Universidade Federal do Espirito Santo

Física Computacional

Professor: Alan Miguel Velásquez Toribio
Núcleo-cosmo ufes
Departamento de Física
Centro de Ciências Exatas

Interpolação Polinomial

- Teorema de Weierstrass

A base conceitual para representar uma função contínua por um polinômio de grau n
É o teorema de Weierstrass. Que pode ser escrito da forma:

Suponha uma função de valor real contínuo, f, definida no intervalo real [a,b].
Então, podemos dizer que para um $\varepsilon > 0$, tem um polinomio p tal que para todo
$x \in [a, b]$ temos, $|f(x) - P_n| < \varepsilon$

Ou equivalentemente que a norma suprema é

- Este teorema têm implicâncias conceituais e práticas

1. Entre as conceituais permite desenvolver definições sobre funções contínuas, conceitos topológicos, espaços compactos, etc.
2. As práticas são basicamente são a base da interpolação numérica.

Interpolação Polinomial

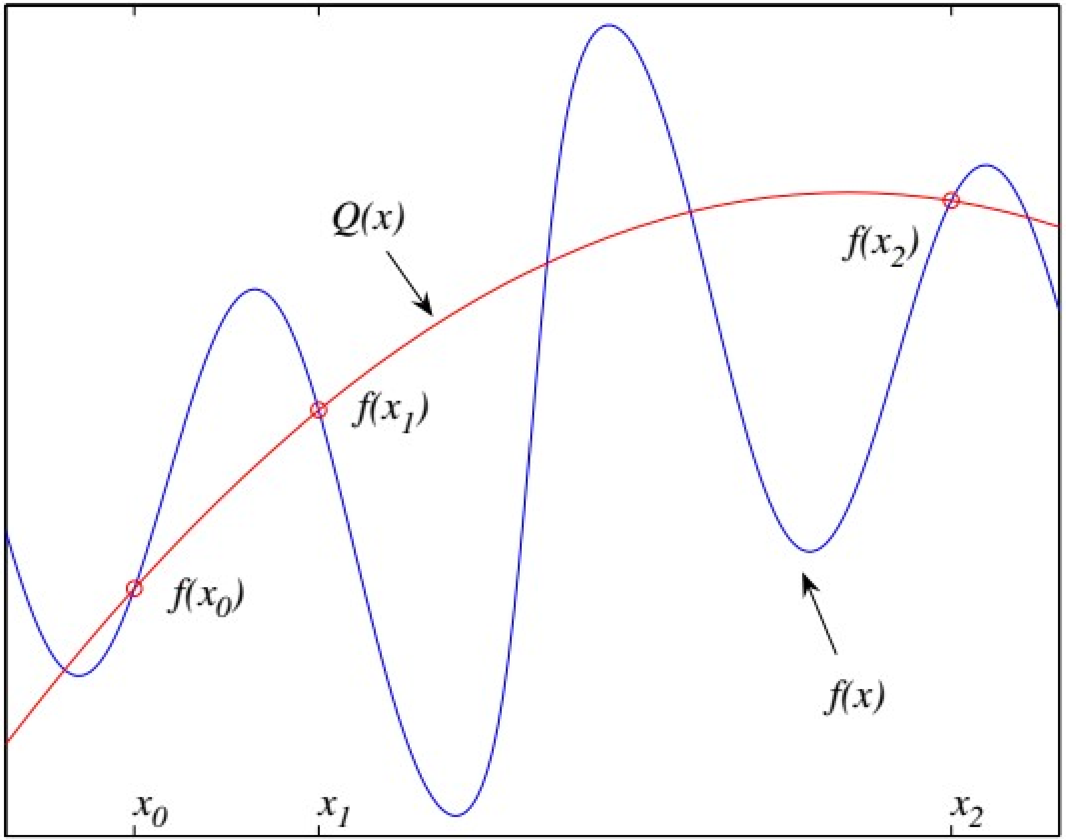
- Que é interpolação:

Seja que temos os seguintes pontos:

$$(x_0, x_1, ..., x_n)$$

Como dados e queremos construir uma função que inclua todos estos pontos

$$Q(x_j) = f(x_j) \quad 0 \leq j \leq n$$



Interpolação Polinomial

- Problema de interpolação

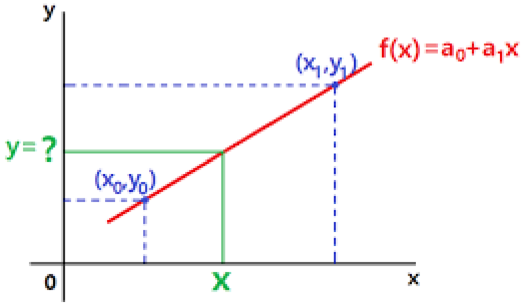
Considere que temos $(x_0, x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}$ são pontos diferentes. Então, para qualquer $f(x_0), \ldots, f(x_n)$ temos um polinômio univoco $Q(x_j)$ de grau <n, tal que a condição $Q(x_j) = f(x_j)$ é satisfeita.

- Diferentes soluções: Forma de Newton

Aproximação linear: Ajustar pontos a uma linha reta

$$Q_1(x) = a_0 + a_1(x - x_0). \qquad Q_0(x) = a_0, \; a_0 = f(x_0).$$

$$a_1 = \frac{f(x_1) - Q_0(x_1)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$



Interpolação Polinomial

- Em geral podemos escrever

$$\begin{aligned} Q_n(x) &= a_0 + a_1(x - x_0) + \ldots + a_n(x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}) \\ &= a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j \prod_{k=0}^{j-1} (x - x_k). \end{aligned}$$

$$a_0 = f(x_0),$$

$$a_j = \frac{f(x_j) - Q_{j-1}(x_j)}{\prod_{k=0}^{j-1}(x_j - x_k)}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant n.$$

Exemplo: para ajustar três pontos obtemos

$$Q_2(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) + \frac{f(x_2) - \left[f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0)\right]}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}(x - x_0)(x - x_1).$$

Interpolação Polinomial

- Exemplo:

  Determinar o polinomio de interpolação que passa pelos pontos: {(0,1),(1,6),(2,5),(3,-8)}

Uma forma alternativa é considerar diretamente:

$$Q_n(x) = \sum_{k=0}^{n} b_k x^k,$$

Depois impor a condição: $Q_n(x_j) = f(x_j), \qquad 0 \leqslant j \leqslant n.$

Em forma extensa podemos escrever:

$$b_0 + b_1 x_j + \ldots + b_n x_j^n = f(x_j), \qquad j = 0, \ldots, n.$$

Interpolação Polinomial

- Em forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}.$$

Condição para solução única:

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{vmatrix} \neq 0.$$

Usando este método podemos obter a solução
Do problema acima usando Python

Interpolação Polinomial

- Solução em Python

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

xi = np.array([0,1,2,3], dtype= 'double')
yi = np.array([1,6,5,-8], dtype='double')

A = np.array([xi**3,xi**2,xi**1,xi**0]).transpose()
a = np.linalg.inv(A).dot(yi);
a = np.array([ -1,  0.,  6,  1. ])
xx = np.linspace(-0.5,3.25);
plt.plot(xi,yi,'ro',xx,np.polyval(a,xx),'b-')
plt.grid();plt.show()
```

Interpolação Polinomial

- ## Forma de Lagrange

Interpolação polinomial é uma combinação linear de n+1 polinômios de grau n

$$Q_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j^n(x),$$

Usamos dos índices para os l's sendo que o j roda de 0,..,n e o superíndice indica o grau do polinômio. Condição de interpolação:

$$Q_n(x_i) = f(x_i), \qquad 0 \leqslant i \leqslant n.$$

Por substituir x por x_i então obtemos que:

$$Q_n(x_i) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j^n(x_i), \qquad 0 \leqslant i \leqslant n.$$

Interpolação Polinomial

- ## Forma de Lagrange

Para que nosso resultado anterior seja compatível com a condição de interpolação:

$$l_j^n(x_i) = \delta_{ij}, \qquad i, j = 0, \ldots, n,$$

Onde δ_{ij} é a delta de Krönecker definida como:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Resumo do método de Lagrange:

A condição do delta de Krönecker para os polinômios proporciona um conjunto de n+1 equações que os polinômios l's devem satisfazer.
Estas equações devem ser solucionadas para determinar os l's e encontrar o polinômio de interpolação.

Interpolação Polinomial

- Forma de Lagrange

Uma forma de escrever os polinômios l’s é escrever

$$l_j^n(x) = \frac{(x-x_0)\cdot\ldots\cdot(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdot\ldots\cdot(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdot\ldots\cdot(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdot\ldots\cdot(x_j-x_n)}, \quad 0 \leqslant j \leqslant n.$$

Ainda de forma compacta pode ser escrito como

$$l_j^n(x) = \frac{\prod\limits_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}(x-x_i)}{\prod\limits_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}(x_j-x_i)}, \qquad j = 0, \ldots, n.$$

Interpolação Polinomial

- ## Forma de Lagrange

Exemplos:
1. Determinar o polinômio de Lagrange para interpolar dois pontos
2. Determinar o polinômio de Lagrande para três pontos

$$(x_0, f(x_0)) \quad (x_1, f(x_1)) \longrightarrow$$

Dois pontos

$$l_0^1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \qquad l_1^1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Portanto, temos que o polinômio de interpolação:

$$Q_1(x) = f(x_0)l_0^1(x) + f(x_1)l_1^1(x) = f(x_0)\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1)\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Interpolação Polinomial

- Forma de Lagrange

$(x_0, f(x_0)),\ (x_1, f(x_1)),\ (x_2, f(x_2))$ → Três pontos

$$
\begin{aligned}
l_0^2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},\\
l_1^2(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\\
l_2^2(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.
\end{aligned}
$$

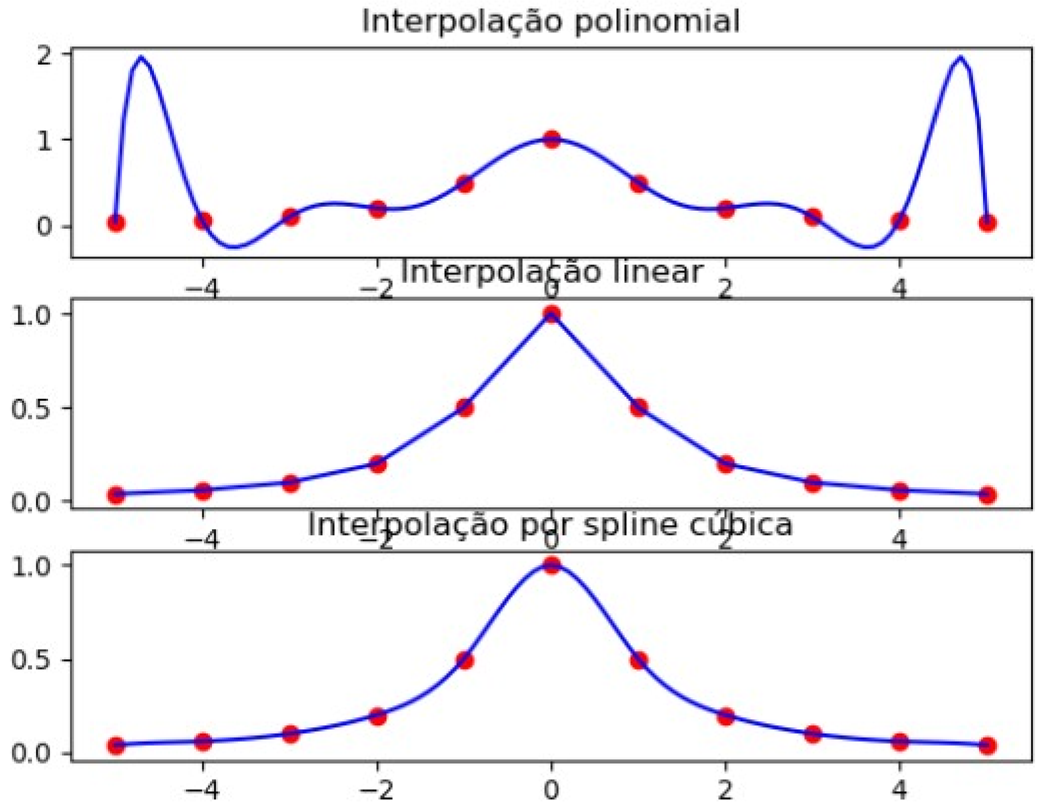
Portanto, o polinômio de interpolação resulta:

$$
\begin{aligned}
Q_2(x) &= f(x_0)l_0^2(x) + f(x_1)l_1^2(x) + f(x_2)l_2^2(x)\\
&= f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.
\end{aligned}
$$

Interpolação Polinomial

- Função de Runge

$$y(x) \approx \frac{1}{1+x^2}$$



Interpolação Polinomial

- Diferenças Divididas de Newton

$$Q_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \ldots + a_n(x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}),$$

$$a_0 = f(x_0)$$

$$a_j = \frac{f(x_j) - Q_{j-1}(x_j)}{\prod_{k=0}^{j-1}(x_j - x_k)}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant n.$$

Os coeficientes podem ser denotamos como

$$a_j = f[x_0, \ldots, x_j],$$

$$a_0 = f[x_0],$$

$$f[x_0] = f(x_0).$$

Portanto obtemos que

Interpolação Polinomial

- Diferenças Divididas de Newton

$$Q_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + \ldots + f[x_0, \ldots x_n] \prod_{k=0}^{n-1} (x - x_k).$$

Teorema ou lema:

$$f[x_0, \ldots x_n] = \frac{f[x_1, \ldots x_n] - f[x_0, \ldots x_{n-1}]}{x_n - x_0}.$$

Exemplo:

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2 - x_0}.$$

Para três pontos $(x_0, f(x_0))$ $(x_1, f(x_1))$ $(x_2, f(x_2))$

$$Q_2(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

$$= f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) + \frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2 - x_0}(x - x_0)(x - x_1).$$

Interpolação Polinomial

- Diferenças Divididas de Newton

Então consideremos explicitamente dados os n pontos

$$p_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + \ldots. + b_n(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})$$

$$b_0 = f[x_0] = f(x_0) \qquad \text{Ordem zero}$$

$$b_1 = f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \qquad \text{Ordem 1}$$

$$b_2 = f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} \qquad \text{Ordem 2}$$

•••

$$b_n = f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, \ldots, x_n] - f[x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}]}{x_n - x_0} \qquad \text{Ordem n}$$

Interpolação Polinomial

- Diferenças Divididas de Newton

Temperatura T (^oC) (x)	Concentração Cp(T) (y)
42	4179
52	4186
82	4199
100	4217

$$C_p(T) = b_0 + b_1(T - T_0) + b_2(T - T_0)(T - T_1) + b_3(T - T_0)(T - T_1)(T - T_2)$$

Diferenças Divididas

$T_0 = 42$,	4179 (b_0)			
		0,7 (b_1)		
$T_1 = 52$,	4186		$6,6667 \times 10^{-3}$ (b_2)	
		0,43333		$3,1849 \times 10^{-4}$ (b_3)
$T_2 = 82$,	4199		0,011806	
		1		
$T_3 = 100$,	4217			

http://numericalmethods.eng.usf.edu

Diferenças Divididas de Newton

- Sites interessantes

http://nm.mathforcollege.com/topics/newton_divided_difference_method.html

http://nm.mathforcollege.com/topics/lagrange_method.html

http://nm.mathforcollege.com/topics/direct_method.html

Interpolação Polinomial

- Erros na interpolação polinomial

$$f(x) - Q_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_n) \prod_{j=0}^{n} (x - x_j).$$

Considerando diferenças divididas

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

$$f[x_0, x_1] = f'(\xi), \qquad \xi \in (x_0, x_1).$$

Em geral obtemos que

$$f[x_0, \ldots, x_{n-1}, x] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!},$$

Interpolação Polinomial

- Interpolação de Chebyshev

Erro da interpolação resulta dada pela expressão

$$f(x) - Q_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_n) \prod_{j=0}^{n} (x - x_j).$$

Neste caso ξ_n representa um ponto dentro do intervalo de interesse [a,b]

Efeitos dos pontos de interpolação:

$$\prod_{j=0}^{n} (x - x_j).$$

$$f^{(n+1)}(\xi_n)$$

Como minimizar os erros de interpolação?
Minimizando sobre estes dos termos.
Uma forma é usar polinômios de Chebyshev

Interpolação Polinomial

- Interpolação de Chebyshev

Podemos mostra isto da seguinte forma

$$\begin{aligned}\cos(n+1)\theta &= \cos\theta\cos n\theta - \sin\theta\sin n\theta,\\ \cos(n-1)\theta &= \cos\theta\cos n\theta + \sin\theta\sin n\theta.\end{aligned}$$

Usando estas duas equações podemos obter

$$\cos(n+1)\theta = 2\cos\theta\cos n\theta - \cos(n-1)\theta.$$

Considerando que

$\theta = \cos^{-1} x$ pois $x = \cos\theta,$

Então se definimos que $t_n(x) = \cos(n\cos^{-1} x) = \cos(n\theta).$

Interpolação Polinomial

- Interpolação de Chebyshev

Assim podemos verificar que temos

$$\begin{cases} t_0(x) = 1, \\ t_1(x) = x, \\ t_{n+1}(x) = 2xt_n(x) - t_{n-1}(x), \quad n \geqslant 1. \end{cases}$$

Portanto, obtemos então

$$t_n(x) = T_n(x).$$

Implica que um polinômio de grau n resulta $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \dots$

Podemos reescrever que: $2^{1-n}T_n(x) = x^n + \dots$

- Interpolação de Chebyshev

Se p(x) é um polinômio mônico se pode mostrar que obtemos

$$\max_{-1\leqslant x\leqslant 1} |p_n(x)| \geqslant 2^{1-n}.$$

Considerando $q_n(x) = 2^{1-n} T_n(x),$

Considerando que $\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)$ É um polinômio mônico obtemos

$$\max_{|x|\leqslant 1} \left| \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \right| \geqslant 2^{-n}.$$

$$2^{-n} T_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j),$$

Onde consideramos que x’s j são os pontos raízes do polinômio T(x)

Interpolação Polinomial

- Interpolação de Chebyshev

$$T_{n+1}(x) = \cos((n+1)\cos^{-1} x).$$

$$(n+1)\cos^{-1}(x_j) = \left(j + \frac{1}{2}\right)\pi, \qquad 0 \leqslant j \leqslant n,$$

$$x_j = \cos\left(\frac{2j+1}{2n+2}\pi\right), \qquad 0 \leqslant j \leqslant n.$$

Estes são os pontos de Chebyshev que permitem minimizar o erro da interpolação

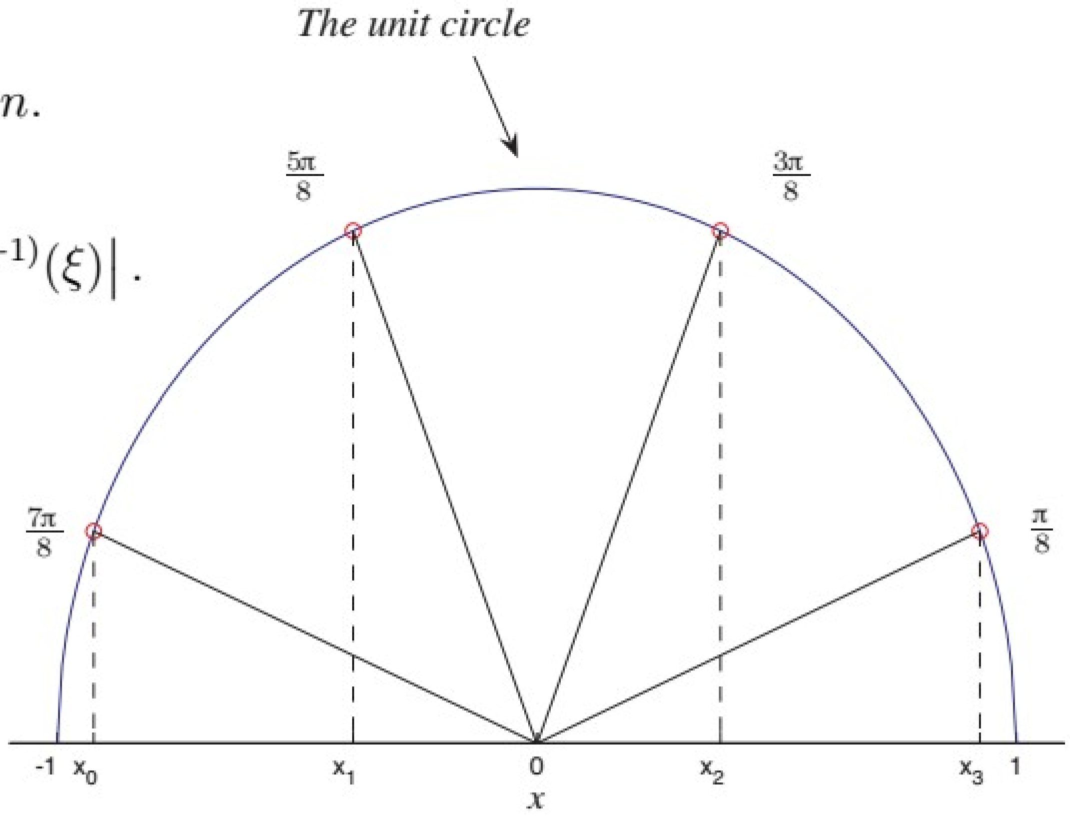
Interpolação Polinomial

- Interpolação de Chebyshev

Teorema: Consideramos que se Q_{n} é o polinômio de interpolação da função f(x)
Nos pontos de interpolação que correspondem aos pontos de chebyshev de ordem n+1

$$x_j = \cos\left(\frac{2j+1}{2n+2}\pi\right), \qquad 0 \leqslant j \leqslant n.$$

$$|f(x) - Q_n(x)| \leqslant \frac{1}{2^n(n+1)!} \max_{|\xi| \leqslant 1} \left| f^{(n+1)}(\xi) \right|.$$



Interpolação Polinomial

- Exemplos de Interpolção polinomial:

  Revisamos os exemplos usando jupyter notebook usando scipy, numpy e matplotlib, etc.
- Revisar os exemplos
- Fazer os exercícios postados

Interpolação Polinomial

- Exemplos:

Método de Diferenças divididas de Newton
Para os dados determinar:

$f(x) = \cos x,\ x_0 = 0.2,\ x_1 = 0.3,\ x_2 = 0.4.$ determinar $f[x_0, x_1, x_2].$

Cálculos:

$$f[x_0, x_1] = \frac{\cos(0.3) - \cos(0.2)}{0.3 - 0.2} \approx -0.2473009$$

$$f'\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) = -\sin(0.25) \approx -0.247404$$

$$f[x_0, x_1] \approx -0.2473009$$

$$f[x_1, x_2] = \frac{\cos(0.4) - \cos(0.3)}{0.4 - 0.3} \approx -0.3427550$$

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} \approx \frac{-0.3427550 - (-0.2473009)}{0.4 - 0.2} \approx -0.4772705.$$

Interpolação Polinomial

- Exemplos:

$$(x_0, y_0),\ (x_1, y_1),\ (x_2, y_2), \longrightarrow (0,-1),(1,-1),(2,7).$$

$$P_2(x) = y_0\, L_0(x) + y_1\, L_1(x) + y_2\, L_2(x)$$

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

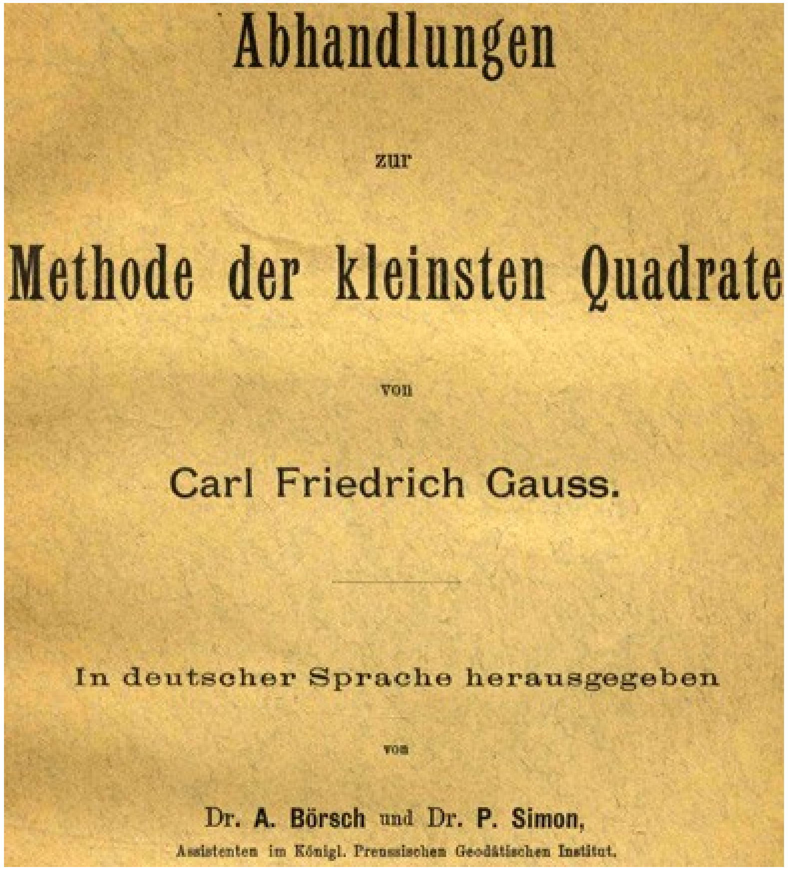
$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$P_2(x) = (-1)\,\frac{(x-1)(x-2)}{2} + (-1)\,\frac{x(x-2)}{-1} + 7\,\frac{x(x-1)}{2} = \frac{-1}{2}(x-1)(x-2) + x(x-2) + \frac{7}{2}x(x-1)$$

Para n pontos $(x_0, y_0),\ (x_1, y_1),\ \cdots (x_n, y_n),$

Métodos de regressão

- Em geral um método de regressão é um método para ajustar dados observacionais usando um modelo matemático.
- O método mais simples é o metodo dos minimos quadrados (MMQ).
- O MMQ foi publicado inicialmente por Legendre e Gauss no início do século XIX.


Abhandlungen

zur

Methode der kleinsten Quadrate

von

Carl Friedrich Gauss.

In deutscher Sprache herausgegeben

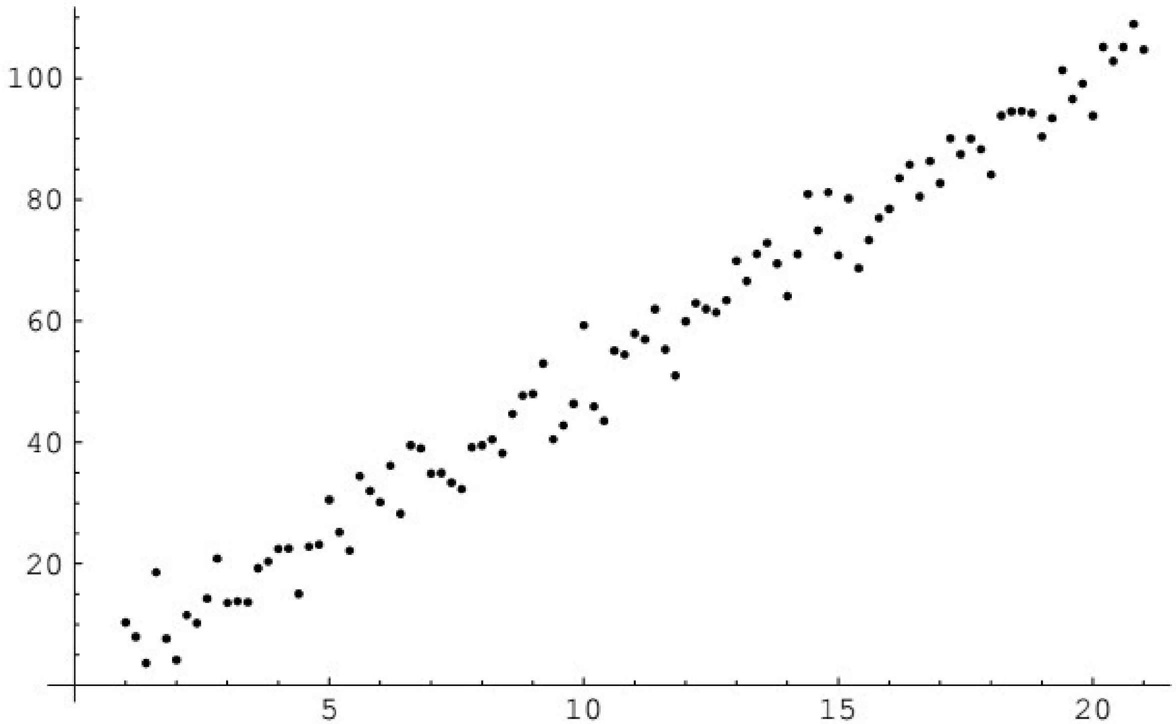
von

Dr. A. Börsch und Dr. P. Simon,

Assistenten im Königl. Preussischen Geodätischen Institut.

Métodos de regressão

- Dados Observacionais
- Modelo teórico
- Correspondência?
- Vínculos sobre parâmetros
- Conclusões



Métodos de regressão

- Método de mínimos quadrados:

dados

$\{(x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)\}$

Modelo linear:

Os betas são os parâmetros do modelo!

$$y = \beta_0 + \beta_1 x,$$

Minimizamos sobre os parâmetros a grandeza definida como

$$S(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 \longrightarrow \frac{\partial S}{\partial \beta_0} = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial \beta_1} = 0,$$

- Método de mínimos quadrados:

Desenvolvendo as derivadas para cada parâmetro obtemos

$$\sum_i y_i = n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \sum_i x_i$$
$$\sum_i x_i y_i = \hat{\beta}_0 \sum_i x_i + \hat{\beta}_1 \sum_i x_i^2$$

Solucionando para os parâmetros:

$$\hat{\beta}_0 = \frac{\sum x_i^2 \sum_i y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$
$$\hat{\beta}_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

- ## Método de mínimos quadrados:

Para casos de considerar modelos não lineares temos que considerar uma espécie De linearização, mas para o caso geral temos que usar outros métodos:

Por exemplo, consideramos as formas como se distribui a energia de partículas clássicamente

$$\alpha(T) = Ce^{-E_A/kT}$$

Podemos linearizar usando

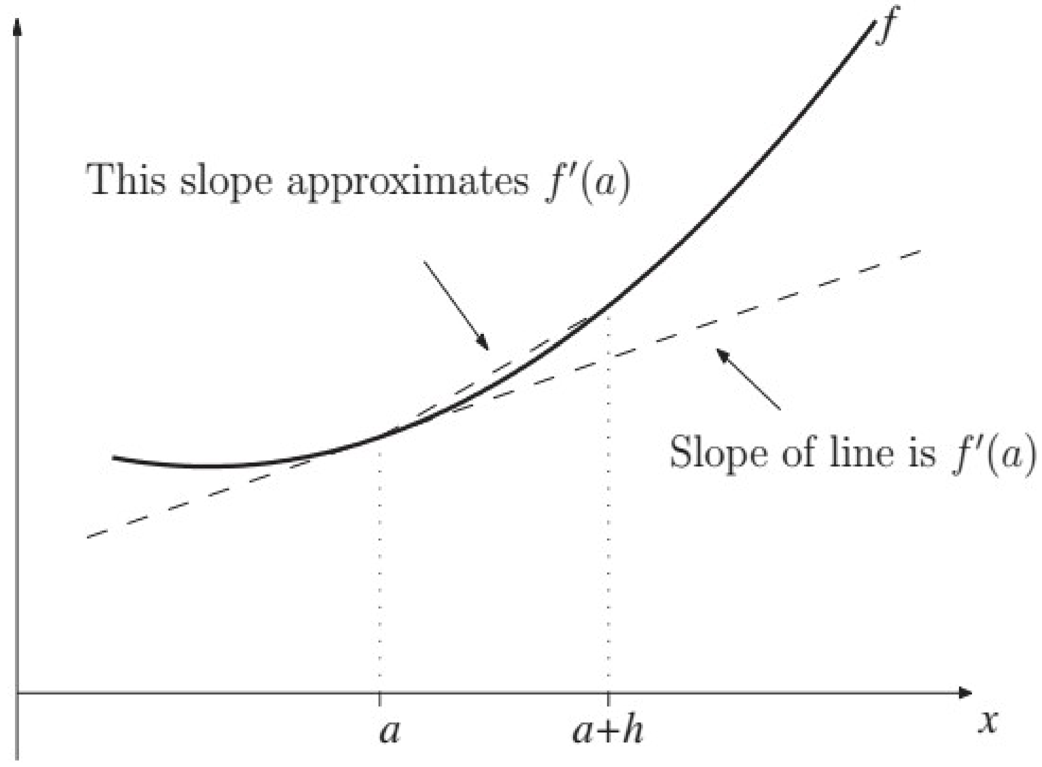
$$\log \alpha(T) = \log C - \frac{E_A}{kT}$$

Derivadas

- Introdução

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}.$$

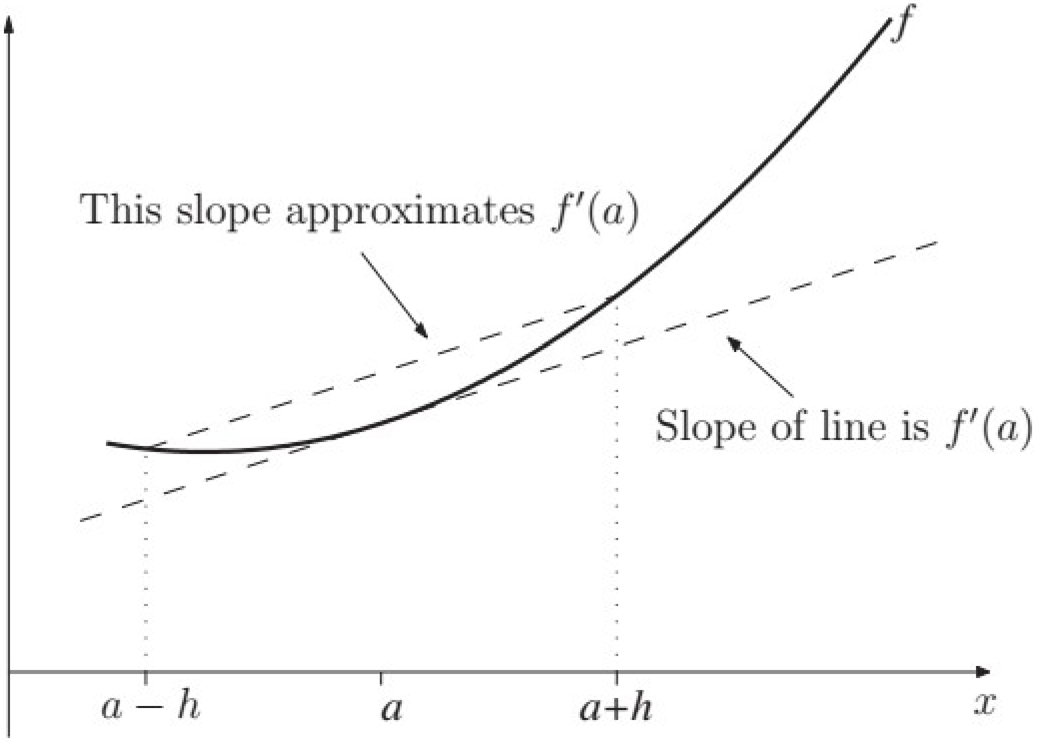
Diferencias para frente



Derivadas Numéricas

- Introdução

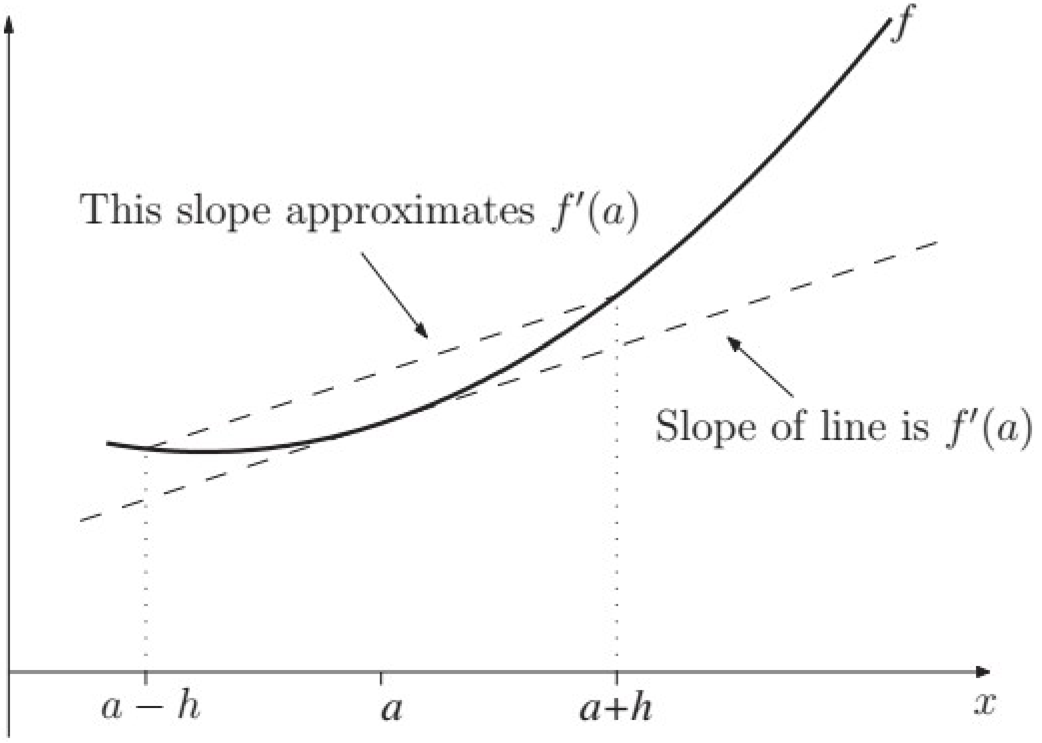
$$f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$



Derivadas Numéricas

- Introdução

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



Derivadas Numéricas

- Exemplo: determinar a derivada numérica da função:

$\cos(x)$ no ponto $x = \pi/3.$

(a) $h = 0.1$ (b) $h = 0.01$ (c) $h = 0.001$ (d) $h = 0.0001$

(a) $f'(a) \approx \dfrac{\cos(a+h) - \cos(a-h)}{2h} = \dfrac{0.41104381 - 0.58396036}{0.2} = -0.86458275$

(b) $f'(a) \approx \dfrac{\cos(a+h) - \cos(a-h)}{2h} = \dfrac{0.49131489 - 0.50863511}{0.02} = -0.86601097$

(c) $f'(a) \approx \dfrac{\cos(a+h) - \cos(a-h)}{2h} = \dfrac{0.49913372 - 0.50086578}{0.002} = -0.86602526$

(d) $f'(a) \approx \dfrac{\cos(a+h) - \cos(a-h)}{2h} = \dfrac{0.49991339 - 0.50008660}{0.0002} = -0.86602540$

Integração

- Problema:

Determinar o valor da integral $\int_a^b f(x)dx$. nos pontos:

$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n,$ onde temos que $h = \frac{b-a}{n}$.

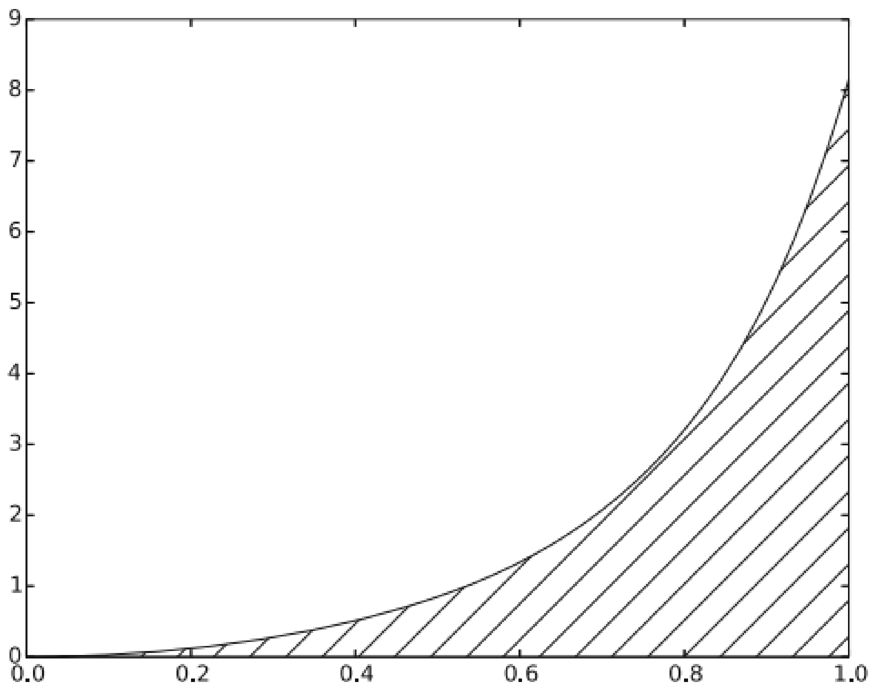
Podemos resolver esta questão de diferentes formas uma delas é o método do trapézio

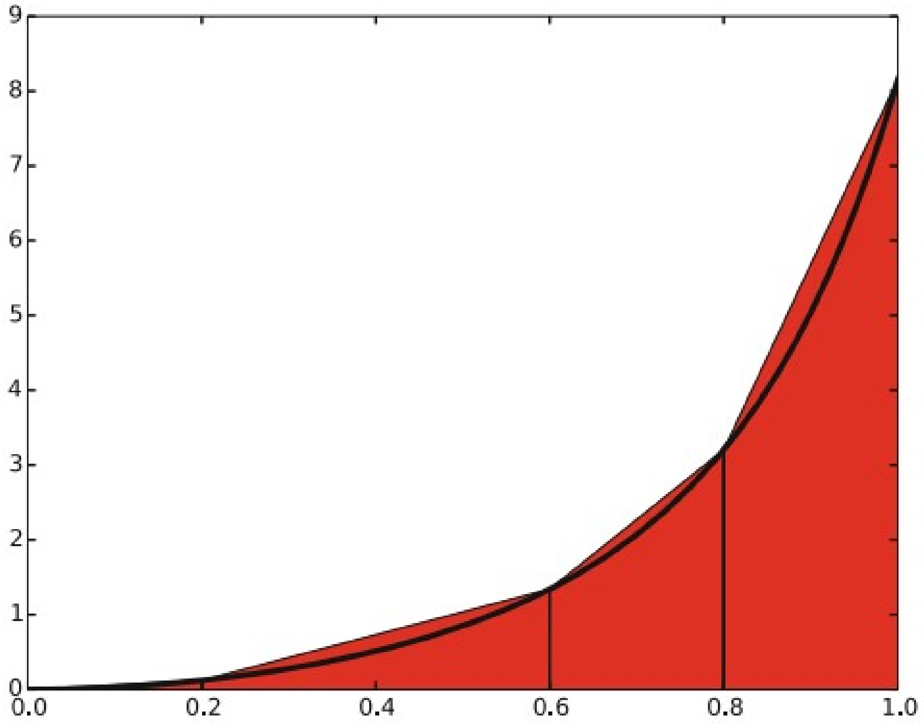
Exemplo: considere a função dada por

$v(t) = 3t^2 e^{t^3}$. $\longrightarrow$ $\int_0^1 v(t)dt,$ $\longrightarrow$ $V(t) = e^{t^3} - 1$.

Integração

- Regra do trapézio





$$\int_0^1 v(t)dt \approx h_1\left(\frac{v(0)+v(0.2)}{2}\right)+h_2\left(\frac{v(0.2)+v(0.6)}{2}\right)$$
$$+h_3\left(\frac{v(0.6)+v(0.8)}{2}\right)+h_4\left(\frac{v(0.8)+v(1.0)}{2}\right),$$

Integração

- Regra de trapézio

$$h_1 = (0.2 - 0.0),$$
$$h_2 = (0.6 - 0.2),$$
$$h_3 = (0.8 - 0.6),$$
$$h_4 = (1.0 - 0.8)$$

$$\int_0^1 v(t)dt \approx 1.895\,.$$

Usando a função analitica obtemos: $1.718,$

Fórmula geral do método do trapézio:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx,$$
$$\approx h\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h\frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \ldots$$
$$+ h\frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

Integração

- Regra de trapézio

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)\right]$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2}f(x_n)\right].$$

Exemplos

- Método do trapézio

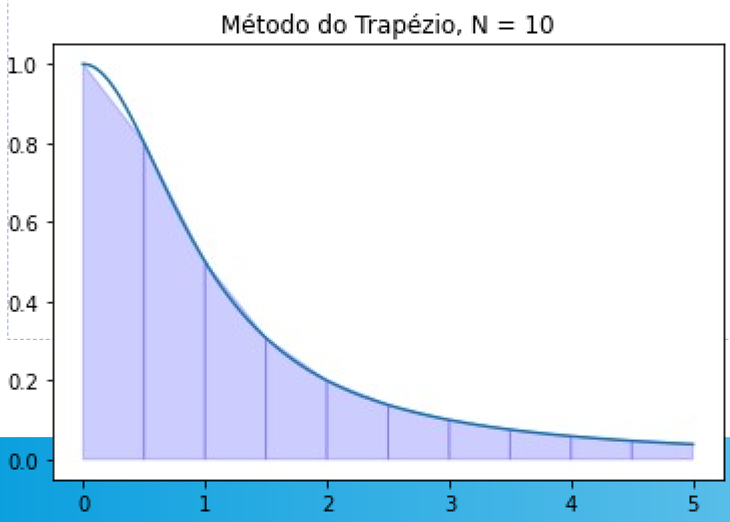
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
```

```
f = lambda x : 1/(1 + x**2)
a = 0; b = 5; N = 10

# x e y valores para a regra do trapézio
x = np.linspace(a,b,N+1)
y = f(x)

# Valores para plotar a função f(x)
X = np.linspace(a,b,100)
Y = f(X)
plt.plot(X,Y)
```

Exemplo

- Exemplo

```
for i in range(N):
    xs = [x[i],x[i],x[i+1],x[i+1]]
    ys = [0,f(x[i]),f(x[i+1]),0]
    plt.fill(xs,ys,'b',edgecolor='b',alpha=0.2)

plt.title('Método do Trapézio, N = {}'.format(N))
plt.show()
```



Equações diferenciais ordinárias

- Uma equação diferencial ordinária é uma equação que envolve derivadas de uma função de uma variável pode ser pensada também como um problema de valor inicial.

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0.$$

Método mais simples: método de Euler.

$$x = x_1 = x_0 + h,$$

$$y(x) = y_0 + m(x - x_0),$$

$$y(x) = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0).$$

$$m = f(x_0, y_0)$$

Equações diferenciais ordinárias

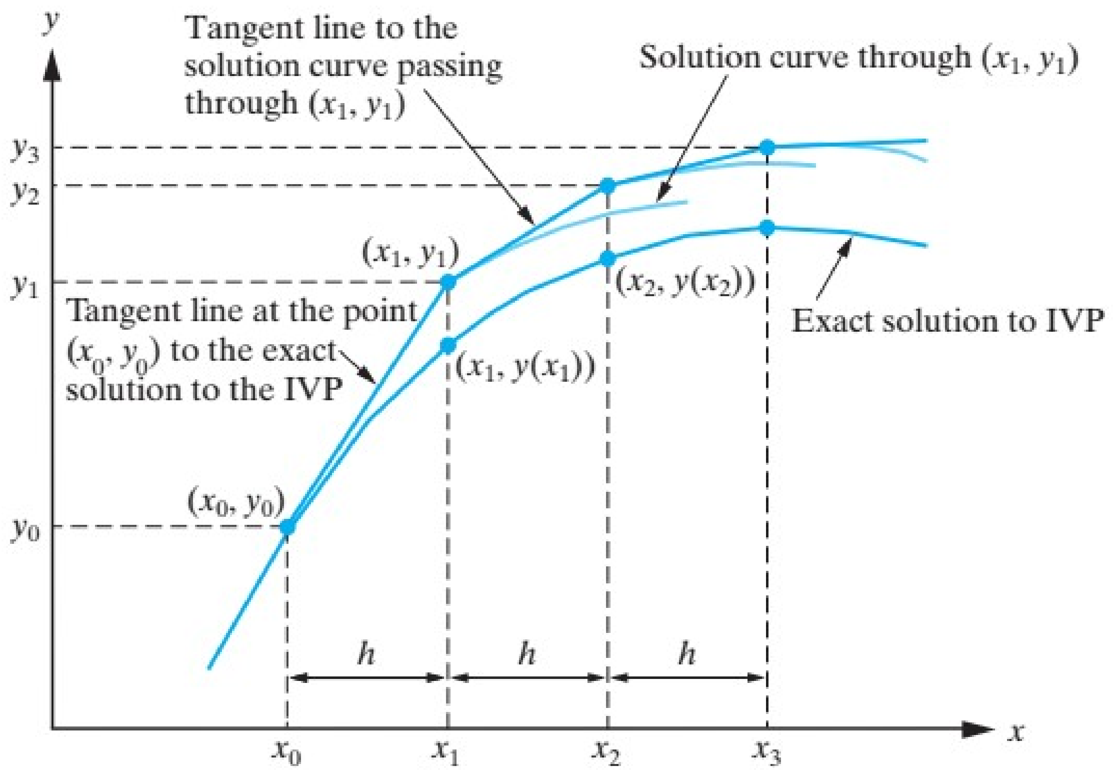
- Método de Euler

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0)(x_1 - x_0),$$

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0).$$

$$x_2 = x_1 + h.$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \qquad n = 0, 1, \ldots$$



Equações diferenciais ordinárias

- Método de Euler resumo:

$$y' = f(x, y), \qquad y(x_0) = y_0$$

Solução aproximada nos pontos $x_{n+1} = x_0 + nh \ (n = 0, 1, \ldots)$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \qquad n = 0, 1, \ldots .$$

Exemplo: $y' = y - x, \quad y(0) = \frac{1}{2}.$

Usar como hs: $h = 0.1$, $h = 0.05$ Para determinar o valor da função $y(1)$.

Determinar o erro se a solução analítica resulta ser: $y(x) = x + 1 - \frac{1}{2}e^x,$

Equações diferenciais ordinárias

- Solução

$$f(x, y) = y - x, \qquad x_0 = 0, \qquad y_0 = \tfrac{1}{2}.$$

Para h=0.1 temos a função y no ponto n+1 dada pela expressão

$$y_{n+1} = y_n + 0.1(y_n - x_n).$$

$$y_1 = y_0 + 0.1(y_0 - x_0) = 0.5 + 0.1(0.5 - 0) = 0.55,$$
$$y_2 = y_1 + 0.1(y_1 - x_1) = 0.55 + 0.1(0.55 - 0.1) = 0.595.$$

Equações diferenciais ordinárias

- Solução

n	x_n	y_n	valor exato	erro absoluto
1	0.1	0.55	0.547414	0.002585
2	0.2	0.595	0.589299	0.005701
3	0.3	0.6345	0.625070	0.009430
4	0.4	0.66795	0.654088	0.013862
5	0.5	0.694745	0.675639	0.019106
6	0.6	0.714219	0.688941	0.025278
7	0.7	0.725641	0.693124	0.032518
8	0.8	0.728205	0.687229	0.040976
9	0.9	0.721026	0.670198	0.050828
10	1.0	0.703129	0.640859	0.062270

$y_{10} = 0.703129,$

Erro absoluto: $|y(1) - y_{10}| = 0.062270.$

- Solução

Para h= 0.05 temos a função y no ponto n+1 dada pela expressão

$$y_{n+1} = y_n + 0.05(y_n - x_n), \qquad n = 0, 1, \ldots, 19,$$

$y_{20} = 0.673351$ Erro absoluto $|y(1) - y_{20}| = 0.032492.$

n	x_n	y_n	valor exato	erro absoluto
2	0.1	0.54875	0.547414	0.001335
4	0.2	0.592247	0.589299	0.002948
6	0.3	0.629952	0.625070	0.004881
8	0.4	0.661272	0.654088	0.007185
10	0.5	0.685553	0.675639	0.009913
12	0.6	0.702072	0.688941	0.013131
14	0.7	0.710034	0.693124	0.016910
16	0.8	0.708563	0.687229	0.021333
18	0.9	0.696690	0.670198	0.026492
20	1.0	0.686525	0.640859	0.032492

Método de Runge-Kutta

- Série de Taylor

Consideremos a série de Taylor para a função x(t+h) obtemos

$$x(t+h) = x(t) + hx'(t) + \frac{h^2}{2!}x''(t) + \frac{h^3}{3!}x'''(t) + \cdots$$

Também considerando o problema do valor inicial:

$$\begin{cases} x' = f(t,x) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases}$$

Podemos escrever as derivadas da série de Taylor como:

$$\begin{aligned} x'(t) &= f \\ x''(t) &= f_t + f_x x' = f_t + f_x f \\ x'''(t) &= f_{tt} + f_{tx} f + (f_t + f_x f) f_x + f(f_{xt} + f_{xx} f) \\ &\quad etc. \end{aligned}$$

Método de Runge-Kutta

- Neste caso usamos repetidamente a regra da cadeia e os subindices são derivadas parciais, assim os primeiros três termos da série de Taylor podem ser escretor como

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x + hf + \tfrac{1}{2}h^2(f_t + ff_x) + O(h^3) \\ &= x + \tfrac{1}{2}hf + \tfrac{1}{2}h[f + hf_t + hff_x] + O(h^3) \end{aligned}$$

Onde x significa x(t) e f significa f(x,t) e considerando

$$f(t+h, x+hf) = f + hf_t + hff_x + O(h^2)$$

Desta forma usando esta definição que é da própria série de Taylor obtemos

$$x(t+h) = x + \tfrac{1}{2}hf + \tfrac{1}{2}hf(t+h, x+hf) + O(h^3)$$

Método de Runge-Kutta

- Desta forma usamos explicitamente até o terceira ordem na série de Taylor, assim podemos escrever

$$x(t+h) = x(t) + \frac{h}{2} f(t,x) + \frac{h}{2} f(t+h, x+hf(t,x))$$

Ou equivalentemente em outra notação podemos reescrever

$$x(t+h) = x(t) + \tfrac{1}{2}(F_1 + F_2)$$

onde

$$\begin{cases} F_1 = hf(t,x) \\ F_2 = hf(t+h, x+F_1) \end{cases}$$

Método de Runge-Kutta

- Método de Runge Kutta de quarto ordem

Usando o mesmo procedimento podemos obter o caso do método de Runge-Kutta De quarto ordem como:

$$x(t+h) = x(t) + \tfrac{1}{6}(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4)$$

onde

$$\begin{cases} F_1 = hf(t,x) \\ F_2 = hf(t + \tfrac{1}{2}h,\ x + \tfrac{1}{2}F_1) \\ F_3 = hf(t + \tfrac{1}{2}h,\ x + \tfrac{1}{2}F_2) \\ F_4 = hf(t + h,\ x + F_3) \end{cases}$$

Neste caso o erro deste método é da ordem de $O(h^5)$

$0 < t < 2$

Example sobre Método de Runge-Kutta

- Considerar a equação diferencial ordinária:

$$\begin{cases} y' = y - t^2 + 1 \\ y(0) = 0.5 \end{cases}$$

Solução analítica: $y = t^2 + 2t + 1 - \frac{1}{2}e^t$

Usar o método de Runge-Kutta de quarta ordem para determinar a solução no intervalo

$0<t<2$

Solução: considerando como $h = 0.5$.

$$t_0 = 0, t_1 = 0.5, t_2 = 1, t_3 = 1.5, t_4 = 2.$$

Example sobre Método de Runge-Kutta

- Para nosso exemplo podemos escrever a fórmula de Runge-Kutta

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \\ y(t_0) = \alpha \end{cases} \qquad t_i = t_0 + ih.$$

$$w_0 = \alpha$$

$$k_1 = hf(t_i,\, w_i)$$

$$k_2 = hf\left(t_i + \frac{h}{2},\, w_i + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = hf\left(t_i + \frac{h}{2},\, w_i + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = hf(t_i + h,\, w_i + k_3)$$

$$w_{i+1} = w_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Para nosso caso podemos fazer

$$t_0 = 0,\, w_0 = 0.5.$$

$$t_0 = 0,\, t_1 = 0.5,\, t_2 = 1,\, t_3 = 1.5,\, t_4 = 2.$$

Example sobre Método de Runge-Kutta

- Aplicando para os pontos

$$t_1 = 0.5$$

$$k_1 = hf(t_0, w_0) = 0.5f(0, 0.5) = 0.75$$
$$k_2 = hf(t_0 + h/2, w_0 + k_1/2) = 0.5f(0.25, 0.875) = 0.90625$$
$$K_3 = hf(t_0 + h/2, w_0 + k_2/2) = 0.5f(0.25, 0.953125) = 0.9453125$$
$$K_4 = hf(t_0 + h, w_0 + K_3) = 0.5f(0.5, 1.4453125) = 1.09765625$$
$$w_1 = w_0 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 = 1.425130208333333$$

$$t_2 = 1$$

$$k_1 = hf(t_1, w_1) = 0.5f(0.5, 1.425130208333333) = 1.087565104166667$$
$$k_2 = hf(t_1 + h/2, w_1 + k_1/2) = 0.5f(0.75, 1.968912760416667) = 1.203206380208333$$
$$K_3 = hf(t_1 + h/2, w_1 + k_2/2) = 0.5f(0.75, 2.0267333984375) = 1.23211669921875$$
$$K_4 = hf(t_1 + h, w_1 + K_3) = 0.5f(1, 2.657246907552083) = 1.328623453776042$$
$$w_2 = w_1 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 = 2.639602661132812$$

Example sobre Método de Runge-Kutta

- Aplicando para os pontos

$$t_3 = 1.5$$

$$k_1 = hf(t_2, w_2) = 0.5f(1, 2.639602661132812) = 1.319801330566406$$
$$k_2 = hf(t_2 + h/2, w_2 + k_1/2) = 0.5f(1.25, 3.299503326416016) = 1.368501663208008$$
$$K_3 = hf(t_2 + h/2, w_2 + k_2/2) = 0.5f(1.25, 3.323853492736816) = 1.380676746368408$$
$$K_4 = hf(t_2 + h, w_2 + K_3) = 0.5f(1.5, 4.020279407501221) = 1.385139703750610$$
$$w_3 = w_2 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 = 4.006818970044454$$

$$t_4 = 2$$

$$k_1 = hf(t_3, w_3) = 0.5f(1.5, 4.006818970044454) = 1.378409485022227$$
$$k_2 = hf(t_3 + h/2, w_3 + k_1/2) = 0.5f(1.75, 4.696023712555567) = 1.316761856277783$$
$$K_3 = hf(t_3 + h/2, w_3 + k_2/2) = 0.5f(1.75, 4.665199898183346) = 1.301349949091673$$
$$K_4 = hf(t_3 + h, w_3 + K_3) = 0.5f(2, 5.308168919136127) = 1.154084459568063$$
$$w_4 = w_3 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 = 5.301605229265987$$

Example sobre Método de Runge-Kutta

- Comparando com solução analítica

t	solução exata	solução numérica	erro
0.0	0.5	0.5	0
0.5	1.425639364649936	1.425130208333333	0.000509156316603
1.0	2.640859085770477	2.639602661132812	0.001256424637665
1.5	4.009155464830968	4.006818970044454	0.002336494786515
2.0	5.305471950534675	5.301605229265987	0.003866721268688

Example sobre Método de Runge-Kutta

- Fazendo o mesmo no entanto para valor de h:

$h = 0.2$.

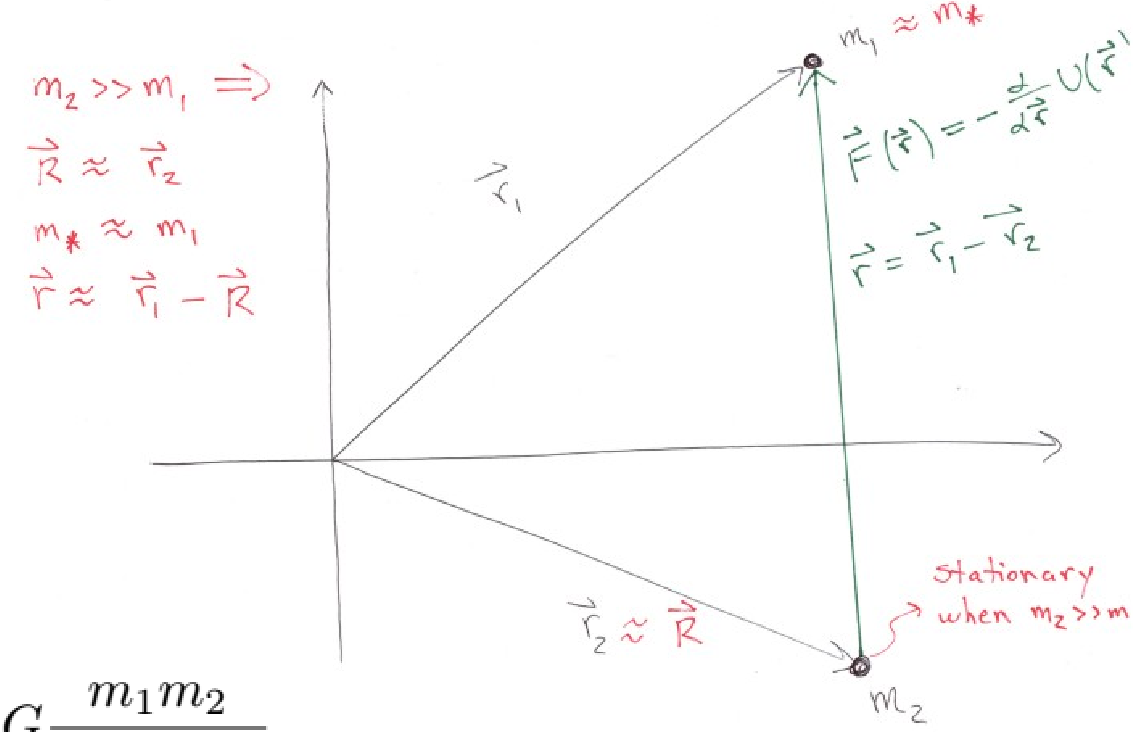
t	valor exato	valor numérico	erro
0.0	0.5	0.5	0
0.2	0.829298620919915	0.829293333333333	0.000005287586582
0.4	1.214087651179365	1.214076210666667	0.000011440512698
0.6	1.648940599804746	1.648922017041600	0.000018582763146
0.8	2.127229535753766	2.127202684947944	0.000026850805823
1.0	2.640859085770477	2.640822692728752	0.000036393041726
1.2	3.179941538631726	3.179894170232231	0.000047368399496
1.4	3.732400016577663	3.732340072854980	0.000059943722683
1.6	4.283483787802442	4.283409498318406	0.000074289484036
1.8	4.815176267793527	4.815085694579435	0.000090573214092
2.0	5.305471950534674	5.305363000692655	0.000108949842019

Sistemas de equações diferenciais

- Problema Terra-Sol

Sistema de equações

$$m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F}_{21} \ ; \ m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{F}_{12}$$



Potencial gravitacional
entre as duas massas

$$U_{12}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = U_{21}(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) = G\frac{m_1 m_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2},$$

$$G = 6.673 \times 10^{-11} \text{ N m}^2/\text{kg}^2.$$

Sistemas de equações diferenciais

- Usando o referencial do centro de massa podemos transformar as duas equações de segunda ordem (usar as leis de Newton) em uma equação de segunda ordem

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M}$$

$$\mathbf{v}_{CM} = \frac{m_1\mathbf{v}_1 + m_2\mathbf{v}_2}{M}.$$

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = M\mathbf{a}_{CM}.$$

Movimento do CM depende da força externa total como o sistema é isolado a velocidade é uma constante

$$\mathbf{v}_{CM}^{(0)} = \frac{m_1\mathbf{v}_1^{(0)} + m_2\mathbf{v}_2^{(0)}}{M}.$$

$$\mathbf{R}\,(t) = \mathbf{v}_{CM}^{(0)}t.$$

Sistemas de equações diferenciais

- Podemos usar o radio vetor r

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{r} \ ; \ \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{r}.$$

Equação de movimento para r temos

$$m_1 m_2 \ddot{\mathbf{r}}_1 = m_2 \mathbf{F}_{21} \ ; \ m_1 m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = m_1 \mathbf{F}_{12}.$$

$$m_1 m_2 \left(\ddot{\mathbf{r}}_1 - \ddot{\mathbf{r}}_2\right) = m_2 \mathbf{F}_{21} - m_1 \mathbf{F}_{12} \ \Rightarrow \ \frac{m_1 m_2}{(m_2 + m_1)}\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_{21},$$

Sistemas de equações diferenciais

- Força derivada do potencial(tarefa mostrar conservação da energia e momento angular)

$$\mathbf{F}_{21} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} U_{12}\left(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\right) = \nabla_1 U_{12}\left(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|\right)$$

$$m_* \ddot{\mathbf{r}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} U\left(|\mathbf{r}|\right) \equiv \mathbf{F}\left(\mathbf{r}\right),$$

$$m_* = \frac{m_1 m_2}{(m_2 + m_1)}$$

Se o sol é m_2 e por ser muito maior que a Terra podemos considerar

$$m_* = \frac{m_1 m_2}{(m_2 + m_1)} \approx m_1, \qquad m_2 \gg m_1 \;\Rightarrow\; \mathbf{r}_1' \approx \mathbf{r} \;;\; \mathbf{r}_2' \approx 0.$$

$$\mathbf{r}_1' = \mathbf{r}_1 - \mathbf{R} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{r} \;;\; \mathbf{r}_2' = \mathbf{r}_2 - \mathbf{R} = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{r}.$$

Sistemas de equações diferenciais

- Reescrevendo a equação de movimento em forma adimensional usando o afélio R e período T da Terra entorno do Sol podemos escrever, onde o rho é o r/R

$$\tau \equiv \frac{t}{T},\ \rho \equiv \frac{r}{R},\ X \equiv \frac{x}{R}\,\mathrm{e}\,Y \equiv \frac{y}{R}.$$

$$\frac{R}{T^2}\frac{d^2\vec{\rho}}{d\tau^2} = -\frac{GM}{R^2\rho^3}\vec{\rho}.$$

$$\left[\frac{GMT^2}{R^3}\right] = \frac{\mathrm{N(m/kg)^2\cdot kg\cdot s^2}}{m^3} = 1.$$

$$\frac{d^2\vec{\rho}}{d\tau^2} = -C\frac{\vec{\rho}}{\rho^3}.$$

$$C \equiv \frac{GMT^2}{R^3},$$

$$\frac{dX}{d\tau} = U, \qquad \frac{dU}{d\tau} = -C\frac{X}{\rho^3}, \tag{1}$$

$$\frac{dY}{d\tau} = V, \qquad \frac{dV}{d\tau} = -C\frac{Y}{\rho^3}, \tag{2}$$

Equações diferenciais Parciais

- Equações que envolvem derivadas de funções de várias variáveis
- Estas equações surgem naturalmente ao modelar problemas de física principalmente.
- Uma equação diferencial parcial (edp) é dita quase – linear e linear se pode ser colocada na forma:

$u = u(x, y)$ → Variável dependente e independente x e y

$F(x, y, u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}) = 0$ → Forma geral da edp

Edp quase-linear

$$A(x, y)u_{xx} + B(x, y)u_{xy} + C(x, y)u_{yy} + G(x, y, u, u_x, u_y) = 0$$

Edp linear

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu + G = 0$$

Equações diferenciais Parciais

- Exemplos de edp

Lineares

(a) $u_{xx} + u_{yy} + u = 0$

(b) $u_{xx} + \sin(x)\ u_{yy} + \cos(x) = 0$

(c) $u_{xx} + e^{x}\ u_{yy} + 6 = 0$

Não lineares

(a) $\mathbf{u}\ u_{xx} + u_{yy} = 0$

(b) $x\ u_{xx} + y\ u_{yy} + \mathbf{u^2} = 0$

(c) $\mathbf{u}\ u_{x} + u_{yy} = 0$

Edp não-homogênea

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_{x} + Eu_{y} + Fu + G = 0$$

Se $G(x, y) = 0$ dizemos que a EDP é **homogênea**.

Equações diferenciais Parciais

- Principais equações diferenciais parciais

Podemos reescrever a equação geral como

$$\boxed{Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{xy} + Du_x + Eu_y + Fu = G}$$

(i) ***elíptica*** em (x_0, y_0) se $d(x_0, y_0) = B^2(x_0, y_0) - 4A(x_0, y_0)C(x_0, y_0) < 0$.

(ii) ***parabólica*** em (x_0, y_0) se $d(x_0, y_0) = 0$.

(iii) ***hiperbólica*** em (x_0, y_0) se $d(x_0, y_0) > 0$.

Equações diferenciais Parciais

- Exemplos arquetípicos

$u_t = \alpha^2 u_{xx} \Rightarrow A = \alpha^2, B = C = 0 \Rightarrow d \equiv 0$, (parabólica)

$u_{tt} = c^2 u_{xx} \Rightarrow A = c^2, B = 0, C = -1 \Rightarrow d \equiv 4c^2 > 0$, (hiperbólica)

$u_{xx} + u_{yy} = 0 \Rightarrow A = C = 1, B = 0 \Rightarrow d \equiv -4 < 0$, (elíptica)

Considere então uma equação do tipo

$y^2 u_{xx} - x^2 u_{yy} = 0.$

Podemos concluir que é uma edp hiperbólica

$d = B^2 - 4AC = 4x^2 y^2 > 0, \forall x, y \neq 0.$

Equações diferenciais Parciais

- Equação parabólica: equação do calor

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

- Equação elíptica: equação de Laplace

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0$$

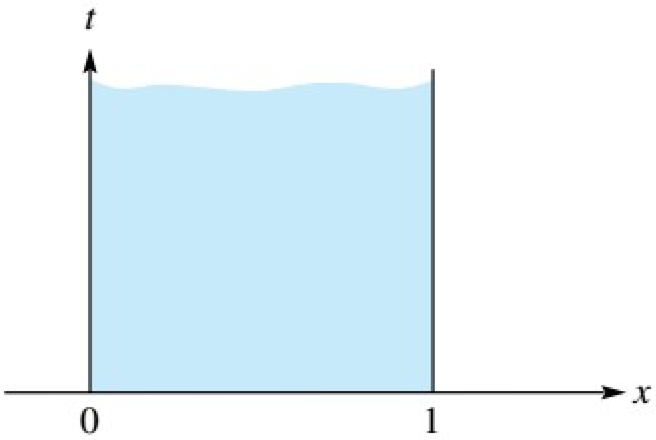
- Equação Hiperbólica: equação da onda

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

Equação parabólica: solução

- Problema: Considere uma barra quente com CC.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,t) = \dfrac{\partial}{\partial t}u(x,t) \\ u(0,t) = u(1,t) = 0 \\ u(x,0) = \sin \pi x \end{cases}$$



Método de diferenças finitas aplicado para Equação do calor

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}[f(x+h) - f(x)]$$

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]$$

Equação parabólica: solução

- Problema: Considere uma barra quente com CC.

Substituindo as derivadas numéricas na equação do calor obtemos

$$\frac{1}{h^2}[u(x+h,t) - 2u(x,t) + u(x-h,t)] = \frac{1}{k}[u(x,t+k) - u(x,t)]$$

Se a função $u(x,t)$ é conhecida para o domínio $0 \leqq x \leqq 1$ $0 \leqq t \leqq t_0$

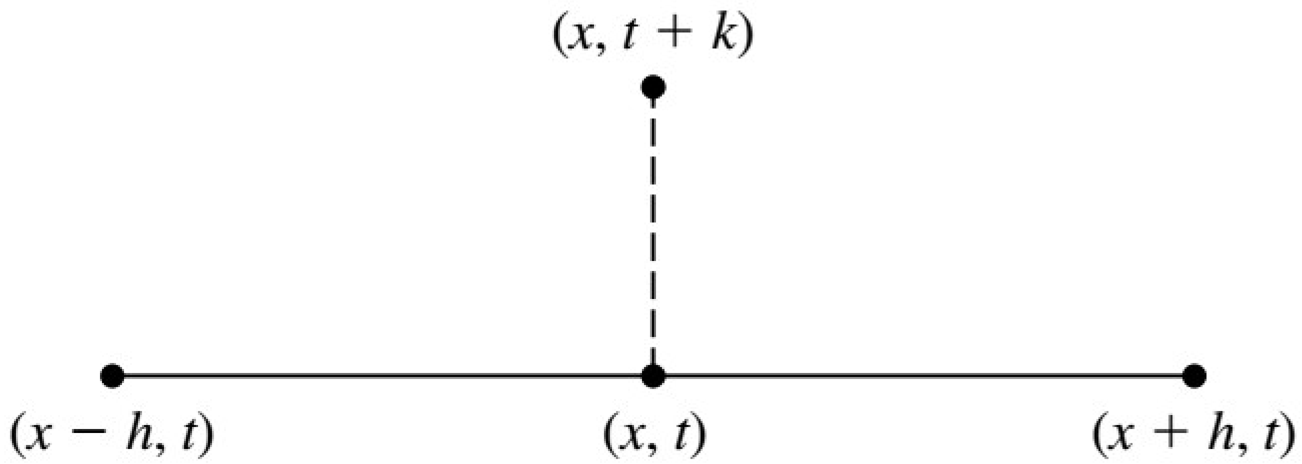
Então podemos determinar a função u(x,t) para $t = t_0 + k$ depois podemos usar a equação anterior para obter:

$$u(x,t+k) = \sigma u(x+h,t) + (1-2\sigma)u(x,t) + \sigma u(x-h,t)$$

$$\sigma = \frac{k}{h^2}$$

Equação parabólica: solução

- Esquema da solução para os pontos que definem uma vizinhança de cálculo



Equação parabólica: solução

- Método de Crank-Nicolson

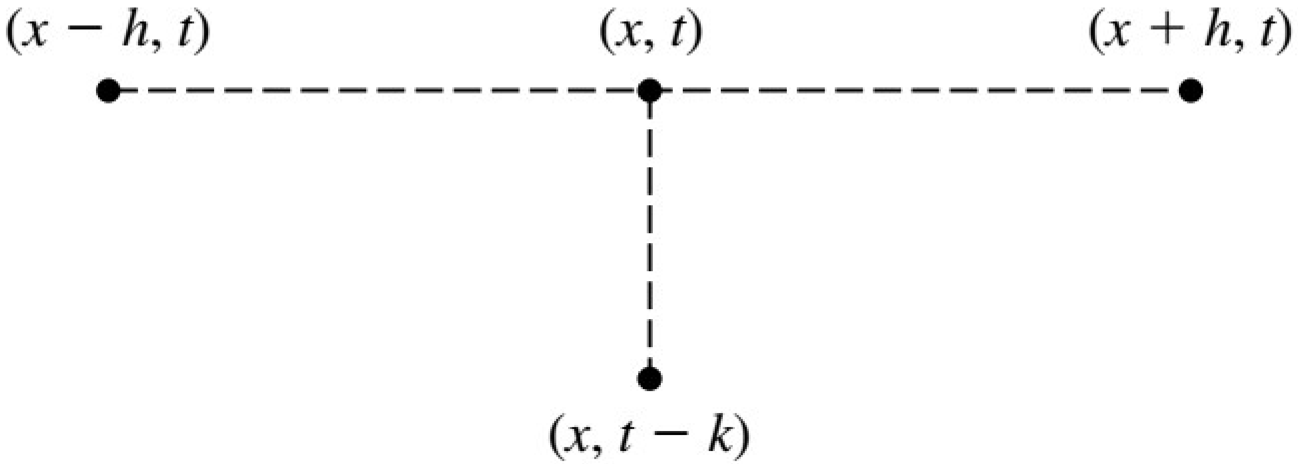
$$\frac{1}{h^2}[u(x+h,t) - 2u(x,t) + u(x-h,t)] = \frac{1}{k}[u(x,t) - u(x,t-k)]$$

$$-u(x-h,t) + ru(x,t) - u(x+h,t) = su(x,t-k)$$

$$r = 2 + s \qquad s = \frac{h^2}{k}$$

Equação parabólica: solução

- Método de Crank-Nicolson



Métodos de Monte Carlo

- Métodos de monte carlo são uma classe geral de métodos que permitem fazer cálculos em base a amostragens aleatórias de variáveis.
- Estes métodos são importantes quando o sistema inclui muitos graus de liberdade. Isto é, por exemplo, o conjunto de equações diferenciais é grande ou difícil de resolver.
- Exemplos: sistemas financeiros, fluidos turbulentos, sistemas complexos de matéria condensada.
- Problemas onde as variáveis são de carater aleatória ou estocástica.
- Sobre problemas como integrais ou bem definidos funciona bem para problemas multidimensionais. Neste aspecto é importante estudar a convergência destes métodos.
- Métodos de Monte Carlo começam a ser usados com o uso de computadores, pois precisa gerar muitos números aleatórios.
- John Von Neumann cunhou o nome Monte carlo inspirado no casino de Mônaco.

Números Pseudo-aleatórios

- Computadores fazem cálculos determinísticos e não aleatórios.
- Para simular números aleatórios os computadores criam uma sequencia de números com período muito grande para simular a sequência como aleatória.
- Esquema de como gerar números pseudo aleatórios:

$$r_n = f(r_{n-1}).$$

Unidade básica de informação é o bit, então podemos representar uma dada quantidade De N bits como: 2^N

Conclusão: depois de 2^N números a sequência vai se repetir.

Na prática o conjunto de números aleatórios deve ser menor que 2^N

Números Pseudo-aleatórios: distribuições

- Função comum usada para gerar números pseudo aleatórios:

$$r_n = (ar_{n-1} + b) \bmod m \quad ou \quad r_n = (ar_{n-1} + b)\%m$$

Usando função linear e depois função de resto sobre números inteiros

Conservação da probabilidade:

$$p(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 < x < 1 \\ 0 & \text{do contrário} \end{cases} \quad \text{com} \quad \int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1 \ \text{(normalização)}$$

Esta expressão representa a probabilidade de que a variável aleatória fique entre X e x+dx e isto é denotado como p(x)dx.

Números Pseudo-aleatórios: distribuições

- Gerar uma distribuição y com probabilidade p(y) sabendo que conhecemos a distribuição uniforma p(x):

$$|p(y)dy| = |p(x)dx|$$

Podemos escrever então

$$p(y) = p(x)\left|\frac{dx}{dy}\right| = \frac{p(x)}{\left|\frac{dy}{dx}\right|}$$

Basicamente o que estamos fazendo é que se geramos uma distribuição uniforme p(x) a distribuição p(y) resultante pode ser calculada pela expressão anterior, isto é, um exemplo de uma transformação de distribuições.

Números Pseudo-aleatórios: distribuições

- Um exemplo concreto consideremos uma função do tipo logaritmo:

$$y(x) = -ln(x) \ (\Longrightarrow x = e^{-y}).$$

Usando então a definição anterior podemos escrever

$$p(y) = p(x)\left|\frac{dx}{dy}\right| = \left|\frac{dx}{dy}\right| = e^{-y}$$

Distribuições deste tipo são frequentes na física: por exemplo na física de partículas.

Números Pseudo-aleatórios: distribuições

- Método de transformação pode ser generalizado da forma

$p(x_1, x_2, ..., x_n)dx_1 dx_2 ... dx_n$ e $y_1, y_2, .., y_n$ $\longrightarrow$ Distribuição conjunta dos x's

Probabilidade conjunta dos y's

$$p(y_1, y_2, ..., y_n)dy_1 dy_2 ... dy_n = p(x_1, x_2, ..., x_n) \left| \frac{\partial(x_1, x_2, ..., x_n)}{\partial(y_1, y_2, ..., y_n)} \right| dy_1 dy_2 ... dy_n,$$

Onde o Jacobiano da transformação é dado por:

$$J(y_1, y_2, ..., y_n) = \frac{\partial(x_1, x_2, ..., x_n)}{\partial(y_1, y_2, ..., y_n)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} & \frac{\partial x_1}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial x_1}{\partial y_n} \\ \frac{\partial x_2}{\partial y_1} & \frac{\partial x_2}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial x_2}{\partial y_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial x_n}{\partial y_1} & \frac{\partial x_n}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial x_n}{\partial y_n} \end{vmatrix}$$

Números Pseudo-aleatórios: distribuições

- Algoritmo de Box-Muller (1958)
- Considerar duas coordenadas aleatórias de distribuição aleatória uniforma entre (0,1)
- Consideramos uma transformação de variáveis da forma:

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \sqrt{-2\ln(x_1)}\cos(2\pi x_2) \\
y_2 &= \sqrt{-2\ln(x_1)}\sin(2\pi x_2),
\end{aligned}
$$

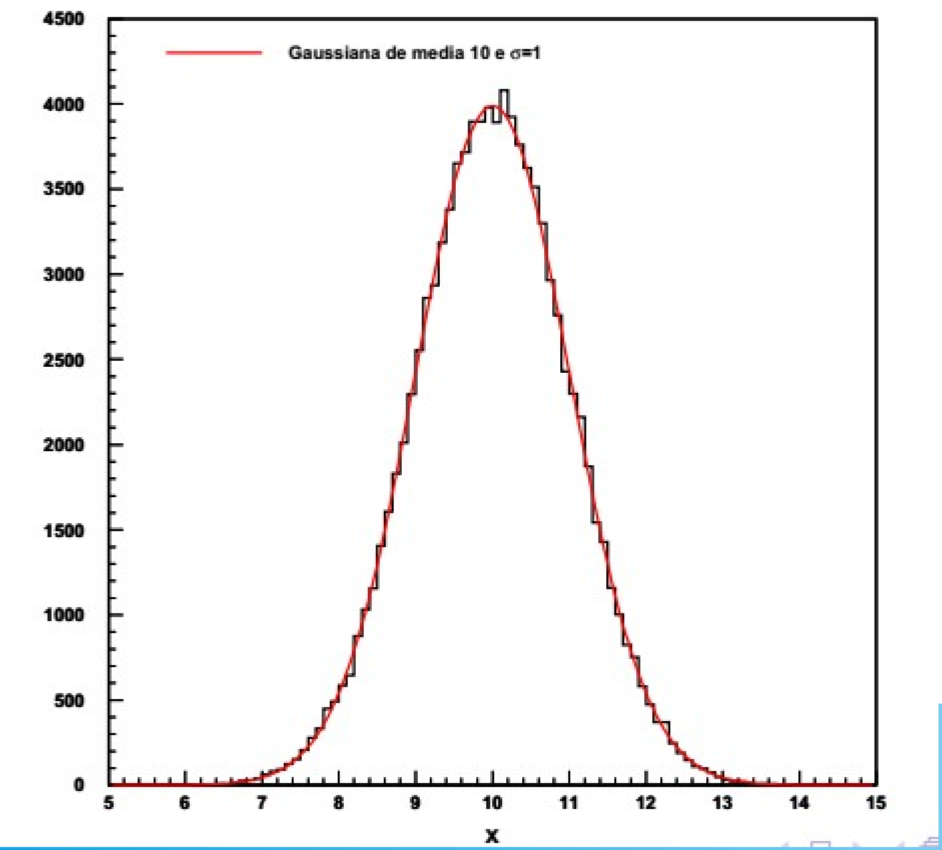
Podemos colocar em evidências os x's da forma:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= e^{-\frac{1}{2}(y_1^2+y_2^2)} \\
x_2 &= \frac{1}{2\pi}\operatorname{atan}\left(\frac{y_2}{y_1}\right).
\end{aligned}
$$

Método de Box-Muller

- Jacobiano da transformação resulta da forma:

$$J(y_1, y_2) = \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} & \frac{\partial x_1}{\partial y_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial y_1} & \frac{\partial x_2}{\partial y_2} \end{vmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_1^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_2^2}{2}}$$



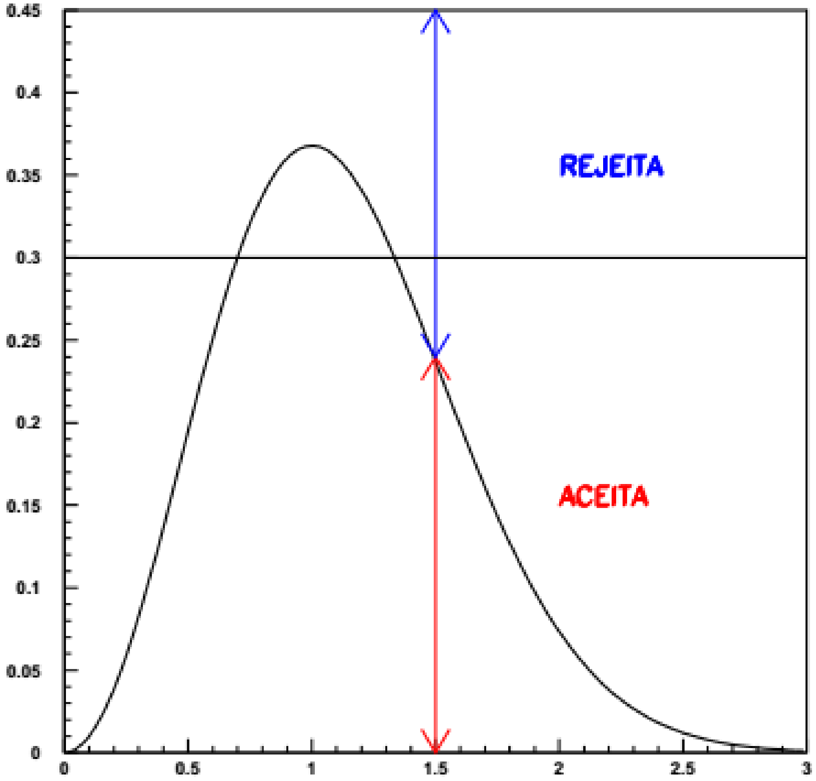
Como resultado obtemos uma distribuições gaussianas

Método de aceitação-rejeição

- Quando a matriz Jacobiana não pode ser determinada analiticamente podemos usar um método de amostragem denominado de aceitação-rejeição.
- Um método de aceitação-rejeição é um método fundado numa interpretação geométrica da amostragem.
- Algoritmo: Estas são as etapas do processo:
- queremos uma variável aleatória x com probabilidade de distribuição p(x)dx no intervalo (a,b)
- Gera-se uma distribuição uniforme para x e depois calcula-se p(x) como distribuição.
- Gera-se outra variável aleatória y no intervalo $(0,y_{max})$, onde y_{max} deve satisfazer
  $y_{max} \geq p_{max}$
- Se y>p então rejeita-se o valor de x e se gera um novo valor, senão, aceita-se o valor de x .
- Os valores de x's assim aceitos tem uma distribuição p(x)

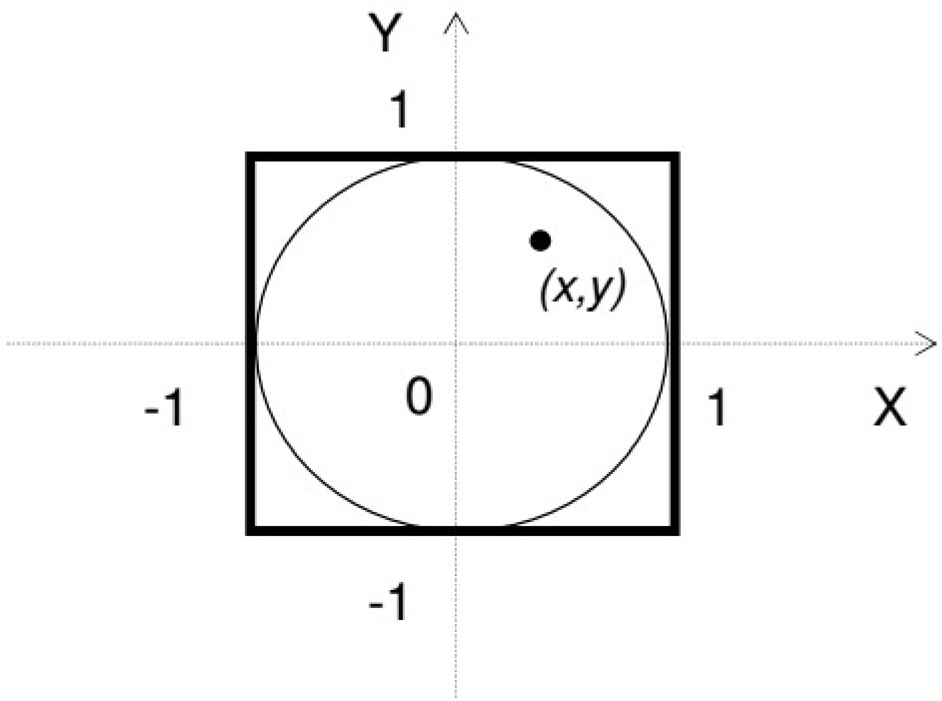
Método de aceitação-rejeição

- Interpretação geométrica do método de aceitação-rejeição



Método de aceitação-rejeição

- Exemplo de cálculo do número pi usando o método de aceitação-rejeição como exemplo padrão do uso do método



$$\Rightarrow P\left((x, y) \in circulo\right) = P\left(x^2 + y^2 \leq 1\right) = \frac{\pi}{4}$$

Método de geração de distribuições

- Entre os métodos temos

Gerando Variáveis Aleatórias Discretas

$\Rightarrow$ Método da Transformada Inversa

$\Rightarrow$ Método da Rejeição (Aceitação/Rejeição)

$\Rightarrow$ Método da Composição

Algoritmo de Metropolis-Hasting

- Consideremos dois pontos

$(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ Vamos ajustar ao modleo $y(x) = m$

Estimador: $$\chi^2(\Theta) = \sum_{i=0}^{1}(m - y_i)^2$$

Podemos derivar

$$P(D|\Theta) = \exp\left(-\sum_{i=0}^{1}(m - y_i)^2\right)$$

Algoritmo de Metropolis-Hasting

- Adicionamos números aleatórios

$$\Theta_p = \Theta_0 + X$$

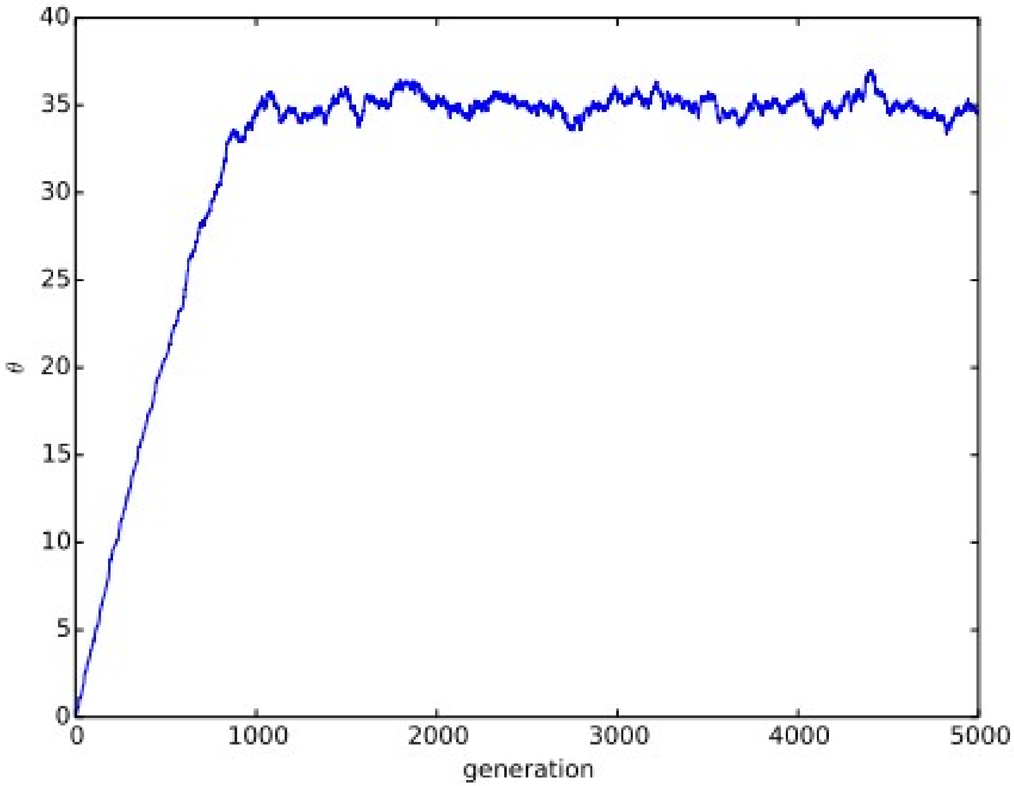
Voltamos a derivar uma distribuição dos números aleatórios

Critério de aceitação

$$r = \frac{P(\Theta_p|D)}{P(\Theta_d|D)}$$

Algoritmo de Metropolis-Hasting

- Implementando o método de metropolis-hasting podemos simular o processo para obtermos uma distribuição da forma onde se pode observar uma certa convergência



Inferência Bayesiana

- Teorema de Bayes

$$\Pr(A|B) = \frac{\Pr(B|A)\Pr(A)}{\Pr(B)}$$

Teorema de Bayes total

$$\Pr(A_i|B) = \frac{\Pr(B|A_i)\Pr(A_i)}{\Pr(B|A_i)\Pr(A_i) + \ldots + \Pr(B|A_n)\Pr(A_n)}$$

Temos inferência baseada em modelo

$$p(\Theta|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\Theta)p(\Theta)}{p(\mathbf{y})}$$

Inferência Bayesiana

- Inferência Bayesiana

$$\Theta = \theta_1, ..., \theta_j$$

$$p(\mathbf{y}) = \int p(\mathbf{y}|\Theta)p(\Theta)d\Theta$$

$$p(\Theta|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\Theta)p(\Theta)}{\mathbf{c}}$$

$$p(\Theta|\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\Theta)p(\Theta)$$

Inferência Bayesiana: Likelihood para um modelo

- Likelihood para uma dada função

$$\mathscr{L}(\theta|\mathbf{y}) = p(\mathbf{y}|\theta) = f(\mathbf{y}|\theta)$$

$$\mathbf{y}_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma^2)$$

$$\mu_i = \beta_1 + \beta_2 \mathbf{X}_{i,1} + \beta_3 \mathbf{X}_{i,2}$$

$$f(\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp[(-\frac{1}{2}\sigma^2)(\mathbf{y}_i - \mu_i)^2]; \quad \mathbf{y} \in (-\infty, \infty)$$

Inferência Bayesiana

- Likelihood

$$p(\mathbf{y}_i|\Theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp[(-\frac{1}{2}\sigma^2)(\mathbf{y}_i - \mu_i)^2]; \quad \mathbf{y} \in (-\infty, \infty)$$

$$\log[p(\mathbf{y}|\theta)] = \sum_{i=1}^{n} \log[p(\mathbf{y}_i|\theta)]$$

$$p(\mathbf{y}|\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(\mathbf{y}_i|\theta)$$

$$p(\beta, \sigma^2|\mathbf{y}) = p(\mathbf{y}|\beta, \sigma^2)p(\beta_1)p(\beta_2)p(\beta_3)p(\sigma^2)$$

Inferência Bayesiana

- Likelihood

$$\log[p(\beta, \sigma^2|\mathbf{y})] = \log[p(\mathbf{y}|\beta, \sigma^2)] + \log[p(\beta_1)] + \log[p(\beta_2)] + \log[p(\beta_3)] + \log[p(\sigma^2)]$$

Fator de Bayes

$$B = \frac{p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_1)}{p(\mathbf{y}|\mathcal{M}_2)} = \frac{\int p(\mathbf{y}|\Theta_1, \mathcal{M}_1)p(\Theta_1|\mathcal{M}_1)d\Theta_1}{\int p(\mathbf{y}|\Theta_2, \mathcal{M}_2)p(\Theta_2|\mathcal{M}_2)d\Theta_2}$$

Inferência Bayesiana

- Sobre fator de Bayes

$$p(\mathbf{y}|m) = (2\pi)^{d_m/2}|\Sigma_m|^{1/2}p(\mathbf{y}|\Theta_m, m)p(\Theta_m|m)$$

Ajustando Modelos

$$D(\mathbf{y}, \Theta) = -2\log[p(\mathbf{y}|\Theta)]$$

$$\mathrm{pV} = \mathrm{var}(D)/2$$

Inferência Bayesiana

- Estatística do chi quadrado: método geral para justar dados

$$\chi_i^2 = \frac{(\mathbf{y}_i - \frac{\sum_{t=1}^{T} \mathbf{y}_{i,t}^{rep}}{T})^2}{\mathrm{var}(\mathbf{y}_{i,1:T}^{rep})},$$

$$p(\chi_{i,1:T}^{2rep} > \chi_{i,1:T}^{2obs})$$

$$\chi_{i,1:T}^{2obs} = \frac{[\mathbf{y}_i - E(\mathbf{y}_i)]^2}{E(\mathbf{y}_i)}$$

$$\chi_{i,1:T}^{2rep} = \frac{[\mathbf{y}_{i,1:T}^{rep} - E(\mathbf{y}_i^{rep})]^2}{E(\mathbf{y}_i^{rep})}$$

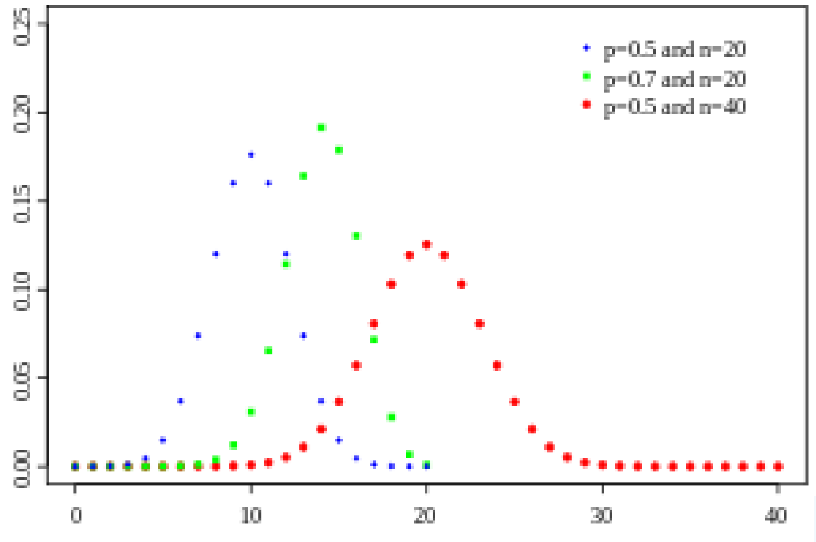
Distribuições de Probabilidade

- Binomial

$$P(X = x) = \frac{n!}{x!(n-x)!} p^x (1-p)^{n-x}$$

Poisson

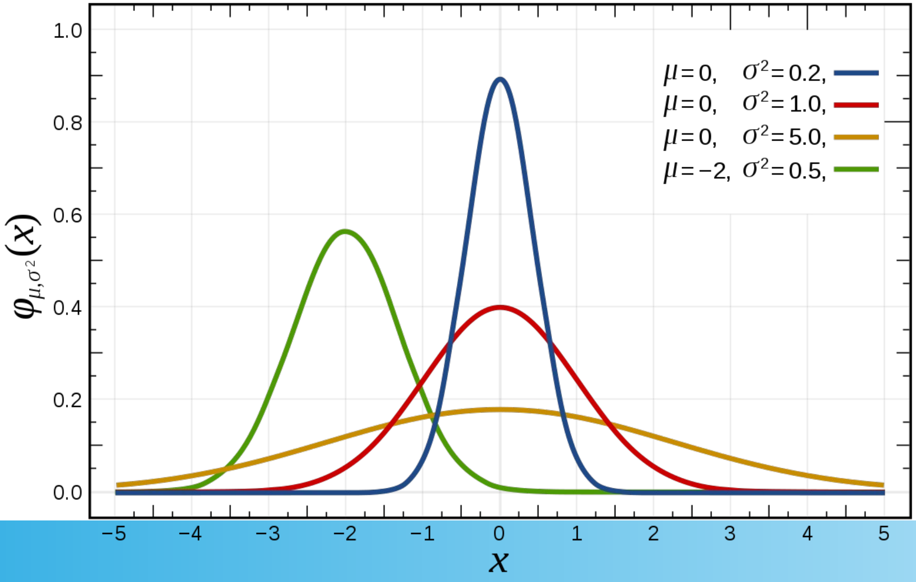
$$P(X = x) = e^{-\mu} \frac{\mu^x}{x!}$$



Distribuições de Probabilidade

- Distribuição Normal

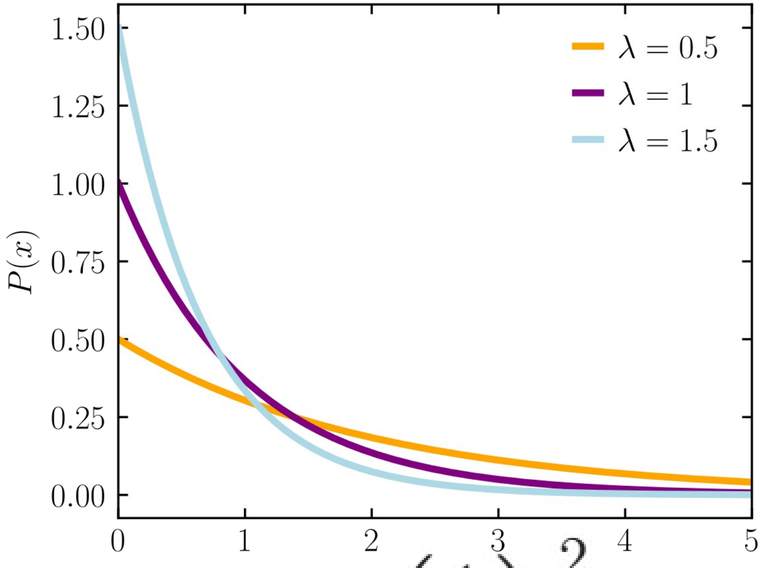
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\boxed{\sigma}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{x - \boxed{\mu}}{\boxed{\sigma}} \right)^2 \right\}$$



Distribuições de Probabilidade

- Distribuição exponencial

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}$$



$$E(X) = \frac{1}{\lambda} \qquad \text{and} \qquad V(X) = \left(\frac{1}{\lambda}\right)^2.$$