Tabela 4.16 Produto iônico da água em função da temperatura.

(K_w é o produto iônico da água e t a temperatura (°C), conforme [21, Tabela II].)

i	t_i	$-\log_{10}(K_w)_i$
1	0	14,9435
2	5	14,7338
3	10	14,5346
4	15	14,3463
5	20	14,1669
6	25	13,9965
7	30	13,8330
8	35	13,6801
9	40	13,5348
10	45	13,3960
11	50	13,2617
12	55	13,1369
13	60	13,0171

Tabela 4.17 Escolha do modelo de $-\log_{10}(K_w)$ em função da temperatura.

(m é o modelo e T a temperatura em Kelvin ($T = 273{,}15 + t$).)

m	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4	$1-r^2$	σ^2
1	$4{,}2216\times10^{0}$	$2{,}9201\times10^{3}$				$8{,}58\times10^{-4}$	$3{,}65\times10^{-4}$
2	$-6{,}5127\times10^{1}$	$6{,}0342\times10^{3}$	$1{,}0335\times10^{1}$			$9{,}86\times10^{-7}$	$4{,}61\times10^{-7}$
3	$-7{,}1817\times10^{1}$	$6{,}2107\times10^{3}$	$1{,}1507\times10^{1}$	$-1{,}9400\times10^{-3}$		$9{,}83\times10^{-7}$	$5{,}11\times10^{-7}$
4	$3{,}5736\times10^{2}$	$-2{,}0656\times10^{3}$	$-7{,}0883\times10^{1}$	$2{,}7101\times10^{-1}$	$-1{,}5047\times10^{-4}$	$9{,}72\times10^{-7}$	$5{,}68\times10^{-7}$

Análise dos resultados

Pelos resultados de $1-r^2$ e σ^2 da Tabela 4.17, pode-se notar que a melhoria do modelo 2 em relação ao modelo 1 é significativa, pois tanto $1-r^2$ quanto a variância residual σ^2 reduziram. No entanto, essa melhoria não é percebida quando se usam os modelos 3 e 4, porque apesar de $1-r^2$ reduzir um pouco, o valor de σ^2 aumenta a partir do modelo 2. Portanto, o modelo 2

$$-\log_{10}(K_w) = -6{,}5127\times10^{1} + 6{,}0342\times10^{3}\frac{1}{T} + 1{,}0335\times10^{1}\log_e(T)$$

é o melhor, visto que consegue o mesmo nível de qualidade no ajuste usando um menor número de parâmetros.

4.7 Exercícios

Seção 4.1

Seja a tabela

i	x_i	y_i
1	0,5	5,1
2	1,2	3,2
3	2,1	2,8
4	3,5	1,0
5	5,4	0,4

4.1. Fazer o diagrama de dispersão.

4.2. Determinar o polinômio de grau 1 que passa pelo primeiro e segundo pontos e calcular o desvio D.

4.3. Achar o polinômio de grau 1 que passa pelo terceiro e quinto pontos e calcular D.

4.4. Encontrar a reta de quadrados mínimos usando os cinco pontos da tabela e calcular D.

4.5. Verificar qual dos três modelos acima (4.2, 4.3 e 4.4) é o melhor.

Seção 4.2

4.6. Dada a tabela, calcular o coeficiente de determinação r^2 do modelo $u = b_0 + b_1x$

i	x_i	y_i
1	1,4	4,2
2	2,1	2,3
3	3,0	1,9
4	4,4	1,1

4.7. Determinar a variância residual σ^2 do modelo acima.

4.8. Calcular o coeficiente de determinação e a variância residual do modelo linear $u = b_0 + b_1x$ a partir dos pontos da Tabela 4.5.

4.9. Usando os dados (Ano, Urbana) da Tabela 4.11, calcular o coeficiente de determinação e a variância residual do modelo $u = b_0 + b_1x$.

4.10. O que mede o coeficiente de determinação?

Seção 4.3

4.11. Achar a equação de quadrados mínimos $u = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ a partir dos pontos da tabela

i	x_{i1}	x_{i2}	y_i
1	−1	−2	13
2	0	−1	11
3	1	0	9
4	2	1	4
5	4	1	11
6	5	2	9
7	5	3	1
8	6	4	−1

4.12. Calcular os coeficientes do modelo $u = b_0 + b_1x + b_2x^2$ usando os pontos

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

4.13. Implementar, em qualquer linguagem de programação, o algoritmo de regressão linear múltipla e polinomial da Figura 4.5.

4.14. Determinar os parâmetros do modelo do Exercício 4.11 usando o programa implementado no Exercício 4.13.

4.15. Achar os coeficientes do modelo do Exercício 4.12 com o programa do Exercício 4.13.

Seção 4.4

4.16. Implementar a decomposição em valores singulares em uma linguagem de programação.

4.17. Usando a mesma linguagem do exercício anterior, implementar o algoritmo de regressão linear múltipla e polinomial via decomposição em valores singulares mostrado na Figura 4.7.

4.18. Resolver o Exercício 4.11 usando o programa do Exercício 4.17.

4.19. Resolver o Exercício 4.12 utilizando o programa do Exercício 4.17.