Métodos Numéricos

Ajuste de Curva pelo Método dos Quadrados Mínimos-MQM

Professor Volmir Eugênio Wilhelm
Professora Mariana Kleina

Método dos Quadrados Mínimos

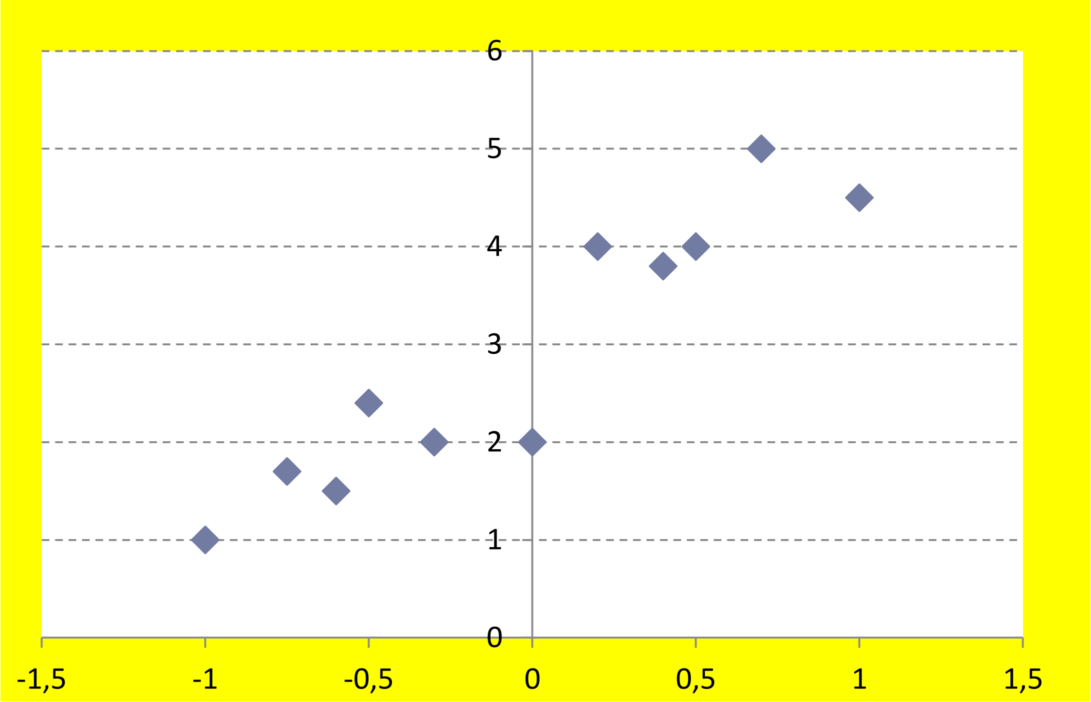
Ajuste Linear

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

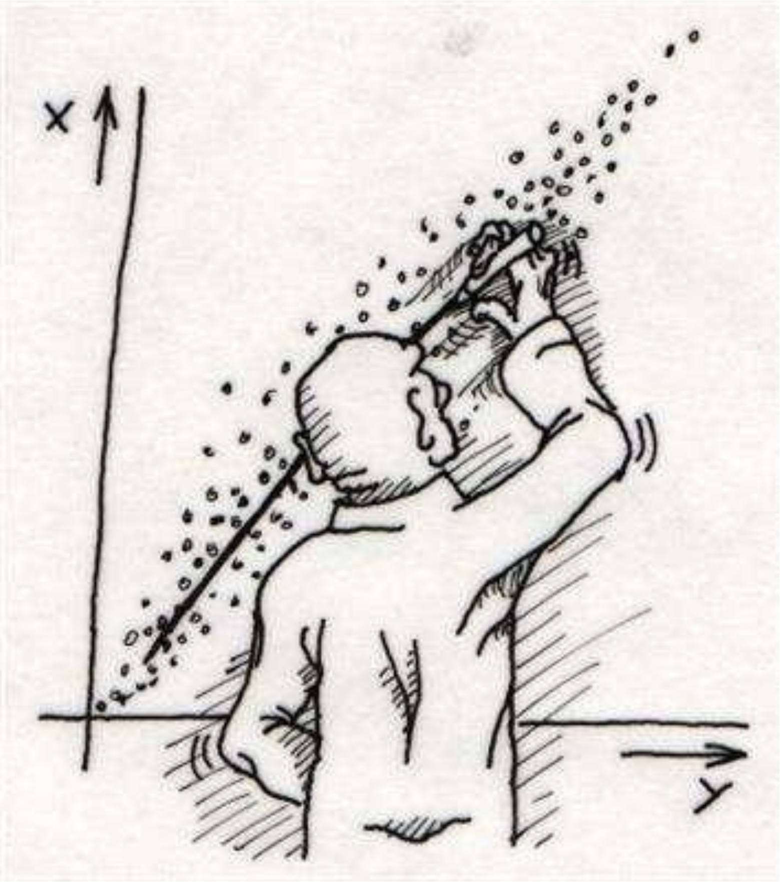


Observa-se que os pontos parecem pertencer a uma reta.

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 – Ajuste Linear



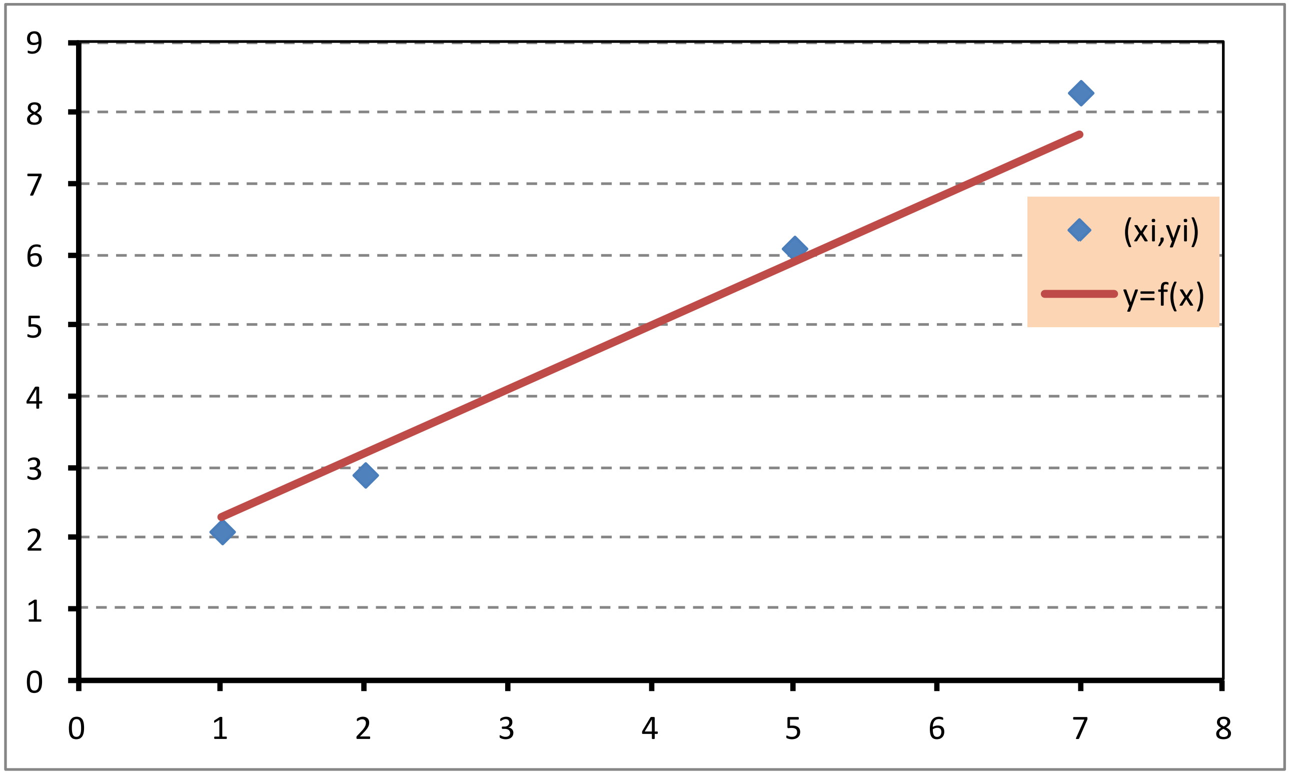
Fonte: Kristen Bauer, Renee Metzger, Holly Soper, Amanda Unklesbay

- Dá a linha de melhor ajuste para um grupo de pontos
- MQM procura minimizar para todos os pontos dados as somas dos quadrados das diferenças entre o valor da função e os valores dados.
- É a mais antiga forma de regressão linear.

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Linear – Exemplo

Sejam os pontos (xi,yi) ={(1; 2,1), (2; 2,9), (5; 6,1), (7; 8,3)} . Suponhamos que a reta y=mx+b que melhor se ajusta aos pontos é f(x) = 0,9x + 1,4.



continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Linear – Exemplo

... continuação

Pode-se calcular o erro e_i entre o valor observado y_i e o valor estimado através da equação da reta, $f(x_i)$.

Erros ao quadrado:

$x_1=1$	$y_1=2,1$	$f(1)=2,3$	$\Rightarrow$	$e_1= (2,3 - 2,1)^2 = 0,04$
$x_2=2$	$y_2=2,9$	$f(2)=3,2$	$\Rightarrow$	$e_2= (3,2 - 2,9)^2 = 0,09$
$x_3=5$	$y_3=6,1$	$f(5)=5,9$	$\Rightarrow$	$e_3= (5,9 - 6,1)^2 = 0,04$
$x_4=7$	$y_4=8,3$	$f(7)=7,7$	$\Rightarrow$	$e_4= (7,7 - 8,3)^2 = 0,36$

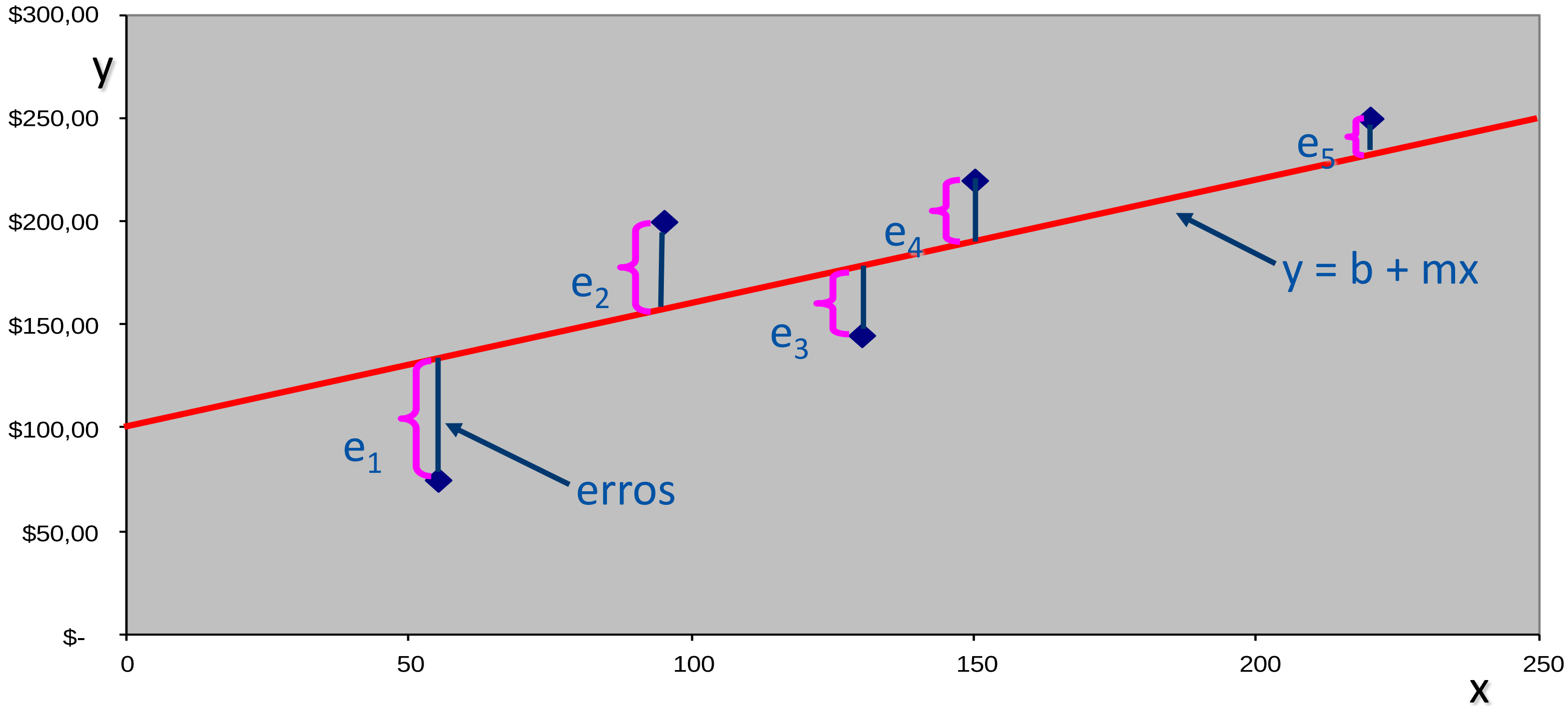
Assim, o Erro Total (somatório dos quadrados dos erros) é

$E = 0,04 + 0,09 + 0,04 + 0,36 =$ **0,53**

Procurando coeficientes mais apropriados para um ajuste melhor da reta, esse erro pode ser minimizado.

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Linear – Erros

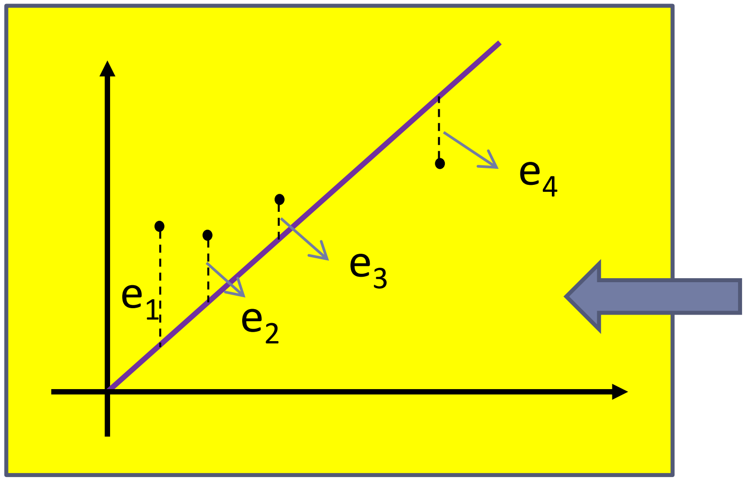


$E = (e_1)^2 + (e_2)^2 + (e_3)^2 + (e_4)^2 + (e_5)^2$ - Erro Total

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 $E = (e_1)^2 + (e_1)^2 + (e_1)^2 + (e_1)^2$

- $E = (e_1)^2 + (e_2)^2 + (e_3)^2 + \ldots + (e_n)^2$ 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 minimiza o erro.

$$\partial E/\partial m = 0 \text{ e } \partial E/\partial b = 0$$

- Visto que a expressão de E é a soma de quadrados que nunca são negativos (é um paraboloide virado para cima), sabe-se que 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 são nulas. I.e, $\partial E/\partial m=0$ e $\partial E/\partial b = 0$

$\partial E/\partial b = \sum 2(mx_i + b - y_i) = 0 \Rightarrow m\sum x_i + \sum b = \sum y_i$

mSx + bn = Sy

$\partial E/\partial m = \sum 2x_i\,(mx_i + b - y_i) \Rightarrow 2\sum(mx_i^2 + bx_i - x_iy_i) = 0 \Rightarrow m\sum x_i^2 + b\sum x_i = \sum x_iy_i$

mSxx + bSx = Sxy

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

$$\begin{cases} mSxx + bSx = Sxy \\ mSx + bn = Sy \end{cases}$$

Resolvendo em relação a m

nmSxx + bnSx = nSxy	multiplicando por n
<u>mSxSx + bnSx = SySx</u>	multiplicando por Sx
nmSxx – mSxSx = nSxy – SySx	subtraindo
m(nSxx – SxSx) = nSxy – SySx	variável m

$$m = \frac{nSxy - SySx}{nSxx - SxSx}$$

$$b = \frac{SxxSy - SxySx}{nSxx - SxSx}$$

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Fórmula do Ajuste Linear

Outra forma de escrever

$$y = mx + b$$

$$m = \frac{\Sigma xy - \dfrac{(\Sigma x)(\Sigma y)}{n}}{\Sigma x^2 - \dfrac{(\Sigma x)^2}{n}}$$

$$b = \frac{\Sigma y}{n} - m\frac{\Sigma x}{n}$$

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)

$$m = \frac{nSxy - SySx}{nSxx - SxSx} \qquad b = \frac{SxxSy - SxySx}{nSxx - SxSx} \qquad y = mx + b$$

Sx = 1+2+3= 6

Sxx = $1^2+2^2+3^2$ = 14

Sy = 1+4+8 = 13

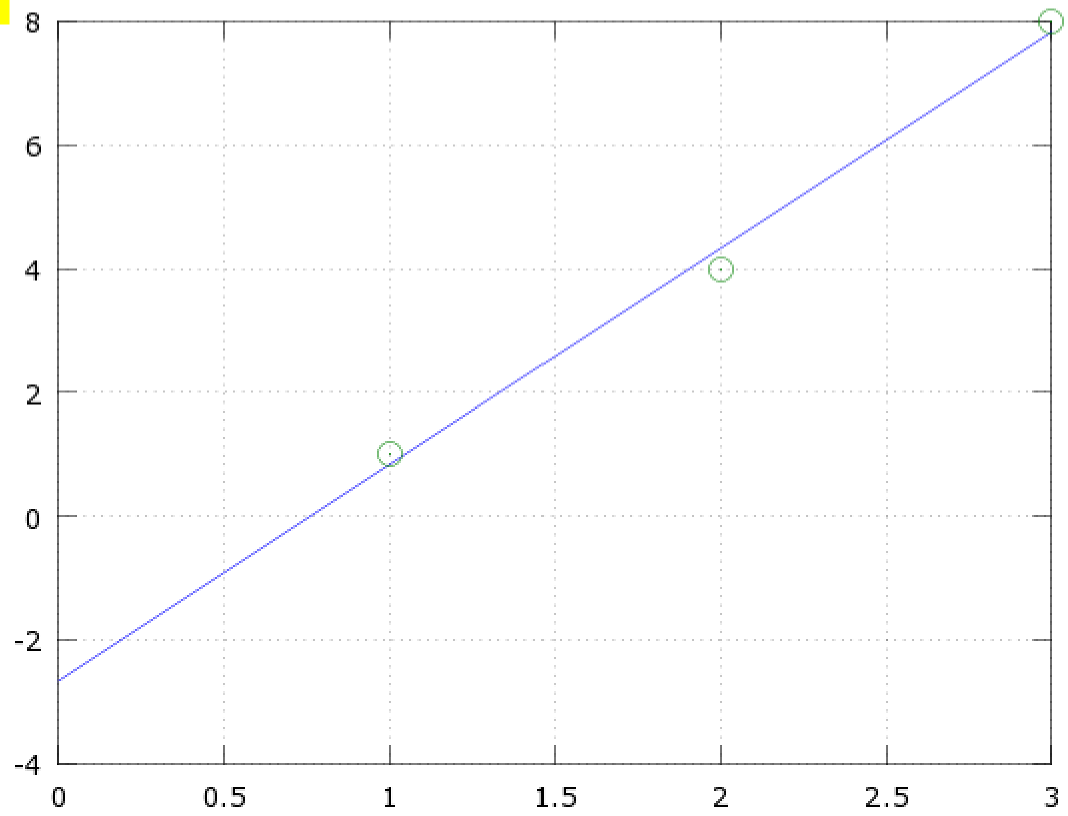
Sxy = 1(1)+2(4)+3(8) = 33

n = 3 (número de pontos)

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

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

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

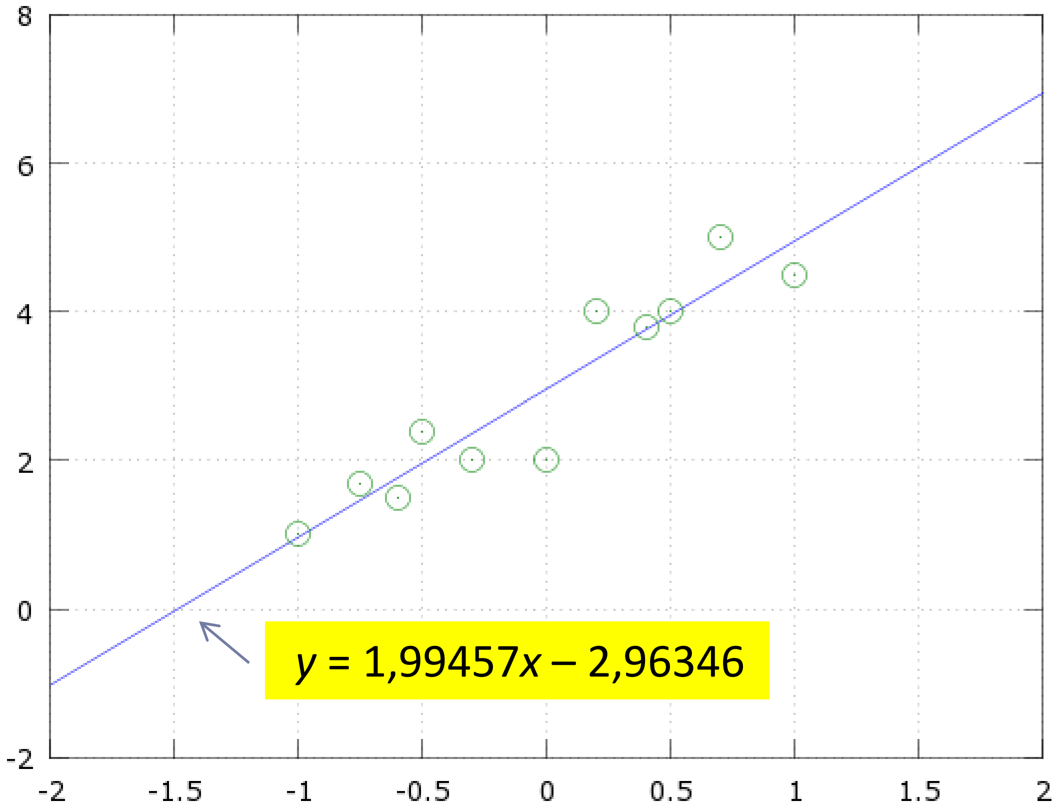


Método dos Quadrados Mínimos

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

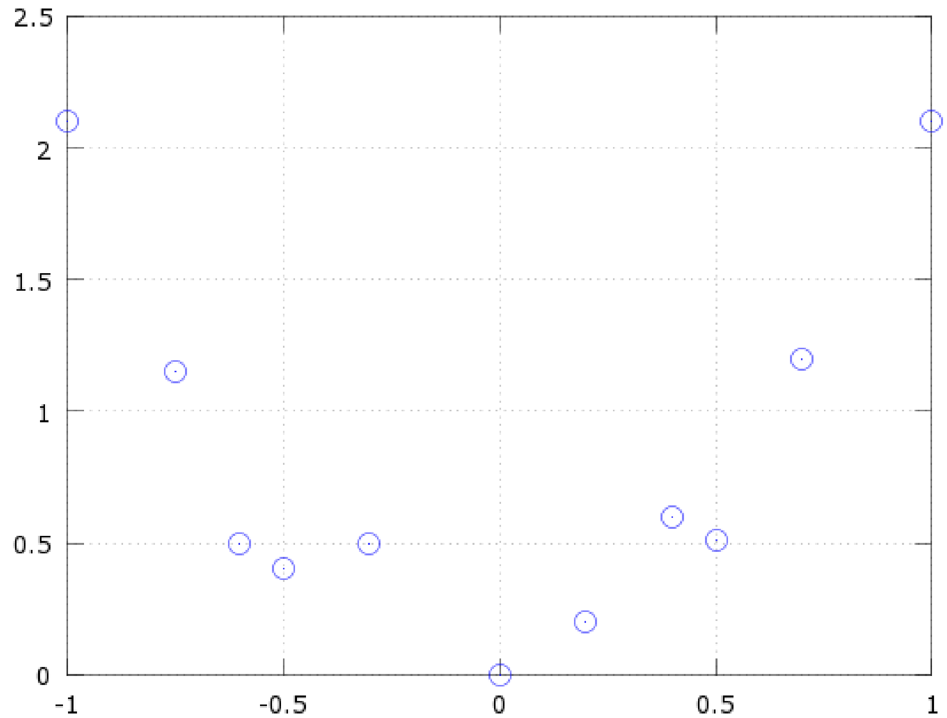
Ajuste Quadrático

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?

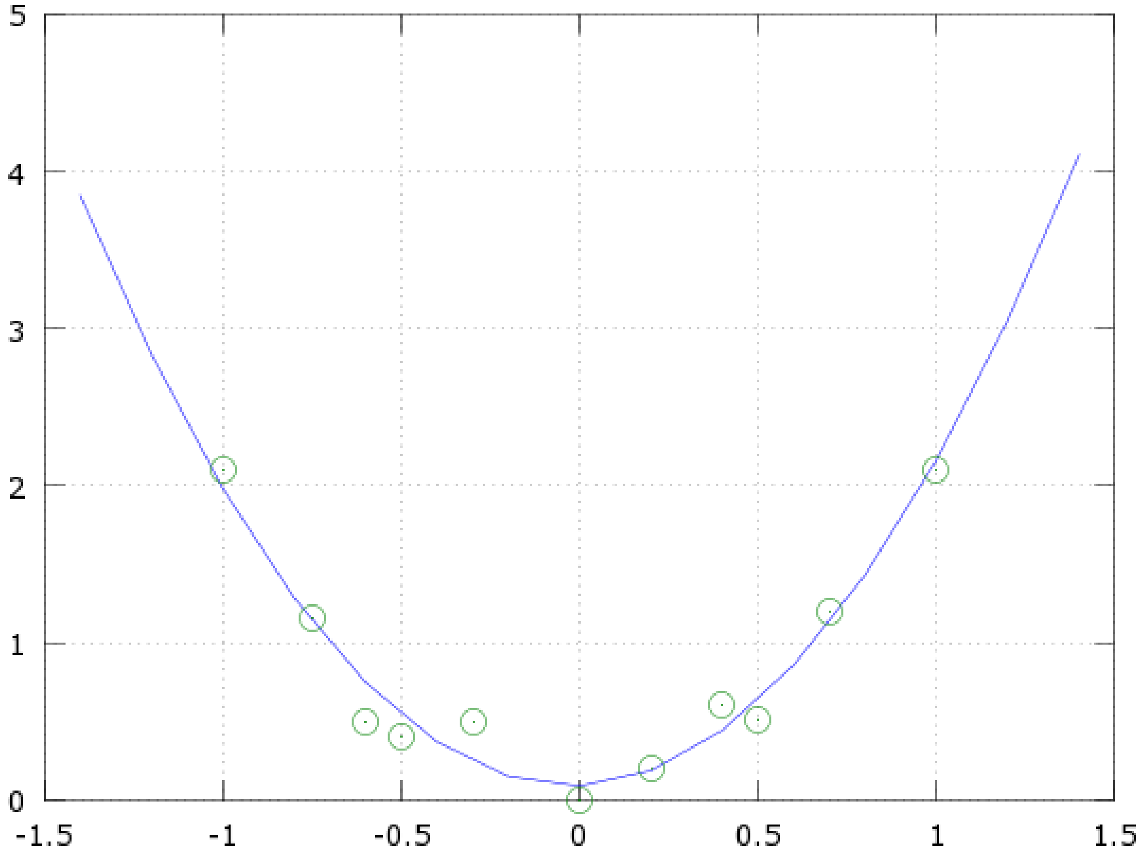
continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Motivação

... continuação

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



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 maior 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

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

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

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

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

continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Quadrático – Exemplo

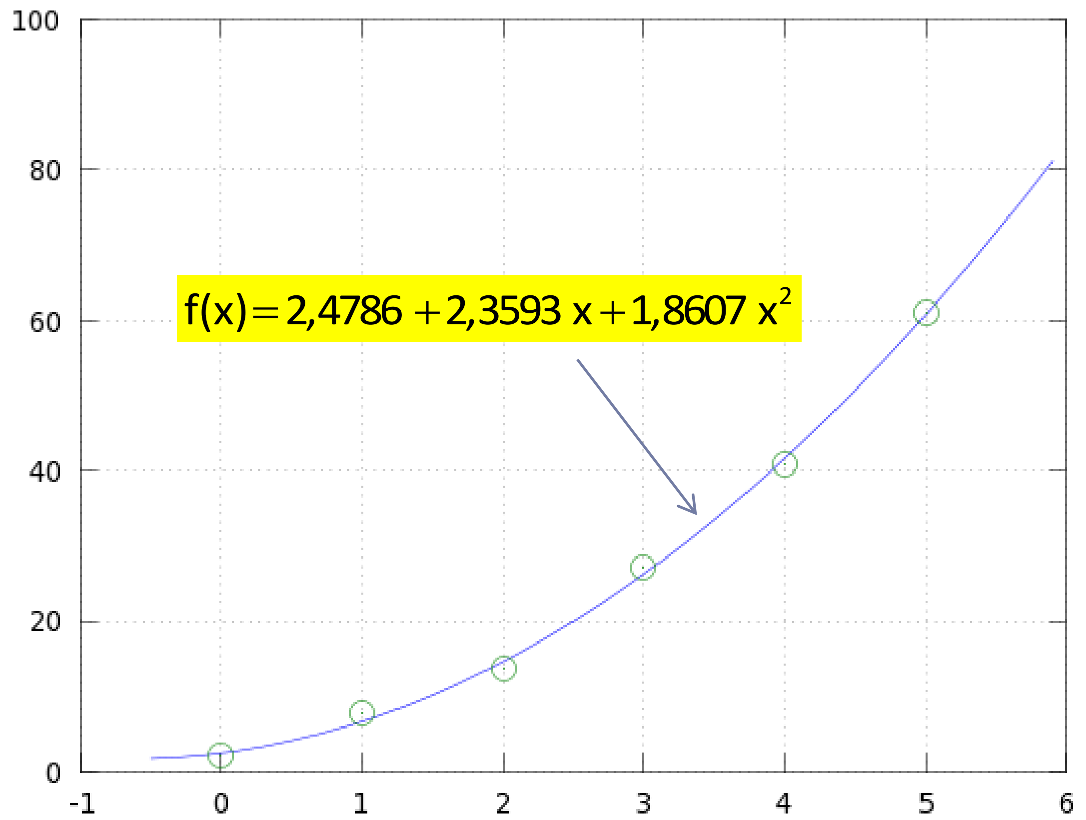
... continuação

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

Resolvendo...

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

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



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

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

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

- Ajustar a função $f(x) = a(\ln(x)) + b\cos(x) + ce^x$ aos dados.

x_i	y_i
0,24	0,23
0,65	-0,23
0,95	-1,10
1,24	-0,45
1,73	0,27
2,01	0,10
2,23	-0,29
2,52	0,24

Deseja-se encontrar uma função da forma:

$f(x) = a\ln(x) + b\cos(x) + ce^x$ para ajustar aos dados.

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

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

... continuação

$$\begin{cases} 4{,}55643\ a - 3{,}31547\ b + 25{,}2192\ c = -0{,}062486 \\ -3{,}31547\ a + 3{,}26307\ b - 14{,}4815\ c = -0{,}848514 \\ 25{,}2192\ a - 14{,}4815\ b + 352{,}388\ c = -1{,}992283 \end{cases}$$

Resolvendo as equações acima:

$$a = -0{,}88815, \quad b = -1{,}1074, \quad c = 0{,}012398$$

Portanto,

$$f(x) = -0{,}88815 \times \ln(x) - 1{,}1074 \times \cos(x) + 0{,}012398 \times e^{x}$$

continua ...

Método dos Quadrados Mínimos

Método dos Quadrados Mínimos – Ajuste Geral – Exemplo

... continuação

$$f(x) = -0{,}88815 \ln(x) - 1{,}1074\cos(x) + 0{,}012398\, e^{x}$$