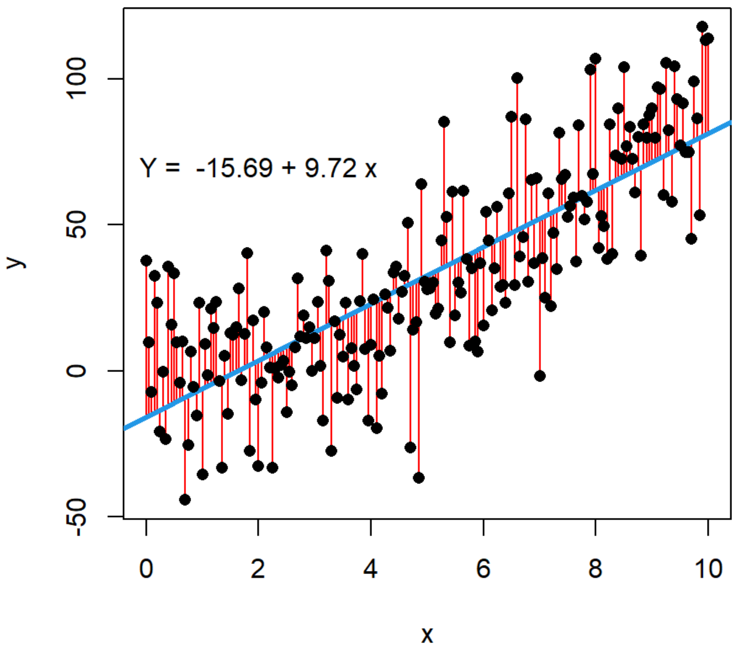
Introdução ao Cálculo Numérico

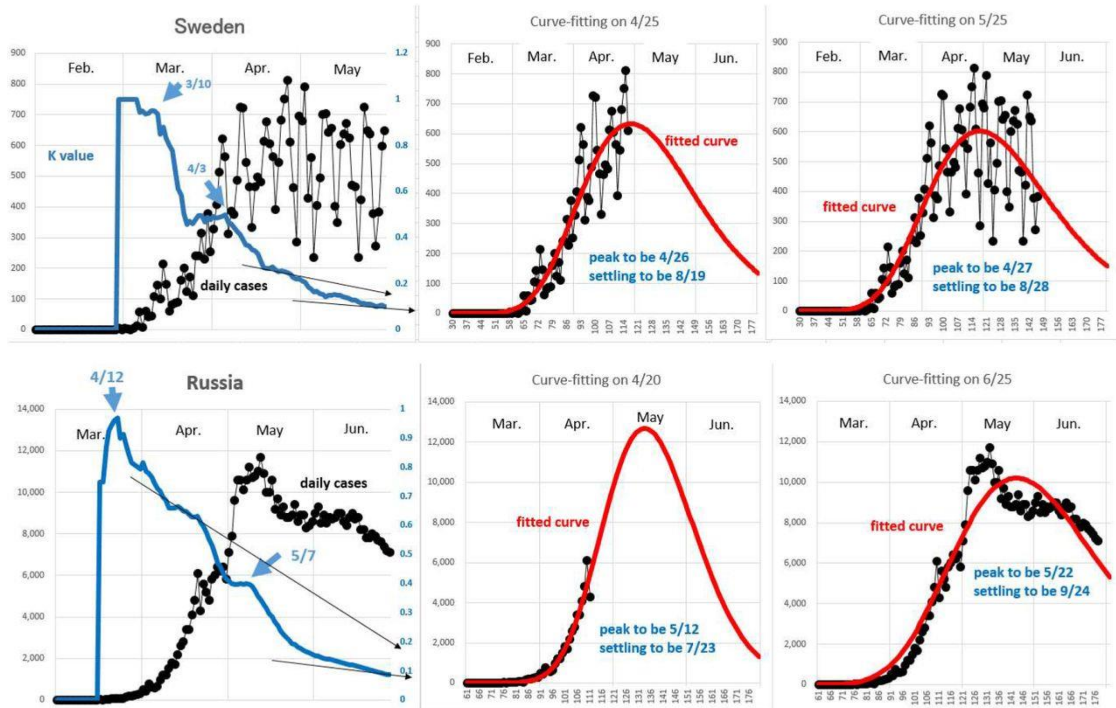
Ajuste de curvas

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

Prof. Rudnei Dias da Cunha

- Ajuste de curvas
  - Em certas situações, é necessário obter uma função $g(x)$ que aproxima (não interpola) um conjunto de pontos $(x_i; y_i)$, de tal maneira que $g(x_i)$ seja o mais próximo possível dos y_i, simultaneamente:

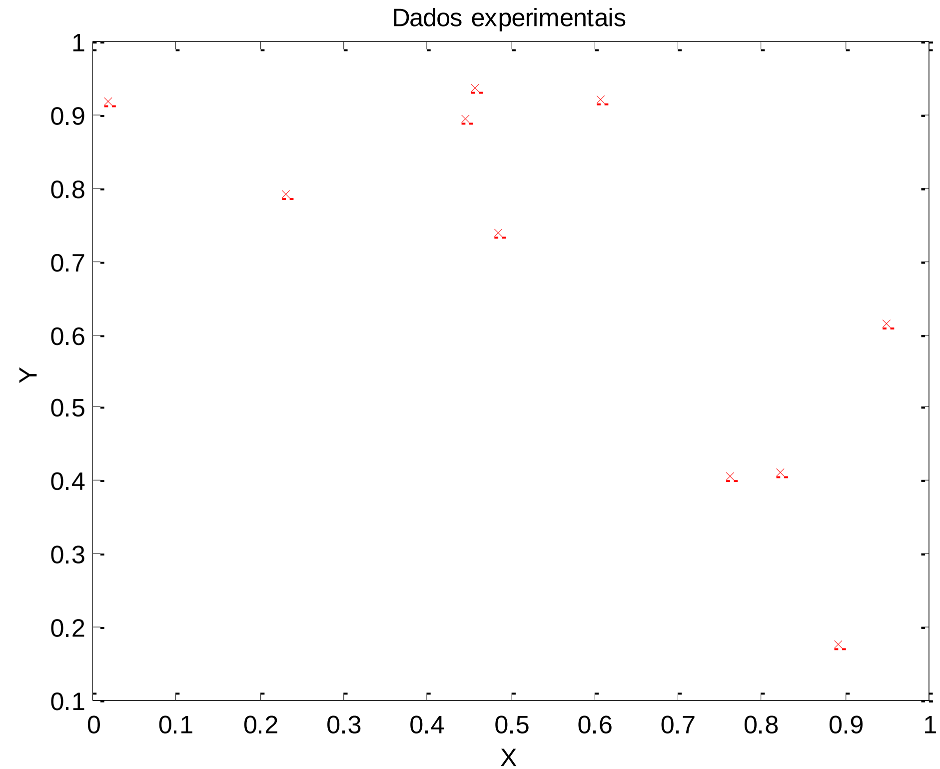




- Ajuste de curvas
  - Essa função será usada, posteriormente, a fim de calcular um valor $y = g(x)$. Um exemplo típico é utilizar um conjunto de pontos que expressam a cotação de câmbio de uma moeda durante um período de um mês e, de posse da curva que melhor ajusta os valores tabelados da cotação de câmbio, poder estimar qual o valor futuro do câmbio.
  - Diferentes curvas de ajuste podem ser usadas, como veremos nos exemplos a seguir:

- # Ajuste de curvas
  - Suponha, por exemplo, os dados experimentais (x, y) tabulados a seguir, juntamente com o gráfico correspondente:

X	Y
0.9501	0.6154
0.2311	0.7919
0.6068	0.9218
0.4860	0.7382
0.8913	0.1763
0.7621	0.4057
0.4565	0.9355
0.0185	0.9169
0.8214	0.4103
0.4447	0.8936



Ajuste de curvas

- Podemos interpolar os pontos, mas talvez o resultado não seja o mais adequado:

Interpolação dos pontos usando o polinômio interpolador de Newton (grau 9)

c_i
0,6154
-0,2455
-172211,0000
-13631,0000
149,8700
418782,0000
-4700,2200
-10141,7000
63015,6000
970547,0000

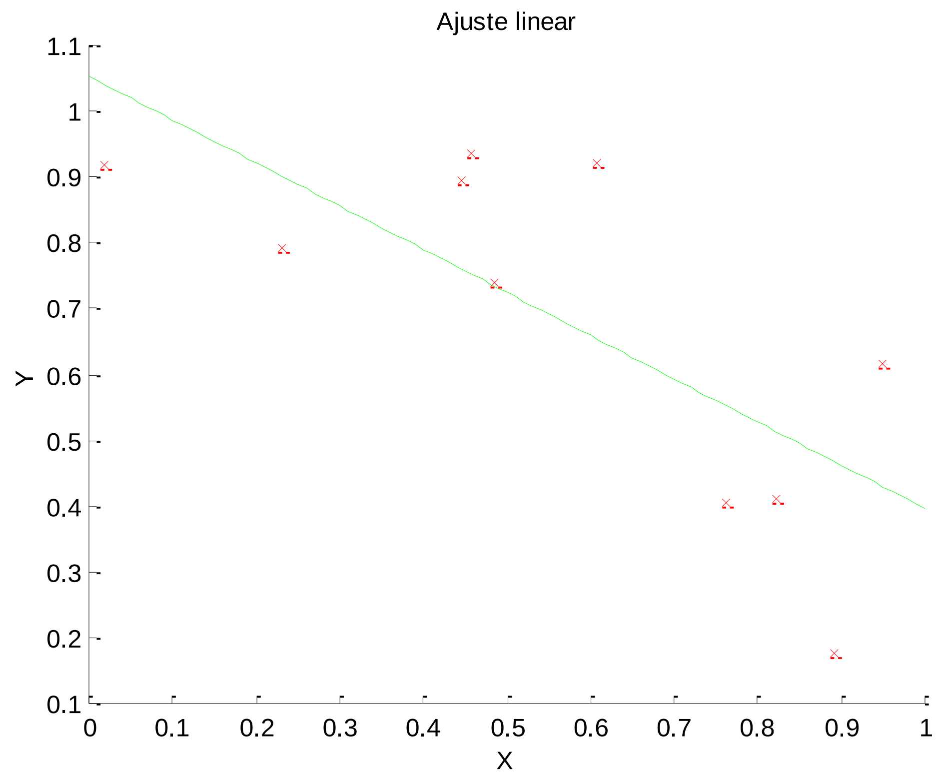
• Ajuste de curvas

- Pode-se aproximar esses pontos por uma *reta*:

Ajuste linear:

$$y = 1{,}0524 - 0{,}6560x$$

Observando a distribuição dos pontos, pode-se ver que eles estão dispostos ao longo de uma reta com declividade negativa.



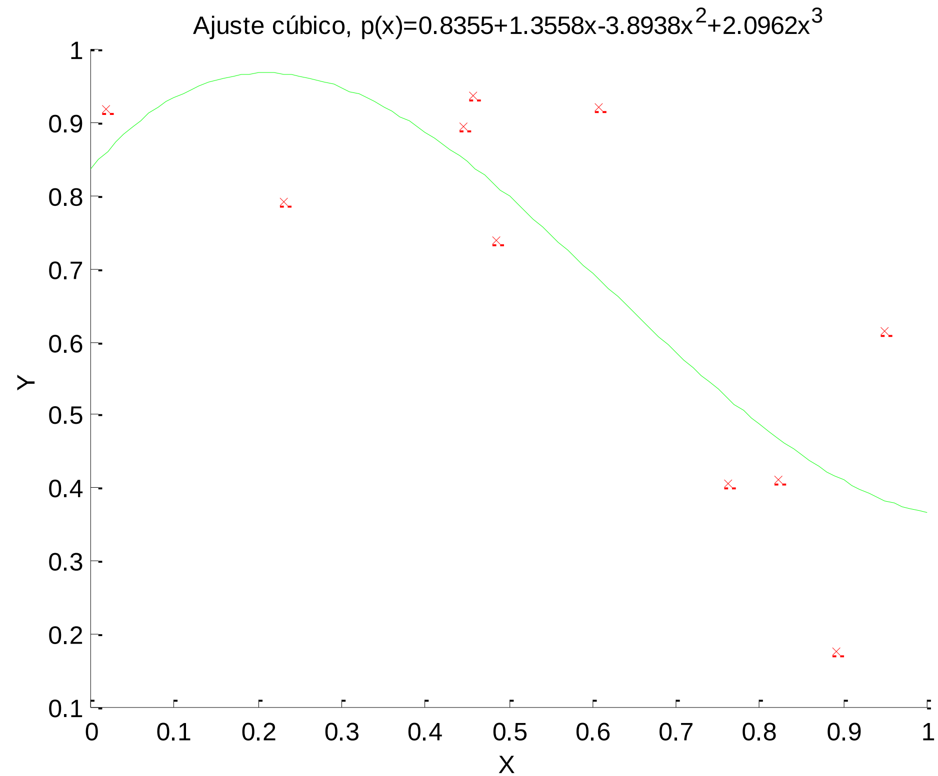
Ajuste de curvas

- Também podemos aproximá-los por um polinômio:

Ajuste cúbico:

$$y = 0{,}8355 + 1{,}3558x$$
$$-3{,}8938x^2 + 2{,}0962x^3$$

O ajuste cúbico poderia ser usado, mas talvez não seja mais adequado do que o ajuste linear, nesse caso.



- Ajuste de curvas
  - Considere, então, um conjunto de pontos $(x_i; y_i), i = 0,1,\ldots,n$, os quais serão aproximados por uma função da forma

$$g(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i g_i(x)$$

  - A determinação dos coeficientes de uma curva de ajuste **univariada** é feita através da **minimização dos quadrados dos resíduos** $r_i = y_i - g(x_i)$.
  - Os a_i são tais que a **soma dos quadrados dos resíduos**,

$$M(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{i=0}^{n} {r_i}^2(x) = \sum_{i=0}^{n} \big(y_i - g(x_i)\big)^2$$

é mínima.

- Ajuste de curvas
  - Para determinar os coeficientes a_i de tal forma que M seja mínima, deriva-se parcialmente M em relação à cada variável, igualando as derivadas parciais a zero, i.e. $\frac{\partial M}{\partial a_0} = \frac{\partial M}{\partial a_1} = \cdots = \frac{\partial M}{\partial a_m} = 0$, de onde se obterá um sistema de equações lineares que permitirá obter os coeficientes a_i.
  - Veremos, a seguir, como determinar os diferentes tipos de curvas de ajuste.

- Ajuste linear
  - No caso do ajuste linear, a função de ajuste é

$$\boxed{g(x) = a_0 + a_1 x}$$

de onde

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

  - Impondo as condições de minimização, vem

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

$$\frac{\partial M}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=0}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i)(-x_i) = 0$$

• Ajuste linear

- Expandindo os termos e reagrupando-os, obtemos o seguinte sistema de equações lineares:

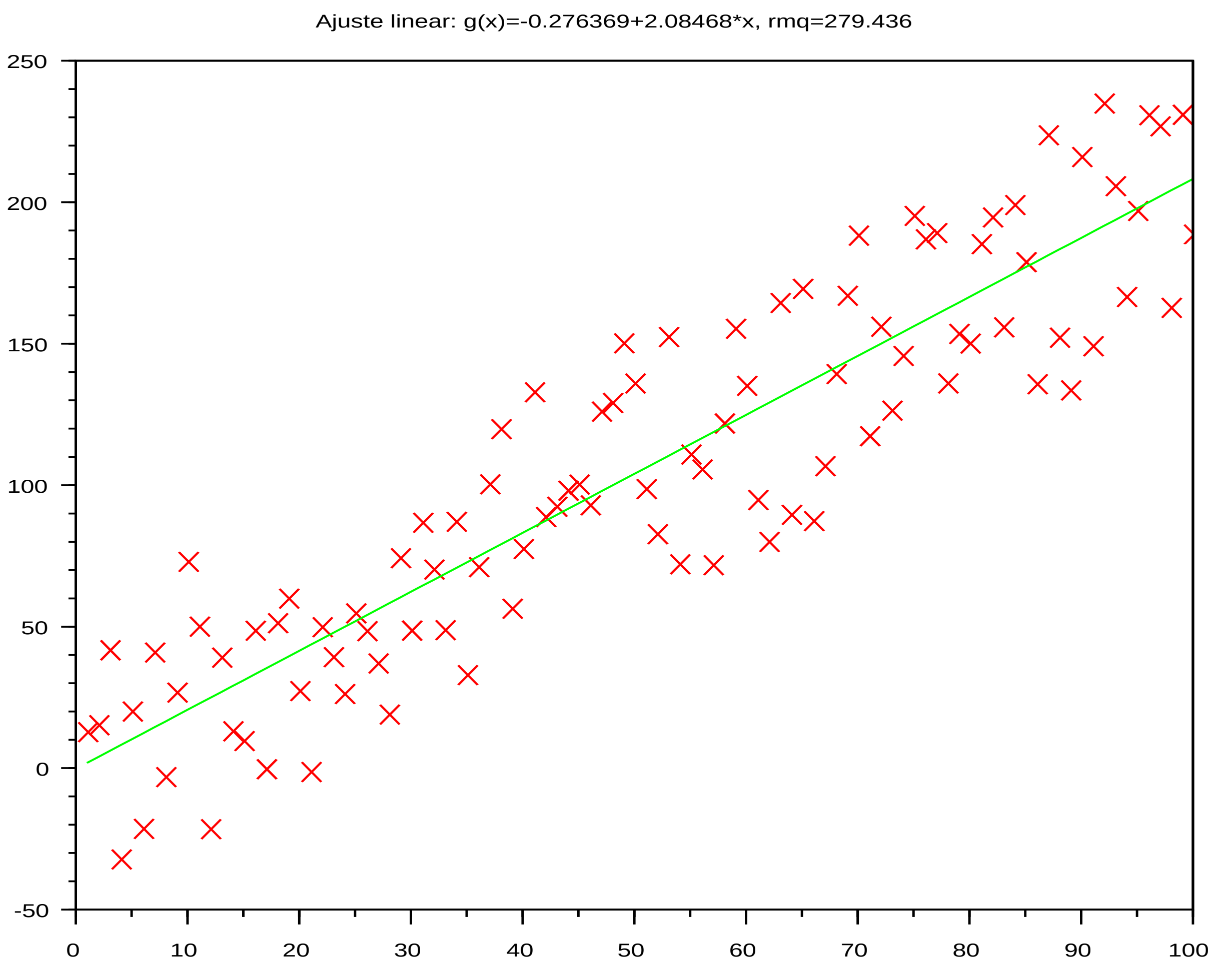
$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=0}^{n} y_i = \left(\sum_{i=0}^{n} a_0\right) + \left(\sum_{i=0}^{n} a_1 x_i\right) \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i y_i = \left(\sum_{i=0}^{n} a_0 x_i\right) + \left(\sum_{i=0}^{n} a_1 {x_i}^2\right) \end{cases}$$

- Ou, em forma matricial,

$$\begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

o qual é um sistema simétrico, de ordem 2, denominado de *sistema normal.*

O exemplo a seguir mostra a curva de ajuste linear para um conjunto de $n = 100$ pontos:



- Ajuste linear
  - Esse tipo de ajuste é tão usado, que calculadoras científicas oferecem teclas específicas para entrar com os dados $(x; y)$ e calcular o ajuste ou "regressão" linear:

$$\begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

L.R.

$\sum +$

Calcula os **somatórios** e resolve o sistema normal.

Adiciona os dados $(x; y)$.

- Ajuste linear
  - O ajuste linear pode ser calculado através do seguinte procedimento:

```
proc ajuste_linear(entrada: n,x,y; saida: a0,a1)
  ! Monta o sistema
  H(1,1):= n+1
  H(1,2):= 0 ; H(2,2):= 0 ; b(1):= 0 ; b(2):= 0
  para i:=0 até n faça
    H(1,2):= H(1,2)+x(i)
    H(2,2):= H(2,2)+x(i)*x(i)
    b(1):= b(1)+y(i)
    b(2):= b(2)+x(i)*y(i)
  fim para
  H(2,1):= H(1,2)
  ! Resolve o sistema (H)*a=b, obtendo a0 e a1
  a:= resolve(H,b)
  a0:= a(1) ; a1:= a(2)
end proc
```

- Ajuste polinomial
  - A função de ajuste polinomial de grau p é

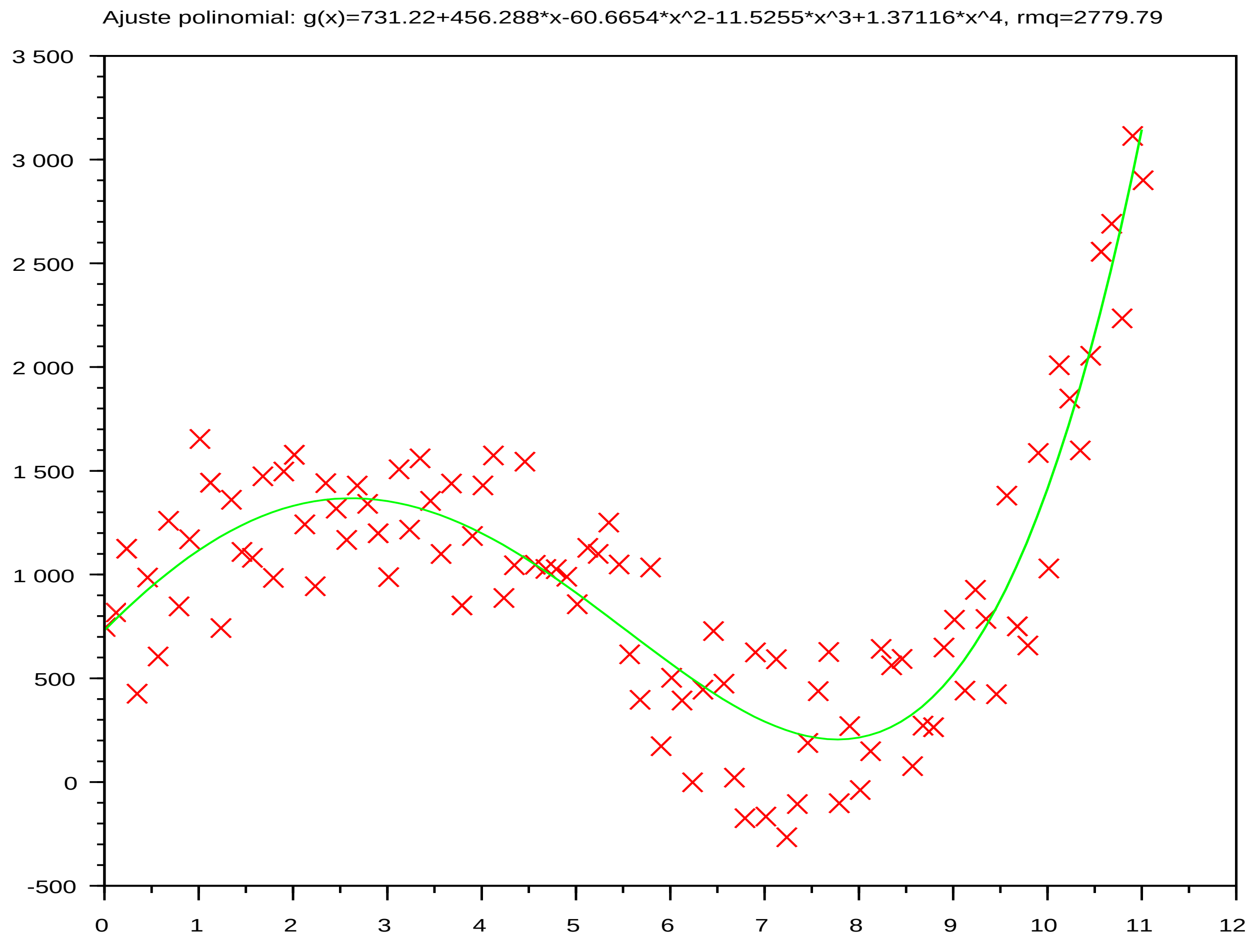
$$\boxed{g(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_p x^p}$$

de onde, procedendo de forma similar à apresentada para o ajuste linear, obtemos o sistema de equações lineares

$$\begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^{n} x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^p \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^2 & \cdots & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^{p+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{n} {x_i}^p & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^{p+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^{2p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{n} {x_i}^p y_i \end{bmatrix}$$

Observe que o sistema acima é simétrico, de ordem $p + 1$.

O exemplo a seguir mostra a curva de ajuste polinomial de grau $p = 4$ para um conjunto de $n = 100$ pontos:



- Ajuste polinomial
  - O ajuste polinomial pode ser calculado através do seguinte procedimento:

```
proc ajuste_polinomial(entrada: n,p,x,y; saida: a)
  ! Monta o sistema
  para j:=0 até p faça
    para i:=0 até p faça
      se (i+j)>0 então
         H(i+1,j+1):= 0
         para k:=0 até n faça
           H(i+1,j+1):= H(i+1,j+1)+x(k)^(i+j)
         fim para
      senão
         H(i+1,j+1):= n+1
      fim se
    fim para
    ...
```

- Ajuste polinomial
  - (cont.)

```
      ...
      se j>0 então
        b(j+1):= 0
        para k:=0 até n faça
          b(j+1):= b(j+1)+(x(k)^j)*y(k)
        fim para
      senão
        b(j+1):= 0
        para k:=0 até n faça
          b(j+1):= b(j+1)+y(k)
        fim para
      fim se
    fim para
    ! Resolve o sistema (H)*a=b, obtendo os
    ! coeficientes a (a_0, a_1, ..., a_p), usando
    ! eliminação gaussiana com pivotamento
    a:= resolve(H,b)
  end proc
```

- Ajuste polinomial
  - Uma vez calculados os coeficientes $a_0, a_1, \ldots, a_p$, o polinômio de ajuste pode ser avaliado num ponto x usando a rotina a seguir, a qual emprega multiplicações aninhadas (método de Horner) para fins de estabilidade numérica:

```
proc avalia_polinomio(entrada: x,p,a; saida: y)
  ! Utiliza multiplicações aninhadas
  y:= a(p)
  para i:=p-1 até 0 faça
    y:= a(i)+x*y
  fim para
fim proc
```

- Ajuste exponencial
  - A função de ajuste exponencial

$$\boxed{g(x) = ce^{kx}}$$

deve ser *linearizada* para podermos usar a técnica de minimização vista aqui.

  - Aplicando logaritmos a ambos os lados da equação, vem

$$\ln g(x) = \ln c + kx$$

e, usando a mudança de variáveis

$$Y = \ln y\,, X = x, a_0 = \ln c\,, a_1 = k,$$

podemos então escrever

$$Y = a_0 + a_1 X$$

a qual representa um ajuste linear para os pontos

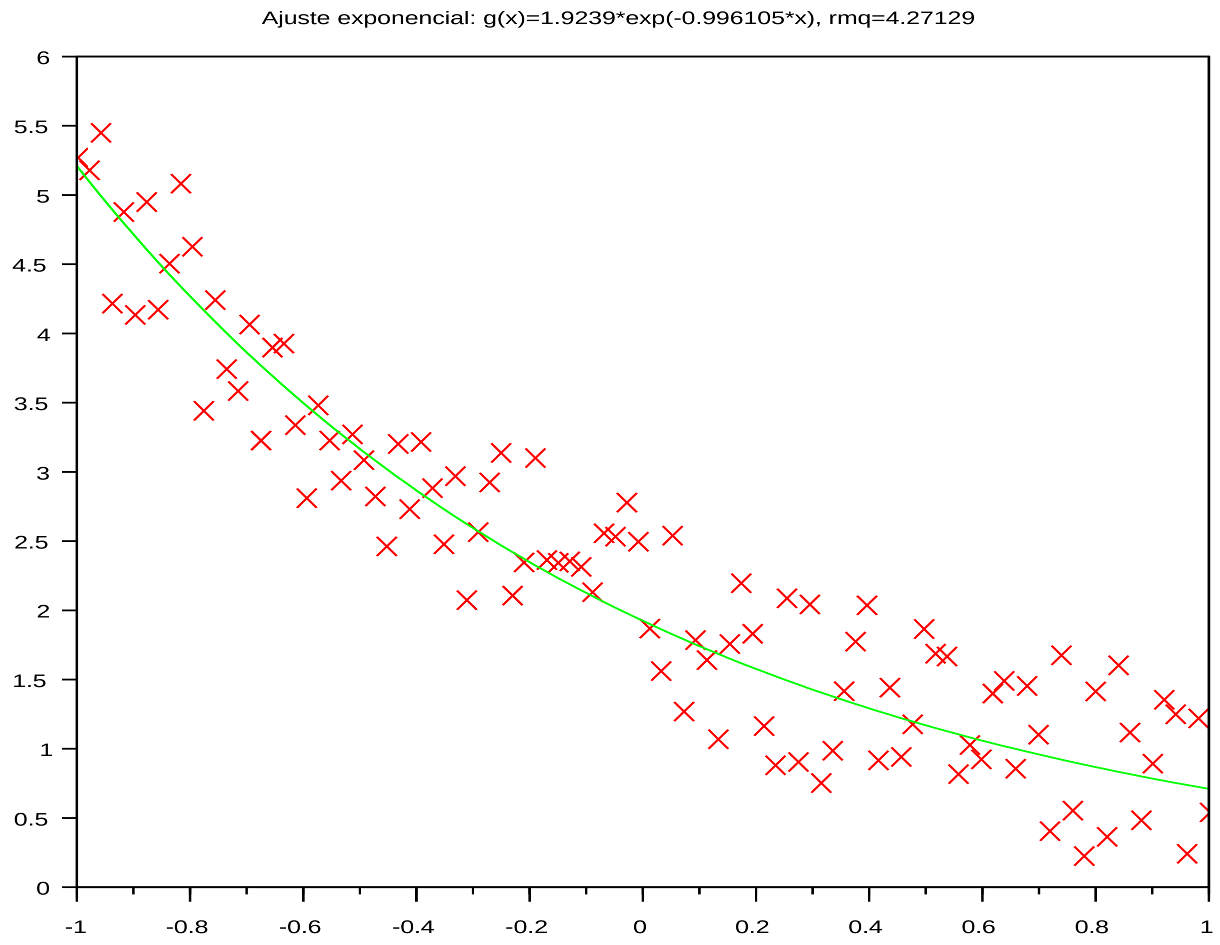
$$(X_i, Y_i) = (x_i, \ln y_i).$$

- Ajuste exponencial
  - Os coeficientes da curva de ajuste são obtidos resolvendo-se o sistema

$$\begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} {x_i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} \ln y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i \ln y_i \end{bmatrix},$$

    sujeito à condição $y_i > 0, \forall i$.
  - Uma vez obtidos a_0 e a_1, calcula-se $c = e^{a_0}, k = a_1$, definindo assim os parâmetros da curva de ajuste exponencial.

O exemplo a seguir mostra a curva de ajuste exponencial para um conjunto de $n = 100$ pontos:



Ajuste de curvas

- Ajuste exponencial
  - O ajuste exponencial pode ser calculado através do seguinte procedimento:

```
proc ajuste_exponencial(entrada: n,x,y; saida: c,k)
  ! Monta o sistema
  H(1,1):= n+1
  H(1,2):= 0 ; H(2,2):= 0 ; b(1):= 0 ; b(2):= 0
  para i:=0 até n faça
    log_y:= log(y(i)) ! OBS.: y(i)>0
    H(1,2):= H(1,2)+x(i)
    H(2,2):= H(2,2)+x(i)*x(i)
    b(1):= b(1)+log_y
    b(2):= b(2)+x(i)*log_y
  fim para
  H(2,1):= H(1,2)
  ! Resolve o sistema (H)*a=b, obtendo a_0 e a_1
  a:= resolve(H,b)
  c:= exp(a(0))
  k:= a(1)
end proc
```

Observe a similaridade com a subrotina ajuste_linear*!*

- Ajuste potencial
  - A função de ajuste potencial

$$\boxed{g(x) = cx^k}$$

deve igualmente ser linearizada, como no caso do ajuste exponencial.

  - Aplicando logaritmos a ambos os lados da equação, vem

$$\ln g(x) = \ln c + k \ln x$$

e, usando a mudança de variáveis

$$Y = \ln y\,, X = \ln x\,, a_0 = \ln c\,, a_1 = k,$$

podemos então escrever

$$Y = a_0 + a_1 X$$

a qual representa um ajuste linear para os pontos

$$(X_i, Y_i) = (\ln x_i\,, \ln y_i).$$

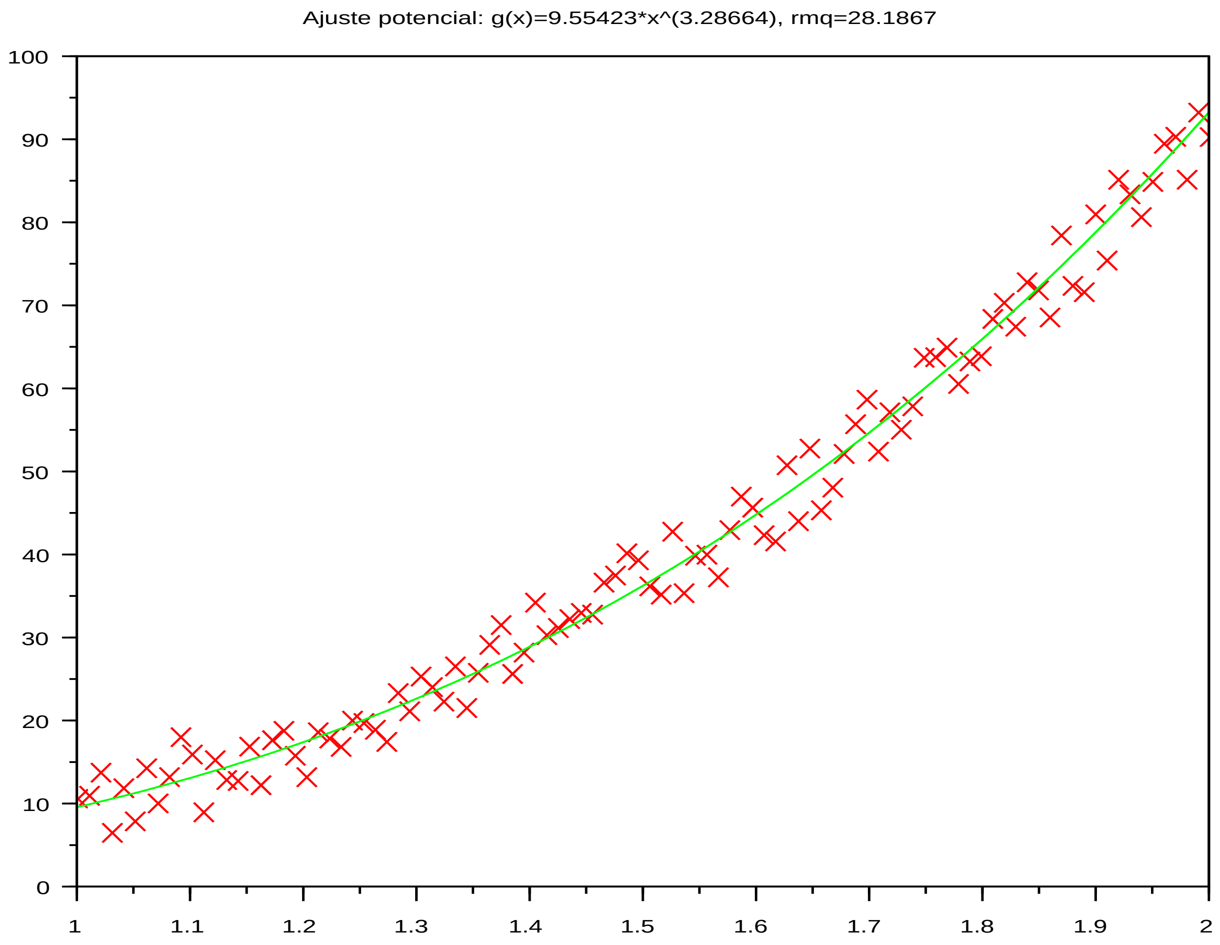
- Ajuste potencial
  - Os coeficientes da curva de ajuste são obtidos resolvendo-se o sistema

$$\begin{bmatrix} n+1 & \sum_{i=0}^{n} \ln x_i \\ \sum_{i=0}^{n} \ln x_i & \sum_{i=0}^{n} (\ln x_i)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} \ln y_i \\ \sum_{i=0}^{n} \ln x_i \ln y_i \end{bmatrix},$$

sujeito às condições $x_i > 0, y_i > 0, \forall i$

- Uma vez obtidos a_0 e a_1, calcula-se $c = e^{a_0}, k = a_1$, definindo assim os parâmetros da curva de ajuste exponencial.

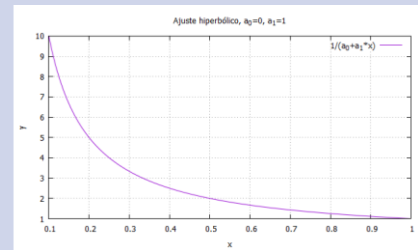
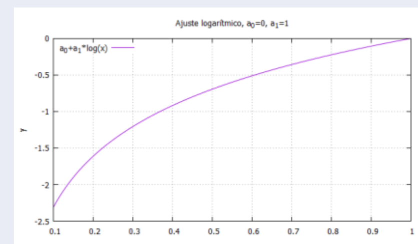
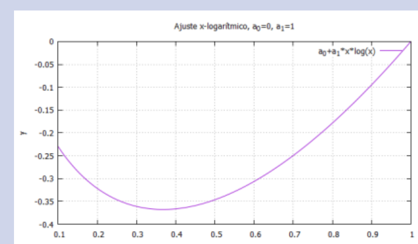
O exemplo a seguir mostra a curva de ajuste potencial para um conjunto de $n = 100$ pontos:



- Ajuste potencial
  - O ajuste potencial pode ser calculado através do seguinte procedimento:

```
proc ajuste_potencial(entrada: n,x,y; saida: c,k)
  ! Monta o sistema
  H(1,1):= n+1
  H(1,2):= 0 ; H(2,2):= 0 ; b(1):= 0 ; b(2):= 0
  para i:=0 até n faça
    log_x:= log(x(i)) ; log_y:= log(y(i)) ! OBS.: x(i)>0 e y(i)>0
    H(1,2):= H(1,2)+log_x
    H(2,2):= H(2,2)+log_x*log_x
    b(1):= b(1)+log_y
    b(2):= b(2)+log_x*log_y
  fim para
  H(2,1):= H(1,2)
  ! Resolve o sistema (H)*a=b, obtendo a_0 e a_1
  a:= resolve(H,b)
  c:= exp(a(0))
  k:= a(1)
end proc
```

- Outras curvas de ajuste
  - Procedimentos similares podem ser feitos, a fim de determinar as curvas de ajuste abaixo:

Curva de ajuste	Condição(ões) para uso	Gráfico
$g(x) = \frac{1}{a_0+a_1 x}$ (**hiperbólica**)	$y_i > 0 \mid 0 \leq i \leq n$	
$g(x) = a_0 + a_1 \log x$ (**logarítmica**)	$x_i > 0 \mid 0 \leq i \leq n$	
$g(x) = a_0 + a_1 x \log x$ (**x-logarítmica**)	$x_i > 0 \mid 0 \leq i \leq n$	

- Ajuste sinusoidal
  - Se os pontos tabulados apresentam uma distribuição cíclica ou periódica, semelhante a uma curva sinusoidal, pode-se buscar ajustar os pontos à curva

$$\boxed{g(x) = A\sin\big(f(x-\varphi)\big) + K}$$

onde:

- K é a média aritmética das ordenadas;
- A é a amplitude máxima das ordenadas, corrigidas para o sistema de referência com centro $(0, K)$;
- f e φ são os parâmetros de ajuste.

- Ajuste sinusoidal
  - De forma a se calcular os parâmetros, escrevemos:

$$\frac{g(x)-K}{A} = \sin\big(f(x-\varphi)\big)$$

$$\sin^{-1}\left(\frac{g(x)-K}{A}\right) = f(x-\varphi)$$

$$\frac{1}{f}\sin^{-1}\left(\frac{g(x)-K}{A}\right) + \varphi = x$$

  - Introduzindo a variável $Y = \sin^{-1}\left(\frac{y-K}{A}\right)$, podemos escrever a equação anterior como $\frac{1}{f}Y + \varphi = x$,

    a qual é a equação de uma reta para os pares de pontos (Y_i, x_i).
  - Esse ajuste é um exemplo de ajuste *inverso*!

- Ajuste sinusoidal
  - Como novamente linearizamos o problema de ajuste, devemos efetuar a troca de variável, calculando inicialmente:

$$K = \bar{y}_i, A = \max_{0 \le i \le n} |y_i - K|, Y_i = \sin^{-1}\left(\frac{y_i - K}{A}\right)$$

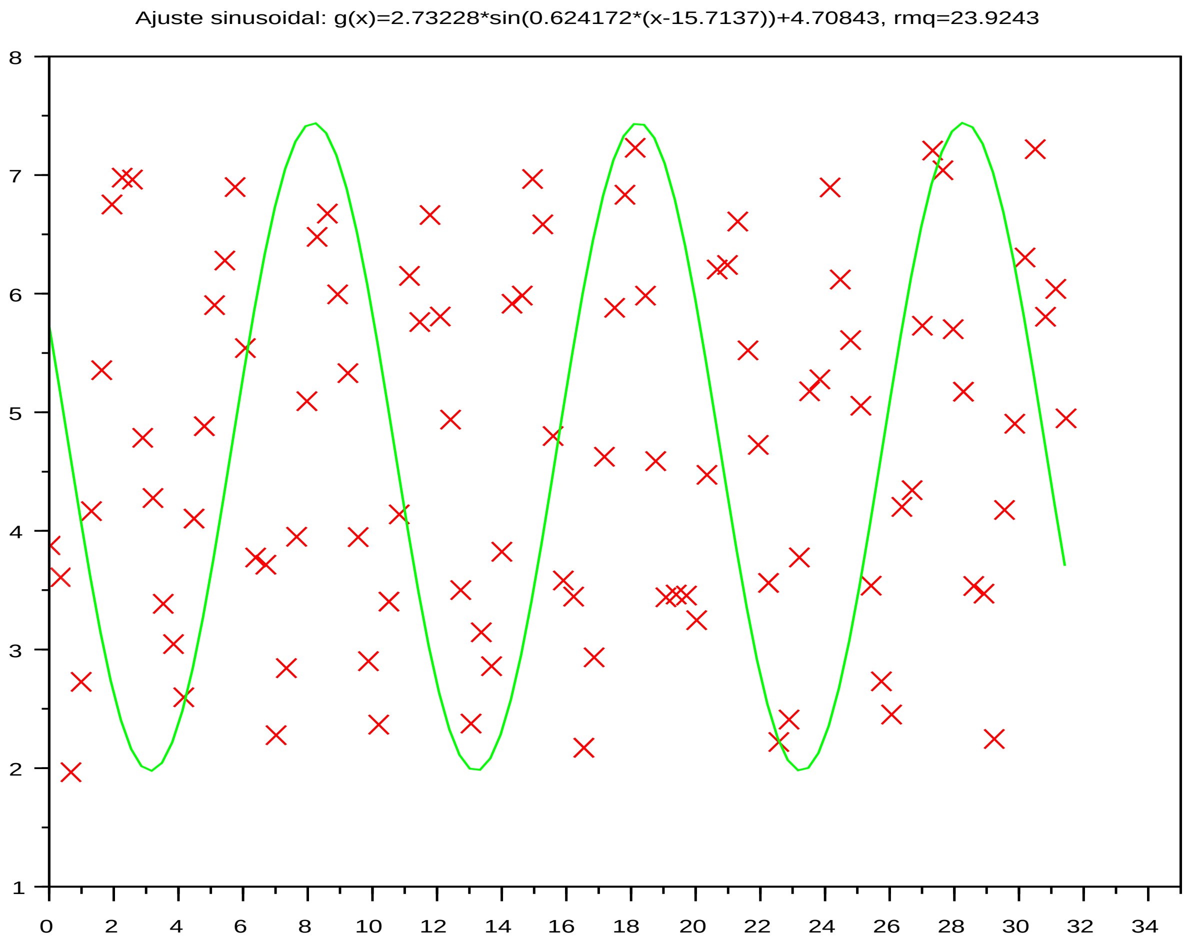
  - Após, resolve-se o problema de ajuste linear para os pares de pontos (Y_i, x_i), obtendo os coeficientes angular e linear da reta

$$x = a_0 + a_1 Y$$

  - Os parâmetros da curva de ajuste sinusoidal são dados por

$$f = \frac{1}{a_1}, \varphi = a_0$$

O exemplo a seguir mostra a curva de ajuste sinusoidal para um conjunto de $n = 100$ pontos:



Ajuste de curvas

- Ajuste sinusoidal
  - O ajuste sinusoidal pode ser calculado através do seguinte procedimento:

```
proc ajuste_sinusoidal(entrada: n,x,y; saida: K,A,f,phi)
  ! Calcula K
  K:= y(0)
  para i:=1 até n faça
    K:= K+y(i)
    Y(i):= y(i)
  fim para
  K:= K/(n+1)
  ! Calcula A, transladando y(i) para o eixo Y=K
  A:= -Inf
  para i:=0 até n faça
    Y(i):= Y(i)-K
    A:= max(A,abs(Y(i)))
  fim para
  ! Divide Y(i) por A e calcula asin((Y(I)-K)/A)
  para i:=0 até n faça
    Y(i):= asin(Y(i)/A)
  fim para
```

• Ajuste sinusoidal

```
! Monta o sistema
H(1,1):= n+1
H(1,2):= 0 ; H(2,2):= 0 ; b(1):= 0 ; b(2):= 0
para i:=0 até n faça
  H(1,2):= H(1,2)+Y(i)
  H(2,2):= H(2,2)+Y(i)**2
  b(1):= b(1)+x(i)
  b(2):= b(2)+x(i)*Y(i)
fim para
H(2,1):= H(1,2)
! Resolve o sistema (H)*a=b, obtendo a_0 e a_1
a:= resolve(H,b)
se abs(a(1))>0 então
  phi:= a(0)
  f:= 1.0/a(1)
senão
  phi:= []
  f:= []
fim se
end proc
```

- Como medir a qualidade de uma curva de ajuste?
  - Quando se experimentam diferentes curvas de ajuste para representar um mesmo conjunto de pontos, a escolha de qual curva deve ser escolhida pode ser feita com calculando-se o **resíduo de mínimos quadrados**:

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

  - Um exemplo do uso do RMQ é mostrado a seguir:

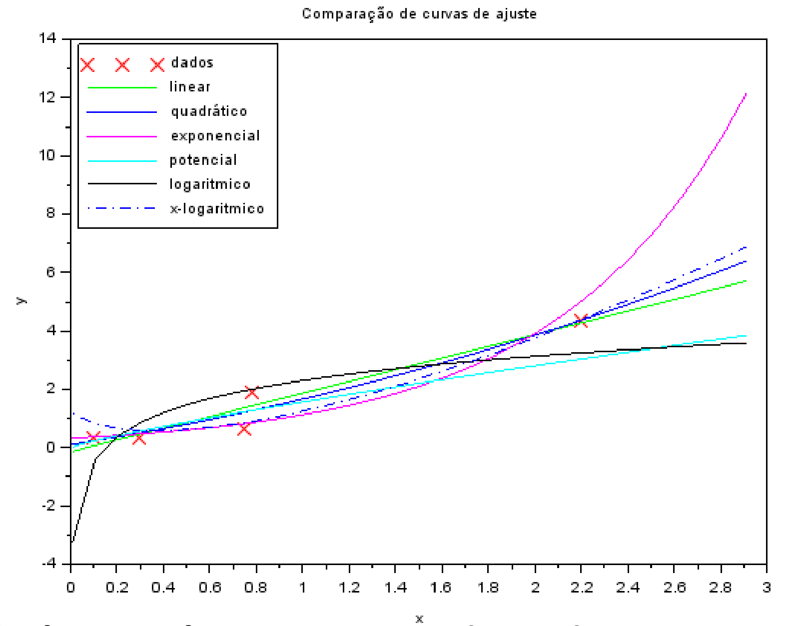
Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

- Como medir a qualidade de uma curva de ajuste?
  - Considere os pontos na tabela:

x	0,1	0,3	0,75	0,78	2,2
y	0,35	0,34	0,62	1,91	4,36

  - Calculando as curvas de ajuste mostradas no gráfico, os seus RMQs são os seguintes:

Ajuste	RMQ
Linear	0,947
Quadrático	0,900
Exponencial	1,260
Potencial	1,610
Logarítmico	1,990
X-logarítmico	1,170



  - Conclui-se que o ajuste quadrático é o mais indicado, evidenciado também no gráfico