MS211, Cálculo Numérico I
Segundo Semestre 2018, IMECC-UNICAMP

Lista de Exercícios 5

(1) Foi medida a profundidade máxima de um iceberg ao longo dos últimos quatro anos. A variavel x indica o ano da medida $f(x)$. Os anos estão em ordem crescente, o ano 0 corresponde a medida efetuada quatro anos atrás e o ano 3 corresponde a medida feita no ano passado.

x	0	1	2	3
$f(x)$	10.0	8.7	7.1	4.0

Extrapole destes dados, uma aproximação da profundidade esperada neste ano usando o ajuste com a reta dos mínimos quadrados.

Solução: Considere uma reta dada por

$$r(x) = c_1 + c_2 x.$$

Nosso objetivo é determinar os parâmetros c_1 e c_2 de modo que a medida do erro E seja mínimo, onde

$$E = \sum_{k=1}^{4} (f(x_j) - r(x_j))^2. \tag{Ex0.0a}$$

Esses parâmetros podem ser obtidos resolvendo o sistema de equações normais $A^T A y = A^T h$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad h = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \end{bmatrix}.$$

Substituindo os valores da tabela, obtemos

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad h = \begin{bmatrix} 10.0 \\ 8.7 \\ 7.1 \\ 4.0 \end{bmatrix}.$$

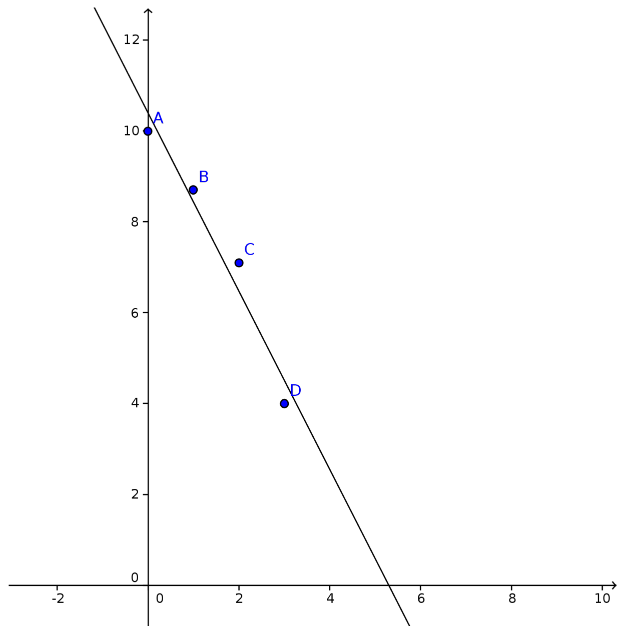
Solucionando o sistema de equações normais por algum método apresentado na primeira parte no curso, vamos obter

$$y = \begin{bmatrix} 10.39 \\ -1.96 \end{bmatrix}$$

Portanto, a reta que melhor se ajusta (de modo que E seja minimizado), é dado por

$$r(x) = 10.39 - 1.96x,$$

cuja representação gráfica é mostrada abaixo:



Além disso, podemos estimar a profundidade aproximada para esse ano (ano $x = 4$) utilizando a reta obtida

$$r(4) = 10.39 - 1.96(4) = 2.55.$$

(2) Resolva o mesmo problema anterior utilizando uma parábola para os mínimos quadrados, ou seja o ajuste $\varphi(x) = ax^2 + bx + c$. Plote o gráfico da $\varphi(x)$ e da reta dos mínimos quadrados. Determine graficamente qual dos dois métodos descreve melhor o fenômeno do degelo do iceberg.

Solução: Considere uma parábola dada por

$$\varphi(x) = ax^2 + bx + c.$$

Nosso objetivo é determinar os parâmetros a, b e c de modo que a medida do erro E (definido em (Ex0.0a)) seja mínimo. Esses parâmetros podem ser obtidos resolvendo o sistema de equações normais $A^T Ay = A^T b$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \\ 1 & x_4 & x_4^2 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} c \\ b \\ a \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad h = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \end{bmatrix}.$$

Substituindo os valores da tabela, obtemos

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad h = \begin{bmatrix} 10.0 \\ 8.7 \\ 7.1 \\ 4.0 \end{bmatrix}.$$

Solucionando o sistema de equações normais por algum método apresentado na primeira parte no curso, obtemos*

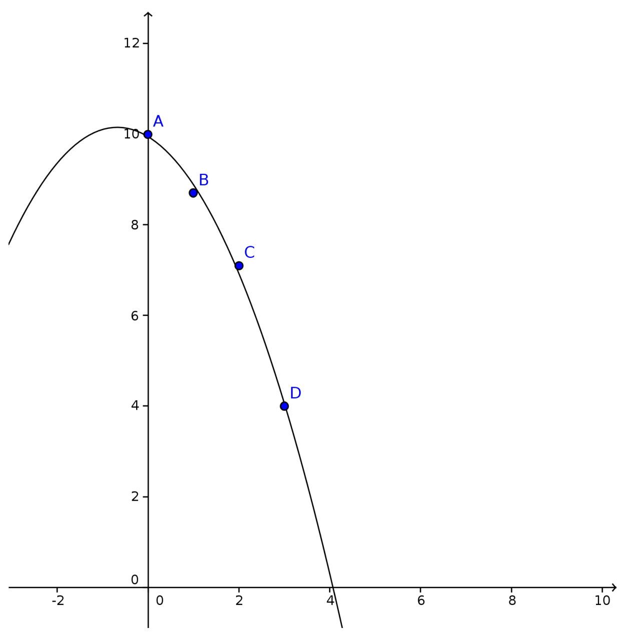
$$y = \begin{bmatrix} 9.94 \\ -0.61 \\ -0.45 \end{bmatrix}$$

* utilizando arredondamento.

Portanto, a parábola que melhor se ajusta (de modo que E seja minimizado), é dado por

$$\varphi(x) = -0.45x^2 - 0.61x + 9.94,$$

cuja representação gráfica é mostrada abaixo:



Além disso, podemos estimar a profundidade aproximada para esse ano (ano $x = 4$) utilizando a parábola obtida

$$\varphi(4) = -0.45(4)^2 - 0.61(4) + 9.94 = 0.3.$$

Observe graficamente que a parábola $\varphi(x)$ descreve o fenômeno de degelo mais adequadamente do que àquele obtido pela reta $r(x)$ do item (1).

(3) Considere um problema linear do tipo $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ com $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ com mais equações n que incógnitas m. É possível resolver o sistema das equações normais $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ay} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$ que determina a $\boldsymbol{y}$ que minimiza a soma dos quadrados das diferenças em norma $\sum_{i=1}^{n} \|b_i - (\boldsymbol{Ax})_i\|^2$. Provar que a $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ que minimiza esta soma é aquele que satisfaz as equações normais.

Solução: Considere o sistema linear

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2m} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

com $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$ e $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ com $n > m$. Queremos determinar $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^m} \sum_{i=1}^{n} \left(b_i - \sum_{k=1}^{m} a_{ik}x_k \right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(b_i - \sum_{k=1}^{m} a_{ik}y_k \right)^2.$$

Por conveniência, definimos o functional que desejamos minimizar por

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} \left(b_i - \sum_{k=1}^{m} a_{ik}x_k \right)^2.$$

Uma condição sobre os valores dos x_j com $j = 1, \cdots, m$ para que Φ seja mínimo é que

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_j} = 0 \quad \Rightarrow \quad -2\sum_{i=1}^{n} \left(b_i - \sum_{k=1}^{m} a_{ik}x_k \right) \sum_{j=1}^{m} a_{ij} = 0$$

ou seja,

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{m} a_{ik}x_k \sum_{j=1}^{m} a_{ij} = \sum_{i=1}^{n} b_i \sum_{j=1}^{m} a_{ij}$$

reescrito, convenientemente, como

$$\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n} a_{ji}^T \sum_{k=1}^{m} a_{ik}x_k = \sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n} a_{ji}^T b_i$$

ou, na forma matricial, como

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}.$$

Além disso, a solução deste sistema (no caso $\boldsymbol{y}$) é àquele que minimiza Φ. Verifique, utilizando m e n pequenos, os somatórios anteriomente descritos.

(4) Encontre o ajuste contínuo quadrático $\varphi(x) = ax^2+bx+c$ da curva cúbica $y(x) = x^3+2x$ no intervalo $[-1, 1]$

Solução: Relembre que a definição do produto escalar de duas funções $p(x)$ e $q(x)$ no intervalo $[t_1, t_2]$ é dada por

$$< p, q >:= \int_{t_1}^{t_2} p(x)q(x)dx.$$

Neste problema, o objetivo é determinar os coeficientes a, b e c de modo que o erro E_c seja o menor possível, onde E_c é dado por

$$E_c = \int_{-1}^{1} [\varphi(x) - y(x)]^2 dx.$$

Esses coeficientes podem ser obtidos através da solução da equação normal $Ay = h$, onde

$$A = (a_{ij}) =< g_i, g_j >, \quad y = \begin{bmatrix} a & b & c \end{bmatrix}^T \quad \text{e} \quad h = (h_i) =< y, g_i >,$$

com $g_1(x) = x^2$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = 1$.

As componentes de A são:

$$\begin{aligned}
a_{11} &= < g_1, g_1 >= \int_{-1}^{1} x^2x^2dx = 2/5, \\
a_{12} &= < g_1, g_2 >= \int_{-1}^{1} x^2xdx = 0, \\
a_{13} &= < g_1, g_3 >= \int_{-1}^{1} x^2dx = 2/3, \\
a_{22} &= < g_2, g_2 >= \int_{-1}^{1} x^2dx = 2/3, \\
a_{23} &= < g_2, g_3 >= \int_{-1}^{1} xdx = 0, \\
a_{33} &= < g_3, g_3 >= \int_{-1}^{1} dx = 2, \\
a_{21} &= a_{12}, \quad a_{31} = a_{13}, \quad a_{32} = a_{23}.
\end{aligned}$$

Enquanto que as componentes de h são:

$$\begin{aligned}
h_1 &= < y, g_1 >= \int_{-1}^{1} (x^3 + 2x)x^2dx = 0, \\
h_2 &= < y, g_2 >= \int_{-1}^{1} (x^3 + 2x)xdx = 26/15, \\
h_3 &= < y, g_3 >= \int_{-1}^{1} x^3 + 2xdx = 0.
\end{aligned}$$

O sistema resultante é descrito como

$$Ay = h \Rightarrow \begin{bmatrix} 2/5 & 0 & 2/3 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 2/3 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 26/15 \\ 0 \end{bmatrix}$$

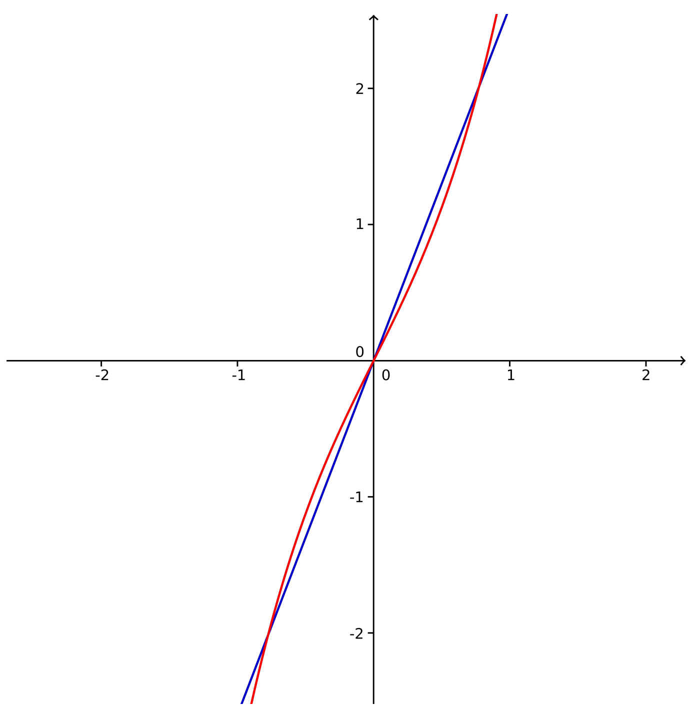
e utilizando algum procedimento para solucionar o sistema (descrito na primeira parte da disciplina), obtemos

$$y = \begin{bmatrix} 0 \\ 2.60 \\ 0 \end{bmatrix}$$

isto é, a função "quadrática" (na verdade ela é linear)

$$\varphi(x) = 0x^2 + 2.6x + 0$$

minimiza o erro E_c. Graficamente, temos a seguinte aproximação das curvas



(5) O volume do iceberg cúbico medido no problema (1) é representado na seguinte tabela:

x	0	1	2	3
$f(x)$	10^3	$(8.7)^3$	$(7.1)^3$	$(4.0)^3$

Determinar o ajuste não linear $\varphi(x) = \alpha_0 + \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$ tal que $\varphi(0) = f(0)$. Depois, usando este adjuste, determine a aproximação do volume do iceberg neste ano.

Solução: Queremos obter os parâmetros α_0, α_1 e α_2 de modo a ajustar a curva $\varphi(x)$ aos dados de $f(x)$ sujeito à condição $\varphi(0) = f(0)$. Para tal, devemos minimizar o funcional descrito por

$$\Phi := \sum_{k=0}^{3} (\varphi(x_k) - f(x_k))^2.$$

Iniciamos reduzindo o número de parâmetros de $\varphi(x)$ utilizando a condição dada por

$$\varphi(0) = \alpha_0 + \alpha_1 = 10^3 \quad \Rightarrow \quad \alpha_0 = 10^3 - \alpha_1.$$

Assim, podemos reescrever a curva como

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= 10^3 - \alpha_1 + \alpha_1 e^{-\alpha_2 x} \\ &= 10^3 + \alpha_1 \left[e^{-\alpha_2 x} - 1\right] \end{aligned}$$

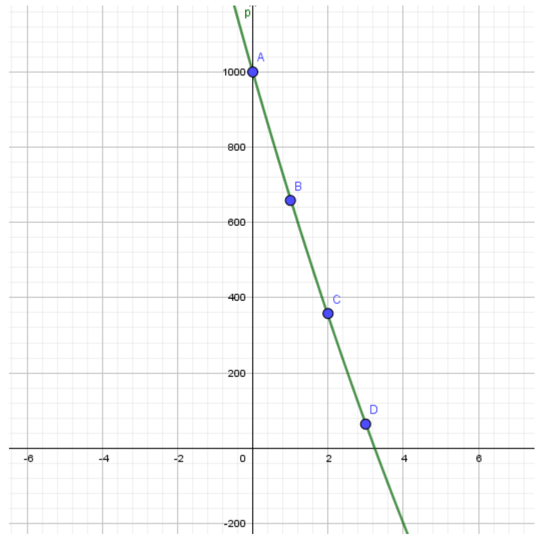
Desta forma, o funcional Φ pode ser descrito como

$$\begin{aligned} \Phi &= (\varphi(0) - f(0))^2 + (\varphi(1) - f(1))^2 + (\varphi(2) - f(2))^2 + (\varphi(3) - f(3))^2 \\ &= (\varphi(1) - f(1))^2 + (\varphi(2) - f(2))^2 + (\varphi(3) - f(3))^2 \\ &= \left(10^3 + \alpha_1 \left[e^{-\alpha_2} - 1\right] - (8.7)^3\right)^2 + \left(10^3 + \alpha_1 \left[e^{-2\alpha_2} - 1\right] - (7.1)^3\right)^2 + \\ &\quad + \left(10^3 + \alpha_1 \left[e^{-3\alpha_2} - 1\right] - (4.0)^3\right)^2. \end{aligned}$$

Os parâmetros ótimos α_1 e α_2 são obtidos a partir do ponto crítico de Φ (condição necessária de mínimo), isto é, a partir da resolução do seguinte sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial \alpha_1} = 0 \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial \alpha_2} = 0 \end{cases}$$

Utilizando o procedimento iterativo de Newton para solucionar o sistema acima, obtemos os valores ótimos $\alpha_1 = 4384.8085$ e $\alpha_2 = 0.0799$. Ilustramos abaixo a curva $\varphi(x)$ com os parâmetros obtidos juntamente com os pontos de $f(x)$.



Contudo, a aproximação do volume do iceberg neste ano é físicamente inconsistente visto que $\varphi(4) \approx -200 < 0$.