UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Campus de São José dos Campos
Instituto de Ciência e Tecnologia

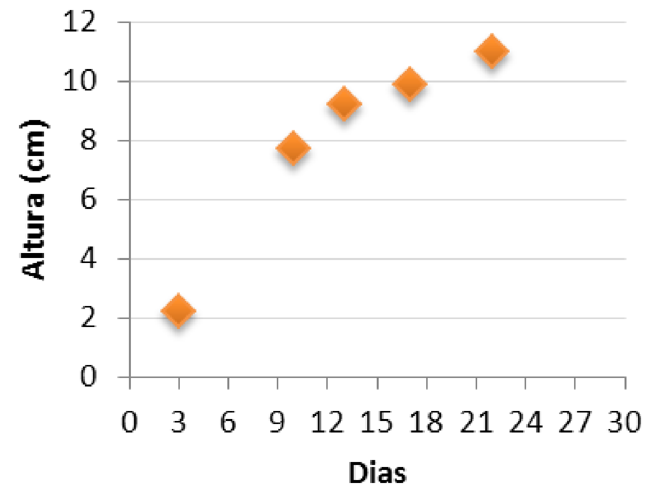
Ajuste de Curvas: Método dos Mínimos Quadrados

Prof. Dr. Rogério Galante Negri

Motivação

- Suponhamos que foi medido em laboratório o crescimento médio de pés de feijão:

Dia	3	10	13	17	22
Altura (cm)	2.2	7.7	9.2	9.9	11



- Como fazemos para conhecer o valor no 6º dia?
- Em que dia (decimal) os feijões atingem altura de 10 cm?

Questões como esta são resolvidas com auxílio da <u>Interpolação</u>:
"Aproximação da função original por uma outra, escolhida dentre uma classe de funções que satisfaz determinadas propriedades"

Contraindicações da Interpolação

- A interpolação é usada para aproximar uma função da qual só conhecemos poucos pontos

- Ela não é indicada para:
  - Determinar valores da função fora do intervalo “interpolado” (não há extrapolação)
  - Os dados tabelados são obtidos de experimentos, pois, os mesmos contém erros inerentes não previsíveis

- Tais contraindicações motiva ajuste de funções aos valores tabelados, da melhor forma possível
- Dessa forma, é possível extrapolar informações com segurança

Casos de Ajuste

- Dois casos para ajuste de curvas são:
  - Discreto
  - Contínuo

- Discreto: ajuste de curvas sobre um conjunto de pontos $(x_i, f(x_i)), i = 1, \ldots, n$ tabelados

- Contínuo: ajuste de curvas sobre uma função $f(x)$ contínua definida em um intervalo $[a, b]$

Caso discreto

- O ajuste é feito sobre os pontos $(x_1, f(x_1)), \dots, (x_m, f(x_m))$ com $x_1, \dots, x_m \in [a, b]$

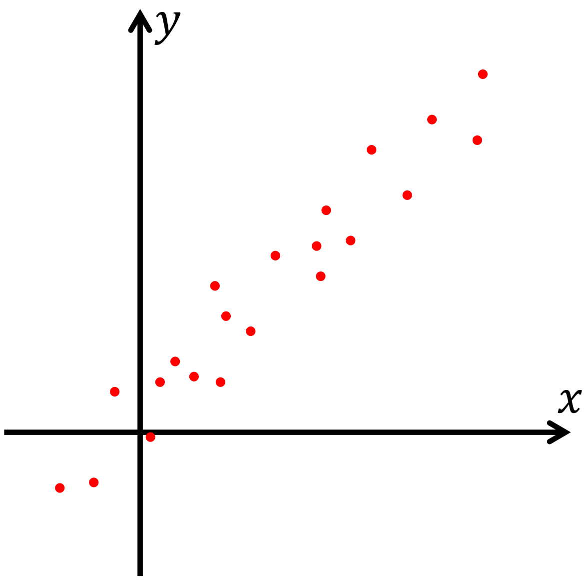
- Para realizar o ajuste:
  - Escolher n funções $g_1(x), \dots, g_n(x)$ contínuas em $[a, b]$
  - Obter n constantes $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ de forma que:

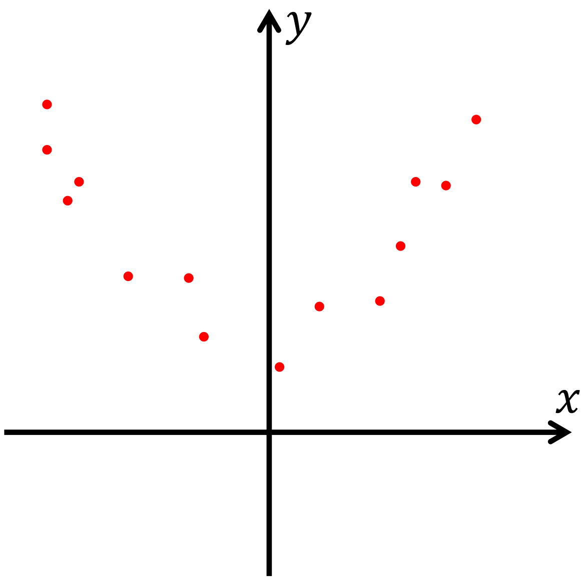
$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \cdots + \alpha_n g_n(x)$$

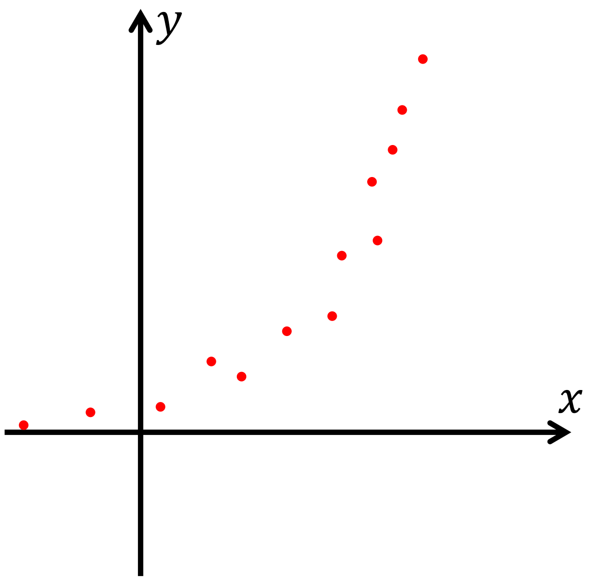
seja a mais próxima possível de $f(x)$

- Observa-se que:
  - É um modelo linear, já que as constantes α_i aparecem linearmente
  - As funções $g_i(x)$ podem não ser lineares
  - A escolha das $g_i(x)$'s é feita pela observação do diagrama de dispersão dos pontos tabelados

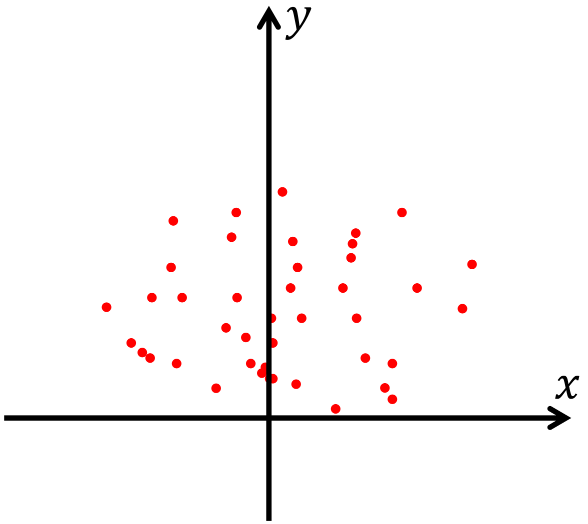
Diagrama de dispersão





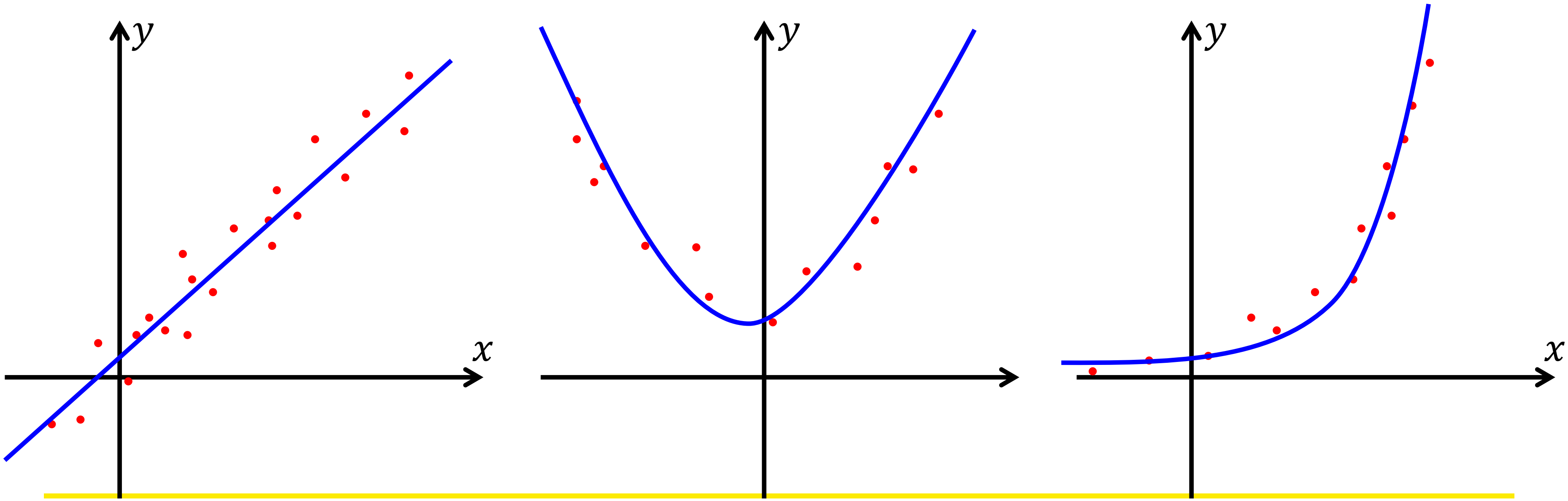


- Suponhamos os diagramas (obtidos experimentalmente)
- Podemos observar um comportamento bem estabelecido
- Nem sempre é possível...



Menor desvio

- Nos exemplos anteriores, qual reta, parábola e exponencial são as que melhor se ajustam?
- Com a escolha das funções $g_i(x)$'s, é observada a proximidade entre $\varphi(x)$ e $f(x)$
- Uma maneira é exigir o <u>menor desvio</u> $f(x) - \varphi(x)$
- O <u>Método dos Mínimos Quadrados</u> (MMQ) determina tal $\varphi(x)$



Caso contínuo

- Dada $f(x)$ contínua em $[a, b]$ e escolhidas $g_1(x), \ldots, g_n(x)$, também contínuas em $[a, b]$

- Podemos definir $\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \cdots + \alpha_n g_n(x)$ que se aproxime o máximo possível de $f(x)$

- A proximidade pode ser dada pela área sob o gráfico de $\varphi(x) - f(x)$

- <u>Área mínima</u> equivale a <u>maior proximidade</u>

MMQ – Caso Discreto

- Dados $(x_i, f(x_i))$, $i = 1, \dots, m$, e $g_j(x)$, $j = 1, \dots, n \leq m$

- Devemos determinar os coef. α_j, $j = 1, \dots, n$ tal que:

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \cdots + \alpha_n g_n(x)$$

seja a mais próxima possível de $f(x)$

- Desejamos $d_k = f(x_k) - \varphi(x_k)$ mínimo, $k = 1, \dots, m$

- O MMQ consiste em selecionar os α_i's que minimiza a seguinte função (soma dos quadrados dos desvios) :

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \sum_{k=1}^{m} d_k^2 = \sum_{k=1}^{m} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2$$

MMQ – Caso Discreto

- O mínimo de $F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ está vinculado aos pontos críticos, isto é:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_n)} = 0; j = 1, \dots, n$$

- Sabemos que:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}\right|_{(\alpha_1,\dots,\alpha_n)} = 2\sum_{k=1}^{m}\big(f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \cdots - \alpha_n g_n(x_k)\big) \cdot (-g_j(x_k))$$

Verifique

- Exigindo $\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_n)} = 0; j = 1, \dots, n$, temos:

$$\sum_{k=1}^{m}\big(f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \cdots - \alpha_n g_n(x_k)\big) \cdot (-g_j(x_k)) = 0$$

para $j = 1, \dots, n$

MMQ – Caso Discreto

- Uma vez que

$$\sum_{k=1}^{m}\big(f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\cdots-\alpha_n g_n(x_k)\big)\cdot(-g_j(x_k))=0$$

para $j=1,\dots,n$, podemos escrever:

$$\begin{cases}\displaystyle\sum_{k=1}^{m}\big(f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\cdots-\alpha_n g_n(x_k)\big)\cdot(-g_1(x_k))=0\\ \displaystyle\sum_{k=1}^{m}\big(f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\cdots-\alpha_n g_n(x_k)\big)\cdot(-g_2(x_k))=0\\ \vdots\\ \displaystyle\sum_{k=1}^{m}\big(f(x_k)-\alpha_1 g_1(x_k)-\cdots-\alpha_n g_n(x_k)\big)\cdot(-g_n(x_k))=0\end{cases}$$

continua...

MMQ – Caso Discreto

$$\begin{cases} \left(\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\cdot g_1(x_k)\right)\alpha_1 + \cdots + \left(\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\cdot g_1(x_k)\right)\alpha_n = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\cdot g_1(x_k) \\ \left(\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\cdot g_2(x_k)\right)\alpha_1 + \cdots + \left(\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\cdot g_2(x_k)\right)\alpha_n = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\cdot g_2(x_k) \\ \vdots \\ \left(\sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\cdot g_n(x_k)\right)\alpha_1 + \cdots + \left(\sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\cdot g_n(x_k)\right)\alpha_n = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\cdot g_n(x_k) \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 + \cdots + a_{1n}\alpha_n = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 + \cdots + a_{2n}\alpha_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}\alpha_1 + a_{n2}\alpha_2 + \cdots + a_{nn}\alpha_n = b_n \end{cases}$$

SL: $\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b}$

onde $a_{ij} = \underbrace{\sum_{k=1}^{m} g_i(x_k)\cdot g_j(x_k)}_{\langle \mathbf{g}_i, \mathbf{g}_j\rangle}$ e $b_i = \underbrace{\sum_{k=1}^{m} f(x_k)\cdot g_i(x_k)}_{\langle \mathbf{f}, \mathbf{g}_j\rangle}$

MMQ – Caso Discreto

- Dado $\mathbf{g}_i = (g_i(x_1), g_i(x_2), \dots, g_i(x_m))^T$
- Se $\mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_n$ são Linearmente Independentes então $\det(\mathbf{A}) \neq 0$
- Logo, o SL possui solução única $\bar{\boldsymbol{\alpha}} = (\bar{\alpha}_1, \dots, \bar{\alpha}_n)$
- Ainda, $\bar{\boldsymbol{\alpha}}$ é o ponto de mínimo de $F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$

- Se os vetores $\mathbf{g}_i$' são tais que o produto escalar

$$\langle \mathbf{g}_i, \mathbf{g}_j \rangle : \begin{cases} = 0, \text{se } i \neq j \\ \neq 0, \text{se } i = j \end{cases}$$

ou seja, ortogonais, teremos $\mathbf{A}$ diagonal, com $a_{ii} \neq 0$ e com solução facílima de calcular [pense!]

O melhor de tudo é que, a partir de $x_1, \dots, x_m$, é simples obter polinômios de grau 0 até n que sejam ortogonais

Exercício – Caso Discreto

- Aproxime uma função para o seguinte conjunto de pontos:

x	-2	-1	0	1	2	3
$f(x)$	19.01	3.99	-1.0	4.01	18.99	45.0

MMQ – Caso Contínuo

Por simplicidade, adotaremos apenas duas funções

- Desejamos que $\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x)$ se aproxime o máximo possível de $f(x)$ em $[a, b]$
- Precisamos obter α_1 e α_2 tais que $\int_a^b \left(f(x) - \varphi(x)\right)^2 dx$ seja o menor possível
- Desenvolvendo:

$$F(\alpha_1, \alpha_2) = \int_a^b \left(f(x) - \varphi(x)\right)^2 dx =$$

$$= \int_a^b f(x)^2 dx - 2\alpha_1 \int_a^b f(x) g_1(x) dx - 2\alpha_2 \int_a^b f(x) g_2(x) dx +$$

$$+\alpha_1^2 \int_a^b g_1^2(x) dx + 2\alpha_1\alpha_2 \int_a^b g_1(x) g_2(x) dx + \alpha_2^2 \int_a^b g_2^2(x) dx$$

MMQ – Caso Contínuo

- Determinamos os pontos críticos de $F(\alpha_1, \alpha_2)$ fazendo:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2)} = 0; \quad j = 1{,}2$$

- Para α_1:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_1}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2)} = -2\int_a^b f(x)g_1(x)dx + 2\alpha_1\int_a^b g_1^2(x)dx + 2\alpha_2\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx$$

- Para α_2:

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_2}\right|_{(\alpha_1,\alpha_2)} = -2\int_a^b f(x)g_2(x)dx + 2\alpha_2\int_a^b g_2^2(x)dx + 2\alpha_1\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx$$

$$\boxed{\mathbf{A}\cdot\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b}} \quad \begin{cases} \alpha_1 \overbrace{\int_a^b g_1^2(x)dx}^{a_{11}} + \alpha_2 \overbrace{\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx}^{a_{12}} = \overbrace{\int_a^b f(x)g_1(x)dx}^{b_1} \\ \alpha_1 \underbrace{\int_a^b g_1(x)g_2(x)dx}_{a_{21}} + \alpha_2 \underbrace{\int_a^b g_2^2(x)dx}_{a_{22}} = \underbrace{\int_a^b f(x)g_2(x)dx}_{b_2} \end{cases}$$

MMQ – Caso Contínuo

- Assim como no caso discreto, se g_1 e g_2 são LI, temos $\det(\mathbf{A}) \neq 0$, logo, o SL tem solução única $\bar{\boldsymbol{\alpha}} = (\bar{\alpha}_1, \ldots, \bar{\alpha}_n)$

- A solução $\bar{\boldsymbol{\alpha}}$ é ponto de mínimo de $F(\alpha_1, \alpha_2)$

- Considerando o produto escalar entre funções $p(x)$ e $q(x)$:

$$\langle p(x), q(x) \rangle = \int_a^b p(x) q(x) dx \quad \star$$

- Temos por sua vez que:

$$(a_{ij}) = \langle g_i(x), g_j(x) \rangle = \int_a^b g_i(x) g_j(x) dx$$

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

É possível obter funções ortogonais para o produto interno ★

Polinômios de Legendre

$$\mathcal{L}_0(x) = 1$$

$$\mathcal{L}_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \cdot \frac{d^{(k)}}{dx^{(k)}} (x^2 - 1)^k; \quad k = 1,2, \ldots$$

são ortogonais em $[-1, +1]$ segundo ★

- Existe ainda uma relação de recorrência para obtenção dos polinômios de Legendre:

$$\mathcal{L}_{k+1}(x) = \left(\frac{2j+1}{j+1}\right) x\mathcal{L}_k(x) - \left(\frac{j}{j+1}\right) \mathcal{L}_{k-1}(x); k = 1,2, \ldots$$

Exercício – Caso Contínuo

- Aproxime a função $f(x) = e^{-x}$ em [1,3] por um polinômio de grau 1 na forma $g(x) = \alpha_1 x + \alpha_2$

Tratamento Não Linear

- Há casos em que as funções escolhidas para ajuste não sejam lineares nos parâmetros α, por exemplo:

$$\varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$$

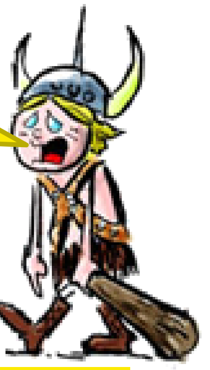
- Para uso do MMQ, deve-se <u>linearizar</u> o problema:

$$\varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x} \Rightarrow \phi(x) = \ln\big(\varphi(x)\big) = \ln(\alpha_1) - \alpha_2 x$$

- Definindo, $\hat{\alpha}_1 = \ln(\alpha_1)$ e $\hat{\alpha}_2 = -\alpha_2$ temos $\phi(x)$ linear nos parâmetros $\hat{\alpha}_1$ e $\hat{\alpha}_2$

- Após essas considerações, o MMQ é aplicado não problema linearizado

Os parâmetros obtidos são usados para determinar os parâmetros originais



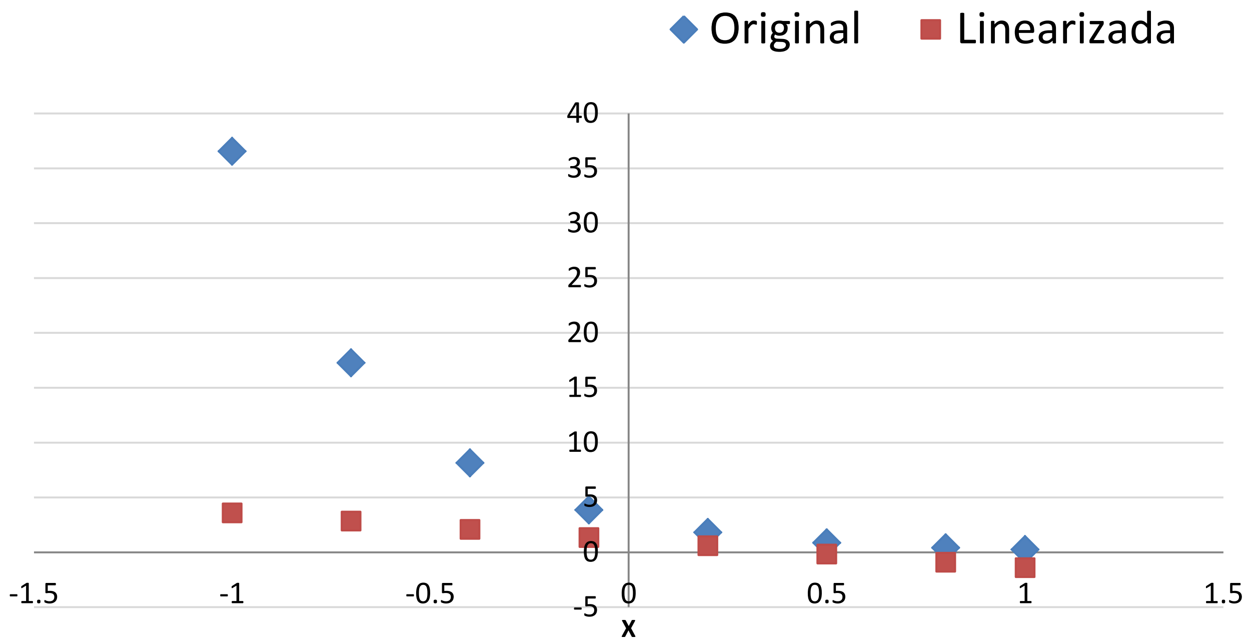
Exemplo

- Considerando os seguintes dados abaixo, faça uma ajuste não-linear. Considere $\varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$

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	1.82	0.86	0.406	0.246

Verificando o Ajuste Não Linear

i. Obter a versão linearizada da função original
ii. Aplicar sobre os dados tabelados
iii. Fazer o diagrama de dispersão
iv. Se os pontos no diagrama estiverem alinhados, então a função usada na linearização foi uma boa escolha



Bibliografia da aula

- RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais**, 2ª Ed. Editora Pearson, 1996.
- FRANCO, N. B. **Cálculo Numérico**. Pearson, 2007.