1^o Trabalho de Matemática Computacional

LEGI e **LERCI** - 2^o Semestre 2003/2004

1^a Parte

1. Seja z a solução da equação $f(x) = 0$ num intervalo $[a, b]$ e seja $(x_n)_{n\in\mathbb{N}} \subset [a, b]$ uma sucessão que converge para z. Mostre que é válida a seguinte fórmula elementar de erro
$$|z - x_n| \leq \frac{|f(x_n)|}{\min_{x\in[a,b]} |f'(x)|}. \tag{1}$$

2. Escreva um programa *Mathematica* para resolver a equação $f(x) = 0$ pelo método da secante. Os dados são a função f, duas aproximações iniciais $x01$ e $x0$, uma tolerância de erro ε e o número máximo de iterações admissíveis $nmax$. O resultado pretendido é a lista das iteradas do método. O critério de paragem deve basear-se na fórmula (1).

3. Seja $(x_n)_{n\in\mathbb{N}} \subset [a, b]$ uma sucessão convergente com limite z. Se a sucessão tem ordem de convergência p com coeficiente assimptótico de convergência $\alpha > 0$ então
$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+2} - x_{n+1}|}{|x_{n+1} - x_n|^p} = \alpha.$$
Assim, para n suficientemente grande tem-se
$$|x_{n+2} - x_{n+1}| \approx \alpha |x_{n+1} - x_n|^p$$
donde resulta
$$\log(|x_{n+2} - x_{n+1}|) \approx \log(\alpha) + p \log(|x_{n+1} - x_n|).$$
Denotando por $(s_n)_{n\in\mathbb{N}}$ a sucessão de termo geral $s_n = \log(|x_{n+1} - x_n|)$, tem-se $s_{n+1} \approx \log(\alpha) + p s_n$ e portanto
$$p \approx \frac{s_{n+2} - s_{n+1}}{s_{n+1} - s_n}, \text{ quando } n \text{ é grande.}$$
Escreva um programa *Mathematica* que recebendo uma lista com os termos de uma sucessão, devolva uma estimativa da ordem de convergência da sucessão.

4. Teste os programas anteriores nos seguintes casos
   (a) $f(x) = x^3 + 4x - 10$, em $[1, 2]$, com $\varepsilon = 10^{-5}$ e $nmax = 20$;
   (b) $f(x) = x + 0.5 + 2\cos(\pi x)$, em $[0.5, 1.5]$, com $\varepsilon = 10^{-16}$ e $nmax = 20$.

   Apresente os resultados com 20 dígitos decimais.

5. Escreva um programa *Mathematica* para resolver o sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pelo método de Gauss-Seidel. Os dados são a matriz $\mathbf{A}$, o vector $\mathbf{b}$, a aproximação inicial $\mathbf{x^{(0)}}$, uma tolerância de erro ε e o número máximo de iterações admissíveis $nmax$. O resultado pretendido é a lista das iteradas do método. Utilize o critério de paragem $\|\mathbf{x^{(n+1)}} - \mathbf{x^{(n)}}\|_\infty / \|\mathbf{x^{(n)}}\|_\infty \leq \varepsilon$.

2^a Parte

1. A concentração de saturação S de oxigénio em água, à pressão de 1 atmosfera, pode ser calculada através de

$$S = \exp(C_0 + C_1 T^{-1} + C_2 T^{-2} + C_3 T^{-3} + C_4 T^{-4})$$

onde T é a temperatura absoluta em graus Kelvin (K= 273.15+ °C) e a concentração de saturação é obtida em mg/L. As constantes são dadas por

$$\begin{aligned} C_0 &= -0.1393441 \times 10^3, \\ C_1 &= 0.1575701 \times 10^6, \\ C_2 &= -0.6642308 \times 10^8, \\ C_3 &= 0.1243800 \times 10^{11}, \\ C_4 &= -0.8621949 \times 10^{12}. \end{aligned}$$

Esta fórmula empírica pode ser usada para águas naturais em climas temperados entre 0 °C e 35 °C.

(a) Considere C_k dado em FP(10,4,-100,100) com arredondamento simétrico e avalie experimentalmente o máximo do erro relativo de S.

(b) Comente os resultados anteriores através da noção de condicionamento e estabilidade, calculando a fórmula de propagação do erro relativo. Assuma que T é um valor exacto.

(c) Pretende-se determinar o valor da temperatuta T a partir da concentração de saturação S entre 7mg/L e 14.6 mg/L.

i. Mostre que nesse intervalo de valores, cada valor de S determina um e um só valor de T.

ii. Determine a temperatura em °C, com erro relativo inferior a 0.01%, correspondente a concentrações de 8, 10 e 12 mg/L, através do método da secante.

2. A deflecção de uma placa rectangular suportada pelas suas extremidades e sujeita a uma carga uniforme pode ser modelada pelo sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ onde

•x_i, $i = 1, 2, ..., n,$ representa a deflecção no ponto P_i,
•$b_i = 0.53$, $i = 1, 2, ..., n,$ é a carga imposta à placa, incluindo o seu próprio peso, no pontoP_i,
•A é a matriz pentadiagonal de dimensão n definida por
$a_{i,i} = 4, \quad i = 1, 2, ..., n,$
$a_{i,i+1} = -1, \quad i = 1, 2, ..., n-1,$
$a_{i+1,i} = -1, \quad i = 1, 2, ..., n-1,$
$a_{i,i+3} = -1, \quad i = 1, 2, ..., n-3,$
$a_{i+3,i} = -1, \quad i = 1, 2, ..., n-3,$
$a_{i,j} = 0,$ nos restantes casos.

(a) Justifique a convergência do método de Gauss-Seidel para a solução deste sistema.

(b) Usando o método de Gauss-Seidel, determine a deflecção em cada ponto P_i no caso $n = 40$, com $\varepsilon = 10^{-8}$ para critério de paragem.