Métodos Numéricos

Aproximação dos Mínimos Quadrados

Teresa Monteiro

Departamento de Produção e Sistemas

Escola de Engenharia

Universidade do Minho

tm@dps.uminho.pt

http://www.norg.uminho.pt/tm/

Objetivo

Dada uma função definida num intervalo $[a, b] \in \Re$ por uma tabela matemática com m pontos ($m =$ tamanho da amostra)

x_j	x_1	x_2	...	x_m
f_j	f_1	f_2	...	f_m

$a \leq x_1 < x_2 < \ldots < x_m \leq b$, ou por uma relação funcional $f(x)$, pretende-se calcular uma função aproximação simples, $M(x)$, que reflita, na generalidade, o comportamento dos dados.

Essa função $M(x)$ pode ser um polinómio de grau menor ou igual a n: $p_n(x)$.

O resíduo $r(x) = f(x) - M(x)$ mede a proximidade de $f(x)$ em relação a $M(x)$.

Sumário

- Introdução
- Modelo Linear
  a) Modelo polinomial
  b) Modelo não polinomial
- Avaliação de modelos
- Exercícios de aplicação

Modelo linear

No problema linear o objetivo é encontrar um modelo $M(x)$ do tipo

$$M(x) = c_0\Phi_0(x) + c_1\Phi_1(x) + \ldots + c_n\Phi_n(x).$$

Notar que este modelo é linear nos parâmetros $c_0, c_1, \ldots, c_n$.

As funções $\Phi_i, i = 0, \ldots, n$ são conhecidas.

Objetivo: calcular $c_i, i = 0, \ldots, n$ (**parâmetros do modelo**).

Modelo linear

Considere-se o seguinte conjunto de m equações lineares nas $n+1$ incógnitas (parâmetros do modelo) $c_i, i = 0, \ldots, n$:

$$c_0\Phi_0(x_j) + c_1\Phi_1(x_j) + \ldots + c_n\Phi_n(x_j) = f(x_j), \qquad j = 1, \ldots, m$$

- Se $m = n+1$ tem-se a técnica de interpolação

- Se $m > (n+1)$ o sistema tem mais equações do que incógnitas (é sobredeterminado) e o que se pretende é que as equações sejam verificadas aproximadamente.

Uma das técnicas para a resolução destes sistemas é a técnica dos mínimos quadrados.

Modelo dos Mínimos Quadrados

O objetivo é encontrar o modelo $M(x)$, que pode ser ou não um polinómio, de tal forma que se verifique:

$$\text{minimizar } < f - M(x), f - M(x) > \;\Leftrightarrow\; \text{minimizar } S$$

S é o somatório do quadrado dos resíduos:

$$S = \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - M(x_j)]^2$$

Nota: Produto interno entre dois vetores

$$\left\langle \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 \\ -4 \end{pmatrix} \right\rangle = 2 \times 3 + 1 \times (-4) = 2$$

Modelo Polinomial

Nesta secção vai aproximar-se a função $f(x)$ por um modelo polinomial, recorrendo a **polinómios ortogonais.**

O objetivo é calcular o seguinte polinómio (o modelo é um polinómio!):

$$p_n(x) = c_0P_0(x) + c_1P_1(x) + \ldots + c_nP_n(x)$$

Para minimizar $S = \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - p_n(x_j)]^2$

$$\sum_{j=1}^{m}[f(x_j)-p_n(x_j)]^2 = \sum_{j=1}^{m}[f(x_j)-c_0P_0(x_j)-c_1P_1(x_j)-\ldots-c_nP_n(x_j)]^2$$

vai derivar-se S em ordem aos parâmetros $(c_0, c_1, \ldots, c_n)$

$$S = \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - c_0 P_0(x_j) - c_1 P_1(x_j) - \ldots - c_n P_n(x_j)]^2$$

$$\text{min } (S) \Leftrightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial c_0} = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial c_1} = 0 \\ \ldots \\ \dfrac{\partial S}{\partial c_n} = 0 \end{cases}$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_0} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_0 P_0(x_j) - c_1 P_1(x_j) - \cdots - c_n P_n(x_j)\right) P_0(x_j) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_1} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_0 P_0\left(x_j\right) - c_1 P_1(x_j) - \cdots - c_n P_n(x_j)\right) P_1(x_j) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_n} = -2\sum_{j=1}^{m}\left(f_j - c_0P_0(x_j) - c_1P_1(x_j) - \cdots - c_nP_n(x_j)\right)P_n(x_j) = 0$$

Sistema das equações normais - **linear** nos parâmetros $c_0, c_1, \ldots, c_n$.

$$\left(\begin{array}{cccc|c}
\sum_{j=1}^{m} P_0^2(x_j) & \sum_{j=1}^{m} P_0(x_j)P_1(x_j) & \ldots & \sum_{j=1}^{m} P_0(x_j)P_n(x_j) & \sum_{j=1}^{m} f_jP_0(x_j) \\
\sum_{j=1}^{m} P_1(x_j)P_0(x_j) & \sum_{j=1}^{m} P_1^2(x_j) & \ldots & \sum_{j=1}^{m} P_1(x_j)P_n(x_j) & \sum_{j=1}^{m} f_jP_1(x_j) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\sum_{j=1}^{m} P_n(x_j)P_0(x_j) & \sum_{j=1}^{m} P_n(x_j)P_1(x_j) & \ldots & \sum_{j=1}^{m} P_n^2(x_j) & \sum_{j=1}^{m} f_jP_n(x_j)
\end{array}\right)$$

Polinómios Ortogonais

Se os polinómios $P_i(x)$ forem ortogonais,
$\langle P_i(x), P_k(x)\rangle = 0,\ i,k = 0,1,\ldots,n,\ \ i \neq k$:

$$\left(\begin{array}{cccc|c}
\sum_{j=1}^{m} P_0^2(x_j) & & & & \sum_{j=1}^{m} f_j P_0(x_j) \\
& \sum_{j=1}^{m} P_1^2(x_j) & & & \sum_{j=1}^{m} f_j P_1(x_j) \\
& & \ddots & & \vdots \\
& & & \sum_{j=1}^{m} P_n^2(x_j) & \sum_{j=1}^{m} f_j P_n(x_j)
\end{array}\right)$$

$$c_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} f_j P_i(x_j)}{\sum_{j=1}^{m} P_i(x_j)^2} \quad i = 0,\ldots,n.$$

Polinómios Ortogonais

Para o cálculo dos $P's$ utiliza-se a seguinte relação de recorrência que gera polinómios ortogonais:

$$P_{i+1}(x) = A_i(x - B_i)P_i(x) - C_iP_{i-1}(x), \quad i = 0, 1, \ldots, n-1$$

$P_0(x) = 1$ e $P_{-1}(x) = 0$ (por convenção)

$A_i = 1, \forall i$

$$B_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} x_j P_i(x_j)\, P_i(x_j)}{\sum_{j=1}^{m} P_i(x_j)\, P_i(x_j)}$$

$C_0 = 0$ e $C_i = \dfrac{\sum_{j=1}^{m} P_i(x_j)\, P_i(x_j)}{\sum_{j=1}^{m} P_{i-1}(x_j)\, P_{i-1}(x_j)}$

Modelo não polinomial

No caso do modelo não ser um polinómio ele tem a forma:

$$M(x) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x) + \ldots + c_n\Phi_n(x).$$

A ideia é a mesma:

$$\min S \Leftrightarrow \min \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - M(x_j)]^2$$

$$\min \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - c_1\Phi_1(x_j) - c_2\Phi_2(x_j) - \ldots - c_n\Phi_n(x_j)]^2$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial c_1} = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial c_2} = 0 \\ \vdots \\ \dfrac{\partial S}{\partial c_n} = 0 \end{cases}$$

Modelo não polinomial

Obtém-se o seguinte **sistema de equações normais**, linear nas incógnitas $c_1, c_2, \ldots, c_n$ que são os parâmetros do modelo:

$$\frac{\partial S}{\partial c_1} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_1 \Phi_1(x_j) - c_2 \Phi_2(x_j) - \cdots - c_n \Phi_n(x_j)\right) \Phi_1(x_j) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_2} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_1 \Phi_1(x_j) - c_2 \Phi_2(x_j) - \cdots - c_n \Phi_n(x_j)\right) \Phi_2(x_j) = 0$$

$$\ldots$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_n} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_1 \Phi_1(x_j) - c_2 \Phi_2(x_j) - \cdots - c_n \Phi_n(x_j)\right) \Phi_n(x_j) = 0$$

Modelo não polinomial

$$\left(\begin{array}{ccccc} \sum_{j=1}^{m} \phi_1^2(x_j) & \sum_{j=1}^{m} \phi_1\phi_2(x_j) & \ldots & \sum_{j=1}^{m} \phi_1(x_j)\phi_n(x_j) & \mid \sum_{j=1}^{m} f_j\phi_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^{m} \phi_2\phi_1(x_j) & \sum_{j=1}^{m} \phi_2^2(x_j) & \ldots & \sum_{j=1}^{m} \phi_2(x_j)\phi_n(x_j) & \mid \sum_{j=1}^{m} f_j\phi_2(x_j) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \mid \ldots \\ \sum_{j=1}^{m} \phi_n(x_j)\phi_1(x_j) & \sum_{j=1}^{m} \phi_n(x_j)\phi_2(x_j) & \ldots & \sum_{j=1}^{m} \phi_n^2(x_j) & \mid \sum_{j=1}^{m} f_j\phi_n(x_j) \end{array}\right)$$

A matriz dos coeficientes é quadrada e simétrica e o sistema linear, cujas incógnitas são os parâmetros $c_1, c_2, \ldots, c_n$ - deve ser resolvido por um método direto e estável (EGPP).

Quando se constroem dois modelos $M_1(x)$ e $M_2(x)$ no sentido dos mínimos quadrados para aproximar um função $f(x)$, como decidir qual o melhor dos dois?

Avaliação de modelos

Calcula-se:

$$S_1 = \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - M_1(x_j)]^2$$

$$S_2 = \sum_{j=1}^{m} [f(x_j) - M_2(x_j)]^2$$

O melhor modelo é aquele que apresentar o menor somatório do quadrado do resíduo (menor S).

Na tabela seguinte apresentam-se as vendas trimestrais de um produto que foi lançado no trimestre 1:

Trimestre (x)	1	2	3	4
Volume de vendas (V)	1.5	11	15.5	12.5

Usando a técnica dos mínimos quadrados construa um modelo quadrático para aproximar o volume de vendas.

Resolução:
O modelo quadrático é do tipo

$$p_2(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + c_2 P_2(x)$$

Têm que ser calculados todos os valores:
$P_0(x), P_1(x), P_2(x), c_0, c_1, c_2$.

Tamanho da amostra $m = 4$.
A construção de uma tabela para calcular os somatórios envolvidos é bastante útil.

Exercício 1 (modelo polinomial)

Os $P's$ são calculados através de

$$P_{i+1}(x) = A_i(x - B_i)P_i(x) - C_iP_{i-1}(x), \quad i = 0, 1, \ldots, n-1$$

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = (x - B_0) = (x - 2.5)$$

$$B_0 = \frac{\sum_{j=1}^{4} x_j}{\sum_{j=1}^{4} 1} = \frac{10}{4} = 2.5$$

Exercício 1 (modelo polinomial)

x_j	f_j	$P_1(x_j)$	$P_1^2(x_j)$	$x_j P_1^2(x_j)$	$f_j P_1(x_j)$	$P_2(x_j)$	$P_2^2(x_j)$
1	1.5	-1.5	2.25	2.25	-2.25	1	1
2	11	-0.5	0.25	0.5	-5.5	-1	1
3	15.5	0.5	0.25	0.75	7.75	-1	1
4	12.5	1.5	$2,25$	9	18.75	1	1
$\sum$ 10	40.5		5	12.5	18.75		4

Exercício 1 (modelo polinomial)

$$P_2(x) = (x - B_1)P_1(x) - C_1$$

$$B_1 = \frac{\sum_{j=1}^{4} x_j P_1^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_1^2(x_j)} = \frac{12.5}{5} = 2.5$$

$$C_1 = \frac{\sum_{j=1}^{4} P_1^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)} = \frac{5}{4} = 1.25$$

$$P_2(x) = (x - 2.5)^2 - 1.25$$

$$c_0 = \frac{\displaystyle\sum_{j=1}^{4} f_j P_0(x_j)}{\displaystyle\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)} = \frac{40.5}{4} = 10.125$$

$$c_1 = \frac{\displaystyle\sum_{j=1}^{4} f_j P_1(x_j)}{\displaystyle\sum_{j=1}^{4} P_1^2(x_j)} = \frac{18.75}{5} = 3.75$$

$$c_2 = \frac{\displaystyle\sum_{j=1}^{4} f_j P_2(x_j)}{\displaystyle\sum_{j=1}^{4} P_2^2(x_j)} = \frac{-12.5}{4} = -3.125$$

$$p_2(x) = 10.125 + 3.75(x - 2.5) - 3.125[(x - 2.5)^2 - 1.25]$$

Exercício 2 (modelo não polinomial)

Foram efetuadas várias medições do nível de água no Mar do Norte, $N(t)$, para diferentes valores de t conforme a seguinte tabela:

t (horas)	2	4	8	10
$N(t)$ (metros)	1.6	1.4	0.2	0.8

Aproxime a função $N(t)$, no sentido dos mínimos quadrados, por um modelo do tipo

$$M(t; c_1, c_2, c_3) = c_1 + c_2 sen(\frac{2\pi t}{p}) + c_3 \cos(\frac{2\pi t}{p})$$

(Nota: $p = 12$ horas representa uma aproximação da periodicidade do nível de água).

Exercício 2 (modelo não polinomial)

Resolução:
Mudança de variável: $t \to x$; cálculos em radianos.

O modelo é não polinomial do tipo:

$$M(x) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x) + c_3\Phi_3(x)$$

em que $\Phi_1(x) = 1$, $\Phi_2(x) = sen\frac{2\pi x}{12}$ e $\Phi_3(x) = \cos\frac{2\pi x}{12}$

Tamanho da amostra $m = 4$

O sistema das equações normais:

$$\left(\begin{array}{llll} \sum_{j=1}^{4}\phi_1^2(x_j) & \sum_{j=1}^{4}\phi_1(x_j)\phi_2(x_j) & \sum_{j=1}^{4}\phi_1(x_j)\phi_3(x_j) & \mid \sum_{j=1}^{4} f_j\phi_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^{4}\phi_2(x_j)\phi_1(x_j) & \sum_{j=1}^{4}\phi_2^2(x_j) & \sum_{j=1}^{4}\phi_2(x_j)\phi_3(x_j) & \mid \sum_{j=1}^{4} f_j\phi_2(x_j) \\ \sum_{j=1}^{4}\phi_3(x_j)\phi_1(x_j) & \sum_{j=1}^{4}\phi_3(x_j)\phi_2(x_j) & \sum_{j=1}^{4}\phi_3^2(x_j) & \mid \sum_{j=1}^{4} f_j\phi_3(x_j) \end{array}\right)$$

Exercício 2 (modelo não polinomial)

x_j	f_j	$sen(\frac{2\pi x_j}{12})$	$\left[sen(\frac{2\pi x_j}{12})\right]^2$	$\cos(\frac{2\pi x_j}{12})$	$\left[\cos(\frac{2\pi x_j}{12})\right]^2$	$sen(\frac{2\pi x_j}{12})\cos(\frac{2\pi x_j}{12})$
2	1.6	0.86603	0.750	0.5	0.25	0.433015
4	1.4	0.86602	0.750	-0.5	0.25	-0.433015
8	0.2	-0.86603	0.750	-0.5	0.25	0.433015
10	0.8	-0.86602	0.750	0.5	0.25	-0.433015
−	4	0	3	0	1	0

$f_j\, sen(\frac{2\pi x_j}{12})$	$f_j \cos(\frac{2\pi x_j}{12})$
1.385648	0.8
1.21248	-0.7
-0.173206	-0.1
-0.692816	0.4
1.732106	0.4

Exercício 2 (modelo não polinomial)

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & |4 \\ 0 & 3 & 0 & |1.732106 \\ 0 & 0 & 1 & |0.4 \end{bmatrix}$$

Por EGPP:

$c_1 = 1,\ c_2 = 0.57737,\ c_3 = 0.4$

O modelo pretendido é então

$$M(x) = 1 + 0.57737 sen \frac{2\pi x}{12} + 0.4 \cos \frac{2\pi x}{12}$$