CCI-22

Prof. Celso HIRATA

Sala 116 Tel. 347 5987

E mail : hirata@comp.ita.br

Instituto Tecnológico de Aeronáutica

Departamento de Computação Científica

Divisão de Ciência da Computação

30 de novembro de 2007

Roteiro

1. **Ajuste de funções**
   - Introdução
   - Critérios para Medida de Qualidade do Ajuste
   - Método dos Mínimos Quadrados
   - Ajuste a uma reta: Regressão Linear
   - Ajuste usando polinômios
   - Ajuste: Caso não-linear
     - Ajuste Usando a Curva Potencial
     - Ajuste Usando a Curva Exponencial

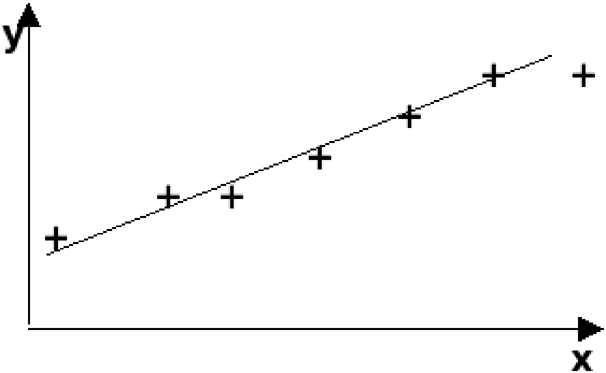
Roteiro

Introdução

A interpolação não é recomendada quando:

- É preciso obter um valor aproximado da função em algum ponto fora do intervalo de tabelamento, ou seja quando se quer extrapolar.
- Os valores tabelados são resultados de algum experimento físico ou de alguma pesquisa, porque, nestes casos, estes valores poderão conter erros inerentes que, em geral, não são previsíveis.ar

Interpolação



Roteiro

1. **Ajuste de funções**
   - Introdução
   - Critérios para Medida de Qualidade do Ajuste
   - Método dos Mínimos Quadrados
   - Ajuste a uma reta: Regressão Linear
   - Ajuste usando polinômios
   - Ajuste: Caso não-linear
     - Ajuste Usando a Curva Potencial
     - Ajuste Usando a Curva Exponencial

Critérios para Medida de Qualidade do Ajuste

Seja $R_i = f^*(x_i) - y_i$

Todos os erros devem tender a zero ou seja $\forall i [R_i \rightarrow 0]$.

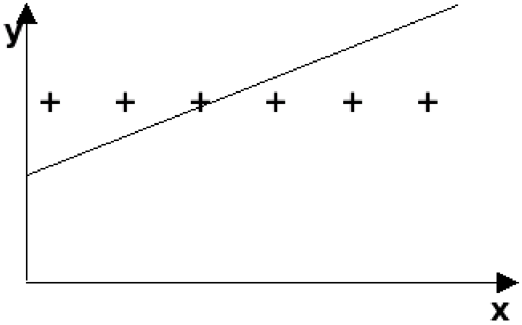
$$f(x_i) = y_i = f^*(x_i), \text{ i.e. } R_i = 0 \text{ , } i = 1, \ldots, n \tag{1}$$

Recai em interpolação.

Soma do Erro

A soma dos erros devem ser tão pequena quanto possível, ou seja, $\sum R_i$ deve ser minimizada.

Problema: soma nula de erros.



Soma do Valor Absoluta do Erro

A soma dos erros em valor absoluto deve ser a menor possível, ou seja,

$$\sum_{i=1}^{m} |f(x_i) - y_i| \qquad (2)$$

deve ser mínima.

Problema: esta soma não é nula, porém a função módulo não é diferenciável em seu ponto de mínimo. Com isso, temos dificuldades em achar o mínimo de tal soma.

Tschebycheff

$$\max_{1 \leq i \leq n} |f^*(x_i) - y_i| \tag{3}$$

deve ser mínimo. Problema: a solução é muito difícil e não recomendada para cálculos manuais.

Método dos Mínimos Quadrados

$$\sum_{i=1}^{n} R_i^2 \tag{4}$$

é minimizado.

Neste caso nunca teremos uma soma nula e a função quadrado é facilmente diferenciável. É o mais usado.

Roteiro

1. **Ajuste de funções**
   - Introdução
   - Critérios para Medida de Qualidade do Ajuste
   - Método dos Mínimos Quadrados
   - Ajuste a uma reta: Regressão Linear
   - Ajuste usando polinômios
   - Ajuste: Caso não-linear
     - Ajuste Usando a Curva Potencial
     - Ajuste Usando a Curva Exponencial

Método dos Mínimos Quadrados

Obter $f^*(x)$ onde:

$$f^*(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \ldots + c_n\phi_n(x) \tag{5}$$

c_k desconhecidas, $k = 1, \ldots, n$ e $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n$ funções escolhidas de acordo com o Diagrama de Dispersão (dados experimentais).

Problema: determinar c_k's de modo que a soma dos quadrados dos resíduos seja mínima. O resíduo é dado por:

$$R_i = f^*(x_i) - y_i \text{ i=1,}\ldots\text{,m} \tag{6}$$

m pontos tabelados ($\geq n$ coeficientes)

Seja R a soma dos quadrados dos resíduos.

$$R = \sum_{i=1}^{m} R_i^2 = \sum_{i=1}^{m} (f^*(x_i) - y_i)^2 \qquad (7)$$

Queremos:

$$\frac{\partial R}{\partial c_k} = 2 \sum_{i} [f^*(x_i) - y_i] \frac{\partial f^*(x_i)}{\partial c_k} = 0 \qquad \text{k=1,...,n} \qquad (8)$$

Como $\frac{\partial f^*(x_i)}{\partial c_k} = \phi_k(x_i)$, k=1,...,n, então:

$$\sum_i [c_1\phi_i(x_i) + c_2\phi_2(x_i) + \ldots + c_n\phi_n(x_i) - y_i]\phi_k(x_i) = 0 \qquad (9)$$

Como $k = 1, \ldots, n$, temos um sistema de equações algébricas:

$$k = 1 \quad \rightarrow \quad \sum_i [c_1\phi_i(x_i) + c_2\phi_2(x_i) + \ldots + c_n\phi_n(x_i) - y_i]\phi_1(x_i) = 0$$

$$k = 2 \quad \rightarrow \quad \sum_i [c_1\phi_i(x_i) + c_2\phi_2(x_i) + \ldots + c_n\phi_n(x_i) - y_i]\phi_2(x_i) = 0$$

$$\vdots$$

$$k = n \quad \rightarrow \quad \sum_i [c_1\phi_i(x_i) + c_2\phi_2(x_i) + \ldots + c_n\phi_n(x_i) - y_i]\phi_n(x_i) = 0$$

Reescrevendo:

$$\left[\sum_i \phi_1(x_i)\phi_1(x_i)\right] c_1 + \left[\sum_i \phi_2(x_i)\phi_1(x_i)\right] c_2 + \quad \ldots \quad + \left[\sum_i \phi_n(x_i)\phi_1(x_i)\right] c_n = \sum_i y_i\phi_1(x_i)$$

$$\left[\sum_i \phi_2(x_i)\phi_1(x_i)\right] c_1 + \left[\sum_i \phi_2(x_i)\phi_2(x_i)\right] c_2 + \quad \ldots \quad + \left[\sum_i \phi_n(x_i)\phi_2(x_i)\right] c_n = \sum_i y_i\phi_2(x_i)$$

$$\vdots$$

$$\left[\sum_i \phi_n(x_i)\phi_1(x_i)\right] c_1 + \left[\sum_i \phi_n(x_i)\phi_1(x_i)\right] c_2 + \quad \ldots \quad + \left[\sum_i \phi_n(x_i)\phi_n(x_i)\right] c_n = \sum_i y_i\phi_n(x_i)$$

n equações, n incógnitas $\rightarrow$ Sistema de Equações (Normais)

Se $\phi_1(x), \ldots, \phi_n(x)$ forem linearmente independentes o determinante do sistema é diferente de zero e portanto o sistema tem solução única.

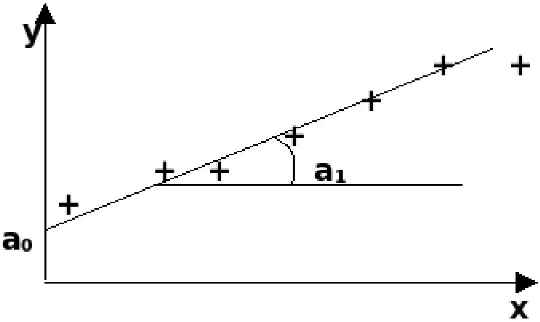
Demonstra-se também que R atinge seu valor mínimo nessa solução.

Veremos os casos mais comuns de ajuste: Ajuste polinomial

Roteiro

1. **Ajuste de funções**
   - Introdução
   - Critérios para Medida de Qualidade do Ajuste
   - Método dos Mínimos Quadrados
   - Ajuste a uma reta: Regressão Linear
   - Ajuste usando polinômios
   - Ajuste: Caso não-linear
     - Ajuste Usando a Curva Potencial
     - Ajuste Usando a Curva Exponencial

Ajuste a uma regra: Regressão Linear



Seja (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, m$ onde $y_i = f(x_i)$

Seja $f^*(x) = a_0 + a_1 x$ a reta que melhor se ajusta aos dados

Originalmente $f^* = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \ldots + c_n\phi_n(x) = a_0 + a_1 x$.

Ou seja, $c_1\phi_1(x) = a_0$ e $c_2\phi_2(x) = a_1 x$.

Dessa forma $c_1 = a_0$, $\phi_1(x) = 1$, $c_2 = a_1$ e $\phi_2(x) = x$.

Queremos achar c_1 e c_2.

Sejam $R_i = y_i - (a_0 + a_1 x_i)$ ou $R_i = f_i - (a_0 + a_1 x_i)$ onde $f_i = f(x_i)$.

Pelo critério dos mínimos quadrados, para que tenhamos $\sum R_i^2$ mínimo, é necessário que:

$$\frac{\partial R}{\partial a_0} = 0 \qquad \text{e} \qquad \frac{\partial R}{a_1} = 0 \tag{10}$$

onde $R = [f_1 - (a_0 + a_1 x_1)]^2 + [f_2 - (a_0 + a_1 x_2)]^2 + \ldots + [f_m - (a_0 + a_1 x_m)]^2$

Teremos:

$$
\begin{aligned}
a_0 &= \frac{\sum_i x_i^2 \sum_i f_i - \sum_i x_i \sum_i x_i.f_i}{m \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \\
a_1 &= \frac{m \sum_i x_i.f_i - \sum_i x_i. \sum_i f_i}{m \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \\
a_1 &= \frac{\sum_i x_i.f_i - (\sum_i x_i. \sum_i f_i)/m}{\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2/m} \\
a_0 &= f^* - a_1 f^*
\end{aligned}
$$

onde $y^* = \frac{\sum_i f_i}{m}$ e $x^* = \frac{\sum_i x_i}{m}$

Exemplo:

x	0.5	1	2	3	4
y	2500	2400	2000	1800	1500

$x = 5$, $y =?$

$x = 6$, $y =?$

$\sum x_i = 10.5$, $\sum y_i = 10200$ e $\sum x_i y_i = 19050$

$\sum x_i^2 = 30.25$, $(\sum x_i)^2 = 110.25$

$a_0 = 2646.95112$ e $a_1 = -289.024390$

$y = 2646.95 - 289.02x$

$x = 5$, $y = 1202$

$x = 6$, $y = 913$

Roteiro

1. **Ajuste de funções**
   - Introdução
   - Critérios para Medida de Qualidade do Ajuste
   - Método dos Mínimos Quadrados
   - Ajuste a uma reta: Regressão Linear
   - Ajuste usando polinômios
   - Ajuste: Caso não-linear
     - Ajuste Usando a Curva Potencial
     - Ajuste Usando a Curva Exponencial

Ajuste usando polinômios

Polinômio de grau 2: $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

$$\begin{vmatrix} m & \sum\limits_i x_i & \sum\limits_i x_i^2 \\ \sum\limits_i x_i & \sum\limits_i x_i^2 & \sum\limits_i x_i^3 \\ \sum\limits_i x_i^2 & \sum\limits_i x_i^3 & \sum\limits_i x_i^4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum\limits_i y_i \\ \sum\limits_i x_i y_i \\ \sum\limits_i x_i^2 y_i \end{vmatrix}$$

Polinômio de grau n: $f^*(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$

Ajuste usando polinômios

Polinômio de grau n: $f^*(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$

$$\begin{vmatrix} m & \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 & \ldots & \sum_i x_i^n \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i^3 & \ldots & \sum_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_i x_i^n & \sum_i x_i^{n+1} & \sum_i x_i^{n+2} & \ldots & \sum_i x_i^{2n} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_i x_i^{n-1} y_i \end{vmatrix}$$

Ajuste usando polinômio - Exemplo

t	13.9	43.0	67.8	89.0	99.2
v	1.04	1.12	1.19	1.24	1.27

Seja $v(t) = 1 + bt + ct^2$

$y(t) = v(t) - 1 = bt + ct^2$

$$\begin{vmatrix} \sum_i t_i^2 & \sum_i t_i^3 \\ \sum_i t_i^3 & \sum_i t_i^4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} b \\ c \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum_i t_i y_i \\ \sum_i t_i^2 y_i \end{vmatrix}$$

Ajuste usando polinômio - Exemplo

$$\sum_i t_i = 312.9 \qquad \sum_i t_i y_i = 66.142$$

$$\sum_i t_i^2 = 24400.69 \qquad \sum_i t_i^2 y_i = 5661.0202$$

$$\sum_i t_i^3 = 2.0750189E6$$

$$\sum_i t_i^4 = 1.841675E8$$

resolvendo,

$$b = 0.003068189$$

$$c = 1.548545E-7 \quad v(t) = 1 + bt + ct^2$$

Ajuste usando polinômio - Exemplo

Verificação:

t	v(dado)	v(ajustado)
13.9	1.04	1.04
43.0	1.12	1.13
67.8	1.19	1.21
89.0	1.24	1.27
99.2	1.27	1.31

t	v(ajustado)
20	1.06
25	1.08
30	1.09
35	1.11
40	1.12

Roteiro

Caso não-linear

- Exponencial: $y(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$, α_1 e α_2 coeficientes positivos.
- Para usar o método dos mínimos quadrados deve-se fazer linearização.

$y(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$

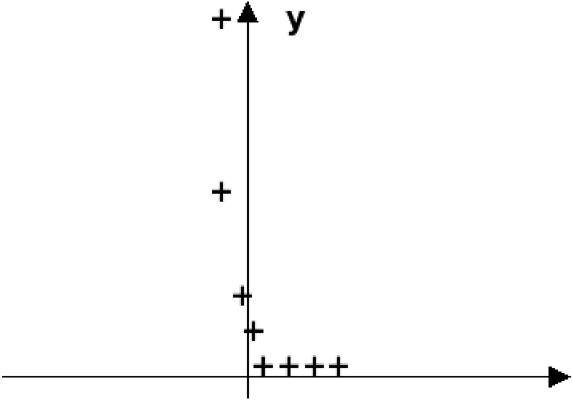
$z = \ln(y) = \ln(\alpha_1) - \alpha_2 x$

- Se $a_1 = \ln(\alpha_1)$ e $a_2 = -\alpha_2$, $z = \ln(y) = a_1 + a_2 x$ é um problema linear

nos parâmetros a_1 e a_2, o método dos mínimos quadrados pode então ser aplicado na resolução do problema. Obtidos os parâmetros deste problema, usaremos estes valores para calcular os parâmetros originais.

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



Exemplo

Isso nos sugere um ajuste: $y(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$

Conforme vimos, a linearização a ser feita é:

$z = \ln(y) = \ln(\alpha_1 e^{-\alpha_2 x}) = \ln(\alpha_1) - \alpha_2 x$

Assim, em vez de ajustar y, ajustaremos $z = \ln(y)$, encontrando

$z(x) = a_1 + a_2 x$ onde $a_0 = \ln(x_1)$ e $a_1 = -\alpha_2$

Temos pois:

x	-1.0	-0.7	-0.4	-0.1	0.2	0.5	0.8	1.0
z	3.599	2.849	2.099	1.349	0.599	-0.151	-0.901	-1.402

Exemplo

$$\begin{vmatrix} m & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum_i z_i \\ \sum_i z_i x_i \end{vmatrix}$$

$$m = 8 \quad \sum_i x_i = 0.3 \quad \sum_i x_i^2 = 3.59 \quad \sum_i z_i = 8.041 \quad \sum_i z_i x_i = -8.646$$

$$\begin{vmatrix} 8 & 0.3 \\ 0.3 & 3.59 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 8.041 \\ -8.646 \end{vmatrix}$$

Exemplo

Assim: $a_0 = 1.099$ e $a_1 = -2.5$

$\alpha_1 = e^{a_0} \rightarrow \alpha_1 = e^{1.099} = 3.001$

$\alpha_2 = -a_1 \rightarrow \alpha_2 = 2.5$

E a função $y(x) = \alpha_1 e^{\alpha_2 x}$ fica:

$$y(x) = 3.001e^{-2.5x}$$

Ajuste Usando a Curva Potencial

$$
\begin{aligned}
y &= \alpha_1 x^{\alpha_2} \\
z &= \ln(y) = \ln(\alpha_1 x^{-\alpha_2}) = \ln(\alpha_1) - \alpha_2 \ln(x) \\
z &= \ln(y) = a_0 + a_1 t
\end{aligned}
$$

Ajuste Usando a Curva Exponencial

$$
\begin{aligned}
y &= \alpha_1 \alpha_2^x \\
\ln(y) &= \ln \alpha_1 + x \ln(\alpha_2) = a_0 + a_1 x
\end{aligned}
$$

Teste de Alinhamento

Uma vez escolhida uma função não linear em $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ para ajuste, uma forma de verificarmos se a função não linear escolhida é adequada ou não, usa-se o teste de alinhamento:

1. Fazer a 'linearização' da função linear escolhida;
2. Fazer o diagrama de dispersão dos novos dados;
3. Se os pontos do diagrama estiverem alinhados, isto significará que a função não linear escolhida foi uma boa escolha.