Matemática Computacional

MEBiol, MEBiom, MEFT,MEQ,MEM

1º Teste

Duração: 60 minutos 19/11/2020 – 19:00

Apresente todos os cálculos e justifique convenientemente todas as respostas.

1. Seja ϕ a função definida por

$$\phi(x) = \sqrt{\exp(2x)+1} - \exp(x),\ x \neq 0. \tag{1}$$

(a) [1.5] Para calcular $\phi(x)$ utiliza-se uma calculadora com o sistema de ponto flutuante $\mathbb{F} = PF(10,4,-20,20)$ e arredondamento simétrico. Explique o que acontece se aplicar diretamente a fórmula (1) com

(i) $x = 25$; (ii) $x = -25$; (iii) $x = 5$.

(b) [1.5] Proponha um algoritmo numericamente estável para o cálculo de $\phi(5)$ no sistema $\mathbb{F}$. Calcule $\phi(5)$ usando esse algoritmo.

2. Considere a equação

$$1 - x - \sin(x) = 0, \tag{2}$$

a qual tem uma e uma só solução real z, e o método iterativo

$$x_{n+1} = 1 - \sin(x_n), \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{3}$$

(a) [1.0] Mostre que o método (3) com $x_0 = 0.5$ converge alternadamente para z.

(b) [1.0] Considere a seguinte sucessão de iteradas do método (3)

$$x_0 = 0.5, \quad x_1 = 0.520574, \quad x_2 = 0.502621, \quad x_3 = 0.518276, \quad \cdots$$

Calcule x_4 e um majorante do erro $|z - x_4|$ tendo em conta que a sucessão é alternada.

(c) [1.5] Sem efetuar mais iterações, determine o número de algarismos significativos de x_{20}.

3. Considere o sistema não-linear

$$\begin{cases} -3x_1 + x_2^2 + x_3^2 = 0 \\ x_1^2 - 3x_2 + x_3^2 = 0 \\ x_1^2 + x_2^2 - 3x_3 = 1 \end{cases}$$

(a) [1.5] Mostre que o cálculo da primeira iterada do método de Newton a partir da aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (0.5, 0.5, 0)$ conduz à resolução de um sistema linear $\mathbf{Ay} = \mathbf{b}$,

$$\begin{bmatrix} -3 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & 0 \\ 1 & 1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Determine ainda o vetor $\mathbf{b}$.

(b) [1.0] Mostre que o método de Gauss-Seidel aplicado ao sistema (4) converge para $\mathbf{y}$ qualquer que seja a aproximação inicial em $\mathbb{R}^3$.

(c) [1.0] Tomando para iterada inicial o vetor nulo, efetue uma iteração do método de Gauss-Seidel para aproximar $\mathbf{y}$. Calcule ainda uma aproximação para a primeira iterada do método de Newton usando a aproximação fornecida pelo método de Gauss-Seidel.

Resolução

1. (a) O algoritmo a ser usado nos cálculos é:

$$w_1 = 2 \times x, \quad w_2 = \exp(w_1), \quad w_3 = w_2 + 1, \quad w_4 = \sqrt{w_3}, \quad w_5 = \exp(x), \quad w_6 = w_4 - w_5. \qquad (1)$$

(i) $x = 25 = 0.25 \times 10^2$; $w_1 = 0.5 \times 10^2$; $w_2 = \mathrm{fl}(\exp(0.5 \times 10^2)) = \mathrm{fl}(0.518471 \times 10^{22})$ Overflow

(ii) $x = -25 = -0.25 \times 10^2$; $w_1 = -0.5 \times 10^2$;

$w_2 = \mathrm{fl}(\exp(-0.5 \times 10^2)) = \mathrm{fl}(0.192875 \times 10^{-21})$ Underflow

(iii) $x = 5 = 0.5 \times 10^1$; $w_1 = 0.1 \times 10^2$, $w_2 = \mathrm{fl}(22026.5) = 0.2203 \times 10^5$, $w_3 = w_2$,

$w_4 = \mathrm{fl}(\sqrt{148.425}) = 0.1484 \times 10^3$, $w_5 = \mathrm{fl}(148.413) = 0.1484 \times 10^3$, $w_6 = w_4 - w_5 = 0$.

(b) Ao calcular $\phi(5)$ no sistema $\mathbb{F}$ usando o algoritmo (1) ocorreu cancelamento subtrativo. Podemos evitar a subtração de números muito próximos, que ocorre quando $\exp(x) \gg 1$, escrevendo uma expressão equivalente para ϕ:

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \sqrt{\exp(2x)+1} - \exp(x) = \frac{(\sqrt{\exp(2x)+1} - \exp(x))(\sqrt{\exp(2x)+1} + \exp(x))}{\sqrt{\exp(2x)+1} + \exp(x)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\exp(2x)+1} + \exp(x)}
\end{aligned}$$

O algoritmo baseado na última expressão

$$y_1 = 2 \times x, \quad y_2 = \exp(y_1), \quad y_3 = y_2 + 1, \quad y_4 = \sqrt{y_3}, \quad y_5 = \exp(x), \quad y_6 = y_4 + y_5, \quad y_7 = 1/y_6$$

é numericamente estável para o cálculo de $\phi(5)$.

Para $x = 5$, obtemos

$$y_1 = 0.1 \times 10^2, \quad y_2 = 0.2203 \times 10^5, \quad y_3 = y_2, \quad y_4 = 0.1484 \times 10^3, \quad y_5 = 0.1484 \times 10^3,$$

$$y_6 = 0.2968 \times 10^3, \quad y_7 = \mathrm{fl}(3.36927 \times 10^{-3}) = 0.3369 \times 10^{-2}.$$

2. (a) Seja $g(x) := 1 - \sin(x)$ e $I := [0.5, 0.520574] = [x_0, x_1]$. Tem-se $g'(x) = -\cos(x)$ e

- $g'(x) < 0$ e $|g'(x)| = \cos(x) \le \cos(0.5) = 0.877583 < 1$, para todo $x \in I$, pelo que g é contrativa em I com $L = 0.877583$;
- g é monótona decrescente em I, $g(0.5) = 0.520574 \in I$, $g(0.520574) = 0.502621 \in I$, logo $g(I) \subseteq I$
- $1 - z - \sin(z) = 0 \iff z = 1 - \sin(z) \iff z = g(z)$.

Pelo Teorema do ponto fixo, o método $x_{n+1} = 1 - \sin(x_n)$, $\quad n = 0, 1, 2, \ldots$ converge para z qualquer que seja $x_0 \in I$, em particular com $x_0 = 0.5$. Como $g' < 0$ em I, a convergência é alternada, ou seja, as iteradas ficam alternadamente à direita e à esquerda de z.

(b) Tem-se

$$x_4 = g(x_3) = 0.504617$$

e dada a convergência alternada, $z \in [x_4, x_3]$. Além disso, devido à contratividade de g, tem-se

$$|z - x_4| = |g(z) - g(x_3)| \le L|z - x_3| < |z - x_3|,$$

donde resulta a estimativa de erro

$$|z - x_4| \le \frac{1}{2}|x_4 - x_3| = 0.0068295.$$

(c) Usamos a fórmula de majoração a priori

$$|z-x_n| \le L^{n-4}|z-x_4| = 0.0068295 \times 0.877583^{n-4}, \quad n = 5,6,7,\ldots$$

partindo de x_4 como iterada inicial. Para $n = 20$, obtemos

$$|z-x_{20}| \le 0.0068295 \times 0.877583^{16} = 0.000845279 = 0.0845279 \times 10^{-2} \le 0.5 \times 10^{-2},$$

pelo que podemos garantir (apenas) 2 algarismos significativos para x_{20}.

Poderíamos tentar melhorar este resultado usando o facto de $x_n \in [x_4, x_3]$, para todo $n \ge 3$. Tem-se

$$L^* := \max_{x\in[x_4,x_3]} |g'(x)| = |g'(x_4)| = 0.87536$$

o que não constitui uma grande melhoria face ao valor de L já calculado. Deste modo obtém-se

$$|z-x_{20}| \le 0.0068295 \times 0.87536^{16} = 0.000811664 = 0.0811664 \times 10^{-2} \le 0.5 \times 10^{-2},$$

o que leva à mesma conclusão: 2 algarismos significativos para x_{20}.

3. O sistema não-linear é equivalente a

$$\begin{cases} -3x_1 + x_2^2 + x_3^2 = 0 \\ x_1^2 - 3x_2 + x_3^2 = 0 \\ x_1^2 + x_2^2 - 3x_3 - 1 = 0 \end{cases} \iff \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0.$$

(a) Devemos resolver o sistema linear $\boldsymbol{J}_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}^{(0)})\mathbf{y} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)})$ para obter $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{y}$.

Como $\mathbf{f}(\mathbf{x}) := (-3x_1 + x_2^2 + x_3^2,\ x_1^2 - 3x_2 + x_3^2,\ x_1^2 + x_2^2 - 3x_3 - 1)$ temos

$$\mathbf{b} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(0)}) = (1.25, 1.25, 0.5).$$

A matriz jacobiana de $\mathbf{f}$ é

$$\boldsymbol{J}_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -3 & 2x_2 & 2x_3 \\ 2x_1 & -3 & 2x_3 \\ 2x_1 & 2x_2 & -3 \end{bmatrix}$$

e obtém-se a matriz dada pois

$$\mathbf{A} = \boldsymbol{J}_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}^{(0)}) = \begin{bmatrix} -3 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & 0 \\ 1 & 1 & -3 \end{bmatrix}.$$

(b) Basta notar que a matrix $\mathbf{A}$ tem diagonal estritamente dominante por linhas: $|-3| > 1$ nas duas primeiras linhas e $|-3| > 1+1$ na última. A matrix $\mathbf{A}$ também tem diagonal estritamente dominante por colunas: $|-3| > 1+1$ nas duas primeiras colunas e $|-3| > 0$ na última coluna.

(c) O algoritmo do método de Gauss Seidel para o sistema $\mathbf{Ay} = \mathbf{b}$ é

$$\begin{cases} y_1^{(k+1)} = \frac{1}{3}(y_2^{(k)} - 1.25) \\ y_2^{(k+1)} = \frac{1}{3}(y_1^{(k+1)} - 1.25) \\ y_3^{(k+1)} = \frac{1}{3}(y_1^{(k+1)} + y_2^{(k+1)} - 0.5), \quad k = 0,1,2,\ldots \end{cases}$$

Tomando para iterada inicial o vetor nulo, $\mathbf{y}^{(0)} = (0,0,0)$, obtemos

$$\mathbf{y}^{(1)} = (-0.416667, -0.555556, -0.490741).$$

A aproximação para a primeira iterada do método de Newton é

$$\mathbf{x}^{(1)} \approx \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{y}^{(1)} = (0.5, 0.5, 0) - (0.416667, 0.555556, 0.490741) = (0.083333, -0.055556, -0.490741).$$