CI-202 - Métodos Numéricos

Ajuste de Curvas

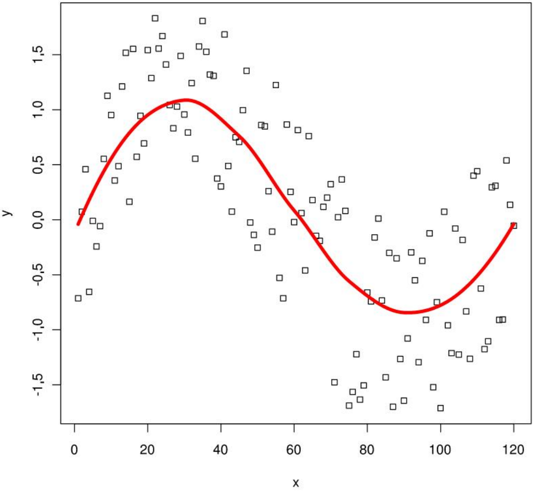
Professor Murilo V. G. da Silva

Departamento de Informática

Universidade Federal do Paraná

18/11/2024

Ajuste de curvas



Ajuste de curvas

- Dado um conjunto de N pontos $\left\{(x_j, y_j) \in \mathbb{R}^2\right\}_{j=1}^{N}$ e uma família de funções $\mathcal{F} = \{f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}; y = f(x)\}$,
- Ajuste de curvas: consiste em encontrar uma função da família $\mathcal{F}$ que melhor se ajusta aos pontos dados.

Ajuste de curvas

- Método dos mínimos quadrados: queremos minimizar a expressão

$$\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{j=1}^{N} \left(f(x_j) - y_j\right)^2 \ .$$

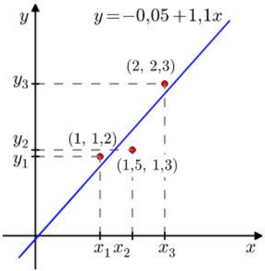
A expressão

$$\begin{aligned} R &:= \sum_{j=1}^{N} \left(f(x_j) - y_j\right)^2 \\ &= \left(f(x_1) - y_1\right)^2 + \left(f(x_2) - y_2\right)^2 + \cdots + \left(f(x_N) - y_N\right)^2 \end{aligned}$$

é chamada de *resíduo*.

Ajuste de uma reta

- Encontrar o polinômio do primeiro grau que melhor se aproxima a um dado conjunto de pontos pelo método dos mínimos quadrados.



- Seja $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_N, y_N)\}$ um conjunto de N pontos dados.
- Buscamos a função $f(x) = a_1 + a_2 x$ que minimize o resíduo

$$R = \sum_{j=1}^{N} \left(f(x_j) - y_j\right)^2$$

Ajuste de uma reta

Resíduo: $$R = \sum_{j=1}^{N} (f(x_j) - y_j)^2$$

Como $f(x_j) = a_1 + a_2 x_j$, o resíduo é a função de duas variáveis:

$$R(a_1, a_2) = \sum_{j=1}^{N} (a_1 + a_2 x_j - y_j)^2$$

O mínimo de $R(a_1, a_2)$ ocorre quando suas derivadas parciais são iguais a zero.

$$\frac{\partial R}{\partial a_1} = 0 \quad \text{i.e.,} \quad \frac{\partial}{\partial a_1} \sum_{j=1}^{N} (a_1 + a_2 x_j - y_j)^2 = 0,$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_2} = 0 \quad \text{i.e.,} \quad \frac{\partial}{\partial a_2} \sum_{j=1}^{N} (a_1 + a_2 x_j - y_j)^2 = 0.$$

Ajuste de uma reta

$$\frac{\partial}{\partial a_1}\sum_{j=1}^{N}(a_1 + a_2 x_j - y_j)^2 = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial a_2}\sum_{j=1}^{N}(a_1 + a_2 x_j - y_j)^2 = 0.$$

Derivando, temos:

$$2\sum_{j=1}^{N}(a_1 + a_2 x_j - y_j)\cdot 1 = 0,$$

$$2\sum_{j=1}^{N}(a_1 + a_2 x_j - y_j)\cdot x_j = 0,$$

Ajuste de uma reta

$$\begin{aligned} 2\sum_{j=1}^{N}\left(a_1 + a_2 x_j - y_j\right)\cdot 1 &= 0 \\ 2\sum_{j=1}^{N}\left(a_1 + a_2 x_j - y_j\right)\cdot x_j &= 0 \end{aligned}$$

Reagrupando:

$$\begin{aligned} a_1 \sum_{j=1}^{N} 1 + a_2 \sum_{j=1}^{N} x_j &= \sum_{j=1}^{N} y_j, \\ a_1 \sum_{j=1}^{N} x_j + a_2 \sum_{j=1}^{N} x_j^2 &= \sum_{j=1}^{N} y_j x_j \end{aligned}$$

Escrevendo em forma de matriz:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} N & \sum_{j=1}^{N} x_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j & \sum_{j=1}^{N} x_j^2 \end{bmatrix}}_{M} \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}}_{a} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{N} y_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j y_j \end{bmatrix}}_{w}.$$

Ajuste de uma reta

$$\underbrace{\begin{bmatrix} N & \sum_{j=1}^{N} x_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j & \sum_{j=1}^{N} x_j^2 \end{bmatrix}}_{M} \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}}_{a} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{N} y_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j y_j \end{bmatrix}}_{w}.$$

O determinante, abaixo, deve ser não nulo:

$$N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j \right)^2 \neq 0$$

- Desta fórmula é possível demonstrar que basta termos pelo menos dois de $x_1, \ldots, x_N$ distintos para que $det(M) \neq 0$
- Basta agora resolver o sistema 2x2 agora

Observações a respeito de sistemas 2x2

Obs: Fórmula para inversa de matriz 2x2:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$$

Obs: Podemos usar a matriz inversa para a solução de um sistema linear:

$$AX = B$$

$$\begin{aligned} \left(A^{-1}\right) AX &= \left(A^{-1}\right) B \\ \left[\left(A^{-1}\right) A\right] X &= \left(A^{-1}\right) B \\ IX &= \left(A^{-1}\right) B \\ X &= \left(A^{-1}\right) B \end{aligned}$$

Ou seja, temos formula analítica para x_1 e x_2:

Ajuste de uma reta

$$\underbrace{\begin{bmatrix} N & \sum_{j=1}^{N} x_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j & \sum_{j=1}^{N} x_j^2 \end{bmatrix}}_{M} \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}}_{a} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{N} y_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j y_j \end{bmatrix}}_{w}.$$

As fórmulas abaixo vem da solução analítica para sistemas 2x2:

$$a_1 = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_j^2 \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} x_j y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

$$a_2 = \frac{N \sum_{j=1}^{N} x_j y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

Exemplo

- Ajuste os pontos da tabela por uma reta.

x_i	y_i
0	0
1	1
2	1
3	4
4	4

$$a_1 = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_j^2 \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} x_j y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

$$a_2 = \frac{N \sum_{j=1}^{N} x_j y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

Ajuste de uma reta; exemplo

$$a_1 = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_j^2 \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} x_j y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

$$a_2 = \frac{N \sum_{j=1}^{N} x_j y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

$\sum_{j=1}^{N} x_j^2 =$
$\sum_{j=1}^{N} y_j =$
$\sum_{j=1}^{N} x_j =$
$\sum_{j=1}^{N} x_j y_j =$

Ajuste de uma reta; exemplo

$$a_1 = \frac{\sum_{j=1}^{N} x_j^2 \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} x_j y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

$$a_2 = \frac{N \sum_{j=1}^{N} x_j y_j - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \sum_{j=1}^{N} y_j}{N \sum_{j=1}^{N} x_j^2 - \left(\sum_{j=1}^{N} x_j\right)^2}$$

$\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = 30$
$\sum_{j=1}^{N} y_j = 10$
$\sum_{j=1}^{N} x_j = 10$
$\sum_{j=1}^{N} x_j y_j = 31$

$$a_1 = -0.2$$

$$a_2 = 1.1$$

Resposta: $f(x) = -0.2 + 1.1x$

Redefinindo o problema: Ajuste linear geral

Dada uma família $\mathcal{F}$ de m funções $\{f_1(x), f_2(x), \ldots, f_m(x)\}$ e um conjunto de n pares ordenados $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)\}$

Calcular os coeficientes a_1, a_2, ..., a_m tais que a função dada por

$$f(x) = \sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \ldots + a_m f_m(x)$$

minimiza o resíduo $R = \sum_{i=1}^{n} [f(x_i) - y_i]^2$.

No exemplo de reta: tínhamos $\mathcal{F} = \{f_1(x), f_2(x)\}$

- $f_1(x) = x$
- $f_2(x) = 1$
- Encontrar a reta: encontrar a_1, a_2 tal que $f(x) = a_1 \cdot f_1(x) + a_2 \cdot f_2(x) = a_1 x + a_2$

Ajuste linear geral

- Igualamos a zero cada uma das derivadas parciais de R em relação aos m coeficientes a_j.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial R}{\partial a_1} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i) - y_i\right] f_1(x_i) = 0,\\
\frac{\partial R}{\partial a_2} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i) - y_i\right] f_2(x_i) = 0,\\
&\vdots\\
\frac{\partial R}{\partial a_m} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[\sum_{j=1}^{m} a_j f_j(x_i) - y_i\right] f_m(x_i) = 0.
\end{aligned}
$$

Ajuste linear geral: $Ma = w$

$$M = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)f_1(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i)f_1(x_i) \\ \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)f_2(x_i) & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i)f_2(x_i) \\ \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)f_3(x_i) & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)f_3(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i)f_3(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)f_m(x_i) & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)f_m(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i)^2 \end{bmatrix}$$

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad w = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)y_i \\ \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} f_m(x_i)y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste linear geral: exemplo

- $f_1(x) = x$
- $f_2(x) = \cos(x)$

Resolvendo $Ma = w$:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)f_1(x_i) \\ \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)f_2(x_i) & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)y_i \\ \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste linear geral: exemplo

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)^2 & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)f_1(x_i) \\ \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)f_2(x_i) & \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} f_1(x_i)y_i \\ \sum_{i=1}^{n} f_2(x_i)y_i \end{bmatrix}$$

- $f_1(x) = x$
- $f_2(x) = \cos(x)$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} cos(x_i)x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i cos(x_i) & \sum_{i=1}^{n} cos(x_i)^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} cos(x_i)y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste linear geral: exemplo

Ajustar para os pontos abaixo:

x_i	y_i
0	1
1,5	1,57
3	2
4,5	4,3
6	7

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} cos(x_i)x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i cos(x_i) & \sum_{i=1}^{n} cos(x_i)^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} cos(x_i) y_i \end{bmatrix}$$

Ajuste linear geral: exemplo

$$\begin{bmatrix} 67,5 & 1,948 \\ 1,948 & 2,951 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 69,71 \\ 6,76 \end{bmatrix}$$

- Resolvendo obtemos:

$$a_1 = 0,9861$$

$$a_2 = 1,64$$

$$f(x) = 0,9861x + 1,64\cos(x)$$