AJUSTE DE CURVAS.
O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS.

CASO DISCRETO

Profa. Dra. Fernanda Paula Barbosa Pola

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

SUMÁRIO

- Introdução e contextualização;
- Objetivos;
- Ajuste de Curvas : O Método dos Mínimos Quadrados
  - Caso discreto
    - Ajuste linear - Regressão linear
    - Ajuste Polinomial
- Considerações finais;
- Referências.

INTRODUÇÃO E CONTEXTUALIZAÇÃO

- Em geral, experimentos geram uma **gama de dados** que devem ser analisados para a criação de um **modelo**.
- Obter uma **função** matemática que **represente** (ou que ajuste) os dados permite fazer simulações do processo de forma confiável, reduzindo assim repetições de experimentos que podem ter um **custo alto.**

INTRODUÇÃO E CONTEXTUALIZAÇÃO

- Em geral usa-se aproximações de funções nas seguintes situações:
  - Quando se deseja extrapolar ou fazer previsões em regiões fora do intervalo considerado;
  - Quando os dados tabelados são resultados de experimentos, onde erros na obtenção destes resultados podem influenciar a sua qualidade;
  - Quando deseja-se substituir uma função conhecida f(x) por outra função g(x) que facilite cálculos como derivadas e integrais.

OBJETIVOS

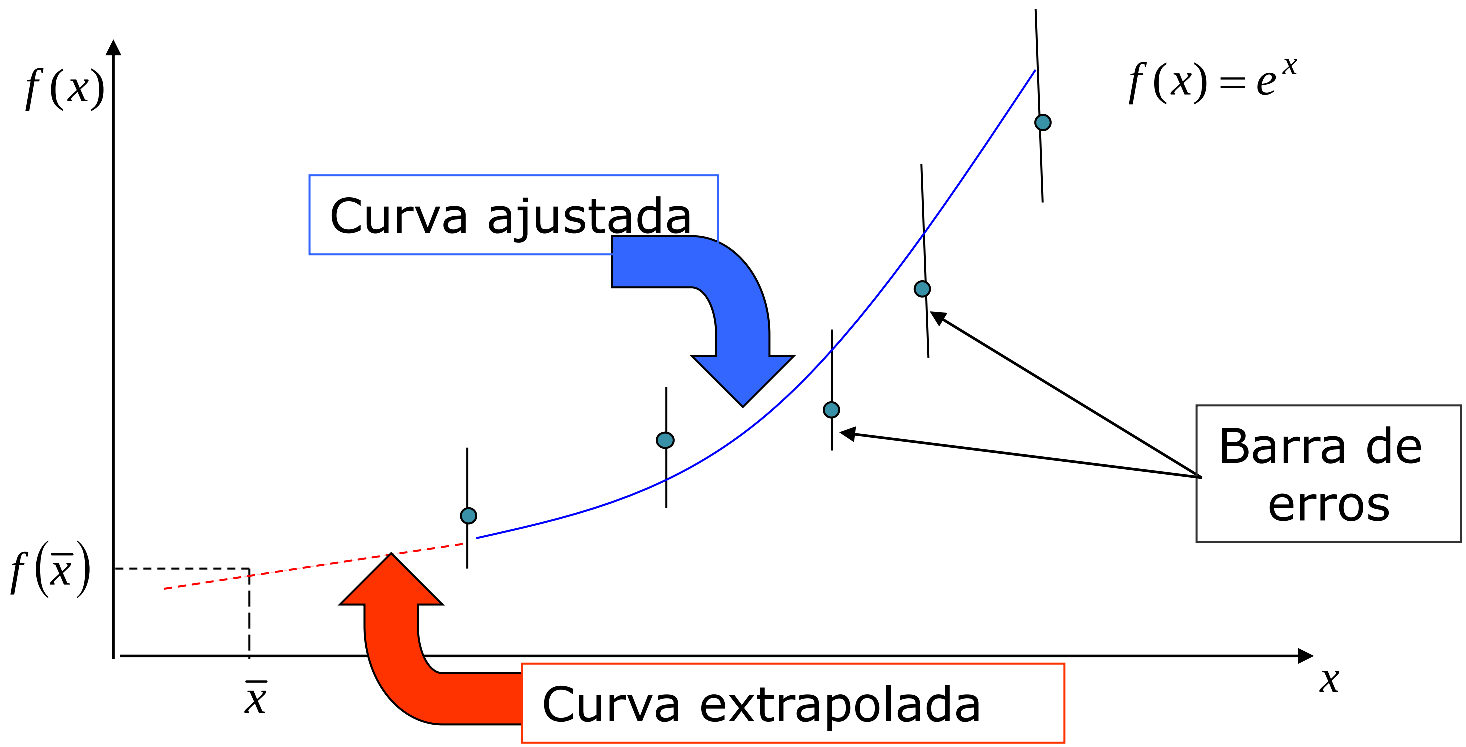
- O objetivo é obter uma função que seja uma “boa aproximação” e que permita **extrapolações** com alguma margem de segurança.
- A escolha das funções pode ser feita **observando o gráfico** dos pontos tabelados, baseando-se em **fundamentos teóricos** dos experimentos que forneceu a tabela ou através de uma **função já conhecida.**

OBJETIVOS

- Os métodos utilizados buscam uma **aproximação** do que seria o **valor exato**. Dessa forma é inerente aos métodos trabalhar com a **aproximação**, levando-se em consideração os **erros e os desvios.**
- O Método dos Mínimos Quadrados é um método bastante utilizado para **ajustar** uma determinada quantidade de **pontos** e **aproximar funções.**

AJUSTE DE CURVAS - INTRODUÇÃO

Graficamente, a extrapolação e o ajuste por barras de erros são vistos na figura abaixo:



AJUSTE DE CURVAS - INTRODUÇÃO

- Temos que ajustar estas funções tabeladas por uma função que seja uma "boa aproximação" e que permita extrapolações com alguma margem de segurança.
- Dados os pontos $(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots\ldots, (x_m, f(x_m))$ num intervalo [a,b], devemos escolher funções $g_1(x), g_2(x), \ldots\ldots\ldots, g_n(x)$, e constantes $\alpha_1(x), \alpha_2(x), \ldots\ldots\ldots, \alpha_n(x)$ tais que a função $\varphi(x) = \alpha_1\, g_1(x) + \alpha_2\, g_2(x) + \alpha_n\, g_n(x)$ se aproxime de $f(x)$.

AJUSTE DE CURVAS - INTRODUÇÃO

- Este modelo é dito linear pois os coeficientes a determinar $\alpha_1(x), \alpha_2(x), \ldots\ldots., \alpha_n(x)$ aparecem linearmente.
- Note que as funções $g_1(x), g_2(x), \ldots\ldots., g_n(x)$

podem ser funções não lineares, por exemplo: $g_1(x) = e^x$, $g_2(x) = (1 + x^2), \ldots\ldots.$

Problema 1

Como escolher as funções $g_1(x), g_2(x), \ldots\ldots., g_n(x)$
?

AJUSTE DE CURVAS – CASO DISCRETO

- Podemos escolher as funções

$$g_1(x)\,,\, g_2(x)\,,\, \ldots\ldots,\, g_n(x)$$

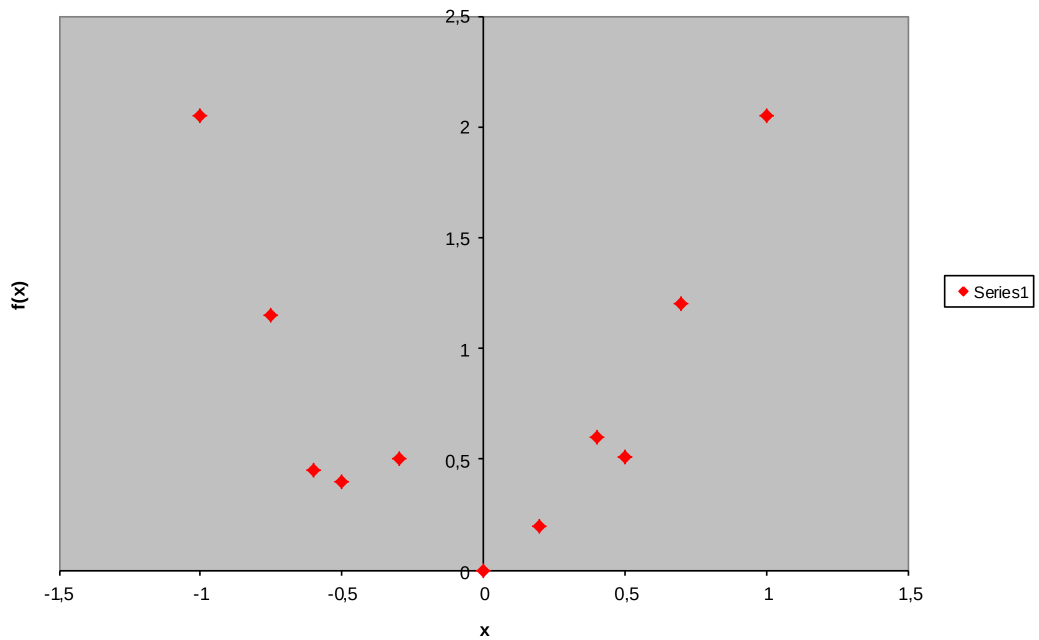
observando os pontos tabelados ou a partir de conhecimentos teóricos do experimento que nos forneceu a tabela. Portanto, dada uma tabela de pontos, deve-se primeiro colocar estes pontos num gráfico cartesiano. O gráfico resultante é chamado de ***diagrama de dispersão.***

AJUSTE DE CURVAS – CASO DISCRETO

- Seja a tabela

x	-1.0	-0.75	-0.6	-0.5	-0.3	0	0.2	0.4	0.5	0.7	1.0
$f(x)$	2.05	1.153	0.45	0.4	0.5	0	0.2	0.6	0.512	1.2	2.05

- O diagrama de dispersão é dado por:



AJUSTE DE CURVAS – CASO DISCRETO

- Escolhemos $g_1(x) = x^2$ a partir da forma dos pontos no diagrama de dispersão.

- Procuramos a função que se aproxime ao máximo de $f(x)$ que tenha a forma

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) = \alpha x^2$$

(parábola passando pela origem)

- PROBLEMA 2: Qual o valor de α que gera melhor ajuste da parábola?

AJUSTE DE CURVAS – CASO CONTÍNUO

- Dada uma função $f(x)$ contínua em [a,b] e escolhidas as funções $g_1(x), g_2(x), \ldots\ldots, g_n(x)$ todas contínuas em [a,b], devemos determinar as constantes $\alpha_1, \alpha_2, \ldots\ldots, \alpha_n$ de modo que a função

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots. + \alpha_n g_n(x)$$

se aproxime ao máximo de $f(x)$

AJUSTE DE CURVAS – CASO CONTÍNUO

- Tanto no caso discreto como no caso contínuo o que significa ficar mais próxima?

- Ideia: A função $\varphi(x)$ é tal que o módulo da área sob a curva $|\varphi(x) - f(x)|$ seja mínimo!

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

- Objetivo: encontrar coeficientes α_j tais que a função

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots + \alpha_n(x) g_n(x)$$

se aproxime ao máximo de $f(x)$

Método dos Mínimos Quadrados

Consiste em escolher os α_j's de modo que a soma dos quadrados dos desvios seja mínima.

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Desvio em x_k: $\mathbf{d}_k = f(x_k) - \varphi(x_k)$
- Se a soma dos quadrados dos desvios

$$\sum_{k=1}^{m} \mathbf{d}_k^{\,2} = \sum_{k=1}^{m} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2$$

é mínima, cada desvio $\mathbf{d}_k = f(x_k) - \varphi(x_k)$ será pequeno. Assim, α_j's devem ser tais que minimizem a função

$$\mathbf{F}(\alpha_1, \alpha_2, \ldots \alpha_n) = \sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - \varphi(x_k)]^2$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Para obter um ponto mínimo devemos encontrar os números críticos, ou seja, α_j's tais que

$$\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha_j}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\ldots\alpha_n)} = 0, \quad j = 1,2\ldots n$$

onde

$$\mathbf{F}(\alpha_1,\alpha_2,\ldots\alpha_n) =$$

$$\sum_{k=1}^{m}[f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \ldots - \alpha_n g_n(x_k)]^2$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Calculando as derivadas

$$\left.\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha_j}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\ldots\alpha_n)} =$$

$$2\sum_{k=1}^{m}[f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\alpha_2 g_2(x_k)-\ldots-\alpha_n g_n(x_k)][-g_j(x_k)]$$

- Igualando a zero,

$$\sum_{k=1}^{m}[f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\alpha_2 g_2(x_k)-\ldots-\alpha_n g_n(x_k)][g_j(x_k)]=0,\ j=1,2,\ldots,n$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Ou seja, temos um **sistema linear** a resolver

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^{m}[f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\alpha_2 g_2(x_k)-\ldots-\alpha_n g_n(x_k)][g_1(x_k)]=0 \\ \sum_{k=1}^{m}[f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\alpha_2 g_2(x_k)-\ldots-\alpha_n g_n(x_k)][g_2(x_k)]=0 \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{m}[f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\alpha_2 g_2(x_k)-\ldots-\alpha_n g_n(x_k)][g_n(x_k)]=0 \end{cases}$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Reescrevendo o sistema,

$$\begin{cases} [\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)g_1(x_k)]\alpha_1 + \ldots + [\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)g_1(x_k)]\alpha_n = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)g_1(x_k) \\ [\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)g_2(x_k)]\alpha_1 + \ldots + [\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)g_2(x_k)]\alpha_n = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)g_2(x_k) \\ \vdots \\ [\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)g_n(x_k)]\alpha_1 + \ldots + [\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)g_n(x_k)]\alpha_n = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)g_n(x_k) \end{cases}$$

Sistema linear com n equações com n incógnitas

As equações desse sistemas linear são as chamadas ***equações normais.***

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- O sistema linear pode ser escrito na forma matricial $A\alpha = b$:

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 + \ldots. + a_{1n}\alpha_n = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 + \ldots. + a_{2n}\alpha_n = b_2 \\ \ldots \\ a_{n1}\alpha_1 + a_{n2}\alpha_2 + \ldots. + a_{nn}\alpha_n = b_n \end{cases}$$

- $a_{ij} = a_{ji}$, a matriz A é simétrica;
- Se o sistema tem uma única solução, esta solução é o ponto mínimo da função $F(\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_n)$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- **Caso Linear (Regressão Linear)**

Aproximação através de uma função linear do tipo:

$$\phi(x) = \alpha_1 x_i + \alpha_0$$

Assim o objetivo é determinar o valor de α_0 e α_1, que minimize:

$$E = \sum_{i=1}^{m} \left[y_i - \left(\alpha_1 x_i + \alpha_0 \right) \right]^2$$

AJUSTE LINEAR

- Para que E seja mínimo é necessário que:

$$\boxed{\frac{\partial E}{\partial \alpha_0} = 0}$$

$$\boxed{\frac{\partial E}{\partial \alpha_1} = 0}$$

AJUSTE LINEAR

- As equações simplificam-se nas Equações Normais

$$\alpha_0 m + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i=1}^{m} y_i$$

$$\alpha_0 \sum_{i=1}^{m} x_i + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i$$

AJUSTE LINEAR

- A solução para o sistema de equações é:

$$\alpha_0 = \frac{\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right)\left(\sum_{i=1}^{m} y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)}{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

$$\alpha_1 = \frac{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{m} y_i\right)}{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- **Caso Linear (Regressão Linear)**

Exemplo 1: Considerando os dados da Tabela 1, e através do gráfico gerado, pode-se definir que tipo de curva melhor se ajusta aos dados.

Tabela 1

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	1,3	3,5	4,2	5,0	7,0	8,8	10,1	12,5	13,0	15,6

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

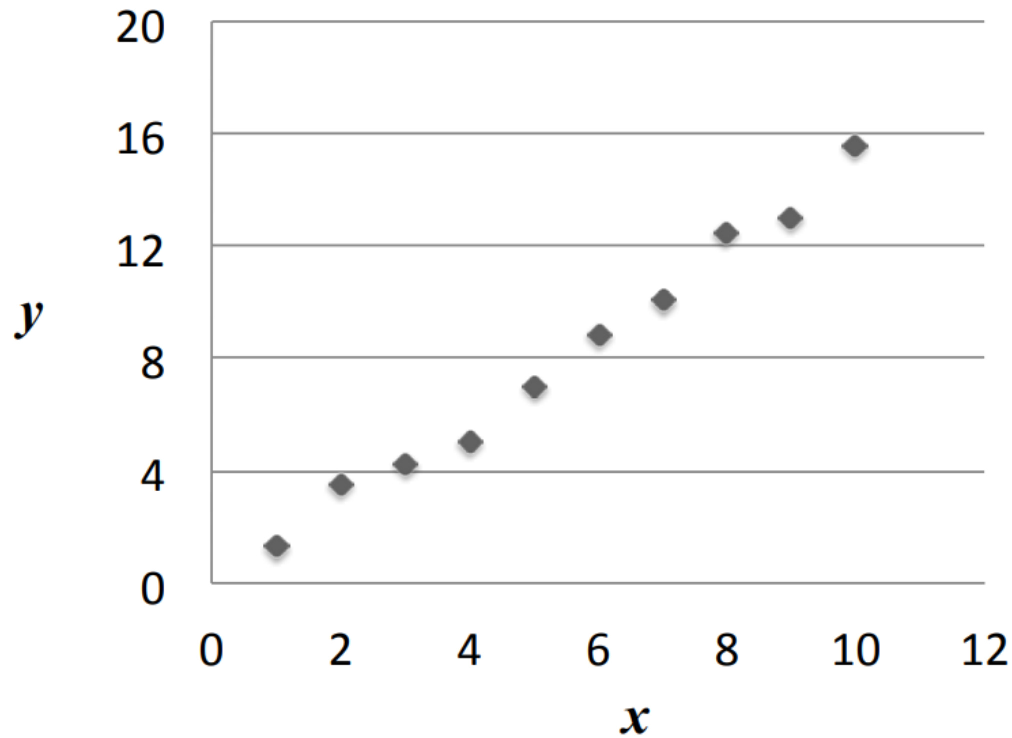


Diagrama de Dispersão para os dados da Tabela 1

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Considerando a Tabela 1, e os dados necessários paras as equações normais, a Tabela 2 pode ser construída:

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	1	1,3	1	1,3
2	2	3,5	4	7,0
3	3	4,2	9	12,6
4	4	5,0	16	20,0
5	5	7,0	25	35,0
6	6	8,8	36	52,8
7	7	10,1	59	70,7
8	8	12,5	64	100,0
9	9	13,0	81	117,0
10	10	15,6	100	156,0
Σ	**55**	**81**	**385**	**572,4**

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Considerando os dados da Tabela 2, os parâmetros α_0 e α_1 podem ser calculados como:

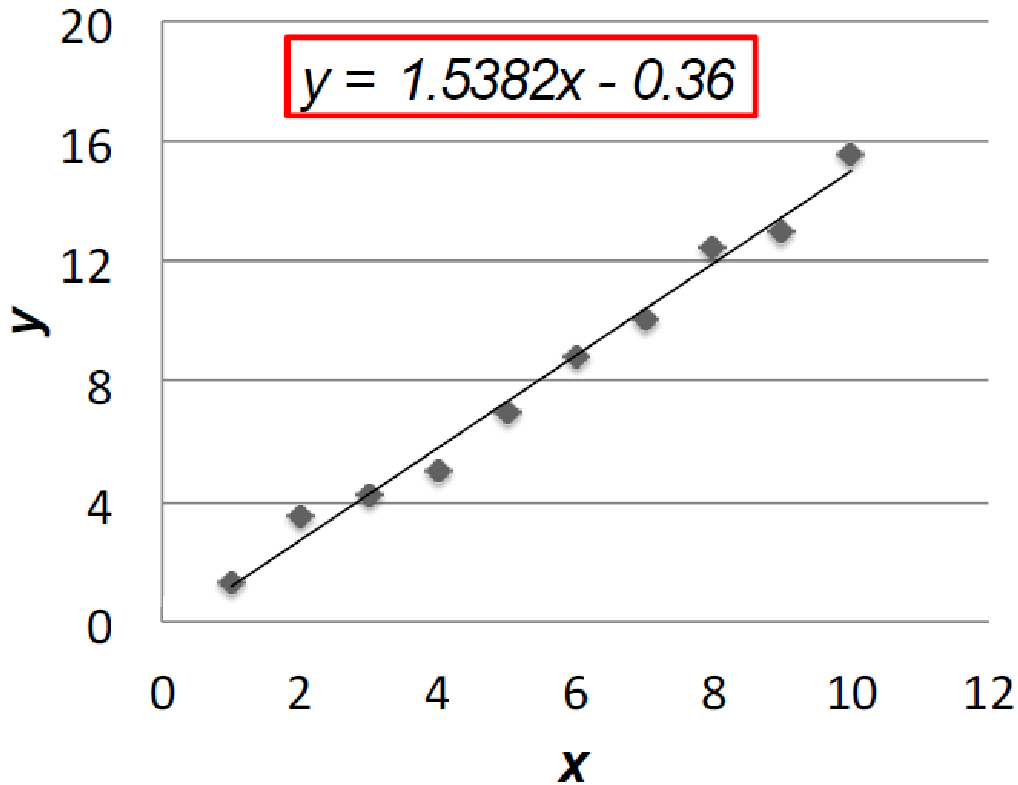
$$\boxed{\alpha_0 = -0,360} \qquad \boxed{\alpha_1 = 1,538}$$

- Assim a reta a ser ajustada é determinada por:

$$\boxed{y = 1,538x - 0,360}$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Pode-se observar o ajuste através da reta:



Ajuste Linear

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- **Caso Linear (Regressão Linear)**

Exemplo2: Encontre a reta de mínimos quadrados que melhor se ajusta aos pontos (2,1), (5,2), (7,3), (8,3).
Calculemos para $g_1(x)=1$ e $g_2(x)=x$.

$$\sum_{k=1}^{4} 1_k.1_k\,\alpha_1 + \sum_{k=1}^{4} x_k.1_k\,\alpha_2 = \sum_{k=1}^{4} f(x_k).1_k$$

$$\sum_{k=1}^{4} x_k.1_k\,\alpha_1 + \sum_{k=1}^{4} x_k.x_k\,\alpha_2 = \sum_{k=1}^{4} f(x_k).x_k$$

$$\Rightarrow \begin{array}{l} (1+1+1+1)\alpha_1 + (2+5+7+8)\alpha_2 = (1+2+3+3) \\ (2+5+7+8)\alpha_1 + (2^2+5^2+7^2+8^2)\alpha_2 = (2.1+5.2+7.3+8.3) \end{array}$$

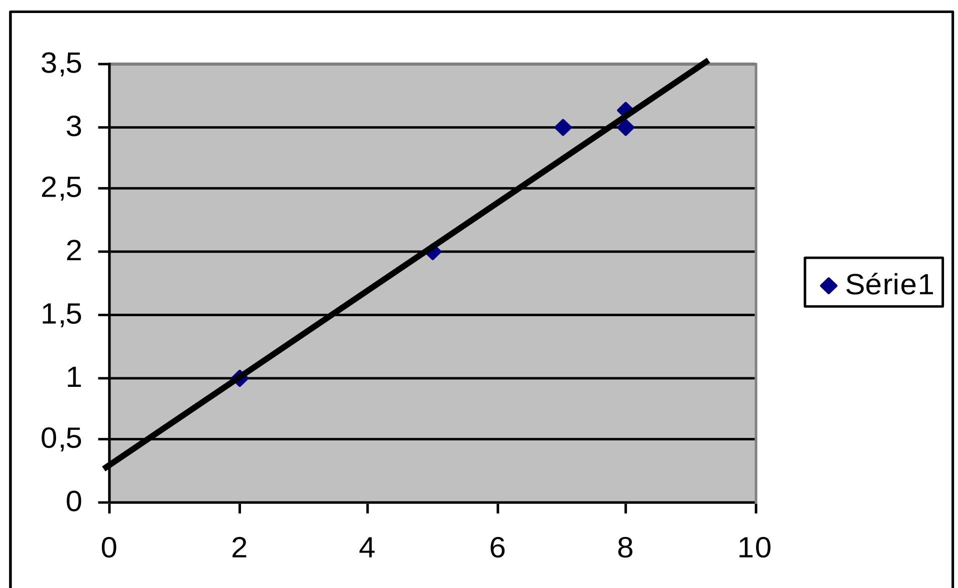
O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Logo

$$\begin{bmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 142 & -22 \\ -22 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/7 \\ 5/14 \end{bmatrix}$$

$$\varphi(x) = \frac{2}{7} + \frac{5}{14} x$$



O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

- **Caso Polinomial**

O processo usado para o ajuste linear pode ser estendido para ajuste polinomial.

Assim, uma função polinomial de grau *n* é dada por:

$$P_n(x) = \alpha_n x^n + \alpha_{n-1} x^{n-1} + \cdots + \alpha_1 x + \alpha_0$$

O objetivo é minimizar o erro:

$$E = \sum_{i=1}^{m} \left[y_i - P_n(x_i) \right]^2$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Como no caso linear, para que E seja minimizado é necessário que:

$$\boxed{\frac{\partial E}{\partial \alpha_j}(\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_n) = 0} \quad \text{para cada } j = 0, 1, \ldots, n.$$

Isto fornece as $n+1$ equações normais nas $n+1$ incógnitas α_j:

$$\boxed{\sum_{k=0}^{n} \alpha_k \sum_{i=1}^{m} x_i^{j+k} = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i^j} \quad \text{para cada } j = 0, 1, \ldots, n.$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

$$\begin{cases} \alpha_0 m + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i + \alpha_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 + \cdots + \alpha_n \sum_{i=1}^{m} x_i^n = \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \\ \alpha_0 \sum_{i=1}^{m} x_i + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 + \alpha_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^3 + \cdots + \alpha_n \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i \\ \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ \alpha_0 \sum_{i=1}^{m} x_i^n + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} + \alpha_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+2} + \cdots + \alpha_n \sum_{i=1}^{m} x_i^{2n} = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i^n \end{cases}$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Ajustar os dados da Tabela 3 com um polinômio de grau dois utilizando o método dos mínimos quadrados.

Tabela 3

i	x_i	y_i
1	0,00	1,0000
2	0,25	1,2840
3	0,50	1,6487
4	0,75	2,1170
5	1,00	2,7183

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

i	x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
1	0,00	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2	0,25	1,2840	0,0625	0,1563	0,0039	0,3210	0,0803
3	0,50	1,6487	0,2500	0,1250	0,0625	0,8244	0,4122
4	0,75	2,1170	0,5625	0,4219	0,3164	1,5878	1,1908
5	1,00	2,7183	1,0000	1,0000	1,000	2,7183	2,7183
Σ	**2,50**	**8,7680**	**1,875**	**1,5625**	**1,3828**	**5,4514**	**4,4015**

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Para este problema, $n = 2$, $m = 5$ e as três equações normais são:

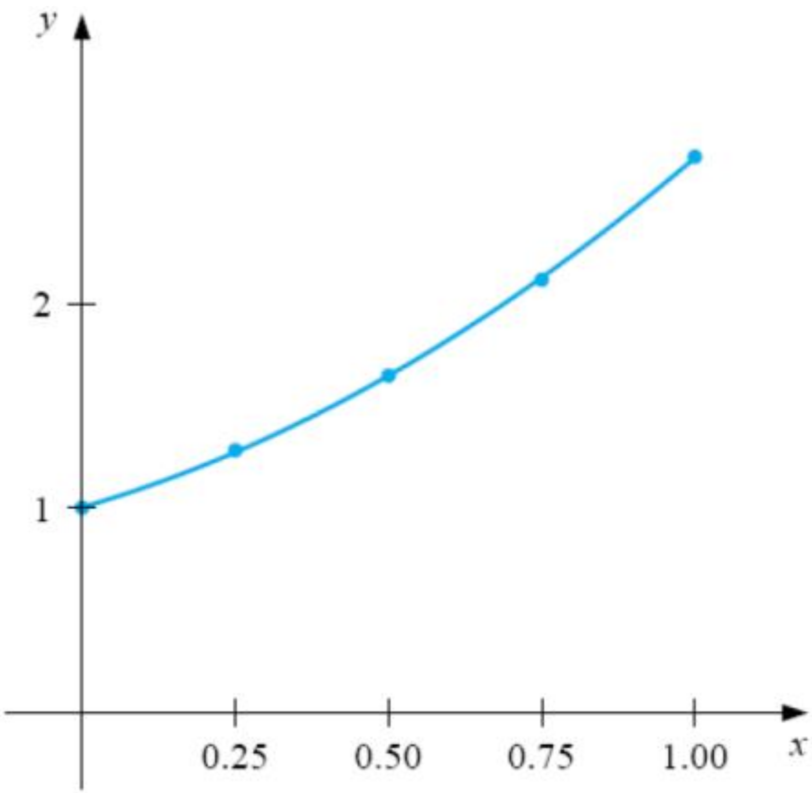
$$\begin{cases} 5,0\alpha_0 + 2,5\alpha_1 + 1,875\alpha_2 = 8,7680 \\ 2,5\alpha_0 + 1,875\alpha_1 + 1,5625\alpha_2 = 5,4514 \\ 1,875\alpha_0 + 1,5625\alpha_1 + 1,3828\alpha_2 = 4,4015 \end{cases}$$

Resolvendo o sistema, obtêm-se:

$$\boxed{\alpha_0 = 1,0051} \quad \boxed{\alpha_1 = 0,8647} \quad \boxed{\alpha_2 = 0,8432}$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

$$y = 1,0051 + 0,8647x + 0,8432x^2$$



O erro total

$$E = \sum_{i=1}^{5} \left[y_i - P(x_i) \right]^2 = 2,74 \times 10^{-4}$$

é o mínimo que pode ser obtido usando um polinômio com grau máximo 2

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- **Caso Polinomial**

Exemplo 3: Seja o conjunto de pontos:

x	-1.0	-0.75	-0.6	-0.5	-0.3	0	0.2	0.4	0.5	0.7	1.0
$f(x)$	2.05	1.153	0.45	0.4	0.5	0	0.2	0.6	0.512	1.2	2.05

Encontre a parábola através dos mínimos quadrados que melhor se ajusta aos pontos da tabela.

- Vimos pelo diagrama de dispersão que uma parábola pela origem seria uma boa escolha, logo seja,

$$g_1(x) = x^2 \Rightarrow \varphi(x) = \alpha_1 x^2 = \alpha x^2$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

- Logo temos uma equação dada por,

$$[\sum_{k=1}^{11} g_1(x_k) g_1(x_k)]\alpha_1 = \sum_{k=1}^{11} f(x_k) g_1(x_k)$$

$$\Rightarrow \alpha_1 \sum_{k=1}^{11} \left[g_1(x_k)\right]^2 = \sum_{k=1}^{11} f(x_k) g_1(x_k)$$

$$\Rightarrow \alpha_1 \sum_{k=1}^{11} \left[(x_k)\right]^4 = \sum_{k=1}^{11} \left[(x_k)\right]^2 f(x_k)$$

O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS CASO DISCRETO

Calculando as somas:

x	-1	-0,75	-0,6	-0,5	-0,3	0	0,2	0,4	0,5	0,7	1	somas
x2.x2	1	0,3164	0,1296	0,0625	0,0081	0	0,0016	0,0256	0,0625	0,2401	1	2,8464
f(x).x2	2,05	0,6485	0,162	0,1	0,045	0	0,008	0,096	0,128	0,588	2,05	5,8756

Nossa equação é

$$2{,}8464\alpha = 5{,}8756$$
$$\alpha = 2{,}0642$$

Então $\varphi(x) = 2.0642x^2$ é a parábola que melhor se aproxima, no sentido dos quadrados mínimos, da função tabelada.

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Existem casos, onde o diagrama de dispersão de uma função indica que os dados devem ser ajustados por uma função não linear.
- Ocasionalmente, é apropriado supor que os dados estejam relacionados exponencialmente.
- Exemplo: $\phi(x) = ae^{bx}$, para a e b constantes .
- A **<u>dificuldade</u>** de aplicação do método dos mínimos quadrados neste caso consiste na tentativa de **<u>minimizar o erro.</u>**

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Para estes casos, um **Processo de Linearização** deve ser empregado, para que seja possível aplicar o Método dos Mínimos Quadrados.

- Neste caso, podemos proceder da seguinte forma:

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Caso I: **Função Exponencial** $\boxed{\varphi(x) = y = ae^{bx}}$

- Aplicando logaritmo em ambos os lados, obtêm-se:

$$\ln(y) = \ln\left(ae^{bx}\right) = \ln(a) + bx$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = \ln(y) \\ \alpha_0 = \ln(a) \\ \alpha_1 = b \\ X = x \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_1 X + \alpha_0$

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Caso II: **Função Logarítmica** $$\boxed{y = a\ln(bx)}$$
- Expandindo: $y = a\ln(b) + a\ln(x)$
- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = y \\ \alpha_0 = a\ln(b) \\ \alpha_1 = a \\ X = \ln(x) \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_1 X + \alpha_0$

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Caso III: **Função Potencial** $\boxed{y = \mathrm{a}x^{\mathrm{b}}}$

- Aplicando logaritmo em ambos os lados:

$$\ln(y) = \ln\left(\mathrm{a}x^{\mathrm{b}}\right) = \ln(\mathrm{a}) + \ln\left(x^{\mathrm{b}}\right) = \ln(\mathrm{a}) + \mathrm{b}\ln(x)$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = \ln(y) \\ \alpha_0 = \ln(\mathrm{a}) \\ \alpha_1 = \mathrm{b} \\ X = \ln(x) \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_1 X + \alpha_0$

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Caso IV: **Função Hiperbólica** $\boxed{y = a + \dfrac{b}{x}}$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = y \\ \alpha_0 = a \\ \alpha_1 = b \\ X = x^{-1} \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_1 X + \alpha_0$

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Usa-se as equações de Ajuste Linear para obter α_0 e α_1

$$\boxed{\alpha_0 m + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i=1}^{m} y_i}$$

$$\boxed{\alpha_0 \sum_{i=1}^{m} x_i + \alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i}$$

LEMBRE-SE!

- Após aplicar o método dos mínimos quadrados, é preciso fazer as **substituições necessárias** para encontrar os parâmetros **a** e **b** da função de aproximação original.

IMPORTANTE

- Observe que os parâmetros assim obtidos **não são ótimos** dentro do critério dos quadrados mínimos, porque estamos ajustando o problema **linearizado** e não o problema **original.**

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Exemplo:

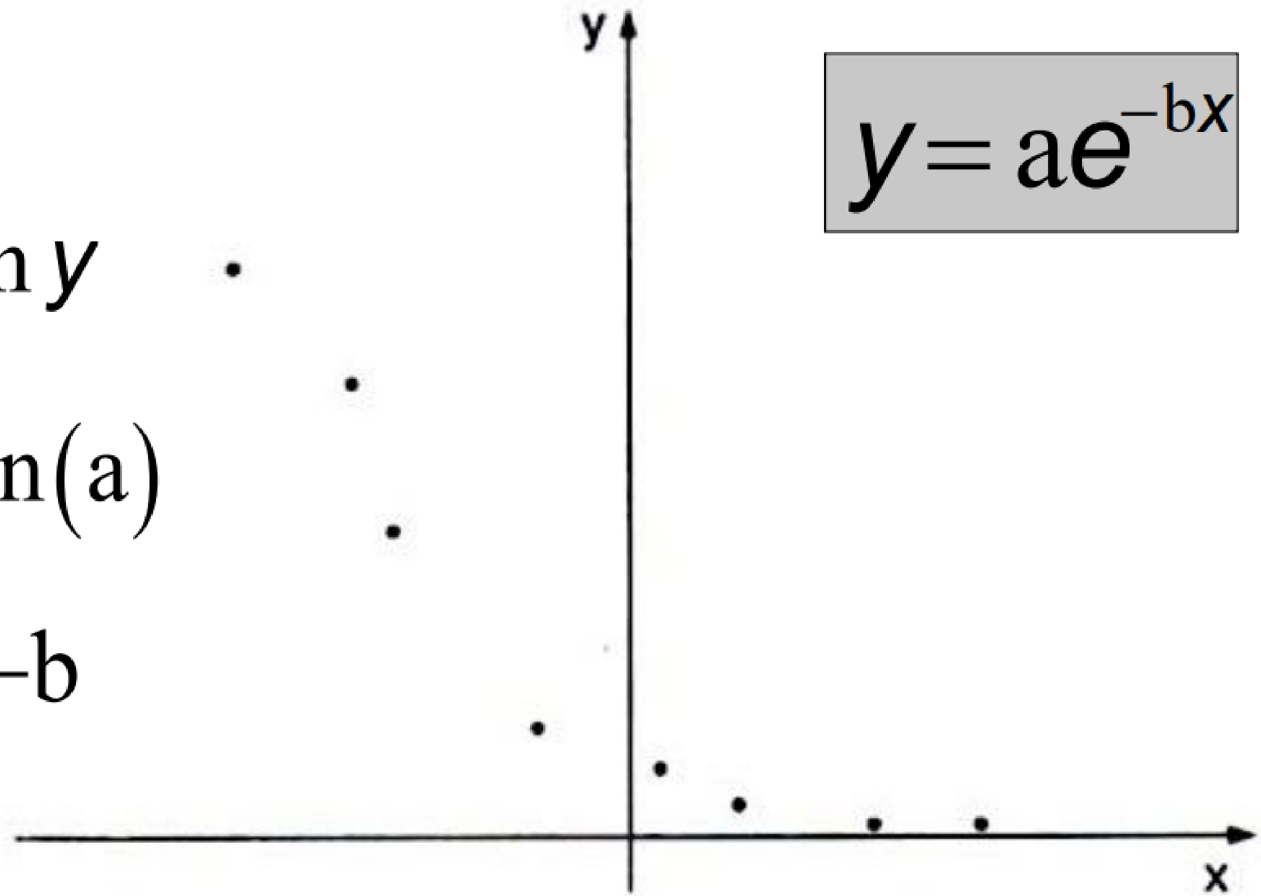
Encontrar uma função que se ajusta aos valores da tabela abaixo:

x	***y***
-1,0	36,547
-0,7	17,267
-0,4	8,155
-0,1	3,852
0,2	1,82
0,5	0,86
0,8	0,406
1,0	0,246

AJUSTE NÃO-LINEAR

$$\boxed{y = a e^{-bx}}$$

$$\begin{cases} Y = \ln y \\ \alpha_0 = \ln(a) \\ \alpha_1 = -b \end{cases}$$



AJUSTE NÃO-LINEAR

- Como o ajuste será realizado por uma função exponencial é necessário calcular: $Y = \ln y$

i	x	y	$Y = \ln(y)$	x_i^2	$x_i Y_i$
1	-1,0	36,547	3,599	1,00	-3,599
2	-0,7	17,264	2,849	0,49	-1,994
3	-0,4	8,155	2,099	0,16	-0,839
4	-0,1	3,852	1,349	0,01	-0,135
5	0,2	1,820	0,599	0,04	0,120
6	0,5	0,860	-0,151	0,25	-0,075
7	0,8	0,406	-0,901	0,64	-0,721
8	1,0	0,246	-1,402	1,00	-1,402
Σ	**0,3**	**69,15**	**8,041**	**3,59**	**-8,645**

AJUSTE NÃO-LINEAR

$$\alpha_0 = 1,099 \qquad \alpha_1 = -2,5$$

$$\alpha_0 = \ln(a) \qquad \alpha_1 = -b$$

$$\boxed{a = 3,001} \qquad \boxed{b = 2,5}$$

$$\boxed{y = 3,001e^{-2,5x}}$$

TESTE DE ALINHAMENTO

- Uma vez escolhida uma função não linear em a, b, ... para ajustar uma função, uma forma de verificar se a escolha foi razoável é aplicar o **Teste de Alinhamento**

TESTE DE ALINHAMENTO

- Fazer a **linearização** da função não linear escolhida;

- Fazer o **diagrama de dispersão** dos novos dados;

- Se os pontos do diagrama estiverem alinhados, isto significará que a **função linear** foi uma "**boa escolha**".

TESTE DE ALINHAMENTO

Gráfico de x versus $Y = ln\ y$

i	x	y	$Y = ln(y)$
1	-1	36,547	3,599
2	-0,7	17,264	2,849
3	-0,4	8,155	2,099
4	-0,1	3,852	1,349
5	0,2	1,820	0,599
6	0,5	0,860	-0,151
7	0,8	0,406	-0,901
8	1	0,246	-1,402
Σ	**0,3**	**69,15**	**8,041**

TESTE DE ALINHAMENTO

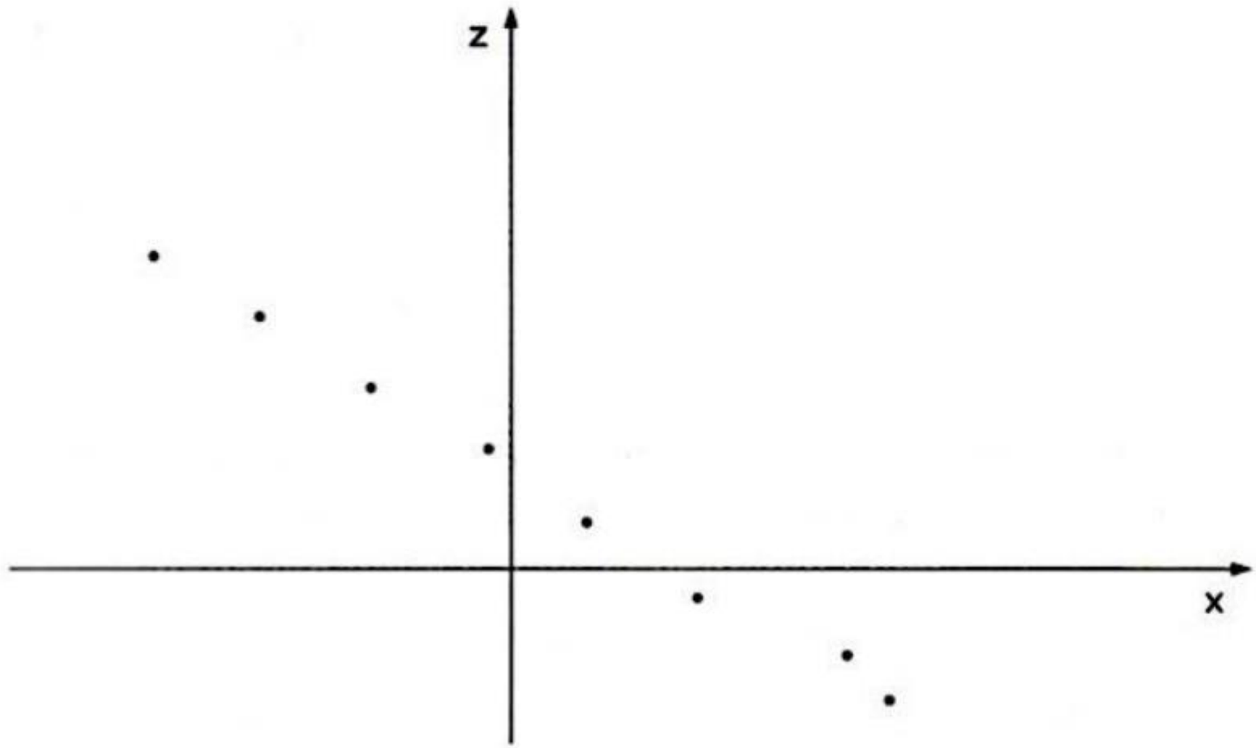


Diagrama de dispersão dos novos dados ($Y = \ln y$).

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Exemplo:

- Usando o Método dos Mínimos Quadrados, ajustar uma curva do tipo $s = q\,t^{\,p}$ aos dados abaixo:

t	2,2	2,7	3,5	4,1
s	65	60	53	50

- Qual o valor de s quando $t = 4{,}5$?
- Qual o vaor de t quando $s = 40$?

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Caso III: **Função Potencial** $\boxed{s = qt^p}$
- Aplicando logaritmo em ambos os lados:

$$\log s = \log q + p \log t$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = \log s \\ \alpha_0 = \log q \\ \alpha_1 = p \\ X = \log t \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_1 X + \alpha_0$

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Temos então:

i	t	s	X_i	Y_i	X_i^2	$X_i Y_i$
1	2,2	65	0,3424	1,8129	0,1172	0,6207
2	2,7	60	0,4314	1,7782	0,1861	0,7671
3	3,5	53	0,5441	1,7243	0,2960	0,9382
4	4,1	50	0,6128	1,6990	0,3755	1,0411
Σ			**1,9307**	**7,0144**	**0,9748**	**3,3671**

AJUSTE NÃO-LINEAR

$$\begin{cases} 4\alpha_0 + 1,9307\alpha_1 = 7,0144 \\ 1,9307\alpha_0 + 0,9748\alpha_1 = 3,3671 \end{cases}$$

$$\alpha_0 = 1,963 \qquad \alpha_1 = -0,434$$

$$\alpha_0 = \log q \qquad \alpha_1 = p$$

$$\boxed{q = 91,83} \qquad \boxed{p = -0,434}$$

$$\boxed{s = 91,83t^{-0,434}}$$

AJUSTE NÃO-LINEAR

- Se:

$$s = 91,83t^{-0,434}$$

- então, para $t = 4,5$; $s \approx 48$, e para $s = 40$; $t \approx 6,8$.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

- O ajuste de curvas é uma boa estratégia para avaliar a natureza de uma massa de dados;
- Ele mostra qual o comportamento da tabela, ou seja, ele busca por uma curva contínua, conhecida, que possa representar o comportamento da tabela.

REFERÊNCIAS

- M. A. Gomes Ruggiero, V. L. da Rocha Lopes. Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais, 2ª edição, Editora Pearson, 1997.
- M.C. Cunha. Métodos Numéricos. 2a edição, Editora da Unicamp, 2000.
- N.B. Franco. Cálculo Numérico. Pearson Prentice Hall, 2007.
- Richard L. Burden e J. Douglas Faires, Análise Numérica, Cengage Learning, Tradução da 8. Ed. Americana, 2008