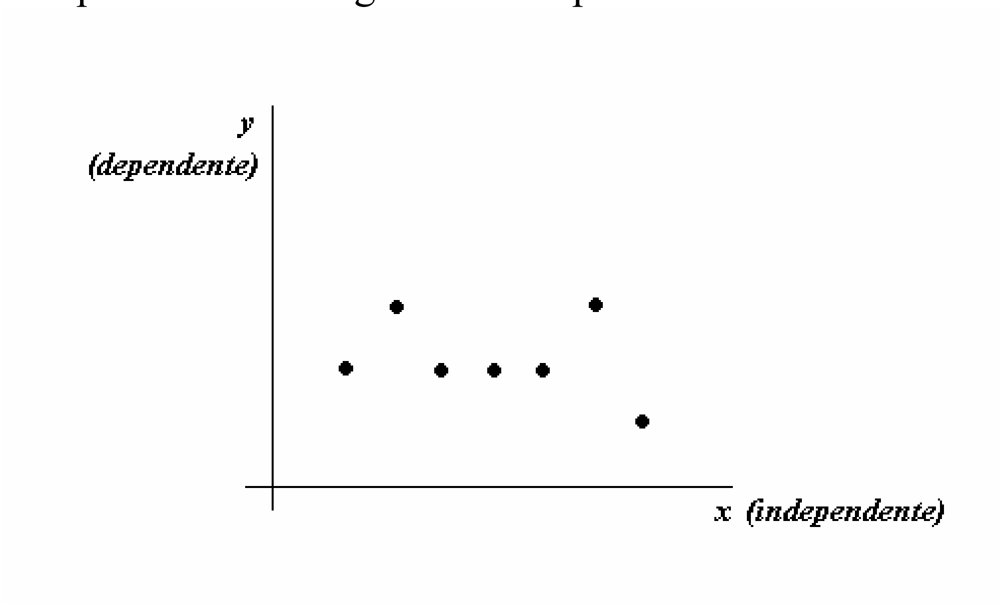
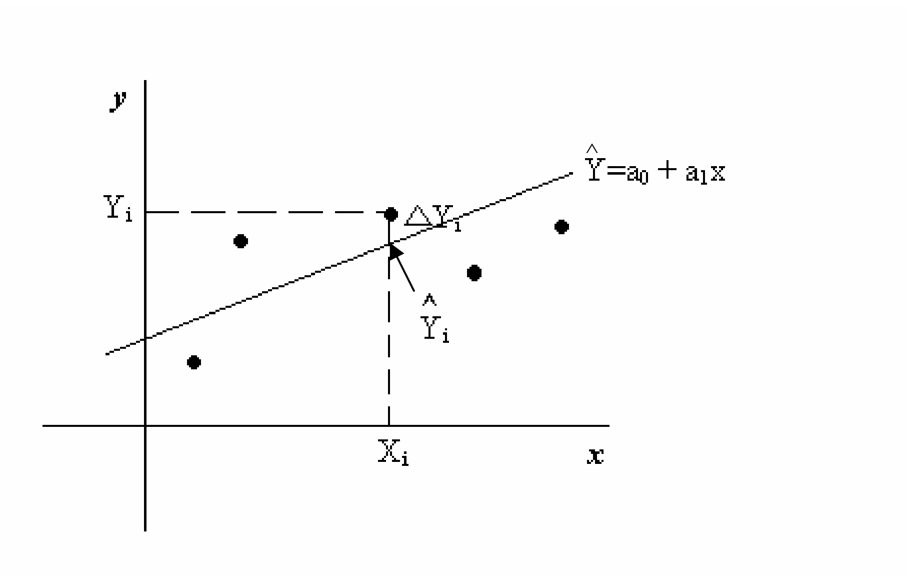
AJUSTES DE CURVAS

Introdução

Experimento – Diagrama de dispersão



Ajuste Linear



$\Delta y_i = y_i - \hat{y}_i \quad \rightarrow \quad$ resíduos

Considerando n pontos, define-se:

$$D = \sum_{i=1}^{n} (\Delta y_i)^2$$

como uma medida do desvio total entre as ordenadas dos pontos dados e dos pontos definidos pela reta ajustada. É claro que o valor de D dependerá da reta escolhida, podendo esta escolha recair sobre a reta que forma mínimo o desvio D. Assim:

$$D = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)^2$$

onde a_o e a_1 são parâmetros a determinar.

Como o valor de D deve ser mínimo, tem-se:

$$\frac{\partial D}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0^* - a_1^* x_i\right) = 0$$

$$\frac{\partial D}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0^* - a_1^* x_i\right) x_i = 0$$

ou ainda:

$$\sum_{i=1}^{n} y_i - n\,a_0^* - a_1^* \sum_{i=1}^{n} x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - a_0^* \sum_{i=1}^{n} x_i - a_1^* \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0$$

Definindo:

$$S_y = \sum_{i=1}^{n} y_i \;; \qquad S_x = \sum_{i=1}^{n} x_i \;; \qquad S_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \;; \qquad S_{x^2} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

tem-se:

$$\begin{cases} n\,a_0^* + S_x a_1^* = S_y \\ S_x a_0^* + S_{x^2} a_1^* = S_{xy} \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} n & S_x \\ S_x & S_{x^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0^* \\ a_1^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_y \\ S_{xy} \end{bmatrix}$$

que resulta em:

$$a_1^* = \frac{n\,S_{xy} - S_x S_y}{n\,S_{x^2} - S_x^2} \; ; \qquad a_0^* = \frac{S_y - a_1 S_x}{n}$$

O método acima é conhecido como método dos mínimos quadrados, uma vez que consiste da minimização de uma função quadrática.

A reta definida pelos coeficientes a_1^* e a_0^* é conhecida como reta ótima ou, simplesmente, a melhor reta.

Ex.: Ajustar os pontos (1,2) , (2,3) , (4,5) a uma reta.

Sol.: $S_x = 1 + 2 + 4 = 7$; $S_y = 2 + 3 + 5 = 10$

$S_{x^2} = 1 + 4 + 16 = 21$; $S_{xy} = 1 \cdot 2 + 2 \cdot 3 + 4 \cdot 5 = 28$

$$a_1^* = \frac{3 \cdot 28 - 7 \cdot 10}{3 \cdot 21 - 7^2} = 1 \quad ; \quad a_0^* = \frac{10 - 1 \cdot 7}{3} = 1$$

i.e.: $y = x + 1$

obs.: Notar que, nesse caso particular, os três pontos pertencem à reta ótima.

Ajuste Linear Múltiplo

Suponha que, em um experimento, os valores assumidos pela variável dependente y (digamos y_1 , y_2 , $\cdots$, y_n) são definidos por diversas combinações dos valores assumidos pelas variáveis independentes (de controle) x_1 , x_2 , $\cdots$, x_p .

Formalmente, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_1\left(X_{11}, X_{21}, \cdots, X_{p1}\right) \\ y_2 &= y_2\left(X_{12}, X_{22}, \cdots, X_{p2}\right) \\ \vdots \quad & \quad \vdots \\ y_n &= y_n\left(X_{1n}, X_{2n}, \cdots, X_{pn}\right) \end{aligned}$$

Um ajuste linear para o fenômeno que define o valor y_1 da variável y como função dos valores ajustados, neste experimento, para as variáveis $X_{11}, X_{21}, \cdots, X_{p1}$, corresponde à função linear:

$$y_1 = a_0 + a_1 X_{11} + a_2 X_{21} + \cdots + a_p X_{p1}$$

Analogamente, tem-se:

$$\begin{aligned} y_2 &= a_0 + a_1 X_{12} + a_2 X_{22} + \cdots + a_p X_{p2} \\ \vdots \\ y_n &= a_0 + a_1 X_{1n} + a_2 X_{2n} + \cdots + a_p X_{pn} \end{aligned}$$

Em forma matricial, tem-se:

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & X_{11} & X_{21} & \cdots & X_{p1} \\ 1 & X_{12} & X_{22} & \cdots & X_{p2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{1n} & X_{2n} & \cdots & X_{pn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_o \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix}$$

ou: $y = X \cdot a$

Multiplicando ambos os membros, à esquerda, por X^T, tem-se:

$$X^T X\, a = X^T y \Rightarrow a = \left(X^T X\right)^{-1} X^T y$$

Notar que, como $X(n \times (p+1))$, então o produto $X^T X$ é da ordem $(p+1) \times (p+1)$ e $X^T y$ é um vetor de $p+1$ elementos, logo, a equação acima é um sistema $(p+1)$ equações a $(p+1)$ incógnitas.

Como $X^T X \neq 0$, as equações desse sistema são conhecidas como "equações normais".

Ex.: Ajustar os pontos da tabela abaixo: $(z = a_0 + a_1 x + a_2 y)$

i	1	2	3	4
x	1	2	4	5
y	0	1	1	3
z	9	4	11	1

Solução:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 4 & 1 \\ 1 & 5 & 3 \end{bmatrix} \qquad Z = \begin{bmatrix} 9 \\ 4 \\ 11 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$C = X^T X = \begin{bmatrix} 4 & 12 & 5 \\ 12 & 46 & 21 \\ 5 & 21 & 11 \end{bmatrix}; \qquad d = X^T z = \begin{bmatrix} 25 \\ 66 \\ 18 \end{bmatrix}$$

$$a = c^{-1} d \Rightarrow \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.1957 \\ 3.1957 \\ -6.8261 \end{bmatrix}$$

Ajuste Polinomial

Consiste de um caso particular do ajuste linear múltiplo, em que:

$$X_1 = X \; ; \quad X_2 = X^2 ; \quad \cdots ; \quad X_p = X^p$$

Com isso:

$$
\begin{aligned}
y_1 &= a_0 + a_1 X_{(1)} + a_2 X_{(1)}^2 + \cdots + a_p X_{(1)}^p \\
y_2 &= a_0 + a_1 X_{(2)} + a_2 X_{(2)}^2 + \cdots + a_p X_{(2)}^p \\
&\vdots \\
y_n &= a_0 + a_1 X_{(n)} + a_2 X_{(n)}^2 + \cdots + a_p X_{(p)}^p
\end{aligned}
$$

$$
\begin{bmatrix}
1 & X_{(1)} & X_{(1)}^2 & \cdots & X_{(1)}^p \\
1 & X_{(2)} & X_{(2)}^2 & \cdots & X_{(2)}^p \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & X_{(n)} & X_{(n)}^2 & \cdots & X_{(n)}^p
\end{bmatrix}
\cdot
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}
$$

$$
X^T = \begin{bmatrix}
1 & 1 & \cdots & 1 \\
X_{(1)} & X_{(2)} & \cdots & X_{(n)} \\
X_{(1)}^2 & X_{(2)}^2 & \cdots & X_{(n)}^2 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
X_{(1)}^p & X_{(2)}^p & \cdots & X_{(n)}^p
\end{bmatrix}
$$

$$
X^T X = \begin{bmatrix}
n & \sum X_{(i)} & \sum X_{(i)}^2 & \cdots & \sum X_{(i)}^p \\
\sum X_{(i)} & \sum X_{(i)}^2 & \sum X_{(i)}^3 & \cdots & \sum X_{(i)}^{p+1} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\sum X_{(i)}^p & \sum X_{(i)}^{p+1} & \sum X_{(i)}^{p+2} & \cdots & \sum X_{(i)}^{2p}
\end{bmatrix} ; \quad
X^T y = \begin{bmatrix}
\sum y_i \\
\sum y_i X_{(i)} \\
\vdots \\
\sum y_i X_{(i)}^p
\end{bmatrix}
$$

Ex.: Ajustar os pontos da tabela abaixo: $\left(y = a_o + a_1 x + a_2 x^2\right)$

i	1	2	3	4	5	6
x_i	-2	-1.5	0	1	2.2	3.1
y_i	-30.5	-20.2	-3.3	8.9	16.8	21.4

$$X^T X = \begin{bmatrix} n & \sum X_i & \sum X_i^2 \\ \sum X_i & \sum X_i^2 & \sum X_i^3 \\ \sum X_i^2 & \sum X_i^3 & \sum X_i^4 \end{bmatrix}$$

$$X^T y = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i X_i \\ \sum y_i X_i^2 \end{bmatrix}$$

Efetuando-se os cálculos indicados, temos:

$$\begin{bmatrix} 6 & 2.8 & 21.7 \\ 2.8 & 21.7 & 30.064 \\ 21.7 & 30.064 & 137.8402 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.9 \\ 203.5 \\ 128.416 \end{bmatrix}$$

logo:

$$a = \begin{bmatrix} -2.018 \\ 11.33 \\ -1.222 \end{bmatrix}$$