Métodos Numéricos

(Aproximação de dados experimentais

Método dos Mínimos Quadrados)

Miguel Moreira
DMAT

1 Introdução

A determinação de funções que aproximem dados experimentais é muitas vezes necessário. Na prática, uma função aproximadora f é normalmente construída recorrendo à combinação de funções elementares f_i $(1 \leq i \leq n)$ através de parâmetros, cuja escolha permita obter o ajuste pretendido de f aos dados disponíveis.

Atendendo à sua simplicidade e sempre que a dinâmica implícita nos dados disponíveis sugira uma lei polinomial de variação, as funções polinomiais

$$f(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n,$$

são frequentemente escolhidas como funções aproximadoras.

Os conceitos seguintes estão na base da metodologia utilizada na construção da função aproximadora f.

Seja f uma função aproximadora e $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ dados que se supõem aproximados por f. Chama-se resíduo ao vector com m componentes

$$\bar{R} = (f(x_1) - y_1, f(x_2) - y_2, \ldots, f(x_m) - y_m).$$

O quadrado da sua norma Euclideana permite definir um erro E (da aproximação)

$$E = \left\|\bar{R}\right\|^2$$

que assume o valor zero quando f interpola exactamente os pontos dados. Note-se que

$$\left\|\bar{R}\right\|^2 = \bar{R}|\bar{R} = \bar{R}^T \bar{R}$$

em que "|" representa a operação de produto interno Euclideano e $\bar{R}^T$ representa o vector transposto do vector $\bar{R}$.

A escolha dos parâmetros a_0, a_1, ..., a_n tais que

$$f(x) = a_0 f_1(x) + \cdots + a_n f(x)$$

constitui uma aproximação que minimize o erro $E = \left\|\bar{R}\right\|^2$ (ou que minimize simplesmente a norma Euclideana do resíduo,$\left\|\bar{R}\right\|$) designa-se **método dos mínimos quadrados**.

2 Aproximação de dados experimentais por rectas

Suponha-se que os dados $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ traduzem uma relação linear entre as variáveis x_j e y_j. Nesta situação a função aproximadora que melhor representará a relação referida será da forma

$$f(x) = a + bx.$$

Naturalmente a escolha dos parâmetros a e b deverá recaír sobre aqueles que tornam mínimo o quadrado da norma Euclidiana do resíduo $\bar{R}$,

$$\begin{aligned} E(a,b) &= \left\|\bar{R}\right\|^2 \\ &= \left\|(f(x_1) - y_1, f(x_2) - y_2, \ldots, f(x_m) - y_m)\right\|^2 \\ &= \sum_{j=1}^{m} (f(x_j) - y_j)^2 \\ &= \sum_{j=1}^{m} (a + bx_j - y_j)^2. \end{aligned} \tag{1}$$

É possível mostrar que o valor mínimo de $E = E(a,b)$ ocorre no seu ponto de estacionaridade (isto é no ponto em que as derivadas parciais de E se anulam). Assim, a e b poderão ser escolhidos de forma a anular $\frac{\partial E(a,b)}{\partial a}$ e $\frac{\partial E(a,b)}{\partial b}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(a,b)}{\partial a} &= 2\sum_{j=1}^{m} (a + bx_j - y_j) = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow am + b\sum_{j=1}^{m} x_j = \sum_{j=1}^{m} y_j \end{aligned} \tag{2}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(a,b)}{\partial b} &= 2\sum_{j=1}^{m} (a + bx_j - y_j)\, x_j = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow a\sum_{j=1}^{m} x_j + b\sum_{j=1}^{m} x_j^2 = \sum_{j=1}^{m} x_j y_j \end{aligned} \tag{3}$$

As equações (2) e (3), cuja solução (a,b) se procura, podem escrever-se na forma matricial seguinte

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^{m} x_j \\ \sum_{j=1}^{m} x_j & \sum_{j=1}^{m} x_j^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{m} y_j \\ \sum_{j=1}^{m} x_j y_j \end{bmatrix}. \tag{4}$$

O sistema de equações anteriores é designado normalmente por **sistema de equações normais**.

Exemplo 1 Determinar a equação da recta que melhor aproxima os pontos $(0,0)$, $(0.5,0.6)$ e $(1,1.2)$.

Não é difícil verificar que o sistema de equações normais cuja solução se procura é

$$\begin{bmatrix} 3 & 1.5 \\ 1.5 & 1.25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.8 \\ 1.5 \end{bmatrix}.$$

Assim, $a = 0$ e $b = 1.2$ o que permite concluír que $f(x) = 1.2x$. ■

3 Aproximação de dados experimentais por um polinómio de grau n

Na situação descrita na secção anterior um certo número de dados (bidimensionais) são aproximados por uma recta (polinómio de grau 1). Naturalmente a opção de aproximação dos dados referidos por uma recta pode não ser razoável.

A metodologia a seguir para determinar o polinómio f de grau $n > 1$,

$$f(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

que melhor aproxima os dados disponíveis $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$, é em tudo semelhante à utilizada anteriormente, bastando para tal escolher os parâmetros a_0, a_1, $\ldots$, a_n que minimizem o quadrado da norma Euclidiana do resíduo $E(a_0, a_1, \ldots, a_n)$.

Pode mostrar-se que os parâmetros a escolher são soluções do sistema de equações normais seguintes

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^m x_j & \cdots & \sum_{j=1}^m x_j^n \\ \sum_{j=1}^m x_j & \sum_{j=1}^m x_j^2 & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{j=1}^m x_j^n & \cdots & \cdots & \sum_{j=1}^m x_j^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m y_j \\ \sum_{j=1}^m x_j y_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^m x_j^n y_j \end{bmatrix}. \quad (5)$$

A utilização desta metodologia pressupõe que o conjunto de pontos a aproximar traduza uma relação polinomial entre as variáveis o que nem sempre acontece.

Por outro lado, a ideia de procurar obter melhores aproximações recorrendo à utilização de polinómios de maior grau tem como inconveniente a possibilidade de ocorrência de oscilações indesejáveis do polinómio aproximador.

O frequente mau condicionamento (determinante quase nulo) da matriz dos coeficientes da equação (5) é um problema com que frequentemente se depara e que dificulta a determinação rigorosa dos coeficientes polinomiais procurados.

No caso de se pretender aproximar um conjunto de pontos por um polinómio do tipo anterior, sabendo à partida que certos coeficientes devem ser nulos, é possível mostrar que o sistema de equações normais que permitem determinar os restantes coeficientes é constituído pelo sistema de equações que resulta de se removerem as linhas da equação matricial (5) e as colunas da matriz dos coeficientes, associadas aos coeficientes que se sabem ser nulos.

Exemplo 2 Sabendo que o polinómio do segundo grau que aproxima os pontos

$$(1, 1.5)\,,\ (2, 3)\ \text{ e }\ (3, 8)\,,$$

deve passar pela origem, determine-o.

Pretende-se determinar a curva $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ que melhor aproxima os pontos indicados sabendo que a mesma deve passar pela origem, isto é sabendo que $a_0 = 0$.

A solução deste sistema passa pela resolução da equação matricial

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^m x_j & \sum_{j=1}^m x_j^2 \\ \sum_{j=1}^m x_j & \sum_{j=1}^m x_j^2 & \sum_{j=1}^m x_j^3 \\ \sum_{j=1}^m x_j^2 & \sum_{j=1}^m x_j^3 & \sum_{j=1}^m x_j^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m y_j \\ \sum_{j=1}^m x_j y_j \\ \sum_{j=1}^m x_j^2 y_j \end{bmatrix}$$

à qual se elimina a linha correspondente ao coeficiente que se sabe ser zero (neste caso 1^a linha) e a coluna com o mesmo número (neste caso 1) da matriz dos coeficientes, resultando

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m x_j^2 & \sum_{j=1}^m x_j^3 \\ \sum_{j=1}^m x_j^3 & \sum_{j=1}^m x_j^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m x_j y_j \\ \sum_{j=1}^m x_j^2 y_j \end{bmatrix}.$$

Como, $\sum_{j=1}^m x_j^2 = 14$, $\sum_{j=1}^m x_j^3 = 36$, $\sum_{j=1}^m x_j^4 = 98$, $\sum_{j=1}^m x_j y_j = 31.5$ e $\sum_{j=1}^m x_j^2 y_j = 85.5$, obtemos

$$\begin{bmatrix} 14 & 36 \\ 36 & 98 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 31.5 \\ 85.5 \end{bmatrix},$$

cuja solução é $(a_1, a_2) = (0.118\,42, 0.828\,95)$.

Assim, o polinómio procurado é

$$f(x) = 0.118\,42x + 0.828\,95x^2. \blacksquare$$

4 Aproximação de dados que traduzem uma lei exponencial

Suponha-se agora que um certo conjunto de dados bidimensionais (x_1, y_1), ..., (x_m, y_m) traduzem um lei exponencial do tipo

$$f(x) = ae^{bx}.$$

Como determinar os parâmetros a e b que tornem f uma boa aproximação dos dados referidos? A aplicação pura e simples da metodologia seguida nas secções anteriores baseada na minimização do quadrado da norma Euclidiana do resíduo

$$E(a, b) = \sum_{j=1}^{m} \left(ae^{bx_j} - y_j \right)^2,$$

conduz-nos às seguintes equações não lineares, de difícil resolução em geral,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(a,b)}{\partial a} &= 2\sum_{j=1}^{m} e^{bx_j} \left(ae^{bx_j} - y_j \right) = 0, \\ \frac{\partial E(a,b)}{\partial b} &= 2\sum_{j=1}^{m} ax_j e^{bx_j} \left(ae^{bx_j} - y_j \right) = 0. \end{aligned}$$

Nesta situação é habitual *linearizar* previamente a função aproximadora $f(x) = ae^{bx}$,

$$z = \ln f(x) = \ln a + bx,$$

e determinar a recta $z = \alpha + \beta x$ (com $\alpha = \ln a$ e $\beta = b$) que melhor aproxima os dados $(x_1, \ln y_1) \ldots (x_m, \ln y_m)$, recorrendo à metodologia descrita na secção 2. Uma vez determinados α e β os parâmetros a e b ficam imediatamente determinados:

$$a = e^{\alpha} \text{ e } b = \beta.$$

Exemplo 3 Sabendo que os pontos $(0, 0.9)$, $(1, 2.5)$ e $(2, 9)$ traduzem uma lei exponencial do tipo $f(x) = ae^{bx}$. Determine os coeficientes a e b da curva exponencial que melhor os aproxima.

A solução deste problema consiste em linearizar previamente a função aproximadora $f(x) = ae^{bx}$ aplicando a função logaritmo neperiano a ambos os membros: $\ln f(x) = \ln a + bx$. Repare-se que fazendo $z = \ln f(x)$, $\alpha = \ln a$ e $\beta = b$ a função $z = \alpha + \beta x$ já é uma função linear.

Nesta nova situação devemos determinar os coeficientes α e β da recta $z = \alpha + \beta x$ que melhor aproxima os dados

$$\begin{aligned} (0, \ln 0.9) &\approx (0, -0.10536) = (x_1, z_1)\,, \\ (1, \ln 2.5) &\approx (1, 0.91629) = (x_2, z_2)\,, \\ (2, \ln 9) &\approx (2, 2.1972) = (x_3, z_3)\,. \end{aligned}$$

Sabendo que $m = 3$, $\sum_{j=1}^{m} x_j = 3$, $\sum_{j=1}^{m} x_j^2 = 5$, $\sum_{j=1}^{m} z_j \approx 3.0081$ e $\sum_{j=1}^{m} x_j z_j \approx 5.3107$ e que α e β são soluções da equação matricial

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{j=1}^{m} x_j \\ \sum_{j=1}^{m} x_j & \sum_{j=1}^{m} x_j^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{m} z_j \\ \sum_{j=1}^{m} x_j z_j \end{bmatrix},$$

facilmente se deduz

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.14857 \\ 1.1512 \end{bmatrix}.$$

Então, $a = e^{\alpha} \approx e^{-0.14857} \approx 0.861\,94$ e $b = \beta \approx 1.1512$ o que permite concluír que $f(x) = 0.861\,94 e^{1.1512x}$. ■

5 Um pouco mais sobre aproximação de dados

Como foi referido, atendendo à sua simplicidade e sempre que a dinâmica implícita nos dados disponíveis sugira uma lei polinomial de variação, as funções polinomiais $f(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$ são frequentemente escolhidas como funções aproximadoras. Tal opção conduz-nos à necessidade de determinar os coeficientes do polinómio aproximador satisfaça o objectivo pretendido. Procedimento este, equivalente à determinação dos coeficientes

$$a_0, a_1, \ldots, a_n$$

da combinação linear dos vectores linearmente independentes do conjunto

$$\left\{1, x, x^2, \ldots, x^n\right\}$$

tais que $f(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$ minimize o quadrado da norma Euclideana do resíduo, isto é, à escolha (de acordo com o critério referido) da função aproximadora $f(x)$ no seio do conjunto (subspaço vectorial gerado)

$$P_n[x] = \left\langle 1, x, x^2, \ldots, x^n \right\rangle.$$

Em termos genéricos nada nos impede de escolhermos a função aproximadora num subspaço vectorial gerado outras funções elementares linearmente independentes

$$\langle f_0(x), f_1(x), f_2(x), \ldots, f_n(x)\rangle$$

cuja combinação linear **traduza mais apropriadamente a lei de variação implícita nos dados disponíveis.** Desta forma, se $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ representarem os dados disponíveis, poderemos como anteriormente, determinar os coeficientes $a_0, a_1, \ldots, a_n$ de

$$f(x) = a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \cdots + a_n f_n(x),$$

de forma a minimizar o quadrado da norma Euclidiana do resíduo

$$E(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \|(f(x_1) - y_1, f(x_2) - y_2, \ldots, f(x_m) - y_m)\|^2.$$

Esta metodologia conduzir-nos-á à obtenção das já referidas equações normais cuja solução permitirá achar os coeficientes pretendidos. Como se referiu na introdução, este método de aproximação de dados é conhecido por **método dos mínimos quadrados.**

Exemplo 4 Suponha que $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ podem ser adequadamente aproximados por uma função do tipo $f(x) = a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x)$. Determine as equações normais correspondentes utilizando a metodologia sugerida anteriormente.

Comecemos por observar que

$$\begin{aligned}
E(a_0, a_1) &= \sum_{j=1}^{m} (a_0 f_0(x_j) + a_1 f_1(x_j) - y_j)^2 \Rightarrow \\
\frac{\partial E(a_0, a_1)}{\partial a_0} &= 2\sum_{j=1}^{m} (a_0 f_0(x_j) + a_1 f_1(x_j) - y_j) f_0(x_j) \text{ e} \\
\frac{\partial E(a_0, a_1)}{\partial a_1} &= 2\sum_{j=1}^{m} (a_0 f_0(x_j) + a_1 f_1(x_j) - y_j) f_1(x_j).
\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(a_0,a_1)}{\partial a_0} &= 0 \Rightarrow a_0 \sum_{j=1}^{m} f_0(x_j) f_0(x_j) + a_1 \sum_{j=1}^{m} f_0(x_j) f_1(x_j) = \\
&= \sum_{j=1}^{m} f_0(x_j) y_j \text{ e} \\
\frac{\partial E(a_0,a_1)}{\partial a_1} &= 0 \Rightarrow a_0 \sum_{j=1}^{m} f_0(x_j) f_1(x_j) + a_1 \sum_{j=1}^{m} f_1(x_j) f_1(x_j) = \\
&= \sum_{j=1}^{m} f_1(x_j) y_j,
\end{aligned}$$

isto é

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m f_0(x_j) f_0(x_j) & \sum_{j=1}^m f_0(x_j) f_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^m f_0(x_j) f_1(x_j) & \sum_{j=1}^m f_1(x_j) f_1(x_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m f_0(x_j) y_j \\ \sum_{j=1}^m f_1(x_j) y_j \end{bmatrix}. \blacksquare$$

Em linguagem matricial, a determinação dos coeficientes $a_0, a_1, \ldots, a_n$ que melhor se ajustem

$$f(x) = a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \cdots + a_n f_n(x)$$

aos dados $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$, é realizada, como temos vindo a fazer, minimizando

$$\left\|\bar{R}\right\|^2 = \|AC - Y\|^2$$

com

$$A = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) & f_2(x_1) & \ldots & f_n(x_1) \\ f_0(x_2) & \ldots & \ldots & \ldots & f_n(x_2) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ f_0(x_m) & \ldots & \ldots & \ldots & f_n(x_m) \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \ldots \\ a_n \end{bmatrix} \text{ e } Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_m \end{bmatrix}.$$

Vamos verificar agora que as equações normais também podem ser facilmente obtidas recorrendo ao formalismo matricial apresentado.

Reparemos que

$$
\begin{aligned}
\left\|\bar{R}\right\|^2 &= \|AC - Y\|^2 = \|Y - AC\|^2 \\
&= (Y - AC) \,|\, (Y - AC) \\
&= (Y - AC)^T (Y - AC) \\
&= Y^T Y - Y^T AC - C^T A^T Y + C^T A^T AC \\
&= C^T A^T AC - 2C^T A^T Y + Y^T Y \\
&= F(C)
\end{aligned}
$$

e que a derivada de F relativamente a C na direcção U se pode definir como

$$\frac{dF_U}{dC} = \lim_{t \to 0} \frac{F(C + tU) - F(C)}{t} \tag{6}$$

com $t \in \mathbb{R} \backslash \{0\}$ e U um vector com a mesma dimensão do vector C e diferente do vector nulo.

Derivando, a expressão obtida para $\left\|\bar{R}\right\|^2$, em ordem a C, na direcção U e igualando a zero, obtemos sucessivamente

$$
\begin{aligned}
\frac{dF_U}{dC} &= \lim_{t \to 0} \frac{F(C + tU) - F(C)}{t}, \text{ com } t \in \mathbb{R} \text{ e } U \in \mathbb{R}^{n+1} \\
&= \lim_{t \to 0} \frac{(C + tU)^T A^T A (C + tU) - 2(C + tU)^T A^T Y + Y^T Y}{t} \\
&\quad - \frac{C^T A^T AC - 2C^T A^T Y + Y^T Y}{t} \\
&= \lim_{t \to 0} \frac{tU^T A^T AC + C^T A^T AtU + U^T A^T At^2 U - 2tU^T A^T Y}{t} \\
&= U^T A^T AC + C^T A^T AU - 2U^T A^T Y = 0 \\
&= 2U^T A^T AC - 2U^T A^T Y.
\end{aligned}
$$

Assim, $\frac{dF_U}{dC} = 0$ equivale a $U^T \left(A^T AC\right) = U^T \left(A^T Y\right)$, ou seja, a

$$A^T AC = A^T Y. \tag{7}$$

A equação matricial (7) constitui, como se pode verificar, o já conhecido sistema de equações normais cuja resolução em ordem a C permite obter os coeficientes procurados

$$C = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}.$$

Esta formulação tem a vantagem de permitir de uma forma directa construir as equações normais cuja resolução é necessária para aplicar o método dos mínimos quadrados na construção de uma função aproximadora com as características indicadas.

Repare-se que para resolver a equação matricial (7) basta determinar a matriz inversa da matriz quadrada $A^T A$ (porquê?).

Exemplo 5 Suponha que $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ podem ser adequadamente aproximados por uma função do tipo $f(x) = a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x)$. Determine as equações normais correspondentes utilizando a formulação matricial.

Seja

$$A = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) \\ \cdots & \cdots \\ f_0(x_m) & f_1(x_m) \end{bmatrix}, C = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} \text{ e } Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}.$$

As equações normais são $A^T A C = A^T Y$,

$$\begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) \\ \cdots & \cdots \\ f_0(x_m) & f_1(x_m) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) \\ \cdots & \cdots \\ f_0(x_m) & f_1(x_m) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) \\ \cdots & \cdots \\ f_0(x_m) & f_1(x_m) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

isto é

$$\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m f_0(x_j) f_0(x_j) & \sum_{j=1}^m f_0(x_j) f_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^m f_0(x_j) f_1(x_j) & \sum_{j=1}^m f_1(x_j) f_1(x_j) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^m f_0(x_j) y_j \\ \sum_{j=1}^m f_1(x_j) y_j \end{bmatrix}. \blacksquare$$

Nem sempre as equações normais têm solução já que a matriz $A^T A$ nem sempre é invertível. No entanto é possível mostrar que se as colunas da matriz A forem linerarmente independentes a matriz $A^T A$ é invertível.

5.1 Aferição da aproximação conseguida

A aferição da aproximação obtida entre os dados $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$ e a função aproximadora pode realizar-se por inspecção do resíduo $\bar{R}$, verificando se este não tem componentes muito diferentes umas das outras (ou todas muito grandes em valor absoluto).

O valor da norma Euclidiana do resíduo

$$\|(f(x_1) - y_1, f(x_2) - y_2, \ldots, f(x_m) - y_m)\|$$

(ou do seu quadrado),

$$\|(f(x_1) - y_1, f(x_2) - y_2, \ldots, f(x_m) - y_m)\|^2$$

representam igualmente critérios naturais para a estimativa da aproximação conseguida.

Quando a estimativa dos erros experimentais Δy_j (associados à determinação de cada y_j) estiver disponível é possível utilizar o chamado critério do Qui-quadrado. Este critério baseia-se na ideia de que a ordem de grandeza de cada uma das componentes do resíduo deve ser semelhante aos erros experimentais. Assim, definindo a quantidade

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^{m} \frac{[f(x_j) - y_j]^2}{\Delta y_j^2},$$

uma boa aproximação deve satisfazer a condição

$$\chi^2 = m - N,$$

em que m representa o número de pontos utilizados na aproximação e N o número de parâmetros na cosntrução da função aproximadora. No caso em que $f(x)$ é um polinómio de grau n, $N = n + 1$.

Exercícios propostos

Exercício 1 *Explique em que é que consiste o método dos mínimos quadrados.*

Exercício 2 *Considere os pontos* $(0,0)$, $(1,1)$, $(2,1)$ *e* $(3,2)$ *e o polinómio aproximador* $p(x) = 2x + 1$. *Cálcule o quadrado da norma Euclideana do resíduo.*

Exercício 3 *Enuncie as equações que permitem determinar a equação da recta que melhor aproxima os pontos anteriores e determine essa recta.*

Exercício 4 *Determine os coeficientes do polinómio de grau 2 que melhor aproxima os mesmos pontos.*

Exercício 5 *Suponha que os pontos* $(0,1)$, $(1,2)$ *e* $(2,9)$ *traduzem uma lei exponencial do tipo* $f(x) = ae^{bx}$. *Enuncie as equações que permitem determinar os coeficientes* a *e* b *da curva exponencial que melhor os aproxima.*

Exercício 6 *Determine a recta que melhor aproxima os pontos seguintes (Indique em cada caso o valor do quadrado da norma Euclideana do resíduo):*

1. $(0,0)$, $(1,1.5)$ *e* $(2,2)$;
2. $(0,1)$, $(1,-0.5)$, $(2,-2)$ *e* $(3,-3.5)$;
3. $\begin{array}{ccccccccccc} x_j = & 0 & 0.5 & 1 & 1.5 & 2 & 2.5 & 3 & 3.5 & 4 \\ y_j = & 4.9 & 8.5 & 14.2 & 17 & 22 & 26 & 32 & 39 & 45 \end{array}.$

Exercício 7 *Compare as aproximações lineares e quadráticas obtidas nas respostas às questões 3 e 4 e indique justificando qual é a melhor aproximação.*

Exercício 8 *Determine o polinómio do segundo grau* $p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ *que aproxima os pontos*

$$(1,1.5)\,,\ (2,3)\,,\ (3,8)\ \ e\ \ (4,10)\,,$$

sabendo que este deve apresentar o coeficiente a_1 *nulo.*

Exercício 9 *Sabendo que os pontos indicados traduzem uma lei exponencial do tipo* $f(x) = ae^{bx}$. *Determine os coeficientes* a *e* b *da curva exponencial que melhor os aproxima.*

1. $(0,1.1)$, $(1,2.9)$ *e* $(2,10)$;

2. $(-1, 0.6)$, $(0, 2.1)$ *e* $(1, 7)$.

Exercício 10 *Considere os pontos* $(0, 0)$ *e* $(1, 1)$ *e a função aproximadora* $f(x) = a_1\phi_1 + a_2\phi_2$, *com* $\phi_1 = x$ *e* $\phi_2 = x^2$. *Indique as equações normais do problema de aproximação dos pontos indicados pela função* f, *na sua forma matricial e em seguida determine* a_1 *e* a_2. *Comente o resultado que obteve.*

Exercício 11 *Considere as seguintes funções do vector* C: $F_1(C) = C^T A^T A C$, $F_2(C) = -2C^T A^T Y$ *e* $F_3(C) = Y^T Y$. *Determine as derivadas das funções vectoriais anteriores relativamente a* C *na direccção* U. *Suponha que* A *é uma matriz do tipo* $m \times n$, Y *e* C *são vectores do tipo* $m \times 1$ *e* $n \times 1$, *respectivamente.*

Exercício 12 *Considere a função aproximadora* $f(x) = a_1 e^x + a_2 \frac{1}{1+x}$ *e os pontos* $(0, 0)$, $(1, 1)$ *e* $(2, 1)$. *Enuncie as equações que permitem determinar os coeficientes que tornam* f *a melhor aproximação possível dos pontos indicados.*

Exercício 13 *Enuncie e descreva dois critérios que permitam aferir da boa aproximação entre os dados e uma função aproximadora.*

Laboratórios

5.2 Laboratório 1

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% apr.m
%
% Aproximação polinomial de grau 2
% por construção matricial
% das equações normais
%
% 22 de Dezembro de 2002
clear all; close all; clc;
% Entrada de dados D(i,1)=xi; D(i,2)=yi
D=[0 4.9; 0.5 8.5; 1 14.2; 1.5 17; 2 22; 2.5 26; 3 32; 3.5 39;
4 45];
m=length(D(:,1)); % Número de pontos de dados
% Aproximação dos pontos recorrendo às funções 1, x, x^2;
% Construção da matriz A
A=[ ones(m,1) D(:,1) D(:,1).^2];
% Const. das eq. nor.: A.'*AC=A.'Y
N=A.'*A;
B=A.'*D(:,2);
% Res.das equações normais e det. coef. C: C0, C1 e C2
C=inv(N)*B;
% Plot resultados
x1=(min(D(:,1)):0.01:max(D(:,1)));
y1=C(1)+C(2)*x1+C(3)*x1.^2;
plot(x1,y1,'r')
title('Aproximação polinomial')
xlabel('X')
ylabel('Y')
hold on
plot(D(:,1),D(:,2),'ko')
pause; close;
% Cálculo do quadrado da norma Euclideana do resíduo
E=sum((C(1)+C(2)*D(:,1)+C(3)*D(:,1).^2-D(:,2)).^2);
% impressão no display
clc
fprintf(' \n') ;
fprintf(' \n') ;
```

```
fprintf('APROXIMAÇÃO POLINOMIAL\n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf('COEFICIENTES:\n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf('C0 C1 C2\n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf(' %5.4f %5.4f %5.4f\n',C(1), C(2), C(3)) ;
fprintf(' \n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf('VALOR DO QUADRADO DA NORMA RESÍDUAL:\n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf('E\n') ;
fprintf(' \n') ;
fprintf('%5.4f\n',E) ;
```

Referências

[1] Apostol, Tom M., Calculus, Editorial Reverté, 1967.

[2] Conte, S. D. & Boor, C., Elementary Numerical Analysis, McGraw-Hill, 1980.

[3] Gerald, C. e Wheatley, P., Applied Numerical Analysis, Addison-Wesley, 1997.

[4] Lindfield, G. e Penny, J., Numerical Methods Using Matlab. Ellis Horwood, 1995.

[5] Kreyszig, Erwin., Advanced Engineering Mathematics (Cap. 17 e 18), Willey, 1999.

[6] Pina, Heitor, Métodos Numéricos, McGraw-Hill, 1995.

[7] Press, W., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. e Vetterling, W. T., Numerical Recipes-The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1989.