ENSINO

Ajuste de dados discretos bidimensionais por funções racionais

Maria Cecília Kawazoe Aguilera-Navarro

Departamento de Matemática - UNICENTRO
85010-990 Guarapuava, PR

Valdir C. Aguilera-Navarro
Departamento de Física - UNICENTRO
85010-990 Guarapuava, PR

(*Recebido: 2 de setembro de 2003*)

Resumo: *Desenvolve-se o método dos quadrados mínimos usando-se funções racionais. A idéia é dispor de recursos para representar eventuais singularidades no conjunto de dados iniciais.*

Palavras-chave: *método dos quadrados mínimos, funções racionais, singularidades*

Abstract: *The least squares approximation is developed by considering rational functions. The idea is to provide means to represent eventual singularities in the data set.*

Key words: *least squares approximation, rational functions, singularities*

1 Introdução

Vários processos, como observações de fenômenos naturais, espontâneos ou provocados, experiências laboratoriais, levantamentos sociais, etc., dão origem a um conjunto de pares de valores dependentes. A interpretação e a descrição matemática desses valores requerem que se encontre alguma função ajustável ao conjunto e passe a representá-lo. Para encontrar essa representação, devemos formular algumas questões básicas, como: (1) que tipo de funções usar? (2) que critério escolher para se obter o melhor ajuste? Uma vez definida a classe de funções com as quais queremos trabalhar, para atender o quesito (2), um método bastante popular é o chamado "método dos quadrados mínimos". Ao utilizar esse método, quase sempre procura-se, inicialmente, ajustar uma função polinomial. Outras tentativas usuais procuram ajustar uma função exponencial ou logarítmica. Esses procedimentos são bem conhecidos e descritos em vários textos, alguns mencionados na bibliografia *(BRADBURY, 1984; CLÁUDIO et al., 1989; HAMMING, 1962; HUMES et al., 1984; RALSTON, et al., 1960).*

Os ajustes polinomiais têm sido capazes de descrever razoavelmente os dados disponíveis. Porém, são totalmente incapazes de descrever situações em que há singularidades, que precisam ser identificadas e explicitadas. Para enfrentar essas situações, pode-se desenvolver o método dos quadrados mínimos usando funções racionais (quociente de dois polinômios), com a esperança de que os pólos dessas funções (zeros do denominador) descrevam singularidades eventualmente presentes no conjunto de dados.

Este trabalho, de carácter essencialmente didático, é orientado a estudantes em nível de graduação e a pesquisadores interessados em funções alternativas para ajustes de curvas.

Na próxima seção, desenvolvemos o método dos quadrados mínimos para funções gerais. Consideramos o caso de um conjunto discreto de dados. O método para funções racionais e uma aplicação são encontrados na seção 3. Finalmente, as conclusões são apresentadas na seção 4.

2 O método dos quadrados mínimos: funções gerais

O problema que vamos considerar pode ser enunciado da seguinte forma: dado um conjunto de pares ordenados (x_i, y_i), com $i = 1, 2, \dots, N$, encontrar uma função g que o descreva da melhor maneira. Esta "melhor maneira" é definida a seguir. Seja g uma função de x, dependente de $M + 1$ parâmetros a_k, com $k = 0, 1, 2, \dots, M$, isto é, $g = g(a_0, a_1, \dots, a_M, x)$. O método dos quadrados mínimos assegura que a melhor estimativa é obtida minimizando-se, com respeito aos parâmetros a_k, a função f definida por

$$f(a_0, a_1, \dots, a_M) = \sum_{i=1}^{N} [y_i - g(a_0, a_1, \dots, a_M, x_i)]^2 \tag{1}$$

Aprendemos em Cálculo que para minimizar f com respeito aos parâmetros a_k, devemos derivá-la com respeito a esses parâmetros, igualar a zero e resolver as $M+1$ equações resultantes. Esse procedimento conduz ao seguinte conjunto de equações algébricas:

$$\frac{\partial f}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^{N} [y_i - g(a_0, a_1, \dots, a_M, x_i)] \frac{\partial g}{\partial a_k} = 0, \qquad k = 0, 1, \dots, M \tag{2}$$

Para dar prosseguimento ao desenvolvimento analítico do método, consideraremos a função g como uma combinação linear de funções $g_k(x)$ conhecidas, isto é:

$$g(a_0, a_1, \ldots, a_M, x) = \sum_{k=0}^{M} a_k g_k(x) \tag{3}$$

Substituindo (3) em (1), a função f se expressa como:

$$f(a_0, a_1, \ldots, a_M) = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \sum_{k=0}^{M} a_k g_k(x_i) \right]^2 \tag{4}$$

e as condições (2) são definidas por:

$$\frac{\partial f}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \sum_{k=0}^{M} a_k g_k(x_i) \right] g_k(x_i) = 0, \qquad k = 0, 1, \ldots, M \tag{5}$$

em que usamos (3) com $x = x_i$.

Um caso particular, de ampla utilização, consiste em se tomar uma função g polinomial em x, isto é, tomar para $g_k(x)$ a função x^k:

$$g = \sum_{k=0}^{M} a_k x^k \tag{6}$$

Assim, a Eq. (3) se torna:

$$g(a_0, a_1, \ldots, a_M, x) = \sum_{k=0}^{M} a_k x^k \tag{7}$$

Neste caso, pode-se ver que a condição (5) se reduz a:

$$\frac{\partial f}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - a_k x_i^k \right] x_i^k = 0, \qquad k = 0, 1, \ldots, M \tag{8}$$

Outros casos de interesse estudados na literatura consideram polinômios ortogonais para a família de funções $g_k(x)$, ou funções trigonométricas. Neste último caso, costuma-se dar ao processo o nome de análise harmônica, de interesse particular para sistemas periódicos. Nenhuma dessas escolhas, entretanto, é capaz de descrever eventuais singularidades. Esta é uma motivação que leva a considerar funções racionais. O desenvolvimento deste caso é feito na próxima seção.

3 O método dos quadrados mínimos: funções racionais

Na eventualidade do conjunto de pares conhecidos (x_i, y_i) estar associado a situações que apresentam possíveis singularidades, é conveniente tomar para g a seguinte função dependente de $L + M + 1$ parâmetros:

$$g = g(a_0, a_1, \ldots, a_{L+M}, x) = \frac{a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_L x^L}{1 + a_{L+1} x + a_{L+2} x^2 + \cdots + a_{L+M} x^M} = \frac{p(x)}{q(x)} \tag{9}$$

com

$$p(x) = \sum_{i=0}^{L} a_i x^i \tag{10}$$

e

$$q(x) = 1 + \sum_{i=1}^{M} a_{L+i} x^i \tag{11}$$

Notemos que quando os parâmetros a_k, para $k = L+1, L+2, \ldots, L+M$ são nulos, a função $q(x)$ se reduz ao valor constante 1 e (9) se reduz a um polinômio, como em (7).

O fato de termos tomado o termo independente do denominador da Eq. (9), como sendo unitário, não implica em perda de generalidade, pois se ele tivesse outro valor, digamos v, poderíamos dividir o numerador e o denominador de (9) por v, sem alterar essencialmente a função g.

A função f a ser minimizada tem, agora, a forma:

$$f(a_0, a_1, \ldots, a_{L+M}) = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \frac{p(x_i)}{q(x_i)} \right]^2 \tag{12}$$

e as derivadas de f com respeito aos parâmetros a_k são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial a_k} &= -2 \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \frac{p(x_i)}{q(x_i)} \right] \frac{\partial}{\partial a_k} \left[\frac{p(x_i)}{q(x_i)} \right] \\ &= -2 \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \frac{p(x_i)}{q(x_i)} \right] \left[\frac{q(x_i)\dfrac{\partial p(x_i)}{\partial a_k} - p(x_i)\dfrac{\partial q(x_i)}{\partial a_k}}{[q(x_i)]^2} \right] \end{aligned} \tag{13}$$

donde obtemos o seguinte sistema de $L+M+1$ equações algébricas para determinar os parâmetros a_k que minimizam f:

$$\sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \frac{p(x_i)}{q(x_i)} \right] \left[\frac{q(x_i)\dfrac{\partial p(x_i)}{\partial a_k} - p(x_i)\dfrac{\partial q(x_i)}{\partial a_k}}{[q(x_i)]^2} \right] = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, L+M \tag{14}$$

em que N, lembramos, é o número de pares (x_i, y_i) que queremos ajustar pela função (9).

O sistema de equações (14) é, obviamente, não linear. Não há procedimentos gerais para se resolver essa classe de equações. Dessa forma, teremos que utilizar métodos numéricos. Na próxima subseção, aplicamos esses resultados em um caso particular.

3.1 Aplicação no caso $L = M = 1$

Consideremos o caso particular da função racional (9):

$$g = g(a_0, a_1, a_2, x) = \frac{a_0 + a_1 x}{1 + a_2 x} = \frac{p(x)}{q(x)} \tag{15}$$

em que $L = M = 1$. A função que temos de minimizar se expressa como:

$$f(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - \frac{p(x_i)}{q(x_i)} \right]^2 \tag{16}$$

Um pouco de álgebra elementar nos mostra que o sistema de $L+M+1 = 3$ equações (14) pode ser escrito na forma:

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{N} \frac{a_0 + a_1 x_i - (1 + a_2 x_i) y_i}{(1 + a_2 x_i)^2} = 0 \\ &\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i \left[a_0 + a_1 x_i - (1 + a_2 x_i)\, y_i\right]}{(1 + a_2 x_i)^2} = 0 \\ &\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i \left[a_0 + a_1 x_i\right] \left[a_0 + a_1 x_i - (1 + a_2 x_i)\, y_i\right]}{(1 + a_2 x_i)^3} = 0 \end{aligned} \tag{17}$$

Como este é um trabalho de ordem didática, que visa a ilustrar o uso de funções racionais no método dos quadrados mínimos, para ajustar um conjunto de dados, vamos "construir" esses dados a partir da função:

$$F(x) = y = \sqrt{(1 + x)/(1 + 2x)} \tag{18}$$

que tem, claramente, um pólo em $x = -0,5$. Quando encontrarmos os valores dos parâmetros a_0, a_1 e a_2, que definem a função g em (15), poderemos compará-la com a função exata e ter uma idéia da precisão do método.

Consideremos, então, os pares:

x	y
$-0,49$	$5,04975$
$-0,20$	$1,15470$
$1,5$	$0,790569$
$5,5$	$0,735980$

(19)

gerados a partir de (18), mas de origem supostamente desconhecida.

Com os quatro pares de valores (19), o sistema (17) toma a forma

$$\frac{a_0-0,49a_1-5.04975(1-0,49a_2)}{(1-0,49a_2)^2}+\frac{a_0-0,2a_1-1,1547(1-0,2a_2)}{(1-0,2a_2)^2}+$$
$$\frac{a_0+1,5a_1-0,790569(1+1,5a_2)}{(1+1,5a_2)^2}+\frac{a_0+5,5a_1-0,73598(1+5,5a_2)}{(1+5,5a_2)^2}=0$$

$$-\frac{0,49(a_0-0,49a_1-5,04975(1-0,49a_2))}{(1-0,49a_2)^2}-\frac{0,2(a_0-0,2a_1-1,1547(1-0,2a_2))}{(1-0,2a_2)^2}+$$
$$\frac{1,5(a_0+1,5a_1-0,790569(1+1,5a_2))}{(1+1,5a_2)^2}+\frac{5,5(a_0+5,5a_1-0,73598(1+5,5a_2))}{(1+5,5a_2)^2}=0$$

$$\frac{0,49(a_0-0,49a_1)(a_0-0,49a_1-5,04975(1-0,49a_2))}{(1-0,49a_2)^3}+$$
$$\frac{0,2(a_0-0,2a_1)(a_0-0,2a_1-1,1547(1-0,2a_2))}{(1-0,2a_2)^3}-$$
$$\frac{1,5(a_0+1,5a_1)(a_0+1,5a_1-0,790569(1+1,5a_2))}{(1+1,5a_2)^3}-$$
$$\frac{5,5(a_0+5,5a_1)(a_0+5,5a_1-0,73598(1+5,5a_2))}{(1+5,5a_2)^3}=0 \tag{20}$$

O sistema de equações (20) é, obviamente, não linear. Não há procedimentos gerais para se resolver tais sistemas. Dessa forma, é necessário utilizar métodos numéricos como, por exemplo, o método de Newton e o das iterações *(DEMIDOVITCH, B. et al., 1973; KOPCHENOVA et al., 1975)*. Ao invés de utilizar métodos numéricos diretamente, optamos pelo *sofware Mathematica*, obtendo seis soluções. Duas delas são complexas, que descartamos, porque nossos dados são reais. As quatro soluções reais são mostradas na Tabela 1, em que $x_0 = -1/a_2$ é um pólo da função (15) que estamos ajustando aos dados (19) e $f(a_0, a_1, a_2)$ é a função (16) que precisamos minimizar.

	a_0	a_1	a_2	x_0	$f(a_0,a_1,a_2)$
1	0,987253	1,37029	1,91318	−0,52	0,000033
2	1,93275	16,6753	8,62774	−0,12	13,058
3	3,16586	−2,49024	−1,34665	0,74	9,6721
4	1,93275	−0,776387	−0,401701	2,49	13,058

Tabela 1. Soluções reais para o sistema de equações algébricas não lineares (20). x_0 é o pólo associado a cada solução. Na última coluna, mostramos o valor da função (16) que minimizamos.

Entre as quatro soluções reais encontradas, escolhemos a primeira por nos dar, no intervalo que contém os dados iniciais, um mínimo local da função que minimizamos (16). Pode-se garantir, formalmente, a existência de um mínimo global, mas isso escapa ao objetivo principal deste trabalho. Contudo, do ponto de vista geométrico, não é difícil convencer-se de que há (pelo menos) uma curva que melhor se ajusta aos dados.

Assim, a função racional g que melhor se ajusta aos dados é definida por:

$$g(x) = \frac{0,987253 + 1,37029\,x}{1 + 1,91318\,x} \tag{21}$$

Na Figura 1, mostramos os quatro pares de valores (19) e o gráfico associado à função (21). Notamos que o pólo $x_0 = -0,52$ dessa função está nas vizinhanças do pólo $x'_0 = -0,5$ da função (18). Certamente, não podemos usar essa informação, pois, supostamente, não conhecemos a função (18) que gerou os dados (19), contudo, a figura nos dá uma idéia da confiabilidade do método que discutimos.

Nessa mesma figura, plotamos a função *F(x)*, dada em (18). Na escala em que foi apresentada a figura, não se nota nenhuma diferença com o gráfico da função (21): os dois gráficos se sobrepõem.

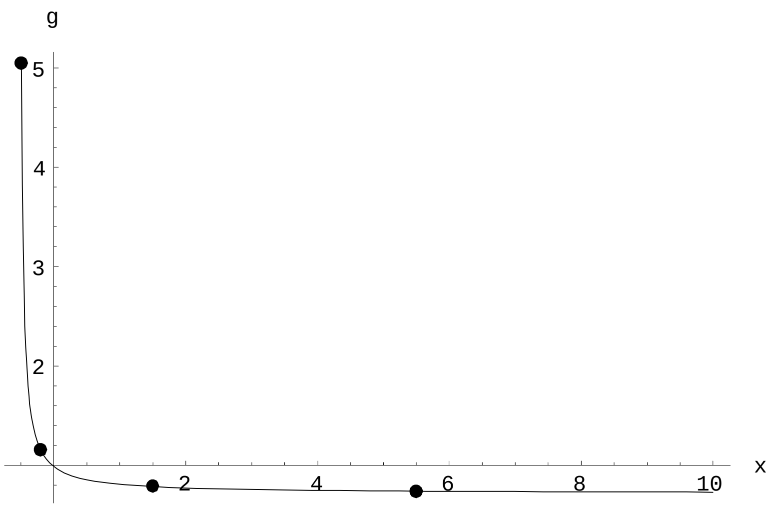

Figura 1. Comparação entre a curva ajustada g, definida em (21), e os dados iniciais (19), indicados por círculos.

4 Conclusão

O método de ajuste de funções polinomiais a um conjunto de dados é bastante usado, e com razoável êxito em um grande número de casos. Entretanto, um polinômio é uma função inteira, isto é, analítica em todo o plano *(KNOPP, 1945; AHLFORS, 1966; MARKUSHEVICH, 1970; CHURCHILL, 1980),* em particular em $\mathbb{R}$, que é o caso de dados reais, como o discutido neste trabalho. Dessa forma, é incapaz de descrever eventuais singularidades presentes no conjunto de dados iniciais. Essa limitação, inerente aos polinômios, pode ser superada considerando-se funções racionais. Com essas funções, o método tem disponível, portanto, o recurso de utilizar os zeros do polinômio do denominador para ajustar singularidades, se existirem. O exemplo desenvolvido e discutido na subseção 3.1 ilustra muito bem essa característica das funções racionais, quando usadas no método dos quadrados mínimos.

É importante salientar que o uso de funções racionais também tem suas limitações. Por exemplo, não é adequado para os casos de eventuais singularidades logarítmicas, de expoente fracionário, de divergência exponencial ou altamente oscilantes. Quando se suspeita fortemente da presença de tais singularidades, faz-se necessário um tratamento mais cuidadoso.

Agradecimentos

Os autores agradecem os árbitros por suas valiosas sugestões.

Bibliografia

AHLFORS, L. V. *Complex analysis.* New York:McGraw-Hill, 1966.

BRADBURY, T. C. *Mathematical methods.* New York:John Wiley, 1984.

CHURCHILL, R. V. *Variáveis complexas e suas aplicações.* São Paulo: McGraw-Hill, 1980.

CLÁUDIO, D. M. e MARINS, J. M. *Cálculo numérico computacional, teoria e prática.* São Paulo: Atlas, 1989.

DEMIDOVITCH, B.; MARON, I. *Eléments de calcul numérique.* Moscou: Mir, 1973.

KOPCHENOVA, N, V.; MARON, I. A. *Computational mathematics.* Moscou: Mir, 1975.

HAMMING, R. W. *Numerical methods for scientists and engineers.* New York: McGraw-Hill, 1962.

HUMES, A. F. P. C; MELO, I. S. H.; YOSHIDA, L. K.; e MARTINS, W. T. *Noções de cálculo numérico* São Paulo: McGraw-Hill, 1984.

KNOPP, K. *Theory of functions.* New York: Dover, 1945.

MARKUSHEVICH, A. *Teoría de las funciones analíticas.* Moscou: Mir, 1970.

RALSTON, A. e WILF, H. S. *Mathematical methods for digital computers.* New York: John Wiley, 1960.