Trabalho Prático

Cálculo Numérico (SME0104)
Professora Cynthia Lage Ferreira

05 de junho de 2025

Orientações Gerais

- Esta avaliação é **individual ou em dupla** e deverá ser desenvolvida na plataforma Colab (https://colab.research.google.com/).
- Cada aluno/dupla deverá produzir um **arquivo .ipynb** contendo tanto a parte escrita (teórica) quanto a parte prática (códigos em Python) de cada um dos exercícios.
- Os arquivos deverão estar identificados da seguinte forma: **NOMEDOALUNO1+NOMEDOALUNO2.ipynb** a fim de facilitar a organização das atividades pela professora. **Enviem apenas um arquivo por dupla.**
- Os arquivos deverão ser **enviados até às 20h do dia 01/07/2025** através da plataforma e-disciplinas da USP (https://edisciplinas.usp.br/). **Os arquivos recebidos fora do prazo ou por e-mail não serão corrigidos.**
- Apenas os alunos que estiverem com a **situação regularizada no Sistema Jupiter** terão suas avaliações corrigidas.
- Todos os exercícios deverão conter justificativas teóricas e todos os códigos utilizados para resolver os problemas deverão ser apresentados, executados e minimamente comentados.
Questões com respostas sem justificativas não serão consideradas.
- Os alunos poderão apresentar um resumo teórico referente aos conteúdos de cada questão. A realização desta tarefa poderá gerar uma bonificação ao aluno, a critério da professora.
- As funções prontas do Python dos métodos estudados poderão ser utilizadas para validar os resultados obtidos, mas não as utilize como ÚNICA forma de solução dos exercícios.

1 Sistemas Lineares

Discuta, detalhadamente, as diferenças entre as funções *func1* e *func2* apresentadas abaixo. Comente os códigos, os resultados obtidos e apresente as suas conclusões a partir da aplicação destas duas funções no exemplo abaixo.

```
import numpy as np
import time

def func1( A ):

    n = A.shape[ 0 ]
    U = A.copy()
    L = np.eye( n )

    for j in range( n - 1 ):
        for i in range( j + 1, n ):
            L[ i, j ] = U[ i, j ] / U[ j, j ]
            U[ i, j : n ] = U[ i, j : n ] - L[ i, j ] * U[ j, j : n ]
    return ( L, U )


def func2( A, p ):

    n = A.shape[ 0 ]
    U = A.copy()
    L = np.eye( n )

    for j in range( n - 1 ):
        v = min( n, j + p + 1 )
        for i in range( j + 1, v ):
            L[ i, j ] = U[ i, j ] / U[ j, j ]
            U[ i, j : v ] = U[ i, j : v ] - L[ i, j ] * U[ j, j : v ]
    return ( L, U )


#Exemplo

n = 2000
p = 2
A = np.zeros( ( n, n ) )
for i in range( n ):
    for j in range( max( 0, i - p ), min( n, i + p + 1 ) ):
        A[ i, j ] = np.random.normal()


start_time = time.time()
( L, U ) = func1( A )
end_time = time.time()
print( end_time - start_time )


start_time = time.time()
( L_, U_ ) = func2( A, p )
end_time = time.time()
print( end_time - start_time )


print( np.linalg.norm( L @ U - A ) )
print( np.linalg.norm( L_ @ U_ - A ) )
```

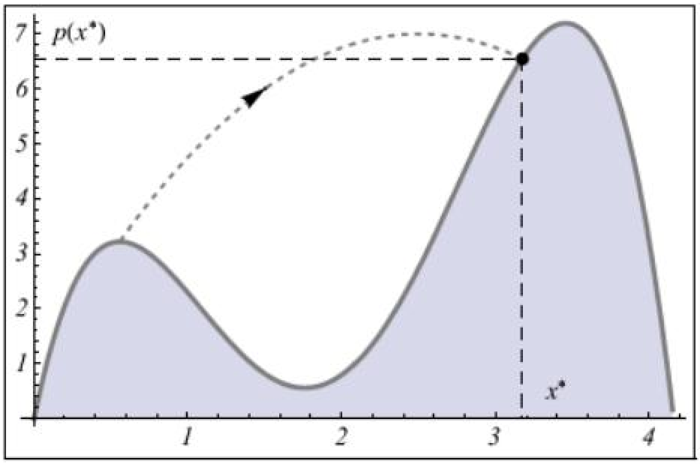
2 Zeros de funções e sistemas não lineares

A região sombreada do gráfico apresentado a seguir representa o perfil de duas elevações dado pela função $p(x) = -x^4 + 7.7x^3 – 18x^2 + 13.6x$. Um projétil é lançado a partir da menor elevação e descreve uma curva dada por $q(x) = -x^2 + 5x + 0.75$. Pede-se determinar a altura na qual ocorre o impacto com a maior elevação.

a) Formule o problema de modo que sua solução seja uma raiz de uma função não linear $f : \Re \to \Re$. Use o método da bisseção com precisão 0.001 e até 5 iterações para aproximar esta raiz e, consequentemente, a altura na qual ocorre o impacto.

b) Formule este problema de modo que sua solução seja uma raiz de função não linear $F : \Re^2 \to \Re^2$. Use o método de Newton para sistemas com precisão 0.001 para aproximar esta raiz e, consequentemente, a altura na qual ocorre o impacto.

Comente as soluções detalhadamente, apresentando os códigos utilizados, os critérios de parada e comparações entre os dois resultados.



3 Decomposição em Valores Singulares (SVD)

A decomposição SVD de uma matriz $A_{m\times n}$ tem a forma

$$A = U\Sigma V^T \tag{1}$$

em que U é uma matriz $m \times n$ ortogonal, V uma matriz também ortogonal com dimensão $n \times n$ e Σ uma matriz diagonal $m \times n$ com entradas

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{para } i \neq j \\ \sigma_i \geq 0 & \text{para } i = j \end{cases}. \tag{2}$$

Esses valores σ_i são chamados de valores singulares de A e geralmente são ordenados tais que $\sigma_{i-1} \geq \sigma_i,\ i = 2, \cdots, \min\{m, n\}$. Já as colunas de U e V são os vetores singulares a esquerda e a direta, respectivamente. Esta decomposição está diretamente ligada a algoritmos para calcular autovalores e autovetores de matrizes. Os valores singulares de A são as raízes quadradas dos autovalores de A^TA e as colunas U e V são os autovetores ortonormais de AA^T e A^TA respectivamente.

Ainda, para uma matriz simétrica $B_{n\times n}$, a decomposição QR pode ser usada para calcular **todos** os seus autovalores e autovetores usado sucessivas decomposições até que se obtenha uma matriz diagonal (ou muito próxima de uma diagonal). O processo envolvido é

1. $B_1 = B$ decompõe-se a matriz $B_1 = Q_1R_1$
2. $B_2 = R_1Q_1$ decompõe-se a matriz $B_2 = Q_2R_2$
3. $B_3 = R_2Q_2$ e então $B_3 = Q_3R_3$
4. Repete-se essas iterações até $B_k = R_{k-1}Q_{k-1}$

como trata-se de um processo iterativo, é importante escolher um bom critério de parada. Dentre os critérios mais usados, pode-se limitar o número de iterações k por um máximo de iterações k_{max}, verificar se os elementos da matriz fora da diagonal estão tão próximos de zero quanto se queira usando uma tolerância

$$\max_{i<j}\{|b_{ij}|\} < \epsilon \tag{3}$$

ou verificar se $off(B) < \epsilon$ em que

$$off(B) = \sqrt{\|B\|_F^2 - \sum_{i=1}^{n} b_{ii}^2}. \tag{4}$$

Este método é conhecido como método de Francis, ao final do processo iterativo, tem-se

$$B_k = V^T B V \tag{5}$$

em que $V = Q_1 Q_2 \cdots Q_{k-1}$, ou seja, B e B_k são matrizes semelhantes e possuem os mesmos autovalores. Além disso, B_k, como dito anteriormente, converge para uma matriz diagonal, ou seja, os elementos da diagonal de B_k fornecem uma aproximação para os autovalores de B e as colunas das matriz $V = Q_1 Q_2 \cdots Q_{k-1}$ são aproximações dos respectivos autovetores. O método de Francis pode ser usado para obter a decomposição SVD de uma matriz *qualquer* $A_{m\times n}$ ao ser aplicado nas matrizes simétricas AA^T e $A^T A$, uma vez que

- $AA^T = (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U\Sigma(V^T V)\Sigma U^T = U\Sigma^2 U^T$ e
- $A^T A = (U\Sigma V^T)^T(U\Sigma V^T) = V\Sigma(U^T U)\Sigma V^T = V\Sigma^2 V^T$.

a) Escreva um código implementando o método de Francis usando a função *numpy.linalg.qr* para obter as decomposições QR necessárias.

b) Usando a rotina implementada para o método de Francis, escreva um código que retorne a decomposição SVD de uma matriz qualquer $A_{m\times n}$. *Dica: use o método de Francis apenas uma vez em AA^T ou em $A^T A$ e obtenha a matriz faltante a partir da expressão da decomposição SVD de A.*

c) Podemos armazenar uma imagem em uma matriz $A_{m\times n}$. Toda imagem consiste em um conjunto de pixels que são os blocos de construção dessa imagem. Cada pixel representa a cor ou a intensidade da luz em um local específico na imagem. Em uma imagem em escala de cinza em formato PNG, cada pixel tem um valor entre 0 e 1, em que 0 corresponde ao preto e 1 corresponde ao branco. Assim, uma imagem em escala de cinza com $m \times n$ pixels pode ser armazenada em uma matriz $m \times n$ com valores entre 0 e 1. Use a função *imread()* da biblioteca Matplotlib do Python para carregar a imagem *cat.png* em escala de cinza. Depois, use as decomposições SVD *numpy.linalg.svd* e a implementada no ítem 2) para comprimir a imagem, representando-a por k ($k < \min\{m, n\}$) valores singulares, isto é, troque a matriz A por $A_k = U[:, :k] * \Sigma[:k, :k] * V^T[:k, :]$. Plote a imagem original e a imagem 50% e 70% comprimida e compare os resultados. Para tal, use a função *imshow()*, também da biblioteca Matplotlib. *Observação: para este exercício, utilize a imagem cat.png anexa.*

4 Interpolação

Para a função

$$f(t) = \frac{1}{1 + 25t^2} \tag{6}$$

no intervalo $[-1, 1]$ faça:

a) Implemente as interpolações de Lagrange e de Newton.

b) Usando 11 pontos igualmente espaçados dentro do intervalo dado, calcule as interpolações de Lagrange e Newton com o código implementado no item anterior. Mostre os resultados em dois gráficos separados. Que resultado teórico justifica o fato das duas soluções serem iguais?

c) Repita o processo com 21 pontos. O que acontece? Exiba o gráfico das soluções comparando com a exata.

d) Usando a função **scipy.interpolate.interp1d** calcule a interpolação usando *spline* linear e cúbica, considerando 21 pontos igualmente espaçados. Exiba os gráficos e comente as diferenças das soluções deste item para os anteriores.

e) Repita os itens b) e c) com nós de Chebyshev. Comente os resultados obtidos. Por que este resultado é melhor do que os resultados obtidos nos ítens b) e c) ?

5 Mínimos Quadrados

Vamos supor que os casos acumulados de Covid-19, no período inicial da pandemia, de 26 de fevereiro de 2020 a 18 de junho de 2020 são dados em *casosacumuladosbrasilatuaizado.txt*. O objetivo deste exercício é estudar o ajuste dos dados, no sentido dos mínimos quadrados, a uma função $g(x) = ab^x$, com $a, b \in \mathbb{R}$ e a função polinomial $P_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + ... + a_mx^m$, para $m = 4, 5, 6$ com $a_i \in \mathbb{R}$. Vamos utilizar os códigos implementados em aula:

```
import numpy as np

def mmq(x,y,k):

    X = np.vander(x,k)
    A = np.transpose(X).dot(X)
    b = np.transpose(X).dot(y)
    a = np.linalg.solve(A,b)
    return a


def mmq_QR(x,y,k):

    X = np.vander(x,k)
    (Q,R) = np.linalg.qr(X)
    b = np.transpose(Q).dot(y)
    a = np.linalg.solve(R,b)
    return a
```

a) Explique cada um dos códigos dados acima. O que está sendo calculado ?

b) Aproxime, no sentido dos mínimos quadrados, os dados do período completo, de 26 de fevereiro de 2020 a 18 de junho de 2020, por uma função $g(x) = ab^x$, com $a, b \in \mathbb{R}$. Use um dos códigos dados acima.

c) Aproxime, no sentido dos mínimos quadrados, os dados do período completo, de 26 de fevereiro de 2020 a 18 de junho de 2020, por uma função polinomial $P_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + ... + a_mx^m$, para $m = 4, 5, 6$ com $a_i \in \mathbb{R}$. Use um dos códigos dados acima.

d) Calcule o erro de truncamento dos ítens b) e c) e compare os resultados.

e) Repita os ítens b), c) e d) usando apenas os 20 primeiros dias.

f) Repita os ítens b), c) e d) usando apenas os 50 últimos dias.

g) Compare os resultados obtidos. Que tipo de informação os dados nos fornecem ?