Projeto de Matemática Computacional – MEEC – 2020/2021 – VERSÃO 55

Grupo I

Chama-se *método quasi-Newton* para a equação $f(x) = 0$ a uma variante do método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\delta}{f(x_k + \delta) - f(x_k)} f(x_k)$$

onde δ é um valor dado, próximo de 0. A ideia é substituir $f'(x_k)$ por um valor próximo, evitando assim calcular a derivada de f.

1. Construa uma função denominada **newtonquasi** como implementação do método de quasi-Newton. Os dados de entrada deverão ser uma função `f`, a aproximação inicial `x0`, a precisão mínima exigida `TolX` para o critério de paragem $\frac{|x_{n+1}-x_n|}{|x_{n+1}|} <$ `TolX` e o número máximo de iteradas `MaxIter`. Os resultados deverão ser a aproximação da raiz `z`, o valor da função na raiz `fz` e um vector contendo as iteradas `iter`.

   Realize a função **newtonquasi** para resolver $f(x) = x^3 - x^2 - x + 1$ com `TolX = 1e-2`, `Delta = 1e-5` e aproximações inicias `x0 = -0.2` e `x0 = -0.3`. Quantas iteradas foram precisas para atingir a precisão desejada?

2. Considere a função $w(r) = b\exp(-kr)\,(k\sin(a\,r) + \cos(a\,r))$, onde $r > 0$ e a, k, b são contantes reais positivas.

   (a) Sendo $b = 1$, $k = 2$, $a = 4$, determine os dois primeiros intervalos de valores de r para os quais se verifica $f(r) \geq 0.1$ utilizando o método da bisseção com um erro menor do que 10^{-15}. Poderá usar a função `bissecao` da biblioteca de programas.

   (b) Pretende-se estudar experimentalmente a convergência local do método quasi-Newton, em torno da primeira raiz z da equação

   $$b\exp(-kr)\,(k\sin(a\,r) + \cos(a\,r)) - 0.001 = 0 \qquad (1)$$

   e descobrir a sua ordem de convergência.

   - Para `x0 = 0.5`, `TolX = 1e-12` e `Delta = 1e-4` obtenha dois vectores

     $$\mathbf{x} = (\ln|e_0|,\ \ln|e_1|,\ \ln|e_2|, \ldots,\ \ln|e_{k-1}|)$$

     $$\mathbf{y} = (\ln|e_1|,\ \ln|e_2|,\ \ln|e_3|, \ldots,\ \ln|e_k|)$$

     denominados por `x` e `y`, respectivamente, e onde $|e_n| = |z - x_n|$ é o erro absoluto da iterada x_n. No cálculo dos erros absolutos deverá usar o valor "exato" calculado na alínea anterior pelo método da bisseção.
   - Obtenha a recta que melhor se ajusta aos pontos (x_i, y_i), $i = 1, ..., k$, por exemplo utilizando a função `polyfit` do `matlab`.
   - Represente graficamente os pontos (x_i, y_i), $i = 1, ..., k$, como circunferências, e a recta que obteve. Poderá usar as funções `plot` e `polyval` do `matlab`.
   - Através de um estudo teórico, determine a ordem e o coeficiente assimptótico de convergência do método de quasi-Newton. Calcule uma estimativa do coeficiente assimptótico de convergência para esta situação que está a estudar.

   Comente detalhadamente os resultados que obteve com base no que sabe da teoria.

   (c) Obtenha valores aproximados da primeira raiz z da equação (1) usando `x0 = 0.5`, `TolX = 1e-5` e diversos valores de `Delta`. Em cada caso obtenha o erro de aproximação e o número de iteradas. Utilize o valor "exato" calculado na alínea (a). Escolha o valor de `delta` que lhe parece mais apropriado justificando detalhadamente.

Grupo II

Pretende-se modelar a relação entre x e y, com base nos dados da Tabela 1, utilizando o método dos mínimos quadrados.

Tabela 1

x	0	0.25	0.5	0.75	1	1.25	1.5	1.75	2	2.25	2.5	2.75	3
$f(x)$	0.652	0.217	0.264	0.0689	-0.183	0.209	0.529	0.689	1.18	1.48	2.21	3.09	3.64

Aproxime os pontos da Tabela 1, utilizando todos os polinómios **não** interpoladores de grau m da forma $P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_m x^m$, onde a_0, a_1, a_2, ..., a_m são os parâmetros desconhecidos que precisam ser estimados.
Para cada ajuste deverá obter os valores SSE, MSE, onde $\text{SSE} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{P}(x_i))^2$ e $\text{MSE} = \text{SSE}/\text{gl}$, com gl sendo o número de graus de liberdade da aproximação ($\text{gl} = n - (m+1)$, onde $m+1$ é o número de parâmetros estimados). Preencha a tabela seguinte.

grau m do polinómio	SSE_m	MSE_m	MSE_{m+1}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Represente graficamente os pontos da Tabela 1, como circunferências, e as aproximações que obteve com um mínimo de definição. A representação gráfica deverá ser constituída por dois gráficos lado a lado, cada um contendo os pontos da Tabela 1 e metade das funções aproximadoras. Com base nos resultados que obteve, justifique qual considera ser o melhor modelo.

Grupo III

1. Construa uma função denominada **integratrap** para aproximar o integral

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx$$

A função deverá calcular o valor do integral usando o método dos trapézios com dois subintervalos T_2, quatro subintervalos T_4 e assim sucessivamente até obter T_{2n}.

Os parâmetros de entrada são a função integranda `f`, os extremos do intervalo `alpha` e `beta`, o número máximo de k, onde $n = 2^k$, `MaxK`. A saída deverá ser uma matriz com quatro colunas onde a primeira, a segunda, a terceira e a quarta colunas contêm os valores de 2^k, $|T_n|$, $|T_{2n} - T_n|$ e $|T_{2n} - T_n|/|T_{4n} - T_{2n}|$, respectivamente:

$$\begin{array}{cccc} 2 & T_2 & 0 & 0 \\ 4 & T_4 & |T_4 - T_2| & 0 \\ 8 & T_8 & |T_8 - T_4| & |T_4 - T_2|/|T_8 - T_4| \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

2. Considere os integrais

$$\int_5^{11} e^{5-x}\sin(50(x-5))\,dx, \qquad \int_5^{2\pi+5} \frac{1}{2+\sin(x-5)}\,dx, \qquad \int_5^{7} e^{-x^2+10x-25}\,dx$$

   (a) Represente graficamente as funções integrandas cada uma em seu gráfico lado a lado.

   (b) Calcule os valores dos integrais utilizando a função **integratrap** com `MaxK = 19`. Comente os resultados que obteve no que diz respeito à precisão e eficiência. A regra dos trapézios tem um desempenho melhor ou pior do que esperava? Explique qual poderá ser a causa.

   (c) Sem calcular analiticamente, para cada um dos integrais, com base na fórmula do erro do método dos trapézios $E_n^T(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi)$, calcule o número mínimo de subintervalos para que o erro seja menor que 10^{-6}. Preencha a Tabela seguinte e explique se os resultados computacionais estão de acordo com a fórmula teórica do erro.

	Teórico	Experimental	Teórico / Experimental
1º caso			
2º caso			
3º caso			