# Métodos Numéricos para Engenharia

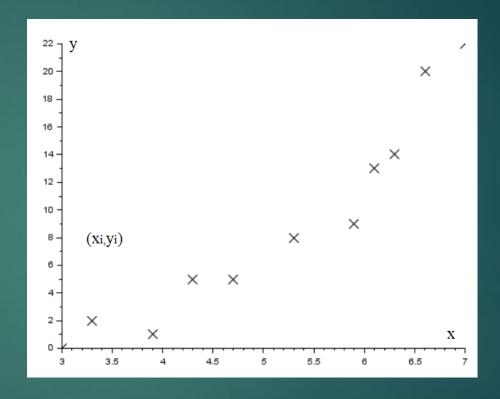
MÓDULO 11- MÍNIMOS QUADRADOS PROFESSOR LUCIANO NEVES DA FONSECA

## Definições

- Na interpolação por polinômios por Vandermonde (e também por Newt<mark>on e Lagrange) o polinômio interpolador passa exatamente por todos os N pontos de controle  $(x_i, y_i)$ .</mark>
- Esta exigência pode ser um problema quando temos um número de pontos de controle N muito grande, pois a ordem do polinômio interpolador (N-1) será muito alta, o que pode causar instabilidade numérica.
- Além da instabilidade numérica, um polinômio de ordem muito alta pode oscilar (wiggling) ao passar por todos os pontos de controle, gerando um interpolação duvidosa, o exemplo a seguir ira discorrer sobre este problema
- Uma solução para este problema é se usar um polinômio de ordem menor M<N. Este polinômio interpolador de ordem menor não irá passar exatamente pelos pontos de controle, mas entre eles, assumindo um certo erro de interpolação entre os pontos de controle e o polinômio.
- O método dos mínimos quadrados oferece uma solução na qual o erro quadrático médio entre os pontos de controle e a interpolação sejam minimizados.

# **Exemplo:** Ajustar um polinômio interpolador aos 11 postos de controle mostrados na tabela abaixo.

i	Xi	f(x <sub>i</sub> )	
0	3.00	0.00	
1	3.30	2.00	
2	3.90	1.00	
3	4.30	5.00	
4	4.70	5.00	
5	5.30	8.00	
6	5.90	9.00	
7	6.10	13.00	
8	6.30	14.00	
9	6.60	20.00	
10	7.00	22.00	

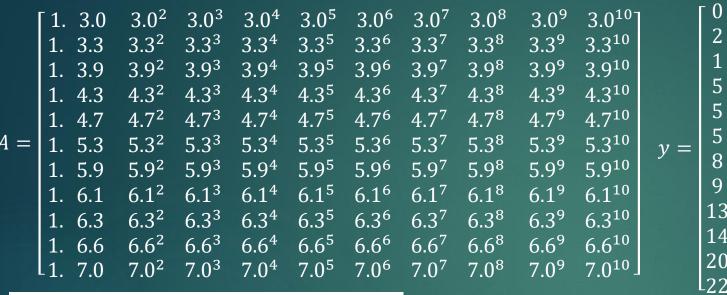


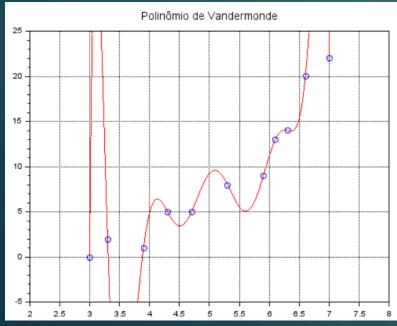
```
--> x=[3,3.3,3.9,4.3,4.7,5.3,5.9,6.1,6.3,6.6,7.0];

--> y=[0,2,1,5,5,8,9,13,14,20,22];

--> plot2d(x,y,-2)
```

Podemos passar um polinômio de Vandermonde de ordem 10 aos 11 pontos de controle. A matriz A será quadrada 10x10. Número de linhas é igual ao número de pontos de controle, número de colunas é igual ao número de coeficientes do polinômio (tamanho de u que é o vetor coeficientes).





```
u = A^{-1}y
u \text{ \'e o vetor de coeficientes}
```

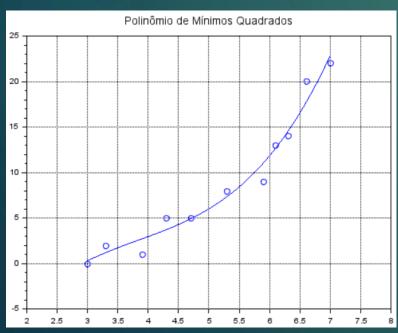
```
-> x=[3,3.3,3.9,4.3,4.7,5.3,5.9,6.1,6.3,6.6,7.0];
--> y=[0,2,1,5,5,8,9,13,14,20,22];
--> A=[x'^0,x'^1,x'^2,x'^3,x'^4,x'^5,x'^6,x'^7,x'^8,x'^9,x'^10];
--> u=inv gauss(A) *y'
  -26064673.
   55745991.
  -53147982.
   29750838.
  -10830617.
   2679881.9
  -456537.54
   52885.778
  -3987.7474
  176.77826
  -3.4994365
--> ps=poly(u,"s","coeff")
  -26064673 +55745991s -53147982s* +29750838s* -10830617s4
  +2679881.9s5 -456537.54s6 +52885.778s7 -3987.7474s8
  +176.77826s9 -3.4994365s10
```

```
p_{10}(x)
= -26064689 + 55746026x - 53148015x^2 + 29750856x^3 - 10830624x^4 + 2679883.5x^5 - 456537.82x^6 + 52885.81x^7 - 3987.7498x^8 + 176.77837x^9 - 3.4994386x^{10}
```

Notar que o polinômio interpolador de ordem 10 passa pelos 11 pontos de controle, no entanto há oscilações (wiggling) que comprometem o resultado. A interpolação não é feita de maneira adequada.

Podemos também passar um polinômio de MQ de ordem 3 entre os 11 pontos de controle. A matriz A será retangular 10x4. Número de linhas é igual ao número de pontos de controle, número de colunas é igual ao número de coeficientes do polinômio (tamanho de coef).

$$A = \begin{bmatrix} 1. & 3.0 & 3.0^2 & 3.0^3 \\ 1. & 3.3 & 3.3^2 & 3.3^3 \\ 1. & 3.9 & 3.9^2 & 3.9^3 \\ 1. & 4.3 & 4.3^2 & 4.3^3 \\ 1. & 4.7 & 4.7^2 & 4.7^3 \\ 1. & 5.3 & 5.3^2 & 5.3^3 \\ 1. & 5.9 & 5.9^2 & 5.9^3 \\ 1. & 6.1 & 6.1^2 & 6.1^3 \\ 1. & 6.3 & 6.3^2 & 6.3^3 \\ 1. & 6.6 & 6.6^2 & 6.6^3 \\ 1. & 7.0 & 7.0^2 & 7.0^3 \end{bmatrix}$$



$$y = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 5 \\ 5 \\ 8 \\ 9 \\ 13 \\ 14 \\ 20 \\ 22 \end{bmatrix}$$

```
--> x=[3,3.3,3.9,4.3,4.7,5.3,5.9,6.1,6.3,6.6,7.0];

--> y=[0,2,1,5,5,8,9,13,14,20,22];

--> A=[x'^0,x'^1,x'^2,x'^3];

--> u=inv_gauss(A'*A)*A'*y'
u =

-29.666755
20.296888
-4.6476658
0.4030047

--> pm=poly(u,"s","coeff")
pm =

-29.666755 +20.296888s -4.6476658s' +0.4030047s'
```

$$u = (A^t A)^{-1} A^t y$$

$$u \text{ \'e o vetor de coeficientes}$$

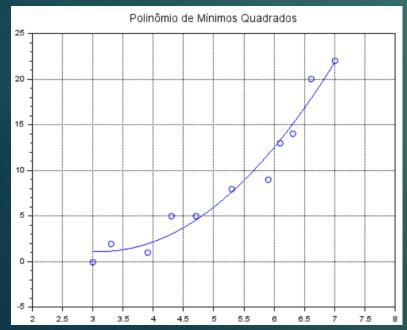
Como A é retangular, não podemos calcular a sua inversa  $A^{-1}$ , mas sim a sua pseudo-inversa  $(A^tA)^{-1}A^t$ .

$$p_3(x) = -29.666755 + 20.296888x - 4.6476658x^2 + 0.4030047x^3$$

Notar que o polinômio interpolador de ordem 3 passa entre os 11 pontos de controle.

Podemos também passar um polinômio de MQ de ordem 2 entre os 11 pontos de controle. A matriz A será retangular 10x3. Número de linhas é igual ao número de pontos de controle, número de colunas é igual ao número de coeficientes do polinômio (tamanho de coef).

$$A = \begin{bmatrix} 1. & 3.0 & 3.0^2 \\ 1. & 3.3 & 3.3^2 \\ 1. & 3.9 & 3.9^2 \\ 1. & 4.3 & 4.3^2 \\ 1. & 4.7 & 4.7^2 \\ 1. & 5.3 & 5.3^2 \\ 1. & 5.9 & 5.9^2 \\ 1. & 6.1 & 6.1^2 \\ 1. & 6.3 & 6.3^2 \\ 1. & 6.6 & 6.6^2 \\ 1. & 7.0 & 7.0^2 \end{bmatrix}$$



$$u = (A^t A)^{-1} A^t y$$

$$u \text{ \'e o vetor de coeficientes}$$

Como A é retangular, não podemos calcular a sua inversa  $A^{-1}$ , mas sim a sua pseudo-inversa  $(A^tA)^{-1}A^t$ .

$$p_2(x) = 14.576664 - 8.6372239x + 1.3822754x^2$$

Notar que o polinômio interpolador de ordem 2 passa entre os 11 pontos de controle.

Cálculo detalhado para o ajuste um polinômios de ordem 2,  $p_2(x)$ , que passa "entre os 11 pontos" de controle  $(x_i, y_i)$  abaixo:

i	Xi	f(x <sub>i</sub> )	
0	3.00	0.00	
1	3.30	2.00	
2	3.90	1.00	
3	4.30	5.00	
4	4.70	5.00	
5	5.30	8.00	
6	5.90	9.00	
7	6.10	13.00	
8	6.30	14.00	
9	6.60	20.00	
10	7.00	22.00	

$$p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

$$u = \begin{bmatrix} a_o \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

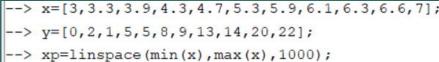
$$u = (A^t A)^{-1} A^t y$$

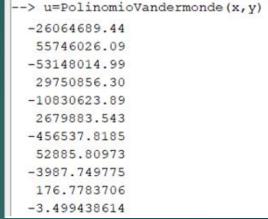
$$u = (A^t A)^{-1} A^t y = \begin{bmatrix} 14.576664 \\ -8.6372239 \\ 1.3822754 \end{bmatrix}$$

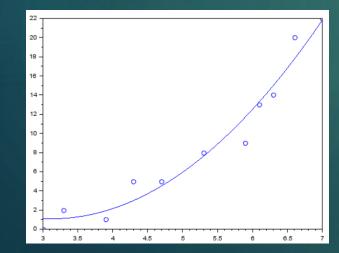
$$p_2(x) = 14.576664 - 8.6372239x + 1.3822754x^2$$

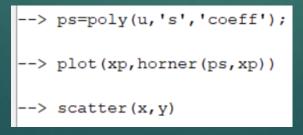
```
function [u,A]=PolinomioMO(x,y,ordem)
                                                                   function [u, A] = PolinomioVandermonde (x, y)
   A = (x.^0)';
                                                                    A = (x.^0)';
   for (k=1:ordem)
                                                                    for (k=1: length(\mathbf{x})-1)
   \mathbf{A} = [\mathbf{A}, (\mathbf{x} \cdot ^{k})]
                                                                    \mathbf{A} = [\mathbf{A}, (\mathbf{x}.^{k})]
   end
                                                                    end
      u=EliminacaoGauss((A'*A),(A'*y'),%f)
                                                                        u=EliminacaoGauss (A, y', %f);
7 endfunction
                                                                 7 endfunction
                                 --> x=[3,3.3,3.9,4.3,4.7,5.3,5.9,6.1,6.3,6.6,7];
                                                                                     --> u=PolinomioVandermonde(x,y)
                                 --> y=[0,2,1,5,5,8,9,13,14,20,22];
```

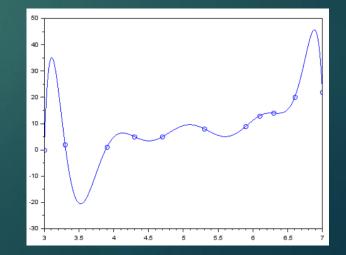
```
--> u=PolinomioMQ(x,y,2)
  14.57666393
 -8.637223875
  1.382275429
```











```
function Plot PolinomioMO(x, y, ordem)
     [u,A]=PolinomioMO(x,y,ordem)
   printf("Matriz Aumentada [(A''A) | (A''y))]")
   disp([(A'*A), (A'*y')])
     printf("Coeficientes u=inv(A''A)*(A''y))")
   disp(u)
    printf ("Polinômio Mínimos Quadradros ordem %d", ordem);
      St = sum( (y-mean(y))^2); //goodness of fitness
      Sr = sum( \cdot (y'-A*u)^2);
    r2= abs(St-Sr)/St
      str=sprintf("MQ r2=%.1f%%\t r=%.2f\n", r2*100, sqrt(r2));
    disp(str)
    pm=poly(u,'s','coeff')
    disp(pm)
    xp=linspace(min(x), max(x), 1000);
    yp=horner(pm,xp)
   plot (xp, yp, 'b')
     scatter (x, y)
    xtitle(str);
20 endfunction
                                   Coeficiente de Determinação
```

#### Soma dos Resíduos

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y_i})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - A u)^2$$

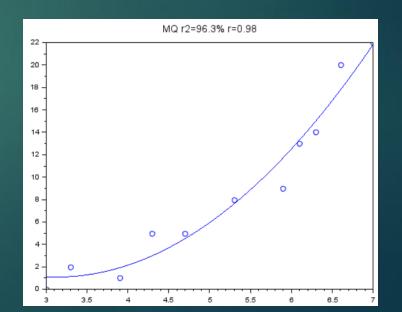
$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

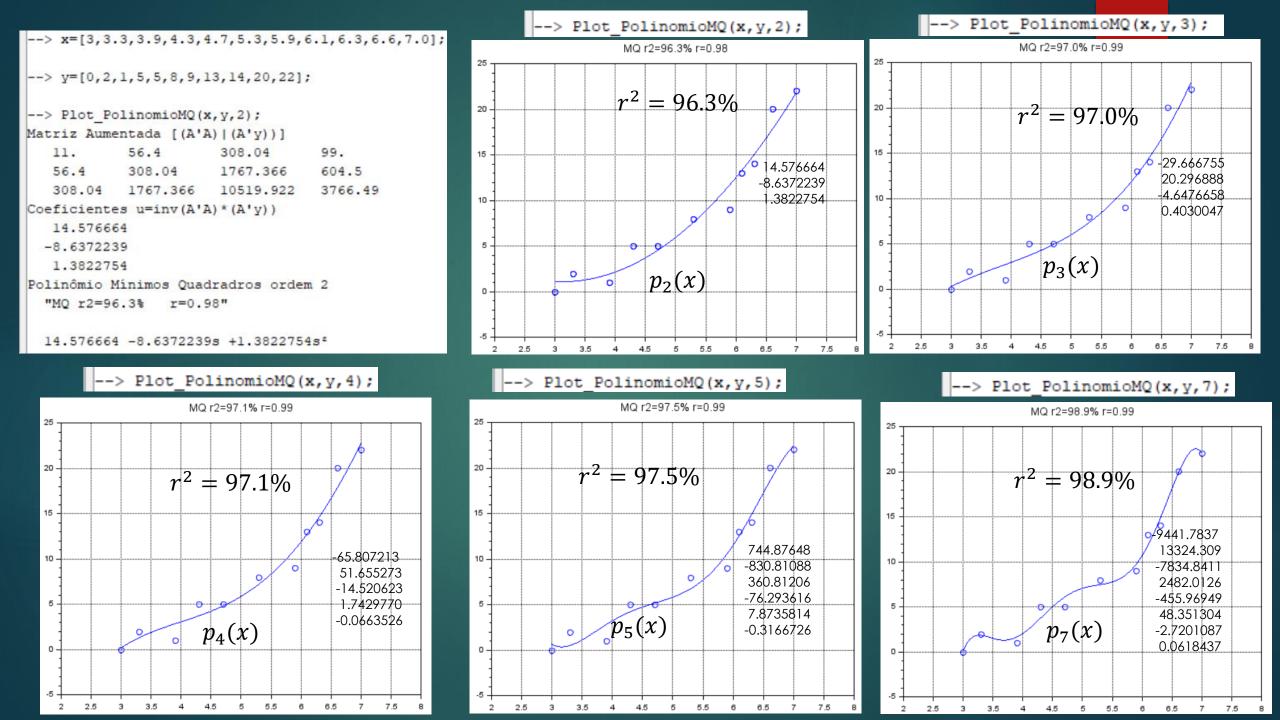
$$r^2 = \frac{|S_t - S_r|}{S_t}$$

Coeficiente de Correlação

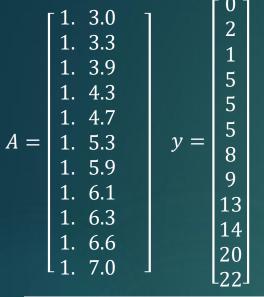
$$r = \sqrt{\frac{|S_t - S_r|}{S_t}}$$

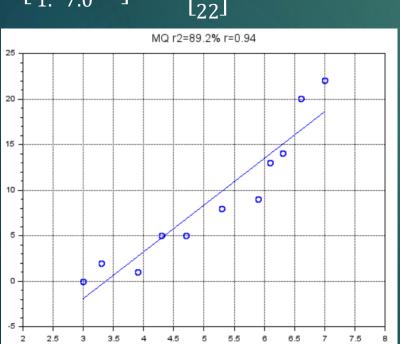
```
-> x=[3,3.3,3.9,4.3,4.7,5.3,5.9,6.1,6.3,6.6,7];
--> y=[0,2,1,5,5,8,9,13,14,20,22];
--> Plot PolinomioMQ(x,y,2)
Matriz Aumentada [(A'A)|(A'y))]
           56.4
  11.
                      308.04
                                   99.
           308.04
  56.4
                      1767.366
                                   604.5
  308.04 1767.366 10519.9224
                                   3766.49
Coeficientes u=inv(A'A)*(A'y))
  14.57666393
 -8.637223875
  1.382275429
Polinômio Mínimos Quadradros ordem 2
  "MO r2=96.3% r=0.98"
 14.57666393 -8.637223875s +1.382275429s2
```





Podemos inclusive passar um polinômio de MQ de ordem 1 (reta)entre os 11 pontos de controle. A matriz A será retangular 10x2. Número de linhas é igual ao número de pontos de controle, número de colunas é igual ao número de coeficientes do polinômio (tamanho de coef).





```
--> x=[3,3.3,3.9,4.3,4.7,5.3,5.9,6.1,6.3,6.6,7];
--> y=[0,2,1,5,5,8,9,13,14,20,22];
```

```
--> Plot_PolinomioMQ(x,y,1)

Matriz Aumentada [(A'A)|(A'y))]

11. 56.4 99.

56.4 308.04 604.5

Coeficientes u=inv(A'A)*(A'y))

-17.340659

5.1373626

Polinômio Mínimos Quadradros ordem 1

"MQ r2=89.2% r=0.94"

-17.340659 +5.1373626s
```

$$u = (A^t A)^{-1} A^t y$$

Já que A é retangular, não podemos calcular a sua inversa  $A^{-1}$ , mas sim a sua pseudo-inversa  $(A^tA)^{-1}A^t$ .

$$p_2(x) = -17.340659 + 5.1373626x$$

Notar que o polinômio interpolador de ordem 1 passa entre os 11 pontos de controle.

#### Os polinômios MQ de 1ª Ordem podem ser utilizados na Linearização de Regressões não-lineares

1) 
$$y = \alpha e^{\beta x} \Rightarrow \ln(y) = \ln(\alpha e^{\beta x}) = \ln \alpha + \beta x$$

$$y_l = \ln(y)$$

$$x_l = x$$

$$y_l = a_0 + a_1 x_l$$

$$\beta = a_1$$

2) 
$$y = \alpha x^{\beta} \Rightarrow \log(y) = \log(\alpha x^{\beta}) = \log \alpha + \beta \log(x)$$

$$\begin{cases} y_{l} = \log(y) \\ x_{l} = \log(x) \\ y_{l} = a_{o} + a_{1}x_{l} \end{cases}$$

$$\alpha = 10^{a_{0}}$$

$$\beta = a_{1}$$

3) 
$$y = \frac{\alpha x}{x + \beta} \Rightarrow \frac{1}{y} = \frac{x + \beta}{\alpha x} = \frac{1}{\alpha} + \frac{\beta}{\alpha} \left(\frac{1}{x}\right)$$
 
$$\begin{cases} y_l = 1/y \\ x_l = 1/x \\ y_l = a_o + a_1 x_l \end{cases}$$
  $\alpha = 1/a_o$   $\beta = a_1/a_o$ 

4) 
$$y = \frac{\beta}{x + \alpha} \Rightarrow \left(\frac{1}{y}\right) = \left(\frac{x + \alpha}{\beta}\right) \Rightarrow \left(\frac{1}{y}\right) = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right) + \left(\frac{1}{\beta}\right)(x)$$

$$\begin{cases} y_l = 1/y \\ x_l = x \\ y_l = \alpha + \beta x_l \end{cases} \qquad \alpha = a_o/a_1$$

$$\beta = 1/a_1$$

5) 
$$y = \alpha + \frac{\beta}{x} \Rightarrow \Rightarrow (y) = (\alpha) + (\beta) \left(\frac{1}{x}\right)$$

$$y_l = y \\ x_l = 1/x \\ y_l = \alpha + \beta x_l$$
 $\alpha = a_0$ 
 $\beta = a_1$ 

6) 
$$y = \alpha + \beta x^n \Rightarrow (y) = (\alpha) + (\beta)(x^n)$$

$$\begin{cases} y_l = y \\ x_l = x^n \\ y_l = \alpha + \beta x_l \end{cases} \quad \alpha = a_0$$

$$\beta = a_1$$

Regressão Não Linear	Linearização	Regressão Linear $y_l = a_o + a_1 x_l$	α	β
$y = \alpha e^{\beta x}$	MQL(x, ln(y))	$ln(y) = ln \alpha + (\beta) (x)$	$\alpha = e^{a_0}$	$\beta = a_1$
$y = \alpha x^{\beta}$	$MQL(\log(x), \log(y))$	$\log(y) = \log \alpha + (\beta) \log(x)$	$\alpha = 10^{a_o}$	$\beta = a_1$
$y = \frac{\alpha x}{x + \beta}$	MQL(1./x, 1./y)	$\left(\frac{1}{y}\right) = \left(\frac{1}{\alpha}\right) + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)\left(\frac{1}{x}\right)$	$\alpha = 1/a_o$	$\beta = a_1/a_o$
$y = \frac{\beta}{x + \alpha}$	MQL(x, 1./y)	$\left(\frac{1}{y}\right) = \left(\frac{\alpha}{\beta}\right) + \left(\frac{1}{\beta}\right)(x)$	$\alpha = a_o/a_1$	$\beta = 1/a_1$
$y = \alpha + \frac{\beta}{x}$	MQL(1./x, y)	$(y) = (\alpha) + \beta \left(\frac{1}{x}\right)$	$\alpha = a_o$	$\beta = a_1$
$y = \alpha + \beta x^n$	$MQL(x^n, y)$	$(y) = (\alpha) + (\beta)(x^n)$	$\alpha = \boldsymbol{a_o}$	$\beta = a_1$
$y^m = \alpha + \beta x^n$	$MQL(x^n, y^m)$	$(y^m) = (\alpha) + (\beta)(x^n)$	$\alpha = a_o$	$\beta = a_1$
$f(y) = \alpha + \beta g(x)^{-(1)}$	MQL(g(x), f(y))	$f(y) = (\alpha) + (\beta) g(x)$	$\alpha = \boldsymbol{a_o}$	$\beta = a_1$

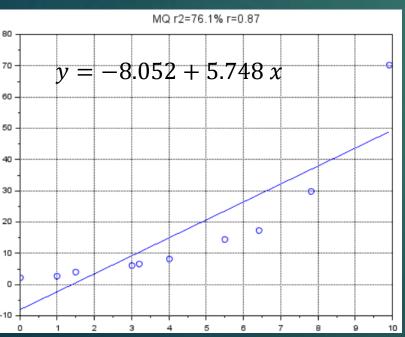
(1) Onde f(y) indica uma função qualquer da variável real  $y \in g(x)$  uma função qualquer da variável real x

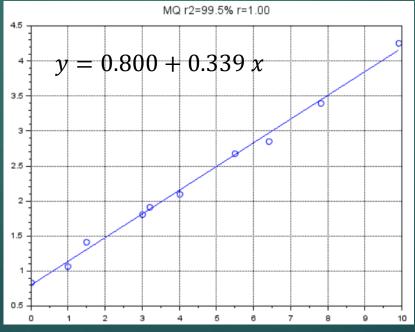
#### Exemplo 1 Ajuste da função $y = \alpha e^{\beta x}$

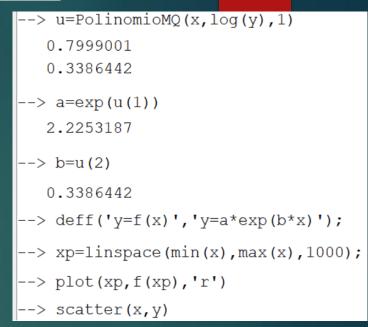
```
--> x=[0,1,1.5,3,3.2,4,5.5,6.4,7.8,9.9];
--> y=[2.3,2.9,4.1,6.1,6.8,8.2,14.6,17.3,30.0,70.3];
```

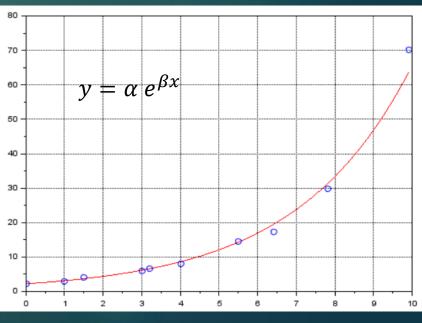
```
--> Plot_PolinomioMQ(x,y,1);
Matriz Aumentada [(A'A)|(A'y))]
10. 42.3 162.6
42.3 268.6 1203.
Coeficientes u=inv(A'A)*(A'y))
-8.052
5.748
Polinômio Minimos Quadradros ordem 1
"MQ r2=76.1% r=0.87"
```

```
--> Plot_PolinomioMQ(x,log(y),1);
Matriz Aumentada [(A'A)|(A'y))]
10. 42.3 22.32
42.3 268.6 124.8
Coeficientes u=inv(A'A)*(A'y))
0.800
0.339
Polinômio Mínimos Quadradros ordem 1
"MQ r2=99.5% r=1.00"
```









## Exemplo 2 = ajuste da função $y = \frac{\alpha x}{x+\beta}$

```
--> x=[0.1,0.12,0.15,0.19,0.25,0.39,0.59,0.62,0.82,1.5,2.6,4.2,5.9,6.9,8.5,9];

--> y=[0.5,0.6,0.75,0.81,1.3,1.6,2.4,2.35,2.95,4.1,5.8,6.4,7.7,7.6,,8.25,8.3];
```

```
--> Plot_PolinomioMQ(x,y,1)
Matriz Aumentada [(A'A)|(A'y))]
16. 41.83 61.41
41.83 264.0225 297.4344
Coeficientes u=inv(A'A)*(A'y))
1.5242560
0.8850563
Polinômio Mínimos Quadradros ordem 1
pm=
1.524256 +0.8850563s
r2=89.2% r=0.945
```

```
--> Plot_PolinomioMQ(1./x,1./y,1)

Matriz Aumentada [(A'A)|(A'y))]

16. 43.187146 9.8856897

43.187146 271.85073 56.095787

Coeficientes u=inv(A'A)*(A'y))

0.1065876

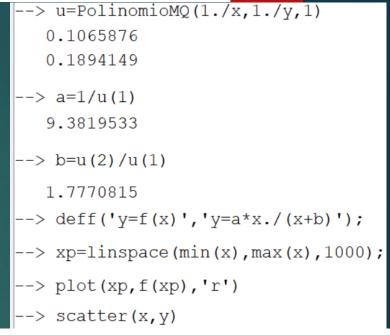
0.1894149

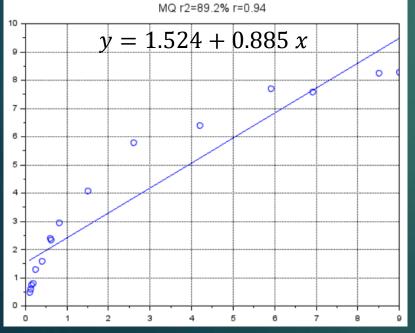
Polinômio Minimos Quadradros ordem 1

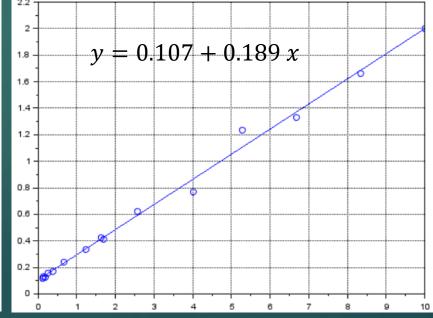
pm=

0.1065876 +0.1894149s

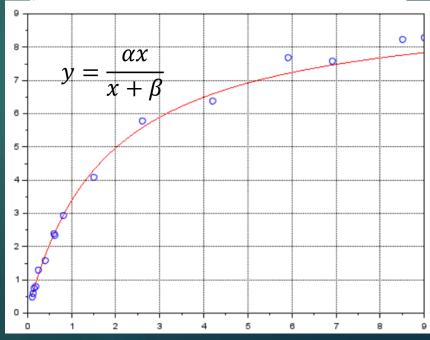
2=99.5% r=0.997
```





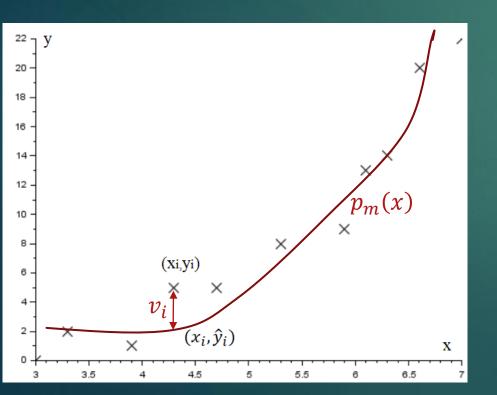


MQ r2=99.5% r=1.00

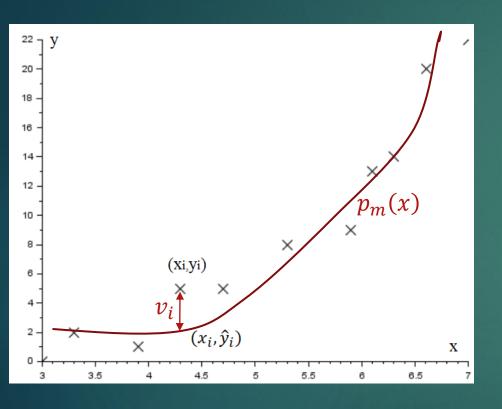


### Conteúdo Opcional Dedução da Fórmula de Mínimos Quadrados (Pseudo-Inversa)

- Vamos agora ajustar um polinômios de  $p_m(x)$ , com coeficiente u, de ordem M<N, que passa "entre os pontos" de controle  $(x_i, y_i)$
- Haverá uma discrepância " $v_i$ " entre o ponto de controle  $(x_i, y_i)$  e o ponto ajustado no polinômio  $(x_i, \hat{y}_i)$ , onde  $\hat{y}_i = p_m(x_i)$
- A discrepância pode ser positiva se  $(x_i, y_i)$  estiver acima de  $(x_i, \hat{y}_i)$ , e negativa se  $(x_i, y_i)$  estiver abaixo de  $(x_i, \hat{y}_i)$
- Vamos definir então a discrepância total  $\Phi$  como sendo a soma do quadrado de todas as discrepâncias  $v_i$



$$\hat{y}=Au$$
 . Onde  $\hat{y}$  são os pontos ajustados em  $p_m(x)$  com discrepância  $y=\hat{y}+v=Au+v$  . O valor exato  $y$  é o valor ajustado  $\hat{y}$  mais a discrepância  $v$   $v=y-\hat{y}=y-Au$  .  $v$  é a discrepância ( erro ) de estimação  $\Phi=\sum_{i=0}^N v_i^2=v^tv$  . Soma dos quadrados da discrepâncias  $v=v^tv=(v-Au)^t(v-Au)$  . Forma quadrática  $v=v^tv=(v^t-v^t)^t(v-v^t)$  . Forma quadrática  $v=v^tv=(v^t-v^t)^t(v^t)$  . Forma quadrática  $v=v^tv=(v^t-v^t)^t(v^t)$  . Matrizes simétricas



$$v=y-\hat{y}=y-Au$$
  $v$  é a discrepância ( erro ) de estimação

$$\Phi = \sum_{i=0}^N v_i^2 = v^{\mathrm{t}}v$$
 soma dos quadrados da discrepâncias

$$\frac{d\Phi}{du} = 0 \frac{y^t y - 2y^t A u + u^t A^t A u}{u^t A^t A u}$$

Minimizar a soma dos quadrados da discrepâncias, em relação ao coeficiente u de  $p_m(x)$  (que são as incógnitas)

$$0 - 2y^{t}A + 2u^{t}A^{t}A = 0$$
$$2y^{t}A = 2u^{t}A^{t}A$$
$$(A^{t}A)u = A^{t}y$$

$$u = (A^t A)^{-1} A^t y$$