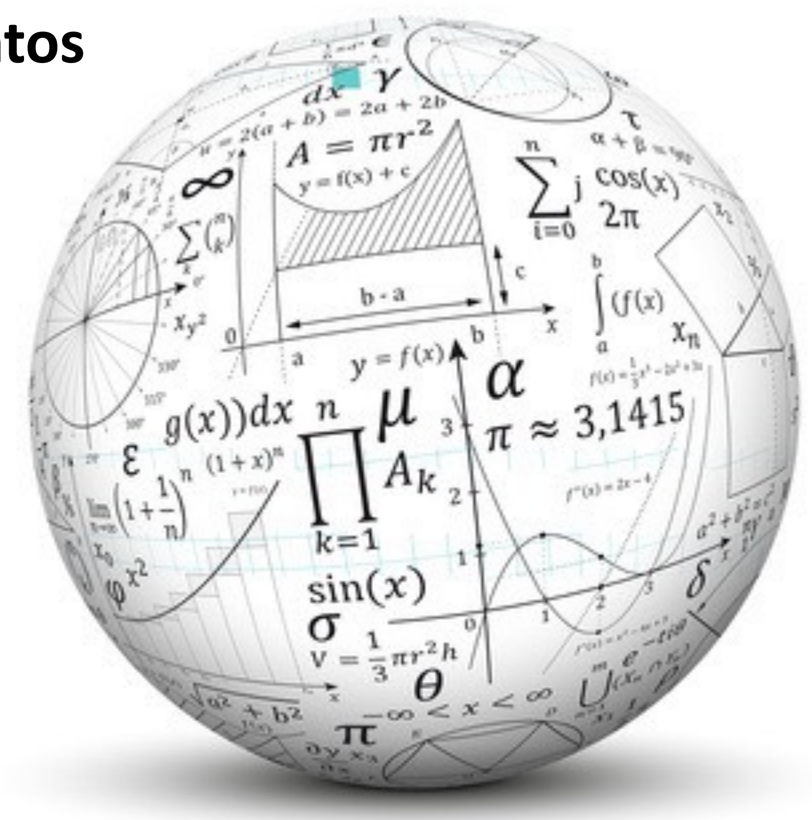
MAP 2110 – Modelagem e Matemática

1º Semestre - 2023

Prof. Dr. Luis Carlos de Castro Santos

lsantos@ime.usp.br



RECAPITULANDO

Data Fitting = Ajuste de Dados

Processo:

- Escolha uma função conhecida para aproximar a função, em geral desconhecida, que é representada pelos dados.
- Proponha algum <u>critério de ajuste</u> comparando o valor proposto pelo modelo e o dado observado.
- Utilize esse <u>critério</u> para determinar os coeficientes da função conhecida (modelo).

Para uma tabela de *m* pontos:

$$
\begin{gathered}
(x_1, y_1) \\
(x_2, y_2) \\
\vdots \\
(x_m, y_m)
\end{gathered}
$$

Deseja-se ajustar aos dados um modelo. Por exemplo, vamos tomar como referência a forma linear: $f(x) = ax + b$

Para um par de valores a e b seria possível prever qual seria a aproximação do ajuste ao dado de entrada: $f(x_i) = ax_i + b$

x	y	f(x)
x_1	y_1	$f(x_1)$
x_2	y_2	$f(x_2)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_m	y_m	$f(x_m)$

Para cada ponto pode-se definir um resíduo:

$$R_i = y_i - f(x_i)$$

$$i = 1, \cdots, m$$

O resíduo pode ser visto como um vetor, onde cada componente representa o erro em relação a cada ponto da tabela de dados.

$$\vec{R} = (R_1, R_2, \dots, R_m)$$

Uma norma consiste numa função que associa um espaço vetorial a um escalar.

Dentre as normas existentes, a norma Euclidiana tem a forma

$$\|R\|_2 = \left[\sum_{i=1}^{m} \{R_i\}^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

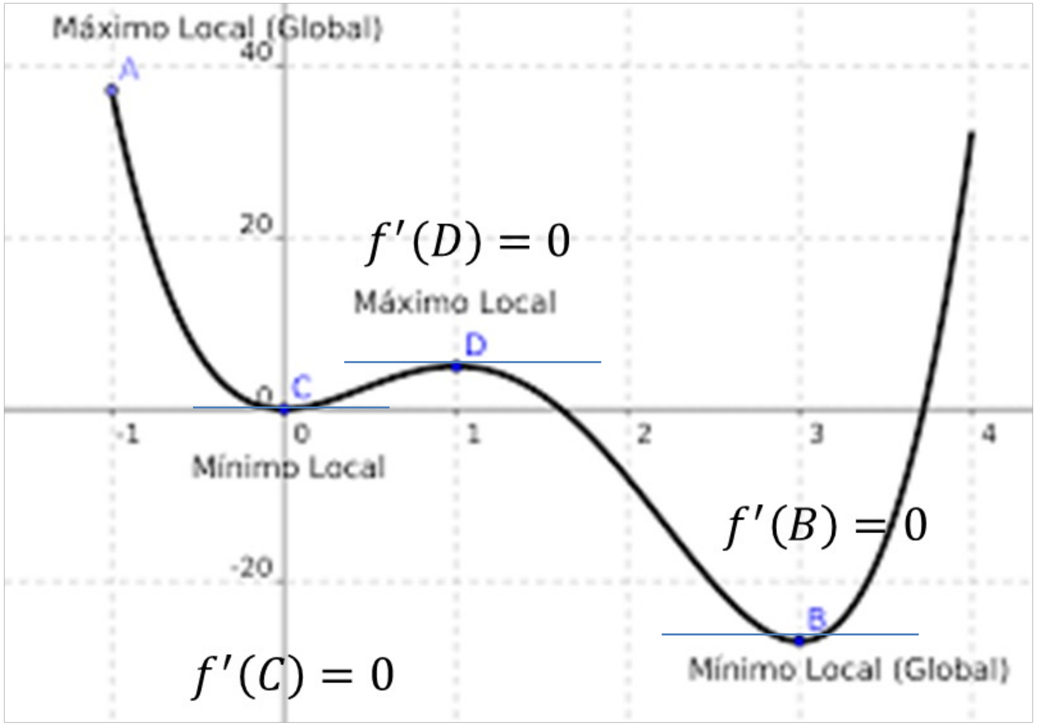
associada diretamente ao comprimento de vetores no $\mathbb{R}_n$

Se a norma dos resíduos for nula (comprimento igual a zero) isso significa que cada componente é nula, ou seja o modelo passa por cada um dos pontos para a escolha de a e b.

Como o número de pontos é em geral maior que 2, a menos que os pontos estejam alinhados, não é possível que a norma seja nula. Portanto a melhor escolha viável é <u>minimizar</u> a norma.

Pontos Extremos de Uma Função

Nos pontos extremos de uma função as derivadas (que equivalem a inclinação para funções de uma variável) tem valor nulo.



Essa relação é usada para a determinação dos pontos extremos (máximos ou mínimos)

A minimização da norma, ou do quadrado da norma, tem o mesmo efeito prático para a determinação dos coeficientes, com a facilidade do cálculo da derivada sem a necessidade de tratar com a raiz.

$$S = \|R\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \{y_i - (ax_i + b)\ \}^2$$

Perceba que a função que representa o quadrado da norma dos resíduos, S, é dependente de a e b. Logo é uma função de duas variáveis.

Para o cálculo do mínimo é necessário usar o conceito de derivadas parciais:

A derivada parcial de uma função de *n* argumentos $(x_1, \ldots, x_n)$ pode ser representada através de um limite como sendo

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, \ldots, x_n) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_1, \ldots, x_i + h, \ldots, x_n) - f(x_1, \ldots, x_n)}{h}.$$

Cada derivada parcial de uma função de várias variáveis é equivalente a derivada de uma função de apenas uma das variáveis tomando as remanescentes como constantes.

De acordo com o critério para os pontos extremos:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = 0$$

Derivadas parciais

Onde: $S(a,b) = \sum_{i=1}^{m} \{y_i - (ax_i + b)\}^2$

Começando com a derivada parcial em relação a a :

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\left[\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (ax_i + b)\}^2\right] =$$

$$\sum_{i=1}^{m} 2\{y_i - (ax_i + b)\} \quad (-x_i) = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (ax_i + b)\} \quad (x_i) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{m} \left\{y_i x_i - a x_i^2 - b x_i\right\} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^{m} \left\{y_i x_i - a x_i^2 - b x_i\right\} = 0 \qquad \text{(i)}$$

Analisando agora a derivada parcial em relação a b:

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b}\left[\sum_{i=1}^{m}\{y_i - (ax_i + b)\}^2\right] =$$

$$\sum_{i=1}^{m} 2\{y_i - (ax_i + b)\}\ \ (-1) = -2\sum_{i=1}^{m}\{y_i - (ax_i + b)\} \quad = 0$$

logo

$$\sum_{i=1}^{m}\{y_i - (ax_i + b)\} \quad = 0 \qquad\qquad \text{(ii)}$$

Reunindo as equações, distribuindo os somatórios e colocando de a e b em evidência:

$$a\sum_{i=1}^{m} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i$$

$$a\sum_{i=1}^{m} x_i \quad + bm = \sum_{i=1}^{m} y_i$$

A solução desse sistema, equivale a resolver o problema de minimização do resíduo e consequentemente encontrar os coeficientes da reta que se ajusta aos pontos dados.

O sistema pode ser resolvido por qualquer processo. Como é pequeno pode ser feito por substituição, entrando com os valores dos somatórios nas respectivas posições da matriz, e do lado direito.

Uma outra alternativa é encontrar a solução analítica usando a Regar de Cramer e dispor de uma fórmula fechada para os coeficientes.

$$a = \frac{m\sum_{i=1}^{m} y_i x_i - \sum_{i=1}^{m} y_i \quad \sum_{i=1}^{m} x_i}{m\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{m} x_i^2 \sum_{i=1}^{m} y_i \quad - \sum_{i=1}^{m} y_i x_i \sum_{i=1}^{m} x_i}{m\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

Para facilitar o cálculo manual foi sugerida uma organização de tabela e cálculos de somatórios.

x	y	yx	x^2	f	$y-f$	$\{y-f\}^2$

$$\sum_{i=1}^{m} x_i \quad \sum_{i=1}^{m} y_i \quad \sum_{i=1}^{m} y_i x_i \quad \sum_{i=1}^{m} x_i^2$$

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

$$\left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2$$

$$f(x) = ax + b$$

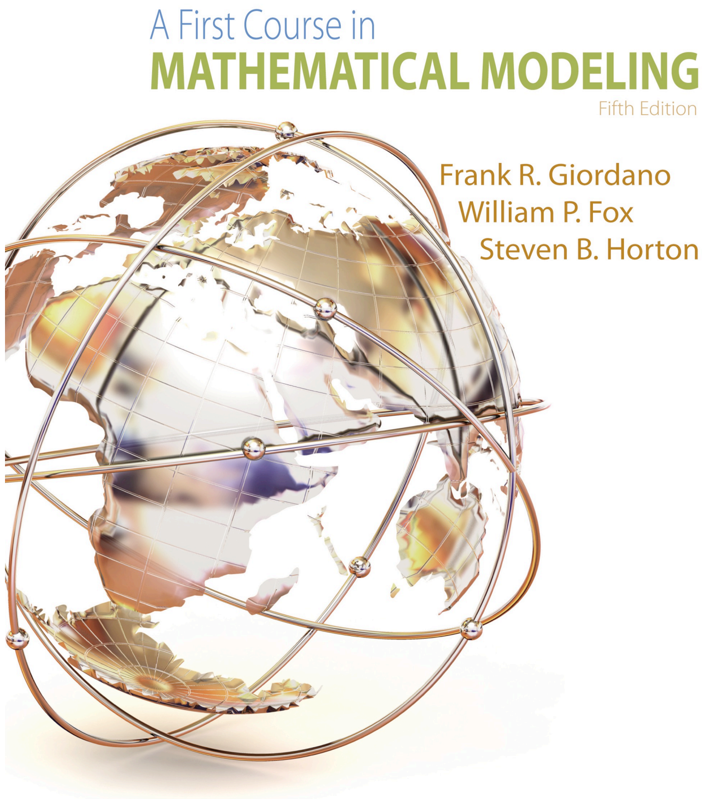
$$den = m\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2$$

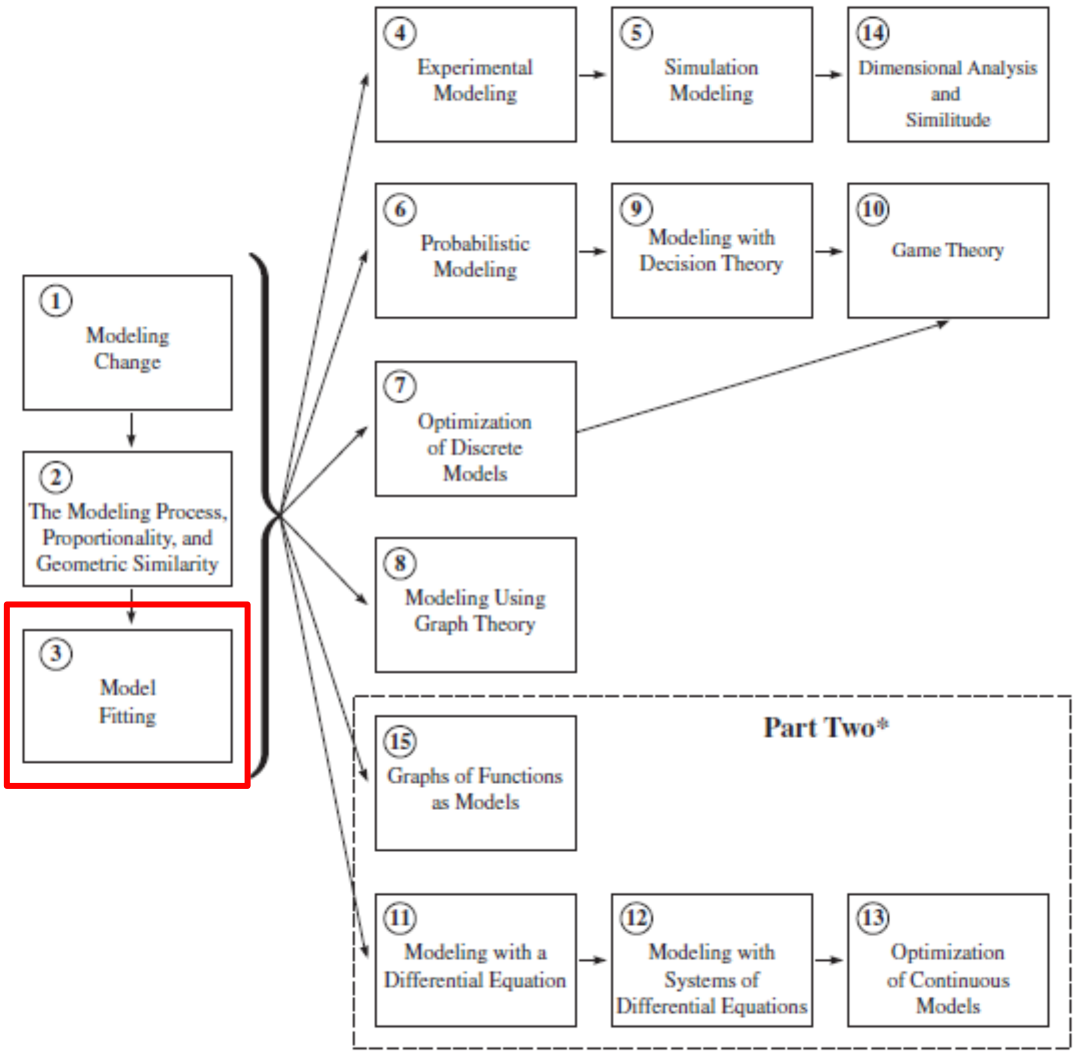
$$num_a = m\sum_{i=1}^{m} y_i x_i - \sum_{i=1}^{m} y_i \sum_{i=1}^{m} x_i$$

$$a = \frac{num_a}{den}$$

$$num_b = \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \sum_{i=1}^{m} y_i - \sum_{i=1}^{m} y_i x_i \sum_{i=1}^{m} x_i$$

$$b = \frac{num_b}{den}$$





*Part Two requires single-variable calculus as a corequisite.

Na aula anterior foi apresentado o Método dos Mínimos Quadrados (Linear):

1. Escolhe-se um modelo com uma relação linear de coeficientes:
$$f(x) = f(x, a, b, c, \cdots)$$

2. Escreve-se a equação da norma do quadrado dos resíduos:
$$S = \|R\|_2^2$$

3. Deduz-se as equações através das respectivas derivadas parciais da equação da norma ao quadrado dos resíduos em relação aos coeficientes do modelo
$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0, \frac{\partial S}{\partial b} = 0, \frac{\partial S}{\partial c} = 0, \cdots$$

4. Resolve-se o sistema de equações

(Ajustando uma Curva de Potência)

Considerando agora uma curva com o expoente definido (potência)

$$f(x) = ax^n$$

n é especificado.

Nesse caso a norma do resíduo ao quadrado é:

Resíduo: $$S = \|R\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \{y_i - ax_i^n\}^2$$

Calculando a derivada em relação a a (que não é parcial, pois só temos um parâmetro) :

$$\frac{dS}{da} = \frac{d}{da}\left[\sum_{i=1}^{m} \{y_i - ax_i^n\}^2\right] = \sum_{i=1}^{m} 2\{y_i - ax_i^n\} \quad (-x_i^n) = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i - ax_i^n\} \quad (x_i^n) = 0$$

$$\frac{dS}{da} = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i x_i^n - ax_i^{2n}\} = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^{m} \{y_i x_i^n - ax_i^{2n}\} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m}\{y_i x_i^n - a x_i^{2n}\} = 0$$

Segregando os somatórios: $$\sum_{i=1}^{m} y_i x_i^n - \sum_{i=1}^{m} a x_i^{2n} = 0$$

Colocando a em evidência: $$\sum_{i=1}^{m} y_i x_i^n - a\sum_{i=1}^{m} x_i^{2n} = 0$$

Como temos apenas uma equação o coeficiente pode ser facilmente obtido:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{m} y_i x_i^n}{\sum_{i=1}^{m} x_i^{2n}}$$

Exemplo:

$n = 2$

Table 3.3 Data collected to fit $y = Ax^2$

x	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
y	0.7	3.4	7.2	12.4	20.1

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{m} y_i x_i^n}{\sum_{i=1}^{m} x_i^{2n}}$$

x	y	x^n	x^{2n}	$y\ x^n$	f	$y - f$	$\{y - f\}^2$

$$\sum_{i=1}^{m} x_i^{2n} \quad \sum_{i=1}^{m} y_i x_i^n$$

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


12
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11

In this case, the least-squares estimate a is given by

$$a = \frac{\sum x_i^2 y_i}{\sum x_i^4}$$

We compute $\sum x_i^4 = 61.1875$, $\sum x_i^2 y_i = 195.0$ to yield $a = 3.1869$ (to four decimal places). This computation gives the least-squares approximate model

$$y = 3.1869x^2$$

When $x = 2.25$, the predicted value for y is 16.1337.

Ajustes de Mínimos Quadrados Transformados:

Se a função escolhida para o ajuste for uma função não-linear, processo irá resultar num sistema não-linear.

Por exemplo, considerando uma função da forma: $f(x) = ae^{bx}$

O resíduo teria a forma $S = \|R\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \{y_i - ae^{bx_i}\}^2$

Calculando as derivadas parciais:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\left[\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (ae^{bx_i})\}^2\right] = \sum_{i=1}^{m} 2\{y_i - (ae^{bx_i})\} \left(-e^{bx_i}\right) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b}\left[\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (ae^{bx_i})\}^2\right] = \sum_{i=1}^{m} 2\{y_i - (ae^{bx_i})\} \left(-ax_ie^{bx_i}\right) = 0$$

Que resulta num sistema não-linear

Uma possibilidade é promover uma transformação de variáveis na função proposta de forma a recair numa função linear que possa ser facilmente aproximada usando o método dos mínimos quadrados.

Depois de resolvido o problema, aplica-se a transformação reversa, retornando as variáveis originais.

Usando letras diferentes por comodidade, e para evitar confusão, na forma:

$$y = \beta x^{\alpha}$$

Aplicando o logaritmo ...

Relembrando as propriedades do logaritmos

$$\text{Logaritmo: } \log_b a = x \Leftrightarrow b^x = a$$

$$\text{Logaritmo do produto: } \log_b(a \cdot c) = \log_b a + \log_b c$$

$$\text{Logaritmo do quociente: } \log_b \left(\frac{a}{c}\right) = \log_b a - \log_b c$$

$$\text{Logaritmo da potência: } \log_b(a^c) = c \cdot \log_b a$$

$$\text{Logaritmando igual a 1: } \log_b 1 = 0$$

$$\text{Logaritmando e bases iguais: } \log_b b = 1$$

$$\text{Mudança de base: } \log_b a = \frac{\log_c a}{\log_c b}$$

Usando as propriedades do logaritmo:

$$\ln(y) = \ln(\beta x^{\alpha})$$

$$\ln(y) = \ln(\beta) + \ln(x^{\alpha})$$

$$\ln(y) = \ln(\beta) + \alpha \ \ln(x)$$

Organizando: $g(x) = \ln(y) = \alpha \ \ln(x) + \ln(\beta)$

Identificando os termos equivalentes de um ajuste linear: $f(\hat{x}) = \hat{y} = \ a\hat{x} + b$

Pode-se usar a organização do problema linear e as expressões para as variáveis transformadas, calcular os coeficientes e depois aplicar as transformações inversas para extrair os coeficientes da função original.

$$g(x) = \ln(y) = \alpha \ \ln(x) + \ln(\beta)$$

$$f(\hat{x}) = \hat{y} = \ a\hat{x} + b$$

A tabela deve ser alterada para que a variável independente x e dependente y sejam substituídas por $\ln(x)$ e $\ln(y)$.

$$\ln(x) \rightarrow \hat{x}$$
$$\ln(y) \rightarrow \hat{y}$$

$$\Rightarrow \quad f(\hat{x}) = \hat{y} = \ a\hat{x} + b$$

Calculados os coeficientes:

$$\alpha \rightarrow a$$
$$\ln(\beta) \rightarrow b$$

$$\Rightarrow \quad \alpha = a$$
$$\beta = e^b$$

Retomando o problema anterior com uma função mais geral:

$$f(x) = \beta x^{\alpha}$$

Com os mesmos dados:

x	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
y	0.7	3.4	7.2	12.4	20.1

A tabela deve ser substituída pela equivalente em variáveis transformadas.


12
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11

O exemplo da referência apresenta os resultados:

For the data displayed in Table 3.3 we get $\sum \ln x_i = 1.3217558$, $\sum \ln y_i = 8.359597801$, $\sum (\ln x_i)^2 = 1.9648967$, $\sum (\ln x_i)(\ln y_i) = 5.542315175$, yielding $n = 2.062809314$ and $\ln \alpha = 1.126613508$, or $\alpha = 3.085190815$. Thus, our least-squares best fit of Equation (3.8) is (rounded to four decimal places)

$$y = 3.0852x^{2.0628}$$

This model predicts $y = 16.4348$ when $x = 2.25$. Note, however, that this model fails to be a quadratic like the one we fit previously.

Usando a potência fixada, o modelo, como vimos anteriormente, resulta em:

$$y = 3.1869x^2$$

3.3 PROBLEMS

4. Make an appropriate transformation to fit the model $P = ae^{bt}$ using Equation (3.4). Estimate a and b.

t	7	14	21	28	35	42
P	8	41	133	250	280	297

Calcule a soma do quadrado dos resíduos.

3. Derive the equations that minimize the sum of the squared deviations between a set of data points and the quadratic model $y = c_1x^2 + c_2x + c_3$. Use the equations to find estimates of c_1, c_2, and c_3 for the following set of data.

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
y	0.06	0.12	0.36	0.65	0.95

a) Aplique a transformação de variáveis
b) Faça as derivadas parciais
c) Escreva as equação normais
d) Resolva o sistema encontre os coeficientes
e) Utilize os dados e calcule a soma do quadrado dos resíduos

Fim Aula 12