Prova substitutiva de Cálculo Numérico
Primeiro trimestre de 2012
prof. Rodrigo Fresneda

Avisos:

- Sempre que puder, justifique as passagens efetuadas, demonstrando conhecimento sobre os resultados e teoremas discutidos em sala. Poucas questões bem resolvidas valem mais que muitas mal resolvidas.
- Resolva as questões na ordem que lhe convier, mas indique na folha de resposta a questão e item sendo resolvidos.
- Não é permitida a consulta a material externo, incluindo seu colega.
- Esta prova vale 10 pontos.

1. Seja ξ uma raiz da equação $f(x) = 0$. Supomos que $f(x)$, $f^{'}(x)$ e $f''(x)$ sejam contínuas e limitadas num intervalo fechado I contendo ξ e que $f'(\xi) = 0$ e $f''(\xi) \neq 0$.

   (a) Mostre que o método iterativo definido por

   $$x_{k+1} = x_k - 2\frac{f(x_k)}{f'(x,)}$$

   converge para ξ se $x \in I$.
   Temos

   $$\varphi(x) = x - 2\frac{f(x)}{f'(x)} \Rightarrow \varphi'(x) = -1 + 2\frac{f(x) f''(x)}{f'^2(x)}$$

   E

   $$\lim_{x\to\xi} \frac{f(x)}{f'^2(x)} = \lim_{x\to\xi} \frac{f'(x)}{2f'(x) f''(x)} = \frac{1}{2f''(\xi)}\,.$$

   Logo,

   $$\lim_{x\to\xi} \varphi'(x) = 0\,.$$

   Disso se conclui que numa vizinhança da raiz ξ, $|\varphi'| \sim 0$, e o método converge.

   (b) O método definido em a) estende-se para uma raiz de multiplicidade m da seguinte maneira:

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

   Calcular a raiz ξ próxima de 1 da equação:

   $$f(x) = x^4 - 3.1x^3 + 2.52x^2 + 0.432x - 0.864 = 0$$

   com erro relativof inferior a 10^{-3}, usando método descrito aqui e sabendo que $f(\xi) = f'(\xi) = f''(\xi) = 0$ e $f'''(\xi) \neq 0$.
   Temos de utilizar a função de iteração

   $$\varphi(x) = x - 3\frac{f(x)}{f'(x)}\,.$$

Começando com $x_0 = 1$, temos

x_k	$\varphi(x_k)$	$\left\|x_k - x_{k-1}\right\| / \left\|x_k\right\|$
1	1.2093023	
1.2093023	1.2000168	0.1730769
1.2000168	1.2000011	0.0077377
1.2000011	1.2000551	0.0000131

2. Seja A uma matriz de ordem n. Podemos encontrar A^{-1}, a inversa de A, resolvendo o conjunto de sistemas lineares

$$Ax^{(i)} = e^{(i)},\ i = 1, ..., n\,,$$

em que os vetores $e^{(i)}$ são as colunas da matriz identidade de ordem n e os vetores $x^{(i)}$ são as colunas de A^{-1}. Utilizando decomposição LU, inverta a matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

A decomposição LU de A é

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0.5 & -1 & 1 \end{pmatrix}\,,\ U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0.5 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Para encontrar a primeira coluna de A^{-1}, precisamos resolver o sistema

$$LUx = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

que dá $x = (0.5\ 0\ \ -0.5)^T$. Resolvendo para as outras duas colunas de A^{-1}, temos

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5 & -0.5 & 0.5 \\ 0 & 1 & -1 \\ -0.5 & 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}.$$

3. Supomos que o sistema linear

$$\begin{aligned} x_1 - \alpha x_2 &= c_1 \\ -\alpha x_1 + x_2 - \alpha x_3 &= c_2 \\ -\alpha x_2 + x_3 &= c_3 \end{aligned}$$

seja resolvido iterativamente pelas fórmulas

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \alpha x_2^{(k)} + c_1 \\ x_2^{(k+1)} &= \alpha\left(x_1^{(k)} + x_3^{(k)}\right) + c_2 \\ x_3^{(k+1)} &= \alpha x_2^{(k)} + c_3 \end{aligned}$$

Para que valores de α a convergência do método acima é garantida? Justifique.
A matriz de iteração para esse sistema é

$$B = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & \alpha \\ 0 & \alpha & 0 \end{pmatrix}$$

Uma condição suficiente para o sistema iterativo convergir é que $\|B\|_\infty < 1$. Temos que

$$\|B\|_\infty = \|B\|_1 = 2\,|\alpha|\ ,$$

portanto para $|\alpha| < 0.5$, o processo iterativo converge. Uma condição necessária e suficente para que o sistema iterativo vá convergir é que o raio espectral de B seja menor que 1, $S(B) < 1$. Os autovalores de B são 0 e $\pm\sqrt{2}\alpha$, e portanto $S(B) = \sqrt{2}\,|\alpha|$ e o processo iterativo converge para $|\alpha| < \sqrt{2}/2 \simeq 0.7$

4. Ajuste um polinômio de grau 2 ao conjunto de pontos dados na tabela

x	-1	0	1	2
y	0	-1	0	7

, utilizando uma base ortonormal segundo o produto escalar

$$(p,q)=\sum_{i=0}^{3}p\left(x_i\right)q\left(x_i\right)\ ,$$

em que x_0,x_1,x_2,x_3 são pontos da tabela.
Primeiro ortonormalizamos a base $\left\{1,x,x^2\right\}$. Primeiro normalizamos $p_0=1$

$$\|1\|^2=\sum_{i=0}^{3}1=4\,,\ \hat{p}_0=\frac{1}{\|1\|}=\frac{1}{2}\,.$$

Em seguida obtemos p_1 tal que $(p_1,\hat{p}_0)=0$,

$$\begin{aligned} p_1 &= x-(x,\hat{p}_0)\,\hat{p}_0 \\ &= x-\frac{1}{4}\sum_{i=0}^{3}x_i=x-\frac{1}{2} \end{aligned}$$

e normalizamos p_1,

$$\|p_1\|^2=\sum_{i=0}^{3}\left(x_i-\frac{1}{2}\right)^2=5\,,\ \hat{p}_1=\frac{p_1}{\|p_1\|}=\frac{1}{\sqrt{5}}\left(x-\frac{1}{2}\right)$$

Finalmente, calculamos p_2 tal que $(p_2,\hat{p}_0)=(p_2,\hat{p}_1)=0$:

$$\begin{aligned} p_2 &= x^2-\left(x^2,\hat{p}_0\right)\hat{p}_0-\left(x^2,\hat{p}_1\right)\hat{p}_1 \\ &= x^2-\frac{1}{4}\sum_{i=0}^{3}x_i^2-\frac{1}{5}\sum_{i=0}^{3}x_i^2\left(x_i-\frac{1}{2}\right) \\ &= x^2-x-1 \end{aligned}$$

Normalizando, temos

$$\left\|x^2-x-1\right\|^2=4\,,\ \hat{p}_2=\frac{1}{2}\left(x^2-x-1\right)\ .$$

O polinômio do segundo grau que melhor ajusta os dados da tabela segundo mínimos quadrados é

$$p\left(x\right)=a_0\hat{p}_0+a_1\hat{p}_1+a_2\hat{p}_2\,,$$

onde

$$a_0=(y,\hat{p}_0)=\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{3}y_i=3$$

$$a_1=(y,\hat{p}_1)=\frac{1}{\sqrt{5}}\sum_{i=0}^{3}y_i\left(x_i-\frac{1}{2}\right)=\frac{11}{\sqrt{5}}$$

$$a_2=(y,\hat{p}_2)=\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{3}y_i\left(x_i^2-x_i-1\right)=4$$

5. Considere a integral

$$I\left(a\right)=\int_0^a x^4e^{-x}dx$$

(a) Obtenha $I(1)$ com erro relativo inferior a 10^{-2} usando a regra de Simpson 3/8.
O valor exato da integral é

$$\begin{aligned}\int_0^1 x^4 e^{-x} dx &= -e^{-x}\left(x^4+4x^3+12x^2+24x+24\right)\Big|_0^1 \\ &= 24-\frac{65}{e}\approx 0.08784\end{aligned}$$

Aplicando Simpson 3/8 para $h=1/3$ temos

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(x)\,dx &\approx \frac{3h}{8}\left(f(0)+3f\left(\frac{1}{3}\right)+3f\left(\frac{2}{3}\right)+f(1)\right) \\ &\approx 0.08512\end{aligned}$$

O erro relativo é aproximadamente 0.031. Aplicando Simpson 3/8 para $h=1/6$, temos

$$\begin{aligned}\int_0^1 f(x)\,dx &\approx \frac{3h}{8}\left(f(0)+3f\left(\frac{1}{6}\right)+3f\left(\frac{2}{6}\right)+2f\left(\frac{3}{6}\right)+3f\left(\frac{4}{6}\right)+3f\left(\frac{5}{6}\right)+f(1)\right) \\ &\approx 0.08782\end{aligned}$$

O erro relativo é aproximadamente 2×10^{-4}.

(b) Calcule exatamente $I(\infty)$, a menos de erros de arrendondamento, usando quadratura gaussiana.
A integral

$$\int_0^\infty e^{-x}x^4 dx$$

pode ser resolvida exatamente utilizando quadratura gaussiana com um polinômio interpolador de grau $2n+1\geq 4$ ou $n\geq 3/2$. Logo, $n=2$, utilizamos as três raízes reais do polinômio de Laguerre de grau 3 para realizar a interpolação. Assim,

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-x}x^4 dx &\approx (0.4157745567)^4\times 0.7110930099 \\ &\quad +(2.294280360)^4\times 0.278517735 \\ &\quad +(6.289945082)^4\times 0.01038925650 \\ &\approx 24\end{aligned}$$