Departamento de Matemática – Instituto Superior Técnico

Projeto de Matemática Computacional

MEBiol, MEBiom e MEFT - 1° Semestre, 2020/21
Data de entrega: 4 de janeiro de 2021

Justifique e comente todas as respostas.

I

1. Chama-se **método quasi-Newton** para a equação $f(x) = 0$ a uma variante do método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\delta}{f(x_k + \delta) - f(x_k)} f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, ...$$

onde δ é um valor dado, próximo de 0. A ideia é substituir $f'(x_k)$ por um valor próximo, evitando assim calcular a derivada de f.

   (a) Através de um estudo teórico, determine a ordem e o coeficiente assintótico de convergência do método quasi-Newton.

   (b) Construa um programa como implementação do método quasi-Newton. Os dados de entrada devem ser a função f, um valor para δ, uma aproximação inicial x_0 para a solução, o número máximo de iterações a efetuar e uma tolerância de erro ε. Deve explicar o critério de paragem associado a ε que irá ser implementado e a sua relação com o erro absoluto de cada iterada. Os dados de saída devem ser a sucessão de iteradas calculadas e as correspondentes estimativas de erro.

2. **Aplicação: Função de Conectividade entre Neurónios.**

A conectividade entre dois neurónios, W, numa certa área do córtex cerebral depende da distância r ($r > 0$) entre eles através da função

$$W(r) = B \exp(-kr) \left[k \sin(a\, r) + \cos(a\, r)\right], \qquad (1)$$

onde a, k, B são constantes reais positivas.

Utilize o programa que escreveu para o método quasi-Newton na resposta às questões que se seguem. Em cada caso, o valor de δ a utilizar deverá ser optimizado experimentalmente (isto é, devem ser testados vários valores de δ e escolhido aquele que garante maior eficiência do método). Obtenha aproximações com erro absoluto a 10^{-8}.

   (a) Sendo $B = 2$, $k = 1$, $a = 3$, determine os dois primeiros intervalos de valores de r para os quais se verifica $W(r) \geq 0.1$.

n	r_n	$r_n - r_{n-1}$	$(r_n - r_{n-1})/(r_{n-1} - r_{n-2})$
1	...	...	−
2	...	...	...
2	...	...	...

Tabela 1: Exemplo de tabela para o exercício I-2(b), onde r_n representa uma aproximação da menor raiz de $W(r) = 0.1$.

(b) Verifique experimentalmente a ordem de convergência do método. Para isso, elabore uma tabela com os valores das iteradas, da diferença entre elas, e da estimativa do coeficiente assintótico de convergência (ver exemplo). Verifique se os resultados estão de acordo com o estudo teórico realizado na pergunta anterior.

(c) Sendo $B = 2$ e $a = 3$, determine k em (1) de modo a que se verifique

$$\max_{r \in \mathbb{R}^+} W(r) = 2.4.$$

Determine também a distância r^* para a qual esse máximo é atingido.

Sugestão: Use o método quasi-Newton para determinar r^* e o método da bisseção para determinar k.

II

1. Para aproximar o integral $I(f) = \displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)dx$ pretende-se utilizar uma quadratura do tipo:

$$Q(f) = A_1 f(-\sqrt{3/5}) + A_2 f(0) + A_3 f(\sqrt{3/5}).$$

(a) Determine A_1, A_2, A_3 de modo a que a quadratura tenha, pelo menos, grau 2. Qual é de facto o grau de $Q(f)$?

(b) Sejam A_1, A_2, A_3 os pesos determinados na alínea anterior, e sejam

$$x_i = a + h\,i, \quad i = 0, ..., n-1, \qquad h = (b-a)/n.$$

Designa-se por **quadratura de Gauss composta** uma quadratura no intervalo $[a, b]$ com os seguintes nós:

$$x_{i,1} = x_i + h\frac{1-\sqrt{3/5}}{2}; \quad x_{i,3} = x_i + h\frac{1+\sqrt{3/5}}{2}; \quad x_{i,2} = x_i + \frac{h}{2}, \qquad i = 0, \ldots, n-1.$$

A fórmula de quadratura neste caso é:

$$Q_n(f) = \frac{b-a}{2n}\left[A_1 \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i,1}) + A_2 \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i,2}) + A_3 \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i,3})\right].$$

n	Q_n	$Q_{2n}-Q_n$	$(Q_{2n}-Q_n)/(Q_n-Q_{n/2})$
10	...	...	−
20	...	...	...
40	...	...	...

Tabela 2: Exemplo de tabela para o exercício II-2(c)

Escreva um programa que lhe permita calcular a quadratura $Q_n(f)$, para qualquer função dada. Os dados de entrada para o programa são a função f, o natural n e o intervalo $[a,b]$ e o output deve ser o valor $Q_n(f)$.

2. **Aplicação: Determinar o espaço percorrido por um ponto em movimento.**

Sendo o movimento de um ponto no plano dado pelas funções, $x = x(t)$, $y = y(t)$, que definem a sua posição (x, y) no instante t, o comprimento da trajetória percorrida no intervalo de tempo $[0, \tau]$ é dado pelo integral

$$L(\tau) = \int_0^\tau \sqrt{x'(t)^2 + y'(t)^2}dt, \tag{2}$$

onde x' e y' representam as derivadas de x e y, respetivamente.

Neste problema consideramos

$$x(t) = t, \qquad y(t) = t\exp(-t/4). \tag{3}$$

(a) Utilizando o programa onde implementou a quadratura de Gauss composta, calcule valores aproximados de $L(15)$, dado por (2) e (3), com vários valores de n: $n = 10, 20, 40, 80, 160, ...$

(b) Componha uma tabela (ver exemplo acima, Tabela 2) onde, além dos valores de $Q_n(f)$ obtidos na alínea anterior, sejam apresentadas também as diferenças $|Q_{2n}(f) - Q_n(f)|$ e os quocientes $|Q_{2n}(f) - Q_n(f)|/|Q_n(f) - Q_{n/2}(f)|$.

(c) Sabe-se que, sendo a função integranda suficientemente regular, o erro da fórmula de quadratura utilizada satisfaz uma desigualdade do tipo

$$|E_n(f)| \leq Ch^\alpha, \tag{4}$$

onde C e α são constantes que não dependem de h. Poderá, com base na tabela anterior, deduzir qual é o valor de α? Justifique a sua afirmação.

Com base na estimativa de erro (4), compare a eficiência da quadratura que utilizou com a das outras regras de integração numérica estudadas.

(d) Recorrendo ao programa da questão 1., trace o gráfico da função $\tau \mapsto L(\tau)$ para $\tau \in [0, 15]$, com intervalos de 0.15 entre os sucessivos valores de τ. Os valores de $L(\tau)$ devem ser calculados usando uma quadratura Q_n, escolhendo n de tal modo que $|Q_n - Q_{2n}| \leq 10^{-6}$.

III

Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \ t \in [a, b] \\ y(a) = y_a \end{cases}$$

e o **método de Runge Kutta**

$$\begin{cases} y_0 = y_a, \, h = \dfrac{b-a}{n}, \\ k_i^{(1)} = f(t_i, y_i), \, k_i^{(2)} = f\left(t_i + \dfrac{h}{3}, y_i + \dfrac{h}{3} k_i^{(1)}\right), \, k_i^{(3)} = f\left(t_i + \dfrac{2h}{3}, y_i + \dfrac{2h}{3} k_i^{(2)}\right), \\ y_{i+1} = y_i + \dfrac{h}{4}\left(k_i^{(1)} + 3k_i^{(3)}\right), \, i = 0, ..., n-1, \end{cases}$$

o qual fornece aproximações da função y nos pontos $t_i = a + ih$: $y(t_i) \approx y_i$, $i = 0, ..., n$.

1. Escreva um programa que, recebendo $a, b \in \mathbb{R}$, uma função $f : [a, b] \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$, $y_a \in \mathbb{R}^d$ e $n \in \mathbb{N}$, retorne as aproximações $y_0, y_1, ..., y_n$ produzidas pelo método de Runge Kutta apresentado acima.

2. **Aplicação: Simulação de um modelo epidémico $SEIRP$ para a propagação e transmissão da COVID-19 que inclui a contaminação pelo meio ambiente e o distanciamento físico.**

   Um modelo epidémico [1] subdivide a população humana no dia t em cinco grupos,

   $$N(t) = S(t) + E(t) + I_A(t) + I_S(t) + R(t),$$

   onde $S(t)$ designa o grupo suscetível, $E(t)$ o grupo exposto, $I_A(t)$ os infecciosos assintomáticos, $I_S(t)$ os infecciosos sintomáticos e $R(t)$ são os indívíduos recuperados e, tendo em conta os estudos que demonstram que o vírus pode ser transmitido não só de humano para humano, mas também do meio ambiente para humano, introduz a população de patogenos, a qual é representada por $P(t)$. A dinâmica da transmissão do SARS-CoV-2 é descrita pelo seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

   $$\begin{cases} S'(t) &= b - \dfrac{\beta_1 S(t) P(t)}{1 + \alpha_1 P(t)} - \dfrac{\beta_2 S(t)(I_A(t) + I_S(t))}{1 + \alpha_2 (I_A(t) + I_S(t))} + \psi E(t) - \mu S(t), \\ E'(t) &= \dfrac{\beta_1 S(t) P(t)}{1 + \alpha_1 P(t)} + \dfrac{\beta_2 S(t)(I_A(t) + I_S(t))}{1 + \alpha_2 (I_A(t) + I_S(t))} - \psi E(t) - \mu E(t) - \omega E(t), \\ I_A'(t) &= (1-\delta)\omega E(t) - (\mu + \sigma) I_A(t) - \gamma_A I_A(t), \\ I_S'(t) &= \delta \omega E(t) - (\mu + \sigma) I_S(t) - \gamma_S I_S(t), \\ R'(t) &= \gamma_A I_A(t) + \gamma_S I_S(t) - \mu R(t), \\ P'(t) &= \eta_A I_A(t) + \eta_S I_S(t) - \mu_P P(t). \end{cases}$$

[1] Este modelo é proposto e analisado no artigo
Samuel Mwalili, Mark Kimathi, Viona Ojiambo, Duncan Gathungu and Rachel Mbogo, SEIR model for COVID-19 dynamics incorporating the environment and social distancing, *BMC Research Notes* (2020), 13:352.

O distanciamento físico tem sido recomendado de modo a minimizar o contato com indivíduos infecciosos. Neste sentido, o modelo apresentado propõe que as novas infeções ocorrem devido à exposição ao vírus na forma

$$\frac{\beta_1 S(t)P(t)}{1+\alpha_1 P(t)} \text{ ou } \frac{\beta_2 S(t)(I_A(t)+I_S(t))}{1+\alpha_2(I_A(t)+I_S(t))},$$

onde as proporções de interação α_1 e α_2 representam o recíproco da frequência com que indivíduos suscetíveis são infectados com SARS-CoV-2 por ambientes contaminados e por indivíduos infecciosos, respetivamente.

Considere os seguintes dados (adaptados do artigo citado)

- taxa de natalidade da população humana: $b = 2.30137 \times 10^{-5}$ (dias^{-1}),
- taxa de mortalidade (natural) humana: $\mu = 3.38238 \times 10^{-5}$ (dias^{-1}),
- esperança de vida humana: $1/\mu = 29585$ dias(= 81anos),
- taxa de mortalidade natural de patogenos no meio ambiente: $\mu_P = 0.1724$ (dia^{-1}),
- proporção de interação com um ambiente infeccioso: $\alpha_1 = 0.10$,
- proporção de interação com um indivíduo infeccioso: $\alpha_2 = 0.10$,
- taxa de transmissão de S para E devido ao contato com P: $\beta_1 = 0.00414$,
- taxa de transmissão de S para E devido ao contato com I_A e/ou I_S: $\beta_2 = 0.0115$,
- proporção de indivíduos infecciosos sintomáticos: $\delta = 0.7$,
- taxa de progressão de E para S devido a sistema imunológico robusto: $\psi = 0.0051$,
- taxa de progressão de E para I_A ou I_S: $\omega = 0.09$,
- taxa de mortalidade devido à COVID-19: $\sigma = 0.005$,
- taxa de recuperação da população humana sintomática: $\gamma_S = 0.05$ (dia^{-1}),
- taxa de recuperação da população assintomática: $\gamma_A = 0.0714$ (dia^{-1}),
- taxa de disseminação do vírus para o ambiente por indivíduos infecciosos sintomáticos: $\eta_S = 0.1$ (dia^{-1}),
- taxa de disseminação do vírus para o ambiente por indivíduos infecciosos assintomáticos $\eta_A = 0.05$ (dia^{-1}),
- estado inicial da epidemia: $S(0) = 50000$, $E(0) = 500$, $I_A(0) = 30$, $I_S(0) = 20$, $R(0) = 0$, $P(0) = 500$.

Obtenha gráficos que ilustrem a evolução das populações de humanos e patogenos no cenário descrito pelos dados acima, durante 3 meses.

Com base no modelo apresentado, variando os valores de α_1 e α_2, averigue o efeito que a quarentena e o isolamento de casos de infeção podem ter no controlo da propagação da COVID-19.