ANÁLISE NUMÉRICA I

1º Semestre de 2020 MS512A

Profa.: Sandra Augusta Santos sala IM111

Segundo Projeto:

Comparação de diferentes abordagens para o problema de quadrados mínimos lineares

(Data de entrega: 08 de junho)

Instruções. O projeto será desenvolvido em equipes com no mínimo 3 e no máximo 4 alunos. O relatório a ser entregue deve conter: uma breve *Introdução*; o *Desenvolvimento*, com as resoluções comentadas dos itens deste roteiro; uma breve *Conclusão* (explicitando principais descobertas e dificuldades enfrentadas), e as *Referências* (bibliográficas e webgráficas) consultadas, nos moldes de um trabalho científico. Os códigos das implementações desenvolvidas devem ser apresentados em um *Apêndice*, e também encaminhados junto com o texto do relatório.

Parte I. Comparando diferentes abordagens. Este item foi adaptado da proposta original do livro de Thomas S. Shores. Tem por objetivo testar a qualidade da solução obtida por diferentes métodos para resolver o **problema de quadrados mínimos (QM) lineares**, dado por

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\right\|_2^2, \tag{1}$$

em que $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ e $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^m$.

Os métodos a serem investigados (cf. Watkins) para resolver o problema (1) serão:

(a) Solução das **equações normais** via **fatoração de Cholesky**;

(b) Solução via **fatoração QR condensada**, obtida pelo **processo de Gram-Schmidt modificado**;

(c) Solução via **fatoração QR completa** usando **transformações de Householder**.

A investigação será feita com base no seguinte roteiro:

- Problema teste. Visando aproximar a curva $f(x)=\exp(\operatorname{sen}(6x))$ no intervalo $[0,1]$ por um polinômio de grau 10, considere como dados de entrada os valores computados para $f(x)$ nos pontos igualmente espaçados $x_k=kh$, $k=0,1,\ldots,20$ (logo, $h=0.05$). Dessa forma, haverá 21 equações lineares:

$$f(x_k)=c_0+c_1x_k+c_2x_k^2\cdots+c_{10}x_k^{10}, \quad k=0,1,\ldots,20,$$

em que as 11 incógnitas serão os coeficientes $c_0,c_1,\ldots,c_{10}$ do polinômio aproximador. A matriz dos coeficientes desse problema é conhecida como *matriz de Vandermonde*, e os sistemas algébricos matriciais (SAM) como `Matlab`, `Octave` ou `Scylab` possuem comandos pré-programados para construção automática de tais matrizes.

- Procedimento. Trabalhando com o SAM de sua preferência (`Matlab`, `Octave`, `Scylab`, etc.), prepare a matriz $\boldsymbol{A}$ e o vetor $\boldsymbol{b}$ que define o lado direito, os quais constituem os dados para o problema (1). Como a fatoração de Cholesky faz parte da biblioteca de qualquer SAM, o método (a) é facilmente implementado com um conjunto simples de comandos (*script*). Já o método (b) demandará a programação efetiva do algoritmo estudado, veja, por exemplo, Watkins. Por outro lado, a rotina que efetua a fatoração QR dos SAM, é em geral baseada em transformações de Householder[1], de modo que a implementação do método (c) também necessitará apenas de um *script* simples. Os *scripts* que geram os dados do problema, bem como os que computam as soluções para os métodos (a), (b) e (c) devem ser apresentados no *Apêndice* do relatório, e o código-fonte completo deve ser encaminhado junto com o relatório.

- Análise e discussão. Uma vez que as equações normais tenham sido resolvidas pelos três métodos, construa uma tabela com os coeficientes computados:

	método (a)	método (b)	método (c)
c_0			
c_1			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
c_{10}			

  Prepare gráficos comparativos para as diferenças entre os valores da função $f(x)$ e do polinômio aproximador obtido em cada caso, no intervalo $[0,1]$. Calcule o número de condição κ_2 da matriz A^TA, bem como das matrizes triangulares obtidas em cada um dos métodos. Para determinar o número de condição, uma possibilidade é computar a *decomposição em valores singulares* (SVD) de cada uma das matrizes envolvidas, usando os comandos pré-definidos do SAM escolhido, de modo a ter em mãos ferramentas valiosas para as análises[2]. Com base em todos esses elementos, analise e discuta os resultados obtidos, tanto no que se refere à estabilidade e à precisão dos cálculos efetuados, quanto em termos do custo computacional demandado.

Parte II. Algo mais. Pesquise e apresente uma situação problema modelada segundo QM lineares. Resolva com o método que considerar mais adequado dentre os três investigados na Parte I, justificando sua escolha. Analise a solução encontrada e discuta seus resultados.

Referências

- T. S. Shores, *Applied Linear Algebra and Matrix Analysis*, New York: Springer, 2007.

- D. S. Watkins, *Fundamentals of Matrix Computations*, New Jersey: John Wiley & Sons, 2 ed., 2002.

[1] Certifique-se deste fato consultando a documentação do SAM escolhido.
[2] Nesse sentido, a solução do problema (1) via SVD pode ser uma referência interessante.