CCI-22

Matemática Computacional

Carlos Alberto Alonso Sanches

CCI-22

6) Ajuste de Curvas

Método dos Mínimos Quadrados, Regressão Linear

CCI-22

- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

CCI-22

- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

Definição

- Situações em que a interpolação não é aconselhável:
  - Quando se deseja obter um valor aproximado da função em algum ponto fora do intervalo de tabelamento, ou seja, quando se quer extrapolar
  - Quando os valores tabelados são resultados de algum experimento físico ou de alguma pesquisa, e por isso podem conter erros inerentes e não previsíveis
- Nesses casos, convém ajustar a função tabelada a uma função f^* que seja uma "boa aproximação" para os valores obtidos, e que permita a extrapolação

Possíveis critérios de qualidade

- Dados m pontos experimentais $\{(x_1,y_1), ..., (x_m,y_m)\}$, uma questão importante é estabelecer uma medida de qualidade para a função de ajuste
- Sejam $R_i = f^*(x_i) - y_i$, $1 \leq i \leq m$, os resíduos ou erros desse ajuste. Possibilidades:
  - Fazer com que os resíduos tendam a zero
    - Equivaleria à interpolação...
  - Minimizar a soma dos resíduos
    - Não é um bom critério: pode haver soma nula, mas com valores grandes
  - Minimizar a soma dos módulos dos resíduos
    - É difícil encontrar seu mínimo, pois não é uma função diferenciável...
  - Critério de Tschebycheff: minimizar máx $\{|R_i|\}$
    - Solução difícil e não recomendada para cálculos manuais
  - Critério dos mínimos quadrados: minimizar $\sum_i R_i^2$
    - É o mais largamente utilizado

CCI-22

- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

Método dos Mínimos Quadrados

- A técnica dos Mínimos Quadrados consiste no cálculo de n constantes c_i de uma função f^* que aproxima f:
  - $f^*(x) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x) + ... + c_n\Phi_n(x)$
- As funções $\Phi_i(x)$, que podem ser não lineares em x, são escolhidas de acordo com a natureza dos dados experimentais
- Lembrando que $R_i = f^*(x_i) - y_i$, $1 \leq i \leq m$, seja $R = \sum_i R_i^2 = \sum_i (c_1\Phi_1(x_i) + c_2\Phi_2(x_i) + ... + c_n\Phi_n(x_i) - y_i)^2$
- R é uma função dos c_j, $1 \leq j \leq n$, e passará por um mínimo quando suas n derivadas parciais se anularem simultaneamente:
  - $\partial R/\partial c_j = 2\sum_i[f^*(x_i) - y_i].\partial f^*(x_i)/\partial c_j = 0$, $1 \leq j \leq n$
- Como $\partial f^*(x_i)/\partial c_j = \Phi_j(x_i)$, esse mínimo satisfaz:
  - $\sum_i(c_1\Phi_1(x_i) + c_2\Phi_2(x_i) + ... + c_n\Phi_n(x_i) - y_i).\Phi_j(x_i) = 0$, $1 \leq j \leq n$

Equações normais

- Condições para que $R = \sum_i R_i^2$ seja mínimo:
  $\sum_i (c_1\Phi_1(x_i) + c_2\Phi_2(x_i) + \ldots + c_n\Phi_n(x_i) - y_i).\Phi_j(x_i) = 0, 1 \le j \le n$
- Temos então um sistema $Ac = y$ de n equações algébricas lineares, comumente chamadas de *equações normais*, que pode ser resolvido com técnicas já apresentadas:

$$A = \begin{bmatrix} \sum_i \Phi_1(x_i)\Phi_1(x_i) & \sum_i \Phi_2(x_i)\Phi_1(x_i) & \cdots & \sum_i \Phi_n(x_i)\Phi_1(x_i) \\ \sum_i \Phi_2(x_i)\Phi_1(x_i) & \sum_i \Phi_2(x_i)\Phi_2(x_i) & \cdots & \sum_i \Phi_n(x_i)\Phi_2(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_i \Phi_n(x_i)\Phi_1(x_i) & \sum_i \Phi_n(x_i)\Phi_2(x_i) & \cdots & \sum_i \Phi_n(x_i)\Phi_n(x_i) \end{bmatrix} \quad c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} \sum_i y_i\Phi_1(x_i) \\ \sum_i y_i\Phi_2(x_i) \\ \vdots \\ \sum_i y_i\Phi_n(x_i) \end{bmatrix}$$

- Se $\Phi_1(x), \Phi_2(x), \ldots, \Phi_n(x)$ forem linearmente independentes, $\det(A) \neq 0$, e o sistema terá solução única. Demonstra-se que, nesse caso, R atinge seu valor mínimo

CCI-22

- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

Regressão linear

- O caso particular em que a curva f é ajustada a uma reta chama-se *regressão linear*: $f^*(x) = a_0 + a_1x$
- Originariamente, $f^*(x) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x) + \ldots + c_n\Phi_n(x)$. Sem perda de generalidade, podemos dizer que $c_1\Phi_1(x) = a_0$ e $c_2\Phi_2(x) = a_1x$
- Dessa forma, $c_1 = a_0$, $\Phi_1(x) = 1$, $c_2 = a_1$ e $\Phi_2(x) = x$
- Sabemos que $R_i = f^*(x_i) - y_i = a_0 + a_1x_i - y_i$, $1 \le i \le m$
- Para que $R = \sum_i R_i^2$ seja mínimo, é necessário que $\partial R/\partial a_0 = 0$ e $\partial R/\partial a_1 = 0$:
  - $R = (a_0 + a_1x_1 - y_1)^2 + (a_0 + a_1x_2 - y_2)^2 + \ldots + (a_0 + a_1x_m - y_m)^2$
  - $\partial R/\partial a_0 = 2(a_0 + a_1x_1 - y_1) + 2(a_0 + a_1x_2 - y_2) + \ldots + 2(a_0 + a_1x_m - y_m)$
  - $\partial R/\partial a_1 = 2x_1(a_0 + a_1x_1 - y_1) + 2x_2(a_0 + a_1x_2 - y_2) + \ldots + 2x_m(a_0 + a_1x_m - y_m)$
  - $\partial R/\partial a_0 = 0 \Rightarrow ma_0 + (x_1 + \ldots + x_m)a_1 = y_1 + \ldots + y_m \Rightarrow$
    $ma_0 + \sum_i x_i a_1 = \sum_i y_i$
  - $\partial R/\partial a_1 = 0 \Rightarrow (x_1 + \ldots + x_m)a_0 + (x_1^2 + \ldots + x_m^2)a_1 = x_1y_1 + \ldots + x_my_m \Rightarrow$
    $\sum_i x_i a_0 + \sum_i x_i^2 a_1 = \sum_i x_i y_i$
- Temos então um sistema linear com duas incógnitas (a_0 e a_1) e duas equações

Regressão linear

$$ma_0 + \sum_i x_i a_1 = \sum_i y_i$$
$$\sum_i x_i a_0 + \sum_i x_i^2 a_1 = \sum_i x_i y_i$$

- Pela regra de Cramer:

$$a_0 = \frac{\sum_i x_i^2 . \sum_i y_i - \sum_i x_i . \sum_i x_i . y_i}{m\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \qquad a_1 = \frac{m\sum_i x_i . y_i - \sum_i x_i . \sum_i y_i}{m\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2}$$

- Desde que o denominador não seja nulo, esta solução é sempre definida
- Demonstra-se que $m\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2 = (\sum_i \sum_k (x_i - x_k)^2)/2$
- Portanto, se os pontos x_i são distintos, a_0 e a_1 são únicos
- As expressões de a_0 e a_1 podem ser reescritas:

$$a_1 = \frac{\sum_i x_i . y_i - (\sum_i x_i . \sum_i y_i)/m}{\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2/m} \qquad a_0 = y^* - a_1x^*$$

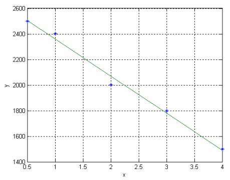
$$y^* = \sum_i y_i/m \qquad x^* = \sum_i x_i/m$$

Exemplo

- A tabela abaixo mostra o desempenho de um torno de parafusos em função do seu tempo de uso. Fazer a projeção para 5 e 6 anos:

x (anos)	0,5	1	2	3	4
y (parafusos/dia)	2500	2400	2000	1800	1500

- Através de uma análise gráfica, é possível constatar que uma reta é um bom ajuste:
  - $\sum_i x_i = 10{,}5$; $\sum_i y_i = 10200$; $\sum_i x_i y_i = 19050$; $\sum_i x_i^2 = 30{,}25$; $(\sum_i x_i)^2 = 110{,}25$
  - $m = 5$
  - $a_1 = (\sum_i x_i.y_i - (\sum_i x_i.\sum_i y_i)/m)/(\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2/m)$ $= -2370/8{,}2 = -289{,}0244$
  - $y^* = \sum_i y_i/m = 2040$
  - $x^* = \sum_i x_i/m = 2{,}1$
  - $a_0 = y^* - a_1 x^* = 2646{,}9511$
  - $y = 2646{,}9511 - 289{,}0244x$
  - $x = 5 \Rightarrow y = 1202$
  - $x = 6 \Rightarrow y = 913$



Regressão linear múltipla

- É possível estender a regressão linear para o caso de funções lineares de múltiplas variáveis: $f(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n)$
- Veremos um caso como exemplo:
  - $f(x_1, x_2) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$
- Definição da função resíduo:
  - $R = \sum_i R_i^2 = \sum_i (a_0 + a_1x_{1i} + a_2x_{2i} - y_i)^2$
- Para que R seja mínimo, é necessário que:
  - $\partial R/\partial a_0 = 2\sum_i (a_0 + a_1x_{1i} + a_2x_{2i} - y_i) = 0$
  - $\partial R/\partial a_1 = 2\sum_i x_{1i}(a_0 + a_1x_{1i} + a_2x_{2i} - y_i) = 0$
  - $\partial R/\partial a_2 = 2\sum_i x_{2i}(a_0 + a_1x_{1i} + a_2x_{2i} - y_i) = 0$

Regressão linear múltipla

- Temos então um sistema linear com três incógnitas (a_0, a_1 e a_2) e três equações
- Este sistema pode ser escrito na forma matricial abaixo:

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} \\ \sum x_{1i} & \sum x_{1i}^2 & \sum x_{1i}.x_{2i} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{1i}.x_{2i} & \sum x_{2i}^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1i}y_i \\ \sum x_{2i}y_i \end{bmatrix}$$

- De modo análogo ao já visto, este sistema pode ser resolvido por algum método numérico
- Determina-se assim o plano que ajusta os pontos tridimensionais

CCI-22

- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

Ajuste a um polinômio

- Se a curva f for ajustada a um polinômio de grau n, teremos $f^*(x) = a_0 + a_1x + \ldots + a_nx^n$
- Seguindo o mesmo procedimento anterior, chegaremos ao seguinte sistema linear:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i^3 & \cdots & \sum_i x_i^n \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i^3 & \sum_i x_i^4 & \cdots & \sum_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_i x_i^n & \sum_i x_i^{n+1} & \sum_i x_i^{n+2} & \sum_i x_i^{n+3} & \cdots & \sum_i x_i^{2n} \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_i x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

Exemplo 1

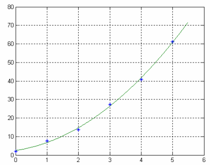
- Ajuste um polinômio de segundo grau aos dados abaixo:

x	0	1	2	3	4	5
y	2,1	7,7	13,6	27,2	40,9	61,1

- A partir desses dados, construímos o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 152,6 \\ 585,6 \\ 2488,8 \end{bmatrix}$$

- $m = 6$
- $\sum x_i = 15$; $\sum y_i = 152,6$; $\sum x_i^2 = 55$; $\sum x_i^3 = 225$; $\sum x_i^4 = 979$; $\sum x_i y_i = 585,6$; $\sum x_i^2 y_i = 2488,8$
- $a_0 = 2,47857$; $a_1 = 2,35929$; $a_2 = 1,86071$



Exemplo 2

- Os dados abaixo correspondem ao volume do álcool anídrico em função da temperatura. Considerando um volume inicial de 1cm³ a 0°C, deseja-se uma tabela do volume para temperaturas entre 20 e 40°C

t (°C)	13,9	43,0	67,8	89,0	99,2
v (cm³)	1,04	1,12	1,19	1,24	1,27

- Ajustaremos v(t) a um polinômio de grau 2
- Considerando o volume inicial, temos $v^*(t) = \overset{a_0}{1} + a_1t + a_2t^2$
- Sistema de equações normais para as demais constantes:

$$\begin{bmatrix} \sum_i t_i^2 & \sum_i t_i^3 \\ \sum_i t_i^3 & \sum_i t_i^4 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i t_i v_i \\ \sum_i t_i^2 v_i \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 24400,69 & 2,0750189.10^6 \\ 2,0750189.10^6 & 1,841675.10^8 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 66,142 \\ 5661,0202 \end{bmatrix}$$

$a_1 = 0,003068189$ $\quad$ $a_2 = 1,548545.10^{-7}$

t	13,9	20	25	30	35	40	43,0	67,8	89,0	99,2
v	1,04						1,12	1,19	1,24	1,27
v*	1,04	1,06	1,08	1,09	1,11	1,12	1,13	1,21	1,27	1,31

CCI-22

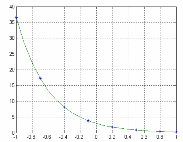
- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

Ajuste à curva exponencial

- Também é possível ajustar f a uma curva exponencial, fazendo-se antes uma troca de variáveis:
  - $f^*(x) = c_1e^{kx}$, onde c_1 e k são constantes
  - $\ln f^*(x) = \ln c_1 + kx$
  - $z^*(x) = c_2 + kx$, onde $z^*(x) = \ln f^*(x)$
  - z^* e x estão relacionadas linearmente: basta resolver a regressão linear
  - Depois de resolvido o sistema correspondente, volta-se ao problema original

Exemplo

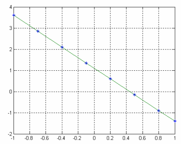
x	-1,0	-0,7	-0,4	-0,1	0,2	0,5	0,8	1,0
f(x)	36,547	17,264	8,155	3,852	1,820	0,860	0,406	0,246



A dispersão dos dados sugere um ajuste à curva exponencial

$z^*(x) = c_2 + kx$, onde $z^*(x) = \ln f^*(x)$

x	-1,0	-0,7	-0,4	-0,1	0,2	0,5	0,8	1,0
z(x) = ln f(x)	3,599	2,849	2,099	1,349	0,599	-0,151	-0,901	-1,402



$$\begin{bmatrix} m & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_2 \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i z_i \\ \sum_i z_i x_i \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 8 & 0,3 \\ 0,3 & 3,59 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_2 \\ k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8,041 \\ -8,646 \end{bmatrix}$$

$c_2 = 1,099$

$k = -2,5$

$\ln f^*(x) = 1,099 - 2,5x$

$f^*(x) = 3,001e^{-2,5x}$

Ajuste a outras curvas

- $f^*(x) = ax^b$
  - $\ln f^*(x) = \ln a + b.\ln x$
  - Sejam $z^*(x) = \ln f^*(x)$ e $t = \ln x$
  - Portanto, $z^*(x) = \ln a + bt$
  - z^* e t estão relacionadas linearmente
- $f^*(x) = ab^x$
  - $\ln f^*(x) = \ln a + x.\ln b$
  - Seja $z^*(x) = \ln f^*(x)$
  - Portanto, $z^*(x) = \ln a + x.\ln b$
  - z^* e x estão relacionadas linearmente

CCI-22

- Introdução
- Método dos Mínimos Quadrados
- Regressão linear
- Ajuste a um polinômio
- Ajuste a outras curvas
- Qualidade do ajuste

Qualidade da regressão linear

- Quanto melhor for a qualidade da regressão linear, menor será o valor do resíduo R, onde $R = \sum_i R_i^2 = \sum_i (f^*(x_i) - y_i)^2$

Critério relativo, válido para qualquer ajuste

- Vamos definir o *resíduo em relação à média dos pontos experimentais* : $R_M = \sum_i (y^* - y_i)^2$, onde $y^* = \sum_i y_i / m$
- O valor R_M – R quantifica a redução de erro decorrente da descrição dos dados em termos de uma reta, em vez de um ponto médio
- $(R_M - R)/R_M$ é o valor normalizado dessa redução
- O coeficiente de correlação r é definido como:

$$r = \sqrt{\frac{R_M - R}{R_M}}$$

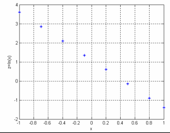
Critério absoluto, mas válido apenas para regressão linear

- Em um ajuste linear perfeito, r = 1 (pois R = 0)
- Portanto, quanto mais próximo de 1 for o coeficiente de correlação, melhor será o ajuste da regressão linear

Teste de alinhamento

- Há uma maneira simples de averiguar se o ajuste de uma função não linear tem boa qualidade:
  - Nos m pontos experimentais $\{(x_1,y_1), \ldots, (x_m,y_m)\}$, fazer as correspondentes trocas de variáveis, de modo a que passem a obedecer uma relação linear
  - Fazer o diagrama de dispersão desses novos dados
  - Verificar o alinhamento dos pontos
- Exemplo:

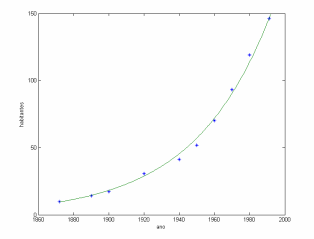
x	-1,0	-0,7	-0,4	-0,1	0,2	0,5	0,8	1,0
y = f(x)	36,547	17,264	8,155	3,852	1,820	0,860	0,406	0,246
z(x) = ln f(x)	3,599	2,849	2,099	1,349	0,599	-0,151	-0,901	-1,402



Exemplo 1

- Ajuste uma curva à tabela abaixo, que fornece dados da evolução da população brasileira em milhões de habitantes:

x = ano	1872	1890	1900	1920	1940	1950	1960	1970	1980	1991
y = habitantes	9,9	14,3	17,4	30,6	41,2	51,9	70,2	93,1	119,0	146,2



- Suponhamos que a melhor curva seja uma exponencial
- Encontramos como resultado $y = a.e^{bx}$, onde $a = 2{,}3111.10^{-18}$ e $b = 0{,}0229$
- Fazendo as correspondentes trocas de variáveis para linearizar a relação, obtemos o coeficiente de correlação r = 0,99775

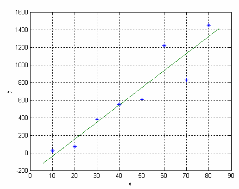
Exemplo 2

- Um objeto é suspenso em um túnel de vento e a força é medida em diversos níveis de velocidade:

x (m/s)	10	20	30	40	50	60	70	80
y (N)	25	70	380	550	610	1220	830	1450

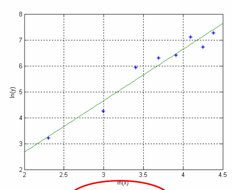
- Através de regressão por mínimos quadrados, verifica-se qual é o melhor ajuste: com uma reta ou com uma equação de potência

y = 19,4702x - 234,2857



r = 0,9384

ln y = -1,2941 + 1,9842.ln x

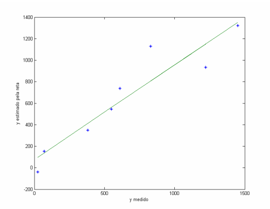


r = 0,9737 melhor ajuste

Exemplo 2 (continuação)

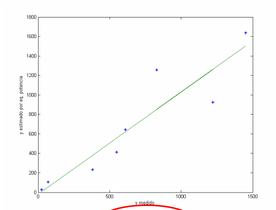
- Um outro modo de verificar a qualidade da escolha é ajustar para uma reta os valores reais de y em função de seus correspondentes valores estimados (por reta ou por relação exponencial)
- Quando o ajuste for perfeito, será encontrada uma reta com coeficientes $a_1 = 1$ e $a_0 = 0$
- Resultados obtidos no caso anterior:

$y = 0{,}8805x + 76{,}7135$



$r = 0{,}9384$

$y = 1{,}0497x - 18{,}6452$



$r = 0{,}9737$ mesmo valor