MS211, Cálculo Numérico, Turma C
Segundo Semestre de 2023, UNICAMP

Prova 2

Pode usar a calculadora. Cada questão $(1)\dots(4)$ **tem peso** 2.5**.**

(1) Deseja se aproximar numericamente a solução de $y(x)$ em $x = 2$ solução do seguinte problema diferencial usando um método numérico de segunda ordem

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

- Escrever a iteração genérica do método de segunda ordem escolhido e depois aplique as iterações para poder chegar a aproximação de $y(2)$, especificando o passo h escolhido.
- Se usar o passo $h/2$ porque pode esperar de ter uma aproximação melhor de $y(2)$? Motive a sua resposta.

(2) Dada a função $\varphi(x) = 1 + x^2$ determine, usando um método dos quadrados mínimos, a melhor reta que aproxima a função $\varphi(x)$ no intervalo $[-2, 0]$.

(3) Dada a seguinte sequencia de pontos

x	-1	0	3	4	5
y	-2	1	-3	-8	-10

Determine o melhor polinômio interpolador de grau até 2 no intervalo $[-1, 4]$.
Qual é a estimativa do erro $|p(x) - y(x)|$ obtida com este polinômio no ponto $x = 1.5$?

Para responder a esta pergunta precisa:

- escrever o polinômio interpolador de grau 2 para dados nós de interpolação
- conhecer a forma associada do erro de interpolação
- escolher os melhores nós de interpolação que minimizam o erro de interpolação no intervalo $[-1, 4]$

(4) Aproxime a integral em $[0; \pi]$ da função $f(x) = x\sin(x)$ usando as seguintes formulas:

- Trapézio
- Simpson
- Retângulo centrado (regra do ponto médio)

Qual formula é esperada ser a mais acurada? Motive a sua resposta.

Algumas Fórmulas

$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k L_k(x)$, onde $L_k(x) = \prod_{j=0,\ j\neq k}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$, $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f[x_0, \ldots, x_k] \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j)$

$\left| f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \right| \leq \frac{h^{n+1}}{4(n+1)} M_{n+1}, \quad f[x_0, x_1, \ldots, x_n, x] = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$,
onde $x, \xi_x \in (x_0, x_n)$.

$f[x_0, \ldots, x_k] = \frac{f[x_1, \ldots, x_k] - f[x_0, \ldots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}$.

$I \approx \frac{h}{2}\{f(x_0) + 2[f(x_1) + \cdots + f(x_{n-1})] + f(x_n)\}$,

$I \approx \frac{h}{3}\{f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\}$,

$I \approx \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$

$I \approx \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$

$I \approx h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i), \quad I \approx h \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\ , \quad I \approx h \sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$.

$|E| \leq \frac{h^2}{2} M_1, \quad M_1 = \max_{x\in[a,b]}\ |f'(x)|$

$|E| \leq \frac{h^3}{12} M_2,\ \ M_2 = \max_{x\in[a,b]}\ |f''(x)|$

$|E| \leq \frac{h^3}{24} M_2,\ \ M_2 = \max_{x\in[a,b]}\ |f''(x)|$

$|E| \leq \frac{h^5}{90} M_4,\ \ M_4 = \max_{x\in[a,b]}\ |f^{(IV)}(x)|$, $h = \frac{b-a}{2}$

$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hf(x_i, y_i))]$,

$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}))$

$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}, \quad y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h}, \quad y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}, \quad y'(x_i) \approx -\frac{3y_i - 4y_{i+1} + y_{i+2}}{2h}$

$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$.

Resolução Questão 1

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

• Vamos utilizar o método de Crank-Nicolson que é de segunda ordem para resolver este problema de valor inicial. Sabemos que os métodos implícitos são sempre estáveis para qualquer h. Portanto não temos alguma condição de estabilidade sobre h para verificar. Sabemos que o método será sempre mais acurado quando escolhemos h que tende a zero. Em particular no nosso problema vale que o erro do método para aproximar $y(2)$ satisfaz: $|y(2) - y_{\bar{k}}| \leq Ch^2$ quando h é suficientemente pequeno. Isso acontece porque Crank-Nicolson é um metodo de segunda ordem.

Sendo $f(x, y) = -y + 2$ linear em y, o método pode ser aplicado explicitamente como seguir :

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})) \\ &= y_i + \frac{h}{2}(-y_i + 2 - y_{i+1} + 2) \\ &= y_i - \frac{h}{2}y_i - \frac{h}{2}y_{i+1} + 2h \\ &\Longrightarrow \left(1 + \frac{h}{2}\right) y_{i+1} = \left(1 - \frac{h}{2}\right) y_i + 2h \\ &\Longrightarrow y_{i+1} = \frac{1}{1 + \frac{h}{2}} \left[\left(1 - \frac{h}{2}\right) y_i + 2h\right] \end{aligned}$$

Iremos aproximar $y(2)$ utilizando o método de Crank-Nicolson com um tamanho de passo $h = 0.5$. Este passo garante que partindo de $x_0 = 1$ chegaremos a $x = 2$ depois dois passos: $x_0 = 1, x_1 = x_0 + h = 1.5, x_2 = x_1 + h = 2$.

$$x_0 = 1 \text{ e } y(x_0) = y(1) = y_0 = 0,$$

$$x_1 = 1.5 \text{ e } y(x_1) \approx y_1 = \frac{1}{1 + \frac{h}{2}} \left[\left(1 - \frac{h}{2}\right) y_0 + 2h\right] = \frac{1}{1 + \frac{0.5}{2}} \left[\left(1 - \frac{0.5}{2}\right) \times 0 + 2 \times 0.5\right] = \frac{4}{5} = 0.8 \text{ e}$$

$$x_2 = 2 \quad y(x_2) \approx y_2 = \frac{1}{1 + \frac{h}{2}} \left[\left(1 - \frac{h}{2}\right) y_1 + 2h\right] = \frac{1}{1 + \frac{0.5}{2}} \left[\left(1 - \frac{0.5}{2}\right) \times \frac{4}{5} + 2 \times 0.5\right] = \frac{4}{5}\left[\frac{3}{5} + 1\right] = \frac{32}{25} = 1$$

Portanto, $y(2) \approx 1.28$ utilizando o método de Crank-Nicolson com passo $h = 0.5$. Nesse caso, conhecemos a solução analítica, em que $y(x) = 2 - 2e^{1-x}$, e podemos comparar os resultados obtidos, conforme mostra a Tabela a seguir.

$\mathbf{k}$	$\mathbf{x_k}$	$\mathbf{y_k}$	$\mathbf{y(x_k)}$	$\mathbf{\lvert y(x_k) - y_k \rvert}$
0	1	0	0	0
1	1.5	0.8	0.7869	0.0131
2	2	**1.28**	1.2642	0.0158

• Se usarmos o tamanho de passo $\dfrac{h}{2}$, isto é, $h = 0.25$, teremos uma aproximação melhor. De fato, por o que foi escrito antes se h for suficientemente pequeno (pelo menos $h < 1$) então é esperado que o erro diminui. porque vale para h pequeno que $|y(2) - y_{\bar{k}}| \leq Ch^2$. Quando usamos $h = 0.25$ obteremos $x_{\bar{k}} = 2$ para $\bar{k}$ tal que $2 = x_0 + \bar{k}h = 1 + \bar{k}h$ ou seja se $\bar{k} = \frac{2-1}{h} = \frac{2-1}{0.25=4}$ Então depois $\bar{k}$ passos do método de Crank-Nicolson com $h = 0.25$ vamos poder aproximar $y(2)$:

$$x_0 = 1 \ \text{ e } \ y(x_0) = y(1) = y_0 = 0,$$

$$x_1 = 1.25 \ \text{ e } \ y(x_1) \approx y_1 = \frac{1}{1+\frac{h}{2}}\left[\left(1-\frac{h}{2}\right)y_0 + 2h\right] = \frac{1}{1+\frac{0.25}{2}}\left[\left(1-\frac{0.25}{2}\right)\times 0 + 2\times 0.25\right] = 0.4444,$$

$$x_2 = 1.5 \ \text{ e } \ y(x_2) \approx y_2 = \frac{1}{1+\frac{h}{2}}\left[\left(1-\frac{h}{2}\right)y_1 + 2h\right] = \frac{1}{1+\frac{0.25}{2}}\left[\left(1-\frac{0.25}{2}\right)\times 0.4444 + 2\times 0.25\right] = 0.7901,$$

$$x_3 = 1.75 \ \text{ e } \ y(x_2) \approx y_2 = \frac{1}{1+\frac{h}{2}}\left[\left(1-\frac{h}{2}\right)y_2 + 2h\right] = \frac{1}{1+\frac{0.25}{2}}\left[\left(1-\frac{0.25}{2}\right)\times 0.7901 + 2\times 0.25\right] = 1.059 \ \text{ e}$$

$$x_4 = 2 \ \text{ e } \ y(x_2) \approx y_2 = \frac{1}{1+\frac{h}{2}}\left[\left(1-\frac{h}{2}\right)y_3 + 2h\right] = \frac{1}{1+\frac{0.25}{2}}\left[\left(1-\frac{0.25}{2}\right)\times 1.059 + 2\times 0.25\right] = 1.2681.$$

Logo, $y(2) \approx 1.2681$ utilizando o método de Crank-Nicolson com $h = 0.25$, conforme mostra a Tabela a seguir.

$\mathbf{k}$	$\mathbf{x_k}$	$\mathbf{y_k}$	$\mathbf{y(x_k)}$	$\mathbf{\lvert y(x_k) - y_k \rvert}$
0	1	0	0	0
1	1.25	0.4444	0.4424	0.002
2	1.5	0.7901	0.7869	0.0032
3	1.75	1.059	1.05527	0.00373
4	2	**1.2681**	1.2642	0.0039

Note que o erro para $\dfrac{h}{2}$ foi de 0.0039, que é menor do que o erro de 0.0158 para o tamanho de passo h escolhido. Note que o erro com este $h = 0.25$ é quase um quarto do erro feito com $h = 0.5$, isso confirme que o metodo de Crank-Nicolson tem ordem 2. Confirmamos que a aproximação de $y(2)$ é melhor ao diminuir o tamanho de passo.

Resolução Questão 2

Para determinar a melhor reta $y(x) = a + bx$, usamos o método dos quadrados mínimos contínuo com $n = 2$, que usa $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$. Assim teremos $y(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x)$, com $\alpha_1 = a$ e $\alpha_2 = b$. O sistema linear $A\alpha = \beta$ para resolver tem dimensão 2, com

$$A = \begin{bmatrix} < g_1, g_1 > & < g_1, g_2 > \\ < g_2, g_1 > & < g_2, g_2 > \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{-2}^{0} g_1^2(x)dx & \int_{-2}^{0} g_1(x)g_2(x)dx \\ \int_{-2}^{0} g_2(x)g_1(x)dx & \int_{-2}^{0} g_2^2(x)dx \end{bmatrix} \ \text{ e}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} < \varphi, g_1 > \\ < \varphi, g_2 > \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{-2}^{0} \varphi(x)g_1(x)dx \\ \int_{-2}^{0} \varphi(x)g_2(x)dx \end{bmatrix}.$$

Assim,

$$a_{11} = \int_{-2}^{0} g_1^2(x)dx = \int_{-2}^{0} dx = -2,$$

$$a_{12} = a_{21} = \int_{-2}^{0} g_1(x)g_2(x)dx = \int_{-2}^{0} xdx = \frac{x^2}{2}\,|_{-2}^{0} = -\frac{(-2)^2}{2} = -2,$$

$$a_{22} = \int_{-2}^{0} g_2^2(x)dx = \int_{-2}^{0} x^2dx = \frac{x^3}{3}\,|_{-2}^{0} = -\frac{(-2)^3}{3} = \frac{8}{3},$$

$$\beta_1 = \int_{-2}^{0} \varphi(x)g_1(x)dx = \int_{-2}^{0} (1+x^2)\times 1dx = \int_{-2}^{0} dx + \int_{-2}^{0} x^2dx = +2 + \frac{8}{3} = \frac{14}{3},$$

$$\beta_2 = \int_{-2}^{0} \varphi(x)g_2(x)dx = \int_{-2}^{0} (1+x^2)\times xdx = \int_{-2}^{0} xdx + \int_{-2}^{0} x^3dx = -2+\frac{x^4}{4}\,|_{-2}^{0} = -2-\frac{(-2)^4}{4} = -2-\frac{16}{4}-6.$$

O sistema para resolver é então

$$\begin{bmatrix} -2 & -2 \\ -2 & \frac{8}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{14}{3} \\ -6 \end{bmatrix}$$

A solução é $\alpha_1 = -\frac{1}{21} \approx -0.0476$ e $\alpha_2 = -\frac{32}{14} \approx -2.2857$. Portanto, a melhor reta que aproxima φ é $y(x) = -\frac{1}{21} - \frac{32}{14}x$ no intervalo $[-2, 0]$.

A figura 1 a seguir mostra o plot da função junto com a aproximação linear obtida.

Resolução Questão 3

Queremos aproximar o valor de y em $\overline{x} = 1.5$ usando interpolação polinomial. Em particular, precisamos achar o polinômio de grau 2 tal que $p(\overline{x})$ seja o mais próximo de $y(\overline{x})$.

Como queremos uma boa aproximação e a escolha dos nós é livre, uma boa escolha é considerar x_0, x_1 e x_2 próximos de $\overline{x}$. Isso acontece porque o erro é proporcional às distâncias $|\overline{x} - x_k|$. Então, observando que $|1.5-(-1)| = 2.5$, $|1.5-0| = 1.5$, $|1.5-3| = 1.5$, $|1.5-4| = 2.5$ e $|1.5-5| = 3.5$ então temos quatro pontos x_k mais próximos onde conhecemos o valor. Escolhendo $x_0 = -1$, $x_1 = 0$ e $x_2 = 3$, o polinômio interpolador p será

$$p(x) = y(x_0) + y[x_0, x_1](x - x_0) + y[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1).$$

Construindo a tabela das diferenças divididas, temos que

$\mathbf{x}$	$\mathbf{y(x)}$	$\mathbf{y[x_i, x_j]}$	$\mathbf{y[x_i, x_j, x_k]}$
$x_0 = -1$	-2		
$x_1 = 0$	1	$\frac{1-(-2)}{0-(-1)} = 3$	
$x_2 = 3$	-3	$\frac{-3-1}{3-0} = -\frac{4}{3}$	$\frac{-\frac{4}{3}-3}{3-(-1)} = -\frac{13}{12}$

Logo,

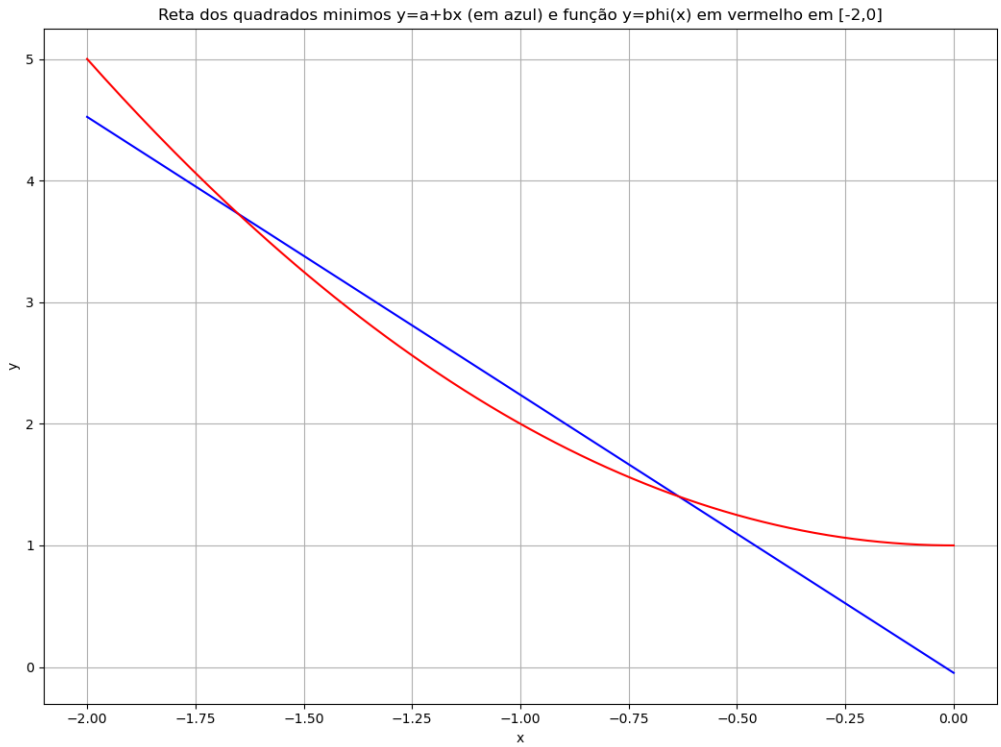

Figura 1: Questão 2: Reta dos quadrados minimos achada e função $\phi(x) = 1 + x^2$ em $[-2, 0]$

$$\begin{aligned} p(x) &= -2 + 3(x - (-1)) - \frac{13}{12}(x - (-1))(x - 0) \\ &= -2 + 3(x + 1) - \frac{13}{12}x(x + 1) = 1 + \frac{23}{12}x - \frac{13}{12}x^2 \end{aligned}$$

Portanto, $p(\overline{x}) = p(1.5) = 1.4375 \approx y(1.5)$. O erro cometido nessa aproximação é dado por

$$|y(\overline{x}) - p(\overline{x})| \leq \prod_{j=0}^{2} |\overline{x} - x_j| \max_z |y[x_0, x_1, x_2, z]|.$$

Para encontrar uma estimativa de $\max_z |y[x_0, x_1, x_2, z]|$, iremos considerar todas as diferenças divididas de ordem 3 definidas dos x_k ordenados em ordem crescente como se segue

$\mathbf{x}$	$\mathbf{y(x)}$	$\mathbf{y[x_i, x_j]}$	$\mathbf{y[x_i, x_j, x_k]}$	$\mathbf{y[x_i, x_j, x_k, x_l]}$
$x_0 = -1$	-2			
$x_1 = 0$	1	3		
$x_2 = 3$	-3	$-\dfrac{4}{3}$	$\dfrac{-\frac{4}{3} - 3}{3 - (-1)} = -\frac{13}{12}$	
4	-8	$\dfrac{-8 - (-3)}{4 - 3} = -5$	$\dfrac{-5 - (-\frac{4}{3})}{4 - 0} = -\dfrac{11}{12}$	$\dfrac{-\frac{11}{12} - (-\frac{13}{12})}{4 - (-1)} = \dfrac{1}{30}$
5	-10	$\dfrac{-10 - (-8)}{5 - 4} = -2$	$\dfrac{-2 - (-5)}{5 - 3} = \dfrac{3}{2}$	$\dfrac{\frac{3}{2} - (-\frac{11}{12})}{5 - 0} = \dfrac{29}{60}$

Assim, a maior diferença dividida de ordem 3 em módulo é $\dfrac{29}{60} \approx 0.4833$. Logo, uma estimativa do erro feito no aproximar $y(1.5)$ com $p(1.5)$ é

$$\begin{aligned} |y(1.5) - p(1.5)| &\leq \prod_{j=0}^{2} |1.5 - x_j| \times \frac{29}{60} \\ &= |1.5 - (-1)||1.5 - 0||1.5 - 3|\frac{29}{60} \\ &= \frac{87}{32} \approx 2.7186. \end{aligned}$$

Portanto, $y(1.5) \approx 1.4375$ com um erro que pode chegar até a 2.7186, isto é,

$$y(1.5) \approx 1.4375 \pm 2.7186.$$

Resolução Questão 4

Considere $I = \int_0^\pi xsin(x)dx$. O valor exato da integral é $\pi \approx 3.141593$, com 6 dígitos.

• Utilizando a fórmula da quadradura do Trapézio $I \approx \dfrac{h}{2}[f(a) + f(b)]$, com $a = 0$, $b = \pi$ e $h = b - a = \pi$, temos que

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{h}{2}[f(a) + f(b)] \\ &\approx \frac{\pi}{2}[0\sin(0) + \pi\sin(\pi)] \\ &\approx \frac{\pi}{2} \times 0 \\ &\approx 0. \end{aligned}$$

Note que o erro cometido foi de

$$|E_h| = |I - I_{aprox}| = |\pi - 0| = \pi \approx 3.141593$$

A estimativa do erro da formula do trapézio (sem usar o valor exato) é

$$|E_h| \leq \frac{h^3}{12}M_2 = \frac{\pi^3}{12}\max_{x\in[0,\pi]}|(x\sin(x))''| \leq \frac{\pi^3}{12}(2 + \pi) \approx 13.285$$

onde usamos $h = b - a = \pi$.

- Utilizando a fórmula de quadratura de Simpson ($\frac{1}{3}$ Simpson)

$$I \approx \frac{h}{3}[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)],$$

com $a = 0$, $b = \pi$ e $h = \dfrac{b-a}{2} = \dfrac{\pi}{2}$, segue que

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{h}{3}[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)] \\ &\approx \frac{\pi}{6}[0sin(0) + 4 \times \frac{\pi}{2}sin\left(\frac{\pi}{2}\right) + \pi sin(\pi)] \\ &\approx \frac{\pi}{6} \times 2\pi \\ &\approx \frac{\pi^2}{3}. \end{aligned}$$

Note que o erro cometido foi de

$$|E_h| = |I - I_{aprox}| = \left|\pi - \frac{\pi^2}{3}\right| \approx |3.141593 - 3.28987| = 0.148277.$$

A estimativa do erro da formula de Simpson é

$$|E_h| \leq \frac{h^5}{90}M_4 = \frac{\pi^5}{2880}\max_{x\in[0,\pi]}|(x\sin(x))''''| \leq \frac{\pi^5}{2880}(4+\pi) \approx 0.7588.$$

onde usamos $h = \frac{b-a}{2} = \frac{\pi}{2}$. Então era mesmo esperado que Simpson dava um erro menor respeito ao Trapézio. Note que este acontece se bem estamos usando um $b - a > 1$.

- Utilizando a fórmula de quadratura do Retângulo Centrado, ou do Ponto Médio, $I \approx (b-a)f\left(\dfrac{a+b}{2}\right)$, com $a = 0$ e $b = \pi$, obtemos que

$$\begin{aligned} I &\approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \\ &\approx (\pi - 0)\left(\frac{\pi}{2}sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) \\ &\approx \pi \times \frac{\pi}{2} \\ &\approx \frac{\pi^2}{2}. \end{aligned}$$

Note que o erro cometido foi de

$$|E_h| = |I - I_{aprox}| = \left|\pi - \frac{\pi^2}{2}\right| \approx |3.141593 - 4.934803| = 1.79321.$$

A estimativa do erro da formula do Ponto médio é

$$|E_h| \leq \frac{h^3}{24} M_2 = \frac{\pi^3}{24} \max_{x \in [0,\pi]} |(x \sin(x))''| \leq \frac{\pi^3}{24}(2+\pi) \approx 6.6425.$$

Portanto, o método mais acurado resulta ser o método de Simpson, como esperado da analise das estimativas dos erros dos metodos e que foi também confirmado usando o valor exato do integral.