Secção de Matemática Aplicada e Análise Numérica
Departamento de Matemática/Instituto Superior Técnico

Matemática Computacional (LMAC) – Projeto 2

Data de Entrega: 07:59 de 11 de Abril

Instruções

Cada grupo deve entregar um relatório e os *scripts* de Matlab por e-mail para

`jvideman@math.tecnico.ulisboa.pt`.

O relatório, em pdf, não deve ultrapassar as 15 páginas e deve conter as respostas às questões e alguns exemplos do funcionamento dos programas implementados. Os grupos podem elaborar o relatório em Word ou LaTex, desde que o submetam em pdf. Se quiserem usar LaTex podem pedir um template ao professor.

1. [10 valores] Um problema de mínimos quadrados escreve-se na forma

$$\min_{x\in\mathbb{R}^N} g(x)\,, \qquad g(x) = \frac{1}{2}\,\|F(x)\|_2 = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{M} f_j^2(x)\,, \quad F(x) = (f_1(x), f_2(x), \ldots, f_M(x))\,, \tag{1}$$

onde a função $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^M$, $N < M$, é designada por função residual.

O objetivo do método dos mínimos quadrados consiste em determinar os parâmetros de uma função modelo $m, m : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, para que ela melhor se ajuste a um conjunto de dados $(t_j, y_j), j = 1, \ldots, M$, isto é, as componentes da função residual são

$$f_j(x) = m(x, t_j) - y_j, j = 1, \ldots, M\,.$$

No caso apresentado nas aulas (método dos mínimos quadrados linear), o modelo m é linear (em x) e o problema reduz-se à resolução de um sistema de equações normais. Neste trabalho, a função m é não linear em x.

Suponha que F é duas vezes continuamente diferenciável. Para que $z \in \mathbb{R}^N$ seja uma solução (um minimo) do problema (1), é necessário que $\nabla g(z) = 0$. Se, além disso, a matriz Hessiana H_g é definida positiva em z, então z é uma solução local.

a) Mostre que

$$\nabla g(x) = J_F(x)^T F(x)\,, \qquad H_g(x) = J_F(x)^T J_F(x) + S(x)\,, \tag{2}$$

onde $J_F(x) \in \mathbb{R}^{M\times N}$ é a matriz Jacobiana de F em x e H_g é a matriz Hessiana de g, com

$$S(x) = \sum_{j=1}^{M} f_j(x)\, H_{f_j}(x)\,,$$

em que H_{f_j} é a matriz Hessiana de f_j.

O método de Newton para a aproximação dos pontos estacionários de g escreve-se

Algoritmo de Newton

Escolher $x^{(0)} \in \mathbb{R}^N$. Para $k = 0, 1, \ldots$

1. Resolver o sistema linear $\Big(J_F(x^{(k)})^T J_F(x^{(k)}) + S(x^{(k)})\Big)\, p_k = -\, J_F(x^{(k)})^T F(x^{(k)})$.
2. Fazer $x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}$.

O método de Gauss–Newton é uma variante do método de Newton em que se omite o termo S da matriz Hessiana H_g.

Algoritmo de Gauss-Newton

Escolher $x^{(0)} \in \mathbb{R}^N$. Para $k = 0, 1, \ldots$

1. Resolver o sistema linear $J_F(x^{(k)})^T J_F(x^{(k)}) p^{(k)} = -\, J_F(x^{(k)})^T F(x^{(k)})$.
2. Fazer $x^{(k+1)} = x^{(k)} + p^{(k)}$.

b) Mostre que, linearizando a função F em torno de x_k e minimizando

$$\frac{1}{2}\,\|\widetilde{F}(x, x^{(k)})\|_2^2\,,$$

onde

$$\widetilde{F}(x, x^{(k)}) = F(x^{(k)}) + J_F(x^{(k)})\,(x - x^{(k)})\,,$$

obtém-se o método de Gauss-Newton.

c) Escreva um código `Matlab` que resolva o problema dos mínimos quadrados não linear (1) pelo método de Gauss-Newton e outro que resolva o problema pelo método de Newton. Os seus códigos devem receber o conjunto de pontos (t_j, y_j), a função $m(x_1, x_2, t)$, a tolerância *eps* e o número máximo de iteradas *nmax* e devolver a solução $z = (z_1, z_2)$, o número de iteradas e o valor de g em z.

Considere o conjunto de dados

$$\begin{aligned} &(t_1, y_1) = (-2.3, 0.1)\,, \quad (t_2, y_2) = (-1.2, 0.6)\,, \quad (t_3, y_3) = (0.0, 2.0)\,,\\ &(t_4, y_4) = (1.0, 5.0) \quad (t_5, y_5) = (1.3, 7.0)\,. \end{aligned} \tag{3}$$

Utilize os seus códigos `Matlab` para resolver o problema de minimização $\min_{x\in\mathbb{R}^2} g(x)$, onde

$$g(x_1, x_2) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{5}(x_1^2\, e^{t_j\, x_2} - y_j)^2\,. \tag{4}$$

Considere diferentes aproximações iniciais e utilize a tolerância $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_2 \leq eps$. Desenhe, no plano ty os pontos $(t_j, y_j), j = 1. \ldots, 5$, e o gráfico da função aproximadora $y(t) = z_1^2\, e^{t\, z_2}$, em que $z = (z_1, z_2)$ é a solução (ou soluções) que encontrou pelo método de Gauss-Newton (ou Newton).

d) Suponha que o conjunto (3) inclui um sexto ponto $(t_6, y_6) = (1.2, 55.0)$. Determine novamente a solução aproximada pelos métodos de Gauss-Newton e Newton e desenhe, no plano ty os pontos $(t_j, y_j), j = 1. \ldots, 6$, e o gráfico da função ajustadora $y(t) = z_1^2\, e^{t\, z_2}$. Comente os resultados.

2. [10 valores] O método das relaxações sucessivas (SOR – Successive Over Relaxation) é um método iterativo tipo ponto fixo para a resolução numérica de sistemas lineares $Ax = b$. Na forma matricial, o método escreve-se

$$\begin{cases} x^{(n+1)} = -(\omega L + D)^{-1}((\omega - 1)D + \omega U)\, x^{(n)} + \omega (\omega L + D)^{-1} b\,, & n = 0, 1, \ldots \\ x^{(0)} \in \mathbb{R}^N\,, \end{cases} \tag{5}$$

onde $\omega \in (0, 2)$ é um parâmetro e as matrizes L, D e U correspondem à decomposição da matriz A em matrizes estritamente triangular inferior (L), diagonal (D) e estritamente triangular superior (U) tais que $A = L + D + U$.

Note-se que o caso $\omega = 1$ corresponde ao método de Gauss-Seidel.

a) Defina uma matriz tridiagonal $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{N\times N}$ tal que

$$a_{jj} = 2\,, \quad j = 1, \ldots, N\,, \qquad a_{j,j-1} = -1\,, \quad j = 2, \ldots, N\,, \qquad a_{j+1,j} = -1\,, \quad j = 1, \ldots, N-1\,.$$

Calcule, com $N = 5, 10, 15, 20, 25, \ldots$, o número de condição associado ao raio espetral da matriz A. O condicionamento da matriz A depende do valor de N?

b) Implemente o método SOR no `Matlab`. O seu código deve receber uma matriz A, um vetor b, um valor de ω e o número máximo de iteradas *nmax* e devolver a solução aproximada após *nmax* iteradas. Utilize o seu código para aproximar a solução do sistema linear $Ax = b$, em que $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ é a matriz tridiagonal definida na alínea anterior e $b \in \mathbb{R}^N$ é um vetor, com $b_j = 1\ \forall j$. Considere $N = 5, 10, 15, 20$, $x^{(0)} = (0, 0, \ldots, 0)$, *nmax*=20 e $\omega = 0.5, 0.75, 1.25, 1.5, 1.75$. Compare as soluções aproximadas com a solução exata obtida pelo comando `linsolve`. Verifique, experimentalmente, que o método converge se e só se $\omega \in (0, 2)$. O que acontece quando $\omega = 0$ ou $\omega = 2$?

c) Determine o raio espetral da matriz de iteração

$$C(\omega) = -(\omega L + D)^{-1}((\omega - 1)D + \omega U)\,,$$

para diferentes valores de $N = 5, 10, 15, 20, \ldots$ e variando o valor de $\omega \in (0, 2)$. Existe, para N fixo, um valor ótimo para ω, isto é, um valor ω_{opt} que conduz à convergência mais rápida e, se existir, esse valor depende de N?

d) Verifique, numericamente, que o determinante da matriz de iteração $C(\omega)$ é igual a $(1-\omega)^N$. Com base neste resultado, o que pode concluir sobre a convergência do método para $\omega \notin (0, 2)$?

e) Aproxime, pelos métodos de Jacobi, Gauss-Seidel e SOR (com $\omega = \omega_{\text{opt}}$), a solução do sistema linear $Ax = b$, em que $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$, com $N = 5, 10, 15, 20$, é a matriz definida na alínea **a)** e $b_j = 1\ \forall j$. Considerando a solução obtida pelo comando `linsolve` como exata e tomando como aproximação inicial $x^{(0)} = (0, 0, \ldots, 0)$, determine, para cada método, o erro absoluto da décima iterada. Comente.