

Ajuste de Curvas

Lucia Catabriga e Andréa Maria Pedrosa Valli

Laboratório de Computação de Alto Desempenho (LCAD)
Departamento de Informática
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, Vitória, ES, Brasil

Ajuste de Curvas

- 1 Motivação
- 2 Caso Geral Regressão Linear
- 3 Qualidade do Ajuste
- 4 Regressão Linear Múltipla
- 5 Regressão Não Linear

O objetivo da **regressão linear** (ajuste) é encontrar uma função

$$u = a_1g_1(x) + a_2g_2(x) + \cdots + a_mg_m(x)$$

que “melhor” se ajusta a uma tabela de dados,

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

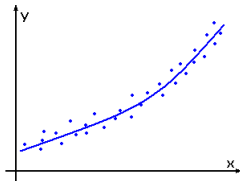
oriunda de n **experimentos** e podendo conter erros de medição.

- Podemos usar a regressão linear para estimar um valor $y_1 \leq y \leq y_n$ que não esteja tabelado, $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$.

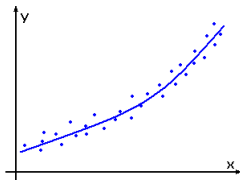
- Podemos usar a regressão linear para estimar um valor $y_1 \leq y \leq y_n$ que não esteja tabelado, $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$.
- Podemos também estimar um valor y em algum ponto fora do intervalo de tabelamento (**extrapolação**).

- Podemos usar a regressão linear para estimar um valor $y_1 \leq y \leq y_n$ que não esteja tabelado, $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$.
- Podemos também estimar um valor y em algum ponto fora do intervalo de tabelamento (**extrapolação**).
- Uma aplicação, por exemplo, seria estimar a população de Vitória no ano de 2020 dada uma tabela com a população de Vitória em anos anteriores a 2015.

- Para escolher as funções do ajuste, $g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x)$, podemos fazer o **diagrama de dispersão** ou utilizar informações *a priori* sobre a relação entre as variáveis x e y do modelo.

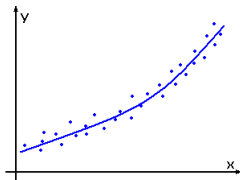


- Para escolher as funções do ajuste, $g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x)$, podemos fazer o **diagrama de dispersão** ou utilizar informações *a priori* sobre a relação entre as variáveis x e y do modelo.



- Caso não tenha nenhuma informação sobre as funções do ajuste, podemos fazer a **regressão polinomial**, ou seja, escolher as funções de interpolação como sendo polinômios de grau menor ou igual a m .

- Para escolher as funções do ajuste, $g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x)$, podemos fazer o **diagrama de dispersão** ou utilizar informações *a priori* sobre a relação entre as variáveis x e y do modelo.



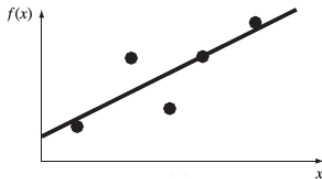
- Caso não tenha nenhuma informação sobre as funções do ajuste, podemos fazer a **regressão polinomial**, ou seja, escolher as funções de interpolação como sendo polinômios de grau menor ou igual a m .
- Vamos ter que definir o critério para o “melhor” ajuste. Neste curso, vamos estudar o **método dos quadrados mínimos**.

Ajustar uma reta a um conjunto de pares de observação: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$. A expressão matemática do ajuste por uma reta é

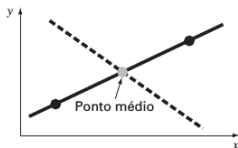
$$\begin{aligned}y &= a_0 + a_1x + e \\ &= u + e\end{aligned}$$

onde a_0 e a_1 são coeficientes representando a intersecção com o eixo y e a inclinação, respectivamente, e e é o erro ou resíduo (**erro residual**) entre o modelo e a observação.

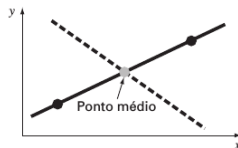
Portanto, o erro ou resíduo é a discrepância entre o valor verdadeiro de y e o valor aproximado, $u = a_0 + a_1x$, previsto pela equação linear.



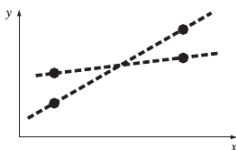
- 1 Minimizar a soma dos erros residuais ($\text{Min } \sum_{k=1}^n e_k$): qualquer reta passando pelo ponto médio resulta em um mínimo (não fornece solução única).



- 1 Minimizar a soma dos erros residuais ($\text{Min } \sum_{k=1}^n e_k$): qualquer reta passando pelo ponto médio resulta em um mínimo (não fornece solução única).



- 2 Minimizar a soma dos valores absolutos dos erros residuais ($\text{Min } \sum_{k=1}^n |e_k|$): qualquer reta entre as duas retas é um mínimo (não fornece solução única).



Critério dos **quadrados mínimos** para ajustar uma reta:

$$\text{Min } S_r(a_0, a_1) = \text{Min} \sum_{k=1}^n (e_k)^2 = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1 x_k))^2$$

Critério dos **quadrados mínimos** para ajustar uma reta:

$$\text{Min } S_r(a_0, a_1) = \text{Min} \sum_{k=1}^n (e_k)^2 = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1 x_k))^2$$

Condições para o mínimo:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_0 + a_1 x_k))(-1) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_0 + a_1 x_k))(-x_k) = 0$$

Equações Normais (sistema simétrico):

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^n 1\right)a_0 + \left(\sum_{k=1}^n x_k\right)a_1 &= \sum_{k=1}^n y_k \\ \left(\sum_{k=1}^n x_k\right)a_0 + \left(\sum_{k=1}^n x_k^2\right)a_1 &= \sum_{k=1}^n x_k y_k \end{aligned}$$

Na forma vetorial

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n 1 & \sum_{k=1}^n x_k \\ \sum_{k=1}^n x_k & \sum_{k=1}^n x_k^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n y_k \\ \sum_{k=1}^n x_k y_k \end{bmatrix}$$

Exemplo: Ajustar uma reta, pelo método dos quadrados mínimos, ao conjunto de dados abaixo. Utilize 4 casas decimais.

x_k	1	2	3	4	5	6	7
y_k	0.5	2.5	2.0	4.0	3.5	6.0	5.5

Exemplo: Ajustar uma reta, pelo método dos quadrados mínimos, ao conjunto de dados abaixo. Utilize 4 casas decimais.

x_k	1	2	3	4	5	6	7
y_k	0.5	2.5	2.0	4.0	3.5	6.0	5.5

$$\sum_{k=1}^7 1 = 7 \quad \sum_{k=1}^7 x_k = 28$$

$$\sum_{k=1}^7 x_k^2 = 140 \quad \sum_{k=1}^7 y_k = 24, \quad \sum_{k=1}^7 x_k y_k = 119.5$$

Exemplo: Ajustar uma reta, pelo método dos quadrados mínimos, ao conjunto de dados abaixo. Utilize 4 casas decimais.

x_k	1	2	3	4	5	6	7
y_k	0.5	2.5	2.0	4.0	3.5	6.0	5.5

$$\sum_{k=1}^7 1 = 7 \quad \sum_{k=1}^7 x_k = 28$$

$$\sum_{k=1}^7 x_k^2 = 140 \quad \sum_{k=1}^7 y_k = 24, \quad \sum_{k=1}^7 x_k y_k = 119.5$$

$$\begin{bmatrix} 7 & 28 & | & 24 \\ 28 & 140 & | & 119.5 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.0714 \\ 0.8393 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow y = 0.0714 + 0.8393x$$

$$\Rightarrow S_r(0.0714, 0.8393) = 2.9911$$

Critério dos **quadrados mínimos** para ajustar um **polinômio de grau m** :

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))^2$$

Critério dos **quadrados mínimos** para ajustar um **polinômio de grau m** :

$$\text{Min } S_r = \text{Min } \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))^2$$

Condições de mínimo: $\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = \frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \dots = \frac{\partial S_r}{\partial a_m} = 0$

Critério dos **quadrados mínimos** para ajustar um **polinômio de grau m** :

$$\text{Min } S_r = \text{Min } \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))^2$$

Condições de mínimo: $\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = \frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \dots = \frac{\partial S_r}{\partial a_m} = 0$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))(-1) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))(-x_k) = 0$$

...

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_m} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))(-x_k^m) = 0$$

onde $S_r = S_r(a_0, a_1, \dots, a_m)$.

Equações Normais (sistema simétrico $(m + 1) \times (m + 1)$):

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n 1 & \sum_{k=1}^n x_k & \cdots & \sum_{k=1}^n x_k^m \\ \sum_{k=1}^n x_k & \sum_{k=1}^n x_k^2 & \cdots & \sum_{k=1}^n x_k^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^n x_k^m & \sum_{k=1}^n x_k^{m+1} & \cdots & \sum_{k=1}^n x_k^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n y_k \\ \sum_{k=1}^n x_k y_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^n x_k^m y_k \end{bmatrix}$$

Ajustar uma curva do tipo $u = a_1 + a_2x + a_3e^x$ a tabela de dados

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

Ajustar uma curva do tipo $u = a_1 + a_2x + a_3e^x$ a tabela de dados

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\text{Min } S_r(a_1, a_2, a_3) = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_1 + a_2x_k + a_3e^{x_k}))^2$$

Ajustar uma curva do tipo $u = a_1 + a_2x + a_3e^x$ a tabela de dados

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\text{Min } S_r(a_1, a_2, a_3) = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_1 + a_2x_k + a_3e^{x_k}))^2$$

Condições de mínimo: $\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \frac{\partial S_r}{\partial a_2} = \frac{\partial S_r}{\partial a_3} = 0$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 + a_2x_k + a_3e^{x_k}))(-1) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 + a_2x_k + a_3e^{x_k}))(-x_k) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_3} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 + a_2x_k + a_3e^{x_k}))(-e^{x_k}) = 0$$

Equações Normais (sistema simétrico):

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n 1 & \sum_{k=1}^n x_k & \sum_{k=1}^n e^{x_k} \\ \sum_{k=1}^n x_k & \sum_{k=1}^n x_k^2 & \sum_{k=1}^n x_k e^{x_k} \\ \sum_{k=1}^n e^{x_k} & \sum_{k=1}^n x_k e^{x_k} & \sum_{k=1}^n e^{2x_k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n y_k \\ \sum_{k=1}^n x_k y_k \\ \sum_{k=1}^n e^{x_k} y_k \end{bmatrix}$$

Problema com n experimentos e m parâmetros:

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$y = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \cdots + a_m g_m(x) + e$$

Problema com n experimentos e m parâmetros:

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$y = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \cdots + a_m g_m(x) + e$$

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k)))^2$$

Problema com n experimentos e m parâmetros:

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$y = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \cdots + a_m g_m(x) + e$$

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k)))^2$$

$$\text{Condições de mínimo: } \frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \frac{\partial S_r}{\partial a_2} = \cdots = \frac{\partial S_r}{\partial a_m} = 0$$

onde $S_r = S_r(a_1, a_2, \cdots, a_m)$.

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \dots + a_m g_m(x_k))) (-g_1(x_k)) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k))) (-g_1(x_k)) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k))) (-g_2(x_k)) = 0$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_r}{\partial a_1} &= \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k))) (-g_1(x_k)) = 0 \\ \frac{\partial S_r}{\partial a_2} &= \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k))) (-g_2(x_k)) = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial S_r}{\partial a_m} &= \sum_{k=1}^n 2(y_k - (a_1 g_1(x_k) + a_2 g_2(x_k) + \cdots + a_m g_m(x_k))) (-g_m(x_k)) = 0\end{aligned}$$

Equações Normais (sistema simétrico $m \times m$):

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n g_1 g_1 & \sum_{k=1}^n g_1 g_2 & \cdots & \sum_{k=1}^n g_1 g_m \\ \sum_{k=1}^n g_2 g_1 & \sum_{k=1}^n g_2 g_2 & \cdots & \sum_{k=1}^n g_2 g_m \\ & & \ddots & \\ \sum_{k=1}^n g_m g_1 & \sum_{k=1}^n g_m g_2 & \cdots & \sum_{k=1}^n g_m g_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n g_1 y_k \\ \sum_{k=1}^n g_2 y_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^n g_m y_k \end{bmatrix}$$

onde $g_i = g_i(x_k)$, $i = 1, 2, \dots, m$

Se $\bar{g}_1, \bar{g}_2, \dots, \bar{g}_m$ formam um conjunto **linearmente independente**

\Rightarrow o determinante do sistema normal é diferente de zero

\Rightarrow o sistema tem solução única.

Além disso, demonstra-se que que esta solução é o mínimo de

$$S_r(a_1, a_2, \dots, a_m) = \sum_{k=1}^n (y_k - (a_1 g_1(x_k) + \dots + a_m g_m(x_k)))^2.$$

$$\bar{g}_j = \begin{bmatrix} g_j(x_1) \\ g_j(x_2) \\ \dots \\ g_j(x_n) \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Coeficiente de determinação

$$(r^2 = (S_t - S_r)/S_t):$$

Fornece a proporção da variação total dos dados em torno da média

$$(\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k)$$

Soma total dos quadrados **em torno da média** ($SQTot$): o tamanho do erro residual antes do ajuste.

$$S_t = SQTot = \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})^2$$

Soma dos quadrados dos **resíduos** ($SQRes$): o tamanho do erro residual que continua depois do ajuste.

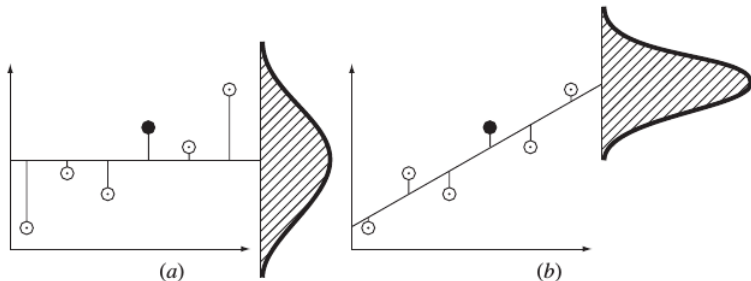
$$S_r = SQRes = \sum_{k=1}^n e_k^2$$

Dados de regressão por uma reta mostrando:

(a) a dispersão dos dados em torno da média da variável dependente

y

(b) a dispersão dos dados em torno da reta de melhor de ajuste.



$S_t - S_r$, quantifica a melhora ou a redução de erro quando comparamos os dados com a função do ajuste ao invés da média.

Coeficiente de determinação (r^2):

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} = 1 - \frac{S_r}{S_t}$$

$r^2 \approx 1 \Rightarrow$ melhor o ajuste

$r^2 = 0 \Rightarrow$ não houve nenhum melhoramento

$$\begin{aligned} S_t &= \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})^2 = \sum_{k=1}^n y_k^2 - 2\bar{y} \sum_{k=1}^n y_k + n\bar{y}^2 \\ &= \sum_{k=1}^n y_k^2 - 2\bar{y}n\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k\right) + n\bar{y}^2 = \sum_{k=1}^n y_k^2 - n\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k\right)^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow r^2 = 1 - \frac{S_r(a_1, \dots, a_m)}{\sum_{k=1}^n y_k^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{k=1}^n y_k\right)^2}$$

Ajuste por um **polinômio de grau m** :

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1x_k + \dots + a_mx_k^m))^2$$

x_k	x_1	x_2	x_3	\dots	x_m
y_k	y_1	y_2	y_3	\dots	y_m

Ajuste por um **polinômio de grau m** :

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1 x_k + \dots + a_m x_k^m))^2$$

x_k	x_1	x_2	x_3	\dots	x_m
y_k	y_1	y_2	y_3	\dots	y_m

Variância residual: $\sigma = \frac{S_r}{n-p}$ onde n é o número de experimentos e $p = m + 1$ é o número de parâmetros.

$$\Rightarrow \sigma = \frac{S_r}{n - (m + 1)}$$

A redução global da variância residual vai definir se mais parâmetros devem ou não ser incorporados ao modelo.

Exemplo: Dados históricos dos censos do Brasil [1]. Para reduzir os erros de ponto flutuante $x = \text{ano} - 1970$ e $y = \text{urbana} \times 10^{-6}$.

Ano	Urbana	Rural
1940	12.880.182	28.356.133
1950	18.782.891	33.161.506
1960	31.303.034	38.767.423
1970	52.084.984	41.054.053
1980	80.436.409	38.566.297
1991	110.990.990	35.834.485
1996	123.076.831	33.993.332
2000	137.953.959	31.845.211

g	r^2	σ^2
1	0,96602	$9,58219 \times 10^1$
2	0,99776	$7,59261 \times 10^0$
3	0,99939	$2,57228 \times 10^0$
4	0,99940	$3,42930 \times 10^0$
5	0,99980	$1,65615 \times 10^0$
6	0,99998	$4,17203 \times 10^{-1}$

Ajustar uma curva do tipo $y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$ a tabela abaixo

x_1	$(x_1)_1$	$(x_1)_2$	$(x_1)_3$	\dots	$(x_1)_n$
x_2	$(x_2)_1$	$(x_2)_2$	$(x_2)_3$	\dots	$(x_2)_n$
y_k	y_1	y_2	y_3	\dots	y_n

Ajustar uma curva do tipo $y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$ a tabela abaixo

x_1	$(x_1)_1$	$(x_1)_2$	$(x_1)_3$	\dots	$(x_1)_n$
x_2	$(x_2)_1$	$(x_2)_2$	$(x_2)_3$	\dots	$(x_2)_n$
y_k	y_1	y_2	y_3	\dots	y_n

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1(x_1)_k + a_2(x_2)_k))^2$$

Ajustar uma curva do tipo $y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2$ a tabela abaixo

x_1	$(x_1)_1$	$(x_1)_2$	$(x_1)_3$	\dots	$(x_1)_n$
x_2	$(x_2)_1$	$(x_2)_2$	$(x_2)_3$	\dots	$(x_2)_n$
y_k	y_1	y_2	y_3	\dots	y_n

$$\text{Min } S_r = \text{Min} \sum_{k=1}^n (y_k - (a_0 + a_1(x_1)_k + a_2(x_2)_k))^2$$

$$\left(\sum_{k=1}^n 1\right)a_0 + \left(\sum_{k=1}^n (x_1)_k\right)a_1 + \left(\sum_{k=1}^n (x_2)_k\right)a_2 = \sum_{k=1}^n y_k$$

$$\left(\sum_{k=1}^n (x_1)_k\right)a_0 + \left(\sum_{k=1}^n (x_1)_k^2\right)a_1 + \left(\sum_{k=1}^n (x_1)_k(x_2)_k\right)a_2 = \sum_{k=1}^n (x_1)_k y_k$$

$$\left(\sum_{k=1}^n (x_2)_k\right)a_0 + \left(\sum_{k=1}^n (x_2)_k(x_1)_k\right)a_1 + \left(\sum_{k=1}^n (x_2)_k^2\right)a_2 = \sum_{k=1}^n (x_2)_k y_k$$

- $y = ax^b$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

- $y = ax^b$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\Rightarrow \ln(y) = \ln(a) + b \ln(x)$$

- $y = ax^b$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\Rightarrow \ln(y) = \ln(a) + b \ln(x) \Rightarrow z = \bar{a} + \bar{b} \ln(x)$$

- $y = ax^b$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\Rightarrow \ln(y) = \ln(a) + b \ln(x) \Rightarrow z = \bar{a} + \bar{b} \ln(x)$$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
$z_k = \ln(y_k)$	z_1	z_2	z_3	\cdots	z_n

- $y = ax^b$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\Rightarrow \ln(y) = \ln(a) + b \ln(x) \Rightarrow z = \bar{a} + \bar{b} \ln(x)$$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
$z_k = \ln(y_k)$	z_1	z_2	z_3	\cdots	z_n

$$\Rightarrow z = \bar{a} g_1(x) + \bar{b} g_2(x)$$

$$\Rightarrow g_1(x) = 1$$

$$\Rightarrow g_2(x) = \ln(x)$$

Utilize o método dos quadrados mínimos na tabela de dados (x_k, z_k) e determina \bar{a} e \bar{b} e depois $a = e^{\bar{a}}$, $b = \bar{b}$.

- $y = \frac{1}{a+bx+cx^2}$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

- $y = \frac{1}{a+bx+cx^2}$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_n
y_k	y_1	y_2	y_3	\cdots	y_n

$$\Rightarrow \frac{1}{y} = a + bx + cx^2 \Rightarrow z = a + bx + cx^2$$

x_k	x_1	x_2	x_3	\cdots	x_k
$z_k = 1/y_k$	z_1	z_2	z_3	\cdots	z_k

Utilize o método dos quadrados mínimos na tabela de dados (x_k, z_k) e determina a , b e c .

Exercício: Calcule o Ajuste Polinomial de ordem $m = 1, 2, \dots, 6$ e os respectivos Coeficiente de Determinação (r^2) e Variância (σ) para cada m .

x_k	-30	-20	-10	0	10	21	26	30
y_k	12,88	18,78	31,30	52,08	80,44	110,99	123,08	137,95

Comandos do Octave:

- $p = \text{polyfit}(X, Y, m)$ encontra o melhor polinômio p de ordem m que aproxima os pontos $(X \times Y)$ no sentido dos mínimos quadrados. Se $m = n - 1$, p é o polinômio interpolador de ordem m dos $m + 1$ pontos tabelados. No contexto do Octave p é um vetor contendo os coeficientes do polinômio de ordem p :
 $p = [a_m \ a_{m-1} \ \dots \ a_1 \ a_0]$.
- $\text{polyout}(p, "x")$ mostra o polinômio no formato
 $p = [a_p x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots a_1 x + a_0]$.
- $X_{tam} = \text{linspace}(x_a, x_b, tam)$, gera um vetor X_{tam} com $z_1 = x_a$, $z_{tam} = x_b$ e tam componentes igualmente espaçadas.
- $Y_{tam} = \text{polyval}(p, X_{tam})$ calcula o valor do polinômio p em todas as componentes de X_{tam} , gerando o vetor Y_{tam} .
- $\text{mean}(Y)$ calcula a média das componentes do vetor Y .
- $\text{norm}(Y, 2)$ calcula a norma euclidiana do vetor Y
 $(\text{norm}(Y, 2) = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_n^2})$.

Bibliografia Básica

[1] Algoritmos Numéricos, Frederico F. Campos, Filho - 2ª Ed., Rio de Janeiro, LTC, 2007.

[2] Métodos Numéricos para Engenharia, Steven C. Chapa e Raymond P. Canale, Ed. McGraw-Hill, 5ª Ed., 2008.

[3] Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais, Márcia A. G. Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes, Ed. Pearson Education, 2ª Ed., 1996.