Método dos mínimos quadrados:

GENERALIZAÇÃO

Introdução: - O método de Regressão Linear é uma particularização do método dos mínimos quadrados para o caso em que se deseja que a função aproximadora seja uma reta. Entretanto, o método dos mínimos quadrados permite ajustar outros tipos de funções.

- De fato, a forma geral das funções ajustadas pelo método é

$$Y = a g_0(x) + b g_1(x) + c g_2(x) + \cdots$$

onde, para ajustar uma reta, fazemos $g_0(x) = 1$, $g_1(x) = x$, e todos os outros termos são anulados.

- As funções $g_n(x)$ podem ser as mais variadas possíveis, desde que dependentes apenas de x.

Generalização do método dos mínimos quadrados:

objetivo: Ajustar os dados de uma tabela de pontos:

x	x_0	x_1	x_2	.....	x_n
y	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	...	$f(x_n)$

através de uma função aproximadora do tipo:

(I) $G(x) = a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \dots + a_n g_n(x)$

onde os parametros $a_0, a_1, a_2 \dots a_n$ são calculados resolvendo-se um sistema linear de ordem $(m+1)$, chamado de Sistema Normal, cujos coeficientes são dados a seguir.

Como no ponto x_0, tanto $g(x)$ como $f(x)$ tem o mesmo valor, $f(x_0)$, podemos obter o valor de b:

$$
(\mathrm{II})\quad
\begin{bmatrix}
\Sigma g_0 g_0 & \Sigma g_0 g_1 & \cdots & \Sigma g_0 g_m \\
\Sigma g_1 g_0 & \Sigma g_1 g_1 & \cdots & \Sigma g_1 g_m \\
\vdots & & & \\
\Sigma g_m g_0 & \Sigma g_m g_1 & \cdots & \Sigma g_m g_m
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} \Sigma g_0 f \\ \Sigma g_2 f \\ \vdots \\ \Sigma g_m f \end{bmatrix}
$$

É possível representar o sistema normal de ordem $m+1$ na forma matricial

$$A\bar{X} = B \quad \text{ou}$$

$$\sum_{j=0}^{m} A_{ij}\bar{X}_j = B_i$$

para $i = 0, 1, 2, \ldots, m$ onde

$$A_{ij} = \Sigma g_i g_j = \sum_{k=0}^{n} g_i(x_i)\, g_j(x_k)$$

$$B_i = \Sigma g_i f = \sum_{k=0}^{n} g_i(x_k)\, f(x_i)$$

$$\bar{X}_j = a_j$$

Seja um caso geral que necessite obter uma aproximação dos dados experimentais de uma tabela, por um polinômio do tipo

x	x_0	x_1	x_2	.....	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	.....	$f(x_n)$

onde $f(x)$ é uma função desconhecida. De (I) deduz-se que $a_0, a_1, a_2, \ldots, a_n$ são números reais a determinar, e $g_0(x)$, $g_1(x), g_2(x), \ldots, g_n(x)$ são funções conhecidas.

O resíduo r_i, $i = 1, 2, 3, \ldots, n$, calculado no ponto x_i da tabela, é definido por

$$r_i = y(x_i) - f(x_i)$$

onde $y(x_i)$ é a função aproximadora. Deseja-se reduzir ao mínimo a soma dos resíduos quadráticos, ou seja, deseja-se minimizar a função

$$S = \sum_{i=0}^{n} r_i^2 = \sum_{i=0}^{n} \left[y(x_i) - f(x_i)\right]^2$$

— A partir daí, impõe-se que a derivada parcial em relação a cada parâmetro seja nula, pois estamos procurando o mínimo da função $S(a_i)$:

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0, \quad j = 0, 1, 2, \ldots, n$$

fornecendo $m+1$ equações lineares com $m+1$ parametros $a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m$ que são incógnitas do Sistema Normal (II).

Dispositivo prático:

A montagem do sistema Normal é facilitada com a construção de um quadro conforme segue:

i	x_i	$g_0(x)$	$g_1(x)$	$\ldots$	$g_m(x)$	$f(x_i)$
0	x_0	$g_0(x_0)$	$g_1(x_0)$	$\ldots$	$g_m(x_0)$	$f(x_0)$
1	x_1	$g_0(x_1)$	$g_1(x_1)$	$\ldots$	$g_m(x_1)$	$f(x_1)$
2	x_2	$g_0(x_2)$	$g_1(x_2)$	$\ldots$	$g_m(x_2)$	$f(x_2)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
m	x_n	$g_0(x_n)$	$g_1(x_n)$	$\ldots$	$g_m(x_n)$	$f(x_n)$
		Σg_0^2	$\Sigma g_0 g_1$	$\ldots$	$\Sigma g_0 g_m$	$\Sigma g_0 f$
		$\Sigma g_1 g_0$	Σg_1^2	$\ldots$	$\Sigma g_1 g_m$	$\Sigma g_1 f$
		$\Sigma g_2 g_0$	$\Sigma g_2 g_1$	$\ldots$	$\Sigma g_2 g_m$	$\Sigma g_2 f$
		$\vdots$			$\vdots$	$\vdots$
		$\Sigma g_m g_0$	$\Sigma g_m g_1$	$\ldots$	Σg_m^2	$\Sigma g_m f$
		a_0	a_1	$\ldots\ldots\rightarrow$	a_m	

onde $\sum g_0 g_1$ significa

$$\sum_{k=0}^{n} g_i(x_k)g_j(x_k) = g_0(x_0)g_1(x_0) + g_0(x_1)g_1(x_1) + \cdots + g_0(x_n)g_1(x_n)$$

e $\sum g_0 f$ significa

$$\sum_{k=0}^{n} g_i(x_k)f(x_k) = g_0(x_0)f(x_0) + g_0(x_1)f(x_1) + \cdots + g_0(x_n)f(x_n)$$

Exemplos: ① Foram feitas cinco medições da velocidade de um carro de formula 1 e da pressão do ar na superficie do aerofólio dianteiro. Nos dados da tabela a seguir, apresenta-se como a Velocidade V relaciona-se com a pressão P.

V	7,87	11,50	16,40	22,60	32,8
P	0,014	0,028	0,056	0,112	0,223

Deseja-se ajustar esses dados por uma função aproximadora $P(V)$ que permita, mesmo sem conhecer a lei física que rege o ~~fenômeno~~, calcular a pressão correspondente a uma dada velocidade. É sugerida a função $P = a + bV^2$. Logo, é necessário determinar os valores de $\underline{a}$ e b.

1. O primeiro passo é definir exatamente o que será feito. Foi solicitado que o ajuste seja feito através da função $P = a + bV^2$.

Logo, os parâmetros a serem determinados são $\underline{a}$ e $\underline{b}$, sendo

$$P = 1 . a + bV^2 \rightarrow \begin{cases} g_0(V) = 1 \\ g_1(V) = V^2 \end{cases}$$

2. Em seguida é construído o dispositivo prático:

i	V_i	$g_0(V_i)$	$g_1(V_i)$	$P(V_i)$
0	7,87	1	$g_1(V_0) = 7{,}87^2 = 61{,}9369$	$f(V_0) = 0{,}014$
1	11,50	1	$g_1(V_1) = 11{,}50^2 = 132{,}2500$	$f(V_1) = 0{,}028$
2	16,40	1	$g_1(V_2) = 16{,}40^2 = 268{,}9600$	$f(V_2) = 0{,}056$
3	22,60	1	$g_1(V_3) = 22{,}60^2 = 510{,}7600$	$f(V_3) = 0{,}0112$
4	32,80	1	$g_1(V_4) = 32{,}80^2 = 1075{,}840$	$f(V_4) = 0{,}225$

$$\sum g_0^2 = 5 \quad \sum g_0 g_1 = 2049{,}7469$$

$$\sum g_1 g_0 = 2049{,}7469 \quad \sum g_1^2 = 1511973{,}2070$$

$$\sum g_0 f = 0{,}4350$$

$$\sum g_1 f = 318{,}9070$$

3. Agora, é possível escrever o sistema Normal:

$$\begin{bmatrix} \sum g_0^2 & \sum g_1 g_0 \\ \sum g_1 g_0 & \sum g_1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum g_0 f \\ \sum g_1 f \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & 2049{,}7469 \\ 2049{,}7469 & 1511973{,}2070 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}4350 \\ 318{,}9070 \end{bmatrix}$$

4. A última etapa é ~~r~~ resolver o sistema normal, do qual obtém-se:

$$\begin{cases} a = 0{,}001203 \\ b = 0{,}000209 \end{cases}$$

E finalmente:

$$P = 0{,}001203 + 0{,}000209V^2$$

Exemplo ② A tabela a seguir apresenta os valores experimentais da Pressão P de uma massa dada de gás, que correspondem a vários valores de volume, ocupado pelo gás. De acordo com os princípios da Termodinâmica, deve existir entre essas grandezas uma relação da forma $PV^\gamma = C$ na qual γ e c são constantes. Determine os valores de γ e C, e estime o valor da pressão para um volume 100.

V	54,3	64,8	72,4	88,7	118,6	194,0
P	61,2	49,5	37,6	28,4	19,2	10,1

1. Formalização do problema:

Função aproximadora

$PV^{\gamma} = C \rightarrow P = CV^{-\gamma} \rightarrow \text{Log} P = \text{Log}\, C + (-\gamma)\, \text{Log}\, V$

que pode ser substituída por $Y = a + bX$.

Logo, os parametros a serem determinados são a e b.

$$a = \text{Log}\, C$$
$$b = -\gamma$$
$$Y = \text{Log}\, P$$
$$X = \text{Log}\, V$$

E a tabela original deve ser refeita por:

$x = \text{Log} V$	1,7348	1,7910	1,8597	1,9419	2,0741	2,2878
$Y = \text{Log} P$	1,7868	1,6946	1,5752	1,4533	1,2833	1,0043

2. Construção do dispositivo prático

i	x_i	$g_0(x_i)$	$g_1(x_i) = x_i^2$	$y(x_i)$
0	1,7348	1	3,009531	1,7868
1	1,7910	1	3,207681	1,6946
2	1,8597	1	3,458484	1,5752
3	1,9479	1	3,794314	1,4533
4	2,0741	1	4,301891	1,2833
5	2,2878	1	5,234088	1,0043

$\sum g_0^2 = 6 \quad \sum g_0 g_1 = 11,6953 \quad \sum g_0 f = 8,7975$

$\sum g_1 g_0 = 11,6953 \quad \sum g_1^2 = 23,0059 \quad \sum g_1 f = 16,8543$

a b

3. Solução do sistema Normal

$$\begin{bmatrix} 6 & 11,6953 \\ 11,6953 & 23,0059 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8,7975 \\ 16,8543 \end{bmatrix}$$

do qual obtém-se $\begin{cases} a = 4,204464 \\ b = -1,40487 \end{cases}$

4. Deve-se agora retornar às expressões originais, pois não se deseja obter $\underline{a}$ e $\underline{b}$, mas sim C e y. Das expressões anteriores temos: $\begin{cases} C = 10^a \\ y = -b \end{cases}$

Logo, $\underline{C = 16019,17}$ e $y = 1,40487$

$$\boxed{P = 16019,17\,V^{-1,40487}}$$

11

EXERCÍCIOS: 6º NTI — Dia 23/12/2020

1. A tabela a seguir relaciona a condutividade elétrica específica λ com a temperatura t em graus centígrados.

t	14,5	30,0	64,5	74,5	86,7	94,5	98,9
λ	0	0,004	0,018	0,029	0,051	0,073	0,090

Ache os parâmetros para a fórmula empírica $\lambda = be^{at}$

2. Aplicando o processo dos mínimos quadrados, ache o polinômio do 2º grau $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ que melhor se ajuste aos pontos da tabela a seguir:

x	0,78	1,56	2,34	3,12	3,81
y	2,50	1,20	1,12	2,25	4,28

3. Experiências feitas no Hospital das Clínicas mostram os seguintes dados experimentais:

A	10	6	3,5	2	1,3
t(dias)	0	8	16	24	32

onde A é área da superfície de um ferimento e t é o tempo decorrido da cura. Use o método dos mínimos quadrados, testando as seguintes expressões:

$A = ke^{rt}$; $A = k + rt$; $A = kt + rt^2$

Escolha àquela que resulta no menor resíduo χ^2.

4. Os engenheiros que participaram da construção dos túneis da rodovia dos imigrantes em direção ao litoral de São Paulo enfrentaram alguns problemas inéditos no campo da engenharia civil. O maior problema é a presença de nascentes de água na rocha que foi perfurada para a passagem de túneis. Depois de vários estudos, levantaram experimentalmente a relação entre tempo (idade) dos túneis e a taxa de infiltração de água no concreto.

t (anos)	1,0	2,0	3,0	4,0	5,0	6,0	7,0
s (%)	0,050	0,100	0,149	0,199	0,247	0,296	0,343

Os engenheiros levantaram duas hipóteses para a função que relaciona as duas medidas:

$s(t) = At^n$; $S(t) = Be^{ct}$

Qual das duas aproxima melhor os dados? Depois de quantos anos a infiltração atingirá 10%?