

Illum Escola de Ciência

Notas de Matemática: Álgebra Linear Computacional

Prof. Dr. Vinícius Francisco Wasques

15 de dezembro de 2022, Campinas

Sumário

1	Resolução de Sistemas Lineares via Matrizes	2
1.1	Motivação	2
1.2	Eliminação Gaussiana	3
1.2.1	Eliminação Gaussiana com pivoteamento	7
1.3	Decomposição LU	9
1.3.1	Decomposição LU com pivoteamento parcial	12
1.4	Fatoração Cholesky	13
1.5	Decomposição em Valores Singulares (SVD)	15
2	Interpoladores	19
2.1	Interpoladores polinomiais	19
2.2	Interpolador de Lagrange	23
2.3	Fenômeno de Runge	25
3	Método dos Quadrados Mínimos	28
3.1	Quadrados mínimos caso discreto	28

Introdução

Este texto traz um breve resumo do conteúdo de **Álgebra Linear Computacional** estudado pela turma 22 da Ilum Escola de Ciência. Os tópicos abordados aqui corresponderão a uma complementação do curso visto no primeiro semestre de Álgebra Linear. O foco é explorar alguns recursos computacionais envolvendo equações matriciais.

Inicialmente esse material servirá como guia e também um resumo do conteúdo já visto pelos alunos. Os exemplos e exercícios propostos aqui são em sua maioria os mesmos discutidos em sala de aula.

O texto ficará disponível na plataforma [Moodle](#), na aba Material da disciplina **Álgebra Linear Computacional**. Este material será atualizado à medida que o curso for avançando.

Bibliografias principais: [Ruggiero and Lopes \(2000\)](#); [Watkins \(2010\)](#); [Anton, Rorres and Doering \(2012\)](#).

Capítulo 1

Resolução de Sistemas Lineares via Matrizes

1.1 Motivação

Muitos problemas práticos recaem sobre um sistema de equações lineares

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \quad (1.1)$$

O sistema linear (1.1) pode ser escrito na seguinte forma:

$$Ax = b, \quad (1.2)$$

em que

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

Existem várias técnicas para se obter a solução x da equação matricial (1.2). Por exemplo, se A for uma matriz quadrada cujo determinante é diferente de zero (**Pergunta:** o que aconteceria se o determinante de A fosse igual a zero?), então poderia ser aplicada a inversa da matriz A em ambos os lados da equação (1.2), obtendo:

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ \Rightarrow A^{-1}Ax &= A^{-1}b \\ \Rightarrow Ix &= A^{-1}b \\ \Rightarrow x &= A^{-1}b \end{aligned}$$

em que I é a matriz identidade.

Apesar de essa ser uma forma imediata de se obter a solução x , o processo de obtenção da inversa de uma matriz é computacionalmente custoso. Isso significa que para matrizes de ordem muito grandes, o processo exibido acima não é um bom caminho. Lembrando que não existe uma única forma de se obter a inversa de uma matriz de A . Por exemplo, podemos obter A^{-1} fazendo:

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \text{adj}(A), \quad (1.3)$$

em que $\text{adj}(A)$ representa a matriz adjunta de A (transposta da matriz de cofatores).

Sendo assim, se faz necessário utilizar outras técnicas para determinar a solução x . Uma delas é através de decomposição de matrizes. A ideia é decompor a matriz original A em outras matrizes, de tal forma que o sistema obtido seja mais simples de se resolver.

Aqui focaremos nas principais técnicas utilizadas na literatura.

Exercício 1.1.1 (Identificação dos gêneros musicais mais escutados pelos alunos e alunas da Ilum) Se reúna em um grupo de n alunos e escolham n gêneros musicais dos quais se identificam. Preencha a tabela abaixo informando um valor no intervalo $[0, 1]$, em que 0 representa não identificação e 1 representa total identificação.

	Estudante 1	Estudante 2	...	Estudante n
Gênero 1				
Gênero 2				
⋮				
Gênero n				

Agora procure na lista das músicas mais tocadas no Brasil, e para cada gênero, atribua sua colocação ponderando os valores de 0 a 1 (a primeira colocação assume o valor 1).

A partir dessas informações, construa no Octave a matriz associada a tabela que foi preenchida. Em seguida, construa um vetor b associado às classificações dos gêneros mais escutados no Brasil.

a) Utilizando o Octave, resolva o sistema linear associado ao problema acima.

b) O que representa a solução do sistema linear obtido?

1.2 Eliminação Gaussiana

Encerramos a seção anterior com um exercício que coloca em prática a ideia de resolver um sistema linear por meio da obtenção da inversa de uma matriz. No entanto, vamos analisar alguns pontos do problema apresentado. Digamos que três estudantes tenham escolhido os gêneros sertanejo, pop e funk e atribuído a seguinte identificação:

	Estudante 1	Estudante 2	Estudante 3
Sertanejo	0.1	1	0
Pop	0	1	0
Funk	0.25	1	0.01

O determinante da matriz associada a tabela acima é igual a $\det(A) = 0.001$. Como o determinante de A é diferente de 0, existe a inversa dessa matriz, e portanto, podemos utilizar o recurso visto na seção

anterior para resolver o problema. No entanto, no sentido computacional, valores de determinantes próximos de 0 podem acarretar em problemas computacionais, já que a matriz é próxima de uma matriz *singular*, isto é, uma matriz cujo determinante é 0. Mas a leitora deve estar se perguntando, qual o problema do determinante de uma matriz ser 0? Bom, se o determinante de A for igual a 0, então não é possível calcular a fórmula (1.3), e assim, a inversa da matriz não existe. Logo, o processo indicado no item anterior não pode ser operado.

É importante observar que em sistemas lineares, se o determinante da matriz associada possui determinante igual a 0, então chegamos a duas situações: 1) o sistema não possui solução; 2) o sistema possui infinitas soluções. No primeiro caso não há o que fazer, mas no segundo podemos analisar quais delas se adequam melhor ao problema que estamos procurando. Veja também que o **Exercício 1.1.1** pode facilmente fornecer uma coluna (ou linha) só de zeros, acarretando em uma determinante igual a 0. Neste caso, poderíamos utilizar outros meios para trabalhar com este problema. Por exemplo, utilizando a técnica de *Eliminação Gaussiana*.

Considere o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 0 \\ -x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases} \quad (1.4)$$

Para obter os valores de x_1 , x_2 e x_3 podemos realizar o seguinte processo:

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 0 \\ -x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases} \xrightarrow{\substack{\text{Multiplicando a primeira equação por } \frac{1}{2} \\ \text{e fazendo a segunda equação menos a primeira}}} \begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 0x_1 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 = -\frac{1}{2} \\ -x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases}$$

Similarmente poderíamos simplificar a terceira equação, da seguinte forma:

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ -\frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 = -\frac{1}{2} \\ -x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases} \xrightarrow{\substack{\text{Multiplicando a primeira equação por } -\frac{1}{4} \\ \text{e fazendo a terceira equação menos a primeira}}} \begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ -\frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 = -\frac{1}{2} \\ 0x_1 + \frac{15}{4}x_2 + \frac{15}{4}x_3 = \frac{9}{4} \end{cases}$$

Veja que agora apenas a primeira equação possui três variáveis, enquanto que as outras duas equações possuem duas variáveis. Seguindo com o processo em relação a segunda e a terceira equações, obtemos:

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ -\frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 = -\frac{1}{2} \\ \frac{15}{4}x_2 + \frac{15}{4}x_3 = \frac{9}{4} \end{cases} \xrightarrow{\substack{\text{Multiplicando a segunda equação por } -\frac{15}{2} \\ \text{e fazendo a terceira equação menos a segunda}}} \begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ -\frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 = -\frac{1}{2} \\ 0x_2 + 15x_3 = -\frac{3}{2} \end{cases},$$

resultando no seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ -\frac{1}{2}x_2 + \frac{3}{2}x_3 = -\frac{1}{2} \\ 15x_3 = -\frac{3}{2} \end{cases}.$$

O sistema linear obtido deste processo está em uma forma que chamamos de *escalonado* e a matriz associada a este novo sistema (veja abaixo) é chamada de *matriz triangular superior*.

$$\begin{pmatrix} 4 & 3 & -1 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ 0 & 0 & 15 \end{pmatrix}$$

Perceba que para obter a solução do sistema nessa forma é muito mais simples do que o original, uma vez que para obter x_3 basta computar $-\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{15} = -\frac{1}{10} = -0.1$. Substituindo na segunda equação, podemos obter a variável x_2 que é igual a 0.7, e por fim, seguindo o mesmo processo, obtemos $x_1 = -0.3$.

O processo ilustrado acima é conhecido como *Eliminação Gaussiana* (sem pivoteamento). Computacionalmente falando, este processo realiza menos operações do que na obtenção da inversa da matriz A .

De um modo geral, dado um sistema linear, por exemplo como o abaixo,

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases}, \quad (1.5)$$

para escaloná-lo é preciso realizar os passos:

Passo 1:

$$L_2^{(1)} \leftarrow L_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}L_1$$

$$b_2^{(1)} \leftarrow b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}b_1$$

$$L_3^{(1)} \leftarrow L_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}}L_1$$

$$b_3^{(1)} \leftarrow b_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}}b_1$$

em que $L_i^{(j)}$ significa a linha i após a etapa j de escalonamento e $b_i^{(j)}$ significa o coeficiente independente da linha i após a etapa j do escalonamento. Esse processo produz o sistema linear equivalente:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 = b_1^{(1)} \\ 0x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 = b_2^{(1)} \\ 0x_1 + a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 = b_3^{(1)} \end{cases},$$

Passo 2:

$$L_3^{(2)} \leftarrow L_3^{(1)} - \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}L_2^{(1)}$$

$$b_3^{(2)} \leftarrow b_3^{(1)} - \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}b_2^{(1)}$$

produzindo

$$\begin{cases} a_{11}^{(2)} x_1 + a_{12}^{(2)} x_2 + a_{13}^{(2)} x_3 = b_1^{(2)} \\ 0x_1 + a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 = b_2^{(2)} \\ 0x_1 + 0x_2 + a_{33}^{(2)} x_3 = b_3^{(2)} \end{cases} .$$

Passo 3: Por fim, a solução é obtida fazendo:

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{b_3^{(2)}}{a_{33}^{(2)}} \\ x_2 &= \frac{(b_2^{(2)} - a_{23}^{(2)} x_3)}{a_{22}^{(2)}} \\ x_1 &= \frac{(b_1^{(2)} - a_{12}^{(2)} x_2 - a_{13}^{(2)} x_3)}{a_{11}^{(2)}} \end{aligned}$$

A eliminação Gaussiana pode ser resumida por meio do seguinte algoritmo:

Algorithm 1: Eliminação Gaussiana (sem pivoteamento)

Input: Coeficientes da matriz $A_{n \times n}$ e do vetor $b_{n \times 1}$, associados ao problema $Ax = b$.

Assume-se que o pivô $a_{kk} \neq 0$, para cada etapa k ;

```

for  $k=1, \dots, n-1$  do
  for  $i=k+1, \dots, n$  do
     $m = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$ 
     $b_i = b_i - mb_k$ 
     $a_{ik} = 0$ 
    for  $j=k+1, \dots, n$  do
       $a_{ij} = a_{ij} - ma_{kj}$ 
    end
  end

```

end

Output:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

```

for  $k=(n-1), \dots, 1$  do

```

```

   $s = 0$ 

```

```

  for  $j=(k+1), \dots, n$  do

```

```

     $s = s + a_{kj} x_j$ 

```

```

     $x_k = \frac{(b_k - s)}{a_{kk}}$ 

```

```

  end

```

```

end

```

Observação 1.2.1

1. É importante ressaltar que as operações efetuadas no processo da Eliminação Gaussiana, isto é, multiplicar equações por valores não nulos e somá-los ou subtraí-los não interfere no resultado final do problema.
2. O algoritmo descrito em **Algorithm 1** efetua $\frac{4n^3 + 9n^2 - 7n}{6}$ operações, em que n é a dimensão da matriz A . Isso significa que o custo computacional deste método é de ordem n^3 (notação: $\mathcal{O}(n^3)$). Enquanto que o método direto de obtenção da solução por meio da inversa requer um ¹custo computacional de ordem n^4 (notação: $\mathcal{O}(n^4)$). Isso significa que o método de eliminação Gaussiana é menos custoso que o método da matriz inversa.

¹Custo computacional é o número de operações que o computador precisa realizar para concluir o algoritmo.

1.2.1 Eliminação Gaussiana com pivoteamento

Na seção anterior apresentamos um método que transforma o sistema linear original em um outro que tem um formato triangular (superior). Perceba que no **Algorithm 1** existe uma condição para que o método possa funcionar. Vejamos um exemplo que ilustra essa condição.

Considere o sistema linear

$$\begin{cases} x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_1 + 6x_2 + x_3 = 0 \\ -x_1 + x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases} \quad (1.6)$$

Pelo processo de Eliminação Gaussiana, temos:

$$\begin{cases} x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_1 + 6x_2 + x_3 = 0 \\ -x_1 + x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases} \xrightarrow{\substack{\text{Multiplicando a primeira equação por 2} \\ \text{e fazendo a segunda equação menos a primeira}}} \begin{cases} x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 0x_1 + 0x_2 + 3x_3 = -2 \\ -x_1 + x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 0x_1 + 0x_2 + 3x_3 = -2 \\ -x_1 + x_2 + 4x_3 = 2 \end{cases} \xrightarrow{\substack{\text{Multiplicando a primeira equação por -1} \\ \text{e fazendo a terceira equação menos a primeira}}} \begin{cases} x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 0x_1 + 0x_2 + 3x_3 = -2 \\ 0x_1 + 4x_2 + 3x_3 = 3 \end{cases} \quad (1.7)$$

Se continuássemos com o processo da Eliminação Gaussiana, então o algoritmo calcularia

$$m = \frac{a_{32}}{a_{22}} = \frac{4}{0},$$

resultando em um erro computacional. Agora, note que o sistema linear (1.7) está quase na forma escalonada. Trocando a segunda linha com a terceira, obtemos:

$$\begin{cases} x_1 + 3x_2 - x_3 = 1 \\ 0x_1 + 4x_2 + 3x_3 = 3 \\ 0x_1 + 0x_2 + 3x_3 = -2 \end{cases} \quad (1.8)$$

Desse modo, a simples troca entre linhas do sistema linear evita um erro computacional. Pode ser que a troca das linhas do sistema linear não resulte diretamente no sistema escalonado, mas o algoritmo fornecido em **Algorithm 1** poderá ser computado. Portanto, um algoritmo mais completo é formado pela combinação da Eliminação Gaussiana com a troca das linhas do sistema linear. Esse método é chamado de *Eliminação Gaussiana com Pivoteamento*.

A estratégia de pivoteamento consiste em escolher o maior pivô (em módulo), em cada etapa k , e se for necessário, realizar as devidas trocas das linhas. Existem dois tipos de pivoteamentos, o parcial e o completo. Aqui focaremos apenas no parcial, já que o completo acarreta em um esforço computacional maior.

Observação 1.2.2 O método de Eliminação Gaussiana com pivoteamento evita a divisão por zero. Além disso, o **Algorithm 2** também evita a divisão por números próximos de zero. Isso é tão importante quanto

o problema da divisão por zero, pois a divisão por um pivô próximo de zero pode acarretar em resultados imprecisos, uma vez que cálculos computacionais são efetuados com uma precisão finita. Para mais detalhes sobre essa discussão, a leitora pode consultar *Ruggiero and Lopes (2000)*.

Algorithm 2: Eliminação Gaussiana (com pivoteamento parcial)

Input: Coeficientes da matriz $A_{n \times n}$ e do vetor $b_{n \times 1}$, associados ao problema $Ax = b$;

for $k=1, \dots, n-1$ **do**

Pivoteamento parcial:

pivo = a_{kk}

indice_pivo = k

for $i=k+1, \dots, n$ **do**

if $|a_{ik}| > \text{pivo}$ **then**

 pivo = a_{ik}

 indice_pivo = i

end

if pivo=0 **then**

 Parar. A matriz é singular

end

if indice_pivo $\neq k$ **then**

for $j=1, \dots, n$ **do**

 troca = a_{kj}

$a_{kj} = a_{\text{indice_pivo } j}$

$a_{\text{indice_pivo } j} = \text{troca}$

end

 troca = b_k

$b_k = b_{\text{indice_pivo}}$

$b_{\text{indice_pivo}} = \text{troca}$

end

end

Eliminação Gaussiana:

for $i=k+1, \dots, n$ **do**

$m = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$

$b_i = b_i - mb_k$

$a_{ik} = 0$

for $j=k+1, \dots, n$ **do**

$a_{ij} = a_{ij} - ma_{kj}$

end

end

Output:

$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$

for $k=(n-1), \dots, 1$ **do**

$s = 0$

for $j=(k+1), \dots, n$ **do**

$s = s + a_{kj}x_j$

$x_k = \frac{(b_k - s)}{a_{kk}}$

end

end

end

Exercício 1.2.1 Utilize seu programa de Eliminação Gaussiana sem pivoteamento e constate que o sistema linear (1.6) não poderá ser resolvido. Agora teste o novo programa de Eliminação Gaussiana com pivotea-

mento. Qual foi o resultado obtido?

Exercício 1.2.2 *Discuta sobre as vantagens do método de Eliminação Gaussiana com ou sem pivotamento.*

1.3 Decomposição LU

A partir do cálculo da Eliminação Gaussiana podemos construir uma nova decomposição chamada de *Decomposição LU*. Essa decomposição consiste em transformar um sistema linear $Ax = b$ em um outro na forma $LUx = b$. Em outras palavras, a matriz de coeficientes A é transformada em um produto de duas matrizes LU , em que L é uma matriz triangular inferior e U é uma matriz triangular superior².

O objetivo desse método é resolver uma sequência de sistemas lineares que são mais simples de se resolver do que a original. Desse modo, tendo em mãos os valores de b e das matrizes L e U , o problema se resume a:

$$Ax = b \quad \xrightarrow[\text{e chamando } Ux = y, \text{ temos:}]{\text{Decompondo } A \text{ em } LU} \quad \begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

A vantagem desse tipo de processo é que podemos resolver qualquer sistema linear que tenha A como matriz dos coeficientes, e se for vetor b for alterado, então a resolução do novo sistema é obtido praticamente de forma imediata.

Podemos construir as matrizes L e U utilizando algumas fórmulas. No entanto, como já trabalhamos com o algoritmo da Eliminação Gaussiana, vamos produzir essas matrizes aproveitando as construções anteriores.

Dado um sistema linear

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases}, \quad (1.9)$$

vimos que no processo de eliminação Gaussiana é preciso calcular os multiplicadores $m_{21} = \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$ e $m_{31} = \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$. Em seguida, multiplicamos esses valores pelas linhas correspondentes e subtraímos da primeira equação. Dessa forma, armazenamos esse primeiro passo em forma de matriz, como a que segue abaixo:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -m_{21} \\ -m_{31} \end{pmatrix}$$

Por outro lado, após realizada essa etapa, o sistema linear resulta em

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 = b_1^{(1)} \\ 0x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 = b_2^{(1)} \\ 0x_1 + a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 = b_3^{(1)} \end{cases}. \quad (1.10)$$

²Uma matriz é chamada de triangular inferior se todos os elementos acima da diagonal principal são iguais a zero. Por outro lado, uma matriz triangular superior é uma matriz cujos elementos abaixo da diagonal principal são iguais a zero.

Isto é, a primeira coluna da matriz resultante é escrita por:

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Continuando o processo de eliminação (e supondo que $a_{22}^{(1)} \neq 0$), o novo multiplicador é dado por $m_{32} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$. Logo, armazenando esse segundo passo em forma de matriz, temos que:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -m_{32} \end{pmatrix}.$$

Por consequência, o sistema linear fica:

$$\begin{cases} a_{11}^{(2)}x_1 + a_{12}^{(2)}x_2 + a_{13}^{(2)}x_3 = b_1^{(2)} \\ 0x_1 + a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 = b_2^{(2)} \\ 0x_1 + 0x_2 + a_{33}^{(2)}x_3 = b_3^{(2)} \end{cases} \quad (1.11)$$

Isto é, a segunda e a terceira coluna da matriz resultante são escritas respectivamente por

$$\begin{pmatrix} a_{12}^{(2)} \\ a_{22}^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} a_{13}^{(2)} \\ a_{23}^{(2)} \\ a_{33}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Como o sistema linear (1.11) já se encontra escalonado, então não há necessidade de calcular o multiplicador m_{ij} . Nesse caso, a última coluna desse processo é descrita por

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Juntando todo esse processo, obtemos as seguintes matrizes:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{pmatrix} \text{ e } U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

As matrizes L e U são as matrizes de decomposição LU . Perceba que $LU = A$.

Vamos fazer agora um exemplo numérico para ilustrar o método. Considere o sistema linear

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 2 \\ 4x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 3 \end{cases} \quad (1.12)$$

Assim, a matriz associada ao sistema linear (1.12) é dada por:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 1 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

Com isso, temos os seguintes multiplicadores

$$m_{21} = \frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{1}{3} \quad \text{e} \quad m_{31} = \frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} = \frac{4}{3}.$$

Desse modo, a partir das operações

$$L_1^{(1)} \leftarrow L_1^{(0)}$$

$$L_2^{(1)} \leftarrow L_2^{(0)} - m_{21}L_1^{(0)}$$

$$L_3^{(1)} \leftarrow L_3^{(0)} - m_{31}L_1^{(0)}$$

obtemos as matrizes

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & -\frac{10}{3} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad M^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 0 & 0 \\ m_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Continuando o processo, obtemos o multiplicador

$$m_{32} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} = \frac{\frac{1}{3}}{\frac{1}{3}} = 1.$$

Assim,

$$L_1^{(2)} \leftarrow L_1^{(1)}$$

$$L_2^{(2)} \leftarrow L_2^{(1)}$$

$$L_3^{(2)} \leftarrow L_3^{(1)} - m_{32}L_2^{(1)}.$$

Logo, obtemos as matrizes

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad M^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{pmatrix}$$

Portanto, $L = M^{(2)}$ e $U = A^{(2)}$. Para resolver o sistema linear $Ax = b \Rightarrow (LU)x = b$, primeiro consideramos $Ly = b$, sendo $Ux = y$, e depois resolvemos o segundo sistema $Ux = y$. Em outras palavras,

do sistema $Ly = b$, temos:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{4}{3} & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 1 \\ \frac{1}{3}y_1 + y_2 = 2 \\ \frac{4}{3}y_1 + y_2 + y_3 = 3 \end{cases} . \quad (1.13)$$

Resolvendo o sistema escalonado, temos que

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Substituindo no sistema $Ux = y$, segue que

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 4 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{3} \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 1 \\ \frac{1}{3}x_2 + \frac{2}{3}x_3 = \frac{5}{3} \\ -4x_3 = 0 \end{cases} , \quad (1.14)$$

cuja solução é

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 5 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Observação 1.3.1

1. A fatoração LU é uma das técnicas mais utilizadas na resolução de sistemas lineares;
2. Se a matriz A for não singular, então a decomposição LU é única. E além disso, o determinante de $A = LU$ é dado pelo produto dos elementos de sua diagonal;
3. O custo computacional da decomposição LU é de $\frac{2n^3}{3} - \frac{n^2}{2} - \frac{n}{6}$. Para resolver cada sistema associado, o custo computacional é de $2n^2$, resultando em um custo de $\frac{2n^3}{3} + \frac{3n^2}{2} - \frac{n}{6}$. Isto é, o custo é da ordem de $\mathcal{O}(n^3)$.

Exercício 1.3.1 Uma matriz P quadrada de ordem n é chamada de matriz de permutação se pode ser obtida por meio da matriz identidade de mesma ordem permutando-se suas linhas (ou colunas).

a) Considere a matriz de permutação P dada por

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Calculando PA , sendo A uma matriz qualquer, o que a matriz P está fazendo com a matriz A ?

1.3.1 Decomposição LU com pivoteamento parcial

No **Exercício 1.3.1** foi definido o conceito de matriz de permutação. Nesse nosso contexto, o objetivo da matriz de permutação é armazenar as trocas de linhas (ou colunas) no processo de pivoteamento.

Caso seja necessário realizar um pivoteamento parcial no sistema, antes de efetuar a decomposição LU , multiplicamos o sistema linear $Ax = b$ por P , em que P é a matriz de permutação, ficando $PAx = Pb$. Em seguida, aplicamos o método de decomposição LU para a matriz PA e seguimos com o processo de resolução do sistema linear $LUx = \bar{b}$, sendo $\bar{b} = Pb$.

1.4 Fatoração Cholesky

Na seção anterior vimos que uma matriz A , associada a um sistema linear $Ax = b$ pode ser decomposta em um produto de outras duas L e U , sendo L e U matrizes triangulares inferiores e superiores, respectivamente.

Algumas vezes é possível dividir a matriz A em um produto em que U é igual a matriz transposta de L , ou seja, $A = LL^t$. Essa decomposição é chamada de *decomposição de Cholesky*³ e ela só pode ser realizada para matrizes simétricas *definidas positivas*. Uma matriz A é chamada de simétrica definida positiva se satisfaz: $A = A^t$ e $x^t Ax > 0$ para todo vetor x , em que x^t é uma matriz linha. Se a desigualdade for dada por $x^t Ax \geq 0$ dizemos que a matriz é *semi-definida positiva*. Por exemplo, toda matriz de covariância é uma matriz simétrica semi-definida positiva.

Vejam como essa decomposição funciona. Considere a seguinte matriz definida positiva:

$$A = \begin{pmatrix} 16 & -4 & 12 & -4 \\ -4 & 2 & -1 & 1 \\ 12 & -1 & 14 & -2 \\ -4 & 1 & -2 & 83 \end{pmatrix}$$

Nosso objetivo é escrever A da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} 16 & -4 & 12 & -4 \\ -4 & 2 & -1 & 1 \\ 12 & -1 & 14 & -2 \\ -4 & 1 & -2 & 83 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & 0 \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & b_{31} & b_{41} \\ 0 & b_{22} & b_{32} & b_{42} \\ 0 & 0 & b_{33} & b_{43} \\ 0 & 0 & 0 & b_{44} \end{pmatrix}$$

Vamos comparar agora coluna por coluna. Para isso, perceba que a primeira coluna de A é obtida através de:

$$\begin{pmatrix} 16 \\ -4 \\ 12 \\ -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & 0 \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Desse modo,

$$\begin{pmatrix} 16 \\ -4 \\ 12 \\ -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11}^2 \\ b_{21}b_{11} \\ b_{31}b_{11} \\ b_{41}b_{11} \end{pmatrix}.$$

³Essa decomposição foi estabelecida pelo matemático André-Louis Cholesky e tal decomposição, quando aplicável, é aproximadamente duas vezes mais eficiente que a decomposição LU para resolver sistemas lineares

Concluimos então que

$$\begin{aligned}
 b_{11}^2 &= 16 \Rightarrow b_{11} = 4 \\
 b_{21}b_{11} &= -4 \Rightarrow b_{21} = \frac{-4}{b_{11}} = \frac{-4}{4} = -1 \\
 b_{31}b_{11} &= 12 \Rightarrow b_{31} = \frac{12}{b_{11}} = \frac{12}{4} = 3 \\
 b_{41}b_{11} &= -4 \Rightarrow b_{41} = \frac{-4}{b_{11}} = \frac{-4}{4} = -1
 \end{aligned}$$

Continuando o processo, a segunda coluna é obtida por:

$$\begin{pmatrix} -4 \\ 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & 0 \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & 0 \\ b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{21} \\ b_{22} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Desse modo,

$$\begin{pmatrix} -4 \\ 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{21}b_{11} \\ b_{21}^2 + b_{22}^2 \\ b_{31}b_{21} + b_{32}b_{22} \\ b_{41}b_{21} + b_{42}b_{22} \end{pmatrix}.$$

Perceba que os valores b_{11} , b_{21} , b_{31} e b_{41} foram obtidos na etapa anterior. Assim, concluimos que

$$\begin{aligned}
 b_{21}b_{11} &= -4 \Rightarrow (4)(-1) = -4 \quad \checkmark \\
 b_{21}^2 + b_{22}^2 &= 2 \Rightarrow b_{22} = \sqrt{2 - (-1)^2} = \sqrt{1} = 1 \\
 b_{31}b_{21} + b_{32}b_{22} &= -1 \Rightarrow b_{32} = \frac{-1 - 3(-1)}{b_{22}} = \frac{2}{1} = 2 \\
 b_{41}b_{21} + b_{42}b_{22} &= 1 \Rightarrow b_{42} = \frac{1 - (-1)(-1)}{b_{22}} = \frac{0}{1} = 0
 \end{aligned}$$

De modo similar, seguindo o mesmo raciocínio para as demais etapas obtemos que $b_{33} = 1$, $b_{43} = 1$ e $b_{44} = 9$. Portanto, a decomposição de Cholesky da matriz A é dada por

$$\begin{pmatrix} 16 & -4 & 12 & -4 \\ -4 & 2 & -1 & 1 \\ 12 & -1 & 14 & -2 \\ -4 & 1 & -2 & 83 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}$$

Para evitar confusão com a notação da decomposição LU , vamos denotar a decomposição de Cholesky por $A = GG^t$, sendo G uma matriz triangular inferior.

Observação 1.4.1

1. Em geral, identificar se uma matriz é simétrica definida positiva não é simples. O método de decompo-

sição de Cholesky pode ser usado para esse fim. Isto é, se o método falhar é porque A não é simétrica definida positiva;

2. A decomposição de Cholesky requer em cerca de $\frac{n^3}{6}$ operações, ou seja, aproximadamente a metade das operações do método de decomposição LU ;
3. Se existir a decomposição de Cholesky, então a matriz G da decomposição é única;
4. Os elementos da diagonal principal da matriz G são sempre positivos.

Abaixo segue um algoritmo para a decomposição de Cholesky.

Algorithm 3: Decomposição de Cholesky

```

Input: Coeficientes da matriz  $A_{n \times n}$ ;
for  $k=1, \dots, n$  do
   $s = 0$ 
  for  $j=1, \dots, k-1$  do
     $s = s + g_{kj}^2$ 
  end
   $r = a_{kk} - s$ 
   $g_{kk} = \sqrt{r}$ 
  for  $i=k+1, \dots, n$  do
     $s = 0$ 
    for  $j=1, \dots, k-1$  do
       $s = s + g_{ij}g_{kj}$ 
    end
     $g_{ik} = \frac{a_{ik} - s}{g_{kk}}$ 
  end
end

```

Exercício 1.4.1 Veja se a matriz A dada por

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

é simétrica definida positiva, por meio da decomposição de Cholesky.

Exercício 1.4.2 Resolva o sistema linear $Ax = b$, sendo A a matriz dada no exercício anterior e b dado por

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}$$

da melhor forma computacional possível.

1.5 Decomposição em Valores Singulares (SVD)

Uma última decomposição matricial que veremos aqui é a *decomposição em valores singulares* (Singular Value Decomposition - SVD). Existe um resultado na matemática que afirma que se uma matriz A

é simétrica, então ela pode ser fatorada da seguinte forma:

$$A = QDQ^t,$$

sendo D uma matriz diagonal formada por elementos obtidos por meio dos autovalores de A e Q é uma *matriz ortogonal*⁴. Observe que, considerando que os autovalores de A são $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, e escrevendo a matriz Q como $Q = (v_1, \dots, v_n)$, a fórmula $A = QDQ^t$ pode ser escrita na forma:

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i v_i v_i^t.$$

Sem perda de generalidade podemos pensar que $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$. Em muitos problemas reais os autovalores λ_1 e λ_2 (autovalores que possuem maior valor em módulo) são muito maiores que λ_{n-1} e λ_n (autovalores que possuem menor valor em módulo). Nesses casos a matriz A pode ser “compactada” considerando a soma-tória envolvendo apenas os autovalores maiores. Depois de compactada, a matriz pode ser “transmitida” ou armazenada com um custo moderado.

No caso acima, a matriz A precisa ser quadrada. No entanto, existe uma outra decomposição mais geral do que esta. Dada uma matriz A de m linhas e n colunas, existe uma matriz ortogonal U ($m \times m$) e uma matriz ortogonal V ($n \times n$), tais que

$$A = UDV^t,$$

em que D é de $m \times n$ e todos seus elementos fora da diagonal principal são zeros. Mais ainda, os elementos de D são autovalores de $A^t A$ ou AA^t , as colunas de V são autovetores de $A^t A$ e as colunas de U são autovetores de AA^t . A SVD é uma das ferramentas fundamentais para, por exemplo, a compressão de imagens. Essa decomposição também apresenta a vantagem de simplificar os dados, remover ruídos e melhorar o desenvolvimento de um algoritmo.

Para ilustrar a construção dessa decomposição, considere a matriz retangular (3×2)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Assim, $A^t A$ é dada por

$$A^t A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$$

Os autovalores de $A^t A$ são $\lambda_1 = 7$ e $\lambda_2 = 2$, cujos autovetores são dados respectivamente por $v_1 = (\frac{1}{2}, 1)$ e $v_2 = (-2, 1)$. Dessa forma, definimos a matriz diagonal D ⁵ por

$$D = \begin{pmatrix} \sqrt{7} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A fim de construir as matrizes U e V ortogonais, precisamos normalizar os autovetores, isto é, precisamos tomar $u = \frac{v}{\|v\|}$. Efetuando esta conta, chegamos que os vetores normalizados são dados por

⁴Uma matriz A é chamada de ortogonal se $A^{-1} = A^t$. Isso é equivalente a dizer que as colunas (ou linhas) de A são vetores ortonormais.

⁵Uma matriz diagonal não precisa ser necessariamente quadrada, basta que $a_{ij} = 0$ para todo $i \neq j$

$v_1 = \left(\frac{\sqrt{5}}{5}, \frac{2\sqrt{5}}{5}\right)$ e $v_2 = \left(-\frac{2\sqrt{5}}{5}, \frac{\sqrt{5}}{5}\right)$. Esses vetores compõem a matriz V da seguinte forma:

$$V = [v_1 \quad v_2] = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}}{5} & -\frac{2\sqrt{5}}{5} \\ \frac{2\sqrt{5}}{5} & \frac{\sqrt{5}}{5} \end{pmatrix}$$

Por fim, para determinar a matriz U é necessário computar:

$$\begin{aligned} u_1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} Av_1 &\Rightarrow u_1 = \frac{1}{\sqrt{7}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}}{5} \\ \frac{2\sqrt{5}}{5} \end{pmatrix} \Rightarrow u_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{35}}{7} \\ \frac{3\sqrt{35}}{35} \\ -\frac{\sqrt{35}}{35} \end{pmatrix} \\ u_2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}} Av_2 &\Rightarrow u_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{2\sqrt{5}}{5} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{pmatrix} \Rightarrow u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{10}}{10} \\ -\frac{3\sqrt{10}}{10} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Veja que para poder computar UDV^t é necessário que a matriz U tenha três colunas. No entanto, obtivemos apenas duas delas a partir da fórmula $u_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} Av_i$. Para completar a terceira coluna, precisamos calcular o *núcleo* de A^t , isto é, precisamos determinar o vetor u_3 tal que $A^t u_3 = 0$. Pois bem,

$$A^t u_3 = 0$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Escalonando o sistema (nesse caso não há necessidade de realizar pivoteamento) e resolvendo-o, obtemos como solução o vetor $u_3 = (2z, -3z, z) = z(2, -3, 1)$. Normalizando-o, chegamos que $u_3 = \frac{(2, -3, 1)}{\sqrt{14}}$, ou seja,

$$u_3 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{14}}{7} \\ -\frac{3\sqrt{14}}{14} \\ \frac{\sqrt{14}}{14} \end{pmatrix}$$

Portanto, a matriz U é dada por:

$$U = [u_1 \quad u_2 \quad u_3] = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{35}}{7} & 0 & \frac{\sqrt{14}}{7} \\ \frac{3\sqrt{35}}{35} & -\frac{\sqrt{10}}{10} & -\frac{3\sqrt{14}}{14} \\ -\frac{\sqrt{35}}{35} & -\frac{3\sqrt{10}}{10} & \frac{\sqrt{14}}{14} \end{pmatrix}$$

Assim, a decomposição SVD de A é dada por

$$A = UDV^t,$$

sendo

$$U = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{35}}{7} & 0 & \frac{\sqrt{14}}{7} \\ \frac{3\sqrt{35}}{35} & -\frac{\sqrt{10}}{10} & -\frac{3\sqrt{14}}{14} \\ -\frac{\sqrt{35}}{35} & -\frac{3\sqrt{10}}{10} & \frac{\sqrt{14}}{14} \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} \sqrt{7} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } V = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}}{5} & -\frac{2\sqrt{5}}{5} \\ \frac{2\sqrt{5}}{5} & \frac{\sqrt{5}}{5} \end{pmatrix}.$$

Exercício 1.5.1 *Faça a decomposição SVD da matriz A dada por:*

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Para validar o resultado, utilize o comando `svd` no Octave para verificar se as matrizes que você obteve estão corretas. O comando é definido por

$$[U, D, V] = \text{svd}(A)$$

Exercício 1.5.2 *Na decomposição SVD, ilustrada nos exercícios anteriores, obtivemos apenas autovalores reais. Isso acontece sempre? Justifique.*

Exercício 1.5.3 *Nos exercícios anteriores obtivemos autovalores não negativos. Isso é válido sempre? Justifique.*

Exercício 1.5.4 *Considere a seguinte afirmação:*

“Os autovalores de uma matriz quadrada A são exatamente os mesmos da matriz quadrada A^t ”

Essa afirmação é falsa ou verdadeira? Justifique.

Capítulo 2

Interpoladores

Neste capítulo vamos abordar uma outra ferramenta matemática chamada de *interpolação*. Essa técnica é utilizada para aproximar uma função $f(x)$ por uma outra $g(x)$, sendo a função $g(x)$ com propriedades melhores de serem trabalhadas.

Um exemplo para motivar esse estudo é o seguinte, considere que você esteja fazendo um levantamento do número de pessoas com diabetes por ano no Brasil. Nesse estudo foram coletados dados nos anos de 2018, 2019 e 2022. Por motivos desconhecidos, os dados para 2020 e 2021 não puderam ser obtidos. Os interpoladores podem ser usados para estimar esses valores intermediários.

Um outro exemplo seria a relação entre o calor específico da água e a temperatura [Ruggiero and Lopes \(2000\)](#). Suponha que se saiba que o calor específico da água é de 0,99907 à temperatura de 20°, enquanto que para os calores específicos 0,99852 e 0,99828 as temperaturas são de 30° e 40°, respectivamente. Com isso, surgem duas perguntas: 1) qual seria o calor específico da água à temperatura de 35°? 2) qual a temperatura da água quando o calor específico é de 0,99837?

Vamos então fornecer diferentes ferramentas para poder estudar estes tipos de problemas.

2.1 Interpoladores polinomiais

Para trabalhar com interpoladores, primeiros partimos do pressuposto que se conhece o valor de uma função f em $n + 1$ pontos, isto é, dados x_0, \dots, x_n temos conhecimento dos valores $f(x_0), \dots, f(x_n)$. O objetivo desta seção é determinar uma função g de tal modo que¹

$$\begin{cases} g(x_0) = f(x_0) \\ g(x_1) = f(x_1) \\ \vdots \\ g(x_n) = f(x_n) \end{cases} \quad (2.1)$$

A Figura 2.1 representa graficamente as hipóteses trazidas em (2.1). Perceba que nos pontos x_0, \dots, x_n as funções f e g coincidem, mas fora destes pontos as funções não são necessariamente iguais.

A função g , nesse caso, é obtida por meio da construção de um polinômio de grau no máximo n .

¹As condições exibidas aqui são para realizar um tipo de interpolação polinomial. Nem todas as interpolações polinomiais precisam assumir as hipóteses ilustradas em (2.1). Por exemplo, a *fórmula de Taylor* e o *polinômio de Hermite* partem de outros pressupostos.

satisfaz $p(-1) = f(-1) = 2$, $p(0) = f(0) = -1$ e $p(1) = f(1) = 3$. A matriz de Vandermonde associada a este interpolador é dada por

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & (-1)^2 \\ 1 & 0 & 0^2 \\ 1 & 1 & (1)^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Note que $\det(A) = 2 \neq 0$. Portanto, existe o interpolador polinomial. Resolvendo o sistema linear abaixo por meio da eliminação gaussiana com pivoteamento, obtemos

$$\begin{cases} a_0 - a_1 + a_2 = 2 \\ a_0 = -1 \\ a_0 + a_1 + a_2 = 3 \end{cases} \xrightarrow[\text{eliminação gaussiana com pivoteamento}]{\text{Sistema escalonado a partir da}} \begin{cases} a_0 + a_1 + a_2 = 3 \\ -a_1 - a_2 = -4 \\ 2a_2 = 7 \end{cases} \quad (2.3)$$

Assim, os coeficientes do polinômio interpolador são $a_0 = -1$, $a_1 = \frac{1}{2}$ e $a_2 = \frac{7}{2}$. Logo, obtemos

$$p(x) = -1 + \frac{x}{2} + \frac{7x^2}{2}. \quad (2.4)$$

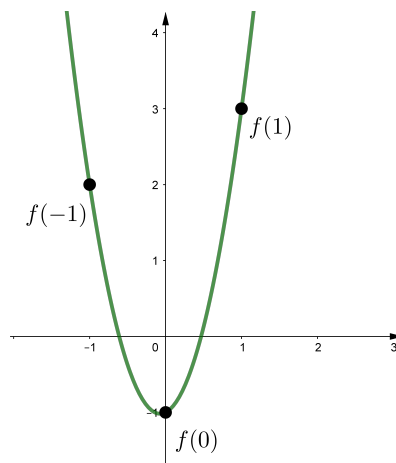


Figura 2.2: Polinômio interpolador dado pela equação (2.4). A função $p(x)$ é dada pela curva em verde.

É importante observar que a solução do sistema linear foi obtida de forma muito simples, utilizando o método da eliminação gaussiana com pivoteamento. No entanto, a matriz de Vandermonde pode ser, por muitas vezes, uma matriz *mal condicionada*². Por exemplo, considere a tabela de dados [Ruggiero and Lopes \(2000\)](#)

x	0,1	0,2	0,3	0,4
f(x)	5	13	-4	-8

Tabela 2.1: Tabela com dados que ilustram o mal condicionamento de um sistema linear associado ao interpolador polinomial

²Dizemos que uma matriz ou um sistema é *mal condicionado* quando a matriz do sistema é próxima de uma matriz singular. Dizemos que um sistema linear é *bem condicionado* se pequenas mudanças nos coeficientes e/ou nos termos independentes acarretarem pequenas mudanças na solução do sistema [Ruggiero and Lopes \(2000\)](#). O *número de condição* de uma matriz A é definido por $\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$, sendo $\|\cdot\|$ uma norma de matrizes [Watkins \(2010\)](#). Se o número de condicionamento for maior que 1, então temos um valor relativo do erro amplificado, enquanto um valor menor que 1 nos diz que o erro é atenuado

A partir dos dados fornecidos na Tabela 2.1, construímos o seguinte sistema linear

$$\begin{cases} a_0 + 0,1a_1 + 0,01a_2 + 0,001a_3 = 5 \\ a_0 + 0,2a_1 + 0,04a_2 + 0,008a_3 = 13 \\ a_0 + 0,3a_1 + 0,09a_2 + 0,027a_3 = -4 \\ a_0 + 0,4a_1 + 0,16a_2 + 0,064a_3 = -8 \end{cases} \quad (2.5)$$

Novamente usando a eliminação gaussiana com pivoteamento, obtemos o seguinte polinômio interpolador

$$p(x) = -66 + 1151.667x - 5050x^2 + 6333.333x^3 \quad (2.6)$$

Dependendo da aritmética de ponto flutuante da máquina, por exemplo, se considerarmos três dígitos, obteríamos o seguinte polinômio interpolador

$$q(x) = (-0.66 \times 10^2) + (0.115 \times 10^4)x - (0.505 \times 10^4)x^2 + (0.633 \times 10^4)x^3 \quad (2.7)$$

O polinômio p dado na expressão (2.6) satisfaz $p(0,4) = -8 = f(0,4)$. No entanto, o polinômio q dado na expressão (2.7) é tal que $q(0,4) = -10 \neq -8 = f(0,4)$. Portanto, podemos cair em um problema mal condicionado, obtendo valores diferentes dos desejados.

Exercício 2.1.1 (Exercício adaptado de Ruggiero and Lopes (2000)) Considere a seguinte tabela de valores

Temperatura(°C)	20	25	30	35	40
Calor específico	0,99907	0,99852	0,99826	0,99818	0,99828

Tabela 2.2: Tabela de temperatura \times calor específico

A partir da Tabela 2.2, determine:

1. A matriz de Vandermonde associada e o seu polinômio interpolador.
2. Esboce o gráfico do polinômio interpolador.
3. Utilizando seu polinômio interpolador, qual seria o valor aproximado do calor específico da água na temperatura 32 ?
4. Considere agora uma nova tabela

Temperatura(°C)	20	30	40
Calor específico	0,99907	0,99826	0,99828

Tabela 2.3: Tabela de temperatura \times calor específico

Como você faria para estimar o valor da temperatura da água sabendo que o calor específico é 0,99837?

2.2 Interpolador de Lagrange

Para evitar o uso da matriz de Vandermonde, temos outras formas de construir o polinômio interpolador que fita os dados. Nesta seção trataremos do *Interpolador de Lagrange*³ Fornecido um conjunto de $n + 1$ dados $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$, o polinômio de Lagrange é definido por

$$P(x) = y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + \dots + y_nL_n(x), \quad (2.8)$$

em que $L_i(x)$ são polinômios de grau n , para todo $i \in \{0, 1, \dots, n\}$, definidos pela função δ_{ij} ⁴:

$$L_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}. \quad (2.9)$$

Este polinômio P , assim como o obtido a partir da matriz de Vandermonde, deve satisfazer a seguinte condição $P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1, \dots, P(x_n) = y_n$. Para isso, define-se cada polinômio $L_i(x)$ da seguinte forma:

$$L_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}. \quad (2.10)$$

Perceba que os polinômios dados pela Equação (2.10) funcionam da seguinte forma, no numerador se calcula o produto de todos os elementos na forma $(x - x_k)$, pulando o termo $(x - x_i)$. Já no denominador, considera-se o mesmo produto que aparece no numerador, mas no lugar de x coloca-se x_i .

Veja que o polinômio L_i , na forma que foi construído, possui duas propriedades importantes. A primeira é que ele tem grau n , já que é obtida através de um produto de n termos que dependem de x . Além disso, satisfaz a propriedade $L_i(x_j) = \delta_{ij}$. De fato,

$$L_i(x_i) = \frac{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} = 1$$

e considerando $i \neq j$, temos duas situações ou $i < j$ ou $i > j$. Sem perda de generalidade, considere $i > j$. Assim,

$$\begin{aligned} L_i(x_j) &= \frac{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \dots (x_j - x_j) \dots (x_j - x_{i-1})(x_j - x_{i+1}) \dots (x_j - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \\ &= \frac{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \dots 0 \dots (x_j - x_{i-1})(x_j - x_{i+1}) \dots (x_j - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \\ &= \frac{0}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Observação 2.2.1 Caso tivesse considerado o caso em que $i < j$, o termo $(x_j - x_j)$ apareceria entre $(x_j - x_{i+1})$ e $(x_j - x_n)$, obtendo o mesmo resultado apresentado acima.

A partir das propriedades enunciadas acima, temos então que o polinômio P dado em (2.8) possui

³Na seção anterior vimos que a resolução de um problema de interpolação pode ser enxergado como um problema de sistema matricial dentro da área de Álgebra Linear, levando a uma matriz de Vandermonde mal condicionada. Com o objetivo de evitar essa abordagem, vamos para um estudo breve na área de Análise Numérica.

⁴O matemático Joseph-Louis de Lagrange definiu uma base que melhora o condicionamento da matriz de Vandermonde. A ideia por trás dessa abordagem foi buscar uma base do espaço vetorial de tal forma que a diagonalização da matriz original resultasse na matriz identidade, tornando a resolução do sistema linear simples e direta. Essa abordagem é equivalente a recorrer a função δ_{ij} dada em (2.9).

grau menor ou igual a n , e mais, $P_n(x_i) = y_i$ para todo $i \in \{0, 1, \dots, n\}$. Para visualizar a segunda propriedade, basta notar que

$$\begin{aligned} P(x_i) &= y_0L_0(x_i) + y_1L_1(x_i) + \dots + y_iL_i(x_i) + \dots + y_nL_n(x_i) \\ &= y_0 \cdot 0 + y_1 \cdot 0 + \dots + y_i \cdot 1 + \dots + y_n \cdot 0 \\ &= 0 + \dots + y_i + \dots + 0 \\ &= y_i. \end{aligned}$$

Para ilustrar essa abordagem, vamos considerar os mesmos dados fornecidos no exemplo da seção anterior, isto é, $(x_0, y_0) = (-1, 2)$, $(x_1, y_1) = (0, -1)$ e $(x_2, y_2) = (1, 3)$ ⁵. Assim, o polinômio de Lagrange é dado por

$$\begin{aligned} P(x) &= y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + y_2L_2(x) \\ &= 2L_0(x) - L_1(x) + 3L_2(x). \end{aligned}$$

Vamos obter agora cada um dos polinômios L_i .

$$\begin{aligned} L_0(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \\ &= \frac{(x)(x - 1)}{(-1)(-2)} \\ &= \frac{(x)(x - 1)}{2} \\ &= \frac{x^2}{2} - \frac{x}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_1(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \\ &= \frac{(x + 1)(x - 1)}{(1)(-1)} \\ &= -(x + 1)(x - 1) \\ &= -x^2 + 1 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} L_2(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{(x + 1)(x)}{(2)(1)} \\ &= \frac{(x + 1)(x)}{2} \\ &= \frac{x^2}{2} + \frac{x}{2} \end{aligned}$$

⁵Podemos denotar os dados tanto na forma de tabela x por $f(x)$ ou na forma de coordenadas $(x, f(x))$ ou (x, y) .

Logo, obtemos o seguinte polinômio interpolador de Lagrange:

$$\begin{aligned}
 P(x) &= 2L_0(x) - L_1(x) + 3L_2(x) \\
 &= 2\left(\frac{x^2}{2} - \frac{x}{2}\right) - (-x^2 + 1) + 3\left(\frac{x^2}{2} + \frac{x}{2}\right) \\
 &= x^2 - x + x^2 - 1 + \frac{3}{2}x^2 + \frac{3}{2}x \\
 &= \frac{7x^2}{2} + \frac{x}{2} - 1
 \end{aligned}$$

Perceba que obtivemos o mesmo polinômio interpolador que o fornecido na seção anterior. Isso ilustra o fato de que o polinômio produzido pelo processo de interpolação é sempre único. No entanto, esse processo evita o uso de matrizes má condicionadas.

Observação 2.2.2 É comum encontrar nos livros e artigos a notação para o polinômio de Lagrange na forma de somatório e produto, isto é,

$$P(x) = \sum_{k=0}^n y_k L_k(x),$$

em que

$$L_k(x) = \prod_{q=0, q \neq k}^n \frac{(x - x_q)}{(x_k - x_q)}.$$

A primeira notação se chama somatório e nela está incorporada a soma entre os termos que estão indexados por k . A segunda notação se chama produto e nela está incorporada o produto entre os termos que estão indexados por q . Além disso, para incorporar possíveis restrições, é colocada uma condição de restrição juntamente com o índice. Por exemplo, existe uma restrição $q \neq k$ no índice do produto.

2.3 Fenômeno de Runge

Com a ferramenta produzida nas últimas seções, a partir de um conjunto de dados é possível construir um polinômio de grau n que coincide com a função f exatamente nos pontos x_i , isto é, $f(x_i) = p(x_i)$. Ainda mais, vimos que esse polinômio sempre existe e é único.

Uma pergunta que surge é a seguinte, se é possível fazer essa construção, então é possível construir um polinômio p de tal forma que $f(x) = p(x)$, para todo x de seu domínio? Apesar do conjunto dos polinômios ser denso no espaço das funções contínuas⁶, mesmo que a sequência de polinômios $\{p_n(x)\}$ convirja para $f(x)$ em $[a, b]$, admitindo que $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ cubra todo o intervalo $[a, b]$, não necessariamente temos que tal construção produza um polinômio p que convirja para f em todo o seu domínio. Para ilustrar esse fato, considere o seguinte exemplo.

Exemplo 2.3.1 Seja o intervalo $[-1, 1]$ particionado igualmente em n subintervalos (e consequentemente em $n + 1$ pontos) de tamanho $h = x_i - x_{i-1}$, sendo $i = \{0, 1, \dots, n\}$. Cada ponto x_i pode ser obtido fazendo $x_i = -1 + \frac{2i}{n}$. Vamos agora considerar a seguinte função f a ser interpolada

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2} \tag{2.11}$$

⁶Dizer que um conjunto A é denso em um conjunto B significa que todo elemento de B pode ser aproximado por uma sequência de elementos de A . No caso particular dos polinômios, o Teorema de Aproximação de Weierstrass Weierstrass (1885) assegura que o espaço dos polinômios definidos num intervalo compacto $[a, b]$ é denso no espaço $C([a, b])$ das funções contínuas com domínio em $[a, b]$, munido da norma $\|f\|_\infty = \sup_{t \in [a, b]} |f(t)|$, chamada de norma infinito.

Vejamos então na Figura 2.3 os polinômios interpoladores (construídos através do método de Lagrange) para diferentes valores de n .

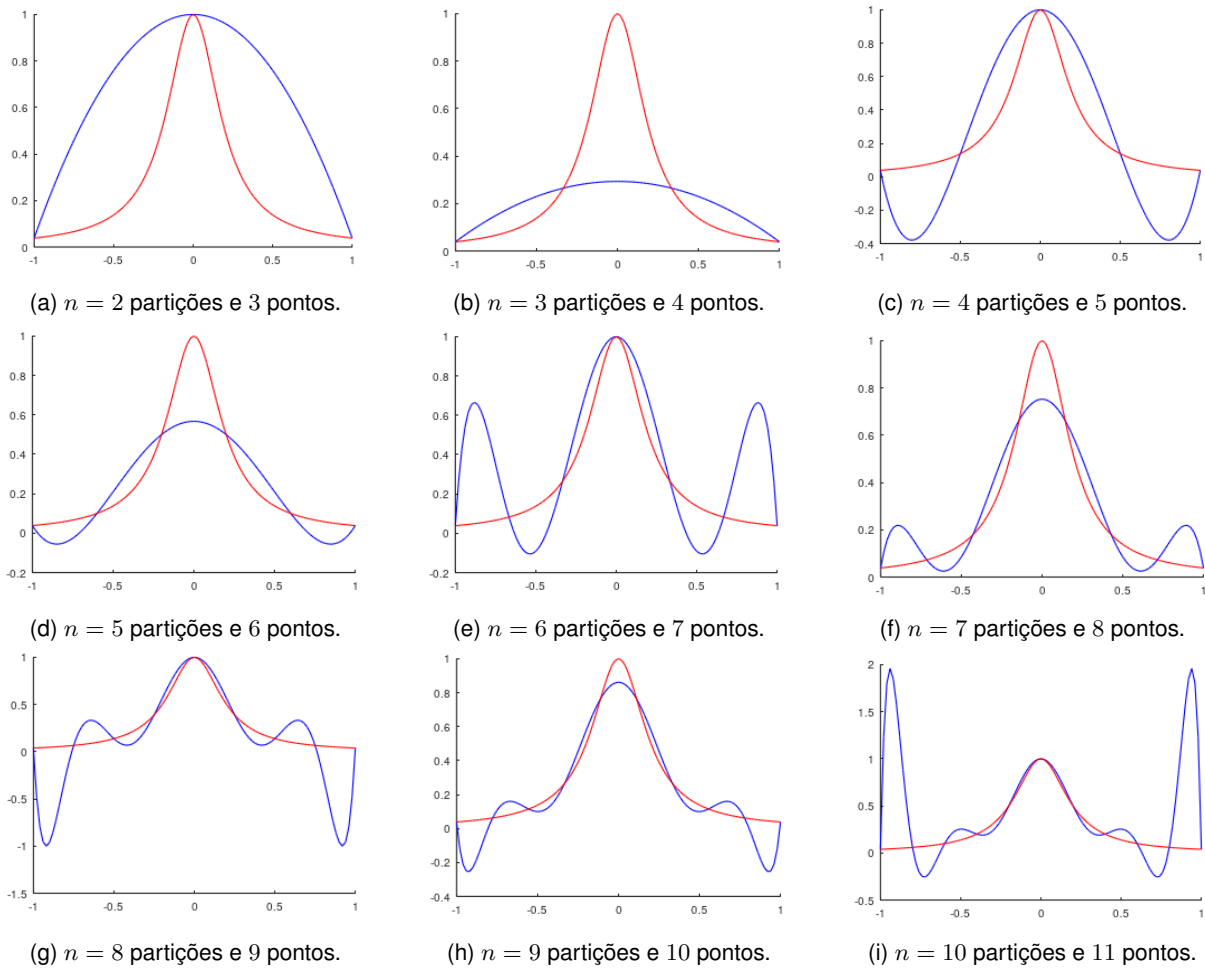


Figura 2.3: Interpolação por meio do método de Lagrange da função f , dada em (2.11), para diferentes partições n igualmente espaçadas. A função em vermelho representa a função f e as funções em azul representam os diferentes polinômios interpoladores em cada caso.

Observando o intervalo $[-1, 1]$ é possível perceber que existe uma divergência entre a função f e o interpolador g . Essa divergência pode ser melhor ilustrada na Figura 2.4.

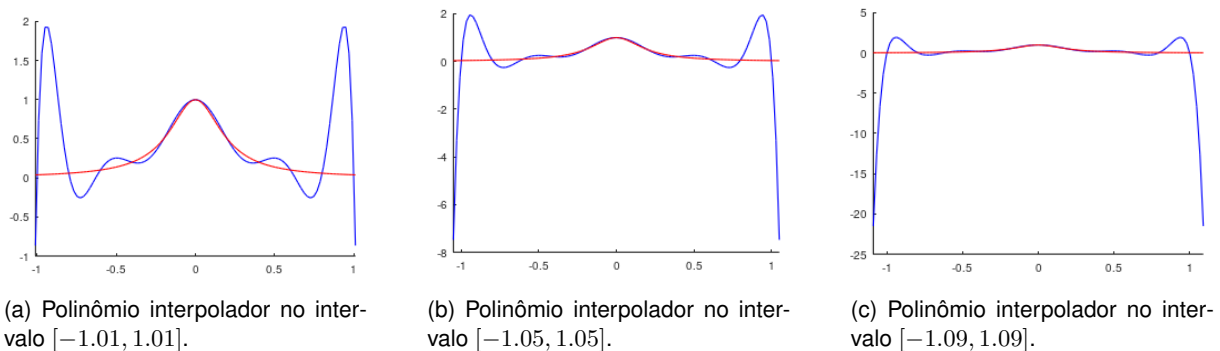


Figura 2.4: Polinômio interpolador de Lagrange de ordem 10 (em azul) e função f (em vermelho), dada em (2.11). As subfiguras 2.4a, 2.4b e 2.4c ilustram as mesmas funções mas em intervalos diferentes, a saber $[-1.01, 1.01]$, $[-1.05, 1.05]$ e $[-1.09, 1.09]$, respectivamente.

Fora do intervalo $[-1, 1]$ temos que $|f(x) - p(x)|$ se torna arbitrariamente grande⁷, quando n aumenta. Na verdade, é possível demonstrar que no intervalo $[-5, 5]$ as funções f e p divergem Isaacson and Keller (1994).

O problema apresentado no **Exemplo 2.3.1** é chamado de *fenômeno de Runge*. Para contornar esse tipo de problema, é possível utilizar diferentes mecanismos. Por exemplo, pode-se utilizar aproximações por polinômios por meio de *nós de Chebyshev* Chebyshev (1854); Isaacson and Keller (1994); Ruggiero and Lopes (2000). Neste caso, escolhe-se outros pontos a serem interpolados de tal forma que o erro seja distribuído homogeneamente em todo intervalo. A Figura 2.5 ilustra o polinômio construído a partir do método de nós de Chebyshev. Para mais detalhes consulte Marcos Eduardo Valle's Homepage.

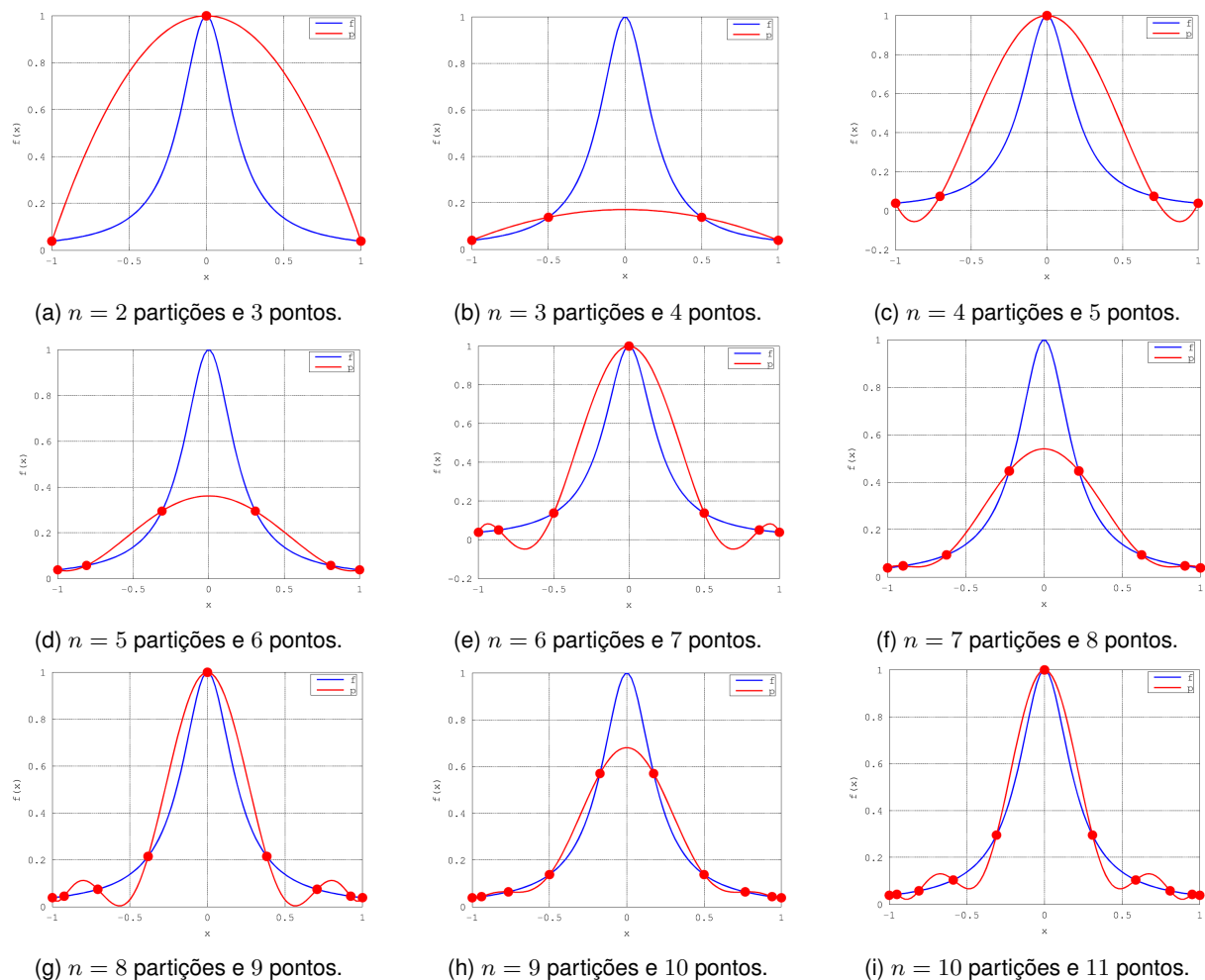


Figura 2.5: Interpolação por meio do método de nós de Chebyshev. A função em azul representa a função f e as funções em vermelho representam os diferentes polinômios interpoladores em cada caso. Fonte: Marcos Eduardo Valle's Homepage.

Outras formas alternativas para se construir o interpolador seria por meio de aproximações por funções racionais Trefethen (2013) ou aproximações por funções *splines*, onde se tem convergência garantida Becker, Carey and Oden (1981).

⁷O módulo $|f(x) - p(x)|$ é utilizado para poder “medir” a distância entre os valores assumidos pela função f e p em cada instante x .

Capítulo 3

Método dos Quadrados Mínimos

No capítulo anterior vimos como ajustar dados por meio de interpolação polinomial. Estudamos também os casos em que interpoladores não são aconselháveis. Por exemplo, interpolação não é a melhor forma para extrapolar os dados, ou seja, não é recomendável estimar valores que estão fora do intervalo considerado por meio de interpoladores. Este capítulo se dedica a discutir uma outra metodologia que permite ajustar dados de tal forma que seja possível extrapolar os dados com uma margem “aceitável” de erro.

Introduziremos o *método dos quadrados mínimos* para o caso discreto, isto é, forneceremos um método para ajustar uma função f , sendo que só é conhecido alguns valores desta função, digamos $(f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_m))$. Neste caso, os pares $(x_i, f(x_i))$, para todo $i = 1, \dots, m$, representariam um conjunto de dados. Depois de abordar o caso discreto, vamos generalizar o problema para o caso contínuo, isto é, em que se é conhecida a função f em todo o seu domínio.

3.1 Quadrados mínimos caso discreto

O objetivo do método é escolher funções $g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)$, chamadas de *funções de base*, e determinar coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ de tal modo que a função

$$\varphi(x_i) = \alpha_1 g_1(x_i) + \alpha_2 g_2(x_i) + \dots + \alpha_n g_n(x_i),$$

se aproxime ao máximo de $f(x_i)$, para todo $i = 1, \dots, n$.

Veja que acima utilizamos a expressão “aproxime ao máximo”, isso significa que este método não necessariamente produz funções que passam exatamente em cima dos pontos tabelados $(x_i, f(x_i))$, como no caso de interpolação. Por outro lado, é interessante observar que se o erro cometido nessa aproximação fosse zero, então teríamos que a função φ passaria exatamente em cima dos dados, significando que o método produziu um interpolador. Nesse sentido, a interpolação é um caso particular dentro do método de quadrados mínimos.

O método de quadrados mínimos é construído a partir dessa noção de estimativa de erro. Vamos então fazer uma breve revisão desta ideia. Para cada x_i , o *erro*¹, ou também podemos chamar de *desvio*

¹ Aqui o nome erro está sendo utilizado para se referenciar ao *erro absoluto* $x - \bar{x}$, isto é, a diferença entre o valor exato de um número x e o seu valor aproximado/estimado \bar{x} . O erro absoluto geralmente é denotado por $EA_x = x - \bar{x}$. Por outro lado, existe um outro tipo de erro, o *erro relativo* que é definido pelo erro absoluto EA_x dividido pelo valor aproximado \bar{x} , que é denotado por $ER_x = \frac{x - \bar{x}}{\bar{x}}$. Dependendo da ordem de grandeza dos números envolvidos, o erro absoluto não é indicado para descrever a precisão de um cálculo.

em x_i , é dado por $d_i = f(x_i) - \varphi(x_i)$. Temos então como objetivo determinar os coeficientes $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ de tal modo que d_i seja mínimo, para todo $i = 1, \dots, m$. Para esse fim, recorreremos à abordagem de minimizar a soma dos quadrados dos desvios², isto é,

$$\begin{aligned}
& \min \sum_{i=1}^m d_i^2 \\
& \min \sum_{i=1}^m (f(x_i) - \varphi(x_i))^2 \\
& \min \sum_{i=1}^m (f(x_i) - (\alpha_1 g_1(x_i) + \alpha_2 g_2(x_i) + \dots + \alpha_n g_n(x_i)))^2 \\
& \min \sum_{i=1}^m (f(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i))^2 \tag{3.1}
\end{aligned}$$

Considere então $F(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = (f(x_i) - (\alpha_1 g_1(x_i) + \alpha_2 g_2(x_i) + \dots + \alpha_n g_n(x_i)))^2$ uma função que depende de n variáveis. Assim, minimizar o problema (3.1) é equivalente a minimizar a função $F(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Sendo assim, precisamos determinar os valores $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ de tal modo que $\frac{\partial F}{\partial \alpha_k} = 0$, para todo $k = 1, \dots, n$. Pois bem, utilizando a regra da cadeia, concluímos que

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_k} = 2 \sum_{i=1}^m (f(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i))(-g_k(x_i))$$

Impondo a condição de que $\frac{\partial F}{\partial \alpha_k} = 0$, concluímos que

$$\begin{aligned}
2 \sum_{i=1}^m (f(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i))(-g_k(x_i)) &= 0 \\
\sum_{i=1}^m (f(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i))(g_k(x_i)) &= 0 \\
\sum_{i=1}^m (f(x_i)g_k(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i)g_k(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i)g_k(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i)g_k(x_i)) &= 0,
\end{aligned}$$

para todo $k = 1, \dots, n$.

Vamos escrever a expressão acima em forma de sistema, para cada k

$$\begin{cases}
\sum_{i=1}^m (f(x_i)g_1(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i)g_1(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i)g_1(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i)g_1(x_i)) = 0 \\
\sum_{i=1}^m (f(x_i)g_2(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i)g_2(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i)g_2(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i)g_2(x_i)) = 0 \\
\vdots \\
\sum_{i=1}^m (f(x_i)g_n(x_i) - \alpha_1 g_1(x_i)g_n(x_i) - \alpha_2 g_2(x_i)g_n(x_i) - \dots - \alpha_n g_n(x_i)g_n(x_i)) = 0
\end{cases},$$

Sendo assim, o erro relativo é, em geral, mais utilizado.

²Minimizar a soma dos quadrados dos desvios acarreta em minimizar cada parcela $(f(x_i) - \varphi(x_i))^2$, e conseqüentemente todos $f(x_i) - \varphi(x_i)$.

que é equivalente a

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m \alpha_1 g_1(x_i)g_1(x_i) + \alpha_2 g_2(x_i)g_1(x_i) + \cdots + \alpha_n g_n(x_i)g_1(x_i) = \sum_{i=1}^m (f(x_i)g_1(x_i)) \\ \sum_{i=1}^m \alpha_1 g_1(x_i)g_2(x_i) + \alpha_2 g_2(x_i)g_2(x_i) + \cdots + \alpha_n g_n(x_i)g_2(x_i) = \sum_{i=1}^m (f(x_i)g_2(x_i)) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m \alpha_1 g_1(x_i)g_n(x_i) + \alpha_2 g_2(x_i)g_n(x_i) + \cdots + \alpha_n g_n(x_i)g_n(x_i) = \sum_{i=1}^m (f(x_i)g_n(x_i)) \end{cases}$$

isto é, obtivemos um sistema linear com n incógnitas e n variáveis $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. As equações desse sistema linear são chamadas de *equações normais*.

Podemos escrever esse problema na forma matricial $A\alpha = b$, em que

$$A = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m g_1(x_i)g_1(x_i) & \sum_{i=1}^m g_2(x_i)g_1(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^m g_n(x_i)g_1(x_i) \\ \sum_{i=1}^m g_1(x_i)g_2(x_i) & \sum_{i=1}^m g_2(x_i)g_2(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^m g_n(x_i)g_2(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^m g_1(x_i)g_n(x_i) & \sum_{i=1}^m g_2(x_i)g_n(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^m g_n(x_i)g_n(x_i) \end{pmatrix}_{n \times n}$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}_{n \times 1} \quad \text{e} \quad b = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m (f(x_i)g_1(x_i)) \\ \sum_{i=1}^m (f(x_i)g_2(x_i)) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^m (f(x_i)g_n(x_i)) \end{pmatrix}_{n \times 1}$$

Observação 3.1.1

1. É importante observar que A é uma matriz simétrica;
2. Tanto os coeficientes da matriz A , quanto os coeficientes da matriz coluna b , podem ser vistos como o produto interno (produto escalar) entre as funções de base a função f conhecida, isto é,

$$a_{ij} = \langle g_i, g_j \rangle = \sum_{k=1}^m g_i(x_k)g_j(x_k)$$

e

$$b_j = \langle f, g_j \rangle = \sum_{k=1}^m f(x_k)g_j(x_k)$$

3. Se as funções de base g_i forem linearmente independentes, então o determinante da matriz A é diferente de zero, isto é, A é não singular (invertível). Isso implica que existirá solução única para o problema, ou seja, existem únicos coeficientes $\alpha_1, \dots, \alpha_n$. E mais, os valores encontrados para esses coeficientes de fato minimizam o erro;
4. Naturalmente surge a seguinte pergunta, como escolher de forma apropriada as funções de base g_i ? Para isso, o mais recomendável é observar o gráfico dos dados ou se baseando em fundamentos teóricos do experimento. Esse gráfico é também conhecido como diagrama de dispersão;
5. Se as funções de base possuem a seguinte propriedade $\langle g_i, g_j \rangle = 0$, para todo $i \neq j$, e $\langle g_i, g_j \rangle \neq 0$, para todo $i = j$, isto é, se as funções de base são ortogonais entre si, então a matriz A será diagonal. Essa abordagem é interessante já que resulta em um processo simples de resolução do problema. E ainda mais, polinômios ortogonais são facilmente construídos, desse modo, quadrados mínimos via polinômios ortogonais caracteriza uma ótima abordagem, quando compatíveis aos dados estudados.

Exercício 3.1.1 Considere o mesmo problema da temperatura \times calor específico enunciado no Capítulo anterior (**Exercício 2.1.1**). Faça o diagrama de dispersão e determine que tipo de função de base você utilizaria.

Exercício 3.1.2 A partir da sua escolha no exercício anterior, determine a função φ que ajusta os dados.

Exercício 3.1.3 Uma vez construída a função φ , faça uma estimativa do calor específico da água na temperatura 45°C .

Referências

Anton, H., Rorres, C. and Doering, C.I., 2012. *Álgebra linear com aplicações*. Bookman.

Becker, Carey, G. and Oden, J., 1981. *Finite elements: An introduction*. Prentice-Hall.

Chebyshev, P.L., 1854. Théorie des mécanismes connus sous le nom parallelogrammes. *Mémoires des savants étrangers présentes à l'academie de saint-petersbourg*. (7), pp.539–586.

Isaacson, E. and Keller, H.B., 1994. *Analysis of numerical methods*. Dover Publications.

Marcos eduardo valle's homepage. <http://www.ime.unicamp.br/~valle/teaching.php>. Accessed: 2022-10-18.

Ruggiero, M.A.G. and Lopes, V.L.R., 2000. *Cálculo numérico: Aspectos teóricos e computacionais*. Pearson Universidades.

Trefethen, L.N., 2013. *Approximation theory and approximation practice*. SIAM.

Watkins, D.S., 2010. *Fundamentals of matrix computations*. John Wiley & Sons.

Weierstrass, K., 1885. Über die analytische darstellbarkeit sogenannter willkrlicher functionen einer reellen vernderlichen. *Sitzungsberichte der kniglich preuischen akademie der wissenschaften zu berlin*. (11).

Índice Remissivo

- custo computacional, [6](#)
- decomposição Cholesky, [13](#)
- decomposição em valores singulares, [15](#)
- decomposição LU, [9](#)
- denso, [25](#)
- diagrama de dispersão, [30](#)
- eliminação gaussiana, [4](#), [5](#)
- eliminação gaussiana com pivoteamento, [7](#)
- equações normais, [30](#)
- erro absoluto, [28](#)
- erro relativo, [28](#)
- fenômeno de Runge, [27](#)
- funções de base, [28](#)
- interpolador de Lagrange, [23](#)
- interpolação, [19](#)
- matriz de permutação, [12](#)
- matriz de Vandermonde, [20](#)
- matriz definida positiva, [13](#)
- matriz mal condicionada, [21](#)
- matriz ortogonal, [16](#)
- matriz semi-definida positiva, [13](#)
- matriz singular, [4](#)
- matriz triangular inferior, [9](#)
- matriz triangular superior, [5](#), [9](#)
- método de Lagrange, [20](#)
- método de Newton, [20](#)
- método dos quadrados mínimos, [28](#)
- norma infinito, [25](#)
- nós de Chebyshev, [27](#)
- número de condição de uma matriz, [21](#)
- pivô, [6](#)
- polinômio de Hermite, [19](#)
- polinômio de Taylor, [19](#)
- polinômios ortogonais, [30](#)
- sistema bem condicionado, [21](#)
- sistema linear escalonado, [5](#)
- sistema mal condicionado, [21](#)
- splines, [27](#)