Cálculo Numérico - Método dos Mínimos Quadrados: ajuste por funções lineares nos parâmetros
Prof$^{\text{a}}$. Vanessa Rolnik - DCM - FFCLRP/USP

Este material é baseado nas Seções 7.2 e 7.3 do livro FRANCO, N.B. Cálculo Numérico. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.

Objetivo: ajustar f por uma função g formada pela combinação linear de m funções pré-definidas $\{g_1, g_2, \cdots, g_m\}$, conjunto linearmente independentes, da forma

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

sendo a_1, a_2, ..., a_m.

Procedendo como na aula passada, obtemos o sistema normal no caso discreto, dados n pontos

$$\begin{cases} (\sum_{i=1}^{n} g_1(x_i)g_1(x_i))a_1 & +(\sum_{i=1}^{n} g_1(x_i)g_2(x_i))a_2 & +\cdots+(\sum_{i=1}^{n} g_1(x_i)g_m(x_i))a_m & = \sum_{i=1}^{n} g_1(x_i)f(x_i) \\ (\sum_{i=1}^{n} g_2(x_i)g_1(x_i))a_1 & +(\sum_{i=1}^{n} g_2(x_i)g_2(x_i))a_2 & +\cdots+(\sum_{i=1}^{n} g_2(x_i)g_m(x_i))a_m & = \sum_{i=1}^{n} g_2(x_i)f(x_i) \\ \quad\vdots & & & \\ (\sum_{i=1}^{n} g_m(x_i)g_1(x_i))a_1 & +(\sum_{i=1}^{n} g_m(x_i)g_2(x_i))a_2 & +\cdots+(\sum_{i=1}^{n} g_m(x_i)g_m(x_i))a_m & = \sum_{i=1}^{n} g_m(x_i)f(x_i) \end{cases}$$

e no caso contínuo, dada f em $[c, d]$,

$$\begin{cases} (\int_c^d g_1(x)g_1(x)\,dx)a_1 & +(\int_c^d g_1(x)g_2(x)\,dx)a_2 & +\cdots+(\int_c^d g_1(x)g_m(x)\,dx)a_m & = \int_c^d g_1(x)f(x)\,dx \\ (\int_c^d g_2(x)g_1(x)\,dx)a_1 & +(\int_c^d g_2(x)g_2(x)\,dx)a_2 & +\cdots+(\int_c^d g_2(x)g_m(x)\,dx)a_m & = \int_c^d g_2(x)f(x)\,dx \\ \quad\vdots & & & \\ (\int_c^d g_m(x)g_1(x)\,dx)a_1 & +(\int_c^d g_m(x)g_2(x)\,dx)a_2 & +\cdots+(\int_c^d g_m(x)g_m(x)\,dx)a_m & = \int_c^d g_m(x)f(x)\,dx \end{cases}$$

Generalizamos os sistema normal usando o conceito de produto escalar

Produto escalar usual para vetores: $\langle u, v\rangle = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i$

Produto escalar usual para funções: $\langle f, g\rangle = \int_c^d f(x)g(x)dx$

Assim,

$$\begin{cases} \langle g_1, g_1\rangle a_1 & +\langle g_1, g_2\rangle a_2 & +\cdots+\langle g_1, g_m\rangle a_m & = \langle g_1, f\rangle \\ \langle g_2, g_1\rangle a_1 & +\langle g_2, g_2\rangle a_2 & +\cdots+\langle g_2, g_m\rangle a_m & = \langle g_2, f\rangle \\ \quad\vdots & & & \\ \langle g_m, g_1\rangle a_1 & +\langle g_m, g_2\rangle a_2 & +\cdots+\langle g_m, g_m\rangle a_m & = \langle g_m, f\rangle \end{cases} \tag{1}$$

Na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1\rangle & \langle g_1, g_2\rangle & \cdots & \langle g_1, g_m\rangle \\ \langle g_2, g_1\rangle & \langle g_2, g_2\rangle & \cdots & \langle g_2, g_m\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle g_m, g_1\rangle & \langle g_m, g_2\rangle & \cdots & \langle g_m, g_m\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, f\rangle \\ \langle g_2, f\rangle \\ \vdots \\ \langle g_m, f\rangle \end{bmatrix}$$

Exemplo 1. A partir do sistema (1), como fica o ajuste linear?

No ajuste linear, $f(x) \approx g(x) = a + bx = a * 1 + b * x$.

Observe que g é uma função linear nos parâmetros com duas funções de ajuste $g_1(x) = 1$ e $g_2(x) = x$ e dois parâmetros a determinar $a_1 = a$, $a_2 = b$.

O sistema normal usando a notação de produto escalar fica

$$\begin{bmatrix} \langle 1, 1\rangle & \langle 1, x\rangle \\ \langle x, 1\rangle & \langle x, x\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1, f\rangle \\ \langle x, f\rangle \end{bmatrix}$$

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

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

(a) Ajustá-la por um polinômio do 2^o grau usando o método dos mínimos quadrados.

(b) Calcular a soma dos resíduos ao quadrado (erro de truncamento). O que esse erro representa?

(c) Comparar com o Exemplo 1 da aula passada.

$f(x) \approx g(x) = a_1 + a_2x + a_3x^2$,

que é um caso de ajuste por funções lineares nos parâmetros com 3 funções de ajuste $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = x^2$ e 3 parâmetros a determinar a_1, a_2 e a_3.

Neste caso, o sistema normal é $3\times$ 3:

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1\rangle & \langle g_1, g_2\rangle & \langle g_1, g_3\rangle \\ \langle g_2, g_1\rangle & \langle g_2, g_2\rangle & \langle g_2, g_3\rangle \\ \langle g_3, g_1\rangle & \langle g_3, g_2\rangle & \langle g_3, g_3\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, f\rangle \\ \langle g_2, f\rangle \\ \langle g_3, f\rangle \end{bmatrix}$$

Vamos calcular cada um dos produtos escalares, usando o produto de vetores pois com f é tabelada, o caso é discreto (temos $n = 4$ pontos)

$\langle g_1, g_1\rangle = \langle 1, 1\rangle = \sum_{i=1}^4 1 * 1 = \sum_{i=1}^4 1 = 4$

$\langle g_1, g_2\rangle = \langle 1, x\rangle = \sum_{i=1}^4 1 * x_i = \sum_{i=1}^4 x_i = -1 + 0 + 1 + 2 = 2$

$\langle g_2, g_1\rangle = \langle g_1, g_2\rangle = 2$

$\langle g_1, g_3\rangle = \langle 1, x^2\rangle = \sum_{i=1}^4 1 * x_i^2 = \sum_{i=1}^4 x_i^2 = (-1)^2 + 0^2 + 1^2 + 2^2 = 6$

$\langle g_3, g_1\rangle = \langle g_1, g_3\rangle = 6$

$\langle g_2, g_2\rangle = ... = 6$

$\langle g_2, g_3\rangle = \sum_{i=1}^4 x_i * x_i^2 = \sum_{i=1}^4 x_i^3 = (-1)^3 + 0^3 + 1^3 + 2^3 = 8$

$\langle g_3, g_2\rangle = \langle g_2, g_3\rangle = 8$

$\langle g_3, g_3 \rangle = \sum_{i=1}^{4} x_i^2 * x_i^2 = \sum_{i=1}^{4} x_i^4 = (-1)^4 + 0^4 + 1^4 + 2^4 = 18$
$\langle g_1, f \rangle = \sum_{i=1}^{4} 1 * f(x_i) = \sum_{i=1}^{4} f(x_i) = 0 - 1 + 0 + 7 = 6$
$\langle g_2, f \rangle = \sum_{i=1}^{4} x_i * f(x_i) = (-1) * 0 + 0 * (-1) + 1 * 0 + +2 * 7 = 14$
$\langle g_3, f \rangle = \sum_{i=1}^{4} x_i^2 * f(x_i) = (-1)^2 * 0 + 0^2 * (-1) + 1^2 * 0 + +2^2 * 7 = 28$

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 6 \\ 2 & 6 & 8 \\ 6 & 8 & 18 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 14 \\ 28 \end{bmatrix}$$

cuja solução é $a_1 = -\dfrac{8}{5}$, $a_2 = \dfrac{1}{5}$ e $a_3 = 2$.

Portanto, o polinômio do 2o. grau que melhor se ajusta à funçõa tabelada ê

$$g(x) = -\frac{8}{5} + \frac{1}{5}x + 2x^2.$$

(b) Soma dos resíduos ao quadrado: $\sum_{i=1}^{4}[f(x_i) - g(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^{4}[f(x_i) + \dfrac{8}{5} - \dfrac{1}{5}x_i - 2x_i^2]^2$

$= [0 - (-\dfrac{8}{5} + \dfrac{1}{5}(-1) + 2(-1)^2)]^2 + [-1 - (-\dfrac{8}{5} + \dfrac{1}{5}(0) + 2(0)^2)]^2 +$
$[0 - (-\dfrac{8}{5} + \dfrac{1}{5}(1) + 2(1)^2)]^2 + [7 - (-\dfrac{8}{5} + \dfrac{1}{5}(2) + 2(2)^2)]^2 = 0.8$

Entre todos os polinômios do 2o. grau este é o que possui a menor soma dos resíduos ao quadrado.

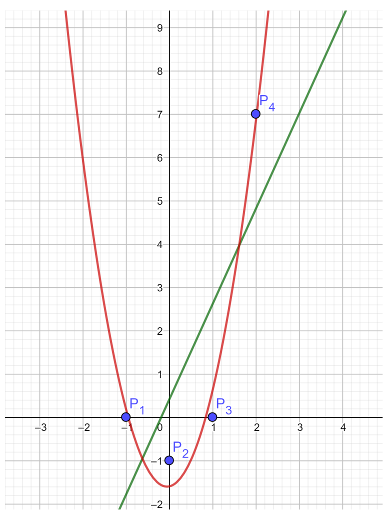
(c) Na aula passada ajustamos os mesmos pontos por um polinômio do 1o. grau e calculamos a soma dos resíduos ao quadrado, que deu 16.8.

Comparando então os dois resíduos,

$$R_{\text{reta}} = 16.8 \quad e \quad R_{\text{parábola}} = 0.8,$$

fica bem claro que a parábola (polinômio do 2o. grau) é melhor quando comparado à reta.

Graficamente, temos



Exemplo 3. Seja $f(x) = x^4 - 5x$, $x \in [-1, 1]$. Aproximar $f(x)$ por um polinômio do 2^o grau usando o método dos mínimos quadrados.

Da mesma forma que no exemplo anterior, a função de ajuste é $g(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2$ e o sistema normal $3\times$ 3 fica:

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1\rangle & \langle g_1, g_2\rangle & \langle g_1, g_3\rangle \\ \langle g_2, g_1\rangle & \langle g_2, g_2\rangle & \langle g_2, g_3\rangle \\ \langle g_3, g_1\rangle & \langle g_3, g_2\rangle & \langle g_3, g_3\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, f\rangle \\ \langle g_2, f\rangle \\ \langle g_3, f\rangle \end{bmatrix}$$

a diferença é que agora temos um caso contínuo pois a f está definida no intervalo $[-1, 1]$. Assim, vamos usar o produto escalar de funções.

$\langle g_1, g_1\rangle = \langle 1, 1\rangle = \int_{-1}^{1} 1 * 1\, dx = \int_{-1}^{1} 1\, dx = x|_{-1}^{1} = 2$

$\langle g_1, g_2\rangle = \langle 1, x\rangle = \int_{-1}^{1} 1 * x\, dx = \int_{-1}^{1} x\, dx = \left.\dfrac{x^2}{2}\right|_{-1}^{1} = 0$

$\langle g_2, g_1\rangle = \langle 1, x\rangle = \langle x, \rangle = \langle g_1, g_2\rangle = 0$

$\langle g_1, g_3\rangle = \langle 1, x^2\rangle = \int_{-1}^{1} 1 * x^2\, dx = \int_{-1}^{1} x^2\, dx = \left.\dfrac{x^3}{3}\right|_{-1}^{1} = \dfrac{2}{3}$

$\langle g_3, g_1\rangle = \langle g_1, g_3\rangle = \dfrac{2}{3}$

$\langle g_2, g_3\rangle = \langle x, x^2\rangle = \int_{-1}^{1} x^3\, dx = \left.\dfrac{x^4}{4}\right|_{-1}^{1} = 0$

$\langle g_3, g_2\rangle = \langle g_2, g_3\rangle = 0$

$\langle g_3, g_3\rangle = \langle x^2, x^2\rangle = \int_{-1}^{1} x^4\, dx = \left.\dfrac{x^5}{5}\right|_{-1}^{1} = \dfrac{2}{5}$

$\langle g_1, f\rangle = \int_{-1}^{1} x^4 - 5x\, dx = -\left.\left(\dfrac{x^5}{5} - \dfrac{5x^2}{2}\right)\right|_{-1}^{1} = \dfrac{2}{5}$

$\langle g_2, f\rangle = \int_{-1}^{1} x(x^4 - 5x)\, dx = -\left.\left(\dfrac{x^6}{6} - \dfrac{5x^3}{3}\right)\right|_{-1}^{1} = -\dfrac{10}{3}$

$\langle g_3, f\rangle = \int_{-1}^{1} x^2(x^4 - 5x)\, dx = -\left.\left(\dfrac{x^7}{7} - \dfrac{5x^4}{4}\right)\right|_{-1}^{1} = \dfrac{2}{7}$

Substituindo no sistema normal, obtemos

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 2/3 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 2/3 & 0 & 2/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/5 \\ -10/3 \\ 2/7 \end{bmatrix}$$

cuja solução é $a_1 = -\dfrac{3}{35}$, $a_2 = -5$ e $a_3 = \dfrac{6}{7}$.

Portanto, a função de ajuste procurada é

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

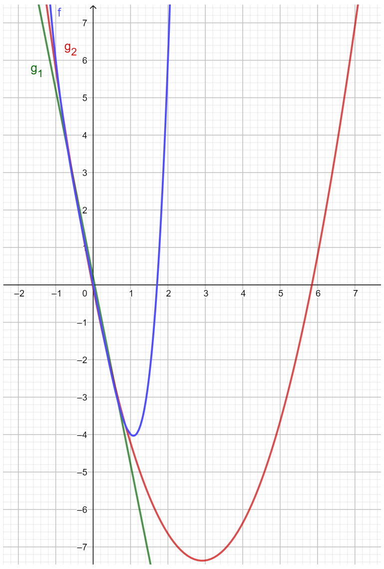
Entre todas as parábolas, esta é a que melhor se ajusta aos dados da tabela.

Não foi pedido no exercício mas para complementar, podemos calcular a soma dos resíduos ao quadrado e comparar com o ajuste linear como no Exemplo 2. Assim,

$R_{\text{parábola}} = \int_{-1}^{1}[f(x) - g(x)]^2 dx = \int_{-1}^{1}[x^4 - 5x - (-\frac{3}{35} - 5x + \frac{6}{7}x^2))]^2 dx$
$= \frac{128}{11025} \approx 0.0116$

Para o ajuste linear obtido na aula passada, $g(x) = \frac{1}{5} - 5x$ e o resíduo
$R_{\text{reta}} = \int_{-1}^{1}[f(x) - g(x)]^2 dx = \int_{-1}^{1}[x^4 - 5x - (-\frac{1}{5} - 5x)]^2 dx = \int_{-1}^{1}[x^4 + \frac{1}{5})]^2 dx = \int_{-1}^{1} x^8 + \frac{2}{5}x^4 + \frac{1}{25} dx = \frac{32}{225} \approx 0.1122$

Portanto, a **parábola** se ajusta melhor aos pontos da tabela. Graficamente, temos



Exemplo 4. Observando um sinal no osciloscópio, verifica-se que ela corresponde à superposição de 2 efeitos, um oscilatório e outro crescente. Medindo alguns valores desse sinal, obtemos a tabela

x	0	1.5	3.0	4.5	6.0
$f(x)$	1.00	1.57	2.00	4.30	7.00

Nestas condições, vamos aproximá-lo por uma função g da família

$$g(x) = ax + b\cos(x).$$

A função de ajuste é linear nos parâmetros, com 2 funções de base $g_1(x) = x$ e $g_2(x) = \cos(x)$ e 2 parâmetros a determinar a e b.

O sistema linear neste caso é 2×2 e fica:

$$\begin{bmatrix} \langle g_1, g_1\rangle & \langle g_1, g_2\rangle \\ \langle g_2, g_1\rangle & \langle g_2, g_2\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle g_1, f\rangle \\ \langle g_2, f\rangle \end{bmatrix}$$

ou ainda,

$$\begin{bmatrix} \langle x, x\rangle & \langle x, \cos x\rangle \\ \langle \cos x, x\rangle & \langle \cos x, \cos x\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle x, f\rangle \\ \langle \cos x, f\rangle \end{bmatrix}$$

Para facilitar, podemos incluir uma linha na tabela para o $\cos(x)$

x	0	1.5	3.0	4.5	6.0
$f(x)$	1.00	1.57	2.00	4.30	7.00
$\cos(x)$	1.00	0.07	-0.98	-0.21	0.96

Calculando os produtos escalares:
$\langle x, x\rangle = \sum_{i=1}^{5} x_i^2 = (0)^2 + (1.5)^2 + (3)^2 + (4.5)^2 + (6)^2 = 67.5$
$\langle x, \cos x\rangle = \sum_{i=1}^{5} x_i \cos(x_i) = 0*1+1.5*0.07+3*(-0.98)+4.5*(-0.21)+6*0.96 = 1.98$
$\langle \cos x, \cos x\rangle = ... = 2.93$
$\langle x, f\rangle = ... = 69.71$
$\langle \cos x, f\rangle = ... = 4.97$
$a = 1.00$ e $b = 1.02$

Exercícios

1) Escreva o sistema normal, na forma matricial, do ajuste por um polinômio de grau m, usando a notação de procuto escalar. Em seguida, reescreva para o caso discreto, usando o produto escalar usual de vetores.

2) Escreva um algoritmo para o ajuste polinomial, caso discreto.

3) Para estudar a variação da relação entre a velocidade tangencial de um vórtice e a velocidade de fluxo, $y = V_\theta/V_\infty$, *versus* a relação entre a distância do núcleo do vórtice e o eixo principal da asa de um avião, $x = R/C$:

x	0,6	0,8	0,85	0,95	1,0	1,1	1,2	1,3	1,45	1,6	1,8
y	0,08	0,06	0,07	0,07	0,07	0,06	0,06	0,06	0,05	0,05	0,04

Segundo a teoria, $y = \dfrac{A}{x} + \dfrac{Be^{-2x^2}}{x}$. Determine A e B.

4) Dados os polinômios ortogonais $P_0(x) = \dfrac{\sqrt{2}}{2}$, $P_1(x) = \dfrac{\sqrt{6}}{2}x$ e $P_2(x) = \dfrac{3\sqrt{10}}{4}(x^2 - \dfrac{1}{3}$.
Aproximar a função $f(x) = x^4 - 5x$, $x \in [-1, 1]$ por
(a) uma reta $g(x) = a_1P_0(x) + a_2P_1(x)$
(b) uma parábola $g(x) = a_1P_0(x) + a_2P_1(x) + a_3P_2(x)$

4) Obter a aproximação trigonométrica $g(x) = a_1 + a_2 \cos x$ para a função $f(x) = |x|$, $-\pi \leq x \leq \pi$. Faça o gráfico de f e g em um mesmo plano cartesiano.