Cálculo Numérico

Trabalho Computacional 2
Data de Entrega: 02/12/16, até 12h00

Instruções básicas.

1. Este trabalho deve ser realizado em grupos de três alunos, em conjunto. O trabalho deve ser entregue em forma de relatório, no qual estão discutidos os problemas e os resultados obtidos para cada uma das questões. **Tenha certeza de que todas as perguntas realizadas no trabalho sejam respondidas de maneira clara e objetiva.**

2. **O relatório final deve ser ao professor pela página da disciplina no Moodle. Não serão aceitas versões impressas do relatório nem relatórios contendo apenas as listagens dos códigos desenvolvidos.** É imprescindível que o grupo anexe, em sua submissão, além do relatório com os resultados do trabalho, os arquivos dos códigos desenvolvidos para resolver o problema.

3. Os códigos podem ser escritos em qualquer linguagem computacional, sendo fortemente recomendado (mas não exigido) que sejam escritos em linguagens gratuitas abertas e que **possam ser compiladas no computador do professor**. Os códigos devem ser comentados e devem conter as informações básicas sobre o que cada rotina faz e o que cada variável representa. Todos os cálculos devem ser feitos com variáveis de precisão simples. Não usar rotinas pré-implementadas.

4. Os resultados devem ser claramente apresentados, isto é, tabelas e gráficos devem conter todas as identificações necessárias para sua compreensão, incluindo título de colunas, nome dos eixos, legenda de cores e símbolos, etc.

5. Plágios não serão tolerados em hipótese alguma e implicarão em nota zero no trabalho para todos os grupos envolvidos. Reincidência implicará em reprovação automática do aluno na disciplina.

Parte I: Ajuste de curvas.

Esta primeira parte de trabalho será dedicada ao ajustes de curvas pelo método dos mínimos quadrados. Para tal, considere o conjunto de dados apresentado na Tabela 1.

Questão 1: Determine, para o conjunto de pontos da Tabela 1, os melhores ajustes polinomiais de grau 1, 2, 3, 5 e 10. Trace os seus resultados e comente sobre a adequação de cada um destes ajustes. É possível encontrar uma maneira quantitativa de se julgar qual dentre estes cinco ajustes é o melhor?

Questão 2: Encontre o polinômio interpolador para estes dados e trace o seu resultado num gráfico. Apresente, igualmente, o polinômio interpolador encontrado teoricamente, usando polinômios de Lagrange (talvez seja recomendado usar algum programa de manipulação simbólica!). Comente seus resultados. Se você precisasse de uma função para descrever os dados da tabela, qual dentre o polinômio interpolador e os ajustes encontrados na questão 1 você escolheria? Por quê?

Questão 3: Suponha que você precise determinar derivadas da função que gerou os pontos da tabela. Calcule, com ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, as derivadas primeira e segunda em todos os pontos apresentados na tabela. Apresente os esquemas numéricos utilizados e justifique porque eles são de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Compare os valores obtidos com as derivadas calculada utilizando-se a função que você escolheu na questão 2 para representar estes pontos.

Questão 4: Suponha, agora, que você precise determinar uma aproximação para o valor da área que a função que gerou os pontos da tabela descreve. Calcule, com a regra dos trapézios e com a regra $\frac{1}{3}$-Simpson, a integral da função descrita pela tabela. Compare os valores obtidos com a integral calculada utilizando-se a função que você escolheu para representar estes pontos.

Parte II: Splines.

Vamos, agora, calcular um tipo de ajuste de curvas chamado *splines*. As splines são um tipo especial de ajuste construído por polinômios que são definidos por partes, isto é, cada par de pontos do conjunto de dados é unido por um polinômio diferente. Estes polinômios são construídos de tal forma a serem contínuos em todos os pontos do conjunto de dados, e a terem apenas algumas derivadas de baixa ordem contínuas. De fato, se escolhermos splines baseadas em polinômios de grau N para interpolar os pares de pontos, as $N-1$ derivadas destes polinômios serão contínuas nos pontos do conjunto de dados. Nos passos a seguir, vamos construir uma interpolação por splines cúbicas.

Questão 5: Considere que cada par de pontos (t_i, y_i) e (t_{i+1}, y_{i+1}) do conjunto de dados sejam unidos por uma curva parametrizada do tipo $(T_i(s), Y_i(s))$, com $s \in [0, 1]$. As funções $T_i(s)$ e $Y_i(s)$ são dadas por polinômios cúbicos do tipo:

$$T_i(s) = \alpha_i s^3 + \beta_i s^2 + \gamma_i s + \delta_i \tag{1}$$
$$Y_i(s) = a_i s^3 + b_i s^2 + c_i s + d_i \tag{2}$$

Note que, para cada um destes ajustes, os coeficientes do polinômio devem ser encontrados. Para tal, as seguintes condições devem ser satisfeitas (por exemplo, para $Y_i(s)$):

- Em $s = 0$, $Y_i(0) = y_i$;
- Em $s = 1$, $Y_i(1) = y_{i+1}$ (continuidade da spline);
- Em $s = 0$, $Y_i'(0) = D_i$, em que D_i é o valor da derivada neste ponto;
- Em $s = 1$, $Y_i'(1) = D_{i+1}$ (continuidade da primeira derivada da spline).

Mostre que, com estas condições, os coeficientes a_i, b_i, c_i, d_i estão determinados em termos dos valores (conhecidos) de y_i e y_{i+1} e dos valores das derivadas D_i e D_{i+1}, até o momento desconhecidos. Note que este procedimento vale para as duas curvas $T_i(s)$ e $Y_i(s)$.

Questão 6: O próximo passo é impor a continuidade das segundas derivadas de $T_i(s)$ e $Y_i(s)$ nos pontos do conjunto de dados. Mostre que, fazendo $Y_i^{''}(1) = Y_{i+1}^{''}(0)$, as derivadas primeiras satisfazem as equações

$$D_i + 4D_{i+1} + D_{i+2} = 3y_{i+2} - 3y_i, \quad i = 1, \ldots, n-2, \tag{3}$$

para um conjunto de n pontos. Note, portanto, que temos n incógnitas, que são as primeiras derivadas D_i nos pontos, mas apenas $n-2$ equações simultâneas. Para resolver este problema, impomos a chamada condição de contorno natural, em que

$$Y_1^{''}(0) = 0 \quad \text{e} \quad Y_n^{''}(1) = 0. \tag{4}$$

Determine as duas equações resultantes destas relações e mostre que o sistema a ser resolvido para determinar D_i, com $i = 1, n$, é dado por:

$$\left\{ \begin{array}{ccccccccccccc} 2D_1 & + & D_1 & & & & & & & & & = & 3y_2 - 3y_1 \\ D_1 & + & 4D_2 & + & D_3 & & & & & & & = & 3y_3 - 3y_1 \\ & & D_2 & + & 4D_3 & + & D_4 & & & & & = & 3y_4 - 3y_2 \\ & & & & D_3 & + & 4D_4 & + & D_5 & & & = & 3y_5 - 3y_3 \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & = & \vdots \\ & & & & & & D_{n-2} & + & 4D_{n-1} & + & D_n & = & 3y_n - 3y_{n-2} \\ & & & & & & & & D_{n-1} & + & 2D_n & = & 3y_n - 3y_{n-1} \end{array} \right. \tag{5}$$

Resolvendo-se este sistema, as derivadas D_i das splines são encontradas e, consequentemente, todos os coeficientes α_i, β_i, γ_i, δ_i e a_i, b_i, c_i, d_i das curvas $T_i(s)$ e $Y_i(s)$ podem ser encontrados. Note que, para cada coluna t_i e y_i da tabela, este sistema deverá ser resolvido $n-1$ vezes para encontrar as $n-1$ curvas que unem os n pontos do conjunto de dados.

Questão 7: Resolva este sistema e encontre as splines que ajustam o conjunto de dados apresentado acima. Implemente um método direto e um método indireto para resolver o sistema e compare a velocidade de solução de cada um deles. Posteriormente, compare seu resultado com o resultado dado pelo polinômio interpolador e comente o que você observa.

Questão 8: Sabendo que a curvatura de uma curva $\mathbf{x}(\mathbf{s}) = (t(s), y(s))$ é dada, em termos de um parâmetro qualquer s, que não seja o comprimento de arco, por

$$\kappa(s) = \frac{|\mathbf{x}'(s) \times \mathbf{x}''(s)|}{|\mathbf{x}'(s)|^3}, \tag{6}$$

determine a curvatura do ajuste por splines dos pontos da Tabela 1 no intervalo $t \in [t_1, t_n]$ e trace o seu resultado em um gráfico. Explique o que você observa. De maneira similar, seria possível traçar a torção deste ajuste por splines? Justifique sua resposta.

Questão 9: Considere, agora, o conjunto de dados tridimensional apresentado na Tabela 2. Usando exatamente o mesmo raciocínio apresentado acima, encontre as splines cúbicas $T_i(s)$, $Y_i(s)$ e $Z_i(s)$ que ajustam este conjunto de dados e trace seu resultado.

Tabela 1

i	t_i	y_i
1	0.1	8.3827801
2	0.2	8.9531612
3	0.3	1.2518859
4	0.4	7.7934885
5	0.5	1.7538714
6	0.6	1.6550660
7	0.7	5.3359199
8	0.8	0.42043209
9	0.9	2.8155446
10	1.0	0.11795521
11	1.1	5.7835269
12	1.2	4.6180773
13	1.3	2.5036669
14	1.4	2.6098585
15	1.5	3.3071423
16	1.6	3.3925891
17	1.7	4.1093898

Tabela 2

i	t_i	y_i	z_i
1	0.1	5.5223823	4.6905708
2	0.2	4.4522500	8.9916754
3	0.3	3.0981469	0.56587458
4	0.4	0.67522049	8.4608250
5	0.5	1.0958886	8.6160755
6	0.6	0.41280031	7.9440808
7	0.7	6.2002969	8.3959503
8	0.8	0.76290607	2.1995735
9	0.9	8.2696009	7.2201276
10	1.0	8.6900501	3.6648965
11	1.1	5.9416008	0.50965071
12	1.2	5.7015514	6.0142612