

CAPÍTULO III

Aproximação de funções pelo método dos Mínimos Quadrados**1. Alguns conceitos fundamentais de Álgebra Linear**

Relembramos nesta secção alguns conceitos importantes da álgebra Linear que utilizaremos no contexto do método dos mínimos quadrados.

- Espaço gerado por uma matriz.

Considerando a matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, o subespaço gerado pelos vectores coluna desta matriz é representado por $\text{span}(A)$ e corresponde ao conjunto de todos os vectores que são combinação linear de dos vectores coluna de A . Simbolicamente:

$$\text{span}(A) \equiv \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax \text{ com } x \in \mathbb{R}^n\}.$$

- Produto escalar.

Considerando dois vectores (matrizes coluna) v_1 e $v_2 \in \mathbb{R}^m$, o produto escalar de destes dois vectores é um escalar que resulta de

$$v_2^T v_1 = \|v_1\|_2 \|v_2\|_2 \cos(\theta),$$

Sendo θ ângulo entre v_1 e v_2 .

- Vectores ortogonais.

Em consequência da definição anterior dois vectores não nulos v_1 e $v_2 \in \mathbb{R}^m$ são ortogonais (perpendiculares ou normais) se o respectivo produto escalar for nulo, isto é se $v_1^T v_2 = v_2^T v_1 = 0$.

Consequentemente, se um vector u for ortogonal a um conjunto de vectores $v_1, v_2, \dots, v_n$ que constituem as colunas de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ então $u^T A = 0$, pois

$$u^T A = [u^T v_1 \ u^T v_2 \ \dots \ u^T v_n] = [0 \ 0 \ \dots \ 0].$$

Por outro lado também se verifica que $A^T u = 0$, pois

$$A^T u = \begin{bmatrix} v_1^T u \\ v_2^T u \\ \vdots \\ v_n^T u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

2. Formulação do problema.

Dada uma função (sob a forma de tabela com m pontos)

$$y_i = f(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Queremos encontrar um polinómio de grau $n-1$

$$P(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \dots + c_{n-1}x^{n-1}$$

Para um determinado $n < m$. Este polinómio ajusta os dados no sentido dos mínimos quadrados se minimizar a soma dos quadrados dos desvios em relação aos dados, isto é,

$$S = \sum_{i=1}^n (y_i - P(x_i))^2.$$

Minimizar S é o mesmo minimizar o quadrado da norma do resíduo do sistema

$$\begin{cases} P(x_1) = y_1 \\ P(x_2) = y_2 \\ \vdots \\ P(x_m) = y_m \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} c_0 + c_1x_1 + c_2x_1^2 + \dots + c_{n-1}x_1^{n-1} = y_1 \\ c_0 + c_1x_2 + c_2x_2^2 + \dots + c_{n-1}x_2^{n-1} = y_2 \\ \vdots \\ c_0 + c_1x_m + c_2x_m^2 + \dots + c_{n-1}x_m^{n-1} = y_m \end{cases},$$

Que na sua forma matricial é representado por

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \dots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \dots & x_m^{n-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \Leftrightarrow Ac = y.$$

O vector resíduo deste sistema é $r = y - Ac$ e a sua norma dois é

$$\|r\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m (y_i - P(x_i))^2},$$

Pelo que o quadrado desta norma é $\|r\|_2^2 = S$.

O problema dos mínimos quadrados reduz-se assim à resolução do sistema $Ac = y$. Contudo o problema não é tão simples quanto parece pois como temos $m > n$ (mais equações do que incógnitas) o sistema é sobredeterminado. Na maior parte dos casos estes sistemas não admitem solução pois y não é combinação linear dos vectores coluna da matriz A ($y \notin \text{span}(A)$). Para que $y \in \text{span}(A)$ a matriz A teria de possuir m vectores coluna linearmente independentes.

3. Método da equação normal

O facto do sistema não admitir solução exacta não é grave no contexto dos mínimos quadrados pois nós apenas estamos interessados em resolver aproximadamente um sistema $Ax = b$ de maneira a encontrar o vector x que minimiza o resíduo $r = b - Ax$.

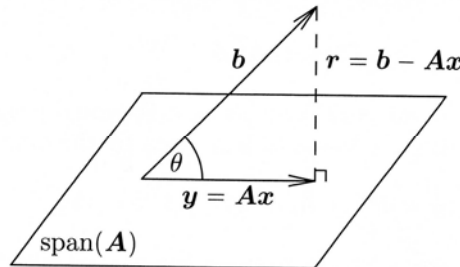


Figura 1 – Descrição geométrica do problema dos mínimos quadrados. O paralelogramo representa o subespaço $\text{span}(A)$ (gerado pelos vectores coluna de A), ao qual o vector b geralmente não pertence.

Dados uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (com $m > n$) e um vector $b \in \mathbb{R}^m$, procuramos um vector $x \in \mathbb{R}^n$ tal que a norma de (cumprimento de) $r = b - Ax$ seja mínima. Tal como se pode visualizar na **figura 1** o comprimento do vector resíduo r é mínimo quando $r \perp \text{span}(A)$, isto é

$$\begin{aligned} A^T r &= 0 \\ \Leftrightarrow A^T (b - Ax) &= 0 \\ \Leftrightarrow A^T Ax &= A^T b \end{aligned}$$

Esta última equação é designada por equação normal do sistema. O sistema resultante da equação normal é um sistema possível e determinado. A solução deste sistema é a solução aproximada do sistema original ($Ax = b$) que minimiza o resíduo $r = b - Ax$.

Aplicando agora este resultado ao problema original. Dados os pontos (x_i, y_i) para $i = 1, 2, \dots, m$, para calcular o vector, c dos coeficientes do polinómio de ordem $n-1$, que melhor aproxima os dados no sentido dos mínimos quadrados temos de resolver o sistema

$$A^T A c = A^T y.$$

Esta é o método tradicionalmente usado para resolver o problema dos mínimos quadrados. Tem no entanto a desvantagem de implicar a resolução de um sistema mal condicionado, pois à medida que o grau do polinómio aumenta as colunas de A aproximam-se cada vez mais da dependência linear. E o mau condicionamento de $A^T A$ é proporcional ao quadrado do condicionamento de A . Pelo que a resolução do sistema normal deverá ser efectuado com todos os cuidados de maneira a minimizar a introdução de erros.

Exemplo:

Considerando os dados da seguinte tabela

x	0	1	2	3	4	5
y	1.0	2.7	5.8	6.6	7.5	9.9

determine o polinómio de grau 4 que melhor ajusta os dados no sentido dos mínimos quadrados.

O polinómio de grau quatro terá a seguinte estrutura

$$P_4(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4.$$

A determinação dos coeficientes deste polinómio implica a resolução do sistema

$$A^T A c = A^T y$$

em que a matriz A é igual a

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 & x_1^4 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 & x_2^4 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 & x_3^4 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 & x_4^4 \\ 1 & x_5 & x_5^2 & x_5^3 & x_5^4 \\ 1 & x_6 & x_6^2 & x_6^3 & x_6^4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 & 16 \\ 1 & 3 & 9 & 27 & 81 \\ 1 & 4 & 16 & 64 & 256 \\ 1 & 5 & 25 & 125 & 625 \end{bmatrix}.$$

A resolução do sistema

$$A^T A c = A^T y \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 5 & 15 & 55 & 225 & 979 \\ 15 & 55 & 225 & 979 & 4425 \\ 55 & 225 & 979 & 4425 & 20515 \\ 225 & 979 & 4425 & 20515 & 96825 \\ 979 & 4425 & 20515 & 96825 & 462979 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 33.50 \\ 113.60 \\ 452.80 \\ 1944.80 \\ 8737.60 \end{bmatrix}$$

conduz a

$$c = \begin{bmatrix} 0.97183 \\ 0.11997 \\ 2.63403 \\ -0.99120 \\ 0.10625 \end{bmatrix}.$$

O polinómio de grau quatro que melhor aproxima os dados no sentido dos mínimos quadrados é

$$P_4(x) = 0.97183 + 0.11997x + 2.63403x^2 - 0.99120x^3 + 0.10625x^4$$

Hoje em dia, para problemas de grande dimensão, usam-se métodos alternativos muito mais eficientes do ponto de vista computacional. Para mais informações sobre estes métodos recomenda-se a consulta da bibliografia do capítulo.

4. Problemas Propostos

1. Considere a seguinte função $y = t(x)$, dada sob a forma da seguinte tabela:

x_i	-8	-4	-2	-1	0	1	2	4	6	9	11
$y_i = t(x_i)$	-785	-53	13	13	7	7	25	163	517	1663	2997

- a) Determine o polinómio de grau 3 que, no sentido do método dos mínimos quadrados que melhor aproxima a tabela dada. Estime: $t(-2)$, $t(5)$, $t(-10)$ e $t(12)$.
- b) Determine a combinação linear das funções $\{1, 2x-1, (x+2)^2, (x-1)^3\}$ que, no sentido do método dos mínimos quadrados, melhor aproxima a tabela dada. Estime: $t(-2)$, $t(5)$, $t(-10)$ e $t(12)$.
2. Determine a combinação linear do seguinte conjunto de funções: $\{(2x+1)^n\}_{n=1,2,3}$ que, no sentido do método dos mínimos quadrados, melhor aproxima a seguinte tabela:

x	0	1	2	4	6	10	15	20
$y = f(x)$	1.75	8.25	28.75	159.75	490.75	2136.75	7029.75	16471.75

3. Considere a seguinte função (tabela):

x_i	-1	0	1	2	3
$f_i = f(x_i)$	-15	-10	-5	0	5

- a) Qual o polinómio do 1º grau que, no sentido do método dos mínimos quadrados, melhor representa a função dada.
- b) Qual a combinação linear dos polinómios $\{2x-1, 5x+4\}$ que, no sentido do método dos mínimos quadrados, melhor representa a função dada.

4. Considere a seguinte função:
- | | | | | | | |
|----------------|----|----|----|----|---|----|
| x_i | -2 | -1 | 0 | 2 | 3 | 4 |
| $f_i = f(x_i)$ | 11 | 1 | -5 | -5 | 1 | 11 |

- a) Qual o grau do polinómio que melhor se adapta à função dada? Defina o polinómio de regressão.
- b) Qual a combinação linear dos polinómios $\{x^2 - x - 1, (x+1)^2, x+1\}$ que, no sentido do método dos mínimos quadrados, melhor representa a função dada.

5. Determine a combinação linear das funções $\{1, x, 1+x, 1-x\}$ que, no sentido do método dos mínimos quadrados, melhor representa o conjunto de pontos: $(0, 0.2)$, $(1, 2.5)$, $(2, 5.0)$, $(4, 10.2)$, $(5, 12.4)$.

5. Bibliografia

- Michael T. Heath. Scientific Computing an Introductory Survey. McGraw-Hill, New York, 2002 (<http://www.cse.uiuc.edu/heath/scicomp/>).

- Lloyd N. Trefethen and David Bau, III. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, Philadelphia, 1997.