Matemática Computacional

MEBiol, MEBiom, MEFT

2º Teste - Versão A

Duração: 90 minutos 22/01/2019 – 11:30

Apresente todos os cálculos e justifique detalhadamente todas as respostas.

1. Seja $F \in C^{\infty}(\mathbb{R})$ uma função monótona no intervalo $[0,1]$, que satisfaz

$$F(0) = 1, \quad F(0.5) = 1.28403, \quad F(0.75) = 1.75505, \quad F(1) = 2.71828, \tag{1}$$

$$F''(x) \geq 2F(x), \ \forall x \in [0,1].$$

(a) [1.5] Calcule um valor aproximado de $F(0.3)$ usando interpolação polinomial com 2 nós apropriados.

(b) [1.5] Determine a parábola da forma

$$p(x) = ax^2 + b$$

que melhor se ajusta aos pontos dados em (1) segundo o critério dos mínimos quadrados.

(c) Seja $\mathscr{I} = \int_0^1 F(x)dx$.

i) [1.5] Calcule um valor aproximado $\tilde{\mathscr{I}}$ para $\mathscr{I}$ usando a regra dos trapézios composta e valores dados em (1). Mostre que $\mathscr{I} < \tilde{\mathscr{I}}$.

ii) [1.5] Sabendo que a aplicação da regra dos trapézios ao integral $\mathscr{I}$ considerando 10 e 20 subintervalos resultou, respetivamente, em

$$T_{10} = 1.46717, \qquad T_{20} = 1.46378,$$

obtenha um valor aproximado de $\mathscr{I}$ pela regra de Simpson composta.

2.[1.5] Seja $I(f) = \displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)dx$. Pretende-se construir uma regra de quadratura da forma

$$Q(f) = A[f(-1) + f(1)] + B[f'(-1) - f'(1)]$$

para aproximar $I(f)$, quando $f \in C^1([-1,1])$. Determine os coeficientes $A, B \in \mathbb{R}$ de modo que Q seja exata para polinómios de grau ≤ 2. Qual é o grau da regra obtida?

3. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = e^{t-y(t)}, & t \in [0,1], \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

(a) [1.0] Calcule valores aproximados para $y(0.1)$ e $y(0.2)$ usando o método de Euler.

(b) [1.5] Determine $n \in \mathbb{N}$ tal que o erro global do método de Euler satisfaz

$$\max_{0 \leq i \leq n} \left| y\left(\frac{i}{n}\right) - y_i \right| \leq 10^{-6}.$$

Formulário

• Ajustamento de dados discretos e Aproximação de funções

Fórmula de Lagrange:

$$\ell_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \qquad p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i \ell_i(x)$$

Fórmula de Newton com diferenças divididas:

$$f[x_i, \ldots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}] - f[x_i, \ldots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

$$p_n(x) = f_0 + \sum_{i=1}^{n} f[x_0, \ldots, x_i] \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j)$$

Erro de interpolação:

$$e_n(x) = f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j), \ \xi \in \operatorname{int}(x_0, \ldots, x_n, x)$$

Método dos mínimos quadrados:

$$\begin{bmatrix} (\phi_1, \phi_1) & \cdots & (\phi_1, \phi_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\phi_m, \phi_1) & \ldots & (\phi_m, \phi_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\phi_1, f) \\ \vdots \\ (\phi_m, f) \end{bmatrix} \qquad \begin{array}{l} (\phi_i, \phi_j) = \sum_{k=1}^{n} \phi_i(x_k)\phi_j(x_k), \\ (\phi_i, f) = \sum_{k=1}^{n} \phi_i(x_k) f_k \end{array}$$

• Integração numérica

Regra dos trapézios:

$$T_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)], \quad T_N(f) = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_N) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i)\right], \ h = \frac{b-a}{N}$$

$$E_N^T(f) = -\frac{(b-a)\,h^2}{12} f''(\xi), \ \xi \in (a,b)$$

Regra de Simpson:

$$S_2(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right], \quad S_N(f) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_N) + 4\sum_{i=1}^{N/2} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(x_{2i})\right]$$

$$E_N^S(f) = -\frac{(b-a)\,h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \ \xi \in (a,b)$$

• Métodos numéricos para equações diferenciais

Método de Euler explícito:

$$y_{i+1} = y_i + h f(t_i, y_i)$$

$$|y(t_i) - y_i| \leq \frac{hM\left[e^{L(t_i - t_0)} - 1\right]}{2L}, \quad |y''(t)| \leq M$$

Método do ponto médio:

$$y_{i+1} = y_i + h f(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} f(t_i, y_i))$$

Método de Heun:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(t_i, y_i) + f(t_i + h, y_i + h f(t_i, y_i))\right]$$

Resolução

1.

(a) Escolhemos 0 e 0.5 como nós de interpolação, por estarem mais próximos de 0.3, para obter um valor aproximado por interpolação linear:

$$F(0.3) \approx p_1(0.3) = F(0) + F[0,0.5](0.3-0) = 1 + \frac{1.28403-1}{0.5-0} \times 0.3 = 1.17042.$$

Na versão B:

$$F(0.2) \approx p_1(0.2) = F(0) + F[0,0.5](0.2-0) = 1 + \frac{1.28403-1}{0.5-0} \times 0.2 = 1.11361.$$

(b) As funções de base associadas à parábola $p(x) = ax^2 + b$ são

$$\Phi_1(x) = x^2 \quad \Phi_2(x) = 1.$$

O sistema de equações normais com suporte nos pontos $x_0 = 0$, $x_1 = 0.5$, $x_2 = 0.75$ e $x_3 = 1$ fica

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_k)^2 & \sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_k)\phi_2(x_k) \\ \sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_k)\phi_2(x_k) & \sum_{k=0}^{3} \phi_2(x_k)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_K)F(x_k) \\ \sum_{k=0}^{3} \phi_2(x_K)F(x_k) \end{bmatrix}$$

onde

$$\sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_k)^2 = 0.5^4 + 0.75^4 + 1 = 1.37890625, \qquad \sum_{k=0}^{3} \phi_2(x_k)^2 = 4,$$

$$\sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_k)\phi_2(x_k) = 0.5^2 + 0.75^2 + 1 = 1.8125,$$

$$\sum_{k=0}^{3} \phi_1(x_K)F(x_k) = 0.5^2 \times 1.28403 + 0.75^2 \times 1.75505 + 2.71828 = 4.02651,$$

$$\sum_{k=0}^{3} \phi_2(x_K)F(x_k) = 1 + 1.28403 + 1.75505 + 2.71828 = 6.75736.$$

Resolvendo o sistema

$$\begin{bmatrix} 1.37890625 & 1.8125 \\ 1.8125 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.02651 \\ 6.75736 \end{bmatrix}$$

obtém-se $a = 1.7298$, $b = 0.90551$ e a função de ajustamento é $g(x) = 1.7298x^2 + 0.90551$.

(c) i) Os nós de integração a usar na regra dos trapézios composta devem ser igualmente espaçados, pelo que consideramos

$$x_0 = 0, \qquad x_1 = 0.5, \qquad x_2 = 1$$

e os correspondentes valores de F dados em (1). Para estes nós, o espaçamento é $h = 0.5$ e obtém-se o valor aproximado

$$\tilde{\mathscr{I}} = \frac{0.5}{2}[F(x_0) + F(x_2) + 2F(x_1)] = 1.571585$$

para $\mathscr{I}$. Pela fórmula de erro da regra dos trapézios,

$$\mathscr{I} = T_2(F) - \frac{0.5^2}{12}F''(\xi) = \tilde{\mathscr{I}} - \frac{0.5^2}{12}F''(\xi) < \tilde{\mathscr{I}}$$

pois $F''(\xi) \geq F(\xi) > 0$, uma vez que F é monótona em $[0,1]$ e $F(0), F(1) > 0$.

ii) A informação fornecida traduz-se em

$$T_{10} = 1.46717 \Leftrightarrow \frac{1}{20}\left[F(0)+F(1)+2\sum_{i=1}^{9} F(\frac{i}{10})\right] = 1.46717,$$

$$T_{20} = 1.46378 \Leftrightarrow \frac{1}{40}\left[F(0)+F(1)+2\sum_{i=1}^{19} F(\frac{i}{20})\right] = 1.46378.$$

Vamos calcular um valor aproximado de $\mathscr{I}$ pela regra de Simpson composta com 20 subintervalos:

$$\begin{aligned}
S_{20}(F) &= \frac{1}{60}\left[F(0)+F(1)+4\sum_{i=1}^{10} F(\frac{2i-1}{20})+2\sum_{i=1}^{9} F(\frac{2i}{20})\right]\\
&= \frac{1}{60}\left[F(0)+F(1)+4\sum_{i=1}^{10} F(\frac{2i-1}{20})+4\sum_{i=1}^{9} F(\frac{2i}{20})-4\sum_{i=1}^{9} F(\frac{2i}{20})+2\sum_{i=1}^{9} F(\frac{2i}{20})\right]\\
&= \frac{1}{60}\left[F(0)+F(1)+4\sum_{i=1}^{19} F(\frac{i}{20})-2\sum_{i=1}^{9} F(\frac{i}{10})\right]\\
&= \frac{1}{60}\left[80\frac{1}{40}\left(F(0)+F(1)+2\sum_{i=1}^{19} F(\frac{i}{20})\right)-20\frac{1}{20}\left(F(0)+F(1)+2\sum_{i=1}^{9} F(\frac{i}{10})\right)\right]\\
&= \frac{4T_{20}-T_{10}}{3} = 1.46265.
\end{aligned}$$

2. Para que Q seja exata para polinómios de grau ≤ 2:

$$\begin{cases} Q(1) = I(1) \\ Q(x) = I(x) \\ Q(x^2) = I(x^2) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 2A = 2 \\ 0 = 0 \\ 2A - 4B = \frac{2}{3} \end{cases} \Leftrightarrow A = 1, \quad B = \frac{1}{3}.$$

Assim,

$$Q(f) = f(-1) + f(1) + \frac{1}{3}[f'(-1) - f'(1)]$$

e a regra tem, pelo menos, grau 2. Como

$$Q(x^3) = I(x^3) = 0$$

mas

$$Q(x^4) = 1 + 1 + \frac{1}{3}[4(-1)^3 - 4] = -\frac{2}{3} \neq I(x^4) = \frac{2}{5},$$

a regra tem grau 3.

3.

(a) Com $f(t,y) = e^{t-y}$, $h = 0.1$, $t_i = ih$, $i = 0,1,2$, $y_0 = 1$, obtém-se sucessivamente

$$y(0.1) = y(t_1) \approx y_1 = y_0 + hf(t_0,y_0) = 1 + 0.1f(0,1) = 1 + 0.1e^{-1} = 1.036788$$

$$y(0.2) = y(t_2) \approx y_2 = y_1 + hf(t_1,y_1) = y_1 + 0.1f(0.1,y_1) = 1.075976.$$

(b) Começamos por notar que, para cada $t \in [0,1]$ existe $\xi(t)$ entre 0 e t tal que

$$y(t) = y(0) + ty'(\xi(t)) = 1 + te^{\xi(t)-y(\xi(t))},$$

pelo que $y(t) \geq 1$, $\forall t \in [0,1]$.

Vamos usar a fórmula

$$\max_{0\le i\le n}\left|y\left(\frac{i}{n}\right)-y_i\right| = \max_{0\le i\le n}|y(t_i)-y_i| \le \frac{hM\left(e^L-1\right)}{2L}, \quad |y''(t)|\le M$$

onde já fizémos a majoração $t_i - t_0 \le 1$. Tem-se

$$\left|\frac{\partial f(t,y)}{\partial y}\right| = e^{t-y} \le 1, \forall\, t\in[0,1], \forall\, y\ge 1,$$

logo $L=1$. Como

$$0\le y''(t) = (t-y(t))' e^{t-y(t)} = (1-e^{t-y(t)})e^{t-y(t)} \le 1, \forall\, t\in[0,1]$$

podemos tomar $M=1$. Substituindo estes valores de L e M na fórmula de erro e fazendo $h = 1/n$, obtém-se

$$\max_{0\le i\le n}|y(t_i)-y_i| \le \frac{e-1}{2n}.$$

Agora basta resolver

$$\frac{e-1}{2n} < 10^{-6} \Leftrightarrow n > 0.8591409\times 10^6$$

e tomar $n = 859141$.

Observação: Neste caso, é possível obter a solução exata da equação, pois de

$$y'(t) = e^{t-y(t)} \Leftrightarrow \frac{de^{y(t)}}{dt} = e^t, \qquad y(0)=1$$

resulta

$$\int_0^t \frac{de^{y(s)}}{ds}ds = \int_0^t e^s ds \Leftrightarrow e^{y(t)} - e = e^t - 1 \Leftrightarrow y(t) = \ln(e^t + e - 1).$$

Tem-se

$$y'(t) = \frac{e^t}{e^t+e-1}, \quad y''(t) = \frac{(e-1)e^t}{(e^t+e-1)^2}$$

e $\max_{0\le t\le 1}|y''(t)| \le (e-1)/e =: M$.