UFPR
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

Métodos Numéricos

Ajuste de Curva pelo Método dos Quadrados Mínimos-MQM

Professor Volmir Eugênio Wilhelm
Professora Mariana Kleina

Método dos Quadrados Mínimos

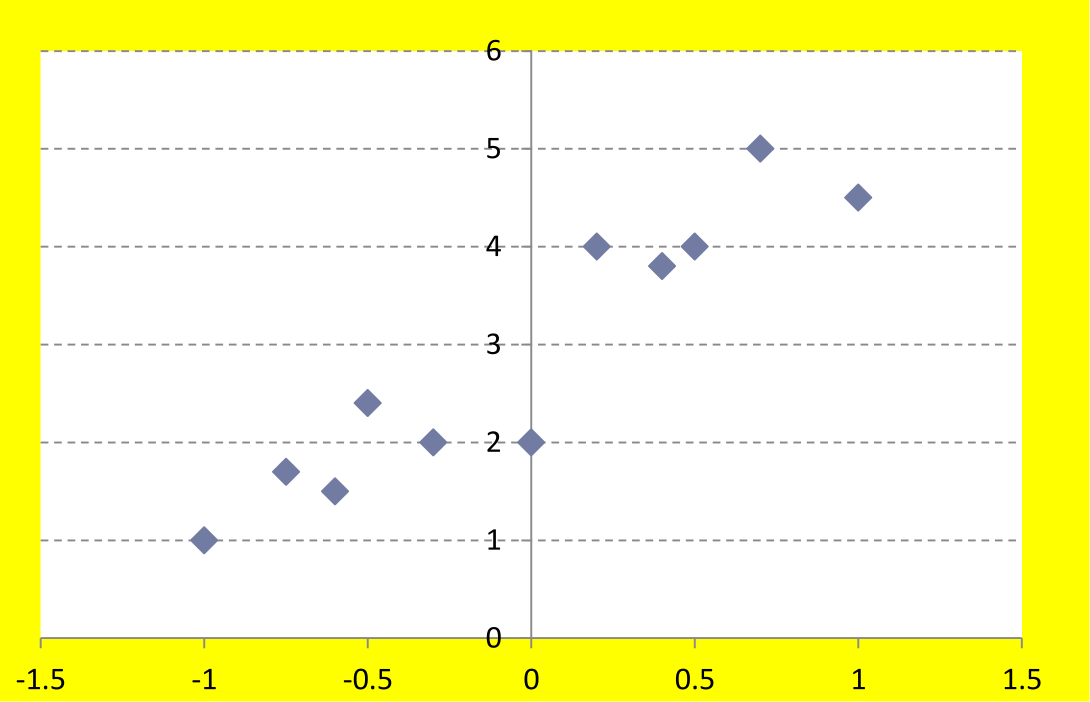
Ajuste Linear

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Linear – Motivação

Seja a tabela de dados

x	-1,0	-0,75	-0,6	-0,5	-0,3	0,0	0,2	0,4	0,5	0,7	1,0
f(x)	1,0	1,7	1,5	2,4	2,0	2,0	4,0	3,8	4,0	5,0	4,5



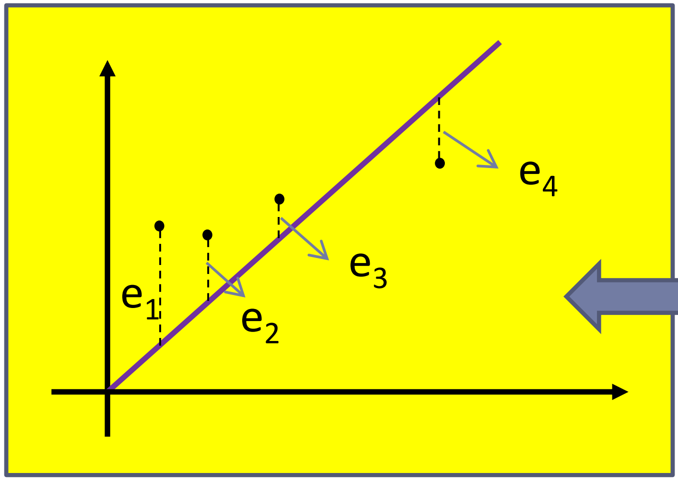
Observa-se que os pontos parecem pertencer a uma reta.

A pergunta é: qual a melhor reta que os aproximaria? Qual a reta $y=mx+b$ que melhor se ajusta aos dados?

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Fórmula do Ajuste Linear

Deseja-se minimizar a distância vertical entre os pontos e a reta y=mx+b



Encontrar a equação da reta que minimiza o Erro Total $E = (e_1)^2 + (e_2)^2 + (e_3)^2 + (e_4)^2$

- $E = (e_1)^2 + (e_2)^2 + (e_3)^2 + \ldots + (e_n)^2$ para n pontos dados
- $E = [f(x_1) - y_1]^2 + [f(x_2) - y_2]^2 + \ldots + [f(x_n) - y_n]^2$
- $E = [mx_1 + b - y_1]^2 + [mx_2 + b - y_2]^2 + \ldots + [mx_n + b - y_n]^2$
- $E = \sum(mx_i + b - y_i)^2$

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Fórmula do Ajuste Linear

- Questão: como minimizar o Erro Total?

$$E = \sum(mx_i + b - y_i)^2 \quad \text{(Erro total)}$$

- Como x e y são constantes, será necessário encontrar m e b que minimizam o erro. Isto é realizado determinando:

$$\partial E/\partial m = 0 \qquad\qquad \partial E/\partial b = 0$$

- Os valores de m e b que satisfazem estas equações podem corresponder a pontos de mínimo ou de máximo de E
- Como a expressão de E é a soma de quadrados ($\sum(mx_i + b - y_i)^2$ que nunca são negativos) então E é um paraboloide virado para cima, e portanto a solução será um ponto de mínimo.
- Isto pode ser provado usando as derivadas parciais de segunda ordem.

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Fórmula do Ajuste Linear

$$E = \sum(mx_i + b - y_i)^2$$

é minimizado quando as derivadas parciais em relação a cada variável (m b) são nulas.
Ou seja, $\partial E/\partial m = 0$ e $\partial E/\partial b = 0$

obs: $\frac{d}{dv}u^n = n\, u^{n-1}\frac{du}{dv}$

(a) fazendo $u = (mx_i + b - y_i)$ e $v = m$, $du/dv = xi$

$\partial E/\partial m = \Sigma(\ 2\ (mx_i + b - y_i)\ .\ x_i\ ) = 2\Sigma(mx_i^2 + bx_i - x_iy_i) = 0$ $\quad m\Sigma x_i^2 + b\Sigma x_i = \Sigma x_iy_i$

$$m\Sigma(x_i^2) + b\Sigma x_i = \Sigma(x_iy_i) \qquad \text{(eq. 1)}$$

(b) fazendo $u = (mx_i + b - y_i)$ e $v = b$, $du/dv = 1$

$\partial E/\partial b = \Sigma(\ 2(mx_i + b - y_i)\ .\ 1\ ) = 2\ (\ m\Sigma x_i + \Sigma b - \Sigma y_i\ ) = 0$ $\quad m\Sigma x_i + \Sigma b = \Sigma y_i$

fazendo $\Sigma b = (b.n)$, onde n é o nº de pares (x_i, y_i)

$$m\Sigma x_i + bn = \Sigma y_i \qquad \text{(eq. 2)}$$

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Fórmula do Ajuste Linear

Em seguida deve-se resolver o sistema de equações em relação às variáveis m e b

$$\begin{cases} m\Sigma x_i^2 + b\Sigma x_i = \Sigma x_i y_i & (eq.1) \\ m\Sigma x_i + bn = \Sigma y_i & (eq.2) \end{cases}$$

Resolvendo em relação a m

$nm\Sigma x_i^2 + bn\Sigma x_i = n\Sigma x_i y_i$	multiplicando eq.1 por n	(eq.3)
$m\Sigma x_i\Sigma x_i + bn\Sigma x_i = \Sigma y_i\Sigma x_i$	multiplicando eq.2 por Σx_i	(eq.4)
$nm\Sigma x_i^2 - m\Sigma x_i\Sigma x_i = n\Sigma x_i y_i - \Sigma y_i\Sigma x_i$	fazendo (eq.3) - (eq.4)	(eq.5)
$m(n\Sigma x_i^2 - \Sigma x_i\Sigma x_i) = n\Sigma x_i y_i - \Sigma y_i\Sigma x_i$	isolando m	(eq.6)

$$m = \frac{n\Sigma x_i y_i - \Sigma y_i \Sigma x_i}{n\Sigma x_i^2 - \Sigma x_i \Sigma x_i} \qquad (eq.7)$$

substituindo (eq.7) na (eq.2)

$$b = \frac{\Sigma x_i^2 \Sigma y_i - \Sigma x_i y_i \Sigma x_i}{n\Sigma x_i^2 - \Sigma x_i \Sigma x_i} \qquad (eq.8)$$

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Fórmula do Ajuste Linear

- Uma medida de quão bom é o ajuste da reta aos dados é dado pelo Coeficiente de Correlação de Pearson, geralmente denominado de r

$$r = \frac{\sum xy - \left(\sum x \sum y\right)/n}{\sqrt{\left[\sum x^2 - \left(\sum x\right)^2/n\right]\left[\sum y^2 - \left(\sum y\right)^2/n\right]}}$$

- O coeficiente de correlação r mede o grau de relação entre duas variáveis. A correlação está sempre entre -1 e 1.
- O valor -1 corresponde à correlação negativa perfeita e o valor +1 corresponde a correlação positiva perfeita. O coeficiente de correlação (zero) indica que as duas variáveis não estão correlacionadas linearmente.

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Linear – Exemplo 1

Ache a aproximação linear através dos mínimos quadrados para os dados: (1,1), (2,4), (3,8)

$$m = \frac{n\Sigma x_i y_i - \Sigma y_i \Sigma x_i}{n\Sigma x_i^2 - \Sigma x_i \Sigma x_i}$$

$$b = \frac{\Sigma x_i^2 \Sigma y_i - \Sigma x_i y_i \Sigma x_i}{n\Sigma x_i^2 - \Sigma x_i \Sigma x_i}$$

$$y = mx + b$$

Σx_i = 1+2+3= 6

$\Sigma x_i x_i$ = $1^2+2^2+3^2$ = 14

Σy_i = 1+4+8 = 13

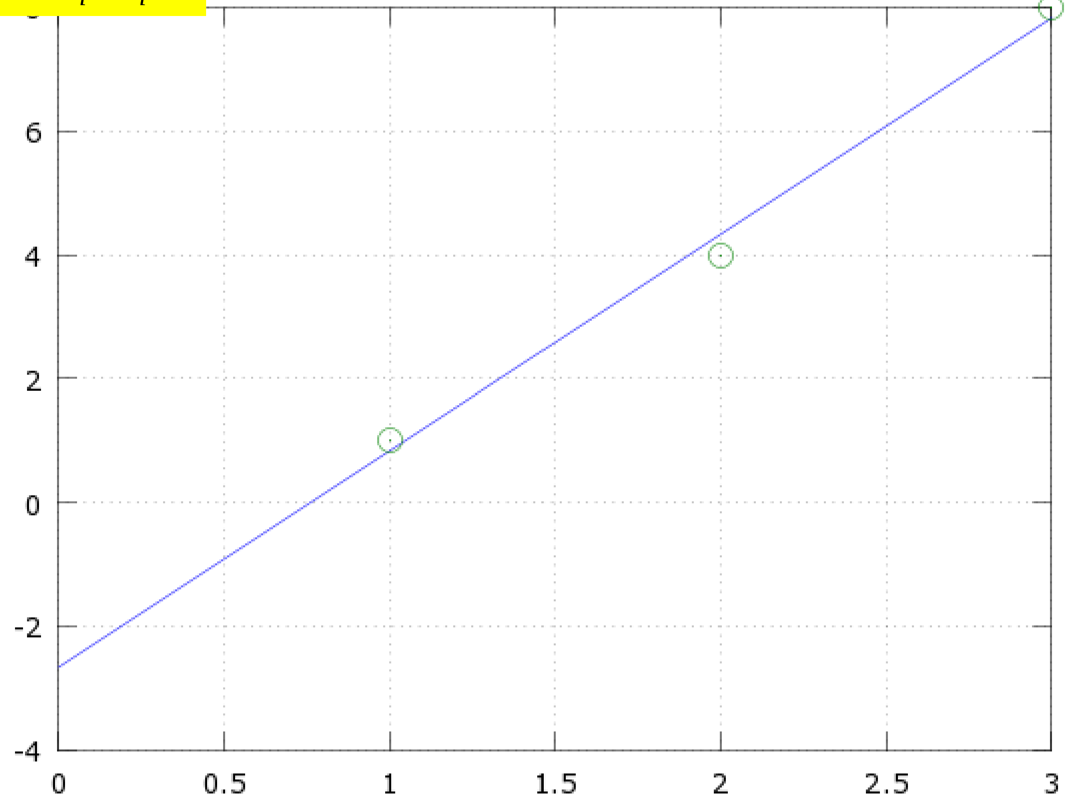
$\Sigma x_i y_i$ = 1.1+2.4+3.8 = 33

n = 3 (número de pontos)

$$m = \frac{3\times 33 - 6\times 13}{3\times 14 - 6\times 6} = \frac{7}{2}$$

$$b = \frac{14\times 13 - 33\times 6}{3\times 14 - 6\times 6} = -\frac{8}{3}$$

$$y = \frac{7x}{2} - \frac{8}{3}$$

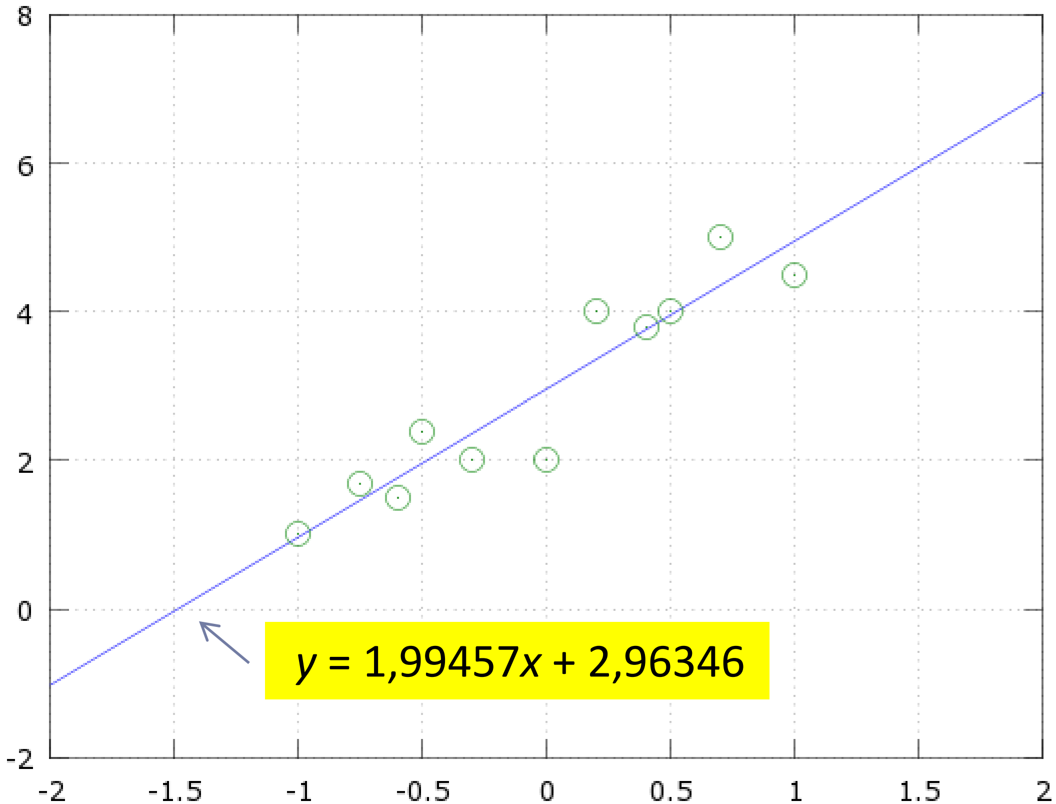


Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Linear – Exemplo 2

Ache a aproximação linear através dos mínimos quadrados para os dados

x	f(x)
-1,00	1,0
-0,75	1,7
-0,60	1,5
-0,50	2,4
-0,30	2,0
0,00	2,0
0,20	4,0
0,40	3,8
0,50	4,0
0,70	5,0
1,00	4,5



Método dos Quadrados Mínimos

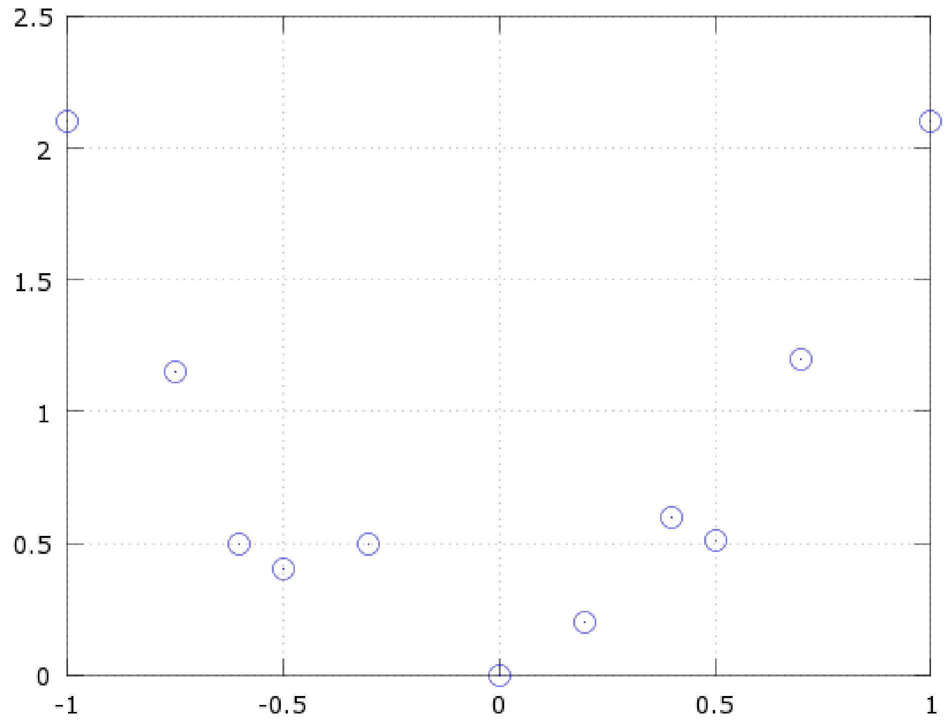
Ajuste Quadrático

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Motivação

Seja a tabela de dados

x	f(x)
-1,00	2,10
-0,75	1,15
-0,60	0,50
-0,50	0,40
-0,30	0,50
0,00	0,00
0,20	0,20
0,40	0,60
0,50	0,51
0,70	1,20
1,00	2,10



- Vemos que os pontos parecem uma parábola.
- A pergunta é: qual a melhor parábola que os aproximaria?

continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Fórmula

- O método dos quadrados mínimos pode ser estendido para ajustar aos dados polinômios de segundo grau

$$f(x) = a + bx + cx^2,$$

$$\text{Erro}: \; E = \sum (e_i)^2 = \sum (f(x_i) - y_i)^2 = \sum (a + bx_i + cx_i^2 - y_i)^2$$

$$\min E(a,b,c) = \sum_{i=1}^{n} \left(a + bx_i + cx_i^2 - y_i\right)^2$$

Condições necessárias:

$$\frac{\partial E(a,b,c)}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial E(a,b,c)}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial E(a,b,c)}{\partial c} = 0$$

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Fórmula

$$\min E(a,b,c)=\sum_{i=1}^{n}\left(a+bx_i+cx_i^2-y_i\right)^2$$

obs: $u = (a+bx_i+cx_i^2)$

$v = a \quad du/dv = 1$

$v = b \quad du/dv = x_i$

$v = c \quad du/dv = x_i^2$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial E(a,b,c)}{\partial a}=2\sum_{i=1}^{n}\left(a+bx_i+cx_i^2-y_i\right)=0 \\ \dfrac{\partial E(a,b,c)}{\partial b}=2\sum_{i=1}^{n}\left(a+bx_i+cx_i^2-y_i\right)x_i=0 \\ \dfrac{\partial E(a,b,c)}{\partial c}=2\sum_{i=1}^{n}\left(a+bx_i+cx_i^2-y_i\right)x_i^2=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} an+b\sum_{i=1}^{n}x_i+c\sum_{i=1}^{n}x_i^2=\sum_{i=1}^{n}y_i \\ a\sum_{i=1}^{n}x_i+b\sum_{i=1}^{n}x_i^2+c\sum_{i=1}^{n}x_i^3=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i \\ a\sum_{i=1}^{n}x_i^2+b\sum_{i=1}^{n}x_i^3+c\sum_{i=1}^{n}x_i^4=\sum_{i=1}^{n}x_i^2y_i \end{cases}$$

para o ajuste linear o sistema de equações foi resolvido de forma genérica, determinando os valores de m e b

para o ajuste quadrático, o sistema de equações lineares na forma Ax = b com vetor de incógnitas x = [a b c] deve ser construído substituindo os valores de x_i y_i nas equações acima para obter os elementos das matrizes A b

este sistema de equações deve ser resolvido empregando qualquer dos métodos já vistos anteriormente

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Exemplo

Ajuste um polinômio de segundo grau aos seguintes dados

x_i	0	1	2	3	4	5	∑=15
y_i	2,1	7,7	13,6	27,2	40,9	61,1	∑=152,6
x_i^2	0	1	4	9	16	25	∑=55
x_i^3	0	1	8	27	64	125	225
x_i^4	0	1	16	81	256	625	∑=979
$x_i\,y_i$	0	7,7	27,2	81,6	163,6	305,5	∑=585,6
$x_i^2\,y_i$	0	7,7	54,4	244,8	654,4	1527,5	∑=2488,8

$$\begin{cases} a\,n + b\sum_{i=1}^{n} x_i + c\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^3 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i \end{cases}$$

$$\begin{cases} 6\,a + 15\,b + 55\,c = 152{,}6 \\ 15\,a + 55\,b + 225\,c = 585{,}6 \\ 55\,a + 225\,b + 979\,c = 2488{,}8 \end{cases}$$

continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Exemplo

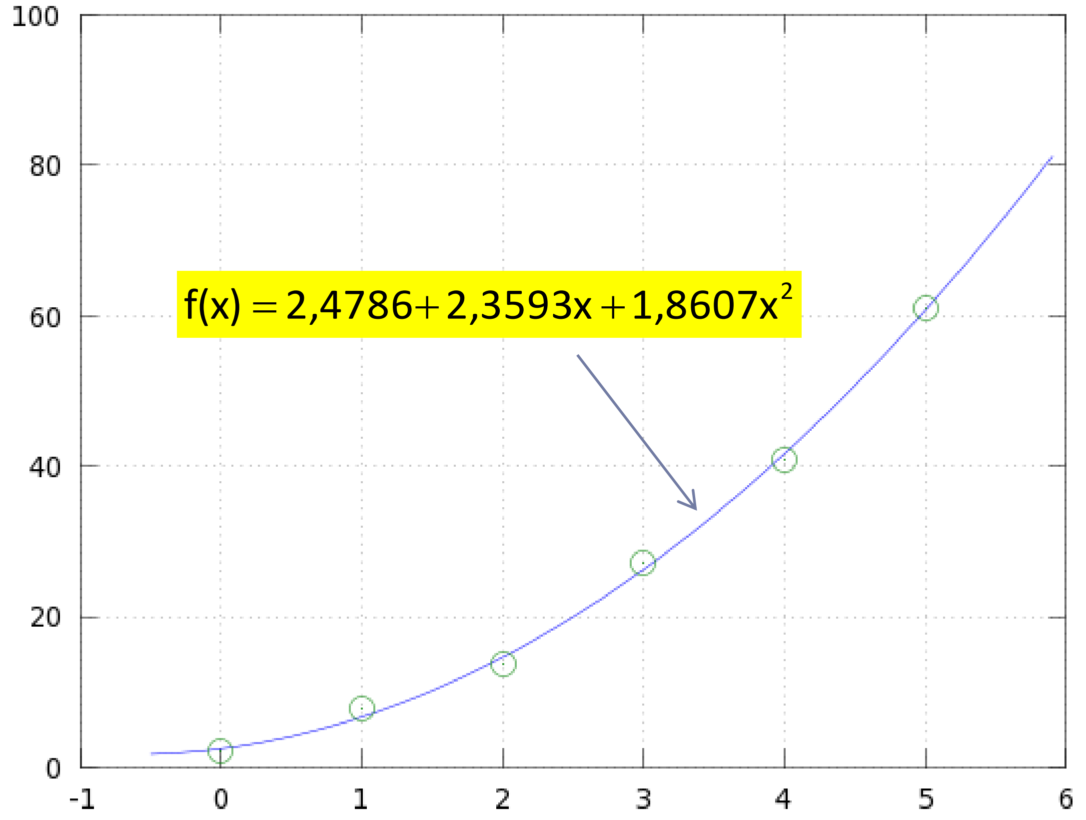
... continuação

$$\begin{cases} 6a + 15b + 55c = 152{,}6 \\ 15a + 55b + 225c = 585{,}6 \\ 55a + 225b + 979c = 2488{,}8 \end{cases}$$

Resolvendo...

$a = 2{,}4786,\ b = 2{,}3593,\ c = 1{,}8607$

$f(x) = 2{,}4786 + 2{,}3593x + 1{,}8607x^2$



Método dos Quadrados Mínimos

Ajuste Polinomial

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Polinomial

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_mx^m$$

$$E = \sum \left(a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \ldots + a_mx_i^m - y_i\right)^2 \qquad \text{(Erro total)}$$

1º) Calcular as derivadas parciais da equação do Erro total em relação a cada um dos coeficientes desconhecidos: p.ex. a derivada parcial em relação a a_2

$$\frac{\partial E}{\partial a_2} = \sum 2\left(a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \ldots .. a_mx_i^m - y_i\right)x_i^2$$

2º) Estas equações são igualadas a zero para minimizar o erro total.

3º) Este conjunto de equações resulta em m+1 equações que podem ser resolvidas usando eliminação de Gauss para determinar a_0, a_1, a_2,..., a_m.

4º) Utilize os coeficientes a_0, a_1, a_2,..., a_m para escrever a equação do polinômio.

Método dos Quadrados Mínimos

Ajuste Geral

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Geral

Ajustar a função f(x), tal que

$$f(x) = a_0 + a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \ldots + a_m f_m(x)$$

O Erro Total é

$$E = \sum \left(a_0 + a_1 f_1(x_i) + a_2 f_2(x_i) + \ldots + a_m f_m(x_i) - y_i\right)^2 \qquad \text{(Erro total)}$$

1º) Calcular as derivadas parciais da equação do Erro total em relação a cada um dos coeficientes desconhecidos.

2º) Estas equações são igualadas a zero para minimizar o erro total.

3º) Este conjunto de equações resulta em m+1 equações que podem ser resolvidas usando eliminação de Gauss para determinar a_0, a_1, a_2,..., a_m.

4º) Utilize os coeficientes a_0, a_1, a_2,..., a_m para escrever a equação do polinômio.

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Geral – Exemplo

Deseja-se encontrar uma função da forma:

$f(x) = a\ln(x) + b\cos(x) + c\,e^{x}$ para ajustar aos dados (x, y).

x	y
0.1	0.0263
0.39	-0.7956
0.68	-0.9021
0.97	-0.7016
1.26	-0.3121
1.55	0.1957
1.84	0.7682
2.13	1.3635
2.42	1.9533
2.71	2.5265
3	3.0932

$$E(a,b,c) = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{8} \left(a\ln(x_i) + b\cos(x_i) + c\,e^{x_i} - y_i\right)^2$$

Condições necessárias para obter o mínimo:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial E(a,b,c)}{\partial a} &= 0 \\ \frac{\partial E(a,b,c)}{\partial b} &= 0 \\ \frac{\partial E(a,b,c)}{\partial c} &= 0 \end{aligned}\right\} \Rightarrow \text{Equações Normais}$$

continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Geral – Exemplo

$$E(a,b,c)=\sum_{i=1}^{n}(f(x_i)-y_i)^2=\sum_{i=1}^{8}\left(a\ln(x_i)+b\cos(x_i)+c\,e^{x_i}-y_i\right)^2$$

$$d/dx\,(\ln(x))=1/x \qquad d/dx\,(\cos(x))=-sen(x) \qquad d/dx\,(e^x)=e^x$$

$$\partial E/\partial a=\sum_{i=1}^{8}2\left(a\ln(x_i)+b\cos(x_i)+c\,e^{x_i}-y_i\right)\left(1/x_i\right)=0$$

$$a\sum_{i=1}^{8}\frac{\ln(x_i)}{x_i}+b\sum_{i=1}^{8}\frac{\cos(x_i)}{x_i}+c\sum_{i=1}^{8}\frac{e^{x_i}}{x_i}=\sum_{i=1}^{8}\frac{y_i}{x_i} \qquad (eq.1)$$

$$\partial E/\partial b=\sum_{i=1}^{8}2\left(a\ln(x_i)+b\cos(x_i)+c\,e^{x_i}-y_i\right)\left(-sen(x)\right)=0$$

$$a\sum_{i=1}^{8}\ln(x_i)sen(x_i)+b\sum_{i=1}^{8}\cos(x_i)sen(x_i)+c\sum_{i=1}^{8}e^{x_i}sen(x_i)=\sum_{i=1}^{8}y_i sen(x_i) \qquad (eq.2)$$

$$\partial E/\partial c=\sum_{i=1}^{8}2\left(a\ln(x_i)+b\cos(x_i)+c\,e^{x_i}-y_i\right)\left(e^{x_i}\right)=0$$

$$a\sum_{i=1}^{8}\ln(x_i)e^{x_i}+b\sum_{i=1}^{8}\cos(x_i)e^{x_i}+c\sum_{i=1}^{8}e^{x_i}e^{x_i}=\sum_{i=1}^{8}y_i e^{x_i} \qquad (eq.3)$$

continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

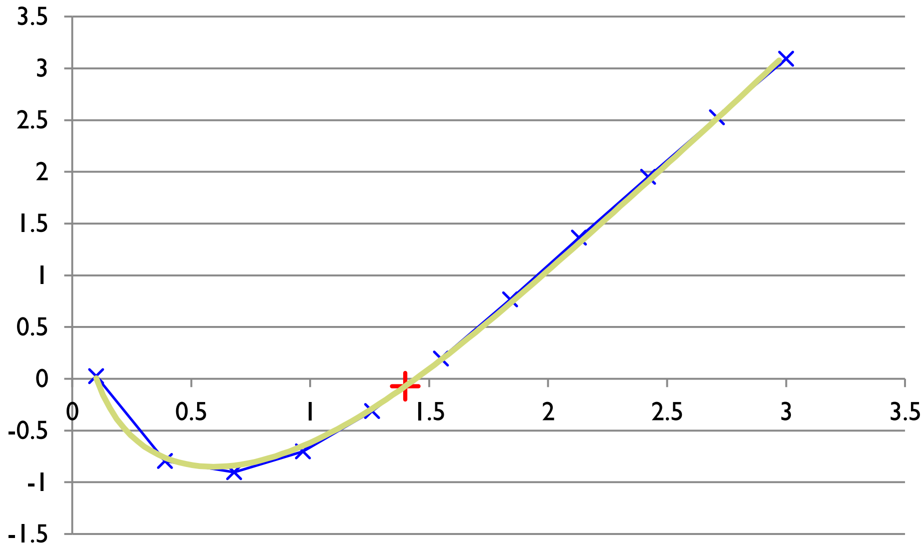
Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Geral – Exemplo

... continuação

x	y
0.1	0.0263
0.39	-0.7956
0.68	-0.9021
0.97	-0.7016
1.26	-0.3121
1.55	0.1957
1.84	0.7682
2.13	1.3635
2.42	1.9533
2.71	2.5265
3	3.0932

-23.787 a	+12.935 b	50.5595 c	= -0.12021
2.187338 a	-0.00352 b	+ 41.90914 c	= 3.13273
55.29295 a	-41.4495	+ 915.118 c	= 133.4216

a = -0.68275
b = -1.69575
c = 0.110242



$$f(x) = -0.68275\ln(x) - 1.69575\cos(x) + 0.110242\,e^{x}$$

continua ...