Trabalho de Matemática Computacional
Licenciatura em Eng. Informática e Computadores
1 Sem. 03/04

Versão 8

Considere a seguinte tabela de valores de uma certa função f:

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
f_i	2.50252	2.21812	2.03617	1.66165	1.53966	1.52617	1.31931	1.21002	1.28199	1.24585

Sabe-se que os valores obtidos experimentalmente podem ser ajustados por uma função g, dependente de três parâmetros a, b, c , do tipo

$$g(x) = a + be^{cx}.$$

O objectivo deste trabalho é obter os valores destes parâmetros pelo método dos mínimos quadrados.

1. Para começar, suponhamos que o valor de a é conhecido aproximadamente($a = 1$) e, para obter os valores dos outros dois parâmetros, vamos usar uma função ajustadora mais simples,
   $\bar{g}(x) = ln(g(x) - 1) = ln\, b + cx$.
   - (a) Tendo em consideração que a nova função ajustadora corresponde a um ajustamento linear, obtenha os valores de b e c, usando o comando do Mathematica *Polynomial Fit*.
   - (b) Calcule a soma dos quadrados dos desvios da função g, construída com base nos valores de a,b e c considerados, em relação aos valores tabelados.
2. Passemos agora ao problema mais geral do ajustamento não-linear com a função ajustadora g. Deste modo, vamos refinar os valores dos parâmetros obtidos ao resolver o primeiro problema.
   - (a) Escreva o sistema de equações que lhe permite calcular os parâmetros a, b e c pelo método dos mínimos quadrados.
   - (b) Escreva funções em Mathematica que lhe permitam calcular a função F, correspondente ao sistema da alínea anterior, e a respectiva matriz Jacobiana, sendo dado qualquer vector (a_0, b_0, c_0). Sugere-se que use o comando D do Mathematica para calcular as derivadas parciais.
   - (c) Escreva um algoritmo em Mathematica que use o método de Newton-Raphson e as funções da alínea b) para obter uma solução aproximada do sistema da alínea a).
   - (d) Aplique o algoritmo da alínea anterior à resolução do sistema da alínea a), usando como aproximação inicial os valores de a, b e c obtidos no problema 1.
   - (e) Calcule a soma dos quadrados dos desvios da função g, construída com base nos novos valores de a,b e c, em relação aos valores tabelados. Compare com o valor obtido em 1-b) e comente.