Cálculo Numérico - Método dos Mínimos Quadrados: introdução e ajuste linear
Prof^a. Vanessa Rolnik - DCM - FFCLRP/USP

Este material é baseado nas Seções 7.1 e 7.2 do livro FRANCO, N.B. Cálculo Numérico. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.

Introdução

Ajustar uma curva consiste em escolher uma família de funções g que depende de alguns parâmetros e determinar tais parâmetros de forma que melhor represente os dados disponiveis. Por exemplo,

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \cdots + a_m g_m(x),$$

em que a família de funções $\{g_1, g_2, \cdots, g_m\}$ são escolhidas e os parâmetros a determinar são a_1, a_2, ..., a_m.

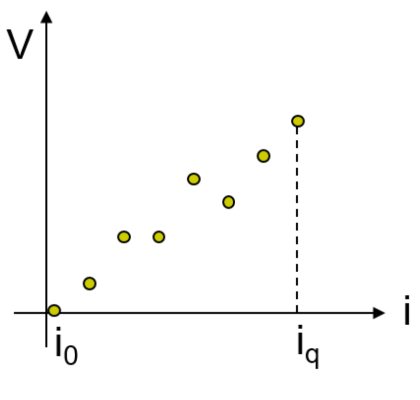
Quanto aos dados a serem ajstados, podem ter

- uma função f que possui algum inconveniente como ter a expressão complicada, não ser derivável, o gráfico com muitas oscilações, etc..., e precisamos de algo mais conveniente e que ao mesmo tempo não perca certas característicias da f, como periodicidade, crescimento, oscilações, etc. (**caso contínuo**)

- um conjunto de pontos $(x_i, f(x_i))$ e precisamos de uma função contínua que represente os dados (**caso discreto**)

O ajuste de curvas pelo Método dos Mínimos Quadrados fornece uma "boa aproximação" para a f e permite "extrapolar" as informações/tendências com uma certa margem de segurança.

Exemplo: Em uma experiência foram medidos vários valores de corrente elétrica que passa por uma resistência submetida a várias tensões, conforme figura



Sabendo que $V = Ri$, queremos determinar o R que faz a reta melhor se ajustar aos pontos.

Ajuste linear - caso discreto

f tabelada e g é um polinômio do 1^o grau

x	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
$f(x)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$\cdots$	$f(x_n)$

$$f(x) \approx g(x) = a + bx$$

queremos determinar os parâmetros a e b de modo que a função g esteja mais próxima possível da f em algum sentido.

Precisamos definir uma forma de medir o erro entre f e g. Seja a função resíduo

$$r(x) = f(x) \; - \; g(x)$$

1a. ideia: $\sum_{i=1}^{n} r(x_i)$, não é interessante pois os erros positivos e negativos se cancelam;

2a. ideia: $\sum_{i=1}^{n} |r(x_i)|$, não é interessante pois a função módulo não é derivável em todos os pontos

3a. ideia: $\sum_{i=1}^{n} (r(x_i))^2$ esta sim é interessante! Não cancela erros positivos e negativos, a função x^2 é derivável em toda a reta e, além disso, penaliza os erros grandes e bonifica erros pequenos.

Mais especificamente, queremos determinar os parâmetros a e b de modo que a reta g minimize a soma dos resíduos ao quadrado. Daí o nome Método dos Mínimos Quadrados.

Para isso, vamos declarar a função $M(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (r(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{n} [f(x_i) - a - bx_i]^2$, derivar e igualar a zero

$$\begin{aligned} \frac{\partial M}{\partial a} &= 2\sum_{i=1}^{n} [f(x_i) - a - bx_i](-1) = 0 \\ \frac{\partial M}{\partial b} &= 2\sum_{i=1}^{n} [f(x_i) - a - bx_i](-x_i) = 0 \end{aligned}$$

Reoganizando as equações, obtemos um sistema linear de 2 equações e 2 incógnitas, a e b, chamado **sistema normal**

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \left(\sum_{i=1}^{n} 1\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b &=& \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \\ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) b &=& \sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i) \end{array} \right. \tag{1}$$

É possível verificar que o sistema normal possui solução única desde que todos os x_i's sejam distintos e que a solução, (a^*, b^*), é um ponto de mínimo de M.

Assim, podemos concluir que entre o conjunto de todas os polinômios do 1^o grau, o que melhor se ajusta aos dados, no sentido dos mínimos quadrados, é $g(x) = a^* + b^*x$. Qualquer outro possui a soma dos resíduos ao quadrado maior do que a de g.

Exemplo 1. Considere a função $y = f(x)$ dada pela tabela

x	-1	0	1	2
y	0	-1	0	7

Ajustá-la por um polinômio do 1^o grau usando o método dos mínimos quadrados e calcular a soma dos resíduos ao quadrado (erro de truncamento ou resíduo total).

Neste caso, $f(x) \approx g(x) = a + bx$ e o número de pontos é $n = 4$.
Fazendo as somas do sistema normal,

$$\sum_{i=1}^{4} 1 = 4 \qquad \sum_{i=1}^{4} x_i = -1 + 0 + 1 + 2 = 2$$

$$\sum_{i=1}^{4} x_i^2 = (-1)^2 + 0^2 + 1^2 + 2^2 = 6 \qquad \sum_{i=1}^{n} f(x_i) = 0 + (-1) + 0 + 7 = 6$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i) = (-1)(0) + (0)(-1) + (1)(0) + (2)(7) = 14$$

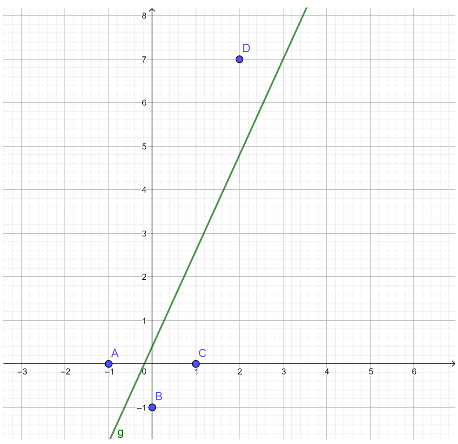
O sistema fica

$$\begin{cases} 4a + 2b = 6 \\ 2a + 6b = 14 \end{cases}$$

que possui a solução $a = 0.4$ e $b = 2.2$.

Portanto, a função de ajuste é $g(x) = 0.4 + 2.2x$. Esta é a reta que melhor se ajusta aos pontos da tabela. Sua soma dos resíduos ao quadrado (erro de truncamento) é

$$\sum_{i=1}^{4} [f(x_i) - 0.4 - 2.2x_i]^2 = [0 - 0.4 - 2.2(-1)]^2 + [-1 - 0.4 - 2.2(0)]^2 + [0 - 0.4 - 2.2(1)]^2 + [7 - 0.4 - 2.2(2)]^2 = 1.8^2 + (-1.4)^2 + (-2.6)^2 + 2.2^2 = 16.8.$$



Ajuste linear - caso contínuo

f definida em um intervalo $[c, d]$ e g um polinômio do 1^o grau, ou seja,

$$f(x) \approx g(x) = a + bx$$

e queremos determinar os parâmetros a e b de modo que a função g esteja mais próxima possível da f no sentido dos mínimos quadrados.

Neste caso, definimos a forma de medir o erro entre f e g por

$$r(x) = f(x) - g(x).$$

Para determinarmos os parâmetros a e b de modo que a distância entre f e g seja mínima, chamamos $M(a,b) = \int_c^d (r(x))^2 dx = \int_c^d [f(x) - a - bx]^2 dx$, derivamos M parcialmente em relação à a e parcialmente em relação â b e igualamos as derivadas a zero

$$\begin{aligned} \frac{\partial M}{\partial a} &= 2\int_c^d [f(x) - a - bx](-1)dx = 0 \\ \frac{\partial M}{\partial b} &= 2\int_c^d [f(x) - a - bx](-x)dx = 0 \end{aligned}$$

com isso, obtemos o sistema normal

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \left(\int_c^d 1\,dx\right) a + \left(\int_c^d x\,dx\right) b &=& \int_c^d f(x)\,dx \\ \left(\int_c^d x\,dx\right) a + \left(\int_c^d x^2\,dx\right) b &=& \int_c^d x f(x)\,dx \end{array} \right. \qquad (2)$$

cuja solução corresponde aos parâmetros procurados.

Exemplo 2. Seja $f(x) = x^4 - 5x$, $x \in [-1, 1]$. Aproximar $f(x)$ por um polinômio do 1^o grau usando o método dos mínimos quadrados.

Começamos pelo cálculo das integrais do sistema normal (2) de -1 a 1

$$\int_{-1}^1 1\,dx = x\Big|_{-1}^1 = 2$$

$$\int_{-1}^1 x\,dx = \frac{x^2}{2}\Big|_{-1}^1 = 0$$

$$\int_{-1}^1 x^2\,dx = \frac{x^3}{3}\Big|_{-1}^1 = \frac{2}{3}$$

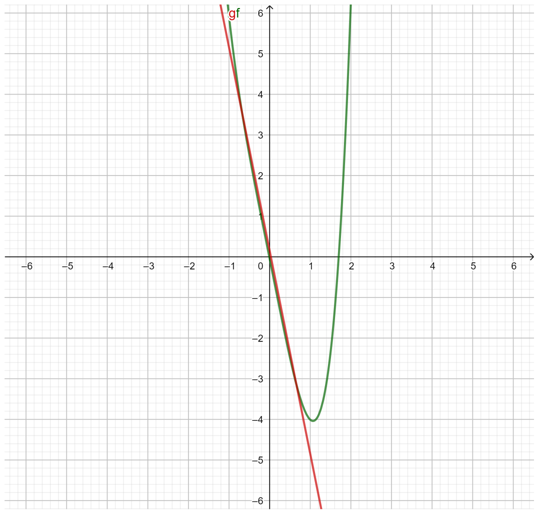
$$\int_{-1}^1 f(x)\,dx = \int_{-1}^1 (x^4 - 5x)\,dx = \left(\frac{x^5}{5} - \frac{5x^2}{2}\right)\Big|_{-1}^1 = \frac{2}{5}$$

$$\int_{-1}^1 x f(x)\,dx = \int_{-1}^1 (x^5 - 5x^2)\,dx = \left(\frac{x^6}{6} - \frac{5x^3}{3}\right)\Big|_{-1}^1 = -\frac{10}{3}$$

Assim, obtemos

$$\left\{ \begin{array}{lcl} 2a + 0b &=& \frac{2}{5} \\ 0a + \frac{2}{3}b &=& -\frac{10}{3} \end{array} \right.$$

que tem como solução $a = \dfrac{1}{5}$ e $b = -5$. Portanto, $g(x) = \dfrac{1}{5} - 5x$.



Exercícios

1) A tabela a seguir mostra um experimento sobre a relação entre pressão e temperatura para um gás ideal em um volume constante

$T(^0\mathrm{C})$	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
p(atm.)	$0,94$	$0,96$	$1,0$	$1,05$	$1,07$	$1,09$	$1,14$	$1,17$	$1,21$	$1,24$	$1,28$

(a) ajuste os dados por uma reta;
$p(T) \approx g(T) = a + bT$
$n = 11$ pontos
caso discreto
calcular os 5 somatórios, montar o sistema normal e resolver. Encontrando a e b substitui na função g.

(b) Extrapolando (estendendo) os dados até que cruze o eixo T horizontal, obtemos uma estimativa da temperatura do zero absoluto. Determine essa aproximação.

2) Aproximar $f(x) = e^x$ por uma reta no intervalo $[0, 1]$ e calcular o erro de truncamento.
caso contínuo, semelhante ao Exemplo 2.

3) Resolver o sistema (1) pela regra de Cramer.
Regra de Cramer para resolver um sistema linear $Ax = b$, onde $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$
$x_1 = \dfrac{\det(A_1)}{\det(A)}$, onde A_1 é a matriz A com a coluna 1 substituída pelo vetor b
$x_2 = \dfrac{\det(A_2)}{\det(A)}$, onde A_2 é a matriz A com a coluna 2 substituída pelo vetor b
Escrevendo na forma matricial o sistema normal do caso discreto, tremos um sistema

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i) \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{pmatrix},\ A_1 = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} f(x_i) & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i) & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{pmatrix} \text{ e } A_2 = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} 1 & \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i) \end{pmatrix}$$

$$a = \frac{\det(A_1)}{\det(A)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} f(x_i) \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} 1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i}$$

$$b = \frac{\det(A_1)}{\det(A)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} 1 \sum_{i=1}^{n} x_i f(x_i) - \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \sum_{i=1}^{n} x_i}{\sum_{i=1}^{n} 1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i}$$

4) Escrever um algoritmo para o ajuste linear discreto usando o resultado do Exercício 3).

Dados de entrada:
n (inteiro): quantidade de pontos
x[n] (vetor de números reais): valores de x tabelados
f[n] (vetor de números reais): valores de $f(x)$ tabelados

Saída: coeficientes a e b da reta $g(x) = a + bx$

```
INICIO
   somax=0
   somax2=0
   somaf=0
   somaxf=0
   Para i de 1 até n faça
      somax=somax+x[i]
      somax2=somax2+x[i]*x[i]
      somaf=somaf+f[i]
      somaxf=somaxf+x[i]*f[i]
   fim
   numa = somaf*somax2-somax*somaxf
   numb = soman*somaxf-somaf*somax
   denom = n*somax2-somax*somax
a=numa/denom
b=numb/denom
Escreva "A reta de ajuste é g(x)='a'+'b'x ."
FIM
```

5) O coeficiente R^2 é bastante utilizado para medir a qualidade do modelo em relação

à sua habilidade de estimar corretamente os dados. É dado por

$$R^2 = 1 - \frac{SQ_{res}}{SQ_{tot}}$$

onde $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$ (ponto médio), $\quad SQ_{tot} = \sum_{i=1}^{n} [g(x_i) - \bar{y}]^2$ (erro total) e $SQ_{res} = \sum_{i=1}^{n} [f(x_i) - \bar{y}]^2$ (erro residual) .

Calcule o coeficiente R^2 do ajuste do Exemplo 1. Incluir o cálculo do R^2 no algoritmo do ajuste linear.