TE 231
Capitulo 5 – Ajuste de Curva

Prof. Mateus Duarte Teixeira

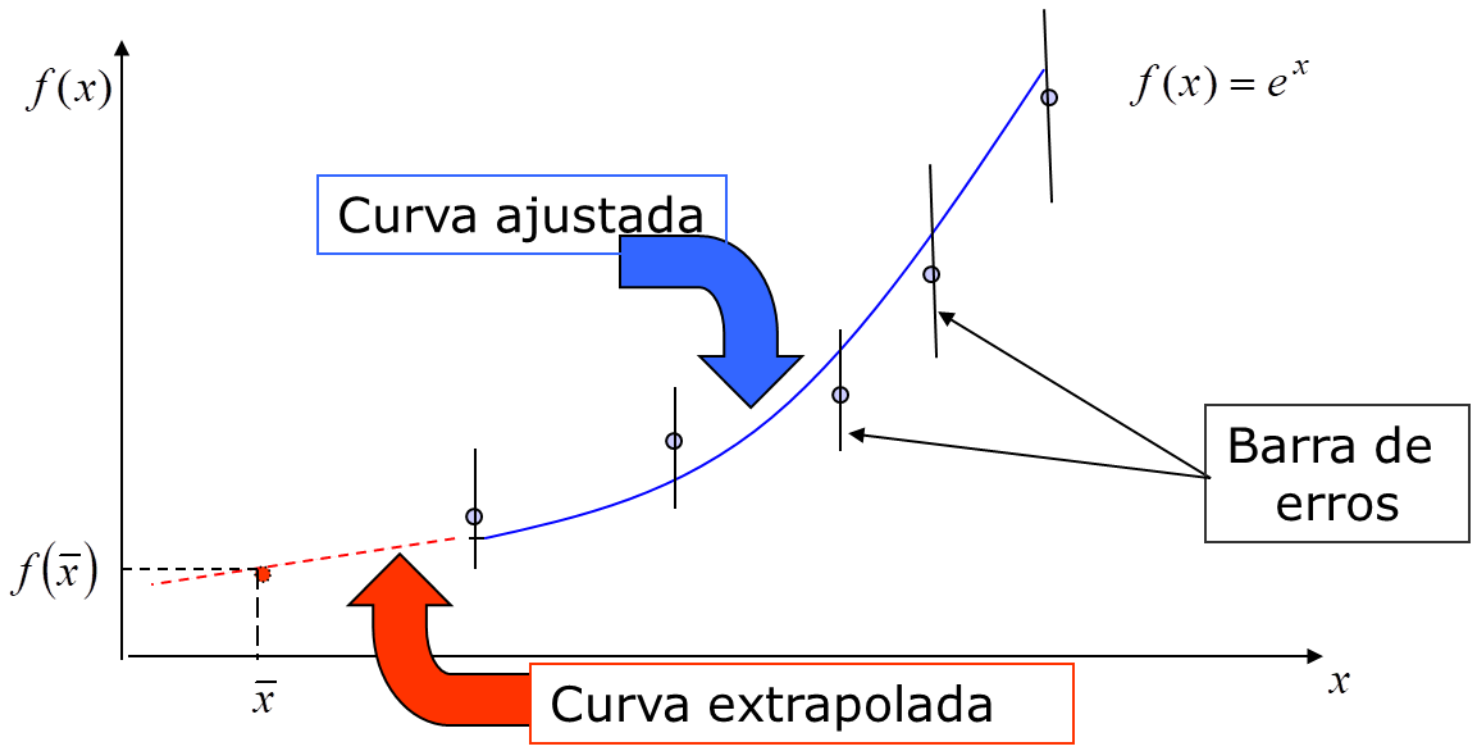
1. Introdução

- No capítulo anterior vimos uma forma de trabalhar com uma função (polinômio) definida por uma tabela. A interpolação polinomial.
- Nem sempre a interpolação é aconselhável.

1. Quando se quer aproximar um valor da função fora do intervalo de tabelamento. Extrapolação.
2. Quando os valores são medidas experimentais com erros. Neste caso a função deve passar pela barra de erros não pelos pontos.

1. Introdução

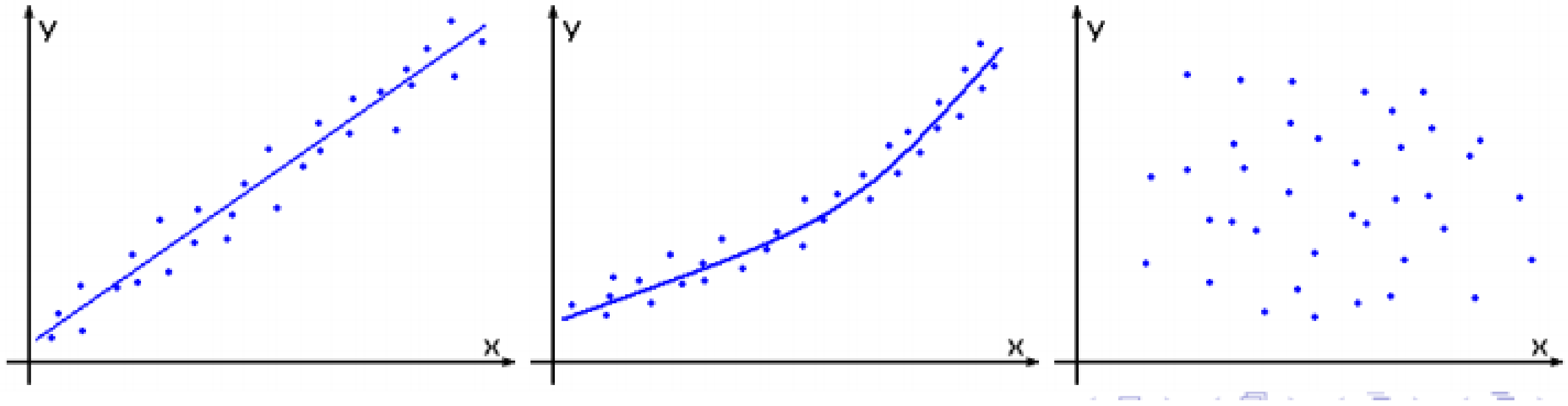
- Graficamente, a extrapolação e o ajuste por barras de erros são vistos abaixo:



1. Introdução

- O primeiro passo é a coleta de dados exibindo os valores correspondentes das variáveis. Por exemplo, sejam x e y, respectivamente, a altura e o peso de alunos do sexo masculino. Uma amostra de n indivíduos acusaria alturas x_1, x_2, ..., x_n e os correspondentes pesos y_1, y_2, ..., y_n.
- O segundo passo é criar um gráfico dos pontos (x_1, y_1), (x_2, y_2), ...,(x_n, y_n) em um sistema de coordenadas retangulares. O conjunto resultante costuma chamar-se de diagrama de dispersão. Pelo diagrama de dispersão, muitas vezes se pode visualizar uma curva aproximativa dos dados

1. Introdução

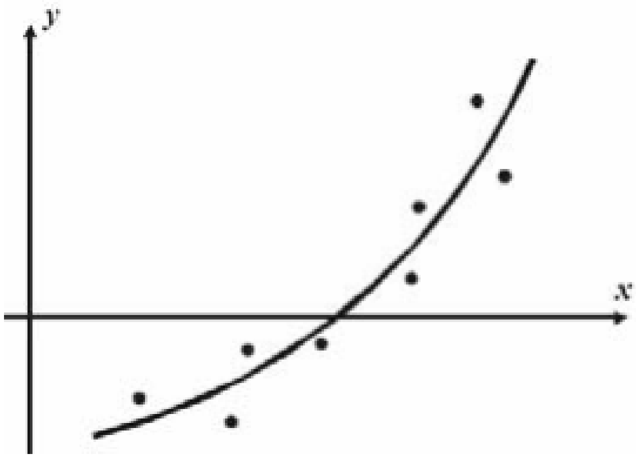


1. Introdução

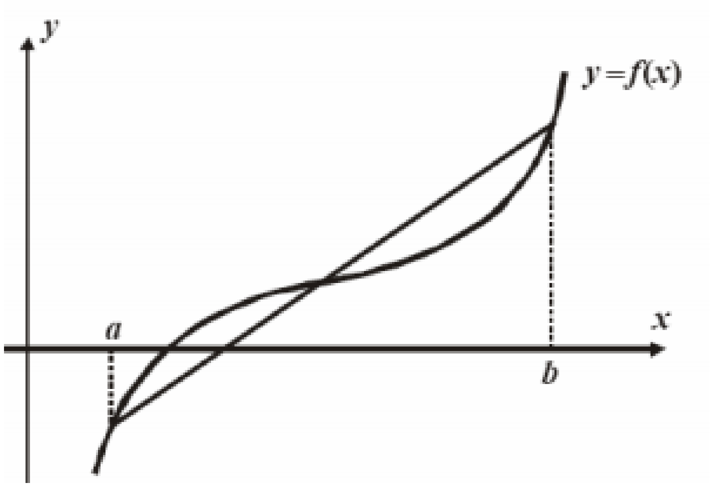
- Temos que ajustar estas funções tabeladas por uma função que seja uma "boa aproximação" e que permita extrapolações com alguma margem de segurança.
- Assim, o objetivo deste processo é aproximar uma função f(x) por outra função $\phi(x)$, escolhida de uma família de funções ou por uma soma de funções em duas situações distintas:
  - **Domínio discreto:** quando a função f é dada por uma tabela de valores.
  - **Domínio contínuo:** quando a função f é dada por sua forma analítica.

1. Introdução

- Domínio Discreto



- Domínio Contínuo



1. Introdução

- Temos que ajustar estas funções tabeladas por uma função que seja uma "boa aproximação" e que permita extrapolações com alguma margem de segurança.
- Dado os pontos $(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots\ldots, (x_m, f(x_m))$

num intervalo [a,b], devemos escolher funções

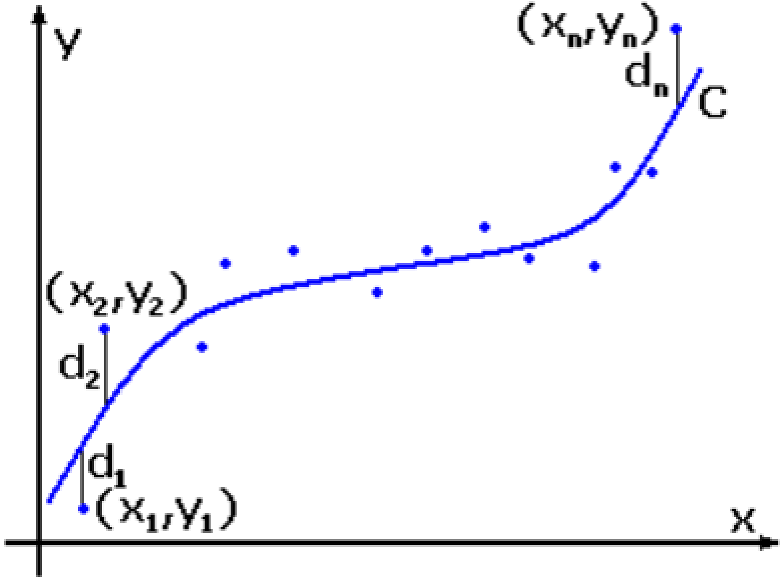
$g_1(x), g_2(x), \ldots\ldots, g_n(x)$, e constantes

$\alpha_1(x), \alpha_2(x), \ldots\ldots, \alpha_n(x)$ tais que a função

$\varphi(x) = \alpha_1\, g_1(x) + \alpha_2\, g_2(x) + \alpha_n\, g_n(x)$ se aproxime de f(x)

2. Método dos Mínimos Quadrados

- De modo geral, pode-se ajustar mais de uma curva a determinado conjunto de dados. A fim de evitar critérios individuais na escolha de retas, parábolas, etc., é necessário chegar-se a um consenso quanto ao que se deve entender por "melhor reta", "melhor curva", etc.
- A fim de motivar uma possível definição, consideremos a figura a seguir, em que os pontos são dados por (x_1, y_1), (x_2, y_2), ...,(x_n, y_n).



- Para determinado valor x, digamos x_1, haverá uma diferença entre o valor y_1 e o correspondente valor "ajustado", determinado pela curva C. Denotamos tal diferença por d_1, e chamamo-la desvio, erro ou resíduo. Uma medida da "aderência", ou "validade do ajustamento", da curva C aos dados do problema é dada por

$$d_1{}^2 + d_2{}^2 + \ldots + d_n{}^2$$

- De todas as curvas que se aproximam de determinado conjunto de pontos, a curva que goza da propriedade

$$d_1{}^2 + d_2{}^2 + \ldots + d_n{}^2 = \text{Mínimo}$$

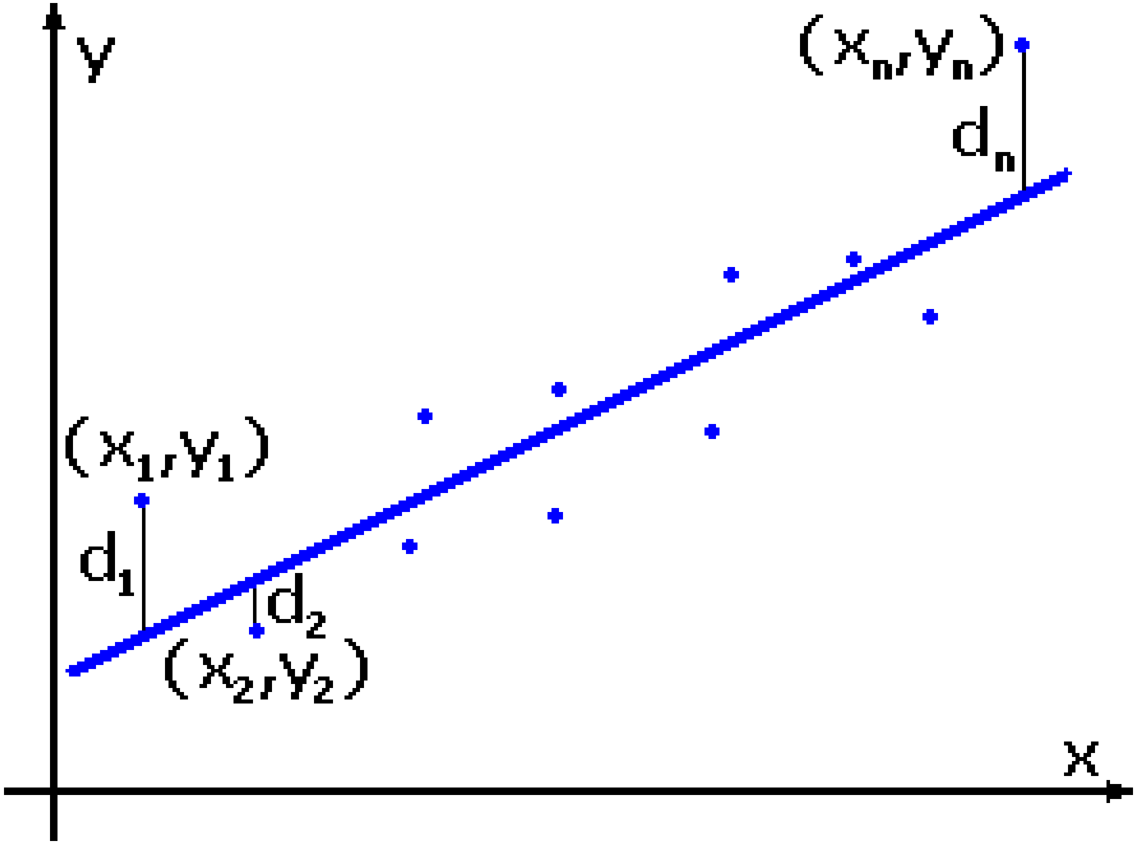
É a melhor curva ajustadora

- Uma curva com esta propriedade se ajusta aos dados no sentido de mínimos quadrados, e é chamada curva de mínimos quadrados. Temos então reta de mínimos quadrados, parábola de mínimos quadrados, etc.
- É usual empregar a definição acima quando **x** é a variável independente e **y** é a variável dependente. Se **x** for a variável dependente, modifica-se a definição, considerando-se os desvios horizontais ao invés de verticais.
- Outra possibilidade consiste em considerar distâncias perpendiculares dos pontos observados à curva, em lugar de distâncias horizontais ou verticais. Tal processo, entretanto, não é muito usado.

- A reta dos mínimos quadrados.
  - Pela definição, temos que a reta de mínimos quadrados que aproxima, ou ajusta, o conjunto de pontos $(x_1; y_1)$, $(x_2; y_2)$, ...,$(x_n; y_n)$ tem por equação:

$$y = bx + a$$

onde a e b são incógnitas a serem determinadas.



y
(xn,yn)
dn
(x1,y1)
d1
d2
(x2,y2)
x

- Os valores de y na reta de mínimos quadrados, correspondente a x_1; x_2;...; x_n são

$$\mathbf{a + bx_1;\ a + bx_2;\ldots;\ a + bx_n}$$

- Logo, os correspondentes desvios verticais são:

$$d_1 = a + bx_1 - y_1$$

$$d_2 = a + bx_2 - y_2$$

$$\vdots$$

$$d_n = a + bx_n - y_n$$

Então a soma dos quadrados dos desvios é:

$$\sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (a + bx_i - y_i)^2$$

ou, de forma abreviada,

$$\sum d^2 = \sum (a + bx - y)^2$$

é uma função de a e b, isto é,

$$F(a, b) = \sum (a + bx - y)^2$$

A condição necessária para que esta expressão seja mínima é $\frac{\partial F}{\partial a} = 0$, $\frac{\partial F}{\partial b} = 0$.

Como

$$\frac{\partial F}{\partial a} = \sum \frac{\partial F}{\partial a}(a + bx - y)^2 = \sum 2(a + bx - y)$$

$$\frac{\partial F}{\partial b} = \sum \frac{\partial F}{\partial b}(a + bx - y)^2 = \sum 2x(a + bx - y)$$

obtemos

$$\sum (a + bx - y) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \sum y = an + b \sum x$$

$$\sum x(a + bx - y) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \sum xy = a \sum x + b \sum x^2$$

- Portanto, para determinar as incógnitas a e b devemos resolver o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} \sum y &= an + b\sum x \\ \sum xy &= a\sum x + b\sum x^2 \end{aligned} \qquad (2)$$

que é chamado de equações normais para a reta de mínimos quadrados.
Os valores de a e b obtidos de (2) são dados por

$$a = \frac{(\sum y)(\sum x^2) - (\sum x)(\sum xy)}{n\sum x^2 - (\sum x)^2} \qquad (3)$$

$$b = \frac{n\sum xy - (\sum x)(\sum y)}{n\sum x^2 - (\sum x)^2} \qquad (4)$$

- Portanto, para determinar as incógnitas a e b devemos resolver o seguinte sistema linear:

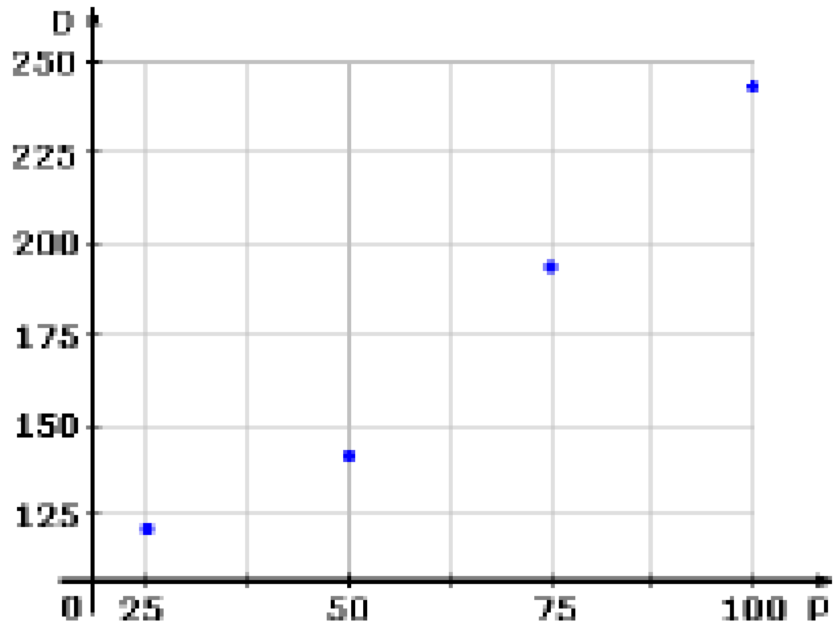
$$\begin{bmatrix} n & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{bmatrix}$$

- Exemplo 1:
  - A dureza (HB) para aços comuns recozidos varia com a quantidade de perlita (um tipo de estrutura cristalina do aço) presente.

a) Obtenha um modelo matemático para descrever os dados medidos.

b) Qual a dureza do material com 90% de Perlita?

% de Perlita	25	50	75	100
Dureza (HB)	120	138	190	240



- Observamos visualmente um comportamento linear da dureza D em relação a porcentagem de perlita P, logo, obteremos um modelo da forma

y = bx + a

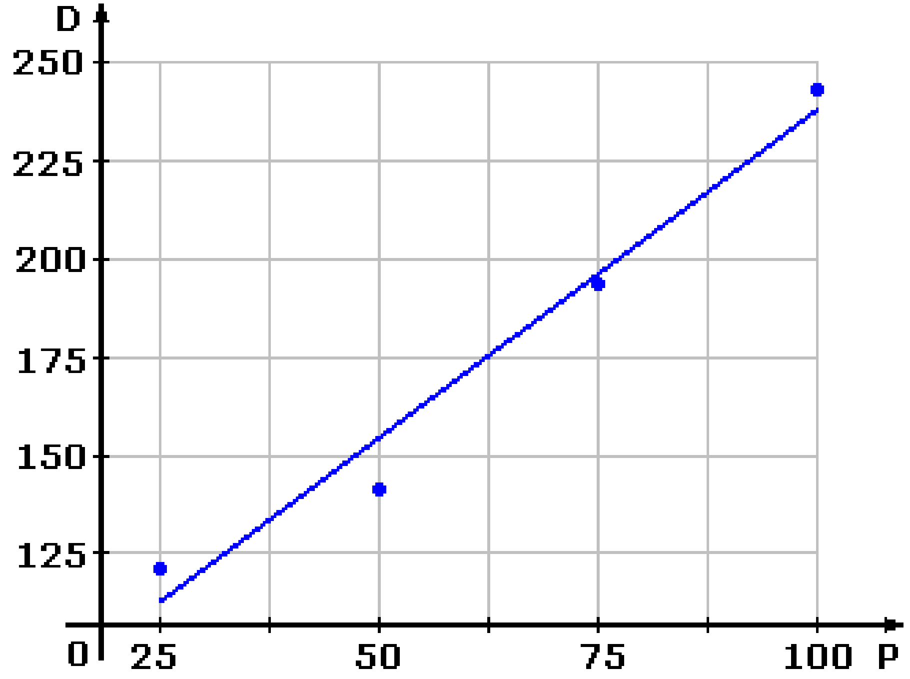
x = % de Perlita	y = Dureza (HB)	x^2	xy
25	120	625	3000
50	138	2500	6900
75	190	5625	14250
100	240	10000	24000
250	688	18750	48150

$$a = \frac{(\sum y)(\sum x^2) - (\sum x)(\sum xy)}{n\sum x^2 - (\sum x)^2} = 69{,}0$$

$$b = \frac{n\sum xy - (\sum x)(\sum y)}{n\sum x^2 - (\sum x)^2} = 1{,}648$$

- Então:

$$y = 69 + 1{,}648x \qquad \text{ou} \qquad D = 69 + 1{,}648P$$



Substituindo $P = 90$ na expressão anterior temos

$$D = 69 + 1{,}648 \cdot 90 = 217{,}32$$

- O procedimento de mínimos quadrados para ajustes lineares pode ser estendido para polinômios de grau mais elevado.
- Supondo-se um polinômio de segundo grau ou quadrático:

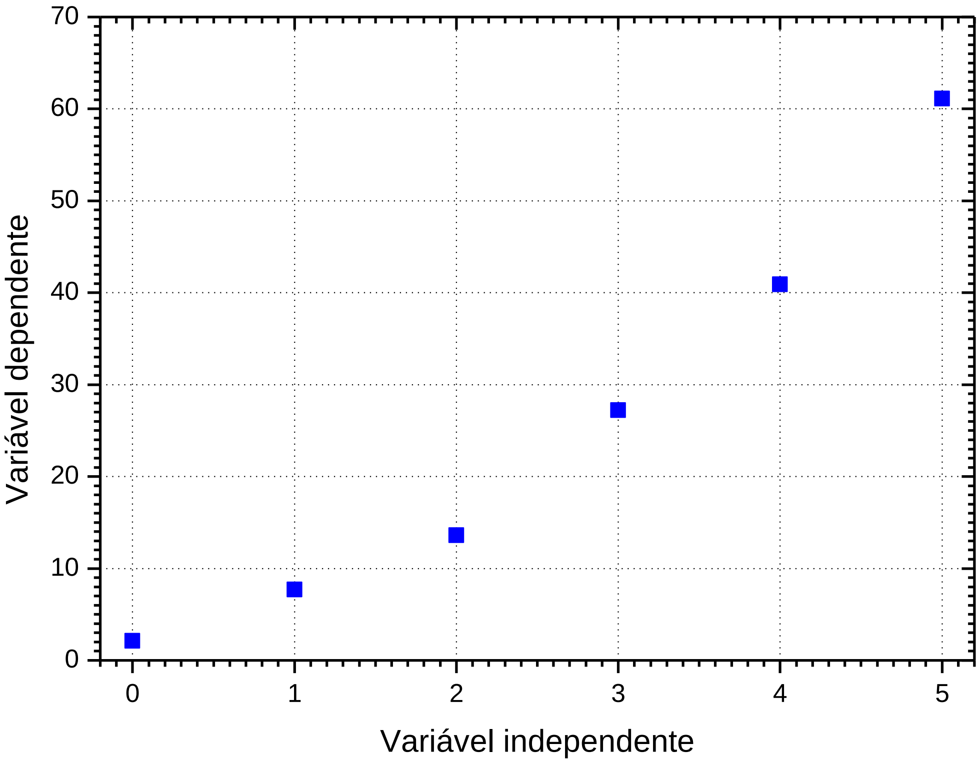
$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$$

- Para o ajuste por uma função quadrática ($y = a_0 + a_1 x + a_2 x_2$) o sistema matricial será:

$$\begin{bmatrix} n & \sum x & \sum x^2 \\ \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum xy \\ \sum x^2 y \end{bmatrix}$$

- Exemplo: Ajustar um polinômio de segundo grau aos dados apresentados na tabela a seguir.

x_i	y_i
0	2,1
1	7,7
2	13,6
3	27,2
4	40,9
5	61,1



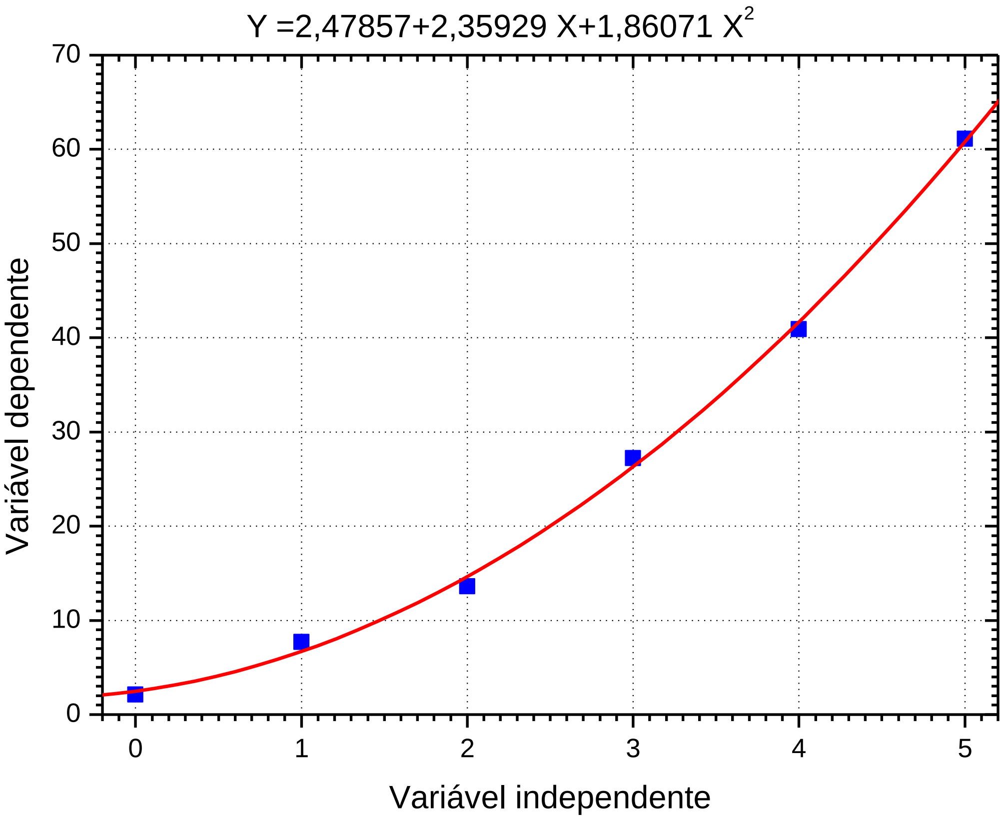
- Então:

x_i	y_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$x_i y_i$	$x_i^2 y_i$
0	2,1	0	0	0	0,0	0,0
1	7,7	1	1	1	7,7	7,7
2	13,6	4	8	16	27,2	54,4
3	27,2	9	27	81	81,6	244,8
4	40,9	16	64	256	163,6	654,4
5	61,1	25	125	625	305,5	1527,5
$\sum_{i=1}^{n} x_i = 15$	$\sum_{i=1}^{n} y_i = 152{,}6$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 55$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^3 = 225$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^4 = 979$	$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 585{,}6$	$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i = 2488{,}8$
$\bar{x} = 2{,}5$	$\bar{y} = 25{,}433333$					

$$\begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 152{,}6 \\ 585{,}6 \\ 2488{,}8 \end{Bmatrix} \quad \therefore \quad \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2{,}47857 \\ 2{,}35929 \\ 1{,}86071 \end{Bmatrix}$$

$$y = 2{,}47857 + 2{,}35929x + 1{,}86071x^2$$

Solução:



Y =2,47857+2,35929 X+1,86071 X2
70
60
50
40
30
20
10
0
0
1
2
3
4
5
Variável dependente
Variável independente

- Ajuste os dados abaixo pelo método de mínimos quadrados utilizando: (a) uma reta; (b) uma parábola. Trace as duas curvas no gráfico de dispersão dos dados.

x	2	3	4	5	6	7
y	0,6	0,9	0,8	1,2	1,5	1,7

Respostas:

(a) $y = 0{,}12667 + 0{,}22000x$

(b) $y = 0{,}46714 + 0{,}04321x + 0{,}01964x^2$