

Nome: _____ RA: _____

Questão 1. (30 pontos)Considere os métodos iterativos para solução de um sistema linear $Ax = b$.

- (a) Suponhamos que a cada iteração k tenhamos que verificar se $Ax^{(k)} - b$ ou $x^{(k)} - x^{(k-1)}$ estão próximos de zero. Explique como realizar esses testes e qual o seu custo computacional em termos de número operações aritméticas.
- (b) Sejam agora os métodos de Gauss-Seidel e Gauss-Jacobi para a solução de $Ax = b$. Represente esquematicamente um destes métodos e calcule o custo de efetuar *uma* iteração.
- (c) Baseado no número de operações calculado nas letras (a) e (b) acima, a partir de quantas iterações torna-se mais vantajosa a utilização da Eliminação Gaussiana (ou Fatoração LU)?

Solução: (a) O teste de “proximidade” pode ser calculado considerando a norma dos vetores $Ax^{(k)} - b$ e $x^{(k)} - x^{(k-1)}$ (uma norma computacionalmente “eficiente” é a norma ∞). Para calcular o vetor-diferença precisamos da ordem de n operações (subtrações), enquanto para calcular o vetor resíduo precisamos, em geral, de $2n^2$ operações (multiplicações/somas), por conta da multiplicação da matriz A pelo vetor $x^{(k)}$.

(b) No método de Jacobi, a iteração é dada por:

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j^{(k-1)} \right).$$

No método de Gauss-Seidel:

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k-1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right).$$

Em ambos os métodos precisamos fazer o equivalente a multiplicar uma matrix $n \times n$ por um vetor $n \times 1$, o que requer $2n^2$ operações.

(c) Somando as operações aritméticas das letras (a) e (b), precisamos, a cada iteração, da ordem de $4n^2$ operações. Como na Eliminação Gaussiana precisamos da ordem de $2/3n^3$ operações, então se forem necessárias mais do que $n/6$ iterações dos métodos de Gauss-Seidel ou Gauss-Jacobi, a Eliminação Gaussiana é mais vantajosa. (O importante aqui é perceber que enquanto fizermos até $O(n)$ iterações nos métodos de Jacobi/Gauss-Seidel, eles ainda estão competitivos (em termos de custo), com a eliminação Gaussiana. As constantes dependem do modo de realizar as contagens de operações, ou da otimização nos cálculos).

Questão 2. (30 pontos)

Um antigo método para encontrar a raiz p -ésima positiva de um número real $a > 0$ (isto é, $\sqrt[p]{a}$, ou ainda $a^{1/p}$, $p > 2$) é, a partir de uma aproximação inicial x_0 , realizar as iterações

$$x_{k+1} = \frac{1}{p} \left((p-1)x_k + \frac{a}{x_k^{p-1}} \right).$$

- Formule o problema de encontrar $\sqrt[p]{a}$ como um problema de zeros de uma função real e, a partir daí, deduza a expressão acima aplicando algum dos métodos conhecidos
- Encontre uma aproximação para $\sqrt[3]{5}$ fazendo 2 iterações do método acima, com aproximação inicial $x_0 = 1.6$. Considerando que a solução real, com aproximação de 6 casas decimais, é $x^* \approx 1.709975$, calcule o erro do valor obtido.
- Considere a sua formulação para o problema no item (a). É possível utilizar o Método da Bisseção para aproximar $\sqrt[3]{5}$ com intervalo inicial $[a_0, b_0] = [1, 2]$? Caso seja possível, realize 2 iterações desse método. Quantos passos seriam necessários para obter o *mesmo* erro de aproximação (ε) encontrado no item anterior (critério de parada $|a_k - b_k| < \varepsilon$)? Explique essa diferença.

Solução: (a) Seja a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = x^p - A$. Encontrar $\sqrt[p]{A}$ é equivalente a encontrar a raiz positiva de $f(x)$. Com efeito, $f(x) = 0$ se e somente se $x^p - A = 0 \Rightarrow x = \sqrt[p]{A}$, considerando $x > 0$. Como $f'(x) = px^{p-1}$, utilizando o Método de Newton-Raphson para a função f :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^p - A}{px_k^{p-1}} = \frac{p-1}{p}x_k + \frac{A}{px_k^{p-1}},$$

que é a fórmula desejada.

(b) Partindo de $x_0 = 1.5$, trabalhando com 6 casas decimais, temos $x_1 = 1.717708$, $x_2 = 1.710010$. Comparando com a solução real:

$$|1.710010 - 1.709975| \approx 3.5 \times 10^{-5}$$

(c) É fácil ver que $f(1)f(2) < 0$. Como a função é contínua, garantimos a existência de uma raiz real no intervalo e portanto podemos utilizar o Método da Bisseção. Lembrando que a cada iteração do Método da Bisseção dividimos o intervalo por 2, temos

$$|x - x_k| \leq \frac{|a_0 - b_0|}{2^{k+1}}.$$

Para garantir uma precisão da ordem de 3.5×10^{-5} precisaríamos que

$$\frac{|a_0 - b_0|}{2^{k+1}} < 3.5 \times 10^{-6} \therefore k + 1 > -\log_2(3.5 \times 10^{-5}) \therefore 14 \text{ iterações}$$

Essa diferença se dá ao fato de que a ordem de convergência do Método da Bissecção é inferior (linear) à do Método de Newton (quadrática), garantidas as hipóteses de convergência. (A depender do jeito que você começa a contar as iterações, o resultado pode dar 14 ou 13 iterações, o que não influencia o raciocínio.)

Questão 3. (30 pontos)

Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $z = f(x, y) = e^x + e^y$. Gostaríamos de encontrar o ponto do gráfico de $f(x, y)$ mais próximo de $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, 0)$.

- Formule este problema como o de encontrar zeros de um sistema de equações não-linear (*Dica: Minimize $d(x, y)^2$, onde $d(x, y)$ é a distância entre um ponto do gráfico $(x, y, f(x, y))$ e $(1, 1, 0)$*).
- Escreva o sistema de equações e mostre que o jacobiano nunca será singular.
- Realize 1 iteração do Método de Newton a partir do ponto $x^{(0)} = (0, 0, 0)$. Considerando as características do jacobiano do sistema, você considera custosa cada iteração? Explique

Solução: (a) A distancia de $(1, 1, 0)$ até um ponto genérico do gráfico de f é dada por

$$d(x, y)^2 = (x - 1)^2 + (y - 1)^2 + (e^x + e^y)^2.$$

Para minimizar essa distância, encontramos a solução para o sistema de equações

$$\left(\frac{\partial(d(x, y)^2)}{\partial x}, \frac{\partial(d(x, y)^2)}{\partial y} \right) = (0, 0)$$

(b) O sistema que devemos resolver é

$$\begin{cases} g_1(x, y) = 2e^{x+y} + 2x + 2e^{2x} - 2 = 0 \\ g_2(x, y) = 2e^{x+y} + 2y + 2e^{2y} - 2 = 0 \end{cases}.$$

Calculando o Jacobiano do sistema:

$$J(x, y) = \begin{pmatrix} 2 + 4e^{2x} + 2e^{x+y} & 2e^{x+y} \\ 2e^{x+y} & 2 + 4e^{2y} + 2e^{x+y} \end{pmatrix}$$

É fácil ver que $\det J > 0$. Por exemplo, há duas maneiras (i) Fazendo a conta toda:

$$\det J = 8e^{x+y} + 8e^{3x+y} + 16e^{2x+2y} + 8e^{x+3y} + 8e^{2x} + 8e^{2y} + 4 > 0.$$

(ii) Sem fazer a conta toda:

$$\begin{aligned} \det J &= (\text{algo positivo} + 2e^{x+y})(\text{algo positivo} + 2e^{x+y}) - 4e^{x+y} \\ &= \text{algo positivo} + 4e^{x+y} - 4e^{x+y} > 0. \end{aligned}$$

(c) $x_0 = (0, 0)$. 1a Iteração:

$$J(0, 0)p = g(0, 0) \Rightarrow \begin{pmatrix} 8 & 2 \\ 2 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \therefore p = \begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.2 \end{pmatrix}$$

$$x^{(1)} = x^{(0)} - p = \begin{pmatrix} -0.2 \\ -0.2 \end{pmatrix}$$

Excetuando as chamadas das funções g e J , o procedimento mais caro em cada iteração é a solução do sistema linear $Jp = g$. Podemos utilizar, de uma maneira geral, por exemplo, os métodos de Eliminação Gaussiana ou métodos iterativos de Gauss-Seidel/Gauss-Jacobi. No caso 2×2 cada iteração requer apenas o cálculo de inversões e a solução de um sistema simples (que pode ser feito de maneira “literal”).

Escolha apenas **uma** das questões abaixo

Questão 4. (20 pontos)

A função

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

calcula a probabilidade de que uma variável com distribuição normal esteja entre 0 e x . Gostaríamos de determinar x tal que essa probabilidade seja 45%.

- Formule o problema de encontrar zeros de funções associado.
- Monte a iteração do Método de Newton aplicado ao problema acima. Qual cálculo requer maior esforço computacional em cada iteração? Explique.

Solução:

(a) (de graça). Devemos encontrar x tal que $p(x) = 0,45$, ou seja.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt - 0.45,$$

e gostaríamos de encontrar a raiz de f .

(b) A iteração de Newton é dada por

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

Mas $f'(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$ (por quê?). Então

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{x_k} e^{-\frac{t^2}{2}} dt - 0.45}{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x_k^2}{2}}}.$$

O maior esforço computacional está no fato de que teremos que resolver uma integral (numericamente) a cada iteração. Maneiras eficientes de fazer isso são cenários do próximo módulo do curso...

Questão 5. (20 pontos)

Seja $\varepsilon > 0$ um parâmetro real. Considere a matriz quadrada A e o vetor b dados por

$$A = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon & -1 \\ -1 & 1 + \varepsilon \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \varepsilon \end{pmatrix}.$$

- (a) Escreva a iteração do método de Jacobi para o sistema acima, explicitando o problema de ponto fixo associado. É possível garantir a convergência (teórica) do método?
- (b) O que ocorre com a iteração quando $\varepsilon \rightarrow 0$? Explique esse comportamento.

Solução:

- (a) O método de Gauss-Seidel considera que a matriz A é decomposta em $A = L + D + U$, com L contendo os elementos de A estritamente abaixo da diagonal, D contendo os elementos restantes e U contendo os elementos estritamente acima da diagonal. Para esta matriz A , temos

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

O Método de Gauss-Seidel define $E = L + D$ e $F = U$ e função de iteração $\varphi(x) = E^{-1}b - E^{-1}Fx$. Para o sistema específico desta questão, temos

$$\begin{aligned} x_1^{k+1} &= \frac{x_2^k + \varepsilon}{1 + \varepsilon} \\ x_2^{k+1} &= \frac{x_1^{k+1} + \varepsilon}{1 + \varepsilon}. \end{aligned}$$

- (b) Quanto $\varepsilon \rightarrow 0$ temos $x_1^{k+1} = x_2^k$ e $x_2^{k+1} = x_1^k$, ou seja, o método oscila, sem convergir. Uma das razões para isso é que a matriz torna-se não-diagonalmente dominante, não satisfazendo os critérios para convergência (uma análise mais fina utiliza o *número de condição* da matriz A).