Revisão – Parte I

INF1608 – Análise Numérica

Departamento de Informática, PUC-Rio

Tópicos

- Representação de Números
- Série de Taylor
- Raízes de Equações
- Sistema de Equações Lineares
- Interpolação de Polinômios
- Método dos Mínimos Quadrados

Representação de Números

Representação de números

Problema

- Representação de números grandes
  - Ex. escala astronômica
- Representação de números pequenos
  - Ex. escala molecular

Representação científica

- Representação de ponto flutuante

$$732.48 \longrightarrow 7.3248 \times 10^2$$

$$0.00234 \longrightarrow 2.34 \times 10^{-3}$$

Espaço para a representação

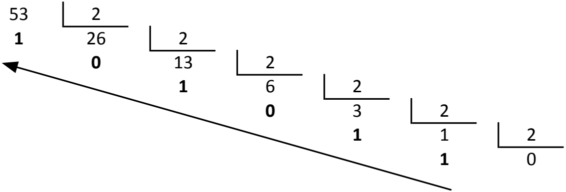
sinal **mantissa** base$^{\textbf{expoente}}$

- onde a base é representada implicitamente

Representação binária

Conversão de decimal para binário

- $(53)_{10}$ em representação binária?



Logo:

$$(53)_{10} = (110101)_2$$

Representação binária

$(0.7)_{10}$?

$$
\begin{aligned}
0.7 \times 2 &= 0.4 + 1 \\
0.4 \times 2 &= 0.8 + 0 \\
0.8 \times 2 &= 0.6 + 1 \\
0.6 \times 2 &= 0.2 + 1 \\
0.2 \times 2 &= 0.4 + 0 \\
0.4 \times 2 &= 0.8 + 0 \\
&\dots
\end{aligned}
$$

Logo:

$$(0.7)_{10} = (0.1011001100110\ldots)_2 = (0.1\overline{0110})_2$$

E:

$$(53.7)_{10} = (110101.1011001100110\ldots)_2 = (110101.1\overline{0110})_2$$

Representação no computador

Notação científica de números binários:

$$\pm 1.bbbb... \times 2^{eee...}$$

- A parte inteira é sempre 1
- A base é 2
- $bbbb...$ representa a mantissa
- $eee...$ representa o expoente

	sinal	mantissa	expoente
float	1	23	8
double	1	52	11

Representação no computador

Precisão dupla (double)

- Representação na máquina

$$\underbrace{s e_1 e_2 \ldots e_{11} b_1 b_2 \ldots b_{52}}_{\text{64 bits}}$$

- Representação do número 1:

$$+1.000 \ldots 000 \times 2^0$$

  - Menor número maior que 1:

$$+1.000 \ldots 001 \times 2^0 = 1 + 2^{-52}$$

Epsilon da máquina

$$\epsilon_{mach} = 2^{-52}$$

Representação no computador

Arredondamento

- Se bit 53 for 0: descarta-se bits 53 em diante
- Se bit 53 for 1 e existir bit > 53 com valor 1: soma-se 2^{-52}, descarta-se bits 53 em diante
- Se bit 53 for 1 e bits > 53 for 0
  - Se bit 52 for 0: descarta-se bits 53 em diante
  - Se bit 52 for 1: soma-se 2^{-52}, descarta-se demais
  - Note que ao final, bit 52 fica com valor 0

Representação finita

Representação de dízimas em precisão finita

$$fl(x) \neq x$$

- onde $fl(x)$ é a representação ponto flutuante de x

Padrão IEEE garante que:

$$\frac{|fl(x) - x|}{|x|} \leq \frac{1}{2}\epsilon_{mach}$$

Exercício: $fl(0.2)$

Representação binária de 0.2:

$$
\begin{aligned}
0.2 \times 2 &= 0.4 + 0 \\
0.4 \times 2 &= 0.8 + 0 \\
0.8 \times 2 &= 0.6 + 1 \\
0.6 \times 2 &= 0.2 + 1 \\
0.2 \times 2 &= 0.4 + 0 \\
\ldots
\end{aligned}
$$

Logo: $(0.2)_{10} = (0.\overline{0011})_2 = 0.001100110011\ldots$

Notação científica: $1.1001\overline{1001} \times 2^{-3}$

Exercício: $fl(0.2)$

Arrendondamento:

- Bit 53 vale 1, com valores diferentes de 0 em seguida
  - Soma-se $2^{-52}2^{-3}$, descarta-se $(0.\overline{1001})_2 \times 2^{-52}2^{-3}$
  - Considerando $(0.\overline{1001})_2 = \frac{9}{15} = 0.6$

Sendo assim:

$$\begin{aligned} fl(0.2) &= 0.2 + 2^{-55} - \frac{9}{15} \times 2^{-55} \\ &= 0.2 + (1 - 0.6) \times 2^{-55} = 0.2 + 0.4 \times 2^{-55} > 0.2 \end{aligned}$$

Para verificar precisão, calcular:

$$\frac{|fl(0.2) - 0.2|}{|0.2|} = \frac{|0.4 \times 2^{-55}|}{|0.2|} = 2 \times 2^{-55} = \frac{1}{2} \times 2^{-53} \leq \frac{1}{2}\epsilon_{mach}$$

Série de Taylor

Série de Taylor

Teorema de Taylor

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x-x_0)^3 + \\ + \ldots + \frac{f^{[k]}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k + \underbrace{\frac{f^{[k+1]}(c)}{(k+1)!}(x-x_0)^{k+1}}_{\text{Resíduo da Série de Taylor}}$$

onde:

$$c \in [x_0, x]$$

- Se o resíduo for pequeno, tem-se uma boa aproximação
- Aproximação não considera resíduo

Série de Taylor

- Aproximação da função $\sin x$ em torno de $x_0 = 0$

$$\begin{aligned} f(x) &= \sin x &\Rightarrow\quad f(0) &= 0 \\ f'(x) &= \cos x &\Rightarrow\quad f'(0) &= 1 \\ f''(x) &= -\sin x &\Rightarrow\quad f''(0) &= 0 \\ f'''(x) &= -\cos x &\Rightarrow\quad f'''(0) &= -1 \\ f^{[4]}(x) &= \sin x &\Rightarrow\quad f^{[4]}(0) &= 0 \end{aligned}$$

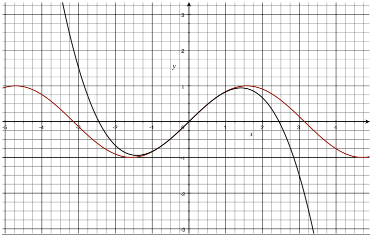
$$f(x) \approx 0 + \frac{1}{1!}x + \frac{0}{2!}x^2 + \frac{-1}{3!}x^3 + \frac{0}{4!}x^4 = x - \frac{x^3}{6}$$

- Termo residual:

$$r(x) = \frac{f^{[5]}(c)}{5!}x^5$$

$$r(x) = \frac{x^5}{120}\cos c$$

$$r(x)_{max} = \frac{x^5}{120}$$

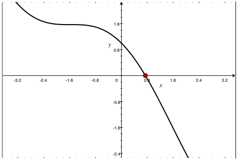


Raízes de Equações

Raízes de Equações

Problema

- Dada $f(x)$, determinar r tal que $f(r) = 0$, isto é, r seja raiz da equação $f(x) = 0$



Possíveis formas de **avaliação do erro**:

- **Avaliação regressiva** (*backward evaluation*)
  - Erro avaliado pela definição do problema (entrada)

$$|f(c)| \approx 0$$

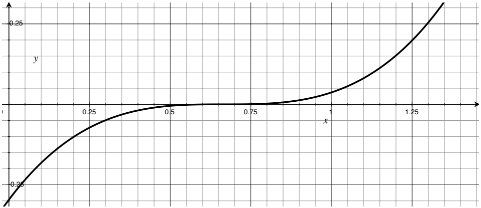
- **Avaliação progressiva** (*forward evaluation*)
  - Erro avaliado pela solução do problema (saída)

$$|r - c| \approx 0$$

Erros regressivo *vs* progressivo

Falta de precisão para avaliar o erro regressivo impede a obtenção da solução dentro da precisão desejada

Exemplo: $f(x) = x^3 - 2x^2 + \frac{4}{3}x - \frac{8}{27}$, solução $r = \frac{2}{3}$



Solução de $f(x)$ limitada a 10^{-5} de precisão, pois:

- $f(0.6666641) = 0$ na precisão *double*
- $(10^{-6})^3 = 10^{-18}$, a partir do dígito 6, não é possível de armazenar na precisão *double*

Obs: raiz tem multiplicidade 3, mas pode ocorrer com multip. 1.

Método da Bisseção

Método fechado:

- Deve-se ter um intervalo $[a, b]$ que contenha a raiz
  - Se $f(x)$ é contínua e $f(a)\,f(b) < 0$, isto é, $f(x)$ tem seu sinal invertido, então $\exists\ r \in [a, b]$
  - Pode-se realizar uma busca para achar tal intervalo.

- Possibilita avaliação do erro progressivo
  - Limite superior
- Convergência garantida
  - Método fechado: $r \in [a, b]$
- Convergência linear
  - Erro reduz à metade a cada iteração

$$erro = |c - r| < \frac{b - a}{2^{n+1}}$$

  - Onde n é o número de iterações

while $\frac{b-a}{2} > \epsilon$

  $c = \frac{a+b}{2}$

  if $f(c) \approx 0$

    break

  if $f(a)f(c) < 0$

    $b = c$

  else

    $a = c$

return $\frac{a+b}{2}$

Iteração de Ponto Fixo

Método por iteração de ponto fixo

- Transformação: $f(x) \Rightarrow g(x) - x$
  - Achar ponto fixo de $g(x)$

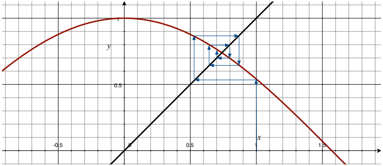
- Algoritmo
  - Dado x_0

$x = x_0$
while $|g(x) - x| > \epsilon$
$\quad x = g(x)$
return x

- Método aberto
  - parte de estimativa inicial
  - pode não convergir

Exemplo

- $f(x) = \cos x - x$
  - $g(x) = \cos x$

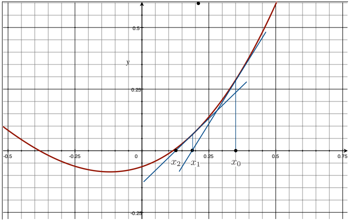


$|g'(r)| < 1 \Rightarrow$ há convergência

Método de Newton-Raphson

Método aberto

- Estimativa inicial x_0
- Assume ser possível avaliação de $f'(x)$



- Pode não convergir
  - Método aberto
- Convergência quadrática
  - Não obrigatoriamente

$$\lim_{i\to\infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = \frac{f''(c)}{2f'(x_i)}$$

Iteração de Newton-Raphson:

$$x_0 = \text{estimativa inicial}$$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i = 1, 2, 3, \ldots$$

Sistema de Equações Lineares

Sistema de Equações Lineares

$$A_{n\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_n$$

Eliminação de Gauss

- Transformar a matriz A em uma matriz triangular superior:

$$a_{ij} = 0 \quad \forall \quad i > j$$

```
X X X X X X X
0 x X X X X X
0 0 X X X X X
0 0 0 X X X X
0 0 0 0 X X X
0 0 0 0 0 X X
0 0 0 0 0 0 X
```

- Eliminar os elementos da coluna j abaixo da diagonal $(i > j)$
  - Para eliminar aij, fazemos:

$$L_i \leftarrow L_i - \frac{a_{ij}}{a_{jj}} L_j$$

$$\text{onde } L_i = a_{ik}, k = 0, 1, 2, \ldots$$

- O valor $f_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}$ é chamado **fator** da eliminação

Sistema de Equações Lineares

Retro-substituição (*back substitution*)

- Determinar x_{n-1}, x_{n-2}, ..., x_1, x_0, nesta ordem

$$a_{ii}\, x_i + \sum_{j=i+1}^{n-1} a_{ij} \underbrace{x_j}_{\text{já conhecidos, pois } j > i} = b_i$$

$$\therefore\ x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} a_{ij} x_j}{a_{ii}}$$

Custo computacional:

- Eliminação: $O(n^3)$
- Retro-substituição: $O(n^2)$
- **Total**: $O(n^3)$

Exemplo

Sistema de equações:

$$\begin{aligned} x + 2y - z &= 3 \\ 2x + y - 2z &= 3 \\ -3x + y + z &= -6 \end{aligned}$$

Forma matricial:

$$A \quad \mathbf{x} \quad = \quad \mathbf{b}$$

$$\begin{array}{cc} & \longrightarrow j \\ \begin{array}{c} \downarrow \\ i \end{array} & \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & -2 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ -6 \end{bmatrix}$$

Eliminação de Gauss

Para a coluna $j = 0$:

- Para eliminar a_{10}:
  - Fator

$$f_{10} = \frac{a_{10}}{a_{00}} = \frac{2}{1} = 2$$

  - Alterando a L_1

$$L_1 = L_1 - f_{10}L_0$$

Representação matricial compacta:

$$\left[\begin{array}{rrr|r} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 2 & 1 & -2 & 3 \\ -3 & 1 & 1 & -6 \end{array}\right] \longrightarrow \left[\begin{array}{rrr|r} 1 & 2 & -1 & 3 \\ \mathbf{0} & \mathbf{-3} & \mathbf{0} & \mathbf{-3} \\ -3 & 1 & 1 & -6 \end{array}\right]$$

Eliminação de Gauss

Para a coluna $j = 0$:

- Para eliminar a_{20}:
  - Fator

$$f_{20} = \frac{a_{20}}{a_{00}} = \frac{-3}{1} = -3$$

  - Alterando a L_2

$$L_2 = L_2 - f_{20} L_0$$

Representação matricial compacta:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 0 & -3 \\ -3 & 1 & 1 & -6 \end{array}\right] \longrightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 0 & -3 \\ \mathbf{0} & \mathbf{7} & \mathbf{-2} & \mathbf{3} \end{array}\right]$$

Eliminação de Gauss

Para a coluna $j = 1$:

- Para eliminar a_{21}:
  - Fator

$$f_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} = \frac{7}{-3} = -\frac{7}{3}$$

  - Alterando a L_2

$$L_2 = L_2 - f_{21} L_1$$

Representação matricial compacta:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 0 & -3 \\ 0 & 7 & -2 & 3 \end{array}\right] \longrightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 0 & -3 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{-2} & \mathbf{-4} \end{array}\right]$$

Retro-substituição

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -3 & 0 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ -\mathbf{4} \end{bmatrix} \qquad x_2 = \frac{-4}{-2} = 2$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ \mathbf{0} & -\mathbf{3} & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -\mathbf{3} \\ -4 \end{bmatrix} \qquad x_1 = \frac{-3 - 0}{-3} = 1$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{2} & -\mathbf{1} \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{3} \\ -3 \\ -4 \end{bmatrix} \qquad x_0 = \frac{3 - (2 - 2)}{1} = 3$$

Avaliação de erros

Avaliação do erro

- Avaliação regressiva: $\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$
- Avaliação progressiva: $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{exato}\|$

Fator de ampliação do erro

$$F_{AE} = \frac{e_{prog_{rel}}}{e_{reg_{rel}}}$$

Número de Condicionamento

- Representa o máximo fator de ampliação de erro na solução de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, para qualquer $\mathbf{b}$

$$cond(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$$

  - onde $\|A\|$ é a norma máxima de uma matriz:

$$\|A\| = \max_i \left(\sum_j |a_{ij}| \right)$$

Sistema de Equações Lineares

Pivotamento

- Objetivo: Manter $|f| \leq 1$
  - Usa como pivô maior valor absoluto da coluna
  - Evita divisão por zero

$$|a_{pj}| \geq |a_{ij}| \;\; \forall \;\; j \leq i \leq n-1$$

Exemplo sem troca de linhas: $f_{10} = 10^{20}$

$$\left[\begin{array}{cc|c} 10^{-20} & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 10^{-20} & 1 & 1 \\ 0 & 2-10^{20} & 4-10^{20} \end{array}\right] \therefore x = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Exemplo com troca de linhas: $f_{10} = 10^{-20}$

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 4 \\ 10^{-20} & 1 & 1 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 4 \\ 0 & 1-2\times 10^{-20} & 1-4\times 10^{-20} \end{array}\right] \therefore x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Fatoração LU

Sistema

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Fatoração da matriz

$$A = L\,U$$

- $U \longrightarrow$ Resultado da Eliminação de Gaus
- $L \longrightarrow$ Armazena fatores da Eliminação:

$$l_{ij} = \begin{cases} 1, \text{ se } i = j \text{ (diagonal)} \\ f_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}, \text{ se } i > j \end{cases}$$

Fatoração LU

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$L\,U\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$\begin{cases} L\mathbf{y} & = \mathbf{b} \\ U\mathbf{x} & = \mathbf{y} \end{cases}$$

- Acha-se **y** por **substituição progressiva**
- Acha-se **x** por **substituição regressiva** (retro-substituição)

Note que a fatoração de A não altera b

- Solução para diferentes b pode ser obtida em tempo $O(n^2)$
  - Mas o tempo de fatoração é $O(n^3)$
- Pivotamento registrado em **matriz de permutação**
  - Ou vetor de permutação

Fatoração LU com pivotamento

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$
$$L\,U\mathbf{x} = P\mathbf{b}$$
$$\begin{cases} L\mathbf{y} & = P\mathbf{b} \\ U\mathbf{x} & = \mathbf{y} \end{cases}$$

P representa a matriz de pivotamento

- Inicializada como identidade $P = I$.
- Durante a fatoração, uma operação de troca de linha deve ser aplicada nas matrizes L, U e P.

Fatoração LU

Fatoração *in place*

$$A \longrightarrow LU$$

$$\begin{bmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} u_{00} & u_{01} & u_{02} \\ l_{10} & u_{11} & u_{12} \\ l_{20} & l_{21} & u_{22} \end{bmatrix}$$

Interpolação de Polinômios

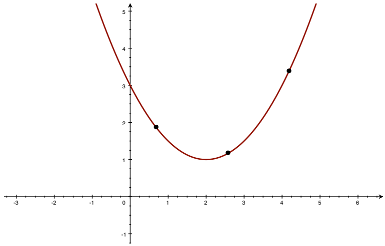
Interpolação de Polinômios

Definição

- $y = f(x)$ interpola um conjunto de pontos (x_i, y_i) se, e somente se, $y_i = f(x_i) \quad \forall \quad (x_i, y_i)$.

Exemplo

- Existe uma parábola que interpola 3 pontos não colineares



Como $f(x)$ é uma função, é necessário que x_i sejam distintos. Se forem, o polinômio $y = P(x)$ **sempre existe e é único**

Interpolação de Polinômios

Interpolação de Lagrange

- Dados n pontos $(x_0, y_0)...(x_{n-1}, y_{n-1})$, existe um polinômio interpolante de grau $n-1$ dado pela fórmula de Lagrange:

$$P_{n-1}(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + ... + y_{n-1} L_{n-1}(x)$$

  - onde $L_k(x)$ é dado por:

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0)...(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})...(x - x_{n-1})}{(x_k - x_0)...(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})...(x_k - x_{n-1})}$$

- Resulta em um polinômio de grau no máximo igual a $n-1$
- Não favorece fatoração na avaliação

Interpolação por Diferenças Divididas de Newton

Fórmula geral dos Polinômios por Diferenças Divididas de Newton

- Considerando n pontos

$$f(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + \\ + b_{n-1}(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-2})$$

onde:

$$b_0 = f[x_0]$$

$$b_1 = f[x_0\ x_1]$$

$$b_2 = f[x_0\ x_1\ x_2]$$

$$\ldots$$

$$b_{n-1} = f[x_0 \ldots x_{n-1}]$$

- $f[x_i \ldots x_j]$: diferenças divididas de Newton de x_i a x_j
- Note que o polinômio gerado favorece fatoração

Interpolação por Diferenças Divididas de Newton

Diferenças divididas

- Ordem 0:

$$f[x_k] = f(x_k)$$

- Ordem 1:

$$f[x_k\ x_{k+1}] = \frac{f[x_{k+1} - f[x_k]}{x_{k+1} - x_k}$$

- Ordem 2:

$$f[x_k\ x_{k+1}\ x_{k+2}] = \frac{f[x_{k+1}\ x_{k+2}] - f[x_{k+1}\ x_k]}{x_{k+2} - x_k}$$

- Ordem n:

$$f[x_i \dots x_j] = \frac{f[x_{i+1} \dots x_j] - f[x_i \dots x_{j-1}]}{x_j - x_i}$$

Diagrama de Diferenças Divididas de Newton

Exemplo para $n = 3$:

	Ordem 0	Ordem 1	Ordem 2
x_0	$f[x_0]$		
		$f[x_0\, x_1]$	
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0\, x_2]$
		$f[x_1\, x_2]$	
x_2	$f[x_2]$		

Interpolação de Polinômios

Por que não obter o polinômio na forma convencional?

$$f(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + \ldots + c_{n-1} x^{n-1}$$

- Não existe fórmula para determinar o polinômio nesta forma
- Solução seria resolver um sistema linear $n \times n$
  - Ineficiente computacionalmente
  - Instável numericamente
    - Sistemas tendem a ser mal condicionados para n grandes
    - Perde-se o controle do erro na determinação dos coeficientes

Interpolação de Polinômios

Erro da Interpolação

- Considere a interpolação da função $f(x)$ pelo polinômio $P(x)$
- **Teorema**

$$f(x) - P(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1})}{n!} f^{[n]}(c)$$

  - onde:

$$c \in [\min(x, x_0), \max(x, x_{n-1})]$$

- Pela fórmula, concluímos que erros no meio do intervalo tendem a ser menores
  - Termos do produtório tendem a ser menores

Espaçamento de Amostras

Teorema de Chebyshev: minimização do erro da interpolação

$$\frac{(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_{n-1})}{n!}\ f^{[n]}(c)$$

- Considerando, inicialmente, $x \in [-1, 1]$
- Objetivo: minimizar polinômio numerador

$$N(x) = (x-x_0)(x-x_1)...(x-x_{n-1})$$

$$x_i = \cos\frac{\beta\pi}{2n},\ \text{onde}\ \beta = 1, 3, ..., 2n-1$$

- Valor máximo do polinômio numerador

$$|N(x)|_{max} = \frac{1}{2^{n-1}}$$

Teorema de Chebyshev

Fórmula geral para $x \in [a, b]$

$$x_i = \frac{b-a}{2} \cos \frac{\beta\pi}{2n} + \frac{a+b}{2}, \text{ onde } \beta = 1, 3, ..., 2n-1$$

- Valor máximo do polinômio numerador

$$|N(x)|_{max} = \frac{\left(\frac{b-a}{2}\right)^n}{2^{n-1}}$$

Interpolação por partes

Splines Cúbicas

- Continuidade C^0
  - $s_i(x_i) = y_i$: já satisfeitas pelas expressões de $s_i(x)$
  - $s_i(x_{i+1}) = y_{i+1}, i = 0, ..., n-2 : n-1$ equações
- Continuidade C^1
  - $s'_{i-1}(x_i) = s'_i(x_i), i = 1, ..., n-2 : n-2$ equações
- Continuidade C^2
  - $s''_{i-1}(x_i) = s''_i(x_i), i = 1, ..., n-2 : n-2$ equações
- Spline natural
  - Impõe curvatura nula nas extremidades

$$s''_0(x_0) = 0$$
$$s''_{n-2}(x_{n-1}) = 0$$

Sistema linear (tridiagonal) formado a partir de $3n-3$ equações

- Resolução em $O(n)$

Método dos Mínimos Quadrados

Método dos Mínimos Quadrados

Sistemas lineares inconsistentes

- Número de equações é maior que o número de incógnitas
- Pode-se achar a "melhor" solução aproximada

$$A_{m\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_m, \quad n < m$$

  - Se "melhor" for menor distância Euclidiana $\Rightarrow$ **MMQ**

Método dos Mínimos Quadrados

- Equações normais

$$(A^T A)\,\bar{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$$

  - que minimiza o vetor residual $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\bar{\mathbf{x}}$

- Note que $A^T A$ é sempre simétrica

Método dos Mínimos Quadrados: Exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

$$A^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Método dos Mínimos Quadrados: Exemplo

Ficamos com o sistema linear:

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

- Solução:

$$\begin{bmatrix} \overline{x_0} \\ \overline{x_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$

Substituindo no sistema original:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{7}{4} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{10}{4} \\ \frac{4}{4} \\ \frac{10}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.5 \\ 1 \\ 2.5 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Resíduo

- Erro regressivo: MMQ minimiza este erro
  - Pela norma-2 do vetor **r**

$$\|\mathbf{r}\|_2 = \sqrt{r_0^2 + r_1^2 + \ldots r_{n-1}^2}$$

  - Pela raiz da média do erro ao quadrado
    - RMSE (*root mean squared error*)

$$RMSE = \frac{\|\mathbf{r}\|_2}{\sqrt{n}}$$

- Se o erro for nulo, encontra-se a solução do problema original
  - Uma solução existia
  - O vetor **b** estava no plano $A\mathbf{x}$

Método dos Mínimos Quadrados: Estudo de modelos

Ajustar um modelo a um conjunto de pontos

- Ao invés de ajustar um polinômio que honre todos os pontos
- Pode ajustar conjunto de pontos com erros de aquisição

Uso

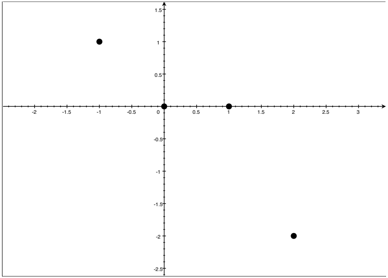
1. Definir um modelo, como $y = a + bx$
2. Forçar o ajuste do modelo a partir de um sistema $\mathrm{Ax} = \mathrm{b}$
   - Nesse caso, vetor $x = [a, b]$
3. Resolver o sistema para encontrar o vetor solução aproximado
   - Que pode ser uma solução exata

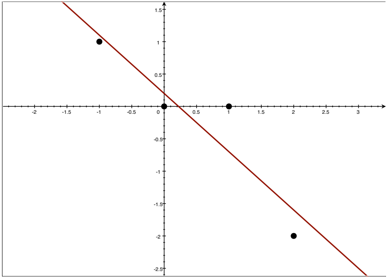
Método dos Mínimos Quadrados: Estudo de modelos

Considere os pontos $(-1,1),(0,0),(1,0),(2,-2)$

- Ajuste de uma reta: $y = a + bx$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2 \\ -0.9 \end{bmatrix}$$



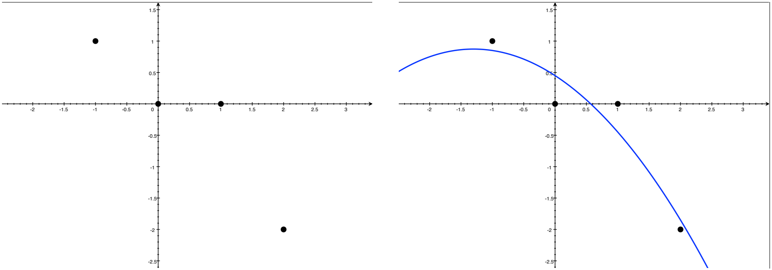


Método dos Mínimos Quadrados: Estudo de modelos

Considere os pontos $(-1,1),(0,0),(1,0),(2,-2)$

- Ajuste de uma parábola: $y = a + bx + cx^2$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.45 \\ -0.65 \\ -0.25 \end{bmatrix}$$



Método dos Mínimos Quadrados: Estudo de modelos

- Dados periódicos
  - Exemplo: variação de temperatura durante o dia
    - Washington, DC (01/01/2001)

h	t	T
0	0	-2.2
3	$1/8$	-2.8
6	$1/4$	-6.1
9	$3/8$	-3.9
12	$1/2$	-0.0
15	$5/8$	1.1
18	$3/4$	-0.6
21	$7/8$	-1.1

Modelo:

$$y = c_0 + c_1 \cos 2\pi t + c_2 \sin 2\pi t$$

Sistema inconsistente

$$\begin{bmatrix} 1 & \cos 2\pi t_0 & \sin 2\pi t_0 \\ 1 & \cos 2\pi t_1 & \sin 2\pi t_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cos 2\pi t_{n-1} & \sin 2\pi t_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_{n-1} \end{bmatrix}$$

Método dos Mínimos Quadrados: Linearização

Como usar MMQ para problemas não lineares?

- Transformar em modelo linear – **Linearização**
  - Métodologia acha resíduo mínimo da linearização
  - Métodologia não garante resíduo mínimo do problema original

---

Exemplos de modelos não lineares

- Modelo exponencial: $y = a\, e^{b\, x}$
  - Linearização: $\ln y = k + b\, x, \quad a = e^k$
- Modelo de potência simples: $y = a\, x^b$
  - Linearização: $\log y = k + b \log x, \quad a = 10^k$
- Modelo de crescimento com saturação: $y = a \frac{x}{x+b}$
  - Linearização: $\frac{1}{y} = k_1 + k_2 \frac{1}{x}, \quad a = \frac{1}{k_1}, \quad b = k_2\, a$