Semana 15

CÁLCULO NUMÉRICO

Prof. Maria Clara Schuwartz Ferreira
mclarascferreira@gmail.com

INSTITUTO FEDERAL
Espírito Santo

Conteúdo da Semana 15

1. Ajuste de curvas
2. O método dos mínimos quadrados
3. Ajuste de uma reta
4. Ajuste linear geral
5. Ajuste com parâmetros não lineares

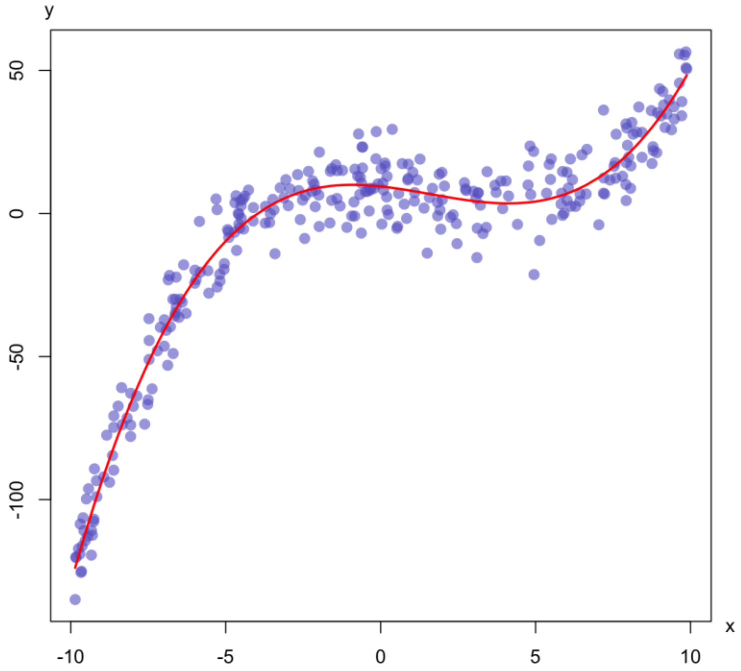
Ajuste de curvas

- Interpolação VS Extrapolação

- Interpolação: uma forma de se trabalhar com uma função definida por uma tabela de valores.

A interpolação pode não ser aconselhável quando:

- É preciso obter um valor em algum ponto fora do intervalo de tabelamento (extrapolação).
- Os valores tabelados são resultado de experimentos físicos (podendo conter erros inerentes que, em geral, não são previsíveis).

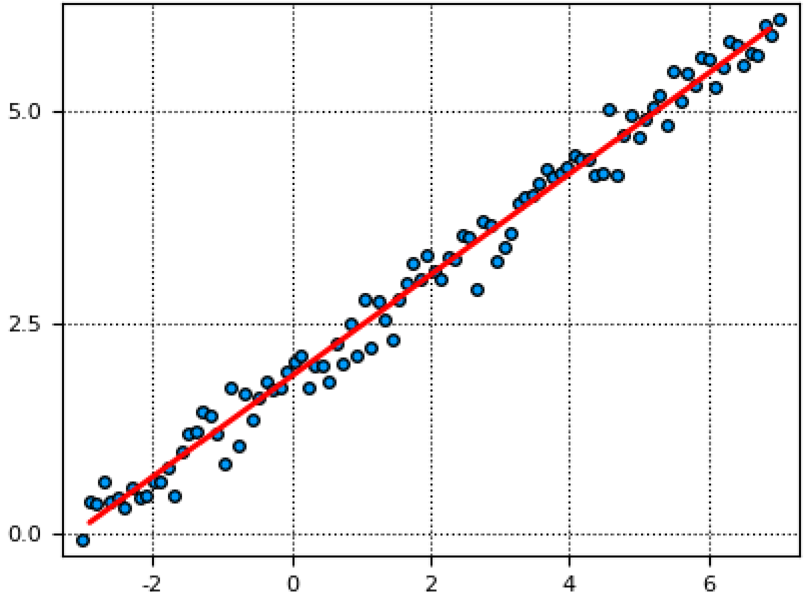


Ajuste de curvas

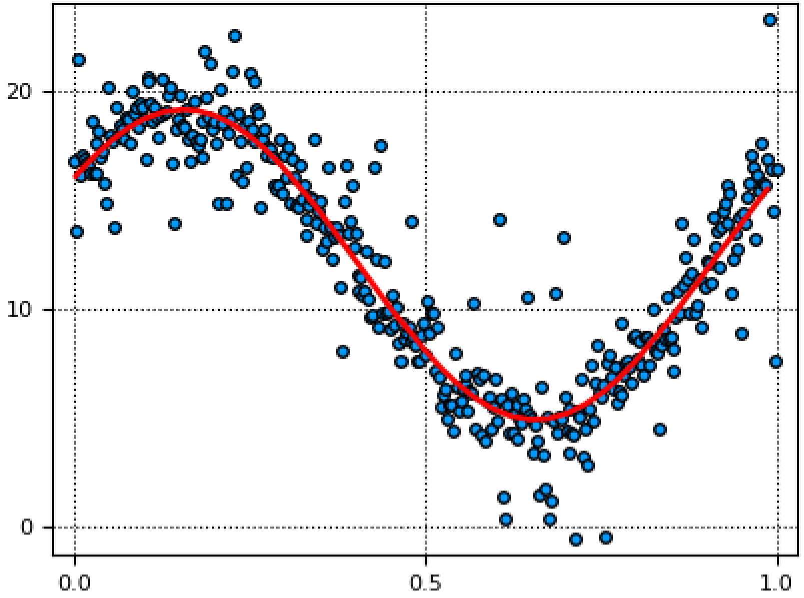
- Dado um conjunto de pontos $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, queremos encontrar a $\boxed{\text{melhor curva } f(x)}$ que se ajuste a este conjunto de dados.

?

- Diagrama de dispersão e ajuste de curva:



$$y \overset{?}{=} ax + b$$



$$y \overset{?}{=} a\text{sen}(px) + b\cos(px) + c$$

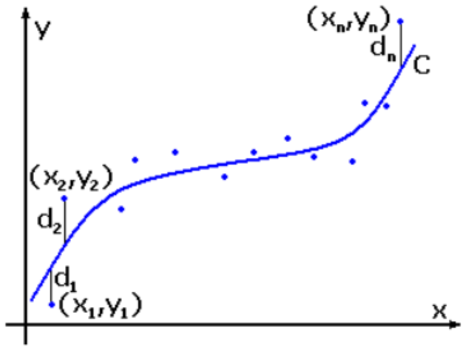
INSTITUTO FEDERAL
Espírito Santo

Conteúdo da Semana 15

1. Ajuste de curvas
2. O método dos mínimos quadrados
3. Ajuste de uma reta
4. Ajuste linear geral
5. Ajuste com parâmetros não lineares

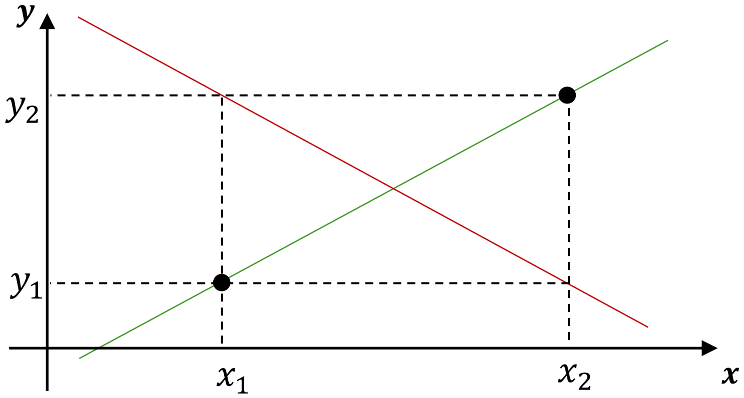
O método dos mínimos quadrados

- É necessário chegar a um consenso quanto ao melhor ajuste $f(x)$.



  - Apenas somar os desvios $d_k = f(x_k) - y_k$

  Minimizar $\sum d_k$



$$d_1 = f(x_1) - y_1 = y_1 - y_1 = 0$$
$$d_2 = f(x_2) - y_2 = y_2 - y_2 = 0$$

$$d_1 = f(x_1) - y_1 = y_2 - y_1$$
$$d_2 = f(x_2) - y_2 = y_1 - y_2$$
$$\Rightarrow \; d_1 + d_2 = 0$$

  - Somar os valores absolutos dos desvios d_k $\longrightarrow$ Minimizar $\sum |d_k|$

  - Somar os quadrados dos desvios

  $\boxed{\text{Minimizar } \mathrm{R} = \sum {d_k}^2}$ $\longleftarrow$ Método mínimos quadrados

  R é chamado de resíduo.

INSTITUTO FEDERAL
Espírito Santo

Conteúdo da Semana 15

1. Ajuste de curvas
2. O método dos mínimos quadrados
3. Ajuste de uma reta
4. Ajuste linear geral
5. Ajuste com parâmetros não lineares

Ajuste de uma reta

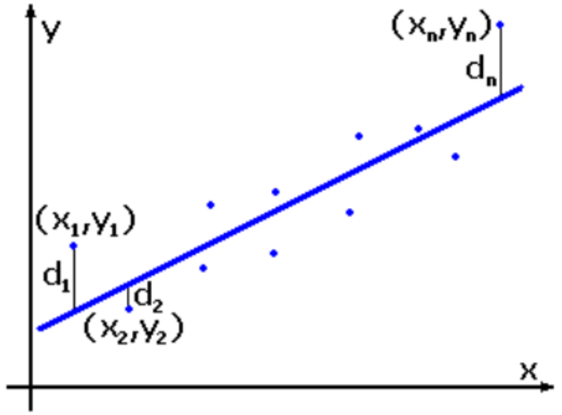
- Queremos determinar a reta de mínimos quadrados $f(x) = a_1 + a_2 x$ que aproxima, ou ajusta, o conjunto de pontos $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$

→ a_1 e a_2 são incógnitas a serem determinadas de maneira a minimizar $\mathrm{R} = \sum {d_k}^2$

$$d_k = f(x_k) - y_k \qquad \Rightarrow d_k = a_1 + a_2 x_k - y_k$$

$$\Rightarrow R(a_1, a_2) = \sum (a_1 + a_2 x_k - y_k)^2$$

→ Função nas variáveis a_1 e a_2.



O mínimo ocorre quando $\frac{\partial R}{\partial a_1} = \frac{\partial R}{\partial a_2} = 0$

$$\Rightarrow \frac{\partial R}{\partial a_1} = \sum 2(a_1 + a_2 x_k - y_k) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial R}{\partial a_2} = \sum 2x_k(a_1 + a_2 x_k - y_k) = 0$$

$$\rightarrow \begin{cases} a_1 \sum 1 + a_2 \sum x_k = \sum y_k \\ a_1 \sum x_k + a_2 \sum {x_k}^2 = \sum x_k y_k \end{cases}$$

Ajuste de uma reta

- Forma matricial do sistema:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} n & \sum x_k \\ \sum x_k & \sum x_k{}^2 \end{bmatrix}}_{M} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sum y_k \\ \sum x_k y_k \end{bmatrix}}_{w} \Rightarrow \boxed{a_1 = \frac{\sum x_k{}^2 \sum y_k - \sum x_k \sum x_k y_k}{n \sum x_k{}^2 - (\sum x_k)^2}} \quad \boxed{a_2 = \frac{n \sum x_k y_k - \sum x_k \sum y_k}{n \sum x_k{}^2 - (\sum x_k)^2}}$$

$$Ma = w$$

- Obs: Dado $V = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}$, $M = V^T V$ e $w = V^T y$

$$Ma = w \Rightarrow V^T V a = V^T y \Rightarrow a = (V^T V)^{-1} V^T y$$

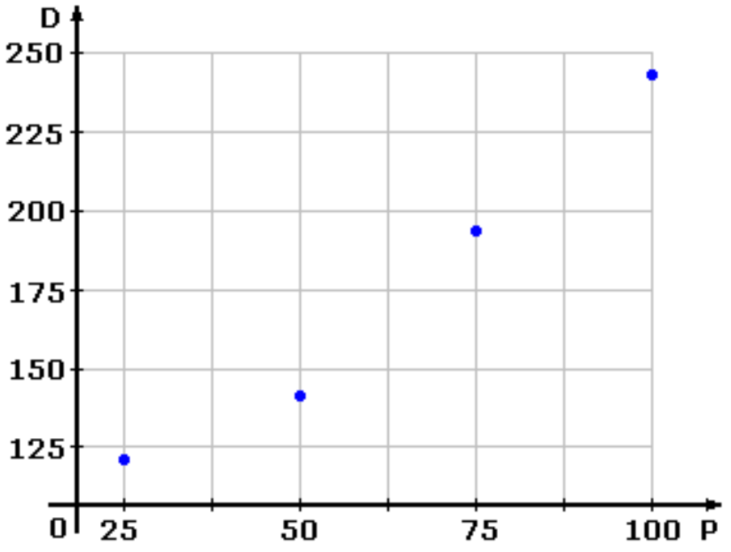
Ajuste de uma reta

- Exemplo: A dureza (HB) para aços comuns recozidos varia com a quantidade de perlita (um tipo de estrutura cristalina do aço) presente:

% de Perlita	25	50	75	100
Dureza (HB)	120	138	190	240

a) Obtenha um modelo matemático para descrever os dados medidos

b) Qual a dureza do material com 90% de Perlita?



a)

Observamos visualmente um comportamento linear da dureza D em relação a porcentagem de perlita P

Forma do modelo: $y = a_1 + a_2 x$

onde y é a dureza e x é a porcentagem de perlita.

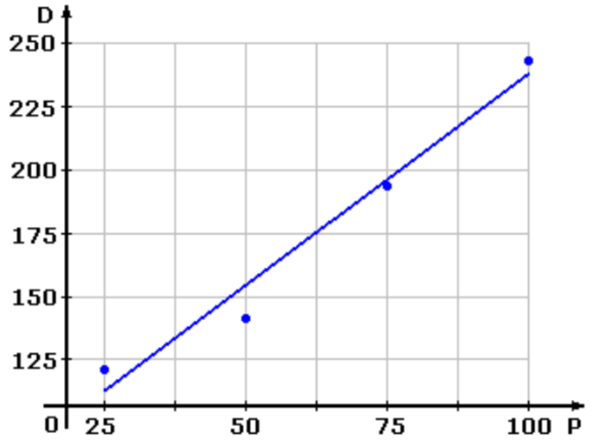
Ajuste de uma reta

					Σ
x (% de Perlita)	25	50	75	100	250
y (Dureza)	120	138	190	240	688
x^2	625	2500	5625	10000	18750
xy	3000	6900	14250	24000	48150

$$a_1 = \frac{\sum x^2 \sum y - \sum x \sum xy}{n \sum x^2 - (\sum x)^2} = \frac{18750(688) - 250.(48150)}{4(18750) - (250)^2} = 69$$

$$a_2 = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2} = \frac{4(48150) - 250.(688)}{4(18750) - (250)^2} = 1{,}648$$

$$\boxed{y = 69 + 1{,}648x}$$



b) Substituindo $P = 90$ em $(*)$ temos

$$D = 69 + 1{,}648 . 90 = 217{,}32$$

Conteúdo da Semana 15

1. Ajuste de curvas
2. O método dos mínimos quadrados
3. Ajuste de uma reta
4. $\boxed{\text{Ajuste linear geral}}$
5. Ajuste com parâmetros não lineares

INSTITUTO FEDERAL
Espírito Santo

Ajuste linear geral

- Dado o conjunto $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ e uma família de funções $\{f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)\}$, queremos determinar a função $f(x) = a_1 f_1(x) + \cdots + a_m f_m(x)$ que minimiza o resíduo $R(a_1, \dots, a_m) = \sum (f(x_k) - y_k)^2$.

- Obs: No caso de ajuste de uma reta que fizemos anteriormente a família de funções era $\{1, x\}$.

O mínimo para o resíduo ocorre quando $\frac{\partial R}{\partial a_k} = 0$ para $k = 1, \dots, m$

$$\Rightarrow \frac{\partial R}{\partial a_1} = \sum 2 f_1(x_k)(a_1 f_1(x_k) + \cdots + a_m f_m(x_k) - y_k) = 0$$

$$\vdots$$

$$\Rightarrow \frac{\partial R}{\partial a_m} = \sum 2 f_m(x_k)(a_1 f_1(x_k) + \cdots + a_m f_m(x_k) - y_k) = 0$$

Ajuste linear geral

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \sum (f_1(x_k))^2 & \cdots & \sum f_1(x_k) f_m(x_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum f_1(x_k) f_m(x_k) & \cdots & \sum (f_m(x_k))^2 \end{bmatrix}}_{M} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sum f_1(x_k) y_k \\ \vdots \\ \sum f_m(x_k) y_k \end{bmatrix}}_{w}$$

$$Ma = w$$

- **Obs1:** Dado $V = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ f_1(x_2) & \cdots & f_m(x_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & \cdots & f_m(x_n) \end{bmatrix}$, $M = V^T V$ e $w = V^T y$

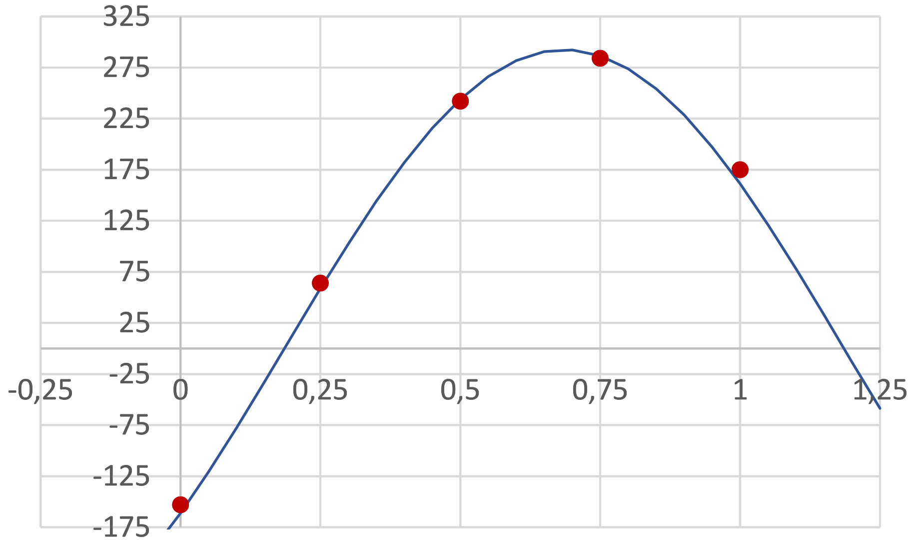
$$Ma = w \Rightarrow V^T V a = V^T y \Rightarrow \; a = (V^T V)^{-1} V^T y$$

- **Obs2:** Interpolação polinomial é o caso particular do ajuste linear para funções polinomiais $\{f_1(x), f_2(x), f_3(x), \ldots\} = \{1, x, x^2, \ldots\}$

Ajuste linear geral

- Exemplo: Encontre a função $f(x) = a_1 \operatorname{sen}(\pi x) + a_2 \cos(\pi x)$ que melhor se ajusta pelo critérios dos mínimos quadrados aos seguintes pontos dados

x	$0{,}00$	$0{,}25$	$0{,}50$	$0{,}75$	$1{,}00$
y	-153	64	242	284	175



$$y = 244{,}03658 \operatorname{sen}(\pi x) - 161{,}18783 \cos(\pi x)$$

$f_1(x) = \operatorname{sen}(\pi x)$ e $f_2(x) = \cos(\pi x)$

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = ?$$

$$V = \begin{bmatrix} \operatorname{sen}(0.\pi) & \cos(0.\pi) \\ \operatorname{sen}(0{,}25\pi) & \cos(0{,}25\pi) \\ \operatorname{sen}(0{,}5\pi) & \cos(0{,}5\pi) \\ \operatorname{sen}(0{,}75\pi) & \cos(0{,}75\pi) \\ \operatorname{sen}(\pi) & \cos(\pi) \end{bmatrix}$$

$$a = (V^T V)^{-1} V^T y$$

$$a = \begin{bmatrix} 244{,}03658 \\ -161{,}18783 \end{bmatrix}$$

INSTITUTO FEDERAL
Espírito Santo

Conteúdo da Semana 15

1. Ajuste de curvas
2. O método dos mínimos quadrados
3. Ajuste de uma reta
4. Ajuste linear geral
5. Ajuste com parâmetros não lineares

Ajuste com parâmetros não lineares

- Em alguns casos, a família de funções escolhidas pode ser não linear nos parâmetros, isto é, f não é da forma $f(x) = a_1 f_1(x) + \cdots + a_m f_m(x)$

  $\Rightarrow$ Resolver um sistema não linear

- Nestes casos é precisa efetuar uma "linearização" através de transformações convenientes.

- Exemplo: Encontre uma curva da forma $y = a_1 e^{a_2 x}$ que melhor ajusta os pontos $(1, 2)$, $(2, 3)$ e $(3{,}5)$.

$$f(x) = \ln y = \underbrace{\ln a_1}_{b_1} + \underbrace{a_2}_{b_2} x$$

$\Rightarrow$ Resolvemos o ajuste para $f(x) = \ln y = b_1 + b_2 x$ com os pontos: $(1, \ln 2)$, $(2, \ln 3)$ e $(3, \ln 5)$.

Ajuste com parâmetros não lineares

Modelo para $y = a_1 e^{a_2 x}$ com pontos $(1, 2)$, $(2, 3)$ e $(3{,}5)$.

Modelo para $f(x) = \ln y = b_1 + b_2 x$ com pontos $(1, \ln 2)$, $(2, \ln 3)$ e $(3, \ln 5)$.

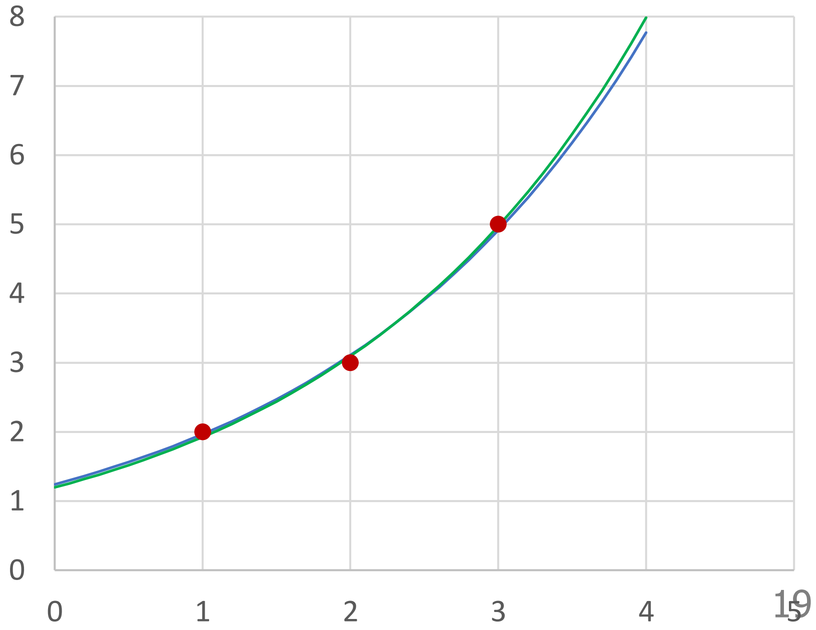
$\Rightarrow b_1 = 0{,}217442$ e $b_2 = 0{,}458145$

$\Rightarrow a_1 = 1{,}242890$ e $a_2 = 0{,}458145$

Obs: Estamos minimizando $\sum(\ln f(x_k) - \ln y_k)^2$ em vez de $\sum(f(x_k) - y_k)^2$

$\Rightarrow$ Os coeficientes obtidos a partir dessa linearização são aproximados

Se resolvêssemos o sistema não linear a solução seria $a_1 = 1{,}19789$ e $a_2 = 0{,}47438$.



Ajuste com parâmetros não lineares

- Tabela com algumas curvas e transformações para linearizar o ajuste:

Curva	Transformação	Problema linearizado
$y = a_1 e^{a_2 x}$	$f(x) = \ln y$	$f(x) = \ln a_1 + a_2 x$
$y = a_1 x^{a_2}$	$f(x) = \ln y$	$f(x) = \ln a_1 + a_2 \ln x$
$y = \dfrac{a_1}{a_2 + x}$	$f(x) = \dfrac{1}{y}$	$f(x) = \dfrac{a_2}{a_1} + \dfrac{1}{a_1} x$
$y = \sqrt{a_1 + a_2 x}$	$f(x) = y^2$	$f(x) = a_1 + a_2 x$

Semana 15 - Fim

CÁLCULO NUMÉRICO

Prof. Maria Clara Schuwartz Ferreira
mclarascferreira@gmail.com

INSTITUTO FEDERAL
Espírito Santo