# Calculo Numérico: Trabalho 2

Jean Jordanou, Eduardo Camponogara e Laio Seman

(Setembro 2024)

## 1 Problema 1: Integração

Para efetuar cálculos de campo elétrico na proximidade de fontes eletromagnéticas, utiliza-se integrais com a seguinte forma:

$$S(x) = \int_0^x \sin(t^2)dt \tag{1}$$

Considerando regras compostas com um número de intervalos $n = x/h$ para diferentes passos de integração $h \in \mathcal{H}$, onde $\mathcal{H} = \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1\}$, a integral utilizando:

- Regra dos retângulos.
- Regra dos trapézios.
- Regra de Simpson.

Considere $x = 20$.

Apresente em uma tabela as soluções utilizando os três métodos para cada um dos passos $h$.

## 2 Problema 2: Equação de Calor (Simulação de EDO)

O problema de transmissão de calor descrito no Trabalho 1 é caracterizado por uma equação diferencial parcial, com uma descrição para casos onde o tempo, além do espaço, é considerado. O fenômeno é expresso da seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} - q(x,t) \tag{2}$$

Essa equação descreve os valores de temperatura $T$ ao longo do tempo e no espaço segundo um eixo unidimensional onde $x \in (0, 1)$. Para fins dessa questão, o fluxo de calor exógeno é considerado nulo, ou seja $q(x,t) = 0, \forall x, t$. Para

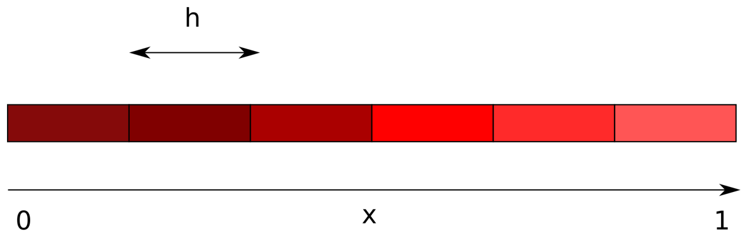


Figure 1: Representação gráfica da discretização da barra sujeita à equação de calor.

resolver uma EDP, primeiramente é preciso conhecer suas condições de contorno. Para esse caso, elas são definidas $\forall t$ como:

$$\begin{cases} T(0,t) = T_{begin} \\ T(1,t) = T_{end} \end{cases} . \tag{3}$$

No caso onde a EDP também depende to tempo, é preciso conhecer as condições iniciais do sistema no tempo. Nesse caso, considere a seguinte condição inicial $\forall x \in (0,1)$:

$$T(x,0) = T_0 \tag{4}$$

ou seja, a barra começará aquecida na temperatura $T_0$ ao longo de todo o seu comprimento.

Um método para resolver EDPs transientes computacionalmente é reduzi-las para a forma de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs). Para isso, utilizamos **Diferenças Finitas** para efetuar essa transformação. (Curiosidade: O método de Euler não é nada mais do que o método de diferenças finitas aplicado de forma unidirecional).

Efetuando a aproximação, a representação por EDOs do sistema possui a seguinte forma:

$$\dot{\mathbf{T}} = (k/h^2)(\mathbf{D_2 T} + \mathbf{BC}) \tag{5}$$

onde $\mathbf{D_2}$, $\mathbf{T}$ e $\mathbf{BC}$ são matrizes e vetores de dimensões adequadas definidos abaixo. O parâmetro $h$ é o espaçamento dos pontos de interesse, sendo os mesmos definidos da seguinte forma:

$$x_{i+1} = x_i + h \tag{6}$$

A matriz $\mathbf{T}$ é organizada de tal forma que o elemento $i$ corresponde a $T(x_i)$, obtendo:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T(x_1) \\ T(x_2) \\ \vdots \\ T(x_N) \end{pmatrix} \tag{7}$$

A Figura 1 demonstra uma representação gráfica dessa discretização da barra, sendo cada intersecção dos blocos um ponto de medida de temperatura.

O número $N \in \mathbb{N}$ de elementos da matriz $\mathbf{T}$ é definido da seguinte forma:

$$N = 1/h - 1 \tag{8}$$

A matriz $\mathbf{D_2} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é obtida pela discretização da derivada parcial no espaço, e $\mathbf{BC} \in \mathbb{R}^N$ oriundo das condições de contorno. As mesmas possuem a seguinte forma:

$$\mathbf{D_2} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \tag{9}$$

$$\mathbf{BC} = \begin{pmatrix} T_{begin} \\ 0 \\ \vdots \\ T_{end} \end{pmatrix} \tag{10}$$

Alternativamente, $\mathbf{D_2}$ possui a seguinte descrição:

$$\mathbf{D_2}(i,j) = \begin{cases} -2 & i = j \\ 1 & i = j+1, i = j-1 \\ 0 & \text{outros} \end{cases} \tag{11}$$

Dado os seguintes valores para os parâmetros do problema:

$$\begin{aligned} k &= 2.5 \\ T_{begin} &= 60 \\ T_{end} &= 40 \\ T_0 &= 50 \end{aligned}$$

Considere estes 3 casos:

$$h = \begin{cases} 0.2 & \text{caso a)} \\ 0.1 & \text{caso b)} \\ 0.05 & \text{caso c)} \end{cases}$$

Para cada valor de $h$, faça:

1. Implemente os métodos de Euler e de Runge-Kutta para simular o sistema de ODEs proposto em (7). Note que o sistema de equações diferenciais é caracterizado por um vetor $\mathbf{T}$ com $N$ estados e $N$ equações, uma para cada bloco de discretização da barra.

2. Escolha um intervalo de tempo por passo suficientemente pequeno para simular o sistema. **Dica:** Como o sistema é linear, é possível verificar a menor constante de tempo do sistema calculando o inverso do maior autovalor de $(k/h^2)\mathbf{D_2}$. Uma simulação correta do sistema deve convergir para um regime constante.

3. Apresente um gráfico de cada valor de $\mathbf{T}$ ao longo de simulação de 0.05 segundos. Imprima o valor final da simulação. **Observação:** O passo escolhido para essa simulação deve resultar em no máximo 1000 amostras.

4. Suponha agora que $T_{begin}$ varia durante o tempo. Execute uma simulação em que $T_{begin}$ e incrementado em 5 a cada 0.2 segundos, totalizando 2 segundos. Plote $T_{begin}$ e os estados do sistema no tempo ($\mathbf{T}$) em uma única figura.

- **Observação 1:** Mostre os códigos.
- **Dica:** As matrizes obtidas para essa questão podem ser reaproveitadas do trabalho anterior, visto que os intervalos de integração $h$ são os mesmos.

# 3 Problema 3: Identificação de Sistema Linear (Mínimos Quadrados)

Observe que a equação de calor da questão anterior, para computar o proximo passo de uma dada temperatura $T[k]$, pode ser representada da seguinte forma, caso algum tipo de operação de discretização seja efetuada:

$$T_i[k+1] = \mathbf{a} \cdot \mathbf{T}[k] + bT_{begin}[k] \tag{12}$$

com $\mathbf{T}_{begin}[k]$ definido no item 4 do problema acima. Note que $T_{begin}[0] = 60$ sendo incrementado em 5 unidades a cada 0.2 s, e $\mathbf{a}$ um vetor de tamanho $N(h)$ (vide exercicio anterior).

Utilizando os dados obtidos na simulação por método de Runge-Kutta da alternativa 4 do Problema 1, para $h = 0.2$ deseja-se obter um modelo na forma da equação (12) de forma data-driven, a fim de identificar a temperatura mais proxima de $T_{end}$, a $T_N$.

**Tarefas:**

1. Implemente o Método de Mínimos Quadrados:

$$\min_{\mathbf{a},b} \sum_{k=0}^{K} \|T_N[k+1] - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{T}[k] + b \cdot T_{begin}[k])\|^2$$

   Calcule a solução de forma que não precise utilizar a inversa e inclua o método de Cholesky no cálculo da mesma.

2. De acordo com os dados obtidos, monte a matriz de dados de entrada $\mathbf{X}$

e a matriz de dados de saída $\mathbf{Y}$. Sugestão: defina $\mathbf{Y}$ e $\mathbf{X}$ conforme segue:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} T_N[1] \\ T_N[2] \\ \vdots \\ T_N[K] \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}^T[0] & T_{begin}[0] \\ \mathbf{T}^T[1] & T_{begin}[1] \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{T}^T[K-1] & T_{begin}[K-1] \end{bmatrix}$$

Note que, assim como $\mathbf{T}[k+1] = \mathbf{A}\mathbf{T}[k] + \mathbf{B}T_{begin}[k]$, a seguinte relação é válida:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ b \end{bmatrix} \tag{13}$$

ou seja,

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{W} \tag{14}$$

sendo

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ b \end{bmatrix} \tag{15}$$

3. Execute o algoritmo de resolução de mínimos quadrados para obter a matriz $\mathbf{W}$.

4. Calcule o resíduo com relação aos dados de saída $\mathbf{Y}$,

$$\|\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{W}\|^2$$

   Imprima o resíduo quadrático para $T_N$.

5. Extraia o vetor $\mathbf{a}$ e o escalar $b$ da matriz $\mathbf{W}$ obtida.

# 4 Problema 4: Minimização de Norma

Considere o seguinte polinomio de oitavo grau:

$$y = p(x) = \sum_{i=0}^{8} w_i x^i \tag{16}$$

Deseja-se que para determinados valores:

$$3 = p(2) \tag{17}$$
$$7 = p(5) \tag{18}$$
$$-5 = p(-1) \tag{19}$$

O objetivo é encontrar valores de $w$ que façam essas 3 relações valerem, enquanto se minimiza a norma:

$$\|\mathbf{w}\|^2 = \sum_{i=0}^{8} w_i^2 \tag{20}$$

Tarefas:

1. Coloque o problema na forma:

$$\min_{\mathbf{w}} \|\mathbf{w}\|^2 \tag{21}$$

$$\text{s.t.} \;\; \mathbf{A_{LN}} \mathbf{w} = \mathbf{b}_{LN} \tag{22}$$

   explicite a forma numérica das matrizes.

2. Resolva o problema de minimização de norma aplicando a solução apresentada na disciplina. Não utilize inversões matriciais em sua solução. Resolva utilizando LDL$^T$ com ordenação AMD (Approximate Minimum Degree).

3. Resolva novamente o problema, agora por meio do método do **gradiente residual**.

4. Mostre um gráfico retratando o polinômio e os pontos mencionados.

# 5 Problema 5: Otimização Não Linear

Uma empresa de manufatura estipula que o custo médio diário para produzir $q$ unidades de um dado produto é dado pela seguinte equação:

$$\bar{C}(q) = \alpha q^2 + \beta q + \frac{\lambda}{q} + c$$

onde $\alpha = 0.0001$, $\beta = -0.08$, $\lambda = 5000$, e $c = 65$.

**Tarefas:**

1. A função $\bar{C}(q)$ é convexa no domínio $\mathbb{R}_+^*$? Desenvolva uma demonstração formal, qualquer que seja a resposta.

2. Dado a condição inicial $q_0 = 50$, utilize o método de Newton para encontrar o número de unidades $q$ produzidas que minimiza o custo diário médio do produto.

3. Forneça uma tabela com os valores de $q_k$, $\bar{C}(q_k)$ nos primeiros 4 passos de Newton $k = 1, ..., 4$.

4. Plote a curva da função $\bar{C}(q)$ dado $q \in \{150, 800\}$ e determine o ponto mínimo visualmente para validar a solução obtida pelo método de Newton.