Trabalho Prático 2 Cálculo Numérico - SME0104

Cynthia de Oliveira Lage Ferreira

2023

Orientações Gerais

- Esta avaliação é **individual** e deverá ser desenvolvida na plataforma Colab (https://colab.research.google.com/).
- Cada aluno deverá produzir um arquivo .ipynb contendo a solução dos exercícios.
- Os arquivos deverão estar identificados da seguinte forma: **NOMEDOALUNO-NoUSP-TURMA.ipynb** a fim de facilitar a organização das atividades pela professora.
- Os arquivos deverão ser enviados até às 20h do dia 08/07 através da plataforma e-disciplinas da USP (https://edisciplinas.usp.br/) respeitando o prazo. Os arquivos recebidos por e-mail não serão corrigidos.
- Apenas os alunos que estiverem com a situação regularizada no Sistema Jupiter terão suas avaliações corrigidas.
- Todos os códigos utilizados para resolver os problemas deverão ser apresentados, executados e minimamente comentados. Questões com respostas sem justificativas não serão consideradas.
- 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.

BOM TRABALHO!

1 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

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{para } i \neq j \\ \sigma_i \ge 0 & \text{para } i = j \end{cases}$$
 (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 $B_1 = Q_1 R_1$
- 2. $B_2 = R_1 Q_1$ decompõe-se a matriz $B_2 = Q_2 R_2$
- 3. $B_3 = R_2 Q_2$ e então $B_3 = Q_3 R_3$
- 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 $of f(B) < \epsilon$ em que

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

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

$$B_k = V^T B V (5)$$

em que $V=Q_1Q_2\cdots Q_{k-1}$, 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 $V=Q_1Q_2\cdots Q_{k-1}$ 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^TA , uma vez que

- $AA^T = (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U\Sigma (V^TV)\Sigma U^T = U\Sigma^2 U^T$ 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 $A_{m \times n}$.

2 Interpolação

Para a função

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

no intervalo [-1,1] faça:

- a) Implemente a interpolação 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.
- 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. 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.

3 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 casosacumulados brasilatuaizado.txt. O objetivo deste exercício é estudar o ajuste dos dados, no sentido dos mínimos quadrados, a uma função $g(x) = ab^x$, com $a, b \in \mathbb{R}$. 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 mmqQR(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) Repita o ítem b) usando apenas os 20 primeiros dias.
 - d) Repita o ítem b) usando apenas os 50 últimos dias.
 - e) Compare os ítens b), c) e d). Que tipo de informação os dados nos fornecem?