INF1608 – Análise Numérica: Prova 2 – 23/11/2021

Prof. Waldemar Celes
Departamento de Informática, PUC-Rio

Nome: Suemy Inagaki Pinheiro Fagundes Matrícula: 1811208

A prova é ***individual****. As* ***justificativas*** *das resposta são essenciais. Respostas sem justificativas adequadas não serão consideradas na correção.*

As respostas devem ser escritas em **caligrafia própria**, digitalizadas e enviadas, em formato **pdf**, via EAD. Não esqueça de indicar *nome* e *número de matrícula* nas respostas.

O prazo para submissão **expira às 23:59h**.

---

1. Da Série de Taylor, podemos derivar um método para avaliar a derivada de segunda ordem de uma função, $f''(x)$:

$$f''(x) \approx \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}$$

Esse método tem erro proporcional a h^2, sendo portando um método de segunda ordem.

Com base nos conceitos discutidos e na "sintaxe" dos pseudo-códigos dos *slides* apresentados nas aulas, escreva um pseudo-código de uma função que retorna o valor da derivada de segunda ordem de uma função, $f''(x)$, usando um método de *terceira ordem*.

2. O método da Regra do Trapézio para integração numérica é dada por:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b)\right] - \frac{h^3}{12} f''(c)$$

e método do Ponto Médio para integração numérica é dado por:

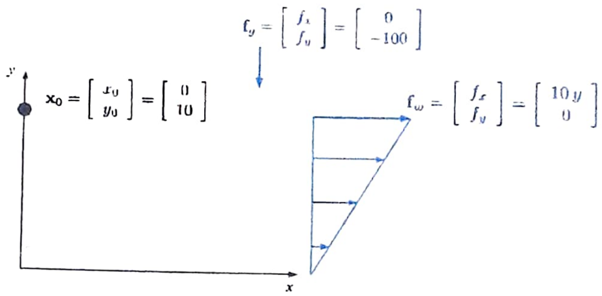
$$\int_a^b f(x)dx = h\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{h^3}{24} f''(c)$$

com $h = b - a$ e $c \in [a, b]$.

Considere a implementação de um método de integração adaptativo. Ao invés de usar o mesmo método e aplicar a estratégia de dobrar o passo para avaliar o erro, vamos considerar a avaliação numérica da integral pelo método da Regra do Trapézio, $T_{[a,b]}$, e pelo método do Ponto Médio, $M_{[a,b]}$, no mesmo intervalo. Deduza uma fórmula para avaliar o erro numérico associado à avaliação da integral pelo método do Ponto Médio em função dessas avaliações numéricas.

3. Considere um sistema físico como ilustrado abaixo. Uma partícula, com massa $m = 1$, inicialmente em repouso, é solta a partir da posição $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0) = (0, 10)$, num meio submetida à força de gravidade $\mathbf{f}_g = (f_x, f_y) = (0, -100)$ e a uma força de vento horizontal que varia com a altura da partícula $\mathbf{f}_w = (f_x, f_y) = (10\,y, 0)$.

Usando o método de Verlet com passo de integração $h = 0.1$, sem amortecimento, determine a posição da partícula $\mathbf{x} = (x, y)$ no instante $t = 0.2$. Como a velocidade inicial da partícula é nula, pode-se considerar que a posição anterior, no início da simulação, é igual a posição inicial.



4. Considere o sistema linear $n \times n$ ilustrado abaixo, onde os elementos nulos da matriz não são representados. Considere ainda implementações eficientes de métodos iterativos para a resolução desse sistema.

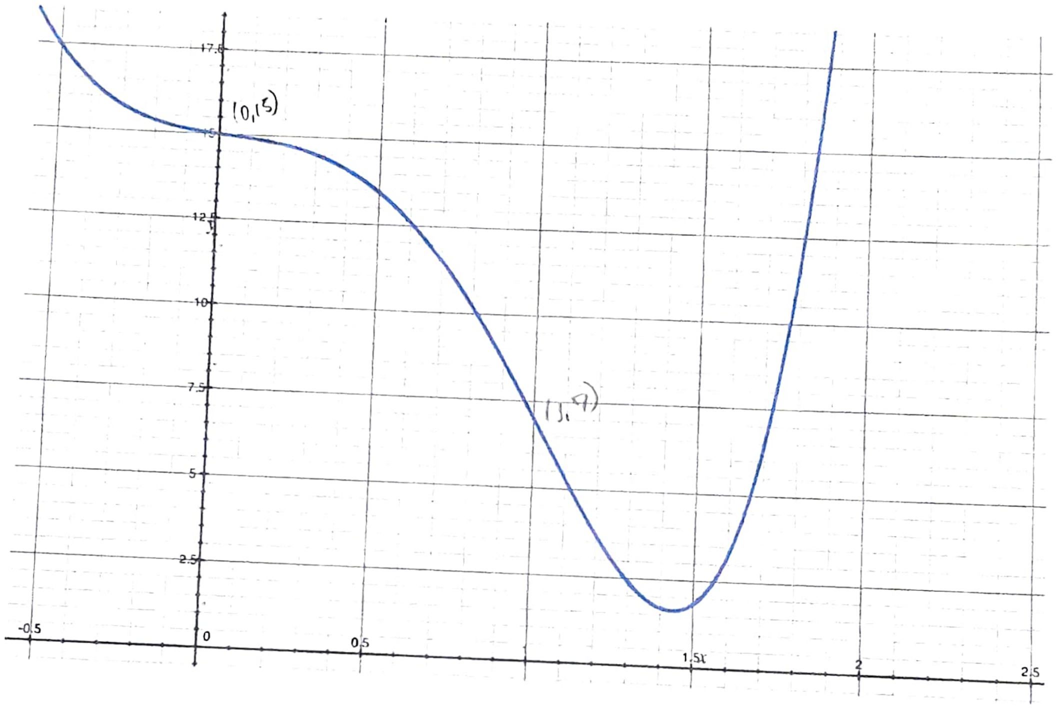
$$\begin{bmatrix} 5 & -3 & & & & \\ -3 & 5 & -3 & & & \\ & -3 & 5 & -3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -3 & 5 & -3 \\ & & & & -3 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-2} \\ x_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

(a) Considerando o método iterativo de Gauss-Seidel para resolução desse sistema, é possível afirmar que o método converge para a solução?

(b) Considerando o método dos Gradientes Conjugados para resolução desse sistema, qual a ordem do tempo esperado, em relação a n, de cada iteração? Qual a ordem do tempo esperado, em relação a n, para o método chegar na solução exata (a menos de erros de arredondamento)?

(c) Se o objetivo for alcançar uma solução aproximada dentro de uma tolerância de erro, como você avalia o uso do pré-condicionador de Jacobi para esse sistema; o problema em questão apresenta as condições favoráveis para que o pré-condicionar tenha bons resultados?

5. O método de *Nelder-Mead* para determinação de mínimo de funções escalares parte de duas estimativas iniciais, x_0 e x_1. Considerando as diferentes estratégias do método, entre *expansão*, *contração externa e interna*, e *encolhimento*, determine a próxima estimativa, x_2, se o método for aplicado à função $f(x) = x^6 + 3x^4 - 12x^3 + x^2 - x + 15$, ilustrada abaixo, considerando as seguintes estimativas iniciais: $x_0 = 0$ e $x_1 = 1$. Note que é possível avaliar a função de forma aproximada observando o gráfico.



Sremy Inagaki 1811208.

Questão 1

Usando extrapolação de Richardson, sabemos que partindo de $Q \approx F_n(h) + kh^n$ podemos chegar em $Q \approx \frac{2^n F_n(h/2) - F_n(h)}{2^n - 1}$, que é um método de ordem $n+1$. No nosso caso, $F_n(h)$ é dado por

$$\underset{\hookrightarrow n=2}{F_n(h)} = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}$$

Então, podemos obter um método de ordem 3 fazendo

$$Q \approx \frac{2^2 F_2(h/2) - F_2(h)}{2^2 - 1} = \frac{4F_2(h/2) - F_2(h)}{3}$$

Então, o pseudo código é:

```
Função (f, x, h)
    return (f(x-h) - 2*f(x) + f(x+h)) / (h*h).

Derivada (f, x, h)
    Fh = Função(f, x, h)
    Fh2 = Função (f, x, h/2)
    return (4*Fh2 - Fh)/3
```

Questão 2

Sabemos que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \overbrace{\frac{h}{2}[f(a) + f(b)]}^{T_{[a,b]}} - E_T \qquad \text{e que } E_T = 2E_M.$$

e que

$$\int_a^b f(x)\,dx = \overbrace{hf\left(\frac{a+b}{2}\right)}^{M_{[a,b]}} + E_M$$

igualando as duas expressões:

continua →

$$T_{[a,b]} - E_T = M_{[a,b]} + E_M$$

Substituindo E_T por $2E_M$:

$$T_{[a,b]} - 2E_M = M_{[a,b]} + E_M$$

$$T_{[a,b]} - M_{[a,b]} = 3E_M$$

Logo, $\boxed{E_M = \dfrac{T_{[a,b]} - M_{[a,b]}}{3}}$

$$E_M = \frac{\frac{h}{2}[f(a) + f(b)] - hf\left(\frac{a+b}{2}\right)}{3}$$

$$\boxed{E_M = \frac{h}{6}\left(f(a) + f(b) - 2f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right)}$$

Questão 3

O método de verlet nos diz que

$$X_{i+1} = 2X_i - X_{i-1} + \frac{h^2}{m} f_i$$

em $t=0$, $X_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 10 \end{bmatrix}$ e $X'_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 10 \end{bmatrix} \rightarrow$ posição anterior à inicial

então, em $t=0.1$: $X_{0.1} = 2\begin{bmatrix} 0 \\ 10 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 10 \end{bmatrix} + \frac{0.1^2}{1} \cdot \begin{bmatrix} 10.10 \\ -100 \end{bmatrix}$

$$X_{0.1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 10 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 9 \end{bmatrix}$$

continua →

em $t = 0.2$:

$$X_{0.2} = 2\begin{bmatrix}1\\9\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0\\10\end{bmatrix} + 0.1^2\begin{bmatrix}90\\-100\end{bmatrix}$$

$$X_{0.2} = \begin{bmatrix}2\\8\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0.9\\-1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2.9\\7\end{bmatrix}$$

Portanto, em $t=0.2$, a partícula está na posição $(29, 7)$

Questão 4

a) Não, não podemos garantir a convergência nesse caso, pois a matriz não é estritamente diagonal dominante.

No caso da segunda linha:

$$|5| < \underbrace{|-3| + |-3|}_{6}$$

b) Em cada iteração, a operação dominante é a de multiplicação de matriz por vetor na determinação do a. $O(n^2)$ Entretanto, como a matriz é esparsa, podemos reduzir o custo se fizermos essa operação considerando somente os elementos não nulos da matriz. Podemos representar a matriz por um vetor de vetores, onde cada elemento armazena a coluna correspondente ao elemento não nulo da matriz. Dessa forma, a complexidade da multiplicação de matriz por vetor se reduz a $O(n)$ e o custo por iteração também se reduz a $O(n)$

Para o método chegar na solução exata, é preciso executar o loop até o final, ou seja, são n iterações de $O(n)$, o que nos dá a complexidade total de $O(n^2)$ As operações fora do loop têm complexidade menor que $O(n^2)$ então não são relevantes

c) O problema não apresenta as condições favoráveis para o uso do pré-condicionador de Jacobi, pois a matriz não é estritamente diagonal dominante. Portanto, acredito que não deveríamos usá-lo para a solução desse problema.

~~Questão 5~~

~~melhor~~ ~~pior~~

~~Ordenando os pontos, teremos que~~ $\cancel{x_0 = 1}$ ~~e~~ $\cancel{x_1 = 0}$. ~~Agora vamos refletir o ponto~~ $\cancel{x_1}$ ~~com relação à reta que passa pelo centroide~~ ($\cancel{x = 0.5}$). ~~Assim,~~ $\cancel{x_r = 1}$. ~~Vamos ver em qual caso entra:~~

~~fo~~

$$\cancel{f_0 = 7, \quad f_r = 7 \text{ e } f_{n-1} = 7}$$

~~Não entra no caso de substituir direto pois~~ $\cancel{f_0 = f_r = f_{n-1}}$

Questão 5

melhor pior

Ordenando os pontos, teremos que $x_0 = 1$ e $x_1 = 0$

Vamos remover o pior caso da lista.

O centroide da lista restante é o própro $x_0 = 1$.

Refletindo x_1 com relação ao centroide, teremos $x_r = 2$.

$$f_0 = 7, \quad f_r = 33, \quad f_{n-1} = f_0 = 7$$

Não entra no primeiro caso pois $f_r > f_{n-1}$. Logo, não substitui.

Não entra na expansão pois $f_r > f_0$

Como $f_r > f_{n-1}$, fazemos contração:

$$x_{ic} = 0.5 \cdot 1 + 0.5 \cdot 0 \Rightarrow 0.5$$

$$x_{ec} = 1.5 \cdot 1 - 0.5 \cdot 0 \Rightarrow 1.5$$

entre x_r, x_{ic} e x_{ec}, o melhor é o x_{ec}. $\boxed{\text{Logo, } x_2 = \underline{1.5}}$