

# Atividade para casa #6

## Ajustes de curvas *Regressões e interpolações*

25 de junho de 2025

### 1 Contextualização

Para um usuário atual de ferramentas modernas voltadas à produção de representações visuais do comportamento de dados, costumamos associar o conceito de ajuste de curva a uma espécie de botão mágico que em frações de segundos olha para os nossos dados, busca um padrão que os relacione dentro de uma lista de possibilidades que escolhemos e nos mostra em tempo real como cada modelo ou tipo de curva se ajusta visualmente aos nossos dados. Usamos até uma palavra em inglês que virou um neologismo próprio na forma do verbo *fitar*, expressão muito usada por cientistas que lidam com dados.

Do ponto de vista físico a busca por uma curva que ajuste bem nossos dados experimentais pode representar um avanço na busca por relações causais que expliquem o fenômeno que estamos querendo entender. Como não ganhar confiança na qualidade dos nossos dados experimentais quando concebemos um experimento de difícil execução e que por meio de medições indiretas gera uma curva de dados medidos que se encaixa perfeitamente com uma elegante lei de potência?

O objetivo do nosso estudo nesse capítulo consiste em entender a matemática e os conceitos por trás dos algoritmos largamente usados e implementados nas mais diversas ferramentas prontas voltadas à análise de dados. Nesse sentido, essa seção será voltada à duas classes de problemas matemáticos relacionados ao ajuste de curvas, que podem no caso mais geral representar conjuntos de dados.

A primeira classe de problemas que estudaremos nesse capítulo diz respeito à regressões. A ideia aqui é tentar encontrar curvas prontas, como retas, leis de potência ou funções exponenciais que buscarão ajustar matematicamente seus coeficientes a fim de minimizar os desvios globais entre os valores da função em cada ponto e conjuntos de dados que cruzem esse intervalo.

A segunda classe que iremos abordar diz respeito às interpolações. Aqui o objetivo é tentar prever o valor de dados intermediários entre valores discretos de um certo conjunto de dados. O objetivo é desenvolver um método para obtenção da estimativa de um dado de saída para o qual não existe um dado de entrada correspondente, utilizando dados vizinhos.

Uma questão importante dentro do assunto que iremos aqui estudar é: para quais tipos de dados estaremos interessados em regressões e para quais tipos estaremos mais focados no uso de interpolações? Geralmente, quando os dados são muito ruidosos, no sentido de apresentarem pontos muito dispersos, uma interpolação provavelmente perderá sentido físico ou mesmo prático. Nesse cenário, ajustes por regressões visando recuperar certas curvas conhecidas que passem aproximadamente pelos pontos serão mais interessantes.

Essas regressões poderão ser utilizadas por exemplo para estimarmos tendências gerais. É importante que fique claro aqui que o estudo formal de técnicas orientadas ao ajuste de curvas visa mais do que mostrar um gráfico bonito para o seu chefe, orientador ou colega. Esses ajustes são baseados na adoção de procedimentos matemáticos e estatísticos e podem ser a chave para destravar compreensões mais profundas sobre como seus dados estão organizados.

## 2 Regressões em pesquisa científica: um exemplo de cálculo numérico aplicado

Falamos algumas vezes nessa apostila que o bom numericista é aquele que consegue enxergar como aplicar em conjunto diferentes métodos numéricos voltados à solução de um problema específico. Poderíamos usar por exemplo uma regressão por mínimos quadrados como parte de um algoritmo maior voltado à solução de equações diferenciais em domínios discretizados para responder uma pergunta científica objetiva.

Para exemplificar, gostaria de compartilhar um problema de pesquisa no qual venho trabalhando e que me levou a pensar numa situação onde o uso de um processo de regressão poderia me ajudar a responder uma pergunta científica, ainda em aberto, que venho investigando por meio de um outro código de simulação, baseado em OpenFOAM (uma biblioteca aberta voltada à dinâmica dos fluidos computacional) que basicamente é um resolvidor de equações diferenciais parciais.

Para explicar o meu problema, vou lhe contar uma história científica. Em meados dos anos 1950, passamos a ter relatos na literatura científica acerca da possibilidade de derretermos pequenos tumores malignos por meio de um processo conhecido como aquecimento por indução magnética, ou magnetohipertermia. A técnica consiste em injetar no tecido cancerígeno um conjunto de pequenas partículas magnéticas biocompatíveis e submetê-las à aplicação de um campo magnético oscilatório em alta frequência. Esse procedimento induz um aumento local da temperatura do tecido cancerígeno, o que provoca um processo de desativação do núcleo das células cancerígenas conhecido como termo-apoptose celular. Essas células desativadas são então absorvidas pelo sistema de defesa do paciente e assim o tumor é eliminado.

A equação que descreve o comportamento do campo de temperatura desse sistema é uma equação diferencial parcial dada por

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T - \rho_b C_b \omega_b (T - T_b) + \dot{q}_m + \Phi(\mathbf{x}, t) \dot{P}_m, \quad (1)$$

com

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \Phi, \quad (2)$$

em que  $\rho$ ,  $C_p$  e  $T$  correspondem respectivamente a massa específica, calor específico e temperatura do tecido em questão,  $t$  denota o tempo,  $k$  é a condutividade térmica do tecido,  $\nabla$  é o operador gradiente,  $\rho_b$ ,  $C_b$ ,  $\omega_b$  representam a massa específica, calor específico e taxa de perfusão sanguínea do sangue arterial em cada tecido, sendo  $\omega_b$  uma função da temperatura local,  $T_b$  é a temperatura do sangue arterial,  $\dot{q}_m$  é um termo que computa localmente a taxa de produção de energia térmica por efeitos magnéticos e  $\Phi(\mathbf{x}, t)$  representa a fração volumétrica local de partículas magnéticas em cada ponto do espaço do nosso domínio de solução. O modelo apresentado por essas equações considera por exemplo o fato de que uma vez que o material magnético seja injetado no paciente, o mesmo

irá se espalhar ao longo do tempo num processo equivalente ao processo de difusão de massa, porém numa escala não-molecular. Hoje em dia essas partículas magnéticas são inseridas em um líquido base com viscosidade próxima a do sangue e possuem diâmetros de aproximadamente  $10nm$ .

Atualmente, temos um código baseado em OpenFOAM, que resolve esse sistema de equações por meio da técnica dos volumes finitos (que veremos ao final dessa apostila). Esse código está inserido dentro de um projeto maior que idealizei, denominado *fhdFoam*. Esse projeto consiste na organização na forma de um repositório público do github um conjunto de *solvers* baseados em solvers originais da biblioteca OpenFOAM, voltados à simulação do comportamento de escoamentos de fluidos magnéticos em diferentes contextos. Além dos solvers, o repositório conta com estudos de caso configurados e previamente validados, bem como com um protótipo de interface gráfica desenvolvido em Python para intermediação do usuário com arquivos de configuração internos do fluxo de simulações do OpenFOAM. Esse é um projeto em construção e pode ser acessado em <https://github.com/lcec-unb/fhdFoam>.

Dentro desse repositório, o *solver* responsável por executar simulações dentro do contexto de magnetohipertermia é o *mhtFoam*. A figura (1) ilustra uma pequena galeria do que esse solver pode fazer.

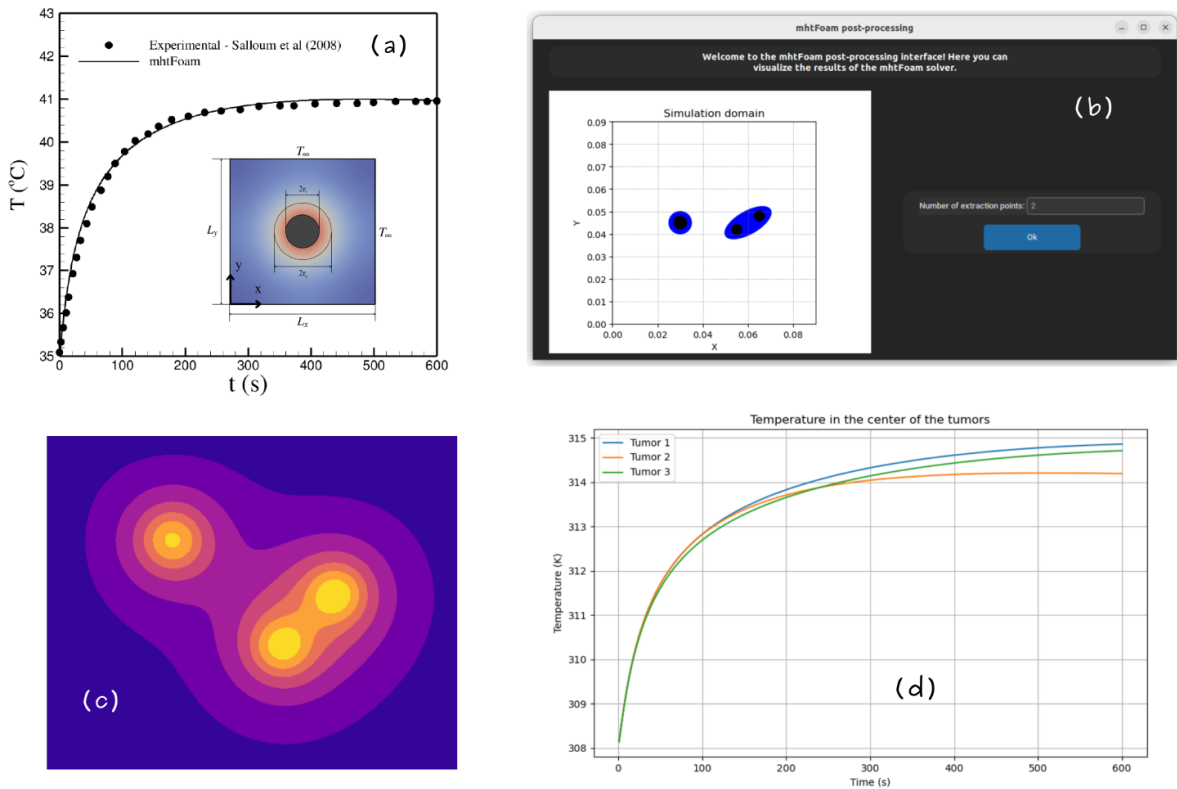


Figura 1: (a) validação do mhtFoam, (b) exemplo de interface gráfica de pós-processamento, (c) exemplo de campo de temperatura para o caso de 3 tumores interagindo termicamente, (d) gráfico de temperatura por tempo para o campo mostrado em (c)

O mhtFoam foi validado com base em uma comparação realizada entre nossas simulações e dados experimentais obtidos por Salloum et al. (2008) para um experimento feito com um rato de laboratório vivo. A comparação foi feita para o comportamento da

temperatura no centro do tumor ao longo de um intervalo de 10 minutos. Essa validação é apresentada na figura (1a). Todo simulador voltado à obtenção de dados confiáveis acerca da realidade de um dado fenômeno observado deve ser rigorosamente validado para que qualquer conclusão científica oriunda de resultados feitos com esse simulador sejam críveis.

Uma pergunta científica ainda em aberto no campo da magnetohipertermia é: *se injetássemos o ferrofluido aos poucos, com doses bem pequenas ao longo de intervalos definidos de tempo e com pequenas pausas entre os processos de injeção, poderíamos obter o mesmo efeito de aquecimento e utilizar menos material magnético quando comparado ao cenário de uma única grande quantidade injetada apenas no início do processo de uma vez?* Essa é uma pergunta que me ocorreu e que poderia ser respondida utilizando a seguinte estratégia.

1. Adicionamos um termo fonte na equação (2) para o cálculo do campo de  $\Phi(\mathbf{x}, t)$  na forma:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \Phi + \dot{\Phi}_i(t), \quad (3)$$

em que  $\dot{\Phi}_i(t)$  representa uma taxa de injeção num dado instante de tempo. Do ponto de vista numérico, o desafio seria o de estimar a cada tempo de simulação o valor exato de  $\dot{\Phi}_i(t)$  que gera o menor desvio entre os dados numéricos e os dados experimentais;

2. Começamos uma simulação com uma condição inicial em que não existe material magnético inserido nos tecidos biológicos;
3. Do ponto de vista do algoritmo, precisaríamos implementar no solver uma estratégia de cálculo de  $\dot{\Phi}_i$  que comparasse o valor atual da temperatura do centro do tumor obtida numericamente  $T_n$  com o valor experimental  $T_e$ . É importante notar que esses dados experimentais geralmente vem na forma de uma tabela com pontos muito espaçados quando comparados com a necessidade de atualização da comparação entre valores numéricos e experimentais ao longo da simulação, uma vez que o passo de tempo numérico é muito menor que o passo de tempo da coleta dos dados experimentais;
4. Chamando  $|T_n - T_e|$  de  $\Delta_T(t)$ , queremos encontrar  $\dot{\Phi}_i$  que a cada tempo  $t$  faça  $\Delta_T(t) \rightarrow 0$ . Sabemos que  $\Delta_T$  depende a cada tempo do valor de  $\dot{\Phi}_i(t)$ , logo, poderíamos escrever que  $\Delta_T(\dot{\Phi}_i, t)$ ;
5. Estamos então buscando para cada tempo fixo ao longo do processo de execução da simulação encontrar  $\dot{\Phi}_i$  que zere a função  $\Delta_T(\dot{\Phi}_i, t)$ . Esse é um problema de estimativa do zero de uma função. Para resolvê-lo podemos usar a cada instante de tempo informações dos últimos passos de tempo para reconstruir uma tendência do comportamento numérico dessa função e usarmos por exemplo o método de Newton-Raphson para calibrar o valor de  $\dot{\Phi}_i(t)$  que para o tempo atual zere essa função resíduo  $\Delta_T(t)$  nesse instante;
6. Mas o que fazemos com os dados em tempos intermediários para os quais não temos uma base de dados experimental de referência? Podemos muito bem propor uma curva por exemplo de saturação, típica do comportamento obtido por modelos de crescimento populacional, para em seguida aplicarmos um processo de regressão a fim de obter os coeficientes que geram essa curva;

7. Em seguida, utilizamos uma expressão algébrica simples no meio do código para refinarmos as previsões do comportamento de  $\Delta_T(t)$  e aumentarmos o sucesso das previsões de  $\dot{\Phi}_i(t)$  que garantam  $\Delta_T \rightarrow 0$  ao longo de todo o processo de simulação;
8. Uma vez que consigamos representar o comportamento esperado de  $T_n \times t$  que crave com os dados da base experimental, simplesmente integramos  $\dot{\Phi}_i$  ao longo de todo o tempo de simulação e verificamos ao final se o valor obtido foi superior ou inferior à quantidade utilizada no experimento de referência do nosso problema.

Esse é um racional lógico viável para responder à pergunta científica proposta por meio da construção de um código autoral que mistura técnicas numéricas diversas. Veja que aqui estamos falando do uso combinado de procedimentos para determinação de zeros de funções, ajustes de curvas e soluções de equações diferenciais parciais (EDPs). Além disso, no próprio algoritmo de solução das EDPs que descrevem o problema, baseado na lógica de construção da biblioteca OpenFOAM, utilizamos também métodos de solução de sistemas lineares e técnicas de interpolação, características do método dos volumes finitos. O exemplo dado aqui visa reforçar no leitor a ideia de que o próprio conceito de *simulação computacional* nada mais é do que a aplicação inteligente do uso combinado de técnicas numéricas voltadas à solução de problemas matemáticos enunciados de diferentes formas.

### 3 Regressão por mínimos quadrados

Quando temos dados muito espalhados e queremos obter uma função pré-definida que cruze da melhor forma possível essa dispersão de dados, podemos utilizar uma técnica famosa conhecida como *regressão por mínimos quadrados*. A ideia é representada na figura (2).

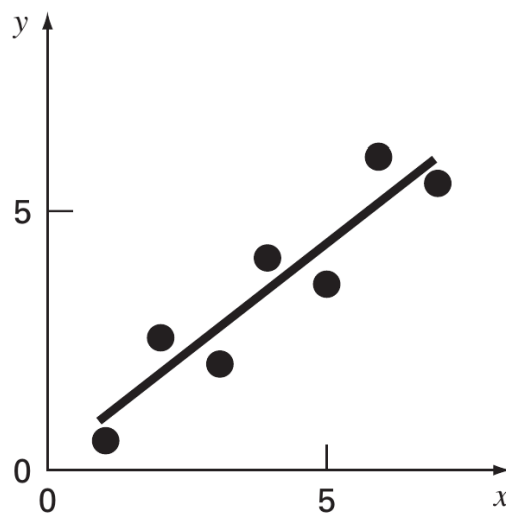


Figura 2: Ilustração do comportamento típico de uma regressão linear para um conjunto de dados dispersos

Na figura (2) temos uma regressão linear aplicada sobre os pontos dispersos. Para compreendermos a construção de esquemas de regressão por mínimos quadrados, começaremos com o contexto mais simples de uma regressão linear. Nesse caso, considere que

$y$  representa o conjunto de pontos experimentais, ou os dados que queremos fitar. Dessa forma, o erro, ou resíduo, para cada ponto  $x$  entre os dados experimentais e a reta que estamos buscando é dado por  $e = y - a_0 - a_1x$ . A ideia aqui consiste em estimar  $a_0$  e  $a_1$  que minimizem o erro quadrático

$$S_r = \sum_{i=1}^N e_i^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - a_0 - a_1x_i)^2. \quad (4)$$

Aqui  $S_r$  representa a soma do quadrado dos resíduos. Utilizamos os resíduos quadráticos para compensar o fato de que valores experimentais abaixo da reta contribuam com resíduos quadráticos positivos, uma vez que estamos buscando a reta que melhor se ajusta em torno dos pontos experimentais. A fim de estimar  $a_0$  e  $a_1$  que minimizem  $S_r$ , precisamos derivar  $S_r$  com relação à  $a_0$  e com relação à  $a_1$ , igualar à zero e descobrir os coeficientes da reta que estamos buscando. Utilizando (4) obtemos

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^N (y_i - a_0 - a_1x_i) \quad (5)$$

e

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^N [(y_i - a_0 - a_1x_i) x_i], \quad (6)$$

igualando essas duas derivadas à zero é possível obter

$$0 = \sum y_i - \sum a_0 - \sum a_1x_i \quad (7)$$

e

$$0 = \sum y_i x_i - \sum a_0 x_i - \sum a_1 x_i^2. \quad (8)$$

Nas equações (7) e (8), os somatórios variam de 1 à  $N$ . Note ainda que  $\sum a_0 = Na_0$ , de tal sorte que com um pouco de reorganização, podemos reescrever as equações (7) e (8) como um sistema linear  $2 \times 2$  na forma

$$c_{11}a_0 + c_{12}a_1 = b_1 \quad (9)$$

$$c_{21}a_0 + c_{22}a_1 = b_2, \quad (10)$$

em que  $c_{11} = N$ ,  $c_{12} = \sum x_i$ ,  $c_{21} = \sum x_i$ ,  $c_{22} = \sum x_i^2$ ,  $b_1 = \sum y_i$  e  $b_2 = \sum x_i y_i$ . Note que todos esses coeficientes podem ser obtidos diretamente a partir dos dados experimentais. Dessa forma, podemos resolver um sistema linear razoavelmente simples, com coeficientes obtidos a partir dos dados que queremos fitar para descobrir os coeficientes da reta que melhor se ajusta a esses pontos, gerando o mínimo resíduo quadrático possível.

Para exemplificar o procedimento de obtenção da reta que melhor fita uma dispersão de pontos, considere os dados da tabela (1). Esses dados representam os pontos da figura (2). Para esses dados, temos:

$$c_{11} = 7, \quad c_{12} = c_{21} = \sum_{i=1}^7 x_i = 28, \quad c_{22} = \sum_{i=1}^7 x_i^2 = 140 \quad (11)$$

$$b_1 = \sum_{i=1}^7 y_i = 24, \quad b_2 = \sum_{i=1}^7 x_i y_i = 119.5. \quad (12)$$

Esses resultados parciais podem ser organizados para montarmos o seguinte sistema linear

$$7a_0 + 28a_1 = 24 \quad (13)$$

$$28a_0 + 140a_1 = 119.5, \quad (14)$$

cujas soluções fornece  $a_0 = 0.07142857$  e  $a_1 = 0.8392857$ . Esses coeficientes geram como resultado a reta apresentada na figura (2).

| $x_i$ | $y_i$ |
|-------|-------|
| 1     | 0.5   |
| 2     | 2.5   |
| 3     | 2.0   |
| 4     | 4.0   |
| 5     | 3.5   |
| 6     | 6     |
| 7     | 5.5   |

Tabela 1: Dados experimentais associados aos pontos representados na figura (2)

### 3.1 Para casa: explorando regressões polinomiais e regressões múltiplas

Podemos utilizar a mesma lógica para obtermos os coeficientes de polinômios de grau  $n$  que visem representar ajustes para distribuições de dados dispersos. Considere por exemplo um polinômio de segunda ordem, expresso genericamente por  $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ .

1. Utilize a mesma abordagem adotada no contexto da regressão linear e mostre que os valores de  $a_0, a_1, a_2$  que melhor ajustam dados experimentais pelo método dos mínimos quadrados podem ser obtidos pela solução do seguinte sistema linear  $3 \times 3$ :

$$c_{11}a_0 + c_{12}a_1 + c_{13}a_2 = b_1 \quad (15)$$

$$c_{21}a_0 + c_{22}a_1 + c_{23}a_2 = b_2 \quad (16)$$

$$c_{31}a_0 + c_{32}a_1 + c_{33}a_2 = b_3 \quad (17)$$

com

$$c_{11} = N, \quad c_{12} = \sum x_i, \quad c_{13} = \sum x_i^2, \quad b_1 = \sum y_i \quad (18)$$

$$c_{21} = c_{12}, \quad c_{22} = c_{13}, \quad c_{23} = \sum x_i^3, \quad b_2 = \sum x_i y_i \quad (19)$$

$$c_{31} = c_{13}, \quad c_{32} = c_{23}, \quad c_{33} = \sum x_i^4, \quad b_3 = \sum x_i^2 y_i \quad (20)$$

2. Ajuste por um polinômio do segundo grau os dados da tabela (2), resolvendo o sistema linear deduzido no passo anterior a fim de obter os coeficientes  $a_0, a_1, a_2$ . Aqui você deverá resolver tudo à mão antes de plotar o gráfico no computador;
3. Mostre que para uma função de 2 variáveis  $f(x_1, x_2)$  para as quais temos dados experimentais medidos, dados por  $y(x_1, x_2)$ , é possível aplicar um procedimento de regressão linear múltipla, no qual  $f(x_1, x_2) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$  e que os valores

| $x_i$ | $y_i$ |
|-------|-------|
| 0     | 2.1   |
| 1     | 7.7   |
| 2     | 13.6  |
| 3     | 27.2  |
| 4     | 40.9  |
| 5     | 61.1  |

Tabela 2: Dispersão de pontos a serem ajustados por um polinômio de segunda ordem

dos coeficientes  $a_0, a_1, a_2$  que melhor ajustam os dados pelo método dos mínimos quadrados são dados pela solução do sistema linear:

$$c_{11}a_0 + c_{12}a_1 + c_{13}a_2 = b_1 \quad (21)$$

$$c_{21}a_0 + c_{22}a_1 + c_{23}a_2 = b_2 \quad (22)$$

$$c_{31}a_0 + c_{32}a_1 + c_{33}a_2 = b_3 \quad (23)$$

com

$$c_{11} = N, \quad c_{12} = \sum x_{1i}, \quad c_{13} = \sum x_{2i}, \quad b_1 = \sum y_i \quad (24)$$

$$c_{21} = c_{12}, \quad c_{22} = \sum x_{1i}^2, \quad c_{23} = \sum x_{1i}x_{2i}, \quad b_2 = \sum x_{1i}y_i \quad (25)$$

$$c_{31} = c_{13}, \quad c_{32} = c_{23}, \quad c_{33} = \sum x_{2i}^2, \quad b_3 = \sum x_{2i}y_i \quad (26)$$

4. Finalmente, use a regressão linear múltipla para ajustar os seguintes dados experimentais

| $x_{1i}$ | $x_{2i}$ | $y_i$ |
|----------|----------|-------|
| 0        | 0        | 5     |
| 2        | 1        | 10    |
| 2.5      | 2        | 9     |
| 1        | 3        | 0     |
| 4        | 6        | 3     |
| 7        | 2        | 27    |

Tabela 3: Dispersão de pontos a serem ajustados por uma regressão linear múltipla

## 4 Regressões baseadas na linearização de relações não-lineares

É provável que você já tenha se deparado com a opção de escolher ajustes de curvas específicas para tentar fitar um certo conjunto de dados. Ajustes de leis de potência, exponenciais, entre outros. Esses ajustes são obtidos por meio de um processo de lineari-



zação de relações não lineares. Aqui trataremos três tipos de ajustes dessa natureza:

$$y = \alpha_1 e^{\beta_1 x} \Rightarrow \text{ajuste 1;} \quad (27)$$

$$y = \alpha_2 x^{\beta_2} \rightarrow \text{ajuste 2;} \quad (28)$$

$$y = \frac{\alpha_3 x}{\beta_3 + x} \Rightarrow \text{ajuste 3.} \quad (29)$$

Aqui  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_1, \beta_2, \beta_3$  são constantes reais. O ajuste 1 representa um ajuste exponencial, já o ajuste 2 denota um ajuste por lei de potência, enquanto o ajuste 3 representa um ajuste relacionado a uma taxa de crescimento com tendência de saturação. Cada um desses ajustes pode ser mais ou menos adequado a diferentes tipos de problemas físicos. Ajustes exponenciais, por exemplo, representam bem o comportamento de processos de resfriamento. Já ajustes do tipo lei de potência costumam fitar muito bem dados reológicos de fluidos não Newtonianos sujeitos a um incremento de taxa de cisalhamento, enquanto ajustes do tipo 3 representam comportamentos típicos de evolução populacional de seres vivos, como bactérias, leveduras, entre outros.

Os três tipos de curvas/ajustes apresentados aqui nessa seção podem ser obtidos por meio da transformação dessas relações em retas, como representado na figura (3).

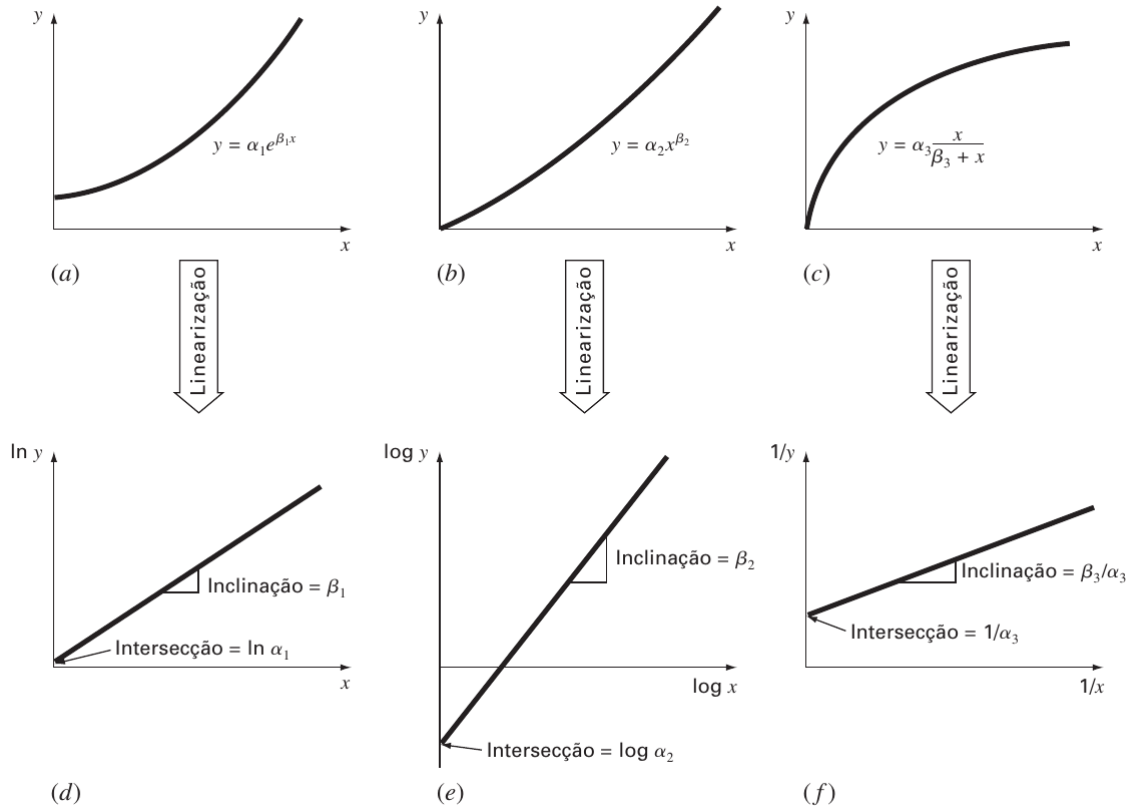


Figura 3: (a) Curva exponencial, (b) curva de uma lei de potência e (c) comportamento da taxa de crescimento da saturação. Os gráficos (d), (e) e (f) representam as versões linearizadas dessas três curvas por meio de transformações simples.

Para obtenção de um ajuste exponencial por exemplo, podemos aplicar a função  $\ln$  dos dois lados da expressão apresentada para o ajuste 1 para obter

$$\ln(y) = \ln(\alpha_1 e^{\beta_1 x}) = \ln(\alpha_1) + \ln(e^{\beta_1 x}) = \ln(\alpha_1) + \beta_1 x, \quad (30)$$

chamando  $\ln(y) = \bar{y}$ ,  $\ln(\alpha_1) = \bar{\alpha}_1$ , podemos reescrever

$$\bar{y} = \bar{\alpha}_1 + \beta_1 x. \quad (31)$$

Note que apesar de  $y(x)$  apresentar uma relação exponencial, a transformação  $\bar{y}(x)$  é dada em termos de uma relação linear. Caso queiramos obter uma curva do tipo  $y = \alpha_1 e^{\beta_1 x}$  para representar o comportamento de uma dada dispersão de pontos, podemos construir uma tabela  $\bar{y} \times x$ , aplicarmos um procedimento de regressão linear para obter  $\bar{\alpha}_1, \beta_1$  e em seguida fazer  $\alpha_1 = e^{\bar{\alpha}_1}$  para obter  $\alpha_1$ . Com os valores de  $\alpha_1$  e  $\beta_1$ , aplicamos o ajuste  $y = \alpha_1 e^{\beta_1 x}$  e temos então nosso ajuste exponencial.

O mesmo racional se aplica aos ajustes do tipo 2 e 3. Para o ajuste de lei de potência, podemos aplicar a função log dos dois dados para obter

$$\log(y) = \log(\alpha_2 x^{\beta_2}) = \log(\alpha_2) + \log(x^{\beta_2}) = \log(\alpha_2) + \log(\beta_2) \log(x), \quad (32)$$

chamando  $\log(y) = \bar{y}$ ,  $\log(\alpha_2) = \bar{\alpha}_2$ ,  $\log(\beta_2) = \bar{\beta}_2$  e  $\log(x) = \bar{x}$ , temos

$$\bar{y} = \bar{\alpha}_2 + \bar{\beta}_2 \bar{x}. \quad (33)$$

A equação (33) representa portanto o passo final do processo de linearização de uma lei de potência visando a aplicação do procedimento de regressão linear pelo método dos mínimos quadrados para obtenção dos coeficientes da lei de potência que melhor ajustam a dispersão de dados de entrada.

Finalmente, para o ajuste do tipo 3, podemos elevar os dois lados da equação a -1 para obter:

$$y^{-1} = \left( \frac{\alpha_3 x}{\beta_3 + x} \right)^{-1} \Rightarrow \frac{1}{y} = \frac{\beta_3}{\alpha_3} \frac{1}{x} + \frac{1}{\alpha_3}, \quad (34)$$

chamando  $1/y = \bar{y}$ ,  $\beta_3/\alpha_3 = \gamma_3$ ,  $1/\alpha_3 = \bar{\alpha}_3$  e  $1/x = \bar{x}$ , temos a relação linearizada para o ajuste do tipo 3 dada por

$$\bar{y} = \bar{\alpha}_3 + \gamma_3 \bar{x}. \quad (35)$$

## 4.1 Para casa: ajustando dados por uma lei de potência

Considere a dispersão de dados ilustrada na tabela (4).

| $x_i$ | $y_i$ |
|-------|-------|
| 1     | 0.5   |
| 2     | 1.7   |
| 3     | 3.4   |
| 4     | 5.7   |
| 5     | 8.4   |

Tabela 4: Dispersão de pontos a serem ajustados por uma lei de potência

Mostre que a lei de potência que melhor ajuste esses dados é dada por:  $y = 0.5x^{1.75}$ . Obtenha esses coeficientes sem o auxílio do computador.

## 5 Interpolação: diferenças divididas de Newton

Em muitos contextos, nosso objetivo transcende o mero ajuste visual ou mesmo numérico de uma coletânea de pontos dispersos a uma função pré-definida e passa pela necessidade de estimarmos valores intermediários entre dados precisos. Aqui estamos interessados no que chamamos de interpolação. O tipo mais comum de interpolação é a interpolação polinomial, na qual buscamos uma curva do tipo

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \cdots + a_nx^n. \quad (36)$$

Para esse tipo de ajuste, quando temos por exemplo  $n+1$  pontos a serem ajustados, temos apenas 1 polinômio de grau  $n$  que passa por todos os pontos. Para uma reta por exemplo, precisamos de 2 pontos. Para uma parábola, 3 pontos e assim sucessivamente. Interpolar é no fundo descobrir o polinômio que cruza esses pontos dados e por meio deste encontrar valores de pontos intermediários.

Para apresentarmos o procedimento matemático utilizado nessa seção para fins de interpolação. Considere a figura (4). Essa figura ilustra o conceito de interpolação linear.

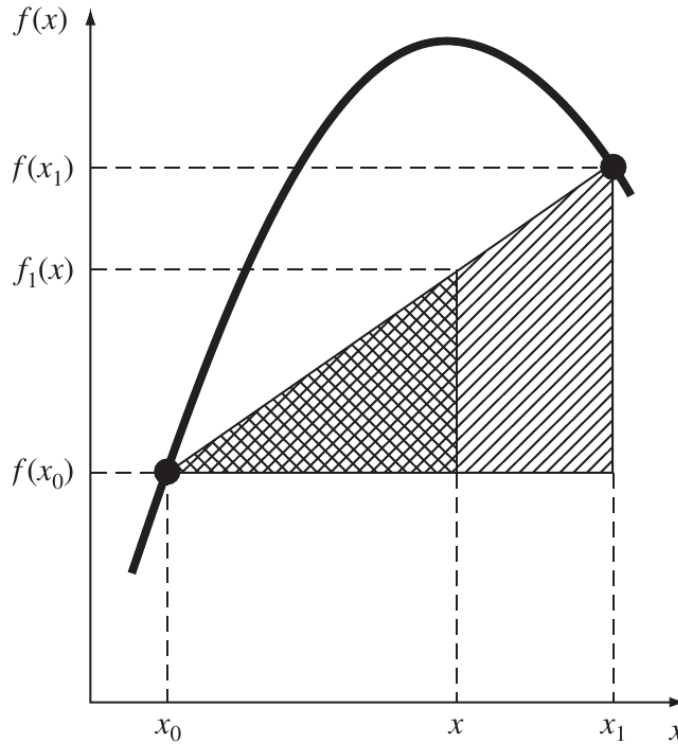


Figura 4: Representação gráfica de uma interpolação linear

Por semelhança de triângulos, podemos construir as seguintes relações a partir da figura (4):

$$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f_1(x) - f(x_0)}{x - x_0} \Rightarrow f_1(x) = f(x_0) + \left[ \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right] (x - x_0), \quad (37)$$

note que aqui estamos fazendo uma diferenciação clara entre o polinômio  $f$  e a reta  $f_1$  que estamos querendo construir para interpolar pontos intermediários  $x$  entre  $x_0$  e  $x_1$ .

A expressão em (37) representa um polinômio interpolador de primeiro grau. Note que o termo em colchetes é uma aproximação da primeira derivada da função  $f(x)$  usando um esquema em diferenças finitas, que no contexto do estudo de técnicas de interpolação chamaremos de *diferenças divididas finitas*.

Podemos estender a expressão geral apresentada em (37) para um procedimento de interpolação quadrática como

$$f_2(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1), \quad (38)$$

em que

$$b_0 = f(x_0) \quad \text{e} \quad b_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}. \quad (39)$$

Os coeficientes  $b_0$  e  $b_1$  que surgem na expressão (38) são obtidos a princípio por comparação direta com a expressão obtida em (37) para o contexto da interpolação linear. A obtenção de  $b_2$  é um pouco mais elaborada. Considere substituir as expressões (39) em (38):

$$f_2(x) = f(x_0) + \left[ \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right] (x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1), \quad (40)$$

isolando  $b_2$  de (40) é possível mostrar, após um pouco de manipulação algébrica que

$$b_2 = \frac{\left[ \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \right] - \left[ \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \right]}{x_2 - x_0}. \quad (41)$$

A expressão para  $b_2$  obtida em (41) representa uma aproximação da derivada segunda de  $f(x)$  por diferenças divididas finitas.

## 5.1 Forma geral dos polinômios interpoladores de Newton

Para um polinômio de grau  $n$  podemos ajustar os  $n + 1$  dados com a seguinte relação geral

$$f_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + b_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}), \quad (42)$$

em que os  $n + 1$  pontos dados serão ajustados de acordo com a relação de dados e funcionais para as  $i$ -ésimas diferenças divididas de Newton dadas na tabela (5)]. As expressões entre

| Ponto    | Dados           | Funcionais de $b_i$                            |
|----------|-----------------|--|
| 0        | $[x_0, f(x_0)]$ | $b_0 = f(x_0)$                                 |
| 1        | $[x_1, f(x_1)]$ | $b_1 = f[x_1, x_0]$                            |
| 2        | $[x_2, f(x_2)]$ | $b_2 = f[x_2, x_1, x_0]$                       |
| 3        | $[x_3, f(x_3)]$ | $b_3 = f[x_3, x_2, x_1, x_0]$                  |
| $\vdots$ | $\vdots$        | $\vdots$                                       |
| n        | $[x_n, f(x_n)]$ | $b_n = f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_2, x_1, x_0]$ |

Tabela 5: Relação entre o número de pontos, os dados a serem interpolados e os funcionais das diferenças divididas utilizadas para isso

colchetes na tabela (5) servem para indicar que conforme avançamos na estimativa das derivadas de ordem mais alta utilizando um esquema de diferenças finitas, precisamos

incorporar as informações das derivadas anteriores. Sabemos que a derivada segunda é a derivada da derivada primeira, assim como a derivada terceira é a derivada da derivada segunda e assim sucessivamente. Assim, dizemos que a primeira diferença dividida finita é dada por

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}, \quad (43)$$

já a segunda diferença dividida finita é dada por

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}, \quad (44)$$

da mesma forma que a terceira diferença dividida finita é dada por

$$f[x_i, x_j, x_k, x_l] = \frac{f[x_i, x_j, x_k] - f[x_j, x_k, x_l]}{x_i - x_l}, \quad (45)$$

finalmente, a  $n$ -ésima diferença dividida finita é dada por

$$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1] - f[x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0]}{x_n - x_0}. \quad (46)$$

Essa forma de representação, juntamente com a tabela (5), nos auxilia a compreender a natureza da dependência funcional das diferenças divididas de ordem mais alta com relação às derivadas anteriores. Além disso, essa forma de olhar para o procedimento de interpolação polinomial, traz insights importantes sobre o próprio procedimento de discretização espacial empregado em técnicas modernas de simulação computacional. Quando transformamos um domínio com um número infinito de pontos em um domínio discretizado, por meio do emprego de uma malha de cálculo, a fim de resolvermos equações diferenciais no domínio discreto, precisamos de um número de pontos cada vez maior em torno de um ponto central para obtermos versões discretizadas de derivadas de ordem mais alta.

No nosso esquema de interpolação polinomial, uma vez que tenhamos calculado as  $n$ -ésimas diferenças divididas finitas, podemos utilizá-las para reconstruir o polinômio interpolador de Newton como

$$\begin{aligned} f_n(x) = & f(x_0) + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] + \dots \\ & \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] \end{aligned} \quad (47)$$

## 5.2 Para casa: pensando sobre polinômios interpoladores de Newton

Considere os dados de entrada da tabela (6) para representar o comportamento discreto da função  $\ln(x)$ .

1. Interpole os dados da tabela usando um polinômio de grau 3;
2. Faça para esse caso uma estimativa do valor de  $\ln(2)$ ;
3. Plote um gráfico comparando a função  $\ln(x)$  com seu polinômio e avalie o erro percentual na sua estimativa para o valor de  $\ln(2)$ ;

| Ponto | $x$ | $\ln(x)$ |
|-------|-----|----------|
| $x_0$ | 1   | 0        |
| $x_1$ | 4   | 1.386294 |
| $x_2$ | 6   | 1.79179  |
| $x_3$ | 5   | 1.609438 |

Tabela 6: Dados discretos da função  $\ln(x)$ 

4. Adicione agora um quinto ponto à tabela e gere um polinômio de grau 4 que interpole esses dados;
5. Refaça sua estimativa do erro do valor de  $\ln(2)$ . Seu erro aumentou, diminuiu ou permaneceu o mesmo?

## 6 Interpolação por splines

A ideia aqui consiste em aplicar polinômios de graus mais baixos a sub-conjuntos de pontos e conectar esses polinômios de maneira contínua. A palavra *spline* se origina da expressão em inglês para uma técnica de desenho que utilizava uma tira fina de um material flexível (chamada *spline*) pra desenhar uma curva lisa passando por um conjunto de pontos, como ilustrado na figura (5).

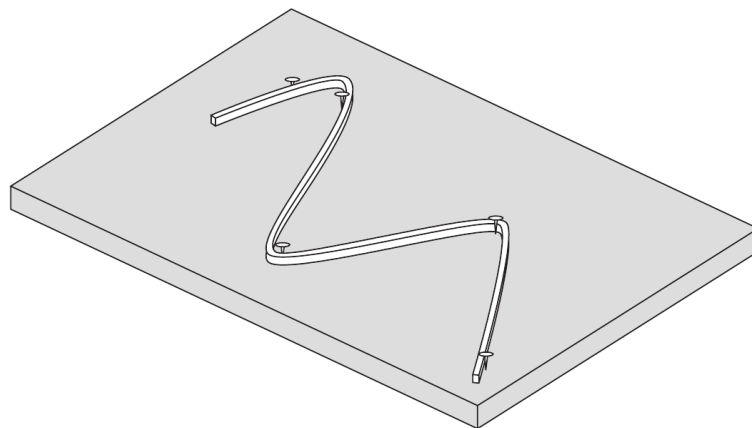


Figura 5: Representação gráfica da técnica de desenho que dá origem ao nome da técnica conhecida como *spline*

Quando usamos por exemplo, polinômios base de grau 3 para o processo de interpolação de cada trecho dos dados originais, chamamos esses trechos de curvas de splines cúbicos. Nessa seção veremos como diferentes tipos de splines podem ser construídos com base em um conjunto de dados de entrada.

### 6.1 Splines lineares

A maneira mais simples de conectarmos dois pontos se dá por meio de uma reta. As splines de primeiro grau para um conjunto de pontos ordenados são definidas como o

conjunto de funções lineares descrito por

$$f(x) = f(x_0) + m_0(x - x_0) \Rightarrow x_0 \leq x \leq x_1 \quad (48)$$

$$f(x) = f(x_1) + m_1(x - x_1) \Rightarrow x_1 \leq x \leq x_2 \quad (49)$$

$$\vdots \quad (50)$$

$$f(x) = f(x_{n-1}) + m_{n-1}(x - x_{n-1}) \Rightarrow x_{n-1} \leq x \leq x_n \quad (51)$$

com

$$m_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad (52)$$

As splines lineares são essencialmente conexões entre os pontos que queremos representar expressas em termos de segmentos de retas. Este tipo de spline é pouco usado, uma vez que não apresenta um comportamento liso da curva que conecta os pontos. É fácil perceber que quando se conectam pontos por segmentos de reta, perdemos o senso de continuidade entre esses pontos.

## 6.2 Splines quadráticos

Um tipo mais interessante de ajuste por splines consiste na construção de polinômios do segundo grau entre nossos conjuntos de pontos. De um modo geral, estamos interessados em descobrir os coeficientes  $a_i, b_i, c_i$  em cada intervalo dado que ajustem os pontos de entrada por funções do tipo  $f_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i$ , de acordo com a nomenclatura apresentada na figura (6).

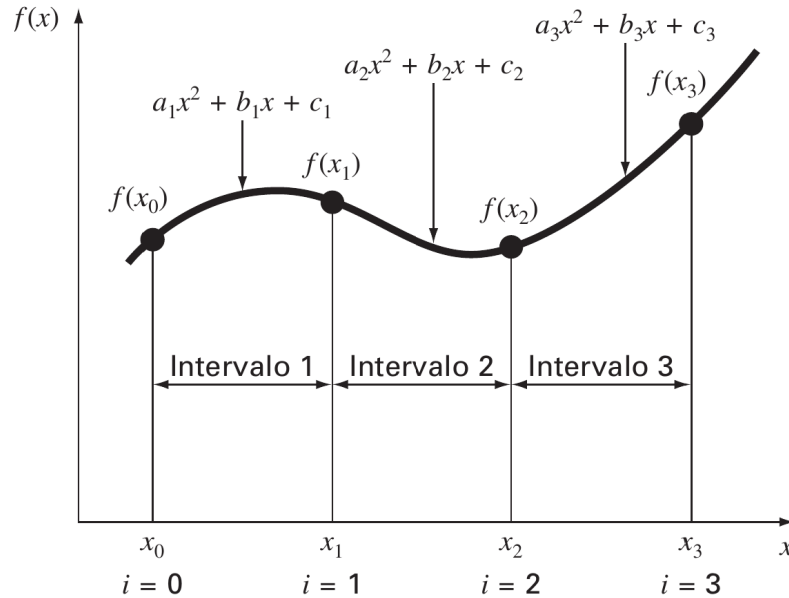


Figura 6: Notação utilizada aqui para apresentação do processo de construção de splines quadráticos

Note que se dividimos nosso intervalo total em  $n$  sub-intervalos, teremos  $3n$  coeficientes a determinarmos. A pergunta central aqui é: como determinar essas constantes, garantindo um senso de continuidade para a função que passa pela dispersão de pontos de entrada?

Para respondermos essa pergunta, precisamos definir critérios objetivos que garantam a continuidade das parábolas entre os sub-intervalos para os quais cada uma vale. Esses critérios são listados a seguir.

1. Os valores da função e dos polinômios adjacentes devem ser iguais nos nós internos:

$$a_{i-1}x_{i-1}^2 + b_{i-1}x_{i-1} + c_{i-1} = f(x_{i-1}) \rightarrow i = 2, n$$

$$a_i x_i^2 + b_i x_i + c_i = f(x_{i-1}) \rightarrow i = 2, n,$$

fornecendo  $2 \times (n - 1) = 2n - 2$  equações;

2. Tanto a primeira parábola, quanto a última, devem passar pelos pontos extremos:

$$a_1 x_0^2 + b_1 x_0 + c_1 = f(x_0)$$

$$a_n x_n^2 + b_n x_n + c_n = f(x_n),$$

fornecendo mais 2 equações, o que nos gera até o momento um total de  $2n$  equações baseadas nas restrições apresentadas;

3. As primeiras derivadas nos nós interiores devem ser iguais em todas as conexões entre intervalos:

$$2a_{i-1}x_{i-1} + b_{i-1} = 2a_i x_{i-1} + b_i \rightarrow i = 2, n,$$

fornecendo mais  $n - 1$  equações, o que nos gera até esse ponto  $3n - 1$  equações adicionais para estimarmos as  $3n$  constantes;

4. Para fecharmos ao problema de determinação dos  $3n$  coeficientes associados à construção das splines quadráticas, precisamos de uma restrição ou condição adicional. Uma restrição adicional simples que resolve o problema consiste em assumir que a derivada segunda é nula no primeiro ponto. A interpretação visual dessa condição é que os dois primeiros pontos serão ligados por uma reta. Matematicamente, essa condição final leva à  $a_1 = 0$ .

Para aplicarmos os critérios acima no processo de construção de splines quadráticos vamos a um exemplo. Considere os dados da tabela (7).

| $x$ | $f(x)$ |
|-----|--------|
| 3.0 | 2.5    |
| 4.5 | 1.0    |
| 7.0 | 2.5    |
| 9.0 | 0.5    |

Tabela 7: Pontos para exemplificar a construção de splines quadráticos

Temos aqui um conjunto de 4 pontos, que será dividido em 3 intervalos:  $[3.0 \rightarrow 4.5]$ ,  $[4.5 \rightarrow 7.0]$  e  $[7.0 \rightarrow 9.0]$ . Desses 4 pontos, temos apenas 2 pontos internos  $x_1 = 4.5$  e  $x_2 = 7.0$ . Aplicando a condição 1, temos:

$$a_1 \times 4.5^2 + b_1 \times 4.5 + c_1 = a_2 \times 4.5^2 + b_2 \times 4.5 + c_2 = 1,$$



o que nos leva ao seguinte par de equações

$$20.25a_1 + 4.5b_1 + c_1 = 1 \quad (53)$$

$$20.25a_2 + 4.5b_2 + c_2 = 1. \quad (54)$$

Fazendo o mesmo procedimento para o segundo ponto interno ( $x_2 = 7.0$ ), obtemos

$$49a_2 + 7b_2 + c_2 = 2.5 \quad (55)$$

$$49a_3 + 7b_3 + c_3 = 2.5. \quad (56)$$

Aplicando agora a condição 2 para os pontos da extremidade, temos

$$a_1 \times 3^2 + b_1 \times 3 + c_1 = 2.5$$

$$a_3 \times 9^2 + b_3 \times 9 + c_3 = 0.5,$$

o que nos leva às seguintes equações adicionais

$$9a_1 + 3b_1 + c_1 = 2.5 \quad (57)$$

$$81a_3 + 9b_3 + c_3 = 0.5. \quad (58)$$

Até o momento temos 6 equações e um total de 9 incógnitas para calcular. Precisamos de mais 3 equações para fecharmos o problema. Vamos então utilizar a condição 3, referente à continuidade das derivadas dos pontos interiores:

$$2 \times a_1 \times 4.5 + b_1 = 2 \times a_2 \times 4.5 + b_2$$

$$2 \times a_2 \times 7.0 + b_2 = 2 \times a_3 \times 7.0 + b_3,$$

o que nos leva às seguintes equações adicionais

$$9a_1 + b_1 = 9a_2 + b_2 \quad (59)$$

$$14a_2 + b_2 = 14a_3 + b_3. \quad (60)$$

Finalmente, aplicando a condição 4, obtemos  $a_1 = 0$ . As equações obtidas acima podem ser organizadas na forma de um sistema linear  $8 \times 8$  para obtermos os demais coeficientes. O sistema em questão é representado por

$$\begin{pmatrix} 4.5 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 20.25 & 4.5 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 49 & 7 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 49 & 7 & 1 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 81 & 9 & 1 \\ 1 & 0 & -9 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 14 & 1 & 0 & -14 & -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ c_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ a_3 \\ b_3 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2.5 \\ 2.5 \\ 2.5 \\ 0.5 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (61)$$

**Para casa:** resolva esse sistema linear e estime o valor de  $f(5)$ . Mostre que no caso  $f(5) = 0.66$ .

### 6.3 Splines cúbicos

Quando utilizamos polinômios de terceiro grau para interpolar conjuntos de dados em sub-intervalos, estamos utilizando o tipo mais comum de ajuste por splines, que são os splines cúbicos. Nesse caso, podemos utilizar polinômios com estrutura semelhante aos polinômios utilizados para as splines quadráticas, porém com um coeficiente adicional, uma vez que a forma geral de um polinômio de terceiro grau é dada por  $f_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i$ . Aqui também precisaremos impor condições/restrições que garantam a continuidade das conexões entre os polinômios de ajuste de um intervalo para o outro. As condições para splines cúbicos envolvem, além das condições utilizadas para o contexto das splines quadráticas, continuidade das derivadas segundas entre os nós interiores, além de uma derivada segunda da função nula também no ponto extremo do intervalo.

Aplicando essas condições, é possível mostrar que o polinômio de terceiro grau que representa o conjunto de dados em cada sub-intervalo é dado por

$$\begin{aligned} f_i(x) = & \frac{f_i''(x_{i-1})}{6(x_i - x_{i-1})} \times (x_i - x)^3 + \frac{f_i''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1})} \times (x - x_{i-1})^3 \\ & + \left[ \frac{f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f''(x_{i-1})(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x_i - x) \\ & + \left[ \frac{f(x_i)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f''(x_i)(x_i - x_{i-1})}{6} \right] (x - x_{i-1}), \end{aligned} \quad (62)$$

em que os valores das derivadas segundas  $f''$  avaliadas nos nós interiores do domínio são obtidos por meio da aplicação das condições de restrição que garantem a continuidade do ajuste, de forma análoga ao que fizemos para o caso das splines quadráticas.

**Para casa:** aplique manualmente (na mão) a metodologia aqui descrita e mostre que os polinômios cúbicos interpoladores para o segundo e terceiro intervalos do exemplo anterior são dados por:

$$f_2(x) = 0.111939(7 - x)^3 - 0.102205(x - 4.5)^3 - 0.299621(7 - x) + 1.638783(x - 4.5)$$

$$f_3(x) = -0.127757(9 - x)^3 + 1.761027(9 - x)^3 + 0.25(x - 7)$$