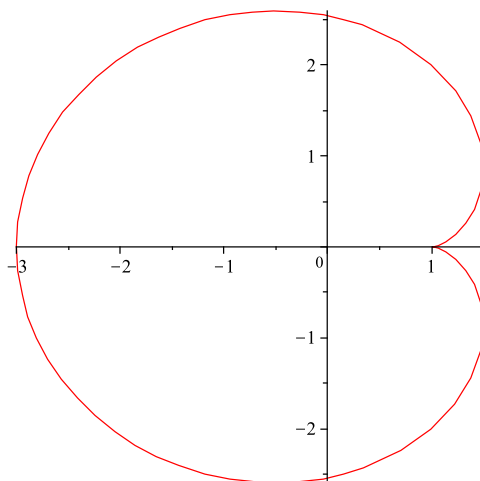


Figura 1: Corba cardioide

- a) Calculeu la primera i segona derivades de la parametrització $(x(t), y(t))$. Expresseu la derivada de $f(t)$ en funció de $x(t)$, $y(t)$, $\dot{x}(t)$, $\dot{y}(t)$, $\ddot{x}(t)$, $\ddot{y}(t)$.

En una primera fase, volem utilitzar mètodes que *no* requereixin el càlcul de la derivada de f a cada iteració. Per aquest motiu, descartem el mètode de Newton i optem pel mètode de Whittaker

$$t^{k+1} = t^k - f(t^k)/m$$

amb m constant.

- b) Calculeu 4 iteracions del mètode de Whittaker corresponents al càlcul de la projecció del punt $P_1 = (2.134141, 0.864141)$ sobre la corba. Considereu l'aproximació inicial $t^0 = 2$ i la constant $m = 7 \simeq f'(t^0)$.
- c) La projecció del punt P_1 correspon al valor del paràmetre $\tau_1 = 1.04655891$. Quin és el factor asimptòtic de convergència del mètode? Calculeu l'error en les aproximacions obtingudes a l'apartat anterior. Té el mètode el comportament esperat?
- d) És el mètode de Whittaker el mètode més adequat pel càlcul de zeros de funcions si no volem calcular derivades de la funció? Quins mètodes recomanariem? Justifiqueu la resposta.

En una segona fase, decidim emprar el mètode de Newton. La taula 1 mostra l'evolució de l'error en les aproximacions del mètode de Newton, $|E^k| = |t^k - \tau|$, amb aproximació inicial $t^0 = 2$, per calcular les projeccions dels punts P_1 i $P_2 = (0.221486, 0.864080)$, corresponents a τ_1 i $\tau_2 = 0.99951548361763$ respectivament.

A	B
$ E^0 = 9.534411 \cdot 10^{-1}$	$ E^0 = 1.000485$
$ E^1 = 2.366346 \cdot 10^{-1}$	$ E^1 = 4.281070 \cdot 10^{-1}$
$ E^2 = 1.570112 \cdot 10^{-1}$	$ E^2 = 2.271002 \cdot 10^{-1}$
$ E^3 = 1.916665 \cdot 10^{-2}$	$ E^3 = 1.201145 \cdot 10^{-1}$
$ E^4 = 4.043330 \cdot 10^{-4}$	$ E^4 = 6.255743 \cdot 10^{-2}$
$ E^5 = 1.894739 \cdot 10^{-7}$	$ E^5 = 3.221387 \cdot 10^{-2}$
$ E^6 = 4.174439 \cdot 10^{-14}$	$ E^6 = 1.654600 \cdot 10^{-2}$

Taula 1: Error en les iteracions del mètode de Newton per al càlcul de la projecció de dos punts diferents.

- e) Decidiu raonadament a quin punt, P_1 o P_2 , correspon cadascuna de les columnes de la taula 1 (columnes A i B). Té el mètode de Newton el comportament esperat?

-
2. El sistema mecànic il·lustrat a la figura 2 està format per dues varetes de massa m i longitud L , unides entre sí per una articulació que permet la rotació relativa d'una vareta respecte de l'altra. El conjunt està unit, mitjançant una altra articulació, a un eix vertical que gira amb una velocitat de rotació constant Ω . El moviment estacionari del sistema es pot caracteritzar pels angles θ_1 i θ_2 de les varetes respecte de la vertical. La intuïció ens indica que si la velocitat de rotació és nula, llavors la configuració d'equilibri ve donada per $\theta_1 = \theta_2 = 0$ (varetes alineades amb l'eix), i que aquests dos angles augmenten a mesura que ho fa la velocitat de rotació.

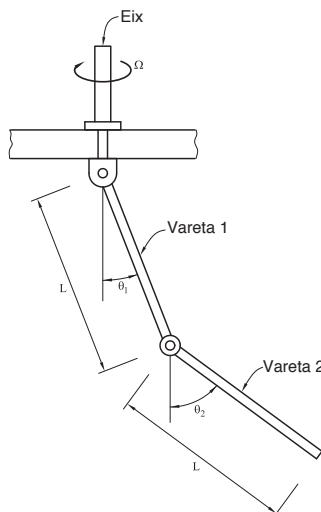


Figura 2: Sistema mecànic (adaptada de Kane & Levinson (1985))

Per determinar la configuració d'equilibri corresponent a una velocitat de rotació donada, podem recórrer a la mecànica de Lagrange. Per una banda, l'energia cinètica del sistema és

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

i, per altra banda, la seva energia potencial és

$$V(\theta_1, \theta_2) = -\frac{mgL}{2} (3 \cos \theta_1 + \cos \theta_2) \quad (2)$$

on g és l'acceleració de la gravetat. El *lagrangiana* del sistema es defineix com

$$\mathcal{L}(\theta_1, \theta_2) = K(\theta_1, \theta_2) - V(\theta_1, \theta_2) \quad (3)$$

Les configuracions d'equilibri són extrems del lagrangiana i, per tant, anulen el seu gradient. Imposant aquesta condició, s'obtenen les equacions (convenientment adimensionalitzades)

$$f_1(\theta_1, \theta_2) := \frac{2}{3mgL} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_1} = \left(\frac{L\Omega^2}{g} \right) \cos \theta_1 (8 \sin \theta_1 + 3 \sin \theta_2) - 9 \sin \theta_1 = 0 \quad (4)$$

$$f_2(\theta_1, \theta_2) := \frac{2}{3mgL} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_2} = \left(\frac{L\Omega^2}{g} \right) \cos \theta_2 (3 \sin \theta_1 + 2 \sin \theta_2) - 3 \sin \theta_2 = 0 \quad (5)$$

Així doncs, per determinar el moviment estacionari del sistema mecànic de la figura 2, cal resoldre un sistema no lineal de dimensió 2, format per les equacions (4) i (5).

2.1. Mètode de Newton

- Plantegem la resolució del sistema no lineal mitjançant el mètode de Newton. Justifiquem raonadament la tècnica triada pel càlcul de la matriu jacobiana (derivació analítica o derivació numèrica).
- Codifiquem l'algorisme plantejat a l'apartat anterior en Matlab o Octave.

- c) Utilitzeu el codi desenvolupat en l'apartat anterior per resoldre el problema per $L\Omega^2/g = 2$. Discutiu el vostre resultat. És raonable la solució obtinguda? Presenta el mètode de Newton el comportament esperat?

2.2. Mètode de Broyden

- d) Plantegeu la resolució del sistema no lineal mitjançant el mètode de Broyden.
e) Codifiqueu l'algoritme plantejat a l'apartat anterior en Matlab o Octave.
f) Utilitzeu el codi desenvolupat en l'apartat anterior per resoldre el problema per $L\Omega^2/g = 2$. Discutiu el vostre resultat. S'obté la mateixa solució que a l'apartat c)? Presenta el mètode de Broyden el comportament esperat?

2.3. Influència de la velocitat de rotació

- g) Resolgueu el problema per valors creixents de la velocitat de rotació Ω (és a dir, del paràmetre adimensional $L\Omega^2/g$), començant amb $\Omega = 0 \text{ rad/s}^{-1}$.
h) Representeu gràficament la relació entre el paràmetre $L\Omega^2/g$ i els angles θ_1 i θ_2 d'equilibri. Són raonables els resultats obtinguts?

2.4. (opcional¹) Extensió al cas amb tres varetes

Estengueu el problema físic, el model matemàtic associat, els algoritmes, els codis i les simulacions numèriques al cas d'un sistema mecànic format per tres varetes.

3. Tant en modelització numèrica com en visualització, és habitual aproximar un domini continu Ω per la unió disjunta d'elements (triangles, quadrilàters, tetraedres, o altres), anomenada malla. En aquest problema, es considera una malla composta per triangles, donada per una matriu \mathbf{X} , que conté les coordenades dels vèrtexs, $\mathbf{X}(i, :) = (x_i, y_i)$ per $i = 1 \dots N$, i l'anomenada matriu de connectivitats \mathbf{T} . Cada fila e de la matriu de connectivitats conté els números dels nodes del triangle e -éssim. Per exemple, per a la malla a la Figura 3 les matrius són

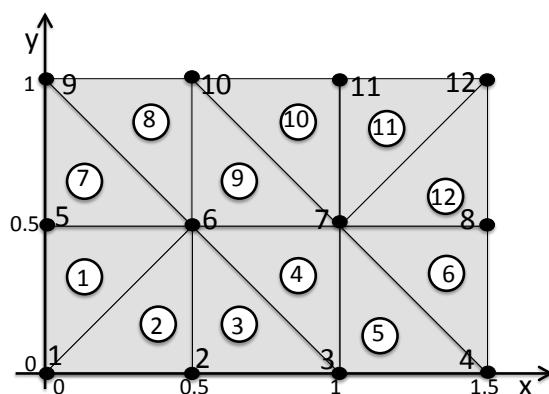


Figura 3: Malla amb 12 vèrtexs (cercles negres) i 12 elements triangulars (cercles blancs) per al domini $\Omega = (0, 1.5) \times (0, 1)$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0.5 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \\ 1 & 0.5 \\ 1.5 & 0.5 \\ 0 & 1 \\ 0.5 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1.5 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 1 & 2 & 6 \\ 2 & 3 & 6 \\ 3 & 7 & 6 \\ 3 & 4 & 7 \\ 4 & 8 & 7 \\ 5 & 6 & 9 \\ 6 & 10 & 9 \\ 6 & 7 & 10 \\ 7 & 11 & 10 \\ 7 & 12 & 11 \\ 7 & 8 & 12 \end{bmatrix}$$

¹Apartat no inclòs en la qualificació del treball pràctic

Amb aquestes definicions, $\mathbf{X}_e := \mathbf{X}(\mathbf{T}(e, :), :) \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$ és una matriu amb les coordenades dels 3 vèrtexs del triangle e -èssim.

Per a la resolució numèrica d'Equacions en Derivades Parcial (EDPs) és convenient que els elements siguin poc distorsionats; és a dir, que siguin el més semblants possible a un triangle equilàter. En aquest problema considerem la següent funció per a mesurar la distorsió d'un triangle

$$\eta_{tri}(\mathbf{X}_e) = \frac{\|\mathbf{D}\phi\|_F^2}{2|\det(\mathbf{D}\phi)|}, \quad (6)$$

on ϕ és la transformació afí del triangle equilàter de vèrtexs $(0, 0)$, $(1, 0)$ i $(\sqrt{3}/2, 1/2)$ al triangle de vèrtexs donats per \mathbf{X}_e , $\mathbf{D}\phi$ és la matriu diferencial de ϕ , i $\|\cdot\|_F$ és la norma de Frobenius (`norm(·, 'fro')` a Matlab). Amb aquestes definicions, la matriu diferencial $\mathbf{D}\phi$ es pot calcular com

$$\mathbf{D}\phi = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_e(2, :) - \mathbf{X}_e(1, :) \\ \mathbf{X}_e(3, :) - \mathbf{X}_e(1, :) \end{pmatrix}^T,$$

Per a mesurar la distorsió de la malla, es pot avaluar la funció

$$\eta(\mathbf{X}, \mathbf{T}) = \sqrt{\sum_{e=1}^{N_{tri}} [\eta_{tri}(\mathbf{X}(\mathbf{T}(e, :), :))]^2}, \quad (7)$$

on N_{tri} és el nombre de triangles de la malla.

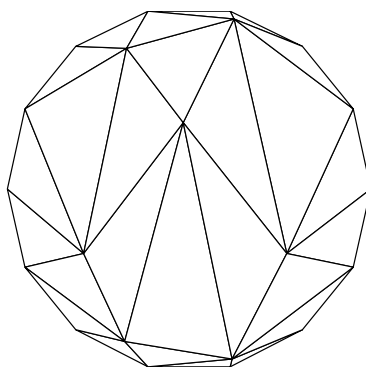


Figura 4: Malla a l'arxiu `malla.mat`. Es vol trobar la posició dels vèrtexs interiors que minimitza la distorsió de la malla, mantenint fixos els vèrtexs del contorn.

- a) Omple l'arxiu proporcionat `calculaDistorsioMalla.m`, de forma que, donades \mathbf{X} i \mathbf{T} , retorni la distorsió de la malla. Avalua i escriu aquí el valor de la distorsió per a la malla a l'arxiu `malla.mat`, representada a la Figura 4.

Indicació: executa `load malla` per carregar les variables \mathbf{X} i \mathbf{T} emmagatzemades.

Es vol ara optimitzar la posició dels vèrtexs interiors per a minimitzar la distorsió, fixada la posició dels vèrtexs del contorn. Per això, es defineix el vector $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{2N_{int}}$ que conté les coordenades dels N_{int} nodes interiors. Per exemple, per a la malla a la Figura 3, seria $\mathbf{y} = (x_6, y_6, x_7, y_7)^T$. La funció \mathbf{F} definida a l'arxiu `mainNewton.m` avalua la distorsió de la malla per les posicions donades al vector \mathbf{y} , fent servir la funció `calculaDistorsioMalla.m` implementada a l'apartat anterior.

- b) Proposa una metodologia per a minimitzar la distorsió fent servir el mètode de Newton, i la funció F i les seves derivades.

L'arxiu `mainNewton.m` és un script per a calcular les iteracions del mètode de Newton i avaluar l'error.

- c) Completa l'script `mainNewton.m` implementant la metodologia proposada a l'apartat anterior i executa'l. Per tal de simplificar el càlcul de les derivades, les funcions `numericalDerivative.m` i `numericalHessian.m` calculen la derivada numèrica i la hessiana numèrica d'una funció en un punt donat.

Quina és la distorsió de la malla obtinguda? Quantes iteracions ha necessitat el mètode de Newton per a satisfer el criteri de convergència implementat?

- d) La figura 3 de Matlab mostra la convergència del mètode. Té el comportament esperat? Justifica la teva resposta.
-

Referències

Kane, T.R. & Levinson, D.A. (1985). *Dynamics: theory and applications*. McGraw-Hill, New York.