Pràctica 2: Zeros de funcions

Al final del document s'explica amb detall què (i quan) cal entregar en aquesta pràctica.

L'objectiu és trobar zeros de sistemes d'equacions no lineals $f(x) = 0$ (observeu que aquesta pràctica complementa la primera, on es resolien equacions lineals: $Ax - b = 0$).

Es farà servir una modificació (per a usar les funcions de la primera pràctica) del mètode de Newton; mètode iteratiu, i, en cada iteració se substitueix el problema de resoldre equacions no lineals en el problema de resoldre equacions lineals. Conseqüentment la primera pràctica ens serà molt útil, especialment a la segona part.

Primera Part: Cas d'una variable

Suposem que $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ és una funció derivable.

a) Escriviu una funció que implementi el mètode de Newton per trobar una solució de $f(x) = 0$ a partir d'una aproximació inicial donada (que suposarem propera al zero que estem buscant). La funció tindrà com a capçalera

```
int newton(double x, double *sol, double tol, int iter)
```

Així, a la funció se li passen com a paràmetres l'aproximació inicial `x`, la precisió demanada `tol` i el nombre màxim d'iterats permesos `iter`. El *mètode de Newton* en dimensió 1 s'escriu

$$x_0 = x, \quad x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n \geq 0$$

Les condicions de retorn de la funció són: si $|x_{n+1} - x_n| <$`tol` o $|f(x_n)| <$`tol`, l'últim iterat s'assignarà a la variable `*sol` i retorna 0; en canvi, si no es compleix alguna de les condicions abans de `iter` vegades o si $|f'(x_n)| <$`tol` retorna 1, indicant que no s'ha trobat una aproximació prou bona del zero.

b) També cal implementar les funcions que avaluen tant f com f' en un punt. Les funcions tindran, respectivament, les capçaleres

```
double f(double x)      double df(double x)
```

Aquestes contindran les diverses expressions dels exemples i caldrà comentar i descomentar-les adequadament per a treballar amb cadascun dels casos.

Exemples (cal que penseu una aproximació inicial x_0 en cada cas):

$$\begin{array}{ll} \text{(a) } f(x) = x^2 + \sin(x) - \pi, & \text{(b) } f(x) = 1 - \log(x) \\ \text{(c) } f(x) = \sqrt{x} - e^{-x}, & \text{(d) } f(x) = \sinh(x) - \sin(x) \end{array}$$

c) La funció `main` s'encarregarà de llegir la tolerància, el nombre màxim d'iteracions i l'aproximació inicial, cridarà `newton` i escriurà el resultat corresponent (quan no hi hagi situació d'error).

Aplicació: Trobar conques d'atracció de zeros de polinomis

Sigui $P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$ ($a_n \neq 0$) un polinomi de grau n. Se sap que totes les seves arrels reals (n'hi ha una quantitat entre 0 i n) estan a l'interval $I = [-M, +M]$ amb $M = 1 + \sum_{j=0}^{n-1} \left| \frac{a_j}{a_n} \right|$.

Donat un zero α de P, la seva conca d'atracció C_α és el conjunt de valors $x_0 \in \mathbb{R}$ tals que, quan apliquem el mètode de Newton amb aproximació inicial x_0, convergim a α. En general, una conca d'atracció és una reunió d'intervals.

L'objectiu és trobar els zeros de P i les seves conques d'atracció respectives. El procediment serà el següent: Donat un pas h (per exemple $2M/m, m = 10^3, 10^4, \ldots$), anem aplicant el mètode de Newton amb aproximacions inicials a l'interval I, separades una distància h.

Exemple: $P(x) = x^2 - 1$, $M = 2$. S'obté que si $x_0 \in [-2, -h]$ es convergeix a l'arrel -1, si $x_0 \in [h, 2]$ convergeix a l'arrel +1, i per $x_0 = 0$, no hi ha convergència.

Feu les modificacions al `main` anterior, amb les funcions `f` i `df` corresponents a cada exemple, i la funció `main` llegirà també la constant M, calculada prèviament a mà, i el pas h. Partint de $x_0 = -M$ i amb pas h anirà cridant `newton` i escrivint els resultats.

Apliqueu-ho als següents polinomis:

(a) $P(x) = x^2 - 1,\ M = 2$ (b) $P(x) = x^3 - x,\ M = 2$

(c) $P(x) = 3x^3 - x + 1,\ M = 5/3$ (d) $P(x) = x^4 + 1,\ M = 2$

(e) $P(x) = \prod_{i=1}^{6} (x - \frac{10i}{i+1}),\ M = ?$ (f) $P(x) = \prod_{i=1}^{6} (x - \frac{i+1}{10i}),\ M = ?$

Segona Part: Diverses variables

En la segona part de la pràctica volem resoldre un sistema d'equacions no lineals fent servir el mètode de Newton en diverses variables. Només considererem el cas de dimensió tres:

$$f_0(x_0, x_1, x_2) = 0 \;\; f_1(x_0, x_1, x_2) = 0 \;\; f_2(x_0, x_1, x_2) = 0$$

Si escrivim $f = (f_0, f_1, f_2)$ i $x = (x_0, x_1, x_2)$ volem resoldre $f(x) = 0$. Recordem que el mètode de Newton per funcions de diverses variables s'escriu com:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} - \Delta x^{(n)}$$

on $\Delta x^{(n)}$ és la solució del sistema lineal d'equacions

$$Df(x^{(n)}) \Delta x^{(n)} = f(x^{(n)}).$$

Aquí $Df(x^{(n)})$ és la matriu de les derivades parcials de la funció f (en aquest cas, 3×3).

Per tant per anar de $x^{(n)}$ a $x^{(n+1)}$ el que cal és resoldre el sistema lineal anterior. I un cop s'ha calculat $\Delta x^{(n)}$ simplement es substitueix $x^{(n)}$ per $x^{(n+1)} = x^{(n)} - \Delta x^{(n)}$. Però resoldre sistemes lineals és el que s'ha programat en la pràctica 1; com les funcions servien per a resoldre sistemes amb matrius simètriques es convertirà el sistema en

$$Df(x^{(n)})^t Df(x^{(n)})\Delta x^{(n)} = Df(x^{(n)})^t f(x^{(n)}).$$

i es podran usar les funcions de la primera pràctica. Assegureu-vos que la vostra funciona correctament.

Les capçaleres de les funcions de la primera part han de ser ara:

```
void F(double *x, double *f)     void dF(double *x, double **df)
   int newton3(double *x, double *sol, double tol, int iter)
```

O sigui, les diferències són: a cada iteració de Newton cal resoldre un sistema lineal usant `ldlt`, `resTsup` i `resTinf`; els valors absoluts en dimensió 1 s'han de substituir per la norma vectorial en dimensió 3 (i usar `norma2`); la condició sobre la derivada no cal avaluar-la ja que equival a no poder resoldre el sistema lineal. S'agafaran només valors inicials dins d'un cert "*cub*" donat $Q = \{(x_0, x_1, x_2) \in \mathbb{R}^3 \mid x_i \in [a_i, b_i]\}$.
Feu un `main` que llegeixi la tolerància, el nombre màxim d'iteracions i el cub; generi 100 condicions inicials a l'atzar (veure `void srand48(long int seed);` i `double drand48(void);`) dins del cub i, per a cada una, iteri el mètode de Newton i escrigui la solució on convergeix (si ho fa).

Apliqueu-ho als sistemes següents:

$$\left\{\begin{array}{c} x+y+z=1 \\ y+z=0 \\ x^2+0.75y=0 \end{array}\right., \; Q=[-1,1]^3 \qquad \left\{\begin{array}{c} x^2+y^2+z^2=1 \\ \frac{1}{4}(x-y)^2+(x+y)^2+z^2=1 \\ (x-y)^2+(x+y)^2+\frac{1}{4}z^2=1 \end{array}\right., \; Q=[-1,1]^3$$

Instruccions per a l'entrega

Abans de començar a fer la pràctica heu de crear un subdirectori anomenat:

grup-Cognom1Cognom2Nom-X

on

- grup: és el vostre grup de pràctiques en minúscules (pot ser a, b, o c).
- Cognom1Cognom2Nom: és el vostre primer cognom, segon cognom i nom.
- X: identifica el número de la pràctica (1, 2, 3, etc).

Exemple: `a-GonzalezRuizDolores-1` correspon a una alumna del grup a que fa la pràctica 1.
Aquest directori contindrà els arxius .c corresponents a les diverses parts:

a) Arxiu `prac2funs.c` que conté les funcions `resTinf`, `resTsup`, `ldlt`, `prodMatVec`, `prodMatMat`, `norma2`.

b) Arxiu `prac2a.c` que conté el programa principal de la primera part i les funcions `newton`, `f` i `df`.

c) Arxiu `prac2b.c` que conté el programa principal de l'aplicació "*conca*" i les funcions `newton`, `f` i `df`.

d) Arxiu `prac2c.c` que conté el programa principal de la segona part i les funcions `newton3`, `F`, `dF`.

e) Arxiu `prac2funs.h` que conté les **capçaleres** de les funcions de `prac2funs.c`, `srand48` , `drand48`, `newton`, `f`, `df`, `newton3`, `F` i `dF` per a usar un `#include` en els arxius .c

No es poden incloure funcions en els arxius tret de les que apareixen en el texte

Es crearà un arxiu comprimit del directori amb la comanda

```
tar -czvf a-GonzalezRuizDolores-2.tgz a-GonzalezRuizDolores-2
```

executada des del directori pare.

Entregar la pràctica vol dir el següent:

(1) Es penjarà el fitxer comprimit (.tgz) al campus virtual abans del **15 de desembre de 2019**.

Tots els arxius .c lliurats hauran de començar amb les dades de l'alumne en un comentari de la forma

```
/* COGNOM1: COGNOM2: NOM: DNI: */
```

Tots els programes hauran de compilar amb les opcions: `-ansi -pedantic -O -Wall`.
Lliurar un programa sense les dades personals (usant l'estil anterior), o amb algun error o avís (warning) de compilació, serà avaluat amb la qualificació mínima.

(2) Entregar un document (imprès) durant l'hora del laboratori del **18 de desembre de 2019** on es doni resposta argumentada a les diferents qüestions que es proposin en relació a la pràctica.