ANÁLISE NUMÉRICA

VI. AJUSTE DE CURVAS

* MOTIVAÇÃO: i) OBTER UM VALOR APROXIMADO DE UMA FUNÇÃO NUM PONTO FORA DO INTERVALO EM QUE ELA É CONHECIDA (i.e., FAZER EXTRAPOLAÇÃO)

ii) FAZER INTERPOLAÇÃO OU EXTRAPOLAÇÃO DE VALORES CORROMPIDOS POR ERRO.

* APLICAÇÕES: i) AJUSTE DE DADOS TABULADOS

$\Rightarrow$ CASO DISCRETO

ii) APROXIMAÇÃO DE FUNÇÕES

$\Rightarrow$ CASO CONTÍNUO

- CASO DISCRETO: DADA UMA TABELA DE PONTOS

$$(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots (x_m, f(x_m))$$

COM $x_1, x_2, \ldots, x_m$ EM $[a,b]$

E n FUNÇÕES CONTÍNUAS EM $[a,b]$,

OBTER AS n CONSTANTES

$$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$$

TAIS QUE A FUNÇÃO

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots + \alpha_n g_n(x)$$

SE APROXIME AO MÁXIMO DE $f(x)$.

- CASO CONTÍNUO: DADA UMA FUNÇÃO $f(x)$ CONTÍNUA EM UM INTERVALO $[a,b]$, E n FUNÇÕES CONTÍNUAS EM $[a,b]$, OBTER AS n CONSTANTES

$$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$$

TAIS QUE A FUNÇÃO

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \dots + \alpha_n g_n(x)$$

SE APROXIME AO MÁXIMO DE $f(x)$.

- CRITÉRIOS PARA A APROXIMAÇÃO

⇒ DIVERSAS POSSIBILIDADES:

e.g., MINIMAX

MINIMIZAÇÃO DO DESVIO ABSOLUTO

CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

* O CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS É O MAIS CONVENIENTE EM TERMOS PRÁTICOS, E TAMBÉM APRESENTA VANTAGENS DO PONTO DE VISTA TEÓRICO (e.g., QUANDO SE CONSIDERA A DISTRIBUIÇÃO ESTATÍSTICA DOS ERROS)

* ABORDAGEM DOS MÍNIMOS QUADRADOS

1. CASO DISCRETO:

⇒ CONJUNTO DE m PONTOS TABULADOS

$$(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \ldots, (x_m, f(x_m))$$

⇒ CONJUNTO DE n FUNÇÕES

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

OBSERVAÇÕES: i) CONSIDERAREMOS SEMPRE QUE

$$m \geq n$$

ii) CONSIDERAREMOS QUE AS FUNÇÕES $g_i(x)$ TENHAM SIDO ADEQUADAMENTE ESCOLHIDAS

e.g., PELA ANÁLISE DO DIAGRAMA DE DISPERSÃO (GRÁFICO CARTESIANO DOS PONTOS TABULADOS)

⇒ OBJETIVO: ENCONTRAR O CONJUNTO DE COEFICIENTES

$$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$$

TAIS QUE A FUNÇÃO

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots + \alpha_n g_n(x)$$

SE APROXIME AO MÁXIMO DE $f(x)$, DE ACORDO COM O CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS.

- CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS:

$\Rightarrow$ O CONJUNTO DE COEFICIENTES $\{\alpha_i\}$ DEVE MINIMIZAR A MEDIDA

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n) = \sum_{k=1}^{m} \left[f(x_k) - \varphi(x_k) \right]^2 =$$

$$= \sum_{k=1}^{m} \left[f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \ldots - \alpha_n g_n(x_k) \right]^2$$

OBSERVAÇÃO: SE O MODELO AJUSTAR EXATAMENTE OS DADOS,

i.e., SE $f(x_k) = \varphi(x_k)$

E $F(\{\alpha_i\}) = 0$

TEMOS O EQUIVALENTE À INTERPOLAÇÃO, QUE É PORTANTO UM CASO PARTICULAR DENTRO DO AJUSTE DE CURVAS.

* MINIMIZAÇÃO DE $F(\{\alpha_i\})$:

$\Rightarrow$ ENCONTRAR O CONJUNTO $\{\bar{\alpha}_i\}$ TAL QUE

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \alpha_j} \right|_{\{\bar{\alpha}_i\}} = 0$$

PARA

$j = 1, 2, 3, \ldots, n$

INTRODUZINDO A EXPRESSÃO PARA $F(\{\alpha_i\})$, OBTEMOS

$$0 = 2\sum_{k=1}^{m}\left[f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \ldots - \alpha_n g_n(x_k)\right]\left[-g_j(x_k)\right]$$

PARA $j = 1, 2, 3, \ldots, n$

i.e.,

$$0 = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\, g_j(x_k) - \alpha_1 \sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\, g_j(x_k) - \ldots - \alpha_n \sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\, g_j(x_k)$$

PARA $j = 1, 2, 3, \ldots, n$

REESCREVENDO,

$$\alpha_1 \sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\, g_j(x_k) + \ldots + \alpha_n \sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\, g_j(x_k) = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\, g_j(x_k)$$

PARA $j = 1, 2, 3, \ldots, n$

DEFININDO
$$\begin{cases} a_{1j} = \sum_{k=1}^{m} g_1(x_k)\, g_j(x_k) \equiv a_{j1} \\ \quad\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\ a_{nj} = \sum_{k=1}^{m} g_n(x_k)\, g_j(x_k) \equiv a_{nj} \end{cases}$$

E

$$b_j = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\, g_j(x_k)$$

OBTEMOS

$$a_{j1}\alpha_1 + a_{j2}\alpha_2 + \ldots + a_{jn}\alpha_n = b_j$$

PARA $j = 1, 2, 3, \ldots, n$

OU SEJA, O SISTEMA LINEAR

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 + \dots + a_{1m}\alpha_m = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 + \dots + a_{2m}\alpha_m = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}\alpha_1 + a_{m2}\alpha_2 + \dots + a_{mm}\alpha_m = b_m \end{cases}$$

i.e., $A\underset{\sim}{\alpha} = \underset{\sim}{b}$

com $A = \{a_{ij}\}$, $a_{ij} = a_{ji} = \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k)\, g_j(x_k)$

$\underset{\sim}{b} = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$, $b_i = \sum_{k=1}^{m} f(x_k)\, g_i(x_k)$

$\underset{\sim}{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)^T$

OBSERVAÇÕES: i) AS EQUAÇÕES DESSE SISTEMA LINEAR SÃO CHAMADAS EQUAÇÕES NORMAIS.

ii) PODEMOS REESCREVER A E $\underset{\sim}{b}$ COMO

$$A = \{a_{ij}\} = \{\langle \underset{\sim}{g_i}, \underset{\sim}{g_j} \rangle\}$$

$$\underset{\sim}{b} = (b_i)^T = (\langle \underset{\sim}{f}, \underset{\sim}{g_i} \rangle)^T$$

PARA $\underset{\sim}{g_i} = (g_i(x_1), g_i(x_2), \dots, g_i(x_m))^T$

$\underset{\sim}{f} = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_m))^T$

ONDE $\langle \underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{y} \rangle = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i$

É O PRODUTO ESCALAR DE $\underset{\sim}{x}$ POR $\underset{\sim}{y}$.

iii) SE AS FUNÇÕES $\{g_i(x)\}$ FOREM TAIS QUE OS VETORES $\underset{\sim}{g}_1, \underset{\sim}{g}_2, \ldots, \underset{\sim}{g}_n$ SEJAM LINEARMENTE INDEPENDENTES, ENTÃO O SISTEMA LINEAR $A\underset{\sim}{\alpha} = \underset{\sim}{b}$ ADMITE SOLUÇÃO ÚNICA, E ESTA SOLUÇÃO É O PONTO EM QUE A FUNÇÃO $F(\{\alpha_i\})$ ATINGE O SEU MÍNIMO.

- AJUSTE DE CURVAS COM POLINÔMIOS ORTOGONAIS

* DADO UM CONJUNTO DE PONTOS $\{x_1, x_2, \ldots, x_m\}$ É FÁCIL CONSTRUIR UM CONJUNTO DE POLINÔMIOS DE GRAUS $0, 1, \ldots, n$ QUE SÃO ORTOGONAIS COM RELAÇÃO AO PRODUTO ESCALAR

$$\langle \underset{\sim}{g}_i, \underset{\sim}{g}_j \rangle \equiv \sum_{k=1}^{m} g_i(x_k)\, g_j(x_k)$$

i.e.,

PARA TAIS POLINÔMIOS:

$$\langle \underset{\sim}{g}_i, \underset{\sim}{g}_j \rangle \begin{cases} = 0, \text{ SE } i \neq j \\ \neq 0, \text{ SE } i = j \end{cases}$$

* NESTE CASO, A MATRIZ A DO SISTEMA NORMAL SERÁ UMA MATRIZ DIAGONAL, COM ENTRADAS

$$a_{ii} \neq 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

E A SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NORMAIS É FACILMENTE OBTIDA.

2. CASO CONTÍNUO:

⇒ FUNÇÃO $f(x)$ CONTÍNUA NO INTERVALO $[a,b]$

⇒ CONJUNTO DE n FUNÇÕES: $g_1(x), g_2(x), \ldots, g_n(x)$

OBJETIVO: ENCONTRAR O CONJUNTO DE COEFICIENTES

$$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$$

TAIS QUE A FUNÇÃO

$$\varphi(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \ldots + \alpha_n g_n(x)$$

SE APROXIME AO MÁXIMO DA FUNÇÃO $f(x)$, DE ACORDO COM O CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS, $F(\{\alpha_i\}) = $ MÍNIMO, ONDE

$$F(\{\alpha_i\}) = \int_a^b [f(x) - \varphi(x)]^2 dx$$

$$= \int_a^b \left[f(x) - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k g_k(x)\right]^2 dx$$

MINIMIZAÇÃO DE $F(\{\alpha_i\})$:

⇒ ENCONTRAR O CONJUNTO $\{\bar{\alpha}_i\}$ TAL QUE

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}\right|_{\{\bar{\alpha}_i\}} = 0$$

PARA

$j = 1, 2, 3, \ldots, n$

DIFERENCIANDO $F(\{\alpha_i\})$ COM RELAÇÃO A α_j, OBTEMOS

$$0 = 2\int_a^b \left[f(x) - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k g_k(x)\right] g_j(x)\,dx$$

PARA $j = 1, 2, 3, \dots, n$

REESCREVENDO,

$$\sum_{k=1}^{n} \alpha_k \int_a^b g_k(x)\, g_j(x)\,dx = \int_a^b f(x)\, g_j(x)\,dx$$

PARA $j = 1, 2, 3, \dots, n$

DEFININDO $a_{kj} = \int_a^b g_k(x) g_j(x)\,dx \quad k, j = 1, 2, 3, \dots, n$

$$b_j = \int_a^b f(x) g_j(x)\,dx \quad j = 1, 2, 3, \dots, n$$

OBTEMOS O SISTEMA LINEAR

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 + \dots + a_{1n}\alpha_n = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 + \dots + a_{2n}\alpha_n = b_2 \\ \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \qquad \vdots \\ a_{n1}\alpha_1 + a_{n2}\alpha_2 + \dots + a_{nn}\alpha_n = b_n \end{cases}$$

ISTO É,

$$A\underset{\sim}{\alpha} = \underset{\sim}{b}$$

COM $A = \{a_{ij}\}$, $a_{ij} = a_{ji} = \int_a^b g_i(x)\,g_j(x)\,dx$

$\underset{\sim}{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_m)^T$, $b_i = \int_a^b f(x)\,g_i(x)\,dx$

$\underset{\sim}{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m)^T$

OBSERVAÇÕES: i) ASSIM COMO NO CASO DISCRETO, PODEMOS ESCREVER

$$a_{ij} = \langle g_i, g_j \rangle \quad \text{E} \quad b_i = \langle f, g_i \rangle$$

USANDO A DEFINIÇÃO DO PRODUTO ESCALAR DE DUAS FUNÇÕES NO INTERVALO $[a, b]$:

$$\langle p, q \rangle = \int_a^b p(x)\,q(x)\,dx$$

ii) SE AS FUNÇÕES $\{g_i(x)\}$ FOREM LINEARMENTE INDEPENDENTES, O SISTEMA NORMAL ADMITE SOLUÇÃO ÚNICA, E ESTA SOLUÇÃO É O PONTO EM QUE A FUNÇÃO $F(\{\alpha_i\})$ ATINGE O SEU MÍNIMO.

iii) PARA FUNÇÕES ORTOGONAIS $\{g_i(x)\}$, O SISTEMA NORMAL TORNA-SE DIAGONAL, E A SUA SOLUÇÃO É FACILMENTE OBTIDA, POIS

$$\langle g_i, g_j \rangle = 0 \quad \text{SE} \quad i \neq j.$$

3. CASO NÃO LINEAR

* MOTIVAÇÃO: EM ALGUMAS SITUAÇÕES PODE SER NECESSÁRIO O EMPREGO DE FUNÇÕES NÃO LINEARES NOS PARÂMETROS α_i, PARA O AJUSTE DE CURVAS,

$$\text{e.g.,}\quad \varphi(x) = \alpha_1 e^{-\alpha_2 x}$$

OU

$$\varphi(x) = \alpha_1 x^{\alpha_2}$$

NESTES CASOS, PARA APLICAR O MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS, É PRECISO QUE SE EFETUE ANTES A LINEARIZAÇÃO DAS FUNÇÕES DE APROXIMAÇÃO, ATRAVÉS DE UMA TRANSFORMAÇÃO ADEQUADA,

$$\text{e.g.,}\quad \log \varphi(x) = \log(\alpha_1) - \alpha_2 x$$

OU

$$\log \varphi(x) = \log(\alpha_1) + \alpha_2 \log x$$

* OBSERVAÇÕES: i) UMA VEZ OBTIDOS OS PARÂMETROS PARA O PROBLEMA LINEARIZADO, EFETUA-SE A TRANSFORMAÇÃO INVERSA, PARA OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS ORIGINAIS.

ii) OS PARÂMETROS ASSIM OBTIDOS NÃO SÃO ÓTIMOS, NO CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS, PORQUE SE OTIMIZOU A SOLUÇÃO APENAS PARA O PROBLEMA LINEARIZADO.