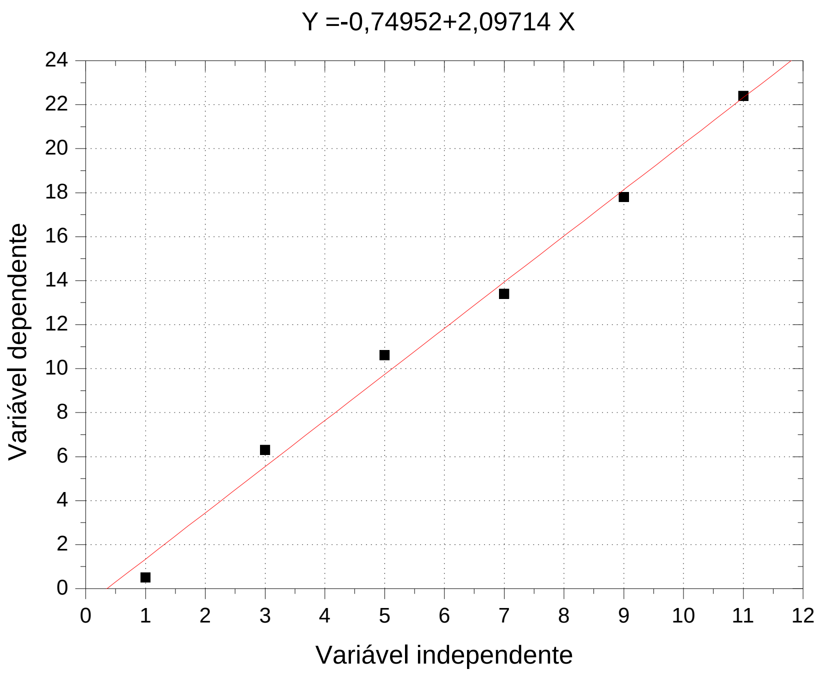
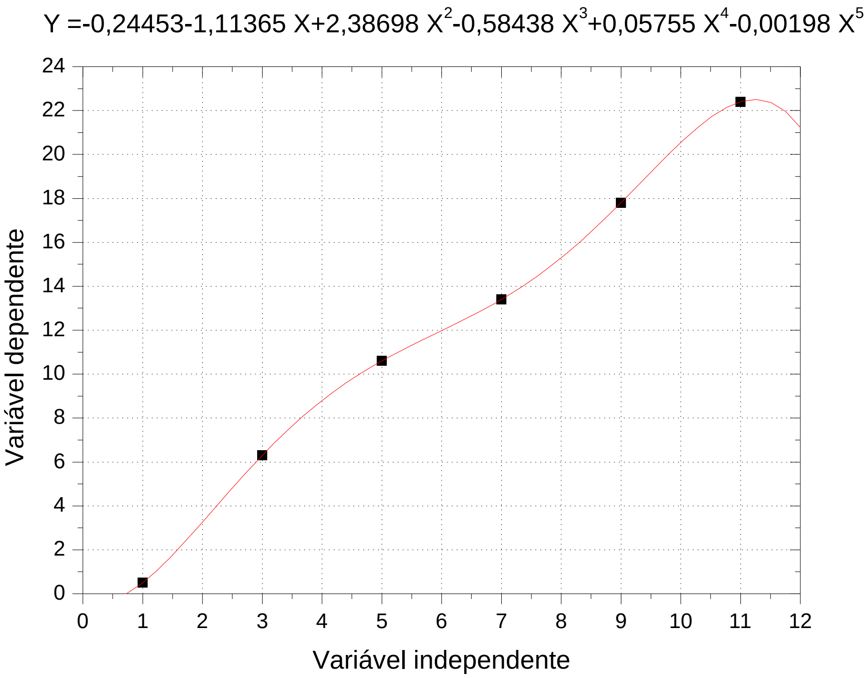
Ajuste de Curvas

Cálculo Numérico

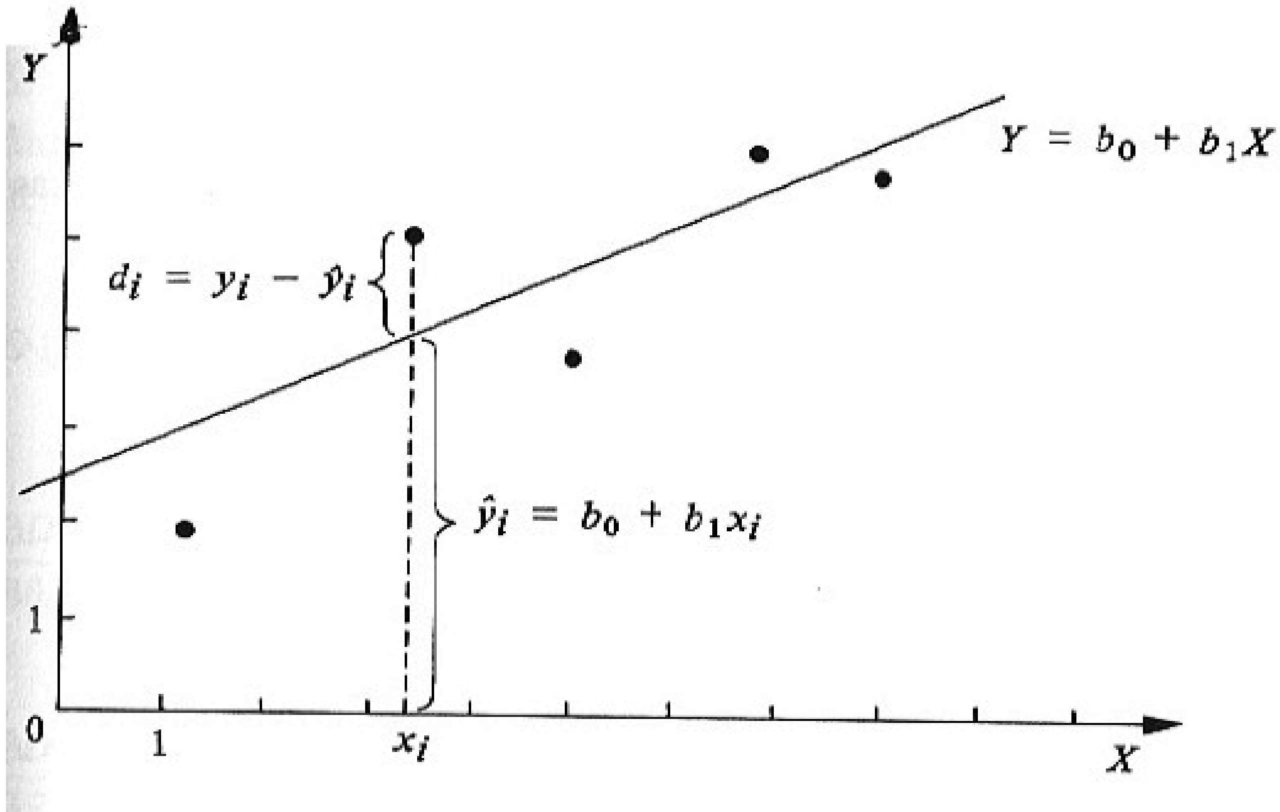
Prof. Vitor José Petry

➢ Observe a situação abaixo e avalie qual a curva mais adequada de acordo com os pontos mostrados.





Método de Mínimos Quadrados



$$S_r = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \hat{y}_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - b_0 - b_1x_i\right)^2$$

Método de Mínimos Quadrados

$$\frac{\partial S_r}{\partial b_0} = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - b_0 - b_1 x_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i - b_o.n - b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$b_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial b_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left[(y_i - b_0 - b_1 x_i)x_i\right] = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i - b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i x_i = 0$$

$$b_1 = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

com $\boldsymbol{y = b_o + b_1 x}$

Método de Mínimos Quadrados

A qualidade do ajuste linear é medida através do coeficiente de:

$$R^2 = \frac{\left[n \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i \right]^2}{\left[n \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2 \right] \left[n \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i \right)^2 \right]}$$

Onde $0 \leq R^2 \leq 1$. Quanto mais próximo de 1 estiver o valor de R^2, melhor será a aproximação.

Método de Mínimos Quadrados

Exemplo: Ajuste uma reta aos valores de x e y para os dados apresentados na tabela a seguir:

x_i	y_i
1	0,5
2	2,5
3	2,0
4	4,0
5	3,5
6	6,0
7	5,5

Ajuste Linear Múltiplo

- Quando temos mais de uma variável independente "x" para uma única variável dependente "y", devemos utilizar o ajuste linear múltiplo para relacionarmos todas elas.

- O Ajuste linear múltiplo parte do princípio de que é possível encontrar um polinômio tal que:

$$\bar{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_p x_p$$

O objetivo é encontrar os valores dos parâmetros b_0, b_1, b_2 ... b_p.

Ajuste Linear Múltiplo

Se considerarmos n pontos na forma $P(x_{1,i}, x_{2,i}, \ldots x_{p,i}, y_i)$ a aproximação requerida nestes pontos fica na forma matricial

$$\begin{bmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \vdots \\ \bar{y}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & . & . & . & x_{P1} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & . & . & . & x_{P2} \\ 1 & x_{13} & x_{23} & . & . & . & x_{P3} \\ . & . & . & & & & . \\ . & . & . & & & & . \\ . & . & . & & & & . \\ 1 & x_{1n} & x_{2n} & . & . & . & x_{Pn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_p \end{bmatrix}$$

Ou $\bar{Y} = X.B.$

Ajuste Linear Múltiplo

O erro cometido para cada ponto será dado por $\varepsilon_i = y_i - \overline{y}_i$, sendo o vetor de erros dado por $\mathrm{E} = Y - \bar{Y} = Y - XB$.

Fazendo

$$S = \sum_{i=1}^{n} {\varepsilon_i}^2 = \mathrm{E}^T\mathrm{E} = (Y - XB)^T(Y - XB)$$

Temos que $\frac{\partial S}{\partial B} = -2X^TY + 2X^TXB = 0$ o que implica em**:** $\boldsymbol{X^TXB} = \boldsymbol{X^TY}$, ou seja:

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} & \cdots & \sum x_{pi} \\ \sum x_{1i} & \sum x_{1i}.x_{1i} & \sum x_{2i}.x_{1i} & \cdots & \sum x_{pi}.x_{1i} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{1i}.x_{2i} & \sum x_{2i}.x_{2i} & \cdots & \sum x_{pi}.x_{2i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_{pi} & \sum x_{1i}.x_{pi} & \sum x_{2i}.x_{pi} & \cdots & \sum x_{pi}.x_{pi} \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1i}.y_i \\ \sum x_{2i}.y_i \\ \vdots \\ \sum x_{pi}.y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste Linear Múltiplo

O coeficiente de determinação pode ser obtido pela expressão:

$$R^2 = 1 - \frac{n\sum(y_i - \overline{y_i})^2}{n\sum y_i^2 - (\sum y_i)^2}$$

Onde y_i é o valor da variável dependente do ponto dado e $\overline{y_i}$ é o valor aproximado pelo ajuste.

<u>Exemplo:</u>

Ajustar os pontos da tabela abaixo à equação $Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2$.

i	1	2	3	4	5	6	7	8
x_{1i}	−1	0	1	2	4	5	5	6
x_{2i}	−2	−1	0	1	1	2	3	4
y_i	13	11	9	4	11	9	1	−1

Ajuste Polinomial

O ajuste polinomial pode ser considerado caso especial do ajuste multilinear, ou seja, para ajustar um conjunto de *n* pontos por um polinômio da forma:

$$\bar{y} = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \cdots + b_p x^p$$

basta fazermos $x_1 = x; x_2 = x^2; \ldots;\ x_p = x^p$ e aplicar no modelo de ajuste multilinear

$$\bar{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \cdots + b_p x_p$$

conforme descrito anteriormente.

Ajuste Polinomial

Assim, se considerarmos n pontos na forma $P(x_i, y_i)$ a a Matriz X fica:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \cdots x_1^p \\ 1 & x_2 & x_2^2 \cdots x_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots \quad \ddots \quad \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \cdots x_n^p \end{bmatrix}$$

Ajuste Polinomial

E o sistema fica da forma:

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^p \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{p+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \cdots & \sum x_i^{p+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^p & \sum x_i^{p+1} & \sum x_i^{p+2} & \cdots & \sum x_i^{2.p} \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i . y_i \\ \sum x_i^2 . y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^p . y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste Polinomial

Exemplo:

Ajustar os pontos da tabela abaixo à equação $Y = b_0 + b_1 X + b_2 X^2$.

i	1	2	3	4	5	6
x_i	−2	−1,5	0	1	2,2	3,1
y_i	−30,5	−20,2	−3,3	8,9	16,8	21,4

$$\begin{bmatrix} n & \Sigma x_i & \Sigma x_i^2 \\ \Sigma x_i & \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i^3 \\ \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i^3 & \Sigma x_i^4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma y_i \\ \Sigma x_i y_i \\ \Sigma x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Transformação de modelos não lineares em lineares

Em alguns casos, deparamos com modelos essencialmente não lineares, em que precisamos determinar seus parâmetros. Nestes casos, aplicamos algumas regras simples para transformar este modelo não linear em linear para poder ser trabalhado.

Exemplos de transformações:

$y=a.x^{b} \rightarrow \ln(y)=\ln(a)+b.\ln(x)$

$y=a.b^{x} \rightarrow \ln(y)=\ln(a)+\ln(b).x$

$y=a.e^{b.x} \rightarrow \ln(y)=\ln(a)+b.x$

$y=e^{(a+b.x1+c.x2)} \rightarrow \ln(y)=a+b.x1+c.x2$

Transformação de modelos não lineares em lineares

$$y = a.x_1^b.x_2^c \to \ln(y) = \ln(a) + b.\ln(x_1) + c.\ln(x_2)$$

$$y = \frac{1}{a + b.x_1 + c.x_2} \to \frac{1}{y} = a + b.x_1 + c.x_2$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{a + b.x_1 + c.x_2}} \to \ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = a + b.x_1 + c.x_2$$

Exemplo:

Ajustar os pontos abaixo à equação $Z = a \cdot e^{bX}$.

i	1	2	3	4	5
x_i	0,1	1,5	3,3	4,5	5,0
z_i	5,9	8,8	12,0	19,8	21,5

Este modelo pode ser transformado em

$lnZ = lna + bX$

Fazendo-se $Y = lnZ$, os dados tornam-se

i	1	2	3	4	5
x_i	0,1	1,5	3,3	4,5	5,0
y_i	1,77	2,17	2,48	2,99	3,07