UNIDADE 4
APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES
Ajuste de curvas pelo método dos Mínimos Quadrados

Ajuste de Curvas

Uma das formas de se trabalhar com uma função definida por uma tabela de valores é a interpolação polinomial.

Contudo, a interpolação não é aconselhável quando:

- É preciso obter um valor aproximado da função em algum ponto fora do intervalo de tabelamento, ou seja, quando se quer **extrapolar**.
- Os valores tabelados são resultados de algum experimento físico ou de alguma pesquisa, porque, nestes casos, estes valores poderão conter erros inerentes que, em geral, não são previsíveis.

Surge então a necessidade de se ajustar a estas funções tabeladas uma função que seja uma "boa aproximação" para os valores tabelados e que permita extrapolar com certa margem de segurança.

O problema do ajuste de curvas no caso em que temos uma tabela de pontos ($\mathbf{x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots, (x_m, f(x_m))}$ com $\mathbf{x_1, x_2, \ldots, x_m}$, pertencentes a um intervalo **[a, b]**, consiste em:

- escolher **n** funções $\mathbf{g_1(x), g_2(x), \ldots, g_n(x)}$, contínuas em **[a, b]**,
- obter **n** constantes $\boldsymbol{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n}$ tais que a função
  $\boldsymbol{\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots + \alpha_n g_n(x)}$
  se aproxime ao máximo de **f(x)**.

Genericamente, no caso linear, estaremos supondo que os dados serão aproximados por uma função do tipo:

$$\mathbf{f(x) \cong \varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots + \alpha_n g_n(x)}$$

onde as funções $\mathbf{g_1(x), g_2(x), \ldots, g_n(x)}$ são preestabelecidas.

Dizemos que este é um modelo matemático linear porque os coeficientes a determinar, $\boldsymbol{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n}$, aparecem linearmente, embora as funções $\mathbf{g_1(x), g_2(x), \ldots, g_n(x)}$ possam ser funções não lineares de **x**, como por exemplo,

- $g_1(x) = e^x$
- $g_2(x) = (x^2 + 2)$
- $g_3(x) = \text{sen}(x)$, etc.

A escolha das funções pode ser feita observando o gráfico dos pontos conhecidos ou se baseando em fundamentos teóricos do experimento que nos forneceu a tabela.

Portanto, dada uma tabela de pontos $\mathbf{(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots, (x_m, f(x_m))}$, deve-se, em primeiro lugar, colocar estes pontos num gráfico cartesiano.

O gráfico resultante é chamado diagrama de dispersão. Através deste diagrama pode-se visualizar a curva que melhor se ajusta aos dados.

Exemplo 1:

Tabela 1 – Valores de tabela

i	**1.**	**2.**	**3.**	**4.**	**5.**	**6.**	**7.**	**8.**	**9.**
x_i	-1,0	-0,75	-0,5	-0,25	0	0,25	0,5	0,75	1,0
$f(x_i)$	2,1	1,3	1,1	0,2	0	0,5	0,6	1,5	2,2

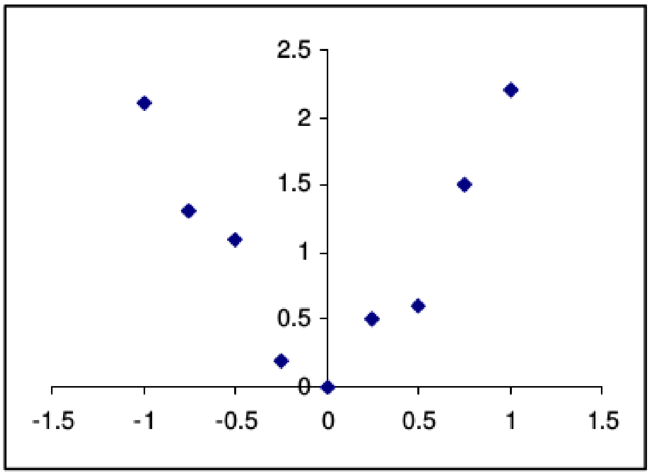

Figura 1 – Diagrama de dispersão

Portanto, é natural escolher apenas uma função $\mathbf{g_1(x) = x^2}$ e procurar então $\boldsymbol{\varphi(x) = \alpha x^2}$ (equação geral de uma parábola passando pela origem).

Exemplo 2:

Se considerarmos uma experiência onde foram medidos vários valores de corrente elétrica que passa por uma resistência submetida a várias tensões, colocando os valores correspondentes de corrente e tensão em um gráfico, poderemos ter gráfico apresentado na Fig. 2.

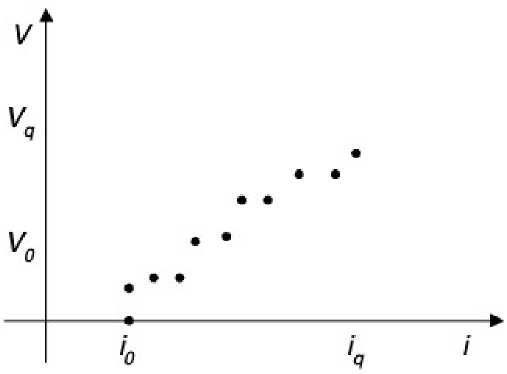

Figura 2 – Diagrama de dispersão

Neste caso, existe uma fundamentação teórica relacionando a corrente com a tensão $\mathbf{V = Ri}$, isto é, **V** é uma função linear de **i**.

Assim, $\mathbf{g_1(x) = i}$ e $\boldsymbol{\varphi(i) = \alpha g_1(i)}$

O problema é determinar qual parábola com equação **αx_2** se ajusta melhor ao primeiro gráfico e qual reta, passando pela origem, melhor se ajusta ao segundo gráfico.

No caso geral, escolhidas as funções **$g_1(x), g_2(x), ..., g_n(x)$** temos de estabelecer o conceito de proximidade entre as funções **$\varphi(x)$** e **$f(x)$** para obter as constantes **$\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n$**.

Uma maneira é impor que o desvio **$(f(x_i) - \varphi(x_i))$** seja mínimo, para **$i = 1, 2, ..., m$**.
Veremos a seguir o método conhecido como Método dos Quadrados Mínimos.

Método dos Quadrados Mínimos

O Método dos Quadrados Mínimos é provavelmente a técnica de aproximação mais usada na análise numérica e em problemas práticos.

Isto se deve tanto à sua simplicidade quanto ao fato de que em geral, buscamos aproximações para dados que são medidas obtidas experimentalmente com um certo grau de incerteza.

Veremos que o método dos quadrados mínimos contempla a possível existência de erros nos dados a serem aproximados.

O critério de aproximação consiste em minimizar os resíduos.

Chamaremos de **$f(x)$** a função que será convenientemente aproximada por outra função **$\varphi(x)$**.

No caso dos quadrados mínimos lineares, partimos da hipótese de que temos algumas informações sobre o comportamento de **$\varphi(x)$**.

Poderíamos saber, por exemplo, que **$\varphi(x)$** é uma reta, ou seja:

$$\varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x$$

A questão é encontrar qual é esta reta, ou seja, quais são os valores de **α_1** e **α_2** que ajustam os pontos conhecidos.

Num outro exemplo, vamos procurar valores para **α_1**, **α_2** e **α_3** que tornam a função:

$$\varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2$$

uma boa aproximação dos dados.

Sejam dados os pontos **$(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), ..., (x_m, f(x_m))$** e as **$n$** funções **$g_1(x), g_2(x), ..., g_n(x)$** escolhidas de alguma forma.

Considerando que o número de pontos **m**, tabelados, é sempre maior ou igual a **n** o número de funções escolhidas ou o número de coeficientes **α_i** a se determinar.

Nosso objetivo é encontrar os coeficientes **$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$** tais que a função

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

se aproxime ao máximo de **$f(x)$**.

Seja **$d_k = f(x_k) - \varphi(x_k)$** o desvio em **$x_k$**. O conceito de **proximidade** é que **d_k** seja mínimo para todo **$k = 1, 2, ..., m$**.

O método dos quadrados mínimos consiste em escolher os $\mathbf{a_j}$'s de tal forma que a soma dos quadrados dos desvios seja mínima.

Ajuste Linear Simples

Dada uma tabela com **m** valores $(x_i, f(x_i))$, $i = 1, 2, ..., m$, queremos encontrar a reta que melhor ajusta esta tabela, no sentido dos quadrados mínimos.

Como o ajuste será feito por uma reta, tomaremos $g_1(x) = 1$ **e** $g_2(x) = x$, isto é:

$$f(x) \cong \varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x$$

O resíduo para cada par (α_1, α_2) e para cada **x** será $r(\alpha_1, \alpha_2; x) = f(x) - \alpha_1 - \alpha_2 x$.

Assim, pelo método dos quadrados mínimos devemos procurar α_1 e α_2 que minimizam a função:

$$<r, r> (\alpha_1, \alpha_2) = < f(x) - \alpha_1 - \alpha_2 x, f(x) - \alpha_1 - \alpha_2 x> = \sum_{i=1}^{m} \left(f(x_i) - \alpha_1 - \alpha_2 x_i \right)^2$$

Do Cálculo Diferencial sabe-se que a condição necessária do ponto crítico é que as derivadas nele se anulem, esto é:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_1} <r, r> = \frac{\partial}{\partial \alpha_2} <r, r> = 0$$

ou ainda, procedidas as respectivas derivações na expressão **<r, r>** temos:

$$-2\sum_{i=1}^{m} \left(f(x_i) - \alpha_1 - \alpha_2 x_i \right) x_i = 0 \quad \text{e} \quad -2\sum_{i=1}^{m} \left(f(x_i) - \alpha_1 - \alpha_2 x_i \right) = 0$$

Após o desenvolvimento, estas duas equações formam um sistema linear com as incógnitas α_1 e α_2, que podem ser reescrito na forma:

$$\sum_{i=1}^{m} f(x_i) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_1 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_2 x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_1 x_i - \sum_{i=1}^{m} \alpha_2 x_i^2 = 0$$

ou

$$m\alpha_1 + \alpha_2 \sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i=1}^{m} f(x_i)$$

$$\alpha_1 \sum_{i=1}^{m} x_i + \alpha_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = \sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i)$$

A solução deste sistema pode ser obtida pelo método da Eliminação de Gauss. Através das substituições retroativas obtém-se:

$$\alpha_2 = \frac{m\sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) - \sum_{i=1}^{m} x_i \sum_{i=1}^{m} f(x_i)}{m\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

e

$$\alpha_1 = \frac{\sum_{i=1}^{m} f(x_i) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)\alpha_2}{m}$$

Assim, a solução do sistema de equações lineares é $\boldsymbol{\alpha_1}$ e $\boldsymbol{\alpha_2}$ dados pelas equações acima, e com estes valores os resíduos apresentam o seu menor valor.

Como este método consiste em achar o mínimo de uma função quadrática, ele é conhecido como método dos mínimos quadrados.

Exemplo 3: Ajustar os dados da tabela abaixo a uma reta de modo que o resíduo seja o menor possível.

i	**1.**	**2.**	**3.**	**4.**	**5.**
$\mathbf{x_i}$	1,3	3,4	5,1	6,8	8,0
$\mathbf{f(x_i)}$	2,0	5,2	3,8	6,1	5,8

Solução

Usando os valores da tabela temos:

a) Cálculo dos somatórios:

m = 5

$$\sum_{i=1}^{5} x_i = (1.3) + (3.4) + (5.1) + (6.8) + (8.0) = \mathbf{24.6}$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i^2 = (1.3)^2 + (3.4)^2 + (5.1)^2 + (6.8)^2 + (8.0)^2 = \mathbf{149.5}$$

$$\sum_{i=1}^{5} f(x_i) = (2.0) + (5.2) + (3.8) + (6.1) + (5.8) = \mathbf{22.9}$$

$$\sum_{i=1}^{5} x_i f(x_i) = (1.3)(2.0) + (3.4)(5.2) + (5.1)(3.8) + (6.8)(6.1) + (8.0)(5.8) = \mathbf{127.54}$$

b) Resolução do sistema:
Assim, os valores de α_1 e α_2 da melhor reta (no sentido dos quadrados mínimos) são obtidos pelo sistema:

$$\begin{cases} 5\alpha_1 + 24.6\alpha_2 = 22.9 \\ 24.6\alpha_1 + 149.5\alpha_2 = 127.54 \end{cases}$$

Resolvendo o sistema, obtêm-se **α_1 = 2,0098** e **α_2 = 0,5224**

Usando as fórmulas de α_1 e α_2 temos:

$$\alpha_2 = \frac{m\sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) - \sum_{i=1}^{m} x_i \sum_{i=1}^{m} f(x_i)}{m\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2} = \frac{(5)(127.54) - (24.6)(22.9)}{(5)(149.5) - (24.6)^2} = \frac{637.7 - 563.34}{747.5 - 605.16} = \frac{74.36}{142.34} = 0.5224$$

$$\alpha_1 = \frac{\sum_{i=1}^{m} f(x_i) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)\alpha_2}{m} = \frac{22.9 - (24.6)(0.5224)}{5} = \frac{22.9 - 12.851}{5} = 2{,}0098$$

Então, a melhor reta que passa pelos pontos, usando a equação, é:

$\varphi(x) = 2{,}0098 + 0{,}5224x$

c) Cálculo do quadrado dos resíduos:

Os valores de **$\varphi(x_i)$** e os respectivos resíduos **($r(x_i) = f(x_i) - \varphi(x_i)$)** estão na tabela abaixo:

i	1	2	3	4	5
x_i	1,3000	3,4000	5,1000	6,8000	8,0000
$f(x_i)$	2,0000	5,2000	3,8000	6,1000	5,8000
$\varphi(x_i)$	2,6889	3,7859	4,6740	5,5621	6,1890
$r(x_i)$	-0,6889	1,4141	-0,8740	0,5379	-0,3890
$r^2(x_i)$	0,4745	1,9996	0,7639	0,2893	0,1513

Neste exemplo, a soma dos quadrados dos resíduos é:

$$\sum_{i=1}^{5} r^2(x_i) = 3.6787$$

Exercício 1: Considere o ajuste da tabela abaixo por uma reta. Calcular a soma dos quadrados dos resíduos.

i	1.	2.	3.	4.	5.
x_i	0	0,25	0,5	0,75	1,00
$f(x_i)$	1,0000	1,2840	1,6487	2,1170	2,7183

Resposta:

Equação: **$\varphi(x) = 0{,}89968 + 1{,}70784x$**
Soma dos quadrados dos resíduos: **0,039198364**

Ajuste Polinomial

O ajuste linear simples é um caso especial do ajuste polinomial.
A equação geral do ajuste polinomial é dada por:

$$\varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2 + \ldots + \alpha_{n+1} x^n$$

e as equações normais ficam:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 & \sum_{i=1}^{m} x_i^4 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+2} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{2n} \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f(x_i) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n f(x_i) \end{bmatrix}$$

Exemplo 4: Ajustar os pontos da tabela abaixo à equação **$\varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2$**
Calcular a soma dos quadrados dos resíduos.

i	1.	2.	3.	4.	5.	6.
x_i	-2	-1,5	0	1	2,2	3,1
$f(x_i)$	-30,5	-20,2	-3,3	8,9	16,8	21,4

Solução

O vetor α é a solução do sistema acima, que, neste caso, torna-se:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 & \sum_{i=1}^{m} x_i^4 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f(x_i) \end{bmatrix}$$

a) Cálculo dos somatórios:
m = 6

$$\sum_{i=1}^{6} x_i = (-2) + (-1.5) + (0) + (1) + (2.2) + (3.1) = \mathbf{2.8}$$

$$\sum_{i=1}^{6} x_i^2 = (-2)^2 + (-1.5)^2 + (0)^2 + (1)^2 + (2.2)^2 + (3.1)^2 = \mathbf{21.7}$$

$$\sum_{i=1}^{6} x_i^3 = (-2)^3 + (-1.5)^3 + (0)^3 + (1)^3 + (2.2)^3 + (3.1)^3 = \mathbf{30.064}$$

$$\sum_{i=1}^{6} x_i^4 = (-2)^4 + (-1.5)^4 + (0)^4 + (1)^4 + (2.2)^4 + (3.1)^4 = \mathbf{137.8402}$$

$$\sum_{i=1}^{6} f(x_i) = (-30.5) + (-20.2) + (-3.3) + (8.9) + (16.8) + (21.4) = \mathbf{-6.9}$$

$$\sum_{i=1}^{6} x_i f(x_i) = (-2)(-30.5) + (-1.5)(-20.2) + (0)(-3.3) + (1)(8.9) + (2.2)(16.8) + (3.1)(21.4) = \mathbf{203.5}$$

$$\sum_{i=1}^{6} x_i^2 f(x_i) = (-2)^2(-30.5) + (-1.5)^2(-20.2) + (0)^2(-3.3) + (1)^2(8.9) + (2.2)^2(16.8) + (3.1)^2(21.4) = \mathbf{128.416}$$

b) Resolução do sistema:

O sistema é:

$$\begin{bmatrix} 6 & 2.8 & 21.7 \\ 2.8 & 21.7 & 30.064 \\ 21.7 & 30.064 & 137.8402 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.9 \\ 203.5 \\ 128.416 \end{bmatrix}$$

A solução deste sistema é:
α_1 = –2.018
α_2 = 11.33
α_3 = –1.222

c) Cálculo do quadrado dos resíduos:

i	1	2	3	4	5	6
x_i	-2,0000	-1,5000	0,0000	1,0000	2,2000	3,1000
$f(x_i)$	-30,5000	-20,2000	-3,3000	8,9000	16,8000	21,4000
$\varphi(x_i)$	-29,5697	-21,7650	-2,0177	8,0917	16,9962	21,3645
$r(x_i)$	-0,9303	1,5650	-1,2823	0,8083	-0,1962	0,0355
$r^2(x_i)$	0,8655	2,4492	1,6444	0,6534	0,0385	0,0013

Resposta:

Equação:

φ (x) = -2,0177 + 11,3315 x + -1,2222 x²

Soma dos quadrados dos resíduos: **5,65227**

Exercício 2: Considerando a função tabelada abaixo

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
x_i	-1	-0,75	-0,6	-0,5	-0,3	0	0,2	0,4	0,5	0,7	1
$f(x_i)$	2,05	1,153	0,45	0,4	0,5	0	0,2	0,6	0,512	1,2	2,05

- construir o diagrama de dispersão
- construir uma parábola passando pela origem, ou seja, $\mathbf{f(x) = \varphi(x) = \alpha_3 x^2}$ (neste caso temos apenas uma função $\mathbf{g(x) = x^2}$ e $\mathbf{\alpha_1 = 0}$ e $\mathbf{\alpha_2 = 0}$).
  Ou seja, considerar sistema:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 & \sum_{i=1}^{m} x_i^4 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f(x_i) \end{bmatrix} \rightarrow \begin{aligned} \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \alpha_3 &= \sum_{i=1}^{m} f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^3 \alpha_3 &= \sum_{i=1}^{m} x_i f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^4 \alpha_3 &= \sum_{i=1}^{m} x_i^2 f(x_i) \end{aligned}$$

Resposta:

Equação: **φ (x) = 2,0642 x²**

Soma dos quadrados dos resíduos: **0,32069**

Exercício 3: Ajustar os pontos da tabela abaixo à equação $\mathbf{\varphi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2}$
Calcular a soma dos quadrados dos resíduos.

i	1	2	3	4	5	6	7
x_i	-0,75	-0,5	-0,25	0	0,25	0,5	0,75
$f(x_i)$	1,3	1,1	0,2	0	0,5	0,6	1,5

Resposta:

Equação:

φ (x) = 0,1762 + -0,0143 x + 2,2667 x²

Soma dos quadrados dos resíduos: **0,25095**