Exercícios de Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT

Conceitos básicos do cálculo científico

1. Represente x, em base decimal, num sistema de ponto flutuante com 4 dígitos e arredondamento simétrico, nos seguintes casos

(a)	$x = 1/6$	(b)	$x = 1/3$	(c)	$x = -83784$
(d)	$x = -83785$	(e)	$x = 83798$	(f)	$x = 0.0013296$

2. Considere os números reais $x = \pi$ e $y = 2199/700$ representados em base decimal.

   (a) Considere um sistema de ponto com 4 algarismos na mantissa e arredondamento simétrico. Represente os números x e y nesse sistema e calcule $\text{fl}(\text{fl}(x) - \text{fl}(y))$.

   (b) Calcule os erros absolutos e relativos de $\text{fl}(x)$, $\text{fl}(y)$ e $\text{fl}(\text{fl}(x) - \text{fl}(y))$, bem como as percentagens de erro. Comente.

   (c) Com o objectivo de ilustrar a influência da precisão utilizada nos resultados, calcule agora $\text{fl}(\text{fl}(x) - \text{fl}(y))$ num sistema de ponto flutuante com 6 algarismos na mantissa. Calcule os respetivos erros relativos e verifique que houve melhoria nos resultados em relação a (a) e (b).

3. Considere um sistema de representação numérica de ponto flutuante $\mathbb{F}$, de base 10, com 5 dígitos na mantissa e arredondamento simétrico.

   (a) Indique o valor da unidade de arredondamento de $\mathbb{F}$.

   (b) Qual é o menor número positivo x, tal que $1 + x$ tem uma representação em $\mathbb{F}$ distinta de 1?

4. Seja $\mathbb{F}$ um sistema de ponto flutuante e sejam $x, y \in \mathbb{F}$ tais que $0 < y/2 \leq x \leq 2y$. Mostre que $\text{fl}(x - y) = x - y$ (supondo que não ocorre underflow no cálculo de $x - y$).

5. Dada a função $f(x) := \ln(x)$, calcule:

   (a) o erro relativo que se comete no cálculo de $f(1.01)$ quando, em vez de $x = 1.01$, é utilizada a aproximação $\tilde{x} = 1.009$,

   (b) uma estimativa para o erro relativo anterior, recorrendo à fórmula de propagação de erros em funções.

6. Considere uma matriz $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$.

   (a) Determine a expressão do erro relativo correspondente ao cálculo de $\det(A)$, em termos dos erros relativos das entradas a_{ij} $(i, j = 1, 2)$ da matriz e dos erros de arredondamento das operações elementares que compõem o algoritmo.

   (b) Para a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 5.7432 & 7.3315 \\ 6.5187 & 8.3215 \end{bmatrix},$$

   determine os erros absoluto e relativo cometidos no cálculo de $\det(A)$ num sistema de ponto flutuante com mantissa de comprimento 4 e arredondamento simétrico. Repita os cálculos com mantissa de comprimento 6 e compare os resultados.

7. Suponha que pretende calcular a soma de três números reais positivos $S = a + b + c$, usando os seguintes algoritmos:

$$(1)\; S_1 = (a + b) + c; \qquad (2)\; S_2 = a + (b + c).$$

   (a) Para $a = 2745.568$, $b = 34.68734$, $c = 0.0003$, e efetuando os cálculos num sistema $\mathbb{F}(10, 7)$ com arredondamento simétrico, calcule S usando os dois algoritmos indicados. Comente os resultados.

   (b) Determine a expressão do erro relativo do algoritmo (1) em termos dos erros relativos das parcelas e dos erros de arredondamento em cada passo. Utilize este resultado para concluir qual a ordem por que deve proceder à soma por forma a minimizar os efeitos dos erros de arredondamento. Comente os resultados das alíneas anteriores.

8. Considere a função real de variável real definida por

$$f(x) = \frac{1 - \cos x}{x^2} \tag{1}$$

   (a) Recorrendo ao Teorema de Taylor, determine um valor aproximado de $f(10^{-6})$ com erro absoluto inferior a 0.5×10^{-6}.

   (b) Considere um sistema de ponto flutuante com 12 dígitos na mantissa e arredondamento simétrico.

      i. Calcule $f(10^{-6})$ utilizando o algoritmo associado à expressão (1).

      ii. Usando a identidade $1 - \cos x = 2 \sin^2(x/2)$, calcule $f(10^{-6})$ utilizando um novo algoritmo.

   (c) Compare os valores obtidos nas alíneas anteriores e comente.

9. Ao calcular $f(x) = x - \sqrt{x^2 - 1}$ numa máquina usando o sistema de ponto flutuante $\mathbb{F}(10, 6, -30, 30)$ com arredondamento simétrico, verificou-se que, para valores de x muito grandes, o erro relativo era elevado.

(a) Verifique que o erro é 100% para $x = 2000$. Qual o valor do erro relativo para valores de x ainda maiores?

(b) Qual a razão desse erro relativo grande: o problema é mal condicionado ou há instabilidade numérica? Justifique e apresente uma forma de calcular $f(x)$ que não apresente erros relativos tão grandes.

10. Na equação $ax^2+bx+c=0$, suponha-se que os coeficientes são todos positivos e exatos e que $b^2 \gg 4ac$. Como é sabido, as duas raízes da equação são dadas por

$$z_1 = \frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a}, \qquad z_2 = \frac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

Faça $a = 1$, $b = 62.10$ e $c = 1$. A equação correspondente tem raízes $z_1 \approx -0.01610723$ e $z_2 \approx -62.08390$. Usando aritmética de ponto flutuante com 4 dígitos e arredondamento simétrico, obtenha aproximações para z_1 e z_2. Dê uma explicação para o valor que obteve para z_1 e proponha uma maneira alternativa de calcular essa raiz.

11. Seja $p(x) := x^4 - 4x^2 + \alpha$ ($\alpha \in \mathbb{R}$). As quatro raízes (reais ou complexas) da equação $p(x) = 0$ são dadas por

$$z_{1,2} = \pm\sqrt{2+\sqrt{4-\alpha}}, \qquad z_{3,4} = \pm\sqrt{2-\sqrt{4-\alpha}}.$$

(a) Suponha $\alpha < 4$ e mostre que

$$|\delta_{z_i(\tilde{\alpha})}| \approx \frac{|\alpha|}{|16-4\alpha \pm 8\sqrt{4-\alpha}|}|\delta_{\tilde{\alpha}}|, \quad i = 1,2,3,4.$$

(b) Analise o condicionamento do problema do cálculo das raízes z_i, $i = 1,2,3,4$, quando $\alpha \approx 0$.

Resolução numérica de equações não lineares

1. Considere a equação $\sin(x) - e^{-x} = 0$.

   (a) Verifique que a equação tem um número infinito de soluções em $\mathbb{R}$.

   (b) Prove que, no intervalo $[0.5, 0.7]$, a equação tem uma e uma só raiz, a qual será designada por z.

   (c) Partindo de $I_0 = [0.5, 0.7]$, calcule a terceira iterada do método da bisseção para aproximar z e um majorante do erro dessa aproximação.

   (d) Determine o número m de iterações necessárias para garantir $|z - x_m| < 10^{-6}$.

2. Considere a equação $\ln(x) = (x-2)^2$.

   (a) Mostre que a equação tem 2 e só 2 raízes reais distintas e indique, para cada uma delas, um intervalo que a contenha, sem conter a outra.

   (b) Se pretendesse utilizar o método de Newton para calcular a raiz mais pequena, diga, justificando, qual (ou quais) dos seguintes valores poderia utilizar como aproximação inicial: $x_0 = 2.1$, $x_0 = 2.5$ ou $x_0 = 1.4$?

   (c) Mostre que, para a iterada inicial escolhida na alínea anterior, estão garantidas as condições de convergência do método de Newton e efetue três iterações desse método.

3. Pretende-se aproximar a raiz da equação $e^x + \sin(x) = 0$ mais próxima de zero.

   (a) Use o método da bisseção para calcular essa aproximação com erro inferior a 10^{-2}.

   (b) Quantas iteradas do método da bisseção deverá ainda calcular para garantir um erro inferior a 10^{-7}?

   (c) Se aplicar o método de Newton com $x_0 = 0$, quantas iteradas deverá calcular para garantir um erro inferior a 10^{-7}?

4. Pretende-se aproximar a raiz da equação $x^3 - \cos(x) = 1$ usando o método de Newton.

   (a) Mostre que a raiz pertence ao intervalo $[1, 2]$.

   (b) Escolha o valor $x_0 = 1$ para iterada inicial e efetue duas iterações. Obtenha um majorante do erro do resultado obtido.

   (c) Quantas iteradas teria ainda de calcular para obter uma aproximação da raiz com erro inferior a 10^{-9}?

5. Pretende-se determinar, utilizando o método de Newton, a maior das duas raízes positivas da equação $x^3 - 14x + 1 + e^x = 0$.

   (a) Mostre que, se a iterada inicial for escolhido no intervalo [2.5,3], estão asseguradas as condições de convergência do método para a raiz referida.

(b) Efetue três iterações do método de Newton com $x_0 = 2$ e determine um majorante do erro de x_3. Justifique a convergência do método com esta iterada inicial.

(c) Sem efetuar mais iterações, calcule um majorante para o erro da sexta iterada.

6. Considere a função $f(x) := \cos(x) - x$.

   (a) Determine um intervalo I tal que, qualquer que seja a iterada inicial em I, o método de Newton converge para z, o único zero de f em $\mathbb{R}$.

   (b) Calcule a primeira iterada x_1 do método de Newton, começando com $x_0 = 1$, e justifique que $|z - x_1| \leq 0.025$.

   (c) Sem efetuar mais iterações, determine o número de algarismos significativos de x_3.

   (d) Com base nos valores x_0 e x_1 obtido em (b), calcule x_2 pelo método da secante. Este método também irá convergir?

7. Para obter um valor aproximado de $\sqrt[3]{2}$, pretende-se utilizar o método da secante.

   (a) Escreva a fórmula iteradora do método.

   (b) Tomando como aproximações iniciais $x_0 = 1$ e $x_1 = 2$, verifique que as condições de convergência do método são satisfeitas e efetue iterações até obter uma aproximação de $\sqrt[3]{2}$ com três algarismos significativos.

8. Considere a equação $e^x = 2 - x^2$.

   (a) Prove que a equação tem uma única raiz no intervalo $[0.5, 1.0]$. Por bisseção determine um sub-intervalo I com comprimento inferior a 0.2, que contenha a raiz.

   (b) Escolha duas iteradas iniciais x_{-1} e x_0 de modo a que se possa aplicar o método da secante para aproximar a raiz em I e calcule a iterada seguinte x_1.

   (c) Calcule um majorante do erro absoluto da iterada x_2 que tenha em conta os valores encontrados na alínea anterior.

9. Considere a equação $x\tan(x) - 1 = 0$.

   (a) Mostre que é possível escolher iteradas iniciais de modo a garantir a convergência do método da secante para a menor raiz positiva da equação.

   (b) Aplicando o método da secante com iteradas iniciais 0.8 e 0.9, obtenha as três primeiras iteradas e calcule um majorante do erro do resultado obtido.

   (c) Repita a alínea anterior com iteradas iniciais 0.9 e 1.0.

10. Sabendo que $h, h' \in C^1(I)$ são crescentes e que h tem um zero no intervalo $I = [-1, 1]$, pretende-se determinar a raiz da equação

$$F(x) = x + h(x) = 0$$

usando o seguinte método:

$$x_0 = a, \quad x_1 = b, \quad x_{n+1} = x_n - \frac{(x_n - x_{n-1})F(x_n)}{F(x_n) - F(x_{n-1})}, \; n = 1, 2, ...$$

Verifique que F tem um único zero em I e que existem valores a e b para os quais o método converge. Que pode dizer relativamente à ordem de convergência?

11. Considere a função

$$g(x) := \frac{1 + e^x + x^3}{14}$$

e a sucessão numérica definida por $x_{m+1} = g(x_m), m = 0, 1, ...$

(a) Mostre que, se $x_0 \in [0, 1]$, esta sucessão tem limite $z \in [0, 1]$, independente de x_0.

(b) Partindo de $x_0 = 0$, calcule x_5 e determine um majorante de $|z - x_5|$.

(c) Verifique que a função g tem um (único) ponto fixo no intervalo $[2, 3]$. Poder usar, para a sua determinação, o método do ponto fixo baseado na função iteradora g?

12. Considere a equação $e^x - 4x^2 = 0$, a qual tem três raízes reais: $z_1 \in [-1, 0]$, $z_2 \in [0, 1]$ e $z_3 \in [4, 5]$.

(a) Para aproximar as raízes positivas da equação, considere o método do ponto fixo com função iteradora

$$g(x) := \frac{1}{2}\, e^{x/2}$$

i. Mostre que z_2 e z_3 são pontos fixos de g.

ii. Mostre que o método iterativo associado a g converge para z_2, qualquer que seja a aproximação inicial $x_0 \in [0, 1]$.

(b) Mostre que não é possível usar o método do ponto fixo anterior para obter uma boa aproximação da raiz z_3.

(c) Considere o método de Newton para aproximar a raiz z_3.

i. Prove que está assegurada a convergência do método de Newton com qualquer iterada inicial $x_0 \in [4.1, 4.4]$.

ii. Partindo de $x_0 = 4.1$, calcule x_1. Sem efetuar mais iterações, determine um majorante para $|z_3 - x_2|$.

(d) Determine uma função iteradora tal que o método do ponto fixo associado convirja para a raiz negativa da equação.

13. Seja g uma função contínua tal que $g(a) = b$ e $g(b) = a$.

   (a) Mostre que existe pelo menos um ponto fixo de g em $[a, b]$.

   (b) Mostre que se $g \in C^1([a, b])$ então a derivada de g toma o valor -1 em algum ponto desse intervalo. Poderá aplicar o teorema do ponto fixo à função g no intervalo $[a, b]$?

14. Considere um intervalo $I = [a, b]$, o qual contém um único ponto fixo z de uma função $g \in C^1(I)$. Seja $g'(z) = 1$.

   (a) Mostre que, se $0 < g'(x) < 1, \forall x \in I \setminus \{z\}$, então o método do ponto fixo converge qualquer que seja $x_0 \in I$.

   (b) Aplique este resultado para mostrar que $x_{m+1} = \sin(x_m)$ converge para 0, qualquer que seja $x_0 \in \mathbb{R}$.

15. Seja $\varphi \in C([0, 1])$. Considere a equação $2x\varphi(x^2) = \varphi(x)$.

   (a) Mostre que a equação admite pelo menos uma raiz no intervalo $[0, 1]$. *Sugestão*: aplique o Teorema de Rolle à função $F(x) := \int_x^{x^2} \varphi(s)\, ds$.

   Sejam $\varphi(x) := e^x$ e $g(x) := \frac{\varphi(x)}{2\varphi(x^2)}$.

   (b) Mostre que o método do ponto fixo com a função iteradora g e $x_0 \in [0, 1]$ converge para a única raiz da equação dada.

   (c) Efetue duas iterações com $x_0 = 1/2$ e estime $|z - x_2|$.

   (d) Justifique a convergência linear do método.

16. Considere a equação $3x^2 - e^x = 0$.

   (a) Localize graficamente as raízes da equação e indique intervalos de comprimento unitário que as contenham.

   (b) Considere as seguintes sucessões

$$(S_1) \quad x_{n+1} = \sqrt{\frac{e^{x_n}}{3}} \qquad\qquad (S_2) \quad x_{n+1} = \ln(3x_n^2).$$

   Mostre que é possível obter aproximações das raízes positivas da equação usando, para cada raiz, uma destas sucessões. Indique, em cada caso, um intervalo onde poder escolher a iterada inicial x_0.

   (c) Efetue duas iterações usando a sucessão (S_1) com $x_0 = 1$. Calcule ainda um majorante para o erro da aproximação obtida.

   (d) É possível usar a sucessão (S_1) para aproximar a maior raiz positiva da equação? E pode usar a sucessão (S_2) para aproximar a menor raiz positiva da equação?

17. Seja $g(x) := \frac{1}{3}\ln(x^2+1)$.

   (a) Prove que a sucessão definida por $x_{n+1} = g(x_n)$ $(n = 0, 1, \dots)$, converge para um número real $z \in [-1, 1]$. Determine z, bem como a ordem de convergência do método iterativo.

   (b) Efetue algumas iterações, começando com $x_0 = 1$ e calcule os quocientes $\frac{|e_i|}{(e_{i-1})^2}$, onde $e_i := z - x_i$. Os resultados parecem estar de acordo com o que provou na alínea anterior?

18. Considere a equação $x^3 - x = \frac{1}{4}\cos(x)$.

   (a) Mostre que a equação tem duas raízes reais z_1 e z_2 situadas, respetivamente, nos intervalos $[-0.5, -0.2]$ e $[1.0, 1.5]$, e que existe apenas uma raiz em cada um destes intervalos.

   (b) Considere as funções iteradoras

   $$g_1(x) := x^3 - \frac{1}{4}\cos(x) \qquad g_2(x) := (x + \frac{1}{4}\cos(x))^{1/3}.$$

   Se partirmos da aproximação inicial $x_0 = 0.5$ e aplicarmos cada uma das funções iteradoras, obtemos sucessões que convergem para cada uma das raízes consideradas na alínea anterior. Diga qual das funções corresponde a cada uma das raízes e justifique, com base no teorema do ponto fixo.

   (c) Indique uma nova função iteradora que permita obter aproximações para as raízes consideradas, de tal modo que a convergência das respetivas sucessões seja quadrática.

19. Considere a iteração do ponto fixo $x_{m+1} = g(x_m)$, $m = 0, 1, ...$ com

   $$g(x) := 1 + \arctan(x).$$

   (a) Indique um intervalo onde as condições do teorema do ponto fixo sejam válidas para a função g.

   (b) Aproxime o ponto fixo de g com erro inferior a 10^{-6}. Qual a ordem de convergência do método?

20. Considere o seguinte método iterativo

   $$x_0 \in \mathbb{R}, \quad x_{m+1} = \frac{\alpha x_m + 1 + 2e^{-x_m}}{2+\alpha}, \quad m = 0, 1, \dots$$

   com $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{-2\}$.

   (a) Mostre que, para todo o $\alpha \in [0, 1]$, o método converge para a solução da equação $e^x - 2xe^x + 2 = 0$ qualquer que seja $x_0 \geq 0$. *Sugestão:* Utilize o teorema do ponto fixo no intervalo $[0, \max\{2, x_0\}]$.

(b) Determine o valor de α de tal modo que a convergência seja a mais rápida possível.

(c) Aplique o método para aproximar a solução da equação $f(x) = 0$ com um erro inferior a 10^{-5}.

21. Considere a função real $f(x) := 2x - \cos(x)$.

(a) Mostre que a equação $f(x) = 0$ possui uma só raiz z no intervalo $]0, \pi/4[$ e calcule-a com erro inferior a 0.25. Justifique.

(b) Mostre que o processo iterativo $x_{n+1} = \cos(x_n)/2$, $n = 0, 1, \ldots$ converge para z, independentemente da escolha que fizer de $x_0 \in [0, \pi/4]$. Dê uma estimativa do coeficiente assintótico de convergência. A convergência é monótona? Justifique.

(c) Faça $x_0 = \pi/8$. Calcule um majorante para o erro de x_{16} como aproximação de z.

22. Considere os seguintes métodos iterativos para aproximar $\sqrt{10}$:

(a) *O método de Newton aplicado à função* $f_1(x) = x^2 - 10$.

Mostre que se escolher $x_0 = 4$ então o método converge e a convergência é de ordem 2. Calcule 3 iteradas e indique um majorante para o erro de x_3. O que acontece se escolher $x_0 > 4$?

(b) *O método de Newton aplicado à função* $f_2(x) = x^{-1/2}(x^2 - 10)$.

Admitindo que o método converge, mostre que a ordem de convergência é 3.

(c) *O método de ponto fixo* $x_{m+1} = \dfrac{30x_m + x_m^3}{10 + 3x_m^2}$.

Admitindo que o método converge, mostre que a ordem de convergência é 3.

23. Considere a equação $e^x + x^2 = 2$.

(a) Quantas raízes tem a equação dada? Para cada raiz, indique um intervalo de comprimento não superior a 1 que a contenha.

Considere os métodos iterativos seguintes

$$(1) \quad x_{n+1} = \frac{(x_n - 1)e^{x_n} + x_n^2 + 2}{e^{x_n} + 2x_n} \qquad\qquad (2) \quad x_{n+1} = x_n + 1 - \frac{e^{x_n} + x_n^2}{2}.$$

(b) Mostre que, no caso de $x_0 \in [0.5, 0.6]$, o método correspondente à fórmula (1) gera uma sucessão que converge para z, a raiz positiva da equação.

(c) Utilizando o método (2) com $x_0 = 0$, calcule x_3 e obtenha uma estimativa do erro absoluto da aproximação obtida para z.

(d) Com base na noção de ordem de convergência, diga qual das sucessões (1) e (2) converge mais rapidamente para z.

(e) É possível usar o método (2) para aproximar a raiz negativa da equação? Justifique sem efetuar iterações.

Resolução numérica de sistemas de equações

1. Calcule $cond_\infty(A)$ nos seguintes casos:

$$(a)\, A = \begin{bmatrix} 0.001 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad (b)\, A = \begin{bmatrix} 0.001 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad (c)\, A = \begin{bmatrix} 0.001 & 1 \\ 0 & 999 \end{bmatrix}$$

2. Seja $A = \begin{bmatrix} 1 & a \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$ com $a \in \mathbb{R}$.

   (a) Mostre que $cond_1(A) = cond_\infty(A)$.

   (b) Seja $|a| > 1$. Suponhamos que, ao resolver um sistema $Ax = b$ ($b \in \mathbb{R}^2$), o segundo membro está afetado de um erro tal que $\|\delta_{\tilde{b}}\|_\infty \leq \epsilon$. Determine um majorante de $\|\delta_{\tilde{x}}\|_\infty$.

   (c) Para que valores de a o sistema da alínea anterior é mal condicionado?

3. Considere a matriz $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & a \\ 0 & 1 & 0 \\ -a & 0 & 1 \end{bmatrix}$.

   (a) Calcule $cond_\infty(A)$.

   (b) Para que valores de $a \in \mathbb{R}$ há mau condicionamento da matriz?

4. Considere o sistema $Ax = b$ onde

$$A = \begin{bmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}$$

   e o sistema perturbado $A_\varepsilon x_\varepsilon = b_\varepsilon$ onde

$$A_\varepsilon = \begin{bmatrix} 6+\varepsilon & -2 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}, \qquad b_\varepsilon = \begin{bmatrix} b_1 + \varepsilon \\ b_2 \end{bmatrix},$$

   e ε é um parâmetro real tal que $|\varepsilon| \leq 1$. Sabendo que $\|b\|_1 = 5$, determine um majorante de $\|x_\varepsilon - x\|_1$.

5. $^{(*)}$ [1] Seja $A = \begin{bmatrix} 5 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & -3/2 & 0 \\ 1 & 1 & 5 & 0 \\ 1/2 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$.

   (a) Obtenha a fatorização de Gauss da matriz A.

[1] Os exercícios assinalados com $^{(*)}$ são facultativos.

(b) Usando a factorização anterior, resolva o sistema $Ax = b$, em que

$$b = [13500 \;\; 11250 \;\; 12000 \;\; 4250]^T.$$

(Neste exercício, pode usar o MATLAB, em particular, o comando `lu`.)

6. (*) Considere o sistema $Ax = b$ com

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

(a) Mostre que A se pode decompor na forma $A = LL^T$, com L triangular inferior e determine a matriz L.

(b) Usando a decomposição anterior, resolva o sistema $Ax = b$.

(Pode usar o MATLAB, em particular, o comando `chol`.)

7. (*) Mostre que se a matriz A for tridiagonal, isto é, se se verificar $a_{ij} = 0$, se $|i-j| > 1$, então as matrizes L e U da sua fatorização de Gauss satisfazem as condições

$$\begin{array}{lll} l_{ij} = 0, & \text{se} \;\; i < j \;\; \text{ou} \;\; i > j+1, \\ u_{ij} = 0, & \text{se} \;\; i > j \;\; \text{ou} \;\; i < j+1. \end{array}$$

8. (*) Considere a matriz quadrada de ordem n com a forma geral

$$A_n = \begin{bmatrix} 9 & 3 & 0 & \dots & 0 \\ 3 & 10 & 3 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 3 & 10 & 3 \\ 0 & \dots & 0 & 3 & 10 \end{bmatrix}.$$

(a) Obtenha a forma geral da fatorização de Gauss desta matriz.

(b) Com base na factorização obtida, calcule $\det A_n$.

(c) Resolva o sistema $A_n\, x = b_n$, onde $b_n = [0\,0\,...\,1]^T$.

(d) Prove que esta matriz é definida positiva e determine a sua fatorização de Cholesky.

(Pode usar o MATLAB, Mathematica, etc...)

9. Considere um sistema de duas equações na forma geral

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$

onde $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0$.

(a) Mostre que os métodos iterativos de Jacobi e Gauss-Seidel convergem para qualquer aproximação inicial $x^{(0)}$ se e só se $|m| < 1$, onde $m = \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}a_{22}}$.

(b) No caso do método de Jacobi, mostre que se a matriz do sistema tiver a diagonal estritamente dominante por linhas, se verifica

$$\|x^{(k+1)} - x\|_\infty \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_\infty$$

onde $\alpha = \max\left\{\frac{|a_{12}|}{|a_{11}|}, \frac{|a_{21}|}{|a_{22}|}\right\}$.

(c) Considere o sistema

$$\begin{cases} 3x + y = 8 \\ x + 2y = 4 \end{cases}$$

Efetue três iterações do método de Jacobi, partindo da aproximação inicial $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (2, 1)$. Com base na alínea anterior, determine um majorante para o erro do resultado obtido.

(d) Nas condições da alínea anterior, quantas iterações do método de Jacobi são necessárias para garantir que seja satisfeita a condição $\|(x^{(k)}, y^{(k)}) - (x, y)\|_\infty < 0.001$?

10. Considere o sistema $Ax = b$

$$\begin{bmatrix} 1 & 10 & 8 \\ 2 & -7 & -10 \\ 10 & 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 28 \\ -23 \\ 34 \end{bmatrix}$$

(a) Mostre que é possível escrever o sistema de forma equivalente de modo que os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel sejam convergentes.

(b) Calcule $x^{(2)}$ considerando o método de Gauss-Seidel com $x^{(0)} = [1\,1\,1]^T$.

(c) Determine um majorante para $\|x - x^{(2)}\|_\infty$.

11. Considere o sistema linear $\begin{cases} x + z = 2 \\ -x + y = 0 \\ x + 2y - 3z = 0 \end{cases}$

(a) Prove que o método de Jacobi converge para a solução exata deste problema, qualquer que seja a aproximação inicial.

(b) Mostre que, no caso de se usar o método de Gauss-Seidel, não está garantida a convergência para qualquer aproximação inicial. Indique uma aproximação inicial, diferente da solução exata, tal que o método seja convergente, e uma aproximação inicial partindo da qual o método divirja. (Pode usar o MATLAB, Mathematica, etc ... ou procurar as fórmulas para a resolução de equações do terceiro grau.)

12. Considere o sistema linear $Ax = b$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 7 & 2 & 3 \\ 5 & 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 5 \\ 0 & 1 & 8 & 3 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Verifique que este sistema pode ser resolvido por um método iterativo da forma $x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + d$. Indique a matriz C e o vetor d. Sendo $x^{(0)}$ é o vetor nulo, estime o erro $\|x - x^{(k)}\|_\infty$.

13. Considere a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1+\cos(\theta) \\ 0 & 4 & 0 \\ -3 & 0 & 10 \end{bmatrix} \qquad (\theta \in \mathbb{R})$$

   (a) Mostre que os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel convergem para a solução do sistema $Ax = b$ (com $b \in \mathbb{R}^3$ qualquer).
   Seja $b = (1, 1, 1)$.

   (b) Estabeleça uma estimativa de erro para as iteradas do método de Jacobi com $x^{(0)} = (10^5, 10^6, 0)$.

   (c) Ao fim de quantas iterações n do método de Jacobi é possível garantir um erro $\|x - x^{(n)}\|_\infty \leq 10^{-6}$?

14. Considere o sistema de equações lineares

$$\begin{cases} x_1 + 10x_2 + x_3 = 12 \\ x_1 + x_2 + 10x_3 = 12 \\ 10x_1 + x_2 + x_3 = 12 \end{cases}$$

   (a) Reordene as equações de modo a que matriz do novo sistema tenha a diagonal estritamente dominante.

   (b) Aplique o método de Jacobi ao novo sistema e efectue 4 iterações. Calcule um majorante para o erro da quarta iterada. Considere $x^{(0)} = [-4 \ -4 \ -4]^T$.

   (c) Nas condições da alínea anterior, quantas iterações do método de Jacobi são necessárias para garantir que seja satisfeita a condição $||x^{(k)} - x||_\infty < 0.001$?

   (d) Aplique o método de Gauss-Seidel até que $||x^{(k)} - x^{(k-1)}||_\infty < 10^{-2}$. Conclua sobre o erro da iterada $x^{(k)}$.

15. Pretende-se resolver um sistema $A\,x = b$, onde A é uma matriz triangular superior, partindo de uma aproximação inicial arbitrária. Se aplicarmos os métodos de Jacobi ou de Gauss-Seidel, podemos garantir que a solução exata é obtida com um número finito de iterações. Justifique e diga quantas.

16. Considere a matriz da forma $A = \begin{bmatrix} \alpha & -\beta & \alpha \\ \beta & -\beta & -\alpha \\ \beta & -\beta & \alpha \end{bmatrix}$, onde $0 < \beta < \alpha$.

   (a) Mostre que, dada uma iterada inicial arbitrária, o método de Jacobi converge e o método de Gauss-Seidel pode não convergir para a solução de um sistema $Ax = b$.

   (b) Considere $\beta = 1,\ \alpha = 2$ e $b = (0, 0, 0)$.

      i. Mostre que, qualquer que seja $x^{(0)}$, ao fim de três iterações obtemos a solução exata pelo método de Jacobi.

      ii. Mostre que, se começar com $x^{(0)} = (0, 2, 1)$, aplicando o método de Gauss-Seidel, obtém $x^{(1)} = (0, -2, -1),\ x^{(2)} = (0, 2, 1),\ x^{(3)} = (0, -2, -1), \ldots$. Verifique que $(0, 2, 1)$ é um vetor próprio associado ao valor próprio -1 da matriz de iteração do método de Gauss-Seidel e justifique o resultado.

17. Considere o sistema linear $Ax = b$ com

$$A = \begin{bmatrix} 2 & \omega & 0 \\ 1 & 2 & 2\omega \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad (\omega \in \mathbb{R}).$$

   (a) Mostre que tanto o método iterativo de Jacobi como o de Gauss-Seidel convergem para a solução deste sistema, qualquer que seja a aproximação inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^3$, se e só se $|\omega| < \frac{4}{3}$.

   (b) Prove que o método de Gauss-Seidel converge mais rapidamente, desde que $\omega \neq 0$. Como é que os dois métodos convergem quando $\omega = 0$?

   (c) Seja $\omega = \frac{1}{2}$ e $x^{(0)} = [0\,0\,0]^T$. Calcule as três primeiras iteradas pelo método de Gauss-Seidel. Obtenha uma estimativa para o erro $\|x - x^{(3)}\|_\infty$.

18. O sistema de equações lineares $\begin{bmatrix} 1 & -a \\ -a & 1 \end{bmatrix} x = b$ pode, sob certas condições, ser resolvido pelo método iterativo

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -wa & 1 \end{bmatrix} x^{(k+1)} = \begin{bmatrix} 1-w & wa \\ 0 & 1-w \end{bmatrix} x^{(k)} + wb$$

   (a) Para que valores de a o método converge quando $w = 1$?

   (b) Se $a = -1/2$ e $w = 1/2$ o método converge?

19. Pretende-se resolver pelo método de Newton o sistema de equações não-lineares

$$\begin{cases} e^x - 3 & = & 0 \\ 3y + 4z & = & 3 \\ 2x^2 + 2x + 2z & = & 1 \end{cases}$$

(a) Tomando como aproximação inicial $(x_0, y_0, z_0) = (0, 1, 2)$, ao efetuar uma iteração pelo método de Newton, somos conduzidos a resolver um certo sistema de equações lineares. Qual?

(b) Resolva o sistema de equações lineares obtido na alínea anterior pelo método de Gauss-Seidel, considerando como aproximação inicial o vetor nulo e efetuando duas iterações. Calcule (x_1, y_1, z_1).

20. Considere o sistema de equações

$$\begin{cases} 4x_1 - x_2 \cos(x_1) = 0 \\ 1 - x_2 + |x_1 - 1| = 0 \end{cases}$$

(a) Mostre que existe uma e uma só solução $(x_1, x_2) \in [0, 1] \times [1, 2]$.

(b) Determine uma aproximação da solução de forma a que o erro absoluto verifique $\|x - x^{(k)}\|_\infty < 0.05$.

21. Considere o sistema de equações algébricas não-lineares $F(x) = 0 \Leftrightarrow x = G(x)$ onde

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \qquad F(x) = \begin{bmatrix} -3x_1 + x_2^2 + x_3^2 \\ x_1^2 - 3x_2 + x_3^2 \\ x_1^2 + x_2^2 - 3x_3 - 1 \end{bmatrix}, \qquad G(x) = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} x_2^2 + x_3^2 \\ x_1^2 + x_3^2 \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 \end{bmatrix}.$$

(a) Obtenha um valor aproximado $x^{(2)}$ para a solução única z do sistema usando duas iterações do método do ponto fixo partindo da condição inicial $x^{(0)} = (0, 0, 0)$. Apresente uma estimativa para o erro $\|z - x^{(2)}\|_\infty$.

(b) Mostre que a determinação de um valor aproximado $\tilde{x}^{(1)}$ para a solução z do problema inicial usando uma iterada do método de Newton partindo da aproximação inicial $\tilde{x}^{(0)} = (\alpha, \alpha, 0)$, onde α é uma constante real, conduz à resolução de um sistema linear $Ay = b$, onde

$$A = \begin{bmatrix} -3 & 2\alpha & 0 \\ 2\alpha & -3 & 0 \\ 2\alpha & 2\alpha & -3 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 3\alpha - \alpha^2 \\ 3\alpha - \alpha^2 \\ 1 - 2\alpha^2 \end{bmatrix}$$

(c) Tomando $\alpha = 1$, resolva o sistema $Ay = b$ da alínea anterior pelo método de eliminação de Gauss e conclua a determinação do valor aproximado $\tilde{x}^{(1)}$.

22. Seja $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ uma função Lipschitziana. Sejam μ e ν dois números reais tais que $\mu, \nu > (L^2 + 1)/2$, onde L é a constante de Lipschitz de g. Mostre que, para todo $b_1, b_2 \in \mathbb{R}$, o sistema

$$\begin{cases} \mu x_1 + g(x_2) = b_1 \\ \nu x_2 + g(x_1) = b_2 \end{cases}$$

tem uma e uma só solução.

23. Considere o sistema de equações

$$\begin{cases} 4x_1 + \sin(x_2) = 7 \\ 4x_2 + \sin(x_1) = 9 \end{cases}$$

(a) Justifique que o sistema tem uma e uma só solução $z \in \mathbb{R}^2$.

(b) Utilize o seguinte método do ponto fixo

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = x_1^{(k)} - 0.1(4x_1^{(k)} + \sin(x_2^{(k)}) - 7) \\ x_2^{(k+1)} = x_2^{(k)} - 0.1(4x_2^{(k)} + \sin(x_1^{(k)}) - 9), \quad k \in \mathbb{N}, \end{cases}$$

com iterada inicial $x^{(0)} = [1 \;\; 1.5]^T$ para calcular z com 9 casas decimais. Justifique a convergência.

(c) Aplique o método de Newton, partindo da aproximação inicial $x^{(0)} = [1 \;\; 1.5]^T$ e calcule z com 9 casas decimais. Compare com os resultados da alínea anterior.

24. Mostre que o sistema de equações

$$\begin{cases} \sin(x_2) - \cos(x_1) + 2x_1 = 0 \\ \sin(x_1) + \cos(x_2) - 2x_2 = 0 \end{cases}$$

tem uma e uma só solução $z \in \mathbb{R}^2$ e que o método do ponto fixo

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = 0.5\cos(x_1^{(k)}) - 0.5\sin(x_2^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = 0.5\sin(x_1^{(k)}) + 0.5\cos(x_2^{(k)}), \quad k \in \mathbb{N}, \end{cases}$$

converge para z, qualquer que seja $x^{(0)} \in \mathbb{R}^2$.

25. Considere o sistema de equações não-lineares

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{0.5}{1 + (x_1 + x_2)^2} \\[2ex] x_2 = \dfrac{0.5}{1 + (x_1 - x_2)^2} \end{cases}$$

(a) Mostre que o sistema tem uma única solução z em $\mathbb{R}^2$.

(b) Obtenha um valor aproximado $x^{(4)}$ para a solução usando quatro iteradas do método do ponto fixo. Apresente uma estimativa do erro$\|z - x^{(4)}\|_\infty$.

Ajustamento de dados discretos e aproximação de funções

1. Interpolação polinomial

1. Na tabela seguinte são apresentados valores da função $f(x) = x^2 + \dfrac{1}{x}$.

x	0.8	1.0	1.6
$f(x)$	1.890	2.000	3.185

   (a) Obtenha a expressão do polinómio interpolador de f nos três pontos tabelados, através da fórmula de Lagrange.

   (b) Idem, mas através da fórmula de Newton.

   (c) Calcule o valor interpolado para $x = 1.3$. Obtenha um majorante do erro a partir da expressão do erro de interpolação e compare-o com o erro efetivamente cometido.

2. Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	0.2	0.34	0.4	0.52	0.6	0.72
f_i	0.16	0.22	0.27	0.29	0.32	0.37

   (a) Obtenha $f(0.47)$ usando um polinómio de grau 2.

   (b) Admitindo que $f \in C^3([0,1])$ e que $\max_{x\in[0,1]} |f^{(3)}(x)| \leq 3$, calcule um majorante do erro do resultado obtido na alínea anterior.

3. Considere a seguinte tabela de valores da função $f(x) = \log_{10} x$:

x_i	2.0	2.5	3.0
$\log_{10} x_i$	0.30103	0.39794	0.47712

   (a) Usando a fórmula de Newton e todos os pontos da tabela, calcule uma aproximação de $f(2.4)$. Calcule o erro absoluto e o erro relativo dessa aproximação.

   (b) Calcule um majorante do erro $\max_{x\in[2,3]} |f(x) - p(x)|$, onde p é o polinómio utilizado na alínea anterior.

4. Considere a seguinte tabela de valores de um polinómio p

x_i	-1	1	4
$p(x_i)$	2	-2	-8

(a) Sabendo que $p[-1,1,2] = 4$, determine o polinómio de grau ≤ 3 interpolador de p nos nós -1, 1, 4 e 2.

(b) Sabendo que $p[-1,1,2,4,x] = 3$, para todo $x \in \mathbb{R} \setminus \{-1,1,2,4\}$, determine p.

5. Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	-3	-1	1	3
$f(x_i)$	-33	14	-2	-5

(a) Sabendo que a função tabelada é contínua e estritamente monótona em $[-1,3]$, determine por interpolação inversa o zero da função situado no intervalo $[-1,1]$, utilizando o maior número possível de pontos. Justifique a escolha dos nós de interpolação.

(b) Obtenha o polinómio interpolador de f nos três últimos pontos. Se determinasse o zero deste polinómio no intervalo $[-1,1]$, obteria o mesmo resultado que na alínea anterior? Justifique.

(c) Supondo que, para $x \geq -1$, a função é da forma $f(x) = 3x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$ e que $f[-1,1,2] = 4$, escreva, recorrendo ao polinómio interpolador calculado na alínea anterior, uma expressão que permita obter $f(x)$.

6. Seja $f \in C^1([a,b])$ tal que $f(a)f(b) < 0$ e $f'(x) \neq 0$, para todo $x \in [a,b]$ (logo existe um único $z \in]a,b[$ tal que $f(z) = 0$).

(a) Sejam x_0, x_1, ..., x_n, pontos distintos de $[a,b]$ e sejam y_0, y_1, ..., y_n os valores de f nesses pontos. Escreva uma expressão para o polinómio $p_n \in \mathcal{P}_n$ que interpola f^{-1} nos nós y_0, y_1, ..., y_n.

(b) Notando que $z = f^{-1}(0)$, utilize o polinómio p_3 e os seguintes valores tabelados

x_i	0.3	0.4	0.5	0.6
e^{-x_i}	0.740818	0.670320	0.606531	0.548812

para aproximar a raiz da equação $e^{-x} - x = 0$.

7. Sejam $\ell_0(x)$, $\ell_1(x)$,..., $\ell_n(x)$ os polinómios de base de Lagrange de grau n associados aos nós (distintos) x_0, x_1,..., x_n. Mostre que

$$\sum_{i=0}^{n} x_i^k \ell_i(x) = x^k,$$

para todo $x \in \mathbb{R}$, e $k \in \{0, ..., n\}$.

8. Sejam $x_1, ..., x_n$ ($n \geq 2$) valores reais distintos e $f_1, ..., f_n$ os valores correspondentes de uma função f nesses pontos. Prove que existe uma e uma só função F_n da forma

$$F_n(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j \exp(jx),$$

para a qual se tem $F_n(x_i) = f_i$, $i = 1, ..., n$.

9. Seja $f \in C^3([0, 1])$.

   (a) Mostre que existe um e um só polinómio $p \in \mathcal{P}_2$ tal que

   $$p(0) = f(0); \quad p(1) = f(1); \quad \int_0^1 p(x)dx = \int_0^1 f(x)dx.$$

   (b) Supondo que $\left|f^{(3)}(x)\right| \leq M$, para todo $x \in [0, 1]$, mostre que

   $$\max_{x \in [0,1]} |f(x) - p(x)| \leq \frac{M}{6}.$$

10. Considere uma função $f \in C^{n+1}([a, b])$ e os pontos igualmente espaçados $a = x_0 < x_1 < ... < x_n = b$, ou seja, $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, ..., n$, $h = \frac{b-a}{n}$. Mostre que

$$\max_{x \in [a,b]} |f(x) - p_n(x)| \leq \frac{h^{n+1} \max_{t \in [a,b]} |f^{(n+1)}(t)|}{4(n + 1)}.$$

11. Seja $f(x) := \sin(x)$ e seja p_n o polinómio interpolador de f nos nós $0, \dfrac{\pi}{n}, \dfrac{2\pi}{n}, ..., \dfrac{(n-1)\pi}{n}, \pi$. Mostre que

$$\lim_{n \to \infty} p_n(x) = f(x), \quad \forall x \in [0, \pi],$$

e verifique experimentalmente este resultado. Para tal, construa os poliómios p_n, $n = 2, 3, 4, ...$, usando o MATLAB e compare graficamente a função f com os polinómios obtidos.

12. Considere o método da secante para determinar um zero z de uma função $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Mostre que

   (a) $z - x_{n+1} = \dfrac{f[x_{n-1}, x_n, z]}{f[x_{n-1}, x_n]}(z - x_n)(z - x_{n-1})$;

   (b) $z - x_{n+1} = -\dfrac{f''(\mu_n)}{2f'(\nu_n)}(z - x_n)(z - x_{n-1})$, $\mu_n \in \text{int}(x_n; x_{n-1})$, $\nu_n \in \text{int}(z; x_n; x_{n-1})$.

13. Seja p o polinómio interpolador de uma função $f \in C^2([a,b])$ em dois pontos distintos x_0 e x_1 tais que $a \leq x_0 < x_1 \leq b$.

    (a) Mostre, para todo o $x \in [a,b]$, a seguinte estimativa

    $$|f'(x) - p'(x)| \leq \frac{(x-x_0)^2 + (x-x_1)^2}{2(x_1 - x_0)} \max_{s \in [a,b]} |f''(s)|$$

    (b) Seja $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Verifique que

    $$|f(x) - p(x)| \leq \frac{(b-a)2}{8} \max_{s \in [a,b]} |f''(s)|$$

    $$|f'(x) - p'(x)| \leq \frac{b-a}{2} \max_{s \in [a,b]} |f''(s)|$$

2. Método dos mínimos quadrados

1. Considere a tabela

x_i	1.0	1.2	1.5	1.6
f_i	5.44	6.64	8.96	9.91

   (a) Obtenha o polinómio do 1º grau que melhor se ajusta (no sentido dos mínimos quadrados) aos pontos tabelados.

   (b) Idem, mas para o polinómio do 2º grau. Utilizando o polinómio obtido, obtenha uma estimativa do valor de $f(1.4)$.

   (c) Relativamente aos dois casos anteriores, calcule o valor das somas dos quadrados dos desvios correspondentes aos ajustamentos efectuados. Qual seria o valor dessa soma, no caso de se fazer o ajustamento por um polinómio do 3º grau?

   (d) Determine a função da forma $g(x) = a_1 e^x + a_2$ $(a_1, a_2 \in \mathbb{R})$ que melhor se ajusta, no sentido dos mínimos quadrados, aos pontos da tabela.

2. Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	-1	0	1	2
$f(x_i)$	6	3	2	1

   Pretende-se um ajustamento dos pontos da tabela por uma função da forma $g(x) = \dfrac{1}{Ax+B}$. Determine as constantes A, B pelo método dos mínimos quadrados.
   (*Sugestão*: Efetue uma mudança de variáveis.)

3. Seja f uma função tal que $f(-2) = 3$, $f(0) = 6$ e $f(2) = 15$. Obtenha a função do tipo $g(x) = ax + b$ que melhor se ajusta aos valores dados, no sentido dos mínimos quadrados. Mostre ainda que

$$\sum_{i=1}^{3} [f(x_i) - \alpha x_i - \beta]^2 \geq 6, \ \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

4. Considere a tabela

x_i	0	0.5	1.0
y_i	5.0	5.2	6.5

   (a) Determine a função da forma $g(x) = Be^x + Ce^{-x}$ que melhor se ajusta, no sentido dos mínimos quadrados, aos pontos da dados.

   (b) Calcule o valor da soma dos desvios quadrados correspondente ao ajustamento efetuado.

(c) Determine a função da forma $g(x) = A + Be^x + Ce^{-x}$ que verifica $g(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, 2$.

5. Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	0	$\pi/2$	π	$3\pi/2$
f_i	1	0.5	-1	0

(a) Obtenha a função $g(x) = a_1 + a_2 \sin(x) + a_3 \cos(x)$ que melhor aproxima estes valores de f no sentido dos mínimos quadrados e calcule o respetivo valor da soma dos desvios quadrados.

(b) Seja $D_*(a) = \sum_{j=1}^{4}[f(x_j) - a\cos(x_j)]^2$. Justifique que $D_*(a) > 0.0625$, para todo $a \in \mathbb{R}$.

6. Considere a seguinte tabela

x_i	-1.0	-0.5	0.0	0.5	1.0
y_i	0.262087	1.20472	2.82757	1.34375	0.0130539

Recorrendo ao método dos mínimos quadrados, determine um ajustamento da forma $g(x) = ae^{bx^2}$ $(a, b \in \mathbb{R})$ aos pontos tabelados.

7. Considere os 6 pontos $(-1, 7)$, $(0, 6)$, $(1, 6)$, $(2, 4)$, $(4, 3)$, $(5, 1)$.

(a) Determine a função $g(x) = a - x + bx^2$ $(a, b \in \mathbb{R})$ cujo gráfico melhor se ajusta a estes pontos segundo o critério dos mínimos quadrados.

(b) O mesmo que em (a) usando $g(x) = ae^{bx} - \frac{x^2}{4}$, e uma transformação de variáveis.

8. Mostre que o sistema normal tem uma e uma só solução se e só se as funções de base ϕ_1,...,ϕ_m são linearmente independentes no conjunto $\{x_1, ..., x_n\}$.

9. Considere a aproximação mínimos quadrados para a tabela de pontos

x_i	-1	0	1	2
y_i	1	1	2	2

por uma função do tipo $g(x) = c_0 + c_1 x + c_2[\sin(\pi x) + x^4 - 2x^3 + 3x + 1]$. Construa o sistema normal e comente a escolha das funções de base.

10. Mostre que se $n = m$, o polinómio $p \in \mathcal{P}_m$ de mínimos quadrados de uma função f nos nós $x_0, ..., x_n$ (distintos entre si) coincide com o polinómio interpolador nos mesmos nós.

Integração numérica

1. Seja $I(f) := \int_{-1}^{1} f(x)dx$. Pretende-se aproximar I por uma quadratura da forma

$$Q(f) := A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2),$$

com $x_0, x_1, x_2 \in [-1, 1]$.

(a) Determine os coeficientes A_0, A_1 e A_2 de modo que Q seja exata sobre $\mathcal{P}_2$ nos seguintes casos
(i) $x_0 = -1, x_1 = 1/2, x_2 = 1$;
(ii) $x_0 = -1, x_1 = 0, x_2 = 1$;
(iii) $x_0 = -\sqrt{3}/3, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{3}/3$;
(iv) $x_0 = -\sqrt{3/5}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{3/5}$.

(b) Relativamente às fórmulas obtidas na alínea anterior, determine o grau de Q.

(c) Qual o grau máximo possível para a fórmula Q?

2. Sejam $x_0 = -1, x_1 = 0, x_2 = 1$. Seja $f \in C^4([-1, 1])$.

(a) Mostre que existe um e um só $p \in \mathcal{P}_3$ tal que

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \quad p'(x_1) = f'(x_1).$$

(b) Mostre que, para cada $x \in [-1, 1]$, existe $\xi(x) \in (-1, 1)$ tal que

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(4)}(\xi(x))}{4!}(x+1)x^2(x-1).$$

Sugestão: Considere o o polinómio $q \in \mathcal{P}_4$ definido por

$$q(t) = p(t) + \frac{f(x) - p(x)}{W(x)}W(t), \quad W(x) := (x+1)x^2(x-1)$$

e use o Teorema de Rolle.

(c) Mostre que o erro de integração da fórmula (ii) do exercício anterior satisfaz: para cada $f \in C^4([-1, 1])$ existe $\xi \in (-1, 1)$ tal que

$$E(f) := I(f) - Q(f) = -\frac{1}{90}f^{(4)}(\xi).$$

3. Seja agora $I(f) := \int_a^b f(x)dx$. Utilizando o caso (ii) do exercício 1, o exercício 2 e uma mudança de variável apropriada, mostre que

(a) os nós e os pesos da regra de Simpson simples S são dados por

$$x_0 = a, \quad x_1 = \frac{a+b}{2}, \quad x_2 = b; \qquad A_0 = A_2 = \frac{h}{3}, \quad A_1 = \frac{4h}{3}$$

com $h = (b-a)/2$;

(b) S tem grau 3;

(c) se $f \in C^4([a,b])$ então $I(f) - S(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$ para algum $\xi \in (a,b)$.

4. Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	-2	-1	0	1	2
$f(x_i)$	1	0	2	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

(a) Utilizando a fórmula de Newton com diferenças divididas, determine o polinómio $p_2 \in \mathcal{P}_2$, que interpola f nos pontos $x_0 = -2$, $x_2 = 0$ e $x_4 = 2$.

(b) Suponha que pretendemos aproximar $\int_{-2}^{2} f(x)dx$ por $\int_{-2}^{2} p_2(x)dx$. Sabendo que as derivadas de f verificam $|f^{(j)}(x)| \leq j/2$, $j = 1,2,3,4$ no intervalo $[-2,2]$, determine um majorante para o erro de integração. Justifique.

5. Considere o integral $\int_0^1 \exp(x^2)dx$.

(a) Calcule o seu valor aproximado, considerando 4 subintervalos e utilizando
(i) a regra dos trapézios;
(ii) a regra de Simpson.

(b) Para cada um dos valores obtidos na alínea anterior, determine um majorante do erro absoluto de integração.

(c) Faça uma estimativa do número de subintervalos que deveria considerar, se pretendesse calcular o integral anterior com erro inferior a 10^{-4}, utilizando
(i) a regra dos trapézios;
(ii) a regra de Simpson.

6. Calcule um valor aproximado de $\int_0^1 \cos(\pi x^2/2)dx$ com erro inferior a 0.005, usando a regra dos trapézios.

7. Pretende-se obter uma fórmula de integração com dois nós no intervalo $[-1,1]$

$$Q(f) := A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

para aproximar o integral $\int_{-1}^{1} f(x)dx$.

(a) Determine A_0 e A_1 de modo que a fórmula tenha, pelo menos, grau 1.

(b) Mostre que, se x_0 e x_1 forem tais que $x_0 x_1 = -\dfrac{1}{3}$, a fórmula de integração assim obtida tem, pelo menos, grau 2.

(c) Para que valores de x_0 e x_1 a fórmula terá grau 3? Quais são, neste caso os valores de A_0 e A_1?

8. Considere o integral $\int_{-1}^{1} f(x)dx$ e para a sua aproximação numérica uma *quadratura de Gauss-Lobatto*

$$Q(f) := A_0 f(-1) + \sum_{j=1}^{n-1} A_j f(x_j) + A_n f(1)$$

onde os nós interiores $x_1, ..., x_{n-1} \in (-1, 1)$ são tais que o grau de exatidão de Q é igual a $2n - 1$. Determine a quadratura de Gauss-Lobatto com 4 pontos, i.e. calcule x_1, x_2, A_0, A_1, A_2 e A_3.

9. Seja $J(f) := \int_{-1}^{1} |x| f(x)dx$. Pretende-se aproximar $J(f)$ através de uma regra de quadratura da forma

$$Q(f) = af(-x_0) + bf(x_0)$$

(a) Determine a, b e x_0 de modo que Q tenha grau, pelo menos, grau 2.

(b) Determine o grau de Q.

(c) Calcule $\int_{-1}^{1} |x|(2 - x^2 + 10x^3)dx$ usando a regra Q.

(d) Calcule uma aproximação para $\int_{-1}^{1} \frac{|x|}{1.5+\cos(x)} dx$ usando a regra Q.

10. Seja $a > 1$ e f uma função definida no intervalo $[0, a]$ por $f(x) = \begin{cases} 3 - x & 0 \leq x \leq 1 \\ 3x - 1 & 1 \leq x \leq a \end{cases}$

(a) Obtenha aproximações para o integral $I(f) := \int_0^a f(x)dx$ com $a = 2$ e $a = 3$ dos seguintes modos:

i. usando a regra dos trapézios com passo $h = 1$;

ii. usando a regra de Simpson simples.

(b) Calcule o valor exato de $I(f)$ e os erros absolutos e relativos dos resultados obtidos na alínea anterior.

(c) A fórmula de erro da regra de Simpson é aplicável neste caso? E a da regra dos trapézios? Justifique.

11. Utilizando a regra dos trapézios, mostre que

(a) $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2}, \quad \forall n \in \mathbb{N};$

(b) $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$

12. Dedução da Regra do ponto médio.

(a) Mostre que, se $f \in C^2([a,b])$ então

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{h^3}{24}f''(\theta), \quad \theta \in (a,b).$$

(b) Deduza a respetiva fórmula composta, incluindo o erro de integração.

(c) Mostre que, se $f \in C^2([a,b])$, então a regra do ponto médio composta é convergente quando $n \to \infty$.

Resolução numérica de equações diferenciais ordinárias

1. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = 1 - t + 4y(t), & 0 \le t \le 1, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

com solução exata $y(t) = t/4 - 3/16 + (19/16)e^{4t}$.

(a) Obtenha um valor aproximado y_2 para $y(0.2)$ usando o método de Euler com passo $h = 0.1$.

(b) Recorrendo à fórmula de erro do método de Euler, deduza um majorante para $|y(0.2) - y_2|$. Compare com o valor do erro de facto cometido.

(c) Utilize o método de Taylor de ordem 2 com $h = 0.1$ para obter uma aproximação de $y(0.2)$. Compare com o resultado obtido em (a).

(d) Utilize o método do ponto médio com $h = 0.1$ para obter uma aproximação de $y(0.2)$. Compare com o resultado obtidos em (c). Comente.

2. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = t^2 \cos(y(t) + t^2), & t \ge 2, \\ y(2) = 2 \end{cases}$$

Aplique o método de Euler com $h = 0.1$ para aproximar $y(t)$ em $t = 2.1, 2.2, 2.3$ e estime os respetivos erros.

3. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = -y^2(t), & 1 \le t \le 2, \\ y(1) = 1, \end{cases}$$

Obtenha um valor aproximado para $y(1.6)$ pelo método de Taylor de ordem 2 tomando $h = 0.2$ e $h = 0.1$. Compare os resultados com a solução exata.

4. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = \dfrac{1}{1 + t + y(t)^2}, & t \in [0, 1], \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

(a) Mostre que este problema tem uma e uma só solução.

(b) Aplique o método de Euler para obter valores aproximados de $y(\frac{i}{10})$, $i = 1, ..., 4$, e calcule um majorante dos respectivos erros.

(c) Determine o passo $h = \frac{1}{n}$ para o método de Euler de modo que o erro global satisfaça

$$\max_{0 \leq i \leq n} |y(t_i) - y_i| \leq 10^{-6}.$$

(d) Tome $h = 0.2$ e obtenha um valor aproximado de $y(1)$ pelo método do ponto médio.

5. Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} u''(t) + u'(t)^2 u(t) = t^2 u(t)^2, \quad t \geq 2, \\ u(2) = 3, \; u'(2) = -4. \end{cases}$$

Determine a expressão que permite obter valores aproximados de $u(2+h)$ e $u'(2+h)$, $h > 0$, através do método de Euler.

6. Considere a equação diferencial

$$\begin{cases} y'(t) = f(t), \quad t \in [a, b], \\ y(a) = \alpha \end{cases}$$

onde $f \in C[a, b]$ e $\alpha \in \mathbb{R}$.

(a) Verifique que a sua solução é dada por $y(t) = \alpha + \int_a^t f(s)ds$.

(b) Tendo em conta que $y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_1}^{t_{i+1}} f(s)ds$, mostre que, neste caso:

i. o método de Heun corresponde à aplicação da regra do trapézio ao integral $\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s)ds$,

ii. o método do ponto médio corresponde à aplicação da regra do ponto médio ao mesmo integral,

iii. o método de Runge-Kutta de ordem 4 clássico corresponde à aplicação da regra de Simpson ao integral.

(c) Mostre que, se $f \in C^1[a, b]$, então o erro global do método de Euler aplicado a esta equação satisfaz

$$\max_{0 \leq i \leq n} |y(t_i) - y_i| \leq \frac{(b-a)M}{2} h$$

onde $t_i = a + ih = a + i\frac{b-a}{n}$, $i = 0, ..., n$, e $\max_{t \in [a,b]} |f'(t)| \leq M$.