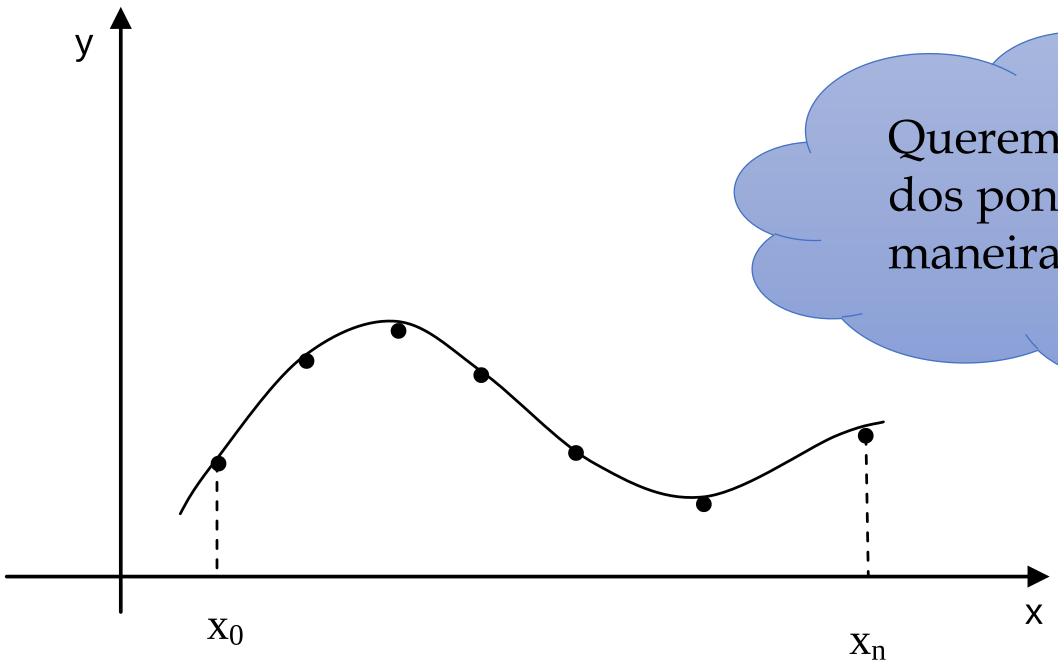
4616 – Métodos Numéricos Computacionais

Larissa Oliveira
oliveira.t.larissa@gmail.com

Na última aula...

AJUSTE DE CURVAS PELO MÉTODO DOS QUADRADOS MÍNIMOS

Interpolação: O polinômio de aproximação foi definido de tal maneira a coincidir com o valor da função dada em pontos definidos.



Queremos nos aproximar dos pontos da melhor maneira possível.

AJUSTE DE CURVAS PELO MÉTODO DOS QUADRADOS MÍNIMOS

- ✓ Consiste em uma boa aproximação para valores tabelados, que nos permita obter um valor da função em algum ponto fora do intervalo tabelado com certa margem de segurança;

- ✓ **Problema:** aproximar f por outra função g de uma família previamente escolhida em que $g(x) = a_1g_1(x) + a_2g_2(x) + \ldots + a_ng_n(x)$;

- ✓ Se f é apresentada na forma tabelada temos o caso **discreto**;

- ✓ Se f é apresentada na forma analítica temos o caso **contínuo**;

AJUSTE DE CURVAS PELO MÉTODO DOS QUADRADOS MÍNIMOS

Como Aproximar???

Ao aproximarmos uma função *f* por uma função *g* de uma família previamente escolhida estamos introduzindo um erro(ou desvio ou resíduo), dado por:

$$\textbf{erro} = (\mathbf{f(x)} - \mathbf{g(x)})$$

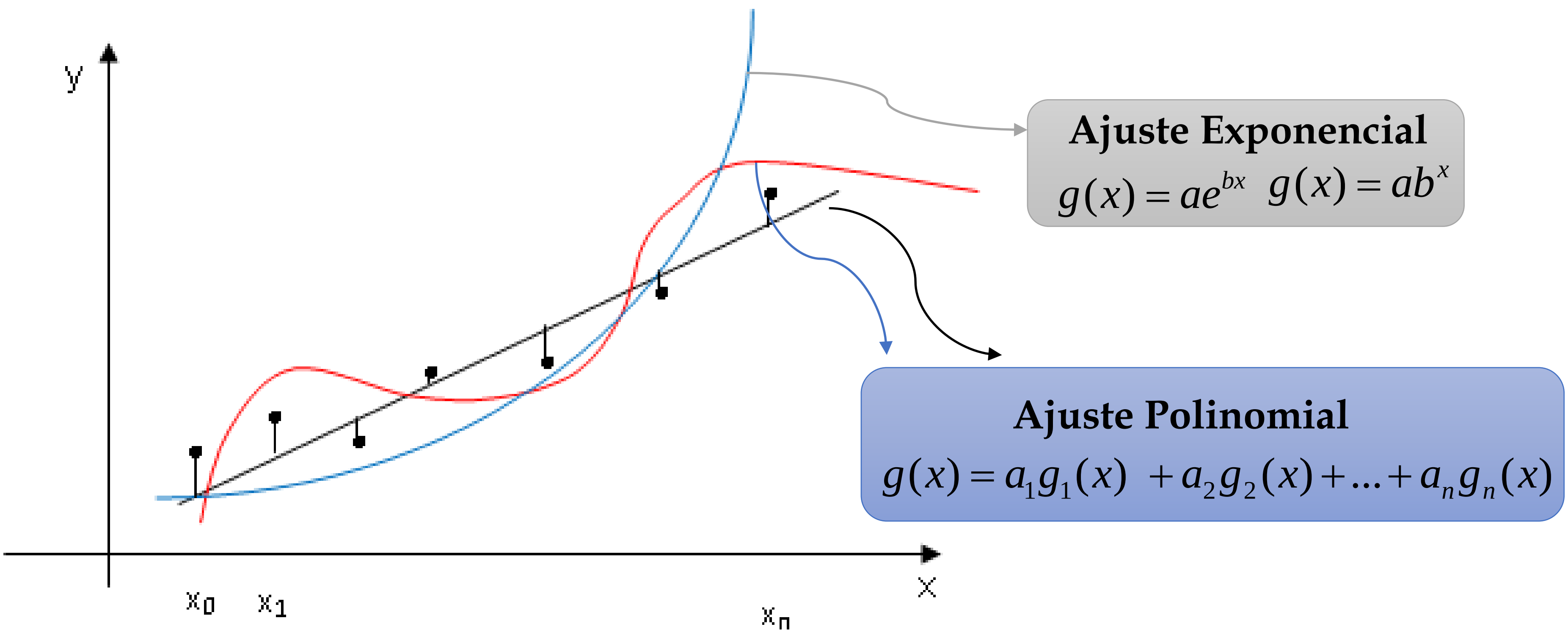
minimizar erros^2

desvios quadráticos mínimos

$$\text{minimizar} \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - g(x_i))^2 \quad \rightarrow \quad \text{minimizar} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} e_{\mathrm{i}}^2$$

AJUSTE DE CURVA – CASO DISCRETO

Dados os pontos $(x_i, f(x_i))$, $i = 1, \ldots, n$, e as n funções $g_1(x)$, $g_2(x)$, …, $g_n(x_n)$ escolhidas de alguma forma, devemos determinar os coeficientes $a_1, a_2, \ldots, a_n$ tal que $g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \ldots + a_n g_n(x)$ se aproxime ao máximo de $f(x)$.



O ajuste de curvas pelo Método dos Mínimos Quadrados tem por objetivo ajustar $g(x) = f(x)$, de forma que os desvios quadráticos sejam mínimos

Hoje...

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

O método dos mínimos quadrados também pode ser usado para aproximar uma função $f(x)$ contínua num intervalo [a,b] por uma combinação de funções do tipo

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \ldots + a_n g_n(x)$$

contínuas no intervalo [a,b]

queremos determinar $g(x)$ que melhor se aproxime da função $f(x)$, ou seja, queremos que a área entre as curvas de $f(x)$ e $g(x)$ seja a menor possível.

$$E(a_1, a_2, \ldots a_n) = \int_a^b \left[f(x) - g(x) \right]^2 dx$$

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

O pronto de mínimo necessariamente satisfaz:

$$E(a_1, a_2, \ldots a_n) = \int_a^b \left[f(x) - g(x) \right]^2 dx$$

$$g(x) = \boxed{a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \ldots + a_n g_n(x)}$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = \frac{\partial E}{\partial a_2} = \ldots = \frac{\partial E}{\partial a_n} = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = -2 \int_a^b \left(f(x) - \sum_{k=1}^{n} a_k g_k(x) \right) g_i(x)\, dx = 0, \quad i = 1, \ldots, n$$

$\int g_2 g_i + \int g_3 g_i \ldots$

$$a_1 \int_a^b g_1(x) g_i(x) dx + \ldots + a_n \int_a^b g_n(x) g_i(x) dx = \int_a^b f(x) g_i(x) dx, \quad i = 1, \ldots, n$$

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

Sistema de equações normais:

$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) \, dx$

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1 \rangle & \langle g_1, g_2 \rangle & \cdots & \langle g_1, g_n \rangle \\ \langle g_2, g_1 \rangle & \langle g_2, g_2 \rangle & \cdots & \langle g_2, g_n \rangle \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \langle g_n, g_1 \rangle & \langle g_n, g_2 \rangle & \cdots & \langle g_n, g_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, f \rangle \\ \langle g_2, f \rangle \\ \vdots \\ \langle g_n, f \rangle \end{bmatrix}$$

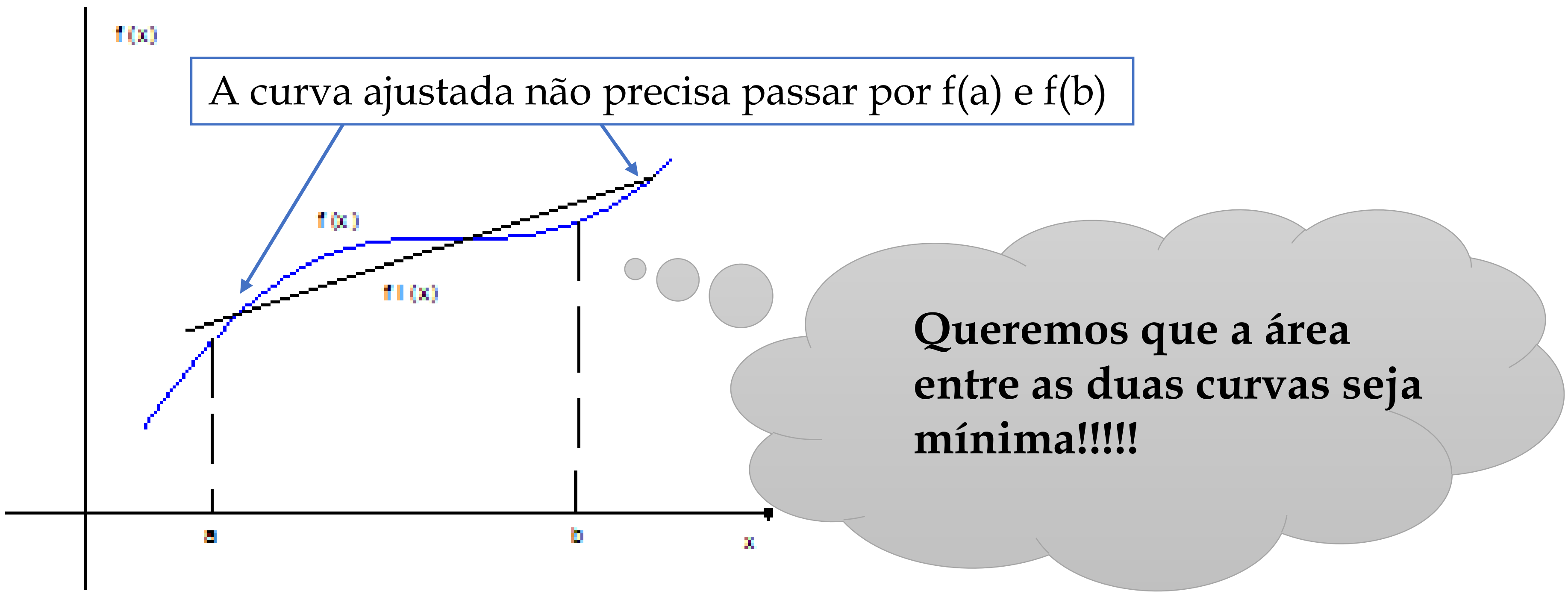
Se o determinante da matriz do sistema de equações normais for diferente de zero, o sistema possui solução única

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

- Sejam $g_1(x)$ e $g_2(x)$ funções que definem a função $g(x)$, contínuas no intervalo [a,b] :

$$\boxed{g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x)}$$

- Encontrar a_1 e a_2 que melhor ajuste $g(x)$ a *f(x)*.



AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

$g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x)$

multip.

$$E = \int_a^b [f(x) - g(x)]^2 dx = \int_a^b \left[f(x)^2 - 2f(x)\underbrace{g(x)} + \underbrace{(g(x))^2}\right]dx =$$

$$= \int_a^b \left\{f(x)^2 - 2f(x)[a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x)] + a_1^2 g_1(x)^2 + 2a_1 a_2 g_1(x) g_2(x) + a_2{}^2 g_2(x)^2\right\}dx =$$

$$\boxed{= \int_a^b [f(x)]^2 dx - \left[2\int_a^b f(x)g_1(x)dx\right]a_1 - \left[2\int_a^b f(x)g_2(x)dx\right]a_2 + \left[\int_a^b g_1(x)^2 dx\right]a_1^2 + \left[2\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx\right]a_1 a_2 + \left[\int_a^b g_2(x)^2 dx\right]a_2{}^2 = F(a_1, a_2)}$$

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

A solução é encontrar $\left(\bar{a}_1, \bar{a}_2\right)$ tal que:

$$\left.\frac{\partial E}{\partial a_i}\right|_{\bar{a}_1,\bar{a}_2} = 0 \quad \text{para} \quad i = 1{,}2$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = -2\int_a^b f(x)g_1(x)dx + \left[2\int_a^b g_1(x)^2 dx\right]a_1 + \left[2\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx\right]a_2$$

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_2} = -2\int_a^b f(x)g_2(x)dx + \left[2\int_a^b g_2(x)^2 dx\right]a_2 + \left[2\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx\right]a_1$$

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

Igualando-se a zero e reagrupando, tem-se:

$$\begin{cases} \left[\displaystyle\int_a^b g_1(x)^2\,dx\right]a_1 + \left[\displaystyle\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx\right]a_2 = \displaystyle\int_a^b f(x)g_1(x)\,dx \\ \left[\displaystyle\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx\right]a_1 + \left[\displaystyle\int_a^b g_2(x)^2\,dx\right]a_2 = \displaystyle\int_a^b f(x)g_2(x)\,dx \end{cases}$$

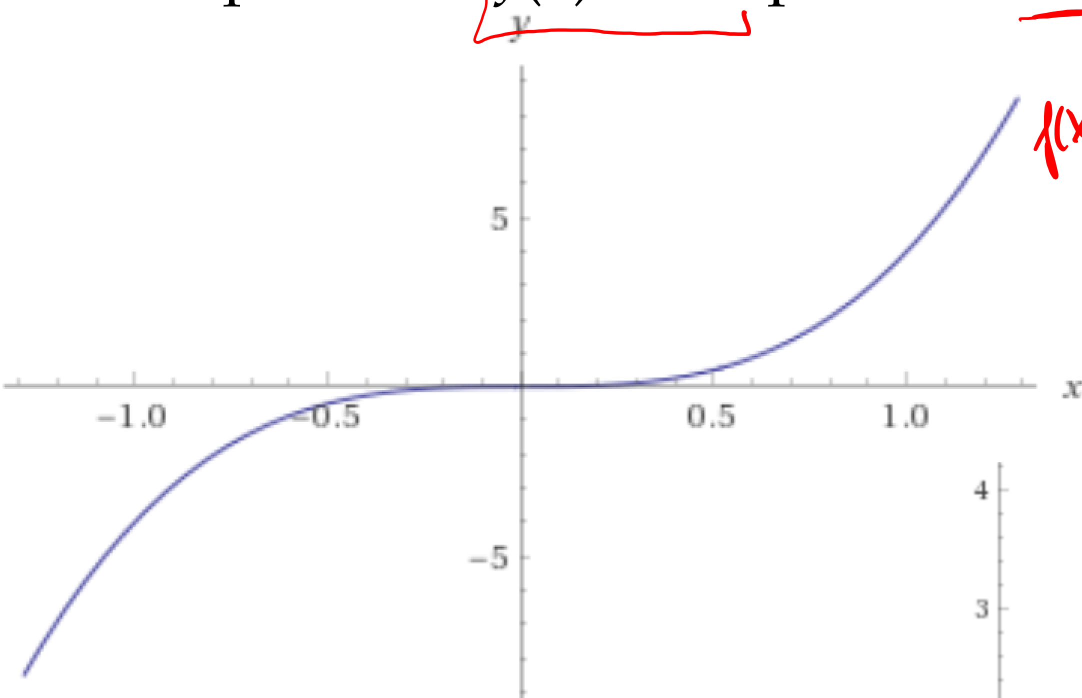
$$\begin{pmatrix} \overset{\langle g_1, g_1\rangle}{\displaystyle\int_a^b g_1(x)^2\,dx} & \overset{\langle g_1, g_2\rangle}{\displaystyle\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx} \\ \overset{\langle g_1, g_2\rangle}{\displaystyle\int_a^b g_1(x)g_2(x)\,dx} & \overset{\langle g_2, g_2\rangle}{\displaystyle\int_a^b g_2(x)^2\,dx} \end{pmatrix} \quad e \quad b = \begin{pmatrix} \overset{\langle f, g_1\rangle}{\displaystyle\int_a^b f(x)g_1(x)\,dx} \\ \overset{\langle f, g_2\rangle}{\displaystyle\int_a^b f(x)g_2(x)\,dx} \end{pmatrix}$$

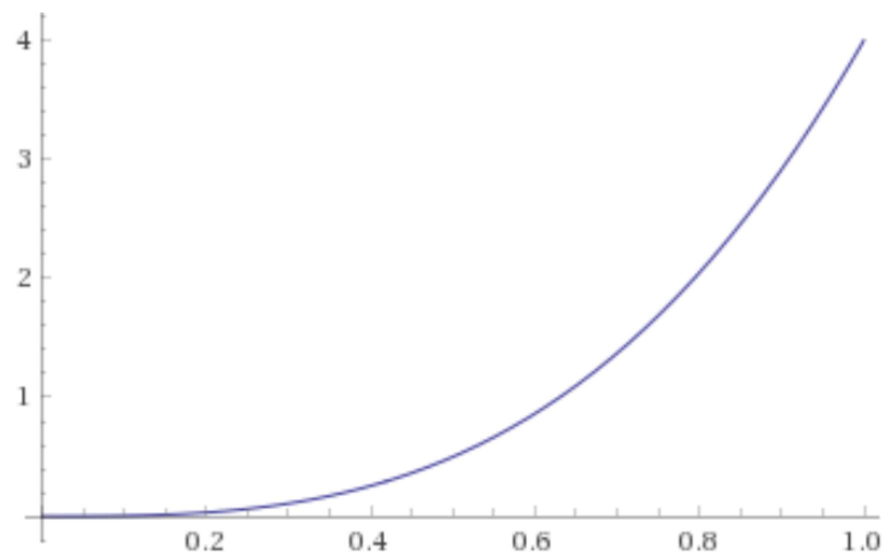
AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

Exemplo:

$g(x) = a_1 + a_2 x$

Aproximar $f(x) = 4x^3$ por uma reta no intervalo [0,1]





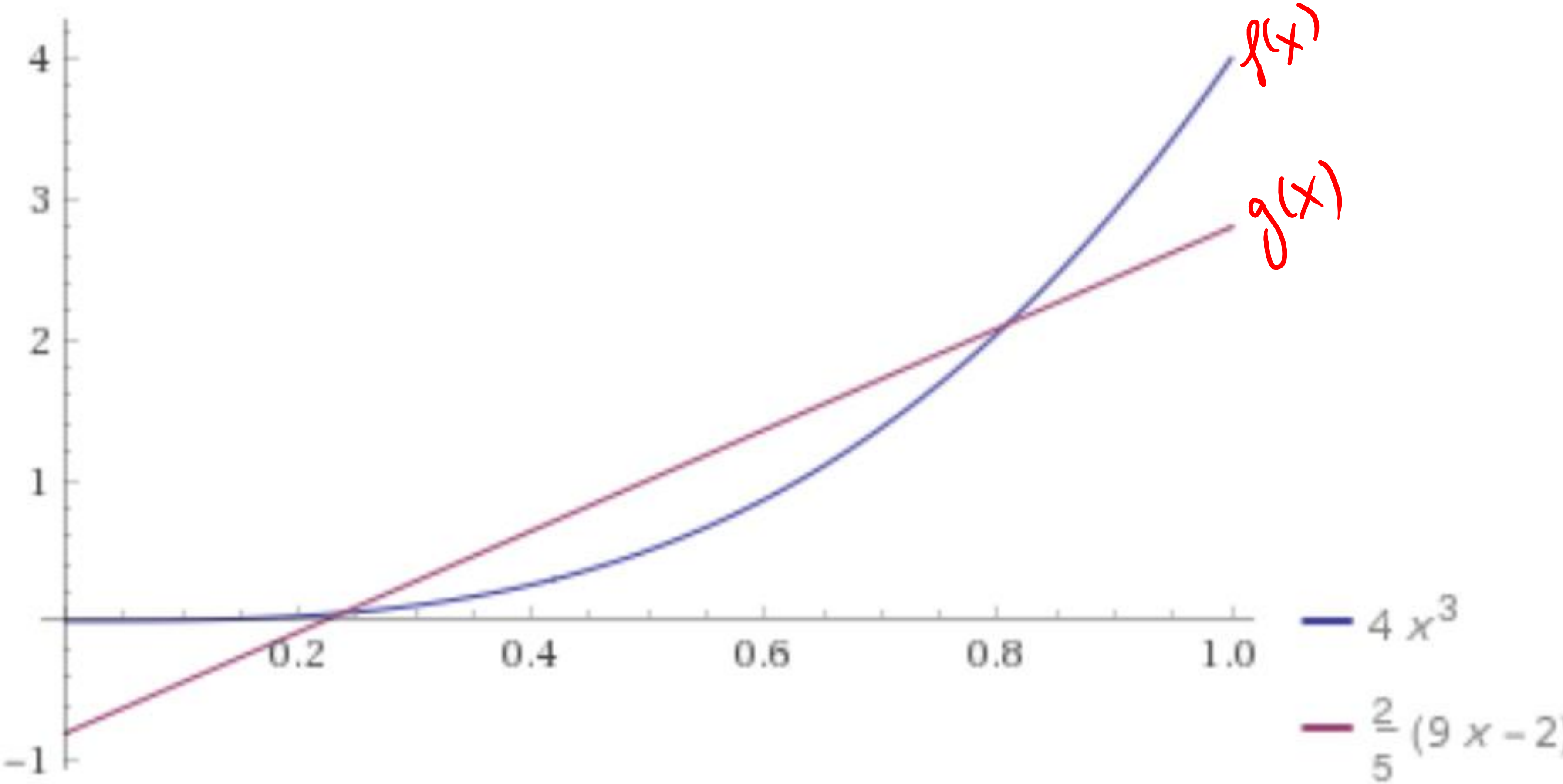
$$g(x) = a_1 + a_2 x \longrightarrow \begin{aligned} g_1(x) &= 1 \\ g_2(x) &= x \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} \langle g_1, g_1 \rangle & \langle g_1, g_2 \rangle \\ \langle g_2, g_1 \rangle & \langle g_2, g_2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle f, g_1 \rangle \\ \langle f, g_2 \rangle \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \int_0^1 1^2\,dx & \int_0^1 x\,dx \\ \int_0^1 x\,dx & \int_0^1 x^2\,dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_0^1 4x^3 \cdot 1\,dx \\ \int_0^1 4x^3 \cdot x\,dx \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4/5 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{aligned} a_1 &= -4/5 \\ a_2 &= 18/5 \end{aligned}$$

$$\therefore\ g(x) = \frac{18}{5}x - \frac{4}{5}$$



f(x)
g(x)
4
3
2
1
−1
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
$4x^3$
$\frac{2}{5}(9x-2)$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

- ✓ Dados experimentais necessitam de uma família de funções para representa-los que não é composta por combinação linear nos parâmetros.

- ✓ É necessário o uso de outras funções para ajustar adequadamente uma função representada na forma de tabela.

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Ajuste exponencial

- ✓ A função tabelada deve ser aproximada por uma função exponencial da forma $\underbrace{g(x) = a(b)^x}$, com a e b positivos.
- ✓ Os valores de a e b devem ser obtidos de modo que o erro seja mínimo

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^{n} e(x_i)^2 \rightarrow \text{minimizar} \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - g(x_i) \right]^2$$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

A função exponencial $g(x) = a(b)^x$ pode ser ajustada fazendo a transformação:

$$h(x) = ln(g(x)) = ln(a(b)^x) = ln(a) + xln(b)$$

$$ln(a) = a_2 \qquad ln(b) = a_1$$

$$e^{a2} = a \qquad e^{a1} = b$$

$h(x) = ln(a) + xln(b) = a_2 + a_1 x$ fica representada por uma combinação linear das funções $g_1(x) = x$ e $g_2(x) = 1$

$$h(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x)$$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

$h(x) = ln(a) + xln(b) = \boxed{a_2 + a_1x}$ fica representada por uma combinação linear das funções $g_1(x) = x$ e $g_2(x) = 1$

$$h(x) = a_1g_1(x) + a_2g_2(x)$$

Para que a função $g(x)$ aproxime-se de $f(x)$, a função $h(x)$ deve se aproximar de $ln(f(x))$:

$$g(x) \approx f(x) \quad \rightarrow \quad ln(g(x)) \approx ln(f(x))$$

A tabela de pontos fica definida como:

x_i	x_1	x_2	...	x_n
$f(x_i)$	$\ln(f_1(x))$	$\ln(f_2(x))$	...	$\ln(f_n(x))$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Do ajuste de reta tem-se o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_2 = \sum_{i=1}^{n} \ln(f(x_i)) x_i \\ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_1 + (n) a_2 = \sum_{i=1}^{n} \ln(f(x_i)) \end{cases}$$

Com os valores de a_1 e a_2 obtidos, resolvemos o problema:

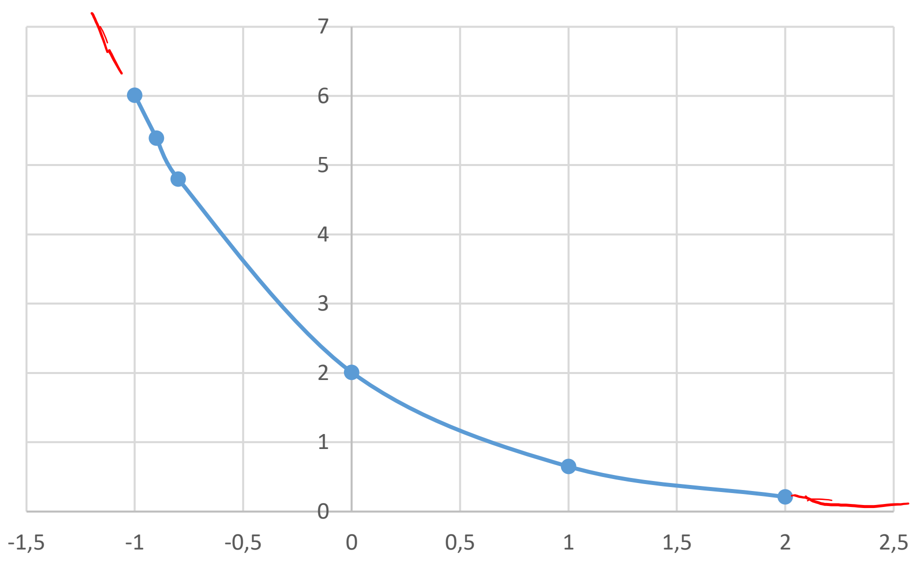
$$\text{minimizar} \sum_{i=1}^{n} \left[\ln(f(x_i)) - h(x_i)\right]^2$$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Exemplo

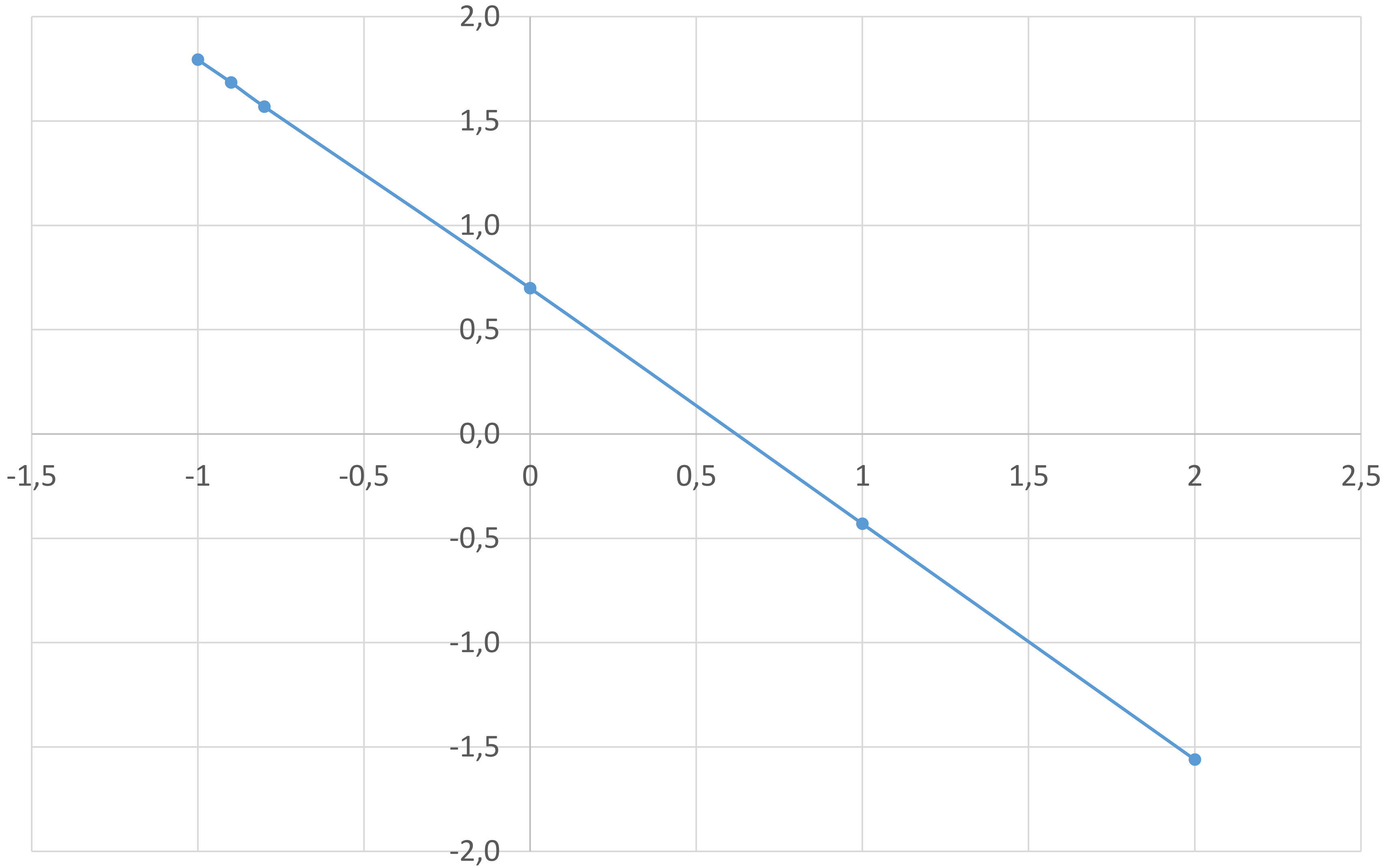
Ajuste os pontos da tabela à equação $g(x) = a(b)^x$, com $0 < b < 1$, e calcule o erro cometido.

x_i	-1	-0,9	-0,8	0	1	2
$f(x_i)$	6,01	5,39	4,80	2,01	0,65	0,21



x_i	-1	$-0,9$	$-0,8$	0	1	2
$\ln(f(x_i))$	1,7934	1,6845	1,5686	0,6981	-0,4308	-1,5606

TESTE DE ALINHAMENTO


2,0
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
-1,5
-1
-0,5
0
0,5
1
1,5
2
2,5

$$
\begin{cases}
\left(\sum_{1}^{6} x_i\right)^2 a_1 + \left(\sum_{1}^{6} x_i\right) a_2 = \sum_{1}^{6} \ln(f(x_i))\, x_i \\
\left(\sum_{1}^{6} x_i\right) a_1 + 6 a_2 = \sum_{1}^{6} \ln(f(x_i))
\end{cases}
$$

$h(x) = a_1 x + a_2$

$g(x) = a(b)^x$

	x_i	x_i^2	$\ln(f(x_i))$	$\ln(f(x_i))\, x_i$
	-1	1	1,7934	-1,7934
	-0,9	0,81	1,6845	-1,5161
	-0,8	0,64	1,5686	-1,2549
	0	0	0,6981	0
	1	1	-0,4308	-0,4308
	2	4	-1,5606	-3,1212
Σ	0,3	7,45	3,7532	-8,1164

$$\begin{pmatrix} 6 & 0.3 \\ 0,3 & 7,45 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3,7532 \\ -8,1164 \end{pmatrix} \rightarrow \left[\begin{array}{l} a_2 = 0,6814 \\ a_1 = -1,1169 \end{array}\right)$$

$$\downarrow$$

$$a = e^{a_2} = 1,9766$$

$$\underline{b = e^{a_1} = 0,3273}$$

$$g(x) = a(b)^x$$

$$\underline{g(x) = 1,9766\,(0,3273)^x}$$

ERRO: $e(x_i)^2 = (f(x_i) - g(x_i))^2$

$$e(x_1)^2 = (6,01 - 6,0391)^2 = 0,0008$$

$$e(x_2)^2 = (5,39 - 5,4009)^2 = 0,0001$$

$$e(x_3)^2 = (4,80 - 4,8302)^2 = 0,0009$$

$$e(x_4)^2 = (2,01 - 1,9766)^2 = 0,0011$$

$$e(x_5)^2 = (0,65 - 0,6469)^2 = 0,0000$$

$$e(x_6)^2 = (0,21 - 0,2117)^2 = 0,0000$$

$$E = \sum_{1}^{6} e(x_i) = \underline{0,0029}$$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Ajuste hiperbólico

No ajuste hiperbólico, os pontos tabelados possuem um comportamento que se aproxima de uma função definida por:

$$\boxed{g(x) = \frac{1}{a_1(x) + a_2}}$$

Deseja-se determinar os parâmetros a_1 e a_2 tal que:

$$E(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n} e(x_i)^2 \rightarrow \text{minimizar} \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - g(x_i) \right]^2$$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Se $\boxed{g(x) = \dfrac{1}{a_1(x) + a_2}}$ aproxima-se da função $f(x)$, fazemos:

$a_1x + a_2$

$$h(x) = \boxed{\frac{1}{g(x)}} = a_1(x) + a_2 \approx \frac{1}{f(x)}$$

A tabela de pontos fica definida como:

$x_i \to$	x_1	x_2	...	x_n
$f(x_i)$	$1/f_1(x)$	$1/f_2(x)$	...	$1/f_n(x)$

REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Do ajuste de reta tem-se o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i}{f(x_i)} \\ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_1 + (n) a_2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{f(x_i)} \end{cases}$$

$\frac{1}{f(x)} \cdot x$

Com os valores de a_1 e a_2 obtidos, resolvemos o problema:

$$\text{minimizar} \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{1}{f(x_i)} - h(x_i) \right]^2$$

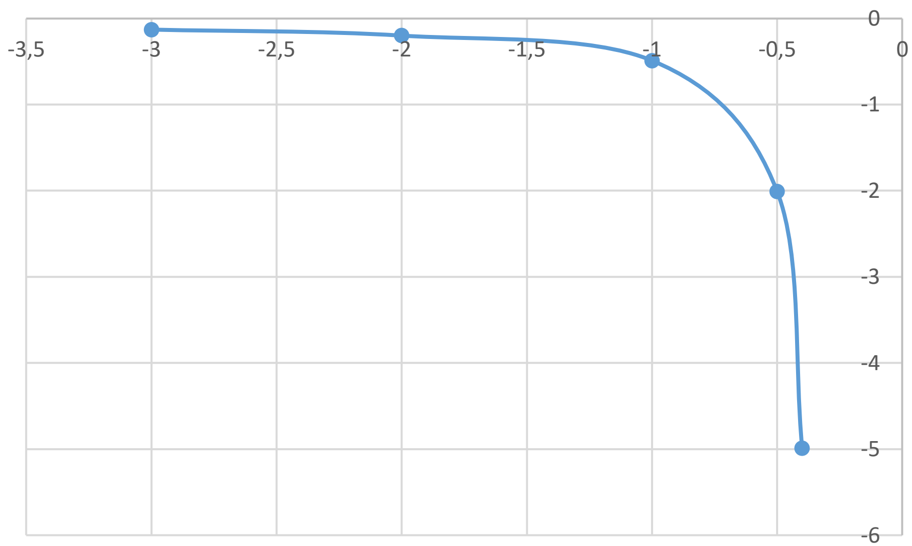
REGRESSÃO LINEAR NOS PARÂMETROS – AJUSTE NÃO LINEAR

Exemplo

Ajuste os pontos da tabela à equação $\boxed{g(x) = \dfrac{1}{a_1(x) + a_2}}$

e calcule o erro cometido.

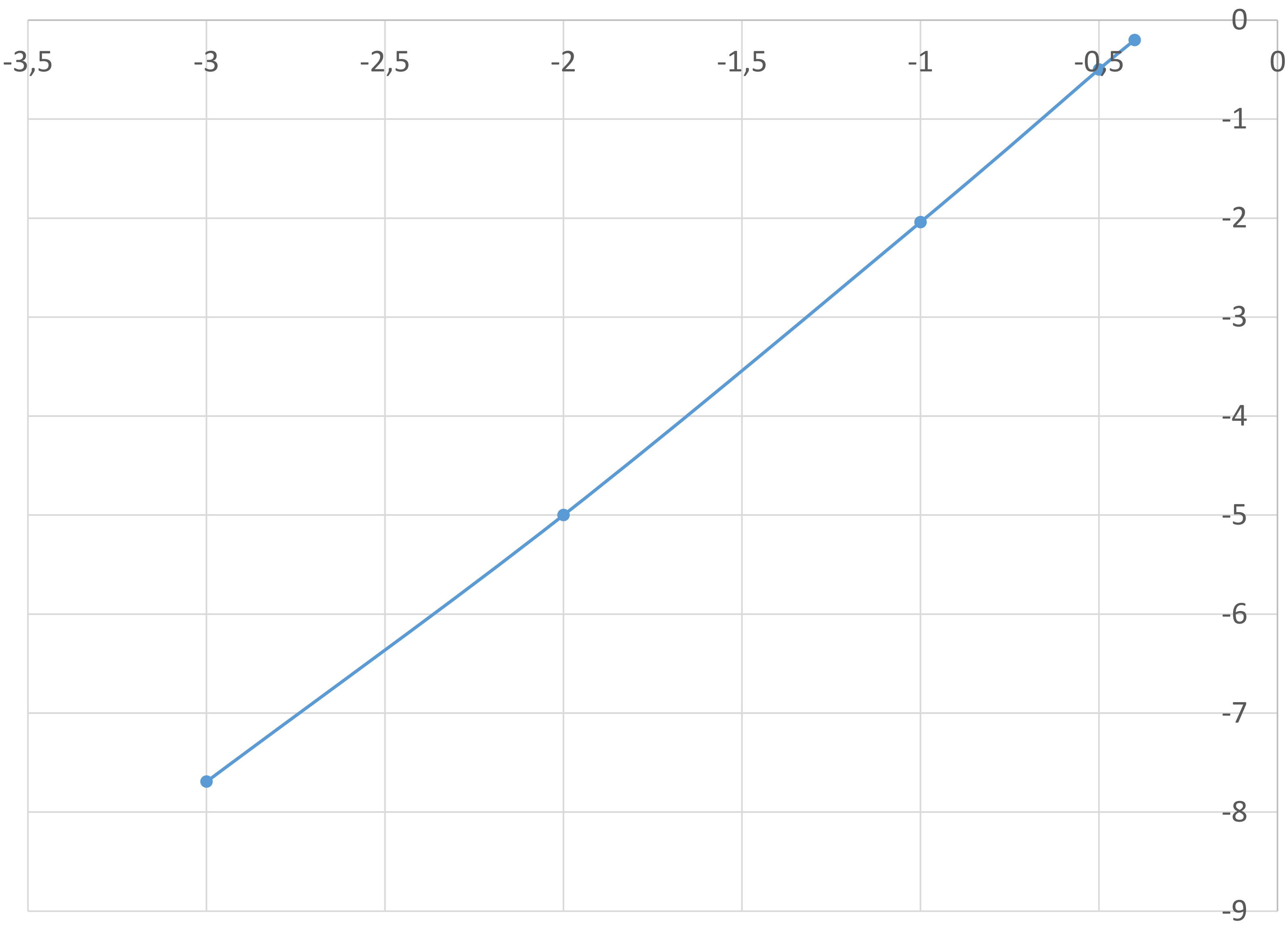
x_i	-3	-2	-1	-0,5	-0,4
$f(x_i)$	-0,13	-0,20	-0,49	-2,01	-4,99



x_i	-3	-2	-1	$-0,5$	$-0,4$
$1/f(x_i)$	$-7,6923$	-5	$-2,0408$	$-0,4975$	$-0,2004$

TESTE DE

ALINHAMENTO



-3,5
-3
-2,5
-2
-1,5
-1
-0,5
0
0
-1
-2
-3
-4
-5
-6
-7
-8
-9

$$\begin{cases} \left(\sum_{1}^{5} x_i^2\right) a_1 + \left(\sum_{1}^{5} x_i\right) a_2 = \sum_{1}^{5} \frac{x_i}{f(x_i)} \\ \left(\sum_{1}^{5} x_i\right) a_1 + 5 a_2 = \sum_{1}^{5} \frac{1}{f(x_i)} \end{cases}$$

	x_i	x_i^2	$1/f(x_i)$	$x_i/f(x_i)$
	-3	9	-7,6923	23,0769
	-2	4	-5	10
	-1	1	-2,0408	2,0408
	-0,5	0,25	-0,4975	0,2488
	-0,4	0,16	-0,2004	0,0802
Σ	-6,9	14,41	-15,4310	35,4467

$$\frac{x_i}{f(x_i)} = x_i \cdot \frac{1}{f(x_i)}$$

$$\begin{pmatrix} 5 & -6{,}9 \\ -6{,}9 & 14{,}41 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -15{,}436 \\ 35{,}467 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{array}{l} a_1 = 2{,}8952 \\ a_2 = 0{,}9092 \end{array}$$

$$\therefore g(x) = \boxed{\frac{1}{2{,}8952x + 0{,}9092}}$$

$$e(x_i)^2 = (f(x_i) - g(x_i))^2$$

ERRO:

$$e(x_1)^2 = (-0{,}13 + 0{,}1286)^2 = 0{,}0000$$

$$e(x_2)^2 = (-0{,}20 + 0{,}2049)^2 = 0{,}0000$$

$$e(x_3)^2 = (-0{,}49 + 0{,}5035)^2 = 0{,}0002$$

$$e(x_4)^2 = (-2{,}01 + 1{,}8574)^2 = 0{,}0233$$

$$e(x_5)^2 = (-4{,}99 + 4{,}0180)^2 = 0{,}9454$$

$$E = \sum_{1}^{5} e(x_i)^2 = 0{,}9689$$

AJUSTE DE CURVA – CASO CONTÍNUO

Atividade para contabilizar presença – 11/08/2020.

Usando o método dos mínimos quadrados, aproxime a função $f(x) = e^{-x}$ no intervalo [1, 3], por um polinômio de grau 1, ou seja, $g(x) = a_1 + a_2 x$.