



## Universidade Federal do Rio Grande do Norte DIMAP

Cálculo Numérico U5 – Ajuste de Curvas

Antonio Carlos Gay Thomé

## Cálculo Numérico

## Introdução

Experimentos em laboratório costumam gerar um conjunto de dados que precisam ser analisados com o objetivo de determinar certas propriedades do fenômeno em análise.

Obter uma função matemática que represente (ou que ajuste) os dados permite fazer simulações, de forma confiável, reduzindo assim repetições de experimentos que podem ser demorados e ter um altos cultos.

## Introdução

## Por quê não interpolar?

A *interpolação* aproxima uma função, sobre um conjunto finito de pontos dados, porém exige que todos os pontos sejam distintos.

Além disso, o *grau do polinômio interpolador* depende da quantidade de pontos. Logo, para um conjunto de 100 pontos, o polinômio interpolador terá grau ≤ 99, o que não é muito prático se desejamos montar um modelo matemático.

A interpolação é mais indicada para aproximações quantitativas e locais, enquanto que o ajuste de curvas é indicado para aproximações qualitativas.

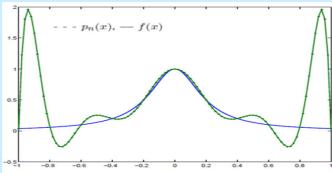
Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Introdução

## Por quê não interpolar?

Outro fato é que a medida que a quantidade de pontos num intervalo [a, b] aumenta, tende a ocorrer um fenômeno chamado de Runge, que aumenta o erro nos pontos extremos do intervalo e melhora a aproximação nos pontos centrais.



## Introdução

O fenômeno de Runge ocorre em função da fórmula do erro, uma vez que nos pontos extremos do intervalo o fator  $(x - x_0)...(x - x_n)$  se torna grande.

Em virtude deste fenômeno, o polinômio interpolador não é indicado para *extrapolar* valores, isto é aproximar valores que não pertençam ao intervalo  $[x_0, x_n]$ .

## **SOLUÇÃO?**

Apelar para técnicas de Ajuste de Curvas.

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Introdução

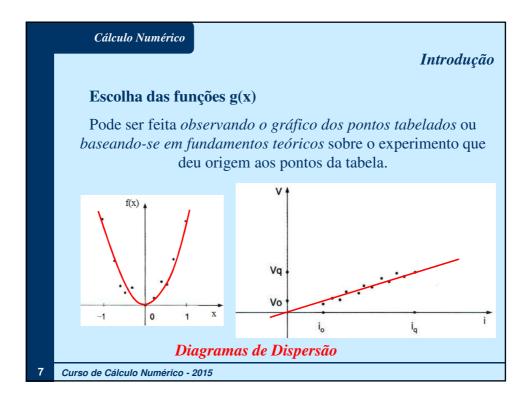
*Ajustar Curvas* consiste em <u>combinar linearmente</u> um conjunto de funções previamente selecionadas (lineares ou não) de tal forma que ela melhor se aproxime da função f(x), <u>desconhecida</u>, porém geradora dos dados tabelados.

## Assim, dado:

- 1. Um conjunto de pontos  $(x_1,f(x_1))$  ...  $(x_m, f(x_m))$  com  $x_1$  ...  $x_m \in [a,b]$  e;
- 2. Um conjunto de **n** funções pré-escolhidas  $g_1(x)$  ...  $g_n(x)$  contínuas em [a, b]

Ajustar uma Curva aos pontos dados é:

Obter n coeficientes tal que  $\Phi(x) = a_1g_1(x) + ... + a_ng_n(x)$  se aproxime ao máximo de f(x).



# Nesta unidade focaremos somente o esquema de ajuste dado pelo Método dos Mínimos Quadrados aplicado às seguintes situações: ✓ Caso Discreto ✓ Caso Contínuo ✓ Ajuste Não-linear

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

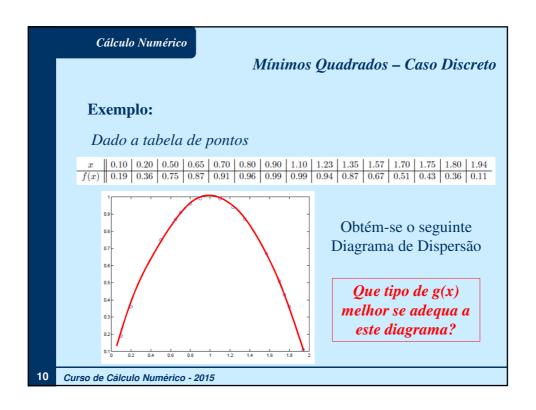
Dado um conjunto de pontos  $(x_k, f(x_k)), k = 0, 1, 2, ..., m$ .

O ajuste de curvas consiste em encontrar uma função  $\Phi(x)$  tal que o desvio em cada ponto k, definido por:

$$d_k = f(x_k) - \Phi(x_k)$$
 seja mínimo

E Φ(x) seja uma combinação linear de funções  $g_i(x)$ , i = 1, 2, ..., n contínuas dentro do intervalo dos pontos tabelados e escolhidas de acordo com os dados do problema.

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



## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

A análise do gráfico de dispersão mostra que a função que procuramos se <u>comporta como uma parábola</u>.

Logo, se escolhermos as funções  $g_1(x) = 1$ ,  $g_2(x) = x$  e  $g_3(x) = x^2$  teremos:

$$\Phi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2$$

Que representará "todas" as parábolas e com a escolha adequada dos  $\alpha_i$  teremos aquela que melhor se ajusta aos pontos da tabela.

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

O Método dos Mínimos Quadrados consiste em determinar os  $\alpha_i$  de tal forma que a soma dos quadrados dos desvios em seja mínimo.

Isto é, achar os  $\alpha_i$  que minimizam a função:

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = \sum_{k=1}^m \left[ f(x_k) - \overbrace{(\alpha_1 g_1(x_k) + \dots + \alpha_n g_n(x_k))}^{\varphi(x_k)} \right]^2.$$

F(.) é uma função que satisfaz  $F(\alpha) \ge 0 \ \forall \alpha \in \mathbb{R}^m$ . Ou seja, F(.) é limitada inferiormente e portanto tem um ponto de mínimo. Este ponto pode ser determinado pelo teste da primeira derivada

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

Pelo teste da primeira derivada temos

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \alpha_i} \right|_{(\alpha_1, \dots, \alpha_n)} = 0 \quad i = 1, \dots, n.$$

Que da fórmula original implica em

$$-2\sum_{k=1}^{m} [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \cdots + \alpha_n g_n(x_k)] g_i(x_k) = 0$$

3 Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

O que resulta num sistema de equações dado por

$$\begin{cases} \alpha_1 \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_1(x_k) + \alpha_2 \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_2(x_k) + \dots + \alpha_n \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_n(x_k) &=& \sum_{k=1}^m f(x_k)g_1(x_k) \\ \alpha_1 \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_1(x_k) + \alpha_2 \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_2(x_k) + \dots + \alpha_n \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_n(x_k) &=& \sum_{k=1}^m f(x_k)g_2(x_k) \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_1 \sum_{k=1}^m g_n(x_k)g_1(x_k) + \alpha_2 \sum_{k=1}^m g_n(x_k)g_2(x_k) + \dots + \alpha_n \sum_{k=1}^m g_n(x_k)g_n(x_k) &=& \sum_{k=1}^m f(x_k)g_n(x_k) \end{cases}$$

com "i" variando de 1 ... n

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

**Exemplo:** O sistema pode ser representado da seguinte forma

$$\begin{cases} a_{1,1}\alpha_1 & + & a_{1,2}\alpha_2 & + & a_{1,3}\alpha_3 & \cdots & a_{1,n}\alpha_n & = & b_1 \\ a_{2,1}\alpha_1 & + & a_{2,2}\alpha_2 & + & a_{2,3}\alpha_3 & \cdots & a_{2,n}\alpha_n & = & b_2 \\ a_{3,1}\alpha_1 & + & a_{3,2}\alpha_2 & + & a_{3,3}\alpha_3 & \cdots & a_{3,n}\alpha_n & = & b_3 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n,1}\alpha_1 & + & a_{n,2}\alpha_2 & + & a_{n,3}\alpha_3 & \cdots & a_{n,n}\alpha_n & = & b_n \end{cases}$$

onde 
$$a_{i,j} = \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k)g_j(x_k)$$
 e  $b_i = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)g_i(x_k)$ 

Este sistema terá solução única se as funções  $g_i(x)$  forem linearmente independentes.

Obs.: para um sistema  $n \times n$ , será necessário calcular  $(n^2 + n)/2$  elementos

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Dependência x Independência Linear

Sejam v<sub>1</sub>, v<sub>2</sub>, ..., v<sub>n</sub> vetores em V e a equação vetorial

$$a_1v_1 + a_2v_2 + ... + a_nv_n = 0$$

Obviamente o vetor zero sempre pode ser escrito como CL dos vetores pois

$$0.v_1 + 0.v_2 + ... + 0.v_n = 0$$

será sempre verdadeira para quaisquer que sejam os vetores dados. A solução  $a_1=a_2=\ldots=a_n=0$  é chamada **solução trivial**.

A resposta à pergunta "A solução trivial de (1) é única? Se for:

- a) **Sim**, então  $v_1, v_2, ..., v_n$  são linearmente independentes (LI)
- b) **Não**, então v<sub>1</sub>, v<sub>2</sub>, ..., v<sub>n</sub> são linearmente dependentes (LD)

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

Tomando então  $g_1(x) = 1$ ,  $g_2(x) = x e g_3(x) = x^2$ e expandindo a tabela para cada  $g_i(x)$  nos pontos  $x_k$  temos:

	0.10														
	0.19														
$g_1(x)$	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
$g_2(x)$															
$g_3(x)$	0.01	0.04	0.25	0.42	0.49	0.64	0.81	1.21	1.51	1.82	2.46	2.89	3.06	3.24	3.76

O passo seguinte é calcular os coeficientes  $a_{i,j}$  e os termos independentes b<sub>i</sub>

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

Cálculo dos coeficientes  $a_{i,j}$  e os termos independentes  $b_i$ 

Calculo dos coeficientes 
$$a_{i,j}$$
 e os termos independentes  $b_i$ 

$$a_{1,1} = \sum_{k=1}^{15} g_1(x_k) * g_1(x_k) = 15$$

$$a_{1,2} = \sum_{k=1}^{15} g_1(x_k) * g_2(x_k) = 16.29 = a_{2,1}$$

$$a_{1,3} = \sum_{k=1}^{15} g_1(x_k) * g_3(x_k) = 22.62 = a_{3,1}$$

$$a_{2,2} = \sum_{k=1}^{15} g_2(x_k) * g_2(x_k) = 22.62$$

$$a_{3,3} = \sum_{k=1}^{15} g_3(x_k) * g_3(x_k) = 57.09$$

$$b_1 = \sum_{k=1}^{15} f(x_k) * g_1(x_k) = 9.91$$

$$b_2 = \sum_{k=1}^{15} f(x_k) * g_2(x_k) = 10.28$$

$$b_3 = \sum_{k=1}^{15} f(x_k) * g_3(x_k) = 12.66$$

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

Chegamos assim ao seguinte sistema de equações

$$15.00\alpha_1 + 16.29\alpha_2 + 22.62\alpha_3 = 9.91$$

$$16.29\alpha_1 + 22.62\alpha_2 + 34.92\alpha_3 = 10.28$$

$$22.62\alpha_1 + 34.92\alpha_2 + 57.09\alpha_3 = 12.66$$

que pode ser resolvido por qualquer dos esquemas numéricos vistos no curso, chegando ao resultado:

$$\alpha_1 = 0.00, \quad \alpha_2 = 1.99, \quad \alpha_3 = -0.99$$

9 Curso de Cálculo Numérico - 2015

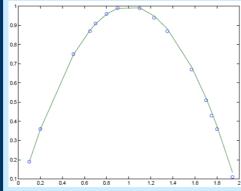
## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## **Exemplo:**

Finalmente chegamos à função  $\Phi(x)$  final que é dada por

$$\varphi(x) = 1.99x - 0.99x^2$$



## Através da função $\Phi(x)$ podemos:

- ✓ determinar valores de máximo ou mínimos;
- ✓ Determinar valores aproximados para a derivada;
- ✓ aproximar valores de f em pontos que não pertencem a tabela.

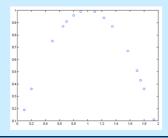
**←**Diagrama de dispersão

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## Considerações:

No exemplo ajustamos os dados a uma parábola, mas outras funções bases  $g_i(x)$  poderiam ter sido usadas.

Poderíamos imaginar que os dados representassem o primeiro meio ciclo de uma função senoidal e não uma parábola.



Neste caso poderíamos tomar  $g_1(x) = 1$ e  $g_2(x) = \text{sen}(\pi x/2)$ .

Qual proporcionaria o melhor ajuste?

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Discreto

## Considerações:

O desvio fornece uma medida que pode ser usada como parâmetro de comparação entre ajustes diferentes. No caso do ajuste pela parábola temos que o desvio é dado por:

$$D = \sum_{k=1}^{15} (f(x_k) - \varphi(x_k))^2 = 0.0019$$

Se o ajuste feito pela função senoidal tiver um desvio menor, então este representaria melhor os dados.

<u>Outro ponto</u> a observar é <u>a dimensão do sistema linear</u> que depende do número de funções bases usadas. No caso da parábola foram três funções bases e um sistema  $3 \times 3$ . No caso da função senoidal o sistema será  $2 \times 2$ .

## Mínimos Quadrados - Caso Contínuo

No caso contínuo temos uma função f(x) dada num intervalo [a, b] e não mais uma tabela de pontos.

O procedimento é análogo ao caso discreto.

Escolhidas as funções bases  $g_i(x)$  devemos determinar a função

$$\Phi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \dots + \alpha_n g_n(x)$$

de modo que o desvio seja mínimo, onde

$$D = \int_{a}^{b} (f(x) - \varphi(x))^{2} dx$$

Curso de Cálculo Numérico - 2015

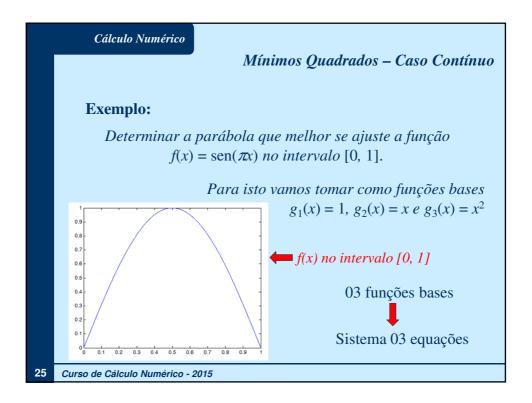
## Cálculo Numérico

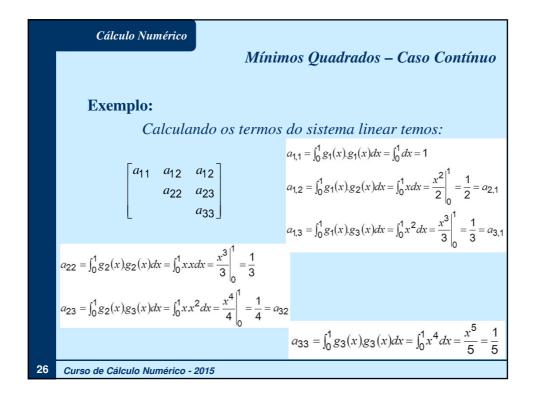
## Mínimos Quadrados - Caso Contínuo

Neste caso os  $\alpha_i$  também são determinados pela resolução de um sistema de equações.

De forma semelhante ao caso Discreto, os elementos  $a_{i,j}$  são obtidos por intermédio do produto interno entre as funções  $g_i(x)$  e  $g_j(x)$  e os elementos  $b_i$  pelo produto interno entre f(x) e  $g_i(x)$ .

$$a_{i,j} = \int_a^b g_i(x)g_j(x)dx$$
 e  $b_i = \int_a^b f(x)g_i(x)dx$ 





## Mínimos Quadrados - Caso Contínuo

## **Exemplo:**

Calculando os termos b<sub>i</sub>:

$$b_1 = \int_0^1 f(x) \cdot g_1(x) dx = \int_0^1 sen(\pi x) dx = \frac{-\cos(\pi x)}{\pi} \Big|_0^1 = 0.636$$

$$b_2 = \int_0^1 f(x) \cdot g_2(x) dx = \int_0^1 x \cdot sen(\pi x) dx$$
$$u = \pi x \Rightarrow du = \pi dx \Rightarrow \int_0^1 \frac{u}{\pi} sen(u) \frac{du}{\pi} = 0$$

$$\frac{1}{\pi^2} \int_0^1 u sen(u) du = \frac{1}{\pi^2} \left( -u \cos(u) - \int_0^1 \cos(u) du \right) \qquad \int_0^1 \cos(u) du = sen(u)$$

$$\frac{1}{\pi^2} \int_0^1 u sen(u) du = \frac{1}{\pi^2} (-u \cos(u) - sen(u))_0^1$$

$$b_2 = \frac{1}{\pi^2} (-\pi x \cos(\pi x) - sen(\pi x))_0^1 = \frac{1}{\pi} = 0.3183$$

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Contínuo

## **Exemplo:**

Calculando os termos b<sub>i</sub>:

$$b_3 = \int_0^1 f(x) \cdot g_3(x) dx = \int_0^1 x^2 \cdot sen(\pi x) dx$$

$$u = \pi x \Rightarrow du = \pi dx$$

$$u = \pi x \Rightarrow du = \pi dx \Rightarrow \int_0^1 \left(\frac{u}{\pi}\right)^2 sen(u) \frac{du}{\pi} =$$

$$\frac{1}{\pi^3} \int_0^1 u^2 sen(u) du = \frac{1}{\pi^3} \left( -u^2 \cos(u) \Big|_0^1 - 2 \int_0^1 u \cos(u) du \right)$$

$$\int_0^1 u \cos(u) du = u sen(u) + \int_0^1 sen(u)$$

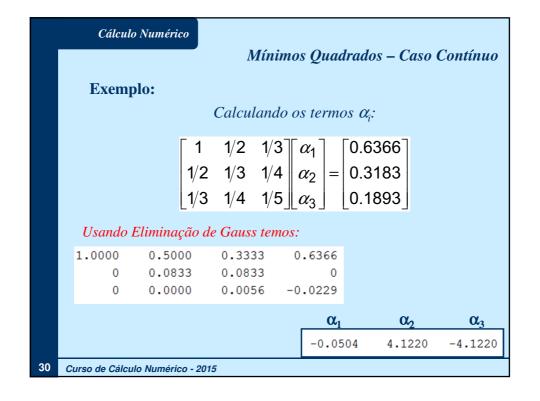
$$\int_0^1 sen(u) = -\cos(u)$$

$$\int_0^1 \left(\frac{u}{\pi}\right)^2 sen(u) \frac{du}{\pi} = \frac{1}{\pi^3} \left(-u^2 \cos(u) - 2(usen(u) - \cos(u))\right)_0^1$$

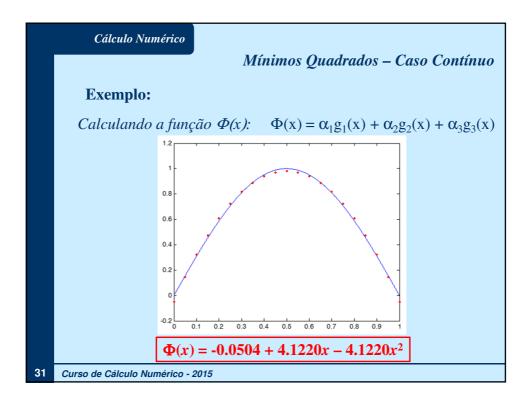
Curso de Cálculo Numérico - 2015

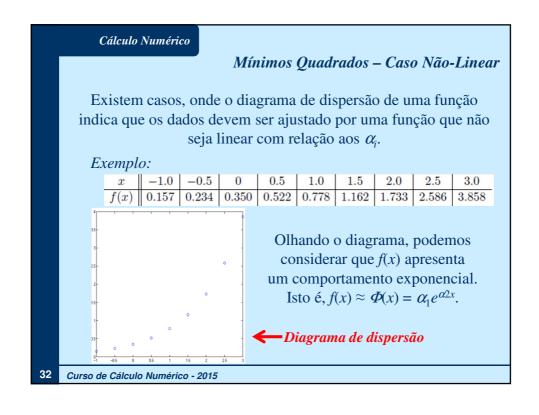
28

## Mínimos Quadrados – Caso Contínuo Exemplo: $Calculando\ os\ termos\ b_i:$ $\int_0^1 x^2 sen(\pi x) dx = \frac{1}{\pi^3} \Big( -(\pi x)^2 \cos(\pi u) - 2((\pi x)sen(\pi x) - \cos(\pi x)) \Big)_0^1$ $b_3 = \frac{1}{\pi^3} \Big( \pi^2 - 2(1+1) \Big) = 0.189$ $Com\ os\ valores\ de\ a_{ij}\ e\ b_i\ podemos\ calcular\ os\ coeficientes\ \alpha_i\ e\ a\ função\ \Phi(x)$ $Curso\ de\ Cálculo\ Numérico\ - 2015$



15





## Mínimos Quadrados - Caso Não-Linear

$$f(x) \approx \mathbf{\Phi}(x) = \alpha_1 e^{\alpha 2x}$$

Observe que o parâmetro  $\alpha_2$  permite que a função seja ajustada no seu fator de crescimento. E, assim, a aproximação não linear pode permitir uma flexibilidade maior no ajuste da função.

Esta abordagem é diferente do caso linear, onde  $f(x) \approx \Phi(x) = \alpha_1 + \alpha_2 e^x$  cujo o fator de crescimento é fixo.

A abordagem não-linear requer um processo de linearização para que seja possível aplicar o Método dos Mínimos Quadrados.

33 Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Não-Linear

O conceito de linearização está relacionado com a ideia de função inversa, pois se:

$$f(x) = y$$
, então  $h(x) = f^{-1}(f(x)) = x$ 

Isto é, a inversa de uma função (quando existe) aplicada nela própria resulta numa reta.

No nosso exemplo temos uma exponencial, cuja inversa é a função ln(x). Logo podemos proceder da seguinte forma:

$$f(x) = \alpha_1 e^{\alpha 2x} \implies z = ln(f(x)) = ln(\alpha_1) + \alpha_2 x.$$

## Mínimos Quadrados - Caso Não-Linear

$$f(x) = \alpha_1 e^{\alpha 2x} \implies z = \ln(f(x)) = \ln(\alpha_1) + \alpha_2 x.$$

fazendo 
$$\beta_1 = ln(\alpha_1) e \beta_2 = \alpha_2$$

$$z = \beta_1 + \beta_2 x$$

O problema passa a consistir em ajustar os dados de z por uma reta.

Para isto podemos tomar:  $g_1(x) = 1$  e  $g_2(x) = x$ .

Curso de Cálculo Numérico - 2015

## Cálculo Numérico

## Mínimos Quadrados - Caso Não-Linear

Calculando z,  $g_1(x)$  e  $g_2(x)$ , expandimos a tabela da seguinte

	x	-1.0	-0.5	0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
	f(x)	0.157	0.234	0.350	0.522	0.778	1.162	1.733	2.586	3.858
Ī	$z = \ln(f(x))$	-1.851	-1.452	-1.049	-0.650	-0.251	0.150	0.549	0.950	1.350
1	$g_1(x)$	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Г	$g_2(x)$	-1.0	-0.5	0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0

O passo seguinte é calcular os termos a<sub>ii</sub> e b<sub>i</sub>

$$a_{1,1} = \sum_{k=1}^{9} g_1(x_k) * g_1(x_k) = 9$$

$$a_{1,2} = \sum_{k=1}^{9} g_1(x_k) * g_2(x_k) = 9 = a_{2,1}$$

$$a_{2,2} = \sum_{k=1}^{9} g_2(x_k) * g_2(x_k) = 24$$

$$b_1 = \sum_{k=1}^{15} z(x_k) * g_1(x_k) = -2.254$$

$$b_2 = \sum_{k=1}^{15} z(x_k) * g_2(x_k) = 9.749$$

$$b_1 = \sum_{k=1}^{15} z(x_k) * g_1(x_k) = -2.254$$

$$b_2 = \sum_{k=1}^{15} z(x_k) * g_2(x_k) = 9.749$$

