Métodos Numéricos
Mínimos quadrados (polinómio + modelo linear)

Ana Maria A. C. Rocha

Departamento de Produção e Sistemas

Universidade do Minho

arocha@dps.uminho.pt

Objetivo

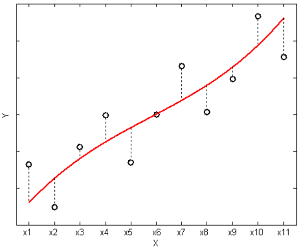
Definir um **modelo** $M(x; c_i)$ - expressão matemática - que melhor se ajuste à função dada, $f(x)$, no intervalo $[a, b]$.

Usando a técnica dos mínimos quadrados, pretende-se minimizar a soma dos quadrados dos erros.

- problema discreto:

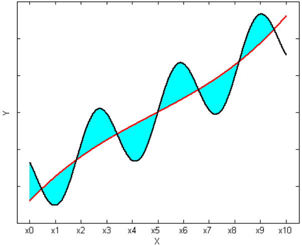
Dados m pontos $x_1 < x_2 < \ldots < x_m$ no intervalo $[a, b]$:

$$\boxed{\text{minimizar} \sum_{j=1}^{m} \left(f(x_j) - M(x_j; c_i)\right)^2}$$



Objetivo

- problema contínuo:



Dada $f(x)$

$$\boxed{\text{minimizar } \int_a^b \left(f(x) - M(x; c_i)\right)^2 \, dx}$$

Nota: só vamos considerar problemas discretos, isto é, a função f é dada por um conjunto discreto de valores

$$(x_1, f_1), (x_2, f_2), \ldots, (x_m, f_m).$$

Tipos de modelos

• Modelo **linear e polinomial**,
define um problema de mínimos quadrados linear

Exemplo: $M(x; a_0, a_1, a_2) \equiv p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

• Modelo **linear e não polinomial**,
define um problema de mínimos quadrados linear

Exemplo: $M(x; c_1, c_2) = c_1 e^{x^2} + c_2 \text{sen}(x)$

• Modelo **não linear**,
define um problema de mínimos quadrados não linear

Exemplo: $M(x; c_1, c_2) = \ln(c_1 x^2) + e^{c_2 x}$

1. Modelo linear e polinomial

- **objetivo:** definir polinómio de grau n (completo) $p_n(x)$
- **condição única para que o problema seja bem definido:** $m \geq n+1$, sendo m o número de pontos onde a função é definida e n o grau do polinómio;
- para que o problema seja bem condicionado, isto é, não seja sensível a erros nos dados ou erros de arredondamento nos cálculos, o polinómio $p_n(x)$ deve ser construído, usando sequência de polinómios ortogonais

$$P_0(x),\ P_1(x),\ P_2(x), \ldots,\ P_n(x),$$

na forma

$$p_n(x) = c_0\, P_0(x) + c_1\, P_1(x) + c_2\, P_2(x) + \cdots + c_n\, P_n(x).$$

1. Modelo linear e polinomial (cont.)

- Propriedade dos polinómios ortogonais:

$$\sum_{i=1}^{m} P_j(x_i)\, P_k(x_i) \begin{cases} = 0, & \text{se } j \neq k \\ \neq 0, & \text{se } j = k \end{cases}$$

- Como se constrói o polinómio $p_n(x)$ (completo) **?**

a partir dos pontos dados (x_j, f_j), $j = 1, 2, \ldots, m$

determinam-se $P_0(x), \ldots, P_n(x)$ e $c_0, \ldots, c_n$ para formar

$$p_n(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + c_2 P_2(x) + \cdots + c_n P_n(x)$$

Construção do polinómio $p_n(x)$

passo 1: Construir os polinómios ortogonais da sequência de polinómios ortogonais $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \ldots, P_n(x)$ usando a **relação de recorrência**

$$P_{i+1}(x) = (x - B_i)\, P_i(x) - \mathbb{C}_i\, P_{i-1}(x), \quad \text{para} \quad i = 0, 1, \ldots, n-1$$

em que $P_{-1}(x) = 0$ e $P_0(x) = 1$,

$$B_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} x_j\, P_i^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{m} P_i^2(x_j)}, \quad \text{para todo o} \quad i$$

$$\mathbb{C}_0 = 0 \quad \text{e} \quad \mathbb{C}_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} P_i^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{m} P_{i-1}^2(x_j)} \quad \text{para} \quad i > 0.$$

Construção do polinómio $p_n(x)$

passo 2: Calcular os coeficientes do polinómio

$$c_0, c_1, c_2, \dots, c_n$$

sendo

$$c_i = \frac{\sum_{j=1}^{m} f_j \, P_i(x_j)}{\sum_{j=1}^{m} P_i^2(x_j)}, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

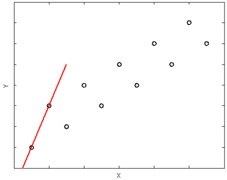
passo 3: Formar o polinómio pretendido:

$$p_n(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + c_2 P_2(x) + \cdots + c_n P_n(x).$$

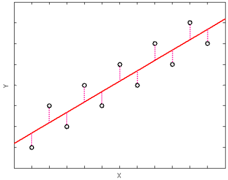
Exemplos de modelos polinomiais

Construir $p_1(x)$ (número mínimo de pontos, $n+1=2$)

Se $m=2$, $p_1(x)$ é o polinómio interpolador (e é único):



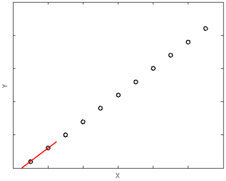
Se $m>2$, $p_1(x)$ é o polinómio que melhor ajusta a 'mancha' de pontos:



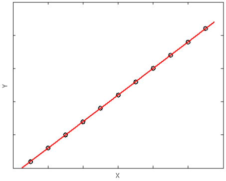
Exemplos de modelos polinomiais (cont.)

Ajustar $p_1(x)$ considerando os seguintes pontos:

Se só usar 2 pontos



Se usar todos os pontos



Neste caso todos os polinómios $p_1(x)$ são iguais e passam nos pontos de $f(x)$ porque a função é um polinómio de grau 1, o que significa que $\sum_{j=1}^{m}(f_j - p_1(x_j))^2 = 0$.

Exercício 1

A resistência de um certo fio (de uma certa substância), $f(x)$, varia com o diâmetro desse fio, x. A partir de uma experiência registaram-se os seguintes valores:

x_i	1.5	2.0	3.0	4.0
$f(x_i)$	4.9	3.3	2.0	1.5

Foram sugeridos os seguintes modelos para ajustar os valores de $f(x)$, no sentido dos mínimos quadrados:

- uma reta
- uma parábola

(a) Calcule a reta.

(b) Calcule a parábola.

(c) Estime o valor da resistência de um fio que tem de diâmetro 2.5, através da parábola calculada em b).

Resolução do Exercício 1

(a) Pretende determinar-se uma reta, que é um polinómio de grau 1 (modelo linear polinomial)

$$p_1(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x)$$

Passo 1: Construir os polinómios ortogonais da sequência de polinómios ortogonais $P_0(x)$ e $P_1(x)$, sabendo que

$$P_0(x) = 1 \text{ e } P_{-1}(x) = 0$$

$$P_1(x) = (x - B_0)P_0(x) - C_0 P_{-1}(x) = x - B_0$$

$$B_0 = \frac{\sum_{j=1}^{4} x_j P_0^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)} = \frac{\sum_{j=1}^{4} x_j}{\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)} = \frac{10.5}{4} = 2.625$$

$$P_1(x) = x - 2.625$$

Resolução do Exercício 1

Passo 2: Cálculo dos coeficientes do polinómio c_0 e c_1

$$c_0 = \frac{\sum_{j=1}^{4} f_j P_0(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)} = \frac{\sum_{j=1}^{4} f_j}{\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)} = \frac{11.7}{4} = 2.925$$

$$c_1 = \frac{\sum_{j=1}^{4} f_j P_1(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_1^2(x_j)}$$

Podemos construir uma tabela para auxiliar os cálculos:

	x_j	f_j	$P_1(x_j)$	$P_1^2(x_j)$	$f_j P_1(x_j)$
	1.5	4.9	-1.125	1.265625	-5.5125
	2.0	3.3	-0.625	0.390625	-2.0625
	3.0	2.0	0.375	0.140625	0.75
	4.0	1.5	1.375	1.890625	2.0625
$\sum$	**10.5**	**11.7**		**3.6875**	**-4.7625**

$$c_1 = \frac{-4.7625}{3.6875} = -1.291525$$

Resolução do Exercício 1

Passo 3: Construção do polinómio

$$\boxed{p_1(x) = 2.925 - 1.291525(x - 2.625)}$$

Resolução do Exercício 1

(b) Pretende determinar-se uma parábola, polinómio de grau 2 (modelo linear polinomial)

$$p_2(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + c_2 P_2(x)$$

$$p_2(x) = \underbrace{c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x)}_{p_1(x)} + c_2 P_2(x)$$

$$p_2(x) = p_1(x) + c_2 P_2(x)$$

Resolução do Exercício 1

Passo 1: Construir o polinómio ortogonal $P_2(x)$

$$P_2(x) = (x - B_1)P_1(x) - C_1 P_0(x) = (x - B_1)P_1(x) - C_1$$

$$B_1 = \frac{\sum_{j=1}^{4} x_j P_1^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_1^2(x_j)}$$

$$C_1 = \frac{\sum_{j=1}^{4} P_1^2(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_0^2(x_j)}$$

Podemos construir uma tabela auxiliar:

	x_j	f_j	$P_1(x_j)$	$P_1^2(x_j)$	$x_j P_1^2(x_j)$
	1.5	4.9	-1.125	1.265625	1.898438
	2.0	3.3	-0.625	0.390625	0.78125
	3.0	2.0	0.375	0.140625	0.421875
	4.0	1.5	1.375	1.890625	7.5625
$\sum$	**10.5**	**11.7**		**3.6875**	**10.664063**

Resolução do Exercício 1

$$B_1 = \frac{10.6640625}{3.6875} = 2.891949$$

$$C_1 = \frac{3.6875}{4} = 0.921875$$

$$\boxed{P_2(x) = (x - 2.891949)(x - 2.625) - 0.921875}$$

Resolução do Exercício 1

Passo 2: Cálculo do coeficiente do polinómio c_2

$$c_2 = \frac{\sum_{j=1}^{4} f_j P_2(x_j)}{\sum_{j=1}^{4} P_2^2(x_j)}$$

Continuar a tabela auxiliar:

	x_j	f_j	$P_1(x_j)$	$P_1^2(x_j)$	$x_j P_1^2(x_j)$	$f_j P_1(x_j)$	$P_2(x_j)$	$P_2^2(x_j)$
	1.5	4.9	-1.125	1.265625	1.898438	-5.5125	0.644068	0.414824
	2.0	3.3	-0.625	0.390625	0.78125	-2.0625	-0.364407	0.132792
	3.0	2.0	0.375	0.140625	0.421875	0.75	-0.881356	0.776788
	4.0	1.5	1.375	1.890625	7.5625	2.0625	0.601695	0.362037
$\sum$	**10.5**	**11.7**		**3.6875**	**10.664063**	**-4.7625**		**1.686441**

$$c_2 = \frac{1.093221}{1.686441} = 0.648241$$

Passo 3: Construção do polinómio

$$\boxed{p_2(x) = 2.925 - 1.291525(x - 2.625) + 0.648241\left[(x - 2.891949)(x - 2.625) - 0.921875\right]}$$

Resolução do Exercício 1

(c) Pretende-se estimar o valor da resistência quando o diâmetro é 2.5, através da parábola calculada em (b).

Então, é só substituir $x = 2.5$ no polinómio $p_2(x)$:

$$p_2(2.5) = 2.5206$$

2. Modelo linear mas não polinomial

- Forma do modelo:

$$M(x; c_1, \ldots, c_n) = c_1\,\Phi_1(x) + c_2\,\Phi_2(x) + \cdots + c_n\,\Phi_n(x)$$

  (linear nos coeficientes) em que

$$c_1, c_2, \ldots, c_n$$

  são os **coeficientes** do modelo e

$$\Phi_1(x), \Phi_2(x), \ldots, \Phi_n(x)$$

  são funções.
- neste modelo só é preciso determinar os coeficientes, pois as funções $\Phi_i(x)$, $i = 1, \ldots, n$ são dadas;
- o número de termos na definição do modelo caracteriza a dimensão do problema - n - este é também o número de coeficientes a determinar;

2. Modelo linear mas não polinomial (cont.)

- **condição única para que o problema seja bem definido:**

$$m \geq n,$$

sendo m o número de pontos onde a função é definida e n o número de coeficientes a determinar;

- o cálculo dos coeficientes

$$c_1, c_2, \ldots, c_n$$

é feito a partir do **sistema das equações normais**.

Dedução do sistema das equações normais

$$M(x; c_1, \ldots, c_n) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x) + \cdots + c_n\Phi_n(x)$$

No sentido dos mínimos quadrados, o objetivo é encontrar o modelo $M(x; c_1, \ldots, c_n)$ tal que

$$\underset{c_1,\ldots,c_n}{\text{minimizar}} \;\; S(c_1, c_2, \ldots, c_n) \equiv \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - M(x_j; c_1, \ldots, c_n)\right)^2$$

$$\underset{c_1,\ldots,c_n}{\text{minimizar}} \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - (c_1\Phi_1(x_j) + c_2\Phi_2(x_j) + \cdots + c_n\Phi_n(x_j))\right)^2$$

Dedução do sistema das equações normais

Como pretendemos calcular c_1, c_2, ..., c_n tal que $S(c_1, c_2, \ldots, c_n)$ seja **mínima**, vamos usar o cálculo diferencial, ou seja, derivar $S(c_1, c_2, \ldots, c_n)$ em ordem aos coeficientes e igualar a zero:

$$\frac{\partial S}{\partial c_1} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_1\Phi_1(x_j) - c_2\Phi_2(x_j) - \cdots - c_n\Phi_n(x_j)\right) \Phi_1(x_j) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_2} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_1\Phi_1(x_j) - c_2\Phi_2(x_j) - \cdots - c_n\Phi_n(x_j)\right) \Phi_2(x_j) = 0$$

$$\ldots$$

$$\frac{\partial S}{\partial c_n} = -2 \sum_{j=1}^{m} \left(f_j - c_1\Phi_1(x_j) - c_2\Phi_2(x_j) - \cdots - c_n\Phi_n(x_j)\right) \Phi_n(x_j) = 0$$

Dedução do sistema das equações normais

ou seja:

$$\sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_1(x_j) - \sum_{j=1}^{m} c_1 \Phi_1(x_j)\Phi_1(x_j) - \cdots - \sum_{j=1}^{m} c_n \Phi_n(x_j)\Phi_1(x_j) = 0$$

$$\sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_2(x_j) - \sum_{j=1}^{m} c_1 \Phi_1(x_j)\Phi_2(x_j) - \cdots - \sum_{j=1}^{m} c_n \Phi_n(x_j)\Phi_2(x_j) = 0$$

$$\cdots$$

$$\sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_n(x_j) - \sum_{j=1}^{m} c_1 \Phi_1(x_j)\Phi_n(x_j) - \cdots - \sum_{j=1}^{m} c_n \Phi_n(x_j)\Phi_n(x_j) = 0$$

Dedução do sistema das equações normais

ou ainda

$$c_1 \sum_{j=1}^{m} \Phi_1^2(x_j) + c_2 \sum_{j=1}^{m} \Phi_2(x_j)\Phi_1(x_j) + \cdots + c_n \sum_{j=1}^{m} \Phi_n(x_j)\Phi_1(x_j) = \sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_1(x_j)$$

$$c_1 \sum_{j=1}^{m} \Phi_1(x_j)\Phi_2(x_j) + c_2 \sum_{j=1}^{m} \Phi_2^2(x_j) + \cdots + c_n \sum_{j=1}^{m} \Phi_n(x_j)\Phi_2(x_j) = \sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_2(x_j)$$

$$\cdots$$

$$c_1 \sum_{j=1}^{m} \Phi_1(x_j)\Phi_n(x_j) + c_2 \sum_{j=1}^{m} \Phi_2(x_j)\Phi_n(x_j) + \cdots + c_n \sum_{j=1}^{m} \Phi_n^2(x_j) = \sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_n(x_j)$$

Este sistema $(n \times n)$ é **linear** nos coeficientes a determinar - $c_1, c_2, \ldots, c_n$ - Na forma matricial $\Longrightarrow$

A matriz dos coeficientes do sistema das equações normais

$$A = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{m} \Phi_1^2(x_j) & \sum_{j=1}^{m} \Phi_2(x_j)\Phi_1(x_j) & \cdots & \sum_{j=1}^{m} \Phi_n(x_j)\Phi_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^{m} \Phi_1(x_j)\Phi_2(x_j) & \sum_{j=1}^{m} \Phi_2^2(x_j) & \cdots & \sum_{j=1}^{m} \Phi_n(x_j)\Phi_2(x_j) \\ \ldots & \ldots & \ddots & \ldots \\ \sum_{j=1}^{m} \Phi_1(x_j)\Phi_n(x_j) & \sum_{j=1}^{m} \Phi_2(x_j)\Phi_n(x_j) & \cdots & \sum_{j=1}^{m} \Phi_n^2(x_j) \end{pmatrix}$$

O sistema das equações normais

$$A \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_2(x_j) \\ \dots \\ \sum_{j=1}^{m} f_j \Phi_n(x_j) \end{pmatrix}$$

A resolução do sistema linear das equações normais fornece os coeficientes pretendidos $c_1, c_2, \dots, c_n$, e deve ser feita por um método direto e estável - **EGPP**.

Passos para calcular o modelo linear não polinomial

Para calcular o modelo na forma:

$$M(x; c_1, \ldots, c_n) = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x) + \cdots + c_n\Phi_n(x)$$

passo 1: Identificar:

- n (número de termos/número de coeficientes a determinar/dimensão do problema)

- $\Phi_1(x) = \cdots, \ \Phi_2(x) = \cdots, \ \cdots, \Phi_n(x) = \cdots$

Passos para calcular o modelo linear não polinomial

passo 2: Formar o sistema das equações normais - de n equações nas n incógnitas $c_1, c_2, \ldots, c_n$ - na forma matricial

$$\begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix}$$

passo 3: Resolver este sistema por EGPP.
passo 4: Formar o modelo pretendido

$$M(x; c_1, \ldots, c_n) = c_1\,\Phi_1(x) + c_2\,\Phi_2(x) + \cdots + c_n\,\Phi_n(x)$$

Exercício 1 (cont.)

A resistência de um certo fio (de uma certa substância), $f(x)$, varia com o diâmetro desse fio, x. A partir de uma experiência registaram-se os seguintes valores:

x_i	1.5	2.0	3.0	4.0
$f(x_i)$	4.9	3.3	2.0	1.5

Foram sugeridos os seguintes modelos para ajustar os valores de $f(x)$, no sentido dos mínimos quadrados:

- uma reta
- uma parábola
- o modelo linear: $M(x, c_1, c_2) = \dfrac{c_1}{x} + c_2 x$

(a) Calcule a reta.

(b) Calcule a parábola.

(c) Calcule o modelo M.

(d) Qual dos modelos escolheria? Justifique a sua escolha.

Resolução do Exercício 1 (cont.)

(c) Pretende determinar-se um modelo (modelo linear e não polinomial), no sentido dos mínimos quadrados, do tipo

$$M(x; c_1, c_2) = \frac{c_1}{x} + c_2 x$$

Passo 1: $n = 2$. Identificação das funções Φ_i:

$$\Phi_1(x) = \frac{1}{x}$$
$$\Phi_2(x) = x$$

Passo 2: Construir o sistema de equações normais

$$\left(\begin{array}{cc|c} \sum_{i=1}^{4} \Phi_1^2(x_j) & \sum_{i=1}^{4} \Phi_2(x_j)\Phi_1(x_j) & \sum_{i=1}^{4} f_j \Phi_1(x_j) \\ \sum_{j=1}^{4} \Phi_1(x_j)\Phi_2(x_j) & \sum_{j=1}^{4} \Phi_2^2(x_j) & \sum_{j=1}^{4} f_j \Phi_2(x_j) \end{array} \right)$$

Resolução do Exercício 1 (cont.)

Construir uma tabela auxiliar

	x_j	f_j	$\Phi_1(x_j)$	$\Phi_2(x_j)$	$\Phi_1^2(x_j)$	$\Phi_2^2(x_j)$	$\Phi_1(x_j)\Phi_2(x_j)$	$f_j\Phi_1(x_j)$	$f_j\Phi_2(x_j)$
	1.5	4.9	0.6667	1.5	0.4444	2.25	1.0	3.2667	7.35
	2.0	3.3	0.5	2.0	0.25	4	1.0	1.65	6.6
	3.0	2.0	0.3333	3.0	0.1111	9	1.0	0.6666	6
	4.0	1.5	0.25	4.0	0.0625	16	1.0	0.375	6
$\sum$					**0.8681**	**31.25**	**4**	**5.9583**	**25.95**

Passo 3: Resolver o sistema resultante por EGPP

$$\left(\begin{array}{ll|l} 0.868055 & 4 & 5.958334 \\ 4 & 31.25 & 25.95 \end{array}\right) \Longrightarrow \begin{cases} c_1 = 7.405391 \\ c_2 = -0.117490 \end{cases}$$

Passo 4: Construir o modelo

$$\boxed{M(x) = \frac{7.405391}{x} - 0.117490x}$$

Resolução do Exercício 1 (cont.)

(d) Para saber qual dos modelos calculado anteriormente aproxima melhor os dados no sentido dos mínimos quadrados, deve ser calculada a soma do quadrado dos resíduos, para cada modelo (linear polinomial ou linear não polinomial), e selecionar o que tiver menor valor, ou seja,

$$\text{minimizar} \sum_{j=1}^{m} (f_j - \text{MODELO}_j)^2$$

Em que MODELO é qualquer um dos calculados anteriormente:

$$p_1(x) = 2.925 - 1.291525(x - 2.625)$$

$$p_2(x) = 2.925 - 1.291525(x - 2.625) + 0.648241\left[(x - 2.891949)(x - 2.625) -\right.$$

$$M(x) = \frac{7.405391}{x} - 0.117490x$$

Resolução do Exercício 1 (cont.)

Construir uma tabela auxiliar

x_j	f_j	$p_1(x_j)$	$p_2(x_j)$	$M(x_j)$	$(f_j - p_1(x_j))^2$	$(f_j - p_2(x_j))^2$	$(f_j - M(x_j))$
1.5	4.9	4.377966	4.795477	4.760683	0.272519391	0.010924977	0.01940913
2	3.3	3.732203	3.49598	3.4677	0.18679977	0.038408121	0.0281232
3	2	2.440678	1.869347	2.115967	0.19419707	0.017070276	0.01344826
4	1.5	1.149153	1.539196	1.38135	0.123093939	0.001536325	0.01407782
$\sum$					**0.77661017**	**0.0679397**	**0.0750585**

O modelo que aproxima melhor os dados no sentido dos mínimos quadrados é $p_2(x)$, uma vez que é o que apresenta menor soma do quadrado dos resíduos.