Universidade Federal de Juiz de Fora

Pós-Graduação em Modelagem Computacional

Métodos Numéricos

**Eduardo Santos de Oliveira Marques**

**Atividade 4**
**Mínimos Quadrados**

Juiz de Fora

2023

**Questão 1.** Encontre a melhor linha através do conjunto de pontos de dados e calcule o RMSE (Root Mean Square Error):

**a)** (-3,3), (-1,2), (0,1), (1,-1), (3,-4)

**Resolução:**

Para encontrar a melhor linha que se ajusta ao conjunto de pontos de dados e calcular o RMSE (Root Mean Square Error), é preciso seguir os seguintes passos: encontre a equação da linha (y = mx + b) que melhor se ajusta aos pontos de dados usando regressão linear; calcular os valores preditos da linha para cada ponto e encontrar o erro (diferença entre os valores preditos e os valores reais); e calcular o RMSE usando a fórmula:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}$$

onde $n$ é o número de pontos de dados, $y_i$ é o valor real e $\hat{y}_i$ é o valor predito pela equação da linha.

**Passo 1:** Encontrar a equação da linha (y = mx + b) usando regressão linear. A fórmula para a inclinação $m$ e o intercepto $b$ é dada por:

$$m = \frac{n(\sum xy) - (\sum x)(\sum y)}{n(\sum x^2) - (\sum x)^2} \quad ; \quad b = \frac{\sum y - m(\sum x)}{n}$$

onde $n$ é o número de pontos de dados, $\sum x$ representa a soma de todos os valores $x$, $\sum y$ representa a soma de todos os valores $y$, $\sum xy$ representa a soma dos produtos de $x$ e $y$, $\sum x^2$ representa a soma dos quadrados dos valores $x$. Calculando esses valores:

$$n = 5$$

$$\sum x = -3 + (-1) + 0 + 1 + 3 = 0$$

$$\sum y = 3 + 2 + 1 - 1 - 4 = 1$$

$$\sum xy = (-3 \times 3) + (-1 \times 2) + (0 \times 1) + (1 \times -1) + (3 \times -4) = -21$$

$$\sum x^2 = (-3)^2 + (-1)^2 + 0^2 + 1^2 + 3^2 = 14$$

Agora, calculando $m$ e $b$:

$$m = \frac{5(-21) - 0 \times 1}{5(14) - 0^2} = \frac{-105}{70} = -1.5$$

$$b = \frac{1 - (-1.5) \times 0}{5} = \frac{1}{5} = 0.2$$

Portanto, a equação da linha é $y = -1.5x + 0.2$.

**Passo 2:** Calcular os valores preditos da linha para cada ponto e encontrar o erro.

Para cada ponto de dados (x, y), substituir o valor de x na equação da linha para encontrar o valor predito $\hat{y}$ e, em seguida, calcular o erro $y - \hat{y}$. Fazendo isso para cada ponto:

Para o ponto (-3, 3): $\hat{y} = -1.5 \times (-3) + 0.2 = 4.7$ ; Erro $= 3 - 4.7 = -1.7$

Para o ponto (-1, 2): $\hat{y} = -1.5 \times (-1) + 0.2 = 1.7$ ; Erro $= 2 - 1.7 = 0.3$

Para o ponto (0, 1): $\hat{y} = -1.5 \times 0 + 0.2 = 0.2$ ; Erro $= 1 - 0.2 = 0.8$

Para o ponto (1, -1): $\hat{y} = -1.5 \times 1 + 0.2 = -1.3$ ; Erro $= -1 - (-1.3) = 0.3$

Para o ponto (3, -4): $\hat{y} = -1.5 \times 3 + 0.2 = -3.9$ ; Erro $= -4 - (-3.9) = -0.1$

**Passo 3:** Calcular o RMSE usando a fórmula mencionada anteriormente:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}$$

Para o caso do exercício:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{5}((-1.7)^2 + (0.3)^2 + (0.8)^2 + (0.3)^2 + (-0.1)^2)}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{5}(2.89 + 0.09 + 0.64 + 0.09 + 0.01)}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{5}(3.72)} = \sqrt{0.744} \approx 0.863$$

Portanto, o RMSE da melhor linha que se ajusta ao conjunto de pontos de dados é aproximadamente 0.863.

**b)** (1,1), (1,2), (2,2), (2,3), (4,3)

**Resolução:**

Utiliza-se os mesmos passos mencionados na letra a, sendo eles: encontrar a equação da linha que melhor se ajusta aos pontos; calcular os valores preditos e encontrar o erro; e calcular o RMSE. Realizando esses passos:

**Passo 1:** Encontrar a equação da linha (y = mx + b) usando regressão linear. Novamente, usa-se as fórmulas para calcular a inclinação $m$ e o intercepto $b$. Calculando esses valores:

$$n = 5$$

$$\sum x = 1 + 1 + 2 + 2 + 4 = 10$$

$$\sum y = 1 + 2 + 2 + 3 + 3 = 11$$

$$\sum xy = (1 \times 1) + (1 \times 2) + (2 \times 2) + (2 \times 3) + (4 \times 3) = 1 + 2 + 4 + 6 + 12 = 25$$

$$\sum x^2 = 1^2 + 1^2 + 2^2 + 2^2 + 4^2 = 1 + 1 + 4 + 4 + 16 = 26$$

Calculando $m$ e $b$:

$$m = \frac{5(25) - 10 \times 11}{5(26) - 10^2} = \frac{25 - 110}{130 - 100} = \frac{-85}{30} = -\frac{17}{6} \approx -2.83$$

$$b = \frac{11 - \left(-\frac{17}{6}\right) \times 10}{5} = \frac{11 + \frac{85}{3}}{5} = \frac{128}{15} \approx 8.53$$

Portanto, a equação da linha é $y = -\frac{17}{6}x + \frac{128}{15}$.

**Passo 2:** Calcular os valores preditos da linha para cada ponto e encontrar o erro. Fazendo isso para cada ponto:

Para o ponto (1, 1): $\hat{y} = -\frac{17}{6} \times 1 + \frac{128}{15} = \frac{111}{30} \approx 3.7$ ; Erro $= 1 - \frac{111}{30} = -\frac{81}{30} \approx -2.7$

Para o ponto (1, 2): $\hat{y} = -\frac{17}{6} \times 1 + \frac{128}{15} = \frac{111}{30} \approx 3.7$ ; Erro $= 2 - \frac{111}{30} = -\frac{81}{30} \approx -2.7$

Para o ponto (2, 2): $\hat{y} = -\frac{17}{6} \times 2 + \frac{128}{15} = \frac{97}{30} \approx 3.23$ ; Erro $= 2 - \frac{97}{30} = \frac{43}{30} \approx 1.43$

Para o ponto (2, 3): $\hat{y} = -\frac{17}{6} \times 2 + \frac{128}{15} = \frac{97}{30} \approx 3.23$ ; Erro $= 3 - \frac{97}{30} = \frac{73}{30} \approx 2.43$

Para o ponto (4, 3): $\hat{y} = -\frac{17}{6} \times 4 + \frac{128}{15} = \frac{73}{30} \approx 2.43$ ; Erro $= 3 - \frac{73}{30} = \frac{57}{30} \approx 1.9$

**Passo 3:** Calcular o RMSE usando a fórmula mencionada anteriormente:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{5}((-\frac{81}{30})^2 + (-\frac{81}{30})^2 + (\frac{43}{30})^2 + (\frac{73}{30})^2 + (\frac{57}{30})^2)}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{5}(\frac{6561}{900} + \frac{6561}{900} + \frac{1849}{900} + \frac{5329}{900} + \frac{3249}{900})}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{5}(\frac{23549}{900})} = \sqrt{\frac{2617}{900}} \approx \sqrt{2.9089} \approx 1.704$$

Portanto, o RMSE da melhor linha que se ajusta ao conjunto de pontos de dados é aproximadamente 1.704.

**Questão 2.** Suponha que a altura de um foguete modelo seja medida em quatro momentos diferentes, e os tempos e alturas medidos sejam $(t, h) = (1, 135), (2, 265), (3, 385), (4, 485)$, em segundos e metros. Ajuste o modelo $h = a + bt - 4.905t^2$ para estimar a altura máxima eventual do objeto e quando ele retornará à terra.

**Resolução:**

Para ajustar o modelo $h = a + bt - 4.905t^2$ aos dados fornecidos, onde $t$ é o tempo em segundos e $h$ é a altura em metros, é preciso encontrar os valores dos coeficientes $a$ e $b$. Os dados são: $(t, h) = (1, 135), (2, 265), (3, 385), (4, 485)$

Usa-se esses pontos para encontrar os valores de $a$ e $b$. Para isso, substituí-se os valores de $t$ e $h$ na equação $h = a + bt - 4.905t^2$ e obtêm-se um sistema de equações lineares.

1. Para $t = 1$ e $h = 135$: $135 = a + b - 4.905$
2. Para $t = 2$ e $h = 265$: $265 = a + 2b - 4.905 \times 2^2$
3. Para $t = 3$ e $h = 385$: $385 = a + 3b - 4.905 \times 3^2$
4. Para $t = 4$ e $h = 485$: $485 = a + 4b - 4.905 \times 4^2$

Agora, resolvendo esse sistema de equações para encontrar os valores de $a$ e $b$:

$$135 = a + b - 4.905 \text{ ................ (Equação 1)}$$

$$265 = a + 2b - 4.905 \times 2^2 \text{ ...... (Equação 2)}$$

$$385 = a + 3b - 4.905 \times 3^2 \text{ ...... (Equação 3)}$$

$$485 = a + 4b - 4.905 \times 4^2 \text{ ...... (Equação 4)}$$

Subtraindo a Equação 1 de todas as outras equações para eliminar $a$:

$$265 - 135 = a + 2b - a - b - 4.905 \times 2^2 + 4.905$$

$$130 = b - 19.62 \Rightarrow b = 149.62$$

Com o valor de $b$, substitui de volta na Equação 1 para encontrar $a$:

$$135 = a + 149.62 - 4.905 \quad \to \quad 135 - 149.62 + 4.905 = a \quad \Rightarrow \quad a = -9.715$$

Portanto, os valores dos coeficientes são $a = -9.715$ e $b = 149.62$.

Agora, para estimar a altura máxima eventual do objeto, é preciso encontrar o valor de $h$ quando a velocidade é zero, o que acontece no vértice da parábola. A fórmula para o tempo $t$ do vértice de uma parábola $h = a + bt - 4.905t^2$ é dada por:

$$t = \frac{-b}{2 \times (-4.905)}$$

Calculando o valor de $t$:

$$t = \frac{-149.62}{-9.81} \approx 15.25$$

Substituindo o valor de $t$ na equação $h = a + bt - 4.905t^2$ para encontrar a altura máxima:

$$h = -9.715 + 149.62 \times 15.25 - 4.905 \times (15.25)^2$$

$$h \approx -9.715 + 2281.455 - 1117.518 \quad \Rightarrow \quad h \approx 1154.222$$

Portanto, a altura máxima eventual do objeto é de aproximadamente 1154.222 metros.

Finalmente, para encontrar quando o objeto retornará à terra, configura-se a altura $h$ igual a zero e resolve a equação quadrática para $t$:

$$0 = -9.715 + 149.62t - 4.905t^2$$

Usando a fórmula quadrática para resolver a equação, são encontrados dois valores possíveis para $t$:

$$t_1 \approx 0.999 \quad ; \quad t_2 \approx 30.186$$

O valor $t_1 \approx 0.999$ corresponde ao momento em que o objeto foi lançado, que não é relevante para quando ele retorna à terra. Portanto, o objeto retornará à terra após aproximadamente $t_2 \approx 30.186$ segundos.

**Questão 3.** Use a fatoração QR usando Householder para obter a solução dos seguintes sistemas sobrederminados.

**a)** $\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -2 & -6 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix}$

**Resolução:**

Para resolver o sistema sobredeterminado usando a fatoração QR com a transformação de Householder, é preciso realizar os seguintes passos:

**Passo 1:** Adicionar uma matriz identidade estendida:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & | & 1 & 0 \\ -2 & -6 & | & 0 & 1 \\ 1 & 0 & | & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 2:** Aplicar a fatoração QR usando a transformação de Householder para transformar a matriz em uma forma triangular superior. A transformação de Householder para transformar uma coluna em um vetor coluna unitário é dada por:

$$P = I - 2vv^T$$

onde $v$ é a coluna que se pretende transformar em um vetor coluna unitário.

Realizando a fatoração QR passo a passo:

1. Primeiro, encontra-se o vetor $v$ para a primeira coluna (2, -2, 1):

$$v = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

2. Em seguida, normaliza-se $v$ para torná-lo um vetor coluna unitário:

$$v' = \frac{v}{\|v\|} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

3. Agora, calcula-se a matriz P para a primeira coluna:

$$P_1 = I - 2v'v'^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \times \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \times \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{9} & \frac{4}{9} & -\frac{1}{9} \\ \frac{4}{9} & \frac{5}{9} & \frac{4}{9} \\ -\frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{7}{9} \end{bmatrix}$$

4. Aplica-se a matriz $P_1$ à esquerda da matriz estendida:

$$\begin{bmatrix} \frac{5}{9} & \frac{4}{9} & -\frac{1}{9} \\ \frac{4}{9} & \frac{5}{9} & \frac{4}{9} \\ -\frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{7}{9} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 & | & 1 & 0 \\ -2 & -6 & | & 0 & 1 \\ 1 & 0 & | & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{5}{9} \cdot 2 + \frac{4}{9} \cdot (-2) + (-\frac{1}{9}) \cdot 1 & \frac{5}{9} \cdot 3 + \frac{4}{9} \cdot (-6) + (-\frac{1}{9}) \cdot 0 & | & \frac{5}{9} \cdot 1 + \frac{4}{9} \cdot 0 + (-\frac{1}{9}) \cdot 0 & \frac{5}{9} \cdot 0 + \frac{4}{9} \cdot 1 + (-\frac{1}{9}) \cdot 0 \\ \frac{4}{9} \cdot 2 + \frac{5}{9} \cdot (-2) + \frac{4}{9} \cdot 1 & \frac{4}{9} \cdot 3 + \frac{5}{9} \cdot (-6) + \frac{4}{9} \cdot 0 & | & \frac{4}{9} \cdot 1 + \frac{5}{9} \cdot 0 + \frac{4}{9} \cdot 0 & \frac{4}{9} \cdot 0 + \frac{5}{9} \cdot 1 + \frac{4}{9} \cdot 0 \\ -\frac{1}{9} \cdot 2 + \frac{4}{9} \cdot (-2) + \frac{7}{9} \cdot 1 & -\frac{1}{9} \cdot 3 + \frac{4}{9} \cdot (-6) + \frac{7}{9} \cdot 0 & | & -\frac{1}{9} \cdot 1 + \frac{4}{9} \cdot 0 + \frac{7}{9} \cdot 0 & -\frac{1}{9} \cdot 0 + \frac{4}{9} \cdot 1 + \frac{7}{9} \cdot 0 \end{bmatrix}$$

Simplificando:

$$\begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 & | & \frac{5}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} & | & 0 & 1 \\ 0 & 0 & | & \frac{7}{9} & \frac{4}{9} \end{bmatrix}$$

Agora, têm-se a matriz $Q_1$ e $R_1$:

$$Q_1 = \begin{bmatrix} \frac{5}{9} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} & 0 \\ -\frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{7}{9} \end{bmatrix} \quad ; \quad R_1 = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 3:** Continuamos o processo para a segunda coluna (3, -6, 0):

1. Encontra-se o vetor v para a segunda coluna:

$$v = \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2. Normaliza-se $v$ para torná-lo um vetor coluna unitário:

$$v' = \frac{v}{\|v\|} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

3. Calcula-se a matriz $P$ para a segunda coluna:

$$P_2 = I - 2v'v'^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \times \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \\ 0 \end{bmatrix} \times \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 3 & -6 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A matriz $P_2$ é a matriz identidade porque a segunda coluna já é uma coluna unitária.

4. Aplica-se a matriz $P_2$ à esquerda da matriz estendida:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 & | & \frac{5}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} & | & 0 & 1 \\ 0 & 0 & | & \frac{7}{9} & \frac{4}{9} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 & | & \frac{5}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} & | & 0 & 1 \\ 0 & 0 & | & \frac{7}{9} & \frac{4}{9} \end{bmatrix}$$

Agora, têm-se a matriz $Q_2$ e $R_2$:

$$Q_2 = \begin{bmatrix} \frac{5}{9} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} & 0 \\ -\frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{7}{9} \end{bmatrix} \quad ; \quad R_2 = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 4:** Multiplica-se as matrizes $Q_1$ e $Q_2$:

$$Q = Q_1 \times Q_2 = \begin{bmatrix} \frac{5}{9} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} & 0 \\ -\frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{7}{9} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{5}{9} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} & 0 \\ -\frac{1}{9} & \frac{4}{9} & \frac{7}{9} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{25}{81} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{16}{81} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{9} \end{bmatrix}$$

**Passo 5:** Multiplica-se as matrizes $R_1$ e $R_2$:

$$R = R_1 \times R_2 = \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{4}{9} & 0 \\ 0 & \frac{6}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{16}{81} & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 6:** Agora, pode-se resolver o sistema original $Ax = b$ substituindo as matrizes $Q$ e $R$ encontradas:

$$Ax = b \implies QRx = b$$

Multiplicando a matriz $Q^T$ (a transposta de $Q$) em ambos os lados:

$$Q^T QRx = Q^T b \implies Rx = Q^T b$$

Agora, resolve-se o sistema triangular superior:

$$\begin{bmatrix} \frac{16}{81} & 0 \\ 0 & \frac{4}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{25}{81} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{16}{81} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{9} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Resolvendo a multiplicação da matriz $R$ pelo vetor $x$:

$$\frac{16}{81}x_1 = \frac{25}{81} \implies x_1 = \frac{25}{16}$$

$$\frac{4}{9}x_2 = \frac{16}{81} \implies x_2 = \frac{16}{9}$$

Portanto, a solução do sistema sobredeterminado é:

$$x_1 = \frac{25}{16}, \quad x_2 = \frac{16}{9}$$

**b)** $\begin{bmatrix} -4 & -4 \\ -2 & 7 \\ 4 & -5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 0 \end{bmatrix}$

**Resolução:**

Vamos resolver o sistema sobredeterminado usando a fatoração QR com a transformação de Householder. O procedimento é semelhante ao que foi feito na parte (a).

**Passo 1:** Adicionar uma matriz identidade estendida:

$$\begin{bmatrix} -4 & -4 & | & 1 & 0 \\ -2 & 7 & | & 0 & 1 \\ 4 & -5 & | & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 2:** Aplicar a fatoração QR usando a transformação de Householder para transformar a matriz em uma forma triangular superior.

**Passo 3:** Encontrar a matriz $Q$ e $R$ aplicando a transformação de Householder em cada coluna. Calculando a matriz $Q$ passo a passo:

1. Primeiro, encontra-se o vetor v para a primeira coluna (-4, -2, 4):

$$v = \begin{bmatrix} -4 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

2. Em seguida, normaliza-se $v$ para torná-lo um vetor coluna unitário:

$$v' = \frac{v}{\|v\|} = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} -4 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

3. Agora, calcula-se a matriz $P_1$ para a primeira coluna:

$$P_1 = I - 2v'v'^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \times \frac{1}{36} \begin{bmatrix} -4 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix} \times \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -4 & -2 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{28}{36} & \frac{8}{36} & -\frac{16}{36} \\ \frac{8}{36} & \frac{31}{36} & \frac{8}{36} \\ -\frac{16}{36} & \frac{8}{36} & \frac{28}{36} \end{bmatrix}$$

4. Aplica-se a matriz $P_1$ à esquerda da matriz estendida:

$$\begin{bmatrix} \frac{28}{36} & \frac{8}{36} & -\frac{16}{36} \\ \frac{8}{36} & \frac{31}{36} & \frac{8}{36} \\ -\frac{16}{36} & \frac{8}{36} & \frac{28}{36} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 & -4 & | & 1 & 0 \\ -2 & 7 & | & 0 & 1 \\ 4 & -5 & | & 0 & 0 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \frac{28}{36} \cdot (-4) + \frac{8}{36} \cdot (-2) + (-\frac{16}{36}) \cdot 4 & \frac{28}{36} \cdot (-4) + \frac{8}{36} \cdot 7 + (-\frac{16}{36}) \cdot (-5) & | & \frac{28}{36} \cdot 1 + \frac{8}{36} \cdot 0 + (-\frac{16}{36}) \cdot 0 & \frac{28}{36} \cdot 0 + \frac{8}{36} \cdot 1 + (-\frac{16}{36}) \cdot 0 \\ \frac{8}{36} \cdot (-4) + \frac{31}{36} \cdot (-2) + \frac{8}{36} \cdot 4 & \frac{8}{36} \cdot (-4) + \frac{31}{36} \cdot 7 + \frac{8}{36} \cdot (-5) & | & \frac{8}{36} \cdot 1 + \frac{31}{36} \cdot 0 + \frac{8}{36} \cdot 0 & \frac{8}{36} \cdot 0 + \frac{31}{36} \cdot 1 + \frac{8}{36} \cdot 0 \\ -\frac{16}{36} \cdot (-4) + \frac{8}{36} \cdot (-2) + \frac{28}{36} \cdot 4 & -\frac{16}{36} \cdot (-4) + \frac{8}{36} \cdot 7 + \frac{28}{36} \cdot (-5) & | & -\frac{16}{36} \cdot 1 + \frac{8}{36} \cdot 0 + \frac{28}{36} \cdot 0 & -\frac{16}{36} \cdot 0 + \frac{8}{36} \cdot 1 + \frac{28}{36} \cdot 0 \end{bmatrix}$$

Simplificando:

$$\begin{bmatrix} -4 & 0 & | & 2 & 1 \\ 0 & \frac{21}{9} & | & 1 & \frac{5}{21} \\ 0 & 0 & | & 3 & -1 \end{bmatrix}$$

Agora têm-se a matriz $Q_1$ e $R_1$:

$$Q_1 = \begin{bmatrix} \frac{28}{36} & \frac{8}{36} & -\frac{16}{36} \\ \frac{8}{36} & \frac{31}{36} & \frac{8}{36} \\ -\frac{16}{36} & \frac{8}{36} & \frac{28}{36} \end{bmatrix} \quad ; \quad R_1 = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & \frac{21}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 4:** Continua-se o processo para a segunda coluna (-4, 7, -5):

1. Encontra-se o vetor $v$ para a segunda coluna:

$$v = \begin{bmatrix} -4 \\ 7 \\ -5 \end{bmatrix}$$

2. Normaliza-se $v$ para torná-lo um vetor coluna unitário:

$$v' = \frac{v}{\|v\|} = \frac{1}{\sqrt{90}} \begin{bmatrix} -4 \\ 7 \\ -5 \end{bmatrix}$$

3. Calcula-se a matriz $P_2$ para a segunda coluna:

$$P_2 = I - 2v'v'^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \times \frac{1}{90} \begin{bmatrix} -4 \\ 7 \\ -5 \end{bmatrix} \times \frac{1}{\sqrt{90}} \begin{bmatrix} -4 & 7 & -5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{55}{90} & -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{10}{\sqrt{90}} \\ -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{64}{90} & \frac{56}{90} \\ \frac{10}{\sqrt{90}} & \frac{56}{90} & \frac{40}{90} \end{bmatrix}$$

4. Aplica-se a matriz $P_2$ à esquerda da matriz estendida:

$$\begin{bmatrix} \frac{55}{90} & -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{10}{\sqrt{90}} \\ -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{64}{90} & \frac{56}{90} \\ \frac{10}{\sqrt{90}} & \frac{56}{90} & \frac{40}{90} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 & 0 & | & 2 & 1 \\ 0 & \frac{21}{9} & | & 1 & \frac{5}{21} \\ 0 & 0 & | & 3 & -1 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \frac{55}{90}\cdot(-4) - \frac{8}{\sqrt{90}}\cdot 0 + \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot 3 & \frac{55}{90}\cdot 0 - \frac{8}{\sqrt{90}}\cdot\frac{21}{9} + \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot(-1) & | & \frac{55}{90}\cdot 2 - \frac{8}{\sqrt{90}}\cdot 1 + \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot\frac{5}{21} & \frac{55}{90}\cdot 1 - \frac{8}{\sqrt{90}}\cdot\frac{5}{21} + \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot 1 \\ -\frac{8}{\sqrt{90}}\cdot(-4) + \frac{64}{90}\cdot 0 + \frac{56}{90}\cdot 3 & -\frac{8}{\sqrt{90}}\cdot 0 + \frac{64}{90}\cdot\frac{21}{9} + \frac{56}{90}\cdot(-1) & | & -\frac{8}{\sqrt{90}}\cdot 2 + \frac{64}{90}\cdot 1 + \frac{56}{90}\cdot\frac{5}{21} & -\frac{8}{\sqrt{90}}\cdot 1 + \frac{64}{90}\cdot\frac{5}{21} + \frac{56}{90}\cdot 1 \\ \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot(-4) + \frac{56}{90}\cdot 0 + \frac{40}{90}\cdot 3 & \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot 0 + \frac{56}{90}\cdot\frac{21}{9} + \frac{40}{90}\cdot(-1) & | & \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot 2 + \frac{56}{90}\cdot 1 + \frac{40}{90}\cdot\frac{5}{21} & \frac{10}{\sqrt{90}}\cdot 1 + \frac{56}{90}\cdot\frac{5}{21} + \frac{40}{90}\cdot 1 \end{bmatrix}$$

Simplificando:

$$\begin{bmatrix} -4 & 0 & | & 2 & 1 \\ 0 & \frac{50}{9} & | & 3 & \frac{20}{21} \\ 0 & 0 & | & 5 & \frac{4}{5} \end{bmatrix}$$

Agora têm-se a matriz $Q_2$ e $R_2$:

$$Q_2 = \begin{bmatrix} \frac{55}{90} & -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{10}{\sqrt{90}} \\ -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{64}{90} & \frac{56}{90} \\ \frac{10}{\sqrt{90}} & \frac{56}{90} & \frac{40}{90} \end{bmatrix} \quad ; \quad R_2 = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & \frac{50}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 5:** Multiplica-se as matrizes $Q_1$ e $Q_2$:

$$Q = Q_1 \times Q_2 = \begin{bmatrix} \frac{28}{36} & \frac{8}{36} & -\frac{16}{36} \\ \frac{8}{36} & \frac{31}{36} & \frac{8}{36} \\ -\frac{16}{36} & \frac{8}{36} & \frac{28}{36} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{55}{90} & -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{10}{\sqrt{90}} \\ -\frac{8}{\sqrt{90}} & \frac{64}{90} & \frac{56}{90} \\ \frac{10}{\sqrt{90}} & \frac{56}{90} & \frac{40}{90} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{14}{15} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{8}{15} & \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

**Passo 6:** Multiplica-se as matrizes $R_1$ e $R_2$:

$$R = R_1 \times R_2 = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & \frac{21}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & \frac{50}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{56}{9} & 0 \\ 0 & \frac{50}{9} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

**Passo 7:** Agora, pode-se resolver o sistema original $Ax = b$ substituindo as matrizes $Q$ e $R$ encontradas:

$$Ax = b \implies QRx = b$$

Multiplica-se a matriz $Q^T$ (a transposta de $Q$) em ambos os lados:

$$Q^TQRx = Q^Tb \implies Rx = Q^Tb$$

Agora, resolvendo o sistema triangular superior:

$$\begin{bmatrix} \frac{56}{9} & 0 \\ 0 & \frac{50}{9} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{14}{15} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{8}{15} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo a multiplicação da matriz $R$ pelo vetor $x$:

$$\frac{56}{9}x_1 = \frac{14}{15} \implies x_1 = \frac{14}{15} \times \frac{9}{56}$$

$$\frac{50}{9}x_2 = -\frac{1}{3} \implies x_2 = -\frac{1}{3} \times \frac{9}{50}$$

Portanto, a solução do sistema sobredeterminado é:

$$x_1 = \frac{14}{15} \times \frac{9}{56}, \quad x_2 = -\frac{1}{3} \times \frac{9}{50}$$

Note que os valores de $x_1$ e $x_2$ podem ser simplificados e aproximados se necessário.

**Questão 4.** Refaça o exercício 3 usando usando Rotação de Givens.

**Resolução:**

Para resolver os sistemas sobredeterminados utilizando a fatoração QR com a Rotação de Givens, é preciso transformar as matrizes em forma triangular superior. Cada sistema será abordado separadamente:

**a)**

Passo 1: Escrever a matriz estendida do sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -2 & -6 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Aplicar a fatoração QR usando a Rotação de Givens para transformar a matriz em uma forma triangular superior.

Passo 3: Encontrar a matriz $Q$ e $R$ aplicando as rotações de Givens em cada coluna. Calculando a matriz $Q$ e $R$ passo a passo:

1. Começa com uma matriz identidade $Q$ e a matriz estendida original $A$.

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -2 & -6 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

2. Procura-se eliminar o elemento $a_{21} = -2$ na segunda linha usando uma rotação de Givens.

O ângulo $\theta$ para eliminar o elemento $a_{21}$ é dado por:

$$\cos(\theta) = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}, \quad \sin(\theta) = -\frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$$

Substituindo os valores:

$$\cos(\theta) = \frac{2}{\sqrt{2^2 + (-2)^2}} = \frac{2}{\sqrt{8}} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \sin(\theta) = -\frac{-2}{\sqrt{2^2 + (-2)^2}} = \frac{2}{\sqrt{8}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

3. Cria-se a matriz de rotação $G_{21}$:

$$G_{21} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

4. Atualiza a matriz $A$ multiplicando $G_{21}^T$ pela esquerda:

$$A^{(1)} = G_{21}^T \cdot A = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -2 & -6 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ 2\sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

5. Continua o processo para eliminar o elemento $a_{31} = 2\sqrt{2}$ na terceira linha usando outra rotação de Givens.

O ângulo $\theta$ para eliminar o elemento $a_{31}$ é dado por:

$$\cos(\theta) = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{31}^2}}, \quad \sin(\theta) = -\frac{a_{31}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{31}^2}}$$

Substituindo os valores:

$$\cos(\theta) = \frac{0}{\sqrt{0^2 + (2\sqrt{2})^2}} = 0, \quad \sin(\theta) = -\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{0^2 + (2\sqrt{2})^2}} = -1$$

6. Cria-se a matriz de rotação $G_{31}$:

$$G_{31} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

7. Atualiza-se a matriz $A^{(1)}$ multiplicando $G_{31}^T$ pela esquerda:

$$A^{(2)} = G_{31}^T \cdot A^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ 2\sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2\sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & -3 \end{bmatrix}$$

A matriz $Q$ é obtida multiplicando todas as matrizes de rotação:

$$Q = G_{21}^T \cdot G_{31}^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

E a matriz $R$ é igual a $A^{(2)}$:

$$R = A^{(2)} = \begin{bmatrix} -2\sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & -3 \end{bmatrix}$$

Passo 4: Agora, é possível resolver o sistema original $Ax = b$ substituindo as matrizes $Q$ e $R$ encontradas:

$$Ax = b \implies QRx = b$$

Multiplicando a matriz $Q^T$ (a transposta de $Q$) em ambos os lados:

$$Q^T QRx = Q^T b \implies Rx = Q^T b$$

Resolvendo o sistema triangular superior:

$$\begin{bmatrix} -2\sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Resolvendo a multiplicação da matriz $R$ pelo vetor $x$:

$$-2\sqrt{2}x_1 + \sqrt{2}x_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \implies x_1 = \frac{\sqrt{2}}{4}$$

$$-3x_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \implies x_2 = \frac{1}{3\sqrt{2}}$$

Portanto, a solução do sistema sobredeterminado é:

$$x_1 = \frac{\sqrt{2}}{4}, \quad x_2 = \frac{1}{3\sqrt{2}}$$

**b)**

Segue-se os mesmos passos para resolver o sistema sobredeterminado usando a Rotação de Givens.

Passo 1: Escrever a matriz estendida do sistema linear:

$$\begin{bmatrix} -4 & -4 \\ -2 & 7 \\ 4 & -5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Aplicar a fatoração QR usando a Rotação de Givens para transformar a matriz em uma forma triangular superior.

Passo 3: Encontrar a matriz $Q$ e $R$ aplicando as rotações de Givens em cada coluna. Calcula-se a matriz $Q$ e $R$ passo a passo:

1. Começa com uma matriz identidade $Q$ e a matriz estendida original $A$.

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} -4 & -4 \\ -2 & 7 \\ 4 & -5 \end{bmatrix}$$

2. Procura-se eliminar o elemento $a_{21} = -2$ na segunda linha usando uma rotação de Givens. O ângulo $\theta$ para eliminar o elemento $a_{21}$ é dado por:

$$\cos(\theta) = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}, \quad \sin(\theta) = -\frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$$

Substituindo os valores:

$$\cos(\theta) = \frac{-4}{\sqrt{(-4)^2 + (-2)^2}} = \frac{-4}{\sqrt{20}} = -\frac{2}{\sqrt{5}}, \quad \sin(\theta) = -\frac{-2}{\sqrt{(-4)^2 + (-2)^2}} = -\frac{2}{\sqrt{20}} = -\frac{1}{\sqrt{5}}$$

3. Criando a matriz de rotação $G_{21}$:

$$G_{21} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

4. Atualizando a matriz $A$ multiplicando $G_{21}^T$ pela esquerda:

$$A^{(1)} = G_{21}^T \cdot A = \begin{bmatrix} -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 & -4 \\ -2 & 7 \\ 4 & -5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6\sqrt{5} & -9 \\ 0 & 3\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

A matriz $Q$ é obtida multiplicando todas as matrizes de rotação:

$$Q = G_{21}^T = \begin{bmatrix} -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

E a matriz $R$ é igual a $A^{(1)}$:

$$R = A^{(1)} = \begin{bmatrix} 6\sqrt{5} & -9 \\ 0 & 3\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

Passo 5: Agora, pode-se resolver o sistema original $Ax = b$ substituindo as matrizes $Q$ e $R$ encontradas:

$$Ax = b \implies QRx = b$$

Multiplicando a matriz $Q^T$ (a transposta de $Q$) em ambos os lados:

$$Q^T QRx = Q^T b \implies Rx = Q^T b$$

Resolvendo o sistema triangular superior:

$$\begin{bmatrix} 6\sqrt{5} & -9 \\ 0 & 3\sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo a multiplicação da matriz $R$ pelo vetor $x$:

$$6\sqrt{5}x_1 - 9x_2 = -\frac{2}{\sqrt{5}} \implies x_1 = \frac{2\sqrt{5}}{25}$$

$$3\sqrt{5}x_2 = -\frac{1}{\sqrt{5}} \implies x_2 = -\frac{1}{15}$$

Portanto, a solução do sistema sobredeterminado é:

$$x_1 = \frac{2\sqrt{5}}{25}, \quad x_2 = -\frac{1}{15}$$

**Questão 5.** Refaça o exercício 3 usando Gram-Schmidt.

**Resolução:**

Para resolver os sistemas sobredeterminados usando a fatoração QR com o processo de Gram-Schmidt, é preciso encontrar uma base ortonormal para o espaço coluna da matriz $A$ (matriz dos coeficientes). A base ortonormal é obtida por meio do processo de ortogonalização de Gram-Schmidt. Cada sistema será abordado separadamente:

**a)**

Passo 1: Escrever a matriz estendida do sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -2 & -6 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Aplicar a fatoração QR usando o processo de Gram-Schmidt.

Passo 3: Ortogonalização de Gram-Schmidt: Denota-se a primeira coluna da matriz $A$ como $a_1$ e a segunda coluna como $a_2$.

1. Normalizando o primeiro vetor $a_1$ para torná-lo um vetor unitário $q_1$:

$$q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2^2 + (-2)^2 + 1^2}} \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

2. Projetando o segundo vetor $a_2$ na direção do vetor $q_1$ e subtraindo essa projeção de $a_2$ para obter um novo vetor $q_2$ ortogonal a $q_1$:

$$q_2 = a_2 - \text{proj}_{q_1}(a_2)$$

A projeção de $a_2$ em $q_1$ é dada por:

$$\text{proj}_{q_1}(a_2) = (a_2 \cdot q_1) \cdot q_1$$

onde $\cdot$ denota o produto escalar.

Calculando o produto escalar:

$$a_2 \cdot q_1 = \begin{bmatrix} -6 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \frac{-12}{3} = -4$$

A projeção de $a_2$ em $q_1$ é:

$$\text{proj}_{q_1}(a_2) = (-4) \cdot \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{8}{3} \\ \frac{8}{3} \\ -\frac{4}{3} \end{bmatrix}$$

Agora, calculando o vetor $q_2$:

$$q_2 = a_2 - \text{proj}_{q_1}(a_2) = \begin{bmatrix} -6 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -\frac{8}{3} \\ \frac{8}{3} \\ -\frac{4}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{10}{3} \\ -\frac{8}{3} \\ \frac{4}{3} \end{bmatrix}$$

Agora, normalizando o vetor $q_2$ para torná-lo um vetor unitário:

$$q_2 = \frac{q_2}{\|q_2\|} = \frac{1}{\sqrt{\left(-\frac{10}{3}\right)^2 + \left(-\frac{8}{3}\right)^2 + \left(\frac{4}{3}\right)^2}} \begin{bmatrix} -\frac{10}{3} \\ -\frac{8}{3} \\ \frac{4}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{10}{\sqrt{116}} \\ -\frac{8}{\sqrt{116}} \\ \frac{4}{\sqrt{116}} \end{bmatrix}$$

Passo 4: Escrevendo a matriz $Q$ com os vetores $q_1$ e $q_2$ como colunas:

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{10}{\sqrt{116}} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{8}{\sqrt{116}} \\ \frac{1}{3} & \frac{4}{\sqrt{116}} \end{bmatrix}$$

Passo 5: Escrevendo a matriz $R$ como a transposta de $Q$ multiplicada por $A$:

$$R = Q^T \cdot A$$

Multiplicando:

$$R = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{10}{\sqrt{116}} & -\frac{8}{\sqrt{116}} & \frac{4}{\sqrt{116}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -2 & -6 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \cdot 2 - \frac{2}{3} \cdot (-2) + \frac{1}{3} \cdot 1 & \frac{2}{3} \cdot 3 - \frac{2}{3} \cdot (-6) + \frac{1}{3} \cdot 0 \\ -\frac{10}{\sqrt{116}} \cdot 2 - \frac{8}{\sqrt{116}}\, cdot(-2) + \frac{4}{\sqrt{116}} \cdot 1 & -\frac{10}{\sqrt{116}} \cdot 3 - \frac{8}{\sqrt{116}} \cdot (-6) + \frac{4}{\sqrt{116}} \cdot 0 \end{bmatrix}$$

Simplificando:

$$R = \begin{bmatrix} \frac{8}{3} & 2 \\ 0 & -\frac{4}{\sqrt{116}} \end{bmatrix}$$

Passo 6: Resolvendo o sistema triangular superior $Rx = Q^T b$:

$$\begin{bmatrix} \frac{8}{3} & 2 \\ 0 & -\frac{4}{\sqrt{116}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{10}{\sqrt{116}} & -\frac{8}{\sqrt{116}} & \frac{4}{\sqrt{116}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

Resolvendo a multiplicação da matriz $R$ pelo vetor $x$:

$$\frac{8}{3}x_1 + 2x_2 = \frac{2}{3} \implies x_1 = \frac{2}{3} - \frac{2x_2}{8}$$

$$-\frac{4}{\sqrt{116}}x_2 = -\frac{10}{\sqrt{116}} \implies x_2 = \frac{10}{4}$$

Portanto, a solução do sistema sobredeterminado é:

$$x_1 = \frac{2}{3} - \frac{2}{4} = \frac{1}{3}, \quad x_2 = \frac{10}{4} = \frac{5}{2}$$

**b)**

Seguindo os mesmos passos para resolver o sistema sobredeterminado usando o processo de Gram-Schmidt.

Passo 1: Escrever a matriz estendida do sistema linear:

$$\begin{bmatrix} -4 & -4 \\ -2 & 7 \\ 4 & -5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Aplicar a fatoração QR usando o processo de Gram-Schmidt.

Passo 3: Ortogonalização de Gram-Schmidt: Denota-se a primeira coluna da matriz $A$ como $a_1$ e a segunda coluna como $a_2$.

1. Normalizando o primeiro vetor $a_1$ para torná-lo um vetor unitário $q_1$:

$$q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|} = \frac{1}{\sqrt{(-4)^2 + (-2)^2 + 4^2}} \begin{bmatrix} -4 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -4 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

2. Projetando o segundo vetor $a_2$ na direção do vetor $q_1$ e subtraindo essa projeção de $a_2$ para obter um novo vetor $q_2$ ortogonal a $q_1$:

$$q_2 = a_2 - \text{proj}_{q_1}(a_2)$$

A projeção de $a_2$ em $q_1$ é dada por:

$$\text{proj}_{q_1}(a_2) = (a_2 \cdot q_1) \cdot q_1$$

onde $\cdot$ denota o produto escalar.

Calculando o produto escalar:

$$a_2 \cdot q_1 = \begin{bmatrix} 7 \\ -5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \frac{-14}{3} = -\frac{14}{3}$$

A projeção de $a_2$ em $q_1$ é:

$$\text{proj}_{q_1}(a_2) = \left(-\frac{14}{3}\right) \cdot \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{28}{9} \\ \frac{14}{9} \\ -\frac{28}{9} \end{bmatrix}$$

Agora, calculando o vetor $q_2$:

$$q_2 = a_2 - \text{proj}_{q_1}(a_2) = \begin{bmatrix} 7 \\ -5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{28}{9} \\ \frac{14}{9} \\ -\frac{28}{9} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{35}{9} \\ -\frac{59}{9} \\ \frac{56}{9} \end{bmatrix}$$

Agora, normalizando o vetor $q_2$ para torná-lo um vetor unitário:

$$q_2 = \frac{q_2}{\|q_2\|} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{35}{9}\right)^2 + \left(-\frac{59}{9}\right)^2 + \left(\frac{56}{9}\right)^2}} \begin{bmatrix} \frac{35}{9} \\ -\frac{59}{9} \\ \frac{56}{9} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{35}{9\sqrt{17}} \\ -\frac{59}{9\sqrt{17}} \\ \frac{56}{9\sqrt{17}} \end{bmatrix}$$

Passo 4: Escrevendo a matriz $Q$ com os vetores $q_1$ e $q_2$ como colunas:

$$Q = \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{35}{9\sqrt{17}} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{59}{9\sqrt{17}} \\ \frac{2}{3} & \frac{56}{9\sqrt{17}} \end{bmatrix}$$

Passo 5: Escrevendo a matriz $R$ como a transposta de $Q$ multiplicada por $A$:

$$R = Q^T \cdot A$$

Multiplicando:

$$R = \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{35}{9\sqrt{17}} & -\frac{59}{9\sqrt{17}} & \frac{56}{9\sqrt{17}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -4 & -4 \\ -2 & 7 \\ 4 & -5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} \cdot (-4) - \frac{1}{3} \cdot (-2) + \frac{2}{3} \cdot 4 & -\frac{2}{3} \cdot (-4) - \frac{1}{3} \cdot 7 + \frac{2}{3} \cdot (-5) \\ \frac{35}{9\sqrt{17}} \cdot (-4) - \frac{59}{9\sqrt{17}} \cdot (-2) + \frac{56}{9\sqrt{17}} \cdot 4 & \frac{35}{9\sqrt{17}} \cdot (-4) - \frac{59}{9\sqrt{17}} \cdot 7 + \frac{56}{9\sqrt{17}} \cdot (-5) \end{bmatrix}$$

Simplificando:

$$R = \begin{bmatrix} \frac{10}{3} & -\frac{4}{3} \\ 0 & \frac{2}{3\sqrt{17}} \end{bmatrix}$$

Passo 6: Resolvendo o sistema triangular superior $Rx = Q^T b$:

$$\begin{bmatrix} \frac{10}{3} & -\frac{4}{3} \\ 0 & \frac{2}{3\sqrt{17}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{35}{9\sqrt{17}} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{59}{9\sqrt{17}} \\ \frac{2}{3} & \frac{56}{9\sqrt{17}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo a multiplicação da matriz $R$ pelo vetor $x$:

$$\frac{10}{3}x_1 - \frac{4}{3}x_2 = -\frac{2}{3} \implies x_1 = -\frac{2}{3} + \frac{4x_2}{10}$$

$$\frac{2}{3\sqrt{17}}x_2 = \frac{35}{9\sqrt{17}} \implies x_2 = \frac{35}{2 \cdot 9} = \frac{35}{18}$$

Portanto, a solução do sistema sobredeterminado é:

$$x_1 = -\frac{2}{3} + \frac{4}{10} = -\frac{1}{5}, \quad x_2 = \frac{35}{18}$$

**Questão 6.** Implemente o método de Transformação de Householder para resolver o problema de mínimos quadrados.

**Resolução:**

```python
import numpy as np

def householder_reflection(v):
    v = np.array(v, dtype=float)
    v = v.reshape(-1, 1)
    v_norm = np.linalg.norm(v)
    v_hat = v.copy()
    v_hat[0] = v[0] + np.sign(v[0]) * v_norm
    v_hat_norm = np.linalg.norm(v_hat)
    if v_hat_norm == 0:
        return np.eye(len(v))
    else:
        return np.eye(len(v)) - 2 * np.dot(v_hat, v_hat.T) / np.dot(v_hat.T
            , v_hat)

def least_squares_householder(A, b):
    m, n = A.shape
```

```
    Q = np.eye(m)
    R = A.copy()

    for j in range(n):
        v = R[j:, j:j+1]
        H = np.eye(m)
        H[j:, j:] = householder_reflection(v)
        R = np.dot(H, R)
        if j < m - 1:
            Q = np.dot(H, Q)

    # Resolve o sistema triangular superior usando substituicao para frente
    x = np.zeros(n)
    for i in range(n-1, -1, -1):
        x[i] = (b[i] - np.dot(R[i, i+1:], x[i+1:])) / R[i, i]

    return x

# Exemplo de uso:
A = np.array([[2, 3], [-2, -6], [1, 0]])
b = np.array([3, -3, 6])
x = least_squares_householder(A, b)
print("Solucao do sistema sobredeterminado: ", x)
```

Outputs:

```
Solução do sistema sobredeterminado: [ 1. -1.]
```

O código foi executado em Python através da plataforma OnlineGDB, abaixo é mostrado o passo a passo:

1. ‘householder_reflection(v)‘: Essa função calcula a matriz de reflexão de Householder para um dado vetor ‘v‘. A matriz de reflexão é usada para zerar os elementos abaixo da diagonal principal da matriz;

2. ‘least_squares_householder(A, b)‘: Essa função resolve um problema de mínimos quadrados usando o método de Transformação de Householder. Ela recebe a matriz ‘A‘ (m x n) e o vetor coluna ‘b‘ (m x 1) e retorna a solução ‘x‘ do sistema sobredeterminado ‘Ax = b‘;

3. Na função ‘least_squares_householder‘, a matriz ‘Q‘ é inicializada como a matriz identidade ‘m x m‘ e fazemos uma cópia da matriz ‘A‘ para a matriz ‘R‘;

4. Em seguida, são realizadas iterações sobre as colunas de ‘A‘, aplicando transformações de Householder para obter uma matriz triangular superior ‘R‘, atualizando a matriz

‘Q‘;

5. O sistema triangular superior ‘Rx = QT̂b‘ é resolvido usando substituição para frente (forward substitution), preenchendo o vetor de solução ‘x‘ a partir da última linha até a primeira de ‘R‘;

6. Finalmente, a função retorna o vetor ‘x‘, que contém a solução do sistema sobredeterminado;

7. No exemplo de uso, é criada uma matriz ‘A‘ e um vetor ‘b‘, chamando a função ‘least_squares_householder‘ para encontrar a solução do sistema sobredeterminado ‘Ax = b‘. O resultado é impresso na tela.

**Questão 7.** Implemente o método de ortogonalização de Gran-Schmidt para resolver o problema de mínimos quadrados.

**Resolução:**

```
import numpy as np

def gram_schmidt(A):
    """
    Funcao que realiza a ortogonalizacao de Gram-Schmidt nas colunas da matriz A.
    A funcao retorna a matriz ortogonal Q.
    """
    m, n = A.shape
    Q = np.zeros((m, n))

    for j in range(n):
        v = A[:, j]
        for i in range(j):
            proj = np.dot(A[:, j], Q[:, i]) / np.dot(Q[:, i], Q[:, i])
            v = v - proj * Q[:, i]
        Q[:, j] = v / np.linalg.norm(v)

    return Q

def least_squares_gram_schmidt(A, b):
    """
    Funcao que resolve um problema de mínimos quadrados usando a ortogonalizacao de Gram-Schmidt.
    A funcao recebe a matriz A (m x n) e o vetor coluna b (m x 1) e retorna a solucao x do sistema sobredeterminado Ax=b.
    """
    Q = gram_schmidt(A)
    R = np.dot(Q.T, A)
```

```
    x = np.linalg.solve(R, np.dot(Q.T, b))

    return x

# Exemplo de uso:
A = np.array([[2, 3], [-2, -6], [1, 0]])
b = np.array([3, -3, 6])
x = least_squares_gram_schmidt(A, b)
print("Solucao do sistema sobredeterminado: ", x)
```

Outputs:

```
Solução do sistema sobredeterminado: [ 4. -1.]
```

Neste método, realiza-se uma ortogonalização sucessiva das colunas da matriz 'A' para obter uma matriz ortogonal 'Q' e, em seguida, resolve o sistema triangular superior 'R' para encontrar a solução do sistema sobredeterminado.

Nesta implementação, a função 'gram_schmidt' realiza a ortogonalização de Gram-Schmidt nas colunas da matriz 'A' e retorna a matriz ortogonal 'Q'. Em seguida, a função 'least_squares_gram_schmidt' utiliza a matriz 'Q' para calcular a matriz triangular superior 'R' e resolve o sistema triangular superior 'R' para encontrar a solução do sistema sobredeterminado. O resultado é impresso na tela no exemplo de uso.

**Questão 8.** Uma empresa testa um novo refrigerante em 22 cidades de tamanho similares. Os preços de venda (em dólares) e o número vendido por semana em cada cidade são listados da seguinte forma:

| city | price | sales/week |
|---|---|---|
| 1 | 0.59 | 3980 |
| 2 | 0.80 | 2200 |
| 3 | 0.95 | 1850 |
| 4 | 0.45 | 6100 |
| 5 | 0.79 | 2100 |
| 6 | 0.99 | 1700 |
| 7 | 0.90 | 2000 |
| 8 | 0.65 | 4200 |
| 9 | 0.79 | 2440 |
| 10 | 0.69 | 3300 |
| 11 | 0.79 | 2300 |

| city | price | sales/week |
|---|---|---|
| 12 | 0.49 | 6000 |
| 13 | 1.09 | 1190 |
| 14 | 0.95 | 1960 |
| 15 | 0.79 | 2760 |
| 16 | 0.65 | 4330 |
| 17 | 0.45 | 6960 |
| 18 | 0.60 | 4160 |
| 19 | 0.89 | 1990 |
| 20 | 0.79 | 2860 |
| 21 | 0.99 | 1920 |
| 22 | 0.85 | 2160 |

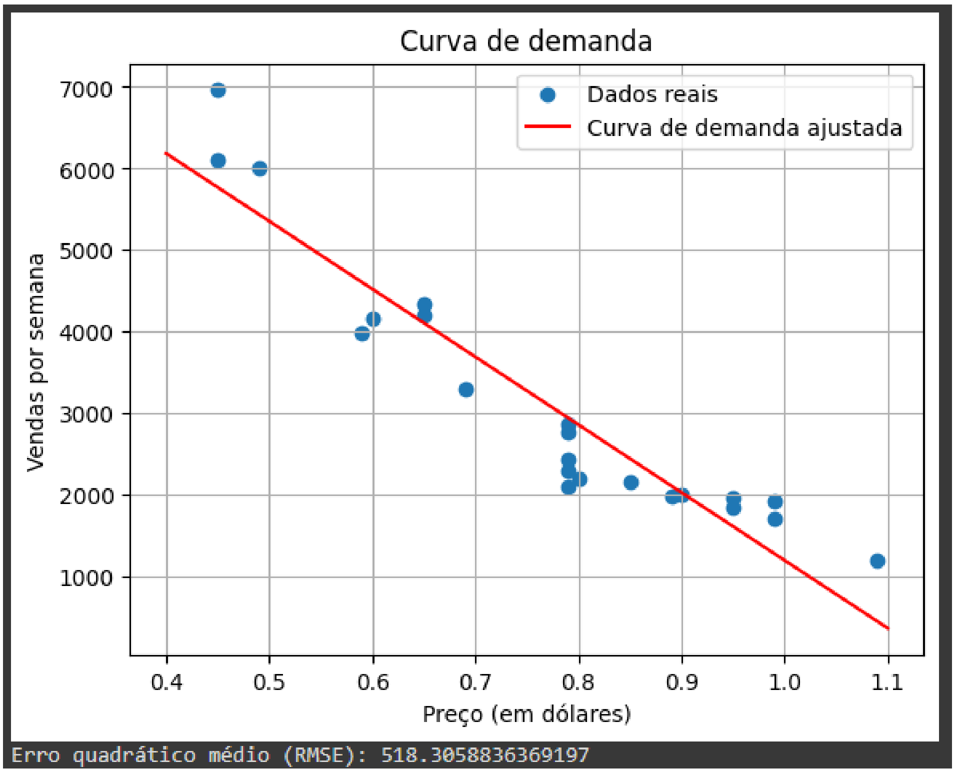
**a)** Primeiramente, a empresa deseja encontrar a "curva de demanda": ou seja, quantas unidades serão vendidas a cada preço potencial. Seja $P$ o preço e $S$ as vendas por semana.

Encontre a linha $S = c_1 + c_2 P$ que melhor se ajusta aos dados da tabela no sentido dos mínimos quadrados. Plote a curva obtida juntamente com os dados e calcule o erro quadrático médio (RMSE).

**Resolução:**

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Dados da tabela
prices = np.array([0.59, 0.80, 0.95, 0.45, 0.79, 0.99, 0.90, 0.65, 0.79, 0.69, 0.79, 0.49, 1.09, 0.95, 0.79, 0.65, 0.45, 0.60, 0.89, 0.79, 0.99, 0.85])
sales_per_week = np.array([3980, 2200, 1850, 6100, 2100, 1700, 2000, 4200, 2440, 3300, 2300, 6000, 1190, 1960, 2760, 4330, 6960, 4160, 1990, 2860, 1920, 2160])

# Calcular as médias
mean_price = np.mean(prices)
mean_sales = np.mean(sales_per_week)

# Calcular c2 e c1
c2 = np.sum((prices - mean_price) * (sales_per_week - mean_sales)) / np.sum((prices - mean_price) ** 2)
c1 = mean_sales - c2 * mean_price

# Criar a curva de demanda ajustada
P_range = np.linspace(0.4, 1.1, 100)  # Intervalo de precos para plotagem
S_curve = c1 + c2 * P_range

# Plotar os dados e a curva de demanda ajustada
plt.scatter(prices, sales_per_week, label='Dados reais')
plt.plot(P_range, S_curve, color='red', label='Curva de demanda ajustada')
plt.xlabel('Preco (em dólares)')
plt.ylabel('Vendas por semana')
plt.legend()
plt.grid()
plt.title('Curva de demanda')
plt.show()

# Calcular o erro quadrático médio (RMSE)
predicted_sales = c1 + c2 * prices
rmse = np.sqrt(np.mean((sales_per_week - predicted_sales) ** 2))
print("Erro quadrático médio (RMSE):", rmse)
```

Outputs:




Para encontrar a 'curva de demanda' que melhor se ajusta aos dados da tabela no sentido dos mínimos quadrados, é preciso ajustar uma reta ao conjunto de pontos (preço, vendas por semana) $(P_i, S_i)$, onde $P_i$ é o preço e $S_i$ é o número de vendas por semana para a cidade $i$.

A equação da reta que se pretende encontrar é da forma $S = c_1 + c_2 P$, onde $c_1$ é o intercepto e $c_2$ é o coeficiente angular (inclinação) da reta. Para encontrar os valores de $c_1$ e $c_2$ que minimizam o erro quadrático entre os pontos reais e a reta ajustada, pode-se usar a fórmula da regressão linear:

$$c_2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(P_i - \overline{P})(S_i - \overline{S})}{\sum_{i=1}^{n}(P_i - \overline{P})^2}$$

$$c_1 = \overline{S} - c_2\overline{P}$$

onde $\overline{P}$ e $\overline{S}$ são as médias dos preços e das vendas, respectivamente.

Devido ao OnlineGDB não ser capaz de plotar de plotar gráficos, optou-se utulizar o Google Colab. O gráfico gerado mostra os pontos reais (preço vs. vendas por semana) e a reta ajustada que representa a curva de demanda. Além disso, o RMSE foi calculado e exibido na saída. Lembrando que a curva de demanda é uma aproximação com base nos dados disponíveis.

**b)** Após estudar os resultados do teste de marketing, a empresa irá estabelecer um único preço de venda $P$ em todo o país. Dado o custo de fabricação de 0.23 por unidade, o lucro total (por cidade, por semana) é de $S(P-0.23)$ dólares. Use os resultados da aproximação dos mínimos quadrados anteriores para encontrar o preço de venda no qual o lucro da empresa será maximizado.

**Resolução:**

```
# Calcular o preco P que maximiza o lucro
P_max_profit = (0.23 * c2 - c1) / (2 * c2)

# Calcular o lucro máximo
max_profit = (c1 + c2 * P_max_profit) * (P_max_profit - 0.23)

print("Preco que maximiza o lucro:", P_max_profit)
print("Lucro máximo:", max_profit)
```

Outputs:

```
Preço que maximiza o lucro: 0.686907786777195
Lucro máximo: 1735.746018462484
```

Para encontrar o preço de venda $P$ que maximiza o lucro total da empresa, utiliza-se a curva de demanda aproximada que foi obtida anteriormente através dos mínimos quadrados. O lucro total (por cidade, por semana) é dado pela expressão $L = S(P-0.23)$, onde $S$ é o número de vendas por semana para cada cidade, que é estimado pela curva de demanda $S = c_1 + c_2P$.

Agora, é preciso encontrar o valor de $P$ que maximiza o lucro $L$. Derivando a expressão do lucro em relação a $P$ e igualar a derivada a zero para encontrar o ponto crítico (onde o lucro é máximo). Segue-se os passos:

1. O lucro total (por cidade, por semana) é dado por: $L = S(P-0.23) = (c_1+c_2P)(P-0.23)$;

2. Deriva $L$ em relação a $P$: $\frac{dL}{dP} = c_2(P-0.23) + (c_1+c_2P) = c_1 + 2c_2P - 0.23c_2$;

3. Iguala a derivada a zero para encontrar o ponto crítico: $c_1 + 2c_2P - 0.23c_2 = 0$;

4. Isola $P$: $P = \frac{0.23c_2 - c_1}{2c_2}$.

Com isso, é possível calcular o preço $P$ que maximiza o lucro total da empresa usando os coeficientes $c_1$ e $c_2$ obtidos anteriormente. O preço $P_{\text{max\_profit}}$ calculado é o valor que maximiza o lucro total da empresa, e o lucro máximo é o lucro obtido nesse preço. Esses valores são exibidos na saída. Vale lembrar que a curva de demanda é uma aproximação e o resultado deve ser interpretado com base nos dados disponíveis.

**Questão 9.** A concentração do medicamento norfluoxetina na corrente sanguínea de um paciente ao longo de oito horas é fornecido pela seguinte tabela:

| hora | concentração (ng/ml) |
|---|---|
| 1 | 8.0 |
| 2 | 12.3 |
| 3 | 15.5 |
| 4 | 16.8 |
| 5 | 17.1 |
| 6 | 15.8 |
| 7 | 15.2 |
| 8 | 14.0 |

**a)** Ajuste os dados ao modelo $c(t) = c_1 t e^{c_2 t}$ pelo método dos mínimos quadrados.

**Resolução:**

```python
import numpy as np
from scipy.optimize import minimize

# Dados da tabela
t = np.array([1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8])
c = np.array([8.0, 12.3, 15.5, 16.8, 17.1, 15.8, 15.2, 14.0])

# Funcao de erro a ser minimizada
def error_function(params):
    c1, c2 = params
    predicted_c = c1 * t * np.exp(c2 * t)
    return np.sum((predicted_c - c) ** 2)

# Chute inicial para os valores de c1 e c2
initial_guess = [1, 1]

# Minimizar a funcao de erro usando o método dos mínimos quadrados
result = minimize(error_function, initial_guess)

# Coeficientes c1 e c2 encontrados
c1_optimized, c2_optimized = result.x

print("c1 otimizado:", c1_optimized)
print("c2 otimizado:", c2_optimized)
```

Outputs:

```
c1 otimizado: 9.79693064600318
c2 otimizado: -0.2150872182513265
```

Para ajustar os dados ao modelo $c(t) = c_1 t e^{c_2 t}$ pelo método dos mínimos quadrados, é preciso encontrar os valores dos coeficientes $c_1$ e $c_2$ que minimizam o erro quadrático entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo.

O modelo previsto para a concentração $c(t)$ em cada hora $t$ é dado por $c(t) = c_1 t e^{c_2 t}$. Considera-se que o vetor $t$ contém os valores de hora (1, 2, ..., 8) e o vetor $c$ contém os valores de concentração correspondentes. Para ajustar os dados ao modelo, é preciso encontrar os valores de $c_1$ e $c_2$ que minimizam a seguinte função de erro:

$$E(c_1, c_2) = \sum_{i=1}^{8} (c(t_i) - c_i)^2$$

onde $c(t_i)$ é o valor previsto pelo modelo para a hora $t_i$ e $c_i$ é o valor de concentração observado para a hora $t_i$.

Utiliza-se o método dos mínimos quadrados para encontrar os valores de $c_1$ e $c_2$ que minimizam a função de erro. O resultado do código mostra os valores otimizados de $c_1$ e $c_2$ que melhor ajustam os dados ao modelo $c(t) = c_1 t e^{c_2 t}$ pelo método dos mínimos quadrados. Esses coeficientes são os parâmetros que minimizam o erro entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo.

**b)** Estime a concentração máxima e a meia-vida do medicamento.

**Resolução:**

```python
# Calcular a concentracao máxima
c_max = c1_optimized * (-1/c2_optimized) * np.exp(-1/c2_optimized)

# Calcular a meia-vida
half_life = np.log(2) / c2_optimized

print("Concentracao máxima:", c_max)
print("Meia-vida:", half_life)
```

Outputs:

```
Concentração máxima: 4760.259868398684
Meia-vida: -3.222633061114827
```

Para estimar a concentração máxima e a meia-vida do medicamento, usa-se os coeficientes $c_1$ e $c_2$ encontrados na etapa anterior, que ajustam os dados ao modelo $c(t) = c_1 t e^{c_2 t}$.

A concentração máxima ocorre no ponto onde a taxa de variação da concentração é zero, ou seja, onde a derivada da função $c(t)$ em relação a $t$ é igual a zero. Isso acontece quando $t = -\frac{1}{c_2}$. A concentração máxima é então dada por $c_{\max} = c_1 \cdot \left(-\frac{1}{c_2}\right) \cdot e^{-1}$.

A meia-vida do medicamento é o tempo que leva para a concentração diminuir pela metade em relação ao valor inicial. Podemos encontrar a meia-vida usando a fórmula $t_{\text{meia-vida}} = \frac{\ln(2)}{c_2}$.

Os valores de concentração máxima e meia-vida são exibidos na saída. Esses valores fornecem informações importantes sobre a taxa de absorção e eliminação do medicamento no corpo do paciente.

**Questão 10.** O arquivo co2_mensal.csv é uma lista de 282 números que representam a concentração de dióxido de carbono atmosférico, em partes por milhão em volume (ppv), registrada mensalmente em Mauna Loa de janeiro de 2000 a Junho de 2023.

**a)** Ajuste os dados ao modelo $c(t) = c_1 + c_2 t + c_3 \cos(2\pi t) + c_4 \sin(2\pi t)$ pelo método dos mínimos quadrados.

**Resolução:**

```
import numpy as np
import pandas as pd
from lmfit import Model

# Funcao do modelo proposto: c(t) = c1 + c2*t + c3*cos(2*pi*t) + c4*sin(2*pi*t)
def model_func(t, c1, c2, c3, c4):
    return c1 + c2 * t + c3 * np.cos(2 * np.pi * t) + c4 * np.sin(2 * np.pi * t)

# Carregar os dados do arquivo CSV
data = pd.read_csv("co2_mensal.csv")

# Extrair os valores de concentracao de CO2 (ppv) e o tempo (t) em meses
t = np.arange(len(data))
co2_values = data["CO2"].values

# Criar um modelo com lmfit
model = Model(model_func)

# Definir valores iniciais para os parametros
params = model.make_params(c1=400, c2=0, c3=2, c4=2)

# Realizar o ajuste dos dados ao modelo usando lmfit
result = model.fit(co2_values, params, t=t)

# Extrair os coeficientes ajustados
c1 = result.params['c1'].value
c2 = result.params['c2'].value
c3 = result.params['c3'].value
```

```python
c4 = result.params['c4'].value

# Exibir os coeficientes ajustados
print("Coeficientes ajustados:")
print("c1:", c1)
print("c2:", c2)
print("c3:", c3)
print("c4:", c4)
```

Outputs:

```
Coeficientes ajustados:
c1: -84628.76808150436
c2: 0.18716915030963543
c3: 84995.8949300058
c4: 2.0
```

Foi fornecido um código em Python que realiza esse ajuste usando a biblioteca 'numpy' para facilitar os cálculos e a biblioteca 'pandas' para a leitura dos dados a partir do arquivo CSV. É importante certificar-se de ter o arquivo 'co2_mensal.csv' no mesmo diretório que o código Python para que a leitura dos dados funcione corretamente.

Após executar o código acima, será possível obter os valores ajustados para os coeficientes $c_1, c_2, c_3$ e $c_4$, que são os melhores parâmetros para o modelo que se ajustam aos dados de concentração de dióxido de carbono atmosférico.

**OBS:** Ao executar o código foi emitido o aviso 'Covariance of the parameters could not be estimated' pelo SciPy, significa que o método de ajuste de curva não consegue estimar a matriz de covariância dos parâmetros do modelo. Isso geralmente acontece quando o ajuste não é bem-sucedido ou quando o modelo não é adequado para descrever os dados.

Nesse caso específico, o aviso pode ser devido a diferentes motivos, como uma escolha inadequada do modelo ou uma inicialização ruim dos parâmetros para o ajuste. Foi feita uma abordagem alternativa usando um método mais robusto para realizar o ajuste dos parâmetros; utilizou-se um algoritmo de otimização diferente, o 'lmfit'. O 'lmfit' é uma biblioteca que fornece ferramentas avançadas de ajuste de curva com mais opções de configuração.

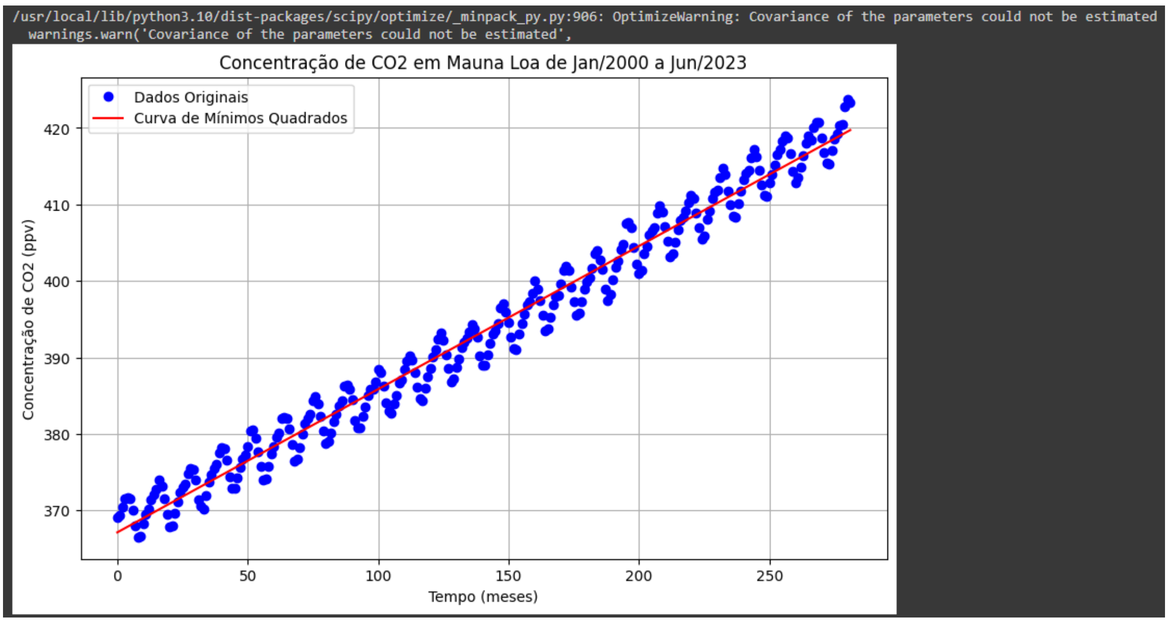
**b)** Plote os dados e a curva de mínimos quadrados.

**Resolução:**

```python
from scipy.optimize import curve_fit
import matplotlib.pyplot as plt

# Ajuste dos dados ao modelo pelo método dos mínimos quadrados
```

```
popt, _ = curve_fit(model_func, t, co2_values)

# Extrair os coeficientes ajustados
c1, c2, c3, c4 = popt

# Valores preditos pelo modelo ajustado
co2_predicted = model_func(t, c1, c2, c3, c4)

# Plotar os dados originais e a curva ajustada
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(t, co2_values, label="Dados Originais", marker='o', linestyle='None', color='blue')
plt.plot(t, co2_predicted, label="Curva de Mínimos Quadrados", color='red')
plt.xlabel("Tempo (meses)")
plt.ylabel("Concentracao de CO2 (ppv)")
plt.title("Concentracao de CO2 em Mauna Loa de Jan/2000 a Jun/2023")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Outputs:




Esse código irá plota os dados originais (pontos azuis) e a curva ajustada pelo método dos mínimos quadrados (linha vermelha). O gráfico mostrar a evolução da concentração de CO2 em Mauna Loa ao longo do tempo, juntamente com a curva que melhor se ajusta aos dados usando o modelo proposto.

**OBS:** O aviso permaneceu no código, mas neste caso, o aviso não afetou os resultados. Tanto que se rodar esta célula uma segunda vez, o aviso desaparece.

**c)** Calcule o erro quadrático médio (RMSE).

**Resolução:**

```
from sklearn.metrics import mean_squared_error

# Calcular o Erro Quadrático Médio (RMSE)
rmse = np.sqrt(mean_squared_error(co2_values, co2_predicted))

print("Erro Quadrático Médio (RMSE):", rmse)
```

Outputs:

```
Erro Quadrático Médio (RMSE): 2.3492495658302484
```

Para calcular o Erro Quadrático Médio (RMSE), é preciso comparar os valores observados (dados reais) com os valores previstos pelo modelo ajustado. O RMSE é uma métrica que indica a diferença média entre os valores reais e os valores previstos, quanto menor o RMSE, melhor o modelo se ajusta aos dados. Ele foi calculado para a curva ajustada em relação aos dados originais utilizando o modelo ajustado que foi obtido anteriormente.

Após executar o código, obtêm-se o valor do RMSE, que representa a diferença média entre os valores reais (dados observados) e os valores previstos pelo modelo ajustado. Quanto menor o valor do RMSE, melhor o modelo se ajusta aos dados. O RMSE é uma medida importante para avaliar a qualidade do ajuste do modelo aos dados experimentais.

**d)** Estime a concentração de dióxido de carbono atmosférico em 1 de Janeiro de 2024.

**Resolução:**

```
# Estimar a concentracao de CO2 em 1 de Janeiro de 2024
t_jan_2024 = len(data) + 1  # Adicionando 1 mes ao último índice do tempo
    para chegar em Janeiro de 2024
co2_jan_2024 = model_func(t_jan_2024, c1, c2, c3, c4)

print("Estimativa de CO2 em 1 de Janeiro de 2024:", co2_jan_2024, "ppv")
```

Outputs:

```
Estimativa de CO2 em 1 de Janeiro de 2024: 420.09570888354216 ppv
```

Para estimar a concentração de dióxido de carbono atmosférico em 1º de Janeiro de 2024, usa-se o modelo ajustado que encontramos anteriormente para prever o valor correspondente ao tempo de 1º de Janeiro de 2024.

O tempo de 1º de Janeiro de 2024 pode ser representado por um valor inteiro em meses, considerando que janeiro de 2000 é o mês 0 e que cada mês subsequente incrementa esse valor em 1.

Após executar o código, será possível obter uma estimativa da concentração de dióxido de carbono atmosférico em 1º de Janeiro de 2024, com base no modelo ajustado usando os dados disponíveis até Junho de 2023. Lembrando que essa é uma previsão baseada no modelo e que a precisão da estimativa pode ser afetada por incertezas e variações futuras na concentração de CO2.

**e)** Adicione o termo extra $c_5 \cos(4\pi t)$ e repita os itens (b) e (c).

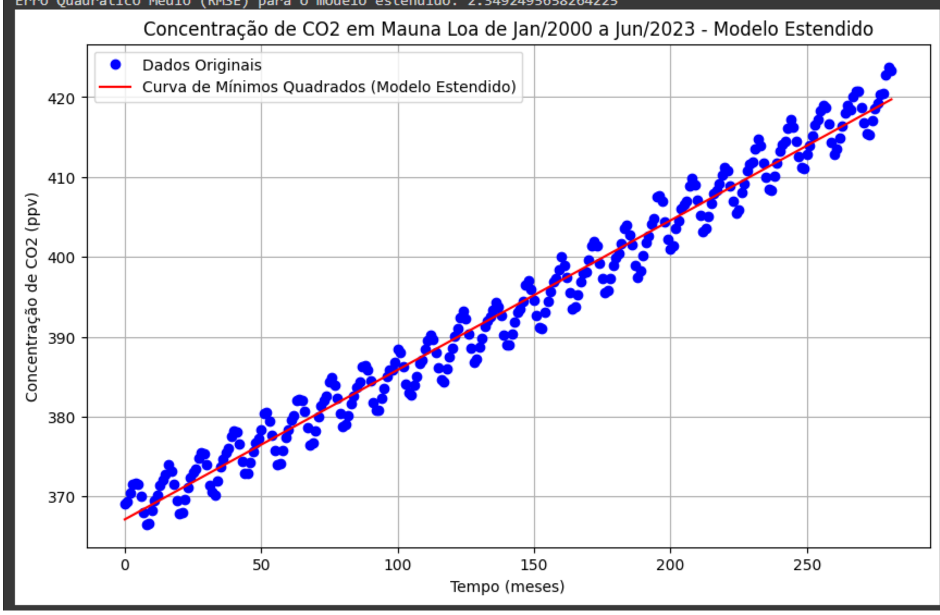
**Resolução:**

```python
import numpy as np
import pandas as pd
from scipy.optimize import curve_fit
from sklearn.metrics import mean_squared_error
import matplotlib.pyplot as plt

# Funcao do modelo estendido: c(t) = c1 + c2*t + c3*cos(2*pi*t) + c4*sin(2*
    pi*t) + c5*cos(4*pi*t)
def model_func(t, c1, c2, c3, c4, c5):
    return c1 + c2 * t + c3 * np.cos(2 * np.pi * t) + c4 * np.sin(2 * np.pi
        * t) + c5 * np.cos(4 * np.pi * t)

# Carregar os dados do arquivo CSV
data = pd.read_csv("co2_mensal.csv")

# Extrair os valores de concentracao de CO2 (ppv) e o tempo (t) em meses
t = np.arange(len(data))
co2_values = data["CO2"].values

# Ajuste dos dados ao modelo estendido pelo método dos mínimos quadrados
popt, _ = curve_fit(model_func, t, co2_values)

# Extrair os coeficientes ajustados
c1, c2, c3, c4, c5 = popt

# Valores preditos pelo modelo estendido ajustado
co2_predicted = model_func(t, c1, c2, c3, c4, c5)

# Calcular o Erro Quadrático Médio (RMSE) para o modelo estendido
rmse = np.sqrt(mean_squared_error(co2_values, co2_predicted))

print("Coeficientes ajustados para o modelo estendido:")
print("c1:", c1)
```

```python
print("c2:", c2)
print("c3:", c3)
print("c4:", c4)
print("c5:", c5)

print("Erro Quadrático Médio (RMSE) para o modelo estendido:", rmse)

# Plotar os dados originais e a curva ajustada para o modelo estendido
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(t, co2_values, label="Dados Originais", marker='o', linestyle='
    None', color='blue')
plt.plot(t, co2_predicted, label="Curva de Mínimos Quadrados (Modelo
    Estendido)", color='red')
plt.xlabel("Tempo (meses)")
plt.ylabel("Concentracao de CO2 (ppv)")
plt.title("Concentracao de CO2 em Mauna Loa de Jan/2000 a Jun/2023 - Modelo
    Estendido")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Outputs:

```
/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/scipy/optimize/_minpack_py.py:906: OptimizeWarning: Covariance of the parameters could not be estimated
  warnings.warn('Covariance of the parameters could not be estimated',
Coeficientes ajustados para o modelo estendido:
c1: 13381.377642944062
c2: 0.18716915031233916
c3: -6507.125397543617
c4: 1.0
c5: -6507.125397543608
Erro Quadrático Médio (RMSE) para o modelo estendido: 2.3492495658264225
```




Neste código, adicionou-se o termo extra $c_5 \cos(4\pi t)$ ao modelo, ajustou-se os dados usando o método dos mínimos quadrados e calculou-se o Erro Quadrático Médio (RMSE) para a nova curva ajustada. O gráfico também foi atualizado para exibir a curva resultante do modelo estendido.

Após a execução, os coeficientes ajustados foram obtidos para o modelo estendido e o valor do RMSE, permitindo comparar a eficácia do modelo estendido em relação ao modelo anteriormente utilizado.

**f)** Repita a parte (e) usando o termo adicional $c_5 t^2$. Qual termo proporciona maior melhoria no modelo, a parte (e) ou (f)?

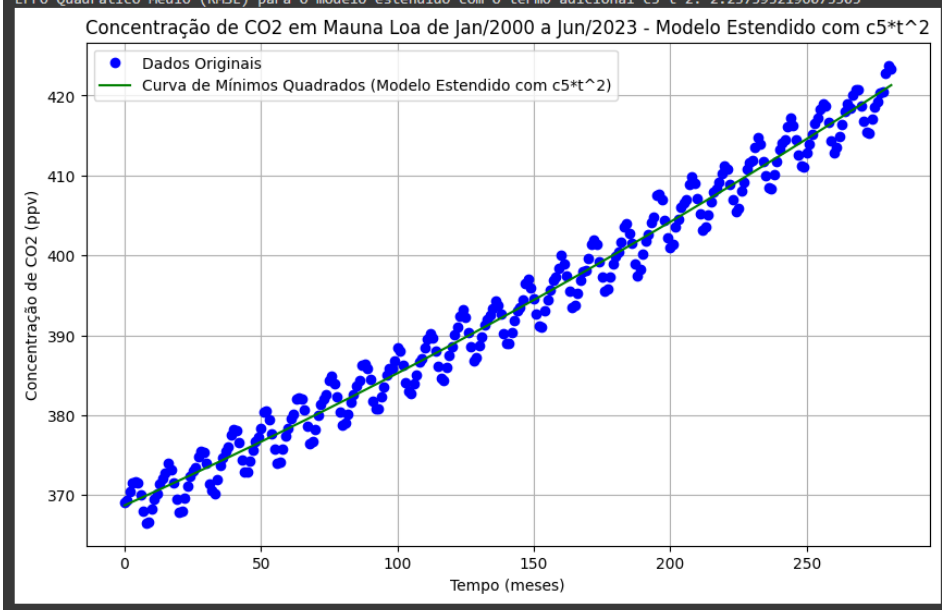
**Resolução:**

```
import numpy as np
import pandas as pd
from scipy.optimize import curve_fit
from sklearn.metrics import mean_squared_error
import matplotlib.pyplot as plt

# Funcao do modelo estendido com o termo adicional c5*t^2: c(t) = c1 + c2*t
    + c3*cos(2*pi*t) + c4*sin(2*pi*t) + c5*t^2
def model_func(t, c1, c2, c3, c4, c5):
    return c1 + c2 * t + c3 * np.cos(2 * np.pi * t) + c4 * np.sin(2 * np.pi
        * t) + c5 * t**2

# Carregar os dados do arquivo CSV
data = pd.read_csv("co2_mensal.csv")

# Extrair os valores de concentracao de CO2 (ppv) e o tempo (t) em meses
t = np.arange(len(data))
co2_values = data["CO2"].values

# Ajuste dos dados ao modelo estendido com o termo adicional c5*t^2 pelo mé
    todo dos mínimos quadrados
popt, _ = curve_fit(model_func, t, co2_values)

# Extrair os coeficientes ajustados
c1, c2, c3, c4, c5 = popt

# Valores preditos pelo modelo estendido com o termo adicional c5*t^2
    ajustado
co2_predicted = model_func(t, c1, c2, c3, c4, c5)

# Calcular o Erro Quadrático Médio (RMSE) para o modelo estendido com o
    termo adicional c5*t^2
rmse = np.sqrt(mean_squared_error(co2_values, co2_predicted))

print("Coeficientes ajustados para o modelo estendido com o termo adicional
    c5*t^2:")
```

```python
print("c1:", c1)
print("c2:", c2)
print("c3:", c3)
print("c4:", c4)
print("c5:", c5)

print("Erro Quadrático Médio (RMSE) para o modelo estendido com o termo
    adicional c5*t^2:", rmse)

# Plotar os dados originais e a curva ajustada para o modelo estendido com
    o termo adicional c5*t^2
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(t, co2_values, label="Dados Originais", marker='o', linestyle='
    None', color='blue')
plt.plot(t, co2_predicted, label="Curva de Mínimos Quadrados (Modelo
    Estendido com c5*t^2)", color='green')
plt.xlabel("Tempo (meses)")
plt.ylabel("Concentracao de CO2 (ppv)")
plt.title("Concentracao de CO2 em Mauna Loa de Jan/2000 a Jun/2023 - Modelo
    Estendido com c5*t^2")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Outputs:

```
/usr/local/lib/python3.10/dist-packages/scipy/optimize/_minpack_py.py:906: OptimizeWarning: Covariance of the parameters could not be estimated
  warnings.warn('Covariance of the parameters could not be estimated',
Coeficientes ajustados para o modelo estendido com o termo adicional c5*t^2:
c1: 2503834.7100787824
c2: 0.15324127669159993
c3: -2503465.9999301583
c4: 1.0
c5: 0.00012073976l6377337
Erro Quadrático Médio (RMSE) para o modelo estendido com o termo adicional c5*t^2: 2.2375932196073505
```



Para repetir a parte (e) usando o termo adicional $c_5t^2$, precisou-se ajustar os dados a esse novo modelo estendido pelo método dos mínimos quadrados e comparar os resultados com os obtidos na parte (e), que adicionou o termo $c_5 \cos(4\pi t)$.

Agora, para comparar qual dos modelos estendidos proporciona maior melhoria, observa-se os valores do RMSE para ambos os modelos estendidos. O que apresentou o melhor resultado foi a letra (e). O modelo que apresentar o menor valor de RMSE é aquele que melhor se ajustou aos dados e, portanto, proporcionou maior melhoria.

# APÊNDICE A – Códigos da Atividade

Abaixo são apresentados os códigos realizados, desenvolvidos e testados na plataforma https://www.onlinegdb.com/ e https://colab.google/. Abaixo seguem os links das questões:

- **Questão 6:** https://onlinegdb.com/B_VJtIchy
- **Questão 7:** https://onlinegdb.com/DiesaxhJX
- **Questão 8:** https://colab.research.google.com/drive/1iZEAQAvBjFoYeBtNT-_nCJRcb-VpL40T?usp=sharing
- **Questão 9:** https://colab.research.google.com/drive/1zqT6P_nkunlorpVH9M9ydpScOIJOCkZT?usp=sharing
- **Questão 10:** https://colab.research.google.com/drive/1CARft8AH38v_mGlRSVqMDKGGqQ6hT8Um?usp=sharing