Questão 1. [2,0 pt] Ajuste um polinômio quadrático aos dados seguintes:

x_i	y_i
-1	-3
$-\frac{1}{2}$	-2
0	1
$\frac{1}{2}$	2
1	2

Solução: Começamos estendendo a tabela dada para obter os coeficientes do sistema que determina o polinômio $\hat{p}(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ ajustado:

x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
-1	-3	1	-1	1	3	-3
$-\frac{1}{2}$	-2	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	1	$-\frac{1}{2}$
0	1	0	0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	2	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	1	$\frac{1}{2}$
1	2	1	1	1	2	2
$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{\frac{5}{2}}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{\frac{17}{8}}$	$\mathbf{7}$	$\mathbf{-1}$

O sistema de equações normais na forma matricial é:

$$\begin{bmatrix} M+1 & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Tendo em vista que o conjunto de dados consiste de $M+1 = 5$ pontos, no nosso caso os coeficientes do polinômio precisam satisfazer:

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & \frac{5}{2} \\ 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ \frac{5}{2} & 0 & \frac{17}{8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 7 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Podemos escalonar o sistema através da única operação $L_3 \leftarrow L_3 - \frac{1}{2}L_1$ para obter o sistema equivalente

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & \frac{5}{2} \\ 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{7}{8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 7 \\ -1 \end{bmatrix} .$$

Agora, por retro-substituição, encontramos que

$$a_2 = -\frac{8}{7}, \quad a_1 = \frac{14}{5}, \quad a_0 = \frac{4}{7}.$$

Portanto

$$\boxed{\hat{p}(x) = -\frac{8}{7}x^2 + \frac{14}{5}x + \frac{4}{7}}$$

Questão 2.

[1,5 pt] (a) Começando com a estimativa inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (0,0,0)$, utilize duas iterações do método de Gauss-Seidel ou de Jacobi para aproximar a solução do sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, onde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 10 & -2 \\ 0 & -2 & 10 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 9 \\ 7 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

[1,0 pt] (b) Decida se a seqüência $(\mathbf{x}^{(k)})$ produzida pelo método converge à solução exata do sistema.

Solução:

(a) Em qualquer dos casos, começamos isolando a i-ésima variável na i-ésima equação ($i = 1,\ 2,\ 3$):

$$\begin{cases} x = (9+y)/3 \\ y = (7+x+2z)/10 \\ z = (6+2y)/10 \end{cases}$$

No método de Jacobi, calculamos as novas estimativas (à esquerda) utilizando à direita os valores da iteração anterior. No método de Gauss-Seidel, utilizamos à direita sempre os valores mais atuais disponíveis.

Vamos considerar aqui apenas o método de Jacobi. Na primeira iteração, obtemos:

$$\begin{aligned} x &\leftarrow (9+0)/3 &&= 3 \\ y &\leftarrow (7+0+2\cdot 0)/10 &&= \frac{7}{10} \\ z &\leftarrow (6+2\cdot 0)/10 &&= \frac{3}{5} \end{aligned}$$

Na segunda iteração,

$$\begin{aligned} x &\leftarrow \frac{9+7/10}{3} &&= \frac{97}{30} \\ y &\leftarrow \frac{7+3+6/5}{10} &&= \frac{28}{25} \\ z &\leftarrow \frac{6+7/5}{10} &&= \frac{37}{50} \end{aligned}$$

(b) Sim. Vimos em aula que um critério suficiente para convergência de qualquer um dos dois métodos é que a matriz dos coeficientes seja (estritamente) diagonalmente dominante, por linhas ou por colunas, e a matriz $\mathbf{A}$ possui ambas propriedades. Por exemplo:

- Na primeira linha, $|3| = 3 > 1 + 0 = |-1| + |0|$;
- Na segunda linha, $|10| = 10 > 1 + 2 = |-1| + |-2|$;
- Na terceira linha, $|10| = 10 > 0 + 2 = |0| + |-2|$.

Questão 3.

[1,5 pt] (a) Calcule a tabela de diferenças divididas $\nabla^j y_i$ associada aos dados abaixo:

$$(x_0, y_0) = (-2, -5), \quad (x_1, y_1) = (-1, 0), \quad (x_2, y_2) = (0, 1), \quad (x_3, y_3) = (1, 4)$$

[1,0 pt] (b) Expresse o polinômio interpolador destes dados na forma de Newton.

Solução:

(a) A tabela de diferenças divididas associada é:

x_i	y_i	$\nabla^1 y_i$	$\nabla^2 y_i$	$\nabla^3 y_i$
-2	$\mathbf{-5}$			
-1	0	$\mathbf{5}$		
0	1	3	$\mathbf{-2}$	
1	4	3	-1	$\mathbf{1}$

(b) Como o conjunto de dados consiste de quatro pontos, o polinômio interpolador p possui grau 3. Na forma de Newton, ele é dado por:

$$\begin{aligned} p(x) &= y_0 + \nabla^1 y_1\,(x - x_0) + \nabla^2 y_2\,(x - x_0)(x - x_1) + \nabla^3 y_3\,(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &= \boxed{-5 + 5(x + 2) - 2(x + 2)(x + 1) + (x + 2)(x + 1)x} \end{aligned}$$

Questão 4. Considere a integral
$$I = \int_{-1}^{1} e^{-x^2}\, dx\,.$$

[1,0 pt] (a) Aproxime I usando a *regra de Simpson* simples.

[2,0 pt] (b) Encontre o menor número N de subdivisões que garante que o módulo do erro E cometido ao se aproximar I pela *regra do trapézio* (composta) com N subdivisões não excede 10^{-4}. *Dica:* Recorde que
$$E = \int_a^b f(x)\, dx - \langle\text{regra do trapézio}\rangle = -\frac{(b-a)^3}{12N^2} f''(c) \quad \text{para algum } c \in [a,b]\,.$$

Solução:

(a) A regra de Simpson simples aproxima a integral
$$\int_a^b f(x)\, dx$$
por
$$\frac{b-a}{6}\Big[f(a) + 4f(m) + f(b)\Big] \qquad \text{onde} \quad m = \frac{a+b}{2}\,.$$
No nosso caso, $a = -1$, $b = 1$, $m = 0$ e
$$\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\, dx \approx \frac{2}{6}\big(e^{-1} + 4e^0 + e^{-1}\big) = \boxed{\frac{1}{3}\left(4 + \frac{2}{e}\right)}$$

(b) Tomando valores absolutos na fórmula para o erro, concluímos que
$$|E| \le \frac{|b-a|^3}{12N^2} \max_{[a,b]} |f''|\,.$$
No nosso caso $f(x) = e^{-x^2}$, portanto, pela regra da cadeia,
$$f'(x) = -2xe^{-x^2}\,;$$
$$f''(x) = -2e^{-x^2} + 4x^2e^{-x^2} = (4x^2 - 2)e^{-x^2}\,.$$
Precisamos determinar o máximo valor do módulo da segunda derivada. Para isto, vamos derivar f mais uma vez:
$$f^{(3)}(x) = \big(12x - 8x^3\big)\, e^{-x^2} = x\big(12 - 8x^2\big)e^{-x^2}\,.$$
Daí segue que os pontos críticos de f'' são $x = 0$ e $x = \pm\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}$, mas os dois últimos estão fora do intervalo $[-1,1]$. Assim, os candidatos a máximo de $|f''|$ são $x = 0$ e as extremidades $x = \pm 1$ do intervalo. Comparando os valores de $|f''|$ aí, concluímos que $\max_{[-1,1]} |f''|$ é $|f''(0)| = 2$.

Portanto, para que $|E|$ não exceda 10^{-4}, basta que
$$\frac{|b-a|^3}{12N^2} \max_{[a,b]} \big|f''\big| = \frac{2^3}{12 \cdot N^2} \cdot 2 = \frac{4}{3N^2} \le 10^{-4}\,.$$
Equivalentemente,
$$N \ge \frac{200}{\sqrt{3}}\,.$$
Como N deve ser inteiro, o menor número de subdivisões que garante que o erro seja menor que ou igual a 10^{-4} é o teto da última expressão:
$$\boxed{N = \left\lceil \frac{200}{\sqrt{3}} \right\rceil}$$