MÈTODES NUMÈRICS I

Departament de Matemàtica Aplicada I
Facultat de Matemàtiques i Estadística (UPC)

Mercè Ollé, Antoni Susín

ÍNDEX

ORGANITZACIÓ I TEMARI

Objectius generals

En els molt diversos camps de la ciència, la tecnologia, la medicina, l'economia, les ciències socials, etc, es descriuen tot sovint fenòmens reals mitjançant models matemàtics. Buscar i aplicar les eines més adients per trobar solucions a problemes basats en aquests models constitueix l'objectiu principal de la matemàtica aplicada. Dissortadament, no sempre es pot recórrer als mètodes analítics clàssics per diverses raons: no s'adeqüen al model concret, llur aplicació resulta excessivament enrevessada, la solució formal resultant és tan complexa que fa impossible qualsevol interpretació posterior, etc. En tals casos són útils les tècniques numèriques que, mitjançant una labor de càlcul més o menys intensa, arriben a solucions aproximades.

L'objectiu de l'assignatura *Mètodes Numèrics I* és introduir aquestes tècniques numèriques, i representa així un primer curs de Càlcul Numèric. Està dirigit no només a estudiants de la llicenciatura de Matemàtiques, sinó també a estudiants d'altres carreres tècniques, científiques, o socials que vulguin conèixer, de manera tan pràctica com sigui possible, eines bàsiques que els permetin de fer front a qüestions numèriques amb comoditat i rigor.

Temari

Tema 1: Errors

Conceptes generals. Estimació i fitació d'errors. Propagació dels errors. Errors de truncament.

Tema 2: Interpolació de funcions

Concepte d'interpolació. Interpolació polinòmica, error d'interpolació. Mètodes de càlcul del polinomi interpolador. Interpolacions de Taylor i d'Hermite.

Tema 3: Aplicacions de la interpolació de funcions

Fórmules de derivació i integració interpolatòria i errors. Mètode de Richardson d'extrapolació repetida. Mètodes interpolatoris iteratius d'aproximació de solucions d'equacions no lineals.

Tema 4: Sistemes lineals

Conceptes bàsics. Resolució de sistemes triangulars. Mètodes gaussians. Mètodes d'ortogonalització, matrius de Householder. Càlcul de determinants i inverses de matrius. Anàlisi de l'error. Sistemes lineals sobredeterminats.

Tema 5: Valors i vectors propis

Conceptes bàsics. Deflació de matrius. Mètodes de la potència. Mètodes de Jacobi. Mètodes de reducció: Givens, Householder. Mètodes LR, QR.

Avaluació

En l'avaluació dels alumnes tindrà especial rellevància la feina desenvolupada en les classes pràctiques, on hauran d'implementar diversos algorismes corresponents a diferents parts del temari. Al final del curs hi haurà un examen, amb una part teòrica i una pràctica, aquesta consistent en la resolució d'exercicis, on caldrà utilitzar algunes de les rutines implementades en les classes pràctiques.

Bibliografia

Referències bàsiques

[ABD91] A. Aubanell, A. Benseny i A. Delshams. *Eines Bàsiques de Càlcul Numèric.* Volum 7 de *Manuals de la Univ. Autònoma de Barcelona*, Pub. Univ. Autònoma de Barcelona, Bellaterra, Barcelona, 1991. En castellà: Labor, 1993.

[BJM*92] C. Bonet, A. Jorba, M.T. M-Seara, J. Masdemont, M. Ollé, A. Susín i M. València. *Càlcul Numèric.* CPDA-ETSEIB, Univ. Pol. de Catalunya, Barcelona, 3a. edició, 1992.

[Cia82] P.G. Ciarlet. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation.* Masson, Paris, 1982.

[DB74] G. Dahlquist i A. Björck. *Numerical Methods.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1974.

[Fro69] C.E. Froberg. *Introduction to numerical analysis.* Addison-Wesley, Reading, Mass., 1969. En castellà: Vicens Vives, 1977.

Referències recomanades

[AS65] M. Abramowitz i I.A. Stegun, editors. *Handbook of mathematical functions.* Dover, N.Y., 1965.

[CdB72] S.D. Conte i C. de Boor. *Elementary numerical analysis, an algorithmic approach.* McGraw-Hill, N.Y., 1972. En castellà: 1974.

[DM73] B. Demidovitch i I. Maron. *Eléments de calcul numérique.* Mir, Moscou, 1973. En castellà: Paraninfo, Madrid, 1977.

[Gas66] N. Gastinel. *Analyse numérique linéaire.* Hermann, Paris, 1966. En castellà: Reverté, 1975.

[Hen64] P. Henrici. *Elements of numerical analysis.* Wiley, N.Y., 1964. En castellà: Trillas, México, 1968.

[IK66] E. Isaacson i H.B. Keller. *Analysis of numerical methods.* Wiley, N.Y., 1966.

[OP81] J.M. Ortega i W.G. Poole, Jr. *An introduction to numerical methods for differential equations.* Pitman Pub. Inc., London, 1981.

[Ral65] A. Ralston. *A first course in numerical analysis.* McGraw-Hill, N.Y., 1965. En castellà: Limusa-Wiley, México, 1970.

[RR78] A. Ralston i P. Rabinowitz. *A first course in numerical analysis.* McGraw-Hill, N.Y., 2nd. edition, 1978.

[SB80] J. Stoer i R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis.* Springer, Berlin, 1980.

[Sch67] F. Scheid. *Numerical analysis, including 775 solved problems.* Schaum, N.Y., 1967. En castellà: 1972.

[WR71] J.H. Wilkinson i C. Reinsch. *Handbook for automatic computation. Vol. 2: Linear algebra.* Springer, Berlin, 1971.

[Wil65] J.H. Wilkinson. *The algebraic eigenvalue problem.* Clarendon, Oxford, 1965.

TEMA 1

ERRORS

1 El nombres següents provenen d'un computador que usa aritmètica de coma flotant de 4 dígits:

$$A = 0.4523 \times 10^4 \qquad B = 0.2115 \times 10^{-3} \qquad C = 0.2583 \times 10^1 .$$

Realitzeu les operacions següents indicant-ne l'error absolut i el relatiu:

i) $A + B + C$, ii) A/C, iii) $A - B$, iv) $A - B - C$, v) $A \times B/C$, vi) $B/C \times A$.

2 Calculeu $f(x) = 1 - \cos x$ amb aritmètica de coma flotant de 6 dígits, per a $|x| < 10^{-3}$. És fiable el resultat? Feu el mateix amb la representació de $f(x)$

$$f(x) = \frac{\sin^2 x}{1 + \cos x} .$$

Trobeu una representació alternativa de $f(x)$ per a $|x|$ petit.

3 Se sap que la sèrie $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n}$ és divergent. No obstant això si la "intentem sumar" en un ordinador usant precisió simple (per qüestions de temps) dóna un valor concret. Trobeu aquest valor i expliqueu aquest fenòmen.

4 Useu aritmètica de 3 dígits amb tall per tal de calcular la suma $\sum_{i=1}^{10} \frac{1}{i^2}$ primer en l'ordre natural $\frac{1}{1} + \frac{1}{4} + \ldots + \frac{1}{100}$ i després a l'inrevés $\frac{1}{100} + \frac{1}{81} + \ldots + \frac{1}{1}$. Decidiu quin és el mètode més exacte de tots dos.

5* En un ordinador IBM, cada cel·la de memòria està formada per 32 posicions binàries (bits). Sabem que tot nombre p s'emmagatzema en punt flotant hexadecimal (en base 16) de la forma següent: un cop escrit p en la forma $\pm p' \times 16^{(p"-64)}$ amb $p" \geq 0$, $\frac{1}{16} \leq p' < 1$, s'emmagatzemen en els 32 bits i successivament: el signe (0 si $+$, 1 si $-$) (1 bit), l'exponent modificat $p"$ en base 2 (7 bits) i les primeres xifres no enteres de la mantissa p' en base 2 (24 bits, en precisió simple, i 56 bits, en precisió doble). Notem que un nombre emmagatzemat en precisió doble ocupa 2 cel·les de memòria.

a) Indiqueu com s'emmagatzemen en precisió simple 1.0, 1.1 i -17.0.

b) Expresseu, en forma decimal, els nombres positius més gran i més petit que poden ser emmagatzemats.

c) Calculeu l'error relatiu màxim, en notació decimal, amb què pot ser emmagatzemat un nombre qualsevol en precisió simple i doble.

6 Demostreu que en l'operació $\sqrt{x}$ l'error relatiu és aproximadament la meitat de l'error relatiu de les dades. Direm que l'operació de fer $\sqrt{x}$ és una operació *segura* respecte a l'error relatiu. Feu patent la "inseguretat" de l'operació $f(x) = \frac{1}{1-x^2}$ per a $x \simeq 1$.

7 Amb quina exactitud s'ha de mesurar el radi d'una esfera i amb quants decimals s'ha de donar el número π perquè el seu volum es conegui amb un error relatiu menor que el 0.01%? Considereu ambdós efectes per separat.

8* a) Determineu l'error màxim per a $y = x_1 x_2^2$, per a

$$\bar{x}_1 = 2.0 \pm 0.1 \ , \quad \bar{x}_2 = 3.0 \pm 0.2 \ .$$

i) Exactament, operant amb intervals.

ii) Emprant les fórmules (aproximades) de l'error maximal en les operacions aritmètiques.

iii) Calculant primerament l'error relatiu, usant que l'error relatiu és aproximadament l'error absolut del logaritme.

b) Calculeu l'error estàndard amb les mateixes dades d'a), suposant que les fites per als errors de x_1, x_2 són, de fet, desviacions estàndard.

9* Donat el sistema d'equacions lineals

$$\left.\begin{array}{ccccc} 3x & + & ay & = & 10 \\ 5x & + & by & = & 20 \end{array}\right\} ,$$

on $a = 2.100 \pm 5 \times 10^{-4}$ i $b = 3.300 \pm 5 \times 10^{-4}$; amb quina exactitud pot ser determinat $x + y$?

10 Hem de calcular x^n per a n natural. Suposem que x està emmagatzemat amb un error relatiu menor que ϵ, que les multiplicacions es fan amb error relatiu menor que ϵ i que les funcions ln i exp donen errors relatius fitats per 4ϵ i 6ϵ, respectivament. Compareu l'acumulació dels errors en els dos algorismes següents per al seu càlcul:

i) $x^n = \exp[n \ln(x)]$;

ii) a partir de la representació de n en base 2 (que suposem coneguda),
$n = a_k \cdots a_1 a_0 \quad (a_k \neq 0)$, es calcula $\quad x^n = x^{a_k 2^k + \ldots + a_1 2 + a_0}$ a partir del següent algorisme:

Es calculen les potències x^{2^j} $(j = 1 \div k)$ i es multipliquen aquelles que es corresponen amb els uns de la representació en base 2. Per exemple,

x^{21} es calcula fent $x \to x^2 \to x^4 \to x^8 \to x^{16} \to x^{20} = x^{16} \cdot x^4 \to x^{21} = x^{20} \cdot x \quad .$

11* Treballant amb 5 xifres decimals, calculeu

$$\sqrt[k]{2.15283} - \sqrt[k]{2.15263} \ (k = 2, 3, 4) \ .$$

a) Directament.

b) Usant fórmules equivalents, millors des del punt de vista numèric. (Indicació: Feu la divisió de polinomis $(a^k - b^k)/(a - b)$).

c) Compareu els resultats i comenteu-los.

12* Trobeu una expressió de la fita aproximada de l'error absolut en avaluar la funció

$$f(x) = \sqrt{3 + \ln^2(x)} \ .$$

Hom suposa que els errors relatius en la representació de nombres, operacions aritmètiques, arrels quadrades i logaritmes són, en valor absolut, menors que ϵ, 2ϵ, 3ϵ i 5ϵ, respectivament; a més, hom comet un error relatiu menor, en valor absolut, que 4ϵ a l'hora de mesurar x.

13 Es vol calcular $f_n(x)$, on $f_n(x) = n! \left[e^x - \left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} \right) \right]$, per a $x = 1$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

a) Demostreu que se satisfà la següent llei de recurrència

$$f_{n+1}(x) = (n + 1) f_n(x) - x^{n+1} \ .$$

b) Calculeu $f_n(1)$, $n = 1 \div 10$ amb aritmètica de coma flotant amb 5 dígits significatius. És fiable el resultat? Què es pot fer per a calcular $f_5(1)$?

14* Usant un mètode recurrent, calculeu el valor de les integrals

$$I_j = \int_0^1 x^j \sin(\pi x) \ dx \ (j = 2, 4, \ldots, 20) \ .$$

Estudieu l'estabilitat del mètode trobat.

TEMA 2

INTERPOLACIÓ

15* Donada la següent taula de la funció $f(x) = e^x$:

x	0.0	0.2	0.4	0.6
$f(x)$	1.0000	1.2214	1.4918	1.8221

a) Trobeu valors aproximats de $\sqrt[3]{e}$ per interpolació lineal i cúbica, emprant els mètodes de Lagrange i de Newton.

b) Doneu fites respectives dels errors deguts a la interpolació. Compareu les dites fites amb l'error exacte, sabent que $\sqrt[3]{e} = 1.395612425\ldots$

16 Doneu l'expressió del polinomi interpolador de Lagrange en cas d'utilitzar abscisses equidistants: $x_k = x_0 + kh$.

17 Definim $S_n = 1^2 + 2^2 + \cdots + n^2$. Proveu, utilitzant la fórmula d'interpolació de Newton, que S_n és un polinomi, i calculeu-lo.

18 L'equació $x^3 - 15x + 4 = 0$ té una arrel pròxima a 0.3. Obteniu aquesta arrel amb 3 xifres decimals usant interpolació inversa.

19 Si ens proposem calcular $A = (1.001)^{1000}$ mitjançant l'aplicació d'interpolació de Taylor a la funció $y(x) = (1 + x)^{1000}$, quants termes caldrien? (Considereu $\ln y(x)$ i utilitzeu que $\exp(0.999500) = 2.71692$ és correcte fins a 6 dígits per tal de calcular A amb la mateixa precisió.)

20* a) Doneu de forma explícita els polinomis de Taylor en el punt $x = 0$ a les funcions següents:

i) $\cosh x = (e^x + e^{-x})/2$, $\sinh x = (e^x - e^{-x})/2$; ii) $(1 + x)^\alpha$ $(\alpha = 2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, -\frac{1}{3})$.

b) Trobeu expressions per als errors i fites d'aquestes.

c) Estudieu la convergència dels desenvolupaments de Taylor.

d) Calculeu les funcions donades en $x = 0.001$ amb un error menor que 10^{-20}.

21* Trobeu, com a mínim, els cinc primers termes no nuls dels desenvolupaments de Taylor en $x_0 = 0$ de les funcions següents:

$$\begin{array}{ll}
\text{a)} & e^{3x}, \quad e^x \sin x^2, \quad x^4(1+x^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \tan(3x), \quad \sin^3 x; \\
\text{b)} & \dfrac{\sin x}{x}, \quad \dfrac{\cos x - 1}{x^2}, \quad \dfrac{\sin x - x - x^3/6}{x^5}, \quad \ln\left(\dfrac{1+x}{1-x}\right)^{\frac{1}{x}}; \\
\text{c)} & \dfrac{x^5}{\sin^3 x}, \quad \dfrac{x(\cos x - 1)}{\sin x - \sin^3 x}, \quad \dfrac{(1+x)^{\frac{1}{3}} - (1-x)^{\frac{1}{3}}}{(1+x)^{\frac{1}{3}} + (1-x)^{\frac{1}{3}}}; \\
\text{d)} & e^{\sin x}, \quad e^{\sqrt{\cos x}}, \quad \ln(\cos x).
\end{array}$$

22 *(Interpolació d'Hermite)* a) Demostreu que el polinomi p_{2m+1}, de grau menor o igual que $2m + 1$, complint:

$$p_{2m+1}(x_k) = f_k \ , \quad p'_{2m+1}(x_k) = f'_k \quad (k = 0 \div m) \ ,$$

existeix sempre i és únic.

b) Demostreu que

$$p_{2m+1}(x) = \sum_{i=0}^{m} f_i \Phi_i(x) + \sum_{i=0}^{m} f'_i \Psi_i(x) \ ,$$

amb

$$\Phi_i(x) = (1 - 2l'_i(x)(x - x_i))l_i^2(x) \text{ i } \Psi_i(x) = (x - x_i)l_i^2(x),$$

essent $l_i(x)$ el polinomi de Lagrange associat al punt x_i $(i = 0 \div m)$.

c) Demostreu també:

$$\sum_{i=0}^{m} \Phi_i(x) = 1 \ ,$$

$$\sum_{i=0}^{m} \Phi_i(x) x_i^j + j \sum_{i=0}^{m} \Psi_i(x) x_i^{j-1} = x^j \ (j = 1 \div 2m+1) \ ,$$

$$\sum_{i=0}^{m} \Phi_i(x) x_i^{2m+2} + (2m+2) \sum_{i=0}^{m} \Psi_i(x) x_i^{2m+1}$$
$$= x^{2m+2} - (x-x_0)^2 \cdots (x-x_m)^2 \ .$$

d) Trobeu el polinomi interpolador d'Hermite $p_5(x)$ a $f(x) = e^x$ en els punts $x_0 = -1$, $x_1 = 0$ i $x_2 = 1$, emprant les fórmules d'a) i diferències dividides generalitzades. Fiteu l'error $|f(x) - p_5(x)|$ a l'interval $[-1, 1]$.

23 Calculeu el polinomi interpolador d'Hermite per la funció $g(x)$ de la qual sabem que $g(0) = 0$, $g'(0) = 1$, $g(1) = 3$, $g'(1) = 6$.

24* Calculeu $\tan 22.5°$ fent servir interpolació d'Hermite en 0° i 45°. Fiteu l'error comès i compareu la fita trobada amb l'error exacte.

25 a) Siguin $x_k = x_0 + kh$, $k = 0, \ldots, m$, punts equidistants donats. Determineu un *spline cúbic* $B_i(x)$ que compleixi:

i) $B_i(x)$ és un polinomi de grau 3 en cada subinterval $[x-k, x-k+1]$,

ii) $B_i(x_k) = \begin{cases} 0, & \text{si } j < i-1 \text{ o } j > i+1 \\ 1, & \text{si } j = i \end{cases}$,

iii) $B_i'(x) = B_i''(x) = 0$ per a $x = x_{i-2},\ x_{i+2}$.

a) Demostreu que $B_i(x) = 0$ quan $|x - x_i| \geq 2h$ i $B_i(x) > 0$ quan $|x - x_i| \leq 2h$ (i.e., el suport de B_i és $[x_{i-2}, x_{i+2}]$).

b) Les funcions $B_i(x)$ s'anomenen *B-splines*. Veieu que tot spline cúbic amb nodes sobre la xarxa $\{x_k\}$, $k = 0, \ldots, m$ té una única representació de la forma $s(x) = \sum_{i=-1}^{m+1} a_i B_i(x)$. (i.e., els B-splines són una base dels splines cúbics).

26 Suposeu que $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ i $f \in \mathcal{C}^2[a,b]$. Notem $f_i = f(x_i)$, $i = 0 \div n$ i considereu l'spline que compleix

$$s(x_i) = f_i \qquad i = 0, \ldots, n,$$
$$s'(a) = f'(a) \quad s'(b) = f'(b).$$

a) Demostreu que es té

$$\int_a^b (f''(x))^2 \, dx - \int_a^b (s''(x))^2 \, dx = \int_a^b (f''(x) - s''(x))^2 \, dx$$

(Indicació: agafeu la segona part de la igualtat, desfeu el quadrat i apliqueu parts.)

b) Deduïu que per a tota $u \in \mathcal{C}^2[a,b]$ que interpoli (és a dir que $u(x_i) = f_i$) i a més $u'(a) = f'(a)$ i $u'(b) = f'(b)$ es té

$$\int_a^b [u''(x)]^2 \, dx \geq \int_a^b [s''(x)]^2 \, dx \,, \quad \text{amb la igualtat per a} \quad s = u.$$

Aquesta és la propietat de *mínima energia* dels splines amb derivada fixada als extrems.

TEMA 3

APLICACIONS DE LA INTERPOLACIÓ DE FUNCIONS

Derivació numèrica

27 a) Calculeu els coeficients de la fórmula de quadratura interpolatòria

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} f(x)\,\mathrm{d}x \;\simeq\; Af(0) + Bf(\frac{1}{2}) + Cf(1)$$

substituint f pel seu polinomi interpolador en els punts $0, \frac{1}{2}, 1$.

b) Trobeu una fita de l'error quan $f \in \mathcal{C}^3([0,1])$.

c) Aplicació: Calculeu $\displaystyle\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x$ usant la fórmula de l'apartat a). Serveix en aquest cas la fita trobada a l'apartat b)?

28 a) Determineu la fórmula de derivació numèrica

$$g'(0) \simeq w_{-1}g(-1) + w_0 g(0) + w_1 g(1)$$

de manera que sigui exacta per a tots els polinomis de grau menor o igual que 2.

b) És exacta també per als polinomis de grau menor o igual que 3?

c) Usant els apartats anteriors, deduïu una fórmula de derivació de la forma

$$f'(c) \simeq a_{-1}f(c-h) + a_0 f(c) + a_1 f(c+h)$$

de manera que sigui exacta per a tots els polinomis de grau menor o igual que 3.

29 Calculeu $f'''(10)$, on $f(x) = (x^3+1)^{1/2}$, amb un error relatiu d'un 1 %. (Indicació: $f(x) = x^{3/2}(1+x^{-3})^{1/2}$, desenvolupeu en potències negatives de x i deriveu).

30 a) Escriviu de manera explícita una fórmula de derivació per al càlcul de $f'(a)$, deduïda per derivació del polinomi d'interpolació en les abscisses a, $a+h$, $a+2h$, $a+3h$ i $a+4h$.

b) Doneu una expressió exacta per a l'error, si $f \in \mathcal{C}^5([a, a+4h])$.

c) Trobeu una expressió asimptòtica per a l'error, quan f és suficientment diferenciable.

31* Disposem de les dades següents d'una funció f:

x	0.4	0.5
$f(x)$	1.554284	1.561136
$f'(x)$	0.243031	-0.089618

a) Trobeu l'abscissa del màxim de f a $[0.4, 0.5]$, aproximant-la pel màxim del polinomi interpolador d'Hermite $p_3(x)$ a la taula donada de f.

b) Suposant que $f \in \mathcal{C}^4([x_0, x_1])$, trobeu la següent expressió per a la derivada e_3' de l'error en la interpolació d'Hermite en dos punts $x_0 < x_1$:

$$e_3'(x) \equiv f'(x) - p_3'(x) = \frac{f^{(4)}(\eta(x))}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-\xi)\ ,$$

on $\xi \in (x_0, x_1)$ i $\eta(x) \in < x_0, x_1, x >$.

c) Fiteu l'error en l'abscissa del màxim degut a la interpolació, sabent que $\mid f^{(4)}(x) \mid < 10^3$ i $\mid f^{(2)}(x) \mid > 1$ $\forall x \in (0.4, 0.5)$.

Integració numèrica

32 Determineu els pesos i les abscisses de la fórmula d'integració

$$\int_{-1}^{1} g(t)dt \simeq w_0 g(t_0) + w_1 g(t_1)$$

per tal que sigui exacta per a tots els polinomis del grau més alt possible.

33 Considerem una funció f suficientment diferenciable.

a) Doneu de forma explícita les *fórmules d'integració numèrica de Taylor*

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{j=0}^{n} C_j f^{(j)}(c) \ ,$$

trobades per integració numèrica del polinomi d'interpolació de Taylor de grau més petit o igual que n a f en una abscissa c de l'interval $[a, b]$.

b) Expliciteu la dita fórmula quan $c = a$ i quan $c = b$.

c) Doneu una expressió per a l'error en tots els casos.

34 Trobeu la integral

$$\int_0^1 \frac{\cos x - 1}{x^2} dx$$

per desenvolupament de Taylor de l'integrant amb un error menor que 10^{-10}.

35 Calculeu amb 5 xifres decimals correctes

$$\int_{10}^{\infty} (x^3 + x)^{-\frac{1}{2}} dx \ .$$

36 Sigui $f(x) = e^{-x^2} \cos x$. Sabent que $\left|f^{(4)}(x)\right| \leq 25$, $\forall\, x \in \mathbb{R}$, calculeu $\int_0^\infty \cos x e^{-x^2}\, dx$ amb error més petit que 10^{-6}.

37 Sigui $f(x) = \sin x^2$.

a) Calculeu la sèrie de Taylor de $f(x)$ al voltant de 0.

b) Useu a) per calcular $\int_0^1 f$ amb error menor que 10^{-6}.

c) Useu a) per trobar una fita de $\left|f^{(4)}(x)\right|$ a l'interval $[0, 1]$.

d) Useu c) per calcular de nou $\int_0^1 f$ amb error més petit que 10^{-6}.

38* El període d'un pèndol simple de longitud l, deixat lliure des d'un angle inicial α amb la direcció vertical en un lloc de la terra on l'acceleració de la gravetat val g, és

$$T = 4\sqrt{\frac{l}{g}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - K^2 \sin^2 \varphi}} \ , \quad K = \sin \frac{\alpha}{2} \ .$$

a) Trobeu el desenvolupament de Taylor de T com a funció de K.

b) Descobriu-hi la fórmula aproximada $T \simeq 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}$, vàlida per a petites oscil·lacions.

c) Quin error es comet usant la fórmula de b) quan $\alpha = 5°$?

39 a) Deduïu la regla dels rectangles :

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\, dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3} f''(\xi), \ \ h = \frac{x_2 - x_0}{2}, \ \ x_1 = x_0 + h.$$

b) Feu servir la regla composta de Simpson amb pas $h = 1/3$ per a calcular la integral

$$\int_{-1}^{1} e^{-x^2}\, dx$$

(Considerarem aquest valor com el resultat exacte).

c) Calculeu aquesta integral mitjançant la regla composta dels rectangles amb un error $< 10^{-3}$ i $< 10^{-4}$.

d) Usant el mateix nombre d'intervals, aproximeu la integral per la fòrmula de trapezis composta. Determineu una fita de l'error comés. És millor rectangles o trapezis? Perquè?

e) Fiteu l'error en l'avaluació de la regla composta dels rectangles si els valors de la funció integrand es coneixen amb un error $< 10^{-10}$ i les operacions es fan sense error. Quin serà el pas a emprar a fi que la fita dels errors de truncament de la fórmula sigui aproximadament igual a la fita dels errors provinents de l'avalució de la funció?

Extrapolació

40 a) Demostreu que el semi-perímetre del polígon regular de n costats ($n \geq 3$) inscrit a la circumferència unitat és $P_n = n \sin(\frac{\pi}{n})$.

b) $\forall n \geq 3$, aproximem π per P_n; demostreu que l'error és de la forma

$$\pi - P_n = \frac{A_2}{n^2} + \frac{A_4}{n^4} + \frac{A_6}{n^6} + \cdots$$

per a constants A_{2k} ($k \geq 1$) adequades i independents de n.

c) Calculeu P_3, P_4 i P_6;en acabat, feu dues etapes d'extrapolació per a obtenir π amb més precisió (treballeu amb 3 decimals).

41 Considerem les taules de valors de les funcions següents:

x	$f(x)$
0.8	1.28062485
0.9	1.34536241
1.0	1.41421356
1.1	1.48660688
1.2	1.56204994

x	$g(x)$
0.8	0.59719544
0.9	0.72428717
1.0	0.84147098
1.1	0.93561600
1.2	0.99145835

.

Calculeu $f'(1)$, $f''(1)$, $g'(1)$ i $g''(1)$, utilitzant extrapolació.

42 Feu el problema anterior utilitzant una taula de diferencies. Fiteu l'error i compareu resultats.

43 a) Calculeu aproximacions de la derivada de la funció $f(x) = \ln x$ en $x = 2$ emprant les fórmules

$$\begin{aligned} f'(a) &\simeq \frac{1}{h}(f(a+h) - f(a)) \ , \\ f'(a) &\simeq \frac{1}{2h}(f(a+h) - f(a-h)) \ , \end{aligned}$$

amb passos $h = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001$.

b) Usant l'expressió asimptòtica de l'error de truncament de les fórmules de derivació numèrica d'a), deduïu-ne expressions millors, quan el pas h tendeix a 0.

c) Apliqueu les fórmules trobades per extrapolació a b) al càlcul de la derivada proposada en a) i comenteu els resultats.

44* Considerem la fórmula de derivació per al càlcul de derivades segones de f en x_0

$$f_0^{(2)} \simeq \frac{1}{h^2}(\delta^2 - \frac{1}{12}\delta^4) f_0 \ .$$

a) Expresseu aquesta fórmula en funció dels valors de la taula de f, $\{(x_k = x_0 + kh, f_k = f(x_k))\}_{k=-2 \div 2}$.

b) Demostreu que aquesta fórmula es troba per extrapolació de la fórmula

$$f_0^{(2)} \simeq \frac{1}{h^2}\delta^2 f_0$$

i trobeu l'error de truncament d'aquella, si $f \in \mathcal{C}^6([x_0 - 2h, x_0 + 2h])$.

c) Si f s'avalua amb un error fitat per ϵ, quin seria el valor del pas h^* que hem d'emprar a fi que sigui mínima la suma de les fites d'error degudes a la discretització i a l'avaluació de la fórmula?

d) Aplicació: Trobeu la derivada segona de la funció $f(x) = \sin(1 + x)$ en $x_0 = 0$ amb els passos $h = 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1$ i compareu amb el pas h^*, suposant que la funció es calcula amb 6 xifres decimals correctes.

45 Demostreu que en extrapolar trapezis amb passos h i $h/2$ s'obté la fórmula de Simpson amb pas $h/2$. Demostreu que si extrapolem Simpson amb passos h i $h/2$, el que s'obté encara és una fórmula de Newton-Cotes. Quina?

46 Expliqueu la ràpida convergència del mètode dels trapezis en calcular la integral $\int_0^1 e^{x^2(1-x)^2}\, dx$.

47 Calculeu $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \cos x \, dx$ amb 6 xifres significatives.

48 Calculeu $\int_0^{0.1} \arctan x \; dx$ amb error $< \frac{1}{2} 10^{-5}$.

a) Desenvolupant $\arctan x$ en sèrie de potències al voltant de l'origen; justifiqueu que la integral i la sèrie corresponent commuten.

b) Usant la regla dels trapezis.

c) Usant la regla de Simpson.

d) Usant trapezis amb h, $h/2$ i extrapolant. Trieu h per garantir que l'error dels trapezis amb pas h sigui menor que 10^{-2}. Quantes xifres milloren amb l'extrapolació?

49 Calculeu $\int_1^3 e^x \sin x \; dx$ amb una precisió de 10^{-4}.

a) Utilitzant la fórmula del trapezi combinada amb l'extrapolació de Richardson.

b) En quants subintervals hem de dividir l'interval $[1, 3]$ per tal de garantir la precisió requerida en el mètode de Simpson?

50 Considerem la fórmula d'integració numèrica següent: $\int_0^1 f(x)\, dx \approx w_0 f(0) + w_1 f(\theta) + w_2 f(1)$, amb $\theta \in (0, 1)$.

a) Imposant que la fórmula sigui exacta per als polinomis 1, x, x^2, calculeu w_i; $i = 0, 1, 2$ en funció de θ.

b) Sabent que aquesta fórmula de quadratura prové d'integrar el polinomi interpolador de $f(x)$ en les abscisses 0, θ i 1, i suposant que $\left|f^{(3)}(x)\right| < M$ a l'interval $(0, 1)$ doneu una expressió que fiti l'error E en funció de θ. (Indicació: demostreu que

$$\int_0^1 |x(x-\theta)(x-1)| \; dx = \int_0^\theta |x(x-\theta)(x-1)| \; dx - \int_\theta^1 |x(x-\theta)(x-1)| \; dx \;)$$

c) No disposant de cap altra cota millor per a les derivades, busqueu el θ òptim per tal de minimitzar la fita de l'error. Quant val la fita en aquest cas?

d) Quina és la fórmula d'integració que obtenim per al valor de θ de l'apartat anterior? (Demostreu que integra exactament polinomis de grau 3, i digueu quina fórmula alternativa de l'error coneixem per a aquesta quadratura.)

Equacions no lineals

51 Considerem la iteració simple $x_0 = 0$, $x_{k+1} = g(x_k)$ amb

$$g(x) = \frac{\epsilon - 2x^2 - x^3}{3} \; ,$$

amb ϵ suficientment petit.

a) Digueu si és convergent o no i, en cas afirmatiu, cap a quin límit.

b) Aplicació: Feu els càlculs per a $\epsilon = 0.1$ i trobeu, en aquest cas, l'ordre de convergència i la constant asimptòtica de l'error.

52 Sigui $f(x) = \dfrac{x^3+bx}{cx^2+d}$. Calculeu les constants b, c, d de manera que el mètode d'iteració tingui convergència cúbica cap a $\sqrt{a}$, $a \in \mathbb{R}^+$. A partir d'això calculeu $\sqrt{10}$ amb 10 xifres decimals.

53 Donada l'equació $f(x) = 2x - \ln x - 4$ volem trobar les seves arrels reals.

a) Digueu quantes arrels té i justifiqueu-ho.

b) Utilitzeu el teorema de Bolzano per a determinar intervals que separin les arrels.

c) Apliqueu Newton, fins obtenir 6 decimals correctes per trobar l'arrel més gran.

d) Expresseu l'equació de la forma $x = f(x)$ i busqueu un interval que asseguri la convergència de la iteració per a buscar l'arrel més petita.

e) Idem de d) per a buscar l'arrel més gran.

f) Representeu gràficament els esquemes iteratius obtinguts en els dos apartats anteriors.

54 El *mètode de la corda* fa servir la iteració

$$x_{k+1} = x_k - mf(x_k) \ (k \geq 0)$$

per al càlcul de zeros d'una funció f donada.

a) Per a quins valors de m és localment convergent cap a un zero simple α de f? Què passa si α és un zero múltiple de f?

b) Trobeu l'ordre de convergència en tots els casos.

c) Indiqueu quins problemes pràctics hi ha quan es volen assolir els ordres més elevats.

55 a) Demostreu que el mètode de Newton aplicat a la funció $f(x) = \frac{1}{x} - a$ permet calcular $\frac{1}{a}$ sense fer divisions.

b) Quina relació exacta existeix entre $e_{k+1} = x_{k+1} - \frac{1}{a}$ i $e_k = x_k - \frac{1}{a}$ $(k \geq 0)$?

c) Si $a = 0.4$ i $e_0 = -0.2$, per a quins valors de k tindrem $|\, e_k \,| \leq 10^{-20}$?

d) Doneu, en funció d'a, els valors de x_0 que fan que el mètode sigui convergent.

56 Trobeu $h(x)$ de l'equació

$$f(x) = x - \frac{F(x)}{F'(x)} + h(x)\left(\frac{F(x)}{F'(x)}\right)^2$$

per tal que la iteració $x_{k+1} = f(x_k)$ convergeixi cúbicament cap a una solució de $F(x) = 0$.

57 a) Modifiqueu el mètode de Txebixev

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} - \frac{f^{(2)}(x_k)f^2(x_k)}{2f'^3(x_k)} \ ,$$

per tal que tingui ordre almenys 3 quan l'usem per trobar zeros de multiplicitat coneguda m.

b) Aplicació: Calculeu, amb un error menor que 10^{-10}, el zero de $f(x) = (x \ln x - 1)^2$ que es troba prop de $x_0 = 1.8$ i comproveu numèricament l'ordre de convergència.

58 Considerem el següent mètode per a trobar extrems α (màxims o mínims) de funcions f de classe $\mathcal{C}^4$: un cop trobades les aproximacions x_k i x_{k-1}, cerquem la nova aproximació x_{k+1} com el zero de la derivada del polinomi interpolador $p_2(x)$ de grau mès petit o igual que 2 complint

$$p_2(x_k) = f(x_k), \quad p_2'(x_k) = f'(x_k), \quad p_2(x_{k-1}) = f(x_{k-1})\,.$$

a) Trobeu una expressió explícita de x_{k+1} en funció de x_k, x_{k-1}, $f(x_k)$, $f'(x_k)$ i $f(x_{k-1})$.

b) Deduïu la següent fórmula per a l'error d'aproximació de la derivada de la funció per la derivada del polinomi

$$f'(x) - p_2'(x) = \frac{f^{iv}(\eta(x))}{4!}(x-x_k)^2(x-x_{k-1}) + \frac{f'''(\xi(x))}{3!}(x-x_k)\left[2(x-x_{k-1}) + (x-x_k)\right]$$

emprant que $\dfrac{1}{3!}\dfrac{d}{dx}(f'''(\xi(x))) = \dfrac{1}{4!}f^{iv}(\eta(x))$.

c) Expresseu l'error $e_{k+1} = x_{k+1} - \alpha$ en funció dels errors e_k i e_{k-1}, considereu només el terme dominant del segon membre de la dita expressió per tal de deduir l'ordre i el coeficient asimptòtic del dit mètode, suposant que $f''(\alpha) \neq 0$.

59 Es vol calcular les arrels reals de $x^3 + x - 1000$ mitjançant iteració simple.

a) Demostreu que només té una arrel.

b) Formeu esquemes iteratius que no convergeixin cap a la solució.

c) Formeu-ne de tal manera que convergeixin. Quin serà el més ràpid? Determineu per a aquest, un interval on es compleixin les hipòtesis del teorema de punt fix. Determineu el mínim nombre d'iteracions per assegurar (teòricament) 6 xifres decimals exactes. Trobeu la solució.

d) Accelereu per Aitken la successió anterior.

60 Trobeu una solució propera a $x = .8$, $y = .4$ per al sistema

$$\left.\begin{array}{ll} x - x^2 - y^2 & = 0 \\ y - x^2 + y^2 & = 0 \end{array}\right\}$$

.

TEMA 4

SISTEMES LINEALS

61 Donada la matriu

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 0 & 6 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

a) Triangularitzeu-la usant amb pivotatge parcial i parcial esglaonat, especificant P, L, U.

b) Comproveu $PA = LU$.

c) Calculeu $\det A$ a partir de b).

d) Calculeu A^{-1} (tenint en compte la matriu de permutació P).

62 a) Proveu que si una matriu A és tridiagonal i expressem $A = LU$ amb

$$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & b_n & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \beta_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \beta_{n-1} & 1 & \\ & & & \beta_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & c_1 & & & \\ & \alpha_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \alpha_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & \alpha_n \end{pmatrix}$$

llavors α_i, β_j es poden determinar a partir de

$$\alpha_1 = a_1, \quad \beta_k = \frac{b_k}{\alpha_{k-1}}, \quad \alpha_k = a_k - \beta_k c_{k-1}, \quad k = 2, 3, \ldots, n \, .$$

b) Proveu que, amb aquesta descomposició, la solució de $Ax = b$ es pot calcular a partir de la substitució recursiva:

$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 \, , \quad y_i = b_i - \beta_i y_{i-1} \, , \quad i = 2, 3, \ldots, n \\ x_n &= \frac{y_n}{\alpha_n} \, , \quad x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{\alpha_i} \, , \quad i = n-1, \ldots, 2, 1 \end{aligned}$$

c) Apliqueu a), b) al sistema $Ax = b$ on

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix} , \qquad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

(Notem que A és diagonalment dominant i per tant $P = Id$).

63* a) Si $A = (a_{ij})$ és una matriu definida positiva, demostreu que:

i) $a_{ii} > 0$ $(i = 1 \div n)$;

ii) $\max_{i,j} |a_{ij}| = \max_i a_{ii}$;

iii) les submatrius $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})_{i,j=k\div n}$ $(k = 2 \div n)$, trobades en aplicar el mètode de Gauss, són definides positives i, per tant, que es pot portar a terme el procés sense haver de recórrer als pivotatges;

iv) $a_{ii}^{(k+1)} \leq a_{ii}^{(k)}$ $(i = k+1 \div n, \ k = 1 \div n-1)$.

b) Aplicació: Demostreu que la matriu

$$\begin{pmatrix} 13 & 11 & 11 \\ 11 & 13 & 11 \\ 11 & 11 & 13 \end{pmatrix}$$

és definida positiva, trobeu-ne la factorització de Txolesqui i el seu determinant.

64 a) Expliciteu el mètode LU per resoldre sistemes tridiagonals, pentadiagonals i heptadiagonals.

b) Compteu el nombre d'operacions requerides en cada cas.

c) Repetiu els apartats anteriors, suposant que la matriu del sistema és real i simètrica.

65* Considerem la matriu $n \times n$

$$A = \begin{pmatrix} a & 1 & & & & & \\ 1 & a & 1 & & & & \\ & 1 & a & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & a & 1 \\ & & & & & 1 & a \end{pmatrix}.$$

a) Demostreu que la matriu A és definida positiva per a $a \geq 2$.

b) Si $a \geq 2$, trobeu un mètode recurrent per fer la factorització de Txolesqui de la matriu A, $A = \mathcal{L}\mathcal{L}^\top$ amb

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & & & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & \\ & & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

c) Si l'element a_{11} d'A té un error absolut δ i els altres elements són exactes, doneu una estimació de l'error relatiu de α_n en fer la factorització, suposant δ prou petit.

66 a) Doneu un mètode directe de resolució de sistemes de la forma següent, dits *sistemes quasi-tridiagonals*:

$$\left(\begin{array}{ccccccc|c} a_1 & c_1 & & & & & e & z_1 \\ b_2 & a_2 & c_2 & & & & & z_2 \\ & b_3 & a_3 & c_3 & & & & z_3 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & & & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} & z_{n-1} \\ d & & & & & b_n & a_n & z_n \end{array}\right).$$

b) Si la matriu fos a més simètrica, com s'hauria de variar el mètode a fi de minimitzar la memòria emprada i el nombre d'operacions?

c) Aplicació: Resoleu el sistema

$$\left(\begin{array}{rrrrr|r} 4 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 4 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 4 & 5 \end{array}\right).$$

67 Sigui A una matriu regular donada. Per tal de resoldre el sistema lineal $A^2x = b$, és millor calcular A^2 i resoldre el sistema, o bé, resoldre els dos sistemes $Ay = b$, $Ax = y$, sempre usant la factorització LU?

68 Sigui A una matriu regular $n \times n$ que considerem partida en quatre blocs

$$A = \begin{pmatrix} P & Q \\ R & S \end{pmatrix} ,$$

amb P i S matrius $p \times p$ i $s \times s$, respectivament ($p + s = n$).

Suposant que P i $S - RP^{-1}Q$ tenen inversa:

a) Doneu un mètode per trobar la inversa d'A.

b) En general, quantes operacions calen per trobar A^{-1} usant aquest mètode?

c) Quan serà útil el mètode esmentat?

d) Expliciteu un procediment per invertir una matriu A, emprant $n - 1$ vegades el procediment anterior.

e) Sota quines condicions funcionarà el procediment de l'apartat d)?

f) Demostreu que segur que funciona si A és definida positiva.

g) Aplicació: Trobeu

$$\left(\begin{array}{cc|cc} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \end{array}\right)^{-1} \text{, usant l'apartat a) i}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}^{-1} \text{, usant l'apartat d) .}$$

69 Volem calcular la inversa d'una *matriu bidiagonal (inferior)*

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & & & & \\ b_2 & a_2 & & & & & \\ & b_3 & a_3 & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & b_{n-1} & a_{n-1} & \\ & & & & & b_n & a_n \end{pmatrix} .$$

a) Doneu un mètode per al càlcul de cadascuna de les seves columnes.

b) Calculeu el nombre d'operacions necessàries per tal d'invertir-la, en el cas més general.

c) Trobeu la inversa quan $a_i = a$ $(i = 1 \div n)$, $b_i = b$ $(i = 2 \div n)$.

d) Si les multiplicacions i les divisions es fan en precisió doble, fiteu l'error relatiu en l'element $(A^{-1})_{n1}$, degut només a les dites operacions.

70* Demostreu que les normes matricials subordinades a les normes vectorials

$$\|x\|_1 = \sum_i |x_i| \ , \quad \|x\|_\infty = \max_i |x_i| \ ,$$

són respectivament:

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}| \ , \quad \|A\|_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}| \ .$$

71 a) Demostreu que la norma de matrius (no multiplicativa)

$$\|A\|_E = (\sum_{i,j} |a_{ij}|^2)^{\frac{1}{2}}$$

no està subordinada a cap norma vectorial.

(Indicació: Considereu la norma de la matriu identitat).

b) Demostreu que la norma subordinada a la norma euclidiana

$$\|x\|_2 = (\sum_i |x_i|^2)^{\frac{1}{2}}$$

és

$$(\rho(A^*A))^{\frac{1}{2}} \ .$$

(Indicació: Useu el fet que, si N és hermitiana, existeix una matriu U unitària tal que U^*NU és diagonal).

c) Demostreu les relacions següents:

i) $\|A^*A\|_2 = \|A\|_2^2 = \|A^*\|_2^2$;

ii) $\|U^*AU\|_2 = \|AU\|_2 = \|UA\|_2$, si U és unitària;

iii) $\|A\|_2 \le \|A\|_E \le \sqrt{n}\|A\|_2$ i $\frac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_E \le \|A\|_2 \le \|A\|_E$;

iv)

$$\|A\|_2 = \max_{x,y\neq 0} \frac{|y^*Ax|}{\|x\|_2\|y\|_2} \ .$$

72* a) Partint de $(A+\delta A)(x+\delta x) = b+\delta b$, demostreu que, si

$$\|A^{-1}\| \ \|\delta A\| < 1 \ ,$$

llavors

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\mu(A)}{1-\mu(A)\frac{\|\delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right) \ ,$$

sempre que la norma matricial emprada sigui consistent amb la norma vectorial.

b) Trobeu una matriu 3×3 A tal que compleixi $\mu_\infty(A) > 10^6$, malgrat que $\|A\|_\infty < 10^{-6}$.

c) Resoleu els sistemes corresponents $Ax = b$ amb

$$\text{i) } b = b^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \ , \quad \text{ii) } b = b^{(2)} = \begin{pmatrix} 0.9 \\ 1.1 \\ 1 \end{pmatrix} \ .$$

d) Comenteu els resultats trobats a l'apartat c).

73 a) Resoleu

$$\begin{pmatrix} 1.0 & 0.5 & 0.33 \\ 0.5 & 0.33 & 0.25 \\ 0.33 & 0.25 & 0.20 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 0.0 \\ 0.0 \end{pmatrix}$$

b) $x = (9, -36, 30)^\top$ és la solució exacta del sistema $Ax = b$ on ara

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{pmatrix}$$

Compareu les dades i els resultats de a). Calculeu $\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x+\delta x\|_\infty}$ per justificar la resposta.

74 Per a una matriu $n\times n$ A, definim

$$\begin{aligned} e^A &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A^j}{j!} \ , \\ \sin A &= \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \frac{A^{2r+1}}{(2r+1)!} \ , \\ \cos A &= \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \frac{A^{2r}}{(2r)!} \ . \end{aligned}$$

a) Trobeu expressions per a les fites de les restes d'aquestes sèries matricials en una norma donada.

b) Aplicació: Donada

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.01 \\ 0.01 & 0.1 \end{pmatrix} ,$$

calculeu e^A, $\sin A$ i $\cos A$ amb un error menor que 10^{-6} en la norma $\| \ \|_\infty$.

75 Considerem l'equació diferencial de segon ordre lineal

$$a(x)v'' + b(x)v' + c(x)v = d(x) \ , \quad x \in (0,1)$$

amb les condicions de contorn

$$v'(0) = \alpha \ , \qquad v(1) = \beta,$$

i volem calcular la solució $v(x)$ a la xarxa equiespaiada $x_i = ih$, $i = 0, 1, \dots, N$. Denotem $v_i = v(x_i)$, $a_i = a(x_i)$, $b_i = b(x_i)$, $c_i = c(x_i)$, $d_i = d(x_i)$, $\forall\, i$, i aproximem les derivades mitjançant les expressions següents:

$$\begin{aligned} v'(0) &= \frac{v(h) - v(0)}{h}, & \\ v'(x_i) &= \frac{v(x_i + h) - v(x_i - h)}{2h}, & i = 1, \dots, N-1, \\ v''(x_i) &= \frac{v(x_i + h) - 2v(x_i) + v(x_i - h)}{h^2}, & i = 1, \dots, N-1. \end{aligned}$$

a) Comproveu que aquesta discretització ens porta a resoldre el següent sistema lineal tridiagonal de $N+1$ equacions, amb $N+1$ incògnites

$$\begin{aligned} -v_0 + v_1 &= \alpha h \\ r_i v_{i-1} + p_1 v_i + q_i v_{i+1} &= -h^2 d_i \ , \qquad i = 1, \dots, N-1 \\ r_N v_{N-1} + p_N v_N &= -h^2 d_N - q_N \beta \end{aligned}$$

b) Apliqueu l'apartat a) al cas particular:

$$v'' = d(x), \quad x \in (0,1), \qquad v'(0) = \alpha, \quad v(1) = \beta,$$

i comproveu que la matriu del sistema lineal és diagonalment dominant.

76* Trobeu la millor aproximació per mínims quadrats als punts

$$(-\frac{\pi}{2}, 1), \ (0,0), \ (\frac{\pi}{2}, \frac{1}{2}), \ (\pi, 1)$$

i que sigui del tipus

$$t_1(\theta) = a + r \sin(\theta + \alpha) \ ,$$

amb a, r reals i $\alpha \in [0, 2\pi]$.

77* Ajusteu per mínims quadrats la taula de dades:

x	0.25	0.50	0.75	1.00	1.25	1.50	1.75
y	0.40	0.50	0.90	1.28	1.60	1.66	2.02

a funcions dels tipus següents:

a) $y = a_0 + a_1 x$,

b) $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$,

c) $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4$,

d) $y = a x^\alpha$.

78 Sabem que els pesos atòmics de l'oxigen i del nitrogen són aproximadament $O = 16$ i $N = 14$; utilitzeu els pesos moleculars dels sis òxids de nitrogen donats a continuació per tal d'ajustar-los per mínims quadrats

Compost	NO	N_2O	NO_2	N_2O_3	N_2O_5	N_2O_4
Pes molecular	30.006	44.013	46.006	76.012	108.010	92.011

79 Hom suposa que el cometa Tentax, descobert l'any 1968, és un objecte del Sistema Solar. En un cert sistema de coordenades polars (r, φ), centrat en el Sol, s'han mesurat experimentalment les següents posicions del cometa:

r	2.70	2.00	1.61	1.20	1.02
φ	48°	67°	83°	108°	126°

Les lleis de Kepler garanteixen que el cometa es mourà en una òrbita el·líptica, parabòlica o hiperbòlica (si es menyspreen les pertorbacions dels planetes), que, en les dites coordenades polars, tindrà per equació

$$r = \frac{p}{1 + e\cos\varphi} ,$$

on p és un paràmetre i e l'excentricitat. Ajusteu per mínims quadrats els valors de p i e, a partir de les mesures fetes.

80 Per a resoldre el problema lineal de valors a la frontera

$$\begin{aligned} (p(x)v'(x))' + q(x)v(x) &= f(x) \qquad 0 \le x \le 1 \\ v(0) = v(1) &= 0 \end{aligned}$$

s'utilitza el *mètode de Galerkin* que consisteix en buscar $v(x)$ com a combinació lineal $\sum_{j=1}^{n} c_j \varphi_j(x)$ on $\varphi_j(0) = \varphi_j(1) = 0$ i llavors imposar que l'error residual

$$r(x) = \left(p(x) \sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j'(x) \right)' + q(x) \sum_{j=1}^{n} c_j \varphi_j(x) - f(x)$$

sigui ortogonal a totes les φ, i.e. $\int_0^1 r(x)\varphi_j(x)dx = 0 , \quad \forall j$. Aquesta condició dóna un sistema d'equacions lineal. Resoleu per aquest mètode el problema

$$\begin{aligned} y'' - y &= x^2 , \qquad 0 \le x \le 1 \\ y(0) = y(1) &= 0 \end{aligned}$$

utilitzant, per a $j = 1, 2, 3$: i) $\varphi_j = \sin j\pi x$, ii) $\varphi_j = x^j(1 - x)$.

81 Obteniu una fórmula del tipus $P(x) = Ae^{Mx}$ a partir de les dades següents:

x_i	1	2	3	4
P_i	7	11	17	27

82 El nivell de l'aigua en el Mar del Nord està determinat per la marea anomenada M_2, que té un període aproximat de dotze hores; suposarem així que el dit nivell segueix una llei del tipus:

$$H(t) = h_0 + a_1 \sin\frac{2\pi t}{12} + a_2 \cos\frac{2\pi t}{12}$$

(l'altura es mesura en metres i el temps en hores).

Experimentalment, s'han obtingut les següents dades:

t	0	2	4	6	8	10
$H(t)$	1.0	1.6	1.4	0.6	0.2	0.8

Ajusteu els coeficients de la funció $H(t)$ a la taula, per mínims quadrats.

Què passaria si volguéssiu fer servir la fórmula equivalent

$$H(t) = h_0 + A\sin\frac{2\pi(t - t_0)}{12},$$

directament?

TEMA 5

VALORS I VECTORS PROPIS

83* Sigui B una *matriu de Frobenius*; això és, una matriu de la forma

$$B = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & b_3 & \cdots & \cdots & b_{n-1} & b_n \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

a) Trobeu el polinomi característic de B.

b) Si λ és un valor propi de B, trobeu un vector propi associat a λ.

c) Sigui $A = A_1 = (a_{ij}^{(1)})$ una matriu $n \times n$ qualsevol. Considereu les successives transformacions de semblança

$$A_{l+1} = M_{n-l}^{-1} A_l M_{n-l} \ (l = 1 \div n-1) ,$$

essent

$$M_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ m_{k1} & \cdots & \cdots & m_{kk} & \cdots & \cdots & m_{kn} \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} ,$$

amb

$$m_{kj} = -\frac{a_{k+1,j}^{(n-k)}}{a_{k+1,k}^{(n-k)}} \ (j \neq k) \ , \quad m_{kk} = \frac{1}{a_{k+1,k}^{(n-k)}} \ ,$$

suposant que $a_{k+1,k}^{(n-k)} \neq 0 \ \ (k = n-1 \div 1)$.

Demostreu que $A^{(n)}$ és una matriu de Frobenius. Se l'anomena *forma normal de Frobenius d'A*. La combinació dels apartats a), b) i c) ofereix un mètode de càlcul de valors i vectors propis anomenat *mètode de Danilevski*.

d) Apliqueu aquest mètode de reducció a la forma normal de Frobenius a fi de trobar els valors i vectors propis de la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 39 & -16 & -56 \\ 87 & -36 & -126 \\ -2 & 1 & 3 \end{pmatrix} .$$

84* Sigui B_n una matriu de la forma

$$\begin{pmatrix} b_1 & b_2 & b_3 & \cdots & \cdots & b_{n-1} & b_n \\ a & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & \cdots & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & a & 0 \end{pmatrix} ,$$

amb $b_j = \frac{K}{2^j}$ $(j = 1 \div n)$.

a) Considerem el cas en què a i K són reals no negatius. Responeu a les preguntes següents:

i) si n és parell, poden ser tots els valors propis de B_n reals positius?

ii) poden ser negatives totes les parts reals dels valors propis?

b) Trobeu l'equació característica i els valors propis de B_n per a $a = 2$ i $K = -2$.

c) Considerem un mètode iteratiu general del tipus $x^{(k+1)} = B_n x^{(k)} + c$ per a c qualsevol. Estudieu la seva convergència per a $|a| < 1$ i $|K| \leq 1$.

85 Apliqueu el mètode de la potència (amb quocient de components) a la matriu $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ amb $z^{(0)} = (1,\ 1)^\top$. Per què divergeix?

86* Trobeu tots els valors propis de la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 4 \end{pmatrix} ,$$

emprant els mètodes de la potència i de la potència inversa.

87 La matriu següent

$$A = \begin{pmatrix} 14 & 7 & 6 & 9 \\ 7 & 9 & 4 & 6 \\ 6 & 4 & 9 & 7 \\ 9 & 6 & 7 & 15 \end{pmatrix}$$

té un valor propi prop de 4. Trobeu-lo amb 6 xifres decimals correctes.

88 Suposem que A és una matriu 3×3 amb valors propis λ_1 i λ_2, tals que $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ i λ_1 és de multiplicitat 2. Suposem que A té només dos vectors propis normalitzats linealment independents $v^{(1)}$ i $v^{(2)}$ associats a λ_1 i λ_2, respectivament. Es pot demostrar que existeix un vector no nul v tal que $(A - \lambda_1 I)v = v^{(1)}$ (aquest v s'anomena *vector propi generalitzat*).

a) Demostreu que v, $v^{(1)}$ i $v^{(2)}$ són linealment independents.

b) Expresseu $A^k v$ com a combinació lineal dels vectors linealment independents d'a) ($k \geq 0$).

c) Sigui w un vector qualsevol tal que $w^\top v \neq 0$ i $w^\top v^{(1)} \neq 0$. Trobeu

$$\lim_{k\to\infty} \frac{w^\top x^{(k+1)}}{w^\top x^{(k)}} ,$$

on $(x^{(k)})_{k\geq 0}$ és la successió obtinguda en aplicar el mètode de la potència a la matriu A, partint d'un vector inicial $x^{(0)} = av + a_1 v^{(1)} + a_2 v^{(2)}$, amb $a \neq 0$.

d) Sigui e_k l'error comès en aproximar el límit anterior pel terme k-è de la successió $w^\top x^{(k)}$ ($k \geq 0$). Trobeu

$$\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} .$$

89 Sigui

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

a) Apliqueu el mètode de la potència per calcular el valor propi dominant i el seu vector propi associat (preneu $z^{(0)} = (1,\ 1,\ 1)^\top$).

b) Calculeu el valor propi de mòdul mínim.

c) Apliqueu el mètode de Jacobi clàssic per trobar tots els valors propis i vectors propis de A.

90* Reduïu la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

a forma tridiagonal simètrica pel mètode de Householder i trobeu després els seus valors i vectors propis.

91 Sigui A una matriu tridiagonal i B la matriu tridiagonal que s'obté a partir d'A, canviant tan sols el signe dels elements de la diagonal. Demostreu que λ és un valor propi de B si i només si $-\lambda$ és un valor propi d'A.

92 Determineu els valors i vectors propis de la matriu

$$\begin{pmatrix} 3 & 4 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 4 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} ,$$

passant pel càlcul recurrent del polinomi característic.

93* a) Resoleu el següent *problema de valors propis en equacions diferencials lineals*: trobar els valors de λ per als quals existeixen funcions $y(x)$ no idènticament nul·les tals que compleixen l'equació diferencial

$$y"(x) + \lambda y(x) = 0 \quad \forall x \in (0,1) \ ,$$

i les *condicions de frontera* $y(0) = y(1) = 0$.

Discretitzem el problema imposant la validesa de l'equació només en els $m+1$ punts equidistants $x_k = kh$ $(k = 0 \div m)$, $h = \frac{1}{m}$, i aproximant després la derivada segona emprant diferències centrades; en resulta un problema de valors propis en dimensió finita en les aproximacions y_k de y en x_k:

$$y_0 = 0 \ , \quad \frac{1}{h^2}(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}) + \lambda y_k = 0 \ (k = 1 \div m-1) \ , \quad y_m = 0 \ .$$

b) Resoleu exactament el problema de valors propis resultant.

c) Compareu les solucions del problema discretitzat amb les solucions exactes.