MS211, Cálculo Numérico, Turma C
Segundo Semestre 2018, IMECC-UNICAMP

Prova 2 - Resolução

(1) (Peso 3 pontos)

Considere os seguintes valores Y de uma onda na posição X

X	-1	0	1	2
Y	2.5	1.0	-0.7	-0.8

(a) Determine a melhor parábola $p(x) = a + bx + cx^2$ que aproxima a onda baseando-se nos dados acima. Usando este aproximante, qual é o valor da onda em $X = 3$?

Solução: Os coeficientes a, b e c de $p(x) = a + bx + cx^2$ que melhor aproximam os dados indicados na tabela são obtidos do sistema normal

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b},$$

onde

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & X_1 & X_1^2 \\ 1 & X_2 & X_2^2 \\ 1 & X_3 & X_3^2 \\ 1 & X_4 & X_4^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.5 \\ 1.0 \\ -0.7 \\ -0.8 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}.$$

O sistema normal resultante é dado por

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 6 \\ 2 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 18 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -4.8 \\ -1.4. \end{pmatrix},$$

com solução $\boldsymbol{y} = (0.73, -1.51, 0.35)^T$. O polinômio resultante é então escrito como $p(x) = 0.73 - 1.51x + 0.35x^2$. Agora, basta avaliar $p(x = 3) = 0.73 - 1.51(3) + 0.35(3)^2 = -0.65$.

(b) Responda a mesma pergunta anterior usando como aproximante a melhor curva $s(x) = a\sin(x + b) + c$.

Solução: Queremos obter os parâmetros a, b e c (não são os mesmos do item (a)) de modo que a curva $s(x) = a\sin(x+b)+c$ melhor se aproxima dos dados da tabela. Para tal, devemos minimizar o funcional descrito por

$$\Psi = \sum_{i=1}^{4} (Y_i - s(X_i))^2.$$

Os parâmeros ótimos a, b e c são obtidos a partir do ponto crítico de Ψ, isto é, a partir da resolução do seguinte sistema de equações não lineares

$$\boldsymbol{F} := \begin{cases} \dfrac{\partial \Psi}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial \Psi}{\partial b} = 0 \\ \dfrac{\partial \Psi}{\partial c} = 0 \end{cases} \tag{1}$$

Utilizando o procedimento iterativo de Newton, partindo de um valor inicial $\boldsymbol{y}^{(0)} = \left(a^{(0)}, b^{(0)}, c^{(0)}\right)^T$ e construindo a sequência dada por

$$\boldsymbol{y}^{(k+1)} = \boldsymbol{y}^{(k)} - \boldsymbol{J}^{(i)} \boldsymbol{F}^{(i)}, \tag{2}$$

com o Jacobiano $\boldsymbol{J}$, obtemos os valores desejados. Uma vez que os parâmetros a, b e c são obtidos, construimos $s(x) = a\sin(x+b) + c$ e avaliamos $s(x=3)$.

Alternativamente, podemos utilizar o procedimento de linearização, lembrando que

$$a\sin(x+b) = a\sin(b)\cos(x) + a\cos(b)\sin(x) = k_1\cos(x) + k_2\sin(x),$$

construindo um sistema normal $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$ com

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \cos(X_1) & \sin(X_1) & 1 \\ \cos(X_2) & \sin(X_2) & 1 \\ \cos(X_3) & \sin(X_3) & 1 \\ \cos(X_4) & \sin(X_4) & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5403023 & -0.8414710 & 1. \\ 1. & 0. & 1. \\ 0.5403023 & 0.8414710 & 1. \\ -0.4161468 & 0.9092974 & 1. \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.5 \\ 1.0 \\ -0.7 \\ -0.8 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{y} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ c \end{pmatrix}.$$

com $k_1 = a\sin(b)$ e $k_2 = a\cos(b)$. O sistema normal é dado por

$$\begin{pmatrix} 1.7570314 & -0.3784012 & 1.6644578 \\ -0.3784012 & 2.2429686 & 0.9092974 \\ 1.6644578 & 0.9092974 & 4. \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.3054616 \\ -3.4201451 \\ 2. \end{pmatrix} \tag{3}$$

com solução $\boldsymbol{y} = (0.0423579, -1.8871522, 0.9113699)^T$. Assim, obtido k_1 e k_2 avaliamos $a = 1.8876$ e $b = 1.5483$. Logo, a curva é descrita como
$s(x) = 1.8876\sin(x + 1.5483) + 0.91137$ e $s(x=3) = -0.9509$.

(2) (Peso 4 pontos)

Considere a função $f(x) = e^{-x} + \sin(x)$.

(a) Determine a expressão do polinômio $p_2(x)$ (de grau 2) interpolante a $f(x)$, que aproxima com o menor erro possível a função f no ponto $\dfrac{\pi}{2}$. Use somente os valores de $f(x)$ nos pontos: $0,\ 0.5,\ \dfrac{\pi}{3},\ 2\dfrac{\pi}{3},\ \pi$.

Solução:

Sabemos que o erro de interpolação num ponto x (no nosso caso $x = \frac{\pi}{2}$) é

$f(x) - p_2(x) = f[x_0, x_1, x_2, x] \displaystyle\prod_{i=0}^{2}(x - x_i)$ então o erro depende da distância dos três nós de interpolação x_0, x_1, x_2 escolhidos. Mas depende também da diferença dividida de ordem 3 $f[x_0, x_1, x_2, x]$. Os nós mais próximos são $(x_0, x_1, x_2) = (0.5, \frac{\pi}{3}, 2\frac{\pi}{3})$. Neste caso temos $|f[x_0, x_1, x_2, \frac{\pi}{2}] \prod_{i=0}^{2}(\frac{\pi}{2} - x_i)| = |-0.0895 \cdot 0.3| = 0.0268$.

Para ter a certeza que eles dão o erro menor de interpolação comparamos com uma outra escolha de nós proximos a $x = \frac{\pi}{2}$: $(x_0, x_1, x_2) = (\frac{\pi}{3}, 2\frac{\pi}{3}, \pi)$. Note que esta escolha poderia dar um erro menor se $f[x_0, x_1, x_2, \frac{\pi}{2}]$ (que aproxima a derivada terceira em $[\frac{\pi}{3}, \pi]$) fosse bastante menor respeito aquela da escolha anterior. Neste caso temos $|f[x_0, x_1, x_2, \frac{\pi}{2}] \prod_{i=0}^{2}(\frac{pi}{2} - x_i)| = |0.0349 \cdot 1.7226| = 0.0602$.

Sendo que a primeira escolha tem erro menor será a escolha melhor. O polinômio associado escrito na forma de Newton é

$$p_2(x) = f(0.5) + f[0.5, \frac{\pi}{3}](x - 0.5) + f[0.5, \frac{\pi}{3}, 2\frac{\pi}{3}](x - 0.5)(x - \frac{\pi}{3}).$$

(b) Qual é a expressão teórica do erro de interpolação $E_2(x) = f(x) - p_2(x)$ num ponto $x \in [0, \pi]$? Dar pelo menos uma forma do erro, explicando como pode ser deduzida teoricamente.

Verifique que o erro cometido no aproximar f em $\frac{\pi}{2}$ é menor da estimativa $\displaystyle\max_{z\in[0,\pi]} \frac{|f^{(3)}(z)|}{12}(1.0708)^3$.

Solução: O erro de interpolação no ponto x: $E_2(x) = f(x) - p_2(x)$, onde p_2 é o polinomio intermpolador a f em $x_0, x_1, x_2 \in [0, \pi]$ é $E_2(x) = f[x_0, x_1, x_2, x] \prod_{i=0}^{2}(\frac{\pi}{2} - x_i)$.

Demonstração teorica: Sabemos que o polinomio $p_{n+1}(y)$ interpolador a f em $x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}$, dado na forma de Newton é

$$\begin{aligned} p_{n+1}(y) = \quad & f(x_0) + f[x_0, x_1](y - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](y - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ & + f[x_0, \ldots, x_n] \prod_{i=0}^{n-1}(y - x_i) + f[x_0, \ldots, x_n, x_{n+1}] \prod_{i=0}^{n}(y - x_i) \end{aligned}$$

então vale que para cada y: $p_{n+1}(y) = p_n(y) + f[x_0, \ldots, x_n, x_{n+1}] \prod_{i=0}^{n}(y - x_i)$ onde p_n é o polinomio interpolador a f em $x_0, \ldots, x_n$. Portanto se usamos x_{n+1} igual ao $x \in [0, \pi]$ dado, temos que $p_{n+1}(y) = p_n(y) + f[x_0, \ldots, x_n, x_{n+1}] \prod_{i=0}^{n}(y - x_i)$.

Agora usando que $x_{n+1} = x$ é um nó de interpolação

$p_{n+1}(x) = f(x) = p_n(x) + f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$ portanto provamos que $f(x) - p_n(x) = f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$.

(c) Aproximar a integral de $f(x)$ em $[0, 5; \pi]$ usando a fórmula com dois trapézios repetidos (TRR) e a de Simpson (S).

Solução: Trapezio repetido: $x_0 = 0.5, x_1 = (0.5+\pi)/2 = 1.8208, x_2 = \pi$, $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = 1.3208$,

$$I_{TRR} = \frac{h}{2} * (f2(x_0) + 2 * f2((0.5+pi)/2) + f2(pi)) = 2.2393.$$

Simpson: $x_0 = 0.5, x_1 = (0.5+\pi)/2 = 1.8208, x_2 = \pi$, $h = (\pi - 0.5)/2 = 1.3208$,

$$I_S = \frac{h}{3} * (f(x_0) + 4 * f(x_1) + f(x_2)) = 2.4886.$$

- (∗) Qual fórmula é esperada ser mais acurada? Motive a sua resposta.

  Solução: O erro de Simpson é $E_h(f) = f^{(4)}(\xi)\frac{h^5}{90}$. O erro de trapezio repetido é

  $$E_{TRR}(f) = f''(\xi_1)\frac{h^3}{12} + f''(\xi_2)\frac{h^3}{12} = f''(\xi)\frac{h^3}{12}$$

  onde $\xi_1 \in [x_0, x_1]$, $\xi_1 \in [x_1, x_2]$ e, $\xi_3 \in [x_1, x_2]$ para o teorema da media é tal que $2f''(\xi_3) = f''(\xi_1) + f''(\xi_2)$, então $E_{TRR}(f) = f''(\xi_3)\frac{h^3}{6}$.
  Observamos que se bem $h = 1.3208 > 1$, temos que

  $$\frac{h^5}{90} = 0.0477 < \frac{h^3}{6} = 0.3804.$$

  Se vamos analizar também as derivadas temos: $f''(x) = e^{-x} - \sin x$, $f^{(4)} = e^{-x} + sin(x)$. Temos que $0 < |f^{(4)}(\xi)| < 1.236$ e $0 \le |f^{(4)}(\xi)| < 0.81$, então exceito que no caso raro que $f^{(4)}(\xi)$ seja muito perto de zero respeito $f^{(4)}(\xi)$, podemos dizer que o erro de Simpson é menor do trapezio.
  Este não acontece como se pode verificar sendo que o integral exato
  $I = [-e^{-x} - \cos(x)]_{x=0.5}^{x=\pi} = -e^{-\pi} + 1 + e^{-0.5} + \cos(0.5) = 2.4409$ é mais proximo a I_S que a I_{TRR}.

- Verificar numericamente, com a f dada, que os erros em valor absoluto da aproximação podem ser estimados (majorados) usando respetivamente as estimativas: (TRR) $\max_{z\in[0,5;\pi]} |f''(z)|\frac{(\pi-0.5)^3}{48}$; (S) $\max_{z\in[0,5;\pi]} |f^{(4)}(z)|\frac{(\pi-0.5)^5}{2880}$.

Por responder a (∗), pode utilizar as fórmulas:
erros do trapézio (não repetido) $|E_h(f)| = |f''(\xi)|\frac{h^3}{12}$;
erro de Simpson $|E_h(f)| = |f^{(4)}(\xi)|\frac{h^5}{90}$;
onde h é o espaçamento entre os pontos de quadratura utilizados na fórmula de integração considerada.

(3) (Peso 3 pontos) Considere o seguinte problema diferencial

$$\begin{cases} 2y'' - 4y' + 3xy = \sin x \\ y(0) = 1 \\ y'(0) = -1 \end{cases}$$

(a) Determine uma aproximação de $y(1)$ usando o método de Euler progressivo (Euler explícito) com espaçamento $h = 0.5$.

Solução: Vamos reescrever o PVI acima como um sistema de 2 equações diferenciais de primeira ordem juntamente com as condições iniciais

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = \dfrac{1}{2}\sin(x) - \dfrac{3}{2}xy + 2z \\ y(0) = 1 \\ z(0) = -1 \end{cases},$$

alternativamente escrito como

$$\begin{cases} Y' = F(x, Y) \\ Y(0) = Y_0 \end{cases},$$

onde

$$Y = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} z \\ \frac{1}{2}\sin(x) - \frac{3}{2}xy + 2z \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad Y_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Vamos aplicar Euler progressivo utilizando $h = 0.5$.

Para $k = 1$:

$$Y_1 = Y_0 + hF(x_0, Y_0) = \begin{pmatrix} y_0 \\ z_0 \end{pmatrix} + 0.5 \begin{pmatrix} z_0 \\ \frac{1}{2}\sin(x_0) - \frac{3}{2}x_0y_0 + 2z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ -2.0 \end{pmatrix}.$$

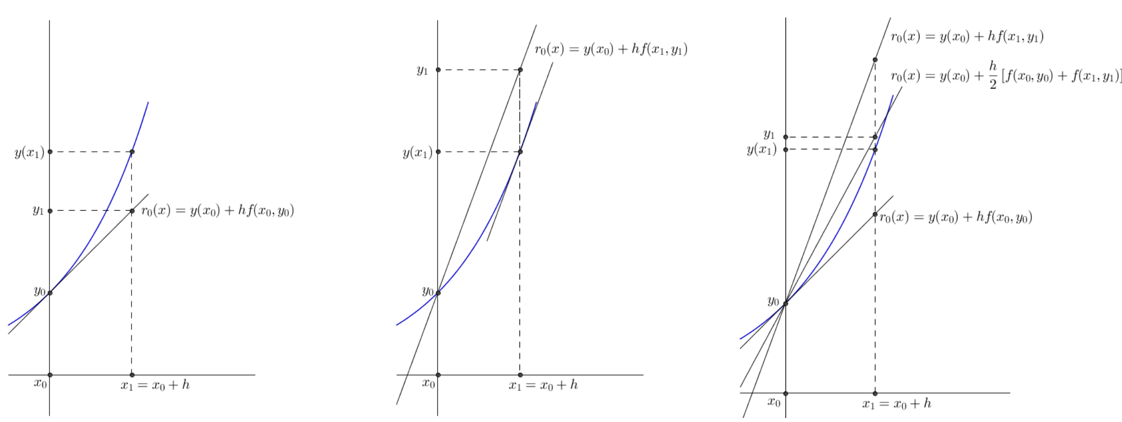
Para $k = 2$:

$$Y_2 = Y_1 + hF(x_1, Y_1) = \begin{pmatrix} y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} + 0.5 \begin{pmatrix} z_1 \\ \frac{1}{2}\sin(x_1) - \frac{3}{2}x_1y_1 + 2z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.5 \\ -4.0676 \end{pmatrix}.$$

Assim, a aproximação de $y(1)$ usando o método de Euler progressivo com espaçamento $h = 0.5$ é $y_2 = -0.5$.

(b) Explicar graficamente como funciona o método de Euler progressivo (explícito), de Euler regressivo (implícito) e de Crank Nicolson para um problema diferencial geral do tipo $y' = f(x, y)$ com $y(x_0) = y_0$.

Solução: Da direita para a esquerda temos a representação geométrica dos métodos de Euler progressivo, regressivo e de Crank-Nicolson:



(c) Descreva uma estratégia numérica para aproximar $y(1)$, onde $y = y(x)$ é solução do problema diferencial

$$\begin{cases} 2y'' - 4y' + 3xy = \sin x \\ y(0) = 1 \\ y(2) = -2 \end{cases}$$

Solução: Queremos resolver o problema diferencial de contorno (PVC) acima com condições de Dirichlet. Para tal, vamos utilizar uma malha de espaçamento uniforme h e as seguintes aproximações (de segunda ordem) para a primeira e segunda derivada de y nos pontos interiores

$$y'(x_j) \approx \frac{1}{2h}\left(y_{j+1} - y_{j-1}\right) \tag{4}$$

$$y''(x_j) \approx \frac{1}{h^2}\left(y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}\right). \tag{5}$$

Vamos dividir o domínio $x \in (0, 2)$ do problema proposto em $m + 1$ subintervalos (com m pontos interiores) de espaçamento uniforme $h = 2/(m + 1)$ onde

$$x_j = jh, \quad y_j \approx y(x_j) \quad \text{para} \quad 0 \leq j \leq m + 1.$$

Por conveniência vamos exigir que m seja uma quantidade ímpar, de modo que nossa aproximação para $y(1)$ possa ser construida como $y_k \approx y(x_k)$ onde $x_k = 1$ e $k = (m + 1)/2$.

Note que, para cada j temos a igualdade

$$2y_j'' - 4y_j' + 3x_j y_j = \sin(x_j).$$

Substituindo as aproximações (4) e (5) para a primeira e segunda derivadas na equação diferencial obtemos, para cada $1 \leq j \leq m$, a igualdade

$$2\left[\frac{y_{j-1} - 2y_j + y_{j+1}}{h^2}\right] - 4\left[\frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h}\right] + 3x_j y_j = \sin(x_j),$$

onde, após algumas manipulações resulta em

$$\frac{1}{h^2}\left[2(1 + h)y_{j-1} + (3x_j h^2 - 4)y_j + 2(1 - h)y_{j+1}\right] = \sin(x_j).$$

As equações para $1 \leq j \leq m$ descritas anteriormente constituem um sistema de equações lineares (cuja solução é o que buscamos) dada matricialmente por

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f},$$

onde

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 3x_1h^2 - 4 & 2(1-h) & & & & \\ 2(1+h) & 3x_2h^2 - 4 & 2(1-h) & & & \\ & 2(1+h) & 3x_3h^2 - 4 & 2(1-h) & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 2(1+h) & 3x_{m-1}h^2 - 4 & 2(1-h) \\ & & & & 2(1+h) & 3x_mh^2 - 4 \end{bmatrix}$$

$$
\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{m-1} \\ y_m \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{f} = \begin{bmatrix} \sin(x_0) - \dfrac{1}{h^2} 2(1+h) y_0 \\ \sin(x_1) \\ \sin(x_2) \\ \vdots \\ \sin(x_{m-1}) \\ \sin(x_m) - \dfrac{1}{h^2} 2(1-h) y_{m+1} \end{bmatrix}
$$

sendo $y_0 = 1$ e $y_{m+1} = -2$ as condições de contorno impostas (conhecidas).