GRAU en Estadística. UB-UPC

MÈTODES NUMÈRICS
Pràctiques 2A, 2B, 2C - QP1617

©M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques. Secció FIB-FNB.
Jordi Girona 1-3, Omega, 08034 Barcelona, Spain.
Universitat Politècnica de Catalunya. BarcelonaTech.

11 de maig de 2017

Instruccions

Normes

Sobre les vostres entregues (si no es diu el contrari a classe):

- Escriviu un breu informe que contingui, per cada exercici/apartat:
    1. Enunciat.
    2. Estratègies emprades: precisió, criteri, iteracions, etc.
    3. Resultats (taula, gràfic, etc)
    4. Conclusions i comentaris.
    5. Annex amb el codi de Matlab emprat per l'exercici.
- En cas de no acabar, cal descriure els problemes tinguts.
- En cas de còpia l'entrega es qualificarà amb 0 i no podreu fer ús del mètode d'avaluació contínua.

Dates

Data límit d'entrega: 6 de juny de 2017 a les 9h. del matí

Abans del dia i hora indicats heu de penjar a la intranet de l'assignatura un fitxer que contingui tots els fitxers de Matlab necessaris per a resoldre la pràctica i un document de texte amb les explicacions segons les normes publicades.
El nom del fitxer ha d'èsser **DNI_prac_A.zip**, o **DNI_prac_B.zip** o **DNI_prac_C.zip** segons correspongui.

No s'accepten pràctiques amb retard.

No s'accepten pràctiques SENSE els fitxers d'instruccions de Matlab.

M. Àngela Grau Gotés
Professora responsable Mètodes Numèrics

Enunciat - A

1.1 Integració numèrica: fórmules compostes

Doneu una aproximació de l'àrea de la regió acotada per la corba

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x/\sigma)^2/2}$$

A l'interval $[-3\sigma, 3\sigma]$:

(a) Previ al càlcul numèric feu el canvi de variables $t = \frac{x}{\sigma}$ a la integral que defineix l'àrea a calcular.

(b) Useu la regla composta dels trapezis per $N = 2, 4, 8, 16, 32, 64, \ldots$.

(c) Useu el mètode de Romberg per millorar l'aproximació obtinguda.

(d) Calculeu el valor exacte PRO donat per `Matlab`

```
p = normcdf([-3*sigma, 3*sigma])
PRO = p(2)-p(1)
```

(e) Presenteu en taules els resultats i els errors absoluts obtinguts. Quants decimals correctes s'obtenen? Comenteu els resultats obtinguts.

1.2 Diferenciació numèrica: comportament de l'error

Hom pot pensar que les millors aproximacions numèriques de les derivades s'obtenen prenent passos de derivació molt petits. L'aparició en moltes de les fórmules de diferències de quantitats molt properes, amb la corresponent cancel·lació de termes, fa que això no sigui en general cert.

La derivada de la funció $f(x) = \arctan(x)$ en $x = \sqrt{2}$ pren el valor $f'(\sqrt{2}) = 1/3$. Considereu les dues fórmules d'aproximació de la derivada primera següents:

$$F1\ : f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}, \qquad F2\ : f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}.$$

I.- Aproximeu $f'(\sqrt{2})$ fent ús de la fórmula F1

(a) Per $h_k = 10^{-k}$ per a $k = 1, 2, 3 \cdots 15$.

(b) Calculeu l'error absolut per cada una de les aproximacions obtingudes.

(c) Presenteu els resultats dels dos apartats en una mateixa taula (T1).

II.- Aproximeu $f'(\sqrt{2})$ fent ús de la fórmula F2

(a) Per $h_k = 10^{-k}$ per a $k = 1, 2, 3 \cdots 15$.

(b) Calculeu l'error absolut per cada una de les aproximacions obtingudes.

(c) Presenteu els resultats dels dos apartats previs en una mateixa taula (T2).

III.- Representeu els dos errors en una gràfica, amb $k = 1, 2, 3 \cdots 15$ a l'eix d'abscises i $\log(error)$ a l'eix d'ordenades.

IV.- Per totes dues fórmules de derivació hi ha un pas òptim a partir del qual, si prenem valors de h més petits, els errors comencen a crèixer. Quin és aquest pas per F1? i per F2?

1.3 Sistemes Lineals: mètodes iteratius

Sigui A la matriu i b el vector definits per:

$$A = \begin{pmatrix} -4 & 2 & 0 & . & . & . & 0 \\ 2 & -4 & 2 & 0 & . & . & 0 \\ 0 & 2 & -4 & 2 & 0 & . & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 \\ 0 & . & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & . & . & 0 & 2 & -4 & 2 \\ 0 & . & . & . & 0 & 2 & -4 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ . \\ . \\ . \\ 0 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Per a tots els ordres **N** tals que $3 \leq N \leq 20$ es demana:

(a) Calculeu el determinant i el nombre de condició de les matrius A.

(b) Demostreu que $X = (1, 1, \ldots, 1)^t$ és solució exacte per a qualsevol N.

(c) Estudieu la convergència dels mètodes de Jacobi i Gauss-Seidel per a la resolució del sistema d'equacions lineals. Abans de calcular res, feu un gràfic d'evolució del radi espectral de la matriu d'iteració de cadascun dels mètodes estudiats en funció de **N**.

(d) Trobeu la solució X del sistema $Ax = b$ per ambdós mètodes amb com a mínim 8 decimals correctes. Quantes iteracions calen en cada pas? Expliqueu els avantages i inconvenients dels mètodes per aquest cas concret, expliqueu les desviacions de la solució que s'obtenen.

1.4 Sistemes lineals: mínims quadrats

Els processos termodinàmics adiabàtics de sistemes físics estan caracteritzats per la pressió P, el volum V i la temperatura T (els gasos, per exemple) segueixen una llei del tipus $PV^\gamma = C$, on C és constant al llarg del procés (i depèn de la temperatura, que es manté constant).

Volem ajustar els valors de C i de γ en un procés adiabàtic segons la taula de mesures experimentals següent:

P (atm.)	1.62	1.00	0.75	0.62	0.52	0.46
V (litres)	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0

Es demana:

(a) Plantejeu el problema de determinar els valors de C i de γ com un sistema lineal $Ax = b$, i.e. definiu les components del vector d'incògnites x, expresseu A i b en funció de P_i i V_i.

(b) Resoleu el problema fent ús de les equacions normals. Doneu la solució obtinguda i calculeu el vector residu.

(c) Resoleu el problema lineal $Ax = b$ fent ús de la factorització $A = QR$. Doneu la solució obtinguda i calculeu el vector residu.

(d) Comenteu les diferències entre les solucions trobades, compareu els residuos dels apartats (b) i (c). Doneu l'equació de la llei resultant ($PV^\gamma = C$).

Enunciat - B

2.1 Integració numèrica: Fórmules compostes

Doneu una aproximació de l'àrea de la regió acotada per la corba

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x/\sigma)^2/2}$$

A l'interval $[-2\sigma, 2\sigma]$:

(a) Previ al càlcul numèric feu el canvi de variables $t = \frac{x}{\sigma}$ a la integral que defineix l'àrea a calcular.

(b) Useu la regla composta dels trapezis per $N = 2, 4, 8, 16, 32, 64, \ldots$.

(c) Useu el mètode de Romberg per millorar l'aproximació obtinguda.

(d) Calculeu el valor exacte PRO donat per `Matlab`

```
p = normcdf([-sigma, sigma])
PRO = p(2)-p(1)
```

(e) Presenteu en taules els resultats i els errors absoluts obtinguts. Quants decimals correctes s'obtenen? Comenteu els resultats obtinguts.

2.2 Diferenciació numèrica: comportament de l'error

Hom pot pensar que les millors aproximacions numèriques de les derivades s'obtenen prenent passos de derivació molt petits. L'aparició en moltes de les fórmules de diferències de quantitats molt properes, amb la corresponent cancel·lació de termes, fa que això no sigui en general cert.

La derivada de la funció $f(x) = \arctan\left(\frac{x}{5}\right)$ en $x = \sqrt{5}$ pren el valor $f'(\sqrt{5}) = 1/6$. Considereu les dues fórmules d'aproximació de la derivada primera següents:

$$F1\ : f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}, \qquad F2\ : f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}.$$

I.- Aproximeu $f'(\sqrt{5})$ fent ús de la fórmula F1

(a) Per $h_k = 10^{-k}$ per a $k = 1, 2, 3 \cdots 15$.

(b) Calculeu l'error absolut per cada una de les aproximacions obtingudes.

(c) Presenteu els resultats dels dos apartats en una mateixa taula (T1).

II.- Aproximeu $f'(\sqrt{5})$ fent ús de la fórmula F2

(a) Per $h_k = 10^{-k}$ per a $k = 1, 2, 3 \cdots 15$.

(b) Calculeu l'error absolut per cada una de les aproximacions obtingudes.

(c) Presenteu els resultats dels dos apartats previs en una mateixa taula (T2).

III.- Representeu els dos errors en una gràfica, amb $k = 1, 2, 3 \cdots 15$ a l'eix d'abscises i $\log(error)$ a l'eix d'ordenades.

IV.- Per totes dues fórmules de derivació hi ha un pas òptim a partir del qual, si prenem valors de h més petits, els errors comencen a créixer. Quin és aquest pas per F1? i per F2?

2.3 Sistemes lineals: mètodes iteratius

Siguin $A(N) = (a_{ij})_{N\times N}$ i $B(N) = (b_{i1})_{N\times 1}$ la matriu i el vector d'ordre N definits per

$$a_{ij} = \begin{cases} -1 & |i-j| \leq 2\,, \\ 5 & i=j\,, \\ 0 & |i-j| > 2\,, \end{cases} \qquad \text{i} \qquad b_{i1} = \begin{cases} 3 & i = 1\,, N\,, \\ 2 & i = 2\,, N-1\,, \\ 1 & i \neq 1, 2, N-1, N\,, \end{cases}$$

$$\text{per a } i = 1, \ldots, N\,, \quad j = 1, \ldots, N\,.$$

Per a tots els ordres $\mathbf{N}$ tals que $6 \leq N \leq 30$ es demana:

(a) Calculeu el determinant i el nombre de condició de les matrius A.

(b) Demostreu que $X = (1, 1, \ldots, 1)^t$ és solució exacte per a qualsevol N.

(c) Estudieu la convergència dels mètodes de Jacobi i Gauss-Seidel per a la resolució del sistema d'equacions lineals. Abans de calcular res, feu un gràfic d'evolució del radi espectral de la matriu d'iteració de cadascun dels mètodes estudiats en funció de $\mathbf{N}$.

(d) Fent ús d'un mètode iteratiu de resolució de sistemes d'equacions lineals, determineu la solució X del sistema $A(N)X = B(N)$ fent ús de l'aritmètica de coma flotant de `Matlab` i arrodonint. Preneu $\mathbf{N} = \mathbf{6}, ..., \mathbf{30}$. Prèviament feu un gràfic d'evolució del radi espectral de la matriu d'iteració del mètode escollit en funció de $\mathbf{N}$. Expliqueu els avantages i inconvenients del mètode per aquest cas concret.

2.4 Sistemes lineals: mínims quadrats

El nivell d'aigua del Mar del Nord queda determinat fonamentalment per l'anomenada marea $M2$ el període és aproximadament de 12 hores i la seva expresió aproximada és

$$H(t) = h_0 + a_1 \sin\left(\frac{2\pi t}{12}\right) + a_2 \cos\left(\frac{2\pi t}{12}\right)$$

Volem ajustar els valors de h_0, a_1 i a_2 segons la taula de mesures següent:

t (h)	0	2	4	6	8	10
H (litres)	1.0	1.6	1.4	0.6	0.2	0.6

Es demana:

(a) Plantejeu el problema de determinar els valors de h_0, a_1 i a_2 com un sistema lineal $Ax = b$, i.e. definiu les components del vector d'incògnites x, expresseu A i b en funció de t_i i H_i.

(b) Resoleu el problema fent ús de les equacions normals. Doneu la solució obtinguda i calculeu el vector residu.

(c) Resoleu el problema lineal $Ax = b$ fent ús de la factorització $A = QR$. Doneu la solució obtinguda i calculeu el vector residu.

(d) Comenteu les diferències entre les solucions trobades, compareu els residuos dels apartats (b) i (c). Doneu l'equació $H(t)$ resultant.

Enunciat - C

3.1 Integració numèrica: Fórmules compostes

Doneu una aproximació de l'àrea de la regió acotada per la corba

$$y = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x/\sigma)^2/2}$$

A l'interval $[-\sigma, \sigma]$:

(a) Previ al càlcul numèric feu el canvi de variables $t = \frac{x}{\sigma}$ a la integral que defineix l'àrea a calcular.

(b) Useu la regla composta dels trapezis per $N = 2, 4, 8, 16, 32, 64 \cdots$.

(c) Useu el mètode de Romberg per millorar l'aproximació obtinguda.

(d) Calculeu el valor exacte PRO donat per `Matlab`

```
p = normcdf([-sigma, sigma])
PRO = p(2)-p(1)
```

(e) Presenteu en taules els resultats i els errors absoluts obtinguts. Quants decimals correctes s'obtenen? Comenteu els resultats obtinguts.

3.2 Diferenciació numèrica: comportament de l'error

Hom pot pensar que les millors aproximacions numèriques de les derivades s'obtenen prenent passos de derivació molt petits. L'aparició en moltes de les fórmules de diferències de quantitats molt properes, amb la corresponent cancel·lació de termes, fa que això no sigui en general cert.

La derivada de la funció $f(x) = \sin(x^2)$ en $x = \sqrt{2}$ pren el valor $f'(\sqrt{2}) = 2\sqrt{2}\cos(2)$. Considereu les dues fórmules d'aproximació de la derivada primera següents:

$$F1\ : f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h},$$

$$F2\ : f'(x_0) \approx \frac{-f(x_0+2h) + 8f(x_0+h) - 8f(x_0-h) + f(x_0-2h)}{12h}.$$

I.- Aproximeu $f'(\sqrt{2})$ fent ús de la fórmula F1

(a) Per $h_k = 10^{-k}$ per a $k = 1, 2, 3 \cdots 15$.

(b) Calculeu l'error absolut per cada una de les aproximacions obtingudes.

(c) Presenteu els resultats dels dos apartats en una mateixa taula (T1).

II.- Aproximeu $f'(\sqrt{2})$ fent ús de la fórmula F2

(a) Per $h_k = 10^{-k}$ per a $k = 1, 2, 3 \cdots 15$.

(b) Calculeu l'error absolut per cada una de les aproximacions obtingudes.

(c) Presenteu els resultats dels dos apartats previs en una mateixa taula (T2).

III.- Representeu els dos errors en una gràfica, amb $k = 1, 2, 3 \cdots 15$ a l'eix d'abscises i $\log(error)$ a l'eix d'ordenades.

IV.- Per totes dues fórmules de derivació hi ha un pas òptim a partir del qual, si prenem valors de h més petits, els errors comencen a crèixer. Quin és aquest pas per F1? i per F2?

3.3 Sistemes lineals: mètodes iteratius

Siguin $A(N) = (a_{ij})_{N\times N}$ i $B(N) = (b_{i1})_{N\times 1}$ la matriu i el vector d'ordre N definits per

$$a_{ij} = \begin{cases} ij & |i-j| \leq 3\,, \\ 2 & i = j\,, \\ 0 & |i-j| > 3\,, \end{cases} \qquad \text{i} \qquad b_{i1} = \begin{cases} 1 & i = 1\,, \\ 0 & i \neq 1\,, \end{cases}$$

$$\text{per a } i = 1, \ldots, N\,, \quad j = 1, \ldots, N\,.$$

Es demana:

(a) Calculeu el determinant i el nombre de condició de les matrius $A(N)$. Comproveu la simetria d'aquestes matrius. Preneu a $\mathbf{N} = \mathbf{3}, ..., \mathbf{30}$.

(b) Fent ús d'un mètode directe de resolució de sistemes d'equacions lineals, determineu la solució X del sistema $A(N)X = B(N)$ fent ús de l'aritmètica de coma flotant de `Matlab` i arrodonint. Preneu $\mathbf{N} = \mathbf{3}, ..., \mathbf{30}$. Expliqueu els avantages i inconvenients del mètode per aquest cas concret.

(c) Fent ús d'un mètode iteratiu de resolució de sistemes d'equacions lineals, determineu la solució X del sistema $A(N)X = B(N)$ fent ús de l'aritmètica de coma flotant de `Matlab` i arrodonint. Preneu $\mathbf{N} = \mathbf{3}, ..., \mathbf{30}$. Prèviament feu un gràfic d'evolució del radi espectral de la matriu d'iteració del mètode escollit en funció de $\mathbf{N}$. Expliqueu els avantages i inconvenients del mètode per aquest cas concret.

3.4 Sistemes lineals: mínims quadrats

Sigui una funció no lineal $y = f(t)$, amb t una variable real, es vol aproximar f per un *polinomi quadràtic* de variable t. S'ha avaluat f en 6 punts, s'ha obtingut la taula següent:

t_i	8	10	12	16	20	40
y_i	0.88	1.22	1.64	2.72	3.96	11.96

(a) Plantejeu el problema de determinar els coeficients del polinomi com un sistema lineal $Ax = b$, i.e. definiu les components del vector d'incògnites x, expresseu A i b en funció de t_i i y_i per a $1 \leq i \leq 8$.

(b) Resoleu el problema fent ús de les equacions normals i la factorització LU de la matriu dels sistema d'equacions normals. Doneu la solució obtinguda i calculeu el vector residu.

(c) Determineu el polinomi interpolador en els tres primers punts donats, $t_i =$ 8, 10, 12. Doneu l'equació del polinomi resultant.

(d) Determineu el polinomi interpolador en els tres darrers punts donats, $t_i =$ 16, 20, 40.Doneu l'equació del polinomi resultant. (2p.)

(e) Avalueu els tres polinomis obtinguts en $t = 11.3$ i en $t = 29.0$ Comenteu les diferències entre els valors de les solucions trobades. Tots els resultats són creïbles? Quins us mereixen més confiança i per què.

Bibliografia

[1] Abramowitz, M. and Stegun, I.A. *Hanbook of Mathematical Functions*. Ed. Dover.

[2] Grau, Miquel i Noguera, Miquel. *Càlcul Numèric*. Edicions U.P.C. 1993

[3] Forshythe, G.E.; Malcom, M.A.; Moler, C. B. : *Computer Methods for Mathematical Computations*. Prentice Hall. 1977

[4] Moler, Cleve, *Numerical Computing with MATLAB*. Electronic edition: The MathWorks, Inc., Natick, MA, 2004.
`http://www.mathworks.es/moler/chapters.html`

[5] Help online de `Matlab`.