Ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados

Algoritmos Numéricos
Ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados
Profa. Cláudia Galarda Varassin

Março de 2021

Sumário

Ajuste de uma curva a um conjunto de pontos

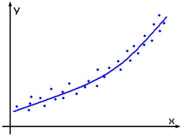
Ajustar uma curva a um conjunto de pontos consiste em obter uma função (expressão analítica) que permita descrever a relação entre variáveis em análise.

Surge quando se tem um conjunto de pontos onde há alguma incerteza envolvida nos dados. Quer-se expressar (descobrir) a relação entre as variáveis.

Ilustrando: dado um conjunto com n pontos quaisquer:

x_k	x_1	x_2	x_3	$\cdots$	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	$\cdots$	y_n

a curva ajustada:



Neste curso será tratado apenas o caso de ajuste com problemas envolvendo duas variáveis (x e y, por exemplo).
Uma das variáveis é a variável dependente (a variável resposta, a imagem).
A outra é a variável independente.

Neste curso será tratado apenas o caso de ajuste com problemas envolvendo duas variáveis (x e y, por exemplo).
Uma das variáveis é a variável dependente (a variável resposta, a imagem).
A outra é a variável independente.

- Como a relação entre as variáveis é conhecida somente para um conjunto de pontos $((x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n))$, a função do ajuste serve para se estimar/prever o valor da variável dependente (y) para os valores de x onde a imagem (y) não é conhecida.

  obs: chama se de extrapolação quando se estima o valor da variável dependente (resposta) para algum ponto fora do intervalo tabelado de x.

Neste curso será tratado apenas o caso de ajuste com problemas envolvendo duas variáveis (x e y, por exemplo).
Uma das variáveis é a variável dependente (a variável resposta, a imagem).
A outra é a variável independente.

- Como a relação entre as variáveis é conhecida somente para um conjunto de pontos $((x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n))$, a função do ajuste serve para se estimar/prever o valor da variável dependente (y) para os valores de x onde a imagem (y) não é conhecida.

  obs: chama se de extrapolação quando se estima o valor da variável dependente (resposta) para algum ponto fora do intervalo tabelado de x.

- A função do ajuste serve também se ter para uma representação gráfica da relação entre variáveis (de forma a ficar visível a dependência entre as variáveis).

Um exemplo

Exemplo extraído e adapatado do exercicio 20.24 de Chapra e Canale)

O escoamento de água (em m^3/s) em um rio está relacionado com a precipitação anual de chuva (em cm). As seguintes informações foram coletadas, em vários anos, para um dado rio:

precip., (x)	88.9	108.5	104.1	139.7	127.0	94.0	116.8	99.1
escoam., (y)	14.6	16.7	15.3	23.2	19.5	16.1	18.1	16.6

Um exemplo

Exemplo extraído e adapatado do exercicio 20.24 de Chapra e Canale)
O escoamento de água (em m^3/s) em um rio está relacionado com a precipitação anual de chuva (em cm). As seguintes informações foram coletadas, em vários anos, para um dado rio:

precip., (x)	88.9	108.5	104.1	139.7	127.0	94.0	116.8	99.1
escoam., (y)	14.6	16.7	15.3	23.2	19.5	16.1	18.1	16.6

Com estes dados, poderia se estar interessado em saber o escoamemto quando, em um dado ano, a precipitação fosse de 120 cm, por exemplo.

Poderia se buscar ajustar uma reta $f(x) = \beta_1 + \beta_2 x$

A escolha do modelo (tipo de curva)

Para se fazer o ajuste, é necessário escolher a forma funcional, isto é, o modelo (tipo da função) a ser empregado.

Exemplos:

(1)Modelo quadrático: $f(x) = a + bx + cx^2$

(2)Modelo exponencial: $f(x) = \beta_0 e^{\beta_1 x}$

(3)Modelo com funções trigonométricas: $f(x) = ...$

A escolha do modelo (tipo de curva)

Para se fazer o ajuste, é necessário escolher a forma funcional, isto é, o modelo (tipo da função) a ser empregado.

Exemplos:

(1)Modelo quadrático: $f(x) = a + bx + cx^2$

(2)Modelo exponencial: $f(x) = \beta_0 e^{\beta_1 x}$

(3)Modelo com funções trigonométricas: $f(x) = ...$

Neste curso será tratado apenas o caso onde as funções são escritas como uma combinação linear de funções mais simples, ou seja, funções do tipo:

$$f(x) = \beta_1 g_1(x) + \beta_2 g_2(x) + \cdots + \beta_i g_i(x) + \cdots + \beta_m g_m(x)$$

As $g_i(x)$ são conhecidas como funções de base.

Para obter a função de ajuste é preciso, primeiramente, escolher as funções de base para, em seguida, determinar os coeficientes (β_i) do ajuste.

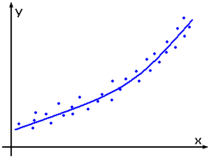
Obs: notar que a $f(x)$ acima é um modelo matemático linear nos coeficientes pois os coeficientes β_i aparecem linearmente arranjados

A escolha das funções de base

Como escolher as $g_i(x)$?

A escolha das funções $g_1(x), g_2(x), \cdots, g_m(x)$ pode se basear:

- No modelo matemático já conhecido para descrever aquele fenômeno (quando se trata de um fenômeno já estudado).
  Exemplos: corrente elétrica (i)$\times$ tensão (V)
  crescimento de bacteria $\times$ temperatura
- No diagrama de dispersão dos pontos. (quando não há nenhum um conhecimento *a priori sobre o fenômeno)*

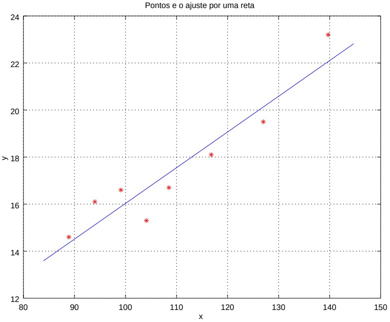


Voltando ao exemplo escoamento de água (em m^3/s) e a precipitação anual de chuva (em cm).

(x) precip.	88.9	108.5	104.1	139.7	127.0	94.0	116.8	99.1
(y) escoam.	14.6	16.7	15.3	23.2	19.5	16.1	18.1	16.6

Voltando ao exemplo escoamento de água (em m^3/s) e a precipitação anual de chuva (em cm).

(x) precip.	88.9	108.5	104.1	139.7	127.0	94.0	116.8	99.1
(y) escoam.	14.6	16.7	15.3	23.2	19.5	16.1	18.1	16.6



Dados os pontos $P : ((x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n))$ e escolhido o tipo da função
Como obter o curva de ajuste?

É preciso encontrar a melhor função que se ajusta aos pontos.
O que é a melhor função?
Critério?

Critério?

O resíduo em um ponto x_k é definido por:

$$r_k = f(x_k) - y_k$$

É a diferença entre o modelo (valor fornecido pela função ajustada) e a observação.

$$r_k = (\beta_1 g_1(x_k) + \beta_2 g_2(x_k) + \cdots + \beta_m g_m(x_k)) - y_k$$

Critério?

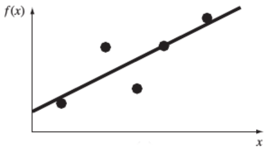
O resíduo em um ponto x_k é definido por:

$$r_k = f(x_k) - y_k$$

É a diferença entre o modelo (valor fornecido pela função ajustada) e a observação.

$$r_k = (\beta_1 g_1(x_k) + \beta_2 g_2(x_k) + \cdots + \beta_m g_m(x_k)) - y_k$$

Que critério adotar? Tornar "pequeno" todos os resíduos?



Ideia 1: tornar mínima a soma dos resíduos.

$$Min(\sum_{k=1}^{n} r_k) = Min(\sum_{k=1}^{n}(f(x_k) - y_k)$$

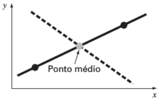
Problema: pode haver cancelamento mútuo.

Ideia 1: tornar mínima a soma dos resíduos.

$$Min(\sum_{k=1}^{n} r_k) = Min(\sum_{k=1}^{n}(f(x_k) - y_k)$$

Problema: pode haver cancelamento mútuo.
Ilustrando: ao ajustar uma reta a dois pontos, haverá várias soluções com $soma = 0$, no entanto, só uma é a solução de interesse (obs: qualquer reta que passa pelo ponto médio resulta em $soma = 0$).

Figura: As duas retas têm a mesma soma mínima ($soma = 0$)



Ideia 2: tornar mínima a soma dos resíduos, em valor absoulto (em módulo).

$$Min(\sum_{k=1}^{n} |r_k|)$$

Problema: a obtenção do mínimo não é simples matematicamente

Ideia 2: tornar mínima a soma dos resíduos, em valor absoulto (em módulo).

$$Min(\sum_{k=1}^{n} |r_k|)$$

Problema: a obtenção do mínimo não é simples matematicamente

Ideia 3: **tornar mínima a soma dos quadrados dos resíduos.**

$$Min(\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$$

Tornar mínima a $S_q = \sum_{k=1}^{n} r_k^2$ isto é $\Rightarrow Min(\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$

onde $r_k = (\beta_1 g_1(x_k) + \beta_2 g_2(x_k) + \cdots + \beta_m g_m(x_k)) - y_k$

$$S_q =$$

$$((\beta_1 g_1(x_1) + \beta_2 g_2(x_1) + \cdots + \beta_m g_m(x_1)) - y_1)^2$$

$$+$$

$$((\beta_1 g_1(x_2) + \beta_2 g_2(x_2) + \cdots + \beta_m g_m(x_2)) - y_2)^2$$

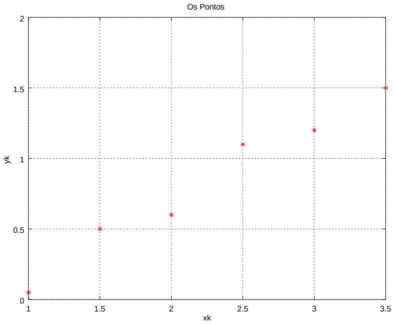
$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$((\beta_1 g_1(x_n) + \beta_2 g_2(x_n) + \cdots + \beta_m g_m(x_n)) - y_n)^2$$

Suponha dados os seguintes pontos e se queira ajustar uma função do tipo $f(x) = \beta_1 ln(x)$



Ilustrando: suponha que $f(x) = \beta_1 ln(x)$ (caso onde $g_1 = ln(x)$.)

Tornar mínima S_q isto é $\Rightarrow Min(\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$

$$S_q =$$

$$(\beta_1 g_1(x_1) - y_1)^2$$

$$+$$

$$(\beta_1 g_1(x_2) - y_2)^2$$

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$(\beta_1 g_1(x_n) - y_n)^2$$

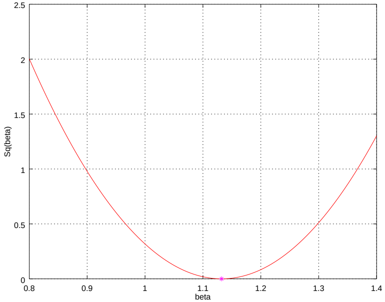
$Min(\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$ onde $Sq = (\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$

$$S_q(\beta_1) = (\beta_1 g_1(x_1) - y_1)^2 + (\beta_1 g_1(x_2) - y_2)^2 + \cdots + (\beta_1 g_1(x_n) - y_n)^2$$

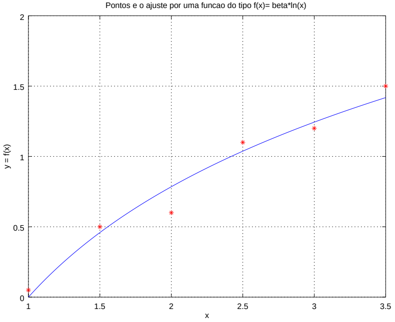
Substituindo a função $g_1(x)$ por $ln(x)$

$$S_q(\beta_1) = (\beta_1 ln(x_1) - y_1)^2 + (\beta_1 ln(x_2) - y_2)^2 + \cdots + (\beta_1 ln(x_n) - y_n)^2$$

Tornar mínima $S_q(\beta_1)$



Fazendo a minimização ($\frac{dS_q}{d\beta_1} = 0$) o mínimo de Sq ocorre para $\beta_1 = 1.13$
A função ajustada é: $f(x) = 1.13 ln(x)$



RESUMINDO:
Dados um conjunto de n pontos, no plano, é possível obter uma função que descreva a relação entre a variável x e y pelo método dos mínimos quadrados.
O processo consiste em:

- Definir o tipo do modelo para o ajuste.
  O método permite ajustar apenas funções do tipo:
  $f(x) = \beta_1 g_1(x) + \beta_2 g_2(x) + \cdots + \beta_i g_i(x) + \cdots + \beta_m g_m(x)$
- O Critério é: minimizar $(\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$
  onde $r_k = (\beta_1 g_1(x_k) + \beta_2 g_2(x_k) + \cdots + \beta_m g_m(x_k)) - y_k$
- Resolver o problema do ajuste é resolver o problema de otimização
  $Min(\sum_{k=1}^{n} r_k^2)$

Bibliografia Básica

[1] Algoritmos Numéricos, Frederico F. Campos, Filho - 2ª Ed., Rio de Janeiro, LTC, 2007.

[2] Métodos Numéricos para Engenharia, Steven C. Chapa e Raymond P. Canale, Ed. McGraw-Hill, 5ª Ed., 2008.

[3] Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais, Márcia A. G. Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes, Ed. Pearson Education, 2ª Ed., 1996.