CÁLCULO NUMÉRICO

Lista No. 5 – Gabarito

1. (a) Queremos $y = f(x) \approx \varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x$. Temos então $n = 2$, as funções bases $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$, e $m = 8$. Precisamos resolver o sistema de equações normais correspondente. Este sistema para $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$, tem a forma geral

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\alpha_j = b_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, n \tag{1}$$

onde

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k)g_j(x_k), \quad b_i = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)g_i(x_k), \quad i, j = 1, 2, \ldots, n.$$

Neste caso temos que

$$\left.\begin{aligned}
a_{11} &= \sum_{k=1}^{8} g_1^2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} 1 = 8,\\
a_{12} = a_{21} &= \sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} x_k = 36\\
a_{22} &= \sum_{k=1}^{8} g_2^2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} x_k^2 = 204,\\
b_1 &= \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_1(x_k) = \sum_{k=1}^{8} f(x_k) = 9.2,\\
b_2 &= \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)x_k = 50.5.
\end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} 8 & 36 \\ 36 & 204 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.2 \\ 50.5 \end{pmatrix}$$

Resolvemos o sistema e obtemos $\alpha_1 = 0.1750$, $\alpha_2 = 0.2167$, ou seja que a reta que melhor se ajusta aos dados tem a forma $y = 0.2167x + 0.1750$.

(b) Agora queremos $f(x) \approx \varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2$. Temos que $n = 3$, $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$, $g_3(x) = x^2$. Para escrever as equações normais primeiro notamos que a_{11},

$a_{12} = a_{21}$, a_{22}, b_1 e b_2 são os mesmos que na parte (a). Para as outras entradas temos

$$\left.\begin{aligned} a_{13} = a_{31} &= \sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} x_k^2 = a_{22} = 204, \\ a_{23} = a_{32} &= \sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_3(x_k)) = \sum_{k=1}^{8} x_k^3 = 1296 \\ a_{33} &= \sum_{k=1}^{8} g_3^2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} x_k^4 = 8772, \\ b_3 &= \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_3(x_k) = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)x_k^2 = 319.1 \end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow \qquad \begin{bmatrix} 8 & 36 & 204 \\ 36 & 204 & 1296 \\ 204 & 1296 & 8772 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.2 \\ 50.5 \\ 319.1 \end{pmatrix}$$

Daí temos que $\alpha_1 = 0.4071$, $\alpha_2 = 0.0774$, $\alpha_3 = 0.0155$. O melhor ajuste é obtido com a parábola $y = 0.4071 + 0.0774\,x + 0.0155\,x^2$.

Para definir qual das curvas dá o melhor ajuste vamos calcular a soma dos quadrados dos residuos correspondentes

$$\delta = \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - \varphi(x_k)]^2$$

quando $\varphi(x) = 0.2167\,x + 0.1750$ temos $\delta = 0.0883$ e para $\varphi(x) = 0.4071 + 0.0774\,x + 0.0155\,x^2$, $\delta = 0.0481$. Portanto a parábola nos dá o melhor ajuste.

2. (a) Na seguinte figura mostramos o diagrama de dispersão para os dados da tabela. Note que os pontos se encontram alinhados numa vizinhança da linha em vermelho. Isto indica que podemos considerar que existe uma relação linear entre a altura e o peso.

   (b) Neste caso a variavél independente x representa a altura e a variável dependente y representa o peso. Queremos que $y \approx \alpha_1 + \alpha_2\,x$, temos $n = 2$, as funções bases $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$, e $m = 9$. Usando (1), obtemos o sistema de equações normais

$$\begin{bmatrix} 9 & 1567 \\ 1567 & 274021 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 646 \\ 113103 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \text{peso} \approx 0.5276 \times \text{altura} - 20.0780$$

   (c) Para uma altura de $175cm$, o peso estimado é $0.5276 \times \text{altura} - 20.0780 = 0.5276 \times 175 - 20.0780 = 72.2467$ (kg). Para estimar a altura x quando o peso $y = 80$ (kg), usamos que $y \approx 0.5276\,x - 20.0780$, logo $x \approx (y + 20.0780)/0.5276$. Obtemos que a altura estimada é $(80 + 20.0780)/0.5276 = 189.6854$ (cm)

   (d) Agora a variável independente x é o peso, e a variável dependente y a altura. Procuramos $y \approx \alpha_1 + \alpha_2\,x$, e usando (1) chegamos em

$$\begin{bmatrix} 9 & 646 \\ 646 & 46764 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1567 \\ 113103 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \text{altura} \approx 1.5857 \times \text{peso} + 60.2949$$

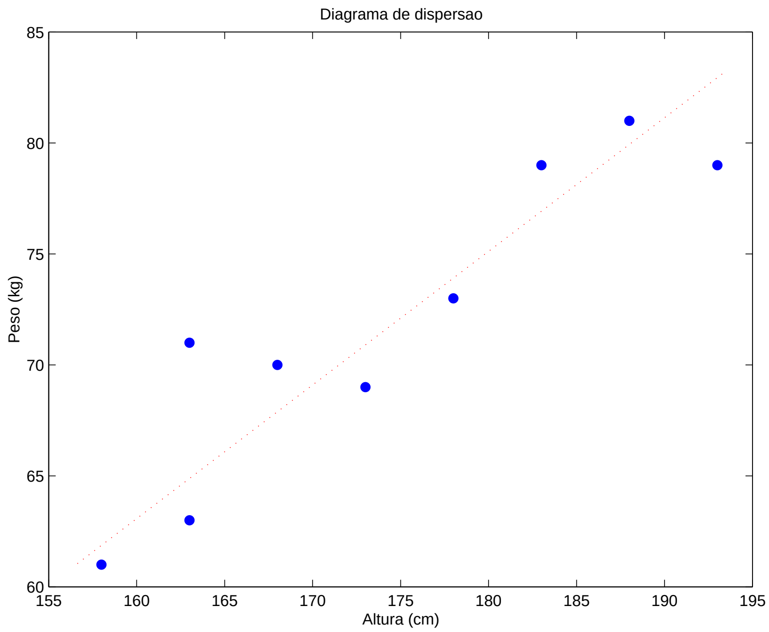

Figure 1: Diagrama de dispersão

(e) Usando a aproximação acima temos que para a altura $y = 175$ o peso $x \approx (y - 60.2949)/1.5857 = 72.3372$ (kg). Neste caso obtemos um valor maior em ≈ 0.1 (kg) que no item (c).

Por outro lado, para um peso de 80 kg a altura estimada é $1.5857 \times \text{peso} + 60.2949 = 187.1489$ (cm). Obtemos de esta forma um resultado menor em ≈ 2 (cm)

3. (a) Neste caso temos o modelo não linear $y \approx \varphi(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$. Aplicamos a linearização $z = 1/y$, obtemos que $z \approx a_0 + a_1 x$, e usamos o método dos quadrados mínimos considerando a tabela

x	-8	-6	-4	-2	0	2	4
z	1/30	1/10	1/9	1/6	1/5	1/4	1/4

Obtemos as seguintes equações

$$\begin{bmatrix} 7 & -14 \\ -14 & 140 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.1111 \\ -0.1444 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad y \approx \frac{1}{0.1958 + 0.0186\,x}.$$

Observe na figura 2 que os dados se ajustam a uma reta.

(b) O modelo não linear $y \approx \varphi(x) = a\,b^x$. Aplicamos a linearização $z = \log(y)$, obtemos que $z \approx \log(a) + \log(b)\,x = \alpha_1 + \alpha_2\,x$, $\alpha_1 = \log(a)$, $alpha_2 = \log(b)$, e usamos o método dos quadrados mínimos considerando a tabela

x	-8	-6	-4	-2	0	2	4
$z = \log(y)$	3.4012	2.3026	2.1972	1.7918	1.6094	1.3863	1.3863

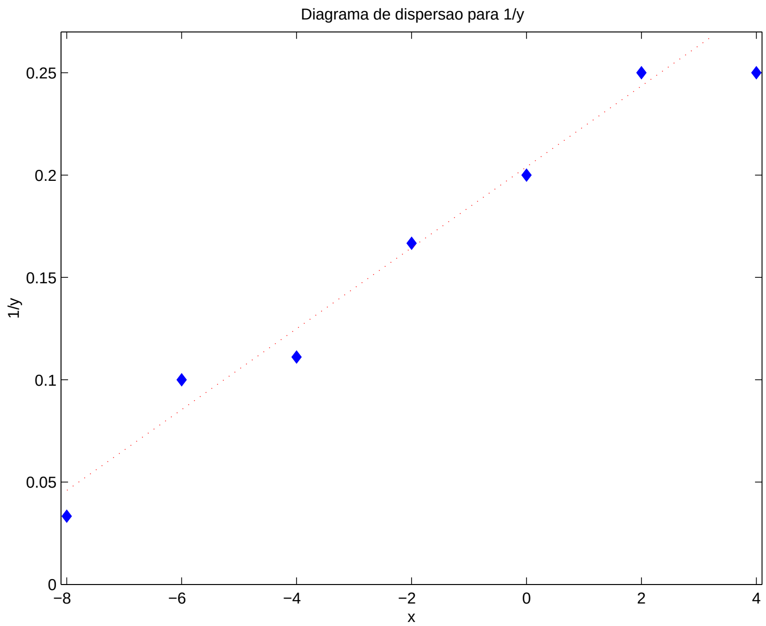

Figure 2: Diagrama de dispersão para $1/y$.

Obtemos as seguintes equações

$$\begin{bmatrix} 7 & -14 \\ -14 & 140 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14.0748 \\ -45.0797 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha_1 = 1.7084,\ \alpha_2 = -0.1512.$$

logo $a = \exp(\alpha_1) = 5.5201$, $b = \exp(\alpha_2) = 0.8597$ e finalmente $y \approx 5.5201 \cdot 0.8597^x$.

Observe na figura 3 como os dados se ajustam a uma reta.

(c) Para avaliar qual ajuste é melhor determinamos $\delta = \sum_{k=1}^m [z_k - \tilde{\varphi}(x_k)]^2$ para cada modelo linear $\tilde{\varphi}(x)$. No caso da transformação $z = 1/y$ obtemos $\delta = 0.0013$, e quando $z = \log(y)$ temos $\delta = 0.4830$. Concluimos que a curva $y = \frac{1}{0.1958+0.0186\,x}$ dá um melhor ajuste.

4. (a) Para isto observamos na figura 4, que o gráfico para $\log(y)$ indica um bom ajuste a uma reta.

(b) Considerando $y \approx a\,\exp(bx)$ temos que $z = \log(y) \approx \log(a) + b\,x = \alpha_1 + \alpha_2 x$, com $\alpha_1 = \log(a)$, $\alpha_2 = b$. Usando quadrados mínimos para o modelo linearizado temos que

$$\begin{bmatrix} 7 & 21 \\ 21 & 91 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 31.7587 \\ 105.2312 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha_1 = 3.4703,\ \alpha_2 = 0.3555,$$

logo $a = \exp(\alpha_1) = 32.1464$, $b = \alpha_2 = 0.3555$ e finalmente $y \approx 32.1464\,\exp(0.3555\,x)$.

Considerando $y \approx a\,x^b$ temos a linearização $z = \log(y) \approx \log(a) + b\,\log(x) = \alpha_1 + \alpha_2 \log(x)$, com $\alpha_1 = \log(a)$, $\alpha_2 = b$. Mas, como $\log(0) = -\infty$, não é possível aplicar o método dos quadrados mínimos para se fazer o ajuste.

Por outro lado qualquer curva $y = ax^b$ sempre dá $y = 0$ para $x = 0$ obtemos, e então o desvio nesse ponto será sempre igual a 32 e a soma dos quadrados dos desvios $\sum_{k=1}^m [y_k -$

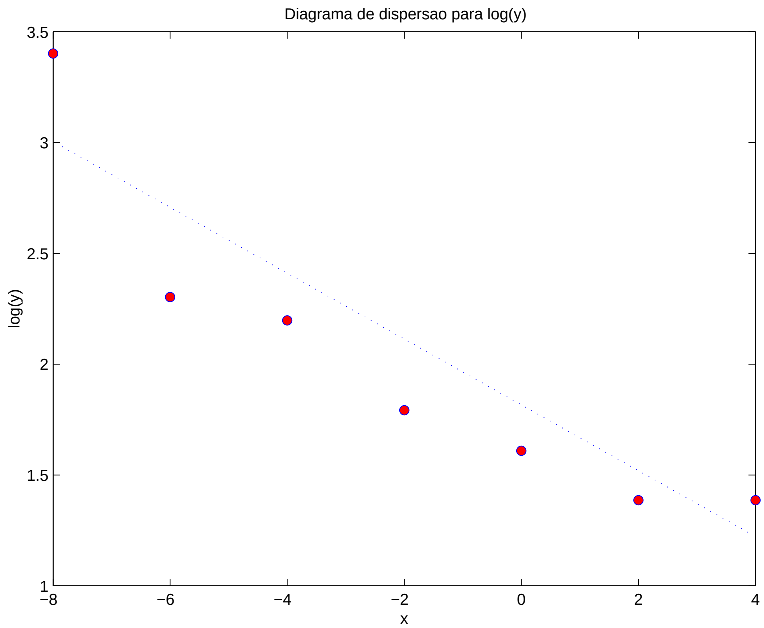

Figure 3: Diagrama de dispersão para $\log(y)$.

$ax_k^b]^2 \geq 32^2$. Este valor é maior que a soma dos quadrados dos desvios para a curva $y = 32.1464\,\exp(0.3555\,x)$.

(c) De acordo com a observação acima a melhor forma de avaliar $y(7)$ é usando $y = 32.1464\,\exp(0.3555\,x)$, e temos que $y(7) = 32.1464\,\exp(0.3555 \cdot 7) = 387.2741$.

5. Para se obter o ajuste, aplicamos a linearização $z = \log(y-1) = \log(a) + b\,x = \alpha_1 + \alpha_2 x$, com $\alpha_1 = \log(a)$, $\alpha_2 = b$.

$$\begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 7 & 16.5 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6.9604 \\ 16.4690 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha_1 = -0.0130,\ \alpha_2 = 1.0036,$$

logo $a = \exp(\alpha_1) = 0.9871$, $b = \alpha_2 = 1.0036$ e finalmente $y \approx 1 + 0.9871\,\exp(1.0036\,x)$.

Na figura 5 apresentamos os dados da tabela e a curva que melhor se ajusta aos dados, quando presentados na escala logarítmica observamos que o ajuste é excelete.

6. Esperamos que as duas retas não coincidam, já que os pontos não estão numa mesma reta e as duas formas de se fazer a aproximação medem desvios em diferentes direções.

Podemos provar que se os pontos não são colineares as duas retas não coincedem. Notamos primeiro que a reta $y = \alpha_1 + \alpha_2 x$ que faz o ajuste passa pelo centroide $(\bar{x}, \bar{y})$ onde $\bar{x} = m^{-1}\sum x_i$, $\bar{y} = m^{-1}\sum y_i$ (isto também acontece quando y é a variável independente). De fato o sistema de equações normais

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{pmatrix}$$

indica que $m\alpha_1 + \sum x_i \alpha_2 = \sum y_i$ ou seja $m\alpha_1 + m\bar{x}\alpha_2 = m\bar{y}$, logo $\bar{y} = \alpha_1 + \alpha_2 \bar{x}$, ou seja que o centroide está contido na reta.

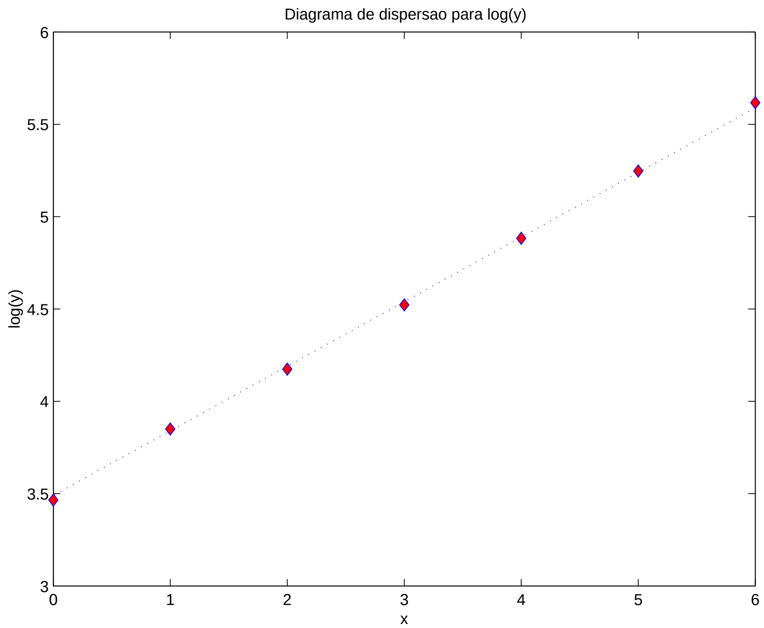

Figure 4: Diagrama de dispersão para $\log(y)$.

Colocando a origem do sistema de coordenadas no centroide, esta reta toma a forma $\tilde{y} = \alpha_2 \tilde{x}$ onde $(\tilde{x}, \tilde{y}) = (x - \bar{x}, y - \bar{y})$. De fato, considerando os dados $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i) = (x_i - \bar{x}, y_i - \bar{y})$ temos as equações normais

$$\begin{bmatrix} m & \sum \tilde{x}_i \\ \sum \tilde{x}_i & \sum \tilde{x}_i^2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum \tilde{y}_i \\ \sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & \sum \tilde{x}_i^2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i \end{pmatrix}$$

donde segue que

$$\beta_1 = 0, \quad \sum \tilde{x}_i^2 \beta_2 = \sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i \qquad \Rightarrow \qquad \alpha_2 = \beta_2 = \frac{\sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i}{\sum \tilde{x}_i^2}$$

E quando a variável independente é $\tilde{y}$ temos o ajuste pela reta $\tilde{x} = \bar{\alpha}_2 \tilde{y}$ onde

$$\sum \tilde{y}_i^2 \bar{\alpha}_2 = \sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i \qquad \Rightarrow \qquad \bar{\alpha}_2 = \frac{\sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i}{\sum \tilde{y}_i^2}$$

As duas retas coincidem quando $\alpha_2 \bar{\alpha}_2 = 1$, ou seja se $(\sum \tilde{x}_i \tilde{y}_i)^2 = (\sum \tilde{x}_i^2)(\sum \tilde{y}_i^2)$ e isto acontece apenas quando todos os pontos são colineares.

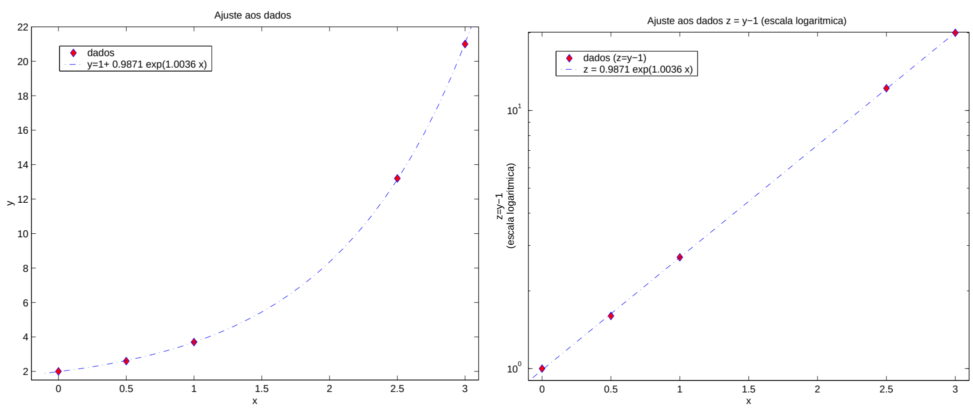

Figure 5: (esquerda) Dados e curva de melhor ajuste. (direita) Dados $(x, y-1)$ e curva de ajuste, na escala logarítmica do eixo das ordenadas.