CÁLCULO NUMÉRICO

Aula 14

Ajuste de Curvas

AJUSTE
DE
CURVAS

Introdução

- Em geral, experimentos geram uma **gama de dados** que devem ser analisados para a criação de um **modelo**.

- Obter uma **função** matemática que **represente** (ou que ajuste) os dados permite fazer simulações do processo de forma confiável, reduzindo assim repetições de experimentos que podem ter um **custo alto**.

Introdução

- Em geral, **não é aconselhável** usar interpolação polinomial quando:

  - Deseja-se **extrapolar**, fazer previsões em regiões fora do intervalo considerado;

  - Os dados tabelados são **resultados de experimentos**, onde **erros** na obtenção destes resultados podem influenciar a sua qualidade.

Introdução

O objetivo é obter uma função que seja uma "boa aproximação" e que permita **extrapolações** com alguma margem de segurança.

Introdução

- A escolha das funções pode ser feita:
  - **Observando o gráfico** dos pontos tabelados;
  - Baseando-se em **fundamentos teóricos** do experimento que forneceu a tabela ou;
  - Através de uma **função já conhecida**.

Introdução

O Método dos Mínimos Quadrados é um método bastante utilizado para **ajustar** uma determinada quantidade de pontos e **aproximar funções**.

MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Método dos Mínimos Quadrados

- O Método dos Mínimos Quadrados consiste em escolher os α_k ($k = 1, 2, ..., n$) de tal forma que:

$$\boxed{\phi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \cdots + \alpha_n g_n(x)} \quad (1)$$

se aproxime ao máximo de $f(x)$.

onde: $f(x)$ fornece os **pontos exatos;**

$g(x)$ fornece os **pontos estimados**.

Método dos Mínimos Quadrados

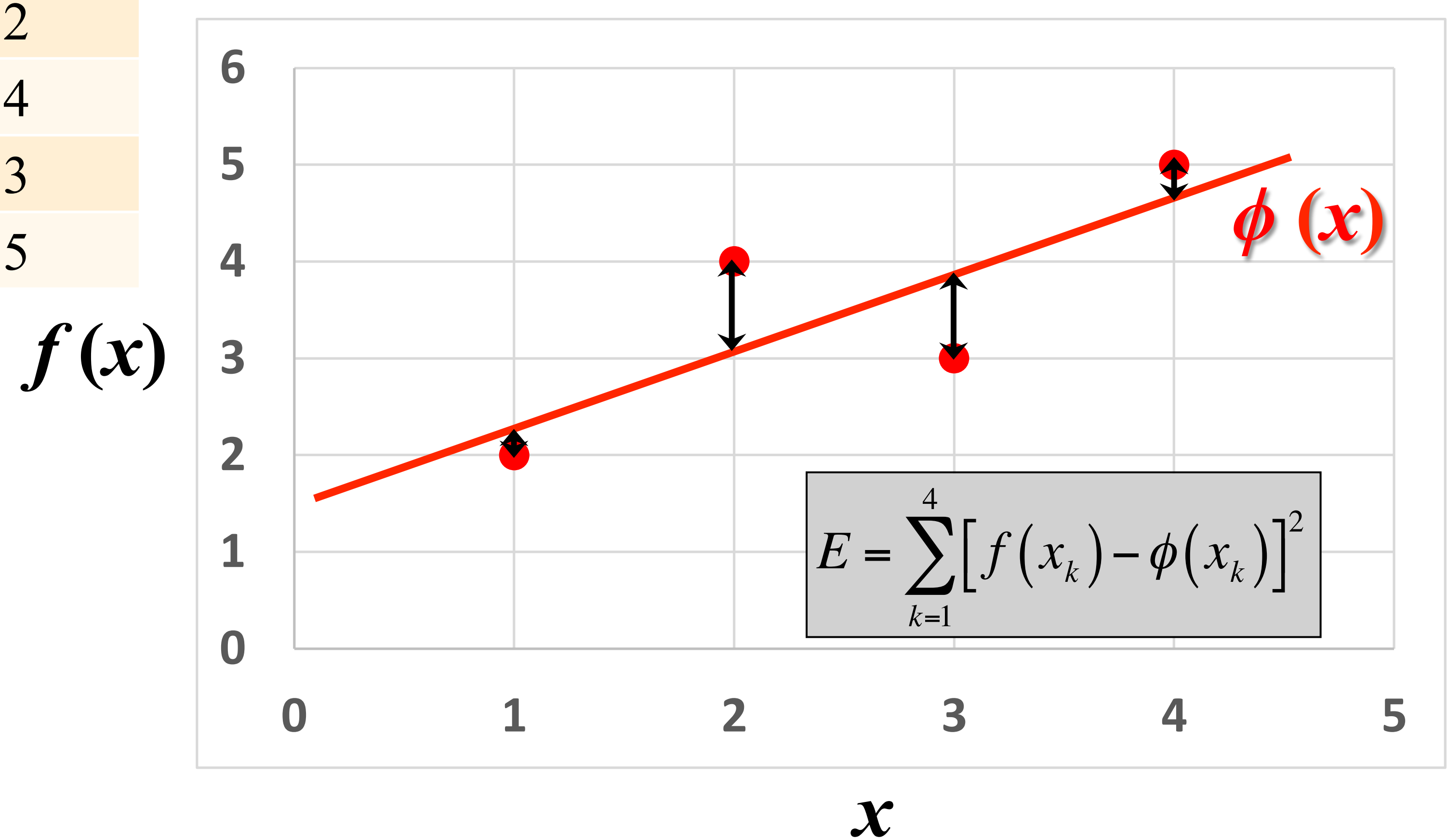
- O Método dos Mínimos Quadrados consiste em escolher os α_k ($k = 1, 2, \ldots, n$) de tal forma que a **soma dos quadrados dos desvios** seja mínima.

$$\boxed{E = \sum_{k=1}^{m} \left[f(x_k) - \phi(x_k) \right]^2} \qquad (2)$$

Método dos Mínimos Quadrados

x_i	$f(x_i)$
1	2
2	4
3	3
4	5

$$\phi(x) = 0{,}8\,x + 1{,}5$$



Método dos Mínimos Quadrados

- Observe que, se o modelo ajustar exatamente aos dados, o mínimo da função:

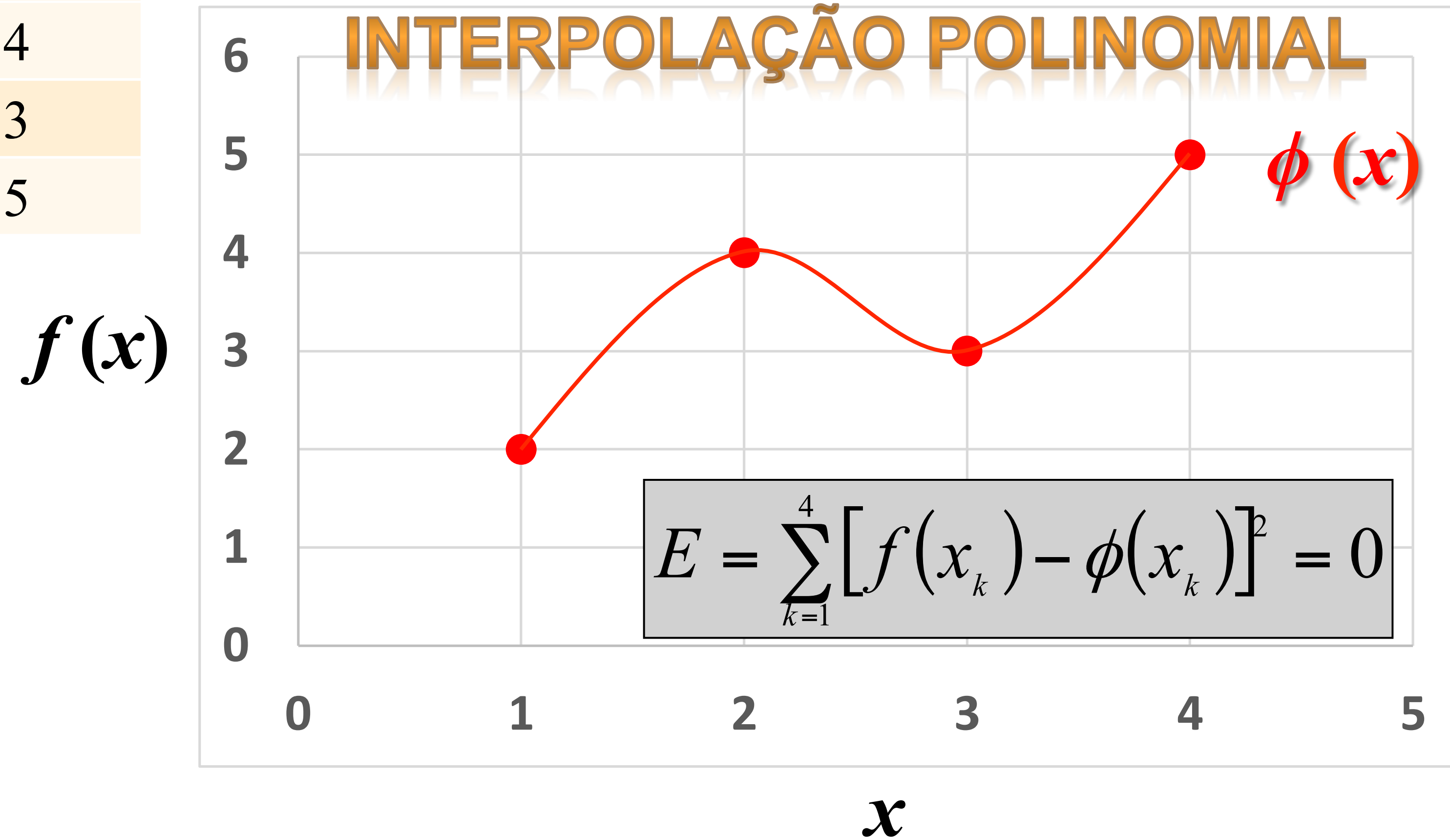
$$E = \sum_{k=1}^{m} \left[f(x_k) - \phi(x_k) \right]^2$$

será zero e, portanto, a **interpolação** é um **CASO ESPECIAL** dentro do método dos quadrados mínimos.

Método dos Mínimos Quadrados

x_i	$f(x_i)$
1	2
2	4
3	3
4	5

$$\phi(x) = x^3 - 7{,}5\,x^2 + 17{,}5\,x - 9$$



$$E = \sum_{k=1}^{4}\left[f(x_k) - \phi(x_k)\right]^2 = 0$$

Método dos Mínimos Quadrados

- Dado um conjunto de pontos $(x_k; f(x_k))$, $k = 0, 1, 2, \ldots, m$

(f dada por **TABELA DE VALORES**)

- O problema de ajuste de curvas consiste em encontrar funções $g_k(x)$, tais que o desvio em cada ponto k, definido por (2) seja mínimo, ou seja:

$$\boxed{\phi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \cdots + \alpha_n g_n(x)}$$

se aproxime ao máximo de $f(x)$.

Método dos Mínimos Quadrados

- **COMO ESCOLHER $g_k(x)$????**

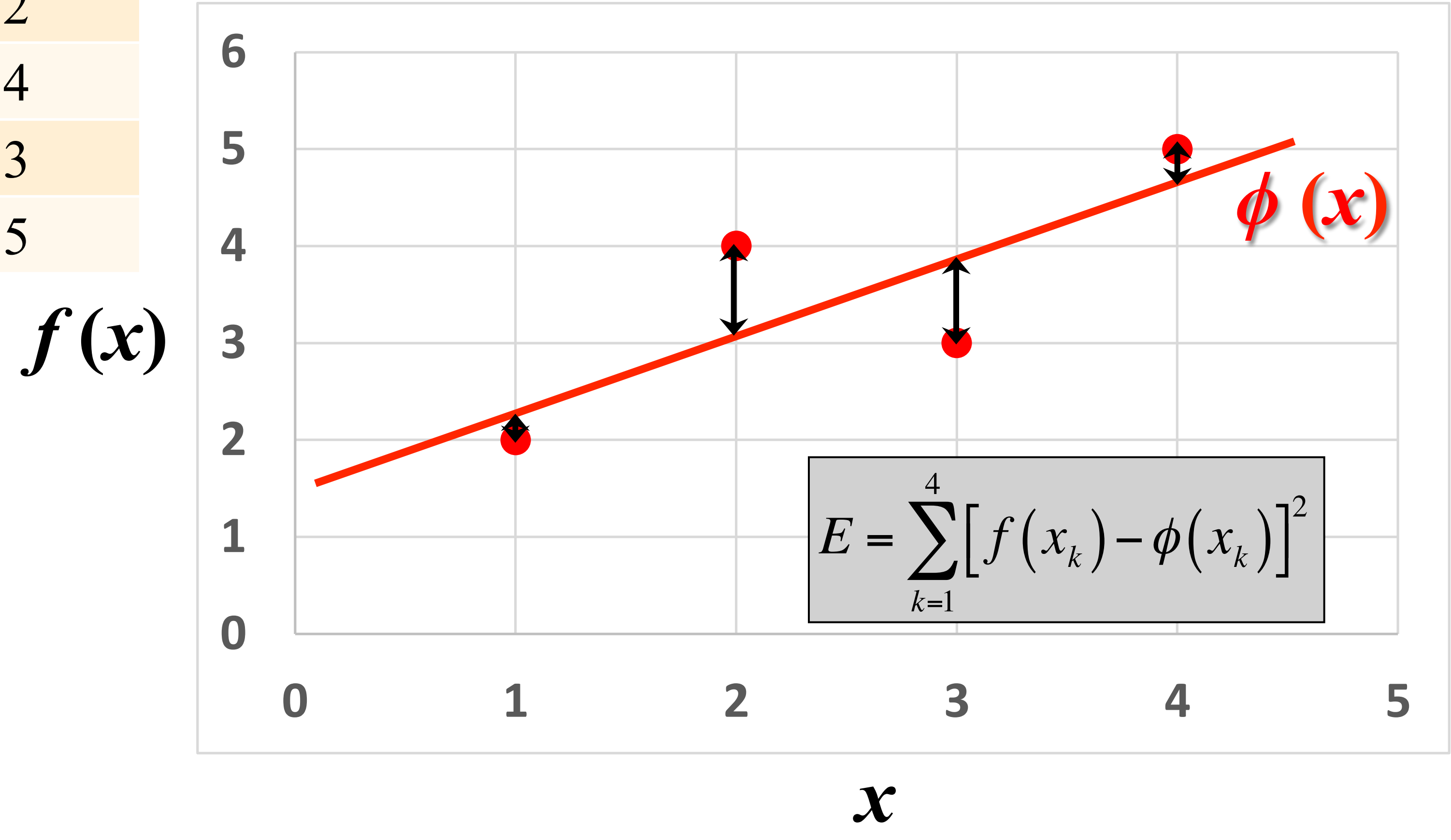
- A escolha das funções $g_k(x)$ depende do gráfico dos pontos, chamado de **DIAGRAMA DE DISPERSÃO**, através do qual pode-se visualizar o tipo de curva que melhor se ajusta aos dados.

AJUSTE LINEAR

Ajuste Linear

x_i	$f(x_i)$
1	2
2	4
3	3
4	5

$$\phi(x) = 0{,}8\,x + 1{,}5$$



$$E = \sum_{k=1}^{4} \left[f(x_k) - \phi(x_k) \right]^2$$

Ajuste Linear

- Como pode ser observado no gráfico anterior, uma possível aproximação seria através de uma **função linear** do tipo:

$$\boxed{\phi(x_k) = \alpha_0 + \alpha_1 x_k} \qquad (3)$$

- Assim o objetivo é determinar os valores de α_0 e α_1, que minimizem:

$$\boxed{E = \sum_{k=1}^{m} \left[y_k - (\alpha_0 + \alpha_1 x_k) \right]^2}$$

Ajuste Linear

- Para que *E* seja mínimo é necessário que:

$$\boxed{\frac{\partial E}{\partial \alpha_0} = 0} \qquad (4)$$

$$\boxed{\frac{\partial E}{\partial \alpha_1} = 0} \qquad (5)$$

Ajuste Linear

- As equações (4) e (5) simplificam-se nas **EQUAÇÕES NORMAIS**:

$$\alpha_0 m + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k = \sum_{k=1}^{m} y_k \qquad (6)$$

$$\alpha_0 \sum_{k=1}^{m} x_k + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k^2 = \sum_{k=1}^{m} x_k y_k \qquad (7)$$

- Resolvendo este sistema de equações, encontramos os valores de α_0 e α_1.

EXEMPLO 1

- Considerando os dados da Tabela 1, e através do gráfico gerado, pode-se definir que tipo de curva melhor se ajusta aos dados.

Tabela 1

x_k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_k	1,3	3,5	4,2	5,0	7,0	8,8	10,1	12,5	13,0	15,6

EXEMPLO 1

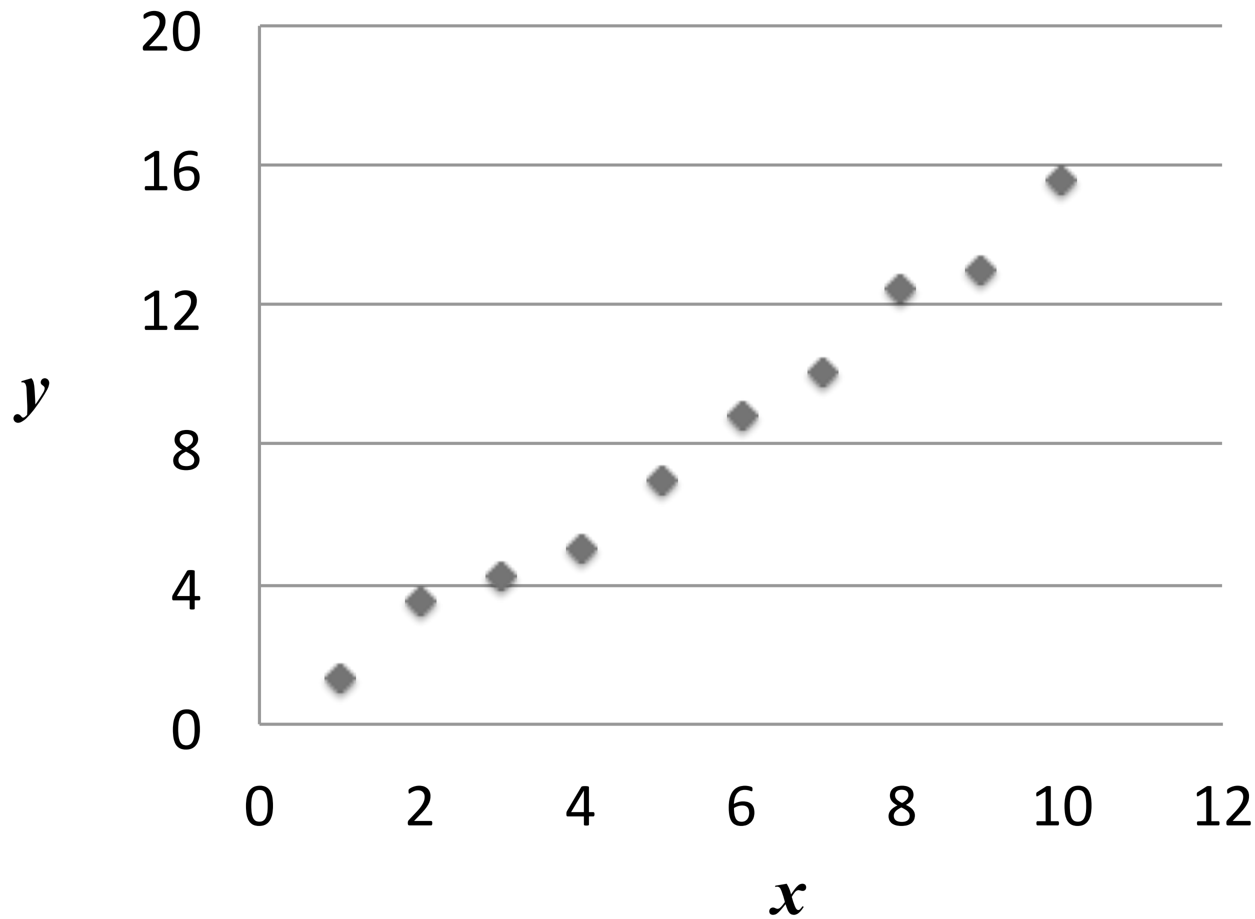


Figura 1. Diagrama de Dispersão para os dados da Tabela 1

EXEMPLO 1

- Considerando a Tabela 1, e os dados necessários para as equações (8) e (9), a Tabela 2 pode ser construída:

k	x_k	y_k	x_k^2	$x_k y_k$
1	1	1,3	1	1,3
2	2	3,5	4	7,0
3	3	4,2	9	12,6
4	4	5,0	16	20,0
5	5	7,0	25	35,0
6	6	8,8	36	52,8
7	7	10,1	59	70,7
8	8	12,5	64	100,0
9	9	13,0	81	117,0
10	10	15,6	100	156,0
Σ	**55**	**81**	**385**	**572,4**

EXEMPLO 1

- Considerando os dados da Tabela 2, os parâmetros α_0 e α_1 podem ser calculados como:

$$\boxed{\alpha_0 = -0,360}$$

$$\boxed{\alpha_1 = 1,538}$$

- Assim a reta a ser ajustada é determinada por:

$$\boxed{y = 1,538x - 0,360}$$

EXEMPLO 1

- Na Figura 2, pode-se observar o ajuste através da reta:

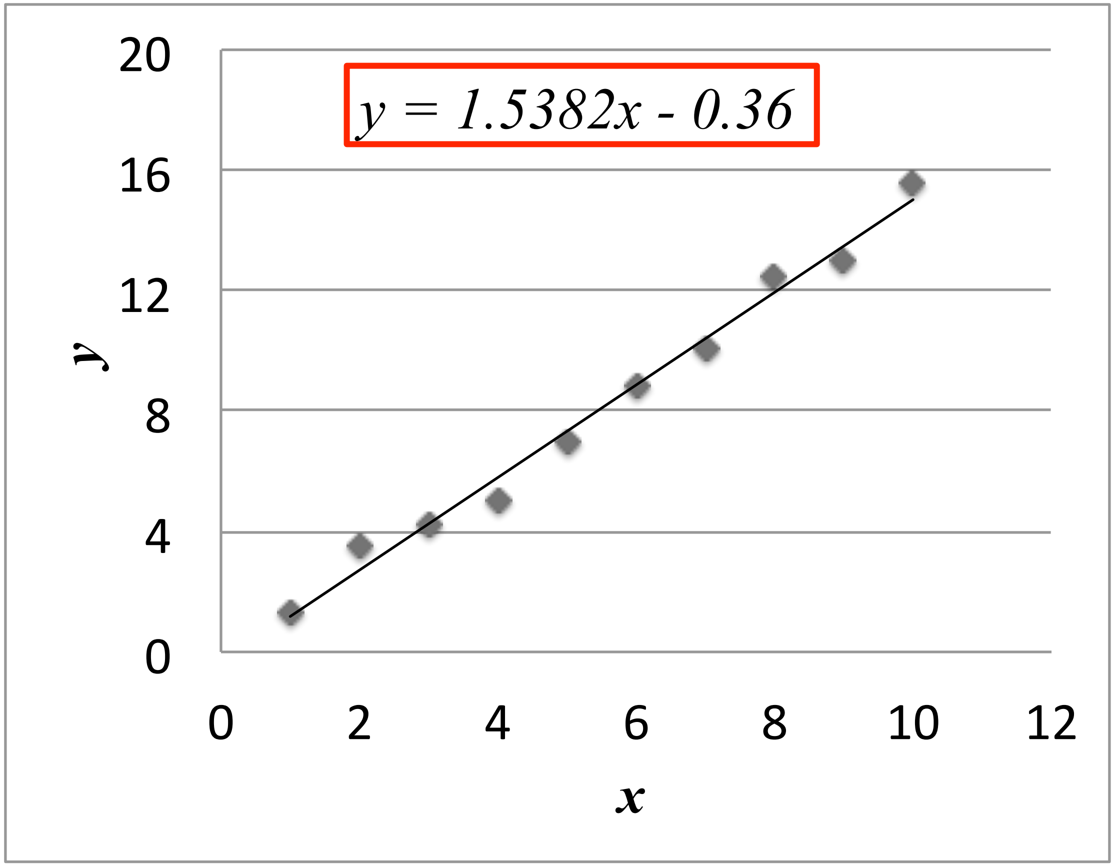


Figura 2. Ajuste linear

AJUSTE POLINOMIAL

Ajuste Polinomial

- O processo usado para o ajuste linear pode ser estendido para ajuste polinomial.
- Assim, uma função polinomial de grau n é dada por:

$$P_n(x) = \alpha_n x^n + \alpha_{n-1} x^{n-1} + \cdots + \alpha_1 x + \alpha_0$$

- O objetivo é minimizar o erro:

$$E = \sum_{k=1}^{m} \left[y_k - P_n(x_k) \right]^2$$

Ajuste Polinomial

- Como no caso linear, para que E seja minimizado é necessário que:

$$\boxed{\frac{\partial E}{\partial \alpha_j}(\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_n) = 0}$$ para cada $j = 0, 1, \ldots, n$.

- Isto fornece as $n+1$ equações normais nas $n+1$ incógnitas α_j:

$$\boxed{\sum_{i=0}^{n} \alpha_i \sum_{k=1}^{m} x_k^{j+i} = \sum_{k=1}^{m} x_k^j y_k}$$ para cada $j = 0, 1, \ldots, n$.

Ajuste Polinomial

$$
\begin{cases}
\alpha_0 m + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k + \alpha_2 \sum_{k=1}^{m} x_k^2 + \cdots + \alpha_n \sum_{k=1}^{m} x_k^n = \sum_{k=1}^{m} y_k \\
\alpha_0 \sum_{k=1}^{m} x_k + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k^2 + \alpha_2 \sum_{k=1}^{m} x_k^3 + \cdots + \alpha_n \sum_{k=1}^{m} x_k^{n+1} = \sum_{k=1}^{m} y_k x_k \\
\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
\alpha_0 \sum_{k=1}^{m} x_k^n + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k^{n+1} + \alpha_2 \sum_{k=1}^{m} x_k^{n+2} + \cdots + \alpha_n \sum_{k=1}^{m} x_k^{2n} = \sum_{k=1}^{m} y_k x_k^n
\end{cases}
$$

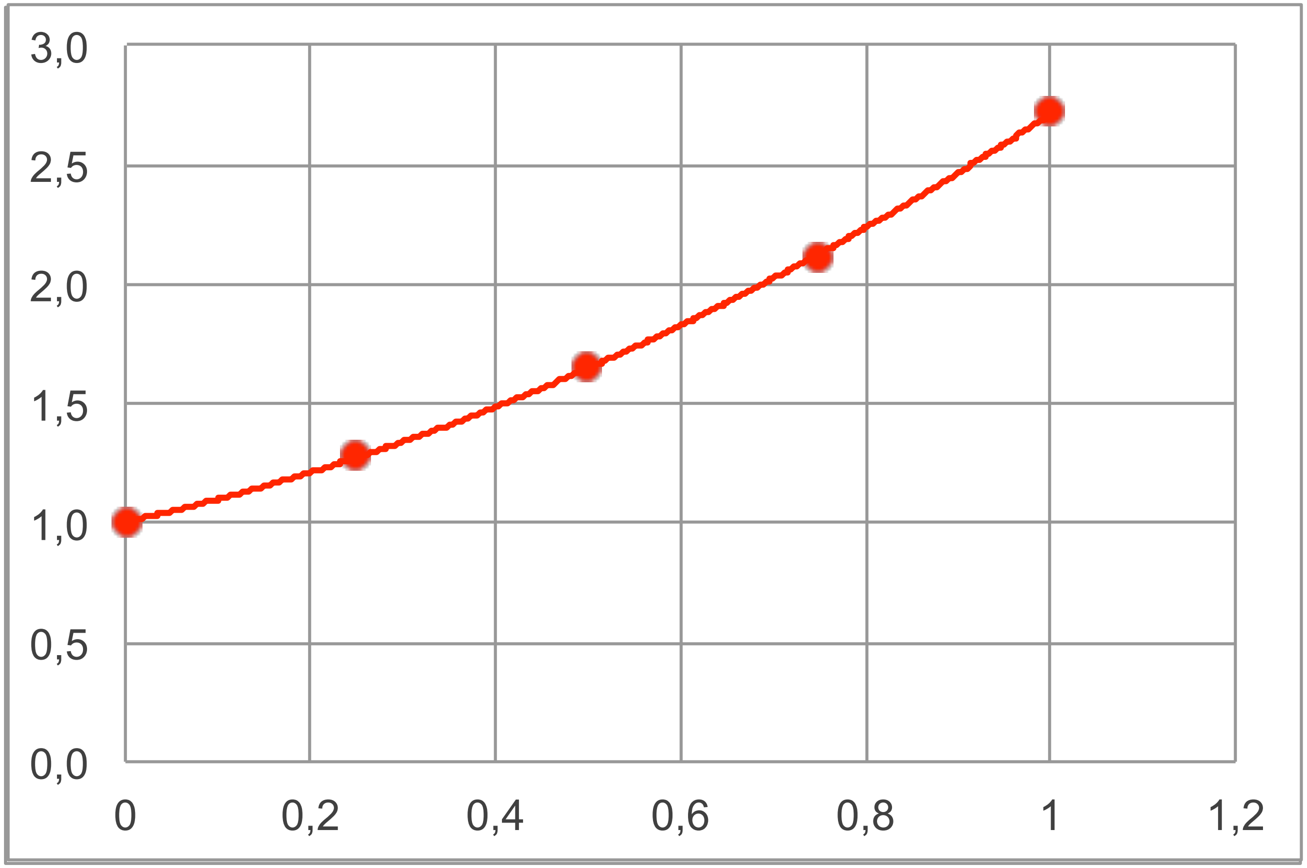
EXEMPLO 2

- Ajustar os dados da Tabela 3 com um polinômio de grau dois utilizando o método dos mínimos quadrados.

Tabela 3

k	x_k	y_k
1	0,00	1,0000
2	0,25	1,2840
3	0,50	1,6487
4	0,75	2,1170
5	1,00	2,7183

EXEMPLO 2



EXEMPLO 2

k	x_k	y_k	x_k^2	x_k^3	x_k^4	$x_k y_k$	$x_k^2 y_k$
1	0,00	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
2	0,25	1,2840	0,0625	0,1563	0,0039	0,3210	0,0803
3	0,50	1,6487	0,2500	0,1250	0,0625	0,8244	0,4122
4	0,75	2,1170	0,5625	0,4219	0,3164	1,5878	1,1908
5	1,00	2,7183	1,0000	1,0000	1,000	2,7183	2,7183
Σ	**2,50**	**8,7680**	**1,875**	**1,5625**	**1,3828**	**5,4514**	**4,4015**

EXEMPLO 2

- Para este problema, $n = 2$, $m = 5$ e as três equações normais são:

$$
\begin{cases}
5{,}0\alpha_0 + 2{,}5\alpha_1 + 1{,}875\alpha_2 = 8{,}7680 \\
2{,}5\alpha_0 + 1{,}875\alpha_1 + 1{,}5625\alpha_2 = 5{,}4514 \\
1{,}875\alpha_0 + 1{,}5625\alpha_1 + 1{,}3828\alpha_2 = 4{,}4015
\end{cases}
$$

- Resolvendo o sistema, obtêm-se:

$$\boxed{\alpha_0 = 1{,}0051} \quad \boxed{\alpha_1 = 0{,}8647} \quad \boxed{\alpha_2 = 0{,}8432}$$

EXEMPLO 2

$$y = 1,0051 + 0,8642x + 0,8437x^2$$

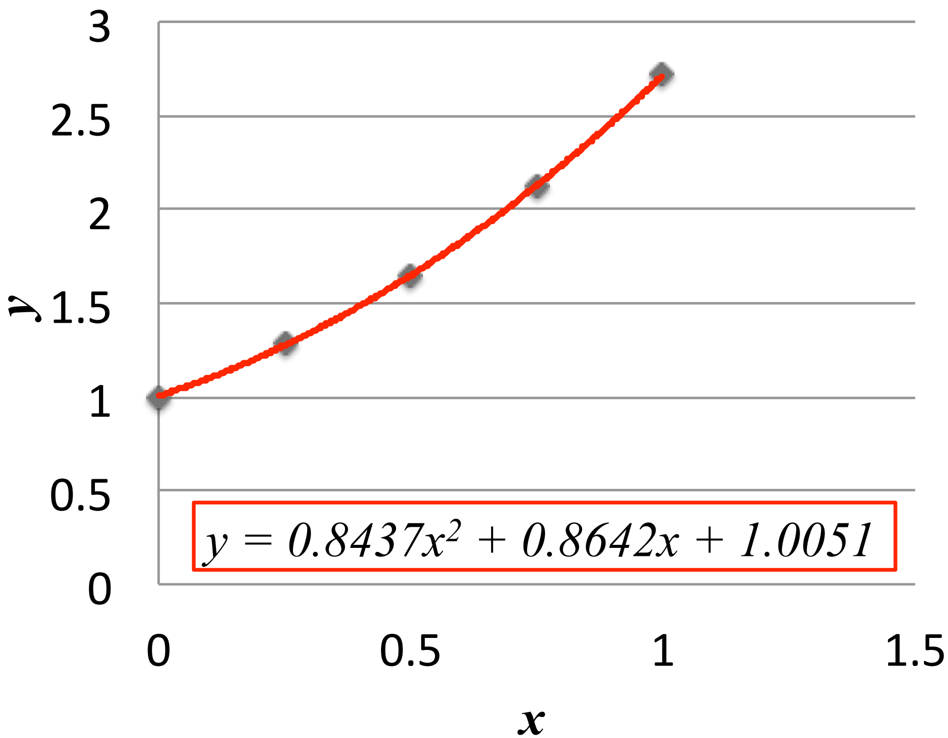


Figura 3. Ajuste polinomial

O erro total

$$E = \sum_{k=1}^{5}\left[y_k - P(x_k)\right]^2$$
$$= 2,74 \times 10^{-4}$$

é o mínimo que pode ser obtido usando um polinômio com grau máximo 2

ATENÇÃO

- Os ajustes realizados até aqui, são **lineares** em relação aos α_k e não às $g_k(x)$.

$$\boxed{g_1(x) = e^x}$$

$$\boxed{g_2(x) = (1+x)^2}$$

se

$$\phi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x)$$

$$\phi(x) = \alpha_1^2 g_1(x) + e^{\alpha_2} g_2(x)$$

EXEMPLO 3

- Podemos proceder de forma análoga aos casos anteriores.
- Por exemplo, se tivermos:

$$\boxed{g_0(x) = x}$$

$$\boxed{g_1(x) = \cos(x)}$$

com, $\phi(x) = \alpha_0 g_0(x) + \alpha_1 g_1(x)$

EXEMPLO 3

$$\begin{cases} \alpha_0 \sum_{k=1}^{m} x_k^2 + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k \cos x_k = \sum_{k=1}^{m} x_k y_k \\ \alpha_0 \sum_{k=1}^{m} x_k \cos x_k + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} \cos^2 x_k = \sum_{k=1}^{m} y_k \cos x_k \end{cases}$$

AJUSTE NÃO-LINEAR

Ajuste Não-Linear

- Existem casos, onde o **diagrama de dispersão** de uma função indica que os dados devem ser ajustados por uma função **não linear**.

- Ocasionalmente, é apropriado supor que os dados estejam relacionados exponencialmente.

- **Exemplo:** $\phi(x) = ae^{bx}$, para a e b constantes.

A **dificuldade** de aplicação do método dos mínimos quadrados neste caso consiste na tentativa de **minimizar** ***E***.

Ajuste Não-Linear

- Para estes casos, um **PROCESSO DE LINEARIZAÇÃO** deve ser empregado, para que seja possível aplicar o Método dos Mínimos Quadrados.

- Neste caso, podemos proceder da seguinte forma:

Ajuste Não-Linear

- Caso I: **Função Exponencial**

$$\boxed{\phi(x) = y = ae^{bx}}$$

- Aplicando logaritmo em ambos os lados, obtêm-se:

$$\ln(y) = \ln\left(ae^{bx}\right) = \ln(a) + bx$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = \ln(y) \\ \alpha_0 = \ln(a) \\ \alpha_1 = b \\ X = x \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_0 + \alpha_1 X$

Ajuste Não-Linear

- Caso II: **Função Logarítmica** $\boxed{y = a\ln(bx)}$
- Expandindo: $y = a\ln(b) + a\ln(x)$
- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = y \\ \alpha_0 = a\ln(b) \\ \alpha_1 = a \\ X = \ln(x) \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_0 + \alpha_1 X$

Ajuste Não-Linear

- Caso III: **Função Potencial** $\boxed{y = \mathrm{a}x^{\mathrm{b}}}$
- Aplicando logaritmo em ambos os lados:

$$\ln(y) = \ln(\mathrm{a}x^{\mathrm{b}}) = \ln(\mathrm{a}) + \ln(x^{\mathrm{b}}) = \ln(\mathrm{a}) + \mathrm{b}\ln(x)$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = \ln(y) \\ \alpha_0 = \ln(\mathrm{a}) \\ \alpha_1 = \mathrm{b} \\ X = \ln(x) \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_0 + \alpha_1 X$

Ajuste Não-Linear

- Caso IV: **Função Hiperbólica**

$$\boxed{y = \mathrm{a} + \frac{\mathrm{b}}{x}}$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = y \\ \alpha_0 = \mathrm{a} \\ \alpha_1 = \mathrm{b} \\ X = x^{-1} \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_0 + \alpha_1 X$

Ajuste Não-Linear

- Usam-se as equações do **Ajuste Linear** para obter α_0 e α_1:

$$\alpha_0 m + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k = \sum_{k=1}^{m} y_k$$

$$\alpha_0 \sum_{k=1}^{m} x_k + \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} x_k^2 = \sum_{k=1}^{m} x_k y_k$$

LEMBRE-SE!!!!!!!

Após aplicar o método dos mínimos quadrados, é preciso fazer as **substituições necessárias** para encontrar os parâmetros **a** e **b** da função de aproximação original.

IMPORTANTE

Observe que os parâmetros a e b assim obtidos **não são ótimos** dentro do critério dos quadrados mínimos, porque estamos ajustando o problema **linearizado** e não o problema **original**.

EXEMPLO 4

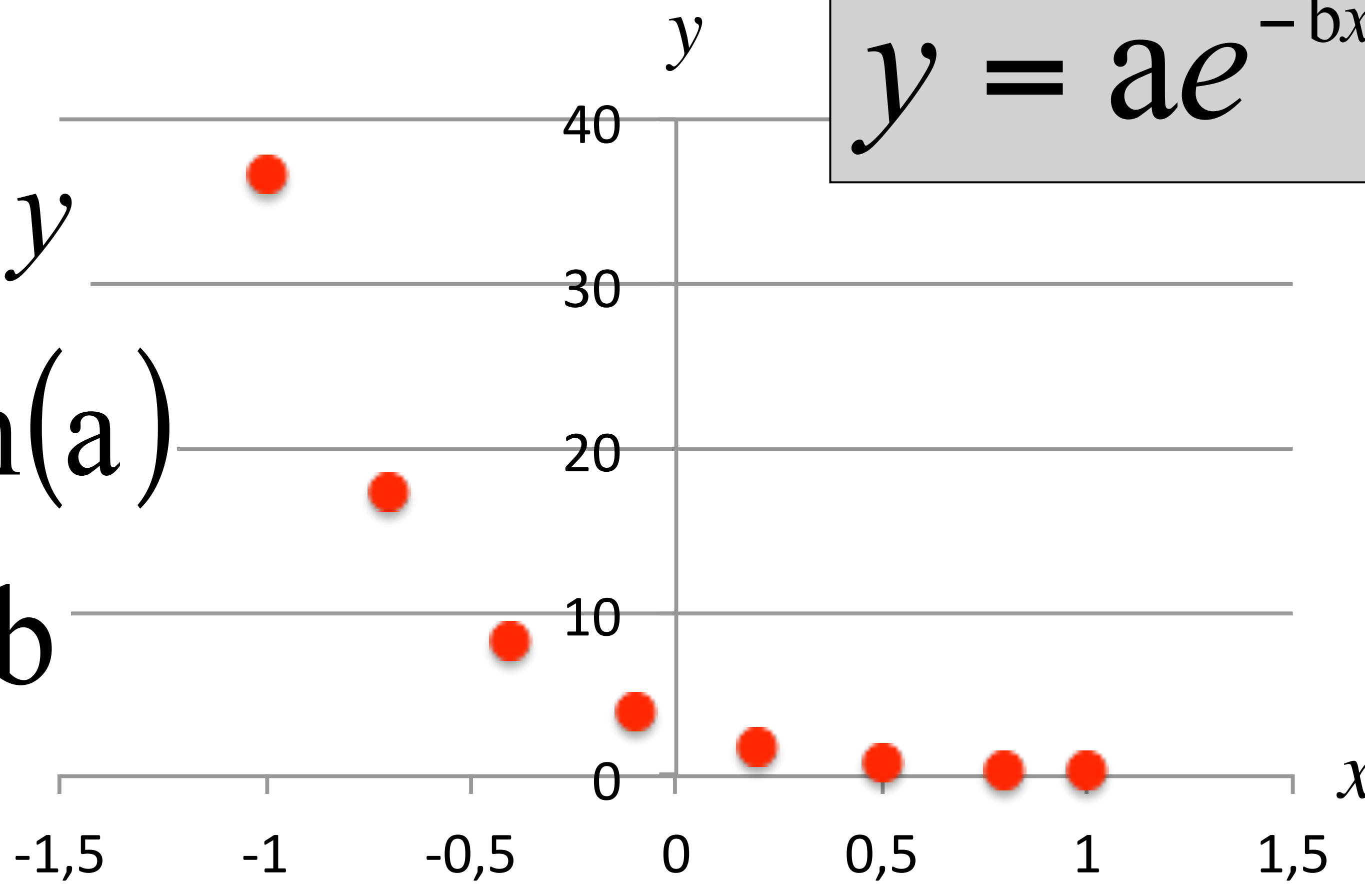
- Encontrar uma função que se ajusta aos valores da tabela abaixo:

x	y
-1,0	36,547
-0,7	17,267
-0,4	8,155
-0,1	3,852
0,2	1,82
0,5	0,86
0,8	0,406
1,0	0,246

EXEMPLO 4

$$y = ae^{-bx}$$

$$\begin{cases} Y = \ln y \\ \alpha_0 = \ln(\mathrm{a}) \\ \alpha_1 = -\mathrm{b} \end{cases}$$



EXEMPLO 4

- Como o ajuste será realizado por uma função exponencial é necessário calcular: $Y = \ln y$

k	x_k	y_k	$Y_k = \ln(y_k)$	x_k^2	$x_k Y_k$
1	-1,0	36,547	3,599	1,00	-3,599
2	-0,7	17,264	2,849	0,49	-1,994
3	-0,4	8,155	2,099	0,16	-0,839
4	-0,1	3,852	1,349	0,01	-0,135
5	0,2	1,820	0,599	0,04	0,120
6	0,5	0,860	-0,151	0,25	-0,075
7	0,8	0,406	-0,901	0,64	-0,721
8	1,0	0,246	-1,402	1,00	-1,402
Σ	**0,3**	**69,15**	**8,041**	**3,59**	**-8,645**

EXEMPLO 4

$$\alpha_0 = 1,099 \qquad \alpha_1 = -2,5$$

$$\alpha_0 = \ln(a) \qquad \alpha_1 = -b$$

$$\boxed{a = 3,001} \qquad \boxed{b = 2,5}$$

$$\boxed{y = 3,001e^{-2,5x}}$$

LEMBRE-SE!!!!!!!

- Os parâmetros α_0 e α_1 que ajustam a função **$\varphi(x)$ à função y** no sentido dos quadrados mínimos.

- **NÃO** se pode afirmar que os parâmetros **a** e **b** (obtidos através de α_0 e α_1) são os que **ajustam ϕ (x) à função y** dentro dos critérios dos quadrados mínimos.

Teste de Alinhamento

- Uma vez escolhida uma função não linear em a, b, … para ajustar uma função. Uma forma de verificar se a escolha foi razoável é aplicar o **TESTE DE ALINHAMENTO**.

Teste de Alinhamento

- Fazer a "**linearização**" da função não linear escolhida;

- Fazer o **diagrama de dispersão** dos novos dados;

- Se os pontos do diagrama estiverem alinhados, isto significará que a **função não linear** escolhida foi uma "**boa escolha**".

EXEMPLO 4

- Gráfico de x versus $Y = ln\ y$

k	x_k	y_k	$Y_k = ln(y_k)$
1	-1	36,547	3,599
2	-0,7	17,264	2,849
3	-0,4	8,155	2,099
4	-0,1	3,852	1,349
5	0,2	1,820	0,599
6	0,5	0,860	-0,151
7	0,8	0,406	-0,901
8	1	0,246	-1,402
Σ	**0,3**	**69,15**	**8,041**

Teste de Alinhamento

- **EXEMPLO 4**

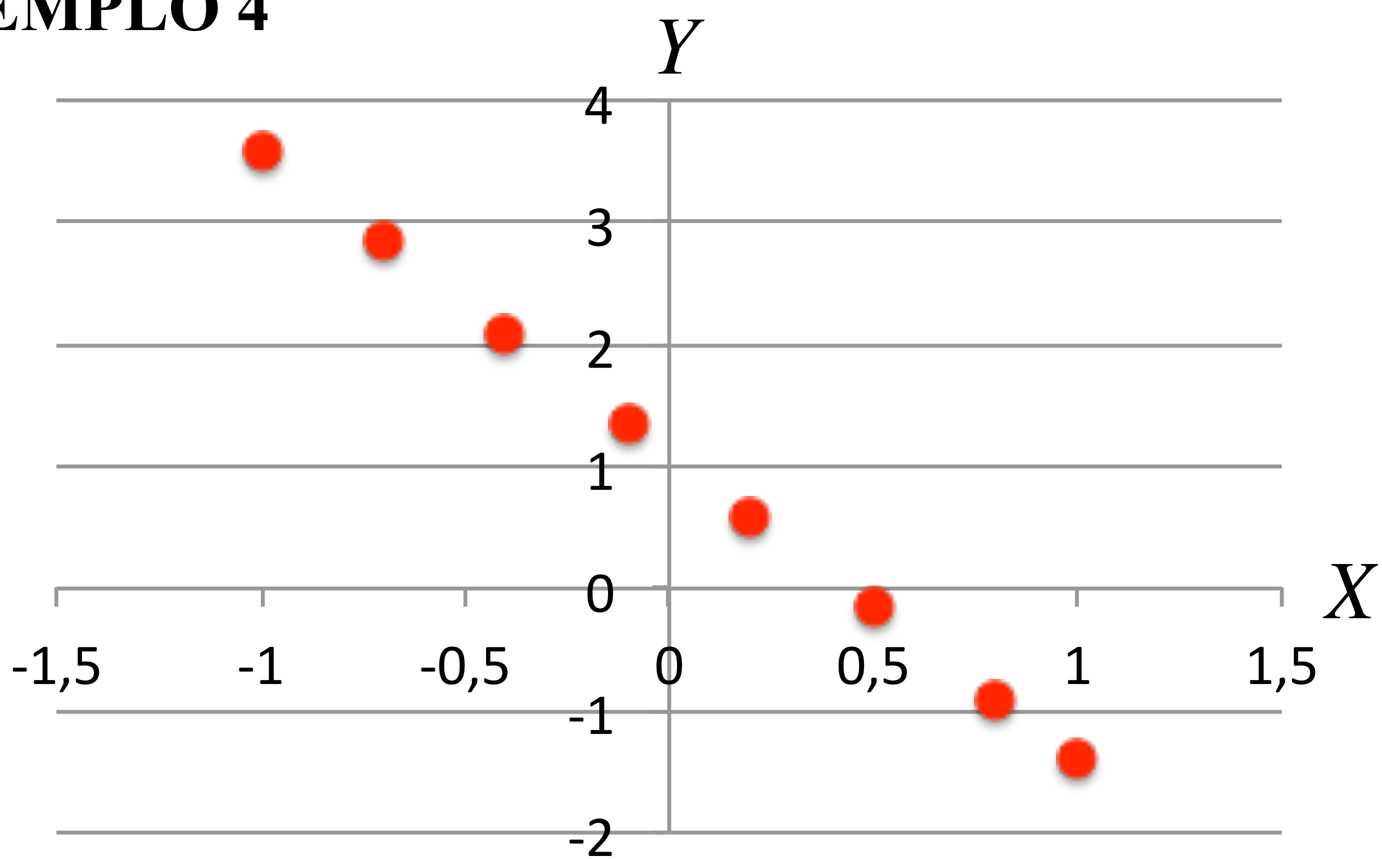


Diagrama de dispersão dos novos dados ($Y = \ln y \ \times X = x$).

EXEMPLO 5

- Usando o Método dos Mínimos Quadrados, ajustar uma curva do tipo $s = q\, t^{p}$ aos dados abaixo:

t	2,2	2,7	3,5	4,1
s	65	60	53	50

- Qual o valor de s quando $t = 4,5$?
- Qual o vaor de t quando $s = 40$?

EXEMPLO 5

- Caso III: **Função Potencial** $\boxed{s = qt^p}$

- Aplicando logaritmo em ambos os lados:

$$\log s = \log q + p \log t$$

- Realizando as seguintes substituições:

$$\begin{cases} Y = \log s \\ \alpha_0 = \log q \\ \alpha_1 = p \\ X = \log t \end{cases}$$

- Obtêm-se: $Y = \alpha_1 X + \alpha_0$

EXEMPLO 5

- Temos então:

k	t	s	X_k	Y_k	X_k^2	$X_k Y_k$
1	2,2	65	0,3424	1,8129	0,1172	0,6207
2	2,7	60	0,4314	1,7782	0,1861	0,7671
3	3,5	53	0,5441	1,7243	0,2960	0,9382
4	4,1	50	0,6128	1,6990	0,3755	1,0411
Σ			**1,9307**	**7,0144**	**0,9748**	**3,3671**

EXEMPLO 5

$$\begin{cases} 4\alpha_0 + 1,9307\alpha_1 = 7,0144 \\ 1,9307\alpha_0 + 0,9748\alpha_1 = 3,3671 \end{cases}$$

$$\alpha_0 = 1,963 \qquad \alpha_1 = -0,434$$

$$\alpha_0 = \log q \qquad \alpha_1 = p$$

$$\boxed{q = 91,83} \qquad \boxed{p = -0,434}$$

$$\boxed{s = 91,83\,t^{-0,434}}$$

EXEMPLO 5

- Se:

$$\boxed{s = 91{,}83\,t^{-0{,}434}}$$

- então, para $t = 4{,}5$; $s \approx 48$, e para $s = 40$; $t \approx 6{,}8$.

COEFICIENTE DE DETERMINAÇÃO

Coeficiente de Determinação

- O coeficiente de determinação (r^2) nos fornece uma estimativa da qualidade do ajuste.

$$\boxed{r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}}$$

onde:

- S_t é a soma total dos quadrados dos desvios entre os pontos dados e a média;
- S_r é a soma dos quadrados dos desvios entre o y medido e o y calculado (que chamamos aqui de E).

Coeficiente de Determinação

$$S_t = \sum_{k=1}^{m} \left(y_k - \bar{y} \right)^2$$

- S_t mede o quadrado da discrepância entre os dados e uma única estimativa da medida de tendência central – a média.

$$S_r = E = \sum_{k=1}^{m} \left[f\left(x_k \right) - \phi\left(x_k \right) \right]^2$$

- S_r mede o quadrado da distância vertical entre os dados e uma outra medida da tendência central (a curva ajustada).

Coeficiente de Determinação

- Para implementação computacional, é conveniente usar:

$$r^2 = \left[\frac{m\sum_{k=1}^{m} x_k y_k - \left(\sum_{k=1}^{m} x_k\right)\left(\sum_{k=1}^{m} y_k\right)}{\sqrt{m\sum_{k=1}^{m} x_k^2 - \left(\sum_{k=1}^{m} x_k\right)^2}\sqrt{m\sum_{k=1}^{m} y_k^2 - \left(\sum_{k=1}^{m} y_k\right)^2}} \right]^2$$

EXEMPLO 6

- Usando os dados do Exemplo 1, obtenha o coeficiente de determinação para o ajuste realizado.
- No Exemplo 1, ajustamos a seguinte reta aos dados:

$$\boxed{y = 1{,}538x - 0{,}360}$$

onde:

$$\boxed{\alpha_0 = -0{,}360} \qquad \boxed{\alpha_1 = 1{,}538}$$

EXEMPLO 6

- Para calcular o coeficiente de determinação, precisamos:

k	x_k	y_k	$(y_k - \bar{y})^2$	$\phi(x_k)$	$[y_k - \phi(x_k)]^2$
1	1	1,3	46,24	1,1780	0,0149
2	2	3,5	21,16	2,7160	0,6147
3	3	4,2	15,21	4,2540	0,0029
4	4	5,0	9,61	5,7920	0,6273
5	5	7,0	1,21	7,3300	0,1089
6	6	8,8	0,49	8,8680	0,0046
7	7	10,1	4,00	10,4060	0,0936
8	8	12,5	19,36	11,9440	0,3091
9	9	13,0	24,01	13,4820	0,2323
10	10	15,6	56,25	15,0200	0,3364
Σ	**-**	**-**	**197,54**	**-**	**2,3447**

média

$$\bar{y} = 8,1$$

EXEMPLO 6

- Assim:

$$r^2 = \frac{197{,}54 - 2{,}3447}{197{,}54} = 0{,}9881$$

- Podemos concluir que a reta se ajustou bem aos dados.
- O coeficiente de determinação indica que a reta explica 98,81% da variação dos dados.

EXEMPLO 7

- Usando os dados do Exemplo 4, obtenha o coeficiente de determinação para o ajuste realizado.

- No Exemplo 4, fizemos um ajuste não-linear. Nestes casos, para calcular o Coeficiente de Determinação (r^2), usamos as informações da equação linearizada:

$$\boxed{Y = \ln y = \alpha_0 + \alpha_1 X}$$

com: $\alpha_0 = 1{,}099, \quad \alpha_1 = -2{,}5$

EXEMPLO 7

- Como o ajuste será realizado por uma função exponencial é necessário calcular: $Y = \ln y$

k	x_k	y_k	$Y_k = ln(y_k)$	x_k^2	$x_k Y_k$
1	-1,0	36,547	3,599	1,00	-3,599
2	-0,7	17,264	2,849	0,49	-1,994
3	-0,4	8,155	2,099	0,16	-0,839
4	-0,1	3,852	1,349	0,01	-0,135
5	0,2	1,820	0,599	0,04	0,120
6	0,5	0,860	-0,151	0,25	-0,075
7	0,8	0,406	-0,901	0,64	-0,721
8	1,0	0,246	-1,402	1,00	-1,402
Σ	**0,3**	**69,15**	**8,041**	**3,59**	**-8,645**

Exemplo 7

- Para calcular o coeficiente de determinação, precisamos:

k	X_k	Y_k	$(Y_k - \bar{Y})^2$	$\alpha_0 + \alpha_1 X$	$[y_k - (\alpha_0 + \alpha_1 X)]^2$
1	-1,0	3,599	6,7282	3,599	0
2	-0,7	2,849	3,3999	2,849	0
3	-0,4	2,099	1,1966	2,099	0
4	-0,1	1,349	0,1183	1,349	0
5	0,2	0,599	0,1649	0,599	0
6	0,5	-0,151	1,3366	-0,151	0
7	0,8	-0,901	3,6333	-0,901	0
8	1,0	-1,402	5,7943	-1,402	0
Σ	**-**	**-**	**22,3720**	**-**	**0**

média

$$\bar{Y} = 1,0051$$

Exemplo 7

- Assim:

$$r^2 = \frac{22,3720 - 0}{22,3720} = 1$$

- Podemos concluir que a função exponencial se ajustou bem aos dados.
- O coeficiente de determinação indica que a função exponencial encontrada explica 100% da variação dos dados.

Regressão Linear Múltipla

Regressão Linear Múltipla

- Em diversas situações, temos uma variável dependente (resposta) que depende de duas ou mais variáveis independentes (explanatórias, preditoras).
- Por exemplo:

$$\boxed{\phi(x_k) = \alpha_0 + \alpha_1 x_{1k} + \alpha_2 x_{2k}}$$

- Vamos, então, minimizar:

$$\boxed{S_r = \sum_{k=1}^{m} \left[y_k - \left(\alpha_0 + \alpha_1 x_{1k} + \alpha_2 x_{2k} \right) \right]^2}$$

Regressão Linear Múltipla

- Para que *E* seja mínimo é necessário que:

$$\boxed{\frac{\partial S_r}{\partial \alpha_0} = 0}$$

$$\boxed{\frac{\partial S_r}{\partial \alpha_1} = 0}$$

$$\boxed{\frac{\partial S_r}{\partial \alpha_2} = 0}$$

Regressão Linear Múltipla

- Em forma matricial, teremos:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{k=1}^{m} x_{1k} & \sum_{k=1}^{m} x_{2k} \\ \sum_{k=1}^{m} x_{1k} & \sum_{k=1}^{m} x_{1k}^2 & \sum_{k=1}^{m} x_{1k}x_{2k} \\ \sum_{k=1}^{m} x_{2k} & \sum_{k=1}^{m} x_{1k}x_{2k} & \sum_{k=1}^{m} x_{2k}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{m} y_k \\ \sum_{k=1}^{m} x_{1k}y_k \\ \sum_{k=1}^{m} x_{2k}y_k \end{bmatrix}$$

- Resolvendo este sistema de equações, encontramos os valores de α_0 , α_1 e α_2

Exemplo 8

- Use regressão linear múltipla para ajustar os dados abaixo:

x_1	x_2	y
0,0	0,0	5,0
2,0	1,0	10,0
2,5	2,0	9,0
1,0	3,0	0,0
4,0	6,0	3,0
7,0	2,0	27,0

Exemplo 8

k	y	x_1	x_2	x_1^2	x_2^2	x_1x_2	x_1y	x_2y
1	5,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
2	10,0	2,0	1,0	4,0	1,0	2,0	20,0	10,0
3	9,0	2,5	2,0	6,25	4,0	5,0	22,5	18,0
4	0,0	1,0	3,0	1,0	9,0	3,0	0,0	0,0
5	3,0	4,0	6,0	16,0	36,0	24,0	12,0	18,0
6	27,0	7,0	2,0	49,0	4,0	14,0	189,0	54,0
$\sum$	54	16,5	14	76,25	54,0	48,0	243,5	100,0

Exemplo 8

- Teremos então:

$$\begin{bmatrix} 6,0 & 16,5 & 14,0 \\ 16,5 & 76,5 & 48,0 \\ 14,0 & 48,0 & 54,0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 54,0 \\ 243,5 \\ 100,0 \end{bmatrix}$$

- Resolvendo o sistema:

$$\alpha_0 = 5,0, \quad \alpha_1 = 4,0 \quad e \quad \alpha_2 = -3,0$$

Exemplo 8

- Após realizar o ajuste, a equação linear de y em função de x_1 e x_2 será:

$$\boxed{y = 5 + 4x_1 - 3x_2}$$

EXEMPLO 8

- Para calcular o coeficiente de determinação, precisamos:

k	$x_{1,k}$	$x_{2,k}$	y_k	$(y_k - \bar{y})^2$	$\phi(x_1, x_2)$	$[y_k - \phi]^2$
1	0,0	0,0	5,0	16	5,0	0,0
2	2,0	1,0	10,0	100	10,0	0,0
3	2,5	2,0	9,0	81	9,0	0,0
4	1,0	3,0	0,0	0	0,0	0,0
5	4,0	6,0	3,0	9	3,0	0,0
6	7,0	2,0	27,0	729	27,0	0,0
Σ	-	-	-	**935**	-	0,0

média
$$\bar{y} = 9,0$$

$$r^2 = 1$$

Referências

- BURDEN, Richard L.; FAIRES, J. Douglas. **Análise numérica**. São Paulo, SP: Cengage Learning, 2008. xiii, 721 p. ISBN 8522106010.

- RUGGIERO, Marcia A. Gomes; LOPES, Vera Lucia da Rocha. **Cálculo numérico:** aspectos teóricos e computacionais. 2. ed. São Paulo, SP: Makron, c1997. xvi, 406 p. ISBN 8534602042.

- CHAPRA, Steven C.; CANALE, Raymond P. **Métodos numéricos para engenharia**. 5. ed. São Paulo: McGraw-Hill, 2008. 809 p. ISBN 978-85-86804-87-8.