Resultados obtidos no 4º exercício computacional
Algoritmos numéricos I

Leandro Furlam Turi

15 de outubro de 2019

1 Preparativos

Para realização dos testes, foi construído um *script* único que automatizasse as operações necessárias. Em todos os casos, para a construção dos gráficos foram utilizados 100 pontos por intervalo.

2 Resultados

2.1 Questão 1

Buscando obter o melhor e viável ajuste de curva, foram analisados polinômios com ordem $n = 1, 2, ..., 6$, obtendo-se os seguintes resultados:

$P_1(x) = -1.9373 * x^1 + 11.701$
$P_2(x) = 20.243 * x^2 - 116.24 * x^1 + 172.75$
$P_3(x) = 33.014 * x^3 - 259.86 * x^2 + 675.15 * x^1 - 571.83$
$P_4(x) = -276.91 * x^4 + 3159.7 * x^3 - 13490 * x^2 + 25538 * x^1 - 18081$
$P_5(x) = -5060.2 * x^5 + 71282 * x^4 - 4.0141e + 05 * x^3 + 1.1296e + 06 * x^2 - 1.5885e + 06 * x^1 + 8.9306e + 05$
$P_6(x) = -39810 * x^6 + 6.6913e + 05 * x^5 - 4.6843e + 06 * x^4 + 1.7482e + 07 * x^3 - 3.6683e + 07 * x^2 + 4.1036e + 07 * x^1 - 1.9119e + 07$

Estimando-se o tempo de congelamento usando 2.8 volumes, obteve-se os seguintes resultados:

$P_1(2.8) = 6.276781$
$P_2(2.8) = 5.985620$
$P_3(2.8) = 6.011404$
$P_4(2.8) = 5.972488$
$P_5(2.8) = 6.033581$
$P_6(2.8) = 6.071143$

Nota-se que, com exceção do tempo estimado através de P_1, isto é, com uma aproximação através de uma reta, todos os P_n estão próximos. Isto pode significar que não é necessário um ajuste de curva com um polinômio de ordem elevada. Mas ainda é necessário observar uma medida de ajustamento do modelo, bem como a variância dos resíduos.

	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
R^2	0.073296	0.899905	0.911500	0.916773	0.927691	0.930581
σ^2	0.470905	0.015127	0.014712	0.015373	0.015025	0.016486

Observando o coeficiente de determinação e a variância dos resíduos, nota-se que em todos os casos, com exceção da reta, houveram baixos valores nas variâncias, e um R^2 considerável. Observando por essas medidas, pode-se dizer que um P_3 é uma aproximação adequada, visto que após ele as medias de ajuste quase não se alteram.
A título de observar o comportamento da aproximação, pode-se avaliar a beleza da Figura 1, onde nota-se diferentes polinômios buscando a melhor aproximação no conjunto de pontos.

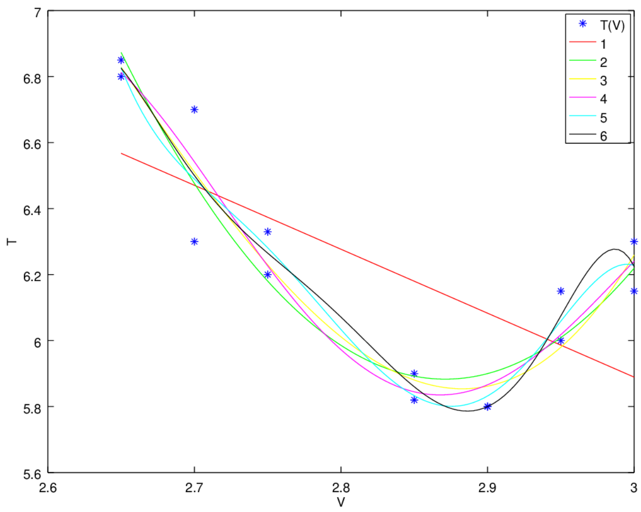

Figura 1: Comparação entre resultados correspondentes.

2.2 Questão 2

Como ambos os casos não são lineares, fez-se os seguintes algebrismos nas equações para torná-las lineares:

2.2.1 Caso 1:

$$v = \frac{v_m[S]}{k_s + [S]}$$

Se $k_s \neq -[S]$ e $v \neq 0$, fazemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} &= \frac{1}{\frac{v_m[S]}{k_s+[S]}} \\ &= \frac{k_s + [S]}{v_m[S]} \\ &= \frac{k_s}{v_m[S]} + \frac{[S]}{v_m[S]} \end{aligned}$$

Fazendo $\frac{1}{v} = y$, $\frac{k_s}{v_m} = a$, $\frac{1}{v_m} = b$ e $1/[S] = x$, temos:

$$y = a + bx$$

2.2.2 Caso 2:

$$v = \frac{v_m[S]^2}{k_s^2 + [S]^2}$$

Se $v \neq 0$, fazemos:

$$\begin{aligned}\frac{1}{v} &= \frac{1}{\frac{v_m[S]^2}{k_s^2+[S]^2}} \\ &= \frac{k_s^2 + [S]^2}{v_m[S]^2} \\ &= \frac{k_s^2}{v_m[S]^2} + \frac{[S]^2}{v_m[S]^2}\end{aligned}$$

Fazendo $\frac{1}{v} = y$, $\frac{k_s^2}{v_m} = a$, $\frac{1}{v_m} = b$ e $1/[S]^2 = x$, temos:

$$y = a + bx$$

Dessa forma, o ajuste foi feito sobre os modelos linearizados.

2.2.3 Item (a)

Com a aplicação da técnica dos quadrados mínimos sobre os modelos linearizados, obteve-se os valores de a e b. Fazendo as equivalências necessárias, obteve-se os seguintes valores:

2.2.4 Caso 1:

$\frac{1}{v_m} = b$
$k_s = av_m$

$$v = \frac{5.256963[S]}{86.225957 + [S]}$$

Estimando a taxa de crescimento em $[S] = 7$ obteve-se como resultado 0.394726.

2.2.5 Caso 2:

$\frac{1}{v_m} = b$
$k_s = \sqrt{av_m}$

$$v = \frac{0.408292[S]^2}{2.812661^2 + [S]^2}$$

Estimando a taxa de crescimento em $[S] = 7$ obteve-se como resultado 0.351536.

Observando a tabela de resultados, ambos valores estão fora do que era esperado (estar entre $V[6] = 0.335$ e $V[8] = 0.35$). Isto pode-se ser explicado pelo mau ajuste do modelo. Será analisado este fato a seguir.

2.2.6 Item (b)

	Caso 1	**Caso 2**
R^2	0.934405	0.992934
σ^2	1.404879	0.151329

Quando comparados ambos os casos, observa-se que o caso 2 está com qualidade superior ao caso 1, devido ao melhor coeficiente de determinação (mais próximo de 1) e menor variância dos resíduos. Isto leva a concluir que a aproximação realizada no caso 2 pelo modelo linearizado foi melhor. Esta análise pode ser concluída graficamente, como será visto através das Figuras 2 e 3 para os modelos linearizados, e pela Figura 4 para o modelo original.

2.2.7 Item (c)

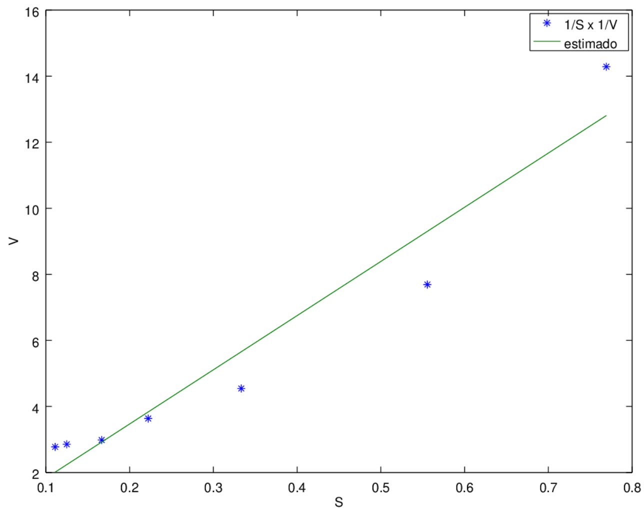

Figura 2: Solução linearizada para o caso 1.

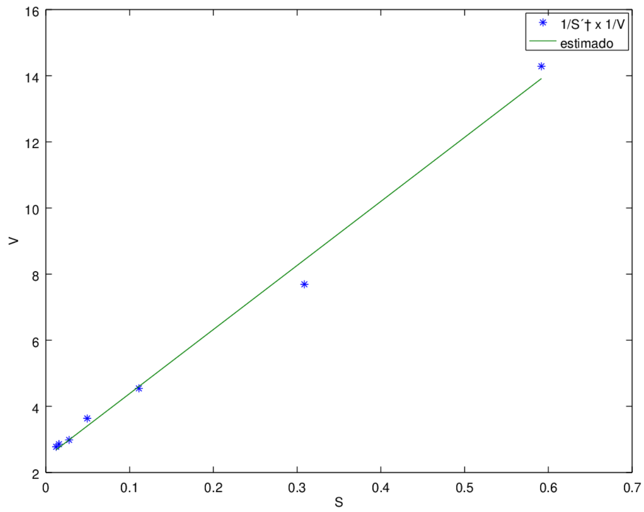

Figura 3: Solução linearizada para o caso 2.

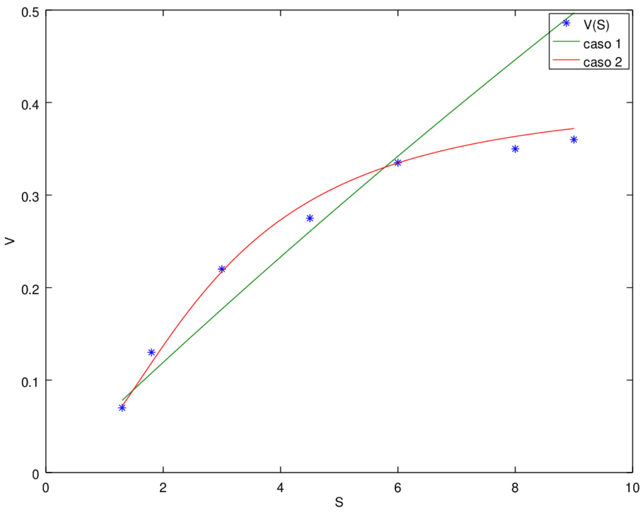

Figura 4: Comparação entre resultados correspondentes.

2.2.8 Item (d)

Ao término da análise, pode-se notar, principalmente ao analisar as medidas de ajustamento do modelo, que o caso 2 trouxe uma melhor aproximação do problema proposto. Essa hipótese pode ser sustentada, ainda, pela taxa de crescimento estimada em $[S] = 7$, que foi mais próxima ao intervalo esperado (entre V(6) e V(8)). Este último fato pode ser notado pela Figura 4, onde observa-se uma suavidade da curva aproximada com melhor ajuste pelo caso 2. É interessante ressaltar que os gráficos das soluções linearizadas, por não representarem o problema proposto de fato, não levou a conclusão alguma nesta análise. Eles parecem levar à solução do caso 2, mas por não representar o problema propriamente dito, faz-se necessária maiores análises.

3 Conclusões

Pode-se observar em ambas as questões que a técnica de aproximação linear é um meio confiável de se obter aproximações de valores não tabelados, de fácil implementação (inclusive a técnica de linearização), e que sua qualidade pode ser analisada por meio de máquinas, através do R^2 e do σ^2, mas que isto não exclui a análise humana do gráfico gerado.