MS211 - Atividade 06 - Turmas L e M - Gabarito

Questão 1: Considere o seguinte Problema de Valor de Contorno (PVC), $y = y(x) \in \mathbb{R}$:

$$(\star)\begin{cases} y'' = y' - y, & -1 < x < 3, \\ y(-1) = 2, & \\ y(3) + \alpha y'(3) = 4, & \alpha \in \mathbb{R}, \text{ uma constante.} \end{cases}$$

(a) Seja $\alpha = 0$.

a.1) Para o PVC $(\star)$, calcule numericamente uma aproximação da solução em $x = 0$, ou seja,$y(0)$, usando um método de diferenças finitas de segunda ordem e para os espaçamentos: $h = 1/2$, $h = 1/4$ e $h = 1/10$.

a.2) Depois, compare os resultados obtidos no item a.1), indicando o comportamento do erro para os valores de h indicados. Para efeito de comparação das aproximações obtidas $y(0)$, compare os erros para cada, valor de h com o valor $y(0)$, obtido pelo método no caso $h = 1/50$. Justifique sua resposta.

(b) Seja $\alpha = 1$.

b.1) Escreva o sistema linear associado ao método de diferenças finitas da segunda ordem para resolver o PVC $(\star)$), considerando um espaçamento arbitrário $h > 0$.

Dica: Atenção com as equações dos pontos interiores e, em especial, com as equações resultantes das aproximações dos extremos do contorno, ou seja, em $x = -1$ e x=3.

b.2) Considerando o item b.1), use $h = 0.1$ e calcule uma aproximação de y em $x = 0$.

Dica: Procure tirar proveito da estrutura do sistema linear resultante para a escolha do método numérico para sua resolução.

Solução:

(a) Para $\alpha = 0$, o PVC $(\star)$ pode ser escrito como:

$$(\star)\begin{cases} y'' = y' - y, & -1 < x < 3, \\ y(-1) = 2, & \\ y(3) = 4, & \alpha \in \mathbb{R}, \text{ uma constante.} \end{cases}$$

Este problema de contorno é associado a equação diferencial $y'' = y' - y$, no domínio $[x_0, x_n] = [-1, 3]$ e com valores de contorno $y_0 = y(-1) = 2$ e $y_n = y(3) = 4$. Sabemos que, se distanciarmos os pontos x_i no intervalo $[-1, 3]$, com espaçamento fixo h, obtemos $x_1 = x_0 + h$, $x_n = x_0 + nh$, ou seja, temos $n+1$ pontos, com $x_0 = -1$ e $x_1, \ldots, x_n$ equidistantes em $[x_0, x_n]$, com $n = \frac{x_n - x - 0}{h} = \frac{4}{h}$. (xn-x0)/h

a.1) Como, no nosso problema, os espaçamentos são $h = 1/2, 1/4$ e $1/10$, temos $n = 8, 16$ e 40, respectivamente. Além disso, queremos determinar uma aproximação de $y(x)$ no ponto x_{\bar{n}}

$\bar{x} = 0$. Como $\bar{x} \in [-1, 3]$, o mesmo é um ponto da malha $\{x_i\}_{i=0,\dots,n}$ construída com espaçamento h. Então, existe $\bar{n}$ tal que $\bar{x} = x\bar{n} = x_0 + \bar{n}h$. Dessa forma, devemos ter $\bar{n} = \frac{\bar{x}-x_0}{h} = \frac{1}{h}$ inteiro e, para $h = 1/2, 1/4$ e $1/10$, obtemos $\bar{n} = 2, 4$ e 10, respectivamente, e devemos determinar y_2, y_4 e y_{10}.

Para determinarmos tais $y_{\bar{n}}$ usamos um método de diferenças finitas de segunda ordem aplicado a equação diferencial do problema. Aproximamos as derivadas com as seguintes fórmulas centradas:

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

Então, o método aplicado a equação diferencial nos pontos $x_1 = x_0 + ih$, com $i = 1, \dots, n-1$ é:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + y_i = 0.$$

Multiplicando por h^2, obtemos

$$y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} - \frac{h}{2}(y_{i+1} - y_{i-1}) + h^2 y_i = 0.$$

Reagrupando os termos, chegamos a

$$(1 + h/2)y_{i-1} + (h^2 - 2)y_i + (1 - h/2)y_{i+1} = 0,$$

para cada $i = 1, \dots, n-1$.

Para $i = 1$:

$$(1 + h/2)y_0 + (h^2 - 2)y_1 + (1 - h/2)y_2 = 0.$$

Como $y_0 = y(-1) = 2$, temos

$$(h^2 - 2)y_1 + (1 - h/2)y_2 = -2(1 + h/2) = -2 - h.$$

Para $i = n - 1$:

$$(1 + h/2)y_{n-2} + (h^2 - 2)y_{n-1} + (1 - h/2)y_n = 0.$$

Como $y_n = y(3) = 4$, temos

$$(1 + h/2)y_{n-2} + (h^2 - 2)y_{n-1} = -4(1 - h/2) = 2(h - 2).$$

Então, obtemos o seguinte sistema linear, de dimensão $n - 1$, $Ay_h = b$, com

$$A = \begin{bmatrix} h^2 - 2 & 1 - h/2 & & & & \\ 1 + h/2 & h^2 - 2 & 1 - h/2 & & & \\ & 1 + h/2 & h^2 - 2 & 1 - h/2 & & \\ & & & \dots & & \\ & & & 1 + h/2 & h^2 - 2 & 1 - h/2 \\ & & & & 1 + h/2 & h^2 - 2 \end{bmatrix},$$

$$y_h = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad b = \begin{bmatrix} -2-h \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 2(h-2) \end{bmatrix}.$$

Este sistema tridiagonal pode ser resolvido eficientemente com o algoritmo de Thomas, mas vamos verificar se podemos resolvê-lo utilizando os métodos iterativos de Gauss-Jacobi e Gauss-Seidel. Dessa forma, vamos verificar se a matriz A satisfaz ao critério das linhas estrito:

$$|a_{i,i}| = |h^2 - 2| = h^2 - 2$$

$$|a_{i,i-1}| + |a_{i,i+1}| = |1 + h/2| + |1 - h/2| = 1 + h/2 + 1 - h/2 = 2.$$

Então, para que ocorra $h^2 - 2 > 2$, devemos ter $h > 2$, o que não ocorre no nosso caso. Então, vamos utilizar métodos diretos para a resolução do problema. Logo, utilizando o Wolfram Mathematica®, o qual utiliza o método de Runge-Kutta de quarta ordem para a resolução das equações diferenciais, temos os seguintes resultados:

h	n	$y_h(0)$	$\lvert y_W(0) - y_h(0)\rvert$
1/2	8	-5.7457	1.7797
1/4	16	-7.0257	0.4997
1/10	40	-7.4426	0.0828
Wolfram	$--$	-7.5254	$--$

O comportamento das soluções é apresentado nos gráficos da Figura 1:

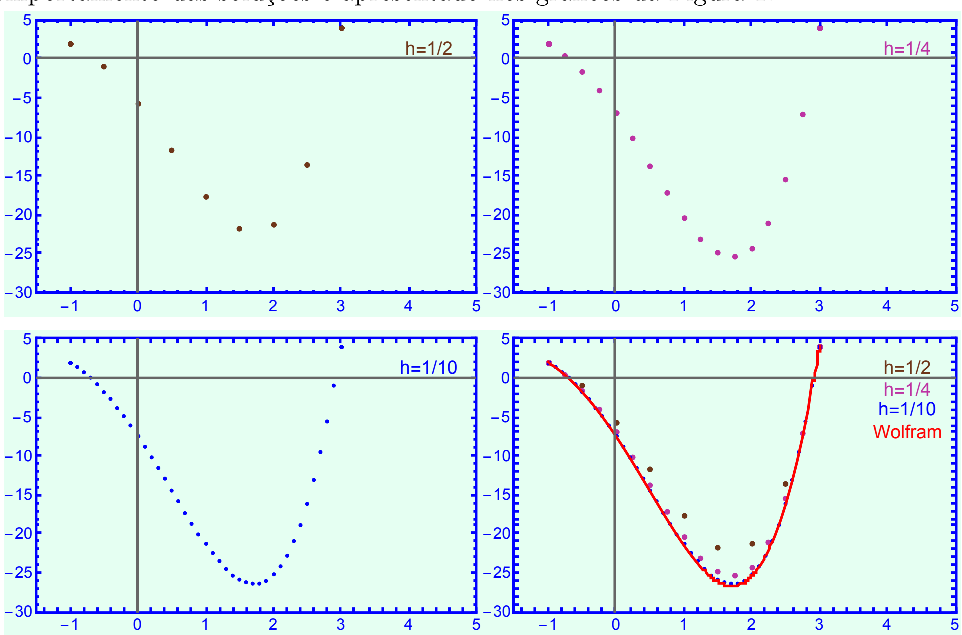

Figura 1: Gráficos das soluções para diferentes valores de h e a solução apresentada pelo Wolfram.

Observando os gráficos da Figura 1, podemos concluir que, quanto menor o valor de h, mais os pontos se ajustam a curva obtida pela resolução do PVC pelo Wolfram. Embora essa não seja a solução analítica, é uma solução mais precisa do que quando utilizamos o método das diferenças finitas.

Comparando o resultado obtido com o calculado pelo Wofram, temos um erro no valor de 0.0033, o qual é muito inferior quando comparado aos valores dos erros obtidos quando utilizamos valores maiores para h.

a.2) Para $h = 1/50$, encontramos $y(0) = y_{50} = -7.5221$ e temos o resultado apresentado na Figura 2:

precisa comparar h=1/50 com os resultados numericos obtido com os h anteriores

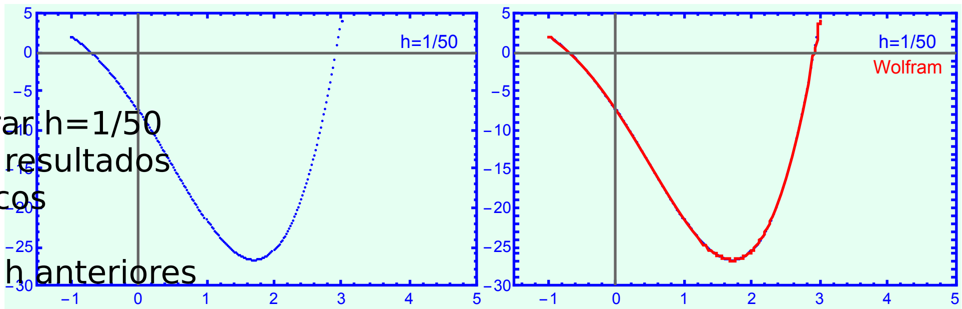

Figura 2: Gráficos da solução para $h = 1/50$ e a solução apresentada pelo Wolfram.

A partir dos gráficos da Figura 2, podemos observar que os pontos praticamente se ajustam a curva obtida pelo Wofram. Comparando o resultado obtido com o calculado pelo Wofram, temos um erro no valor de 0.0033, o qual é muito inferior quando comparado aos valores dos erros obtidos quando utilizamos valores maiores para h.

(b) b.1) Para $\alpha = 1$, a segunda condição de contorno torna-se $y(3) + y'(3) = 4$ e podemos considerar um ponto a mais a direita de x_n, do qual podemos obter a informação de $y(x)$. Dessa forma, usando a fórmula das diferenças centradas para $y'(x)$, temos:

$$y'(x_n) \approx \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}$$

e, para $x_n = 3$, temos:

$$y_n + \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} = 4 \qquad \Longrightarrow \qquad y_{n+1} = 8h - 2hy_n + y_{n-1}.$$

Então, o nosso sistema de equações pode ser escrito como:

Para $i = 1$:

$$(h^2 - 2)y_1 + (1 - h/2)y_2 = -2 - h.$$

Para $i = 2, \ldots, n-1$:

$$(1 + h/2)y_{i-1} + (h^2 - 2)y_i + (1 - h/2)y_{i+1} = 0.$$

Para $i = n$:

$$(1 + h/2)y_{n-1} + (h^2 - 2)y_n + (1 - h/2)y_{n+1} = 0.$$

dividindo por 2 ambos os membros

Substituindo a equação obtida para y_{n+1}, temos

$$y_{n-1} + (h^2 - h - 1)y_n = 2h(2-h).$$

Dessa forma, temos o sistema linear de n equações, $Ay = b$, em que

$$A = \begin{bmatrix} h^2-2 & 1-h/2 & & & & & \\ 1+h/2 & h^2-2 & 1-h/2 & & & & \\ & 1+h/2 & h^2-2 & 1-h/2 & & & \\ & & & \cdots & & & \\ & & & & 1+h/2 & h^2-2 & 1-h/2 \\ & & & & & 1 & h^2-h-1 \end{bmatrix},$$

$$y_h = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad b = \begin{bmatrix} -2-h \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 2h(2-h) \end{bmatrix}.$$

Uma outra maneira de resolvermos o problema da derivada na condição de contorno é utilizarmos uma aproximação de diferenças atrasada para $y'(x)$, ou seja, $y'(x) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$. Então, para $i = n$, podemos escrever a condição de contorno da seguinte maneira:

$$y_n + \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = 4 \qquad \Longrightarrow \qquad -y_{n-1} + (h+1)y_n = 4h$$

e o nosso sistema com n equações é escrito como $Ay = b$, em que

$$A = \begin{bmatrix} h^2-2 & 1-h/2 & & & & & \\ 1+h/2 & h^2-2 & 1-h/2 & & & & \\ & 1+h/2 & h^2-2 & 1-h/2 & & & \\ & & & \cdots & & & \\ & & & & 1+h/2 & h^2-2 & 1-h/2 \\ & & & & & -1 & h+1 \end{bmatrix},$$

$$y_h = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad b = \begin{bmatrix} -2-h \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 4h \end{bmatrix}.$$

Obtive com o Matlab e resolvendo o sistema com A\b o valor y(0)=-0.5973 que é proximo do Wolfram. Note que com o metodo das diferenças atrasadas tem um metodo de ordem 1 por isso é melhor usar so o metodo com as difereças centradas em todo o lado incluindo a fronteira

b.2) Utilizando os sistemas lineares do item anterior, vamos encontrar o valor de $y(0)$, com $h = 0.1$, ou seja, vamos encontra o valor de y_{10}:

	Diferenças Centradas	Diferenças Atrasadas	Wolfram
y_{10}	0.4477	-0.7431	-0.6120

Os resultados estão apresentados nos gráficos da Figura 2, em que podemos observar que a solução utilizando diferenças atrasadas na derivada da condição de contorno se aproximou mais da solução obtida pelo Wolfram.

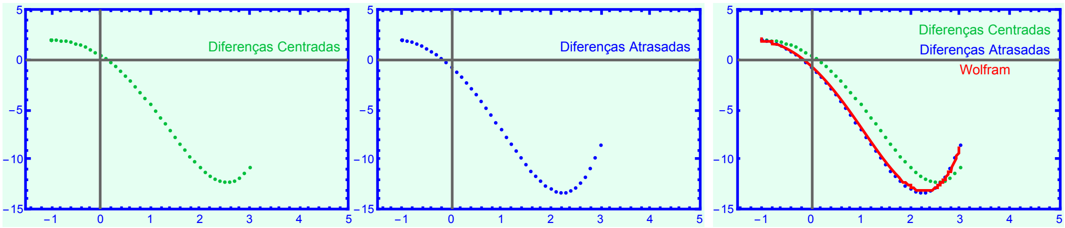

Figura 3: Gráficos da solução para $h = 1/50$ e a solução apresentada pelo Wolfram.

Questão 2: Considere a seguinte sequência de valores observados:

X	-10	-9	-8	-6	-5	-3	-2	0	2	3	4	5	6	8	9	10
Y	13.6	9.76	7.03	8.84	9.87	4.57	1.27	2	2.7	-0.57	-4.27	-5.87	-4.84	-3.0	-5.76	-9.63

Utilizando a metodologia dos quadrados mínimos, calcule a melhor curva possível que ajusta os valores observados da tabela, resolvendo os seguintes itens:

(a) Faça o diagrama de dispersão dos pontos observados (x_i, y_i).

(b) Com base no item a.1), determine as funções da base, ou seja, as funções $g_1(x)$, $g_2(x)$ e $g_3(x)$ da função

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \alpha_3 g_3(x),$$

que melhor se ajusta aos valores observados na tabela anterior.

(c) Use o método dos quadrados mínimos para determinar melhores α_1, α_2 e α_3 da função φ. Escreva os valores α_1, α_2 e α_3 obtidos com dois dígitos significativos.

Solução:

(a) Diagrama de dispersão dos pontos observados:

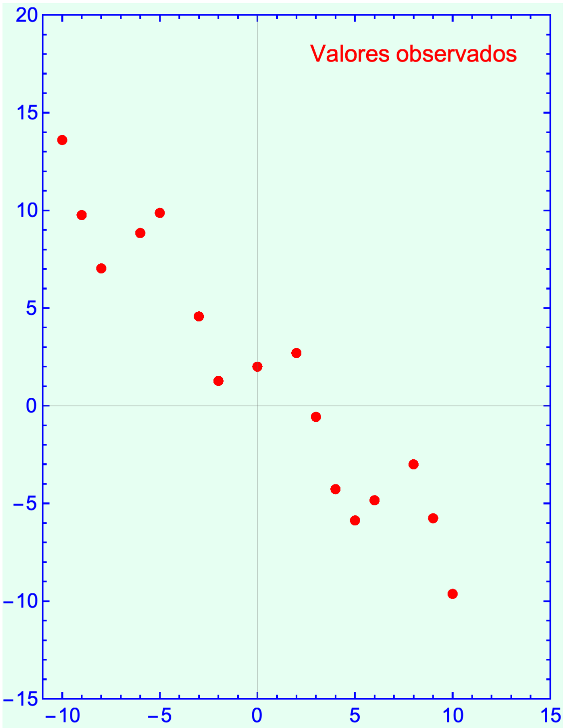

Figura 4: Diagrama de dispersão dos pontos observados.

(b) Observando o gráfico de dispersão, podemos escolher as funções de base como $g_1(x) = \sin(x)$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = 1$, de maneira a obtermos a função

$$\varphi(x) = \alpha_1 \sin(x) + \alpha_2 x + \alpha_3.$$

(c) Como queremos aproximar $\varphi(x) \approx y$, temos o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \alpha_1 \begin{bmatrix} \sin(x_1) \\ \sin(x_2) \\ \vdots \\ \sin(x_n) \end{bmatrix} + \alpha_2 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \alpha_3 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix},$$

ou, ainda,

$$\begin{bmatrix} \sin(x_1) & x_1 & 1 \\ \sin(x_2) & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \sin(x_n) & x_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix},$$

em que temos um sistema $A\alpha = y$, de dimensão $A : 16 \times 3$, $\alpha : 3 \times 1$ e $y : 16 \times 1$.

Vamos resolver o sistema linear utilizando o método das equações normais, ou seja, $A^t A\alpha = A^t y$, em que

$$A^tA = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \sin^2(x_i) & \sum_{i=1}^n x_i \sin(x_i) & \sum_{i=1}^n \sin(x_i) \\ \sum_{i=1}^n x_i \sin(x_i) & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n \sin(x_i) & \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A^ty = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \sin(x_i) \\ \sum_{i=1}^n y_i x_i \\ \sum_{i=1}^n y_i \end{bmatrix}.$$

Então, obtivemos a seguinte solução: $\alpha_1 = 3.00$, $\alpha_2 = -1.00$ e $\alpha_3 = 2.00$, o que resulta na seguinte função:

$$\varphi(x) = 3.00\sin(x) - 1.00x + 2.00.$$

ver resolução alternativa. Eu obtenho com 4 decimais

a1=2.9974
a2=-0.9989
a3=1.9977

Na Figura 5, apresentamos os pontos tabelados e o ajuste $\varphi(x)$ obtido:

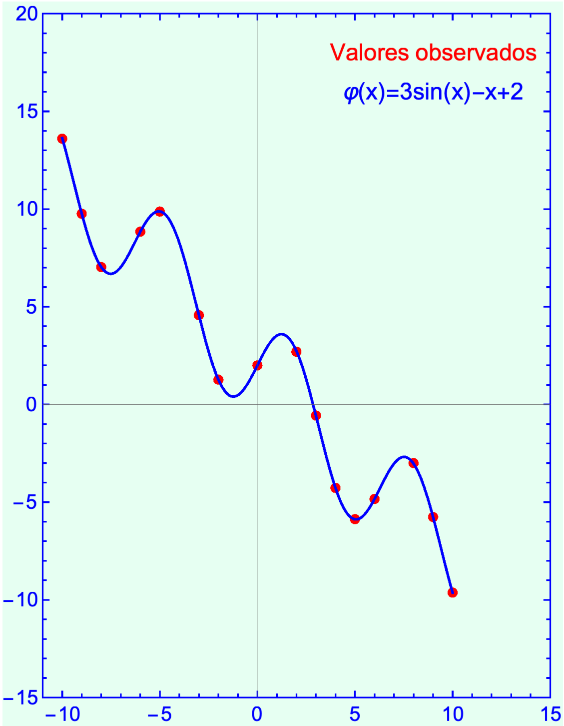

Figura 5: Diagrama de dispersão dos pontos observado e a solução obtida.

Além disso, calculamos o resíduo: $||\varphi(x_i) - y_I||_\infty = 0.03$.

Questão 3:

(a) Achar a melhor curva $\varphi = \alpha_1 2^{\alpha_2 x}$ que se ajusta aos valores da tabela do item (2) que tem $Y > 0$.

(b) Achar a melhor parábola que aproxime a função $f(x) = \cos(x)+1$, em $[-3\pi/4, 3\pi/4]$, usando o método dos quadrados mínimos no caso contínuo.

Solução:

(a) Para ajustarmos os dados do item (2) com a curva $y \approx \varphi = \alpha_1 2^{\alpha_2 x}$, para $Y > 0$, primeiramente devemos linearizar essa função. Então, aplicando ln na equação, temos:

$$\ln(y) = \ln(\alpha_1 2^{\alpha_2 x}) = \ln(\alpha_1) + \ln(2^{\alpha_2 x}).$$

Usando as propriedades do ln, obtemos

$$\ln(y) = \ln(\alpha_1) + \alpha_2 x \ln(2),$$

ou seja, obtemos a equação $z = a_1 + a_2 x$, em que $z = \ln(y)$ e $x = x$, obtidos através da tabela do item (2) e $a_1 = \ln(\alpha_1)$ e $a_2 = \alpha_2 \ln(2)$ são as constantes a serem obtidas.

Então, podemos escrever $z = a_1 + a_2 x$ como um sistema linear $Aa = b$, em que

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}, \qquad a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad b = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}.$$

para resolvê-lo, utilizamos o método das equações normais, ou seja, $A^t A a = A^t b$, em que

$$A^t A = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n 1 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{bmatrix} \qquad \text{e} \qquad A^t b = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n z_i \\ \sum_{i=1}^n x_i z_i \end{bmatrix}.$$

Como utilizamos somente valores positivos de Y, temos a seguinte tabela de dados:

x	y	$z = \ln(y)$
-10	13.6	2.61
-9	9.76	2.28
-8	7.03	1.95
-6	8.84	2.18
-5	9.87	2.29
-3	4.57	1.52
-2	1.27	0.24
0	2	0.69
2	2.7	0.99

Então, temos a solução de $A^t A a = A^t b$: $a_1 = 0.88$ e $a_2 = -0.17$. Mas, como $a_1 = \ln(\alpha_1)$ e $a_2 = \alpha_2 \ln(2)$, obtemos $\alpha_1 = 2.42$ e $\alpha_2 = -0.25$. Logo,

$$\varphi = 2.422^{-0.25x}$$

e o gráfico do ajuste é apresentado na Figura 6.

Nos meus caluclos, usando a estrategia alternativa, ver gabarito_ex6.pdf
obtenho alpha1=2.421 e alpha2= -0.2391

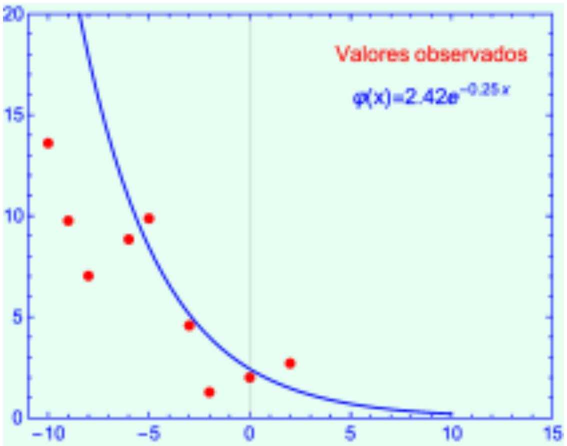

Figura 6: Diagrama de dispersão dos pontos observado e a solução obtida.

(b) Queremos aproximar, por uma parábola, a função $f(x) = \cos(x) + 1$, em $[-\frac{3\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}]$, ou seja,

$$f(x) \approx \varphi(x) = \alpha_1 x^2 + \alpha_2 x + \alpha_3,$$

usando o método dos quadrados mínimos no caso contínuo.

Dessa forma, seja $F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ definida por

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} [f(x) - \varphi(x)]^2 dx.$$

Queremos encontrar os pontos críticos de F, ou seja, encontrar $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ tais que

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_i}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = 0, \qquad i = 1, 2, 3.$$

Antes de calcularmos as derivadas, vamos escrever $F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ de uma forma explícita:

$$\begin{aligned} F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) &= \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} [f(x) - \varphi(x)]^2 dx = \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} [f^2(x) - 2f(x)\varphi(x) + \varphi^2(x)] dx \\ &= \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} f^2(x) dx - 2\int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} f(x)\varphi(x) dx + \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} \varphi^2(x) dx. \end{aligned}$$

Como as derivadas serão feitas em função dos α's, podemos escrever

$$\int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} f^2(x) dx = \bar{f} = \text{constante}$$

e, dessa forma, não precisamos calcular essa integral.

Então, calculando as outras integrais, chegamos a seguinte fórmula para a F:

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \bar{f} - 11.78\alpha_1 - 12.25\alpha_3 + 29.05\alpha_1^2 + 8.72(\alpha_2^2 + 2\alpha_1\alpha_3) + 4.71\alpha_3^2.$$

Derivando F em relação a α_i, obtemos:

Para $i = 1$: $\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_1}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = 0 \implies 4.93\alpha_1 + 1.48\alpha_3 = 1.00.$

Para $i = 2$: $\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_2}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = 0 \implies \alpha_2 = 0.$

Para $i = 3$: $\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_3}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)} = 0 \implies 1.85\alpha_1 + 1.00\alpha_3 = 1.30$

Dessa forma, devemos resolver o sistema linear $A\alpha = b$, em que

$$A = \begin{bmatrix} 4.93 & 1.48 \\ 1.85 & 1 \end{bmatrix}, \quad \alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 1.00 \\ 1.30 \end{bmatrix},$$

uma vez que $\alpha_2 = 0$.

Então, $\alpha_1 = -0.42$ e $\alpha_3 = 2.08$. Logo,

$$\varphi(x) = -0.42x^2 + 2.08$$

obtenho outros valores
usando a estrategia
classica
alfa1= -0.3299;
alfa3=1.9105
ver gabarito

e os gráficos das funções são apresentados na Figura 7:

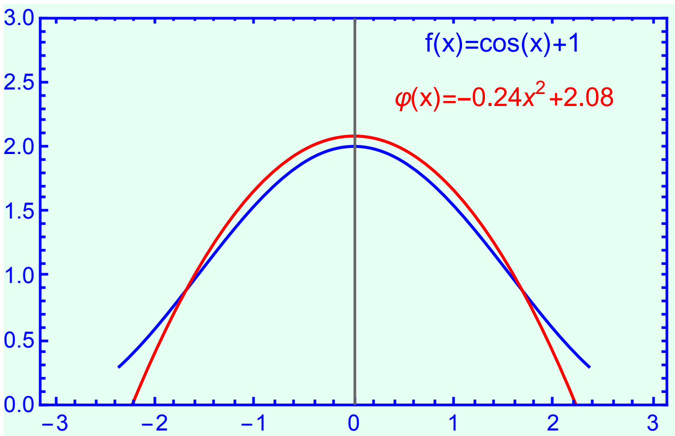

Figura 7: Curvas $f(x)$ e $\varphi(x)$ para o intervalo estudado.

Calculando as áreas abaixo das curvas, temos

$$A_1 = \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} f(x)dx = 6.13 \quad \text{e} \quad A_1 = \int_{-\frac{3\pi}{4}}^{\frac{3\pi}{4}} \varphi(x)dx = 6.14.$$

Comparando A_1 e A_2, podemos ter uma estimativa para o valor do erro, o qual foi de 0.01.