Cálculo Numérico - Método dos Mínimos Quadrados: funções linearizáveis
Prof^a. Vanessa Rolnik - DCM - FFCLRP/USP

Este material é baseado na Seção 7.4 do livro FRANCO, N.B. Cálculo Numérico. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.

Reduzir funções de ajuste não lineares nos parâmetros para lineares. Vamos estudar algumas linearizações possíveis.

- Aproximar f por uma função do tipo exponencial

$$f(x) \approx g(x) = ae^{bx}.$$

  Este problema é linearizado por meio de uma transformação logarítmica $\ln f(x) \approx \ln(ae^{bx}) = \ln a + bx$.

  Observando que as funções de ajuste são $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$ e os parâmetros são $a_1 = \ln a$ e $a_2 = b$, reduzimos o problema a um caso de ajsute por função linear nos parâmetros. Chamando $F(x) = \ln f(x)$, temos então um novo problema

$$F(x) \approx G(x) = a_1 + a_2 x.$$

  É importante observar que o sistema normal é construído para o novo problema

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1 \rangle & \langle g_1, g_2 \rangle \\ \langle g_2, g_1 \rangle & \langle g_2, g_2 \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, F \rangle \\ \langle g_2, F \rangle \end{bmatrix}$$

  Resolvendo o sistema, obtemos a_1 e a_2 e, para finalizar, voltamos aos parâmetros iniciais $a = e^{a_1}$ e $b = a_2$.

- Aproximar f por uma função do tipo geométrica

$$f(x) \approx g(x) = ax^b.$$

  Este problema é linearizado por meio de uma transformação logarítmica $\ln f(x) \approx \ln(ax^b) = \ln a + b \ln x$.

  Observando que as funções de ajuste são $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = \ln x$ e os parâmetros são $a_1 = \ln a$ e $a_2 = b$, reduzimos o problema a um caso de ajsute por função linear nos parâmetros. Além disso, $F(x) = \ln f(x)$.

- Aproximar f por uma função do tipo hiperbólica

$$f(x) \approx g(x) = \frac{1}{a + bx}.$$

  Este problema é linearizado por meio da inversão da f $\dfrac{1}{f(x)} \approx a + bx$.

  Observando que as funções de ajuste são $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$ e os parâmetros são $a_1 = a$ e $a_2 = b$, reduzimos o problema a um caso de ajsute por função linear nos parâmetros. Além disso, $F(x) = \dfrac{1}{f(x)}$.

- Aproximar f por uma função do tipo racional, por exemplo

$$f(x) \approx g(x) = \frac{a + bx + cx^2}{d + ex}, \quad d \neq 0.$$

Este problema é linearizado multiplicando a expressão pelo denominador

$(d + ex)f(x) \approx a + bx + cx^2$

$df(x) \approx a + bx + cx^2 - exf(x).$

$f(x) \approx \frac{a}{d} + \frac{b}{d}x + \frac{c}{d}x^2 - \frac{e}{d}xf(x).$

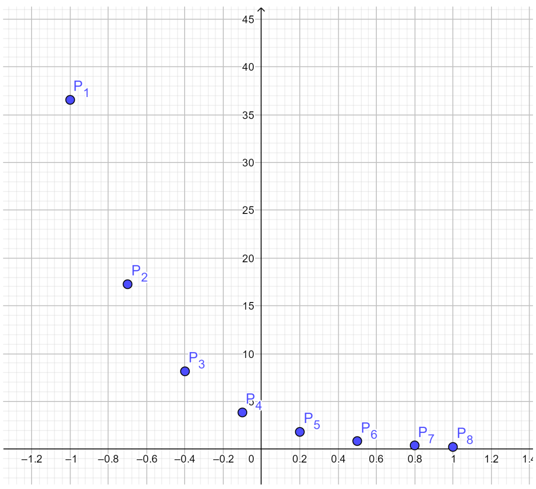
Observando que as funções de ajuste são $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$, $g_3(x) = x^2$ e $g_4(x) = xf(x)$ e os parâmetros são $a_1 = a/d$, $a_2 = b/d$, a_3 reduzimos o problema a um caso de ajsute por função linear nos parâmetros. Neste caso $F(x) = f(x)$.

Exemplo 1. Dada a tabela

x	-1.0	-0.7	-0.4	-0.1	0.2	0.5	0.8	1.0
$f(x)$	36.547	17.264	8.155	3.852	1.820	0.860	0.406	0.246

(a) fazer o gráfico de dispersão;
(b) escolher uma família adequada para o ajuste
(c) realizar o ajuste

a)



b) Pelo gráfico de dispersão, uma escolha bastante representativa dos dados é a função exponencial

$$g(x) = ae^{bx}.$$

c) Como g é não linear nos parâmetros, fazemos a linearização com o operador ln, ou seja, $\ln f(x) \approx \ln(ae^{bx}) = \ln a + bx$.

Neste caso, $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$, $a_1 = \ln a$, $a_2 = b$ e $F(x) = \ln f(x)$ e montamos o seguinte sistema normal

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1\rangle & \langle g_1, g_2\rangle \\ \langle g_2, g_1\rangle & \langle g_2, g_2\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, F\rangle \\ \langle g_2, F\rangle \end{bmatrix}$$

O caso é discreto pois os dados são tabelados e o número de pontos é $n = 8$. Para facilitar as contas, vamos acrescentar uma linha na tabela do enunciado

x	-1.0	-0.7	-0.4	-0.1	0.2	0.5	0.8	1.0
$f(x)$	36.547	17.264	8.155	3.852	1.820	0.860	0.406	0.246
$F(x) = \ln(f(x))$	3.5986	2.8486	2.0986	1.3486	0.5988	-0.1508	-0.9014	-1.4024

Calculamos os produtos escalares,
$\langle g_1, g_1\rangle = \langle 1, 1\rangle = \sum_{i=1}^{8} 1 = 8$
$\langle g_1, g_2\rangle = \langle 1, x\rangle = \sum_{i=1}^{8} x_i = -1 - 0.7 - 0.4 - 0.1 + 0.2 + 0.5 + 0.8 + 1 = 0.3$
$\langle g_2, g_1\rangle = \langle g_1, g_2\rangle = 0.3$
$\langle g_2, g_2\rangle = \langle x, x\rangle = \sum_{i=1}^{8} x_i^2 = (-1)^2 + (-0.7)^2 + (-0.4)^2 + (-0.1)^2 + 0.2^2 + 0.5^2 + 0.8^2 + 1^2 = 3.59$
$\langle g_1, F\rangle = \langle 1, F\rangle = \sum_{i=1}^{8} F(x_i) = 3.599 + 2.849 + 2.099 + 1.349 + 0.599 - 0.151 - 0.901 - 1.402 = 8.0386$
$\langle g_2, F\rangle = \langle x, F\rangle = \sum_{i=1}^{8} x_i F(x_i) = (-1)3.599 + (-0.7)2.849 + (-0.4)2.099 + (-0.1)1.349 + (0.2)0.599 - (0.5)0.151 - (0.8)0.901 - (1)1.402 = -8.6461$
Substituindo no sistema

$$\begin{bmatrix} 8 & 0.3 \\ 0.3 & 3.59 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.0386 \\ -8.6461 \end{bmatrix}$$

cuja solução é $a_1 = 1.0986$ e $a_2 = -2.5002$.
Voltando ao problema original, $a = e^{a_1} = e^{1.0986} = 2.9999$ e $b = a_2 = -2.5002$.
Logo, a função de ajuste procurada é

$$g(x) = 2.9999\, e^{-2.5002\, x}.$$

Exemplo 2. Aproximar a função $y = f(x)$ dada pela tabela

x	0	1	2	3
y	1	1	1.7	2.5

por uma função racional do tipo $g(x) = \dfrac{a + x^2}{b + x}$.

Observe que a função de ajuste é não linear nos parâmetros, porém linearizável. É uma função racional e a técnica de lineazrização é multiplicar o problema original pelo denominador. Assim,

$$f(x) \approx \frac{a + x^2}{b + x} \quad \Rightarrow \quad (b + x)f(x) \approx a + x^2 \quad \Rightarrow \quad bf(x) \approx a + x^2 - xf(x)$$

$$\Rightarrow f(x) \approx \frac{a}{b} + \frac{1}{b}x^2 - \frac{1}{b}xf(x) \quad \Rightarrow \quad \Rightarrow f(x) \approx \frac{a}{b} + \frac{1}{b}(x^2 - xf(x)).$$

O novo problema é linear nos parâmetros com 2 funções $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x^2 - xf(x)$ e 2 parâmetros a determinar $a_1 = a/b$ e $a_2 = 1/b$. Além disso, $F(x) = f(x) = y$.

Para facilitar, adicionamos a função g_2 à tabela

x	0	1	2	3
y	1	1	1.7	2.5
$g_2(x) = x^2 - xy$	0	0	-0.6	-1.5

Calculando os produtos escalares (soma e $n = 4$),
$\langle g_1, g_1 \rangle = \langle 1, 1 \rangle = \sum_{i=1}^{4} 1 = 4$
$\langle g_1, g_2 \rangle = \sum_{i=1}^{4} g_2(x_i) = 0 + 0 - 0.6 - 1.5 = -2.1$
$\langle g_2, g_1 \rangle = \langle g_1, g_2 \rangle = -2.1$
$\langle g_2, g_2 \rangle = \sum_{i=1}^{4} [g_2(x_i)]^2 = 0^2 + 0^2 + (-0.6)^2 + (-1.5)^2 = 2.61$
$\langle g_1, F \rangle = \langle 1, F \rangle = \sum_{i=1}^{4} y_i = 1 + 1 + 1.7 + 2.5 = 6.2$
$\langle g_2, F \rangle = \langle x, F \rangle = \sum_{i=1}^{4} g_2(x_i)y = 0 * 1 + 0 * 1 - 0.6 * 1.7 - 1.5 * 2.5 = -4.77$
Escrevendo o sistema normal,

$$\begin{bmatrix} 4 & -2.1 \\ -2.1 & 2.61 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6.2 \\ -4.77 \end{bmatrix}$$

cuja solução é $a_1 = 1.0224$ e $a_2 = -1.005$.
Voltando ao problema original,

$$a_2 = -\frac{1}{b} \Rightarrow b = -\frac{1}{a_2} = -\frac{1}{-1.005} = 0.9950$$
$$a_1 = \frac{a}{b} \Rightarrow a = a_1 * b = 1.0224 * 0.9950 = 1.0173$$

Logo, a função de ajuste procurada é

$$g(x) = \frac{1.0173 + x^2}{0.9950 + x}.$$

Obs. Note que o mínimo dos resíduos ao quadrado ocorreu em relação ao problema linear nos parâmetros. O que não necessariamente implica que a função de ajuste g em relação a f possuirá a menor soma dos resíduos ao quadrado.

Teste de alinhamento

Tem como objetivo nos auxiliar na escolha da função de ajuste, antes de realizar os cálculos. Suponha que queremos ajustar $y = f(x)$ por, por exemplo, uma das duas funções já linearizadas

$F_1(x) \approx G(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x)$ de forma que $g_1(x) = 1$, a_1 e a_2 não dependem da F_1 e da g_2

$F_2(x) \approx H(x) = c_1 h_1(x) + c_2 h_2(x)$, de forma que $h_1(x) = 1$, c_1 e c_2 não dependem da F_2 e da h_2

Fazer os gráficos (I) $g_2(x)$ contra $F_1(x)$ e (II) $h_2(x)$ contra $F_2(x)$. Escolher o ajuste G se o gráfico (I) estiver mais alinhadodo que o (II) ou escolher o ajuste H se (II) estiver mais alinhado do que o (I).

Exemplo 3. Considere a função dada pela tabela

x	-8	-6	-4	-2	0	2	4
$f(x)$	30	10	9	6	5	4	4

Entre as funções $g(x) = \dfrac{1}{a+bx}$ e $h(x) = a\,b^x$, qual escolher para ajustar os dados da tabela?

Para $f(x) \approx \dfrac{1}{a+bx}$, fazemos a linearização

$$\frac{1}{f(x)} \approx a + bx,$$

então $F_1(x) = \dfrac{1}{f(x)}$, $G(x) = a + bx$ com $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$, $a_1 = a$ e $a_2 = b$. Observe que $g_1(x) = 1$, a_1 e a_2 não dependem da F_1 e da g_2.

Para $f(x) \approx a\,b^x$, fazemos a linearização

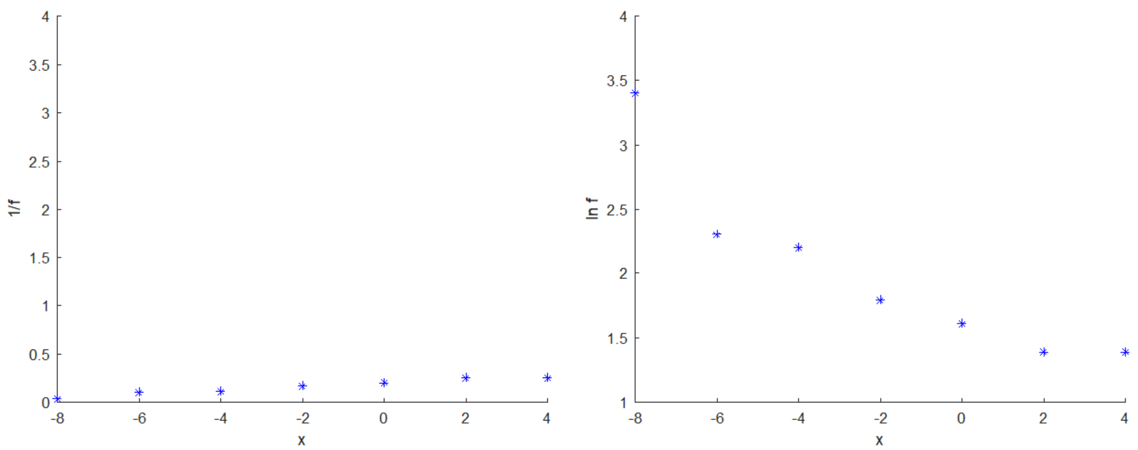
$$\ln f(x) \approx \ln a + bx,$$

então $F_2(x) = \ln f(x)$, $H(x) = \ln a + bx$ com $h_1(x) = 1$, $h_2(x) = x$, $c_1 = \ln a$ e $c_2 = b$. Observe que $h_1(x) = 1$, c_1 e c_2 não dependem da F_2 e da h_2.

Para facilitar, incluímos na tabela F_1 e F_2

x	-8	-6	-4	-2	0	2	4
$f(x)$	30	10	9	6	5	4	4
$F_1(x) = 1/f(x)$	0.0333	0.1000	0.1111	0.1667	0.2000	0.2500	0.2500
$F_2(x) = \ln f(x)$	3.4012	2.3026	2.1972	1.7918	1.6094	1.3863	1.3863

Fazendo os gráficos (I) g_2 contra F_1, ou seja, x contra $1/f(x)$ e (II) h_2 contra F_2, ou seja, x contra $\ln f(x)$



Os pontos do gráfico (I) estão mais alinhados. Portanto, devemos escolher o ajuste $g(x) = \dfrac{1}{a + bx}$.

Exercícios

1) Voltando ao Exemplo 3), faça os dois ajustes sugeridos e compare-os visualmente por meio de gráficos e também pelos resíduos totais.

2) A intensidade de uma fonte radioativa é dada por

$$I = I_0 e^{-\alpha t}.$$

Através de observações, tem-se:

t	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
I	3.16	2.38	1.75	1.34	1.00	0.74	0.56

3) Conside a função dada por

x	1.5	2.0	2.5	3.0
$f(x)$	2.1	3.2	4.4	5.8

(a) ajuste os pontos acima por uma função do tipo $\sqrt{a + bx}$, usando o método dos mínimos quadrados.

(b) qual função foi minimizada?