ISEL
INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA
AREA DEPARTAMENTAL DE MATEMÁTICA
LICENCIATURA EM ENGENHARIA QUÍMICA E BIOLÓGICA

CÁLCULO NUMÉRICO

EXAME DE 1ª ÉPOCA

ANO LECTIVO 2012/2013 DATA - 25/01/2013

Apresente cuidadosamente todos os cálculos.

---

1. Uma variável U pode ser calculada a partir de valores experimentais $x = 0.25 \pm 0.003$ e $y = 1.41 \pm 1\%$, usando a relação
$$U = \frac{x^2 y}{\sqrt{x+2}}.$$
   (a) Determine um majorante para o erro relativo de x e um majorante para o erro absoluto de y. (0.5 valores)
   (b) Aplicando a fórmula fundamental do cálculo dos erros, determine um valor aproximado de U e um majorante para o erro absoluto da aproximação. Qual o número de algarismos significativos de U? (2.5 valores)

2. Na seguinte tabela são apresentados valores de duas variáveis x e t

x	1	3	5	7	10
t	2.2	5.0	5.5	6.1	6.6

   Considere que a relação entre estas duas variáveis é modelada pela equação
$$t(x) = \frac{Ax}{B+x}.$$
   Utilizando o método dos mínimos quadrados, calcule as constantes A e B que conduzam a um melhor ajustamento da função aos dados. Determine o desvio cometido em $x = 1$. (2.5 valores)

3. Considere a seguinte tabela de valores

x	0	0.5	1.0
$f(x)$	5.0	5.2	6.5

   (a) Calcule um valor aproximado de $f(0.25)$ através de um polinómio do 1^o grau na forma de Lagrange. (1.5 valores)
   (b) Suponha que $f(x)$ é um polinómio de grau não superior a 3. Obtenha o valor exacto do integral $I = \int_0^1 f(x)\, dx$, sem determinar os coeficientes do polinómio. (1.0 valor)

4. Considere o integral $I = \int\limits_0^1 f(x)\ dx$ com, $f(x) = \frac{e^{1-2x}}{2x+1}$ e $máx\left|f^{(n)}(x)\right| \leq \frac{n!}{máx\{1,2^{n-2}\}}$, $\forall n \in \mathbb{N}$ e $x \in [0,1]$.

(a) Considere 5 pontos igualmente espaçados no intervalo de integração $[0,1]$ e os respectivos valores da função arredondados simetricamente à ordem 10^{-3}. Utilize esses pontos para calcular um valor aproximado de I usando a fórmula de Newton-Cotes simples adequada à partição do intervalo efectuada. (1.5 valores)

(b) Determine majorantes para o erro de truncatura e para o erro de arredondamento da aproximação obtída na alínea anterior. (1.5 valores)

(c) Utilizando a regra dos trapézios composta, indique um número de subintervalos a escolher para a partição do intervalo $[0,1]$ de modo que o erro de truncatura seja inferior a 10^{-3}. (1.5 valores)

5. Considere a equação

$$e^x - x^2 + 6x - 8 = 0,\ \ x \in]0,2[\,.$$

(a) Apresentando argumentos analíticos e geométricos, mostre que a equação tem uma só raiz real quando $x \in]0,2[$. (0.5 valores)

(b) Separe a raiz num intervalo J com amplitude máxima de $\frac{1}{10}$ e determine uma estimativa para o valor da raiz. (0.5 valores)

(c) Estabeleça a garantia de convergência do método de Newton-Raphson, no intervalo J, definido na alínea anterior, indicando o extremo favorável para iniciar o algoritmo. (1.0 valor)

(d) Indique um valor aproximado da raiz fazendo duas iterações pelo método de Newton. (1.5 valor)

6. Mostre que a aproximação linear dos mínimos quadrados $g(x) = a_0 + a_1 x$ para uma função contínua $f(x)$, no intervalo $[-2,2]$, é tal que

$$a_0 = \frac{1}{4}\int\limits_{-2}^{2} f(x)\ dx \quad \text{e} \quad a_1 = \frac{3}{16}\int\limits_{-2}^{2} x\ f(x)\ dx$$

(2.5 valores)

NÃO FAZER 7. Considere a seguinte EDO de 1ª ordem

$$\frac{dy}{dx} = -x^3 + yx \quad \text{de} \quad x = 0 \quad \text{a} \quad x = 1.2 \quad \text{com} \quad y(0) = 1.0$$

Determine um valor aproximado de $y(0.6)$ usando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem com $h = 0.6$. (1.5 valores)

Fim

CÁLCULO NUMÉRICO

Exame de 1ª Época

Ano Lectivo 2012/2013 Data – 25/01/2013

1 Uma grandeza U pode ser calculada a partir de valores experimentais $x = 0.25 \pm 0.003$ e $y = 1.41 \pm 1\%$, usando a relação

$$U = \frac{x^2 y}{\sqrt{x+2}}.$$

(a) Determine um majorante para o erro relativo de x e um majorante para o erro absoluto de y.

Majorante para o erro relativo de x

$$\varepsilon_x = \frac{\Delta x}{\bar{x} - \Delta x} = \frac{0.003}{0.25 - 0.003} = \frac{0.003}{0.247} = 0.012145749$$

Podemos tomar

$$\varepsilon_x = 0.013$$

Majorante para o erro absoluto de y

$$\Delta y = \frac{1}{100} \times 1.41 = 0.0141$$

Assim,

$$\Delta y = 0.0141$$

(b) Aplicando a F.F.C.E, determine um valor aproximado de U e um majorante para o erro absoluto da aproximação. Indique, justificando, os algarismos significativos da aproximação $\bar{U}$.

⇨ Seja $a = x^2 y$

$$\Delta a = \left|\frac{\partial a}{\partial x}\right|_M \Delta x + \left|\frac{\partial a}{\partial y}\right|_M \Delta y$$

$$\Delta a = |2xy|_M \Delta x + |x^2|_M \Delta y$$

$$\Delta a = 2\times\left(0.253 \times 1.4241\right)\times 0.003 + \left(0.253\right)^2 \times 0.0141$$

$$\Delta a = 0.002161783 8 + 0.0009025269$$

$$\Delta a = 0.003065$$

$$\uparrow$$

$$10^{-6}$$

$$\bar{a} = \bar{x}^2\bar{y}$$

$$\bar{a} = 0.25^2 \times 1.41$$

$$\bar{a} = 0.088125$$

⇨ Seja $b = \sqrt{x+2}$

$$\Delta b = \left|\frac{db}{dx}\right|_M \Delta x$$

$$\Delta b = \left|\frac{1}{2\sqrt{x+2}}\right|_M \Delta x$$

$$\Delta b = \frac{0.003}{2\sqrt{0.247+2}} = 0.0010006673$$

$$\Delta b = 0.001001$$

$$\bar{b} = \sqrt{\bar{x}+2}$$

$$\bar{b} = \sqrt{0.25+2}$$

$$\bar{b} = 1.500000$$

⇨ Finalmente, $U = \frac{a}{b}$

$$\Delta U = \left|\frac{\partial U}{\partial a}\right|_M \Delta a + \left|\frac{\partial U}{\partial b}\right| \Delta b$$

$$\Delta U = \left|\frac{1}{b}\right|_M \Delta a + \left|-\frac{a}{b^2}\right|_M \Delta b$$

$$\Delta U = \frac{0.003065}{1.5-0.001001} + \frac{(0.088125+0.003065)}{(1.5-0.001001)^2}\times 0.001001$$

$$\Delta U = 0.0020446978 + 4.062361868\times 10^{-5} = 0.0020853214$$

$$\Delta U = 0.002086 \; ; \qquad \bar{U} = \frac{\bar{a}}{\bar{b}} = 0.05875. \quad U = \bar{U} \pm \Delta U$$

$$\Delta U \leq 0.005 = 0.5\times 10^{-2}\,(1\,alg)$$

2 Na seguinte tabela são apresentados valores de duas variáveis x e y

x	1	3	5	7	10
y	2.2	5.0	5.5	6.1	6.6

Considere que a relação entre estas duas variáveis é modelada pela função

$$y(x) = \frac{x}{+x}.$$

Utilizando o critério dos mínimos quadrados, calcule as constantes m e b que conduzam a um melhor ajustamento da função aos dados. Determine o desvio cometido em $x=1$

Consideremos, $y = \dfrac{A x}{B + x}$. Linearizando

$$\frac{1}{y} = \frac{B + x}{A \cdot x}$$

$$\underbrace{\frac{1}{y}}_{z} = \underbrace{\frac{1}{A}}_{a_0} + \underbrace{\frac{B}{A}}_{a_1} \times \underbrace{\frac{1}{x}}_{t}$$

$t = \frac{1}{x}$	$z = \frac{1}{y}$
1	0.45455
$\frac{1}{3}$	0.2
$\frac{1}{5}$	0.18182
$\frac{1}{7}$	0.16393
$\frac{1}{10}$	0.15152

O sistema normal

$$\begin{array}{c} \\ 1 \\ \\ t \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} 1 & \quad t \end{array} \\ \begin{bmatrix} \sum 1 & \sum t \\ & \\ \sum t & \sum t^2 \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} a_0 \\ \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} z \\ \begin{bmatrix} \sum z \\ \\ \sum tz \end{bmatrix} \end{array}$$

$\sum 1 = 5$ $\qquad \sum t^2 = 1.18152$ $\qquad \sum tz = 0.59615$

$\sum t = 1.7762$ $\qquad \sum z = 1.15182$

$$\begin{bmatrix} 5 & 1.7762 \\ 1.7762 & 1.18152 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.15182 \\ 0.59615 \end{bmatrix}$$

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 1.15182 & 1.7762 \\ 0.59615 & 1.18152 \end{vmatrix}}{2.75271} = \frac{0.30202}{2.75271} = 0.10972$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 5 & 1.15182 \\ 1.7762 & 0.59615 \end{vmatrix}}{2.75271} = \frac{0.93489}{2.75271} = 0.33962$$

$$a_0 = \frac{1}{A} \Rightarrow A = \frac{1}{a_0} \Leftrightarrow \boxed{A = 9.11410}$$

$$a_1 = \frac{B}{A} \Rightarrow \boxed{B = 3.09533}$$

Deste modo, $y(x) = \dfrac{9.1141 \times x}{3.09533 + x}$

$y(1) = 2.225486102$

O desvio em $x = 1$ é dado por

$y(1) - 2.2 = 0.0254861025...$

3 Considere a seguinte tabela de valores

x	0	0.5	1.0
$f(x)$	5.0	5.2	6.5

(a) Calcule um valor aproximado de $f(0.25)$ através de um polinómio do 1º grau na forma de Lagrange.

$$p_1(x) = L_0(x)\, y_0 + L_1(x)\, y_1$$

x	y
$x_0 = 0$	$5.0 = y_0$
$x_1 = 0.5$	$5.2 = y_1$

$$p_1(x) = \frac{x - 0.5}{0 - 0.5} \times 5 + \frac{x - 0}{0.5 - 0} \times 5.2$$

$$f(0.25) \approx p_1(0.25) = \frac{-0.25}{-0.5} \times 5 + \frac{0.25}{0.5} \times 5.2$$

$$= 2.5 + 2.6 = 5.1$$

(b) Suponha que $f(x)$ é um polinómio de grau não superior a 3. Obtenha o valor exacto do integral $I = \int_0^1 f(x)\,dx$, sem determinar os coeficientes do polinómio.

Se $f(x)$ é um polinómio de grau ≤ 3, a sua derivada de 4ª ordem é nula.
Assim, devemos escolher uma fórmula de integração que apresente pelo menos uma derivada de 4ª ordem o que conduz a um erro de truncatura nulo.

Como dispomos de 3 pontos tabelados igualmente espaçados, escolhemos a regra de Simpson

$$\int_0^{1.0} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + f_2\right)$$

$$= \frac{0.5}{3}\left(5 + 4 \times 5.2 + 6.5\right)$$

$$= 5.3833\ldots$$

[4] Considere o integral $I = \int_0^1 \frac{1}{(2x+1)e^{2x-1}} dx$ com

$\max |f^{(n)}(x)| \leq n!\, 2^{2-n}$, $\forall n \in \mathbb{N}$ e $x \in [0,1]$.

(a) Considere 5 pontos igualmente espaçados no intervalo de integração [0, 1] e os respectivos valores da função arredondados simetricamente à ordem 10^{-3}. Utilize esses pontos para calcular um valor aproximado de I usando a fórmula de Newton-Cotes simples adequad à partição do intervalo efectuada.

x	$f(x)$
$x_0 = 0.0$	$2.718 = f_0$
$x_1 = 0.25$	$1.099 = f_1$
$x_2 = 0.5$	$0.500 = f_2$
$x_3 = 0.75$	$0.243 = f_3$
$x_4 = 1.0$	$0.123 = f_4$

A fórmula de Newton-Cotes adequada é a fórmula de Milne ($n = 4$ subintervalos)

Deste modo, $\int_0^1 f(x)\, dx \simeq \frac{2}{45} \times 0.25 \times (7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$

$\simeq 0.76479$

(b) Determine majorantes para o erro de truncatura e para o erro de arredondamento da aproximação obtida na alínea anterior.

⇨ Cálculo do majorante para o erro de truncatura

Pretendemos majorar $\left| \frac{8h^7}{945} f^{VI}(x) \right|_{x \in [0,1]}$

Atendendo ao enunciado, temos

$\max |f^{(6)}(x)| \leq 6! \times 2^{-4} = \frac{720}{16} = 45$

Pelo que $\left|\frac{8h^7}{945} f^{VI}(x)\right| \leq 2.9064 \times 10^{-6}$

⇨ Cálculo do majorante para o erro de arredondamento

$$\frac{2 \times 0.25}{45} \times 90 \times 0.0005 = 0.5 \times 10^{-3}$$

(e) Utilizando a Regra dos trapézios composta, indique um nº de subintervalos a escolher para a partição do intervalo [0,1] de modo que o erro de truncatura seja inferior a 10^{-3}.

$$\left|\frac{(b-a)^3}{12m^2} \times f^{(2)}(x)\right|_{x \in [0,1]} < 10^{-3}$$

Atendendo a que

$$\max \left| f^{(2)}(x) \right| \leq 2! \times 2^{2-2}$$

$$\max \left| f^{(2)}(x) \right| \leq 2, \text{ temos}$$

$$\frac{1}{12m^2} \times 2 \leq 10^{-3}$$

$$\frac{1}{6m^2} \leq 10^{-3}$$

$$m^2 \geq \frac{1}{6 \times 10^{-3}}$$

$$m \geq 12.9099.$$

Tomamos $m = 13$

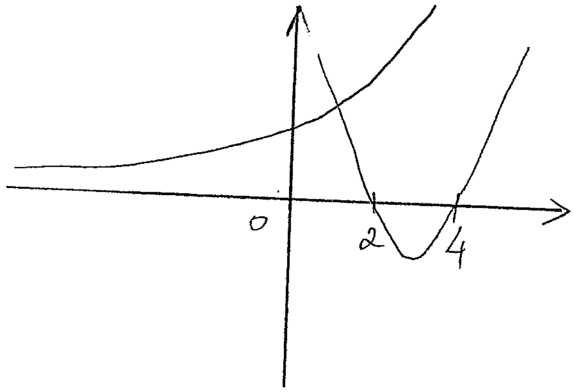
$\boxed{5}$ Considere a equação

$$-x^2+6x-8+e^x=0\ ,\quad x\in\,]0,2[\,.$$

(a) Apresentando argumentos analíticos e geométricos, mostre que a equação tem uma só raiz real quando $x \in\,]0,2[$.

Consideremos

$$\underbrace{e^x}_{\varphi(x)} = \underbrace{x^2-6x+8}_{\psi(x)}$$



$x^2-6x+8=0$

$x=2 \ \vee\ x=4$

$f(x)=e^x-x^2+6x-8$

$f'(x)=e^x-2x+6 \ \Rightarrow\ f'(x)>0,\ \forall x\in[0,2]$

f é estritamente crescente em $[0,2]$

$f(0)=1-8=-7<0$

$f(2)=e^2-4+12-8=e^2>0$

Pelo corolário do Teorema de Bolzano, $f(x)$ tem apenas um zero em $]0,2[$.

(b) Separe a raiz num intervalo I com amplitude máxima 0.1 e determine uma estimativa para o valor da raiz.

$r\in[1.0,\ 1.1]$

$f(1)<0 \qquad r\sim\dfrac{1+1.1}{2} \qquad r=\bar{r}\pm\Delta r$

$f(1.1)>0 \qquad r\sim 1.05 \qquad r=1.05\pm 0.05$

(c) Estabeleça a garantia de convergência do método Newton-Raphson, no intervalo J, definido na alínea anter. indicando o extremo favorável para iniciar o algoritmo.

As condições de convergência do método de Newton-R.

(i) f, f' e f'' são contínuas no intervalo $[1.0, 1.1]$

$$f(x) = e^x - x^2 + 6x - 8$$

$$f'(x) = e^x - 2x + 6$$

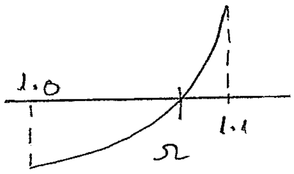
$$f''(x) = e^x - 2$$

(ii) $f'(x) \neq 0 \;, \; \forall x \in [1.0, 1.1]$

$f''(x) \neq 0 \;, \; \forall x \in [1.0, 1.1]$

(iii) f é estritamente crescente e $[1.0, 1.1]$, pois $f'(x) = e^x - 2x + 6 > 0 \;, \; \forall x \in [1.0, 1.1]$

$f''(x) = e^x - 2 > 0 \;, \; \forall x \in [1.0, 1.1]$



Tomamos para extremo favorável

$x_0 = 1.1$, pois $f(1.1)$ tem o mesmo sinal de $f''(x)$ $\forall x \in [1.0, 1.1]$

(d) Indique um valor aproximado da raiz fazendo duas iterações pelo método de Newton-Raphson.

$$x_{m+1} = x_m - \frac{e^{x_m} - x_m^2 + 6x_m - 8}{e^{x_m} - 2x_m + 6} \qquad x_0 = 1.1$$

x_m	x_{m+1}
$x_0 = 1.1$	$1.042069899 = x_1$
$x_1 =$	$1.04183 4525 = x_2$

$r \approx 1.0418345 25$

6 Mostre que a aproximação linear dos mínimos quadrados $g(x) = a_0 + a_1 x$ para uma função contínua $f(x)$, no intervalo $[-2,2]$, é tal que

$$a_0 = \frac{1}{4}\int_{-2}^{2} f(x)\,dx \qquad e \qquad a_1 = \frac{3}{16}\int_{-2}^{2} x\, f(x)\,dx$$

O sistema normal tem a forma

$$\begin{array}{c|c} & \begin{array}{cc} 1 & x \end{array} \\ \begin{array}{c} 1 \\ x \end{array} & \begin{bmatrix} \int_{-2}^{2} 1\,dx & \int_{-2}^{2} x\,dx \\ \int_{-2}^{2} x\,dx & \int_{-2}^{2} x^2\,dx \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{-2}^{2} f(x)\,dx \\ \int_{-2}^{2} x\, f(x)\,dx \end{bmatrix}$$

$$\int_{-2}^{2} 1\,dx = \left[x\right]_{-2}^{2} = 2-(-2) = 4$$

$$\int_{-2}^{2} x\,dx = \left[\frac{x^2}{2}\right]_{-2}^{2} = \frac{4}{2} - \frac{4}{2} = 0$$

$$\int_{-2}^{2} x^2\,dx = \left[\frac{x^3}{3}\right]_{-2}^{2} = \frac{8}{3} - \frac{(-8)}{3} = \frac{16}{3}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & \frac{16}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_{-2}^{2} f(x)\,dx \\ \int_{-2}^{2} x\, f(x)\,dx \end{bmatrix}$$

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} \int_{-2}^{2} f(x)\,dx & 0 \\ \int_{-2}^{2} x f(x)\,dx & 16/3 \end{vmatrix}}{\frac{64}{3}} = \frac{3}{64} \times \frac{16}{3} \int_{-2}^{2} f(x)\,dx = \frac{1}{4}\int_{-2}^{2} f(x)\,dx$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 4 & \int_{-2}^{2} f(x)\,dx \\ 0 & \int_{-2}^{2} x f(x)\,dx \end{vmatrix}}{\frac{64}{3}} = 4 \times \frac{3}{64} \int_{-2}^{2} x\, f(x)\,dx = \frac{3}{16}\int_{-2}^{2} x\, f(x)\,dx$$

De facto $a_0 = \frac{1}{4}\int_{-2}^{2} f(x)\,dx$ e $a_1 = \frac{3}{16}\int_{-2}^{2} x\, f(x)\,dx$ c.q.d

$\boxed{7}$ Considere a seguinte EDO de 1ª ordem

$$\frac{dy}{dx} = yx - x^3 \text{ de } x=0 \text{ a } x=1.2 \text{ com } y(0)=1.0.$$

Determine um valor aproximado de $y(0.6)$ usando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem com $h=0.6$.

$x_0 = 0 \;;\; y = 1.0$

$f(x,y) = yx - x^3$

$x_1 = x_0 + h$

$x_1 = 0 + 0.6$

$x_1 = 0.6$

$$k_1 = h\,f(x_0, y_0)$$
$$k_1 = 0.6 \times f(0,1)$$
$$k_1 = 0.6 \times 0 = \underline{0}$$

$$k_2 = h\,f\left(x_0 + \frac{h}{2},\, y_0 + \frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_2 = 0.6 \times f(0.3, 1)$$
$$k_2 = 0.6 \times (1 \times 0.3 - 0.3^3)$$
$$k_2 = \underline{0.1638}$$

$$k_3 = h\,f\left(x_0 + \frac{h}{2},\, y_0 + \frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_3 = 0.6 \times f\left(0.3,\, 1 + \frac{0.1638}{2}\right)$$
$$k_3 = 0.6 \times f(0.3, 1.0819)$$
$$k_3 = 0.6 \times (1.0819 \times 0.3 - 0.3^3)$$
$$k_3 = \underline{0.178542}$$

$$k_4 = h\,f(x_0 + h,\, y_0 + k_3)$$
$$k_4 = 0.6 \times f(0.6, 1.178542)$$
$$k_4 = 0.6 \times (1.178542 \times 0.6 - 0.6^3)$$
$$k_4 = \underline{0.29467512}$$

Portanto, $y_1 = y_0 + \dfrac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}$

$y_1 = 1.16322652$ ::

Escrevemos $y(0.6) \approx y_1$