Capítulo 5 – Ajuste de Curvas

Método dos Mínimos Quadrados

Objetivo

- Obter uma função g(x) que aproxime dados tabelados $\{x_i, f(x_i)\}$ afetados por erros inerentes.
- A função g(x) não passa pelos pontos da tabela, $g(x_i) \neq f(x_i)$, mas fornece o **melhor** ajuste no sentido dos **mínimos quadrados**.

Aplicações

- Resultados experimentais (presença de erros inerentes)
- Grande quantidade de dados
- A obtenção da curva de ajuste muitas vezes está associada a um tratamento estatístico dos dados.

Considere a seguinte tabela genérica de pontos:

X_i	x_0	x_1	...	x_n
Y_i	y_0	y_1	...	y_n

Seja $e_i = y_i - g(x_i)$ para i = 0,...,n o erro em cada ponto x_i

O critério de ajuste será:

$$\sum_{i=1}^{n} e_i^{\,2} = \min! \qquad\qquad \|e\|_2^2 = \min!$$

Função de ajuste na forma geral, onde M<<n :

$$g(x) = c_0\phi_0 + c_1\phi_1 + \ldots + c_M\phi_M$$

- g(x) é a função de ajuste e ϕi são as funções de base

$$\{\phi_k(x)\}_{k=0}^{M}$$

- O objetivo do ajuste por mínimos quadrados é escolher uma coleção de funções e determinar os coeficientes

$$\{c_k\}_{k=0}^{M}$$

de modo que a soma

$$\sum_{i=0}^{n}\left(y_i - g(x_i)\right)^2$$

seja mínima.

- Erro total via mínimos quadrados:

$$E(c_0, c_1, \ldots, c_M) = \sum_{i=0}^{n}\left(y_i - g(x_i)\right)^2 = \sum_{i=0}^{n}\left(y_i - \sum_{k=0}^{M} c_k \phi_k(x_i)\right)^2$$

- Precisamos determinar

$$\{c_k\}_{k=0}^{M}$$

de modo a minimizar

$$E(c_0, c_1, \ldots, c_M)$$

- Do cálculo diferencial, sabemos que devemos impor

$$\frac{\partial E}{\partial c_k} = 0, \qquad k = 0,1,\ldots,M$$

Então

$$\frac{\partial E}{\partial c_j} = 2\sum_{i=0}^{n}\left\{y_i - \sum_{k=0}^{M} c_k\phi_k(x_i)\right\}\left\{-\phi_j(x_i)\right\} = 0 \quad , \qquad j = 0,1,\ldots,M$$

$$\therefore \sum_{i=0}^{n}\left\{y_i - \sum_{k=0}^{M} c_k\phi_k(x_i)\right\}\left\{-\phi_j(x_i)\right\} = 0 \quad , \qquad j = 0,1,\ldots,M$$

- Fazendo j = 0, 1 , ..., M, obtemos

$$\sum_{i=0}^{n}\left\{c_0\phi_0(x_i) + c_1\phi_1(x_i) + \ldots + c_M\phi_M(x_i)\right\}\phi_0(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\phi_0(x_i)$$

$$\sum_{i=0}^{n}\left\{c_0\phi_0(x_i) + c_1\phi_1(x_i) + \ldots + c_M\phi_M(x_i)\right\}\phi_1(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\phi_1(x_i)$$

$$\vdots$$

$$\sum_{i=0}^{n}\left\{c_0\phi_0(x_i) + c_1\phi_1(x_i) + \ldots + c_M\phi_M(x_i)\right\}\phi_M(x_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i\phi_M(x_i)$$

- Obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n}\phi_0(x_i)\phi_0(x_i) & \sum_{i=0}^{n}\phi_1(x_i)\phi_0(x_i) & \cdots & \sum_{i=0}^{n}\phi_M(x_i)\phi_0(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n}\phi_0(x_i)\phi_1(x_i) & \sum_{i=0}^{n}\phi_1(x_i)\phi_1(x_i) & \cdots & \sum_{i=0}^{n}\phi_M(x_i)\phi_1(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{n}\phi_0(x_i)\phi_M(x_i) & \sum_{i=0}^{n}\phi_1(x_i)\phi_M(x_i) & \cdots & \sum_{i=0}^{n}\phi_M(x_i)\phi_M(x_i) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i\phi_0(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} y_i\phi_1(x_i) \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{n} y_i\phi_M(x_i) \end{bmatrix}$$

- Esta matriz é simétrica de ordem (M+1)x(M+1), M<<n.
- As equações associadas a este sistema são denominadas equações normais.

Fatos:

- $\{\phi_k(x)\}_{k=0}^{M}$ devem ser L.I. para que o sistema admita solução
- a solução de fato minimiza o erro
- A matriz resultante é geralmente mal condicionada.

1. **Ajuste Polinomial**

Este ajuste é baseado em funções $\{\phi_k(x)\}_{k=0}^{M}$ polinomiais. Logo, considere

$$g(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \ldots + c_M x^M \quad , \quad M << \text{n}$$

Então o sistema acima torna-se:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} 1 & \sum_{i=0}^{n} x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{M} \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^{2} & \cdots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{M+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^{M} & \sum_{i=0}^{n} x_i^{M+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{2M} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \sum_{i=0}^{n} y_i x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^{M} \end{bmatrix}$$

$$\phi_0 = 1 \ , \quad \phi_1 = x \quad , \quad \phi_2 = x^2 \quad , \quad \ldots \quad , \quad \phi_M = x^M$$

O sistema acima pode ser reescrito também na forma

$$\sum_{k=0}^{M} c_k \left[\sum_{i=0}^{n} x_i^{\,j+k-1} \right] = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^{\,j} \;, \qquad \mathrm{j} = 0, 1, \ldots, \mathrm{M}$$

A medida que elevamos o grau de *g*, o sistema torna-se mais e mais mal condicionado. Isso se deve ao fato de que os polinômios

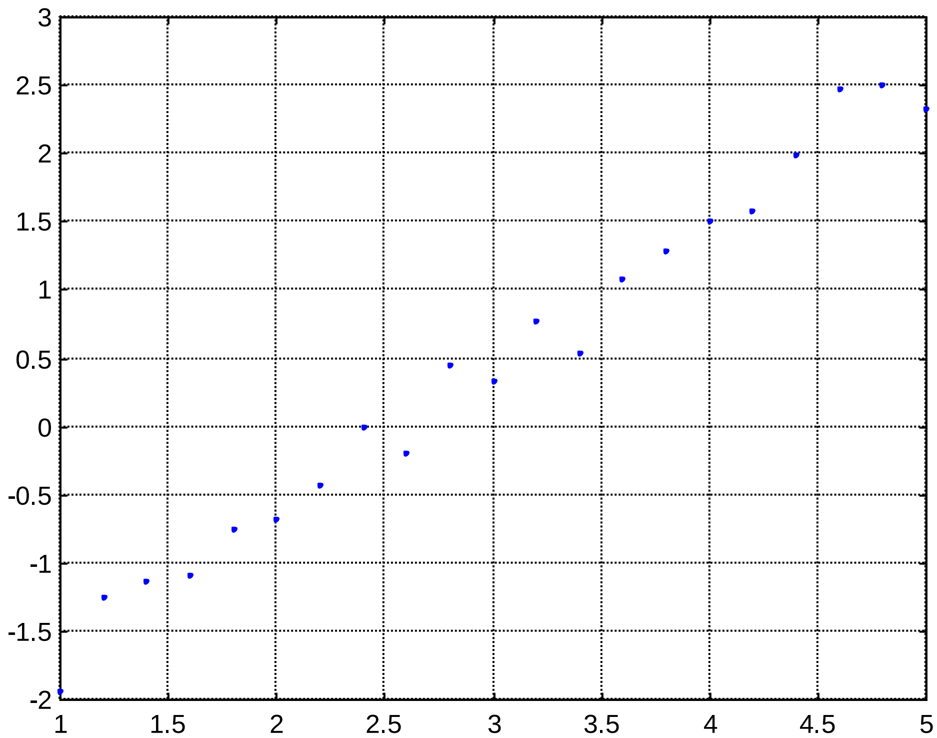
$$1 \;,\; x \;\;,\;\; x^2 \;\;,\;\; x^3 \;,\;\; \ldots \;\;,\;\; x^M$$

São muito “parecidos”, ou seja, são quase linearmente dependentes. Raramente devemos ir além de M=2.

1.a) Exemplo: Ajuste Linear

Suponha uma experiência que envolva a medição de 2 variáveis, x e y, para obter y = f(x). Considere os dados experimentais:

x_i	y_i	x_i	y_i	x_i	y_i
1.0	-1.945	2.4	-0.012	3.8	1.286
1.2	-1.253	2.6	-0.190	4.0	1.502
1.4	-1.140	2.8	0.452	4.2	1.582
1.6	-1.087	3.0	0.337	4.4	1.993
1.8	-0.760	3.2	0.764	4.6	2.473
2.0	-0.682	3.4	0.532	4.8	2.503
2.2	-0.424	3.6	1.073	5.0	2.322



- Podemos notar que f(x) é um polinômio linear. Assumindo isto como verdadeiro, temos que f(x) = ax + b, quanto valem as variáveis a e b? Qual a reta que melhor ajusta todos os pontos?

- Queremos usar os pontos (x_1,y_1), ..., (x_n, y_n) para determinar y = f(x) tão precisamente quanto possível.

  - Estes pontos, que representam dados experimentais possuem erros.

- Determine o ajuste por mínimos quadrados para os dados da tabela acima

$$\phi_0 = 1 \ , \ \ \phi_1 = x$$

m = 21

$$\sum_{i=1}^{m} x_i = 63.0 \qquad \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = 219.8$$

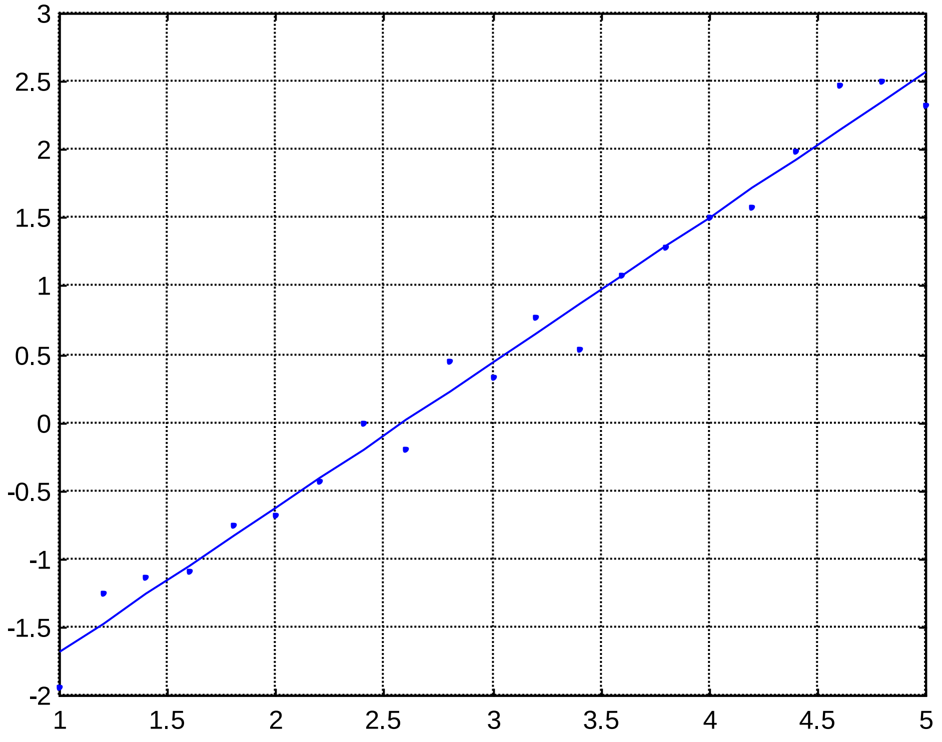
$$\sum_{i=1}^{m} y_i = 9.326 \qquad \sum_{i=1}^{m} x_i y_i = 60.7302$$

- Temos o sistema Ax = b:

$$\begin{bmatrix} 21 & 63 \\ 63 & 219.8 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.326 \\ 60.7302 \end{bmatrix}$$

a = 1.0634 b = -2.7461

Logo, f(x) = 1.064x - 2.7461



Como determinar qual o grau do polinômio mais adequado para o ajuste dos pontos tabelados?

- Calculamos a variância

$$\sigma_M^2 = \frac{1}{M}\sum_{i=0}^{n}\left[y_i - p_M(x_i)\right]^2, \qquad \mathrm{M} << \mathrm{n}$$

- da estatística, sabemos que quando a tendência da tabela for adequadamente descrita por um polinômio de grau M, teremos

$$\sigma_0^2 > \sigma_1^2 > \cdots > \sigma_M^2 = \sigma_{M-1}^2 = \sigma_{M-2}^2 = \cdots = \sigma_{n-1}^2$$

- Portanto, devemos incrementar M até que a condição acima seja satisfeita.

- Note que M deve ser muito menor que n e que M > 2 origina problemas de mal condicionamento.

Exercícios:

1) Ajustar uma função linear pelo método dos mínimos quadrados os seguintes valores numéricos:

x	0	1,2	2,5	3,7
y	0,134	0,275	0,339	0,401

2) Ajuste os dados abaixo pelo método dos mínimos quadrados utilizando:
   a) Uma reta
   b) Uma parábola

x	1	2	3	4	5	6	7	8
y	0,5	0,6	0,9	0,8	1,2	1,5	1,7	2,0

3) Ajuste os dados abaixo pelo método dos mínimos quadrados utilizando:
   a) Uma reta
   b) Uma parábola

x	0	1	2	3	4
y	27	42	60	87	127

4) Ajuste o seguinte conjunto de dados utilizando funções exponenciais como funções de base:

T	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
I	3.16	2.38	1.75	1.34	1.00	0.74	0.56

3) **Outros Ajustes**

- Ajuste Hiperbólico

$$y(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$$

- Ajuste Trigonométrico

$$y(x) = a_0 + a_1 \cos(\omega\, x)$$

$$y(x) = a_0 + \sum_{k=1}^{n} a_k \cos(k\omega\, x) + \sum_{k=1}^{n} b_k \operatorname{sen}(k\omega\, x)$$

- Para resolver o problema associado ao mal condicionamento da matriz, utilizar Polinômios Ortogonais.