

Cálculo Numérico





Unidade III:

Ajuste de Curvas

Responsável pelo Conteúdo:

Prof. Dr. João Pacheco B.C. de Melo Prof. Dr. Jaime Sandro da Veiga

Revisão Técnica:

Prof. Dr. Victor Barbosa Felix



Orientação de Estudos

Olá caros alunos,

Sejam bem-vindos a mais uma unidade de ensino e de aprendizagem da disciplina de Cálculo Numérico. Vocês irão conhecer os métodos utilizados para o ajuste de curvas, um conteúdo muito utilizado em situações do dia a dia, principalmente para quem trabalha com dados experimentais. O tema consiste em encontrar a melhor curva que se ajuste a um conjunto de dados. Pode-se ajustar também um conjunto de funções simples para substituir uma função mais complexa a fim de tornar os cálculos mais simples sem perder sua essência. Para isso, falaremos sobre:

Ajuste de curvas nos **casos discreto** (dados) e **contínuo** (funções).

Espero que tenham um excelente estudo e um bom aproveitamento.



A T E NÇ Ã O: Para um bom aproveitamento do curso, leiam o material teórico atentamente antes de realizar as atividades. É importante também respeitar os prazos estabelecidos no cronograma.



Contextualização

Quando você está realizando experimentos em um laboratório e obtém valores de medidas feitas por duas quantidades relacionadas entre si, é necessário obter a função matemática que rege o fenômeno. Por exemplo, a distância e o tempo de um corpo em queda livre.

Admitindo-se que a lei física que rege o fenômeno observado possa ser representada por uma função contínua y=f(x), deseja-se obter a expressão analítica de outra função g(x) que substitua f(x) aproximadamente no intervalo considerado.

A equação y=g(x) chama-se "fórmula empírica" e ocorre em grande número nas aplicações. Outros exemplos:

Relação entre:

- Resistência elétrica e temperatura de uma bobina;
- Pressão e volume de vapor saturado;
- Altura relativamente ao nível do mar e pressão atmosférica local;
- Potência e velocidade desenvolvida de um navio;
- Resistência do concreto e sua "idade";
- Amplitude descrita por um pêndulo e o tempo decorrido durante a oscilação.

Dentro desse contexto, o conteúdo a ser estudado nesta unidade de Cálculo Numérico é o ajuste de curvas.



Ajuste de Curvas

Introdução

Nesta parte do curso, tratamos de como podemos aproximar certa classe de funções, por exemplo, uma função f(x), que seja conhecida de antemão, por uma outra função $\varphi(x)$, mais fácil de manipular.

Temos que considerar aqui dois casos:

- i) Caso discreto: a função é dada em forma de tabela.
- ii) Caso contínuo: a função é dada de forma analítica, ou seja, na forma de um gráfico de uma curva contínua.

Um método muito utilizado para aproximar funções é o método dos mínimos quadrados. Agora, iremos fazer, como primeira aplicação, a aproximação dos pontos dados em
uma tabela pelo gráfico de uma reta (função linear ou função afim). Após isto, faremos
uma generalização na qual poderemos aproximar um dado conjunto de pontos para uma
função $\varphi(x)$, podendo esta função ser mais geral do que uma simples reta (por exemplo,
uma parábola ou uma cúbica).

O problema de aproximar uma tabela de pontos por funções (ajuste de curvas) está presente quando fazemos um experimento para medir uma determinada quantidade em que temos uma ideia prévia de qual será o tipo de curva (função) que descreverá a variação dessa quantidade durante o experimento. É importante notar que a função para a qual iremos aproximar o conjunto de pontos não precisa resultar exatamente sobre todos os valores obtidos no experimento, pois todo experimento contém flutuações que acarretam em algum tipo de erro. Logo, temos que encontrar, em meio a uma certa classe de funções, a que melhor se aproxima dos valores obtidos.

No caso contínuo, em vez de uma tabela de pontos temos uma função f(x) em sua forma analítica. No entanto, às vezes é melhor substituir a função f(x) por uma outra função $\varphi(x)$ que, apesar de ser uma aproximação para f(x), pode ter um comportamento mais adequado do que a função original em função de facilitar, de alguma forma, os cálculos sem, no estanto, resultar em grandes prejuízos em termos de erros. A relação custo (na forma de erros)/benefício (na forma de rapidez e facilidade de cálculo) deve sempre ser analisada.

Família de Funções

A função f(x) é aproximada por uma função escolhida dentro de uma classe de funções $\varphi(x)$, de modo que

$$f(x) \cong \varphi(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i h_i(x)$$
 (1)

Esta é uma combinação de funções não nulas, h_i , com $i = 0, 1, 2 \dots, m$.

A função $\varphi(x)$ deve facilitar a execução de alguns cálculos, como, por exemplo, no caso em que uma função, que possua forma analítica que dificulta os cálculos, é aproximada por uma combinação de polinômios, os quais são facilmente diferenciados ou integrados. Para que a substituição seja considerada boa, a função aproximada dever ser a mais próxima possível da função original.

Exemplo 1: Em cálculo, há uma maneira de expandir uma função contínua e infinitamente diferenciável na vizinhança do ponto x=0 por uma série (uma soma) de potências. Essa expansão em série é chamada "série de Taylor". Vamos apresentar a série de Taylor da função $\sin x$:

$$\sin x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2i+1}}{(2i+1)!} x^{2i+1} \ . \tag{2}$$

Observando a expressão, percebemos que a série possui infinitos termos, tal como ela é apresentada a seguir em sua forma expandida:

$$\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \dots$$

$$= x - \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{120}x^5 - \frac{1}{5040}x^7 + \dots$$
(3)

Identificamos, facilmente, os coeficientes $a_0 = 1$, $a_1 = -\frac{1}{6}$, $a_2 = \frac{1}{120}$, $a_3 = -\frac{1}{5040}$ etc. e $h_0(x) = x$, $h_1(x) = x^3$, $h_2(x) = x^5$, $h_3(x) = x^7$ etc. Podemos nos perguntar: se a série é infinita, perderemos muito se pararmos em um determinado termo? A resposta é: depende do intervalo de x em torno de x = 0. Vamos exemplificar com gráficos.

A função $\sin x$ possui o seguinte gráfico:

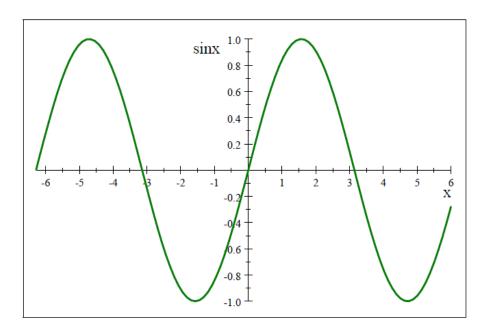


Figura 1: Gráfico da função $\sin x$.

Vamos aproximar função $f\left(x\right)=\sin x$ pela função $h_{0}\left(x\right)=x$ e colocar as duas no mesmo gráfico:

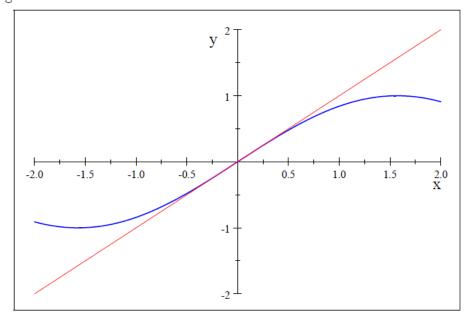


Figura 2: Comparação entre a aproximação linear (em vermelho) e a $\sin x$ completo.

É possível notar que $h_0(x)=x$ constitui uma boa aproximação para o $\sin x$ no intervalo [-0.5,0.5], aparentemente (às vezes, ampliando-se a região do gráfico em questão, pode acontecer de percebermos que a aproximação não é tão boa quanto pensávamos). Mas vamos seguir em frente e colocar uma função a mais na aproximação. Faremos $f(x)=\sin x\cong x-\frac{1}{6}x^3=a_0h_0(x)+a_1h_1(x)$:

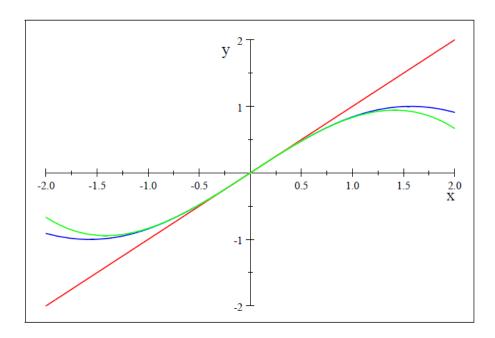


Figura 3: Gráfico mostrando as duas primeiras componentes de aproximação (linear em vermelho e linear mais cúbica em verde) comparadas ao $\sin x$ (azul).

Notamos que a linha verde faz uma aproximação bem melhor do que a vermelha anterior e o intervalo pode ser ampliado para [-1.1,1.1]. Para finalizar, vamos introduzir todos os termos que apresentamos na expressão e comparar essa aproximação com o gráfico da função $\sin x$. Logo, faremos a aproximação $\sin x \cong x - \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{120}x^5 - \frac{1}{5040}x^7 = a_0h_0\left(x\right) + a_1h_1\left(x\right) + a_2h_2\left(x\right) + a_3h_3\left(x\right)$:

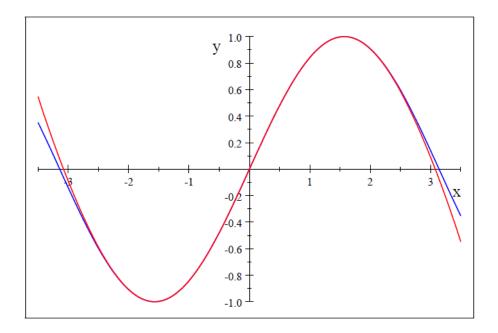


Figura 4: Gráfico mostrando quatro funções aproximativas (vermelho) somadas em comparação ao $\sin x$ completo (azul). Note que a aproximação é boa quase por um período completo.

Podemos achar que melhorou em relação às aproximações anteriores? Bastante, sem dúvida! A função $\sin x$ possui uma aproximação muito boa quase por um período completo de $-\pi$ até π com poucos termos aproximativos, o que pode ser uma imensa vantagem em termos matemáticos e calculacionais.

Esperamos que o exemplo tenha esclarecido o que é uma aproximação por funções mais simples e como a poderemos construir.

Método dos Mínimos Quadrados

Iremos aproximar uma função f(x) qualquer por uma função do tipo linear (ou afim), dada por $\varphi(x) = a + bx$. Assim, faremos a chamada regressão linear. Para tanto, iremos utilizar o método dos mínimos quadrados, que consiste em avaliar a distância d entre o ponto definido pela função f(x) e o ponto definido pela função aproximada $\varphi(x)$ para o x em questão, determinar a área do quadrado de lado d, isto é, d^2 , e somar a área de todos os quadrados envolvidos conforme o número de pontos avaliados. Ao encontrarmos uma função $\varphi(x)$ para a qual a soma das áreas desses quadrados é mínima, encontraremos a melhor aproximação para f(x) para a classe (linear) de funções $\varphi(x)$ utilizada.

A função f(x) a ser aproximada pode ser apresentada em dois casos: o caso discreto, na forma de uma tabela de números (ou de dados numéricos, caso sejam resultados de um experimento), e o caso contínuo, em que f(x) é uma função contínua.

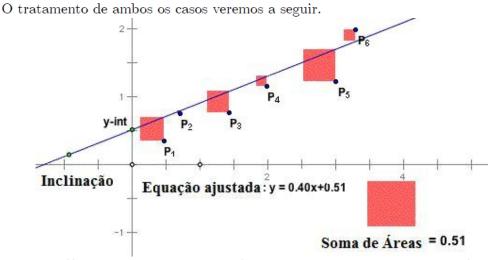


Figura 5: Gráfico apresentando pontos que foram aproximados por uma reta pelo método dos mínimos quadrados.

Caso Discreto

É o caso em que faremos a aproximação de uma função f(x) tabelada por uma função $\varphi(x)$ linear em x. É importante frisar que o número de pontos tabelados deve sempre ser superior ao número de termos da função $\varphi(x)$ que, no caso, é igual a dois.

O chamado $residuo\ r(x_i)$, para cada ponto $(x_i,y_i=f(x_i))$, é dado por:

$$r(x_i) = y_i - \varphi(x_i) \ . \tag{4}$$

Lembrando do que foi dito anteriormente, podemos notar que |r(x)| é o mesmo que a distância d entre os pontos definidos pelo valor da função f(x) e pelo valor a função $\varphi(x)$ no ponto x.

Para reforçar: o método dos mínimos quadrados consiste em achar uma função $\varphi(x)$ de tal modo que a soma dos quadrados $|r(x_i)|^2$ em cada ponto x_i seja mínima. Iremos procurar uma função da forma $\varphi(x) = a_0 + a_1 x$. Desse modo, a função que procuramos minimizar é dada por:

$$\chi(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n} r_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$
(5)

Do Cálculo Diferencial e Integral, é condição para que uma função tenha um ponto de extremo (que poderá ser um mínimo), que as suas derivadas em tais pontos sejam nulas, a saber:

$$\begin{cases} \frac{\partial \chi(a_0, a_1)}{\partial a_0} = 0\\ \frac{\partial \chi(a_0, a_1)}{\partial a_1} = 0 \end{cases}$$
(6)

Isto tem como resultado o seguinte grupo de equações abaixo:

$$2\sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i)(-1) = 0$$
 (7)

$$2\sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i)(-x_i) = 0$$
 (8)

Dividindo cada equação por 2 e isolando o y_i do lado direito, podemos escrever esse sistema de equações como uma equação matricial, ou seja:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \end{bmatrix}$$
(9)

O sistema acima possui o determinante sempre positivo e, portanto, diferente de zero, que é a condição para que a solução exista. Logo, o sistema sempre terá solução. Utilizando-se da notação a seguir para a matriz (2x2) do sistema acima:



$$\begin{cases}
\sum_{i=1}^{n} 1 = A_{11} \\
\sum_{i=1}^{n} x_i = A_{21} = A_{12} \\
\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = A_{22}
\end{cases}$$
(10)

Logo, o determinante do sistema acima é dado por:

$$\det A = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} . (11)$$

A solução desse sistema é dada pela regra de Cramer, em que o a_0 é dado pela substituição da primeira coluna de A pelo lado direito da Eq. (9) e calculado o determinante, e a_1 é obtido pelo procedimento análogo, mas com a substituição na segunda coluna de A:

$$a_{0} = \frac{\sum y_{i} \sum x_{i}^{2} - \sum x_{i} \sum y_{i} x_{i}}{\det A}$$

$$a_{1} = \frac{\sum 1 \sum y_{i} x_{i} - \sum x_{i} \sum y_{i}}{\det A}$$

$$(12)$$

$$a_1 = \frac{\sum 1 \sum y_i x_i - \sum x_i \sum y_i}{\det A}$$
 (13)

O ponto calculado acima (a_0, a_1) é um ponto de mínimo para a função $\chi(a_0, a_1)$. A função procurada que ajusta o conjunto de pontos dados é:

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x \ . \tag{14}$$

Exemplo 2: Seja dada a tabela abaixo de um conjunto de dados.

Determine uma função linear que melhor ajuste estes dados.

Solução: A função linear procurada é da forma $\varphi(x) = a_0 + a_1 x$. A função para a qual temos de achar o mínimo, neste caso, é dada por:

$$\chi(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{4} (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2 . \tag{15}$$

Substituindo-se os valores do problema, temos que:

$$\begin{cases}
A_{11} = \sum_{i=1}^{4} 1 = 4 \\
A_{21} = A_{12} = \sum_{i=1}^{4} x_{i} = 11 \\
A_{22} = \sum_{i=1}^{4} x_{i}^{2} = 39 \\
\sum_{i=1}^{4} y_{i} = 8 \\
\sum_{i=1}^{4} y_{i}x_{i} = 19
\end{cases}$$
(16)

Assim, obtemos:



$$a_{0} = \frac{\sum y_{i} \sum x_{i}^{2} - \sum x_{i} \sum y_{i} x_{i}}{\det A} = \frac{8 \times 39 - 11 \times 19}{4 \times 39 - (11)^{2}} = \frac{103}{35}$$

$$a_{1} = \frac{\sum 1 \sum y_{i} x_{i} - \sum x_{i} \sum y_{i}}{\det A} = \frac{4 \times 19 - 11 \times 8}{4 \times 39 - (11)^{2}} = -\frac{12}{35}$$
(18)

$$a_1 = \frac{\sum 1 \sum y_i x_i - \sum x_i \sum y_i}{\det A} = \frac{4 \times 19 - 11 \times 8}{4 \times 39 - (11)^2} = -\frac{12}{35}$$
 (18)

Logo, a tabela de dados é ajustada pela função linear abaixo:

$$\varphi(x) = \frac{103}{35} - \frac{12}{35}x = 2.9429 - 0.34286x . \tag{19}$$

Fazendo o gráfico, temos:

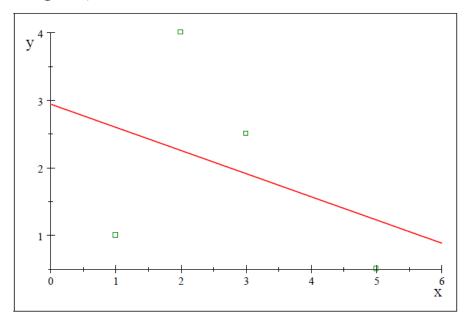


Figura 6: Exemplo de uso da regressão linear para o ajuste de pontos. Perceba que a reta não passa necessariamente pelos pontos.

Percebemos que a regressão linear não passa necessariamente pelos pontos, mas fornece uma espécie de reta média que é a reta que se aproxima ao máximo de todos pontos simultaneamente.

Caso Geral

Ajustar pontos por uma reta em uma regressão linear pode não ser o melhor procedimento a ser seguido. Em geral, é possível encontrar outras curvas, dadas por polinômios com graus maiores do que 1, que se ajustam melhor ao conjunto de pontos dados. Contudo, o método desenvolvido para a regressão linear pode ser usado com poucas modificações para ajustar curvas mais gerais (isto é, mais complexas) do que uma função linear do tipo $\varphi(x) = a_0 + a_1 x$ (uma reta).

Assim, por exemplo, funções polinomiais de grau N do tipo:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + \dots + a_N x^N$$
 (20)



poderão ser utilizadas. Também podemos ter funções envolvendo senos e cossenos que podem, neste caso, ser consideradas funções lineares de séries harmônicas.

A forma geral aproximada procurada é dada por:

$$f(x) \cong \varphi(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i h_i(x)$$
 (21)

As funções $h_i(x)$ são funções arbitrárias de x, chamadas de funções da base. A eq. (21) funciona como uma decomposição vetorial de um vetor $\varphi(x)$ em uma base de vetores $h_i(x)$ com componentes a_i .

Precisamos determinar $a_0, a_1, a_2, a_3, \ldots, a_m$, que minimizam a função soma dos resíduos dada abaixo:

$$\chi(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n \left(f(x_i) - \sum_{k=0}^m a_k h_k(x_i) \right)^2 . \tag{22}$$

Escrevendo explicitamente o somatório interno, temos:

$$\chi(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^n \left[f(x_i) - a_0 h_0(x_i) - a_1 h_1(x_i) - a_2 h_2(x_i) - \dots - a_m h_m(x_i) \right]^2 \quad (23)$$

Agora determinamos $(a_0, a_1, a_2, \dots, a_m)$, de tal forma que a derivada primeira em relação a cada um dos coeficientes da função χ se anule, ou seja,

$$\frac{\partial \chi}{\partial a_j} = 2 \sum_{i=1}^n \left[f(x_i) - a_0 h_0(x_i) - a_1 h_1(x_i) - a_2 h_2(x_i) - \dots - a_m h_m(x_i) \right] (-h_j(x_i)) = 0 ,$$
(24)

em que $0 \le j \le n$. Reescrevendo, temos que:

$$\sum_{i=1}^{n} a_0 h_0(x_i) h_j(x_i) + \sum_{i=1}^{n} a_1 h_1(x_i) h_j(x_i) + \dots + \sum_{i=1}^{n} a_m h_m(x_i) h_j(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) h_j(x_i), \quad (25)$$

com j = 0, 1, 2, ..., n.

Esta equação representa um sistema de m+1 equações e m+1 incógnitas (a_0, a_1, \ldots, a_m) conforme abaixo:

$$\begin{cases}
\sum_{i=1}^{n} a_0 h_0(x_i) h_0(x_i) + \dots + \sum_{i=1}^{n} a_n h_n(x_i) h_0(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) h_0(x_i) \\
\sum_{i=1}^{n} a_0 h_0(x_i) h_1(x_i) + \dots + \sum_{i=1}^{n} a_n h_n(x_i) h_1(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) h_1(x_i) \\
\vdots = \vdots \\
\sum_{i=1}^{n} a_0 h_0(x_i) h_m(x_i) + \dots + \sum_{i=1}^{n} a_m h_m(x_i) h_m(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) h_m(x_i)
\end{cases} (26)$$

Podemos, usando a notação vetorial da álgebra linear, escrever cada função $h_j(x)$ como um vetor de m componentes. Por exemplo, a função $h_1=(h_1(x_1),\ldots,h_1(x_n)\in\Re^n,$ e a função $f=(f(x_1),\ldots,f(x_n)\in\Re^n.$ Ficarão em uma notação mais compacta todos

os somatórios do tipo $\sum_{i=1}^m h_0(x_i)h_0(x_i) = h_0(x_1)h_0(x_1) + h_0(x_2)h_0(x_2) + h_0(x_3)h_0(x_3) + \dots + h_0(x_m)h_0(x_m) = (h_0|h_0)$ na forma de produtos escalares. Assim, podemos escrever a Eq. (26) como uma equação matricial como segue:

$$\begin{bmatrix}
(h_0|h_0) & (h_0|h_1) & (h_0|h_2) & \cdots & (h_0|h_m) \\
(h_1|h_0) & (h_1|h_1) & (h_1|h_2) & \cdots & (h_1|h_m) \\
(h_2|h_0) & (h_2|h_1) & (h_2|h_2) & \cdots & (h_2|h_m) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
(h_m|h_0) & (h_m|h_1) & (h_m|h_2) & \cdots & (h_m|h_m)
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
a_0 \\
a_1 \\
a_2 \\
\vdots \\
a_m
\end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
(h_0|f) \\
(h_1|f) \\
(h_2|f) \\
\vdots \\
(h_m|f)
\end{bmatrix} (27)$$

A Eq. (27) é chamada de sistema normal. Podemos observar que esse sistema é simétrico, de maneira que se o sistema admitir uma solução, ela será a melhor aproximação para a função f(x) pelo método dos mínimos quadrados.

Exemplo 3: Dada a seguinte tabela relativa a um experimento. Para fixar o método, iremos primeiro aproximar a tabela dada por uma função linear e, em seguida, por um polinômio de grau dois:

$$\begin{bmatrix} (h_0|h_0) & (h_0|h_1) \\ (h_1|h_0) & (h_1|h_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (h_0|f) \\ (h_1|f) \end{bmatrix},$$

$$(28)$$

para o caso de uma função linear $h(x) = a_0 + a_1 x$, neste caso, temos que:

$$\begin{cases} h_0 = (1, 1, 1, 1) \\ h_1 = (x_1, x_2, x_3, x_4) \end{cases}$$
 (29)

Os elementos da matriz acima estão calculados abaixo:

$$\begin{cases}
(h_0|h_0) = & = \sum_{i=1}^4 1 = 4 \\
(h_0|h_1) = (h_1|h_0) = & = \sum_{i=1}^4 x_i = 9 \\
(h_1|h_1) = & = \sum_{i=1}^4 x_i^2 = 35 \\
(h_0|f) = & = \sum_{i=1}^4 f(x_i) = 7 \\
(h_1|f) = & = \sum_{i=1}^4 x_i f(x_i) = 26 \end{cases}$$
(30)

For am utilizados os produtos escalares: $(1,1,1,1) \cdot (1,1,1,1)$, $(1,1,1,1) \cdot (x_1,x_2,x_3,x_4)$, $(x_1,x_2,x_3,x_4) \cdot (x_1,x_2,x_3,x_4)$, $(1,1,1,1) \cdot (f(x_1),f(x_2),f(x_3),f(x_4))$ e $(x_1,x_2,x_3,x_4) \cdot (f(x_1),f(x_2),f(x_3),f(x_4))$.



Agora, temos de resolver o sistema linear abaixo:

$$\begin{bmatrix} 4 & 9 \\ 9 & 35 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 26 \end{bmatrix}, \tag{31}$$

que resulta pelo método de Cramer :

$$a_0 = \frac{\det \begin{bmatrix} 7 & 9 \\ 26 & 35 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 4 & 9 \\ 9 & 35 \end{bmatrix}} = \frac{7 \times 35 - 9 \times 26}{4 \times 35 - 9 \times 9} = \frac{11}{59} = 0.18644$$
 (32)

e

$$a_{1} = \frac{\det \begin{bmatrix} 4 & 7 \\ 9 & 26 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 4 & 9 \\ 9 & 35 \end{bmatrix}} = \frac{4 \times 26 - 7 \times 9}{4 \times 35 - 9 \times 9} = \frac{41}{59} = 0.69492$$
 (33)

na solução $a_0 = 0.18644$ e $a_1 = 0.69492$, chegando à solução aproximada por regressão linear $\varphi(x)$:

$$\varphi(x) = 0.18643 + 0.69491x \ . \tag{34}$$

Agora, iremos ajustar o mesmo conjunto de dados por uma função do tipo

$$\phi(x) = b_0 + b_1 x + b_2 x^2, \tag{35}$$

em que:

$$\begin{cases} h_0 = 1 = (1, 1, 1, 1) \\ h_1 = x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \\ h_2 = x^2 = (x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_4^2) \end{cases}$$
 (36)

A equação matricial é escrita, neste caso, como:

$$\begin{bmatrix} (h_0|h_0) & (h_0|h_1) & (h_0|h_2) \\ (h_1|h_0) & (h_1|h_1) & (h_1|h_2) \\ (h_2|h_0) & (h_2|h_1) & (h_2|h_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (h_0|f) \\ (h_1|f) \\ (h_2|f) \end{bmatrix}$$
(37)



Neste caso os elementos da matriz são dados por:

$$\begin{cases}
(h_0|h_0) = & = \sum_{i=1}^4 1 = 4 \\
(h_0|h_1) = (h_1|h_0) = & = \sum_{i=1}^4 x_i = 9 \\
(h_0|h_2) = (h_0|h_2) = & = \sum_{i=1}^4 x_i^2 = 35 \\
(h_1|h_1) = & = \sum_{i=1}^4 x_i^2 = 35 \\
(h_1|h_2) = (h_2|h_1) = & = \sum_{i=1}^4 x_i^3 = 153 \\
(h_2|h_2) = & = \sum_{i=1}^4 x_i^4 = 707 \\
(h_0|f) = 7 & = \sum_{i=1}^4 f(x_i) = 7 \\
(h_1|f) = 26 & = \sum_{i=1}^4 x_i f(x_i) = 26 \\
(h_2|f) = 118 & = \sum_{i=1}^4 x_i^2 f(x_i) = 118
\end{cases}$$
(38)

ou seja:

$$\begin{bmatrix} 4 & 9 & 35 \\ 9 & 35 & 153 \\ 35 & 153 & 707 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 26 \\ 118 \end{bmatrix}. \tag{39}$$

Vamos resolver o sistema pelo método de Cramer, com:

$$b_0 = \frac{\det \begin{bmatrix} 7 & 9 & 35 \\ 26 & 35 & 153 \\ 118 & 153 & 707 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 4 & 9 & 35 \\ 9 & 35 & 153 \\ 35 & 153 & 707 \end{bmatrix}} = \frac{1080}{1592} = 0.67839 , \tag{40}$$

$$b_{1} = \frac{\det \begin{bmatrix} 4 & 7 & 35 \\ 9 & 26 & 153 \\ 35 & 118 & 707 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 4 & 9 & 35 \\ 9 & 35 & 153 \\ 35 & 153 & 707 \end{bmatrix}} = \frac{-424}{1592} = -0.26633,$$

$$(41)$$

$$b_{2} = \frac{\det \begin{bmatrix} 4 & 9 & 7 \\ 9 & 35 & 26 \\ 35 & 153 & 118 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 4 & 9 & 35 \\ 9 & 35 & 153 \\ 35 & 153 & 707 \end{bmatrix}} = \frac{304}{1592} = 0.19095$$

$$(42)$$



Logo, a função procurada é dada por:

$$\phi(x) = 0.67839 - 0.26633x + 0.19095x^{2}. \tag{43}$$

Vamos fazer um gráfico comparativo para observar os pontos, a regressão linear e esta última aproximação quadrática:

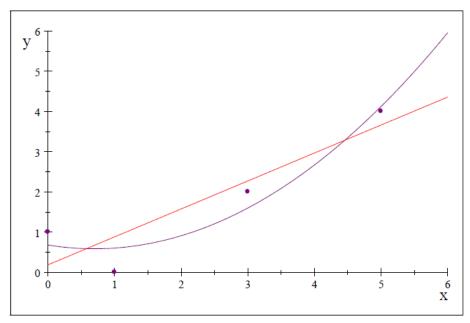


Figura 7: Gráfico com a aproximação linear e a aproximação quadrática para os pontos dados.

Caso Contínuo

No caso contínuo, não temos mais uma tabela de valores de funções, mas temos uma função $f\left(x\right)$ dada em um intervalo. Assim, aproximamos essa função por outra $\varphi\left(x\right)$ no mesmo intervalo. Isso é necessário para termos uma função mais conveniente de ser trabalhada do que a função original.

Do mesmo modo que no caso discreto, temos de achar uma família de funções da forma

$$f(x) \cong \varphi(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i h_i(x) , \qquad (44)$$

que descreva de modo satisfatório a função original. Mas como estamos em um caso contínuo, esta nova função deverá estar dentro de um intervalo fechado, ou seja, o intervalo $I = [x_i, x_f]$.

Neste caso, para não perder informações sobre a função a ser aproximada, temos que minimizar a seguinte função:



$$\chi(a_0, a_1, a_2, \dots, a_m) = \int_{x_i}^{x_f} [f(x) - \varphi(x)]^2 dx$$

$$= \int_{x_i}^{x_f} [f(x) - a_0 h_0(x) - a_1 h_1(x) - \dots - a_m h_m(x)]^2 dx . (45)$$

Temos agora de achar os mínimos para esta função em termos do conjunto dos parâmetros (a_0, a_1, \dots, a_m) , ou seja:

$$\frac{\partial \chi}{\partial a_0} = \frac{\partial \chi}{\partial a_1} = \frac{\partial \chi}{\partial a_2} = \dots = \frac{\partial \chi}{\partial a_m} = 0. \tag{46}$$

Logo:

$$\frac{\partial \chi}{\partial a_j} - 2 \int_{x_i}^{x_f} \left[f(x) - \sum_{i=0}^m a_i h_i(x) \right] h_j(x) \ dx = 0 \ , \tag{47}$$

onde $0 \le j \le m$.

Podemos utilizar a notação da álgebra linear para denotar, neste caso, o produto interno entre funções, conforme abaixo:

$$(f \mid h) = \int_{x_1}^{x_2} f(x)h(x)dx \tag{48}$$

Logo, utilizando-se a notação acima, obtemos o seguinte sistema normal na forma de uma equação matricial:

$$\begin{bmatrix}
(h_0|h_0) & (h_0|h_1) & (h_0|h_2) & \cdots & (h_0|h_m) \\
(h_1|h_0) & (h_1|h_1) & (h_1|h_2) & \cdots & (h_1|h_m) \\
(h_2|h_0) & (h_2|h_1) & (h_2|h_2) & \cdots & (h_2|h_m) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
(h_m|h_0) & (h_m|h_1) & (h_m|h_2) & \cdots & (h_m|h_m)
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
a_0 \\
a_1 \\
a_2 \\
\vdots \\
a_m
\end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
(h_0|f) \\
(h_1|f) \\
(h_2|f) \\
\vdots \\
(h_m|f)
\end{bmatrix} (49)$$

Similarmente ao caso discreto, se o sistema acima apresentar uma solução, esta será única.



Iremos agora resolver um exemplo para fixar estas ideias.

Exemplo 4: Faça a aproximação da função $f(x) = x^2 + 3x + 2$ por uma função linear da forma $\varphi(x) = a_0 + a_1 x$ no intervalo [0, 1].

Solução: Temos de resolver o sistema matricial:

$$\begin{bmatrix} (h_0|h_0) & (h_0|h_1) \\ (h_1|h_0) & (h_1|h_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (h_0|f) \\ (h_1|f) \end{bmatrix}$$
(50)

Calculando-se os elementos de matriz da equação matricial acima, temos que:

$$\begin{cases}
(h_0|h_0) &= \int_0^1 1.1 dx = x|_0^1 = 1 \\
(h_0|h_1) = (h_1|h_0) &= \int_0^1 1.x dx = \left[\frac{x^2}{2}\right]_0^1 = \frac{1}{2} \\
(h_1|h_1) &= \int_0^1 x.x = \left[\frac{x^3}{3}\right]_0^1 = \frac{1}{3} \\
(h_0|f) &= \int_0^1 1.(x^2 + 3x + 2) dx = \left[\frac{x^3}{3} + 3\frac{x^2}{2} + 2x\right]_0^1 = \frac{23}{6} \\
(h_1|f) &= \int_0^1 x.(x^2 + 3x + 2) dx = \left[\frac{x^4}{4} + 3\frac{x^3}{3} + 2\frac{x^2}{2}\right]_0^1 = \frac{9}{4}.
\end{cases} (51)$$

Consequentemente, a equação matricial fica:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 23/6 \\ 9/4 \end{bmatrix}, \tag{52}$$

cuja solução é

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{11}{6} \\ 4 \end{bmatrix} . \tag{53}$$

Portanto, a função procurada é escrita na seguinte forma:

$$\varphi(x) = \frac{11}{6} + 4x \ . \tag{54}$$

Na figura a seguir, mostramos os gráficos das funções f(x) e $\varphi(x)$ para o intervalo considerado I=[0,1].

$$\varphi(x) = \frac{11}{6} + 4x$$
, vermelho

$$f(x) = x^2 + 3x + 2 , \text{ azul}$$

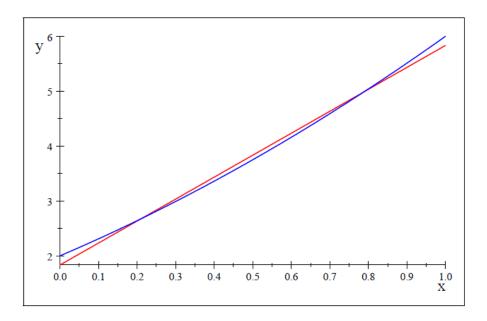


Figura 8: Função $f(x)=x^2+3x+2$ (azul) e a função aproximada $\phi(x)=11/6+4x$ (vermelho).

Exemplo 5: Aproxime a função $f(x) = \frac{1}{x+2}$ por uma função linear da forma $\varphi(x) = a_0 + a_1 x$ no intervalo [0, 1].

Solução: Devemos resolver o seguinte sistema matricial abaixo:

$$\begin{bmatrix} (h_0|h_0) & (h_0|h_1) \\ (h_1|h_0) & (h_1|h_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (h_0|f) \\ (h_1|f) \end{bmatrix}$$
(55)

Os elementos de matriz do sistema acima são dados por:

$$\begin{cases} (h_0|h_0) &= \int_0^1 1.1 dx = [x]_0^1 = 1\\ (h_0|h_1) = (h_1|h_0) &= \int_0^1 1.x dx = \left[\frac{x^2}{2}\right]_0^1 = \frac{1}{2}\\ (h_1|h_1) &= \int_0^1 x^2 dx = \left[\frac{x^3}{3}\right]_0^1 = \frac{1}{3}\\ (h_0|f) &= \int_0^1 1.\frac{1}{x+2} dx = [\ln(x+2)]_0^1 = 0.405465\\ (h_1|f) &= \int_0^1 x.\frac{1}{x+2} dx = [x-2\ln(x+2)]_0^1 = 0.18907 \end{cases}$$
(56)

Logo, o sistema linear a ser resolvido é dado por:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.405465 \\ 0.18907 \end{bmatrix}, \tag{57}$$

cuja solução é

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.48744 \\ -0.16395 \end{bmatrix} . (58)$$

Portanto, a função procurada que melhor descreve a função dada no intervalo considerado é:

$$\varphi(x) = 0.48744 - 0.16395x \ . \tag{59}$$

Na figura abaixo, apresentamos as curvas para as funções f(x) e $\varphi(x)$ para o intervalo considerado no exemplo dado.

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{x+2} \text{ azul}}$$

$$\boxed{\varphi(x) = 0.48744 - 0.16395x \text{ preto}}$$

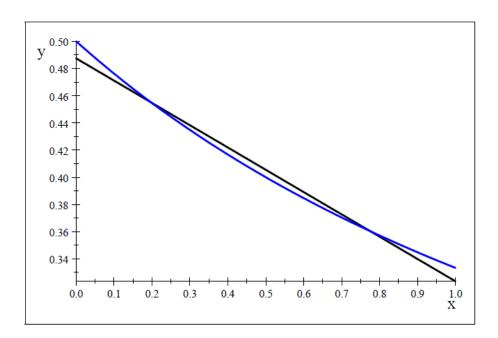


Figura 9: Comparação entre a função f(x)=(1/(x+2)) (azul) e a função aproximada (preto) $\Phi(x)=0.48744-0.16395x$.

Exemplo 6: Seja a função $f(x) = \frac{1}{x+2}$ do exemplo anterior. Iremos, aproximar esta função por uma função da forma $j(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ no intervalo [0,1] para ver se conseguimos um ajuste mais preciso. A equação matricial, neste caso, tem a forma abaixo:

$$\begin{bmatrix} (h_0|h_0) & (h_0|h_1) & (h_0|h_2) \\ (h_1|h_0) & (h_1|h_1) & (h_1|h_2) \\ (h_2|h_0) & (h_2|h_1) & (h_2|h_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (h_0|f) \\ (h_1|f) \\ (h_2|f) \end{bmatrix}$$
(60)

Logo, os elementos de matriz que temos de calcular são dados por:

$$\begin{cases}
(h_0|h_0) &= \int_0^1 1.1 dx &= 1 \\
(h_0|h_1) = (h_1|h_0) &= \int_0^1 1.x dx &= \frac{1}{2} \\
(h_1|h_1) &= \int_0^1 x^2 dx &= \frac{1}{3} \\
(h_0)|h_2) = (h_2|h_0) &= \int_0^1 1.x^2 dx &= \frac{1}{3} \\
(h_1|h_2) = (h_2|h_1) &= \int_0^1 x^3 dx &= \frac{1}{4} \\
(h_2|h_2) &= \int_0^1 x^4 dx &= \frac{1}{5} \\
(h_0|f) &= \int_0^1 1 \frac{1}{x+2} dx &= 0.405465 \\
(h_1|f) &= \int_0^1 x \frac{1}{x+2} dx &= 0.18907 \\
(h_2|f) &= \int_0^1 x^2 \frac{1}{x+2} dx &= 0.12186 .
\end{cases}$$

Logo, o sistema matricial neste caso é escrito como sendo:



$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.405465 \\ 0.18907 \\ 0.12186 \end{bmatrix}$$
(62)

O sistema tem solução dada por:

$$\left\{ \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.49847 \\ -0.2301 \\ 0.06615 \end{bmatrix} \right.$$

A função j(x) procurada é: $j(x) = 0.49847 - 0.2301x + 0.06615x^2$.

Abaixo, apresentamos as curvas para as funções f(x), $\varphi(x)$ e j(x) no intervalo considerado. Note que a função ajustada j(x) tem um resultado muito melhor do que o obtido no exemplo 5.

$$f(x) = \frac{1}{x+2} \ \text{preto}$$

$$j(x) = 0.49847 - 0.2301x + 0.06615x^2$$
 azul

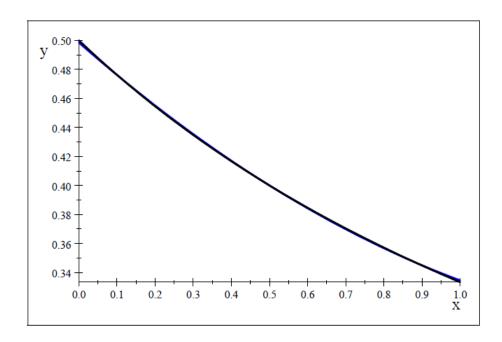


Figura 10: Gráfico comparativo da função f(x)=(1/(x+2)) (preto) e a função aproximada quadraticamente $j(x)=0.49847-0.2301x+0.06615x^2$ (azul).



Material Complementar

Para conhecer e se informar um pouco mais sobre o ajuste de curvas, visite o site:



http://www.dca.ufrn.br/~diogo/FTP/dca0304/ajustedecurvas.pdf

E para complementar sua leitura, visite também:

http://www.dsc.ufcg.edu.br/~cnum/

http://objetoseducacionais2.mec.gov.br/handle/mec/10529

http://www.khanacademy.org/math/linear-algebra/v/vector-dotproduct-and-vector-length

http://www.khanacademy.org/math/linear-algebra/v/linear-algebra-cross-product-introduction

http://www.matematica.pucminas.br/lcn/vcn1.htm



Depois de ler o material e informar-se sobre o assunto, vamos pôr em prática esses conhecimentos nas atividades!

Bom trabalho!



Anotações	Wilder The second of the seco
	1



Referências



RUGGIERO, M.A.G. & LOPES, V.L.R. Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais. 2ª Edição. São Paulo: Editora Makron Books, 1998.

SPERANDIO, D., MENDES, J.T. & SILVA, L.H.M. Cálculo Numérico: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos. São Paulo: Editora Pearson, 2003.

HUMES, A.F.P.C., MELO, I.S.H., YOSHIDA, L.K. & MARTINS, W.T. Noções de Cálculo Numérico. São Paulo: Editora McGraw Hill, 1984.

BURDEN, R.L. & FAIRES, J.D. Análise Numérica. São Paulo: Editora Pioneira Thomson Learning, 2003.

BARROS, I.Q. Introdução ao Cálculo Numérico. São Paulo: Editora Edgard Blucher Ltda, 1972.

STEINBERG, A. & WINTERLE, P. Álgebra Linear. Editora Pearson Makron Books, 1987.

PISKOUNOV, N. Cálculo Diferencial e Integral, Vols. I e II. Porto: Lopes da Silva Editora, 1983.



www.cruzeirodosul.edu.br

Campus Liberdade

Rua Galvão Bueno, 868

01506-000

São Paulo SP Brasil

Tel: (55 11) 3385-3000









