MAP0151 - Cálculo Numérico e Aplicações
Lista 6 (Correção)

Neste ponto, todos já sabemos que todas as questões têm o mesmo valor, totalizando 10.0 pontos.

(Questão 1) Comecei escrevendo uma função `ajusta_reta.sci` que recebe como entrada uma tabela (matriz)

$$T = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & \dots & x_n \\ y_1 & \dots & y_n \end{bmatrix}$$

e a ajusta por uma reta que melhor a aproxima no sentido dos mínimos quadrados. Para isso, selecionei como modelo uma função de reta, i.e.

$$y(x) = c_1 + c_2 x$$

onde identificamos as componentes

$$\begin{aligned} f_1(x) &:= 1 \\ f_2(x) &:= x \end{aligned}$$

de modo que o modelo fica $y(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)$. Usando a notação

$$f(\mathbf{x}) := (f(x_1), \dots, f(x_n))$$

considerando então o produto interno de funções induzido por $\mathbf{x}$

$$\begin{aligned} \langle f, g \rangle_{\mathbf{x}} &:= \langle f(\mathbf{x}), g(\mathbf{x}) \rangle \\ &= f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x})' \\ &= \sum_{i=1}^{n} f(x_i) g(x_i) \end{aligned}$$

montamos o sistema do MMQ:

$$\begin{bmatrix} \langle f_1(\mathbf{x}), f_1(\mathbf{x}) \rangle & \langle f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}) \rangle \\ \langle f_2(\mathbf{x}), f_1(\mathbf{x}) \rangle & \langle f_2(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}) \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f_1(\mathbf{x}), \mathbf{y} \rangle \\ \langle f_2(\mathbf{x}), \mathbf{y} \rangle \end{bmatrix}$$

o qual denotamos simplesmente por

$$\mathbf{Ac} = \mathbf{b}. \tag{1}$$

Por fim, resolvemos o sistema linear (1) utilizando algum algoritmo conhecido. Como eu já havia implementado o Método de Gauss com Pivotamento Parcial na Lista 4, utilizei esse método.

A função `ajusta_reta.sci` ficou assim:

```
// ajusta_reta.sci

function [c1, c2] = ajusta_reta(T)
  [nl, nc] = size(T);
  n = nc;

  // importando funcoes auxiliares
  getf("gausspv.sci");

  // inicializando o sistema do MMQ
  A = zeros (2, 2);
  b = zeros (2, 1);

  // modelo de reta: c1 + c2x
  deff("y = f1(x)", "y = 1");
  deff("y = f2(x)", "y = x");

  // montando o sistema com o produto
  // interno dado por T
  for i = 1:n do
    A(1,1) = A(1,1) + f1(T(1,i)) * f1(T(1,i));
    A(1,2) = A(1,2) + f1(T(1,i)) * f2(T(1,i));
    A(2,1) = A(2,1) + f2(T(1,i)) * f1(T(1,i));
    A(2,2) = A(2,2) + f2(T(1,i)) * f2(T(1,i));

    b(1) = b(1) + f1(T(1,i)) * T(2,i);
    b(2) = b(2) + f2(T(1,i)) * T(2,i);
  end

  // exibindo na tela as matrizes A, b
  mprintf ("%.2f\t%.2f\t%.2f\n", A, b);
  mprintf ("\n");
```

```
  // resolvendo o sistema linear Ac = b
  [p, B, c] = gausspv (A, b);

  c1 = c(1);
  c2 = c(2);
endfunction
```

e, quando executada para

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 5 \end{bmatrix}$$

produziu o sistema

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 10 & 30 \end{bmatrix}, \ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 8 \\ 27 \end{bmatrix}$$

e a solução

$$\begin{aligned} c_1 &= -1.5 \\ c_2 &= 1.4 \end{aligned}$$

ou seja, a reta que melhor ajusta a tabela é $y(x) = -1.5 + 1.4x$. *Sugestão: faça o gráfico no SciLab para ver como ficou.*

Vamos ver o problema agora por um outro enfoque (mais intuitivo), que nos levará ao mesmo resultado e poderá ser bastante esclarecedor. Essencialmente, o que gostaríamos de fazer é encontrar c_1, c_2 tais que

$$\begin{aligned} y(x_i) &= c_1 + c_2 x_i \\ &= y_i \end{aligned}$$

para cada (x_i, y_i) da tabela T, ou seja, gostaríamos que

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= 0 \\ c_1 + 2c_2 &= 2 \\ c_1 + 3c_2 &= 1 \\ c_1 + 4c_2 &= 5 \end{aligned}$$

o que é o mesmo que a forma matricial

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix}$$

(note onde foram parar os x_i e os y_i da tabela). Sendo esse um sistema de 4 equações e apenas 2 incógnitas, dificilmente terá solução. No entanto, podemos mostrar que o *sistema normal*

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix}$$

(multiplicando-se pela matriz transposta do sistema dos dois lados) possui uma única solução, $(c_1, c_2)^T$, que é exatamente aquela que que minimiza o *erro quadrático*

$$E(c_1, c_2) := \sqrt{\sum_{(x_i, y_i) \in T} [c_1 + c_2 x_i - y_i]^2}$$

e, portanto, é a melhor aproximação no sentido dos mínimos quadrados. Note que, reescrevendo o sistema normal, obtemos

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 10 & 30 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 27 \end{bmatrix}$$

que é um sistema linear quadrado de posto máximo e, portanto, possui uma e somente uma solução. Note que ele é exatamente o sistema que obtivemos na resolução pelo primeiro método. Resolvendo este sistema pelo Método de Gauss obtemos, novamente,

$$c_1 = -1.5$$
$$c_2 = 1.4$$

que define completamente a solução.

(Questão 2) Mesmo problema de MMQ, só que agora para ajustar funções mais gerais a uma tabela, em vez de uma reta.

Para o primeiro modelo $g(x) = ax^2 + b$ temos as funções componentes

$$g_1(x) := x^2$$
$$g_2(x) := 1$$

ou seja, $g(x) = ag_1(x) + bg_2(x)$. Então, dada a tabela

$$T = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 1 & 2 \\ 1 & -3 & 1 & 9 \end{bmatrix}$$

devemos encontrar $a, b \in \mathbb{R}$ que minimizam o erro quadrático

$$\begin{aligned}
E(a,b) &= \sqrt{\sum_{(x_i,y_i)\in T} [g(x_i) - y_i]^2} \\
&= \sqrt{\sum_{(x_i,y_i)\in T} [ag_1(x_i) + bg_2(x_i) - y_i]^2} \\
&= \sqrt{\sum_{(x_i,y_i)\in T} [ax_i^2 + bx_i - y_i]^2}.
\end{aligned}$$

Para montar o sistema linear, temos novamente o produto interno $\langle , \rangle_{\mathbf{x}}$ a partir de T, e então

$$\begin{aligned}
\langle g_1, g_1 \rangle &= (-2)^2 * (-2)^2 + (-1)^2 * (-1)^2 + 1^2 * 1^2 + 2^2 * 2^2 \\
&= 34 \\
\langle g_1, g_2 \rangle &= (-2)^2 * 1 + (-1)^2 * 1 + 1^2 * 1 + 2^2 * 1 \\
&= 10 \\
&= \langle g_2, g_1 \rangle \\
\langle g_2, g_2 \rangle &= 1 * 1 + 1 * 1 + 1 * 1 + 1 * 1 \\
&= 4
\end{aligned}$$

donde temos

$$\begin{aligned}
\mathbf{C} &= \begin{bmatrix} \langle g_1, g_1 \rangle & \langle g_1, g_2 \rangle \\ \langle g_2, g_1 \rangle & \langle g_2, g_2 \rangle \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 34 & 10 \\ 10 & 4 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\langle g_1, \mathbf{y} \rangle &= (-2)^2 * 1 + (-1)^2 * (-3) + 1^2 * 1 + 2^2 * 9 \\
&= 38 \\
\langle g_2, \mathbf{y} \rangle &= 1 * 1 + 1 * (-3) + 1 * 1 + 1 * 9 \\
&= 8
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
\mathbf{d} &= \begin{bmatrix} \langle g_1, \mathbf{y} \rangle \\ \langle g_2, \mathbf{y} \rangle \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 38 \\ 8 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Resolvendo o sistema

$$\mathbf{C} * \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \mathbf{d}$$

utilizando o MEG, obtemos

$$\begin{aligned} a &= 2 \\ b &= -3 \end{aligned}$$

ou seja, $g(x) = 2x^2 - 3$.

Para o modelo $h(x) = cx^2 + dx$ temos as componentes

$$\begin{aligned} h_1(x) &:= x^2 \\ h_2(x) &:= x. \end{aligned}$$

Reproduzindo os mesmos passos feitos no caso do modelo g temos

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} \langle h_1, h_1 \rangle & \langle h_1, h_2 \rangle \\ \langle h_2, h_1 \rangle & \langle h_2, h_2 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 34 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix} \\ \mathbf{b} &= \begin{bmatrix} \langle h_1, \mathbf{y} \rangle \\ \langle h_2, \mathbf{y} \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 38 \\ 20 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Resolvendo o sistema

$$\mathbf{A} * \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \mathbf{b}$$

obtemos

$$\begin{aligned} c &= \frac{19}{17} \\ d &= 2 \end{aligned}$$

ou seja, $h(x) = \frac{19}{17}x^2 + 2x$.

É muito fácil modificar o método `ajusta_reta.sci` *para calcular os coeficientes de g e h, e até de modelos mais gerais. Tente fazê-lo!*

Para descobrir qual destas funções melhor se ajusta à tabela T pelo critério dos mínimos quadrados, devemos efetivamente computar os erros quadráticos

$$\begin{aligned} E_g^2 &:= \sum_{(x_i, y_i) \in T} [g(x_i) - y_i]^2 \\ E_h^2 &:= \sum_{(x_i, y_i) \in T} [h(x_i) - y_i]^2 \end{aligned}$$

e compará-los: o modelo que produzir o menor erro é aquele que melhor ajusta a tabela pelo critério dos mínimos quadrados, por definição (claro que para obter os verdadeiros erros devemos tirar a raiz quadrada dos E^2, mas evidentemente isto não interfere no critério de seleção do melhor modelo).

Para fazer estas contas, escrevi um *script* `erro_quad.sci`, o qual vocês mesmos podem fazer, pois é muito fácil. Obtive

$$\begin{aligned} E_g^2 &= 40 \\ E_h^2 &= 9.5294118 \end{aligned}$$

ou seja, $E_h^2 < E_g^2$ e, portanto, h ajusta melhor T do que g (no sentido dos mínimos quadrados). Fiz também um gráfico (`gversush.pdf`) só para comparar visualmente os ajustes.

(Questão 3) Recordemos que o n-ésimo polinômio mônico p_n é aquele que tem grau n e cujo coeficiente do termo de maior grau é 1. Logo sempre temos que $p_0(x) = 1$.

Então, dada a tabela da **Questão 1**

$$T = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 5 \end{bmatrix}$$

e o produto interno por ela definido

$$\langle f, g \rangle := \sum_{i=1}^{n} f(x_i) g(x_i)$$

gostaríamos de encontrar a família $\{p_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de polinômios mônicos *ortogonais*, isto é, se $n \neq m$ então

$$\langle p_n, p_m \rangle = 0.$$

Como já conhecemos p_0 vamos determinar p_1 e p_2, nesta ordem. Sabemos que, por definição, p_1 deve ser um polinômio de grau igual a 1 e que o coeficiente do termo de maior grau deve se igual a 1 (já que estamos tratando de polinômios mônicos). Ou seja, devemos ter

$$p_1(x) = a_1 + x \tag{2}$$

onde a constante a_1 deve ser determinada. Para determinarmos a_1, usamos que

$$\begin{aligned}
0 &= \langle p_0, p1\rangle \\
&= p_0(1) * p_1(1) + p_0(2) * p_1(2) + p_0(3) * p_1(3) + p_0(4) * p_1(4) \\
&= 1 * (a_1 + 1) + 1 * (a_1 + 2) + 1 * (a_1 + 3) + 1 * (a_1 * 4) \\
&= 4a_1 + 10 \\
a_1 &= \frac{(-10)}{4} \\
&= -\frac{5}{2}.
\end{aligned}$$

Substituindo em (2) obtemos $p_1(x) = -\frac{5}{2} + x$.

Vamos agora calcular p_2. Novamente, a expressão de p_2 deve ser

$$p_2(x) = a_2 + b_2x + x^2 \tag{3}$$

onde as constantes a_2, b_2 devem ser determinadas sabendo que

$$\begin{aligned}
0 &= \langle p_0, p_2\rangle \\
&= 4a_2 + 10b_2 + 30 \\
0 &= \langle p_1, p_2\rangle \\
&= 5b_2 + 25.
\end{aligned}$$

Resolvendo o sistema linear acima (por exemplo, aplicando o MEG), obtemos

$$\begin{aligned}
a_2 &= 5 \\
b_2 &= -5
\end{aligned}$$

e, substituíndo em (3), obtemos $p_2(x) = 5 - 5x + x^2$.

(Questão 4) Embora o enunciado não tenha sido explícito nesse sentido, vou calcular o 3 primeiros polinômios *mônicos* em relação ao produto interno

$$\langle f, g\rangle := \int_0^1 f(x)g(x)dx$$

Naturalmente, $p_0(x) = 1$. Além disso, p_1 é dado pela expressão (2), onde devemos determinar a_1 usando que

$$\begin{aligned}
0 &= \langle p_0, p_1 \rangle \\
&= \int_0^1 p_0(x)p_1(x)dx \\
&= \int_0^1 1 * (a_1 + x)dx \\
&= \left(a_1 x + \frac{x^2}{2}\right)\Big|_0^1 \\
&= a_1 + \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

donde temos que $a_1 = -\frac{1}{2}$ e, portanto, $p_1(x) = -\frac{1}{2} + x$.

Ainda, p_2 tem a expressão geral (3), com a_2, b_2 a determinar. Temos

$$\begin{aligned}
0 &= \langle p_0, p_2 \rangle \\
&= \int_0^1 p_0(x)p_2(x)dx \\
&= \int_0^1 1 * (a_2 + b_2 x + x^2)dx \\
&= a_2 + \frac{1}{2}b_2 + \frac{1}{3} \\
0 &= \langle p_1, p_2 \rangle \\
&= \int_0^1 p_1(x)p_2(x)dx \\
&= \int_0^1 (-0.5 + x) * (a_2 + b_2 x + x^2)dx \\
&= \frac{1}{12}b_2 + \frac{1}{12}.
\end{aligned}$$

Resolvendo o sistema linear, obtemos $b_2 = -1$ e $a_2 = \frac{1}{6}$, donde temos que $p_2(x) = \frac{1}{6} - x + x^2$.

(Questão 5) Este exercício, quem tentou viu que são uma porção de integrais a se resolver por integração por partes, que dão uma conteira danada. Só vou contar para vocês – tomara que minhas contas estejam certas! – que

$$
\begin{aligned}
\langle p_O, p_0 \rangle &= \int_0^1 dx \\
&= 1 \\
\langle p_1, p_1 \rangle &= \int_0^1 \left(-\frac{1}{2} + x \right)^2 dx \\
&= \frac{1}{12} \\
\langle p_2, p_2 \rangle &= \int_0^1 \left(\frac{1}{6} - x + x^2 \right)^2 dx \\
&= \frac{1}{180}
\end{aligned}
$$

e que

$$
\begin{aligned}
\int \sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) dx &= -\frac{6}{\pi}\cos\left(\frac{\pi}{6}x\right) \\
\int x\sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) dx &= -\frac{6}{\pi}x\cos\left(\frac{\pi}{6}x\right) + \left(\frac{6}{\pi}\right)^2 \sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) \\
\int x^2\sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) dx &= \left[2\left(\frac{6}{\pi}\right)^3 - \frac{6}{\pi}x^2\right]\cos\left(\frac{\pi}{6}x\right) + 2\left(\frac{6}{\pi}\right)^2 x\sin\left(\frac{\pi}{6}x\right)
\end{aligned}
$$

donde temos que

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 \sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) dx &= \left(\frac{2-\sqrt{3}}{2}\right)\frac{6}{\pi} \\
\int_0^1 x\sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) dx &= \frac{1}{2}\left(\frac{6}{\pi}\right)^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{6}{\pi} \\
\int x^2\sin\left(\frac{\pi}{6}x\right) dx &= \sqrt{3}\left(\frac{6}{\pi}\right)^3 - \left(\frac{6}{\pi}\right)^2 + \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{6}{\pi}
\end{aligned}
$$

Então temos o seguinte: definindo

$$
f(x) := \sin\left(\frac{\pi}{6}x\right)
$$

temos que

$$
\begin{aligned}
\langle p_0, f\rangle &= \int_0^1 f(x)dx \\
&= \left(\frac{2-\sqrt{3}}{2}\right)\frac{6}{\pi} \\
\langle p_1, f\rangle &= \int_0^1 \left[-\frac{1}{2}f(x) + xf(x)\right]dx \\
&= -\left(\frac{2-\sqrt{3}}{4}\right)\frac{6}{\pi} + \frac{1}{2}\left(\frac{6}{\pi}\right)^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{6}{\pi} \\
&= -\left(\frac{2+\sqrt{3}}{4}\right)\frac{6}{\pi} + \frac{1}{2}\left(\frac{6}{\pi}\right)^2 \\
\langle p_2, f\rangle &= \int_0^1 \left[\frac{1}{6}f(x) - xf(x) + x^2 f(x)\right]dx \\
&= \left(\frac{2-11\sqrt{3}}{12}\right)\frac{6}{\pi} - \frac{3}{2}\left(\frac{6}{\pi}\right)^2 + \sqrt{3}\left(\frac{6}{\pi}\right)^3
\end{aligned}
$$

Logo, quando quisermos encontrar c_0, c_1, c_2 tais que $g(x) = c_0p_0(x) + c_1p_1(x) + c_2p_2(x)$ seja a melhor aproximação deste tipo para a função f definida acima, chegaremos ao sistema linear

$$
\begin{bmatrix} \langle p_0, p_0\rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle p_1, p_1\rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle p_2, p_2\rangle \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle p_0, f\rangle \\ \langle p_1, f\rangle \\ \langle p_2, f\rangle \end{bmatrix}
$$

onde as entradas nulas se justificam pela ortogonalidade de p_0, p_1, p_2. Esta é a grande vantagem dos polinômios ortogonais: na hora de utilizá-los para obter aproximações, chegamos a um sistema *diagonal*, o qual é trivial de se resolver: de fato, temos que

$$
\begin{aligned}
c_0 &= \langle p_0, f\rangle \\
c_1 &= 12\langle p_1, f\rangle \\
c_2 &= 180\langle p_2, f\rangle
\end{aligned}
$$

e então basta substituí-los na expressão da g (sinto muito pessoal, a expressão completa não cabe em uma linha...).