Projeto Computacional 2 – Curso MS512

ATENÇÃO: Não será aceito após a data de entrega 29 de Junho (dia da P2).

1. Data de entrega 29 de Junho (dia da P2)

2. O projeto deverá ser entregue no formato impresso.

3. Atenção: Todas as referências abaixo citadas estão disponíveis na BIBIMECC; quando possível é indicado um link para download de material útil para execução do projeto computacional 2.

1) Essa atividade refere-se ao teorema SVD (Singular Value Decomposition) e suas aplicações. Pede-se fazer os seguintes itens:

(a) Enuncie e prove o teorema da decomposição SVD, seguindo, por exemplo, o livro "G.H.Golub and C.F.van Loan, Matrix Computations, 3.ed. The Johns Hopkins University Press"; esse livro tem várias edições. Esse teorema e sua prova "Singular Value Decomposition" fica no Capítulo 2. A decomposição SVD é restrita apenas para matrizes que tem a propriedade defenida-positiva e simétrica ? Justifique sua resposta.

(b) Faça uma interpretação geométrica da "Singular Value Decomposition".

Dicas: Complemente seu entendimento sobre a decomposição SVD, incluindo a questão do aspecto da interpretação geométrica, nos seguintes livros:

- L. N. Trefethen & D. Bau III – Numerical Linear Algebra, SIAM, 1997. Nesse livro procure por "Reduced SVD" e "Full SVD" (ambos na Lecture 4); uma demonstração de existência e unicidade da "Full SVD" também está disponível nesse livro (procure no final da Lecture 4, um pouco antes dos exercícios). Ainda nesse livro (bem no início da Lecture 4), veja uma interpretação geométrica da SVD. Nesse livro, "Full SVD" trata-se do mesmo teorema "SVD" do livro do Golub&Loan, Capítulo 2.

- Nos livros "D. S. Watkins, Fundamentals of Matrix Computations, New Jersey: John Wiley & Sons, 2 ed. (2002) ou 3ed., (2010)", "Reduced SVD" é chamado de "(Condensed SVD Theorem)" enquanto "(SVD Theorem)" é o mesmo do "Full SVD" ou simplesmente "SVD".

- Existem algumas variantes do teorema SVD para o caso especial quando uma matriz A é definita-positiva (e simétrica). Em particular, se A é definida positiva, a decomposição de Schur de A, a sua decomposição espectral, e a sua decomposição em valores singulares coincidem.

(c) Como tratar a compressão de imagens em figuras coloridas usando SVD ? Siga as intruções nas dicas 1 e 2. Utilize várias imagens coloridas em seu projeto para explorar diferentes cores. Imagens/fotos de natureza são muitos boas para essa finalidade. Por exemplo, digite "nature" na opção "image" do seu navegador para encontrar um conjunto de imagens de sua preferência.

Dica 1: Vimos em sala que podemos usar "Singular Value Decomposition" (SVD) para aplicação de compressão de imagens; os códigos executados em sala podem ser encontrados no link a seguir http://www.ime.unicamp.br/~ms512/sites/default/files/material-didatico/MS512-Aplicacao_SVD.pdf . Clique nesse link e depois siga as instruções para reproduzir os experimentos numéricos e aplicações mostrados em sala de aula (note que no primeiro link apresentado no arquivo acima tem uma explicação sobre os gráficos gerados em sala junto com uma explicção adicional sobre o processo de compressão de imagens, verifique !). Observa-se que no caso discutido em sala de aula, foram consideradas figuras em escala de cinza (note que no link acima as figuras "tiger" e "cat" são coloridas, mas foram convertidas antes da aplicação SVD).

Dica 2: Assim, uma pergunta natural seria: como tratar a compressão de imagens em figuras coloridas ? Para ajudar a responder essa pergunta, estude o material "**Singular Value Decomposition,** Investigation in Mathematics, Singular Value Decomposition, Rebekah Wheeler 10214927, 28th March 2013", que está disponível no link seguinte:
http://mathsforall.co.uk/documents/Singular%20Value%20Decomposition%20by%20Becky%20Wheeler.pdf

Considere também uma leitura do material disponível no link que segue logo abaixo:
http://msemac.redwoods.edu/~darnold/math45/laproj/fall2006/iancraig/SVD_paper.pdf

2) Enuncie e prove os seguintes resultados indicados nos itens abaixo.

(a) Teorema de Schur (ou Decomposição de Schur). Ver páginas 337-338 (D. S. Watkins, 2ed/2002) ou páginas 338-339 (D. S. Watkins, 3ed/2010).

(b) Teorema Espectral para matrizes simétricas reais. Ver páginas 340-341 (D. S. Watkins, 2ed/2002).

Obs.: O teorema espectral também fornece uma "decomposição canônica", chamada de "decomposição espectral" (ver página 182, Lecture 24 - L. N. Trefethen & D. Bau III – Numerical Linear Algebra, SIAM, 1997). Com efeito, existem diferenças fundamentais entre a "decomposição SVD" e a "decomposição de valores próprios/autovalores" ou "decomposição espectral". ***i)*** SVD utiliza duas bases diferentes (os conjuntos de vetores singulares à esquerda e à direita), enquanto que a "decomposição espectral" utiliza apenas uma única base, a saber, a base dos autorvetores. ***ii)*** SVD faz uso de uma base ortonormal, ao passo que a "decomposição espectral" utiliza uma base que geralmente não é ortogonal. ***iii)*** Nem todas as matrizes (mesmo as matrizes quadradas) têm uma "decomposição espectral" (i.e., nem sempre existe), mas todas as matrizes (até mesmo aquelas que são retangulares não-singulares) têm uma decomposição em valores singulares SVD. Verifique tais fatos e sua implicações no contexto de aplicações computacionais !

- **Dica:** Alguns desses resultados estão demonstrados em "P. Pulino, Algebra Linear e suas Aplicações: Notas de Aula, IMECC, UNICAMP, Janeiro de 2015 http://www.ime.unicamp.br/~pulino/ALESA/."

3) Faça um sumário sobre "Equação de Sylvester" (i.e., "Sylvester equation") e "Lei da Inércia de Sylvester" ("Sylvester's law of inertia") e verifique sua relevância em Álgebra Linear Computacional no escopo do curso MS512, considerando os aspectos da teoria matemática/análise numérica e aplicações no mundo real. James Joseph Sylvester inventou um grande número de termos matemáticos, e.g., "matriz" (em 1850), "graph/grafo" (combinatória) e "discriminante".

- **Dica:** Faça o download do material Nicholas J. Higham, ***Sylvester's Influence on Applied Mathematics*** *(ISSN 1361-2042).* Mathematics Today, 50(4). pp. 202-206 (2014) http://eprints.ma.man.ac.uk/2142/01/covered/MIMS_ep2014_26.pdf. Nesse material, do ponto de vista de análise numérica em álgebra linear ver referências [9] James W. Demmel e [21] Roger A. Horn and Charles R. Johnson entre várias outras lá citadas. Ver também Accuracy and stability of numerical algorithms / Nicholas J. Higham. Philadelphia, PA - SIAM, 2002 (capítulo 15 1st Ed, 1996 ou capítulo 16, 2nd Eq, 2002).

4) Essa atividade refere-se a “fatoração/decomposição QR” e ao “algoritmo QR”. Pede-se fazer os seguintes itens:

(a) Faça o dowloand do arquivo “materialQR.zip” em “Vídeos científicos e outros materiais” no site http://www.ime.unicamp.br/~ms512/sites/default/files/material-didatico/MS512-Aplicacao_SVD.pdf

Em seguida, execute os códigos em matlab “runQRgivensRot.m” e “runQRhouseholderRef.m”; esses códigos realizam a decomposição A=QR via transformações ortogonais pelas fatorações de Givens e Householder, respectivamente. Uma vez colocado a dimensão da matriz “A”, esses códigos realizam a fatoração QR. Para efeito de comparação, ao final, é mostrada a matriz “R” sobreposta na matriz “A”, computadas pelos programas acima e também uma matriz “R” calculada pela função do MATLAB. Note que na execução desses programas é mostrado a sequência de matrizes a partir de “A” até “R”; veja que a matriz “A” é gerada de forma aleatória.

Modifique cada um dos programas “runQRgivensRot.m” e “runQRhouseholderRef.m” para imprimir, em cada nível da iteração, suas respectivas matrizes de transformação ortogonal, a saber, “Transformação Givens” e “Transformação Householder”.

5) Considere os dois textos a seguir (que foram disponibilizados em sala):

- David S. Watkins, Understanding the QR algorithm *SIAM REVIEW*, Vol. 24, No. 4, pp. 427-440, 1982.
- David S. Watkins, The QR Algorithm Revisited, *SIAM REVIEW*, Vol. 50, No. 1, pp. 133–145, 2008.

a) Com base nesse dois textos, faça uma descrição dos principais argumentos para demonstração de convergência do método QR via sua equivalência com o método de iterações simultâneas, que é fundamentalmente uma generalização dos métodos das potências.

Dicas:
- Faça primeiro a leitura do “David S. Watkins, Understanding the QR algorithm SIAM REVIEW, Vol. 24, No. 4, pp. 427-440, 1982”, que resume bem toda a discussão para estabelecer a equivalência entre “Simultaneous Iteration <=> QR Algorithm”.
- No livro “L. N. Trefethen & D. Bau III – Numerical Linear Algebra, SIAM, 1997”, procure por “Simultaneous Iteration <=> QR Algorithm”, Lecture 28, Theorem 28.2 (página 215), Theorem 28.3 (página 216) e Theorem 28.4 (página 218).
- No livro “D. S. Watkins, Fundamentals of Matrix Computations, New Jersey: John Wiley & Sons, SEGUNDA EDIÇÃO (2002), ver “Section 6.2 Subspace Iteration, Simultaneous Iteration, and the QR Algorithm”, páginas 420-427.

6) Essa atividade refere-se ao tratamento de métodos construtivos de aproximação para modelos de sistemas de equações não lineares, seguindo o livro “***L. Burden e J. Douglas Faires, Análise Numérica, revisão técnica Helena Maria Ávila de Castro. São Paulo, SP : Cengage Learning, 2013.***” **Importante:** Trata-se exatamente da Tradução da 8ª edição norte-americana (temos vários exemplares desse livro em nossa BIBIMECC).

a) Formule em detalhes o método de ponto fixo para várias variáveis (Seção 10.1 do livro Burden & Faires, Tradução da 8ª edição) para a aproximação de sistemas de equações não lineares, indicando todos os passos em detalhes, incluindo pelo menos os enunciados dos teoremas. Comente *i)* as implicações matemáticas das hipóteses para efeito de aplicações, *ii)* implementação computacional e *iii)* número de avaliações por iteração.

b) Repetir o item a), mas para o método de Newton (Seção 10.2 do livro Burden & Faires, Tradução da 8ª edição).

c) Repetir o item a), mas para o método de Broyden (Seção 10.3 do livro Burden & Faires, Tradução da 8ª edição); o método de Broyden é uma variante do método de Newton, também conhecido como quasi-Newton.

d) Implemente os métodos dos itens b) e c) para a resolução dos exercícios 7 e 11 – ***do conjunto 10.3 de exercícios do livro Burden & Faires, Tradução da 8ª edição***. Para ambos os métodos dos itens b) e c), implemente também suas respectivas variantes que fazem uso da ***fórmula de Sherman-Morrison***, a qual é empregada para eliminar a necessidade de "inversão" de matrix por iteração. Faça um estudo comparativo mostrando **vangatens** e **desvantagens** desses métodos.

Dica: Para mais informações teóricas e opções computacionais consultem o livro "***C. T. Kelley, Solving Nonlinear Equations with Newton's Method, SIAM, 2003***"; tem na BIBIMECC. Vejam também os seguintes links: http://www4.ncsu.edu/~ctk/newtony.html (wabe page do autor C. T. Kelley) e http://www4.ncsu.edu/~ctk/newton/MATLAB.tar.gz

Observação: Com efeito, para o próposito de aplicações, o exercício 11 do livro Burden & Faires, Tradução da 8ª edição, trata de uma aplicação de mínimos quadrados em uma modelagem para estudar a eficiência de utilização da energia pelas larvas da traça "Sphinx modesta" (Pachysphinx modestus). Esse estudo pode ser relevante em agricultura, pois tem a possibilidade de aplicação no entendimento do efeito de herbivoria de insetos em vegetações. No livro C. T. Kelley tem outros dois exemplos de aplicações, o modelo "Chandrasekhar H-equation", uma equação integral, que surge na teoria da transferência radiativa. Um outro exemplo é a equação em derivadas parciais de convecção-difusão que descreve fenômenos físicos, onde as partículas de energia, ou outras quantidades físicas, são transferidas/transportadas em um sistema físico devido a dois processos: difusão e convecção. Pesquise você mesmo por outras aplicações no mundo real !

ATENÇÃO

1) Recomenda-se uma leitura cuidadosa dos enunciados e também que tirem proveito dos vários comandos e rotinas especializadas disponíveis no MATLAB. Claramente espera-se do estudante uma atitude crítica sobre qual é o método/algoritmo usado em cada um dos "comandos especializados" do MATLAB. Claro, se deseja, o estudante por implementar os métodos na linguagem de programação que julgar mais conveniente, tais como, "C", "FORTRAN", "R" etc...

2) Observações gerais para apresentação dos projetos. O projeto pode ser desenvolvido de forma individual ou em grupo, com no máximo (três) estudantes. Em hipótese alguma será permitido projetos com mais do que três estudantes. As rotinas computacionais utilizadas também deverão ser anexadas ao projeto no formato impresso, independentemente da linguagem de programação utilizada. A nota do projeto será composta da avaliação dos resultados apresentados (teóricos e computacionais). Soluções "soltas" ou "desconexas" não serão consideradas.

3) Sugestões para elaboração do projeto.
(a) Justifique todas as etapas do desenvolvimento do projeto.
(b) Faça um resumo dos métodos numéricos utilizados.
(c) Utilize recursos gráficos para auxiliar o desenvolvimento do projeto.
(d) Apresente os algoritmos dos métodos numéricos utilizados.
(e) Anexe as listagens dos programas.
(f) Apresente claramente os resultados numéricos obtidos fazendo uma análise objetiva.
(g) Apresente conclusão e bibliografia.