Unidade de Ensino de Matemática Aplicada e Análise Numérica
Departamento de Matemática/Instituto Superior Técnico

Trabalho de Matemática Computacional 1º Sem. 2016/17
PARTE II - entrega até 23 de Dezembro

Notas prévias

As observações incluídas no enunciado da Parte I são válidas. Contudo, recomendamos como linguagens de programação *Mathematica*, *Matlab*, Octave, *Python*. Tentem não usar *C*.

I

Em algumas situações, as observações (x_k, y_k), $k = 1 : n$, às quais se pretende aplicar o **método dos mínimos quadrados**, podem não ser igualmente relevantes ou fidedignas. Neste caso, para obter a função de ajustamento $g(x) := \sum_{i=1}^{m} c_i \phi_i(x)$ a esses dados, deve-se minimizar a soma ponderada dos desvios quadrados

$$Q(c) = \sum_{k=1}^{n} w_k [y_k - g(x_k)]^2,$$

onde $w_k \geq 0$. Cada um destes valores representa um certo peso a atribuir ao par (x_k, y_k). O sistema normal escreve-se

$$B^T W B c = B^T W y$$

onde $B_{ij} = \phi_j(x_i)$, tal como no caso clássico, e $W_{ij} = \delta_{ij} w_i$ define a matriz de pesos.

1. Escreva um programa que, recebendo um conjunto pontos a ajustar, os respetivos pesos e uma lista com funções de base, retorne a aproximação de mínimos quadrados ponderados desses dados.

2. Foi realizada uma experiência com o objetivo de estudar a natureza da interação entre certos tipos de partículas elementares em colisão com protões-alvo. Acredita-se que neste processo a secção transversal da reação (s) tem uma relação linear com o inverso da energia $(1/e)$. O número de observações realizadas permitiu também estimar com precisão o desvio padrão da resposta (d), estando os resultados registados na seguinte tabela

$1/e$	0.345	0.287	0.251	0.225	0.207	0.186	0.161	0.132	0.084	0.060
s	367	311	295	268	253	239	220	213	193	192
d	17	9	9	7	7	6	6	6	5	5

Obtenha (i) a reta de regressão obtida pelo critério clássico, (ii) o ajustamento por uma parábola pelo critério clássico (iii) o ajustamento por uma reta usando o critério dos mínimos quadrados ponderados com pesos $1/d_k^2$. Compare os resultados através de um gráfico, onde deve também apresentar os pontos tabelados.

II

Recorde a **regra de Simpson** para aproximar o integral $\int_a^b f(x)dx$

$$S_N(f) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_N) + 4\sum_{i=1}^{N/2} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(x_{2i}) \right],$$

onde $h = (b-a)/N$ e N é par.

1. Escreva um programa que, recebendo $a, b \in \mathbb{R}$, uma função $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ e o natural N retorne uma aproximação do integral através da regra de Simpson.

2. Pretende-se determinar a força total exercida pelo vento no mastro de um barco. O mastro tem um comprimento de 30 metros, e a função que modela a força por metro no mastro é dada por $f(z) = \frac{200z}{5+z}e^{-2z/30}$, $z \in [0, 30]$. A força total F é

$$F = \int_0^{30} f(z)dz.$$

Utilizando o programa construído para a regra de Simpson composta:

(a) Aproxime F pelo valor $S_{2000}(f)$.

(b) Preencha uma tabela como indicado em baixo, onde $E_n = S_n - F$, sendo S_n a aproximação obtida com o método de Simpson com n subintervalos. Utilize para F o valor S_{2000}. Justifique se os valores da coluna 4 da tabela estão de acordo com o que se espera do comportamento dos erros da regra de Simpson composta, quando se duplica o número de subintervalos utilizados.

n	S_n	$\lvert F - S_n \rvert$	$\frac{\lvert F-S_{n/2}\rvert}{\lvert F-S_n\rvert}$
2			-
4			
8			
16			
32			
64			
128			
256			
512			

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 do ponto médio**

$$\begin{cases} y_0 = y_a, \\ y_{i+1} = y_i + hf\left(t_i + \dfrac{h}{2}, y_i + \dfrac{h}{2}f(t_i, y_i)\right), \ i = 0 : n-1, \quad h = \dfrac{b-a}{n}, \end{cases}$$

o qual permite obter 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 os valores/vetores $y_0, y_1, ..., y_n$, produzidos pelo método do ponto médio.

2. Numa comunidade isolada de 800 crianças suscetíveis de contrair varicela, uma é diagnosticada com esta doença. Sabe-se que a transmissão da doença pode ser modelada pelo seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{cases} \dfrac{dS}{dt} &= -0.001\, S\, I \\ \dfrac{dI}{dt} &= 0.001\, S\, I - 0.3\, I \\ \dfrac{dR}{dt} &= 0.3\, I \end{cases}$$

onde $S = S(t)$ é o número de indivíduos suscetíveis de contrair a doença no momento t, $I = I(t)$ é o número de infetados na mesma altura, e que podem propagar a doença, e $R(t)$ é o número de recuperados, ou seja, que já contraíram a doença e adquiriram imunidade. Como condições iniciais para o sistema, podemos tomar $I(0) = 1, S(0) = 799, R(0) = 0$.

(a) Mostre que

$$\frac{d\,I}{d\,S} = -1 + \frac{300}{S}$$

e conclua que

$$I(S) = -S + 300\,\ln S + c,$$

onde c é uma constante. Usando as condições iniciais do sistema, determine o valor de c. Qual é o número máximo de crianças doentes num dado momento?

(b) De acordo com este modelo, quantas crianças suscetíveis irão evitar contrair varicela enquanto a epidemia segue o seu curso? Note que a epidemia termina devido à inexistência de crianças infetadas. Utilize interpolação inversa para resolver a equação não linear que permite determinar o respetivo valor de S, após verificar que este número é inferior a 200.

(c) Utilize o método do ponto médio para traçar um gráfico que mostre a evolução das variáveis (S, I, R). Confirme os resultados obtidos nas alíneas anteriores.