Cálculo Numérico Computacional

Aula 14

Ajuste de Curva pelo Método dos Mínimos Quadrados
Caso discreto, contínuo e não linear

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

Agenda:

1. Considerações iniciais;
2. Caso discreto;
3. Exemplo;
4. Caso contínuo;
5. Exemplo;
6. Caso não linear;
7. Exemplo;
8. Exercícios.

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

1. Considerações iniciais

- Vimos que uma forma de se trabalhar com uma função definida por uma tabela de valores é a interpolação polinomial;

- Porém, quando se quer trabalhar fora do intervalo tabelado (extrapolação), tem-se um problema de aproximação;

- Além disso, a interpolação não é aconselhável porque os valores tabelados são resultados de algum experimento ou pesquisa, que normalmente contém erros inerentes e imprevisíveis.

Cálculo Numérico Computacional

- Assim, é necessário ajustar a essas funções tabeladas uma função que seja uma boa aproximação para os valores, e que permita a extrapolação com alguma margem de segurança;

- Vamos assim considerar uma aproximação pelos mínimos quadrados em sua forma discreta inicialmente;

2. Caso discreto

- Dados $(\boldsymbol{n}+\mathbf{1})$ pares de valores $(\boldsymbol{x_0}, \boldsymbol{y_0}), (\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{y_1}), \ldots, (\boldsymbol{x_n}, \boldsymbol{y_n})$ de uma função $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$;

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- Desejamos determinar os coeficientes $a_0, a_1, \dots, a_n$ do polinômio de grau m ($m < n$), tal que:

$$p_m = a_m \times x^m + a_{m-1} \times x^{m-1} + \cdots + a_1 \times x + a_0$$

- Esse polinômio deve minimizar a função $S(a_0, a_1, \dots, a_n)$, onde:

$$S(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{j=0}^{n} \left[f(x_j) - a_0 - a_1 \times x_j - \cdots - a_m \times x_j^m \right]^2$$

- Por esse motivo, essa minimização é conhecida pelo Método dos Mínimos Quadrados ou Quadrados Mínimos.

Cálculo Numérico Computacional

- Podemos mostrar que o mínimo de S é obtido através da solução do sistema linear:

$$
\begin{cases}
(n+1) \times a_0 + a_1 \times \sum_{j=0}^{n} x_j + a_2 \times \sum_{j=0}^{n} x_j^2 + \cdots + a_m \times \sum_{j=0}^{n} x_j^m = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \\
a_0 \times \sum_{j=0}^{n} x_j + a_1 \times \sum_{j=0}^{n} x_j^2 + a_2 \times \sum_{j=0}^{n} x_j^3 + \cdots + a_m \times \sum_{j=0}^{n} x_j^{m+1} = \sum_{j=0}^{n} x_j \times f(x_j) \\
\vdots \\
a_0 \times \sum_{j=0}^{n} x_j^m + a_1 \times \sum_{j=0}^{n} x_j^{m+1} + a_2 \times \sum_{j=0}^{n} x_j^{m+2} + \cdots + a_m \times \sum_{j=0}^{n} x_j^{2m} = \sum_{j=0}^{n} x_j^m \times f(x_j)
\end{cases}
$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

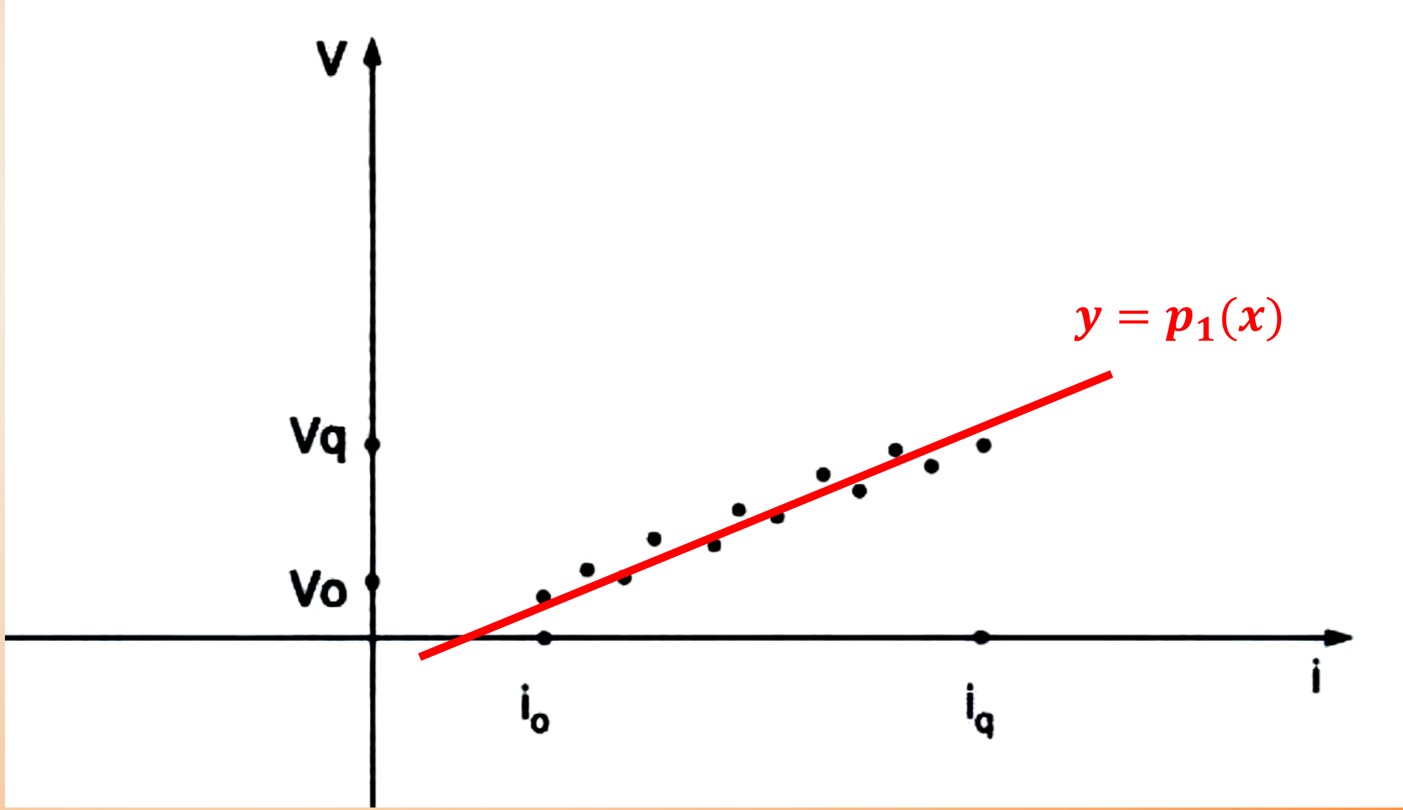
Cálculo Numérico Computacional

- Ao conjunto de equações lineares anteriormente mostradas, damos o nome de equações normais.

- Graficamente, temos:

- Qual reta, passando pela origem, melhor se ajusta ao diagrama ao lado?

- Minimização.



Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

3. Exemplo

Obter, pelo Método dos Mínimos Quadrados, a melhor aproximação para os elementos dados por meio de um polinômio do primeiro grau.

x	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	4	3	6	7	11	11	13

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

Solução:

Neste caso, temos $n+1=7$. Desejamos determinar $p_1(x)=a_0+a_1\times x$. Assim, devemos resolver o sistema linear:

$$\begin{cases} (n+1)\times a_0 + a_1 \times \sum_{j=0}^{6} x_j = \sum_{j=0}^{6} f(x_j) \\ a_0 \times \sum_{j=0}^{6} x_j + a_1 \times \sum_{j=0}^{6} x_j^2 = \sum_{j=0}^{6} x_j \times f(x_j) \end{cases}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

$$\begin{cases} 7 \times a_0 + 28 \times a_1 = 55 \\ 28 \times a_0 + 140 \times a_1 = 268 \end{cases}$$

Resolvendo:

$$a_0 = 1, \qquad a_1 = 12/7$$

Dessa forma:

$$\boxed{p_1(x) = 1 + \frac{12}{7} \times x}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

Outro exemplo:

2. Ajuste os dados abaixo pelo método dos quadrados mínimos utilizando:

   a) uma reta

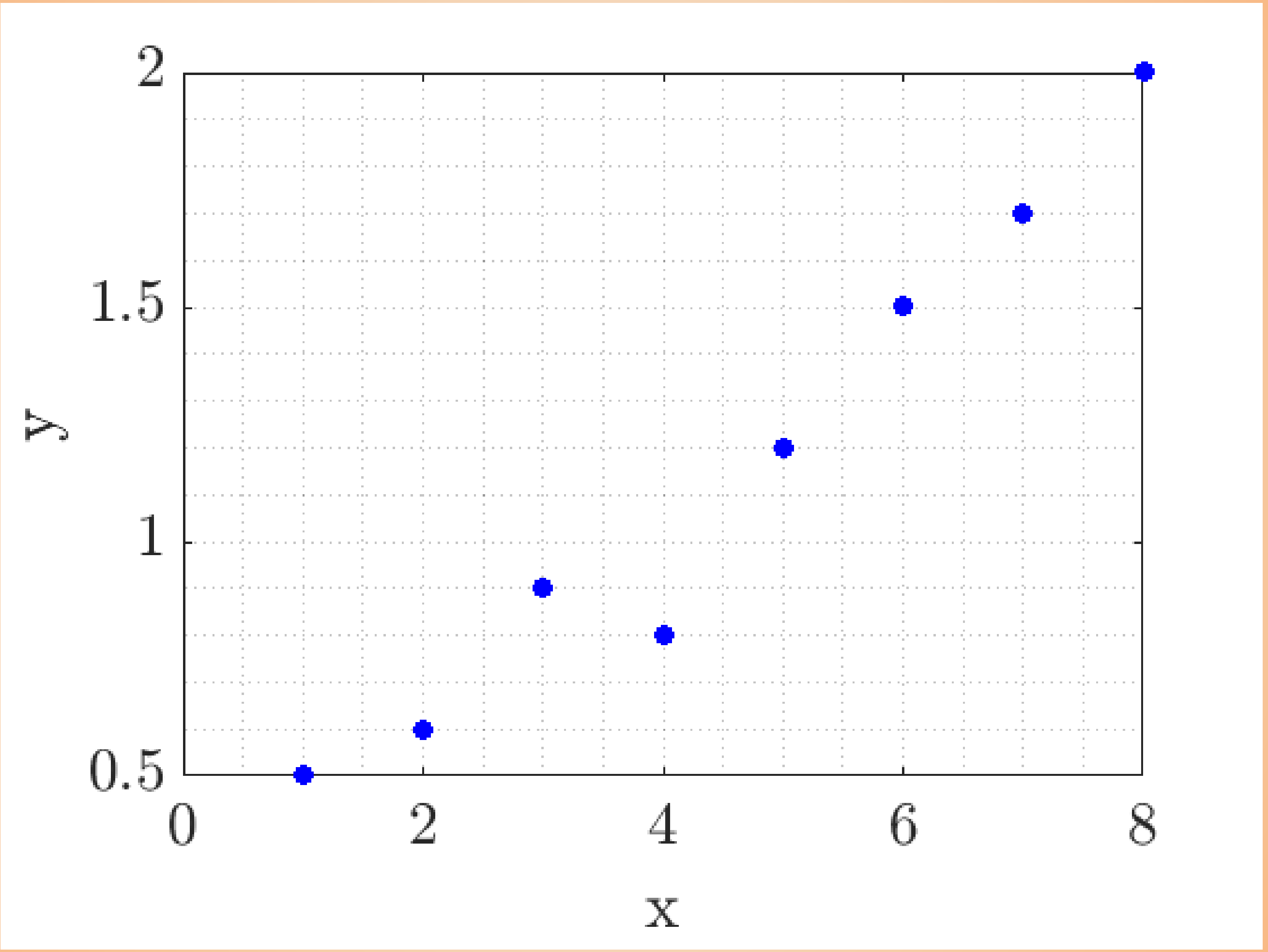
   b) uma parábola do tipo $ax^2 + bx + c$.

   Trace as duas curvas no gráfico de dispersão dos dados. Como você compararia as duas curvas com relação aos dados?

x	1	2	3	4	5	6	7	8
y	0.5	0.6	0.9	0.8	1.2	1.5	1.7	2.0

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional



Cálculo Numérico Computacional

Solução:

Neste caso, temos $\boldsymbol{n+1=8}$. Desejamos determinar $\boldsymbol{p_1(x)=a_0+a_1\times x}$. Assim, devemos resolver o sistema linear:

$$\begin{cases} (n+1)\times a_0 + a_1 \times \displaystyle\sum_{j=0}^{7} x_j = \sum_{j=0}^{7} f(x_j) \\ a_0 \times \displaystyle\sum_{j=0}^{7} x_j + a_1 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^2 = \sum_{j=0}^{7} x_j \times f(x_j) \end{cases}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

$$\begin{cases} 8 \times a_0 + 36 \times a_1 = 9.2 \\ 36 \times a_0 + 204 \times a_1 = 50.5 \end{cases}$$

Resolvendo:

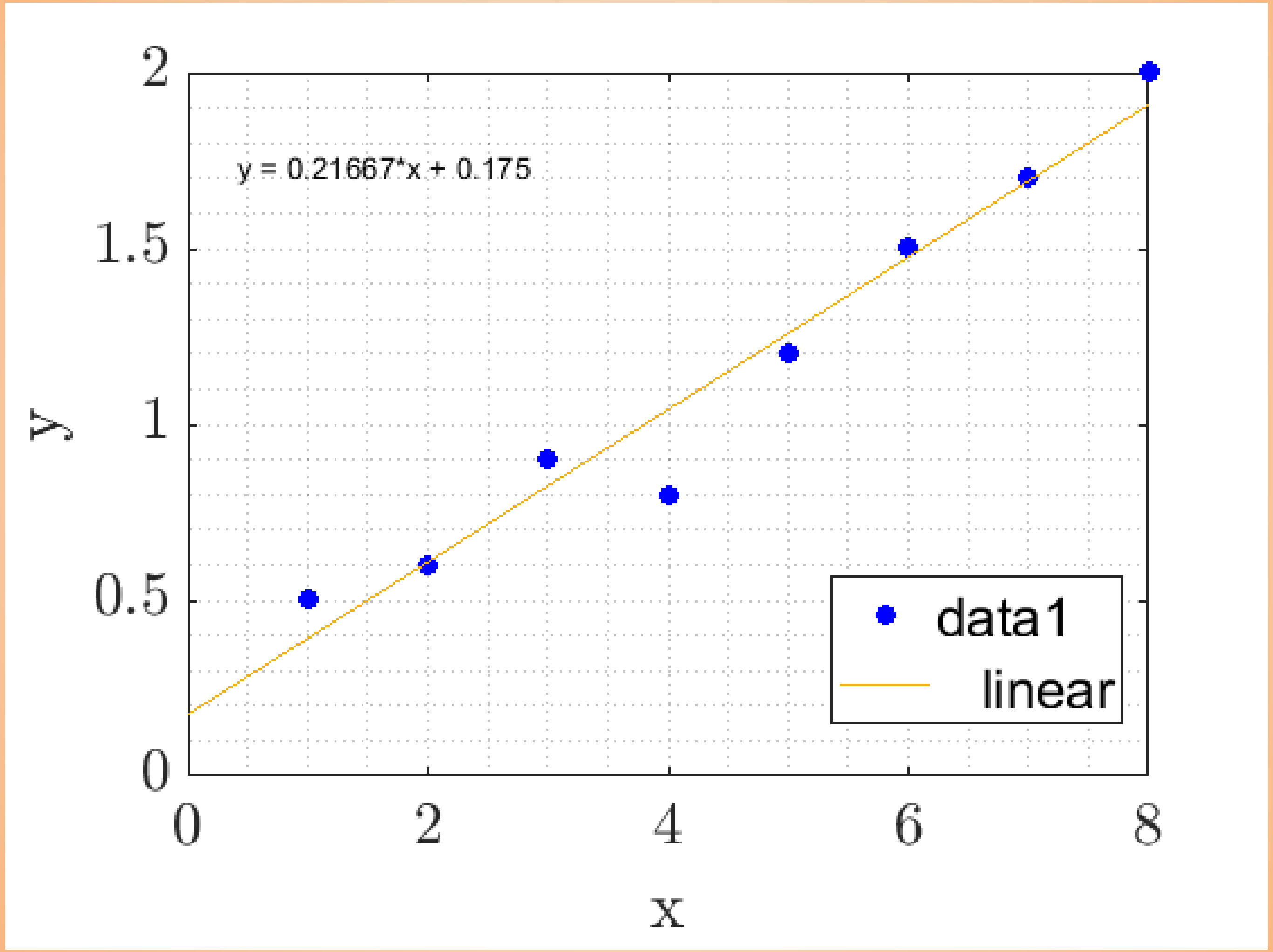
$$a_0 = 0.175, \qquad a_1 = 0.21667$$

Dessa forma:

$$p_1(x) = 0.175 + 0.21667 \times x$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional



Cálculo Numérico Computacional

Agora, desejamos determinar $p_2(x) = a_0 + a_1 \times x + a_2 \times x^2$. Assim, devemos resolver o sistema linear:

$$\begin{cases} (n+1) \times a_0 + a_1 \times \sum_{j=0}^{7} x_j + a_2 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^2 = \sum_{j=0}^{7} f(x_j) \\ a_0 \times \sum_{j=0}^{7} x_j + a_1 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^2 + a_2 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^3 = \sum_{j=0}^{7} x_j \times f(x_j) \\ a_0 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^2 + a_1 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^3 + a_2 \times \sum_{j=0}^{7} x_j^4 = \sum_{j=0}^{7} x_j^2 \times f(x_j) \end{cases}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

$$\begin{cases} 8 \times a_0 + 36 \times a_1 + 204 \times a_2 = 9.2 \\ 36 \times a_0 + 204 \times a_1 + 1296 \times a_2 = 50.5 \\ 204 \times a_0 + 1296 \times a_1 + 8772 \times a_2 = 319.1 \end{cases}$$

Resolvendo:

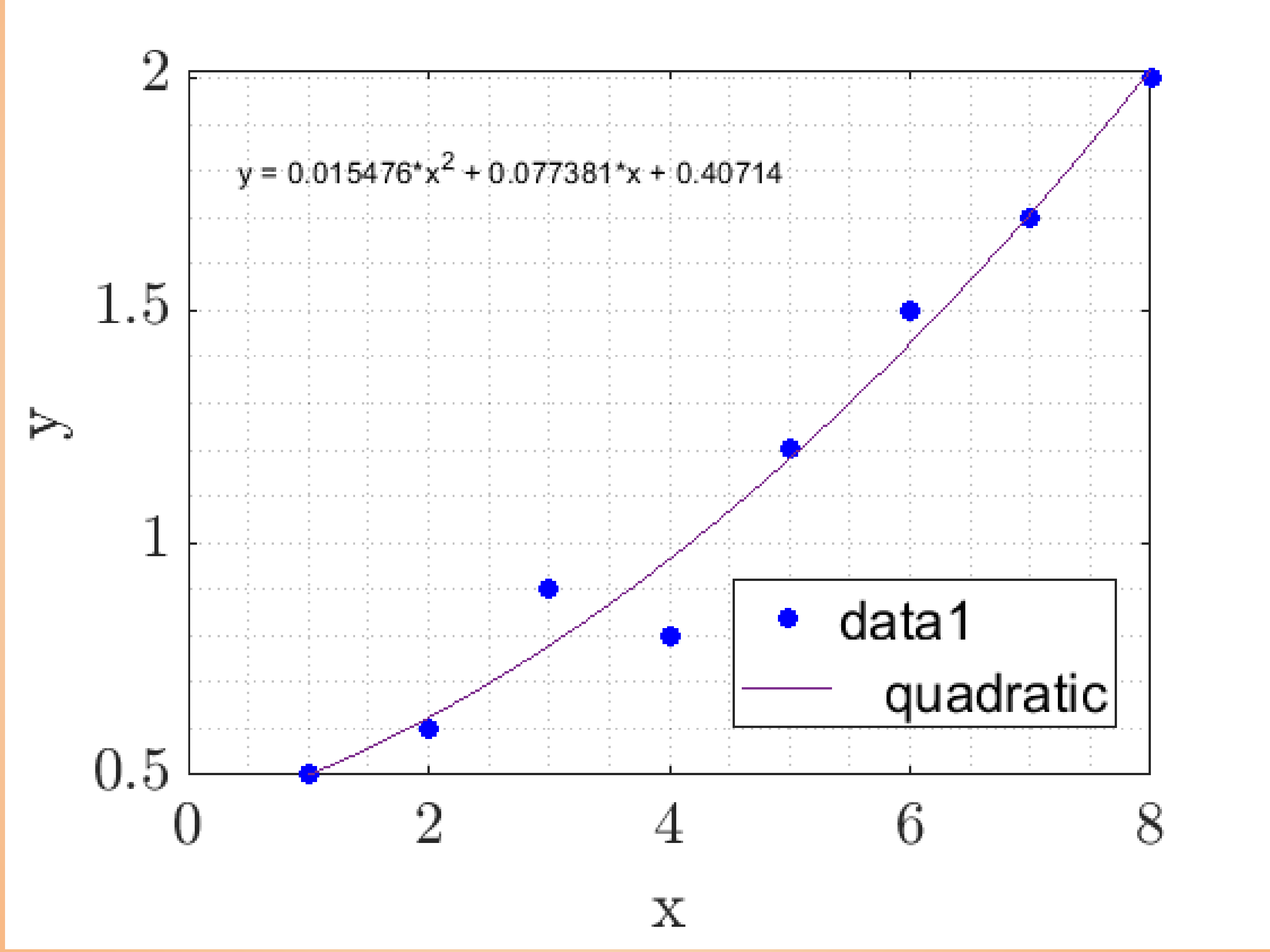
$$a_0 = 0.40714, \qquad a_1 = 0.077381, \qquad a_2 = 0.015476$$

Dessa forma:

$$p_2(x) = 0.40714 + 0.077381 \times x + 0.015476 \times x^2$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional



Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

A comparação pode ser feita através do cálculo de $\sum_{k=1}^{8} d_k^2$: para a reta, $\sum_{k=1}^{8} d_k^2 = 0.08833$ e, para a parábola, $\sum_{k=1}^{8} d_k^2 = 0.04809$.

Como o menor valor para a soma dos quadrados dos desvios foi para a parábola, o melhor ajuste para os dados, entre as duas possibilidades, é a parábola.

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

4. Caso contínuo

- Dada uma função $f(x)$ contínua em $[a,b]$ e escolhidas as funções $g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)$ todas contínuas em $[a,b]$. Desejamos determinar n constantes $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ de modo que a função $\varphi(x) = \alpha_1 \times g_1(x) + \alpha_2 \times g_2(x) + \cdots + \alpha_n \times g_n(x)$ se aproxime ao máximo de $f(x)$ no intervalo $[a,b]$;

- O método dos Mínimos Quadrados determina o mínimo da função

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \int_a^b [f(x) - \varphi(x)]^2 \times dx$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- Para o caso particular de duas funções $\boldsymbol{g_1(x)}$ e $\boldsymbol{g_2(x)}$, o ponto mínimo de $\boldsymbol{F(\alpha_1, \alpha_2)}$ é obtido como a solução única do sistema linear:

$$\begin{cases} \left[\int_a^b g_1^2(x) \times dx\right] \times \alpha_1 + \left[\int_a^b g_1(x) \times g_2(x) \times dx\right] \times \alpha_2 = \int_a^b f(x) \times g_1(x) \times dx \\ \left[\int_a^b g_1(x) \times g_2(x) \times dx\right] \times \alpha_1 + \left[\int_a^b g_2^2(x) \times dx\right] \times \alpha_2 = \int_a^b f(x) \times g_2(x) \times dx \end{cases}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

5. Exemplo

- Usando o método dos Mínimos Quadrados, aproximar $\boldsymbol{f(x) = 4 \times x^3}$ por um polinômio de 1º grau, uma reta, no intervalo $[\boldsymbol{a, b}] = [\boldsymbol{0, 1}]$.

- SOLUÇÃO: Neste caso, $\boldsymbol{f(x) = 4 \times x^3, a = 0, b = 1}$;

- Desejamos determinar $\boldsymbol{\varphi(x) = \alpha_1 \times g_1(x) + \alpha_2 \times g_2(x)}$, onde $\boldsymbol{g_1(x) = 1}$ e $\boldsymbol{g_2(x) = x}$.

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- Cálculo das integrais:

$$\int_0^1 1^2 \times dx = 1, \qquad \int_0^1 1 \times x \times dx = \frac{1}{2}, \qquad \int_0^1 4 \times x^3 \times 1 \times dx = 1$$

$$\int_0^1 x^2 \times dx = \frac{1}{3}, \qquad \int_0^1 4 \times x^3 \times x \times dx = \frac{4}{5}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- Temos, assim, o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 1 \times \alpha_1 + \dfrac{1}{2} \times \alpha_2 = 1 \\ \dfrac{1}{2} \times \alpha_1 + \dfrac{1}{3} \times \alpha_2 = \dfrac{4}{5} \end{cases}$$

Resolvendo:

$$\alpha_1 = -\frac{4}{5}, \qquad \alpha_2 = \frac{18}{5}$$

Portanto: $$\boxed{\varphi(x) = -\frac{4}{5} + \frac{18}{5} \times x}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

6. Caso não linear

- Em alguns casos, as funções escolhidas poderão ser não lineares nos parâmetros;

- Por exemplo, se ao diagrama de dispersão de uma determinada função se ajustar uma exponencial do tipo $\boldsymbol{f(x) \approx \varphi(x) = \alpha_1 \times e^{-\alpha_2 \times x}}$, sendo $\boldsymbol{\alpha_1}$ e $\boldsymbol{\alpha_2}$ positivos;

- Para a aplicação do método dos Mínimos Quadrados, é necessário uma linearização através de uma conveniente mudança de variáveis.

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- Por exemplo:

$$y \approx \alpha_1 \times e^{-\alpha_2 \times x} \quad \rightarrow \quad z = ln(y) \approx ln(\alpha_1) - \alpha_2 \times x$$

- Se $a_1 = ln(\alpha_1)$ e $a_2 = -\alpha_2$, segue que $ln(y) \approx a_1 - a_2 \times x = \varphi(x)$, que é um problema linear nos parâmetros a_1 e a_2;

- Os parâmetros obtidos não são ótimos dentro do critério dos quadrados mínimos, porque estamos ajustando o problema linearizado por quadrados mínimos e não o problema original.

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

7. Exemplo

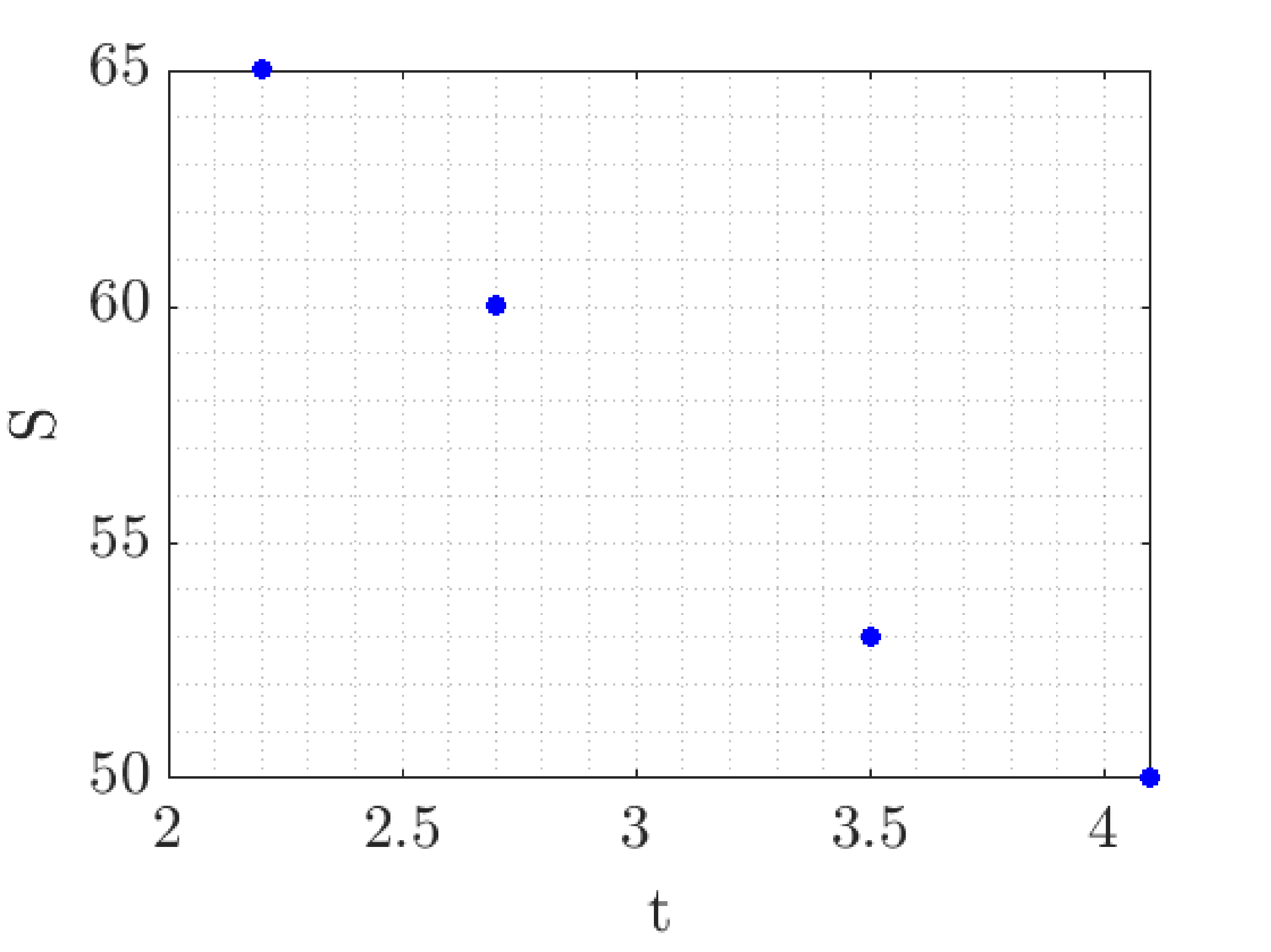
- Suponha a situação onde desejamos determinar a função exponencial da forma $S = q \times t^p$, que melhor se ajusta aos dados tabelados por:

t	2.2	2.7	3.5	4.1
S	65	60	53	50

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- Diagrama de dispersão



Cálculo Numérico Computacional

- Como $\boldsymbol{S = q \times t^p}$, então:

$$\boldsymbol{log(S) = log(q \times t^p)}$$

$$\boldsymbol{log(s) = log(q) + p \times log(t)}$$

- Vamos considerar agora as mudanças de variável:

$$\boldsymbol{y = log(S), \qquad a_0 = log(q), \qquad a_1 = p, \qquad x = log(t)}$$

- Temos assim o polinômio de 1º grau $\boldsymbol{y = a_0 + a_1 \times x}$, o qual pode ser determinado pelo método dos Mínimos Quadrados.

Cálculo Numérico Computacional

- Devemos utilizar os dados:

$x = log(t)$	0.3424	0.4314	0.5441	0.6128
$y = log(S)$	1.8129	1.7782	1.7243	1.6990

- E resolver o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} (n+1) \times a_0 + a_1 \times \sum_{j=0}^{3} x_j = \sum_{j=0}^{3} f(x_j) \\ a_0 \times \sum_{j=0}^{3} x_j + a_1 \times \sum_{j=0}^{3} x_j^2 = \sum_{j=0}^{3} x_j \times f(x_j) \end{cases}$$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

$$\begin{cases} 4 \times a_0 + 1.9307 \times a_1 = 7.0144 \\ 1.9307 \times a_0 + 0.9748 \times a_1 = 3.3671 \end{cases}$$

Resolvendo:

$$a_0 = 1.963, \qquad a_1 = -0.434$$

Dessa forma:

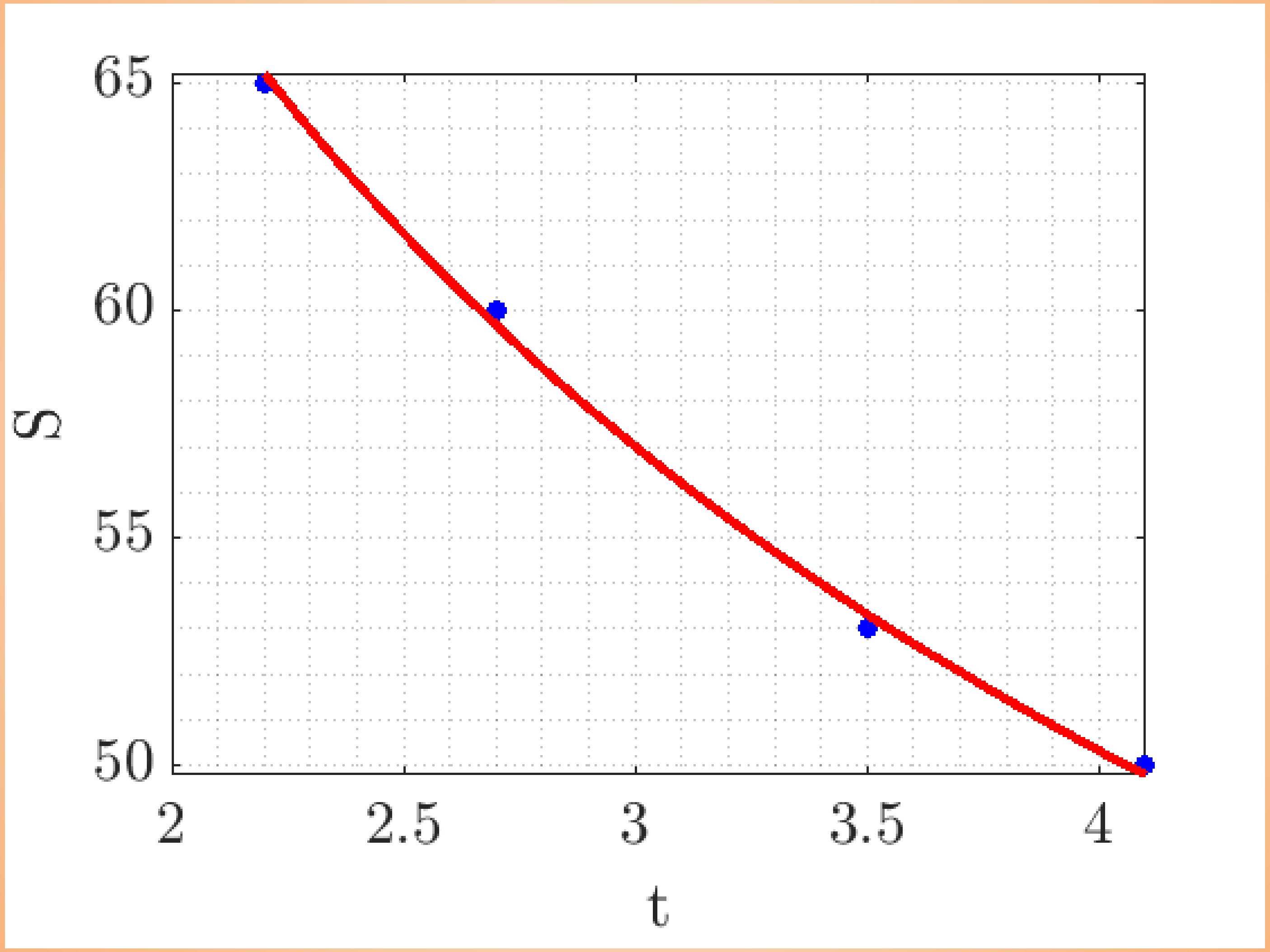
$$10^{a_0} = q \rightarrow \quad q = 91,83$$

$$p = -0.434$$

Assim: $\boxed{S = 91.83 \times t^{-0.434}}$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional



Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

- OUTRAS FUNÇÕES:

(a) $\boldsymbol{S = A \times e^{c \times t}}$, sendo $\boldsymbol{A}$ e $\boldsymbol{c}$ constantes a serem determinadas.

t	t_0	t_1	…	t_n
S	S_0	S_1	…	S_n

Como $\boldsymbol{S = A \times e^{c \times t}}$:

$$ln(S) = ln(A \times e^{c \times t})$$

Cálculo Numérico Computacional

$$\boldsymbol{ln(S) = ln(A \times e^{c \times t})}$$

$$\boldsymbol{ln(S) = ln(A) + c \times t}$$

Assim:

$$\boldsymbol{y = ln(S), \qquad a_0 = ln(A), \qquad a_1 = c, \qquad x = t}$$

Construímos uma nova tabela:

$x = t$	t_0	t_1	...	t_n
$y = ln(S)$	$ln(S_0)$	$ln(S_1)$	...	$ln(S_n)$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

(b) $S = \frac{1}{p+q\times t}$, sendo p e q constantes a serem determinadas.

t	t_0	t_1	...	t_n
S	S_0	S_1	...	S_n

Mudança de variável: $y = \frac{1}{s} = p + q \times t$

Assim: $a_0 = p,\ \ a_1 = q,\ \ x = t$. Nova tabela:

$x = t$	t_0	t_1	...	t_n
$y = 1/S$	$1/S_0$	$1/S_1$	...	$1/S_n$

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

EXERCÍCIOS

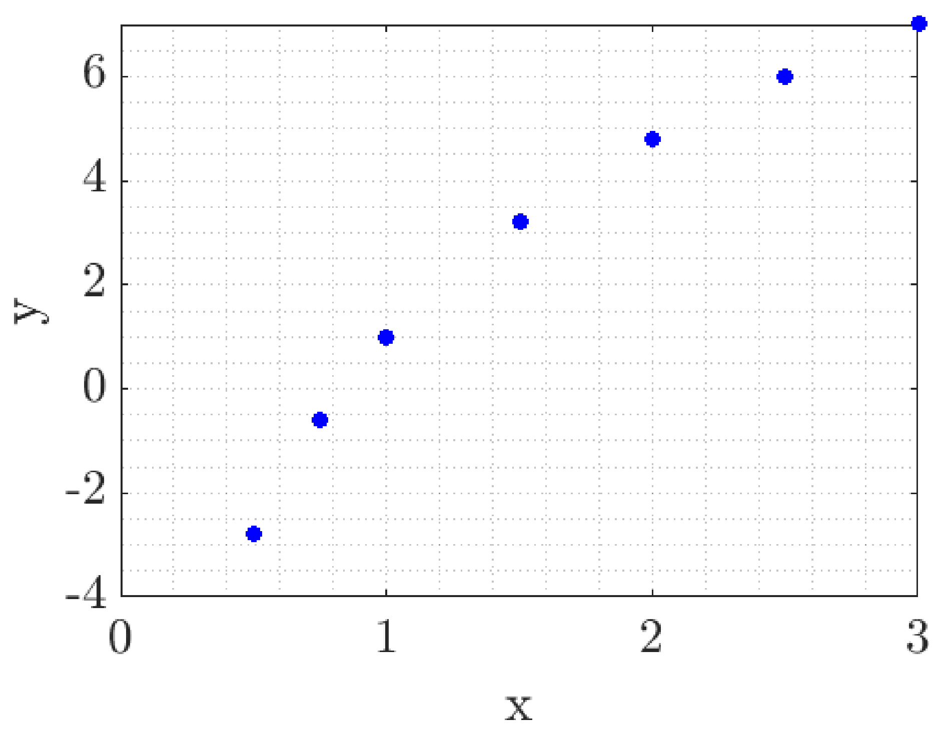
Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

3. Dada a tabela abaixo, faça o gráfico de dispersão dos dados e ajuste uma curva da melhor maneira possível:

x	0.5	0.75	1	1.5	2.0	2.5	3.0
y	–2.8	–0.6	1	3.2	4.8	6.0	7.0

3. Curva de ajuste escolhida: $\varphi(x) = \alpha_1 \ln(x) + \alpha_2$. Obteve-se: $\varphi(x) = 5.47411 \ln(x) + 0.98935$.



Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional

A tabela abaixo mostra as alturas e pesos de uma amostra de nove homens entre as idades de 25 a 29 anos, extraída ao acaso entre funcionários de uma grande indústria:

Altura	183	173	168	188	158	163	193	163	178	cm
Peso	79	69	70	81	61	63	79	71	73	kg

a) Faça o diagrama de dispersão dos dados e observe que parece existir uma relação linear entre a altura e o peso.

b) Ajuste uma reta que descreva o comportamento do peso em função da altura, isto é, peso = f(altura).

c) Estime o peso de um funcionário com 175 cm de altura; e estime a altura de um funcionário com 80 kg.

d) Ajuste agora a reta que descreve o comportamento da altura em função do peso, isto é, altura = g(peso).

e) Resolva o item (*c*) com essa nova função e compare os resultados obtidos. Tente encontrar uma explicação.

f) Coloque num gráfico as equações (*b*) e (*d*) e compare-as.

4. *b*) $52.7570x - 20.0780$, trabalhando com as alturas em metros.

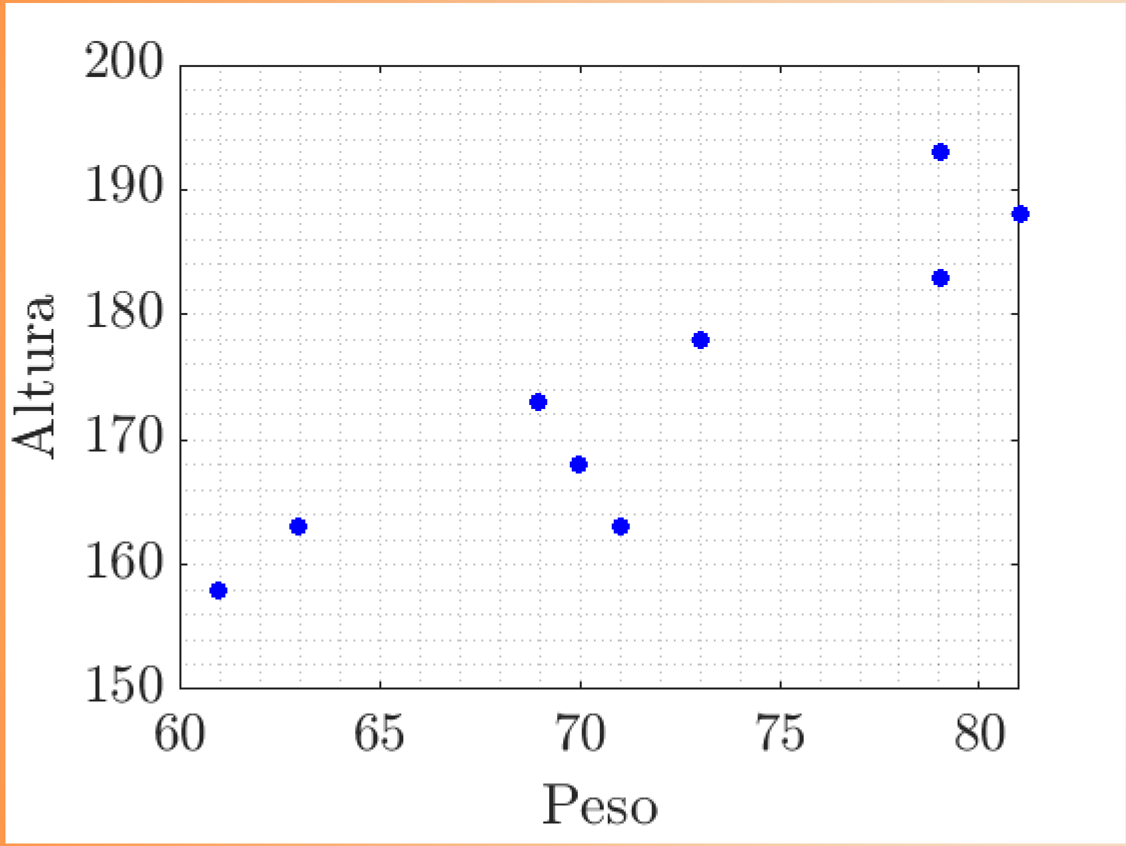
c) peso de um funcionário com 1.75 m de altura ≃ 72.2467 kg; altura de um funcionário com 80 kg ≃ 1.897 m.

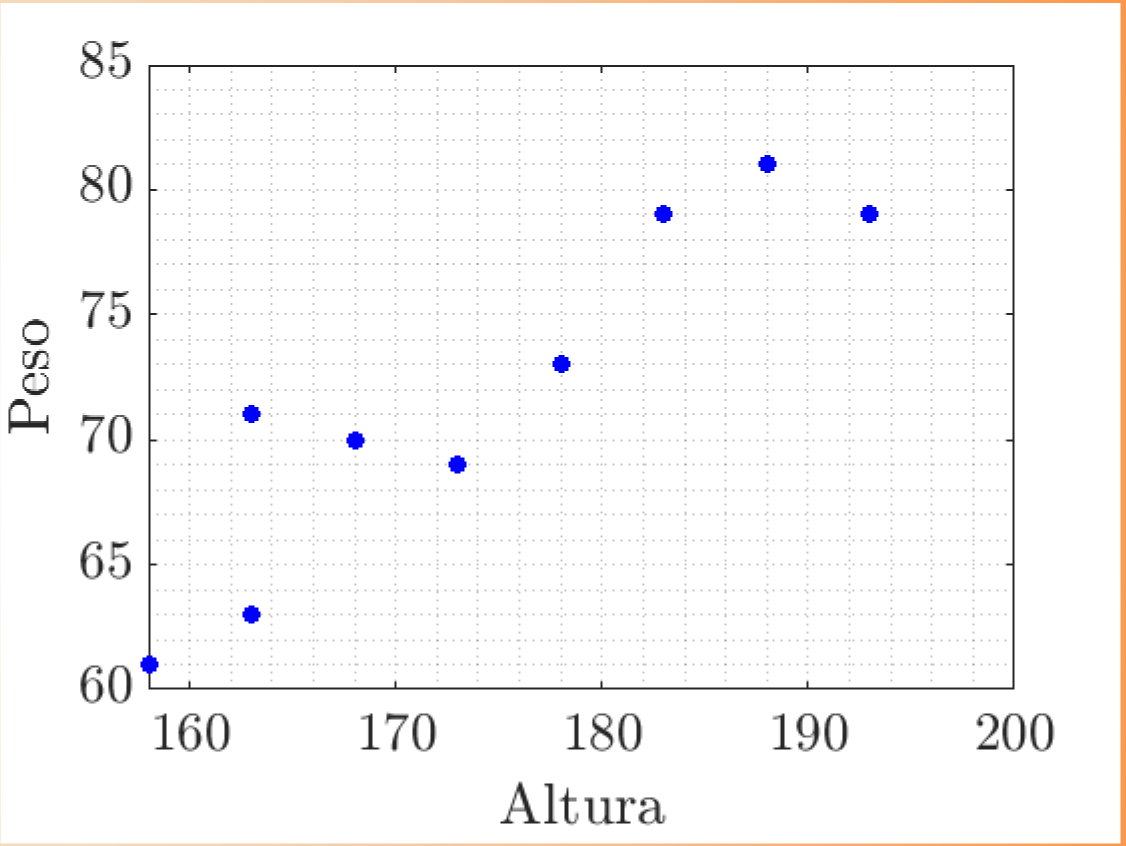
d) $0.0159x + 0.6029$.

e) peso de um funcionário com 1.75 m de altura ≃ 72.14 kg; altura de um funcionário com 80 kg ≃ 1.871 m.

Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br

Cálculo Numérico Computacional





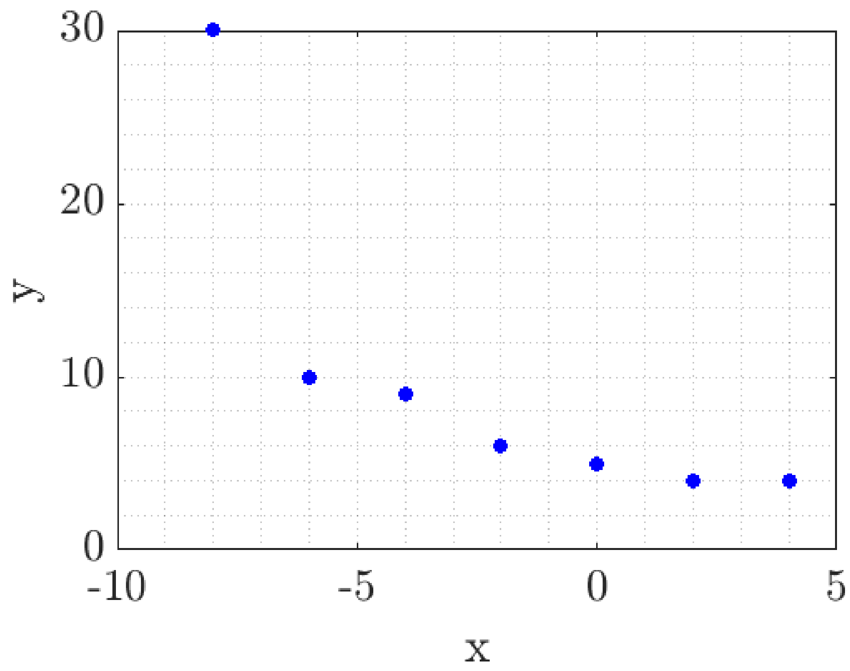
6. Ajuste os dados:

x	−8	−6	−4	−2	0	2	4
y	30	10	9	6	5	4	4

a) usando a aproximação $y \approx 1/(a_0 + a_1x)$. Faça o gráfico para $1/y$ e verifique que esta aproximação é viável;

b) idem para $y \approx ab^x$;

c) compare os resultados (*a*) e (*b*).



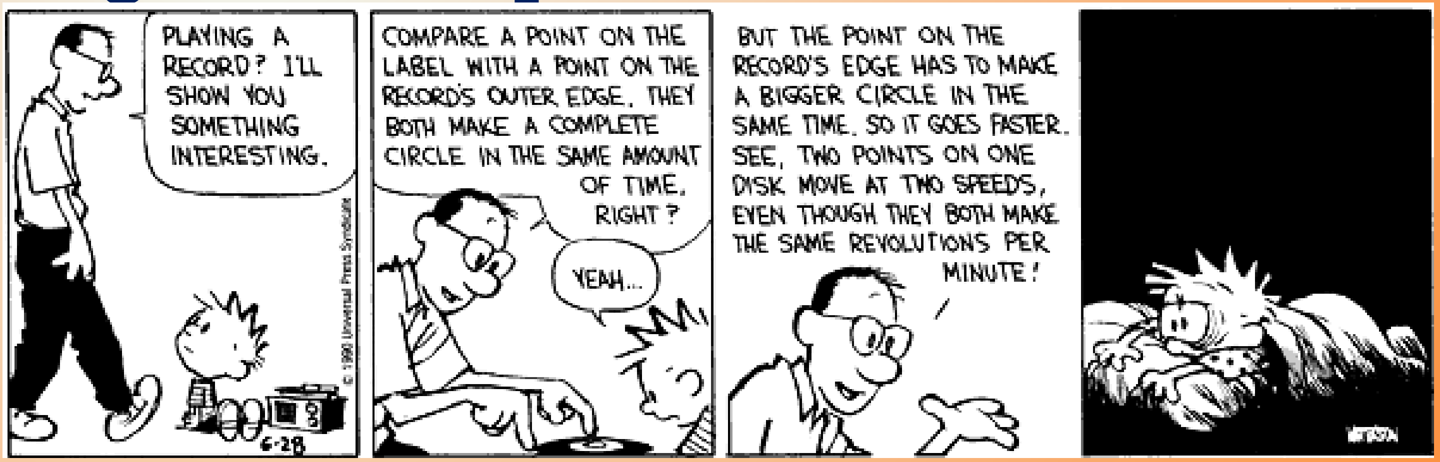
6. *a*) $y \approx \dfrac{1}{0.1958 + 0.0185x}$.

b) $y \approx 5.5199(0.8597)^x$.

Cálculo Numérico Computacional
Próxima aula:

Aula 15

- Diferenciação numérica;
- Integração numérica: regra dos trapézios.



Prof. Lucas Zanovello
lucas.tahara@unesp.br