Interpolação e Ajuste de Curvas

Cálculo Numérico

Prof. Darci Luiz Savicki

2020

Aplicação

TABELA A.6 Propriedades Termofísicas da Água Saturada[a]

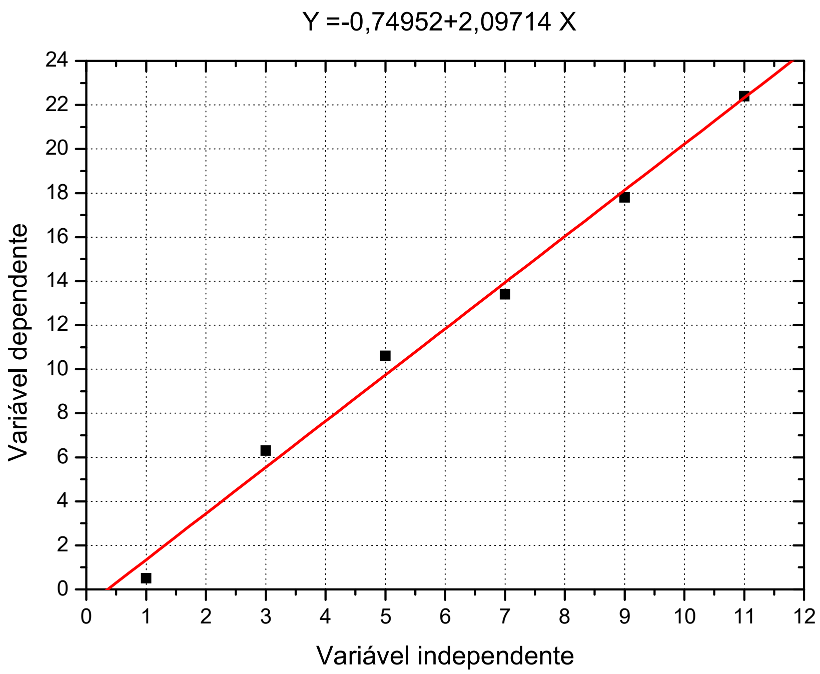
Temperatura, T (K)	Pressão, P (bar)[b]	Volume Específico (m³/kg) $v_f \cdot 10^3$	Volume Específico (m³/kg) v_g	Calor de Vaporização h_{fg} (kJ/kg)	Calor Específico (kJ/kg · K) $c_{p,f}$	Calor Específico (kJ/kg · K) $c_{p,g}$	Viscosidade (N · s/m²) $\mu_f \cdot 10^6$	Viscosidade (N · s/m²) $\mu_g \cdot 10^6$	Condutividade Térmica (W/m · K) $k_f \cdot 10^3$	Condutividade Térmica (W/m · K) $k_g \cdot 10^3$	Número de Prandtl Pr_f	Número de Prandtl Pr_g	Tensão Superficial, $\sigma_f \cdot 10^3$ (N/m)	Coeficiente de $\beta_f \cdot 10^6$ (K⁻¹)	Temperatura, T (K)
273,15	0,00611	1,000	206,3	2.502	4,217	1,854	1.750	8,02	569	18,2					
275	0,00697	1,000	181,7	2.497	4,211	1,855	1.652	8,09	574	18,3					
280	0,00990	1,000	130,4	2.485	4,198	1,858	1.422	8,29	582	18,6					
285	0,01387	1,000	99,4	2.473	4,189	1,861	1.225	8,49	590	18,9					
290	0,01917	1,001	69,7	2.461	4,184	1,864	1.080	8,69	598	19,3					
295	0,02617	1,002	51,94	2.449	4,181	1,868	959	8,89	606	19,5					
300	0,03531	1,003	39,13	2.438	4,179	1,872	855	9,09	613	19,6					
305	0,04712	1,005	29,74	2.426	4,178	1,877	769	9,29	620	20,1					
310	0,06221	1,007	22,93	2.414	4,178	1,882	695	9,49	628	20,4					
315	0,08132	1,009	17,82	2.402	4,179	1,888	631	9,69	634	20,7					
320	0,1053	1,011	13,98	2.390	4,180	1,895	577	9,89	640	21,0					
325	0,1351	1,013	11,06	2.378	4,182	1,903	528	10,09	645	21,3					
330	0,1719	1,016	8,82	2.366	4,184	1,911	489	10,29	650	21,7					
335	0,2167	1,018	7,09	2.354	4,186	1,920	453	10,49	656	22,0					
340	0,2713	1,021	5,74	2.342	4,188	1,930	420	10,69	660	22,3					
345	0,3372	1,024	4,683	2.329	4,191	1,941	389	10,89	668	22,6					
350	0,4163	1,027	3,846	2.317	4,195	1,954	365	11,09	668	23,0					
355	0,5100	1,030	3,180	2.304	4,199	1,968	343	11,29	671	23,3					
360	0,6209	1,034	2,645	2.291	4,203	1,983	324	11,49	674	23,7					
365	0,7514	1,038	2,212	2.278	4,209	1,999	306	11,69	677	24,1					
370	0,9040	1,041	1,861	2.265	4,214	2,017	289	11,89	679	24,5					
373,15	1,0133	1,044	1,679	2.257	4,217	2,029	279	12,02	680	24,8					
375	1,0815	1,045	1,574	2.252	4,220	2,036	274	12,09	681	24,9					
380	1,2869	1,049	1,337	2.239	4,226	2,057	260	12,29	683	25,4					
385	1,5233	1,053	1,142	2.225	4,232	2,080	248	12,49	685	25,8					
390	1,794	1,058	0,980	2.212	4,239	2,104	237	12,69	686	26,3					
400	2,455	1,067	0,731	2.183	4,256	2,158	217	13,05	688	27,2					
410	3,302	1,077	0,553	2.153	4,278	2,221	200	13,42	688	28,2					
420	4,370	1,088	0,425	2.123	4,302	2,291	185	13,79	688	29,8					
430	5,699	1,099	0,331	2.091	4,331	2,369	173	14,14	685	30,4					

Veja que as propriedades foram determinadas em função da temperatura.

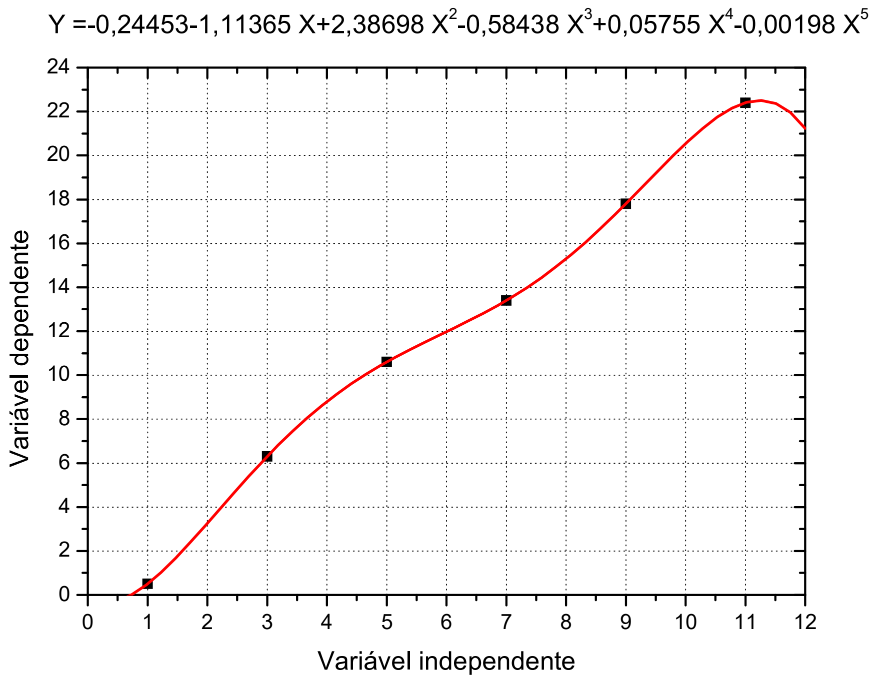
Mas o que fazemos se a temperatura de trabalho não está tabelada? Por exemplo, T=282K

Fonte:Incropera et al., "Fundamentos Transferência de Calor e de Massa", 6 ed., LTC Editora, 2008.

Ajuste x Interpolação



Ajuste de curvas (linear)



Interpolação ($P_5(x)$)

Ajuste de curvas x interpolação

- Ajuste: os dados exibem um grau significativo de erro ou "ruído". A curva ajustada representa a tendência geral dos dados.

- Interpolação: os dados são muito precisos e, assim, o ajuste de curvas deve passar diretamente por cada um dos pontos.

Mínimos Quadrados

- Minimização a diferença entre os dados e os pontos da curva ajustada, através da minimização da soma dos quadrados dos resíduos.

- Resíduos: diferença entre valores medidos e valores calculados pelo modelo ajustado.

Mínimos Quadrados

- Modelo linear: $y_{\text{mod}elo} = a_0 - a_1 x$

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{i,\text{medido}} - y_{i,\text{modelo}} \right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \left(a_0 + a_1 x_i \right) \right)^2$$

- Determinação dos coeficientes a_0 e a_1, exijimos que o erro mínimo quadrático seja mínimo.

- Ponto de mínimo: $\dfrac{\partial S_r}{\partial a_0} = 0 \ e \ \dfrac{\partial S_r}{\partial a_1} = 0$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right) = 0 \\ \dfrac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \left[\left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right) x_i \right] = 0 \end{cases}$$

- O sistema anterior pode ser reescrito na forma

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i & n \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

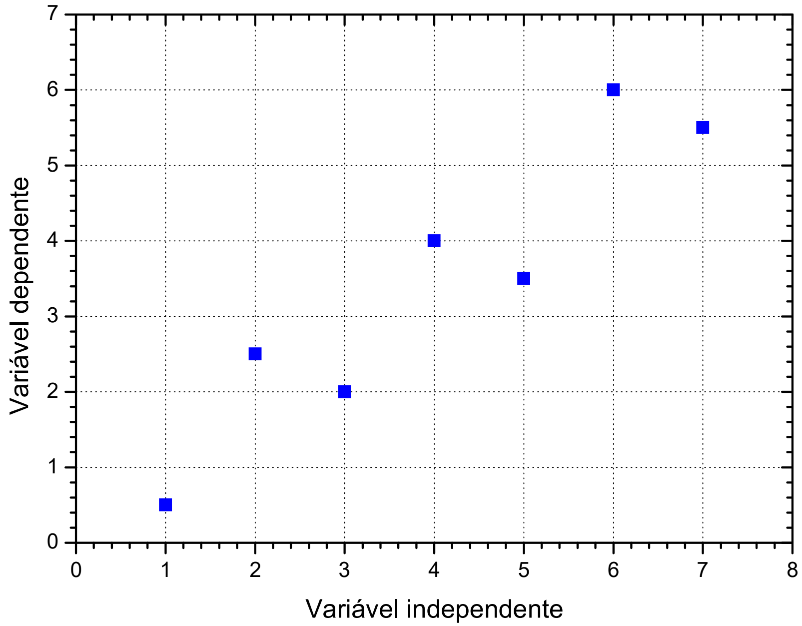
- A qualidade do ajuste é analisada com base no coeficiente de determinação (r^2)

$$r^2 = 1 - \frac{n\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (a_0 + a_1 x_i)\right)^2}{n\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2} \Rightarrow 0 \le r^2 \le 1$$

Quanto mais perto de 1, melhor o ajuste!!!

➢ Exemplo 01: 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



➢ Solução:

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	0,5	1,0	0,5
2	2,5	4,0	5,0
3	2,0	9,0	6,0
4	4,0	16,0	16,0
5	3,5	25,0	17,5
6	6,0	36,0	36,0
7	5,5	49,0	38,5
$\sum_{i=1}^{n} x_i = 28$	$\sum_{i=1}^{n} y_i = 24$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 140{,}0$	$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 119{,}5$
$\bar{x} = 4$	$\bar{y} = 3{,}428571$		

$n = 7$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i & n \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 28 & 7 \\ 140 & 28 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 \\ 119,5 \end{bmatrix}$$

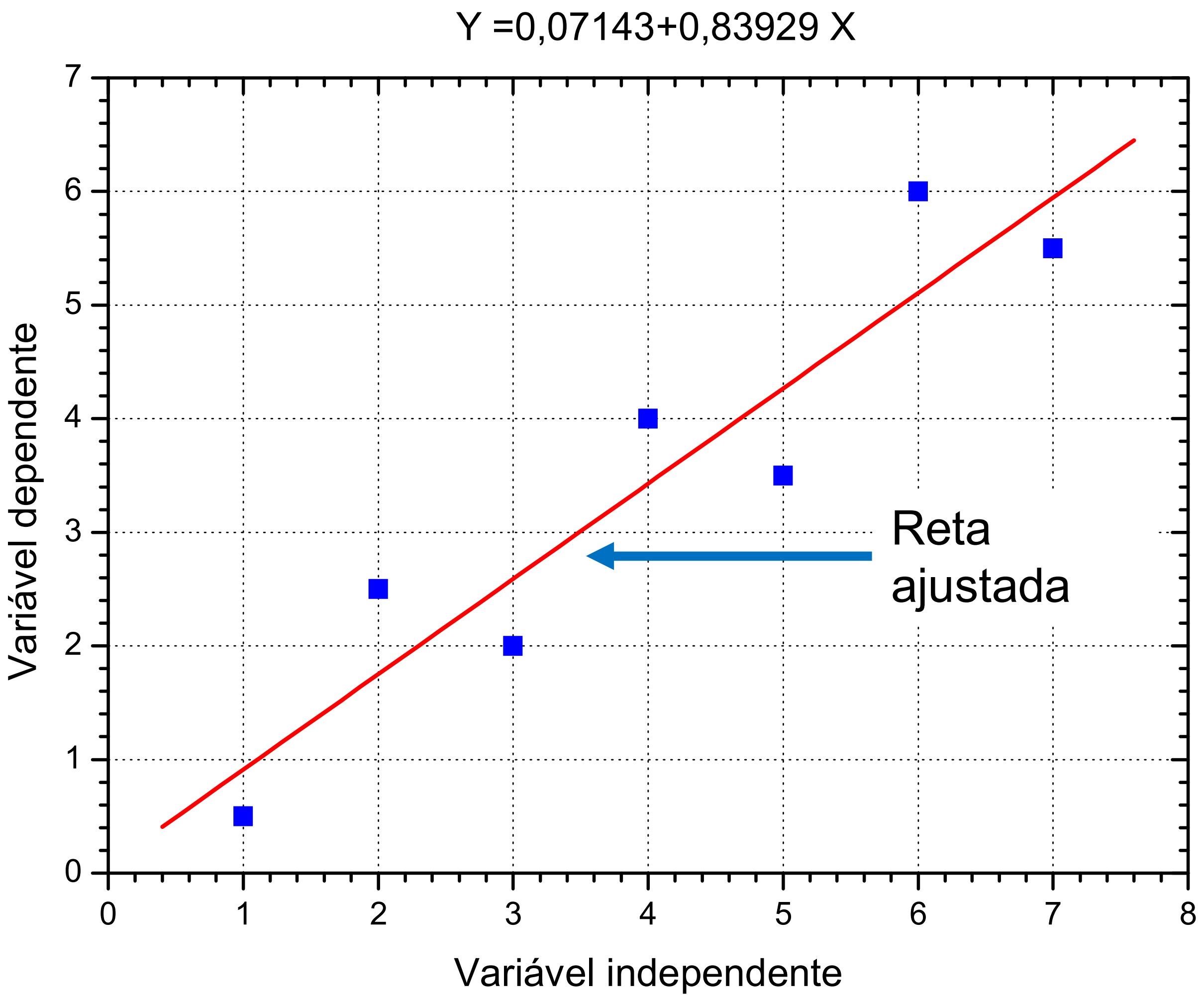
Mínimos Quadrados Discretos

- Resolvendo (por eliminação gaussiana), obtemos:

$$a_1 = 0,8392857$$

$$a_0 = 0,07142857$$

➢ Comparação (dados x ajuste)



➢ Coeficiente de determinação r²:

x_i	y_i	$(y_i - a_0 - a_1 x)^2$
1	0,5	0,168686
2	2,5	0,562500
3	2,0	0,347258
4	4,0	0,326531
5	3,5	0,589605
6	6,0	0,797194
7	5,5	0,199298

$\sum_{i=1}^{n} x_i = 28$ $\sum_{i=1}^{n} y_i = 24$ $S_r = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x)^2 = 2{,}9911$ $\sum_{i=1}^{n} y_i^2 = 105$

$$r^2 = 1 - \frac{n\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (a_0 + a_1 x_i)\right)^2}{n\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i\right)^2}$$

$$r^2 = 1 - \frac{7(2{,}9911)}{7 \cdot 105 - (24)^2}$$

$$r^2 = 0{,}868$$

- Linearização de relações não-lineares:
  - Modelo logarítmico: $y = a + b \ln x$
  - Modelo exponencial: $y = a\,e^{bx}$
  - Modelo potência: $y = a\,x^{b}$
  - Modelo inverso: $y = a + \frac{b}{x}$

- Através de manipulações matemáticas simples podemos transformar estes modelos em modelos lineares.

Linearização: modelo exponencial

- Uma função do tipo exponencial:

$$y = ae^{bx}$$

- Pode ser linearizada empregando-se:

$$\ln y = \ln a + b\,x \ln e$$

$$\ln y = \ln a + bx$$

$$y' = a' + b\,x$$ ➡ Modelo linear

Linearização: modelo potência

- Uma função do tipo potência:

$$y = ax^b$$

- Pode ser linearizada empregando-se:

$$\log y = b \log x + \log a$$

$$\boxed{y' = b\,x' + a'}$$ → Modelo linear

- Linearização do modelo logarítmico:

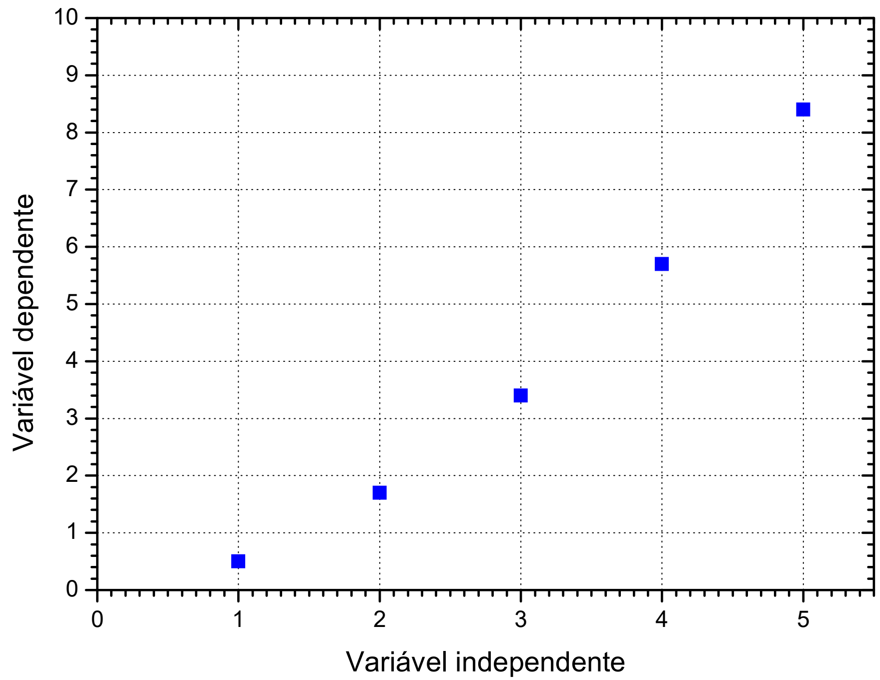
$$y = a + b\ln x \quad \Longrightarrow \quad y = a + b\,x' \;\;,\;\; x' = \ln(x)$$

- Linearização do modelo inverso

$$y = a + \frac{b}{x} \quad \Longrightarrow \quad y = a + b\,x' \quad ,\;\; x' = \frac{1}{x}$$

- Exemplo 02: Ajustar os dados da seguinte tabela empregando-se uma função do tipo potência.

x_i	y_i
1	0,5
2	1,7
3	3,4
4	5,7
5	8,4



- **Solução:** Obs: usamos $\log_{10}$, mas poderíamos usar $\ln_e$.

x_i	y_i	$x' = \log x_i$	$y' = \log y_i$	$(x')^2$	$x'y'$
1	0,5	0,000000	-0,301030	0,000000	0,000000
2	1,7	0,301030	0,230449	0,090619	0,069372
3	3,4	0,477121	0,531479	0,227645	0,253580
4	5,7	0,602060	0,755875	0,362476	0,455082
5	8,4	0,698970	0,924279	0,488559	0,646043

$a_0 = 0,500\ ;\ a_1 = 1,751\ ;$

$\sum x' = 2,079181$ $\quad \sum y' = 2,14105$ $\quad \sum (x')^2 = 1,169299$ $\quad \sum x'y' = 1,424077$

$\sum (y')^2 = 1.8518$

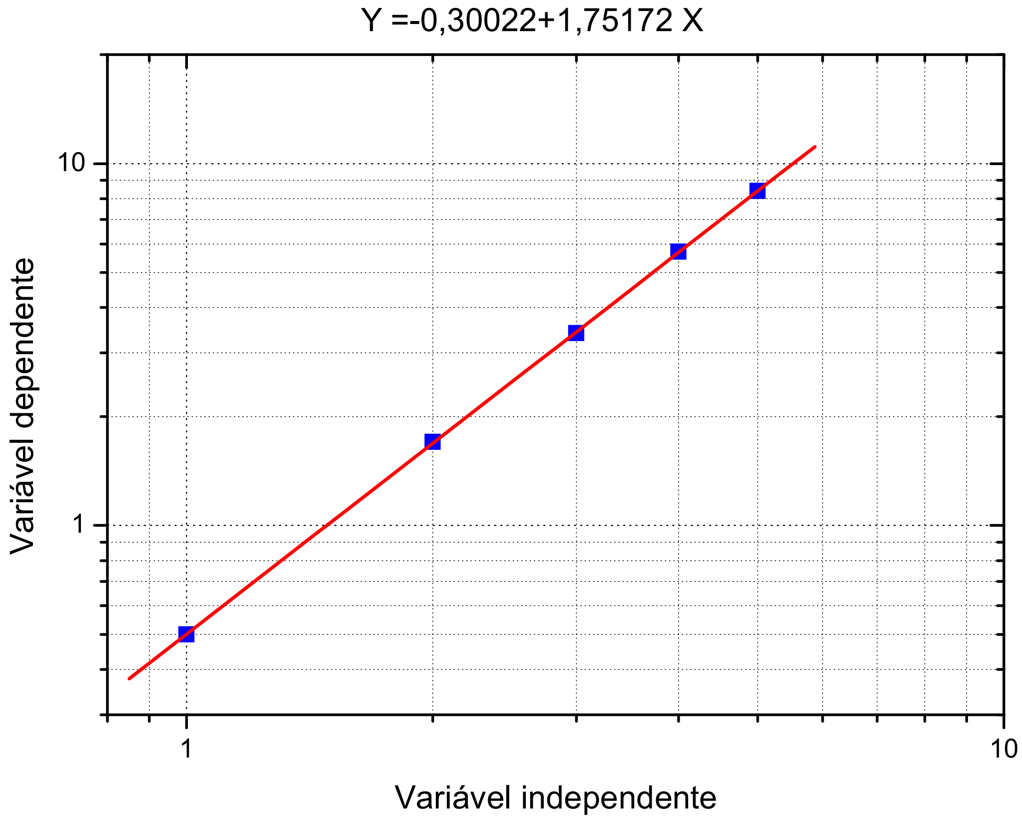
$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i & n \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 2,079 & 5 \\ 1,169 & 2,079 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1' \\ a_0' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,141 \\ 1,424 \end{bmatrix}$$

$a_0' = -0,300\ ;\ a_1' = 1,751\ ;$

$a_0 = 10^{a_0'} = -0,300\ ;\ a_1' = a_1\ ;$

$a_0 = 0,500\ ;\ a_1 = 1,751\ ;$

- Solução: $y = 0{,}500934x^{1{,}75172365}$



Ajuste quadrático

- Regressão polinomial: o procedimento de mínimos quadrados para ajustes lineares pode ser estendido para polinômios de grau mais elevado.

- Supondo-se um polinômio de segundo grau ou quadrático:

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

Ajuste quadrático

- Soma dos quadrados dos resíduos:

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right)$$

- Determinação dos coeficientes:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right) = 0$$

Ajuste quadrático

- Sistema de equações normais:

$$\left(n\right)a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)a_1 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)a_2 = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)a_1 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right)a_2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right)a_1 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^4\right)a_2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i$$

Ajuste quadrático

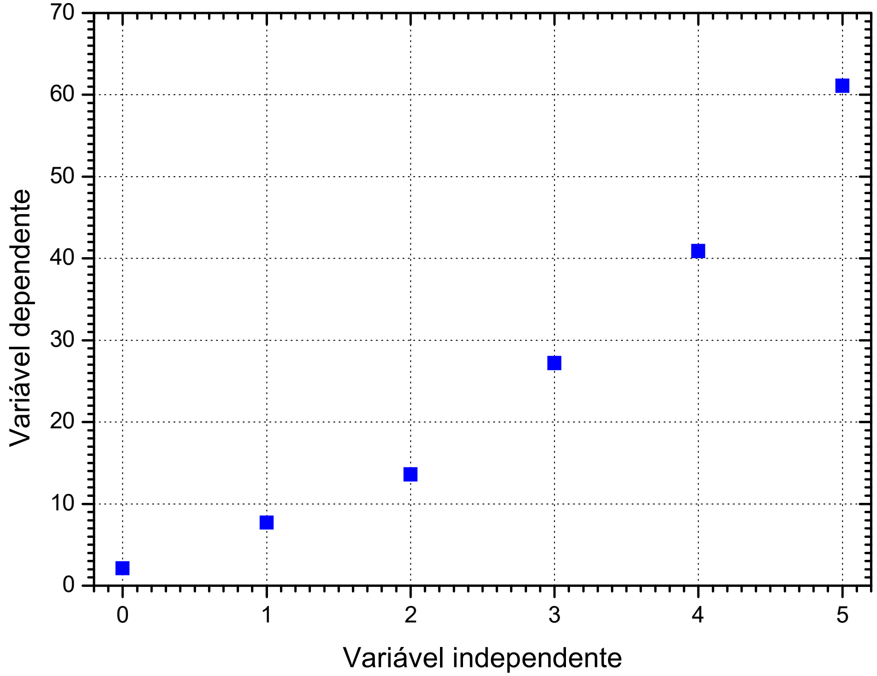
- Sistema de equações normais:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i & n \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^4 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste quadrático

➢ Exemplo 03: Ajustar um polinômio de segundo grau aos dados apresentados na tabela a seguir.

x_i	y_i
0	2,1
1	7,7
2	13,6
3	27,2
4	40,9
5	61,1



Ajuste quadrático

- Solução: $n = 6$

  $m = 2$

x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
0	2,1	0	0	0	0,0	0,0
1	7,7	1	1	1	7,7	7,7
2	13,6	4	8	16	27,2	54,4
3	27,2	9	27	81	81,6	244,8
4	40,9	16	64	256	163,6	654,4
5	61,1	25	125	625	305,5	1527,5
$\sum_{i=1}^{n} x_i = 15$	$\sum_{i=1}^{n} y_i = 152{,}6$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 55$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^3 = 225$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^4 = 979$	$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 585{,}6$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i = 2488{,}8$
$\bar{x} = 2{,}5$	$\bar{y} = 25{,}433333$					

Ajuste quadrático

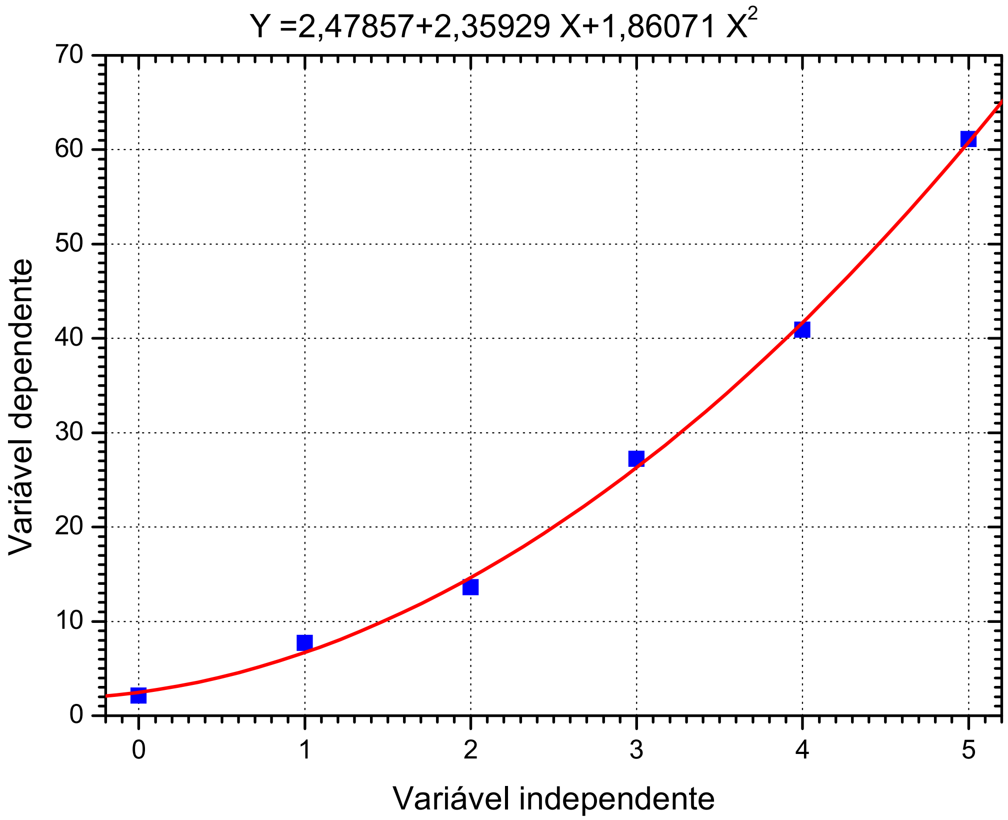
- Solução:

$$\begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 152{,}6 \\ 585{,}6 \\ 2488{,}8 \end{Bmatrix} \quad \therefore \quad \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2{,}47857 \\ 2{,}35929 \\ 1{,}86071 \end{Bmatrix}$$

$$y = 2,47857 + 2,35929\,x + 1,86071\,x^2$$

Ajuste quadrático

- Solução:



Programa em matlab / octave

- Os cálculos que apresentamos aqui estão sintetizados no programa mmq.m (ver no AVA)
- Neste programa, o usuário fornece um conjunto de pontos (x,y) ao programa.
- O programa pergunta que tipo de modelo o usuário deseja ajustar. Após escolher o modelo, o programa faz os cálculos e retorna os coeficientes do modelo e o gráfico de comparação (dados x modelo)