Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos

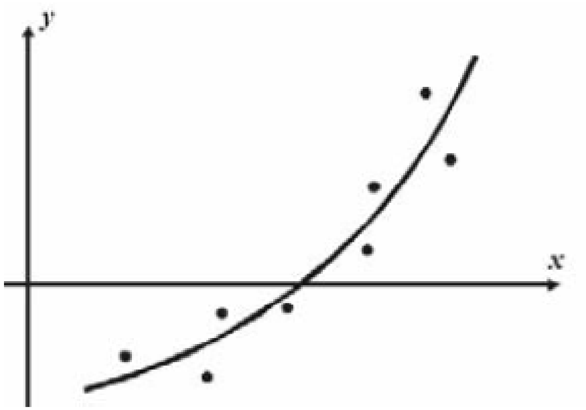
- O **método dos quadrados mínimos** é outra forma de aproximar uma função.

- Ao contrário do polinômio interpolador, visto anteriormente, agora não é necessário que o ajuste passe exatamente por cima dos pontos ajustados.

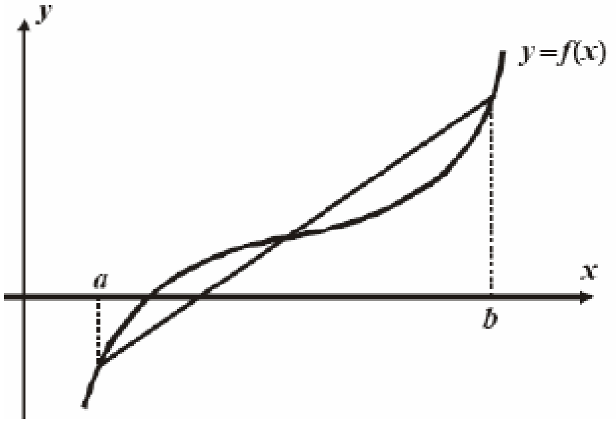
- Com esse método, encontramos uma função $\varphi(x)$ de um certo tipo pré-estabelecido (ex. reta, parábola, senoide) que melhor ajusta um conjunto de pontos ou uma função dada.

Método dos Quadrados Mínimos

- **Caso Discreto:** quando a função f é dada por uma tabela de valores.



- **Caso Contínuo:** quando a função f é dada por sua forma analítica.



Método dos Quadrados Mínimos – Caso Discreto

O problema do ajuste de curvas no caso em que se tem uma tabela de m pontos

x_1	x_2	x_3	$\dots$	x_m
$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	$\dots$	$f(x_m)$

com $x_1, x_2, x_3, \dots, x_m \in [a,b]$, consiste em: "escolhidas" n funções contínuas $g_1(x)$, $g_2(x)$, $g_3(x)$, $\dots$, $g_n(x)$, contínuas em $[a,b]$, obter n constantes $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ tais que a função $\varphi(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + a_3 g_3(x) + \dots + a_n g_n(x)$ se aproxime ao máximo de $f(x)$.

Este modelo matemático é linear pois os coeficientes que devem ser determinados $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ aparecem linearmente, embora as funções $g_1(x)$, $g_2(x)$, $g_3(x)$, $\dots$, $g_n(x)$ possam ser funções não lineares de x, como por exemplo, $g_1(x)= x^2$, $g_2(x)= e^x$, $g_3(x)= (1+x)^2$, etc.

Surge então a primeira pergunta: Como escolher as funções contínuas $g_1(x)$, $g_2(x)$, $g_3(x)$, … , $g_n(x)$?

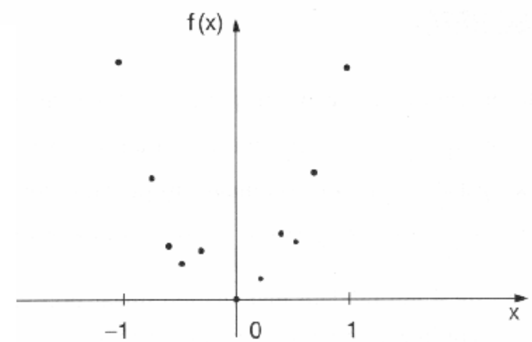
Esta escolha pode ser feita observando o gráfico dos pontos tabelados **(diagrama de dispersão)** ou baseando-se em fundamentos teóricos do experimento que forneceu a tabela. Portanto, dada uma tabela de pontos $(x_1, f(x_1))$, $(x_2,f(x_2))$, …., $(x_n,f(x_n))$, deve-se, em primeiro lugar colocar estes pontes num gráfico cartesiano e a partir daí pode-se visualizar a curva que melhor se ajusta aos dados.

EXEMPLO 1

Seja a tabela de pontos abaixo:

x	–1.0	– 0.75	– 0.6	– 0.5	– 0.3	0	0.2	0.4	0.5	0.7	1.0
f(x)	2.05	1.153	0.45	0.4	0.5	0	0.2	0.6	0.512	1.2	2.05

O diagrama de dispersão para esses pontos é apresentado ao lado:

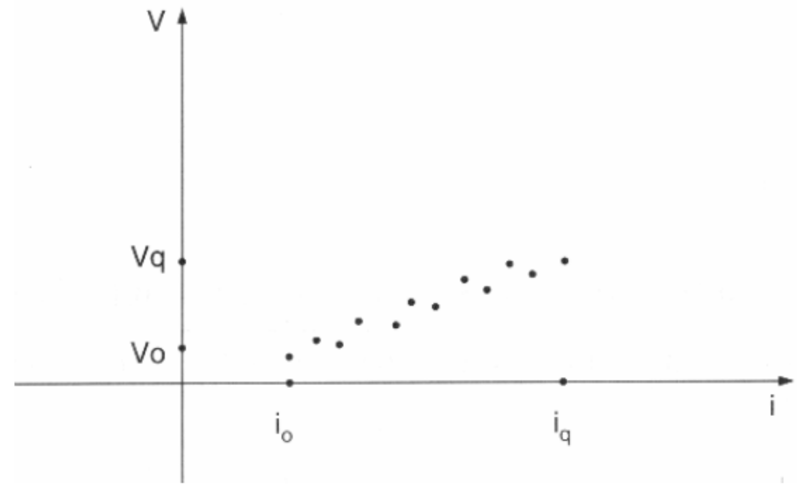


Esse diagrama se assemelha muito a uma parábola com centro na origem, não e?

Portanto, nesse caso, é natural escolhermos apenas uma função $g_1(x)=x^2$ e procurarmos então $\varphi(x) = ax^2$ (equação geral de uma parábola passando pela origem).

EXEMPLO 2

Se considerarmos uma experiência onde foram medidos vários valores de corrente elétrica (i) que passa por uma resistência (R) submetida a várias tensões (V), colocando os valores correspondentes de corrente elétrica e tensão em um gráfico podemos ter a figura ao lado:



Neste caso, existe uma fundamentação teórica relacionando a corrente com a tensão (V= R i; Lei de Ohm), isto é, V é uma função linear de i. Assim, $g_1(i)= i$ e $\varphi(i)= a\, g_1(i) = a\, i$. Queremos ajustar nesse caso uma reta.

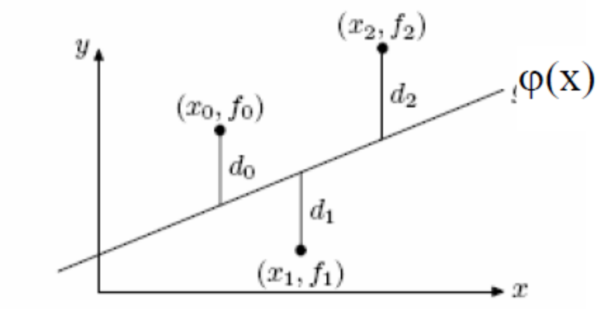
Surge agora a segunda pergunta: Qual parábola com equação αx^2 melhor se ajusta ao diagrama do exemplo 1 e qual reta, passando pela origem, melhor se ajusta ao diagrama do exemplo 2?

No caso geral, escolhidas as funções $g_1(x)$, $g_2(x)$, ..., $g_n(x)$, temos de estabelecer o conceito de proximidade entre as funções $\varphi(x)$ e $f(x)$ para obter as constantes a_1, a_2, a_3, …, a_n.

Uma idéia é impor que o desvio entre $f(x)$ e $\varphi(x)$, ou seja, $d_k=(f(x_k)-\varphi(x_k))$ seja mínimo para todos os pontos (k =1, 2, ..., m).

Existem varias formas de impor que os desvios sejam mínimos. Veremos nessa aula o método dos quadrados mínimos.

Seja $d_k = f(x_k) - \varphi(x_k)$ o desvio em x_k.



O método dos quadrados mínimos consiste em escolher os coeficientes a_1, a_2, a_3, … , a_n de tal forma que a soma dos quadrados dos desvios seja mínima, isto é: $\sum_{k=1}^{m} d_k^2 = \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - \varphi(x_k)]^2$ deve ser mínimo. $\longrightarrow$ A derivada tem que ser igual a zero!

Assim, os coeficientes $a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n$ que fazem com que $\varphi(x)$ se aproxime ao máximo de $f(x)$, são os que minimizam a função:

$$F(a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n) = \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - \varphi(x_k)]^2 = \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - a_1 g_1(x_k) - a_2 g_2(x_k) - a_3 g_3(x_k) - \cdots - a_n g_n(x_k)]^2$$

Para isto é necessário que:

$$\frac{\partial F}{\partial a_j}(a_1, a_2, a_3, \cdots, a_n) = 0, \quad j = 1, 2, 3, \ldots, n, \text{ isto é:}$$

Obs: A derivada tem que ser zero para acharmos o valor mínimo de F.

$$\frac{\partial F}{\partial a_j}(a_1, a_2, a_3, \cdots, a_n) =$$

$$2 \cdot \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - a_1 g_1(x_k) - a_2 g_2(x_k) - \cdots - a_n g_n(x_k)] \cdot [-g_j(x_k)] = 0, \quad j = 1, 2, 3, \ldots, n$$

ou

$$\sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - a_1 g_1(x_k) - a_2 g_2(x_k) - \cdots - a_n g_n(x_k)] \cdot [g_j(x_k)] = 0, \quad j = 1, 2, 3, \ldots, n$$

Assim, tem-se o seguinte sistema de n equações lineares com n incógnitas a_1, a_2, $a_3, \cdots, a_n$:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - a_1 g_1(x_k) - a_2 g_2(x_k) - \cdots - a_n g_n(x_k)] \cdot [g_1(x_k)] = 0 \\ \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - a_1 g_1(x_k) - a_2 g_2(x_k) - \cdots - a_n g_n(x_k)] \cdot [g_2(x_k)] = 0 \\ \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - a_1 g_1(x_k) - a_2 g_2(x_k) - \cdots - a_n g_n(x_k)] \cdot [g_n(x_k)] = 0 \end{cases}$$

Que é equivalente a:

$$\boxed{\begin{cases}\left[\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\cdot g_1(x_k)\right]\cdot a_1+\cdots+\left[\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\cdot g_n(x_k)\right]\cdot a_n=\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\cdot f(x_k)\\ \left[\sum_{k=1}^{m} g_2(x_k)\cdot g_1(x_k)\right]\cdot a_1+\cdots+\left[\sum_{k=1}^{m} g_2(x_k)\cdot g_n(x_k)\right]\cdot a_n=\sum_{k=1}^{m} g_2(x_k)\cdot f(x_k)\\ \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots\\ \left[\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\cdot g_1(x_k)\right]\cdot a_1+\cdots+\left[\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\cdot g_n(x_k)\right]\cdot a_n=\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\cdot f(x_k)\end{cases}}$$

As equações deste sistema linear são chamadas de equações normais.

Este sistema pode ser escrito na forma matricial $\hat{A} \cdot \hat{a} = \hat{b}$

$$\begin{cases} a_{11}\,a_1 + a_{12}\,a_2 + \cdots + a_{1n}\,a_n = b_1 \\ a_{21}\,a_1 + a_{22}\,a_2 + \cdots + a_{2n}\,a_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}\,a_1 + a_{n2}\,a_2 + \cdots + a_{nn}\,a_n = b_n \end{cases} \longrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$$

onde $A = (a_{ij})$ tal que $a_{ij} = \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k) \cdot g_j(x_k) = \sum_{k=1}^{m} g_j(x_k) \cdot g_i(x_k) = a_{ji}$, ou seja, A é uma matriz simétrica;

$a_i = [\, a_1, a_2, \dots, a_n \,]^T$ e $b = [b_1, b_2, \cdots, b_n]^T$ é tal que $b_i = \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k) \cdot f(x_k)$.

Passos para aplicar o Método dos Quadrados Mínimos

PASSO 1 – Depois de escolhida a função ajuste φ(x) identificar nela as funções auxiliares g(x) tal que φ(x) seja do tipo:

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i g_i(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + a_3 g_3(x) ... + a_n g_n(x) \qquad n \in \mathrm{I}$$

PASSO 2 – Montar o sistema de equações. O numero de equações do sistema igual ao numero de funções auxiliares $g_i(x)$ (igual ao numero de incógnitas a_i)

Ex 1. No caso da reta: $\varphi(x) = a_1 + a_2 x \rightarrow g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$

Teremos um sistema com 2 equações. $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \times \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}}_{\text{incógnitas}} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$

Ex 2. No caso de uma parábola: $\varphi(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 \rightarrow g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = x^2$

Teremos um sistema com 3 equações.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \times \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}}_{\text{incógnitas}} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

Ex 3. No caso de uma exponencial simples: $\varphi(x) = a_1 e^x \rightarrow g_1(x) = e^x$

Teremos um sistema com 1 equação. $a_{11} \times \underbrace{a_1}_{\text{incógnita}} = b_1$

PASSO 3 – Calcular os coeficientes a_{ij} e b_i do passo 2. Esses coeficientes são definidos pelos seguintes somatórios e após seu calculo obteremos números.

número de pontos experimentais.

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k) g_j(x_k) = a_{ji} \qquad\qquad b_i = \sum_{k=1}^{m} f(x_k) g_i(x_k)$$

PASSO 4 – Reescrever o sistema de equações do passo 2 (agora os a_{ij} e b_i são números) e resolvê-lo, por exemplo, utilizando o método de eliminação de Gauss ou algum método iterativo (Gauss-Jacobi ou Gauss-Seidel).

Exercício 1

Ajuste os dados abaixo pelo método dos quadrados mínimos utilizando:

a) uma reta $\varphi(x) = a_1 + a_2 x \rightarrow g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$

b) uma parábola do tipo $\varphi(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 \rightarrow g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = x^2$

x	1	2	3	4	5	6	7	8
y	0.5	0.6	0.9	0.8	1.2	1.5	1.7	2.0

Solução a)

Nesse caso temos $f(x) \approx \varphi(x) = a_1 + a_2 x$ o que resulta em termos $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$

Para encontrarmos a_1 e a_2 resolveremos o sistema de 2 equações abaixo:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

Escrevendo o sistema em termos dos a_{ij} e b_i , ficamos assim:

Temos 8 pontos experimentais

$$\begin{cases} \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_1(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_1(x_k)\right]a_2 = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_1(x_k) \\ \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_2(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_2(x_k)\right]a_2 = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_2(x_k) \end{cases}$$

Cada somatório da parte esquerda resultará em:

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_1(x_k)}_{1}\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = \sum_{k=1}^{8} (g_1(x_k))^2 = 1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1 = 8$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_2(x_k)}_{x_k}\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = 1\times1+2\times1+3\times1+4\times1+5\times1+6\times1+7\times1+8\times1 = 36$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_1(x_k)}_{1}\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = 1\times1+1\times2+1\times3+1\times4+1\times5+1\times6+1\times7+1\times8 = 36$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_2(x_k)}_{x_k}\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = \sum_{k=1}^{8} (g_2(x_k))^2 = 1\times1+2\times2+3\times3+4\times4+5\times5+6\times6+7\times7+8\times8 = 204$$

Cada somatório da parte direita resultará em:

$$\sum_{k=1}^{8} f(x_k)\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = 0.5\times1+0.6\times1+0.9\times1+0.8\times1+1.2\times1+1.5\times1+1.7\times1+2.0\times1 = 9.2$$

$$\sum_{k=1}^{8} f(x_k)\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = 0.5\times1+0.6\times2+0.9\times3+0.8\times4+1.2\times5+1.5\times6+1.7\times7+2.0\times8 = 50.5$$

Reescrevendo o sistema de equações teremos:

$$\begin{cases} 8a_1 + 36a_2 = 9.2 \\ 36a_1 + 204a_2 = 50.5 \end{cases} \xrightarrow[L_1 = -4.5L_2]{} \begin{cases} -36a_1 - 162a_2 = -41.5 \\ 36a_1 + 204a_2 = 50.5 \end{cases}$$

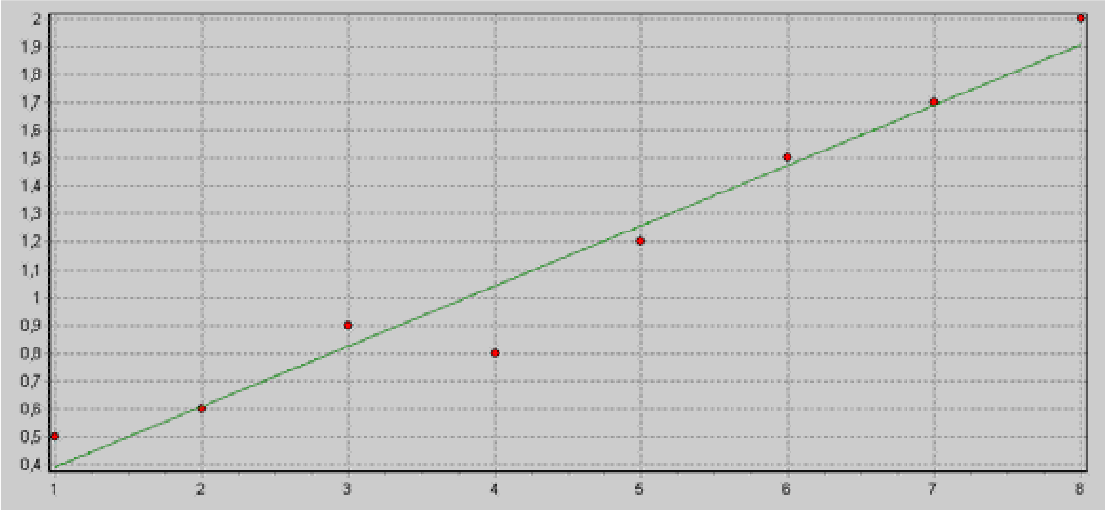
Subtraindo as duas equações encontramos:

$$a_2 = \frac{50.5 - 41.5}{204 - 162} = 0.214 \quad \text{e} \quad a_1 = \frac{50 - 204 \times 0.214}{36} = 0.176$$

Podemos agora escrever a equação que ajusta os pontos experimentais $f(x) \approx \varphi(x) = a_1 + a_2 x$.

Resposta:

$\varphi(x) = 0.176 + 0.214\,x$



Solução b)

Nesse caso temos $f(x) \approx \varphi(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2$ o que resulta em termos $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = x^2$. De forma análoga ao caso anterior, para encontrarmos a_1, a_2 e a_3 resolveremos o sistema de 3 equações abaixo:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$$

Escrevendo o sistema em termos dos a_{ij} e b_i , ficamos assim:

$$\begin{cases} \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_1(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_1(x_k)\right]a_2 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_3(x_k)g_1(x_k)\right]a_3 = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_1(x_k) \\ \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_2(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_2(x_k)\right]a_2 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_3(x_k)g_2(x_k)\right]a_3 = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_2(x_k) \\ \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_3(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_3(x_k)\right]a_2 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_3(x_k)g_3(x_k)\right]a_3 = \sum_{k=1}^{8} f(x_k)g_3(x_k) \end{cases}$$

Cada somatório da parte esquerda resultará em:

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_1(x_k)}_{1}\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = \sum_{k=1}^{8} (g_1(x_k))^2 = 1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1+1\times1 = 8$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_2(x_k)}_{x_k}\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = 1\times1+2\times1+3\times1+4\times1+5\times1+6\times1+7\times1+8\times1 = 36$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2}\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = 1^2\times1+2^2\times1+3^2\times1+4^2\times1+5^2\times1+6^2\times1+7^2\times1+8^2\times1 = 204$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_1(x_k)}_{1}\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = 1\times1+1\times2+1\times3+1\times4+1\times5+1\times6+1\times7+1\times8 = 36$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_2(x_k)}_{x_k}\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = \sum_{k=1}^{8} (g_2(x_k))^2 = 1\times1+2\times2+3\times3+4\times4+5\times5+6\times6+7\times7+8\times8 = 204$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2}\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = 1^2\times1+2^2\times2+3^2\times3+4^2\times4+5^2\times5+6^2\times6+7^2\times7+8^2\times8 = 1296$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_1(x_k)}_{1}\underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2} = 1\times1^2+1\times2^2+1\times3^2+1\times4^2+1\times5^2+1\times6^2+1\times7^2+1\times8^2 = 204$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_2(x_k)}_{x_k}\underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2} = 1\times1^2+2\times2^2+3\times3^2+4\times4^2+5\times5^2+6\times6^2+7\times7^2+8\times8^2 = 1296$$

$$\sum_{k=1}^{8} \underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2}\underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2} = \sum_{k=1}^{8} (g_3(x_k))^2 = 1^2\times1^2+2^2\times2^2+3^2\times3^2+4^2\times4^2+5^2\times5^2+6^2\times6^2+7^2\times7^2+8^2\times8^2 = 8772$$

Cada somatório da parte direita resultara em:

$$\sum_{k=1}^{8} f(x_k)\underbrace{g_1(x_k)}_{1} = 0.5\times1+0.6\times1+0.9\times1+0.8\times1+1.2\times1+1.5\times1+1.7\times1+2.0\times1 = 9.2$$

$$\sum_{k=1}^{8} f(x_k)\underbrace{g_2(x_k)}_{x_k} = 0.5\times1+0.6\times2+0.9\times3+0.8\times4+1.2\times5+1.5\times6+1.7\times7+2.0\times8 = 50.5$$

$$\sum_{k=1}^{8} f(x_k)\underbrace{g_3(x_k)}_{x_k^2} = 0.5\times1^2+0.6\times2^2+0.9\times3^2+0.8\times4^2+1.2\times5^2+1.5\times6^2+1.7\times7^2+2.0\times8^2 = 319.1$$

Reescrevendo o sistema de equações teremos:

$$\begin{cases} 8a_1 + 36a_2 + 204a_3 = 9.2 \\ 36a_1 + 204a_2 + 1296a_3 = 50.5 \\ 204a_1 + 1296a_2 + 8772a_3 = 319.1 \end{cases}$$

Nesse caso utilizaremos o método direto de eliminação de Gauss para resolver o sistema de equações.

matriz sanduíche otimizada

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 204 & 1296 & 8772 & 319.1 \\ 36 & 204 & 1296 & 50.5 \\ 8 & 36 & 204 & 9.2 \end{array}\right)$$

1ª etapa de eliminação

$$\begin{pmatrix} 204 & 1296 & 8772 & 319.1 \\ 0 & -24.706 & -252 & -5.812 \\ 0 & -14.823 & -140 & -3.133 \end{pmatrix}$$

2ª etapa de eliminação

$$\begin{pmatrix} 204 & 1296 & 8772 & 319.1 \\ 0 & -24.706 & -252 & -5.812 \\ 0 & 0 & 11.193 & 0.354 \end{pmatrix}$$

re-escrevendo o sistema de equações

$$\begin{cases} 204a_1 + 1296\,a_2 + 8772a_3 = 319.1 \\ -24.706\,a_2 - 252\,a_3 = -5.812 \\ 11.193a_3 = 0.354 \end{cases}$$

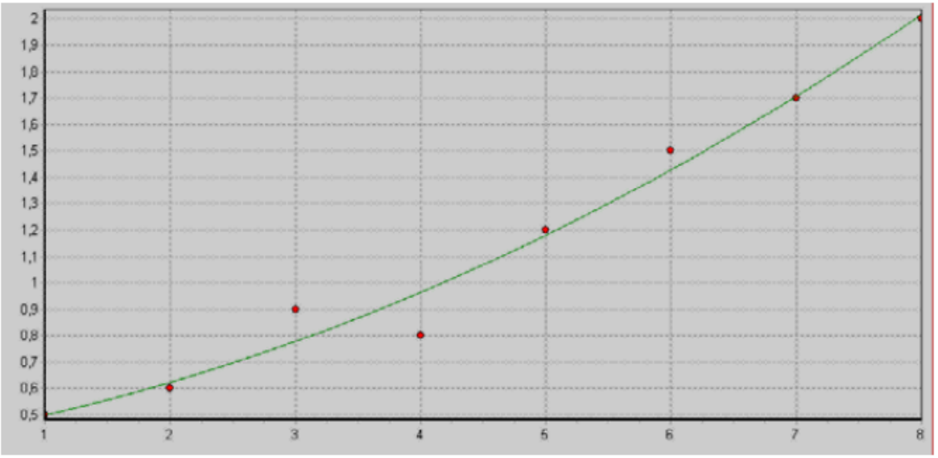
Resolvendo o sistema de baixo para cima encontramos:

$a_3 = 0.0316$, $a_2 = -0.0871$ e $a_1 = 0.7587$

Podemos agora escrever a equação da parábola que melhor ajusta os pontos experimentais $f(x) \approx \varphi(x) = a_1 + a_2x + a_3x^2$.

Resposta:

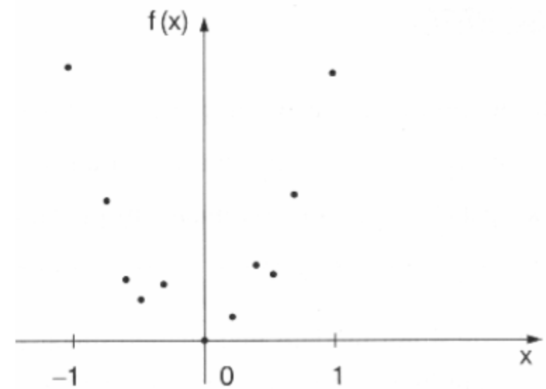
$\boldsymbol{\varphi(x)} = 0.7587 \ -0.0871\ x \ + 0.0316\ x^2$



Exercício 2

Resolveremos agora o exemplo 1 que vimos no inicio da aula. A partir da função tabelada abaixo, desenhamos o diagrama de dispersão e percebemos que a melhor curva que ajusta os pontos seria um a parábola passando pela origem, ou seja, $f(x) \approx \varphi(x) = a_1 x^2$ (neste caso teremos apenas 1 função $g_1(x) = x^2$).

x	–1.0	– 0.75	– 0.6	– 0.5	– 0.3	0	0.2	0.4	0.5	0.7	1
f(x)	2.05	+ 1.153	0.45	0.4	0.5	0	0.2	0.6	0.512	1.2	2.05



Como só temos uma função de $g(x)$ e $f(x) \approx \varphi(x) = a_1 x^2$ temos de resolver apenas a equação e com isso encontramos diretamente o valor de a_1

$$a_{11} \times a_1 = b_1$$

$$\sum_{k=1}^{11} \underbrace{g_1(x_k)}_{x_k^2} \underbrace{g_1(x_k)}_{x_k^2} \times a_1 = \sum_{k=1}^{11} \underbrace{g_1(x_k)}_{x_k^2} f(x_k)$$

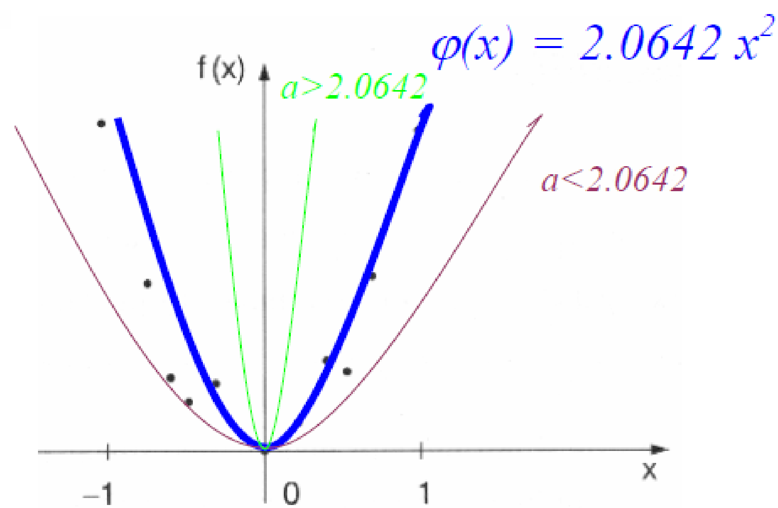
Resolvendo os dois somatórios temos:

$$\sum_{k=1}^{11} \underbrace{(g_1(x_k))^2}_{(x_k^2)^2} = 1 + 0.3164 + 0.1296 + 0.0625 + 0.0081 + 0 + 0.0016 + 0.0256 + 0.0625 + 0.2401 + 1 = 2.8464$$

$$\sum_{k=1}^{11} f(x_k)\underbrace{g_1(x_k)}_{x_k^2} = 2.05 + 0.6486 + 0.162 + 0.1 + 0.045 + 0 + 0.008 + 0.096 + 0.128 + 0.588 + 2.05 = 5.8756$$

Logo nossa equação é $2.8464\,a = 5.8756 \longrightarrow a = 2.0642$

Então $\varphi(x) = 2.0642\,x^2$ é a parábola que melhor se aproxima dos pontos tabelados segundo o método dos mínimos quadrados.



Exercícios

(1) Ajuste os dados abaixo pelo método dos quadrados mínimos utilizando:

a) uma reta $\varphi(x) = a_1 + a_2 x \rightarrow g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$

b) uma parábola do tipo $\varphi(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 \rightarrow g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = x^2$

x	0	1	2	3	4
y	27	42	60	87	127

Resp: a) $\varphi(x) = 19{,}6 + 24{,}5\,x$
b) $\varphi(x) = 28{,}02 + 7{,}64\,x + 4{,}21\,x^2$

(2) Considere a tabela abaixo:

x	0.5	0.75	1	1.5	2	2.5	3
y	-2.8	-0.6	1	3.2	4.8	6	7

a) Faça o gráfico de dispersão e verifique que uma função para ajustar esses dados possui a forma $\varphi(x) = a_1 \ln(x) + a_2$.

b) Utilize o método dos quadrados mínimos para ajustar os valores da tabela à função $\varphi(x) = a_1 \ln(x) + a_2$.

Método dos Quadrados Mínimos – Caso Contínuo

Para simplificar a notação, desenvolveremos aqui o caso em que "escolhemos" apenas duas funções.

Sejam então f(x) contínua em um intervalo [a, b] e $g_1(x)$ e $g_2(x)$ duas funções contínuas em [a, b] que foram escolhidas de alguma forma. É preciso encontrar duas constantes reais α_1 e α_2 tais que $\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x)$ esteja o "mais próximo possível" de f(x).

Seguindo o critério dos quadrados mínimos para o conceito de proximidade entre $\varphi(x)$ e f(x), os coeficientes α_1, α_2 a serem obtidos deverão ser tais que o valor de $\int_a^b [f(x) - \varphi(x)]^2 \, dx$ seja o menor possível.

Geometricamente, isto significa que a área entre as curvas f(x) e $\varphi(x)$ seja mínima.

Portanto, o problema consiste em obter o mínimo para

$$\int_a^b [f(x) - \varphi(x)]^2\,dx = \int_a^b [f(x)^2 - 2f(x)\,\varphi(x) + \varphi(x)^2]\,dx =$$

$$= \int_a^b \{f(x)^2 - 2f(x)[\alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x)] + \alpha_1^2 g_1^2(x) +$$

$$+ 2\alpha_1\alpha_2 g_1(x)\,g_2(x) + \alpha_2^2 g_2^2(x)\}\,dx$$

$$= \int_a^b f(x)^2\,dx - [2\int_a^b f(x)g_1(x)\,dx]\,\alpha_1 - [2\int_a^b f(x)g_2(x)\,dx]\,\alpha_2 +$$
$$+ [\int_a^b g_1^2(x)\,dx]\,\alpha_1^2 + [2\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx]\,\alpha_1\alpha_2 +$$

$$+ [\int_a^b g_2^2(x)\,dx]\,\alpha_2^2 = F(\alpha_1,\ \alpha_2)$$

$$\Rightarrow \int_a^b [f(x) - \varphi(x)]^2\,dx = F(\alpha_1, \alpha_2)$$

Com o mesmo argumento do caso discreto, temos de achar os pontos críticos de F, ou seja, achar (α_1, α_2) tal que

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_i}\right|_{(\alpha_1,\ \alpha_2)} = 0, \quad i = 1,2.$$

$$i = 1 \Rightarrow \left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_1}\right|_{(\alpha_1,\ \alpha_2)} = -2\int_a^b f(x)g_1(x)\,dx + [2\int_a^b g_1^2(x)\,dx]\,\alpha_1 +$$

$$+ [2\int_a^b g_1(x)\,g_2(x)\,dx]\,\alpha_2$$

$$i = 2 \Rightarrow \left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_2}\right|_{(\alpha_1,\ \alpha_2)} = -2\int_a^b f(x)g_2(x)\,dx + [2\int_a^b g_2^2(x)\,dx]\,\alpha_2 +$$

$$+ [2\int_a^b g_1(x)\,g_2(x)\,dx]\,\alpha_1$$

Assim, $\left.\dfrac{\partial F}{\partial \alpha_1}\right|_{(\alpha_1,\ \alpha_2)} = \left.\dfrac{\partial F}{\partial \alpha_2}\right|_{(\alpha_1,\ \alpha_2)} = 0 \Rightarrow$

$$\begin{cases} \left[\int_a^b g_1^2(x)\,dx\right]\alpha_1 + \left[\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx\right]\alpha_2 = \int_a^b f(x)g_1(x)\,dx \\ \left[\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx\right]\alpha_1 + \left[\int_a^b g_2^2(x)\,dx\right]\alpha_2 = \int_a^b f(x)g_2(x)\,dx \end{cases} \qquad (3)$$

Desse modo, obtemos o sistema linear

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 = b_2 \end{cases}$$

$$\alpha = (\alpha_1\ \alpha_2)^T, \quad b = (b_1\ b_2)^T.$$

onde

$$a_{11} = \int_a^b g_1^2(x)\,dx, \quad a_{12} = \int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx = \int_a^b g_2(x)g_1(x)\,dx = a_{21}$$

$$a_{22} = \int_a^b g_2^2(x)\,dx$$

$$b_1 = \int_a^b f(x)g_1(x)\,dx \quad \text{e} \quad b_2 = \int_a^b f(x)g_2(x)\,dx,$$

Exemplo: Aproxime a função $f(x) = 4x^3$ por um polinômio do primeiro grau, no intervalo $[0,1]$.

Solução: Temos que:

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$$

$$(g_1(x) \equiv 1 \qquad g_2(x) = x).$$

Vamos obter a solução do sistema linear $A\alpha = b$, onde

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad \alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix},$$

$$a_{11} = \int_a^b g_1^2(x)dx = \int_0^1 1dx = 1 \qquad a_{22} = \int_a^b g_2^2(x)dx = \int_0^1 x^2dx = \frac{x^3}{3}\Big|_0^1 = \frac{1}{3}$$

$$a_{12} = \int_a^b g_1(x)\, g_2(x)dx = \int_0^1 xdx = \frac{x^2}{2}\Big|_0^1 = \frac{1}{2} = a_{21}$$

$$b_1 = \int_a^b f(x)\, g_1(x)dx = \int_0^1 4x^3 dx = \frac{4x^4}{4}\Big|_0^1 = 1$$

$$b_2 = \int_a^b f(x)\, g_2(x)dx = \int_0^1 4x^3 x dx = \frac{4x^5}{5}\Big|_0^1 = \frac{4}{5}$$

Temos então o sistema

$$\begin{cases} 1\alpha_1 + \frac{1}{2}\alpha_2 = 1 \\ \frac{1}{2}\alpha_1 + \frac{1}{3}\alpha_2 = \frac{4}{5} \end{cases} \Rightarrow \alpha_1 = -\frac{4}{5},\ \alpha_2 = \frac{18}{5}.$$

Logo, a aproximação por quadrados mínimos de $f(x) = 4x^3$ no intervalo $[0, 1]$, por um polinômio de grau 1, é a reta $\varphi(x) = \frac{18}{5}x - \frac{4}{5}$.

Observação: Considere o sistema de equações normais:

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 = b_2 \end{cases} \text{ ou } A\alpha = b, \text{ onde } A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

$$\alpha = (\alpha_1\ \alpha_2)^T, \quad b = (b_1\ b_2)^T.$$

Demonstra-se que, se as funções escolhidas $g_1(x)$ e $g_2(x)$ forem linearmente independentes, o determinante da matriz A é diferente de zero, o que implica que o sistema linear (3) admite única solução $(\overline{\alpha}_1, \overline{\alpha}_2)$. Ainda mais, demonstra-se também que esta solução é o ponto em que a função $F(\alpha_1, \alpha_2)$ atinge seu valor mínimo.

Usando aqui a definição de *produto escalar de duas funções* p(x) e q(x) no intervalo [a, b] por

$$\langle p, q \rangle = \int_a^b p(x)\, q(x)\, dx, \qquad (4)$$

teremos que, no caso em que queremos aproximar

$f(x) \approx \alpha_1 g_1(x) + \ldots + \alpha_n g_n(x)$ o sistema normal $A\alpha = b$ fica

$$A = (a_{ij}) = \langle g_i, g_j \rangle = \int_a^b g_i(x)\, g_j(x)\, dx = \langle g_j, g_i \rangle$$

$$b = (b_i) = \langle f, g_i \rangle = \int_a^b f(x)\, g_i(x)\, dx.$$

Exercício:

4- Aproxime, pelo método dos quadrados mínimos, a função $f(x) = x^4 - 5x$ no intervalo $[-1, 1]$ por um polinômio do segundo grau: $\varphi(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2$.

Método dos Quadrados Mínimos (Modelo Não Linear)

Em alguns casos, a família de funções escolhidas pode ser não linear nos parâmetros, como, por exemplo, se ao diagrama de dispersão de uma determinada função se ajustar uma exponencial do tipo $f(x) \approx \varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$, α_1 e α_2 positivos.

Para se aplicar o método dos quadrados mínimos, com o que já estudamos neste capítulo, é necessário que se efetue uma linearização do problema através de alguma transformação conveniente.

Por exemplo:

$$y \approx \alpha_1 e^{-\alpha_2 x} \Rightarrow z = \ln(y) \approx \ln(\alpha_1) - \alpha_2 x.$$

Se $a_1 = \ln(\alpha_1)$ e $a_2 = -\alpha_2 \Rightarrow \ln(y) \approx a_1 + a_2 x = \phi(x)$ que é um problema linear nos parâmetros a_1 e a_2.

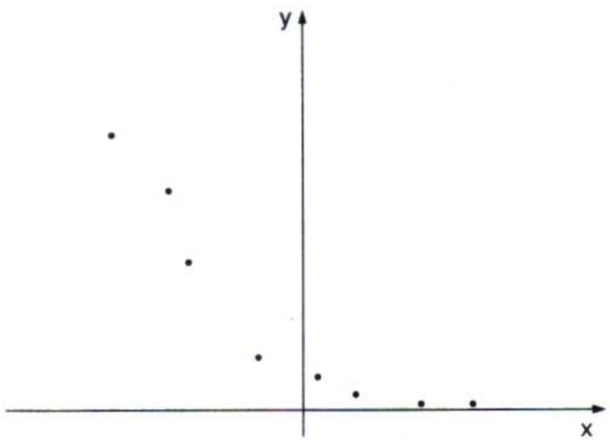
O método dos quadrados mínimos pode então ser aplicado na resolução do problema linearizado. Obtidos os parâmetros deste problema, usaremos estes valores para calcular os parâmetros originais.

Exemplo

Suponhamos que num laboratório obtivemos experimentalmente os seguintes valores para f(x) sobre os pontos x_i, i = 1, 2, …, 8:

x	–1.0	–0.7	–0.4	–0.1	0.2	0.5	0.8	1.0
f(x)	36.547	17.264	8.155	3.852	1.820	0.860	0.406	0.246

Fazendo o diagrama de dispersão dos dados acima, obtemos



que nos sugere um ajuste $y \approx \varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$.

Conforme vimos anteriormente, a "linearização" a ser feita é $z = \ln(y) \approx \ln(\alpha_1 e^{-\alpha_2 x}) = \ln(\alpha_1) - \alpha_2 x = \phi(x)$.

Assim, em vez de ajustarmos y por quadrados mínimos, ajustaremos $z = \ln(y)$ por quadrados mínimos, encontrando $\phi(x) = a_1 + a_2 x$, onde $a_1 = \ln(\alpha_1)$ e $a_2 = -\alpha_2$. (Aqui $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$.)

Temos pois:

x	–1	–0.7	–0.4	–0.1	0.2	0.5	0.8	1
z = ln(y)	3.599	2.849	2.099	1.349	0.599	–0.151	–0.901	–1.402

e a_1 e a_2 serão a solução do sistema:

$$\begin{cases} \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_1(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_1(x_k)\right]a_2 = \sum_{k=1}^{8} z(x_k)g_1(x_k) \\ \left[\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_2(x_k)\right]a_1 + \left[\sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_2(x_k)\right]a_2 = \sum_{k=1}^{8} z(x_k)g_2(x_k) \end{cases}$$

$$g_1(x) = 1 \Rightarrow \sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_1(x_k) = \sum_{k=1}^{8} 1 = a_{11} = 8$$

$$g_2(x) = x \Rightarrow \sum_{k=1}^{8} g_2(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} x_k^2 = a_{22} = 3.59$$

$$\sum_{k=1}^{8} g_1(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} 1x_k = a_{12} = a_{21} = 0.3$$

$$b_1 = \sum_{k=1}^{8} z(x_k)g_1(x_k) = \sum_{k=1}^{8} z(x_k) = 8.041$$

$$b_2 = \sum_{k=1}^{8} z(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^{8} z(x_k)\,x_k = -8.646$$

e o sistema fica

$$\begin{cases} 8.0a_1 + 0.3a_2 = 8.041 \\ 0.3a_1 + 3.59a_2 = -8.646 \end{cases} \Rightarrow a_1 = 1.099 \text{ e } a_2 = -2.5$$

Agora, $\alpha_1 = e^{a_1} \Rightarrow \alpha_1 = e^{1.099} = 3.001$

$$\alpha_2 = -a_2 \Rightarrow \alpha_2 = 2.5.$$

Assim, a função $\varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x} = 3.001e^{-2.5x}$.

Teste de Alinhamento para o Modelo Não Linear

Uma vez escolhida uma função não linear em $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ para ajustar uma função dada, uma forma de verificarmos se a escolha feita foi razoável é aplicarmos o *teste de alinhamento*, que consiste em:

i) fazer a "linearização" da função não linear escolhida;

ii) fazer o diagrama de dispersão dos novos dados;

iii) se os pontos do diagrama (*ii*) estiverem alinhados, isto significará que a função não linear escolhida foi uma "boa escolha".

Observamos que, devido aos erros de observação, e cálculos aproximados, consideramos satisfatório o diagrama de dispersão onde os pontos se distribuem aleatoriamente em torno de uma reta média.

Exemplo: Para o exemplo anterior, temos que:

x	–1	–0.7	–0.4	–0.1	0.2	0.5	0.8	1
y	36.547	17.264	8.155	3.852	1.820	0.860	0.406	0.246
z = ln(y)	3.599	2.849	2.099	1.349	0.599	–0.151	–0.901	–1.402

O gráfico de dispersão de x e z é dado abaixo. Como os pontos estão em torno de uma reta, segue que a escolha da função não linear $\varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$ foi "boa" para o ajuste.