Ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados (parte 2)

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

Março de 2021

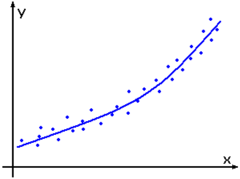
Sumário

Fazer o ajuste de uma curva, a um conjunto de pontos, consiste em obter uma função f (expressão analítica) que permita descrever a relação entre variáveis em análise.

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

e a curva de ajuste correspondente:



Ajustar uma função do tipo

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

a um conjunto de n pontos (x_i, y_i)

Critério adotado no método dos mínimos quadrados:

Tornar mínima a soma dos quadrados dos resíduos

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

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

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

$$S_q =$$

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

$$+$$

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

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

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

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} =$$

$$2((\beta_1 g_1(x_1) + \beta_2 g_2(x_1) + \cdots + \beta_m g_m(x_1)) - y_1)^1 g_1(x_1)$$

$$+$$

$$2((\beta_1 g_1(x_2) + \beta_2 g_2(x_2) + \cdots + \beta_m g_m(x_2)) - y_2)^1 g_1(x_2)$$

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$2((\beta_1 g_1(x_n) + \beta_2 g_2(x_n) + \cdots + \beta_m g_m(x_n)) - y_n)^1 g_1(x_n)$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_2} =$$

$$2((\beta_1 g_1(x_1) + \beta_2 g_2(x_1) + \cdots + \beta_m g_m(x_1)) - y_1)^1 g_2(x_1)$$

$$+$$

$$2((\beta_1 g_1(x_2) + \beta_2 g_2(x_2) + \cdots + \beta_m g_m(x_2)) - y_2)^1 g_2(x_2)$$

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$2((\beta_1 g_1(x_n) + \beta_2 g_2(x_n) + \cdots + \beta_m g_m(x_n)) - y_n)^1 g_2 x_n$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_i} =$$

$$2((\beta_1 g_1(x_1) + \beta_2 g_2(x_1) + \cdots + \beta_m g_m(x_1)) - y_1)^1 g_i(x_1)$$

$$+$$

$$2((\beta_1 g_1(x_2) + \beta_2 g_2(x_2) + \cdots + \beta_m g_m(x_2)) - y_2)^1 g_i(x_2)$$

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$2((\beta_1 g_1(x_n) + \beta_2 g_2(x_n) + \cdots + \beta_m g_m(x_n)) - y_n)^1 g_i(x_n)$$

Desenvolvendo...

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} = 0$$

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

$$+$$

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

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$(\beta_1 g_1(x_n) g_1(x_n) + \beta_2 g_2(x_n) g_1(x_n) + \cdots + \beta_m g_m(x_n) g_1(x_n)) - y_n g_1(x_n) = 0$$

Agrupando os termos em β_1, β_2,..., β_m

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} = 0$$

$$\beta_1(g_1(x_1)g_1(x_1)) + g_1(x_2)g_1(x_2) + \cdots + g_1(x_n)g_1(x_n))$$

$$+$$

$$\beta_2(g_2(x_1)g_1(x_1) + g_2(x_2)g_1(x_2) + \cdots + g_2(x_n)g_1(x_n))$$

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$\beta_m(g_m(x_1)g_1(x_1) + g_m(x_2)g_1(x_2) + \cdots + g_m(x_n)g_1(x_n))$$

$$= y_1 g_1(x_1) + y_2 g_1(x_2) + y_n g_1(x_n)$$

Usando a notação de somatária

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} = 0$$

$$\beta_1(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_1(x_k))$$

$$+$$

$$\beta_2(\sum_{k=1}^{n}(g_2(x_k)g_1(x_k))$$

$$+$$

$$\vdots$$

$$+$$

$$\beta_m(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_1(x_k))$$

$$= \sum_{k=1}^{n} y_k g_1(x_k)$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} = 0$$

$$\beta_1\left(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_1(x_k))\right) + \cdots + \beta_m\left(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_1(x_k))\right) = \sum_{k=1}^{n} y_k g_1(x_k)$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} = 0$$

$$\beta_1(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_1(x_k)) + \cdots + \beta_m(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_1(x_k)) = \sum_{k=1}^{n} y_k g_1(x_k)$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_2} = 0$$

$$\beta_1(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_2(x_k)) + \cdots + \beta_m(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_2(x_k)) = \sum_{k=1}^{n} y_k g_2(x_k)$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_1} = 0$$

$$\beta_1\left(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_1(x_k)\right) + \cdots + \beta_m\left(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_1(x_k)\right) = \sum_{k=1}^{n} y_k g_1(x_k)$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_2} = 0$$

$$\beta_1\left(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_2(x_k)\right) + \cdots + \beta_m\left(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_2(x_k)\right) = \sum_{k=1}^{n} y_k g_2(x_k)$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial S_q}{\partial \beta_m} = 0$$

$$\beta_1\left(\sum_{k=1}^{n}(g_1(x_k)g_m(x_k)\right) + \cdots + \beta_m\left(\sum_{k=1}^{n}(g_m(x_k)g_m(x_k)\right) = \sum_{k=1}^{n} y_k g_m(x_k)$$

Equações Normais ($N\beta = b$, matriz de dimensão $m \times m$):

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{n} g_1 g_1 & \sum_{k=1}^{n} g_1 g_2 & \cdots & \sum_{k=1}^{n} g_1 g_m \\ \sum_{k=1}^{n} g_2 g_1 & \sum_{k=1}^{n} g_2 g_2 & \cdots & \sum_{k=1}^{n} g_2 g_m \\ & & \ddots & \\ \sum_{k=1}^{n} g_m g_1 & \sum_{k=1}^{n} g_m g_2 & \cdots & \sum_{k=1}^{n} g_m g_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{n} g_1 y_k \\ \sum_{k=1}^{n} g_2 y_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{n} g_m y_k \end{bmatrix}$$

onde $g_i = g_i(x_k)$

$$N(i,j) = \sum_{k=1}^{n} (g_i(x_k) g_j(x_k))$$

$$b(i) = \sum_{k=1}^{n} (g_i(x_k) y_k)$$

Ilustrando: Dado um conjunto de pontos abaixo:

x_k	2.0	2.3	2.5	4.0
y_k	1.25	1.35	1.40	1.60

Fazer o ajuste por uma função do tipo $f(x) = \beta_1 + \beta_2 ln(x)$.
As funções de base são $g_1(x) = 1$ e $g_2 = ln(x)$

Ilustrando: Dado um conjunto de pontos abaixo:

x_k	2.0	2.3	2.5	4.0
y_k	1.25	1.35	1.40	1.60

Fazer o ajuste por uma função do tipo $f(x) = \beta_1 + \beta_2 ln(x)$.
As funções de base são $g_1(x) = 1$ e $g_2 = ln(x)$

O sistema linear $N\beta = b$, resultante da aplicação da minimização dos quadrados dos resíduos é:

$$\begin{bmatrix} N(1,1) & N(1,2) \\ N(2,1) & N(2,2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b(1) \\ b(2) \end{bmatrix}$$

Montando o sistema $N\beta = b$

A matriz N

linha 1

$$N(1,1) = \sum_{k=1}^{4} (g_1(x_k) g_1(x_k)) = \sum_{k=1}^{4} (1) = 1 + 1 + 1 + 1 = 4$$

$$N(1,2) = \sum_{k=1}^{4} (g_1(x_k) g_2(x_k)) = \sum_{k=1}^{4} (1 * ln(x_k))$$

$$= ln(x_1) + ln(x_2) + ln(x_3) + ln(x_4) = 3.8286$$

Montando o sistema $N\beta = b$

A matriz N

linha 1

$$N(1,1) = \sum_{k=1}^{4}(g_1(x_k)g_1(x_k)) = \sum_{k=1}^{4}(1) = 1+1+1+1 = 4$$

$$N(1,2) = \sum_{k=1}^{4}(g_1(x_k)g_2(x_k)) = \sum_{k=1}^{4}(1 * ln(x_k)) = ln(x_1) + ln(x_2) + ln(x_3) + ln(x_4) = 3.8286$$

linha 2

$$N(2,1) = \sum_{k=1}^{4}(g_2(x_k)g_1(x_k)) = \sum_{k=1}^{4}(ln(x_k) * 1) = N(1,2) = 3.8286$$

$$N(2,2) = \sum_{k=1}^{4}(g_2(x_k)g_2(x_k)) = \sum_{k=1}^{4}(ln(x_k)^2) = N(1,2) = (ln(x_1))^2 + (ln(x_2))^2 + (ln(x_3))^2 + (ln(x_4))^2 = 3.9356$$

Montando o sistema $N\beta = b$
O vetor b
linha 1

$$b(1) = \sum_{k=1}^{4}(g_1(x_k)y_k) = \sum_{k=1}^{4}(1 * y_k)$$
$$= y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 5.6$$

$$b(2) = \sum_{k=1}^{4}(g_2(x_k)y_k) = \sum_{k=1}^{4}(ln(x_k) * y_k)$$
$$= ln(x_1)y_1 + ln(x_2)y_2 + ln(x_3)y_3 + ln(x_4)y_4 = 5.4917$$

o sistema é:

$$\begin{bmatrix} 4 & 3.8286 \\ 3.8286 & 3.9356 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.6 \\ 5.4917 \end{bmatrix}$$

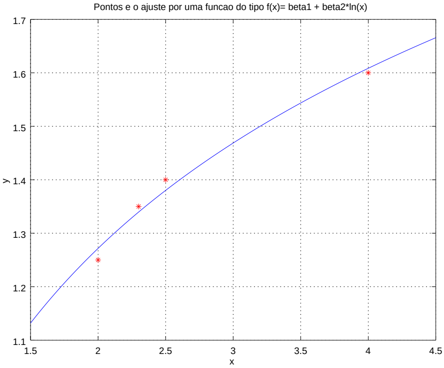
Resolvendo o sistema, obtém se:
$\beta_1 = 0.93499$ e $\beta_2 = 0.48582$

o sistema é:

$$\begin{bmatrix} 4 & 3.8286 \\ 3.8286 & 3.9356 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.6 \\ 5.4917 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema, obtém se:
$\beta_1 = 0.93499$ e $\beta_2 = 0.48582$
Portanto a função ajustada é :
$f(x) = 0.93499 + 0.48582 ln(x)$.

Trançando a função e os pontos :



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 (a função para o ajuste).
  $f(x) = \beta_1 g_1(x) + \beta_2 g_2(x) + \cdots + \beta_i g_i(x) + \cdots + \beta_m g_m(x)$
- Montar o sistema linear $N\beta = b$, resultante da minimização dos quadrados dos resíduos.
- Resolver o sistema linear $N\beta = b$ de forma a obter os coeficientes β_i para aquele modelo escolhido.

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.