Instituto Superior Técnico • Departamento de Matemática • Secção de Matemática Aplicada e Análise Numérica

Matemática Computacional - 2º ano LEMat e MEQ

Exame/Teste - 5 de Fevereiro de 2010 - Parte I (1h30m)

1. Considere função $f(x) = \ln(1+2x) - \exp(-x) \quad (x > -1/2)$.

   (a) Mostre que a equação $f(x) = 0$ tem uma única raíz, z, a qual pertence ao intervalo $[0,1]$. **[1.0]**

   Resolução: Tem-se

   i. $f(0)f(1) < 0$, pois $f(0) = -1$ e $f(1) = 0.730733$;

   ii. $f'(x) = \dfrac{2}{1+2x} + \exp(-x) > 0$ para todo o $x > -1/2$.

   Portanto, a equação $f(x) = 0$ tem uma raíz $z \in [0,1]$, sendo esta a única raíz da equação em $]-1/2, \infty[$ uma vez que f é estritamente crescente em $]-1/2, \infty[$.

   (b) Usando o método da bissecção, determine um intervalo de comprimento inferior a 0.2 que contenha z. **[1.0]**

   Resolução: Seja $I_0 := [a_0, b_0] = [0,1]$. Aplicando o método da bissecção partindo deste intervalo obtém-se sucessivamente:

$$x_1 = \frac{a_0+b_0}{2} = 0.5\,, \quad f(a_0)\times f(x_1) < 0 \Rightarrow I_1 := [a_1,b_1] = [a_0,x_1] = [0,0.5]\,, \quad |I_1| = 0.5 > 0.2\,,$$

$$x_2 = \frac{a_1+b_1}{2} = 0.25\,, \quad f(x_2)\times f(b_1) < 0 \Rightarrow I_2 := [a_2,b_2] = [x_2,b_1] = [0.25,0.5]\,, \quad |I_2| = 0.25 > 0.2\,,$$

$$x_3 = \frac{a_2+b_2}{2} = 0.375\,, \quad f(x_3)\times f(b_2) < 0 \Rightarrow I_3 = [x_3,b_2] = [0.375,0.5]\,, \quad |I_3| = 0.125 < 0.2\,.$$

   O intervalo pretendido é $[0.375, 0.5]$.

   (c) Mostre que o método de Newton com iterada inicial $x_0 = 0.5$ converge para z. **[1.0]**

   Resolução: A função f é de classe C^2 no intervalo $[0,1]$ (por exemplo), sendo

$$f'(x) = \frac{2}{1+2x} + \exp(-x)\,,$$
$$f''(x) = -\frac{4}{(1+2x)^2} - \exp(-x)\,.$$

   Já vimos na alínea (a) que

   i. $f(0)f(1) < 0$;

   ii. $f' > 0$ em $[0,1]$.

   Além disso, tem-se

   iii. $f'' < 0$ em $[0,1]$ (logo f'' não muda de sinal em $[0,1]$);

   iv. $\left|\frac{f(0)}{f'(0)}\right| = |-1/3| < 1$ e $\left|\frac{f(1)}{f'(1)}\right| = 0.706332 < 1$.

   Portanto, o método de Newton com iterada inicial em $[0,1]$, em particular com $x_0 = 0.5$, converge para z.

   (d) Calcule um valor aproximado de z efectuando duas iterações do método de Newton, tomando para iterada inicial $x_0 = 0.5$, e calcule um majorante do erro relativo do valor obtido. **[2.0]**

   Resolução: De

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \qquad (n = 0,1,2,...)$$

com $f(x)=\ln(1+2x)-\exp(-x)$, $f'(x)=\dfrac{2}{1+2x}+\exp(-x)$ e $x_0=0.5$, obtém-se

$$x_1=0.446085,\ x_2=0.447502\,.$$

Quanto à majoração do erro de x_2, usando as fórmulas de erro do método de Newton, tem-se

$$|z-x_2|\leq\frac{1}{K}(K|z-x_0|)^4 \qquad K:=\frac{\max_{x\in I}|f''(x)|}{2\min_{x\in I}|f'(x)|}$$

onde I é um intervalo que contém z e as iteradas $x_i\,(i=0,1,2)$. Atendendo a que $f(x_2)<0$ e $f(x_0)>0$, tem-se $z\in]x_2,x_0[$. Então $I=[x_1,x_0]$ e

$$K=\frac{\max_{x\in[x_1,0.5]}|f''(x)|}{2\min_{x\in[x_1,x_0]}|f'(x)|}=\frac{|f''(x_1)|}{2|f'(x_0)|}=0.54694,$$
$$|z-x_0|\leq x_0-x_2=0.052498.$$

Obtemos assim o seguinte majorante do *erro absoluto* de x_2

$$|z-x_2|\leq\frac{1}{0.54694}(0.54694\times0.052498)^4\leq1.24277\times10^{-6}.$$

Quanto ao *erro relativo*, como $z\in]x_2,0.5[$ tem-se

$$z>x_2=0.447502\wedge|z-x_2|\leq0.001505\Longrightarrow\frac{|z-x_2|}{|z|}\leq\frac{1.24277\times10^{-6}}{0.447502}=2.77713\times10^{-6}\,.$$

Em alternativa, poderíamos majorar o erro absoluto de x_2 do seguinte modo

$$|z-x_2|\leq\frac{|f(x_2)|}{\min_{x\in[x_2,0.5]}|f'(x)|}=\frac{|f(0.447502)|}{|f'(0.5)|}\leq1.24\times10^{-6},$$

que daria um resultado semelhante ao anterior.

(e) Considere o método do ponto fixo

$$\begin{cases}x_0=0.45,\\ x_{n+1}=x_n+\ln(1+2x_n)-\exp(-x_n) \qquad (n=0,1,2,...)\end{cases}$$

e a lista

$$\{0.454226, 0.465579, 0.495926, 0.575984, 0.780216, 1.26208, 2.23867, 3.83268\}$$

que contém as iteradas $x_1,x_2,...,x_8$ deste método. Diga o que estes valores sugerem quanto à convergência do método (para z) e dê uma justificação para este resultado. **[1.5]**

Resolução: Estes valores sugerem que este método não converge para z. De facto, a função iteradora deste método é

$$g(x):=x+\ln(1+2x)-\exp(-x) \quad (x>-1/2)$$

e tem-se

$$g(x)=1+\frac{2}{1+2x}+\exp(-x)>1, \quad \forall x>-1/2.$$

Em particular, $g(z)>1$, e portanto a sucessão dada não converge para z.

2. Considere o sistema linear $Ax=b$ em que

$$A=\begin{bmatrix}10&7&8&7\\7&5&6&5\\8&6&10&9\\7&5&9&10\end{bmatrix} \qquad b=\begin{bmatrix}32.1\\22.9\\33.1\\30.9\end{bmatrix}$$

(a) Obtenha a representação $\tilde{b}$ de b num sistema de ponto flutuante com 2 dígitos na mantissa e arredondamento simétrico. Calcule o erro relativo $\frac{\|b-\tilde{b}\|_\infty}{\|b\|_\infty}$. **[1.0]**

Resolução: Em ponto flutuante com 2 dígitos na mantissa e arredondamento simétrico, tem-se

$$\tilde{b} = \begin{bmatrix} fl(32.1) \\ fl(22.9) \\ fl(33.1) \\ fl(30.9) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} fl(0.321 \times 10^2) \\ fl(0.229 \times 10^2) \\ fl(0.331 \times 10^2) \\ fl(0.309 \times 10^2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.32 \times 10^2 \\ 0.23 \times 10^2 \\ 0.33 \times 10^2 \\ 0.31 \times 10^2 \end{bmatrix}$$

e o erro relativo de $\tilde{b}$ é

$$\frac{\|b-\tilde{b}\|_\infty}{\|b\|_\infty} = \frac{\|[0.1 \quad -0.1 \quad 0.1 \quad -0.1]^T\|_\infty}{\|[32.1 \quad 22.9 \quad 33.1 \quad 30.9]^T\|_\infty} = \frac{0.1}{33.1} = 0.00302115\,.$$

(b) Sabendo que

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 25 & -41 & 10 & -6 \\ -41 & 68 & -17 & 10 \\ 10 & -17 & 5 & -3 \\ -6 & 10 & -3 & 2 \end{bmatrix}$$

calcule o erro relativo $\frac{\|x-\tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty}$ da solução do sistema $A\tilde{x} = \tilde{b}$. (Se não resolveu a alínea anterior, considere $\tilde{b} = [32 \quad 22 \quad 33 \quad 30]^T$.) **[1.5]**

Resolução: Como A^{-1} é dada, podemos facilmente calcular x e $\tilde{x}$:

$$x = A^{-1}b = [9.2 \quad -12.6 \quad 4.5 \quad -1.1]^T$$

e

$$\tilde{x} = A^{-1}\tilde{b} = [1 \quad 1 \quad 1 \quad 1]^T\,.$$

Então

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \frac{\|[8.2 \quad -13.6 \quad 3.5 \quad -2.1]^T\|_\infty}{\|[9.2 \quad -12.6 \quad 4.5 \quad -1.1]^T\|_\infty} = \frac{13.6}{12.6} = 1.07937$$

(c) Compare os erros $\frac{\|b-\tilde{b}\|_\infty}{\|b\|_\infty}$ e $\frac{\|x-\tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty}$ e explique o valor elevado de $\frac{\|x-\tilde{x}\|_\infty}{\|x\|_\infty}$. **[1.0]**

Resolução: Um erro relativo muito pequeno em $\tilde{b}$ deu origem a um erro relativo bastante grande em $\tilde{x}$. Isto significa que o sistema é mal condicionado. De facto, o número de condição (na norma do máximo) da matriz A é bastante grande

$$\begin{aligned} cond_\infty(A) &= \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty \\ &= \max\{10+7+8+7, 7+5+6+5, 8+6+10+9, 7+5+9+10\} \\ &\quad \times \max\{25+41+10+6, 41+68+17+10, 10+17+5+3, 6+10+3+2\} \\ &= 33 \times 136 = 4488 \end{aligned}$$

e a relação entre o erro relativo do vector b e o erro relativo da solução do sistema (na norma do máximo) é

$$\|\delta\tilde{x}\|_\infty \le 4488 \|\delta\tilde{b}\|_\infty\,.$$

Esta relação confirma que $\|\delta\tilde{b}\|_\infty$ pode ser muito pequeno e $\|\delta\tilde{x}\|_\infty$ muito elevado.

Instituto Superior Técnico • Departamento de Matemática • Secção de Matemática Aplicada e Análise Numérica

Matemática Computacional - 2º ano LEMat e MEQ

Exame/Teste - 5 de Fevereiro de 2010 - Parte II (1h30m)

1. Considere o sistema não linear

$$\begin{cases} x_1x_2x_3 = 0 \\ x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3 = -1 \\ x_1 + x_2 = 0 \end{cases}$$

(a) Mostre que, se aplicar o método de Newton a este sistema partindo de $x^{(0)} = [-1 \;\; 0 \;\; 1]^T$, a primeira iterada é $x^{(1)} = x^{(0)} + y$, onde $y = [y_1 \;\; y_2 \;\; y_3]^T$ é a solução do sistema linear

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

[1.0]

Resolução: O sistema dado escreve-se na forma $f(x) = 0$ com

$$f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$$
$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1x_2x_3, x_1x_2 + x_2x_3 + x_1x_3, x_1 + x_2).$$

A matriz Jacobiana de f é dada por

$$J_f(x_1, x_2, x_3) = \begin{bmatrix} x_2x_3+ & x_1x_3 & x_1x_2 \\ x_2 + x_3 & x_1 + x_3 & x_2 + x_1 \\ 3 & 1 & 10 \end{bmatrix}.$$

A primeira iterada do método de Newton é $x^{(1)} = x^{(0)} + y$, onde y é a solução do sistema linear

$$J_f(x^{(0)})y = -f(x^{(0)}).$$

Para $x^{(0)} = (-1, 0, 1)$ tem-se

$$f(x^{(0)}) = f(-1, 0, 1) = (0, 0, -1)$$

e

$$J_f(x^{(0)}) = J_f(-1, 0, 1) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

pelo que o sistema a resolver para obter $x^{(1)}$ é

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

(b) Transforme o sistema linear acima de modo a poder aplicar o método de Jacobi. Em seguida, mostre que o método de Jacobi converge para y ao fim de 3 iterações, qualquer que seja a iterada inicial $y^{(0)} \in \mathbb{R}^3$. **[2.0]**

Resolução: Por troca de linhas, o sistema é equivalente a

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde todos os elementos da diagonal principal da matriz são não nulos. A matriz de iteração do método de Jacobi é

$$C_J = -\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Sabe-se que, para cada iterada inicial $y^{(0)} \in \mathbb{R}^3$, a *sucessão dos erros* das iteradas do método de Jacobi satisfaz

$$y - y^{(k)} = C_J^k (y - y^{(0)}) \quad (k = 1, 2, ...)$$

onde $\{y^{(k)}\}$ é a sucessão de iteradas do método de Jacobi. Atendendo a que

$$C_J^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } C_J^3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

tem-se

$$y - y^{(k)} = 0 \quad (k = 3, 4, ...) \Longleftrightarrow y^{(k)} = y \quad (k = 3, 4, ...)$$

o que mostra que o método converge para y ao fim de 3 iterações.

(c) Calcule y usando o método de Jacobi com $y^{(0)} = [0 \;\; 0 \;\; 0]^T$. **[1.5]**

Resolução: A sucessão de iteradas do método de Jacobi é dada por

$$y^{(k+1)} = C_J y^{(k)} + d \quad (k = 0, 1, 2, ...)$$

com

$$C_J = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad d = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Já vimos que o método converge ao fim de 3 iterações. Com $y^{(0)} = [0 \;\; 0 \;\; 0]^T$ obtém-se:

$$\begin{aligned} y^{(1)} &= d = [-1 \;\; 0 \;\; 0]^T, \\ y^{(2)} &= C_J y^{(1)} + d = [-1 \;\; 0 \;\; -1]^T, \\ y = y^{(3)} &= C_J y^{(2)} + d = [-1 \;\; 0 \;\; -1]^T. \end{aligned}$$

Observação: Na verdade, com iterada inicial nula, a solução exacta é obtida ao fim de 2 iterações.

2. Considere a seguinte tabela de valores da *função distribuição acumulada da distribuição normal* $\Phi(x) := \dfrac{1}{2}\left[1 + \dfrac{2}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_0^{\frac{x}{\sqrt{2}}} exp(-t^2)dt\right]$

x_i	0.5	1.0	1.5	2.0
$\Phi(x_i)$	0.691462	0.841345	0.933193	0.97725

(a) Utilizando a fórmula de Newton, obtenha o polinómio de menor grau interpolador de Φ nos três primeiros pontos da tabela. Calcule um valor aproximado de $\Phi(\sqrt{2})$ recorrendo ao polinómio obtido. **[1.0]**

Resolução: Usando a fórmula de Newton, tem-se a seguinte expressão para o polinómio, de grau menor ou igual a 2, interpolador de Φ nos nós 0.5, 1.0 e 1.5

$$p_2(x) = \Phi[0.5] + \Phi[0.5, 1.0](x - 0.5) + \Phi[0.5, 1.0, 1.5](x - 0.5)(x - 1.0)$$

A tabela de diferenças divididas é:

$$\begin{array}{llll}
0.5 & 0.691462 & & \\
 & & \frac{0.841345-0.691462}{1.0-0.5} = 0.299766 & \\
1.0 & 0.841345 & & \frac{0.183696-0.299766}{1.5-0.5} = -0.11607 \\
 & & \frac{0.933193-0.841345}{1.5-1.0} = 0.183696 & \\
1.5 & 0.933193 & &
\end{array}$$

Assim,

$$p_2(x) = 0.691462 + 0.299766(x - 0.5) - 0.11607(x - 0.5)(x - 1.0)\,.$$

Um valor aproximado de $\Phi(\sqrt{2})$ é $p_2(\sqrt{2}) = 0.921559$.

(b) Usando os valores tabelados, determine a função da forma $g(x) = \frac{1}{2} + ax + bx^3$ $(a, b \in \mathbb{R}^3)$ que melhor se ajusta à função Φ no sentido dos mínimos quadrados. **[1.5]**

Resolução: Temos que determinar os coeficientes $a, b \in \mathbb{R}^3$ que minimizam

$$Q(a, b) = \sum_{i=0}^{3}[\Phi(x_i) - g(x_i)]^2 = \sum_{i=0}^{3}[\Phi(x_i) - (1/2 + ax + bx^3)]^2 = \sum_{i=0}^{3}[(\Phi(x_i) - 1/2) - (ax + bx^3)]^2\,.$$

Então, o problema dado é equivalente a determinar a função da forma $ax + bx^3$ que melhor se ajusta à função $(\Phi - 1/2)$ no sentido dos mínimos quadrados. As funções de base a considerar são

$$\phi_0(x) = x, \qquad \phi_1(x) = x^3$$

e os parâmetros a e b obtêm-se resolvendo o sistema de equações normais

$$\begin{bmatrix} (\phi_0, \phi_0) & (\phi_0, \phi_1) \\ (\phi_1, \phi_0) & (\phi_1, \phi_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\phi_0, (\Phi - 1/2)) \\ (\phi_1, (\Phi - 1/2)) \end{bmatrix},$$

onde

$$(\phi_0, \phi_0) = \sum_{i=0}^{3} x_i^2 = 7.5$$

$$(\phi_0, \phi_1) = (\phi_1, \phi_0) = \sum_{i=0}^{3} x_i^4 = 22.125$$

$$(\phi_1, \phi_1) = \sum_{i=0}^{3} x_i^6 = 76.4063$$

$$(\phi_0, (\Phi - 1/2)) = \sum_{i=0}^{3} x_i(\Phi(x_i) - 1/2) = 2.04137$$

$$(\phi_1, (\Phi - 1/2)) = \sum_{i=0}^{4} x_i^3(\Phi(x_i) - 1/2) = 5.6453$$

Resolvendo o sistema

$$\begin{bmatrix} 7.5 & 22.125 \\ 22.125 & 76.4063 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.04137 \\ 5.6453 \end{bmatrix},$$

(cuja matriz é definida positiva) obtém-se

$$g(x) = \frac{1}{2} + 0.37197x - 0.0338262x^3\,.$$

(c) Calcule um valor aproximado de $\Phi(\sqrt{2})$ usando a regra dos trapézios com 5 nós de integração igualmente espaçados. **[1.5]**

Resolução: Começamos por observar que

$$\Phi(\sqrt{2}) = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 \exp(-t^2)dt\right].$$

Agora usamos a regra dos trapézios com 5 nós de integração para aproximar o integral

$$I := \int_0^1 \exp(-t^2)dt\,.$$

Os 5 nós de integração são $t_0 = 0$, $t_1 = 0.25$, $t_2 = 0.5$, $t_3 = 0.75$ e $t_4 = 1$, com espaçamento $h = 0.25$ e o valor aproximado para o integral é

$$\tilde{I} = 0.25\left(\frac{\exp(-t_0^2) + \exp(-t_4^2)}{2} + \exp(-t_1^2) + \exp(-t_2^2) + \exp(-t_3^2)\right) = 0.742984\,.$$

O valor aproximado para $\Phi(\sqrt{2})$ é

$$\widetilde{\Phi(\sqrt{2})} = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\tilde{I}\right] = 0.919184\,.$$

3. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = \exp(-y(t)) \quad (t > 0), \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Obtenha um valor aproximado de $y(1)$ aplicando o método de Euler com $h = 0.25$. **[1.5]**

Resolução: Neste caso, tem-se

$$f(t, y) := \exp(-y)$$

e para $h = 0.25$, obtemos os pontos

$$t_i = 0.25i,\ i = 0, 1, 2, ...$$

Assim, $y(1) = y(t_4) \approx y_4$, sendo y_4 obtido pelo método de Euler

$$\begin{cases} y_0 = 1 \\ y_{i+1} = y_i + 0.25 f(t_i, y_i) = y_i + 0.25\exp(-y_i),\ i = 0, 1, 2, ... \end{cases}$$

Obtém-se então

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + 0.25\exp(-y_0) = 1 + 0.25\exp(-1) = 1.09197\,, \\ y_2 &= y_1 + 0.25\exp(-y_1) = 1.09197 + 0.25\exp(-1.09197) = 1.17586\,, \\ y_3 &= y_2 + 0.25\exp(-y_2) = 1.17586 + 0.25\exp(-1.17586) = 1.253\,, \\ y_4 &= y_3 + 0.25\exp(-y_3) = 1.253 + 0.25\exp(-1.253) = 1.32441\,. \end{aligned}$$