Conceitos Fundamentais em Análise Numérica [1]

Prof. Dr. Eliandro R. Cirilo

Universidade Estadual de Londrina - UEL
Centro de Ciências Exatas - CCE
Departamento de Matemática

[1] BURDEN, R. L., FAIRES, J. D. Análise Numérica. 3º ed. São Paulo: Cengage Leaning, 2015.

Sumário

1. Erro
   - Taylor
   - Erros: absoluto e relativo
   - Processos iterativos
   - Ordem de convergência
   - Lista de Exercícios
2. Interpolação Spline
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Taylor

- Seja f uma função dada como uma série de potências em $(x-a)$ na forma:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n (x-a)^n = C_0 + C_1 (x-a) + C_2 (x-a)^2 + \ldots \qquad (1)$$

- Se o raio de convergência de (1) é r, então f será infinitamente derivável em $(a-r, a+r)$. Logo, de (1) resulta:

$$\begin{aligned} f'(x) &= C_1 + 2C_2 (x-a) + 3C_3 (x-a)^2 + 4C_4 (x-a)^3 + \ldots \\ f''(x) &= 2C_2 + 6C_3 (x-a) + 12C_4 (x-a)^2 + \ldots \\ f'''(x) &= 6C_3 + 24C_4 (x-a) + \ldots \end{aligned}$$

Anotações

Taylor

- Se $x = a$ em (1) e nas derivadas de f, então obtemos:

$$f(a) = C_0 \quad f'(a) = C_1 \quad f''(a) = 2C_2 \quad f'''(a) = 6C_3 \quad \ldots\ldots$$

que de forma geral permite escrever:

$$C_n = \frac{1}{n!} f^{(n)}(a). \tag{2}$$

- Portanto levando (2) em (1) encontramos:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(a)(x-a)^n \tag{3}$$

nomeada por Série de Taylor de f em $x = a$.

Anotações

Taylor

Teorema de Taylor

Suponha que $f(x)$ tenha $n+1$ derivadas em um intervalo aberto I e que $a \in I$. Para cada $x \in I$, existe pelo menos um número c entre a e x tal que:

$$R_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(c)(x-a)^{n+1}$$

nomeado como resto.

Exemplo: Considerações sobre $f(x) = ln(x)$ em $a = 1$

- Da teoria das séries sabe-se que a série (3) para $ln(x)$, considerando $a = 1$, é do tipo:

$$ln(x) = ln(1) + 1(x-1) + \frac{1}{2}(-1)(x-1)^2 + \frac{1}{6}(2)(x-1)^3 + \ldots$$

Anotações

Taylor

- Pode-se aproximar $ln\,(x)$, por exemplo, como:

$$ln\,(x) \simeq 0 + (x-1) - \frac{1}{2}(x-1)^2 + \frac{1}{3}(x-1)^3 \equiv P_3\,(x)\,.$$

- Em particular pode-se escrever:

$$R_3\,(x) = \frac{1}{4!} f^{(4)}\,(c)\,(x-1)^4 = -\frac{1}{4c^4}(x-1)^4$$

ou ainda (com c entre x e a)

$$R_3\,(x) = ln\,(x) - P_3\,(x) \quad \Rightarrow \quad ln\,(x) = P_3\,(x) - \frac{1}{4c^4}(x-1)^4\,.$$

- Por exemplo, se $x = 1.1$, em módulo tem-se:

$$|R_3\,(1.1)| \simeq |ln\,(1.1) - P_3\,(1.1)|$$

$$= |0.095310 - 0.095333| = 0.000023 = 2.3 \times 10^{-5}.$$

Anotações

Erros: absoluto e relativo

- Considere p^* como sendo uma aproximação de p. Os erros absoluto e relativo são respectivamente:

$$E.A. = |p - p^*| \qquad\qquad E.R. = \frac{|p - p^*|}{|p^*|}.$$

- Sob as definições acima o $E.R.$ descreve de modo mais adequado a precisão, quando comparado ao $E.A.$.

Anotações

Erros: absoluto e relativo

Exemplo: Comparação entre erros

- (I) Considere que p_1 é representado por $p_1^* = 3.1$ de modo que $E.A. < 0.1$, então:

$$E.A. = |p_1 - 3.1| < 0.1 \quad \Rightarrow$$

$$E.R. = \frac{|p_1 - 3.1|}{|3.1|} < \frac{0.1}{|3.1|} \quad \Leftrightarrow \quad E.R. < \frac{0.1}{3.1} \simeq 0.0322581.$$

- (II) Considere que p_2 é representado por $p_2^* = 2112.9$ tal que $E.A. < 0.1$, logo:

$$E.A. = |p_2 - 2112.9| < 0.1 \quad \Rightarrow$$

$$E.R. = \frac{|p_2 - 2112.9|}{|2112.9|} < \frac{0.1}{|2112.9|} \quad \Leftrightarrow \quad E.R. < \frac{0.1}{2112.9} \simeq 4.7 \times 10^{-5}.$$

- Conclui-se então que p_2 é representado com maior precisão do que p_1, pois seu $E.R.$,comparado ao E.R. em (I), é menor!

Anotações

Processos iterativos

- Em processos iterativos gera-se sequência de valores do tipo:

$$\{\mathbf{P}_k\}_{k=0}^{m} = \{\mathbf{P}_0, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \ldots, \mathbf{P}_m\}, \quad \mathbf{P} \in \mathbb{k}$$

então admite-se que $\mathbf{P}_{k=n}$, $(1 \leq n \leq m)$ é solução numérica se

$$E.R._n = \frac{||\mathbf{P}_n - \mathbf{P}_{n-1}||}{||\mathbf{P}_n||} < \varepsilon$$

com $\varepsilon << 1$ a-priori fixo.

- A medida que os sucessivos $E.R._k$ vão se aproximando de ε, dizemos que há um processo de convergência.

Anotações

Ordem de convergência

- Denotando os erros relativos (gerados em uma malha de espaçamento h) por E^h, então estes podem ser estimados via expressão $E^h \simeq Ch^\theta$. A constante C é dependente dos dados do problema e θ é uma estimativa para ordem de convergência.
- Se $E^{h/2} \simeq C(h/2)^\theta$ segue que:

$$\frac{E^h}{E^{h/2}} \simeq \frac{Ch^\theta}{C(h/2)^\theta} = 2^\theta \quad \Rightarrow \quad \theta \simeq \frac{1}{log2}\left[log\left(\frac{E^h}{E^{h/2}}\right)\right].$$

- Quanto maior o valor θ, significa que maior será a ordem de convêrncia.
- Em síntese, mais rápido o método numérico converge para a solução exata.

Artigo 2019

https://doi.org/10.1007/s40819-019-0633-z

Anotações

Lista de Exercícios - 1

1. Sejam $f(x) = cos(x)$ e $x_0 = 0$. Determine
   (a) o segundo polinômio de Taylor de f em x_0; e
   (b) o terceiro polinômio de Taylor de f em x_0.

2. Determine o polinômio de Taylo de ordem três $P_3(x)$ para a função $f(x) = \sqrt{x+1}$ em $x_0 = 0$. Aproxime $\sqrt{0.5}$, $\sqrt{0.75}$, $\sqrt{1.25}$ e $\sqrt{1.5}$ usando $P_3(x)$ e determine os erros reais.

3. Determine o polinômio de Taylo de ordem dois $P_2(x)$ para a função $f(x) = e^x cos(x)$ em $x_0 = 0$.
   (a) Use $P_2(0.5)$ para aproximar $f(0.5)$. Determine um limitante superior para o erro $|f(0.5) - P_2(0.5)|$ usando a fórmula de erro e compare-o com o erro real.
   (b) Determine um limitante para o erro $|f(x) - P_2(x)|$ cometido ao usar $P_2(x)$ para aproximar $f(x)$ no intervalo $[0, 1]$.

Anotações

Lista de Exercícios - 1

4 Use um polinômio de Taylor em $\pi/4$ para aproximar $cos\,(42^o)$ com uma precisão de 10^{-6}.

5 Calcule o erro absoluto e o erro relativo na aproximação de p por p^*.

a	$p = \pi,\ p^* = 22/7$	$p = \pi,\ p^* = 3.1416$
b	$p = e,\ p^* = 2.718$	$p = \sqrt{2},\ p^* = 1.414$
c	$p = e^{10},\ p^* = 22000$	$p = 8!,\ p^* = 39900$
d	$p = 10^{\pi},\ p^* = 1400$	$p = 9!,\ p^* = \sqrt{18\pi}\,(9/e)^9$

Nota: atente que definimos erro relativo em relação a p^*, na bibliografia do curso a definição foi em relação a p. Sobre isso não existe certo ou errado, apenas uma questão de referência. Desta forma, a expressão $\dfrac{|p - p^*|}{|p|}$ também é correta!

Anotações

Respostas da Lista de Exercícios - 1

1

(a) $1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 sin\,(c)$

(b) $cos\,(x) = 1 - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{24}x^4 cos\,(c)$.

2

$P_3\,(x) = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 \quad ; \quad \sqrt{x+1} = P_3\,(x) + R_3\,(x)$

$\sqrt{0.5} \simeq P_3\,(-1/2)$

erro $\simeq \left|\sqrt{0.5} - P_3\,(-1/2)\right|$

3

$P_2\,(x) = 1 + x \quad ; \quad R_2\,(x) = \frac{-2e^c\,(sen(c) + cos(c))}{6}x^3$

para algum c entre x e 0, temos o seguinte:

(a) $P_2\,(0.5) = 1.5$ e $|f\,(0.5) - P_2\,(0.5)\,| \leq 0.0932$

(b) $|f\,(x) - P_2\,(x)\,| \leq 1.252$

Anotações

Respostas da Lista de Exercícios - 1

4 Como $42^o = \dfrac{7\pi}{30}$ radianos, use $x_0 = \dfrac{\pi}{4}$. Então

$$\left|R_n\left(\frac{7\pi}{30}\right)\right| \leq \frac{\left(\frac{\pi}{4} - \frac{7\pi}{30}\right)^{n+1}}{(n+1)!} < \frac{0.053^{n+1}}{(n+1)!}$$

para que $\left|R_n\left(\dfrac{7\pi}{30}\right)\right| < 10^{-6}$, é suficiente tomar $n = 3$. Até 7 algarismos, $cos\left(\dfrac{7\pi}{30}\right) = 0.7431448$ e $P_3\left(\dfrac{7\pi}{30}\right) = 0.7431446$.

5

	EA	ER	EA	ER
a	0.001264	4.025×10^{-4}	7.346×10^{-6}	2.338×10^{-6}
b	2.818×10^{-4}	1.037×10^{-4}	2.136×10^{-4}	1.510×10^{-4}

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
   - Interpolação Spline Linear
   - Interpolação Spline Cúbico
   - Lista de Exercícios
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Interpolação Spline S_p

- Considere a tabela de um conjunto de dados do tipo:

x	x_1	x_2	$\dots$	x_{n+1}
$f(x)$	y_1	y_2	$\dots$	y_{n+1}

Tabela 1: Tabela do conjunto de dados.

com monotonicidade estrita, ou seja $x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+1}$.

- A função $S_p(x)$ é nomeada Spline de grau p com nós nos pontos x_i $(i = 1, 2, \dots, n+1)$ se:

  a) para qualquer subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$ com $i = 1, 2, \dots, n$ tenhamos $S_p(x)$ como polinômio de grau p;

  b) $S_p(x)$ é contínua e tem derivada contínua até a ordem $p-1$ em $[x_i, x_{n+1}]$;

  c) $S_p(x_i) = y_i \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, n+1.$

Anotações

Interpolação Spline Linear

- A Spline linear interpolante [2], $S_1^i(x)$, da Tabela 1, que verifica a definição Spline do slide anterior, é:

$$S_1^i(x) = y_i\left(\frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i}\right) + y_{i+1}\left(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right) \tag{4}$$

  com $x \in [x_i, x_{i+1}]$.

- Essencialmente, por intermédio da expressão (4) temos um conjunto de n segmentos de retas.

- $\mathcal{A}_1$: A dedução da equação (4) é fácil de ser obtida! Como exercício, a partir dos pontos $A = (x_i, y_i)$ e $B = (x_{i+1}, y_{i+1})$ deduza a equação da reta.

- Porquê é necessária a premissa de garantia da <u>monotonicidade estrita</u>?

[2] RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais, 2ª edição. São Paulo: Editora Makron, 1996.

Anotações

Interpolação Spline Linear

Exemplo: Da tabela a seguir segue que:

x	5	10	17	21	25
$f(x)$	0	5	9	7	0

- Como neste exemplo $n = 4$ então pela expressão (4) temos:

$$S_1^1(x) = 0\left(\frac{10-x}{5}\right) + 5\left(\frac{x-5}{5}\right) = x - 5 \quad ; \quad x \in [5, 10]$$

$$S_1^2(x) = \frac{4}{7}x - \frac{5}{7} \quad ; \quad x \in [10, 17]$$

$$S_1^3(x) = -\frac{1}{2}x + \frac{35}{2} \quad ; \quad x \in [17, 21]$$

$$S_1^4(x) = -\frac{7}{4}x + \frac{175}{4} \quad ; \quad x \in [21, 25]$$

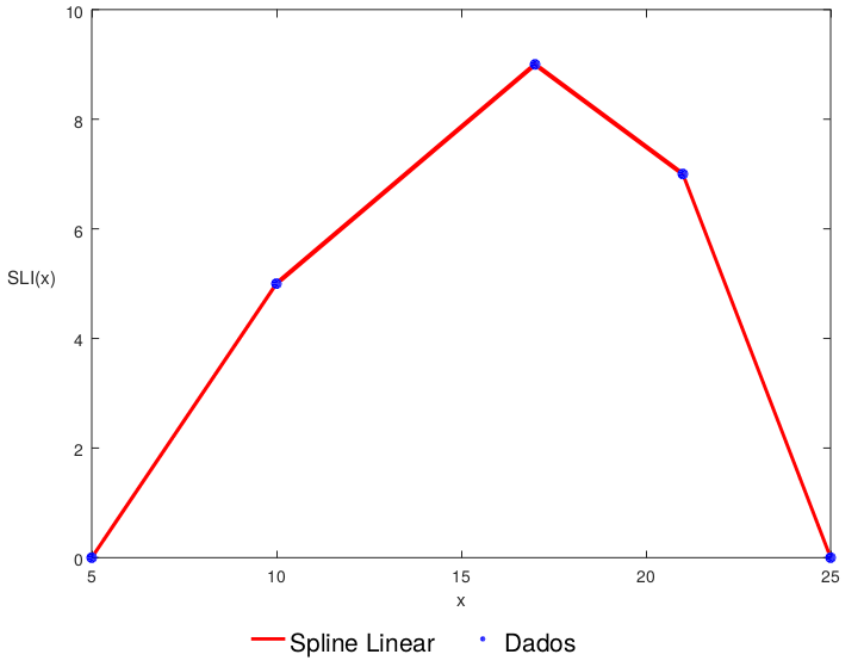
Anotações

Interpolação Spline Linear

ou ainda

$$SLI(x) = \begin{cases} S_1^1(x) & ; \quad x \in [5, 10] \\ S_1^2(x) & ; \quad x \in [10, 17] \\ S_1^3(x) & ; \quad x \in [17, 21] \\ S_1^4(x) & ; \quad x \in [21, 25] \end{cases}$$

cujo gráfico é tipo



Anotações

Interpolação Spline Linear

$\mathcal{A}_2$: Exemplo:

x	5	10	17	21	25
$f(x)$	0	5	9	7	0

Da tabela acima construa a spline linear interpolante parametrizada:

$$SLI(t) = \begin{cases} x_1^i(t) \\ \\ y_1^i(t) \end{cases} \quad t \in [t_i, t_{i+1}]$$

Dica: Conside a tabela

t	1	2	3	4	5
x	5	10	17	21	25

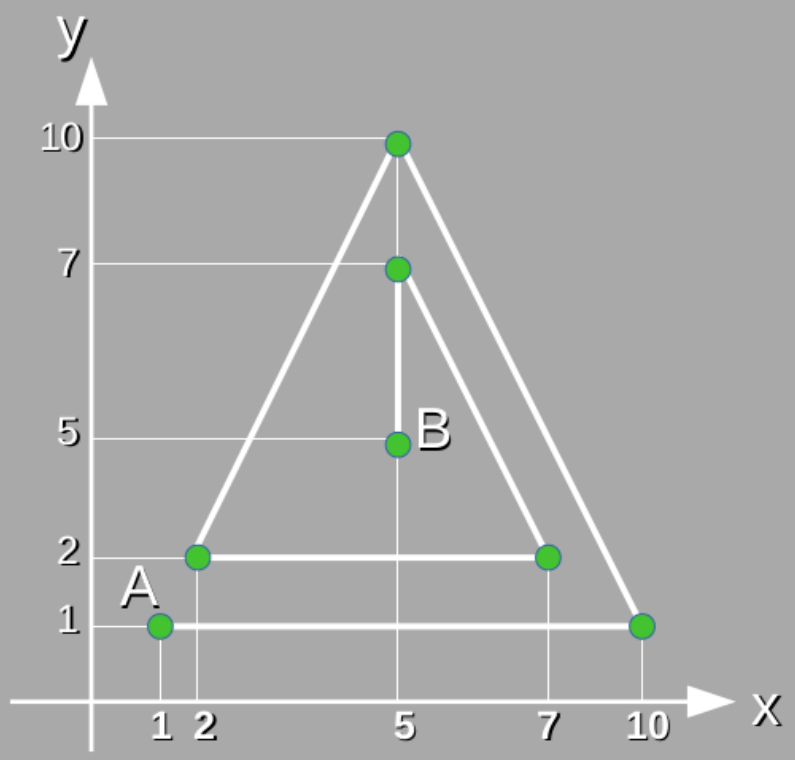
para o cálculo de $x_1^i(t)$. Para $y_1^i(t)$ considere

t	1	2	3	4	5
$f(x)$	0	5	9	7	0

Anotações

Interpolação Spline Linear

$\mathcal{A}_3$: Exemplo: Obtenha a spline linear do seguinte gráfico, com início em A e fim em B.



Dica: Construa a tabela de dados. Após, use Spline Linear Parametrizada

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

x	x_1	x_2	$\ldots$	x_{n+1}
$f(x)$	y_1	y_2	$\ldots$	y_{n+1}

Tabela 2: Tabela do conjunto de dados com monotonicidade estrita.

- Considerando os dados da Tabela 2 a Spline Cúbica Interpolante $S_3^i(x)$, nos nós x_i, é aquela tal que existem os polinômios cúbicos

$$\boldsymbol{P_k(x) \quad ; \quad k = 2, \ldots, n+1 \quad ; \quad \text{de modo que}}$$

(I) $S_3(x) = P_k(x) \quad ; \quad x \in [x_{k-1}, x_k] \quad ; \quad k = 2, \ldots, n+1$

(II) $S_3(x_k) = f(x_k) \quad ; \quad k = 1, \ldots, n+1$

(III) $P_k(x_k) = P_{k+1}(x_k) \quad ; \quad k = 2, \ldots, n$

(IV) $P'_k(x_k) = P'_{k+1}(x_k) \quad ; \quad k = 2, \ldots, n$

(V) $P''_k(x_k) = P''_{k+1}(x_k) \quad ; \quad k = 2, \ldots, n$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

- Os polinômios $P_k(x)$ a serem obtidos são da forma:

$$P_k(x) = A_k(x - x_k)^3 + B_k(x - x_k)^2 + C_k(x - x_k) + D_k \tag{5}$$

para $k = 2, \ldots, n+1$.

- Das condições (I) e (II), $k = 2, \ldots, n+1$, e considerando (5) obtemos:

$$\begin{aligned} S_3(x_k) = P_k(x_k) &= f(x_k) \\ P_k(x_k) &= D_k \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad D_k = f(x_k) \tag{6}$$

e de (5) temos também

$$\begin{aligned} P_k'(x) &= 3A_k(x - x_k)^2 + 2B_k(x - x_k) + C_k \\ P_k''(x) &= 6A_k(x - x_k) + 2B_k \end{aligned}$$

e como $P_k''(x_k) = 2B_k$ então

$$B_k = \frac{P_k''(x_k)}{2}. \tag{7}$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

- Uma vez que

$$P_k''(x_{k-1}) \quad = \quad 6A_k(x_{k-1} - x_k) + 2B_k$$

então

$$A_k = \frac{-2B_k + P_k''(x_{k-1})}{6(x_{k-1} - x_k)} = \frac{-P_k''(x_k) + P_k''(x_{k-1})}{6(x_{k-1} - x_k)}$$

mas da condição (V) $P_k''(x_{k-1}) = P_{k-1}''(x_{k-1})$. Denotando $x_k - x_{k-1} = h_k$ segue ainda que

$$A_k = \frac{P_k''(x_k) - P_{k-1}''(x_{k-1})}{6h_k} \tag{8}$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

- Da condição (III)

$$P_k(x_k) = P_{k+1}(x_k) = f(x_k)$$

adicionalmente

$$P_{k+1}(x_k) = A_{k+1}(x_k - x_{k+1})^3 + B_{k+1}(x_k - x_{k+1})^2 + C_{k+1}(x_k - x_{k+1}) + D_{k+1}$$

o que conduz a

$$-A_{k+1}h_{k+1}^3 + B_{k+1}h_{k+1}^2 - C_{k+1}h_{k+1} + D_{k+1} = f(x_k) \qquad (9)$$

com $h_{k+1} = (x_{k+1} - x_k)(-1)$.

- Em (9), transladando os índices em uma unidade e isolando C deduz-se que

$$-A_k h_k^3 + B_k h_k^2 - C_k h_k + D_k = f(x_{k-1})$$

$$\Rightarrow$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

$$C_k = \frac{1}{h_k}\left(-A_k h_k^3 + B_k h_k^2 + D_k - f\left(x_{k-1}\right)\right)$$

$$\Rightarrow$$

$$C_k = \frac{f\left(x_k\right) - f\left(x_{k-1}\right)}{h_k} + \frac{2P_k''\left(x_k\right)h_k + P_{k-1}''\left(x_{k-1}\right)h_k}{6} \tag{10}$$

- Denotando $P_k''\left(x_k\right) = g_k$ e $f\left(x_k\right) = y_k$ então de (8), (7), (10) e (6) escreve-se

$$A_k = \frac{g_k - g_{k-1}}{6h_k} \tag{11}$$

$$B_k = \frac{g_k}{2} \tag{12}$$

$$C_k = \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} + \frac{2h_k g_k + h_k g_{k-1}}{6} \tag{13}$$

$$D_k = y_k \tag{14}$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

- Por outro lado, da igualdade (5) segue que

$$\begin{aligned} P_k'(x_k) &= 3A_k(x_k - x_k)^2 + 2B_k(x_k - x_k) + C_k = C_k \\ &\text{e} \\ P_{k+1}'(x_k) &= 3A_{k+1}h_{k+1}^2 - 2B_{k+1}h_{k+1} + C_{k+1} \end{aligned}$$

logo de $P_k'(x_k) = P_{k+1}'(x_k)$ sai

$$C_{k+1} = C_k - 3A_{k+1}h_{k+1}^2 + 2B_{k+1}h_{k+1}$$

mas mediante (11), (12) e (13) a igualdade anterior fica

$$\begin{aligned} \frac{1}{6}\{&2h_{k+1}g_{k+1} + h_{k+1}g_k - 2h_kg_k - g_{k-1}h_k + 3g_{k+1}h_{k+1} \\ &-3g_kh_{k+1} - 6g_{k+1}h_{k+1}\} = \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} - \frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} \end{aligned} \tag{15}$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

ou finalmente

$$h_k g_{k-1} + 2\left(h_k + h_{k+1}\right) g_k + h_{k+1} g_{k+1} = -6\left(\frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} - \frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}}\right) \quad (16)$$

para $k = 2, \ldots, n$.

- A igualdade (16) é um sistema linear com $(n-1)$ equações e $(n+1)$ incógnitas, logo indeterminado.
- Para que o sistema seja de solução única uma das seguintes alternativas podem ser utilizadas:
  1. $g_1 = g_{n+1} = 0$ (condição Spline Natural);
  2. $g_1 = g_2$ e $g_{n+1} = g_n$ (condição Aproximação por Parábolas)
  3. $g_1 = H$ e $g_{n+1} = L$ (condição de Inclinação prescrita)

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

Por exemplo, se a condição Spline Natural é usada, o sistema (16) fica:

$$\begin{bmatrix} 2\left(h_2+h_3\right) & h_3 & & \\ h_3 & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & \dots & h_n \\ & & h_n & 2\left(h_n+h_{n+1}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_2 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ g_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_2 - M_1 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ M_n - M_{n-1} \end{bmatrix}$$

onde $M_k = 6\dfrac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}}$.

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

Exemplo: Da tabela a seguir temos que:

x	5	10	15	20	25
$f(x)$	5	20	16	22	18

- $n+1=5 \qquad \Rightarrow n=4$

$$P_k(x) = A_k(x-x_k)^3 + B_k(x-x_k)^2 + C_k(x-x_k) + D_k;$$

para $k = 2, 3, 4, 5$

- $h_2 = h_3 = h_4 = h_5 = 5$
- Por Spline Natural, segundo a relação (16), temos

$$\begin{bmatrix} 20 & 5 & 0 \\ 5 & 20 & 5 \\ 0 & 5 & 20 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_2 \\ g_3 \\ g_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -22.8 \\ 12 \\ -12 \end{bmatrix}$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico

$$g_2 = -1.43571428$$

$$g_3 = 1.18285714 \qquad g_1 = g_5 = 0$$

$$g_4 = -0.89571428$$

- Os coeficientes de $P_k(x)$ ficam determinados então por:

$$A_2 = -0.04785 \quad A_3 = 0.08728 \quad A_4 = -0.06928 \quad A_5 = 0.02985$$

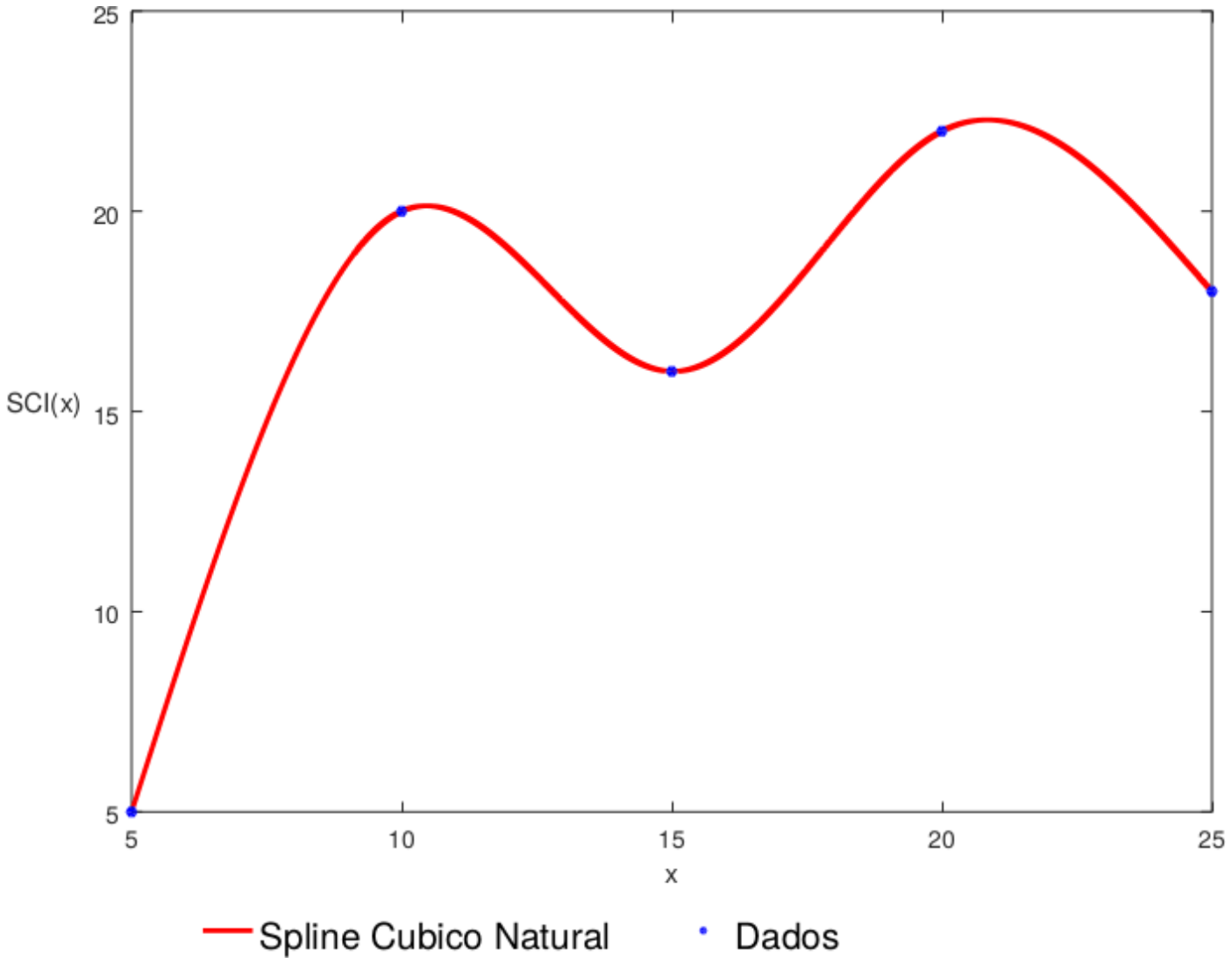
$$B_2 = -0.71785 \quad B_3 = 0.59142 \quad B_4 = -0.44785 \quad B_5 = 0$$

$$C_2 = 0.60714 \quad C_3 = -0.0250 \quad C_4 = 0.69285 \quad C_5 = -1.54642$$

$$D_2 = 20 \quad D_3 = 16 \quad D_4 = 22 \quad D_5 = 18$$

Anotações

Interpolação Spline Cúbico



Anotações

Interpolação Spline Cúbico

$\mathcal{A}_4$: Exemplo:

x	5	10	15	20	25
$f(x)$	5	20	16	22	18

Da tabela acima construa a spline cúbica interpolante parametrizada:

$$SCI(t) = \begin{cases} x_1^i(t) \\ \\ y_1^i(t) \end{cases} \qquad t \in [t_i, t_{i+1}]$$

e esboce o gráfico

Dica: Conside a tabela

t	1	2	3	4	5
x	5	10	15	20	25

para o cálculo de $x_1^i(t)$. Para $y_1^i(t)$ considere

t	1	2	3	4	5
$f(x)$	5	20	16	22	18

Anotações

Lista de Exercícios - 2

1. Um Spline Cúbico Natural S em $[0,2]$ é definido por:

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x) = 1 + 2x - x^3, & 0 \leq x < 1 \\ S_1(x) = 2 + b(x-1) + c(x-1)^2 + d(x-1)^3, & 1 \leq x \leq 2 \end{cases}$$

   Encontre b, c e d.

2. Determine, por Spline Natural, o desenho da borda do mapa da cidade de Londrina.
   - Dica 1: Utilize papel milimetrado para extrair um conjunto de pares ordenados
   - Dica 2: Utilize softwares para extração de um conjunto de pares ordenados

Anotações

Respostas da Lista de Exercícios - 2

1. $b = -1$, $c = -3$ e $d = 1$

2.

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
3. Integração
   - Regras: dos Trapézios e de Simpson
   - Quadratura Gaussiana
   - Lista de Exercícios
   - Quadratura Adaptativa
   - Lista de Exercícios
   - Cálculo de θ para as regras: dos Trapézios e de Simpson
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Regras: dos Trapézios e de Simpson

Regra dos Trapézios Composta

Sejam $f \in C^2[a,b]$, $h = \dfrac{b-a}{n}$ e $x_j = a + jh$ com $j = 0, \ldots, n$. Existe um $\mu \in (a,b)$ para o qual a Regra dos Trapézios Composta, para n subintervalos pode ser escrita como:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(b)\right] - \frac{b-a}{12}h^2 f''(\mu).$$

Regra de Simpson Composta

Sejam $f \in C^4[a,b]$, n par, $h = \dfrac{b-a}{n}$ e $x_j = a + jh$ com $j = 0, \ldots, n$. Existe um $\mu \in (a,b)$ em que a Regra de Simpson Composta para n subintervalos é:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left[f(a) + 2\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} f(x_{2j-1}) + f(b)\right] - \frac{b-a}{180}h^4 f''''(\mu).$$

Anotações

Regras: dos Trapézios e de Simpson

Exemplo: Cálculo da $\displaystyle\int_0^2 \frac{1}{x+1}dx$ pelas regras do Trapézio e Simpson com o menor número de elementos possíveis.

- RT: $n = 1$, $h = \dfrac{2-0}{1}$, $j = 0, 1$

$$\int_0^2 \frac{1}{x+1}dx \simeq \frac{2}{2}\left[1 + \frac{1}{3}\right] \simeq \frac{4}{3}$$

- RS: $n = 2$, $h = \dfrac{2-0}{2}$, $j = 0, 1, 2$

$$\int_0^2 \frac{1}{x+1}dx \simeq \frac{1}{3}\left[1 + 4\frac{1}{2} + \frac{1}{3}\right] \simeq \frac{10}{9}$$

Anotações

Regras: dos Trapézios e de Simpson

- $|E_f|_{RT}$

$$
\begin{aligned}
|E_f|_{RT} &= \left| -\frac{2}{12} 2^2 \left\{ \frac{2}{(\mu+1)^3} \right\} \right| = \frac{16}{12} \left| \left\{ \frac{1}{(\mu+1)^3} \right\} \right| \\
&\leq \frac{16}{12} \left| \max_{\mu \in [0,2]} \left\{ \frac{1}{(\mu+1)^3} \right\} \right| = \frac{16}{12} \simeq 1.333...
\end{aligned}
$$

- $|E_f|_{RS}$

$$
\begin{aligned}
|E_f|_{RS} &= \left| -\frac{2}{180} 1^4 \left\{ \frac{24}{(\mu+1)^5} \right\} \right| = \frac{48}{180} \left| \left\{ \frac{1}{(\mu+1)^5} \right\} \right| \\
&\leq \frac{48}{180} \left| \max_{\mu \in [0,2]} \left\{ \frac{1}{(\mu+1)^5} \right\} \right| = \frac{48}{180} \simeq 0.266...
\end{aligned}
$$

OBS: Note que o $|E_f|_{RS}$ é significativamente menor do que o $|E_f|_{RT}$.

Anotações

Regras: dos Trapézios e de Simpson

Exemplo: Qual o menor número n de elementos, no cálculo de $\int_0^{\pi} sen\,(x)\,dx$, com erro absoluto menor que 0.00002, via regras do Trapézio e Simpson?

De

$$h = \frac{\pi - 0}{n} \quad \Rightarrow \quad h = \frac{\pi}{n} \quad \text{e} \quad x_j = 0 + jh = jh \quad \text{com} \quad j = 0, 1, 2, \ldots, n$$

então

$$\begin{aligned} |E_f|_{RT} &= \left| -\frac{\pi}{12} h^2 \left\{ -sen\,(\mu) \right\} \right| = \frac{\pi h^2}{12} \left| \left\{ -sen\,(\mu) \right\} \right| \\ &\leq \frac{\pi(\pi/n)^2}{12} \left| \max_{\mu \in [0,\pi]} \left\{ sen\,(\mu) \right\} \right| = \frac{\pi^3}{12n^2} \overbrace{1}^{\text{estimado}} \quad \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\frac{\pi^3}{12n^2} < 2 \times 10^{-5} \quad \Leftrightarrow \quad n > \sqrt{\frac{\pi^3}{24 \times 10^{-5}}} \simeq 359.43 \quad \Rightarrow \quad n = 360$$

$\mathcal{A}_1$: De modo análogo confirme $n = 18$ para a Regra de Simpson.

Anotações

Quadratura Gaussiana

- Considere a integral

$$\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = \sum_{i=1}^{p} w_i f(t_i) + E_p \qquad p \geq 1 \tag{17}$$

  tal que w_i é chamado de peso e t_i são os pontos de integração.
- Em (17) o termo dado pelo somatório é nomeado por Quadratura Gaussiana e E_p é o seu termo de erro.
- Uma forma de se calcular t_i e w_i é por Polinômios de Legendre. Os Polinômios de Legendre são aqueles que satisfazem a seguinte relação de recorrência:

$$\begin{cases} \rho_{n+1}(t) &= \left(\dfrac{2n+1}{n+1}\right) t\rho_n(t) - \left(\dfrac{n}{n+1}\right)\rho_{n-1}(t) \quad n \geq 1 \\ \rho_0(t) &= 1 \quad ; \quad \rho_1(t) = t. \end{cases} \tag{18}$$

Anotações

Quadratura Gaussiana

Teorema para o cálculo dos pesos

Os pontos de integração t_i são os zeros dos Polinômios de Legendre de grau p e os w_i são:

$$w_i = \frac{1}{\left[\rho'_p\left(t_i\right)\right]^2} \cdot \frac{2}{\left(1 - t_i^2\right)} \quad ; \quad i = 1, 2, \ldots, p. \tag{19}$$

O erro E_p é calculado por:

$$E_p = \frac{2^{2p+1}\left(p!\right)^4}{\left(2p+1\right)\left[\left(2p\right)!\right]^3} \cdot f^{(2p)}\left(\xi\right) \quad ; \quad \xi \in \left[-1, 1\right]. \tag{20}$$

- Observe que a avaliação de (17) se dá pelos cálculos dos pesos mediante (19) cujos pontos de integração são obtidos via (18). O erro da Quadratura Gaussiana pode ser estimado por (20).

Anotações

Quadratura Gaussiana

- Regras de Gauss

1° Ordem $(p=1)$ $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = w_1 f(t_1) + E_1$

$$\begin{aligned} \rho_1(t) = t \;\Rightarrow\; & t_1 = 0 \quad ; \quad w_1 = 2 \\ \therefore \int_{-1}^{1} f(t)\,dt \;=\; & 2f(0) + \frac{1}{3} f^{(2)}(\xi) \end{aligned}$$

2° Ordem $(p=2)$ $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(t)\,dt = w_1 f(t_1) + w_2 f(t_2) + E_2$

$$\begin{aligned} \rho_2(t) = \frac{3}{2}t^2 - \frac{1}{2} \;\Rightarrow\; & t_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}};\, t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}};\, w_1 = w_2 = 1 \\ \therefore \int_{-1}^{1} f(t)\,dt \;=\; & f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{135} f^{(4)}(\xi) \end{aligned}$$

para $\xi \in [-1, 1]$.

- $\mathcal{A}_2$: Deduza a regra de Gauss de ordem 3.

Anotações

Quadratura Gaussiana

- No caso de um intervalo genérico $[a, b]$ onde se deseja realizar a integração, é necessário fazer uma mudança de variável do tipo:

$$x \in [a, b] \quad \text{para} \quad t \in [-1, 1]$$

dada por

$$x = \frac{1}{2}\left[a + b + t\,(b - a)\right] \quad \text{e} \quad dx = \frac{b - a}{2} dt$$

Exemplo: $\displaystyle\int_0^{10} e^{-x} dx$

De $x = 5 + 5t$ e $dx = 5dt$ temos:

$$\int_0^{10} e^{-x} dx = 5e^{-5} \int_{-1}^{1} e^{-5t} dt \simeq 0.606102$$

(integração de 2° ordem)

Anotações

Lista de Exercícios - 3

1. Obtenha uma aproximação das seguintes integrais com os valores indicados de n.

Regra dos Trapézios Composta :

a. $\int_1^2 xln\,(x)\,dx; n = 4$

b. $\int_0^{\frac{3\pi}{8}} tg\,(x)\,dx; n = 8$

Regra de Simpson :

c. $\int_{-2}^2 x^3 e^x dx; n = 4$

d. $\int_3^5 \frac{1}{\sqrt{x^2-4}} dx; n = 8$

2. Obtenha uma aproximação das seguintes integrais, utilizando Quadratura Gaussiana, com os valores indicados de n.

a. $\int_1^{1.5} x^2 ln\,(x)\,dx; n = 3$

b. $\int_0^{0.35} \frac{2}{x^2-4} dx; n = 5$

Anotações

Respostas da Lista de Exercícios - 3

1

a. 0.639900
b. 0.970926
c. 22.47713
d. 0.6043941

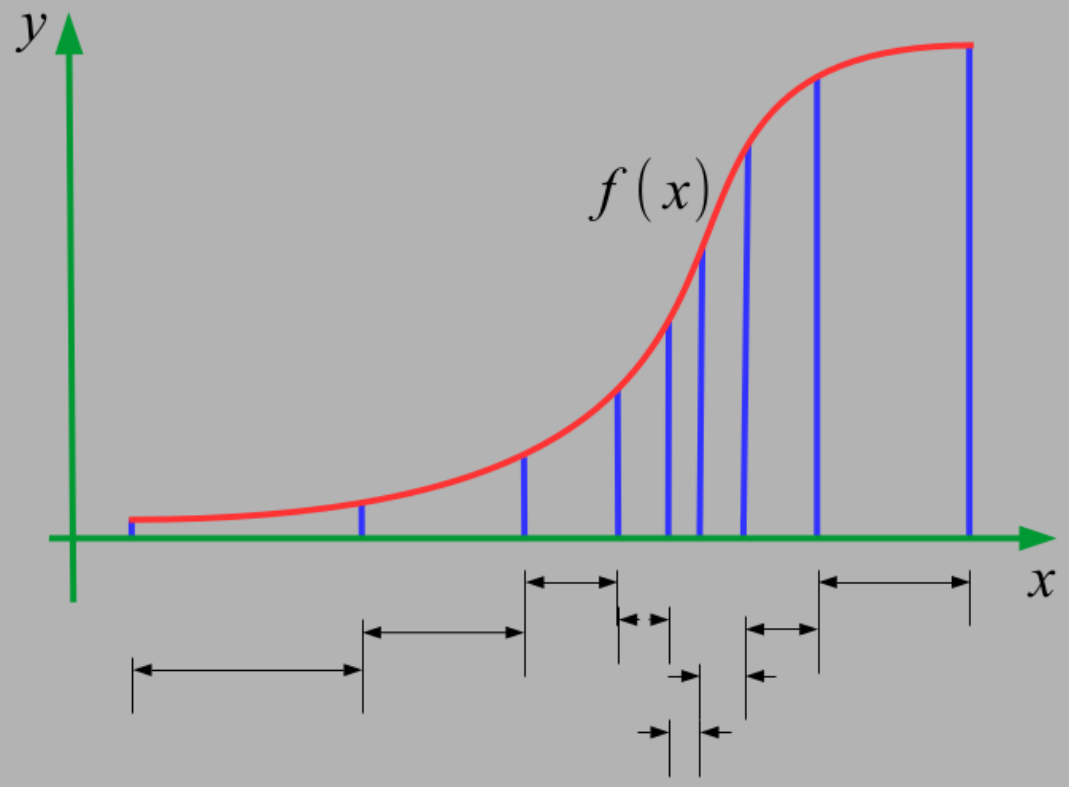
2

a. 0.1922594
b. -0.1768200

Anotações

Quadratura Adaptativa

- A Quadratura Adaptativa é uma técnica que procura prever a variação funcional e adaptar o tamanho do espaçamento quando for necessário, como sugere o gráfico abaixo.



- O método da Quadratura Adaptativa pode ser deduzido para diversas regras tipo: dos Trapézios, Simpson, etc.

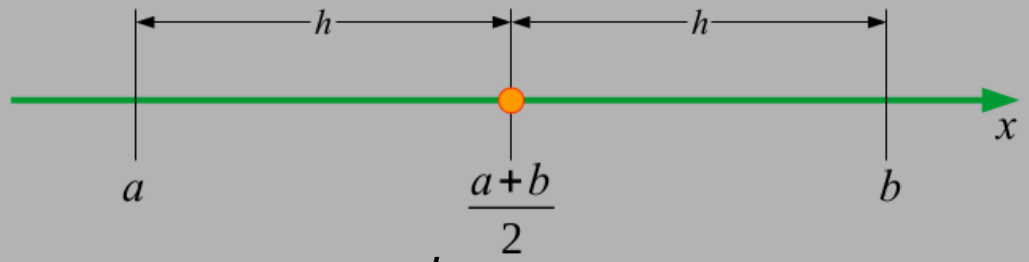
Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

- Admita por hipótese que queiramos calcular no intervalo $I = [a, b]$

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

via a Regra de Simpson (R.S.) com quadratura adaptativa.

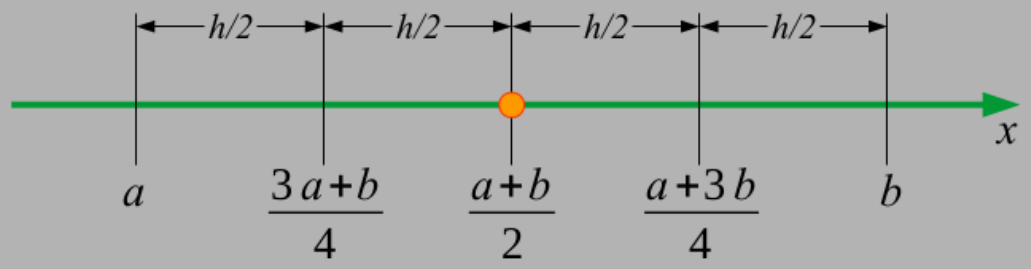


- Assumindo que $n = 2$ e $h = \dfrac{b-a}{2}$, ver discretização na figura acima, pela R.S. (pág. 71) temos:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \underbrace{\frac{h}{3}\left[f(a) + 4f(a+h) + f(b)\right]}_{\text{integral aproximada}} - \underbrace{\overbrace{\frac{h^5}{90}}^{b-a=2h} f^{(4)}(\mu)}_{\text{termo do erro}} \\ &= I_2 + E_2; \quad \mu \in (a, b) \qquad (21)\end{aligned}$$

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson



- Agora, tomando $n = 4$ e $\dfrac{h}{2} = \dfrac{b-a}{4}$ encontramos pela R.S.:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \frac{h}{6}\left[f(a) + 2f(a+h) + 4\left(f(a+h/2) + f(a+3h/2)\right)\right.\\ &+ \left. f(b)\right] - \frac{1}{16}\left(\frac{h^5}{90}\right) f^{(4)}(\widetilde{\mu}) = I_4 + E_4; \quad \widetilde{\mu} \in (a,b)\end{aligned}$$

que nos permite escrever:

$$\begin{aligned} I_4^- &= \frac{h}{6}\left[f(a) + f(a+h) + 4f(a+h/2)\right]\\ I_4^+ &= \frac{h}{6}\left[f(a+h) + 4f(a+3h/2) + f(b)\right]\end{aligned}$$

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

então a integral fica:

$$\int_a^b f(x)\,dx = I_4^- + I_4^+ - \frac{1}{16}\left(\frac{h^5}{90}\right) f^{(4)}(\widetilde{\mu}) \tag{22}$$

- Assuma por hipótese (Hipótese ousada!) que

$$\mu \simeq \widetilde{\mu} \qquad \Rightarrow \qquad f^{(4)}(\mu) \simeq f^{(4)}(\widetilde{\mu})$$

então de (21) e (22) podemos escrever:

$$I_2 + E_2 \simeq I_4^- + I_4^+ + E_4$$

ou ainda

$$\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\widetilde{\mu}) \simeq \frac{16}{15}\left[I_2 - I_4^- - I_4^+\right]. \tag{23}$$

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

- De (22) segue que:

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - I_4^- - I_4^+\right| = \left|-\frac{1}{16}\left(\frac{h^5}{90}\right) f^{(4)}(\widetilde{\mu})\right|$$

mas considerando (23) deduz-se

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - I_4^- - I_4^+\right| \simeq \frac{1}{15}\left|I_2 - I_4^- - I_4^+\right|.$$

- Impondo que:

$$e_\varepsilon = \frac{1}{15}\left|I_2 - I_4^- - I_4^+\right| < \varepsilon \tag{24}$$

para algum ε fixado a-priori, espera-se (por conta da hipótese ousada)

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - I_4^- - I_4^+\right| < \varepsilon \tag{25}$$

e então, $I_4^- + I_4^+$ é aceito como uma aproximação de $\int_a^b f(x)\,dx$.

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

- Por outro lado, se (24) não é verificado é provável que o resultado (25) não seja válido também. Diante disso, dividimos o intervalo I na forma $I = I_A \cup I_B$, e aplicamos a R.S. tal que:

$$I_A = \left[a, \frac{a+b}{2}\right] \qquad \text{e} \qquad I_B = \left[\frac{a+b}{2}, b\right].$$

- Em I_A estimamos uma versão parecida com (24) para $\frac{\varepsilon}{2}$ e não ε.

  Esperamos que a versão parecida com (25) seja válida em $\frac{\varepsilon}{2}$.

  Analogamente estimamos em I_B.
- Se as estimativas valerem para I_A e I_B então a soma das integrais nestes intervalos provavelmente satisfaz a expressão (25), ou seja:

$$\left| \int_a^b f(x)\, dx - I_{4_A}^- - I_{4_A}^+ - I_{4_B}^- - I_{4_B}^+ \right| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon \tag{26}$$

  e então é aceito como aproximação de $\int_a^b f(x)\, dx$ o valor

$$I_{4_A}^- + I_{4_A}^+ + I_{4_B}^- + I_{4_B}^+.$$

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

- No entanto se as estimativas para I_A e I_B não valerem, fracionamos os intervalos I_A e I_B e repetimos todo o processo anteriormente descrito.

- O procedimento descrito é dinâmico e dependente do valor funcional de $f(x)$.

- Pode ocorrer a necessidade de subdivisões de intervalos novos não necessariamente aos pares como acima desenvolvido, é aí que se caracteriza a metodologia adaptativa.

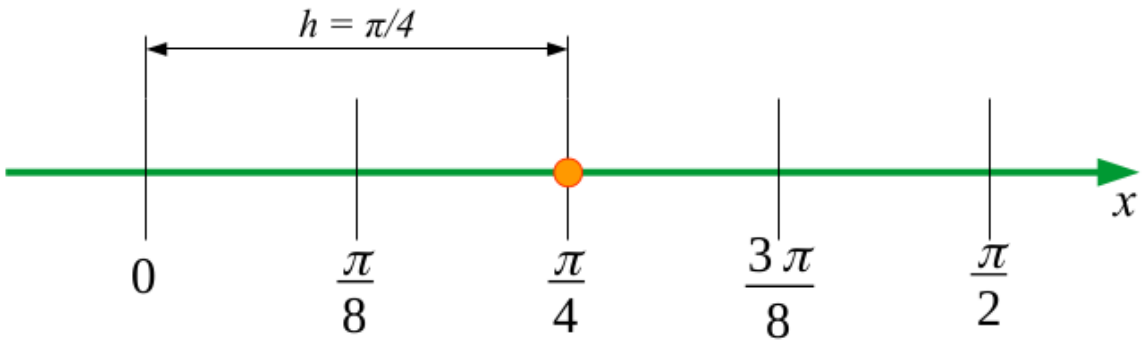
- $\mathcal{A}_3$: Deduza a Quadratura Adaptativa para a Regra dos Trapézios. Dica: inicie com $n = 1$, após considere $n = 2$ e então finalize o procedimento em $n = 4$.

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

Exemplo: $\int_0^{\pi/2} sen\,(x)\,dx$ cujo critério é $\varepsilon = 1 \times 10^{-5}$

1° Iteração:



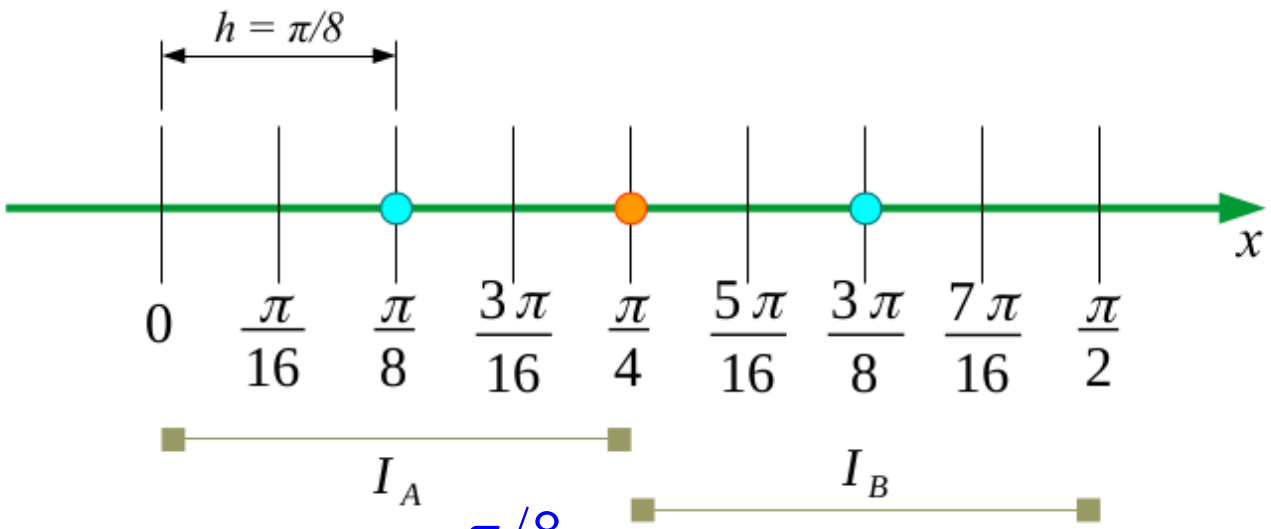
$$
\begin{aligned}
I_2 &= \frac{\pi/4}{3}\left[sen\,(0) + 4sen\,(\pi/4) + sen\,(\pi/2)\right] \\
I_4^- &= \frac{\pi/4}{6}\left[sen\,(0) + sen\,(\pi/4) + 4sen\,(\pi/8)\right] \\
I_4^+ &= \frac{\pi/4}{6}\left[sen\,(\pi/4) + 4sen\,(3\pi/8) + sen\,(\pi/2)\right]
\end{aligned}
$$

$$
e_\varepsilon = \frac{1}{15}\left|I_2 - I_4^- - I_4^+\right| = 1.43 \times 10^{-4} < 1 \times 10^{-5}\,(\mathbf{F}) \quad \text{“Itera!”}
$$

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

2° Iteração:



- I_A

$$
\begin{aligned}
I_2 &= \frac{\pi/8}{3}\left[sen\,(0) + 4sen\,(\pi/8) + sen\,(\pi/4)\right] \\
I_4^- &= \frac{\pi/8}{6}\left[sen\,(0) + sen\,(\pi/8) + 4sen\,(\pi/16)\right] \\
I_4^+ &= \frac{\pi/8}{6}\left[sen\,(\pi/8) + 4sen\,(3\pi/16) + sen\,(\pi/4)\right]
\end{aligned}
$$

$$
e_{\frac{\varepsilon}{2}} = \frac{1}{15}\left|I_2 - I_4^- - I_4^+\right| = 2.4 \times 10^{-6} < \varepsilon/2\,(\mathbf{V})
$$

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

$$\therefore \int_0^{\pi/4} sen\,(x)\,dx \simeq 0.29289564$$

- I_B

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

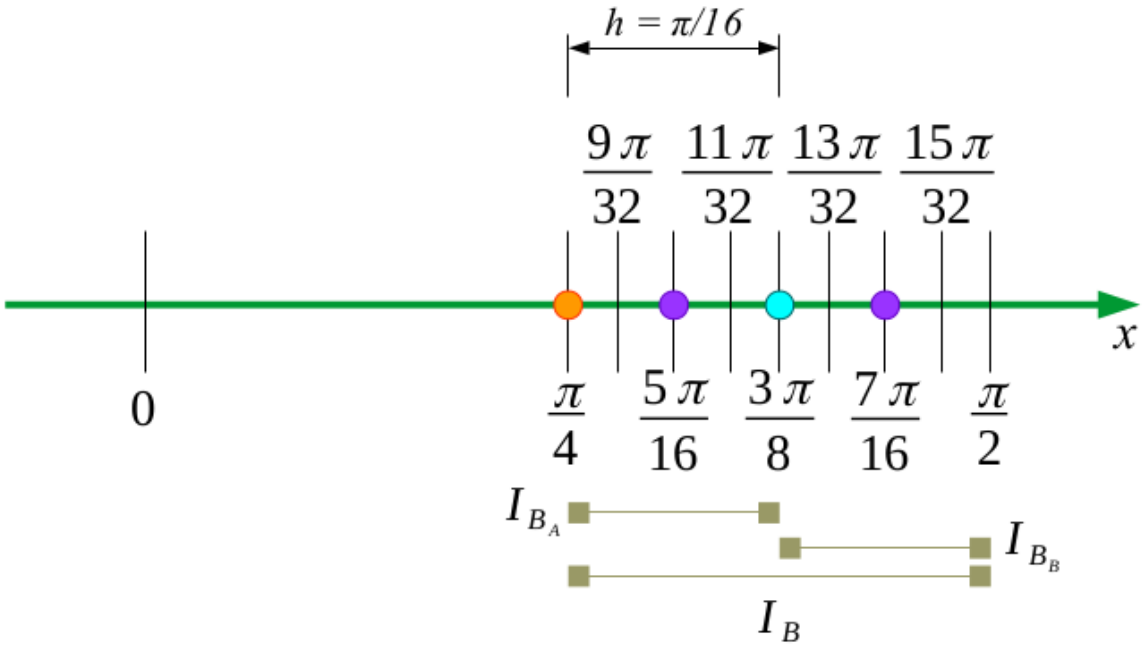
$$e_{\frac{\varepsilon}{2}} \quad = \quad 5.9 \times 10^{-6} < \varepsilon/2\,(\mathbf{F}) \quad \text{“Itera em } I_B\text{!”}$$

- Reforçando! É aqui que a adptatividade se mostra relevante. O refinamento é aplicado apenas em I_B, uma vez que em I_A já alcançamos o critério imposto. Essa estratégia tem um menor custo computacional, o que torna a adptatividade uma metodologia interessante.

Anotações

Quadratura Adaptativa para a Regra de Simpson

3° Iteração:



$\mathcal{A}_4$:

- I_{B_A}
- I_{B_B}

Obs: Não se esqueça que a verificação é sobre $e_{\frac{\varepsilon}{4}}$ nos dois intervalos!

$$\therefore \quad \int_0^{\pi/2} sen\,(x)\,dx \simeq ?$$

Anotações

Lista de Exercícios - 4

1. Faça os gráficos de $sen\left(\frac{1}{x}\right)$ e $cos\left(\frac{1}{x}\right)$ em $[0.1, 2]$. Utilize a quadratura adaptativa para obter uma aproximação das integrais a seguir com a precisão de 10^{-3}.

   a. $\displaystyle\int_{0.1}^{2} sen\left(\frac{1}{x}\right) dx$

   b. $\displaystyle\int_{0.1}^{2} cos\left(\frac{1}{x}\right) dx$

Anotações

Respostas da Lista de Exercícios - 4

1

a. 1.1454

b. 0.67378

Anotações

Cálculo de θ para as regras: dos Trapézios e de Simpson

Considerando que:

- $\theta \simeq \dfrac{1}{log2}\left[log\left(\dfrac{E^h}{E^{h/2}}\right)\right]$ é uma estimativa para a ordem de convergência (ver slide 17)
- e, por exemplo, desejamos saber o valor de θ no cálculo da

$$\int_0^{\pi/2} sen\,(x)\,dx \qquad \textbf{(por meio da Regra dos Trapézios)}$$

então o cálculo da estimativa é realizado pela metodologia a seguir.

1. **Valor exato:**
$$\int_0^{\pi/2} sen\,(x)\,dx = -cos\,(x)\Big|_0^{\pi/2} = -cos\,(\pi/2) + cos\,(0) = 1$$
2. **Escolha das malhas:**
Considere os resultados numéricos com diferentes espaçamentos h's, de modo a ter as seguintes quantidades de elementos:

$$2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024, 2048, 4096$$

Anotações

Cálculo de θ para as regras: dos Trapézios e de Simpson

3. **Resultados do cálculo numérico:**

n	I_n	$Erro_{relativo}$
2	9.480594489685e-01	9.480594489685e-01
4	9.871158009728e-01	1.019858491375e-02
8	9.967851718862e-01	9.881348924650e-04
16	9.991966804851e-01	1.107888120599e-04
32	9.997991943200e-01	1.316736753233e-05
64	9.999498000921e-01	1.606393153347e-06
128	9.999874501175e-01	1.984170346826e-07
256	9.999968625353e-01	2.465590962179e-08
512	9.999992156342e-01	3.072932875945e-09
1024	9.999998039086e-01	3.835534864655e-10
2048	9.999999509771e-01	4.790779119569e-11
4096	9.999999877443e-01	5.988876135133e-12

4. **Resultados considerados:**
   Fixando $\varepsilon = 10^{-3}$ para o $Erro_{relativo}$, descartamos os casos em que n é 2 e 4

Anotações

Cálculo de θ para as regras: dos Trapézios e de Simpson

5. **Resultados finais:**

n	I_n	$Erro_{relativo}$	θ
8	9.967851718862e-01	9.881348924650e-04	–
16	9.991966804851e-01	1.107888120599e-04	3.15689580165268
32	9.997991943200e-01	1.316736753233e-05	3.07277334833838
64	9.999498000921e-01	1.606393153347e-06	3.03507001504334
128	9.999874501175e-01	1.984170346826e-07	3.01721722972142
256	9.999968625353e-01	2.465590962179e-08	3.00853050685612
512	9.999992156342e-01	3.072932875945e-09	3.00424531999158
1024	9.999998039086e-01	3.835534864655e-10	3.00211657312004
2048	9.999999509771e-01	4.790779119569e-11	3.00109557113228
4096	9.999999877443e-01	5.988876135133e-12	2.99990309986642

6. **Discussão:**
   A ordem de convergência é de aproximadamente **3.0** [3].

[3] Caso não tenhamos o valor exato em um problema, procedemos da mesma maneira. Porém, admitimos a solução numérica na malha mais fina no lugar da exata!

Anotações

Cálculo de θ para as regras: dos Trapézios e de Simpson

$\mathcal{A}_5$: Admita a solução numérica quando n = 4096 (no lugar da exata), e proceda com os cálculos de modo análogo ao que foi feito anteriormente.

$\mathcal{A}_6$: Faça todos os desenvolvimentos realizados nesta seção, mas agora para a Regra de Simpson.

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
   - Normas
   - Método das Relaxações Sucessivas
   - Critérios de Convergência
   - Lista de Exercícios
   - Método do Gradiente Conjugado
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Normas

Uma norma em $\Re^{m\times n}$ é uma função com as seguintes propriedades:

i) $\left(\forall A \in \Re^{m\times n}\right)\left(||A|| \geqslant 0 \text{ e } ||A|| = 0 \leftrightarrow A = 0\right)$

ii) $\left(\forall A \in \Re^{m\times n}\right)\left(\forall \alpha \in \Re\right)\left(||\alpha A|| = |\alpha|.||A||\right)$

iii) $\left(\forall A, B \in \Re^{m\times n}\right)\left(||A + B|| \leqslant ||A|| + ||B||\right)$

As normas usuais são:

$$||A||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{i,j}^2} \quad , \quad \text{norma Euclidiana}$$

$$||A||_c = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^{m} |a_{i,j}| \quad , \quad \text{norma do máx. das colunas}$$

$$||A||_l = \max_{1\leqslant i\leqslant m} \sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}| \quad , \quad \text{norma do máx. das linhas}$$

Anotações

Normas

Norma vetorial/matricial

Suponha que $x = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 6 \end{pmatrix}$ então temos:

$$||x||_c = \max_{1 \leqslant j \leqslant 3} \sum_{i=1}^{1} |x_{i,j}| = \max\{|-2|, |1|, |6|\} = 6$$

$$||x||_l = 9 \qquad\qquad ||x||_2 = \sqrt{4+1+36} = \sqrt{41}$$

mas se $M = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 6 & 2 \\ 1 & 1 & 5 & 1 \\ 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 1 & 2 & 5 \end{pmatrix}$ então:

$$||x||_c = \max_{1 \leqslant j \leqslant 4} \sum_{i=1}^{4} |m_{i,j}| = \max\{1, 4, 17, 10\} = 17$$

$$||M||_2 = \sqrt{122} \qquad\qquad ||x||_l = \max\{10, 8, 6, 8\} = 10$$

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

O Método das Relaxações Sucessivas é uma técnica que resolve sistemas lineares, $AX = b$, de modo iterativo. Sem perda de generalidade considere:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 & = & b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 & = & b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 & = & b_3 \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 & = & b_4 \end{cases}$$

onde $a_{ii} \neq 0$ para $i = 1, 2, 3, 4$. Esse sistema pode ser reescrito na forma

$$\begin{cases} x_1 & = & \dfrac{1}{a_{11}}\left(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - a_{14}x_4\right) \\ x_2 & = & \dfrac{1}{a_{22}}\left(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - a_{24}x_4\right) \\ x_3 & = & \dfrac{1}{a_{33}}\left(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2 - a_{34}x_4\right) \\ x_4 & = & \dfrac{1}{a_{44}}\left(b_4 - a_{41}x_1 - a_{42}x_2 - a_{43}x_3\right) \end{cases} \tag{27}$$

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

e assumindo que no nível k os valores x_1, x_2, x_3, x_4 sejam conhecidos, então de (27) temos para o nível $k+1$ o que segue:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} &= \dfrac{1}{a_{11}}\left(b_1 - a_{12}x_2^k - a_{13}x_3^k - a_{14}x_4^k\right) \\ x_2^{k+1} &= \dfrac{1}{a_{22}}\left(b_2 - a_{21}x_1^k - a_{23}x_3^k - a_{24}x_4^k\right) \\ x_3^{k+1} &= \dfrac{1}{a_{33}}\left(b_3 - a_{31}x_1^k - a_{32}x_2^k - a_{34}x_4^k\right) \\ x_4^{k+1} &= \dfrac{1}{a_{44}}\left(b_4 - a_{41}x_1^k - a_{42}x_2^k - a_{43}x_3^k\right) \end{cases}$$

que corresponde ao Método de Jacobi para a resolução do sistema linear. No caso geral o método pode ser escrito como:

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^k - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^k\right] \tag{28}$$

com $i = 1, \ldots, n$.

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

Por outro lado, se x_i está sendo calculado então todos os valores x_j para $j = 1, \ldots, i-1$ são conhecidos, logo de (28) pode-se deduzir

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^k \right] \tag{29}$$

com $i = 1, \ldots, n$, o qual é nomeado de Método de Gauss-Seidel.
Adicionando e subtraindo x_i^k em (29) então segue que

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

mas podemos escrever $-x_i^k = -\frac{a_{ii}}{a_{ii}} x_i^k$, logo

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \boxed{\sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^k} \right] \tag{30}$$

com $i = 1, \ldots, n$.

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

Observe em (30) que x_i^{k+1} é x_i^k acrescido de um termo de correção $\frac{1}{a_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij}x_j^k\right]$.

A convergência pode ser acelerada por um fator ω multiplicado pelo termo de correção. O ω é mais conhecido como Fator de Relaxação e geralmente é tomado na faixa $0 < \omega < 2$, de modo que:

- $0 < \omega < 1$ significa sub-relaxado
- $\omega = 1$ significa que a forma Gauss-Seidel é a utilizada
- $1 < \omega < 2$ significa sobre-relaxado

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

Desta forma, de (30) pode-se escrever ainda

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \frac{\omega}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i}^{n} a_{ij} x_j^k \right]$$

ou

$$x_i^{k+1} = x_i^k - \omega \frac{a_{ii}}{a_{ii}} x_i^k + \frac{\omega}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^k \right]$$

ou finalmente

$$x_i^{k+1} = \frac{\omega}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^k \right] - (\omega - 1)\, x_i^k \qquad (31)$$

com $i = 1, \ldots, n$ e $0 < \omega < 2$, $k = 0, 1, \ldots,$ que é nomeado Método das Relaxações Sucessivas.

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

Exemplo:

$$\begin{pmatrix} 4 & 0.24 & -0.08 \\ 0.09 & 3 & -0.15 \\ 0.04 & -0.08 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 9 \\ 20 \end{pmatrix}; \quad X^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \varepsilon = 0.02; \quad \omega = 1$$

	x_1	x_2	x_3	E_{rel}
–	**0**	**0**	**0**	–
$k = 0$	2	2.94	5.0388	$\{1,1,1\}$ $1 < \varepsilon$ (F)
$k = 1$	1.9244	3.1942	5.0446	$\{3.9\times10^{-2}, 7.9\times10^{-2}, 1.1\times10^{-3}\}$ $7.9 \times 10^{-2} < \varepsilon$ (F)
$k = 2$	1.9092	3.1950	5.0448	$\{7.9\times10^{-3}, 2.5\times10^{-4}, 3.9\times10^{-5}\}$ $7.9 \times 10^{-3} < \varepsilon$ (V)

$\mathcal{A}_1$: avalie os casos em que $\omega = 0.5$ e $\omega = 1.7$ nas outras normas (no modo relativo).

Anotações

Critérios de Convergência

Teorema: Critério das Linhas

Considere o sistema linear $A.X = b$ e seja $\alpha_L = \dfrac{1}{|a_{LL}|} \displaystyle\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq L}}^{n} |a_{Lj}|$.

Se $\alpha = \displaystyle\max_{1 \leqslant L \leqslant n} \alpha_L < 1$, então o Método de Gauss-Seidel gera uma sequência de vetores solução convergente para a solução do sistema linear qualquer que seja a escolha de X^0.

Observação:

- o critério das linhas estabelece que a matriz dos coeficientes é diagonal dominante;
- que a convergência, via o método de Gauss-Seidel, tem relação estrita com a estrutura da matriz dos coeficientes A.

Anotações

Critérios de Convergência

Teorema: Critério de Sassenfeld

Seja o sistema linear $A.X = b$ e sejam:

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= \frac{1}{|a_{11}|}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq L}}^{n}|a_{1j}| \\
\beta_L &= \frac{1}{|a_{LL}|}\left(|a_{L1}|\beta_1 + |a_{L2}|\beta_2\right. \\
&\quad \left. + \cdots + |a_{L,j-1}|\beta_{j-1} + |a_{L,j+1}|\beta_1 + \cdots + |a_{Ln}|\right)
\end{aligned}$$

e seja ainda $\beta = \underset{1\leqslant L\leqslant n}{\text{máx}}$. Se $\beta < 1$, então o Método de Gauss-Seidel gera uma sequência de vetores solução convergente, qualquer que seja X^0. Quanto menor o valor de β, mais rápida é a convergência.

Observação:

- o critério de Sassenfeld é uma generalização do critério das linhas.

Anotações

Critérios de Convergência

Exemplo:

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 5 & 2 & 2 \\ 0 & 6 & 8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \\ -6 \end{pmatrix}$$

Temos:

$$\alpha = 4 \Rightarrow \text{não há garantia de convergência via M.G.S.}$$

mas trocando 1° com a 2° linha,

$$\alpha = 0.8 \Rightarrow \text{ logo há convergência via M.G.S. nesta configuração.}$$

Ressalta-se que o sistema a ser resolvido é:

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 2 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 6 & 8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \\ -6 \end{pmatrix}$$

Anotações

Critérios de Convergência

Exemplo:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.5 & -0.1 & 0.1 \\ 0.2 & 1 & -0.2 & -0.1 \\ -0.1 & -0.2 & 1 & 0.2 \\ 0.1 & 0.3 & 0.2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2 \\ -2.6 \\ 1 \\ -2.5 \end{pmatrix}$$

Temos:

$$\beta_1 = 0.7 \quad \beta_2 = 0.44 \quad \beta_3 = 0.358 \quad \beta_4 = 0.2736$$

então

$$\beta = 0.7 < 1$$

garante uma sequência convergente, via M.G.S., para a solução do sistema linear.

Anotações

Critérios de Convergência

Teorema: Critério Ostrowski-Reich

Seja o sistema linear $A.X = b$, se A for definida positiva $\left(\langle X, A.X\rangle = X^t.A.X > 0, \forall X\right)$, então o Método das Relaxações Sucessivas converge para qualquer escolha X^0 e $0 < w < 2$.

Observação:

- verificar se A é definida positiva não é uma tarefa fácil. Uma maneira matemática/computacional dessa verificação é por meio da Fatoração Cholesky.

$\mathcal{A}_2$: Deduza a Fatoração Cholesky. Após, dê mais detalhes sobre como a Fatoração Cholesky efetivamente é utilizada.

Anotações

Lista de Exercícios - 5

1 Considere os sistemas lineares:

$$(\mathrm{I})\ \begin{cases} 3x_1 - x_2 + x_3 &= 1 \\ 3x_1 + 6x_2 + 2x_3 &= 0 \\ 3x_1 + 3x_2 + 7x_3 &= 4 \end{cases}$$

$$(\mathrm{II})\ \begin{cases} 10x_1 - x_2 &= 9 \\ -x_1 + 10x_2 - 2x_3 &= 7 \\ -2x_2 + 10x_3 &= 6 \end{cases}$$

$$(\mathrm{III})\ \begin{cases} 10x_1 + 5x_2 &= 6 \\ 5x_1 + 10x_2 - 4x_3 &= 25 \\ -4x_2 + 8x_3 - x_4 &= -11 \\ -x_3 + 5x_4 &= -11 \end{cases}$$

$$(\mathrm{IV})\ \begin{cases} 4x_1 + x_2 + x_3 + x_5 &= 6 \\ -x_1 - 3x_2 + x_3 + x_4 &= 6 \\ 2x_1 + x_2 + 5x_3 - x_4 - x_5 &= 6 \\ -x_1 - x_2 - x_3 + 4x_4 &= 6 \\ 2x_2 - x_3 + x_4 + 4x_5 &= 6 \end{cases}$$

(a) Use o método de Gauss-Seidel para resolver os sistemas lineares com $TOL = 10^{-3}$ na norma 2.

(b) Use o método das Relaxações Sucessivas, com $w = 1.2$, para resolver os sistemas lineares com $TOL = 10^{-3}$ na norma l.

(c) Determine quais matrizes dos sistemas são tridiagonais definidas positivas. Resolva os sistemas tridiagonais definidos positivos por Relaxações Sucessivas para melhor estimativa w.

OBS: Desenvolva um procedimento que valide as soluções dos itens acima!

Anotações

Produto Interno

- Teorema: Para quaisquer vetores x, y, z e qualquer nº real α, temos:
  1. $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$
  2. $\langle \alpha x, y \rangle = \langle x, \alpha y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle$
  3. $\langle x + z, y \rangle = \langle x, y \rangle + \langle z, y \rangle$
  4. $\langle x, x \rangle \geq 0$
  5. $\langle x, x \rangle = 0 \leftrightarrow x = 0$

- Se A é uma matriz definida positiva, então

$$\langle x, Ax \rangle = x^T Ax > 0 \quad , \forall x$$

a menos que $x = 0$. Quando A é simétrica temos

$$x^T Ay = x^T A^T y = (Ax)^T y$$

logo

$$\langle x, Ay \rangle = \langle Ax, y \rangle \quad , \forall y.$$

Anotações

Formulação do Método Gradiente

- Teorema: O vetor x^* é uma solução do sistema linear definido positivo $Ax = b$ se e somente se, x^* minimiza o funcional

$$g(x) = \langle x, Ax \rangle - 2 \langle x, b \rangle .$$

Dem.

($\Rightarrow$) Considere $x \neq \mathbf{0}$ e $v \neq \mathbf{0}$ fixos, e $t \in R$ variável, então:

$$g(x + tv) =$$
$$\langle x + tv, Ax + tAv \rangle - 2 \langle x + tv, b \rangle =$$
$$\langle x, Ax + tAv \rangle + \langle tv, Ax + tAv \rangle - 2 \{ \langle x, b \rangle + \langle tv, b \rangle \} =$$
$$\langle x, Ax \rangle + \langle x, tAv \rangle + \langle tv, Ax \rangle + \langle tv, tAv \rangle - 2 \langle x, b \rangle - 2 \langle tv, b \rangle =$$
$$\langle x, Ax \rangle + t \langle x, Av \rangle + t \langle v, Ax \rangle + t^2 \langle v, Av \rangle - 2 \langle x, b \rangle - 2t \langle v, b \rangle =$$

ou finalmente

$$g(x + tv) = g(x) + 2 \langle v, Ax - b \rangle t + \langle v, Av \rangle t^2.$$

Anotações

Formulação do Método Gradiente

Com x, v fixos e t variável, definimos a função $H(t) = g(x + tv)$. Uma vez que $\langle v, Av \rangle > 0$, então $H(t)$ tem valor mínimo em $t = \hat{t}$. De fato, considerando

$$H'(t) = 2\langle v, Ax - b \rangle t + 2t \langle v, Av \rangle = 0$$

sai que

$$t = -\frac{\langle v, Ax - b \rangle}{\langle v, Av \rangle} = \frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle} = \hat{t}.$$

Desta forma,

$$\begin{aligned}
&g\left(x + \hat{t}v\right) = \\
&g(x) + 2\hat{t}\langle v, Ax - b \rangle + \hat{t}^2 \langle v, Av \rangle = \\
&g(x) + 2\frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle}\langle v, Ax - b \rangle + \left[\frac{\langle v, b - Ax \rangle}{\langle v, Av \rangle}\right]^2 \langle v, Av \rangle = \\
&g(x) - 2\frac{\langle v, Ax - b \rangle^2}{\langle v, Av \rangle} + \frac{\langle v, Ax - b \rangle^2}{\langle v, Av \rangle}
\end{aligned}$$

Anotações

Formulação do Método Gradiente

ou simplesmente

$$g\left(x+\hat{t}v\right)=g\left(x\right)-\frac{\left\langle v,Ax-b\right\rangle^{2}}{\left\langle v,Av\right\rangle}$$

é o **Valor Mínimo**.

Desta última igualdade temos:

1. $g\left(x+\hat{t}v\right)<g\left(x\right)$, pois $\dfrac{\left\langle v,Ax-b\right\rangle^{2}}{\left\langle v,Av\right\rangle}>0$ considerando que $\left\langle v,Ax-b\right\rangle\neq 0$;
2. caso $\left\langle v,Ax-b\right\rangle=0$, então $g\left(x+\hat{t}v\right)=g\left(x\right)$;
3. é correto dizer que $g\left(x+\hat{t}v\right)\leq g\left(x\right)$.

Anotações

Formulação do Método Gradiente

Portanto, temos as seguintes conclusões.

1. Se x^* satisfaz $Ax^* = b$, isto implica que

$$g\left(x^* + \hat{t}v\right) = g\left(x^*\right) - \frac{\left\langle v, Ax^* - b\right\rangle^2}{\left\langle v, Av\right\rangle} = g\left(x^*\right) \quad , \quad \forall v$$

   ou seja, x^* é o valor tal que $g\left(x^*\right)$ é o mesmo que o valor mínimo, então x^* minimiza g.

2. Se x^* minimiza g, então é verdade que
   2.1 $g\left(x^* + \hat{t}v\right) \leq g\left(x^*\right) \quad \Rightarrow \quad g\left(x^* + \hat{t}v\right) = g\left(x^*\right)$

   2.2 $g\left(x^* + \hat{t}v\right) = g\left(x^*\right) - \dfrac{\left\langle v, Ax^* - b\right\rangle^2}{\left\langle v, Av\right\rangle}$

Anotações

Formulação do Método Gradiente

($\Leftarrow$) De (2.1) e (2.2) segue

$$\begin{aligned} g\left(x^* + \hat{t}v\right) - g\left(x^*\right) &= -\frac{\langle v, Ax^* - b\rangle^2}{\langle v, Av\rangle} \\ 0 &= \langle v, Ax^* - b\rangle \\ Ax^* - b &= \mathbf{0} \quad , \quad \text{pois por hipótese } v \neq \mathbf{0} \end{aligned}$$

ou seja, x^* é solução do sistema linear. Portanto o teorema está provado!
Em resumo, o método gradiente conjugado consiste em:

1. Escolha x^0
2. Admita $v^1 \neq 0$
3. Para $k = 1, 2, 3, \ldots$ calcule
   - $t_k = \dfrac{\left\langle v^k, b^k - Ax^{k-1}\right\rangle}{\langle v^k, Av^k\rangle}$
   - $x^k = x^{k-1} + t_k v^k$
   - escolha uma nova direção v^{k+1}
4. fim

Anotações

Formulação do Método Gradiente

A melhor forma de escolha de v^{k+1} é a partir do conjunto $\left\{v^1, v^2, \ldots, v^n\right\}$ A-**Ortogonal**.

Considerando o conjunto $\left\{v^1, v^2, \ldots, v^n\right\}$ e a matriz A definida positiva, então o conjunto é A-Ortogonal se:

$$\left(v^i\right)^T A v^j = 0 \quad \text{se} \quad i \neq j.$$

- Teorema: Seja $\left\{v^1, v^2, \ldots, v^n\right\}$ um conjunto A-Ortogonal de vetores não nulos associados a matriz definida positiva A, e seja x^0 arbitrário, se:

$$t_k = \frac{\left\langle v^k, b - Ax^{k-1}\right\rangle}{\left\langle v^k, Av^k\right\rangle} \quad ; \quad x^k = x^{k-1} + t_k v^k$$

  para $k = 1, 2, \ldots, n$. Então, supondo aritmética exata, $Ax^n = b$.

Anotações

Método das Relaxações Sucessivas

Exemplo:

$$\begin{pmatrix} 4 & 3 & 0 \\ 3 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24 \\ 30 \\ -24 \end{pmatrix}$$

A matriz dos coeficientes é definida positiva, e $\{v^1, v^2, v^3\}$ é A-Ortogonal onde $v^1 = (1 \;\; 0 \;\; 0)^T$; $v^2 = (-3/4 \;\; 1 \;\; 0)^T$; $v^3 = (-3/7 \;\; 4/7 \;\; 1)^T$.

Se $x^0 = \mathbf{0}$ então temos:

$k = 1$
- $t_1 = 6$
- $x^1 = (6 \;\; 0 \;\; 0)^T$

$k = 2$
- $t_2 = 48/7$
- $x^1 = (6/7 \;\; 48/7 \;\; 0)^T$

$k = 3$
- $t_1 = -5$
- $x^1 = (3 \;\; 4 \;\; -5)^T$ solução exata.

Anotações

Formulação do Método Gradiente

Teorema (Hestenes e Stiefel - 1951): Os vetores residuais $r^k = b - Ax^k$, $k = 1, \ldots, n$, para um método de direção conjugada satisfaz as equações:

$$< r^k, v^j >= 0 \quad ; \quad j = 1, 2, \ldots, k.$$

Do teorema é deduzido que

$$t_k = \frac{\left\langle r^{k-1}, r^{k-1} \right\rangle}{\left\langle v^k, Av^k \right\rangle}$$

e um novo parâmetro s_k surge para atualizar v^{k+1} tal que o conjunto $\left\{ v^1, v^2, \ldots, v^n \right\}$ seja A-Ortogonal, ou seja

$$s_k = \frac{\left\langle r^k, r^k \right\rangle}{\left\langle r^{k-1}, r^{k-1} \right\rangle} \quad ; \quad v^{k+1} = r^k + s_k v^k.$$

Anotações

Formulação do Método Gradiente

Algoritmo 1: Gradiente Conjugado

Entrada: A, b, x^0, $ITMAX$, ϵ

Saída: x^k para algum $1 \leq k < ITMAX$

```
1  início
2  |  r^0 = b - Ax^0   ;   v^1 = r^0
3  |  para k = 1, ..., ITMAX faça
4  |  |  t_k = <r^{k-1}, r^{k-1}> / <v^k, Av^k>;   r^k = r^{k-1} - t_k A v^k;   x^k = x^{k-1} + t_k v^k
5  |  |  se ||r^k|| ≤ ε então
6  |  |  |  Convergiu! x^k é a solução numérica
7  |  |  senão
8  |  |  |  s_k = <r^k, r^k> / <r^{k-1}, r^{k-1}>   ;   v^{k+1} = r^k + s_k v^k
9  |  |  fim
10 |  fim
11 fim
```

$\mathcal{A}_1$: resolva o exemplo do slide 169 com o algoritmo 1.

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
   - Caso particular
   - Caso geral
   - Lista de Exercícios
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Caso particular

Considere uma função não linear $F : D \subset \Re^2 \to \Re^2$ de modo que queremos as soluções de $F(x) = 0$, ou equivalentemente

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2) &= 0 \end{cases} \tag{32}$$

onde $x = (x_1, x_2)$ e $F(x) = (f_1(x) \quad f_2(x))^T$. Considere ainda $x^* = (x_1^*, x_2^*)$ como a solução da função $F(x)$, então é verdade que:

$$F(x^*) = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \begin{cases} f_1(x_1^*, x_2^*) &= 0 \\ f_2(x_1^*, x_2^*) &= 0 \end{cases}$$

Admita que (x_1^0, x_2^0) seja uma aproximação de (x_1^*, x_2^*) e que a Série de Taylor de f_1, f_2 possam ser calculadas, então para (32) podemos escrever:

$$f_1(x_1, x_2) = f_1(x^0) + \frac{\partial}{\partial x_1} f_1(x^0)(x_1 - x_1^0) + \frac{\partial}{\partial x_2} f_1(x^0)(x_2 - x_2^0) + E_1$$

$$f_2(x_1, x_2) = f_2(x^0) + \frac{\partial}{\partial x_1} f_2(x^0)(x_1 - x_1^0) + \frac{\partial}{\partial x_2} f_2(x^0)(x_2 - x_2^0) + E_2$$

Anotações

Caso particular

Levando as funções anteriores em (32) temos

$$\begin{aligned} f_1\left(x^0\right)+\frac{\partial}{\partial x_1}f_1\left(x^0\right)\left(x_1-x_1^0\right)+\frac{\partial}{\partial x_2}f_1\left(x^0\right)\left(x_2-x_2^0\right)+E_1 &= 0 \\ f_2\left(x^0\right)+\frac{\partial}{\partial x_1}f_2\left(x^0\right)\left(x_1-x_1^0\right)+\frac{\partial}{\partial x_2}f_2\left(x^0\right)\left(x_2-x_2^0\right)+E_2 &= 0 \end{aligned}$$

e quando desprezamos E_1 e E_2 podemos escrever

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1}f_1\left(x^0\right) & \frac{\partial}{\partial x_2}f_1\left(x^0\right) \\ \\ \frac{\partial}{\partial x_1}f_2\left(x^0\right) & \frac{\partial}{\partial x_2}f_2\left(x^0\right) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1-x_1^0 \\ \\ x_2-x_2^0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -f_1\left(x_1^0,x_2^0\right) \\ \\ -f_2\left(x_1^0,x_2^0\right) \end{pmatrix} \tag{33}$$

como uma aproximação linear de (32).

Anotações

Caso particular

Denotando

$$\begin{array}{ccc} x_1 - x_1^0 = p_0 & & \overline{x}_1 = x_1^0 + p_0 \\ & \Rightarrow & \\ x_2 - x_2^0 = q_0 & & \overline{x}_2 = x_2^0 + q_0 \end{array} \tag{34}$$

o sistema linear (33) pode ser resolvido por alguma técnica e $\overline{x}_1$ e $\overline{x}_2$ em (34) é uma estimativa para (x_1^*, x_2^*), logo alguma técnica de avaliação sobre convergência pode agora ser aplicada.
Escrevendo $\overline{x}_1 = x_1^1$ e $\overline{x}_2 = x_2^1$ de modo que $\left(x_1^1, x_2^1\right)$ seja uma aproximação de (x_1^*, x_2^*), e procedendo de modo análogo ao feito anteriormente, pode-se deduzir

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x_1} f_1\left(x^1\right) & \dfrac{\partial}{\partial x_2} f_1\left(x^1\right) \\ \\ \dfrac{\partial}{\partial x_1} f_2\left(x^1\right) & \dfrac{\partial}{\partial x_2} f_2\left(x^1\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ \\ q_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f_1\left(x_1^1, x_2^1\right) \\ \\ -f_2\left(x_1^1, x_2^1\right) \end{pmatrix} \tag{35}$$

Anotações

Caso particular

e obter novas estimativas

$$x_1^2 = x_1^1 + p_1$$

$$x_2^2 = x_2^1 + q_1$$

que podem ser avaliadas com respeito a convergência. Procedendo assim sucessivamente obtém-se um conjunto de soluções numéricas do problema original (32).
Em resumo, dado o problema

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2) &= 0 \end{cases}$$

e uma estimativa incial $\left(x_1^0, x_2^0\right)$ e um critério de convergência, então o método de Newton para o sistema não linear consiste em:

Anotações

Caso particular

- resolver o sistema linear

$$J\left(x_1^k, x_2^k\right) . \begin{pmatrix} p_k \\ \\ q_k \end{pmatrix} = -F\left(x_1^k, x_2^k\right) \tag{36}$$

onde $J\left(x_1^k, x_2^k\right)$ é nomeada Matriz Jacobiana

- calcular a nova estimativa

$$\begin{aligned} x_1^{k+1} &= x_1^k + p_k \\ x_2^{k+1} &= x_2^k + q_k \end{aligned} \tag{37}$$

- avaliar a precisão da estimativa

$$ER_1 = \frac{||F\left(x^{k+1}\right) - F\left(x^k\right)||}{||F\left(x^{k+1}\right)||} < \varepsilon_1 \qquad ER_2 = \frac{||x^{k+1} - x^k||}{||x^{k+1}||} < \varepsilon_2 \tag{38}$$

Anotações

Caso particular

Exemplo: $F(x) = \left(x_1 + x_2 - 3, x_1^2 + x_2^2 - 9\right)^T \quad ; \quad x^0 = (1,5) \quad ; \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon = 10^{-4}$

Temos que

$$J(x) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2x_1 & 2x_2 \end{pmatrix}$$

logo para $k = 0$, mediante (36), escrevemos $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -17 \end{pmatrix}$.

Mas resolvendo o sistema e considerando (37) obtemos a primeira aproximação, ou seja,

$$\begin{aligned} x_1^1 &= 1 + p_0 &= -0.625 \\ x_2^1 &= 5 + q_0 &= 3.625. \end{aligned}$$

Em seguida, por (38), podemos avaliar se seguimos ou não no processo iterativo. $\mathcal{A}_1$: prossiga com os cálculos ....

Anotações

Caso geral

No caso geral, dado o sistema não linear

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0 \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0 \\ \vdots & & \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) & = & 0 \end{cases} \tag{39}$$

e uma escolha x^0 suficientemente próxima da solução x^* do sistema, então o método de Newton para este sistema é:

$$x^{k+1} = x^k - \left[J\left(x^k\right)\right]^{-1}.F\left(x^k\right) \tag{40}$$

para $k = 0, 1, 2, \ldots,$ desde que $\left[J\left(x^k\right)\right]^{-1}$ exista.

Anotações

Caso geral

Como o custo computacional de $\left[J\left(x^k\right)\right]^{-1}$ em geral é alto, então (40) pode ser implementado pelos cálculos:

$$\begin{cases} J\left(x^k\right).y^k & = & -F\left(x^k\right) \\ x^{k+1} & = & x^k + y^k \end{cases} \tag{41}$$

- Teoricamente, as metodologias (40) ou (41) são de convergência quadrática, mas por conta de se resolver um sistema linear iterativamente a convergência diminui.

- Em (40) ou (41), para cada k temos de calcular novamente $J\left(x^k\right)$, porém este procedimento é caro computacionalmente.

Anotações

Caso geral

- Uma alternativa seria calcular

$$x^{k+1} = x^k - \left[J\left(x^0\right)\right]^{-1}.F\left(x^k\right) \tag{42}$$

ou equivalentemente

$$\begin{cases} J\left(x^0\right).y^k & = & -F\left(x^k\right) \\ x^{k+1} & = & x^k + y^k \end{cases} \tag{43}$$

onde a matriz Jacobiana é avaliada uma única vez, o que nos dá o Método de Newton modificado. O mesmo tem taxa linear de convergência.

O Octave tem rotinas implementadas que possibilitam a resolução de sistemas não lineares, por exemplo consultar o link:

http://homepages.math.uic.edu/~hanson/Octave/OctaveNonlinearEG.html

http://hplgit.github.io/Programming-for-Computations/pub/p4c/._p4c-bootstrap-Matlab030.html

Anotações

Lista de Exercícios - 6

1 Considere o sistema Não-linear:

$$\begin{cases} 3x_1 - cos\left(x_2x_3\right) - \dfrac{1}{2} & = & 0 \\ x_1^2 - 81\left(x_2 + 0.1\right)^2 + sen\left(x_3\right) + 1.06 & = & 0 \\ e^{-x_1x_2} + 20x_3 + \dfrac{10\pi - 3}{3} & = & 0 \end{cases}$$

Considerando $x^0 = (0.1 \quad 0.1 \quad -0.1)^T$ e $\varepsilon = 10^{-5}$, nos seguintes casos:

(a) Método de Newton.

(b) Método de Newton modificado.

(c) Faça, no mesmo gráfico, o gráfico de $k \times ER_2$ de (a) e (b). Qual é a conclusão?

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
   - Mínimos Quadrados Linear
   - Mínimos Quadrados Não-Linear
   - Coeficientes de determinação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Mínimos Quadrados Linear

Com relação ao caso discreto, considere a tabela:

x	x_1	x_2	$\ldots$	x_m
$f(x)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$\ldots$	$f(x_m)$

Tabela 3: Tabela do conjunto de dados.

e as funções

$$g_1(x), \quad g_2(x), \ldots, \quad g_n(x)$$

definidas e escolhidas a priori, onde $m \geq n$ necessariamente.

O objetivo é encontrar o vetor de constantes $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)$ tal que

$$^{4}g(\alpha, x) = \alpha_1 g_1(x) + \cdots + \alpha_n g_n(x) \tag{44}$$

se aproxime de $f(x)$.

[4] g é uma **combinação linear** de funções

Anotações

Mínimos Quadrados Linear

Seja $d_k(\alpha) = f(x_k) - g(\alpha, x_k)$ o desvio no ponto k. O Método dos Mínimos Quadrados Linear (MMQL) consiste em encontrar os $\alpha_j{}'s$ tal que

$$Res(\alpha) \equiv \sum_{k=1}^{m} \Big[d_k(\alpha) \Big]^2 = \sum_{k=1}^{m} \Big[f(x_k) - g(\alpha, x_k) \Big]^2 \tag{45}$$

seja mínima. Denotando (45) sob a forma:

$$F(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) = \sum_{k=1}^{m} \Big[f(x_k) - g(\alpha, x_k) \Big]^2$$

então temos

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_j} = 2 \sum_{k=1}^{m} \Big[f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \cdots - \alpha_n g_n(x_k) \Big] . \Big[- g_j(x_k) \Big]$$

Anotações

Mínimos Quadrados Linear

e impondo $\dfrac{\partial F}{\partial \alpha_j} = 0$ para $j = 1, \ldots, n$ encontramos

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \displaystyle\sum_{k=1}^{m} \Big[f(x_k) - \alpha_1 g_1 - \cdots - \alpha_n g_n \Big] . g_1 & = & 0 \\ \vdots & & \\ \displaystyle\sum_{k=1}^{m} \Big[f(x_k) - \alpha_1 g_1 - \cdots - \alpha_n g_n \Big] . g_n & = & 0 \end{array} \right. \tag{46}$$

ou ainda

$$\left\{ \begin{array}{rcl} a_{11}\alpha_1 + \cdots + a_{1n}\alpha_n & = & b_1 \\ \vdots & & \\ a_{n1}\alpha_1 + \cdots + a_{nn}\alpha_n & = & b_n \end{array} \right. , \quad \begin{array}{rcl} a_{ij} & = & \displaystyle\sum_{k=1}^{m} g_i(x_k)\, g_j(x_k) \equiv < \overline{g}_i, \overline{g}_j > \\ a_{ji} & = & a_{ij} \\ b_i & = & \displaystyle\sum_{k=1}^{m} f(x_k)\, g_i(x_k) \equiv < \overline{f}, \overline{g}_i > \end{array}$$

$\mathcal{A}_1$: faça as operações até obter o S.L.

Anotações

Mínimos Quadrados Linear

Observações:

I. demonstra-se que: se $g_1(x), \ldots, \quad g_n(x)$ forem tais que $\overline{g}_1, \ldots, \quad \overline{g}_n$ sejam LI então $det(A) \neq 0$, logo o sistema linear (46) tem solução única;

II. a solução $\alpha = (\alpha_1 \quad \ldots \quad \alpha_n)^T$, em [I], é o ponto de mínimo da função $F(\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$;

III. se $\overline{g}_1, \ldots, \quad \overline{g}_n$ tiverem a propriedade

$$< \overline{g}_i, \overline{g}_j > \begin{cases} = & 0 \quad ; \quad i \neq j \\ \neq & 0 \quad ; \quad i = j \end{cases}$$

então os vetores são ortogonais entre si. Assim, A é diagonal e o sistema linear (46) terá solução única facilmente obtida.

IV. Além do MMQL existem também:

MMQL-***Ponderados*** e o MMQL-***Móveis***.

Anotações

Exemplo linear - MMQL

Exemplo:

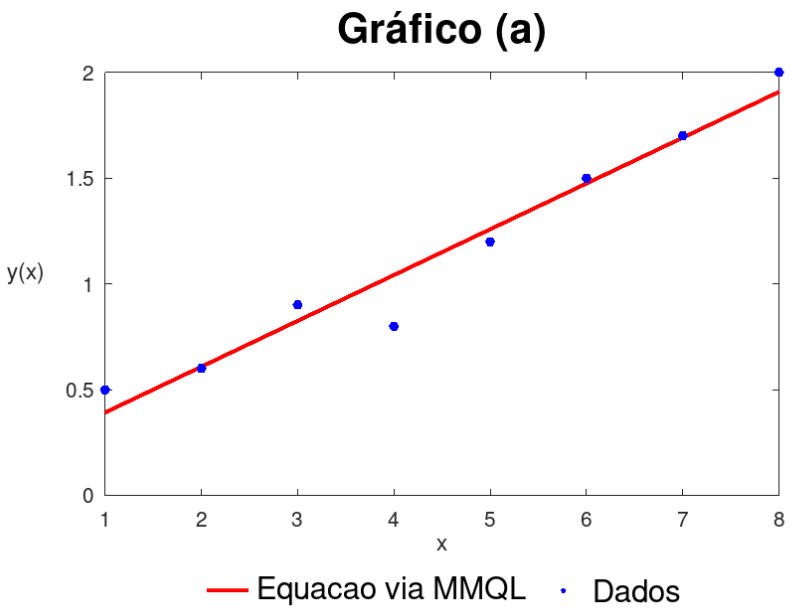
x	1	2	3	4	5	6	7	8
$f(x)$	0.5	0.6	0.9	0.8	1.2	1.5	1.7	2.0

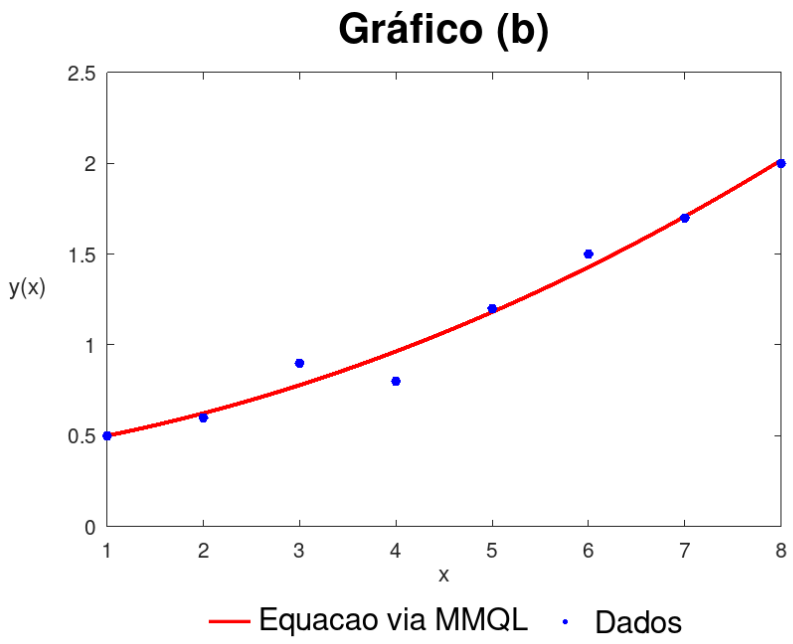
a. Ajuste linear

b. Ajuste quadrático

a. $g(\alpha, x) = 0.175 + 0.21667x$

b. $g(\alpha, x) = 0.40714 + 0.07738x + 0.01548x^2$





Anotações

Exemplo linear - MMQL

Exemplo:

x	1	2	3	4	5	6	7	8
$f(x)$	0.5	0.6	0.9	0.8	1.2	1.5	1.7	2.0

c. Quem é melhor (a) ou (b)?

c. $$Res(\alpha)_a = \sum_{k=1}^{8} \left[d_k(\alpha) \right]^2 = 0.08833,$$

$$Res(\alpha)_b = \sum_{k=1}^{8} \left[d_k(\alpha) \right]^2 = 0.04809$$

Anotações

Mínimos Quadrados Linear (Caso não linear!)

Existem modelos não lineares de ajuste que podem ser linearizados e servirem como ótimas práticas de ajustamento de dados, por exemplo:

- $P(\mu, x) = \mu_1 (\mu_2)^x$

  $$ln(P) = ln(\mu_1 (\mu_2)^x) \quad \Leftrightarrow \quad ln(P) = ln(\mu_1) + x ln(\mu_2) \quad \Leftrightarrow$$

  $$g(\alpha, x) = \alpha_1 + \alpha_2 x \ ; \ g(\alpha, x) = ln(P) \ ; \ \alpha_1 = ln(\mu_1) \ ; \ \alpha_2 = ln(\mu_2)$$

- $P(\mu, x) = \dfrac{1}{\mu_1 + \mu_2 x}$

- $P(\mu, x) = \mu_1 x^{\mu_2}$

- $P(\mu, x) = \sqrt{\mu_1 + \mu_2 x}$

- $P(\mu, x) = x ln(\mu_1 + \mu_2 x)$

- e outros .....

$\mathcal{A}_2$: linearize os quatro últimos modelos acima.

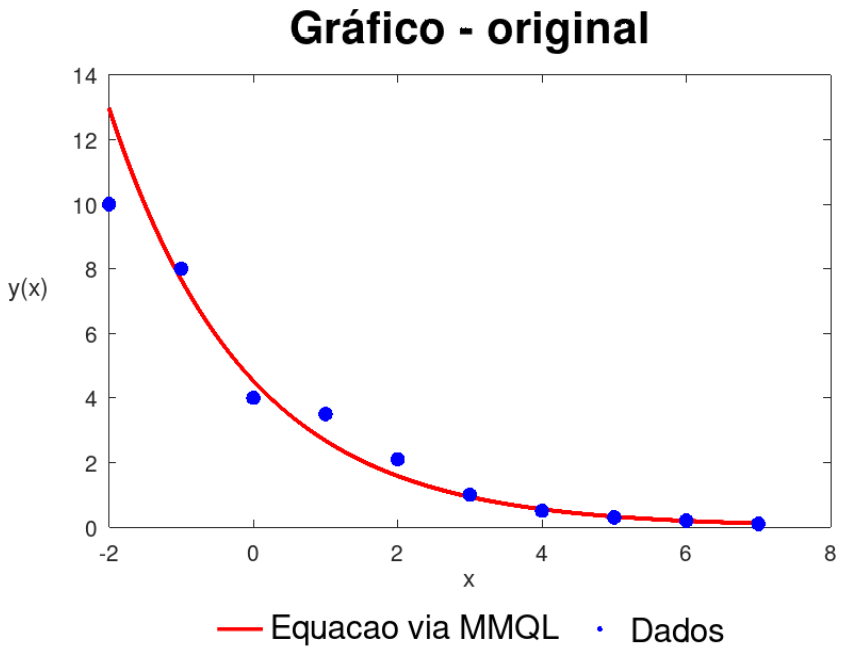
Anotações

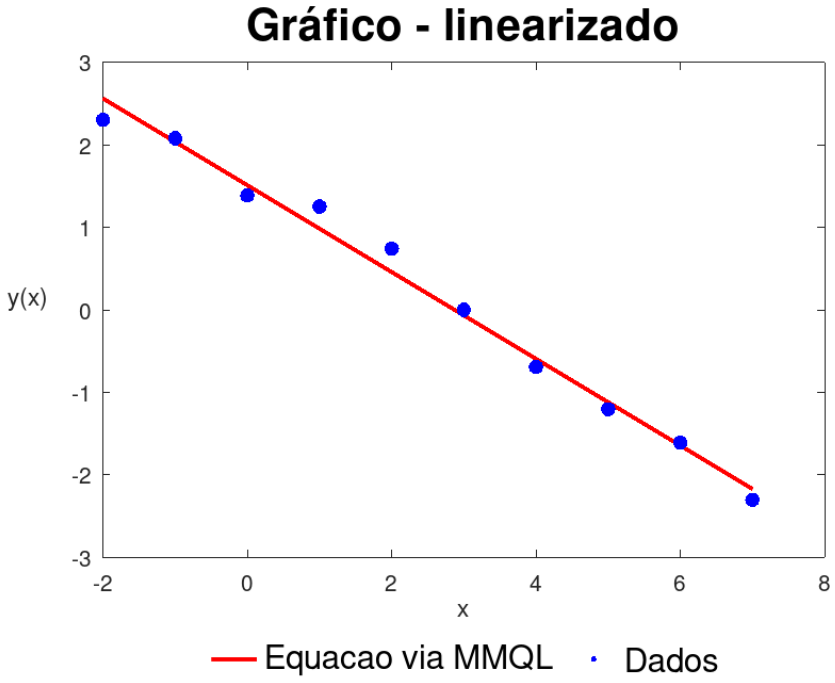
Exemplo não linear - Parte I

Exemplo:

x	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	10	8	4	3.5	2.1	1	0.5	0.3	0.2	0.1

$$P(\mu, x) = \mu_1 e^{-\mu_2 x} \quad \Rightarrow \quad \overbrace{ln\left[P(\mu, x)\right]}^{g(\alpha,x)} = \overbrace{ln(\mu_1)}^{\alpha_1} \overbrace{-\mu_2}^{+\alpha_2} x$$





$\mathcal{A}_3$: encontre μ_1 e μ_2

Anotações

Mínimos Quadrados Não-Linear

Considere a tabela:

x	x_1	x_2	$\ldots$	x_m
$f(x)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$\ldots$	$f(x_m)$

Tabela 4: Tabela do conjunto de dados.

e o vetor de parâmetros $\theta = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n,)$, de modo que $m \geq n$ necessariamente. O objetivo é encontrar a função $H(x, \theta)$, que depende de forma não linear de θ, ajustada ao conjunto de dados da tabela (4), no sentido dos mínimos quadrados.

Em outras palavras, encontrar θ que minimiza a função:

$$F(\theta) = \sum_{k=1}^{m} \left[f(x_k) - H(\theta, x_k) \right]^2 \tag{47}$$

e consequentemente nos dar a função $H(\theta, x)$ que se aproxima de $f(x)$. A presente técnica é denominada Método dos Mínimos Quadrados Não-linear (MMQNL).

Anotações

Mínimos Quadrados Não-Linear

Em uma notação mais geral, se escrevermos

$$f(x_k) - H(\theta, x_k) = d_k(\theta)$$

então (47) fica

$$F(\theta) = \sum_{k=1}^{m} \left[d_k(\theta) \right]^2 \equiv Res(\theta) \tag{48}$$

lembrando que objetivamos encontrar θ que minimiza a função $F(\theta)$.

Tomando $\dfrac{\partial F(\theta)}{\partial \theta_j} = 0$ (com $j = 1, 2, \ldots, n$), segue que

$$\frac{\partial F(\theta)}{\partial \theta_j} = 2 \sum_{k=1}^{m} d_k(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta_j} d_k(\theta) = 0$$

ou ainda

$$\sum_{k=1}^{m} d_k(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta_j} d_k(\theta) = 0 \quad \text{para} \quad j = 1, 2, \ldots, n.$$

Anotações

Mínimos Quadrados Não-Linear

que equivale a escrever

$$J^T(\theta)\,.d\,(\theta) = \mathbf{0} \tag{49}$$

de modo que $\mathbf{0}$ é o vetor nulo, enquanto que $J\,(\theta)$ e $d\,(\theta)$ são tais que

$$J\,(\theta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\theta_1} d_1\,(\theta) & \frac{\partial}{\partial\theta_2} d_1\,(\theta) & \dots & \frac{\partial}{\partial\theta_n} d_1\,(\theta) \\ \frac{\partial}{\partial\theta_1} d_2\,(\theta) & \frac{\partial}{\partial\theta_2} d_2\,(\theta) & \dots & \frac{\partial}{\partial\theta_n} d_2\,(\theta) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial}{\partial\theta_1} d_m\,(\theta) & \frac{\partial}{\partial\theta_2} d_m\,(\theta) & \dots & \frac{\partial}{\partial\theta_n} d_m\,(\theta) \end{pmatrix} \qquad d\,(\theta) = \begin{pmatrix} d_1\,(\theta) \\ d_2\,(\theta) \\ \dots \\ d_m\,(\theta) \end{pmatrix}$$

Anotações

Mínimos Quadrados Não-Linear

Por exemplo, se tívessemos os seguintes dados:

x	x_1	x_2	x_3
$f(x)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$

Tabela 5: Tabela de dados.

$$H(\theta, x) = \theta_1 e^{\theta_2 x} \; ; \; f(x_k) - \theta_1 e^{\theta_2 x_k} = d_k(\theta)$$

$$\frac{\partial d_k(\theta)}{\partial \theta_1} = -e^{\theta_2 x_k} \; ; \; \frac{\partial d_k(\theta)}{\partial \theta_2} = -\theta_1 x_k e^{\theta_2 x_k}$$

por meio de (49) o sistema não linear seria do tipo

$$\begin{cases} \left[f(x_1) - \theta_1 e^{\theta_2 x_1}\right] e^{\theta_2 x_1} & + & \left[f(x_2) - \theta_1 e^{\theta_2 x_2}\right] e^{\theta_2 x_2} & + \\ \left[f(x_3) - \theta_1 e^{\theta_2 x_3}\right] e^{\theta_2 x_3} & = & 0 & \\ & & & \\ \left[f(x_1) - \theta_1 e^{\theta_2 x_1}\right] \theta_1 x_1 e^{\theta_2 x_1} & + & \left[f(x_2) - \theta_1 e^{\theta_2 x_2}\right] \theta_1 x_2 e^{\theta_2 x_2} & + \\ \left[f(x_3) - \theta_1 e^{\theta_2 x_3}\right] \theta_1 x_3 e^{\theta_2 x_3} & = & 0. & \end{cases}$$

$\mathcal{A}_4$: Escreva o presente problema em notação matricial, exibindo de foma explícita a matriz $J(\theta)$ e o vetor $d(\theta)$.

Anotações

Mínimos Quadrados Não-Linear

Existem diversas técnicas numéricas que permitem resolver o sistema de equações (49), as mais conhecidas são:

1. Método de Newton
2. Método de Gauss-Newton
3. Método de Levenberg-Marquardt.

Anotações

Mínimos Quadrados Não-Linear (Método de Newton)

Para o sistema não linear (49), via (41), o Método de Newton fica:

$$\begin{cases} J\left(J^T\left(\theta^{IT}\right) d\left(\theta^{IT}\right)\right).y^{IT} &= -J^T\left(\theta^{IT}\right) d\left(\theta^{IT}\right) \\ \theta^{IT+1} &= \theta^{IT} + y^{IT} \end{cases}$$

com θ^0 suficientemente próximo de θ^* (solução exata).

Denotando $J\left(J^T\left(\theta^{IT}\right) d\left(\theta^{IT}\right)\right) = U$ e $-J^T\left(\theta^{IT}\right) d\left(\theta^{IT}\right) = V$, temos que:

$$U_{L,C} = \sum_{k=1}^{m} \left\{ \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta_C \partial\theta_L} d_k\left(\theta^{IT}\right)\right].d_k\left(\theta^{IT}\right) + \left[\frac{\partial}{\partial\theta_C} d_k\left(\theta^{IT}\right)\right].\left[\frac{\partial}{\partial\theta_L} d_k\left(\theta^{IT}\right)\right] \right\}$$

$$V_C = -\sum_{k=1}^{m} \left\{ d_k\left(\theta^{IT}\right) \frac{\partial}{\partial\theta_C} d_k\left(\theta^{IT}\right) \right\}$$

com $L, C = 1, \ldots, n$; $y^{IT} = \left(y_1^{IT}, \ldots, y_n^{IT}\right)^T$; e $IT = 1, \ldots, IT_{max}$.

$\mathcal{A}_5$: Deduza o Método de Newton, em notação U e V, do problema no slide página 221.

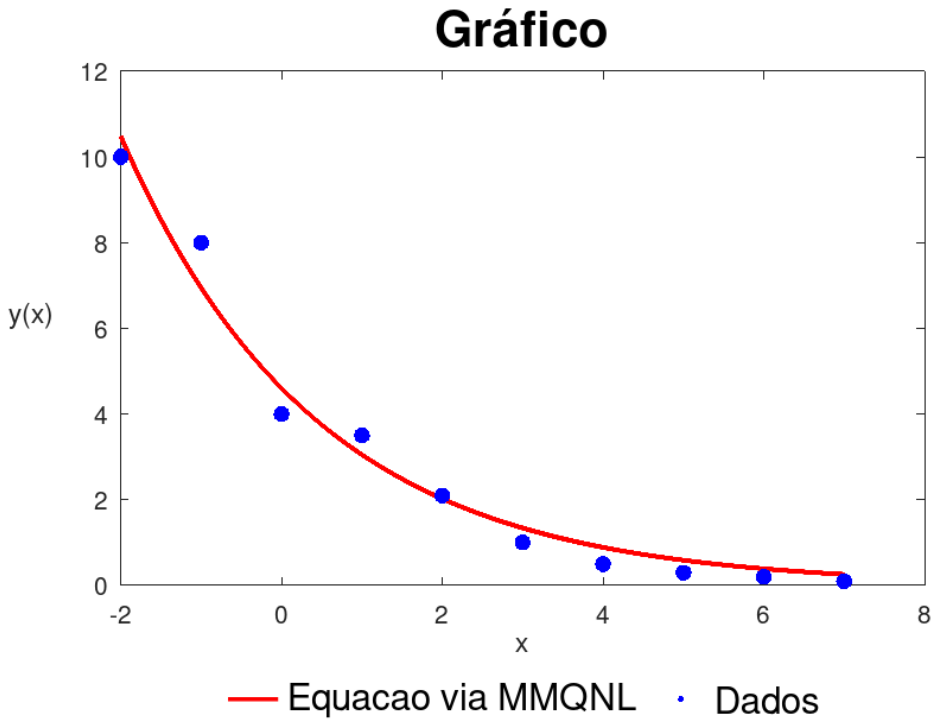
Anotações

Exemplo não linear - Parte II

Exemplo:

x	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	10	8	4	3.5	2.1	1	0.5	0.3	0.2	0.1

$H(\theta, x) = \theta_1 e^{\theta_2 x}$



$\mathcal{A}_6$: encontre θ_1 e θ_2

Anotações

Exemplo não linear - MMQL $\times$ MMQNL

Exemplo:

x	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	10	8	4	3.5	2.1	1	0.5	0.3	0.2	0.1

a. Ajuste via MMQL
b. Ajuste via MMQNL
c. Quem é melhor (a) ou (b)?

a. $P(\mu, x) = 4.5291e^{-0.5260x}$

b. $H(\theta, x) = 4.6031e^{-0.4112x}$

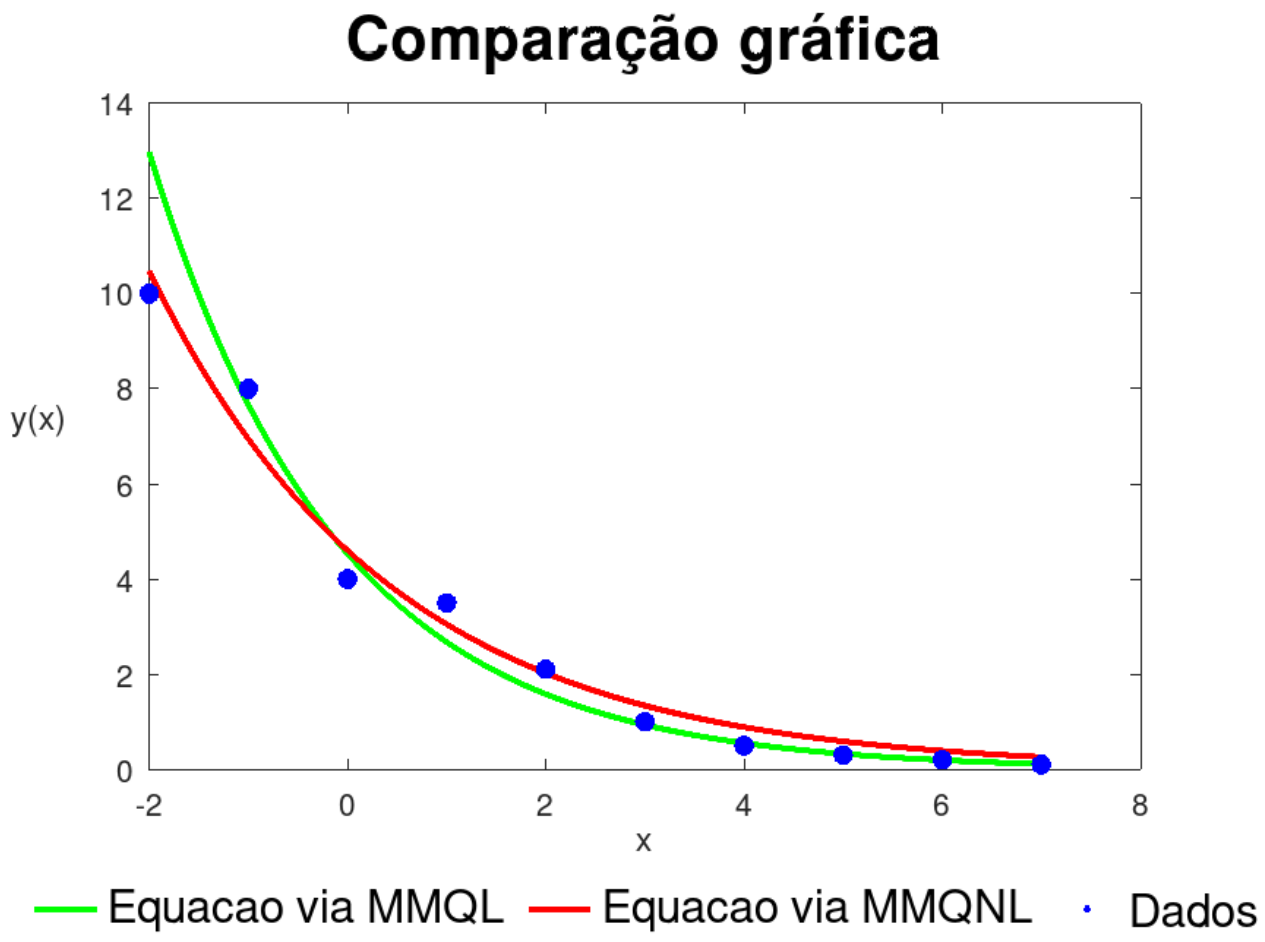
c. $Res(\mu) = \sum_{k=1}^{10} \left[d_k(\mu)\right]^2 = 10.16$; $Res(\theta) = \sum_{k=1}^{10} \left[d_k(\theta)\right]^2 = 2.32$

Anotações

Exemplo não linear - MMQL × MMQNL

Exemplo:

x	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	10	8	4	3.5	2.1	1	0.5	0.3	0.2	0.1



Anotações

Coeficientes de determinação: R^2 e R^2_{aj}

O coeficiente de determinação R^2 é uma métrica que explica quanto a curva de ajuste, $g(\alpha, x)$ ou $H(\theta, x)$, explica os dados. O R^2 é escrito por:

$$R^2 = \frac{\sum_{k=1}^{m}\left[MQ - y_M\right]^2}{\sum_{k=1}^{m}\left[f(x_k) - y_M\right]^2} = \frac{\text{variação explicada}}{\text{variação total}} \quad ; \qquad 0 \leq R^2 \leq 1$$

onde:

$$MQ = \begin{cases} g(\alpha, x_k) \\ H(\theta, x_k) \end{cases} \quad \text{e} \quad y_M = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m} f(x_k) \ \text{ média arit. simples}$$

O R^2_{aj} (cof. de det. ajustado) é uma métrica parcimoniosa, quando comparada ao R^2, que considera a quantidade de parâmetros (K) e o tamanho da amostra. O mesmo é escrito por $R^2_{aj} = 1 - \left(1 - R^2\right)\underbrace{\left[\frac{m-1}{m-(K+1)}\right]}_{Penalidade}$.

$\mathcal{A}_7$: encontre R^2_{aj} das equações de ajuste do problema no slide (231).

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
   - Definições sobre Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Definições sobre Autovalores e Autovetores

Muitos problemas aplicados recaem na resolução da equação

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \tag{50}$$

onde $\mathbf{A}$ é uma matriz quadrada de ordem $n \in \mathbb{N}$ sobre o corpo κ, $\mathbf{v}$ é um vetor não-nulo tal que $\mathbf{v} \in \kappa^n$ e $\lambda \in \kappa$ é um escalar. A resolução da equação (50) é mais conhecida como o Problema de Autovalor/Autovetor.

De (50) temos

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{v} - \lambda\mathbf{v} = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\,\mathbf{v} = \mathbf{0}$$

que em última análise significa que temos um sistema linear homogêneo a ser resolvido.

O sistema linear $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\,\mathbf{v} = \mathbf{0}$ sempre tem solução nula. Mas admitirá solução não nula se for imposto que $det\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = \mathbf{0}$, pois:

Anotações

Definições sobre Autovalores e Autovetores

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\,\mathbf{v} = \mathbf{0}$$
$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1} \cdot (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\,\mathbf{v} = \mathbf{0}$$

que implica em

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1} = \frac{1}{det\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})} \cdot adj\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$$
$$\therefore$$
$$det\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) \neq 0 \quad \Rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{0}$$
$$det\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0 \quad \Rightarrow \mathbf{v} \neq \mathbf{0} \text{ ou } \nexists \mathbf{v}.$$

A equação $det\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$ é nomeada como Polinômio Característico e escrita sob a notação:

$$P\,(\lambda) = det\,(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$$

e como tal deseja-se encontrar os $\lambda's$ tais que $P\,(\lambda) = 0$, é aqui que temos o primeiro desafio!

Encontrado os $\lambda's$, voltamos em $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\,\mathbf{v} = \mathbf{0}$, e para cada λ resolvemos o sistema linear, e aqui temos o segundo desafio!

Anotações

Caso com $n = 2$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \qquad \lambda = ? \qquad \mathbf{v} = ?$$

Problemática:

$$\begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

Pol. Característico:

$$P(\lambda) = det\left(\begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\right) = \lambda^2 - 4\lambda - 5 = (\lambda - 5)(\lambda + 1)$$

Sistema Homogêneo:

$$\begin{bmatrix} 1-\lambda & 4 \\ 2 & 3-\lambda \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Anotações

Caso com $n = 2$

Raízes de $P(\lambda)$:

$$\lambda_1 = 5 \quad \lambda_2 = -1$$

1º autovetor associado ao autovalor $\lambda_1 = 5$:

$$-v_1 + v_2 = 0 \quad \Rightarrow \qquad v_{\lambda_1} = (1, 1)$$

$$\|v_{\lambda_1}\|_2 = \sqrt{2} \quad \Rightarrow \qquad v_{\lambda_1}^N = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

2º autovetor associado ao autovalor $\lambda_2 = -1$:

$$v_1 + 2v_2 = 0 \quad \Rightarrow \qquad v_{\lambda_2} = (-2, 1)$$

$$\|v_{\lambda_2}\|_2 = \sqrt{5} \quad \Rightarrow \qquad v_{\lambda_1}^N = \left(-\frac{2}{\sqrt{5}}, \frac{1}{\sqrt{5}}\right)$$

Anotações

Sumário

1. Erro
2. Interpolação Spline
3. Integração
4. Resolução de Sistemas Lineares
5. Resolução de Sistemas Não-Lineares
6. Aproximação
7. Cálculo de Autovalores e Autovetores
8. Avaliações

Anotações

Orientações

- Utilize o **Overleaf** [5] para escrever sobre as suas avaliações (Projeto).
- Compartilhe a sua 1º/2º avaliação com o professor.
- É necessário o envio do PDF final da sua 1º/2º avaliação nas datas agendadas.
- Use o "Template-Aval" para produzir o Projeto.

http://www.uel.br/laboratorios/labsan/perfilEliandro.html

[5] Acesse a plataforma no link – `https://pt.overleaf.com/login`

Anotações

Apresentação

Para que tenhamos êxito em nossas colaborações, via Matemática Aplicada, é importante que uma apresentação tenha como principais elementos:

1. a descrição do problema em linguagem comum (não puramente matemática);
2. a evidenciação da(s) pergunta(s);
3. o detalhamento das ferramentas matemáticas que nos darão acesso à(s) resposta(s) da(s) pergunta(s) (use com parcimônia);
4. a discussão dos resultados encontrados com validação dos mesmos.

Anotações