CÁLCULO NUMÉRICO

Ajuste de Curvas

Gustavo Bono

Universidade Federal de Pernambuco
Centro Acadêmico do Agreste
Núcleo de Tecnologia
Caruaru - Brasil

2017.2

1) Ajuste de Curvas: *Introdução*

a) Existem duas classes de métodos para a aproximação de dados, e a distinção entre elas está em *considerarmos, ou não, a existência de erro nos dados*;

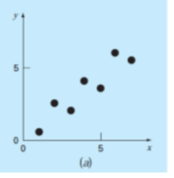
b) No primeiro caso, os métodos levam em consideração possíveis erros introduzidos na obtenção dos dados, tais como: limitações do instrumento, condições experimentais, etc.;

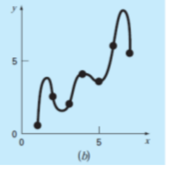
c) O principal método desenvolvido neste caso é **Método dos Mínimos Quadrados**;

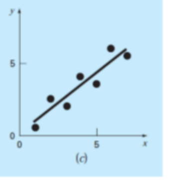
d) No segundo caso, consideramos que não existem erros nos dados e podemos exigir que a curva passe pelos pontos dados. Como veremos, no próximo capitulo, esse problema será resolvido com **interpolação**;

e) Nesse caso aproximaremos uma função $f(x)$ por uma função polinomial $p(x)$ que passa pelos pontos dados. Assim dado $p(x)$ é possível estimar o valor de $f(x)$ para um ponto x diferente dos pontos dados.

1) Ajuste de Curvas: *Introdução*







Dados experimentais
(limitações do instrumentos, condições experimentais, etc.)

Interpolação

Ajuste de curvas
(Método dos Mínimos Quadrados)

1) Ajuste de Curvas: *Introdução*

O objetivo do presente capítulo consiste em resolver o seguinte problema: aproximar uma função $y = f(x)$ (real e de variável real) por uma função $F(x)$ que seja combinação linear de funções conhecidas, isto é:

$$f(x) \simeq a_0\, g_0(x) + a_1\, g_1(x) + \ldots + a_m\, g_m(x) = F(x) \, .$$

de tal modo que a distância de $f(x)$ a $F(x)$ seja a menor possível.

A substituição de $f(x)$ por uma função $F(x)$ é indicada quando o uso da função dada oferece alguns inconvenientes, tais como:

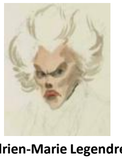
a) $f(x)$ é definida através de processos não-finitos como integrais, soma de séries, etc;

b) $f(x)$ é conhecida através de pares de pontos, obtidos em experimentos, e desejamos substituí-la por uma função cujo gráfico se ajuste aos pontos observados;

que podem ser afastados através de uma escolha apropriada da função $F(x)$.

Método de Mínimos Quadrados

Josef Daniel Huber
1768-1830
(matemático e astrônomo suíço)



Adrien-Marie Legendre
1752-1833
(matemático francês)

Carl Friedrich Gauss
1777-1855
(matemático alemão)
MMQ (1809)

Vamos chamar de *f (x)* a função que queremos aproximar por uma outra função *g (x)*.

Nem sempre temos uma expressão analítica para *f (x)*.

No **Método dos Mínimos Quadrados (MMQ)** partimos da hipótese de que temos alguma informação sobre a forma de *g (x)*. Poderíamos saber, através da observação dos dados, por exemplo, que *g (x)* é uma reta,

$$g(x) = c_0 + c_1 x$$

ou que é uma parábola,

$$g(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$

ou que tenha algum outra forma específica.

2) **Ajuste de Curvas:** *Método de Mínimos Quadrados*

De forma geral, no **caso linear,** vamos considerar que a aproximação será dada por uma função do tipo:

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \ldots + c_n\phi_n(x)$$

onde $\phi_0(x)$, $\phi_1(x)$, ..., $\phi_n(x)$ são *funções pré-estabelecidas* (conhecidas!!).

No **MMQ linear**, a função $g(x)$ que aproxima $f(x)$ é **linear** nos seus parâmetros c_0, c_1, c_2, ..., c_n.

Por exemplo:

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = x, \quad \phi_2(x) = x^2, \quad \ldots$$

$$\phi_0(x) = \sin(\pi x), \quad \phi_1(x) = \sin(2\pi x), \quad \ldots$$

No caso do **MMQ não linear**, a relação da função $g(x)$ com seus parâmetros c_0, c_1, c_2, ..., c_n , pode ser do tipo, por exemplo:

$$g(x) = c_0\ e^{c_1 x}.$$

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

2) **Ajuste de Curvas:** *Método de Mínimos Quadrados*

Considerando uma função aproximação do tipo:

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \ldots + c_n\phi_n(x)$$

Para cada conjunto de coeficientes c_i, $i = 0, 1, ..., n,$ o **resíduo (desvio) da aproximação** no ponto x_k é dado por:

$$\begin{aligned} r(x_k) &= f(x_k) - g(x_k) \\ &= f(x_k) - [c_0\phi_0(x_k) + c_1\phi_1(x_k) + \ldots + c_n\phi_n(x_k)] \\ &= r(x_k; c_0, c_1, \ldots, c_n) \end{aligned}$$

Precisamos estabelecer algum critério de aproximação para encaminhar o problema da determinação dos parâmetros c_0, c_1, c_2, ..., c_n que nos levarão à *melhor aproximação*.

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

Exemplo 1: Determinar o peso da bike e do ciclista.

B + C ⟹ **67 kg** **B** ⟹ **6 kg** **C** ⟹ **62 kg**

$$\left.\begin{aligned} B + C &= 67 \\ B &= 6 \\ C &= 62 \end{aligned}\right\}$$

Quanto pesa ciclista + bike ?

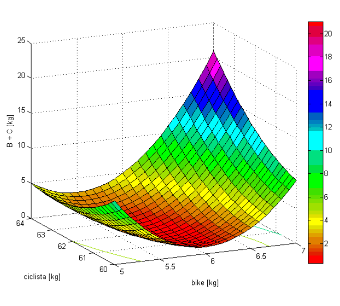
Sistema inconsistente !!

Exemplo 1: Determinar o peso da bike e do ciclista.

Precisamos procurar os de *B* e *C* que minimizem:

$$\mathbf{P}(B,C) = (B+C-67)^2 + (B-6)^2 + (C-62)^2$$

Os valores de **P** para diferentes valores de *B* e *C* ficam:

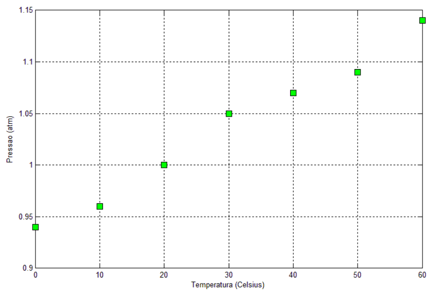


	60	61	62	63	64
5.0	9.0000	3.0000	1.0000	3.0000	9.0000
5.5	6.5000	1.5000	0.5000	3.5000	10.5000
6.0	5.0000	1.0000	1.0000	5.0000	13.0000
6.5	4.5000	1.5000	2.5000	7.5000	16.5000
7.0	5.0000	3.0000	5.0000	11.0000	21.0000

Exemplo 2: De acordo com a lei de Charles para um gás ideal em um volume constante, existe uma relação linear entre a pressão *p* e a temperatura *T*. Obtenha uma aproximação para os seguintes dados experimentais:

```
Temp = 0      10      20      30      40      50      60

Pressao = 0.9400    0.9600    1.0000    1.0500    1.0700    1.0900    1.1400
```



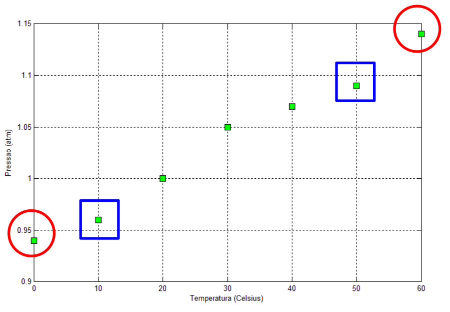
Podemos considerar que existe uma relação aproximadamente **linear** entre as variáveis, Logo, podemos desprezar alguns pontos da lista, escolher 2 pontos e usar polinômios interpoladores lineares para a aproximação.

2) Ajuste de Curvas: *Método de Mínimos Quadrados*

Exemplo 2: De acordo com a lei de Charles para um gás ideal em um volume constante, existe uma relação linear entre a pressão *p* e a temperatura *T*. Obtenha uma aproximação para os seguintes dados experimentais:

```
Temp = 0      10      20      30      40      50      60

Pressao = 0.9400    0.9600    1.0000    1.0500    1.0700    1.0900    1.1400
```



Considerando,

$$g(x) = c_0 + c_1$$

- Para os pontos **P1** e **P7** temos:

$$g_1(x) = 0.94 + 0.00333\,x$$

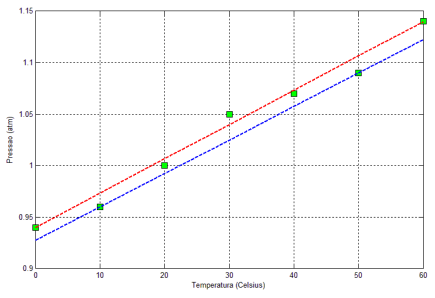
- Para os pontos **P2**e **P6** temos:

$$g_2(x) = 0.9275 + 0.00325\,x$$

Exemplo 2: De acordo com a lei de Charles para um gás ideal em um volume constante, existe uma relação linear entre a pressão *p* e a temperatura *T*. Obtenha uma aproximação para os seguintes dados experimentais:

```
Temp = 0      10      20      30      40      50      60

Pressao = 0.9400    0.9600    1.0000    1.0500    1.0700    1.0900    1.1400
```



Considerando,

$$g(x) = c_0 + c_1$$

➢ Para os pontos **P1** e **P7** temos:

$$g_1(x) = 0.94 + 0.00333\,x$$

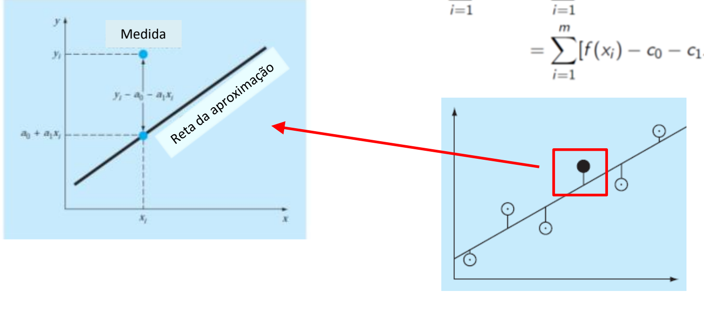
➢ Para os pontos **P2** e **P6** temos:

$$g_2(x) = 0.9275 + 0.00325\,x$$

Para obter as aproximações g_1 e g_2 desprezamos vários dados da lista para fazer a interpolação !! Um modo de verificar quão bem a função aproximação é capaz de representar os dados fornecido pode ser obtido com o cálculo do erro total em termos dos resíduos.

Uma definição para o erro global que fornece uma boa medida do erro total e que também pode ser usara para determinar uma única função linear que leve ao melhor ajuste (isto é, ao menor erro total) é obtida fazendo:

$$E^2 = \sum_{i=1}^{m} r(x_i)^2 = \sum_{i=1}^{m} [f(x_i) - g(x_i)]^2$$
$$= \sum_{i=1}^{m} [f(x_i) - c_0 - c_1 x_i]^2$$



2) **Ajuste de Curvas:** *Método de Mínimos Quadrados*

Para os pontos **P1** e **P7** temos:

$g_1(x) = 0.94 + 0.00333\,x$

x_i	$f(x_i)$	$g(x_i)$	$r_i^{\,2}$
0	0.94	0.94	0
10	0.96	0.97333	0.00017777
20	1	1.0067	4.4436e-005
30	1.05	1.04	0.00010002
40	1.07	1.0733	1.1102e-005
50	1.09	1.1067	0.00027772
60	1.14	1.14	4e-012

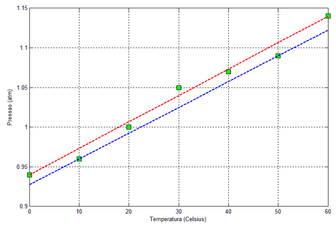
$E_1^{\,2} = 0.00061105$

Para os pontos **P2** e **P6** temos:

$g_2(x) = 0.9275 + 0.00325\,x$

x_i	$f(x_i)$	$g(x_i)$	$r_i^{\,2}$
0	0.94	0.9275	0.00015625
10	0.96	0.96	0
20	1	0.9925	5.625e-005
30	1.05	1.025	0.000625
40	1.07	1.0575	0.00015625
50	1.09	1.09	0
60	1.14	1.1225	0.00030625

$E_2^{\,2} = 0.0013$



Logo, $g_1(x)$ é mais adequado de acordo com esse critério de erros ao quadrado.

Depois de analisar o exemplo, surge a pergunta:

- ***Como escolher c_0 e c_1 de forma que $E^{\,2}$ seja mínimo ?***

2) **Ajuste de Curvas:** *Método de Mínimos Quadrados*

Até o momento somente falamos em aproximação de dados discretos, isto é, aproximar $f(x)$ sabendo os valores de f em um conjunto de pontos x_i.

Também podemos trabalhar com o caso de aproximar $f(x)$, uma função conhecida para todo x, por uma função mais simples como $g(x)$. No **caso contínuo** do método dos mínimos quadrados (MMQ) temos que minimizar:

$$\int_a^b r(x)^2\,dx = \int_a^b (f(x) - g(x))^2\,dx$$

Para poder medir o resíduo, vamos a introduzir formalmente o conceito de **produto escalar** entre funções:

$$< f, g >= \begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^{m} f(x_i)g(x_i), & \textbf{caso discreto} \\ \displaystyle\int_a^b f(x)g(x)\,dx, & \textbf{caso contínuo} \end{cases}$$

2) Ajuste de Curvas: *Método de Mínimos Quadrados*

O MMQ consiste na procura dos parâmetros (c_0, c_1, ...,c_n) que minimizem:

- a soma dos quadrados dos resíduos (caso discreto), ou,
- a integral da função resíduo ao quadrado (caso contínuo).

Desta forma, introduzindo a notação do produto escalar obtemos:

$$< r, r >= \sum_{i=1}^{m}[r(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^{m}[f(x_i) - g(x_i)]^2$$

Portanto, $< r , r >$ é função dos parâmetros c_0, c_1, ...,c_n.

Método de Mínimos Quadrados

Caso Discreto (Linear)

2) **Ajuste de Curvas:** *MMQ – Caso Discreto – Linear*

De forma geral, queremos aproximar *f(x)* por:

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \ldots + c_n\phi_n(x)$$

onde $\phi_j(x)$ são funções conhecidas. Assim, para encontrar os parâmetros c_0, c_1, ...,c_n é preciso minimizar a função:

$$< r, r > = < f - c_0\phi_0 - \ldots - cn\phi_n, f - c_0\phi_0 - \ldots - cn\phi_n >$$
$$= \sum_{i=1}^{m} \left[f(x_i) - \sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j(x_i) \right]^2$$

Observando que < *r, r* > é uma forma quadrática, precisamos derivar com relação a cada um dos parâmetros c_k e igualando a zero temos:

$$< r, r > = -2\sum_{i=1}^{m} \left[f(x_i) - \sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j(x_i) \right] \phi_k(x_i) = 0$$

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

2) **Ajuste de Curvas:** *MMQ – Caso Discreto – Linear*

$$-2\sum_{i=1}^{m} \left[f(x_i) - \sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j(x_i) \right] \phi_k(x_i) = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m} \left\{ \left[f(x_i) - \sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j(x_i) \right] \phi_k(x_i) \right\} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{m} \left[\sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j(x_i)\phi_k(x_i) \right] = \sum_{i=1}^{m} f(x_i)\phi_k(x_i)$$

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{n} c_j \left(\sum_{i=1}^{m} \phi_j(x_i)\phi_k(x_i) \right) = \sum_{i=1}^{m} f(x_i)\phi_k(x_i)$$

Lembrando que:

$$< f, g > = \sum_{i=1}^{m} f(x_i)g(x_i)$$

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

2) **Ajuste de Curvas:** *MMQ – Caso Discreto – Linear*

Empregando a notação de produto escalar, podemos escrever:

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{n} c_j \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{m} \phi_j(x_i)\phi_k(x_i) \right)}_{<\phi_j,\phi_k>=<\phi_k,\phi_j>} = \underbrace{\sum_{i=1}^{m} f(x_i)\phi_k(x_i)}_{<f,\phi_k>=<\phi_k,f>}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{j=0}^{n} c_j < \phi_k, \phi_j > = < f, \phi_k >}$$ para *k = 0, 1, ..., n*

que representa um sistema de equações lineares ($n+1$, $n+1$).

Por exemplo para **n = 2**:

$$\begin{aligned} &< \phi_0, \phi_0 > c_0 + < \phi_0, \phi_1 > c_1 + < \phi_0, \phi_2 > c_2 = < \phi_0, f > \\ &< \phi_1, \phi_0 > c_0 + < \phi_1, \phi_1 > c_1 + < \phi_1, \phi_2 > c_2 = < \phi_1, f > \\ &< \phi_2, \phi_0 > c_0 + < \phi_2, \phi_1 > c_1 + < \phi_2, \phi_2 > c_2 = < \phi_2, f > \end{aligned}$$

Campus AGRESTE

2) **Ajuste de Curvas:** *MMQ – Caso Discreto – Linear*

Escrevendo de forma matricial:

$$\begin{bmatrix} < \phi_0, \phi_0 > & < \phi_0, \phi_1 > & < \phi_0, \phi_2 > \\ < \phi_1, \phi_0 > & < \phi_1, \phi_1 > & < \phi_1, \phi_2 > \\ < \phi_2, \phi_0 > & < \phi_2, \phi_1 > & < \phi_2, \phi_2 > \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} < \phi_0, f > \\ < \phi_1, f > \\ < \phi_2, f > \end{bmatrix}$$

De forma geral, o sistema pode ser representado por:

$$\begin{bmatrix} < \phi_0, \phi_0 > & < \phi_0, \phi_1 > & \dots & < \phi_0, \phi_n > \\ < \phi_1, \phi_0 > & < \phi_1, \phi_1 > & \dots & < \phi_1, \phi_n > \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ < \phi_n, \phi_0 > & < \phi_n, \phi_1 > & \dots & < \phi_n, \phi_n > \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} < \phi_0, f > \\ < \phi_1, f > \\ \vdots \\ < \phi_n, f > \end{bmatrix}$$

o qual é chamado de sistema normal ou equações normais.

IMPORTANTE: pelo fato de $<f, g> = <g, f>$ a matriz é ***simetria***.

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

Exemplo 3: Aplique o MMQ para a tabela de dados:

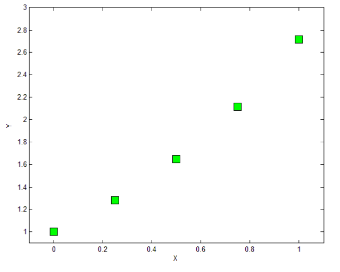
$x_i =$	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x_i) =$	1	1.284	1.6487	2.117	2.7183

Aproximar a função por um polinômio linear.

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x),$$

$$g(x) = c_0 + c_1 x$$

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = x.$$



O sistema que precisamos resolver é dado por:

$$\begin{bmatrix} <\phi_0,\phi_0> & <\phi_0,\phi_1> \\ <\phi_1,\phi_0> & <\phi_1,\phi_1> \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} <\phi_0, f> \\ <\phi_1, f> \end{bmatrix}$$

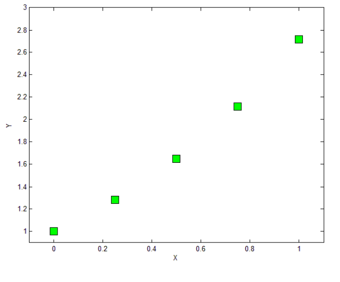
Exemplo 3: Aplique o MMQ para a tabela de dados:

$x_i =$	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x_i) =$	1	1.284	1.6487	2.117	2.7183

Aproximar a função por um polinômio linear.

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = x,$$

$$\phi_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \phi_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0,25 \\ 0,5 \\ 0,75 \\ 1 \end{bmatrix}$$



Calculando os produtos escalares, obtemos:

$$<\phi_0,\phi_0> = 5$$
$$<\phi_0,\phi_1> = 2,5$$
$$<\phi_1,\phi_1> = 1,875$$

$$<f,\phi_0> = 8,768$$
$$<f,\phi_1> = 5,4514$$

2) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Linear*

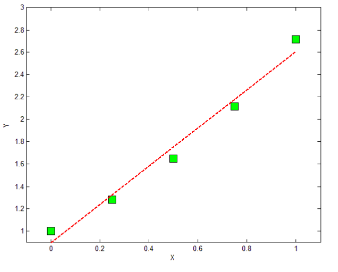
Exemplo 3: Aplique o MMQ para a tabela de dados:

$x_i =$	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x_i) =$	1	1.284	1.6487	2.117	2.7183

Aproximar a função por um polinômio linear.

$$5c_0 + 2.5c_1 = 8.768$$
$$2.5c_0 + 1.875c_1 = 5.4514$$

$$c_0 = 0.89968$$
$$c_1 = 1.70784 \Rightarrow g(x) = 0.89968 + 1.70784x$$



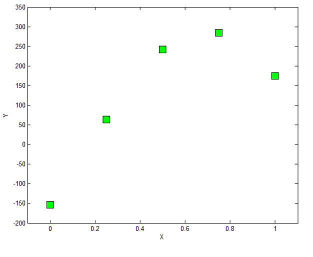
Campus AGRESTE

2) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Linear*

Exemplo 4: Aplique o MMQ para a tabela de dados:

$x_i =$	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x_i) =$	-153	64	242	284	175

Aproximar a função por um polinômio de grau 2.



Campus AGRESTE

2) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Linear*

Exemplo 4: Aplique o MMQ para a tabela de dados:

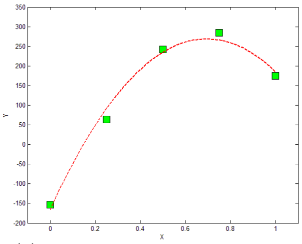
$x_i =$	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x_i) =$	-153	64	242	284	175

Aproximar a função por um polinômio de grau 2.

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x),$$

$$g(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$$

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = x, \quad \phi_2(x) = x^2$$



$$g(x) = -165.3714 + 1250.9714\,x - 900.5714\,x^2$$

$$\begin{bmatrix} <\phi_0,\phi_0> & <\phi_0,\phi_1> & <\phi_0,\phi_2> \\ <\phi_1,\phi_0> & <\phi_1,\phi_1> & <\phi_1,\phi_2> \\ <\phi_2,\phi_0> & <\phi_2,\phi_1> & <\phi_2,\phi_2> \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} <\phi_0, f> \\ <\phi_1, f> \\ <\phi_2, f> \end{bmatrix}$$

Campus AGRESTE

Método de Mínimos Quadrados

Caso Discreto (Não Linear)

Campus AGRESTE

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Não Linear*

Em muitos casos, precisamos ajustar uma curva *g(x)* que é uma função não linear dos parâmetros. Por exemplo:

$$g(x) = c_0\ e^{c_1 x}$$
$$g(x) = c_0\ x^{c_1}$$
$$g(x) = \frac{1}{c_0 + c_1 x}$$
$$g(x) = c_0\ c_1^x$$

Uma forma de tratar esse problema é através da transformação do modelo não linear em um modelo linear (**linearização** ou **mudança de variável**). Para entender o procedimento vamos a considerar o seguinte exemplo.

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

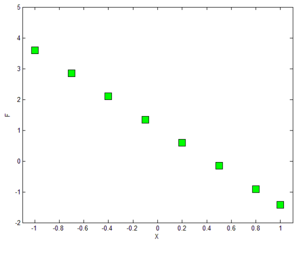
3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Não Linear*

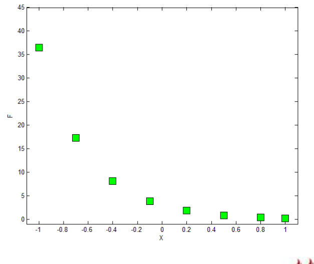
Exemplo 5: Considerando a seguinte tabela de dados, ajuste os mesmos com a função exponencial $f(x) = \beta_1 e^{\beta_2 x}$.

x_i = (-1, -0.7, -0.4, -0.1, 0.2, 0.5, 0.8, 1)^T

$f(x_i)$ = (36.54, 17.26, 8.15, 3.85, 1.82, 0.86, 0.4, 0.24)^T

$$\begin{bmatrix} <\phi_0,\phi_0> & <\phi_0,\phi_1> \\ <\phi_1,\phi_0> & <\phi_1,\phi_1> \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} <\phi_0,F> \\ <\phi_1,F> \end{bmatrix}$$





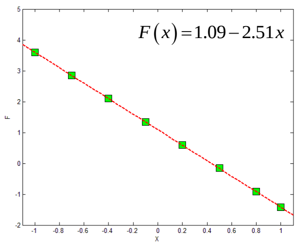
Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

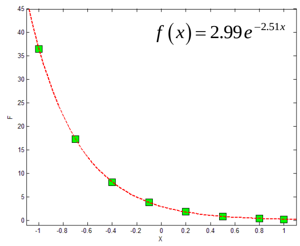
Exemplo 5: Considerando a seguinte tabela de dados, ajuste os mesmos com a função exponencial $f(x) = \beta_1 e^{\beta_2 x}$.

$$x_i = (-1, -0.7, -0.4, -0.1, 0.2, 0.5, 0.8, 1)^T$$

$$f(x_i) = (36.54, 17.26, 8.15, 3.85, 1.82, 0.86, 0.4, 0.24)^T$$

$$\begin{bmatrix} 8.0 & 0.30 \\ 0.30 & 3.59 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 8.0 \\ -8.68 \end{Bmatrix}$$





3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Não Linear*

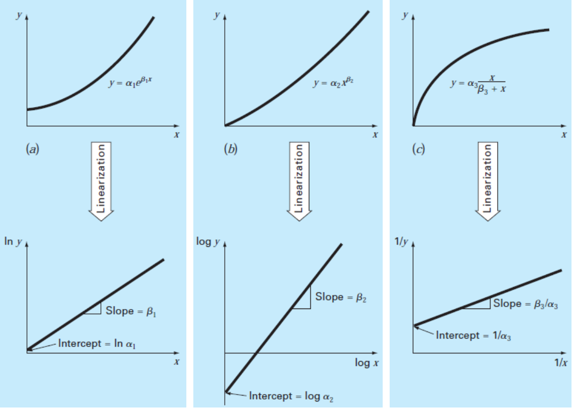
NOTA: os coeficientes obtidos a partir da linearização são aproximados, ou seja, são diferentes daqueles obtidos quando aplicamos mínimos quadrados não linear. Observe que estamos minimizando $\sum_i \left[\ln y_i - \ln\left(f(x_i)\right)\right]^2$ em vez de $\sum_i \left[y_i - f(x_i)\right]^2$.

Na próxima tabela mostram-se algumas curvas e transformações que linearizam o problema de ajuste.

Curva	Transformação	Problema Linearizado
$y = ae^{bx}$	$\tilde{y} = \ln y$	$\tilde{y} = \ln a + bx$
$y = ax^b$	$\tilde{y} = \ln y$	$\tilde{y} = \ln a + b \ln x$
$y = ax^b e^{cx}$	$\tilde{y} = \ln y$	$\tilde{y} = \ln a + b \ln x + cx$
$y = ae^{(b+cx)^2}$	$\tilde{y} = \ln y$	$\tilde{y} = \ln a + b^2 + bcx + c^2x^2$
$y = \frac{a}{b+x}$	$\tilde{y} = \frac{1}{y}$	$\tilde{y} = \frac{b}{a} + \frac{1}{a}x$
$y = A\cos(\omega x + \phi)$	$-$	$y = a\cos(\omega x) - b\,\mathrm{sen}\,(\omega x)$
ω conhecido		$a = A\cos(\phi)$, $b = A\,\mathrm{sen}\,(\phi)$

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Discreto – Não Linear*



Método de Mínimos Quadrados

Caso Contínuo

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Contínuo*

Até o momento foi apresentado como aproximar uma função $f(x)$ por uma função $g(x)$ em um conjunto de pontos x_i onde conhecemos o valor de $f(x_i)$. → CASO DISCRETO

Agora vamos a considerar o **CASO CONTÍNUO**, onde queremos aproximar $f(x)$ que é uma função conhecida para todo x em um intervalo [a, b], por uma função $g(x)$ definida na forma:

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \ldots + c_n\phi_n(x)$$

onde ϕ_0(x), ..., ϕ_n(x) são funções contínuas e conhecidas.

- Inicialmente, para apresentar o método vamos a considerar o seguinte caso:

$$g(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x)$$

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Contínuo*

Lembrando, ver *slide 12*, que o produto escalar entre duas funções contínuas no intervalo [a, b] é definido por:

$$< f, g >= \int_a^b f(x)g(x)\ dx$$

Podemos então medir a distância entre as funções $f(x)$ e $g(x)$ fazendo:

$$< f-g, f-g >= \int_a^b [f(x)-g(x)]^2\ dx$$

NOTA: no caso discreto empregamos

$$< f-g, f-g >= \sum_{i=1}^{m}[f(x_i)-g(x_i)]^2$$

Cálculo Numérico – 2017.2 – Prof. Gustavo Bono

Campus AGRESTE

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Contínuo*

Considerando o resíduo , r = f – g , temos:

$$< r, r > = \int_a^b [f(x) - g(x)]^2 \, dx = \int_a^b [f - c_0\phi_0 - c_1\phi_1]^2 \, dx$$

$$= \int_a^b [f^2 - 2c_0 f\phi_0 - 2c_1 f\phi_1 + c_0^2\phi_0^2 + 2c_0c_1\phi_0\phi_1 + c_1^2\phi_1^2] \, dx$$

$$= \int_a^b f^2 \, dx - 2c_0 \int_a^b f\phi_0 \, dx - 2c_1 \int_a^b f\phi_1 \, dx$$
$$+ c_0^2 \int_a^b \phi_0^2 \, dx + 2c_0c_1 \int_a^b \phi_0\phi_1 \, dx + c_1^2 \int_a^b \phi_1^2 \, dx$$

No método dos mínimos quadrados (MMQ) procuramos o ponto de mínimo da função dada por

< *r, r* > = < *r, r* > (c_0, c_1).

Portanto, precisamos calcular as derivadas parciais de < *r, r* > com relação a c_0 e c_1.

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Contínuo*

Calculando as derivadas parciais e igualando a zero, podemos escrever:

$$\frac{\partial < r, r >}{\partial c_0} = -2 \int_a^b f\phi_0 \, dx + 2c_0 \int_a^b \phi_0\phi_0 \, dx + 2c_1 \int_a^b \phi_0\phi_1 \, dx = 0$$
$$\frac{\partial < r, r >}{\partial c_1} = -2 \int_a^b f\phi_1 \, dx + 2c_1 \int_a^b \phi_1\phi_1 \, dx + 2c_0 \int_a^b \phi_0\phi_1 \, dx = 0$$

organizando os termos, temos o seguinte sistema:

$$c_0 \int_a^b \phi_0\phi_0 \, dx + c_1 \int_a^b \phi_0\phi_1 \, dx = \int_a^b f\phi_0 \, dx$$
$$c_1 \int_a^b \phi_1\phi_1 \, dx + c_0 \int_a^b \phi_0\phi_1 \, dx = \int_a^b f\phi_1 \, dx$$

usando a definição de produto escalar, o sistema em forma compacto fica:

$\boxed{< \phi_i, \phi_j >= \int_a^b \phi_i(x)\phi_j(x) \, dx}$

$$c_0 \langle \phi_0, \phi_0 \rangle + c_1 \langle \phi_0, \phi_1 \rangle = \langle f, \phi_0 \rangle$$
$$c_0 \langle \phi_1, \phi_0 \rangle + c_1 \langle \phi_1, \phi_1 \rangle = \langle f, \phi_1 \rangle$$

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Contínuo*

O sistema de equações lineares (**equações normais**), pode ser escrito de forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} <\phi_0, \phi_0> & <\phi_0, \phi_1> \\ <\phi_1, \phi_0> & <\phi_1, \phi_1> \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} <f, \phi_0> \\ <f, \phi_1> \end{bmatrix}$$

NOTA: o procedimento de cálculo é similar ao caso discreto, a diferença é na forma de calcular os produtos escalares, pois no caso contínuo temos que calcular as integrais definidas por:

$$\langle \phi_i(x), \phi_j(x) \rangle = \int_a^b \phi_i(x)\phi_j(x)\,dx$$

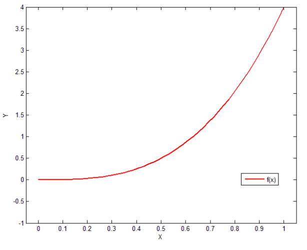
$$\langle f(x), \phi_i(x) \rangle = \int_a^b f(x)\phi_i(x)\,dx$$

3) Ajuste de Curvas: *MMQ – Caso Contínuo*

Exemplo 6: Encontre a reta que melhor aproxima $f(x) = 4x^3$ em [0, 1] usando o Método dos Mínimos Quadrados.

$$\begin{bmatrix} <\phi_0, \phi_0> & <\phi_0, \phi_1> \\ <\phi_1, \phi_0> & <\phi_1, \phi_1> \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} <f, \phi_0> \\ <f, \phi_1> \end{bmatrix}$$

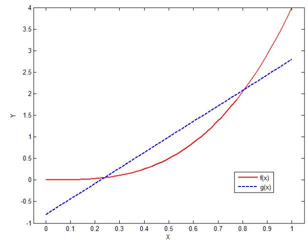
$$\begin{bmatrix} \langle 1,1 \rangle & \langle 1,x \rangle \\ \langle x,1 \rangle & \langle x,x \rangle \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \langle f,1 \rangle \\ \langle f,x \rangle \end{Bmatrix}$$



Exemplo 6: Encontre a reta que melhor aproxima $f(x) = 4x^3$ em [0, 1] usando o Método dos Mínimos Quadrados.

$$\begin{bmatrix} <\phi_0,\phi_0> & <\phi_0,\phi_1> \\ <\phi_1,\phi_0> & <\phi_1,\phi_1> \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} <f,\phi_0> \\ <f,\phi_1> \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \langle 1,1\rangle & \langle 1,x\rangle \\ \langle x,1\rangle & \langle x,x\rangle \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \langle f,1\rangle \\ \langle f,x\rangle \end{Bmatrix}$$



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

Exemplo 7: Encontre o polinômio de segundo grau que melhor aproxima $f(x) = x^4 - 5x$ em [-1, 1] usando o Método dos Mínimos Quadrados.

$$\begin{bmatrix} \langle 1,1\rangle & \langle 1,x\rangle & \langle 1,x^2\rangle \\ \langle x,1\rangle & \langle x,x\rangle & \langle x,x^2\rangle \\ \langle x^2,1\rangle & \langle x^2,x\rangle & \langle x^2,x^2\rangle \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \langle f,1\rangle \\ \langle f,x\rangle \\ \langle f,x^2\rangle \end{Bmatrix}$$

$$\boxed{g(x) = -\frac{3}{35} - 5x + \frac{6}{7}x^2}$$

Dúvidas ??

Obrigado

Críticas e sugestões serão bem-vindas, pois assim poderão ser melhoradas as aulas/slides.
bonogustavo@gmail.com