UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

BC1419 Cálculo Numérico (2º 2021) - LISTA 2
Entrega: até 12/08/2021
Prof. André Pierro de Camargo

Orientações gerais

- A linguagem de programação utilizada na implementação dos métodos é de livre escolha.
- Peça ajuda ao professor sempre que necessário.
- Realize testes preliminares com cada método para identificar possíveis erros de implementação. Por exemplo: teste o método de eliminação de Gauss em sistemas de equações cuja solução seja previamente conhecida e veja se o resultado obtido é coerente.
- Discuta com os outros grupos e também com o professor caso encontre resultados aparentemente sem sentido. Isso pode (ou não) ser um erro de implementação, ou mesmo um indicativo de que o método utilizado possui as suas limitações.

Cada grupo deverá entregar

- Um relatório contendo a resolução dos exercícios teóricos e **TUDO** o que foi solicitado nos exercícios práticos (leiam a descrição com bastante atenção).
- O arquivo contendo o código fonte utilizado nos exercícios práticos.

Enviar o material por e-mail para andre.camargo@ufabc.edu.br, **especificando o número do grupo**.

Exercício 1

Na primeira lista de exercícios, utilizamos o método de diferenças finitas para resolver o problema de contorno

$$y''(x) \;=\; p(x)y'(x)+q(x)y(x)+r(x),\;\; a\;\le x\le b,\;\; y(a)=\alpha,\;\; y(b)=\beta. \quad (1)$$

Nesse exercício, utilizaremos o método dos Mínimos quadrados contínuo para resolver o seguinte case particular de (1)

$$y''(x) \;=\; r(x),\;\; -1\;\le x\le 1,\;\; y(-1)=\alpha,\;\; y(1)=\beta. \qquad (2)$$

De forma mais precisa, fixado um número inteiro positivo k, vamos aproximar a função $r(x)$ por uma combinação linear dos polinômios de Legendre:

$$r(x) \;\approx\; \sum_{j=1}^{k} \alpha_j f_j(x),$$

$$f_j(x) \;=\; P_{j-1}(x) \;=\; \sum_{i=0}^{j-1} \binom{j}{i}\binom{j+i}{i}\left(\frac{x-1}{2}\right)^i, j=1,2,\ldots,k. \qquad (3)$$

Observação: para $n\ge \ell\ge 0$, define-se $\displaystyle\binom{n}{\ell} \;=\; \frac{n!}{\ell!(n-\ell)!}$.

Os coeficientes $\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_k$ que fornecem a melhor aproximação para $r(x)$ segundo o método dos Mínimos quadrados contínuo formam a solução do seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} \langle f_1,f_1\rangle & \langle f_1,f_2\rangle & \ldots & \langle f_1,f_k\rangle \\ \langle f_2,f_1\rangle & \langle f_2,f_2\rangle & \ldots & \langle f_k,f_k\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle f_k,f_1\rangle & \langle f_k,f_2\rangle & \ldots & \langle k_1,f_k\rangle \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f_1,r\rangle \\ \langle f_2,r\rangle \\ \vdots \\ \langle f_k,r\rangle \end{bmatrix}, \qquad (4)$$

com

$$\langle f_i,f_j\rangle \;:=\; \int_{-1}^{1} f_i(x)f_j(x)\,dx, \qquad \langle f_i,r\rangle \;:=\; \int_{-1}^{1} f_i(x)r(x)\,dx. \qquad (5)$$

Os polinômios de Legendre são ortogonais em $[-1,1]$ e, para $1 \leq i,j \leq k$, vale que

$$\langle f_i, f_j \rangle \;=\; \langle P_{i-1}, P_{j-1} \rangle \;=\; \int_{-1}^{1} P_{i-1}(x) P_{j-1}(x)\, dx \;=\; \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \frac{2}{2j-1}, & i = j. \end{cases}$$

Dessa forma, podemos calcular os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ que aparecem em (4) diretamente por

$$\alpha_j \;=\; \frac{2j-1}{2} \int_{-1}^{1} P_{j-1}(x) r(x)\, dx,\;\; j = 1, 2, \ldots, k. \tag{6}$$

Uma vez calculada a melhor aproximação

$$f^*(x) = \sum_{j=1}^{k} \alpha_j f_j(x)$$

para r no sentido de mínimos quadrados, podemos integrar f^* duas vezes e usar as condições de contorno para encontrar uma aproximação $G(x)$ para a solução $y(x)$ da equação diferencial (2). De modo mais preciso, se $F : [-1,1] \to \mathbb{R}$ é tal que $F''(x) = f^*(x),\; x \in]-1,1[$, aproximamos $y(x)$ por

$$G_k(x) \;:=\; F(x) + [\alpha - F(-1)]\frac{(1-x)}{2} + [\beta - F(1)]\frac{(x+1)}{2}. \tag{7}$$

Observe que G satisfaz as condições de contorno $G(-1) \;=\; \alpha$ e $G(1) = \beta$.

Observação: Note que f^* é um polinômio e, portanto, é simples de integrar 2 vezes.

O objetivo desse exercício é resolver a equação

$$y''(x) \;=\; -\pi^2(\sin(\pi x) + \cos(\pi x)),\;\; -1 \;\leq x \leq 1,\;\;\; y(-1) = y(1) = -1 \tag{8}$$

pelo método descrito acima.

Tarefa 1

1. (0.5) Para $k = 10$, calcule os polinômios de Legendre $P_0(x), P_1(x), \ldots, P_{k-1}(x)$ no ponto $x = 0.7688$.

   Para fins de verificação de código, exibimos abaixo os respectivos valores calculados para $k = 4$:

   ```
   1.0000000000000000  0.7688000000000000  0.3865801600000001 -0.0171952883199999
   ```

Tarefa 2

Para $k \in \{2, 3, 4, \ldots, 30\}$,

1. (1.0) Calcule os coeficientes de mínimos quadrados $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ definidos por (6). Use a regra dos trapézios

   $$\int_a^b f(t)\,dt \approx T_m := \frac{b-a}{2m}\left[f(t_0) + \left(\sum_{i=1}^{m-1} 2f(t_i)\right) + f(t_m)\right],$$

   com $m = 10^4$ para calcular as integrais no lado direito de (6). Exiba os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ para $k = 9$ **com todos os dígitos disponíveis**. Para fins de verificação de código, exibimos abaixo os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6$ para $k = 6$.

   ```
   4.62119231769975e-16 -9.42477765070660e+00  1.50000004934802e+01

   1.14313901976492e+01 -5.74851558112779e+00 -2.16429994342160e+00
   ```

2. (1.0) Calcule a função G_k definida em (7) para $k = 7$ nos pontos $x = -1, -0.7, 0, 0.3, 1$. Para fins de verificação de código, exibimos abaixo os valores para G_4

   ```
   -1  -1.33325090583352  0.87500006168503  1.33650246753877 -1
   ```

3. (1.5) Calcule o erro máximo (em valor absoluto)

   $$E_{m,k} = \max_{x \,\in\, [-1,1]} |y(x) - G_k(x)|, \tag{9}$$

onde $y(x) = \sin(\pi x) + \cos(\pi x)$ é a solução exata da equação diferencial (8) e G_k é a aproximação definida por (7). Em geral, é difícil determinar o valor exato da expressão que aparece no lado direito de (9). Para estimar esse valor, calcule o erro $|y(x) - G_k(x)|$ fazendo x percorrer uma malha de pontos igualmente espaçados em $[-1, 1]$ com 10117 sub intervalos e guarde o maior valor encontrado. Exiba os erros (9) para $k = 2, 3, \ldots, 30$. Para fins de verificação de código, exibimos abaixo os erros calculados (9) para $k = 2, 3, 4$.

```
4.65923236964747e-01 1.29124133189195e-01 2.69084266640963e-02
```

Observação: Para cada valor de k, calcule os coeficientes $c_1, c_2, \ldots, c_k$ uma única vez.

Tarefa 3

1. (0.5) Recalcule os erros (9) da Tarefa 2, mas agora use $m = 10^5$ para a regra dos trapézios.

2. (1.0) Recalcule os erros (9) da Tarefa 2, mas agora use a regra de Simpson

$$\begin{aligned}\int_a^b f(t)\,dt \approx S_m \quad &:= \quad \tfrac{(b-a)}{3m}\left[f(t_0) + 4f(t_1) + 2f(t_2) + 4f(t_3) + 2f(t_4) + \ldots\right] \\ &+ \quad \left[4f(t_{m-1}) + f(t_m)\right]\end{aligned}$$

   com $m = 10^5$ para calcular os coeficientes do item 1 da Tarefa 2.

3. (1.0) Plote os valores calculados $(k, \log(E_{m,k})), k = 2, 3, \ldots, 30$, para a regra dos trapézios ($m = 10^4$ e $m = 10^5$) e para a regra de Simpson ($m = 10^5$) em um mesmo gráfico. Observe que, nesse caso, o fator limitante para o erro de aproximação é a precisão no cálculo das integrais (6). Qual regra de integração se mostrou mais eficiente nesse caso?

Para refletir: para $k > 20$, ocorre um fenômeno de instabilidade que faz com que os erros calculados $E_{m,k}$ comecem a crescer. Qual seria a causa mais provável desse fenômeno?

Tarefa 4

Ajuste os dados $(k, \log(E_{m,k})), k = 2, 3, \ldots, 16$ calculados na Tarefa anterior com a regra de Simpson (**só até** $k = 16$) por uma função quadrática

$$f(x) \;=\; \alpha_1 f_1(x) + \alpha_2 f_2(x) + \alpha_3 f_3(x), \qquad (10)$$

$f_1(x) = 1$; $f_2(x) = x$; $f_3(x) = x^2$, pelo método dos mínimos quadrados discreto.

Lembrete: Os coeficientes de mínimos quadrados $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ são a solução do sistema de equações

$$\begin{bmatrix} \langle f_1, f_1\rangle & \langle f_1, f_2\rangle & \langle f_1, f_3\rangle \\ \langle f_2, f_1\rangle & \langle f_2, f_2\rangle & \langle f_2, f_3\rangle \\ \langle f_3, f_1\rangle & \langle f_3, f_2\rangle & \langle f_3, f_3\rangle \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f_1, y\rangle \\ \langle f_2, y\rangle \\ \langle f_3, y\rangle \end{bmatrix}, \qquad (11)$$

com $x_k = k, y_k = \log(E_{m,k}), k = 2, 3, \ldots, 16$ e

$$\langle f_i, f_j\rangle \;=\; \sum_{k=2}^{16} f_i(x_k) f_j(x_k), \quad \langle f_i, y\rangle \;=\; \sum_{k=2}^{16} f_i(x_k) y_k. \qquad (12)$$

1. (0.5) Exiba a matriz e o vetor de termos independentes do sistema (11) calculados numericamente.

2. (1.0) Exiba a solução do sistema obtida computacionamente com **TODOS** os digitos da máquina utilizada.

   Observação: O sistema (11) deve ser resolvido computacionalmente, utilizando o método da Eliminação de Gauss implementado nas etapas anteriores do curso.

3. (0.5) Faça um gráfico com os dados amostrais utilizados e a função de mínimos quadrados obtida (plotar os dois juntos).

Exercício 2

A seguinte tabela mostra as coordenadas (x_i, y_i, z_i) da trajatória de um corpo que se move em $\mathbb{R}^3$ para alguns valores da variável temporal $t \in [0, 1]$.

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
t_i	0.000	0.125	0.250	0.375	0.500	0.625	0.750	0.875	1.000
x_i	0.7416	0.2685	0.3333	0.3982	-0.0749	-0.3089	0.3333	0.9756	0.7416
y_i	0.7416	0.9756	0.3333	-0.3089	-0.0749	0.3982	0.3333	0.2685	0.7416
z_i	-0.4832	-0.2441	0.3334	0.9107	1.1498	0.9107	0.3334	-0.2441	-0.4832

Tabela 1: Alguns pontos da trajetória de um corpo em $\mathbb{R}^3$.

Note que, para cada índice i, $x_i + y_i + z_i = 1$, isto é, o corpo está na verdade preso ao plano σ cuja equação analítica é $x + y + z = 1$. Pode-se mostrar que, se $p_x(t), p_y(t)$ e $p_z(t)$ são os polinômios de grau no máximo oito que interpolam os conjuntos de dados $(t_i, x_i), (t_i, y_i)$ e (t_i, z_i), respectivamente, a imagem da curva γ definida por

$$\gamma(t) = (p_x(t), p_y(t), p_z(t)), \ t \ \in \ \mathbb{R}$$

está contida em σ.

1. (1.0) Calcule os polinômios $p_x(t), p_y(t)$ e $p_z(t)$ nos pontos $t_j^* := j/50, j = 0, 1, \ldots, 50$. Mostre os valores calculados em uma tabela. Para fins de checagem de código, a seguir exibimos os primeiros valores a serem calculados I

```
t_j         0.02               0.04               0.06
x_j    0.731170970533011  0.658402867431580  0.557003355652040
y_j    0.745950320550440  0.799590053264361  0.869250617463324
z_j   -0.477121291083451 -0.457992920695940 -0.426253973115363
```

2. (0.5) Para cada $j \ \in \ \{0, 1, \ldots, 50\}$, calcule $p_x(t_j^*) + p_y(t_j^*) + p_z(t_j^*)$ e verifique se os valores obtidos estão perto de 1 (eles deveriam valer 1 em aritmética exata).

3. (0.5) Usando um dispositivo gráfico adequado, plote os pontos $(p_x(t_j^*), p_y(t_j^*), p_z(t_j^*)), j = 0, 1, \ldots, 50$ em perspectiva 3D.