Problemes d'Introducció a la Computació Científica

Semestre de tardor del curs 2010-11

Tema 1: Errors i aritmètica de punt flotant

1. Responeu les següents qüestions considerant el format IEEE simple:

(a) Quina és la representació en punt flotant dels nombres $x = -1.6$ i $x = 115.1$?
(b) Quins són els nombres positius més gran i més petit representables exactament?
(c) Quin és el nombre representable exactament que segueix a 6?

2. Opereu usant aritmètica decimal de punt flotant amb sis dígits:

$$(2.43875 \times 10^6 + 4.12642 \times 10^1) - 2.43826 \times 10^6 \text{ i } (2.43875 \times 10^6 - 2.43826 \times 10^6) + 4.12642 \times 10^1.$$

Calculeu també el valor exacte. En quin dels dos casos patim els efectes de cancel.lació? Perquè?

3. Amb quina exactitud s'ha de mesurar el radi d'una esfera i amb quants decimals s'ha de donar el número π per tal de conèixer el seu volum amb un error relatiu menor que el 0.01? (Considereu ambdós efectes per separat.)

4. Calculeu la cota de l'error absolut propagat al fer l'operació

$$E = \frac{7\sqrt{2} - \pi\sqrt{3}}{\pi^2 + \sqrt{3}}$$

si arrodonim π, $\sqrt{2}$ i $\sqrt{3}$ per 3.1, 1.4 i 1.7 respectivament.

5. Determina la cota d'error absolut per l'expressió $y = \frac{x_1 x_2^2}{\sqrt{x_3}}$, on $x_1 = 2.0 \pm 0.1$, $x_2 = 3.0 \pm 0.2$ i $x_3 = 1.0 \pm 0.1$. Quina de les variables té una contribució més gran a l'error de y?

6. Volem calcular $a = (7 - 4\sqrt{3})^4$ utilitzant el valor aproximat 1.73205 per $\sqrt{3}$. Trieu entre les fórmules equivalents següents la millor des del punt de vista numèric:

(a) $\frac{1}{(7+4\sqrt{3})^4}$ (b) $(97 - 56\sqrt{3})^2$ (c) $\frac{1}{(97+56\sqrt{3})^2}$
(d) $18817 - 10864\sqrt{3}$ (e) $\frac{1}{18817+10864\sqrt{3}}$

7. Calcular l'arrel més petita de l'equació $x^2 - 40x + 1 = 0$ utilitzant l'expressió aproximada $\sqrt{399} \approx 19.97498$.

(a) Directament.
(b) Utilitzant l'expressió $\frac{1}{20+\sqrt{399}}$.
(c) Comparar els errors.

8. Per calcular $\ln(x - \sqrt{x^2 - 1})$ quan $x = 30$, busquem l'arrel quadrada amb una calculadora que dona 6 xifres decimals. Quin serà l'error absolut en el resultat? Trobar una expressió equivalent matemàticament però que sigui millor numèricament. Acotar l'error absolut usant aquesta nova expressió en les mateixes condicions.

9. Usant un mètode recurrent, calculeu el valor de les integrals

$$I_k = \int_0^1 \frac{x^k}{x+10}\, dx \text{ per } k = 1, 2, \ldots, 20.$$

Estudieu l'estabilitat del mètode trobat.

Problemes d'Introducció a la Computació Científica

Semestre de tardor del curs 2010-11

Tema 2: Resolució d'equacions no lineals en una variable

10. Considereu la funció $f(x) = x^3 - e^x + 3$.

(a) Localitzeu els seus zeros (en intervals on només n'hi hagi un).

(b) Trobeu-los usant els mètodes de bisecció, Newton, secant i Regula Falsi, amb un error absolut més petit que 10^{-6}.

(c) Discutiu els resultats i la convergència.

Feu el mateix per la funció $g(x) = \left(x^2 + \ln\left(x^2+1\right) - 1\right) e^x$.

11. Donada la funció $f(x) = e^x - 2 - x$, trobeu dos punts a i b tals que $f(a)f(b) < 0$. Useu llavors el mètode de la bisecció per trobar un interval d'amplada menor que 0.1 que contingui una solució de $f(x) = 0$. A partir d'aquest interval, useu el mètode de la secant fent els càlculs amb cinc decimals arrodonits per trobar-ne una solució aproximada.

Feu el mateix per $f(x) = \cos x + 1 - x$, $f(x) = \ln x - 5 + x$ i $f(x) = x^2 - 10x + 23$.

12. Donats e i M, l'equació de Kepler el.líptica és

$$x - e\sin x = M.$$

Quantes solucions té si $M \in [0, 2\pi]$ i $e \in (0,1)$? Trobeu-la usant el mètode de Newton amb un error absolut més petit que 10^{-5} en els casos $\{M = 0.8\,, e = 0.2\}$ i $\{M = 1.5\,, e = 0.8\}$.

13. Proveu que la funció $f(x) = \frac{1}{x^2}\ln(x) + 1$ té un màxim local i un punt d'inflexió. Localitzeu-los i calculeu-los amb un error més petit que 10^{-6} usant secant i Newton.

14. Sabem que $P(x) = x^3 + 0.83246x^2 - 0.9692228x - 0.817781874$ té un zero a l'interval $(-1, 0)$. Calculeu els primers 5 iterats del mètode de Newton prenent $x_0 = -0.5$. És quadràtica la seva velocitat de convergència? Què està passant?

15. Quin és el propòsit de la fórmula d'iteració $x_{n+1} = 2x_n - \beta x_n^2$? (Identifiqueu-la com la iteració de Newton per una certa funció.)

16. Volem aproximar les solucions de l'equació $e^x - 3x^2 = 0$ usant un mètode de punt fix $x_{k+1} = g(x_k)$. Sabem que hi ha 3 solucions: una prop de -0.5, l'altra prop de 1.0, i la darrera prop de 4.0. Per cadascuna d'aquestes solucions, trobeu una expressió de $g(x)$ per tal que el mètode sigui convergent.

17. Sabem que l'equació $x + \ln(x) = 0$ té una arrel prop de 0.5 i volem trobar-la mitjançant un método de punt fix. Quina de les següents fórmules triaries?

(a) $x_{n+1} = -\ln(x_n)$, (b) $x_{n+1} = e^{-x_n}$, (c) $x_{n+1} = \dfrac{x_n + e^{-x_n}}{2}$.

18. Aplicant un mètode de punt fix, trobeu una arrel propera a $x_0 = 0$ de l'equació $2^x - 5x + 2 = 0$. (Treballeu amb tres decimals i itereu fins que es verifiqui la condició de convergència $\mid x_k - x_{k-1} \mid \leqslant 0.0005$.)

Problemes d'Introducció a la Computació Científica

Semestre de tardor del curs 2010-11

Tema 3: Interpolació polinomial i aproximació

19. Estimeu $f(4)$ usant el polinomi interpolador construït amb el mètode de Lagrange a partir de la taula:

x_k	-1	0	3	7
$f(x_k)$	2	0	4	7

20. Donada la següent taula de valors:

x_k	3.2	2.7	1
$f(x_k)$	22.0	17.8	14.2

(a) Trobar el polinomi interpolador per aquests valors usant el mètode de les diferencies dividides i fent els càlculs amb tres decimals.

(b) Trobar el polinomi interpolador si a la taula anterior afegim la dada $f(4.8) = 38.3$.

21. Calculeu $\ln(0.6)$ de les següents maneres:

(a) Desenvolupant $f(x) = \ln(x)$ per Taylor al voltant de $x_0 = 0.5$ i truncant després de la tercera derivada.

(b) Utilitzant el polinomi interpolador construït a partir de les dades:

x	0.4	0.5	0.7	0.8
$f(x)$	-0.916291	-0.693147	-0.356675	-0.223144

En cada cas, acoteu els errors comesos i, sabent que $\ln(0.6) \approx -0.5108256238$, compareu-los amb l'error real.

22. Considerem la següent taula de la funció $f(x) = e^x$:

x	0.0	0.2	0.4	0.6
$f(x)$	1.0000	1.2214	1.4918	1.8221

(a) Trobar els valors aproximats de $\sqrt[3]{e}$ per interpolació lineal i cúbica.

(b) Donar les cotes respectives dels errors deguts a la interpolació. Comparar els resultats amb el valor "exacte" $\sqrt[3]{e} \approx 1.395612425$

23. Considerem una funció f de classe $\mathcal{C}^1$ a l'interval $[a, b]$ amb $f'(x) \neq 0$, i suposem que existeix $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$. Per trobar-ne una aproximació triem n punts diferents $x_0 < \ldots < x_{n-1}$ dins $[a, b]$ i definim $y_k = f(x_k)$.

(a) Justifiqueu que si $P(x)$ és el polinomi interpolador de (y_k, x_k) per $k = 0, 1, \ldots, n-1$, llavors $c \approx P(0)$.

(b) Tenint en compte l'anterior, calculeu aproximadament la solució de l'equació $e^{-x} - x = 0$ usant la taula:

x	0.3	0.4	0.5	0.6
$e^{-x} - x$	0.441	0.270	0.107	-0.051

24. Utilitzant el mètode d'Hermite, trobeu un polinomi de grau 4 que interpoli la taula:

x	0	1	2
$f(x)$	2	-4	44
$f'(x)$	-9	4	

Trobeu ara un polinomi de grau 5 que interpoli els valors anteriors i $f(3) = 2$.

25. Construïu el spline cúbic natural per la funció $f(x) = x \ln x$ en els nodes $x_0 = 1$, $x_1 = 2$ i $x_3 = 2.5$. Useu-lo per aproximar $f(1.35)$ i $f(2.15)$, i compareu el resultat amb el valors exacte.

26. Construïu el spline cúbic (amb condicions de frontera) s que interpola les dades $f(0) = 0$, $f(1) = 1$ i $f(2) = 2$ i que verifica $s'(0) = s'(2) = 1$.

27. Trobeu la recta de mínims quadrats que ajusta les següents dades:

x	1	2	3	4	5	6
y	5.04	8.12	10.64	13.18	16.20	20.04

28. Els pesos atòmics de l'oxigen i del nitrogen són, aproximadament, 16 i 14 respectivament. Utilitzeu els pesos moleculars dels sis òxids de nitrogen donats a continuació per tal d'aproximar-los millor. (Useu mínims quadrats lineals.)

Compost	NO	N_2O	NO_2	N_2O_3	N_2O_5	N_2O_4
Pes molecular	30.006	44.013	46.006	76.012	108.010	92.011

29. Els processos termodinàmics de sistemes físics caracteritzats per la pressió P, el volum V i la temperatura T (com per exemple els gasos) segueixen una llei tipus $PV^\gamma = C$, on C i γ són constants. Ajusteu per mínims quadrats els valors de C i γ d'un procés adiabàtic del que tenim la taula de mesures experimentals següent:

P (atm)	1.62	1.00	0.75	0.62	0.52	0.46
V (litres)	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0

Problemes d'Introducció a la Computació Científica

Semestre de tardor del curs 2010-11

Tema 4: Derivació i integració numèrica

30. Els temps i les velocitats corresponents a un mòbil venen donats per la taula:

t	0	60	120	180	240	300
v	0.0	0.0824	0.2747	0.6502	1.3851	3.2229

Calculeu els valors aproximats de l'acceleració en els instants $t = 0$, $t = 120$ i $t = 300$.

31. La taula següent es construeix a partir de la funció $f(x) = xe^x$:

x	1.8	1.9	2.0	2.1	2.2
$f(x)$	10.8894	12.7032	14.7781	17.1490	19.8550

Aproximeu $f'(2)$ utilitzant diferències progressives amb dos i tres punts, i acoteu els errors absoluts de les aproximacions obtingudes. Compareu les aproximacions amb el valor exacte.

32. Considereu la següent taula corresponent a la funció $f(x) = xe^x$:

x	1.00	1.01	1.02	1.03	1.04	1.05	1.06
$f(x)$	2.7182	2.7730	2.8286	2.8850	2.9423	3.0005	3.0595

(a) Aproximeu els valors de $f'(1.0)$ i $f'(1.06)$.

(b) Aproximeu $f'(1.03)$ utilitzant la fórmula centrada de 3 punts amb la màxima precisió possible. (Justifiqueu la resposta.)

33. Sigui $f(x) = x^2 - e^x + e^{-x}$.

(a) Treballant amb 8 decimals, useu la fórmula de les diferencies finites centrada de primer ordre per aproximar $f'(0.7)$ amb $h = 10^{-i}$ per $i = 1, 2, \ldots, 5$.

(b) Si $F(h)$ és la fórmula anterior, es pot veure que

$$F(h) = f'(a) + a_2h^2 + a_4h^4 + \ldots + a_{2n}h^{2n} + \ldots$$

Tenint en compte això, i a partir dels resultats de l'apartat (a), useu el mètode d'extrapolació de Richardson per obtenir una millor aproximació de $f'(0.7)$. Doneu els errors absoluts comparant amb el valor exacte de la derivada.

34. Disposem de la taula

x	1.00	1.05	1.10	1.15	1.20	1.25	1.30
$\sqrt{x}$	1.00000	1.02470	1.04881	1.07238	1.09544	1.11803	1.14017

Utilitzeu aquesta informació per calcular $\int_{1.00}^{1.30} \sqrt{x}\, dx$ mitjançant:

(a) La regla composta dels trapezis.

(b) La regla composta de Simpson.

Compareu els resultats amb el valor correcte calculat analíticament.

35. Mitjançant la fórmula composta dels trapezis volem calcular una aproximació de

$$\int_{1.8}^{3.4} e^x \, dx$$

amb cinc xifres decimals correctes. Quin ha de ser el valor de h? Comparar el valor obtingut amb el valor correcte trobat analíticament.

36. Volem calcular la integral

$$\int_{1}^{2} e^{-x} \, dx$$

amb un error absolut menor que $\varepsilon = 10^{-6}$. Quantes divisions necessitem si volem utilitzar la fórmula composta dels trapezis? I per la fórmula composta de Simpson?

37. Calculeu

$$\int_{0}^{\pi} \frac{\cos(x) - 1}{x^2} \, dx$$

amb un error absolut menor que 10^{-10} usant les regles dels trapezis i de Simpson.

38. Mitjançant la integració de Romberg, calculeu $R_{3,3}$ i $R_{4,4}$ per les següents integrals:

$$(a) \int_{1}^{1.5} x^2 \ln x dx, \qquad (b) \int_{0}^{1} x^2 e^{-x} dx, \qquad (c) \int_{0}^{\pi/4} x^2 \sin x dx.$$

39. Useu la integració de Romberg per aproximar les integrals de l'exercici anterior amb una exactitud de 10^{-6}. (Calculeu la taula de Romberg fins que $|R_{n,n} - R_{n-1,n-1}| < 10^{-6}$ o fins que $n = 10$.) Compareu el resultat amb el valor exacte de les integrals calculades analíticament.

Problemes d'Introducció a la Computació Científica

Semestre de tardor del curs 2010-11

Tema 5: Resolució numèrica de sistemes lineals

40. Considereu el sistema d'equacions lineals $Ax = b$ amb

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ 2 & 5 & 2 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \text{ i } b = \begin{pmatrix} 8 \\ 3 \\ 11 \end{pmatrix}.$$

(a) Usant aritmètica de 3 dígits (és a dir, $b = 10$ i $t = 3$), resoleu el sistema fent servir Gauss, amb i sense pivotatge maximal,

(b) Resoleu el sistema de forma exacte, fent servir Gauss amb pivotatge maximal per columnes.

Feu el mateix pel sistema lineal amb

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & -1 \\ 1 & 1 & -3 \end{pmatrix} \text{ i } b = \begin{pmatrix} 9 \\ -5 \\ -9 \end{pmatrix}.$$

41. Considereu el sistema d'equacions lineals $Ax = b$ amb $b^T = (1, 20000, 0)$ i

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 10000 & 1 & 20000 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

(a) Resoleu-lo fent Gauss amb aritmètica de 4 dígits.

(b) Resoleu-lo fent Gauss amb pivotatge maximal per columnes amb aritmètica de 4 dígits.

(c) Resoleu-lo exactament.

42. Efectueu la factorització LU de la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Fent us d'aquesta factorització, resoleu el sistema $Ax = b$ amb $b^T = (1, 1, 1, 1, 1)$.

43. Calculeu $A^{-1}c$ amb $A = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.1 & 1.0 \\ -3.9 & 1.1 & 3.2 \\ 1.4 & 1.5 & -1.0 \end{pmatrix}$ i $c^T = (0.1, 1.1, -1.4)$. Calculeu també el determinant d'A.

44. Calculeu una solució aproximada del sistema

$$\begin{cases} 4x_1 + 0.24x_2 - 0.08x_3 = 8 \\ 0.09x_1 + 3x_2 - 0.15x_3 = 9 \\ 0.04x_1 - 0.08x_2 + 4x_3 = 20 \end{cases}$$

emprant els mètodes de Jacobi i de Gauss-Seidel. Feu els càlculs amb dos decimals fins que $|x_i^{r+1} - x_i^r| < 0.05$ per a cadascuna de les variables.

45. Calculeu una solució aproximada de cadascun dels següents sistemes lineals:

$$(a)\ \begin{cases} 3x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ 3x_1 + x_2 - 5x_3 = -1 \\ x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \end{cases} \qquad (b)\ \begin{cases} 3x_1 - x_2 + x_3 = 1 \\ 3x_1 + 6x_2 + 2x_3 = 0 \\ 3x_1 + 3x_2 + 7x_3 = 4 \end{cases}$$

$$(c)\ \begin{cases} 4x_1 + 3x_2 = 24 \\ 3x_1 + 4x_2 - x_3 = 30 \\ -x_2 + 4x_3 = -24 \end{cases} \qquad (d)\ \begin{cases} 10x_1 - x_2 = 9 \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 7 \\ -2x_2 + 10x_3 = 6 \end{cases}$$