MÉTODOS COMPUTACIONAIS

DR. MARCOS NAPOLEÃO RABELO
DR. WANDERLEI M. PEREIRA JUNIOR

Ajuste de curvas

Grupo de Pesquisa e Estudos em Engenharia (GPEE)

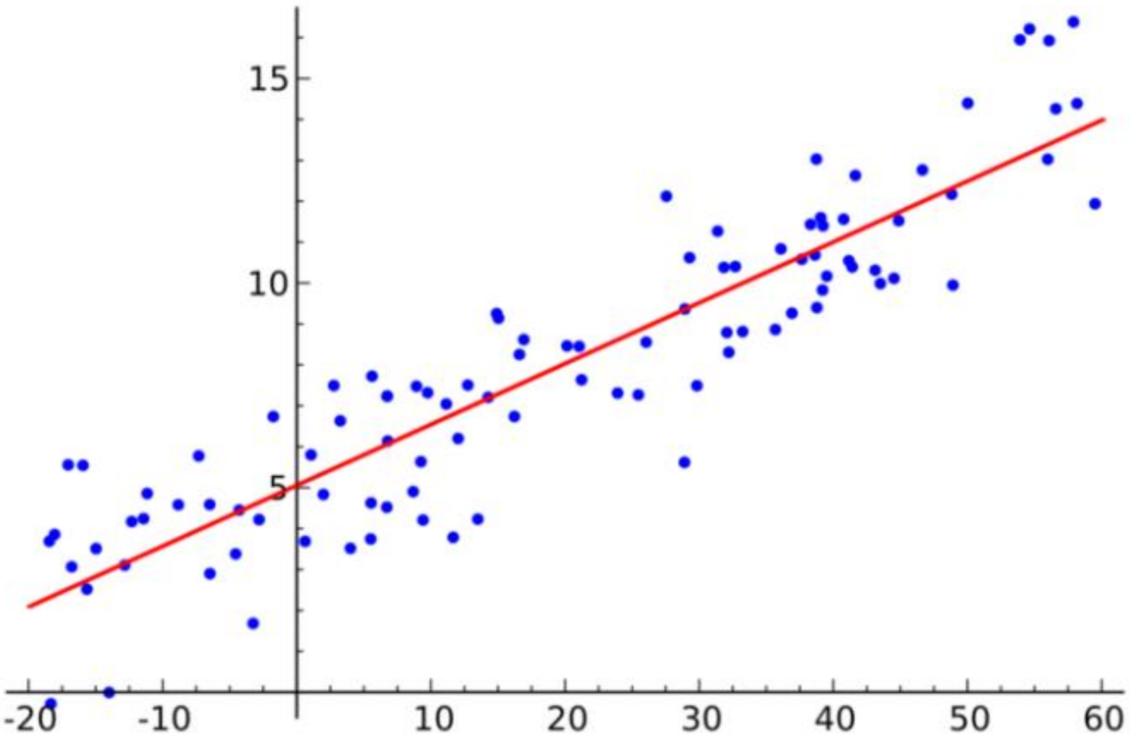
O AJUSTE DE CURVAS

O ajuste de curvas faz parte de uma teoria chamada de teoria de aproximação de funções. Onde deseja-se conhecer uma função similar a um determinado comportamento.

Essa teoria é amplamente empregada em diversos campos da ciência como por exemplo a área de aprendizado de máquina especificamente nos problemas de predição. Por exemplo a Figura 1 apresenta uma regressão linear que representa um determinado padrão em um conjunto de dados.

Um problema de ajuste normalmente tenta reduzir a distância entre a resposta da função aproximada e os dados observados.

Figura 1 – Modelo de IA do tipo regressão linear para predição [1].



Logo neste contexto são exemplos de métodos para fazer essa aproximação em relação a uma observação:

- Método dos mínimos quadrados;
- Métodos de interpolação polinomial;
- Métodos de séries.

INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL

O problema de interpolação polinomial consiste na determinação de uma função polinomial que aproxima um conjunto de dados observados. Essa função pode ser escrita conforme equação (1):

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} a_n . x^n \tag{1}$$

Na interpolação será necessário escrever um sistema de equações para cada ponto x_i. Portanto utilizaremos a matriz de Vandermonde para obter essa construção do sistema. A matriz de Vandermonde é apresentada na equação (2).

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \vdots & x_2^n \\ 1 & x_3 & \ddots & x_n^n \end{bmatrix} \tag{2}$$

No Python é possível obter a matriz de Vandermonde automaticamente. Vejamos que a matriz é montada a partir dos termos das abscissas, ou seja, o termo x. A função é da biblioteca numpy e tem a seguinte sintaxe: `numpy.vander(x, increasing = True)`.

Portanto para aplicar uma interpolação é necessário informar os pares ordenados para qual pretende-se aplicar a interpolação, ou seja, x_0 necessita de um f_0.

Observando a equação (1) é possível perceber que, por exemplo, 4 pontos geram um polinômio interpolador de terceiro grau do tipo:

$$p(x) = a_0 + a_1.x + a_2.x^2 + a_3.x^3 \tag{3}$$

Exemplo 1.1 [2,3]: Façam a montagem do sistema de Vandermonde para o seguintes problemas:

$$\{(0,1),(1,6),(2,5),(3,-8)\} \qquad \text{a)}$$

$$\{(0,2.1),(1,7.7),(2,13.6),(3,27.2),(4,40.9),(5,61.1)\} \qquad \text{b)}$$

Como exemplo vamos resolver o problema a. A construção será feita utilizando a função da biblioteca Numpy. Como são 4 pontos o polinômio interpolador é de terceira ordem. Porém a matriz de Vandermonde é dada como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 3 & 9 & 27 \end{bmatrix} \tag{4}$$

QUALIDADE DO AJUSTE

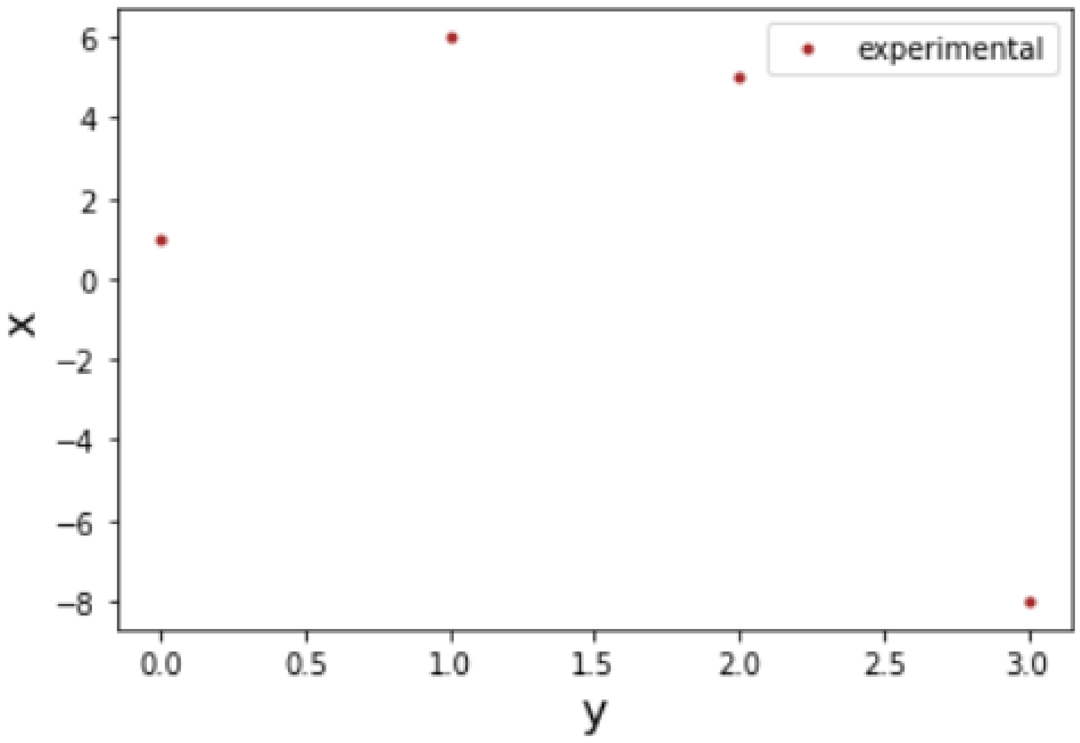
A qualidade de um ajuste pode ser medida de diversas formas e basicamente todas elas consistem em uma comparação entre o valor numérico e o valor experimentalmente observado. Portanto será definida uma equação de resíduo. A qualidade do ajuste que iremos implementar é o R^2. O R^2 varia de 0% a 100% e representa a quantidade da variância que é explicada pelo modelo obtido.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum({y_i}^{exp} - {y_i}^{num})^2}{\sum({y_i}^{exp} - \overline{{y_i}^{num}})^2} \tag{5}$$

Onde ${y_i}^{exp}$ indica o valor experimental, ${y_i}^{num}$ o valor numérico e $\overline{{y_i}^{num}}$ é a média dos valores numéricos.

Vamos retomar o exemplo 1 para resolução do problema de interpolação polinomial. Para isso vamos começar visualizando o conjunto de dados.

Figura 2 – Dados experimentais do exemplo 1a.



De posse da visualização dos dados experimentais podem montar o sistema completo relativo ao problema de ajuste de curva. Com isso será possível montar o vetor de incógnitas $\boldsymbol{a}$.

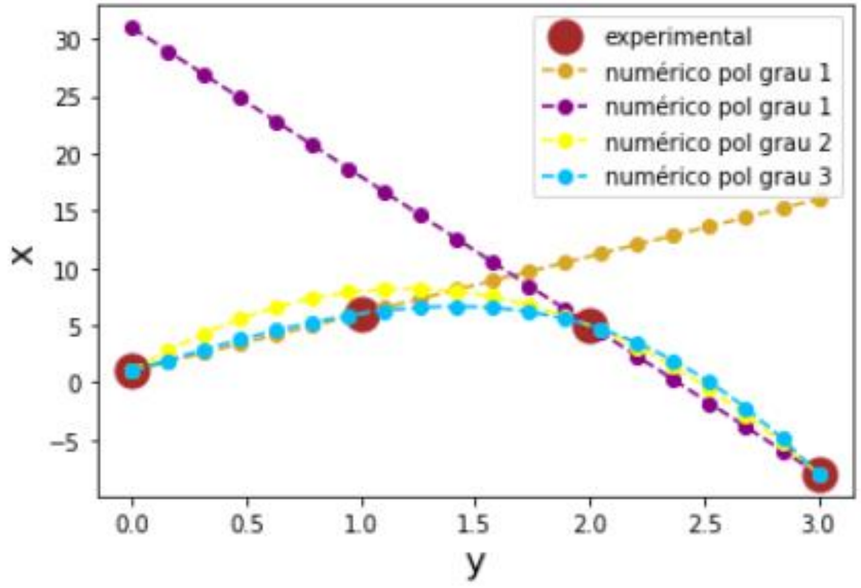
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 3 & 9 & 27 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ 5 \\ -8 \end{bmatrix}$$

Aplicando os métodos de solução de sistemas é possível então determinar os coeficientes:

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Refazendo o exemplo para diversos polinômios interpoladores chegamos as seguintes representações gráficas:

Figura 3 – Representação do polinômio interpolador de diversos graus.



REFERÊNCIAS

[1] Esposito P. Modelos de Predição | Regressão Linear. Turing Talks 2020. https://medium.com/turing-talks/turing-talks-11-modelo-de-predi%C3%A7%C3%A3o-regress%C3%A3o-linear-7842709a593b (accessed October 6, 2021).

[2] Justo DAR, Sauter E, Azevedo FS, Lima HGG, Guidi LF, Konzen PH de A. Interpolação polinomial. REAMAT-Cálculo Numérico, Porto Alegre: 2020.

[3] Chapra SC. Métodos Numéricos Aplicados com MATLAB® para Engenheiros e Cientistas. 3ª edição. AMGH; 2013.

OBRIGADO!

GPEE

GRUPO DE PESQUISAS E ESTUDOS EM ENGENHARIA